

1. Analyse chaotischer Zeitreihen

Zeitreihen erhält man durch Integration von Differentialgleichungen der dynamischen Systeme oder durch Messung von physikalischen Größen an natürlichen Systemen. Zur Analyse betrachtet man konventionell die Amplituden, die Fourier-Spektren oder die Korrelationsfunktionen. Diese Methoden sind für lineare Systeme hervorragend geeignet. In solchen Systemen überlagern sich die verschiedenen Freiheitsgrade ungestört und können mit den linearen Analysemethoden getrennt und dargestellt werden.

Natürliche Systeme sind in der Regel sehr komplex oder nur unvollkommen von der Umwelt zu isolieren. Die Fourier-Spektren zeigen dann keine scharfen Linien. Sie bestehen aus sehr breiten Verteilungen und sind kaum auszuwerten. Ferner ist es für natürliche Systeme in der Regel nicht möglich, alle physikalischen Größen des Systems messtechnisch vollständig zu erfassen. Oft misst man nur die zeitliche Entwicklung einer einzigen Observablen.

Solche Systeme können dann mit nichtlinearen Methoden wesentlich besser analysiert werden als mit linearen. Experimentell zugängliche Systeme mit nichtlinearen Phänomenen sind unter anderem:

- Elektrische Oszillationen in Halbleitern,
- Laser bei hoher Pumprate,
- hydrodynamische Systeme (Taylor-Couette, Bernard-Rollen,...),
- Plasmaentladungen,
- elektrische und magnetische Aktivitäten in Nervensystemen (EEG),
- elektrische und magnetische Aktivitäten in Herzen (EKG),
- Blutflussgeschwindigkeiten im Adersystem,
- Fluktuationen der Pupillenweite,
- Wetterdaten,
- Aktienkurse,
- ...

Die Figuren Fig. 1-1 bis Fig. 1-4 zeigen verschiedene Beispiele von Zeitreihen mit steigendem Komplexitätsgrad. Die Ergebnisse verschiedener konventioneller Analysen sind dargestellt. Gekoppelte Schwingungen mit rationalem oder irrationalem Frequenzverhältnis lassen sich sehr gut mit den konventionellen Methoden analysieren. Bei komplexeren Zeitreihen, in Fig. 1-3 ist das der Lorenz-Attraktor und in Fig. 1-4 die Blutflussgeschwindigkeit in Hautkapillaren, sind diese Methoden weniger geeignet. Die Fourier-Spektren zeigen keine scharfen Linien und die Autokorrelationsfunktionen gehen sehr schnell nach null.

Hier müssen moderne Methoden der Chaos-Theorie zum Einsatz kommen. Dazu gehören:

- die Rekonstruktion kompletter Systemtrajektorien aus eindimensionalen Zeitreihen,
- die Bestimmung von Einbettungsdimensionen und weiteren Rekonstruktionsparametern,
- die Isolierung einzelner Freiheitsgrade mit der Biorthogonalzerlegung,
- die Charakterisierung rekonstruierter Systemtrajektorien mit fraktalen Dimensionen, Lyapunov-Exponenten, Entropie und

- die Wavelet-Analyse.

Diese Methoden sollen im Folgenden vorgestellt und diskutiert werden.

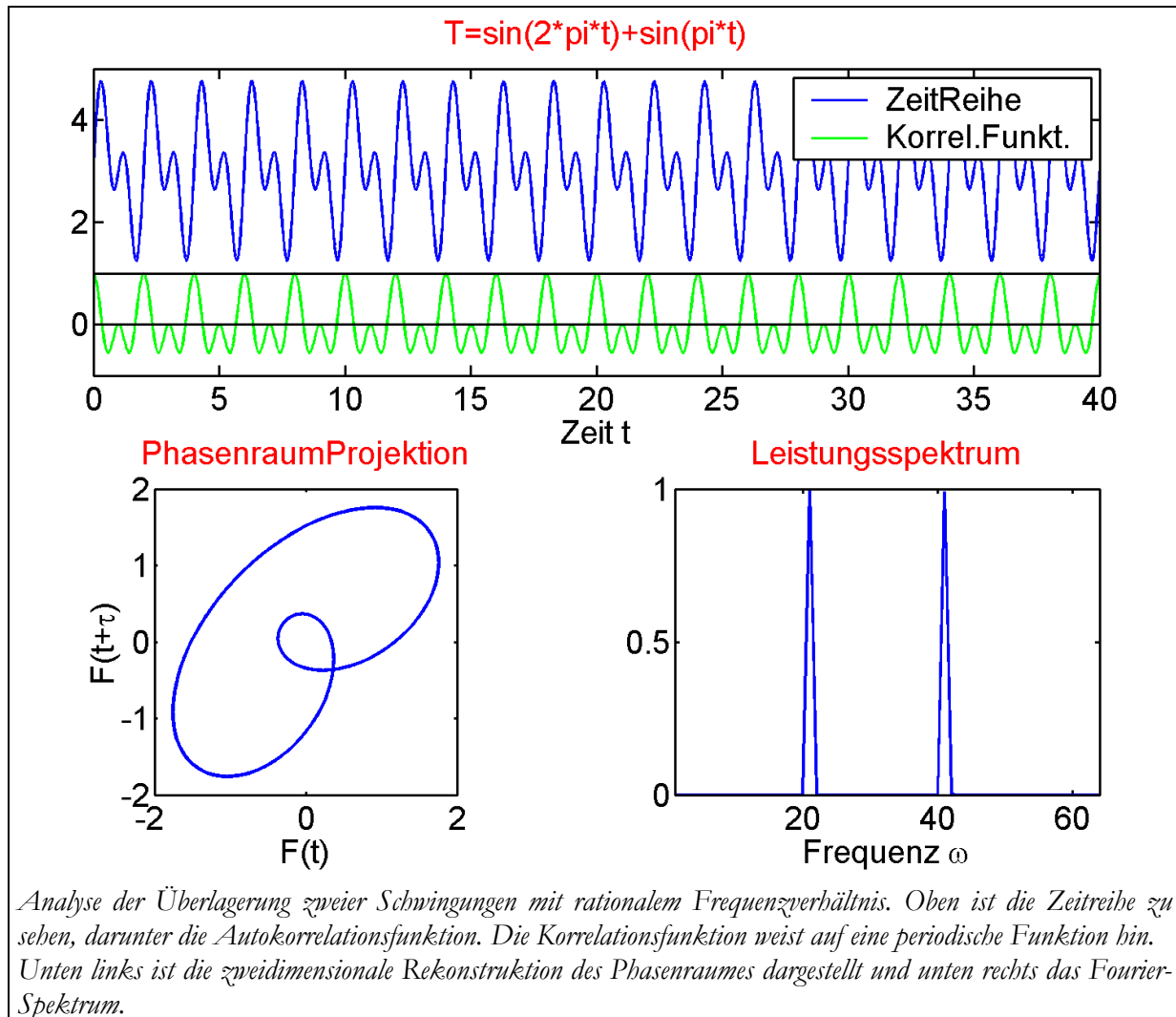


Fig. 1-1

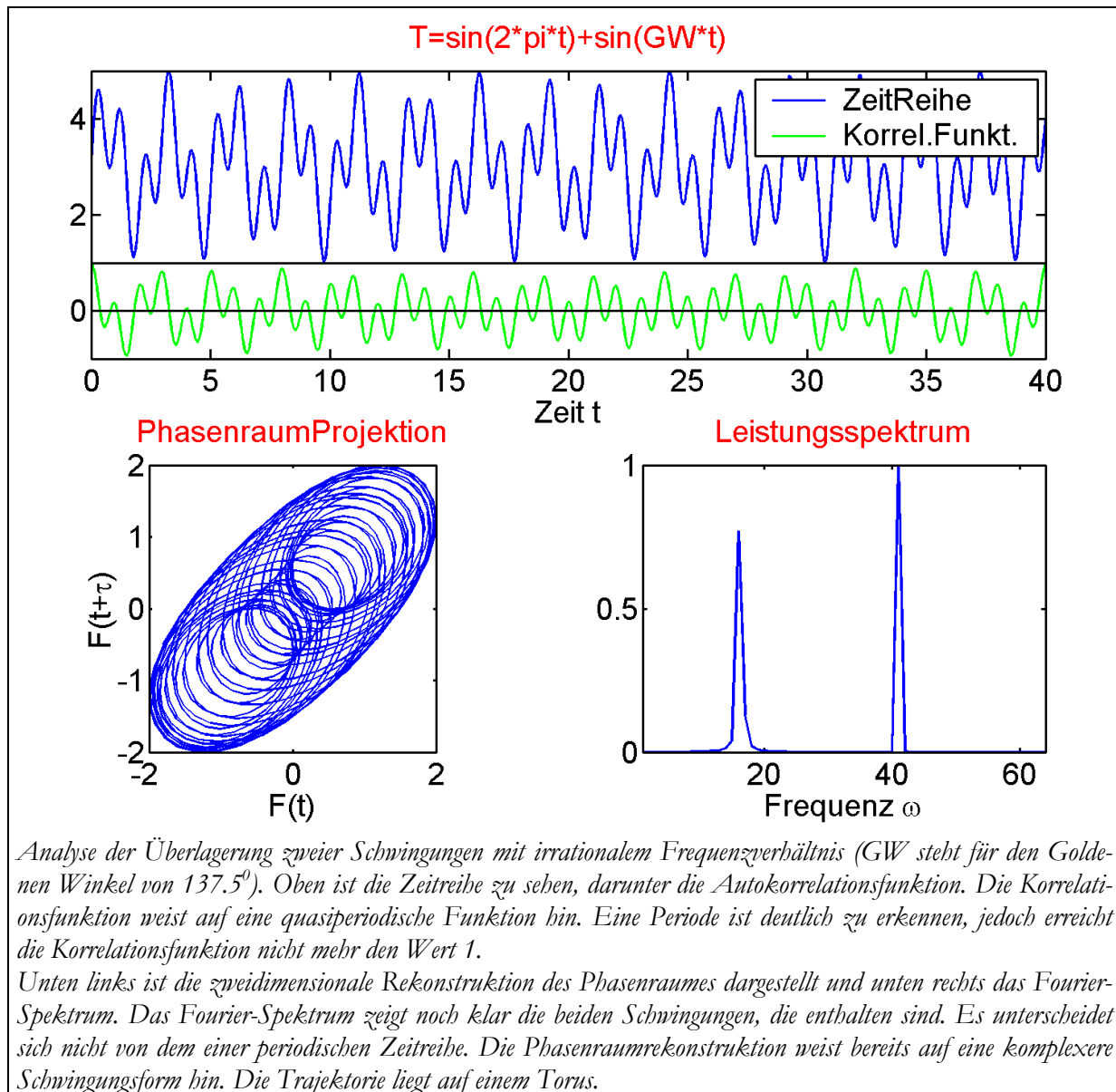


Fig. 1-2

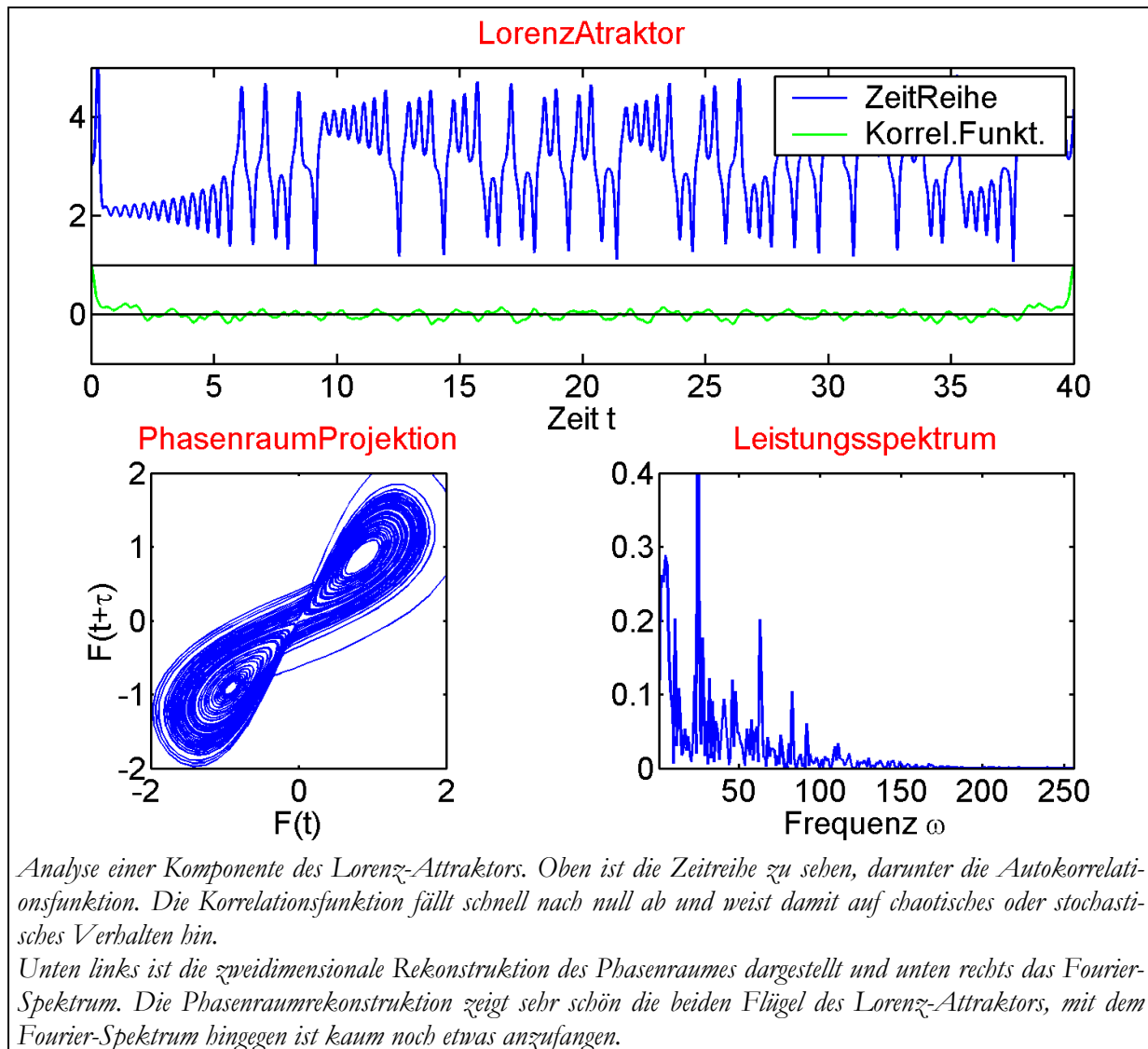


Fig. 1-3

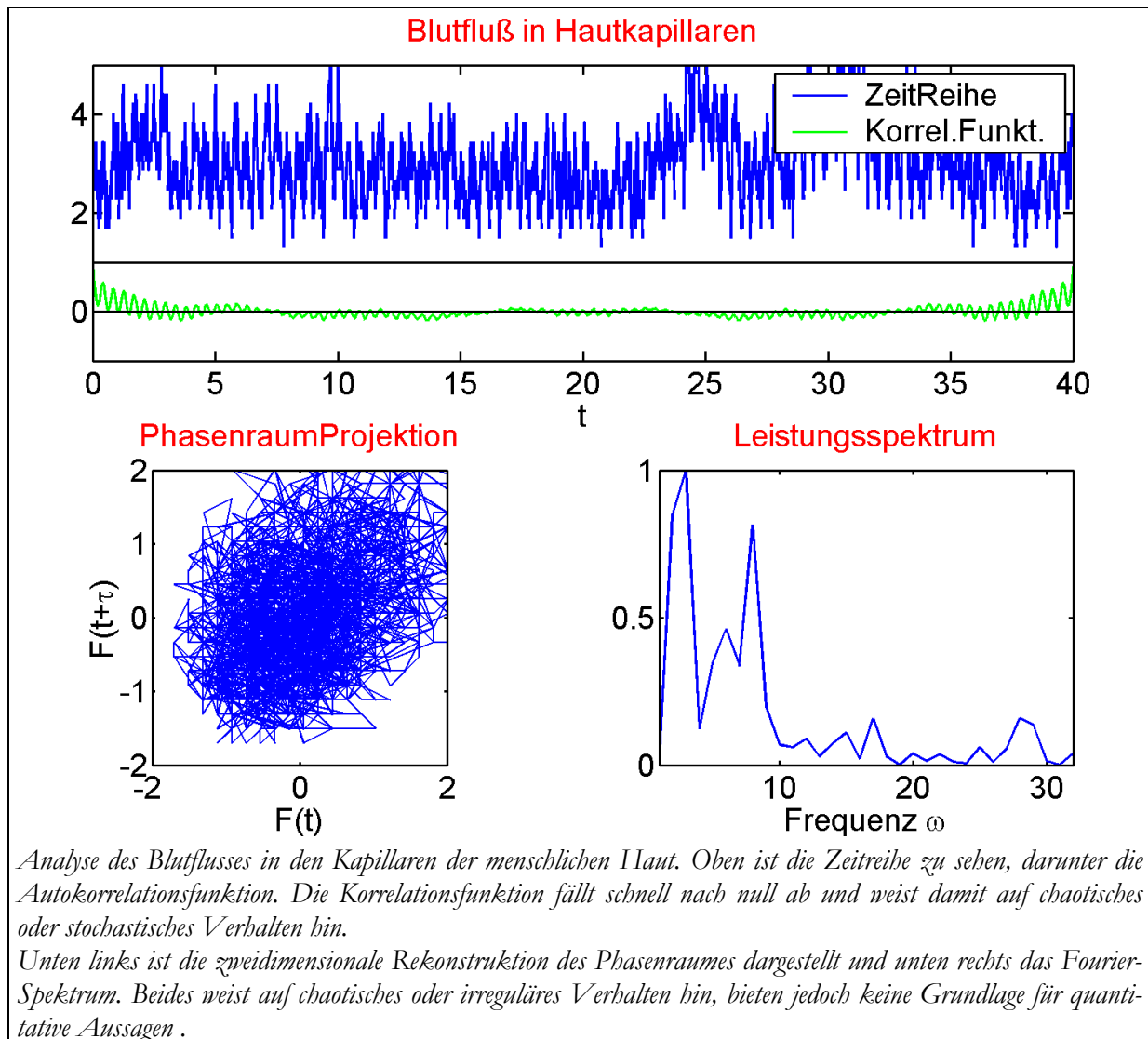


Fig. 1-4

Lineare Methoden der Analyse

Lineare Methoden beruhen auf dem Superpositionsprinzip, d.h. auf der Annahme, dass sich einzelne Freiheitsgrade des Systems ungestört überlagern. Nichtlineare Kopplungen zwischen verschiedenen Freiheitsgraden werden nicht berücksichtigt. Ferner erlauben sie nicht, zwischen chaotischem und stochastischem Verhalten zu unterscheiden.

Die Fourier-Analyse

Für eine Zeitreihe

$$\xi_n = \xi(n\Delta t), \quad n \in \{1..N_{Dat}\}, \quad (1-1)$$

gewonnen mit äquidistanten Zeitintervallen Δt , lautet die diskrete Fourier-Transformation

$$\Xi_k = \frac{1}{\sqrt{N_{Dat}}} \sum_{n \in \{1..N_{Dat}\}} \xi_n e^{2\pi i(k-1)(n-1)/N_{Dat}}, \quad k \in \{1..N_{Dat}\}. \quad (1-2)$$

In erster Linie interessant ist dabei das Leistungsspektrum

$$P(\omega_k) = |\Xi_k|^2 \quad (1-3)$$

mit $\omega_k = \frac{2\pi k f}{N_{Dat}}$ und der Abtastrate $f[Hz]$.

Die Abtastrate f ist durch die Anzahl der Messpunkte pro Sekunde festgelegt.

Die Autokorrelationsfunktion

Die Autokorrelationsfunktion ist definiert durch

$$C(\tau) = \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{n \in \{1..N_{Dat}\}} \tilde{\xi}_n \tilde{\xi}_{n+\tau}^* \quad (\text{für } \tau \ll N_{Dat}), \quad (1-4)$$

$$\text{mit } \tau \in \{1..N_{Dat}\} \quad \text{und} \quad \tilde{\xi}_k = \xi_k - \langle \xi \rangle = \xi_k - \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{n \in \{1..N_{Dat}\}} \xi_n.$$

Für periodische Zeitreihen zeigt die Autokorrelationsfunktion genau die gleiche Periode wie die Zeitreihe selbst. Die Periode kann so sehr sicher bestimmt werden. Für chaotische Funktionen klingt die Funktion mit der Zeit nach 0 ab. Die Zeit für das Abklingen ist ein Maß für das Chaos. Je schneller benachbarte Trajektorien divergieren, desto kürzer ist auch die Abklingdauer von C .

Die Autokorrelationsfunktion enthält dieselbe Information wie das Leistungsspektrum, es handelt sich lediglich um eine andere Darstellung. Das ergibt sich aus der Fourier-Transformierten des Leistungsspektrum:

$$\begin{aligned} C(\tau) &= \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{n \in \{1..N_{Dat}\}} \tilde{\xi}_n \tilde{\xi}_{n+\tau}^* \quad (1-5) \\ &= \frac{1}{N_{Dat}} \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{\substack{k,l \in \{1..N_{Dat}\} \\ n \in \{1..N_{Dat}\}}} \Xi_k e^{-2\pi i(k-1)(n-1)/N_{Dat}} \Xi_l^* e^{2\pi i(l-1)(n-1+\tau)/N_{Dat}} \\ &= \frac{1}{N_{Dat}} \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{\substack{k,l \in \{1..N_{Dat}\} \\ n \in \{1..N_{Dat}\}}} \Xi_k \Xi_l^* \underbrace{e^{-2\pi i(n-1)(k-l)/N_{Dat}}}_{N_{Dat} \delta_{k,l}} e^{2\pi i(l-1)\tau/N_{Dat}} \\ &= \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{k \in \{1..N_{Dat}\}} \Xi_k \Xi_k^* e^{2\pi i(k-1)\tau/N_{Dat}} \\ &= \frac{1}{N_{Dat}} \sum_{k \in \{1..N_{Dat}\}} |\Xi_k|^2 e^{2\pi i(k-1)\tau/N_{Dat}}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformation (FFT) kann die Autokorrelationsfunktion so sehr schnell berechnet werden.

Die Rekonstruktion des Zustandsraumes

Die Problematik

Experimentell können in der Regel nicht alle Observablen bestimmt werden, es wird oft nur eine physikalische Größe als Funktion der Zeit gemessen. Ganz extrem ist die Situation bei unendlich dimensional Systemen. In der Hydrodynamik wird zum Beispiel das Geschwindigkeitsfeld oft an nur einer Stelle gemessen oder bei medizinischen Untersuchungen wird eine Größe wie der Blutdruck oder die elektrische Aktivität des Herzens (EKG) oder Gehirns (EEG) bestimmt. Unabhängig davon kann unter Umständen das gesamte System beurteilt werden. Das geschieht durch die Rekonstruktion der Systemtrajektorien in einem Einbettungsraum.

Die Einbettung

Unter einer Einbettung versteht man die

topologisch äquivalente Zuordnung des unbekannten Attraktors im unbekannten Phasenraum aus einer eindimensionalen Zeitreihe.

Aus Zeitreihen wie in Fig. 1-1 bis Fig. 1-4 können Trajektorien des Gesamtsystems in einem Einbettungsraum rekonstruiert werden. Deren Eigenschaften entsprechen in vieler Hinsicht denen der unbekannten Phasenraum-Trajektorien:

- sie haben die gleiche Topologie,
- Nachbarpunkte im Phasenraum werden Nachbarpunkte im Einbettungsraum,
- sie haben die gleiche fraktale Dimensionen,
- sie haben die gleichen Lyapunov-Exponenten,
- sie haben die gleiche Kolmogorov-Entropie.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten der Einbettung. Takens hat bewiesen [TAKE80], dass sowohl zeitverzögerte Koordinaten $\vec{x}_n = (\xi_n, \xi_{n+1}, \xi_{n+2}, \dots)$ als auch sukzessive Ableitungen $\vec{x}_n = (\xi_n, \xi_n', \xi_n'', \dots)$ Einbettungen ergeben.

Der Beweis beruht auf der linearen Unabhängigkeit der konstruierten Vektoren. Diese schöpfen alle Freiheitsgrade aus, die in der Zeitreihe enthalten sind. Das prinzipielle Vorgehen ist in Fig. 1-5 dargestellt.

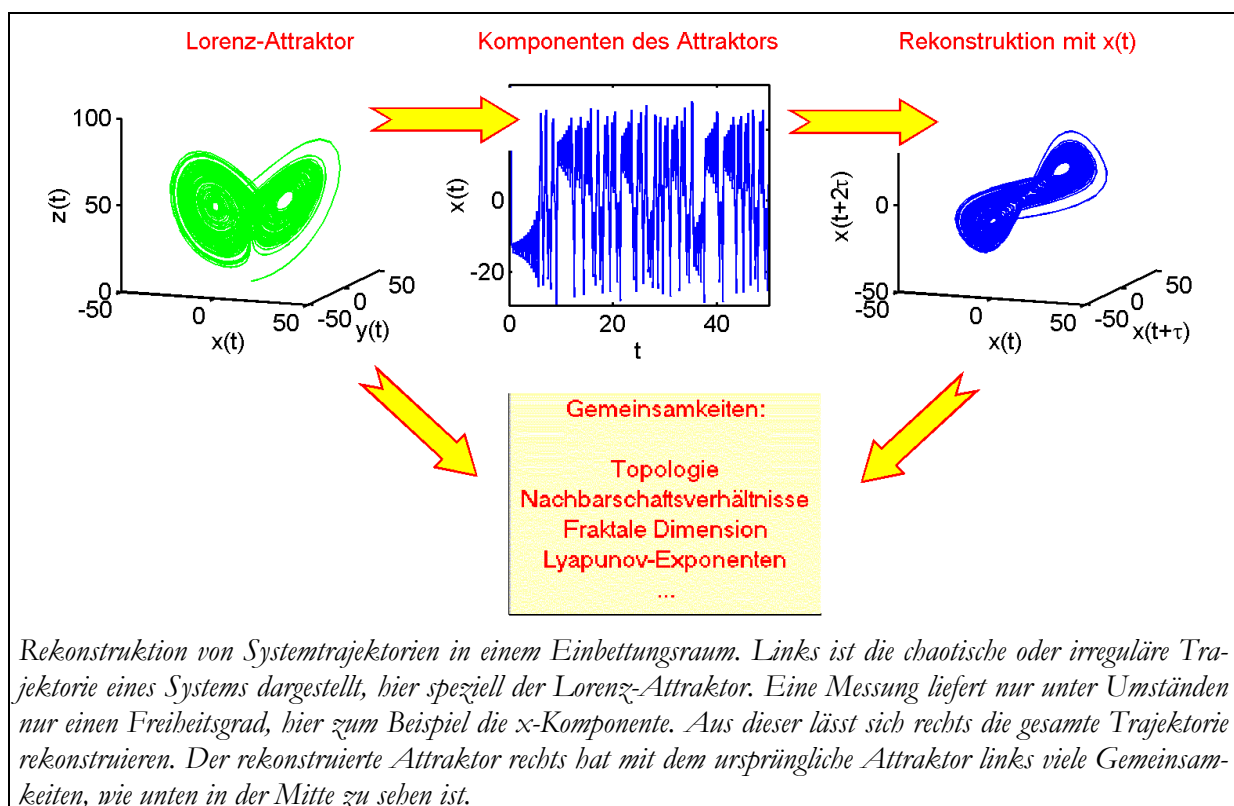


Fig. 1-5

Hat ein System n Freiheitsgrade, so benötigt die Einbettung im mathematischen Beweis $2n+1$ Dimensionen. In der Praxis reichen meist weniger Dimensionen aus. Zur Rekonstruktion des

Lorenz-Attraktors oder des Rössler-Attraktors reichen genau die drei Dimensionen der ursprünglichen Objekte aus.

Zeitverzögerte Koordinaten

Man definiert die Punkte des Attraktors im Einbettungsraum $\vec{x}_n$ durch

$$\vec{x}_n = \begin{pmatrix} x_n^{(1)} \\ x_n^{(2)} \\ x_n^{(3)} \\ \vdots \\ x_n^{(\dim_E)} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \xi_n \\ \xi_{n+\tau} \\ \xi_{n+2\tau} \\ \vdots \\ \xi_{n+\tau(\dim_E-1)} \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \tau \in \mathbb{N}, \\ n \in \{1..N_{pkt}\}, \\ N_{pkt} \equiv N_{Dat} - \tau(\dim_E - 1). \end{cases} \quad (1-6)$$

Dabei ist τ die sogenannte Zeitverzögerung und wird in Anzahl von Datenpunkten angegeben. $\dim_E$ ist die Dimension des Einbettungsraumes. Beide Parameter müssen geeignet gewählt werden, zum Beispiel mit Hilfe des Füllfaktors, der weiter unten eingeführt wird.

Das Beispiel des harmonischen Oszillators:

Die kanonischen Variablen (q, p) des harmonischen Oszillators bilden im Phasenraum eine Ellipse. Als kontinuierliche Zeitreihe kann man

$$q(t) = \sin(\omega t + \alpha) \quad (1-7)$$

wählen, wobei ω und α die Winkelgeschwindigkeit und die Phasenlage des Oszillators kennzeichnen. Die Darstellung im Einbettungsraum mit einer Zeitverzögerung $\Delta t = \pi/(2\omega)$ mit $\alpha=0$ ist

$$\left(q(t), q\left(t + \frac{\pi}{2\omega}\right) \right) = \left(\sin(\omega t), \sin\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) \right) = (\sin(\omega t), \cos(\omega t)) = (q(t), p(t)). \quad (1-8)$$

Bei einem ganzzahlig Vielfachen von π als Verzögerungszeit wäre wegen

$$\sin(\omega t + n\pi) = \sin(\omega t) \quad (1-9)$$

Die Einbettungs-Trajektorie wäre 1-dimensional, also entartet. Die Einbettung wäre extrem schlecht. Eine optimale Einbettung des harmonischen Oszillators erhält man offensichtlich für $\Delta t = \pi/(2\omega)$. Für periodische Prozesse wird dieser Wert immer eine gute erste Wahl für die Verzögerungszeit τ sein. Der Sachverhalt ist in Fig. 1-6 illustriert.

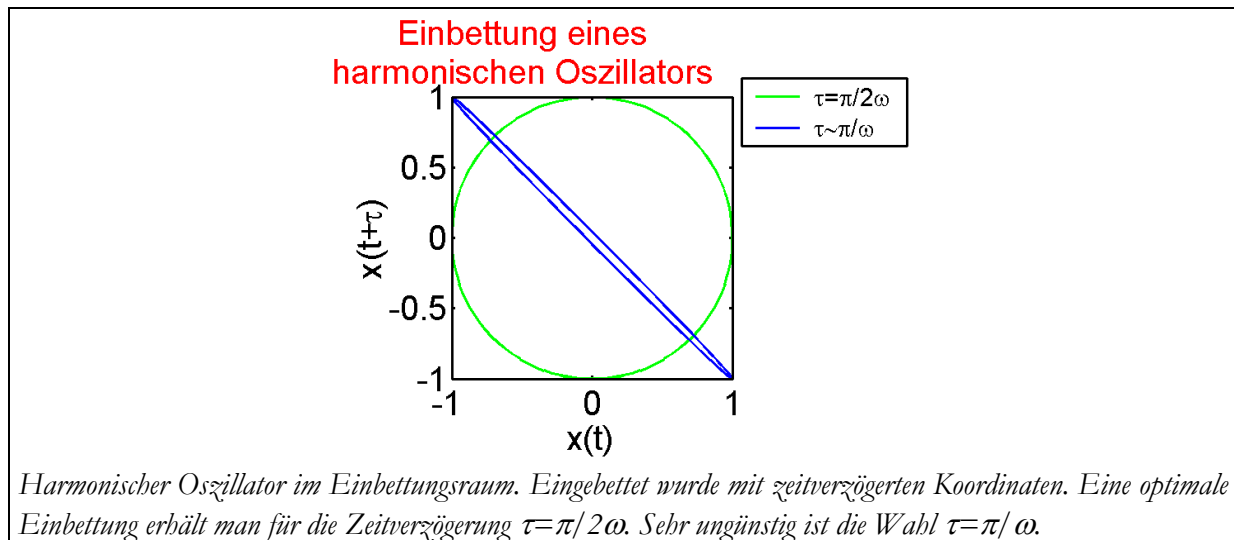


Fig. 1-6

Beispiel Lorenz-Attraktor:

Fig. 1-7 zeigt noch einmal den Lorenz-Attraktor mit seinen drei Komponenten. In Fig. 1-8 sind dann zweidimensionale Einbettungen aus der x-Komponente mit verschiedenen Zeitverzögerungen τ dargestellt. Gute Werte liegen um $\tau=40$. Kleinere τ -Werte führen zu einer schlechten Entfaltung, größere Werte zu einer Überfaltung. In Fig. 1-9 sind dann dreidimensionale Einbettungen aus allen drei Komponenten des Attraktors für eine Zeitverzögerung von $\tau=40$ dargestellt.

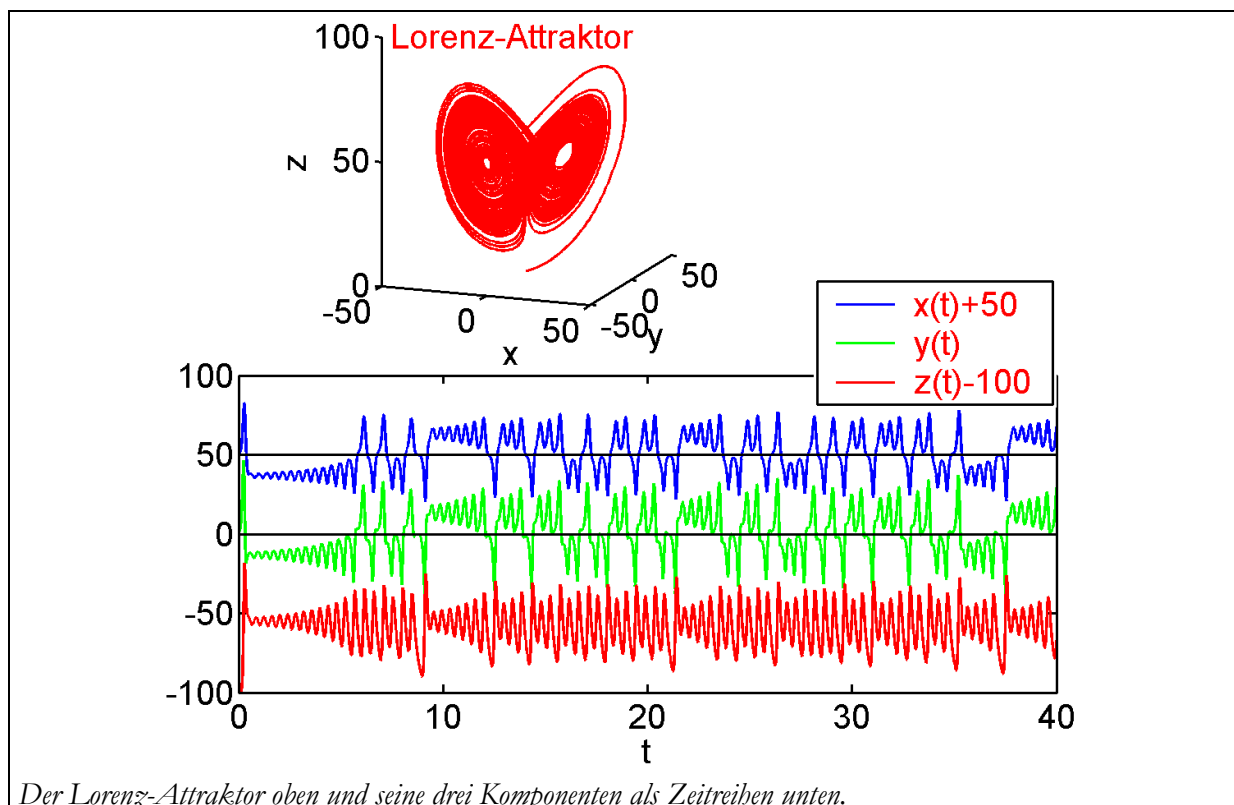


Fig. 1-7

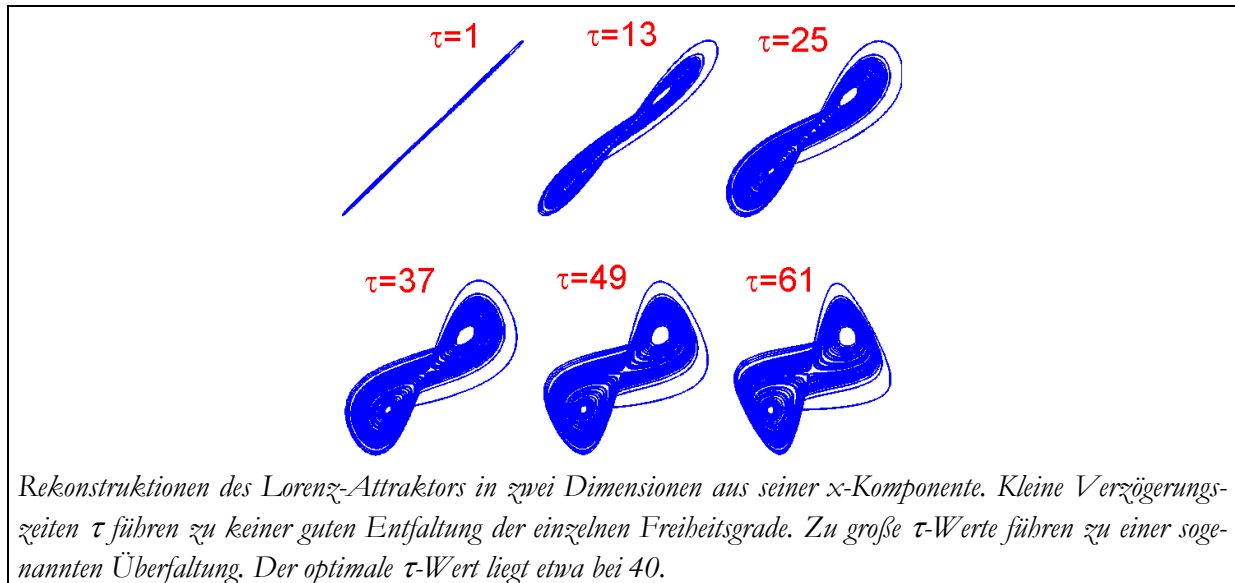


Fig. 1-8

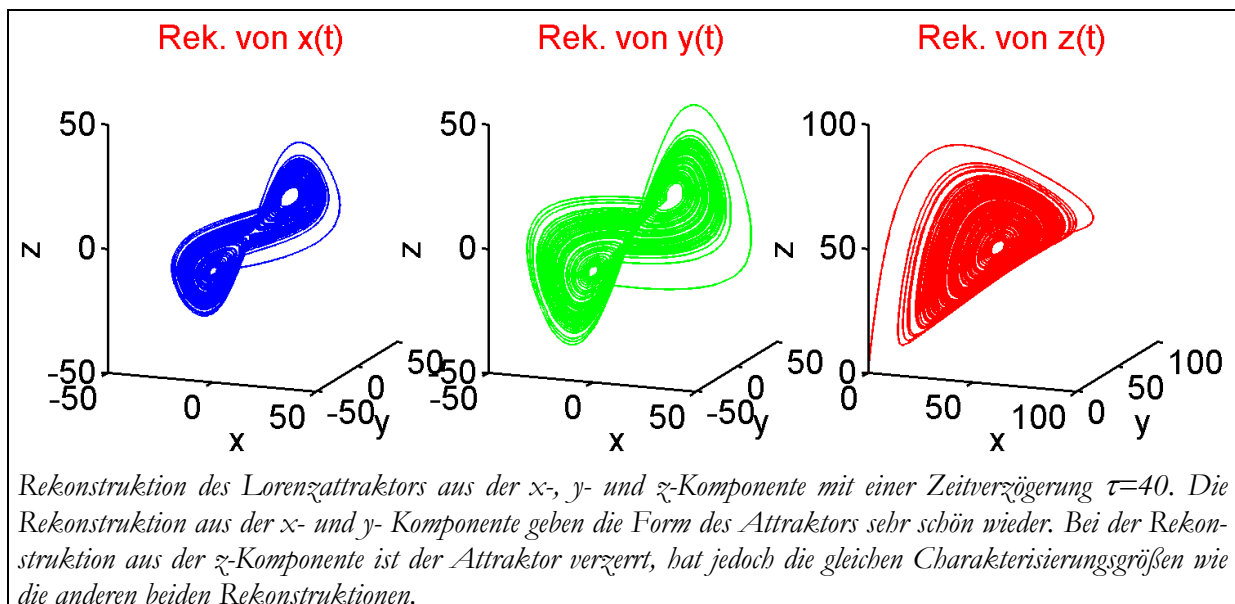


Fig. 1-9

Bestimmung der Einbettungsparameter

Für die Rekonstruktion eines Attraktors im Einbettungsraum müssen die Parameter Zeitverzögerung τ und Einbettungsdimension dim_E möglichst optimal gewählt werden. Der Einbettungsraum sollte optimal ausgenutzt werden. Ziel ist eine maximale Separation der Trajektorien und eine Entfaltung möglichst aller Freiheitsgrade. Damit einher geht eine Reduzierung von Mehrdeutigkeit. Es gibt verschiedene Strategien, diese zu erreichen.

Das Waber-Produkt

Es wurde von Liebert, Pawelzik und Schuster eingeführt und lässt sich direkt aus dem Takenischen Einbettungstheorem herleiten. Man nutzt als einziges Argument die Tatsache, dass Einbettungen topologische Abbildungen darstellen. Es werden Nachbarschaftsrelationen auf dem Attraktor definiert, aus denen sich dann die Güte der Einbettung ablesen lässt. Eine ausführliche Beschreibung findet man in [BUZU93].

Das Verfahren ist numerisch recht aufwendig und eignet sich nicht für verrauschte Datensätze.

Zählen der nächsten Nachbarn

Hier fordert man eine maximale Separation von Trajektorien im Einbettungsraum. Trajektorien mit unterschiedlichen Richtungen sollen einen maximalen Abstand haben. Es wurde ein lokales, statistisches Maß entwickelt, mit dem sich die Separation quantitativ beurteilen lässt.

Auch dieses Verfahren liefert nicht in allen Fällen brauchbare Ergebnisse für eine optimale Zeitverzögerung τ . Signifikante Werte für eine minimale notwendige Einbettungsdimension sind nur für periodische und quasiperiodische Attraktoren relativ sicher abzuschätzen. Weiter Einzelheiten findet man in wieder in [BUZU93].

Der Füllfaktor

Beim Füllfaktor macht man rein geometrische Annahmen über den Attraktor. Man definiert global Volumenelemente im Einbettungsraum. Bei einer optimalen Aufspannung des Attraktors sollten diese besonders groß werden. Bei zu vielen Dimensionen sollten diese Volumen wegen der linearen Abhängigkeit der Basisvektoren gegen null gehen.

Ein besonderer Vorteil des Füllfaktors ist die gleiche Gewichtung aller Koordinaten. Außerdem liegen alle Stützpunkte auf dem rekonstruierten Attraktor.

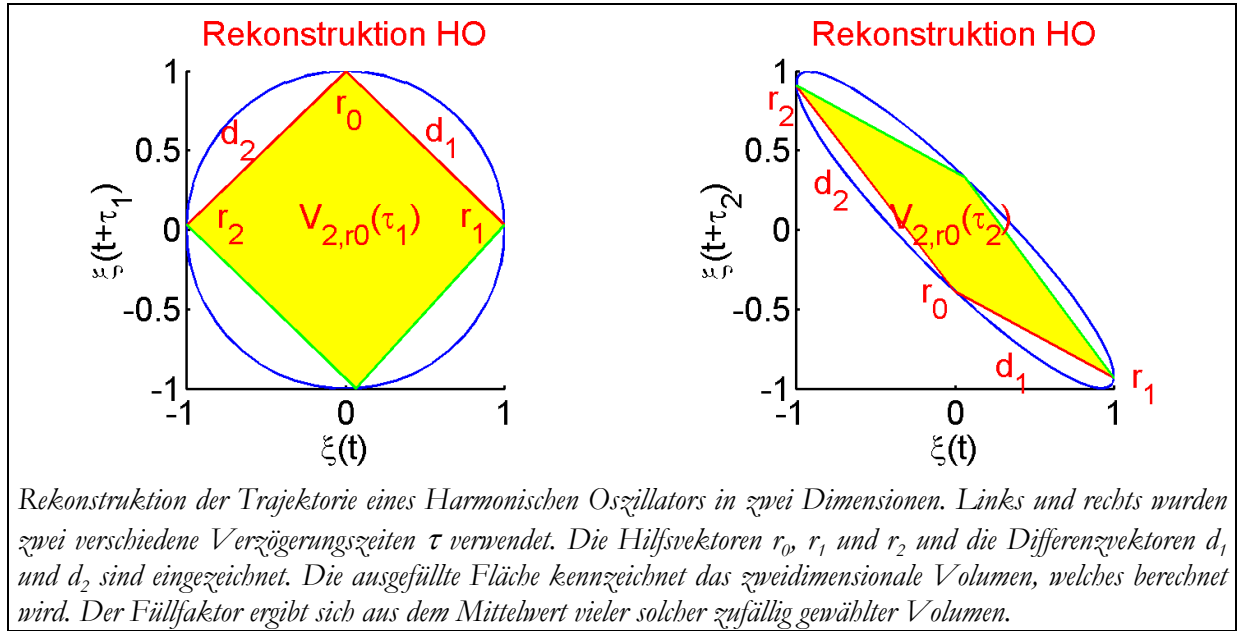
Algorithmus zur Berechnung der mittleren Volumina von Parallelepipeden:

Um die Eckpunkte der Parallelepipeden festzulegen, trifft man eine zufällige Auswahl von $dim_E + 1$ Indizes r_m ($r_m = \text{Zufallszahl} \in \{1..N_{Pnt}\}$). Die $dim_E + 1$ Indizes reichen zur Bildung eines dim_E -dimensionalen Parallelepipeds aus.

Dann bestimmt man die Differenzvektoren

$$\mathbf{d}_n(\tau) = \begin{pmatrix} \xi_{r_0} - \xi_{r_n} \\ \xi_{r_0+\tau} - \xi_{r_n+\tau} \\ \vdots \\ \xi_{r_0+\tau(dim_E-1)} - \xi_{r_n+\tau(dim_E-1)} \end{pmatrix} \quad (1-10)$$

Für $n \in \{1, \dots, dim_E\}$ hat man eine ausreichende Anzahl von Kanten für das Parallelepiped.



Man bildet nun eine Matrix

$$\mathbf{M}_{\dim_E, r_0}(\tau) = (\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_{\dim_E}) \quad (1-11)$$

und kann dann das Volumen des Parallelepipeds bestimmen als

$$V_{\dim_E, r_0}(\tau) = |\det(\mathbf{M}_{\dim_E, r_0}(\tau))|. \quad (1-12)$$

Diese Größe ist invariant unter Vertauschen der Indizes.

Das mittlere Volumen F vieler Parallelepipede $j \in N_{Vol}$ ist dann

$$F_{\dim_E}(\tau) = \frac{\frac{1}{N_{Vol}} \sum_{j \in \{1..N_{Vol}\}} V_{\dim_E, r_0}^{(j)}(\tau)}{\left(\max_{k \in \{1..N_{Dat}\}} \{\xi_k\} - \min_{k \in \{1..N_{Dat}\}} \{\xi_k\} \right)^{\dim_E}}. \quad (1-13)$$

Es ist normiert auf das Volumen des umschließenden Würfels.

Letztlich definiert man den Füllfaktor als Logarithmus dieser normierten Volumen

$$f_{\dim_E}(\tau) = \log_{10}(F_{\dim_E}(\tau)). \quad (1-14)$$

Die Interpretation des Füllfaktors

Je größer das mittlere Volumen der Parallelepipede ist, desto größer ist auch der genutzte, eingeschlossene Raum.

Bei zu kleiner Verzögerungszeit τ sind die Koordinaten nahezu linear abhängig, der Füllfaktor ist klein. Bei wachsendem τ wächst zunächst auch der Füllfaktor. Das lokale Maximum des Füllfaktors bei kleinstem τ kennzeichnet die optimale Zeitverzögerung.

Ein Minimum des Füllfaktors bedeutet, dass τ unglücklich gewählt ist. Eine Überfaltung kann allerdings nicht ermittelt werden.

Mit zunehmender Dimension des Einbettungsraumes dim_E ändert der Füllfaktor als Funktion der Verzögerungszeit τ seine Struktur. Ab einer bestimmten Dimension hört das dann auf, der Füllfaktor zeigt dann die gleiche Struktur wie bei kleineren Dimensionen, nur dass er immer kleiner wird. Alle Freiheitsgrade werden dann bei der Rekonstruktion entfaltet und mehr Dimensionen bringen keine neuen Entfaltungsmöglichkeiten mehr. Daraus ergibt sich die optimale Einbettungsdimension.

Beispiele:

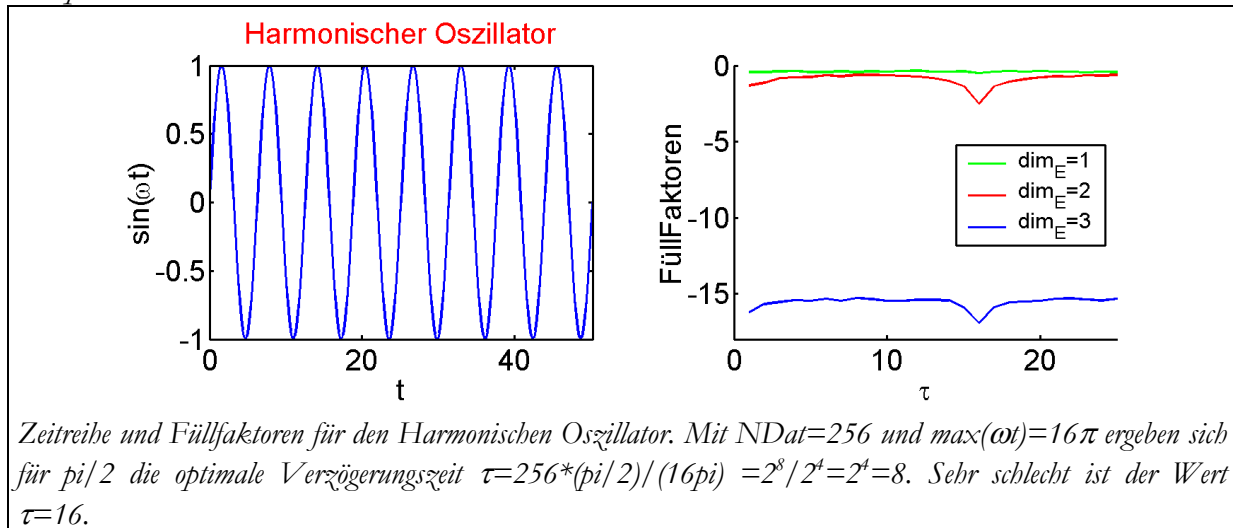


Fig. 1-10

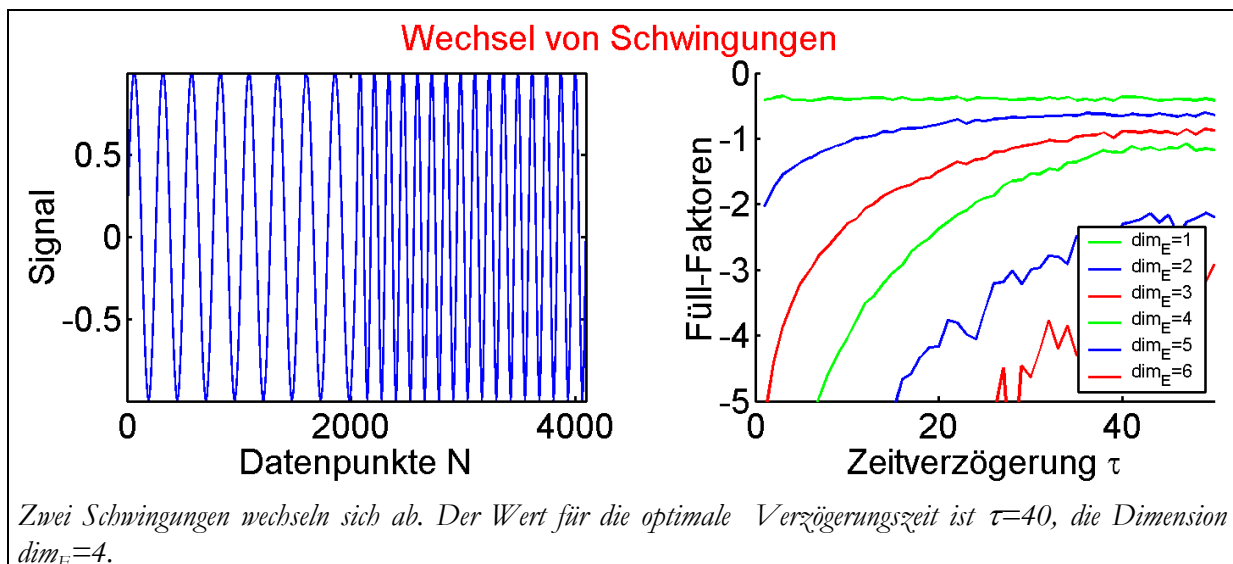


Fig. 1-11

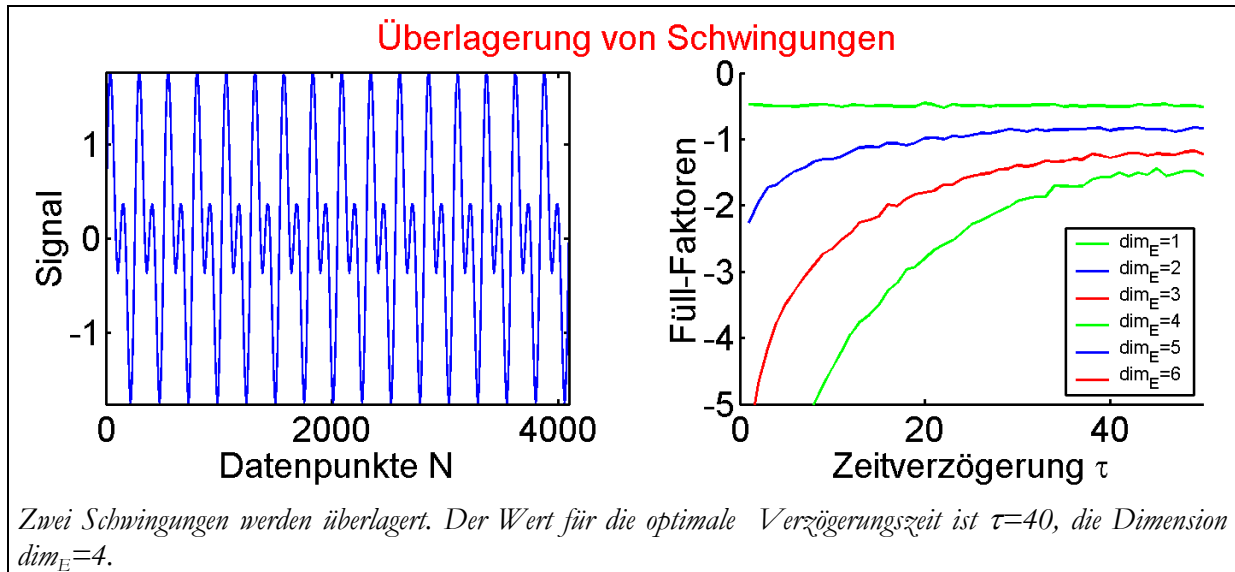


Fig. 1-12

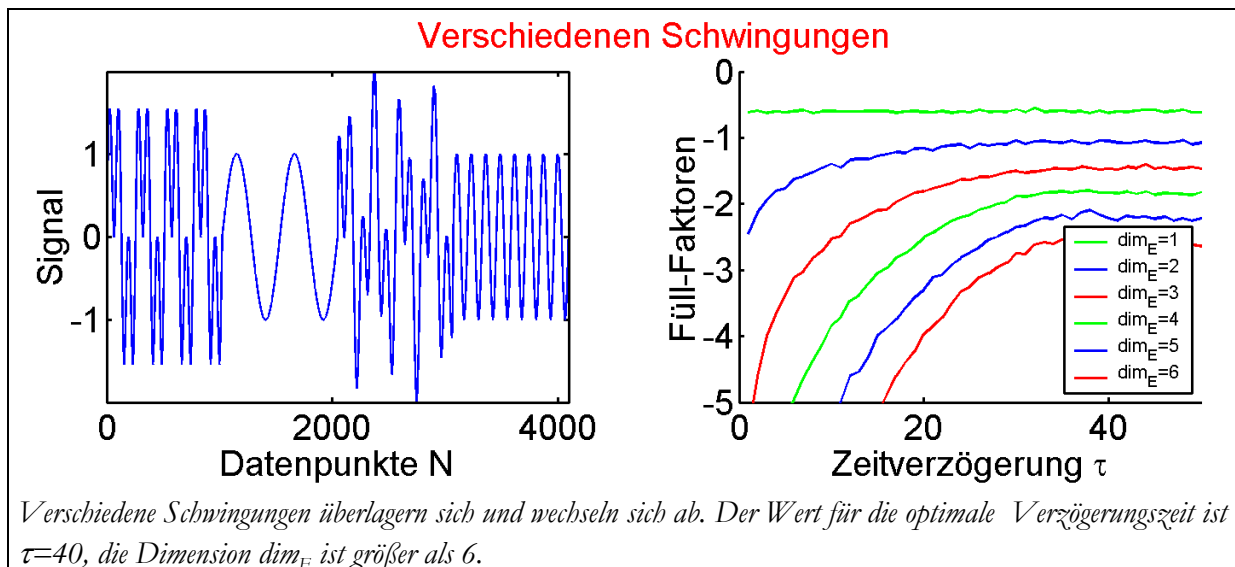


Fig. 1-13

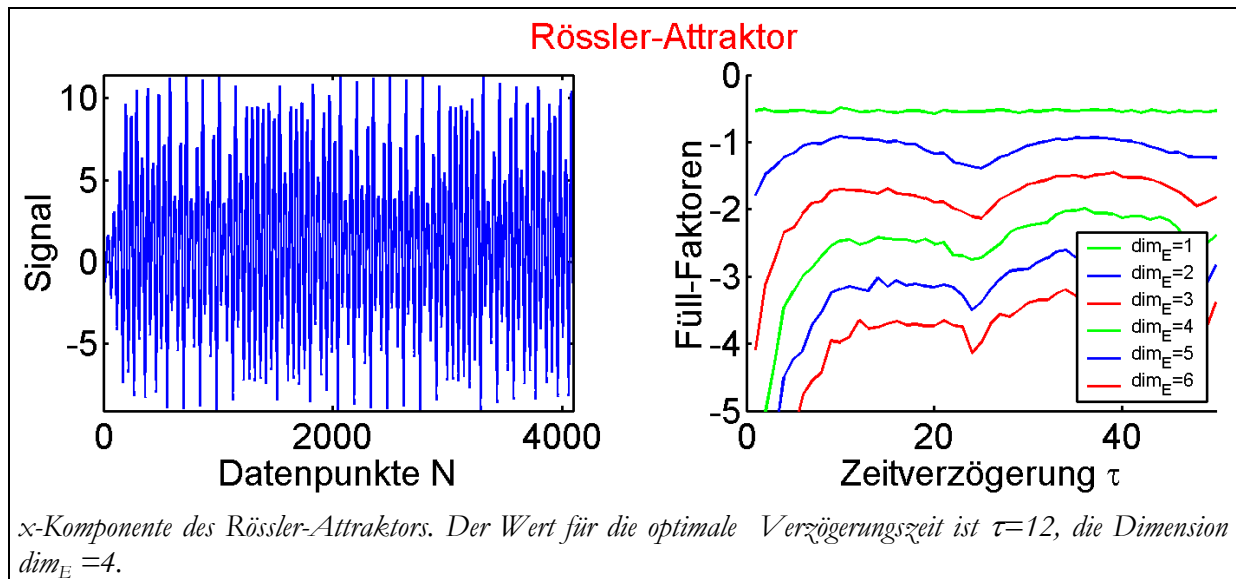


Fig. 1-14

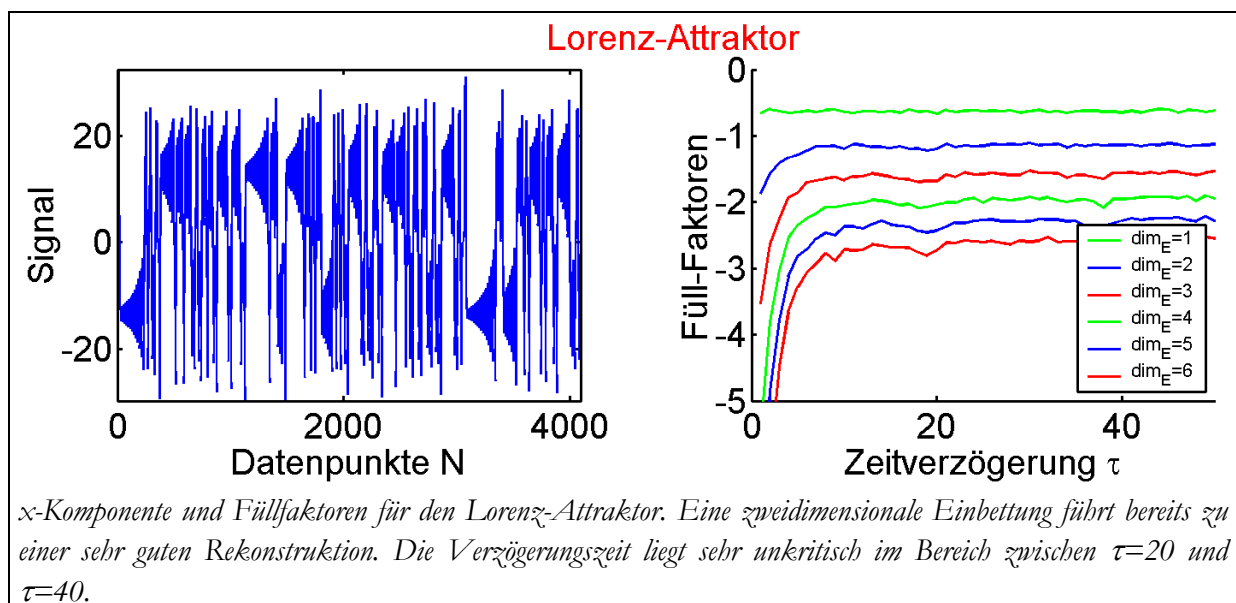


Fig. 1-15

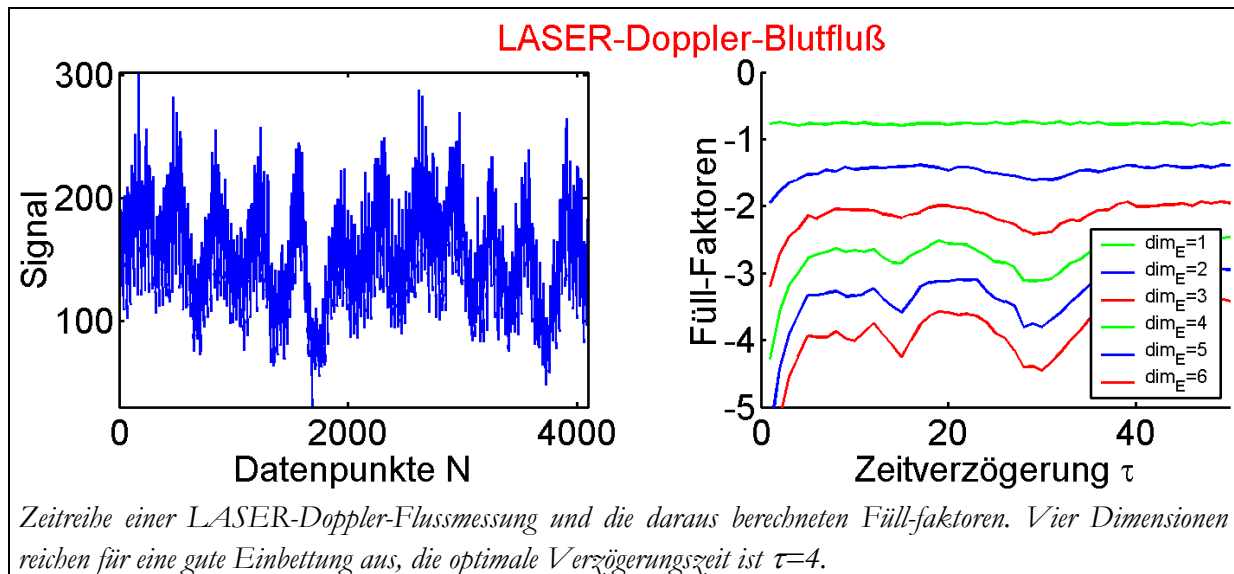


Fig. 1-16

Die Biorthogonalzerlegung

Die Orientierung eines rekonstruierten Attraktors im Einbettungsraum ist eher zufällig. Die einzelnen Koordinatenrichtungen haben nichts mit den ursprünglichen Koordinaten des Phasenraumes zu tun. Es macht daher auch wenig Sinn, die einzelnen Komponenten des rekonstruierten Attraktors zu betrachten.

Es wäre natürlich sehr interessant und hilfreich, den Attraktor im Einbettungsraum so zu rotieren, dass die einzelnen Richtungskomponenten wieder Sinn bekommen. Wenn möglich, sollte eine bestimmte Richtung im Einbettungsraum einem ganz bestimmten Freiheitsgrad des Systems entsprechen. Für einen Oszillator sollte zum Beispiel die eine Richtung mit der Auslenkung und die andere mit der Geschwindigkeit zusammenfallen.

Eine solche Rotation des Attraktors im Einbettungsraum ist in vielen Fällen tatsächlich möglich. Die einzelnen Freiheitsgrade können dann zumindest näherungsweise isoliert, gesondert dargestellt und betrachtet werden.

Dazu bestimmt man im Einbettungsraum Richtungsvektoren $\vec{v}_k$, für welche die Summe der Projektionen aller Attraktorpunkte maximal ist. Dies führt in den meisten Fällen zu einer guten Entkopplung der einzelnen Freiheitsgrade. Das Vorgehen ist ähnlich dem bei der Hauptachsentransformation in der Mechanik.

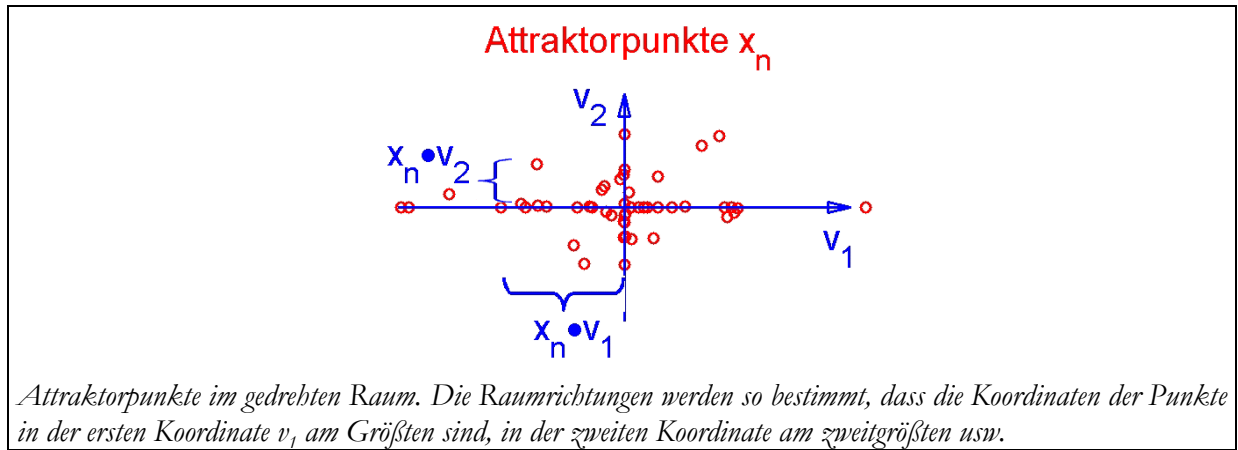


Fig. 1-17

Der erste Schritt besteht in einer Koordinatenverschiebung, die den Attraktor im Einbettungsraum zentriert

$$\tilde{\vec{x}}_n = \vec{x}_n - \vec{x}_0 \quad \text{mit} \quad \vec{x}_0 = \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \vec{x}_n \quad (1-15)$$

und in einer Normierung

$$\tilde{\tilde{\vec{x}}}_n = \frac{1}{\sqrt{F}} \tilde{\vec{x}}_n \quad \text{mit} \quad F = \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \tilde{\vec{x}}_n^2 \quad (1-16)$$

Die Tilde wird im Folgenden weggelassen.

Dann wird eine Entwicklung der Einbettungstrajektorien in die noch unbekannten, optimalen Richtungen angesetzt

$$\vec{x}_n = \sum_{k \in \{1..dim_E\}} y_n^{(k)} \vec{v}_k \quad (1-17)$$

Die optimalen Richtungen v_k werden dann durch die Extremalbedingung

$$\frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} (\vec{x}_n \cdot \vec{v}_k)^2 = \max \quad \forall \quad k \in \{1..dim_E\} \quad (1-18)$$

bestimmt. In Fig. 1-17 wird veranschaulicht, wie diese Bedingung die 'Hauptachsen' des Attraktors festlegt. Schräg liegende Achsen würden immer zu kleineren Projektionswerten führen.

Zusätzlich fordert man noch als Nebenbedingung die Normiertheit der neuen Basisvektoren

$$(\vec{v}_k)^2 = 1 \quad (1-19)$$

Nun wird eine Variation mit Lagrange-Parametern durchgeführt:

$$\vec{\nabla}^{(v_k)} \left(\frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} (\vec{x}_n \cdot \vec{v}_k)^2 - \lambda_k (\vec{v}_k^2 - 1) \right) = 0 \quad (1-20)$$

Die partielle Differentiation führt auf

$$\frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} 2\vec{x}_n \cdot \vec{v}_k - 2\lambda_k \vec{v}_k = 0 \quad \text{oder} \quad (1-21)$$

$$\sum_{p \in \{1..\dim_E\}} \left(\frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} x_n^{(o)} x_n^{(p)} \right) v_k^{(p)} = \lambda_k v_k^{(o)} \forall o \in \{1..\dim_E\},$$

also auf das Eigenwertproblem

$$\mathbf{R} \vec{v}_k = \lambda_k \vec{v}_k \quad (1-22)$$

mit den Matrixelementen der Kovarianzmatrix

$$R_{op} = \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} x_n^{(o)} x_n^{(p)} \quad (1-23)$$

Die einzelnen Komponenten können dann betrachtet werden als neue Zeitreihen

$$y_n^{(k)} = \vec{x}_n \cdot \vec{v}_k \quad (1-24)$$

Die Eigenvektoren $\vec{v}_k$ sind orthogonal und normiert. Die Eigenwerte λ_k werden so geordnet, dass $\lambda_k > \lambda_l \quad \forall k < l$ ist. Bei entsprechend normierten Zeitreihen gilt ferner für die Spur der Kovarianzmatrix

$$\text{Spur}(\mathbf{R}) = \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \vec{x}_n^2 = \sum_{k \in \{1..\dim_E\}} \lambda_k = 1 \quad (1-25)$$

Berücksichtigt man nur die ersten k Komponenten der Biorthogonalzerlegung, wird der Fehler

$$\begin{aligned} E_K &= \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \left(\vec{x}_n - \sum_{k \in \{1..K\}} y_n^{(k)} \vec{v}_k \right)^2 = \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \left(\vec{x}_n - \sum_{k \in \{1..K\}} \vec{x}_n \cdot \vec{v}_k \vec{v}_k \right)^2 \\ &= \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \left(\vec{x}_n^2 - 2 \sum_{k \in \{1..K\}} (\vec{x}_n \cdot \vec{v}_k)^2 + \sum_{k, k' \in \{1..K\}} (\vec{x}_n \cdot \vec{v}_k) \vec{v}_k \cdot \vec{v}_{k'} (\vec{x}_n \cdot \vec{v}_{k'}) \right) \\ &= \frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \vec{x}_n^2 - \sum_{k \in \{1..K\}} \left(\frac{1}{N_{Pkt}} \sum_{n \in \{1..N_{Pkt}\}} \vec{x}_n \vec{x}_n \cdot \vec{v}_k \right) \cdot \vec{v}_k \\ &= 1 - \sum_{k \in \{1..K\}} \lambda_k. \end{aligned} \quad (1-26)$$

Man sieht also den Eigenwerten λ_k genau an, welche Komponenten unwichtig sind!

Das Beispiel des Harmonischen Oszillators

Für den Harmonischen Oszillator kann man eine kontinuierliche Zeitreihe und die Einbettungs-Trajektorie durch

$$\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} \sin(t) \\ \sin(t + \Delta t) \\ \sin(t + 2\Delta t) \end{pmatrix} \quad (1-27)$$

beschreiben. Die Kovarianzmatrix ergibt sich dann zu

$$\mathbf{R} = \left(\frac{1}{T} \int_0^T x^{(m)}(t) x^{(n)}(t) dt \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos(\Delta t) & 2\cos(\Delta t)^2 - 1 \\ \cos(\Delta t) & 1 & \cos(\Delta t) \\ 2\cos(\Delta t)^2 - 1 & \cos(\Delta t) & 1 \end{pmatrix} \quad (1-28)$$

Dabei war auf $T=10\pi$ gesetzt. Die Eigenwerte und Eigenvektoren ergeben sich dann zu

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} + \cos(\Delta t)^2, \quad \lambda_2 = \sin(\Delta t)^2 \quad \text{und} \quad \lambda_3 = 0 \quad (1-29)$$

und

$$\vec{v}_1 = \sqrt{\frac{1}{\cos(2\Delta t) + 2}} \begin{pmatrix} \cos(\Delta t) \\ 1 \\ \cos(\Delta t) \end{pmatrix},$$

$$\vec{v}_2 = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{und}$$

$$\vec{v}_3 = \sqrt{\frac{1}{2\cos(2\Delta t) + 2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2\cos(\Delta t) \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Die Komponenten der Trajektorien im Einbettungsraum vor und nach der Biorthogonalzerlegung sind in Fig. 1-18 dargestellt. Dabei wurde eine offensichtlich ungünstige Verzögerungszeit $\Delta t=0.5$ gewählt. Nach der Biorthogonalzerlegung hat man trotzdem genau die bekannten Phasenraumverhältnisse des Harmonischen Oszillators. Es gibt zwei Freiheitsgrade, die um eine viertel Phase versetzt sind. Der dritte Freiheitsgrad ist redundant und erscheint im rotierten Oszillator nicht mehr.

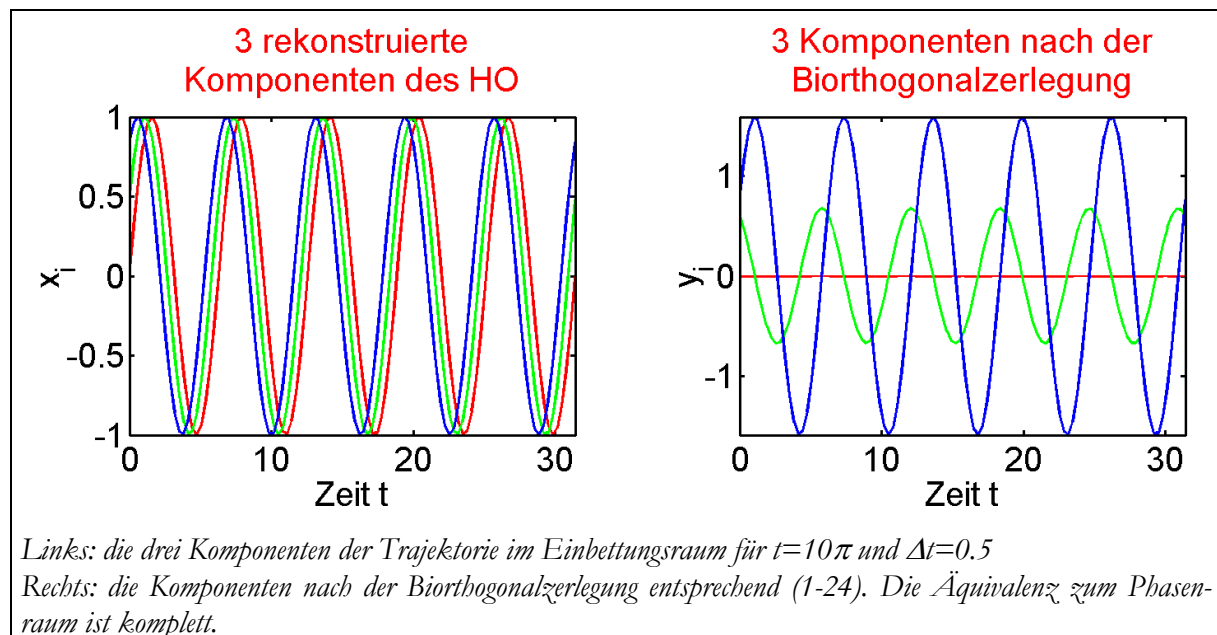


Fig. 1-18

Beispiele:

Tübingen, den 02.02.2005

www.kbraeuer.de

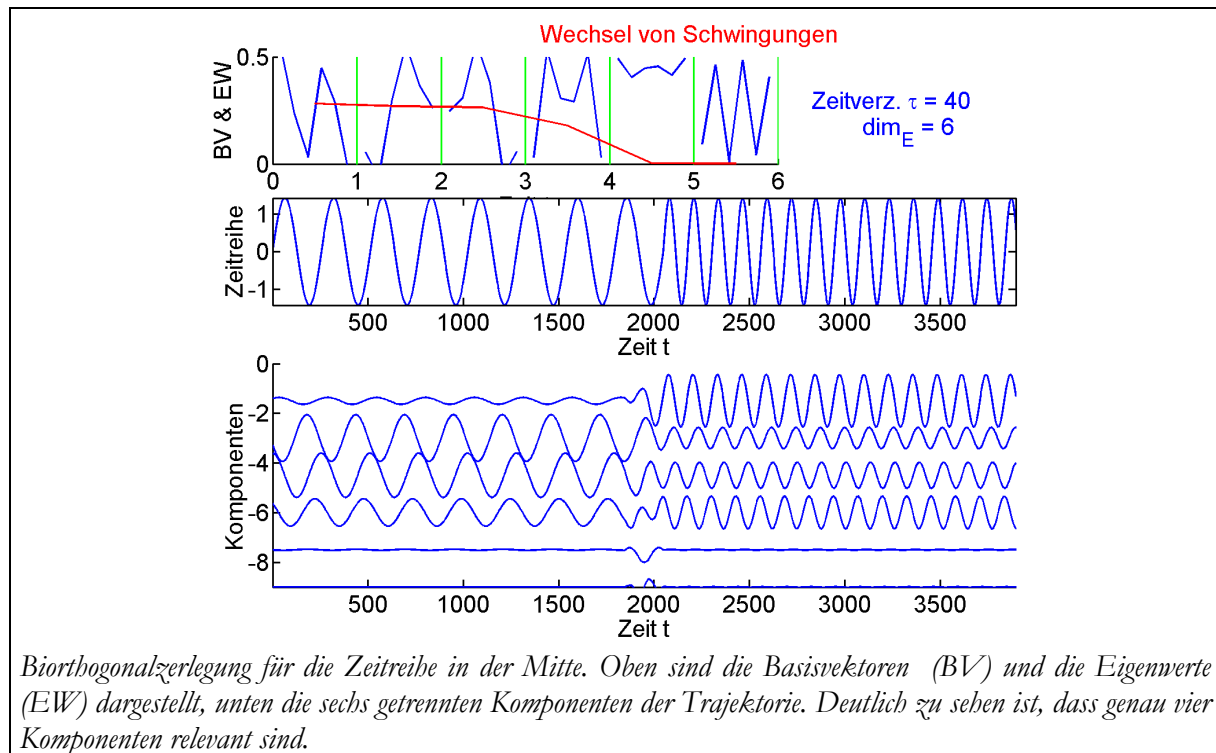


Fig. 1-19

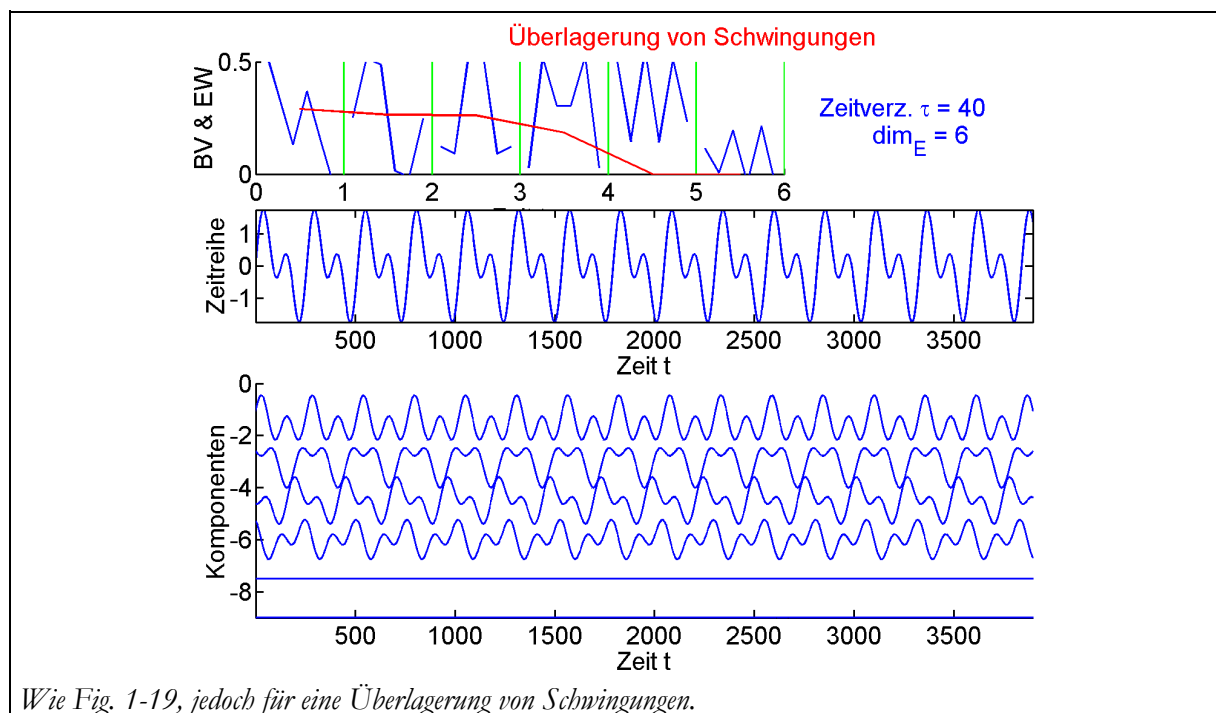


Fig. 1-20

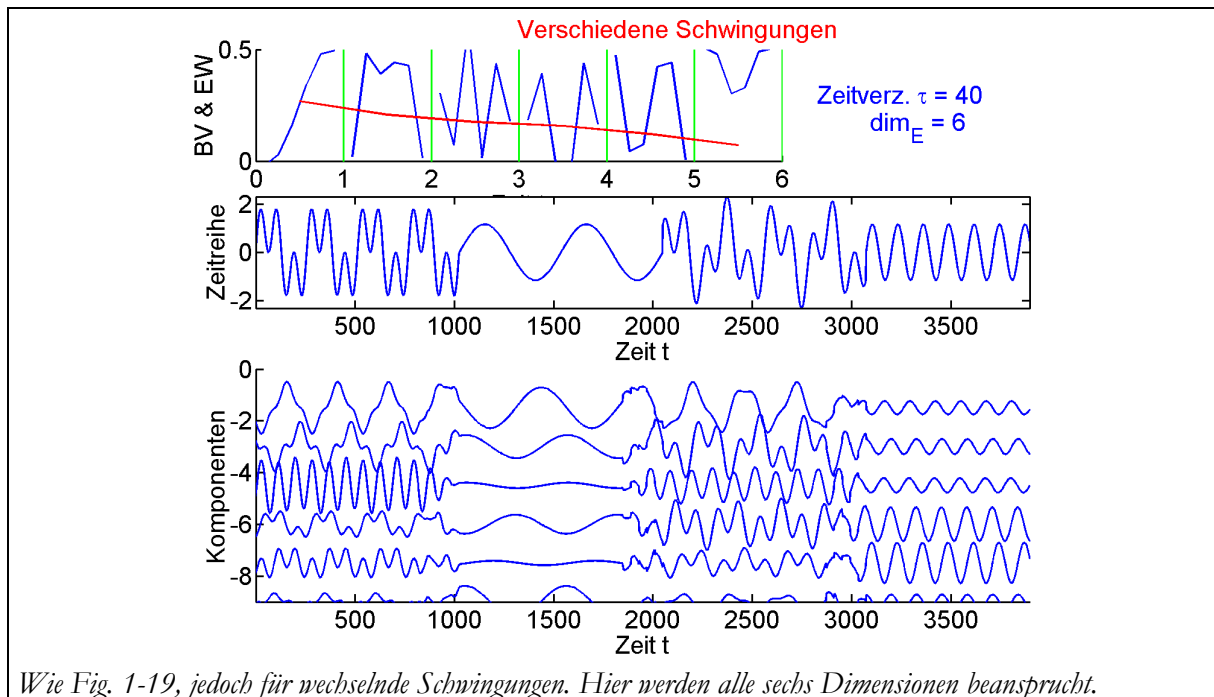


Fig. 1-21

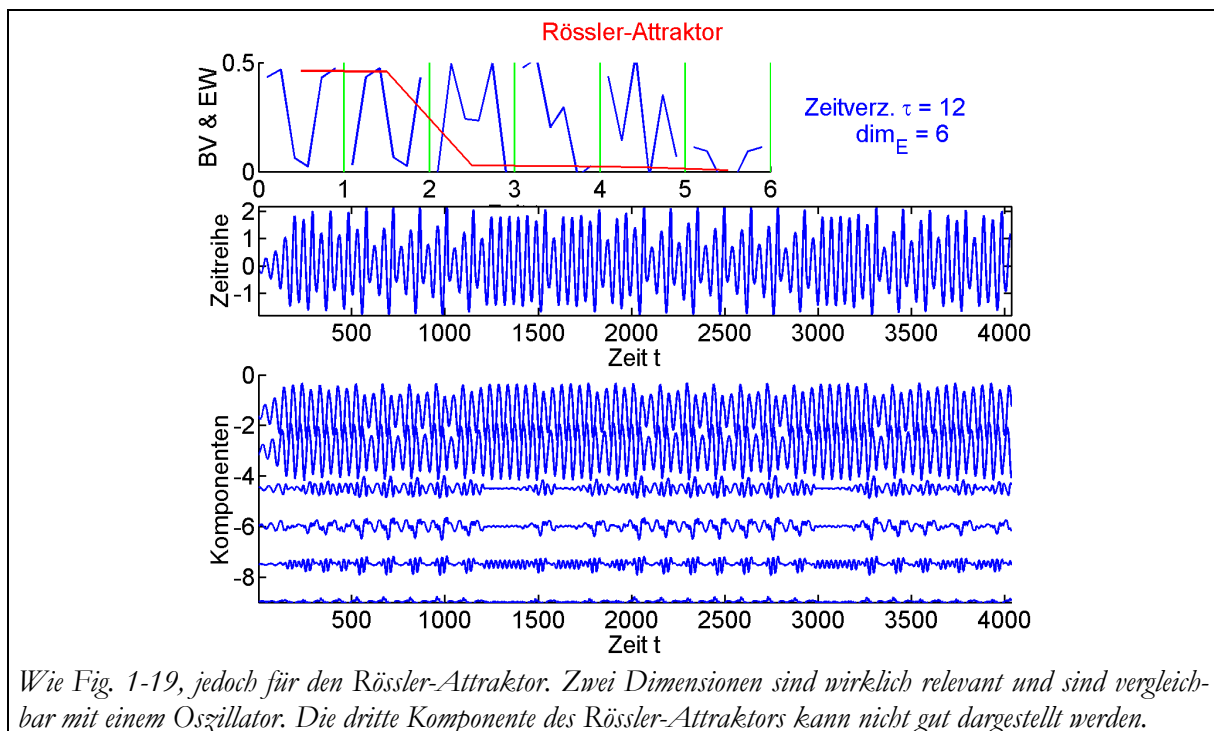


Fig. 1-22

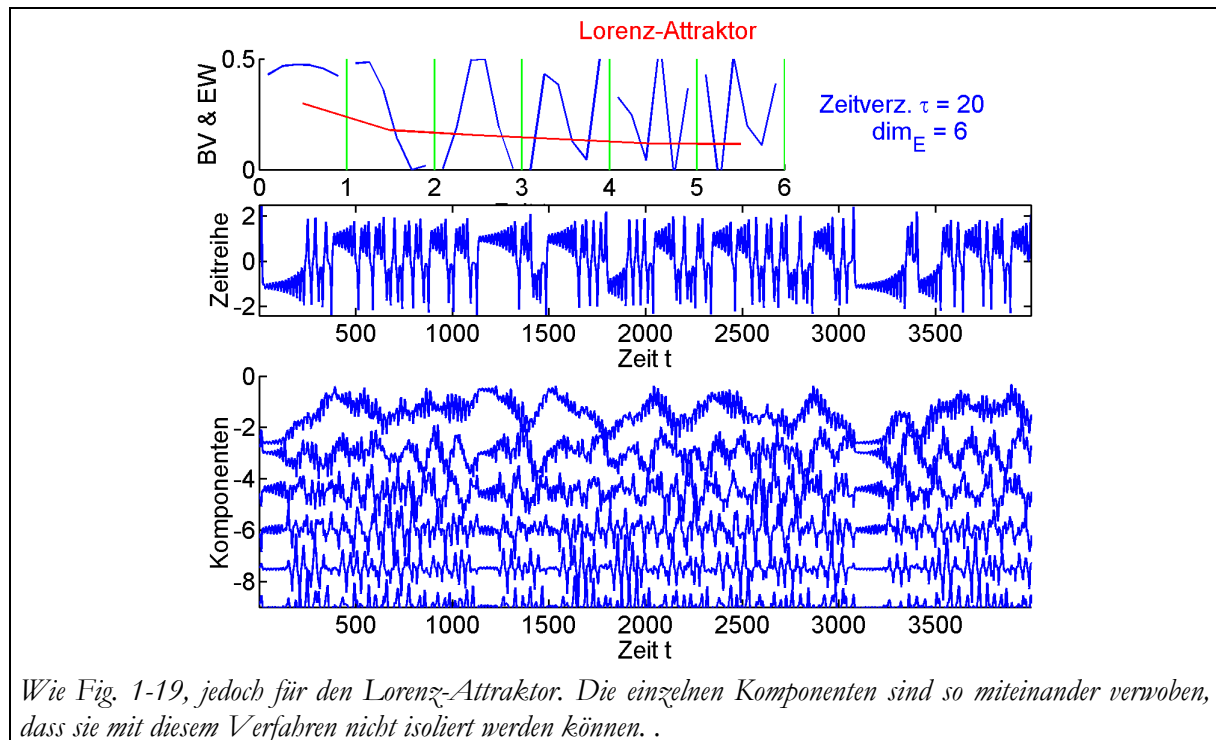


Fig. 1-23

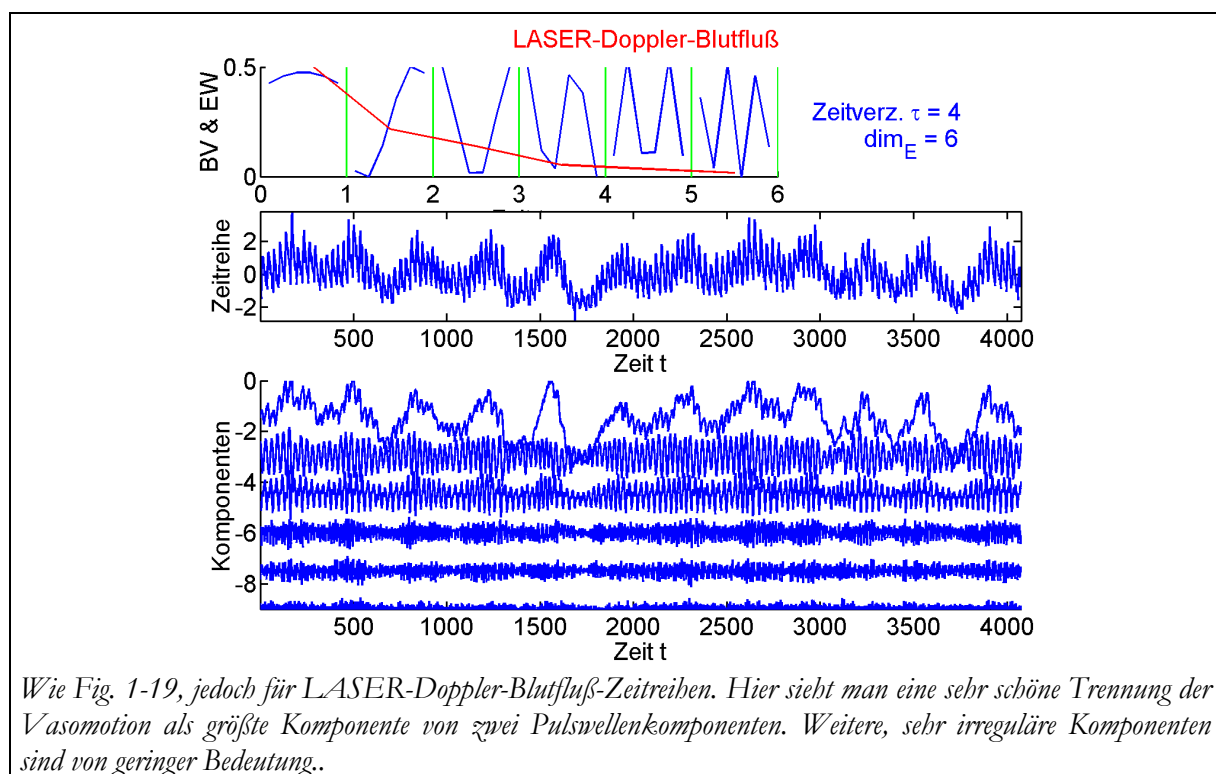


Fig. 1-24

'Wavelets'

Motivation

Zeitreihen geben die zeitliche Entwicklung einer physikalischen Größe eines Systems wieder. Fourier-Transformationen geben den Frequenzinhalt wieder, wobei zeitliche Aspekte völlig verloren gehen. Ein extremer Fall ist in Fig. 1-25 gezeigt. Für ganz unterschiedliche Zeitreihen erhält man fast identische Fourier-Spektren. Von Vorteil ist in dieser Beziehung die darunter gezeigte Zeit- und Frequenzauflösung von Wavelets.

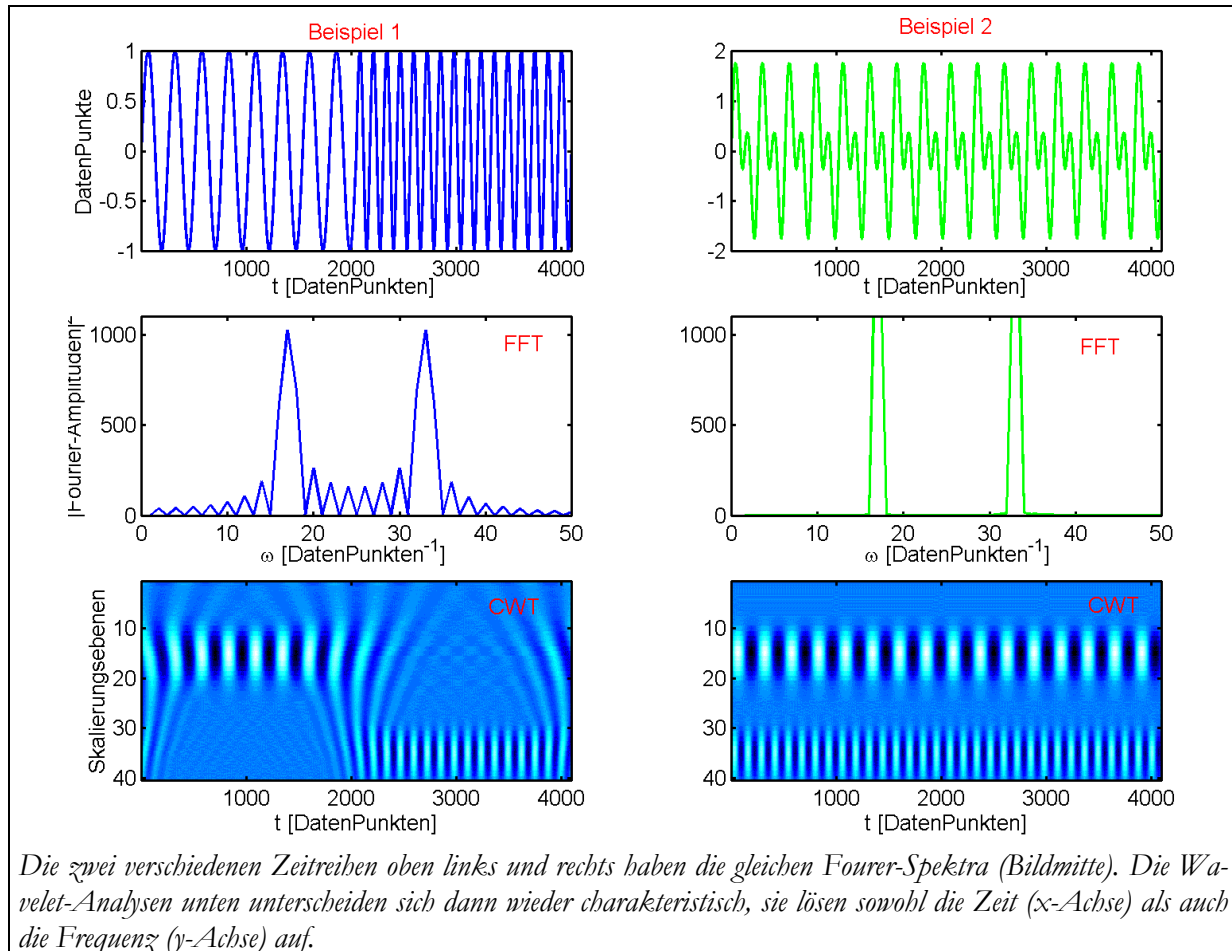


Fig. 1-25

Bei der Fourier-Analyse projiziert man die Zeitreihe auf ebene Wellen $e^{i\omega t}$:

$$\hat{S}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} S(t) e^{i\omega t} dt. \quad (1-30)$$

Damit erhält man eine scharfe Frequenzauflösung, jegliche Zeitinformation geht jedoch verloren.

Um sowohl eine Zeitauflösung als auch eine Frequenzauflösung zu bekommen, wählt man zeitlich begrenzte Funktionen $f(t)$ wie in Fig. 1-26 und projiziert auf diese. Damit erhält man eine Zeitauflösung. Für die Frequenzauflösung werden die Funktionen zusätzlich skaliert:

$$f_a(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} f\left(\frac{t}{a}\right). \quad (1-31)$$

Der Faktor sorgt dafür, dass bei der Skalierung die Norm erhalten bleibt. Zusätzlich soll das Integral über die Wavelets f verschwinden.

Die Wavelet-Darstellung ergibt sich dann als

$$F(a, t) = \int f_a(t' - t) S(t') dt'. \quad (1-32)$$

Eine beliebte Wavelet-Funktion ist der sogenannte Mexikaner-Hut

$$f(t) = (t^2 - 1)e^{-t^2/2}. \quad (1-33)$$

Er ist in Fig. 1-26 dargestellt. Als weitere Beispiele werden wir die Haar-Wavelets in (1-34) und die Morelet-Wavelets in (1-47) betrachten.

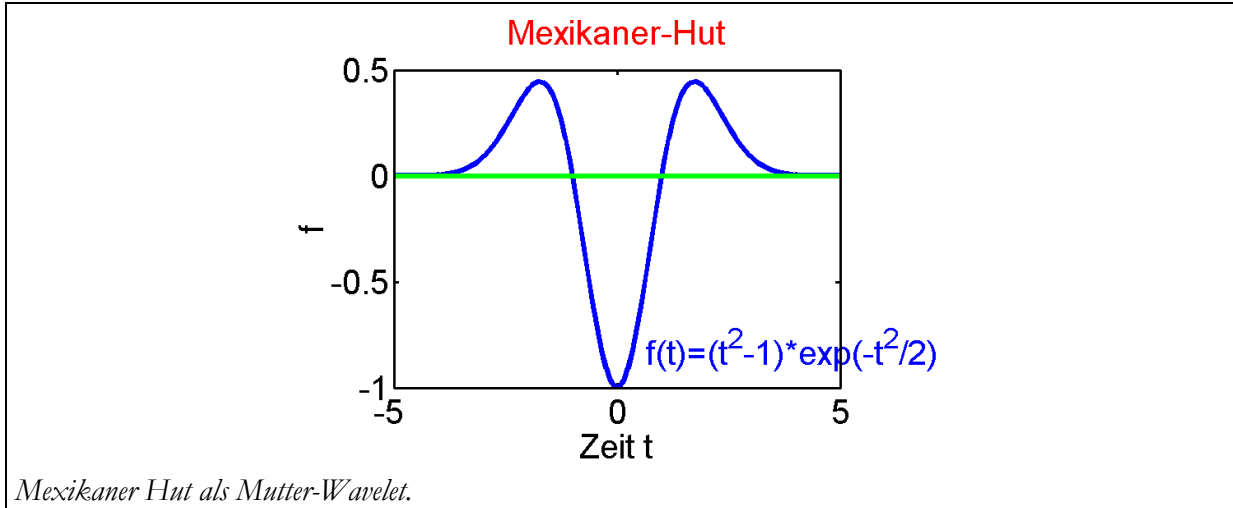


Fig. 1-26

Man unterscheidet grundsätzlich zwei Arten von Wavelet-Transformationen: die diskreten und die kontinuierlichen. Fig. 1-25 zeigt eine kontinuierliche, der Skalierungsparameter a durchläuft eine kontinuierliche Zahlenmenge. Man erhält sehr schöne Bilder und einen qualitativen Einblick in die Zeitreihe. Die Darstellung enthält jedoch sehr viel Redundanz. Diskrete Wavelet-Transformationen stellen hingegen eine biorthogonale Entwicklung dar. Sie enthalten keine Redundanz und sind umkehrbar, d.h. aus den Wavelet-Koeffizienten lässt sich die Zeitreihe rekonstruieren.

Diskrete Wavelet-Transformationen mit Haar-Wavelets

Die Wavelets für die diskrete Transformation müssen biorthogonal sein und oft werden iterative Verfahren zu ihrer Rekonstruktion eingesetzt. Sie lassen sich dann nicht geschlossen formulieren. Eine Ausnahme sind die Haar-Wavelets, an denen sich die Ideen hinter der diskreten Wavelet-Analyse daher halbwegs anschaulich diskutieren lassen.

Definition

Das Haar-Wavelet wird definiert durch

$$\psi(t) = \begin{cases} +1 & \forall t \in [0, \frac{1}{2}]; \\ -1 & \forall t \in [\frac{1}{2}, 1]; \\ \pm 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1-34)$$

Ein vollständiger Satz von Basisfunktionen ergibt sich mit

$$\psi_{m,n}(t) = 2^{-m/2} \psi(2^{-m}t - n), \quad m, n \in \mathbb{Z}. \quad (1-35)$$

m ist der Skalierungsfaktor und n ist der Verschiebungsfaktor. Diese Basisfunktionen sind orthogonal, wie leicht aus Fig. 1-27 zu ersehen ist. Die einzelnen Funktionen einer Skalierungsebene m haben keinen Überlapp und bei unterschiedlichen Skalierungsebenen ist die Funktion mit größerem Skalierungsparameter m da konstant, wo die andere Funktion ihre nicht-verschwindenden Funktionswerte hat. Es gilt also

$$\langle \psi_{m,n}(t) | \psi_{m',n'}(t) \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{m,m'}. \quad (1-36)$$

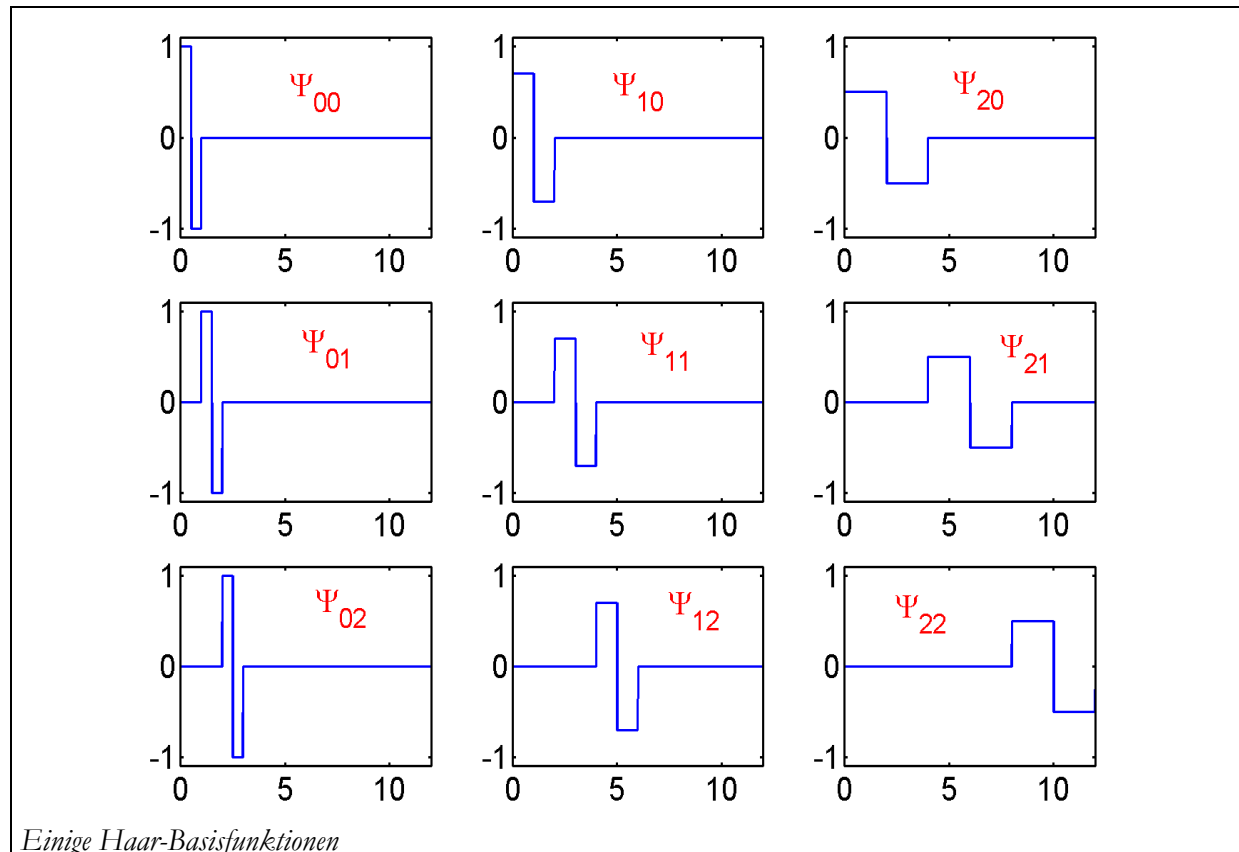


Fig. 1-27

Der Vorteil dieser Haar-Wavelets besteht in ihrer besonders guten Lokalisation in der Zeit. Mit wachsendem m kann jeder Punkt beliebig genau lokalisiert werden. Dafür haben sie dann jedoch eine sehr schlechte Frequenzauflösung.

Entwicklung von Funktionen nach Haar-Wavelets

Wir betrachten Funktionen, die in den Intervallen $[n2^{m_0}, (n+1)2^{m_0}]$ konstant und auf das Intervall $[-2^{m_1}, 2^{m_1}]$ beschränkt sind. Mit großen Werten für m_0 und m_1 kann jede beliebige, stetig differenzierbare Funktion beliebig genau angenähert werden.

Mit den sogenannten Skalierungsfunktionen der Haar-Wavelets

$$\varphi_{-m_0,n}(t) = \begin{cases} 2^{m_0/2} & \forall t \in [n2^{-m_0}, (n+1)2^{-m_0}]; \\ 0 & \text{sonst;} \end{cases} \quad (1-37)$$

kann diese Funktion auch durch

$$f^{(-m_0)}(t) = \sum_{n \in \{-N, \dots, N-1\}} f_n^{(-m_0)} \varphi_{-m_0,n}(t) \quad (1-38)$$

mit

$$N = 2^{m_0+m_1} \quad \text{und} \quad f_n^{(-m_0)} = 2^{-m_0/2} f^{(-m_0)}(n2^{-m_0})$$

dargestellt werden.

Nun kommt der wesentliche Schritt. Man betrachtet zwei benachbarte Intervalle $[2n \cdot 2^{m_0}, (2n+1) \cdot 2^{m_0})$ und $[(2n+1) \cdot 2^{m_0}, (2n+2) \cdot 2^{m_0})$. In diesem Bereich wird unsere Funktion nach (1-38) durch

$$f_{2n}^{(-m_0)} \varphi_{-m_0,2n}(t) + f_{2n+1}^{(-m_0)} \varphi_{-m_0,2n+1}(t) \quad (1-39)$$

beschrieben. Nun stellen wir die Funktion in diesem Bereich dar, zum einen durch eine gemittelte Funktion und durch die Abweichung vom Mittelwert

$$\begin{aligned} & \frac{f_{2n}^{(-m_0)} + f_{2n+1}^{(-m_0)}}{2} \sqrt{2} \varphi_{-m_0+1,n}(t) \quad \text{und} \\ & \frac{f_{2n}^{(-m_0)} - f_{2n+1}^{(-m_0)}}{2} \sqrt{2} \psi_{-m_0+1,n}(t). \end{aligned} \quad (1-40)$$

Mit Hilfe der Definitionen

$$\begin{aligned} f_n^{(-m_0+1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (f_{2n}^{(-m_0)} + f_{2n+1}^{(-m_0)}) \quad \text{und} \\ d_n^{(-m_0+1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (f_{2n}^{(-m_0)} - f_{2n+1}^{(-m_0)}) \end{aligned} \quad (1-41)$$

lässt sich die Funktion in den beiden Intervallen nun als

$$f_n^{(-m_0)} \varphi_{-m_0+1,n}(t) + d_n^{(-m_0)} \psi_{-m_0+1,n}(t) \quad (1-42)$$

angeben. Wenn man dieses Vorgehen nun auf alle Intervalle ausdehnt, erhält man auf dieser Skalierungsebene m_0

$$\begin{aligned} f^{(-m_0)}(t) &= f^{(-m_0+1)}(t) + d^{(-m_0+1)}(t) \\ &= \sum_{n \in \{-N/2, \dots, N/2\}} f_n^{(-m_0+1)} \varphi_{-m_0+1,n}(t) + \sum_{n \in \{-N/2, \dots, N/2\}} d_n^{(-m_0+1)} \psi_{-m_0+1,n}(t). \end{aligned} \quad (1-43)$$

Dieses Vorgehen wird auf allen Skalierungsebenen wiederholt. Die Funktion wird jeweils durch den Mittelwert auf einer höheren Ebene und durch die Abweichungen dazu dargestellt. Am Ende bleibt

$$f^{(-m_0)}(t) = f^{(m_1)}(t) + \sum_{\substack{m \in \{-m_0+1, \dots, m_1\}, \\ n \in \{-2^{m_1-m}, \dots, -2^{m_1-m-1}\}}} d_n^{(m)} \psi_{m,n}(t) \quad (1-44)$$

übrig. In (1-44) ist $f^{(m_1)}(t)$ für das entsprechende Beispiel dargestellt. Man will nun auch noch diesen Teil los werden. Dazu stellt man sie im Intervall $[-2^{m_1+1}, 2^{m_1+1})$ dar durch den Mittelwert und eine Haar-Funktion. Dabei ändert sich die Norm des neuen Mittelwertes von $|f_0^{(m_1)}| 2^{m_1/2}$ auf $|f_0^{(m_1)}| 2^{(m_1-1)/2}$. Wiederholt man dieses Vorgehen M mal, ergibt sich endlich die ausschließliche,

zweidimensionale Entwicklung nach den Wavelets

$$f^{(-m_0)}(t) = \sum_{\substack{m \in \{-m_0+1, \dots, m_1+M\}, \\ n \in \{-2^{m_1-m}, \dots, -2^{m_1-m-1}\}}} d_n^{(m)} \psi_{m,n}(t) + \varepsilon_M \quad (1-45)$$

Der zu M gehörende Fehler ist

$$\|\varepsilon_M\| = \left(|f_{-1}^{(-m_1)}| + |f_0^{(-m_1)}| \right) 2^{(m_1-M)/2} \quad (1-46)$$

Kontinuierliche Wavelet-Transformation

Kontinuierliche Wavelet-Transformationen ergeben einen oft beeindruckenden qualitativen Einblick in eine Zeitreihe. Diese kann ruhig chaotisch oder stochastisch sein. Als Wavelet-Beispiel betrachten wir das von Morlet.

Ein Morlet-Mutter-Wavelet ist zum Beispiel gegeben durch

$$\psi(x) = \cos(cx) \exp(-x^2), \quad c = 15.382, \quad (1-47)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx = 0.$$

Die Konstante c ist dabei so gewählt, dass das Integral über das Wavelet null ist. Die skalierten Wavelets haben die Form

$$\psi_a(x) = \sqrt{a} \psi(ax), \quad (1-48)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi_a(x))^2 dx = a \int_{-\infty}^{\infty} (\psi(ax))^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\psi(x))^2 dx,$$

wobei der Faktor $\sqrt{a}$ für eine skalenunabhängige Normierung sorgt. Vier skalierte Morelet-Wavelets sind in Fig. 1-28 zu sehen. Da sich in der Darstellung die Breite der Wavelets jeweils um den Faktor 2 unterscheidet, spricht man von verschiedenen Oktaven.

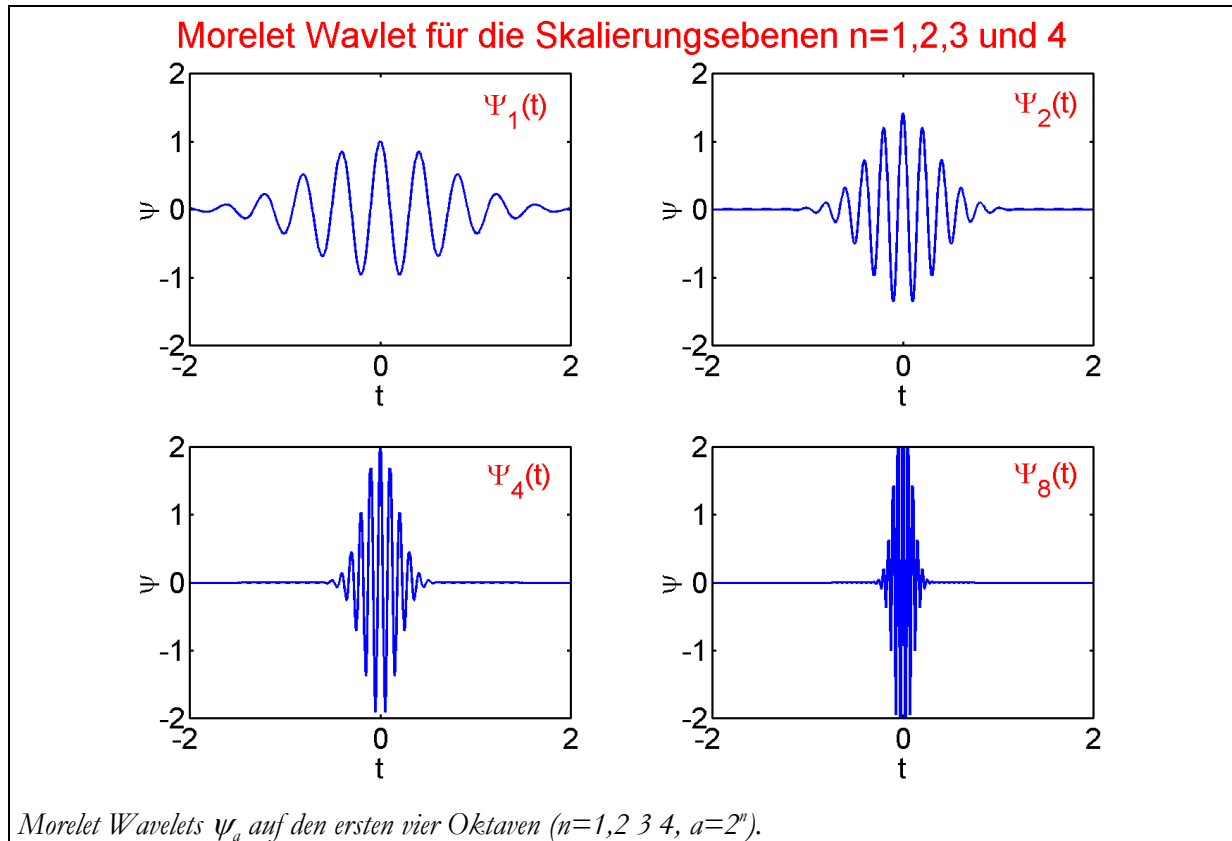


Fig. 1-28

Die kontinuierliche Wavelet-Transformation ist dann durch

$$C_{a,b} = \int s(t) \psi_a(t-b) dt = \sqrt{a} \int s(t) \psi(a(t-b)) dt \quad (1-49)$$

gegeben. a ist dabei der Skalierungsparameter. In der Regel wählt man für ihn die Werte

$$a = 2^{n/m}, \quad m \in \{1 \dots N_{\text{Stimmen}}\}, \quad n \in \{1 \dots N^{(\text{Stimmen})} N^{(\text{Oktaven})}\}. \quad (1-50)$$

$N^{(\text{Stimmen})}$ ist dabei die Zahl der Stimmen pro Oktave und $N^{(\text{Oktaven})}$ ist die Anzahl der Oktaven der Darstellung.

Zur Durchführung der kontinuierlichen Wavelet-Transformation beachtet man am Besten, dass die Koeffizienten $C_{a,b}$ als Korrelationsfunktion des Wavelets der Skalierungsstufe a bezüglich der Zeit b interpretiert werden kann. Damit lässt sich die Technik zur Berechnung der Korrelationsfunktion auf die Transformation anwenden:

$$\begin{aligned}
C_{a,b} &= \int s(t) \sqrt{a} \psi((t-b)/a) dt = \sqrt{a} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(\omega) \hat{\psi}(\omega') e^{i\omega t} e^{i\omega'((t-b)/a)} d\omega d\omega' dt \\
&= \sqrt{a} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(\omega) \hat{\psi}(\omega') e^{i(\omega - a\omega')t} e^{-i\omega'ab} d\omega d\omega' dt \\
&= \sqrt{a} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(\omega) \hat{\psi}(\omega') \delta(\omega - a\omega') e^{-i\omega'ab} d\omega d\omega' \\
&= \sqrt{a} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(a\omega') \hat{\psi}(\omega') e^{-i\omega'ab} d\omega' = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(a\omega') \hat{\psi}(\omega') e^{-i\omega'ab} d(a\omega') \\
&= \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{s}(\omega) \hat{\psi}(\omega/a) e^{-i\omega b} d\omega.
\end{aligned} \tag{1-51}$$

Mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformation wird die Kontinuierliche Wavelet-Transformation extrem schnell durchführbar.

Einige Beispiele sind in den Figuren Fig. 1-29 bis Fig. 1-34 angegeben. Sie zeigen den Charakter der Kontinuierlichen Wavelet-Transformation für Zeitreihen mit verschiedenem Komplexitätsgrad.

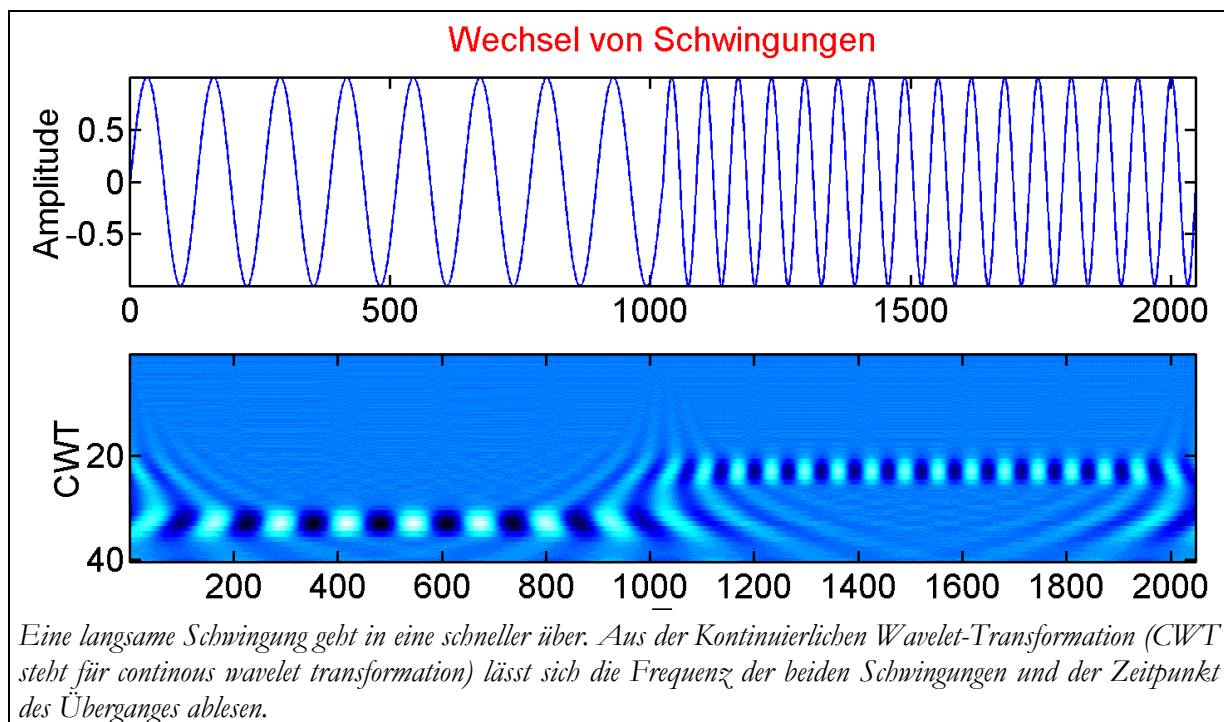


Fig. 1-29

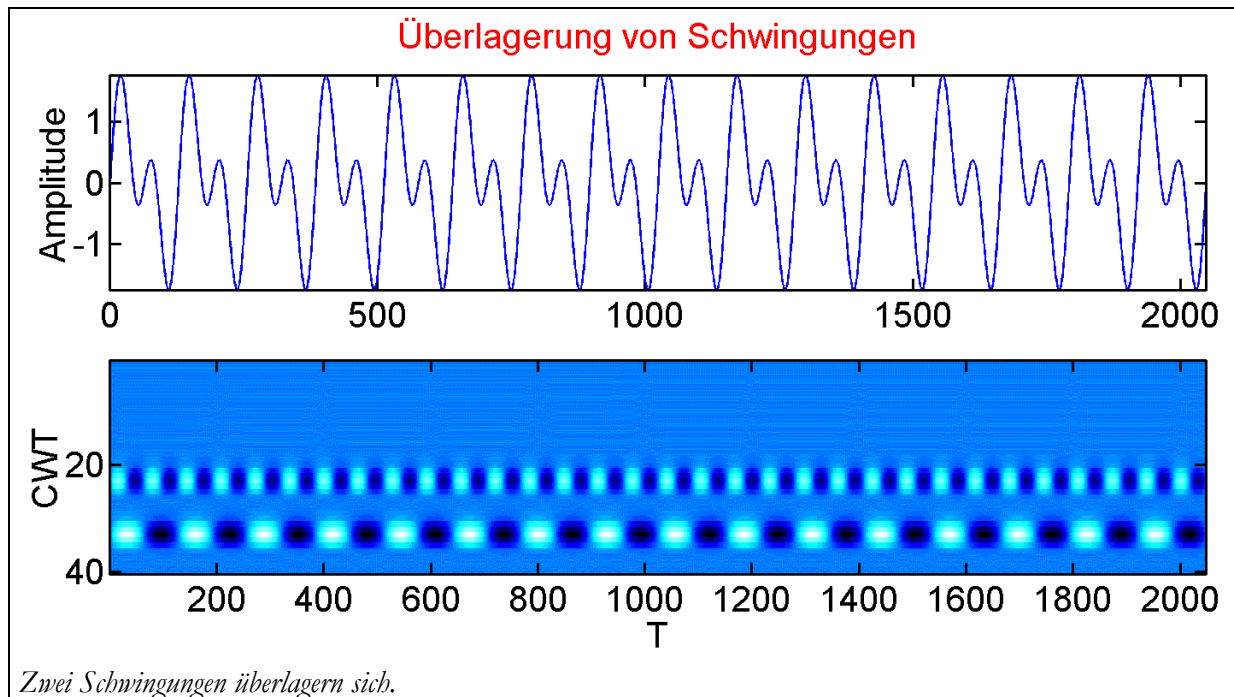


Fig. 1-30

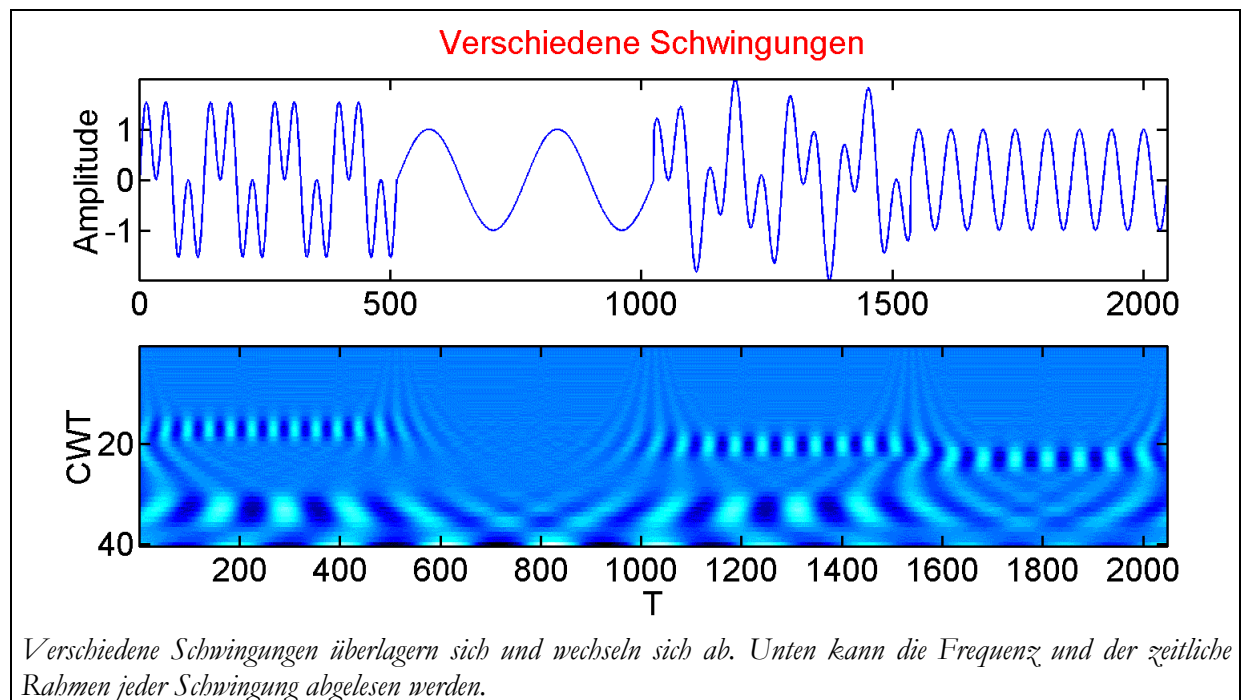


Fig. 1-31

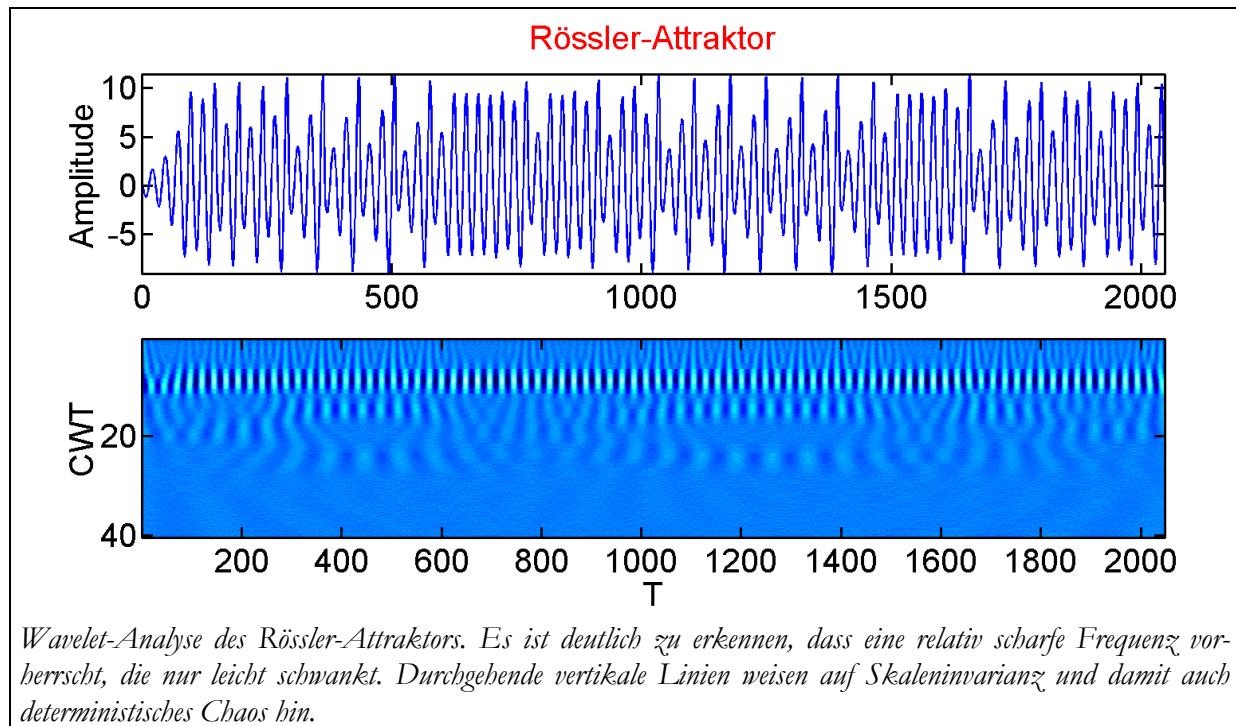


Fig. 1-32

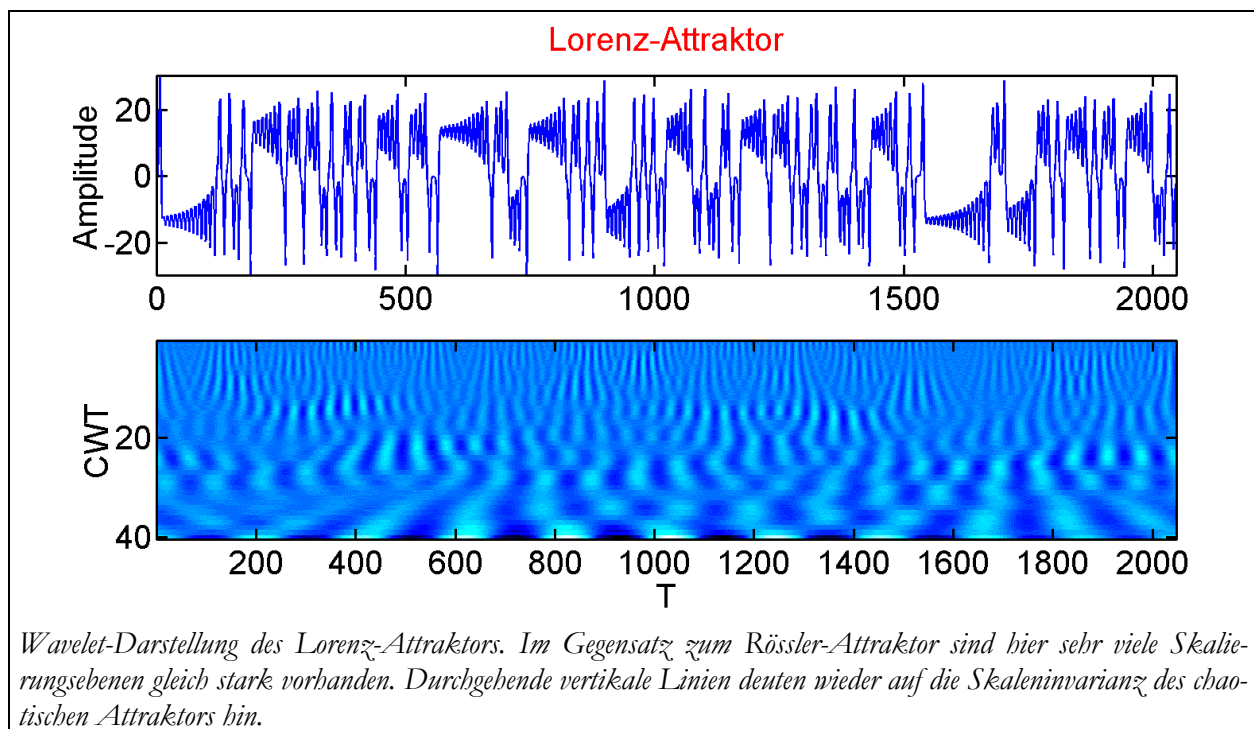


Fig. 1-33

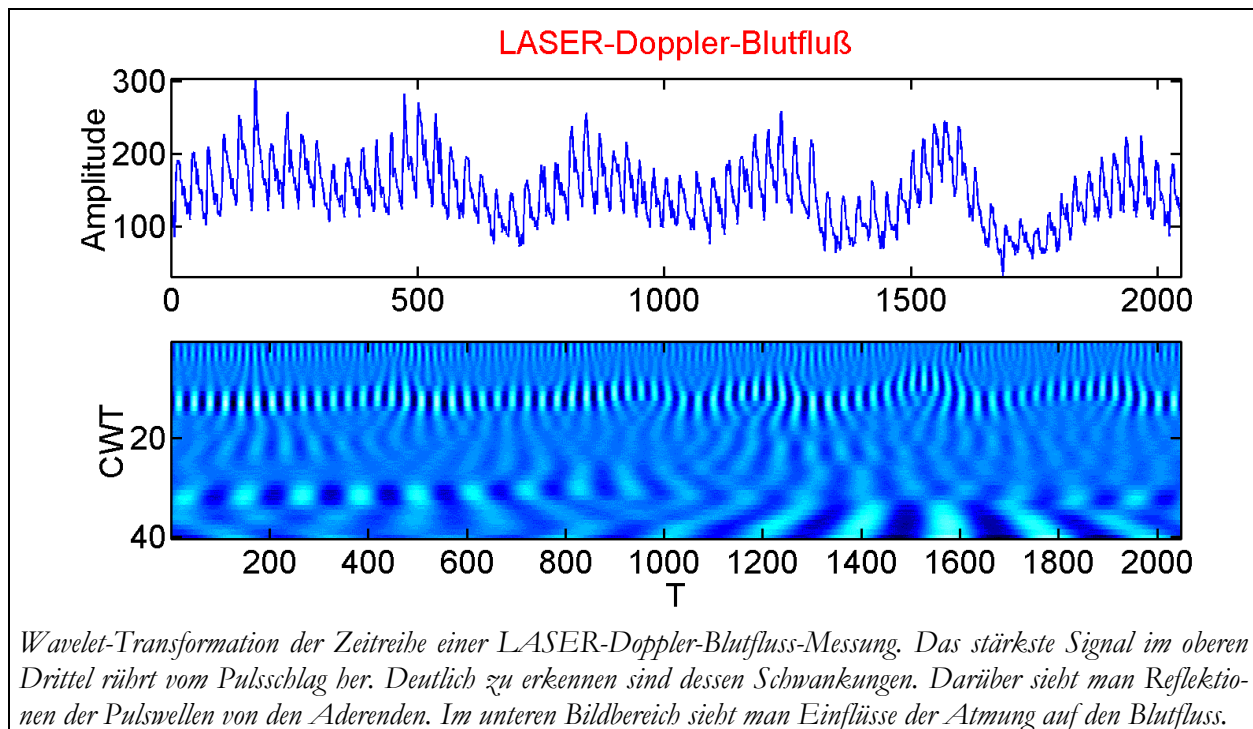


Fig. 1-34

Abschließende Bemerkungen zur Wavelet-Transformation

Unschärfe

Verschiedene Wavelet-Basen unterscheiden sich durch Zeit- und Frequenzauflösung. Beides kann nicht beliebig genau verbessert werden, es besteht eine Komplementarität oder Unschärfe genau wie in der Quantenmechanik. Für jedes Problem muss eine geeignete Wavelet-Basis gefunden werden.

Datenkomprimierung

Eine wichtige Anwendung von Wavelet-Entwicklungen ist die Datenkomprimierung, speziell von Musik- und Bilddateien. Der Übergang zur Entwicklung zweidimensionaler Datenreihen ist dabei kein Problem, man entwickelt eine Dimension nach der anderen. Hat man die diskrete Wavelet-Darstellung einer Bilddatei, kann man so viele Details weglassen, wie vertretbar ist. Hierbei wird die Eigenschaft der diskreten Wavelet-Entwicklung ausgenutzt, eine Entwicklung nach Detailstufen zu sein.

Um eine optimale Datenkompression zu erhalten, sucht man spezielle Wavelet-Formen aus. Optimal ist dabei, wenn möglichst wenige Komponenten der Entwicklung möglichst groß und die anderen möglichst klein sind. Die kleinen können dann einfach weggelassen werden, ohne dass sich der Dateninhalt wesentlich ändert.

Diese Technik wird heute bei standardmäßigen Komprimierungsverfahren für Computerbilder, aber auch für Musik-CD's erfolgreich eingesetzt.

Unterdrückung von Rauschen

Mit Wavelets können sehr effektive Rauschfilter entwickelt werden. Durch optimierte Wavelet-Formen erfolgt die Trennung von Signal und Rauschen, so dass die Rausch-Komponenten einfach weggelassen werden können.

Visualisierung komplexer Zusammenhänge

Wavelet-Entwicklungen eignen sich hervorragend zur Visualisierung von irregulären Datenreihen, weil sie eben eine Zeit- und Frequenzauflösung ermöglichen. Man erhält einen manchmal überwältigenden Einblick in den Dateninhalt, der mit anderen Techniken kaum möglich ist. Das gilt vor allem für eine kontinuierliche Wavelet-Entwicklung.

Im Vergleich zur Biorthogonalzerlegung haben Wavelet-Entwicklungen den Vorteil, Darstellungen in einer festen Basis zu liefern, so dass verschiedene Zeitreihen sehr gut miteinander verglichen werden können. Bei einer Biorthogonalzerlegung wird immer die für jede Zeitreihe optimale Basis bestimmt. Das ist natürlich auch sehr vorteilhaft, erschwert jedoch manchmal den direkten Vergleich verschiedener Zeitreihen.