

文章编号 1004-924X(2008)01-0006-05

BP 神经网络用于光镊力的非线性修正

王自强¹, 李银妹¹, 楼立人¹, 魏衡华², 王 忠¹

(1. 中国科学技术大学 理学院, 安徽 合肥 230026; 2. 中国科学技术大学 信息学院, 安徽 合肥 230026)

摘要:提出了运用 BP 神经网络法对光镊力的测量和标定进行非线性修正。针对 BP 算法收敛慢的缺点, 采用 LM 算法改进 BP 神经网络算法。结合常用的流体力学法进行了实验研究, 证实了所提出的方法使光镊力的测量范围扩大了 30%。与多项式拟合方法相比, 该方法的精度更高。研究结果表明, 采用神经网络算法在不需增加或更换实验设备的前提下, 可以有效地提高光镊系统的性能指标。

关键词:光镊; BP 神经网络; 非线性修正

中图分类号: TN249; TP183 **文献标识码:** A

Application of BP neural network to nonlinearity correction of optical tweezer force

WANG Zi-qiang¹, LI Yin-mei¹, LOU Li-ren¹, WEI Heng-hua², WANG Zhong¹

(1. *School of Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China;*
2. *School of Information, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

Abstract: The Back-Propagation (BP) neural network was proposed to correct the nonlinearity and to optimize the force measurement and calibration of an optical tweezer system. Considering the low convergence rate of the BP algorithm, the Levenberg Marquardt (LM) algorithm was used to improve the BP network. The proposed method was experimentally studied for force calibration in a typical optical tweezer system using the hydromechanic methods. The result shows that with the nonlinearity correction using BP neural network, the range of force measurement of an optical tweezer system is enlarged by 30% and the precision is also improved comparing with polynomial fitting method. It is demonstrated that the nonlinearity correction by neural network method improves effectively the performance of optical tweezers without adding or changing measuring system.

Key words: optical tweezer; Back-Propagation (BP) neural network; nonlinearity correction

1 引 言

微小粒子间的相互作用是决定粒子体系动力

学过程的重要因素。例如, 在微观生物学中, 人们试图在生物大分子水平深入理解生命过程, 在这一层次上力学量是生命过程的重要参量; 在典型的软物质-分散体系中, 分散相微粒间的相互作用

是决定体系宏观行为的重要基础。这类涉及微小粒子的相互作用,包括生物大分子等微小粒子的力学性质、粒子间的相互作用,往往都涉及皮牛量级微小力的测量,因此,发展可靠精确地测量微小力的方法具有重要意义。

光镊测力^[1-2]是基于光与微粒相互作用产生的力学效应,即微粒在光学势阱(或光阱)中受到的光场作用力与位置的关系。理论和实验研究^[2-4]表明,对不同光束形成的光阱,小球横向位移较小时,横向光阱效率(单位光功率下的光阱力)与位移有良好的线性关系,因而这一区域也叫简谐区。当涉及的力较大时,横向光阱力与粒子位移的关系将表现出明显的非线性。考虑到测量的方便和精度,光镊测力通常都限于利用上述的线性区,这时光阱力—位移关系的标定就简化为线性比例系数,即光阱刚度^[5]的标定。然而,只利用线性区这种做法限制了测力的范围。

如果对光阱力—位移的非线性响应关系进行标定,利用标定的依赖关系能够在较大的范围精确测力,将这种对非线性的校正包括在测量系统中,使校正后的输出与测量值在整个量程内都成线性关系,即可扩大光镊系统测量力的有效线性范围。此前,已经有人用三次多项式拟合光阱力与粒子位移间的非线性依赖关系^[2,6-7],利用它可以将测力范围扩大到简谐区以外,即扩大了系统测力的量程。但是这种方法的测量精度还比较低。

力的测量精度和测量范围是光镊系统的重要技术指标。近年来神经网络的研究和应用有了很大的发展,由于神经网络具有极强的非线性映射能力,能以任意精度逼近任何连续函数^[8],所以,越来越多的被用来标定非线性传感器的响应特性,从而实现非线性响应特性的校正,提高测量精度,扩大有效线性范围^[9-10]。鉴于光镊系统固有的光阱力—位移间的非线性依赖关系,本文提出利用神经网络方法,对光镊测力的非线性响应区域进行标定和校正,在不改变硬件条件的前提下,扩大光镊测力的有效线性范围。

2 BP 网络^[9]及学习算法改进

目前,在神经网络的实际应用中,绝大部分的神经网络模型是采用 BP 网络(Back-Propa-

gation Network)和它的变化形式,它也是前向网络的核心部分,体现了人工神经网络最精华的部分。

2.1 BP 网络

BP 网络是一种多层前馈神经网络,由输入层、隐含层和输出层组成。输入层是 BP 网络输入接口,每个输入结点和相邻隐含层所有结点全连接;隐含层作为网络学习功能实现层,按照上层每个结点与下层所有结点相连原则来实现网络信号的前向传递;输出层综合隐含层的逼近结果得到最终输出。

BP 网络中难以确定的是隐含层层数及其结点数,目前还没有确切的理论指导方法,一般通过学习样本和测试样本对一定的网络结构的误差进行交叉评价,再用试差法选取合适的网络结构。增加层数可以更进一步地降低误差,提高精度,但同时也使网络复杂化,从而增加了网络权值的训练时间,而误差精度的提高实际上也可以通过增加隐含层中神经元数来实现。隐含层层数一般取 1~3 层,本文选择的隐含层为 1 层,隐含层神经元选用常用的 S 型函数:

$$f(s_j) = \frac{1}{1 + e^{-T_j s_j}}, \quad (1)$$

式中: $S_j = \sum_{i=0}^N x_i W_{ij}$;

T_j —该神经元的输入调节系数,一般取 0~1 之间;

x_i —该神经元来自前一层结点的第 i 个输入;

W_{ij} —前一层第 i 个神经元至该神经元(第 j 个)的连接权值, $i=0$ 时的权值称为阈值。

2.2 BP 网络的学习算法改进

BP 网络学习属于典型的诱导式学习,它的基本学习算法——反向传播学习算法是学习规则的进一步推广。反向传播学习算法简单、实用,但是收敛速度较慢,且容易陷于局部极小点而难以收敛。因此,出现了各种改进的学习算法,如遗传算法、快速下降法、Levenberg-Marquardt(LM)法及变结构学习法等,加速了网络学习过程。本文采用 LM 算法来改进 BP 网络的学习算法。

LM 算法实质上为二阶梯度法。LM 算法将最速下降法和牛顿法相结合以获取最快的收敛速度:对于任意二次函数,不管初始点处于何处,只需迭代一次即可得到最小值;对于非二次函数,由于它们在极小点附近和二次函数类似,因此接近

极小值时仍可达到很快的收敛速度。算法简介如下:

设 \mathbf{x}_k 表示第 k 次迭代的权值和阈值所组成的向量,则:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{H} + u_k \mathbf{I})^{-1} \mathbf{g}, \quad (2)$$

式中, \mathbf{I} 为单位矩阵, $u_k = 0$ 时为牛顿法, u_k 充分大时近似于最速下降法。

Hessian 矩阵为:

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^T \mathbf{J}, \quad (3)$$

式中, \mathbf{J} —包含了误差 e 对权值和偏差偏导数的 Jacobian 矩阵; 梯度可表示为:

$$\mathbf{g} = \mathbf{J}^T e, \quad (4)$$

把式(3)、(4)带入式(2)得到 LM 算法:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + u_k \mathbf{I})^{-1} \mathbf{J}^T e. \quad (5)$$

3 光镊系统力学特性的实验标定^[11-12]

纳米光镊系统可以对微米粒子的位移进行准确测量,精度可以达到纳米量级。因而光镊测力的关键是标定光镊的力学特性,即测定光阱力与小球偏离光镊中心的位移之间的依赖关系。在光镊中心附近,这种依赖关系近似是线性的,这时,光镊力学特性的标定就简化为光阱刚度的标定。

考虑到在大量的实际应用中,光镊对微粒的捕获操作都是在类水溶液中进行的,所以本文采用的标定方法为常用的流体力学法:被光镊捕获的小球相对周围液体以一定速度运动时,小球受到液体的粘滞阻力可用斯托克斯定理算出:

$$F_{\text{vis}} = -6\pi\eta r v, \quad (6)$$

其中, r 为小球半径, η 为液体粘滞系数, v 为相对运动速度。当粘滞阻力与小球所受到的光阱力平衡时,小球将偏离光镊中心而处于新的平衡位置,偏离光镊中心的位移 x 可以直接测量得到。因为这时光阱力和粘滞阻力大小相等,根据式(6)即可求出光阱力。速度 v 不同,光阱力不同,粒子平衡位置 x 也不同,这样就可以得到光阱力一位移间的依赖关系 $F_{\text{trap}} = F(x)$ 。在光镊的中心区域,这一依赖关系近似为线性关系:

$$F_{\text{trap}} = -k_x \cdot x, \quad (7)$$

其中, k_x 即为光阱刚度。

具体的实验装置和方法简述如下:

光阱实验装置如图 1 所示:主要有光路部分,操控和探测部分。光路部分包括光阱形成部分和显微观察部分。后者与通常的显微镜类似。光阱形成部分如下:

波长 632.8 nm 的 He-Ne 激光器(10 mW, Polarized, Coherent, USA)作为产生光阱所需的光源。出射的光束经扩束器和用以匹配激光束与显微物镜的会聚透镜 L_1 ($f=750$ mm)后,进入倒置生物显微镜(Olympus IX70)中,其后反射到 100 倍油浸物镜(N. A. = 1.35),并被强会聚到样品池中,形成实验所用的光阱。

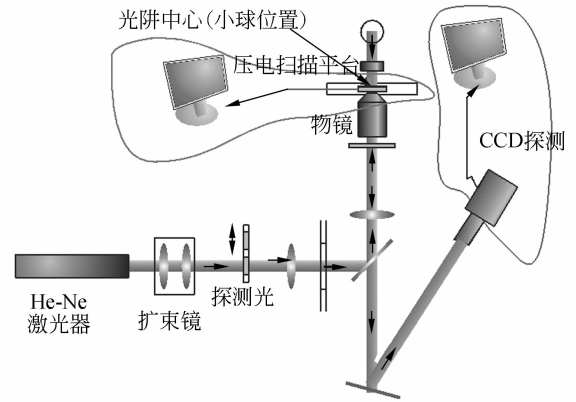


图 1 实验装置图

Fig. 1 Experimental setup

实验中,光阱的操控采用被动操控方式。亚纳米精度压电扫描平台(P-517.3CL, PI, German)作为被动操控的驱动机构,使固定在平台上的样品池移动到所要求的位置,或以所要求的速度运动,其操控的精度为 1 nm,移动范围为 $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m}$ 。实验中光阱的位置是固定的,这样就实现了样品池内被光阱俘获的粒子相对周围液体运动的操控。

实验系统对粒子运动过程的观测是由 CCD 图像采集系统(CoolsnapCF mono camera, USA)实现的。对采集的粒子运动显微图像进行相关运算图像分析^[11,12],可以得出粒子的位置,测量精度可以达到 1 nm。

实验中,操控平台使之做恒速率的往复运动,这时粒子将在二个平衡位置间往复跳动。对每一给定的平台速度 v ,由 CCD 拍摄 1 000 张被捕获小球的运动过程图像,进而得出每一帧图像相应的小球平衡位置信息,这样就得到流体相对速

度(平台速度)与粒子偏离光镊中心位移之间的关系,然后通过式(6)得到光阱的力场分布 $F_{\text{trap}}(x)$ 。

4 BP 网络训练与测试

通过上述光阱标定实验方法可以得到光阱的力场分布 $F_{\text{trap}}(x)$,即在不同的平台速度下小球所受光阱力和偏移光阱中心位移的对应关系。实验数据如表 1 中 F 列和 x 列,其中, F 是作为基准的流体粘滞力,与平衡时的光阱力大小相等,为小球偏移光阱中心的位移。这些数据将作为训练神经网络的样本数据。

表 1 光镊测力标定实验的输入输出信号值
和非线性修正的结果

Tab.1 Input and output signals of optical tweezer calibration and its non-linearity correction

序号	F/pN	$x/\mu\text{m}$	F_{nn}/pN	F_{ct}/pN
1	0.115 9	0.015 7	0.115 9	0.112 5
2	0.231 8	0.032 3	0.231 8	0.233 2
3	0.347 8	0.053 6	0.347 8	0.369 0
4	0.463 7	0.066 9	0.463 6	0.448 4
5	0.579 6	0.087 3	0.579 7	0.568 8
6	0.695 5	0.107 9	0.695 4	0.697 4
7	0.811 5	0.121 7	0.811 6	0.793 0
8	0.927 4	0.143 5	0.927 2	0.966 7
9	1.043 3	0.152 6	1.043 6	1.049 3
10	1.159 2	0.163 4	1.159 1	1.158 5
11	1.275 2	0.175 6	1.275 7	1.296 0
12	1.391 1	0.180 1	1.390 9	1.350 2
13	1.507 0	0.189 8	1.507 4	1.478 0
14	1.622 9	0.202 0	1.623 0	1.656 4
15	1.738 9	0.206 9	1.739 0	1.733 6

通过试差法最终确定神经网络采用 1-7-1 结构,即输入端将 1 个输入端信息传递到隐层,隐层由 7 个正切 S 型函数神经元构成,而输出层由 1 个线性传递函数神经元构成,目标函数设定的平方和误差为 $E=0.000\ 001$ 。神经网络的训练和测试是借助 MATLAB7.01 中的 Neural Network 工具箱函数来完成的。

经过 303 次训练,达到设定误差目标,误差平方和为 $6.351\ 06 \times 10^{-7}$,这时的函数逼近曲线如图 2 所示。可见计算机仿真训练结果输出的曲线

非常逼近目标曲线“+”,证明训练后的网络具有较好的拟合性、泛化性,且过程收敛。图 3 为误差与训练次数的关系曲线。

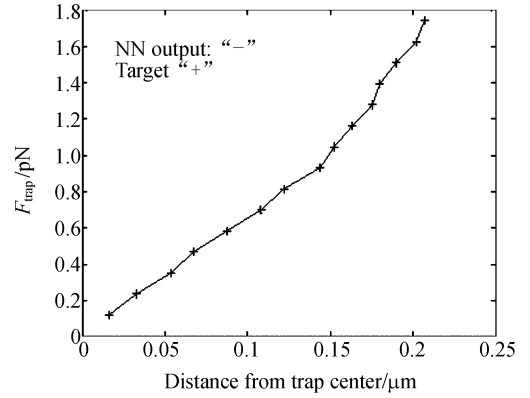


图 2 函数逼近曲线

Fig.2 Approximation function derived by BP network

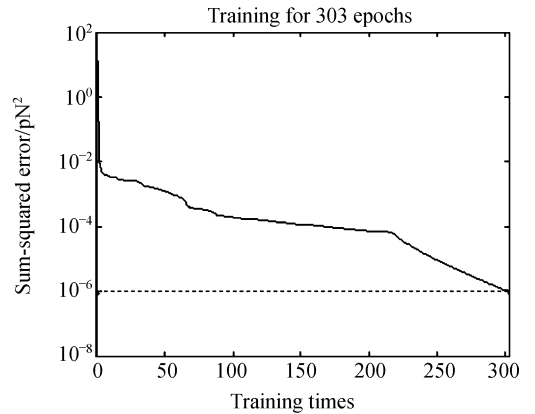


图 3 误差随训练次数的变化

Fig.3 Relation between error and training times

用 BP 神经网络训练好的函数构建传感器逆模,由位移 x 得到相应的光阱力 F_{nn} (如表 1 中的 F_{nn} 列),作为比较,在表 1 中也列出了用多项式拟合方法得到的数据(如表 1 中的 F_{ct} 列)。

由表 1 数据可以看出,在相同实验条件下,运用神经网络非线性修正的方法得到的结果精度为 $0.001\ \text{pN}$,和实验所得到数据基本一致,而多项式拟合方法得到的数据精度仅为 $0.01\ \text{pN}$ 。由此可见,二种方法都对光阱力场的非线性进行了修正,但是传感器输出信号经人工神经网络的处理,得出的光阱力的测量精度远高于多项式拟合法。

图 2 的结果表明,实验测量与理论计算值基本一致,由于实验过程中受到系统状况及环境影

响,数据有一定的波动误差。这些误差是由系统状况及数据采集带来的,对于由系统状况带来的误差可以通过 BP 神经网络进行非线性修正,而对于数据采集带来的误差可以提高采集设备精度及增加采集数据量来进行处理。由图 2 可以看到采用神经网络修正法使得在测量范围由原来的线性近似下的 $0 \sim 0.3 r$ 扩展到 $0.41 r$ 。实际上只要光阱能够稳定捕获小球,就可以用此方法对光阱力标定,但是理论和实验都证明在接近 $0.6 r$ 时,粒子将从光阱的纵向逃离,所以标定的距离范

围也只能限制在 $0.6 r$ 之内^[4]。

5 结 论

本研究运用 BP 神经网络对光镊力的标定进行非线性修正,不仅拓宽了光镊力的测量范围,提高了力的测量精度,而且,能在同等光功率的条件下获得宽的测力范围,降低了对系统硬件的要求。BP 神经网络方法的运用有效地提高了光镊系统的性能指标。

参考文献:

- [1] BROUHARD G J, SCHEK H T, HUNT A J, *et al.*. Advanced optical tweezers for the study of cellular and molecular biomechanics [J]. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 2003,50(1):121-125.
- [2] HUANG CH CH, WANG CH F, MEHTA D S, *et al.*. Optical tweezers as sub-pico-newton force transducers [J]. *Opt. Commun.*, 2001,195(1-4):41-48.
- [3] XU SH H, Li Y M, LOU L R. Systematical study of the trapping forces of optical tweezers formed by different types of optical ring beams [J]. *Chinese Physics*, 2006,15(6):1391-1397.
- [4] METENDA F, BOER G, ROHNER J, *et al.*. Escape trajectories of single-beam optically trapped micro-particles in a transverse fluid flow [J]. *Opt. Exp.*, 2006,14(4):1685-1699.
- [5] KATRL O G. *Micromanipulation by Light in Biology and Medicine* [M]. Berlin: Birkhauser Verlag, 1999:90-96.
- [6] RANAWEERA A, BAMIEH B. Modeling, identification, and control of a spherical particle trapped in an optical tweezer [J]. *Int. J. Robust Nonlinear Control*, 2004,00:1-19.
- [7] RANAWEERA A, BAMIEH B, TEEL A R. Nonlinear stabilization of a spherical particle trapped in an optical tweezer [C]. *Proceedings of the 42nd IEEE Conference on Decision and Control*, 2003:3431-3436.
- [8] HAGAN M T. *Neural Network Design* [M]. Beijing: China Machine Press, 2002:227-255.
- [9] 田社平, 赵阳, 韦红雨, 等. 基于神经网络模型的佳感器非线性校正[J]. *光学 精密工程*, 2006,14(5):896-902.
TIAN SH P, ZHAO Y, WEI H Y, *et al.*. Nonlinear correction of sensors based on neural network model [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006,14(5):896-902. (in Chinese)
- [10] 史泽林, 康娇, 孙锐. 基于 BP 神经网络的大视场成像畸变校正方法[J]. *光学 精密工程*, 2005,13(3):348-353.
SHI Z L, KANG J, SUN R. BP NN-based method for lens distortion correction of large-field imaging [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2005,13(3):348-353. (in Chinese)
- [11] 陈洪涛, 李银妹, 楼立人, 等. 光镊技术中的纳米位移探测及其测量误差讨论[J]. *中国激光*, 2004,31(6):729-734.
CHEN H T, LI Y M, LOU L R, *et al.*. Detection of nanometer displacement in optical tweezers and its related measuring errors [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2004,31(6):729-734. (in Chinese)
- [12] HUISSTED E J H G, VANDERWERG K O, BENNINK M L, *et al.*. Force detection in optical tweezers using backscattered light [J]. *Opt. Exp.*, 2005,13(4):1113-1123.

作者简介:王自强(1970—),男,安徽合肥人,讲师,主要从事光学微操作、微测量,检测与控制等方面的研究。E-mail: wzqiang@ustc.edu.cn.

李银妹(1954—),女,安徽合肥人,教授,主要从事光学和激光应用研究。E-mail: liyinmei@ustc.edu.cn