Numerische Methoden für die Infrarot Radiometrie am Beispiel der Lackschichtdickenbestimmung

Peter Dörr

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Allen Rosencwaig und Allen Gersho [32] begründeten 1976 mit ihren Arbeiten zur Theorie des photoakustischen Effekts bei Festkörpern ein neues Forschungsgebiet der Meßtechnik, dessen Gegenstand die Untersuchung der thermischen Eigenschaften von Festkörpern mit sogenannten thermischen Wellen ist: Einem zu untersuchenden Objekt wird periodisch Wärme zugeführt. Der daraus resultierende, schwingende Temperaturverlauf innerhalb des Objektes wird als thermische Welle bezeichnet. Dieser Begriff rührt von der Vorstellung her, daß sich die Wärme im Objekt wellenartig ausbreitet, und daß sie insbesondere an Hindernissen gebrochen wird. Erfolgt die thermische Anregung des Objektes in einer luftdichten Zelle, so führt die periodische Abgabe von Wärme an die Luft zu einer akustischen Welle, die mit einem Mikrofon erfaßt werden kann. Die Entstehung einer akustischen Welle als Folge der thermischen Welle bezeichneten Rosencwaig und Gersho als den Photoakustischen Effekt. Andere Meßverfahren nutzen die periodische mechanische Ausdehnung des Objektes oder aber die Infrarotstrahlung, die vom Objekt ausgeht, um die thermische Welle meßtechnisch zu erfassen. Die auf Strahlung beruhende Methode wird als Infrarot-Radiometrie bezeichnet.

In dieser Arbeit steht eine bestimmte Anwendung der Infrarot-Radiometrie im Mittelpunkt des Interesses: Die Bestimmung von Lackschichtdicken. Zwei Ziele werden verfolgt:

1. Bestmögliches Ausnutzen der Informationen, die durch die aktuelle Meßtechnik erfaßt werden.

2. Untersuchung der Perspektiven, die eine weiterentwickelte Meßtechnik eröffnen würde.

In der Literatur sind Beiträge zu diesen Themen heute fast ausschließlich in physikalisch orientierten Zeitschriften und Monographien zu finden. Die vorliegende Arbeit versteht sich auch als Brückenschlag zwischen der naturwissenschaftlichen und der numerisch/mathematischen Disziplin, was besonders im letzten Kapitel zum Ausdruck kommt.

Das physikalische Verständnis der Infrarot-Radiometrie ist eine wichtige Voraussetzung, besonders wenn es um die Signalverarbeitung bei real gemessenen Daten geht. Entsprechende Grundlagen werden im ersten Kapitel zusammengefaßt. In den Kapiteln 2 und 3 wird darauf aufbauend ein Verfahren zur Berechnung von Lackschichtdicken entwickelt, das einige wichtige praxisrelevante Vorteile gegenüber der etablierten Kalibriertechnik vorzuweisen hat. Im letzten Kapitel untersuchen wir thermische Wellen in einem allgemeineren Kontext, der auch Methoden für andere Anwendungen als die Lackschichtdickenmessung einschließt und der nicht auf bestimmte Methoden zur Erzeugung der periodischen Wärmezufuhr beschränkt ist.

Die Abbildungen (1, 2) zeigen eine schematische Darstellung der Messung. Es werden Proben betrachtet, die aus horizontal angeordneten Schichten verschiedener Materialien (Lacke, Kunstoffe oder Metalle) bestehen. Ein Laserstrahl, der durch einen mechanischen Chopper (sich drehende Kreisscheibe mit abwechselnd lichtdurchlässigen und -undurchlässigen Segmenten) periodisch unterbrochen wird. Die Absorption des Laserstrahls führt zu einer (periodischen) Wärme-

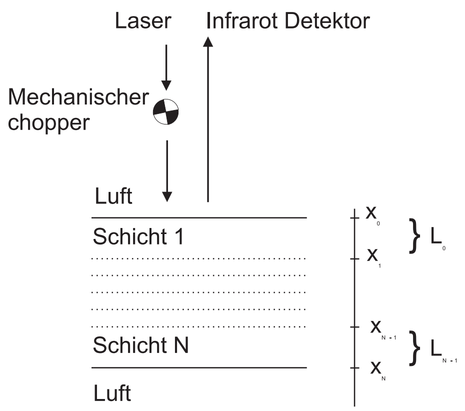

Abbildung 1: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus

quelle $Q(x, t, \omega_0)$ in der Probe, die neben dem Ort x und der Zeit t auch von der Chopperfrequenz ω_0 abhängt. Die Ausbreitung der Wärme innerhalb der Probe kann aus Symmetriegründen auf die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung zurückgeführt werden:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[k(x)\frac{\partial}{\partial x}T(x,t,\omega_0)\right] - \rho(x)c(x)\frac{\partial}{\partial t}T(x,t,\omega_0) = -Q(x,t,\omega_0) \tag{1}$$

mit der ortsabhängigen Wärmeleitfähigkeit $k(x)$, der spezifischen Wärmekapazität $c(x)$ und der spezifischen Dichte $\rho(x)$. Da für die Quelle ein Separationsansatz

$$Q(x,t,\omega_0) = Q(x)\exp(i\omega_0 t)$$

zutreffend ist, ergibt sich wegen der Linearität von (1) eine gleich geartete Zeitabhängigkeit $T(x,t,\omega_0) = T(x)\exp(i\omega_0 t)$ für die Temperatur. Innerhalb einer der homogenen Schichten sind die Materialeigenschaften k, c, ρ nicht vom Ort abhängig. Division der Gleichung durch die hier konstante Konduktivität k und Betrachten der Gleichung im Frequenzraum ergibt eine Darstellung von (1), für die wir den Begriff der *Fourier-Wärmeleitungsgleichung* einführen:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x,\omega_0) - \underbrace{i\omega\frac{\rho c}{k}}_{\sigma^2}T(x,\omega_0) = -\frac{Q(x,\omega_0)}{k} \tag{2}$$

An dieser Stelle wird nun der Wellencharakter durch die Einführung der sogenannten thermischen Wellenzahl σ deutlich, durch die die Wärmeleitungsgleichung in die Form der Helmholtzgleichung überführt wird. Die geläufige Form der thermischen Wellenzahl ist

$$\sigma = (1+i)\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha}},$$

mit der thermischen Diffusivität $\alpha = k/\rho c$. Verglichen mit dem Fall des inversen Medienproblems bei akustischen Wellen, wo Daten auf einer Kreislinie um das Objekt erfaßt werden, liegen uns hier Daten nur an einem Ort der Probe vor; dafür aber zu verschiedenen Anregungsfrequenzen ω_0 vor. Das besondere

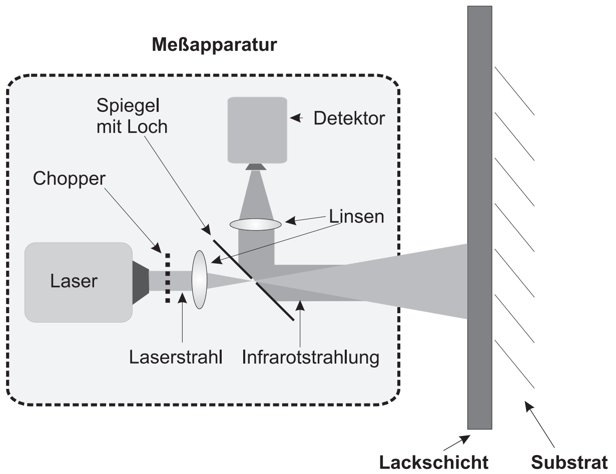

Abbildung 2: Schematische Darstellung des Meßinstrumentes

bei thermischen Wellen ist, daß sie exponentiell gedämpft werden, während bei Schallwellen häufig davon ausgegangen wird, daß sie das Objekt dämpfungsfrei durchdringen. Aufgrund der starken Dämpfung ist es mit thermischen Wellen nur möglich ein Objekt in der Nähe der Oberfläche zu untersuchen. Schichtstrukturierte Objekte, wie zum Beispiel lackiertes Blech, werden durch Kopplungsbedingungen zwischen benachbarten homogenen Schichten modelliert. Es wird häufig von einem stetigen Temperaturverlauf und einem stetigen Wärmefluß innerhalb der Probe ausgegangen. Dadurch sind eindeutige Lösungen von (2) bestimmt.

> Bei der Schichtdickenbestimmung werden Schichten konstanter thermophysikalischer Eigenschaft identifiziert.

Die Infrarotstrahlung, die von der Probe ausgeht, wird mit einem Detektor erfaßt und in Form von digitalisierten Zeitreihen einem Computer zur Weiterverarbeitung bereitgestellt. Das ist die Stelle, an der wir ansetzen werden, indem wir eine neue Methode zur Aufbereitung und Auswertung der Meßdaten einführen. In Abbildung (3) sind solche Zeitreihen von zwei Proben zu sehen, die sich nur in

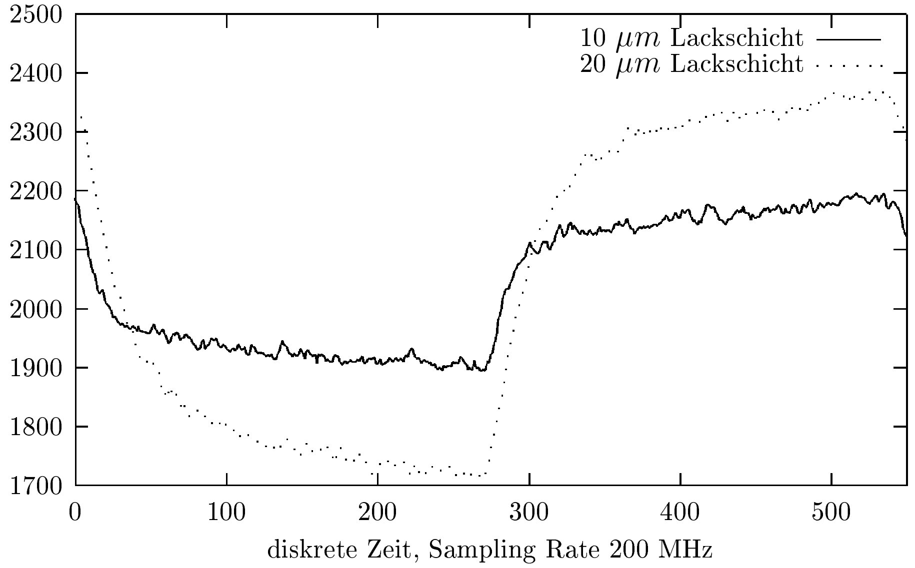

Abbildung 3: *Infrarotsignal zu zwei Proben Lack auf Metall. Die Proben unterscheiden sich lediglich durch die Dicke der Lackschicht. Den Werten auf der y-Achse wird keine quantitative Bedeutung zugemessen.*

der Dicke der Lackschicht unterscheiden. Beim praktischen Einsatz ist dies das Szenarion, in dem ein Meßverfahren operiert. Der einzige Parameter, der variieren kann ist die Lackdicke. Veränderung des Infrarotsignals, das auch von der Art des Lackes und des Substrates abhängt, werden also ausschließlich durch Variation der Lackdicke hervorgerufen. Soll zum Beispiel eine andere Lackart vermessen werden, so muß neu kalibriert werden.

Betrachten wir wieder die Zeitreihen in Abbildung (3). Bereits visuell sind diese durch die unterschiedliche Amplitude und Form des Anstieges bzw. Abfallens zu unterscheiden. Die Schwierigkeit besteht darin, aus diesen Daten direkt die Schichtdicken zu berechnen. Das Vorgehen bei dem hierzu entwickelten Verfahren ist durch drei Schritte gekennzeichnet:

Schritt 1: Entfernen des Einflußes von Parametern der Meßapparatur und anderen unerwünschten Einflußgrößen - soweit möglich.

Schritt 2: Reduktion des mathematischen Modells der Infrarotradiometrie auf die Parameter, die die größte Sensitivität aufweisen.

Schritt 3: Einsatz eines Verfahren zur nichtlinearen Optimierung zur Bestimmung der verbleibenden Parameter - unter anderem der gesuchten Schichtdicke.

Ausgehend vom mathematischen Modell der Wärmeausbreitung wird in Kapitel 3 ein Verfahren zur Signalanalyse hergeleitet, das unerwünschte Effekte, die durch die Apparatur verursacht sind, bis auf einen konstanten Faktor herausfiltert. Erreicht wird diese Filterung, indem wir das Fourier-Spektrum (Abb. 4) der Zeitreihe betrachten. Aufgrund des annähernd linearen Prozesses, der die thermische Anregung in die Infrarotstrahlung umwandelt, können wir die einzelnen Frequenzanteile getrennt betrachten.

> Die absolute Größe der Amplituden kann dabei nicht als quantitative Größe gelten, sie wird von der Meßapparatur und anderen Umgebungsvariablen mit bestimmt. Aber das Verhältnis der signifikanten Amplituden zueinander beinhaltet quantitativ verwertbare Information. Das bedeutet, daß diese Quotienten genutzt werden können, um ein mathematisches Modell an die Meßdaten anzupassen.

Dieses Auswerteverfahren, das die Quotienten signifikanter Amplituden, bzw. Differenzen der zugehörigen Phasen nutzt, bezeichnen wir als *Simultane Kalibrierung*. Es bringt gegenüber den herkömmlichen Kalibrierverfahren praxisrelevante Vorteile mit sich: Einerseits ist es möglich, neben dem Phasengang zwischen Anregung und Meßsignal auch die Amplitude auszunutzen. Weiterhin wird durch den Austausch von Baugruppen des Apparates keine Neukalibrierung erforderlich. Besonders wichtig ist die Tatsache, daß das klassische Kalibrierverfahren mehrere geeichte Kalibrierproben benötigt. Es werden zu den Kalibrierproben die genannten Phasengänge gemessen, und in einer Kurve werden die Lackschichtdicken gegen die Phasenwerte aufgetragen. Die Bestimmung der Dicke einer Lackschicht bei einer unbekannten Probe erfolgt, indem der Phasengang bestimmt und anhand der vorher bestimmten Kurve die zugehörige Dicke abgelesen wird. Durch die simultane Kalibrierung und die mathematische Modellierung kann dieser Prozeß vereinfacht werden. Es wird nämlich nur noch eine Probe bekannter Dicke zur Kalibrierung benötigt (*single sample calibration* [6]):

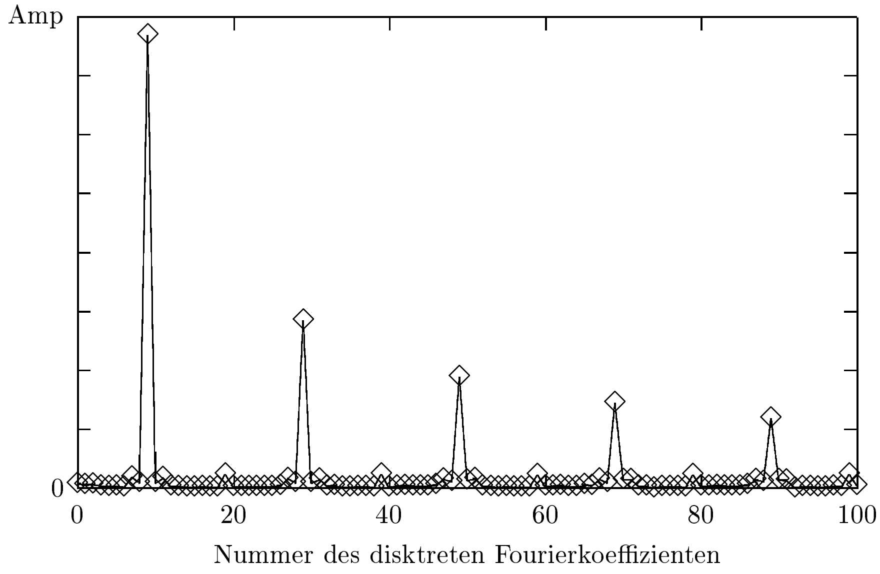

Abbildung 4: *Typisches Amplitudenspektrum der gemessenen Zeitreihe.*

1. Es werden Zeitreihen zu einer Vielzahl von Anregungsfrequenzen zu einer Probe aufgenommen und aufbereitet. Mit einem Optimierungsverfahren werden die thermophysikalischen Parameter der Probe anhand dieser Daten und dem mathematischen Modell bestimmt.

2. Die Bestimmung der Dicke einer Lackschicht erfolgt durch Lösen einer nichtlinearen Gleichung für die Lackdicke. Dabei werden die Modellparameter aus Schritt 1 in das Modell eingesetzt, lediglich die Schichtdicke bleibt als freier Parameter.

Die mathematische Modellierung und die simultane Kalibrierung wurden anhand eines Satzes realer Meßdaten erfolgreich verifiziert. Es zeigt sich jedoch, daß zumindest mit den vorliegenden Daten eine Erkennung von mehreren Lackschichten auf Metall nicht durchführbar ist.

Lösen wir uns von der Annahme, daß das Objekt sich aus wenigen homogenen Schichten zusammensetzt, und daß wir mit der speziellen Form der thermischen Anregung, wie sie von einem Chopper hervorgerufen wird, arbeiten müssen, so eröffnet dies die Möglichkeit andere mathematische Methoden einzusetzen: Wir sprechen von Rekonstruktionsverfahren. Es wird dabei der Verlauf thermophysikalischer Eigenschaften des Objektes berechnet. Erst in einem zweiten Schritt kann im Falle der Schichtdickenberechnung der Verlauf (auch Profil genannt) auf Sprünge untersucht werden, die an den Stellen sichtbar werden, wo die Übergänge zwischen den Schichten lokalisiert sind. Mit dieser Betrachtungsweise öffnen wir uns darüberhinaus auch anderen Anwendungen, bei denen es direkt um die Berechnung des Profils geht, so zum Beispiel bei der Rekonstruktion von Konduktivitätsprofilen bei gehärtetem Stahl. Bei der Schichtdickenbestimmung haben wir die Freiheit, jede thermophysikalische Größe zur Sprungerkennung heranzuziehen, die sich für Lack und Metall deutlich unterscheidet. Es werden in dieser Arbeit zwei unterschiedliche Zugänge präsentiert und verglichen:

1. Über die thermische Effusivität: Bertolotti und andere [3] entwickelten einen Algorithmus zur Rekonstruktion der Effusivität von gehärtetem Stahl. Solche Profile sind im allgemeinen glatt, was die Linearisierungen bei der Modellbildung motiviert und legitimiert. In Kapitel 4 wird gezeigt, daß sich dieses Verfahren auch dann anwenden läßt, wenn wir nicht mehr von einem glatten Profil ausgehen können, jedoch nur noch an der Lokalisierung von Sprüngen interessiert sind. Das Bertolotti Verfahren eignet sich besonders, da nicht direkt das Effusivitätsprofil $e(x)$ berechnet wird, sondern die Funktion $(\frac{d}{dx}e(x))/e(x)$, die Singularitäten an den Stellen aufweist, wo $e(x)$ Sprünge hat. Diese Singularitäten nehmen in den (regularisierten) numerisch berechneten Profilen die Form lokaler Maxima an, die leicht lokalisiert werden können.

2. Über die thermische Diffusivität: Ausgehend von der sogenannten Pseudo Helmhotzgleichung [29] wird in Kapitel 4 ein Verfahren hergeleitet, das mittels Born-Approximation ebenfalls auf ein lineares Problem führt. Berechnet wird der Kontrast der reziproken Diffusivität am Ort x im Vergleich zum Mittelwert $1/\alpha(x) - 1/\alpha_0$. Ein Verfahren zur Kanten- bzw. Sprungerkennung liefert die gewünschte Dickeninformation.

Obwohl die beiden Methoden von unterschiedlicher Modellierung ausgehen und obwohl sie jeweils unterschiedliche physikalische Größen rekonstruieren, führen sie auf das gleiche Inversionsproblem.

> Das Inversionsproblem bei der Profilrekonstruktion führt nach Bildung linearer Modelle, sowohl bei der Bertolotti Formulierung als auch bei der Formulierung als Streuproblem, auf das gleiche Kernproblem, nämlich die numerische Inversion der Laplace Transformation.

In Anbetracht der exponentiellen Dämpfung thermischer Wellen war dies bereits zu vermuten. So erstaunt doch der relativ einfache Zusammenhang, der sich letztlich zwischen der Laplacetransformierten des Objektes (bzw. dessen Eigenschaften) und den Meßdaten ergibt. Wie in Kapitel 4 nachzulesen ist ergibt sich

$$\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)(\sigma_0(2\omega)) \quad = \quad c_1 \frac{T(0,\omega) - T_{ref}(0,\omega)}{T(0,\omega) + T_{ref}(0,\omega)},$$

$$\mathcal{L}\left(\frac{1}{\alpha(x)} - \frac{1}{\alpha_0}\right)(\sigma_0(2\omega)) \quad = \quad c_2 T_s(0,\omega).$$

Mit der Temperatur einer homogenen Referenzprobe T_{ref} der Diffusivität α_0, die gleich der mittleren Diffusivität der zu untersuchenden Probe ist, dem gestreuten Temperaturfeld T_s und den im allgemeinen unbekannten Konstanten c_1 und c_2. Die Laplacetransformierte $\mathcal{L}(.)(.)$ liegt an diskreten Meßpunkten $\sigma_0(2\omega) = (1+i)\sqrt{\omega/\alpha_0}$ vor, α_0 steht für die mittlere Diffusivität des Objektes.
Die numerische Inversion der Laplace Transformation anhand fehlerbehafteter Meßdaten gehört in die Klasse der exponentiell schlecht gestellten Probleme. Bei der Inversion der Laplacetransformation macht sich dies dadurch bemerkbar, daß der Fehler in der rekonstruierten Funktion mit wachsender Laufvariable (in unserer Anwendung mit wachsender Rekonstruktionstiefe) exponentiell steigt. Es kann also immer nur bis zu einer gewissen Tiefe rekonstruiert werden, wenn eine gewisse Genauigkeit erreicht werden soll.

Im Falle thermischer Wellen liegen die Daten zu komplexen Argumenten $\sigma(2\omega) = (1+i)\sqrt{\omega/\alpha(x)}$ vor, die selbst vom Objekt, genauer von dessen thermischer Diffusivität abhängen. Dies verschärft die Situation dadurch, daß die maximale Eindringtiefe im allgemeinen unbekannt ist. Zu dieser Situation gibt es auch eine physikalische Interpretation: Es ist üblich von der Eindringtiefe μ einer thermischen Welle zu sprechen. Das ist die Tiefe, bei der die thermische Welle bis auf $1/e$ ihrer Anfangsamplitude abgedämpft wurde. Die Eindringtiefe hängt von der Anregungsfrequenz und dem Objekt ab. Im Falle eines homogenen Objektes der Diffusivität α beträgt die thermische Eindringtiefe:

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\omega}}$$

Mit der Variation der Anregungsfrequenz werden sozusagen verschiedene Tiefen des Objektes abgetastet. Ein Frequenzscan stellt folglich Daten bis zu bestimmten Eindringtiefen bereit. Der Versuch, in tieferen Regionen zu rekonstruieren, muß demnach scheitern, denn die Daten enthalten keine signifikante Information über das Objekt zu diesen Tiefen.
Betrachten wir Objekte, deren Diffusivitätsprofil zu bestimmen ist, so können wir a priori keine Aussagen über die thermische Eindringtiefe mehr machen. Trotzdem ist es möglich Diffusivitätsprofile zu berechnen, wenn sinnvolle a priori Annahmen über das Diffusivitätsprofil gemacht werden können. Hinzu kommt die Problematik der Wahl des geeigneten Regularisierungsparameters, wie es bei allen schlecht gestellten Problemen der Fall ist. In Kapitel 4 wird ein Verfahren zur Inversion der Laplace Transformation vorgestellt, das alle genannten Eigenheiten berücksichtigt. Ausgehend von einer diskreten Form der Laplace Transformation wird dem Konzept der *Approximativen Inversen* [19] folgend ein Algorithmus entwickelt, der im Gegensatz zu anderen Ansätzen, die eine bestimmte Verteilung

der Anregungsfrequenzen voraussetzen würden, die Daten eines Frequenzscans mit beliebiger Verteilung der Frequenzen zur Inversion heranziehen kann.

In den folgenden Kapiteln werden die zwei bereits im Überblick dargestellten Herangehensweisen untersucht. Der erste Weg ist der, so viel Vorweginformation wie möglich auszunutzen. Da wären die Schichtstruktur der Probe und das Spektrum der Anregung, die durch den Chopper hervorgerufen wird, zu nennen. Weitere einschränkende Annahmen kommen in Kapitel 3 hinzu. Die eng vorgegebene Problemstruktur reduziert die Komplexität des Problems der Schichtdickenbestimmung, was wir zur Konstruktion eines meßtechnischen Verfahrens, der single sample calibration ausnutzen können. Der zweite Weg erlaubt eine hohe Komplexität des Problems (keine Schichtstruktur mehr) und ist daher flexibler und auch für andere Anwendungen interessant. Gemeint ist die Profilrekonstruktion, die erst einmal mehr Information liefert als gesucht wird. Schließlich genügt es uns, zu wissen, wie dick die Lackschicht ist. Das Profil an sich interessiert uns nicht. Es muß in einem zweiten Schritt aus dem berechneten Profil die eigentlich gesuchte Information extrahiert werden. Wir arbeiten hier mit linearen Modellen, die dem nichtlinearen Charakter nur mangelhaft Rechnung tragen. Daß wir sie trotzdem einsetzen können, liegt daran, daß unter Umständen eine dürftige Qualität des rekonstruierten Profils, durchaus eine brauchbare Qualität der daraus ermittelbaren Schichtdicke liefert. Unter dem Einfluß von Störungen in den Daten sind jedoch alle untersuchten Verfahren nicht mehr sensitiv genug, mehrere Lackschichten auf metallischem Untergrund zu unterscheiden. Zu gering ist der Kontrast zwischen den Lackschichten, besonders im Vergleich mit dem enormen Kontrast zwischen Lack und Metall. Die Anwendung von Rekonstruktionsverfahren bietet jedoch vielfältige Möglichkeiten zur Weiterentwicklung bestehender Verfahren und eröffnet womöglich neue Anwendungsgebiete. Voraussetzung für ein solches Vorgehen in der Praxis wird aber eine andere Meßtechnik sein, die es erlaubt, eine große Zahl von Anregungsfrequenzen gleichzeitig abzutasten, denn nur dann können Rekonstruktionsverfahren bei Online-Messung überhaupt erst eingesetzt werden.

Kapitel 1

Physikalische Grundlagen und technische Methoden der Thermographie

Es ist im gesamten gesehen sehr komplexer physikalischer Vorgang, der letztlich ein photothermisches Signal zur Folge hat und dessen Auswertung und Analyse Gegenstand dieser Arbeit ist. So weit nötig, wird in diesem Kapitel auf die physikalischen und auch technologischen Aspekte der photothermischen Messung eingegangen, um insbesondere die in dieser Arbeit immer wiederkehrende Problematik bei der Verwendung real gemessener Daten zu erklären. Ausgangspunkt unserer Überlegungen in späteren Kapiteln wird die Wärmeleitungsgleichung sein, die mathematisch beschreibt, wie sich Wärme ausbreitet. Anhand des Ausbreitungsverhaltens modulierter thermischer Anregung sollen Aussagen über die thermophysikalischen Eigenschaften des erwärmten Objektes getroffen werden. Die praktischen Anwendungen erfordern, daß Messungen nur kontaktfrei durchgeführt werden. Und das bedeutet, daß wir nicht direkt auf die Temperaturdaten des Objektes zugreifen können. Statt dessen werden Auswirkungen der Erwärmung kontaktfrei als indirekte Meßgröße erfaßt und daraus muß dann die gewünschte Information gewonnen werden. Diese Aufgabenstellung wird im folgenden behandelt. Gute Überblicksartikel zu diesem Thema finden sich bei Murphy u. a. [25] und Busse und Walther [4]. Ausführliche praxisbezogene Information kann der Dissertation von Christian Gruss [13] entnommen werden.

1.1 Modulierte thermische Anregung

Typischerweise werden bei thermographischen Verfahren eine von zwei möglichen Lichtquellen zur modulierten Erwärmung des zu untersuchenden Objektes eingesetzt. Eine Möglichkeit besteht darin eine Blitzlampe einzusetzen, die eine impulsartige Erwärmung des Objektes zur Folge hat. Die zweite Form der Modulation ist die durch ein periodisches Zuführen von Energie mit einem intensitätsmodulierten Licht- bzw. Laserstrahl. Prinzipiell gibt es keine Einschränkungen durch welche Technologie das Objekt thermisch angeregt wird. Entscheidend ist, daß das Objekt ausreichend stark erwärmt wird, so daß die verfügbaren Meßmethoden ein hinreichend gutes Signal zu Rauschen Verhältnis erreichen. In dieser Arbeit werden reale Daten einer Apparatur verwendet, die einen Laserstrahl als Energiequelle nutzt. Dieser Laser wird durch einen sogenannten Chopper (eine sich drehende Kreisscheibe, bei der sich regelmäßig durchsichtige und undurchsichtige Kreissegmente abwechseln) periodisch unterbrochen. Relevante Eigenschaften eines Laserstrahles sind in diesem Zusammenhang:

1. Geometrische Verteilungsfunktion: Gaußförmiges Intensitätsprofil.

2. Spektrale Verteilungfunktion: Intensität in Abängigkeit von der Wellenlänge des Laserstrahles.

1.2 Absorption

Voraussetzung dafür, daß das Objekt durch die eingebrachte Strahlung auch erwärmt wird, ist die Absorption der Strahlung. Wenn die Strahlung transmittiert oder reflektiert wird, bedeutet dies, daß keine Energie innerhalb der Probe in Wärme umgesetzt wird. Ob und in welcher Stärke die eingebrachte Strahlung absorbiert wird, hängt ab von der Absorptionsfunktion des betrahlten Materials, die der Wellenlänge des Strahles die jeweilige Stärke der Absorption zuordnet. Für ein bestimmtes zu untersuchendes Material eignet sich daher die Lichtquelle am besten, die eine spektrale Verteilungsfunktion hat, die möglichst gut mit der Absorptionsfunktion des Materials übereinstimmt. Sollen verschiedene Materialien mit der selben Apparatur untersucht werden, so ist ein geeigneter Kompromiss zu finden, also eine Lichtquelle, deren Strahlung von allen in Frage kommenden Materialien möglichst gut absorbiert wird. Eine Konsequenz dieser Problematik ist, daß wir prinzipiell nicht davon ausgehen können, daß wir die Amplitude der thermischen Quellfunktion als bekannt voraussetzen können. Werden andere Materialien bestrahlt, oder etwa die Lichtquelle ausgetauscht, so ändert sich die Quellfunktion.

1.3 Emission und Detektion

Es gilt nun die Ausbreitung der Wärme zu beobachten. Verschiedene Technologien sind hierzu gebräuchlich, nicht alle eignen sich für den Einsatz im industriellen Betrieb.

1.3.1 Photoakustik

Bei diesem Meßverfahren wird die Wärmeabgabe des Objektes in die Umgebung ausgenutzt, um indirekt auf die thermische Information zuzugreifen. Die Anwendung sieht vor, auf einer ebenen Fläche eine luftabgeschlossene und lichtdurchlässige Zelle anzubringen, in der sich ein Mikrofon befindet. Wird nun das Objekt unter der Zelle periodisch thermisch angeregt, kommt es zu periodischer Erwärmung (objektabhängig) der Luft, die als akustisches Signal meßbar ist. Vorteil des Verfahrens ist die gute Qualität der Meßdaten. Allerdings ist das Verfahren im allgemeinen nicht berührungsfrei.

1.3.2 Mirage Effekt

Hier wird ebenfalls die Erwärmung der oberflächennahen Luft ausgenutzt. Ein Laserstrahl, der parallel zur Oberfläche veräuft, wird an der Stelle der Erwärmung in der Art einer thermischen Linse abgelenkt. Diese Ablenkung erfolgt mit der periodischen Erwärmung ebenfalls periodisch und wird bei diesem Verfahren als Sekundärinformation zur Bestimmung der Temeraturveränderung an der Probenoberfläche ausgenutzt. Dieses Verfahren kommt ohne Kontakt zum Objekt aus.

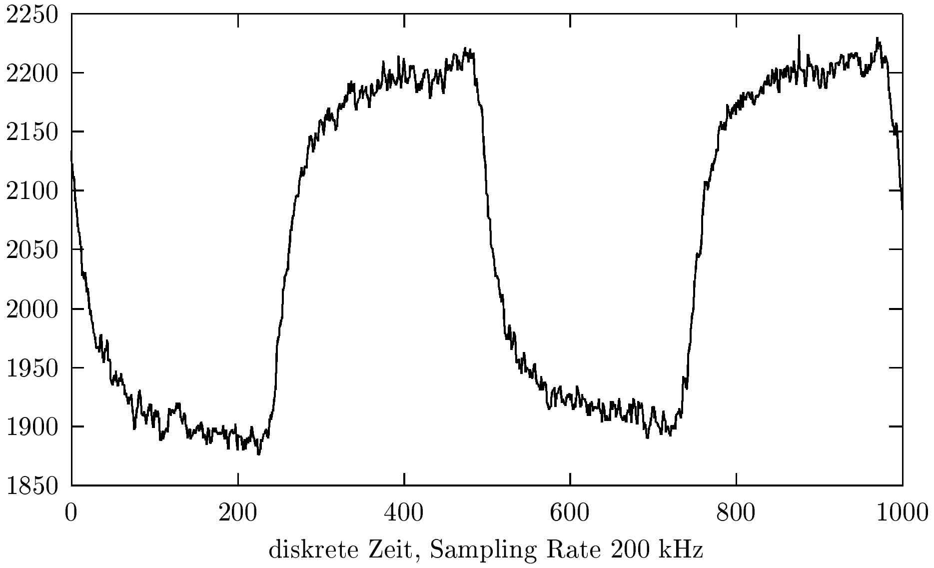

Abbildung 1.1: *Gemessenes Infrarotsignal (Detektoroutput) zu einer Probe Lack auf Metall bei einer Chopper Frequenz von* $20Hz$.

1.3.3 Infrarot-Thermographie

Das flexibelste Verfahren, das zudem kontaktfrei arbeitet, ist die Messung der durch die Erwärmung hervorgerufenen Infrarot Wärmestrahlung, die vom Objekt ausgeht. Dies erfolgt bei Punktmessung mittels eines Detektors mit genau einer Photozelle, die ein analoges Signal liefert, das verzögerungsfrei die Strahlungsintensität, die von der Probe ausgeht, anzeigt (siehe Abb. 1.1). Hierzu wird die Strahlung durch den Einsatz von Linsen gebündelt. Auch hier haben wir es wieder mit einer Verteilungsfunktion zu tun; und zwar mit der spektralen Empfindlichkeit des verwendeten Detektors. Nur in Wellenlängenbereichen in denen der Detektor eine gute Empfindlichkeit vorweist, kann eine optimale Messung erfolgen. Da die spektrale Verteilung der thermischen Emission vom Material abhängt muß auch der Detektor von seiner spektralen Empfindlichkeit her zu dem Material passen. Das Infrarotsignal wird bei den meisten Anwendungen in einen sogenannten Lock-In Verstärker eingespeist, der über einen weiteren Eingang den zeitlichen Verlauf des anregenden Signals erhält und daraus den Phasengang zwischen den beiden Signalen bestimmt.

1.3.4 Bildgebende Meßverfahren

Mit einer Blitzlampe wird eine Fläche gepulst in der Zeit bestrahlt. Eine Infrorotkamera zeichnet in schneller zeitlicher Abfolge Bilder der Infrarotstrahlung auf, die von der erwärmten Fläche ausgeht. Diese Daten werden zumeist herangezogen um die Qualität einer Oberfläche in dem Sinne zu prüfen, ob die zu prüfende Probe sich von einer Referenzprobe optimaler Qualität unterscheidet. Hierzu werden Differenzbilder zwischen denen der Referenzprobe und denen der zu prüfenden Probe herangezogen. Weitergehende Methoden nutzen Bilder die sich durch pixelweise Fourier Transformation der Bildfolgen ergeben.

1.4 Modellapparatur

Es geht nun darum, für das weitere Vorgehen eine Modellapparatur zu beschreiben, die es uns einerseits erlaubt von der tatsächlichen Ausformung der Apparatur zu abstrahieren, und die darüberhinaus hinreichend genau die Realität annähert, so daß auch reale Meßdaten verarbeitet werden können. Hierzu betrachten wir die einzelnen Komponenten des eingesetzten Apparates *PS-Online* der Firma Phototherm Dr. Petry GmbH. Aufgrund der bereits beschriebenen Problematik der spekrale Verteilung von Emission, Absorption und Detektion erhalten wir eine Erwärmung, deren maximale Amplitude keine verwendbare quantitative Information bietet. In der Praxis finden Messungen rund um die Uhr statt. Wir können noch nicht einmal davon ausgehen, daß die Amplitude bei einer festen Konstellation von Meßgerät und Probe über die Zeit konstant bleibt. Immer wieder wird die maximale Amplitude durch Wärmequellen in der Umgebung

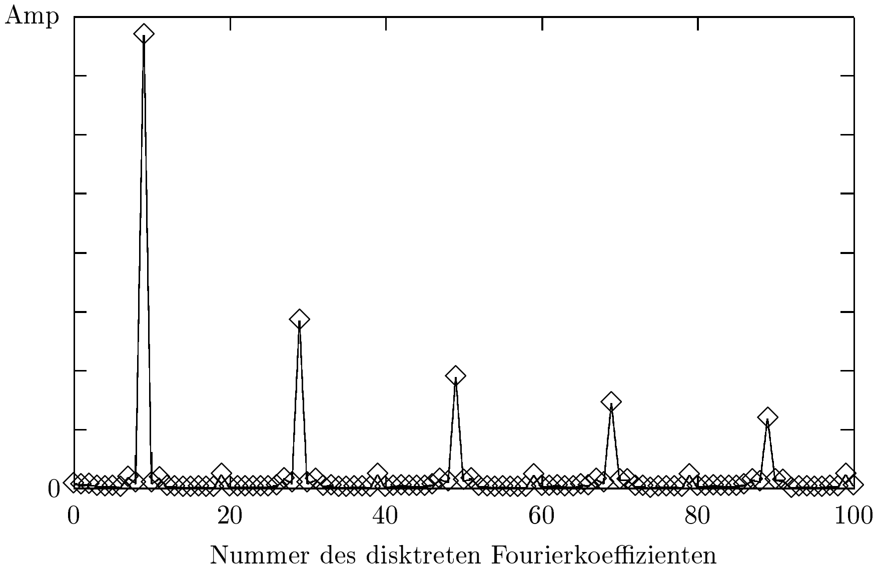

Abbildung 1.2: *Amplitudenspektrum des diskretisierten Photothermischen Signals zu einer Probe Lack auf Metall bei einer Chopper Frequenz von* $20Hz$. *Die Daten zu zwei vollen Umdrehungen des fünfblättrigen Chopperblattes, also 10 Perioden des Signals wurden diskret fouriertransformiert. Es sind die Amplituden der jeweiligen Koeffizienten aufgetragen.*

mit beeinflußt. Gerade aus diesem Grund wird im allgemeinen die Phase des Signals als Informationsträger bevorzugt, da die Phase durch die genannten Effekte unverändert bleibt. Doch andere Komponenten der Apparatur verursachen unerwünschte Veränderung der Phase. Dies gilt insbesondere für die eingesetzten Linsen, und für den Vorverstärker, der das Detektorsignal aufbereitet. Da in diesem speziellen Gerät - im Gegensatz zum üblichen Fall - die Anregung als Referenz nicht zur Verfügung gestellt wird, kann auch kein quantitativer Phasengang ermittelt werden. Da jedoch die Frequenz mit der sich das Chopper Blatt dreht bekannt ist, kann eine synthetische Referenz, mit einem unbekannnten, aber konstanten Phasengang genutzt werden. Das Photothermische Signal, das uns zur Verfügung steht wird durch folgende Gleichung dargestellt:

$$S(t) = \Phi \left(DT * P \right) (t + \phi)$$

DT ist die Detektorfunktion, P das Spektrum der abgestrahlten Energie, Φ und ϕ unbekannte reelle Variablen, die als unabängig von der Abtastfrequenz angenommen werden. $*$ steht für die Faltung in der Wellenlänge. Gehen wir davon aus, daß die Luft weder absorbiert noch emittiert, so erhalten wir das Photothermische Signal P lediglich von der Probe. Die Temperatur T ist mit diesem Signal über das Stefan-Boltzmannsche Gesetz verknüpft

$$P = \delta(T^4 - T_0^4)$$

δ ist eine Konstante, T_0 die Temperatur der umgebenden Luft und T die Temperatur an der Probenoberfäche. Für die kleinen Temperaturschwankungen, mit denen wir es bei der Infrarotradiometrie zu tun haben, können wir einen linearen Zusammenhang herleiten:

$$\begin{aligned} T^4 - T_0^4 &= (T - T_0)(T^3 + T^2 T_0 + T T_0^2 + T_0^3) \\ &= (T - T_0) T_0^3 \left[\frac{T^3}{T_0^3} + \frac{T^2}{T_0^2} + \frac{T}{T_0} + 1 \right] \\ &\approx 4 T_0^3 (T - T_0) \end{aligned}$$

Das bedeutet, daß nur Temperaturunterschiede bezüglich der Umgebungstempe-

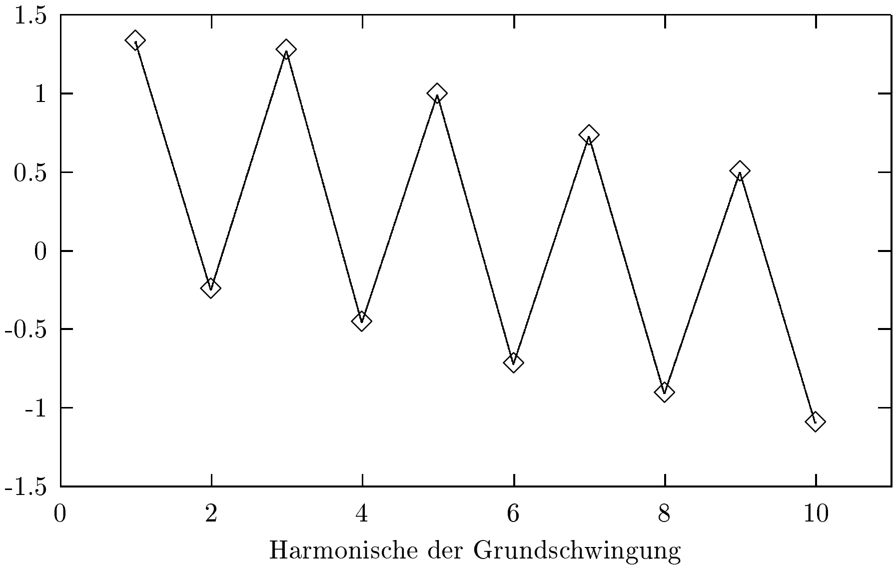

Abbildung 1.3: *Phasenspektrum des diskretisierten Photothermischen Signals zu einer Probe Lack auf Metall bei einer Chopper Frequenz von* $20Hz$*. Es sind die Phasen zu den ganzzahligen Vielfachen der Chopperfrequenzaufgetragen.*

ratur wahrgenommen werden, und keine absoluten Temperaturwerte. Und zwar ist die Strahlungsleistung annähernd proportional zu dieser Temperaturdifferenz. Ebenfalls begründet durch die relativ geringen Temperaturschwankungen ist die Annahme, daß die thermophysikalischen Eigenschaften der Proble unabhängig von der Temperatur sind. Dies bedeutet, daß wir es mit der linearen Form der Wärmeleitungsgleichung als mathematisches Modell zu tun haben.
Eine weitere Näherung, die wir an dieser Stelle vornehmen wollen, betrifft die

Anregungsfunktion. Gruss [14] zeigte, daß die durch den Chopper hervorgerufene Unterbrechung hinreichend gut durch die Rechteckfunktion approximiert werden kann. Dort ist auch der Fall von Proben, die sich mit einer konstanten Geschwindigkeit bewegen untersucht worden. Bis zu einer bestimmten Geschwindigkeit können Effekte durch Bewegung vernachlässigt werden, was wir im folgenden auch tun werden.

Als Nachweis für die hier eingeführten Vereinfachungen und Approximationen zeigt die Abbildung (1.2) das Amplitudenspektrum des Photothermischen Signals einer Probe. Wenn der Prozeß der Wärmeausbreitung linear ist, und die Anregung durch eine Rechteckfunktion angenähert werden kann, und die Temperaturschwankungen so gering sind, daß die Strahlungsleistung proportional der Temperatur ist, dann hat das Photothermische Signal eine von Null verschiedene Amplitude nur für ungerade Vielfache der Chopper-Frequenz. Denn dies gilt für die Rechteck-Anregung, und wegen der Linearität der Wärmeleitungsgleichung muß dies auch für die Temperatur und letztlich auch für die emittierte Strahlung gelten. Verbleibende Unregelmäßigkeiten sind unter anderem auf die unregelmäßige Anregung durch den mechanischen Chopper zurückzuführen, dessen Segmentgöße um bis zu 3% variiert. Man sieht insbesondere an der regelmäßigen Verteilung der Phasenwerten (1.3), daß die Daten zu geradzahligen Vielfachen der Chopperfrequenz nicht bloß Rauschen beinhalten. Doch ist der Anteil der geradzahligen harmonische Schwingungen an der Gesamtenergie sehr gering, so beträgt die Amplitude der zweiten Harmonischen etwa 3% der Amplitude der Grundschwingung, so daß die angeführten vereinfachenden Annahmen gerechtfertigt sind.

Kapitel 2

Mathematische Modellierung und Signalanalyse

Nachdem die Durchführung der Messung, und die ersten vereinfachenden Annahmen vorgestellt wurden, arbeiten wir nun weiter an der Modellierung und an der Verarbeitung der Meßdaten. Das Ziel ist es, Modelle zu entwickeln, die gut der physikalischen Wirklichkeit entsprechen, und die darüberhinaus auch mit den Meßdaten verglichen werden können. Das bedeutet, daß bei der Modellbildung und insbesondere bei der Signalanalyse die Einschränkungen, die durch die industrielle Anwendung auftreten, berücksichtigt werden müssen. Einen sehr guten Einstieg in das Thema Modellierung bietet die Dissertation von Werner Karpen [16], auf die ein wesentlicher Teil dieses Kapitels zurückgeht. Weitere aktuelle Ansätze zur Modellierung von Mehrschichtsystemen finden sich bei Glorieux u. a. [10], Garcia u. a. [9], [8] und Karabutinov u. a. [15]

2.1 Absorption, Ausbreitung und Detektion thermischer Wellen

Wir sehen im Moment ab von der Entstehung und Messung des Photothermischen Signals und wenden uns der Wärmeausbreitung im Objekt zu. Unter Objekt verstehen wir eine oder mehrere auf Metall aufgebrachte Lackschichten. Wobei viele der folgenden Aussagen auf den allgemeinen Fall eines Festkörpers zutreffen. Die Ausbreitung der Wärme wird beschrieben durch die Wärmeleitungsgleichung

$$\nabla\left[k(u)\nabla T(u,t)\right] - \rho(u)c(u)\frac{\partial}{\partial t}T(u,t) = -Q(u,t) \tag{2.1}$$

Mit der ortsabhängigen Wärmeleitfähigkeit $k(u)$, der spezifischen Dichte $\rho(u)$ und der spezifischen Wärmekapazität $c(u)$, $u \in \mathbb{R}^3$. Der Quellterm $Q(u,t)$ beschreibt die räumliche und zeitliche Verteilung von Wärmequellen.

Wir treffen an dieser Stelle eine wichtige Vereinbarung, die für den Rest dieser Arbeit Gültigkeit haben soll, nämlich

$$f(\omega) := \mathcal{F}(f)(\omega),$$

daß das Auftreten der Variablen ω statt t bedeutet, daß diese Funktion fouriertransformiert und ausgewertet wird zur Frequenz ω. Dies ist sinnvoll da alle weiteren Rechnungen im Fourier Raum durchgeführt werden. Weiterhin wird vereinbart daß die Fourier-Transformierten von T und Q bezüglich der Zeit existieren sollen. Ausgangspunkt ist die Betrachtung einer periodischen Erwärmung mit der Anregungsfrequenz (auch als Chopperfrequenz bezeichnet) $\omega_0 = 2\pi f_0$:

$$Q(u,t) = Q(u) \cdot e^{i\omega_0 t}$$

Mit der Linearität der Gleichung (2.1) ergibt sich eine Temperatur

$$T(u,t) = T(u) \cdot e^{i\omega t}$$

mit der gleichen Periodizität wie die Anregung. Damit läßt sich Gleichung (2.1) schreiben

$$\nabla \left[k(u)\nabla T(u)\right] - i\omega\rho(u)c(u)T(u) = -Q(u) \tag{2.2}$$

Typischerweise ist das Objekt durch eine ebene Fläche ($u_1 - u_2$ Ebene) von der umgebenden Luft abgegrenzt. Auf dieser Fläche trifft der Laserstrahl auf und bringt durch sein gaußförmiges Intensitätsprofil eine Wärmequelle ein:

$$Q(u) = Q(u_3)\exp\left(-\frac{u_1^2 + u_2^2}{2R_S^2}\right)$$

Mit der Breite R_S des Gaussprofils. Die Tiefenabhängigkeit in u_3 ergibt sich durch das Absorptionsverhalten der Probe. Ein einfacher Ansatz folgt dem Lambert-Beer Gesetz

$$Q(u_3) = Q_0\beta_a \exp(-\beta_a u_3)$$

Der Kehrwert $1/\beta_a$ wird als optische Eindringtiefe bezeichnet. Die optischen Eigenschaften der Probe sind allgemein auch als ortsabhängig anzusehen. Bei der hier vorgestellten Methode berücksichtigen wir dies jedoch nicht, da bei den zu untersuchenden Proben von einer Ortsabhängigkeit abgesehen werden kann.

Eine weitere Annahme vervollständigt die Forderungen, die wir an die Probe stellen. Sie ist die stärkste Einschränkung, betrifft aber den in der Praxis häufigsten Fall: Wir nehmen an, das Objekt sei schichtstrukturiert, das heißt alle thermophysikalischen Parameter hängen nur von der Tiefe u_3 ab. Die Strahlung, die vom Objekt Ω ausgeht und vom Infrarotdetektor erfaßt wird, ist proportional zu dem gewichteten Tiefenintegral [17]:

$$\int_\Omega e^{-\beta_{IR} u_3} T(u,\omega)\, du$$

Das Detektorsignal wird näherungsweise durch die Proportionaliät

$$S(\omega) \sim \int_\Omega D(u) e^{-\beta_{IR} u_3} T(u,\omega) du$$

beschrieben. Die Detektorfunktion $D(u)$ gibt an, welcher Anteil der von einem Volumenelement am Ort u ausgehenden Infrarorstrahlung zum Detektor gelangt. D wird durch ein Gaussprofil der Breite R_D, dem sogenanten Detektorfokus, approximiert. Es wird im folgenden knapp dargestellt, daß S proportional der Lösung der eindimensionalen Variante der Wärmeleitungsgleichung ist, wenn bestimmte Voraussetzungen erfüllt sind. Die Proportionaliät zur eindimensionalen Lösung genügt uns an dieser Stelle, denn, wie sich später herausstellen wird, können wir konstante Faktoren durch Normierung des Detektorsignals eliminieren.

Wir folgen der Argumentation von Karpen [16]: Der erste Schritt besteht darin, die Gleichung (2.1) in Polarkoordinaten (r,x) zu transformieren:

$$\begin{aligned} \frac{k(x)}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{T(r,x)}{\partial r}\right) &+ k(x)\frac{\partial^2 T(r,x)}{\partial x^2} + \frac{\partial k(x)}{\partial x}\frac{\partial T(r,x)}{\partial x} - i\omega\rho(x)c(x)T(r,x) \\ &= Q_0\beta_a e^{-\beta_a x} e^{-r^2/(2R_S^2)} \end{aligned}$$

Anwendung der Hankel Transformation bezüglich r ergibt [24]

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[k(x)\frac{\partial}{\partial x}\widetilde{T}(p,x)\right] - \widetilde{\sigma}^2\widetilde{T}(p,x) = \widetilde{Q}, \tag{2.3}$$

mit

$$\begin{aligned} \widetilde{\sigma} &= \sqrt{(2\pi^2 p^2 k(x) + i\omega\rho(x)c(x))}, \\ \widetilde{Q} &= Q_0\beta_a e^{-\beta_a x} 2\pi R_S^2 e^{-2\pi^2 p^2 R_S^2}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir eine Lösung für den dreidimensionalen Fall indem wir die eindimensionale Gleichung (2.3) für alle p lösen. Inverse Hankeltransformation von $\widetilde{T}(p,x)$ liefert eine Darstellung in euklidischen Koordinaten. Wir gehen aber weiter und betrachten das Detektorsignal

$$\begin{aligned} S(\omega) &\sim \int_0^\infty \left(\int_0^\infty 2\pi r e^{-r^2/(2R_D^2)} T(r,x) dr\right) \beta_{IR} e^{-\beta_{IR} x} dx \\ &= \int_0^\infty \left(\int_0^\infty 2\pi r e^{-r^2/(2R_D^2)} \left[\int_0^\infty 2\pi p \widetilde{T}(p,x) J_0(2\pi p r) dp\right] dr\right) \beta_{IR} e^{-\beta_{IR} x} dx \\ &\sim \int_0^\infty \left(\int_0^\infty \widetilde{T}(p,x) e^{-\beta_{IR} x} \underbrace{\left[\int_0^\infty r e^{-r^2/(2R_D^2)} J_0(2\pi p r) dr\right]}_{2\pi R_D^2 \exp(-2\pi^2 R_D^2 p^2)} dx\right) p\, dp \\ &\sim \int_0^\infty \underbrace{\left(\int_0^\infty \widetilde{T}(p,x) e^{-\beta_{IR} x} dx\right)}_{:=\widetilde{P}(p)} p\, e^{-2\pi^2 R_D^2 p^2}\, dp. \end{aligned}$$

Karpen setzt an dieser Stelle für $\widetilde{T}(p,x)$ die Temperaturverteilung in einem schichtstrukturierten Objekt ein, und rechnet nach, daß das Detektorsignal

$$S(\omega) \sim \widetilde{T}(0,x) \tag{2.4}$$

falls der Gesamtradius $R_D + R_S$ wesentlich größer als die thermische Eindringtiefe $\mu = \sqrt{\omega\rho c/k}$ ist. Und das bedeutet, daß das Detektorsignal näherungsweise proportional der Lösung des eindimensionalen Problems ist. Weitere Details hierzu finden sich in [16].

2.2 Schichtstrukturierte Materialien

Wir beschränken uns nun auf den eindimensionalen Fall. Lösungen der Gleichung (2.1) im Falle schichtstrukturierter Objekte sind im eindimensionalen Fall Lösungen für den zusammengesetzten Stab, der in ein unbeschränktes Medium eingebettet ist. Wir formulieren das Problem

Problem 2.2.1 *Sei* $I = [0, L_{ges}]$ *ein Intervall in* $\mathbb{R}$ *mit einer Unterteilung in* N *Teilintervalle* $I_j = [x_j, x_{j+1}], j = 0, \ldots, N-1$, $x_j < x_{j+1}$ *mit den Längen* $L_j = x_{j+1} - x_j$.
Die Funktionen $k, \rho, c : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *seien konstant innerhalb der Intervalle* I_j *und* $Q(x,t) : I \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ *sei stetig in* x *und periodisch in* t *jeweils auf den Teilintervallen* $I_j, j = 0...N-1$.
Gesucht sind Lösungen der Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x}(k(x)\frac{\partial}{\partial x}T(x,t)) - \rho(x)c(x)\frac{\partial}{\partial t}T(x,t) = -Q(x,t) \tag{2.5}$$

zu den Bedingungen

1. *Die Lösung* T *ist stetig in* x.

2. *Der thermische Fluß*

   $$k(x)\frac{\partial T}{\partial x}(x,t)$$

   ist stetig in x.

3. *Für die Temperatur gilt*

   $$\lim_{x\to\infty} T(x,t) = 0.$$

für alle $t, x > 0$.

Wir betrachten die Einschränkung des Problems (2.2.1) auf die einzelnen Teilintervalle. Dort sind die thermischen Materialeigenschaften konstant; das Wärmeleitungsproblem vereinfacht sich entsprechend.

Satz 2.2.2 *Sei $\omega > 0$ beliebig aber fest. $Q_0, Q_1 \in \mathbb{C}$, $k_0, k_1 > 0$.*

1. *Gegeben sei die homogene Differentialgleichung*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x,\omega) - \sigma^2 T(x,\omega) = 0, \tag{2.6}$$

mit $x \geq 0$. Sei $Q_0 \in \mathbb{C}$ und es gelten die Bedingungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T(x,\omega)|_{x=0} &= -\frac{Q_0}{k_0}, \\ \lim_{x\to\infty} T(x,\omega) &= 0. \end{aligned}$$

Dann hat die Gleichung (2.6) die eindeutige Lösung

$$T(x,\omega) = \frac{Q_0}{\sigma k_0} \exp(-\sigma x). \tag{2.7}$$

2. *Gegeben sei die inhomogene Differentialgleichung*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x,\omega) - \sigma^2 T(x,\omega) = -\beta \frac{Q_0}{k_0} \exp(-\beta x), \tag{2.8}$$

mit $x \geq 0$. Sei $Q_0 \in \mathbb{C}$ und es gelten die Bedingungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T(x,\omega)|_{x=0} &= 0, \\ \lim_{x\to\infty} T(x,\omega) &= 0. \end{aligned}$$

Dann hat die Gleichung (2.8) die eindeutige Lösung

$$T(x,\omega) = A\, e^{-\sigma x} + C\, e^{-\beta x}, \tag{2.9}$$

mit

$$\begin{aligned} C &= \frac{\beta Q_0}{k_0(\sigma^2 - \beta^2)}, \\ A &= -\frac{\beta}{\sigma} C. \end{aligned}$$

3. *Die homogene Differentialgleichung (2.6) mit $0 \leq x \leq L$ zu den Randbedingungen*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T(x,\omega)|_{x=0} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} T(x,\omega)|_{x=L} &= -\frac{Q_1}{k_1}, \end{aligned}$$

hat die eindeutige Lösung

$$T(x,\omega) = A\,e^{-\sigma x} + B\,e^{\sigma x}, \tag{2.10}$$

mit

$$\begin{aligned} A &= -\frac{\frac{Q_1}{\sigma k_1}e^{-\sigma L}}{1+e^{-2\sigma L}}, \\ B &= -A. \end{aligned}$$

4. *Die inhomogene Differentialgleichung (2.8) mit $0 \leq x \leq L$ zu den Randbedingungen*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}T(x,\omega)|_{x=0} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial x}T(x,\omega)|_{x=L} &= -\frac{Q_1}{k_1}, \end{aligned}$$

hat die eindeutige Lösung

$$T(x,\omega) = A\,e^{-\sigma x} + B\,e^{\sigma x} + C\,e^{-\beta x}, \tag{2.11}$$

mit

$$\begin{aligned} C &= -\frac{\beta Q_0}{k_0(\beta^2-\sigma^2)}, \\ A &= \frac{1}{1-e^{-2\sigma L}}\left[-\frac{Q_1}{k_1\sigma}e^{-\sigma L}, -\frac{\beta}{\sigma}C\left(1-e^{-(\beta+\sigma):}\right)\right], \\ B &= A + \frac{\beta}{\sigma}C. \end{aligned}$$

Beweis: Für festes ω haben wir es nur noch mit einer gewöhnlichen linearen Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten zu tun. Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen sind damit gegeben, bzw. nur noch von den Randbedingungen abhängig. Lösungen ergeben sich mittels Ansatz

$$T(x,\omega) = A\,e^{-\sigma x} + B\,e^{\sigma x} + C\,e^{-\beta x}. \tag{2.12}$$

Die Variable C ist nur im inhomogenen Fall verschieden von Null. Unabhängig von den Randbedingungen ergibt sich C durch Einsetzen von (2.12) in die Differentialgleichung (2.8). Die Variablen A und B sind durch die jeweiligen Randbedingungen bestimmt. ∎

Die vier Fälle aus Satz (2.2.2) beschreiben alle im weiteren betrachten Modelle für die Wärmeausbreitung in den einzelnen Schichten. Die homogenen Differentialgleichungen modellieren den Fall der Oberfächenabsorption, bei dem im Innern

des Objektes keine von Null verschiedenen Quellterme auftreten. Die eingebrachte Energie wird als vorgeschriebener thermischer Fluß an der Oberfläche modelliert. Betrachtet wird der unendlich ausgedehnte Stab, der als Modell für das Substrat herangezogen werden kann, wenn die Substratdicke entsprechend groß ist, und der Stab der Länge L, der als Modell für die einzelnen Lackschichten dient.
Die beiden Fälle mit Quellterm entsprechen der Situation, daß der Laserstrahl innerhalb der Probe absorbiert wird. Dabei wird angenommen, daß es nicht zu optischer Reflexion - zum Beispiel am Übergang Lack-Substrat - kommt, also die Energie bereits zum überwiegenden Teil oberflächennah absorbiert wurde. Die Modellierung von Reflexion kann gegebenenfalls analog obiger Beweisidee hergeleitet werden.
An dieser Stelle müssen wir etwas vorwegnehmen, was sich erst in der Praxis herausgestellt hat: Es war anhand der gegebenen Daten nicht möglich bzw. sinnvoll verschiedene Absorptionskoeffizienten für jede Schicht zuzulassen. Wir gehen daher in unserem Modell vereinfachend davon aus, daß alle oberen Schichten den gleichen Absorptionskoeffizienten β aufweisen. und daß das Substrat nicht absobiert. Kommen wir nun zum Ausgangsproblem (2.2.1) zurück und betrachten wir das gekoppelte System aufeinanderliegender Schichten, die jeweils konstante physikalische Parameter vorweisen. Es werden lokale Variablen für jede Schicht wie folgt eingeführt:

$$\begin{aligned} \pi(x) &:= \max_{0\le j\le N-1} x_j \le x \\ T(x) &=: T_{\pi(x)}(x - x_{\pi(x)}) \\ T_j(x) &= A_j\, e^{-\sigma_j x} + B_j\, e^{\sigma_j x} + C_j\, e^{-\beta x} \end{aligned}$$

mit $x_0 = 0$ und $T_j(x)$, $0 \le x \le L_j$ erfülle

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T_j(x) - \sigma^2 T(x) = -\beta q_j \exp(-\beta x)$$

und

$$q_j = \frac{Q_0}{k_j} \exp(-\beta x_j)$$

Durch diese lokalen Variablen ersparen wir uns die im folgenden umständlich wirkenden Umrechnungen der Ortsvariable, die nun lokal innerhalb jeder Schicht von 0 bis L_j, der jeweiligen Schichtdicke läuft. Weitere Vereinfachung der Notation erreichen wir durch Auslassen des Argumentes ω, das bis auf weiteres als fest angenommen werden kann.

Wir suchen eine stetige Lösung im Sinne von Problemstellung (2.2.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} T_0(0) &= \frac{\partial}{\partial x} T_{N-1}(L_{N-1}) = 0, && (2.13) \\ T_j(L_j) &= T_{j+1}(0), && (2.14) \\ k_j \frac{\partial}{\partial x} T_j(L_j) &= k_{j+1} \frac{\partial}{\partial x} T_{j+1}(0), && (2.15) \end{aligned}$$

$j = 0, \ldots, N-2$. Dabei wurden die Übergänge vom Objekt zur Umgebung als isolierend angenommen (2.13). Soll der Wärmefluß in die umgebende Luft berücksichtigt werden, so kann dies geschehen, indem die Umgebung als unbegrenzter Festkörper mit der thermischen Konduktivität der Luft angesetzt wird.

Die Temperaturverteilung T_j in den einzelnen Schichten erfüllt die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T_j(x) - \sigma^2 T_j(x) = -\beta exp(-\beta x) q_j,$$

mit der Quellverteilung

$$q_j = q_1 e^{-\beta x_{j-1}}.$$

Die Gleichungen (2.13-2.15) ergeben insgesamt ein lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten A_j und B_j, $j = 0, \ldots, N-1$

$$\begin{aligned}
-\sigma_0 A_0 + \sigma_0 B_0 &= \beta C_0, \\
-k_j \sigma_j (e^{-\sigma_j L_j} A_j - e^{\sigma_j L_j} B_j) + k_{j+1}\sigma_{j+1}(A_{j+1} - B_{j+1}) &= \beta \left(k_j C_j e^{-\beta L_j} - k_{j+1} C_{j+1} \right), \\
e^{-\sigma_j L_j} A_j + e^{\sigma_j L_j} B_j - A_{j+1} - B_{j+1} &= C_{j+1} - C_j e^{-\beta L_j}, \\
-\sigma_{N-1} e^{-\sigma_{N-1} LN-1} A_{N-1} + \sigma_{N-1} e^{\sigma_{N-1} LN-1} B_{N-1} &= \beta C_{N-1} e^{-\beta L},
\end{aligned}$$

mit $j = 1, ..., N-2$. Mit den folgenden Rechnungen leiten wir eine geschlossene Lösung des Gleichungssystems her. Wir formen die letzte Gleichung um zu

$$E_{N-1} A_{N-1} + B_{N-1} = F_{N-1}, \tag{2.16}$$

mit

$$\begin{aligned}
E_{N-1} &= -\exp(-2\sigma_{N-1} L_{N-1}), \\
F_{N-1} &= \left[\beta C_{N-1} e^{-\beta L_{N-1}} \right] \sigma_{N-1}^{-1} e^{-\sigma_{N-1} L_{N-1}} \\
&= \left[\beta q_{N-1} \frac{\beta}{\sigma_{N-1}^2 - \beta^2} e^{-\beta L_{N-1}} \right] \sigma_{N-1}^{-1} e^{-\sigma_{N-1} L_{N-1}} \\
&= \sigma_{N-1}^{-1} \left[\frac{1}{(\frac{\sigma_{N-1}}{\beta})^2 - 1} q_{N-1} e^{-\sigma_{N-1} L_{N-1}} \right] e^{-\beta L_{N-1}} \\
&= \sigma_{N-1}^{-1} \left[\frac{1}{(\frac{\sigma_{N-1}}{\beta})^2 - 1} q_1 e^{-\beta x_{N-2}} e^{-\beta_{N-1} L_{N-1}} \right] e^{-\sigma L_{N-1}} \\
&= \frac{q_1}{\sigma_{N-1}} \frac{1}{(\frac{\sigma_{N-1}}{\beta})^2 - 1} e^{-\beta x_{N-1} - \sigma_{N-1} L_{N-1}}.
\end{aligned}$$

Weiterhin haben wir

$$\begin{aligned}
-s_j A_j e^{-\sigma_j L_j} + s_j B_j e^{\sigma_j L_j} + A_{j+1} - B_{j+1} &= G_j, && (2.17) \\
A_j e^{-\sigma_j L_j} + B_j e^{\sigma_j L_j} - A_{j+1} - B_{j+1} &= H_j, && (2.18) \\
E_{j+1} A_{j+1} + B_{j+1} &= F_{j+1}, && (2.19)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} s_j &= \frac{k_j\sigma_j}{k_{j+1}\sigma_{j+1}} = \frac{1+R_j}{1-R_j}, \\ G_j &= \beta\frac{k_jC_je^{-\beta L_j} - k_{j+1}C_{j+1}}{k_{j+1}\sigma_{j+1}}, \\ H_j &= C_{j+1} - C_je^{-\beta L_j}. \end{aligned}$$

Die Variable R_j bezeichnet die bedeutsame Größe des Effusivitätskontrastes

$$R_j = \frac{e_{j-1} - e_j}{e_{j-1} + e_j}.$$

Es gilt $-1 \leq R_j \leq 1$, ein Effusifitätskontrast von 0 liegt zwischen Schichten gleicher Effusivität vor, und ein Effusivitätskontrast von 1 weist auf den Übergang zu einem Isolator hin.

Auflösen der Gleichungen (2.17-2.19) ergibt zusammen mit (2.16) eine rekursive Formel zur Bestimmung der gesuchten Koeffizienten A_j nud B_j

$$E_jA_j + B_j = F_j,$$

wobei

$$\begin{aligned} E_j &= \frac{\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}} - s_j}{\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}} + s_j}e^{-2\sigma_j L} = -\frac{1 - \frac{1+R_j}{1-R_j}\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}}}{1 + \frac{1+R_j}{1-R_j}\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}}}e^{-2\sigma_j L}, \\ F_j &= \frac{F_{j+1}\left(1 + \frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}}\right) - C_j\left(1 - \frac{\beta}{\sigma_j}\frac{1+R_j}{1-R_j}\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}}\right)e^{-\beta L_j} + C_{j+1}\left(1 - \frac{\beta}{\sigma_{j+1}}\right)}{1 + \frac{1+R_j}{1-R_j}\frac{1-E_{j+1}}{1+E_{j+1}}}e^{-\sigma_j L_j}. \end{aligned}$$

Bemerkung 2.2.3 Wir interessieren uns im Falle der Oberflächendetektion für die Temperatur an der Oberfläche, die nun in eine recht einfache Darstellung hat

$$T(0) = A_1 + B_1 + C_1 = 2A_1 + (1 + \beta/\sigma_1)C_1 \tag{2.20}$$

$$= \frac{\beta}{\sigma_1}C_1\left[1 + \frac{\sigma_1}{\beta} - 2\frac{1 - \frac{\sigma_1}{\beta}\frac{F_1}{C_1}}{1 + E_1}\right]. \tag{2.21}$$

Bemerkung 2.2.4 Bei der numerischen Auswertung dieses Ausdruckes (2.20) für die Oberflächentemperatur sind die folgenden Terme zu berechnen

$$\begin{aligned} \frac{F_{N-1}}{C_1} &= \frac{\frac{q_1}{\sigma_1}\frac{1}{(\frac{\sigma_{N-1}}{\beta})^2-1}e^{-\beta_{N-1}x_{N-1}-\sigma_{N-1}L_{N-1}}}{\frac{q_1}{\beta}\frac{1}{(\frac{\sigma_1}{\beta})^2-1}} \\ &= \frac{\beta}{\sigma_{N-1}}\frac{(\frac{\sigma_1}{\beta})^2 - 1}{(\frac{\sigma_{N-1}}{\beta})^2 - 1}e^{-\beta_{N-1}x_{N-1}-\sigma_{N-1}L_{N-1}}, \\ \frac{C_j}{C_1} &= \frac{(\frac{\sigma_1}{\beta})^2 - 1}{(\frac{\sigma_j}{\beta})^2 - 1}e^{-\beta x_{j-1}}. \end{aligned}$$

Betrachten wir die freien Parameter in diesen Ausdrücken, so fällt auf, daß pro Schicht derer nur zwei vorliegen, die dritte läßt sich nämlich aus den beiden anderen berechnen

$$\beta L_j = \left[\frac{\beta}{\sigma_j}\right] \cdot [\sigma_j L_j], \tag{2.22}$$

bzw. unter Ausnutzung von $\sigma_j = (1+i)\sqrt{\omega/2\alpha_j}$

$$\beta L_j = \left[\beta\sqrt{\alpha_j}\right] \cdot \left[\frac{L_j}{\sqrt{\alpha_j}}\right]. \tag{2.23}$$

2.3 Signalanalyse: Simultane Kalibrierung

Das Ziel der der Auswertung des Zeitsignals (s. Abb. 1.1) ist es, Informationen zu extrahieren, die es ermöglichen die freien Parameter (2.22) mit einem Verfahren zur nichtlinearen Optimierung zu bestimmen. Eine besondere Anforderung an das Verfahren ist durch die Forderung der industriellen Verwendbarkeit des Vorgehens bestimmt. Optimal wäre eine Aufbereitung des Signals, deren Ergebnis nur von von der Schichtdicke des Lackes beeinflußt wird. Die Einflußgrössen die aber zumindest übrig bleiben sind die thermophysikalischen Parameter (2.22), sowie ein Geräteparameter K, der alle Effekte zusammenfaßt, die durch die Meßapparatur eingebracht werden, also

1. Spektrum der Detektivität des Detektors.
2. Absorptionsspektrum der Probe.
3. Wellenlänge des eingestrahlten Laserlichtes.
4. Maximum der absorbierten Energie.
5. Einfluß von Linsen.
6. Eigenschaften der eingesetzten Elektronik.
7. Langfristige Änderungen der Hintergundstrahlung.

Wir nehmen an, daß K nicht, oder vernachlässigbar wenig von der Abstastfrequenz abhängig ist. Gegebenenfalls muß die Abhängigkeit von der Frequenz mit einer Kalibriermessung bestimmt werden. Wir rufen uns in Erinnerung, daß das Detektorsignal S über

$$S(\omega) = K\,\beta_{IR}\int_0^L \exp(-\beta_{IR}\,x)T(x,\omega)dx$$

bestimmt ist [17]. In vielen photothermischen und photoakustischen Anwendungen wird das Detektorsignal S mit einem Refenzsignal $S_r(\omega)$ normiert. Diese Normierung erfolgt durch Division der komplexen Zahlen S und S_r:

$$\frac{S(\omega)}{S_r(\omega)} = \frac{K q_0 \beta_a \beta_{IR} \int\limits_0^L \exp(-\beta_{IR} x) \frac{T(x,\omega)}{q_0 \beta} dx}{K q_{0,r} \beta_{a,r} \beta_{IR,r} \int\limits_0^L \exp(-\beta_{IR,r} x) \frac{T(x,\omega)}{q_{0,r} \beta_r} dx} \tag{2.24}$$

Die Normierung (2.24) hat den Effekt, daß der Faktor K sich herauskürzt, solange sich keine Änderungen am experimentellen Aufbau ergeben. Die Faktoren $q_0\beta$ und $q_{0,r}\beta$, die sich aus dem Term für die Temperatur im Objekt (2.20) ausklammern lassen, und β_a, β_{IR} küzen sich jedoch nicht heraus, denn die absorbierte Energie und der Emissionskoeffizient sind für Probe und Referenzprobe im allgemeinen unterschiedlich. Das bedeutet, daß die normierten Daten lediglich quantitativ sind, solange keine Kalibrieung durchgeführt wird zur Bestimmung des Parameters $q_0\beta\beta_{IR}/q_{0,r}\beta_r\beta_{IR,r}$. In manchen Anwendungen, bei denen es zum Beispiel um die Bestimmumg des Absorptionskoeffizienten [9] geht, ist dieser Effekt sehr hilfreich. Aber im unserem Falle wirkt er sich nachteilig aus, denn es gibt so einen weiteren unbekannten Parameter zu bestimmen, der zudem stark von Umgebungsbedingungen beeinflußt wird.

Ein alternativer Weg zur Normierung des Meßsignals beruht auf einer multiharmonischen Anregung (mehrere Frequenzen gleichzeitig), die ein multi - harmonisches Detektorsignal zur Folge hat. Dieser Ansatz erlaubt es uns, einen Frequenzanteil des Detektorsignals als Referenz zu nutzen, und einen anderen, oder auch alle anderen als Informationsträger [6]. Erinnern wir uns an die Fourierentwicklung einer Rechteckanregung der Periode π:

$$\mathrm{square}(t) = \frac{4}{\pi}\left(\sin(t) + \frac{\sin(3t)}{3} + \frac{\sin(5t)}{5} + \dots\right)$$

Es liegt also im Falle der Verwendung eines Choppers eine multi-harmonische Anregung vor. Wir wenden für diese spezielle Anregung die folgende Transformation auf die Meßdaten $S(t)$ an:

$$S(t) \rightarrow \widehat{S} = \left(\frac{S(\omega_0)}{3\sqrt{3}S(3\omega_0)}, \frac{S(\omega_0)}{5\sqrt{5}S(5\omega_0)}, \dots, \frac{S(\omega_0)}{(2n+1)^{3/2}S((2n+1)\omega_0)}, \dots\right)^T \tag{2.25}$$

Es sei noch ein mal darauf hingewiesen, daß $S(\omega)$ für die Fouriertransformierte von S ausgewertet zur Frequenz ω steht. Bei realen Anwendungen sind hochfrequente Anteile stärker verrauscht, so daß nur einige der Komponenten des Vektors $\widehat{S}$ genutzt werden können. Die Nenner $3, 5, ..., (2n-1), ...$ werden eingesetzt, um den geringeren Amplitudenlevel im Falle der Rechteckanregung auszugleichen. Die Zähler $\sqrt{2n+1}$ sind so gewählt, daß alle Einträge von $\widehat{S}$ eine Amplitude von eins und eine Phase von null haben für den halbunendlichen Festkörper mit Oberflächenabsorption und -emission. Die Einträge $\widehat{S}_n$ des Vektors $\widehat{S}$ sind:

$$\widehat{S}_n = \frac{(2n+1)^{-3/2} S(\omega_0)}{S((2n+1)\omega_0)} = (2n+1)^{-3/2} \frac{\int_0^L \exp(-\beta_{IR} x) T(x, \omega_0) dx}{\int_0^L \exp(-\beta_{IR} x) T(x, (2n+1)\omega_0) dx} \tag{2.26}$$

Im Gegensatz zu (2.24) haben wir nun den selben Faktor $\beta\beta_{IR}q_0$ in unserem Refenzsignal und in dem Informationsträgersignal, so daß $\beta\beta_{IR}q_0$ sich bei der Division (2.26) herauskürzt. Wir nennen die Abbildung $S(t) \to \widehat{S}$ *Simultane Kalibrierung* da Meßvorgang und Kalibriermessung in einem Experiment parallel durchgeführt werden. Verglichen mit der üblichen Form der Normierung per Referenzprobe ergeben sich einige wichtige Vorteile:

1. Unabhängigkeit von unerwünschten Einflüssen gemäß der Aufzählung zu Beginn des Abschnittes.

2. Bauteile des Meßapparates können ausgetauscht werden, ohne, daß davon das normierte Signal beeinflußt wird.

3. Langzeitänderung der Hintergundstrahlung haben nur in der Übergangsphase Auswirkungen auf das normierte Signal.

4. Verglichen mit Methoden, die nur die erste Harmonische als Informationsträger ausnutzen, stehen nun mit einer Messung Informationen zu mehreren Eindringtiefen zur Verfügung.

Kapitel 3

Praktische Anwendung: Lackschichtdickenbestimmung

Der Aufbau der Meßapparatur wird dargestellt in Abbildung (2). Es wird ein CO_2 Laser eingesetzt, dessen Ausgangsstrahl mit einem mechanischen Chopper moduliert wird. Der modulierte Strahl wird durch eine $ZnSe$ Linse fokussiert, so daß der Strahl den Spiegel durch ein kleines Loch in demselben passieren kann. Mit dieser Linse wird die Größe des Laserspots auf der Probe kontrolliert. Die Funktion des Spiegels besteht darin, die von der Probe ausgehende Infrarotstrahlung in Richtung des Detektors abzulenken. Eine weitere (CAFl) Linse dient der Fokussierung der Strahlung auf den $HgCdTe$ Detektor. Nachdem das Detektorsignal durch einen Vorverstärker aufbereitet wurde, erfaßt ein Computer mittels einer Analog-Digital Umwandlung mit einer Sampling Rate von 200 MHz das Signal als Zeitreihe.
Die Auswertung dieser Zeitreihe, die im Computer durchgeführt wird, liefert letztlich die Dicke der Lackschicht. Wegen der Sensitivität der Zeitreihe bezüglich vieler Einflußgrößen über die Lackschichtdicke hinaus (vgl. Kapitel zur Signalanalyse) ist das folgende Vorgehen zur Bestimmung der Lackschichtdicke in die industrielle Praxis übergegangen, es wird allgemein als Kalibrierverfahren bezeichnet:

- *Kalibrierungsmessung:* Mit einem bestimmten Meßgerät wird eine bestimmte Sorte Lack auf einem bestimmten Substrat vermessen: Zu mehreren Proben mit unterschiedlichen Lackschichtdicken werden Zeitreihen aufgenommen. Die Lackschichtdicken dieser Proben sind bekannt durch Messung mit anderen Methoden, zum Beispiel durch (nicht kontaktfreie) Ultraschallmessungen. Aus den Zeitreihen werden Phasenwerte ermittelt, und eine sogenannte Kalibrierkurve wird erstellt, bei der auf der x-Achse die Lackschichtdicken und auf der y-Achse die zugehörigen Phasenwerte aufgetragen werden. Die Punkte werden zu einer Kurve verbunden, oder eine Gerade approximiert ihren Verlauf.

- *Dickenmessung:* Eine Probe, bei der die Lackschichtdicke zu bestimmen ist, wird wie beim Kalibriervorgang vermessen und ein Phasenwert wird bestimmt. An der Kalibrierkurve kann nun - per Computerprogramm - die zugehörige Schichtdicke abgelesen und ausgegeben werden.

In der Praxis hat sich dieses Verfahren als sehr robust und industrietauglich erwiesen. Die erreichbare Genauigkeit liegt bei unter einem μm und ist damit ausreichend um die Qualitätskontrolle bei der Lackaufbringung durchzuführen, und darüberhinaus als Eingangsgößе für einen Regelkreises zu dienen, der die Aufsprühstärke kontrolliert.

3.1 Zielsetzung

Nachteile des beschriebenen Verfahrens ergeben sich nicht durch mangelnde Meßgenauigkeit oder mangelnde Stabilität, als vielmehr durch Nachteile, die allen Kalibriermethoden mehr oder weniger gemeinsam sind:

1. Die Durchführung von Kalibrierungen ist aufwendig. Es müssen entsprechende Proben hergestellt und vermessen werden. Je höher die angestrebte Genauigkeit und je größer der Meßbereich sein soll, desto mehr Kalibriermessungen müssen durchgeführt werden.

2. Wenn relevante Teile des Apparates ausgetauscht werden, müssen mit hoher Wahrscheinlichkeit alle bereits vorgenommenen Kalibrierungen erneut durchgeführt werden.

3. Das Verfahren bietet keinen Ansatz zur Weiterentwicklung, zum Beispiel für die Messung von mehreren übereinander aufgebrachten Schichten.

Die Zielsetzung der im folgenden vorgestellten Weiterentwicklung des Kalibrierverfahrens besteht in der Überwindung bzw. Abschwächung dieser Nachteile. Die Methoden, die hierzu eingesetzt werden sind einmal eine Parameteridentifizierung zur Bestimmung der Lackschichtdicke und anderer Größen. Das heißt wir finden uns damit ab, daß es mehrere Parameter gibt, die die Messungen beeinflußen, und die wir ebenfalls mitbestimmen müssen, auch wenn wir eigentlich nicht an ihnen interessiert sind. Und die zweite Methode betrifft die Signalverarbeitung, die vor der Parameteridentifizierung soweit möglich alle unerwünschten Einflüße aus dem Signal entfernt, gemeint ist *Simultane Kalibrierung*. Eine weitere praxisrelevante Zielsetzung ist die Vereinfachung der BEstimmung der optimalen Anregungsfrequenz für die Messung.

3.2 Sensitivitätsanforderungen an Modell und Daten

Voraussetzung für eine erfolgreiche, auch unter dem Einfluß von Störungen in den Meßdaten stabile Identifizierung von Parametern ist die Sensitivität der Daten bezüglich Änderungen der zu bestimmenden Parameter. Anders ausgedrückt, das Problem der Identifizierung eines Parameters sollte gut konditioniert sein. Besonders kompliziert ist die Lage im Falle thermischer Wellen. Diese haben nämlich eine von der Chopperfrequenz und vom Objekt selbst abhängige Eindringtiefe

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\omega}}.$$

Ist die Anregungsfrequenz zu klein oder zu groß, so liefern Proben mit unterschiedlichen Lackschichtdicken im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht unterscheidbare Meßdaten. Es liegt also keine Sensitivität bezüglich Änderungen des Parameters Lackschichtdicke vor. In Kapitel (4) werden wir uns eingehend mit der Frage der Wahl geeigneter Anregungsfrequenzen befassen. Für den Fall von geschichteten Proben Lack auf Metall kann anhand des Schichtmodelles (2.2.3) die optimale Anregungsfrequenz bestimmt werden, wenn die Parameter der Probe bereits bestimmt wurden. Hierzu diffenernzieren wir die Modellfunktion nach der Schichtdicke und bestimmen von dieser Ableitung das Betragsmaximum bezüglich der Anregungsfrequenz.
Durch die Signalaufbereitung mittels Simultaner Kalibrierung reduzieren wir die Anzahl der Parameter, die Einfluß auf das Signal haben. Es bleiben die thermophysikalischen und geometrischen Eigenschaften der Probe, die für die Ausbreitung der Wärme innerhalb der Probe verantwortlich sind, und die Parameter, die Emissions- und Absorptionseigenschaften der Probe beschreiben. Durch geeignete Wahl der Anregungsfrequenz, so hat die Praxis gezeigt, kann eine hinreichende Sensitivität der thermophysikalischen Parameter (2.22) typischer Proben erreicht werden. Eine besondere Problematik liegt allerdings bei den Parametern für die optische Absorptionskoeffizienten β_a und dem Infrarotemissionskoeffizient β_{IR} vor.

Wir betrachten eine Probe, bestehend aus einer Lackschicht auf einem metallischen Substrat. Wie in (2.2) kann die Temperaturverteilung

$$T(x) = A_0 \exp(-\sigma_0 x) + B_0 \exp(\sigma_0 x) + C_0 \exp(-\beta_a x)$$

hergeleitet werden mit

$$A_0 = -C_0 \frac{\beta_a}{\sigma_0} \frac{1 + \tilde{E}_0}{1 + E_0},$$

$$
\begin{aligned}
B_0 &= A_0 + \frac{\beta_a}{\sigma_0} C, \\
C_0 &= \frac{q_0 \beta_a}{\sigma_0^2 - \beta_a^2},
\end{aligned}
$$

wobei

$$
\begin{aligned}
\widetilde{E_0} &= \frac{\frac{\sigma_0}{\beta_a} - \frac{1+R_1}{1-R_1}\frac{1-E_1}{1+E_1}}{1 + \frac{1+R_1}{1-R_1}\frac{1-E_1}{1+E_1}} e^{-(\beta+\sigma_0)L_0}, \\
E_0 &= \frac{1 - \frac{1+R_1}{1-R_1}\frac{1-E_1}{1+E_1}}{1 + \frac{1+R_1}{1-R_1}\frac{1-E_1}{1+E_1}} e^{-2\sigma_0 L_0}.
\end{aligned}
$$

Das Detektorsignal ergibt sich (bis auf einen konstanten Faktor) als [17]

$$
\begin{aligned}
SD(\omega) &= \int_0^L e^{-\beta_{IR}} T(x,\omega)\, dx, \\
&= a_0 A_0 + b_0 B_0 + c_0 C_0,
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
a_0 &= \frac{1 - e^{-(\sigma_0+\beta_{IR})L_0}}{\sigma_0 + \beta_{IR}}, \\
b_0 &= -\frac{1 - e^{(\sigma_0-\beta_{IR})L_0}}{\sigma_0 - \beta_{IR}}, \\
c_0 &= \frac{1 - e^{-(\beta_a+\beta_{IR})L_0}}{\beta_a + \beta_{IR}}.
\end{aligned}
$$

Wir betrachten die beiden Fälle:

I: Oberflächenabsorption und Tiefenemission: $\beta_a \to \infty$

$$
\begin{aligned}
C\frac{\beta}{\sigma_0} &\to -\frac{Q_0}{\sigma_0}, && (3.1)\\
\widehat{E}_0 &\to 0, && (3.2)
\end{aligned}
$$

und demnach

$$
\begin{aligned}
A_0 &\to \frac{Q_0}{\sigma_0}\frac{1}{1+E_0}, && (3.3)\\
B_1 &\to -\frac{Q_0}{\sigma_0}\frac{E_0}{1+E_0}, && (3.4)\\
C &\to 0. && (3.5)
\end{aligned}
$$

Für das Detektorsignal erhalten wir

$$
\begin{aligned}
SD_I(\omega) &= a_0 \frac{q_0}{\sigma_0} \frac{1}{1+E_0} - b_0 \frac{q_0}{\sigma_0} \frac{E_0}{1+E_0} \\
&= \beta_{IR} \frac{1-e^{-(\sigma_0+\beta_{IR})L_0}}{\sigma_0+\beta_{IR}} \frac{q_0}{\sigma_0} \frac{1}{1+E_0} + \beta_{IR} \frac{1-e^{(\sigma_0-\beta_{IR})L_0}}{\sigma_0-\beta_{IR}} \frac{q_0}{\sigma_0} \frac{E_0}{1+E_0}, \\
&= \frac{q_0 \beta_{IR}}{\sigma_1(1+E_0)} \left(\frac{1-e^{-(\sigma_0+\beta_{IR})L_0}}{\sigma_1+\beta_{IR}} + \frac{1-e^{(\sigma_0-\beta_{IR})L_0}}{\sigma_0-\beta_{IR}} E_0 \right).
\end{aligned}
$$

II: Oberflächenemission und Tiefenabsorption, $\beta_{IR} \to \infty$: In diesem Fall gilt $a_0 = b_0 = c_0$ und

$$
\begin{aligned}
SD_{II}(\omega) &= T(0) \\
&= A_0 + B_0 + C_0 \\
&= A_0 + A_0 + \frac{\beta_a}{\sigma_0} C + C \\
&= C_0 \left[1 + \frac{\beta_a}{\sigma_0} - 2 \frac{\beta_a}{\sigma_0} \frac{1+\widetilde{E}_0}{1+E_0} \right] \\
&= \frac{C_0}{1+E_0} \left[\left(1 + \frac{\beta_a}{\sigma_0} \right) (1+E_0) - 2 \frac{\beta_a}{\sigma_0} \left(1 + \widetilde{E}_0 \right) \right] \\
&= \frac{C_0}{1+E_0} \left[\left(1 - \frac{\beta_a}{\sigma_0} \left(1 + 2\widetilde{E}_0 \right) \right) + \left(1 + \frac{\beta_a}{\sigma_0} \right) E_0 \right].
\end{aligned}
$$

Satz 3.2.1 *Sei $\beta_{IR} = \beta_a := \beta$. Dann ist $SD_I(\omega) = SD_{II}(\omega)$*

Beweis: Sei

$$F_0 = \frac{1+R_1}{1-R_1} \frac{1-E_1}{1+E_1}.$$

Dann gilt

$$
\begin{aligned}
\widetilde{E}_0 &= \frac{\frac{\sigma_0}{\beta} - F_0}{1+F_0} e^{-(\sigma_0+\beta)L_0} \\
&= \frac{1}{2} \frac{(\frac{\sigma_0}{\beta} - 1)(1+F_0) + (\frac{\sigma_0}{\beta} + 1)(1-F_0)}{1+F_0} e^{-(\sigma_0+\beta)L_0} \\
&= \frac{1}{2\beta} \left(\sigma_0 - \beta + (\sigma_0+\beta) \frac{1-F_0}{1+F_0} \right) e^{-(\sigma_0+\beta)L_0} \\
&= \frac{1}{2\beta} \left((\sigma_0-\beta) e^{-(\sigma_0+\beta)L_0} + (\sigma_0+\beta) e^{(\sigma_0-\beta)L_0} \frac{1-F_0}{1+F_0} e^{-2\sigma_0 L_0} \right) \\
&= \frac{1}{2\beta} \left((\sigma_0-\beta) e^{-(\sigma_0+\beta)L_0} + (\sigma_0+\beta) e^{(\sigma_0-\beta)L_0} E_0 \right).
\end{aligned}
$$

Einsetzen in (3.6) liefert

$$\begin{aligned}
SD_{II}(\omega) &= \frac{C}{1+E_0}\left[\left(1-\frac{\beta}{\sigma_0}\left(1+\frac{1}{\beta}\left((\sigma_0-\beta)e^{-(\sigma_0+\beta)L_0}+(\sigma_0+\beta)e^{(\sigma_0-\beta)L_0}E_0\right)\right)\right)+\right.\\
&\quad \left.\left(1+\frac{\beta}{\sigma_0}\right)E_0\right]\\
&= \frac{q_0\beta}{1+E_0}\frac{(\sigma_0-\beta)-(\sigma_0-\beta)e^{-(\sigma_0+\beta)L_0}-(\sigma_0+\beta)e^{(\sigma_0-\beta)L_0}E_0+(\sigma_0+\beta)E_0}{(\sigma_0+\beta)(\sigma_0-\beta)\sigma_0}\\
&= \frac{q_0\beta}{\sigma_0(1+E_0)}\left(\frac{1-e^{-(\sigma_0+\beta)L_0}}{\sigma_0+\beta}+\frac{1-e^{(\sigma_0-\beta)L_0}}{\sigma_0-\beta}E_0\right)\\
&= SD_I(\omega). \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

Bemerkung 3.2.2 Das bedeutet für den Fall der Zwei-Schicht-Probe: Wenn nur einer der Effekte Tiefenemission oder Tiefenabsorption vorliegt, und es sich um große Koeffizienten β handelt (geringe Eindringtiefe), so können wir anhand gestörter Meßdaten nicht unterscheiden, um welchen Fall es sich handelt. Darüberhinaus bedeutet dies, daß zumindest für große β und β_{IR} einer der Parameter den Effekt des anderen kompensieren kann. Die Bestimmung dieser beiden Parameter ist demnach ein schlecht konditioniertes Problem. Da wir nicht originär an der Bestimmung der Absorptions- und Emissionskoeffizienten interessiert sind, können wir in der Praxis mit dem vereinfachten Modell arbeiten, bei dem nur einer der beiden Effekte Tiefenabsorption bzw. -emission berücksichtigt wird.

Bemerkung 3.2.3 Die sensitiven Parameter, mit denen wir im folgenden Proben mit Schichtstruktur beschreiben wollen sind:

$\frac{1}{\beta\sqrt{\alpha}}$	thermo-optischer Absorptionskoeffizient,
$\frac{L}{\sqrt{\alpha}}$	thermische Schichtdicke,
R	Effusivitätskontrast zur nächsten Schicht.

Pro Schicht haben wir es mit diesen drei Parametern zu tun. Es genügt allerdings den thermo-optischen Absorptionskoeffizienten nur für die oberste Schicht zu bestimmen, wenn angenommen werden kann, daß die eingestrahlte Energie in der obersten Schicht absorbiert wird. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn es sich bei der zweiten Schicht um eine Metallschicht handelt. Für die tieferliegenden Schichten bleiben dann nur noch jeweils zwei Parameter zu bestimmen.

3.3 Technologische Umsetzung

Nachdem nun die Art und Weise der Datenerfassung und der damit verbundenen Problematik umrißen wurden, und die Normierung der Daten sowie die Modellbildung besprochen sind, bleibt noch die Frage zu klären, wie diese Kenntnisse nun zu einem neuen Meßverfahren zusammengeführt werden können. Hierzu benötigen wir noch einen zentralen Baustein: ein Optimierungsverfahren, das eingesetzt wird, um die freien Parameter so anzupassen, daß Meßdaten und Modell in einem optimalen Sinne zusammenpassen. Es wird dieser Vorgang oft als Multi-Parameter Fitting bezeichnet, wenn mehrere freie Parameter anzupassen sind. Ähnliche Ansätze finden sich auch in der Literatur, zumeist bei Verfahren zur Diffusivitätsbestimmung [28], [31], [35]. Alle Parameteridentifizierungen wurden mit dem Gauss-Newton Verfahren durchgeführt.

3.3.1 Kalibriervorgang

Es wird ein sogenannter Frequenzscan durchgeführt. Hierzu werden zu Anregungsfrequenzen in einem Intervall $[\omega_1, \omega_m]$ Meßdaten erfaßt und mittels Simultaner Kalibrierung (2.25) ausgewertet. Die Messungen werden an einer oder mehreren Proben Lack auf Metall, mit bekannten Lackschichtdicken aufgenommen. Anregungsfrequenzen werden verteilt (zum Beispiel) wie

$$\omega_j = \omega_1 + \sqrt{j-1}\,\frac{(\omega_m - \omega_1)}{\sqrt{m-1}}$$

um eine gleichmäßige Verteilung der thermischen Eindringtiefen zu erreichen. Ausdrücklich sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß eine solche Verteilung der Anregungsfrequenzen nicht erforderlich ist für eine erfolgreiche Parameteridentifizierung. Es handelt sich lediglich um eine besonders günstige Verteilung (siehe 4.3). Die Anzahl der Anregungsfrequenzen sollte möglichst groß gewählt werden, mindestens aber so viele Anregungsfrequenzen wie Parameter. Das Intervall in dem die Frequenzen liegen sollten ist von der jeweiligen Probe abhängig. Die maximale Anregungsfrequenz ω_m sollte so gewählt werden, daß weitere Erhöhung der Anregungsfrequenz keine Veränderung der Daten mehr hervorruft. Niedrige Anregungsfrequenzen entsprechen großen Eindringtiefen. Daten zu niederigen Frequenzen dienen der Erfassung der Parameter des Substrates. Die Daten zu hohen Frequenzen betreffen die Lackschicht.
Liegen die Daten S als Frequenzscan vor, werden sie entspechend (2.25) normiert

$$\widehat{S} = \left(\frac{S(\omega)}{3\sqrt{3}S(3\omega)}, \frac{S(\omega)}{5\sqrt{5}S(5\omega)}, ..., \frac{S(\omega)}{(2n+1)^{3/2}S((2n+1)\omega)}, ...\right)^T. \tag{3.6}$$

Ein Verfahren zur nichtlinearen Optimierung (z.B. Gauss-Newton) wird angewendet, um das folgende Funktional

$$\min_{x\in X} \left\| \begin{pmatrix} \widehat{S}_1(\omega_1) & - & \widehat{IR}_1(x_1,\ldots,x_q,\omega_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \widehat{S}_p(\omega_1) & - & \widehat{IR}_q(x_1,\ldots,x_q,\omega_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \widehat{S}_1(\omega_m) & - & \widehat{IR}_1(x_1,\ldots,x_q,\omega_m) \\ \vdots & & \vdots \\ \widehat{S}_p(\omega_m) & - & \widehat{IR}_q(x_1,\ldots,x_q,\omega_m) \end{pmatrix} \right\|_2^2 \tag{3.7}$$

zu minimieren. Wobei IR für die Modellfunktion steht, die numerisch ausgewertet wird. Gesucht sind die Parameter

$$x = \left(\frac{1}{\beta\sqrt{\alpha_0}}, \frac{L_0}{\sqrt{\alpha_0}}, R_1, \ldots\right)$$

aus der Menge X der physikalisch sinnvollen Parameter. Es handelt sich demnach um ein nichtlineares Minimierungs Problem mit Restriktion: Gesucht sind q Parameter aus der Menge X, die die ersten p Komponenten des Vektors $\widehat{S}$, die sich via Simultaner Kalibrierung aus den Meßdaten ergeben, in optimale Übereinstimmung bringen, mit den sich aus dem Mathematischen Modell (2.2.3) ergebenden Werten IR, die den Meßdaten entsprechend transformiert werden.
Weil die Lackschichtdicke(n) bei der Kalibriermessung bekannt sind, können wir nun die Diffusivität der Lackschicht

$$\alpha_1 = \left(\frac{1}{x_2 L_1}\right)^2$$

direkt bestimmen. Liegen Frequenzscans zu verschiedenen Proben mit gleichen Materialien, aber unterschiedlicher Lackdicken vor, so verlängert sich der Vektor (3.7) entspechend. Allerdings muß das Modell in diesem Fall so modifiziert werden, daß die Lackdicke als bekannte Eingangsgröße modelliert wird, und damit Parameter $x_2 = 1/\alpha_1$.
Liegen nun die Parameter nach erfolgreicher Berechnung vor, so haben wir damit sozusagen eine abstrakte Form einer Kalibrierkurve in der Hand. Eine Kalibrierkurve im üblichen Sinn erhalten wir durch Auswerten den Mathematischen Modelles zu verschiedenen Schichtdicken bei fester Anregungsfrequenz, und zwar jeweils eine für jede Komponente von $\widehat{S}$ die genutzt werden soll.

Bemerkung 3.3.1 Die Frage, welche Frequenz sich am besten als Anregungsfrequenz eignet, kann, wie bereits angemerkt wurde, durch Differenzieren der

Modellfunktion nach der Schichtdicke beantwortet werden, wenn die thermophysikalischen Parameter bereits vorliegen. Doch auch schon am Frequenzscan läßt sich die optimale Anregungsfrequenz ablesen.
Wir suchen die Frequenz, bei der die beste Sensitivität bezüglich Änderung der Schichtdicke vorliegt. Betrachten wir das Modell für ein Zweischichtsystem Lack auf Metall (2.2.3), so gilt für die Oberflächentemperatur und damit näherungsweise für das Infrarotsignal

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\omega}\sqrt{\omega}T(\omega,x=0,L) &\sim \frac{\partial}{\partial\omega}\sqrt{\omega}\frac{I}{\sigma_0 k_0}\left[1-2\left(1-\frac{1}{1+R_0e^{-2\sigma_0 L_0}}\right)\right] \\
&\sim \frac{-R\frac{1}{2\omega}\left(-2L(1+i)\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}\right)e^{-2\sigma_0 L_0}}{(1+Re^{-2\sigma_0 L_0})^2} \\
&= \frac{-L_0}{\omega}\frac{2\sigma_0 R_0 e^{-2\sigma_0 L_0}}{(1+Re^{-2\sigma_0 L_0})^2} \\
&= \frac{-L_0}{\omega}\frac{\partial}{\partial L}T(\omega,x=0)
\end{aligned}$$

Wir erhalten einen einfachen Zusammenhang zwischen der Sensitivität bezüglich der Anregungsfrequenz und bezüglich der Schichtdicke, der es erlaubt aus der numerisch bestimmbaren Ableitung des Detektorsignals bezüglich der Frequenz auf eine Approximation der Sensitivität bezüglich der Schichtdicke zu schließen. Die optimale Anregungsfrequenz ergibt sich durch Maximieren des Ausdruckes:

$$\max_{\omega}\left|\omega\frac{\partial}{\partial\omega}\left(\sqrt{\omega}\,IR(\omega)\right)\right| \tag{3.8}$$

3.3.2 Meßvorgang

Die Wahl der Anregungsfrequenz ist auch durch die erforderliche Meßgeschwindigkeit bestimmt. Bei höherer Frequenz ist die Dauer der Meßwertaufnahme geringer, das heißt daß auch andere Gesichtspunkte bei der Wahl der Anregungsfrequenz zu berücksichtigen sind als es die Forderung (3.8) nahelegt. Um das Signal zu Rauschen Verhältnis zu verbessern, werden möglichst viele Perioden des Zeitsignals aufgenommen. Die Fourierkoeffizienten werden durch Mittelung über die Perioden bestimmt. Beim zeitunkritischen Kalibriervorgang kann hier großzügig vorgegangen werden. Beim Meßvorgang, der etwa einmal pro Sekunde einen Schichtdickenwert liefern soll, sind vergleichsweise wenige Mittelungen möglich. Bei Anwendung der Simultanen Kalibrierung (2.25) als Normierungsverfahren werden höhere Harmonische des Zeitsignals ausgewertet, deren Signal zu Rauschen Verhältnis schlechter ist, als dasjenige der ersten Harmonischen. Während dies im Kalibriervorgang dadurch berücksichtigt werden kann, daß eine entsprechend gewichtete Norm anstelle der 2− Norm in (3.7) eingesetzt wird, ist beim Meßvorgang ein andere Methode erforderlich: In Anbetracht der Tatsache,

daß es darum geht eine mehr oder weniger konstante Schichtdicke zu messen und zu kontrollieren, ist ein Mittelungsalgorithmus sinnvoll, der entsprechend dem verschiedenen Signal zu Rauschen Verhältnis die Anzahl der Mittelungen für die höheren Harmonischen höher ansetzt.
Beim Meßvorgang werden Daten nur noch zu einer Anregungsrequenz aufgenommen. Es sind alle Parameter der Probe bekannt, lediglich die Lackschichtdicke darf variieren. Wo beim klassischen Kalibrierverfahren anhand einer Kalibrierkurve die Schichtdicke abgelesen wird, müssen wir nun eine nichtlineare Gleichung lösen, denn die Kalibrierkurve ist in Form der nichtlineare Modellfunktion gegeben. Es kann das Newton Verfahren eingesetzt werden, oder aber das Bisektionsverfahren, das wegen seiner Robustheit Vorteile bietet.

3.3.3 Single Sample Calibration

Es ist also möglich mit nur einer einzigen Probe, bei der die Lackschichtdicke bekannt ist, eine Kalibrierung der Meßvorrichtung durchzuführen. Dies wurde erst durch den Einsatz von Modellierung und Parameteridentifizierung möglich. Das klassische Kalibrierverfahren benötigt mindestens zwei Proben, die als Kalibrierkurve eine (weniger genaue) Gerade ergeben. Weiterhin können mehrere Kalibrierproben ausgewertet werden, die Anzahl der verschiedenen Proben verbessert die Approximationsqualität.
Neben der Möglichkeit mit nur einer Probe zu kalibrieren hat sich ein weiteres Einsatzgebiet ergeben, nämlich in dem Falle, daß die Dicke der zu vermessenden Proben durch die Dicke einer Referenzprobe festgelegt sein soll, aber diese Dicke nicht vorliegt. Dann kann nämlich die Abweichung der Schichtdicke einer anderen Probe von der Referenz quantitativ in % angegeben werden.

3.4 Numerische Ergebnisse

Der experimentelle Aufbau ist in den Abbildungen (1) und (2) dargestellt. Mit dieser Apparatur wurden sechs Proben vermessen. Die Proben unterscheiden sich nur in der Schichtdicke der obersten Lackschicht. Eine weitere Lackschicht, die als Haftgrund dient, und die Substratschicht aus Stahl sind bei allen Proben annähernd gleich. Die Gesamtdicke der beiden Lackschichten ist bekannt, sie variiert in $2\,\mu m$ Schritten zwischen $10\,\mu m$ und $20\,\mu m$. Die Dicke der Metallschicht betrug $430\,\mu m$. Mit diesem Probensatz wurden die folgenden benchmarks definiert, die zur Verifizierung des mathematischen Modells und der Annahmen über die normierenden Eigenschaften der Simultanen Kalibrierung herangezogen wurden

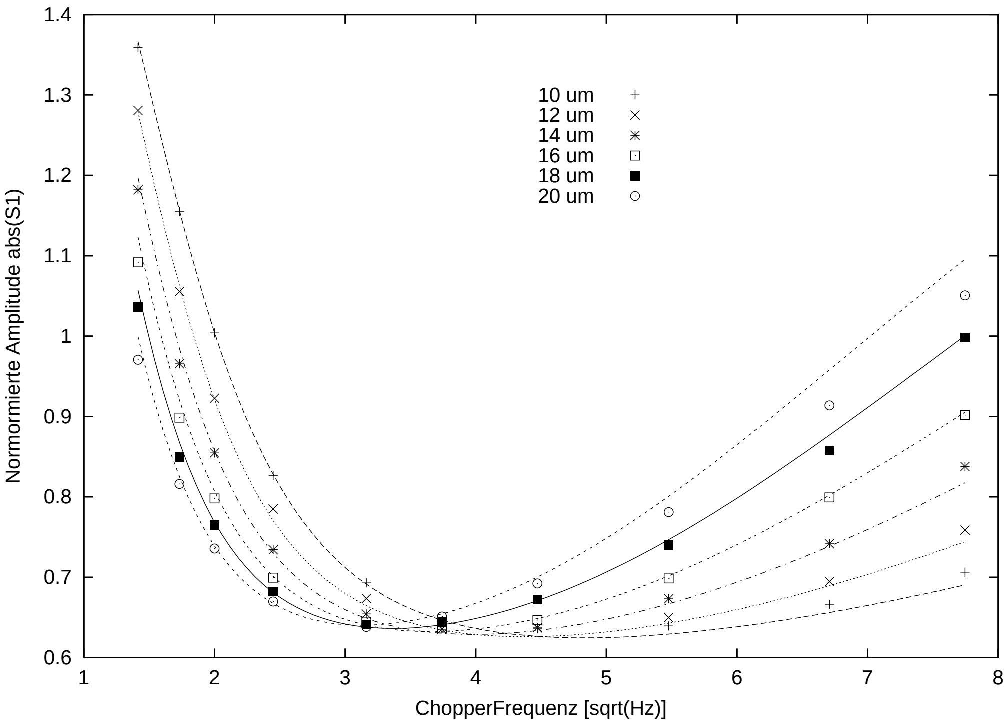

Abbildung 3.1: *Normierte Amplitude $|\widehat{S}_1|$. Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zu allen Proben als Daten*

Benchmarks

Zu allen Proben wurden Frequenzscans mit jeweils 10 *Anregungsfrequenzen zwischen* 2 *Hz und* 75 *Hz durchgeführt.*

1. **Multi-Sample-Calibration:** *Es werden die Frequenzscans zu* **allen** *Proben und die Kenntnis über die Schichtdicken zur Bestimmung der Diffusivität, der thermo-optischen Eindringtiefe und des Effusivitätskontrats eingesetzt. Mit diesen Parametern werden im zweiten Schritt die Lackschichtdicken der einzelnen Proben durch Ein-Parameter Fitting bestimmt.*

2. **Single-Sample-Calibration:** *Es werden einzelne Frequenzscans zur Bestimmung der Parameter herangezogen. Für jede Probe erhalten wir einen Parametersatz, der in Schritt zwei zur Bestimmung der Schichtdicken der jeweils anderen Proben herangezogen wird.*

Die Ergebnisse der benchmarks sehen wir in den Tabellen (3.1) und (3.2). Zunächst müssen wir feststellen, daß das Datenmaterial es nicht hergab, die zweite Lackschicht reproduzierbar zu erkennen. Dies äußerte sich darin, daß der Effusi-

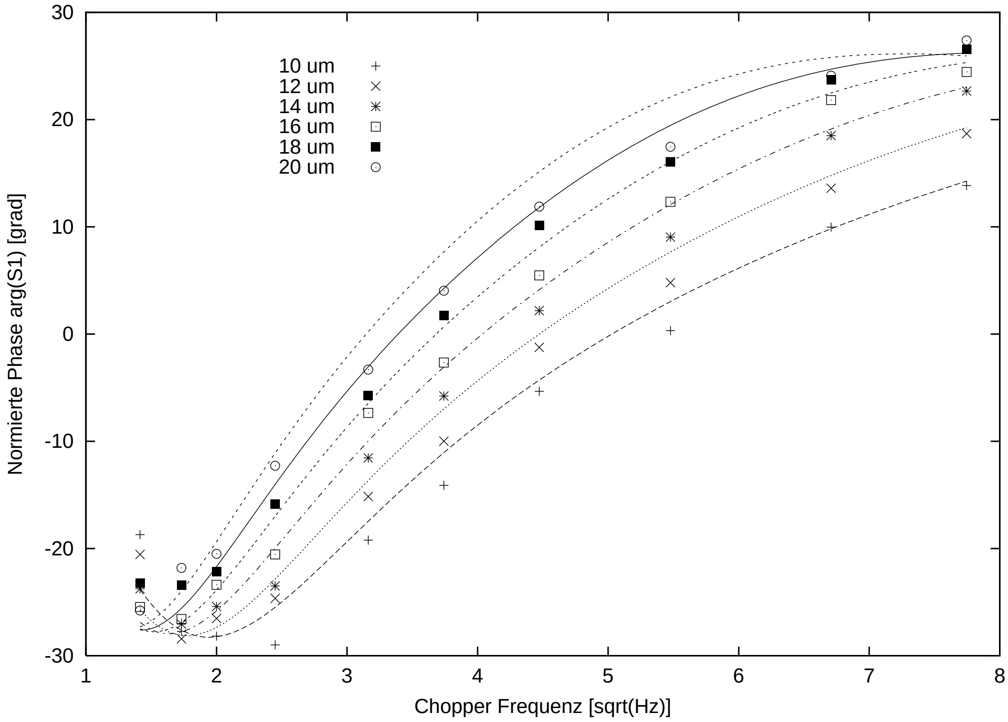

Abbildung 3.2: *Normierte Phase arg($\widehat{S}_1$). Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zu allen Proben als Daten*

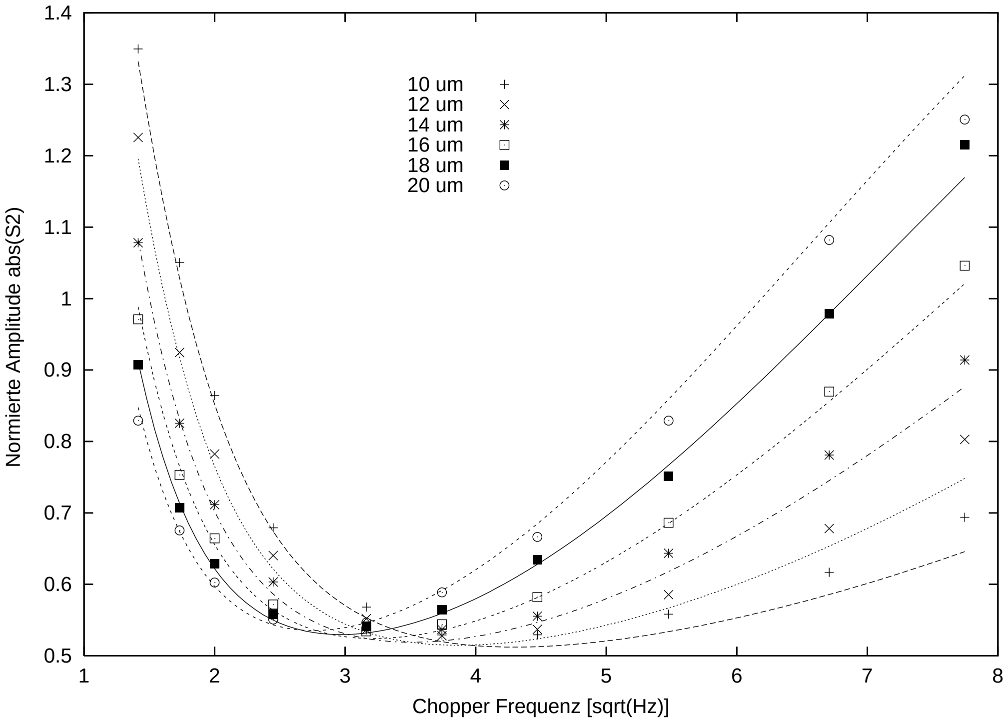

Abbildung 3.3: *Normierte Amplitude $|\widehat{S}_2|$. Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zu allen Proben als Daten*

vitätskontrast R_2 beim Einsatz eines Drei-Schicht-Modelles gegen 1 konvergiert, also den Kontrast zwischen Metall und Luft annäherte.

Für die Parameterbestimmung wurden die ersten beiden Komponenten des Vektors $\widehat{S}$ nach (3.6) ausgenutzt. Die Phase wurde durch Addition eines konstanten Faktors korrigiert, die Amplitude konnte ohne weitere Kalibrierung übernommen werden. Aufgrund der weniger gut quantitativ verwertbaren Phasenwerte wurde die Norm im Funktional (3.7) so gewählt, daß die Phasenwerte nur mit einem Gewicht von 25% in die Bewertung eingehen.

In Abbildungen (3.1) und (3.2) sehen wir die Ergebnisse der Multiparameter-Fits nach benchmark 1. Optisch sind keine großen Unterschiede zu den Ergebnissen bei Single-Sample-Calibration zu erkennen, deshalb wurde auf Abbildungen zu diesen Ergebnissen verzichtet. In der Darstellung sind die Amplitudenwerte und Phasenwerte der Messung (gepunktet) und die des beschriebenen mathematischen Modells (durchgezogene Linien) verglichen. Generell kann man sagen, daß die Amplitudenwerte quantitativ besser zum Modell passen. Dies liegt vermutlich an dem nicht unerheblichen frequenzabhängigen Phasenshift, der durch die Elektronik verursacht ist, und der gegebenenfalls besser herausgerechnet werden müßte. Bei der Amplitude ist zu beobachten, daß Modell und Daten für hohe Frequenzen weniger gut zusammen passen, als für niedrige. Ursache ist vermut-

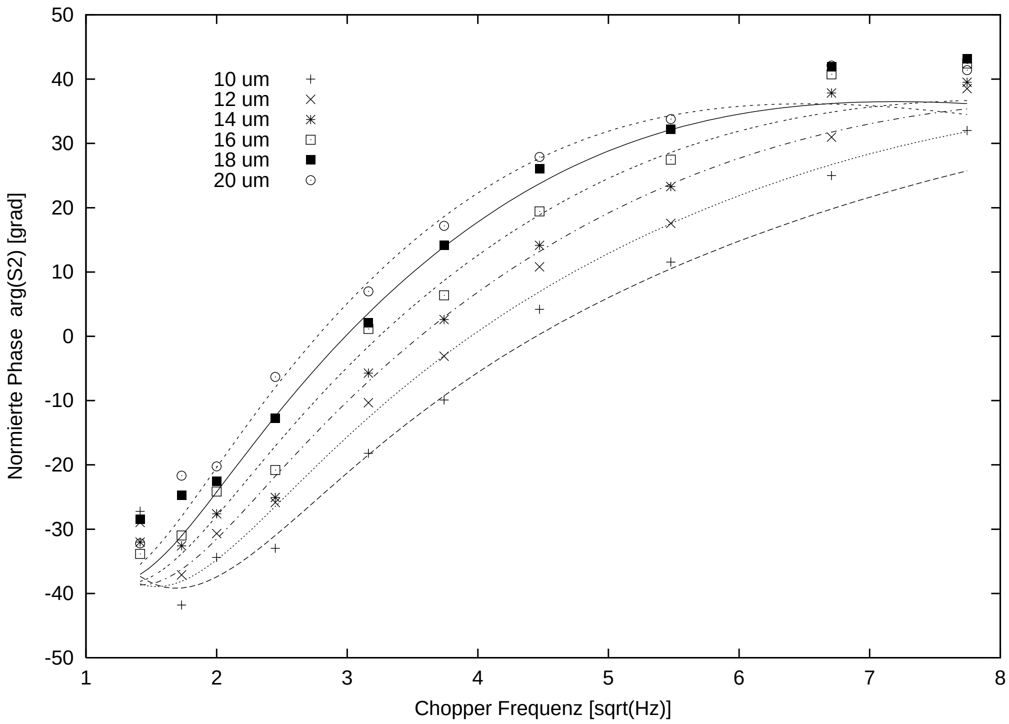

Abbildung 3.4: *Normierte Phase arg($\widehat{S}_2$). Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zu allen Proben als Daten*

lich die Struktur des Materials: Hohe Frequenzen tasten geringe Tiefen in der Lackschicht ab. Durch den Trocknungsprozeß des Lackes kommt es vermutlich zu inhomogener Ausformung des Materials nahe der Oberfäche, die die Annahme, es handele sich um eine homogene Schicht weniger gut zutreffen läßt, als im Falle größerer Tiefen. Wie die späteren Berechnungen zeigen werden, ist die Approximationsgüte für unsere Zwecke hinreichend gut. In den Abbildungen (3.3) und (3.4) sehen wir die entsprechenden Vergleiche zwischen Modell und Daten für die zweite Komponente des Vektors $\widehat{S}$. Die Tatsache, daß jetzt, wo noch wesentlich höhere Freuenzen ausgewertet werden, die Phasenwerte quantitativ sogar besser stimmen, als im weniger von Störung betroffenen Fall der ersten Komponente, bestätigt die Vermutung eines frequenzabhängigen Phasenshifts, der durch die Apparatur verursacht wird. Die Amplituden weisen eine vergleichbare Qualität der Übereinstimmung auf, wie es bei $\widehat{S}_1$ der Fall ist.
In den Abbildungen (3.5) und (3.6) sehen wir die Ergebnisse des Multiparameterfits nach benchmark 2: Anhand der Daten des Frequenzscans zur 16 μm Probe wurden die Parameter bestimmt. Die Abbildungen zeigen einen Vergleich zwischen Modell und Daten. Im Vergleich zu den Fits, bei denen Daten zu mehreren Proben herangezogen wurde, zeigen diese Fits nicht, wie gut das Modell den Einfluß der Lackschichtdicke erfaßt. Dies wird aber in den Auswertungen, die in

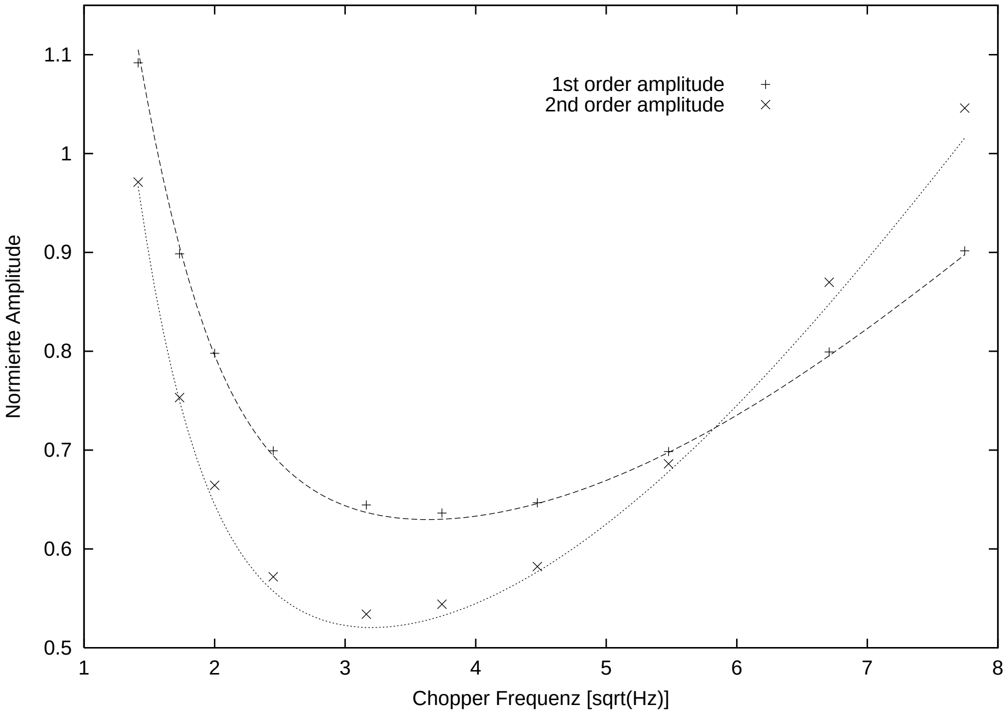

Abbildung 3.5: *Normierte Amplitude* $|\widehat{S}_1|$, $|\widehat{S}_2|$. *Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zur Probe mit* $16\,\mu m$ *Lackschicht als Daten*

den Tabellen (3.1) und (3.2) präsentiert werden deutlich: In (3.1) wird die Reproduzierbarkeit der Parameterbestimmung bei Verwendung der verschiedenen Proben als Kalibrierproben und bei gleichzeitiger Verwendung der Daten zu allen Proben verifiziert. In Anbetracht der Tatsache, daß das Modell nicht mit dem Ziel entwickelt wurde, die thermo-phyikalischen Parameter der Probe zu bestimmen, und insbesondere ein ausgezeichneter Kompensationsparameter eingeführt wurde, zeigt sich eine beachtlich Robustheit, die bei Einsatz von deutlich mehr Anregungsfrequenzen sich weiter verbessern würde. Verglichen mit den Ergebnissen anderer Arbeiten [28], [31], [35], bei denen Methoden mit besserer Sensitivität (Mirage Effekt) benutzt wurden, erscheint die gemessene Diffusivität des Lackes realistisch.

Einzig die Probe mit $20\,\mu m$ Lackschicht fällt aus dem Rahmen. Da sie es in allen Rechnungen gleichermaßen abweichende Ergebnisse liefert, gehen wir davon aus, daß die Angabe der Schichtdicke von $20\,\mu m$ stark fehlerbehaftet ist.
In Tabelle (3.2) sehen wir die Ergebnisse von Schritt 2 des benchmarks. Alle Parameter, die in Tabelle (3.1) zu sehen sind, wurden festgehalten, bis auf die Schichtdicke der ersten Schicht. Es geht darum die Tauglichkeit des Schichtdicken-Meßverfahren zu verifizieren. Die Dicke der obersten Schicht wurde an die Daten

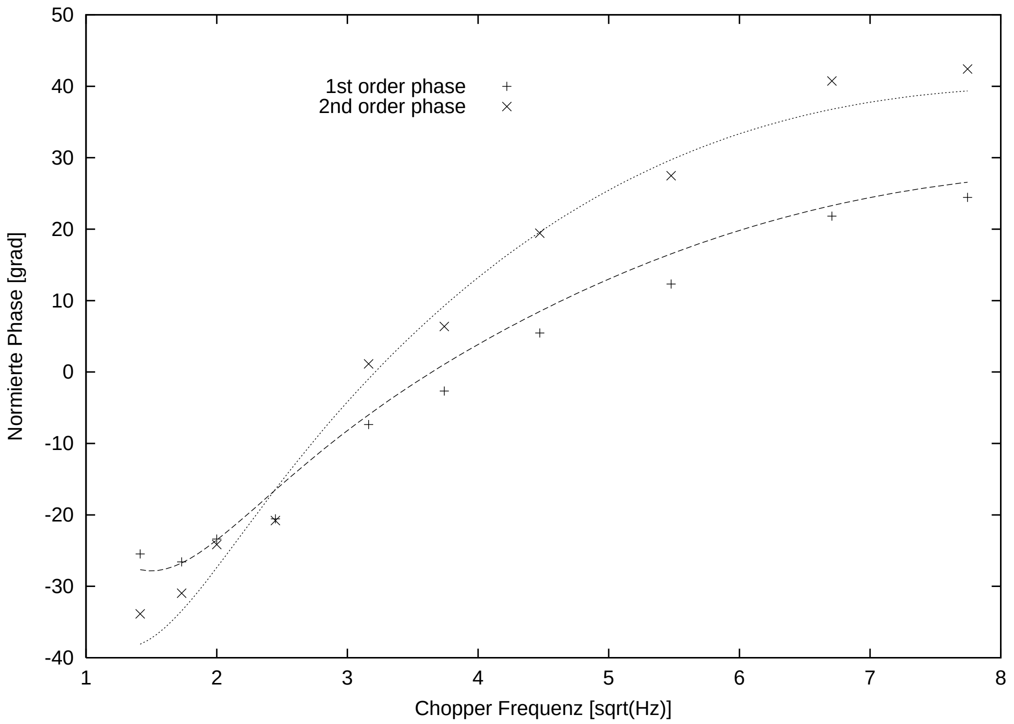

Abbildung 3.6: *Normierte Phase* $arg(\widehat{S}_1)$, $arg(\widehat{S}_2)$. *Ergebnis des Multi-Parameter-Fits, mit Frequenzscans zur Probe mit* $16\,\mu m$ *Lackschicht als Daten*

der einzelnen Frequenzscans angepaßt, und die sich daraus ergebenden Dicken in der Tabelle aufgelistet. Bis auf die $20\,\mu m$ Probe kann von einer sehr guten Reproduzierbarkeit der berechneten Dicken gesprochen werden. Und damit ist der Beweis geliefert, daß der Einfluß der Schichtdicke durch das Modell sehr gut erfaßt wird, und daß die Normierung mittels Simultaner Kalibrierung die gesuchte Information zugänglich macht.

Kalibrierung mit	$1/\beta_1[m]$	$\alpha_1[m^2/s]$	R_1	$\alpha_2[m^2/s]$
alle Proben:	1.5E-5	9.15E-8	-0.830	1.91E-5
10 μm :	4.3E-4	8.15E-8	-0.833	1.93E-5
12 μm :	1.15E-3	8.44E-8	-0.839	2.03E-5
14 μm :	6.82E-4	9.04E-8	-0.835	1.63E-5
16 μm :	9.9E-4	9.5E-8	-0.85	1.72E-5
18 μm :	1.15E-3	9.5E-8	-0.851	1.71E-5
20 μm :	1.3E-3	1.09E-7	-0.822	1.06E-5

Tabelle 3.1: Ergebnisse des Multi-Parameter Fits für das Zweischicht-Modell. Daten zu Proben verschiedener und bekannter Lackschichtdicken wurden ausgenutzt, um die thermophysikalischen Parameter der Proben zu bestimmen. Der Parameter $1/\beta_1$ kompensiert den Einfluß von Emission und Absorption und ist daher nicht nicht von quantitativ sinnvoller Größe.

Kalibrierung mit	10 μm	12 μm	14 μm	16 μm	18 μm	20 μm
alle Proben:	10.0	12.1	14.2	16.1	18.1	19.4
10 μm :	10.0	11.9	13.9	15.5	17.3	18.4
12 μm :	10	12	14	15.7	17.5	18.7
14 μm :	9.7	11.9	14	15.8	17.8	19
16 μm :	9.5	11.7	14.0	16	18.0	19.3
18 μm :	9.4	11.6	14	16.0	18	19.3
20 μm :	8.7	11.2	14	16.3	18.6	20

Tabelle 3.2: Berechnete Dicken der obersten Schicht für die jeweiligen Proben. Die thermophysikalischen Parameter wurden aus Tabelle (3.1) übernommen. Alle Parameter außer der Dicke der ersten Schicht wurden festgehalten. Der frei bleibende Parameter wurde per Ein-Parameter Fit angepaßt.

Kapitel 4

Modellierung kontinuierlich veränderlicher Materialeigenschaften

Nachdem ein praxistaugliches Verfahren zur Lackschichtdickenbestimmung in den vorangehenden Kapiteln entwickelt wurde, wird es in diesem Kapitel um die Frage gehen, ob auch andere mathematische Methoden, die mehr Potential für Weiterentwicklung bieten, bei der Lackschichtdickenbestimmung erfolgreich sein können. Dabei lösen wir uns von den Einschränkungen durch den technologischen Stand der Meßtechnik, und untersuchen ob der Einsatz von Rekonstruktionsverfahren erfolgsversprechend ist. Unter Rekonstruktionsverfahren ist ein Verfahren zu verstehen, das die thermophysikalischen Eigenschaften des Objektes als Funktion von der Ortsvariablen auffaßt. Eine Rekonstruktion dieser Funktion wird dann an der Stelle eine Sprung aufweisen, an der der Übergang von der Lack- zur Substratschicht verortet ist, und das ist ja gerade die gesuchte Schichtdicke.
Es lohnt sich den Blick auf andere Methoden zu lenken, die thermische Wellen einsetzen. Insbesondere Verfahren zur Rekonstruktion von Effusivitäts- bzw. Konduktivitätsprofilen von gehärtetem Stahl bieten sich an, auf ihre Anwendbarkeit bei der Schichtdickenbestimmung geprüft zu werden. Bei gehärtetem Stahl ist die zu rekonstruierende Funktion glatt und weicht nur in der Nähe der Oberfläche von einem (i.a. bekannten) Mittelwert ab. Ausgehend von solchem Vorwissen macht es Sinn statt des originär nichtlinearen Problems lineare Näherungen zu betrachten. Doch auch bei der Bestimmung von Schichtdicken kann ein solcher Ansatz verfolgt werden; besonders dann, wenn wir nur an Sprüngen im Profil interessiert sind, und davon ausgehen können, daß zwischen den Sprüngen annähernd konstante Materialeigenschaften vorherrschen. Die erste Linearisierung besteht darin, anzunehmen, daß die Stoffwerte nicht temperaturabhängig sind, und daß es nicht zu Konvektion durch Wärmeausbreitung innerhalb des Mediums kommt. Weiterhin wird die Annahme gemacht, daß die zu bestimmende Materialgröße nur von der Tiefe abhängig ist, also daß die Probe schichtstrukturiert ist. Das inverse

Medien-Problem der Bestimmung einer kontinuierlichen Funktion, zum Beispiel der Diffusivität der Probe in Abhängigkeit von der Tiefe wird in der Ingenieursliteratur als *photothermal depth profiling* bezeichnet. Die Methoden beschäftigen sich vorwiegend mit der Rekonstruktion der Konduktivität von gehärtetem Stahl, deren Tiefenprofil als Qualitätsmerkmal des Stahles von großem Interesse ist.
Untersuchungen der Gruppe von Andreas Mandelis [29], [26], [27] zeigen, daß thermische Wellen auch Meßdaten für bildgebende tomographische Verfahren bei Dünnfilm Untersuchungen liefern. Den Weg in die Praxis haben solche Verfahren bis heute jedoch noch nicht gefunden. Ein weiteres Verfahren wurde von Mandelis [20], [23] unter der Bezeichnung "Hamilton Oszillator" vorgestellt. Dabei wird ein Stripping Verfahren angewandt: Ausgehend von der Überlegung, daß thermische Wellen eine frequenzabhängige Eindringtiefe haben, werden zuerst oberflächennahe Schichten aus Daten zu hohen Frequenzen bestimmt. Unter Ausnutzung der Kenntnis der oberen Schichten werden dann sukzessive mit Daten zu immer niedrigeren Frequenzen, tiefere Schichten bestimmt. Zusätzlich wird die Vorgehensweise dadurch stabilisiert, daß das gesuchte Profil durch eine spezielle Funktionen darstellbar sein soll, die ein gewisses Vorwissen über das gesuchte Profil wiederspiegeln, z. B. $\alpha(x) = \alpha_0(1 + \Delta_1 \exp(-\Delta_2 x))^2$. Bestimmt werden dann nur noch die Parameter Δ_1, Δ_2. Ein weiteres Rekonstruktionsverfahren wurde von J. Power [30] vorgestellt, das als Ziel die Rekonstruktion der Quellverteilung in einem thermisch homogenen Objekt hat. Bemerkenswert ist bei dieser Arbeit, die ungewöhnliche Art der stochastischen Regularisierung. Der Vollständigkeit halber soll ein Verfahren [33] Erwähnung finden, das einen dreidimensionalen Ansatz für die Anregungsfunktion macht, und das die Temperatur als Faltung einer Greenschen Funktion mit dem Objekt auffaßt. Bei der Inversion der Faltungsgleichung kommt die Fouriertransformation zum Einsatz. Zuletzt sei ein Verfahren erwähnt, bei dem auf die eigentliche Modellierung verzichtet wird, das aber sehr erfolgreich im "Wiedererkennen" von Konduktivitätsprofilen ist, gemeint ist die Anwendung von Neuronalen Netzen [11].
Im folgenden werden zwei Methoden näher vorgestellt, die sich durch ihre rigorose mathematische Darstellung auszeichnen, und die stellvertretend für die genannten Methoden einige Besonderheiten der Wärmeleitung bei periodischer Anregung aufzeigen.

4.1 Linearisierung nach Bertolotti und Li Voti

Die folgende Dartstellung faßt die Arbeiten [3], [12], [34] zusammen: Wir gehen aus von der 1D Fourier-Wärmeleitungsgleichung, wobei angenommen wird, daß sich sowohl Konduktivität als auch Diffusivität mit der Tiefe ändern dürfen:

$$\frac{d}{dx}\left[k(x)\left(\frac{d}{dx}T(x,\omega)\right)\right] - \sigma(x,\omega)^2 k(x) T(x,\omega) = 0 \tag{4.1}$$

mit $x \in [0, \infty)$ und die Größen $k(x) > 0$, $\sigma(x, \omega) = (1 + i)\sqrt{\omega/2\alpha(x)}$ seien differenzierbar. Diese Voraussetzungen gelten für das gesamte Kapitel. Die Argumente von $\sigma(x, \omega)$ werden im allgemeinen aus gelassen, um die Notation übersichtlicher zu gestalten. Wir gehen davon aus, daß die Meßdaten als Temperaturwerte $T(0, \omega)$ an der Oberfläche zu verschiedenen Anregungsfrequenzen $\omega = \omega_j$, $j = 1 \ldots m$ vorliegen. Weiterhin gehen wir von Oberflächenabsorbtion aus, was durch die Randbedingung

$$-k(0)\frac{d}{dx}T(0) = F(0) = I \tag{4.2}$$

modelliert wird.

4.1.1 Ein spezieller Ansatz

Wir betrachten zuerst einen homogenen Körper, das heißt $k(x) = k$, $\alpha(x) = \alpha$. Alle Lösungen der Gleichung (4.1) haben die Form:

$$T(x) = Ae^{-\sigma x} + Be^{\sigma x} \tag{4.3}$$

mit Konstanten $A, B \in \mathbb{C}$ die so gewählt sind, daß geforderte Randbedingungen erfüllt werden. Dies motiviert einen Ansatz, wie er auch in der Streutheorie üblich ist. Wir fassen T als Temperaturfeld auf, das aus der Summe einer einfallenden Welle und einer gestreuten Welle besteht,

$$T(x) = T_i(x) + T_s(x). \tag{4.4}$$

Mit (4.3) erhalten wir für den thermischen Fluß im halbunendlichen, homogenen Medium:

$$\begin{aligned} F(x) &= -k\frac{d}{dx}T(x) && (4.5)\\ &= -k\left(-\sigma Ae^{-\sigma x} + \sigma Be^{\sigma x}\right) && (4.6)\\ &= k\sigma\left(T_i(x) - T_s(x)\right), && (4.7) \end{aligned}$$

was eine Ausweitung des Ansatzes, der sich lediglich auf die Gestalt des Temperaturfeldes beschränkt, darstellt.

4.1.2 Die thermische Reflektivität

Definition 4.1.1 *Gegeben sei ein Temperaturfeld* $T(x)$, $x \in [0, \infty)$, *das die Gleichung* (4.1) *erfüllt und das eine Darstellung*

$$T(x) = T_i(x) + T_s(x)$$

und einen zugehörigen thermischen Fluß mit einer Darstellung

$$F(x) = k(x)\sigma(x)\left(T_i(x) - T_s(x)\right)$$

habe. Es gelte $T_i(x) \neq 0$ *für alle* $x \in [0, \infty)$*. Wir nennen den Quotienten*

$$R(x, \omega) = \frac{T_s(x, \omega)}{T_i(x, \omega)}$$

die thermische Reflektivität *des Temperaturfeldes.*

Auch hier werden wir die Abhängigkeit der Variablen von ω implizit annehmen, und verzichten im allgemeinen auf explizite Angabe dieses Arguments.

Satz 4.1.2 *1. Die thermische Reflektivität R erfüllt die Ricatti Differentialgleichung*

$$\frac{d}{dx}R(x) = 2\sigma(x)R(x) + \left[\frac{d}{2dx}\ln(k(x)\sigma(x))\right]\left(1 - R(x)^2\right). \tag{4.8}$$

2. Es gelte

$$\begin{aligned} \lim_{x\to\infty} k(x) &= \bar{k}, \\ \lim_{x\to\infty} \sigma(x) &= \bar{\sigma}, \\ \lim_{x\to\infty} T(x) &= 0. \end{aligned}$$

Dann erfüllt R die Randbedingung:

$$\lim_{x\to\infty} R(x) = 0$$

Beweis:

1. Als ersten Schritt schreiben wir die lineare Differentialgleichung (4.1) zweiter Ordnung in ein System von zwei Gleichung erster Ordnung um:

$$\begin{cases} F(x) &= -k(x)\,\frac{d}{dx}T(x) \\ \frac{d}{dx}F(x) &= -\sigma(x)^2\,k(x)\,T(x) \end{cases} \tag{4.9}$$

Demnach ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}T(x) &= -\frac{1}{k(x)}F(x) \\ &= -\sigma(x)\left(T_i(x) - T_s(x)\right) \end{aligned}$$

Wir betrachten nun das lineare Gleichungssystem für einfallendes und gestreutes Temperaturfeld:

$$\begin{aligned} k(x)\sigma(x)T(x) &= k(x)\sigma(x)\left(T_i(x) + T_s(x)\right) \\ F(x) &= k(x)\sigma(x)\left(T_i(x) - T_s(x)\right) \end{aligned}$$

Addition der beiden Gleichungen ergibt

$$F(x) + k(x)\sigma(x)T(x) = 2k(x)\sigma(x)T_i(x),$$

und wir erhalten eine Gleichung für das einfallende Feld $T_i(x)$

$$T_i(x) = \frac{1}{2}\left(T(x) + \frac{1}{k(x)\sigma(x)}F(x)\right)$$

Differenzieren wir den Ausdruck nach x, so ergibt sich unter Ausnutzung von (4.9):

$$\begin{aligned}
2\frac{d}{dx}T_i(x) &= \frac{d}{dx}T(x) + \frac{k(x)\sigma(x)\frac{d}{dx}F(x) - F(x)\frac{d}{dx}(k(x)\sigma(x))}{(k(x)\sigma(x))^2} \\
&= -\sigma(x)(T_i(x) - T_s(x)) - \frac{\sigma(x)^2 k(x)(T_i(x) + T_s(x))}{k(x)\sigma(x)} \\
&\quad -\frac{\frac{d}{dx}(k(x)\sigma(x))}{k(x)\sigma(x)}(T_i(x) - T_s(x)) \\
&= -2\sigma(x)T_i(x) - \left[\frac{\frac{d}{dx}(k(x)\sigma(x))}{k(x)\sigma(x)}\right](T_i(x) - T_s(x))
\end{aligned}$$

Analog erhalten wir

$$\frac{d}{dx}T_s(x) = \sigma(x)T_s(x) + \left[\frac{\frac{d}{dx}(k(x)\sigma(x))}{2k(x)\sigma(x)}\right](T_i(x) - T_s(x))$$

Und die Behauptung ergibt sich mittels

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}R = \frac{d}{dx}\left(\frac{T_s(x)}{T_i(x)}\right) &= \frac{1}{T_i}\frac{d}{dx}T_s - \frac{T_s}{T_i^2}\frac{d}{dx}T_i \\
&= \frac{1}{T_i}\left\{\quad \sigma T_s + \left[\frac{\frac{d}{dx}(k\sigma)}{2k\sigma}\right](T_i - T_s)\right\} \\
&\quad -\frac{T_s}{T_i^2}\left\{-\sigma T_i - \left[\frac{\frac{d}{dx}(k\sigma)}{2k\sigma}\right](T_i - T_s)\right\} \\
&= 2\sigma R + \frac{\frac{d}{dx}(k\sigma)}{2k\sigma}\left(1 - R^2\right) \\
&= 2\sigma R + \left(\frac{d}{2dx}\ln(k\sigma)\right)\left(1 - R^2\right)
\end{aligned}$$

2. Wir betrachten wieder die Wärmeleitungsgleichung (4.1) wobei wir $k(x) = \bar{k} + a(x)$ und $\sigma(x) = \bar{\sigma} + b(x)$ einsetzen und ausnutzen, daß $\lim_{x\to\infty} a(x) =$

$\lim_{x\to\infty} b(x) = 0$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left[(\bar{k}+a(x))\left(\frac{d}{dx}T(x,\omega)\right)\right] &= (\bar{\sigma}+b(x))^2(\bar{k}+a(x))T(x,\omega)\\ \Leftrightarrow \bar{k}\frac{d^2}{dx^2}T(x) - \bar{\sigma}^2\bar{k}T(x) &= \frac{d}{dx}\left[-a(x)\left(\frac{d}{dx}T(x,\omega)\right)\right]\\ &\quad +(2\bar{\sigma}b(x)+b(x)^2)(\bar{k}+a(x))\,T(x)\end{aligned}$$

Die rechte Seite obiger Gleichung konvergiert für große x gegen Null, denn $a(x)$ und $b(x)$ sowie deren Ableitungen konvergieren gegen Null. Für große x beschreibt die Lösung von

$$\frac{d^2}{dx^2}\bar{T}(x) - \bar{\sigma}^2\bar{T}(x) = 0$$

das Verhalten der thermischen Welle in einem homogenen Festkörper. Sie hat wegen $\lim_{x\to\infty} T(x) = 0$ die Form $\bar{T}(x) = A\exp(-\bar{\sigma}x)$, und mit der Definition für T_i und T_s ergibt sich für den homogenen Fall

$$\begin{aligned}T(x) - T_i(x) &= T_i(x) + \frac{1}{\bar{\sigma}}\frac{d}{dx}T(x),\\ T_i(x) &= Ae^{-\bar{\sigma}x}\\ &= T(x),\end{aligned}$$

und damit ist die Reflektivität des homogenen Festkörpers identisch Null, was die Behauptung beweist.

■

Einen direkten Zusammenhang zwischen den Meßdaten und der Reflektivität liefert uns:

Korollar 4.1.3 *Es gilt*

$$R(0,\omega) = \frac{T_s(\omega) - \frac{I}{k(0)\sigma(0,\omega)}}{T_s(\omega) + \frac{I}{k(0)\sigma(0,\omega)}}.$$

Beweis:

$$\frac{1+R(0,\omega)}{1-R(0,\omega)} = \frac{1+\frac{T_s}{T_i}}{1-\frac{T_s}{T_i}} = \frac{T_i+T_s}{T_i-T_s} = \frac{T(0)}{\frac{1}{k(0)\sigma(0)}F(0)},$$

und damit

$$\begin{aligned}T_s &= \frac{I}{k\sigma}\frac{1+R(0,\omega)}{1-R(0,\omega)}\\ \Leftrightarrow R(0,\omega) &= \frac{T_s - \frac{I}{k\sigma}}{T_s + \frac{I}{k\sigma}},\end{aligned}$$

wobei $|T_i| > |T_s|$ und daher $1 - R(0,\omega) \neq 0$. ■

4.1.3 Linearisierung

Setzen wir an dieser Stelle voraus, daß $I, \alpha(0), k(0)$ bekannt sind, so eröffnet sich hier die erste Möglichkeit, mit dem bisherigen Ergebnissen ein Verfahren zur Bestimmung der Materialeigenschaften des Objektes anzugeben. Hierzu benötigen wir ein numerisches Verfahren, das den diskretisierten Parametern $k(x), \alpha(x)$ eine Lösung R zuordnet. Mit Hilfe eines Verfahrens zur nichtlinearen Optimierung könnten dann Meßdaten zur Identifikation der Parameterfunktionen benutzt werden. Wir folgen aber an dieser Stelle Bertolotti [3] und linearisieren anhand zweier Approximationen:

1. $0 < R \ll 1$: Somit können wir die Ricatti Differentialgleichung mit einer linearen Differentialgleichung approximieren:

$$\frac{d}{dx}R(x) = 2\sigma(x)R(x) + \left[\frac{d}{2dx}\ln(k(x)\sigma(x))\right] \tag{4.10}$$

2. Zur Vereinfachung der Schreibweise führen wir erst die thermische Effusivität e ein:

$$e(x) = \frac{k(x)}{\sqrt{\alpha(x)}}.$$

Damit wird unter Ausnutzung der Definition der Effusivität

$$\frac{\frac{d}{dx}\left(k(x)\sigma(x)\right)}{k(x)\sigma(x)} = \frac{\frac{d}{dx}\left(k(x)(1+i)\sqrt{\omega/2\alpha(x)}\right)}{k(x)(1+i)\sqrt{\omega/2\alpha(x)}} = \frac{e'(x)}{e(x)},$$

und die Lösung der Differentialgleichung (4.10) hat die Darstellung:

$$\begin{aligned} R(x) &= \exp\left(\int_\infty^x 2\sigma(t)dt\right)\left[\int_\infty^x \frac{e'(z)}{2e(z)}\exp\left(-\int_\infty^z 2\sigma(t)dt\right)dz\right] \\ &= -\int_x^\infty \frac{e'(z)}{2e(z)}\exp\left(-\int_x^z 2\sigma(t)dt\right)dz. \end{aligned}$$

Die zweite Approximation ist

$$\int_x^z \sigma(t)dt \approx (z-x)\bar{\sigma},$$

mit der mittleren Wellenzahl $\bar{\sigma}$. Somit ist die Reflektivität zur Anregungsfrequenz ω bestimmt durch die Laplacetransformierte von e'/e:

$$R_0(\omega) = -\frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{e'(z)}{e(z)} \exp\left(-2z\bar{\sigma}(\omega)\right) dz \tag{4.11}$$

$$= -\frac{1}{2}\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)\left(\bar{\sigma}(2\omega)\right). \tag{4.12}$$

Bemerkung 4.1.4 Normierung

Die in der Praxis relevante Problematik, daß das photothermische Signal im allgemeinen nicht quantitativ ist, und daher normiert werden muß, ist in dieser Arbeit bereits mehrmals betont worden. Für den hier vorgestellten Ansatz schlagen Glorieux und andere [12] die folgende Normierung vor, die voraussetzt, daß eine homogene Probe als Referenz mit den thermischen Eigenschaften k_0, α_0 zur Verfügung steht, die die Forderungen

$$k(0) = k_0, \quad \alpha(0) = a_0 \tag{4.13}$$

erfüllt. Dann liefert die folgende Normierung die gewünschte Unabhängigkeit vom Niveau der absorbierten Energie I:

$$\frac{T(\omega) - T_{ref}(\omega)}{T(\omega) + T_{ref}(\omega)} = -\frac{1}{2}\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)\left(\bar{\sigma}(2\omega)\right), \tag{4.14}$$

mit der abkürzenden Schreibweise $T(\omega) = T(x = 0, \omega)$.

Beweis: Die Temperaturverteilung in einer homogenen Probe mit vorgegebenem Fluß an der Oberfläche ist gegeben durch (2.2.2):

$$T_{ref}(x) = \frac{I}{k_0\sigma_0}\exp(-\sigma_0 x)$$

Ausnutzen von (4.13) und einsetzen in (4.12) liefert den Beweis:

$$\frac{T(\omega) - T_{ref}(\omega)}{T(\omega) + T_{ref}(\omega)} = \frac{\frac{I}{k_0\sigma_0}\frac{1+R_0}{1-R_0} - \frac{I}{k_0\sigma_0}}{\frac{I}{k_0\sigma_0}\frac{1+R_0}{1-R_0} + \frac{I}{k_0\sigma_0}} \tag{4.15}$$

$$= \frac{(1+R_0) - (1-R_0)}{(1+R_0) + (1-R_0)} \tag{4.16}$$

$$= R_0 \tag{4.17}$$

$$= -\frac{1}{2}\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)\left(\bar{\sigma}(2\omega)\right). \tag{4.18}$$

■

Bemerkung 4.1.5 Ausnutzen spezieller Eigenschaften der Laplace-Transformation

Es erscheint auf den ersten Blick unpraktisch und unter Umständen sogar unmöglich, wenn zu jeder Probe erst eine Referenzmessung an einer anderen Probe durchgeführt werden muß, die (4.13) erfüllt. Ein praktikable Lösung für dieses Problem ergibt sich aus der folgenden Eigenschaft der Laplace-Transformation:

$$\lim_{y\to\infty} y\mathcal{L}(f)(y) = f(0). \tag{4.19}$$

Denn für die Oberflächentemperatur gilt demnach:

$$\begin{aligned}\lim_{\omega\to\infty} T_s(\omega) &= \lim_{\omega\to\infty} \frac{I}{k_0\sigma_0(\omega)} \frac{1-\frac{1}{2}\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)(\bar{\sigma}(2\omega))}{1+\frac{1}{2}\mathcal{L}\left(\frac{e'}{e}\right)(2\bar{\sigma}(\omega))} \\ &= \lim_{\omega\to\infty} \frac{I}{k_0\sigma_0(\omega)} \frac{1-\frac{1}{2\sigma(\omega)}\frac{e'}{e}(0)}{1+\frac{1}{2\sigma(\omega)}\frac{e'}{e}(0)} \\ &= \lim_{\omega\to\infty} \frac{I}{k_0\sigma_0(\omega)}.\end{aligned}$$

Das heißt, daß sich die Daten zu hohen Anregungsfrequenzen denen zum homogenen Festkörper mit den Eigenschaften $k(0), \alpha(0)$ annähert, was wir mit (4.19) zu der Approximation

$$T_{ref}(\omega) \approx T_s(\omega_{max})\sqrt{\frac{\omega}{\omega_{max}}} \tag{4.20}$$

heranziehen. Als Anforderung an einen Frequenzscan ergibt sich daraus, daß eine ausreichend hohe Anregungsfrequenz ω_{max} zu wählen ist. Wenn I auch noch durch (frequenzabhängige) Geräteparameter beeinflußt ist, so kann ein Frequenzscan an einer homogenen Probe auf dieselbe Weise zur Kalibrierung von $I(\omega)$ herangezogen werden.

Bemerkung 4.1.6 Berechnung der Effusivität

Gemäß Formel (4.18) wird mittels numerischer Inversion der Laplace Transformation eine Näherung an e'/e berechenbar. Durch Integration können wir hieraus Effusivität selbst bestimmen:

$$\int_0^x \frac{e'(t)}{e(t)}dt = \ln(e(x)) - \ln(e(0))$$

wobei der Argumentation zu (4.20) folgend

$$e(0) = \frac{k(0)}{\sqrt{\alpha(0)}} = \left|\frac{I}{T(\omega_{max})\sqrt{\omega_{max}}}\right|$$

angenähert werden kann. Die so berechnete Effusivität ist von $e(0)$ nur als multiplikativem Faktor abhängig:

$$e(x) = e(0) \exp\left(\int_0^x \frac{e'(t)}{e(t)} dt\right).$$

4.2 Modellierung als Streuproblem

Dieses Modell wurde von Mandelis ursprünglich für das thermische 2D Tomographieproblem bei dünnen Schichten [21] entwickelt. Es nutzt die Verwandschaft der Fourier- Wärmeleitungsgleichung mit der Helmholtzgleichung aus. Wir berachten hier die 1D Fourier-Wärmeleitungsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\left[k(x)\left(\frac{d}{dx}T(x,\omega)\right)\right] - i\omega\rho(x)c(x)k(x)T(x,\omega) &= 0, \quad (4.21)\\ -k(0)\frac{d}{dx}T(0) &= I, \quad (4.22)\\ \lim_{x\to\infty} T(x) &= 0, \quad (4.23) \end{aligned}$$

für ein Medium, das sich zusammensetzt aus einem thermisch homogenen Teil für $x <= 0$ mit der thermischen Konduktivität k_0 , der Dichte ρ_0 und der spezifischen Wärmekapazität c_0, und einem Medium von kontinuierlich veränderlichen thermischen Eigenschaften, die von der Tiefe x abhängen. Dem Ansatz von Mandelis [21] folgend, fassen wir die Änderungen der thermischen Eigenschaften als Abweichungen von dem homogenen Medium auf. Die erste Näherung, die wir einführen, bezieht sich auf die Konduktivität, für die angenommen wird

$$\frac{d}{dx}k(x)\frac{d}{dx}T(x) \approx 0. \quad (4.24)$$

Dann ergibt sich aus (4.21) die Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}T(x) - \sigma(x)^2 T(x) &= -\frac{\frac{d}{dx}k(x)}{k(x)}\frac{d}{dx}T(x)\\ &\approx 0. \end{aligned}$$

4.2.1 Greensche Funktion

Lemma 4.2.1 *Die Greensche Funktion G, die die Fourier-Wärmeleitungsgleichung*

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,y) - \sigma^2 G(x,y) = -\frac{1}{\alpha}\delta(x-y) \quad (4.25)$$

für den halb-unendlichen, homogenen Stab $0 \leq x, y$, *zu den Neumann-Randbedingungen*

$$\frac{\partial}{\partial y} G(x,y) \mid_{y=0} \equiv 0$$

löst, lautet

$$G(x,y) = \frac{1}{2\sigma\alpha}\left(e^{-\sigma|x-y|} + e^{-\sigma|x+y|}\right).$$

Beweis: Sei $x + y \neq 0$. Wir prüfen zuerst, ob G die Differentialgleichung (4.25) erfüllt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial x^2} G(x,y) &= \frac{\partial}{2\sigma\alpha\partial x}\left(-\sigma \mathrm{sgn}(x-y)e^{-\sigma|x-y|} - \sigma \mathrm{sgn}(x+y)e^{-\sigma|x+y|}\right) \\
&= -\frac{1}{2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{sgn}(x-y)\right)e^{-\sigma|x-y|} + \frac{\sigma}{2\alpha}e^{-\sigma|x-y|} \\
&\quad -\frac{1}{2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{sgn}(x+y)\right)e^{-\sigma|x+y|} + \frac{\sigma}{2\alpha}e^{-\sigma|x+y|} \\
&= \sigma^2 G(x,y) - \frac{1}{2\alpha}\left[2\,\underbrace{\delta(x-y)e^{-\sigma|x-y|}}_{\delta(x-y)} + 2\,\underbrace{\delta(x+y)}_{0}\,e^{-\sigma|x+y|}\right].
\end{aligned}$$

Und damit ist (4.25) erfüllt. Es bleibt die Randbedingung zu prüfen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} G(x,y) \mid_{y=0} &= \frac{1}{2\alpha}\left(sign(x-y)e^{-\sigma|x-y|} - sign(x+y)e^{-\sigma|x+y|}\right) \mid_{y=0} \\
&= \frac{1}{2\alpha}\left(e^{-\sigma|x|} - e^{-\sigma|x|}\right) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

■

Bemerkung 4.2.2 Für die unterschiedlichen Geometrien bei photothermischen Meßapparaturen ist es oft notwendig, entsprechende Greensche Funktionen herzuleiten. Eine Zusammenfassung für die wichtigsten Fälle findet sich in [22], wo durch Fouriertransformation der bekannten Greenschen Funktionen im Zeitbereich, diejenigen für den Fourierbereich gewonnen werden, und durch Anwendung der *method of images* [24] Varianten für beschränkte Gebiete hergeleitet werden. Eine andere Möglichkeit Greensche Funktionen herzuleiten besteht darin, die räumliche Laplace Transformation auf die Gleichung (4.25) anzuwenden, und nach algebraischer Umformung der Gleichung die Greensche Funktion mittels inverser Laplacetransformation zu bestimmen. Insbesondere in höheren Dimensionen ist diese Berechnung nicht trivial [21]. Mandelis gibt unter anderem eine Herleitung eines Projektionssatzes an, der für die Laplacetransformierte des Born-Feldes gilt, und damit die Analogie zum inversen Medienproblem bei akustischen Wellen aufzeigt.

Bemerkung 4.2.3 Der Normierungsfaktor $1/\alpha$ auf der rechten Seite von Gleichung (4.25) wurde eingesetzt, um Temperaturfelder der richtigen physikalischen Dimension zu erhalten.

4.2.2 Pseudo-Helmholtz-Gleichung

Satz 4.2.4 *T erfülle die sogenannte Pseudo-Helmholtzgleichung:*

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \sigma_0^2\right) T(x) = F(x)T(x) \tag{4.26}$$

mit

$$F(x) = \begin{cases} \sigma_0^2(n(x)^2 - 1) & : \quad 0 \leq x \\ 0 & : \quad x < 0 \end{cases}$$

und dem thermischen Brechungsindex

$$n(x) = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\alpha(x)}}$$

mit der thermischen Diffusivität $\alpha = k/\rho c$. Dann ist T Lösung der Fourier-Wärmeleitungsgleichung (4.21) und T besitzt eine Darstellung

$$T(x) = T_i(x) + T_s(x)$$

als Summe des einfallenden Feldes T_i und des gestreuten Feldes T_s mit

$$T_s(x) = -\alpha_0 \int_0^\infty G(x,y)F(y)T(y)dy$$

und

$$T_i(x) = \frac{I}{\sigma_0 k_0} e^{-\sigma_0 x}$$

für $x > 0$.

Beweis: Einsetzen der Definition des Brechungsindexes liefert

$$\frac{d^2}{dx^2} T(x) = \begin{cases} \sigma(x)^2 T(x) & : \quad 0 \leq x \\ \sigma_0^2 T(x) & : \quad x < 0 \end{cases}$$

und demnach erfüllt T die Gleichung (4.21). Wir gehen aus von dem linearen Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \tfrac{d^2}{dx^2} T(x) - \sigma_0^2 T(x) &= F(x)T(x), \\ \tfrac{\partial^2}{\partial x^2} G(x,y) - \sigma^2 G(x,y) &= -\tfrac{1}{\alpha_0}\delta(x-y), \end{aligned}$$

das sich aus (4.25) und (4.26) ergibt und multiplizieren die erste Gleichung mit $G(x,y)$ und die zweite mit $T(x)$. Subtrahieren der beiden Gleichungen liefert dann

$$G(x,y)\frac{d^2}{dx^2}T(x) - T(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,y) = F(x)T(x)G(x,y) + \frac{1}{\alpha_0}\delta(x-y)T(x).$$

Nun integrieren wir obige Gleichung über die positive reelle Achse und erhalten:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\alpha_0}T(y) &= -\int_0^\infty G(x,y)F(x)T(x)dx \\ &\quad + \int_0^\infty G(x,y)\frac{d^2}{dx^2}T(x) - T(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}G(x,y)dx\end{aligned}$$

Ausnutzen der Symmetrie von G und Anwenden der zweiten Greenschen Formel ergibt

$$\begin{aligned}\frac{1}{\alpha_0}T(y) &= -\int_0^\infty G(x,y)F(x)T(x)dx \\ &\quad + \left[G(y,x)\frac{d}{dx}T(x) - T(x)\frac{\partial}{\partial x}G(y,x)\right]_{x=0} \\ &= -\int_0^\infty G(x,y)F(x)T(x)dx \\ &\quad + G(0,y)\frac{I}{k_0} \\ &= \frac{I}{\sigma_0\alpha_0 k_0}e^{-\sigma_0 y} - \int_0^\infty G(x,y)F(x)T(x)dx.\end{aligned}$$

■

Bemerkung 4.2.5 T_i ist Lösung der homogenen Gleichung:

$$\frac{d}{dx}T(x) - \sigma_0^2 T(x) = 0, \tag{4.27}$$

$$\frac{d}{dx}T(0) = -\frac{I}{k_0}. \tag{4.28}$$

Wir gehen im folgenden davon aus, daß das einfallende Feld bekannt ist; als Meßdaten stehen uns direkt die Streufelddaten zur Verfügung.

Bemerkung 4.2.6 *Das Streufeld erfüllt homogene Neumann Randbedingungen:*

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}T_s(x) &= -\alpha_0\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x}G(x,y)F(y)T(y)dy \\ &= \frac{1}{2}\int_0^\infty \left(\mathrm{sgn}(x-y)e^{-\sigma_0|x-y|} + \mathrm{sgn}(x+y)e^{-\sigma_0|x+y|}\right) \\ &\quad F(y)T(y)dy \\ \frac{\partial}{\partial x}T_s(x)|_{x=0} &= \frac{1}{2}\int_0^\infty \underbrace{(\mathrm{sgn}(-y)+\mathrm{sgn}(y))}_{=0} e^{-\sigma_0|y|}F(y)T(y)dy \\ &= 0\end{aligned}$$

Beispiel 4.2.7 Wir betrachten den halbunendlichen Stab mit Ortskoordinate $x \geq 0$. Werden Neumann Randbedingungen

$$\frac{\partial}{\partial x} T(x)|_{x=0} = -\frac{I}{k_1}$$

vorgegeben, so erhalten wir die exakte Lösung

$$T(x) = \frac{I}{k_1} e^{-\sigma_1 x}$$

Wir setzten nun die Lösung T in die Formel von Satz (4.2.4) ein, wobei wir das Medium mit den Eigenschaften k_0, σ_0 als homogene Schätzung interpretieren, Wir interessieren uns für die Temperatur im Meßpunkt $x = 0$:

$$\begin{aligned}
T(0) &= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \alpha_0 \int_0^\infty G(0, y) F(y) T(y) dy \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \alpha_0 \int_0^\infty \frac{1}{\sigma_0 \alpha_0} e^{-\sigma_0 y} F(y) T(y) dy \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \frac{1}{\sigma_0} \int_0^\infty e^{-\sigma_0 y} F(y) T(y) dy \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \frac{1}{\sigma_0} \int_0^\infty e^{-\sigma_0 y} (\sigma_1^2 - \sigma_0^2) T(y) dy \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \frac{\sigma_1^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0} \int_0^\infty e^{-\sigma_0 y} \frac{I}{\sigma_1 k_1} e^{-\sigma_1 y} dy \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \frac{\sigma_1 - \sigma_0}{\sigma_0} \frac{I}{\sigma_1 k_1} \\
&= \frac{I}{\sigma_0 k_0} - \frac{I}{\sigma_0 k_1} + \frac{I}{\sigma_1 k_1}
\end{aligned}$$

Interpretieren wir die zugrundeliegende Approximation (4.24) in der Art, daß $k_0 = k_1$, dann ergibt sich mit der Integralgleichungsdarstellung die exakte Lösung

$$T(0) = \frac{I}{\sigma_1 k_1}.$$

Ansonsten können wir direkt den relativen Fehler in der approximierten Lösung $\widetilde{T}$ quantifizieren:

$$\left| \frac{T(0) - \widetilde{T}(0)}{T(0)} \right| = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\alpha_1}} \left| 1 - \frac{k_1}{k_0} \right|$$

Beispiel 4.2.8 Als weiteres Beispiel betrachten wir den halbunendlichen Stab

$$\begin{aligned}
\alpha(x) &= \begin{cases} \alpha_1 & : \quad 0 \leq x \leq h, \\ \alpha_2 & : \quad h < x, \end{cases} \\
k(x) &= \begin{cases} k_1 & : \quad 0 \leq x \leq h, \\ k_2 & : \quad h < x, \end{cases}
\end{aligned}$$

der sich aus zwei Medien zusammen setzt. Die Temperaturverteilung ergibt sich zu:

$$T(x,\omega) = \begin{cases} A_1 e^{-\sigma_1 x} + B_1 e^{\sigma_1 x} & : \quad 0 \le x \le h \\ A_2 e^{-\sigma_2 (x-h)} & : \quad h < x \end{cases}$$

mit

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{I}{\sigma_1 k_1} \frac{1}{1 + R_1 e^{-2\sigma_1 h}}, \\ B_1 &= A_1 - \frac{I}{\sigma_1 k_1}, \\ A_2 &= A_1 e^{-\sigma_1 h} + B_1 e^{\sigma_1 h}. \end{aligned}$$

Mit dem Effusivitätskontrast $R_1 = (\sigma_2 k_2 - \sigma_1 k_1)/(\sigma_2 k_2 + \sigma_1 k_1)$. Die Temperatur an der Oberfläche ist

$$T(0) = A_1 + B_1 = \frac{I}{\sigma_1 k_1} \left[1 - 2 \left(1 - \frac{1}{1 + R_1 e^{-2\sigma_1 h}} \right) \right].$$

Auch hier können wir direkt den Anteil von einfallendem und gestreutem Feld identifizieren: Ist der Effusivitätskontrast $R_1 = 0$, so erhalten wir die Lösung für den homogenen Stab. Eine Abschätzung des relativen Modellfehlers läßt sich auch hier angeben; jedoch bietet der Term wenig direkt einsehbare Information, deswegen verzichten wir hier auf die exakte Darstellung. Von Interesse ist lediglich die Tatsache, daß

$$\left| \frac{T(0) - \tilde{T}(0)}{T(0)} \right| \sim \frac{1}{\sigma_0}$$

gilt, woran wir ablesen können, daß er für hohe Frequenzen (geringe Eindringtiefe) der Modellierungsfehler wie $1/\sqrt{\omega}$ fällt.

4.2.3 Bornapproximation

Das weitere Vorgehen betrifft nun die Lösung der Gleichung

$$T(0,\omega) = \int_0^\infty e^{-\sigma_0 y} F(y) T(y) dy \tag{4.29}$$

wobei als Besonderheit zu beachten ist, daß $\sigma_0 = (1+i)\sqrt{\omega/2\alpha_0}$ komplexwertig ist. Die als Born-Approximation bekannte Methode linearisiert die Gleichung (4.29), indem das Gesamt-Feld T durch das einfallende Feld T_i ersetzt wird:

$$\begin{aligned} T_s(0,\omega) &\approx -\alpha_0 \int_0^\infty \frac{1}{2\alpha_0 \sigma_0} 2 e^{-\sigma_0 y} T_i(y,\omega) F(y) dy \\ &= -\frac{1}{\sigma_0} \int_0^\infty e^{-\sigma_0 y} T_i(y,\omega) F(y) dy \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{\sigma_0}\int_0^\infty e^{-\sigma_0 y}\left(\frac{I}{\sigma_0 k_0}e^{-\sigma_0 y}\right)\left(\sigma(y)^2-\sigma_0^2\right)dy \\
&= -\frac{i\omega I}{\sigma_0^2 k_0}\int_0^\infty e^{-2\sigma_0 y}\left(\frac{1}{\alpha(y)}-\frac{1}{\alpha_0}\right)dy \\
&= -\frac{\alpha_0}{2k_0}I\int_0^\infty e^{-\sigma_0 y}\underbrace{\left(\frac{1}{\alpha(\frac{y}{2})}-\frac{1}{\alpha_0}\right)}_{:=f(y)}dy
\end{aligned}
$$

Diskretisierung obiger Gleichung führt auf ein komplexwertiges lineares Gleichungssystem, dessen Lösung F das gesuchte Objekt approximiert.

Bemerkung 4.2.9 Als Daten werden Temperaturwerte des Streufeldes an der Oberfläche benötigt. Diese können wiederum der Argumentation in (4.20) folgend gemäß

$$T_s(0,\omega) = T(0,\omega) - T(0,\omega_{max})\frac{\sqrt{\omega_{max}}}{\sqrt{\omega}}$$

berechnet werden.

Bemerkung 4.2.10 Ein Vorgehen, das bei der Approximativen Inversen für das inverse Medien Problem bei Ultraschallmessung erfolgreich angewendet wurde [1], beruht darauf, daß das Produkt des Feldes (hier Temperatur) und dem Objekt $T \cdot F$ als Ersatzobjekt aus der dann linearen Gleichung (4.29) bestimmt wird. In einem zweiten Schritt wird das Feld im Innern des Objektes mit der Kenntnis des Ersatzobjektes berechnet und letztlich das gesuchte Objekt durch Division des Ersatzobjektes durch das Feld im Innern des Objetes bestimmt. Dieses Vorgehen kann in unserem Fall nicht angewendet werden. Der Grund besteht in der Tatsache, daß das Temperaturfeld von der Frequenz abhängig ist, und daher das Produkt $T \cdot F$ nicht berechenbar ist. Eine Idee, in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt wurde, die aber eine weniger grobe Vereinfachung darstellen würde als es die Bornapproximation ist, soll hier noch kurz erwähnt werden. Und zwar wäre eine Annahme zu machen, daß das Temperaturfeld die gleiche Frequenzabhängigkeit vorweist wie das einfallende Feld, daß wir also einen Separationsansatz machen $T(x,\omega) = T(x)/\sqrt{\omega}$. Damit ist das Konzept der Approximativen Inversen gemäß [1] wieder in der oben kurz umrissenen Art und Weise anwendbar.

4.3 Inversion der Laplace-Transformation

Die Inversion der Laplace-Transformation aus diskreten, gemessenen und damit fehlerbehafteten Daten ist in der Literatur nur in wenigen Arbeiten behandelt worden. Das Problem ist exponentiell schlecht gestellt, und gilt daher als sehr problematisch, was den praktischen Einsatz angeht. In der Tat werden wir sehen,

daß einige Besonderheiten was die Darstellung der gesuchten Funktion sowie die Verteilung der Daten angeht zu beachten sind. Die Qualität erreichbarer Ergebnisse sind nicht vergleichbar mit denen mäßig schlecht gestellter Probleme.
Zwei Vorgehensweisen sind bei der Inversion der Laplace-Transformation üblich:

1. Substitution, die die Integration auf ein kompaktes Intervall überführt. Auf diesem Intervall wird die gesuchte Funktion in die entprechenden orthogonalen Polynome entwickelt und die Lösung des Haussdorf-Momenten-Problems liefert eine Approximation an die gesuchte Funktion [5], [7].

2. Ersetzen der Laplace Transformation durch eine Näherung der Art

$$\int_0^\infty e^{-xy} f(x)dx \approx \int_0^L e^{-xy} f(x)dx$$

und diskretisieren dieser Gleichung durch ein Projektionsverfahren [2].

Der erste Ansatz setzt allerdings Daten zu bestimmten Meßpunkten voraus, die es erlauben die Koeffizienten der orthogonalen Polynome in eindeutiger Weise zu bestimmen. Dies kann in der Praxis zu Problemen führen, wenn nur ganz bestimmte Meßpunkte vermessen werden können. In dieser Arbeit wird daher der zweite Ansatz verfolgt.

4.3.1 Diskretisierung der Laplacetransformation

Wir betrachten nun allgemein die Gleichung

$$g(y) = \int_0^\infty f(x)e^{-\sigma(y)x}dx \tag{4.30}$$

mit komplexwertigem f, $y = \sqrt{\omega}$ und $\sigma(y) = (1+i)y/\sqrt{2\alpha}$ Es seien Daten $g(y_j)$, $j = 1, \ldots, m$ gegeben mit aufsteigend sortierten y_j. Unter Ausnutzung von $\lim_{y\to\infty} yg(y) = f(0)$ approximieren wir das Integral (4.30) durch eine Summe:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(x)e^{-\sigma(y)x}dx \quad &\approx \quad \frac{y_m g(y_m) + f(x_1)}{2} \int_0^{x_1} e^{-\sigma(y)x}dx && (4.31)\\ &+\sum_{i=1}^{n-1} \frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-\sigma(y)x}dx && (4.32)\\ &+f(x_n)\int_{x_n}^\infty e^{-\sigma(y)x}dx && (4.33)\end{aligned}$$

Hierbei haben wir eine geeignete Zerlegung $x_0 = 0 < x_1 \ldots x_n < \infty$ der reellen Achse vorausgesetzt, die später noch näher betrachtet wird.. Außerdem wurde die Approximation $y_m\mathcal{L}(f)(y_m) \approx f(y_m)$ ausgenutzt, die für große y_m Gültigkeit besitzt, und es wurde angenommen, daß gilt

$$\lim_{x\to\infty} f(x) = 0.$$

Abkürzend schreiben wir

$$c_j(y) = \frac{1}{2}\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} e^{-\sigma(y)x}dx.$$

Umsortieren der obigen Summe (4.31) bis (4.33) liefert

$$\tilde{g}(y) := g(y) - \frac{y_m g(y_m)}{2}\int_0^{x_1} e^{-\sigma(y)x}dx \approx \sum_{j=1}^{n} c_j f(x_j). \tag{4.34}$$

Wir erhalten eine diskrete Lösung des Problems (4.30) als Lösung des linearen Gleichungssystems:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_1(y_0) & \cdots & c_n(y_0) \\ \vdots & & \vdots \\ c_1(y_{m-1}) & \cdots & c_n(y_{m-1}) \end{bmatrix}}_{:=C} \begin{pmatrix} f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{g}(y_0) \\ \vdots \\ \tilde{g}(y_{m-1}) \end{pmatrix}. \tag{4.35}$$

Handelt es sich um ein reellwertiges Objekt f so haben wir zwei Möglichkeiten zur Berechnung. Erstens belassen wir f bei der Rechnung komplexwertig, das Objekt wird dann dargestellt durch den Realteil der Lösung. Wie in [26] vorgeschlagen wird, kann der Betrag des berechneten Imaginärteiles als Hinweis für eine erfolgreiche Inversion angesehen werden, wenn er nahe Null ist. Alternativ kann f direkt als reellwertig angesetzt werden, und als Lösung des stark überbestimmten Systems

$$\begin{bmatrix} Re\,(C) \\ Im\,(C) \end{bmatrix} f = \begin{pmatrix} Re\,(\tilde{g}) \\ Im\,(\tilde{g}) \end{pmatrix}$$

berechnet werden.

4.3.2 Stützstellenwahl

Im vorigen Abschnitt wurde von einer "geeigneten" Zerlegung

$$x_0 = 0 < x_1 \ldots x_n < \infty$$

des Intervalles $[0, \infty)$ ausgegangen. Was unter "geeignet" verstanden werden kann, soll im folgenden hergeleitet werden. Wir gehen vom technologisch motivierten Begriff der thermischen Eindringtiefe μ aus, die üblicherweise definiert wird als die Tiefe, bei der die einfallende thermische Welle bis auf den Faktor $1/e$ abgeschwächt ist.

$$\begin{aligned} \left|e^{-\bar{\sigma}\mu}\right| &= \left|e^{-1}\right|, \\ \mu &= \sqrt{\frac{\bar{\alpha}}{\omega}}. \end{aligned}$$

Erfahrungsgemäß sind photothermische Verfahren sensitiv für Diffusivitätsänderungen bis zu dieser Tiefe. Eine äquidistante Verteilung der Eindringtiefen

$$\mu_l = \mu_0(1 + l\Delta\mu) \tag{4.36}$$

entpricht demnach einer Verteilung der Anregungsfrequenzen

$$\sqrt{\omega_l} = \frac{1}{\sqrt{\omega_0}} + l\frac{\Delta\mu}{\sqrt{\omega_0}}. \tag{4.37}$$

Um ein besseres Verständnis für den Effekt der thermischen Eindringtiefe zu ermöglichen, führen wir den mathematisch motivierten Begriff der sprungsensitiven thermischen Eindringtiefe ein.

Definition 4.3.1 *Es seien Meßdaten $g^\epsilon(\omega)$ zu Anregungsfrequenzen ω gegeben, mit*

$$\left|\frac{g^\epsilon(\omega) - g(\omega)}{g(\omega)}\right| = \left|\frac{g^\epsilon(\omega) - \mathcal{L}_{\alpha_0}(f)(\omega)}{\mathcal{L}_{\alpha_0}(f)(\omega)}\right| < \epsilon \textit{ für alle } \omega$$

mit

$$\mathcal{L}_{\alpha_0}(f)(\omega) = \int_0^\infty \exp\left(-(1+i)\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha_0}}\right) f(x)dx.$$

Weiterhin sei

$$f_{\mu,\delta} = \begin{cases} f(x) & : \ x \le \mu, \\ (1+\delta)f(x) & : \ \mu < x. \end{cases}$$

Wir definieren die (sprungsensitive) thermische Eindringtiefe μ *als die Tiefe, für die gilt:*

$$\left|\frac{\mathcal{L}(f_{\mu,\delta})(\sigma_0) - \mathcal{L}(f)(\sigma_0)}{\mathcal{L}(f)(\sigma_0)}\right| = \delta \left|\frac{\int_\mu^\infty \exp(-\sigma_0 x) f(x)dx}{\int_0^\infty \exp(-\sigma_0 x) f(x)dx}\right| = \epsilon. \tag{4.38}$$

Bemerkung 4.3.2 Der Zusatz sprungsensitiv wird eingeführt, um zu verdeutlichen, daß μ gerade die Tiefe ist, in der Sprünge in der gesuchten Funktion um eine relative Höhe δ gerade zu Änderungen in den Meßdaten führen, die in der Gößenordnung der Meßgenauigkeit liegen. Letztlich ist die so definierte Eindringtiefe abhängig von der gesuchten Funktion f. Im speziellen Fall $f \equiv 1$ erhalten wir

$$\delta \left|\frac{1/\sigma_0 \exp(-\mu\sigma_0)}{1/\sigma_0}\right| = \delta \left|e^{-\mu\sigma_0}\right| = \epsilon, \tag{4.39}$$

das heißt

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\omega}}\sqrt{2}\ \ln\left(\frac{\delta}{\epsilon}\right). \tag{4.40}$$

und für $\delta = \exp(\sqrt{2})\epsilon$ erhalten wir die klassische Eindringtiefe (4.36). Liegt ein Frequenz-Scan $g(\omega_i)$, $i = 1..m$ vor, so ergeben sich aus obiger Formel die minimale und maximale Eindringtiefe:

$$\mu_{min} = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\omega_{max}}} \quad \sqrt{2}\,\ln\left(\frac{\delta}{\epsilon}\right) \qquad \mu_{max} = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\omega_{min}}} \quad \sqrt{2}\,\ln\left(\frac{\delta}{\epsilon}\right)$$

Es wäre naheliegend, die Stützstellen für f so wie die thermischen Eindringtiefen zu wählen. Dem spricht einerseits entgegen, daß die Eindringtiefen vom zu untersuchenden Objekt abhängen. Andererseits muß bedacht werden, daß die Diskretisierung im allgemeinen feiner gewählt werden muß, um den Diskretisierungsfehler (4.43) gering zu halten. eine Anpassung der Diskretisierung an das Objekt ist prinzipiell sinnvoll, und kann iterativ geschehen. Von einer solchen Anpassung wurde bei den nachfolgenden Beispielen jedoch abgesehen. Statt dessen wurde die Diskretisierung für das Objekt $f \equiv 1$ optimal gewählt gemäß der Forderung

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} e^{-|\sigma_0|x} dx = \frac{1}{n+1} \int_0^\infty e^{-|\sigma_0|x} dx.$$

Hierdurch ist gewährleistet, daß bei der Anregung mit der größten Eindringtiefe die Anteile des Intervalles $[x_j, x_{j+1}]$ für alle j mit gleichem Gewicht eingehen.

4.3.3 Volldiskrete Approximative Inverse

Die Approximative Inverse [19] hat sich als Mittel der Wahl zur Regularisierung schlecht gestellter linearer und einiger nichtlinearer inverser Probleme, sowie als Verallgemeinerung des Konzeptes der Pseudo-Inversen [18] etabliert. Vorteile dieses Ansatzes sind die vielfältigen Möglichkeiten eine Regularisierung bei der Lösung des inversen Problems einzuführen, und insbesondere durch das Betrachtung des kontinuierlichen Problems sehr effiziente Lösungsalgorithmen anzugeben, die gewisse Invarianzeigenschaften des Operator ausnutzen. An dieser Stelle soll das Konzept der Approximativen Inversen für ein als Matrixgleichung - also bereits diskret gegebenes Problem formuliert werden, ohne jedoch auf effizienzsteigernde Methoden einzugehen.
Weiterhin beschränken wir uns auf den eindimensionalen Fall. Wir gehen aus von der kontinuierlichen Gleichung

$$(Bf)(y) = \int_0^1 f(x)k(x,y)dx = g(y) \tag{4.41}$$

mit dem quadratintegrierbaren Kern k, und den Daten g. Es seien diskrete Meßdaten an den Meßpunkten y_i, $i = 1, \ldots, m$ gegeben. Gesucht seien Näherungen für die Funktion f in den Rekonstruktionspunkten x_j, $j = 1, \ldots, n$. A sei eine diskrete Version des Operators B, der durch die Anwendung einer Integrationsformel auf die Gleichung (4.41) und eine Zerlegung $X_n : 0 = x_1 < \ldots x_n < 1$, bzw. durch Anwendung eines Projektionsverfahrens entsteht:

$$S_X(v) := \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j v(x_j) \approx \int_0^1 v(x)dx \tag{4.42}$$

Der Diskretisierungsfehler sei beschrieben durch Δ:

$$(Af + \Delta f)(y) = Bf(y) \tag{4.43}$$

Sei

$$\begin{aligned} f &= (f(x_1), \ldots, f(x_n))^T &\in& \mathbb{R}^n, \\ g &= (g(y_1), \ldots, g(y_m))^T &\in& \mathbb{R}^m, \\ A &= (a)_{i,j} = \alpha_j k(x_j, y_i) &\in& \mathbb{R}^{m\times n}. \end{aligned}$$

Weiterhin heiße E_γ ein *diskreter Mollifier* wenn gilt

$$\lim_{\gamma\to 0} E_\gamma = Id \in \mathbb{R}^{n\times n}, \tag{4.44}$$

$$\|E_\gamma\|_\infty = 1, \tag{4.45}$$

mit der Identität Id und der Zeilensummennorm. Unser Ziel ist nun die Berechnung einer Näherung

$$f_\gamma := I_\gamma f$$

Der Mollifier E_γ werde durch eine quadratintegrierbare Funktion $\tilde{e}_\gamma(x)$ erzeugt:

$$e_\gamma(i,j) := \tilde{e}_\gamma(x_j - x_i), \tag{4.46}$$

$$(I_\gamma)_{i,j} := \frac{e_\gamma(i,j)}{\sum_{k=1}^n e_\gamma(i,k)}. \tag{4.47}$$

Dann gilt $\|E_\gamma\|_\infty = 1$ in der Zeilensummennorm. Der Mollifier kann zum Beispiel mit dem Gauss-Kern gebildet werden.

$$\tilde{e}_\gamma(x) := \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\gamma}\right)^2\right)$$

Die sogenannte Approximative Inverse f_γ berechnen wir nun allein mit Mitteln der linearen Algebra:

$$\begin{aligned} f_\gamma &= (E_\gamma)^T f \\ &= \left(A^T \psi_\gamma\right)^T f \\ &= \psi_\gamma^T A f \\ &= \psi_\gamma^T g - \psi_\gamma^T \Delta f \\ &\approx \psi_\gamma^T g \end{aligned}$$

Die Matrix $\psi_\gamma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ heißt *diskreter Rekonstruktionskern.* Die Berechnung der Lösung f_γ ist damit im wesentlichen auf das Problem der Berechnung von ψ_γ mittels

$$A^T \psi_\gamma = E_\gamma \tag{4.48}$$

verlagert, das durch Anwendung einer Regularisierung T_{γ_2} von A^T berechnet wird:

$$\psi_\gamma \approx \psi_{\gamma_1,\gamma_2} := T_{\gamma_2} E_{\gamma_1}.$$

Es gibt also nun zwei Regularisierungsparameter, den Parameter des Mollifiers γ_1, und den Regularisierungsparameter bei der Lösung des Gleichungssystems (4.48) γ_2 . Wenn wir lediglich an der Lokalisierung von Sprüngen interessiert sind, so ist die Berechnung der Ableitung f' von f interessant. Diese kann direkt berechnet werden. Hierzu ersetzen wir den Mollifier I_γ durch einen differenzierenden Mollifier D_γ der definiert ist durch

$$\lim_{\gamma\to 0} D_\gamma = D \in \mathbb{R}^{n\times n} \tag{4.49}$$

$$\|D_\gamma\|_\infty = \|D\|_\infty \tag{4.50}$$

und D ist ein diskreter Diffentialoperator, der durch ein Verfahren zur numerischen Differentiation gewonnen wird. Eine mögliche Wahl für D_γ ergibt sich durch Glättung von D in der Art

$$D_\gamma = E_\gamma D$$

denn damit ist $\psi_\gamma^T g \approx E_\gamma D f$.

4.3.4 Algorithmus zur Inversion der Thermo-Laplace Transformation

Unter Verwendung der Ergebnisse dieses Kapitels kann ein Algorithmus zur Bestimmung einer Funktion $f : \mathbb{R}^+ \to \mathbb{C}$, die

$$g(\omega) = \mathcal{L}_{\alpha_0}(f)(\omega) = \int_0^\infty f(x) \exp\left((1+i)\sqrt{\frac{\omega}{2\alpha_0}}\,x\right) dx$$

näherungsweise erfüllt, angegeben werden. Einschränkend ist zu bemerken, daß f nur in einem Intervall $[\mu_{min}, \mu_{max}]$ bestimt werden kann, und daß gewisse Forderungen an die Verteilung der (diskret) gegebenen Daten $g(\omega_j)$, $j = 0 \dots m-1$ zu stellen sind. Insbesondere muß das maximale ω_{max} so groß gewählt sein, daß die Approximation $\sigma_0 \mathcal{L}_{\alpha_0}(f)(\omega_{max}) \approx f(0)$ hinreichend genau erfüllt ist. Weiterhin wird angenommen daß $\lim_{x\to\infty} f(x) = 0$.

Algorithmus 4.3.3 *Inversion der Thermo-Laplace Transformation*

1. **Input:** Daten $g(\omega_j)$ und Frequenzen ω_j für $j = 0, \dots, m-1$

2. **Input:** Regularisierungsparameter γ_1, γ_2

3. **Input:** Schätzung für die mittlere Diffusivität α_0

4. **Input:** Anzahl Stützstellen n der zu rekonstruierenden Funktion f

5. **Init:** Stützstellen von f

$$\begin{aligned} s &= \sqrt{\frac{\omega_{min}}{\alpha_0}} \\ x_n &= -\frac{1}{s}\log(\frac{1}{n+1}) \\ \Delta_j &= \frac{1}{s}\log\left(1+\exp(sx_{j+1})\frac{1}{n+1}\right) \\ x_j &= x_{j+1} - \Delta_j \end{aligned}$$

   $j = 2, \ldots, n-1$. Die Anzahl der Stützstellen n ist so groß zu wählen, daß der Einfluß des Diskretisierungsfehlers ausreichend gering wird. Setze zum Beispiel $n = 400$.

6. **Init:** Mollifier $E_{\gamma_1} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ gemäß (4.47):

$$(E_{\gamma_1})_{i,j} = \frac{e_{\gamma_1}(x_i - x_j)}{\sum_{k=1}^n e_{\gamma_1}(x_i - x_k)}$$

   Mit einer geeigneten Funktion $e_{\gamma_1}(x)$.

7. **Init:** Diskreter Operator $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ gemäß (4.35):

$$A_{i,j} = \frac{1}{2}\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \exp(-\sigma_j x)dx.$$

8. **Compute:** Berechne modifizierte Daten gemäß (4.34):

$$\tilde{g}(y) := g(y) - \frac{y_m g(y_m)}{2} K(0, x_1).$$

9. **Compute:** Löse näherungsweise lineares Gleichungssystem für den Rekonstruktionskern $\Psi_{\gamma_1,\gamma_2} \in \mathbb{C}^{n\times m}$

$$A^H \Psi_{\gamma_1,\gamma_2} = E_{\gamma_1},$$

   indem A^H durch eine geeignete Regularisierung zum Parameter γ_2 ersetzt wird.

10. **Compute:** Die Lösung $f \in \mathbb{C}^n$ ergibt sich durch Multiplikation des Rekonstruktionskernes mit den Daten:

$$f = \Psi^H_{\gamma_1,\gamma_2}\tilde{g}.$$

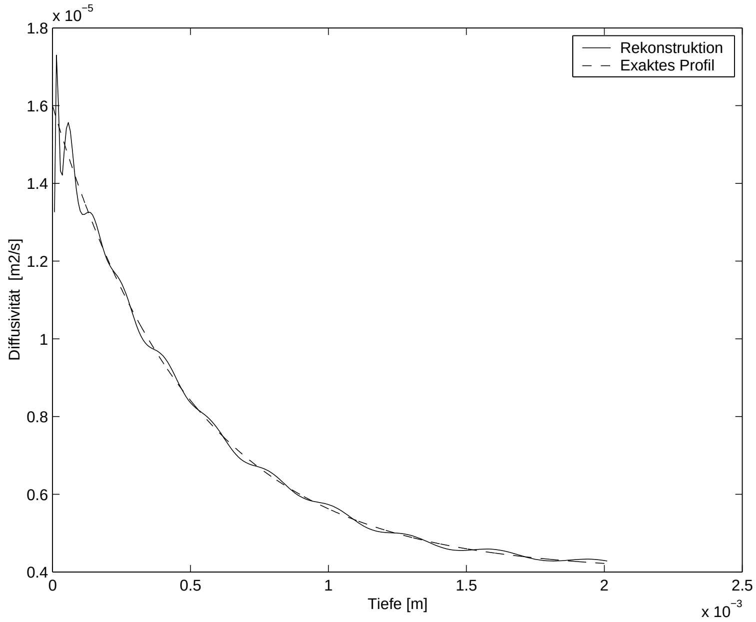

Abbildung 4.1: *Phantom-Profil Stahl, m=100 Frequenzen,* $0.16 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$, $\gamma_1 = 1$, $\gamma_2 = 3.9 \cdot 10^{-15}$ *entspr.* 30 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 0\%$.

4.3.5 Numerische Ergebnisse

Hier werden Rekonstruktionen zweier Phantome bei unterschiedlichem Rauschniveu in den Daten präsentiert. Das erste Phantom

$$f_1(x) = \alpha_0(1 + 3\exp(-2000x))$$

wurde bei Mandelis [20] als typisches Diffusivitätsprofil bei gehärtetem Stahl angesetzt. Das zweite Phantom zeigt die Rekonstruktionsgüte bei einer unstetigen Funktion, bei der der Übergang zwischen einer Lack- und einer Metallschicht simuliert wird:

$$f_2(x) = \begin{cases} 10^{-7} & : \; 0 < x < 50\mu m, \\ 4 \cdot 10^{-6} & : \; 50\mu m \leq x. \end{cases}$$

Die Daten wurden ohne Modellfehler erzeugt, indem zur Datenerzeugung analytisch berechnete Thermo-Laplace Transformierte ausgewertet wurden. Der Datenfehler ϵ wird relativ angegeben, so daß die gestörten Datensätze g_ϵ (als Vektoren aufgefaßt) die folgende Gleichungen

$$\frac{|\angle g(k) - \angle g_\epsilon(k)|}{|\angle g(k)|} \leq \epsilon,$$

$$\frac{|g(k) - g_\epsilon(k)|}{|g(k)|} \leq \epsilon,$$

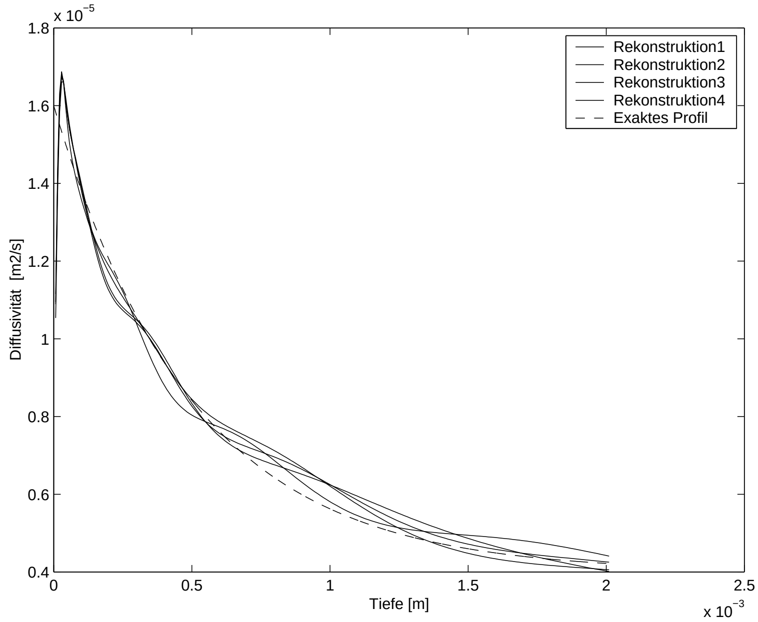

Abbildung 4.2: *Phantom-Profil Stahl, m=100 Frequenzen,* $0.16 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$, $\gamma_1 = 2$, $\gamma_2 = 3.06 \cdot 10^{-6}$, *entspr.* 8 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 1\%$.

für $k = 0, \ldots, m$ erfüllen. Diese Art den Fehler in den Daten zu quantifizieren, nämlich relativ in Phase und Ampliutude, ist realitätsnäher, als den Fehler in der 2-Norm des Datenvektors zu messen, was die übliche Vorgehensweise ist. Als Mollifier wurde beim Stahlprofil der Gausskern gewählt, der an die nicht-äquidistante Diskretisierung durch die Mollifierdefinition

$$e_\gamma(k,l) = \tilde{e}_\gamma \left(\frac{k-l}{n\gamma} \right)$$

angepaßt wurde. Es ist naheliegend, zur Rekonstruktion einer glatten Funktion einen glatten Mollifier heranzuziehen. Zur Rekonstruktion des zweiten Phantoms wurde dementsprechend die charakteristische Funktion als Mollifier herangezogen.

Nach Anpassung eines geeigneten Spektrums von Anregungsfrequenzen können auch gestörte Daten zur Rekonstruktion herangezogen werden. Aus der Erfahrung heraus kann der Regularisierungsparameter γ_2 bei gestörten Daten relativ unabhängig vom Rauschniveau eingestellt werden. Unglätte der rekonstruierten Funktion kann per fein-tuning mit γ_1 ausgeglichen werden. Als Regularisierungsverfahren bei der Lösung des Gleichungssytems für die Rekonstruktionskerne wurde die abgeschnittene Singulärwertzerlegung benutzt. Die Abschneidefrequenz bei den Beispielen zu gestörten Daten (Abb. 4.2), (Abb. 4.3) entprechen dem Betrag

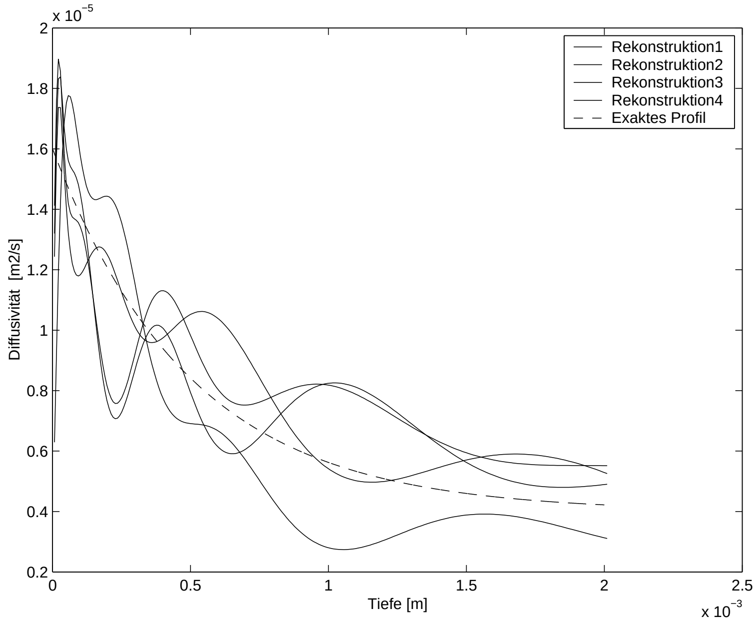

Abbildung 4.3: *Phantom-Profil Stahl, m=100 Frequenzen,* $0.16 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$, $\gamma_1 = 2$, $\gamma_2 = 3.06 \cdot 10^{-6}$ *entspr.* 8 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 5\%$.

des 9. Singulärwertes, die im Beispiel mit ungestörten Daten (Abb. 4.1) entprechen dem Betrag des 30. Singulärwertes. Da es sich um ein exponentiell schlecht gestelltes Problem handelt, ist es angebracht statt von exakten Daten, von Daten mit einem Rauschniveau in der Größenordnung der Rechengenauigkeit zu sprechen. Solche Störungen wirken bereits stark destabilisierend auf den Inversionsprozeß, so daß Regularisierung notwendig wird. Abschließend ist anzumerken, daß die exakte Wahl der optimalen Regularisierungsparameter keine so große Rolle spielt wie bei manchen besser gestellten Problemen. So führen die Rekonstruktionen zu Daten mit 1% und 5% mit den gleichen Regularisierungsparametern zu vergleichbaren Ergebnissen. Die visuell erfaßbare Glattheit der berechneten Rekonstruktionen rührt daher, daß diese aus lediglich 8 oder 9 singulären Funktionen zusammengesetzt sind.

Die Beispiele zeigen deutlich die Grenzen der Inversion der Laplacetransformation bei diskret gegebenen und störungsbehafteten Daten. Für eine den Umständen entsprechenden optimalen Rekonstruktion sind nicht nur die Regularisierungsparameter von Bedeutung, sondern insbesondere eine geeignete Verteilung der Anregungsfrequenzen, ein dazu passendes Rekonstruktionsintervall und eine geeignete Verteilung der Stützstellen der rekonstruierten Funktion. Ist eine dieser Forderungen verletzt so bedeutet dies häufig, daß die rekonstruierte Funktion extrem von der gesuchten abweicht.

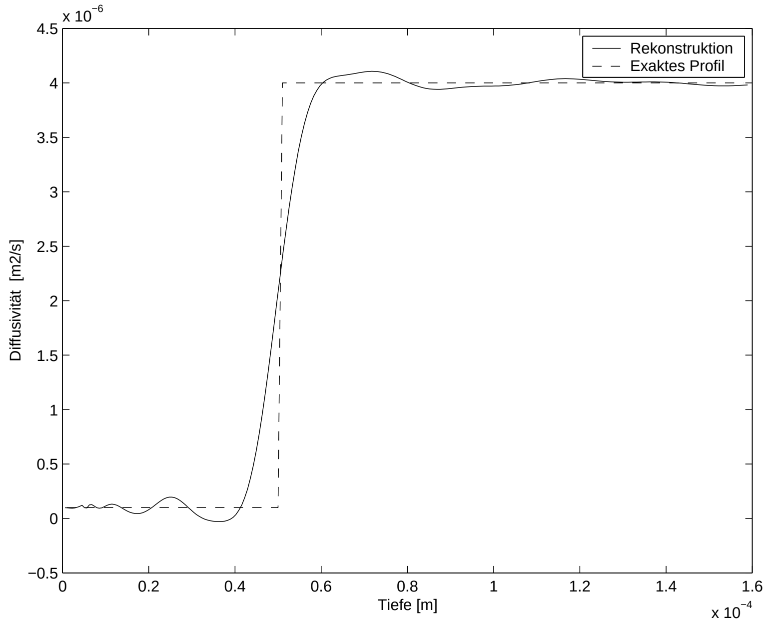

Abbildung 4.4: *Phantom-Profil Lack, m=100 Frequenzen,* $1 < f < 1600$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$, $\gamma_1 = 0.02$, $\gamma_2 = 1.06 \cdot 10^{-18}$ *entspr.* 35 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 0\%$.

4.4 Anwendung und Vergleich der Verfahren

In diesem Abschnitt werden die beiden Verfahren nach Bertolotti (4.1) und via Born Approximation (4.2.3) miteinander verglichen. Dabei soll aber eine realistischere Datenlage Ausgangspunkt sein, als es im vorigen Abschnitt der Fall war. Die Daten werden hier mit dem Schichtmodell (2.2.3) produziert. Dieses Modell ist nicht linear, und somit zeigen sich hier auch die Effekte durch Linearisierung und Modellbildung, wie sie in den vorigen Abschnitten dokumentiert sind. Besonders interessant ist vor diesem Hintergrund inwiefern Rekonstruktionsmethoden konkurrenzfähig sein können zu den vorgestellten Methoden der nichtlinearen Parameteridentifizierung zur Bestimmung der Lackschichtdicke. Da keine passenden real gemessenen Daten vorliegen, wird hier auf synthetisch erzeugte zurückgegriffen. Die zu vergleichenden Algorithmen werden nun noch einmal im Detail vorgestellt.

Algorithmus 4.4.1 *Profilrekonstruktion nach Bertolotti*

1. **Input:** Daten $dat(\omega_j)$ und Frequenzen ω_j für $j = 0, \ldots, m-1$

2. **Input:** Regularisierungsparameter γ_1, γ_2

3. **Input:** Schätzung für die mittlere Diffusivität der Lackschicht α_0

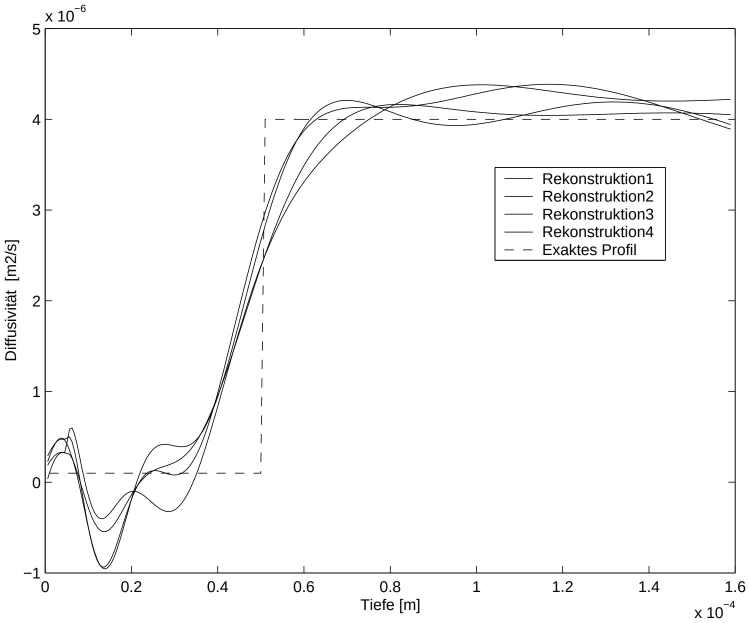

Abbildung 4.5: *Phantom-Profil Lack, m=100 Frequenzen,* $1 < f < 1600$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$, $\gamma_1 = 0.02$, $\gamma_2 = 1.15 \cdot 10^{-7}$ *entspr.* 9 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 1\%$.

4. **Input:** Anzahl Stützstellen n der zu rekonstruierenden Funktion f

5. **Init:** Stützstellen von f wie in (4.3.3)

6. **Compute:** Modifizierte Daten S_j, $j = 1, \ldots, m$ (4.14):

$$g_j := -2\,\frac{S_j - S_m \cdot \sqrt{\omega_m/\omega_j}}{S_j + S_m \cdot \sqrt{\omega_m/\omega_j}}$$

7. **Compute:** Inversion der Thermo-Laplace-Transformation mittels Algorithmus (4.3.3) Rekonstruktion : f

8. **Compute:**

$$\begin{aligned} e(x_1) &= \frac{1}{|S_m\sqrt{\omega_m}|}x_1, \\ e(x_j) &= e_{j-1} + \frac{1}{2}\,(x_j - x_{j-1})\,(\mathrm{real}(f_{j-1}) + \mathrm{real}(f_j))\,, \quad j = 2, \ldots, n, \\ e(x_j) &= \frac{1}{|S_m\sqrt{\omega_m}|}\exp(e(x_j)), \quad j = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

Algorithmus 4.4.2 *Profilrekonstruktion mittels Born Approximation*

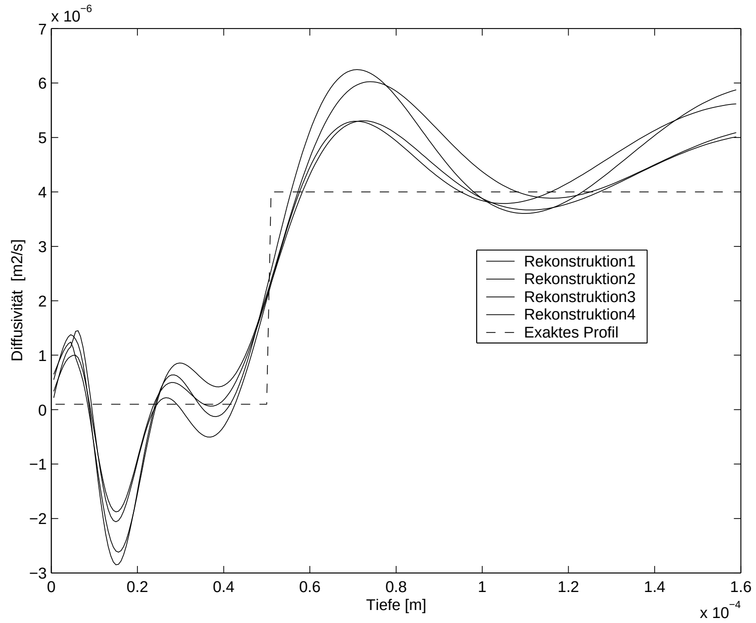

Abbildung 4.6: *Phantom-Profil Lack, m=100 Frequenzen,* $1 < f < 1600$ *Hz, Diskretisierung* $n = 400$*,* $\gamma_1 = 0.02$*,* $\gamma_2 = 2.4e \cdot 10^{-7}$ *entspr.* 8 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 5\%$.

1. **Input:** Daten $dat(\omega_j)$ und Frequenzen ω_j für $j = 0, \ldots, m-1$
2. **Input:** Regularisierungsparameter γ_1, γ_2
3. **Input:** Schätzung für die mittlere Diffusivität der Lackschicht α_0
4. **Input:** Anzahl Stützstellen n der zu rekonstruierenden Funktion f
5. **Init:** Stützstellen von f wie in (4.3.3)
6. **Compute:** Modifizierte Daten S_j, $j = 1, \ldots, m$ (4.14):
$$g_j := -\left(S_j - S_m \cdot \sqrt{\omega_m/\omega_j}\right)$$
7. **Compute:** Inversion der Thermo-Laplace-Transformation mittels Algorithmus (4.3.3) Rekonstruktion : f, Realteil von f ist rekonstruierte Diffusivität.

In den Grafiken werden die Rekonstruktionen nur bis zu einer maximalen Eindringtiefe von
$$x_{max} = \sqrt{\frac{\alpha_0}{\omega_0}}$$
geplottet.

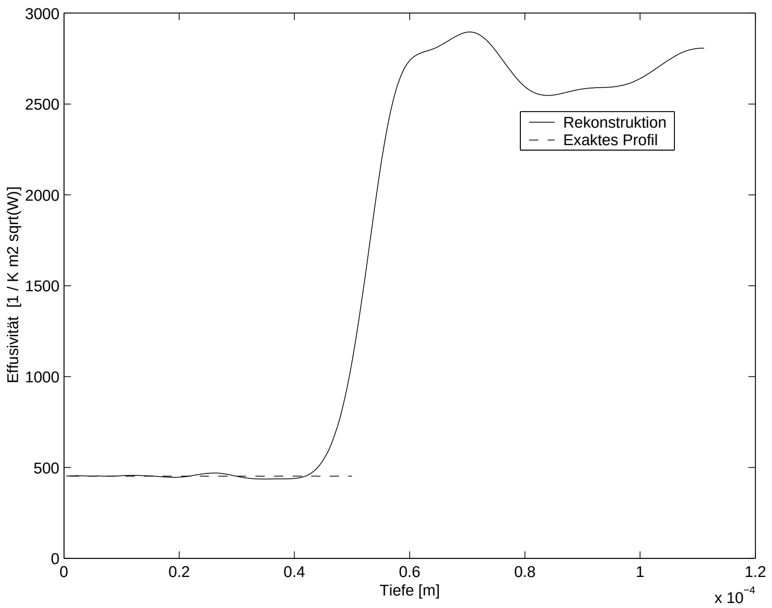

Abbildung 4.7: *Phantom-Profil Lack, Bertolotti Algorithmus. m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$, $\gamma_1 = 0.02$, $\gamma_2 = 7.3 \cdot 10^{-21}$ *entspr.* 40 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 0\%$.

Betrachten wir die Rekonstruktionen, die mit dem Bertolotti Algorithmus berechnet wurden (Abb. 4.7, 4.8, 4.9), so fällt auf, daß unabhängig vom Rauschniveau, die oberste Schicht sehr gut rekonstruiert werden kann. Doch sogar bei exakten Daten machen sich Instabilitäten in der zweiten Schicht bemerkbar. Ursache hierfür ist in der Tatsache zu suchen, daß beim Bertolotti Algorithmus die Funktion

$$\frac{e'(x)}{e(x)}$$

rekonstruiert wird, eine Funktion, die beim Übergang zwischen den Schichten eine Singularität hat. Die Rekonstruktion ist an dieser Stelle durch das Problem bedingt sehr instabil. Die gezeigten Plots stellen die Effusivität $e(x)$ dar, die sich durch Integration der rekonstruierten Funktion ergibt. Die Instabilität bei der Rekonstruktion in der Nähe der Singularität setzt sich hier fort in der Instabilität der Effusivität für Tiefen jenseits der Singularität. Während die berechnete Effusivität bei exakter Schätzung von α_0 quantitativ berechnet wird, ist sie aus oben genannten Gründen nach dem Sprung nicht mehr in der richtigen Größenordnung. Für die Lokalisierung des Sprunges, also der Bestimmung der Schichtdicke der obersten Schicht ist dies jedoch auch nicht erforderlich.

Bei Rekonstruktion mit dem Born Algorithmus (Abb. 4.11, 4.12, 4.13) tritt diese Problematik nicht auf. Wir rekonstruieren hier eine andere Größe, die Diffusi-

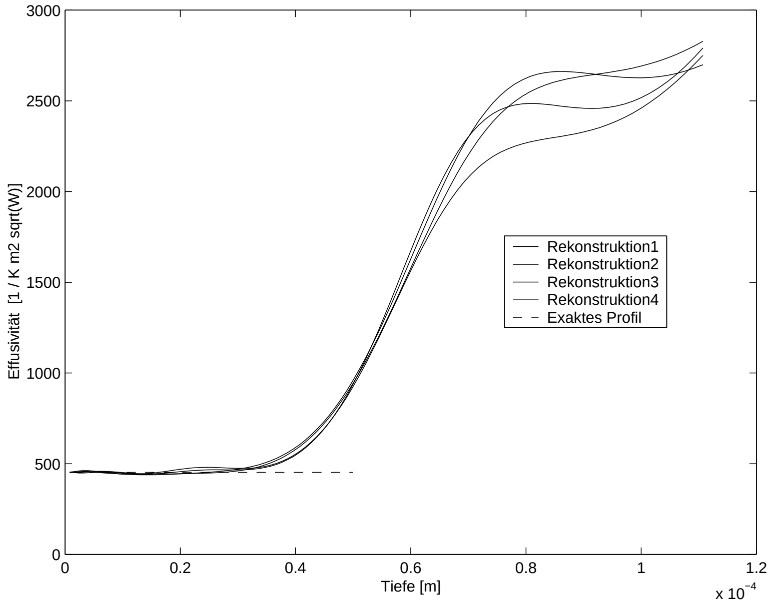

Abbildung 4.8: *Phantom-Profil Lack, Bertolotti Algorithmus. m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$, $\gamma_1 = 0.01$, $\gamma_2 = 1.87 \cdot 10^{-7}$ *entspr. 9 Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 1\%$.

vität, genauer die reziproke Diffusivitätsdifferenz

$$\frac{1}{\alpha(x)} - \frac{1}{\alpha_0}.$$

Bei exakter Schätzung für α_0 ergibt diese Differenz 0 für $x < L = 50\mu m$. Die Notwendigkeit starker Regularisierung bei verrauschten Daten führt, verglichen mit dem Bertolotti Algorithmus, zu weniger guten Ergebnissen für die erste Schicht. Aber in der Tiefe erhalten wir bessere Ergebnisse, auch wenn die Maßgabe, daß $f(x) \to 0$ für große x sich deutlich auswirkt. Das Plotten mehrerer Rekonstruktionen soll eine Vorstellung davon davon vermitteln, mit welcher Reproduzierbarkeit gerechnet werden kann.

Um die Tauglichkeit der Verfahren bei der Schichtdickenmessung zu prüfen, definieren wir den folgenden Benchmark: Es wird ein Frequenzscan mit 100 Frequenzen zwischen $0.3Hz$ und $400Hz$ zur Verfügung gestellt. Alle Daten sind mit einem Rauschen von 1% gestört. Beide Algorithmen sollen zur Berechnung von 6 Schichtdicken zwischen $40\mu m$ und $50\mu m$ eingesetzt werden. Die Diskretisierung wird mit $n = 600$ so gewählt, daß wir im relevanten Tiefenbereich eine Auflösung von etwa $1/3\mu m$ erhalten. Beim Bertolitti Algorithmus wird die Tiefe des Maximums der Funktion e'/e als Schichtdicke ausgegeben. Bei der Born-Approximation setzten wir als erzeugende Funktion für den Mollifier das Haar-

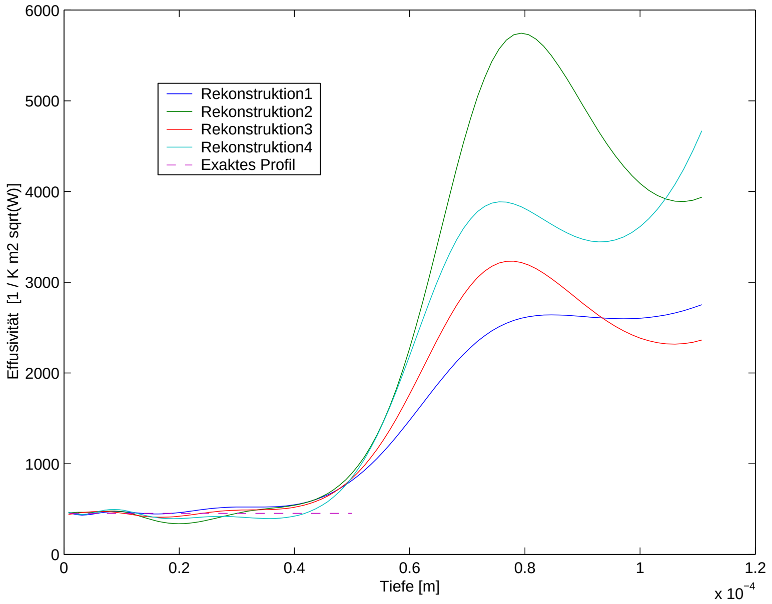

Abbildung 4.9: *Phantom-Profil Lack, Bertolotti Algorithmus. m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$*,* $\gamma_1 = 0.01$*,* $\gamma_2 = 1.87 \cdot 10^{-7}$ *entspr. 9 Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 5\%$.

Wavelet

$$e_\gamma(x) = \begin{cases} -1 & : \quad 0 < x < \gamma \\ +1 & : \quad -\gamma < x \leq 0 \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases}$$

ein, um eine Approximation an die Ableitung der Funktion zu erhalten. Von der rekonstruierten Funktion bestimmen wir ebenfalls das Maximum als Schichtdicke. In den Abbildungen (4.10, 4.14) sehen wir die entsprechenden Rekonstruktionen für unterschiedliche Rauschniveaus. Schon visuell ist feststellbar, daß hier der Born Algorithmus stabiler erscheint unter dem Einfluß von Rauschen. Und dies bestätigt auch die die folgende Tabelle.

Exakte Dicke	Berechnete Dicke Bertolotti Algorithmus	Berechnete Dicke Born-Approximation
40 μm	38.8	40.1
42 μm	40.1	42.1
44 μm	42.8	44.5
46 μm	44.2	46.3
48 μm	48.4	48.4
50 μm	48.8	50.1

Die berechneten Dicken stimmen beim Born-Algorithmus in der Größenordnung der Auflösung mit den exakten Dicken überein. Bei der Lösung nach Bertolotti

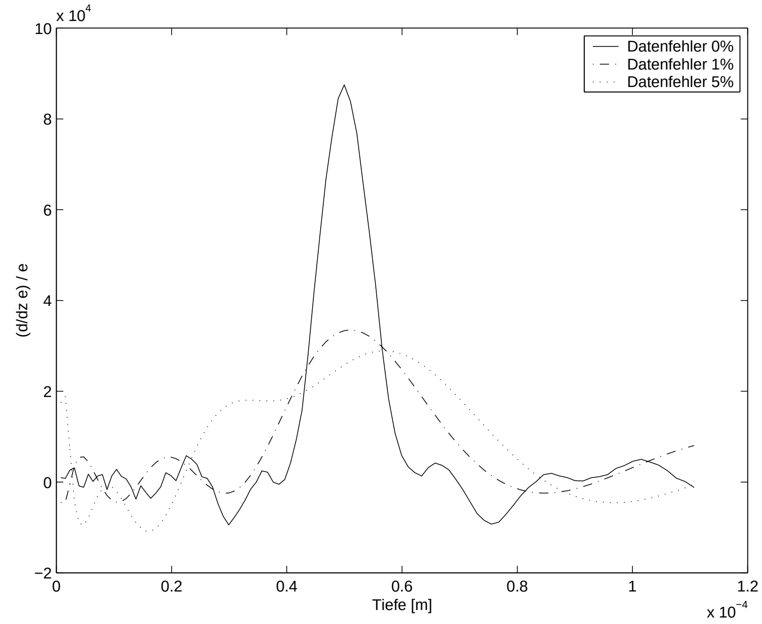

Abbildung 4.10: *Phantom-Profil Lack, Bertolotti Algorithmus. Vergleich Sprungrekonstruktion bei verschieden hohem Rauschniveu. m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 600$.

wird zwar die Monotonie der Dickenabfolge eingehalten, sie wird aber im Mittel um etwa $1.5\,\mu m$ zu gering errechnet.

Die Frage, ob nun diese Algorithmen in der Praxis Anwendungen finden können, ist insbesondere bestimmt durch die Frage, ob entsprechende Daten in der erforderlichen Zeit aufgenommen werden können. Nicht zu vergessen ist auch die Tatsache, daß bei den Untersuchungen in diesem Kapitel die Effekte Tiefenabsorption und Tiefenemission nicht berücksichtigt wurden. Auch wäre der Fall dünner Metallschichten, auf die der Lack aufgebracht ist weiter zu untersuchen, da er in der Praxis eine Rolle spielt. Es wurde jedoch nachgewiesen, daß Rekonstruktionsverfahren erfolgreich angewendet werden können, und es bleibt nun der Meßtechnik überlassen der Frage nachzugehen, ob Daten in hinreichender Qualität zur Verfügung gestellt werden können.

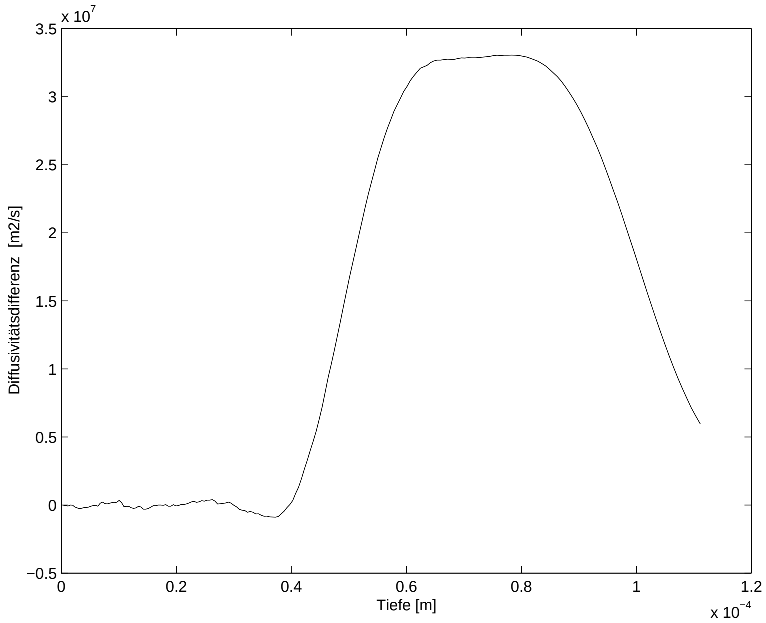

Abbildung 4.11: *Phantom-Profil Lack, Born Approximation, m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$, $\gamma_1 = 0.04$, $\gamma_2 = 9.11 \cdot 10^{-21}$ *entspr. 40 Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 0\%$.

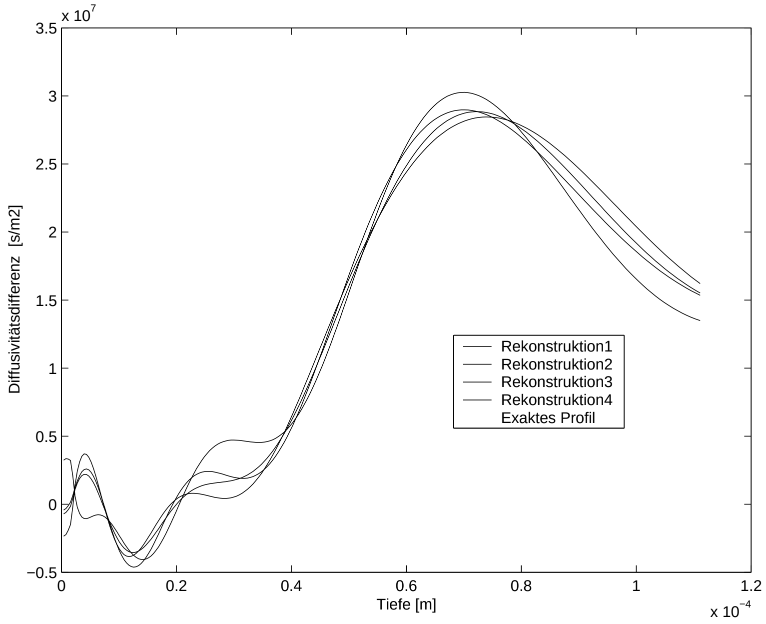

Abbildung 4.12: *Phantom-Profil Lack, Born Approximation, m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$, $\gamma_1 = 0.01$, $\gamma_2 = 1.4 \cdot 10^{-7}$ *entspr. 9 Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 1\%$.

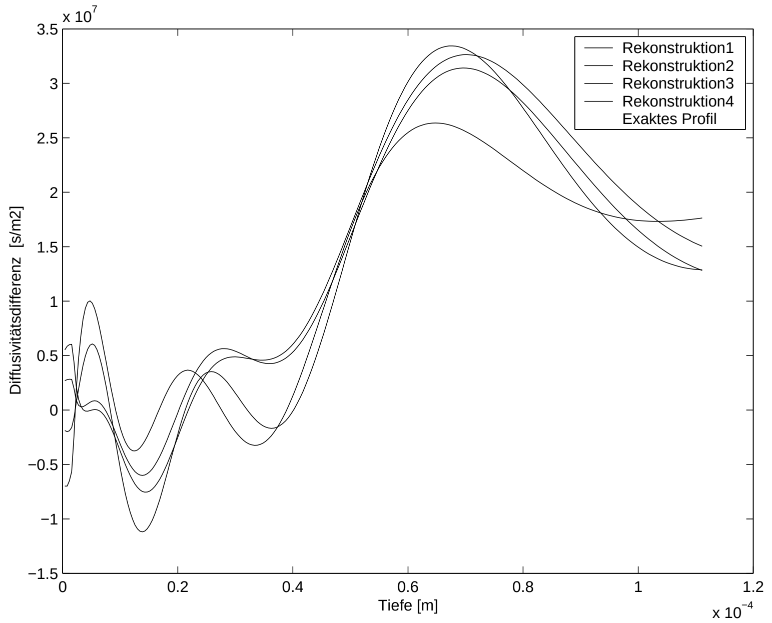

Abbildung 4.13: *Phantom-Profil Lack, Born Approximation, m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 200$, $\gamma_1 = 0.01$, $\gamma_2 = 1.4 \cdot 10^{-7}$ *entspr.* 9 *Singulärwerten, Rauschniveau* $\epsilon = 5\%$.

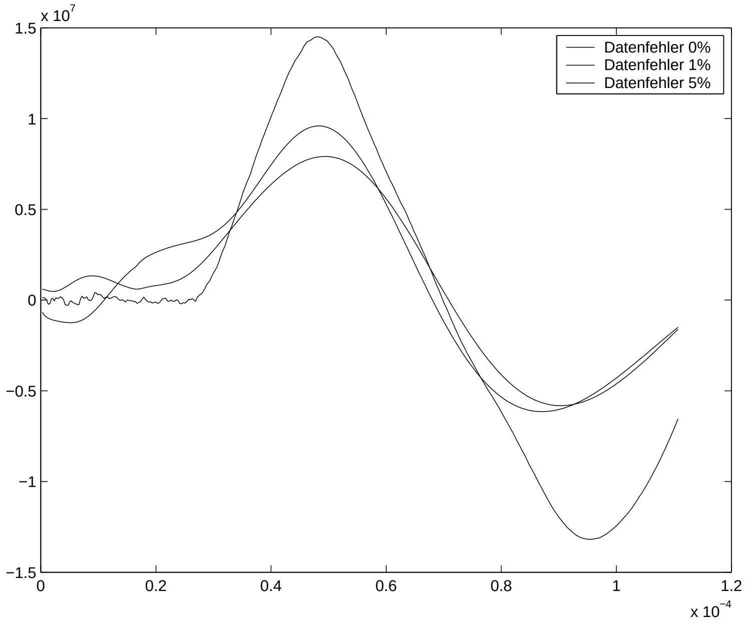

Abbildung 4.14: *Phantom-Profil Lack, Born Approximation, Vergleich Sprungrekonstruktion bei verschieden hohem Rauschniveu. m=100 Frequenzen,* $0.35 < f < 406$ *Hz, Diskretisierung* $n = 600$.

Literaturverzeichnis

[1] H. Abdullah und A. K. Louis, *The approximate inverse for solving an inverse scattering problem for acoustic waves in an inhomgeneous medium*, Inverse Problems, 15 (1999), S. 1213–1230.

[2] M. Bertero, P. Brianzi und E. R. Pike, *Singular value decomposition of the laplace transform inversion with discrete data*, Publicazioni dell'istituto di analisi globale e applicazioni, n.11 (firenze, 1983).

[3] M. Bertolotti, R. L. Voti, G. L. Liakhou, S. Paoloni und C. Sibilia, *A new approach to the photothermal depth profiling in frequency domain: theory and experiment*, in AIP conference proceedings, F. Scudieri und M. Bertolotti (Hrsg.), Band 463, American Institute of Physics, 1999, S. 24–26.

[4] G. Busse und H. G. Walther, *Photothermal nondestructive evaluation of materials with thermal waves*, in Progress in photothermal and photoacoustic science and technology, A. Mandelis (Hrsg.), Band I, Elsevier, 1992, S. 205–298.

[5] C. Cunha und F. Viloche, *The laguerre functions in the inversion of the laplace transform*, Inverse Problems, 9 (1993), S. 56–68.

[6] P. Dörr, C. Gruss, H. Petry und A. K. Louis, *No. 19907804*, Germany, 1999.

[7] W. A. Essah und L. M. Delves, *On the numerical inversion of the laplace transform*, Inverse Problems, 4 (1988), S. 705–724.

[8] J. A. Garcia, A. Mandelis, B. Farahbakhsh, C. Lebowitz und I. Harris, *Thermophysical properties of thermal sprayed coatings on carbon steel substrates by photothermal radiometry*, International Journal of Thermophysics, 20 (1999), S. 1587–1602.

[9] J. A. Garcia, A. Mandelis, M. Marinova, K. H. Michaelian und S. Afrashtehfar, *Quantitative photothermal radiometric and ft-ir photoacoustic measurements of speciality papers*, Appl. Spectrosc., 52 (1998), S. 1222–1229.

[10] C. Glorieux, J. Fivez und J. Thoen, *Photoacoustic investigation of the thermal properties of layered materials: Calculation of the forward signal and numerical inversion procedure*, J. Appl. Phys., 73 (1993), S. 686–690.

[11] C. Glorieux und J. Thoen, *Depth profile reconstruction by neural network recognition of the photothermal frequency spectrum*, J. Appl. Physics, 80 (1996), S. 6510–6515.

[12] C. Glorieux, R. L. Voti, J. Thoen, M. Bertolotti und C. Sibilia, *Photothermal depth profiling: analysis of reconstruction errors*, Inverse Problems, 15 (1999), S. 1149–1159.

[13] C. Gruss, *Camera photothermique etude theroretique et realisation pratique d'une camera infrarouge active avec excitation laser*, Dissertation, Universite de Poitiers, 1993.

[14] ——, *Aufbau einer photothermischen Anordnung mit thermischen Wellen für die Schichtdickenbestimmung in industrieller Umgebung*, Projektbericht der Stiftung Industrieforschung, Köln, 1998.

[15] A. A. Karabutinov, V. V. Klevitskiy und A. P. Kubyshkin, *Thermal wave characterization of coatings on substrate*, in Proceedings of SPIE, G. Pachenko, Y. Vladislav und S. Vladimir (Hrsg.), Nr. 2713, 1996, S. 414–423.

[16] W. Karpen, *Berührungslose und zerstörungsfreie Prügung von Kunststofflackierungen mit thermischen Wellen*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1993.

[17] W. Leung und A. Tam, *Techniques of flash radiometry*, J. App. Phys., 56 (1984), S. 153–161.

[18] A. K. Louis, *Inverse und schlecht gestellte Probleme*, Teubner, Stuttgart, 1989.

[19] ——, *Approximate inverse for linear and some nonlinear problems*, Inverse Problems, 12 (1996), S. 175–190.

[20] A. Mandelis, *Hamilton-jacobi formulation and quantum theory of thermal wave propagation in the solid state*, J. Math. Phys, 26 (1985), S. 2676–2683.

[21] ——, *Theory of photothermal wave diffraction tomography via spatial laplace spectral decomposition*, J. Phys. A: Math. Gen., 24 (1991), S. 2485–2505.

[22] ——, *Green's functions in thermal-wave physics: cartesian coordinate representations*, J. Appl. Phys, 78 (1995), S. 647–655.

[23] A. Mandelis, S. B. Peralta und J. Thoen, *Photoacoustic frequency-domain dpth profiling of continuously inhomogeneous condensed phases: Theory and simulations for the inverse problem*, J. Appl. Phys, 70 (1991), S. 1761–1770.

[24] P. M. Morse und H. Feshbach, *Methods of theoretical physics, Part I*, McGraw-Hill, New York, 1953.

[25] J. C. Murphy, L. C. Amodt und J. W. Spicer, *Principles of photothermal detection in solids*, in Progress in photothermal and photoacoustic science and technology, A. Mandelis (Hrsg.), Band I, Elsevier, 1992, S. 43–95.

[26] L. Nicolaides und A. Mandelis, *Image-enhanced thermal-wave sloce diffraction tomography with numerically simulated reconstructions*, Inverse Problems, 13 (1997), S. 1393–1412.

[27] L. Nicolaides, M. Munidasa und A. Mandelis, *Thermal-wave infrared radiometric slice diffraction tomography with back-scattering and transmission reconstructions: experimental*, Inverse Problems, 13 (1997), S. 1413–1425.

[28] E. T. Ogawa, C. Hu und P. S. Ho, *Thermal diffusivity measurement of polymeric thin films using the photothermal displacement technique. i. free-standing film case*, J. Appl. Phys., 86 (1999), S. 6018–6027.

[29] O. Padé und A. Mandelis, *Photothermal depth profiling: analysis of reconstruction errors*, Inverse Problems, 10 (1994), S. 185–197.

[30] J. Power, *Expectation minimum - a new principle of inverse problem theory in the photothermal sciences: theoretical characterization of expectation values*, Opt. Eng., 36 (1995), S. 487–503.

[31] J. Rantala, L. Wei, P. K. Kuo, J. Jaarinen, M. Luukkala und R. L. Thomas, *Determination of thermal diffusivity of low-diffusivity materials using the mirage method with multiparameter fitting*, J. Appl. Phys, 73 (1993), S. 2714–2723.

[32] A. Rosencwaig und A. Gersho, *Theory of the photoacoustic effect with solids*, J. Appl. Phys., 47 (1976), S. 64–69.

[33] U. Seidel, K. Haupt, H. G. Walther, J. A. Burt und M. Munidasa, *An attempt towards quantitative photothermal microscopy*, J. Appl. Phys., 78 (1995), S. 2050–2056.

[34] R. L. Voti, M. Bertolotti und C. Sibilia, *Thermal conductivity and diffusivity depth profiles by photothermal technique: the direct and inverse problem*, in III international workshop - advances in signal processing for

NDE of materials, X. P. V. Maldaque (Hrsg.), Band 3, Quebec City, 1997, S. 379–386.

[35] P. K. Wong, P. C. W. Fung und H. L. Tam, *Low thermal diffusivity measurements of thin films using mirage technique*, J. Appl. Phys., 84 (1998), S. 6623–6627.