

Partikelgrößenanalyse mit spektroskopischen Messmethoden

*– Über die Unmöglichkeit,
Partikelgrößenverteilungen exakt zu messen –*

PD Dr.-Ing. habil. Frank Babick

PVT-Seminar, 23. Juni 2023

Fahrplan

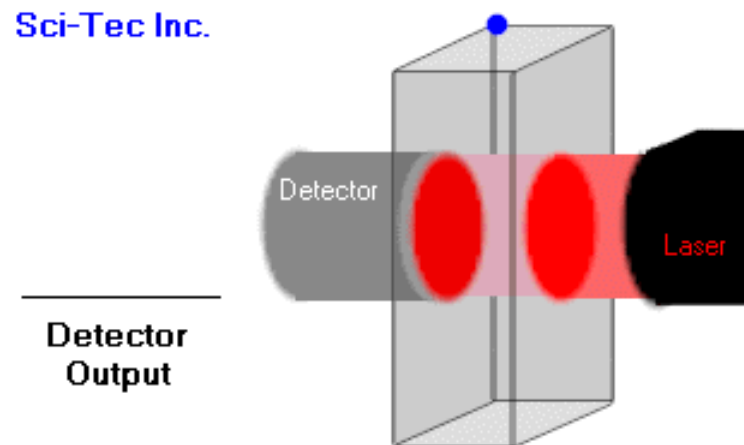
1. Auswertung von Partikelmessergebnissen
2. Spektralanalyse
3. Inversionsproblem
 - Beschreibung
 - Lösungsansätze
4. Informationsgehalt spektraler Messergebnisse

Partikelmessmethoden und Ergebnisanalyse *- Zählmethoden -*

Lichtmikroskopie



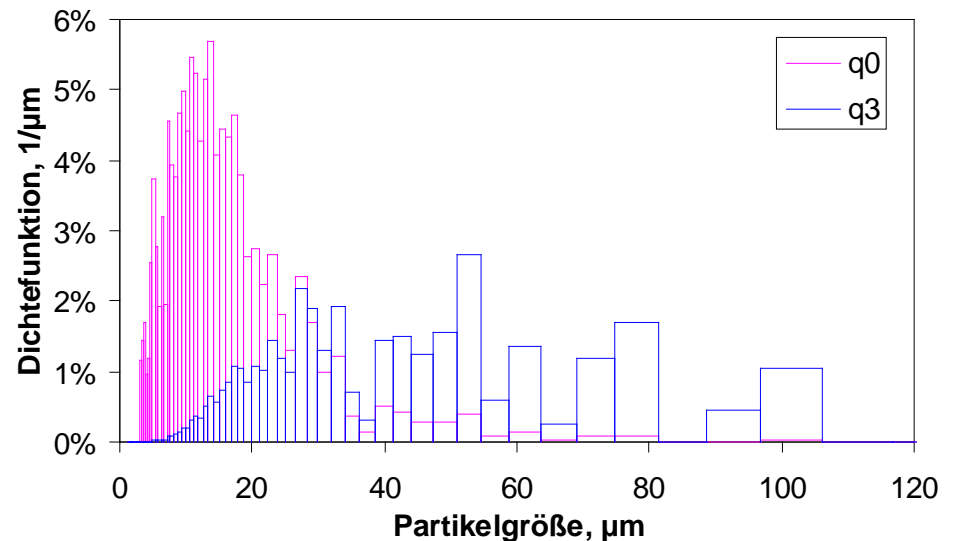
Optische Partikelzähler (OPC)



- www.pssnicomp.com/accutheory.htm

Zählmethoden - Ergebnisdarstellung

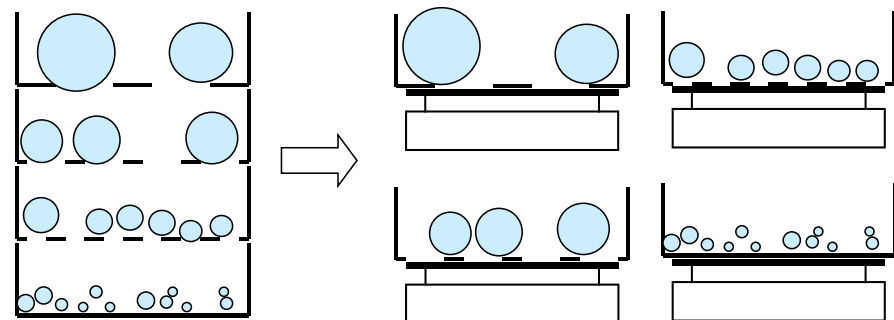
- jedes Ereignis (Impuls im OPC, Partikelprojektion am Mikroskop) kann anhand der Messgröße (z.B. Projektionsfläche) eindeutig einer Größenklasse zugeordnet werden
- Klassenbreite beschränkt durch Messunsicherheit
→ oft hohe Auflösung
- abh. vom Messprinzip sind zusätzlich Fehlbestimmungen der Messgröße / Partikelhäufigkeit möglich (z.B. Koinzidenz)



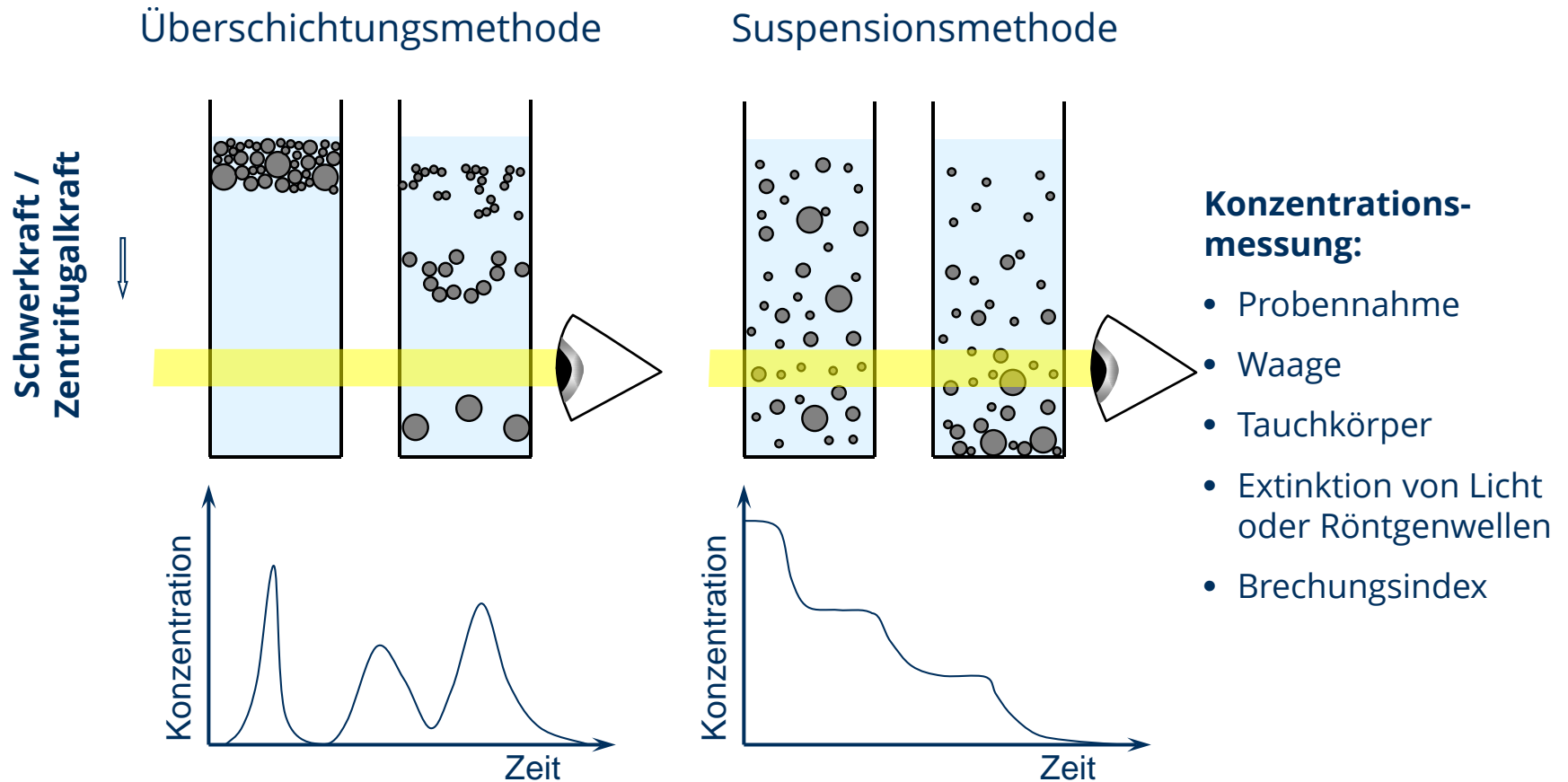
mögliches Ergebnis einer Zählmethode, die Kanäle entsprechen Größenklassen

Partikelmessmethoden und Ergebnisanalyse - *fraktionierende Methoden* -

Siebanalyse

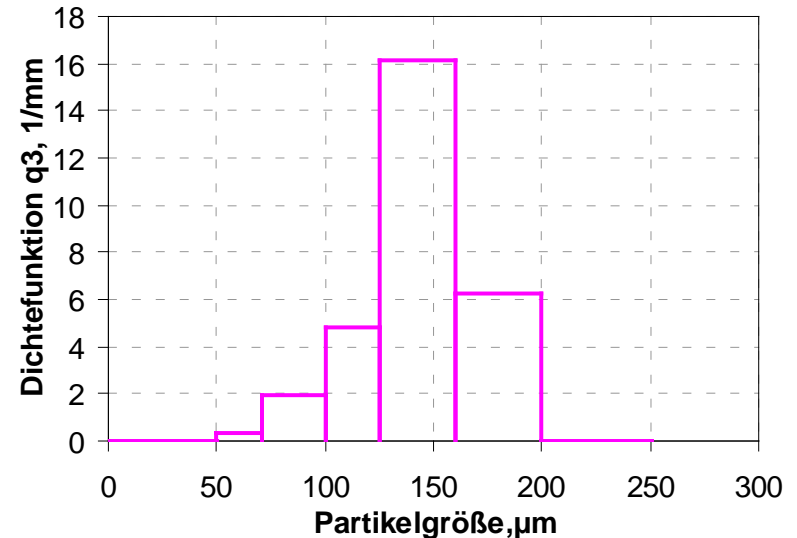


Sedimentationsanalyse



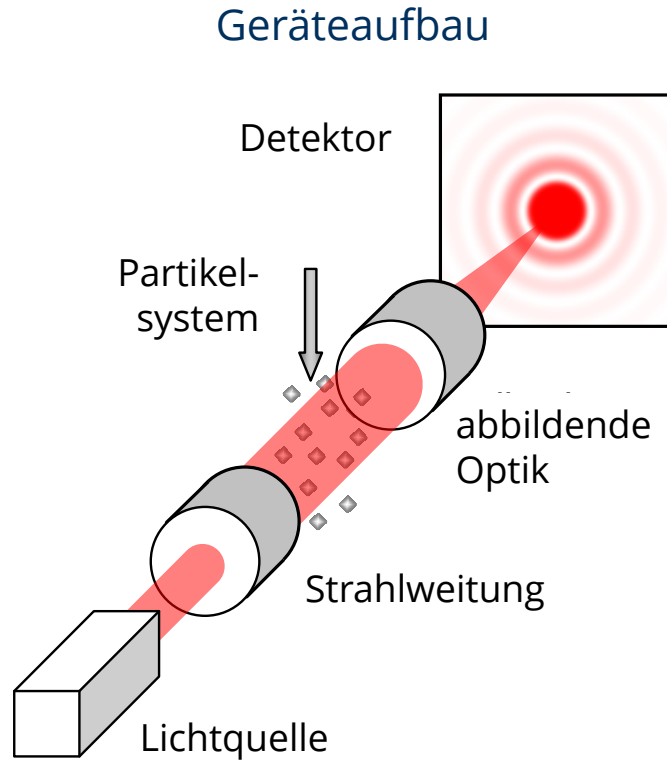
Fraktionierende Methoden - Ergebnisdarstellung

- Klassieren des Partikelsystems anhand eines Partikelmerkmals
- Häufigkeit jeder Klasse wird durch geeignetes Messverfahren (Wägung, Trübungsmessung, ...) ermittelt
- Klassenbreite beschränkt durch Trennschärfe beim Klassieren bzw. Messen
→ mittlere ... hohe Auflösung
- unangebracht feine Klassenteilung führt zu Inversionsproblem!

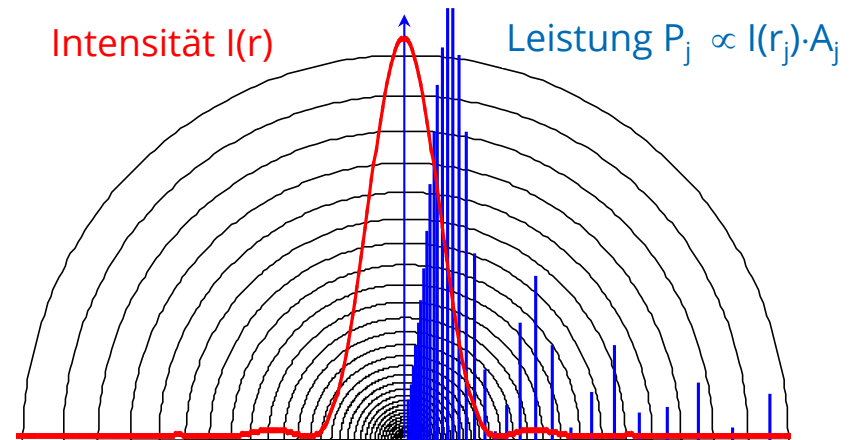


Partikelmessmethoden und Ergebnisanalyse - *spektroskopische Methoden* -

Laserbeugungsspektroskopie (LB)

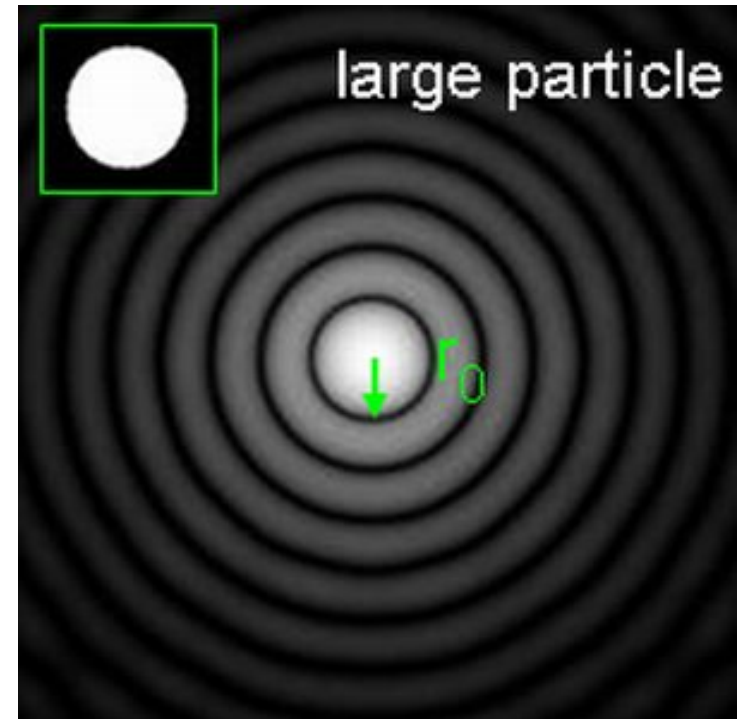
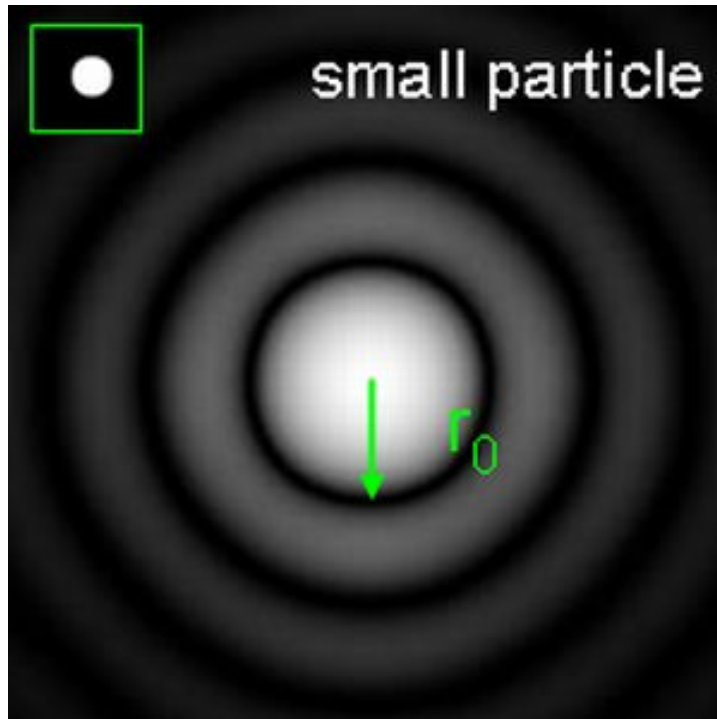


gemessenes Spektrum



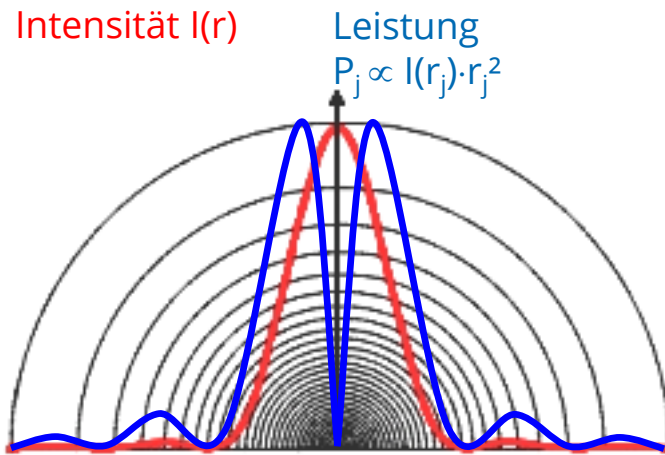
- Größenbereich: $1 \mu\text{m} \dots 3 \text{mm}$
- Partikelkonzentration $< 0,01 \text{ Vol.-%}$

Beugungsmuster für Kugeln



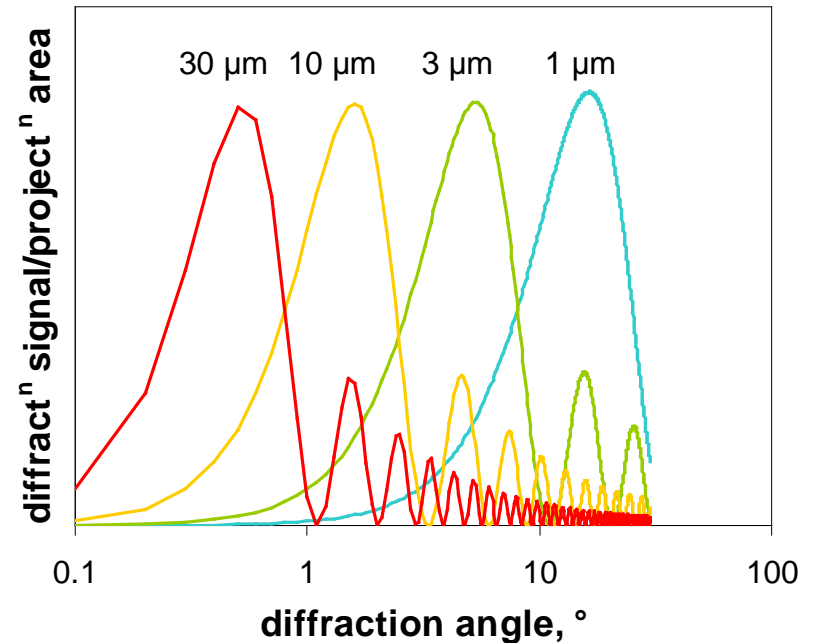
www.sympatec.com/DE/LaserDiffraction/LaserDiffraction.html

Spektren der Lichtintensität und -leistung



Ringdetektor

- 30..50 Halbringelemente
- Breite $s_j \propto$ Radius r_j
- Zentralelement: gebeugtes und anregendes Licht



für gegebene Trübung ist Form der Spektren unabhängig von x

Vom Spektrum zur Zusammensetzung

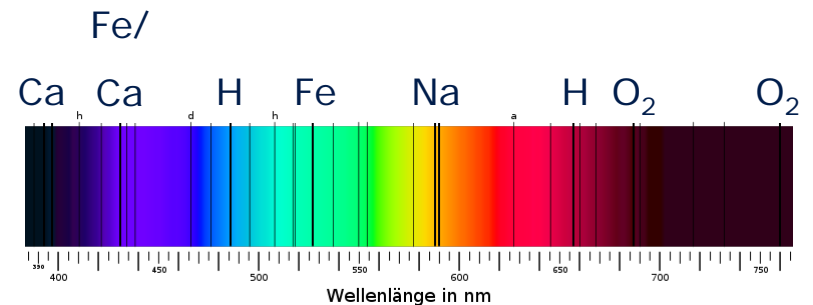
Optische Spektralanalyse



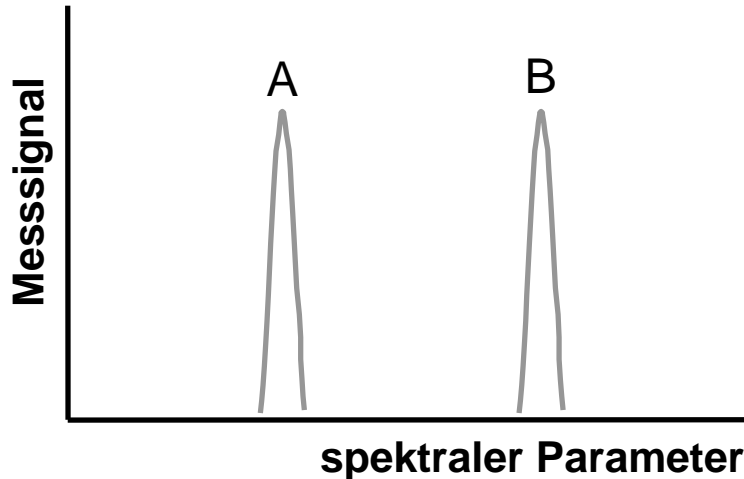
Emissionsspektren,
z.B. für Na-Flamme



Absorptionsspektren,
z.B. Fraunhofer-Linien

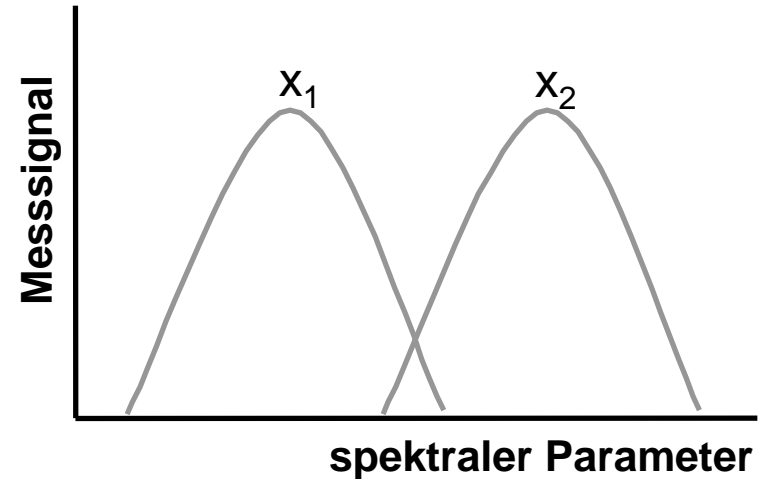


Spektren: Element- und Partikelgrößenanalyse



optisches Spektralanalyse:

enge, charakteristische Frequenzbanden für jede Komponente (Atom/Molekül)

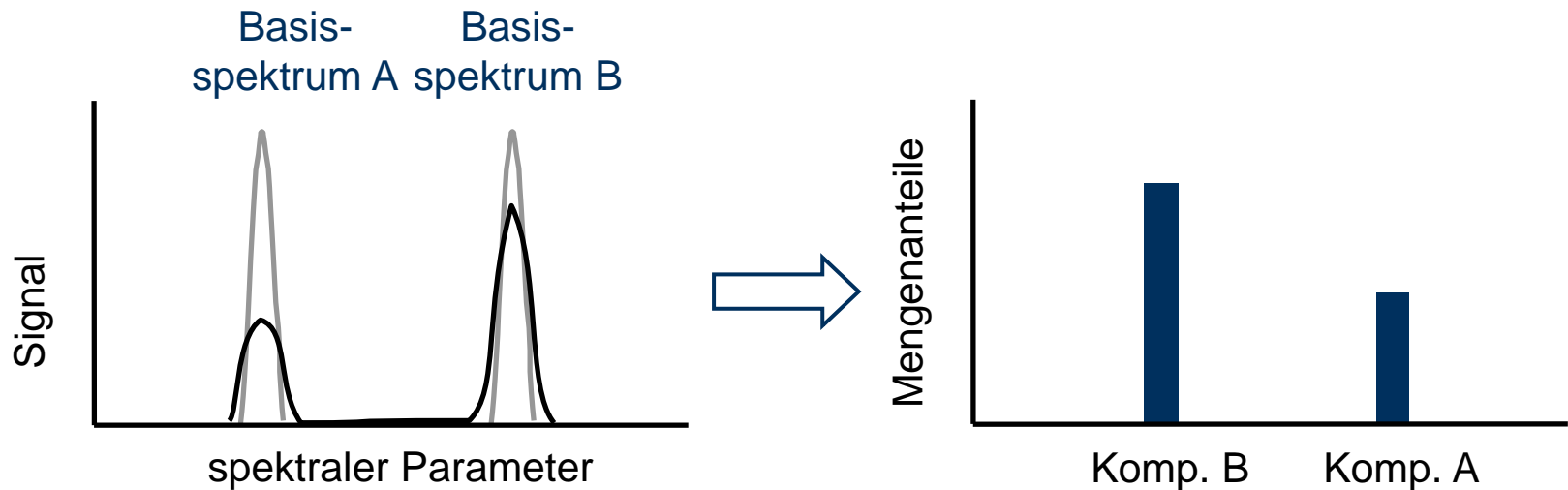


Spektrum von Partikeln:

breite, aber charakteristische Spektren für jede Größenklasse, spektraler Parameter: Zeit, Ort, Frequenz

Auswertung von spektralen Messergebnissen

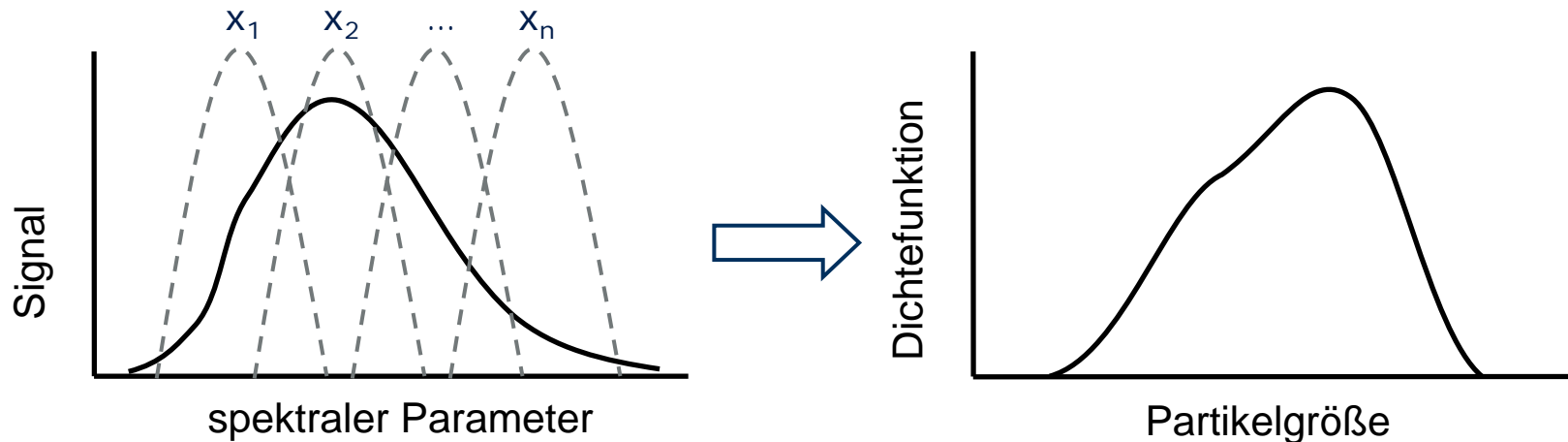
Dekomposition eines Spektrums



- Spektrum: $g(s) = \xi_1 \cdot p_1(s) + \xi_2 \cdot p_2(s) + \dots + \xi_m \cdot p_m(s)$
 p_i ... Basisspektrum der Komp. i, ξ_i ... Mengenanteil der Komp. i
- einfache Auswertung, falls keine Überlappung der Basisspektren

Auswertung von spektralen Messergebnissen

charakteristische Spektren der einzelnen Partikelgrößenklassen



- Spektrum: $g(s) = \Delta Q_1 \cdot k(s, \bar{x}_1) + \dots + \Delta Q_n \cdot k(s, \bar{x}_n) = \int k(s, x)q(x)dx$
 k_i ... Kernfunktion, ΔQ_i ... Mengenanteil der Größenklasse x_k
- Überlappung der charakt. Spektren verhindert direkte Auswertung

Das Inversionsproblem:

$$g(s) = b(s) + c_r \int k(s, x) q_r(x) dx$$

bzw.

$$g(s) = \int k(s, x) q_r(x) dx$$

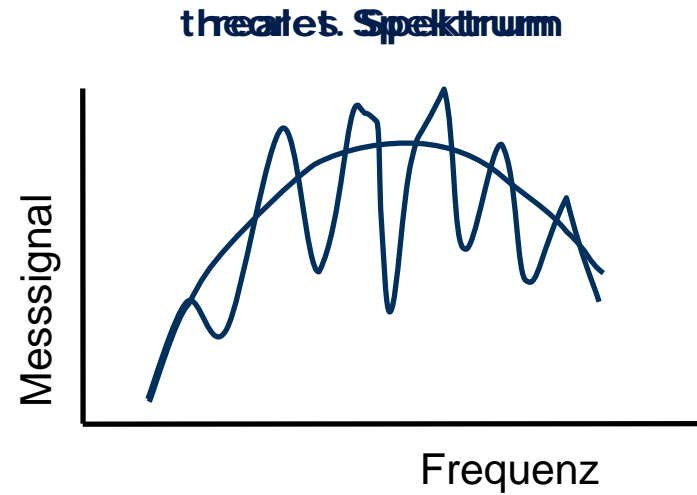
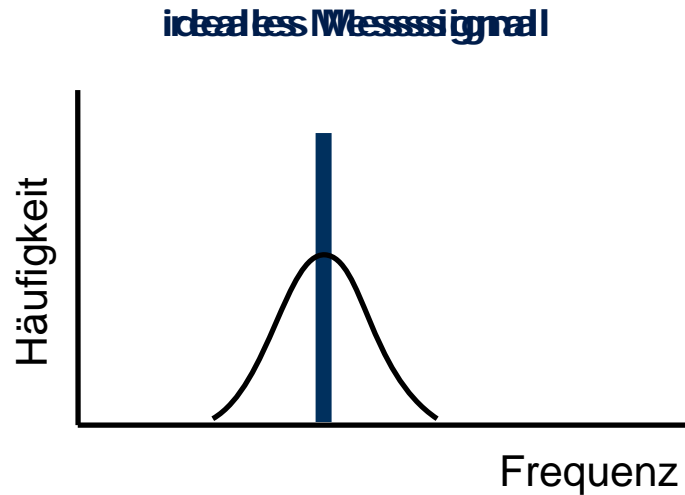
!Bestimme die Funktion $q_r(x)$ aus der Funktion $g(s)$!

Inversionsproblem - *weitere Beispiele* -

Spektroskopische Messmethoden

- Laserbeugungsspektroskopie
- Statische Lichtstreuung (SLS)
- Kleinwinkel-Röntgenstreuung (SAXS)
- Kleinwinkel-Neutronenstreuung (SANS)
- Dynamische Lichtstreuung (DLS)
- Dynamische Extinktionsspektroskopie
- Ultraschallspektroskopie
- Elektroakustische Mobilitätsspektroskopie
- Verfahren der Fernerkundung zur Atmosphärenmessung
- ...

„Entschmieren“ von Messsignalen



- Messsignale auf Basis von Wellen sind „verschmiert“, d.h. Frequenzgemisch statt einzelne Frequenz (kann aber auch gewollt sein)
- betrifft z.B. Ultraschall, SAXS, SANS
- Inversionsproblem:

$$g(\bar{s}) = \int c(s, \bar{s}) \tilde{g}(s) ds = \int c(s, \bar{s}) \int k(s, x) q(x) dx ds$$

Berücksichtigung von Strahlgeometrien

- jede Strahlung besitzt ein charakteristisches Profil, aber in keinem Fall ein Rechteckprofil
- Beispiel Streuung:



Inverse Laplace und Fouriertransformation

- Laplace-Transformation:

$$F(s) = \mathcal{L}\{f\}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad s \in \mathbb{C}.$$

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} F(s) ds \quad \gamma > s_0$$

- Fourier-Transformation:

$$\mathcal{F}_{tw}\{x(t)\} = \hat{x}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt.$$

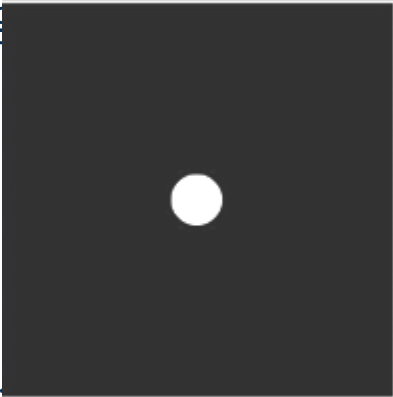
$$\mathcal{F}_{\omega t}^{-1}\{\hat{x}(\omega)\} = x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{x}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

- inverse Transformationen beschreiben Lösungen des Inversionsproblems

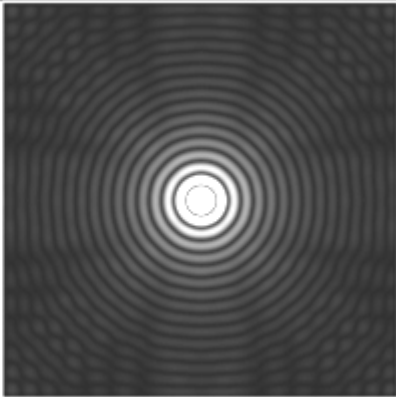
Beispiel für Fouriertransformation

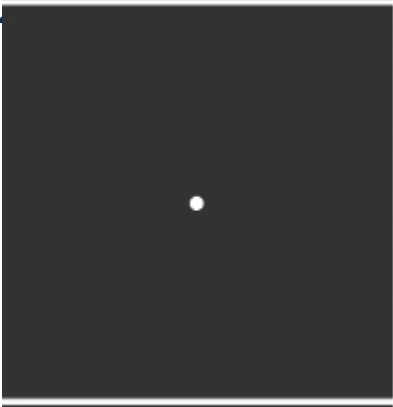
- Zusammenhang
 - $x, y \dots$ Koord
- Darstellung als
 - $E(x, y, z)$

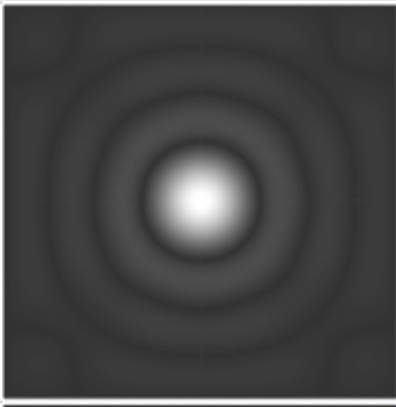
Projektion



Beugung=FT







nsbild

aten, z Abstand

$$\left. \begin{matrix} x^2 + y'^2 \end{matrix} \right\} \left| \begin{matrix} p = \frac{x}{\lambda z} ; q = \frac{y}{\lambda z} \end{matrix} \right.$$

Inversion = Deutung einer Abbildung

Sokrates:

Überhaupt also würden solche nichts für wahr gelten lassen als die Schatten jener Gebilde?

Glaukon:

Ja, ganz notwendig.



- Platons Höhlengleichnis (*Politeia*, 7tes Buch)

Inversion = Deutung einer Abbildung



Inversionsproblem

- *Analyse der Problemstellung* -

Inversion – ein schlecht gestelltes Problem

- Beschreibung:
$$g(s) = \int k(s, x)q_r(x)dx$$
 - Fredholmsche Integralgleichung 1ter Art
 - lineare Integralgleichung → hilfreich für Auswertung
- Randbedingungen:
 - Messfehler
 - beschränkter Messbereich
 - diskrete Frequenzen, Zeitpunkte, Winkel etc.
- Fragen:
 - ¿Gibt es eine eindeutige Lösung? außerdem: ¿ist sie sinnvoll?
 - ¿Wie stabil ist die Lösung? stetige Änderung in $q(x)$ bei Änderung in $g(s)$?
im Regelfall: Nein! → *ill-posed problem*

Diskretisierung

- im Regelfall bestimmt man das spektrale Signal
 - an bestimmten Frequenzen / Wellenlänge
 - in festen Winkelbereichen
 - zu konkreten Zeitpunkten
 - ...

→ spektrales Signal ist diskret
 - parallel dazu interessiert man sich für die Häufigkeit der einzelnen Größenklassen
- Diskretisierung des Inversionsproblems

$$g(s_j) = \sum k(s_j, x_i) \cdot \Delta Q_{r,i} \quad \mathbf{g} = \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q}$$

Unsicherheit der Messung

- reale Messsignale sind mit Messunsicherheiten behaftet:

$$g(s) = \varepsilon(s) + \int k(s, x) q_r(x) dx$$

bzw.

$$g(s_j) = \varepsilon(s_j) + \sum k(s_j, x_i) \cdot \Delta Q_{r,i}$$

- Unsicherheiten im spektralen Signal bedingen Unsicherheiten in der gesuchten Verteilungsfunktion

$$g(s) \pm \varepsilon(s) \rightarrow q_r(x) \pm \delta(x)$$

bzw.

$$g_j \pm \varepsilon_j \rightarrow \Delta Q_{r,i} \pm \delta_i$$

Fehlerverstärkung

- Zusammenhang zwischen Fehler $\delta(x)$ im gesuchten Häufigkeitsvektor und dem Messfehler $\varepsilon(s)$:

$$|\delta(x)|^2 = \sum \lambda_j^{-1} \varepsilon_j$$

- wobei λ_i die Eigenwerte der Kern-Kovarianzmatrix sind:

$$C_{i,j} = \int \mathbf{k}(\mathbf{s}, x) \mathbf{k}^T(\mathbf{s}, x) dx$$

- falls $\lambda_i \ll 1$ (gilt sehr oft in Messtechnik), dann extreme Fehlerverstärkung
- man nutzt die Konditionszahl κ der Kernmatrix \mathbf{K} :

$$\kappa(\mathbf{K}) = \left| \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{C})}{\lambda_{\min}(\mathbf{C})} \right|^{1/2}$$

- falls $\kappa \gg 1$, dann spricht man von schlecht konditioniertem Problem

Lösungsansätze

Nullversuch zur Lösung des Inversionsproblems

spektrale Funktion:
$$g(s) = \int k(s, x) \cdot q_r(x) dx$$

s spektraler Parameter, x Partikelgröße, $k(s, x)$ Kernfunktion
 r Mengenartindex, c_r Konzentration, $q_r(x)$ Verteilungsdichte

Diskretisierung:
$$g(s_j) = \sum k(s_j, x_i) \cdot \Delta Q_{r,i} \quad \text{oder} \quad \mathbf{g} = \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q}$$

einfache Lösung?: ~~$$\mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{g} = \Delta \mathbf{Q}$$~~

Residuum:
$$R = \left| \mathbf{g}_{\text{exp}} - \mathbf{g}_{\text{theo}} \right|^2 = \left| \mathbf{g}_{\text{exp}} - \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q} \right|^2 \rightarrow \text{Min!}$$

Inversionsstrategien

- **Optimierung:**
 - Annahme eines bestimmten Verteilungstyps
→ Minimiere Residuum R durch Variation der Verteilungsparameter
 - Formuliere Nebenbedingungen (e.g. $\Delta Q_j \geq 0$)
→ Minimiere Residuum R durch Variation der Klassenhäufigkeiten ΔQ_j
- **Regularisierung des Inversionsproblems:**
 - Integration von “plausiblen” Randbedingungen in die Zielfunktion (z.B.: Verteilungsfunktion soll „glatt“ sein)

$$\left| \mathbf{g}_{\text{exp}} - \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q} \right|^2 + \gamma \cdot G \rightarrow \text{Min!} \quad \text{z.B.} \quad G = \Delta \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{H} \cdot \Delta \mathbf{Q}$$

- direkte Algorithmen
- iterative Algorithmen
- Iteration direkter Algorithmen

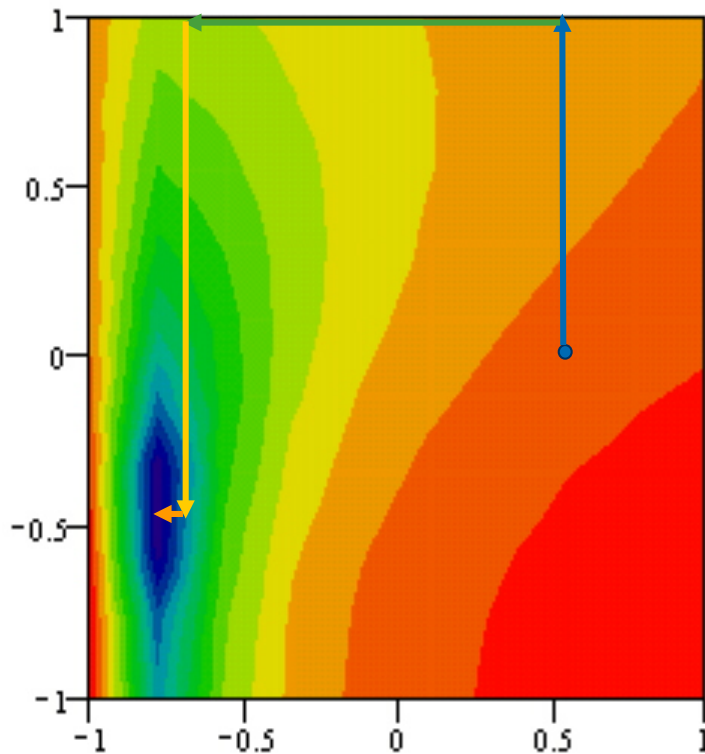
Lösungsansätze

- *Optimierungsverfahren* -

Suchalgorithmen

- häufig für vorgegebene Verteilungstypen (Parametersuche, oft LNVT), seltener für Klassenhäufigkeiten ΔQ_i
- Achsenparallele Suche
- Simplex-Verfahren
- Levenberg-Marquardt
- Gradientenverfahren
- Monte-Carlo / Bayesian approach
- ...

Achsenparallele Suche

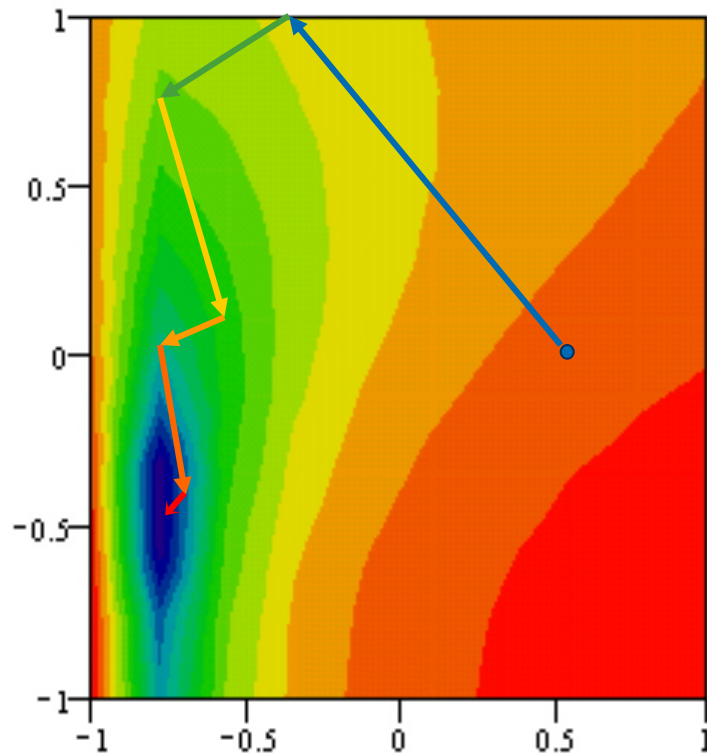


- Annahme:
logarithmisch normal verteilte
Partikelgrößen → 2 Unbekannte
- Gewählte Inversionsmethode:
Achsenparallele Suche

Abbildung: Umrissdiagramm für die
Zielfunktion der Inversion:

$$R = \sum (g_{\text{exp}}(s_j) - g_{\text{Modell}}(s_j))^2$$

Gradientenverfahren

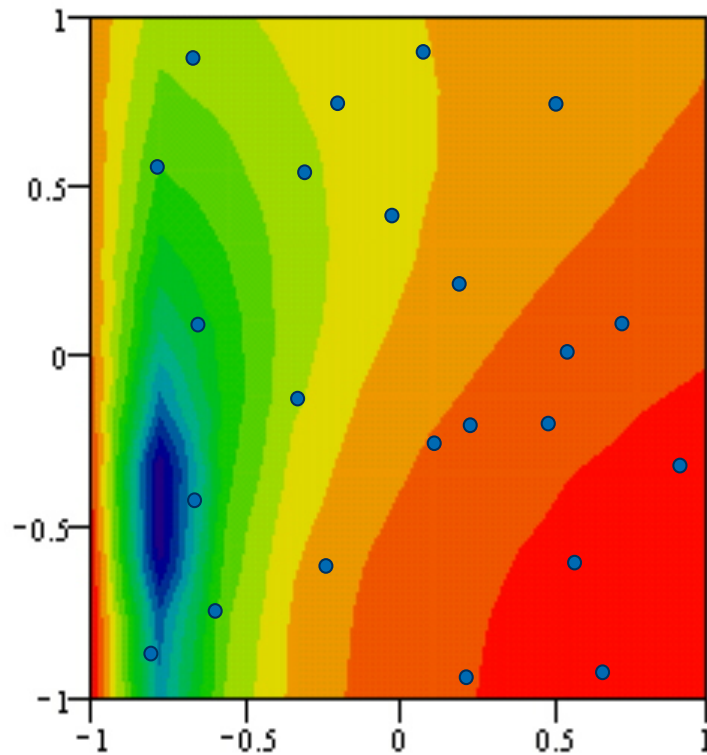


- Annahme:
logarithmisch normal verteilte
Partikelgrößen → 2 Unbekannte
- Gewählte Inversionsmethode:
Gradientenverfahren

Abbildung: Umrissdiagramm für die
Zielfunktion der Inversion:

$$R = \sum (g_{\text{exp}}(s_j) - g_{\text{Modell}}(s_j))^2$$

Monte-Carlo-Verfahren



- Annahme:
logarithmisch normal verteilte
Partikelgrößen → 2 Unbekannte
- Gewählte Inversionsmethode:

Monte-Carlo

Abbildung: Umrissdiagramm für die
Zielfunktion der Inversion:

$$R = \sum \left(g_{\text{exp}}(s_j) - g_{\text{Modell}}(s_j) \right)^2$$

Lösungsansätze - *direkte Verfahren* -

Iterative Verfahren

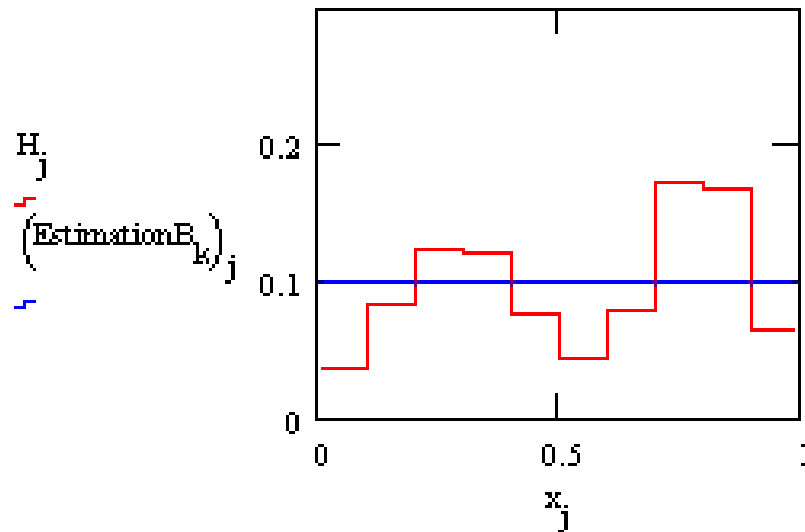
- Chahine-Algorithmus (*expectation maximisation* - EM)
 - Starte mit *educated guess*!
 - Berechne den Residuenvektor und nutze ihn um vorhergehende Schätzung zu verbessern!
 - existiert in verschiedenen Modifikationen
 - keine negativen Lösungen!
 - Abbruchkriterium!
- Landweber-Iteration
 - ursprünglich Lösungsstrategie für kontinuierliche Funktionen
 - Idee: Iteration auf Basis der Kernfunktionen

Modifizierter EM-Algorithmus

$k := 0 + \text{FRAME}$

$j := 0 \dots n$

Chahine 3: $\varphi = 2$ $\delta = 0.01$



Iterationsschritt:

$k = 0$

Residual des Messvektors:

$r_{\text{mess}_k} = 0.316$

Residual des Verteilungsvektors:

$r_{\text{estim}_k} = 0.142$

Lösungsansätze - *direkte Verfahren* -

Direkte Verfahren

- Lösung aus der Pseudo-Inversen

$$R = \|\mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{Q}\|^2 \rightarrow \text{Min.} \implies \Delta\mathbf{Q} = (\mathbf{K}^T \mathbf{K})^{-1} \cdot \mathbf{K}^T$$

- Singulärwert-Zerlegung
- Regularisierung
 - mit/ohne Berücksichtigung der Messunsicherheit
 - unterschiedliche Glättungskriterien
 - z.B.: Phillips-Twomey, Tihonov-Regularisierung
- Lösung in Kernfunktionen
- Lösung in Basisfunktionen
- ...

Singulärwert-Zerlegung

Singulärwertzerlegung: $\mathbf{K} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{V}^T$

wobei $\mathbf{\Sigma}$ eine Diagonalmatrix mit den Singulärwerten von \mathbf{K} ,
 \mathbf{U} und \mathbf{V} sind orthonomale Matrixen

Inversionsgleichung: $\Delta\mathbf{Q} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{\Sigma}^{-1} \cdot \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{g}^{(1)}$

die Inverse von $\mathbf{\Sigma}$ ist ebenfalls eine Diagonalmatrix mit den
Elementen $s_{ii} = \sigma_{ii}^{-1}$

modif. Inversionsproblem: $s_{ii} = \begin{cases} \sigma_{ii}^{-1} & \text{für } \sigma_{ii} \geq \delta \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

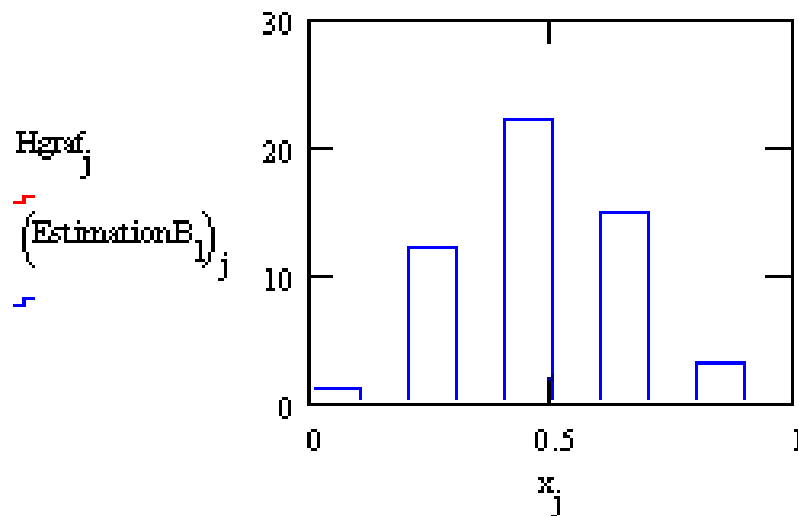
oder: $s_{ii} = \frac{\sigma_{ii}}{\sigma_{ii}^2 + \lambda^2}$

Singulärwert-Zerlegung

$i := 0 + \text{FRAME} \cdot 10$

$j := 0 \dots n$

SVD:



$$s_{ii} = \frac{\sigma_{ii}}{\sigma_{ii}^2 + \lambda^2}$$

Fehler:

$$e = 1 \text{ \%}$$

Lagrangian Multiplikator:

$$\lambda_1 = 1 \cdot 10^{-11}$$

Residual des Messvektors:

$$r_{\text{mess}_1} = 3.307 \cdot 10^{-3}$$

Residual des Verteilungsvektors:

$$r_{\text{estim}_1} = 41.751$$

Tikhonov-Regularisierung

Idee 1:

statt Matrixinversion $\Delta\mathbf{Q} = \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{g}$

Optimierungsproblem $R = \|\mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{Q}\|^2 \rightarrow \text{Min.}$

Idee 2:

Lösung $\Delta\mathbf{Q}$ muss Randbedingungen $G(\Delta\mathbf{Q})=0$ genügen

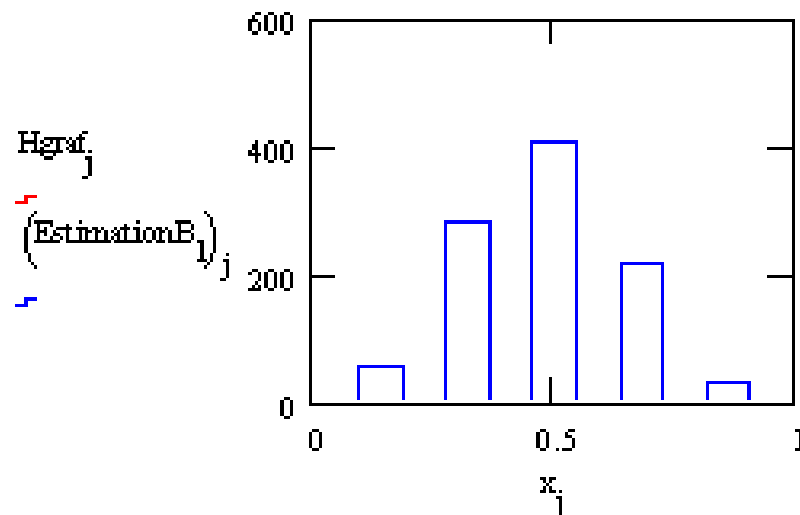
$$V(\alpha) = \left\| \mathbf{M}_\varepsilon^{-1/2} (\mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{Q}) \right\|^2 + \alpha \cdot G(\Delta\mathbf{Q}) \rightarrow \text{Min.}$$

Bestimmung des Regularisierungsparameters α mittels *L-curve* Methode!

Tihonov-Regularisierung

$i := 0 + \text{FRAME} - 10$ $j := 0..n$

Tikhonov-Regularisierung:



Fehler:

$$e = 1 \%$$

Lagrangian Multiplikator:

$$\gamma_1 = 1 \cdot 10^{-11}$$

Residual des Messvektors:

$$r_{mess_1} = 1.146 \cdot 10^{-4}$$

Residual des Verteilungsvektors:

$$r_{estim_1} = 781.439$$

Diskussion der direkten Verfahren

- sind schneller als iterative Verfahren
- Lösung hängt von Übergangsfunktionen (SVD), Glättungskriterien und dem Glättungsparameter ab
- Algorithmen tendieren zu Lösungen mit negativen Mengenanteilen
→ physikalisch unsinnig
- Lösungen verletzen die Normierungsbedingung $\sum \Delta Q_i = 1$ z.T. deutlich

→ Versuche Dein Glück in der Kombination von Iteration und direkten Verfahren!

Lösungsansätze

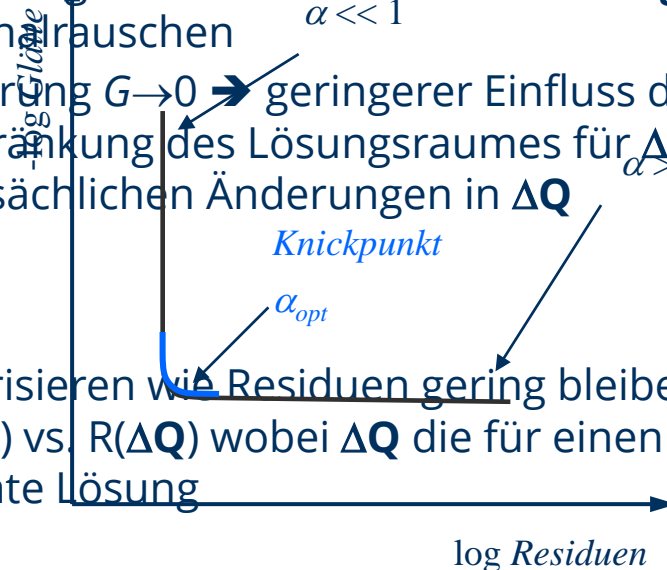
- *Iteration direkter Verfahren* -

Die L-curve Methode

- Grundgedanken:

$$\left| \mathbf{g}_{\text{exp}} - \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q} \right|^2 + \alpha \cdot G \rightarrow \text{Min!}$$

- wenig Regularisierung $G \gg 0 \rightarrow$ kleines Residuum $\| \mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q} \| \rightarrow 0$, aber hohe Sensibilität zu Signalauschen $\alpha \ll 1$
- starke Regularisierung $G \rightarrow 0 \rightarrow$ geringerer Einfluss des Messfehlers aber drastische Einschränkung des Lösungsraumes für $\Delta \mathbf{Q}$ (*bias*), d.h. geringere Sensitivität zu tatsächlichen Änderungen in $\Delta \mathbf{Q}$ $\alpha \gg 1$



- Strategie

- nur soviel Regularisieren wie Residuen gering bleiben \rightarrow L-curve = $G(\Delta \mathbf{Q})$ vs. $R(\Delta \mathbf{Q})$ wobei $\Delta \mathbf{Q}$ die für einen Regularisierungsparameter α jeweils bestimmte Lösung

NNLS-Algorithmus

- NNLS – *Non-Negative Least Squares*

- Iterative Strategie $R = \|\mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta\mathbf{Q}\|^2 \rightarrow \text{Min.}$

- unter Berücksichtigung von $\Delta\mathbf{Q} \geq 0$

- und eventuell weiterer Randbedingungen (z.B. Tikhonov-Regularisierung)

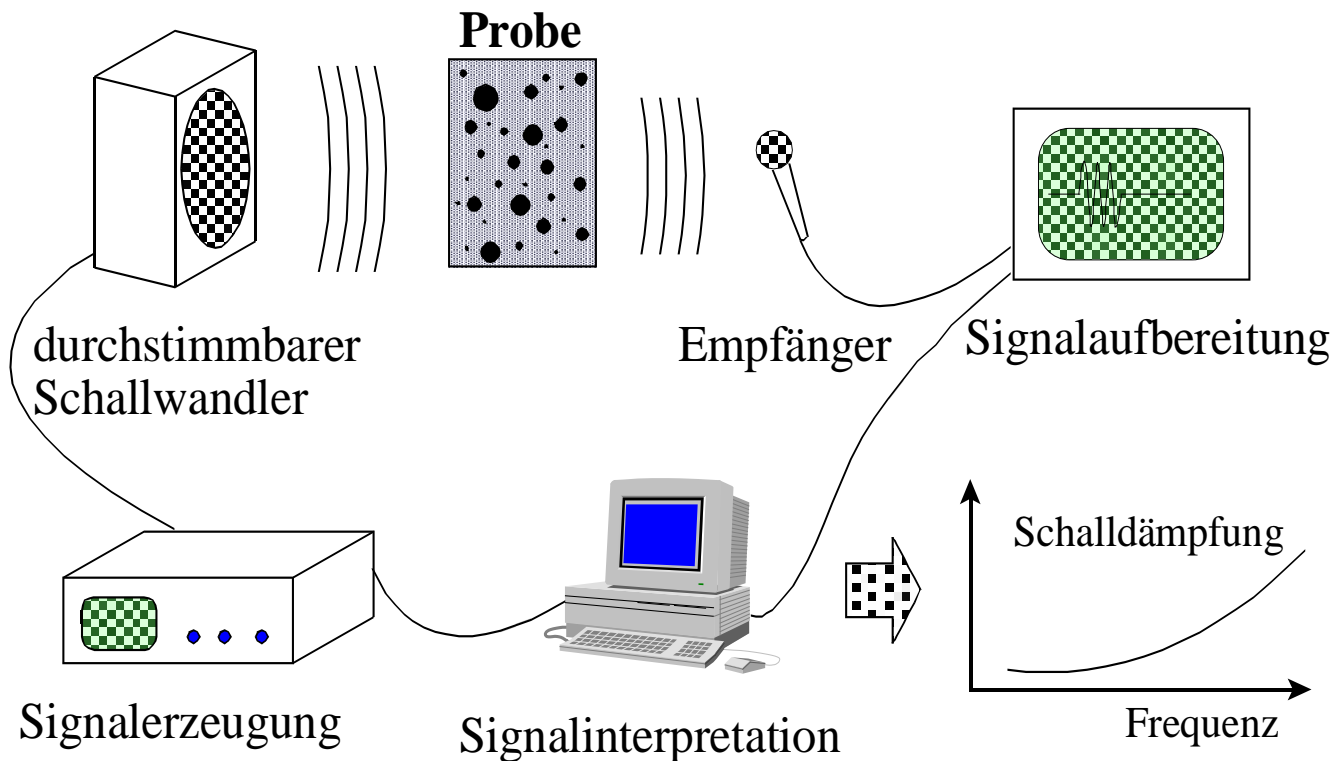
- Grundidee:
wenn Modell nicht völlig unsinnig, dann werden die Modalwerte richtig erkannt

NNLS-Algorithmus

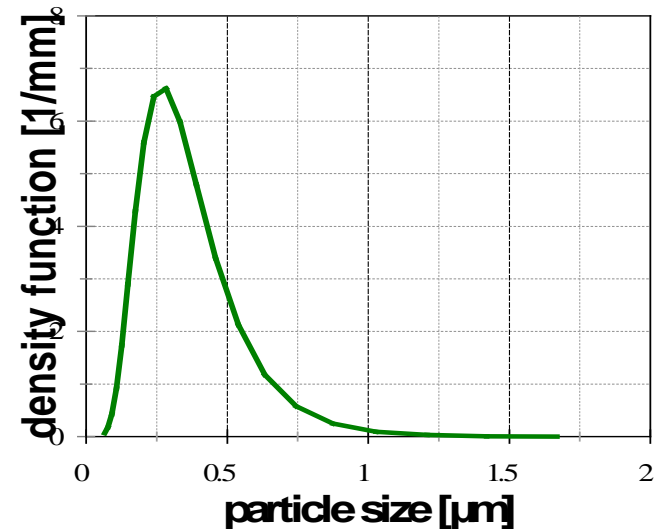
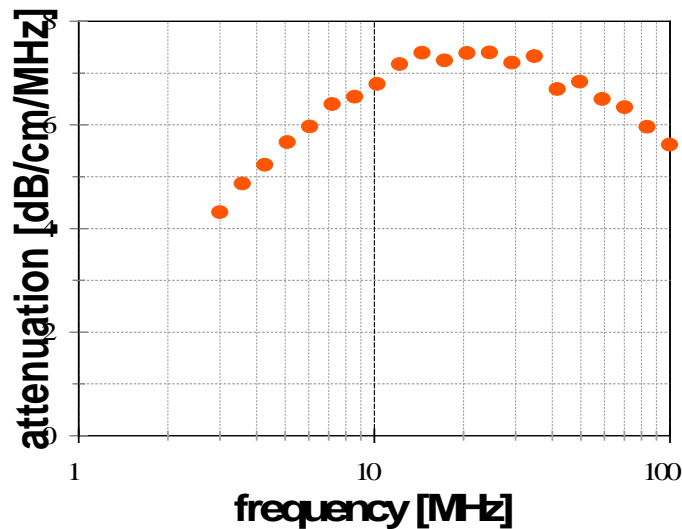
1. Setze alle $\Delta Q_i = 0$, sämtliche Größenklassen gelten als unberücksichtigt
2. Berechne den negativen Gradienten der Zielfunktion $\mathbf{K}^T (\mathbf{g} - \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{Q})$
3. Beende, wenn alle Größenklassen berücksichtigt oder wenn der maximale Gradientenwert der unberücksichtigten Größenklassen nicht positiv
4. Suche von allen unberücksichtigten Größenklasse jene mit maximalen Wert im Gradienten, diese Größenklassen soll im weiteren berücksichtigt werden
5. Löse das Inversionsproblem mit der für die berücksichtigten Größenklassen berechneten Kernmatrix
6. Sind die ΔQ_i der berücksichtigten Größenklassen sämtlich nicht-negativ, dann gehe zu Schritt 2
7. Sind hingegen einige der ΔQ_i negativ, dann berechne einen neuen Lösungsvektor basierend auf jener des vorhergehenden Iterationsschrittes:
8. $\Delta \mathbf{Q} = \Delta \mathbf{Q}^{alt} + \lambda \cdot (\Delta \mathbf{Q} - \Delta \mathbf{Q}^{alt})$, der Parameter λ ist so gewählt, dass für danach für die Mengenanteile aller Klassen $\Delta Q_i \geq 0$ gilt; jene Größenklassen mit $\Delta Q_i = 0$ gelten fürderhin als unberücksichtigt, gehe zu Schritt 5

Informationsgehalt

Schalldämpfungsspektroskopie

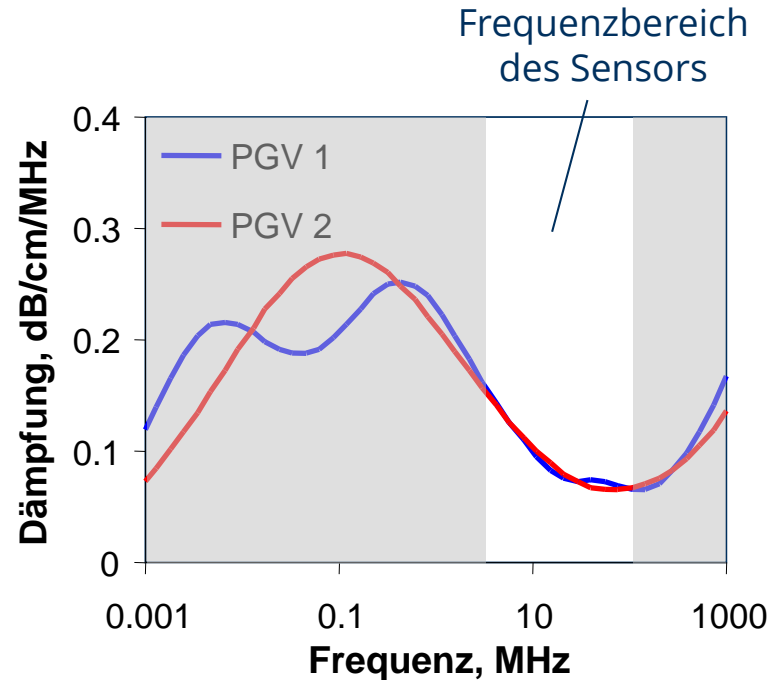
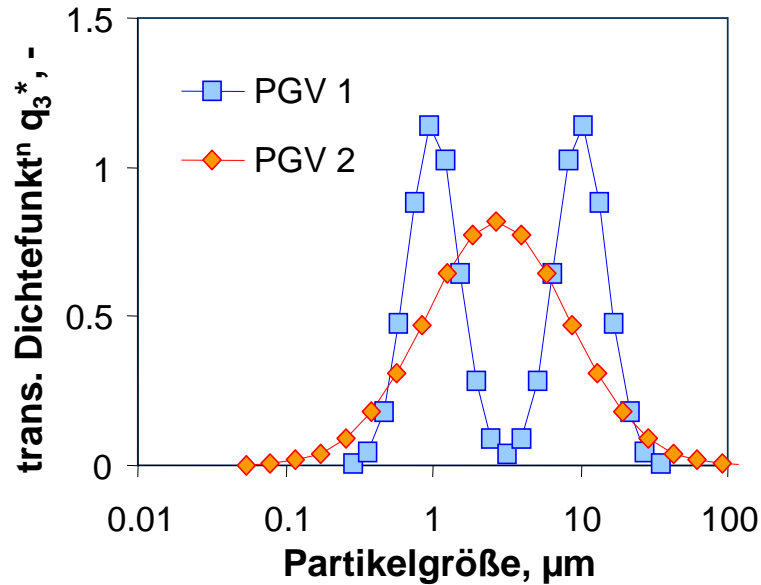


Inversion von spektralen Messergebnissen



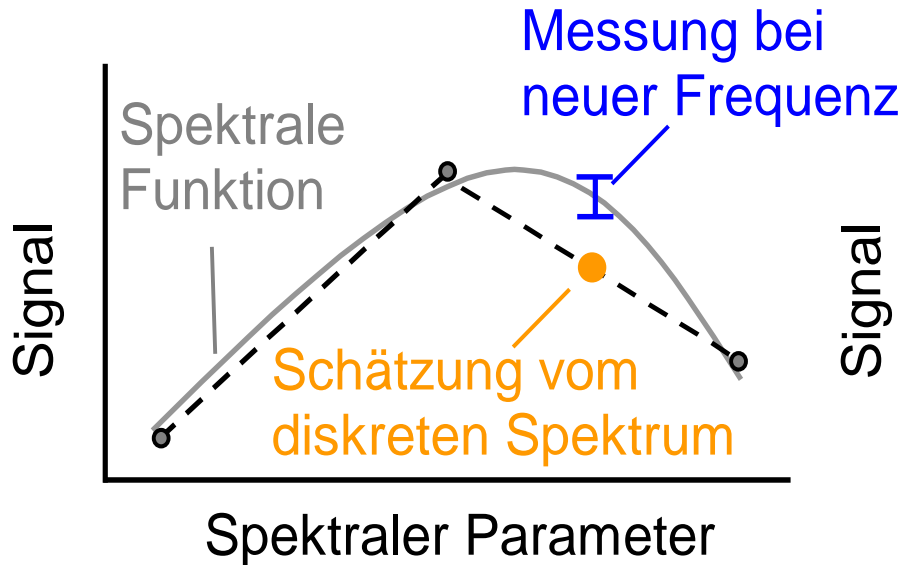
- Inversion erhöht **immer** die Unsicherheit von Messergebnissen.
- Ursache: Modellunzulänglichkeiten, inkorrekte Modellparametern und Messfehler

Informationsgehalt



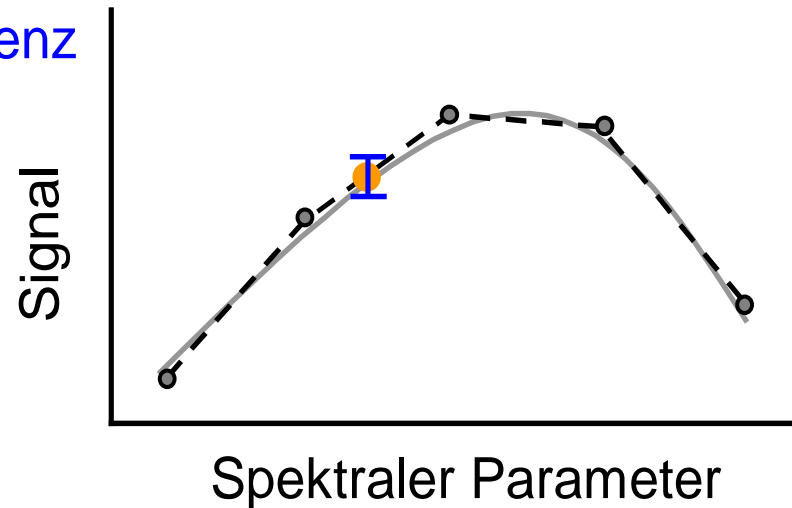
- begrenzter Frequenzbereich und Messfehler
 ➔ Details der Größenverteilung sind nur begrenzt auflösbar
- **Informationsgehalt** von Spektrum in Bezug auf die PGV ist beschränkt

Informationsanalyse - Idee



wenige Messpunkte:

zusätzliche Messpunkte zeigen mehr Details des Spektrums



zu viele Messpunkte:

weitere Messpunkte bringen keinen Informationsgewinn

Bewertung des Informationsgehaltes

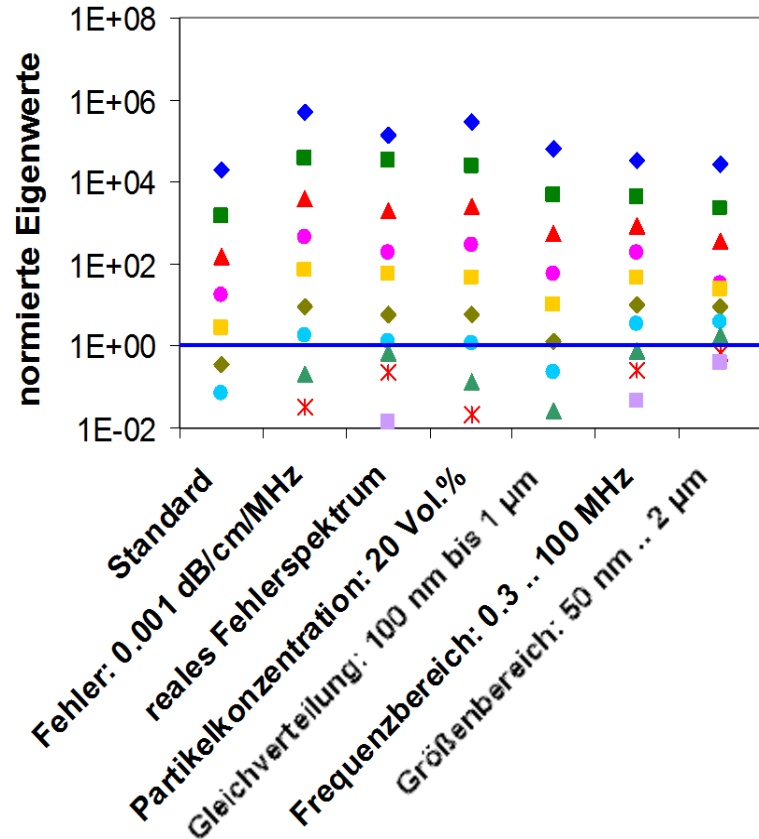
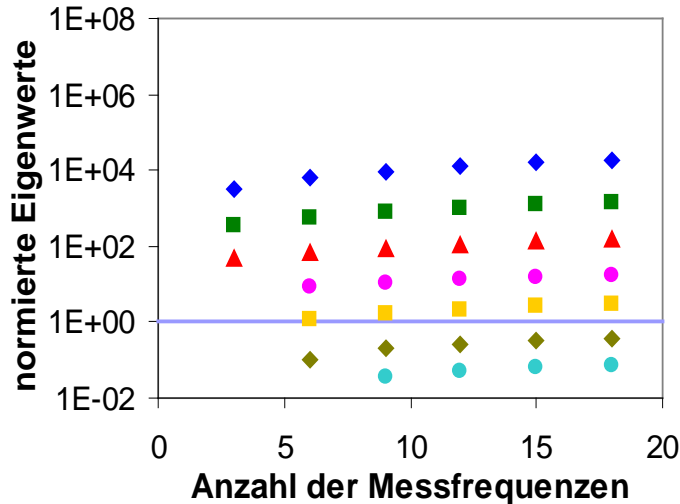
Messaufgabe:
$$\tilde{\alpha}_{\text{Exz}}(f_j) + \varepsilon(f_j) = \varphi_V \cdot \int k_{\tilde{\alpha},j}(x) \cdot q_3(x) dx$$

Kernkovarianzmatrix:
$$C_{i,j} = \int k_i(x) k_{\tilde{\alpha},j}(x) dx$$

Bedingung für freie Information:
$$\lambda_{\min} > \frac{|\boldsymbol{\varepsilon}|^2}{m} \cdot \frac{1}{\varphi_V^2 \cdot |q_3|^2}$$

S. Twomey: *Introduction to the Mathematics of Inversion in remote Sensing and indirect measurements*. Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, 1977

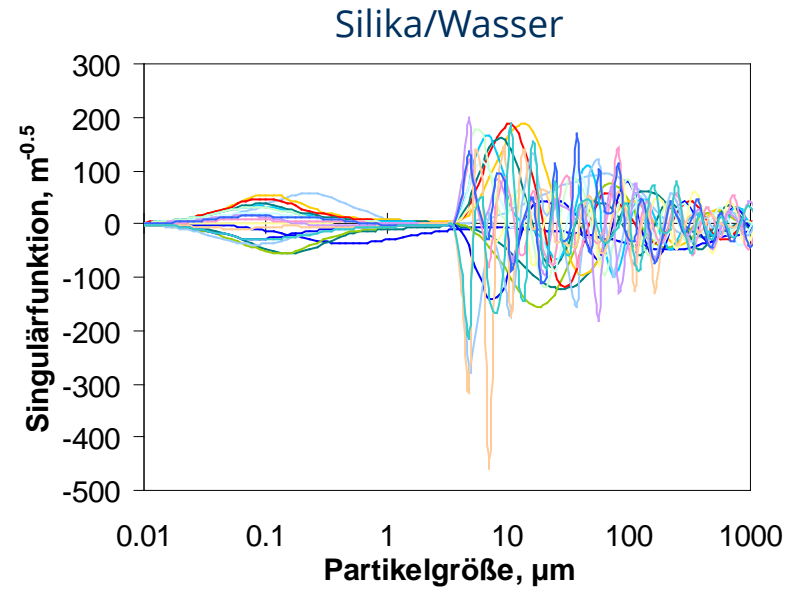
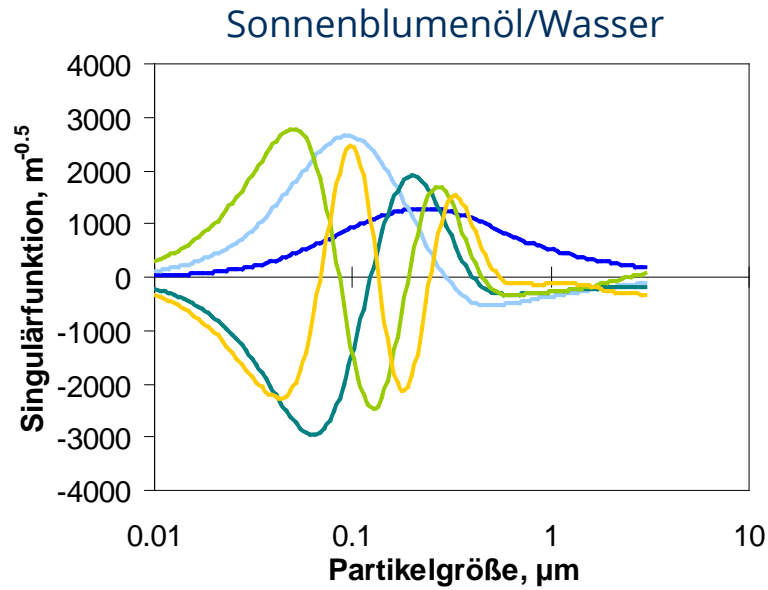
Ergebnisse der Informationsanalyse



Sonnenblumenöl-Emulsion:

- Ölkonzentration: 5 Vol.-%
- Gleichverteilung 10 nm .. 10 µm
- Frequenzbereich: 3 MHz .. 100 MHz
- Messfehler: 0.005 dB/cm/MHz

Diskussion des Informationsgehaltes



Singulärfunktionen des Inversionsproblems

... bestimmen, inwieweit Feinstruktur der PGV aufgelöst werden kann

- je ausgeprägter die Oszillationen, desto mehr Details erkennbar
 - ➔ geringe Auflösung: $< 50 \text{ nm}$ und zw. $0,7 \dots 5 \mu m$
 - ➔ hohe Auflösung: $> 5 \mu m$ (akustische Streuung)

Zusammenfassung

- Auswertung spektroskopischer Messsignale = Lösen eines Inversionsproblems
- Inversion reduziert die Erkennbarkeit von PGV-Details
- Messergebnis ist abhängig vom gewählten Inversionsalgorithmus und den Parametereinstellungen
 - sorgfältige Dokumentation muss Inversionsprozedur beschreiben!
- es gibt kein perfekte Inversionsverfahren!
- Bewertungskriterien (CPU-Zeit, Speicherbedarf, Residuum, Plausibilität, ...) sind problemspezifisch zu beantworten
- vieles wurde nicht genannt (Newton-Verfahren, evolutionäre Algorithmen; statistische Methoden, ...); vieles ist mir vermutlich nicht bekannt (z.B. Auswahlkriterien auf Basis der Kernmatrix)
- **Inversion schafft Artefakte – Bleibt Euren Messwerten gegenüber skeptisch!**

