# 激光写光电子学进展

# 基于便携式激光诱导击穿光谱的T91金属 老化等级评估

卢伟业<sup>1,2</sup>,董美蓉<sup>2\*</sup>,白凯杰<sup>1</sup>,尚子瀚<sup>2</sup>,李至淳<sup>2</sup>,陈小玄<sup>1</sup>,蔡俊斌<sup>2</sup>,陆继东<sup>2</sup> <sup>1</sup>广东省特种设备检测研究院顺德检测院,广东 佛山 528300; <sup>2</sup>华南理工大学电力学院,广东 广州 510640

**摘要** 耐热钢微观组织及机械性能会随着服役过程发生退化,对老化状态的实时快速监测对安全运行及生产具有重要 意义。基于便携式激光诱导击穿光谱(LIBS)设备对获取的T91光谱特征进行降维并优化了老化等级评估模型,实现了 对T91耐热钢老化等级的快速诊断。分别采用主成分分析与线性判别式分析(LDA)的降维方法,对光谱特征进行优化 精简。而后基于降维后的数据,进一步采用K最近邻算法和支持向量机(SVM)算法来建立金属老化等级评估模型,讨论 了建模关键参数选择对模型性能的影响。结果表明,经过LDA降维的光谱数据能实现更好的聚类分布,可有效提高评 估模型的准确率。同时,应用LDA-SVM模型能获得最高的老化等级评估准确度,达94.58%。所采用的模型建模方法 可有效实现基于便携式LIBS的T91耐热钢老化等级评估。

关键词 光谱学;激光诱导击穿光谱;金属老化等级评估;光谱特征降维;K最近邻算法;支持向量机
 中图分类号 O657.38;O433.5+4
 文献标志码 A
 DOI: 10.3788/LOP230526

# Evaluation of T91 Steel Aging Grade Based on Portable Laser-Induced Breakdown Spectroscopy Device

Lu Weiye<sup>1,2</sup>, Dong Meirong<sup>2\*</sup>, Bai Kaijie<sup>1</sup>, Shang Zihan<sup>2</sup>, Li Zhichun<sup>2</sup>, Chen Xiaoxuan<sup>1</sup>, Cai Junbin<sup>2</sup>, Lu Jidong<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Guangdong Institute of Special Equipment Inspection and Research Shunde Branch, Foshan 528300, Guangdong, China;

<sup>2</sup>School of Electric Power Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, Guangdong, China

**Abstract** Microstructure and mechanical properties of heat-resistant steel will deteriorate during the service process. The real-time monitoring of the aging state is of great significance for safe operation and production. In this study, a portable laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) device is used to quickly diagnose the aging grade of T91 steel, while the obtained spectral features are dimensionally reduced and the modeling method is optimized. Principal component analysis (PCA) and linear discriminant analysis (LDA) are used to optimize and simplify the spectral features. Finally, after dimensionality reduction, the data are used to evaluate the aging grade model based on the K-nearest neighbor and the support vector machine (SVM) algorithms. Further, the influence of key parameter selection on the model performance is studied. The results show that the spectral data reduced by LDA can achieve a better clustering distribution and improve the accuracy of the evaluation model. In addition, the LDA-SVM model can achieve 94. 58% accuracy, which is the highest among all the mentioned aging grade evaluation models. The result demonstrates that the modeling method can efficiently realize the aging grade evaluation of T91 steel based on portable LIBS.

**Key words** spectroscopy; laser-induced breakdown spectroscopy; aging grade assessment; spectral dimensionality reduction; K nearest neighbor algorithm; support vector machine

收稿日期: 2023-01-17;修回日期: 2023-02-08;录用日期: 2023-03-01;网络首发日期: 2023-03-09

**基金项目**: 广东省特种设备检测研究院科技项目(2021CY-2-02)、广东省自然科学基金重点项目(2017B030311009) 通信作者: \*epdongmr@scut.edu.cn

# 1引言

耐热钢是在高温承压工况下能保持良好机械性能 和化学稳定性的合金钢,被广泛应用于热力发电设备 制造、动力机械、航空航天、石油化工等领域。虽拥有 良好的服役性能,但因运行时长增长及服役参数波动 等原因,其微观组织及机械性能会不可避免地发生退 化,这给设备运行及生产带来巨大的安全隐患。日常 工业生产中一般采用定期巡检等方式监测耐热钢的服 役情况,但现有检测技术仍存在检测周期长或无法进 行无损检测等缺陷,更无法进行实时原位监测<sup>[14]</sup>。

激光诱导击穿光谱(LIBS)技术作为一种极具潜 力的快速原位原子发射光谱检测技术,在被广泛应用 于成分检测的同时,其对耐热钢特性检测的能力也已 被逐渐开发优化。Yang 等<sup>[5]</sup>提出一种改进分段的 Hermite 三次插值方法用于校正 LIBS 测量过程中出 现的基线偏移,提升了在生产奥氏体不锈钢过程中对 铬含量的检测与控制能力,以保证优质奥氏体不锈钢 产出。由于液态锂对耐热钢这类金属部件具有强腐蚀 性,可影响结构材料的力学性能,Ke等<sup>[6]</sup>用LIBS对 316不锈钢基体和焊缝进行了液态锂腐蚀分析,结果 表明在相对低温和短时间腐蚀条件下,316不锈钢试 件焊缝与基体具有相似的耐腐蚀性。Lu等<sup>[7-8]</sup>将LIBS 应用于对受热面金属材料的失效评估,研究了不同老 化程度的T91合金钢等离子体的时空演化特性及激光 烧蚀特性,分析了等离子体特征参数、基体元素和合金 元素特征谱线图像和强度的时空演化规律;在此基础 上,基于支持向量机(SVM)建立了老化等级预测模 型,研究了在不同激光脉冲数、取样位置等条件下采集 的光谱数据对模型预测性能的影响。Huang 等<sup>[9]</sup>分析 了光谱特征变量的多重共线性,对比了不同数据降维 方法耦合多变量分析方法对硬度预测效果的影响,结 果表明典型相关分析(CCA)耦合支持向量回归 (SVR)算法可以更加快速、准确地测量受热面金属材 料的硬度。为了实现对在役受热面金属材料的原位 LIBS检测,余移山等<sup>[10]</sup>研究了T91金属表面氧化层对 于LIBS测量的影响,发现打磨掉氧化层的样品与未 处理样品经过一定脉冲激光烧蚀后,其特征谱线强度 趋于一致,由合适脉冲数范围内采集的光谱数据建立 的预测模型对不同表面状况样品的分类准确率可达 91%以上。Zhang等<sup>[11-12]</sup>与Cai等<sup>[13]</sup>研究了金属管道 表面附面层的光谱特征,并使用人工老化耐热钢试样 数据,基于不同的光谱预处理及筛选方法并结合不同 建模方法进行建模,将其应用于实际金属管道的失效 诊断。白伟洋等<sup>[14]</sup>利用LIBS技术结合随机森林算 法,实现了对不同类别不锈钢的精细分类。文大鹏 等<sup>[15]</sup>将LIBS结合主成分分析(PCA)-粒子群优化-SVM 算法,成功对12类矿石进行了分类。

目前,基于LIBS金属材料特性的研究已有一定 基础,但大部分研究是基于实验室的探索性研究。为 了实现LIBS技术在耐热钢状态诊断方面的实际应 用,有必要开展应用于现场便携式LIBS设备检测的 检测方案探究,以拓展延伸LIBS技术的应用。而为 缩小便携式LIBS设备的体积,需要牺牲其部分性能, 例如减小激光光源能量、缩小光谱波段范围、降低分辨 率,这些均会影响便携式LIBS设备测得数据的质量。 针对便携式LIBS检测设备的特点,本研究从光谱数 据优化处理及建模方法入手,开展T91金属老化等级 评估研究,发展适用于实际应用的LIBS金属老化等 级评估方案,为便携式LIBS设备的实际应用奠定 基础。

#### 2 实验过程

#### 2.1 实验试样

选用常用于锅炉过热器的T91耐热钢作为研究对 象,原始供货态是由日本住友生产的SA-213T91合金 钢管,基于《GB/T2039—2012金属材料单轴拉伸蠕变 试验方法》对钢管在不同载荷和温度工况条件下进行 高温时效老化试验,在钢管不同截面处获得不同应力 状态的10个T91钢老化试样,如图1所示。具体处理 过程及细节已在作者所在研究团队以往工作中详细介 绍<sup>[7-10]</sup>。依据中国电力行业标准《DL/T 884—2004火 电厂金相检验与评定技术导则》,处理后的试样老化等 级可划分为1~5级,各等级表征不同微观组织及机械 性能老化程度,具体的老化等级信息如表1所示,表中 A1~A10的标号与图1中的试样1~10对应。

#### 2.2 实验设备

实验采用便携式LIBS仪器(图2),该装置是由激



图 1 T91钢人工试样 Fig. 1 Artificial samples of T91 steel

#### 第 61 卷第 5 期/2024 年 3 月/激光与光电子学进展

#### 研究论文

Table 1Aging grades of T91 samples				
Sample	Aging grade	Sample	Aging grade	
A1	1	A6	4	
A2	2	Α7	3	
A3	2	A8	3	
A4	3	A9	5	
A5	2	A10	3	

表1 T91试样老化等级



图 2 便携式 LIBS 仪器 Fig. 2 Portable LIBS device

光器、光谱仪及分析测试系统集成的一体化LIBS检 测设备,仪器采用Nd:YAG激光器(宁波谱泰克科学 仪器有限公司,LDlaser-1064-10-C)作为激光源,激光 波长为1064 nm,重复频率为10~30 Hz,脉冲宽度范 围为5~10 ns,最大单次脉冲激光能量约为13 mJ。光 谱仪(Mini spectrometer MK II, 10 µm 狭缝, 3600线/mm 光栅)的光谱测量范围为180~240 nm,并用2048 pixel 的互补金属氧化物半导体(CMOS)线阵图像传感器探 测光谱强度。设置脉冲激光的平均能量为10 mJ,光 谱接受信号的延迟时间在实验条件下优化设定为 440 ns,对各金属试样表面进行砂纸打磨、酒精清洗 后,对每个样品的4个不同位置进行了测量,每次测量 经过30次烧蚀,共收集120个光谱,对10个T91试样 共可获取1200个光谱。在构建老化等级评估模型前, 将实验所得光谱数据按8:2的比例,分别划分为训练 集与测试集。

# 3 分析与讨论

#### 3.1 光谱数据降维

如图 3 所示,LIBS 耐热钢光谱数据存在特征维度 大、元素特征谱线多的特点,且光谱特征中的同一元素 会被激发产生不同的谱峰,这可能使各特征之间出现 一定的关联性,这一关联性可表现为数据的共线性,数 据的多重共线性容易导致建立模型的泛化能力下降。 同时,高维空间样本具有一定的稀疏性。在使用高维 矩阵进行建模训练时,过大的特征矩阵不仅会延长模 型训练时间,还加大了在训练过程中取得数据核心特





征及规律的难度。因此,对光谱数据进行降维处理是 保证训练模型高效性和可靠性的重要步骤。 3.1.1 PCA

PCA 是一种被广泛使用的数据降维算法,其目的 主要是将高维数据转换映射至低维,并保证映射后的 数据能够包含原数据的大部分信息。PCA 的主要原 理是以映射后数据在低维度空间上方差最大为目标, 对原数据不同维度间协方差矩阵求解,得到其特征值 与特征向量,而后以特征值大小为依据,选取相应的特 征向量为主成分组成新维度空间的矩阵,即实现了对 原数据的降维。

对原始数据降低的维数可通过计算主成分累计贡 献率G来确定。累计贡献率越大意味着降维后的数据 包含的原始数据信息量越大,若要将原始的n维数据降 低至k维,则累计贡献率在数值上等于前k个特征值之和 与所有特征值之和的比。累计贡献率G的计算方法为

$$G = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i / \sum_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad (1)$$

式中,λ<sub>i</sub>表示第*i*个特征值。 3.1.2 线性判别式分析

线性判别式分析(Linear discriminant analysis, LDA)也是一种常用的降维算法,属于有监督学习算法,即在进行降维处理时纳入学习数据的标签信息。 由于加入了标签信息,应用LDA对数据进行分类的效 率与准确率都会有所提升。因此,在进行数据降维时, 需要考虑到对不同类标签数据的处理,LDA的基本原 理主要是在数据的投影变换中,令同类数据间距离最 小,不同类数据间距离最大。同样地,也可利用累计贡 献率来确定LDA降低的维数。

#### 3.1.3 降维方式效果对比

为防止奇异样本数据导致的不良影响,并尽可能 消除测量过程中由测量仪器或环境引起的噪声,在利 用光谱数据进行训练建模前,对获取的LIBS光谱数 据先进行全谱归一化的预处理。对预处理后的训练集 数据进行 PCA 降维,图4(a)列出了 PCA 降维后前 15个成分的特征信息贡献率及累计贡献率。从特征



图 4 光谱特征信息贡献率。(a)PCA 降维;(b)LDA 降维

Fig. 4 Contribution rates of spectral feature information. (a) PCA dimension reduction; (b) LDA dimension reduction

信息贡献率可看出,前3个主成分的信息贡献率较高, 且第1主成分的特征信息贡献率远高于其他成分。同时,前3个主成分的累计贡献率可达到95%,这说明前 3个主成分包含了95%的原始光谱数据信息量。

同样对预处理后的训练集数据应用LDA进行降 维,相应的各成分特征信息贡献率和累计贡献率变化 如图4(b)所示。前2个成分的特征信息贡献率远高于 其他成分,并且取前2个成分的累计贡献率就可达 99%,即经LDA变换,前2个主成分就可基本解释原 始数据的全部信息。

为便于比较分析经2种降维方法优化后的数据分 布情况,选择将预处理后的训练集数据均降维至3维, 得到各老化等级分类情况如图5所示。由PCA降维 后的数据分布图[图 5(a)]可知,T91金属老化等级为 1、4和5级的数据较好地形成了聚集,而2、3级的数据 则出现了不同程度的分散,且与其他老化等级的数据 形成了混合。这可能是由于测得的光谱都来自T91金 属,虽然不同老化等级的T91光谱存在差异,但被激发 的等离子体、获得的特征谱线都存在一定的相似性,这 在一定程度上造成使用该方法不能很好地实现对不同 老化等级数据的聚类,也给评估模型的训练带来一定 的难度。而从图 5(b)可以看出,因有学习数据标签信 息的参与,LDA对各同类的数据能够实现很好的聚 类。相较 PCA 降维的数据分布,LDA 降维的数据分 布在分类任务中能够大大提高评估模型的准确率,具 有更大的优势。



图 5 降维后的训练集光谱数据分布。(a)PCA;(b)LDA Fig. 5 Training set spectral data distributions after dimension reduction. (a) PCA; (b) LDA

### **3.2** 使用 LDA-K 最近邻(KNN)进行金属老化等级 评估

KNN算法根据相邻数据点的分类情况对新数据 或实例进行分类。算法的总体思想是在训练数据已被 正确分类的情况下,通过计算新数据与其近邻数据之 间的距离(一般取欧氏距离),按距离由小到大选取距 新数据最近的*K*个点,新数据将被归为包含点最多的 类别。由于*K*值的大小存在一个范围,为防止*K*值取 得过大或过小从而影响最终的分类准确度,先确定 *K* 值。通过交叉验证,使用 LDA-KNN 对训练集数据老 化等级类别进行预测,所得的分类准确率随 *K* 值增大 的变化趋势如图 6 所示。

从图 6 可以看出,在 K 值取 1~25 时,随 K 值的增大,分类准确率主要在 93.75%~94.17% 范围内反复 波动。出现这一情况的主要原因在于经过 LDA 降维 后的数据已处于类间距离最大、类内距离最小的状态,





则经LDA处理输入后待分类样本数据的空间位置只可能处于某一类内或处于某几类之间。对于处于类内的新数据,随着K值增大,其预测的归属类别不会发生改变;对于处于几类间的新数据,随K值增大,其预测的归属类别会随邻近包含点多的类别而发生变化。

由于参与训练的各老化等级金属试样数量不等, 不同老化等级试样的数据量也不同。当待分类样本属 于较小数据量的老化等级类别时,所取K值过大且大 数据量的老化等级类别过多,就容易发生误判。同时, 过大的K值也增加了KNN算法的计算量,故选择K= 8的KNN算法。图7为LDA-KNN模型对实验数据测 试集老化等级的预测结果。其中,横轴刻度值表示测 试集数据的顺序标签,纵轴刻度值1~5则表示T91金 属的老化等级标签,实心圆表示光谱数据对应的实际 类别标签,空心圆表示评估模型预测的类别标签。由 此可见,采用LDA-KNN模型进行分类的准确率为 94.17%,且模型对测试集的误判主要发生在3、4两个 老化等级间。





#### 3.3 LDA-SVM进行金属老化等级评估

SVM是一种监督学习算法,在对小样本数据的识别分类应用中具有明显的优势。SVM的基本思想是

根据训练的样本数据在N维空间中的分布情况,找到 最佳的分割超平面,利用这一分割超平面对数据进行 识别、预测。从LDA降维后数据分布特征可知,应用 线性SVM分类器就能较好地对不同老化等级的T91 金属进行分类,图8为LDA-SVM模型对实验数据测 试集老化等级的预测结果。



图 8 LDA-SVM模型对测试集的预测结果 Fig. 8 LDA-SVM model prediction results on test set

采用 LDA-SVM 模型进行 T91 钢老化等级分类的准确率为94.58%,比 LDA-KNN 模型的准确率高。 比较图 7 和图 8,能够发现 2 种评估模型误判的测试 集样本类别具有相似性(对 2、3、4 级的误判较多),这 是因为在使用 LDA 降维后,2、3、4 级的类别较为 靠近。

除了应用LDA、KNN、SVM构建评估模型,还 训练得到了PCA-KNN、PCA-SVM评估模型在实验 数据测试集上的分类准确率,采用不同模型得到的 测试集分类准确率如表2所示。表中,PCA和LDA 是选用的降维方法,KNN和SVM是选用的分类算 法。可以看出,LDA-SVM模型的分类准确率最高, PCA-SVM分类准确率最低。而PCA-KNN分类准 确率远高于PCA-SVM模型,这是由于经PCA降维 后不同类别的数据有所混合,这时难以使用线性 SVM进行类别划分,但KNN能很好地识别、处理各 个类别。

表 2 各模型的测试集分类准确率 Table 2 Test set classification accuracy of each model

Dimension reduction mothed	Accuracy / %	
Dimension reduction method	KNN	SVM
PCA	93.33	66.25
LDA	94.17	94.58

综上所述,相较于基于PCA降维的老化等级评估 模型,结合LDA降维的评估模型均具有更高的分类准 确率。这说明应用LDA降维后的数据进行模型训练, 能有效提升分类算法的准确度,且LDA-SVM模型评 估金属老化等级的准确度最高,效果最好。

# 4 结 论

耐热钢服役状态诊断对运行及生产安全具有重要 意义。为推进LIBS耐热钢老化诊断的实际应用进 程,基于便携式LIBS设备,针对T91耐热钢开发构建 高效稳定的老化分析模型。首先,采用PCA与LDA 对不同老化等级金属样品的光谱数据进行降维处理, 并对比2种降维方法的模型优化效果,发现LDA降维 的数据能够达到较好的聚类效果,在分类任务中能够 提高分类模型的准确率。然后,基于LDA降维的数据 探究建模方法,分别采用KNN和SVM算法建立金属 老化等级模型,结果表明LDA-SVM模型分类准确率 最高,可达94.58%。综上所述,当获取数据有明确标 签类别时,在使用LDA降维的基础上结合SVM对不 同老化等级T91金属进行分类能够令便携式LIBS设 备取得良好的分类效果。该方法对LIBS在耐热钢状 态诊断方面的实际应用具有一定的优化和指导意义。

#### 参考文献

- Ratier A, Feraud P, Chalon F, et al. An X-ray diffraction method to improve fatigue fracture surface analysis[J]. Journal of Failure Analysis and Prevention, 2016, 16(3): 369-375.
- [2] Zárate B A, Caicedo J M, Yu J G, et al. Deterministic and probabilistic fatigue prognosis of cracked specimens using acoustic emissions[J]. Journal of Constructional Steel Research, 2012, 76: 68-74.
- [3] Chandra K, Kain V, Bhutani V, et al. Low temperature thermal aging of austenitic stainless steel welds: Kinetics and effects on mechanical properties[J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, 534: 163-175.
- [4] Yi Y S, Shoji T. Quantitative evaluation of material degradation of thermally aged duplex stainless steels using chemical immersion test[J]. Journal of Nuclear Materials, 1996, 240(1): 62-69.
- [5] Yang L, Zhang Y H, Liu J M, et al. Spectral preprocessing to improve accuracy of quantitative detection of elemental Cr in austenitic stainless steel by laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Review of Scientific Instruments, 2022, 93(3): 033002.
- [6] Ke C, Li Y, Liu X, et al. Application of laser induced breakdown spectroscopy for fast depth profiling analysis of type 316 stainless steel parts corroded by liquid lithium [J]. Fusion Engineering and Design, 2018, 136: 1647-1652.

- [7] Lu S Z, Dong M R, Chen Q F, et al. Temporal-spatial resolved laser-induced breakdown spectroscopy of T91 steel of different aging grades[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2019, 151: 1-11.
- [8] Lu S Z, Dong M R, Huang J W, et al. Estimation of the aging grade of T91 steel by laser-induced breakdown spectroscopy coupled with support vector machines[J]. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2018, 140: 35-43.
- [9] Huang J W, Dong M R, Lu S Z, et al. Estimation of the mechanical properties of steel *via* LIBS combined with canonical correlation analysis (CCA) and support vector regression (SVR) [J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2018, 33(5): 720-729.
- [10] 余移山,陆继东,董美蓉,等.T91金属管道表面特性对LIBS测量的影响[J].应用科技,2020,47(4):82-87. Yu Y S, Lu J D, Dong M R, et al. Study on the influence of surface characteristics of T91 metal pipeline on laser-induced breakdown spectroscopy measurement [J]. Applied Science and Technology, 2020, 47(4): 82-87.
- [11] Zhang Y S, Dong M R, Cai J B, et al. Study on the evaluation of the aging grade for industrial heat-resistant steel by laser-induced breakdown spectroscopy[J]. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2022, 37(1): 139-147.
- [12] 张勇升,董美蓉,蔡俊斌,等.基于便携式激光诱导击 穿光谱技术的耐热钢老化等级评估[J]. 冶金分析, 2020,40(12):86-93.
  Zhang Y S, Dong M R, Cai J B, et al. Estimation of the aging grade of heat-resistant steel based on portable laserinduced breakdown spectroscopy[J]. Metallurgical Analysis, 2020,40(12):86-93.
  [13] Cai J B, Dong M R, Zhang Y S, et al. Estimating the
- aging grade of heat-resistant steel by using portable laserinduced breakdown spectroscopy[J]. Atomic Spectroscopy, 2021, 42(2): 43-50.
- [14] 白伟洋,陈蔚芳,杨成杰,等.基于LIBS技术的不锈钢 精细分类方法[J].激光与光电子学进展,2022,59(23): 2330001.
   Bai W Y, Chen W F, Yang C J, et al. Fine classification

method of stainless steel based on LIBS technology[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(23): 2330001.

[15] 文大鹏,梁西银,苏茂根,等.激光诱导击穿光谱技术 结合 PCA-PSO-SVM 对矿石分类识别[J].激光与光电 子学进展,2021,58(23):2314006.
Wen D P, Liang X Y, Su M G, et al. Classification of ores using laser-induced breakdown spectroscopy combined with PCA-PSO-SVM[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2021,58(23):2314006.