LIBS技术用于钢水元素的定量分析与研究

摘要 激光诱导击穿光谱（LIBS）在液态合金钢中的定量分析已经取得了很大的进展，为了提高预测精确度，本文将聚类方法结合偏最小二乘法应用在冶金工业中来测定钢水中的的元素浓度。实验结果表明，测量的相对标准误差低于1.316%，平均绝对误差为0.869%，该方法比传统偏最小二乘法测量精度有了很大的提高，测量相对标准误差明显降低。

关键词 激光诱导击穿光谱 定量分析 偏最小二乘法 相对标准误差

**1.引言**

原料及产品化学成分的快速检测是冶金过程的重要环节。目前普遍采用湿法化学分析法、火花发射光谱法、X射线荧光光谱法等，需要现场抽样和处理，再送到实验室进行分析，等待分析结果的时间长，造成产品质量波动及能源的严重浪费[2]。

虽然市场上也有一些快速分析仪器，但都无法在冶金生产过程中实现在线应用。 激光诱导击穿光谱（LIBS）也称为激光诱导等离子体光谱，它是一种基于分析原子发射光谱的成分分析测试技术。它利用高能激光脉冲照射材料，使得被激光照射的区域由于瞬间吸收巨大的能量导致材料中原子的气化电离，从而在照射区附近区域产生大量的处于激发态的原子和离子而形成等离子体。这些不稳定的离子或原子从高能态跃迁回到低能态时，就会发射出与这些原子中电子能级差能量对应的发射谱线[2]。因此，通过分析发射谱线强度随波长（能量）的分布情况，就可以测出材料中的元素的种类和含量了。激光诱导击穿光谱与其它元素技术分析相比有很大优点，如可以进行全元素分析，样品无需预处理，样品形式不限，灵敏度高，可以进行实时分析等。

LIBS光谱图的横坐标对应的是波长，纵坐标对应的是光谱强度，通过特征谱线的波长位置可以定性分析元素种类，通过谱线的强度能够定量分析该种元素的含量。但是受样品不均匀、烧蚀条件不稳定、谱线自吸收效应和基体效应等因素的影响，又导致LIBS光谱具有很大的不稳定性，使得对元素的定量分析不能达到预期的目标，因而，如何通过光谱强度和元素浓度之间建立合适的关系，实现优化定标是钢水冶炼中对元素在线测量的一个重要问题。

本文提出了一套由激光诱导击穿光谱技术结合偏最小二乘法和聚类方法用在钢水冶炼中的定量分析，用来测定元素的浓度。聚类方法结合偏最小二乘法预测钢水元素浓度，对于一个未知样品，我们并不知道它属于哪个浓度区间，为此，我们采用聚类分析的办法判别其所属的浓度区间，然后再使用偏最小二乘算法对其进行含量预测。