多光谱辐射测温的正交多项式回归方法

李奇楠[1],徐晓轩[1],武中臣[1],宋 宁[1],张存洲[1],俞 钢[2]

1. 南开大学物理科学学院光子学中心,天津 300071
2. 南开大学讲座教授(美国 Dupont Display),天津 300071

摘 要 对于多光谱辐射测温问题,传统的数据处理方法多为最小二乘法、多元线性回归拟合和逐步回归拟合。这些处理方法自身都存在一定的缺陷,使得拟合结果与物体表面真温之间存在一定的误差。文章在可变发射率模型的基础上,提出了对多光谱辐射测温数据处理的另一种新方法——正交多项式回归方法。文章阐述了正交多项式回归的数学基础,并根据钨表面在不同温度下的光谱发射率数据,分别采用逐步回归方法和正交多项式回归方法,对钨表面的真温进行了模拟。通过拟合结果的对比发现用正交多项式回归方法来处理数据,其原理简单、运算量小,拟合结果与表面真温之间的相对误差也较小。得出的结论是用正交多项式回归方法对多光谱辐射测温的数据进行处理,拟合结果比传统方法误差小、速度快、精度高。

主题词 多光谱测温;发射率;正交多项式回归;真温;拟合
中图分类号: O551.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-0593(2006)12-2173-04

引 言

温度是确定物质状态的最重要参数之一,它的测量与控制尤其在高温测量,在航天、材料、能源、冶金等领域都占有极重要的地位。多光谱辐射测温技术是目前主要的非接触法测温手段,关于该测温理论的文献也较多。文献[1]讨论了用多光谱测温技术结合最小二乘法来解析物体真温,但忽略了高温物体发射率随波长变化这一因素;文献[2]以可变发射率为基础建模,用多元线性回归方法进行数据处理获得拟合温度,但忽略了回归各变量之间的相关性,这将给拟合的温度结果带来较大误差;文献[3]用逐步回归方法处理数据拟合物体真温,对物体发射率模型自动识别,减小了回归变量之间相关性的影响,但逐步回归方法计算量大,拟合出的温度具有一定误差。

本文指出用多光谱辐射测温方法求解物体真温,取决于物体自身温度和材料发射率两个因素,所以必须结合物体的发射率模型来拟合物体真温。正交多项式回归是一种原理简单、运算量小的数据处理方法,对于发射率随波长成多项式关系变化的物体的真温,具有较好的拟合效果。

1 发射率模型的建立

物体的光谱发射率 $\varepsilon(\lambda, T)$ 定义为

$$\varepsilon(\lambda, T) = \frac{M(\lambda, T)}{M_b(\lambda, T)} \tag{1}$$

式中 $M(\lambda, T)$ 为多光谱辐射测温仪器获得的物体在温度 T、波长 λ 处的光谱辐射出射度($W \cdot (m^2 \cdot \mu m)^{-1}$),$M_b(\lambda, T)$为在同一温度和波长处的黑体辐射表面的光谱辐射出射度。根据普朗克的黑体辐射公式及维恩近似($\lambda T << 1$)有

$$M_b(\lambda, T) = c_1 \lambda^{-5} e^{-\frac{c_2}{\lambda T}} \tag{2}$$

式中 $c_1 = (3.741\ 5 \pm 0.000\ 3) \times 10^8 (W \cdot (\mu m)^4 \cdot m^{-2})$为第一辐射常数,$c_2 = (1.438\ 79 \pm 0.000\ 19) \times 10^4 (K \cdot \mu m)$为第二辐射常数。

基于可变发射率模型假设,目前比较通用的光谱发射率随波长变化模型为多项式模型[4]

$$\ln\varepsilon(\lambda, T) = b_0 + b_1\lambda + b_2\lambda^2 + b_3\lambda^3 + b_4\lambda^4 \cdots \tag{3}$$

根据式(3),将式(2)代入式(1)并取自然对数有

$$\ln M(\lambda, T) - \ln c_1 + 5\ln\lambda + \frac{c_2}{\lambda T} = b_0 + b_1\lambda + b_2\lambda^2 + b_3\lambda^3 + b_4\lambda^4 + \cdots \tag{4}$$

对式(4)整理后有

$$\lambda\ln M(\lambda, T) - \lambda\ln c_1 + 5\lambda\ln\lambda = -\frac{c_2}{T} +$$

收稿日期: 2005-07-16,**修订日期:** 2005-10-26
基金项目: 教育部振兴计划项目(A01504)资助
作者简介: 李奇楠,1975年生,南开大学物理科学学院光子学中心硕士研究生,现为中国科学院物理研究所博士研究生

$$b_0\lambda + b_1\lambda^2 + b_2\lambda^3 + b_3\lambda^4 + b_4\lambda^5 + \cdots \quad (5)$$

式(5)是多光谱辐射测温的基本模型，等式左端的 $M(\lambda, T)$ 由多光谱测温仪通过实验测得，通过回归方法可求得等式右端的一系列回归系数。其中的常数项回归系数即可求得物体的拟合温度，其他的回归系数可以给出发射率随波长变化的具体形式。

2 数据的处理方法

这里采用正交多项式回归来处理数据。所谓正交多项式回归[5]的实质就是对于回归自变量进行适当的变换，获得新的多项式变量，使新变量之间满足正交性，这样就消除了变量之间的多重相关性，从而增加了回归拟合的准确度。

设在某项实验中，自变量 x 是可控制的，从而可以有意识地安排它取等间隔的数值。一般可取 $x_1 = a+h$，$x_2 = a+2h$，$x_3 = a+3h$，…，$x_N = a+Nh$，做变换 $X_i = \frac{x_i - a}{h}$($i = 1, 2, 3, \cdots, N$) 就有 $X_1 = 1$，$X_2 = 2$，$X_3 = 3$，…，$X_N = N$。记对应于 $X_i = i$ 的实验结果为 Y_i，对于这一组观测值我们配一个 k 次多项式，

$$Y = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \cdots + a_k X^k \quad (6)$$

设 $\Psi_1(X)$，$\Psi_2(X)$，…，$\Psi_k(X)$ 分别是 X 的一次，二次及 k 次多项式，式(6)也可以用 $\Psi_t(X)(t = 1,2,\cdots,k)$ 来表示

$$Y = a'_0 + a'_1\Psi_1(X) + a'_2\Psi_2(X) + \cdots + a'_k\Psi_k(X) \quad (7)$$

将 $\Psi_t(X)(t = 1,2,\cdots,k)$ 看作是新变量，$\Psi_t(X)$ 的正交性要求

$$\sum_{i=1}^{N}\Psi_t(X_i) = 0 \quad (t = 1,2,\cdots,k);$$
$$\sum_{i=1}^{N}\Psi_t(X_i)\Psi_j(X_i) = 0 \quad (t \neq j) \quad (8)$$

可以验证满足式(8)的一组正交多项式为

$$\begin{cases}\Psi_1(X) = X - \bar{X} \\ \Psi_2(X) = (X-\bar{X})^2 - \dfrac{N^2-1}{12} \\ \Psi_3(X) = (X-\bar{X})^3 - \dfrac{3N^2-7}{20}(X-\bar{X}) \\ \cdots\cdots \\ \Psi_{p+1}(X) = \Psi_1(X)\Psi_p(X) - \dfrac{p^2(N^2-p^2)}{4(4p^2-1)}\Psi_{p-1}(X)\end{cases} \quad (9)$$

由于 $\Psi_t(X)(t = 1,2,\cdots,k)$ 对于 $X = 1, 2, \cdots, N$ 的值不一定为整数，引进系数 λ_t，使

$$\Phi_t(X) = \lambda_t\Psi_t(X) \quad (10)$$

在 N 个整数点($X = 1, 2, \cdots, N$) 上的值都为整数，此时有

$$\sum_{i=1}^{N}\Phi_t(X_i) = 0 \quad (11)$$

$$\sum_{i=1}^{N}\Phi_t(X_i)\Phi_j(X_i) = \begin{cases}0 & t \neq j \\ S_t & t = j\end{cases} \quad (12)$$

对给定的 N，相应的 λ_t 及 $\Phi_t(X)$ 在 1，2，…，N 各整数点的数值以及 $S_t = \sum_{i=1}^{N}\Phi_t^2(X_i)$ 都可查表得到。此时，k 元线性回归方程式(7)变为

$$\begin{aligned}\hat{Y} &= a'_0 + a''_1\Phi_1(X) + a''_2\Phi_2(X) + \cdots + a''_k\Phi_k(X) \\ &= a'_0 + a''_1\lambda_1\Psi_1(X) + a''_2\lambda_2\Psi_2(X) + \cdots + a''_k\lambda_k\Psi_k(X) \\ &= a'_0 + a'_1\Psi_1(X) + a'_2\Psi_2(X) + \cdots + a'_k\Psi_k(X)\end{aligned} \quad (13)$$

回归系数及由下面正规方程确定：

$$\begin{cases}l_{11}a''_1 + l_{12}a''_2 + \cdots + l_{1k}a''_k = l_{1y} \\ l_{21}a''_1 + l_{22}a''_2 + \cdots + l_{2k}a''_k = l_{2y} \\ \cdots \\ l_{k1}a''_1 + l_{k2}a''_2 + \cdots + l_{kk}a''_k = l_{ky}\end{cases} \quad (14)$$

$$a'_0 = \bar{Y} - a'_1\bar{\Phi}_1(X) - a'_2\bar{\Phi}_2(X) - \cdots - a'_k\bar{\Phi}_k(X) \quad (15)$$

其中 $l_{tj} = \sum_{i=1}^{N}[\Phi_t(X_i) - \bar{\Phi}_t(X)][\Phi_j(X_i) - \bar{\Phi}_j(X)]$，$l_{ty} = \sum_{i=1}^{N}[\Phi_t(X_i) - \bar{\Phi}_t(X)][Y_i - \bar{Y}]$，($t, j = 1, 2, \cdots, k$)。根据正交性式(11)，(12)有

$$a'_0 = \bar{Y}$$
$$B_t = l_{ty} = \sum_{i=1}^{N}\Phi_t(X_i)(Y_i - \bar{Y})$$
$$a''_t = \frac{B_t}{S_t} \quad (t = 1,2,\cdots,k) \quad (16)$$

回归平方和 $U = \sum_{t=1}^{k}a''_t l_{ty} = \sum_{t=1}^{k}a''_t B_t$。注意到每次多项式 $\Phi_t(X)$ 的回归系数 a''_t 及相应的 B_t 只和 Y_i 与 $\Phi_t(X_i)$ 自身有关，而不随其他各次多项式的增减而变化，在整个回归中多配一项 $\Phi_t(X)$ 就使回归平方和 U 增加一项 $a''_t B_t$，因此可以把 $p_t = a''_t B_t = \frac{B_t^2}{S_t}$ 看作是第 t 次多项式 $\Phi_t(X)$ 的效应，而回归平方和 U 则是各次效应的总和。检验各次多项式 $\Phi_t(X)$ 对 Y 的贡献是否显著，可用各次效应 p_t 与方差 s^2 的比值 $F_t = \frac{p_t}{s^2} = \frac{a''_t B_t}{s^2}$ 进行 F 检验，F_t 的自由度为 1，$N-k-1$。对于那些不显著的高次项可以把他们从回归方程中取消。如果检验的结果都显著，同时所配多项式的精度还不够满意的话则可继续增加更高次的项。

Table 1 The surface emissivities of tungsten

波长	温度/K				
/μm	1 600	1 800	2 000	2 200	2 400
0.340	0.482 3	0.479 8	0.477 3	0.474 8	0.472 3
0.380	0.477 5	0.475 4	0.473 3	0.471 2	0.469 1
0.420	0.469 4	0.467 8	0.466 2	0.464 6	0.463 0
0.460	0.462 0	0.460 6	0.459 2	0.457 8	0.456 4
0.500	0.457 1	0.455 2	0.453 3	0.451 4	0.449 5
0.540	0.453 9	0.451 4	0.448 9	0.446 4	0.443 9
0.580	0.450 1	0.447 0	0.443 9	0.440 8	0.437 7
0.620	0.445 0	0.441 3	0.437 6	0.433 9	0.430 2
0.660	0.441 2	0.436 9	0.432 6	0.428 3	0.424 0
0.700	0.437 5	0.433 1	0.428 7	0.424 3	0.419 9
0.740	0.430 4	0.426 6	0.422 8	0.419 0	0.415 2

3 模拟结果与讨论

对式(5)分别用多项式回归和逐步回归方法拟合各种温

度下钨表面的温度。考虑到曲线次数选择越大，残差平方和越小，但曲线次数选择过大时拐点太多，不符合实际情况，选取式(5)中的最高次项为 λ^5 项。钨表面在不同温度下的光谱发射率如表 1 所示[6]。

采用模拟方法，获得式(5)中的回归系数，通过常数项回归系数即可求得钨表面的拟合温度，模拟结果对比如表 2 所示。

Table 2　The fitting result comparison of tungsten surface

钨表面真温/K	逐步回归		正交多项式回归	
	拟合温度/K	相对误差/%	拟合温度/K	相对误差/%
1 600	1 608.9	0.56	1 603.2	0.20
1 800	1 807.9	0.44	1 803.1	0.17
2 000	2 002.3	0.12	2 002.7	0.13
2 200	2 182.2	0.81	2 201.8	0.08
2 400	2 375.0	1.04	2 400.3	0.01

从表 2 的拟合结果对比我们可以看到，正交多项式回归方法的模拟结果普遍比逐步回归方法的模拟结果误差小，更接近钨表面的真温。

逐步回归的基本思想是在所考虑的全部变量中，按其对 Y 作用的显著程度由大到小地逐个引入回归方程。那些对 Y 作用不显著的变量可能从未引入回归方程，而已被引入回归方程的变量在引入新变量后也可能变为对 Y 作用不显著而随时从回归方程中剔除。在逐步回归的实际操作中，为达到上述目的就要求每引入 1 个变量进入回归方程的前、后都要对方程内、外的变量进行 F 检验，并且计算偏相关系数矩阵。这使得逐步回归的步骤繁琐，计算量大，获得拟合温度速度慢。与之相比，正交多项式回归采用变量重新组合成新的多项式变量，由于新变量之间是正交的，就消除了影响多元回归准确度的最大因素——变量的相关性。并且正交多项式的具体形式已经编制成表，可随时查得。这使得正交多项式回归步骤简单，计算量小，能够很快速地得到物体表面的拟合温度。拟合误差比逐步回归小。于是我们得到的结论是：在多光谱辐射测温的数据处理中，正交多项式回归是一种简单、快速的数据处理方法，拟合效果优于逐步回归的拟合效果。

从表 2 还可观察到无论是逐步回归方法还是正交多项式回归方法，拟合温度与钨表面真温的差值随温度的升高有降低的趋势，作者认为这与式(5)中的系数 b_0，b_1，…，b_k 随温度的升高有规律变化有关系，这方面的问题，还有待进一步探讨。

参　考　文　献

[1] MENG Jian-ping，YANG Jing-guo，TAN Hua，et al(蒙建平，杨经国，谭　华，等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析)，2002，22(5)：721.

[2] ZHAN Chun-lian，LI Yan-mei，LIU Jian-ping，et al(占春连，李燕梅，刘建平，等). Journal of Applied Optics(应用光学)，2002，23(6)：39.

[3] SUN Xiao-gang，DAI Jing-min，CONG Da-cheng，et al(孙晓刚，戴景民，丛大成，等). Journal of Infrared and Millimeter Waves(红外与毫米波学报)，1998，17(3)：221.

[4] DAI Jing-min，SUN Xiao-gang(戴景民，孙晓刚). Theory and Practice of Multi-spectral Thermometry(多光谱辐射测温理论与应用). Beijing：Higher Education Press(北京：高等教育出版社)，2002. 11.

[5] ZHOU Ji-xiang(周纪芗). Practical Regression Analysis Method(实用回归分析方法). Shanghai：Shanghai Scientific and Technical Publishers(上海：上海科学技术出版社)，1990. 77.

[6] GE Shao-yan，NA Hong-yue(葛绍岩，那鸿悦). The Character and Measurement of Heat Radiation(热辐射性质及其测量). Beijing：Science Press(北京：科学出版社)，1989. 243.

The Orthogonal Polynomial Regression Method of Multi-Wavelength Radiation Thermometry

LI Qi-nan[1]，XU Xiao-xuan[1]，WU Zhong-chen[1]，SONG Ning[1]，ZHANG Cun-zhou[1]，YU Gang[2]

1. The Photonics Center of the Physics Institute，Nankai University，Tianjin　300071，China

2. Visiting Professor of Nankai University (Dupont Display，California)，Tianjin　300071，China

Abstract　For the problem of multi-wavelength radiation thermometry，the traditional data processing methods are the least squares techniques，the multiple linear regression fitting，and the stepwise regression fitting. There are some shortages in these methods，resulting in a certain error between the fitting result and the true temperature of the object surface. A new data processing method of multi-wavelength radiation thermometry——the orthogonal polynomial regression method was brought forward in this article on the base of variable emissivity. The mathematic principle of orthogonal polynomial regression method was expounded and according to the surface emissivities of tungsten, the true temperature of tungsten surface was simulated by the stepwise regression method and the orthogonal polynomial regression method. By comparing the fitting results, the authors found that the orthogonal polynomial regression method has the merit of simple principle and small operation, and the relative error between the fitting result and the surface true temperature is smaller. So the authors can draw the conclusion that using the orthogonal polynomial regression method to process the data of the multi-wavelength radiation thermometry, the fitting result has smaller error, it can fit the true temperature of object faster, and the result is more accurate than the traditional data processing methods.

Keywords Multi-wavelength radiation thermometry; Emissivity; Orthogonal polynomial regression; True temperature; Fitting

(Received Jul. 16, 2005; accepted Oct. 26, 2005)

第 35 届国际光谱大会
将于 2007 年 9 月 23～27 日在厦门召开

国际光谱会议(Colloquium Spectroscopicum Internationale, CSI) 是世界谱学研究领域的顶级峰会之一。第 35 届国际光谱大会(CSI XXXV)将于 2007 年 9 月 23～27 日在厦门召开。这是 CSI 自 1949 年以来首次在我国举行。这次谱学盛会由国家自然科学基金委员会、中国化学会、中国物理学会、中国光谱学会以及厦门市政府主办，由厦门大学承办；会议主席由黄本立和方肇伦院士担任。会议主要议题包括：

(1) Atomic Spectrometry (AAS, AES, AFS, Plasma, etc.);

(2) Molecular Spectrometry (UV-Vis, IR, Raman, Chemiluminescence/Fluorescence/Phosphorescence, NMR, etc.);

(3) Mass Spectrometry;

(4) Laser Spectrometry;

(5) Hyphenated Techniques (with μ-TAS, HPLC, CE, etc.);

(6) X-Ray and Synchrotron Spectroscopy;

(7) Chemometrics

同时组织 Elemental Speciation, Environmental Analysis, Frontier of Mass Spectrometry, Spectroscopic Sensing of Bio-related Species, Spectroscopy for Nanomaterials 和 Surface-enhanced Spectroscopy 等专题研讨会；还将举办光谱/质谱仪器、部件及周边设备、相关样品化学/物理预处理设备等等的展览会。会议计划邀请 5 位世界一流水平的光谱/质谱学家作大会报告和 30 位在光谱/质谱相关研究领域中的知名学者作主题/特邀报告。第 35 届 CSI 的举行将是我国谱学研究者向世界介绍自己研究工作、与同行进行学术交流并增进友谊的一次良机。我们竭诚欢迎全国高等院校、科研机构和产业部门中从事谱学研究的同行和仪器厂商的朋友们来厦门参加这次谱学界的盛会。详细信息请浏览 www.csixxxv.org

联系方式：厦门大学化学系 CSI 秘书处；邮政编码：361005；电话/传真：0592-2181810；

电子邮件：secrcsi@xmu.edu.cn

重要日期：第二轮通知 2007 年 2 月 10 日

论文摘要截止期 2007 年 4 月 15 日

提前注册截止期 2007 年 5 月 15 日