arXiv:2303.16147v1 [physics.app-ph] 25 Mar 2023

采用动态回归补偿光纤布拉格光栅温度计温度响应中的滞后

Zeeshan Ahmed[a]

[a]美国国家标准与技术研究院，物理测量实验室，传感器科学部，*Bureau Drive 100*号，盖瑟斯堡，马里兰州 *20899*

摘要

近年来，人们对采用光子温度计作为电阻式传统温度计替代技术产生了浓厚兴趣，例如光纤布拉格光栅（FBG）和硅环形谐振器。尽管FBG温度计数十年来已可在市场上买到，但其计量性能仍未得到充分了解，部分原因是高温下复杂的行为特性带来了研究障碍。本研究系统地考察了14个传感器在233 K至393 K之间反复循环时温度响应的时间演化。数据探索与建模表明，模型选择时需要考虑序列相关。我们利用光纤布拉格光栅的耦合模理论指导特征选择，并评估了多种校准模型。结果表明，动态回归模型可将滞后导致的测量不确定度最多降低 $\approx 70\%$。

关键词： 光子测温、滞后补偿、ARIMA、耦合模理论、机器学习、光纤布拉格光栅*PACS*： 0000、1111*2000* 数学主题分类： 0000、1111

1. 引言

温度测量涵盖现代生活的几乎各个方面，从先进制造到健康筛查，构成了一个价值数十亿美元的产业；随着

温度传感器的广泛应用 [1]（以及其中的参考文献）预计该产业将继续增长。为满足用户群体的不同需求，人们开发了许多测温技术，包括电阻式器件，如热敏电阻和铂电阻温度计，以及其他传感方式，包括热电偶、二极管和荧光探针。金属和半导体器件的标准化制造，利用标称系数确保其在给定温度范围内具有可接受的不确定性（100 mK 至数开尔文）。若要实现更低的不确定性（< 100 mK），则需要对每个独立传感器进行耗时的校准 [2, 3, 4]。

温度传感器市场的规模强有力地推动着新技术的开发，以满足当前和未来的测量需求。现有的计量基础设施、用户对最低测量不确定度指标的预期，以及成本、尺寸、重量和功耗方面的性能要求，共同构成了新型温度测量技术广泛应用的巨大障碍 [5]。因此，任何新兴技术不仅要提供新颖的功能，还应向后兼容现有基础设施。光子温度计体积小、热导率优异，且与电信基础设施兼容，因此有望满足或超越用户需求[5]。近年来，光子测温领域的研究主要集中在探索新型材料（例如硅[1, 6, 7, 8], 氮化硅[9], 金刚石等[10]）、器件配置（布拉格波导[11],环形谐振器[1, 6], 光子晶体腔[12]等）和仪器，以拓展光子温度计在计量实验室之外的应用范围[6]。直到最近，人们对这些器件的温度响应进行系统考察（包括对测量不确定度的详细表征）的研究仍然不足。多位作者考察了高温下I型和II型光纤布拉格光栅（FBG）[1] 传感器的行为，发现传感器会出现显著滞后，其程度取决于温度和温度变化持续时间 [13, 14, 15]。这些结果与早期关于FBG制备工艺的研究大体一致；该研究指出，制备过程会在带隙中形成浅陷阱态，而这些陷阱态会在高于450 K的温度下被“擦除”[16, 17, 18, 19]。此外，

[1]光栅类型是指刻写光栅时所采用的光敏机制。I 型光栅依靠在光敏光纤中进行紫外刻写，而 II 型光栅则通过双光子吸收造成的局部“损伤”来刻写。

光纤纤芯与包层之间的热驱动离子迁移、玻璃化转变引起的光纤应力应变变化、 α-石英相的结晶、高温下的光栅擦除以及模式混合，都被认为可能导致测量不确定度[17, 18]。在低于450 K的温度下，热滞后的作用机制尚不明确[16, 20]。了解滞后的成因，并量化其对测量不确定度的时间依赖性影响，是开发FBG温度计的下一步。本研究采用物理信息方法，对FBG传感器温度响应中滞后所引起的变化进行建模。我们借助机器学习和时间序列预测方法，开发一种可在工业环境中以较低成本部署的实用模型。需要指出的是，阐明滞后过程的具体机制细节，例如传感器化学势或带隙的具体变化，不在本研究的范围之内。

2. 实验

在本研究中，我们采用了从五家不同供应商处购得的商用光纤布拉格光栅（FBG）。其中一组传感器涂覆了聚酰亚胺保护层，另一组传感器则涂覆了丙烯酸层。其余所有传感器均未涂覆聚合物涂层。这些光纤在使用前储存在湿度受控环境（相对湿度为20%）中。每根光纤均经过切割，使传感器一侧保留2 mm的多余光纤，另一侧则为0.5 m长，并终接于光纤耦合器。除非另有说明，随后将传感器穿过T型耦合器，引入玻璃管中。传感器底部的有源感测区域置于小型铜圆柱体的通孔（直径为200 μm）内。铜外壳提供了一种无应变机制，用于固定松弛的光纤端，同时提供较大的热容量，以确保传感器保持稳态平衡。随后，向玻璃管中持续通入自由流动的Ar气体，以防止温度低于283 K时发生水分凝结。

解调系统已在其他文献中详细介绍[13]。简而言之，将组装好的光纤布拉格光栅温度计置于圆柱形铝块中（直径 25 mm，长度 170 mm）。圆柱体上有两个长 150 mm 的盲孔（直径分别为 2.5 mm 和 6.5 mm），分别用于放置经校准的温度计或铂电阻温度计，以及组装好的 FBG传感器。经校准温度计在温

度范围 233 K 至 393 K 内的不确定度低于 10 mK。铝块置于干式井式校准器（Fluke 9170）内，校准器的温度由 LabVIEW 编写的软件控制，按预设间隔（通常为 5 K）在 233 K 至 393 K 之间循环变化。达到设定温度后，程序会留出一段平衡时间（除非另有说明，通常为 20 分钟）。平衡时间结束后，激光器（New Focus TLB-6700²）在布拉格反射峰附近的 ≤ 2 nm 窗口内进行扫描。激光输出端的一小部分激光功率立即被分出，用于波长监测（HighFinesse WS/7）；其余光经光环行器（ThorLabs CIR1550PM-FC）通过光子器件后，由大感光面积功率计（Newport，型号 1936-R）检测。除非另有说明，每个温度下均记录连续扫描结果，每个传感器在每次运行中至少进行三次热循环。记录的数据采用三次样条拟合，以提取峰中心、峰高和峰宽随温度变化的函数关系。最终数据集包含 22 个传感器的温度响应，其中包括三个四分之一相移光栅和两个再生光纤布拉格光栅。下文分析不包括再生光纤布拉格光栅的响应。另有六个传感器因热循环次数不足（成功采集到的循环次数不超过一次）而未纳入最终分析。记录的温度相关特征包括测量日期和时间、峰中心、峰高、半高全宽、面积、峰度、传感器/光栅类型、涂层、供应商（作为代表制造工艺变异性的复合变量）、时间、激光功率和实验类型（连续扫描次数达到或超过 100 次的实验称为“退火”实验，因为此类实验旨在检测温度阶跃后可能发生的缓慢弛豫过程）。数据探索使用标准 Python[21] 库（pandas[22], 、seaborn[23], 、Matplotlib[24]）进行；数据建模则使用 sklearn sci-kit [25]和 statmodels[26] 库。补充材料中简要讨论了探索性数据分析以及用于数据建模的方法。

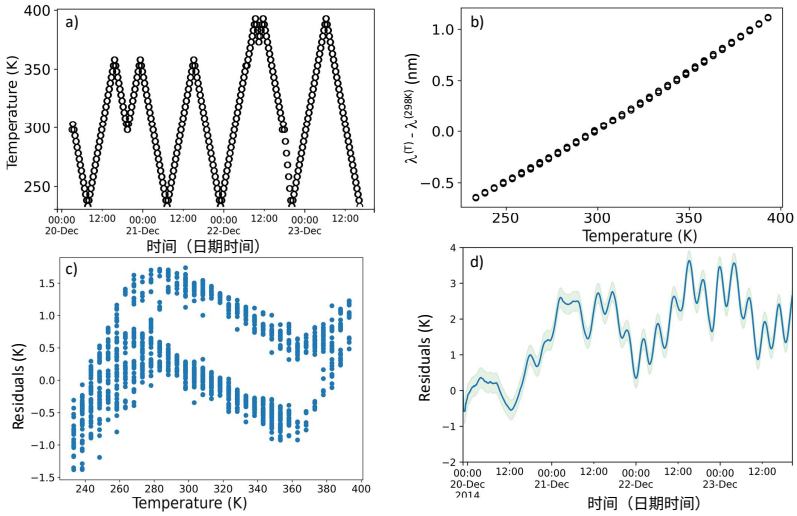


图1：a）传感器 S3 测得的温度循环曲线。b）测得的波长失谐与温度之间呈现出很强的准线性依赖关系，可用二次函数建模。c）二次拟合的残差因滞后而显著偏离正态分布。d）实线所示二次拟合残差的时间依赖性清晰地呈现出线性增长趋势。阴影区域表示在校准斜坡上训练的自回归积分滑动平均（ARIMA）模型的一步预测置信区间（详见讨论）。

3. 结果与讨论

我们探索了完整数据集，以寻找温度与传感器特征之间可能存在的相关性（详见补充材料）。探索性数据分析表明，除与温度高度相关的峰中心外，还有许多特征与温度存在一定程度的相关性，可用于构建温度推断模型。然而，将所有这些特征结合使用并不明智。为减少候选特征的数量，我们注意到，光纤布拉格光栅（FBG）（以及一般的光子温度计）的温度响应依赖于热光系数，将温度变化转换为频率变化[5] （以及其中的参考文献）。因此，我们采用光纤布拉格光栅的耦合模型理论处理方法 [27, 17, 20] ，将特征选择范围缩小到仅依赖于光栅折射率的特征。

光栅的折射率可写为[17]:

$$n = n_{\text{eff}}^{o} + \Delta n_{\text{eff}}^{\text{mean}} + \Delta n_{\text{eff}}^{\text{mod}} cos(\frac{2\pi z}{\Lambda}) \tag{1}$$

其中， n_{eff}^{o} 是未受扰光纤的有效折射率， $\Delta n_{\text{eff}}^{\text{mean}}$和 $\Delta n_{\text{eff}}^{\text{mod}}$分别是有效折射率的“直流”（周期平均）分量和“交流”（在一个周期内呈正弦变化）分量 [17, 27]。交流分量可通过考察最大反射率（$\Delta n_{\text{eff}}^{\text{mod}} = \lambda_B \tanh^{-1}(\sqrt{(R_{\max})}\, \pi l$ ）进行评估；或者，对于反射率似乎不是 $\Delta n_{\text{eff}}^{\text{mod}}$的敏感测量指标的高反射率光栅，也可以使用光栅光谱的半峰全宽（FWHM）。已知光栅响应的半峰全宽会随折射率调制的变化呈线性变化。光栅折射率变化的直流分量由 $\Delta n_{\text{eff}}^{\text{mean}} = \frac{\Delta \lambda_B}{2\Lambda}$给出，并可通过跟踪光栅中心波长偏离设计波长的失谐量进行测量[17, 27, 16]。

因此，我们仅采用由光谱特征（峰中心、最大反射率、半峰全宽和峰度，峰度用于代表折射率沿光栅长度方向的系统性变化）构成的内生变量核心组来构建潜在模型。作为基线模型，我们使用 $(\lambda_B - \lambda_B^{(298\ \text{K})})$ 与温度之间的简单线性回归，并将温度表示为二次函数

[2]任何提及商业产品之处仅供参考；并不意味着美国国家标准与技术研究院推荐或认可。

（表1）。[3] 我们将第一个上升斜坡指定为校准运行，并将其视为训练数据，用于训练回归模型。其余数据作为“样本外”验证集，用于评估训练后的模型对传感器响应的泛化能力，同时表征并量化热诱导滞回的影响。基线模型显示，平均训练误差为513 mK，样本外误差为878 mK。在此处考察的14个传感器中，有10个表现出显著的热滞后或老化效应（训练误差$=$ 461 mK，样本外误差 $=1040$mK）。对于这些传感器，滞后似乎具有叠加性，从而产生偏移误差，使截距发生偏移，表明传感器暴露于升高的温度后，其整体 n_{eff}正在增加（图1）。

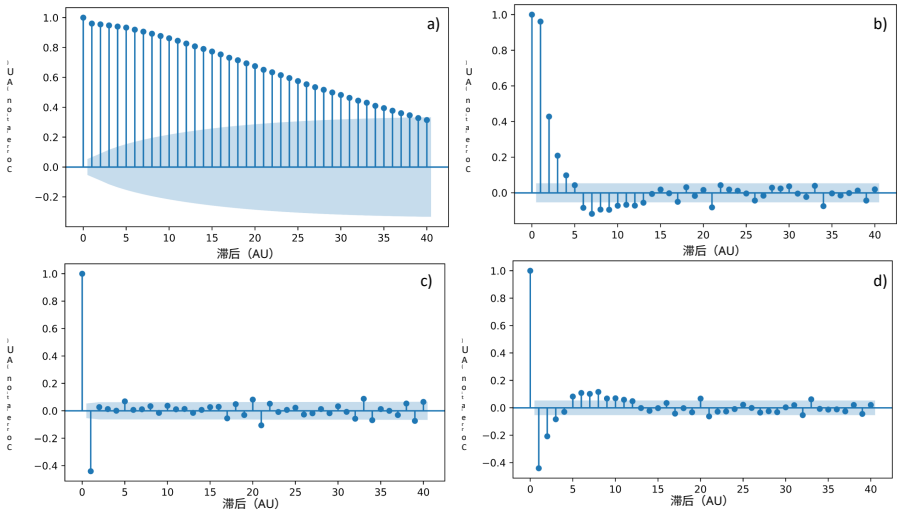


图2：将 S3 传感器残差的自相关函数（ACF）绘制为计算所得时间滞后的函数（a），并展示了一阶差分残差（c）。右侧面板相应展示了 S3 传感器残差（b）及一阶差分残差（d）的偏自相关函数（PACF）图。阴影区域表示自相关系数的不确定性区间。这些图表明，S3 中的滞后可建模为 (1,1, [1,2,4,5]) 过程。有关本研究所考察的每个传感器的 ACF 和 PACF 图，请参见补充材料。

为了提升基线模型的性能，我们需要考虑传感器经历热循环时 n_{eff} 的变化。方程 1 提

[3]我们使用失谐量作为自变量，因为与峰中心相比，它与温度的相关性更强。详情请参见补充材料

供了一个框架，用于将 n_{eff} 的变化分解为光栅的交流或直流分量所引起的变化。如上所述，老化效应会导致热循环开始时的光栅波长发生红移，这一过程表现为直流折射率变化。我们采用动态回归[28]模型来模拟基线光栅波长的红移：利用训练模型的残差训练自回归积分滑动平均（ARIMA）[28] 模型，并将其输出加到训练/校准模型的输出中。我们检查了残差的自相关图和偏自相关图，以确定 ARIMA 模型所需参数（p，d，q）[4]的取值范围，从而描述残差的时间相关行为（图 2）。如图 1d 所示，残差随时间的演变是一个非平稳过程，表现为增长趋势。自相关函数图（图 2a）也显示了这一趋势：随着滞后阶数增加，自相关系数的正值缓慢下降。相比之下，一阶差分残差时间序列的自相关函数图以第一时间滞后为主，表明通过一阶差分可将该时间序列转换为平稳过程。此外，我们注意到，较长时间滞后或其倍数处缺乏显著峰值，表明滞后的时间演变不存在周期性行为。

利用差分残差的自相关函数图和偏自相关函数图，通过选择相关系数显著大于计算所得不确定性的最高时间滞后，确定自回归项和移动平均项中的主导项。随后，通过最大化拟合的对数似然对这些参数进行了进一步优化。总体而言，我们对参数空间的探索表明，包含线性趋势（$d = 1$）、短期移动平均项（$q < 10$）和自回归项（$p < 2$）的简单ARIMA模型足以捕捉所有传感器残差中的长期变化。也就是说，光纤布拉格光栅中的长期漂移可描述为由三个部分组成：缓慢的线性漂移、短期记忆（< 300s）和白噪声成分。在利用ARIMA项的阶数推断导致所观测滞后的物理过程时，应保持谨慎。鉴于布拉格波长的变化源于 n_{eff}的变化，我们将线性趋势解释为表明 n_{eff}

[4] p，d，q分别表示自回归、差分和移动平均过程的阶数。因此，(1,1,1)过程可描述为一阶自回归、具有简单线性趋势，并采用一阶移动平均。一阶差分，即线性趋势校正，对于使时间序列保持平稳是必要的

传感器在热循环进行过程中呈现缓慢的线性增加。短期记忆效应的起因很难确定。该项可能捕捉了短期过程，例如由光纤中的热弛豫或应变弛豫引起的模态噪声，或恒温槽温度控制回路中的短期相关性。

如表1所示，一步预测的平均不确定性仅为265 mK，而在样本外数据集上使用动态预测[5] 时，不确定性为623 mK；与基线模型相比，两者分别降低了69%和41%。值得注意的是，尽管模型在短期（单步预测）表现良好，但预测的不确定性会随时域延长而增大。因此，这些模型最适用于有限时域。对于需要无限时域的计量学问题，纳入器件物理、化学和热历史的状态空间模型或长短期记忆（LSTM）模型[29] 可能更为合适。

我们评估了滞后是否可能由交流分量的变化所致，即观测到的滞后是否部分源于光栅对比度擦除。如上所述，折射率交流分量的变化会按比例影响共振光谱的振幅和宽度。因此，为将交流折射率变化纳入模型，我们在采用L2正则化（$\alpha = 0.000001$）的多元回归模型中加入了额外特征（时间归一化振幅、分数半峰全宽和峰度）[6]；此外，还采用了使用一个或两个隐藏层并使用 sigmoid 激活函数的多层感知机（MLP）（分别为[100x1] 和 [5x1],[3x1] , ），以及一种类似隐藏状态的模型。该模型对振幅、分数宽度和峰度进行变换和回归，以预测峰中心失谐（$\lambda_B - \lambda_B^{(298K)}$），随后将其与测得的峰中心失谐一并作为特征，输入多元回归模型。如表2所示，所得模型未能优于基线模型，且整体表现通常更差。这些模型无法准确补偿滞后，说明尽管峰中心以外的光谱特征会随时间变化，但这些变化与温度或观测到的峰中心均不呈线性相关。光纤布拉格光栅中的滞后可以得到充分建模

[5]有关一步预测与动态预测之间差异的讨论，请参阅补充材料[6]峰度是沿光纤轴方向交流折射率发生非均匀变化的替代变量，即用于反映光栅折射率对比度的退相干。时间归一化振幅和分数宽度分别替代振幅和半峰全宽，因为它们与峰中心的相关性更强。

作为仅直流过程。

表1：滞后补偿动态回归模型的结果

传感器	滞回	训练误差	Out of 样本误差	One step 误差	动态预测误差	未校正误差 over 动态范围
S1	Yes	0.1369	2.106	0.32	0.79	1.9
S2	Yes	0.352	1.553	0.09	0.78	1.45
S3	Yes	0.4683	1.06	0.15	0.42	0.69
S4	Yes	0.774	0.88	0.34	0.48	0.81
S5	Yes	0.4576	0.761	0.17	0.42	0.598
S6	Yes	0.2485	0.749	0.25	0.6	0.67
S7	Yes	0.5381	0.808	0.34	0.55	2.35
S8	Yes	0.8184	1.269	0.63	1.05	1.08
S9	Yes	0.4565	0.81	0.15	0.73	0.54
S10	Yes	0.3622	0.4	0.21	0.41	0.41
S11	No	0.7529	0.6985	0.29	0.47	0.73
S12	No	0.5255	0.5745	0.16	0.6	0.66
S13 [a]	No	0.445	0.447	0.29	0.48	0.45
S13 [b]	No	0.424	0.431	0.28	0.57	0.43
S14	No	0.9336	0.6275	0.25	0.85	0.83
平均值 [c]		0.461	1.04	0.265	0.623	1.05
平均值 [d]		0.513	0.878	0.261	0.613	0.9

[a]输入功率小于 10 微瓦[b]输入功率 2.5 毫瓦[c]仅磁滞传感器的平均值[d]所有传感器的平均值

表2：将扩展的光谱特征集作为校准模型的输入来建模滞后

模型	训练误差（K）	Out of 样本误差（K）
基线模型[a]	0.513	0.878
隐状态式[b]	0.627	6.66
Lasso回归[c]	1.13	6.31
MLP[d]	10.42	22.98
多层感知机[e]	7.88	21.14

[a]峰中心失谐是唯一输入[b]分数宽度、峰度和振幅用于预测波长失谐。该预测结果与测得的波长失谐一起作为回归模型的输入，以推断温度

[c]输入特征包括波长失谐、峰度、分数宽度和面积，alpha =0.000001；[d]隐藏层 [5*3], alpha = 0.0001[e]隐藏层 [100], alpha = 0.0001

4. 总结

光子温度计中的长期滞后或老化效应 [13, 14,15, 12] 是采用光子测温替代电阻温度计所面临的重大测量科学挑战。本研究表明，在器件物理的指导下，我们可以部署经过验证的统计技术来建立老化效应模型，并成功将测量不确定度降低高达70%。我们的工作旨在推动开发基于第一性原理的热光系数模型，使其能够与ARIMA模型共同部署于类似卡尔曼滤波器的预测校正算法中，从而降低测量不确定度，并获得对驱动传感器特性长期和短期漂移过程的机理性认识。

5. 致谢

作者感谢 Dan Samarov、Gilad Kusne、Tobias Herman 和 Tyrus Berry 提供的有益讨论。本研究由芯片上的NIST（NOAC）计划资助。

6. 利益披露

作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1] H. Xu, M. Hafezi, J. Fan, J.M.Taylor, G. F. Strouse, Z. Ahmed, 《利用环形谐振器结构实现超高灵敏度芯片光子温度传感器》, 《Optics Express》22 (3) (2014) 3098–3104。 doi:10.1364/OE.22.003098。网址 http://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-22-3-3098[2] H. Preston-Thomas, 《1990年国际温标（ITS-90）》, 《Metrologia》27 (1) (1990) 3–10。[3] 温度咨询委员会在国际计量委员会指导下发布的国际单位制中开尔文定义的实用实现, https://www.bipm.org/en/publications/mises-en-pratique (2019)。

[4] B. W. Mangum, G. F. Strouse, W. F. Guthrie, R. Pello, M. Stock, E. Re- naot, Y. Hermier, G. Bonnier, P. Marcarino, K. S. Gam, K. H. Kang, Y.-G. Kim, J. V. Nicholas, D. R. White, T. D. Dransfield, Y. Duan, Y. Qu, J. Connolly, R. L. Rusby, J. Gray, G. J. Sutton, D. I. Head, K. D. Hill, A. Steele, K. Nara, E. Tegeler, U. Noatsch, D. Heyer, B. Fell- muth, B. Thiele-Krivoj, S. Duris, A. I. Pokhodun, N. P. Moiseeva, A. G. Ivanova, M. J. de Groot, J. F. Dubbeldam, 《83.8058 K 至 933.473 K 范围内 ITS-90 实现比对总结：CCT关键比对 CCT-K3》, 《Metrologia》39 (2) (2002) 179–205。doi:10.1088/0026-1394/39/2/7。网址 https://doi.org/10.1088/0026-1394/39/2/7[5]Z. Ahmed, 《量子技术在重塑温度计量学未来中的作用》, 《测量：传感器》18 (2021) 100308。doi:https://doi.org/10.1016/j.measen.2021.100308。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2665917421002713[6] R. Eisermann, S. Krenek, G. Winzer, S. Rudtsch, 《利用硅环形谐振器和基于可调谐激光器的光谱技术进行光子接触式测温》, 《tm - Technisches Messen》88 (10) (2021) 640–654。doi:doi:10.1515/teme-2021-0054。网址 https://doi.org/10.1515/teme-2021-0054[7] S. Janz, R. Cheriton, D.-X. Xu, A. Densmore, S. Dedyulin, A. Todd, J. H. Schmid, P. Cheben, M. Vachon, M. K. Dezfouli, D. Melati, 《通过光谱模式识别实现光子温度与波长计量》, 《Optics Express》28 (12) (2020) 17409–17423。doi:10.1364/OE.394642。网址 http://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-28-12-17409[8] C. Zhang, G. Kang, Y. Xiong, T. Xu, L. Gu, X. Gan, Y. Pan, J. Qu, 《基于波导-微环法诺共振的宽温区亚毫开尔文分辨率光子温度计》, 《Optics Express》28 (9) (2020) 12599–12608。 doi:10.1364/OE.390966。网址 http://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-28-9-12599

[9]C. Zhang、G.-G. Kang、J. Wang、S. Wan、C.-H. Dong、Y.-J. Pan、J.-F. Qu，采用氮化硅微环谐振器并具有毫开尔文自热效应的光子温度计，《Measurement》188（2022）110494。doi:https://doi.org/10.1016/j.measurement.2021.110494。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263224121013774[10] J. A. Smith、P. Hill、C. Klitis、M. Sorel、P. A. Postigo、L. Weituschat、M. D. Dawson、M. J. Strain，借助转印集成实现的高精度金刚石/GaN光子测温，载于：《OSA先进光子学大会2021》，Optica Publishing Group，2021年，第IM1A.4页。doi:10.1364/IPRSN.2021.IM1A.4。URL http://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=IPRSN-2021-IM1A.4[11] N. N. Klimov、S. Mittal、M. Berger、Z. Ahmed，片上硅波导布拉格光栅光子温度传感器，《Opt. Lett.》40（17）（2015）3934–3936。doi:10.1364/OL.40.003934。URL http://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?URI=ol-40-17-3934[12] N. Klimov、T. Purdy、Z. Ahmed，以光子测温取代电阻测温，《传感器与执行器A：物理》269（2018）308–312。doi:https://doi.org/10.1016/j.sna.2017.11.055 19315775.2015.11721744。[14] D. Grobnic、C. Hnatovsky、S. Dedyulin、R. B. Walker、H. Ding、S. J. Mihailov，长期高温退火中的光纤布拉格光栅波长漂移，《传感器》21（4）（2021）。doi:10.3390/s21041454。URL https://www.mdpi.com/1424-8220/21/4/1454[15]R. Eisermann、S. Krenek、T. Habisreuther、P. Ederer、S. Simonsen、H. Mathisen、T. Elsmann、F. Edler、D. Schmid、A. Lorenz、A. A. F. Olsen，利用热辐射和经校准的蓝宝石光纤布拉格光栅对用于过程监测的高温混合传感器进行计量学表征

，用于恶劣环境中的过程监测，《传感器》22（3）（2022）。doi:10.3390/s22031034。URL https://www.mdpi.com/1424-8220/22/3/1034[16] T. Erdogan、V. Mizrahi、P. J. Lemaire、D. Monroe，紫外线诱导光纤布拉格光栅的衰减，《应用物理学杂志》76（1）（1994）73–80。arXiv:https://doi.org/10.1063/1.357062，doi:10.1063/1.357062。URL https://doi.org/10.1063/1.357062[17]H. Patrick、S. L. Gilbert、A. Lidgard、M. D. Gallagher，载氢光纤中布拉格光栅的退火，《应用物理学杂志》78（5）（1995）2940–2945。arXiv:https://doi.org/10.1063/1.360753，doi:10.1063/1.360753。URL https://doi.org/10.1063/1.360753[18] D. P. Hawn，高温和核辐射对石英光纤光传输的影响，博士论文，俄亥俄州立大学（2012）。[19] A. Munko、S. Varzhel'、S. Arkhipov、A. Gribaev、K. Konnov、M. Belikin，对在具有椭圆应力包层的氢化双折射光纤中形成的布拉格光栅进行热退火的研究，《物理学杂志：会议系列》735（2016）012015。doi:10.1088/1742-6596/735/1/012015。URL https://doi.org/10.1088/1742-6596/735/1/012015[20] S. Pal、J. Mandal、T. Sun、K. T. V. Grattan，I型硼锗共掺光纤布拉格光栅的热衰减分析及运行寿命预测，《应用光学》42（12）（2003）2188–2197。doi:10.1364/AO.42.002188。URL http://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-42-12-2188[21] G. Van Rossum、F. L. Drake，《Python 3参考手册》，CreateSpace，斯科茨谷，加利福尼亚州，2009年。[22] Wes McKinney，Python统计计算的数据结构，载于：St´efan van der Walt、Jarrod Millman（编），《.....的论文集》

第九届 Python 科学会议，2010 年，第 56–61 页。 doi:10.25080/Majora-92bf1922-00a。[23] M. L. Waskom，seaborn：统计数据可视化，《开放源代码软件期刊》6 (60) (2021) 3021。 doi:10.21105/joss.03021。网址 https://doi.org/10.21105/joss.03021[24] J. D. Hunter，Matplotlib：二维图形环境，《科学与工程计算》9 (3) (2007) 90–95。 doi:10.1109/MCSE.2007.55。[25]F. Pedregosa、G. Varoquaux、A. Gramfort、V. Michel、B. Thirion、O. Grisel、M. Blondel、P. Prettenhofer、R. Weiss、V. Dubourg、J. Vander-plas、A. Passos、D. Cournapeau、M. Brucher、M. Perrot、E. Duchesnay，Scikit-learn：Python 中的机器学习，《机器学习研究期刊》12 (2011) 2825–2830。[26] S. Seabold、J. Perktold，statsmodels：使用 Python 进行计量经济学和统计建模，载于：第九届 Python 科学会议，2010 年，第 92–96 页。[27] T. Erdogan，光纤光栅光谱，《光波技术期刊》15 (8) (1997) 1277–1294。 doi:10.1109/50.618322。[28] R. J. Hyndman、G. Athanasopoulos，《预测：原理与实践》，第 2 版，OTexts，澳大利亚墨尔本，2018 年。[29] S. Hochreiter、J. Schmidhuber，长短期记忆，《神经计算》9 (8) (1997) 1735–1780。arXiv:https://direct.mit.edu/neco/article-pdf/9/8/1735/813796/neco.1997.9.8.1735.pdf，doi:10.1162/neco.1997.9.8.1735。网址 https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735

arXiv:2303.16147v1 [physics.app-ph] 25 Mar 2023

1. 方法

1.1. 数据探索

数据探索过程首先检查了所有连续变量的 Pearson 系数热图（图 SP1）和成对关系图（图 SP 2），涵盖整个数据集，随后又分别解析了每个非分类变量。此外，还分别考察了每个特征的温度和时间依赖性，以确定其随时间和温度历史变化的行为。数据探索表明，相对于温度，以下特征呈现正相关：峰中心、峰度、（分数）峰宽度和光栅类型。温度与以下特征之间未观察到显著相关性：时间、振幅、激光功率和条纹可见度。此外，我们观察到峰失谐（通过从所有后续测量中减去测量开始时 293.15 K 下的峰中心值而生成的特征）与温度的相关性（0.91）强于峰中心（0.77）。

在热循环过程中，对每个传感器各项特征的时间演化进行了考察。热时间历史以及峰中心和相对峰宽的相应变化如图 SP 3 和 SP 4 所示，分别对应传感器 S6 7 和 S。我们注意到，这两个示例传感器的时间历程显示，变化幅度存在显著差异，这表明滞回演化对传感器的历史状态敏感，而这种状态可能受到制造条件、热退火及其他变量的影响。此外，如图 SP 3 和 SP 4 所示，光谱衍生特征的变化缓慢且具有累积性，只有经过较长时间才会超过当前测量噪声水平。如图 SP 5 所示，传感器 S5 和 S7 的艾伦偏差（ADEV）图表表明，在任一给定温度下，测量不确定性主要由 1/f噪声主导，其证据是方差随积分时间线性下降。根据这些结果，我们得出结论：由滞后引起的峰中心漂移，要么发生在本研究所用的观测时间范围之外[1]，要么这些变化对测量方差的影响小于各温度测量所用观测时间内其他过程的影响。基于这些结果及前述分析，我们得出结论：

[1]请注意，恒温槽达到设定温度后，我们允许最多 20 分钟的平衡时间，以消除传感器中的任何热梯度。在此死区时间内，或在远长于此处所用的数分钟至数小时观测时间的时间尺度上，可能会发生滞后变化

既有文献[1, 2] ，导致滞后的过程可能类似于聚合物在崎岖且布满浅陷阱的能量景观上缓慢随机扩散。热退火过程中，光栅似乎发生了退相干——峰中心和峰宽的变化支持这一判断——这表明退火过程中，一些浅陷阱消失了，其占据粒子转移到了更深的陷阱中。随着材料的有效带隙发生红移，光纤的折射率上升，从而导致温度校准产生偏移误差。因此，在后续分析中，我们将滞后的影响视为温度升降过程的累积效应。

1.2. 建模方法

滞后引入的序列相关性或记忆效应（见上文讨论）给模型评估带来了重大挑战。在任何旨在开发可部署且具有良好泛化能力的模型训练工作中，适当平衡偏差-方差权衡[3]非常重要。在传感器文献中，通常重点关注训练误差，例如，报告对整个数据集拟合函数的平均平方误差。仅优化训练误差可能导致数据过拟合，从而创建一个在训练数据上拟合时能够减少残差、但在引入新数据后表现不佳的模型。为平衡模型过度学习的倾向，数据被划分为训练集和验证集（有时也称为测试集）。模型首先在训练集上进行训练，随后在验证集上进行评估。目标是选择一个能够同时最小化训练和验证得分的模型，即一个具有良好泛化能力、能够反映数据中的重要趋势而不会学习噪声的模型。

然而，数据中存在序列相关性，使得简单的训练-测试集划分策略（例如随机选取并留出30%的数据点作为测试集）并不适用。如表1所示，对于914个传感器中的个，训练-测试集划分得到的样本外误差（验证误差）要么与训练误差相近，要么小于训练误差，这表明噪声并未在两个数据集之间得到适当平衡。对于K折交叉验证（CV）也可以观察到类似结果，其中数据集被随机分成k个集合。K折CV方法的优点是能够最大限度地降低[3]离群值对拟合的影响。序列相关性问题的一种常见解决方案是实施时间序列交叉验证（TSCV）[4, 3]。然而，这种方法难以使用计量学中常见的术语来解释模型，例如

滞后。因此，我们通过以下方式实施TSCV的一种变体：将数据分为第一个上升阶梯（训练集）和后续的数据（测试集）。这种逐阶梯划分数据的方法是合适的，因为如上所示，驱动滞后的变化所产生的影响仅在较长时间段内才具有显著性。我们将数据集分为两个较长的时间段，从而能够隔离长期漂移引入的不确定性。训练集上的模型评估采用K折交叉验证（$k=5$）[3]。与既有文献一致[5]，我们发现二次函数的表现远优于一阶模型，使均方误差降低了 $\approx 75\%$。我们注意到，三次函数相较于二次函数仅有小幅改进（13%）。然而，就本研究而言，我们选择了更简单的二次函数来建模温度-波长（峰中心）关系，并与既有文献保持一致[6, 5]。关于不同模型的详细评估，即权衡模型复杂度（自由参数的数量）与其验证误差之间的关系，将在一篇即将发表的论文中讨论。

表1：一阶回归模型训练-测试划分评估中的训练误差和样本外（验证）误差

传感器	训练误差（K）	Out of 样本误差（K）
S1	2.107	1.984
S2	1.78	1.67
S3	1.930	1.851
S4	2.314	2.291
S5	0.357	0.341
S6	0.994	1.023
S7	2.116	2.099
S8	2.196	2.057
S9	2.301	2.275
S10	2.418	2.472
S11	2.330	2.344
S12	1.947	1.937
S13[a]	2.138	2.161
S13[b]	2.322	2.571
S14	2.228	2.279

[a] $1\mu W$ 输入功率[b] 2.5 毫瓦 输入功率

1.2.1. 动态回归 [87]如手稿中所述，我们采用 ARIMA模型，通过动态回归方案补偿传感器因滞后而产生的折射率 [88]长期漂移。正如手稿中所述，每个传感器的（p， d， q）[90]项通过检查残差和一阶差分残差的自相关函数及偏自相关函数图来确定 [4]。下文展示了随时间变化的温度变化、残差以及每个传感器的自相关函数和偏自相关函数图。[92]我们注意到，通过计算 ARIMA模型的一步预测和动态预测表现来评估这些模型。[94]一步预测是指动态回归模型的输出，其中验证集按顺序每次引入一个时间步，并利用最后一个时间步生成预测；也就是说，预测仅限于较短的时间范围。[98]对于动态预测，则一次性评估整个验证集；也就是说，ARIMA模型的输入（残差）仅限于校准集/测试集。[100]一步预测的结果代表这些模型所能达到的最佳性能。另一方面，动态预测结果则衡量这些模型的长期（数周）性能。[104]

参考文献 [105]

[1] T. Erdogan、V. Mizrahi、P. J. Lemaire、D. Monroe，紫外线诱导的[106]光纤布拉格光栅的衰减，《应用物理学杂志》76 (1) (1994) [107] [108] 73 80 arXiv:https://doi.org/10.1063/1.357062 doi:10.1063/1. –. ,357062.[109] 网址 [110] https://doi.org/10.1063/1.357062 [2] H. Patrick、S. L. Gilbert、A. Lidgard、M. D. Gallagher，载氢[111]光纤中布拉格光栅的退火，《应用物理学杂志》[112]78 (5) (1995) 2940–2945。 arXiv:https://doi.org/10.1063/1.360753，[113]doi:10.1063/1.360753。[114] 网址 [115] https://doi.org/10.1063/1.360753 [3] G. James、D. Witten、T. Hastie、R. Tibshirani，《统计学习导论：应用 R 语言》，[116]Springer，纽约，美国，2013。[117]doi:10.1007/978-1-4614-7138-7。[118][4] R. J. Hyndman、G. Athanasopoulos，《预测：原理与实践》，[119]第 2 版，OTexts，墨尔本，澳大利亚，2018。[120]

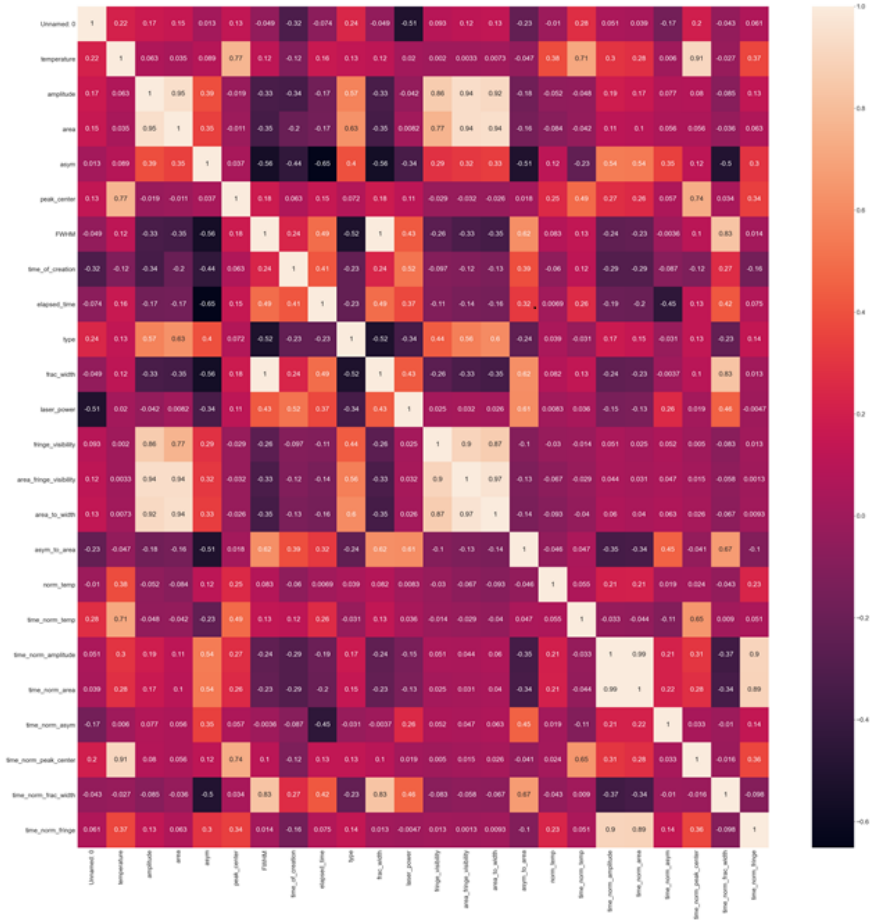


图1：整个 FBG 温度响应数据中非分类变量的皮尔逊相关系数热图

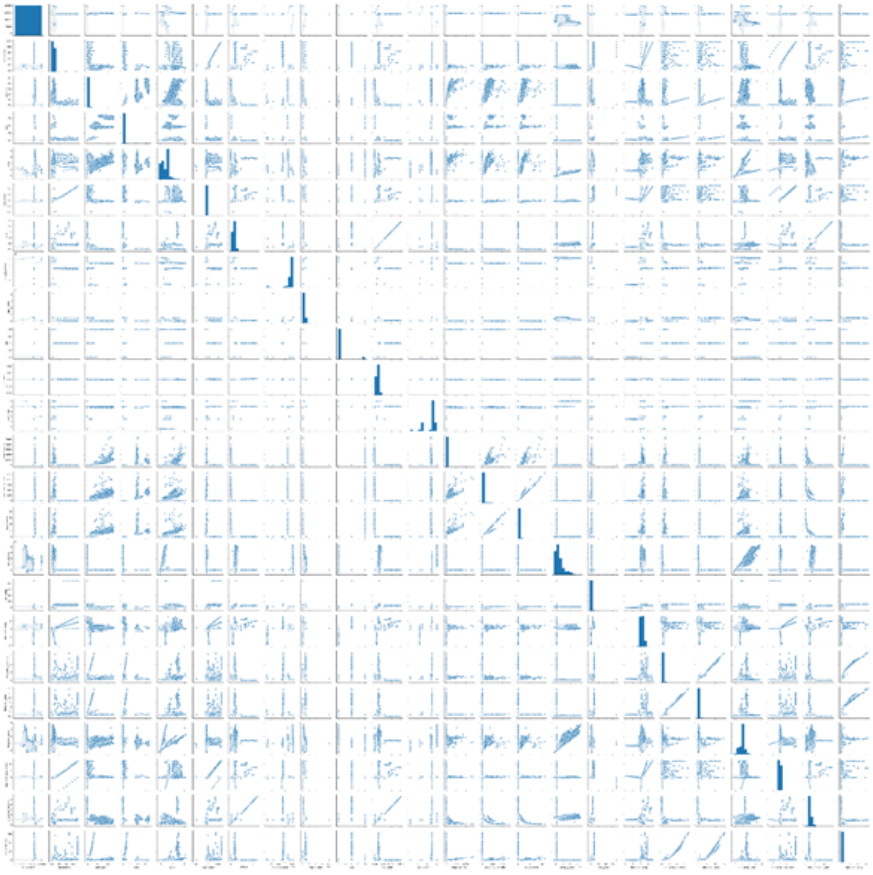


图2：整个数据集上所有非分类变量的成对关系图

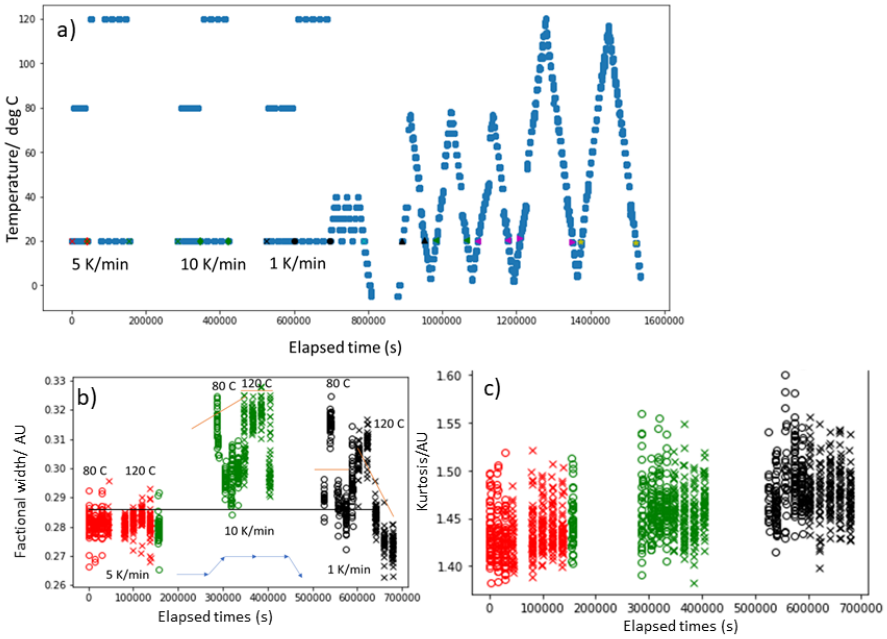


图3：a) 传感器 S6 的热循环历史包括不同的加热速率和温度变化。在 293 K 下，传感器 S6 中分数宽度 b) 和峰度 c) 随时间和温度变化的演变显示出显著的记忆效应

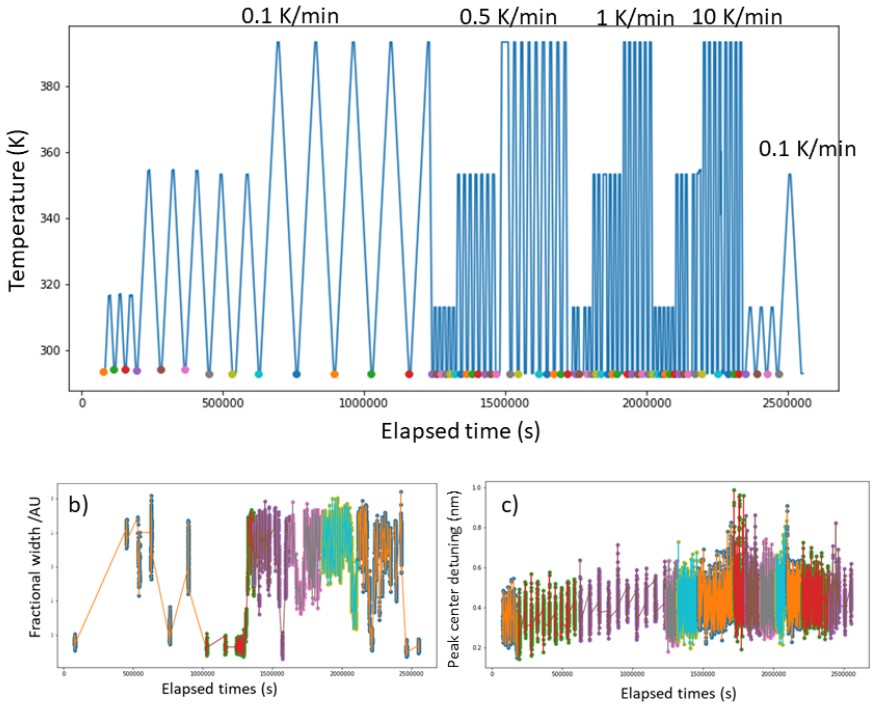


图 4：a）传感器 S7 的热循环历史，包含不同的加热速率和温度变化。在 293 K 下，可以看到热处理对分数宽度（a）和峰中心失谐（b）的累积影响。

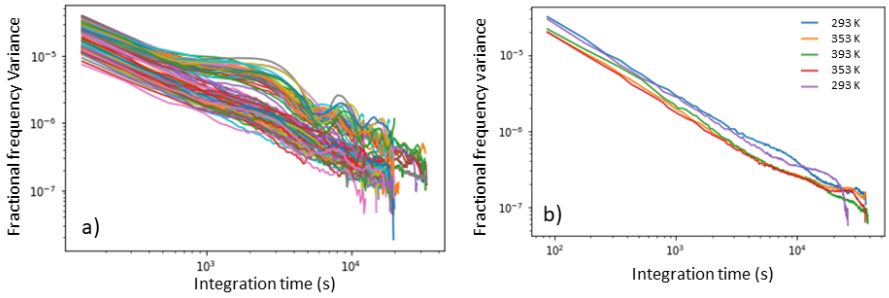


图 5：a）传感器 S7 在三个热循环期间，于 283 K 至 393 K 之间各温度下记录的阿伦偏差图。温度以 5 K 为步长递增。b）传感器 S5 在 293 K（起始）、升温过程中的 353 K 和 393 K，以及 293 K（降温）下的阿伦偏差图。对于这两种传感器，无论温度如何，我们都观察到明显的线性趋势，表明测量噪声主要由 1/f 噪声过程主导。

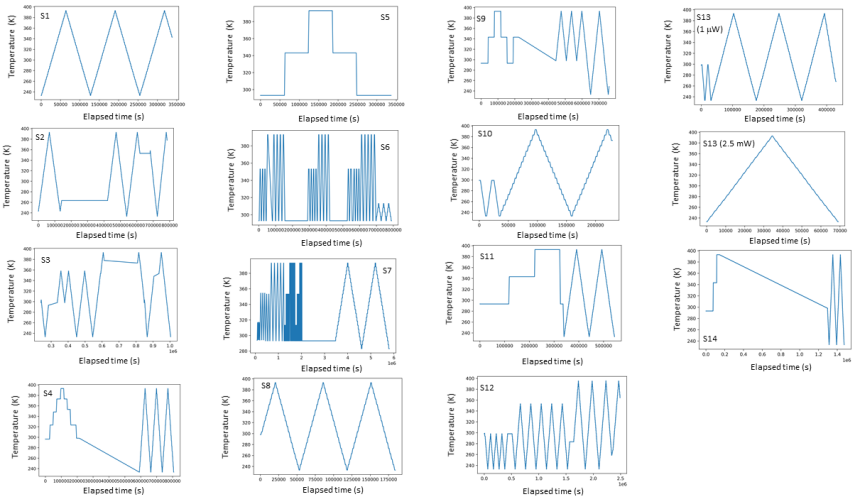


图6：展示了各传感器温度变化的时间历程

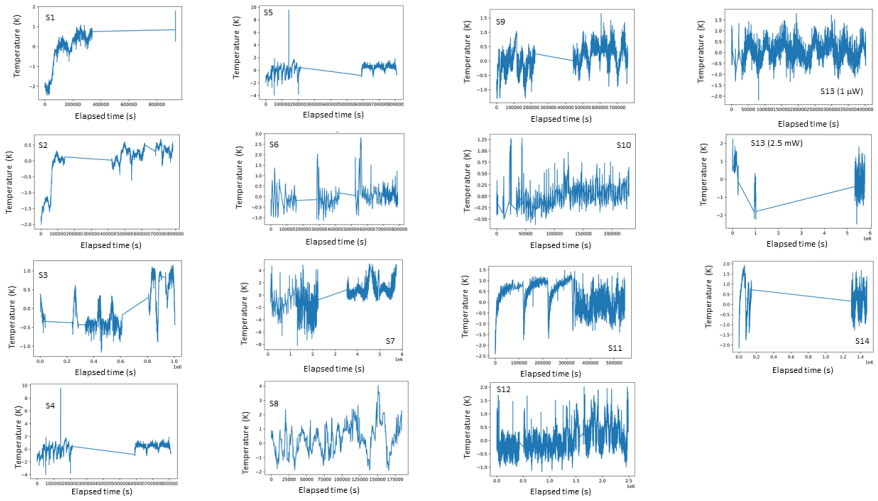


图7：展示了根据各传感器回归模型计算得出的残差的时间演化

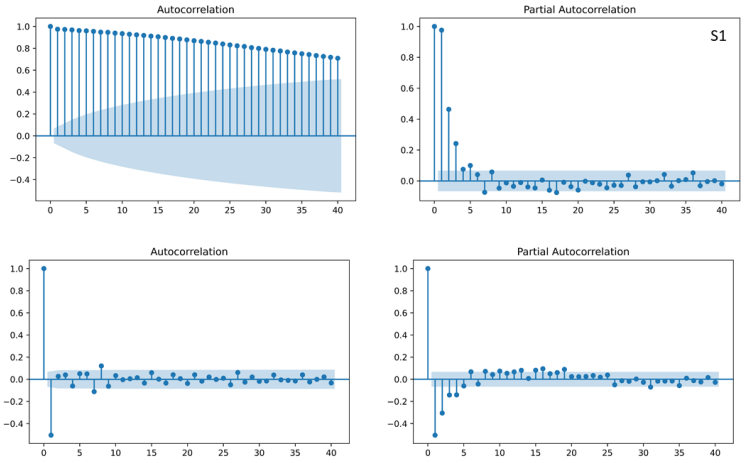


图 8：展示了 S1 的残差（上图）和一阶差分残差图（下图）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

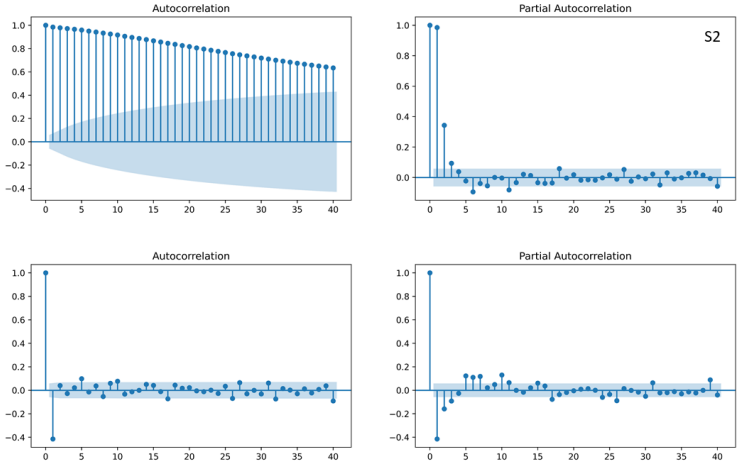


图 9：展示了 S2 的残差（上图）和一阶差分残差图（下图）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

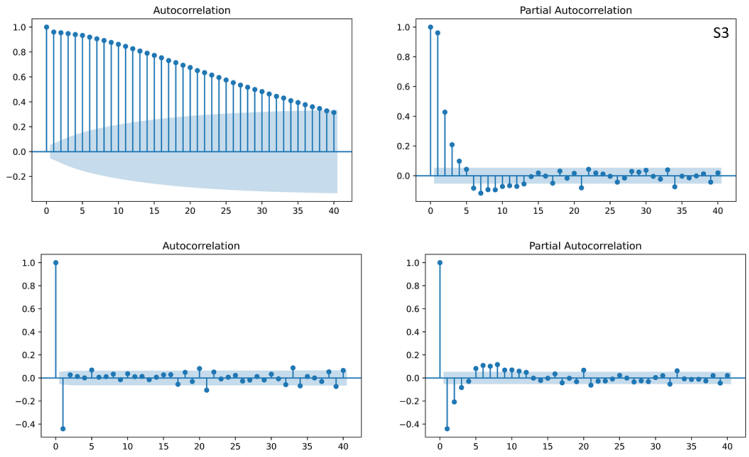


图10：展示了 S3 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上）以及一阶差分残差图（下）。

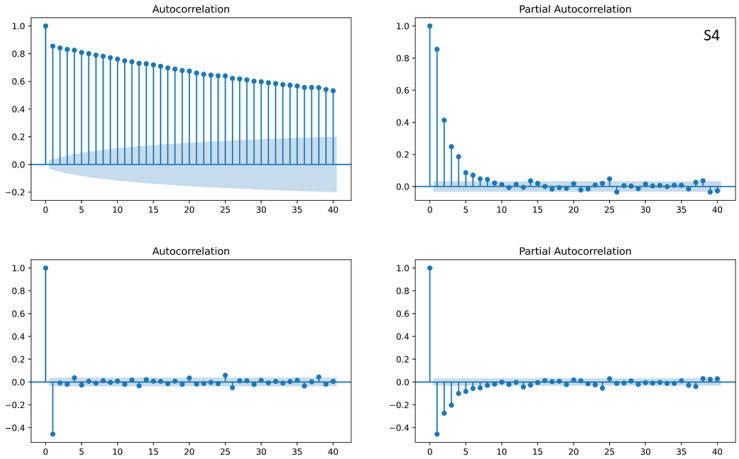


图11：展示了 S4 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上）以及一阶差分残差图（下）。

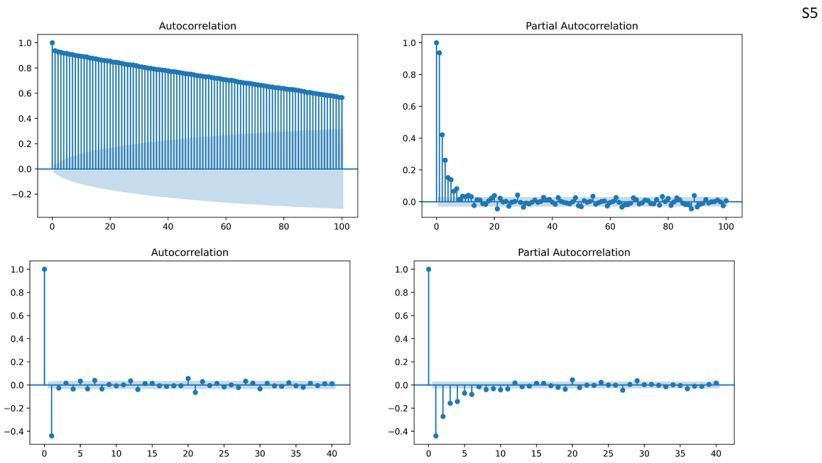


图12：展示了根据 S5 的残差（上图）和一阶差分残差图（下图）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

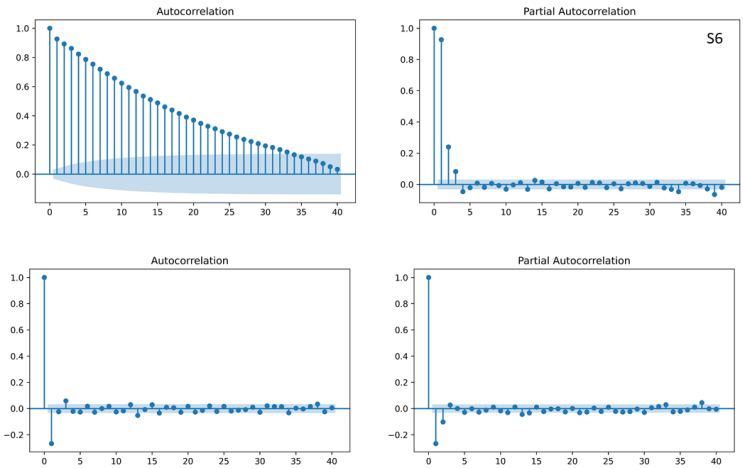


图13：展示了根据 S6 的残差（上图）和一阶差分残差图（下图）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

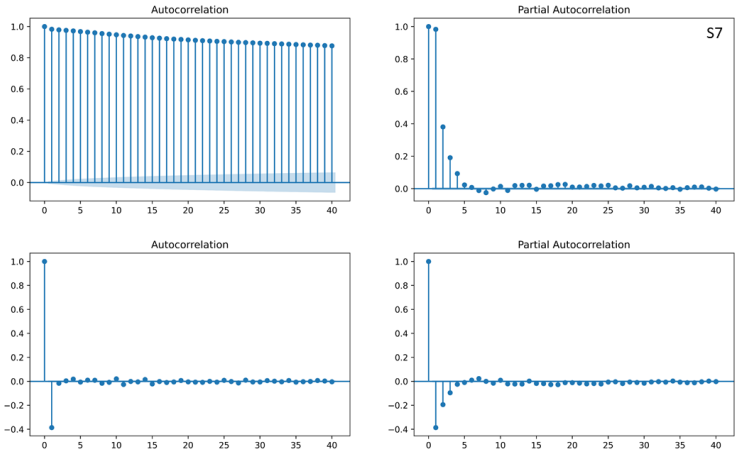


图14：展示了 S7 的残差（上图）的自相关函数和偏自相关函数图，以及一阶差分残差图（下图）。

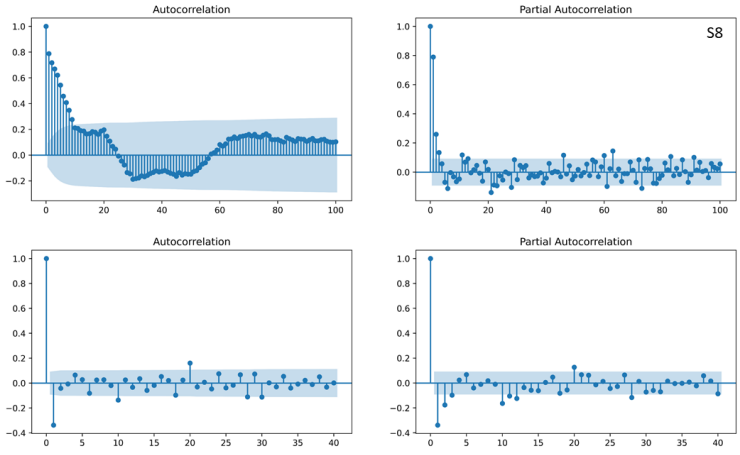


图15：展示了 S8 的残差（上图）的自相关函数和偏自相关函数图，以及一阶差分残差图（下图）。

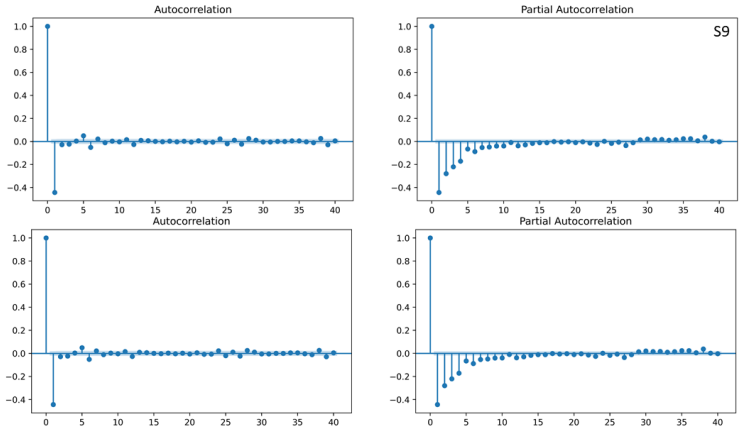


图16：展示了 S9 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上图），以及一阶差分残差图（下图）。

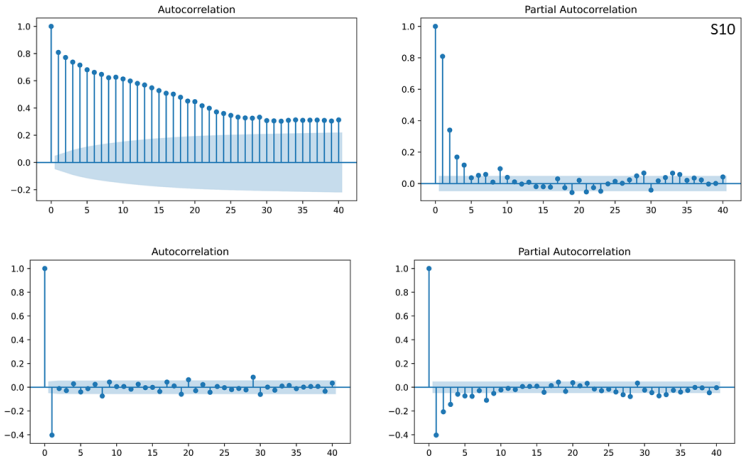


图17：展示了 S10 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上图），以及一阶差分残差图（下图）。

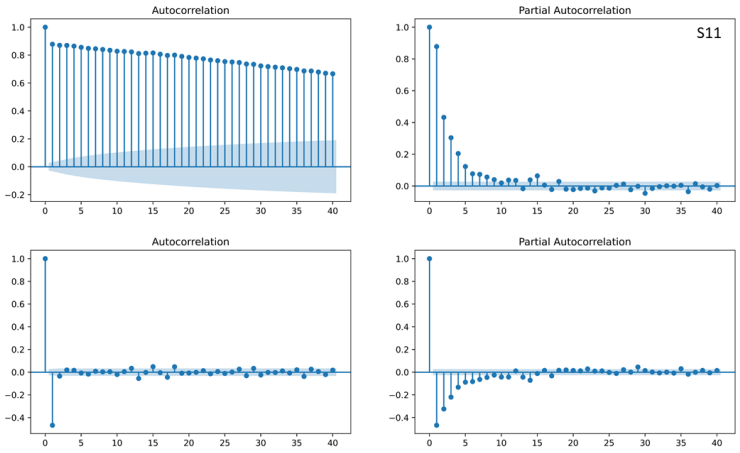


图18：展示了根据 S11 的残差（上）和一阶差分残差绘图（下）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

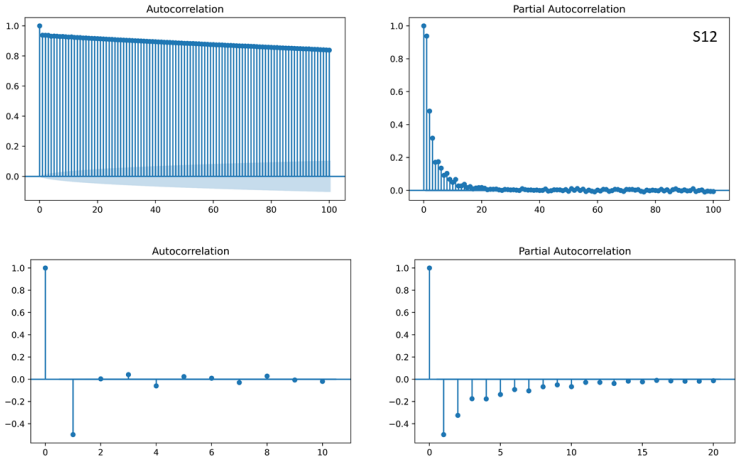


图19：展示了根据 S12 的残差（上）和一阶差分残差绘图（下）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

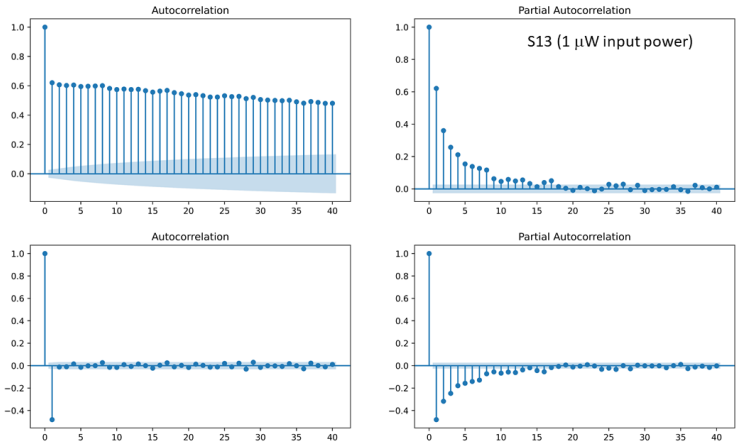


图20：展示了输入功率为 $1\mu W$ 时 S13 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上）以及一阶差分残差图（下）。

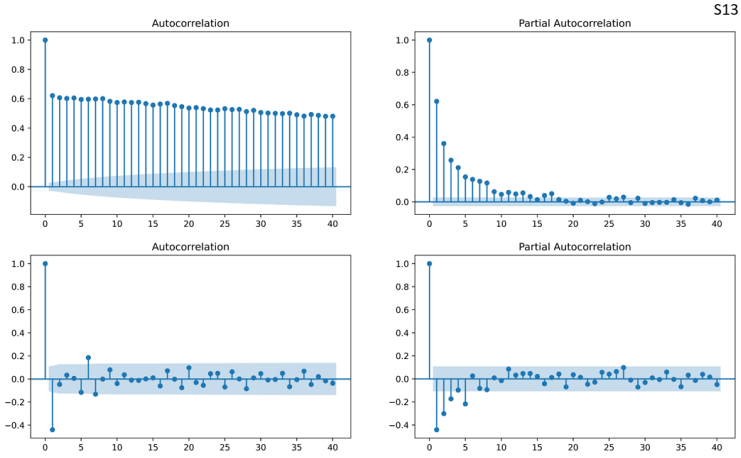


图21：展示了输入功率为 2.5 毫瓦时 S13 的残差自相关函数和偏自相关函数图（上）以及一阶差分残差图（下）。

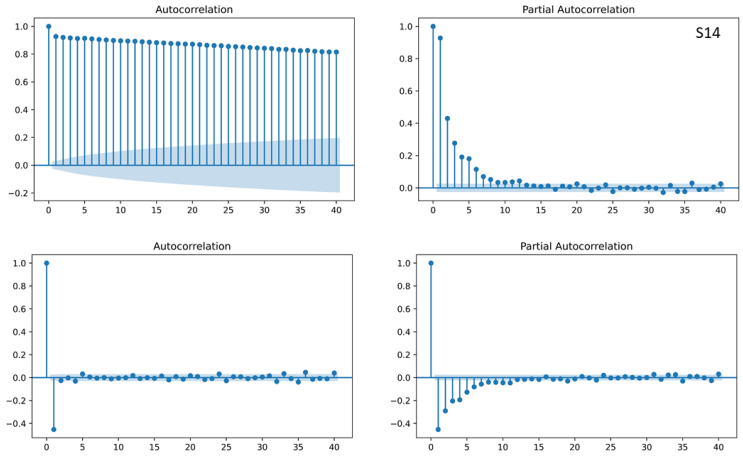


图22：展示了根据 S14 的残差（上图）和一阶差分残差（下图）计算得到的自相关函数和偏自相关函数图。

[5] G. M. Flockhart、R. R. Maier、J. S. Barton、W. N. MacPherson、J. D. Jones、K. E. Chisholm、L. Zhang、I. Bennion、I. Read、P. D. Foote，光纤布拉格光栅温度系数的二次行为，Ap- pliedoptics 43(13)（2004）2744–2751。[6]Z. Ahmed、J. Filla、W. Guthrie、J. Quintavalle，基于光纤布拉格光栅的温度测量，NCSLI Measure 10 4 2015 28 31 doi: （） （） –。10.1080/19315775.2015.11721744。

补充材料：光纤布拉格光栅温度计的滞后补偿[128]温度响应：光纤布拉格光栅[129]使用动态回归的温度计[130]

[131] Zeeshan Ahmed[a]

[a]美国国家标准与技术研究院，物理测量实验室，传感器科学部，*100 Bureau Drive*，盖瑟斯堡，*MD 20899*，美国

提交至《传感器与执行器*A*：物理》的预印本 *2023*年*3*月*29*日