

تعیین سختی فرورفتگی و آنالیز آلیاژهای فولادی زنگ نزن به روش بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری

محمد وحید دستجردی، سید جبار موسوی و محمود سلطان الکتابی

گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۰۵/۲۵؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۰۸/۲۳)

چکیده

سختی سطح، یکی از ویژگی‌های مهم آلیاژها می‌باشد که اندازه‌گیری آن با روش‌های مکانیکی مرسوم با چالش‌هایی همراه است. در این پژوهش ما از بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری (LIBS) به عنوان یک روش جایگزین برای روش‌های مکانیکی مرسوم برای اندازه‌گیری سختی سطح آلیاژهای مختلف، استفاده کردیم. پس از ثبت بیناب مربوط به نمونه‌های آلیاژی به منظور شناسایی سختی سطح نمونه‌های مورد بررسی از روش k - نزدیکترین همسایه (KNN) استفاده شد که نتایج نشان داد روش LIBS-KNN قابلیت تفکیک و شناسایی سختی سطح نمونه‌ها را با دقت ۹۳٪ دارد. همچنین رهیافت درجه بندی به منظور تشخیص در صد عناصر سازنده آلیاژها و همچنین سختی سنجی آنها مورد بررسی قرار گرفت که نتایج این پژوهش در این رابطه نشان داد که رابطه خطی مناسبی بین خطوط گسیلی ثبت شده از بیناب LIBS نمونه‌های آلیاژی و در صد عناصر سازنده آلیاژها و عدد سختی ویکرز نمونه‌ها وجود دارد. بنابراین با توجه به مزایای منحصر به فرد روش LIBS همچون آنالیز سریع و غیرمخرب و قابلیت سیار بودن، می‌توان برخی از مشکلات روش‌های سختی سنجی مکانیکی مرسوم را حذف کرد.

واژه‌های کلیدی: بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری، سختی فرورفتگی، آلیاژها

۱. مقدمه

به طور کلی معمولاً سختی حاکی از مقاومت در برابر تغییر شکل بوده و برای کسی که با آزمایش مواد سروکار دارد به احتمال زیاد سختی به معنی مقاومت در برابر فرورفتگی است. تست سختی به طور گسترده‌ای در بازرسی‌ها و کنترل قطعات مورد استفاده قرار می‌گیرد. به طور کلی بسته به نحوه اجرای آزمایش سختی، می‌توان آزمون‌های موجود را به سه دسته کلی تقسیم بندی نمود:

- ۱- آزمون سختی الاستیک^۱ (سختی برگشت یا انعکاس)
- ۲- آزمون سختی خراش^۲ (مقاومت در برابر برش یا سایش)
- ۳- آزمون سختی فرورفتگی^۳ (مقاومت در برابر فرورفتگی). در بین این سه روش، آزمون سوم و روش‌های مختلف آن از مهم‌ترین ابزارهای مهندسی به شمار می‌آیند [۱ و ۲]. در این

۱. Elastic hardness test

۲. Scratch hardness test

۳. Penetration hardness test

جدول ۱. درصد عناصر تشکیل دهنده آلیاژهای مورد آزمون و عدد سختی ویکرز مربوط به هر نمونه.

%	نمونه ۱	نمونه ۲	نمونه ۳	نمونه ۴	نمونه ۵
	(۲۲۲۷VHN)	(۲۷۶۷VHN)	(۱۳۸۷VHN)	(۲۵۲۷VHN)	(۳۲۸۷VHN)
C	۰,۰۴	۰,۰۳	۰,۰۵	۰,۰۶	۰,۰۸
Si	۰,۵۳	۰,۵۴	۰,۳۸	۰,۷۷	۰,۴۶
Mn	۱,۷۲	۱,۱۸	۰,۵۹	۲,۰۰	۱,۰۵
Cr	۱۶,۶۰	۲۲,۳۰	۱۷,۱۰	۱۷,۵۰	۱۷,۳۴
Ni	۱۰,۸۰	۴,۰۲	۸,۵۲	۱۰,۰۰	۶,۸۷
Mo	۲,۰۰	۰,۱۸	۲,۴۶	۰,۳۰	۰,۱۵
Ti	-	-	-	۰,۵۵	-
Cu	۰,۱۹	۰,۳۶	۰,۳۵	۰,۴۰	۰,۲۰
نام استاندارد نمونه‌ها	SS۳۱۶L	DSS۲۲۰۵	SS۳۱۶	SS۳۲۱	۱۷-VPH

عدد سختی ویکرز که یکی از روش‌های گزارش سختی فرورفتگی است، سختی سنجی شدند، سپس این آلیاژها مورد آزمایش بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری قرار گرفتند، این روش یکی از روش‌های بیناب نمایی گسیل اتمی است که بر اساس آشکارسازی و آنالیز گسیل‌های پلاسمای نمونه استوار است. در این پژوهش امکان تفکیک آلیاژها با سختی متفاوت با استفاده از بیناب ثبت شده و مدل k - نزدیک‌ترین همسایگی^۱ به عنوان یکی از روش‌های کمومتریکس^۲ را مورد بررسی قرار می‌دهیم. همچنین رهیافت درجه بندی به منظور تشخیص در صد عناصر سازنده و همچنین سختی سنجی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۲. مواد و روش‌ها

۱.۲. نمونه‌های مورد آنالیز

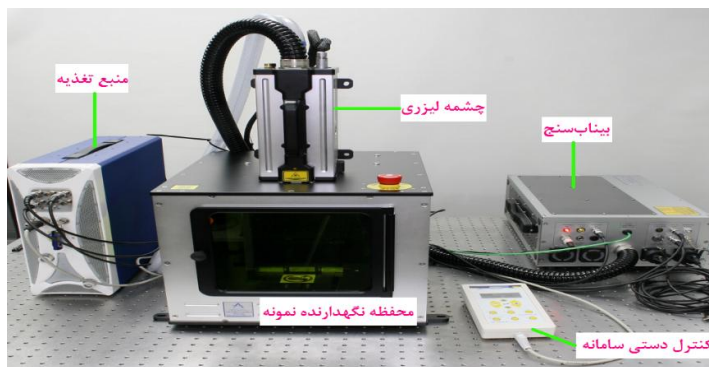
در این پژوهش پنج آلیاژ فولادی در محدوده سختی ۱۳۰ تا ۳۳۰ انتخاب گردید. آلیاژهای انتخابی در کاربردهایی که نیاز به شکل پذیری، سختی بالا و حداقل اعوجاج در عملیات حرارتی هستند، مناسب می‌باشند درجه سختی نمونه‌ها توسط دستگاه سختی سنج مدل EMCO Test MODEL M4U به صورت عدد سختی ویکرز^۳ (VHN) تعیین شد. نتایج اندازه‌گیری‌ها در جدول ۱ آورده شده است. همچنین به منظور بالا بردن دقت آنالیز، سطح تمامی این آلیاژها صیقل داده شدند.

۱. K-nearest neighbors

۲. Chemometrics

۳. Vickers hardness number

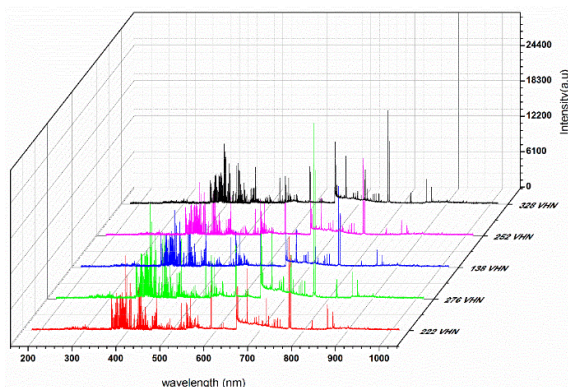
آزمون که به آزمون سختی نفوذ نیز شناخته می‌شود، میزان سختی را به وسیله مقاومت جسم در مقابل فرورونده می‌سنجند. آزمون سختی فرورفتگی با محدودیت‌هایی روبه‌رو است که عبارتند از: ۱- صاف شدن گلوله فولادی فرو رونده که باعث اشتباه در عدد سختی حاصله می‌شود، بدین لحاظ باید گلوله‌ها مرتب مورد بازرسی قرار گیرند. ۲- نمونه بایستی ضخامت کافی داشته باشد، این امر به دلیل است که روی سطحی که فرورونده داخل آن می‌رود هیچ گونه برآمدگی یا پوسته کردنی نباید به وجود آید بدین منظور حداقل ضخامت پیشنهادی برای هر نمونه ۱۰ برابر عمق فرورونده می‌باشد. ۳- همچنین اگر نمونه بلند باشد بایستی به طریقی محکم نگه داشته شود تا در طی آزمایش کج نشود. برای نمونه‌های استوانه‌ای یا لوله بایستی از یک سندان با شکاف V شکل جهت نگه داشتن نمونه استفاده گردد [۱، ۲]. پژوهش‌هایی که تاکنون با استفاده از روش بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری (LIBS) به منظور اندازه‌گیری سختی سطح صورت گرفته مربوط به بیو سرامیک‌ها است. بیو سرامیک‌ها، سرامیک‌هایی با طراحی خاص هستند که در ترمیم و نوسازی اعضاء معلول یا مصدوم بدن در پزشکی مورد استفاده قرار می‌گیرند [۳]. در این پژوهش به دنبال بررسی سختی سنجی به روش بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری به جای استفاده از روش‌های مرسوم سختی سنجی هستیم تا بدین وسیله محدودیت‌های روش‌های مرسوم سختی سنجی را برای اندازه‌گیری سختی نمونه‌های صنعتی برطرف کنیم. به همین منظور تعدادی از آلیاژهای صنعتی انتخاب و با استفاده از



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایه سامانه LIBS.

۲.۲. روش بررسی

بیناب‌نمایی فروشکست القایی لیزری (LIBS) یکی از روش‌های بیناب‌نمایی گسیل اتمی است که بر اساس آشکارسازی و آنالیز گسیل‌های پلاسماهای نمونه استوار است. در این روش، ابتدا نمونه مورد تحلیل توسط یک لیزر تپی با توان بالا مورد تابش قرار گرفته و بلافاصله بعد از جذب انرژی لیزر توسط نمونه، ترکیبات آن تبخیر شده و سپس یک پلاسما با دما و چگالی بالا و حاوی تمام عناصر موجود در نمونه شکل می‌گیرد. با گسترش پلاسما و سرد شدن آن گونه‌های یونی، اتمی و مولکولی مرتبط با عناصر موجود در نمونه شروع به گسیل کرده که با ثبت این گسیل‌ها توسط بیناب‌سنج و تحلیل طول موج‌ها و شدت‌های گسیلی می‌توان به اطلاعات کیفی و کمی از گونه‌های موجود در نمونه دست یافت. از جمله مزایای روش LIBS می‌توان به آنالیز همزمان چند عنصری، قابلیت سیار بودن، غیر مخرب بودن، قابلیت آشکارسازی درجا و آنی، توانایی آنالیز ماده در هر سه حالت جامد، مایع و گاز، عدم نیاز و یا نیاز کم به آماده‌سازی نمونه اشاره کرد [۴]. برای آنالیز نمونه‌ها در این تحقیق از سامانه LIBSCAN ۱۰۰ ساخت شرکت Applied Photonics استفاده شده است. این سامانه مجهز به لیزر Nd:YAG با انرژی خروجی متغیر تا ۱۰۰ mJ، پهنای تپ 2 ± 7 ، بسامد تکرار ۱ تا ۲۰ Hz بوده که بیناب پلاسما تولیدی توسط آشکارساز مدل A-۱۳-۰۱-۲۰ شرکت Avantes ثبت می‌گردد. توانایی تفکیک پذیری دستگاه در نواحی مختلف طول موجی بین ۰/۳ nm تا ۰/۱۵ nm بوده و



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمونه‌ای از بیناب ثبت شده از آلیاژها با عدد سختی ویکرز (VHN) متفاوت.

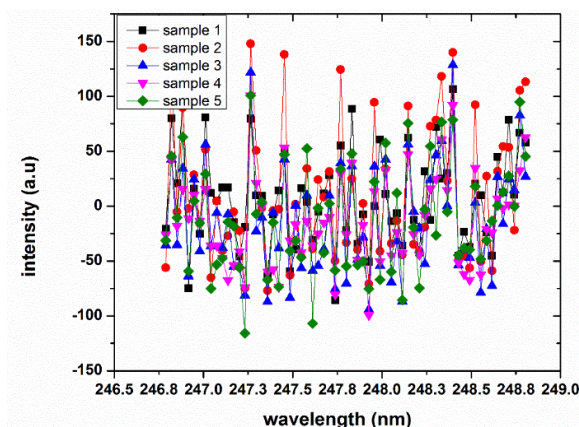
قابلیت بیناب‌نگاری در ناحیه طول موجی ۱۸۰ تا ۱۰۵۷ نانومتر را دارا می‌باشد. سامانه LIBS مورد استفاده در این پژوهش در شکل ۱ نشان داده شده است.

نمونه‌ای از بیناب ثبت شده از آلیاژها در شکل ۲ نشان داده شده است. همچنین قله‌های بینابی مربوط به عناصر مختلف در طول موج‌های مشخصه آنها، با استفاده از پایگاه‌های اطلاعاتی بین‌المللی موجود [۵، ۶] شناسایی و در جدول ۲ گزارش شده است. همچنین شایان ذکر است بیناب نمونه‌ها در اتمسفر هوا ثبت شد و از یک مدار تاخیر انداز الکترونیکی با قابلیت اعمال تاخیر $1.3 \mu s$ جهت بهبود ثبت گسیل‌ها با بیشینه نسبت سیگنال به نوفه استفاده شد. از هر نمونه آلیاژ ۳۵ بیناب ثبت و با میانگین‌گیری از هر ۵ بیناب در نهایت ۷ بیناب برای هر عدد سختی تهیه شد.

تعدادی از طول موج‌های ذکر شده در جدول ۲ مربوط به عناصر اصلی سازنده آلیاژ مانند کروم، نیکل، مولیبدن و تعدادی

جدول ۲. طول موج‌های مورد استفاده برای آشکارسازی عناصر.

عناصر مورد تحلیل	طول موج آشکارسازی شده (nm)
Fe II	(۲۵۷, ۵۷)
Fe I	(۳۷۳/۴۸, ۳۵۸/۱۱, ۴۰۴/۵۸, ۴۳۸/۳۵, ۳۶۳/۱۴, ۳۶۴/۷۸, ۳۸۱/۲۹, ۳۹۲/۲۹, ۴۰۷/۱۷, ۴۴۰/۴۷, ۵۳۹/۷۱)
Cr I	(۳۵۷/۸۶, ۴۲۵/۴۳, ۴۲۷/۴۸, ۴۲۸/۹۷)
Ni I	(۳۶۱/۹۳)
Mo I	(۳۷۹/۸۲)
Al I	(۳۹۴/۴۰, ۳۹۶/۸۴)
Ti	(۳۸۸/۲۸)
Mn I	(۴۰۳/۴۴, ۴۰۳/۰۷)
Cu I	(۴۶۵/۱۱)
Ca II	(۳۹۳/۳۶, ۳۹۶/۸۴)
Ca I	(۴۲۲/۶۷)
Na I	(۵۸۱/۹۹, ۵۸۹/۵۹)
K I	(۷۶۶/۴۸, ۷۶۹/۸۹)
C I	(۱۹۳/۰۹, ۲۴۷/۸۵, ۹۰۹/۴۸)

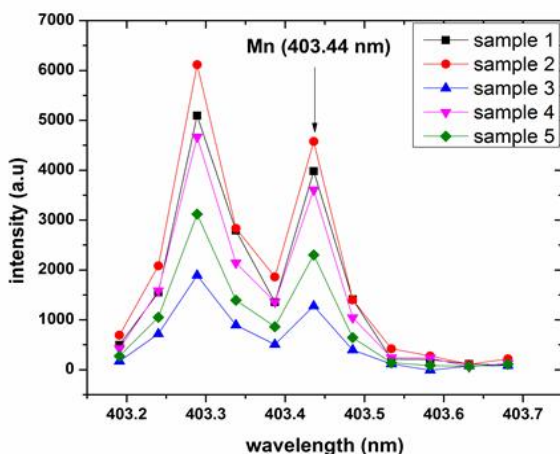


شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) بیناب ثبت شده از نمونه‌های آلیاژی در محدوده طول موجی ۲۴۷ نانومتر.

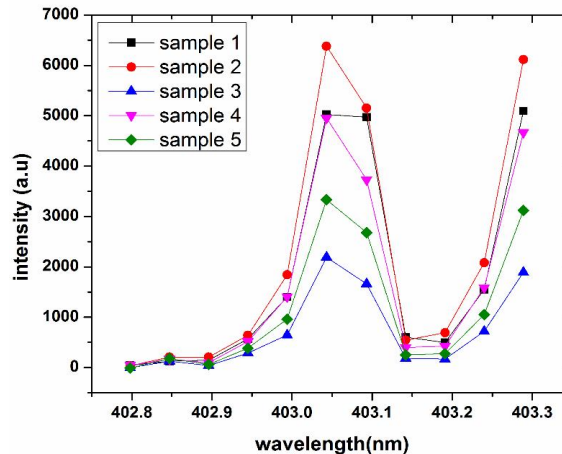
۰٫۰۸ درصد) کمتر از حد آشکارسازی مربوط به طول موج‌های مختلف کربن در این پژوهش است، توانایی آشکارسازی کربن توسط سامانه مورد استفاده در این پژوهش وجود نداشت. بیناب ثبت شده از کربن در طول موج ۲۴۷٫۸۵ nm که یکی از طول موج‌های اصلی برای آشکارسازی اتم کربن است در شکل ۳ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود هیچ قله‌ای مربوط به این طول موج برای هیچ از یک از ۵ نمونه مورد بررسی مشاهده نمی‌شود. در شکل ۲

از این طول موج‌ها مربوط به ناخالصی‌هایی چون K, Ca, Ti و Na است.

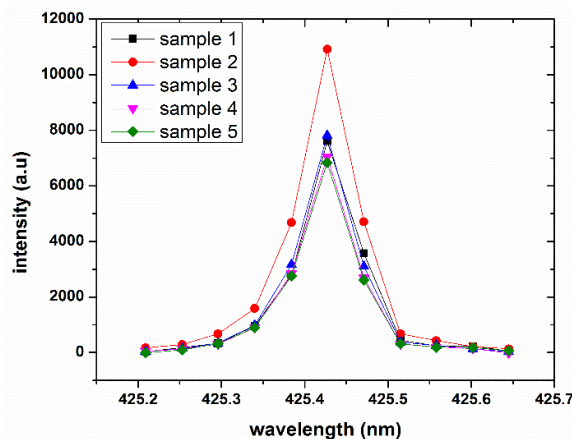
یکی از عوامل مهم در افزایش سختی و یکپارچگی آلیاژهای فولادی مربوط به مقدار کربن و کروم در آنها است. کربن به شدت موجب تردی آلیاژهای فولادی و از طرفی افزایش سختی و یکپارچگی خواهد شد که به تنهایی مسئول بخش به نسبت بالایی از سختی مورد بررسی است، کروم هم به عنوان یکی از عناصر مهم در آلیاژهای فولادی نقش به سزایی در رفتارهای متنوع فولاد دارد، کروم در آلیاژهای فولادی با تشکیل لایه اکسیدی بر سطح به شدت سختی سطحی را افزایش می‌دهد. بنابراین در این پژوهش سعی می‌شود در قدم اول به منظور سختی سنجی و تفکیک آلیاژهایی با سختی متفاوت، امکان استفاده از خطوط گسیلی مربوط به عناصر کربن و کروم در بیناب ثبت شده از نمونه‌های مورد آزمایش، مورد بررسی قرار گیرد. به همین منظور در ابتدا طول موج‌های مختلف مرتبط با اتم کربن در بازه‌های مختلف طول موجی مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که به دلیل این که آلیاژهای مورد بررسی در این پژوهش آلیاژهای کم کربنی هستند و در صد کربن موجود در آلیاژهای مورد بررسی (در صد بسیار کم در محدوده ۰٫۰۳ الی



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) بیناب ثبت شده از آلیاژهای مختلف در طول موج ۴۰۳/۴۴ نانومتر مربوط به عنصر منگنز.



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) بیناب ثبت شده از آلیاژهای مختلف در طول موج ۴۰۳/۰۷ نانومتر مربوط به عنصر منگنز.



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) بیناب ثبت شده از آلیاژهای مختلف در طول موج ۴۲۵/۴۳ نانومتر مربوط به عنصر کروم.

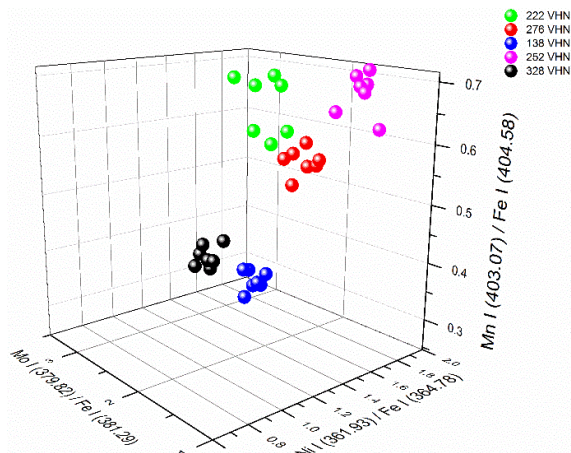
الی ۶ مشاهده می‌شود، از این عناصر در ادامه در رهیافت درجه بندی به منظور سختی سنجی استفاده خواهد شد.

در فرایند بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری (LIBS) به دلایلی نظیر برقرار نشدن کندگی استکیومتری به خوبی (اگر نسبت ترکیبات در حجم پلاسما با نسبت ترکیبات در نمونه یکسان باشد کندگی استکیومتری رخ می‌دهد) و یا پدیده خود جذبی (جذب شدن بخشی از تابش مربوط به یک عنصر در مرکز پلاسما توسط لایه سردتر بیرونی پلاسما) و یا واکنش‌های شیمیایی داخل پلاسما، ممکن است تغییر در شدت در یک خط گسیلی به طور مستقیم از یک نمونه نسبت به نمونه دیگر متناسب با تغییر یک ویژگی متناظر با آن عنصر،

هم در محدوده ۲۴۷/۸ نانومتر، این موضوع آشکار است.

البته در صورت داشتن دوربین‌های ICCD^۱ که توانایی تقویت سیگنال را دارند می‌توان عناصری با مقدار بسیار کم مانند کربن در نمونه مورد بررسی در این پژوهش را آشکارسازی کرد، اما دوربین‌های ICCD بسیار گران قیمت هستند و به همین دلیل در دسترس همه نیستند. بنابراین در این پژوهش امکان استفاده از عنصر کربن برای بررسی سختی نمونه‌ها وجود ندارد و سعی می‌شود از نقش سایر عناصر در این رابطه استفاده شود. بیناب ثبت شده مربوط به طول موج‌های مختلف متناظر با عناصر کروم و منگنز در شکل‌های ۴

۱. Intensified charge-coupled device



شکل ۷. رنگی در نسخه الکترونیکی تعدادی از متغیرهای تفکیک کننده آلیاژها با سختی متفاوت.

آنها مشخص است آموزش می‌دهیم و سپس با استفاده از مدل طراحی شده تشخیص می‌دهیم آلیاژهایی با سختی مجهول دارای چه سختی هستند. این مدل‌ها نیاز به پارامترهای ورودی دارند که این ویژگی را داشته باشند که داده را از هم تفکیک کنند. در این پژوهش از شدت‌های نسبی $Ni(361.93 \text{ nm}) / FeI(363.14 \text{ nm})$ ، $Ni(361.93 \text{ nm}) / FeI(364.78 \text{ nm})$ ، $Mo(379.82 \text{ nm}) / Fe(381.20 \text{ nm})$ و $Mn(403.07 \text{ nm}) / FeI(404.58 \text{ nm})$ به عنوان پارامترهای ورودی مدل KNN استفاده شد. در شکل ۷، سه تا از متغیرهای مورد استفاده مربوط به آلیاژهایی با سختی متفاوت نشان داده شده است، همان طور که مشاهده می‌شود با استفاده از این پارامترها آلیاژهای با سختی متفاوت از هم تفکیک می‌شوند.

برای پیدا کردن این متغیرهای تفکیک کننده که به عنوان ورودی مدل طبقه بندی آلیاژها مورد استفاده قرار می‌گیرد از پارامتر آماری لامبدای ویلکس استفاده شد. اعداد کمتر مربوط به این پارامتر برای هر متغیر مرتبط با سهم بیشتر این متغیر در ایجاد تفکیک بین گروه‌ها یا همان آلیاژها با سختی متفاوت است [۷]. اعداد محاسبه شده لامبدای ویلکس مربوط به ۲۰ نسبت شدت در جدول ۳ و نمودار مربوط به آنها در شکل ۸ نشان داده شده است. بنابراین ما ۵ نسبت شدت اول که دارای کمترین مقدار لامبدای ویلکس بودند را به عنوان ورودی مدل

مثلاً سختی نمونه یا مقدار عنصر نباشد. بنابراین کار رایجی که در حوزه این علم برای حل این مشکل انجام می‌شود این است که با بررسی همه شدت‌های گسیلی مختلف، به جای استفاده مستقیم از خود این شدت‌ها، به پیدا کردن متغیرهای هوشمند که می‌توانند ترکیب خطی از شدت‌ها گسیلی اولیه و یا نسبت آنها باشند، می‌پردازند. این متغیرهای جدید این خصوصیت را دارند که بیشترین وابستگی را به آن ویژگی (سختی سطح و یا در صد عنصر سازنده در نمونه‌های مختلف) دارند. در ادامه نشان خواهیم داد که با استفاده از شدت خطوط گسیلی مربوط به عنصر کروم (مجموع شدت‌ها در طول موج‌های nm ۳۵۷/۸۶ و nm ۴۲۵/۴۳ و nm ۴۲۷/۴۸) نسبت به عنصر منگنز (شدت در طول موج nm ۴۰۳/۳۳) منحنی درجه بندی با بیشترین ضریب همبستگی را برای سختی سنجی خواهیم داشت و در واقع سختی سطح در بیناب LIBS نمونه‌های مورد بررسی با این نسبت شدت به صورت خطی متناسب است که مبین نقش کروم در ایجاد سختی سطح در آلیاژهای مورد بررسی است. در ارتباط با همین موضوع همانطور که در شکل های ۴ و ۵ مشاهده می‌شود یکی از پدیده‌های ذکر شده (خود جذبی، واکنش‌های شیمیایی، عدم برقراری کندگی استکیومتری) باعث شده تا شدت خطوط گسیلی مربوط به منگنز در نمونه ۴ از نمونه‌های ۱ و ۲ پایین‌تر باشد این در حالی است که نمونه ۴ در صد منگنز بیشتری نسبت به نمونه‌های ۱ و ۲ دارد، حال در ادامه نشان خواهیم داد که نسبت شدت گسیلی در این دو طول موج به عنوان یک متغیر هوشمند یک رابطه خطی مناسب با میزان عنصر منگنز دارد و با استفاده از این نسبت شدت می‌توان میزان منگنز را در نمونه‌های مجهول تشخیص داد.

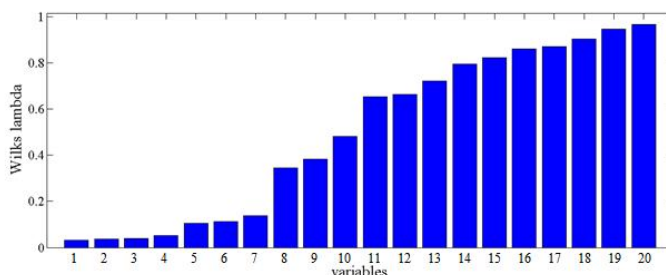
۳. روش تجزیه و تحلیل داده‌ها

۳.۱. مدل k - نزدیک‌ترین همسایگی

در این پژوهش به منظور طبقه بندی آلیاژهای مورد بررسی از مدل k - نزدیک‌ترین همسایگی استفاده می‌کنیم. منظور از طبقه بندی طراحی مدلی است که ابتدا آن را با نمونه‌هایی که ماهیت

جدول ۳. مقادیر محاسبه شده و مرتب شده مربوط به پارامتر لامبدای ویلکس.

شماره نسبت شدت‌های گسیلی	عناصر و طول موج (nm) نسبت شدت‌های گسیلی	لامبدای ویلکس (Wilks lambda)
۱	Mn I (۴۰۳/۰۷) / Fe I (۴۰۴/۵۸)	۰,۰۳۱۶۶۷
۲	Ni I (۳۶۱/۹۳) / Fe I (۳۶۴/۸۸)	۰,۰۳۷۸۲۹
۳	Mo I (۳۷۹/۸۲) / Fe I (۳۸۱/۲۹)	۰,۰۳۹۷۴۱
۴	Mn I (۴۰۳/۴۴) / Fe I (۴۰۷/۱۷)	۰,۰۵۰۹۲۵
۵	Ni I (۳۶۱/۹۳) / Fe I (۳۶۳/۱۴)	۰,۱۰۵۳۲
۶	Al I (۳۹۴/۴۰) / Fe I (۳۹۲/۲۹)	۰,۱۱۱۸۷
۷	Ni I (۳۶۱/۹۳) / Fe I (۳۷۳/۴۸)	۰,۱۳۶۷۴
۸	Cu I (۴۶۵/۱۱) / Fe I (۴۴۰/۴۷)	۰,۳۴۴۷۵
۹	Al I (۳۹۶/۸۴) / Fe I (۳۹۲/۲۹)	۰,۳۸۲۶۶
۱۰	Cr I (۴۲۷/۴۸) / Fe I (۴۰۴/۵۸)	۰,۴۸۳۲۳
۱۱	Ti (۳۳۸/۲۸) / Fe I (۳۸۱/۲۹)	۰,۶۵۲۹۵
۱۲	Cr I (۴۲۷/۴۸) / Fe I (۴۳۸/۳۵)	۰,۶۶۳۳۲
۱۳	Cr I (۴۲۵/۴۳) / Fe I (۴۰۴/۵۸)	۰,۷۲۳۳۵
۱۴	Cr I (۴۲۸/۹۷) / Fe I (۴۰۴/۵۸)	۰,۷۹۴۵۶
۱۵	Ca II (۳۹۳/۳۶) / Ca I (۴۲۲/۶۷)	۰,۸۲۴۱۷
۱۶	Cr I (۴۲۸/۹۷) / Fe I (۴۳۸/۳۵)	۰,۸۶۰۲۶
۱۷	Fe II (۲۵۷/۵۷) / Fe I (۳۷۳/۴۸)	۰,۸۷۲۶۸
۱۸	Cr I (۴۲۵/۴۳) / Fe I (۴۳۸/۳۵)	۰,۹۰۴۶۲
۱۹	Cr I (۳۵۷/۸۶) / Fe I (۳۵۸/۱۱)	۰,۹۴۶۷۴
۲۰	Cr I (۳۵۷/۸۶) / Fe I (۳۷۳/۴۸)	۰,۹۶۸۵۳



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار مقادیر مرتب شده (از کوچک به بزرگ) لامبدای ویلکس مربوط به متغیرهای مختلف.

به کار گرفته شده است [۸، ۹]. در حالت کلی از این الگوریتم به دو منظور استفاده می‌شود: برای تخمین تابع چگالی توزیع داده‌های تعلیم و برای طبقه بندی داده‌های آزمون براساس الگوهای تعلیم. برخلاف توابع انتقالی کلاسیک مدل نزدیک‌ترین همسایگی از هیچ تابع ریاضی از پیش تعریف شده‌ای برای تخمین متغیرهای مختلف استفاده نمی‌کند. به طور کلی می‌توان گفت که مدل نزدیک‌ترین همسایگی یکی از روش‌های داده کاوی می‌باشد که هدف کلی آن طبقه بندی و

طبقه بندی کننده، مورد استفاده قرار دادیم.

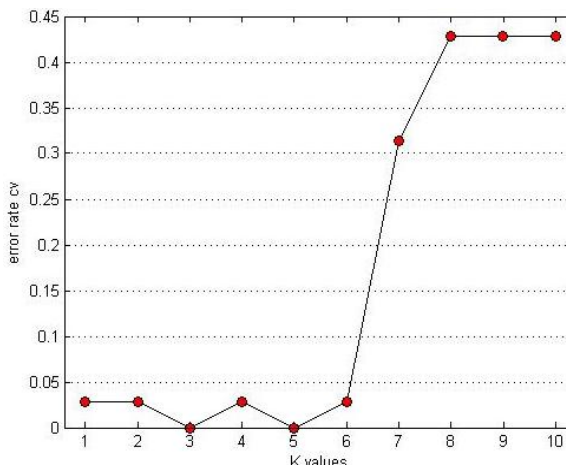
مدل k - نزدیک‌ترین همسایگی یک مدل غیرپارامتریک است. استفاده از الگوریتم‌های غیر پارامتریک در مواردی که نحوه ارتباط بین ورودی و خروجی از قبل به طور کامل مشخص نباشد، سودمند و مؤثر خواهد بود. الگوریتم k - نزدیک‌ترین همسایگی، یکی از مهم‌ترین و توسعه یافته‌ترین رویکردهای غیرپارامتریک می‌باشد که در بسیاری از پژوهش‌های نوین جهت تشخیص الگو و طبقه بندی‌های آماری

مراحل در این مدل به شمار می‌آید و میزان کارایی این روش به طور قابل ملاحظه‌ای به کیفیت انتخاب نزدیک‌ترین (مشابه‌ترین) نمونه‌ها از داده‌های بانک مرجع بستگی دارد. اگر k مقداری کوچک فرض شود، نتایج نسبت به تک نقطه‌های نامتعارف مدل حساس می‌باشد و در صورتی که k مقداری بزرگ انتخاب گردد امکان قرار گرفتن نقاطی از دیگر کلاس‌ها در محدوده مورد نظر وجود دارد. معمولاً بهترین مقدار k با استفاده از عملیات ارزشیابی متقاطع^۳ قابل محاسبه می‌باشد. در این پژوهش به منظور طراحی مدل KNN از نرم‌افزار متلب استفاده و مقدار بهینه k با استفاده از تکنیک ارزشیابی متقاطع تعیین شد. در شکل ۹ میزان دقت در تکنیک ارزشیابی متقاطع جهت تعیین مقدار k بهینه نمایش داده شده است. همان طور که در شکل ۹ مشاهده می‌شود، مقدار $k=3$ دارای کمترین میزان خطا می‌باشد، لذا این مقدار k برای مدل نزدیک‌ترین همسایگی استفاده می‌شود.

در این پژوهش از ۷۰٪ از داده‌ها برای آموزش و ۳۰٪ از داده‌ها برای آزمودن مدل استفاده شد که میزان نرخ گروه بندی صحیح مدل که از مقایسه خروجی مدل KNN با ماهیت واقعی داده‌های آزمون به دست آمد برابر ۹۳٪ بود. در ضمن باید توجه شود که میزان طبقه بندی صحیح ذکر شده مربوط به کل سیستم مورد استفاده در این تحقیق است و فقط مربوط به مدل KNN نیست. برای مثال ممکن است به علت ناپایداری لیزر، متغیرهای ثبت شده در بیناب یک آلیاژ متفاوت با سایر هم گروهی‌های خود باشد و آلیاژ به اشتباه در گروه دیگری دسته بندی شود. البته با افزایش تعداد بیناب ثبت شده از هر نمونه می‌توان عملکرد سیستم را به مراتب افزایش داد. ولی این کار مستلزم صرف زمان بیشتری خواهد بود.

۲.۳. رهیافت درجه بندی

یکی از مهم‌ترین روش‌های تحلیل کمی در LIBS استفاده از منحنی‌های درجه بندی است. در این روش به شرط وجود چند نمونه مرجع که عناصر تشکیل دهنده آنها، مشابه عناصر موجود



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تکنیک ارزشیابی متقاطع برای تعیین مقدار بهینه k .

تخمین ویژگی‌های یک مجموعه از داده‌های مجهول با توجه به بیشترین شباهت این داده‌ها با داده‌های معلوم که در همسایگی (نزدیکی) آنها قرار دارند، می‌باشد [۱۰، ۱۱]. در این مدل داده‌های آزمون^۱ با توجه به نزدیک‌ترین فاصله نسبت به داده‌های آموزش^۲ طبقه بندی می‌شوند. نخستین گام در استفاده از این مدل یافتن روش و رابطه‌ای برای محاسبه فاصله بین داده‌های مورد آزمایش و داده‌های آموزش می‌باشد. معمولاً برای تعیین فاصله بین داده‌های آموزش و داده‌های آزمایش از فاصله اقلیدسی استفاده می‌شود:

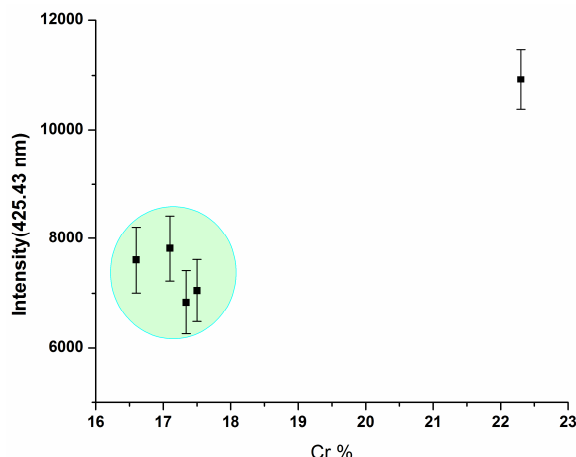
$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2} \quad (1)$$

که در آن X نماینده داده‌های آموزش با پارامترهای مشخص $(X_1$ تا $X_n)$ و Y نماینده داده‌های آزمایش با همان تعداد پارامترهای مشخص $(Y_1$ تا $Y_n)$ می‌باشد. پس از تعیین فاصله اقلیدسی بین داده‌ها، نمونه‌های بانک داده به ترتیب صعودی از کمترین فاصله (حداکثر تشابه) تا بیشترین فاصله (حداقل تشابه) از نمونه مورد نظر طبقه بندی و ارزش گذاری می‌شوند. قدم بعدی در این مدل یافتن تعداد نقاطی (k) از داده‌های آموزش برای تخمین ویژگی‌های بانک داده مورد نظر می‌باشد. تعیین تعداد همسایه‌ها (k)، یکی از کلیدی‌ترین و مهم‌ترین

۱. Test data

۲. Training data

۳. Cross validation



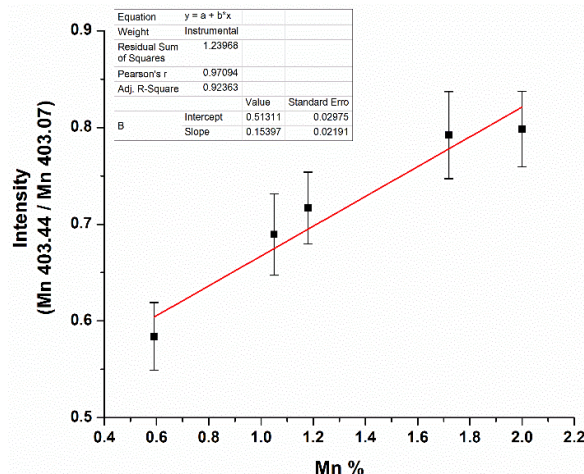
شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) شدت خط گسیلی (۴۲۵،۴۳ nm) و درصد عنصر کروم در آلیاژهای مورد آنالیز.

منحنی درجه بندی برای عناصری مانند کروم، باید در صداهای کروم در آلیاژها تنظیم شود و پس از ساخت آلیاژهای جدید از آنها برای رسم منحنی درجه بندی استفاده کرد.

همچنین با استفاده از رهیافت درجه بندی می توان به سختی سنجی نیز پرداخت، به همین منظور پس از رسم نمودارهای درجه بندی با شدت‌های متناظر با طول موج‌های مختلف، مشخص شد که با استفاده از شدت خطوط گسیلی مربوط به عنصر کروم (مجموع شدت‌ها در طول موج‌های (۳۵۷/۸۶ nm، ۴۲۵/۴۳ و ۴۲۷/۴۸) نسبت به عنصر منگنز (شدت در طول موج ۴۰۳/۳۳ nm) منحنی درجه بندی با بیشترین ضریب همبستگی را برای سختی سنجی خواهیم داشت و در نتیجه از این نمودار درجه بندی می توان برای تعیین عدد سختی ویکرز آلیاژها به روش LIBS استفاده کرد، این نمودار در شکل ۱۲ نشان داده شده است.

۴. نتیجه گیری

هدف از این پژوهش به کارگیری روش بیناب نمایی فروشکست القایی لیزری در تعیین سختی فرورفتگی آلیاژها بود. برای رسیدن به این هدف از روش‌های k - نزدیک‌ترین همسایه به عنوان یک روش طبقه بندی و همچنین رهیافت درجه بندی استفاده شد. نرخ تشخیص صحیح سختی نمونه‌های مجهول

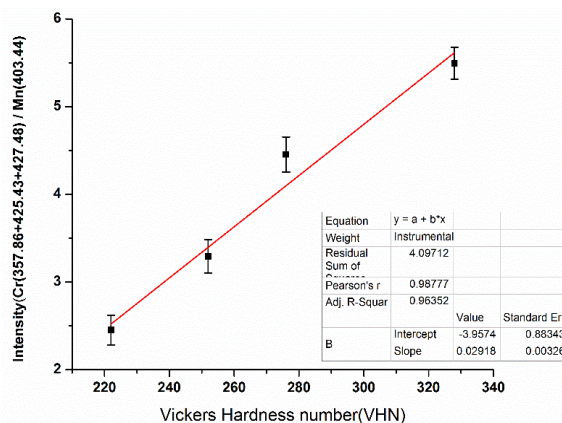


شکل ۱۰. (رنگی در نسخه الکترونیکی) منحنی درجه بندی برای عنصر منگنز.

در نمونه مورد آزمایش باشند، می توان منحنی درجه بندی را رسم نموده و توسط این منحنی با استفاده از شدت خطوط اندازه گیری شده از نمونه آزمون، یک یا چند ویژگی متناظر با هر نمونه را به دست آورد. در این پژوهش نشان خواهیم داد که رابطه معناداری بین سیگنال گسیلی از عناصر سازنده آلیاژها و درصد عناصر تشکیل دهنده وجود دارد. در انتخاب نمونه‌های مرجع برای رسم منحنی درجه بندی باید نمونه‌ها به گونه‌ای انتخاب شوند که درصد عنصر مورد نظر در یک نمونه نسبت به نمونه دیگر بیشتر از حد آشکار سازی^۱ آن عنصر باشد تا سیگنال گسیلی آنها قابل تمیز باشد. با استفاده از آلیاژهای مورد آنالیز در این پژوهش، بنابر دلیل گفته شده، تنها برای برخی از عناصر می توان منحنی درجه بندی استخراج کرد که منحنی درجه بندی استخراج شده برای عنصر منگنز در شکل ۱۰ نمایش داده شده است. برای عناصری مانند کروم هم با استفاده از آلیاژهای مورد مطالعه در این پژوهش نمی توان منحنی درجه بندی رسم کرد چون در صداهای کروم در آلیاژهای مختلف به هم بسیار نزدیک و کمتر از حد آشکار سازی است و بنابراین طبق جدول ۱ برای آلیاژهایی با در صد کروم ۱۷،۷، ۱۷،۱، ۱۷،۳۴ و ۱۶،۶ شدت‌های گسیلی تقریباً یکسان است. این موضوع در شکل ۱۱ و ۶ مشهود است. در نتیجه برای رسم

۱. Limit of detection

روش LIBS از رهیافت درجه بندی استفاده شد که وجود یک رابطه خطی مناسب با ضریب همبستگی خوب نشان داد که می توان از روش درجه بندی به در صد عناصر سازنده پی برد. بنابراین به روش LIBS می توان هم زمان با سختی سنجی آلیاژ به اطلاعات دیگری نظیر در صد عناصر سازنده هم دست یافت. علاوه بر این به دلیل این که سامانه های LIBS می توانند سامانه هایی بسیار هم باشند و حتی قابلیت آنالیز از راه دور را دارند از آنها می توان در مکان هایی که امکان استفاده از دستگاه های سختی سنجی مرسوم وجود ندارد به عنوان یک روش جدید استفاده کرد. چون روش LIBS برای آنالیز ماده تنها در حدود یک میکرو گرم از ماده را تبخیر می کند دیگر در روش LIBS نیازی نیست ضخامت پیشنهادی برای هر نمونه ۱۰ برابر عمق فرو رونده باشد. همچنین سختی سنجی با روش معرفی شده در این پژوهش مشکلاتی نظیر صاف شدن گلوله فولادی فرو رونده و نیاز به محکم نگه داشتن نمونه های بلند در روش های مکانیکی سختی سنجی را برطرف می کند.



شکل ۱۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) منحنی درجه بندی برای تعیین عدد سختی ویکرز آلیاژها.

برای مدل KNN برابر ۹۳٪ به دست آمد، همچنین یک منحنی درجه بندی با ضریب همبستگی بالا به دست آمد که از آن می توان برای سختی سنجی آلیاژها استفاده کرد. از این روش ها می توان برای انجام فرایند کنترل کیفیت در کارخانه برای آزمودن محصول نهایی استفاده کرد و می توان با سرعت بالا مطمئن شد که آیا آلیاژ تولید شده دارای سختی مورد نظر هست یا نه. همچنین برای بررسی در صد عناصر سازنده آلیاژها به

مراجع

1. S H Avner, "Introduction to physical metallurgy", (1964).
2. G E Dieter, and D J Bacon, "Mechanical metallurgy" McGraw-Hill New York (1986).
3. J S Cowpe et al., *Spectrochimica Acta Part B* **66** (2011) 290.
4. S Musazzi, U Perini, "Laser-induced breakdown spectroscopy", *Springer Series in Optical Sciences*, **182**. ISBN 978-3-642-45084-6. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014 (2014) 1.
5. NIST, "Atomic spectra database," <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>.
6. Z Trzebiatowska et al., *Laser Physics and Applications* (2013) Mar 15 (pp. 87700B-87700B). International Society for Optics and Photonics.
7. J Sánchez, K V MARDIA, J T KENT, and J M BIBBY, "Multivariate Analysis", *Biometrical Journal* **24** (1982) 502.
8. Q Godoi et al., *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* **66** (2011) 138.
9. O Beckonert et al., "Analytica Chimica Acta" **490**, (2003) 3.
10. T Cover, and P Hart, "IEEE transactions on information theory" **13** (1967) 21.
11. R. M. Balabin et al., *Analytica Chimica Acta* **671**, (2010) 27.