知识介绍

关于功率谱密度函数计算中的几个问题*

范　顺　庭

（中国科学院海洋研究所）

近年来，“谱分析”方法已在海洋科学的各个学科中广泛地应用，并且取得了不少成果。但在实际工作中，如在分析潮汐、潮流、海流等功率谱密度函数的计算结果时也遇到了一些具体问题。这些问题可以归纳为：通过快速富里叶变换方法得到离散的平滑谱估计值的个数问题；平滑谱估计值的频率分辨问题；变换频率单位对谱估计值的影响问题以及在原始数据中增添零数据点对计算功率谱密度函数的影响问题等。弄清这些问题对进一步了解谱分析方法的实质会有很大帮助。本文就是针对这些问题作一些分析与说明。

为了便于讨论，先把计算功率谱密度函数的方法作一简要介绍。

计算功率谱密度函数通常有两种方法。一种叫做标准的自相关函数法，其表达式为[1]：

$$G_x^{(1)}(f)=4\int_0^{\infty}R_x(\tau)\cos 2\pi f\tau d\tau \qquad (1)$$

其中 $R_x(\tau)$ 表示某个各态历经的随机过程 $\{x(t)\}$ 的自相关函数；另一种叫做直接法，即是直接对随机过程 $\{x(t)\}$ 的样本函数做富里叶变换得到功率谱密度函数，其表达式为[1]：

$$G_x^{(2)}(f)=\lim_{T\to\infty}\frac{2}{T}\left|\int_0^{T}x(t)e^{-j2\pi ft}dt\right|^2 \qquad (2)$$

在电子计算机上计算功率谱密度函数时，要求输入的数据必须是离散数值，所以要对连续观测的数据记录必须做离散化处理。这叫做数据采样。离散化的数据值叫做采样数据。实际计算时，要求参加运算的采样数据的个数是有限的（即是说，在有限的时间区段0—T上进行计算）。在记录是离散的、有限的情况下，计算功率谱密度函数的公式（1）和（2）可以分别近似地表示为：

$$G_x^{(1)}(f)=2\Delta t\left[R_0+2\sum_{r=1}^{M-1}R_r\cos 2\pi fr\Delta t+R_M\cos 2\pi fM\Delta t\right] \qquad (3)$$

和

$$G_x^{(2)}(f)=\frac{2}{N\Delta t}\left|\Delta t\sum_{i=0}^{N-1}x_i\,e^{-j2\pi fi\Delta t}\right|^2 \qquad (4)$$

其中
$R_r=R_x(r\Delta t)$
$r=0,1,2,\cdots,N-1$
$x_i=x(i\Delta t)$
$i=0,1,2,\cdots,N-1$

M为相关函数 $R_x(\tau)$ 的最大滞后数，N为记录 $x(t)$ 的离散数据的个数，Δt 为离散处理的时间间隔。

用公式（3）计算功率谱密度函数的估计值时，通常选取的离散频率点为：

$$f_K=K\frac{f_C}{M}$$

$$K=0,1,2,\cdots,M \qquad (5)$$

其中 $f_C=1/2\Delta t$ 称为Nyquist频率（也称为折叠频率）。于是，式（3）可以改写成：

$$G_K^{(1)}=G_X^{(1)}(f_K)=2\Delta t\left[R_0+2\sum_{r=1}^{M-1}R_r\cos\frac{\pi Kr}{M}+R_M\cos\pi K\right]$$

$$K=0,1,2,\cdots,M \qquad (6)$$

* 本文曾得到袁业立、吴永成和王以谋等同志的具体指导和帮助，特此致谢。

用公式（4）计算功率谱密度函数的估计值时，通常选取的离散频率点为：

$$f_K = K\frac{1}{T} = K\frac{1}{N\Delta t}$$

$$K=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ N/2 \qquad (7)$$

于是，式（4）可改写为：

$$G_K^{(2)} = G_x^{(2)}(f_K) = \frac{2}{N\Delta t}\left|\Delta t\sum_{i=0}^{N-1} x_i e^{-j\frac{2\pi iK}{N}}\right|^2 = \frac{2\Delta t}{N}|X_K|^2$$

$$K=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ N/2 \qquad (8)$$

其中

$$X_K = \sum_{i=0}^{N-1} x_i e^{-j\frac{2\pi iK}{N}}$$

$$K=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ N-1 \qquad (9)$$

称为x（t）的离散富里叶分量。$G_K^{(1)}$ 和 $G_K^{(2)}$ 称为谱估计值。

下面讨论关于功率谱密度函数计算中的几个问题。

一、离散的平滑谱估计值的个数问题

用公式（6）或公式（8）做谱估计所得到的估计值 $G_K^{(1)}$ 或 $G_K^{(2)}$ 也称为周期图或粗谱。在得到粗谱之后，一般需要进行平滑处理，才能得到较稳定的也是实际应用的平滑谱估计值。对于同一组采样数据，用公式（6）和用公式（8）计算得到的粗谱个数是不相同的。用公式（6）得到M＋1个粗谱值；用公式（8）得到（N/2)＋1个粗谱值。通常，M取值为参加运算的采样数据个数N的十分之一，即M＝N/10。取这样的M值主要是因计算相关函数 $R_x(\tau)$的需要。用公式（6）计算的粗谱 $G_K^{(1)}$（K＝0，1，2，…，M）平滑处理一般采用 Hamming 平滑法[2] 或 Hanning 平滑法[1]。用这样的平滑法得到的平滑谱估计值的个数是M＋1个，与相关函数估计值的个数相同。对用式（8）计算，情况就有所不同。下面讨论这一问题。

用式（8）计算得到（N/2＋1）个粗谱值这一事实可由下面的分析来说明。

用式（8）做谱估计通常采用快速富里叶变换方法。当在 $N=2^P$（P为正整数）的情况下这种方法非常有效。用它可以一次算出所有的 X_K（K＝0，1，2，…，N－1)。由于 X_K 满足如下关系：

$$X_K = X^*_{(N-K)} \qquad (10)$$

其中 X_r^* 表示 X_r 的共轭复值量。可以看出，在实际计算时，只要计算出前（N/2)个就可以了。后面的一半可用式（10）得到。

再根据式（10)，有

$$|X_K|^2 = |X^*_{(N-K)}|^2$$

$$K=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ N-1 \qquad (11)$$

当K＝N/2 时，有

$$X_K = X^*_{(N-K)} = X_{(N-K)}$$

这表明 X_K 与 $X^*_{(N-K)}$ 的值在K＝N/2处相重合。因此 $G_K^{(2)}$（K＝0，1，2，…，N－1）便以K＝N/2的纵轴对称（除K＝0)。所以，在实际计算 $G_K^{(2)}$ 时，只要计算前N/2个值就可以，后面一半便可由式（11）相应地求出来。应当注意的是，当K＝N/2时，有 $f_K=f_C$，正好是折叠频率点。这就表明，在频率范围 $(0,\ f_C)$ 内的谱估计值正好是前N/2个 $G_K^{(2)}$，其余的 $G_K^{(2)}$（K＞N/2）是 $G_K^{(2)}$（K⩽N/2）的重复。所以，用式（8）计算功率谱密度函数所得的粗谱个数为（N/2)＋1个(包括K＝0)。

下面谈谈对 $G_K^{(2)}$（K＝0，1，2，…，N/2）平滑所得的平滑谱值的个数问题。

对于 $G_K^{(2)}$ 的平滑处理有多种方法，如算术平均法[1]，叠合平均法，综（混）合平滑法等。因此，平滑谱值的个数也因平滑方法的不同而不同。在一般情况下，当平滑方法选定之后，平滑谱值的个数也就随之而定了。如果为了某种需要，譬如想比较用式（8）和用式（6）两种方法所计算的结果（平滑后的结果），也可以事先确定平滑谱值的个数。在上述情况下，可以选定平滑谱值的个数为 M＋1（M为

相关函数的最大滞后数），然后再选取适当的平滑函数（即平滑核）进行平滑。假定采用算术平均法进行平滑，这样，平滑谱值就取为相邻的N/(2M)个 $G_K^{(2)}$ 的算术平均值。相应于该平滑谱值的频率区间就是每个 $G_K^{(2)}$ 对应的频率区间之和。这样一来，用式（8）计算得到的(N/2)+1个粗谱经过平滑处理后便得到M+1个平滑谱值，与用式（6）计算得到的平滑谱值的个数相同，而且对应的频率区间也相同，因此可以很方便地比较两种方法计算的结果。通过我们实际计算表明，用两种方法计算得到的平滑谱估计值十分相近。以上事实告诉我们，在计算功率谱密度函数时，式（6）和式（8）均可采用。由于当代电子计算机的广泛应用，因此，在计算功率谱密度函数时，采用式（8）并利用快速富里叶变换显得非常有利。

二、平滑谱估计值的频率分辨问题

这个问题与上一问题密切相关，是讨论谱估计的分辨频率问题。我们已经知道，当数据采样的时间间隔 Δt 确定之后，Nyquist 频率 f_C 就随之而决定了，$f_C=1/2\Delta t$。这表明采样数据所涉及的频率范围是 $(0, f_C)$，这一点是人所共知的。Δt 取值的大小对谱估计值是有影响的，对这一点这里暂不作讨论。现在讨论当 Δt 确定之后，在频率域上谱估计值的频率分辨问题。用公式（6）计算功率谱密度函数可得到M+1个粗谱值 $G_K^{(1)}$ (K=0, 1, 2, …, M)。这是相当于把频率区间 $(0, f_C)$ 分成M个相等的小区间，每一个 $G_K^{(1)}$ 就是对应于第K个小区间上的谱估计值。$G_K^{(1)}$ 与 $G_{K+1}^{(1)}$ 之间的频率间隔为 $\Delta f_1=f_C/2M\Delta t$。$\Delta f_1$ 就称为 $G_K^{(1)}$ (K=0, 1, 2, …, M)的分辨频率。也即是M个小区间的长度。由于对 $G_K^{(1)}$ (K=0, 1, 2, …, M)的平滑处理采用了 Hamming 平滑法或 Hanning 平滑法，所以平滑后的 $G_K^{(1)}$，其分辨频率仍为 Δf_1。而离散频率点就是 $f_K=K/2M\Delta t$。

当用公式（8）计算功率谱密度函数时，可得到(N/2)+1个粗谱值 $G_K^{(2)}$ (K=0, 1, 2…, N/2)。根据式（7），有

$$f_K=\frac{K}{N\Delta t}=K\left(\frac{1}{2\Delta t}\right)\left(\frac{2}{N}\right)=Kf_C/(N/2) \qquad (12)$$

这相当于把频率区间 $(0, f_C)$ 分成了N/2个相等的小区间，每一个 $G_K^{(2)}$ 就是对应于第K个小区间上的粗谱值。$G_K^{(2)}$ 与 $G_{K+1}^{(2)}$ 之间的频率间隔，亦即分辨频率 Δf_2 就是 $\Delta f_2=f_C/(N/2)=1/N\Delta t=1/T$。$G_K^{(2)}$ 对应的频率分隔点 f_K 就是 $f_K=K/T$。在一般情况下，$\Delta f_2<\Delta f_1$。

$G_K^{(2)}$ (K=0, 1, 2, …, N/2)平滑后的分辨频率与所采用的平滑方法有关。也可以事先选定。假定想要得到M+1个平滑谱值（其中M仍取为相关函数的最大滞后数），对同一组数据来说，毫无疑问，其分辨频率就等于前面讲过的 Δf_1。在已经得到粗谱 $G_K^{(2)}$ (K=0, 1, 2, …, N/2)的情况下，假定采用算术平均法平滑，那么相应于分辨频率为 Δf_1 的平滑谱值就等于相邻的L(L=N/2M)个 $G_K^{(2)}$ 的算术平均值。例如N=1,024，M=64，则L=8。即平滑谱值等于相邻的8个 $G_K^{(2)}$ 的算术平均值。所以平滑后的分辨频率就是 $\Delta f_1=L/N\Delta t=1/2M\Delta t=f_C/64$。由此可见，分辨频率仅与采样数据的时间间隔 Δt 有关，而与采样数据的个数N无关。

三、变换频率单位对谱估计值的影响问题

在功率谱密度函数的实际应用中，有时需改变分析的频率单位。因为这样做可以使要说明的物理现象更加直观。例如在潮汐、潮流分析中，常用“半日潮”、“全日潮”等这类术语来阐述潮汐、潮流的变化。但是在计算潮汐、潮流的功率谱密度函数时，由于观测资料是以几小时或几分一次记录的，所以谱分析的频率单位自然取为周/时或周/分。因此便存在一个

频率单位的变换问题。下面讨论频率单位变换时对谱估计值的影响。

为了说明这一问题，我们仍然从 Nyquist 频率着手并结合式（6）加以讨论。

从式（6）可以看出，中括号内除了参数K、r、M以外，其余均为已知量，并且K、r、M均取正整数。因此，影响谱值 $G_K^{(1)}$的参量仅是Δt。当用每小时一次的观测记录进行谱分析时，因为 $\Delta t=1$小时，所以由它决定的 Nyquist 频率就是 $f_C=1/2\Delta t=0.5$周/时。如果平滑谱值的个数取为 $M+1$个，则根据第二部分的分析，其分辨频率就是$\Delta f_1=1/2M$(周/时）。这表示当 $K=1$时，平滑谱估计值$G_1^{(1)}$代表了频率为$1/2M$（周/时）的谱分量值。也就是周期为2M小时的谱分量值。当$K=2$时，谱值 $G_2^{(2)}$就代表了周期为M小时的谱分量值。依次类推。如果频率单位发生改变，比如用周/日来记，这时已得到的谱估计值由频率单位的变化也随之发生变化。事实上，令 $\Delta t'=24$小时＝1日，这时，由 $\Delta t'$ 决定的 Nyquist 频率 f_C' 就是 $f_C'=1/2\Delta t'=0.5$周/日。因此有

$$\frac{\Delta t'}{\Delta t}=24 \tag{13}$$

$$\frac{f_C'}{f_C}=\frac{1}{24} \tag{14}$$

从而相应地分辨频率也发生变化。新的分辨频率与原来的分辨频率也有如下关系：

$$\frac{\Delta f_1'}{\Delta f_1}=\frac{1}{24} \tag{15}$$

从式（6）还可以看出，中括号内的项与上述各量均没有关系，只是参数K的意义变了。原来的K相应的频率单位是周/时，改变后相应的频率单位变成了周/日。谱估计值的变化仅取决于 $\Delta t'$。由式（13）知，$\Delta t=\Delta t'/24$。将 Δt 代入式（6）中，并用 $G_K^{(1)'}$ 来表示，这时，

$$G_K^{(1)'}=\frac{2\Delta t'}{24}\left[R_0+2\sum_{r=1}^{M-1}R_r\cos\frac{\pi K r}{M}+R_M\cos\pi K\right] \tag{16}$$

这里，$G_K^{(1)'}$已不是以周/时为频率单位的谱值了，而是代表了以周/日为频率单位的谱值。$G_K^{(1)}$ 和 $G_K^{(1)'}$ 有如下关系：

$$G_K^{(1)'}=\frac{1}{24}G_K^{(1)} \tag{17}$$

可见，当频率单位由周/时变成周/日时，谱估计值 $G_K^{(1)}$ 缩小了24倍。

综上所述，在进行谱分析时，当分析的频率单位发生改变时，谱估计值的个数不发生改变，而谱值发生了变化，而且改变前后之比满足如下关系：

$$\frac{G_K^{(1)}}{G_K^{(1)'}}=\frac{\Delta t'}{\Delta t} \tag{18}$$

或

$$G_K^{(1)'}=\frac{\Delta t}{\Delta t'}G_K^{(1)}$$

$$K=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ M \tag{19}$$

四、增添零数据对计算功率谱密度函数的影响[1,2]

在用公式（6）计算功率谱密度函数时，不需要考虑在原始数据中增添零数据。当用公式(8)做谱估计时，由于要利用快速富里叶变换这一有力的工具，所以要求原始数据的个数 $N=2^P$（P 为正整数）。但在实际中原始数据的个数往往不满足这一要求。因此，一般要通过增添零数据或截去部分原始数据来达到这一要求。增添零数据对算谱有何影响呢？下面讨论这一问题。

在原始数据中增添零数据相当于对如下函数 $x(t)$做变换（见式(2)），

$$x'(t)=\begin{cases}x(t) & 0\leqslant t\leqslant T\\ 0 & T<t\leqslant T+T'\end{cases} \tag{20}$$

即

$$G_X^{(2)'}(f)=\lim_{T\to\infty}\frac{2}{T+T'}\left|\int_0^{T+T'}x'(t)e^{-j2\pi f t}dt\right|^2 \tag{21}$$

离散化处理之后可以近似地写为：

$$G_K^{(2)'}=\frac{2\Delta t}{(N+N')}\left|\sum_{i=0}^{N+N'-1}x_i'e^{-j\frac{2\pi iK}{N+N'}}\right|^2 \tag{22}$$

其中 N' 满足 $T'=N'\Delta t$。因为当 $i>N$时，x_i

的值是零，因此上式可改写成：

$$G_K^{(2)\prime}=\left(\frac{N}{N+N'}\right)\frac{2\Delta t}{N}\left|\sum_{i=0}^{N-1}x_i e^{-j\frac{2\pi i}{N}\left(\frac{KN}{N+N'}\right)}\right|^2 \tag{23}$$

比较式（8）和式（23）可以看出，当在原始数据中增添N′个零数据之后，谱值的频率间隔缩短了原来频率间隔 $\Delta f=1/T=1/N\Delta t$（参见式(7)）的$\left(1-\frac{N}{N+N'}\right)=\frac{N'}{N+N'}$倍。新的频率间隔是：

$$\Delta f'=\frac{1}{T+T'}=\frac{1}{(N+N')\Delta t} \tag{24}$$

特别当$N'=N$时，有

$$\Delta f'=\Delta f/2 \tag{25}$$

这表明新的频率间隔变成了原来间隔的一半，而估计值 $G_K^{(2)\prime}$ 的个数却比 $G_K^{(2)}$增多了一倍。所以，在原始数据中增添零数据会使谱估计的频率点加密，增加了谱估计值的个数。

为了说明增添零数据对谱估计值的影响，将式（2）中的富里叶变换区间（0，T）改为$\left(-\frac{T}{2},\ \frac{T}{2}\right)$是比较方便的。这样在区间$\left(-\frac{T}{2},\ \frac{T}{2}\right)$上的有限富里叶变换就可以看做是一个在$(-\infty,\infty)$上的无限记录$y(t)$乘上一个在$\left(-\frac{T}{2},\ \frac{T}{2}\right)$上定义的一个矩形函数 $U_{T/2}(t)$ 之后的变换，即

$$X_T(f)=\int_{-T/2}^{T/2}x(t)e^{-j2\pi ft}\,dt$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}y(t)U_{T/2}(t)e^{-j2\pi ft}dt \tag{26}$$

其中 $$U_{T/2}(t)=\begin{cases}0 & t<-\frac{T}{2}\\ 1 & -\frac{T}{2}\leqslant t\leqslant\frac{T}{2}\\ 0 & t>\frac{T}{2}\end{cases} \tag{27}$$

$U_{T/2}(t)$的富里叶变换 $U_{T/2}(f)$由下式确定：

$$U_{T/2}(f)=T\left(\frac{\sin\pi fT}{\pi fT}\right) \tag{28}$$

$U_{T/2}(f)$ 称为滤波函数（也称为权函数）。它是用快速富里叶变换方法进行谱估计的最原始的滤波函数。当 $f=\pm1/T$ 时，$U_{T/2}(f)$出现第一个零点。当在原始数据序列中增添零数据时，权函数的形状没有发生变化。由卷积定理从理论上保证了 $X_T(f)$没有改变，从而得到的谱值也不会发生改变。不过，原来潜藏的“泄漏”仍然存在。因此，在得到粗谱之后，适当地选取平滑函数（即权函数），最后得到的平滑谱也不会发生改变。

参 考 文 献

[1] 贝达特、皮尔索，1971。随机数据分析方法，凌福根译。国防工业出版社。1976. P39，P261，P145，P350—355。

[2] Robert, K. O. and Loren Enochsan, 1972. Digital Time Series Analysis. P261, P297.

名词解释

元素的相关

海洋中许多元素之间存在着密切的相关关系，往往一个元素的含量常为另一个元素含量的函数，这种特性称为元素的相关性。一个元素的含量如随另一个元素含量的增高而增高，则称正相关；反应称负相关。如渤海沉积物中U与Fe呈明显的正相关，U 对 Fe 的一元线性回归方程为：$Y=-0.37+1.35X$。

（赵一阳）