Универзитет у Београду

Електротехнички факултет

Миољуб В. Нешић

# Развој техника за решавање инверзног фотоакустичког проблема

Докторска дисертација из области фототермалне науке

Београд, 2018

University of Belgrade

School of Electrical Engineering

Mioljub V. Nesic

# Developing the techniques for solving the inverse problem in photoacoustics

Doctoral thesis in the field of photothermal science

Belgrade, 2018

### Страна са информацијама о менторима/члановима комисије

#### Ментор:

Проф. др. Милан Тадић, Универитет у Београду, Електротехнички факултет

Чланови комисије:

- 1. проф. др Милан Тадић
- 2. др Слободанка Галовић
- 3. доц. др Владимир Арсоски
- 4. проф. др Петар Матавуљ
- 5. проф. др Пеђа Михаиловић

Датум одбране:

#### Изјаве захвалности

Желео бих да се захвалим својој менторки, Слободанки Боби Галовић; без њене научне изврсности, пожртвовања, несебичности као и величине у сваком погледу, професионалном и личном, ова дисертација, у најбољем случају, не би ни приближно могла бити овог калибра.

Велику захвалност дугујем својим најближим сарадницима, колегиници Марици Поповић, колеги Слободану Тодосијевићу и колегиници Весни Борка Јовановић, без чије професионалне и пријатељске подршке би било знатно теже привести крају овакав посао у овоме обиму.

Мојој породици – супрузи, деци, родитељима, сестри – који су свих ових година били приморани да подносе жртву мог бављења научним радом у условима који су нам свима наметнути; њихова подршка и разумевање мог личног схватања значаја бављења науком ниједног тренутка нису изостали и на томе им велико хвала. Овај рад је посвећен њима.

Захвалност дугујем и свом формалном ментору Милану Тадићу, без чије би подршке у премошћавању потешкоћа свих врста приликом реализације овог доктората комплетан посао био много тежи и засигурно би трајао дуже.

Такође, најближи круг мојих пријатеља — Витомир Јовановић, Марко Мишић и Матеја Миленковић — својим саветима и искреним пријатељством су ми свих ових година олакшавали тешке тренутке а увеличавали оне лепе; хвала им на томе.

Коначно, најлепше хвала мојој првој менторки, редовној професорки Електротехничког факултета у пензији, Милеси Срећковић, што ми је својом упорношћу и пријатељским саветима отворила врата бављења науком у престижној институцији као што је Институт за Нуклеарне Науке Винча и тиме засигурно ударила неизбрисив печат у формирању мојих животних назора.

# Развој техника за решавање инверзног фотоакустичког проблема

#### Проширени резиме на српском језику

Фотоакустичке мерне методе се интензивно развијају у последње четири деценије и налазе све разноврснију примену у науци, техници, медицини и стоматологији: од истраживања везе између структуре материје и њених термалних, еластичних, оптичких, електричних и других физичких особина, посебно на ниској временској милисекунде) и просторној скали (субмикронској), (испод 0,1 преко карактеризације наноелектронских направа и фотонских кристала, па све до in vivo дијагностике у медицини. Поред развоја ласера и ласерских диода, који се користе као недеструктивна побуда у фотоакустичким методама, све прецизнијих микрофона и ултразвучних сензора, као и пратеће електронике за побољшање односа сигнал-шум, развоју фотоакустичких метода и ширењу њихове примене значајно доприносе: развој теоријских модела за описивање доминантних процеса при интеракцији електромагнетског зрачења са материјом, развој теорије провођења топлоте и еластичних поремећаја кроз разноврсне супстанце, али и развој методологије за одрећивање параметара модела: ОД решавања експоненцијалних проблема математичке физике и неуронских мрежа за карактеризацију узорака до развоја алгоритама за реконструкцију слике, када се фототермалне и фотоакустичке методе примењују у осликавању површине материјала и структуре испод површине различитих узорака и направа.

До скоро се сматрало да су сви резонантни ефекти у фотоакустичком одзиву последица утицаја мерног ланца, пре свега електронске резонанце микрофона, ултразвучног сензора, функцијског генератора који управља амплитудском модулацијом ласерске побуде или *lock-in* појачавача и тежило се дефинисању и коришћењу само оног дела фотоакустичког одзива у којем се резонанце не појављују, што је значајно сужавало могућности фотоакустичког метода у одређивању оних динамичких својстава у узорку који долазе до изражаја на високим учестаностима (преко 10 килохерца), односно процеса који се дешавају на краткој временској скали, испод 0.1 милисекунде (веома брзи процеси). Недавни развој генерализованог модела за простирање оптички произведеног

iii

термодинамичког поремећаја у узорку узима у обзир коначну брзину простирања топлоте, предвиђајући постојање топлотних и акустичких резонанци у ФА одзиву чији положај и величина зависе од физичких својстава узорка. То значи да је неопходно детаљно истражити резонантне ефекте у фотоакустичком одзиву и развити нове методе за решавање инверзног фотоакустичког проблема. Ово би омогућило одређивање брзине простирања топлоте, својства које до сада није мерено ни за једну супстанцијалну средину, повећало тачност процене физичких својстава узорка и резолуцију фотоакустичке томографије, веома битне за медицинске примене.

Предмет истраживања у овој докторској дисертацији јесте развој методе за решавање инверзног фотоакустичког проблема у срединама у којима је изражен утицај топлотне меморије. Ово обухвата развој генерализоване теорије фотоакустичког одзива и развој техника за одређивање параметара теоријскоматематичког симулационог модела у значајно ширем фреквентном опсегу од оног који се тренутно користи (од 50 херца до изнад 10 килохерца). Како се ради са лоше постављеним проблемом математичке физике у чијој основи је хиперболичка диференцијална једначина, развијене су две различите технике приступа: математичка самоусаглашена процедура за решавање експоненцијалних проблема и употреба неуронске мреже обучаване на генерализованом моделу.

#### Циљ истраживања

Циљ овог истраживања је превасходно повећање броја својстава материјала и направа карактерисаних фотоакустичким мерењима и то са задовољавајућом тачношћу. Последично, секундарни циљеви постају и проширење могућности фотоакустичке карактеризације, повећање тачности одређивања динамичких својстава материјала и повећање резолуције фотоакустичке томографије. Унапређење метода фотоакустичког осликавања (имиџинга) разноврсних материјала (од макромолекулских наноструктура, преко наноелектронских и нанофотонских направа, све до биолошких ткива) веома је важно за карактеризацију и осликавање материјала са ниским степеном уређења. Са практичне тачке гледишта (посебно за биомедицинске примене), али и са теоријског становишта, прецизнијим одређивањем динамичких параметара, а посебно брзине простирања топлоте која до сада није мерена, омогућило би се боље фундаментално описивање транспортних процеса.

#### Значај

Значај овог истраживања огледа се у повећању могућности фотоакустичких мерних техника за недеструктивну карактеризацију, осликавање и томографију, остваривању веће тачности и веће прецизности при одређивању физичких својстава овим методама и проширењу примене ових метода у медицинској дијагностици и инжењерингу особина електронских направа.

#### Полазне хипотезе

Нека експериментална фотоакустичка мерења приказана у литератури и нека наша прелиминарна мерења указују на постојање резонантних ефеката у фотоакустичком одзиву у чујном акустичком опсегу. У литератури су до сада резонантни ефекти сматрани последицом утицаја електронских компоненти мерног система. Детаљнијим прорачунима могућих електронских резонантних ефеката показано је да се они налазе на учестаностима које су стотинак пута веће од оних на којима су уочени резонантни максимуми (пикови). Експериментално измерени резонанти пикови се не могу приписати утицају мерног ланца. Њихова појава може бити последица мале брзине простирања топлоте кроз мерене узорке. Ова претпоставка није обухваћена стандардним моделима фотоакустичког одзива. У нашем истраживању развили смо генерализовани модел трансмисионог фотоакустичког одзива који укључује могућност постојања топлотних резонанци као последице мале брзине простирања топлоте кроз узорке ниског степена структурног уређења, као и могућност постојања акустичних резонанци као последице конструкције мерне апаратуре.

#### Методе истраживања

У истраживању су примењене и експерименталне и теоријске методе.

Експериментално су мерени фотоакустички одзиви алуминијума и бакра, као референтних узорака (материјали високог степена структурног уређења) и неколико типова макромолекуларних материјала различитог степена кристалиничности (материјали ниског степена структурног уређења). Мерења су обављана коришћењем двеју различитих фотоакустичких поставки.

Теоријске методе које су биле коришћене су: фуријеова трансформација за свођење парцијалних диференцијалних једначина на обичне, метода неодређених коефицијената за решавање обичних диференцијалних једначина у комплексном домену, методе за решавање експоненцијалних проблема математичке физике, формирање електричне аналогије за фотоакустички одзив и коришћење алата развијених у теорији система аутоматског управљања и теорији филтара за прорачунавање одзива оваквог система, теорија неуронских мрежа и развој тростепене неуронске мреже за одређивање параметара модела фотоакустичког одзива описаног генерализованим симулационим моделом. Осим тога, употребљене су различите нумеричке методе, попут регресије, линеаризације, усредњавања и фитовања, као и алгоритми за реконструкцију слике.

#### Кључне речи

фотоакустика, инверзни проблем, термоеластична карактеризација, осликавање, топлотна меморија, експоненцијални проблеми математичке физике, неуронске мреже

Научна област: Физичка електроника

Ужа научна област: Наноелектроника и фотоника

**УДК број:** 621.3

# Developing the techniques for solving the inverse problem in photoacoustics

#### **Summary in English language**

Photoacoustic (PA) measurement methods have been intensively developed in the last four decades and have found versatile application in science, technique, medicine and dentistry: from explorations of the relationship between structure of matter and its thermal, elastic, optical, electrical and other physical properties (especially at low timescale – under 0.1 ms and small space-frame – submicron), through characterization of nanoelectronic devices and photon crystals, all the way to in vivo diagnostics in medicine. Along with the development of lasers and laser diodes, used as nondestructive excitation in PA methods, with growing precision of microphones and ultrasound sensors as well as the accompanying electronics aimed at signal-to-noise (SNR) ratio improvement, the development of PA methods and broadening of their application field are significantly influenced by: the development of theoretical models aimed at describing dominant processes in the interaction of electromagnetic (EM) radiation with matter, the development of the theory of heat conduction and elastic movements through different substances, but also the development of the methodology for the determination of model parameters - from solving exponential problems of mathematical physics and neural networks aimed at sample characterization, to the development of image reconstruction algorithms, where photothermal (PT) and PA methods are utilized in the imaging of surface and sub-surface structure of different samples and devices.

Until recently, all resonant effects in PA response were regarded as the consequence of the influence of the measurement chain, primarily originating from the electronic resonances of the microphone, the ultrasound sensor, the function generator running the modulation of the excitation signal, or the lock-in amplifier. Consequently, a general aspiration was the defining and the utilization of the part of the PA response where the resonances were absent, thus constricting the potential of PA methods in determination of those dynamical properties of the sample detectable only at high frequencies (above 10 kHz) – i.e. the ultrafast processes (occurring at short time-scale, under 0.1 ms).

Recent development of the generalized model of the propagation of optically induced thermodynamical perturbation in the sample accounts for the definite heat propagation velocity, presuming the existence of thermal and acoustic resonances in PA response, whose position and intensity are dependent upon physical properties of the sample. This underlines the necessity of a detailed investigation of resonant effects in PA response and the development of novel methods for solving the inverse PA problem in order to enable the determination of heat propagation velocity, a parameter that has never before been measured for any substantial environment, and to improve the accuracy of physical parameter estimation and the resolution of PA tomography (of particular importance in medical application).

The subject of this doctoral dissertation is the development of the method for solving the inverse PA problem in the media with noticeable thermal memory influence. This includes the development of the generalized theory of PA response as well as the development of the techniques for the determination of theoretically/mathematically simulated (TMS) model parameters in a considerably wider frequency range then the one currently used (from 50 Hz to above 10 kHz). Since this is a particularly ill-posed problem of mathematical physics, originating from the usage of hyperbolic differential equation, two different approaches were exercised: a mathematical self consistent procedure for exponential problem solving and the development of a neural network trained on the generalized model.

#### **Exploration aims**

The main aim of this exploration is improvement of the number of material properties which can be characterized by PA methods, with satisfactory level of accuracy. Consequently, secondary goals include the broadening of the possibilities of PA characterization, improving the accuracy of the estimation of dynamic properties of the material. The improvement of PA imaging methods of different materials (from macromolecular structures, through nanoelectronic/nanophotonic devices, to biological tissues) is of utter importance in the characterization of soft matter (i.e. the material with low level of structural arrangement). From a practical point of view, this relates to biomedical applications, but also from a theoretical point of view, more precise determination of dynamic parameters – especially heat propagation velocity – would potentiate a better fundamental description of transport processes.

#### Significance

The significance of this exploration is the augmentation of the possibilities of PA measurement techniques in non-destructive characterization, imaging and tomography. Greater accuracy and better precision are to be achieved in determination of physical properties by these methods, as well as broadening their application range in medical diagnostics and engineering of properties of electronic devices.

#### **Starting hypothesis**

There are certain PA measurements throughout the literature, as well some of our own preliminary experimental results, which point out to the existence of resonant effects in PA response, in the audible modulation frequency range. Literature based considerations of these effects have, until now, related them to the influence of the electronic components of the measurement chain; however, detailed calculations have shown these resonant peaks to be possible only at frequencies around hundred times higher in comparison to the frequencies of the spotted ones. Thus, experimentally obtained resonant peaks cannot be attributed to the influence of the measurement chain. On the other hand, their occurrence can be due to the low heat propagation velocity through the measured samples – an assumption which is not contained in conventional PA response models. In our exploration, the starting point was the generalized model of transmission PA response, which accounts for the existence of heat resonances as the consequence of low heat propagation velocity through the samples of low level of structural arrangement, as well as for the existence of acoustic resonances as the consequence of measurement apparatus construction.

#### **Exploration methods**

Exploration methods deployed were both experimental and theoretical.

As for the experimental methods, the PA response of aluminum, copper and other high structurally arranged reference samples were recorded, along with several types of reference materials of lower level of structural arrangement, which were followed by the measurements of PA response of macromolecular materials of different level of crystallinity. The measurements were conducted with two different experimental PA set-ups.

Theoretical methods of interest were: Fourier transform for solving partial differential equations, method of indeterminate coefficients for solving ordinary differential equations in complex domain, methods for solving exponential problems of mathematical physics, electrical analogies in PA response with tools developed in signal acquisition and processing with filter theories, and the application of three-level neural network for the determination of PA TMS model parameters. Besides, the utilization of different numerical methods, such as regression, linearization, averaging and fitting, as well as image reconstruction algorithms is considered default.

#### Key words

photoacoustics, inverse problem, thermoelastic characterization, imaging, thermal memory, exponential problems of mathematical physics, neural networks

Scientific area: Phisical electronics

Narrow scientific area: Nanoelectronics and photonics

**UDC number:** 621.3

### САДРЖАЈ

Страна са информацијама о менторима/члановима комисије	i
Изјаве захвалности	ii
Проширени резиме на српском језику	iii
Кључне речи	vii
Summary in English language	viii
Key words	xii

1 УВОД 1
1.1. Мотивација 1
1.2 Предмет 2
1.3 Циљ
1.4 Значај 4
1.5 Организација доктората 4
2 ПОЈАМ ИНВЕРЗНОГ ФА ПРОБЛЕМА И ПРЕГЛЕД МЕТОДОЛОГИЈЕ ЊЕГОВОГ РЕШАВАЊА6
2.1 Концепт директне проблематике и инверзног решавања 6
2.2 Мерење и осликавање (имиџинг) са аспекта инверзног решавања 7
2.3 Методе експоненцијалне физике за инверзно решавање
2.4.1 Фредхолмов интеграл 10
2.4.2 Развој преко Својствених Вредности 12
2.4.3 Пикарово правило 14
2.4.4 Разлагање преко Својствених Вредности 14
2.4.5 Регуларизација 16
2.5 Електричне аналогије: алати развијени у теорији Система Аутоматског Управљања
2.6 Нумеричке методе и алгоритми за реконструкцију слике 24
2.6.2 Нормализација: однос амплитуда, разлика фаза, фитовање 24
2.6.3 Примена алгоритама за дигиталну обраде слике 24
2.7 Неуронске мреже 26
3 ТЕОРИЈСКИ ДОПРИНОСИ

3.1 Развој ТМС модела у складу са генерализованом теоријом преноса топло	эте
	27
3.1.1 Одабир региона од интереса и линеаризација	33
3.1.2 Пример утицаја топлотне меморије на ФА одзив	35
3.1.3 Пример утицаја вишеструких рефлексија на ФА одзив	40
3.1.4 Утицај Хелмхолцових резонанци	44
3.2 TMC моделовање	49
3.2.1 Резултати моделовања	51
3.3 Примена неуронске мреже	53
3.3.1 Опис неуронске мреже	53
3.3.2 Дискусија	53
4 ФА МЕРЕЊА И ПРИМЕНА РАЗВИЈЕНЕ ТЕОРИЈЕ НА	
ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИМ РЕЗУЛТАТИМА	57
4.1 Експериментална поставка	59
4.1.1 Конфигурације у теорији	59
4.1.2 Опис коришћених поставки	61
4.1.3 Припрема узорака	65
4.2 Упоредни приказ референтних узорака	75
4.2.1 Алуминијум	76
4.2.2 Бакар	78
4.2.3 АБС	79
4.2.4 Закључак	80
4.3 Методологија тумачења експерименталних резултата	81
4.4 Експеримент: приказ у паралели са теоријским предвиђањима	83
4.4.1 Резултати примене описане методологије: ХДПЕ	83
4.4.2 ХДПЕк	85
4.4.3 ЛДПЕ	87
4.4.4 ПА12	91
4.5 Експеримент: карактеризација ХДПЕ/ЛДПЕ/ХДПЕк	98
4.5.1 Одређивање параметара модела из фазе: процена $D_{T_s}$	. 100
4.5.2 Одређивање параметара модела из амплитуде	. 103
4.6 Закључак поглавља	. 112

5 ЗАКЉУЧЦИ	113
КОРИШЋЕНА ЛИТЕРАТУРА	117
ПРИЛОЗИ	131
Прилог 1	131
Прилог 2	135
Прилог 3	136
Прилог 4	140
БИОГРАФИЈА	141

#### 1 УВОД

#### 1.1. Мотивација

Фотоакустичке (ФА) мерне методе се интензивно развијају у последње четири деценије и налазе све разноврснију примену у науци, техници, медицини и стоматологији: од истраживања везе између структуре материје и њених термалних, еластичних, оптичких, електричних и других физичких особина, посебно на ниској временској (испод 0,1 ms) и просторној скали (испод 1 µs), преко карактеризације наноелектронских направа и фотонских кристала, па све до *in vivo* дијагностике у медицини. Поред развоја ласера и ласерских диода, који се користе као недеструктивна побуда у ФА методама, све прецизнијих микрофона и ултразвучних сензора, као и пратеће електронике за побољшање односа сигналшум, развоју ФА метода и ширењу њихове примене значајно доприноси решавање инверзног ФА проблема.

Инверзни проблем јесте проблем добијања информација о физичком објекту из извршених мерења. Овај проблем се налази у основи највећег броја техника за одређивање састава (композициона анализа), одређивање физичких својстава одређивање морфологије (осликавање) (карактеризација) И разноврсних материјала, биолошких ткива и електронских направа. У фотоакустици, решавање инверзног проблема састоји се од развоја теоријско-математичког симулационог (ТМС) модела и формулисања технике за одређивање параметара модела на основу мерених података. ТМС модел успоставља везу између побуде, физичких процеса у мерном ланцу и експериментално снимљених података. Одређивање параметара симулационог модела јесте лоше постављен проблем математичке физике. Са математичке тачке гледишта, основни проблем је нестабилност решења ТМС модела. За мале промене параметара модела, долази до великих промена у његовом решењу. Са тачке гледишта примене развијене технике за одређивање параметара модела, највеће потешкоће су ограничен фреквентни опсег мерења, условљен карактеристикама компоненти мерног ланца и нерешен проблем калибрације мерења тако да не могу директно да се користе квантитативне вредности ни амплитудских ни фазних мерења.

Детаљном анализом постојећих ТМС модела и поређењем њихових предвиђања са експерименталним амплитудским и фазним ФА одзивима, показано је да ови модели релативно добро описују експеримент на учестаностима испод 1 kHz, чиме је максимални могући аудио опсег 20 kHz значајно смањен. То значи да се из мерених података губе информације о оним процесима и својствима материјала које долазе до изражаја на високим учестаностима аудио-опсега. Са друге стране, сужени фреквентни опсег смањује и тачност одређивања параметара модела односно својстава испитиваног узорка. Ово је био разлог за развој генерализованих модела за трансмисиони ФА одзив, који на задовољавајући начин описују снимљени одзив у значајно ширем фреквентном опсегу. Генерализовани модели захтевају и модификацију техника за одређивање параметара модела. Прегледом постојећих техника објављених у литератури и њихове примене у карактеризацији и осликавању разноврсних материјала, уочено је да нигде нису коришћена и амплитудска и фазна мерења. Процењена је грешка одређивања својстава материјала и закључено је да се услед оваквог приступа могу очекивати и веома велике апсолутне грешке, веће од двадесет процената. Због свега тога, у овом раду је темељније разматрано решавање инверзног  $\Phi A$ од развоја генерализованих ТМС проблема. модела па до развоја самоусаглашених техника за одређивање параметара модела.

#### 1.2 Предмет

Предмет истраживања ове дисертације јесу: развој теоријског модела за описивање доминантних процеса при интеракцији електромагнетског (ЕМ) зрачења са материјом, развој теорије провођења топлоте и еластичних поремећаја кроз разноврсне супстанце, моделовање утицаја мерног ланца, али и развој методологије за одређивање параметара модела. У проблему одређивања параметара модела за карактеризацију разноврсних узорака коришћена је теорија решавања експоненцијалних проблема математичке физике и неуронске мреже док је за осликавање испитиваних узорака и ФА томографију модификован један од најбоље познатих и највише коришћених алгоритама за реконструкцију слике.

Што се тиче развоја ТМС модела, до скоро се сматрало да су сви резонантни ефекти у ФА одзиву последица утицаја мерног ланца, пре свега електронске резонанце микрофона, ултразвучног сензора, функцијског генератора који управља амплитудском модулацијом ласерске побуде или лок-ин (енг. lock-in) појачавача и тежило се дефинисању и коришћењу само оног дела ФА одзива у коме се резонанце не појављују, што је значајно сужавало могућности ФА метода у одређивању оних динамичких својстава у узорку који долазе до изражаја на високим учестаностима (преко 10 kHz), односно процеса који се дешавају на краткој временској скали (испод 0.1 ms, веома брзи процеси). Недавно је развијен генерализовани модел за простирање оптички произведеног термодинамичког поремећаја у узорку који узима у обзир коначну брзину простирања топлоте. Овај модел предвиђа постојање топлотних и акустичких резонанци у ФА одзиву чији положај и величина зависе од физичких својстава узорка. На бази овог модела, развијен је генерализовани модел трансмисионог ФА одзива. Осим тога, разматран је и утицај конструкције ћелије минималне запремине, и развијен је модел који показује да се ова ћелија понаша као Хелмхолцов резонатор. Укључивањем утицаја ФА ћелије, развијен је модел који такоће предвиђа резонантне ефекте у амплитудској ФА карактеристици на учестаностима које се налазе у аудио опсегу. Оба ова уопштења омогућавају да се за одређивање параметара модела користи значајно шири фреквентни опсег. И на крају, развијени модел је додатно уопштен моделовањем утицаја вишеструких оптичких рефлексија које се могу очекивати код веома танких узорака код којих је производ коефицијента оптичке апсорпције и дебљине узорка мањи од један, омогућавајући на тај начин да се из ФА мерења одреди још једно оптичко својство материјала, коефицијент рефлексије.

#### 1.3 Циљ

Циљеви овог истраживања јесу: повећање броја својстава материјала и направа које се могу одредити из једног ФА мерења; омогућавање одређивања брзине простирања топлоте – својства супстанце које до сада није одређено ни за један материјал нити структуру, а чије познавање постаје све значајније, како за

фундаментално објашњење процеса преноса енергије (пре свега у материјалима који имају низак степен структурног уређења, као што су биолошки молекули, макромолекуларни материјали, али и код графена, нанотуба, фулерена и других наноструктурних материјала, композита и направа) тако и за многобројне примене – од решавања проблема самозагревања у наноелектронским и фотонским направама до медицинске дијагностике и медицинских терапијских метода; повећање тачности одређивања физичких својстава узорака и повећање резолуције ФА осликавања и томографије.

#### 1.4 Значај

Значај овог истраживања огледа се у повећању могућности ФА мерних техника за недеструктивну карактеризацију, осликавање и томографију, остваривању веће тачности и веће прецизности при одређивању физичких својстава овим методама и проширењу примене ових метода у медицинској дијагностици и инжењерингу особина електронских направа.

#### 1.5 Организација доктората

У уводном поглављу изложени су мотивација, предмет, циљ и значај ове докторске дисертације. Друго поглавље је посвећено објашњењу фотоакустичког ефекта, историјском прегледу различитих ТМС модела којима се на основу доминантних физичких процеса повезују познати побудни сигнал и очекивани мерени одзив. Осим тога, у овом поглављу је дат систематичан преглед техника за одређивање параметара модела. У трећем поглављу су изложени и дискутовани теоријски резултати: генерализовани модели који боље предвиђају снимљени ФА одзив. Нумеричком симулацијом указано је на фреквентне области у амплитудском и фазном ФА одзиву у којима генерализовани модели предвиђају другачији одзив од претходних модела и анализиран је значај ових разлика за одређивање физичких својстава испитиваних узорака. Дискутоване су различите методе нормализације снимљених одзива као решење проблема некалибрисаности ФА мерења. У другом делу су развијене две технике за одређивање параметара ТМС модела трансмисионог ФА одзива. Прво је изложена самоусаглашена техника за одређивање параметара модела, односно физичких својстава, и на нумеричком експерименту је анализирана грешка која се добија приликом решавања овог лоше постављеног проблема математичке физике за различите материјале и различите технике нормализације. После тога је описана неуронска мрежа и приказани су резултати одређивања параметара модела коришћењем исте. Дискутована је грешка која се појављује када се примени овај приступ у одређивању својстава испитиваног узорка, користећи резултате нумеричког експеримента. У четвртом поглављу су описане експерименталне поставке и узорци који су коришћени за експериментална мерења ФА одзива. Указано је на додатне утицаје који се јављају приликом експерименталног испитивања различитих узорака у односу на предвиђања теоријских модела. На крају овог поглавља је самоусаглашена процедура развијена приказана у трећем поглављу примењена на експериментална мерења и дискутовани су добијени физички параметри и грешке њиховог одређивања за неколико различитих узорака. У петом поглављу су изложени најважнији закључци.

## 2 ПОЈАМ ИНВЕРЗНОГ ФА ПРОБЛЕМА И ПРЕГЛЕД МЕТОДОЛОГИЈЕ ЊЕГОВОГ РЕШАВАЊА

#### 2.1 Концепт директне проблематике и инверзног решавања

Уопштено говорећи, решавање инверзних проблема у науци се концептуално може сврстати у две међуповезане категорије: категорију теоријско-математичког моделовања (директни проблем) и категорију одређивања параметара теоријскосимулационог модела (инверзно решавање).

*Директни проблем* подразумева да су познати узроци одређене (посматране) појаве, и на основу тога се формира математички модел који (довољно добро) описује физичке процесе који до посматране појаве доводе, те да помоћу ових познатих елемената треба одредити (прорачунати) саму појаву, односно мерљиве величине које је карактеришу. Дакле, смер кратања приликом истраживања је од *узрока* ка *последицама*.

Инверзно решавање претпоставља супротни смер кретања истраживачког процеса у односу на директни проблем: полазни подаци су *измерене величине* посматране физичке појаве (последице), а треба прорачунати или *улазне параметре* (узроке) или *параметре модела/система* који појаву описује. Да би ово било могуће, неопходно је развити ТМС модел који повезује познате улазне величине и измерени одзив, а тек затим прећи на развој технике за одређивање параметара модела, односно физичких својстава узорака.

Одређивање физичких својстава је лоше постављен проблем математичке физике. Дакле, карактерише га висока нестабилност, нејединственост или непостојање решења, одсуство непрекидности решења и висока нелинеарност [1], [2]. Осмишљавање инверзне процедуре је дуг процес у коме је битно пажљиво сагледати све аспекте проблема и не дозволити да, увођење погрешних претпоставки компромитује тачност решења.

Инверзно решавање претпоставља да је познат само измерени одговор система, док је од преостала два елемента поставке (побуда и параметри физичког модела) један познат а други непознат. Тако се долази до две врсте инверзних процедура: (1) оних које се баве проценом побуде система на основу познатог физичког модела система и његовог измереног одзива, и (2) оних које на основу познате (добро дефинисане) побуде и познатог (са утврђеним степеном сигурности) одзива система процењују непознате параметре његовог физичког модела. Фототермална (ФТ) наука се превасходно бави инверзном проблематиком овог другог типа, односно проценом термодинамичких, оптичких, еластичних и других са њима повезаних својстава снимане средине, дубинском профилометријом, исподповршинским осликавањем и томографијом, где доминирају проблеми стабилности реконструкције профила, отпорности на неуниформности средине, као и делотвоности одабраних метода. Овакви проблеми захтевају да ТМС модел описује експериментали сигнал у оквиру резидуалне грешке од 1% [1].

#### 2.2 Мерење и осликавање (имиџинг) са аспекта инверзног решавања

Мерење, у општем случају и по дефиницији, подразумева поређење одређене физичке величине са унапред дефинисаним, добро познатим еталоном. Уколико је мерена физичка величина, сама по себи циљ мерног процеса, мерење се сматра директним. У супротном, када је посматрана физичка величина у одређеној мери корелисана са неком другом физичком величином или појавом, та се (друга) величина може, са одређеном прецизношћу, проценити на основу измерене (прве) величине, и тада се мерење сматра индиректним. Мерења везана за ФТ науку, самим тим и фотоакустику као њену подцелину, искључиво су индиректна.

Индиректна мерења подлежу мерној несигурности у већој мери него директна. То је логична последица присуства више "степени" мерења, односно поређења, у ланцу процене крајњег резултата. На мерну несигурност индиректног мерења утиче превасходно неодређеност коју уноси непосредно мерење посматране физичке појаве (која се тиче мерног ланца: његове добре осмишљености, техничких карактеристика као и адекватности изведеног мерења), а онда и неодређеност коју са собом носи корелација измерених величина са циљаном физичком величином, односно обавезна несавршеност физичког модела који крајњу физичку појаву описује. Први степен несигурности се умањује добром техничком припремом експеримента и обучавањем особља (експериментатора) за руковање апаратуром на најадекватнији начин. Други степен несигурности, везан за физички модел, захтева темељан теоријски приступ, те примену различитих теоријских метода за Такође, избор решавање инверзних проблема. методологије обраде експерименталних резултата (попут разматрања односа амплитуда и разлике фаза више снимљених ФА одзива, као и комбиновање одзива рефлексионе и трансмисионе конфигурације) може значајно да утиче на поузданост утврђивања параметара из посматраних сирових података [3]. Више речи о овоме ће бити у одељку 4.3. Раздвајање ФА одзива узорка/материјала од експериментално снимљеног сигнала само за себе представља озбиљан задатак који захтева дубље проучавање инверзне проблематике [3].

У раду [4] инверзни проблем се дефинише као "реконструкција непознатог просторног или временског профила оптичких и/или топлотних својстава узорка применом математичког модела на мерене фототермалне податке, обично са минимумом унапред познатих и/или претпостављених информација о профилу посматране структуре."

Када је у питању методологија осликавања (профилометрија, мискроскопија, томографија), одличан преглед актуелних достигнућа (до 2006. године) у области ФА осликавања и релевантне литературе дат је у раду [5].

Помињање ФА осликавања углавном асоцира на ултразвучно (УЗ) осликавање са надградњом у виду ФА модалитета која значајно побољшава контраст [5]. Резолуција ФА индукованих сигнала, притом, се креће од 1 mm (при модулацији од 1 MHz) до 0,1 mm (при фреквенцији од 10 MHz) [6], са одговарајућим смањењем у дубини продирања, наравно. Нове примене се појављују у посматрању микроваскуларизације [7] као и откривању, карактеризацији, прогнозирању и праћењу лечења тумора [8], [9] паралелно са праћењем испоруке лекова [10], [11] и посматрањем појединачних ћелија [12], [13]! Због могућности праћења и просторног мапирања засићености кисеоником сниманих области или нивоа хемоглобина у истим, нови модалитети (у односу на стандардни УЗ метод) спадају у област *функционалног осликавања*.

Профилометрија и микроскопија су значајне области науке о материјалим са завидним нивоом резултата у последњој деценији [5], [10], [13]–[17].

*Методологија* решавања инверзног проблема, са теоријског аспекта, представља срж ове дисертације. У овом поглављу, паралелно са прегледом одговарајуће литературе, биће разматране најбитније теоријске технике инверзне проблематике, и то:

- методе за решавање експоненцијалних проблема математичке физике (са изразитим акцентом на лошу условљеност/постављеност проблема),
- методе коришћења електричне аналогије за фотоакустички одзив (што повлачи са собом коришћење алата развијених у теорији система аутоматског управљања и теорији филтара за прорачунавање одзива оваквог система),
- биће поменуте различите нумеричке методе и алгоритми за реконструкцију слике у ФА томографији који се користе у тумачењу експерименталних сигнала,
- коначно, размотриће се оправданост примене теорије неуронских мрежа (кроз развој тростепене неуронске мреже за решавање инверзног ФА проблема описаног генерализованим директним моделом).

#### 2.3 Методе експоненцијалне физике за инверзно решавање

Пошто је лоша условљеност инверзног проблема директно повезана са просторном резолуцијом примењеног физичког метода, његовом нестабилношћу и осетљивошћу на артефакте, пожељна је (понекад и неопходна) оцена подобности, а онда и примена, различитих оптимизационих метода. У случајевима дубинске профилометрије, када се идентификују математички извори лоше условљености, резултати реконструкције буду побољшани и за ред величине [1].

Инверзна процедура се оптимизује на различите начине: увођењем апроксимација, одређивањем домена доминантних утицаја, линеаризацијом, усредњавањем, као и регуларизационим процедурама [1], [18]. Суштина нумеричког решавања линеарног, дискретног инверзног проблема помоћу регуларизационих метода је замена постојећег, лоше постављеног проблема сличним, али боље постављеним [19]. На тај начин се из датог проблема извлачи максимум доступних информација. Све ове методе ће добити своје место у овоме поглављу.

Треба поменути још и да фотоакустичке и фототермалне технике своју примену у осликавању или дубинској профилометрији, на просторној скали 1-500 µm, заснивају на добро дефинисаној повезаности између дубине апсопције побудног зрачења и времена потребног за детекцију индуковане површинске промене [20]. Овако уведена претпоставка заснива се на претходно утврђеним механизмима провођења топлоте, који се не преиспитују, а неслагања између експерименталних резултата и теоријских предвиђања се приписују неодређеностима које уводи мерни ланац као и несавршеностима теоријског модела. Постоје, међутим, радови који топлотне транспортне процесе не третирају као у потпуности испитану област и чији резултати имплицирају како би у појединим феноменима, иначе уоченим и описаним у радовима везаним за фотоакустику [21], могли да се налазе докази у прилог томе да би испитивања на овом пољу могла и требало да буду настављена.

#### 2.4.1 Фредхолмов интеграл

У општем случају, експеримент подразумева посматрање (и снимање) одређене појаве (у контролисаним условима) у простору и времену. У фототермалној науци, феномени који се посматрају и снимају по правилу су везани за одређену просторну локализацију (тачка у простору, на површини узорка), при чему је расподела снимљеног ефекта у временском домену повезана, помоћу одговарајућег физичког модела, са одређеним својствима посматране средине, тј. узорка.

Фредхолмов интеграл представља математички алат, веома широке примене у научној и инжењерској пракси, који се употребљава за описивање инетракције материје и ЕМ зрачења [18]. Поставка се односи на *директни проблем*, где се са леве стране налазе резултати мерења (посматрања дате појаве, у општем случају,

у временском домену: g(t)) а на десној се врши интеграција језгра интеграла K(x,t)и просторног профила одређене физичке величине (функција карактеристика посматране средине f(x)) по просторном домену. У дубинској профилометрији, Фредхолмов облик у дискретном запису резултира скупом линеарних једначина са коефицијентима посматраних профила као непознатим величинама, чијим се решавањем добија мапа дубинских својстава узорка [1].

Сврха нумеричког приступа решавању проблема је "извлачење" максимално доступне количине информација из њега. Једначине Фредхолмовог интеграла су суштински лоше постављени проблеми: решења су веома осетљива на мале пертурбације система. Уобичајене методе, попут ЛУ и Чолески факторизације (енг. LU, Cholesky factorization) не дају смислени резултат по обављеној дискретизацији, те решења морају бити процењена (са задовољавајућим степеном веродостојности) на неки други начин [18], [22].

Фредхолмов интеграл је у општој форми дат изразом:

$$g(t) = \int K(x,t)f(x)dx .$$
(1)

Дискретизацијом једначине (1) долази се до облика:

$$g(t_j) = \sum_N K(x_i, t_j) f(x_i) \Delta x_i, \qquad (2)$$

а овако записано сумирање се може представити и у матричној форми као:

$$g = K \cdot f. \tag{3}$$

Језгро интеграла (кернел K) је засновано на физичком моделу који описује посматрану појаву и, суштински, ради *просторно-временско мапирање*. Проблематика лоше условљеноости је нераскидиво повезана са компактношћу оператора K који описује кернел [18], и који изводи филтрирање информација из просторног домена ка временском, што се манифестује слабом линеарном зависношћу решења [1].

Адекватан математички запис овог феномена дат је у литератури, кроз анализу већег броја нумеричких алата који се користе за решавање Фредхолмовог интеграла [18], [22].

Показано је да се језгро, у произвољном случају, може приказати у виду развоја у ред ортогоналних функција – метод познат као *развој својствених вредности* (енг.: *Singular Value Expansion – SVE*) – што подсећа умногоме на развој у Фуријеов ред у проучавању спектралних својстава оператора *K*. [1]

#### 2.4.2 Развој преко Својствених Вредности

По принципу Развоја преко Својствених Вредности (РзСВ, енг.: Singular Value Expansion – SVE), свако интеграбилно језгро се може записати у облику следеће бесконачне суме :

$$K(t,x) = \sum_{1}^{\infty} \mu_{i} u_{i}(t) v_{i}(x).$$
(4)

Функције  $u_i$  и  $v_i$  се називају својственим функцијама језгра K и ортонормалне су на датом базису:

$$(u_i, u_j) = (v_i, v_j) = \delta(i, j), \text{ gde važi: } (\phi, \phi) = \int \phi(\xi) \phi(\xi) d\xi,$$
(5)

а функција  $\delta(i, j)$  је *Кронекерова делта*[2]. Вредности  $\mu_i$  представљају својствене вредности оператора *K*, нису негативне и увек се могу поређати у не-растућем поретку:

$$\mu_1 \ge \mu_2 \ge \mu_3 \ge ...0.$$

Вероватно најбитнија релација између својствених вредности и својствених функција је:

$$\int_{a}^{b} K(t,x)v_{i}(x)dx = \mu_{i}u_{i}(t).$$
(6)

12

Ово имплицира да се било који својствени вектор  $v_i$  мапира на одговарајуће  $u_i$ , као и да је својствена вредност  $\mu_i$  појачање тог конкретног мапирања [18]. Уношењем последње једначине (6) и израза за РзСВ (4) у једначину Фредхолмовог интеграла (1,2), добија се:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \mu_i(v_i, f) u_i(t) = \sum_{i=1}^{\infty} (u_i, g) u_i(t),$$
(7)

односно може се извести општи израз за решење Фредхолмовог интеграла [18]:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(u_i, g)}{\mu_i} v_i(x).$$
 (8)

Физички посматрано, интеграција К у једначини (6) има ефекат "изглађивања" (поравнавања, високофреквентног/нископропусног филтрирања) функције fодносно умањења њених високофреквентних компоненти. Обрнути процес, тј. извођење f из g – једначина (8) – ће довести до *појачања* високофреквентних компоненти функције g [18]. Управо допринос реципрочно позиционираних, екстремно малих вредности  $\mu_i$  у појачању које одређује профил f(x) – као решење Фредхолмовог интеграла – представља суштину лоше условљености инверзног проблема постављеног на овај начин. У оквиру РзСВ, интеграција језгра по просторној координати, дато једначином (6), представља аналогију нископропусног филтрирања (у "смеру директног проблема") док решење интегралне једначине, дато изразом (8), додатно појачава претходно атенуиране компоненте високофреквентне (просторне) сигнала доприносећи лошој постављености проблема [1] (што је "враћање уназад", односно смер инверзног решавања).

#### 2.4.3 Пикарово правило

Из једначине (8), не може се *а приори* претпоставити да ће описани ред бити конвергентан, што је услов постојања (коначног) решења.

Пикарово правило (енг. Picard's condition), суштински, каже да у суми присутној у једначини (8) апсолутна вредност коефицијената ( $u_i, g$ ) мора да се смањује брже од одговарајућег низа својствених вредности  $\mu_i$  како би решење f било интеграбилно [18], односно у форми математичког записа:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \left( \frac{(u_i, g)}{\mu_i} \right)^2 < \infty.$$
(9)

Важност Пикаровог правила огледа се у чињеници да су га одређени аутори [23], [24] узели као мерило степена лоше постављености проблема.

#### 2.4.4 Разлагање преко Својствених Вредности

Овај алат (скр. PrCB, енг.: Singular Value Decomposition – SVD) је производ дискретне аналогије са P3CB методом. На тај начин се анализира матрица G, добијена дискретизацијом језгра K. PrCB матрице  $M \times N$  има следећи облик:

$$G = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i u_i v_i^T,$$
(10)

где су својствени вектори *u*<sub>i</sub> и *v*<sub>i</sub> ортонормални, односно важи:

$$u_i u_j^T = v_i v_j^T = \delta_{ij}, \qquad (11)$$

и где  $\sigma_i$ , својствена вредност *G*, задовољава и услов:

$$\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \dots \ge \mu_{\min(m,n)} \ge 0.$$
<sup>(12)</sup>

Основна дефиниција РгСВ тако добија облик [18]:

$$Gv_i = \sigma_i u_i$$
, где je:  $i = 1...\min(m, n)$ . (13)

Релација (13) показује да се сваки вектор  $v_i$  мапира у одговарајући вектор  $u_i$ ; са "појачањем"  $\sigma_i$  [18]. Једначина (13) се такође може записати и као [1], [18], [25]:

$$G = U \cdot W \cdot V^T, \tag{14}$$

где је матрица W димензија  $(M \times N)$  и садржи (дикретизоване) својствене вредности G дуж дијагонале (док су остали елементи матрице нуле), а ортогоналне матрице  $V(N \times N)$  и  $U(M \times M)$  садрже дискретне апроксимације (у облику вектора колона) функција  $u_i(t)$  и  $v_i(x)$  континуалног модела. Нумерички алат PrCB се може посматрати као апроксимација P3CB, те се у том смислу својствене вредности G могу сматрати апроксимацијом својствених вредности  $\mu_i$ , док вектори  $u_i$  и  $v_i$  представљају апроксимације својствених функција  $u_i(t)$  и  $v_i(x)$ , редом [1], [2]. Главна нумеричка потешкоћа при решавању линеарног система који проистиче из једначина (3), (10) и (14), а који се може записати као:

$$g = G \cdot f, \tag{15}$$

односно проблема минимизације разлике квадрата  $(\min \|G \cdot f - g\|^2)$ , је осетљивост решења *g* на пертурбације *G* и *f*. Што је боља дискретизација, односно што линеарни алгебарски систем боље моделује интегралну једначину, то је и његова лоша постављеност ближа лошој постављености иницијалног проблема у интегралном облику: PrCB матрице *G* је веома блиско повезано са P3CB језгра *K* [18].

Ортогоналност вектора функција V и U доводи до инверзног записа матрице кернела облика:

$$G^{-1} = V \cdot W^{-1} \cdot U^T \equiv G^+, \tag{16}$$

такозване "псеудо-инверзне" матрице G, која је, што се може показати [1], апроксимација  $G^{-1}$  заснована на методу најмањих квадрата:

$$f^+ = G^+ \cdot g$$
, где:  $G^+ = (G^T G)^{-1} G^T$ . (17)

#### 2.4.5 Регуларизација

Здраворазумски начин израчунавања "глатког" решења неког интегралног израза, попут једначине (1), односно решења које поседује нека корисна заједничка својства са *тачним решењем*, је филтрирање високофреквентних компоненти повезаних са малим својственим вредностима [2], [18], [22].

Регзуларизација као појам се помиње први пут у вези са техником коју предлаже Тихонов [26], али данас се уобичајено коористи за широку класу проблема где је суштина тражење "глатког" и приближног решења из кога су искључене поменуте високофреквентне компоненте. Ово је често примењиван метод у дигиталној обради и реконструкцији слике [27].

Регуларизација се може применити непосредно на инверзни проблем, а може се, *у циљу повећања стабилности*, применити и на линеарни систем, изведен из задатог проблема [2], [18].

Борба са лошом условљеношћу коју уноси оператор G почиње "засецањем континуалног реда", односно занемаривањем свих чланова РзСВ развоја преко одређеног индекса (тј. са доприносом испод одређеног прага). Ово се остварује уношењем нула у инверзну  $W^1$  матрицу добијену дискретном РгСВ методом [1]. На овај начин долази до промене интеграбилног језгра чија се физичка манифестација може најилустративније упоредити са ефектом "спектралног цурења" приликом реконструкције одређеног решења у обради сигнала (*Гибсов феномен – Gibb's phenomenon*, слика 1).



Слика 1 Ефекат сличан Гибсовом феномену, последица укључивања својствених вредности на реконструкцију претпостављене степ-функције, присутне у f(x) (број својствених вредности приказан линијом: (.-.-) n=10, (-+-+-+) n=8, (-0-0-0) n=6),

преузето из [1], страна 4063

Како би се добило јединствено решење (односно превазишао проблем нестабилности), уноси се нека информација о систему (у виду претпоставке) која омогућује да се издвоји јединствено решење (апорксимација,  $f_0$ ), а онда се прибегава тражењу решења f које је најприближније издвојеном. Довођење у везу почетног проблема, датог једначином (15), често се изводи увођењем *регуларизације Тихонова*, односно минимизацијом "пенализиране верзије функције губитака најмањих квадрата" [28], као система изведеног из почетног проблема:

$$S^{2} = \left\| G \cdot f - g \right\|_{2}^{2} + \lambda^{2} \left\| f - f_{0} \right\|_{2}^{2},$$
(18)

где  $f_0$  садржи претпостављену информацију о просторној расподели (апроксимација) док је реална вредност скалара  $\lambda^2$  тежински фактор, односно кватнификатор "адекватности" уведене претпоставке, који показује колико је апроксимација слична моделу, *f*.

У одсуству икаквог претходног знања о решењу, претпоставка  $f_0=0$  дефинише стандардни услов минимализације модула решења. Израз за Тихонову регуларизацију нултог реда се може написати и у облику [1], [18], [25], [26], [29]:

$$G^{+} = (G^{T}G + \lambda^{2}I)^{-1}G^{T}.$$
(19)

Избор оптималне вредности параметра  $\lambda$  представља компромис између губитака просторне резолуције и стабилности решења [1]. У општем случају, одабир регуларизационог параметра било ког лоше постављеног проблема је *уметност заснована на искуству и претходном познавању свих отежавајућих фактора приликом извођења експеримента* [30].

#### 2.5 Електричне аналогије: алати развијени у теорији Система

#### Аутоматског Управљања

Теорија провођења топлоте је од раније упоређивана са теоријом провођења наелектрисања. Аналогија се неминовно наметнула у оквиру механике континуума, где су се резултати показали као парадоксални у граничним случајевима (мала просторна и кратка временска скала) [31]–[34]. Одбијање прихватања дифузије као фундаменталног вида топлотног преноса, тј. тренутног успостављања топлотног флукса у бесконачности (по просторној координати), а самим тим и претпоставке бесконачне брзине простирања топлоте (која се тиме имплицира), усмерили су пажњу научника ка *инерцији* као физичком феномену који може објаснити поменути парадокс, а која није укључена у класичну, Фуријеову теорију провођења топлоте [35], [36]. Ревизија Фуријеове теорије на овај начин употпуњује аналогију топлотног транспорта са електричним [33]. Фуријеова теорија провођења топлоте је схваћена као апроксимација једног општијег случаја, уведена из практичних разлога, а диференцијална једначина

која описује провођење тополоте је тада реформулисана и из параболичног облика претворена у хиперболични. На овај начин је емпиријски потврђена сличност са телеграфским једначинама [32], [33], [35], [37]–[39].

Поменуто проширење класичне теорије провођења топлоте, поред аналогије са електричним транспортом, резултирало је још једним иновативним приступом у термодинамици: разматрањем утицаја топлотне меморије на пренос топлоте, а самим тим и на фототермални и фотоакустички одзив посматраног материјала [37], [40]–[44].

Тек када се ФТ одзиву приступи из фреквентног аспекта, наслућује се потенцијал његовог поређења са теоријом електричних мрежа као и предности употребе пратећих алата из те области. У случају одабира аналогије са линеарним пасивним електричном мрежама, наглашена је зависност коришћеног модела (узорка и средине) од фреквенције амплитудске модулације побудног сигнала и дебљине сниманог материјала. Ако су задовољени основни услови, топлотна својства материјала се процењују на основу комбинације нелинеарног фитовања са Бодеовим дијаграмима или анализом полова (у комплексном домену) полинома преносне функције. Нелинеарно фитовање се на тај начин упрошћава, а поузданост добијених података расте [3], [39].

#### Принцип

Телеграфске једначине, познате из литературе [31]-[33], [45]:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = rc \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + lc \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2},$$

$$\frac{\partial^2 i(x,t)}{\partial x^2} = rc \frac{\partial i(x,t)}{\partial t} + lc \frac{\partial^2 i(x,t)}{\partial t^2}.$$
(20)

Модел ФА система, преузет из литературе и ранијих радова [3], [20], [37]:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{G}_i(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{D_i} \frac{\partial \mathcal{G}_i(x,t)}{\partial t} + \frac{\tau_i}{D_i} \frac{\partial^2 \mathcal{G}_i(x,t)}{\partial t^2},$$

$$\frac{\partial^2 q_i(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{D_i} \frac{\partial q_i(x,t)}{\partial t} + \frac{\tau_i}{D_i} \frac{\partial^2 q_i(x,t)}{\partial t^2},$$
(21a)
а гранични услови хомогености: 
$$\begin{aligned} & \mathcal{P}_a(x=-l_a,t)=0, \\ & \mathcal{P}_b(x=l_a+l_s,t)=0, \end{aligned}$$
 (21в)

као и услови континуитета температуре и топлотног флукса на хетеромеђуповршима:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{a}(x = 0, t) &= \mathcal{G}_{s}(x = 0, t), \\ q_{a}(x = 0, t) &= q_{s}(x = 0, t) = S(t), \\ \mathcal{G}_{s}(x = l_{s}, t) &= \mathcal{G}_{b}(x = l_{s}, t), \\ q_{s}(x = l_{s}, t) &= q_{b}(x = l_{s}, t). \end{aligned}$$
(21r)

Одговарајућа илустрација система биће дата у Поглављу 3 – Теоријски доприноси на слици 6. Аналогија је, дакле, следећа:

$$u \leftrightarrow \vartheta, i \leftrightarrow q, r \leftrightarrow \frac{1}{k}, l \leftrightarrow \frac{\tau}{k}, c \leftrightarrow C_{\nu}.$$
(22)

Притом, тврди се да протоком струје кроз хомогее линије система може бити описан проток топлоте кроз *један* хомогени слој [39].

Увођењем комплексне представе горе описаног система добија се следећи облик:

$$\frac{d^{2}\tilde{U}(x)}{dx^{2}} = (j\omega rc - \omega^{2}lc)\tilde{U}(x) \Leftrightarrow \frac{d^{2}\tilde{U}(x)}{dx^{2}} = \sigma^{2}\tilde{U}(x),$$

$$\frac{d^{2}\tilde{I}(x)}{dx^{2}} = (j\omega rc - \omega^{2}lc)\tilde{I}(x) \Leftrightarrow \frac{d^{2}\tilde{I}(x)}{dx^{2}} = \sigma^{2}\tilde{I}(x),$$
(23)

где су дати, редом:  $\sigma_i = \sqrt{\tilde{z}\tilde{y}}, \quad \tilde{z} = r + j\omega l, \quad \tilde{y} = j\omega c,$ 

комплексни преносни коефицијент, дистрибуирана импеданса (отпорност) и дистрибуирана адмитанса (проводност) линије.



Слика 2 Моделовање ФТ одзива електричном мрежом

преузето из [39], страна 134

Преласком на *концентрисане* параметре, што је пракса у анализи електричних кола, целокупни ФА систем (узорак са окружењем) се може моделовати електричном мрежом са комплексним импедансама, где се напон и струја на улазним/излазним спојевима понашају аналогно температури и топлотном флуксу на међуповршима. То углавном одговара експерименталној поставци где дубинска расподела посматраних величина не може бити директно снимљена, односно промене темепратуре и флукса се посматрају на контактним (инструменту доступним) површинама [39]:

$$\begin{split} \tilde{Z}_{eq} &= \tilde{Z} \frac{th\left(\frac{\sqrt{\tilde{Z}\tilde{Y}}}{2}\right)}{\frac{\sqrt{\tilde{Z}\tilde{Y}}}{2}}, \quad \tilde{Z} = \tilde{z} \cdot d, \\ \tilde{Y}_{eq} &= \tilde{Y} \frac{sh\sqrt{\tilde{Z}\tilde{Y}}}{\sqrt{\tilde{Z}\tilde{Y}}}, \quad \tilde{Y} = \tilde{y} \cdot d. \end{split}$$
(24)



Слика 3 Аналогно електрично коле где је узорак моделован електричним линијама

преузето из [39], страна 133

Овај тип моделовања се може проширити и на специјални случај вишеслојног узорка, где се мреже везују каскадно [39] :



Слика 4 Аналогно електрично коле за ФТ одзив *n*-тослојног узорка

преузето из [39], страна 135

Дубља анализа добијених модела врши се развојем у ред израза за еквивалентну адмитансу и импедансу, чиме се долази до важног услова за примену горе описаног моделовања [39]:

$$\frac{\tilde{Z}\tilde{Y}}{6} \ll 1. \tag{25}$$

Додатним трансформацијама и увођењем следећих параметара:

$$\omega_{\tau} = \frac{1}{\tau_s}, \quad \omega_D = \frac{6D_s}{d^2}, \quad d_{\tau} = \sqrt{6D_s\tau_s}, \quad (26)$$

где је  $ω_τ$  гранична фреквенција, а  $d_τ$  критична дебљина, долази се до коначног израза услова примене аналогије фототермалног одзива са са пасивним линеарним мрежама (ПЛМ) [39]:

$$\omega \ll \omega_{\tau} \left(\frac{d_{\tau}}{d}\right)^n, \quad n = \begin{cases} 1, & d < d_{\tau} \\ 2, & d > d_{\tau} \end{cases}.$$
(27)

Тумачењем израза (27) показује се да за произвољну дебљину узорка ПЛМ моделовање ФТ одзива може применити испод одређене граничне фреквенције

модулације. Такође, као што се на графикону са слике 5 јасно види, постоје два опсега дефинисана дебљином узорка: испод те вредности гранична фреквенција опада обрнуто пропорционално дебљини узорка, изнад ње гранична фреквенција опада обрнуто пропорционално квадрату дебљине.



# Слика 5 Графичка представа услова за моделовање ФТ одзива узорка линеарним пасивним електричим мрежама

# преузето из [39], страна 137

Како би ПЛМ моделовање било примењиво, тачка коју вредности узорка дефинишу у описаном параметарском простору мора бити позиционирана што дубље у сивој области графикона на слици 5 [39].

Треба, коначно, поменути и разматрања која су противна оваквом приступу, односно увођењу аналогије између математичких алата коришћених у електротехници и оних коришћених у термодинамици. Ове тврдње се темеље на дискутабилном слагању истих са другим законом термодинамике [46], у оквиру класичне термодинамике, док проширена иреверзибилна термодинамика указује на чињеницу да генерализација провођења топлоте не нарушава овај закон.

#### 2.6 Нумеричке методе и алгоритми за реконструкцију слике

Извенредан аналитички приступ проучавању теоријског модела, поткрепљен литературним примерима кроз историју прочавања ФА одзива, дат је у раду [3]. Аутори показују колико је решавање инверзног ФА проблема заснованог на моделу композитног клипа нумерички компликован и осетљив задатак. Комплексни нелинеарни модели математичке зависности својстава узорка од ФА одзива наводе на нелинеарно фитовање као решење, што је доказано компликована и нестабилна процедура у којој повећавање броја параметара који се фитују смањује поузданост добијених резултата (енг. overfitting). Како би се избегле ове потешкоће, прибегава се примени апроксимативних теоријских модела који омогућавају линеарно фитовање у регионима од интереса [3], [47]–[49]. Опширније о овоме у разматрањима теоријских доприноса, у одељку 3.1.

#### 2.6.2 Нормализација: однос амплитуда, разлика фаза, фитовање

Паралелни приступ проблематици је коришћење више снимљених/симулираних сигнала ФА одзива: до смањивања броја параметара у моделу или искључивања утицаја мерног ланца долази применом метода нормализације или посматрања односа амплитуда и разлика фаза двају или више сигнала [40], [50]–[56].

Упоредо се, уз опрез приликом доношења закључака, приликом фитовања користе и методе регресије (попут методе најмањих квадрата), те корелације за уочавање сличности и локалних тенденција на добијеним графиконима.

#### 2.6.3 Примена алгоритама за дигиталну обраде слике

Примене ФА метода у областима осликавања – микроскопије [57], [58], дубинске профилометрије [14], [57], [59]–[61] и томографије [58], [62]–[64] – налажу употребу нумеричких метода за обраду дигиталне слике приликом решавања инверзног проблема.

Дубинском профилометријом се бавило мноштво аутора. Ова техника, која се назива и *IД томографија*, подразумева да је ФА одзив узорка у временском домену, локално повезан са простоним профилом апсорпције и расејања посматраног узорка (што понекад може бити изражено и у облику аналитичке формуле), па се поменути узорак карактерише директном анализом снимљеног сигнала [5]. Заснивајући приступ на Бер-Ламберовом (енг. *Beer-Lambert's law*) закону слабљења сигнала, изузев код фантомских снимака, ова техника показује релативну грешку ~10% када се експерименти изводе на ткивима [57], [61]. Одличан приказ области праћен релевантном литературом дат је у раду [1] ауторке Џоан Пауер (енг. Joan Power), чији приступ инверзној проблематици у ФТ науци представља основ одељка 2.3 овог поглавља.

Принцип ФА скенирајуће томографије се може упоредити са УЗ осликавањем. Комбиновањем више снимака у тзв. *Бе-моду* (енг. *B-mode*) се добија ЗД приказ сниманог региона, тзв. *Це-скен* (енг. *C-scan*) – тако се из већег броја ФА снимака суседних региона (слојева) може реконструисати ЗД приказ посматраног региона узорка (корен речи томографија је кованица грчког порекла: *tomos+grafein* се директно преводи као *слој+цртање*).

Обзиром да на побољшање односа сигнал/шум утиче излазна снага побудног зрачења, постоји тенденција ка коришћењу ЕМ зрачења из радиофреквентног (РФ) дела опсега (у литератури се користи скраћеница "рф" која покрива ЕМ изворе из читавог дела спектра, укључујући и микроталасе), односно кохерентног зрачења из оптичког и блиског инфрацрвеног дела спектра (тј. ласера). Коришћењем РФ извора (~ MHz) постиже се радијална резолуција испод једног милиметра на дубини од неколико сантиметара, па метода постаје погодна за снимање груди (у циљу превенције рака дојке, нпр.) [65]. Увођењем у употребу пулсних ласера као побудних система (100 MJ са импулсима од 10 ns) достиже се резолуција микроскопа од ~30 µm [5].

Са физичке тачке гледишта, ФА томографија представља инверзни проблем из области дифракционе томографије (услед дифракционе природе УЗ таласа), па се разни концепти осликавања и математичке технике коришћене у другим модалитетима (попут ултразвучне, рендген, или оптичке томографије) могу позајмити и применити у његовом решавању [5]: принцип фокусираних УЗ сонди [57], акустичка сочива [66], компјутеризована томографија (са нефокусираним сондама, али са пратећим софтверским решењима) [67]. Бројни аутори су се бавили овом проблематиком, примењујући алгоритме попут радонове трансформације [68]–[72] и методе "пројекције уназад" (енг. *back-projection*) [73]– [76], али и разних итеративних нумеричких метода [77], [78].

## 2.7 Неуронске мреже

Коначно, један од најсавременијих приступа данашњице подразумева опонашање рада нервног система (односно мозга, као његовог центра) приликом решавања широке класе проблема употребом неуронских мрежа. Ова област је веома широка и има своје примене у скоро свим областима науке, технологије, индустрије, цивилног инжењерства [15], [79].

Потенцијал неуронских мрежа је испитиван и раније као техника дубинске профилометрије [80]. Уопштено говорећи, неуронске мреже служе као изузетно поуздан и довољно осетљив алат за препознавање облика и реконструкцију свих врста сигнала (снимљених или симулираних), те је то својство нашло примену и у ФТ науци [15], [16], [79]–[81]: користи се у дубинској профилометрији, осликавању, као и генерално у анализи ФА одзива (као средство за карактеризацију самог ФА теоријског модела, односно уочавање тенденција и параметризацију унутар истог).

Такође, неуронске мреже могу на основу малог броја снимљених података препознати утицаје инструментације у експерименту, те их у наредном кораку неутралисати, односно филтрирати, што је корак ближе реалном ФА одзиву материјала.

# 3 ТЕОРИЈСКИ ДОПРИНОСИ

У овом поглављу, у одељку 3.1 ће прво бити изложени генерализовани модел ФА одзива који боље предвиђа снимљени ФА одзив, праћен приказом утицаја топлотне меморије, вишеструких рефлексија и Хелмхолцових резонанци, што су појаве које су ретко разматране у литератури. У одељку 3.2 ће бити представљен ТМС модел као идејни основ развоја самоусаглашене инверзне процедуре, а онда у одељку 3.3 и развијена неуронска мрежа за одређивање параметара система. У оба ова одељка биће размотрене грешке које настају на нумеричком експерименту.

# 3.1 Развој ТМС модела у складу са генерализованом теоријом преноса топлоте

Након излагања одређеног узорка дејству ЕМ зрачења из широког спектра таласних дужина, одређени проценат упадне енергије бива депонован у узорку (остатак се рефлектује или пролази кроз узорак), а један део те депоноване енергије бива ослобођен у виду топлоте, стварајући, у узорку и изван њега, читав низ феномена који могу бити детектовани. То су ФТ феномени, попут температурске дилатације, дефлексије површине узорка, појаве акустичког и термалног таласа, као и градијента оптичког индекса преламања у узорку и изван њега [4], [82]–[84]. Овај рад обрађује индиректно генерисани ФА одзив материјала, па су, сходно томе, у фокусу оне промене које доводе до појаве акустичког сигнала који може бити детектован уз помоћ микрофона (гасмикрофонска поставка проблема) [48], [83]–[88].

У индиректној трансмисионој фотоакустици користи се фотоакустичка ћелија испуњена ваздухом као елемент у којем се ствара акустички сигнал уз помоћ деловања амплитудски модулисаног монохроматског светлосног извора  $I = I_0(1 + \cos \omega t)$  на узорак. Обично се користи цилиндрична ФА ћелија у којој је узорак облика диска полупречника *R* и дебљине *l*<sub>s</sub> учвршћен на растојању *R'* од центра узорка (једноставно ослоњена плоча – енг. simply supported plate [88]). Овакав узорак се, кроз ваздух, обасјава са једне стране описаним извором, док се акустички одзив система снима микрофоном у ваздухом испуњеној комори ФА ћелије са друге стране узорка (трансмисиона гас-микрофонска конфигурација, слика 6). На основу претходних истраживања, а у складу са нормама дефинисаним у литератури [4], уведене су следеће ознаке за топлотна својства система приказаног на слици 6:

 $k_i$  – топлотна проводност [W/mK],

 $D_{Ti}$  – топлотна дифузивност [m<sup>2</sup>/s],

 $a_T$  – топлотни коефицијент линеарног ширења [K<sup>-1</sup>],

 $\tau_i$  – топлотно време релаксације [s],

и  $u_i = \sqrt{D_{\tau_i} / \tau_i}$  – брзина простирања топлоте [m/s], са индексом *i*=*a*,*s* који означава *i*-ту средину (енг. *air, sample – вазух или узорак*).





При развоју ТМС модела ФА сигнала коришћене су следеће претпоставке:

 а) површина попречног пресека упадног снопа много је већа од обасјане површине самог узорка, па се рачунајући на планарну униформност енергетске расподеле упадног снопа, уводи једнодимензиона (1Д) апроксимација [42], [48], [85]–[87], [90]–[92]; б) побудна енергија се апсорбује унутар танког површинског слоја узорка (апроксимација која добро описује понашање метала, иначе се постиже наношењем танког, непровидног, апсорбујућег слоја на површину узорка) [87], [91];

в) одавање топлоте у околни гас је занемарљиво услед његове слабе топлотне проводности [87];

г) посматра се само хармонијска компонента Фуријеове трансформације сигнала због *lock-in* детекције и анализе фреквентне карактеристике ФА сигнала;

д) могуће је применити апроксимацију танке плоче због тога што је R много веће од l у коме се занемарује утицај дилатације узорка на механички клип и узима у обзир само термоеластично (ТЕ) савијање [48], [87], [90], [92]–[94].

На основу литературе [48], [87], [90], [92]–[94], почетни израз модела (за мерени сигнал директно пропорционалан промени притиска у ФА комори) може се написати у облику:

$$\tilde{p} = \tilde{p}_{th} + \tilde{p}_{ac}, \qquad (28)$$

где *p*<sub>th</sub> означава промену притиска насталу услед компнонете ФА одзива која потиче од трансфера топлоте из узорка у околни гас (у даљем тексту: *термопроводна компонента – ТП*), док *p*<sub>ac</sub> означава промену притиска услед компоненте ФА одзива која потиче од ТЕ вибрација.

Дакле, за описану конфигурацију, под задатим условима и претпоставкама, ове две компоненте се математички изражавају на следећи начин [48], [87], [92]:

$$\tilde{p}_{th} = \frac{\gamma P_0}{l_a T_0} \int_{l_s}^{l_s + 2\pi\mu_a} \tilde{\mathcal{G}}_s(l_s) e^{-\tilde{\sigma}_a(x - l_s)} dx, \qquad (29a)$$

$$\tilde{p}_{ac} = \frac{3\gamma P_0}{l_a} a_T \frac{R^2}{l_s^3} \int_0^{l_s} (x - \frac{l_s}{2}) \tilde{\mathcal{G}}_s(x) dx,$$
(296)

где су:  $\gamma$  експонент адијабатичности,  $P_0$  атмосферски притисак,  $l_a$  дужина гасне колоне у ФА ћелији,  $T_0$  собна температура, R полупречник, а  $l_s$  дебљина узорка.

У релацијама (29а) и (29б) може се уочити да ТП компонента зависи од температурске варијације на хетероповрши узорак-гас, а интеграција се врши изван узорка: од тачке где се завршава узорак а почиње гас,  $l_s$ , па до  $2\pi\mu_a$  ( $\mu_a$  је топлотна дифузиона дужина у гасу [42]). То је и логично, обзиром да се посматра слој гаса непосредно уз површину узорка чија дилатација представља извор акустичних таласа. Са друге стране, *TE* компонента зависи од температурске расподеле унутар самог узорка, па са и интеграција тако врши по дебљини узорка, од *0* до  $l_s$ .

Оно што је заједничко за обе компоненте је важност познавања температурске расподеле унутар узорка: неопходна је за израчунавање површинске температуре узорка код  $T\Pi$  компонетне (која представља граничну вредност температурске расподеле унутар узорка), а у TE компоненти учествује у интегралу који представља резултат прорачуна напона по свим осама у материјалу, насталих као последица  $\Phi$ T ефекта.

Генерализовани модел провођења топлоте подразумева комбиновање закона очувања енергије и генерализоване Фуријеове конститутивне релације, које су дате једначинама (30а) и (30б) [37]:

$$C\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = S(x,t) - \frac{\partial q(x,t)}{\partial x},$$
(30a)

$$q(x,t) + \tau \frac{\partial q(x,t)}{\partial t} = -k \frac{\partial T(x,t)}{\partial x},$$
(306)

што резултира хиперболичном парцијалном диференцијалном једначином преноса топлоте са температуром као једином непознатом променљивом:

$$\frac{1}{D} \left[ \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial t^2} \right] = -\frac{1}{k} \left[ S(x,t) + \tau \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} \right],$$
(31a)

$$S(x,t) = -\eta \frac{\partial I_{abs}}{\partial x}, \quad I_{abs} = (1-R) \frac{I_0}{2} e^{-\beta x} \cos(\omega t),$$
(316)

где T(x,t) представља температуру, а S(x,t) побудни запремински топлотни флукс који генерише пертурбације температурског поља. Писањем једначина 31(а) и 30(б) за сваки просторни део посматраног система (слика 6) добија се систем једначина који се решава уз поштовање почетних и граничних услова температурске промене као и услова континуитета флукса и температуре на хетеромеђуповршима (датим у једначинама 21(*б*,*в*,*г*) одељка 2.5, а који се овде понављају због прегледности):

$$\begin{split} &\mathcal{G}_{a}(x,t=0) = 0, \\ &q_{a}(x,t=0) = 0, \\ &q_{a}(x,t=0) = 0, \\ &q_{a}(x,t=0) = 0, \\ &\mathcal{G}_{b}(x=l_{a}+l_{s},t) = 0, \\ &\mathcal{G}_{b}(x=l_{a}+l_{s},t) = 0, \\ &\mathcal{G}_{b}(x=l_{s},t) = \mathcal{G}_{b}(x=l_{s},t) = \mathcal{G}_{b}(x=l_{s},t), \\ &q_{s}(x=l_{s},t) = q_{b}(x=l_{s},t). \end{split}$$

где  $\tilde{\mathcal{G}}_{i}(x,t)$  представља *температурску варијацију* у односу на равнотежну температуру и статичку компоненту:

$$\tilde{T}(x,t) = T_{amb} + T(x) + \tilde{\mathcal{G}}_a(x,t),$$
(32)

а q(x,t) представља динамички топлотни флукс.

Полазећи од линеарне генерализоване теорије провођења топлоте која узима у обзир утицај топлотне меморије, решавањем система јендачина (31a и 30б) по сегментима система приказаног на слици 6, расподела температурске варијације у узорку као и њена вредност на површини узорка могу се на основу [37] написати у следећем облику:

$$\tilde{\mathcal{G}}_{s}(x) = S_0 \tilde{Z}_{cs} \frac{ch(\tilde{\sigma}_{s}(x-l_s))}{sh(\tilde{\sigma}_{s}l_s)},$$
(33a)

$$\tilde{\mathcal{G}}_{s}(l_{s}) = S_{0}\tilde{Z}_{cs}\frac{1}{sh(\tilde{\sigma}_{s}l_{s})},$$
(336)

где су ради поједностављења израза и прегледности уведени параметри *топлотне* импедансе,  $Z_{cs}$  и коефицијента простирања топлотних таласа,  $\sigma_s$ , који су дати изразима:

$$Z_{cs} = \frac{\sqrt{D_{Ts}}}{k} \sqrt{\frac{1+j\omega\tau}{j\omega}},$$
(34a)

$$\sigma_s = \frac{1}{\sqrt{D_{T_s}}} \sqrt{j\omega(1+j\omega\tau)},\tag{346}$$

Са  $\omega = 2\pi f$  означена је угаона учестаност (где је f учестаност) временске модулације извора.

Враћањем израза (33а) и (33б) у једначине (29а) и (29б), укупни модел постаје:

$$\tilde{p}_{th} = S_0 \frac{\gamma P_0}{T_0 l_a} \frac{\tilde{Z}_{cs}}{\tilde{\sigma}_a} \frac{1}{sh(\tilde{\sigma}_s l_s)},\tag{35}$$

$$\tilde{p}_{ac} = S_0 \frac{3\gamma P_0}{l_a l_s^3} a_T R^2 \frac{\tilde{Z}_{cs}}{\tilde{\sigma}_s^2} \frac{ch(\tilde{\sigma}_s l_s) - \frac{\tilde{\sigma}_s l_s}{2} sh(\tilde{\sigma}_s l_s) - 1}{sh(\tilde{\sigma}_s l_s)},$$
(36)

$$\tilde{p}_{ins} = E_0 \frac{1}{1 + j\omega\tau_e} (\tilde{p}_{th} + \tilde{p}_{ac}) = E_0 \frac{\tilde{p}_{th}}{1 + j\omega\tau_e} (1 + \frac{\tilde{p}_{ac}}{\tilde{p}_{th}}).$$
(37)

У изразу (37) узет је у обзир утицај електронских компоненти мерног система на фреквентни фотоакустички одзив [91], [94] кроз члан  $E_0/(1+j\omega\tau_e)$  а његов утицај се обично искључује кроз различите поступке нормализације [91].

Када се занемари утицај топлотне меморије и узорка и окружења, изрази (35-37) се своде на класичне изразе за модел композитног клипа [48], [87], [88], [90], [92]–[94].

#### 3.1.1 Одабир региона од интереса и линеаризација

Нумеричке методе одређивања параметара ТСМ ФА модела се ослањају на одређивање региона доминантних утицаја одређених параметара како би се исти проценили применом линеаризације (у посматраном региону).

Када се, на основу израза (34а) и (34б), комплексни аргумент параметра  $\sigma_s l_s$  представи у облику:

$$z = \sigma_s l_s = (1+i)\sqrt{\frac{f}{f_s}},\tag{38}$$

где је *f<sub>s</sub>* карактеристична фреквенција узорка, зависна од врсте материјала и дужине самог узорка:

$$f_{s} = \frac{1}{\pi} \frac{D_{Ts}}{l_{s}^{2}},$$
(39)

анализа ФА одзива се може на даље посматрати у два одвојена опсега, дефинисана граничним вредностима  $\frac{f}{f_s} \ll 1$  и  $\frac{f}{f_s} \gg 1$ . Ови региони у литератури имају различита имена: када се жели нагласити утицај дебљине узорка, користе се изрази "топлотно дебео/танак узорак"; када се акценат ставља на ограничења наметнута фреквентним опсегом модулације [3], употребљавају се термини "нискофреквента/високофреквентна ( $H\Phi/B\Phi$ ) апросимација" (енг. LF/HF, од Low/High Frequency).

У овим регионима од интереса је јасно наглашена доминантност одређене компоненте  $\Phi A$  одзива: у  $H\Phi$  опсегу то је  $T\Pi$  компонента, дата изразом (35), док је у  $B\Phi$  региону то TE компонента дата изразом (36). У  $H\Phi$  региону, употребом развоја у Меклоренов низ до 4. степена:

$$\sinh(z) \approx z + \frac{z^3}{6}$$
 If  $\cosh(z) \approx 1 + \frac{z^2}{2} + \frac{z^4}{24}$ , (40)

изрази (35) и (36) постају [3]:

$$\tilde{p}_{th}^{LF} = S_0 \frac{\gamma P_0}{l_a} \frac{1}{2^{\frac{3}{2}} T_a} \sqrt{\frac{D_{Ta}}{D_{Ts}}} \frac{l_s^2}{k} \frac{1}{\left(\frac{f}{f_s}\right)^{\frac{3}{2}}} \exp(-i\frac{3}{4}\pi),$$
(41)

$$\tilde{p}_{ac}^{LF} = S_0 \frac{\gamma P_0}{8l_a} \frac{a_T}{k} \frac{R^4}{R_c^2} \exp(i\pi), \qquad (42)$$

док у ВФ делу опсега важи апроксимација:

$$\sinh(z) \approx \cosh(z) \approx \frac{\exp(z)}{2} \gg 1,$$
(43)

па изрази (35) и (36) постају [3]:

$$\tilde{p}_{th}^{HF} = S_0 \frac{\gamma P_0}{l_a} \frac{1}{T_a} \sqrt{\frac{D_{Ta}}{D_{Ts}}} \frac{l_s^2}{k} \frac{1}{x \exp(\sqrt{x})} \exp\left(i\left[-\frac{\pi}{2} - \sqrt{x}\right]\right),\tag{44}$$

$$\tilde{p}_{ac}^{HF} = S_0 \frac{3\gamma P_0}{l_a} \frac{a_T}{4k} \frac{R^4}{R_c^2} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{\frac{f}{f_s}}} \right) \exp\left( -i \left[ \frac{3}{2} \pi - \frac{1}{\sqrt{\frac{f}{f_s}}} \right] \right).$$

$$(45)$$

Овако записани изрази *TП* и *TE* компоненте ФА одзива погодни су за даљу линеаризацију, а у овом случају посебно фазна компонента (осносно аргумент у поларном запису комплексне вредности) одзива, која у том случају показује зависност само од параметра топлотне дифузивности,  $D_{Ti}$  [m<sup>2</sup>/s] који је садржан у карактеристичној фреквенцији, *f<sub>s</sub>*, израз (39).

#### 3.1.2 Пример утицаја топлотне меморије на ФА одзив

На илустрацијама које следе дат је симулирани генерализовани ФА одзив више различитих класа материјала од интереса у паралели са експериментално снимљеним подацима. Циљ ових илустрација је да покажу како топлотна меморија утиче на теоријско моделовање сигнала и његово приближавање снимљеном стању ствари (где је то могуће). Такође, веома је илустративан утицај топлотне меморије на облик и померање нивоа амплитуде и фазе, а приметна је и појава осцилаторног карактера амплитудске и фазне карактеристике ФА одзива.

На слици 7 је приказан експериментално снимљени ФА одзив алуминијума на две дебљине (црном бојом) у паралели са теоријским предвиђањима: црвеном бојом је означена карактеристика добијена употребом класичног ТМС модела ФА одзива, док су осталим бојама означени симулирани сигнали са различитим нивоима вредности времена топлотне меморије, у распону  $\tau_s = 10^{-10} - 10^{-3}$  s. Линије добијене за три најмање вредности  $\tau_s$  се скоро у потпуности преклапају у региону од интереса, па су на сликама означени различитим типовима испрекиданих линија како би боје биле уочљиве.

У случају алуминијума, посматрани опсег модулишућих фреквенција се може поделити на два дела:  $H\Phi$  опсег у којем је доминантна  $T\Pi$  компонента  $\Phi$ А одзива, и  $B\Phi$  опсег где доминира TE компонента – ово се манифестује различитим нагибом амплитудске карактеристике, што је јасно уочљиво и на црној линији (експеримент) и на прве три теоријске криве (црвена, зелена, плава). Такође, опсег фреквенција на коме долази до промене доминантног утицаја се помера навише са порастом дебљине узорка. На овим линијама, међутим, преко целог фреквентног опсега се не може уочити било какав утицај присуства толотне меморије. Ипак, повећањем времена топлотне меморије до вредности које су изван опсега теоријских предвиђања, види се *потенцијални* утицај толотне меморије и на облик и на интензитет карактеристика  $\Phi$ А одзива: ниво фазе опада док се и у амплитуди и у фази појављују осцилације; фреквенција на којој овај утицај постаје уочљив се помера ка нижим учестаностима са повећањем дебљине узорка, али истовремено амплитуда уочених осцилација опада (светло плаве и љубичасте линије).



Слика 7 Утицај топлотне меморије на ФА одзив алуминијума дебљине 100 µm (а) и 300 µm (б)

Очекивано тополотне време релаксације за метале је  $\tau_s \sim 10^{-14} - 10^{-12}$  s а очекивани утицај топлотне меморије се, у том случају, помера на опсег модулишућих фреквенција који је далеко од чујног.

Када говоримо о полупроводницима, упрошћени ТМС модел (који не укључује плазмаелектричну компоненту) такође показује два региона доминантних утицаја. Међутим, обзиром на очекиване литературне вредности  $\tau_s \sim 10^{-8} - 10^{-6}$  s, ТМС модел на дебљинама  $l_s \sim 100 - 1000$  µm не предвиђа појављивање утицаја топлотне меморије у чујном опсегу модулишућих фреквенција (слика 8, црвене, зелене и плаве линије).



Слика 8 Утицај топлотне меморије на ФА одзив силицијума дебљине 100 µm (а) и 1000 µm (б)

Међутим, теоријска предвиђања за вредност топлотног времена релаксације су убедљиво највиша за класу полимерних материјала:  $\tau_s \sim 10^{-6} - 10^{-3}$  s, односно очекује се да трендови појављивања ефеката топлотне меморије описани у дискусијама претходних слика буду уочљиви у чујном опсегу модулишућих фреквенција.



Слика 9 Утицај топлотне меморије на ФА одзив полимера дебљине 200 µm (а) и 1000 µm (б)

Управо на овим материјалима, чија ће експриментална ФА карактеризација бити детаљно представљена у Поглављу 4 (ХДПЕ, ЛДПЕ, ПА12), снимљене карактеристике показују осцилаторни карактер при крају чујног опсега модулације, а то је нешто што може указивати на присуство топлотне меморије. Ова класа материјала је зато посебно интересантна за ову дисертацију.

Анализом израза (35)-(37) тј. њиховим раздвајањем на амплитуду и фазу може се успоставити директна зависност између положаја топлотних резонанци у фреквентном домену и брзине простирања толоте, *c*:

$$f_{1\max} = \frac{1}{2l_s} \sqrt{\frac{D_{T_s}}{\tau_s}} = \frac{\pi}{l_s} c.$$
 (46)

Када је узорак довољно танак и када је  $\tau$  довољно велико да топлотне резонанце улазе у аудио опсег, израз (46) омогућује непосредно одређивање брзине простирања топлоте.

#### 3.1.3 Пример утицаја вишеструких рефлексија на ФА одзив

Утицај вишеструких рефлексија на ФА одзив је разматран до сада у ретким радовима [95], [96], док скора експериментална истраживања [54], [97], показују јасно неслагање са теоријским предвиђањима. Наши резултати [98] показују да се код танких узорака са ниским коефицијентом апорпције овај ефекат не сме занемарити ако се жели исправно тумачење резултата мерења.



Слика 10 Шематски приказ принципа унутрашњих рефлексија

На слици 10 је приказан општи случај понашања снопа упадног ЕМ зрачења у узорку. Индексима 0,1 и 2 означени су спољни коефицијент рефлексије на упадној и унутрашњи коефицијент рефлексије на упадној и унутрашњи коефицијент релфлексије на необасјаној страни узорка, редом. У извођењима је, ради поједностављења, сматрано да је  $R_1=R_2=R$ , а за модел слабљења интензитета снопа узет је Бер-Ламберов закон. Интензитет апсорбованог ЕМ зрачења као и ниво оптички генерисаних топлотних извора у оваквом запреминском апсорберу описани су следећим релацијама:

$$I_{abs} = I_0 \left( 1 + \cos\left(\omega t\right) \right) exp(-\beta x),$$
  

$$S(x, \omega) = -\eta \frac{dI_{abs}(x, \omega)}{dx}.$$
(47)

Развојем у ред и сабирањем рефлексија приказаних на слици 10 мењају се и статичка и динамичка компонента интензитета апсорбованог ЕМ зрачења. Анализом у раду [96] показано је да се овај утицај може свести на укључивање корекционог фактора у израз за пораст статичке компоненте температурске варијације ФА одзива:

$$\Theta_{(0)}^{(s)} = \Theta_{(0)}^{(s)} \cdot \frac{1}{1 + \operatorname{Re}^{-\beta l_s}}.$$
(48)

Када је динамичка компонента у питању, ситуација је сложенија. Анализа дата у раду [98] показује да изрази за површинске температурске варијације, насупрот једноставном облику дефинисаном у [37] и датом у јендачинама 33а и 336:

$$\tilde{\mathcal{G}}(0) = I_0 (1 - R_0) \tilde{Z}_{C_s} \frac{\cosh(\tilde{\sigma}_s l_s)}{\sinh(\tilde{\sigma}_s l_s)}, 
\tilde{\mathcal{G}}(l_s) = I_0 (1 - R_0) \tilde{Z}_{C_s} \frac{1}{\sinh(\tilde{\sigma}_s l_s)}.$$
(49a)

постају знатно сложенији:

$$\tilde{\vartheta}(0) = \frac{-2\tilde{U}_{1}\sinh(\tilde{\sigma}_{s}l_{s}) + 2\tilde{U}_{2}\tilde{Z}_{cs}\cosh(\tilde{\sigma}_{s}l_{s}) - 2\tilde{U}_{4}\tilde{Z}_{cs}}{-2\sinh(\tilde{\sigma}_{s}l_{s})},$$

$$\tilde{\vartheta}(l_{s}) = \frac{\left(\tilde{U}_{3} - \tilde{U}_{4}\tilde{Z}_{cs}\right)e^{-\tilde{\sigma}_{s}l_{s}} - \left(\tilde{U}_{3} + \tilde{U}_{4}\tilde{Z}_{cs}\right)e^{\tilde{\sigma}_{s}l_{s}} + \left(2\tilde{U}_{2}\tilde{Z}_{cs}\right)}{-2\sinh(\tilde{\sigma}_{s}l_{s})},$$
(496)

где су нови коефицијенти дати изразима :

$$\begin{bmatrix} \tilde{U}_{1} = \frac{\tilde{\sigma}_{s}\tilde{Z}_{cs}S_{0}\beta}{\tilde{\sigma}_{s}^{2} - \beta^{2}} \cdot \left(1 - Re^{-2\beta l_{s}}\right) \\ \tilde{U}_{2} = \frac{S_{0}\beta^{2}}{\tilde{\sigma}_{s}^{2} - \beta^{2}} \cdot \left(1 + Re^{-2\beta l_{s}}\right) \\ \tilde{U}_{3} = \frac{\tilde{\sigma}_{s}\tilde{Z}_{cs}S_{0}\beta}{\tilde{\sigma}_{s}^{2} - \beta^{2}} \cdot e^{-\beta l_{s}} \cdot (1 - R) \\ \tilde{U}_{4} = \frac{S_{0}\beta^{2}}{\tilde{\sigma}_{s}^{2} - \beta^{2}} \cdot e^{-\beta l_{s}} \cdot (1 + R) \end{bmatrix}$$

$$(49B)$$

Утицај коефицијента рефлексије, коефицијента апсорпције и дебљине узорка је размотрен и приказан на сликама које следе.



Слика 11 Површинске температурске варијације узорка са високим (а) и са ниским коефицијентом унутрашње рефлексије (б)

Вишеструке рефлексије резултују појачаном апсорпцијом ЕМ енергије и, последично, повећаном количином оптички генерисане толоте, али такође утичу и на њену просторну расподелу унутар узорка. За танке узорке ( $l_s$ ~10 µm, коефицијент оптичке апсорпције  $\beta \sim 10^5 \text{ m}^{-1}$ , типичан за полимере) са високим коефицијентом унутрашње рефлексије ( $R_1$ ~0.9), у доњем делу модулационог фреквентног опсега уобичајено коришћеног у експериментима (100 Hz-10 kHz), температурска варијација се значајно повећава и благо је израженија на обасјаној страни (x=0). Са друге стране, за дебеле узорке (~100 µm), као и за све остале са ниским унутрашњим коеф.рефлексије ( $R_1$ ~0.1), ефекат је, изненађујуће, супротан: температурска варијација се смањује у поређењу са оном која се односи на модел без унутрашњих рефлексија.

Изводи се закључак да се на овај начин отвара могућност праћења још једног параметра ТМС модела ФА одзива, а то је коефицијент унутрашње рефлексије узорка. Такође, контрадикторност уочених ефеката позива на опрез, али и указује на неопходност дубљег проучавања топлотног транспорта кроз различите материјале.

#### 3.1.4 Утицај Хелмхолцових резонанци

После учињене генерализације теоријског модела ФА одзива кроз разматрања утицаја топлотне меморије и вишеструких рефлексија, дошло је на ред разматрање утицаја мерне инструментације. Резонантни пикови који су снимљени у овом делу фреквентног опсега се, у литератури, приписују утицају мерног ланца иако се у мерењима они појављују на фреквенцијама које су ниже од очекиваних (фреквентна карактеристика микрофона, појачавача и пратеће електронике). Са друге стране, генерализована теорија ФА одзива предвиђа резонантне пикове условљене присуством топлотне меморије на сличним фреквенцијама код материјала са ниским степеном уређења, што представља разлог за детаљније проучавање ове појаве.

Ћелија минималне запремине је и раније посматрана као електро-акустички резонатор и моделована каскадном везом више филтара [48], [55], што је искоришћено у раду [53], где је представљена преносном функцијом као комбинација два Хелмхолцова резонатора.



Слика 12 Микрофонска шупљина као Хелхолцов резонатор минималне и максималне запремине (а), електрични модел микрофона као ФА Хелхолцовог резонатора (б), аналогни еквивалентни капацитет микрофонске шупљине (в)

Обзиром на облик микрофона, као шупљине отворене на једном крају, примећено је да се његово понашање може моделовати акустичким филтром (слика 12а). У електричној аналогији, редна веза отпорника и калема симулира улаз у микрофон, док се микрофонска шупљина представља капацитивношћу (слика 12б). Нелинеарност коју у систем уводе вибрације дијафрагме микрофона, моделована је линеарно као *конволуција* два гранична случаја: резонатора минималне и максималне запремине (слика 12а), што у електричној аналогији представља паралелна веза два кондензатора (слика12в). На тај начин је омогућено да се преносна функција ћелије прикаже у облику *производа* двеју преносних функција филтара. Индуктанса улаза дата је изразом:

$$L = \frac{\rho l}{S},\tag{50}$$

где је  $S = r^2 \pi$ , а  $\rho$  је густина ваздуха, *l* дужина улаза микрофона и *S* површина попоречног пресека. Капацитивност шупљине микрофона дата је изразима:

$$C_i = \frac{V_i}{\rho v^2}, \quad i = V, \varepsilon$$
 где су:  $V_V = r_1^2 \pi l_1$   
 $V_\varepsilon = r_1^2 \pi (l_1 + \Delta \varepsilon)$  (51)

а *v* је брзина звука у ваздуху, док је *V*<sub>i</sub> одговарајућа запремина.

Заснивајући приступ на описаној електро-акустичкој аналогији, пројектована су два серијски повезана нископропусна филтра. Пошто је сигнал са микрофона дат изразом:

$$p_{mic}(j\omega) = \frac{1}{s^2 L C_{ekv}(\omega) + sR C_{ekv}(\omega) + 1} p_{in},$$
(52)

овај израз је узет за модел преносне крактеристике система. Преносна карактеристика, чији су главни резонантни параметри фреквенција (*f<sub>i</sub>*) и фактор

квалитета ( $Q_i$ ), је функција другог реда и у оба случаја изгледа исто, осим што су вредности параметара другачије:

$$H_{i}(j\omega) = \frac{\omega_{i}^{2}}{\omega_{i}^{2} - \omega^{2} + j\omega\frac{\omega_{i}}{Q_{i}}}, \quad \begin{bmatrix} i = V, \varepsilon \\ \omega = 2\pi f \\ \omega_{i} = 2\pi f_{i} \end{bmatrix}.$$
(53)

\_

Укупан фреквентни одговор је описан као производ изведене преносне функције и теоријски моделоване варијације притиска:

$$\tilde{p}_{u}(j\omega) = \tilde{p}(j\omega) \cdot H_{v}(j\omega) \cdot H_{\varepsilon}(j\omega).$$
(54)

Применом наведеног модела остварено је приметно боље слагање са експериментално добијеним подацима на ласерски синтерованом полиамиду ПА12, што је и приказано на сликама 13 и 14, те је објашњена појава резонантних пикова на високим фреквенцијама и у фазном и у амплитудском спектру.

Размотрене и овако објашњене резонанце проширују опсег примене ФА карактеризације на одређивање својстава микрофона, што до сада овом методом није рађено. Поред тога, софтверско уклањање поменутих појава из снимљеног ФА одзива проширује мерни опсег експеримента, доприносећи бољој карактеризацији материјала на високим фреквенцијама.



Слика 13 Експериментални и теоријски резултати амплитуде ФА одзива ПА12 на две дебљине: 640 и 1030 µm



Слика 14 Експериментални и теоријски резултати фазе ФА одзива ПА12 на две дебљине: 640 и 1030 µm

# 3.2 ТМС моделовање

Идеја развоја самусаглашене процедуре јавила се управо из теоријских разматрања модела ФА одзива, где је, приликом оптимизације прорачуна, примећена линеарна зависност фазе ФА одзива од једног од формираних параметара (базираног на дифузивности, конкретно). Стога је усвојен метод процене управо дифузивности,  $D_{\pi}$ , материјала из фазне карактеристике одзива (за разлику од претходне методологије, где се мултипараметарским фитовањем дифузивност процењивала из амплитудске компоненте) [3]. На овај начин добијен податак о дифузивности материјала, када се врати у процес процене осталих параметара из амплитуде ФА одзива, смањује број параметара за фитовање и повећавајући поузданост процене.

Такође, треба напоменути да је анализа теоријског модела аналитичким методама показала да се параметар топлотне проводности,  $k_i$  [W/mK], може идентификовати само у комбинацији са параметром топлотног коефицијента линеарног ширења,  $a_T$  [K<sup>-1</sup>], и то као део односа  $\frac{a_T}{k_s}$  а никако засебно.

Валидност идеје развоја самоусаглашене инверзне процедуре за процену термодинамичких параметара материјала првобитно је потврђена теоријскоматематичком симулацијом проблема. У програмском пакету Матлаб је развијена процедура (дата у Прилогу 1) која у свом првом кораку задаје насумично одабрану вредност уређеном пару  $(D_{Ts}, a_T/k_s)$  из литературног опсега а онда у наредном кораку симулира ФА одзив са датим вредностима за одабрани материјал, уз додавање одређеног нивоа шума. Додавање шума у симулацији има за циљ да унесе ниво стохастичности карактеристичан за извођење реалног експеримента, односно да спречи да се каснијим фитовањем параметара добије идентичан сигнал као симулирани (користи се функција *awgn* из пакета Матлаб). Однос сигнал/шум [*dB*] за који се добијају вредности најсличније експерименту је ~90. У наредном кораку се врши процена параметра  $D_{T_s}$ , поређењем разлике фаза, праћена проценом односа  $\frac{a_T}{k_s}$ , који се добија поређењем односа амплитуда симулираног одзива са задатим моделом (а у складу са методологијом тумачења ескперименталних резултата описаном у поглављу 4.3): вредности праћених параметара се померају за по 1% у свакој итерацији, уз коришћење нумеричких метода поменутих у поглављу 2.6.

Први корак поређења је утврђивање региона од интереса: то је онај опсег сигнала у коме присуство шума не утиче битно на изглед (глаткоћу) добијених линија; у нашем случају то је опсег 50-3000 Hz.

Следећи корак је нормализација која се постиже посматрањем разлике фаза и односа амплитуда сигнала; у питању је стандардна експериментална процедура којом се искључују различити утицаји коришћене мерне апаратуре [40], [52], [54]–[56], [99], [100] (детаљније у поглављу 4.3)

Коначно, метод поређења на основу кога се утврђује процењена вредност одређеног параметра заснован је на регресији, односно на минимизацији суме квадрата одступања посматраног од референтног сигнала (симулације) на утврђеном фреквентном опсегу. Грешка процене (у процентима) утврђује се поређењем процењене вредности параметара са задатом вредношћу (која је сваким покретањем процедуре различита!) и нормализацијом на исту (функција дата у Прилогу 2).

# 3.2.1 Резултати моделовања

Резултати симулационог модела дати су на примеру *полиетилена високе густине* (енг. High/Low Density PolyEthilene – HDPE/LDPE, тј. ХДПЕ/ЛДПЕ у даљем тексту).

![](_page_67_Figure_2.jpeg)

Слика 15 ТМС модел ФА одзива ХДПЕ на две дебљине: фаза (лево) и амплитуда (десно)

На слици 15 се уочава унесени шум тек на високим фреквенцијама – преко 3 kHz. Овако уведени шум долази до изражаја тек после обраде сигнала и преласка на посматрање разлике феза и односа амплитуда ФА одзива – приметно је појачање истог већ на фреквенцијама ~5 kHz (Слика 16).

Након хиљаду изведених итерација, процедура враћа процењену вредност  $D_{T}$  са грешком 0.94% (испод 2%!), док је грешка процене односа  $\frac{a_T}{k_s}$  44.15% (скоро увек изнад 30%!) – што је апсолутно неприхватљиво висок резултат који најбоље говори о лошој постављености овог иверзног проблема!

Да не постоји функционална повезаност између грешака које установљена процедура прави при одређивању поменутих параметара сведочи графикон на слици 17, добијен после итеративног поступка (на 1000 узорака).

![](_page_68_Figure_0.jpeg)

Слика 16 Обрађени ТМС модел ФА одзива ХДПЕ на две дебљине: разлика фаза (лево) и однос амплитуда (десно)

![](_page_68_Figure_2.jpeg)

Слика 17 Одсуство фукционалне зависности између грешке процене параметара  $D_{Ts}$  и  $\frac{a_T}{k_s}$ 

# 3.3 Примена неуронске мреже

#### 3.3.1 Опис неуронске мреже

Методолошки приступ приликом осмишљавања неуронске мреже која на улазу има ФА одзив је до детаља описан у литератури [101], а теоријски основ развијене неуронске мреже је, у различитим развојним облицима, коришћен у испитивањима метеоролошких и биомедицинских примена, са потврђеном употребном вредношћу за примену у ФА дубинској профилометрији [80], [102], [103]. Тип пројектоване неуронске мреже је вишеслојни перцептрон, а коришћена је метода обучавања пропагације уназад (енг. back-propagation). Због великог опсега улазних величина урађено је њихово претпроцесирање (логаритмовање у случају амплитуде) ради уочавања суштинских обележја актуелних података и њихове нормализације како би мрежа могла да се "фокусира" на унапред дефинисани домен, односно опсег улазних параметара.

#### 3.3.2 Дискусија

За улазне параметре узети су топлотна проводност ( $k_s$ ), топлотна дифузивност ( $D_{T_s}$ ), линеарни коефицијент топлотног ширења ( $\alpha_T$ ) и дебљина узорка ( $l_s$ ). Као материјал је изабран ХДПЕ. Пети улазни параметар, за обучавање неуронске мреже, је фреквенција модулације упадног зрачења. Три групе података (тренинг, валидациони и и тест скупови) су случајно бирани; обучавање је вршено на 40%, валидација је урађена на 10% узорка, а тестирање (реконструкција) на 50%.

Резултати су приказани на сликама (18-20).

Са слике 18 се јасно уочава да конструисана неуронска мрежа са великим успехом на обучавајућем скупу од 10000 симулираних узорака опонаша вредност  $a_T/k_s$  уз грешку процене 0.71%, док се на тест скупу од 15000 узорака постиже слична тачност – 0.73%.

![](_page_70_Figure_0.jpeg)

Слика 18 Обучавање и тестирање неуронске мреже за препознавање односа  $a_T/k_c$ 

![](_page_70_Figure_2.jpeg)

Слика 19 Обучавање и тестирање неуронске мреже за препознавање  $D_{Ts}$ 

У случају процене  $D_{T_s}$  (слика 19), показује се да мрежа не постиже униформну тачност. На ниским и високим вредностима одступања од задате вредности  $D_{T_s}$ приликом реконструкције су приметна, али и даље на високом проценту узорка и тренинг и тест процедура имају грешку испод 2.15%. Овде се већа грешка може приписати чињеници да  $D_{T_s}$  показује изразито стрму зависност на уском делу параметарског простора и то од више параметара (слика 20а,б), што неуронској мрежи "отежава учење", односно уноси већу несигорност процене.

Закључак је да је неуронска мрежа далеко погоднија и за процену  $D_{T_s}$  и за процену

односа  $\frac{a_T}{k_s}$  од нумеричке симулације засноване на регресији.


(a)



(б)

Слика 20 Присуство "стрмине" у функционалној зависности посматране величине од више параметара

# 4 ФА МЕРЕЊА И ПРИМЕНА РАЗВИЈЕНЕ ТЕОРИЈЕ НА ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИМ РЕЗУЛТАТИМА

Теоријски модели су, кроз историју, били обликовани у складу са могућностима тумачења експерименталних података. Уколико није било могуће достићи одређени део фреквентног опсега или су подаци из датог опсега фреквенција одступали од актуелних теоријских предвиђања, опсег је занемариван а део теорије који се бави поменутим опсегом био је сматран граничним случајем, те су се на основу њега уводиле апроксимације које су помагале у тумачењу података из "корисног" дела опсега [20], [44], [47], [49], [85], [87]. Овакав развој теоријских модела морао је да доведе до занемаривања читавог спектра фототермалних феномена (као и потенцијалних примена), на рачун повећања поузданости интерпретације.

Ево примера који се директно тиче проблематике којом се бави наша група: снимање таласних феномена фотоакустичког одзива на високим фреквенцијама побуде гас-микрофонском техником. Наиме, поменути феномени се манифестују на изразито високим фреквенцијама (> $10^{3}$ Hz), или барем тако предвиђају теоријска испитивања. Међутим, јављају се потешкоће на оба "краја" мерног ланца. Прво, због великих потенцијалних трошкова као и техничких потешкоћа у конструисању, побудни извор који би узорке осветљавао довољно добро дефинисаним снопом светлости на високим фреквенцијама модулације је тешко остварив, а друго, микрофони који би овај опсег мерења адекватно покрили су веома ретки, такорећи недоступни (обзиром на примену у чујном опсегу, већина микрофона у опсегу од интереса не даје веродостојне податке). Тако је целокупна област (гас-микрофонске спектроскопије) одувек ограничавана на опсег фреквенција  $10^{1}$ - $10^{3}$ Hz ([88], [100]) који је технички релативно лако доступан, те су и делови и пратеће теорије фотоакустичког одзива "осветљавани" у том светлу.

Неко би приметио како је можда гас-микрофонска фотоакустика, обзиром на своје мањкавости, неадекватна метода за остваривање научног пробоја овог типа, али, у ситуацији где средства бирају нас а не ми њих, вратимо се народној мудрости

(која је једина безусловно доступна, условно речено бесплатна): "бој не бије свијетло оружје, већ бој бије срце у јунака"...

Ово погалвље је организовано на следећи начин: Прво је у, одељку 4.1, детаљно представљена коришћена експериментална поставка: дат је опис две независно развијене хардверске платформе, а затим је описана припрема узорака на којима су вршане каснија испитивања. У одељку 4.2, као потврда оправданости коришћења развијеног генерализованог теоријског модела, дат је упоредни приказ резултата мерења ФА одзива референтних узорака (алуминијум, бакар, АБС). Одељак 4.3 представља методологију тумачења добијених експерименталних резултата, а у одељку 4.4. је дато тумачење експерименталних резултата од интереса паралелно са теоријским предвиђањима. Овде је приказана комплетна проблематика која претходи осмишљавању процедуре за одређивање параметара модела ФА одзива; приказом обрађених експерименталних резултата показује се колико је тешко применити осмишљену процедуру коришћењем аналитичког и нумеричког приступа, те се, последично, указује на недостатке постојећег модела који овом методологијом бивају наглашени. Коначно, у одељку 4.5 дат је преглед досадашњег напретка примене сви претходно наведених теоријских разматрања на експериментално добијене резултате.

#### 4.1 Експериментална поставка

#### 4.1.1 Конфигурације у теорији

У зависности од тога да ли се снимане појаве (које настају као последица ФТ ефекта) налазе на побудној или на оптички непобуђеној страни узорка, експерименталне конфигурације се деле на рефлексионе и трансмисионе (слика 21), редом. Ретко су у употреби диференцијалне конфигурације, где се користе снимљене информације добијене са обе стране побуђиваног узорка.



Слика 21 Конфигурације ФА поставке у теорији: (а) рефлексиона и (б) трансмисиона конфигурација

Уз одобрење преузето из доктората Марице Поповић, Факултет техничких наука Универзитета у Новом Саду, 2016.

Са концептом ФА *ћелије минималне запремине* сусрећемо се у раду [48] где је конфигурација отворене ФА ћелије (*open cell technique, OPC*) примењена на топлотну карактеризацију чврстих узорака. ФА ћелија минималне запремине је, суштински, надограђен/адаптиран електретски микрофон, где је унутрашњост микрофона (микрофонска шупљина – простор ограничен алуминијумским кућиштем, отвором микрофона (са поклопцем за прашину) и микрофонском мембраном) искоришћена као резонатор ФА ћелије (слика 22).



Слика 22 Ћелија минималне запремине: (а) шематски приказ, (б) илустрација микрофона (преузето са: <u>https://www.haikudeck.com/james-edward-maceo-west-</u> <u>business-presentation-ozJEvCRj8F#slide10</u>, приступљено 04.12.2017)

Узорак се позиционира директно на отвор микрофона (уместо мрежасте заштите од прашине), а правилно налегање се обезбеђује употребом специјалног танког гуменог прстена ("*O-ring*") намазаног заптивајућом вакуум-машћу (причвршћивање коришћењем било каквог "уштинућа" изостаје како би се одржала теоријска апроксимација једноставно ослоњене плоче [48], [88]). Детаљни опис овог поступка са илустрацијама дат је на крају одељка 4.1.3.

Механички (звучни) таласи, настали услед ФТ феномена у унутрашњости узорка и у његовој најближој околини, преносе се директно до мембране микрофона, уз минималне губитке, где бивају претворени у електрични сигнал који се преноси даље ка детекторском систему. Оваква трансмисиона конфигурација се одликује високом осетљивошћу, малим губицима и ниском ценом, те као таква представља добитну комбинацију при конципирању ФА мерне апаратуре.

#### 4.1.2 Опис коришћених поставки

Хронолошки посматрано, апаратуре које ће овде бити разматране су развијане са временским размаком од скоро десет година. Прва од њих, датира из 2009. године, а своју сврсисходност је доказала кроз објављивање бројних радова из области фотоакустике [52], [53], [55], [56], [100]. Друга поставка, развијена потпуно независно почетком 2017. године, првенствено је морала бити посматрана као верификација прве и старије апаратуре (што је наглашено у поглављу 4.2), али је непобитно указала и на важност протока времена, односно праћења актуелних техничких могућности: коришћењем модерних компоненти дошло се до повећања тачности и осетљивости, а истовремено до значајне уштеде времена. Један од развојних аспеката који је на тај начин добио на значају је и потенцијал за примену експертских система заснованих на неуронским мрежама, који захтевају велику брзину обраде података али не и велику количину снимљеног материјала (под претпоставком добре поновљивости експеримената). Коначно, поређењем мерења истих узорака на две независно развијене апаратуре, потврђене су претпоставке теоријског модела, али утврђени и неки његови нелостаци.

#### Земун

Апаратура која је употребљена за снимање ФА одзива развијена је у Институту за Физику, Земун. Комплетна поставка је дизајнирана за снимање фреквентног ФА одзива чврстих узорака у трансмисионом режиму, а за технику снимања изабрана је спектроскопија, због једноставности, робусности и осетљивости [52]. ФА ћелија је тзв. ћелија минималне запремине [48], [53] односно комора самог електретског микрофона представља акустички резонатор. Детаљан опис апаратуре дат је у литератури [52], а у наставку ће бити дати само најбитнији изводи из исте.

Поставка инструмента се састоји из јединице за снимање као и уређаја за обраду сигнала и довод струје (кутија са батеријама и електроником "кућне израде", слика 23а). Присутан је и компјутер са одговарајућим аквизиционим софтвером и звучном картицом са стерео улазом која функционише као лок-ин појачавач. Модулишући сигнал, који представља и улаз у драјвер који контролише рад ЛЕД/ласерске диоде, долази из излаза звучне карте (стандардни, 3.5mm конектор, слика23б). Референти сигнал са фотодиоде, који носи информацију о испорученој снази на улазу у ФА ћелију као и фази улазног сигнала, појачава се десет пута, док се сигнал са микрофона појачава десет (или сто) пута – све уз помоћ операционих појачавача ОП37. Овај тип појачавача је показао равну амплитудску карактеристику у опсегу 10Hz – 20kHz, без промене фазе. Оба сигнала улазе у звучну картицу рачунара преко два канала стерео улаза [52].



Слика 23 Експериментална поставка, уз дозволу преузето из [52]: (а) Фотографија апаратуре:

- 1 Кутија са електроником и батеријама,
- 2 ФА ћелија,
- 3 стандардни 3.5мм стерео конектор;
- (б) Шематски дијаграм ФА ћелија означена испрекиданом линијом

ФА ћелија је направљена од дуралуминијума, а у њој се налазе електретски микрофон (ЕСМ60, пречника 9.8mm, осетљивости 2.5mV/Pa), ЛЕД/ласерска диода и фотодиода. Овакав избор побудних елемената (уместо ксенонске лампе или *He*-*Ne* ласера, нпр.) обезбеђује компактност, ефикасност и отпорност на вибрације, а модулација се обавља струјном/напонском модулацијом у широком опсегу фреквенција [52]. Притом, све поменуте компоненте су лако замењиве и цена им је значајно нижа. Тип ћелије се назива *ћелија минималне запремиине*, односно унутрашњост самог микрофона (ограничена улазом са једне и дијафрагмом са друге стране) се понаша као комора ФА ћелије, што је конфигурација која гарантује високу осетљивост и низак ниво губитака [48], [52]. Апсорпциони слој,

нанет на површину узорака у припреми, игра две значајне улоге: прво, као апсорпбер ЕМ зрачења, а друго, као заштита микрофона од упадне светлости. Овај слој се осветљава побудом (трансмисиона конфигурација), а у теоријском ФА моделу сматра се и површинским извором топлоте за сам узорак, чији утицај на трансфер топлоте и, последично на ФА одзив система, може бити занемарен[90], [104]–[107].

#### Краљево

Апаратура из Краљева развијена је као унапређена/надограђена верзија описане апаратуре из Института за физику, Земун. Детаљан опис дат је у докторској дисертацији Слободана Тодосијевића, пријављеној и одбрањеној на Електротехничком факултету Универзитета у Београду 2017.год., док се методологија добијања резултата (у теорији) битно не разликује. Унапређења (у пракси) се могу свести на развој појединачних компоненти побудног и детекторског система, те на коришћење модерније верзије звучне картице самог рачунара. Такође, процедура дигиталне лок-ин детекције је детаљно обрађена и испитана, а снимљена је (и касније урачуната у снимљени сигнал) преносна карактеристика појединачних коришћених микрофона. Један део испитивања наменски је изведен упоредно на обе апаратуре како би се верификовала методологија и установила поновљивост резултата (поглавље 4.2).





Слика 24 Коришћена апарартура из Краљева

уз одобрење преузете из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

#### 4.1.3 Припрема узорака

#### Земун – Винча (ХДПЕ, ЛДПЕ)

Полиетилен (ПЕ) је добро познат и једна од најчешће употребљаваних полимера. Примери његове универзалне употребне вредности широко су рапрострањени – од једноставног и лако остваривог индустријског процеса добијања, преко мноштва поља примена, у зависности од типа (тј. од физичких и хемијских својстава) [108]–[110]. ХДПЕ је врста полиетилена коју карактерише низак ниво гранања (тј. линеарно молекуларно паковање са јаким међумолекулским везама), релативно висока густина као и висок степен кристалиничности у односу на остале ПЕ [111]–[116]. Висок степен отпорности на ударце и затезна чврстоћа, низак ниво упијања влаге и хемијска отпорност чине ХДПЕ материјалом избора у паковању производа, производњи цеви, пословима електричне изолације, као и многим другим гранама индустрије пластике [108], [117], [118].

Мотивација за испитивање термалних својстава ХДПЕ-а, као и њихове везе са структуром макромолекуларних материјала и динамичким процесима у њима, налази се у потреби за инжењерингом управо тих својстава у предвиђеним применама ХДПЕ-а [108]. У протеклим деценијама, динамичка топлотна својства материјала испитују се ФТ/ФА методама, уз задовољаајући ниво слагања добијних резултата са литературним вредностима, добијеним другим методама [90], [106], [119]. На крају, треба напоменути да се овом врстом испитивања отвара могућност и фундаменталног истраживања механизма транспорта енергије кроз мактромолекуларне системе [119], [120].

Коришћени полимер је био ХДПЕ Нірlex ННМ 5502 ( $\rho = 0.955 \text{g/cm}^3$ ,  $M_w = 300$  000). Изотропни листићи квадратног облика а различитих дебљина (200, 400 and 600µm) добијени су двадесетоминутним пресовањем у калупу, коришћењем Карвер лабораторијске пресе (Carver laboratory press), на 160°С и при постепеном повећању притиска до 3.28MPa. Један сет добијених листића брзо је хлађен потапањем у мешавину леда и воде (~0°С), како би се добили узорци ниског степена кристалиничности. Други сет је припремљен постепеним хлађењем са температуре топљења до собне тепературе (~20°С), при чему су узорци остајали у

преси без примене притиска наредних 6 сати, на тај начин постижући код њих висок степен кристалиничности.

Синтеза ових узорака, као и њихова структурна карактеризација, урађена је у Институту за нуклеарне науке "Винча". Композициона анализа и стационарна топлотна карактеризација извршени су методама дифракције Х-зрака широког енергетског спектра (енг. Wide angle X-ray Diffraction –WAXD) и диференцијалне скенирајуће калориметрије [121], [122] (енг. Difraction Scanning Calorimetry – DSC), одакле је процењен ниво кристалиничности узорака (енг. Degree of Crystallinity – DoC), што је приказано у Табели 1 и Слици 25.



Слика 25 Резултати мерења: WAXD (а) и DSC (б)

χ (%)	200 μm		400 µm	600 µm
	DSC	WAXD	DSC	DSC
Fast Cooled	51.7	50.5	57.4	59.3
Slowly Cooled	73.8	72.5	71.5	70.8

Табела 1 Кристалиничност као функција услова припремања и дебљине узорака

Из Табеле 1 се може закључити да је кристалиничност код споро хлађених узорака виша (око 70%, у поређењу са брзо хлађеним узорцима, где је око 50%), као и да благо расте како се дебљина узорка смањује (око 3%, укупно). Код брзо хлађених узорака, присутна је супротна тенденција: кристалиничност опада са опадањем дебљине узорка ( око 7.5%, укупно). Виши степен кристалиничности код споро хлађених узорака приписује се дужем времену хлађења, током ког делови макромолекуларног ланца имају довољно времена да се "поређају". Разлика у утицају дебљине на кристалничност, између споро и брзо хлађених узорака, може се приписати већем утицају површинских ефеката код споро хлађених. Наиме, производња кристалне фазе из растопа брзим хлађењем уводи "дефект-центре" (defect centers) на површини, а њихов утицај на топлотна својства је наглашенији код тањих узорака, конкретно, зато што управо дефект-центри смањују средњу слободну путању носилаца топлотне енергије.

Анализа WAXD и DSC мерења указује да не постоје два структирно истоветна узорка различитих дебљина, те позива на проверу методологије нормализације амплитуде и фазе ФА мерења на два нивоа дебљине.

#### Краљево – референтни узорци: алуминијум, бакар, АБС

Референтни узорци који су коришћени за калибрацију система су алуминијум и бакар. Они су одабрани по критеријуму доброг познавања топлотних параметара: топлотне проводности, топлотне дифузивности и топлотног коефицијента линеарног ширења – редом:  $k_i$  [W/mK],  $D_{Ti}$  [m<sup>2</sup>/s],  $a_T$  [K<sup>-1</sup>]. За дате материјале није било потребно користити опсеге прикликом избора поменутих параметара јер су тачне и конкретне вредности већ биле литературно доступне. Поред тога, најбитнији теоријски рад [87], на коме је заснован читав модел композитног клипа, ослања се управо на експерименталниме податке мерене на узорцима од бакра.

У овом одељку све представљене слике су уз одобрење преузета из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017. Пет узорака са фотографије приказане на слици 26 су бакар од 500 µm, алуминијум од 295 µm, АБС од 920 µm и два узорка од полиамида дебљине од 950 µm и 370 µm. Сви узорци су пречника 10 mm. Ови узорци су значајни јер су коришћени у упоредном испитивању система развијених на Институту за физику Универзитета у Београду и Машинског факултета из Краљева Универзитета у Крагујевцу.



#### Слика 26 Пет узорака за упоредна испитивања: бакар од 500 µm, алуминијум од 295 µm, АБС од 920 µm и два узорка од полиамида дебљине од 950 µm и 370µm,

уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

Друга класа референтних узорака, акрилонитрил-бутадиен-стирен – АБС (Acrylonitrile Butadiene Styrene – ABS) је одабран као референтни материјал

полимерног порекла углавном због свог изванредно јаког ФА одзива, при чему се водило рачуна и о његовој опште познатој применљивости и свакодневној присутности у индустрији полимера. Наиме, многи производи у домаћинству (попут компоненти компјутерских тастатура и сл.) направљени су од АБС-а, док се самлевени АБС (до нивоа просечног пречника зрна од 1µм) користи као боја у одређеним мастилима за тетовирање (боје базиране на АБС-у се сматрају веома живописним!). Коначно, АБС у облику нити је често коришћен материјал у 3Д штампи [123], [124], што нама као групи која сарађује са компанијом "*3D Impuls*" (са Факултета за машинство и грађевинарство у Краљеву, Универзитет у Крагујевцу) представља необорив аргумент за избор овог полимера као референтног.

На слици 27 је дат приказ припреме узорка од АБС из старог флопи диска. Слика је уз одобрење преузета из доктората Слободана Тодосијевића са машинског факултета из Краљева.



(a)



Слика 27 Припремање узорака од АБС – а, а) флопи диск и б) места на којима су пробијени узорци на задњој страни флопи диска, Уа одобрања праната на доктората Срободана Тодоаціонфа. Едоктората у праната на којима

Уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

#### Краљево — ПА12

Други полимерни материјал који је био у фокусу је *Најлон 12*. Овај полимер је изграђен од мономера омега-аминоалуричне киселине са 12 атома угљеника, спада у класу полиамида (полимера чији су мономери повезани амидном везом – одакле и скраћеница ПА12), а по својствима је сличан полиолефинима (полимерима који се добијају полимеризацијом једноставних олефина – алкена). Температура топљења овог материјала је у интервалу 178-180°С, механичка својства попут тврдоће, затезне чврстоће и отпорности на абразију су слични *Најлону 6* и *Најлону 66*, а ниска апсорпција воде и густина потичу од релативно дугих угљоводоничних ланаца. Најлон 12 је, такође, хемијски веома отпоран и неосетљив на пуцање под оптерећењем [125].

Попут претходно испитаног ПЕ, ПА12 је материјал који налази широку примену у индустрији. Верзија за коју смо се ми определили је "PA2200" – индустријски прах сертификован за процесирање на бројним индустријским системима, укључујући и процес ласерског синтеровања на систему "EOS Formiga P100" који поседује фирма "3D Impuls" са Факултета за машинство и грађевинарство у Краљеву, Универзитета у Крагујевцу. Са визијом будуће успешне интеграције са индустријом, унапређивања сарадње и јачања потенцијала примене нашег истраживања, а опет и због физичке близине и професионалне блискости са поменутом организацијом, одлучили смо се за испитивање баш материјала ПА2200 (који је у свим нашим документима, а и надаље у овој дисертацији, заведен скраћено као "ПА12").

Пошто ФА ћелија подржава испитивање само непровидних узорака, било је неопходно узорке од полиамида учинити нетранспарентним, те је искоришћена алуминијумска фолија од 10 µm, која је наношена на осветљавану површину узорака. Овим је, суштински, добијена класа двослојних узорака, али су они, због довољно мале дебљине фолије, у теоријској обради посматрани као једнослојни.

70





(б)

Слика 28 а) Узорци од полиамида ПА12 различитих дебљина, (б) употребљена алуминијумска фолија од 10 µm,

уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

#### Краљево – графит

Графит, као стабилна модификација угљеника, представља битан референтни материјал у ФА испитивањима: поред повољних и врло прецизно утврђених оптичких, термичких, мехничких и електричних својстава ([126]), као и широке распрострањености у природи и сталне доступности, угљеник је (поготову у форми активног угља и/или графита) погодан као материјал за прављење (оптичких) апсорпционих слојева. Са друге стране, због веома иновативних примена као контрастног агенса у техникама ФА осликавања [17], [127], али и зато што је угљеник у форми графена/фулерена је доказано атрактивни материјал будућности, било какво установљавање методологије његовог испитивања (а ФА методе имају доказани потенцијал у термодинамичкој карактеризацији широке класе материјала) мора представљати област са истраживачким потенцијалом.

Припрема узорака од графита, односно њихово синтеровање, описано је до детаља у поглављу 7.4 доктората Слободана Тодосијевића са машинског факултета из Краљева. У овом одељку су представљене слике из поменуте литературе, преузете уз дозволу, на којима се види целокупан поступак припреме узорка као *компримата* : првобитно је направљен одговарајући "алат", односно калуп, после чега је прах унутар коморе изложен притиску (једноставне) машинске стеге и на крају полиран брус-папиром ("шмирглом") на бази воде гранулације 1000. Податак о извршеној компресији се добија из густине узорка, која се одређује накнадно.



Слика 29 Добијени узорак од графита, пречника 10мм,

уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.



#### Слика 30 Припрема узорака од графита, а) прах графита, б) алат за синтеровање праха, в) стезање праха и г) полирање синтерованог узорка од графита,

уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

Узорци су припремљени у облику компримата, пресовањем на предефинисаном притиску а онда је стањивањем постизана жељена дебљина. Како би се обезбедила истоветност узорака у физичком погледу при различитим дебљинама, један узорак је стањиван глачањем до тачке пуцања. Обично је тај, најтањи узорак, касније прелазио у прах (мрвио се) приликом мерења, тако да ниједан примерак није "преживео", како би на њему мерења могла бити поновљена, али довољно пута су узорци изнова прављени, карактерисани и мерени да би поновљивост била загарантована.

### Техника постављања узорака (преузето из доктората С.Тодосијевића Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.)

Код *open – ended* ФА ћелија узорак се причвршћује директно за микрофон [48], [49], [53], тако да једна страна узорка остаје ван ФА ћелије, а друга учествује у формирању ФА ћелије. Технике при којима се то изводе се незнатно разликују и овде ће бити описана она, која се користу у овкиру овог ФА мерног система. Сама техника није најбоље решење, јер се не могу обезбедити исти услови (заптивање) за различите узорке. Док се не пронађе боље решење, ова техника остаје као једина валидна.





Слика 31 Техника наношења узорака, а) вакуум маст, б) вакуум маст нанесена на микрофон, в) наношење вакуум масти на О – ринг подметач, г) О – ring подметач стављен на узорак и д) узорак стављен на О – ring подметач, уз одобрење преузето из доктората Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017.

#### 4.2 Упоредни приказ референтних узорака

Како би се потврдила валидност коришћеног теоријског модела, али и утврдила поновљивост изведених екеперимената, извршена су успоредна мерења на две независно развијене апаратуре.

Први, референтни узорци, су алуминијум и бакар, изабрани због добре дефинисаности и (релативно, односно прихватљиво) малог коефицијента рефлексије, као и АБС – материјал са великим потенцијалом (потврђеним од раније, у индустрији флопи дискова, где је употребљаван за кућишта дискета) који, због својих оптичких (антирефлексионих), структурних (еластичност, жилавост..) и термодинамичких својстава (топлотна проводност, коефицијент апсорпције, топл.капацитет..), показује изванредан ФА одзив!

Након тога, извршена су мерења на узорцима ласерски синтерованог полиамида ПА12. Коначно, одређен број мерења извршен је на узорцима веома чистог графита у праху, где су добијени веома интересантни резултати који су подложни различитим тумачењима.

Следи упоредни приказ (на две независне апаратуре) амплитудских и фазних карактеристика измерених ФА одзива референтних узорака алуминијума, бакра и АБС пластике са теоријским предвиђањима истих, праћен аналогним приказом мерења и предвиђања, те тумачењем резултата изведених мерења на узорцима полиамида ХДПЕ, ЛДПЕ и ПА12.

#### 4.2.1 Алуминијум



Слика 32 Упоредни приказ снимљених ФА одзива алуминијума: фаза(лево) и амплитуда (десно)

Са слике 32 може се уочити да се фазе "прате", амплитуде такође. Поређењем снимљених апмплитуда са теоријским предвиђањем, приметан је знатан померај прелазног региона (фреквентног опсега у коме се једна од компоненти не може сматрати доминантном) ка вишим фреквенцијама.

Коефицијент корелације (величина која је индикатор линеарног слагања, мера "праћења" двеју линија) рачунат је за обе експерименталне амплитудске карактеристике у односу на теоријске линије (појединачне компоненте, као и њихов збир), а онда и међусобно (директно поређење апаратура). Резултати су дати у табели 2:

Табела 2 Коефицијенти корелације различитих апаратура са теоијским предвиђањима ФА одзива

АЛУМИНИЈУМ коеф.корелације	Апаратура 1/2	Теорија – ТХ	Теорија – АЦ	Теорија – укупни сигнал
Апаратура 1	0.9905	0.9794	0.4379	0.9803
Апаратура 2		0.9452	0.4759	0.9470

Показује се да однос амплитуда мерења истог узорка на различитим апаратурама, после линеаризације у региону од интереса, може да се сведе готово на мултипликативну константу – нагиб линије је реда величине  $10^{-4}$ , а промена односа преко два реда величине фреквенција је ~0.2 (3.6%), те се мултипликативна константа процењује на ~5.5.



Слика 33 Линеаризовани однос амплитуда алуминијума – свођење на мултипликативну константу (оордината функције линеаризованог сигнала)

#### 4.2.2 Бакар

Веома слична ситуација се понаваља код узорка бакра, осим што је нагиб линеаризованог односа у региону од интереса још мањи (~10<sup>-5</sup>) а мултипликативна константа се процењује на ~5.6.



(B)

Слика 34 Упоредни приказ снимљених ФА одзива бакра: фаза(а) и амплитуда (б), као и линеаризовани однос амплитуда (в)

## 4.2.3 АБС

АБС показује јасно одсуство *ТП* компоненте из одзива, самим тим и превојне тачке (прелазног региона). Ово је отежавајућа околност која ће за последицу имати повећану мерну несигурност.



Слика 35 Упоредни приказ снимљених ФА одзива АБС: фаза(а) и амплитуда (б)



Слика 36 Линеаризовани однос амплитуда АБС

#### 4.2.4 Закључак

Може се закључити да, иако различитог нивоа, сигнали који се добијају на независно развијеним платформама су истог облика, док је на једној од њих сигнал ~5.5-6 пута јачи.

На основу овако утврђене поновљивости, мерења се надаље могу сматрати ваљано изведеним.

#### 4.3 Методологија тумачења експерименталних резултата

Приликом тумачења експериментално добијених података, установљена је следећа методологија која се састоји од неколико корака које не треба прескочити и чији редослед не треба мењати [55], [56], [99]:

- Прво, треба прегледати разлике фаза снимљених сигнала. Ако се те линије "прате" у региону од интереса, или ако је присутно поклапање (што је најбољи случај!) мерења се могу сматрати поузданим. У региону преко 4 kHz јако је изражен утицај кохерентног шума, па је очекиван одређени степен неслагања фаза ([55]), односно врло је вероватно да линије разлика фаза неће бити равне (како, иначе, предвиђа теорија).
- 2. Даље, треба поређати амплитуде снимљених сигнала и упоредити њихов редослед (са аспекта дебљина сниманих узорака) са редоследом теоријских предвиђања. Ако је тенденција (пораста или опадања са дебљином узорака) једнако присутна у теорији као и у експерименту, то је још један доказ кретања у правом смеру. Линије које не прате утврђену тенденцију би требало искључити из даље анализе.
- 3. Коначно, треба исцртати линије односа амплитуда које су експериментално добијене упоредо са теоријским предвиђањима.

Пракса је, у трећем кораку, да се нормирање изводи на најдебљи узорак, односно на најслабији сигнал. Међутим, ако је дебљина узорка довољно велика, настаје проблем адекватности изабраног теоријског модела који описује ФА одзив: у коришћеном моделу *композитног клипа* ефекат *дилатације* је занемарен у корист *ефекта бубња*, док израженост првопоменутог расте са дебљином, те се код довољно дебелих узорака не сме изоставити! Дакле, уколико се сумња у ФА одзив најдељег узорка, по било ком основу, бира се неки од наредних, тањих, узорака, на који се онда врши нормирање. Чак и ако сумња не постоји, на тај начин се врши потврда методологије.

У региону од интереса теорија предвиђа да овако добијене карактеристике буду равне линије – ово је индикатор да су параметри узорака ( $k_s$ ,  $D_{ts}$ ,  $a_T$ ) једнаки. Ниво који ове линије одређују би у идеалном случају требало да се поклопи са теоријским предвиђањем, међутим у пракси у високом проценту случајева то није

тако. Разлога има више. Прво, постоји вероватноћа да побудни сноп не пада под идеално правим углом на површину узорка, или да не осветљава целокупну површину узорка униформно, што је једна од битних претпоставки теоријског модела која одређује почетни ниво ФА сигнала. Друго, могуће је да није остварено довољно добро налегање узорка на улаз микрофона (односно да ФА ћелија није херметички затворена), што утиче на амплитуду осцилација притиска у ћелији, а самим тим и на ниво сигнала који микрофон снима. Са овим проблемима се најбоље излази на крај вишеструким понављањем комплетног експеримента, укључујући позиционирање узорка. Трећи разлог за "шетање" нивоа амплитуде снимљеног одзива, који поновљивост експеримента не елиминише, је мерна несигурност приликом одређивања дебљине узорака. Овај фактор не уноси неку битну промену на нивоу разлике фаза, али веома фигурише када је однос амплитуда у питању.

#### 4.4 Експеримент: приказ у паралели са теоријским предвиђањима

#### 4.4.1 Резултати примене описане методологије:

#### ХДПЕ

За узорке ХДПЕ, применом описане методологије, добијени су резултати који су представљени на следећим сликама:



Слика 37 Разлика фаза ХДПЕ – теорија у паралели са експериментом

Очигледно је да се разлике фаза довољно добро прате (слика 37), што се јасно види на широком опсегу фреквенција, док се на деловима и преклапају када се узме у обзир ±5% мерна несигурност при одређивању дебљине узорка.

На сликама 38 и 39 се види да се при нивоу мерне несигурности од ~±5%, унутар региона од интереса, односи амплитуда експеримента и теорије приближавају заједничком фактору множења.

Притом, линија експерименталног односа амплитуда 200/600 се "опасно" приближава горњем нивоу теоријског односа 400/600 при мерној несигурности дебљине од +5% (слика 38).



Слика 38 однос амплитуда ХДПЕ, поређење теорије и експеримента



Слика 39 Илустрација последица присутне мерне несигурности на положај односа амплитуда мерених ФА одзива ХДПЕ

Дакле, закључак је да постоји прихватљив ниво вероватноће да се мерења односа амплитуда могу корелисати на нивоу једне мултипликативне константе унутар граница мерне несигурности дебљине узорка од 5%.

# 4.4.2 ХДПЕк



Слични резултати се добијају и за ХДПЕк (кристалинични ХДПЕ):



Слика 40 Разлика фаза ХДПЕк (горе) и однос амплитуда ХДПЕк (доле), поређење теорије и експеримента



Слика 41 Илустрација последица присутне мерне несигурности на положај односа амплитуда мерених ФА одзива ХДПЕк

#### 4.4.3 ЛДПЕ

Када је у питању ЛДПЕ, резултати обраде фазних карактеристика се могу сматрати непоузданим, али само на уском делу опсега снимања: праћење разлике фаза је присутно код узорака од 400 и 600µм, док је у случају 200/600 µm мање изражено на уском него на широком опсегу:



Слика 42 Разлика фаза ЛДПЕ, поређење теорије и експеримента

Анализом односа амплитуда добијени су следећи реултати који су приказани на сликама 43 и 44:



Слика 43 Однос амплитуда ЛДПЕ, поређење теорије и експеримента



Слика 44 Илустрација последица присутне мерне несигурности на положај односа амплитуда мерених ФА одзива ЛДПЕ

Овде се може уочити како однос амплитуда при мерној несигурности ~±5% без проблема улази у опсег скалабилности на једну мултипликативну константу, што је одличан резултат.

#### Резултати обраде односа амплитуда ХДПЕ

Из односа амллитуда снимљених материјала (ХДПЕ, ХДПЕк, ЛДПЕ), поређењем линија 200/600 и 400/600 са теоријским предвиђањима, може се закључити да се редослед линија из предвиђања поклапа са добијеним редоследом линија из експеримента. Односи, са друге стране, утврђени као средња вредност на региону од интереса, су у диспропорцији. Ако се прати претпоставка да се посматрањем односа амплитуда искључује утицај каракетеристике система на линије, а уз претпоставку да је теоријски модел добар, намеће се закључак да у на снимљене линије ипак треба применити још неку корекциону функцију, која зависи од разматраних односа дебљина узорака.



Слика 45 Илустрација прецизности изведеног експеримента на ХДПЕ, поређење теоријских предвиђања и резултата добијених из експеримента

На слици 45 су испрекиданом линијом приказана теоријска предвиђања, која се за два односа (редом: 200/600 и 400/600, на Х-оси тачке 1 и 2) могу свести на вредности ~8.5 и ~2.2, док се у пракси (експерименту) добијају вредности ~2.8 и ~1.8. Ово враћа на закључак да, под претпоставком да је модел коректан, *постоји још нека корекциона функција*, зависна од врсте/дебљине сниманог материјала која треба бити примењена на експерименталне податке како би могли бити корелисани са испитиваним параметрима, односно како би били употребљени за процену истих.

Уколико, са друге стране, претпоставимо немогућност постојања неке друге корекционе функције, долази се до закључка да *предложени и коришћени теоријски модел треба модификовати/допунити* како би на задовољавајућем нивоу описао експериментално добијене податке. Овим се враћамо на поље *директног проблема*, односно показује се међуповезаност директне и инверзне проблематике у научној методологији.

Однос амплитуда/разлика фаза је стандардни метод у тумачењу резултата ФА експеримента. Са слика 37-44 се јасно види колико је теоријски однос амплитуда ФА одзива осетљивији на мерну несигурност дебљине узорка у односу на разлику фаза. Такође, разлика фаза поседује одређени "облик" (за разлику од односа амплитуда који тежи равној линији), што ову величину чини погоднијом за праћење помоћу нумеричких метода заснованих на неуронским мрежама (које суштински препознају облик криве).

Комбинација релативно велике мерене несигурности при одређивању дебљине узорака и лоше условљености проблематике инверзне процедуре, наводи на закључак *да горе-описаном опробаном методологијом, није могуће реализовати довољно прецизну инверзну процедуру за процену параметара узорака*, односно *да се квалитетнији и употребљивији резултати добијају употребом неуронских мрежа*.

#### **4.4.4** ПА12

Када је ПА12 полиамид у питању, *прелиминарна мерења* на две апаратуре су извршена за две дебљине узорка: ~370 и 950 µm. На једној апаратури су измерени ФА одзиви узорака од 375 и 950 µm у 86 тачака, док су на другој измерени ФА одзиви узорака од 365, 370 и 950 µm. Пратећи утврђену методологију, за разлике фаза добијене су линије приказане на следећем графикону:



# Слика 46 Првобитни резултати разлике фаза ПА 12 на две дебљине и на две апаратуре

По графикону разлике фаза (слика 46) се јасно види да је квалитет мерења далеко нижи него у случају ХДПЕ, једино што се може утврдити одређен степен "праћења" двеју линија које потичу са исте апаратуре. Са друге стране, комплетни фазни померај у региону 80 Hz-3 kHz (скоро два реда величине!) је унутар 25°, што није лош резултат.
Када су односи амплитуда у питању (слика 47), може се закључити једино да постоји праћење у погледу редоследа линија према дебљинама узорака.



Слика 47 Првобитни резултати односа амплитуда ПА 12 на две дебљине и на две апаратуре

Даље, односи амплитуда су релативно блиски, и можда се налазе у региону скалабилности на једну мултипликативну константу.

*Поновљеним мерењима на обе апартуре*, при дебљинама узорака 375 и 950µм, добијени су резултати приказани на сликама 48-50:



Слика 48 Поновљена мерења ПА 12 на две апаратуре, фазе на две дебљине (лево) и њихова разлика (десно)



Слика 49 Поновљена мерења ПА 12 на две апаратуре, амплитуде на две дебљине (лево) и њихов однос (десно)



Слика 50 Линеаризација и фитовање односа амплитуда на две апаратуре

Овде је очигледно да је избор теоријског модела адекватан, обзиром на то да су и фазна и амплитудска мерења у великој мери паралелна. Оно што се додатно може приметити је сличност облика криве односа амплитуда са одфговарајућом линијом која се добија за референтни АБС. Појава пикова на високим учестаностима ~10<sup>4</sup> Hz може бити карактеристика једног од аквизиционих система (или чак оба!) када су полимерни материјали у питању.

Такође, у односу на прелиминарна мерења, нивои односа амплитуда су много ближи, што говори о доброј изведености експеримента и поновљивости, али обзиром на то да теорија предвиђа неколико пута вишу вредност односа у региону од интереса, поставља се изнова питање потенцијалног избора мултипликативне константе.

# Најбољи резултати – ПА12

После више поновљених сетова мерења, установљена је експериментална методологија на новој апаратури, те је утврђена довољно висока поновљивост мерења. Такође, направљено је више серија добро дефинисаних узорака (ласерски синтеровани ПА12) на карактеристичним дебљинама, чијим испитивањем је требало доћи до тражених параметара материјала.

Овде приказани резултати поновљених мерења представљају увод у саму инверзну процедуру процене топлотне дифузивност, топлотне проводности и коефицијанта линеарног ширења испитиваног материјала. Приказ фазних карактеристика као и разлике фаза је овде прескочен ради поједностављења, иначе су резултати веома слични досадашњим сликама које се тичу фазе: степен парћења је висок, велики број линија се сустиче у једну.



Слика 51 Најбољи резултати снимљених амплитуда ПА12 и њихових односа на апаратури *Краљево* у паралели са теоријским предвиђањима

Као што се види на слици 51, лево је приказ одабраних снимљених амплитудских карактеристика у паралели са теоријским предвиђањима; очигледно је праћење, па чак и приличан степен поклапања нивоа на појединачним дебљинама.

На слици 51 десно је дат однос амплитуда, односно појединачне амплитуде су нормиране на амплитуду најдебљег узорка. Овде се примећује боље "појачање" ефекта, односно појачана (лоша) условљеност проблема: јасније се оцртава разлика у дебљинама узорака него у случају када се посматрају само амплитуде. Наравно, још је приметнији шум који се уноси овим поступком: експерименталне линије односа амплитуда показују далеко веће средње квадратно одступање од теоријских предвиђања него што је то случај код експерименталних линија за амплитуде.

#### Резултати обраде односа амплитуда ПА12

Код овог материјала се, после обраде односа амплитуда, примећује велико побољшање у односу на резултат добијен на ХДПЕ/ЛДПЕ узорцима. На слици 52 приказане су усредњене вредности на региону од интереса експеримента и теоријских предвиђања мапиране у функцији односа дебљина. У односу на сличну илустрацију (слика 45) која описује ове вредности мерене на старим мерењима узорака ХДПЕ/ХДПЕк/ЛДПЕ, овде је сврсисходност експеримента далко уочљивија, самим тим што су теоријске и експерименталне тачке веома приближне. Висок степен корелације између линија које ове тачке дефинишу је очигледан.



Слика 52 Илустрација прецизности изведеног експеримента на ПА12, поређење теоријских предвиђања и резултата добијених из експеримента

## 4.5 Експеримент: карактеризација ХДПЕ/ЛДПЕ/ХДПЕк

Одељак 4.5 се бави развијеном процедуром одређивања параметара ТМС модела и представља синтезу више објављених резултата у међународним часописима [40], [42], [43], [53], [89].

#### Припрема за обраду – пренос података из Ориџин-фајлова

Подаци добијени мерењима на апаратури у Земуну су пренесени из програмског пакета Ориџин и припремљени за обраду у програмском пакету Матлаб. Сваки узорак има барем два (а понекад и три) мерења амплитуде и фазе. Фреквенцијска скала је свуда иста, распон је ~20 Hz – 20 kHz, расподела је логаритамска.

Одабир најадекватнијег мерења на одређеном узорку (одређене дебљине) врши се поређењем сваке експериментално добијене фазне карактеристике са две теоријске линије (такође фазне карактеристике), добијене употребом граничних вредности (минимум и максимум опсега) топлотне дифузивности. Поменути опсег се добија извођењем из литературних опсега за вредност густине, топлотне проводности и специфичног топлотног капацитета.

Истовремено се из литературе врши одабир теоријског модела који је оптимизован према својствима посматраних узорака и експерименталној поставци. У овај теоријски модел се убацују прорачунати минимум и максимум вредности за топлотну дифузивност, што резултира двема лнијама (фазним карактеристикама) које представљају теоријски оквир у коме би требало "тражити" експерименталну криву. За фреквенцијску скалу се увак користи експериментална скала.

Када се овај пар теоријских линија формира, издваја се опсег од интереса (100-1000 Hz). Опсег, односно регион од интереса, одабран је на основу искуства са мерном апаратуром: од стране произвођача декларисана микрофонска карактеристика је преко 50 Hz углавном равна (чујни опсег је 20-2000 Hz), док преко 4 kHz долази до незанемарљивог утицаја *кохерентног шума* на снимљени сигнал. Одлична анализе ове проблематике са аспекта експеримента, поред поменуте литературе у одељку 4.1.2, дата је у докторату Слободана Тодосијевића, Електротехнички факултет Универзитета у Београду, 2017. Даље се врши скалирање првог одбирка теоријског одзива на први одбирак исто тако издвојеног опсега из мерених података. Поређење се састоји из одузимања, одбирак по одбирак, експеримента од теорије, квадрирања и сумирања резултата, те дељења дужином посматраних низова (која мора бити иста). Добијена вредност се сматра мером сличности посматраних низова података у смислу суме квадрата одступања, где најмања вредност одговара највећој сличности. Написана функција "slicnost.m" све ове кораке, укључујући и проверу дужине низова, врши аутоматски (Прилог 4).

Овако одређено најеадекватније мерење се чува у бази података и надаље се користи у обради података као једино релевантно.

#### 4.5.1 Одређивање параметара модела из фазе: процена $D_{Ts}$

# Моделовање филтара на основу одступања на ниским и високим фреквенцијама

### (Проблематика снимања и тумачења фазе ФА одзива)

У ранијим разматрањима [53]–[55] примећено је да се изобличење ФА сигнала на описаној експерименталној поставци, и на мерењима оствареним на силицијуму, може моделовати двема каскадама филтара пропусника високих и ниских фреквенција, заснованих на електричним и акустичним аналогијама система. Не улазећи претерано у физику проблема, која је довољно добро описана у поменутом раду као и пратећој литератури, овде су посматране манифестације ових и овако описаних појава у снимљеним сигналима са друге класе узорака.



Слика 53 Илустрација идеје водиље приликом осмишљавања процедуре процене  $D_{\tau_s}$  из фазе ФА одзива

### преузето уз одобрење из [55]

Конкретно, филтар високопропусник (који се изводи из електричне аналогије) своје "присуство" у фазној карактеристици манифестује "подизањем" дела фазне карактеристике (слика 52) који се налази на ниским учестаностима у односу на средњи опсег фреквенција где се карактеристика може довољно добро апроскимирати линеарном функцијом. Веома слично, филтар нископропусник (резултат акустичне аналогије и моделовања микрофона Хелмхолцовим

резонатором) се у фази појављује на два места, на високим учестаностима, где додатно "спушта" фазну карактеристику [53], [55].

Обзиром да овако постављени филтри своје дејство у највећој мери показују ван фреквентног опсега линеарности ФА карактеристике (100-1000 Hz), њихови параметри се могу довољно добро проценити на основу посматрања у овим одвојеним деловима фреквенцијске скале. Тако је процена параметара ХФ филтра (високопропусника) вршена искључиво у опсегу фреквенција испод 100 Hz, док је аналогна процена ЛФ филтра (Хелмолц) вршена изнад 1 кHz. На овај начин у процени параметара филтра није учествовао опег од интереса (опсег линеарности карактеристике, 100-1000 Hz), па можемо сматрати да када се добијени филтри примене на теоријску карактеристику (фазну као и амплитудску), добијене криве у региону од интереса имају одступање од експеримента које је "реално". Оно представља збирни резултат грешке у одабиру коришћених параметара и мерних несигурности, али засигурно до поклапања не долази услед спроведених фитовања.

Фазна карактеристика је погодна за иницијалну процену параметара филтара због своје осетљивости а и зато што се у том случају у фреквенцијском домену филтрирање врши сабирањем теоријске карактеристике и датог филтра. Тако се дејство (процењеног) филтра добија, у општем случају, простим одузимањем теоријских предвиђања од експерименталних података. Овако добијени "одсечак" се онда анализира, односно пореди са бројним конструисаним филтрима у датом фреквенцијском домену (односно њиховим касакдама), те се на основу највеће сличности одабира онај сет параметара који се од те тачке сматра процењеним параметрима ХФ/ЛФ филтара који се примењују на теоријску карактеристику.

## Добијени резултати обраде фаза

Обраде фазне карактеристике снимљених података горе описаном процедуром преточена је (у својој финалној верзији) у Матлаб код "inv\_proc\_L\_H\_FAZA.m" (дат у Прилогу 3) који, после покретања, на предефинисаном сету узорака, ради процену карактеристичних фреквенција системских филтара.

Том приликом, за почетне вредности  $D_{Ts}$  и  $k_s$  се узимају средишње вредности из предефинисаних теоријских опсега, а за почетне вредности карактеристичих фреквенција системских филтара се узимају заокружене (приближне) вредности наведене у литератури [55].

Овако добијене вредности системских филтара се разликују од вредности наведених у литератури, што наводи на закључак да се у преносној функцији система налази још нека информација која је везана за врсту сниманог материјала, а врло могуће и његову дебљину.

Какогод, ако се претпостави да се у процењеним филтрима већ налази примењена корекциона процедура непознатог типа (зависна од врсте/дебљине сниманог материјала), те се филтри заиста и примене на фазне карактеристике сниманих материјала, а онда упореде теоријска предвиђања са снимљеним линијама и анализом суме квадрата одступања (програмски реализованим у функцији "slicnost.m", Прилог 4) уради процена параметра  $D_{T_x}$ , добија се следећа табела:

$D_{Ts}$ $\left[\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}\right]$ дебљина узорка [µm]	врста узорка	HDPE	HDPEk	LDPE	LLDPE
200		0.313	0.15	<b>0.204</b> x 10 <sup>-6</sup>	
400			0.127	0.095 x 10 <sup>-6</sup>	0.04 x 10 <sup>-6</sup>
600					
1000/1000/1350/1150		0.127			

Табела 3 Процењене вредности D<sub>тs</sub>

Овде се уводи претпоставка да  $D_{T_s}$  зависи од дебљине сниманог материјала, и у том погледу се може установити једино тенденција опадања  $D_{T_s}$  са порастом дебљине узорка.

Пошто процењене вредности готово по правилу одговарају максимуму или минимуму опсега теоријских предвиђања, може се извести закључак да осмишњена процедура, у условима које диктира некалибрисана апаратура, не

показује довољну прецизност приликом директне процене вредности траженог параметра. Изузетак је ХДПЕк где је после више итерација процедура завршила у неком минимуму параметарског простора, али питање ја да ли локалном или глобалном..?

#### 4.5.2 Одређивање параметара модела из амплитуде

Идеја водиља приликом осмишљавања ове и овакве инверзне процедуре је покушај уштеде ресурса приликом сваког будућег снимања ФА одзива у експериментима заснованим на конфигурцији гас-микрофонске ФА ћелије минималне запремине. Наиме, како је у ранијим разматрањима примећено, разлика теоријских предвиђања (како амплитудских тако и фазних) од експерименталних података се може (у великој мери) приписати утицајима мерног ланца (шум, дисторзија, интерференција [52], [53], [55], [99]). Ова разлика се, приликом моделовања система, (довољно добро) описује применом каскадне везе електричних и акустичних филтара на улазни (теоријски) сигнал ФА одзива узорака. Утицај ових филтара манифестује се променом облика теоријских линија фреквентним опсезима) на начин да оне постају сличне (у датим експериманталним линијама, а по доказивању њихове поновљивости на различитим узорцима, описани филтри се могу назвати карактеристиком посматраног система.

Познавање овако утврђене карактеристике система доприноси прецизнијем и лакшем тумачењу експерименталних података, с'обзиром на повећану сличност са модификованим теоријским моделом (који представља очекивање приликом мерења), а ако се користе референтни узорци, оно засигурно унапређује процедуру калибрације система (уочи експеримента).

Други, веома битан аспект овако установљене методологије је њена независност од појединачних карактеристика компоненти ситема као и карактеристика система као целине. Инверзна процедура је *саморегулишућа* и изнова се прилагођава *посматраном систему*, од случаја до случаја.

У случају апаратуре која је коришћена у овом истраживању [52], [55] нелинеарност и мерна несигурност су интензивиране у ниском и високом делу

103

опсега, наиме испод 100 Hz и изнад 1000 Hz. Предефинисани и раније верификовни опсег од интереса, односно онај опсег за који се сматра да нуди довољно веродостојне податке о мереним вредностима, је 100-800 Hz [100]. Приликом процене параметара саморегулишуће инверзне процедуре, управо је овај опсег од интереса изостављен како не би дошло "намештања резултата", тј. превише доброг слагања модела и експеримента: моделовање свих спољних утицаја врши се ван њега датог опсега, док се из њега подаци само очитавају, и користе као контролни скуп.

Идеја о саморегулишућој инверзној процедури заснована је на опсежним теоријским разматрањима ФА модела [3] где је показано да фазна карактеристика зависи од два независна параметра док амплитудска зависи од чак четири.

Такође, приликом карактеризације узорака добијених методом описаном у одељку 4.1.3, резултати DSC и WAXD анализе (Табела 1) показали су да, у оба случаја (и код брзо и код споро хлађених узорака), није било могуће идентификовати пар са идентичном кристалиничношћу. Сходно томе, уведена је претпоставка да, у датој групи узорака, не постоје два структурно иста примерка на различитим дебљинама, те да је стандардна процедура нормализације резултата на две дебљине, иако широко распрострањена у решавању ФА проблема [51], [90], [128], у нашем случају непримерена. Тако је изведен закључак како мора бити развијена нова, нашем случају прилагођена инверзна процедура процене термалних параметара из измереног фреквентног ФА одзива.

Код ХДПЕ (и других макромолекуларних материјала који се на овај начин моделују, [21] допринос  $p_{th}$  компоненте је значајан на веома ниским фреквенцијама (испод 50 Hz). У овом делу фреквентног опсега микрофонска карактеристика као ни преносна карактеристика остатка мерног ланца (семплери, појачавачи, итд.) нису више равне [3]. Са друге стране, у опсегу 100 Hz – 1 kHz, где се утицаји мерног ланца занемарују, доминантна је *TE* компонента ФА одзива [90]. Тако, заснивајући приступ на експерименталним подацима приказаним на сликама 37-39 као и на детаљној анализи ФА модела, која се може наћи у литератури [3], користимо модел дат једначинама (44,45). Овде се зависност ФА одзива посматра у односу на четири непозната параметра узорка у датом опсегу:

- (1) топлотну проводност ( $k_s [W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}]$ ),
- (2) топлотну дифузивност ( $D_{Ts} [m^2 \cdot s^{-1}]$ ),
- (3) линеарни кооефицијент топлотног ширења ( $\alpha_s[K^{-1}]$ ) и
- (4) дебљину узорка (*l<sub>s</sub>[m]*).

У коришћеној апроксимацији (израз 45), фазна карактеристика показује зависност само од топлотне дифузивности и дебљине узорка:

$$\arg(\tilde{p}_{ac}^{(HF)}) = -\frac{3}{2}\pi - \frac{1}{\sqrt{\frac{f}{f_s}}}, \qquad \text{где je:} \qquad f_s = \frac{1}{\pi} \frac{D_T}{l_s^2}, \qquad (46)$$

па се ова околност користи при избору функције за грубо фитовање на основу кога се процењује опсег вредности  $D_{Ts}$ . Са овим на уму, урађено је грубо фитовање фазне карактеристике како би се добио опсег вредности за  $D_{Ts}$ , који је приказан у Табели 4, заједно са литературно доступним опсегом проводности  $(k_s)$ . Вредност линеарног коефицијента ширења,  $\alpha_s = 225 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ , је такође преузета из литературе [129], [130].

Табела 4 Литературне и фитоване вредности термодинамичких параметара XДПЕ:

HDPE – High-Density Polyethylene						
k <sub>s</sub>	Г Э	интервали				
топлотна проводност	$\left\lfloor \frac{W}{m \cdot K} \right\rfloor$	0.33 - 0.53				
<i>D<sub>Ts</sub></i> топлотна дифузивност	$D_{Ts} = \frac{k_s}{C_p} = \frac{k_s}{c \cdot \rho}, \left[ \times 10^{-6} \frac{m^2}{s} \right]$	(0.265 – 0.313)				

Интервали  $k_s$  и  $D_{Ts}$  су представљени помоћу пет еквидистантних тачака, које су убачене као улазни параметри програма, писаног у програмском пакету Матлаб. Као излаз модела изведено је двадесет и пет теоријских вектора ФА одзива (над регионом од интереса), при чему сваки од њих одговара скупу параметара ( $k_s$ ,  $D_{Ts}$ ). За сваки од добијених вектора је онда израчуната вредност стандардне девијације (СтД) (такође над регионом од интереса (РОИ) а минимална вредност је узета као индикатор одговарајућег теоријског вектора који је "најближи" експериментално добијеним подацима, а који носи информацију о скупу параметара ( $k_s D_{Ts}$ ) који би требало да представља процењену вредност најближу реалној. Описана процедура је поновљена за сваки ниво дебљине узорака (200, 400, 600 µm) посебно, као и за обе брзине хлађења (тј. за све утврђене нивое кристалиничности). Процењени скупови параметара ( $k_s$ ,  $D_{Ts}$ ) који одговарају сваком од минимума представљени су у табели 5. Прорачунате вредности СтД су мапиране у  $k_s$ - $D_{Ts}$  параметарском простору како би се добио графички приказ резултата инверзне процедуре (слике 54 – 56).



Слика 54 Експериментални резултати: брзо хлађени узорци (ниска кристалиничност) лево, амплитуда и фаза (*a* и *б*, редом), и споро хлађени (висока кристалничност) десно, амплитуда и фаза (*в* и *г*, редом)





(в)



Слика 55 Поређење прорачунатих СтД над РОИ као функција скупова (ks,  $D_{Ts}$ ) за узорке од 400 и 600µm: брзо хлађени лево (ниска кристалиничност, *a* и  $\delta$ , редом), споро хлађени десно (висока кристалиничност, *в* и *г*, редом).



(a)



(б)

Слика 56 Поређење прорачунатих СтД над РОИ као функција скупова (ks, D<sub>Ts</sub>) за узорке од 200µm: високо и ниско кристалинични (а и б, редом)

Поређењем литературних и грубо фитованих вредности топлотних параметара (Табела 4) са добијеним ( $k_s D_{Ts}$ ) скуповима (Табела 5) показује се висок ниво слагања [90], [107].

Дебљина	HDPE – High-Density Polyethylene					
[µm]		Брзо хлађен	Споро хлађен	Несигурност		
	$\boldsymbol{k}_{s}\left[\frac{W}{m\cdot K}\right]$	0.33	0.33	(±0.02)		
400, 600	$D_{Ts} \\ \left[ \times 10^{-6}  \frac{m^2}{s} \right]$	0.313	0.313	(±0.019)		
200	$\boldsymbol{k}_{s}\left[\frac{W}{m\cdot K}\right]$	0.48	0.53	(±0.02)		
	$\frac{D_{Ts}}{\left[\times 10^{-6} \frac{m^2}{s}\right]}$	0.265	0.313	(±0.019)		

Табела 5 Процењене вредности термодинамичких параметара ХДПЕ са несигурношћу као полудистанцом између тачака

Као што се јасно види са слике 55, два дебља скупа узорака (400 и 600  $\mu$ m) не показују применте разлике када је процена ( $k_s$ ,  $D_{Ts}$ ) параметара у питању (Табела 5). Са друге стране, код најтањих узорака (200 $\mu$ m), ове каракеристике се појављују на слици 56, где се минимуми СтД-равни очито разликују и, последично, скупови процењених параметара ( $k_s$ ,  $D_{Ts}$ ) су такође различити (Табела 5). Код најтањих узорака, брзо као и споро хлађених, повећање топлотне проводности је приметно у односу на дебље узорке, што је неочекивани резултат уколико се носиоцима топлотне енергије сматрају фонони. Примећено повећање је веће код споро хлађених (више кристалиничних) него код брзо хлађених (мање кристалиничних) узорака, што је очекивани тренд. Са друге стране, код споро хлађених узорака топлотна дифузивност остаје непромењена, без обзира на

дебљину, те је иста за на свим нивоима дебљине. Најтањи брзо хлађени узорци показују пад топлотне дифузивности, што је у складу са очекивањима.

Из Табеле 5, може се приметити да се топлотни параметри добијени фитовањем амплитуде и фазе не могу довести у везу са нивоом кристалиничности дебљих узорака (400 и 600 µm), без обзира на начин њихове припреме. Међутим, ова корелација постоји код најтањих узорака оба типа, што значи да се ФА трансмисиони метод може искористити за карактеризацију узорака тањих од 200µm помоћу одређивања њиховог нивоа кристалиничности.

Код брзо хлађених узорака, пад кристалничности се корелише са порастом топлотне проводности (Табеле 1 и 3), што је у супротности са закључима из [90], [107]. Код споро хлађених узорака, пораст кристалничности се корелише са порастом топлотне проводности, што је у складу са резултатима из [107]. Међутим, наши резултати показују корелацију пада кристалничности код брзо хлађених узорака са падом топлотне дифузивности, што значи да мање кристалинични узорци имају већу запремински топлотни капацитет, што је опет супротно тврђењима из [107]. Објашњење би могла бити претпоставка алтернативног начина преноса топлоте, подржана у неким радовима који се баве поларонским механизмом преноса топлоте у макромоелакуларним ланцима [21].

У литератури, међутим, у ФА мерењима, коришћена је алуминијумска фолија као оптички апсорпциони слој, док је у нашим мерењима то била боја. Поред приписивања примећених феномена механизму преноса тополоте, исти би се могли посматрати и као последица утицаја апсопционог слоја на *TE* компоненту ФА одзива. Обе ове могућности представљају предмет наших тренутних испитивања.

Коначно, требало би нагласити да све вредности топлотне проводности и топлотне дифузивности, добијене помоћу развијене саморегулишуће инверзне процедуре, улазе у опсег литературних вредности представљених у Табели 2.

#### 4.6 Закључак поглавља

Закључак овог поглавља потврђује примењену и новоразвијену методологију, односно неопходност спреге амплитуде и фазе као и њихових односа и разлика (респективно) у правилном проучавању ФА одзива различитих класа материјала.

Такође, наглашен је значај минимизовања мерних несигурности приликом експерименталних извођења које, са обзиром на лошу постављеност изнверзног проблема, доводе до непримерено великих решака у процени параметара система.

Коначно, указано је на већу адекватност примене неуронских мрежа приликом обраде података у односу на нумеричку симулацију (и то већ на нивоу нумеричког експеримента!), чиме је наглашен потенцијал њихове примене у будућим истраживањима ФА одзива и његових примена.

# 5 ЗАКЉУЧЦИ

У докторској дисертацији су изведене следеће генерализације теоријско симулационог модела за ФА одзив у трансмисионој конфигурацији са ћелијом минималне запремине: укључена је коначна брзина простирања топлоте, утицај облика ћелије минималне запремине и вишеструке оптичке рефлексије. Предвиђања изведених ТМС модела су упоређена са предвиђањима постојећих модела и са експерименталним резултатима, одакле су изведени следећи закључци:

Коначна брзина простирања топлоте предвиђа постојање топлотних резонанци на учестаностима побуде које су више од неких карактеристичних учестаности. Ова учестаност зависи од врсте и дебљине материјала, и разликује се код амплитудског и фазног одзива за тачно одређену вредност која такође зависи од врсте и дебљине материјала. Код фазне карактеристике она је увек нижа. Резонантне амплитуде у обе карактеристике, и амплитудској и фазној, могу да се уоче само ако је дебљина узорка мања од неке карактеристичне дебљине. Тада је могуће одредити брзину простирања топлоте и термално време релаксације. Ове величине карактеришу динамичка топлотна својства која до сада нису мерена ни за један материјал нити структуру, нити је предложена методологија за њихово мерење. Познавање ових својстава постаје све значајније како за многобројне примене (од минимизације електронских и фотонских направа и кола, развоја органске електронике па све до радиолошке медицинске дијагностике и терапије), тако и за даља фундаментална истраживања механизма преноса енергије у наноструктурама, макромолекуларним материјалима, биолошким макромолекулима итд. Анализом изведеног теоријско-симулационог модела показано је да трансмисиона фотоакустичка мерења могу да се предложе као метода за одређивање брзине простирања топлоте и термалног времена релаксације код материјала са ниским степеном структурног уређења као што су макромолекуларни материјали, полимери и биолошка ткива, синтеровани материјали и многи други. Код оваквих материјала се очекује појава топлотних резонанци у аудио опсегу. Уколико је дебљина узорка већа од неке

карактеристичне дебљине, топлотне резонанце постају експериментално неуочљиве, али се мења облик ФА амплитудске и фазне карактеристике што захтева додатно преиспитивање модела композитног клипа.

- Ћелија минималне запремине је сама шупљина микрофона. Због своје конструкције се понаша као Хелмхолцов резонатор. Због тога се могу очекивати акустичке Хелмхолцове резонанце y амплитудској ΦA карактеристици на учестаностима модулације побудног ЕМ снопа које су веће од 10 kHz. Резонантне амплитуде и њихов положај у највећој мери зависе од геометријских својстава микрофонске шупљине, еластичних својстава микрофонске дијафрагме и од дебљине узорка. У фазној карактеристици се на учестаностима Хелмхолцових резонанци уочава стрми пад фазе ФА одзива. Изведени модел објашњава појаву експериментално уочених резонанци у експерименталним мерењима, и може да се искористи за проширење примене фотоакустике на карактеризацију микрофона али и за "чишћење" снимљених мерења од непожељног утицаја, чиме се проширује фреквентни опсег доступан за одрећивање параметара модела који зависе од својстава испитиваног узорка. Проширење фреквентног опсега директно утиче на тачност одређивања физичких својстава материјала.
- Укључивање утицаја вишеструких оптичких рефлексија на ФА одзив показује да овај одзив на сложен начин зависи од коефицијента оптичке рефлексије испитиваног узорка, чиме се проширује могућност примене ФА на одређивање већег броја оптичких својстава материјала. Методе за одређивање параметара модела у овом случају захтевају или калибрацију ФА фреквентног одзива тако да осим облика амплитудске и фазне карактеристике може да се користи и измерена величина амплитуде и фазе или нормализацију ФА одзива на неки референтни узорак уместо најчешће коришћене нормализације на две дебљине узорака истог материјала.

Користећи развијене генерализоване ТМС моделе, развијене су две технике за одређивање параметара модела, односно физичких својстава испитиваних узорака: самоусаглашена процедура која симултано користи нормализоване амплитудске и фазне ФА карактеристике и тростепена неуронска мрежа типа

перцептрона која користи и амплитудску и фазну ФА карактеристику за одређивања топлотних својстава испитиваног узорка. Обе технике су примењене на резулатате нумеричких експеримената и на извршена експериментална мерења на две различите апаратуре. Анализом добијених резултата дошло се до следећих закључака:

- Симултаним коришћењем амплитудских и фазних мерења могу се са задовољавајућом тачношћу одредити топлотна дифузивност и однос коефицијента линеарног ширења и коефицијента топлотне проводности, чак и када се користи релативно узак фреквентни опсег одзива. У односу на до сада коришћене технике, које су узимале у обзир или само амплитудски или само фазни ФА одзив, предложене методе проширују могућности ФА карактеризације и повећавају тачност мерених својстава.
- Примена неуронске мреже на нумеричке експерименте показује да би требало преиспитати модел топлотног клипа и размотрити оправданост његове примене на полимерне материјале.
- Применом самоусаглашене процедуре на експериментална мерења извршена на две апаратуре показало се да термална својства полимерних материјала зависе од њихове дебљине ако се праве стандардном техником из растопа. Даљи правац развоја јесте примена ФА мерења у одређивању степена кристалиничности полимерних материјала и за испитивање механизма транспорта топлоте у макромолекуларним структурама.
- Примена неуронских мрежа на експерименталне резултате показује се правилна зависност ФА амплитудских мерених карактеристика и резултата које предвиђа теоријски модел. Систематско одступање је описано полиномом и присутно је независно од врсте материјала и дебљине. Оно указује на потребу калибрације инструмената ФА мерења. Пошто су фазна мерења очигледно преосетљива на спољне факторе и показују велико одступање од теоријских предвиђања, требало би порадити на смањењу ове зависности присутне у експерименту. Један од могућих начина јесте прављење велике базе измерених фазних карактеристика на различитим инструментима, како би се корелисали резултати и неуронска мрежа

прилагодила тако да се добију потребне информације за бољу поставку експеримента и/или за додатни развој ТМС модела.

# КОРИШЋЕНА ЛИТЕРАТУРА

- [1] J. F. Power, "Inverse problem theory in the optical depth profilometry of thin films," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 73, no. 12, pp. 4057–4141, 2002.
- [2] P. C. Hansen, "Computation of the singular value expansion," *Computing*, vol. 40, pp. 185–199, 1988.
- [3] Z. N. Soskic, S. Ciric-Kostic, and S. P. Galovic, "An extension to the methodology for characterization of thermal properties of thin solid samples by photoacoustic techniques," *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 109, p. 217:230, 2016.
- [4] M. Terazima, N. Hirota, S. E. Braslavsky, A. Mandelis, S. E. Bialkowski, G. J. Diebold, R. J. D. Miller, D. Fournier, R. A. Palmer, A. A. C. Tam, Miller R S D, D. Fournier, Palmer RA, and A. A. C. Tam, "Quantities, Terminology, And Symbols In Photothermal And Related Spectroscopies," *Pure Appl. Chem*, vol. 76, no. 6, pp. 1083–1111, 2004.
- [5] M. Xu and L. V. Wang, "Photoacoustic imaging in biomedicine," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 77, no. 4, pp. 1–22, 2006.
- [6] F. A. Duck, *Physical Properties of Tissue: A Comprehensive Reference Book*. Institute of Physics and Engineering in Medicine (30 Nov. 2012), 2012.
- [7] L. M. Smith, J. Varagic, and L. M. Yamaleyeva, "Photoacoustic imaging for the detection of hypoxia in the rat femoral artery and skeletal muscle microcirculation," *Shock*, vol. 46, no. 5, pp. 527–530, 2016.
- [8] K. S. Valluru, K. E. Wilson, and J. K. Willmann, "Photoacoustic Imaging in Oncology: Translational Preclinical and Early Clinical Experience," *Radiology*, vol. 280, no. 2, pp. 332–349, 2016.
- [9] F. Raes, J. Sobilo, M. Le Mee, S. Rétif, S. Natkunarajah, S. Lerondel, and A. Le Pape, "High resolution ultrasound and photoacoustic imaging of orthotopic lung cancer in mice: New perspectives for onco- pharmacology," *PLoS One*, vol. 11, no. 4, pp. 1–15, 2016.

- [10] M. Prato, C. Magnetto, J. Jose, A. Khadjavi, F. Cavallo, E. Quaglino, A. Panariti, I. Rivolta, E. Benintende, G. Varetto, M. Argenziano, A. Troia, R. Cavalli, and C. Guiot, "2H,3H-decafluoropentane-based nanodroplets: New perspectives for oxygen delivery to hypoxic cutaneous tissues," *PLoS One*, vol. 10, no. 3, pp. 1– 20, 2015.
- [11] P. Wang, X. Li, C. Yao, W. Wang, M. Zhao, A. M. El-Toni, and F. Zhang, "Orthogonal near-infrared upconversion co-regulated site-specific O2delivery and photodynamic therapy for hypoxia tumor by using red blood cell microcarriers," *Biomaterials*, vol. 125, pp. 90–100, 2017.
- V. Neuschmelting, N. C. Burton, H. Lockau, A. Urich, S. Harmsen, V.
   Ntziachristos, and M. F. Kircher, "Performance of a Multispectral Optoacoustic Tomography (MSOT) System equipped with 2D vs. 3D Handheld Probes for Potential Clinical Translation," *Photoacoustics*, vol. 4, no. 1, pp. 1–10, 2016.
- [13] E. M. Strohm, M. J. Moore, and M. C. Kolios, "High resolution ultrasound and photoacoustic imaging of single cells," *Photoacoustics*, vol. 4, no. 1, pp. 36–42, 2016.
- [14] J. A. Viator, S. L. Jacques, and S. A. Prahl, "Depth profiling of absorbing soft materials using photoacoustic methods," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 5, no. 4, pp. 989–996, Jul. 1999.
- [15] C. Glorieux, R. Li Voti, J. Thoen, M. Bertolotti, and C. Sibilia, "Depth profiling of thermally inhomogenous materials by neural network recognition of photothermal time domain data," *J. App. Phys.*, vol. 85, no. 10, pp. 7059–7063, 1999.
- [16] C. Glorieux, J. S. Antoniow, M. Chirtoc, I. Chirtoc, and J. Thoen, "Neural network photothermal depth profiling of a heat source distribution . application to water migration in starch sheets," *Anal Sci*, vol. 17, pp. 398–401, 2001.
- [17] A. De La Zerda, C. Zavaleta, S. Keren, S. Vaithilingam, S. Bodapati, Z. Liu, J. Levi, B. R. Smith, T.-J. Ma, O. Oralkan, Z. Cheng, X. Chen, H. Dai, B. T. Khuri-Yakub, and S. S. Gambhir, "Carbon nanotubes as photoacoustic molecular

imaging agents in living mice," Nat. Nanotechnol., vol. 3, p. 557, Aug. 2008.

- [18] P. C. Hansen, "Numerical tools for analysis and solution of Fredholm integral equations of the first kind," *Inverse Probl.*, vol. 8, no. 6, pp. 849–872, 1992.
- [19] M. Fuhry and L. Reichel, "A new Tikhonov regularization method," *Numer. Algorithms*, vol. 59, no. 3, pp. 433–445, 2012.
- [20] A. Mandelis, "Progress in Photoacoustic and Photothermal Science and Technology." Elsevier New York, 1991.
- [21] D. Cevizovic, S. P. Galovic, A. Reshetnyak, Z. Ivić, and Z. Ivić, "The vibron dressing in α-helicoidal macromolecular chains," *Chinese Phys. B*, vol. 22, no. 6, p. 60501, 2013.
- [22] P. C. Hansen, "REGULARIZATION TOOLS: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems," *Numer. Algorithms*, vol. 6, no. 1, pp. 1–35, 1994.
- [23] G. Wahba, "Ill Posed Problems: Numerical and Statistical Methods for Mildly, Moderately and Severely Ill Posed Problems with Noisy Data," *Tecnikcal Report, Statistics Department, University of Wisconsin-Madison.* Newark, Delaware, 1980.
- [24] B. Hofmann, Regularization for Applied Inverse and Ill-Posed Problems A Numerical Approach, 1st ed., vol. 85. Leipzig: Vieweg+Teubner Verlag, 1986.
- [25] M. Bertero, C. De Mol, and E. R. Pike, "Linear inverse problems with discrete data: I. General formulation and singular system analysis," *Inverse Probl.*, vol. 1, no. 4, p. 301, 1985.
- [26] A. N. Tikhonov and V. Y. Arsenin, *Solutions of ill-posed problems*. Washington,D.C.: John Wiley & Sons, New York: V. H. Winston & Sons, 1977.
- [27] M. Bertero, C. De Mol, and E. R. Pike, "Linear inverse problems with discrete data : II Stability and regularisation," *Inverse Probl.*, vol. 4, pp. 573–594, 1988.
- [28] "Linearna regresija." [Online]. Available:

https://hr.wikipedia.org/wiki/Linearna\_regresija. [Accessed: 23-Nov-2017].

- [29] B. Noble, *Applied linear algebra*. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice-Hall, 1969.
- [30] D. P. O'Leary, "Near-Optimal Parameters for Tikhonov and Other Regularization Methods," SIAM J. Sci. Comput., vol. 23, no. 4, p. 1161–1171 (11 pages), 2006.
- [31] P. Vernotte, "Theorie continue et theorie moleculaire des phenomenes thermocinetiques," *Comptes rendus Hebd. des séances l â€<sup>TM</sup> Académie des Sci. Série B*, vol. 227, p. 43, 1948.
- [32] P. Vernotte, "Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de la chaleur," *Comptes rendus Hebd. des séances l â€<sup>TM</sup> Académie des Sci. Série B*, vol. 246, pp. 3154–3155, 1958.
- [33] C. W. ULBRICH, "Exact Electric Analogy to the Vernotte Hypothesis," *Phys. Rev.*, vol. 123, no. 6, pp. 2001–2002, 1961.
- [34] D. D. Joseph and L. Preziosi, "Heat waves," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 61, no. 1, pp. 41–73, Jan. 1989.
- [35] W. Kaminski, "Hyperbolic Heat Conduction Equation for Materials With a Nonhomogeneous Inner Structure," *J. Heat Transfer*, vol. 112, no. 3–August 1990, pp. 555–560, 1990.
- [36] E. Mitura, S. Michalowski, and W. Kaminski, "A MATHEMATICAL MODEL OF CONVECTION DRYING IN THE FALLING DRYING RATE PERIOD," *Dry. Technol.*, vol. 6, no. 1, pp. 113–137, Mar. 1988.
- [37] S. P. Galovic and D. Kostoski, "Photothermal wave propagation in media with thermal memory," *J. Appl. Phys.*, vol. 93, no. 5, p. 3063:3070, 2003.
- [38] Z. Suszyński, "Thermal model based on the electrical analogy of the thermal processes," *AIP Proc. 10th Int. Conf. Photoacoust. photothermal Phenom.*, vol. 463, no. 1, pp. 197–199, 1999.
- [39] S. P. Galovic, Z. N. Soskic, and M. N. Popovic, "Analysis of photothermal response of thin solid films by analogy with passive linear electric networks,"

Therm. Sci., vol. 13, no. 4, pp. 129–142, 2009.

- [40] D. D. Markushev, M. D. Rabasović, M. V. Nesic, M. N. Popovic, and S. P. Galovic, "Influence of thermal memory on thermal piston model of photoacoustic response," *Int. J. Thermophys.*, vol. 33, no. 10–11, pp. 2210–2216, 2012.
- [41] M. V. Nesic, M. N. Popovic, and S. P. Galovic, "influence of thermal memory on the thermoelastic bending component of photoacoustic response," *Hem. Ind.*, vol. 65, no. 3, pp. 219–227, 2011.
- [42] M. V. Nesic, P. Gusavac, M. N. Popovic, Z. N. Soskic, and S. P. Galovic,
  "Thermal memory influence on the thermoconducting component of indirect photoacoustic response," *Phys. Scr.*, vol. T149, p. 14018, 2012.
- [43] M. V. Nesic, S. P. Galovic, Z. N. Soskic, M. N. Popovic, and D. M. Todorović,
   "Photothermal thermoelastic bending for media with thermal memory," *Int. J. Thermophys.*, vol. 33, no. 10–11, pp. 2203–2209, 2012.
- [44] S. P. Galovic, Z. N. Soskic, M. N. Popovic, Z. Stojanovic, D. Cevizovic, and Z. Stojanovic, "Theory of photoacoustic effect in media with thermal memory," *J. Appl. Phys.*, vol. 116, no. 2, pp. 0–12, 2014.
- [45] P. Vernotte, "Application du mecanisme moleculaire a une theorie approchee des phenomenes thermocinetiques," *Comptes rendus Hebd. des séances l â€<sup>TM</sup> Académie des Sci. Série B*, vol. 227, p. 114, 1948.
- [46] Y. Gurevich, G. Logvinov, and I. Lashkevich, "Effective thermal conductivity: application to photothermal experiments for the case of bulk light absorption," *Phys. stat. sol.*, vol. 241, no. 6, pp. 1286–1298, 2004.
- [47] A. Rosencwaig and A. Gerscho, "Photoacoustic Effect with Solids: A Theoretical Treatment," *Science* (80-. )., vol. 190, pp. 556–557, Nov. 1975.
- [48] L. F. Perondi and L. C. M. Miranda, "Minimal-volume photoacoustic cell measurement of thermal diffusivity: Effect of the thermoelastic sample bending," *J. Appl. Phys.*, vol. 62, no. 7, pp. 2955–2959, 1987.

- [49] A. Bedoya, E. Marin, A. M. Mansanares, M. A. Zambrano-Arjona, I. Riech, and A. Calderon, "On the thermal characterization of solids by photoacoustic calorimetry: Thermal diffusivity and linear thermal expansion coefficient," *Thermochim. Acta*, vol. 614, pp. 52–58, 2015.
- [50] O. Pessoa, C. L. Cesar, N. A. Patel, H. Vargas, C. C. Ghizoni, and L. C. M. Miranda, "Two-beam photoacoustic phase measurement of the thermal diffusivity of solids," *J. Appl. Phys.*, vol. 59, no. 4, pp. 1316–1318, Feb. 1986.
- [51] J. A. Balderas-Lopez and A. Mandelis, "Self-normalized photothermal technique for accurate thermal diffusivity measurements in thin metal layers," *Rev.Sci.Instrum.*, vol. 74, p. 5219, 2003.
- [52] M. D. Rabasovic, M. G. Nikolic, M. D. Dramicanin, M. Franko, and D. D. Markushev, "Low-cost, portable photoacoustic setup for solid samples," *Meas. Sci. Technol.*, vol. 20, no. 9, p. 95902, 2009.
- [53] M. N. Popovic, M. V. Nesic, S. Ciric-Kostic, M. Zivanov, D. D. Markushev, M. D. Rabasovic, and S. P. Galovic, "Helmholtz Resonances in Photoacoustic Experiment with Laser-Sintered Polyamide Including Thermal Memory of Samples," *Int. J. Thermophys.*, vol. 37, no. 12, pp. 1–9, 2016.
- [54] D. D. Markushev, M. D. Rabasovic, D. M. Todorović, S. P. Galovic, and S. E. Bialkowski, "Photoacoustic signal and noise analysis for Si thin plate: Signal correction in frequency domain," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 86, no. 3, pp. 1–10, 2015.
- [55] S. M. Aleksic, D. K. Markushev, D. S. Pantic, M. D. Rabasovic, D. D. Markushev, and D. M. Todorović, "Electro-Acustic Influence of the Measuring System on the Photo-Acustic Signal Amplitude and Phase in Frequency Domain," *Univ. Facta*, vol. 8, no. 1, pp. 1–13, 2010.
- [56] D. D. Markushev, J. Ordonez-Miranda, M. D. Rabasovic, M. Chirtoc, D. M. Todorović, S. E. Bialkowski, D. Korte, and M. Franko, "Thermal and elastic characterization of glassy carbon thin films by photoacoustic measurements," *Eur. Phys. J. Plus*, vol. 132, no. 33, pp. 1–9, 2017.

- [57] A. A. Oraevsky, S. L. Jacques, and F. K. Tittel, "Measurement of tissue optical properties by time-resolved detection of laser-induced transient stress," *Appl. Opt.*, vol. 36, no. 1, pp. 402–415, 1997.
- [58] R. A. Kruger and P. Liu, "Photoacoustic ultrasound: Pulse production and detection in 0.5% Liposyn," *Med. Phys.*, vol. 21, no. 7, pp. 1179–1184, 1994.
- [59] A. A. Karabutov, E. V Savateeva, N. B. Podymova, and A. A. Oraevsky,
  "Backward mode detection of laser-induced wide-band ultrasonic transients with optoacoustic transducer," *J. Appl. Phys.*, vol. 87, no. 4, pp. 2003–2014, Jan. 2000.
- [60] G. Paltauf and H. Schmidt-Kloiber, "Pulsed optoacoustic characterization of layered media," J. Appl. Phys., vol. 88, no. 3, pp. 1624–1631, Jul. 2000.
- [61] K. P. Köstli, M. Frenz, H. P. Weber, G. Paltauf, and H. Schmidt-Kloiber,
  "Optoacoustic infrared spectroscopy of soft tissue," *J. Appl. Phys.*, vol. 88, no. 3,
  pp. 1632–1637, Jul. 2000.
- [62] G. Ku and L. V. Wang, "Scanning thermoacoustic tomography in biological tissue," *Med. Phys.*, vol. 27, no. 5, pp. 1195–1202, 2000.
- [63] G. Ku and L. V. Wang, "Scanning microwave-induced thermoacoustic tomography: Signal, resolution, and contrast," *Med. Phys.*, vol. 28, no. 1, pp. 4– 10, 2001.
- [64] M. Xu, G. Ku, and L. V. Wang, "Microwave-induced thermoacoustic tomography using multi-sector scanning," *Med. Phys.*, vol. 28, no. 9, pp. 1958– 1963, 2001.
- [65] G. Ku, X. Wang, G. Stoica, and L. V. Wang, "Multiple-bandwidth photoacoustic tomography," *Phys. Med. Biol.*, vol. 49, no. 7, p. 1329, 2004.
- [66] J. J. Niederhauser, M. Jaeger, and M. Frenz, "Real-time three-dimensional optoacoustic imaging using an acoustic lens system," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 85, no. 5, pp. 846–848, Jul. 2004.

- [67] M. Haltmeier, O. Scherzer, P. Burgholzer, and G. Paltauf, "Thermoacoustic computed tomography with large planar receivers," *Inverse Probl.*, vol. 20, no. 5, p. 1663, 2004.
- [68] M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*. New York: McGraw- Hill, 1953.
- [69] R. A. Kruger, P. Liu, Y. R. Fang, and C. R. Appledorn, "Photoacoustic ultrasound (PAUS)--reconstruction tomography.," *Med. Phys.*, vol. 22, no. 10, pp. 1605–1609, Oct. 1995.
- [70] Y. R. Fang, R. A. Kruger, C. R. APPLEDORN, and P. Liu, "MICROWAVE-INDUCED PHOTOACOUSTIC SONOGRAPHY," *Prog. Nat. Sci.*, vol. 6, pp. 598–601, 1996.
- [71] R. A. Kruger, D. R. Reinecke, and G. A. Kruger, "Thermoacoustic computed tomography-technical considerations," *Med. Phys.*, vol. 26, no. 9, pp. 1832– 1837, 1999.
- [72] Y. Xu, L. V. Wang, G. Ambartsoumian, and P. Kuchment, "Reconstructions in limited-view thermoacoustic tomography," *Med. Phys.*, vol. 31, no. 4, pp. 724– 733, 2004.
- [73] K. P. Köstli, M. Frenz, H. P. Weber, G. Paltauf, and H. Schmidt-Kloiber,
  "Optoacoustic tomography: time-gated measurement of pressure distributions and image reconstruction," *Appl. Opt.*, vol. 40, no. 22, pp. 3800–3809, Aug. 2001.
- [74] D. Feng, Y. Xu, G. Ku, and L. V. Wang, "Microwave-induced thermoacoustic tomography: Reconstruction by synthetic aperture," *Med. Phys.*, vol. 28, no. 12, pp. 2427–2431, 2001.
- [75] M. Xu and L. V Wang, "Time-domain reconstruction for thermoacoustic tomography in a spherical geometry," *IEEE Trans. Med. Imaging*, vol. 21, no. 7, pp. 814–822, Jul. 2002.
- [76] M. Xu, Y. Xu, and L. V Wang, "Time-domain reconstruction algorithms and

numerical simulations for thermoacoustic tomography in various geometries," *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 50, no. 9, pp. 1086–1099, Sep. 2003.

- [77] G. Paltauf, J. A. Viator, S. A. Prahl, and S. L. Jacques, "Iterative reconstruction algorithm for optoacoustic imaging," *J. Acoust. Soc. Am.*, vol. 112, no. 4, pp. 1536–1544, 2002.
- [78] Y. Xu and L. V Wang, "Effects of acoustic heterogeneity in breast thermoacoustic tomography," *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, vol. 50, no. 9, pp. 1134–1146, Sep. 2003.
- [79] C. Glorieux and J. Thoen, "Thermal depth profile reconstruction by neural network recognition of the photothermal frequency spectrum," *J. App. Phys.*, vol. 80, no. 11, pp. 6510–6514, 1996.
- [80] M. N. Popovic, D. Furundzic, and S. P. Galovic, "Photothermal Depth Profiling Of Optical Gradient Materials By Neural Network," *Publ. Astron. Obs. Belgrade*, vol. 89, no. May 2015, 2010.
- [81] C. Glorieux, Z. Bozoki, J. Fivez, and J. Thoen, "IPhotoacoustic depth profiling of the t ermal conductivity of an inhomogeneously aligned liquid crystal at a free surface," J. App. Phys., vol. 78, no. 5, 1995.
- [82] H. Vargas and L. C. M. Miranda, "Photoacoustic and related photothermal techniques," *Phys. Rep.*, vol. 161, pp. 43–101, 1988.
- [83] A. A. C. Tam, "Applications of photoacoustic sensing techniques," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 58, pp. 381–431, 1986.
- [84] H. K. Park, C. P. Grigoropoulus, and A. A. C. Tam, "Optical measurements of thermal diffusivity of a material," *Int. J. Thermophys.*, vol. 16, no. 4, p. 973, 1995.
- [85] A. Rosencwaig and A. Gerscho, "Theory of the photoacoustic effect with solids," *J. Appl. Phys.*, vol. 47, no. 1, pp. 64–69, 1976.
- [86] F. A. McDonald and G. C. Wetsel, "Generalized theory of the photoacoustic

effect," J. Appl. Phys., vol. 49, no. 4, pp. 2313–2322, Apr. 1978.

- [87] L. Rousset, F. Lepoutre, and L. Bertrand, "Influence of thermoelastic bending on photoacoustic experiments related to measurements of thermal diffusivity of metals," *J. Appl. Phys.*, vol. 54, no. 5, pp. 2383–2391, 1983.
- [88] D. M. Todorović and P. M. Nikolic, "Carrier transport Contribution on Thermoelastic and Electronic Deformation in Semiconductors," in *Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology*, vol. 4, A. Mandelis and P. Hess, Eds. Washington, USA: SPIE Press, Bellingham, 2000, p. 272.
- [89] M. V. Nesic, M. N. Popovic, Z. Stojanovic, Z. N. Soskic, and S. P. Galovic,
  "Photoacoustic response of thin films: Thermal memory influence," *Hem. Ind.*,
  vol. 67, no. 1, pp. 139–146, 2013.
- [90] A. M. Mansanares, H. Vargas, F. Galembeck, J. Buijs, and D. Bicanic,
  "Photoacoustic characterization of a two-layer system," *J. Appl. Phys.*, vol. 70, no. 11, pp. 7046–7050, 1991.
- [91] J. A. Balderas-Lopez and A. Mandelis, "Thermal diffusivity measurements in the photoacoustic open-cell configuration using simple signal normalization techniques," J. Appl. Phys., vol. 90, no. 5, pp. 2273–2279, Aug. 2001.
- [92] J. L. Pichardo-Molina and J. J. Alvarado-Gil, "Heat diffusion and thermolastic vibration influence on the signal of an open photoacoustic cell for two layer systems," *J. Appl. Phys.*, vol. 95, no. 11, pp. 6450–6456, May 2004.
- [93] J. Cao, "Interferential formulization and interpretation of the photoacoustic effect in multi-layered cells," *J. Phys. D. Appl. Phys.*, vol. 33, no. 3, p. 200, 2000.
- [94] C. A. S. Lima, M. B. S. Lima, L. C. M. Miranda, J. Baeza, J. Freer, N. Reyes, J. Ruiz, and M. D. Silva, "Photoacoustic characterization of bleached wood pulp and finished papers," *Meas. Sci. Technol.*, vol. 11, no. 5, p. 504, 2000.
- [95] A. R. Fisher, A. . Schissler, and J. C. Schotland, "Photoacoustic effect of multiply scattered light," *Phys. Rev. E*, vol. 76, p. 36604, 2007.

- [96] M. V. Nesic, S. P. Galovic, S. Todosijevic, M. N. Popovic, and Z. N. Soskic, "Stacionarni fototermalni efekat: Uticaj višestrukih optičkih refleksija," in XII Congress of Serbian Physicists, Book of Papers, 2013.
- [97] D. D. Markushev, J. Ordonez-Miranda, M. D. Rabasovic, S. P. Galovic, D. M. Todorović, and S. E. Bialkowski, "Effect of the absorption coefficient of aluminium plates on their thermoelastic bending in photoacoustic experiments," *J. Appl. Phys.*, vol. 117, no. 24, p. 245309, 2015.
- [98] M. V. Nesic, M. N. Popovic, and S. P. Galovic, "The influence of multiple optical reflexions on the photoacoustic frequency response," *Opt. QUANTUM Electron.*, vol. 48, no. 290, p. 7, 2016.
- [99] D. M. Todorović, M. D. Rabasovic, and D. D. Markushev, "Photoacoustic elastic bending in thin film—Substrate system," J. Appl. Phys., vol. 114, no. 21, p. 213510, 2013.
- [100] D. M. Todorović, M. D. Rabasovic, D. D. Markushev, and M. Sarajlić,
  "Photoacoustic elastic bending in thin film-substrate system: Experimental determination of the thin film parameters," *J. Appl. Phys.*, vol. 116, no. 5, 2014.
- [101] D. Furundzic, S. Stankovic, S. Jovicic, S. Punisic, and M. Subotic, "Engineering Applications of Artificial Intelligence Distance based resampling of imbalanced classes : With an application example of speech quality assessment," *Eng. Appl. Artif. Intell.*, vol. 64, no. July, pp. 440–458, 2017.
- [102] D. Furundzic, "Application example of neural networks for time series analysis:Rainfall-runoff modeling," *Signal Processing*, vol. 64, no. 3, pp. 383– 396, 1998.
- [103] D. Furundzic, M. Djordjevic, and A. Jovicevic Bekic, "Neural networks approach to early breast cancer detection," *J. Syst. Archit.*, vol. 44, no. 8, pp. 617–633, 1998.
- [104] R. Sanchez, J. Rieumont, S. Cardoso, M. Silva, M. Sthel, M. Massunaga, C. N. Gatts, and H. Vargas, "Photoacoustic Monitoring of Internal Plastification in
Poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyvalerate) Copolymers: Measurements of Thermal Parameters," *J. Braz. Chem. Soc.*, vol. 10, no. 2, pp. 97–103, 1999.

- [105] L. Olenka, A. N. Medina, M. L. Baesso, A. C. Bento, and A. F. Rubira,
  "Monitoring the Depth Penetration of Dyes in Poly (Ethylene Terephthalate)
  Films Using a Two Layer Based Photoacoustic Model," *Brazilian J. Phys.*, vol. 32, no. 2B, pp. 516–522, 2002.
- [106] L. H. Poley, P. Ana, L. Siqueira, M. G. Silva, and H. Vargas, "Photothermal Characterization of Low Density Polyethylene Food Packages," *Polim. Cienc. e Tecnol.*, vol. 14, pp. 8–12, 2004.
- [107] B. Bonno, J. L. Laporte, and R. T. D'Leon, "Determination of Polyethylene Thermal Parameters from Photopyroelectric and Photoacoustic Techniques," *Instrum. Sci. Technol.*, vol. 33, no. 2, pp. 151–160, Mar. 2005.
- [108] B. Wunderlich, Thermal Analysis of Polymeric Materials. Berlin: Springer, 2005.
- [109] T. C. M. Chung, "Functional Polyolefins for Energy Applications," *Macromolecules*, vol. 46, no. 17, pp. 6671 – 6698, 2013.
- [110] A. A. Basfar, J. Mosnáček, T. M. Shukri, M. A. Bahattab, P. Noireaux, and A. Courdreuse, "Mechanical and thermal properties of blends of low-density polyethylene and ethylene vinyl acetate crosslinked by both dicumyl peroxide and ionizing radiation for wire and cable applications," *J. Appl. Polym. Sci.*, vol. 107, no. 1, pp. 642–649, Jan. 2008.
- [111] S. P. Galovic, B. Secerov, S. Trifunovic, D. Milicevic, and E. Suljovrujic, "A study of gamma-irradiated polyethylenes by temperature modulated differential scanning calorimetry," *Radiat. Phys. Chem.*, vol. 81, pp. 1374–1377, 2012.
- [112] D. Milicevic, M. Micic, G. Stamboliev, A. Leskovac, M. Mitric, and E. Suljovrujic, "Microstructure and crystallinity of polyolefins oriented via solid-state stretching at an elevated temperature," *Fibers Polym.*, vol. 13, no. 4, pp. 466–470, 2012.
- [113] D. Milicevic, S. Trifunovic, M. N. Popovic, T. V. Milic, and E. Suljovrujic, "The

influence of orientation on the radiation-induced crosslinking/oxidative behavior of different PEs," *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, vol. 260, no. 2, pp. 603–612, 2007.

- [114] D. Milicevic, M. Micic, and E. Suljovrujic, "Radiation-induced modification of dielectric relaxation spectra of polyolefins: polyethylenes vs. polypropylene," *Polym. Bull.*, vol. 71, pp. 2317–2334, 2014.
- [115] Q. Yuan, Y. Yang, J. Chen, V. Ramuni, R. D. K. Misra, and K. J. Bertrand, "The effect of crystallization pressure on macromolecular structure, phase evolution, and fracture resistance of nano-calcium carbonate-reinforced high density polyethylene," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 527, no. 24, pp. 6699–6713, 2010.
- [116] E. Suljovrujic, M. Micic, and D. Milicevic, "Uniaxially Oriented High Density Polyethylene," J. Eng. Fiber. Fabr., vol. 8, no. 3, pp. 131–143, 2013.
- [117] S. Kumar, A. K. Panda, and R. K. Singh, "A review on tertiary recycling of highdensity polyethylene to fuel," *Resour. Conserv. Recy.*, vol. 55, no. 11, pp. 893– 910, 2011.
- [118] M. Faizal, A. Bouazza, and R. M. Singh, "Heat transfer enhancement of geothermal energy piles," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 57, no. Supplement C, pp. 16–33, 2016.
- [119] Z. Xu, S. Xu, X. Tang, and X. Wang, "Energy transport in crystalline DNA composites," *AIP Adv.*, vol. 4, no. 1, p. 17131, Jan. 2014.
- [120] P. B. Allen, "Improved Callaway model for lattice thermal conductivity," *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 14, p. 144302, Oct. 2013.
- [121] C. G. Vonk, "Computerization of Ruland's X-ray method for determination of the crystallinity in polymers," J. Appl. Cryst., vol. 6, pp. 148–152, 1973.
- [122] V. Jokanovic, Instrumental Methods: Key to Understanding Nanotechnologies and Nanomedicine. Belgrade: Engineering Academy of Serbia: VINCA Institute for Nuclear Sciences, Belgrade, 2014.

- [123] "Acrylonitrile butadiene styrene (ABS) Wiki." [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Acrylonitrile\_butadiene\_styrene#cite\_note-19. [Accessed: 06-Dec-2017].
- [124] "The Free Beginner's Guide 3D printing." [Online]. Available: https://3dprintingindustry.com/3d-printing-basics-free-beginners-guide.
   [Accessed: 06-Dec-2017].
- [125] "Nylon." [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Nylon. [Accessed: 26-Dec-2017].
- [126] "Ugljenik Wiki." [Online]. Available: https://en.wikipedia.org/wiki/Carbon.[Accessed: 06-Dec-2017].
- [127] J. Weber, P. C. Beard, and S. E. Bohndiek, "Contrast agents for molecular photoacoustic imaging," *Nat. Methods*, vol. 13, p. 639, Jul. 2016.
- [128] J. A. Balderas-Lopez, "Photoacoustic signal normalization method and its application to the measurement of the thermal diffusivity for optically opaque materials," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 77, no. 6, p. 64902, Jun. 2006.
- [129] "High Density Polyethylene (HDPE) Properties." [Online]. Available: http://www.maropolymeronline.com/Properties/HDPE Prop.asp. [Accessed: 06-Feb-2017].
- [130] "Temperature Expansion Coefficients of Piping Materials (HDPE, ABS)."
   [Online]. Available: https://www.engineeringtoolbox.com/pipes-temperatureexpansion-coefficients-d\_48.html. [Accessed: 06-Dec-2017].

## **ПРИЛОЗИ**

#### Прилог 1

```
%%% SIMULACIJA SAMOUSAGLASENE INV.PROC. NA HDPE %%%
%clc;
%clear all; % nece raditi iteracije ako je ovo uncommentovano!
close all;
load('HDPE sve.mat');
%% ODREDJIVANJE INTERVALA
for i=1:size F
   if F(i) > \overline{20}
       min = i; %pocetak mern.opsega mikrofona
       break
   end
end
for i=1:size F
   if F(i)>=50
       start = i; % pocetak kontrolnog intervala
       break
   end
end
for i=1:size F
   if F(i)>3000
       stop = i; % kraj kontrolnog intervala
       break
   end
end
for i=1:size F
   if F(i)>=700
       sedamsto = i; % kada je f~700Hz, tu ih poklapamo
       break
   end
end
for i=1:size F
   if F(i)>4000
       kraj = i; %kraj merenja
       break
   end
end
%% NASUMICNI ODABIR VREDNOSTI PARAMETARA
ks = ks min + (rand(1)*(ks max-ks min));
Dts = Dts min + (rand(1)*(Dts max-Dts min));
aT = aT min + (rand(1)*(aT max-aT min));
alfasaka = aT/ks;
% ks = mean([ks min ks max]);
```

```
% Dts = mean([Dts min Dts max]);
% aT = mean([aT min aT max]);
fo=F;
%% SIMULIRANJE EKSPERIMENTA
ls = [200 1000] * 1e-6;%
PA1 = teor_odz(fo, aT, ks, Dts, ls(1), tau_s);
PA2 = teor odz(fo, aT, ks, Dts, ls(2), tau s);
%ukupni simulirani eksperimentalni signal
sig1 = PA1.RG + PA1.TE;
sig2 = PA2.RG + PA2.TE;
exp1 = awgn(sig1,90, 'measured'); % (sa dodatim sumom),
exp amp1 = abs(exp1);
exp faza1 = unwrap(angle(exp1))/pi*180;
exp2 = awgn(sig2,90, 'measured'); % (sa dodatim sumom),
exp amp2 = abs(exp2);
exp faza2 = unwrap(angle(exp2))/pi*180;
raz faz exp = exp faza1-exp faza2;
odn amp exp = exp amp1./exp amp2;
    figure,
semilogx(fo,unwrap(angle(sig1))/pi*180,'r',fo,exp faza1,'g'),grid
on,hold on;
    semilogx(fo,unwrap(angle(sig2))/pi*180,'r',fo,exp faza2,'g');
    title('HDPE'), xlabel('f[Hz]'), ylabel('faza [deg]')
    figure, loglog(fo,abs(sig1),'r',fo,exp amp1,'g'),grid on,hold on;
    loglog(fo,abs(sig2),'r',fo,exp amp2,'g');
    xlabel('f[Hz]'), ylabel('amplituda [A.U.]');
8
8
      figure, semilogx(fo,unwrap(angle(sig1)-
angle(sig2))/pi*180,'r',fo,raz faz exp,'g');
      figure,
2
semiloqx(fo,abs(siq1)./abs(siq2),'r',fo,odn amp exp,'q');
%% SIMULACIJA I INVERZNA PROCEDURA
%pocetne vrednosti parametara
aTO = aT min; % aT max
ks0 = ks max;
               % ks min
Dts0 = Dts min; % Dts max
alfasaka0 = aT0/ks0;
%% po fazi
```

```
koef_stari = 1e4;
koef_novi = 1e3;
```

```
brojac1 = 0;
while koef_novi < koef_stari
koef_stari = koef_novi;
Dts0 = Dts0*1.01;
PA1_sim = teor_odz(fo, aT0, ks0, Dts0, ls(1), tau_s);
PA2_sim = teor_odz(fo, aT0, ks0, Dts0, ls(2), tau_s);
sig1_sim = PA1_sim.RG + PA1_sim.TE;
sig2_sim = PA2_sim.RG + PA2_sim.TE;
raz_faz_sim = unwrap(angle(sig1_sim)-angle(sig2_sim))/pi*180;
koef_novi = slicnost(raz_faz_exp,raz_faz_sim, start,stop);
brojac1 = brojac1+1;
```

#### end

```
%korekcija
    Dts0 = Dts0/1.01;
    PA1 sim = teor odz(fo, aT0, ks0, Dts0, ls(1), tau s);
    PA2 sim = teor odz(fo, aT0, ks0, Dts0, ls(2), tau s);
    sig1_sim = PA1_sim.RG + PA1 sim.TE;
    sig2 sim = PA2 sim.RG + PA2 sim.TE;
    raz faz sim = unwrap(angle(sig1 sim)-angle(sig2 sim))/pi*180;
figure,semilogx(fo,raz_faz_exp,'r',fo,raz_faz_sim,'g',fo,unwrap(angle(
sig1)-angle(sig2))/pi*180, '*r'), grid on;
    xlabel('f[Hz]'), ylabel('razl.faza [deg]');
Dts err = (Dts0-Dts)/Dts*100;
%% po amplitudi
koef_stari = 1e4;
koef novi = 1e3;
brojac2 = 0;
while koef_novi < koef_stari</pre>
    koef stari = koef novi;
    alfasaka0 = alfasaka0*1.01;
    PA1 sim = teor odz(fo, aT0, aT0/alfasaka0, Dts0, ls(1), tau s);
%aTO, aTO/alfasakaO,
    PA2 sim = teor odz(fo, aT0, aT0/alfasaka0, Dts0, ls(2), tau s);
%ks0*alfasaka0, ks0,
    sig1 sim = PA1 sim.RG + PA1 sim.TE;
    sig2 sim = PA2 sim.RG + PA2 sim.TE;
```

```
odn_amp_sim = abs(sig1_sim)./abs(sig2_sim);
koef_novi = slicnost(odn_amp_exp,odn_amp_sim, start,stop);
brojac2 = brojac2+1;
```

#### end

```
%korekcija
   alfasaka0 = alfasaka0/1.01;
    PA1 sim = teor odz(fo, ks0*alfasaka0, aT0/alfasaka0, Dts0, ls(1),
tau s); %aTO, aTO/alfasaka,
    .
PA2 sim = teor odz(fo, ks0*alfasaka0, aT0/alfasaka0, Dts0, ls(2),
tau s); %ks0*alfasaka, ks0,
    sig1 sim = PA1 sim.RG + PA1 sim.TE;
    sig2 sim = PA2 sim.RG + PA2 sim.TE;
    odn amp sim = abs(sig1 sim)./abs(sig2 sim);
    figure,
plot(fo,odn_amp_exp,'r',fo,odn_amp_sim,'g',fo,abs(sig1)./abs(sig2),'*r
'),grid on;
    xlabel('f[Hz]'), ylabel('odnos [A.U.]');
alfasaka err = (alfasaka0-alfasaka)/alfasaka*100;
%aT0 = ks0*alfasaka;
%ks0 = aT0/alfasaka0;
%ks err = (ks0-ks)/ks*100;
formatSpec = 'procenjena vrednost %s: %e sa greskom %f %s \n';
fprintf(formatSpec, 'Dts', Dts0, Dts err, '%');
%fprintf(formatSpec,'ks',ks0,ks err,'%');
fprintf(formatSpec,'alfasaka',alfasaka0,alfasaka err,'%');
```

#### Прилог 2

```
clear all;
IZLAZ = zeros(6,1000);
for brojac = 1:1000
     SUProc;
     IZLAZ(:,brojac) = [Dts; Dts0; Dts_err; alfasaka; alfasaka0;
alfasaka_err];
end
%save('SUProc.txt', 'IZLAZ', '-ASCII')
[Dts_err,IX] = sort(IZLAZ(3,:));
alfasaka_err = IZLAZ(6,IX);
Dts0_err_eval1 = mean(Dts_err);
Dts0_err_eval2 = mean(abs(Dts_err));
alfasaka_err_eval = mean(alfasaka_err);
figure, plot(Dts_err,alfasaka_err);
fprintf('SREDJNA GRESKA Dts: %f \n',Dts0_err_eval1);
```

fprintf('SREDJNA GRESKA Dts: %f \n',alfasaka\_err\_eval);

#### Прилог 3

```
% funkcija koja analizira odsecke PE
% (razlika izmedju teorijske (NAJOPŠTIJE) i
                                              8
% snimljene FAZE u regionu <100Hz) i pronalazi %</pre>
% odg.filtar cijom primenom odsecak rezultira
                                              8
tic
clear all;
close all;
%clc;
%% Konstante, parametri, jedinice []...%
G = 1.4; %GAMA, eksponent adijabaticnosti%
PO = 1e5; %atm. pritisak, [Pa]%
aT = 225e-6; %koef. linearnog sirenja, [1/K]; pronaci%
S0 = 150; %pobudni fluks, [w/m^2]%
TO = 300; %sobna temperatura [K]%
R = 4e-3; %poluprecnik naleganja [m]%
Rc = 3.65e-3; %poluprecnik dijafragme (ef.polupr.FA celije) [m]%
lg = 2e-3; %duzina celije [m]%
kg = 0.025; %topl. provodnost vazduha, [W/mK]%
Dtg = 1938e-8; %topl. difuzivnost vazduha, [m^2/s]%
tau g = 0; %toplotno vreme relaksacije vazduha [1e-8s]%
tau s = 0; %[s], metal(1e-12,1e-14),poluprovodnik(1e-6,1e-
8),polimer(1e-3,1e-6)%
%PARAMETRI KOJI SE MENJAJU - UZORAK
ime fajla = input('Koji materijal (dodati "k" za kristalinicni)? ',
's');
ime fajla = strcat(ime fajla, ' sve');
load(ime fajla);
ks = mean([ks min ks max]);
Dts = mean([Dts min Dts max]);
%% ODREDJIVANJE INTERVALA
for i=1:size F
    if F(i) > \overline{50}
       min = i; %pocetak mern.opsega mikrofona
       break
    end
end
for i=1:size F
    if F(i)>=100
       start = i; % pocetak kontrolnog intervala
       break
```

```
end
end
for i=1:size F
    if F(i)>1000
        stop = i; % kraj kontrolnog intervala
        break
    end
end
for i=1:size F
    if F(i)>=700
        sedamsto = i; % kada je f~700Hz, tu ih poklapamo
        break
    end
end
for i=1:size F
    if F(i)>4000
        kraj = i; %kraj merenja
        break
    end
end
%% TEORIJA
w = 2*pi*F;
j = sqrt(-1);
Dts1 = Dts; % za prvu iteraciju se uzima sredina opsega
%Konstante
Zcs = sqrt(Dts1)/ks * sqrt((1+j*w*tau s)./(j*w));
Zcg = sqrt(Dtg)/kg * sqrt((1+j*w*tau g)./(j*w));
sig s = sqrt(j*w.*(1+j*w*tau s)/Dts1);
sig g = sqrt(j*w.*(1+j*w*tau g)/Dtg);
K th = P0*S0*G/(T0*lg);
K ac = P0*S0*G/lg * 3*aT/ks * R^4/Rc^2;
%Prealokacija
p th = zeros(size F,length(ls));
p ac = zeros(size F,length(ls));
amp = zeros(size F,length(ls));
faza = zeros(size F,length(ls));
odsecak L = zeros(start-min+1, length(ls));
odsecak H = zeros(kraj-stop+1, length(ls));
for i=1:length(ls)
    z = sig s*ls(i);
    p th(:,i) = K th * Zcs./sig g * 1./sinh(z);
    pac(:,i) = Kac * ((cosh(z)-z/2.*sinh(z)-1)./(z.^3.*sinh(z)));
    amp(:,i) = abs(p th(:,i) + p ac(:,i));
    faza(:,i) = unwrap(angle(p th(:,i)+p ac(:,i)))/pi*180;
    faza(:,i) = faza(:,i) - (faza(min,i)-EXP(min,3,i)); %skaliranje
    odsecak_L(:,i) = EXP(min:start,3,i) - faza(min:start,i);
    odsecak L(:,i) = odsecak L(:,i) - (odsecak L(start-min+1,i) - 0);
%skaliranje prvog odbirka na nulu
```

```
figure(4), hold on, grid on, semilogx(F(min:start), odsecak L(:,i));
    faza(:,i) = faza(:,i) - (faza(stop,i)-EXP(stop,3,i)); %skaliranje
    odsecak H(:,i) = EXP(stop:kraj,3,i) - faza(stop:kraj,i);
    odsecak H(:,i) = odsecak H(:,i) - (odsecak H(1,i) - 0);
%skaliranje prvog odbirka na nulu
    figure(5), hold on, grid on, semilogx(F(stop:kraj), odsecak H(:,i));
end
ODSECAK L = mean(odsecak L, 2);
ODSECAK H = mean(odsecak H, 2);
figure(4), semilogx(F(min:start),ODSECAK L, 'g'), hold off;
figure(5), semilogx(F(stop:kraj),ODSECAK H, 'g'), hold off;
%% FILTRI LF
fc10 = 1;
fc20 = 20;
filts LF0 =[fc10 ODSECAK L(1)]; % fc20
[filts LF] = nlinfit(F(min:start),ODSECAK L,@filt fit1,filts LF0);
fc1 est = filts LF(1);
fc2 est = filts LF(2);
% LF est = (-1)*F./(fc1 est+j*F).*F./(fc2 est+j*F);
% LF est f = unwrap(angle(LF est))/pi*180;
LF est = -(atan(F./fc1 est))/pi*180;
LF est = LF est + (ODSECAK L(1) - LF est(min));
figure, semilogx(F(min:start),ODSECAK L, 'r',
F(min:start),LF est(min:start),'g'), xlim([50 100]);
%% FILTRI HF
fc30 = 1000;
Q30 = 1;
fc40 = 10000;
8040 = 1;
filts HF30 =[fc30 Q30 ODSECAK H(1)];
[filts HF3] = nlinfit(F(stop:kraj),ODSECAK H,@filt fit3,filts HF30);
fc3 est = filts HF3(1);
Q3 = filts HF3(2);
% fc4 est = filts HF3(3);
% Q4 = filts_HF3(4);
% HF3 est = fc3 est^2./(fc3 est^2 - F.^2 + j*F*fc3 est/Q3);
% HF3 est f = unwrap(angle(HF3 est))/pi*180;
HF3 est = unwrap(-atan(Q3*(F./fc3 est)./(1+(F./fc3 est))))/pi*180; % -
atan(Q4*(F./fc4 est)./(1+(F./fc4 est)))
HF3 est = HF3 est + (ODSECAK H(1) - HF3 est(stop));
```

```
figure, semilogx(F(stop:kraj),ODSECAK H,'r',
F(stop:kraj),HF3 est(stop:kraj),'g'), xlim([1000 5000]);
fprintf('Procenjena vrednost svojstv.frekvencije LF filtra [Hz] je: %d
n', fc1 est);
fprintf(<sup>¬</sup>Procenjena vrednost svojstv.frekvencije HF filtra [Hz] je: %d
n', fc3 est);
fprintf( Procenjena vrednost faktora doborte HF filtra je: %d \n',
Q3);
%% FILTRIRANJE FAZE
faza filt = zeros(size F,length(ls));
for i=1:length(ls)
    faza filt(:,i) = faza(:,i) + LF est + HF3 est; %filtriranje
    faza filt(:,i) = faza filt(:,i) - (faza filt(sedamsto,i)-
EXP(sedamsto,3,i)); %skaliranje
    figure,
semilogx(F,faza(:,i),'r',F,faza filt(:,i),'g',F,EXP(:,3,i),'b'), grid
on, xlim([50 4000]);
end
%% KONACNE KOMPLETNE VERZIJE FILTARA
FILT L = (-1) * F./(fc1 est+j*F);
FILT H = 1./(fc3 est + F + j*Q3*F);
%% FILTRIRANJE AMPLITUDE
amp filt = zeros(size F,length(ls));
for i=1:length(ls)
    amp filt(:,i) = amp(:,i) .* abs(FILT L) .* abs(FILT H);
%filtriranje
    %amp_filt(:,i) = amp_filt(:,i) * (EXP(1,3,i)/amp_filt(1,i));
%skaliranje
   figure,
loglog(F,amp(:,i),'r',F,amp filt(:,i),'g',F,EXP(:,2,i),'b'), grid
on;%, xlim([50 4000])
```

```
end
```

time elapsed = toc;

#### Прилог 4

```
% funkcija koja odredjuje slicnost izmedju zadatih nizova
                                                   8
% pomocu proracuna sume razlike kvadrata (odbirak po odbirak)
                                                   6
% podeljene duzinom niza
                                                   8
function [koef_slic] = slicnost(niz_1,niz_2, start, stop)
if isequal(length(niz 1),length(niz 2))
   niz1 = niz 1(start:stop);
   niz2 = niz_2(start:stop);
   niz2 = niz2 - (niz2(1)-niz1(1)); %skaliranje na prvi odbirak
   koef_slic = sum((niz2 - niz1).^2) / length(niz1);
else
  disp('nizovi nisu iste duzine.');
end
```

## БИОГРАФИЈА

Миољуб Нешић, дипломирани инжењер-мастер електротехнике, рођен је 03. јула 1984. године у Београду, Србија. Основну и средњу школу завршио је у Параћину и Београду. Дипломирао је 10. октобра 2008. године на Електротехничком факултету у Београду, на одсеку физичке електронике, смер-биомедицински и еколошки инжењеринг. Мастер студије је завршио 02. Јула 2010 и одбранио мастер рад код професора др Милесе Срећковић, са темом – Снимање, анализа, рачунска и графичка обрада спектралних карактеристика ласерских снопова и медијума од интереса у терапијама биомодулације. Докторске студије уписао је у новембру 2010. године на Електротехничком факултету у Београду. Запослен је у Институту за нуклеарне науке Винча од 01. фебруара 2011. Ангажован је у оквиру задатка Групе за фотоакустику и фототермалну науку на пројекту Министарства за просвету, науку и технолошки развој Републике Србије ИИИ45005 ("Функционални, функционализовани и унапређени наноматеријали"). До сада је у свом истраживачком раду објавио седам (7) радова у међународним часописима, један (1) рад у водећем домаћем часопису, имао осам (8) излагања на међународним конференцијама и четири (4) на домаћим конференцијама која су штампана у изводу.

Прилог 4 Стандарди за писање докторске дисертације - Упутство Универзитета

Прилог 1.

## Изјава о ауторству

Потписани-а	MHOB45	Неший	
број уписа	2010/5018	~	

#### Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

PA3BOJ TEXHHKA 3A PCHUABAKE HABEP3HA OTAKYCTHYKOF DPOL

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

У Београду, <u>28.12.2017</u>

Потпис докторанда

Прилог 2.

# Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

/	
Име и презиме аутора	MOBYE TELLUL
Број уписа 2010/501	8
Студијски програм 🤆	JERTPOTEKHINKA H PAYSHAPCTBO
Наслов рада АЗВОТ ТСХНИКА	34 PELLABATE UHBEPSHOT ODDTOXKYCTHYKOP NPOGAEHA
Ментор Провс. Др. Инл.	AT TABLA
Потписани	MNORSS HELLING

изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада. Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

У Београду, 28. 2.2017

Потпис докторанда

10.00

Прилог 3.

# Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку "Светозар Марковић" да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

"PABBOJ TEXHINKA BA PELLABAKE NHBEPBHOT dorodkyctnykor nPOGAEHA"

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство

2. Ауторство - некомерцијално

ЭАуторство – некомерцијално – без прераде

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

У Београду, <u>28</u>. 12.2017.

Потпис докторанда