

## 基于自回归模型的光阱中粒子运动模拟\*

王自强 钟敏成 周金华 李银妹†

(中国科学技术大学光学与光学工程系, 合肥 230026)

(2013年3月28日收到; 2013年6月17日收到修改稿)

通过分析光阱中颗粒位移信号特性, 建立描述粒子受限布朗运动过程的自回归模型, 进而提出了一种基于自回归模型的光阱中颗粒运动信号模拟的新方法. 对半径为  $1\ \mu\text{m}$  的粒子处于光阱刚度分别为 10, 20, 50 pN/ $\mu\text{m}$  光阱时的位移信号进行了模拟, 得到的模拟位移信号的自相关函数与理论值相一致. 为了进一步阐明自回归模型的有效性, 在相同光阱参数下, 分别采用自回归模型与蒙特卡罗方法模拟光阱中微粒的位移信号, 采用功率谱法分别对两种模拟方法所得的微粒位移标定光阱刚度, 结果表明自回归模型方法能够取得和蒙特卡罗法相同的精度. 因此, 本文为分析光阱中粒子的随机运动提出了一种新的模拟方法, 可以用来对光阱中的噪声及特性进行分析.

**关键词:** 光阱, 布朗运动, 信号模拟, 自回归模型

**PACS:** 87.80.Cc, 05.40.Jc, 02.60.Cb, 05.90.+m

**DOI:** 10.7498/aps.62.188701

## 1 引言

光镊具有非机械接触式操纵微米粒子和测量微小力的功能, 被广泛应用于生物大分子相互作用、胶体化学等研究领域<sup>[1-3]</sup>. 光阱刚度的标定是光镊进行定量测量研究的基础之一. 目前使用较多的光阱刚度标定方法是自相关法<sup>[4,5]</sup>和功率谱法<sup>[6,7]</sup>. 这两种光阱刚度测量方法都是采用光电管采集微粒的位移信号, 之后根据相应的理论模型对位移信号数据进行拟合处理得到光阱刚度. 由于在采集过程中不可避免地受到探测器白噪声以及周围环境噪声的干扰, 对测量的精度必然产生影响, 因此噪声的分析对提高光阱刚度精度非常重要. 但获取无噪声的粒子布朗运动信号需比较昂贵的实验设备和苛刻的实验环境, 计算机模拟是获取这种信号的理想方法. 此前已有使用蒙特卡罗模拟<sup>[8,9]</sup>对粒子位移信号进行模拟, 对光阱中噪声及光阱稳定性进行了研究. 近年来, 自回归 (auto-regressive, AR) 模型因其计算量小、速度快而广泛用于随机振动和时间系列分析中. 本文建立了一种用于光镊系统的粒子位移探测信号模拟的自回归模型, 对半

径为  $1\ \mu\text{m}$  粒子在不同激光功率下 (不同的光阱刚度) 粒子位移信号进行了模拟. 仿真结果表明, 该方法可以有效模拟光阱中粒子运动, 因而可为光阱刚度标定误差研究提供指导.

## 2 光阱中粒子的运动特征

光镊势场中的微米粒子由于受周围液体分子的扰动, 在平衡点附近做无规则热运动. 光阱中粒子运动的 Langevin 方程为<sup>[5,10,11]</sup>

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} + k_x x = f(t), \quad (1)$$

其中  $m$  是粒子的质量,  $\gamma$  为黏滞常数,  $\gamma = 6\pi\eta r$ , 其中  $\eta$  为黏滞系数,  $r$  为粒子半径;  $k_x$  为光阱一维刚度;  $f(t)$  为粒子布朗运动的随机力, 该随机力满足<sup>[6]</sup>:  $\langle f(t) \rangle = 0$ ,  $\langle f(t)f(t') \rangle = 2\gamma k_b T \delta(t-t')$ .

在低雷诺数下, 微粒在光阱中的运动是过阻尼运动, 惯性项可以忽略, 则 (1) 式可写成  $\dot{x} + \frac{1}{\tau_0}x = \frac{1}{\gamma}f(t)$ , 其中  $\tau_0 = \gamma/k_x$ , 此时, 粒子位移自相关函数为

$$\langle x(t)x(t+\tau) \rangle = \frac{k_b T}{k_x} \exp(-\tau/\tau_0). \quad (2)$$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 21073174, 20974107)、国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB910402) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: WK2030380002) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: liyinmei@ustc.edu.cn

光阱中粒子的位移信号是均值为零的随机信号, 其自相关函数是时间差函数, 所以粒子的位移信号  $x_t$  是一平稳随机过程. 平稳随机过程可用自回归滑动平均模型 (ARMA) 来描述, 即用白噪声作为一组线性差分方程的激励项来产生这一平稳随机过程. 理论上, 任意 ARMA 过程均可用 AR 过程表示. 由于 ARMA 模型为非线性, 求解复杂, 而 AR 模型为线性, 具有建模简单、计算迅速、预测容易、参数易于估计, 所以我们选择 AR 模型来描述光阱中粒子的位移信号. 在用 AR 模型模拟随机信号的实际应用中, 用有限阶的 AR 模型模拟随机信号, 这时 AR 系统相当于一组数字滤波器, 它将白噪声变成近似具有目标相关函数的离散随机过程 [12-16]. 对于粒子受限布朗运动信号的模拟, 可以将粒子位移信号看成是一个具有理论相关函数的自回归随机过程, 而某一光阱刚度下的粒子位移的相关函数是可求的. 因此, 用 AR 模型模拟光阱中粒子运动信号是可行性的.

### 3 光阱中粒子位移信号模拟

#### 3.1 光阱中的粒子位移自相关函数

由前面的推导可知光阱中的粒子运动位移的自相关函数是一指数衰减函数, 记为

$$r_x(\tau) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle = \frac{k_b T}{k_x} \exp(-\tau/\tau_0),$$

$$r_x(0) = \frac{k_b T}{k_x},$$

归一化自相关函数:  $R_x(\tau) = r_x(\tau)/r_x(0) = \exp(-\tau/\tau_0)$ , 其中  $\tau_0 = \gamma/k_x$ .

#### 3.2 光阱中粒子运动的 AR 模拟

粒子的布朗运动的 AR 过程可看成是 AR 模型在均值为零、方差为  $\delta_\omega^2$  的白噪声激励下的输出, 则 AR 模型下微粒在光阱中的位移信号可写成

$$x(n) = -\sum_{k=1}^p a_k x(n-k) + \omega(n), \quad (3)$$

其中  $a_k (k=1, 2, \dots, p)$  为自回归系数,  $p$  为模型阶数.  $p$  阶自回归模型表示为 AR( $p$ ). 由 (3) 式定义的 AR( $p$ ) 过程  $\{x(n)\}$ , 可以看作是白噪声序列  $\{\omega(n)\}$  通过一个传递函数为

$$H(z) = 1 / \left( 1 + \sum_{k=1}^p a_k z^{-k} \right)$$

的全极点滤波器产生的.

因此, 只要设计一个全极点滤波器  $H(z)$ , 使它满足 (3) 式, 再用白噪声序列通过该滤波器, 输出的随机序列  $\{x(n)\}$  就具备特定的功率谱特性, 功率谱和自相关函数是一对傅里叶变换对, 则随机序列  $\{x(n)\}$  具备特定的自相关函数. 由 (3) 式知, 若确定了方差  $\delta_\omega^2$  和系数  $a_k (k=1, 2, \dots, p)$ , 就可确定 AR 模型. 这样, 粒子位移信号的模拟问题就转换为对给定相关函数求解其 AR 模型参数的问题.

#### 3.3 模型参数

光阱中的粒子位移  $x(n)$  的自相关函数为

$$r_x(m) = E[x(n)x(n+m)], \quad (4)$$

将 (3) 式代入 (4) 式得

$$r_x(m) = -\sum_{k=1}^p a_k r_x(m-k) + E[x(n)\omega(n+m)], \quad (5)$$

因为  $x(n)$  仅与  $\omega(n)$  有关, 而与  $n$  以后时刻的白噪声序列无关, 则 (5) 式中

$$E[x(n)x(n+m)] = \begin{cases} 0 & m > 0 \\ \delta_\omega^2 & m = 0 \end{cases},$$

那么 (5) 式化为

$$r_x(m) = \begin{cases} -\sum_{k=1}^p a_k r_x(m-k) & m > 0 \\ -\sum_{k=1}^p a_k r_x(m-k) + \delta_\omega^2 & m = 0 \end{cases}. \quad (6)$$

将  $m=1, 2, \dots, p$  代入 (6) 式, 并考虑相关函数的偶对称性 ( $x(n)$  是实信号) 得

$$\begin{bmatrix} r_x(0) & r_x(1) & \cdots & r_x(p) \\ r_x(1) & r_x(0) & \cdots & r_x(p-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_x(p) & r_x(p-1) & \cdots & r_x(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_\omega^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

(7) 式就是  $p$  阶 Yule Walker 方程. 只要已知输出信号  $x(n)$  的前  $p+1$  个自相关函数  $r_x(0), r_x(1), \dots, r_x(p)$  就可以解此方程. Yule Walker 方程求解可由 Levison-Durbin 递推算法 [16] 求得.

当模型阶数  $p=1$  时, 系数

$$\begin{aligned} a_1 &= -r_x(1)/r_x(0), \\ \delta_1^2 &= r_x(0) + a_1 r_x(1). \end{aligned} \quad (8)$$

当模型阶数  $p = 2, 3, \dots, m$  各阶时, 递推关系式为

$$k_m = - \left[ \sum_{k=1}^{m-1} a_{m-1}(k) r_x(m-k) + r_x(m) \right] / \rho_{m-1}, \quad (9)$$

$$a_m(k) = a_{m-1}(k) + k_m a_{m-1}(m-k) \quad (k = 1, 2, \dots, m-1), \quad (10)$$

$$\rho_m = \rho_{m-1} (1 - k_m^2), \quad (11)$$

其中  $k_m$  称为反射系数,  $a_m(k)$  为第  $m$  阶时的第  $k$  个系数,  $\rho_m$  为  $m$  阶时前向预测最小功率误差 ( $\rho_m = \delta_m^2$ ),  $\delta_m^2$  为第  $m$  阶时白噪声序列的方差. 按 (9)—(11) 式递推得到各阶模型的参数  $a_1, a_2, \dots, a_k$  和  $\delta_\omega^2$ .

### 3.4 模型阶数选择

在具体选择 AR 模型阶数时, 一般以保证具有较好的模拟效果为原则. 通常认为, 模型阶数选得越高, 模拟效果越好, 但当阶数达到一定数值后, 则阶数的增大仅在原有 AR 模型中引入一些系数接近为零的高阶项, 对模拟的精度影响不大. 因此 AR 模型阶数的选取应综合考虑运算量、模拟精度两个因素来确定. 目前判断 AR 阶次常用的准则有最终预测误差准则 (FPE) 和信息论准则 (AIC). 这里, 我们选择最终预测误差准则,  $FPE(m) = \sigma_m^2 \left( \frac{N+m+1}{N-m+1} \right)$  其中  $m$  为模型阶数,  $\sigma_m^2$  为  $m$  阶模型激励源的方差,  $N$  是样本数据点数. 括号内的数值随着  $m$  的增大而增加, 这反映预测误差功率估计的不精确性在增加. 由于  $\sigma_m^2$  随阶数的增加而减小, 所以,  $FPE(m)$  将有一个最小值, 该最小值所对应的阶数  $m$  便是最后所确定的阶.

### 3.5 粒子运动信号模拟的算法

1) 确定序列的自相关函数. 对于给定粒子位移的自相关函数  $r_x(t)$  采样得到自相关函数序列,

$r_x(n) = r_x(t) | t = nT$  ( $n = 1, 2, \dots, N$ ),  $N$  为任意模拟序列的长度,  $T$  为采样周期.

2) 按 Levison-Durbin 递推算法计算各阶模型参数及  $\delta_\omega^2$ , 并确定模拟阶数  $p$ .

3) 在一定阶数  $p$  下, 产生均值为零, 方差为  $\delta_\omega^2 = \delta_p^2$  的高斯白噪声序列  $\{\omega(n)\}$ .

4) 利用 AR( $p$ ) 阶模型递推求得近似理论相关函数的粒子位移序列  $\{x(n)\}$ , 其长度为  $N_1$ .

## 4 模拟结果分析

模拟实验条件为: 测量温度 25 °C, 粒子半径为 1  $\mu\text{m}$ , 光阱刚度分别为 10, 20, 50  $\text{pN}/\mu\text{m}$ , 玻尔兹曼常数  $1.3807 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$ , 水的黏度系数  $0.89 \times 10^{-3} \text{ N}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$ . 按 (2) 式对自相光函数曲线离散化为序列, 抽样周期  $T = 0.00005 \text{ s}$  (即抽样频率  $f = 20 \text{ kHz}$ ), 抽样序列长度为  $N = 4000$ ; 按照 Levison-Durbin 递推算法计算各阶模型参数及  $\delta_\omega^2$ , 根据最终预测误差准则确定模拟阶数  $p = 1$ , 并产生相应的高斯白噪声随机序列  $\{\omega(n)\}$ ; 再根据 (3) 式产生不同刚度的光阱中粒子模拟的位移信号, 位移信号的采样频率  $f = 20 \text{ kHz}$ , 模拟时间的总长度为 0.1 s 信号如图 1 所示.

为了考察模拟效果, 我们将模拟数据长度取  $N_1 = 10^6$ , 三种模拟信号的自相关函数曲线与理论的自相关曲线如图 2 所示. 结果表明不同刚度的光阱捕获粒子的模拟位移信号的自相关函数与理论值符合.

分别采用自回归模型法和蒙特卡罗法 [8] 对光阱中粒子位移信号进行模拟, 每种方法都产生了 10 组模拟信号, 用功率谱法分别对两种模拟方法得到的模拟信号标定光阱刚度, 标定的结果见表 1.

表 1 AR 法和蒙特卡罗法模拟光阱信号的刚度比较

实际刚度 $k_t/\text{pN}\cdot\mu\text{m}^{-1}$	AR 法模拟刚度 $k_t/\text{pN}\cdot\mu\text{m}^{-1}$			蒙特卡罗模拟刚度 $k_t/\text{pN}\cdot\mu\text{m}^{-1}$		
	大小		误差/%	大小		误差/%
	平均	标准偏差		平均	标准偏差	
10	10.105	0.232	1.050	10.165	0.259	1.650
20	20.025	0.223	0.125	20.133	0.281	0.665
50	50.469	0.443	0.938	50.338	0.530	0.676

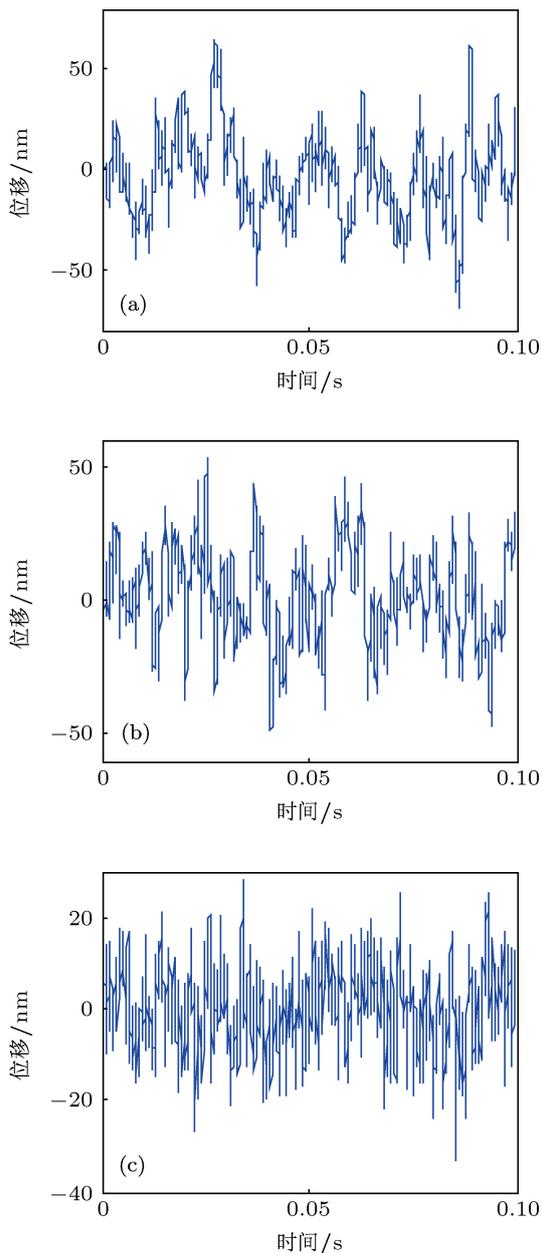


图1 AR模型的模拟信号 (a)  $k_x = 10 \text{ pN}/\mu\text{m}$ ; (b)  $k_x = 20 \text{ pN}/\mu\text{m}$ ; (c)  $k_x = 50 \text{ pN}/\mu\text{m}$

从表 1 可见, AR 法模拟刚度的方法与蒙特卡罗模拟方法具有相当的精度及标准偏差, 表明 AR 法模拟光阱刚度是可行的.

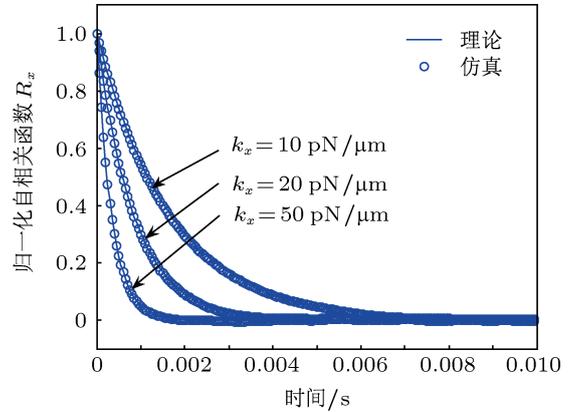


图2 理论相关函数和模拟相关函数

## 5 结论

利用建立的光阱捕获粒子随机过程的自回归模型, 对半径为  $1 \mu\text{m}$  的粒子, 对刚度为 10, 20, 50  $\text{pN}/\mu\text{m}$  的光阱中粒子位移信号进行模拟, 得到的模拟信号自相关函数能很好地符合理论相关函数, 证明采用自回归模型模拟产生光阱中微粒位移信号是可行的. 将 AR 模型方法和蒙特卡罗模拟得到的光阱中微粒位移信号采用功率谱法标定光阱刚度, 结果显示本文所提的 AR 模型方法能够有效模拟光阱中粒子布朗运动. 本文的研究结果提供了一种产生光阱中粒子布朗运动信号的新方法, 对研究光阱刚度测量方法、充分了解光阱参数测量中误差来源具有重要意义.

- [1] Neuman K C, Nagy A 2008 *Nat. Methods* **5** 491
- [2] Dienerowitz M, Mazilu M, Dholakia K 2008 *J. Nanophoton.* **2** 1
- [3] Abbondanzieri E A, Greenleaf W J, Shaevitz J W, Landick R, Block S M 2005 *Nature* **438** 460
- [4] Gibson G M, Leach J, Keen S, Wright A J, Padgett M J 2008 *Opt. Express* **16** 14561
- [5] Bechhoefer J, Wilson S 2002 *Am. J. Phys.* **70** 393
- [6] Berg-Sorensen K, Flyvbjerg H 2004 *Rev. Sci. Instrum.* **75** 594
- [7] Jiang Y Q, Guo H L, Liu C X, Li Z L, Cheng B Y, Zhang D Z, Jia S T 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1721 (in Chinese) [降雨强, 郭红莲, 刘春香, 李兆霖, 程丙英, 张道中, 贾锁堂 2004 物理学报 **53** 1721]
- [8] Czerwinski F, Richardson A C, Oddershede L B 2009 *Opt. Express* **17** 13255
- [9] Ren Y X, Wu J G, Zhong M C, Li Y M 2010 *Chin. Opt. Lett.* **8** 170
- [10] Neuman K C, Block S M 2004 *Rev. Sci. Instrum.* **75** 2787
- [11] Alves P S, Rocha M S 2012 *Appl. Phys. B: Lasers and Optics* **107** 375
- [12] Qi L X, Jia Y L, Tang H C 2010 *Ocean Technol.* **29** 60 (in Chinese) [齐立新, 贾云龙, 唐海川 2010 海洋技术 **29** 60]
- [13] Wang Y J, Zheng G, Shen J, Tan B X, Cheng Y T 2009 *Acta Opt. Sin.* **28** 91 (in Chinese) [王雅静, 郑刚, 申晋, 谭博学, 成艳亭 2009 光学学报 **28** 91]
- [14] Hasan M, Hossain N, Naylor P 2005 *IEEE Proceedings-Proceedings of the Vision, Image and Signal Processing* **152** 520
- [15] Zheng W X 2006 *IEEE Trans. Circ. Syst. II: Express Briefs* **53** 1471
- [16] Hu G S 2003 *Digital Signal Processing: Theory, Algorithms and Implementation* (Beijing: Tsinghua University Press Ltd.) p533 (in Chinese) [胡广书 2003 数字信号处理: 理论、算法与实现 (北京: 清华大学出版社有限公司) 第 533 页]

# Simulation of the Brownian motion of particle in an optical trap based on the auto-regressive model\*

Wang Zi-Qiang Zhong Min-Cheng Zhou Jin-Hua Li Yin-Mei<sup>†</sup>

(Department of Optics and Optical Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(Received 28 March 2013; revised manuscript received 17 June 2013)

## Abstract

An auto-regressive (AR) model is established by analysing the characteristic of the particle motion in an optical trap. In this paper, a new method based on the AR model is investigated to simulate the Brownian motion of the particle in an optical trap. When optical stiffness values are 10, 20, 50 pN/ $\mu\text{m}$  respectively, the displacement signals of 1  $\mu\text{m}$  diameter particle in these optical traps are simulated with this method. Their simulative autocorrelation function of the motion of the particle accords with their theoretical autocorrelation function. In order to further clarify the validity of the model, the particle signals are respectively simulated with the AR model method and the Monte-Carlo method, then the stiffness values are calibrated with power spectrum density method. The results show that the stiffness value based auto-regressive simulation can have the same precision as that based the Monte-Carlo simulation, therefore, the AR method can simulate effectively the motion of the particle in the optical trap.

**Keywords:** optical trap, Brownian motion, signal simulation, auto-regressive model

**PACS:** 87.80.Cc, 05.40.Jc, 02.60.Cb, 05.90.+m

**DOI:** 10.7498/aps.62.188701

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 21073174, 20974107), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB910402), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. WK2030380002).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: liyinmei@ustc.edu.cn