

# 双层随机共振算法用于弱化学信号的检测

吴晓静 郭卫民 蔡文生\* 邵学广 潘忠孝

(中国科学技术大学化学系 合肥 230026)

**摘 要** 提出了一种检测弱分析化学信号的新方法——双层随机共振算法。该方法以随机共振理论为基础,对分析信号进行逐级放大,提高弱分析化学信号的信噪比。通过对模拟信号和弱色谱信号的研究,表明该方法能较好地提高弱信号的信噪比,有望成为弱信号分析及痕量样品分析的有力工具。

**关键词** 随机共振 算法 信号检测

## Detection of Weak Chemical Signal by Using A Two-layer Stochastic Resonance Algorithm

Wu Xiaojing, Guo Weimin, Cai Wensheng\*, Shao Xueguang, Pan Zhongxiao

(Department of Chemistry, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

**Abstract** Based on the theory of stochastic resonance (SR), a new method, named as two-layer stochastic resonance algorithm, was proposed for detection of weak analytical signals. The method gradually enhances the weak signal and improves the signal-to-noise ratio (SNR). By application of the method to a simulated signal and a weak chromatographic signal, it was proven that the SNR of weak signals can be greatly improved by this method. It may be an efficient tool for analysis of samples with trace or ultratrace concentration.

**Key words** Stochastic resonance, Algorithm, Signal detection

噪声是分析化学中普遍存在的现象,尤其在微量及痕量水平的分析中更不容忽视。为了减少噪声的影响,分析工作者总是希望通过噪声背景的扣除以获得分析样品信息,如快速傅立叶变换、小波变换、平滑滤波等。可是,这些方法不适用于信噪比(SNR)特别小的情况。

随机共振是 Benzi 等<sup>[1]</sup>在研究古气象冰川周期时提出的,其基本特征是通过噪声、信号与系统三者之间的协调作用,可对输入系统的微弱信号进行放大。目前,随机共振已在许多领域得到广泛的应用<sup>[2,3]</sup>。笔者曾将随机共振方法用于分析化学信号的处理,并得到了初步的研究结果<sup>[4,5]</sup>。但研究过程中发现,特别微弱的信号经过随机共振方法处理后,不能得到满意的结果。

本文提出了双层随机共振算法,即将第一次通过随机共振处理的结果再次经过随机共振处理,从而使得信噪比进一步提高。模拟信号和实验信号的计算结果表明,该方法可用于特别微弱信号的处理。

\*联系人 蔡文生 女, 37 岁, 教授, 主要从事化学计量学及分子模拟研究。 E-mail: wscail@ustc.edu.cn

国家自然科学基金资助项目(20075024)

2002-04-11 收稿, 2002-06-10 修回

## 1 原理与算法

随机共振是非线性系统、信号和噪声三者协同作用的结果。信号通过非线性系统时, 随着噪声的增加, 输出信号的信噪比会达到极大值, 该现象称为随机共振。这里“共振”一词仅用以强调信号、噪声和非线性系统之间的某种最佳匹配。随机共振通常用体系输出信号的信噪比来表征。图 1 是系统输出信号的信噪比随输入噪声强度的变化曲线。可以看出, 当输入信号一定时, 输出信号的信噪比随着噪声强度的增加存在一个极大值。

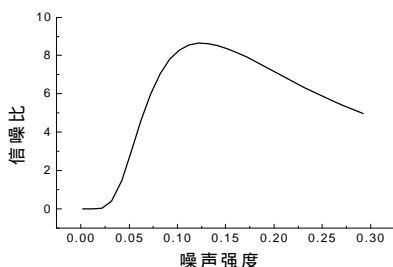


图 1 双稳体系中信噪比随噪声强度的变化曲线

Fig.1 The curve of SNR versus noise intensity in the bistable system

本文采用了如下微分方程表示的非线性系统:

$$\frac{dx}{dt} = -V'(x) + M \cdot S(t) + N(t) \quad (1)$$

式中,  $V$  表示对称的势能函数, 其形式为

$$V = -\frac{m}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4 \quad (2)$$

$S(t)$  是输入系统的信号,  $M$  为信号调节系数,  $N(t)$  为高斯白噪声,  $x$  为输出信号,  $m$  为系统参数。当系统的输入信号和噪声的强度均为 0 时,  $\pm\sqrt{m}$  为系统的两个稳态值。

当系统输入强度为  $D$  的高斯白噪声和振幅为  $A$  的余弦信号时, 理论上的近似得到如下结果:

$$\text{SNR} = \frac{\sqrt{2m^2 A^2}}{4D^2} e^{-m^2/4D} \quad (3)$$

显然, 系统输出信号的信噪比与输入信号的强度  $A$ 、噪声强度  $D$  及  $m$  有关, 三者的协同作用可以产生最大的信噪比。本文是在固定噪声强度的条件下, 调节  $M$  (目的是调节  $A$ ) 和  $m$  值, 在系统、信号和噪声三者协同作用下, 得到信噪比最佳的系统输出。

输出信号  $x_i$  的计算一般采用改进的欧拉法求解微分方程(1)<sup>[4,6]</sup>, 即:

$$\begin{aligned} p_i &= x_i + W(m x_i - x_i^3 + M \cdot S(t_i) + N(t_i)) \\ q_i &= x_i + W(m p_i - p_i^3 + M \cdot S(t_{i+1}) + N(t_{i+1})) \\ x_i &= \frac{1}{2}(p_i + q_i) \quad i = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)中,  $p_i$  和  $q_i$  为中间变量,  $W$  为步长, 本文选用了 0.2。

在研究过程中发现, 特别微弱的信号经过一层随机共振方法处理后, 往往不能得到满意的结果。因此, 本文设计了一个双层随机共振算法, 即: 当输入信号经过第一层共振处理之后, 信号强度  $A$  增大而噪声强度  $D$  减小, 输出信号的信噪比得到提高。再将第一层的输出信号输入

进行第二层共振处理, 信噪比可以进一步得到提高。基于上述原理, 设计了下述双层随机共振算法。具体算法步骤如下:

- (1) 将输入信号  $S(t)$  归一化到  $[-1, 1]$  之间;
- (2) 根据  $S(t)$  的平均标准偏差值, 选择适当的  $m$ , 调节  $M$ , 寻找优化的输出信号  $\{x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n}\}$  作为第一层的输出;
- (3) 将第一层的输出  $\{x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n}\}$  作为第二层的输入, 执行步骤(1)、(2)得到最终的输出信号  $\{x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2n}\}$ 。

## 2 实验部分

### 2.1 信号模拟

信号和噪声的模拟由计算机实现, 图 2(b)由模拟信号图(2a)叠加 Gaussian 噪声组成。

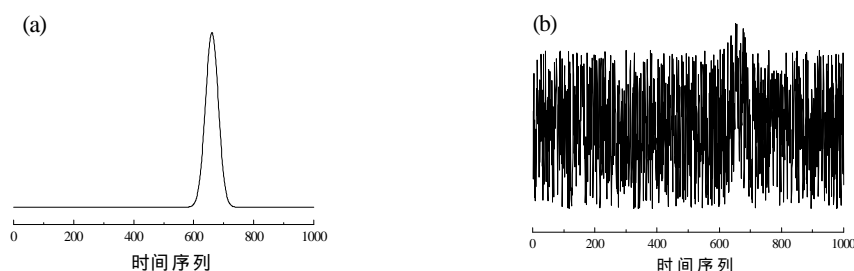


图 2 模拟信号

Fig.2 Simulated signal

(a)模拟信号; (b)模拟信号加噪声

横坐标为时间序列点, 纵坐标为信号幅值, 任意单位

### 2.2 实验条件

采用气相色谱仪 (HP-6890, 美国惠普公司) 分析空气中  $N_2$  和  $O_2$  的信号。色谱条件: TCD 检测器, 温度为  $75^\circ\text{C}$ ;  $100 \times 0.2$  cm I.D. 不锈钢色谱柱内填充  $5\text{\AA}$  分子筛; 柱温为  $50^\circ\text{C}$ ; 汽化室温度  $120^\circ\text{C}$ ; 进样量  $0.5\mu\text{L}$ ; 桥流  $70\text{mA}$ 。信号通过连接色谱系统的计算机采集, 双层随机共振程序为自编程序, 在 P II 266/128M 计算机上实现。图 3 为实验信号, 可以看出, 色谱信号几乎被噪声淹没。

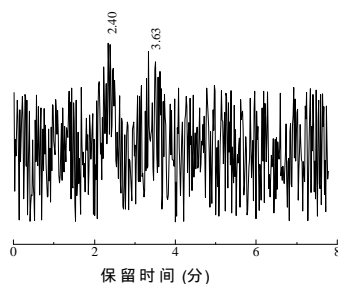


图 3 色谱实验信号

Fig.3 Experimental chromatographic signal

### 3 结果与讨论

#### 3.1 调节系数 $M$ 的确定

式(1)中  $M$  的作用是调节原始输入信号的大小, 对于一定的非线性体系, 在噪声  $D$  一定时, 适当的  $M$  值可以使系统、信号和噪声三者得到最佳匹配, 达到“共振”的效果。在以往的工作中,  $M$  值的选择一般通过尝试的方法在一定范围内考察不同  $M$  值时输出信号的 SNR。但笔者发现  $M$  值的选择与信号数据点的多少及原始信号的信噪比有关, 本文选用噪声信号的平均标准误差作为选择  $M$  值的参考标准。

$$SEM = \frac{SD}{\sqrt{n}} \quad (5)$$

式中,  $SD = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}$ , 是噪声信号的标准偏差。

大量实验结果显示, 不同噪声信号的  $M$  值取值与参数  $m$  值有很大的相关性。 $m$  值增大,  $M$  的取值也随之增大。为  $m$  值固定后,  $M$  值随着噪声信号的 SEM 增大而增加。文中取  $m$  值为 2.0, 模拟信号与实验信号的 SEM 在 0~0.03 之间, 第一层的  $M$  取值在 2.0~8.0 范围。由于第一层的输出信号的 SNR 较高, 第二层的  $M$  取值对信号的检测影响不大, 一般为 2.0 左右。

#### 3.2 模拟信号的处理

采用双层随机共振算法处理模拟信号, 得到图 4。其中输入信号的 SEM 为 0.01619, 取  $M$  值为 3.3, 图 4a 是第一层的输出结果。由于第一层的输出信号明显地被增大, 第二层的  $M$  取值为 2.0。图 4b 是第二层的输出结果。从结果可以看出, 在采样范围中, 第二层输出结果的信噪比明显高于第一层。

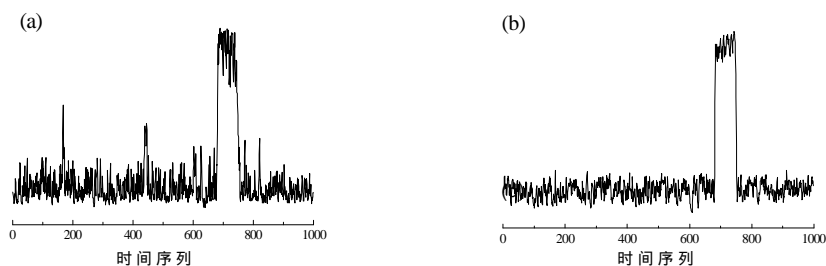


图 4 模拟信号的处理结果

Fig.4 The results of the simulated signal by the algorithm

(a)第一层的处理结果, (b)第二层的处理结果

横坐标为时间序列点, 纵坐标为信号幅值, 任意单位

#### 3.3 色谱信号的处理结果

实验色谱信号的 SEM 为 0.02014,  $M$  值取 6.0 时的第一层输出结果如图 5a, 第二层的  $M$  值为 2.0, 输出结果如图 5b。可以看出, 基信噪比得到了极大地改善, 同时保留时间与原始信号基本一致。

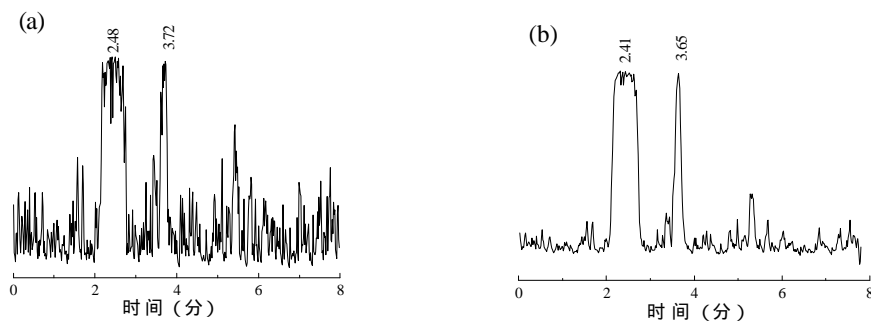


图 5 双层随机共振算法得到的色谱信号

Fig.5 Chromatographic signal obtained by the two-layer stochastic resonance algorithm

(a)为第一层的处理结果 (b)为第二层的处理结果

## 4 结论

本文从模拟和实验信号两方面证明了双层随机共振算法可以对分析化学信号进行逐步地放大, 实现微弱化学信号分析的目的。输入信号的平均标准误差(SEM)判据的引入对算法参数的调整有一定的指导意义。该算法能够显著地提高分析信号的信噪比, 同时能够保持色谱峰的位置不变, 色谱峰的形状也基本满意。

## 参考文献

- [1] Benzi R, Sutera A, Vulpiani A. J. Physics A, 1981,14:L453~L457.
- [2] Douglass J K, Wilkens L, Pantazelou E et al. Nature, 1993,365:337~340.
- [3] Moss F. Nature, 1998, 391:743~744.
- [4] 王利亚, 印春生, 潘忠孝. 分析化学, 1999, 27(12):1391~1396.
- [5] 王利亚, 蔡文生, 潘忠孝. 高等学校化学学报, 2000, 21:53~55.
- [6] 徐士良. FORTRAN 常用算法程序集. 北京:清华大学出版社, 1992:208~209.