Metode najmanjših kvadratov

Želimo poiskati model za neznano funkcijo $z(t)$ kjer je ta funkcija oblike:

$$z(t) = x_0 f_0(t) + x_1 f_1(t) + \ldots + x_m f_m(t)$$

Torej **linearna v parametrih** x_j ampak parametrov **ne poznamo**. Ravno njih bomo našli. Radi bi uporabili znanje o Kalmanovem filtru. Zapišimo problem matrično po enačbi:

$$\vec{z} = H\vec{x} + \vec{r}$$

$$\begin{bmatrix} z(t_1) \\ z(t_2) \\ \vdots \\ z(t_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_0 f_0(t_1) + x_1 f_1(t_1) + \ldots + x_m f_m(t_1) \\ x_0 f_0(t_2) + x_1 f_1(t_2) + \ldots + x_m f_m(t_2) \\ \vdots \\ x_0 f_0(t_n) + x_1 f_1(t_n) + \ldots + x_m f_m(t_n) \end{bmatrix} + \vec{r}$$

H je tu **časovno odvisno okno** in $\vec{x}$ vektor parametrov:

$$H = \begin{bmatrix} f_0(t_1) & f_1(t_1) & \ldots & f_m(t_1) \\ & \vdots & \ddots & \\ f_0(t_n) & f_1(t_n) & \ldots & f_m(t_n) \end{bmatrix} \qquad \vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Uporabimo Kalmanov filter! Spomni se tiste oblike s kvadratno formo $2J(x)$:

$$(\vec{z} - H\vec{x})^\intercal R(\vec{z} - H\vec{x}) = 2J(x)$$

Želimo, da je:

$$\frac{\partial(2J(x))}{\partial \vec{x}} = 0$$

Da je malo enostavnejše predpostavimo, da **so vse točke neodvisne, vse z enako napako** σ:

$$R = \sigma^2 I \quad \Rightarrow \quad R^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} I$$

kjer je I identiteta. Zdaj pa uporabimo Kalmana:

$$\hat{x} = \bar{x} + PH^\intercal R^{-1}(z - H\bar{x})$$

Pred filtriranjem nič ne vemo o parametrih, torej je:

$$\bar{x} = 0 \qquad M \to \infty \qquad M^{-1} = 0$$

Za kovariančno matriko ocen pa:

$$P^{-1} = M^{-1} + H^\intercal R^{-1} H = H^\intercal H \frac{1}{\sigma^2}$$

$$P = \sigma^2 (H^\intercal H)^{-1}$$

Okay in potem lahko zapišemo oceno kot:

$$\hat{x} = \sigma^2 (H^\intercal H)^{-1} H^\intercal \frac{1}{\sigma^2} \vec{z}$$

$$\Rightarrow \hat{x} = (H^\intercal H)^{-1} H^\intercal \vec{z}$$

Torej se izkaže, da vse kar **potrebujemo je matrika H in meritve**. Smo pa zraven dobili “zastonj” še kovariančno matriko. $2J(x)$ je porazdeljena po $\chi^2(n - m - 1)$, kar nam omogoča da preverimo primernost fittanih funkcij.

[Zgled: Linearen fit]

Imamo neke meritve katerim hočemo prilagoditi linearno funkcijo. Matematično zapisano takole:

$$z = Hx + r = x_0 t + x_1 + r$$

kjer sta parametra x_0 in x_1 seveda neznana. Zapišimo potrebne komponente:

$$\displaylines{ \vec{x} =

$$\begin{bmatrix} x_0 x_1 \end{bmatrix}$$

\qquad H =

$$\begin{bmatrix} t_1 & 1 t_2 & 1 \vdots & \vdots t_n & 1 \end{bmatrix}$$

\[3mm]

H^\intercal H =

$$\begin{bmatrix} t_1 & t_2 & \dots & t_n 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} t_1 & 1 t_2 & 1 \vdots & \vdots t_n & 1 \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} \sum_i t_i^2 & \sum_i t_i \sum_i t_i & n \end{bmatrix}$$

\[3mm] (H^\intercal H)^{-1} = \frac{1}{n\sum_i t_i^2-(\sum_i t_i)^2}

$$\begin{bmatrix} n & -\sum_i t_i - \sum_i t_i & \sum_i t_i^2 \end{bmatrix}$$

\[3mm] H^\intercal z =

$$\begin{bmatrix} t_1 & t_2 & \dots & t_n 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} z_1 z_2 \vdots z_n \end{bmatrix}$$

=

$$\begin{bmatrix} \sum_i t_i z_i \sum_i z_i \end{bmatrix}$$

}$$ in tako končno lahko sestavimo skupaj rezultat za naše ocene:

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{n\sum_i t_i^2 - (\sum_i t_i)^2} \begin{bmatrix} n\sum_i t_i z_i - (\sum_i t_i)(\sum_i z_i) \\ -(\sum_i t_i)(\sum_i t_i z_i) + (\sum_i z_i)(\sum_i t_i^2) \end{bmatrix}$$

Luščenje vrhov v spektru

Lahko kot primer obravnavamo **fotoemisijo**, kjer imamo dva emisijska vrha zelo skupaj in se profila posameznih črt, ki sta poznana (recimo Gaussov profil ali pa Lorentzev profil), prekrivata. Kinetična energija je enaka energiji fotona manj vezavna energija elektrona in izstopnega dela:

$$E_{kin} = h\nu - E_\nu - \phi$$

Za **Gaussov profil** imamo funkcijsko obliko tako:

$$f(E_i) = \exp\left[-\frac{(E_i - a)^2}{2\sigma^2}\right]$$

za **Lorentzev profil** pa tako:

$$f(E_i) = \frac{\frac{\gamma}{2}}{(E_i - a)^2 - \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2}$$

Fun fact: Še bolj pogosta oblika pa je Voigtov profil, ki je konvolucija med Gaussovim in Lorentzovim. Zapišimo potem eno meritev kot:

$$z_i = B + A_1 f_1(i) + A_2 f_2(i) + r_i$$

Sedaj pa zapišimo vse potrebne matrične elemente:

$$\vec{x} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} \qquad H = \begin{bmatrix} f_1(1) & f_2(1) \\ f_1(2) & f_2(2) \\ \vdots & \vdots \\ f_1(n) & f_2(n) \end{bmatrix}$$

$$H^\intercal H = \begin{bmatrix} \sum f_1^2(i) & \sum f_1(i) f_2(i) \\ \sum f_1(i) f_2(i) & \sum f_2^2(i) \end{bmatrix}$$

In potem je naša ocena:

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_2 \end{bmatrix} = (H^\intercal H)^{-1} H^\intercal \vec{z} = \frac{1}{\sum f_1^2 f_2^2 - (\sum f_1 f_2)^2} \begin{bmatrix} \sum f_2^2 & -\sum f_1 f_2 \\ -\sum f_1 f_2 & \sum f_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum f_1 z \\ \sum f_2 z \end{bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{\sum f_1^2 \sum f_2^2 - (\sum f_1 f_2)^2} \begin{bmatrix} \sum f_2^2(i) \sum f_1(i) z(i) - \sum f_1(i) f_2(i) \sum f_2(i) z(i) \\ -\sum f_1(i) f_2(i) \sum f_1(i) z(i) + \sum f_1^2(i) \sum f_2(i) z(i) \end{bmatrix}$$

Izračunajmo še kovariančno matriko:

$$P = \sigma^2 (H^\intercal H)^{-1} = \frac{\sigma^2}{\sum f_1^2 \sum f_2^2 - (\sum f_1 f_2)^2} \begin{bmatrix} \sum f_2^2 & -\sum f_1 f_2 \\ -\sum f_1 f_2 & \sum f_1^2 \end{bmatrix}$$

Sedaj pa imamo različne situacije, ampak v splošnem. Če sta **vrha dobro ločljiva** bo p_{12} **majhen**:

$$\sum f_1 f_2 \approx 0$$

$$P \approx \sigma^2 \begin{bmatrix} 1/\sum f_1^2 & \\ & 1/\sum f_2^2 \end{bmatrix}$$

Če pa sta vrhova delno zlita potem pa velja $f_1 \approx f_2$:

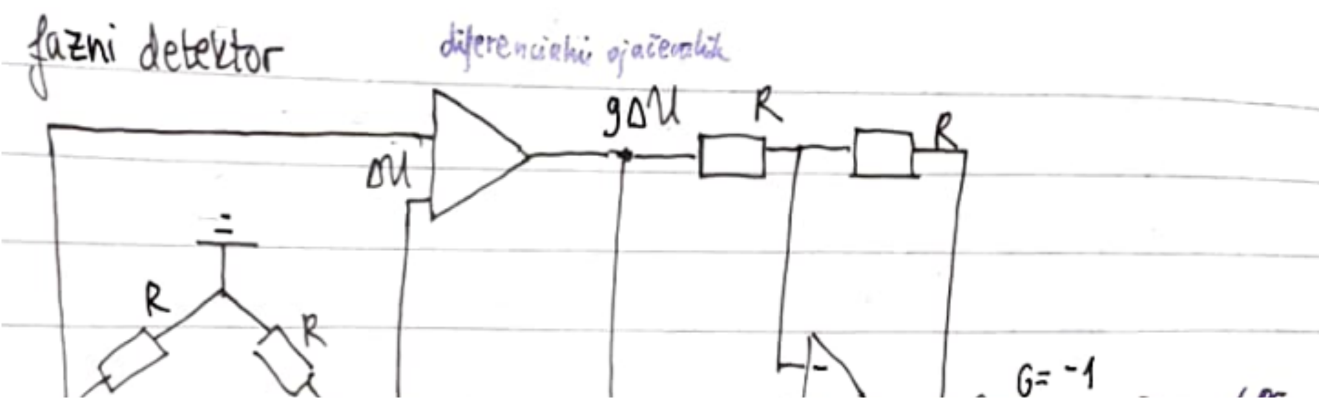
$$\sum f_1^2 \sum f_2^2 - \left(\sum f_1 f_2\right)^2 \to 0$$

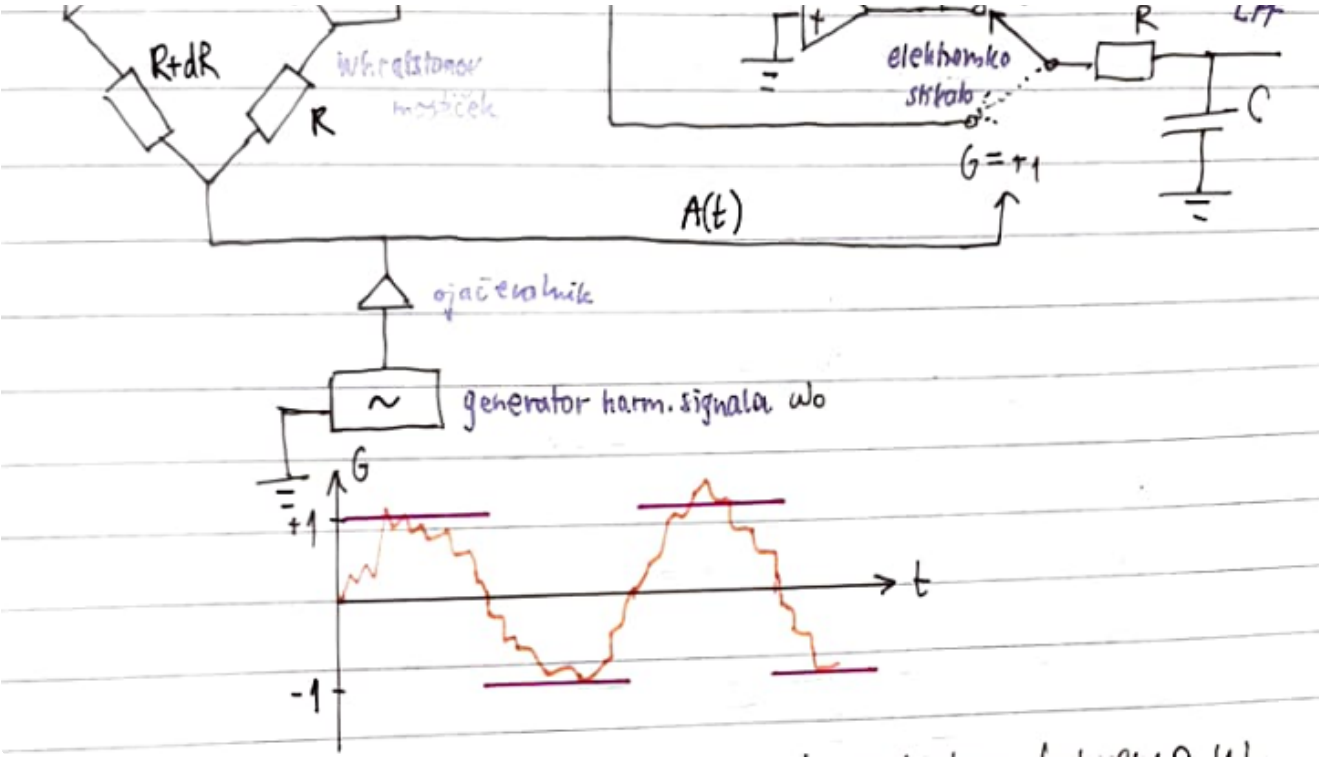
od tod sledi da bo p_{ij} zelo velik oz.

$$\rho_{1,2} = \frac{-\sum f_1 f_2}{\sqrt{\sum f_1^2 f_2^2}} \approx -1$$

Merjenje odziva sistema na periodično motnjo (Fazni detektor)

Imejmo fazni detektor, ki je že kar bolj “involved” vezje, zato ga bom predstavil le grafično (img. credit: Ana Štuhec):





Sinusno vzbujajmo sistem. Ker je sistem linearen se odzove s harmoničnim signalom z isto frekvenco, le amplituda in faza sta drugačni. V amplitudi odziva je informacija o merjeni količini.

$$\vec{z} = H\vec{x} + \vec{r} \qquad (H\vec{x}) = x_0 \sin(\omega t + \delta)$$

Merimo periodično, torej ob časih $t_n = n\Delta t$. Zapišimo časovno spremenljivo okno:

$$H = \begin{bmatrix} \sin(\delta) \\ \sin(\omega\Delta t + \delta) \\ \sin(2\omega\Delta t + \delta) \\ \vdots \\ \sin(n\omega\Delta t + \delta) \end{bmatrix}$$

Napišimo potem našo **oceno za amplitudo**:

$$\hat{x}_0 = (H^\intercal H)^{-1} H^\intercal \vec{z} = \frac{\sum z(t_n)\sin(\omega t_n + \delta)}{\sum \sin^2(\omega t_n + \delta)} \approx$$

$$\approx \frac{\int_0^T \sin(\omega t + \delta) z(t)\, dt}{\int_0^T \sin^2(\omega t + \delta)\, dt} =$$

sedaj pošljemo $\Delta t \to 0$ in od tega dobimo naprej:

$$= \frac{2}{T}\int_0^T \sin(\omega t + \delta) z(t)\, dt = \hat{x}_0$$

S tem integralom se bomo znebili naključnega šuma, saj bo ravno zaradi naključnosti integral šuma enak 0. Vidimo tudi, da integral vsebuje naš referenčni signal. Torej z istim signalom kot moduliramo, delamo tudi analizo. Sedaj pa poglejmo **napako ocenjene amplitude**:

$$P = (H^\intercal H)^{-1}\sigma^2 = \frac{\sigma^2 \Delta t}{\int_0^T \sin^2(\omega t + \delta)\, dt}$$

Limitirajmo tole:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \sigma^2 \Delta t = R$$

in dobimo precej poenostavljen predpis za napako ocenjene amplitude:

$$P = \frac{2R}{T}$$

Vidimo, da če dolgo merimo $(T \to \infty)$ smo zelo natančni, ker bo ta napaka majhna.

Prepuščanje harmoničnega signala

Kako fazni detektor prepusti harmonični signal s poljubno frekvenco ω z amplitudo A_ω in $\delta = 0$?

Naj bo referenčni signal:

$$A(t) = A_\omega \cos \omega_0 t$$

kjer je ω_0 delovna frekvenca. Prepuščeni del izračunamo tako:

$$\alpha(\omega) = \frac{2}{T} A_\omega \int \cos \omega_0 t \cos \omega t \, dt =$$

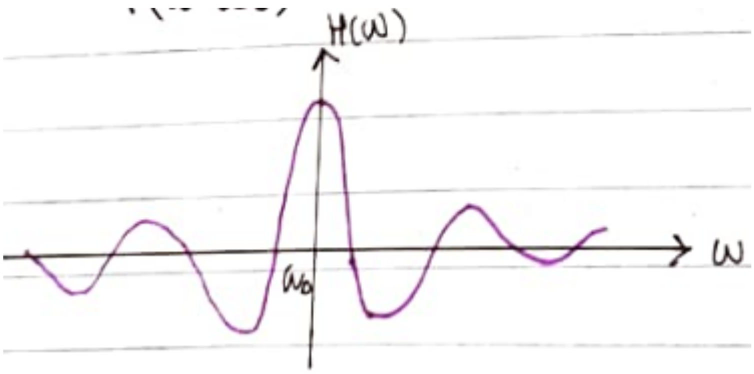
$$= \frac{A_\omega}{T} \int [\cos((\omega - \omega_0)t) + \cos((\omega + \omega_0)t)] \, dt = \frac{A_\omega}{T} \left[\frac{\sin((\omega - \omega_0)t)}{\omega - \omega_0} \Bigg|_0^T + \frac{\sin((\omega + \omega_0)t)}{\omega + \omega_0} \Bigg|_0^T \right] \approx$$

$$\approx A_\omega \frac{\sin((\omega - \omega_0)T)}{T(\omega - \omega_0)} = A_\omega H(\omega)$$

Vidimo, da je frekvenčno okno ožje za daljše integracijske čase in sicer se oža kot:

$$\Delta\omega = 2(\omega - \omega_0) = \frac{2\pi}{T} \propto \frac{1}{T}$$

da je centrirano okoli ω_0. Grafično zgleda to takole (img. credit: Ana Štuhec):



Lock-in detekcija

Imejmo zdaj tako kot prej:

$$z(t) = x_0 \sin(\omega t + \delta) + r(t)$$

ampak imejmo tokrat **dva fazno zamaknjena referenčna signala** in sicer enega s fazo 0 in drugega s fazo $\frac{\pi}{2}$ glede na prvega. To lahko preprosto skonstruiramo takole:

$$\mathrm{Ref}_0 = R \sin \omega t$$

$$\mathrm{Ref}_{\frac{\pi}{2}} = R \cos \omega t$$

Potem je:

$$Y_0 = \mathrm{Ref}_0 z(t) \qquad Y_{\frac{\pi}{2}} = \mathrm{Ref}_{\frac{\pi}{2}} z(t)$$

To oboje pa pošljemo skozi low pass filter in dobimo količini Y_{0^F} in $Y_{\frac{\pi}{2}^F}$. Zraven pa dobimo tudi neko drugo amplitudo x_0 in nek fazni zamik δ. Če zapišemo potem vse:

$$Y_0 = Rx_0 \sin(\omega t) \sin(\omega t + \delta) = \frac{1}{2} Rx_0 (\cos(\delta) - \cos(2\omega t + \delta))$$

$$Y_{0^F} = \frac{1}{2} RTx_0 \cos\delta$$

in

$$Y_{\frac{\pi}{2}} = Rx_0 \cos(\omega t) \sin(\omega t + \delta) = \frac{1}{2} Rx_0 (\sin(\delta) + \sin(2\omega t + \delta))$$

$$Y_{\frac{\pi}{2}^F} = \frac{1}{2} RTx_0 \sin\delta$$

Fazni zamik med njima izračunamo takole:

$$\backslash\mathrm{tg}\delta = \frac{Y_{\frac{\pi}{2}^F}}{Y_{\frac{\pi}{2}}}$$

Hitro dobimo pa tudi:

$$\frac{1}{2} Rx_0 T = \sqrt{Y_{0^F}^2 + Y_{\frac{\pi}{2}^F}^2} \quad \Rightarrow \quad x_0 = \frac{2\sqrt{Y_{0^F}^2 + Y_{\frac{\pi}{2}^F}^2}}{RT}$$

Nastavljiva faza (FOO)

V tem primeru imamo referenčni signal z nastavljivo fazo:

$$\mathrm{Ref}_\varphi = R \sin(\omega t + \varphi)$$

tako kot prej izračunamo Y_φ in pošljemo to skozi LPF, da dobimo:

$$Y_{\varphi^F} = \frac{1}{2} x_0 RT \cos(\delta - \varphi)$$

Spreminjamo φ, dokler ni $Y_{\varphi^F} = \max.$. Takrat je $\delta = \varphi$. Amplitudo x_0 preberemo direktno.

Kaj pravzaprav moduliramo?

V resnici moduliramo karkoli, od česar je odvisen izhod na senzorju. Recimo da je izhod funkcija stimulusa s torej:

$$V = V(s)$$

Mi moduliramo s stimulusom:

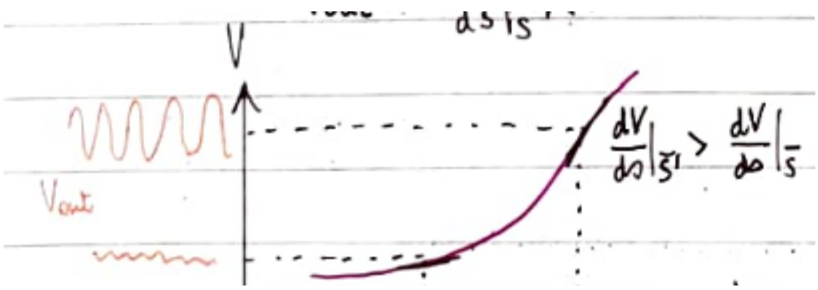
$$s(t) = \bar{s} + A \sin\omega t \qquad A \ll \bar{s}$$

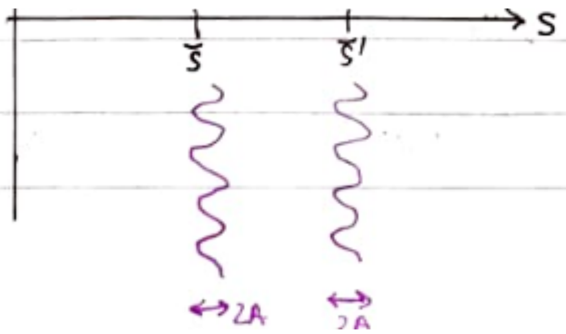
Lock-in detekcija izlušči Fourierovo komponento izhoda s frekvenco ω:

$$V(s) = V(\bar{s}) + \left.\frac{dV}{ds}\right|_{\bar{s}} A \sin\omega t + \frac{1}{2} \left.\frac{d^2V}{ds^2}\right|_{\bar{s}} A^2 \sin^2\omega t + \dots$$

$$\Rightarrow V_{out} \propto \left.\frac{dV}{ds}\right|_{\bar{s}} A$$

Grafično je to lepo prikazano tu (img. credit: Ana Štuhec):





S
$\bar{s}$
$\bar{s}'$
2A
2A