

Прикладная и вычислительная математика

Научная статья

УДК 519.2-519.6

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18114>

АНАЛИЗ СИНГУЛЯРНОГО СПЕКТРА: ПРОБЛЕМЫ И РЕШЕНИЯ

Ю. А. Пичугин , Н. Ю. Пичугина

Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения,

Санкт-Петербург, Россия

 yury-pichugin@mail.ru

Аннотация. Статья посвящена различным аспектам метода анализа сингулярного спектра (SSA). Изначальная цель метода — оптимизировать гармонический спектральный анализ временных рядов. Дано теоретическое обоснование SSA на основе интегральных уравнений. Рассмотрен вопрос адекватного оценивания автоковариационной матрицы (АМ). Выдвинут метод оценки периодов собственных векторов АМ, рассматриваемых как базисные функции времени (ВТФ). Рассмотрены проблемы повторяющихся частот и частотных наложений в структуре ВТФ. Эти наложения могут иметь как более низкую, так и более высокую частоту, по сравнению с основной частотой ВТФ. Отмечена возможность искажения оценки периода ВТФ из-за относительно высокочастотных наложений. Для решения проблемы предложена модификация SSA (SSA-НС), позволяющая результативнее и корректнее решать основную задачу. Решения проблем подкреплены численными примерами.

Ключевые слова: анализ сингулярного спектра, временной ряд, оценивание ковариаций, проблема размерности, повторяющиеся частоты

Для цитирования: Пичугин Ю. А., Пичугина Н. Ю. Анализ сингулярного спектра: проблемы и решения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 1. С. 163–181. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18114>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18114>

A SINGULAR SPECTRUM ANALYSIS: PROBLEMS AND SOLUTIONS

Yu. A. Pichugin , N. Yu. Pichugina

Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, St. Petersburg, Russia

 yury-pichugin@mail.ru

Abstract. The paper has examined various aspects of the singular spectrum analysis (SSA) method. The original purpose of the method is to optimize harmonic (spectral) analysis of time series. A theoretical justification based on integral equations was given for the SSA. A solution to the problem of large dimensionality of the autocovariance matrix (AM) was proposed. A method for estimating the periods of AM eigenvectors considered as basis time functions (BTF) was put forward. The problems of repetitive frequencies and frequency overlaps in the BTF structure were discussed. Those overlaps could have lower or higher frequencies than the main BTF one. A possibility of distortion of the BTF period estimate due to relatively high-frequency superpositions was noted. To solve this problem, a modification of SSA (SSA-HC) has been proposed, that allows for a more correct and effective solution to the main problem. The solutions to problems were supported by numerical examples.

Keywords: singular spectrum analysis, time series, covariance estimation, dimensionality problem, repeated frequencies

For citation: Pichugin Yu. A., Pichugina N. Yu., A singular spectrum analysis: problems and solutions, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (1) (2025) 163–181. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18114>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Анализ сингулярного спектра (*англ.* Singular Spectrum Analysis (SSA)), лишь возникнув, сразу приобрел большую популярность в исследованиях временных рядов различного рода, описывающих разнообразные процессы (природные, экономические, социальные и пр.). SSA представляет собой приложение метода главных компонент (*англ.* Principal Component Analysis (PCA)) к анализу временных рядов и состоит из следующих этапов.

Первый этап. Оценивается матрица автокорреляций (либо автоковариаций). Первый этап оценки можно осуществлять разными способами: классическим (см., например, монографию [1]) и методом «гусеница» (*англ.* Caterpillar method, см., например, монографию [2]). Далее для простоты будет употребляться термин «метод гусеницы». В случае оценивания, которое используется в классическом анализе временных рядов, размерность автокорреляционной матрицы равна $N \times N$, где N есть длина исходного ряда. В методе гусеницы некоторый отрезок ряда фиксированной длины («гусеница») принимается за реализацию случайного вектора, а общая совокупность реализаций, составляющих выборочную матрицу, получается за счет пошаговых сдвигов.

Второй этап. Вычисляются собственные значения и собственные векторы автокорреляционной (или автоковариационной) матрицы. В силу симметрии и положительной определенности автоковариационных и автокорреляционных матриц их собственные значения совпадают с сингулярными. Отсюда и возникло данное название метода — «Анализ сингулярного спектра».

В этой статье мы ограничимся использованием аббревиатуры SSA и далее будем употреблять термин «собственные значения».

Третий этап. Собственные векторы, отвечающие основной значимой части спектра (последняя определяется тестированием спектра или субъективно), используются как базис для сглаживания исходного ряда с минимальной среднеквадратичной погрешностью, что обеспечивается PCA. Здесь коэффициенты разложения по базису собственных векторов автоковариационной (автокорреляционной) матрицы и есть главные компоненты.

Другим вариантом третьего, завершающего этапа может быть определение периодов собственных векторов (см. ниже), когда основным объектом изучения становится базис главных компонент временного ряда. При этом решается задача выяснения периодов, которые являются носителями некоторой основной доли общей дисперсии ряда. Эта доля определяется, как отмечено выше, на основе статистических тестов и критериев, оценивающих значимую часть спектра, или субъективно. Последнее превращает SSA в весьма эффективную альтернативу стандартному спектральному анализу, если учитывать явную избыточность последнего. Напомним, что спектральный анализ занимается оценкой всех возможных частот (периодичностей), содержащихся во временном ряду, не ставя перед собой задачу оптимального выбора. Это обстоятельство и послужило поводом для привлечения алгебраических методов, коим и является метод PCA.

Таким образом, SSA, являясь, в сущности, методом главных компонент, решает задачу оптимизации гармонического спектрального анализа. В некоторых работах, где используется метод гусеницы, можно встретить термин «главные компоненты временных рядов» [2, 3], что, по нашему мнению, лучше отражает суть метода.

Стоит отметить, что SSA по методу гусеницы имеет значительно большую популярность [2 – 5], чем таковой, который базируется на классическом оценивании автоковариаций. Последнее связано, по-видимому, не столько с тем, что в методе гусеницы рекомендуемая размерность автокорреляционной матрицы не превышает половины длины



исходного ряда и может варьироваться (что, несомненно, привлекательно), сколько с тем, что условие стационарности исследуемого ряда не является принципиальным для использования этого метода. В классическом методе SSA стационарность есть неперемное условие, а проблема большой размерности, как будет показано далее, решается применением соответствующих методов вычисления.

Следует особо отметить, что интерес к использованию тех или иных методов исследования в настоящее время во многом определяется наличием программных средств, которые эти методы реализуют.

Цели настоящей работы сводились к следующему: рассмотреть все проблемы, возникающие при реализации классического SSA и предложить пути их решения непосредственно в численных алгоритмах.

Это должно открыть возможности создать соответствующие программные продукты для использования SSA в различных исследованиях.

В основном здесь рассмотрены вычислительные аспекты метода, но и общая идея, несомненно, может быть интересна и тем читателям, которые знакомятся с SSA впервые.

Теоретическая основа SSA

Рассмотрим следующее однородное интегральное уравнение:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p|x-y|} f(y) dy = \lambda f(x), \quad (1)$$

где параметр $p > 0$; λ — некоторое неизвестное число; $f(x)$ — неизвестная функция, являющаяся решением данной задачи.

Уравнение (1) есть частный случай однородного уравнения Фредгольма. Обычно коэффициент λ принято писать перед интегралом, но здесь следует подчеркнуть, что λ — это собственное значение интегрального оператора в левой части уравнения (1). Записанному в таком виде уравнению (1) можно поставить в соответствие дискретный матричный аналог:

$$\mathbf{R}\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X}, \quad (2)$$

где $\mathbf{R}$ — матрица с элементами $r_{ij} = R(i, j) = e^{-p|i-j|}$; $\mathbf{X}$ — неизвестный ненулевой вектор; λ — неизвестное собственное значение матрицы $\mathbf{R}$ (как и в уравнении (1)).

Вектор $\mathbf{X}$, удовлетворяющий уравнению (2), есть собственный вектор матрицы $\mathbf{R}$, равно как и функция $f(x)$, удовлетворяющая уравнению (1), есть собственная функция интегрального оператора с корреляционным ядром

$$R(x, y) = e^{-p|x-y|}$$

(см. далее).

Нетрудно показать, что функция вида

$$f_1(x) = \sin qx \text{ или } f_2(x) = \cos qx,$$

где $q > 0$, представляет собой решение уравнения (1).

Действительно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p|x-y|} \sin qy dy = \int_0^{\infty} e^{-pt} \sin q(x+t) dt + \int_0^{\infty} e^{-pt} \sin q(x-t) dt = 2 \sin qx \int_0^{\infty} e^{-pt} \cos qtdt$$

где $t = |x - y|$.

Вычислив последний интеграл или заглянув в таблицу преобразований Лапласа, получаем:

$$\int_0^{\infty} e^{-pt} \cos qtdt = \frac{p}{p^2 + q^2}.$$

Окончательно имеем уравнение вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p|x-y|} \sin qy dy = \frac{2p}{p^2 + q^2} \sin qx.$$

Аналогично получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-p|x-y|} \cos qy dy = \frac{2p}{p^2 + q^2} \cos qx,$$

т. е. в обоих случаях справедливо выражение

$$\lambda = \frac{2p}{p^2 + q^2}. \quad (3)$$

Из формулы (3) следует, что с увеличением частоты q уменьшается собственное значение λ , соответствующее этой частоте. В практических же задачах это соответствующая доля общей дисперсии (см. далее).

Из линейности определенного интеграла следует, что функции вида

$$f(x) = \alpha \sin qx + \beta \cos qx = A \sin(qx + \varphi) \quad (4)$$

при любых значениях коэффициентов α и β , а соответственно, и при любых значениях

$$\text{амплитуды } A = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \text{ и фазы } \varphi = \arcsin\left(\beta / \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}\right),$$

могут быть решениями уравнения (1), т. е. собственными функциями интегрального оператора в левой части этого уравнения.

В итоге видно, что решениями (2), т. е. собственными векторами матрицы $\mathbf{R}$ оказываются дискретные аналоги гармоник, но общее количество этих решений не превосходит размерности матрицы $\mathbf{R}$.

Из работ по анализу временных рядов (см. монографию [1]) известно, что функция дискретных аргументов

$$R(i, j) = e^{-p|i-j|} \quad (5)$$

при соответствующем подборе значения параметра p есть автокорреляционная функция некоторого стационарного временного ряда, принадлежащего классу дискретных процессов, которые можно описывать моделью авторегрессии первого порядка.

В итоге следует выделить главное: собственные векторы выборочной автокорреляционной матрицы стационарного ряда должны быть дискретными аналогами гармоник или быть достаточно близкими к гармоникам. При этом имеется возможность, что отклонения выборочной автокорреляционной функции от идеального случая, выраженного формулой (5), могут вести и к отклонениям собственных векторов матрицы автокорреляций от дискретных аналогов гармоник (это утверждение продемонстрировано далее, при этом предложен метод решения указанной проблемы).

Необходимо учитывать, что в случае стационарных временных рядов автоковариационная функция $C(i, j)$ отличается от автокорреляционной функции лишь множителем σ^2 , т. е. следует выражению

$$C(i, j) = \sigma^2 R(i, j) \quad (6)$$

(σ^2 — дисперсия членов временного ряда), поэтому и матрица взаимных ковариаций $\mathbf{C}$ отличается от автокорреляционной матрицы $\mathbf{R}$ лишь тем же множителем, т. е. $\mathbf{C} = \sigma^2 \mathbf{R}$.

Из этого следует, что эти матрицы имеют один и тот же набор нормированных собственных векторов с точностью до знака.

Из линейной алгебры известно, что собственные векторы симметричной вещественной матрицы взаимно ортогональны и при условии различных собственных значений образуют базис пространства R^N . С другой стороны, всякое i -е значение каждого из нормированных собственных векторов автоковариационной матрицы $\mathbf{C}$ соответствует некоторому



моменту времени τ_i , поэтому собственные векторы матрицы $\mathbf{C}$ рассматриваются как дискретные базисные функции времени (*англ.* Basis Time Function (BTF)):

$$\psi_j(\tau), j = 1, 2, \dots, N$$

(здесь и далее термин «дискретные» опускается).

Отметим, что каждая BTF служит носителем соответствующей доли общей дисперсии ($\sigma^2 N$) данного временного ряда. В научной литературе закрепилось и другое название: эмпирические ортогональные функции (*англ.* Empirical Orthogonal Functions (EOFs)). Однако, как будет показано далее, неременное требование строгой взаимной ортогональности целесообразно снять, поскольку это даст существенный положительный эффект.

Оценивание ковариаций

Будем предполагать, что исходные данные представляют собой временной ряд $\{y_i\}_{i=1}^N$, или в векторно-матричной форме как

$$\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$$

(T – оператор транспонирования).

Здесь необходимо вычислить оценки ковариаций, которые образуют матрицу $\mathbf{C}$. В ряде литературных источников (см., например, монографию [6]) предлагается использовать несмещенную оценку вида

$$\hat{c}_{ij} = \hat{c}(k) = \frac{1}{N-k} \sum_{t=1}^{N-k} (y_t - \bar{y})(y_{t+k} - \bar{y}), \quad (7)$$

где $k = |i - j|$; $\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N y_t$; $i, j = 1, 2, \dots, N$.

Однако в упомянутом выше (и весьма популярном) издании по анализу временных рядов [1] предлагается использовать смещенные оценки вида

$$\hat{c}_{ij} = \tilde{c}(k) = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{N-k} (y_t - \bar{y})(y_{t+k} - \bar{y}). \quad (8)$$

В качестве аргументации авторы этого издания Г. Дженкинс и Д. Ваттс рассмотрели непрерывный процесс авторегрессии первого порядка $Y(\tau)$, где τ – непрерывное время. Автоковариационная функция этого процесса есть непрерывный аналог выражения (6) с учетом формулы (5) как функция величины сдвига u , а оценки, аналогичные оценкам (7) и (8), вычисляемые на временном интервале $[0, T]$, соответственно имеют следующий вид:

$$\hat{c}(u) = \frac{1}{T-u} \int_0^{T-u} (Y(\tau) - \bar{Y})(Y(\tau+u) - \bar{Y}) d\tau, \quad (7a)$$

$$\tilde{c}(u) = \frac{1}{T} \int_0^{T-u} (Y(\tau) - \bar{Y})(Y(\tau+u) - \bar{Y}) d\tau, \quad (8a)$$

где $0 \leq u \leq T$, $\bar{Y} = \frac{1}{T} \int_0^T Y(\tau) d\tau$.

Стоит отметить, что в монографии [1], в правых частях формул (7a) и (8a), рассматривались как положительные, так и отрицательные значения запаздывания u . Поэтому в правых частях этих формул авторы использовали модуль $|u|$ вместо величины u .

Вычисляя дисперсии оценок (7a) и (8a), Г. Дженкинс и Д. Ваттс обнаружили, что дисперсия оценки $\tilde{c}(u)$ (см. формулу (8a)) стремится к нулю при $u \rightarrow T$, в то время как дисперсия оценки $\hat{c}(u)$ (см. формулу (7a)) не только не убывает, но и стремится к бесконечности в случае неограниченного интервала.

В связи с этим вполне естественно, что в дискретном случае использование оценки (7) приведет к завышенным по модулю значениям, по сравнению с их математическим ожиданием.

Отметим здесь еще один важный момент. Ковариационная матрица случайного вектора всегда положительно определена, или в случае, когда распределение вырождено и в спектре матрицы есть нули, — полуопределена. То же самое справедливо и для оценок этих матриц, а в SSA — для оценок, полученных по методу гусеницы. В нашей работе [7] обнаружилось, что применение оценок $\hat{c}_{ij}$ (7) к данным климатических температурных рядов привело к потере положительной определенности автоковариационных матриц. В спектрах этих матриц появились отрицательные значения. Следовательно, мы имеем еще один весомый аргумент к использованию оценок $\tilde{c}_{ij}$ (8).

Вычисление собственных значений и собственных векторов автоковариационной матрицы и решение проблемы большой размерности

После оценивания автоковариаций мы имеем дело уже не с исходным рядом, а с его автоковариационной матрицей. Первое, что существенно снижает интерес к SSA, — это перспектива вращать (приводить к диагональному виду) матрицу размерности $N \times N$ для вычисления ее спектра и собственных векторов (см. выше). Однако применение метода итераций фон Мизеса [8], как будет показано в настоящем разделе, полностью решает проблему большой размерности и позволяет применять SSA к анализу временных рядов произвольной длины. Это обеспечивается тем фактом, что вся информация об автоковариационной матрице содержится в ее первой строке.

Прежде чем изложить суть алгоритма и метод решения проблемы большой размерности, напомним, что евклидова норма вектора $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ определяется равенством

$$\|\mathbf{X}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N x_i^2}.$$

Для того чтобы не вводить дополнительных обозначений переменных, будем использовать знак $:=$ (присвоить значение). Предварительно задаем точность вычислений $\varepsilon > 0$, а количество вычисленных собственных векторов m считаем равным нулю ($m = 0$). Нижний индекс присваивается для указания номера собственного вектора или номера компоненты, а верхний ($0, n, n + 1$, см. далее) будет использован для указания номера итерации циклической части алгоритма.

Алгоритм 1. Шаг 0 (предварительная часть алгоритма ($n := 0$)).

Присвоение компонентам вектора $\mathbf{X}^0$ произвольных значений; Нормирование

$$\mathbf{X}^0 := \|\mathbf{X}^0\|^{-1} \mathbf{X}^0. \quad (9)$$

Если всем компонентам $\mathbf{X}^0$ присвоить значения $1/\sqrt{N}$, то нормирование (9) не требуется.

Шаг 1 (циклическая часть алгоритма, $n \geq 0$).

Умножение на матрицу $\tilde{\mathbf{C}}$:

$$\mathbf{X}^{n+1} := \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{X}^n. \quad (10)$$

Шаг 2. Вычисление приближения к собственному значению:

$$l^n := (\tilde{\mathbf{C}}\mathbf{X}^n)^T \mathbf{X}^n = (\mathbf{X}^{n+1})^T \mathbf{X}^n. \quad (11)$$

Вычисленное по формуле (11) значение l^n известно как частное Рэлея. Здесь деление на $(\mathbf{X}^n)^T \mathbf{X}^n$ отсутствует, так как ввиду нормирования выполняется равенство $(\mathbf{X}^n)^T \mathbf{X}^n = 1$.

Шаг 3. Нормирование нового значения приближения собственного вектора:

$$\mathbf{X}^{n+1} := \|\mathbf{X}^{n+1}\|^{-1} \mathbf{X}^{n+1}. \quad (12)$$

Шаг 4. Вычисление косинуса угла φ_n между последовательными приближениями собственного вектора:

$$\cos \varphi_n := (\mathbf{X}^{n+1})^T \mathbf{X}^n. \quad (13)$$



Шаг 5. Проверка условия завершения циклической части:

$$\cos \varphi_n \geq 1 - \varepsilon. \quad (14)$$

Если условие (14) не выполнено, то возвращаемся к шагу 1 (действию формулы (10)). При выполнении условия (14) увеличиваем количество собственных векторов $m := m + 1$ и завершаем процесс вычисления собственного вектора и собственного значения $\mathbf{X}_m := \mathbf{X}^{n+1}, \lambda_m := l^n$.

Конец Алгоритма 1.

Очевидно, что с большой размерностью мы сталкиваемся главным образом в действии, описанном формулой (10), где приближение собственного вектора умножается на матрицу $\tilde{\mathbf{C}}$ размерности $N \times N$. Однако, как уже отмечено выше, все элементы $\tilde{c}_{ij}$ матрицы есть элементы множества оценок ковариаций (см. формулу (8)). В частности, множество элементов первой строки матрицы $\tilde{\mathbf{C}}$ есть

$$\{\tilde{c}_{1j} = \tilde{c}(j-1), j = 1, 2, \dots, N\},$$

а все остальные строки состоят из этих же элементов.

В связи с этим нет необходимости хранения в оперативной памяти всей матрицы $\tilde{\mathbf{C}}$, а компоненты вектора $\mathbf{X}^{n+1}$ в формуле (10) можно вычислить следующим образом [9]:

$$\begin{aligned} x_1^{n+1} &:= \sum_{j=1}^N \tilde{c}(j-1)x_j^n; & x_N^{n+1} &:= \sum_{j=1}^N \tilde{c}(N-j)x_j^n; \\ x_i^{n+1} &:= \sum_{j=1}^i \tilde{c}(i-j)x_j^n + \sum_{j=i+1}^N \tilde{c}(j-i)x_j^n \quad (i = 2, 3, \dots, N-1). \end{aligned}$$

Здесь нижний индекс есть номер компоненты соответствующего вектора.

Если использовать модуль разности i и j , т. е. $|i-j|$, то можно обойтись одной формулой, удобной в программной реализации:

$$x_i^{n+1} := \sum_{j=1}^N \tilde{c}(|i-j|)x_j^n \quad (i = 1, 2, \dots, N). \quad (10a)$$

Анализ Алгоритма 1 с применением формулы (10a) приводит к заключению, что он полностью решает проблему большой размерности.

Замечание 1. Нетрудно показать (и это очень важный момент), что Алгоритм 1 в качестве λ_1 дает максимальное собственное значение.

Применение Алгоритма 1 для вычисления следующих собственных значений и собственных векторов автоковариационной матрицы $\mathbf{C}$ потребует выполнения ортогонализации Грамма – Шмидта. Так, если вычислено m нормированных собственных векторов $\{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_m\}$ и требуется вычислить следующий вектор, то необходимо выполнять следующие действия:

$$\mathbf{X}^0 := \mathbf{X}^0 - \sum_{j=1}^m (\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}^0) \mathbf{X}_j, \quad (15)$$

$$\mathbf{X}^{n+1} := \mathbf{X}^{n+1} - \sum_{j=1}^m (\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}^{n+1}) \mathbf{X}_j. \quad (16)$$

Ортогонализацию приближения вектора $\mathbf{X}^0$ (15) следует выполнять непосредственно перед нормированием (9), а ортогонализацию вектора $\mathbf{X}^{n+1}$ (16) – перед нормированием (12). При полном отсутствии погрешности вычислений достаточно ортогонализации (15). Однако ошибки вычислений неизбежны, хотя бы из-за округления. Поэтому ортогонализация (16) не позволит этим ошибкам увести последовательные приближения следующего собственного вектора в пространство уже вычисленных собственных векторов.

Проблема большой размерности возникает вновь из-за множества векторов $\{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_m\}$, которое с ростом m от нуля до N приводит к необходимости хранения большого объема информации ($m \times N$ чисел).

На данный момент, когда оперативная память компьютеров достаточно велика, эта проблема теряет свою актуальность. Ранее вычисленные собственные векторы можно было сразу записывать в память (на диск) компьютера и извлекать (считывать) из памяти (с диска) компьютера последовательно для реализации процедуры ортогонализации (см. формулы (15) и (16)), что вполне реализуемо на уровне программного продукта, решающего эту задачу.

Таким образом, проблема большой размерности в SSA временных рядов относительно большой длины полностью решена.

Оценка периода базисной функции времени (ВТФ)

Технически задача оценка периода ВТФ не представляется сложной. Пусть $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ – это один из вычисленных собственных векторов матрицы $\tilde{\mathbf{C}}$, т. е. ВТФ (см. выше). Множество нулей ВТФ будем обозначать $\{z_1, z_2, \dots, z_p\}$. Для вычисления периода ВТФ используем следующий простой алгоритм.

Алгоритм 2. Шаг 0. Предварительно количеству нулей присвоим значение 0, т. е. $p := 0$.

Шаг 1. Пусть номер j (номер компоненты вектора $\mathbf{X}$) пробегает значения от 1 до N .

Если $x_j = 0$ или $x_j x_{j+1} < 0$, то $p := p + 1$, $z_p := j$.

Шаг 2. Присваиваем номеру j значение z_1 ($j := z_1$).

Если $|x_j| \leq |x_{j+1}|$, то $z_1 := j + |x_j|/(|x_j| + |x_{j+1}|)$.

Если же $|x_j| > |x_{j+1}|$, то $z_1 := j + 1 - |x_{j+1}|/(|x_j| + |x_{j+1}|)$.

Шаг 3. Повторяем шаг 2, заменяя z_1 на z_p .

Шаг 4. Вычисляем значение периода по формуле

$$T = \frac{2}{p-1} \sum_{i=1}^{p-1} (z_{i+1} - z_i) = \frac{2(z_p - z_1)}{p-1}. \quad (17)$$

Конец Алгоритма 2.

Как нетрудно заметить, шаг 1 Алгоритма 2 определяет множество точек, предшествующих нулям (непрерывной, т. е. воображаемой) ВТФ, среди которых с очень малой вероятностью могут оказаться и нули. Как следует из шага 4, период вычисляется с использованием только первого и последнего элементов этого упорядоченного множества (z_1 и z_p). Поэтому на втором и третьем шагах эти значения уточняются.

В нашей работе [10] оценка периода (17) была использована без второго и третьего шагов Алгоритма 2 (без уточнения значений z_1 и z_p). Идея такого подхода состоит в том, что погрешности определения значений z_1 и z_p , полученных на шаге 1 и фигурирующих в формуле (17), как правило, существенно меньше разности (см. формулу (17)) между этими значениями. Однако если учесть, что в окрестности нуля синusoида близка к прямой, то значения z_1 и z_p можно уточнить, что и осуществляется на втором и третьем шагах Алгоритма 2.

Кроме оценки периода (17), в работе [10] использовалась и оценка на основе не нулей, а экстремумов. При этом, как и в Алгоритме 2, сначала количество экстремумов принималось $q := 0$ и далее вычислялось множество точек экстремумов $\{u_1, u_2, \dots, u_q\}$ по правилу:

($j := 1, 2, \dots, N$); если $|x_{j-1}| \leq |x_j| \geq |x_{j+1}|$, то $q := q + 1$, $u_q := j$.

Величина периода вычислялась по аналогичной формуле:

$$T' = \frac{2(u_q - u_1)}{q-1}. \quad (17a)$$

Значения u_1 и u_q в этой формуле не требуют уточнений в силу вспомогательной роли оценки T' : явно выраженное неравенство $T > T'$ может служить индикатором наложения относительно высокой частоты в структуре ВТФ, что будет продемонстрировано в следующем разделе.

Здесь следует отметить, что на этом этапе завершено описание SSA, которое включает в себя оценки автоковариаций, вычисление собственных векторов автоковариационной матрицы и оценки периодов собственных векторов, рассматриваемых как ВТФ.

Далее рассмотрены проблемы, решение которых ведет к существенной модификации SSA.



Проблема повторяющихся частот и частотных наложений

Результаты первого применения описанного выше метода были опубликованы в нашей статье [10]. Рис. 1 из этой статьи графически представляет первые четыре ВТФ ряда среднегодовых значений приземной температуры воздуха в Санкт-Петербурге-Петрограде-Ленинграде-Санкт-Петербурге за 120 лет (1881 – 2000). Видно, что эти ВТФ лишь напоминают гармоники, так как не обладают постоянством амплитуды и периода.

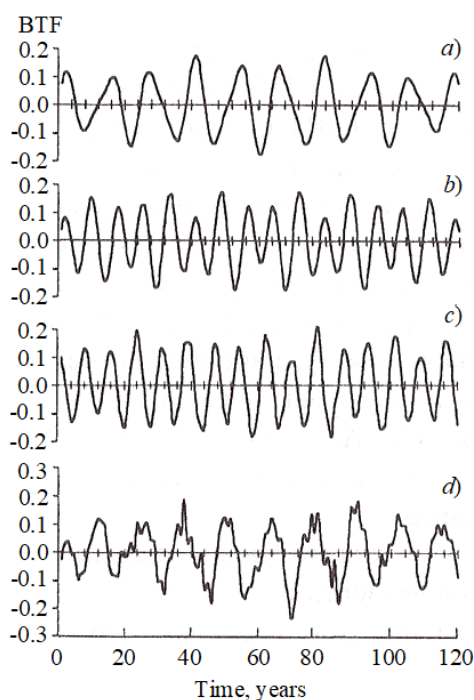


Рис. 1. Первые 4 базисные функции времени (ВТФ) среднегодовой температуры в Санкт-Петербурге-Петрограде-Ленинграде-Санкт-Петербурге за 120 лет (1881 – 2000), полученные методом SSA (Пример 1, см. работу [10])

ные. На рис. 1, *a – c* можно видеть наложения относительно низкой частоты, которые приводят к нестабильности амплитуды, и, вообще говоря, не затрудняют оценку периода ($T \approx T'$), что было показано выше на примере X_2 и X_3 . На рис. 1, *d*, где представлен вектор X_4 , имеет место наложение относительно высоких частот ($T > T'$: $T = 10,17$ года, а $T' = 3,90$ года). Это придает гребням гармоник зубчатый вид. Нетрудно заметить, что если эти зубья расположены вблизи пересечения с осью, то могут появиться дополнительные нули, искажающие оценку (17), т. е. оценка основного периода T окажется ошибочной. В этой ситуации стоит воздержаться от применения термина «шум» по двум причинам. Во-первых, чтобы объединить оба случая, учитывая при этом, что относительно низкочастотные наложения не принято называть шумом, а во-вторых, потому что шумом называют чужеродную составляющую исходного ряда, тогда как мы имеем дело с ВТФ.

В работе [10] для решения этой проблемы предлагалось применить данный метод (Алгоритм 1) к самим ВТФ, выделяя таким образом основное колебание. Очевидно, что такой подход к решению проблемы трудно реализовать в едином программном продукте, так как он приводит к разветвленному алгоритму. Поэтому здесь предлагается другое решение этой проблемы.

Поскольку такое явление нередко имеет место и в реальных данных наблюдений, климатологи избегают термина «периодичность», заменяя его термином «цикличность». Статья [10] практически не раскрывала всей математической сути метода, т. е. она не раскрывала метод вычисления собственных векторов (ВТФ) и не содержала формулу (10а), но при этом позволила выявить две проблемы.

Первая, менее существенная, состоит в том, что мы одну и ту же частоту (один и тот же период) можем получить дважды из-за взаимной ортогональности гармоник, которые сдвинуты относительно друг друга на четверть периода как функции $\sin t$ и $\cos t$. Эта проблема решается относительно просто через сложение собственных значений (т. е. дисперсий) этой частоты. Например, достаточно близки периоды второй и третьей ВТФ:

$$X_2 (T = 7,86 \text{ года}, T' = 7,80 \text{ года}), \\ X_3 (T = 7,73 \text{ года}, T' = 7,79 \text{ года}).$$

В разделе «Численные примеры...» мы дадим объяснения тому, почему небольшие расхождения периода можно игнорировать и считать подобные случаи повторениями.

Вторая проблема состоит в наличии частотных наложений в структуре ВТФ, которые бывают двух типов: относительно низкочастотные и относительно высокочастотные.

Решение проблем повторяющихся частот и частотных наложений.

Метод «кочан капусты»

После оценки ковариаций вычислим лишь первую ВТФ ($\mathbf{X}_1$) и оценку периода $T(T_1 := T)$. Затем вычтем данную периодическую составляющую из исходного центрированного ряда $\mathbf{Y}_0$ ($\mathbf{Y}_0 = \mathbf{Y} - \bar{y}\mathbf{1}$, все элементы вектора $\mathbf{1}$ равны единице) используя формулу, аналогичную формулам ортогонализации (см. формулы (15) и (16)):

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_0 - \alpha \mathbf{X}_s(T_1) - \beta \mathbf{X}_c(T_1), \quad (18)$$

где компоненты векторов $\mathbf{X}_s(T_1)$ и $\mathbf{X}_c(T_1)$ соответственно выражаются как

$$x_{sj} = \sin\left(\frac{2\pi(j-1)}{T_1}\right), x_{cj} = \cos\left(\frac{2\pi(j-1)}{T_1}\right), j = 1, 2, \dots, N,$$

В общем случае векторы $\mathbf{X}_s(T_1)$ и $\mathbf{X}_c(T_1)$ не являются строго взаимно ортогональными. Последнее имеет место лишь в случае, когда полупериод $T_1/2$ делит длину ряда N нацело. Поэтому составим из столбцов (векторов) $\mathbf{X}_s(T_1)$ и $\mathbf{X}_c(T_1)$ матрицу $\mathbf{X}(T_1)$ размерности $N \times 2$ следующего вида:

$$\mathbf{X}(T_1) = (\mathbf{X}_s(T_1), \mathbf{X}_c(T_1)).$$

Тогда значения коэффициентов α и β в выражении (18) получаем по формуле

$$(\alpha, \beta)^T = (\mathbf{X}^T(T_1)\mathbf{X}(T_1))^{-1}\mathbf{X}^T(T_1)\mathbf{Y}_0.$$

Дисперсию, объясняемую этой периодичностью T_1 , оценим как разность значений

$$\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_1) = \text{var}(\mathbf{Y}_0) - \text{var}(\mathbf{Y}_1) = (\tilde{c}_0(0) - \tilde{c}_1(0))N, \quad (19)$$

где $\tilde{c}_0(0)$ — оценка дисперсии σ^2 исходных членов ряда; $\tilde{c}_1(0)$ — оценка дисперсии членов ряда, полученного после применения формулы (18).

Другими словами, данная периодичность T_1 представляет собой носитель дисперсии $\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_1)$. Очевидно, что для значения, полученного по формуле (19), должно выполняться соотношение $\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_1) \geq \lambda_1$ в силу того, что выполнение процедуры (18) решает проблему повторяющихся частот. Такая процедура, несомненно, эффективнее, чем непосредственное вычитание проекции $\mathbf{Y}_0$ на $\mathbf{X}_1$, которое, с учетом нормирования $\mathbf{X}_1$, имеет вид

$$\mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_0 - (\mathbf{Y}_0^T \mathbf{X}_1) \mathbf{X}_1 = \mathbf{Y}_0 - \sqrt{\lambda_1} \mathbf{X}_1. \quad (20)$$

В последнем случае

$$\mathbf{Y}_1^T \mathbf{Y}_1 = \mathbf{Y}_0^T \mathbf{Y}_0 - \lambda_1 = \tilde{c}(0)N - \lambda_1$$

(см. далее формулу (23)).

Преимущество нового подхода проще объяснить на языке линейной алгебры. В равенствах (20) мы вычитаем из вектора $\mathbf{Y}_0$ его ортогональную проекцию на линейное пространство, порожденное вектором $\mathbf{X}_1$. Однако, если игнорировать частотные наложения, то в силу того, что T_1 есть период $\mathbf{X}_1$, мы можем воспроизвести $\mathbf{X}_1$ как линейную комбинацию векторов $\mathbf{X}_s(T_1)$ и $\mathbf{X}_c(T_1)$, т. е.

$$\mathbf{X}_1 \in \Lambda(\{\mathbf{X}_s(T_1), \mathbf{X}_c(T_1)\}),$$

или

$$\Lambda(\{\mathbf{X}_1\}) \subset \Lambda(\{\mathbf{X}_s(T_1), \mathbf{X}_c(T_1)\}), \quad (21)$$

где $\Lambda(\{*\})$ — линейная оболочка множества $\{*\}$.

Отсюда следует, что ортогональная проекция центрированного ряда

$$(\text{вектора } \mathbf{Y}_0 \text{ на } \Lambda(\{\mathbf{X}_s(T_1), \mathbf{X}_c(T_1)\})),$$

вычитаемая в формуле (18), не может быть меньше ортогональной проекции $\mathbf{Y}_0$ на пространство, порожденное $\mathbf{X}_1$, т. е. $\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_1)$ не может быть меньше λ_1 ($\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_1) \geq \lambda_1$).



К этому следует добавить и большую корректность формулы (18), по сравнению с (20), так как вычитаются гармоники, а не их приблизительное подобие. Ниже мы неоднократно еще подчеркнем этот важный момент.

Далее применим к ряду Y_1 , полученному по формуле (18), определенную последовательность действий, т. е. следующий алгоритм.

Алгоритм 3 (модифицированный SSA).

Шаг 1. Оценка автоковариаций (использовать формулу (8)).

Шаг 2. Вычисление только первой BTF (по Алгоритму 1).

Шаг 3. Оценка периода BTF (по Алгоритму 2);

Шаг 4. Извлечение полученной периодичности (использовать формулу (18)) и оценка ее доли дисперсии (формула (19)).

Конец Алгоритма 3.

Продолжая этот процесс (повторяя Алгоритм 3), мы получим последовательность значений периода T_j и дисперсии $\Delta \text{var}(Y_j)$, $j = 1, 2, \dots$, «раздевая» исходный временной ряд по периодам (частотам), как кочан капусты по листу.

Накопленная дисперсия извлеченных периодичностей на j -м шаге следует выражению (см. формулу для дисперсии (19)):

$$\text{Total var}_j = \sum_{l=1}^j \Delta \text{var}(Y_l) = (\tilde{c}_0(0) - \tilde{c}_j(0))N.$$

Далее мы проиллюстрируем на численных примерах действие метода модифицированного SSA, который дополним словосочетанием «кочан капусты» (англ. SSA – Head of Cabbage (SSA–HC)).

Численные примеры и дальнейшая трактовка метода SSA–HC

Пример 1. В качестве первого примера рассмотрим все тот же ряд среднегодовых значений приземной температуры Санкт-Петербурга-Петрограда-Ленинграда-Санкт-Петербурга за 120 лет (1881 – 2000). Однако, в отличие от работы [10], где исходные данные были предоставлены непосредственно климатологами Главной геофизической обсерватории им. А. И. Воейкова (г. Санкт-Петербург, Россия), в этом численном примере использованы сведения из интернет-сайта [11], где климатические данные представлены в округленном виде (до одной десятой градуса).

В табл. 1 приведены первые пятнадцать шагов применения SSA–HC для анализа вышеуказанных среднегодовых значений приземной температуры. Кроме того, в таблицу включены собственные значения $\lambda_1(j)$, соответствующие собственным векторам $X_1(j)$ (BTF), которые вычислены на втором шаге Алгоритма 3 и на j -м шаге (повторении) алгоритма SSA–HC. Эти значения приведены в процентах от общей дисперсии исходного временного ряда Y_0 , т. е. согласно формуле

$$\lambda_1(j) := \frac{\lambda_1(j) \cdot 100\%}{\text{tr} \tilde{C}_0} = \frac{\lambda_1(j) \cdot 100\%}{\tilde{c}_0(0) \cdot N},$$

где $\text{tr} \tilde{C}_0$ – след автоковариационной матрицы исходного временного ряда (Y_0); $\tilde{c}_0(0)$ – ее диагональный элемент, равный дисперсии члена ряда; $N = 120$.

Также преобразовываются и все остальные величины, относящиеся к дисперсии. Суммируя 15 значений третьего столбца табл. 1, получаем величину 33,888 %, что чуть выше половины значения Total var_{15} (66,733 %, см. табл. 1), а это объясняется соотношением

$$\Lambda(\{X_1(j)\}_{j=1}^k) \subset \Lambda(\{X_s(T_j), X_c(T_j)\}_{j=1}^k), \quad (22)$$

причем j – шаг SSA–HC, $k = 15$.

Это соотношение (22) следует из выражения (21), которое справедливо и для всех $j \geq 2$.

При использовании метода SSA–HC график первой BTF (рис. 2, а), естественно, не изменился (см. рис. 1, а), т. е. округление данных из интернет-сайта [11] не оказало существенного влияния.

Отметим важный момент. В структуре BTF $X_1(j)$, полученных методом SSA–HC и представленных на рис. 2, а также других, там не представленных, наблюдаются лишь

Таблица 1

Результаты применения метода SSA-НС к временному ряду
среднегодовых значений приземной температуры в Санкт-Петербурге-
Петрограде-Ленинграде-Санкт-Петербурге за 120 лет (Пример 1)

J	T_j	$\lambda_1(j)$	$\Delta\text{var}(\mathbf{Y}_j)$	Total var _{j}
	лет	%		
1	13,012	3,915	7,912	7,912
2	7,752	3,641	8,163	16,075
3	2,249	3,304	7,556	23,631
4	4,963	2,761	4,939	28,571
5	2,673	2,652	5,270	33,841
6	5,761	2,571	4,950	38,791
7	2,364	2,469	4,788	43,578
8	3,401	2,256	3,865	47,443
9	4,729	2,092	3,529	50,973
10	3,687	2,061	3,215	54,187
11	11,167	2,006	2,794	56,982
12	2,052	1,930	2,384	59,366
13	20,599	1,816	2,714	62,080
14	8,799	1,794	2,336	64,416
15	4,416	1,619	2,318	66,733

Обозначения: SSA–НС – модифицированный анализ сингулярного спектра, названный термином «кочан капусты»; j – шаг SSA–НС (количество повторений Алгоритма 3); T_j – период $\mathbf{X}_1(j)$, т. е. BTF, полученной на j -м шаге; $\lambda_1(j)$ – собственное значение, отвечающее вектору $\mathbf{X}_1(j)$ (дано в процентах от общей дисперсии исходного временного ряда $\mathbf{Y}_0$); $\Delta\text{var}(\mathbf{Y}_j)$ – дисперсия, объясняемая периодом T_j ; Total var _{j} – накопленная дисперсия периодичностей, извлеченных за j шагов.

Примечания. 1. Временной ряд охватывает период с 1881 до 2000 г. ($N = 120$). 2. Представлены первые 15 шагов применения метода SSA-НС. 3. Значения T_j , которые повторили результаты работы [10], выделены жирным шрифтом.

наложения относительно низкочастотных колебаний. Последние, в отличие от наложений относительно высокочастотных колебаний, не препятствуют адекватной оценке периода, которая используется в SSA-НС (см. формулу (18)).

Для сравнения методов SSA-НС и SSA в табл. 2 приведены результаты применения SSA к тому же ряду температурных данных (см. табл. 1) [11].

Принципиальное различие табл. 2 и 1 состоит в том, что в табл. 1 значения $\lambda_1(j)$ были приведены лишь для иллюстрации соотношения (22), которое косвенно свидетельствует о лучшей результативности метода SSA-НС, по сравнению с SSA. В случае применения SSA роль $\Delta\text{var}(\mathbf{Y}_j)$ играет само значение λ_j как величины дисперсии, которая обусловлена периодом колебаний температуры T_j . Поэтому значения накопленной дисперсии Total var _{j} получаются путем суммирования значений λ_i ($i = 1, 2, \dots, j$). На 15-м шаге применения SSA накопленная дисперсия составляет 49,387 % от общей дисперсии ряда, что на 17,346 % меньше, чем в случае применения SSA-НС (см. табл. 1).

Однако здесь имеет место еще один достаточно интересный момент. Анализ данных табл. 2 показывает, что при обычном SSA значение доли дисперсии $\lambda_1 = 3,915$ % объясняется периодом в 13 лет (точное значение 13,012 г.). Ниже в табл. 2 мы видим, что практически тот же период в 13 лет (в табл. 2 это значение 12,890 г.) объясняет и дисперсию $\lambda_4 = 3,873$ %. В результате сложения получается значение 7,787 %. В табл. 1, где даны результаты применения метода SSA-НС, значение $\text{var}(\mathbf{Y}_1) = 7,912$ % тоже объясняется



Таблица 2

Результаты применения метода SSA к временному ряду среднегодовых значений приземной температуры в Санкт-Петербурге-Петрограде-Ленинграде-Санкт-Петербурге за 120 лет (Пример 1)

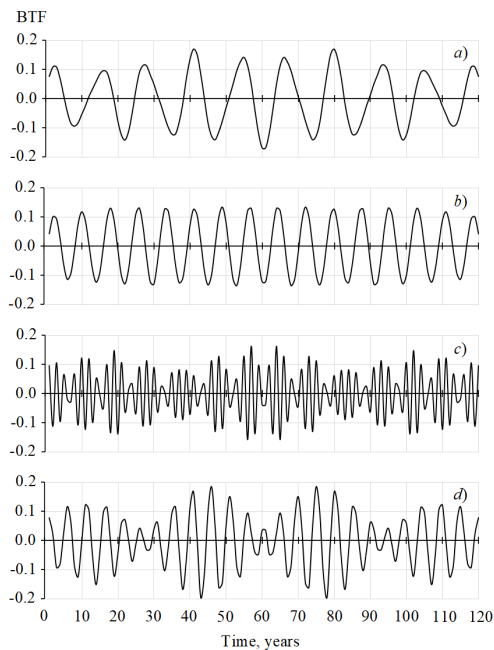


Рис. 2. Графики четырех BTF, аналогичные приведенным на рис. 1, но полученные методом SSA-НС

периодом 13 лет. Небольшое относительное расхождение между этими величинами дисперсии, равное 1,605 %, можно объяснить лишь тем, что относительно низкочастотные наложения (см. рис. 2,а), которые влияют на амплитуду, не исключаемые в SSA, оказывают отрицательное воздействие:

$$7,912\% \approx 7,787\%, \\ \text{но все же } 7,912\% > 7,787\%.$$

Напомним, что в SSA-НС мы извлекаем из ряда «чистые» гармоники, а не их приблизительное подобие, и оцениваем объясняемую ими дисперсию.

Главное, на что здесь следует обратить внимание, — это отсутствие в табл. 1 столь близких значений к периоду 13,012 года (повторений).

Здесь, как было обещано выше, мы объясним, почему близкие значения периода в табл. 2 можно считать повторением, например, 13,012 года и 12,890 года (относительное различие 0,946 %). Наш исследуемый ряд является дискретным представлением непрерывного процесса, спектр которого также непрерывен. Это косвенно отражено в Алгоритме 2. Извлекая из ряда гармонику с периодом T , что, собственно, и делается в SSA-НС, мы при этом для некоторого числа $\delta > 0$ такого, что отношение δ/T мало, существенно приближаем к нулю дисперсии периодичностей из целого интервала $(T - \delta; T + \delta)$. Поэтому значения периода, которые близки к 13,012 г., в SSA-НС могут встретиться при продолжении табл. 2 лишь с пренебрежимо малым значением дисперсии. Очевидно, что взаимная ортогональность BTF с близкими значениями периодов, полученных обычным SSA, имеет место не за счет этого небольшого расхождения величины периода, а за счет взаимного фазового сдвига приблизительно на четверть периода, как в случае с функциями $\sin t$ и $\cos t$.

Аналогичная ситуация имеет место и с близкими значениями периода 7,786 г. и 7,754 г. (см. табл. 2, относительное различие составляет 0,413 %). Складывая дисперсии, объясняемые этими периодами, получаем значение меньше, чем оценка дисперсии

j	T_j	$\lambda_j(j)$	Total var _j
	лет	%	
1	13,012	3,915	3,915
2	7,786	3,741	7,656
3	2,249	3,292	10,948
4	12,890	3,873	14,821
5	7,754	3,744	18,565
6	2,256	3,241	21,806
7	2,995	3,096	24,902
8	2,801	3,107	28,009
9	2,473	3,139	31,148
10	3,886	3,106	34,254
11	3,231	3,006	37,261
12	4,015	3,247	40,508
13	3,790	3,056	43,564
14	3,097	2,980	46,545
15	3,950	2,842	49,387

Примечания. 1. Обозначения идентичны использованным в табл. 1. 2. Временной ряд охватывает период с 1881 до 2000 г. ($N = 120$). 3. Представлены первые 15 шагов применения метода SSA. 4. Исходные данные взяты из интернет-сайта [11].

периодичности 7,752 г. (см. табл. 1), полученная методом SSA-НС:

$$3,741 \% + 3,744 \% = 7,485 \% < 8,163 \%$$

Эти результаты вызывают некоторые сомнения относительно оптимальности обычного SSA.

Прежде чем рассматривать следующий пример, разясним несколько подробнее суть отличия метода SSA-НС от SSA.

В SSA центрированный исходный временной ряд в векторно-матричной форме, как нетрудно проверить, может быть представлен формулой

$$\mathbf{Y}_0 = \hat{\mathbf{Y}}_k + \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{j=1}^k \sqrt{\lambda_j} \mathbf{X}_j + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (23)$$

где $\{\lambda_j, \mathbf{X}_j\}_{j=1}^k$ – собственные значения и нормированные собственные векторы автокорреляционной матрицы исходного ряда ($k < N$); $\boldsymbol{\varepsilon}$ – вектор погрешностей представления (23).

В терминах функций времени формула (23) принимает вид

$$y_0(\tau_i) = \sum_{j=1}^k \sqrt{\lambda_j} \psi_j(\tau_i) + \varepsilon(\tau_i), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (23a)$$

где $\{\psi_j(\tau)\}_{j=1}^k$ – это функции $\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^k$, рассматриваемые как ВТФ (см. раздел «Теоретическая основа SSA»).

При этом $\hat{\mathbf{Y}}_k$ есть ортогональная проекция $\mathbf{Y}_0$ на пространство, порожденное взаимно ортогональными собственными векторами матрицы $\tilde{\mathbf{C}}_0$, т. е. на $\Lambda(\{\mathbf{X}_j\}_{j=1}^k)$. Ортогональ-

ность проекции следует из того, что метод главных компонент (PCA) возник когда-то на основе метода наименьших квадратов (англ. Ordinary Least Squares (OLS), см. нашу статью

[12]). Поэтому он должен обеспечивать минимизацию суммы невязок $\sum_{i=1}^N \varepsilon^2(\tau_i)$. Однако в

случае применения PCA к стационарным временным рядам, т. е. в случае SSA, это далеко не так из-за возможного повторения частот (периодов), что и было показано на примере температурного ряда.

В SSA-НС вместо формулы (23) мы имеем представление вида

$$\mathbf{Y}_0 = \tilde{\mathbf{Y}}_k + \boldsymbol{\delta} = \sum_{j=1}^k \left\{ \alpha_j \mathbf{X}_s(T_j) + \beta_j \mathbf{X}_c(T_j) \right\} + \boldsymbol{\delta}, \quad (24)$$

или в терминах функций времени –

$$y_0(\tau_i) = \sum_{j=1}^k A_j \sin(2\pi\tau_i/T_j + \varphi_j) + \delta(\tau_i), \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (24a)$$

где амплитуда A_j и фаза φ_j вычисляются на основе значений α_j и β_j , как в формуле (4), а период T_j определяется из формы вектора $\mathbf{X}_1(j)$, рассматриваемого как ВТФ, следуя Алгоритму 2.

Таким образом, при использовании метода SSA-НС мы пошагово применяем PCA (т. е. по сути метод OLS) для нахождения формы колебания максимальной дисперсии $\mathbf{X}_1(j)$ среди оставшихся из возможных (см. Алгоритм 1 и Замечание 1). Далее, определив период T_j этой ВТФ ($\mathbf{X}_1(j)$, см. Алгоритм 2), мы выполняем преобразование (18), т. е. переходим к разложению по гармоникам (см. Алгоритм 3).

Проекция $\tilde{\mathbf{Y}}_k$ на $\Lambda(\{\mathbf{X}_s(T_j), \mathbf{X}_c(T_j)\}_{j=1}^k)$ не является строго ортогональной в силу того, что получена пошагово. Это означает, что сочетание последовательных шагов SSA с гармоническим анализом в методе SSA-НС приводит к отказу от жестких требований ортогональности. При этом для доказательства большей результативности SSA-НС, по



сравнению с SSA, мы не можем брать за основу соотношение (22), так как

$$\Lambda\left(\left\{\mathbf{X}_j\right\}_{j=1}^k\right) \neq \Lambda\left(\left\{\mathbf{X}_1(j)\right\}_{j=1}^k\right),$$

поскольку $\left\{\mathbf{X}_j\right\}_{j=1}^k$ – это множество собственных векторов $\tilde{\mathbf{C}}_0$, а $\left\{\mathbf{X}_1(j)\right\}_{j=1}^k$ – это множество первых собственных векторов (см. Алгоритм 1 и Замечание 1) последовательности матриц $\mathbf{C}_{j-1}$ ($j = 1, 2, \dots, k$).

И тем не менее, мы вправе ожидать большей результативности SSA-НС, по сравнению с SSA (а сравнение данных в табл. 1 и 2 это подтверждает), что при фиксированном k можно выразить неравенством

$$\sum_{i=1}^N \delta^2(\tau_i) \leq \sum_{i=1}^N \varepsilon^2(\tau_i),$$

или

$$\|\tilde{\mathbf{Y}}_k\| \geq \|\hat{\mathbf{Y}}_k\| \quad (25)$$

уже в силу того, что $\tilde{\mathbf{Y}}_k$ есть проекция (пусть и не строго ортогональная) на пространство существенно большей размерности, т. е.

$$\dim \Lambda\left(\left\{\mathbf{X}_s(T_j), \mathbf{X}_c(T_j)\right\}_{j=1}^k\right) > \dim \Lambda\left(\left\{\mathbf{X}_j\right\}_{j=1}^k\right).$$

Если возвести неравенство (25) в квадрат, то получается соответствующее неравенство для величин общих дисперсий этих составляющих исходного ряда.

Еще раз подчеркнем, что представление временного ряда (24) – не только более результативно, по сравнению с (23), но и более корректно в отношении гармонического спектрального анализа, так как в (24) мы представляем ряд именно гармониками, а не их приближительным подобием.

Пример 2. В качестве второго примера рассмотрим ряд ($N = 488$) значений давления, полученных на дне (за уступом) экспериментального лотка гидравлической лаборатории инженерно-строительного факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (ныне носит название «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»). С подробностями эксперимента можно ознакомиться в работе [13]. Значения были любезно предоставлены автором статьи [13]. Они даны в условных единицах (в миллиметрах водяного столба). Для Примера 2 были взяты значения с интервалом в 0,32 с. В табл. 3 приведены первые 15 шагов применения метода SSA-НС к этому ряду, где все значения представлены в процентах от дисперсии исходного ряда.

Здесь, как следует из пятого столбца табл. 3, 15 шагов применения метода SSA-НС набирают 44,522 % от общей дисперсии (см. Total var_{15}). Однако с учетом длины исходного ряда, $N = 488$, это значение демонстрирует, что относительная скорость накопления дисперсии оказывается в 2,7 раза выше, чем в случае ряда среднегодовых значений приземной температуры (см. Пример 1).

На рис. 3 представлены первые 4 ВТФ, вычисленные методом SSA-НС для ряда значений давления на дне экспериментального лотка. Напомним, что эти ВТФ являются собственными векторами последовательности автоковариационных матриц.

Замечание 2. Следует учесть, что при вычитании гармоник (см. формулу (18)) среднее значение оставшегося ряда может отклоняться от нуля как в положительную, так и в отрицательную стороны. Кроме того, может появиться незначительный тренд. В связи с этим необходимо после процедуры (18) проводить дополнительное центрирование ряда и последующее извлечение линейного тренда. Здесь стоит отметить, что извлечение линейного тренда следует проводить и при начальном центрировании. При извлечении тренда, естественно, изменится и значение дисперсии. Например, исходный ряд значений давления на дне экспериментального лотка содержал линейный тренд с коэффициентом $5,625 \cdot 10^{-3}$ у. е. $\cdot \text{с}^{-1}$, а извлечение этого тренда уменьшило дисперсию на 0,03 %. Извлечение гармоник с периодом 51,987 с (см. табл. 3) дало среднее значение $4,975 \cdot 10^{-3}$ у. е.

Таблица 3

Результаты применения метода SSA-НС к ряду значений давления воды на дне экспериментального лотка (Пример 2)

j	T_j	$\lambda_1(j)$	$\Delta \text{var}(\mathbf{Y}_j)$	Total var _{j}
	секунды	%		
1	34,599	2,635	6,303	6,303
2	16,563	1,912	4,815	11,118
3	51,987	1,793	5,364	16,482
4	8,210	1,548	4,017	20,499
5	2,708	1,091	2,764	23,262
6	24,725	0,952	2,554	25,816
7	2,565	0,938	2,259	28,076
8	5,570	0,905	2,188	30,263
9	6,102	0,887	2,432	32,695
10	1,628	0,813	1,974	34,670
11	4,124	0,787	2,136	36,806
12	3,859	0,836	1,987	38,793
13	8,581	0,745	2,262	41,056
14	2,443	0,723	1,856	42,912
15	3,007	0,677	1,611	44,522

Примечания. 1. Обозначения идентичны использованным в табл. 1 и 2.

2. Представлены первые 15 шагов применения метода SSA-НС.

3. Экспериментальные данные были любезно предоставлены автором работы [13].

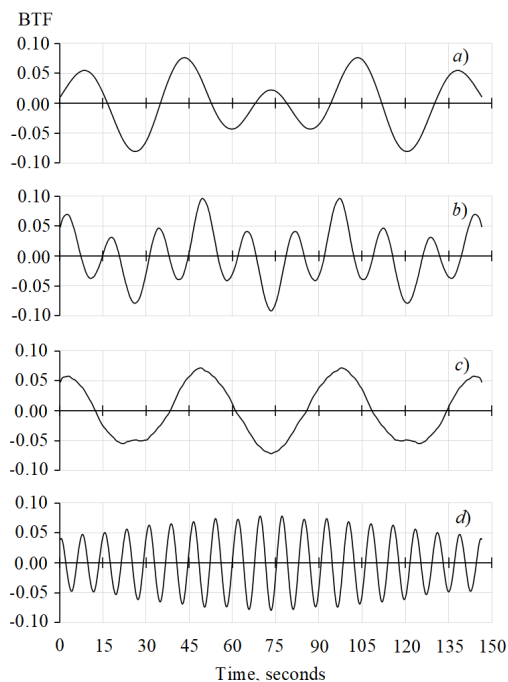


Рис. 3. Первые 4 ВТФ ряда значений давления на дне экспериментального лотка, полученные методом SSA-НС.

Исходные данные представлены автором работы [13]

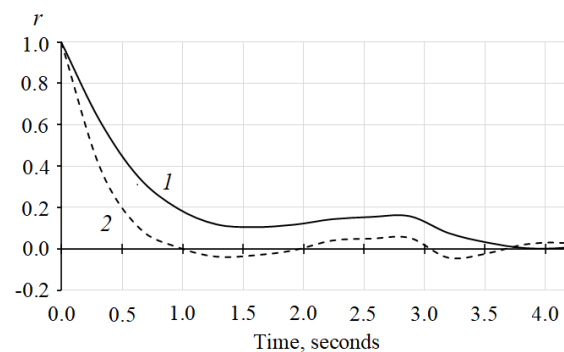


Рис. 4. Начальные фрагменты эмпирических автокорреляционных функций исходного ряда значений давления воды (кривая 1) и ряда, полученного после 15 шагов применения метода SSA-НС (кривая 2).

Исходные данные представлены автором работы [13]



и линейный тренд с коэффициентом $-1,111 \cdot 10^{-2}$ у. е. $\cdot c^{-1}$, а повторное центрирование и извлечение тренда уменьшили дисперсию всего лишь на 0,116 %. В остальных случаях подобные коррекции уменьшали дисперсию менее чем на тысячную процента.

На рис. 4 представлены начальные фрагменты эмпирических автокорреляционных функций

$$r(\tau) = c(\tau)/\sigma^2 = c(\tau)/c(0)$$

(см. разделы «Теоретическая основа SSA» и «Оценивание ковариаций») исходного ряда давления воды и ряда, полученного после 15 шагов применения метода SSA-НС. Видно, что с извлечением 15 гармоник соответствующих периодов, оцененных в процессе SSA-НС, автокорреляция временного ряда заметно снизилась.

Очевидно, что данные в табл. 1 – 3 служат иллюстративным целям, и при необходимости их можно продолжить до требуемого уровня накопленной дисперсии.

Заключение

Подводя итоги настоящей работы, отметим следующие наиболее существенные моменты.

Применение к исследованию временных рядов методами SSA или SSA-НС (за исключением SSA по методу гусеницы) требует использования смещенной оценки автоковариаций (8).

Использование итераций фон Мизеса с формулой (10а) решает проблему большой размерности при вычислении собственных векторов автоковариационной матрицы, так как позволяет применять SSA и SSA-НС к временным рядам произвольной длины.

Оценку периода BTF можно улучшить за счет уточнения первого и последнего нулевых значений.

Как метод SSA, так и метод SSA-НС решают задачу оптимизации гармонического спектрального анализа, но применение SSA-НС обеспечивает большую результативность, по сравнению с SSA, решает проблемы повторяющихся частот и частотных наложений в структуре BTF и, в принципе, его следует признать более корректным.

Все рассмотренные алгоритмы легко реализуемы в программных продуктах.

Благодарности

Авторы выражают глубокую признательность кандидату технических наук А. А. Каверину (во время проведения эксперимента он был младшим научным сотрудником инженерно-строительного факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, а завершил свою деятельность главным конструктором ООО «Триплус-Инжиниринг») за предоставленные экспериментальные данные, послужившие в этом исследовании вторым численным примером применения SSA-НС; а также программисту М. И. Мещерякову, специалисту отдела разработки программного обеспечения ООО «Техноконтент», за помощь в реализации SSA-НС на языке программирования Python.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Дженкинс Г., Ваттс Д.** Спектральный анализ и его приложения. Пер. с англ. В 2-х вып. Выпуск 1. М.: Мир, 1971. 320 с.
2. Главные компоненты временных рядов: метод «Гусеница». Под ред. Д. Л. Данилова, А. А. Жиглявского. СПб.: Изд-во СПбГУ, 1997. 308 с.
3. **Пичугин Ю. А.** Выборочные главные компоненты скользящего отрезка в анализе временных рядов метеорологических данных // Метеорология и гидрология. 1999. № 8. С. 31–36.
4. **Awichi R., Müller W. G.** Improving SSA predictions by inverse distance weighting // REVSTAT – Statistical Journal. 2013. Vol. 11. No. 1. Pp. 105–119.
5. **Leles M. C. R., Sansão J. P. H., Mozelli L. A., Guimarães H. N.** A new algorithm in singular spectrum analysis framework: The Overlap-SSA (ov-SSA) // SoftwareX. 2018. Vol. 8. July–December. Pp. 26–32.
6. **Оппенгейм А. В., Шафер Р. В.** Цифровая обработка сигналов: Пер. с англ. М.: Связь, 1979. 416 с.

7. Пичугин Ю. А. Оценка статистической значимости и пространственной неоднородности линейных трендов приземной температуры воздуха // Известия Русского географического общества. 2003. Т. 135. № 6. С. 78–84.
8. Уилкинсон Дж. Х., Райнш С. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 390 с.
9. Пичугин Ю. А. Вычислительные особенности анализа сингулярного спектра // Сборник тезисов докладов II Международного форума «Математические методы и модели в высокотехнологическом производстве». 9 ноября 2022 г. Санкт-Петербург: ГУАП, 2022. С. 259–260.
10. Пичугин Ю. А. Итерационный анализ сингулярного спектра в оценке естественных цикличностей данных метеорологических наблюдений // Метеорология и гидрология. 2001. № 10. С. 34–39.
11. Погода и климат. Летопись погоды в Санкт-Петербурге (по online данным и литературным источникам). URL: <http://www.pogodaiklimat.ru/history/26063.htm>. Дата обращения 15. 07. 2024.
12. Пичугин Ю. А. Замечания к использованию главных компонент в математическом моделировании // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 74–89.
13. Каверин А. А. Результаты экспериментальных исследований границ смены режимов течения за уступом // Инженерно-строительный журнал. 2013. № 2. С. 62–66.

REFERENCES

1. Jenkins G. M., Watts D. G., Spectral analysis and its applications, Holden-Day, San Francisco, USA, 1969.
2. Danilov D. L., Zhiglyavskii A. A. (Eds.), The principal components of time series: The “Caterpillar method”, SPbSU Publishing, St. Petersburg, 1997 (in Russian).
3. Pichugin Y. A., Sampling principal components of moving interval in the analysis of time series of meteorological data, Russian Meteorology and Hydrology. (8) (1999) 22–27.
4. Awichi R., Müller W. G., Improving SSA predictions by inverse distance weighting, REVSTAT Stat. J. 11 (1) (2013) 105–119.
5. Leles M. C. R., Sansão J. P. H., Mozelli L. A., Guimarrès H. N., A new algorithm in singular spectrum analysis framework: The Overlap-SSA (ov-SSA), SoftwareX. 8 (July–Dec) (2018) 26–32.
6. Oppenheim A. V., Schaffer R. W., Digital signal processing, Pearson, London, 1975.
7. Pichugin Yu. A., Estimation of statistical significance and space heterogeneity of surface air temperature, Proceedings of the Russian Geographical Society. 135 (6) (2003) 78 – 84 (in Russian).
8. Wilkinson J. H., Reinsch C., Handbook for automatic computation, Vol. 2: Linear algebra (Grundlehren Der Mathematischen Wissenschaften, Vol. 186), Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, Germany, 1971.
9. Pichugin Yu. A., Computational features of singular spectrum analysis, Abstracts of the II Int. Forum “Computational and Mathematical Methods and Modelling in High-Tech Manufacturing”, Nov. 9, 2022, St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation. (2022) 259–260 (in Russian).
10. Pichugin Yu. A., Iterative singular-spectrum analysis in estimating natural cyclicities in meteorological observation data, Russian Meteorology and Hydrology. (10) (2001) 24–28.
11. Pogoda i klimat. Letopis pogody v Sankt-Peterburge (po online dannym i literaturnym istochnikam) [The weather and climate. The weather annual chronicle in Saint Petersburg (according to online data and literary sources)]. URL: <http://www.pogodaiklimat.ru/history/26063.htm> (The access data is 15.07.2024).
12. Pichugin Yu. A., Notes on using the principal components in the mathematical simulation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 74–89 (in Russian).
13. Kaverin A. A., Rezultaty eksperimentalnykh issledovaniy granits smeny rezhimov techeniya za ustupom [Results of experimental studies of the boundaries of a flow regime change behind a bench], Magazine of Civil Engineering. (2) (2013) 62–66 (in Russian).



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПИЧУГИН Юрий Александрович — доктор физико-математических наук, профессор Института инноватики и базовой магистерской подготовки Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия.

190000, Россия, г. Санкт-Петербург, Большая Морская ул., 61.

yury-pichugin@mail.ru

ORCID: 0000-0003-0646-364X

ПИЧУГИНА Ника Юрьевна — ассистент Института инноватики и базовой магистерской подготовки Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия.

190000, Россия, г. Санкт-Петербург, Большая Морская ул., 61.

nike.pichugina@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9224-8761

THE AUTHORS

PICHUGIN Yury A.

Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation

61 Bolshaya Morskaya St., St. Petersburg, 190000, Russia

yury-pichugin@mail.ru

ORCID: 0000-0003-0646-364X

PICHUGINA Nika Yu.

Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation

61 Bolshaya Morskaya St., St. Petersburg, 190000, Russia

nike.pichugina@gmail.com

ORCID: 0000-0002-9224-8761

Статья поступила в редакцию 28.08.2024. Одобрена после рецензирования 06.11.2024. Принята 06.11.2024.

Received 28.08.2024. Approved after reviewing 06.11.2024. Accepted 06.11.2024.