

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS  
INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



*Proyecto Fin de Carrera*  
**IDENTIFICACIÓN DE LÍNEAS DE EMISIÓN  
PARA LA MONITORIZACIÓN DE LA  
CALIDAD EN PROCESOS DE SOLDADURA  
DE TIPO TIG**

**(Identification of emission lines for quality  
monitoring of TIG welding processes)**

Para acceder al Título de

**INGENIERO TÉCNICO DE TELECOMUNICACIÓN**

Autor: Fernando Ceballos Bárcena

Julio - 2013



E.T.S. DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACION

## **INGENIERÍA TÉCNICA DE TELECOMUNICACIÓN**

### **CALIFICACIÓN DEL PROYECTO FIN DE CARRERA**

**Realizado por: Fernando Ceballos Bárcena**

**Director del PFC: Jesús María Mirapeix Serrano**

**Título:** “Identificación de líneas de emisión para la monitorización de la calidad en procesos de soldadura de tipo TIG”

**Title:** “Identification of emission lines for quality monitoring of TIG welding processes”

**Presentado a examen el día: 30 de Julio de 2013**

para acceder al Título de

### **INGENIERO TÉCNICO DE TELECOMUNICACIÓN, ESPECIALIDAD EN SISTEMAS ELECTRÓNICOS**

Composición del Tribunal:

Presidente (Apellidos, Nombre): Cobo García, Adolfo

Secretario (Apellidos, Nombre): Mirapeix Serrano, Jesús María

Vocal (Apellidos, Nombre): Quintela Incera, María Ángeles

Este Tribunal ha resuelto otorgar la calificación de: .....

Fdo.: El Presidente

Fdo.: El Secretario

Fdo.: El Vocal

Fdo.: El Director del PFC  
(sólo si es distinto del Secretario)

Vº Bº del Subdirector

Proyecto Fin de Carrera Nº  
(a asignar por Secretaría)

# AGRADECIMIENTOS

Quisiera agradecer en estas líneas, a toda la gente que me ha ayudado y me ha apoyado a lo largo de todos estos años, con especial dedicación...

*A mis padres Fernando e Isabel, porque gracias a ellos he llegado a ser la persona que soy. Gracias por vuestro apoyo y ayuda incondicional, vuestros ánimos y por todo en general: no soy nada sin vosotros.*

*A mi hermana Ana y mi cuñado Aytor, por ser un ejemplo a seguir y un pilar fundamental en mi vida.*

*A mis tíos y primos, por todos los momentos que han pasado conmigo y todo lo que me han ayudado cuando los he necesitado.*

*A mis padrinos Luis y Conchi porque siempre se acuerdan de mí a pesar del trabajo o la distancia.*

*A mi tutor de proyecto, Jesús María Mirapeix, por su paciencia, ayuda y dedicación durante este proyecto.*

*A mis compañeros de Universidad, por los largos días de biblioteca, nervios ante los exámenes... y por aguantarme. En especial a Marta, Lara, Raúl, Elisa, Edgar, Vanesa, Alba, Adrián, Cristina, Fran y Sonia. Sé que me llevo amigos de verdad y para siempre.*

*A mis amigos Ana, Rafi, Mónica, Caco, Lirio, Natalia, Silvia, Chema, Lucía, Nieves, Sofía, Raquel... ..muchas gracias por todo.*

*A mis compañeros del trabajo en Eroski durante tres años y compañeros de casetas: Mónica, Carmen, Miguel, Bea, Elisa, Javi y mi "abu" preferida: Eva.*

*A mis compañeros y amigos del baloncesto, en especial a Eva y Sandra.*

*Y en especial a mis abuelos: Patricio, Tadea, Julián y Juana. Aunque no todos se encuentran entre nosotros estoy seguro que se sentirán orgullosos de mí como yo de ellos.*

*No hay día que no me acuerde de vosotros y estaba deseando que llegaría este día para dedicaros este trabajo que tanto me ha costado. Día a día, os llevo en mi corazón y nadie me podrá borrar la cantidad de momentos que he pasado con vosotros. No os olvidéis nunca de mí, porque yo nunca os voy a olvidar. Os quiero.*

*Gracias por estar ahí*

# ÍNDICE

<b>1. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>8</b>
1.1 Contexto .....	8
1.2 Motivación.....	9
1.3 Objetivos.....	10
1.4 Organización del documento .....	10
<b>2. INTRODUCCIÓN TEÓRICA .....</b>	<b>11</b>
2.1 La soldadura .....	11
2.2 Historia de la soldadura .....	12
2.3 La soldadura TIG.....	14
2.4 El espectro electromagnético.....	15
2.5 Monitorización de procesos de soldadura.....	16
2.6 Espectroscopía de emisión de plasmas .....	17
2.7 Espectrometría de ruptura inducida por láser (LIBS).....	19
2.8 Espectrómetros: Calibración de los espectros y Resolución.....	21
2.9 Técnicas de procesado de espectros ópticos .....	24
2.9.1 Adquisición de datos .....	24
2.9.2 Ecuación y correlación espectral .....	27
2.9.3 Eliminación de la radiación de fondo.....	28
2.9.4 Detección de líneas .....	29
2.9.5 Modelados de los picos: Algoritmos sub-píxel.....	30
2.9.6 Identificación de las líneas de emisión.....	32
2.9.6.1 Base de datos NIST .....	32
2.10 Punto de partida.....	33
2.10.1 Estudio o conocimiento previo.....	34
2.10.2 Nuevo algoritmo.....	36
2.10.3 Resolución del espectrómetro .....	36
2.10.4 Estimación Te .....	38
2.11 Análisis de los componentes principales e independientes .....	38
2.11.1 Descripción del algoritmo PCA .....	40
2.11.2 Descripción del algoritmo ICA .....	43
2.11.3 Algoritmos PCA e ICA en procesos de soldadura .....	45
<b>3. PROGRAMA REALIZADO.....</b>	<b>49</b>
3.1 Introducción y descripción .....	49
3.1.1 Lenguaje C#.....	49
3.1.2 Interfaz gráfica .....	49
3.1.3 Lectura de archivos BKE: Librería OOWrapper.....	50
3.1.4 Representación del espectro: Zedgraph.....	51
3.1.5 Suavizado del espectro.....	53
3.1.6 Búsqueda de picos: Algoritmo del centroide CDA.....	54
3.1.7 Identificación de picos .....	56
3.1.8 Opciones.....	58
3.2 Resultados.....	59
3.2.1 Espectros utilizados.....	59
3.2.2 Experimento nº1.....	60
3.2.3 Experimento nº2.....	67
3.2.4 Resultados ante el ajuste de la ventana de búsqueda.....	75
3.3 Análisis PCA e ICA en datos de soldadura .....	79
3.3.1 Datos HR4000.....	81
3.3.2 Datos USB2000.....	84
3.3.3 Datos USB650.....	86
<b>4. CONCLUSIÓN Y LINEAS FUTURAS .....</b>	<b>90</b>
4.1 Conclusiones.....	90
4.2 Líneas futuras .....	91
<b>5. BIBLIOGRAFÍA.....</b>	<b>92</b>

# ÍNDICE DE FIGURAS

<b>2. INTRODUCCIÓN TEÓRICA.....</b>	<b>11</b>
Figura 2.1. Proceso de soldadura de arco.....	11
Figura 2.2. Herreros .....	12
Figura 2.3. La soldadura fue importante en el desarrollo de los aviones de guerra .....	13
Figura 2.4. Soldadura TIG .....	15
Figura 2.5. El espectro electromagnético.....	16
Figura 2.6. Espectro de emisión del Hidrógeno.....	18
Figura 2.7. Esquema de una instalación típica LIBS .....	20
Figura 2.8. Esquema del funcionamiento de un espectrómetro I.....	22
Figura 2.9. Esquema del funcionamiento de un espectrómetro II.....	22
Figura 2.10. Resolución espectral .....	23
Figura 2.11. Representación del esquema del procesado propuesto para la estimación de la temperatura electrónica del plasma en tiempo real.....	24
Figura 2.12. Ejemplo de espectro del plasma capturado durante la realización de experimentos de soldadura TIG .....	25
Figura 2.13. Curvas de Planck para diferentes temperaturas del cuerpo negro .....	26
Figura 2.14. Curva de la eficiencia del sensor FBG y la fibra óptica. ....	27
Figura 2.15. Espectros una vez eliminada la radiación de fondo.....	29
Figura 2.16. Picos detectados en el espectro.....	30
Figura 2.17. Estimación de la longitud de onda central de una línea de emisión en un espectrómetro basado en CCD.....	31
Figura 2.18. Picos detectados en el espectro utilizando el algoritmo del Centroide.....	31
Figura 2.19. Ejemplo de información ofrecida por la base de datos de espectros atómicos del NIST .....	32
Figura 2.20. Catalogación de los picos .....	34
Figura 2.21. Catalogación incorrecta de la línea de emisión .....	35
Figura 2.22. Catalogación correcta de la línea de emisión.....	35
Figura 2.23. Catalogación de los picos mediante la nueva identificación .....	36
Figura 2.24. Espectrómetros basados en CCD.....	37
Tabla 2.25. Propiedades de los espectrómetros basados en CCD.....	37
Figura 2.26. Tras la transformación lineal (rotación) apenas existe varianza con respecto $y_l$ .....	39
Figura 2.27. Esquema del proceso del algoritmo PCA .....	42
Figura 2.28. Proceso del algoritmo <i>Fast-ICA</i> .....	45
Figura 2.29. Procesamiento de la información espectral .....	46
Figura 2.30. Componentes de la aleación 5A06 .....	46
Figura 2.31. Espectro recogido .....	46
Figura 2.32. Escala de grises de la matriz de correlación .....	47
Figura 2.33. Coeficientes de los componentes principales primero y segundo identificados.....	48
<b>3. PROGRAMA REALIZADO .....</b>	<b>49</b>
Figura 3.1. Interfaz gráfica inicial.....	49
Figura 3.2. Interfaz gráfica una vez cargado el espectro.....	50
Figura 3.3. Datos del archivo BKE.....	51
Figura 3.4. Entorno gráfico muestra 1 .....	52
Figura 3.5. Entorno gráfico muestra 88 .....	52
Figura 3.6. Espectro inicial y posterior al suavizado .....	53
Figura 3.7. Picos detectados aplicando el suavizado .....	53
Figura 3.8. Búsqueda y Representación de Picos (Pestaña Opciones).....	55
Figura 3.9. Longitud de onda de los picos detectados sin aplicar algoritmo CDA.....	55
Figura 3.10. Longitud de onda de los picos detectados aplicando algoritmo CDA .....	55

Figura 3.11. Catalogación de picos (Pestaña Opciones).....	56
Figura 3.12. Base de datos NIST .....	56
Figura 3.13. Pestaña Identificación.....	57
Figura 3.14. Consultas Online dentro de la pestaña Identificación.....	58
Figura 3.15. Ejemplo de la consulta de las líneas de Argón entre 400 y 405 nm .....	58
Figura 3.16. Ejemplo de la consulta mediante Google Académico .....	59
Figura 3.17. Primer archivo .bke .....	60
Figura 3.18. Cordón de la soldadura de Ti 6Al-4V.....	60
Figura 3.19. Espectro inicial y suavizado con un factor de 50.....	61
Figura 3.20. Picos detectados sin utilizar y utilizando el algoritmo del CDA .....	62
Figura 3.21. Composición soldadura de Titanio (Ti 6Al-4V).....	63
Figura 3.22. Fichero de entrada del primer y tercer estudio previo. ....	63
Figura 3.23. Catalogación de los picos detectados con la primera base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.....	64
Figura 3.24. Catalogación de los picos detectados con la segunda base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.....	65
Figura 3.25. Catalogación de los picos detectados sin conocimiento previo con las dos bases de datos NIST .....	66
Tabla 3.26. Resultados obtenidos sin aplicar el algoritmo del centroide .....	66
Tabla 3.27. Resultados obtenidos aplicando el algoritmo del centroide .....	67
Figura 3.28. Archivo .bke .....	67
Figura 3.29. Cordón de la soldadura de Inconel 718 .....	68
Figura 3.30. Espectro inicial y suavizado con un factor de 50.....	69
Figura 3.31. Picos detectados sin utilizar y utilizando el algoritmo del CDA .....	69
Figura 3.32. Composición soldadura de Inconel 718.....	70
Figura 3.33. Fichero de entrada del estudio previo del Inconel 718 .....	70
Figura 3.34. Catalogación de los picos detectados con la primera base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.....	71
Figura 3.35. Catalogación de los picos detectados con la segunda base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.....	72
Figura 3.36. Catalogación de los picos detectados sin conocimiento previo con las dos bases de datos NIST .....	73
Tabla 3.37. Resultados obtenidos sin aplicar el algoritmo del centroide .....	73
Tabla 3.38. Resultados obtenidos aplicando el algoritmo del centroide .....	74
Figura 3.39. Espectro recogido con el espectrómetro USB2000 .....	75
Figura 3.40. Espectro recogido con el espectrómetro HR4000.....	76
Figura 3.41. Espectros recogidos a partir de la misma soldadura pero diferente espectrómetro .	77
Figura 3.42. Picos detectados empleando diferentes valores de la ventana de búsqueda para el mismo espectro .....	78
Figura 3.43. Composición soldadura de acero inoxidable ASI-304 .....	79
Figura 3.44. Cordón soldadura de acero inoxidable ASI-304 sin defectos.....	79
Figura 3.45. Espectro soldadura de acero inoxidable ASI-304.....	80
Figura 3.46. Proceso empleado .....	80
Figura 3.47. Componentes independientes recogidos por espectrómetro HR4000.....	81
Figura 3.48. Componentes independientes por separado.....	82
Figura 3.49. Ejemplo búsqueda mediante Google Académico .....	84
Figura 3.50. Componentes independientes recogidos por espectrómetro USB2000 .....	85
Figura 3.51. Ejemplos búsqueda mediante Google Académico.....	86
Figura 3.52. Componentes independientes recogidos por espectrómetro USB650 .....	87



# 1.INTRODUCCIÓN

## 1.1 Contexto

Las variantes de soldadura por arco y láser son procesos de fabricación muy importantes en diferentes sectores entre los que destacan el sector del automóvil, el energético (en particular el nuclear), el aeronáutico o incluso el aeroespacial. Por lo tanto, la calidad de la soldadura tiene una gran relevancia: de esta calidad depende por ejemplo la durabilidad del material, es decir, la seguridad. Todo ello implica que las temáticas referentes al aseguramiento de la calidad en procesos de soldadura constituyan en la actualidad una línea activa de investigación.

Por ilustrar lo anteriormente comentado, un defecto de soldadura en una pieza metálica utilizada con posterioridad en un automóvil, podría finalizar con: un fallo en el vehículo, un accidente de tráfico, etc. En otros casos como por ejemplo en el área nuclear o aeronáutico, como en la turbina de un avión, los efectos o consecuencias de un defecto podrían ser aún peores.

Con el fin de evitar la aparición de defectos en las soldaduras existen unas altas exigencias recogidas en unos estándares/normas que los procesos implicados deben cumplir. En ocasiones, la aparición de ciertas imperfecciones, al menos de manera absoluta, pueden ser muy complicadas de evitar, debido a los múltiples factores y parámetros que intervienen. Hay que pensar que existe un amplio rango de parámetros de entrada que controlar, como puede ser la tensión y corriente de soldadura, el flujo y tipo del gas de protección, la velocidad de avance, la preparación de las juntas de soldadura, la limpieza de las piezas, la temperatura y humedad del ambiente, etc.

Para evitar desviaciones con respecto a la calidad requerida se realizan pruebas y ensayos en laboratorios que certifiquen el cumplimiento de dichos estándares/normas, pero, pese a todo, en la mayoría de los casos a la hora de realizar las soldaduras existe la posibilidad de que aparezcan ciertos defectos.

Existen muchas técnicas no destructivas muy efectivas para comprobar la calidad de las soldaduras pero éstas se realizan una vez el proceso ha finalizado, por lo que no se puede actuar en tiempo real sobre ningún parámetro de entrada. Por ello, en la actualidad, se ha incrementado la investigación en técnicas de monitorización *online* (en tiempo real, durante el proceso), como la medida de la tensión entre electrodos, cámaras de visión artificial y señales acústicas captadas con micrófonos, que garantizan que los cordones resultantes están libres de imperfecciones identificando secciones defectuosas y pudiendo tomar decisiones *in situ* sobre reparaciones o modificaciones de las variables del proceso.

Un tipo particular de monitorizado se basa en el análisis espectroscópico de la luz generada durante el proceso. En este caso se utilizan espectrómetros basados en dispositivos de carga acoplada CCD (*Charge-Coupled Device*) que son capaces de recoger la luz emitida del plasma térmico que se genera en la soldadura.

## 1.2 Motivación

La posibilidad de disponer de una herramienta capaz de monitorizar y analizar en tiempo real el estado y calidad de una soldadura es una gran ventaja para la industria, porque se puede vigilar el proceso y corregir defectos sin tener que esperar al final de dicho proceso. Algunas de las posibles ventajas son: el aumento del rendimiento y de la productividad, la reducción de los costes de re-elaboración de productos y también la reducción de los tiempos utilizados ante posibles defectos, aparte de una mejor comprensión del proceso que pueda redundar en una optimización del mismo.

Por otro lado la automatización de un proceso también en ocasiones es obligatoria debido a circunstancias como un aumento de la producción, el requerimiento de la mejora de la calidad, necesidad de bajar los costos de la producción, el encarecimiento de la materia prima o la necesidad de brindar seguridad al personal. Sin embargo, esta automatización solo será viable si al evaluar los beneficios económicos o sociales de las mejoras, son mayores a los costos de operación y mantenimiento del sistema.

Además, en la actualidad el uso de la espectroscopía óptica de plasma como técnica para soldadura láser o de arco, recopilando y procesando las líneas de emisión de los espectros del plasma formado durante el proceso de soldadura, se considera como una solución eficaz gracias a la información espectral de las diferentes especies atómicas presentes que se pueden relacionar con la calidad y otros parámetros de la soldadura.

Sin embargo, el procesado de las líneas de emisión y su identificación, en ocasiones, no es el correcto debido a la dificultad de la detección e identificación de los picos. Por identificación se entiende el proceso correspondiente a asignar a cada una de las líneas que aparecen en el espectro, en primer lugar su especie atómica y, en segundo lugar, su grado de ionización, es decir, se trata de asignar a cada línea su ión (o átomo neutro) asociado.

Una vez obtenido el espectro se debe realizar la estimación y eliminación de la radiación de fondo existente, lo que implica un posible filtrado y suavizado y a continuación la detección, modelado e identificación/catalogación de ciertas líneas de emisión, para poder estimar/concretar con ello la calidad de la soldadura por medio de una variable de monitorización.

En muchas ocasiones la identificación de las líneas se realiza manualmente cometiendo algún error y lo que es peor, implicando la no completa automatización del proceso, y todos los problemas que ello conlleva. En otras, los algoritmos utilizados automáticamente en el proceso no resuelven completamente el problema, realizándose identificaciones incorrectas que pueden finalizar en falsas alarmas o defectos no detectados.

Por lo tanto parece evidente que es necesario desarrollar una herramienta amigable para el usuario que permita estudiar la identificación de las líneas de emisión, lo que ayudaría a determinar de una manera más precisa la calidad de una soldadura mediante la subsiguiente generación de una variable de salida, como puede ser la temperatura electrónica del plasma  $T_e$ .

### 1.3 Objetivos

El objetivo de este proyecto es desarrollar una herramienta mediante un programa informático (software) en lenguaje C# (bajo la plataforma de *Visual Studio .NET*) amigable que permita la lectura/visualización en tiempo real de un espectro de emisión de una soldadura de manera automática. Específicamente el software se aplicará a la captura de espectros de emisión de plasmas térmicos generados en el proceso de soldaduras industriales tipo TIG.

En especial hincapié se tendrá en cuenta a la hora de procesar los datos, la utilización de un algoritmo para una más ajustada identificación de las líneas de emisión y poder así distinguir las diferentes especies atómicas para después relacionarlas con la calidad de la soldadura. Se estudiará el diseño de la herramienta para que un usuario cualificado pueda analizar los datos ofrecidos y buscar posibles resultados incorrectos.

Además, dentro de las estrategias de procesado contempladas, se estudiará la viabilidad del empleo del Análisis de Componentes Independientes (ICA) y del Análisis de Componentes Principales (PCA) como apoyo a la correcta identificación de las diferentes líneas espectrales.

### 1.4 Organización del documento

Este documento se divide en las siguientes secciones:

- El Capítulo 2 está dedicado a una pequeña introducción teórica acerca de la historia de la soldadura, la monitorización de procesos de soldadura, la espectroscopía de emisión (plasma), las técnicas de procesado, la base de datos NIST, la calibración de espectros, las técnicas LIBS y los objetivos prioritarios de la identificación de líneas de emisión, incluyendo un análisis de las técnicas del proceso del Análisis de Componentes Principales (PCA) e Independientes (ICA).
- El Capítulo 3 describe el funcionamiento del programa realizado, detallando cada uno de los bloques utilizados y una guía que sirva como manejo del software desarrollado. También se añaden y comentarán los resultados/respuestas obtenidas al identificar las líneas de emisión de varios espectros. Por último se añaden los resultados del estudio e identificación de varias series de datos a partir del proceso del Análisis de Componentes Independientes (ICA) en tres espectros de soldadura capturados por medio de diferentes espectrómetros.
- El Capítulo 4 resumen las conclusiones del trabajo realizado y posibles líneas de investigación en el futuro.
- Y por último, el Capítulo 5, recoge la bibliografía consultada para la realización de este proyecto.

## **2. INTRODUCCIÓN TEÓRICA**

### **2.1 La soldadura**

La soldadura es una de las tecnologías que más se ha desarrollado en los últimos años y que en nuestro país cada vez toma mayor importancia en los procesos relacionados con la construcción y mantenimiento en diferentes industrias.

En la actualidad se puede observar un avance importante en lo relacionado a nuevos materiales industriales, los cuales conllevaran al desarrollo de nuevos materiales de aporte y a una mayor automatización de los procesos de soldadura.

La soldadura tiene una gran importancia comercial y tecnológica porque proporciona una unión permanente; la unión puede ser incluso más fuerte que los materiales originales, y constituye la forma más económica para unir componentes en términos de costos de fabricación no limitándose al ámbito de fábrica.



Figura 2.1. Proceso de soldadura de arco

En cuanto a las limitaciones o desventajas potenciales de la soldadura se puede comentar que: las operaciones en su mayoría son manuales y elevadas en términos de costo de mano de obra, implican el uso de mucha energía y por consiguiente son costosos y peligrosos, no permiten un desensamble adecuado y que algunos defectos que pueden reducir la resistencia de la unión son difíciles de detectar.

La soldadura se entiende como un proceso de fabricación en donde se realiza la unión de dos materiales metálicos o en ocasiones plásticos, que consiste en una fusión de materiales como resultado de la aplicación de calor o de una acción química (que no se tratará en profundidad en este trabajo).

Existen dos formas básicas de soldadura. La soldadura por fusión u homogénea, que involucra la fusión de los metales que están siendo unidos, y la soldadura de fase sólida.

La soldadura de fase sólida se define como el procedimiento que permite unir piezas metálicas con un metal de aporte, fundido con temperatura de fusión inferior a la de una de las piezas que moje el metal de base y que no participa por fusión en la formación de la unión (la presión y la fricción por si solas también pueden soldar metales). Esta soldadura se puede dividir en soldadura blanda o fuerte. En la soldadura por fusión u homogénea los dos bordes de las superficies a unir son calentados por encima de su punto de fusión, y si es necesario, se añade metal de aportación para rellenar el hueco de la unión.

Estas soldaduras se pueden dividir a su vez en soldaduras por fusión con el metal en estado líquido (entre las que se encuentra la soldadura eléctrica con gases) y las soldaduras por presión con el material en estado pastoso. Dentro de las soldaduras por fusión se ha resaltado la soldadura eléctrica con gases por estar dentro de este grupo la soldadura TIG (Tungsten Inert Gas / Gas Inerte Tungsteno) en la cual se centrará este trabajo.

## 2.2 Historia de la soldadura

La historia de la unión de metales se remonta hasta un punto lejano, siendo los primeros herreros los primeros grandes soldadores de la historia. Los primeros avances se produjeron en la Edad Media, en la soldadura de fragua, con la que los herreros repetidamente golpeaban y calentaban el metal hasta que ocurría la unión. Estos herreros eran importantes en las comunidades porque la técnica era dominada por muy pocos y los metales eran usados para herramientas y armamento, ambos de gran importancia en ese tiempo.



Figura 2.2. Herreros

En esta época, la soldadura consistía en el calentamiento de objetos hasta que un metal llegara a una temperatura que se intuía por el color de los objetos (este trabajo se basa en la misma idea con la utilización de un espectrómetro que permite observar con detalle la luz emitida por los metales) para a continuación, martillar rápidamente los dos objetos. Los artesanos del Renacimiento fueron muy habilidosos en el proceso, y la industria continuó creciendo.

Durante el siglo XIX, la soldadura tuvo un gran avance. Humphry Davy descubrió el arco eléctrico (1800) y Nikolai Slavyanov y C.L.Coffin continuaron con las invenciones de los electrodos de metal. Incluso la soldadura por arco de carbón, que usaba un electrodo de carbón, ganó popularidad.

Más tarde, A.P.Strohmenger lanzó un electrodo de metal recubierto en Gran Bretaña (1900), que dio un arco más estable, y la soldadura de corriente alterna fue inventada (C.J.Holslag 1919). Además, en el siglo XIX, fue inventada la soldadura de termita (1893), y alrededor de ese tiempo, se estableció otro proceso: la soldadura a gas.

Al principio, la soldadura de gas fue uno de los más populares métodos de soldadura debido a su portabilidad y costo relativamente bajo. Sin embargo, a medida que progresaba el siglo XX, bajó en las preferencias para las aplicaciones industriales.

En gran parte fue sustituida por la soldadura de arco, en la medida que continuaron siendo desarrolladas las cubiertas de metal para el electrodo (conocidas como fundente), que estabilizan el arco y blindaban el material base de las impurezas.



Figura 2.3. La soldadura fue importante en el desarrollo de los aviones de guerra

La Primera Guerra Mundial causó un repunte importante en el uso de los procesos de soldadura, con las diferentes fuerzas militares procurando determinar cuáles de los varios procesos nuevos de soldadura serían los mejores. También la soldadura de arco fue aplicada durante la guerra, pues algunos fuselajes de aviones alemanes fueron contruidos usando el proceso.

Durante los años 1920, importantes avances fueron hechos en la tecnología de la soldadura, incluyendo la introducción de la soldadura automática, en la que el alambre del electrodo era alimentado continuamente.

También, el gas de protección se convirtió en un tema de gran atención, mientras que los científicos procuraban proteger las soldaduras contra los efectos del oxígeno y el nitrógeno en la atmósfera. La porosidad y la fragilidad eran los problemas primarios, y las soluciones que desarrollaron incluyeron el uso del hidrógeno, argón y helio como atmósferas de soldadura.

Durante la siguiente década, posteriores avances permitieron la soldadura de metales reactivos como el aluminio y el magnesio. Esto, conjuntamente con desarrollos en la soldadura automática, la corriente alterna, y los fundentes alimentaron una importante extensión de la soldadura de arco durante los años 1930 y durante la Segunda Guerra Mundial.

En el año 1941, después de décadas de desarrollo, la soldadura de arco de gas tungsteno (TIG) fue finalmente perfeccionada, al igual que la soldadura por arco metálico con gas en 1948, permitiendo la soldadura rápida de materiales no ferrosos pero requiriendo costosos gases de blindaje.

En 1957 fue inventada la soldadura de arco de plasma y nació el proceso de soldadura por arco con núcleo fundente, en el que el electrodo de alambre auto blindado podía ser usado con un equipo automático, resultando en velocidades de soldadura altamente incrementadas. Un año más tarde se desarrolló la soldadura con rayo de electrones, haciendo posible la soldadura profunda y estrecha por medio de la fuente de calor concentrada

Y por último, y siguiendo la invención del láser en el año 1960, la soldadura por rayo láser ha demostrado ser especialmente útil en la soldadura automatizada de alta velocidad. Sin embargo, ambos procesos continúan siendo altamente costosos debido al alto costo del equipo necesario, y esto ha limitado sus aplicaciones. [1]

## 2.3 La soldadura TIG

Las siglas TIG corresponden a las iniciales de las palabras inglesas "*Tungsten Inert Gas*", que indican una soldadura en una atmósfera con gas inerte y electrodo de tungsteno y sobre la cual está planteado este trabajo.

El procedimiento TIG puede ser utilizado en uniones que requieran alta calidad de soldadura y en soldaduras de metales altamente sensibles a la oxidación (tales como el titanio y el aluminio). Sin embargo, su uso más frecuente está dado en aceros resistentes al calor, aceros inoxidable y aluminio.

Las mayores ventajas del proceso TIG son: la estabilidad y la concentración del arco, la posibilidad de la utilización en todas las posiciones o tipos de juntas y el buen aspecto del cordón (con terminaciones suaves y lisas). También se caracteriza por la ausencia de salpicaduras y escorias (lo que evita trabajos posteriores de limpieza), su aplicabilidad a espesores finos (desde 0,3 mm) y su utilidad con o sin material de aporte.

La técnica de este proceso conocido como soldadura TIG (*Tungsten Inert Gas*) o también como GTAW (*Gas Tungsten Arc Welding*) se puede resumir como un proceso en el cual un arco eléctrico controlado es establecido entre la pieza a ser soldada (obra) y un electrodo no-consumible.

El calor generado del arco es concentrado y funde las partes a ser soldadas, y la región de la soldadura es protegida contra contaminaciones del medio ambiente por una atmósfera gaseosa que fluye a través de la antorcha.

El proceso es ampliamente utilizado, en producción y mantenimiento industrial, para soldar planchas de bajo espesor (0,2 mm a 8 mm) de aceros al carbono, aceros inoxidable, aluminio y sus aleaciones, cobre y sus aleaciones, titanio, circonio, níquel y sus aleaciones, etc.

Utiliza una fuente de energía de corriente continua (rectificador o transformador), cables, antorchas, gas de protección y refrigeradores de agua. Cuando es necesario acrecentar el material de adición, se emplean varillas con composición química compatible con el material de base, a ejemplo de lo que ocurre con la soldadura oxiacetilénica.

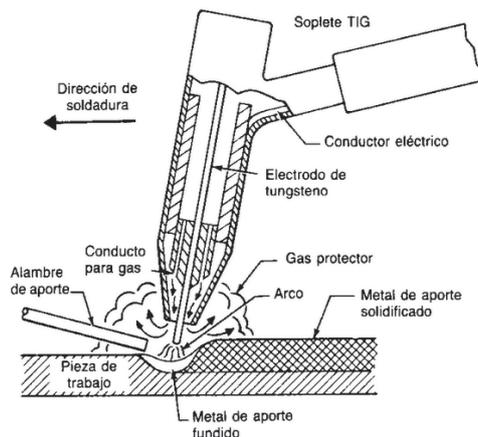


Figura 2.4. Soldadura TIG

Entre algunos de los beneficios de la soldadura TIG por lo tanto, se puede destacar que el proceso puede ser mecanizado o robotizado, que la soldadura TIG facilita la soldadura en lugares de difícil acceso, ofrece alta calidad y precisión, también ofrece óptimas resistencias mecánicas de la articulación soldada, genera poco humo, las soldaduras son claras, brillantes y con óptimo acabado y por último, que los costos de fabricación son menores.

## 2.4 El espectro electromagnético

El espectro electromagnético es la distribución energética del conjunto de ondas electromagnéticas que se encuentran ordenadas de acuerdo a su longitud de onda  $\lambda$  y a su frecuencia. Referido a un objeto se denomina espectro electromagnético o espectro, a la radiación electromagnética que emite (espectro de emisión) o absorbe (espectro de absorción) una sustancia.

El espectro electromagnético se extiende desde la radiación de menor longitud de onda, como los rayos gamma y los rayos X, pasando por la luz ultravioleta, la luz visible y los rayos infrarrojos, hasta las ondas electromagnéticas de mayor longitud de onda, como son las ondas de radio.

Fue en el siglo XIX cuando los científicos descubrieron que más allá de los extremos violeta y rojo del espectro había unas radiaciones que se denominaron ultravioleta e infrarrojos. La radiación ultravioleta, aunque invisible al ojo humano, poseía una notable acción fotoquímica.

Igualmente, la radiación infrarroja, también invisible al ojo humano, transmitía energía, lo que quedaba demostrado al aplicarla a un termómetro. Desde entonces se han abierto los límites del espectro, y se han ido añadiendo las ondas de radio, más allá del infrarrojo, y los rayos X y rayos gamma más allá del ultravioleta.

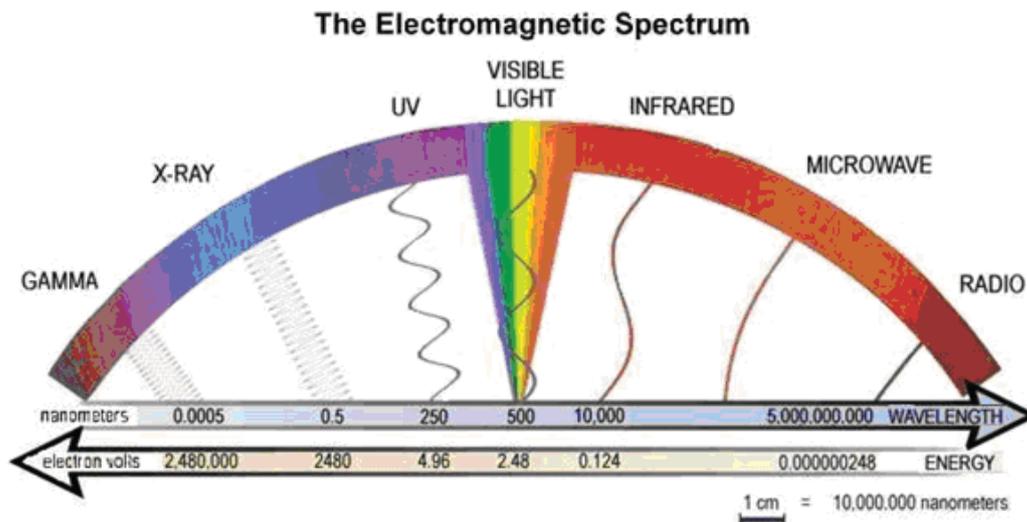


Figura 2.5. El espectro electromagnético

Se cree que el límite para la longitud de onda más pequeña posible es la longitud de Planck, mientras que el límite máximo sería el tamaño del Universo, aunque formalmente el espectro electromagnético es infinito y continuo.

Los aparatos empleados para analizar los espectros son los espectrómetros que observan visualmente el espectro, los espectrógrafos que registran fotográficamente el espectro y por último los espectrofotómetros que miden la intensidad de las diferentes partes del espectro.

## 2.5 Monitorización de procesos de soldadura: La espectroscopía óptica de plasmas

Debido al estudio de la interacción entre la radiación y la materia como función de la longitud de onda surgió la espectroscopía. Al principio se refirió al uso de la luz visible dispersada según su longitud de onda.

Newton, en 1666, observó que cuando un rayo de luz natural (luz blanca) pasa a través de un prisma óptico se descompone en otros colores más simples; es decir, el prisma dispersa o separa los colores simples, o luces monocromáticas, que componen la luz blanca o cualquier otra luz compleja, o policromática.

Después el concepto se amplió para comprender cualquier medida en función de la longitud de onda o frecuencia. Añadió la energía  $E$  como variable, al establecerse la relación  $E=h\nu$  para los fotones.

La espectroscopía a menudo se usa en física y química analítica para la identificación de sustancias mediante el espectro emitido o absorbido por las mismas y también se usa en muchas aplicaciones industriales como puede ser el monitorizado de procesos, como en este caso es el proceso de la soldadura.

En muchos procesos de soldadura, entre ellos la soldadura TIG, se genera de forma natural luz durante el proceso, debido a la formación de un plasma térmico a elevadas temperaturas. La luz generada es por tanto un conjunto de líneas (picos) de emisión con diferentes longitudes de onda e intensidad. Por lo tanto, analizando la evolución de estos picos a lo largo del tiempo (por ejemplo, con un análisis estadístico) es posible obtener información sobre el proceso.

La espectrometría es la técnica espectroscópica que tasa la concentración o cantidad de especies determinadas mediante un espectrómetro o espectrógrafo. El tipo de espectrometría depende de la cantidad física medida, normalmente es una intensidad de energía absorbida o producida. La mayoría de los métodos espectroscópicos se diferencian en atómicos o moleculares en función de si se aplican a átomos o moléculas. Junto con esta diferencia, se pueden distinguir los siguientes tipos de espectroscopía según la naturaleza de su interacción:

Espectroscopía de absorción: se basa en la absorción de fotones por una o más sustancias presentes en una muestra y la promoción subsiguiente del electrón (o electrones) desde un nivel de energía a otro en esa sustancia.

En la espectroscopía de absorción, los fotones absorbidos no son emitidos de nuevo (como en la fluorescencia) sino que la energía que se transfiere al compuesto químico en la absorción de un fotón se pierde por medios no radiantes, como la transferencia de energía por calor a otras moléculas.

Espectroscopía de dispersión: Mide la cantidad de luz que una sustancia dispersa en ciertas longitudes de onda, ángulos de incidencia y ángulos de polarización. El proceso de dispersión es mucho más rápido que el proceso de absorción o de emisión.

Y por último también se puede distinguir en espectroscopía de emisión, en la que se basa este trabajo y se describe más adelante.

## **2.6 Espectroscopía de emisión de plasmas**

La espectroscopía de emisión es una técnica espectroscópica que analiza las longitudes de onda de los fotones emitidos por los átomos o moléculas durante su transición desde un estado excitado a un estado de inferior energía.

Los átomos o las moléculas que están excitadas a niveles de energía altos pueden caer a niveles menores emitiendo radiación (emisión o luminiscencia). Para los átomos excitados por una fuente de energía de alta temperatura esta emisión de luz es comúnmente llamada emisión atómica u óptica (espectroscopía de emisión atómica) y para átomos excitados con luz es llamada fluorescencia atómica (espectroscopía de fluorescencia atómica).

La espectroscopía de emisión atómica (AES) utiliza la medición cuantitativa de la emisión óptica de átomos excitados para determinar la concentración de la sustancia analizable.

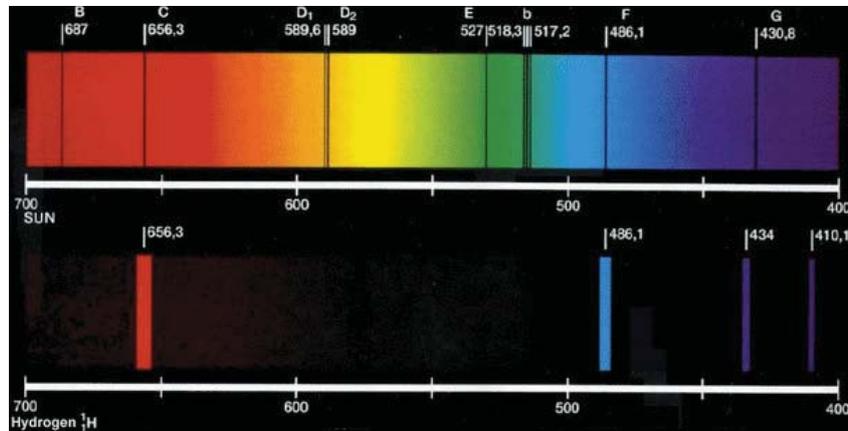


Figura 2.6. Espectro de emisión del Hidrógeno

Mediante la espectroscopía de emisión con plasma es posible determinar de forma cuantitativa la mayoría de los elementos de la tabla periódica a niveles de traza, partiendo de muestras en disolución acuosa.

La muestra, en forma líquida, es transportada por medio de una bomba peristáltica hasta el sistema nebulizador donde es transformada en aerosol gracias a la acción del gas argón. Dicho aerosol es conducido a la zona de ionización que consiste en un plasma generado al someter un flujo de gas argón a la acción de un campo magnético oscilante inducido por una corriente de alta frecuencia. En el interior del plasma se pueden llegar a alcanzar temperaturas de hasta 8000 K. En estas condiciones, los átomos presentes en la muestra son ionizados/excitados. Al volver a su estado fundamental, estos iones o átomos excitados emiten radiaciones de una longitud de onda que es característica de cada elemento. Esta radiación pasa a través de un sistema óptico que separa la radiación según su longitud onda. A continuación un detector mide la intensidad de cada una de las radiaciones relacionando ésta con la concentración de cada elemento en la muestra.

Gracias a esta técnica se pueden detectar y determinar cuantitativamente la mayoría de los elementos del sistema periódico, pudiéndose analizar una amplia variedad de tipos de muestra. Por ejemplo en el sector de la agricultura y alimentos se pueden determinar los metales y posibles contaminantes en suelos, fertilizantes, materias vegetales, alimentos..., en el sector clínico se pueden determinar elementos tóxicos en orina, sangre, heces, leche materna, tejidos..., en geología es posible determinar la procedencia de sedimentos y rocas a través de su composición y evaluar la contaminación de suelos...etc.

Dentro de la espectroscopía de emisión de plasmas se puede englobar a la espectrometría de ruptura inducida por láser (LIBS: *Laser Induced Breakdown Spectroscopy*), también llamada espectrometría de plasma inducida por láser (LABIOS). Esta técnica, en conjunción con la monitorización del proceso de soldadura TIG, también podría ser objeto del presente trabajo y se comentan sus características a continuación. [2]

## 2.7 Espectrometría de ruptura inducida por láser (LIBS)

Ya se ha comentado que con la espectroscopía de emisión atómica es posible caracterizar cuantitativamente la composición de un material. Esto podría hacerse de manera natural en los procesos de soldadura, donde se forma un plasma del que puede capturar la radiación óptica asociada. Sin embargo, cuando se desea analizar la composición de un material cualquiera, es necesario llevar parte de ese material a un estado de plasma, que es lo que se consigue mediante LIBS.

El desarrollo de la espectroscopía de ruptura inducida por láser (LIBS) y el plasma inducido por láser (LIP) ha estado estrechamente ligado a los avances del láser desde sus inicios. En 1962 se usó el láser de rubí para producir vapores en materiales metálicos y no metálicos. Los vapores se excitaron por una fuente de chispa auxiliar y se detectaron espectros de emisión. Este experimento fue el nacimiento del LIBS.

La mayoría de estos trabajos relacionados con el LIP se desarrollaron usando una chispa eléctrica retardada para formación de plasma espectroquímico.

La chispa o arco eléctrico se utilizó con el objeto de obtener condiciones más cercanas al equilibrio termodinámico y por otro lado para aumentar la intensidad de la emisión debido a las grandes dimensiones de los espectrómetros y empleo de placas fotográficas para su detección. En 1964 se reportó el primer LIP, utilizando el láser no solamente para inducir la formación del plasma, sino como la única fuente de suministro de energía en el proceso.

Se obtuvieron curvas analíticas para cromo en muestras de acero fundamentadas sobre las emisiones detectadas directamente del LIP. En este mismo año además se predijo la utilización para la fusión nuclear.

Desde entonces, el interés por aplicaciones espectroscópicas del LIP como por ejemplo LIBS, ha ido creciendo en la medida que se han desarrollado los instrumentos e instalaciones para esta técnica. Antes de los años 70 el entusiasmo disminuyó y el desarrollo analítico del LIBS no podía aun competir con otras técnicas como la espectroscopía de emisión atómica de plasma acoplada inductivamente (ICP-AES).

Sin embargo, a partir de los 80 gracias al desarrollo de detectores de imagen ópticos sensibles y los avances de la fiabilidad de los láseres, renació el interés por el LIBS. Los detectores permitían realizar un análisis *in situ* de cualquier tipo de muestra sin previa preparación.

La ocurrencia de la ruptura inducida por láser depende del medio, la atmósfera circundante y sobre todo el láser empleado. La ruptura ocurre cuando la densidad de portadores libres alcanza un valor que provee una fuerte absorción óptica en el material irradiado llamado plasma. Es un fenómeno colectivo que involucra las propiedades incluso mecánicas del volumen del material como la elasticidad o la comprensibilidad.

Actualmente el LIBS permanece como un campo muy activo pues permite un análisis composicional rápido y sencillo en sólidos, líquidos, gases y aerosoles.

En muchos casos, la ablación del material conduce a un grado de atomización suficiente para los análisis. De esta manera se elimina el tiempo consumido en los pasos involucrados en la preparación de la muestra. Esto es importante para situaciones donde se requieren análisis rápidos (en tiempo real), o análisis en el campo, donde la preparación de la muestra no siempre es factible. La ablación ocurre debido a la energía de luz enfocada y por medio de los láseres se muestrean materiales que pueden ser conductores o no conductores, transparentes u opacos o componentes de compuestos orgánicos o inorgánicos.

La técnica LIBS ha sido cada vez más popular y está siendo aplicada en muchos campos. La operación simple, la versatilidad y su bajo costo relativo, son funciones que hacen seleccionar la técnica LIBS para muchas investigaciones y laboratorios industriales. Sin embargo, la tecnología está lejos todavía de una producción masiva.

Anticipaciones seguras pueden acelerar dicha producción masiva y convertir en LIBS en una instrumentación de rutina en un futuro cercano, por lo menos para aplicaciones que requieren movilidad y sensibilidad moderada. Una identificación fiable de materiales desconocidos es otra de las aplicaciones interesantes del LIBS.

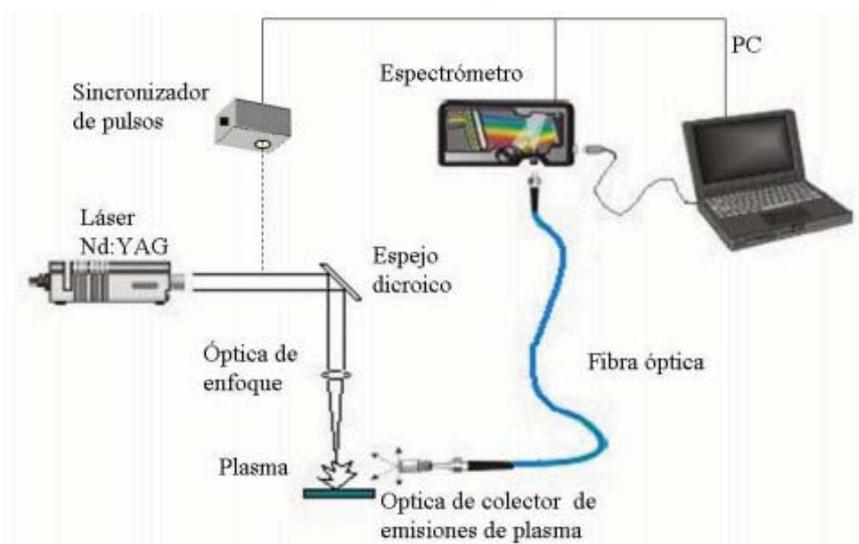


Figura 2.7. Esquema de una instalación típica LIBS

En resumen, se pueden mencionar las ventajas y desventajas que se encuentran en este tipo de espectroscopía y que la mayoría de los reportes realizados sustentan.

Entre las ventajas se pueden remarcar la capacidad para analizar la mayoría de los elementos sólidos, líquidos y gaseosos, la preparación mínima de la muestra, la reducción significativa de tiempo, la capacidad de análisis remoto, el análisis en tiempo real y el relativamente bajo costo.

En cuanto a las desventajas, a pesar de los esfuerzos realizados para empujar la tecnología hacia la miniaturización y una mayor disminución de los costos en la instrumentación comercial del LIBS vigente en el mercado, la demanda sigue baja.

Sin embargo, la tendencia de crecimiento es obviamente hacia una caracterización profunda de LIBS y de la estandarización donde se convertirá en una técnica de rutina. [3]

## 2.8 Espectrómetros: Calibración de los espectros y Resolución

Un espectrómetro es un instrumento óptico que se usa para medir las propiedades de la luz sobre una porción específica del espectro electromagnético. Su utilidad es por ejemplo realizar análisis espectroscópicos para identificar materiales o monitorizar procesos industriales.

La variable medida es generalmente la intensidad de la luz, pero también podría ser, por ejemplo, el estado de polarización. La variable independiente es, por lo general, la longitud de onda de la luz, que suele expresarse como una fracción de metro, aunque a veces se expresa como una unidad directamente proporcional a la energía del fotón, tales como el número de onda o eV (electrón-Voltio) (que tiene una relación recíproca a la longitud de onda).

El funcionamiento del espectrómetro está basado en la descomposición de la luz en las diferentes longitudes de onda que la componen a partir del fenómeno de refracción que sucede en un prisma o a partir del fenómeno de difracción de la luz que se produce en una red de difracción. Además, se miden los ángulos en los cuales se presentan los máximos del patrón de difracción. Estos ángulos son diferentes y característicos de la naturaleza de la fuente que emite la luz.

Las componentes básicas de un espectrómetro común son un conjunto de lentes, un colimador, una rejilla de difracción y una lente ocular.

Un espectrómetro se usa en espectroscopía para producir líneas espectrales y medir sus longitudes de onda e intensidades. Son instrumentos que funcionan en una amplia variedad de longitudes de onda, desde los rayos X hasta el infrarrojo lejano.

En general, cada espectrómetro funcionará sobre una pequeña porción de este rango total debido a las diferentes técnicas usadas para medir las distintas porciones del espectro. Por debajo de las frecuencias ópticas (es decir, en el rango de las microondas y radiofrecuencias), el analizador de espectro es un dispositivo electrónico estrechamente relacionado.

En este proyecto se trabajará con dispositivos CCD (*Charge Coupled Device*) que son dispositivos de carga acoplada. Estos dispositivos consisten en un *array* de fotodiodos que se encargan de convertir la luz incidente en señal eléctrica y que se basan en la utilización de una red de difracción.

El espectrómetro se encarga de colimar por un espejo esférico la luz divergente que llega de la fibra óptica. La luz colimada es difractada por una rejilla plana, y la luz difractada resultante se vuelve a enfocar por un segundo espejo esférico.

De esta manera se obtiene la imagen espectral que es proyectada sobre una matriz de CCD, que consiste en un array de fotodiodos que captan esa luz incidente y se encargan de transformarla en señal eléctrica, que es la que se transfiere a un ordenador una vez que ha sido transformada en señal digital gracias al convertidor A/D que tiene el espectrómetro.

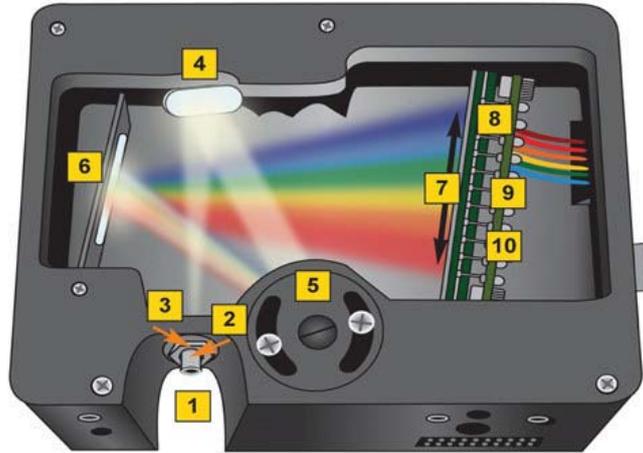


Figura 2.8. Esquema del funcionamiento de un espectrómetro I

La luz incide en la matriz de CCD, que es un conjunto de fotodiodos polarizados en inversa para que puedan fotodetectar. Los fotodiodos descargan un condensador a una velocidad proporcional al flujo de fotones.

Cuando el período de integración del detector se completa, una serie de interruptores se cierran y se transfiere la carga a un registro de desplazamiento. Una vez que la transferencia al registro de desplazamiento se haya completado, los interruptores se abren y los condensadores se recargan y se inicia un período de integración.

Al mismo tiempo que la energía luminosa se está integrando, los datos se leen fuera del registro de desplazamiento por un convertidor A/D y los datos digitalizados se muestran a continuación en el equipo.

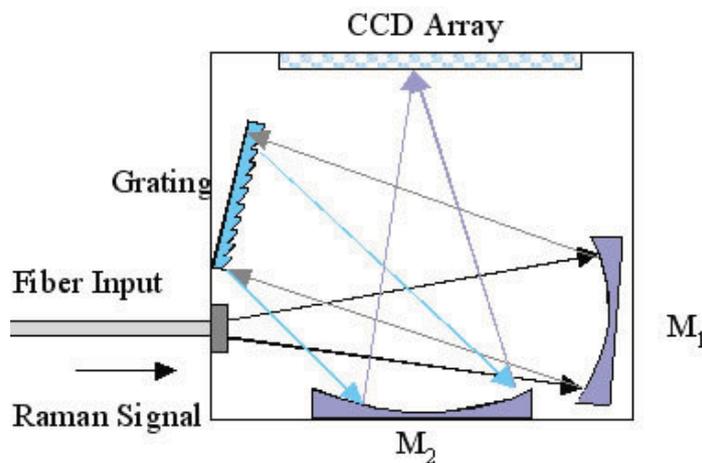


Figura 2.9. Esquema del funcionamiento de un espectrómetro II

En un espectrómetro, la longitud de onda no se obtiene directamente, sino que se estima a partir del número de píxel del CCD por medio de un ajuste polinomial. Por lo tanto, la calibración del espectrómetro es un punto muy importante en la cadena, para certificar que está funcionando según las especificaciones del fabricante. Los fabricantes suelen proporcionar cómo calibrar el espectrómetro de manera manual. Para ello se establece la relación entre el número de píxel del CCD y su longitud de onda asociada por medio de un polinomio de calibración:

$$\lambda(p) = C_0 + C_1 p + C_2 p^2 + C_3 p^3 ,$$

en donde  $\lambda$  es la longitud de onda del píxel  $p$  y  $C_x$  son los coeficientes a calcular.

No obstante, los espectrómetros CCD presentan una deriva en la citada relación con el tiempo, debido, por ejemplo, a cambios en la temperatura ambiente. Este hecho exige recalcular de forma periódica el polinomio de calibración, operación que se lleva a cabo mediante la utilización de lámparas de calibración que proporcionan líneas de emisión a una longitud de onda conocida.

Por lo tanto, para completar la calibración de la longitud de onda del espectrómetro se deberá obtener un espectro que corresponda a la fuente de calibración en un tiempo que muestre varios picos no saturados, a continuación se deberá localizar el máximo de cada uno de los picos y obtener el valor del píxel correspondiente y asignar un valor de longitud de onda a cada uno, para por último utilizar los métodos numéricos que permitan realizar la regresión deseada que obtenga los coeficientes de ajuste.

Independientemente del diseño del espectrómetro su característica fundamental es la resolución espectral ( $R$ ). Este parámetro indica la capacidad del espectrómetro para discriminar dos líneas muy próximas y se define como:

$$R = \frac{\lambda}{\delta\lambda}$$

En donde  $\lambda$  es la longitud de onda en la que se está trabajando y  $\delta$  es la “pureza” espectral, la anchura que tendría una línea monocromática al observarse con el espectrómetro. La pureza espectral dependerá del sistema óptico que se está utilizando así como de la calidad del elemento dispersor. Por lo tanto para decidir si dos líneas están realmente separadas se debe establecer un criterio.

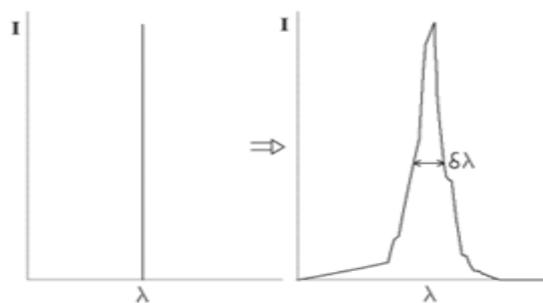


Figura 2.10. Resolución espectral

La resolución espectral también puede ser definida como el indicador del número y anchura de las bandas espectrales que puede discriminar el dispositivo. Por ejemplo los sensores del satélite Landsat TM captan la energía reflejada por la superficie terrestre en 7 bandas o rangos del espectro electromagnético. [4]

## 2.9 Técnicas de procesamiento de espectros ópticos

En este apartado se comentará las diferentes técnicas o pasos realizados desde que el espectro es adquirido hasta que se obtiene la estimación de la temperatura de plasma, parámetro que tiene una correlación conocida con la calidad resultante de los cordones asociados.

El esquema del procesamiento a realizar es:

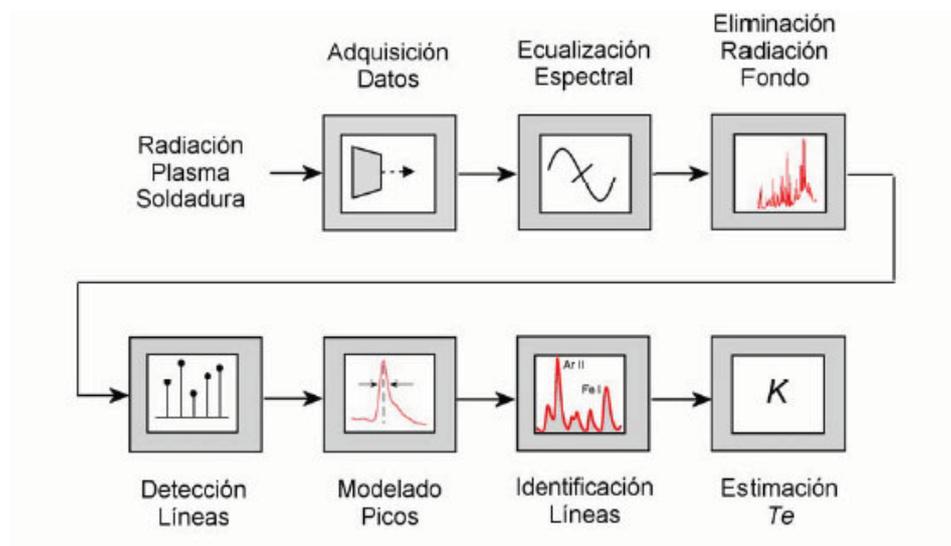


Figura 2.11. Representación del esquema del procesamiento propuesto para la estimación de la temperatura electrónica del plasma en tiempo real

### 2.9.1 Adquisición de datos

El primer paso es básico en la cadena y consiste en la obtención de los espectros correspondientes al plasma generados durante el proceso de soldadura TIG.

A simple vista en el espectro se puede observar varias líneas de emisión sobre una radiación de fondo. Esta radiación de fondo observada en el espectro se corresponde en gran parte con la radiación de cuerpo negro que se describe a continuación.

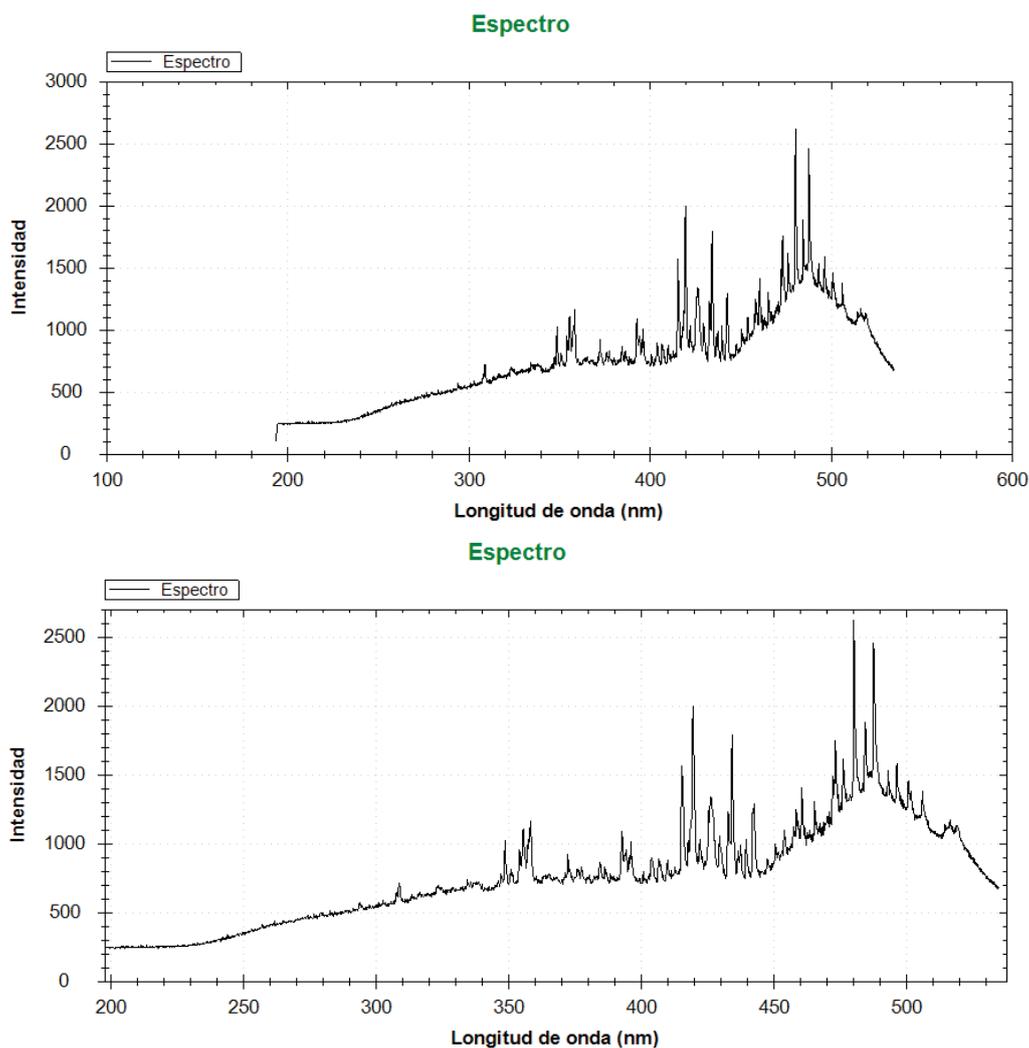


Figura 2.12. Ejemplo de espectro del plasma capturado durante la realización de experimentos de soldadura TIG

Todo cuerpo emite energía en forma de radiación electromagnética (resultado de un gran número de procesos radiativos microscópicos originados en la interacción de las partículas elementales de las que está formado el cuerpo), aunque no debe confundirse con la radiación reflejada por el mismo y que le hace visible.

Al mismo tiempo los cuerpos absorben parte de la radiación electromagnética que sobre ellos inciden y así se define como poder absorbente de un cuerpo al cociente entre la radiación absorbida e incidente sobre dicho cuerpo.

Con todo ello se define cuerpo negro o radiador ideal al cuerpo cuyo dicho cociente es uno, que significa que el cuerpo absorbe totalmente la radiación que incide sobre él sin reflejar nada.

La radiación de un cuerpo negro se describe mediante la función o ley de Planck, en la cual  $B_\lambda(T)$  representa la energía emitida hacia el vacío por la unidad de superficie del cuerpo negro, dentro de la unidad de ángulo sólido, en la unidad de tiempo y por unidad de intervalo de longitudes de onda.

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{(e^{hc/\lambda kT} - 1)}$$

Se puede observar que a mayor temperatura mayor es la radiación emitida y que la frecuencia de la parte del espectro que radia más intensamente también se incrementa con la temperatura.

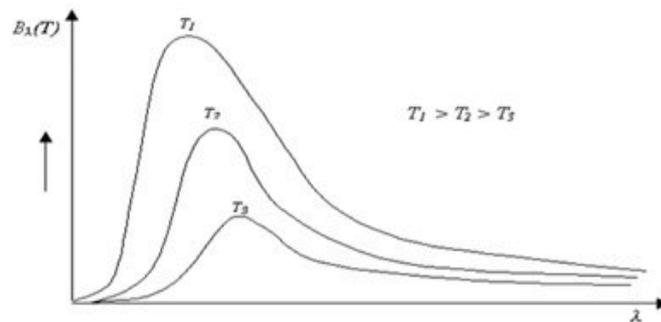


Figura 2.13. Curvas de Planck para diferentes temperaturas del cuerpo negro

En cuanto a las líneas de emisión se puede comentar que su intensidad depende del número de átomos emisores así como de la probabilidad de transición. La anchura natural (perfil Lorentziano) de una línea de emisión está gobernada por el principio de incertidumbre de Heisenberg y es determinado por el tiempo de vida del estado excitado, que a su vez depende de la suma de todas las probabilidades de transición atómica del nivel de energía. [5]

En las líneas de emisión las longitudes de onda ópticas varían dependiendo del medio en el que son medidas. Las longitudes de onda son mayores cuando son medidas en el vacío que en el aire (o nitrógeno). Las longitudes de onda también variarían con la temperatura, presión y humedad del aire.

Y por último la anchura física de la línea (perfil de Voigt) es la anchura natural más varios procesos de ensanchamiento como Doppler (Gausiano) y ensanchamiento por presión (Lorentziano). En la práctica la anchura de línea medida es la anchura física más el efecto de las aberturas del espectrómetro.

Los espectros son almacenados en archivos .bke y son capturados con espectrómetros basados en CCD. Los archivos .bke se escriben en formato binario utilizando la dll *OOSpectrometer* desarrollada por el Grupo de Ingeniería Fotónica de la Universidad de Cantabria, igual que la dll *OOWrapper* utilizada para poder leer un archivo .bke.

Entre los campos que se muestran en el archivo se encuentra:

- Modelo del espectrómetro
- Resolución: Indica en número de píxel la calidad del espectro.

- Número de capturas
- Polinomio de calibración
- Espectro: Cada píxel está asociado a un valor de amplitud.

De especial relevancia se tiene en cuenta la resolución porque cuanto mayor sea mejor será la precisión a la hora del análisis que se comprobará experimentalmente más adelante.

## 2.9.2 Ecuación y correlación espectral

El espectro capturado también se ve alterado por los factores instrumentales como la variación de la eficiencia de la red de difracción y la fibra óptica.

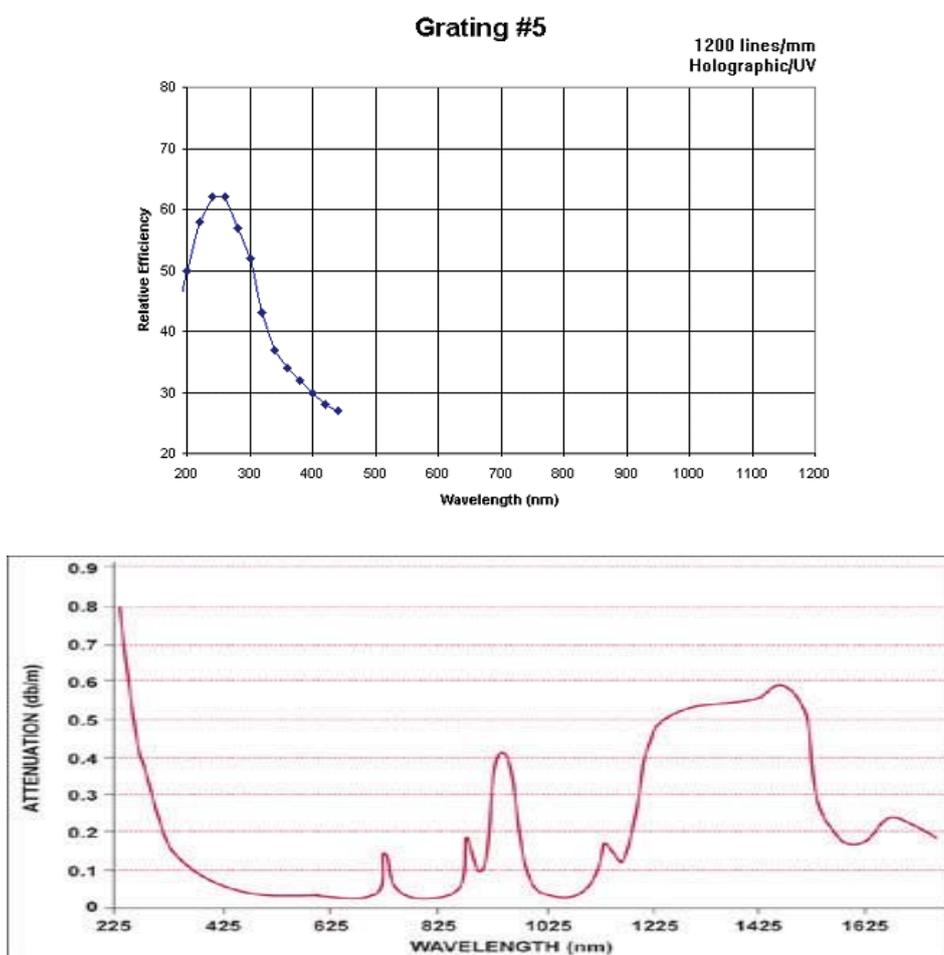


Figura 2.14. Curva de la eficiencia de la red de difracción y la fibra óptica

Para corregir estos factores, en primer lugar se realiza una primera ecuación para compensar la variación de la red de difracción (así como de la respuesta del sensor CCD) dependiente de la longitud de onda. A continuación, se compensa mediante otra ecuación la variación de la eficiencia de la fibra óptica, siendo esta última de menor importancia.

### 2.9.3 Eliminación de la radiación de fondo

En este paso se intenta corregir los factores ambientales que alteran el espectro. Los más significativos son la adición de ruido o la radiación del cuerpo negro ya explicado en el apartado 2.9.1.

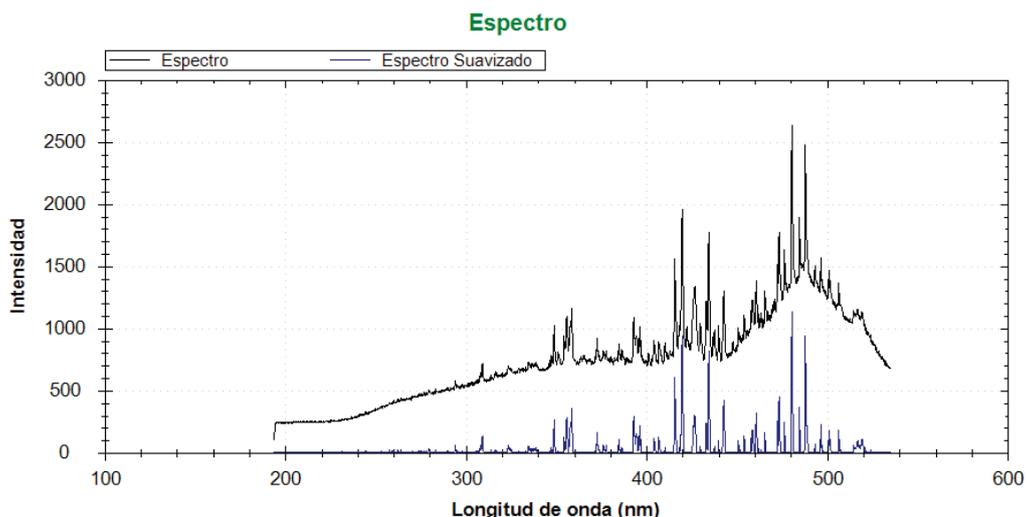
Para ello existe una técnica básica que consiste en utilizar hasta tres algoritmos distintos. Sin embargo, en ocasiones se simplifica utilizando únicamente un algoritmo debido a la alta carga matemática que supone utilizar todos. Además se ha comprobado que utilizando únicamente este último se obtiene prácticamente los mismos resultados.

El primer algoritmo consiste en un ajuste y supresión de la radiación del cuerpo negro comparándolo con la curva de Planck a una temperatura de  $6000^{\circ}\text{K}$ . Sin embargo, en ocasiones puede causar una fuerte pérdida de información y no eliminar la radiación de fondo. El segundo algoritmo consiste en un filtrado paso banda utilizando la transformada de Fourier.

Y por último, el algoritmo de suavizado consiste en ajustar cada punto en el espectro inicial a un valor que es un promedio de los puntos más próximos.

El usuario especifica la intensidad del suavizado y para cada punto del espectro de entrada se computa un punto de un espectro auxiliar. A continuación dicho espectro auxiliar calculado se resta del espectro inicial. La figura 2.15 muestra la diferencia entre el espectro original y el mismo para una intensidad de suavizado de 50.

Hay que destacar que no importa el valor de la amplitud en cada punto del espectro, sino más bien su forma. Es por eso por lo que aplicando el algoritmo de suavizado se obtiene un resultado aceptable que pronuncia los picos de amplitud, lo cual facilitará la búsqueda de estos posteriormente que es lo que realmente se necesita.



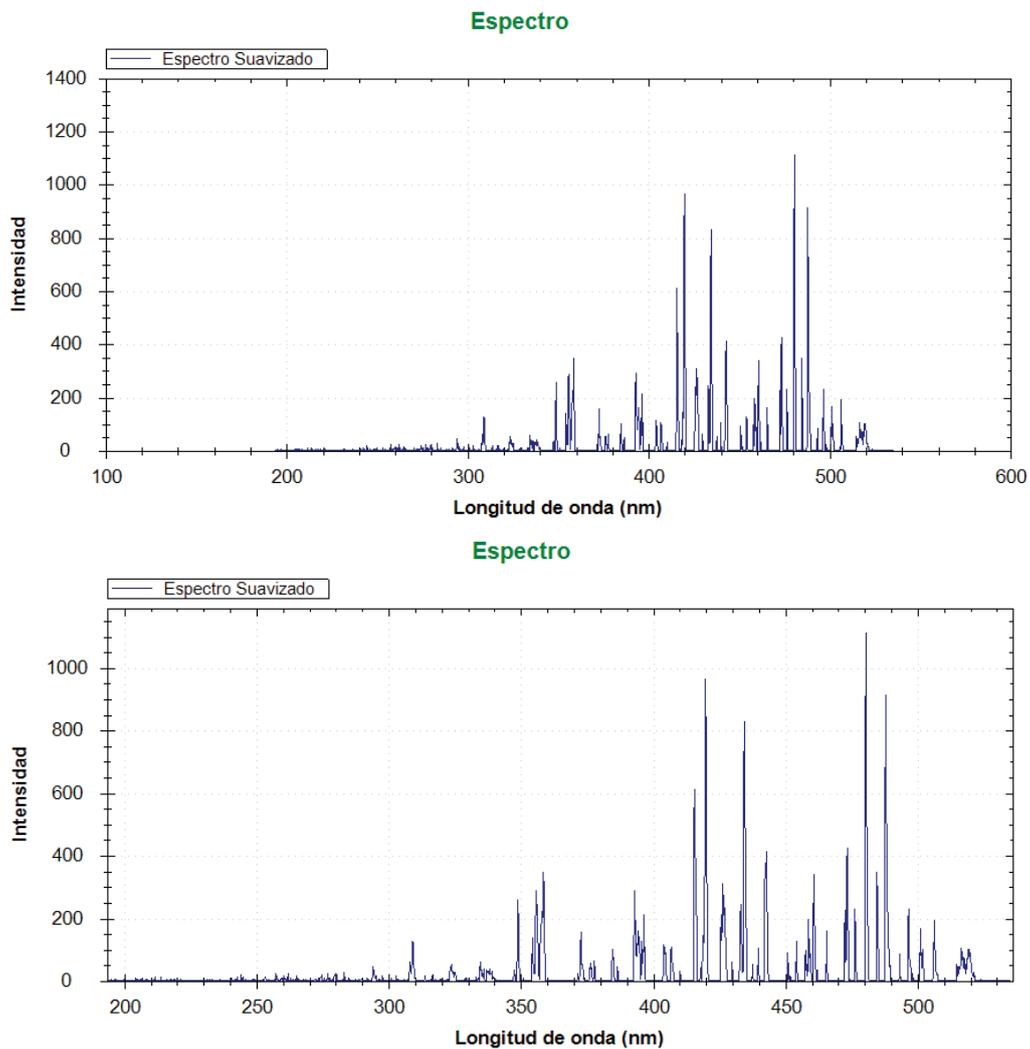


Figura 2.15. Espectros una vez eliminada la radiación de fondo

## 2.9.4 Detección de líneas

Una vez adquirido el espectro, realizado la ecualización espectral y eliminado la radiación de fondo se aplica un algoritmo para la detección de las líneas espectrales.

Este algoritmo se puede dividir en varios pasos: En primer lugar se crea una ventana de amplitud configurable por el usuario (cuanto menor sea mayor precisión se obtiene), la cual se desplazará por el espectro.

Si en la ventana que se va desplazando, el valor de amplitud que está en medio de esta, corresponde a un valor máximo respecto al resto de los puntos de la ventana, se considera que puede haber un pico y se comprueba que la diferencia entre el valor máximo y mínimo de la ventana es mayor que un umbral determinado (para evitar confundir un pico con ruido).

A continuación, si se comprueba que no se trata de ruido se supone que se está ante la longitud de onda central de un pico y se busca el comienzo y final del pico a partir de un porcentaje del valor máximo del pico (configurable). En el caso de no detectarse se consideran las fronteras de dicho entorno como comienzo o final.

Si el porcentaje del valor máximo del pico es configurado de manera correcta nos puede asegurar que no se analizan líneas solapadas (debido por ejemplo a la resolución del espectrómetro) o picos con ensanchamiento espectral muy amplio.

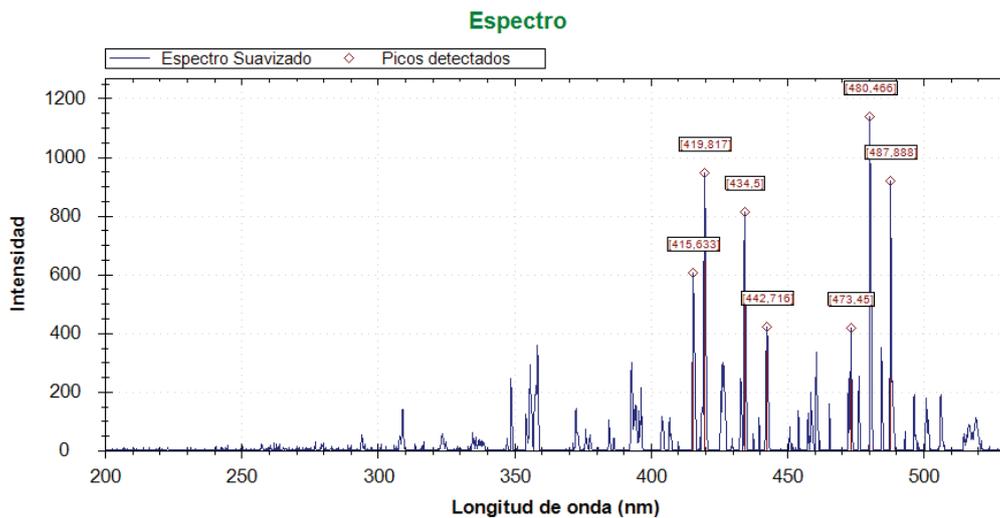


Figura 2.16. Picos detectados en el espectro.

### 2.9.5 Modelado de los picos: Algoritmos sub-píxel

Una vez detectados los picos (cada línea de emisión es un pico con una cierta anchura) el proceso continúa con el modelado. Este apartado es fundamental y trata de estimar la longitud de onda central de las líneas encontradas. La longitud de onda central es muy importante porque es el parámetro fundamental para la identificación de las líneas de emisión.

Existen varios métodos para el modelado de las líneas de emisión para un análisis en tiempo real como el método *Levenberg-Marquardt*, aunque es un proceso iterativo y necesita de un tiempo de procesamiento muy elevado.

Por ello, en la actualidad mediante un tiempo computacional más eficiente se utilizan los denominados algoritmos sub-píxel comúnmente utilizados para el procesamiento de imágenes entre otros.

Dentro de la fotónica son utilizados comúnmente para la exactitud del cálculo de la longitud de onda central de un pico siempre y en tanto que la respuesta comprenda varios píxeles adyacentes. Esto ocurre en espectrómetros basados en CCD que ofrecen una baja resolución espectral, pero que por su bajo coste son ampliamente considerados para diversas aplicaciones.

Como se ve en la siguiente figura se presenta la problemática de la estimación de la longitud de onda central de una línea de emisión capturada con un CCD de baja

resolución espectral: el número de píxel asociado al máximo en intensidad relativa del pico objeto de análisis difícilmente coincidirá con el número de píxel vinculado al máximo real de la línea.

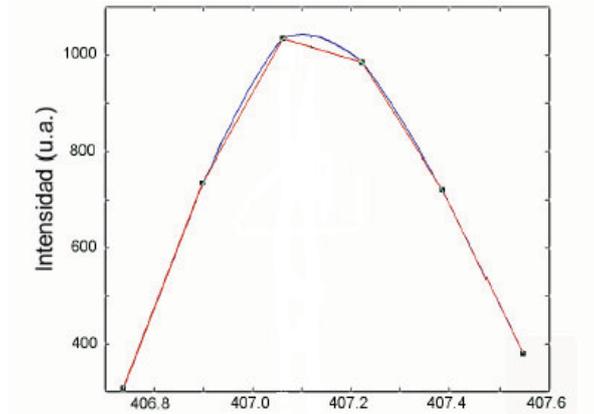


Figura 2.17. Estimación de la longitud de onda central de una línea de emisión en un espectrómetro basado en CCD

Técnicas de ajuste de picos empleando modelos Gausianos o de Voigt dan una buena estimación del número de píxel y, con ello, de la longitud de onda asociados al máximo en intensidad de la línea. Sin embargo, los algoritmos sub-píxel permiten una implementación más eficiente del citado proceso, al evaluar por medio de fórmulas matemáticas simples. Uno de los algoritmos sub-píxel más comúnmente empleado es el conocido como algoritmo del Centroide (Centroid Detection Algorithm, CDA) que se basa en estimar el centro de masas del pico bajo análisis. La longitud de onda sub-píxel  $\lambda_{sub}$  central del pico se obtiene mediante la siguiente expresión:

$$\lambda_{sub} = \frac{\sum_j \lambda_j i_j}{\sum_j i_j},$$

donde  $i_j$  y  $\lambda_j$  son la intensidad y longitud de onda asociados al píxel  $j$ . [6]

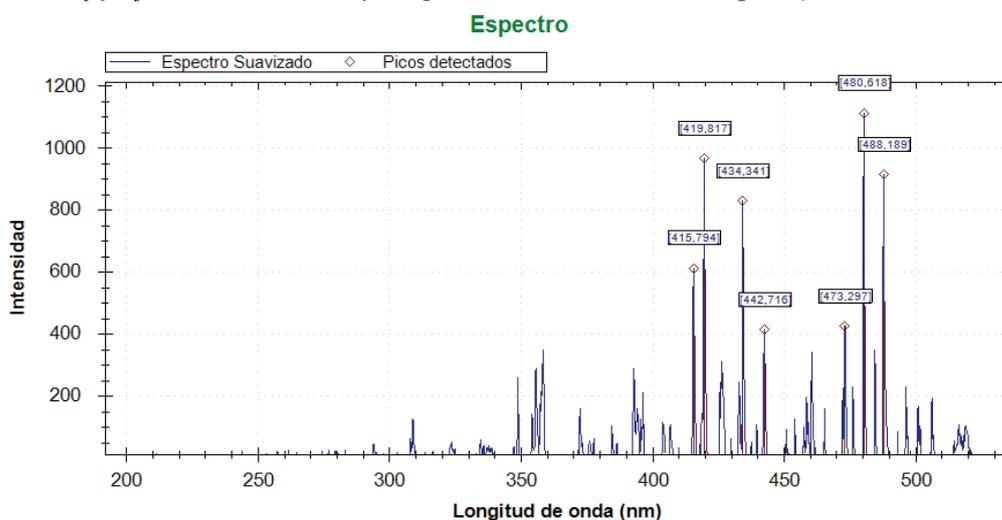


Figura 2.18. Picos detectados en el espectro utilizando el algoritmo del Centroide

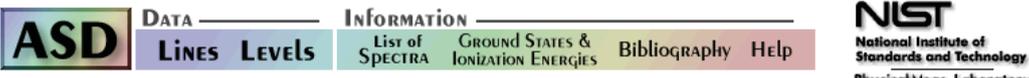
## 2.9.6 Identificación de las líneas de emisión:

### 2.9.6.1 Base de datos NIST

Tras la detección de los picos, éstos deben ser identificados y catalogados; siendo éste el objetivo prioritario del presente proyecto. Para la identificación y catalogación en este trabajo se utiliza la base de datos de espectros atómicos del NIST. El Instituto Nacional de Normas y Tecnología (*NIST, por sus siglas en inglés, National Institute of Standards and Technology*) es una agencia de la Administración de Tecnología del Departamento de Comercio de los Estados Unidos.

La misión de este instituto es promover la innovación y la competencia industrial en Estados Unidos mediante avances en metrología, normas y tecnología de forma que mejoren la estabilidad económica y la calidad de vida.

La base de datos del NIST se ha convertido en el conjunto más completo y fiable de datos de espectros atómicos e incluye información sobre las líneas espectrales y niveles atómicos de energía asociados con muchos elementos e iones.



Ion	Mn I	Ar II
Wavelength (nm)	279.482	434.80635
Rel. Int.	6200	1995
$A_{ki} (s^{-1})$	3.7e+08	1.171e+08
Acc.	C+	A
$E_i (eV) - E_k (eV)$	0.00000 – 4.434911	16.643853 – 19.494532
Configurations	$3d^5 4s^2 - 3d^5 ({}^6S) 4s 4p ({}^1P^o)$	$3s^2 3p^4 ({}^3P) 4s - 3s^2 3p^4 ({}^3P) 4p$
Terms	${}^6S - {}^6P^o$	${}^4P - {}^4D^o$
$J_i - J_k$	5 – 7	5 – 7
$g_i - g_k$	6 – 8	6 – 8
Type		
TP Refs.	T474	T926
Line Refs.	L3475	L11520

Figura 2.19. Ejemplo de información ofrecida por la base de datos de espectros atómicos del NIST

Se explicará brevemente a continuación que significa cada uno de los apartados de la tabla. Dentro de la fila *Ion* se encuentra el elemento y su etapa de ionización mientras que la fila *Wavelength* corresponde con la longitud de onda.

Se pueden ver dos tipos de longitud de onda: *Observed Wavelength* (Longitud de onda observada) y *Ritz Wavelength* (Longitud de onda de Ritz). La longitud de onda suele ser en la mayoría de los casos la diferencia entre los niveles de energía determinados experimentalmente. En este caso es conocida como longitud de onda “Ritz”. Las longitudes de onda “observadas” se utilizan cuando uno o ambos niveles de energía de transición son desconocidos.

La *Intensidad Relativa* se corresponde con valores que están destinados a representar los valores máximos de las líneas de un espectro tal y como aparecerían en la emisión.

Los valores en la base de datos se toman de las publicaciones citadas en la fila de *Line Refs*. Estos valores no están normalizados en modo alguno.

Las intensidades relativas de un espectro dependerán de la fuente de luz utilizada para la excitación. Estos valores pueden cambiar de una fuente a otra, y ésta es otra razón para considerar los valores como forma puramente cualitativa.

El parámetro *Transition Strength* (que podría traducirse como *Probabilidad de Transición*)  $A_{ki}$  representa la probabilidad de transición de emisión en unidades de  $s^{-1}$  y la *Precisión (Accuracy)* se refiere a la concordancia que tienen entre sí un grupo de resultados experimentales. Los valores precisos pueden ser inexactos, ya que un error que causa desviación del valor real puede afectar a todas las mediciones en igual forma y por consiguiente no perjudicar su precisión. La precisión estimada está en la lista para cada fuerza/línea de transición, indicada por una letra de código que figura en la tabla siguiente: AAA  $\leq 0,3\%$  AA  $\leq 1\%$  A +  $\leq 2\%$  A  $\leq 3\%$  B +  $\leq 7\%$  B  $\leq 10\%$  C +  $\leq 18\%$  C  $\leq 25\%$  D +  $\leq 40\%$  D  $\leq 50\%$  E > 50.

También se pueden encontrar las energías del nivel inferior y del nivel superior de la transición  $E_i-E_k$  y las *configuraciones*. En física y química, la *configuración electrónica* es la manera en la cual los electrones se estructuran o se modifican en un átomo, molécula o en otra estructura físico-química, de acuerdo con el modelo de capas electrónico, en el cual las funciones de ondas del sistema se expresan como un producto de orbitales anti-simetrizado (aquellos donde las amplitudes de las ondas electrónicas son de distinto signo).

También se puede encontrar; los *términos* de los niveles inferiores y superiores, en donde un exponente "°" indica paridad impar, la *cantidad de movimiento electrónico angular total* del nivel inferior y superior  $J_i-J_k$ , los *pesos* del nivel inferior *estadístico* y el peso estadístico de nivel superior  $G_i-G_k$ , los *tipos* y las referencias bibliográficas para la probabilidad de transición (*TP Refs*) y de la línea espectral (*Line Refs*).

## 2.10 Punto de partida

A la hora de tratar de realizar la identificación de las líneas de emisión que aparezcan en los espectros del plasma de soldadura, de los parámetros anteriormente citados sólo se trabajará inicialmente con la intensidad relativa y la longitud de onda. Este trabajo parte de la base e ideas propias de los proyectos citados en la bibliografía al final del presente documento [7][8].

La información recogida en la base de datos contiene 99 elementos diferentes que supone una complejidad para el usuario, al ser una base tan amplia. Por eso, en primer lugar, en el trabajo se ha decidido implementar un algoritmo que permita al usuario introducir un fichero de entrada con diferentes elementos, que permite elegir los elementos que se deben buscar en la base de datos.

Este primer algoritmo diseñado accede a la base de datos, una vez seleccionados los elementos a buscar, y analiza las líneas de emisión que se encuentren en un determinado rango de longitudes de onda, por defecto de 2nm. El algoritmo asocia al pico detectado la línea de emisión que cumpla este último requisito y cuyo valor de intensidad relativa sea máximo.

Se puede ver un ejemplo en la siguiente figura, donde las líneas de color rojo son los picos detectados y las líneas en color verde las obtenidas en la base de datos. A simple vista y al hacer zoom se comprueba que hay una variación que se debe, entre otros motivos, a los efectos ambientales e instrumentales ya citados anteriormente, que en algún caso hacen dudar de la correcta identificación.

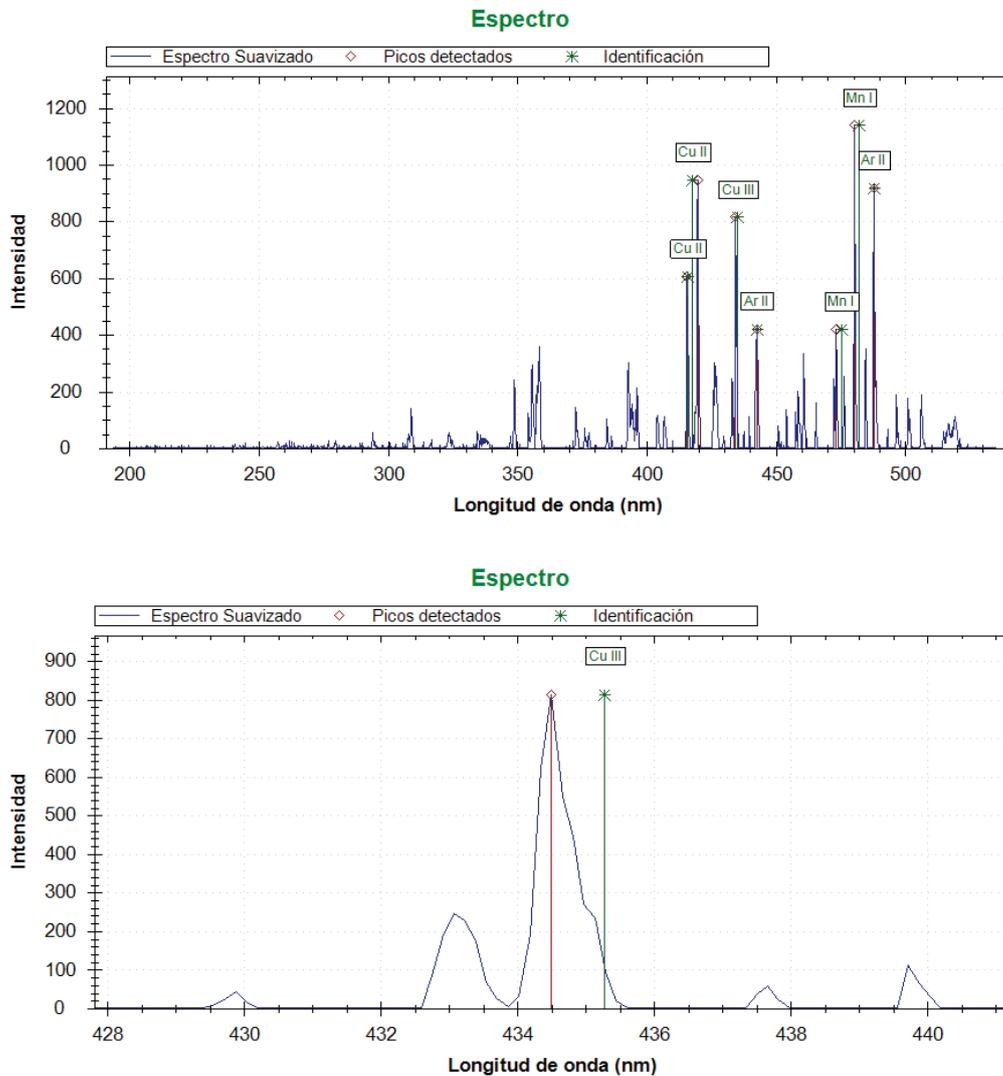


Figura 2.20. Catalogación de los picos

### 2.10.1 Estudio o conocimiento previo

Existen diferentes situaciones en las que utilizando este criterio para la identificación se producen errores: en la naturaleza existen elementos con una intensidad relativa muy grande que pueden llevar a un análisis erróneo, por ejemplo cuando se analicen (o suelden) componentes con hierro (Fe), que posee muchas líneas con intensidades relativas significativas en el rango visible y del infrarrojo cercano.

Un ejemplo claro sucede con la línea identificada como Fe I en la siguiente figura. A la hora de la identificación tanto el Fe I (átomo neutro del Fe) como el Ar II (primer estado de ionización del Ar) están dentro del rango de 2nm de longitud de onda pero se identifica la línea como Fe I por su mayor intensidad relativa. Sin embargo, debido a pruebas realizadas en laboratorio se conoce que la línea de emisión es de Ar II.

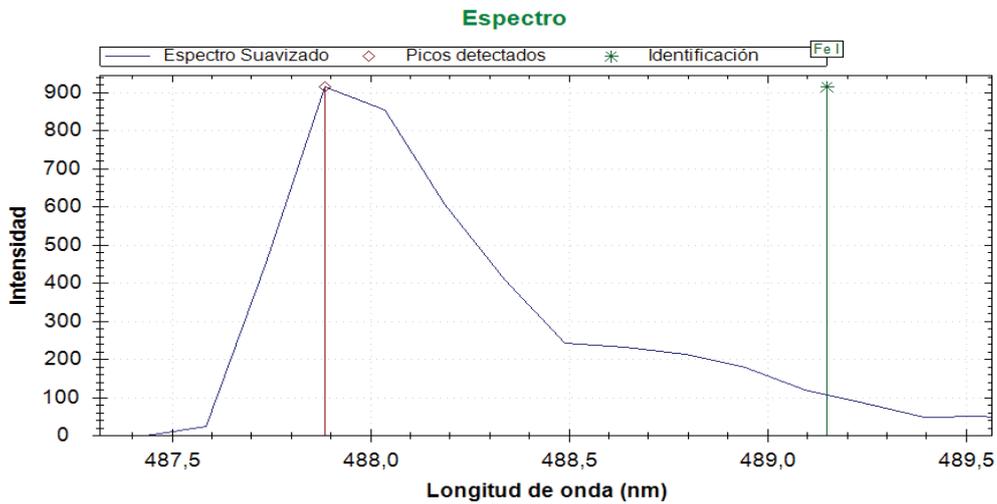


Figura 2.21. Catalogación incorrecta de la línea de emisión

Con el fin de mejorar la identificación se tuvo en cuenta el concepto de “*Estudio / Conocimiento previo*”. La idea se basa en aplicar unos pesos de importancia de aparición a la lista de elementos a buscar. Este peso que se le asigna a cada elemento se multiplicará por la intensidad relativa a la hora de recorrer la base de datos. Con los pesos asignados a los elementos, y al multiplicar la intensidad relativa con el respectivo peso asignado, la identificación se podrá corregir en la mayoría de los casos. Aplicar el “*estudio previo*” para la identificación de las líneas de emisión es especialmente interesante cuando se conoce el tipo de soldadura, el material o detalles del proceso. Para el caso anterior al aplicar un peso mayor al elemento Ar que al Fe por el *estudio previo*, provoca que la identificación se corrija seleccionando la línea de Ar II que se sabe que es correcta.

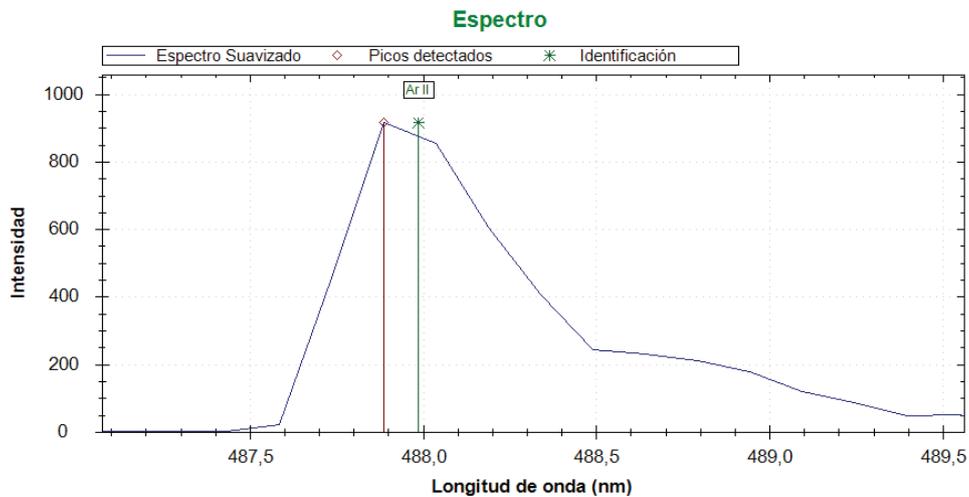


Figura 2.22. Catalogación correcta de la línea de emisión

## 2.10.2 Nuevo algoritmo sin estudio o conocimiento previo

El objetivo prioritario del trabajo es la utilización de un algoritmo para una más certera identificación de las líneas de emisión y poder así distinguir las diferentes especies atómicas para después relacionarlas con la calidad de la soldadura.

Sin embargo, y aunque los resultados con los estudios previos son buenos, otro objetivo básico se ha centrado en automatizar el proceso, para que un usuario pueda identificar las líneas de emisión sin poseer los fundamentos básicos o, como en los casos anteriores, un estudio previo o conocimiento previo de la soldadura.

Por ello, y manteniendo el límite en la longitud de onda configurable por el usuario para la selección de una u otra línea, se planteó un nuevo algoritmo que trabajara con los mismos dos parámetros fundamentales (intensidad relativa y la longitud de onda).

La nueva *figura de mérito* que nos sirve para catalogar los picos en este nuevo algoritmo es directamente proporcional a la intensidad relativa e inversamente proporcional al valor absoluto de la resta de la longitud de onda teórica (Base de datos NIST) y longitud de onda práctica (Pico detectado).

$$P_L = \text{Intensidad relativa} * \frac{1}{(|\text{longitud onda NIST} - \text{longitud onda PICO}|)}$$

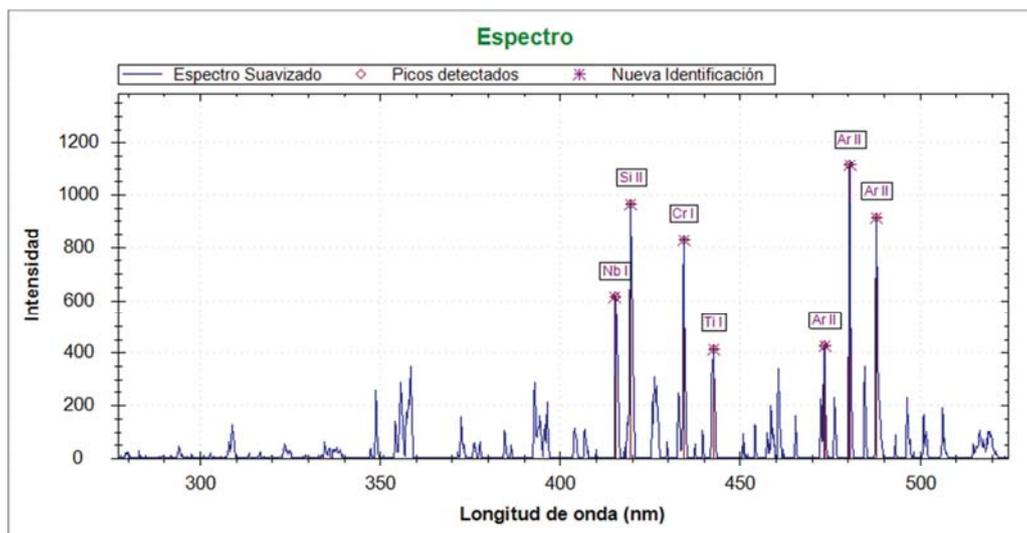


Figura 2.23. Catalogación de los picos mediante la nueva identificación

## 2.10.3 Resolución del espectrómetro: Ajuste de la dimensión de la ventana de búsqueda

Para concluir con la mejora en la identificación de las líneas de emisión, y tras trabajar con dos parámetros fundamentales como la longitud de onda y la intensidad relativa, se tiene en cuenta en el trabajo un nuevo tercer parámetro y no por ello de menor importancia: la resolución del espectrómetro.

Como se comentó anteriormente la característica más importante de un espectrómetro es, independientemente del diseño, su resolución espectral ( $R$ ): Parámetro que indica la capacidad del espectrómetro para separar dos líneas muy próximas.

Al utilizar en el trabajo espectrómetros basados en CCD (relativamente baja resolución espectral y bajo coste) es interesante la idea de trabajar con este parámetro para la mejora de la identificación de las líneas de emisión, a pesar de que los algoritmos sub-píxel como el algoritmo del centroide (CDA) que han sido utilizados, ayudan a solucionar en parte este problema.

La idea consiste en aplicar un valor apropiado de amplitudes en número de píxel que se van a observar a la vez (*dimensión de ventana*) según el espectrómetro con el que se trabaje. Cuanto mayor sea ese valor, menor número de picos serán identificados. Una dimensión de búsqueda menor, acorde a una buena resolución espectral, permitirá identificar las líneas de emisión mejor y de forma más segura.

Las diferencias de trabajar con uno u otro espectrómetro pueden ser muy importantes. Como se podrá comprobar más adelante, tras comparar dos espectros de la misma soldadura con diferentes espectrómetros, el programa puede detectar una cantidad mayor de líneas nuevas, líneas de emisión cuya longitud de onda varía, etc.

A continuación se muestran las características básicas de los espectrómetros basados en CCD más utilizado, en los que se puede apreciar las diferencias mencionadas con respecto a la resolución espectral de unos y otros.



Figura 2.24. Espectrómetros basados en CCD

	Ocean Optics USB650	Ocean Optics USB2000	Ocean Optics HR4000
<b>Espectrómetro</b>	CCD	CCD	CCD
<b>Dimensiones (mm)</b>	89x63x34	89x63x34	149x105x45
<b>Peso (g)</b>	190	190	570
<b>Nº Píxeles</b>	650	2048	3648
<b>Rango espectral (nm)</b>	350-1000	195-535	370-500
<b>Tamaño píxel (µm)</b>	14x200	14x200	8x200
<b>Tamaño ruptura (mm)</b>	1	1	1
<b>Conector óptico</b>	SMA905	SMA905	SMA905
<b>Resolución óptica (nm)</b>	2	0.3	0.07
<b>Tiempo integración</b>	3ms a 65s	3ms a 65s	10us a 65s
<b>Resolución (bits)</b>	12	12	14

Tabla 2.25. Propiedades de los espectrómetros basados en CCD [9]

### 2.10.4 Estimación $T_e$

La correcta identificación de las líneas de emisión es prioritaria para calcular de forma correcta el parámetro  $T_e$ . La temperatura electrónica del plasma es una de las diferentes variables que se utilizan para detectar los posibles defectos en los cordones de soldadura en su instante de aparición.

Esta temperatura puede ser determinada por medio de la utilización de dos líneas de emisión del mismo elemento químico en el mismo estado de ionización. El perfil resultante de este parámetro como se sabe tiene una correlación conocida con la calidad resultante de los cordones asociados, y viene dada por la ecuación:

$$T_e = \frac{E_m(2) - E_m(1)}{k \ln \left[ \frac{I(1)A(2)g_m(2)\lambda(1)}{I(2)A(1)g_m(1)\lambda(2)} \right]}$$

donde  $E_m$  es la energía del nivel superior  $m$  de las líneas de emisión  $1$  y  $2$ ,  $k$  es la constante de Boltzmann,  $I$  la intensidad relativa de las líneas de emisión,  $A$  la probabilidad de transición entre los estados correspondientes,  $g_m$  el peso estadístico y  $\lambda$  la longitud de onda central de cada una de las líneas de emisión.

### 2.11 Análisis de los componentes principales (PCA) y los componentes independientes (ICA)

Tras las estrategias de procesamiento contempladas anteriormente, en este apartado se estudiará la viabilidad del empleo del Análisis de Componentes Independientes (ICA) y del Análisis de Componentes Principales (PCA) como apoyo a la correcta identificación de las diferentes líneas espectrales. Estas dos técnicas se consideran algoritmos de Separación Ciega de Señales (*Blind Signal Separation*, BSS) y se encuentran dentro de la rama de la estadística conocida como Análisis Multivariable [10].

Como su nombre indica, el análisis multivariable trata sobre el análisis de múltiples variables o medidas. Estas pueden ser variables de diferentes medidas realizadas sobre un mismo proceso, como por ejemplo, las medidas a distintas longitudes de onda de una misma muestra. En estos análisis las variables múltiples se suelen representar como una sola variable vector, que engloba a las diferentes variables. Este vector se representa como:

$$X = [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)]^T, \quad 1 < t < n$$

El símbolo  $T$  significa traspuesto y representa la operación matricial de intercambio de filas y columnas. En nuestro caso,  $X$  se compone de  $m$  variables: muestras o espectros, cada uno conteniendo  $n$  ( $t=1, 2, \dots, n$ ) observaciones: píxeles (longitudes de onda).

En general, los resultados del análisis multivariable tratan de relacionar tanto las componentes de una variable como a las propias variables entre sí, y utilizan herramientas para operar en todo el conjunto de datos.

Uno de los propósitos de este tipo de análisis es encontrar una transformación del espacio de los datos multivariable, de forma que el conjunto de los datos sea más pequeño y sencillo de comprender e interpretar. En las transformaciones que reducen la dimensión de los datos multivariable, la idea es convertir una serie de datos en otra nueva serie en la que algunas variables tengan valores menores que el resto. De este modo estas variables podrían ser eliminadas, reduciendo así la dimensión de la multivariable.

Estas transformaciones suelen ser lineales (más sencillas de interpretar y que conllevan menos trabajo computacional) y se representan matemáticamente de la siguiente forma:

$$y_i(t) = \sum_{j=1}^m w_{ij}x_j(t) \quad , i = 1,2, \dots, n$$

donde  $w_{ij}$  es un coeficiente constante que define la transformación. Por lo tanto, como toda transformación lineal, esta operación puede ser interpretada como una rotación.

La siguiente figura muestra un ejemplo de la aplicación de estas técnicas. En este caso la serie de datos se compone de dos variables  $x_1$  y  $x_2$  con diferentes pero similares varianzas. Tras la rotación en las dos nuevas variables, se aprecia que la varianza de  $y_1$  es mucho menor que  $y_2$ . Todo ello sugiere que esta variable contiene casi toda la información de la serie de datos, pudiendo así reducir la dimensión utilizando, por lo tanto, únicamente la variable  $y_2$ .

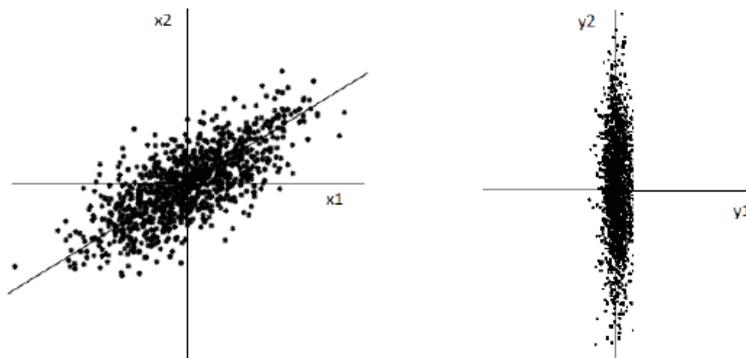


Figura 2.26. Tras la transformación lineal (rotación) apenas existe varianza con respecto  $y_1$

Para resumir el problema de la representación de variables multidimensionales se utilizará la siguiente notación: Se llamará  $X$  a la variable  $m$ -dimensional inicial. El problema consistirá en encontrar una función de  $X$ , para lograr una variable  $n$ -dimensional, donde  $n < m$ , tal que  $S = (s_1, s_2, \dots, s_n)^T$ . Trabajando con transformaciones lineales  $S = WX$  donde  $W$  será la matriz a determinar en el análisis.

A continuación se describen los algoritmos utilizados en los procesos en los que se aplican el Análisis de Componentes Principales (PCA) o Análisis de Componentes Independientes (ICA).

### 2.11.1 Descripción del algoritmo PCA

El Análisis de Componentes Principales (PCA) suele emplearse como técnica de reducción de variables en un conjunto de datos, sin perder información, y también como un posible proceso para identificar nuevas variables con un mayor significado.

En muchas aplicaciones PCA se utiliza para saber la verdadera dimensión de una serie de datos, y qué información es innecesaria o redundante. Esto es, si el conjunto de datos contiene  $m$  variables, quizás tan sólo con  $k < m$  variables se pueda tener totalmente representado el mismo conjunto de datos, sin perder nada de información.

PCA trabaja transformando una serie de variables correladas en una nueva serie de variables incorreladas, que estarán proyectadas en un nuevo espacio de componentes principales. Si las variables de la serie de datos ya están incorreladas, el PCA no tendrá ningún sentido.

Además de estar incorreladas, las componentes principales son ortogonales y están ordenadas en función de la variabilidad que presentan. Esto significa que la primera componente principal (variable) representa la mayor variabilidad del nuevo conjunto de datos y las sucesivas componentes principales tratarán de albergar la mayor variabilidad restante posible.

El objetivo final del PCA será entonces encontrar las componentes  $s_1, s_2, \dots, s_n$  de manera que puedan contener la mayor varianza posible en  $n$  transformaciones lineales.

Este método también es conocido como “método de segundo orden” dado que para su ejecución se utiliza solamente la información contenida en la covarianza de la matriz del vector  $X$ , que es un estadístico de segundo orden.

Para explicar el procedimiento del algoritmo PCA se recogerán las diferentes muestras de espectros recogidos como datos de entrada en la matriz  $X$ . Esta matriz ( $m \times n$ ) está formada por los diferentes valores de amplitud de intensidad relativa para cada píxel “ $m$ ” (longitud de onda) de las diferentes muestras o espectros recogidos “ $n$ ”.

A esta matriz de entrada se le aplican las transformaciones lineales de modo que la matriz resultante será:

$$Y_{n \times m} = X_{n \times m} * W_{m \times n}$$

siendo  $W$  la matriz de coeficientes para la transformación a calcular. Por lo tanto, para solucionar el problema y calcular este valor (matriz  $W$ ), se siguen los siguientes pasos:

1. En primer lugar se debe sustraer la media de cada medida  $m$  en el conjunto de datos y hacer un “centrado”, asegurando que el PCA encuentre la dirección de máxima varianza y no la confunda con la media. La media de cada variable  $m$  se define como:

$$\mu_{\lambda_j} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n I_{\lambda_j} w_k$$

Tras el cálculo, se eliminará la media de los datos de entrada y la nueva matriz de datos sin la media (datos centrados) se denominará  $X$ .

2. El segundo paso corresponde a la obtención de la matriz de covarianza  $C_{m \times m}$

$$C_{m \times m} = X^T X'$$

Donde  $X^T$  es la matriz  $X'$  traspuesta. Esta matriz de covarianza es simétrica respecto a la diagonal principal, que es unitaria.

3. A continuación se debe calcular los autovalores y autovectores de la matriz de covarianza.

Si se quiere obtener una matriz  $B$  transformando una matriz  $A$ , habrá una matriz  $V$  no nula tal que  $VA=VB$ . Esta matriz  $V$  es la matriz de autovectores de  $A$ , y  $B$  es la matriz de autovalores de  $A$  asociado a  $V$ .

Puesto que  $A$  tiene un número de vectores propio igual a su dimensión,  $A$  es diagonalizable a través de  $V$ :  $VA V^{-1}=B$  siendo una matriz cuyos elementos de la diagonal principal son los autovalores y el resto son ceros.

Siendo la matriz  $V$  de autovectores ortogonales o perpendiculares, es decir:  $V^T=V^{-1}$ .

En el caso del presente trabajo, se calculan los autovalores y autovectores de la matriz de covarianza para construir la matriz de coeficientes de la siguiente forma:

$$C = V D V^{-1}$$

4. El último paso del algoritmo del PCA para reducir el número de variables es colocar los autovectores según el orden de los autovalores en orden descendente. Así los primeros vectores serán los más relevantes.

Una vez colocados, la matriz de coeficientes buscada es  $W_{m \times m} = V_{m \times m}$ . La varianza acumulada será la que proporcionan los autovalores correspondientes a cada autovector.

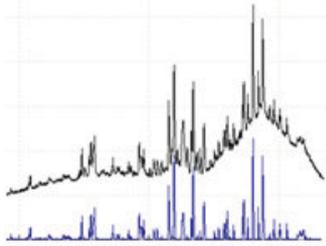
Por lo tanto, una vez organizados los vectores por tamaño se obtiene:

$$C = X^T X' = V D V^{-1}$$

Para tomar solo los componentes principales se delimita el número de componentes  $p$ , teniendo en cuenta la varianza acumulada: el tamaño de los autovalores respecto al total.

A partir de un cierto número de variables siempre se superará un porcentaje de varianza acumulada mayor del 99% lo que supone que a partir de ese momento no se deberán considerar más variables. Este porcentaje es un parámetro que fija el usuario dependiendo de la varianza acumulada que se desea [11][12].

### Adquisición de los datos



$$X = \begin{pmatrix} I_{\lambda_1 w_1} & I_{\lambda_1 w_2} & \dots & I_{\lambda_1 w_n} \\ I_{\lambda_2 w_1} & I_{\lambda_2 w_2} & \dots & I_{\lambda_2 w_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I_{\lambda_m w_1} & I_{\lambda_m w_2} & \dots & I_{\lambda_m w_n} \end{pmatrix}$$

### Obtención de la media

$$X = \begin{pmatrix} I_{\lambda_1 w_1} & I_{\lambda_1 w_2} & \dots & I_{\lambda_1 w_n} \\ I_{\lambda_2 w_1} & I_{\lambda_2 w_2} & \dots & I_{\lambda_2 w_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I_{\lambda_m w_1} & I_{\lambda_m w_2} & \dots & I_{\lambda_m w_n} \end{pmatrix} \Rightarrow \mu_{\lambda_2} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n I_{\lambda_2 w_k}$$

### Substracción de la media a la matriz inicial

$$X' = \begin{pmatrix} I_{\lambda_1 w_1} - \mu_{\lambda_1} & I_{\lambda_1 w_2} - \mu_{\lambda_1} & \dots & I_{\lambda_1 w_n} - \mu_{\lambda_1} \\ I_{\lambda_2 w_1} - \mu_{\lambda_2} & I_{\lambda_2 w_2} - \mu_{\lambda_2} & \dots & I_{\lambda_2 w_n} - \mu_{\lambda_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I_{\lambda_m w_1} - \mu_{\lambda_m} & I_{\lambda_m w_2} - \mu_{\lambda_m} & \dots & I_{\lambda_m w_n} - \mu_{\lambda_m} \end{pmatrix}$$

### Cálculo de la matriz de covarianza

$$C_{m \times m} = \begin{pmatrix} \text{cov}(\lambda_1, \lambda_1) & \text{cov}(\lambda_1, \lambda_2) & \dots & \text{cov}(\lambda_1, \lambda_m) \\ \text{cov}(\lambda_2, \lambda_1) & \text{cov}(\lambda_2, \lambda_2) & \dots & \text{cov}(\lambda_2, \lambda_m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{cov}(\lambda_m, \lambda_1) & \text{cov}(\lambda_m, \lambda_2) & \dots & \text{cov}(\lambda_m, \lambda_m) \end{pmatrix}$$

### Cálculo de los autovalores y autovectores

$$C = VDV^{-1} = |v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_m| \begin{vmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \beta_m \end{vmatrix} \begin{vmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_m \end{vmatrix}$$

### Ordenación de los componentes

$$V = |v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_m| \Rightarrow |v_1 \quad \dots \quad v_c|$$

$$D = \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \beta_{\dots} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \beta_m \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 \\ \dots & \beta_{\dots} & \dots \\ 0 & 0 & \beta_c \end{bmatrix}$$

Figura 2.27. Esquema del proceso del algoritmo PCA

## 2.11.2 Descripción del algoritmo ICA

El algoritmo del procesado de ICA se basa en un método de alto orden. Los métodos de alto orden se caracterizan por utilizar la transformación en  $X$  procedente de estadísticos de más alto orden que la matriz de covarianza. De modo que, para que tenga sentido, la distribución de  $X$  debe ser no-gaussiana.

En este caso, la no correlación de los datos no es suficiente para asegurar la independencia. El objetivo de ICA es encontrar un nuevo sub-espacio en el que las nuevas componentes de  $X$  sean independientes, y no sólo incorreladas. El objetivo es diferente al PCA, no se trata de reducir la dimensión de los datos sino de extraer señales con mayor significado.

A continuación se define qué supone la independencia estadística. Se supone las variables aleatorias  $y_1, y_2, \dots, y_m$  definidas por la función de densidad de probabilidad (fdp) conjunta  $f(y_1, y_2, \dots, y_m)$ . Las variables  $y_i$  son naturalmente independientes si la fdp conjunta cumple la propiedad:

$$f(y_1, y_2, \dots, y_m) = f(y_1) f(y_2) \dots f(y_m)$$

donde  $f(y_i)$  representa la fdp marginal de la variable aleatoria  $y_i$ .

La independencia es claramente diferente a la incorrelación, pues esta última sólo establece independencia lineal. Además, es una característica mucho más restrictiva que la incorrelación.

Los algoritmos ICA se pueden clasificar en dos categorías. Una consiste en minimizar o maximizar un criterio seleccionado y por otro lado, la segunda categoría podría implicar el uso de un algoritmo adaptativo basado en métodos de gradiente estadístico. Uno de los algoritmos más utilizados es el algoritmo *Fast-ICA*, que trata de maximizar o minimizar la *Kurtosis*, basándose en la iteración sobre un punto fijo. Los pasos básicos de este proceso son:

1. En primer lugar, el primer paso necesario es el centrado de los datos extrayendo la media para obtener un vector de entrada de media cero. Además algunos algoritmos requieren un *sphering* o blanqueado de los datos, es decir, que la media de  $X$  sea nula y que su covarianza sea la matriz identidad.

El blanqueado va a suponer una transformación lineal de los datos observados  $v$ , para finalmente lograr el vector de entrada al algoritmo,  $X$ :

$$X = Mv$$

2. El segundo paso consiste en maximizar o minimizar la *Kurtosis* (estadístico de cuarto orden). La kurtosis en muchas soluciones viene definida por una variable aleatoria de media cero de la siguiente manera:

$$kurt(v) = E\{v^4\} - 3(E\{v^2\})^2$$

La función  $E$  es la función de la incorrelación que se puede definir como:

$$E\{y_i y_j\} = E\{y_i\}E\{y_j\}; \quad i \neq j$$

Además, si las variables  $y_i$  fueran independientes, la expresión análoga a la anterior sería la siguiente:

$$E\{g_1(y_i)g_2(y_j)\} = E\{g_1(y_i)\}E\{g_2(y_j)\}; \quad i \neq j$$

La kurtosis se emplea para medir la acumulación de observaciones de la variable en la parte central de la distribución. Estas distribuciones pueden ser de tres formas: una normal, otra algo más achatada y la tercera la correspondiente a distribuciones con mayor frecuencia en los valores centrales, que se denominan como *mesocúrticas*, *platicúrticas* y *leptocúrticas* respectivamente.

Para una variable aleatoria gaussiana la kurtosis es nula. Para funciones de probabilidad con un pico acentuado de kurtosis será positiva, mientras que aquellas más planas tendrán una kurtosis negativa. Maximizando o minimizando la kurtosis se lleva al extremo la no-gaussianidad, y la no-gaussianidad lleva a la independencia estadística, como consecuencia del Teorema del Límite Central. Según el Teorema del Límite Central, el sumatorio de diferentes funciones de distribución de probabilidad de variables aleatorias independientes resultará en una gaussiana bajo una serie de condiciones. De esta manera la suma de dos variables independientes tendrá un aspecto más gaussiano que dichas variables.

Es por ello que la búsqueda de la no-gaussianidad lleva hacia la independencia, por lo que los algoritmos ICA buscarán esta característica, y también la razón por la que en ICA las componentes independientes no pueden ser gaussianas.

A continuación se busca una combinación lineal de las observaciones blanqueadas,  $X$ , que maximice o minimice su kurtosis:

$$W^T X, \text{ de modo que } \|w\| = 1.$$

Se asume que las fuentes independientes,  $s$ , guardan relación lineal con los datos de entrada blanqueados,  $x=Bs$ , donde  $B$  es una matriz ortogonal, debido a que las componentes  $s$  son independientes, y de media nula. También se define  $z=B^T w$ , de donde se puede deducir que  $\|z\|=1$ . Con todo ello y utilizando alguna de las propiedades de la kurtosis se obtiene que la función tiene un máximo y mínimo local, y es:

$$kurt(w^T X) = kurt(w^T B s) = kurt(z^T s) = \sum_{i=1}^n z_i^4 kurt(s_i)$$

Como se ha asumido que los datos han sido previamente blanqueados, entonces la expresión a minimizar será:

$$J(w) = kurt(w^T X) = E\{(w^T X)^4\} - 3\|w^4\|$$

Y será a través de esta expresión de la que se obtendrá una rápida iteración para llegar a la kurtosis máxima.

3. Por último se estiman los componentes independientes. Tras asumir que los datos de entrada han sido centrados y blanqueados se considera que  $X$  es una mezcla lineal de componentes independientes denominados fuentes. Para estimar los  $n$  componentes se correrá el algoritmo  $n$  veces, y para que no se repitan se hará uso de la matriz ortogonal de mezcla  $B$  siguiendo estos pasos:
  1. Se comienza en  $k=0$ . Se toma un vector inicial aleatorio  $w(0)$  de norma 1. Se pasa a  $k=1$ .
  2. Se realiza  $w(k)=E\{x(w(k-1)^T x)^3\}-3w(k-1)$ . Se estima encontrar un valor esperado utilizando una muestra de vectores de  $X$ .
  3. Se toma  $w(k)=w(k)-BB^T w(k)$  y se divide  $w(k)$  por su norma.
  4. Por último, si  $|w(k)^T w(k-1)|$  es diferente de 1, se toma  $k=k+1$  y se vuelve al paso 2.



Figura 2.28. Proceso del algoritmo *Fast-ICA* [13][14]

### 2.11.3 Algoritmos PCA e ICA en procesos de soldadura

Al observar un espectro de soldadura TIG sin el procesado presentado en este capítulo, se puede apreciar multitud de líneas de emisión al margen de la contribución de la radiación de fondo.

Las longitudes de onda a seleccionar para disponer de suficiente información del espectro para calcular la temperatura electrónica del plasma (y así detectar los posibles defectos en los cordones de soldadura), sin perder información necesaria o importante, se plantea como un problema habitual.

Esta selección y en consecuencia reducción de información es necesaria para disminuir la complejidad del sistema (eliminación de información redundante) y es una de las aplicaciones de las técnicas del PCA e ICA.

Además dentro de la monitorización de un proceso de soldadura, el análisis de los componentes principales (PCA) o independientes (ICA) también pueden ser aplicadas para otros propósitos como la extracción de las características de las señales espectrales.



Figura 2.29. Procesamiento de la información espectral

La identificación de las líneas de emisión, base de este trabajo, utilizando el análisis de los componentes principales (PCA) queda demostrado en el artículo [15], que se detallará brevemente en este apartado.

En este artículo se recoge un espectro por un espectrómetro HR4000 de *Ocean Optics* [9] de 3648 píxeles y 0.07 nm de resolución, de una soldadura TIG con el Argón como gas de protección y de una aleación de Aluminio y Manganeso entre otros elementos.

Alloying components of 5A06.

Element	Al	Mg	Mn	Si	Zn	Ti
Weight %	Balance	5.8-6.8	0.5-0.8	≤0.4	≤0.2	0.02-0.1

Figura 2.30. Componentes de la aleación 5A06

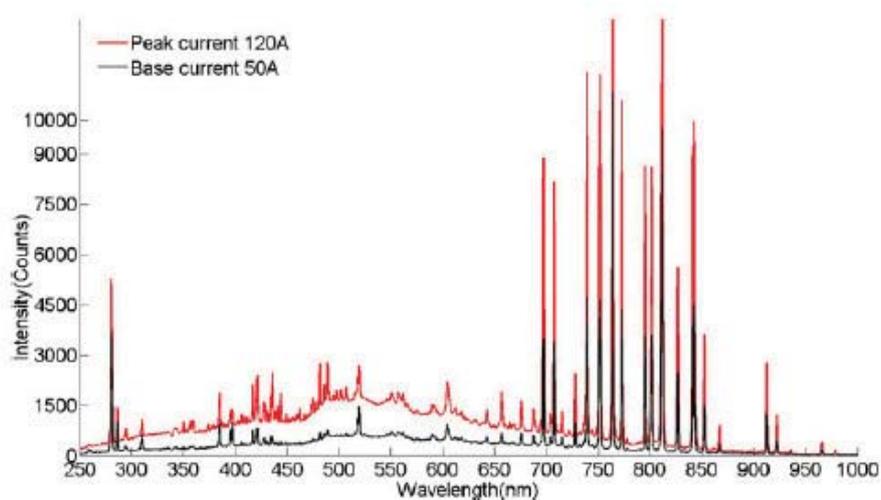


Figura 2.31. Espectro recogido

En el espectro se puede observar que las líneas espectrales entre 280-550 nm y 690-950 nm tienen mayor valor de intensidad. Estas líneas poseen gran información acerca de la soldadura (pueden indicar en tiempo real la calidad de la soldadura). Sin embargo, hay hasta 3648 longitudes de onda; el tiempo de proceso aumenta y disminuye la rapidez del sistema ante tal cantidad de información. Para reducir tal cantidad de información e identificar las líneas de emisión se decide, por tanto, aplicar el análisis de componentes principales PCA.

Como se ha comentado un análisis de componentes principales tiene sentido si existen altas correlaciones entre las variables, ya que esto es indicativo de que existe información redundante y, por tanto, pocos factores explicarán gran parte de la variabilidad total.

En la siguiente figura se representan en escalas de grises la matriz de coeficientes de correlación entre las bandas espectrales. Los cálculos demuestran y comprueban que aproximadamente en el 46.7% de las longitudes de onda los coeficientes de correlación son superiores a 0.80, lo que indica un alto grado de información redundante.

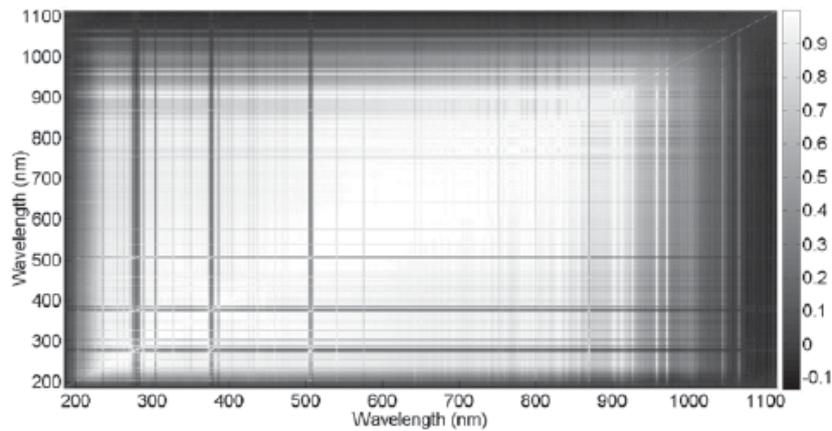


Figura 2.32. Escala de grises de la matriz de correlación

La selección de los factores se realiza de tal forma que el primero recoja la mayor proporción posible de la variabilidad original; el segundo factor debe recoger la máxima variabilidad posible no recogida por el primero y así sucesivamente.

Del total de factores se elegirán aquéllos que recojan el porcentaje de variabilidad que se considere suficiente. A éstos se les denominará componentes principales. En este caso son dos los componentes principales escogidos y que contribuyen con un porcentaje del 81.4% y 9.9%, respectivamente.

Una vez finalizado el proceso y representado los componentes principales se comprueba que las líneas son identificadas como líneas de Argón, Aluminio y Manganeso, como era esperado.

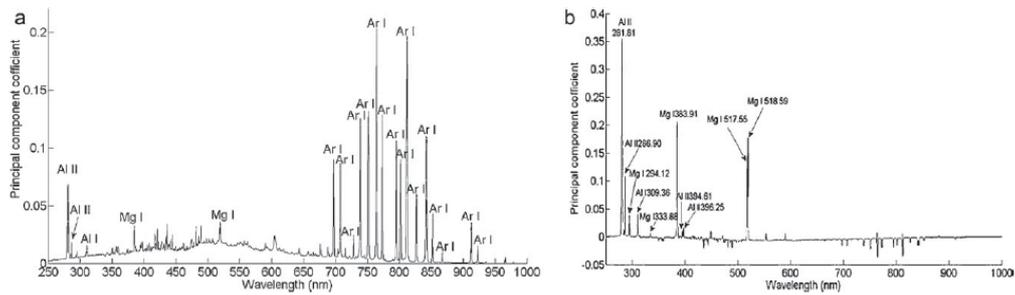


Figura 2.33. Coeficientes de los componentes principales primero y segundo identificados

Pero además como se puede ver, la variabilidad se aporta principalmente por líneas de Argón para el primer componente principal y líneas de otro metal para el segundo componente principal.

Es decir, si se hubieran utilizado más factores o componentes principales, es posible que se pudiera separar e identificar las líneas espectrales de Aluminio, Manganeso y demás materiales por separado, representando el tercer, cuarto y sucesivos componentes principales. Por lo tanto, parece intuirse que estas técnicas pueden ser utilizadas para la ayuda o mejora en la identificación de líneas espectrales.

# 3. PROGRAMA REALIZADO

## 3.1 Introducción y descripción

### 3.1.1 Lenguaje C#

En el trabajo se ha desarrollado un programa informático capaz de realizar una identificación de las líneas de emisión a partir de una base de datos y un archivo que contiene los espectros a analizar, entre otros aspectos que se detallarán a continuación.

El software se ha desarrollado en C# que es un lenguaje de programación orientado a objetos desarrollado y estandarizado por Microsoft como parte de su plataforma .NET y es uno de los lenguajes de programación diseñados para la infraestructura de lenguaje común.

Su sintaxis básica deriva de C/C++ y su modelo de objetos es similar a la de Java, pero incluye mejoras derivadas de otros lenguajes. El entorno usado para la programación es el Visual Studio .NET con el cuál se ha desarrollado una interfaz gráfica amigable con el usuario que facilita el manejo y la comprensión de todo el proceso.

### 3.1.2 Interfaz gráfica

La idea básica del programa realizado es que cualquier usuario, incluso uno que no conozca la teoría que engloba todo este proceso, pueda trabajar con él. Uno de los objetivos básicos es automatizar todo el proceso en la mayor medida posible.

La interfaz gráfica se ha desarrollado mediante un formulario de Windows que es un elemento de Visual Studio que permite añadir botones, etiquetas y programar los eventos. Por la cantidad de datos, configuraciones y opciones del usuario se han creado diferentes pestañas en las cuáles están los diferentes parámetros a configurar.

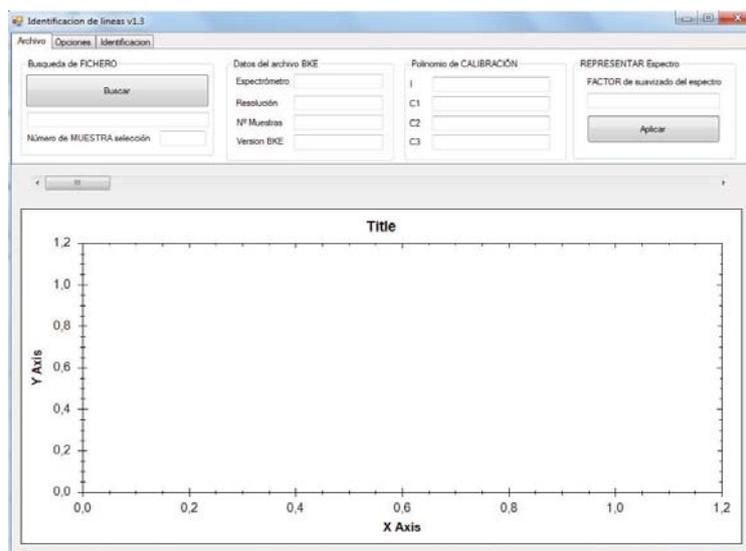


Figura 3.1. Interfaz gráfica inicial

Una vez inicializado el programa el usuario debe introducir el espectro de soldadura a analizar, que es un archivo de extensión *.bke* en la pestaña inicial denominada como *Archivo*.

Una vez seleccionado este archivo se observará que se cargan de manera automática algunos parámetros como los datos básicos del archivo *.bke* o el polinomio de calibración que depende de cada archivo y el factor de suavizado del espectro que en este caso se inicializa por defecto con el valor de 50 para dar una idea o ayudar a un usuario no especializado en el tema. A la vez se controlan posibles valores erróneos (control de errores) que el usuario pueda introducir, como por ejemplo introducir un valor no numérico o un valor mayor de 500 que pueda estropear el espectro.

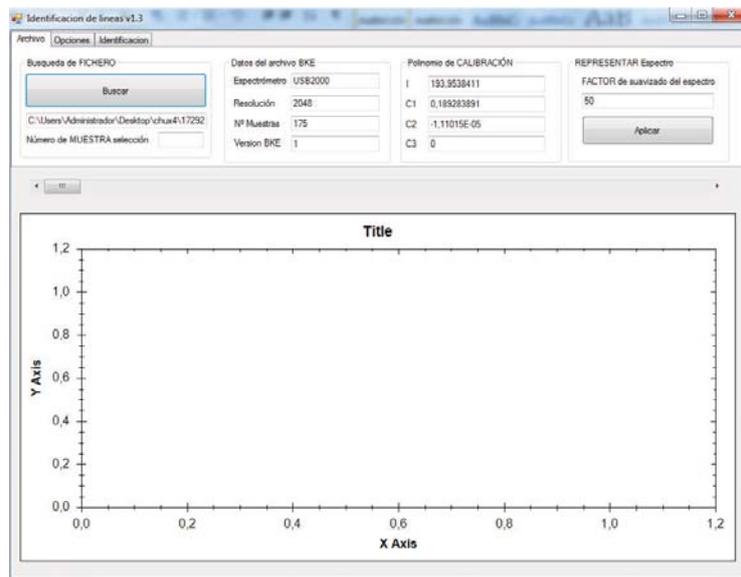


Figura 3.2. Interfaz gráfica una vez cargado el espectro

### 3.1.3 Lectura de archivos BKE (bkeReader): Librería OOWrapper

Los archivos con extensión *.bke* que contienen toda la información espectral están escritos en formato binario por lo que se utiliza la librería OOWrapper con sus métodos y clases para extraer la información y facilitar su manejo. Esta librería ha sido desarrollada por el *Grupo de Ingeniería Fotónica de la Universidad de Cantabria*.

Mediante tres sencillos pasos se puede obtener la información necesaria. Se trata de realizar una instancia *bkeReader* al fichero que se desea leer y a continuación abrir y leer el archivo.

```
myBkeReader = new OOWrapper.BkeReader(ofd.FileName);  
myBkeReader.OpenFile(ofd.FileName);  
myBkeReader.Read();
```

Entre otros parámetros se puede obtener el nombre del espectrómetro con el cuál se recoge el espectro con una variable de tipo *string* (*SpectrometerInfo.Name*), la resolución del espectrómetro en una variable de tipo *int* (*SpectrometerInfo.NPixels*), el

número de muestras en una variable de tipo *int* (*PositionMax*), la versión del archivo *.bke* en una variable de tipo *int* (*FileVersion*) y los valores de amplitud del espectro en formato de tipo *doble* (*CurrentSpectrum.Spectrum*).

Como información adicional también se pueden extraer los coeficientes del polinomio de calibración proporcionado por el fabricante del espectrómetro (*Spectrometer Coefficients*).

```
int Resolution, numberOfSamples, versionBKE;
double[] specActual;

versionBKE = myBkeReader.FileVersion;
string espSerial = myBkeReader.SpectrometerInfo.Name;
Resolution = myBkeReader.SpectrometerInfo.NPixels;
numberOfSamples = myBkeReader.PositionMax;
```

En nuestro programa se debe pulsar el botón *Buscar* para elegir el archivo *.bke* y una vez abierto se comprueba que los campos como la versión, resolución, etc se han rellenado.

The screenshot shows a software window with four main sections:

- Busqueda de FICHERO:** Includes a 'Buscar' button and a text field containing the path 'C:\Users\Administrador\Desktop\chux4\17292'. Below it is a 'Número de MUESTRA selección' field.
- Datos del archivo BKE:** Contains fields for 'Espectrómetro' (USB2000), 'Resolución' (2048), 'Nº Muestras' (175), and 'Version BKE' (1).
- Polinomio de CALIBRACIÓN:** Contains three coefficient fields: 'I' (193,9538411), 'C1' (0,189283891), 'C2' (-1,11015E-05), and 'C3' (0).
- REPRESENTAR Espectro:** Contains a 'FACTOR de suavizado del espectro' field (50) and an 'Aplicar' button.

Figura 3.3. Datos del archivo BKE

Una vez abierto el archivo *.bke* para almacenar el espectro se ha creado una estructura en donde la dimensión del array de estructuras viene dada por la resolución del espectrómetro:

```
public struct Espectro{
    public double [] value;
    public double [] wav;
}
```

### 3.1.4 Representación del espectro: Zedgraph, entorno gráfico 2D

Para diseñar las gráficas del espectro se ha utilizado la librería ZedGraph que es una biblioteca de clases de Windows Forms UserControl para la creación de entre otras; gráficas, barras, y líneas 2D. Es de código libre y casi todos los aspectos de la gráfica pueden ser modificados por el usuario.

Por defecto se permite hacer zoom, acercar o alejar una zona seleccionada entre otras muchas opciones como copiar la imagen, visualizar los puntos de la gráfica, etc. Una vez almacenado el espectro para representarlo mediante este entorno gráfico se introdujo una barra o scroll para representar cualquiera de las muestras del espectro almacenado en el bke.

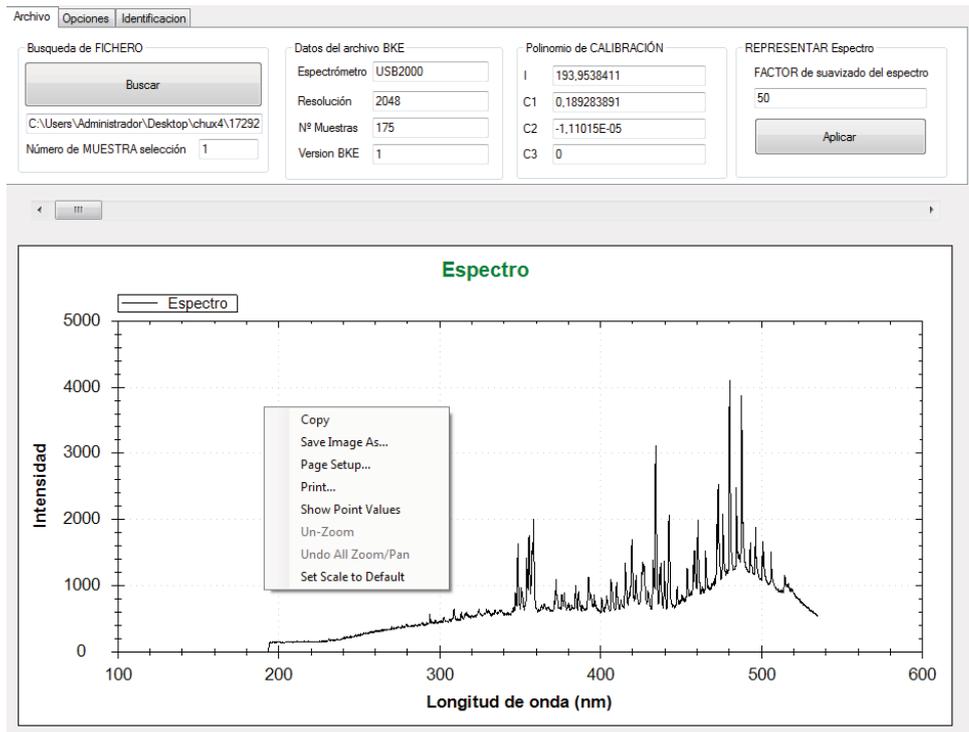


Figura 3.4. Entorno gráfico muestra 1

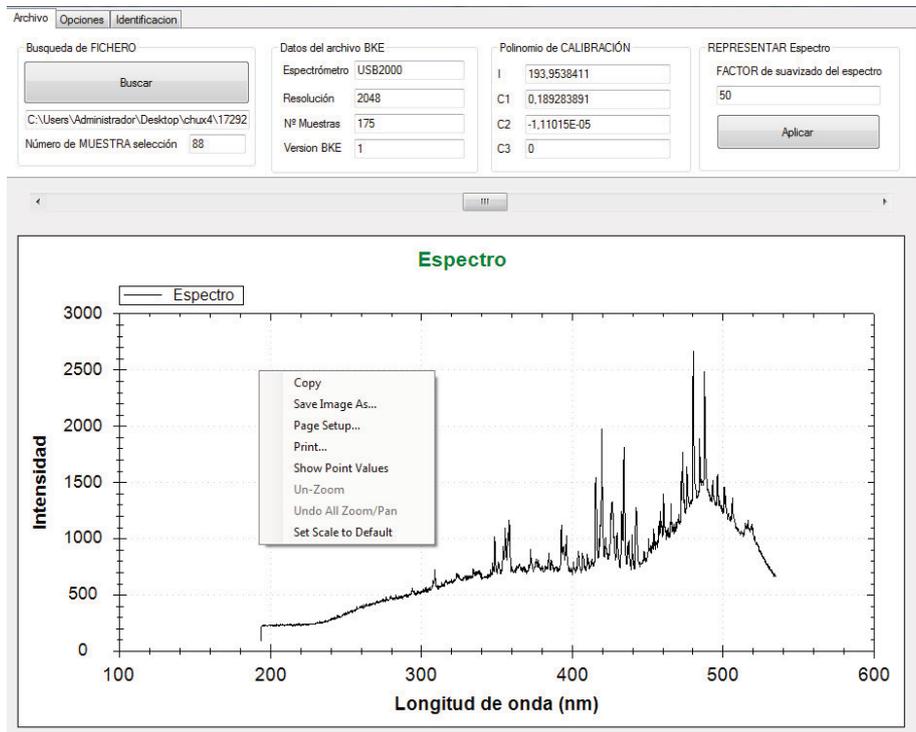


Figura 3.5. Entorno gráfico muestra 88

Se puede observar que los espectros varían notablemente como se esperaba debido a que como ya se ha comentado las primeras muestras no son fiables porque cuando empieza el proceso es aún inestable y no son válidas para su procesado [16].

### 3.1.5 Suavizado del espectro

Una vez representado el espectro se realiza el suavizado para una correcta identificación de los picos, para lo cual el usuario debe introducir un valor numérico entero. Para que esta función de un buen resultado es preferible que el factor de suavizado no sea mayor de 100.

El algoritmo utilizado se basa en la creación de un espectro auxiliar al que se le aplica el suavizado y después se le resta su amplitud menos la amplitud del espectro original.

En los casos que den como resultado de la resta una amplitud negativa, ésta se sustituye por 0. A continuación se muestra un ejemplo de la detección de picos encontrados:

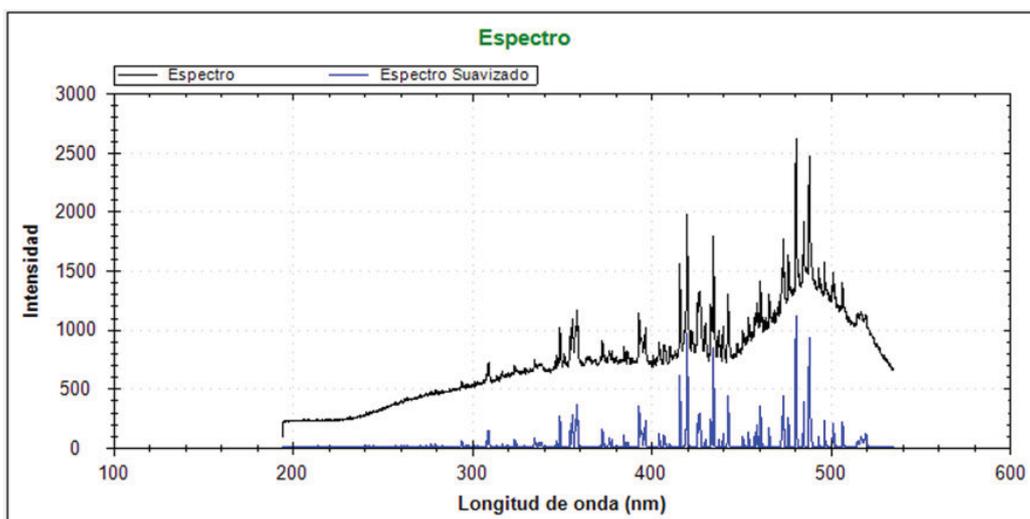


Figura 3.6. Espectro inicial y posterior al suavizado

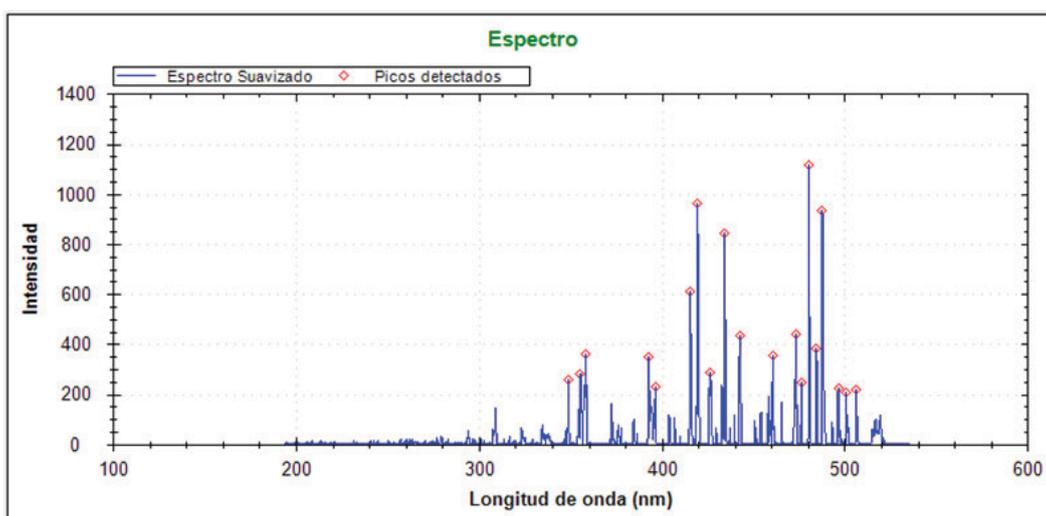


Figura 3.7. Picos detectados aplicando el suavizado

### 3.1.6 Búsqueda de picos. Algoritmo de detección de sub-píxel: Algoritmo del centroide CDA

En el algoritmo utilizado para la búsqueda de picos se crea una estructura de datos con diferentes variables de tipo *double* para almacenar los picos detectados. La primera variable denominada como *Amplitud* almacena la amplitud del pico detectado como su propio nombre indica, en la variable denominada *Lambda* se almacena su longitud de onda y en la tercera variable denominada *Pixel* se almacena el número de píxel correspondiente del espectro.

En las variables *Start* y *End* se almacenan las longitudes de onda en donde empieza y acaba el pico dependiendo de su anchura espectral y por último en las variables denominadas *Min\_Iz* y *Min\_De* indican en que longitudes de onda, dentro del marco de la ventana, se encuentra el valor más pequeño en amplitud a la izquierda y a la derecha del centro respectivamente.

```
public struct Picos{
    public double Amplitud;
    public double Lambda;
    public double Pixel;
    public double Start;
    public double End;
    public double Min_Iz;
    public double Min_De;
}
```

Dentro del programa para la búsqueda de picos se utilizan tres variables numéricas de tipo entero que son la dimensión de la ventana, la amplitud de saturación y el porcentaje de caída del pico todas ellas dentro de la pestaña denominada como *Opciones* en el formulario.

La *dimensión de la ventana* (valor por defecto de 10) nos indica el grupo de valores de amplitudes en número de píxel que se va a observar a la vez. El algoritmo desplaza la ventana a lo largo de todo el espectro y se fija en el píxel que coincide con el valor introducido en *Dimensión ventana* entre dos. Si la amplitud que coincide con ese píxel es mayor que el resto de las amplitudes que engloban la ventana puede que sea un pico. Cuanto mayor es la dimensión de la ventana menos picos son detectados.

Para descartar finalmente si es un pico, se analizan los valores de amplitud a la izquierda y a la derecha de ese máximo y si estos decaen el tanto por ciento introducido en *Caída del pico* (cuyo valor por defecto es de 25%) respecto al máximo, significará que tenemos un pico. Si el porcentaje de caída es bajo, menor de 25% aproximadamente, se detectarían muchos picos pudiendo ralentizar el proceso. Si por el contrario el porcentaje de caída es alto, mayor de 65%, serán pocos los picos que se detecten.

El valor de la saturación (*Amplitud de saturación* cuyo valor por defecto es de 400) se utiliza para descartar aquellos picos que tengan una amplitud demasiado alta.

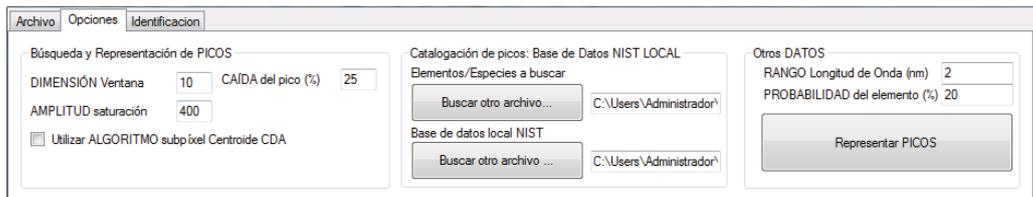


Figura 3.8. Búsqueda y Representación de Picos (Pestaña Opciones)

Como se puede observar también se ha añadido en el formulario un *CheckBox* que permite aplicar el algoritmo de detección de sub-píxel CDA al proceso. Este algoritmo se aplica sólo a los picos detectados, reemplazándose los nuevos valores de las nuevas longitudes de onda. A continuación se muestra un ejemplo:

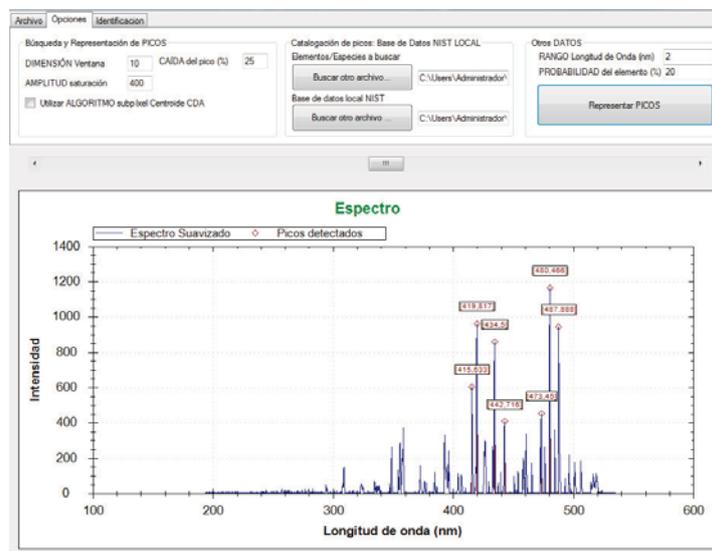


Figura 3.9. Longitud de onda de los picos detectados sin aplicar algoritmo CDA



Figura 3.10. Longitud de onda de los picos detectados aplicando algoritmo CDA

Esta aplicación se ha propuesto, principalmente, con el objeto de solventar los problemas relativos a la resolución espectral de especial relevancia en espectrómetros de bajo coste, y tras varios estudios se ha comprobado que la inclusión de estos algoritmos son una solución eficiente ante este problema. En el ejemplo anterior se puede comprobar que al utilizar este algoritmo los valores de las longitudes de onda en algunos casos varían y son reemplazados, antes de continuar con la catalogación.

### 3.1.7 Identificación de picos

Para catalogar los picos que han sido detectados se deben realizar algunos pasos previos. Para automatizar el proceso por defecto se cargan una base de datos NIST local y un fichero de texto con los elementos y pesos determinados para realizar la catalogación con un estudio previo. Sin embargo, en cualquier instante el usuario puede cargar otra base de datos o estudio previo con el objetivo de mejorar la catalogación o identificación de picos (cada soldadura analizada puede ser de un material distinto o se puede buscar elementos diferentes en cada proceso).

Del fichero de texto con los elementos y pesos determinados se almacena su contenido en las variables de *tipo string*: *element* y *percent*. Para la lectura de la base de datos local NIST se trata como un fichero de texto en el cuál se debe leer línea a línea y delimitar la información según interés.

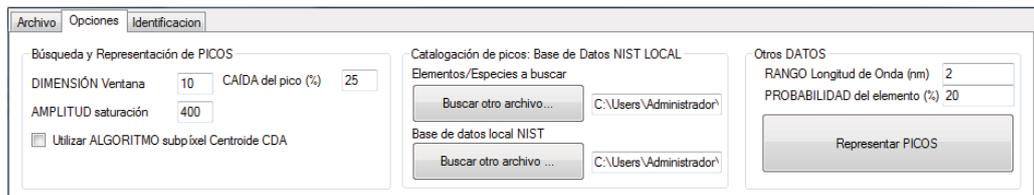


Figura 3.11. Catalogación de picos (Pestaña Opciones)

Por cada pico se lee cada una de las líneas del fichero. Usando la función *Split* se extrae en tres variables de *tipo string*; el elemento, su longitud de onda y su intensidad relativa.

Spectrum	Observed wavelength vac. (nm)	Rel. Int. (%)	Ak1 s <sup>-1</sup>	Acc.	E1 (ev)	E2 (ev)
B I	150.0083	a			0.0018953	8.267040
W III	150.0132	15			4.521367	12.786239
Sf III	150.024	12	2.10e+09	B+	17.722764	25.987049
B I	150.0318	a			0.0000000	8.263861
W III	150.0614	100			2.434064	10.69630
B I	150.0662	a			0.0018953	8.263861
W III	150.0667	200			3.789119	12.04434
Ar III	150.0740	9			19.4692141	27.7306958
B I	150.0989	a			0.0000000	8.260165
W III	150.1170	100			3.378883	11.63806
Sf III	150.119	10	1.86e+09	B+	17.723024	25.982044
B I	150.1334	a			0.0018953	8.260165
W III	150.1416	450			0.778349	9.036154
W III	150.1477	150			2.753947	11.01142
Nb III	150.153	50				
S V	150.1760	18	1.91e+08	A	15.76468	24.02059
B I	150.1777	a			0.0000000	8.253834
W IV	150.1780	30			3.463824	11.73964
Sf III	150.187	9	1.76e+09	B	17.723323	25.978581
W III	150.1897	300			0.279733	8.534894
Nb III	150.199	100				
W III	150.2031	30			2.154895	10.40934
B I	150.2121	a			0.0018953	8.253834
W III	150.2130	45			5.378217	13.632109
P III	150.2228	350				
W III	150.2258	5			1.734804	9.987995

Figura 3.12. Base de datos NIST

Para descartar las líneas que corresponden a elementos que no interesan, el programa compara el elemento leído de la base de datos con los de la lista del material y si en algún caso son iguales sigue con el análisis, de lo contrario pasa a la siguiente línea de la base de datos y repite el proceso.

Si coincide que el elemento de la línea de la base de datos que se está analizando es un elemento que queremos buscar guardamos su longitud de onda e intensidad relativa. En algún caso, además, alguna línea no tiene intensidad relativa (porque la base de datos no contiene todas las transiciones de los elementos), no sirve y debe ser eliminada.

Una vez una línea sea almacenada con su elemento, longitud de onda e intensidad relativa, se debe pasar a compararla con los picos detectados.

Lo primero que se compara y que sirve de filtro es la longitud de onda. Si la longitud de onda de la línea que se ha leído está dentro del rango de  $\pm 2nm$  de la longitud de onda del pico (configurable por el usuario teniendo en cuenta el espectrómetro utilizado) significa que pueda ser la correcta.

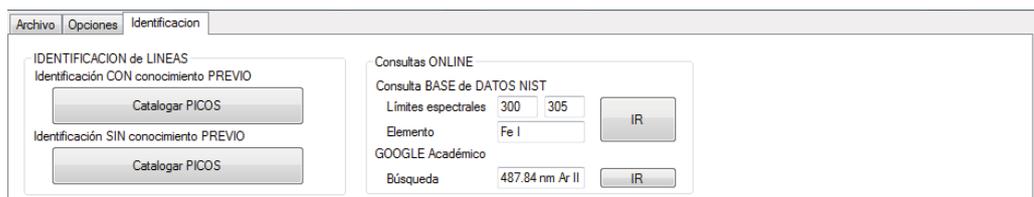


Figura 3.13. Pestaña Identificación

A continuación, y dependiendo de la identificación, los algoritmos no son iguales. En el caso de la identificación sin estudio previo el programa analiza la intensidad relativa.

De todas las líneas que estén dentro del rango de la longitud de onda del pico, finalmente se selecciona aquella cuyo producto de su intensidad relativa por el porcentaje de probabilidad de transición asignado, sea mayor.

Para el caso de la identificación sin estudio previo se selecciona aquella cuya figura de mérito (Intensidad relativa dividido entre el valor absoluto de la resta de las longitudes de ondas teóricas y prácticas) sea mayor.

Finalmente se almacena la amplitud, la longitud de onda, el píxel y el nombre del elemento u material en la estructura de datos creada, denominada *DatosNist*: [17]

```
public struct DatosNist{
    public double[] Amplitud;
    public double[] Lambda;
    public double[] Pixel;
    public string[] Material;
    public string[] Material2;
}
```

### 3.1.8 Opciones

Como complemento a todas las funciones que se han descrito, se han añadido una serie de opciones para que el usuario pueda comprobar o consultar de forma *online* (vía Internet), si las líneas han sido correctamente seleccionadas u otra cualquier consulta que el usuario desee.

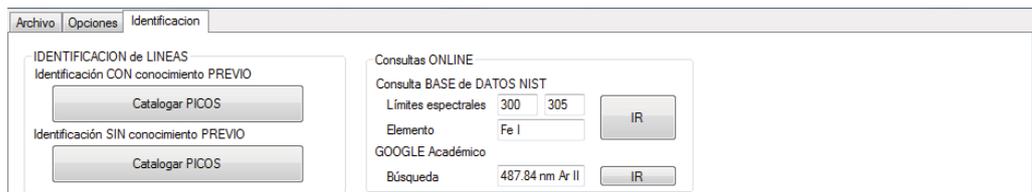


Figura 3.14. Consultas Online dentro de la pestaña Identificación

El usuario puede consultar vía web la base de datos NIST completa almacenada en la web <http://www.nist.gov/pml/index.cfm> indicando los límites espectrales (longitudes de onda inferior y superior) y el elemento con su estado de ionización (opcional), para poder observar las líneas de emisión.

Por ejemplo, si se busca las líneas de emisión de Argón entre 400 y 405 nm el programa abrirá una nueva pestaña en nuestro navegador con la siguiente información dentro de la mencionada página web anteriormente:

Spectrum	Observed Wavelength Air (nm)	Ritz Wavelength Air (nm)	Rel. Int. (?)	Aki s <sup>-1</sup>	Acc.	Ei (cm <sup>-1</sup> )	Ek (cm <sup>-1</sup> )	gi	gk	Type
Ar II	400.11378	400.113759	3	6.e+05	C	147228.0521	- 172213.8798	2	- 4	
Ar II	400.53620	400.53627	10			190106.3000	- 215065.7716	4	- 2	
Ar II	400.7632	400.762828	2			158730.2995	- 183675.6614	6	- 8	
Ar II	401.12084	401.120922	12	3.1e+06	D	158167.7999	- 183090.8927	4	- 4	
Ar II	401.38561	401.385610	145	1.05e+07	A	132327.3616	- 157234.0196	8	- 8	
Ar II	401.98434	401.98429	7			190196.2066	- 215065.7716	2	- 2	
Ar III	402.35864	402.35853	4			214347.599	- 239194.033	3	- 3	
Ar II	403.13769	403.137797	6	7.5e+06	B	159393.3850	- 184191.7917	4	- 2	
Ar II	403.38090	403.380915	95	9.8e+07	D	158167.7999	- 182951.2609	4	- 2	
Ar II	403.4783	403.477769	1b1, G?			186816.0496	- 211593.5615	8	- 10	
Ar II	403.54595	403.545971	50	4.4e+06	B	148620.1414	- 173393.4658	4	- 6	
Ar II	403.88039	403.880380	18	1.2e+06	B	132481.2068	- 157234.0196	6	- 8	
Ar II	404.2190	404.218100	3	4.e+05	C	145668.8845	- 170401.0170	4	- 6	
Ar II	404.28934	404.289342	288	4.06e+07	B	148620.1414	- 173347.9158	4	- 4	
Ar I	404.4418	404.4418	50	3.33e+05	C	93750.5978	- 118469.0508	3	- 5	
Ar II	404.56769	404.567613	8	1.6e+06	C	147503.1134	- 172213.8798	4	- 4	
Ar I	404.5965	404.5965	4	4.1e+04	C	93750.5978	- 118459.5975	3	- 3	
Ar II	404.74803	404.748081	10			159393.3850	- 184093.1337	4	- 2	

Figura 3.15. Ejemplo de la consulta de las líneas de Argón entre 400 y 405 nm

Otra de las opciones es la consulta en la base de datos de *Google Académico* que permite buscar bibliografía especializada de una manera sencilla. Se pueden realizar búsquedas de estudios revisados por especialistas, tesis, libros, resúmenes y artículos de fuentes como editoriales académicas, sociedades profesionales, depósitos de impresiones preliminares, universidades y otras organizaciones académicas.

En este caso puede ayudar para certificar que una línea de emisión a una cierta longitud de onda es de un elemento o material concreto debido a los experimentos o prácticas realizadas por algún estudio, tesis, etc.

Por ejemplo al realizar una búsqueda de una línea de Argón (“487.84 nm Ar II”) nuestro navegador habitual abrirá una nueva pestaña que devuelve múltiples resultados, como al realizar cualquier búsqueda en la página web de Google.

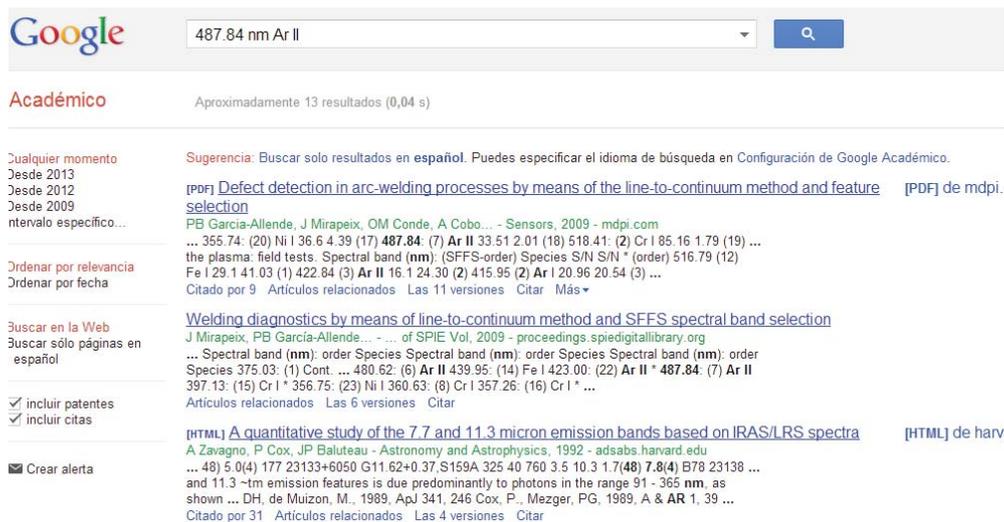


Figura 3.16. Ejemplo de la consulta mediante Google Académico

En este ejemplo entre otros resultados, se ofrece un enlace a un archivo *.pdf* de un artículo de una revista que menciona que tras diversos experimentos esta línea pertenece a Ar II.

## 3.2 Resultados

### 3.2.1 Espectros utilizados

El objetivo de este apartado es comparar la catalogación o identificación de las líneas obtenidas a partir de varios espectros y utilizando las diferentes técnicas que se han comentado anteriormente.

Para ello se compararán los resultados obtenidos utilizando dos bases de datos NIST locales (una más extensa que la otra), hasta tres diferentes ficheros de texto con diferentes pesos a la hora de la identificación mediante estudio o conocimiento previo y por último la identificación para todos estos casos utilizando o no el algoritmo sub-píxel del centroide para el cálculo de la longitud de onda.

No se expondrán los resultados obtenidos paso a paso si se catalogan los picos utilizando el algoritmo del centroide, debido a que los resultados varían ligeramente, y los pequeños cambios se muestran en la tabla final. Sin embargo, si se podrá observar como el algoritmo recalcula el valor de la longitud de onda central, que varía en muchos de los casos.

Para exponer los resultados utilizando el programa desarrollado, se han empleado dos archivos de extensión *.bke* que se corresponden con espectros del proceso de diferentes soldaduras recogidas en el artículo citado en la bibliografía [18], utilizando el Argón como gas de protección.

Las soldaduras recogidas en este artículo se realizaron en las instalaciones de la industria española Turbo Propulsores en Zamudio (España), en aleaciones de Inconel 718 (en placas de 2mm de espesor) y de Titanio 6A1-4V (en placas de 1.6 mm de espesor).

### 3.2.2 Experimento nº1

En primer lugar, y como primer espectro a utilizar, se inicia el programa y se utiliza el archivo *.bke* denominado *C:\...\172920\_USB2000\_USB2E130\_Ti39.bke*.

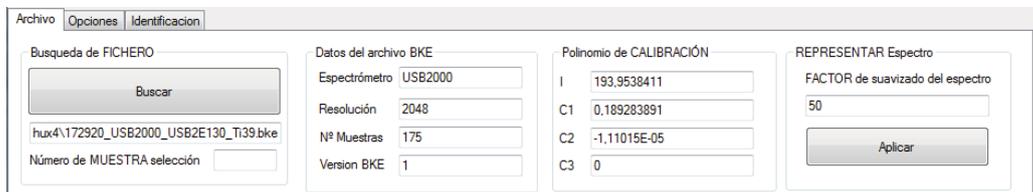


Figura 3.17. Primer archivo *.bke*

Al abrir y leer el archivo *.bke* se puede ver alguno de los datos del archivo en concreto. Se puede observar que el *espectrómetro* por el cual se recoge el espectro es un *USB2000* cuya *resolución* es de *2048 píxeles* y con el que se han recogido hasta de *175 muestras*. Además se puede observar los *coeficientes del polinomio de calibración* y la *versión* del archivo.

Este primer espectro pertenece a un proceso de soldadura de una aleación de Titanio (Ti 6A1-4V). Esta aleación es la más utilizada industrialmente de entre todas las aleaciones de titanio y a ella se dedica la mitad de la producción de titanio metal. Esto se debe al excelente balance entre sus propiedades mecánicas, su resistencia a la corrosión, su buen comportamiento a temperaturas elevadas, debiendo destacarse también su capacidad para ser trabajado mecánicamente y de modificar sus propiedades mediante tratamientos térmicos [19].



Figura 3.18. Cordón de la soldadura de Ti 6A1-4V

En este caso en el cordón de soldadura a analizar se aprecia un defecto: la falta de penetración. La falta de penetración, que suele ir acompañada de incrustaciones de diminutas partículas de escoria, se produce por las interrupciones intermitentes en la fusión de los bordes, sobre todo al reanudar la soldadura tras el cambio de electrodos.

Es uno de los efectos más críticos, siendo causa de roturas en soldaduras en depósitos a presión, tanques y tuberías. Se puede evitar procurando la máxima limpieza y reanudando la soldadura a unos milímetros de donde se interrumpió [20].

A continuación se representa la muestra que corresponde al número total de muestras entre dos, debido como ya se ha comentado, a que las primeras capturas no son fiables. Por lo tanto se representa el espectro de la muestra número 88 y se aplica el suavizado con un factor de 50.

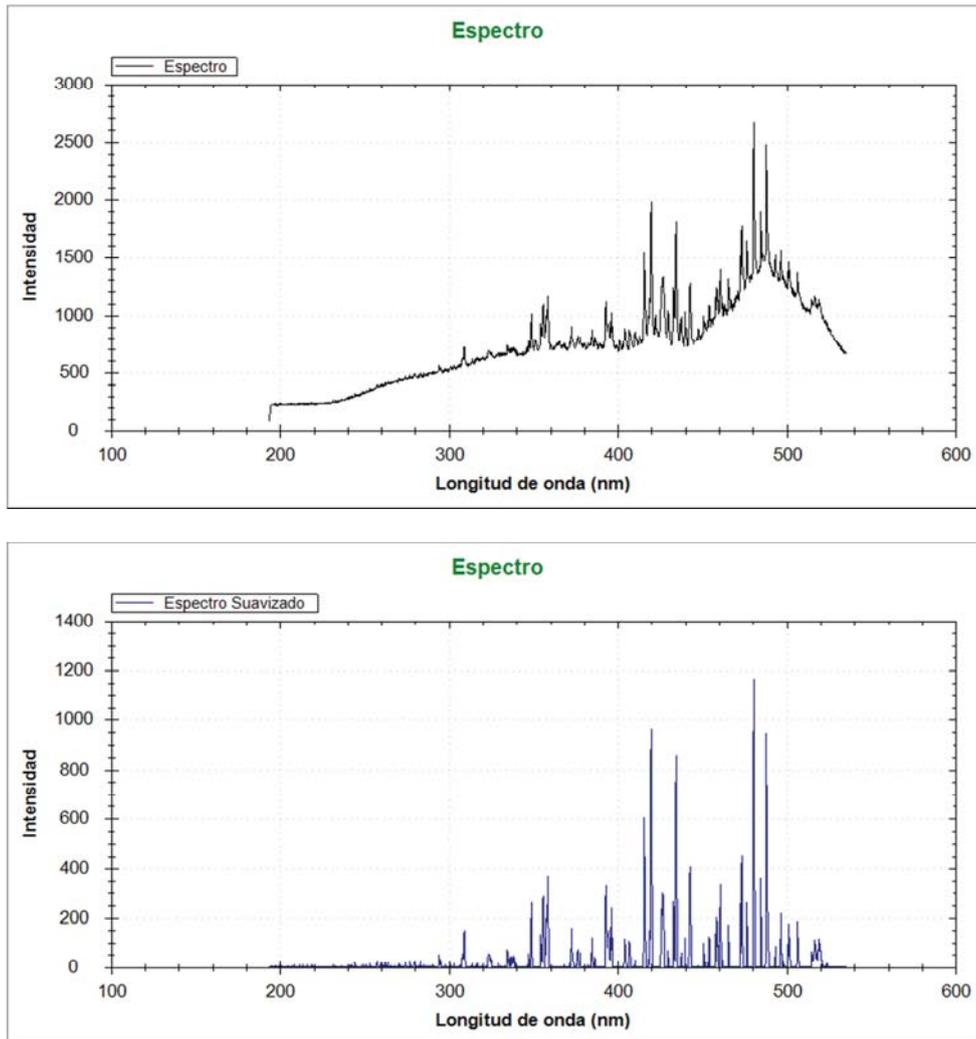


Figura 3.19. Espectro inicial y suavizado con un factor de 50

A continuación se realiza la detección de los picos utilizando los parámetros de la pestaña *Opciones* por defecto, es decir: La *dimensión de la ventana* de 10, la *amplitud de saturación* de 400 y el porcentaje de la *caída del pico* del 25%. También sin utilizar y utilizando el algoritmo sub-píxel del centroide.

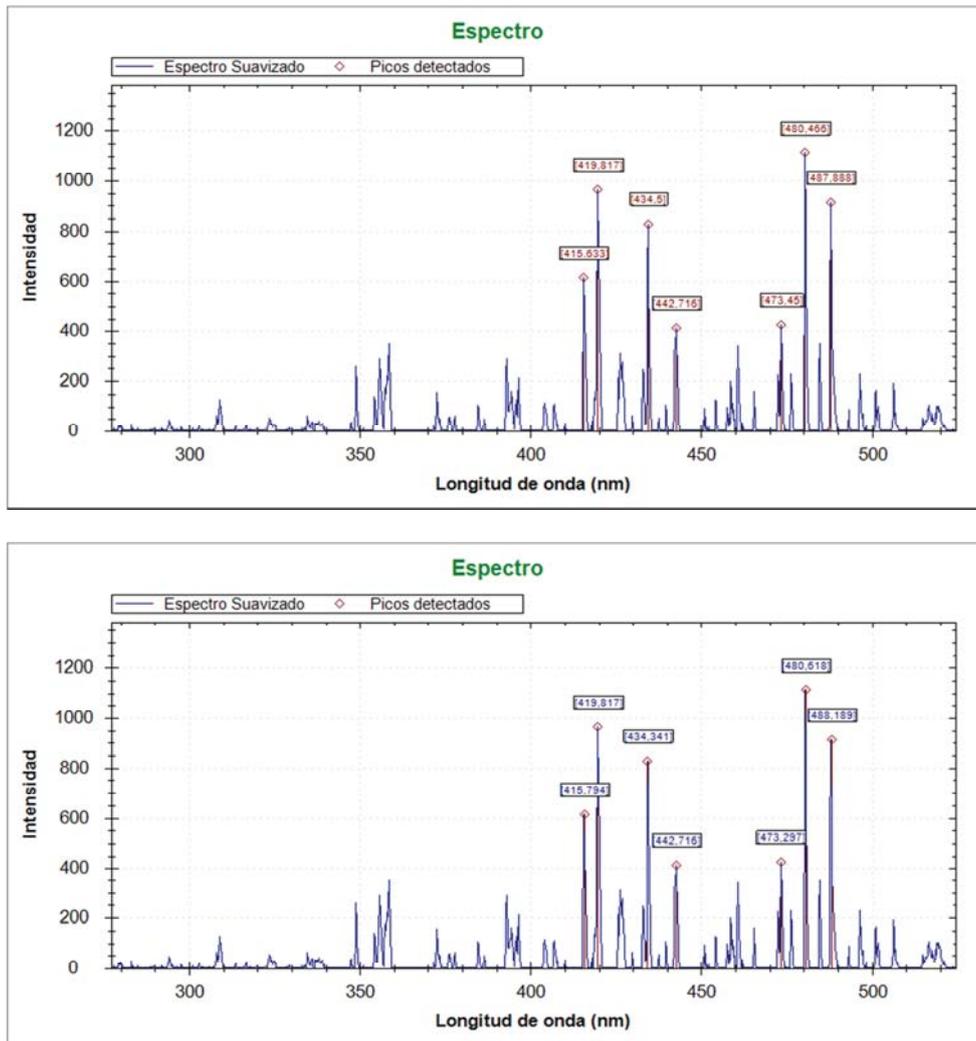


Figura 3.20. Picos detectados sin utilizar y utilizando el algoritmo del CDA

Para detallar los resultados, en primer lugar se observarán aquellos en los que se utiliza el algoritmo que necesita un fichero de entrada y que sirve como un “*estudio o conocimiento previo*”.

En este trabajo se comentarán los resultados obtenidos utilizando tres estudios diferentes, siendo el segundo en general más completo que el primero y siendo el último un estudio previo acorde a la soldadura de Titanio (Ti 6Al-4V) o Inconel 718 según corresponda (más completo y eficaz).

En este primer caso, se sabe que la composición de una soldadura de Titanio (Ti 6Al-4V) está formada por los siguientes elementos:

Titanium 6Al-4V	
Element	% participation
Ti	Balanced
Al	5.5-6.75
V	3.5-4.5
C	0.08 max
H	0.015 max
Fe	0.25 max
N	0.05 max
O	0.2 max

Figura 3.21. Composición soldadura de Titanio (Ti 6Al-4V)

Como se puede ver el elemento predominante en la aleación es el Titanio. Al indicar que la participación del elemento es “*Balanced*” quiere indicar, en este caso, la mayor presencia en la aleación, aunque siempre se encontrarán otros elementos en cantidades mucho menores.

Además, se debe también tener en cuenta el Argón por ser el gas de protección de la soldadura con un peso aproximado del 35%. Aunque este porcentaje o peso asignado se realiza de manera cualitativa y puede ser discutido.

Todos estos datos son de gran ayuda para la creación del fichero del tercer estudio o conocimiento previo que nos ayudará a la correcta identificación de las líneas de emisión.

```

Materiales | Porcentaje
O|23,45
Au|45,45
W|100
Mn|194,128
Mg|23
Si|194,167
Fe|14
Cu|250
Zn|60
Ar|250

Material|Porcentaje
Ti|90
Ar|35
V|4
C|0,08
H|0,015
Fe|0,25
N|0,05
O|0,2
    
```

Figura 3.22. Fichero de entrada del primer y tercer estudio previo

A continuación se puede observar las seis catalogaciones de picos que se han obtenido.

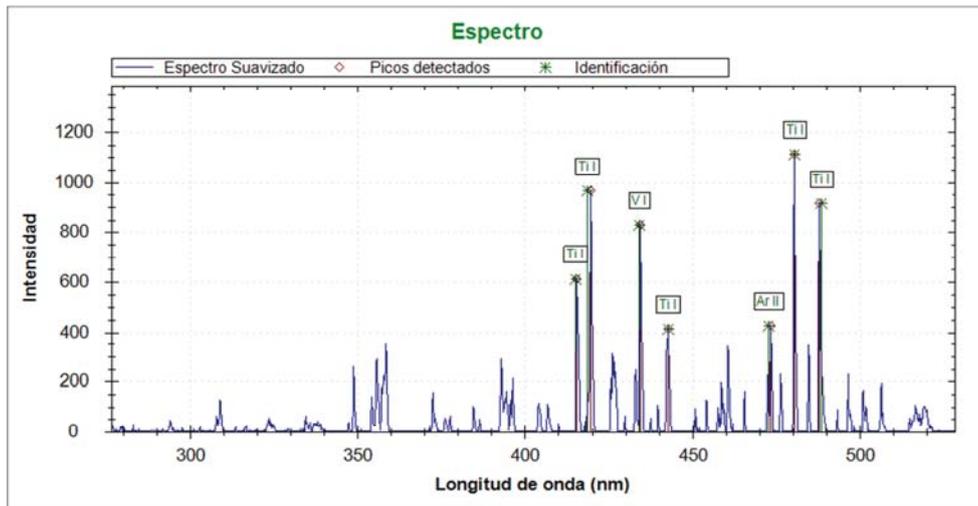
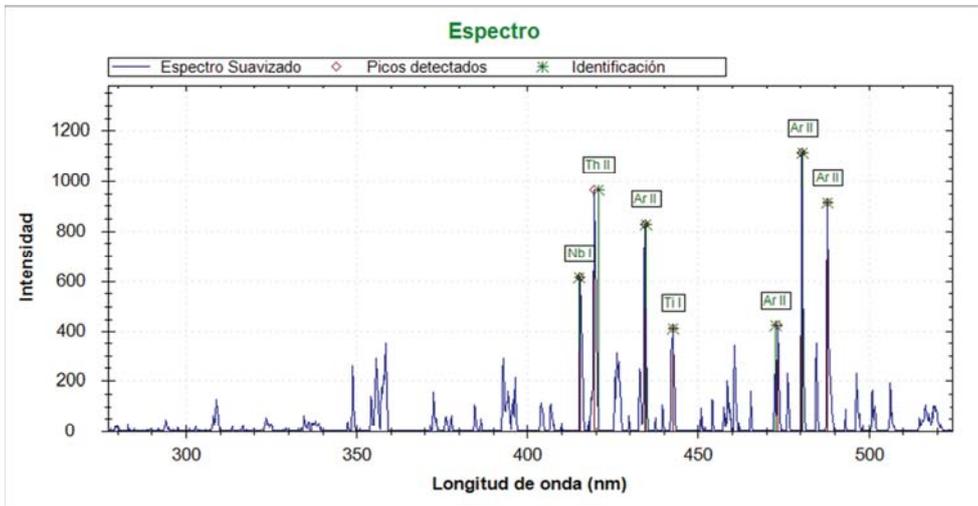
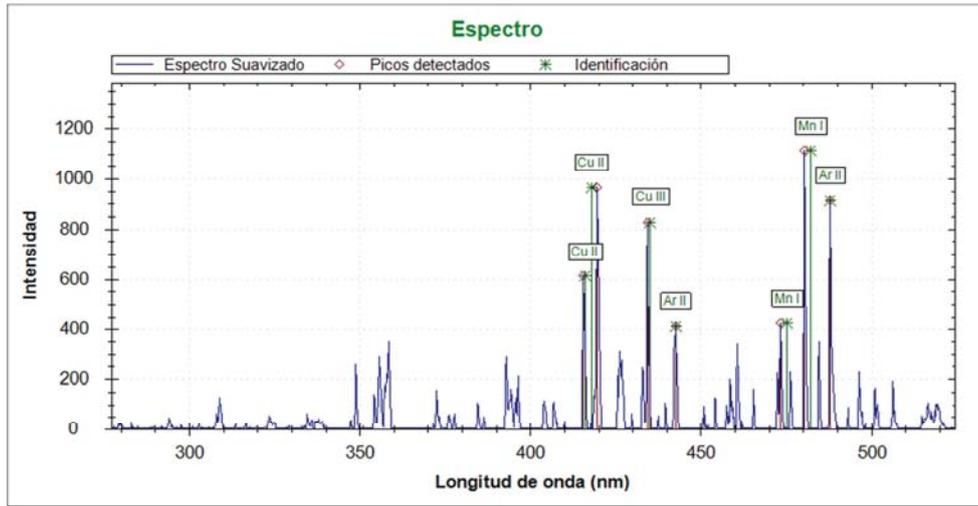


Figura 3.23. Catalogación de los picos detectados con la primera base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.

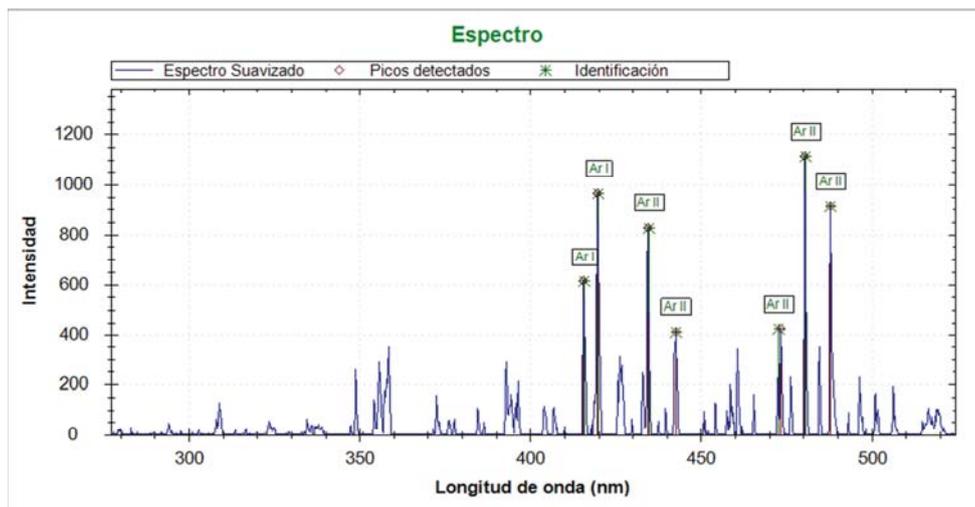
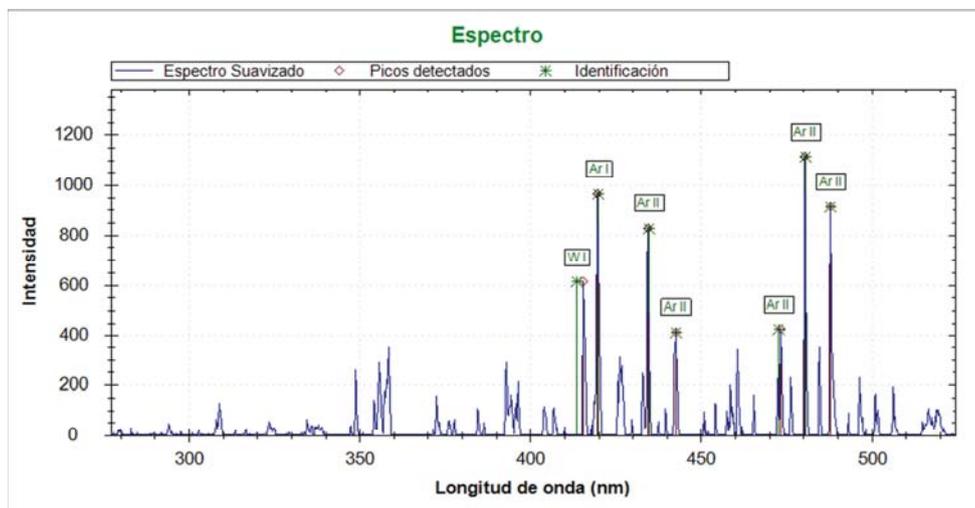
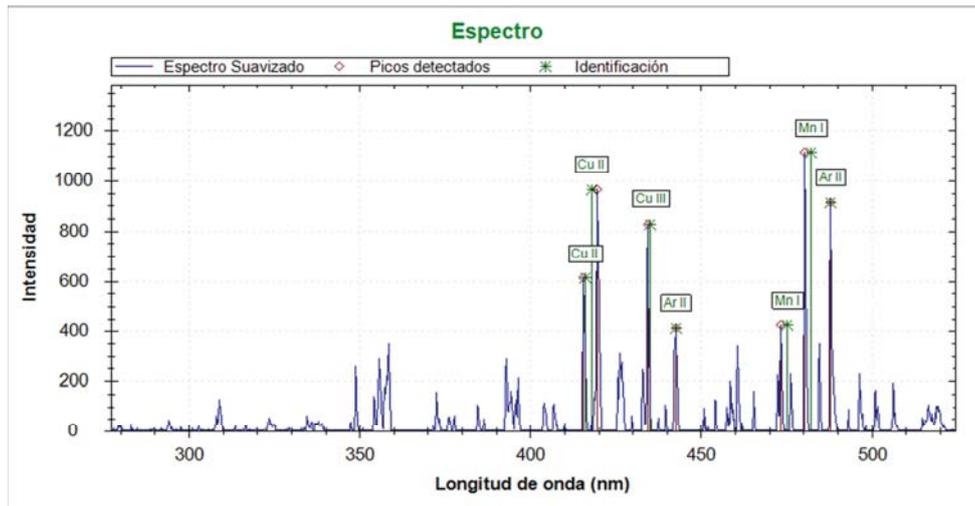


Figura 3.24. Catalogación de los picos detectados con la segunda base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.

Mientras tanto, sin utilizar estudio previo y contando con las dos bases de datos, los resultados obtenidos son:

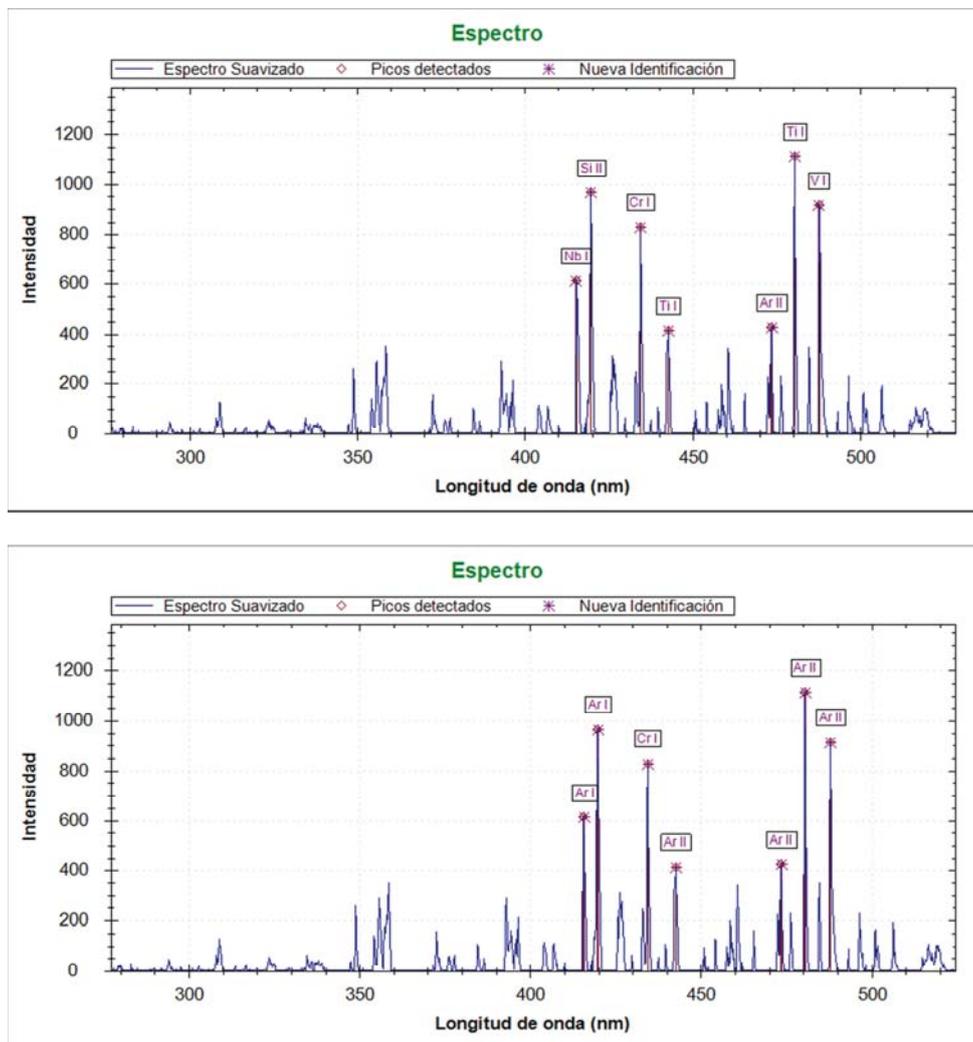


Figura 3.25. Catalogación de los picos detectados sin conocimiento previo con las dos bases de datos NIST

Base de datos	Estudio previo	Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7
Base 1	Estudio 1	Cu II	Cu II	Cu III	Ar II	Mn I	Mn I	Ar II
Base 1	Estudio 2	Nb I	Th II	Ar II	Ti I	Ar II	Ar II	Ar II
Base 1	Estudio 3	Ti I	Ti I	V I	Ti I	Ar II	Ti I	Ti I
Base 2	Estudio 1	Cu II	Cu II	Cu III	Ar II	Mn I	Mn I	Ar II
Base 2	Estudio 2	W I	Ar I	Ar II				
Base 2	Estudio 3	Ar I	Ar I	Ar II				
Base 1	Sin Estudio	Nb I	Si II	Cr I	Ti I	Ar II	Ti I	V I
Base 2	Sin Estudio	Ar I	Ar I	Cr I	Ar II	Ar II	Ar II	Ar II

Tabla 3.26. Resultados obtenidos sin aplicar el algoritmo del centroide

Base de datos	Estudio previo	Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7
Base 1	Estudio 1	Cu II	Cu II	Cu III	Ar II	Ar II	Mn I	Ar II
Base 1	Estudio 2	Nb I	Th II	Ar II	Ti I	Ar II	Ar II	Ar II
Base 1	Estudio 3	Ti I	Ti I	V I	Ti I	Ar II	Ti I	Ti I
Base 2	Estudio 1	Cu II	Cu II	Cu III	Ar II	Ar II	Mn I	Ar II
Base 2	Estudio 2	Ar I	Ar I	Ar II				
Base 2	Estudio 3	Ar I	Ar I	Ar II				
Base 1	Sin Estudio	Nb I	Si II	V I	Ti I	Ar II	Ar II	Ar II
Base 2	Sin Estudio	Ar I	Ar I	Cr I	Ar II	Ar II	Ar II	Ar II

Tabla 3.27. Resultados obtenidos aplicando el algoritmo del centroide

Observando los resultados, en primer lugar, se puede comentar que la utilización de la segunda base de datos en este caso es ineficaz, porque el titanio (elemento principal de la aleación) y otros elementos como el vanadio no se encuentran en ella. Por lo tanto estos elementos no aparecerán en la identificación de ninguna línea, dando lugar a un grave error en la identificación.

En segundo lugar se puede ver que aplicando el algoritmo del centroide, únicamente la identificación de cuatro líneas varían en todos los estudios, a pesar de que el algoritmo sub-píxel recalcula el valor de la longitud de onda central en cinco de los siete casos.

Analizando la identificación se puede afirmar que el quinto, sexto y séptimo picos detectados, se corresponden con líneas de emisión de Ar II. Sin embargo, existen más dudas para la identificación de la primera, segunda, tercera y cuarta línea de emisión.

Teniendo en cuenta el peso del estudio previo, parece indicar que la tercera línea corresponda a vanadio (V I) mientras que tanto la primera como la cuarta línea son de titanio (Ti I), de forma más clara para el cuarto pico.

La identificación del segundo pico detectado (419.817 nm) puede dar lugar a un mayor debate. Consultando la base global de datos del NIST [17] y teniendo en cuenta la resolución espectral del espectrómetro utilizado (USB2000 resolución espectral: 0.3 nm), parece indicar que la línea de emisión corresponde a Argón. Sin embargo, también existe una línea de titanio cercana cuya intensidad relativa es algo menor. Teniendo en cuenta la aleación utilizada en la soldadura, induce a pensar que es el titanio el elemento adecuado para cumplir con una correcta identificación.

Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7
Ti I	Ti I/Ar I	V I	Ti I	Ar II	Ar II	Ar II

### 3.2.3 Experimento nº2

El segundo espectro se denomina *C:\...\151817\_USB2000\_USB2E130\_Inco23.bke*.

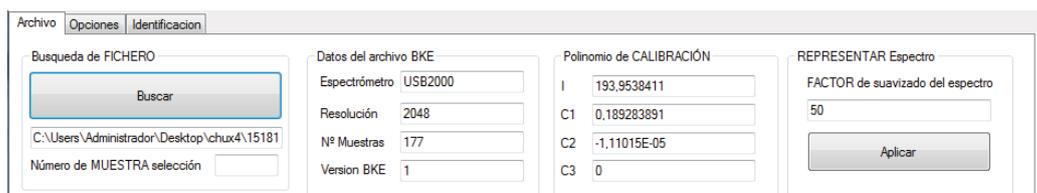


Figura 3.28. Archivo .bke

Este espectro pertenece a un proceso de soldadura de una aleación de Inconel 718. Las aleaciones Inconel son superaleaciones de base níquel-cromo, que cubren un amplio espectro de composiciones y de propiedades. La combinación de níquel y cromo en estas aleaciones proporciona resistencia tanto a soluciones corrosivas reductoras como oxidantes. También actúan en conjunto para resistir la oxidación, carburación y otras formas de deterioro a altas temperaturas. Además, estas aleaciones presentan excelentes propiedades de resistencia y fluencia a altas temperaturas.

Algunas de estas aleaciones aumentan su resistencia mediante la adición de aluminio, titanio y niobio. Otras contienen cobalto, cobre, molibdeno o tungsteno para mejorar los atributos específicos de resistencia mecánica o a la corrosión. También contienen hierro en cantidades que varían desde el 1% a más del 20%. Las aplicaciones de estas aleaciones son muy amplias: recipientes para tratamiento térmico, turbinas, aviación, plantas nucleares generadoras de energía, etc. [21]

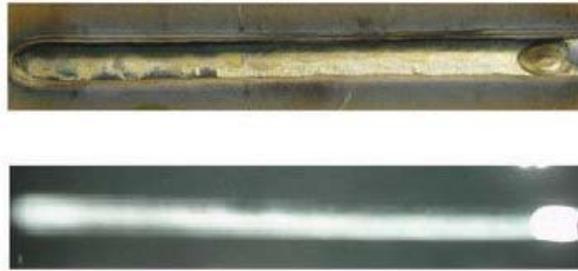
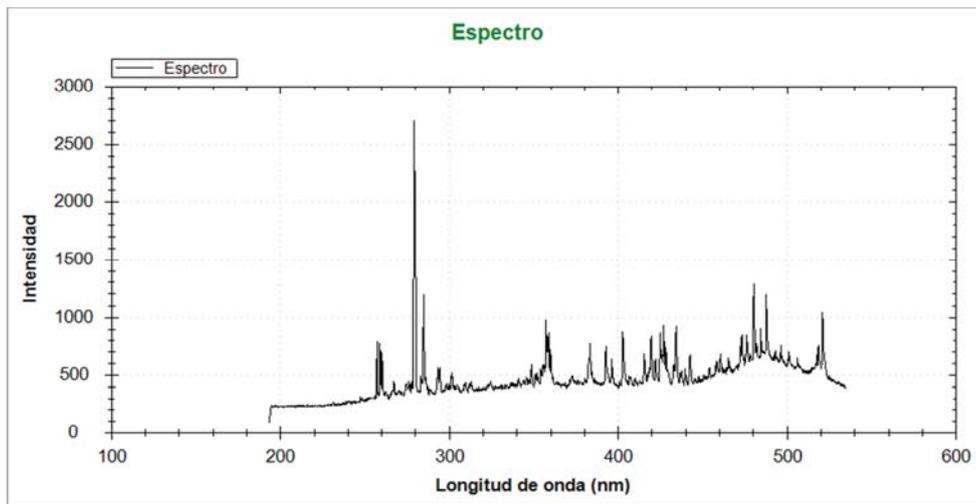


Figura 3.29. Cordón de la soldadura de Inconel 718

En la figura anterior se puede observar el cordón de la soldadura (libre de defectos) de Inconel 718 de la cual se ha recibido el archivo con los espectros a analizar.

Tras iniciar el programa y cargar el segundo archivo se puede observar que el *espectrómetro*, por el cual se recoge el espectro, es un *USB2000* cuya *resolución* es de *2048 píxeles* con un total de *177 muestras*. Por lo tanto se decide que el espectro de la muestra número 88 será representado aplicando un suavizado con un factor de 50. Después se realiza y representa la detección de los picos utilizando los parámetros de la pestaña *Opciones* por defecto como en el experimento anterior.



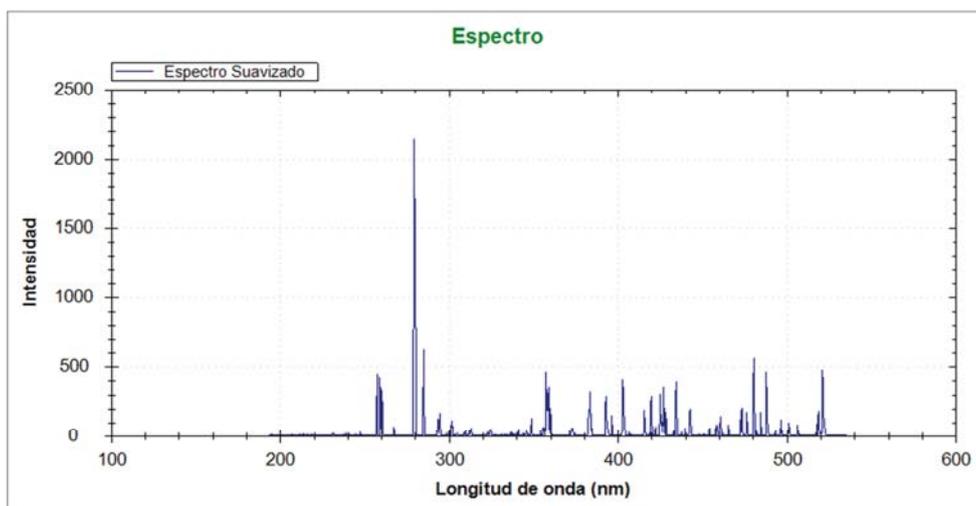


Figura 3.30. Espectro inicial y suavizado con un factor de 50

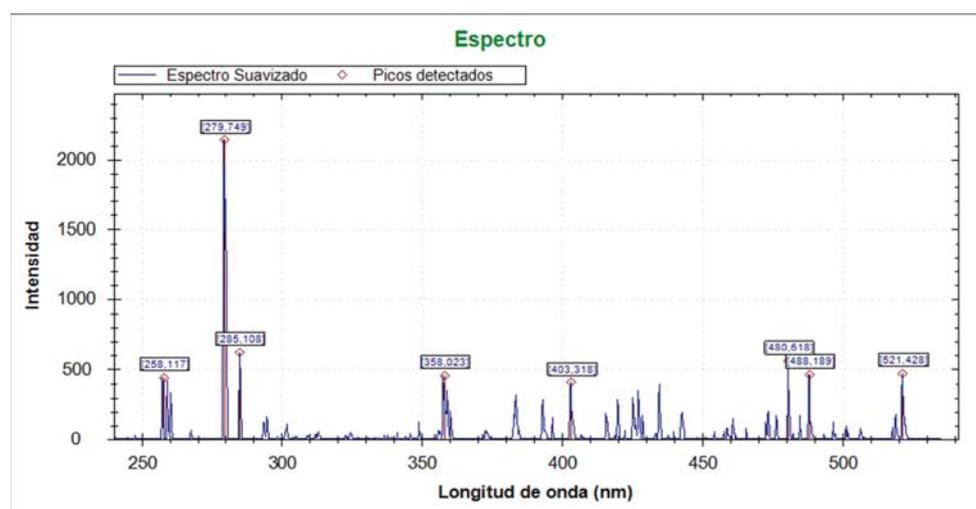
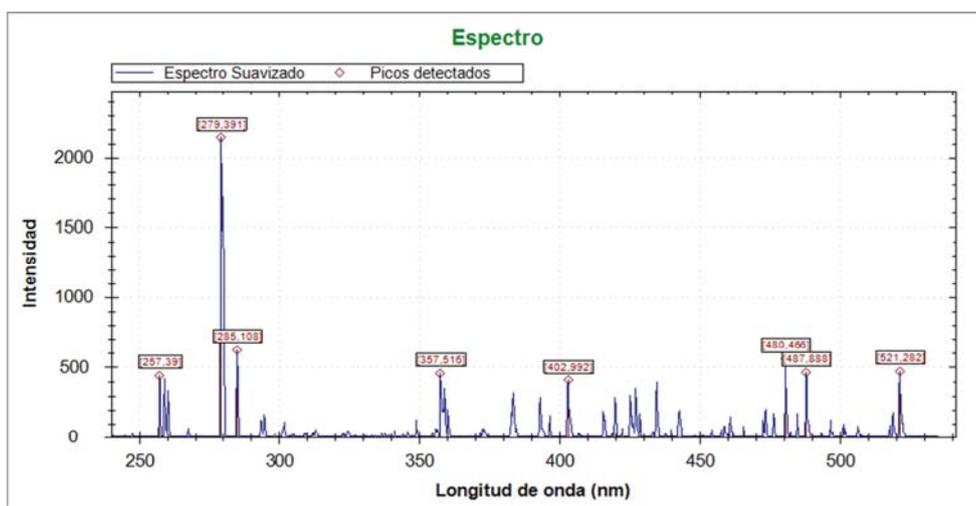


Figura 3.31. Picos detectados sin utilizar y utilizando el algoritmo del CDA

Tras realizar el suavizado se puede observar que el algoritmo detecta en el espectro hasta ocho picos o líneas de emisión con los parámetros por defecto. Además, utilizando el algoritmo del centroide se puede ver que se recalcula el valor de la longitud de onda central en siete de los ocho casos.

Como en el anterior experimento, para comparar los resultados en la identificación de las líneas de emisión se utilizan dos bases de datos distintas y hasta tres ficheros de entrada utilizados como “*estudios o conocimientos previos*”. El primero de ellos sería el más básico, el segundo más completo y por último, el más eficaz teniendo en cuenta la composición de la aleación Inconel 718.

La composición de una soldadura de Inconel 718 está formada por:

Inconel 718	
Element	% participatio n
Fe	Balanced
Ni (+Co)	50-55
Cr	17-21
Mo	2.8-3.3
Nb (+Ta)	4.75-5.5
Ti	0.65-1.15
Al	0.2-0.8
Si	0.35
Mn	0.35

Figura 3.32. Composición soldadura de Inconel 718

Como se puede observar los elementos predominantes en la aleación son el níquel, el cromo y el hierro. En cantidades menores también pueden aparecer el molibdeno, niobio, titanio o aluminio, entre otros. También se debe tener en cuenta como en el caso anterior el gas de protección de la soldadura: el Argón, con un peso aproximado del 35%.

```

Material|Porcentaje
Fe|20
Ar|35
Ni|52,5
Cr|19
Mo|3
Nb|5
Ti|1
Al|0,8
Si|0,35
Mn|0,35
C|0,08
S|0,015

```

Figura 3.33. Fichero de entrada del estudio previo del Inconel 718

A continuación se puede observar las seis catalogaciones de picos que se han obtenido.

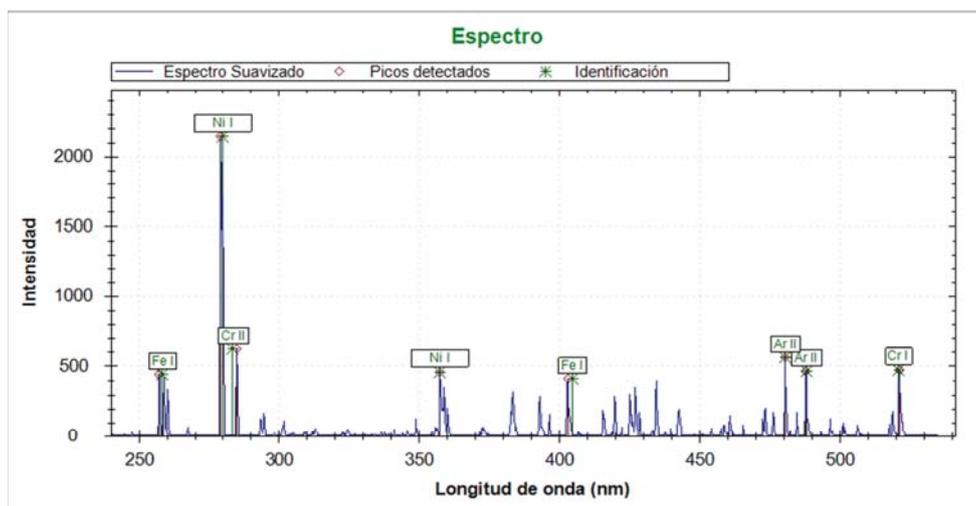
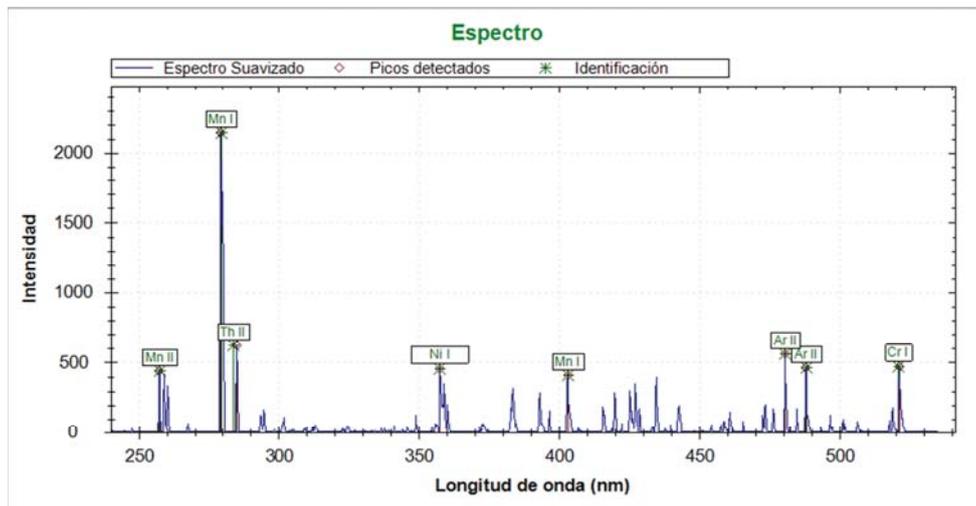
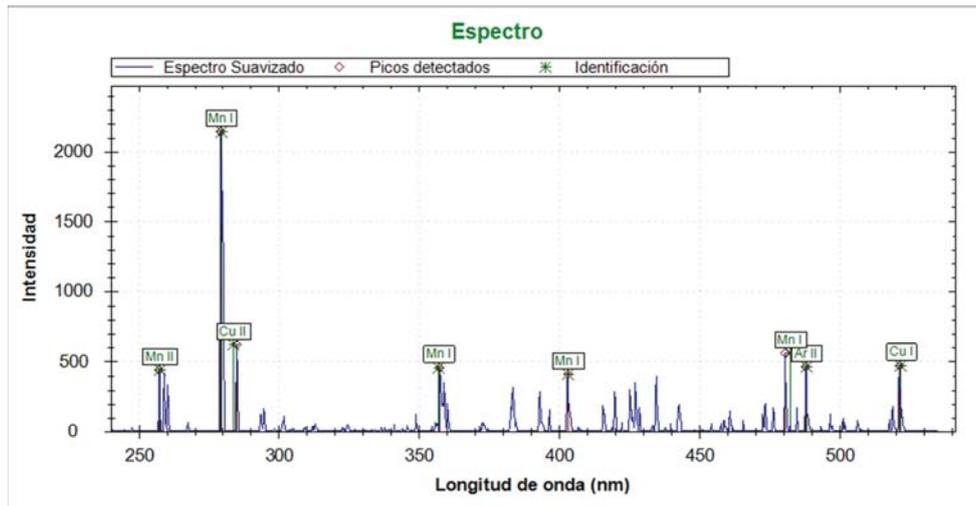


Figura 3.34. Catalogación de los picos detectados con la primera base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.

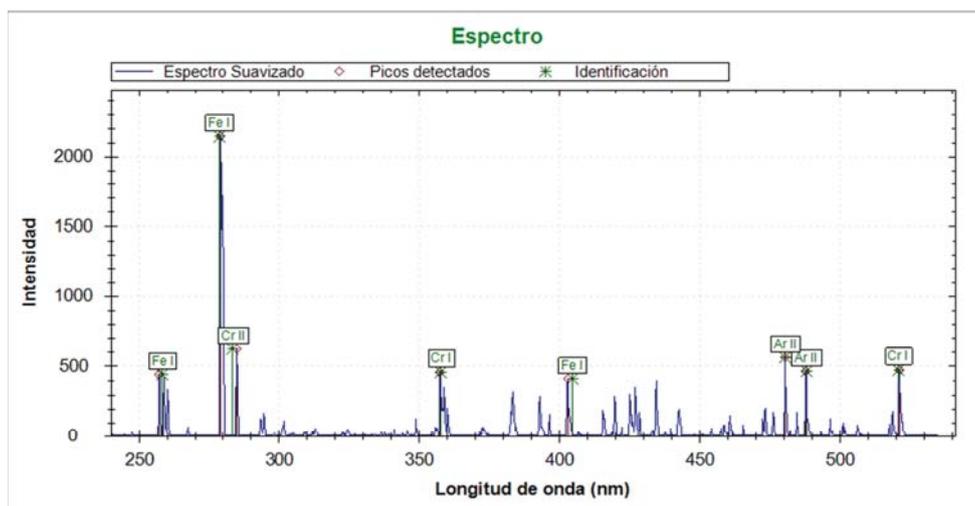
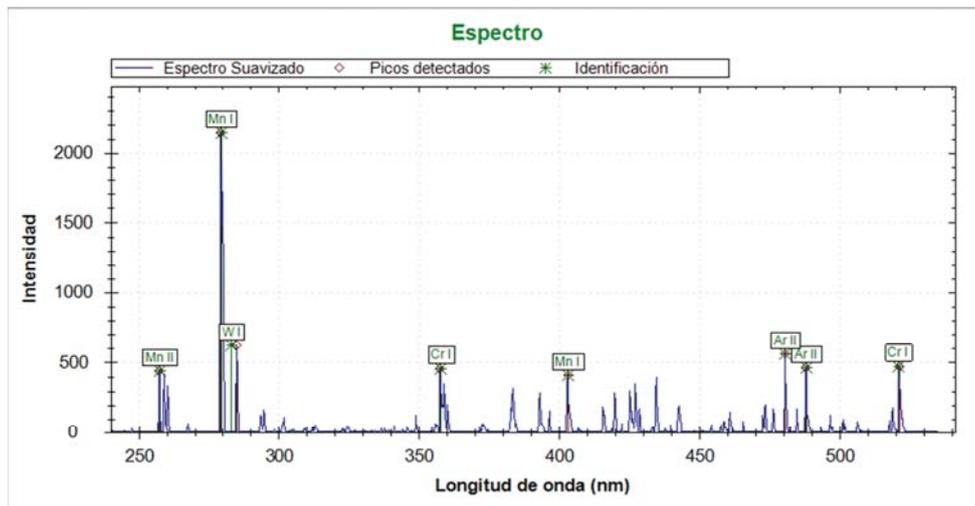
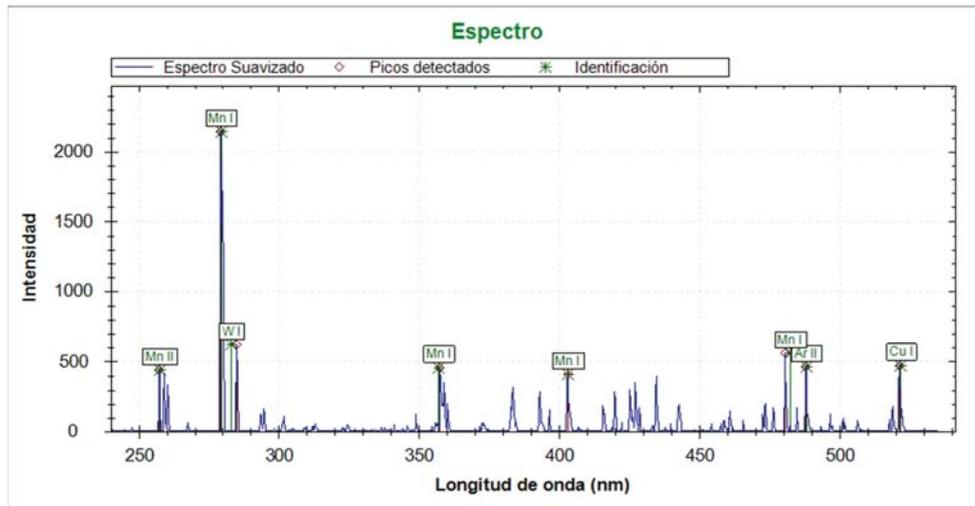


Figura 3.35. Catalogación de los picos detectados con la segunda base de datos y primer, segundo y tercer estudio previo respectivamente.

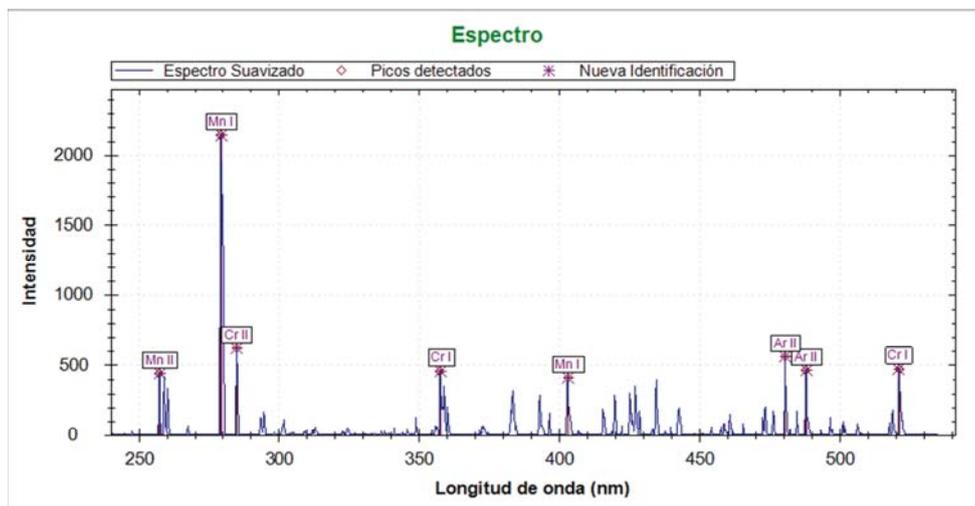
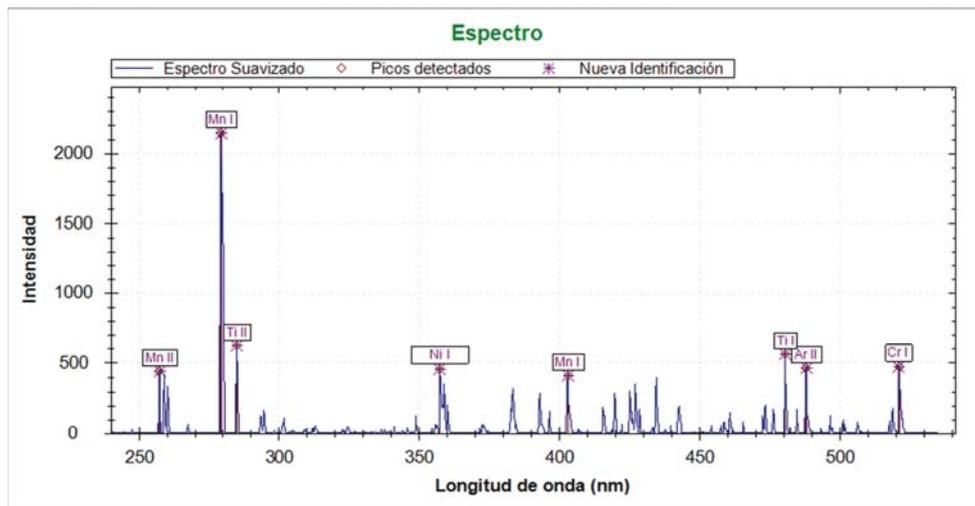


Figura 3.36. Catalogación de los picos detectados sin conocimiento previo con las dos bases de datos NIST

Base de datos	Estudio previo	Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7	Pico 8
Base 1	Estudio 1	Mn II	Mn I	Cu II	Mn I	Mn I	Mn I	Ar II	Cu I
Base 1	Estudio 2	Mn II	Mn I	Th II	Ni I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 1	Estudio 3	Fe I	Ni I	Cr II	Ni I	Fe I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 1	Mn II	Mn I	W I	Mn I	Mn I	Mn I	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 2	Mn II	Mn I	W I	Cr I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 3	Fe I	Fe I	Cr II	Cr I	Fe I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 1	Sin Estudio	Mn II	Mn I	Ti II	Ni I	Mn I	Ti I	Ar II	Cr I
Base 2	Sin Estudio	Mn II	Mn I	Cr II	Cr I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I

Tabla 3.37. Resultados obtenidos sin aplicar el algoritmo del centroide

Base de datos	Estudio previo	Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7	Pico 8
Base 1	Estudio 1	Mn II	Mn I	Cu II	Mn I	Mn I	Mn I	Ar II	Cu I
Base 1	Estudio 2	Mn II	Mn I	Th II	Ni I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 1	Estudio 3	Fe II	Ni I	Cr II	Ni I	Fe I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 1	Mn II	Mn I	W I	Mn I	Mn I	Mn I	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 2	Mn II	Mn I	W I	Cr I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 2	Estudio 3	Fe II	Fe I	Cr II	Cr I	Fe I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 1	Sin Estudio	Mn II	Mn I	Ti II	Nb I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I
Base 2	Sin Estudio	Mn II	Mn I	Cr II	Cr I	Mn I	Ar II	Ar II	Cr I

Tabla 3.38. Resultados obtenidos aplicando el algoritmo del centroide

Tras observar los resultados obtenidos tras el segundo experimento se pueden comentar varios puntos.

En primer lugar, y teniendo en cuenta también el primer experimento, se puede afirmar que la información almacenada en la segunda base de datos es insuficiente o escasa para llevar a cabo una correcta identificación de las líneas de emisión. En este caso, otro elemento principal de la soldadura como el níquel, junto a otros como el molibdeno, no se encuentran en ella. Por lo tanto, todo ello permite afirmar que el trabajo con una base de datos insuficiente puede confundir y acarrear graves problemas en la identificación.

En segundo lugar, el uso del algoritmo del centroide queda demostrado que es aconsejable. En el segundo experimento, siete de las ocho longitudes de onda central son recalculadas (probablemente debido a que la resolución del espectrómetro utilizado no es suficiente), y hasta la identificación de cuatro líneas varían al realizar los distintos estudios.

Al observar la identificación de las líneas se puede comprobar que todos los elementos, se encontraban en la composición de la aleación. El níquel, cromo y hierro junto al gas de protección, son los elementos predominantes. En los estudios también han aparecido otros elementos que componen la aleación como el niobio, titanio o manganeso, pero teniendo en cuenta el porcentaje de participación en la muestra y los resultados tras aplicar los diferentes algoritmos implementados en el programa, hace pensar que las líneas detectadas no pertenecen a líneas de emisión de estos elementos.

Aunque el manganeso aparezca en muchos de los resultados, el estudio previo y el algoritmo del centroide permiten identificar la primera línea de emisión de hierro en su segunda etapa de ionización (Fe II). La segunda y cuarta línea son identificadas como líneas de níquel, mientras la tercera y octava de cromo (en diferentes etapas de ionización). Por último la quinta línea es identificada como una línea de hierro (Fe I) y las dos restantes por el elemento utilizado como gas de protección en la soldadura, el argón (Ar II).

Pico 1	Pico 2	Pico 3	Pico 4	Pico 5	Pico 6	Pico 7	Pico 8
Fe II	Ni I	Cr II	Ni I	Fe I	Ar II	Ar II	Cr I

### 3.2.4 Resultados ante el ajuste de la dimensión de la ventana de búsqueda.

Por último, y tras los resultados obtenidos y discutidos en el apartado anterior se comentan los espectros recogidos de una misma soldadura utilizando diferentes espectrómetros. El objetivo es demostrar que el parámetro de la resolución espectral es un parámetro muy a tener en cuenta, además de la intensidad relativa y la longitud de onda, como se comentó en el apartado 2.10.3.

Estos espectros fueron recogidos utilizando el software desarrollado por el *Grupo de Ingeniería Fotónica de la Universidad de Cantabria MISpectroMon* y también han sido representados mediante la utilización de una hoja de cálculo de *Microsoft Excel*.

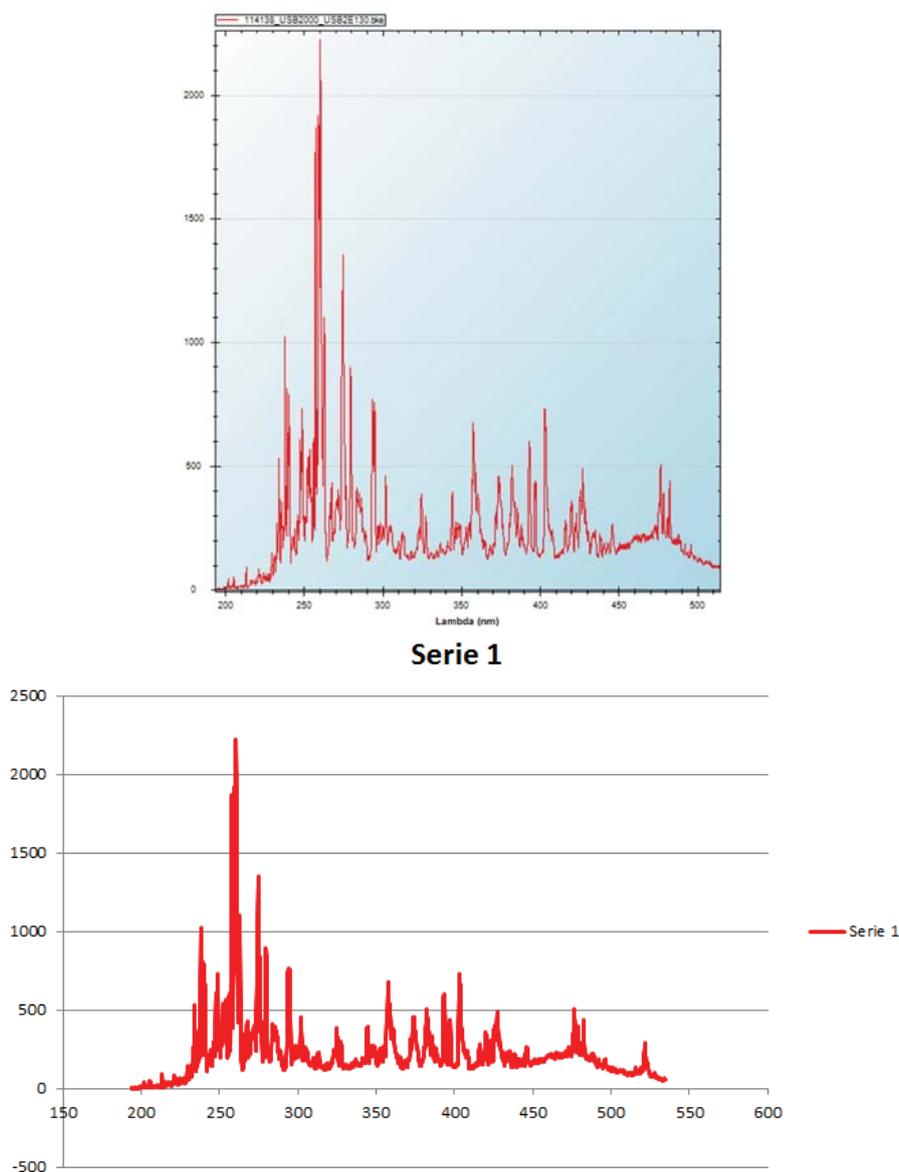
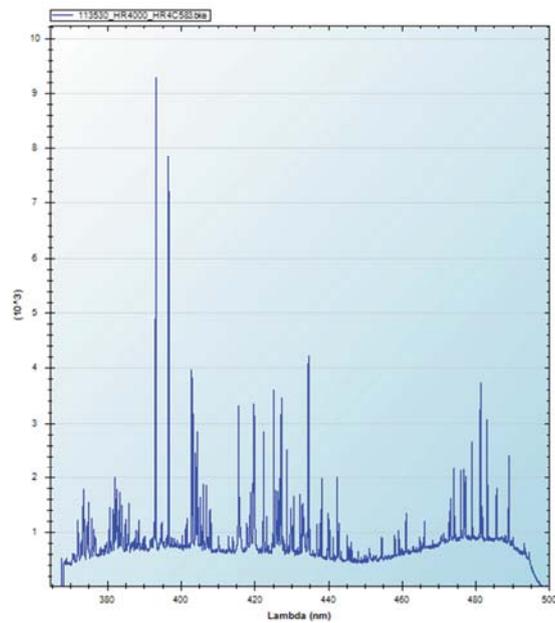


Figura 3.39. Espectro recogido con el espectrómetro USB2000



**Serie 2**

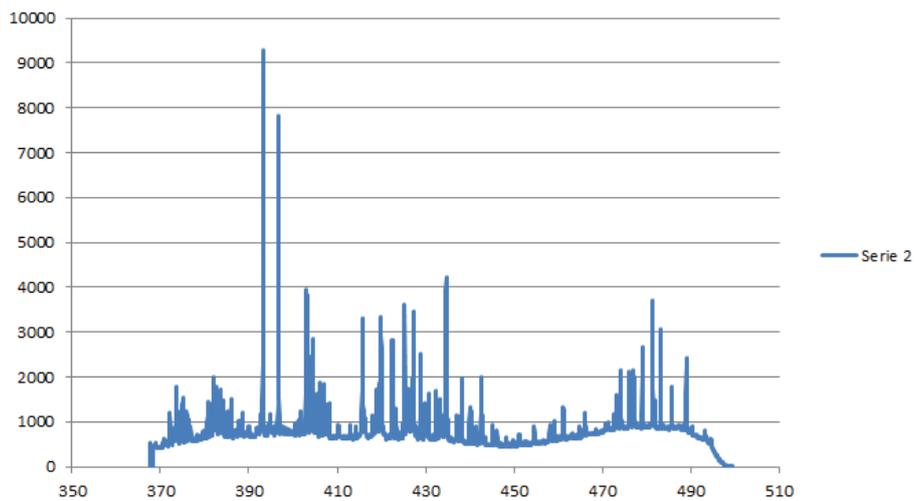


Figura 3.40. Espectro recogido con el espectrómetro HR4000

Tras observar los espectros (recibidos a partir del mismo proceso de soldadura) se pueden comentar varios detalles. El espectro recogido utilizando el espectrómetro de *Ocean Optics* USB2000 abarca un rango espectral de 195-535 nm mientras el obtenido a partir del espectrómetro HR4000 tiene un rango de 370-500 nm. Aunque el primer espectrómetro tiene un rango espectral más amplio su resolución es peor, dando lugar a una peor representación y dificultando en mayor medida la identificación de las líneas.

A continuación, se compararan ambos espectros con el fin de justificar la importancia del parámetro de la resolución para ajustar la identificación de las líneas de emisión.

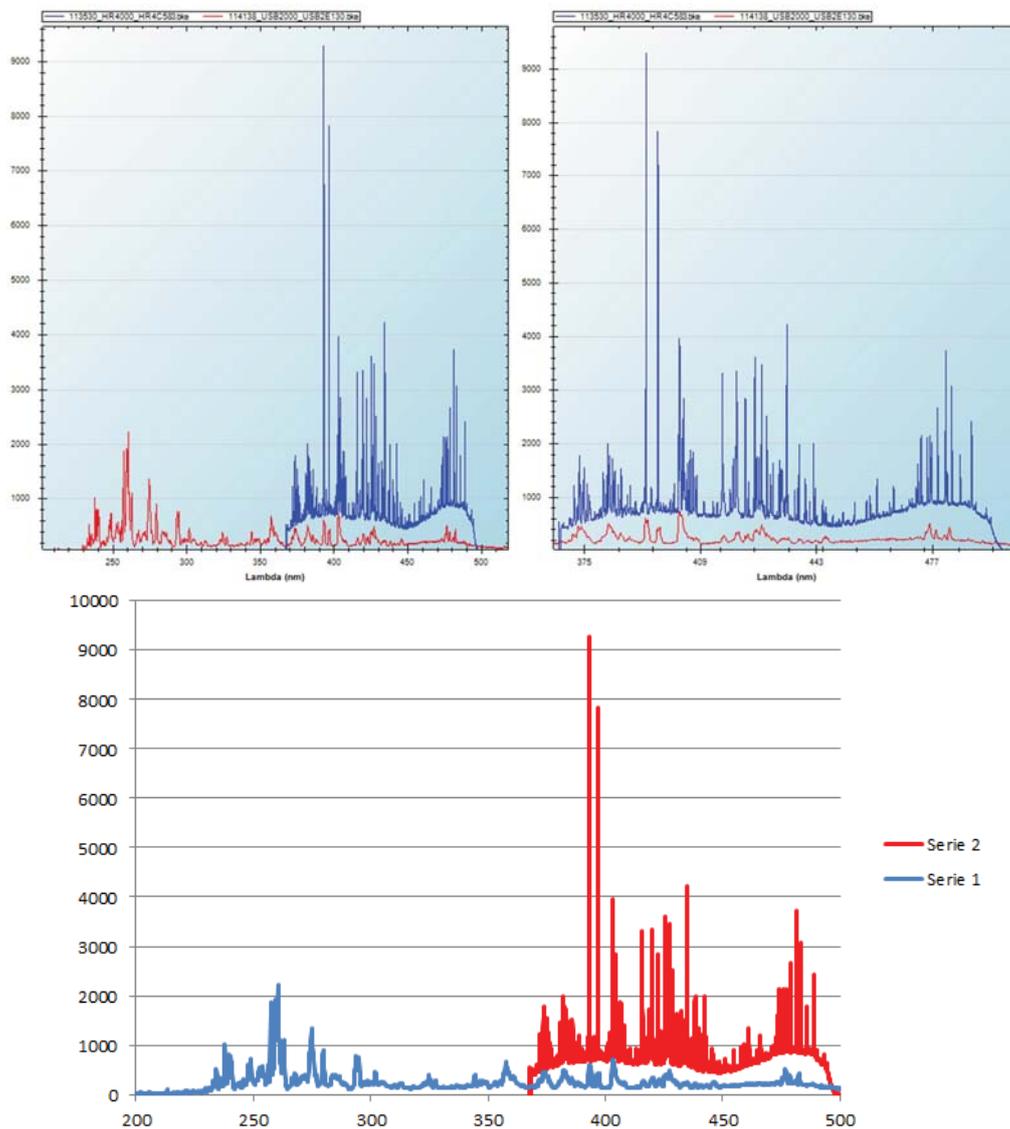


Figura 3.41. Espectros recogidos a partir de la misma soldadura pero diferente espectrómetro

Como se puede comprobar, al comparar ambos espectros, el segundo de ellos recogido con el espectrómetro HR4000 aporta una mayor información espectral necesaria para la identificación.

Aparecen nuevas líneas de intensidad, la intensidad relativa es mucho mayor (facilitando el proceso de identificación) e incluso para lo que en el primer espectro se detectaba una línea, con el segundo espectrómetro, a la misma longitud de onda, hay más de una línea de emisión.

Como por ejemplo, para la longitud de onda aproximadamente de valor  $\lambda=425$  nm, en donde, para el primer espectro apenas se observa una línea de emisión con pequeño valor de intensidad relativa, mientras que para el segundo caso aparecen más líneas con un valor más significativo de intensidad relativa.

Tras observar este caso, se decide implementar en el programa una opción por la que tras la lectura del nombre del espectrómetro, y dependiendo de su resolución espectral, se varía el valor nominal de la dimensión de la ventana, para la búsqueda de picos en el programa desarrollado.

Cuanto mejor sea la resolución espectral del espectrómetro utilizado, menor será el valor nominal de la ventana de búsqueda, ayudando a mejorar la búsqueda e identificación de las líneas de emisión.

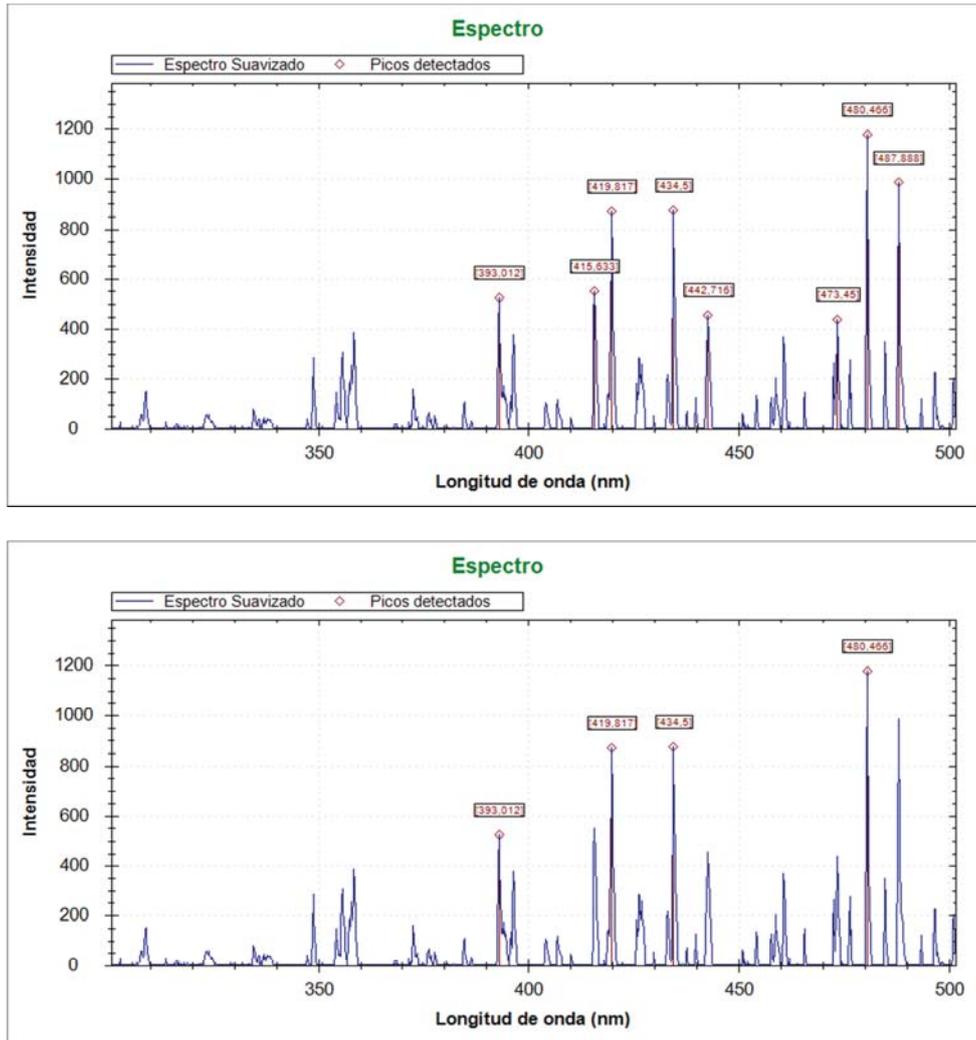


Figura 3.42. Picos detectados empleando diferentes valores de la ventana de búsqueda para el mismo espectro

### 3.3 Análisis PCA e ICA en datos de soldadura

Este punto del documento se realiza con el propósito de verificar una de las aplicaciones de las técnicas de Análisis de Componentes Principales (PCA) e Independientes (ICA) analizados anteriormente.

En este caso se trabajará con los resultados obtenidos tras el Análisis de los Componentes Independientes (ICA) en el proceso de soldadura de acero inoxidable AISI304. Se comprobará (como ya se indicara en puntos anteriores) que una de las aplicaciones de estas técnicas es la identificación de las líneas de emisión, aparte de la reducción de los datos de entrada.

El proceso, previo al análisis, se corresponde con una soldadura de acero inoxidable. El acero inoxidable se define como una aleación de acero con cromo contenido en masa. Es un acero de elevada resistencia a la corrosión, dado que el cromo, u otros metales aleantes que contiene, poseen una gran afinidad por el oxígeno y reacciona con él formando una capa pasivadora, evitando así la corrosión del hierro.

Se utiliza principalmente en cuatro tipos de mercados: Electrodomésticos, automoción, construcción e industria. En concreto, el acero inoxidable AISI304 es usado extensivamente para la fabricación de utensilios domésticos, lavavajillas, bienes de consumo e industria automotriz, por su buena resistencia a la corrosión y soldabilidad.

A continuación se muestra la composición por peso, de una soldadura de acero inoxidable ASI-304:

Composition % per weight	
Element	%
C	Max 0.08
Cr	18 – 20
Ni	8 – 10.5
Fe	66.345 – 74
Mn	Max 2
P	Max 0.045
S	Max 0.03
Si	Max 1

Figura 3.43. Composición soldadura de acero inoxidable ASI-304

El cordón de un proceso de soldadura de acero inoxidable AISI304 sin defectos es:



Figura 3.44. Cordón soldadura de acero inoxidable ASI-304 sin defectos

Y se muestra, también el espectro recogido tras el proceso de soldadura:

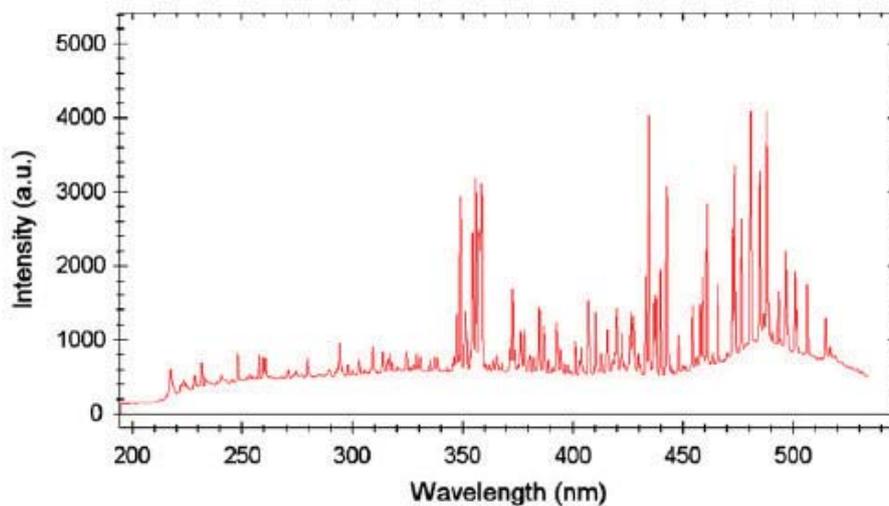


Figura 3.45. Espectro soldadura de acero inoxidable ASI-304

El procedimiento para obtener los componentes independientes, a través del análisis ICA, de los datos de entrada se muestran en la siguiente figura:

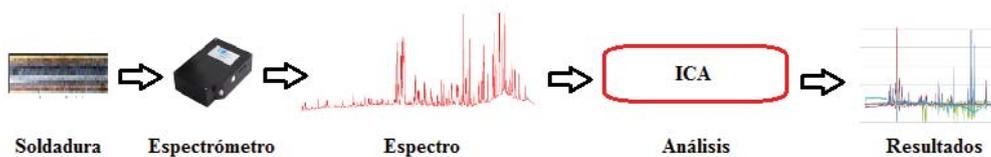


Figura 3.46. Proceso empleado

Se debe recalcar que el análisis de componentes independientes es una técnica pensada para obtener o extraer una representación de cada una de las distintas componentes o señales independientes entre sí que forman parte de una señal de mezcla.

Pero esto es posible siempre que las distintas señales que componen la mezcla son independientes entre sí; es decir, el valor de una de ellas no está relacionado con el de las otras, y que no más de una de ellas tenga una distribución de tipo gaussiana.

Tras el análisis, se comprobará si esta técnica puede ser utilizada para la identificación de las líneas de emisión. Para ello se analizan e identifican las líneas espectrales de todos los componentes independientes obtenidos para los tres espectros recogidos del mismo proceso de soldadura por diferentes espectrómetros. La identificación de las líneas espectrales, tras obtener los componentes independientes, se realizará gracias a la base de datos NIST y artículos de revista de forma manual.

Se analizarán, por tanto, los resultados obtenidos para cada espectrómetro.

### 3.3.1 Datos HR4000

Antes de mostrar los resultados, se debe comentar que los estudios del análisis de componentes independientes ICA, tras recoger los datos de entrada mediante tres espectrómetros diferentes, han sido realizados bajo la supervisión de la profesora Olga M<sup>a</sup> Conde Portilla, miembro del *Grupo de Ingeniería Fotónica de la Universidad de Cantabria*. Tras estos estudios se ha analizado los resultados en este trabajo.

El primer caso analizado corresponde a los datos previamente obtenidos por el espectrómetro HR4000. Este espectrómetro presenta el mayor número de píxeles (3648 píxeles), una resolución espectral de 0.07nm y en este caso el rango de longitudes de onda que abarca es desde 370 nm a 500 nm. Los componentes independientes obtenidos son:

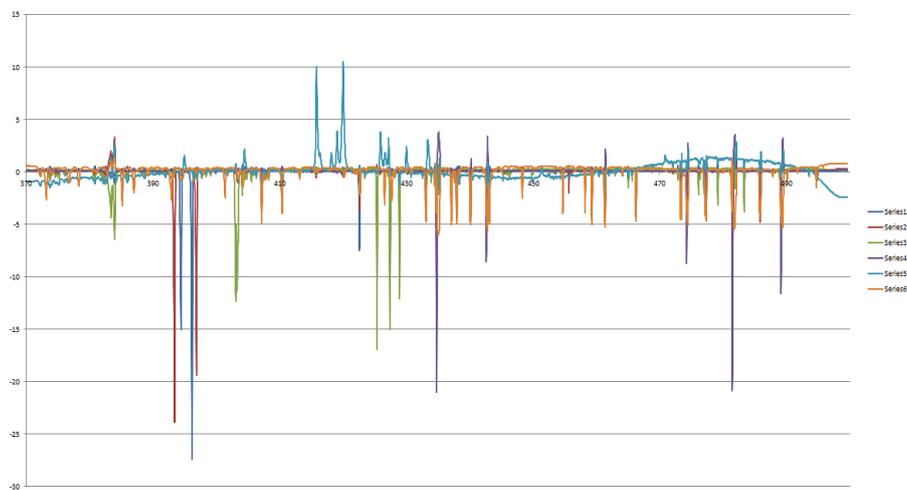
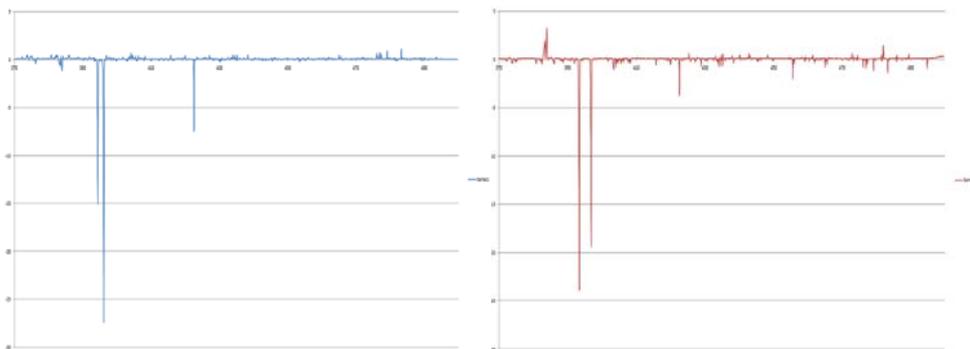


Figura 3.47. Componentes independientes recogidos por el espectrómetro HR4000



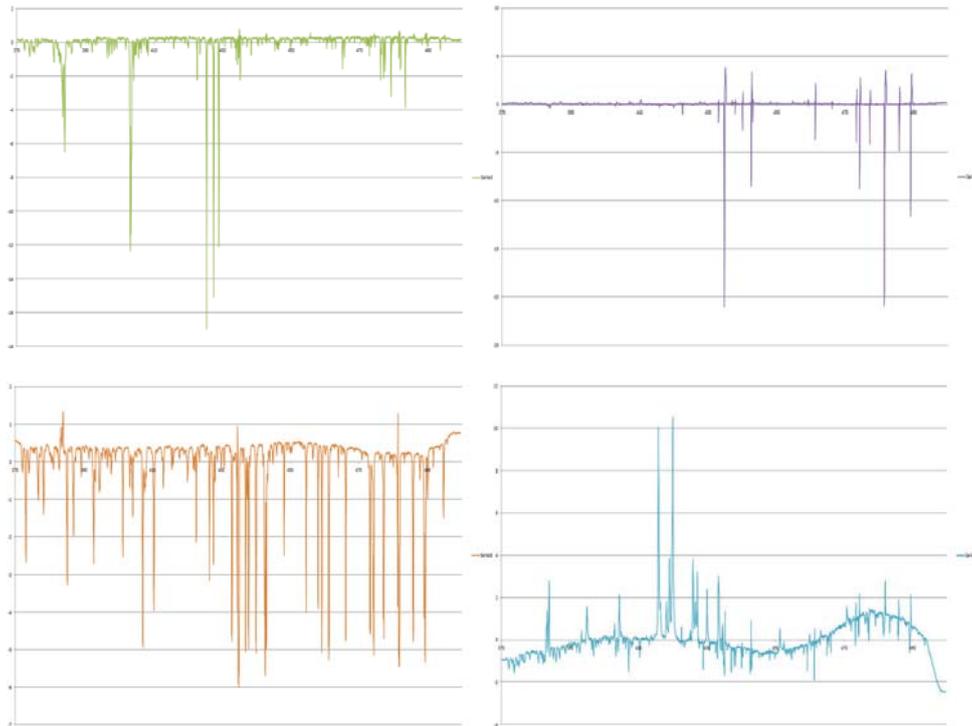


Figura 3.48. Componentes independientes por separado

A continuación se busca identificar las líneas de emisión, gracias a las componentes independientes obtenidas, a partir de la longitud de onda y gracias a la base de datos NIST o artículos obtenidos por la búsqueda mediante Google Académico. Si se realiza un análisis exhaustivo para cada componente independiente se puede identificar por los siguientes elementos:

**Serie 1:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>396.1432</b>	<b>394.3914</b>	<b>422.5413</b>
<b>Elemento</b>	Fe	Fe	Fe
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	396.1139	394.33	422.5454
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	1050	3630	7900

**Serie 2:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>393.3615</b>	<b>396.8274</b>	<b>422.5413</b>
<b>Elemento</b>	Ar	Ar	Ar
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	393.2546	396.83589	422.69
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	91	59	89

**Serie 3:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>425.33</b>	<b>427.3899</b>	<b>428.8533</b>
<b>Elemento</b>	Cr	Cr	Cr
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	425.435	427.480	428.972
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	20000	16000	10000

**Serie 4:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>434.71</b>	<b>481.42</b>	<b>489.10</b>
<b>Elemento</b>	S	S	S
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	434.7230	481.5549	488.91
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	14	22	17

**Serie 5:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>415.77</b>	<b>419.99</b>	<b>418.99</b>
<b>Elemento</b>	Mn	Mn	Mn
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	415.86	420.07	418.9983
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	35	65	120

**Serie 6:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>435.0063</b>	<b>442.792</b>	<b>482.31</b>
<b>Elemento</b>	Ce	Ce	Ce
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	434.979	442.792	482.255
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	700	480	110

<b>Serie 1</b>	<b>Serie 2</b>	<b>Serie 3</b>	<b>Serie 4</b>	<b>Serie 5</b>	<b>Serie 6</b>
Fe	Ar	Cr	S	Mn	Ce

Excepto el último elemento, identificado como Cesio, las demás líneas de emisión corresponden con elementos que componen el acero inoxidable. No se tiene en mucho en cuenta por tanto la aparición del Cesio.

Se conoce que la selección de los factores independientes se realiza de tal forma que el primero recoja la mayor proporción posible de la variabilidad original; el segundo factor debe recoger la máxima variabilidad posible no recogida por el primero y así sucesivamente. Por lo tanto el último factor es el que menor porcentaje posee y menor proporción de la variabilidad original posee, es decir, menos porcentaje del elemento se encuentra en la soldadura.

Como se ha comentado para la identificación de las líneas de emisión en este apartado se ha tenido en cuenta la base de datos NIST e información recogida en *Google Académico*.

Por ejemplo para la identificación de las líneas de emisión de cromo de la tercera serie (tercer factor independiente) a 427.48 y 428.97 nm se pueden observar resultados de artículos que certifican que se tratan de líneas de Cromo y la identificación es correcta.

[Speciation of chromium via laser-induced breakdown spectroscopy of ion exchange polymer membranes](#)

CR Dockery, JE Pender, SR Goode - *Applied spectroscopy*, 2005 - [opticsinfobase.org](#)

... Error bars represent one standard deviation. FIG. 6. Representative LIBS spectrum. The Cr 425.43 and the H lines are used for calibration. Other important lines include Ca 422.67, Cr 427.48, Cr 428.97, Cr 520.84, and the sodium doublet: Na 588.99 and Na 589.59. FIG. ...

Cited by 26 [Related articles](#) [All 7 versions](#) [Cite](#)

[Determination of Cr in water solution by laser-induced breakdown spectroscopy with different univariate calibration models](#)

L Huang, M Yao, Y Xu, M Liu - *Applied Physics B*, 2013 - Springer

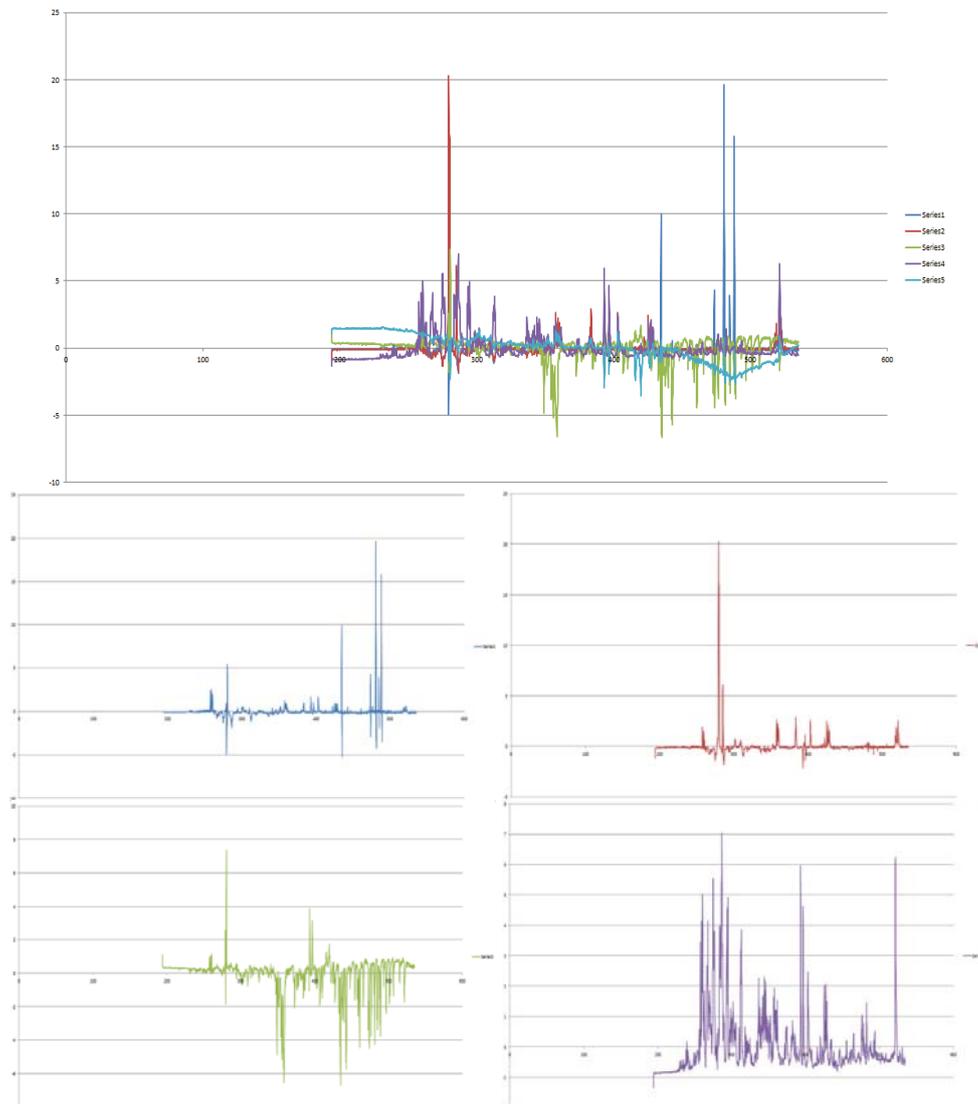
... The RSD of the characteristic line intensity at 357.87, 359.35, 360.53, 425.43, 427.48, and 428.97 nm of the Cr element about the standard solution sample with 50 ug/ml concentration is shown in Fig. 2. Under the ten (Fig. 2a) and five (Fig. ...

[Related articles](#) [All 4 versions](#) [Cite](#)

Figura 3.49. Ejemplo búsqueda mediante Google Académico.

### 3.3.2 Datos USB2000

Este espectrómetro presenta una resolución intermedia (2048 píxeles), una resolución espectral de 0.3nm y en este caso el rango de longitudes de onda que abarca es desde 195nm a 535nm. Los componentes independientes obtenidos son:



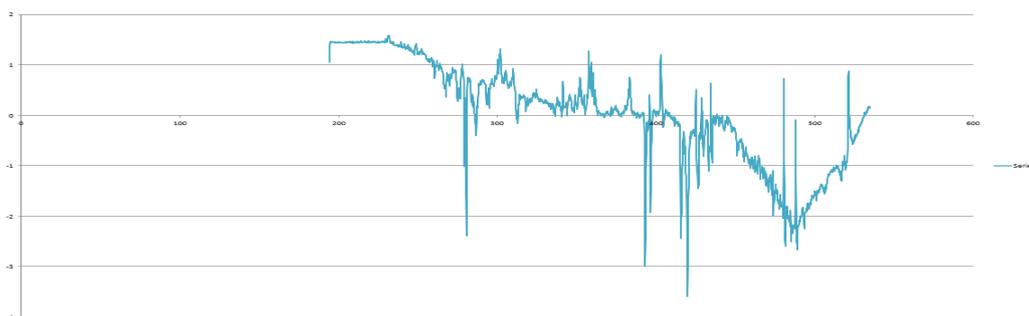


Figura 3.50. Componentes independientes recogidos por el espectrómetro USB2000

Se comprueba a partir de la longitud de onda y gracias a la base de datos NIST o artículos obtenidos por la búsqueda mediante Google Académico la identificación de los componentes independientes como:

**Serie 1:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>480.46591</b>	<b>487.8875</b>	<b>434.4997</b>
<b>Elemento</b>	Ar	Ar	Ar
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	480.602	487.9863	434.8
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	1820	2239	182

**Serie 2:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>279.39</b>	<b>285.1075</b>	<b>383.44</b>
<b>Elemento</b>	Fe	Fe	Fe
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	279.2398	285.1796	383.44552
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	720	700	1170

**Serie 3:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>280.4649</b>	<b>435.29</b>	<b>358.529</b>
<b>Elemento</b>	Cr	Cr	Cr
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	280.177	435.1717	358.530
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	70	2300	130

**Serie 4:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>286.35</b>	<b>393.01</b>	<b>274.73</b>
<b>Elemento</b>	Ni	Ni	Ni
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	286.402	392.671	274.67
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	500	75	150

**Serie 5:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>419.8166</b>	<b>393.01217</b>	<b>415.633</b>
<b>Elemento</b>	Si	Si	Si
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	419.813	392.447	415.3026
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	50	20	10

<b>Serie 1</b>	<b>Serie 2</b>	<b>Serie 3</b>	<b>Serie 4</b>	<b>Serie 5</b>
Ar	Fe	Cr	Ni	Si

En este caso todos los elementos identificados pertenecen a la composición del acero inoxidable. De nuevo varios artículos nos han ayudado a la correcta identificación como para el caso del gas Argón que es el gas de protección utilizado en la soldadura:

[Characterization of the arc cathode attachment by emission spectroscopy and comparison to theoretical predictions](#)

X Zhou, J Heberlein - *Plasma chemistry and plasma processing*, 1995 - Springer

... The Page 5. Characterization of the ARC Cathode 233S argon atom line **Ar I (696.5 nm)** and the singly ionized argon line **Ar II (480.6 nm)** have been used. 2.3. Data Processing 2.3.1.

Abel Inversion ... Therefore, the ion line **Ar II (480.6 nm)** has been used. ...

Citado por 29 Artículos relacionados Las 3 versiones Citar

[A sensing torch for on-line monitoring of the gas tungsten arc welding process of steel pipes](#)

A Ancona, PM Lugara, F Ottonelli... - *Measurement Science ...*, 2004 - iopscience.iop.org

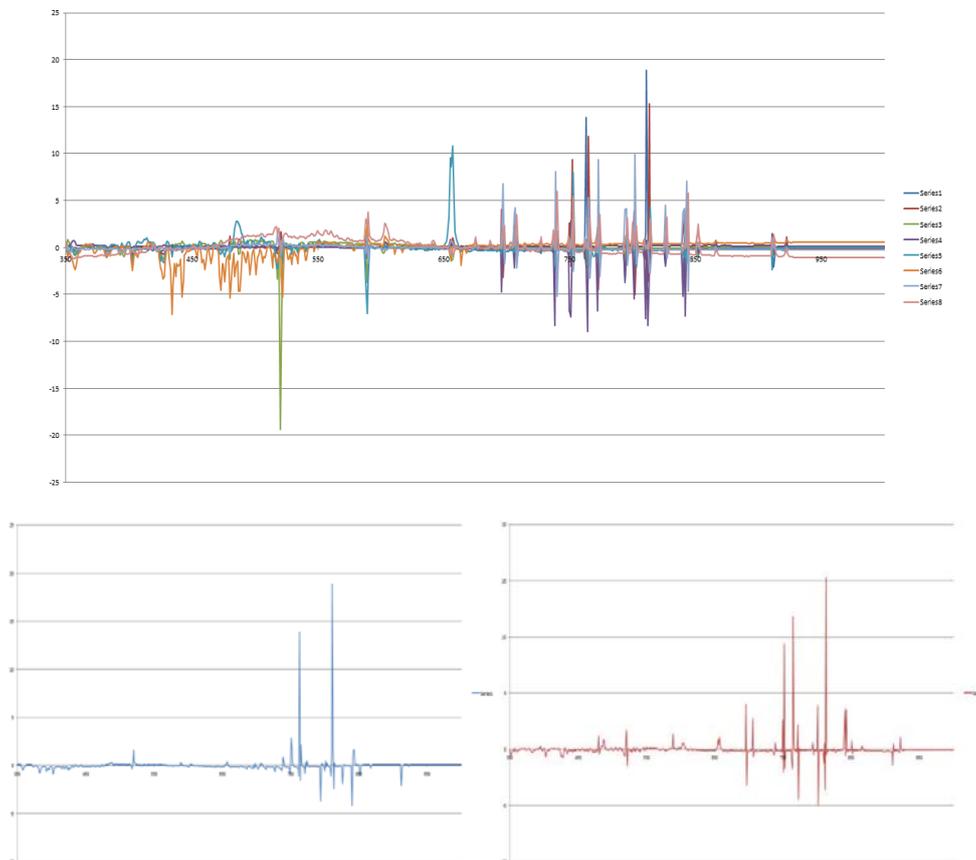
... Lines selected from the arc-plasma emission spectrum are shown in figure 2. They belong to different multiplets [24] of the single ionized argon spectrum (**Ar (II) 460.95 nm** and **Ar (II) 487.98 nm**) and were verified to be free from self-absorption. 3.2. Defect detection algorithm ...

Citado por 24 Artículos relacionados Las 7 versiones Citar

Figura 3.51. Ejemplos búsqueda mediante Google Académico

### 3.3.3 Datos USB650

Por último, este espectrómetro presenta la peor resolución (1024 píxeles) y una resolución espectral mayor que 0.3nm. Los componentes independientes obtenidos son:



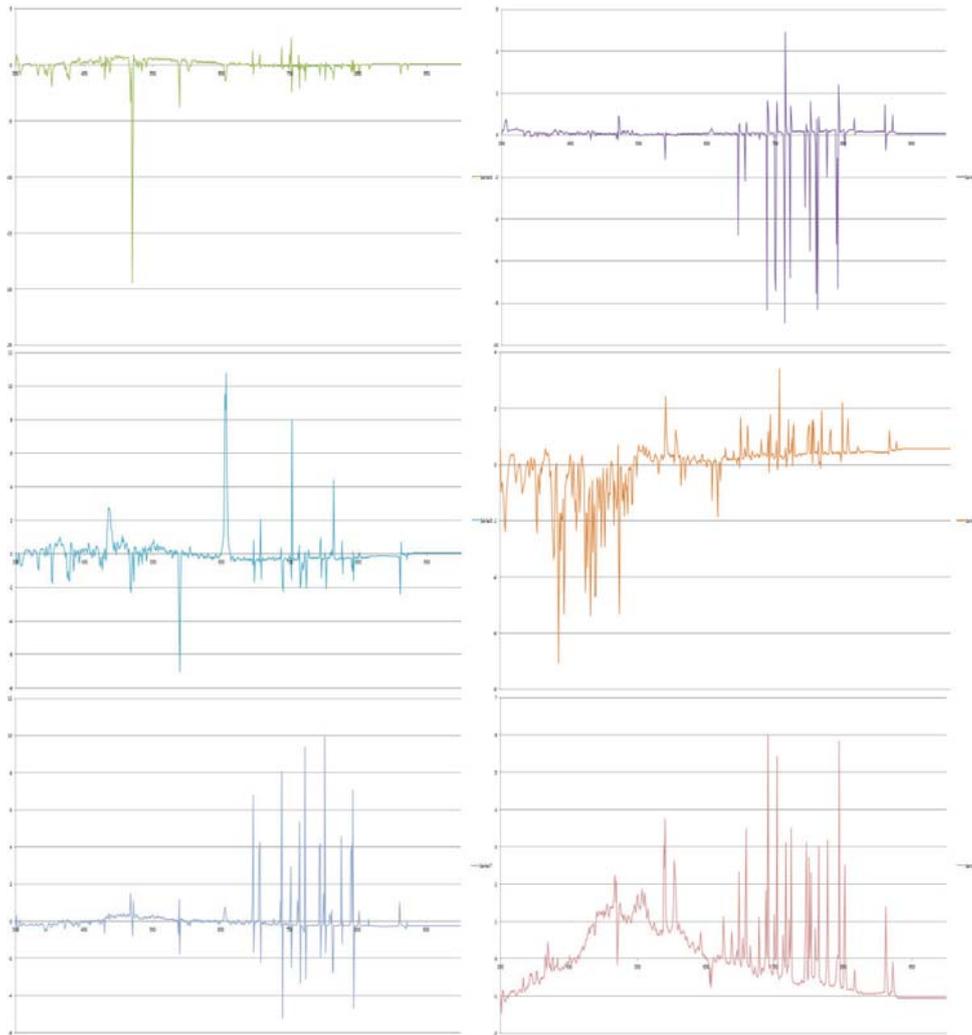


Figura 3.52. Componentes independientes recogidos por el espectrómetro USB650

Se comprueba a partir de la longitud de onda y gracias a la base de datos NIST o artículos obtenidos por la búsqueda mediante Google Académico que: las líneas más significativas del primer componente independiente corresponde con líneas de:

**Serie 1:**

Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)	811	763	840
Elemento	Ar	Ar	Ar
Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)	811.5311	763.5106	840.8209
Intensidad relativa (u.a.)	35000	25000	15000

**Serie 2:**

Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)	813	765	752
Elemento	Fe	Fe	Fe
Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)	812.65061	765.37591	751.51028
Intensidad relativa (u.a.)	363	398	219

**Serie 3:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>520</b>	<b>589</b>	<b>752</b>
<b>Elemento</b>	Cr	Cr	Cr
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	520.452	589.459	751.82
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	5300	19	150

**Serie 4:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>764</b>	<b>810</b>	<b>812</b>
<b>Elemento</b>	Ni	Ni	Ni
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	763.7	809.675	812.148
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	250	1000	700

**Serie 5:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>657</b>	<b>753</b>	<b>589</b>
<b>Elemento</b>	C	C	C
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	657.805	753.057	588.977
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	800	12	570

**Serie 6:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>434</b>	<b>480</b>	<b>442</b>
<b>Elemento</b>	Si	Si	Si
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	434.140	479.2324	441.165
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	9	80	100

**Serie 7:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>802</b>	<b>773</b>	<b>739</b>
<b>Elemento</b>	Xe	Xe	Xe
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	802.967	774.031	739.379
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	100	40	150

**Serie 8:**

<b>Longitud de onda(Componente Independiente) (nm)</b>	<b>740</b>	<b>844</b>	<b>753</b>
<b>Elemento</b>	S	S	S
<b>Longitud de onda (Base de datos NIST) (nm)</b>	740.949	844.956	753.8909
<b>Intensidad relativa (u.a.)</b>	10	5	19

<b>Serie 1</b>	<b>Serie 2</b>	<b>Serie 3</b>	<b>Serie 4</b>	<b>Serie 5</b>	<b>Serie 6</b>	<b>Serie 7</b>	<b>Serie 8</b>
Ar	Fe	Cr	Ni	C	Si	Xe	S

De nuevo los resultados son los esperados excepto en el caso de la séptima serie, como ocurría con los datos recogidos en el espectrómetro HR4000.

Tras observar el resultado para los tres casos, se pueden destacar varios puntos. En primer lugar queda demostrado que las técnicas del Análisis de Componentes Principales (PCA) como el Análisis de Componentes Independientes (ICA) pueden ser utilizadas para la identificación de las líneas de emisión, a pesar que algunos factores dependientes o independientes con el menor porcentaje de variabilidad puedan

identificar elementos que no forman parte de los componentes del proceso de soldadura.

Además al trabajar con diferentes espectrómetros, y al igual que se estudió en puntos anteriores, se comprueba que la dificultad para la identificación de las líneas varía dependiendo en mayor parte debido a la resolución espectral de la instrumentación empleada.

## **4. CONCLUSIÓN Y LÍNEAS FUTURAS**

### **4.1 Conclusiones**

En este documento se ha desarrollado una aplicación informática en lenguaje C# (bajo la plataforma de *Visual Studio .NET*) que permite la lectura y visualización en tiempo real de un espectro de emisión de un proceso de soldadura industrial tipo TIG, aunque sería igualmente aplicable a otros tipos de soldadura, como láser.

En especial, se ha abordado el problema de la identificación de las líneas de emisión para detectar los posibles defectos de soldadura, al mismo tiempo (tiempo real) en el que se realiza el proceso de soldadura.

En primer lugar, se ha desarrollado un sistema basado en pesos asignados a los elementos con los que se acceden a la base de datos para la identificación de las líneas de emisión. Por lo que este proceso se ha denominado identificación de líneas de emisión mediante estudio o conocimiento previo.

En segundo lugar se ha revisado y rediseñado un nuevo algoritmo basado en varios parámetros fundamentales a la hora de buscar una correcta identificación: la intensidad relativa y la longitud de onda central de las líneas de emisión. También se tuvo en cuenta, a posteriori, la resolución espectral del espectrómetro, que permite realizar una búsqueda más exhaustiva de las líneas de emisión.

Para realizar éste análisis y comparar los resultados entre ambas técnicas, se realizaron dos pruebas con aleaciones de Titanio e Inconel, comparando los resultados de la identificación de las líneas de emisión. En estos análisis se utilizaron varios estudios previos (para el primer algoritmo) y hasta dos bases de datos.

El resultado de las pruebas permite concluir varios puntos. En primer lugar se comprobó que los resultados más precisos se obtuvieron mediante la identificación con el algoritmo con estudio previo y tras aplicar el algoritmo del centroide (algoritmo sub-píxel).

Además se ha podido ver que una de las bases de datos utilizadas daba lugar a confusión y resultados erróneos en la identificación. Esto implica que la identificación depende en gran medida de la base de datos NIST utilizada. Se ha comprobado que la segunda base utilizada conduciría siempre a un error en la identificación por no contener líneas de identificación presentes en la soldadura (base de datos incompleta).

En el presente documento también se ha justificado el uso del parámetro principal de un espectrómetro: la resolución espectral. Se ha comprobado que, ante dos espectros pertenecientes al mismo proceso de soldadura recogidos por diferentes espectrómetros (USB2000 y HR4000), la identificación de las líneas de emisión es más correcta y precisa para el espectrómetro cuya resolución espectral es menor (mejor) (HR4000).

Además, se ha estudiado la viabilidad del empleo del Análisis de Componentes Independientes (ICA) y del Análisis de Componentes Principales (PCA) como apoyo a la correcta identificación de las diferentes líneas espectrales.

Tras analizar analíticamente ambos procesos y comprobar cuáles son los motivos por los que estas técnicas son utilizadas, se ha comprobado que el proceso de Análisis de Componentes Independientes (ICA) es una técnica que puede ser utilizada para la identificación de las líneas de emisión.

Para comprobarlo, se ha utilizado tres series de datos recogidas por tres espectrómetros y que corresponden con los factores independientes (tras el proceso del ICA) de tres espectros pertenecientes al mismo proceso de soldadura (acero inoxidable AISI304).

Tras el proceso se han obtenido varias conclusiones. En primer lugar, como era de esperar y se ha comprobado anteriormente, la identificación de las líneas de emisión para la serie de datos recogidas con el espectrómetro de peor resolución espectral ha sido más dificultosa. Y por último, a pesar de la identificación en los factores con menor variabilidad de elementos que no pertenecen al compuesto de la soldadura, la identificación tras el proceso del ICA es muy satisfactoria.

## 4.2 Líneas futuras

Las posibles líneas futuras que el trabajo deja abiertas son:

- Continuar la mejora de la identificación de las líneas de emisión. Para realizar una identificación más idónea podría utilizarse una red neuronal. Entrenada adecuadamente tras diferentes experimentos permitiría que fuera capaz de identificar las líneas de emisión basándose en sus resultados.
- Identificación de las líneas de emisión mediante otros enfoques. La identificación de las líneas de emisión puede realizarse también a través de técnicas de clasificación automática basadas en la recuperación de textos (algoritmo de *Google*) o a través de la correlación lineal o por rangos mediante una mejora previa con un filtrado espectral y enmascarado.
- Mejora y desarrollo en el procesado propuesto para la estimación de la temperatura electrónica del plasma en tiempo real (parámetro clave para la detección de posibles fallos en los procesos de soldadura). Se podría mejorar el procesado, disminuyendo la complejidad del proceso y tiempo de respuesta, utilizando nuevos métodos de suavizado, un nuevo algoritmo que permita detectar los picos sobre la radiación de fondo (eliminando por tanto la etapa de la eliminación) o la utilización de otros métodos para eliminar dicha radiación.
- Mejora del software. Un sistema de tiempo real necesita que sea totalmente tolerante a posibles fallos o excepciones.

## **5. BIBLIOGRAFÍA**

- [1] Historia de la soldadura <http://es.wikipedia.org/wiki/Soldadura>
- [2] Jesús M<sup>a</sup> Mirapeix Serrano. *Contribuciones a la supervisión y optimización de procesos de soldadura mediante espectroscopía óptica de plasmas*. Tesis doctoral. Escuela técnica superior de ingenieros industriales y de telecomunicación. Cantabria 2007.
- [3] Maritza Peña Díaz. *Desarrollo de una instalación para la caracterización del plasma inducido por pulsos láser*. Tesis doctoral. Centro de investigación en ciencia, Unidad Altamira. México 2006.
- [4] Rubén Ruiz Lombera. *Estudio comparativo de técnicas espectroscópicas para la monitorización de la calidad en procesos de soldadura*. Proyecto Fin de Carrera, E.T.S.I.I.T. Universidad Cantabria
- [5] Levenberg-Marquardt A.W. Robinson, P. Gardner, A.P.J. Stampfl, R. Martin, G. Nyberg, *Error analysis in the fitting of photoemission lineshapes using the Levenberg-Marquardt method*, journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 94, 1998.
- [6] Algoritmo del Centroide (*Centroid Detection Algorithm, CDA*) S.S. Welch, *Effects of window size and shape on accuracy of subpixel centroid estimation of target images*, NASA Technical Paper, N° 3331, p.36, 1993.
- [7] Pedro Anuarbe Cortés. *Procesado de Información Espectroscópica en Tiempo Real para el monitorizado de Soldadura Industrial*. Proyecto Fin de Carrera, E.T.S.I.I.T. Universidad Cantabria.
- [8] Marcos Romero Castaño. *Calibración automática de espectrómetros basados en CD para procesos de soldadura tipo TIG*. Proyecto Fin de Carrera, E.T.S.I.I.T. Universidad Cantabria.
- [9] Ocean Optics. <http://www.oceanoptics.com/>
- [10] J.L.Semmlow, *Biosignal and Biomedical Image Processing. MATLAB-Based Applications*, CRC Press, 2004.
- [11] Eusebio Real Peña. *Identificación de la composición de tejidos biológicos a partir de medidas de reflectancia difusa*. Proyecto Fin de Carrera, E.T.S.I.I.T. Universidad Cantabria, 2012.
- [12] J. Mirapeix, P.B. García-Allende, A. Cobo, O.M. Conde, J.M. López-Higuera. *Real-time arc-welding defect Detection and classification with principal component analysis and artificial neural networks*, Science Direct, 2007.

[13] Alma Eguizabal, Ashley M. Laughney, P.B. García-Allende, Venkataramanan Krishnaswamy, Wendy A. Wells, Keith D. Paulsen, Brian W.Pogue, Jose M. Lopez-Higuera, Olga M. Conde. *Blind breast tissue diagnosis using independent component analysis of localized backscattering response*.

[14] Alma Eguizabal, Ashley M. Laughney, P.B. García-Allende, Venkataramanan Krishnaswamy, Wendy A. Wells, Keith D. Paulsen, Brian W.Pogue, Jose M. Lopez-Higuera, Olga M. Conde. *Enhanced tumor contrast during breast lumpectomy provided by independent component analysis of localized reflectance measures*.

[15] Huanwei Yu, Yanling Xu, Na Lv, Huabin Chen, Shanben Chen, *Arc spectral processing technique with its application to wire feed monitoring in Al-Mg alloy pulsed gas tungsten arc welding*, Journal of Materials Processing Technology, 2012.

[16] The Code Project. <http://www.codeproject.com/>

[17] Nist Database. <http://physics.nist.gov/>

[18] Jesus Mirapeix, Adolfo Cobo, Jose Fuentes, Marta Davila, Juan Maria Etayo, Jose-Miguel Lopez-Higuera, “*Use of The Plasma Spectrum RMS Signal for Arc-Welding Diagnostics*”, 2009.

[19] F.J.Gil, J.A. Planell, “*Aplicaciones biomédicas del titanio y sus aleaciones*”, Universidad Politécnica de Cataluña.

[20] Pere Molera Solá, “*Soldadura industrial: clases y aplicaciones*”.

[21] Amandine Thomas, “*Estudio del comportamiento en caliente del Inconel 718*”, Universidad Politécnica de Cataluña.

#### **Otra bibliografía utilizada y consultada:**

J. Mirapeix, A. Cobo, O.M. Conde, C. Jaúregui, J.M. López-Higuera, *Fast algorithm for spectral processing with application to on-line welding quality assurance*, Measurement Science & Technology, Vol. 17, N° 10, pp. 2623-9, 2006.

J. Mirapeix, A. Cobo, O.M. Conde, C. Jaúregui, J.M. López-Higuera, *Robust technique for spectroscopic plasma analysis with application in real-time arc welding quality monitoring*, Optical Engineering, Vol. 45, N° 8, pp. 83002-1-5, 2006.

J. Mirapeix, A. Cobo, O. M. Conde, María A. Quintela, J.M. López-Higuera, *Spectroscopic analysis technique for arc-welding process control*, Proceedings of SPIE, Vol. 5948 II, Photonics Applications in Industry and Research IV, pp. 1-6, Polonia; 28 Agosto- 2 Septiembre de 2005.

Alma Eguizabal Aguado. *Diagnóstico de cáncer de mama mediante técnicas de separación ciega de señal y análisis textural sobre medidas de reflectancia óptica*. Proyecto Fin de Máster, E.T.S.I.I.T. Universidad Cantabria, 2012.

MCGraw-Hill Osborne *C# 4.0 The Complete Reference*