

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, 7. Januar 2019

Aufgabenstellung

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 7. Januar 2019

Patrick Stiller

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	4
2.1	Kleinwinkelstreuung mit Freielektronenlaser	4
2.1.1	Motivation	4
2.1.2	Experimentbeschreibung	4
2.2	Problemidentifikation	8
2.3	Fouriertransformation	8
2.4	Filter	9
2.5	Neuronale Netze	10
2.5.1	Aufbau	10
2.5.2	Feed-Forward-Neuronal Networks	12
2.5.3	Lernprozess	12
3	Simulation	14
3.1	Motivation	14
3.2	Simulationsbeschreibung	14
3.2.1	Design der Gitterstruktur und Simulation des Hochenergielasereinflusses	14
3.2.2	Effekt der Startparameter auf die Gitterstruktur	15
3.2.3	Simulation der Streuung	16
3.2.4	Auswirkung der Startparameter auf das Simulationsergebnis	17
4	Datenbasis	19
4.1	Generator	19
4.2	Wahl der Eingangsparameter	20
4.3	Training-, Validation- und Testdatensatz	20
5	Neuronales Netz	21
5.1	Architektur	21

5.2	Lossfunction	21
5.3	Optimizer	21
6	Ergebnisse und Diskussion	22
6.1	Lernprozess	22
6.2	Ergebnisse und statistische Auswertung	22
6.3	Fazit	22
	Literaturverzeichnis	23

1 Einleitung

2 Grundlagen

2.1 Kleinwinkelstreuung mit Freielektronenlaser

2.1.1 Motivation

Die Kleinwinkelstreuung in Englisch 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 physikalischen 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. Aufgrund des elektrischen Feldes des Lasers entsteht Plasma. 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]. Das im Experiment erzeugte Plasma 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 bei einer klassischen Röntgenaufnahme, 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.

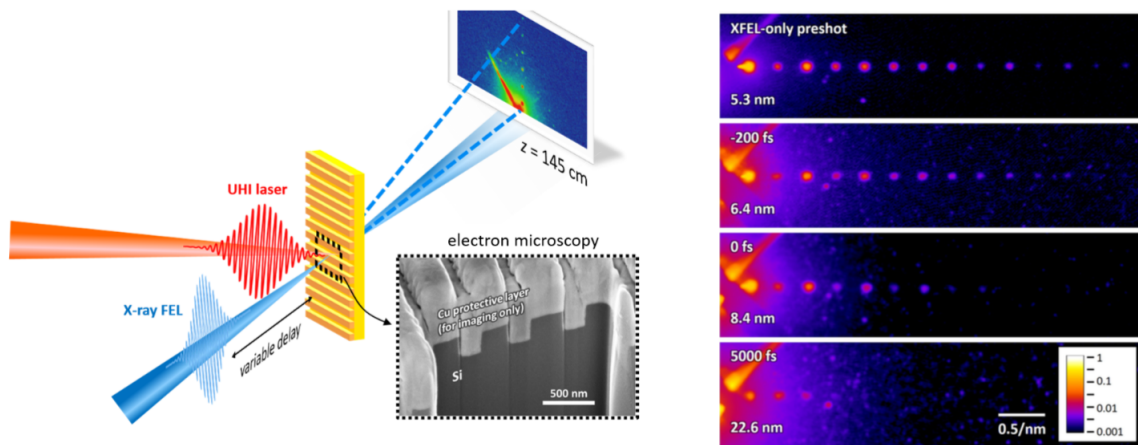


Abbildung 2.1: Schematischer Aufbau des Experimentaufbaus. Im rechten Teil der Abbildung sind Detektorbilder in Abhängigkeit des Einsetzens des Röntgenlaserpulses dargestellt. Bildquelle: [KRM⁺18]

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) designed. Dafür wurde das Target mit einer $2\text{ }\mu\text{m}$ breiten Siliziumschicht überzogen und das Grating in diese Schicht eingraviert. Der Effekt des gewählten Targetdesigns ist, dass das Target 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 Pitch, Feature-Size und Aufweichungsbreite σ . Dabei beschreiben Pitch und Feature-Size die Struktur des Targets und Sigma den Aufweichungseffekt des Hochenergielasers, auf den aber in einem späteren Kapitel eingegangen wird.

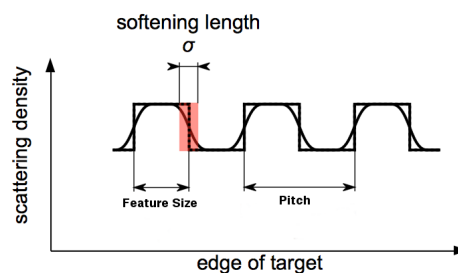


Abbildung 2.2: Analytische Beschreibung des Querschnittes des Targets. Dabei ist das Grating zu erkennen und dass es durch drei Parameter: Wellenlänge, Erhöhungsbreite und Aufweichungsbreite beschrieben werden kann. Bildquelle: [Zac17]

Des weiteren müssen noch Begrifflichkeiten bezüglich des Targets geklärt werden. Die Erhöhungen des Targets werden auch Features genannt. Ein letzter wichtiger Begriff ist die Elektronendichteverteilung

7. Dabei ist das Grating ein Synonym für die Elektronendichteverteilung, dabei werden Features auch als Bereiche mit hoher Energiedichte bezeichnet.

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 Röntgen- Frei Elektron Laser (XFEL) verwendet. Bei diesem Small Angle X-Ray Scattering Ansatz wird ein Frei Elektronen Röntgenlaser in einem kleinen Winkel von 45° auf das Target geschossen (Abbildung 2.1). Bei diesem Vorgang kommt es zu einem Streuvorgang des Lichts des Röntgenlasers an den Elektronen des Targets. Die Intensitäten des gestreuten Röntgenlasers werden durch einen Detektor, welches hinter dem Target platziert ist, gemessen (Abbildung 2.1). Beim Detektor handelt es sich um ein Raster von Lichtdetektoren, welche die ankommenden Lichtintensitäten messen. Dabei ist der Lichtdetektor zeitintegrierend, das heißt, das ankommende Lichtintensitäten über die Zeit summiert werden. Diesen Effekt ist in der Abbildung 2.3 zu erkennen, welche einen beispielhaften Streuprozess an zwei Elektronen zeigt.

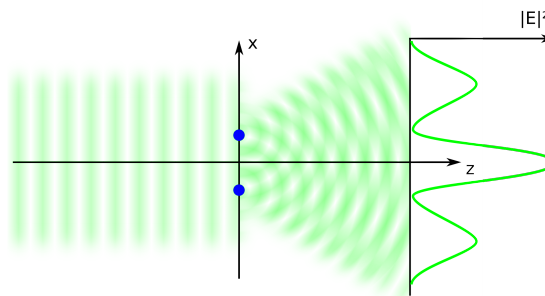


Abbildung 2.3: Beispielhafte Darstellung einer Streuung an zwei Elektronen. Die Röntgenlaserpulse treffen geradlinig auf die Elektronen und werden dann bei den Elektronen gestreut. Der Detektor dahinter misst die ankommenden Intensitäten der kreisförmigen Wellen und summiert diese über die Zeit. Bildquelle: [Zac17]

Durch die Zeitintegrität des Detektors, gehen die zeitlichen Abstände der Wellen verloren (Phase) zusätzlich kann es dazu kommen, dass ankommende Wellen mehrere Detektorzellen gleichzeitig treffen, dabei kommt es zu einem Verschmierungseffekt im Detektorbild. Der funktionale Zusammenhang für den Streuvorgang ist in Gleichung 2.1 definiert.

$$\Phi = \phi_0 \cdot \Delta\Omega \cdot T \cdot \epsilon \cdot |r_0 \cdot \int \eta_e(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{r}|^2 \quad (2.1)$$

Der wichtigste Aspekt ist der hintere Teil der Gleichung. Denn in diesem Teil werden die Intensitäten des Detektorbildes Φ , welches äquivalent zum Betragsquadrat der Fouriertransformation der Elektronendichte η ist.

Hochintensitätslaser Die letzte wichtige Komponente ist der Hochintensitätslaser, welcher zur Generierung von Plasma aus den Targets zuständig ist. Der Hochintensitätslaser hat Einfluss sowohl auf das Target sowie auf das Detektorbild, welcher in diesem Kapitel untersucht wird. Der Hochintensitätslaser (UHI), welcher im 90° Winkel auf das Target schießt (Abbildung 2.1), reißt mit seinem elektrischen Feld die Elektronen aus den Atomkernen des Targets. Dabei entsteht in einem Sekundenbruchteil Plasma. Zeitgleich kommt es zu einem Temperaturanstieg, welcher zu einem Schmelzprozess des Targets und somit zu einer Veränderung der Elektronendichteverteilung η führt [KRM⁺18]. Diesen Schmelzprozess ist in Abbildung 2.4 erkennbar.

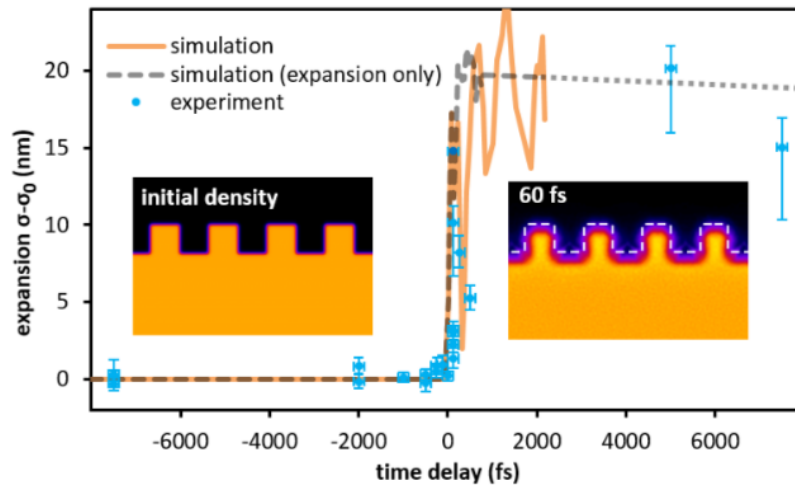


Abbildung 2.4: Veränderung der Elektronendichteverteilung nach einer Bestrahlungsdauer von 60 Femtosekunden Bildquelle: [KRM⁺18]

Ein Nebeneffekt des Schmelzvorgangs ist der Informationsverlust der ursprünglichen Kantenstruktur, welcher sich auch im Detektorbild bemerkbar macht. Im rechten Teil der Abbildung 2.1 ist erkennbar, dass mit späterem Einsätzen des Röntgenlasers, was äquivalent zu längeren Bestrahlungsdauer des Hochintensitätslaser ist, Informationspunkte am Rand des Detektorbildes verloren gehen.

2.2 Problemidentifikation

Beim beschriebenen Experiment ist das größte Problem die Zeitintegrität des Detektors. Diese Detektoreigenschaft ruft den Verlust der Phase hervor, sodass eine Rekonstruktion der Elektronendichteverteilung η mit Hilfe einer inversen Fouriertransformation (IFT) nicht möglich ist. Um dieses Problem zu lösen werden iterative Algorithmen, sogenannte Phaserecovery-Algorithmen verwendet. Beispiele für solche Algorithmen sind : Error-Reduction Algorithm, Gradient Search Methods und der Input Output Algorithmus. Probleme bei diesen Algorithmen ist, dass erstens bei allen Algorithmen keine Konvergenz garantiert ist und zweitens sehr viele Iterationen notwendig sind um eine Optimierung der errechneten Phase zu erzeugen [Fie82]. Diese Algorithmeneigenschaften führen dazu, dass eine hohe Bildraten im Megahertz im Experiment verweht bleibt. Deswegen soll mit Hilfe von Deep Learning die Phase bzw. die Eigenschaften (drei Parameter zur Beschreibung der Welle) der Elektronendichteverteilung η rekonstruiert werden. Der gewählte Deep Learning Ansatz ist ein neuronales Netz. Ein neuronales Netz hat den Vorteil, dass es über GPUs parallelisierbar ist und dass es die Phaseninformation bzw. die Parameter der Elektronendichte nicht-iterativ bestimmt.

2.3 Fouriertransformation

Die Fouriertransformation (benannt nach Jean Baptiste Joseph Fourier) ist eine Transformation, welche zeitbezogene Welle im Ortsraum in ihre frequenzmäßigen Spektralanteile zerlegt. Bei der Fouriertransformation wird die Welle in Teilwellen zerlegt (Abbildung 2.5). Diese Teilwellen ergeben summiert wieder die ursprüngliche Welle (Gleichung (2.2)) [Rot]. So ergibt sich die Fouriertransformation einer stückweise stetig differenzierbaren und T- periodischen Funktion $f_T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ durch folgenden funktionalen Zusammenhang :

$$f_T(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \gamma_k e^{ik\omega t} \text{ mit } \omega = \frac{2\pi}{T} \quad (2.2)$$

die Fourier-Koeffizienten γ_k werden wie bei einem Basiswechsel durch ein Integral bestimmt(Gleichung (2.3)). Dabei ist das Ergebnis des Integrals die Länge der Projektion in Richtung der Basis des Frequenzraumes.

$$\gamma_k = \frac{1}{T} \int_0^T f_T(\tau) e^{-ik\omega\tau} d\tau \quad (2.3)$$

Somit ergibt sich als Resultat der Fouriertransformation eine Folge von Komplexenzahlen u mit zu-

gehörigen Koeffizienten γ_k . Jede Komplexe Zahl kodiert eine Welle, welche über die Euler Identität $e^{ikx} = \cos(kx) + i \cdot \sin(kx)$ errechnet werden kann. Zusätzlich kann noch das Amplituden- und das Phasenspektrum bestimmt werden. Dabei bestimmt das Amplitude die Maxima und Minima der zugehörigen Welle und das Phase die Verschiebung der Welle. Das Amplitudenspektrum $|F(u)|$ und das Phasenspektrum $\phi(u)$ ergeben sich durch die folgende Gleichungen [Sch].

$$|F(u)| = \sqrt{R^2(u) + I^2(u)} \quad (2.4)$$

$$\phi(u) = \tan^{-1} \frac{I(u)}{R(u)} \quad (2.5)$$

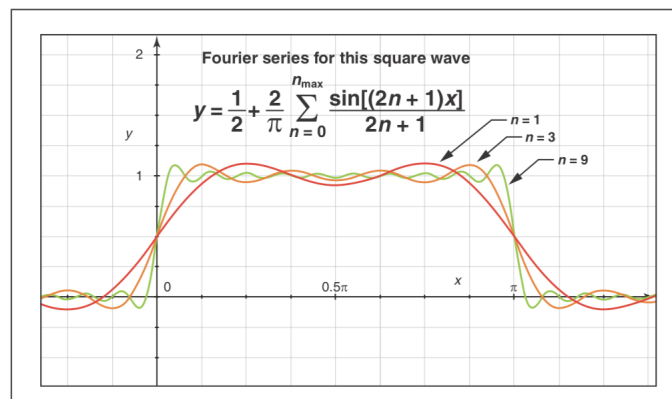


Abbildung 2.5: Überlagerung mehrerer Wellen um eine Rechteckfunktion zu approximieren. Bildquelle: [GNHB08]

2.4 Filter

Ein Filter ist eine Operation, welche auf einem Signal verwendet wird um Signale zu glätten, Signalstörungen zu vermeiden oder um Rauschen zu verhindern. In den meisten Fällen wird die Filteroperation mit Hilfe von Faltung realisiert. Dabei wird die Faltung zweier Funktionen $(f * g)$ durch folgenden funktionalen Zusammenhang in Formel (2.6) beschrieben. Dabei ist f die Funktion, welche das Signal beschreibt und g die Funktion, welche den Filter beschreibt. Im diskreten Fall wird das Integral durch eine Summe bis zur entsprechenden Filtergröße ersetzt.

$$(f * g)(x) := \int_{\mathbb{R}^n} f(\tau)g(x - \tau)d\tau \quad (2.6)$$

2.5 Neuronale Netze

2.5.1 Aufbau

Neuronale Netze sind eine mathematische Adaption des realen menschlichen Gehirns. Ein neuronales Netz besteht aus vielen kleinen Komponenten, Neuronen, welche durch gerichtete und gewichtete Verbindungen verbunden sind. Mathematisch definiert ist ein neuronales Netz ein Tripel (N, V, w) mit den Beiden Mengen N und V und der Funktion w . N ist die Menge aller Neuronen und $V = \{(i, j) | i, j \in N\}$ die Menge der Verbindungen zwischen Neuron i und Neuron j . Die Funktion $w : V \rightarrow \mathbb{R}$ beschreibt die Gewichte des Neuronalen Netzes. Wobei $w(i, j)$ das Gewicht zwischen dem Neuron i und Neuron j beschreibt. Im Allgemeinen wird anstatt der Funktionsnotation die Notation $w_{i,j}$ für die Gewichte zwischen zwei Neuronen verwendet. [Kri07] Die nächste wichtige Komponente ist die Propagierungsfunktion net_j eines Neurons, welche einen wichtigen Teil des Informationsflusses in einem Neuronalen Netz definiert. Dabei wird der Input des Neurons j durch dessen Propagierungsfunktion net_j bestimmt. Die Propagierungsfunktion net_j nimmt den Output aller Neuronen welche eine ausgehende Verbindung zum Neuron j besitzen als Input. So wird die Propagierungsfunktion net_j durch folgenden funktionalen Zusammenhang beschrieben :

$$net_j = \sum_{i \in I_j} (o_i \cdot w_{i,j}) \text{ mit } I_j = \{i \in N | (i, j) \in V\} \quad (2.7)$$

Der Output o_j eines Neuronen j wird mit Hilfe der Aktivierungsfunktion a_j und der der Propagierungsfunktion berechnet. Dazu wird noch der Schwellwert θ_j zur Hemmung des Aktivierungszustand des Neurons zur Hilfe genommen. Somit ergibt sich für den Output des Neurons folgender funktionaler Zusammenhang :

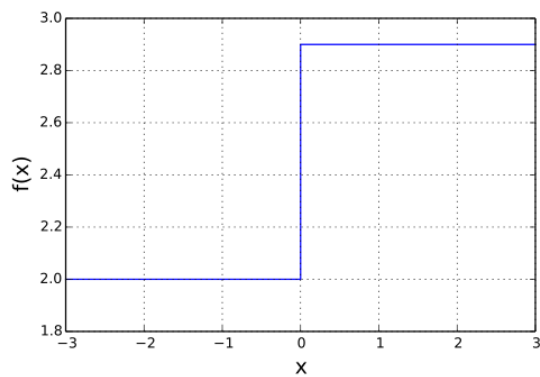
$$o_j = a_j(net_j - \theta_j) = f(x) \quad (2.8)$$

Die Wahl der Aktivierungsfunktion ist von Anwendungsfall von Anwendungsfall unterschiedlich. In den meisten Fällen werden differenzierbare Aktivierungsfunktionen benutzt, da sie den Lernprozess, des neuronalen Netzes erleichtern. Das erste Beispiel für eine Aktivierungsfunktion ist die Heaviside-Funktion(Step-Funktion), welche auf 0 oder 1 abbildet(Abbildung 2.6a). Diese Funktion ist an der Stelle 0 nicht differenzierbar und im generellen für moderne Optimierungsansätze für neuronale Netze nicht geeignet, da die Ableitung der Step-Funktion an allen Stellen 0 ist. Beispiel für gängige und differenzierbare Funktionen sind die Sigmoid-(Abbildung 2.6b, Formel (2.9)), Tangens Hyperbolicus-(Abbildung 2.6c, Formel (2.10)) und die Rectified Linear Units- Aktivierungsfunktion(Abbildung 2.6d, Formel (2.11))

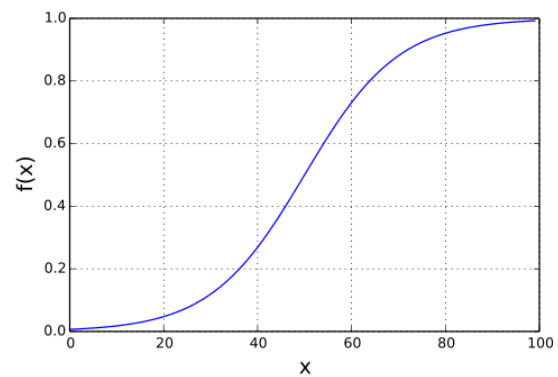
$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.9)$$

$$f(x) = \tanh(x) = 1 - \frac{2}{e^{2x} + 1} \quad (2.10)$$

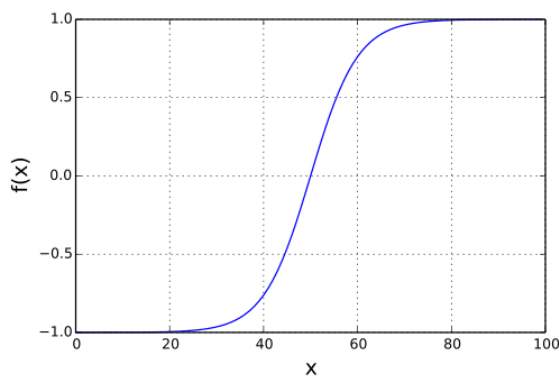
$$f(x) = \max(0, x) \quad (2.11)$$



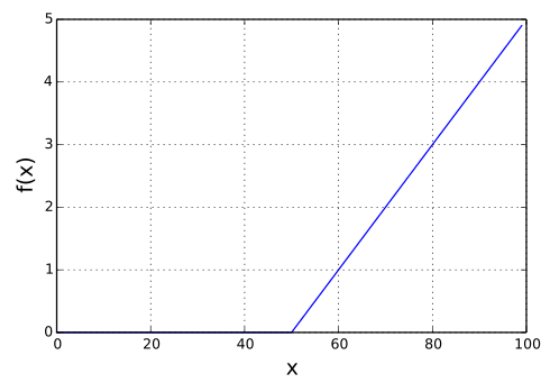
(a) Heavisidefunction



(b) Sigmoid



(c) Tanh



(d) Relu

Abbildung 2.6: Übersicht Aktivierungsfunktionen, Bildquelle: [Kri07]

Jeder der genannten Aktivierungsfunktion hat auf Hinsicht seiner Berechnungsdauer, Wertebereich und Ableitung Vor- und Nachteile. Die Sigmoid und die Tangens Hyperbolicus Aktivierungsfunktion haben einen eingeschränkten Wertebereich, dadurch kann es mit diesen Aktivierungsfunktionen zu keinen zu hohen Werten im Neuronalen Netz kommen und negative Werte werden im Gegensatz zu ReLu noch berücksichtigt. Jedoch sind beide langsamer zu berechnen als die Rectified Linear Units und bieten für den Lernprozess kleinere Gradienten. Rectified Linear Units(ReLu) ist im Vergleich zu Sigmoid und

Tangens Hyperbolicus schneller zu berechnen und bietet größere Gradienten. Jedoch können Neuronen, welche einen negativen Input bekommen nur noch 0 Ausgeben. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem totem Neuron. Ein weiterer Nachteil von ReLu ist der Wertebereich, denn dieser ist nicht eingeschränkt. Somit können im Neuronalen Netz sehr große Werte entstehen, welche den Wertebereich von Zahlenstandards wie zum Beispiel 32 Bit Float überschreiten und somit kein valider Datenfluss im Neuronalen Netz gegeben ist.

2.5.2 Feed-Forward-Neuronal Networks

Für ein Neuronales Netzwerk werden verschiedene Netzwerktopologien verwendet. Ein Beispiel dafür ist das Feed Forward Neuronal Network (Abbildung 2.7) Bei einem Feed Forward Neuronal Network werden die Neuronen als Schichten angeordnet. Diese Schichten sind miteinander verbunden. Dabei ist die Erste Schicht, welche die Input Daten bekommt, wird als Input-Layer bezeichnet. Und die letzte Schicht, welche die Netzberechnung ausgibt, als Output-Layer bezeichnet. Schichten, welche sich zwischen Input- und Output-Layer befinden und somit keinen Kontakt nach Außen haben, werden als Hidden Layer bezeichnet. Ein wichtiges Merkmal von Feed Forward Networks ist, dass der Datenfluss geradlinig ohne Rückkopplung von Input-Layer über die Hiddenlayer bis hin zum Output-Layer verläuft.

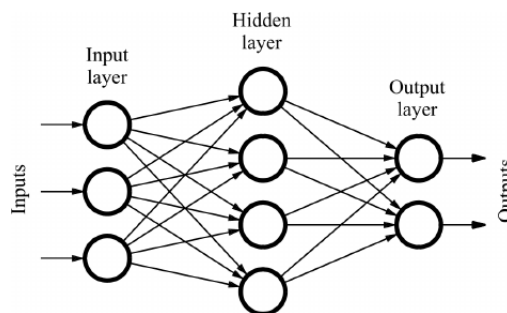


Abbildung 2.7: Beispielhafte Darstellung für ein Feed-Forward-Neuronal-Netzwerk. Bildquelle: [QR11]

2.5.3 Lernprozess

Das Anlernen von Neuronalen Netzen wird in den meisten Fällen durch überwachtes Lernen (supervised Learning) realisiert. Im speziellen wird der Lernprozess durch den Backpropagation Algorithmus durchgeführt. Bei einem überwachten Lernansatz besteht der Datensatz zum Trainieren des Neuronalen Netzen aus zwei Teilen. Zu jedem Netinput x_i gibt es ein zugehöriges Label y_i , welches den gewünschten Netzoutput definiert. Der Lernprozess eines neuronalen Netzes kann in drei Phasen aufgeteilt werden. Der Forward-Pass, Loss-Calculation und Backward Pass [Bec]. Zu Beginn des Trainingsprozesses werden die Gewichte des Neuronalen Netzes mit Zufallszahlen initialisiert. Beim Forward Pass

werden die Input Daten zur Kalkulation des derzeitigen Net-Outputs zum Input-Layer des neuronalen Netzes gegeben. Das Neuronale Netz bestimmt dann durch die Rechenvorschriften des Neuronalen Netzes den Net-Output \hat{y}_i . Im zweiten Schritt wird dann die Qualität des Netouput \hat{y}_i bestimmt.. Dazu wird ein Fehlermaß benutzt, was den Grad des Unterschiedes zwischen \hat{y}_i und y_i bestimmt. Eine beispielhafte Errorfunktion ist Mean-Squared Error (2.12).

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (2.12)$$

Im drittem Schritt, dem Backward-Pass, kommt es zur Optimierung des Neuronalen Netzes. Mithilfe des Fehlers, welcher bis zur Eingabeschicht zurück propagiert, werden die Gewichte, je nach ihrem Einfluss auf den Net-Output angepasst. Dazu wird ein Gradientenabstiegsverfahren verwendet. Dafür wird die partielle Ableitung des Fehlerterms benötigt. Somit ergibt sich für die Gewichtsveränderung Δw_{ij} des Gewichts zwischen Neuron i und Neuron j durch folgenden Funktionalen Zusammenhang :

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -\eta \delta_j o_i \quad (2.13)$$

Dabei ist E die Errorfunktion. δ_j das Fehlersignal des bzw. der Gradient Neurons j und o_i die Ausgabe des Neuron i. Der letzte wichtige Parameter ist η welche die Learning-Rate des Gradientenabstiegsverfahren bestimmt. Schlussendlich fehlt die Definition des Gradienten. Dieser ist davon abhängig, wie stark das Neuron den Output des Neuronalen Netz beeinträchtigt. Deswegen wird eine Unterscheidung getroffen, ob das Neuron sich im Output-Layer oder darunter befindet. In der folgenden Gleichung (2.14) ist die Definition des Gradienten und die zugehörige Propagierung des Fehlers.

$$\delta_j = \begin{cases} a_j(\text{net}_j)(o_j - t_j) & \text{falls } j \text{ Ausgabeneuron ist} \\ a_j(\text{net}_j) \sum_k \delta_k w_{jk} & \text{falls } j \text{ verdecktes Neuron ist.} \end{cases} \quad (2.14)$$

Dabei ist die Gleichung (2.14) in Abhängigkeit von den Variablen o_j dem Output des Neurons j , t_j die Soll-Ausgabe des Neurons j und der Aktivierungsfunktion a_j des Neuron j angegeben. Und somit ergibt sich die Veränderung des neuem Gewicht durch eine Addition des alten Gewichts.

$$w_{ij}^{\text{neu}} = w_{ij}^{\text{alt}} + \Delta w_{ij} \quad (2.15)$$

Der Backpropagation wird iterativ solange angewandt, bis eine bestimmte Anzahl von Iterationen erreicht ist, oder andere Kriterien erfüllt sind. [Wik18]

3 Simulation

3.1 Motivation

Um das Ergebniss des SAXS-Experimentes bestmöglich zu verstehen und aufgrund mangelnder Anzahl von Experimentdaten, wurde im Rahmen der Master Arbeit von Malte Zacharias mit dem Titel: “Model-Driven Parameter Reconstruction from Small Angle X-Ray Scattering Images “eine Simulation entwickelt. Die Simulation beinhaltet das Design der Gitterstruktur (Elektronendichteverteilung), die Simulation des Hochenergielasereinflusses, die Simulation des Streuvorgangs und die Simulation des Detektorbildes. [Zac17].

3.2 Simulationsbeschreibung

3.2.1 Design der Gitterstruktur und Simulation des Hochenergielasereinflusses

Wie in Kapitel 2 beschrieben sind die Targets des SAXS-Experiments als Gitter strukturiert, um eine analytische Beschreibung des Targets zu ermöglichen. Der erste Simulationsschritt ist die Bestimmung der Gitterstruktur. Die Breite des Gratings ist auf N Pixel beschränkt. Und die Struktur des Gratings ist über die drei Starparameter Pitch, Fsize und Sigma definiert. Zunächst wird anhand der Parameter Fsize und Sigma die Struktur eines Features bestimmt. Dazu wird eine Rechteckfunktion ($1_{[0, fsize]}$), welche die Breite eines Features bestimmt, mit einer Gaussverteilung ($\exp(-x^2/2\sigma^2)$) gefaltet, um den Hochenergielasereinfluss zu simulieren. Das Ergebnis der Faltung wird zur Vereinfachung mit der Errorfunktion (3.1) substituiert [KRM⁺18].

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad (3.1)$$

Das Ergebnis der Faltung des Rechteckimpulses und der Gauss-Verteilung ist die Modellierung eines Features (3.2), welches durch eine weitere Faltung mit mehreren um Pitch verschobene Dirac-Impulsen [Beu11] periodisch forgesetzt wird, um die Grating-Struktur zu komplettieren [Zac17]. Aufgrund der begrenzten Targetbreite N Befinden sich $\frac{N}{Pitch}$ Features in der Grating Struktur [Zac17].

$$\tilde{\eta} = \frac{\sqrt{\pi}\sigma}{2} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x - \text{fsize}}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right) \quad (3.2)$$

3.2.2 Effekt der Startparameter auf die Gitterstruktur

Die drei Startparameter Sigma (σ), Pitch und Feature-Size(fsize), welche die Struktur des Gratings beschreiben, haben unterschiedliche Effekte auf die Gratingstruktur. Sigma ist der Parameter, welcher, wie bereits beschrieben, den Einfluss des Hochenergielasers auf ein Feature modelliert. Desto höher Sigma gewählt wird, desto mehr wird die Kantenstruktur des Targets aufgeweicht. In Abbildung 3.1 ist dieser Effekt dargestellt.

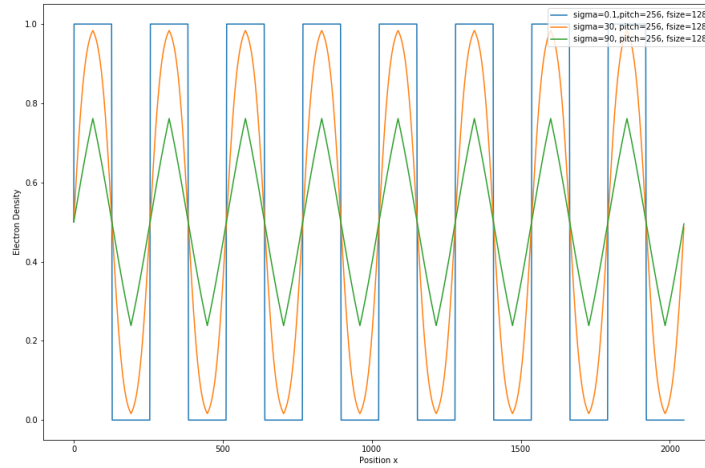


Abbildung 3.1: Vergleich der Kantenstruktur unter variierenden Sigma-Werten bei gleichbleibenden Pitch- und Feature-Size- Werten

Der Parameter Pitch(p) bestimmt die Wellenlänge der Kantenstruktur und bestimmt, somit auch die Periodizität der Kantenstruktur. Daraus folgt, dass mit steigendem Pitch-Wert die Anzahl der Features sinkt. Dieser Effekt ist in der Abbildung 3.2 in der rechten Spalte dargestellt.

Der dritte Startparameter Feature-Size(f) bestimmt die Größe der Features. Dabei kann die Feature-Size nicht größer als Pitch gewählt werden, da sonst keine Kantenstruktur mehr erkennbar wäre. Der Effekt der Feature Size wird in Abbildung 3.2 in der linken Spalte dargestellt.

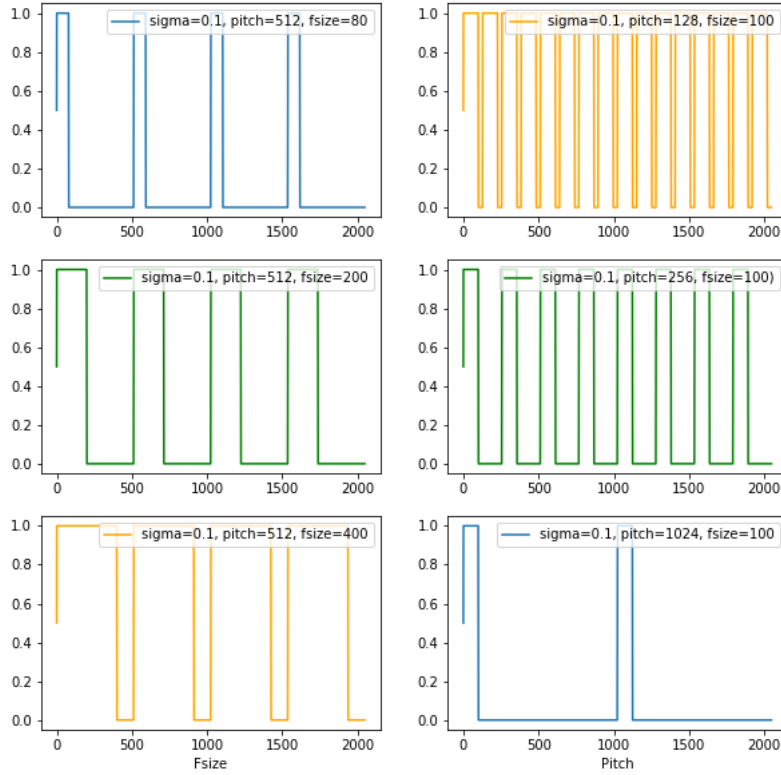


Abbildung 3.2: Vergleich der Kantenstruktur unter variierenden Pitch-Werten(rechte Spalte) und variierenden Feature-Size-Werten(linke Spalte)

3.2.3 Simulation der Streuung

Wie im Kapitel zur Experimentbeschreibung beschrieben, ist das aufgenommene Detektorbild äquivalent zum Betragsquadrat der Fouriertransformation der Elektronendichte η . Im Fall der Simulation ist die Elektronendichte eine diskrete eindimensionale Elektronendichteverteilung. Deswegen wird zur Bildung des Detektorbildes eine eindimensionale diskrete Fouriertransformation (3.3) verwendet [Zac17]

$$\hat{a}_k = \sum_{j=0}^{N-1} e^{-2\pi i \cdot \frac{j \cdot k}{N}} \cdot a_j \text{ für } k = 0, \dots, N-1 \quad (3.3)$$

Das entstandene Produkt der Fouriertransformation ist im Raum der Komplexen Zahlen und weißt den gleichen Informationsgehalt wie die Elektronendichteverteilung auf. Das heißt Amplituden- und Phaseninformationen sind nach wie vor vorhanden. Wie in Kapitel 1 beschrieben, ist der Detektor zeitintegrierend und die Phase geht verloren, deswegen wird die Phaseninformation im weiteren Simulationsverlauf

nicht weiter verwendet. Um schlussendlich die aufgenommenen Intensitäten des Detektors (siehe Abbildung 3.3) zu erhalten, wird das Betragsquadrat des Amplitudenspektrums gebildet.

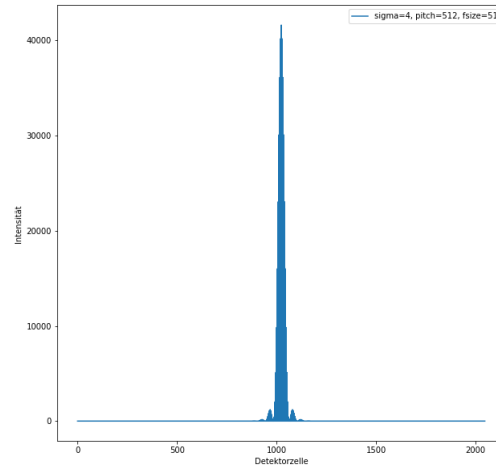


Abbildung 3.3: Resultierendes Detektorbild als Endprodukt der Simulation

3.2.4 Auswirkung der Startparameter auf das Simulationsergebnis

Die Startparameter der Simulation haben ebenfalls Auswirkung auf das Endprodukt der Simulation. Betrachtet man zunächst die Auswirkungen des Startparameters Pitch (Abbildung 3.4), kann man erkennen, dass mit steigendem Pitch sich das Intensitätsmaximum verringert. Zusätzlich kommen noch mehr Peaks hinzu. Das hängt damit zusammen, dass mit steigendem Pitch sich die Anzahl der Features verringert und somit mehr Frequenzen benötigt werden, um die Gitterstruktur zu modellieren.

Einfluss von Pitch auf das Simulationsergebnis

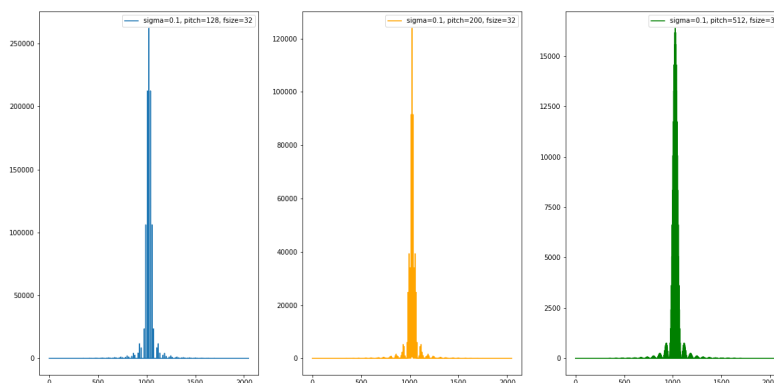


Abbildung 3.4: Verhalten der Detektoraufnahme in Abhängigkeit des Parameters Pitch

Der Startparameter Fsize verhält sich invers zum Parameter Pitch. Mit steigendem Fsize, kommt es zu einer Erhöhung des Intensitätsmaximums und es werden weniger Frequenzen benötigt um die Gitterstruktur zu modellieren, somit sind auch weniger Peaks in der vorhanden (Abbildung 3.5).

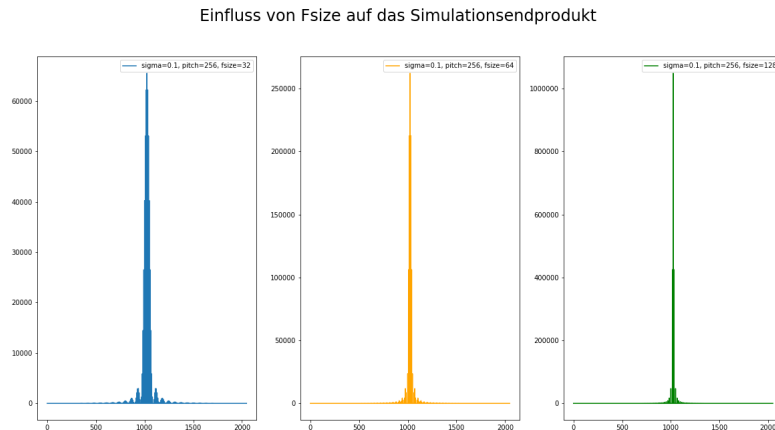


Abbildung 3.5: Verhalten der Detektoraufnahme in Abhängigkeit des Parameters Fsize

Der letzte Starparameter Sigma hat ansteigenden Wert ähnliche Auswirkungen auf die Detektoraufnahmen wie Fsize. Bei steigendem Sigma-Wert steigt das Intensitätsmaximum und die Anzahl der Peaks verringert sich (Abbildung Jedoch skaliert der Parameter Sigma anders als Fsize. Kleinere Unterschiede im Sigma Wert, kann größere Auswirkungen auf die Anzahl der Peaks haben. Auch der Anstieg des Intensitätsmaximums in Abhängigkeit zu Sigma ist geringer im Vergleich zur Abhängigkeit zu Fsize.

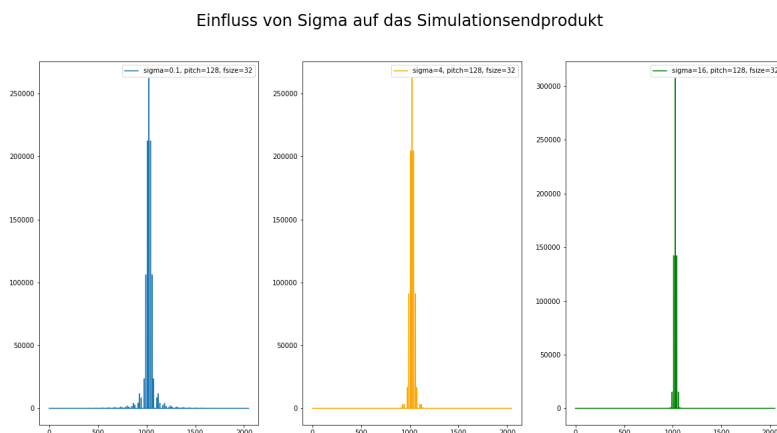


Abbildung 3.6: Verhalten der Detektoraufnahme in Abhängigkeit des Parameters Fsize

4 Datenbasis

4.1 Generator

Um einen Machine Learning Ansatz auszuführen, muss eine ausreichend große Datenbasis existieren. Dazu wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Generator entwickelt, welcher mit Hilfe der vorher beschriebenen Simulation ausreichend viele Trainingsdaten produzieren kann. Bevor der Generator beginnen kann, muss eine Population P von Startparametern festgelegt werden. Um die Berechnung der Simulationsdaten, welche aus P resultieren, zu beschleunigen wurde die Simulation mit Hilfe von MPI (Message Parsing Interface) parallisiert. MPI dubliziert einen Algorithmus auf N beliebige Prozesse, welche dann mit Hilfe vordefinierter Routinen miteinander kommunizieren können [GL94]. Mit Hilfe von MPI-Routinen wurde die Population auf N MPI generierte Prozesse aufgeteilt. Jeder Prozess berechnet dann für seine kleinere Population von Startparametern die Simulationsergebnisse, welche dann anschließend als Dateien in den Speicher geladen werden. Zusätzlich zum Simulationsergebnis wird die Population der Startparameter und die daraus generierten Gitterstrukturen gespeichert, welche als Labels für das Training des neuronalen Netzes vorgesehen sind.

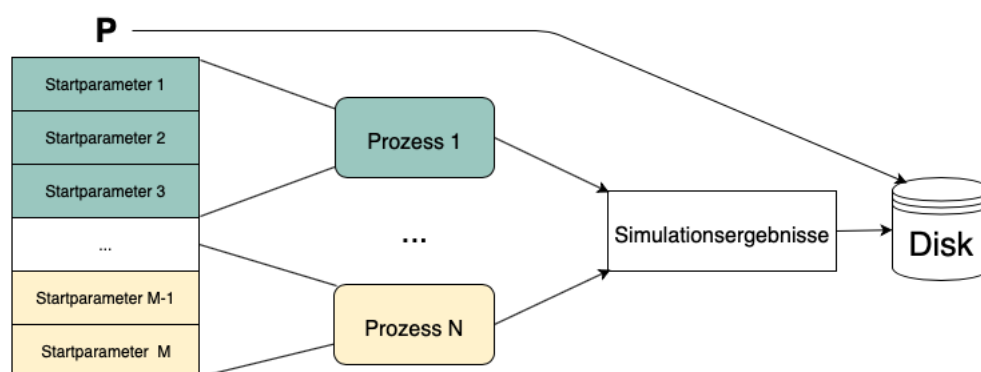


Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau des Generators

4.2 Wahl der Eingangsparameter

4.3 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

- [Bec] BECK, Fabian: *Backpropagation*. <http://www.neuronalesnetz.de/backpropagation1.html>
- [Beu11] BEUCHER, Ottmar: *Übungsbuch Signale und Systeme Lösungsband zum Lehrbuch Signale und Systeme - Theorie, Simulation, Anwendung*. 2011
- [Cro] CROCE, Gianluca: *The Small Angle X-ray Scattering Technique: An Overview*. – <http://people.unipmn.it/gcroce/download/theory.pdf>
- [Fie82] FIENUP, J. R.: Phase retrieval algorithms: a comparison. In: *Appl. Opt.* 21 (1982), Aug, Nr. 15, 2758–2769. <http://ao.osa.org/abstract.cfm?URI=ao-21-15-2758>
- [GL94] GROPP, William ; LUSK, Ewing: *An Introduction to MPI - Parallel Programming with the Message Passing Interface*. (1994)
- [GNHB08] GALLAGHER, Thomas A. ; NEMETH, A J. ; HACEIN-BEY, Lotfi: An introduction to the Fourier transform: relationship to MRI. In: *AJR. American journal of roentgenology* 190 5 (2008), S. 1396–405
- [Kri07] KRIESEL, David: *Ein kleiner Überblick über Neuronale Netze*. 2007 <http://www.dkriesel.com>
- [KRM⁺18] KLUGE, Thomas ; RÖDEL, Melanie ; METZKES, Josefine ; PELKA, Alexander ; GARCIA, Alejandro L. ; PRENCIPE, Irene ; REHWALD, Martin ; NAKATSUTSUMI, Motoaki ; MC-BRIDE, 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
- [QR11] QUIZA R., Davim J.: Computational Methods and Optimization. Machining of Hard Materials. 190 5 (2011), S. 1396–405

- [Rot] ROTH, Ina: *Proseminar: Grundlagen Bildverarbeitung / Bildverstehen Orthogonale Funktionstransformationen*
- [Sch] SCHLESINGER, Dmitrij: *Bildverarbeitung: Fourier-Transformation*
- [Wik18] WIKIPEDIA: *Backpropagation* — *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. <http://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Backpropagation&oldid=181456626>, 2018. – [Online; accessed 04-October-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.