



Analyse von nicht-quantifizierten GDOES-Tiefenprofilen zur Bestimmung von physikalischen Eigenschaften

Dr. Lars Hildebrand

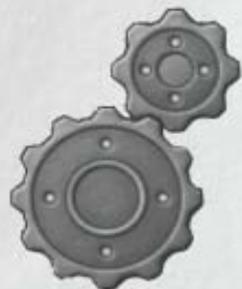
Universität Dortmund, Informatik I
Otto-Hahn-Str. 16, 44227 Dortmund
+49 (0) 231 / 755 - 6375



lars.hildebrand@uni-dortmund.de

Agenda

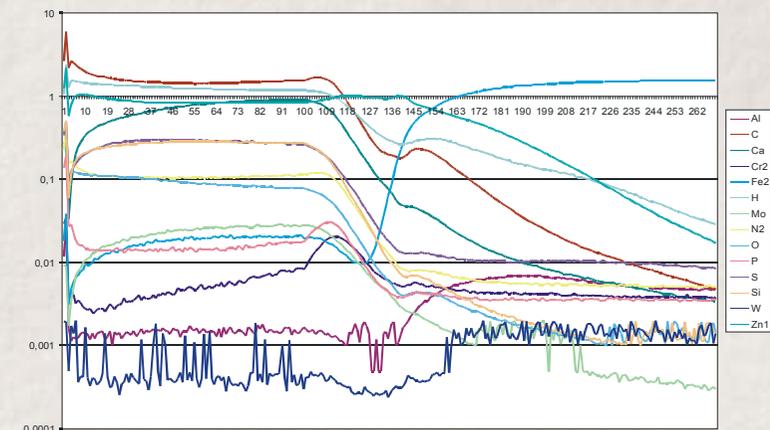
- ▶ Einleitung, Motivation & Einbettung in EU Forschungsprojekte
- ▶ Methodik zur Bestimmung physikalischer Eigenschaften:
Beispiel Bonazink
- ▶ Zusammenfassung & Ausblick





GDOES

- ▶ zerstörendes Verfahren der Tiefenprofilanalytik
- ▶ Bestimmung von Elementverteilungen bezüglich der Tiefe
- ▶ nicht-quantifiziert
 - Messungen der Emissionsintensität
 - eV gemessen über die Zeit
- ▶ quantifiziert
 - Umrechnung der Emissionsintensität in Gewichtsanteile
 - Umrechnung der Zeit in Tiefe
 - benötigt Kalibrierung





Moderne Beschichtungssysteme

- ▶ z. B.: Korrosionsschutz im Automobilbau
- ▶ bestehen aus organischen und anorganischen Verbindungen
- ▶ sind zum Teil natürlichen Ursprungs
- ▶ erfordern auf Grund ihrer komplexen Zusammensetzung neue Analysemethoden

Physikalische Eigenschaften

- ▶ z. B.: Schichtdicke oder Art der Vorbehandlung
- ▶ lassen sich nicht direkt aus dem Tiefenprofil ableiten
- ▶ können durch "intelligente" Methoden bestimmt werden

Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

Zusammen-
fassung
Abschluß





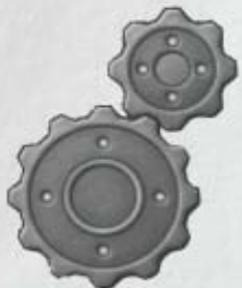
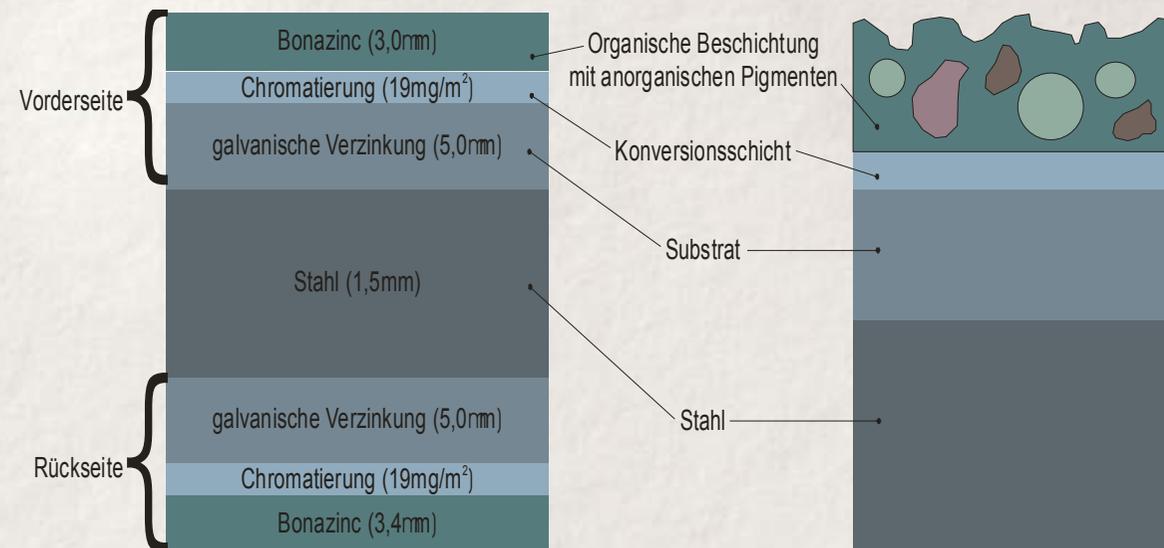
EU Forschungsprojekte RFCS

- ▶ 7210-PR-232: GD-OES expert system for at-the-line control of coated steel products
- ▶ RFCS-CR-03004: Rapid, reproducible and accurate analysis techniques for coating systems (RAPCOAT)

Beispielproben

- ▶ Stahl / Zink / Bonazink Beschichtungssystem
- ▶ jeweils 5 Proben, der Schichtdicken

- 2.1 μm
- 3.0 μm
- 3.3 μm
- 3.9 μm
- 4.4 μm
- 5.3 μm





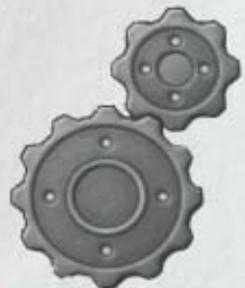
Methodik zur Bestimmung physikalischer Eigenschaften

- ▶ Lassen die Tiefenprofile eine Bestimmung zu?
- ▶ Definition von Kenngrößen
 - Auswahl der Kenngrößen
 - Durchführung notwendiger Vorverarbeitungsschritte
- ▶ Messen von Referenzproben
- ▶ Erstellen eines Modells
 - Regressionsverfahren
 - überwachte künstliche neuronale Netze
 - unüberwachte künstliche neuronale Netze
- ▶ Einsatz der Methodik

Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

Zusammen-
fassung
Abschluß



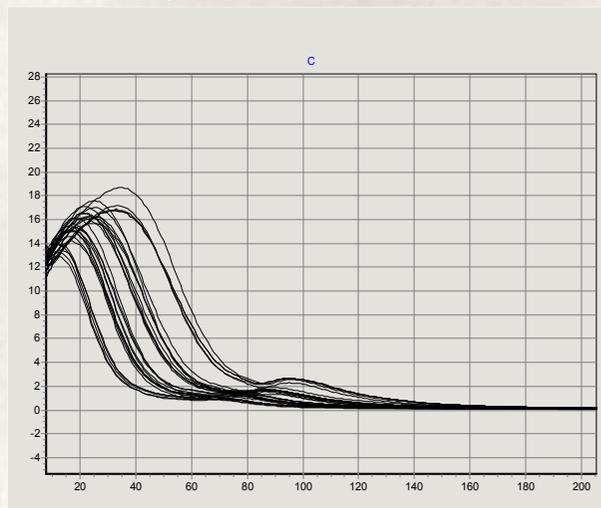


Lassen die Tiefenprofile eine Bestimmung zu?

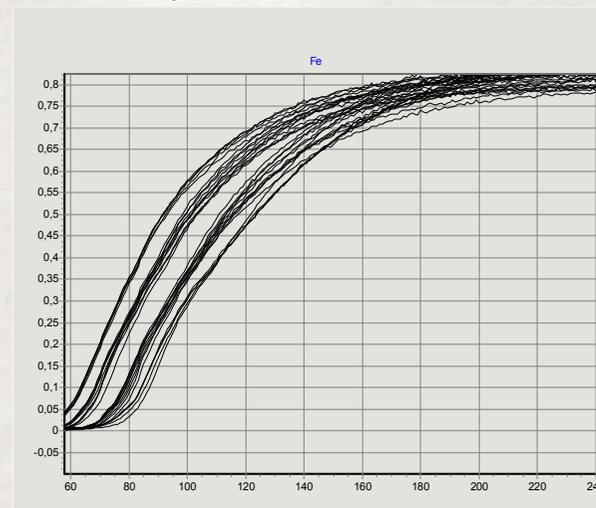
Enthalten die Tiefenprofile notwendige Unterscheidungsmerkmale?

- ▶ Regressionsmodelle:
 - Existieren Merkmale, die in eine Reihenfolge gebracht werden können?
- ▶ Klassifikationsmodelle:
 - Existieren Unterschiede zwischen den unterschiedlichen Proben?

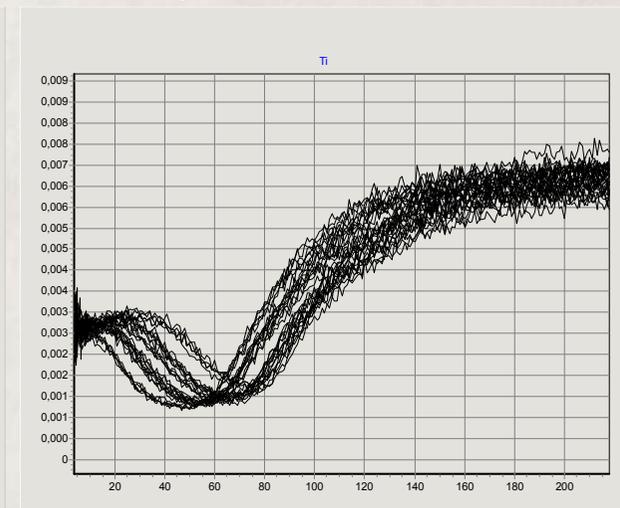
Tiefenprofil C



Tiefenprofil Fe



Tiefenprofil Ti





Definition von Kenngrößen

- ▶ Minimum & Maximum
- ▶ Position der Wendestellen
- ▶ Integral unter der Kurve, begrenzt durch Wendestellen
- ▶ Position der Extrema
- ▶ Abstand zwischen Wendestellen

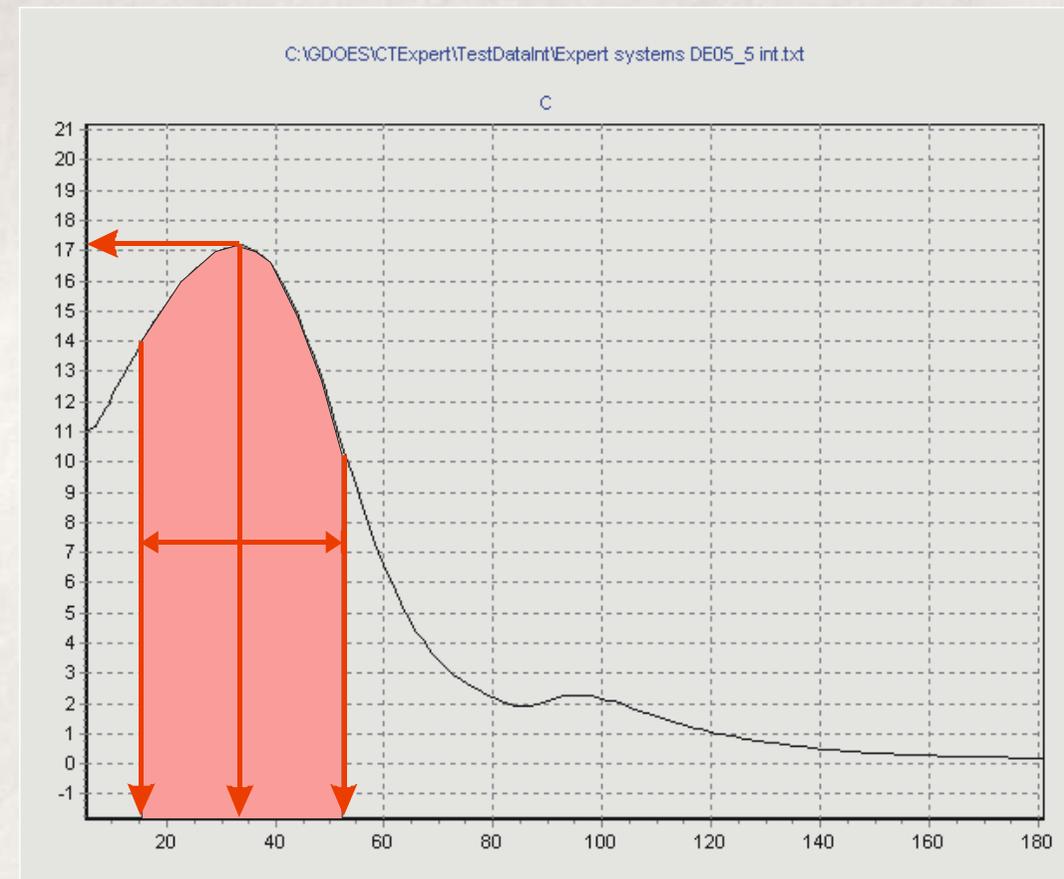
Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

Zusammenfassung
Abschluß

Nicht jedes Tiefenprofil eignet sich für diese Kenngrößen

- ▶ Herleitung neuer Kenngrößen
- ▶ Einsatz unüberwachter Methoden

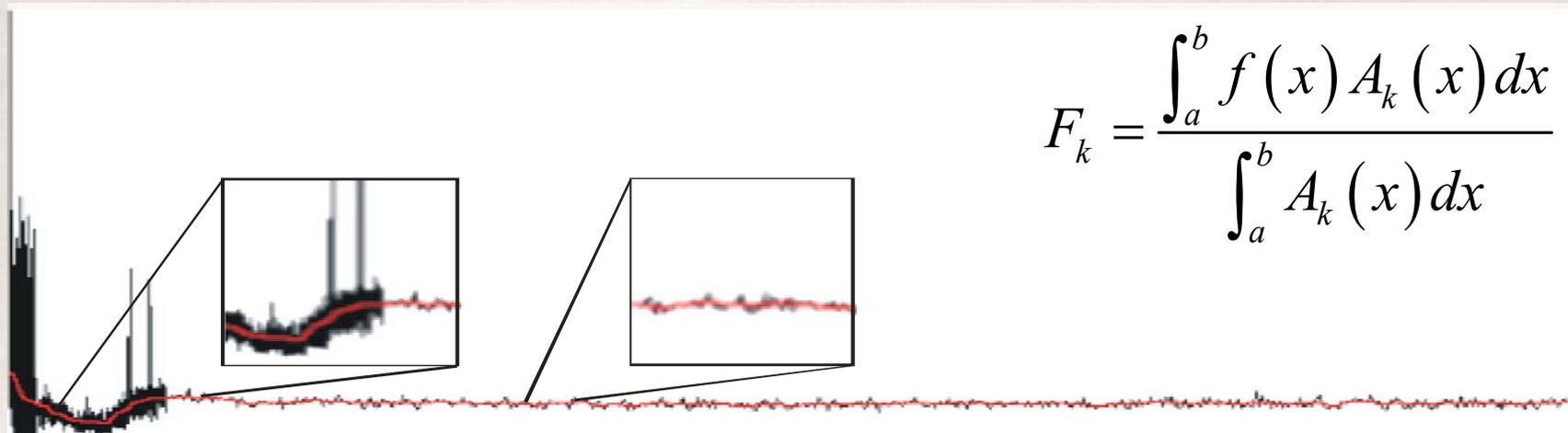
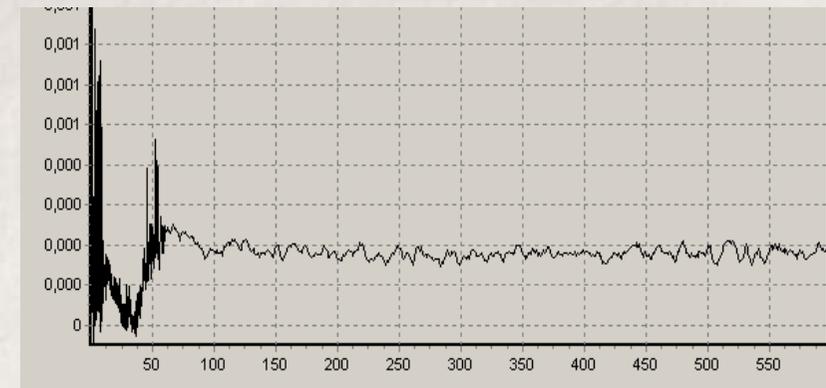
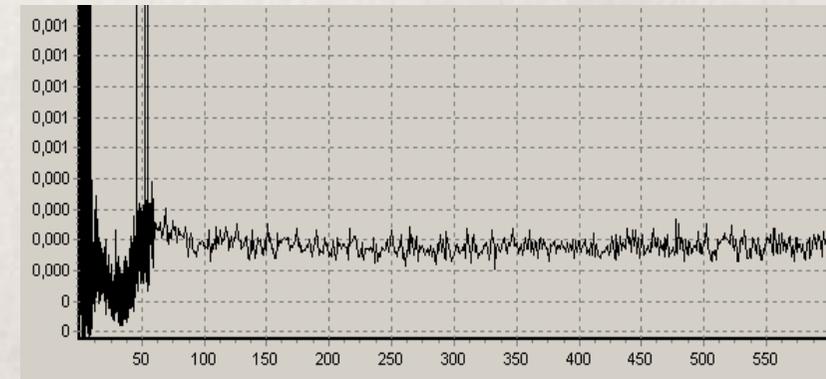




Vorverarbeitung

Beispielhaft: Rauschen des Signals

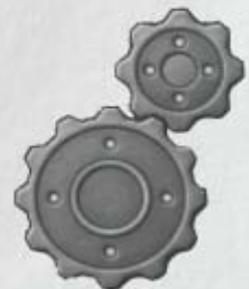
- ▶ stört die Berechnung von Wendestellen
- ▶ Standardlösung
 - gleitende Mittelwerte berechnen
 - Fourier-Transformation
- ▶ bessere Lösung
 - Basisfunktionstransformation



Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

Zusammenfassung
Abschluß





Erstellung von Referenzproben

- ▶ Variationen der zu bestimmenden physikalischen Größe
 - mindestens 3 Variationen für lineare Modelle
 - mindestens 4 Variationen für quadratische Modelle
 - möglichst homogen verteilt über den erlaubten Bereich

- ▶ Mehrfache Referenzproben pro Variation
 - lassen statistische Störungen erkennen
 - erlauben die Erkennung von Messfehlern
 - erlauben die Erkennung von Ausreißern

- ▶ Alternative (nicht tiefenprofilbasierte) Messmethoden
 - Schliffe
 - nasschemische Analysen
 - ...

Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

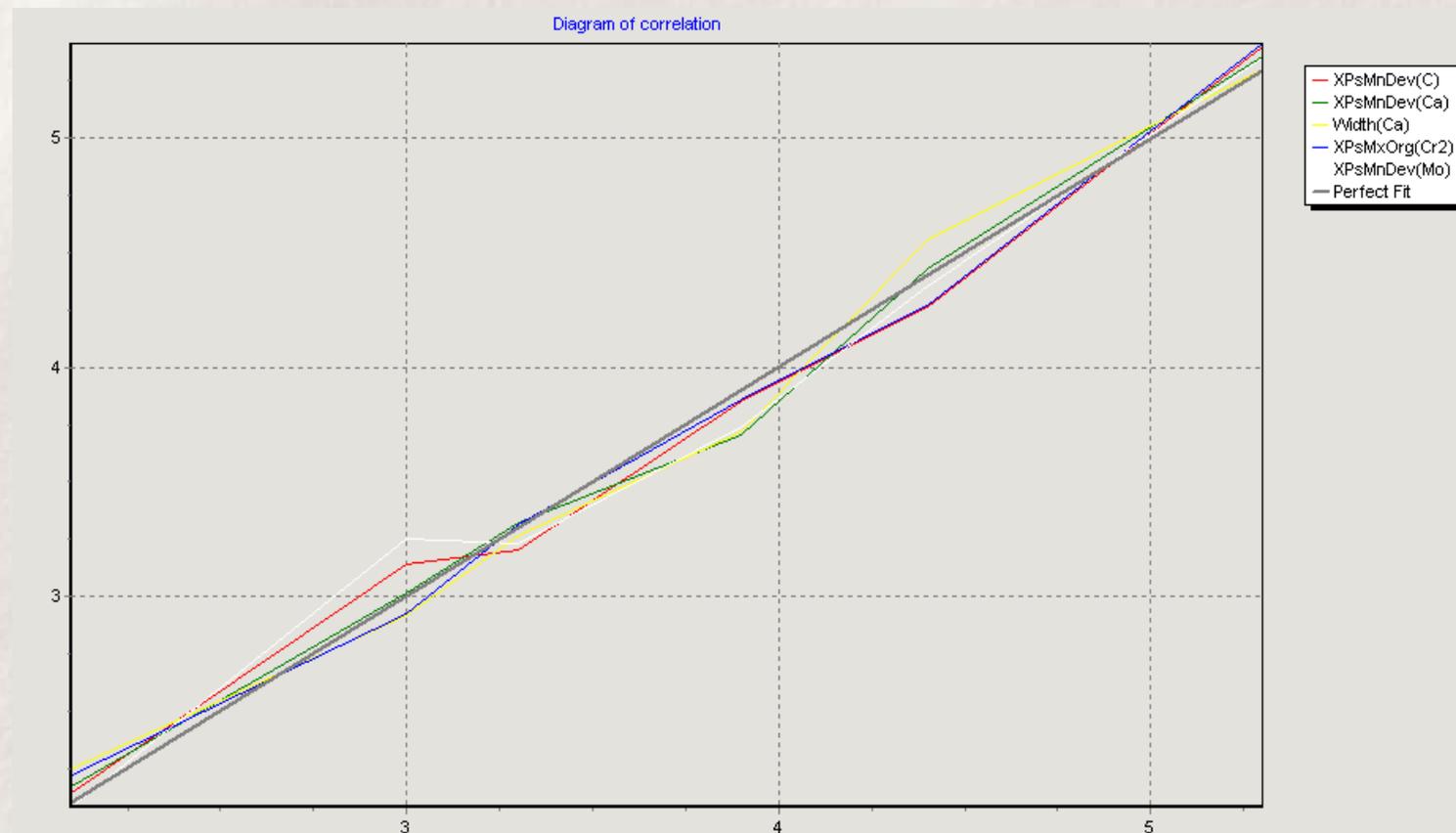
Zusammen-
fassung
Abschluß





Erstellung eines Modells

- ▶ lineares Regressionsmodell
 - Annahme: lineare Abhängigkeit von Merkmalen und physikalischer Eigenschaft
 - Berechnung einer Geraden bei Minimierung der Fehlerquadrate
 - Regressionsansatz erlaubt zudem eine Interpolation

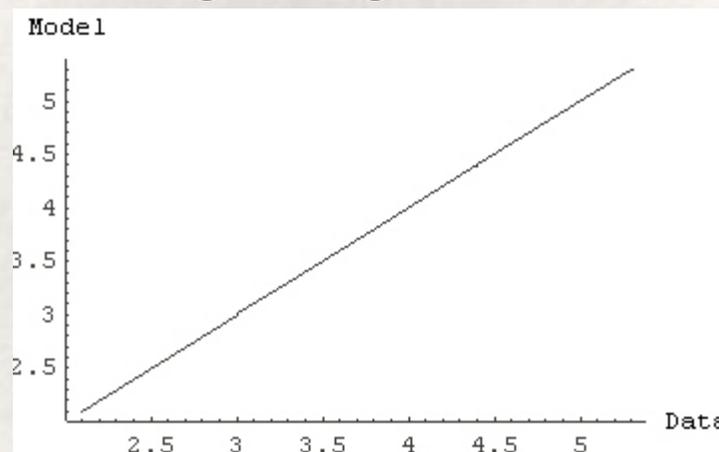




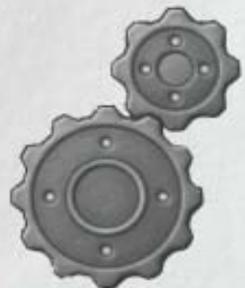
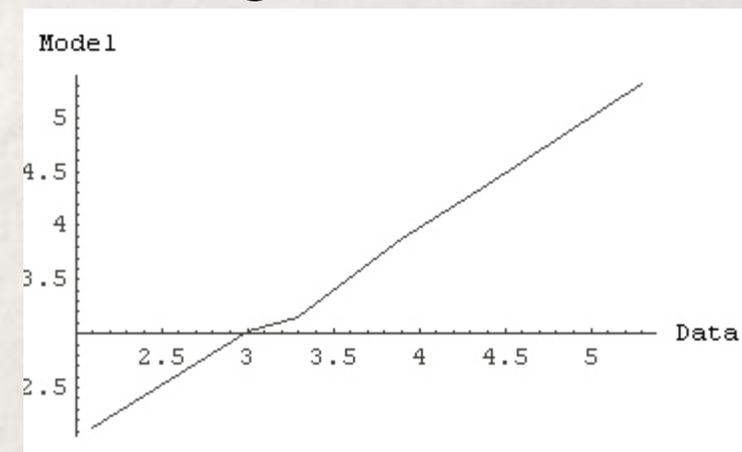
Erstellung eines Modells

- ▶ überwachtetes künstliches neuronales Netz
 - keine Annahme über die Art der Abhängigkeit von Merkmalen und physikalischer Eigenschaft
 - auch hochgradig nicht-lineare Zusammenhänge können gelernt werden
 - Lernmethode: Error-Backpropagation
 - Topologie: 2 Schichten mit je zwei Neuronen
 - auch KNNs erlauben eine Interpolation

Trainingsmenge



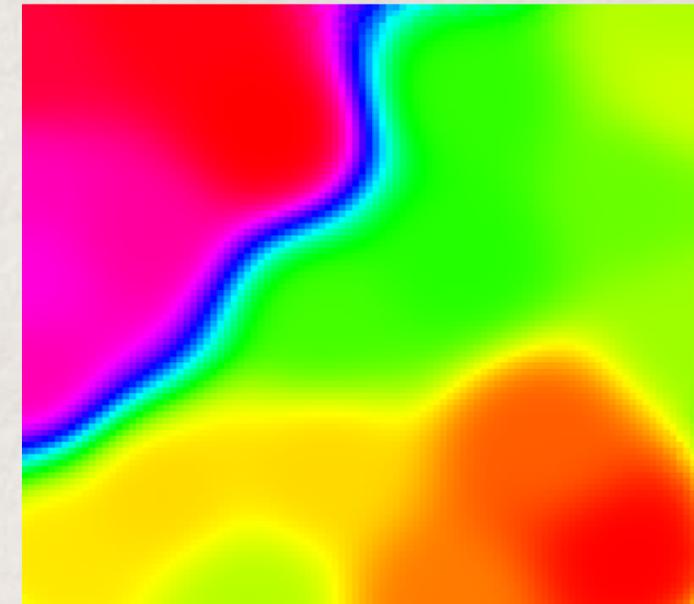
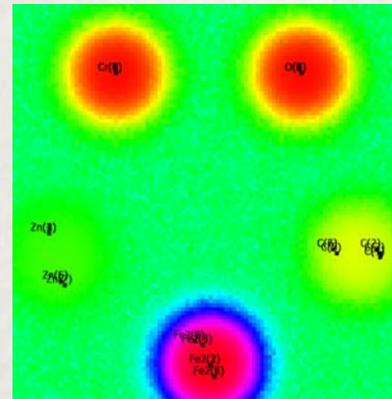
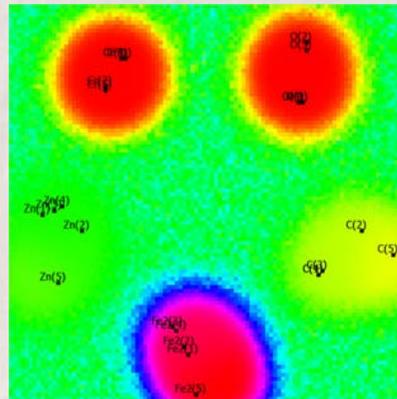
Testmenge





Erstellung eines Modells

- ▶ unüberwachtes künstliches neuronales Netz
 - keine physikalischen Eigenschaften bestimmt
 - Proben sind unterschiedlichen Ursprungs
 - Unterschiede in den Tiefenprofilen sollen erkannt werden
- ▶ Selbstorganisierende Karten (auch: Kohonen-Karten)
 - können Unterschiede in den Proben (hier: Tiefenprofilen) erkennen
 - Positionieren unterschiedliche Proben an unterschiedliche Stellen der Karte





Zusammenfassung

- ▶ Zuordnung von Tiefenprofilen zu physikalischen Eigenschaften
- ▶ Regression, bzw. Interpolation möglich
- ▶ Klassifikation auch bei nicht bestimmbar Merkmalen möglich
- ➔ **Quantifizierung der Tiefenprofile ist in keinem Rechenschritt nötig**

Ausblick

- ▶ Problemabhängige Integration weiterer Merkmale
- ▶ Reduktion der Komplexität der Tiefenprofile
- ▶ Betrachtung weiterer Anwendungsfälle

Einleitung
Motivation
Einbettung

Methodik

Zusammen-
fassung
Abschluß

