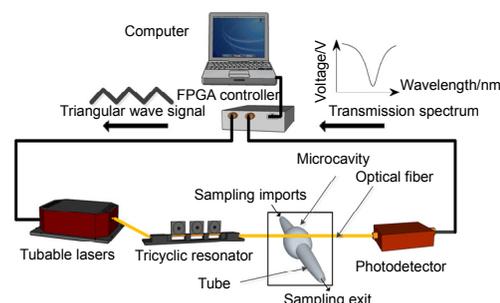


基于隐函数模型的光学微腔传输光谱拟合算法

王晓婷¹, 陈瑞强¹, 胡舜迪^{1*}, 赵鹏¹,
闻路红¹, 吴翔²

¹ 宁波大学宁波高等技术研究院, 浙江 宁波 315211;

² 复旦大学光科学与工程系, 微纳光子结构教育部重点实验室, 上海 200433



摘要: 光学微腔品质因子高、灵敏度高, 在精密生物传感方面有广阔的应用前景。针对洛伦兹拟合算法不能很好地拟合光学微腔输出端非对称波形和劈裂模式波形的问题, 提出了隐函数模型算法。该算法首先建立模板波形, 然后经平移、放缩理论实现模板波形操作, 利用 Levenberg-Marquardt (LM) 算法优化参数值, 能够实现对称波形、非对称波形和劈裂模式波形数据拟合。通过搭建光学微腔数据采集系统, 采用高斯、洛伦兹和隐函数模型算法对不同折射率溶液的实验数据进行拟合。结果表明: 隐函数模型算法比前两种算法的 MSE 低 1 个数量级, 且拟合优度 (R^2) 达到了 0.99, 拟合效果较好; 隐函数模型算法谐振频率误差最小, 谐振频率偏移量最大, 对应的灵敏度最高, 有利于提高光学微腔灵敏度。

关键词: 光学微腔; 隐函数模型; LM 算法; 数据拟合; 传输谱线

中图分类号: TN247; TP212.3

文献标志码: A

Optical microcavity transmission spectrum fitting algorithm based on the implicit function model

Xiaoting Wang¹, Ruiqiang Chen¹, Shundi Hu^{1*}, Peng Zhao¹, Luhong Wen¹ and Xiang Wu²

¹The Research Institute of Advanced Technologies, Ningbo University, Ningbo 315211, China; ²Center Key Lab for Micro and Nanophotonic Structures (Ministry of Education), Department of Optical Science and Engineering, Fudan University, Shanghai 200433, China

Abstract: The optical microcavity has high Q factors and high sensitivity, and has a good application prospect in high-precision biosensing. In order to deal with the problem that the Lorentz fitting algorithm cannot fit the asymmetric waveform and the splitting mode waveform of the optical microcavity, the implicit function model algorithm is proposed. Firstly, according to the method, the template waveform was established and operated by panning and zooming. Then the parameter values were optimized by the Levenberg-Marquardt (LM) algorithm. Finally, data fitting of symmetrical waveform, asymmetric waveform and splitting mode waveform could be achieved. Through constructing the data acquisition system of optical microcavity, the Gauss, the Lorentz and the implicit function model algorithm were used to fit the experimental data of different refractive index of solutions. The results show that MSE of the implicit function model algorithm is one order of magnitude lower than other two algorithms, and has a coefficient of determination (R^2) of 0.99. The resonant frequency error of implicit function model algorithm is the smallest, the resonant frequency of implicit function model algorithm is the largest, and the sensitivity of implicit function model

收稿日期: 2017-04-20; 收到修改稿日期: 2017-06-16

*E-mail: hushundi@nbu.edu.cn

algorithm is the highest. Therefore, the fitting effect of the implicit function model algorithm is better and it can efficiently improve the sensitivity of the optical microcavity.

Keywords: optical microcavity; implicit function model; LM algorithm; data fitting; transmission spectrum

DOI: 10.3969/j.issn.1003-501X.2017.07.006

Citation: *Opto-Elec Eng*, 2017, 44(7): 701–709

1 引言

光学微腔传感器通过检测光学模式传输谱线谐振波长的变化实现待测物质的检测,因其品质因子高、灵敏度高、分析速度快,在生物医学^[1-4]、环境监测^[5]和量子物理^[6]等方面得到广泛应用。其原理为:当待测物质进入微腔表面的倏逝场或腔内时,会引起有效折射率的变化,谐振波长模式也会随之发生偏移^[7,8]。谐振波长偏移量不精确会影响光学微腔灵敏度的测量,不利于对待测物的分析,因此寻找高精度的曲线拟合算法对于提高光学微腔灵敏度的精度极其重要。

近几年,国内外研究学者提出了很多关于曲线拟合的相关算法。例如,金虎^[9]等人采用洛伦兹拟合算法计算品质因子,拟合波形受洛伦兹本身模型的影响,波形底部部分数据拟合效果较好,下降沿和上升沿拟合精度有待提高;张有迪^[10]等人采用 Levenberg-Marquardt (LM)与 BP 神经网络相结合的混合算法对布里渊散射谱线拟合,在信噪比为 10 dB 的情况下得到拟合度超过 0.96,拟合精度还可以进一步改善;周鹏^[11]等人利用高斯拟合实现峰值检测,该算法当拟合峰数过少时,拟合误差会过大,拟合精度不高;张燕君^[12]等人采用多准则决策和粒子群优化-LM 混合算法对布里渊散射谱进行特征提取,该算法对各个波峰的拟合精度有待提高;Naeli^[13]等人采用迭代曲线拟合算法求解谐振器的品质因子达到消除噪音影响的目的,该算法依赖数学模型,因此数学模型选取有待进一步研究。

上述算法都有各自的局限性,针对以上不足,本文提出了一种基于隐函数模型的拟合方法^[14]。通过分析光学微腔传输光谱的波形特点,采用隐函数模型算法对待测样品进行数据处理,并与高斯、洛伦兹算法拟合待测样品的精度作比较,为光学微腔数据处理提供了一种新方法。

2 隐函数模型算法原理

在光学微腔生物传感系统中,灵敏度 $S^{[15]}$ 是描述微腔性质的主要测量参数之一,且对其准确测量具有

重要意义,计算公式如下:

$$S = \frac{\Delta\lambda}{\Delta n}, \quad (1)$$

其中: $\Delta\lambda$ 为波长偏移量, Δn 为溶液折射率变化量。溶液折射率变化量可由所配溶液折射率变化求出,接下来主要讨论如何通过曲线拟合精确求出谐振波长偏移量。

激光线宽可以用频率(Hz)表示,也可以用长度(nm)表示,关系如下:

$$\Delta f = \frac{c}{\lambda^2} \Delta\lambda, \quad (2)$$

其中: Δf 为用频率表示的线宽, c 为光速, λ 为激光中心波长, $\Delta\lambda$ 为用波长表示的线宽。因此谐振波长偏移量可由光学微腔透射光谱频率偏移量求得。频率偏移量可通过向微腔内通入不同折射率溶液时,单个模式谐振频率偏移量求出。为了精确定位谐振频率,且减少噪声对谐振频率的影响,需要对采集到的数据进行曲线拟合。

理想情况下,光学微腔传输光谱呈现洛伦兹线型特征,然而,实验中受激光器输出波长范围、实际制作工艺、微腔结构、待测物质、环境等各方面因素的影响,传输谱线呈现非对称或劈裂模式波形。例如在多模情况下传输谱线呈现非对称 Fano 谱线,且当腔内散射比较强时会导致劈裂模式谱线^[16-18],这种非对称性往往会对曲线拟合的精度有一定影响。为了求得单个模式谐振频率,需要对采集到的传输光谱进行数据处理,本文提出了隐函数模型拟合算法,首先获取模板波形,然后对 LM 算法中的对称中心、半高峰宽及峰高等待参数赋初始值,接着进行 LM 算法迭代,求出对称中心、半高峰宽及峰高的最优解,则对称中心即是本文要求的谐振频率。由于隐函数模型算法没有确定的数学表达式,隐函数求导需单独讨论。

如图 1 所示,横坐标为激光器调谐频率,纵坐标为透射光强转化出的电压值,隐函数模型算法的原理为:首先建立模板波形 $\tilde{f}(v)$,然后通过平移、放缩(即调节 A 、 B 、 C 的值)得到理论目标函数:

$$f_{\text{temp}}(v) = Af[B(v-C)]. \quad (3)$$

A 、 B 、 C 的取值由实际采样数据值 $f(v)$ 与目标函

数值 $f_{\text{temp}}(v)$ 之差的平方和:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N (f(v_i) - f_{\text{temp}}(v_i))^2, \quad (4)$$

求最小得到。本文通过 LM 算法反复迭代使 χ^2 值最小, 进而求出待求参数 A 、 B 、 C 最优解。

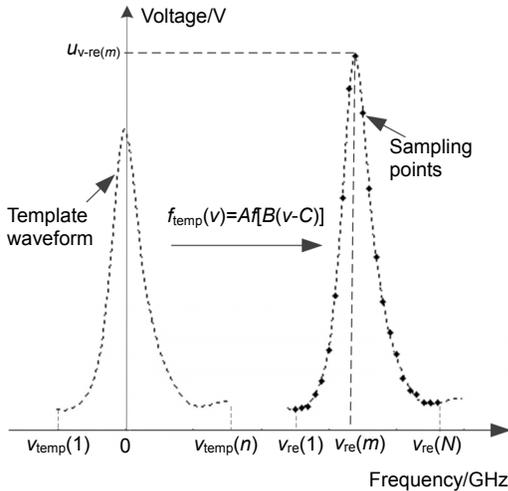


图 1 隐函数模型算法示意图。

Fig. 1 The schematic diagram of implicit function model algorithm diagram.

2.1 模板波形获取

为了提高模板波形算法的收敛速度, 实验中不同溶液的模板波形要分别获取。本文以水溶液为例介绍模板波形获取方法(其他溶液的模板波形获取方法相同):

1) 由于仪器本身、环境等因素干扰, 实际采集到的光学微腔传输光谱数据含有噪音。为了减少噪音影响, 本文选用采样频率为 S_{temp} 的平均模式采集数据, 平均次数为 65536。

2) 为了使数据点走势平滑, 将步骤 1) 采集到的数据选用三次样条函数插值法插值, 插值倍数为 n_{Inter} , 插值之后的数据点个数为 n 。

3) 求取步骤 2) 中所得 n 个光强值中的最大值为 $u_{v_{\text{temp}}(j)}$, v_{temp} 为最大电压值 $u_{v_{\text{temp}}(j)}$ 对应的横坐标, j 为最大电压值对应的索引值。

4) 为了使步骤 2) 中电压的最大值在纵坐标轴上从而获得模板波形, 将步骤 2) 得到的数据整体向左平移 j 个 (j 表示 $u_{v_{\text{temp}}(j)}$ 对应的索引值) 数据点, 获得模板波形数据为

$$\{u_{v_{\text{temp}}(1)}, u_{v_{\text{temp}}(2)}, \dots, u_{v_{\text{temp}}(i)}, \dots, u_{v_{\text{temp}}(n)}\}, \quad (5)$$

其中: $u_{v_{\text{temp}}(i)}$ 为模板波形中某个索引值 i 对应的电压

值, $v_{\text{temp}}(i)$ 为索引值取 i 值时所对应的频率, 并且:

$$v_{\text{temp}}(i) = \frac{i}{S_{\text{temp}} n_{\text{Inter}}}, \quad (6)$$

其中: S_{temp} 为模板波形采样频率, n_{Inter} 为模板波形插值倍数。

5) 选取步骤 4) 模板数据中左半峰宽对应的索引值为 $n_{\text{temp-l}}$, 右半峰宽对应的索引值为 $n_{\text{temp-r}}$, 则模板波形的半高峰宽为

$$\tau_{w\text{-temp}} = \frac{n_{\text{temp-r}} - n_{\text{temp-l}}}{S_{\text{temp}} n_{\text{Inter}}}. \quad (7)$$

2.2 拟合参数初始值确定

在进行 LM 算法之前, 需对目标函数 $f_{\text{temp}}(v) = Af[B(v-C)]$ 中的 A 、 B 、 C 赋初值 A_0 、 B_0 、 C_0 。如图 2, 以非对称波形为例介绍各个变量初始值确定方法(对称峰和多峰初始值确定方法相同)。

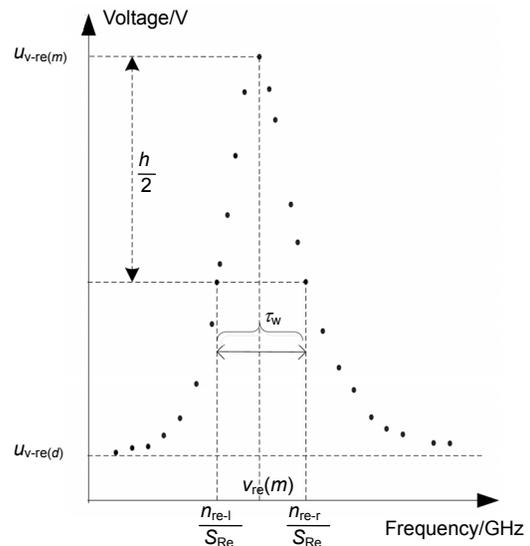


图 2 实际采样数据波形示意图。

Fig. 2 The schematic diagram of actual sampling data waveforms.

1) 由模板波形获取方法步骤 3) 可知, 模板波形的最大电压为 $u_{v_{\text{temp}}(j)}$ 。假设实际采样数据的数据点数为 N , 最大电压值为 $u_{v_{\text{re}}(m)}$, 其中 m 为实际采样数据的最大值 $u_{v_{\text{re}}(m)}$ 所对应的索引值, $v_{\text{re}}(m)$ 为其对应的横坐标, 则隐函数模型算法的参数初始值为

$$A_0 = \frac{u_{v_{\text{re}}(m)}}{u_{v_{\text{temp}}(j)}}. \quad (8)$$

2) 假设求得的实际采样数据的最小值为 $u_{v_{\text{re}}(d)}$, 则谱线半高为

$$\frac{h}{2} = \frac{u_{v_{re}(m)} - u_{v_{re}(d)}}{2}. \quad (9)$$

选取实际采样数据中左半峰宽对应的索引值为 n_{re-l} , 右半峰宽对应的索引值为 n_{re-r} , 采样频率为 S_{Re} , 则实际采样数据半高峰宽为

$$\tau_{w-re} = \frac{n_{re-r} - n_{re-l}}{S_{Re}}. \quad (10)$$

由式(7)可知模板波形半高峰宽, 所以隐函数模型算法的参数初始值:

$$B_0 = \frac{\tau_{w-re}}{\tau_{w-temp}}. \quad (11)$$

3) 隐函数模型算法的参数初始值:

$$C_0 = v_{re}(m). \quad (12)$$

其中: $v_{re}(m)$ 为实际采样数据的最大值 $u_{v_{re}(m)}$ 对应的横坐标。

2.3 拟合参数优化

对于非线性模型参数估计非常有效的方法是 LM 算法, 众所周知, 在合理步长前提下, 最速下降法的搜索方向始终为下降方向, 但是收敛速度太慢, 牛顿法收敛速度有了很大提升, 但是搜索方向未必是函数下降方向, 而 LM 算法吸收了两种算法的优点。通过引入一个简单的阻尼因子 γ , 当算法进展良好时, γ 取较小值, 使算法成为类牛顿法, 保证局部收敛速度快; 当算法进展较差时, γ 取较大值, 保证全局搜索, 所以 LM 算法具有全局收敛性。

LM 算法原理^[19]:

对模板波形函数 $f_{temp}(\mathbf{M})$ 在点 \mathbf{M}_{k+1} 附近进行一阶泰勒公式展开:

$$f_{temp}(\mathbf{M}_{k+1}) = f_{temp}(\mathbf{M}_k + \Delta p) \approx f_{temp}(\mathbf{M}_k) + \mathbf{J}\Delta p, \quad (13)$$

式中: k 为迭代次数, $f_{temp}(\mathbf{M})$ 为隐函数模型算法拟合曲线的电压值, Δp 为迭代步长, \mathbf{M} 为由 A 、 B 、 C 组成的待估向量。寻找下一个迭代点 $\mathbf{M}_{k+1} = \mathbf{M}_k + \Delta p$ 满足:

$$\begin{aligned} \|f(v_i) - f_{temp}(v_i, \mathbf{M}_{k+1})\| &= \\ \|f(v_i) - f_{temp}(v_i, \mathbf{M}_k) - \mathbf{J}\Delta p\| &= \\ \min\|\Delta f - \mathbf{J}\Delta p\|, & \quad (14) \end{aligned}$$

即求实际采样数据 $f(v)$ 与隐函数模型拟合电压值 $f_{temp}(\mathbf{M})$ 残差平方和尽可能小。其中 $i=1,2,\dots,N_0$ 。 $f(v)$ 为实际采样数据的电压值, $\Delta f = f(v) - f_{temp}(v, \mathbf{M})$ 为隐函数模型拟合电压值与实际采样数据的差值; \mathbf{J} 为关于待估向量 \mathbf{M} 的雅克比矩阵:

$$\mathbf{J}(A, B, C) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_{temp}(v_1)}{\partial A} & \frac{\partial f_{temp}(v_1)}{\partial B} & \frac{\partial f_{temp}(v_1)}{\partial C} \\ \frac{\partial f_{temp}(v_2)}{\partial A} & \frac{\partial f_{temp}(v_2)}{\partial B} & \frac{\partial f_{temp}(v_2)}{\partial C} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{temp}(v_N)}{\partial A} & \frac{\partial f_{temp}(v_N)}{\partial B} & \frac{\partial f_{temp}(v_N)}{\partial C} \end{bmatrix} \quad (15)$$

又因为 \mathbf{J} 与 $\Delta f - \mathbf{J}\Delta p$ 正交, 所以 $\mathbf{J}^T(\Delta f - \mathbf{J}\Delta p) = 0$, 即 $\mathbf{J}^T\mathbf{J}\Delta p = \mathbf{J}^T\Delta f$, 迭代步长:

$$\Delta p = (\mathbf{J}^T\mathbf{J})^{-1}\mathbf{J}^T\Delta f = \mathbf{M}_{k+1} - \mathbf{M}_k. \quad (16)$$

定义 Hessian 矩阵:

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^T\mathbf{J}. \quad (17)$$

在 LM 算法中, 可令:

$$\mathbf{H}_{LM} = \mathbf{J}^T\mathbf{J} + \gamma\mathbf{I} = \mathbf{H} + \gamma\mathbf{I}. \quad (18)$$

代替 Hessian 矩阵^[20]带入式(16)得到:

$$\Delta p = (\mathbf{H} + \gamma\mathbf{I})^{-1}\mathbf{J}^T\Delta f, \quad (19)$$

式中: \mathbf{I} 为单位矩阵; γ 为大于零的阻尼因子。

设 A_{est} 、 B_{est} 、 C_{est} 为中间迭代的三个参数值, $f_{temp}(v_i)$ 为所求的目标函数, LM 算法步骤如下:

1) 为待估参数赋初始值:

$$A_{est} = A_0, B_{est} = B_0, C_{est} = C_0,$$

设定目标误差 ε , 迭代次数 k , 阻尼因子 $\gamma = 0.01$;

2) 计算实际采样数据值 $f(v_i)$ 与目标函数值 $f_{temp}(v_i)$ 之间残差平方和:

$$\chi^2(\mathbf{M}) = \sum_{i=1}^N [f(v_i) - f_{temp}(v_i, \mathbf{M})]^2, \quad (20)$$

其中 $i=1,2,\dots,N_0$ 。

3) 计算雅克比矩阵 \mathbf{J} , 因为隐函数模型算法没有确定的数学表达式, 所以隐函数求导需借助模板波形数值计算。设实际采样波形横坐标 $v_{re}(i)$ 对应模板波形中的 $w_i = B(v_{re}(i) - C)$ ($i=1,2,\dots,N$), 那么我们所要求的目标函数值为

$$f_{temp}(v_{re}(i)) = Af[B(v_{re}(i) - C)] = Af(w_i). \quad (21)$$

可由模板 $f(w_i)$ 乘以 A 所得。令 i 从实际采样函数的第一个索引值开始遍历, $w(i) = B_{est}(v_{re}(i) - C_{est})$ 为 $f(w_i)$ 中的横坐标; 令 j 从模板波形的第一个索引值开始遍历, $v_{temp}(j)$ 为模板波形第 j 个索引值对应的模板波形的横坐标。首先令 $i=1, j=1,2,\dots,N$, 当首次出现 $v_{temp}(j) \geq w(i)$ 时, 将 j 的值赋给 $j, i=i+1$; 接着 $i=2, j=1,2,\dots,N$, 记录首次出现 $v_{temp}(j) \geq w(i)$ 时将 j 的值赋给 $j, i=i+1$; $i=3,\dots$, 直到 $i=N$, 记录首次出现 $v_{temp}(j) \geq w(i)$ 时将 j 的值赋给 j , 迭代完成。因为 $v_{temp}(v_i)$ 为离散数据, 所以模板 $f'(w_i)$ 的求导采用差

分法:

$$f'_{\text{temp}}(w_i) = \frac{f_{\text{temp}}(v_{\text{temp}}(j')) - f_{\text{temp}}(v_{\text{temp}}(j'-1))}{v_{\text{temp}}(j') - v_{\text{temp}}(j'-1)}, \quad (22)$$

其中 $i=1,2,\dots,N$ 。

拟合函数值:

$$f_{\text{temp}}(v_i) = A_{\text{est}}[u_{v_{\text{temp}}(j')} + (v_{\text{temp}}(j') - w_i)f'_{\text{temp}}(w_i)], \quad (23)$$

其中 $i=1,2,\dots,N$ 。

则雅克比矩阵中待定因子偏导数求解为

$$\begin{cases} \frac{\partial f(v_i)}{\partial A} = f_{\text{temp}}(w_i) \\ \frac{\partial f(v_i)}{\partial B} = A_{\text{est}}(v_{\text{re}}(i) - C_{\text{est}})f'_{\text{temp}}(w_i), \\ \frac{\partial f(v_i)}{\partial C} = -A_{\text{est}}B_{\text{est}}f'_{\text{temp}}(w_i) \end{cases} \quad (24)$$

其中 $i=1,2,\dots,N$ 。

将式(24)代入式(15)即可求出雅克比矩阵。

4) 计算(拟)Hessian 矩阵 $\mathbf{H} = \mathbf{J}^T \mathbf{J}$, 根据阻尼系数 γ 混合得到 Hessian 矩阵 $\mathbf{H}_{\text{lm}} = \mathbf{H} + \gamma \mathbf{I}(3,3)$, $\mathbf{I}(3,3)$ 为 3×3 的单位矩阵, 由式(19)计算新的可能的参数值:

$$\begin{cases} A_{\text{lm}} = A_{\text{est}} + \Delta p(1) \\ B_{\text{lm}} = B_{\text{est}} + \Delta p(2), \\ C_{\text{lm}} = C_{\text{est}} + \Delta p(3) \end{cases} \quad (25)$$

5) 计算新的可能的参数估计值:

$$f_{\text{temp}}(v_i) = A_{\text{lm}}(u_{v_{\text{temp}}(j')} + (v_{\text{temp}}(j') - w_i)f'_{\text{temp}}(w_i)). \quad (26)$$

以及对应的残差平方和:

$$\chi^2(\mathbf{M} + \Delta p) = \sum_{i=1}^N (f(v_i) - f_{\text{temp}}(v_i, \mathbf{M} + \Delta p))^2. \quad (27)$$

6) 当新的残差平方和 $\chi^2(\mathbf{M} + \Delta p) < \chi^2(\mathbf{M})$ 时, $\gamma = \gamma/10$, $A_{\text{est}} = A_{\text{lm}}$, $B_{\text{est}} = B_{\text{lm}}$, $C_{\text{est}} = C_{\text{lm}}$, $\chi^2(\mathbf{M}) = \chi^2(\mathbf{M} + \Delta p)$ 重新执行 3)~5); 否则, $\gamma = 10\gamma$, 重新执行 4)~5);

7) 当迭代次数达到预定迭代值或者新的残差小于一定的阈值 δ 时, 迭代结束, 否则继续执行上述迭代运算。

8) 将求得的最优参数值 A_{est} 、 B_{est} 、 C_{est} 带入模板函数 $\tilde{f}(v)$ 中即得目标函数:

$$f_{\text{temp}}(v) = A_{\text{est}}f[B_{\text{est}}(v - C_{\text{est}})], \quad (28)$$

其中 C_{est} 即为所求的谐振频率。

3 系统设计与实验分析

3.1 光学微腔数据采集实验系统

光学微腔传感器主要由可调谐激光器、光学微腔耦合系统、光电探测器、偏振控制器、FPGA 控制器等组成^[20], 具体结构如图 3(a)所示。光学微腔耦合系统由熔锥光纤和微泡腔组成, 结构如图 3(b)所示。熔锥光纤锥区长度 10 cm 左右, 锥区直径 $1.5 \mu\text{m} \sim 2.5 \mu\text{m}$, 损耗小于 1 dB, 是目前耦合效率相对较高的近场耦合器件, 能够将更多的光耦合到微腔中, 增大耦合强度。微泡腔内直径 $230.23 \mu\text{m}$, 壁厚 $6 \mu\text{m}$, 由二氧化碳激光器加热软化熔石英毛细管并增加其内部压强而成, 使用光纤锥波导与微泡腔耦合可以有效提高集成性能。实验中选取的微腔谐振波长在 835 nm(谐振频率 359 THz)附近。偏振控制器是 Thorlabs 公司的

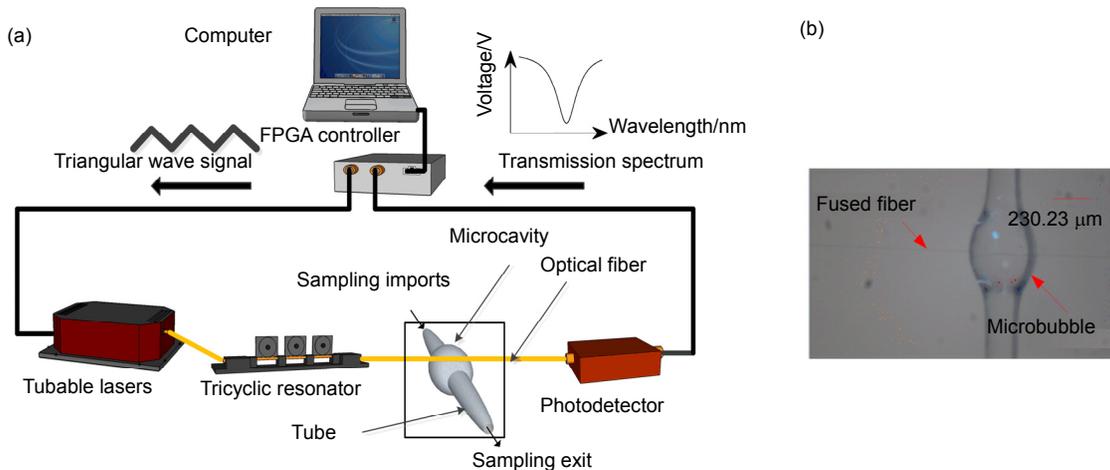


图 3 光学微腔实验装置. (a) 实验装置示意图. (b) 显微镜下回音壁模式微腔与光纤耦合图.

Fig. 3 The experimental device of optical microcavity. (a) Diagram of the experiment setup. (b) Photograph of the MBR coupling with a fused fiber, taken by microscope.

FPC023 型号,用于调整单模光纤的偏振态和相位角,以提高接收和检测的灵敏度 S 。实验中,由 FPGA 控制器输出三角波电压信号(振幅 ± 3 V、频率 20 Hz)驱动可调谐激光器(830 nm~853 nm、功率 50 mW, New Focus 公司,型号 TLB-6716-P)以 835 nm 为中心波长进行-30 GHz 到 30 GHz 无跳模调谐。实验中,可调谐激光器的光通过偏振控制器到达熔锥光纤,当激光器的输出波长与微腔谐振波长相等时,熔锥光纤中的光耦合进微腔中,透射光强下降,产生凹陷谷。光电探测器(Thorlabs 公司, PDA 36A-EC)接收光纤(Thorlabs 公司, 780 nm~970 nm 的单模光纤,包层 125 μm)中的透射光并将光信号转化为电信号,再由 FPGA 控制器中的 AD 采集模块采集电信号,通过 IPORT-3 模块传输给上位机完成信号采集。光学微腔传感理论源于微腔谐振条件:

$$2\pi R n_{\text{eff}} = m\lambda, \quad (29)$$

其中: n_{eff} 为有效折射率, R 为微腔半径, m 为模式的角量子数, λ 为模式的谐振波长。被探测的化学样品引起谐振模式,有效折射率 n_{eff} 改变,使其谐振波长发生移动。由式(2)可知,波长偏移会引起对应的频率偏移。

3.2 实验样品

本实验选择折射率(RI)分别为 1.3430、1.3478、1.3526 的二甲基亚砜(dimethyl sulfoxide, DMSO)溶液, RI 分别为 1.3511、1.3600、1.3690 的甘油(glycerol)溶液, RI 分别为 1.3495、1.3587、1.3665 的葡萄糖(glucose)溶液作为待测样品。

3.3 实验结果分析

为了验证隐函数模型算法的重复性,实验中采用水溶液作为待测样品,采集 100 组数据进行拟合,结果如图 4 所示。

从图 4 可知,调谐频率 X 服从 $X \sim \mathcal{N}(22.0350, 0.00298116)$ 的正态分布,其中标准偏差 $\sigma = 0.0546$ GHz,平均值为 $\mu = 22.0350$ GHz,这条曲线叫做调谐频率曲线。由正态分布 3σ 原则,调谐频率 X 实际可能的取值区间为(21.8712, 22.1988),相对标准偏差为 $RSD = \sigma / \mu = 0.002479042$,证明隐函数模型算法重复性比较好。

为了验证隐函数模型算法的收敛性,我们引入了残差平方和(SSE)。当迭代次数趋于无穷大时,拟合值与真实值之间的残差平方和达到稳定,则证明算法具

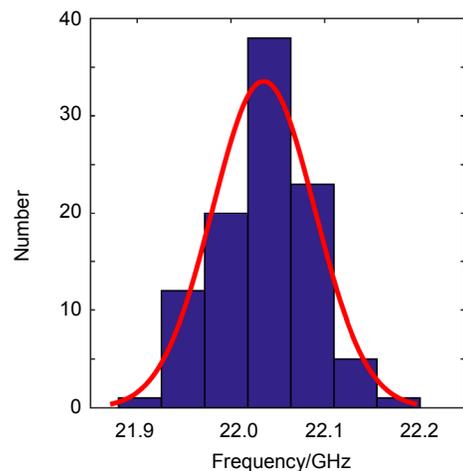


图 4 隐函数模型算法拟合 100 组水溶液数据所得调谐频率分布图。

Fig. 4 The distribution map of frequency detuning obtained by 100 sets of water solution data fitted by implicit function model algorithm.

有收敛性。假设实际采样值为 $f(v)$, 平均值 $\bar{f}(v)$, 曲线拟合之后所得的理论值为 $f_{\text{temp}}(v)$ 。残差平方和计算方法为

$$SSE = \sum_{i=1}^N (f_{\text{temp}}(v_i) - f(v_i))^2, \quad (30)$$

高斯、洛伦兹和隐函数模型算法的迭代次数与残差平方和之间的关系如图 5 所示。

从图 5 可以发现, SSE 的值在迭代 5 次之后就可以趋于稳定,证明算法的收敛速度快,稳健性好;每组数据三种算法的收敛速度不同取决于初始值的确定与模板波形选择,吻合度越高,算法收敛速度越快,说明模板的选取至关重要;当算法收敛稳定之后,隐函数模型算法计算所得 SSE 值最小,由此可以说明基于隐函数模型的拟合效果相对较好。

为进一步验证隐函数模型算法的拟合精度高,采用隐函数模型算法对待测样品数据处理,并与高斯、洛伦兹算法拟合结果作比较,选取具有代表性的对称波形、非对称波形和劈裂模式波形的拟合效果如图 6 所示。

对图 6 中实验数据测出单个波谷的调谐频率,并与高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合所得调谐频率作比较,结果如表 1 所示。

从图 6 高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合三组溶液所得效果图和表 1 可以发现,隐函数模型算法拟合对称波形、非对称波形和劈裂模式波形的效果比高斯、洛伦兹算法的好。图 6(a)对称波形中高斯拟合曲

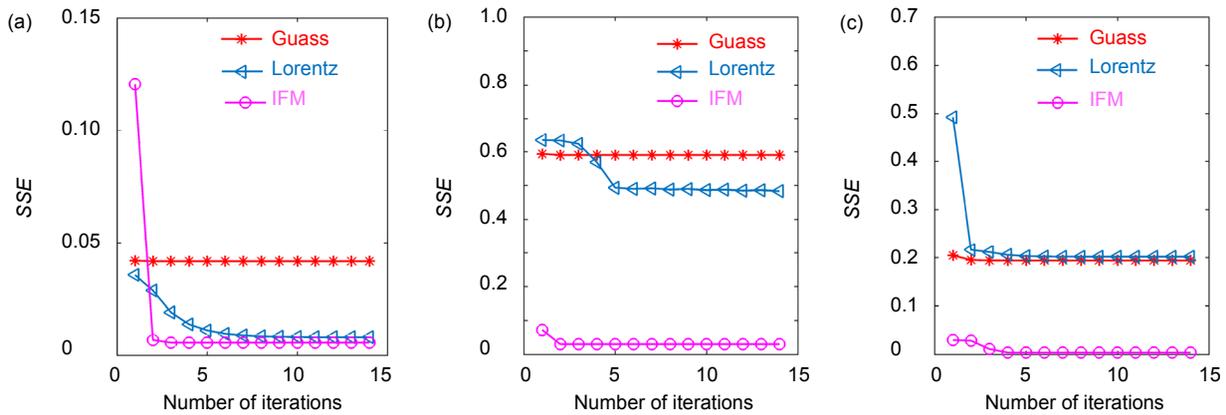


图 5 三种不同溶液下高斯、洛伦兹和隐函数模型算法 SSE 值比较图(IFM: 隐函数模型). (a) DMSO RI=1.3526. (b) 葡萄糖 RI=1.3587. (c) 甘油 RI=1.3511.

Fig. 5 Comparison of SSE values for Gaussian, Lorentz and implicit function model in three different solutions(IFM: Implicit function model). (a) DMSO RI=1.3526. (b) Glucose RI=1.3587. (c) Glycerol RI=1.3511.

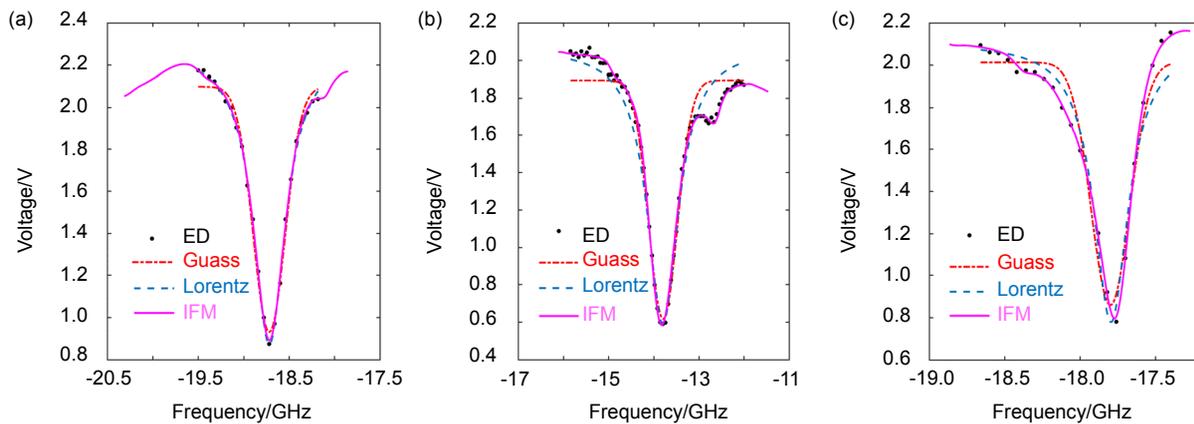


图 6 高斯、洛伦兹、隐函数模型算法拟合三组溶液所得对比图(ED: 实验数据; IFM: 隐函数模型).

(a) DMSO RI=1.3526. (b) 葡萄糖 RI=1.3587. (c) 甘油 RI=1.3511.

Fig. 6 Contrast map of three solutions fitted by Gaussian, Lorentz and implicit function model(ED: Experimental data; IFM: Implicit function model). (a) DMSO RI=1.3526. (b) Glucose RI=1.3587. (c) Glycerol RI=1.3511.

线数值比实际采样数值偏大, 洛伦兹和隐函数模型算法拟合实验数据效果比较好; 图 6(b)劈裂模式波形的高斯和洛伦兹拟合曲线对小的波谷拟合不够好, 拟合值与实验数据之间的差值偏大, 隐函数模型算法可以很好地拟合劈裂模式波形; 图 6(c)非对称波形的高斯和洛伦兹算法拟合实际采样数据的波形数值偏大, 隐函数模型拟合效果较好。

从表 1 中可以发现, 采用隐函数模型算法拟合 DMSO 溶液、葡萄糖溶液和甘油溶液数据所得调谐频率误差最小, 分别为 0.0004 GHz、0.0226 GHz、0.0103 GHz, 说明隐函数模型算法比高斯、洛伦兹拟合算法

求得的调谐频率准确, 则对应的谐振频率也会比较准确。与高斯、洛伦兹拟合算法相比, 隐函数模型算法拥有数字化的模板, 能够适应不同波形的数据拟合, 所以隐函数模型算法拟合对称波形、非对称波形和劈裂模式波形的效果都比较好。

为进一步定量评估隐函数模型算法, 我们引入了均方差(MSE)及拟合优度 R^2 , 且通过拟合待测样品求出谐振频率。残差平方和(SSE)与均方差(MSE)的平方和比值越小, 说明实际采样数据与拟合值越接近, 拟合效果就会越好。假设实际采样值为 $f(v)$, 平均值 $\bar{f}(v)$, 曲线拟合之后所得的理论值为 $f_{\text{temp}}(v)$ 。

表 1 高斯、洛伦兹、隐函数模型拟合算法调谐频率的比较.

Table 1 The comparison of frequency detuning among Gauss, Lorentz and implicit function model algorithm.

Solution	Actual frequency detuning/GHz	Frequency detuning/GHz			Frequency detuning error/GHz		
		IFM	Gauss	Lorentz	IFM	Gauss	Lorentz
DMSO RI=1.3526	-18.72	-18.7196	-18.7192	-18.7181	0.0004	0.0008	0.0019
Glucose RI=1.3587	-13.82	-13.8226	-13.7944	-13.7999	0.0226	0.0056	0.0001
Glycerol RI=1.3511	-17.76	-17.7703	-17.7931	-17.7949	0.0103	0.0331	0.0349

表 2 高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合程度判断.

Table 2 The fitting degree of Gauss, Lorentz and implicit function model algorithm.

Solution	MSE			R ²		
	IFM	Gauss	Lorentz	IFM	Gauss	Lorentz
Average	3.37 × 10 ⁴	5.3 × 10 ³	5.38 × 10 ³	0.998075	0.970083	0.96955

表 3 高斯、洛伦兹、隐函数模型拟合算法灵敏度的比较.

Table 3 The comparison of sensitivity among Gauss, Lorentz and implicit function model algorithm.

Solution	RI	Frequency detuning/GHz			Frequency detuning offset/GHz			Sensitivity /nm·RIU ⁻¹		
		IFM	Gauss	Lorentz	IFM	Gauss	Lorentz	IFM	Gauss	Lorentz
		DMSO	1.3430	-19.2211	-19.2335	-19.2395	0.6421	0.6087	0.6373	0.31089
	1.3478	-18.5790	-18.6248	-18.6022						
Glycerol	1.3600	-13.8210	-13.7969	-13.7908	1.4545	1.4446	1.4382	0.1888	0.1876	0.1867
	1.3690	-12.3665	-12.3523	-12.3526						
Glucose	1.3495	-17.7715	-17.7726	-17.7555	1.5317	1.5299	1.5125	0.2094	0.2092	0.2068
	1.3665	-16.2398	-16.2427	-16.2430						

均方差计算方法为

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f_{temp}(v_i) - \bar{f}(v_i))^2, \quad (31)$$

拟合优度:

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{MSE}, \quad (32)$$

高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合 9 组待测样品所得均方误差(MSE)和拟合优度(R²)的比较结果如表 2 所示。

从表 2 高斯、洛伦兹和隐函数模型算法分别拟合水、葡萄糖和甘油溶液所得 MSE 和 R² 对比中可以发现, 隐函数模型算法比高斯和洛伦兹算法的 MSE 小 1

个数量级, 且拟合优度均达到了 0.99, 比高斯和洛伦兹算法的更大, 进一步验证了隐函数模型算法拟合精度高。

曲线拟合精度能够影响调谐频率进而影响光学微腔传感器的灵敏度, 由式(1)、式(2)可得, 高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合不同溶液所得调谐频率、调谐频率偏移量和灵敏度结果如表 3 所示。

由表 3 高斯、洛伦兹和隐函数模型拟合算法拟合不同折射率溶液所得调谐频率、调谐频率偏移量和灵敏度结果可知, 隐函数模型算法调谐频率偏移最大, 对应的谐振频率偏移量最大, 相应的灵敏度最高, 分别为 0.31089 nm·RIU⁻¹、0.1888 nm·RIU⁻¹、0.2094

nm·RIU⁻¹。由此可见隐函数模型算法能提高灵敏度。

4 结 论

本文采用高斯、洛伦兹和隐函数模型算法拟合不同折射率溶液数据，结果表明：模板波形与实际采样数据越接近，迭代次数会越少，算法收敛速度会越快。隐函数模型算法的 MSE 为 10^{-4} 数量级，拟合优度达到了 0.99，相关性高于高斯、洛伦兹算法，能够很好地拟合对称波形、非对称波形和劈裂模式波形光谱。采用隐函数模板法求出的谐振频率误差最小，为后续寻找光谱谐振中心从而探测生物体成分提供了可靠依据。通过实验采集另一组不同折射率溶液的数据，运用本研究提出的隐函数模型算法检测灵敏度，并与高斯、洛伦兹算法检测出的灵敏度作比较，结果表明隐函数模型算法能够提高灵敏度。数字化的隐函数模型算法将在任意形状的波形数据拟合方面有广泛的应用前景。

基金项目

宁波大学人才工程项目(ZX2015000803)；宁波大学科研基金项目(XYL15023)；王宽诚幸福基金；浙江省自然科学基金(Q16A020002)资助项目。

参考文献

- 1 Wang Y G, Chen Chengchang, Chiu C H, et al. Lasing in metal-coated GaN nanostripe at room temperature[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, **98**(13): 131110.
- 2 Vollmer F, Arnold S. Whispering-gallery-mode biosensing: label-free detection down to single molecules[J]. *Nature Methods*, 2008, **5**(7): 591–596.
- 3 Chen Chengchang, Shih M H, Yang Yichun, et al. Ultraviolet GaN-based microdisk laser with AlN/AlGaIn distributed Bragg reflector[J]. *Applied Physics Letters*, 2010, **96**(15): 151115.
- 4 李皓. 新型光学微腔和微腔激光器生物传感效应研究[D]. 上海: 复旦大学, 2011.
- 5 Böttner S, Li Shilong, Jorgensen M R, et al. Vertically aligned rolled-up SiO₂ optical microcavities in add-drop configuration[J]. *Applied Physics Letters*, 2013, **102**(25): 251119.
- 6 Kimble H J. The quantum internet[J]. *Nature*, 2008, **453**(7198): 1023–1030.
- 7 Ren Liqiang, Wu Xiang, Li Ming, et al. Ultrasensitive label-free coupled opt-ofluidic ring laser sensor[J]. *Optics Letters*, 2012, **37**(18): 3873–3875.
- 8 张兴旺. 高灵敏光微流回音壁模式微腔生化传感器[D]. 上海: 复旦大学, 2014.
- 9 Jin Hu, Lu Yun, Bai Xiaosong. Experimental study of whispering gallery mode-based spherical optical microcavity[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, **49**(6): 062301.
金虎, 陆云, 白晓淞. 基于回音壁模式的球形光学微腔实验研究[J]. *激光与光电子学进展*, 2012, **49**(6): 062301.
- 10 Zhang Youdi, Li Jiaqi, Meng Chuannan, et al. Hybrid optimization algorithm of Brillouin scattering spectra fitting[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2015, **27**(9): 091013.
张有迪, 李嘉琪, 孟钊楠, 等. 布里渊散射谱拟合的混合优化算法[J]. *强激光与粒子束*, 2015, **27**(9): 091013.
- 11 Zhou Peng, Zhang Wenbin, Wang Junxing, et al. Peak detection algorithm of optical fiber SPR signal based on the Gaussian fitting[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, **36**(6): 1949–1953.
周鹏, 张文斌, 王军星, 等. 基于高斯拟合的光纤型 SPR 信号的峰值检测算法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, **36**(6): 1949–1953.
- 12 Zhang Yanjun, Jia Wei, Fu Xinghu, et al. A multi-peak Brillouin scattering spectrum feature extraction method based on multi-criteria decision-making and particle swarm optimization-levenberg marquardt hybrid optimization algorithm[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2016, **36**(7): 2183–2188.
张燕君, 贾伟, 付兴虎, 等. 一种基于多准则决策和 PSO-LM 混合优化算法的多峰 Brillouin 散射谱的特征提取方法[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, **36**(7): 2183–2188.
- 13 Naeli K, Brand O. An iterative curve fitting method for accurate calculation of quality factors in resonators[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2009, **80**(4): 045105.
- 14 陈瑞强, 闻路红. 脉冲波形的拟合方法: 105044702A[P]. 2015-11-11.
- 15 Li Beibei, Xiao Yunfeng, Zou Changling, et al. Experimental observation of Fano resonance in a single whispering-gallery microresonator[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, **98**(2): 021116.
- 16 Wu Xiaowei, Zou Changling, Cui Jinming, et al. Modal coupling strength in a fibre taper coupled silica microsphere[J]. *Journal of Physics B: Atomic Molecular & Optical Physics*, 2009, **42**(8): 085401.
- 17 Dong Chunhua, Zou Changling, Xiao Yunfeng, et al. Modified transmission spectrum induced by two-mode interference in a single silica microsphere[J]. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2009, **42**(21): 215401.
- 18 Luo Yunhan, Chen Xiaolong, Xu Mengyun, et al. Optofluidic glucose detection by capillary-based ring resonators[J]. *Optics & Laser Technology*, 2014, **56**: 12–14.
- 19 Lourakis M I A. A Brief Description of the Levenberg-Marquardt Algorithm Implemented by levmar[J]. *Foundation of Research & Technology*, 2005: 1–6.
- 20 Tang Ting, Wu Xiang, Liu Liying, et al. Packaged optofluidic microbubble resonators for optical sensing[J]. *Applied Optics*, 2016, **55**(2): 395–399.