

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

FAKULTÄT INFORMATIK

INSTITUT FÜR SOFTWARE- UND MULTIMEDIATECHNIK

PROFESSUR FÜR COMPUTERGRAPHIK UND VISUALISIERUNG

PROF. DR. STEFAN GUMHOLD

Großer Beleg

Parameter Reconstruction for Small Angle X-Ray Scattering with Deep Learning

Patrick Stiller

(Mat.-Nr.: 3951290)

Betreuer: Dr. Dmitrij Schlesinger, Dr. Heide Meissner, Dr. Michael Bussmann

Dresden, 20. September 2018

Aufgabenstellung

Text der Aufgabenstellung...

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die von mir am heutigen Tag dem Prüfungsausschuss der Fakultät Informatik eingereichte Arbeit zum Thema:

Parameter Reconstruction for Small Angle X-Ray Scattering with Deep Learning

vollkommen selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Dresden, den 20. September 2018

Patrick Stiller

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	4
2.1	Small Angle X-Ray Scattering with free electron laser pulses	4
2.1.1	Motivation	4
2.1.2	Experimentbeschreibung	4
2.1.2.1	Target	5
2.1.2.2	Small Angle X-Ray Scattering	6
2.1.2.3	Hochintensitätslaser	6
2.1.3	Problemidentifikation	6
2.2	Fouriertransformation	6
2.3	Neuronale Netze	6
2.3.1	Aufbau	6
2.3.2	Training	6
3	Simulation	7
3.1	Motivation	7
3.2	Simulationsbeschreibung	7
3.2.1	Gitterbeschreibung	7
3.2.2	Simulation des Detektorinputs	7
3.2.3	Simulation der Detektoreigenschaften	7
4	Datenbasis	8
4.1	Generator	8
4.1.1	Aufbau	8
4.1.2	Wahl der Eingangsparameter	8
4.2	Training-, Validation- und Testdatensatz	8

5	Neurales Netz	9
5.1	Architektur	9
5.2	Lossfunction	9
5.3	Optimizer	9
6	Ergebnisse und Diskussion	10
6.1	Lernprozess	10
6.2	Ergebnisse und statistische Auswertung	10
6.3	Fazit	10
	Literaturverzeichnis	11

1 Einleitung

2 Grundlagen

2.1 Small Angle X-Ray Scattering with free electron laser pulses

2.1.1 Motivation

Das Small Angle X-Ray Scattering(SAXS) ist eine universelle Technik zur Untersuchung von Feststoffen. Dabei liefert SAXS Informationen über die kristalline Struktur, chemische Komposition und die physikalische Eigenschaften des untersuchten Feststoffes [Cro]. Die Untersuchung von Feststoffen unter Einfluss von Kurzpulslasern ist eine wichtige Aufgabe der heutigen Physik. Wissen über das Verhalten von Feststoffen unter Einfluss von Kurzpulslasern kann offene Fragen in der Krebsforschung und in der Astrophysik beantworten[KRM⁺18]. In diesem Beleg wurde SAXS für die Untersuchung von Plasma eingesetzt.

2.1.2 Experimentbeschreibung

Das Experiment besteht aus vier Hauptkomponenten (siehe Abbildung 2.1). Dem Target, dem Hochintensitätslaser (UHI), dem Röntgen-Freie-Elektronen-Laser(XFEL) und dem Detektor. Während des Experiments wird das Target durch den Hochintensitätslaser in einem Winkel von 90° beschossen. Dadurch kommt es zu einem sehr hohen Temperaturanstieg im Target und somit zu einem Schmelzprozess, sodass Plasma entsteht. Bei Plasma handelt es sich um ein Gemisch aus freien Elektronen, positiven Ionen und neutralen Teilchen, welche unter ständiger Wechselwirkung untereinander und mit Photonen stehen. Dadurch kann es zu unterschiedlichen Energie- bzw. Anregungszuständen kommen. Der Plasmazustand eines Stoffes wird auch als vierter Aggregatzustand bezeichnet [Wis]. Wurde Plasma erzeugt, soll es auf seine Struktur und Elektrodynamik untersucht werden. Dafür wird leicht zeitversetzt ein zweiter Laser benutzt. Dabei handelt es sich um einen Röntgen-Freie-Elektronen-Laser, welcher in einem Winkel von 45° mit einer Pulsdauer von 40 Femtosekunden auf das Target schießt. Dabei wird das Resultat, wie man es bei einer klassischen Röntgenaufnahme kennt, durch einen Detektor, welcher hinter dem Target platziert ist, aufgenommen [KRM⁺18]. In den nächsten drei Unterkapiteln werden die Hauptkomponenten detaillierter untersucht und dessen Beitrag zum Experiment genauer beschrieben.

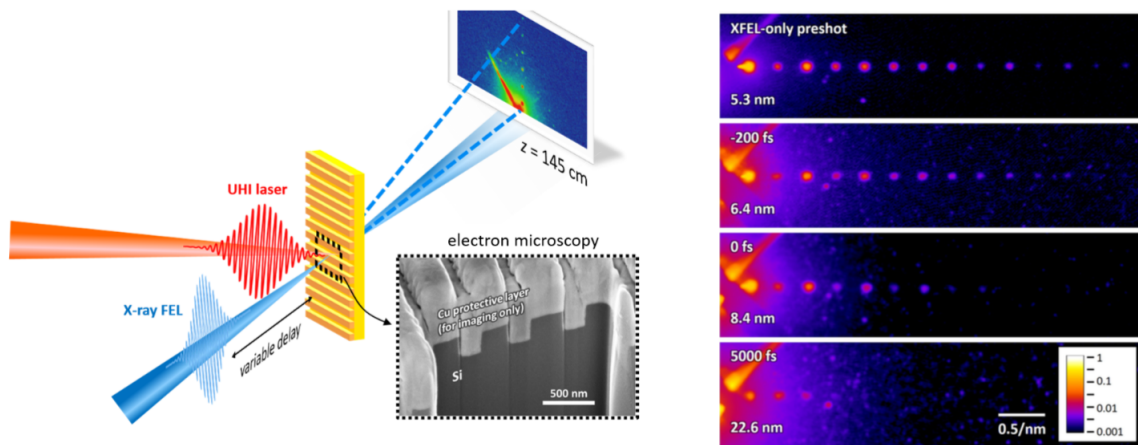


Abbildung 2.1: Schematischer Aufbau des Experimentaufbaus. Die vier Hauptkomponenten sind durch die vorher eingeführten Abkürzungen notiert. Im rechten Teil der Abbildung sind Detektorbilder in Abhängigkeit des Einsetzens des Röntgenlaserpulses dargestellt. Der dargestellte Effekt wird im übernächsten Kapitel genauer erklärt. Bildquelle: [KRM⁺18]

2.1.2.1 Target

Um das Target analytisch beschreiben zu können und das Experiment Resultat zu vereinfachen und somit besser verstehen zu können, wurden die Targets als regelmäßiges Gitter (Grating) strukturiert. Dafür wurde das Target mit einer 2 μm breiten Siliziumschicht überzogen und das Grating in diese Schicht eingraviert. Der Effekt des gewählten Targetdesigns ist, dass das Grating einen eindimensionalen Informationsgehalt hat und somit auch durch eine eindimensionale Funktion in Abhängigkeit von drei Parametern beschrieben werden kann (siehe Abbildung 2.2). Die drei Parameter sind Wellenlänge, Erhöhungsbreite und Aufweichungsbreite. Dabei beschreiben Wellenlänge, Erhöhungsbreite die Struktur des Gratings und die Aufweichungsbreite den Aufweichungseffekt des Hochenergielasers, auf den aber in einem späteren Kapitel eingegangen.

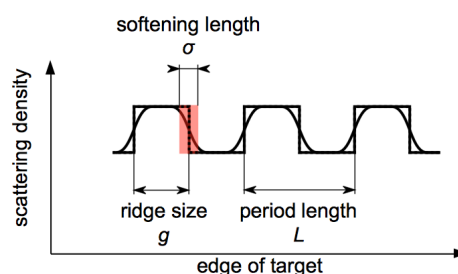


Abbildung 2.2: Analytische Beschreibung des Querschnittes des Targets. Dabei ist das Grating zu erkennen und dass es durch drei Parameter: Wellenlänge, Erhöhungsbreite und Aufweichungsbreite beschrieben werden kann. Bildquelle: [Zac17]

Der genauere funktionale Zusammenhang wird im Simulationskapitel genauer erläutert. Weiterhin müssen noch Begrifflichkeiten geklärt werden. Die Erhöhungen des Gratings werden auch Features genannt und in diesem Kontext wird die Erhöhungsbreite auch Featuresize oder fsize genannt. Das Gitter wird in den meisten Fällen als Welle betrachtet, daher auch die Wahl des Parameternamen Wellenlänge. Weiterhin wird die Wellenlänge auch als Pitch bezeichnet. Ein letzter wichtiger Begriff ist die Elektronendichteverteilung η . Dabei ist das Grating ein Synonym für die Elektronendichteverteilung, dabei werden Features auch als Bereiche mit hoher Energiedichte bezeichnet.

2.1.2.2 Small Angle X-Ray Scattering

Um das Plasma auf seine Struktur zu untersuchen wird der Ansatz des Small Angle X-Ray Scatterings mit Hilfe eines X-ray Free Electron Lasers (XFEL) verwendet.

2.1.2.3 Hochintensitätslaser

2.1.3 Problemidentifikation

2.2 Fouriertransformation

2.3 Neuronale Netze

2.3.1 Aufbau

2.3.2 Training

3 Simulation

3.1 Motivation

3.2 Simulationsbeschreibung

3.2.1 Gitterbeschreibung

3.2.2 Simulation des Detektorinputs

3.2.3 Simulation der Detektoreigenschaften

4 Datenbasis

4.1 Generator

4.1.1 Aufbau

4.1.2 Wahl der Eingangsparameter

4.2 Training-, Validation- und Testdatensatz

5 Neuronales Netz

5.1 Architektur

5.2 Lossfunction

5.3 Optimizer

6 Ergebnisse und Diskussion

6.1 Lernprozess

6.2 Ergebnisse und statistische Auswertung

6.3 Fazit

Literaturverzeichnis

- [Cro] CROCE, Gianluca: *The Small Angle X-ray Scattering Technique: An Overview*. – <http://people.unipmn.it/gcroce/download/theory.pdf>
- [KRM⁺18] KLUGE, Thomas ; RÖDEL, Melanie ; METZKES, Josefine ; PELKA, Alexander ; GARCIA, Alejandro L. ; PRENCIPE, Irene ; REHWALD, Martin ; NAKATSUTSUMI, Motoaki ; MCBRIDE, Emma E. ; SCHÖNHERR, Tommy ; GARTEN, Marco ; HARTLEY, Nicholas J. ; ZACHARIAS, Malte ; ERBE, Arthur ; GEORGIEV, Yordan M. ; GALTIER, Eric ; NAM, Inhyuk ; LEE, Hae J. ; GLENZER, Siegfried ; BUSSMANN, Michael ; GUTT, Christian ; ZEIL, Karl ; RÖDEL, Christian ; HÜBNER, Uwe ; SCHRAMM, Ulrich ; COWAN, Thomas E.: *Observation of ultrafast solid-density plasma dynamics using femtosecond X-ray pulses from a free-electron laser*. 2018
- [Wis] WISSENSCHAFT, Spektrum der: *Plasma*
- [Zac17] ZACHARIAS, Malte: *MODEL-DRIVEN PARAMETER RECONSTRUCTIONS FROM SMALL ANGLE X-RAY SCATTERING IMAGES*. <http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.1208410>. Version: November 2017

Danksagung

Die Danksagung...

Erklärungen zum Urheberrecht

Hier soll jeder Autor die von ihm eingeholten Zustimmungen der Copyright-Besitzer angeben bzw. die in Web Press Rooms angegebenen generellen Konditionen seiner Text- und Bildübernahmen zitieren.