

# 基于小波变换和连续 Hopfield 神经网络的重叠峰解析策略

徐喜荣<sup>\*1</sup>, 潘子琦<sup>2</sup>, 李兴华<sup>3</sup>, 李金泽<sup>1</sup>

(1. 大连理工大学 计算机科学与技术学院, 辽宁 大连 116024;  
2. 上海交通大学 计算机科学与工程系, 上海 200240;  
3. 北京伟瑞迪科技有限公司, 北京 110004)

**摘要:** 针对化学谱图分析中的重叠峰解析问题, 提出了一种基于小波变换和连续 Hopfield 神经网络的谱图重叠峰解析策略. 使用高斯函数作为曲线拟合的数学模型, 将重叠峰分解为一系列高斯峰的叠加组合. 首先, 根据检测信号卷积型小波变换中奇异点特性分析原理, 利用卷积型小波变换方法寻找信号的特征点, 并根据特征点对信号做出初步解析; 然后, 构造解析峰参数与解析误差之间的函数关系, 并以之作为连续 Hopfield 神经网络的能量函数; 最后, 根据该网络自我演化特性经过指定次数的迭代得到误差函数的极小值点, 进而得到谱图重叠峰的最终解析参数. 谱图重叠峰模拟解析表明, 所提算法有效.

**关键词:** 重叠峰解析; 曲线拟合; 小波变换; Hopfield 神经网络

**中图分类号:** TP391

**文献标识码:** A

**doi:** 10.7511/dllgxb201901013

## 0 引言

在化学谱图信号中, 由于不同单峰的峰位可能会出现较为相近的情况, 并且峰宽很大, 导致不同信号的重叠现象非常严重, 给谱图分析工作造成极大的困难, 因此对于谱图信号的重叠峰解析工作一直是亟待解决的难题<sup>[1]</sup>. 谱图信号的重叠峰解析技术可以大体分为两类: 数值方法和非数值方法. 其中, 非数值方法是通过改进仪器或提高实验条件来尽量减少重叠峰的出现; 而数值方法是通过一系列数学方法对已经出现重叠峰进行分离, 提取出单个谱图峰进行分析从而进一步得出谱图信号所包含的信息, 主要包括小波变换、Fourier 自去卷积、Kalman 滤波和曲线拟合等方法<sup>[2]</sup>. 其中使用最为广泛的是曲线拟合方法, 根据最小二乘法原理将原始谱图信号分解为多个给定峰型的单峰叠加组合, 并使拟合谱图信号与实际采集得到的谱图信号之间的拟合误差率最小<sup>[3]</sup>. 在重叠含噪光谱解析中, 确定峰位最为关键<sup>[4]</sup>. 应用二阶和四阶导数确定重叠峰的数量和位置<sup>[5-6]</sup>, Fourier 自去卷积用于拟合曲线参数的估计<sup>[7-8]</sup>,

基于自然计算的谱图峰检测<sup>[9-10]</sup>也都有报道. 此外, 应用小波技术解析重叠峰也是一个相当活跃的领域<sup>[4, 11-17]</sup>. 对于重叠峰解析工作来说, 不同单峰的各个参数相互制约, 通过共同迭代优化得到最优拟合结果, 其优化过程密不可分、相互依赖. 因此, 先对各个单峰的峰位进行确定必然会有它的局限性, 而采用一种对于所有的峰参数进行整体优化的重叠峰解析算法方能提高其分析的有效性.

## 1 基于高斯函数的曲线拟合

曲线拟合通常采用一些已知函数的组合、统计方法、经验公式和测定的峰型来假定曲线拟合的数学模型. 由于高斯函数具有峰高、峰位、峰宽等参数, 本文采用高斯函数对单个谱图峰进行模拟. 用高斯函数模拟的单个谱图峰如:

$$G_{A,U,S}(x) = Ae^{-\left(\frac{x-U}{S}\right)^2}$$

其中  $G_{A,U,S}(x)$  是谱图峰采样点  $x$  处信号强度,  $A$ 、 $U$ 、 $S$  分别为谱图峰的峰高、峰位、峰宽参数.

利用高斯函数模型对原始谱图信号  $g(x)$  进

收稿日期: 2017-06-25; 修回日期: 2018-10-28.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61472465, 61170303, 61562066); 国家级大学生创新训练项目(2016101410168).

作者简介: 徐喜荣<sup>\*</sup>(1967-), 女, 副教授, 博士生导师, E-mail: xirongxu@dlut.edu.cn; 潘子琦(1996-), 男, 硕士生, E-mail: panziqi\_ai@sjtu.edu.cn.

行拟合,即找出一系列高斯函数  $G_{A_i, U_i, S_i}(x)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ), 并叠加作为拟合谱图信号:

$$f(x) = \sum_{i=1}^N G_{A_i, U_i, S_i}(x) \quad (1)$$

使得  $f(x)$  在某种意义下成为逼近原始谱图信号  $g(x)$  的最近似描述.

在实验过程中,通过仪器采集到的谱图信号为离散数据,所以将拟合谱图信号  $f(x)$  与原始谱图信号  $g(x)$  分别离散化为  $f(j)$  和  $g(j)$ , 其中  $j=1, 2, \dots, M$ , 代表了  $M$  个采样点的信息.

将离散化后的拟合信号  $f(j)$  与原始谱图信号  $g(j)$  之间的误差函数  $E$  定义为

$$E = \frac{\sum_{j=1}^M [f(j) - g(j)]^2}{\sum_{j=1}^M g^2(j)} \quad (2)$$

对谱图信号进行拟合旨在寻找最小二乘法意义下的最优拟合函数  $f^*(j)$ , 实质上是确定误差函数  $E$  的全局极小值问题. 由式(1)、(2)可知,  $E$  是关于高斯峰参数  $(A_i, U_i, S_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) 的多元非线性函数, 通过解析法直接求解最优值存在困难. 因此, 本文根据卷积型小波变换与信号奇异点之间的对应关系解析信号特征点, 并根据信号特征点设置信号的初始解析参数. 由于这一初始参数根据信号特征点设立而非随机得出, 其非常接近误差函数的全局极小值点, 因此之后利用连续 Hopfield 神经网络迭代计算最终解析参数, 作为误差最小的解析结果. 这不仅能够提高解析精度, 减少解析结果落入局部极小值的可能性, 而且大大缩小了寻优空间, 使得计算量大幅下降, 解析速度大幅上升, 从而使算法具有时效性.

## 2 基于小波变换的谱图峰特征点识别

小波变换是近年发展起来的一种新的信号分析工具, 具有多分辨分析和将信号分频的特点, 以及表征信号局部奇异性的能力<sup>[16]</sup>. 使用小波变换法进行谱图峰识别, 可以充分而准确地获取谱图中特征点和峰型信息.

### 2.1 小波变换系数与谱图峰信号特征点之间的逻辑对应关系

为了清楚地说明各种谱图峰特征点的含义, 采用高斯函数合成如图 1 所示的仿真复杂重叠谱图峰群, 并给出了组成该重叠谱图的各个高斯峰, 如图 2 所示.

图 1 所示的原始谱图信号重叠峰群包括两个独立峰(峰①⑤)、3 个重叠峰(峰②③④), 其中峰②和④分别与峰③(主峰)重叠表现为一个前肩峰和一个后肩峰. 峰群的各个特征点( $a \sim q$  共 17 个)已标出, 便于清楚地说明各种特征点的含义.

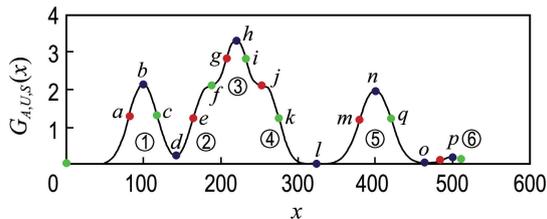


图 1 仿真谱图峰群及特征点

Fig. 1 Peak groups and feature points of simulation spectrum

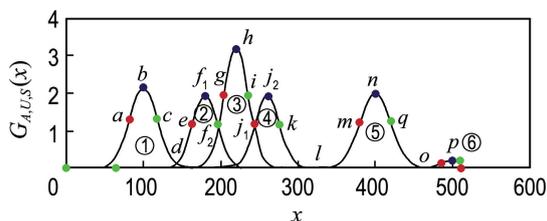


图 2 重叠谱图的各个高斯峰

Fig. 2 Each Gauss peak of the overlapping spectrum

图 3 是图 1 原始谱图信号经 bior1.3 小波变换后的小波变换系数曲线及其对应特征点, 红色点代表小波变换系数极大值点, 绿色点代表小波变换系数极小值点, 蓝色点代表小波变换系数过零点. 图 1 与图 3 中同一字母标识的特征点一一对应.

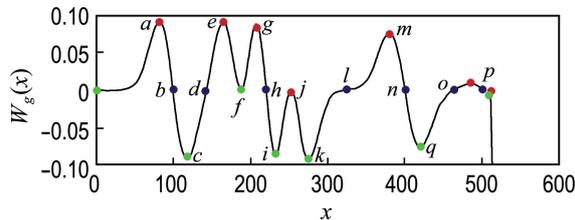


图 3 小波变换系数曲线及特征点

Fig. 3 Wavelet transform coefficients curve and feature points

为了便于描述, 将图 1 原始谱图信号记作  $g(x)$ ,  $g(x)$  一阶导数记作  $g'(x)$ , 图 3 中小波变换系数记作  $W_g(x)$ , 其中  $x$  是采样点横坐标. 根据文献<sup>[17]</sup>, bior1.3 小波具有一阶消失矩, 相应的小波变换系数  $W_g(x)$  相当于一个具有平滑功

能的一阶多尺度微分算子,谱图信号  $g(x)$  对应的小波变换系数  $W_g(x)$  相当于对  $g(x)$  进行平滑处理后的一阶导数。

谱图信号的特征点一共有 8 个:峰左拐点、峰右拐点、前肩峰与主峰交接处拐点、后肩峰与主峰交接处拐点、峰起点/峰终点、峰谷点、峰顶点和噪声点。具体含义如下:

(1)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) > 0$ , 并且  $x_0$  对应于  $g(x)$  的极大值点, 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的峰左拐点。峰左拐点是谱图信号增长速度开始减缓的采样点, 如图中的  $a, e, g, m$  特征点。

(2)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) < 0$ , 并且  $x_0$  对应于  $g(x)$  的极小值点, 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的峰右拐点。峰右拐点是谱图信号下降趋势开始减缓的采样点, 如图中的  $c, i, k, q$  特征点。

(3)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) \geq 0$ , 并且  $x_0$  对应于  $g(x)$  的极小值点, 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的前肩峰与主峰交接处拐点。该特征点是在两个高斯峰重叠后产生的, 如图 2 高斯峰②的峰顶点  $f_1$ 、峰右拐点  $f_2$  与高斯峰③重叠后, 表现为前肩峰与主峰交接处拐点  $f$ 。

(4)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) \leq 0$ , 并且  $x_0$  对应于  $g(x)$  的极大值点, 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的后肩峰与主峰交接处拐点。该特征点是在两个高斯峰重叠后产生的, 如图 2 高斯峰④的峰左拐点  $j_1$ 、峰顶点  $j_2$  与高斯峰③重叠后, 表现为后肩峰与主峰交接处拐点  $j$ 。

(5)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) = 0$ , 并且  $x_0$  作为  $g'(x_0)$  由负到正的过零点; 对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度在给定的基线阈值  $T_b$  之下, 即  $g(x_0) \leq T_b$ , 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的峰起点/峰终点。该特征点既是前一个峰群的终点, 也是后一个峰群的起点, 是两个峰群的分界点, 如图中的  $l$  特征点。

(6)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) = 0$ , 并且  $x_0$  作为  $g'(x_0)$  由负到正的过零点; 对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度在给定的基线阈值  $T_b$  之上, 即  $g(x_0) > T_b$ , 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的峰谷点。该特征点与信号的峰起点/峰终点在数学性态上是一致的, 都是由相邻两个高斯峰的终点和起点重叠而成, 其与峰起点/峰终点不同的是对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度要高一些,

如图中的  $d$  特征点。之所以要做出区分, 是因为要能够准确地划分峰群的位置, 从而为后续的谱图峰解析算法提供足够的信息。

(7)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) = 0$ , 并且  $x_0$  作为  $g'(x_0)$  由正到负的过零点; 对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度在给定的噪声阈值  $T_n$  之上, 即  $g(x_0) \geq T_n$ , 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的峰顶点。该特征点是谱图信号  $g(x)$  的最高点, 如图中的  $b, h, n$  特征点。

(8)若谱图信号  $g(x)$  在  $x_0$  处的一阶导数  $g'(x_0) = 0$ , 并且  $x_0$  作为  $g'(x_0)$  由正到负的过零点; 对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度在给定的噪声阈值  $T_n$  之下, 即  $g(x_0) < T_n$ , 那么  $x_0$  是谱图信号  $g(x)$  的噪声点。该特征点与信号的峰顶点在数学性态上是一致的, 都是谱图信号  $g(x)$  的峰顶点, 只不过其对应谱图信号  $g(x)$  的采样强度不及峰顶点, 如图中的  $p$  特征点。由于基于小波变换的噪声滤除算法经过多频率的分解滤噪, 已经滤去了绝大多数的尖锐噪声, 但仍会遗留一部分, 而这部分噪声虽然数学性态上与峰顶点一致, 即均为峰的极大值点, 只不过其起伏程度不及真实谱图峰。因此采用硬阈值滤噪的方法将这些噪声除去。

在后续的谱图解析过程中, 基线阈值  $T_b$  和噪声阈值  $T_n$  的确定与实际化学问题背景有关。在本文实验中, 根据经验分别将其设为采集谱图信号强度最大值的  $1/8$  和  $1/10$ 。

## 2.2 小波变换系数曲线特征点识别算法

小波变换系数曲线特征点识别算法中, 类似于文献[18]中的数据窗口概念, 本文提出一种数据窗口, 如图 4 所示。该数据窗口可以根据小波变换系数曲线信号值的变化自适应调节窗口宽度大小, 并将窗口内部的数据分为 3 段, 每一段代表了采样点坐标连续、信号值相同的数据点所组成的一个数据段, 即每一个数据段相当于对数据进行

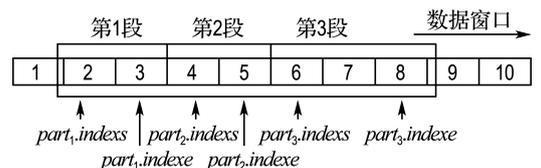


图 4 小波变换系数曲线特征点识别算法数据窗口设计

Fig. 4 Data window design of wavelet transform coefficient curve feature points recognition algorithm

了归一化处理;3 段数据的信号值不同,从而可以表现并检测出极小值点、极大值点或过零点。

设  $value_r$  为第  $r$  个数据段的信号值,  $part_{r, index_s}$  为第  $r$  个数据段起点坐标,  $part_{r, index_e}$  为第  $r$  个数据段终点坐标, 其中  $r=1, 2, 3$ 。

(1) 对于极大值点, 数据窗口 3 个数据段信号值的分布只能是  $value_1 < value_2, value_3 < value_2$ 。

(2) 对于极小值点, 数据窗口 3 个数据段信号值的分布只能是  $value_1 > value_2, value_3 > value_2$ 。

(3) 对于过零点, 由于在算法的分析过程中实际处理的数据为离散数据, 曲线的过零点可能不会位于某一采样点上而是位于二者之间, 当然也可能恰好位于某一采样点上。因此, 对于过零点,

数据窗口 3 个数据段信号值的分布可能有以下两种情况:

① 过零点恰好位于某一采样点上:  $value_2 = 0, value_1 \cdot value_3 < 0$ ;

② 过零点位于两个相邻采样点之间:  $value_1 = 0, value_2 \cdot value_3 < 0$  或  $value_3 = 0, value_1 \cdot value_2 < 0$ 。

除此之外, 可以推知在一个数据窗口中, 极大值点、极小值点和第①种过零点两两互斥, 最多只能出现 1 个; 第②种过零点和极大值点、极小值点可以同时出现。

小波变换系数曲线特征点的识别过程是一个不断迭代循环的过程。小波变换系数曲线特征点识别算法的具体步骤如图 5 所示。

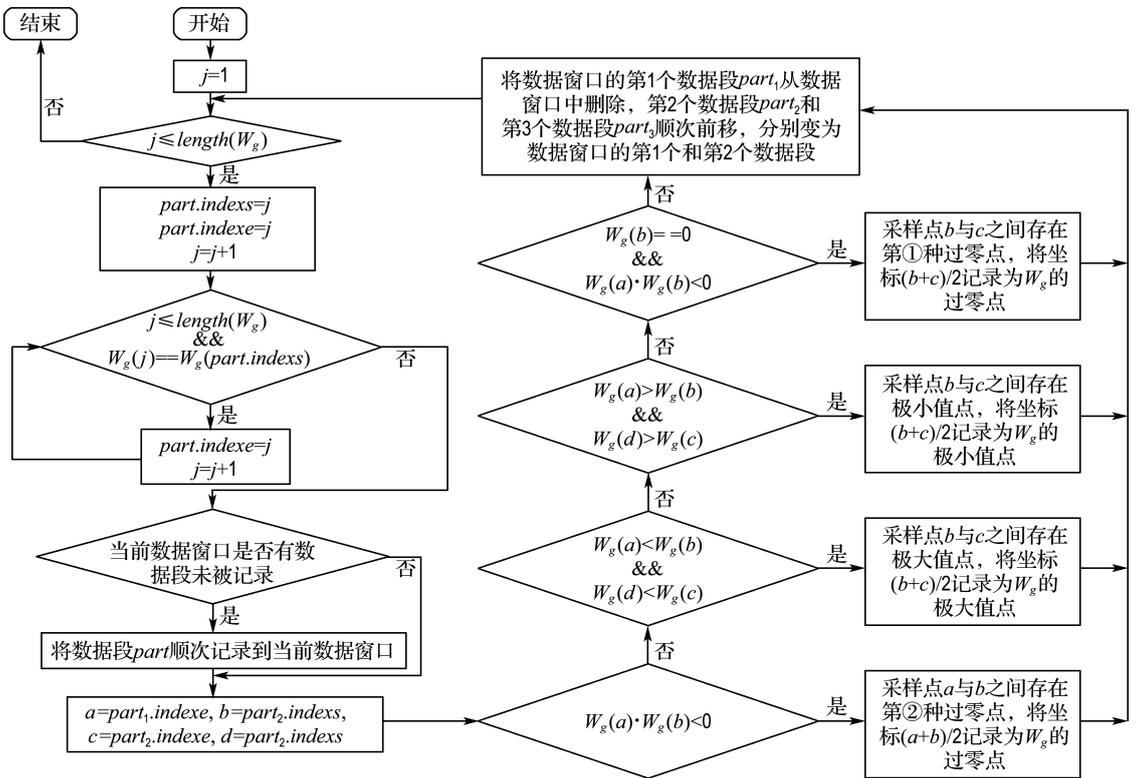


图 5 小波变换系数曲线特征点识别算法

Fig. 5 Wavelet transform coefficient curve feature points recognition algorithm

### 2.3 谱图峰特征点识别结果分析

为了验证本文所提基于小波变换的谱图峰特征点识别算法的识别结果, 采用式(3)所示的模拟谱图信号  $g(x)$  进行谱图峰特征点识别, 其由 6 个高斯峰叠加而成并且各个特征点的位置已知, 如图 2 所示, 添加随机高斯白噪声, 函数表达式如下:

$$g(x) = \frac{5.4}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-100)^2}{648}} + \frac{4.8}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-180)^2}{512}} +$$

$$\frac{5}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-400)^2}{800}} + \frac{8}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-220)^2}{512}} + \frac{4.8}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-260)^2}{512}} + \frac{0.48}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-500)^2}{512}} + N_G \quad (3)$$

其中  $N_G$  为高斯白噪声。

根据前文所述特征点识别步骤及相应识别算法, 首先对模拟谱图信号进行小波变换并识别其小波变换系数曲线特征点; 根据小波变换系数曲

线的特征点与原始谱图信号特征点之间的逻辑对应关系识别模拟谱图信号  $g(x)$  中对应特征点类型及其位置. 识别结果见表 1.

通过表 1 可以看出, 本文所提出的基于小波

变换的谱图峰特征点识别算法对于谱图信号包括噪声点在内的各个特征点识别准确, 平均误差率为 0.006 264%. 这对后续设立解析高斯峰的初始参数打下了坚实的基础.

表 1 谱图峰特征点识别结果

Tab. 1 Result of spectral peak feature point recognition

谱图峰实际参数		谱图峰解析参数	
特征点坐标	特征点类型	特征点坐标	特征点类型
1	峰起点/峰终点	2	峰起点/峰终点
82,165,208,380	峰左拐点	82,165,208,380	峰左拐点
100,220,400	峰顶点	100,220,400	峰顶点
118,232,275,420	峰右拐点	118,232,275,420	峰右拐点
142,322,463,5	峰谷点	142.5,322.5,464.0,5.5	峰谷点
188	前肩峰与主峰交接处拐点	188	前肩峰与主峰交接处拐点
252	后肩峰与主峰交接处拐点	252	后肩峰与主峰交接处拐点
500	噪声点	500	噪声点

### 3 基于连续 Hopfield 神经网络的谱图峰参数寻优

#### 3.1 谱图峰解析参数初始值设立算法

为了利用连续 Hopfield 神经网络<sup>[18]</sup>进行谱图峰解析参数迭代寻优, 必须给定谱图峰解析参数的初始值. 由于 Hopfield 神经网络提供了向初始值附近局部极小值点的收敛能力, 为保证尽可能将谱图峰解析参数迭代收敛到全局极小值点, 应该使给定的谱图峰解析参数的初始值尽可能分布在全局最优解附近.

对于独立的谱图峰或重叠峰中的主峰, 其峰高、峰位、峰宽参数可以由与之相关的峰左拐点和峰右拐点确定; 对于重叠峰中的肩峰, 其峰高、峰位、峰宽参数可以由与之相关的肩峰与主峰交接处拐点和峰拐点确定.

设独立谱图峰  $h(x) = Ae^{-\left(\frac{x-U}{S}\right)^2}$ , 峰左、右拐点坐标分别为  $x_1$ 、 $x_2$ . 根据峰左、右拐点的意义可知, 其坐标对应于谱图信号导数的极值点. 因此, 对独立谱图信号求其二阶导数有

$$h''(x) = -\frac{2A}{S^2} e^{-\left(\frac{x-U}{S}\right)^2} \left[ 1 - \frac{2}{S^2} (x-U)^2 \right] \quad (4)$$

令  $h''(x) = 0$  可得峰左、右拐点的坐标:

$$\begin{aligned} x_1 &= U - \frac{S}{\sqrt{2}} \\ x_2 &= U + \frac{S}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (5)$$

解方程可得峰位  $U$  与峰宽  $S$  的表达式:

$$U = \frac{x_1 + x_2}{2} \quad (6)$$

$$S = \sqrt{2} \left( \frac{x_2 - x_1}{2} \right)$$

又已知  $h(U) = A$ , 故

$$A = h \left( \frac{x_1 + x_2}{2} \right) \quad (7)$$

如此, 谱图峰的峰高、峰位、峰宽参数  $A$ 、 $U$ 、 $S$  便得以确定.

对于肩峰参数的设定亦采用上述规则. 对于前肩峰来说, 上述推导中  $x_1$  与  $x_2$  分别对应峰左拐点和前肩峰与主峰交接处拐点的坐标; 对于后肩峰来说, 上述推导中  $x_1$  与  $x_2$  分别对应后肩峰与主峰交接处拐点及其后相邻的峰右拐点的坐标.

根据以上论述, 识别到谱图所有特征点对应的采样点为  $F_j (j=1, 2, \dots, N)$ , 其中  $N$  为谱图特征点总数, 并且  $F_j < F_{j+1} (j=1, 2, \dots, N-1)$ . 谱图峰解析参数初始值设立算法如图 6 所示.

为了验证谱图峰解析参数初始值设立算法的结果, 采用式(3)所示的模拟谱图信号  $g(x)$  进行实验, 结果如图 7 所示. 图中红色曲线表示原始谱图信号, 蓝色曲线表示依据谱图峰解析参数初始值设立算法设立的初始峰参数对应的独立谱图信号, 绿色曲线表示初始解析得到的独立谱图峰叠加而成的拟合谱图信号.

对于各个谱图峰解析参数的初始值与各个谱图峰实际参数的对应见表 2.

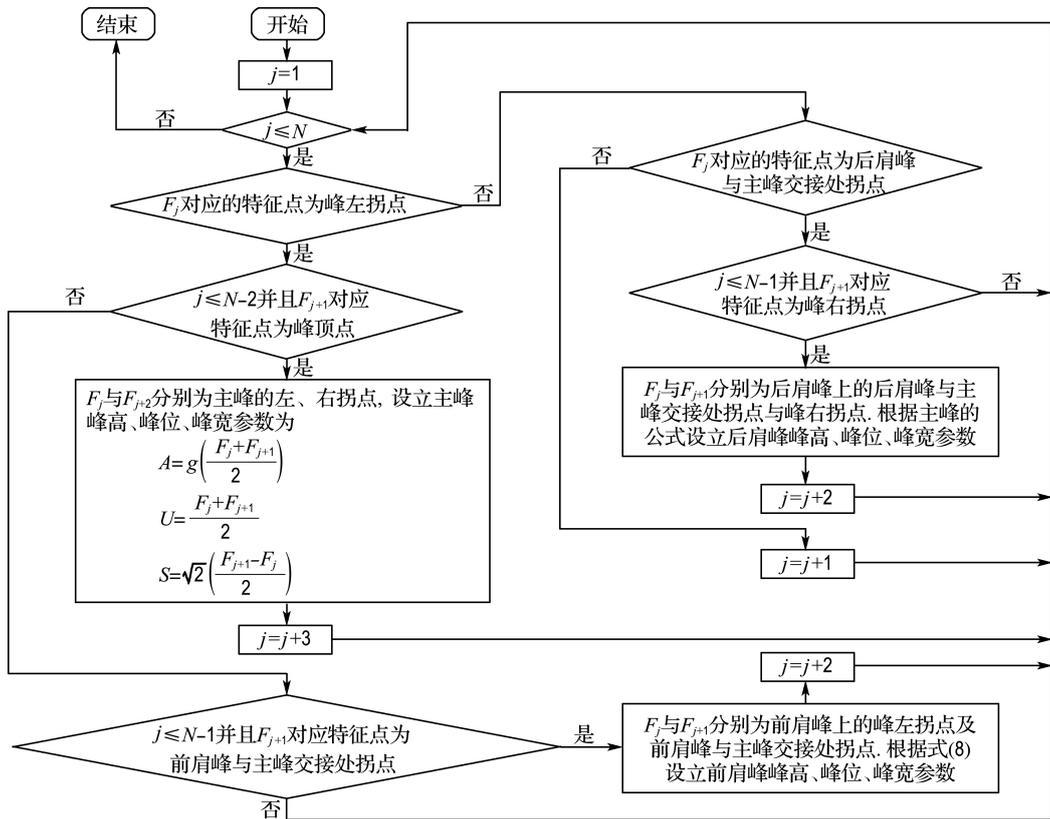


图 6 谱图峰解析参数初始值设立算法

Fig. 6 Initial value setting algorithm of spectral peak analytic parameters

由图 7 和表 2 可知,本文所提算法对于独立

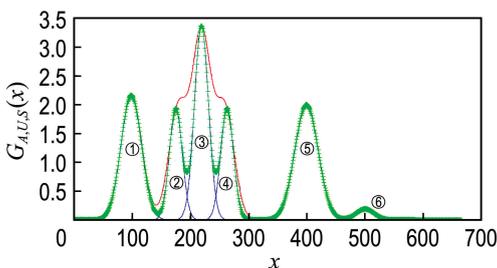


图 7 谱图峰参数初始解析结果图

Fig. 7 Initial analytical results diagram of spectral peak parameters

表 2 谱图峰参数初始解析结果与实际参数对比  
Tab. 2 Comparison of initial analytical results of spectral peak parameters and practical parameters

高斯峰	实际参数			初始解析参数		
	峰高	峰位	峰宽	峰高	峰位	峰宽
①	2.15	100	25.45	2.15	99.5	24.74
②	1.91	180	22.62	1.92	176.0	15.55
③	3.19	220	22.62	3.35	220.0	16.97
④	1.91	260	22.62	1.93	264.0	15.55
⑤	1.99	400	28.28	1.99	400.0	28.28
⑥	0.19	500	22.62	0.19	500.5	21.92

谱图峰解析来说十分准确,而对于重叠峰解析来说稍显不足. 最终初始解析参数的误差率为 7.520 000%. 虽与期望结果相差较大,但已接近最优解析参数,为后续使用连续 Hopfield 神经网络迭代寻优给出了必要的基础,可以有效地保证神经网络迭代寻优结果不会落入错误的局部极小值点,而尽可能接近全局极小值点或接近全局极小值点的局部极小值点.

### 3.2 连续 Hopfield 神经网络能量函数构造

一般情况下,对谱图信号进行拟合旨在寻找最小二乘法意义下的最优拟合函数. 因此,定义网络能量函数  $E_r$  为拟合谱图信号  $f(x)$  与模拟谱图信号  $g(x)$  的误差平方和:

$$E_r = \sum_{i=1}^N [f(i) - g(i)]^2 \quad (8)$$

模拟谱图信号  $g(x)$  由  $M$  个解析高斯峰叠加而成,即

$$g(x) = \sum_{j=1}^M A_j e^{-\left(\frac{x-U_j}{S_j}\right)^2}$$

因此式(8)可以写成

$$E_r = \sum_{i=1}^N \left[ f(i) - \sum_{j=1}^M A_j e^{-\left(\frac{i-U_j}{S_j}\right)^2} \right]^2 \quad (9)$$

令网络的输入为  $U_{1j}, U_{2j}, U_{3j}$ , 网络的输出为  $V_{1j}, V_{2j}, V_{3j}$ , 其中  $j=1, 2, \dots, M$ . 将网络的输出作为解析峰参数  $A_j, U_j, S_j$ , 因此网络能量函数  $E_r$  可写为

$$E_r = \sum_{i=1}^N \left[ f(i) - \sum_{j=1}^M V_{1j} e^{-\left(\frac{i-V_{2j}}{V_{3j}}\right)^2} \right]^2 \quad (10)$$

根据连续 Hopfield 神经网络能量函数理论<sup>[18]</sup>, 构造如下关系便可满足 Hopfield 神经网络自我演化的条件:

$$\begin{aligned} dU_{1j}/dt &= -\partial E_r / \partial V_{1j} & s(U_{1j}) &= V_{1j} \\ dU_{2j}/dt &= -\partial E_r / \partial V_{2j}, & \text{且 } s(U_{2j}) &= V_{2j} \\ dU_{3j}/dt &= -\partial E_r / \partial V_{3j} & s(U_{3j}) &= V_{3j} \end{aligned} \quad (11)$$

其中激励函数  $s(x) = [1 + \text{tansgn}(x)]/2$ .

### 3.3 谱图峰解析参数寻优算法

假设计算出谱图峰初始解析参数为  $A_j^0, U_j^0, S_j^0$ ,

$S_j^0$ , 利用连续 Hopfield 神经网络计算谱图峰最优解析参数的步骤如图 8 所示.

### 3.4 寻优结果分析

为了验证谱图峰解析参数寻优算法的结果, 采用式(3)所示的模拟谱图信号  $g(x)$  进行实验, 结果如图 9 所示. 图中红色曲线表示原始谱图信号, 蓝色曲线表示依据连续 Hopfield 神经网络寻优算法得出的最优峰参数对应的独立谱图信号, 绿色曲线表示最终解析得到的独立谱图峰叠加而成的拟合谱图信号.

在迭代寻优过程中, 网络能量函数随迭代寻优次数的递增而单调递减, 如图 10 所示.

对于各个谱图峰解析参数的初始值与各个谱图峰实际参数的对应见表 3.

由图 10 和表 3 可知, 基于连续 Hopfield 神经网络算法寻优计算出的谱图峰最优解析参数十分准确, 误差率为 0.026 625%, 与表 2 的初始解

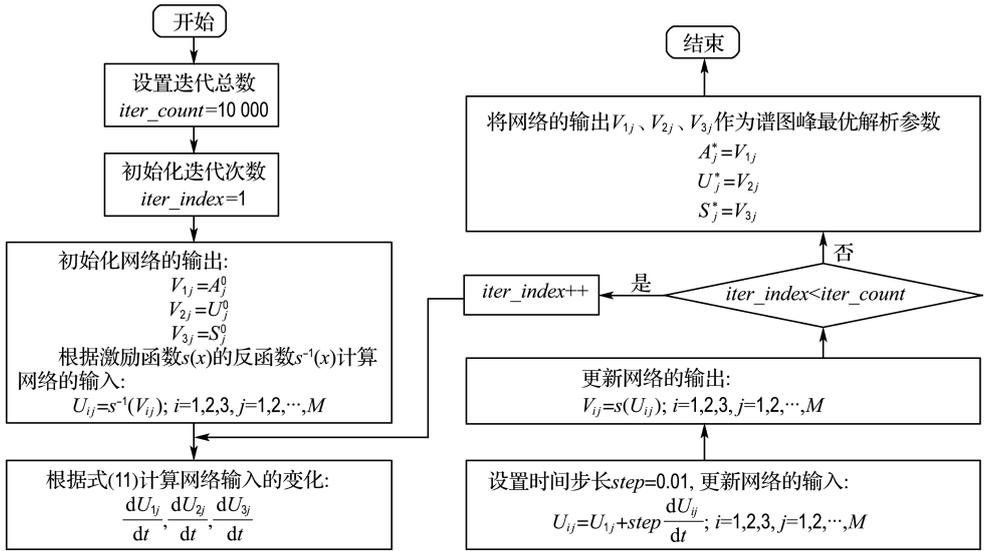


图 8 谱图峰解析参数寻优算法

Fig. 8 Spectral peak analytic parameters optimization algorithm

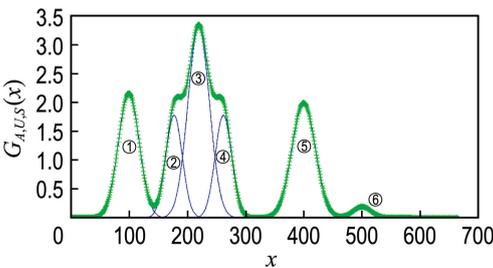


图 9 谱图峰解析参数最终寻优结果

Fig. 9 Final optimization results of spectral peak analytic parameters

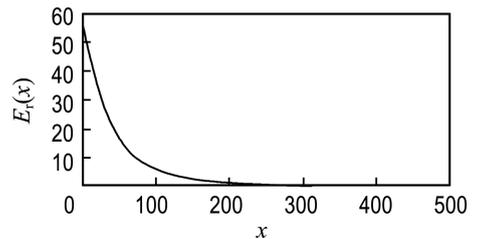


图 10 网络能量函数的变化过程

Fig. 10 The change process of network energy function

表3 谱图峰参数寻优结果

Tab.3 Optimization results of spectral peak parameters

高斯峰	实际参数			最终寻优参数		
	峰高	峰位	峰宽	峰高	峰位	峰宽
①	2.15	100	25.45	2.15	99.8	25.31
②	1.91	180	22.62	1.77	176.0	19.87
③	3.19	220	22.62	3.30	220.0	26.05
④	1.91	260	22.62	1.77	264.0	19.87
⑤	1.99	400	28.28	1.99	400.0	28.28
⑥	0.19	500	22.62	0.19	500.5	21.92

析结果相比,特别是对于原始谱图信号中的重叠峰部分,算法的优化能力表现突出.经过寻优之后的谱图信号基本做到了与原始谱图信号完全拟合,误差率也由7.520 000%降低至0.026 625%.

## 4 结 语

本文提出了基于小波变换和连续 Hopfield 神经网络的谱图峰解析算法,根据卷积型小波变换检测信号奇异点的原理,利用卷积型小波变换方法寻找信号的特征点,并根据特征点对信号做出初步解析;之后构造解析峰参数与解析误差之间的函数关系,并以之作为连续 Hopfield 神经网络的能量函数,根据该网络自我演化特性经过指定次数的迭代便可以得到误差函数的极小值点,得到谱图重叠峰的最终解析参数.实验结果表明,本文所提算法十分有效.

## 参 考 文 献:

- [1] 胡耀垓,张晓星,赵正予,等. 光谱重叠峰的曲线拟合解析策略与实现[J]. 重庆大学学报, 2012, **35**(5):76-81.  
HU Yaogai, ZHANG Xiaoxing, ZHAO Zhengyu, *et al.* Strategy and implementation of resolve overlapping spectra based on curve fitting [J]. **Journal of Chongqing University**, 2012, **35**(5):76-81. (in Chinese)
- [2] 张秀琦,刘 辉,郑建斌,等. 信号处理技术在重叠化学信号解析中的应用[J]. 化学进展, 2002, **14**(3):174-181.  
ZHANG Xiuqi, LIU Hui, ZHENG Jianbin, *et al.* The application of signal processing in resolving overlapping chemical bands [J]. **Progress in Chemistry**, 2002, **14**(3):174-181. (in Chinese)
- [3] HU Yaogai, LI Wei, HU Jiming. Resolving overlapped spectra with curve fitting [J].

**Spectrochimica Acta Part A — Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, 2005, **62**(1/3):16-21.

- [4] KOMATSUBARA M, NAMAZU T, NAGAI Y, *et al.* Raman spectrum curve fitting for estimating surface stress distribution in single-crystal silicon microstructure [J]. **Japanese Journal of Applied Physics**, 2009, **48**(4 PART 2):04C021.
- [5] 张晓星,姚 尧,唐 炬,等. 导电微粒局部放电下 SF<sub>6</sub> 分解组分色谱信号的曲线拟合分峰[J]. 电工技术学报, 2010, **25**(7):179-185.  
ZHANG Xiaoxing, YAO Yao, TANG Ju, *et al.* Separating overlapped chromatogram signals of SF<sub>6</sub> decomposed products under PD of conductive particles based on curve-fitting [J]. **Transactions of China Electrotechnical Society**, 2010, **25**(7):179-185. (in Chinese)
- [6] BRELSTAFF G, BICEGO M, CULEDDU N, *et al.* Bag of peaks: interpretation of NMR spectrometry [J]. **Bioinformatics**, 2009, **25**(2):258-264.
- [7] CHUNG K S, CHOE H S, LEE J I, *et al.* A computer program for the deconvolution of thermoluminescence glow curves [J]. **Radiation Protection Dosimetry**, 2005, **115**(1/4):343-349.
- [8] 何星星,贾 建,何秀丽,等. 用于重叠峰分辨的卡尔曼滤波法[J]. 传感器与微系统, 2006, **25**(12):26-31.  
HE Xingxing, JIA Jian, HE Xiuli, *et al.* A method for resolving overlapped spectra based on Kalman filter [J]. **Transducer and Microsystem Technologies**, 2006, **25**(12):26-31. (in Chinese)
- [9] 时有明,刘 刚,周湘萍,等. 基于曲线拟合的形态相似鹅膏菌的傅里叶变换红外光谱研究[J]. 分析化学, 2008, **36**(8):1105-1108.  
SHI Youming, LIU Gang, ZHOU Xiangping, *et al.* Studies on similar amanita mushrooms by Fourier transform infrared spectroscopy based on curve-fitting analysis [J]. **Chinese Journal of Analytical Chemistry**, 2008, **36**(8):1105-1108. (in Chinese)
- [10] ZEMBATY Z. Discussion on: Kalman filtering for neural prediction of response spectra from mining tremors [J]. **Computers and Structures**, 2009, **87**(13/14):948-949.
- [11] 罗立强,詹秀春. 应用遗传算法拟合偏振 X 射线荧光重叠谱[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, **28**(3):704-706.  
LUO Liqiang, ZHAN Xiuchun. Resolution of

- overlapped spectra in polarization X-ray fluorescence spectrometry by genetic algorithm [J]. **Spectroscopy and Spectral Analysis**, 2008, **28**(3): 704-706. (in Chinese)
- [12] ZHANG X Q, ZHENG J B, GAO H. Curve fitting using wavelet transform for resolving simulated overlapped spectra [J]. **Analytica Chimica Acta**, 2001, **443**(1):117-125.
- [13] NIE L, WU S G, WANG J W, *et al.* Continuous wavelet transform and its application to resolving and quantifying the overlapped voltammetric peaks [J]. **Analytica Chimica Acta**, 2001, **450**(1/2):185-192.
- [14] RAMAKRISHNAN S, SELVAN S. Image texture classification using wavelet based curve fitting and probabilistic neural network [J]. **International Journal of Imaging Systems and Technology**, 2007, **17**(4):266-275.
- [15] 王佩佩, 宋晓峰, 杨平. 利用基于小波特征提取的网络模型解析色谱重叠峰[J]. 计算机与应用化学, 2007, **24**(5):673-677.  
WANG Peipei, SONG Xiaofeng, YANG Ping. The application of network model based on wavelet feature extraction in resolution of overlapped chromatographic peaks [J]. **Computers and Applied Chemistry**, 2007, **24**(5):673-677. (in Chinese)
- [16] MALLAT S. 信号处理的小波导引[M]. 2版. 杨力华, 戴道清, 黄文良, 等译. 北京: 机械工业出版社, 2002.  
MALLAT S. **A Wavelet Tour of Signal Processing** [M]. 2nd ed. YANG Lihua, DAI Daoqing, HUANG Wenliang, *et al.*, trans. Beijing: China Machine Press, 2002. (in Chinese)
- [17] 熊智新, 胡上序, 路文初. 基于小波变换的重叠色谱峰检测方法研究[J]. 浙江大学学报(工学版), 2004, **38**(8):1072-1077.  
XIONG Zhixin, HU Shangxu, LU Wenchu. Novel method for detecting overlapping chromatographic peaks using wavelet transform [J]. **Journal of Zhejiang University (Engineering Science)**, 2004, **38**(8):1072-1077. (in Chinese)
- [18] 王小川, 史峰, 郁磊, 等. MATLAB 神经网络 43 个案例分析[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2013:92-96.  
WANG Xiaochuan, SHI Feng, YU Lei, *et al.* **43 Cases Analysis of MATLAB Neural Network** [M]. Beijing: Beihang University Press, 2013:92-96. (in Chinese)

## Analytical strategy of overlapping peaks based on wavelet transform and continuous Hopfield neural network

XU Xirong<sup>\*1</sup>, PAN Ziqi<sup>2</sup>, LI Xinghua<sup>3</sup>, LI Jinze<sup>1</sup>

( 1. School of Computer Science and Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China;

2. Department of Computer Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China;

3. Beijing Viready Science and Technology Ltd. . Beijing 110004, China )

**Abstract:** Aiming at the problem of chemical spectral overlapping peaks analysis, an analytical strategy for spectral overlapping peaks based on wavelet transform and continuous Hopfield neural network is proposed. Using Gauss function as a mathematical model of curve fitting, the overlapping peaks are decomposed into a series of superimposed combinations of Gauss peaks. Firstly, according to the principle of singularity analysis of convolution wavelet transform and using the convolution wavelet transform, the characteristic points of the signal are found and a preliminary analysis of the signal is made. Secondly, the function relation between analytic peak parameter and analytic error is constructed and used as the energy function of continuous Hopfield neural network. Finally, according to the self-evolution characteristic of network, the minimum point of the error function can be obtained by iterating the specified number, and the final analytic parameter of the spectral overlapping peaks is obtained. The analysis results of the overlapping peaks of the simulated spectrum indicate that the proposed algorithm is effective.

**Key words:** overlapping peaks analysis; curve fitting; wavelet transform; Hopfield neural network