

Caracterización de Materiales Heterogéneos por Mediciones Indirectas

Gloria Frontini
INTEMA (CONICET)
Departamento de Matemática
Univ. Nacional de Mar del Plata
Argentina

Objetivo

Presentar una visión unificada de
varios problemas de Caracterización
de Materiales,

desde el punto de vista del modelo
matemático

y de los métodos para estimar las
cantidades físicas de interés

En colaboración con

UNMDP:

- M. Laura Arias
- Julián Chaubell
- Guillermo Eliçabe
- Gabriela Messineo
- Fernando Otero

INTEC:

- Luis Gugliota
- Jorge Vega

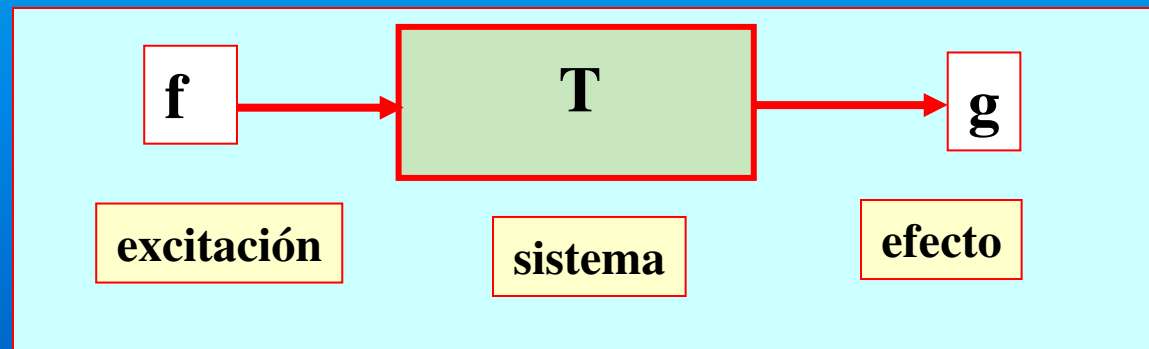
UBA:

Elena Fernández

Mediciones Indirectas

Muchas veces, las cantidades físicas de interés de un sistema, no pueden medirse directamente porque no son accesibles.

Entonces, se analiza el efecto que el sistema produce sobre una excitación.



Ondas Electromagnéticas

luz

Ondas de presión

ultrasonido

Problema Directo

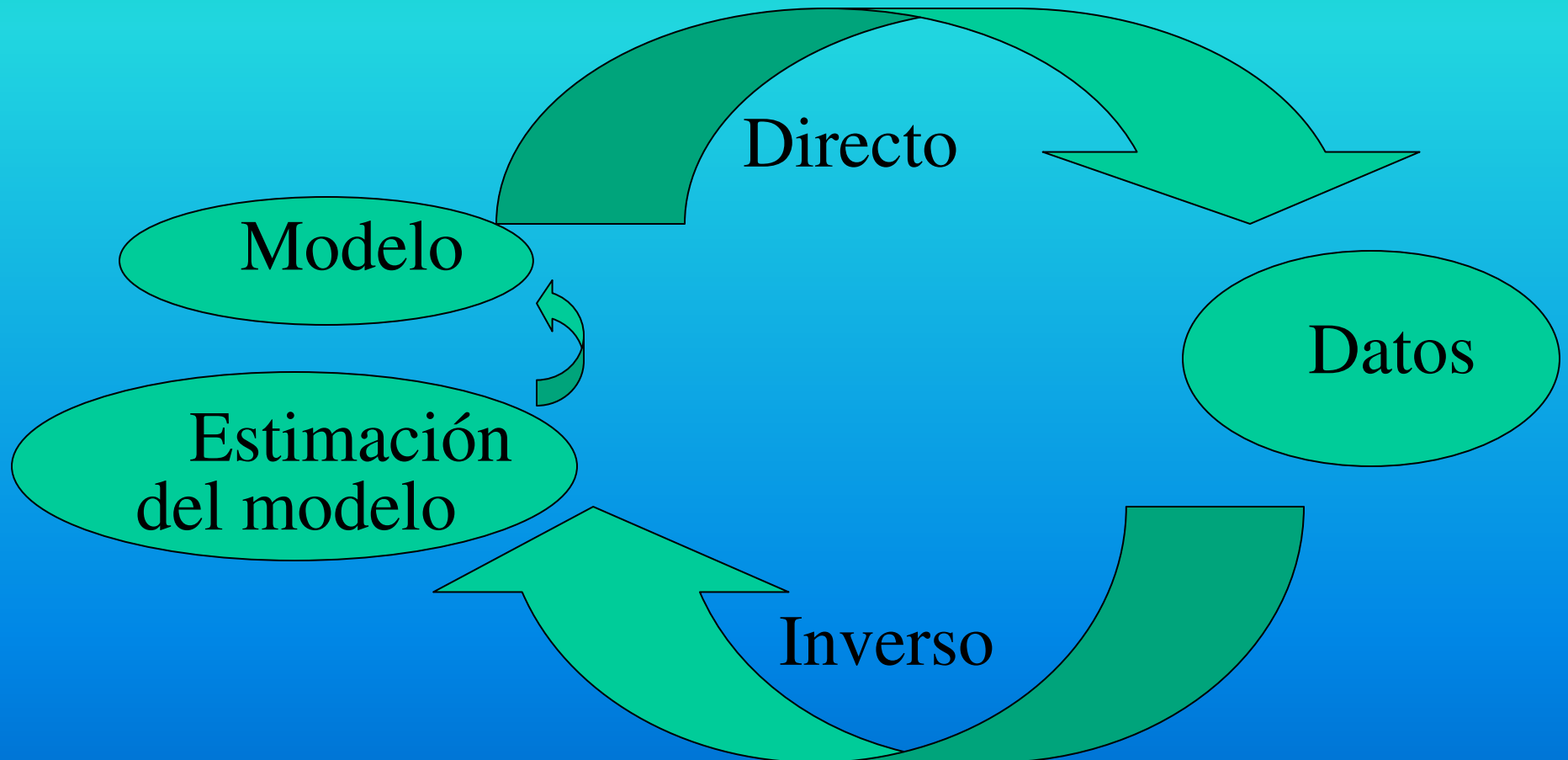
Encontrar las características de la onda transmitida y/o dispersada, en función de las características de la onda incidente y de las propiedades del sistema.

Es el problema que estudia la relación
causa-efecto

En general, puede reproducirse experimentalmente
 \Rightarrow En general, es estable matemáticamente y
podrá simularse numéricamente

¿ Podría caracterizar el sistema
analizando los resultados del problema
directo (efecto) ?

El proceso de inversión puede llevar a una estimación muy diferente del modelo real si no se analiza la "condición" del problema



Problema Inverso

Encontrar las propiedades del sistema
a partir de la onda transmitida.

Es el problema que estudia la relación
Efecto-causa

En general, NO puede reproducirse
experimentalmente

En general, NO es numéricamente estable

Problema Inverso

**Que se sabe del
modelo ?**

Estimación de
Parámetros

Prob. Inverso
Lineal

Prob. Inverso
No- Lineal

Métodos de resolución diversos

Modelo Matemático Unificado

$$g(s) = \int_a^b K(s, \alpha, D) f(D) dD$$

Datos : $g(s) + \varepsilon$

Incógnitas :

α ?

f ?

α, f ?

$$F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad \text{T. de Laplace}$$

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-j\omega t} f(t) dt \quad \text{T. de Fourier}$$

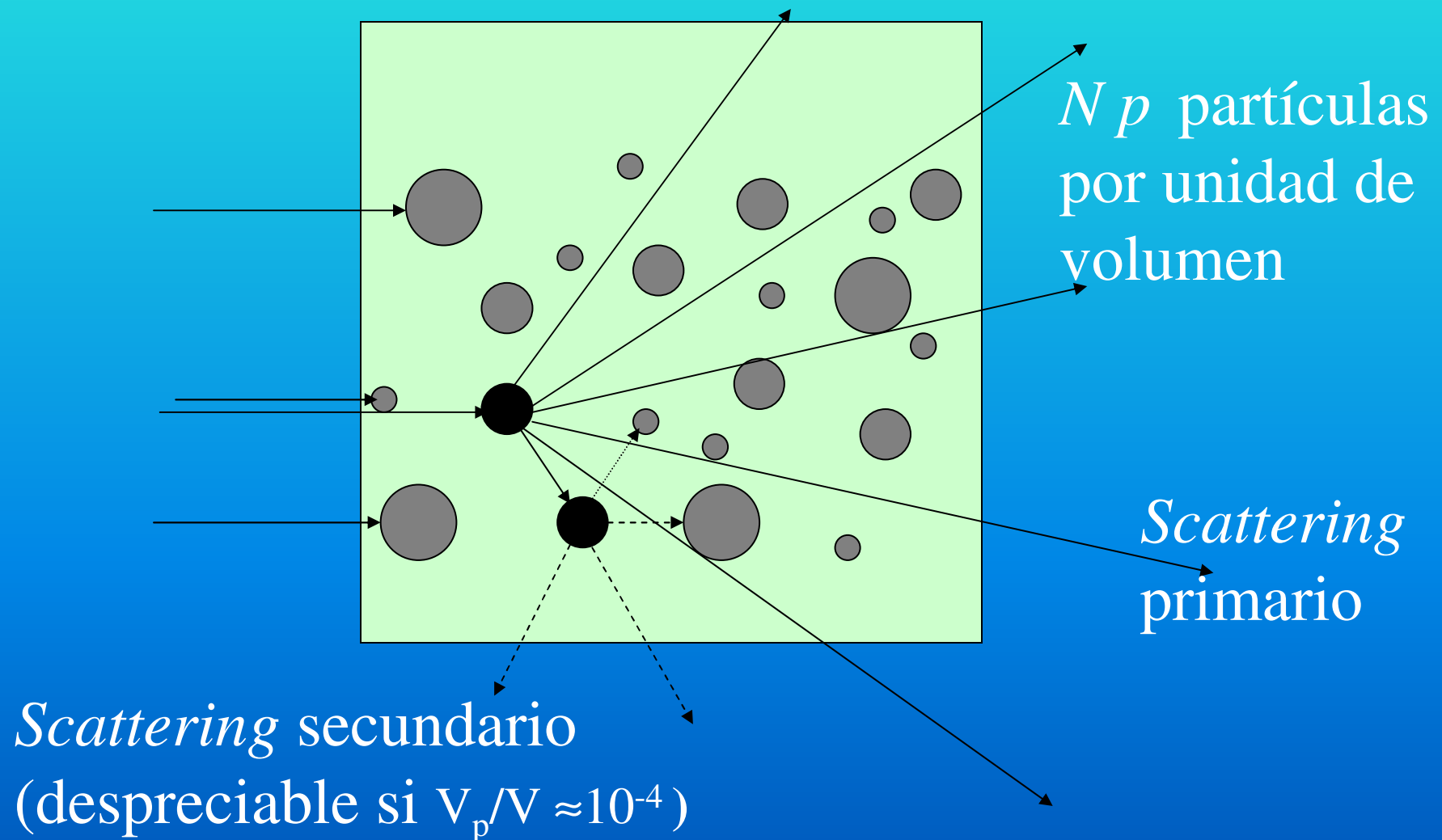
$$y(t) = \int_0^t h(t-\lambda) x(\lambda) d\lambda \quad \text{I. de Convolución}$$

$$I(\theta) = \int_{D_1}^{D_2} S(\theta, D) f(D) dD \quad \text{Dispersión de Luz}$$

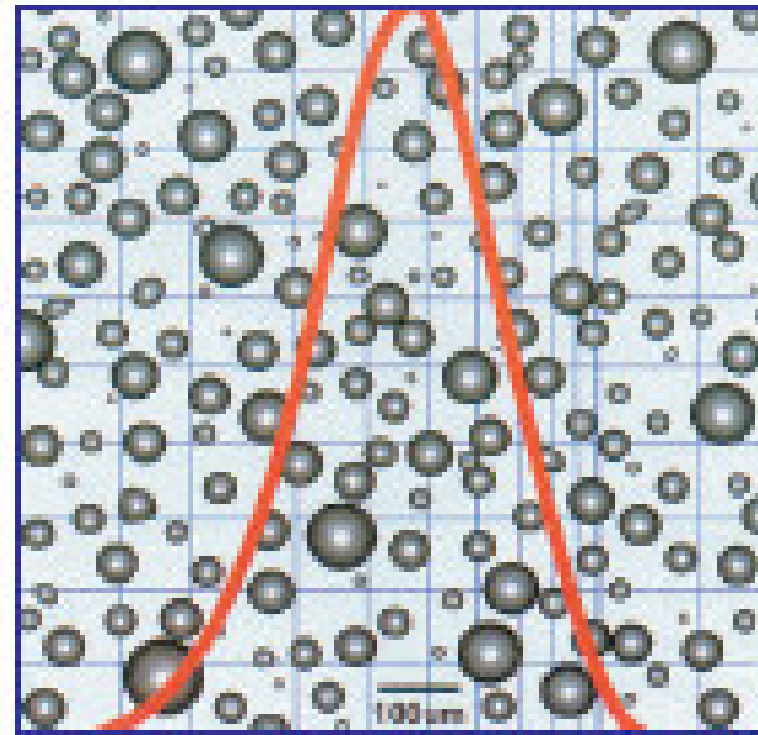
Ondas Electromagnéticas

luz

Técnicas de Medición de “Scattering” para sistemas particulados diluidos



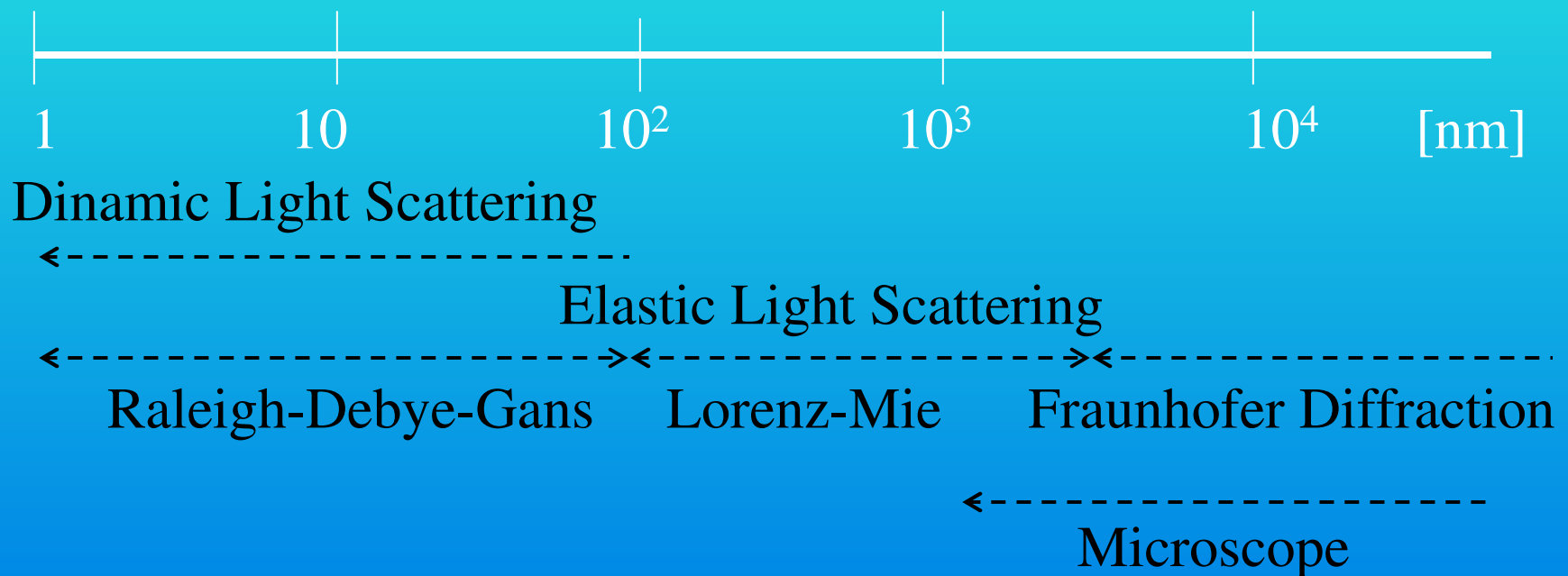
Caso Polidisperso : Distribución de tamaños de Partículas (PSD)



10 20 30 50 70 100 150 200
Particle size (micrometers)

Figure 1 Optical micrograph and superimposed size analysis of Quality Audit Standards

Técnicas de Medición de “Scattering” y modelos, según el tamaño de las partículas



$$\text{RDG} : 2x(m-1) \ll 1$$

$$x = \pi D / \lambda \quad ; \quad m = n_p / n_s \quad ; \quad \lambda = [400 - 900] \text{ nm}$$

↑
índice de refracción

↑
longitud de onda del haz incidente

Modelos Matemáticos

$$g(s) = \int_a^b K(s, D) f(D) dD$$

$$I(\theta) \propto \int_0^\infty C_I(n_{p,0}; \theta, D) f(D) dD$$

Medición
(m ángulos)

Teoría
de Mie

PSD
(n diámetros)

*Modelo
discreto
(vectorial)*

$$\mathbf{i} = \mathbf{E}(n_{p,0}) \mathbf{f}$$

(m×1) (m×n) (n×1)

$$\tau(\lambda) \propto \int_0^\infty C_{\text{ext}}(n_p(\lambda); \lambda, D) f(D) dD$$

Medición
(r longitudes
de onda)

Teoría
de Mie

PSD
(n diámetros)

*Modelo
discreto
(vectorial)*

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{T}(n_p(\lambda)) \mathbf{f}$$

(r×1) (r×n) (n×1)

Mediciones de Scattering Dinámico

Involucra otros aspectos teóricos: Movimiento Browniano. Corrimiento Doppler. Ensanchamiento espectral.

- Cada tamaño de partícula da lugar a un decaimiento exponencial en la autocorrelación.
- El modelo para el caso polidisperso conduce a una transformación de Laplace.

$$g(\tau) = \int_0^{\infty} G(t) e^{-\tau t} dt$$

- Posee las dificultades comunes a todos los problemas inversos del scattering.

Estos sistemas pueden ser

Aerosoles

Emulsiones

Suspensiones

Látex

Sólidos con inclusiones

**materiales con fines industriales, médicos ,farmacológicos,
o materiales no-deseados**

Intensidad en función del ángulo

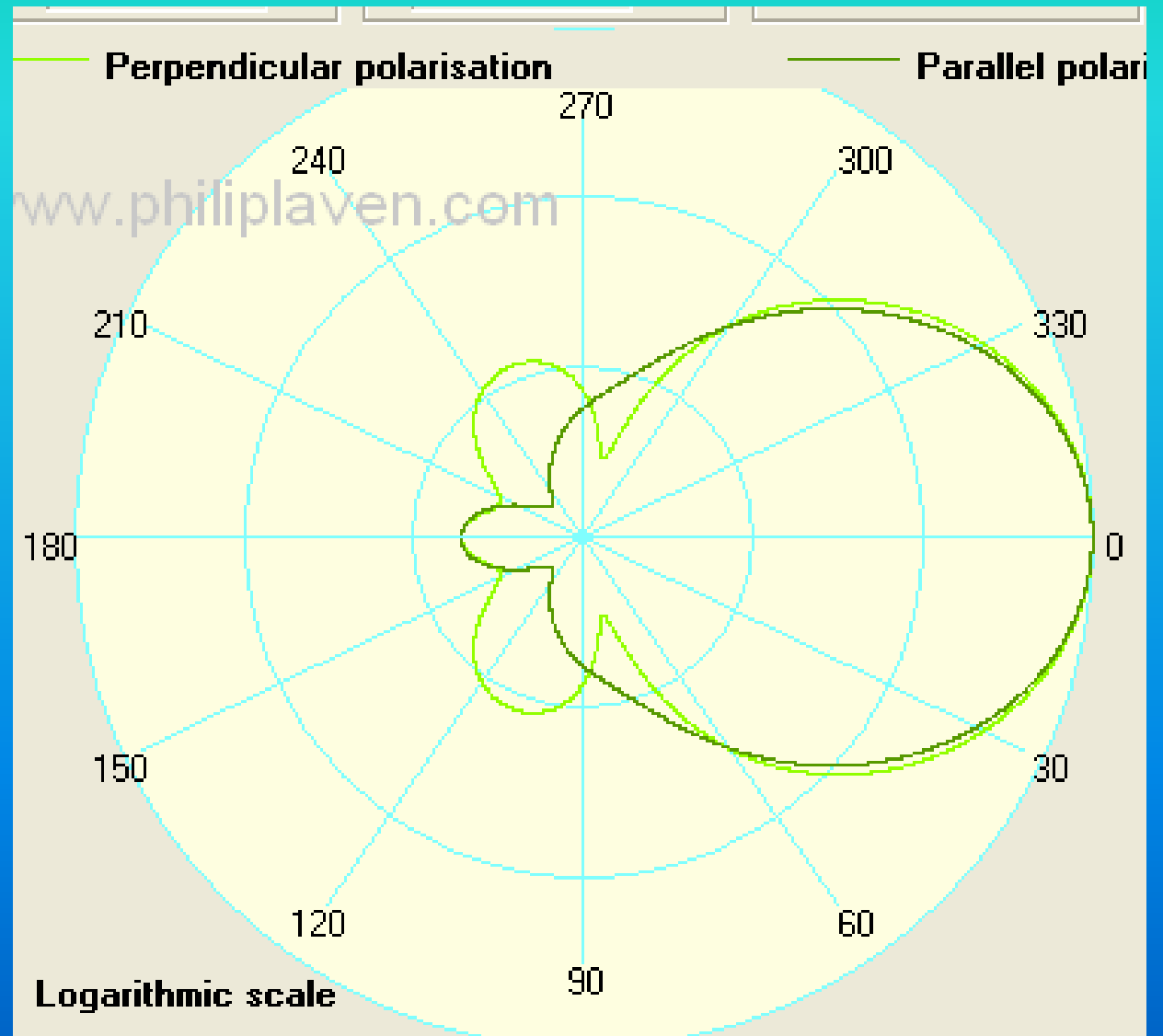
agua en aire,

$$x = 3$$

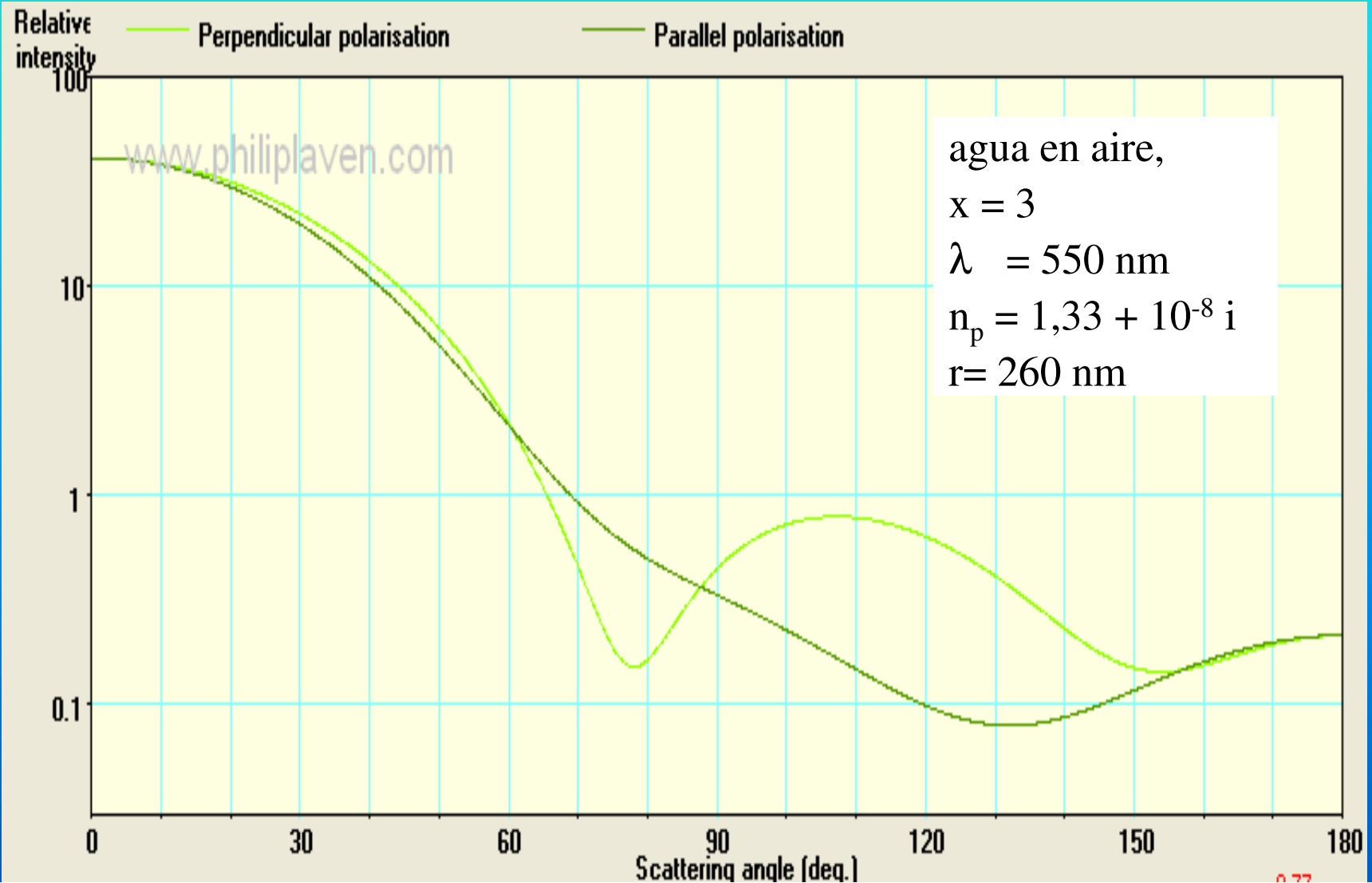
$$\lambda = 550 \text{ nm}$$

$$n_p = 1,33 + 10^{-8} i$$

$$r = 260 \text{ nm}$$



Espectro de Intensidad de luz dispersada $I(\theta)$



Ejemplos

Scattering simple incoherente

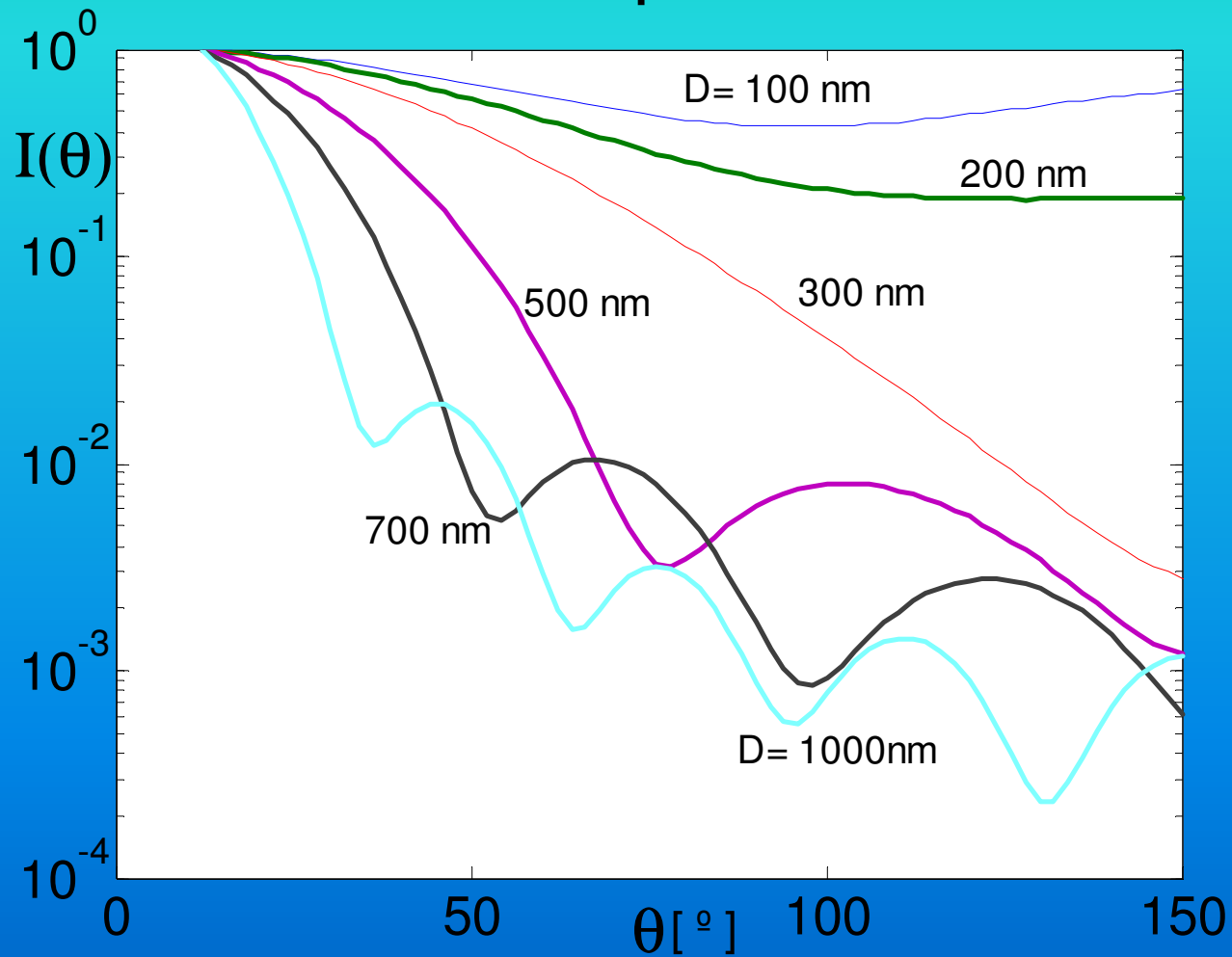
- baja concentración de partículas
- su disposición es al azar

Entonces la irradiancia dispersada por la colección de partículas es la suma de las irradiancias dispersadas por cada una individualmente.

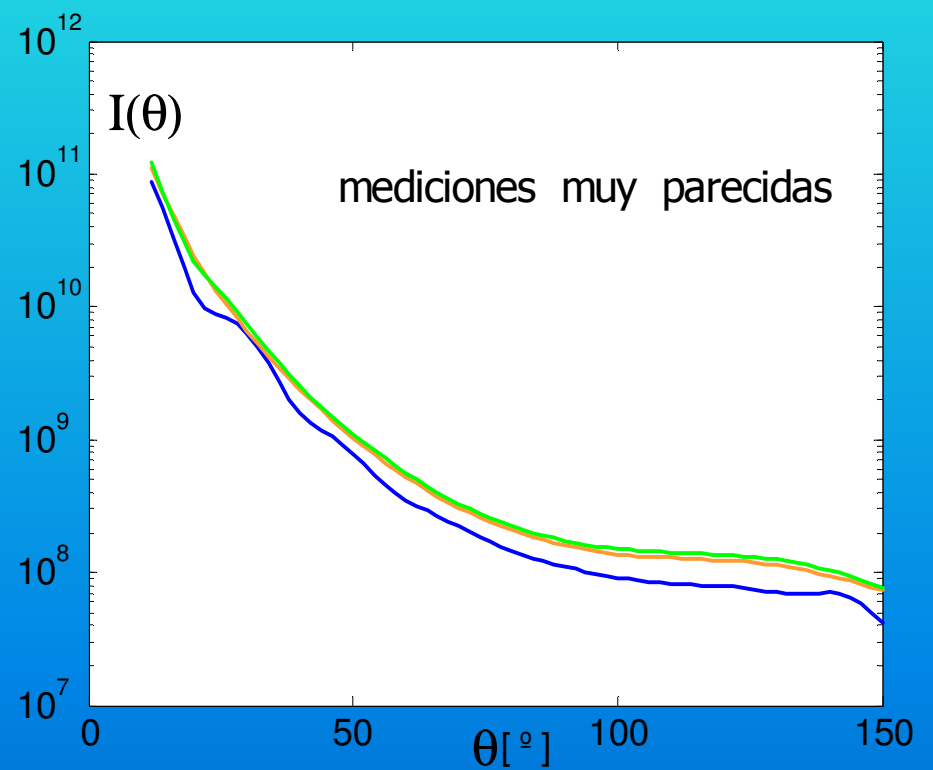
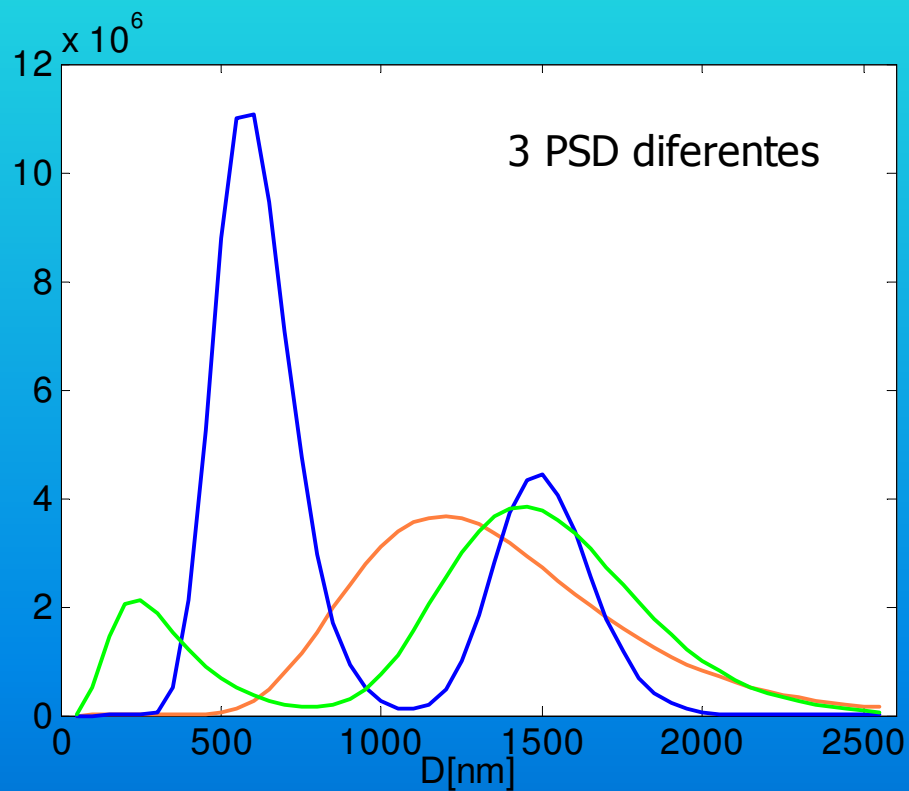
Elástico

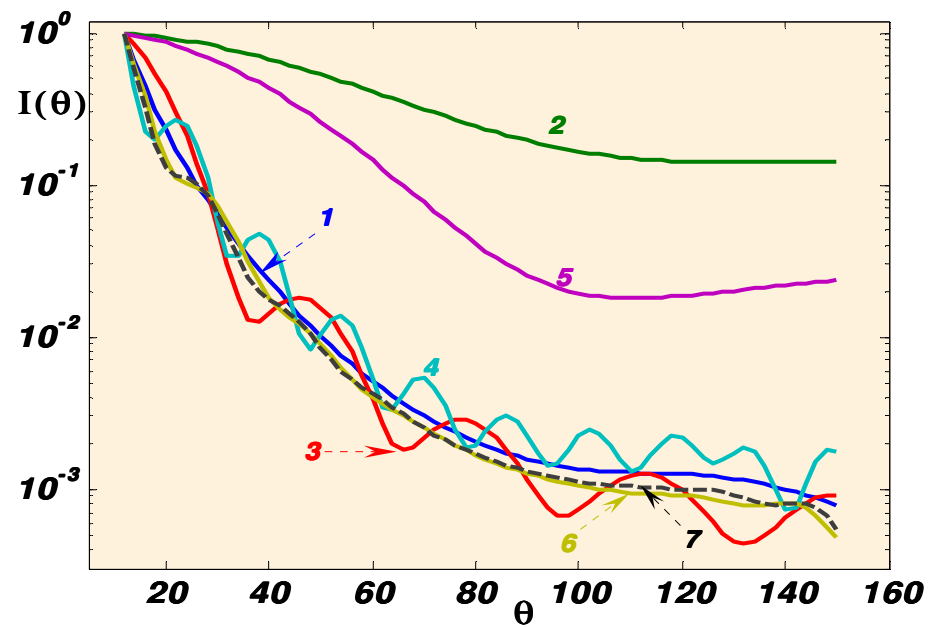
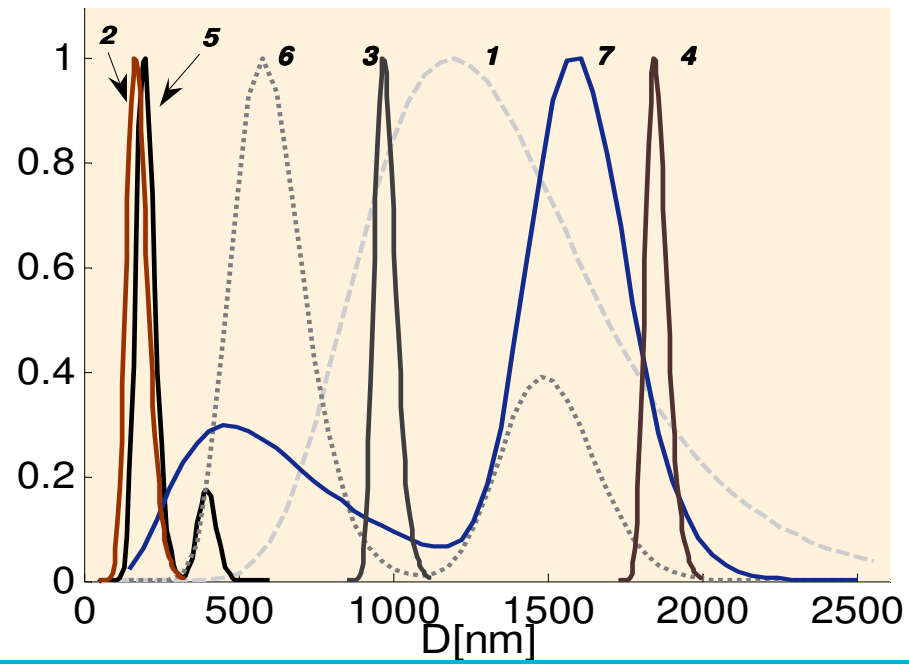
La onda dispersada tiene la misma frecuencia que la onda incidente

ELS para sistemas diluidos de poliestireno monodispersos



ELS para sistemas diluidos de poliestireno polidispersos





Scattering simple con interferencia

- baja concentración de partículas
- su disposición es al azar

Entonces la irradiancia NO es la simple suma de las irradiancias dispersadas por cada una individualmente.

Elástico

La onda dispersada tiene la misma frecuencia que la onda incidente

Modelo: J. S. Pederson, *J. App. Cryst.* (1994) .

- RDG : $2x(m-1) \ll 1$ (bajo contraste)
- Medio no absorbente

$$I(\theta) = \int_{D_1}^{D_2} \phi(\theta, D) S(\tilde{D}, \theta, \tilde{V}_P) f(D) dD$$

↓
Medición
(m ángulos)

↙
 $\tilde{D} = c \cdot D$
diámetro
aparente

↓
volúmen
aparente

↘
PSD
(n diámetros)

**Incógnitas del Modelo
(o sistema) ?**

Parámetros de la PSD

PSD

**P. I.
Lineal**

np , PSD

**P. I.
No lineal**

k , PSD