

Sensitivitätsanalyse der Strahlführungselemente des S-DALINAC unter Anwendung von Polynom-Chaos

Sensitivity Analysis of Beam-influencing Elements at the S-DALINAC using Polynomial Chaos

Master-Thesis von Dominic Schneider

Tag der Einreichung: 1. Dezember 2021

1. Gutachten: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Norbert Pietralla

2. Gutachten: M.Sc. Felix Schließmann

Darmstadt



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Fachbereich Physik
Institut für Kernphysik
Arbeitsgruppe Pietralla

Sensitivitätsanalyse der Strahlführungselemente des S-DALINAC unter Anwendung von
Polynom-Chaos

Sensitivity Analysis of Beam-influencing Elements at the S-DALINAC using Polynomial
Chaos

Master-Thesis von Dominic Schneider

1. Gutachten: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Norbert Pietralla
2. Gutachten: M.Sc. Felix Schließmann

Tag der Einreichung: 1. Dezember 2021

Darmstadt

Erklärung zur Abschlussarbeit gemäß §22 Abs. 7 und §23 Abs. 7 APB der TU Darmstadt

Hiermit versichere ich, Dominic Schneider, die vorliegende Master-Thesis ohne Hilfe Dritter und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht worden. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Mir ist bekannt, dass im Fall eines Plagiats (§38 Abs. 2 APB) ein Täuschungsversuch vorliegt, der dazu führt, dass die Arbeit mit 5,0 bewertet und damit ein Prüfungsversuch verbraucht wird. Abschlussarbeiten dürfen nur einmal wiederholt werden.

Bei der abgegebenen Thesis stimmen die schriftliche und die zur Archivierung eingereichte elektronische Fassung gemäß §23 Abs. 7 APB überein.

Darmstadt, 1. Dezember 2021

D. Schneider

D. Schneider

Zusammenfassung

Thema dieser Arbeit ist die erstmalige Anwendung maschinellen Lernens auf Basis von Polynom-Chaos zur Beschreibung und Untersuchung von Strahldynamikeigenschaften am S-DALINAC. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Ersatzmodelle, sogenannte Surrogat-Modelle, verwendet. Zur Erstellung von Trainingsdaten für diese Modelle wurden ausgewählte Strahleigenschaften im Injektorbereich des S-DALINAC in Abhängigkeit von Magneteinstellungen gemessen. In 61,9 h Messzeit wurden in drei Messreihen insgesamt 135.425 Datenpunkte aufgenommen. Hierfür wurde eine automatisierte Datenaufnahme entwickelt und eingerichtet, sowie die Reaktionszeit und die Hysterese des untersuchten Systems bestimmt. Die Surrogat-Modelle basieren auf Polynom-Chaos-Expansionen. Mit Hilfe eines in dieser Arbeit entwickelten Algorithmus wurden die Surrogat-Modelle mit den aufgenommenen Daten trainiert und ausgewertet. Es wurden ausführliche Überlegungen zur Auswahl der optimalen Ordnung des Modells angestellt. Die konstruierten Modelle wurden mit Hilfe der globalen Sensitivitätsanalyse untersucht. Es wurde der individuelle Einfluss der Strahlführungselemente auf die gemessenen Strahleigenschaften ausgewertet. Zudem wurde das Zusammenspiel der Magnetelemente in einer Korrelationsanalyse tiefergehend untersucht.

Als Anwendungsbeispiel wurde der Einfluss der Solenoide auf den Injektorstrahl mithilfe der Surrogat-Modelle untersucht. Hierbei wurden Unregelmäßigkeiten einzelner Magnetelemente sichtbar. Schließlich wurde eine Strahldynamiksimulation der Injektorsktion mit dem Simulationsprogramm ELEGANT durchgeführt. Mithilfe dieser Simulation konnten die Strahlschwerpunktspositionen x und y im betrachteten System mit einer durchschnittlichen Abweichung von 1,42 mm bzw. 0,79 mm wiedergegeben werden. Im Vergleich hierzu beträgt die mittlere Abweichung des Surrogat-Modells für das gleiche System 0,05 mm bzw. 0,03 mm. Als Referenz dient eine in dieser Arbeit durchgeführte Messreihe am Injektor. Abschließend wurde auf Basis einer Sensitivitätsanalyse diskutiert, welche Magnetelemente die größte Abweichung zwischen Messung und Simulation aufweisen und wie Surrogat-Modelle zu einer weiteren Verbesserung beitragen können.

Abstract

The subject of this work is the first application of machine learning based on polynomial chaos for the description and investigation of beam dynamics properties at S-DALINAC. In the context of this work, so-called surrogate models were used. To generate training data for these models, selected beam properties were measured in the injector section at S-DALINAC as a function of magnet currents. In 61,9 h of measurement time, a total of 135.425 data points were generated in three measurement series. For this purpose, an automated data mining system was developed and implemented. To further optimize the systems, the response time and hysteresis of the investigated system were measured.

The surrogate models are based on polynomial chaos expansions. Using an algorithm developed in this thesis, the surrogate models were trained and evaluated with the generated training data. Detailed considerations were made to select the optimal order of the model. The constructed models were examined using global sensitivity analysis. The effect of the steering and focussing elements on the beam was measured and evaluated. In addition, the interaction of the magnetic elements was investigated in detail in a correlation analysis.

As an application example, the influence of the solenoids on the injector beam was investigated using the surrogate models. Here, irregularities of individual magnetic elements became evident. Finally, a beam dynamics simulation of the injector section was performed using the tracking tool ELEGANT. With the help of this simulation, the beam center positions x and y in the considered system could be reproduced with an average deviation of 1.42 mm and 0.79 mm, respectively. In comparison, the average deviation of the surrogate model for the same system is 0.05 mm and 0.03 mm, respectively. A series of measurements performed in the injector section serves as a reference. Based on a sensitivity analysis, the deviations between measurement and simulation were identified. Finally, the improvement using surrogate models was investigated.



Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	10
1.1. Motivation	10
1.2. Einführung	11
2. S-DALINAC	13
3. Physikalische Grundlagen	16
3.1. Surrogat-Modelle via Polynom-Chaos	16
3.1.1. Unsicherheitsquantifizierung	17
3.1.2. Surrogat-Modell	18
3.1.3. Maschinelles Lernen und Polynomregression	19
3.1.4. Polynom-Chaos	23
3.1.5. Globale Sensitivitätsanalyse	27
3.2. Strahldynamik am S-DALINAC	29
3.2.1. Injektor	29
3.2.2. Strahlführungselemente	30
3.2.3. Programme zur Strahldynamiksimulation	37
4. Algorithmus	38
4.1. UQ-Toolkit	38
4.2. Konstruktion eines Surrogat-Modells via PCE	38
5. Data-Mining am Injektor	41
5.1. Kontrollsyste Infrastruktur	41
5.1.1. EPICS	42
5.1.2. Control System Studio	42
5.1.3. Area-Detektor	44
5.2. Messaufbau	46

5.3.	Beobachtungen und Optimierungen	48
5.3.1.	Reaktionszeit des Systems	48
5.3.2.	Hysterese	50
5.4.	Messreihen	55
6.	Auswertung der Surrogat-Modelle	62
6.1.	Konstruktion	62
6.1.1.	Über- und Unteranpassung	63
6.1.2.	Validierungsdiagramm	63
6.1.3.	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	66
6.1.4.	Laufzeiten	68
6.2.	Globale Sensitivitätsanalyse	70
6.2.1.	Primäre Sensitivitätsanalyse	70
6.2.2.	Totale Sensitivitätsanalyse	72
6.3.	Korrelationsanalyse	72
6.3.1.	Kombinierte Sobol-Koeffizienten	73
6.4.	Untersuchung der Solenoide des Injektors	75
6.5.	Surrogat-Modell zur Unterstützung von Simulationen	79
7.	Strahldynamiksimulation des Injektors	84
7.1.	Charakterisierung des Injektors	84
7.1.1.	Positionsbestimmung der Injektorelemente	85
7.1.2.	Messung der magnetischen Flussdichte der Solenoide	85
7.1.3.	Bestimmung des Ablenkwinkels der Steerermagnete	90
7.1.4.	Bestimmung der Fokussierstärke der Quadrupolmagnete	91
7.2.	ELEGANT-Simulationen	92
7.2.1.	Bunchparameter	92
7.2.2.	Erstellung des Lattice	93
7.2.3.	Durchführung der Simulation	93
7.3.	Auswertung der Simulation	94
7.3.1.	Vergleich der Simulations- und Messergebnisse	94
7.3.2.	Auswertung der Strahldynamiksimulation mit Surrogat-Modellen .	97
8.	Fazit & Ausblick	102
8.1.	Fazit	102
8.2.	Ausblick	104
A.	Anhang	106



1. Einleitung

1.1. Motivation

Innerhalb des letzten Jahrzehnts hat die Bedeutung Maschinellen Lernens (ML) massiv zugenommen [1]. Verbesserte Computerrechenleistung und die erfolgreiche Anwendung Maschinellen Lernens auf komplexe Systeme haben sowohl die Forschung in diesem Gebiet, als auch die Akzeptanz der Methodik beschleunigt. Algorithmische ML-Ansätze sind speziell in der Beschreibung parameter- und datenreicher Systeme erfolgreich [2].

Mit dem Fortschritt in den Bereichen des ML hat auch die Verbreitung von Ersatzmodellen, sogenannten Surrogat-Modellen, zur Beschreibung von physikalischen Systemen zugenommen [3]. Surrogat-Modelle bieten den entscheidenden Vorteil an dem beschriebenen System experimentieren und lernen zu können, ohne das System selbst zu beeinflussen oder einzuschränken. Die Übereinstimmung des Surrogat-Modells mit dem realen Systems bestimmt die Qualität der gewonnenen Erkenntnisse. Hochpräzise Modelle werden als *Digital Twins* (nahezu exakte, digitale Abbilder) bezeichnet [4].

Beschleunigeranlagen stellen hochkomplizierte Systeme mit einer hohen Anzahl an Parametern dar. Zwischen diesen Parametern existieren bekannte und unbekannte Korrelationen. Alle Parameter besitzen zusätzlich Unsicherheiten, die die präzise Bestimmung und Vorhersage der Systemantwort erschweren. Diese Gründe motivieren ML-Techniken am Darmstädter Beschleuniger S-DALINAC [5] einzusetzen. Insbesondere Surrogat-Modelle haben sich bereits an anderen Beschleunigeranlagen als äußerst nützlich erwiesen, um Korrelationen zwischen Strahlführungselementen aufzudecken [6, 7]. Aus diesem Grund wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit Surrogat-Modelle am S-DALINAC konstruiert. Dabei eignet sich der Bereich hinter der Elektronenquelle besonders gut, um Erfahrungen mit den Surrogat-Modellen zu sammeln, da das Maß an existierenden Korrelationen mit der Anzahl verwendeter Elemente exorbitant ansteigt. Daraus folgend konzentriert sich die vorliegende Arbeit auf den Injektorbereich des S-DALINAC. Da die Surrogat-Modelle

direkt aus den Messdaten konstruiert wurden, können sie individuelle Eigenschaften der einzelnen Elemente wie intrinsische Fehler sowie Messunsicherheiten berücksichtigen. Dies erlaubt es Simulationen mit deutlich höherer Präzision durchzuführen. Um präzise Strahldynamiksimulationen auf konventionellem Wege durchführen zu können, sind aufwendig zu vermessende Fieldmaps der Strahlführungselemente nötig (was u.a. einen Ausbau bereits verbauter Elemente voraussetzen würde). Zusätzlich müssten durch Vermessungen mit Hilfe des Elektronenstrahls Fehlpositionierungen der Elemente ermittelt werden; Surrogat-Modelle hingegen sind mit vergleichsweise geringem Aufwand zu erstellen, solange genügend Trainingsdaten und Rechenkapazitäten zur Verfügung stehen.

1.2. Einführung

In dieser Arbeit wurde zunächst die Infrastruktur des Kontrollsystems des S-DALINAC auf die Fähigkeit zur effizienten Datenaufnahme untersucht. Hierbei wurden sowohl technische Voraussetzungen überprüft, als auch auf die strahlbeeinflussenden Parameter und geeignete Diagnosegrößen eingegangen. Anschließend wurden Messreihen von Subsystemen im Injektor aufgenommen. Es gilt die Datenaufnahme einzurichten, zu automatisieren und Verbesserungsmöglichkeiten zu untersuchen.

Auf Basis der aufgenommenen Daten wurden für mehrere Subsysteme des Injektors Surrogat-Modelle konstruiert. Hierbei wurde zunächst die erstmalige Durchführung der Konstruktion von Ersatzmodellen mittels ML-Algorithmen auf Basis von Polynom-Chaos-Expansionen [8] am S-DALINAC gezeigt. Ein weiteres Ziel dieser Arbeit besteht in der Verbesserung der Genauigkeit von Simulationen am S-DALINAC. Um die Ursachen von Abweichungen identifizieren zu können, wurde auf Basis der am S-DALINAC verwendeten Simulationsmethoden ein weiteres Ersatzmodell konstruiert; dieses Modell wurde hingegen aus konventionellen Simulationsdaten und nicht aus Messdaten konstruiert. Auf diese Weise können Sensitivitäts- und Korrelationsanalysen für beide Modelle durchgeführt werden und Unterschiede ermittelt werden.

Zusätzlich zu den dargestellten Zielen wurden weitere Aufgaben verfolgt. So wurde die Datenaufnahme automatisiert und optimiert. Hierfür wurden unter anderem die Reaktionszeit des untersuchten Injektorsystems und Hystereseffekte der involvierten Magnetelemente untersucht. Dies stellt eine wichtige Voraussetzung für eine zukünftige, automatisierte

Einstellung des Injektors dar. Außerdem wurde die Eignung der Ersatzmodelle zur Diagnose der Strahlführungselemente untersucht. Hierfür wurde eine Sensitivitätsanalyse der Solenoide der Injektorsektion durchgeführt.



2. S-DALINAC

Der S-DALINAC (**S**uperconducting **D**Armstadt **L**INear **A**Ccelerator) ist ein supraleitender, rezirkulierender Elektronenbeschleuniger, der seit 1991 im Institut für Kernphysik der Technischen Universität Darmstadt in Betrieb ist [5]. Die Beschleunigeranlage wurde im Jahr 2016 umgebaut, sodass der Elektronenstrahl bis zu drei mal rezirkuliert werden kann [9].

In Abb. 2.1 ist ein Plan des S-DALINAC dargestellt. Die Elektronen können entweder mit Hilfe einer thermionischen Quelle [10] und einer kinetischen Energie von $E_{\text{kin}} = 250 \text{ keV}$ oder mit Hilfe einer spinpolarisierten Quelle [11] und einer kinetischen Energie von $E_{\text{kin}} = 125 \text{ keV}$ bereitgestellt werden. In der normal leitenden Injektorsektion durchläuft der Elektronenstrahl eine Chopper- und Prebunchersektion, die den Strahl für eine Betriebsfrequenz von $2,997 \text{ GHz}$ vorbereitet. Die supraleitende Injektorsektion besteht aus einer 6-zelligen und zwei 20-zelligen Niob-Kavitäten, die den Strahl auf eine kinetische Energie von bis zu 10 MeV beschleunigen. Anschließend wird der Strahl in den Hauptbeschleuniger geführt, der aus acht 20-zelligen Kavitäten besteht. Die supraleitenden Kavitäten liegen dabei in einem Bad aus flüssigem Helium bei einer Temperatur von 2 K . Mit Hilfe von bis zu drei Rezirkulationen werden die Elektronen im Hauptbeschleuniger auf eine kinetische Energie von bis zu 130 MeV beschleunigt und in die Extraktion in Richtung der Experimentierhalle gelenkt. Der Beschleuniger wird im continuous-wave-Modus betrieben.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt können die vier Experimentierplätze DHIPS (Darmstadt High Intensity Photon Setup) [12], das Lintott-Spektrometer [13], das QCLAM-Spektrometer [14, 15] und der Niederenergie-Photonentagger NEPTUN [16, 17] bedient werden. Am DHIPS-Experimentierplatz, welcher sich hinter der Injektorsektion befindet, können Kernresonanzfluoreszenzexperimente durchgeführt werden. Alle weiteren Experimentierplätze befinden sich in der Experimentierhalle. Am NEPTUN-Tagger werden Bremsstrahlungsphotonen zur Untersuchung von Kernen erzeugt. Mit dem QCLAM-Spektrometer

können (e,e') und $(e,e'\gamma)$ -Koinzidenzexperimente und an dem 169° -Lintott-Spektrometer hochauflösende (e,e') -Experimente durchgeführt werden.

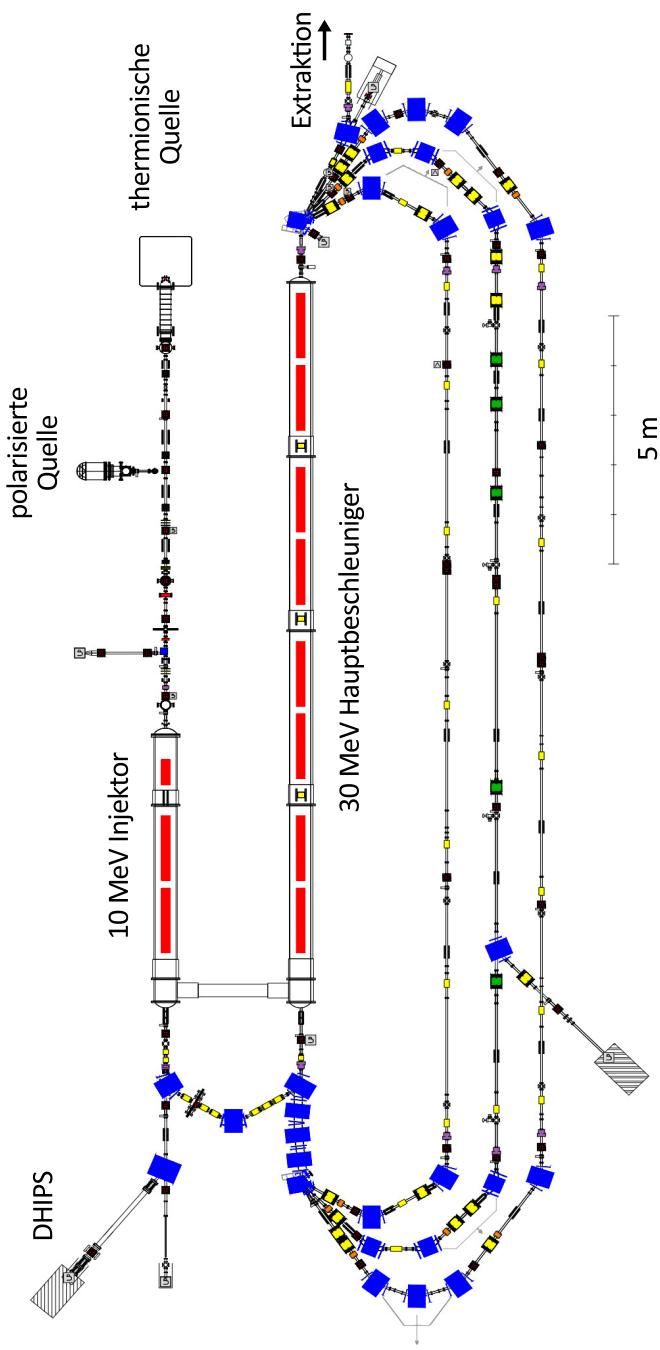


Abbildung 2.1.: Dargestellt ist der Plan des S-DALINAC [5] bis zur Extraktion. Der Elektronenstrahl wird in der thermionischen Quelle erzeugt, im Injektormodul vorbeschleunigt und zum Hauptbeschleuniger gelenkt. Dort kann der Strahl mit Hilfe der Rezirkulationen auf eine kinetische Energie von bis zu 130 MeV beschleunigt werden. Anschließend kann der Strahl in die Extraktion und zu den Experimentierplätzen geführt werden.

3. Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen für diese Arbeit dargestellt. Sie sind in die Themenbereiche Unsicherheitsquantifizierung mittels Polynom-Chaos-Expansionen und Strahldynamik am S-DALINAC aufgeteilt.

In Teilkapitel 3.1 wird die Theorie der Surrogat-Modelle auf Basis der Polynom-Chaos-Expansionen erläutert. Zunächst wird eine Übersicht über Unsicherheitsquantifizierung (Abs. 3.1.1) und Surrogat-Modelle (Abs. 3.1.2) dargestellt. In Abs. 3.1.3 wird die ML-Methode Polynomregression erläutert, welche in dieser Arbeit zur Konstruktion der Surrogat-Modelle verwendet wurde. Die Funktionen, die in der Polynomregression bestimmt werden, sogenannte Polynom-Chaos-Expansionen, werden in Abs. 3.1.4 vorgestellt. Als fundamentale Anwendung der konstruierten Surrogat-Modelle, werden in Abs. 3.1.5 die theoretischen Grundlagen der globalen Sensitivitätsanalyse unter Verwendung von sogenannten Sobol-Indizes dargestellt.

In Teilkapitel 3.2 werden Themen der Strahldynamik am S-DALINAC erläutert. In Abs. 3.2.1 wird zunächst die Injektorsektion als Untersuchungsbereich dieser Arbeit vorgestellt. Die involvierten Strahlführungselemente werden in Abs. 3.2.2 näher erläutert. In Abs. 3.2.3 werden die Strahldynamiksimulationsprogramme ELEGANT [18] und ASTRA [19] kurz vorgestellt.

3.1. Surrogat-Modelle via Polynom-Chaos

In diesem Kapitel wird ein Überblick über die verwendeten Methoden zur Konstruktion der Surrogat-Modelle gegeben. Zunächst wird die Theorie der Fortpflanzung von Unsicherheiten durch mathematische Modelle dargestellt.

3.1.1. Unsicherheitsquantifizierung

Ziel der Unsicherheitsquantifizierung (UQ) ist die Ermittlung des Ursprung, der Fortpflanzung und des Zusammenspiel von Unsicherheiten in komplexen Systemen [7].

Die UQ findet Anwendung zur Beschreibung von unsicherheitsbehafteten, realen Systemen, wenn eine exakte physikalische Beschreibung unzureichend, zu rechenaufwendig oder nicht möglich ist. Mithilfe von UQ-Methoden kann Systemparametern auf Basis eines gewählten Modells sowohl ein Wert als auch eine berechnete Unsicherheit zugeordnet werden. Die Wahl eines optimalen mathematischen Modells, um die Unsicherheit des realen Systems bestmöglich darzustellen, ist ebenfalls Bestandteil der UQ.

Die Wahl der passenden UQ-Methode und des Modells hängt von einer Vielzahl von Faktoren ab. Am wichtigsten ist die Information über die Art der vorliegenden Unsicherheiten. Diese Information ist stark von eingebrachten Expertenkenntnissen und vorhandenen Daten abhängig.

Kategorien von UQ-Methoden

UQ-Methoden werden üblicherweise in folgende Kategorien eingeteilt: Worst-Case-Scenario-Methoden, possibilistische Methoden (engl. possibilistic methods) und probabilistische Methoden (engl. probabilistic methods). In dieser Arbeit werden ausschließlich Polynom-Chaos-Methoden aus der Gruppe der probabilistischen Methoden verwendet.

Worst-Case-Scenario-Methoden werden verwendet, wenn die Informationen über Unsicherheiten in einem System stark limitiert sind oder die vorhandene Datenmenge so gering ist, dass eine exakte Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht bestimmt werden kann. Mit Hilfe dieser Methodik werden obere Schranken für die unsicherheitsbehafteten Variablen bestimmt [20].

Wenn die Unsicherheiten eines Systems nicht mathematisch beschrieben werden können, sind possibilistische Methoden für die Repräsentation der Unsicherheiten geeignet. Es werden nur die Zustände "Eintreten" oder "Nichteintreten" eines Ereignisses berücksichtigt. Zu den meist verwendeten possibilistischen Methoden zählen Intervallanalysen [21], Sensitivitätsderivate [22], die Fuzzy-Set-Theorie [23], die Evidenztheorie [24] und konvexes Modellieren [25]. Grundlegend wird angenommen, dass die Eigenschaften des Systems in Intervallen liegen, die entweder bekannt sind oder zunächst bestimmt werden müssen.

Innerhalb der probabilistischen Beschreibung werden Modellparameter als Zufallsvariablen angenommen, die Zufallsprozessen unterliegen. Zu den bekanntesten Techniken gehören Monte-Carlo-Methoden [26], spektrale Darstellungstechniken [27], zuverlässigkeitsbasierte Methoden [28], Response-Surface-Methoden [29] und Polynom-Chaos-Methoden [30]. Hierbei wird angenommen, dass die Eingangsparameter statistischen Verteilungsfunktionen unterliegen. Das Ziel besteht in der Vorhersage der Ausgangsstistik, bzw. der Fortpflanzung von Parameterunsicherheiten durch das mathematische Modell zu den Ausgangsgrößen.

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass Unsicherheiten, welche in einer probabilistischen Analyse bestimmt werden, einzig durch die Unsicherheiten der Systemparameter bestimmt werden. Die Genauigkeit, mit welcher das mathematische Modell das reale System beschreibt, wird nicht berücksichtigt.

Vorwärtsausbreitung der Unsicherheit

Unabhängig von den gewählten UQ-Methoden gibt es zwei grundsätzliche Problemstellungen in der Unsicherheitsquantifizierung: Die inverse Unsicherheitsquantifizierung und die Vorwärtsausbreitung der Unsicherheit (engl. forward uncertainty propagation).

Bei der weiter verbreiteten Vorwärtsausbreitung der Unsicherheit werden Unsicherheitsquellen der Inputparameter durch das Modell propagiert, um die Gesamtunsicherheit der Outputparameter vorherzusagen. Der Großteil der Techniken zur Unsicherheitsanalyse wurde für diesen Ansatz entwickelt.

Der umgekehrte Prozess, die inverse Unsicherheitsquantifizierung, hat in den letzten Jahren vor allem im Maschinenbau und in Ingenieurwissenschaften stark an Bedeutung gewonnen. Die Quantifizierung der Unsicherheiten eines Modells und die Vorhersage der tatsächlichen Systemantwort beim Entwurf robuster Systeme ist dort von besonderem Interesse [31].

3.1.2. Surrogat-Modell

Zur Unsicherheitsquantifizierung werden Ersatzmodelle, sogenannte Surrogat-Modelle, verwendet. Die Anwendung von Surrogat-Modellen beschränkt sich nicht nur auf die Fortpflanzung von Unsicherheiten [7]. In diesem Abschnitt soll eine Übersicht über Konzepte und Anwendungsmöglichkeiten von Surrogat-Modellen dargestellt werden. Ersatzmodelle

können auf Basis unzähliger mathematischer Beschreibungen konstruiert werden. Die explizite Darstellung der Modelle, welche in dieser Arbeit verwendet wird, wird in Abs. 3.1.4 über Polynom-Chaos-Expansionen vorgestellt.

Angenommen es gilt das (reale) System $M(x)$ durch ein Surrogat-Modell darzustellen. Dann müssen zunächst die Einflussgrößen x_i und die sogenannten QoIs y_j (Quantities of Interest) identifiziert werden. Die Einflussgrößen stellen jene Parameter dar, welche durch individuelle Variation eine Änderung des Systems hervorrufen. Im Sinne der Vorwärtsausbreitung der Unsicherheit handelt es sich um die Inputparameter. Als QoIs werden die Observablen bezeichnet, die Rückschluss auf die Systemänderung oder den Systemzustand geben. Weiterhin sei t_R die sogenannte Reaktionszeit des Systems. Wird die Einflussgröße x_i variiert, so stellt t_R die Zeit dar, die vergeht bis sich das System erneut in einem Gleichgewichtszustand befindet. Die Einflussgrößen x_i und QoIs y_i werden in den Vektoren x bzw. y zusammengefasst.

Wurden x , y und t_R bestimmt, so muss der Modellraum \mathbf{D} festgelegt werden (vergleiche Abb. 3.1). Sind d Einstellgrößen x_i identifiziert worden, so ist $\mathbf{D} \subset \mathbb{R}^d$ und $x \in \mathbf{D}$. Aus mathematischer Sicht ist \mathbf{D} unbeschränkt. In der Realität sind die Parameter x_i und der von x aufgespannte Raum \mathbf{D} durch natürliche oder technische Begrenzungen (z.B. maximaler zulässiger Strom) eingeschränkt. Der Modellraum bildet somit den Bereich der Einstellparameter ab, in welchem das System $M(x)$ physikalisch sinnvoll ist. In der Realität werden Surrogat-Modelle zumeist nicht auf dem vollständigen Modellraum \mathbf{D} , sondern auf einem Teilraum $\mathbf{D}^* \subset \mathbf{D}$ konstruiert, da ein vollständiges Modell auf \mathbf{D} häufig zu rechenintensiv ist. Abbildung 3.1 versinnbildlicht die Zusammenhänge anhand eines Beispiels.

Um das Ersatzmodell zu konstruieren, muss ein Modelltyp und eine Konstruktionsmethode gewählt werden. Methodiken eines ML-Ansatzes zur Konstruktion der Modelle werden im nachfolgenden Abschnitt erläutert. Zumeist werden hierfür Trainingsdaten $\lambda \in \mathbb{R}^d$ generiert. Die Wahl des Modelltypen ist nicht trivial. Im Rahmen der UQ werden Validierungen von Modellzuordnungen behandelt. Da die über das System vorliegenden Informationen in der Praxis oft unvollständig sind, wird die Qualität der Repräsentation des Modells im Nachhinein festgestellt.

3.1.3. Maschinelles Lernen und Polynomregression

Die Unsicherheitsquantifizierung beschäftigt sich mit der Fortpflanzung von Unsicherheiten von Modellen und der Zuordnung eines bestmöglichen Modells zu einem gegebenen

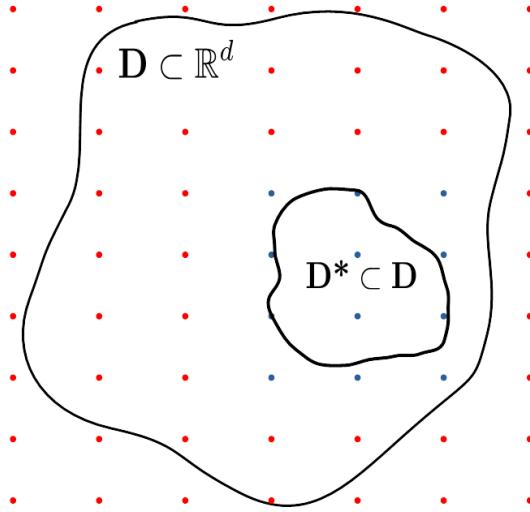


Abbildung 3.1.: Darstellung des mehrdimensionalen Modellraums $\mathbf{D} \subset \mathbb{R}^d$ eines Systems M , der von den Einstellgrößen x aufgespannt wird. Die roten und blauen Punkte stellen Trainingsdaten dar, die benötigt werden, um ein Surrogat-Modell auf ganz $M(x)$ zu konstruieren. Wie in der Abbildung angedeutet, ist es notwendig, Trainingsdaten außerhalb von \mathbf{D} zu generieren, um das Randverhalten berücksichtigen zu können. Der äquidistante Abstand der Punkte ist nicht notwendig. Um ein lokales Surrogat-Modell auf einem signifikant kleineren Unterraum $\mathbf{D}^* \subset \mathbf{D}$ zu konstruieren, werden deutlich weniger Trainingsdaten (blau) benötigt. Das lokale Surrogat-Modell berücksichtigt nur das Verhalten von M auf \mathbf{D}^* .

System. Die Algorithmen des maschinellen Lernens dienen als Werkzeug zur Konstruktion dieser Modelle. Der folgende Abschnitt soll eine Einordnung der verwendeten ML-Methodiken ermöglichen. Der Algorithmus, mit welchem die Surrogat-Modelle in dieser Arbeit konstruiert wurden, ist in Teilkap. 4.2 explizit dargestellt.

Überwachtes, unüberwachtes und bestärkendes Lernen

In Abb. 3.2 ist eine Übersicht über die grundlegenden Klassen und Methoden von ML-Algorithmen dargestellt. Die Klassifizierung von Lernalgorithmen ist in der Literatur nicht eindeutig festgelegt und variiert stark. Traditionell werden ML-Ansätze in drei Kategorien

unterteilt: Das überwachte Lernen, unüberwachtes Lernen und das bestärkende Lernen [32]. Die Kategorisierung erfolgt unter Berücksichtigung der Natur des Signals oder Feedbacks, das dem lernenden Modell zur Verfügung steht.

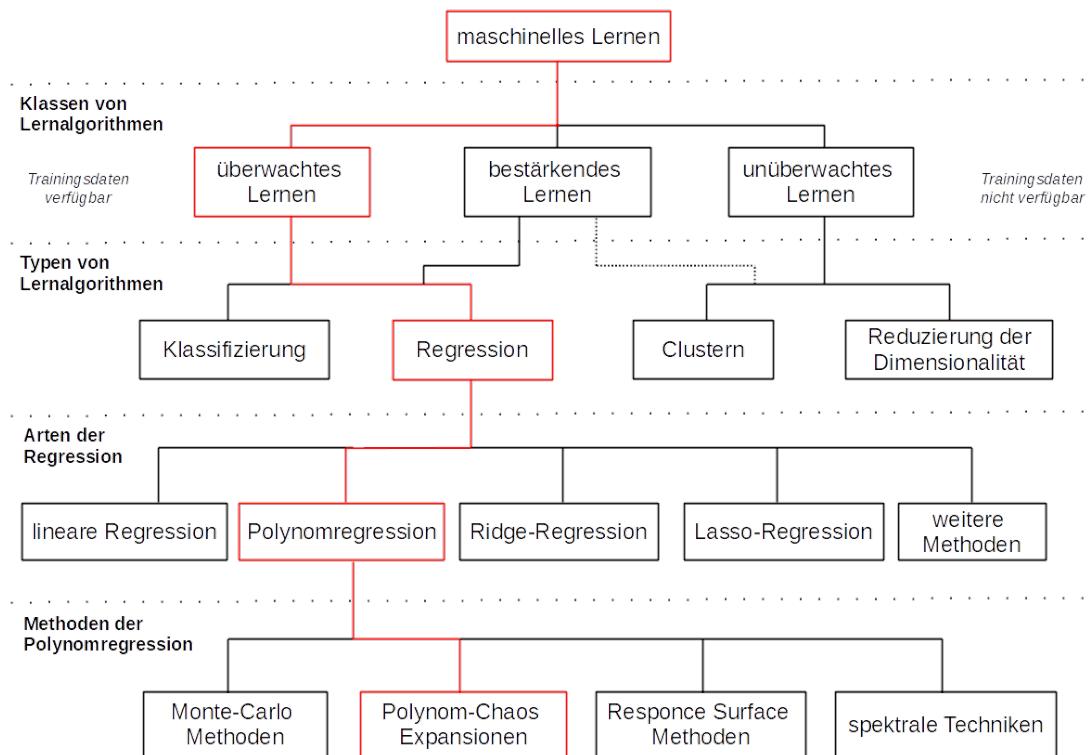


Abbildung 3.2.: Übersicht der grundlegenden Klassen und Methoden von ML-Algorithmen mit Fokus auf überwachtem Lernen unter Verwendung von Polynomregression. Da die Klassifizierung in der Literatur uneinheitlich ist, wird hier nur eine Beispielklassifizierung vorgestellt. Klasse und Typ des Lernalgortihmus sowie Art und Methode der Regression, welche in dieser Arbeit verwendet werden, sind in rot dargestellt. Informationen aus [33] und ergänzt.

Beim überwachten Lernen stehen Trainingsdaten der Inputparameter und der Outputparameter (den QoIs) zur Verfügung, welche von einem Experten ausgewählt wurden. Das Ziel ist das Erlernen einer allgemeinen Regel, welche die Eingangsparameter auf die QoI abbildet.

Beim unüberwachten Lernen stehen keine ausgewiesenen Trainingsdaten, sondern sogenannte ungelabelte Daten zur Verfügung. Dies bedeutet, dass Daten verschiedener Typen unbearbeitet vorliegen. Die Methodik basiert darauf, dass die Maschine Muster durch den Versuch der Nachahmung erkennt. Anders als beim überwachten Lernen findet hier eine Selbstorganisation statt, mit welcher erkannte Muster als neutrale Vorauswahlen oder Wahrscheinlichkeitsdichten aufgefasst werden.

Dem bestärkenden Lernen wurde in jüngster Zeit besondere Aufmerksamkeit zugewendet. In diesem Szenario interagiert ein Computerprogramm mit einer dynamischen Umgebung. Innerhalb dieser Umgebung soll ein vordefiniertes Ziel erreicht werden. Beim Navigieren durch den Problembereich wird durch wiederholtes Versuchen und Scheitern dem Programm Feedback in Form von Belohnungen gegeben. Das Lernen wird hierbei durch das Maximieren der Belohnung erreicht [32].

Da der S-DALINAC als eine Blackbox verstanden werden kann, ein System, mit dem Trainingsdaten sowohl für Eingangsparameter als auch für die QoIs generiert werden können, stehen die Methoden des überwachten Lernens im folgenden Abschnitt im Vordergrund.

Polynomregression

Es gibt verschiedene Ziele, die mit überwachtem Lernen angestrebt werden können (vergleiche Abb. 3.2). Es kann eine Klassifizierung oder Regression der Datensätze durchgeführt werden. Bei einer Klassifizierung werden die Daten in vordefinierte Kategorien eingesortiert. Dieser Ansatz wird vor allem für textbasierte Daten verwendet, ist aber auch für numerische Daten möglich.

In dieser Arbeit sollen Daten einer Beschleunigeranlage möglichst präzise reproduziert werden. In diesem Fall werden Regressionsmethoden verwendet. Die Art der Regression hängt von der Art der Daten ab. Die Wahl der Regressionsart legt zusätzlich den zu verwendenden Modelltypen weitgehenden fest. In Abb. 3.2 wird eine Auswahl an Regressionsarten aufgelistet. Zwar wird im Allgemeinen zwischen linearer Regression und (nichtlinearer) Polynomregression unterschieden, es bleibt aber anzumerken, dass eine lineare Regression mathematisch betrachtet selbstverständlich auch eine Polynomregression ist. Im Nachfolgenden wird unter Polynomregression der lineare Falle explizit ausgeschlossen. Mit der Polynomregression lassen sich komplexe Zusammenhänge im Allgemeinen besser darstellen. In der Ridge-Regression werden die Regressionsparameter nicht individuell, sondern gemeinsam angepasst. Dies ist besonders recheneffizient für stark-korrelierte Probleme, welche vor allem in Modellen mit einer großen Anzahl von

Parametern auftreten. In der Lasso-Regression wird ein ähnlicher Ansatz gewählt. Unterschiede liegen in der gewählten Gewichtung von Regressionsparametern. Anders als in der Ridge- oder Lasso-Regression, werden in der Polynomregression keine Freiheitsgrade in Bezug auf Korrelationen aufgegeben [34].

In der Statistik ist die Polynomregression eine Form der Regressionsanalyse, bei der die Beziehung zwischen den unabhängigen Eingangsparametern und den QoIs als Polynom n -ten Grades in Bezug auf die Eingangsparameter modelliert wird. Eine gängige Regressionsmethode in der Polynomregression stellt die Methode der kleinsten Quadrate dar. In dieser Arbeit wird eine bayessche Version dieses Ansatzes verfolgt, welche in Abs. 4.2 näher erläutert wird.

Die Anforderungen an die Zufallsparameter, welche die Systemvariablen approximieren sollen, sind weitestgehend durch die Wahl der Zielfunktionen festgelegt. Diese Zielfunktionen werden im nachfolgenden Abschnitt erläutert.

3.1.4. Polynom-Chaos

In diesem Abschnitt wird die mathematische Grundlage von Surrogat-Modellen auf Basis von Polynom-Chaos-Expansionen (PCE) vorgestellt.

Wiener führte 1938 die Beschreibung durch Polynom-Chaos (PC) in Form einer homogenen Chaos-Erweiterung ein [8]. Die Idee basiert auf der Projektion der Systemvariablen auf einen stochastischen Raum, welcher durch ein Set von vollständigen, orthogonalen Polynomen Ψ in Abhängigkeit des Zufallsvariablenvektors x aufgespannt wird. Der Zufallsvariablenvektor x ist ein multidimensionaler Vektor $x = x_1, x_2, \dots, x_d$ mit $d \in \mathbb{N}$. Weiterhin hat jede Zufallsvariable ihren zugehörigen Zufallsraum $x_i \in \Omega_i$ mit $i = 1, 2, \dots, d$.

Man betrachte einen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ mit dem Stichprobenraum Ω , einer σ -Algebra \mathcal{F} auf Ω und einem Wahrscheinlichkeitsmaß \mathcal{P} auf Ω . Alle zweifach integrierbaren Zufallsvariablen $\mu(x)$ zweiter Ordnung mit einer endlichen Varianz $\mu(x) \in L_2(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$ und $\mu : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ können dargestellt werden über

$$\begin{aligned} \mu(x) &= \alpha_0 \Psi_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} \alpha_{i_1} \Psi_1(x_{i_1}) + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \alpha_{i_1 i_2} \Psi_2(x_{i_1}, x_{i_2}) \\ &\quad + \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} \alpha_{i_1 i_2 i_3} \Psi_3(x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3}) + \dots \end{aligned} \tag{3.1}$$

Hierbei sind α_i reelle Koeffizienten, sogenannte PCE-Koeffizienten und Ψ_i multivariate PC-Basisfunktionen. Die QoI μ wird durch einen Vektor in Abhängigkeit des Zufallsparameters x dargestellt. Sei i ein Multiindex $i = (i_1, \dots, i_d) \in \mathbb{I}_{d,p}$ und die Menge von Multi-Indizes $\mathbb{I}_{d,p}$ definiert über

$$\mathbb{I}_{d,p} = \left\{ i = (i_1, \dots, i_d) \in \mathbb{N}_0^d : \|i\|_1 \leq p \right\} \quad (3.2)$$

wobei $\|\cdot\|_1$ der l_1 -Norm entspricht, d.h. $\|i\|_1 = i_1 + \dots + i_d$ und p die Polynomordnung ist. Entsprechend der Nomenklatur aus [7] kann Gl. (3.1) mit Hilfe des Multiindex i dargestellt werden über

$$\mu(x) = \sum_{|i|=0}^{\infty} \alpha_i \Psi_i(x). \quad (3.3)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Zufallsvariablen x_k wird als $\rho_k(x)$ bezeichnet. Entsprechend ist $\rho(x)$ die zusammengesetzte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von x . Der Ausdruck $\rho(x)$ wird in Anlehnung an die einschlägige Literatur fortlaufend als PDF (probability density function) bezeichnet. Die multivariaten PC-Basisfunktionen Ψ_i erfüllen die Orthogonalitätsrelation

$$\mathbf{E}[\Psi_i, \Psi_j] = \langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \int \Psi_i(x) \Psi_j(x) \rho(x) dx = \mathbf{E}[\Psi_i^2] \delta_{ij}. \quad (3.4)$$

Die Wahl der Basisfunktionen wird im Folgeabschnitt diskutiert. In der Praxis muss Gl. (3.3) nach einer endlichen Anzahl von Termen trunciert werden:

$$\mu(x) \approx \sum_{i=0}^K \alpha_i \Psi_i(x). \quad (3.5)$$

Entsprechend der Nomenklatur aus [7] kann diese Polynom-Chaos-Expansion mit Hilfe des Multiindex i alternativ dargestellt werden über

$$\mu(x) = \sum_{i \in \mathbb{I}_{d,p}} \alpha_i \Psi_i(x). \quad (3.6)$$

Die Anzahl K der Terme für die Trunkierungsordnung p und Dimension d von x kann zu

$$K = |\mathbb{I}_{d,p}| = \frac{(p+d)!}{p!d!} \quad (3.7)$$

bestimmt werden. Die Anzahl K wächst fakultativ mit der Dimension und Ordnung der PCE. Die Trunkierungsordnung p gibt die höchste Ordnung der Terme x_i^p an, die in Gl. (3.5) auftreten [30].

Nachfolgend ist der explizite Ausdruck der Näherung (3.5) einer QoI mit $d = 2$, d.h. $x = (x_1, x_2)$, und Expansionsordnung $p = 3$ für eine hermitesche Polynom-Chaos-Expansion angegeben.

$$\begin{aligned} \mu(x) \approx & \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3(x_1^2 - 1) + \alpha_4 x_1 x_2 + \alpha_5(x_2^2 - 1) + \alpha_6(x_1^3 - 3x_1) \\ & + \alpha_7(x_1^2 x_2 - x_2) + \alpha_8(x_1 x_2^2 - x_1) + \alpha_9(x_2^3 - 3x_2) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Entsprechend folgt aus Gl. (3.7), dass insgesamt $K = 10$ Terme, bzw. $K - 1 = 9$ Terme mit Basisfunktionen vorhanden sind.

Aufgrund der Orthogonalität von $\Psi_k(x_k)$ und der Unabhängigkeit der Variablen x_k untereinander, konvergiert die trunkierte PCE aus Gl. (3.5) für $p \rightarrow \infty$ genau dann, wenn $\mu(x)$ eine endliche Varianz hat und die Koeffizienten α_i über die Projektionsgleichung

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{E}[\mu \Psi_i]}{\mathbf{E}[\Psi_i^2]} \quad (3.9)$$

berechnet werden. Der Erwartungswert \mathbf{E} und die Varianz \mathbf{Var} von $\mu(x)$ können aufgrund der Orthogonalität der Polynombasisterme direkt aus den PC-Koeffizienten bestimmt werden [8]:

$$\mathbf{E}[\mu] = \alpha_0, \quad \mathbf{Var}[\mu] = \sum_{i \neq 0} \alpha_i^2 \mathbf{E}[\Psi^2(x_i)]. \quad (3.10)$$

Wahl der orthogonalen Basisfunktion

Im vorherigen Kapitel wurde dargestellt, dass die PC-Erweiterung eine spektrale Repräsentation eines Zufallsparameters darstellt. Hierfür werden orthogonale Basisfunktionen Ψ_i verwendet (vergleiche Gl. (3.6)). Weiterhin wurde angenommen, dass Ψ_k und die Dichtefunktion $\rho_k(x)$ der Zufallsvariablen x_k aus dem gleichen Zufallsraum stammen.

Stimmt $\rho_k(x)$ exakt mit der spezifischen Gewichtungsfunktion einer gewählten Polynombasisfunktion Ψ_k überein, so handelt es sich bei der gewählten Basis um die optimale Repräsentation. Dies beinhaltet eine minimale Anzahl an Koeffizienten der Gl. (3.6). Im Idealfall sind jeweils ein Term der nullten und ersten Ordnung ungleich null und alle höheren Ordnungen verschwinden. In Tab. 3.1 sind klassische Verteilungsfunktionen von Zufallsvariablen und die entsprechende optimale Wahl von Polynomen aufgelistet.

Tabelle 3.1.: Dargestellt sind Verteilungsfunktionen von Zufallsvariablen und die zugehörigen Polynombasisfunktionen der Polynom-Chaos-Expansionen für eine optimale Darstellung [35].

Wahrscheinlichkeitsverteilung	Polynombasisfunktion
Gauß	Hermite
Gamma	Laguerre
Beta	Jacobi
Gleichverteilung	Legendre

In der Praxis ist eine exakte Übereinstimmung einer beliebigen PDF mit einer Gewichtungsfunktion nicht möglich. In diesem Fall ist eine Transformation notwendig, um eine nichtoptimale PCE der Zufallsvariable zu bestimmen. Hierbei müssen höhere Ordnungen der PCE die nicht-optimale Darstellung bewältigen. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass grundsätzlich jede Polynomwahl geeignet ist, um die Zufallsvariable in Abwesenheit einer Trunkierung für $K \rightarrow \infty$ (vergleiche Näherung 3.5) exakt darzustellen. Wird die PCE trunkiert, so liefert zu einer gegebenen Trunkierungsordnung p diejenige Polynomwahl die beste Repräsentation der Zufallsvariable, deren Verteilungsfunktion der PDF am nächsten kommt [35].

3.1.5. Globale Sensitivitätsanalyse

In diesem Abschnitt wird die Untersuchung der Sensitivitäten von QoIs bezüglich der Inputparameter beschrieben. Sei $M(x)$ das reale System, das durch die Polynom-Chaos-Expansion $\mu(x) = M(x)$ beschrieben wird. Hierbei stellt x die Inputparameter des Systems im Modellraum \mathbf{D} (vergleiche Abb. 3.1) und μ die QoIs in als Vektor dar.

Sei $\mu^* = M(x^*)$ die gesuchte, wahre Lösung des Systems. Die lokale Sensitivität der Lösung μ bezüglich x_k ist definiert durch $\left. \frac{\partial u}{\partial x_k} \right|_{x=x^*}$. In der globalen Sensitivitätsanalyse hingegen wird der Wert $x = x^*$ nicht explizit festgelegt. Stattdessen wird einzig das Modell $M(x)$ berücksichtigt [7].

Innerhalb dieser Arbeit werden sogenannte Sobol-Indizes für die globale Sensitivitätsanalyse berechnet. Die Berechnung dieser Indizes ergibt sich aus [36], die Notation orientiert sich an [37]. Die primäre Sobol-Sensitivität S_k (engl. main Sobol sensitivity) repräsentiert den individuellen Einfluss der Zufallsvariable x_k auf die Änderung von $\mu(x)$ und ist gegeben durch

$$S_k = \frac{1}{\text{Var}[\mu(x)]} \sum_{i \in \mathbb{I}_k} \alpha_i^2 \mathbf{E}[\Psi^2(x_i)], \quad \mathbb{I}_k = \left\{ i \in \mathbb{N}_0^d : i_k > 0, i_{m \neq k} = 0 \right\}. \quad (3.11)$$

Hierbei ist \mathbb{I}_k eine Menge von Multiindizes, die nur die Dimension k enthält. Bei der Berechnung von S_k werden alle Zufallsvariablen x_j mit $j \neq k$ als konstant angenommen. Somit werden nur die Terme $\Psi_i(x_i)$ aus Gl. (3.6) berücksichtigt. Die Terme $\Psi_i(x_i, x_j)$ und $\Psi_i(x_j)$ mit $i \neq j$ werden ignoriert.

Die totale Sobol-Sensitivität S_k^T (engl. total Sobol sensitivity) von $\mu(x)$ bezüglich x_k ist gegeben durch

$$S_k^T = \frac{1}{\text{Var}[\mu(x)]} \sum_{i \in \mathbb{I}_k^T} \alpha_i^2 \mathbf{E}[\Psi^2(x_i)], \quad \mathbb{I}_k^T = \left\{ i \in \mathbb{N}_0^d : i_k > 0 \right\}. \quad (3.12)$$

Hierbei ist \mathbb{I}_k^T eine Menge von Multiindizes, die unter anderem die Dimension k enthalten. Anders als für S_k tragen die Terme $\Psi_i(x_i, x_j)$ zur totalen Sensitivität S_k^T bei. Je geringer S_k^T ist, desto unwichtiger ist der Einfluss der Variable x_k . Im Falle $S_k^T \ll 1$ wird x_k als

unwichtig eingestuft. In diesem Fall kann die Variable ohne erheblichen Einfluss auf $\mu(x)$ durch ihren Erwartungswert ersetzt werden.

Die sogenannte kombinierte Sobol-Sensitivität (engl. joint Sobol sensitivity) gibt den Anteil der Varianz wieder, der von dem Parameterpaar (x_k, x_l) stammt. Sie kann über den Zusammenhang

$$S_{k,l} = \frac{1}{\text{Var}[\mu(x)]} \sum_{i \in \mathbb{I}_{k,l}} \alpha_i^2 \mathbf{E}[\Psi^2(x_i)], \quad \mathbb{I}_{k,l} = \left\{ i \in \mathbb{N}_0^d : i_k > 0, i_l > 0 \right\} \quad (3.13)$$

berechnet werden. Hierbei ist $\mathbb{I}_{k,l}$ eine Menge von Multiindizes, welche nur die Dimensionen k und l enthält. Die kombinierte Sobol-Sensitivität $S_{k,l}$ berücksichtigt nur Terme $\Psi_i(x_k, x_l)$ aus Gl. (3.6) mit $k \neq l$. Der Ausdruck kann für drei oder mehr Inputparameter verallgemeinert werden. Für einen Inputparameter x_k kann die totale Sensitivität zusätzlich dargestellt werden über

$$S_k^T = S_k + \sum_{l \neq k} S_{k,l} + \sum_{l \neq k, m} S_{k,l,m} + \dots \quad (3.14)$$

Per Definition erfüllen die primären Sobol-Indizes die Normierung

$$\sum_{k=1}^n S_k + \sum_{1 \leq k < l \leq n} S_{k,l} + \dots + S_{1,2,\dots,n} = 1. \quad (3.15)$$

Für die Summen der primären und totalen Sobol-Indizes folgt aus Gl. (3.14) und Gl. (3.15) der Zusammenhang

$$\sum_{k=1}^n S_k \leq 1, \quad \sum_{k=1}^n S_k^T \geq 1, \quad (3.16)$$

wobei der Fall gleich eins nur dann eintritt, wenn alle kombinierten Sobol-Sensitivitäten verschwinden [36].

3.2. Strahldynamik am S-DALINAC

In diesem Teilkapitel werden zentrale Aspekte der Strahldynamik im Injektorbereich des S-DALINAC erläutert. In Abs. 3.2.1 wird der Injektor des S-DALINAC dargestellt. In Abs. 3.2.2 werden die Magnetelemente der Injektorstrahlführung erläutert. Schließlich werden in Abs. 3.2.3 die Programme ELEGANT und ASTRA vorgestellt, die zur Simulation der Strahldynamik am S-DALINAC verwendet werden.

3.2.1. Injektor

Der warme Injektorbereich (Prefix 'I0') des S-DALINAC ist in Abb. 3.3 skizziert. Der Elektronenstrahl wird in der thermionischen Quelle mit einer kinetischen Energie von 250 keV erzeugt. Auf der nachfolgenden Strecke passiert der Strahl eine Vielzahl von Magnetelementen. Zur Korrektur der Strahlbahn stehen 16 Steerermagnete zur Verfügung, jeweils acht für die horizontale (Kennung 'SH') und vertikale (Kennung 'SV') Achse. Zur Strahlfokussierung können drei Quadrupolmagnettriplets (Kennung 'QU') und 4 Solenoide (Kennung 'LE') verwendet werden. Da die Netzteile dieser Magnetelemente individuell betrieben werden, stellen die Magnete somit 29 Freiheitsgrade zur Strahlmanipulation zur Verfügung. Der Diagnosemessplatz (Kennung 'D0') und die dazugehörigen Magnetelemente werden in dieser Arbeit nicht verwendet.

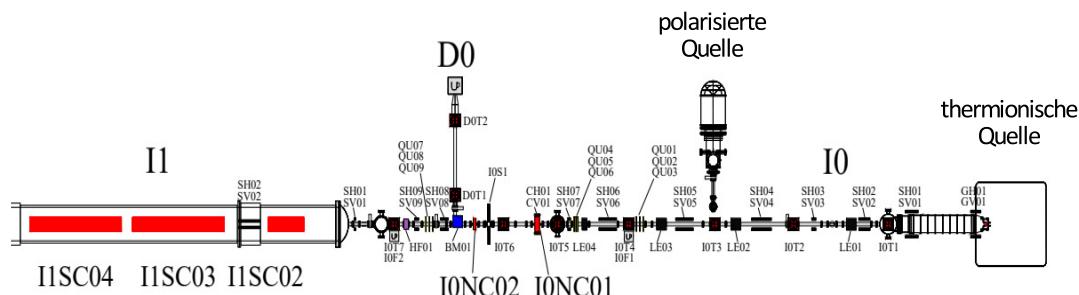


Abbildung 3.3.: Plan des Injektors bis zu den Beschleunigungskavitäten mit Benennung der Elemente wie sie im Kontrollsysteem des S-DALINAC verwendet werden. Den Operateuren stehen 29 Freiheitsgrade zur direkten Beeinflussung der Dynamik des Elektronenstrahls im Injektor zur Verfügung.

Weiterhin befindet sich ein Chopper-Prebuncher-System (Kennung 'NC') im Injektor. Mit dem Chopper wird der durchgehende Elektronenstrahl zu Elektronenpaketen umgeformt, indem der Strahl mit der Betriebsfrequenz von 2,997 GHz über eine Lochblende rotiert wird. Der Prebuncher verkürzt die Bunchlänge, um die Strahlqualität zu verbessern [38].

Zur Diagnose stehen sieben Leuchtschirme (Kennung 'T'), ein Hochfrequenzmonitor (Kennung 'HF') und zwei Faraday-Cups (Kennung 'F') zur Verfügung. Mit Hilfe des Hochfrequenzmonitors kann nicht-destructive Strahldiagnose, mit den übrigen Elementen destruktive Strahldiagnose betrieben werden. Die Leuchtschirmbilder werden mit Hilfe eines Area-Detektors ausgewertet, welcher in Abs. 5.1.3 vorgestellt wird. Zusätzlich befinden sich Beam-Loss-Monitore entlang der Strahlführung.

Zusammen mit der Amplitude und Phase des Prebunchers sowie der Wehnelt-Spannung und des Heizstroms der Elektronenquelle stehen den Operateuren des S-DALINAC im Injektor 33 Freiheitsgrade zur direkten Beeinflussung der Dynamik des Elektronenstrahls zur Verfügung.

3.2.2. Strahlführungselemente

Innerhalb dieses Abschnittes werden die Magnetelemente des Injektorbereichs erläutert. Bewegt sich ein geladenes Teilchen mit Ladung e , Masse m , Impuls $p = mv_s$ und Geschwindigkeit $\vec{v} = (0, 0, v_s)^T$ durch eine in y -Richtung wirkende magnetische Flussdichte $\vec{B} = (0, B_y, 0)^T$, so lässt sich die Ablenkung R durch Gleichsetzen der Zentripetalkraft $|\vec{F}_z| = m \cdot \frac{v_s^2}{R}$ und Lorentzkraft $|\vec{F}_L| = e \cdot v_s \cdot |\vec{B}|$ ausdrücken durch:

$$\frac{1}{R(x, y, z)} = \frac{e}{p} B_y(x, y, z) \quad (3.17)$$

$$\approx \frac{e}{p} B_y + \frac{e}{p} \frac{dB_y}{dx} \cdot x + \frac{1}{2} \frac{e}{p} \frac{d^2 B_y}{dx^2} \cdot x^2 + \dots \quad (3.18)$$

$$= \frac{1}{R} + kx + \frac{1}{2!} sx^2 + \dots \quad (3.19)$$

Hierbei bezeichnet k die Quadrupolstärke, s die Sextupolstärke und R den Ablenkradius. Im Schritt von Gl. (3.17) auf Gl. (3.18) wurde eine Taylorentwicklung vorgenommen. Diese Näherung ist gültig, solange die Ladungsträger eine geringe Abweichung von der Sollbahn aufweisen. In Gleichung (3.19) wird die magnetische Flussdichte schließlich als Summe von Multipoltermen entwickelt.

Dipolmagnet

Dipolmagnete werden in Teilchenbeschleunigern zur Ablenkung des jeweiligen geladenen Teilchenstrahls verwendet. Im S-DALINAC werden H-Magnete als Ablenkdiopolmagnete verwendet. Im Falle eines wie in Abb. 3.4 (a) dargestellten H-Magneten werden zwei gegenüberliegende, stromdurchflossene Spulen um ein Eisenjoch gewickelt. Das Eisenjoch erfüllt hierbei zwei Funktionen. Zum einen wird durch das Joch die magnetische Flussdichte signifikant verstärkt. Zum anderen formt das Joch die magnetische Flussdichte. Hierdurch werden weitere naheliegende Strahlführungselemente abgeschirmt und die Stärke der Flussdichte auf den Spalt zwischen den Lücken der Polschuhe konzentriert. Die magnetische Flussdichte an dieser Stelle ist nahezu homogen.



(a) Ablenkdiopolmagnet



(b) Steerermagnet

Abbildung 3.4.: Dargestellt sind zwei Typen von Dipolmagneten, die am S-DALINAC verwendet werden. In (a) ist ein Ablenkdiopolmagnet mit einem Eisenjoch dargestellt. In (b) ist ein Steerermagnet dargestellt, bestehend aus zwei Spulenpaaren ohne Eisenjoch. Dieser deutlich schwächere Dipolmagnet wird zur Korrektur der Strahlbahn in horizontaler und vertikaler Richtung verwendet.

Wie in Gl. (3.19) gezeigt, lässt sich die Wirkung des Dipolmagneten über

$$\frac{1}{R} = \frac{q}{p} B, \quad (3.20)$$

mit dem Ablenkradius R , der magnetischen Flussdichte B , der Ladung q und dem Impuls p des beeinflussten Teilchens beschreiben. Für niedrige Strahlenergien können schwächere Dipolmagnete zur Korrektur der Strahlbahn verwendet werden. Diese sogenannten Steerermagnete, im Folgenden auch kurz Steerer genannt, sind aus einfachen Drahtspulen in einer Helmholtzspulenanordnung ohne Eisenkern aufgebaut. Ein Steerermagnet der Injektorsektion des S-DALINAC ist in Abb. 3.4 (b) dargestellt. Diese Steerer bestehen aus jeweils zwei orthogonal zueinander ausgerichteten Spulenpaaren und vereinen so die Funktion eines horizontalen und vertikalen Steerers in einem Element.

Quadrupolmagnet

Zur Fokussierung des Elektronenstrahls werden Quadrupolmagnete verwendet. Sie bestehen aus vier Spulen von denen jeweils die benachbarten Spulen eine gegenläufige Polung aufweisen. Durchläuft ein geladenes Teilchen einen Quadrupolmagneten, so erfährt dieses Teilchen eine fokussierende Ablenkung in einer Ebene und eine defokussierende Ablenkung in der Ebene senkrecht dazu. Analog zu Gl. (3.20) kann die Feldgleichung

$$B(x) = \frac{\partial B(x)}{\partial x} x = gx = \frac{p}{q} kx \quad (3.21)$$

aus der Multipolentwicklung aus Gl. (3.19) bestimmt werden. Hierbei bezeichnet g den Feldgradienten und k die Fokussierstärke, welche als auf Impuls und Ladung normalisierter Feldgradient verstanden werden kann.

Um einen fokussierenden Effekt in beiden Ebenen zu erzielen, werden sogenannte FODO-Strukturen verwendet, die eine Aneinanderreihung von fokussierenden und defokussierenden Quadrupolmagneten darstellen. Im Injektor des S-DALINAC werden hauptsächlich Quadrupolmagnettriplets verwendet. Ein Bild eines solchen Triplets ist in Abb. 3.5 dargestellt.

Solenoid

Solenoide werden zur Fokussierung geladener Teilchenstrahlen in Niederenergiesektionen von Beschleunigeranlagen verwendet. Im Gegensatz zu den zuvor beschriebenen Quadrupolmagneten fokussieren Solenoide geladene Teilchen in beiden transversalen Ebenen.

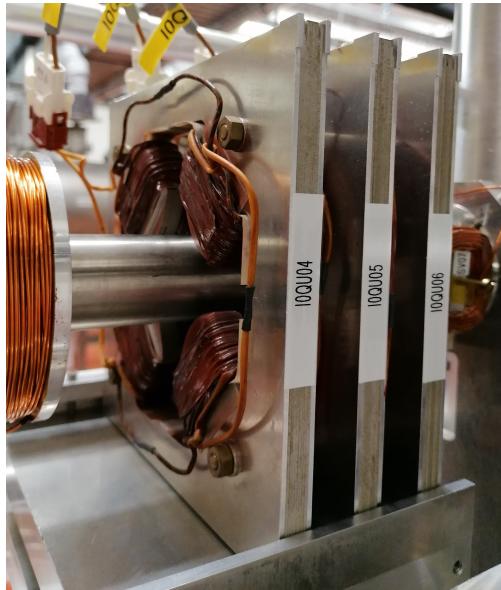
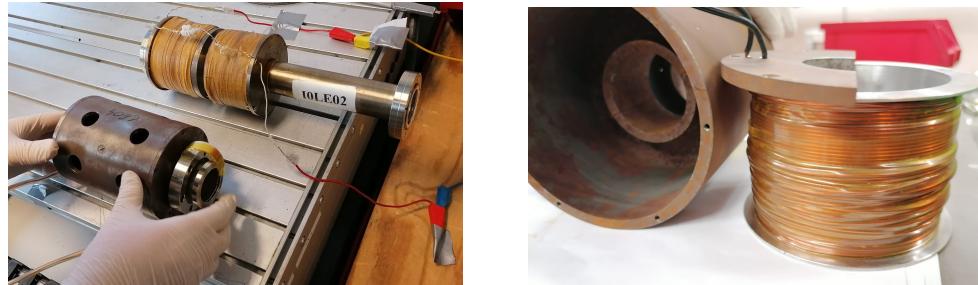


Abbildung 3.5.: Abbildung eines Quadrupolmagnettriplets in der Injektorsektion des S-DALINAC. Da ein einzelner Quadrupolmagnet in einer Ebene einen fokussierenden Effekt auf den Strahl und in der Ebene orthogonal dazu einen defokussierenden Effekt auf den Strahl hat, werden Konfigurationen von mehreren Quadrupolmagneten zur Fokussierung in beiden Ebenen benötigt.

Bei Solenoiden handelt es sich um stromdurchflossene Spulen, durch deren Mitte das Strahlrohr verläuft. Am S-DALINAC bestehen die Solenoide aus zwei aufeinander folgenden Spulen, die um einen Eisenkern gewickelt und mit einer Abschirmung umwandelt sind. Eine Auswahl von Solenoiden des Injektors ist in Abb. 3.6 dargestellt. Es handelt sich bei den Solenoiden um Einzelanfertigungen.

Um die Beschreibung der Dynamik von geladenen Teilchen in magnetischen Feldern von Solenoiden zu erleichtern, wird eine Reihe von Annahmen getroffen. Raumladungseffekte werden vernachlässigt. Zusätzlich wird ein kalter Teilchenstrahl angenommen, d.h. die initiale transversale Geschwindigkeit der Teilchen ist Null. Zur weiteren Vereinfachung wird davon ausgegangen, dass der Teilchenstrahl zylindrisch und die Teilchen gleichverteilt sind. Alle Teilchen besitzen eine initiale Geschwindigkeit v_z in Strahlrichtung. Für die Magnetfeldkomponenten des Solenoids in Zylinderkoordinaten B_r und B_z gilt der Zusammenhang [39]



(a) Feldvermessung der Solenoide.

(b) Solenoid mit ausgebauter Spule.

Abbildung 3.6.: Dargestellt sind Solenoide der Injektorsektion des S-DALINAC, welche für die Charakterisierung der magnetischen Flussdichte ausgebaut wurden. In (a) ist jeweils ein Solenoid mit Strahlrohr und ohne Verkleidung (oben), bzw. mit Abschirmung (unten) abgebildet. In (b) ist ein Solenoid mit einem entnommenem Spulenteilstück dargestellt.

$$B_z(r, z) = B(z) - \frac{r^2}{4} B''(z) + \dots, \quad (3.22)$$

$$B_r(r, z) = -\frac{r}{2} B'(z) + \frac{r^3}{16} B'''(z) + \dots \quad (3.23)$$

Hierbei beschreibt z die Länge entlang der Symmetriearchse des Solenoids, r den Abstand zu der Symmetriearchse und B die magnetische Flussdichte. Unter Ausführung der paraxialen Näherung werden im Folgenden nur Terme bis zur ersten Ordnung in r berücksichtigt. Weiterhin wird eine Rechteckverteilung für die magnetische Flussdichte B angenommen, d.h. $B(z) = B_0$ für $0 > z > L$ und $B(z) = 0$ außerhalb. Hierbei bezeichnet L die Länge des Solenoids. Es kann gezeigt werden, dass die nachfolgenden Resultate für beliebige Verteilungen $B(z)$ verallgemeinert werden können [40].

Mit der paraxialen Näherung folgen aus Gl. (3.22) und Gl. (3.22) die Zusammenhänge

$$B_z = B_0[u(z) - u(z - L)], \quad (3.24)$$

$$B_r = -\frac{r}{2} B_0[\delta(z) - \delta(z - L)] \quad (3.25)$$

hierbei ist $u(z) = 1$ für $z > 0$ und $u(z) = 0$ sonst.

Die folgende Herleitung orientiert sich an [40]. Um den fokussierenden Effekt eines Solenoids zu verstehen, ist es hilfreich den Weg eines geladenen Teilchens durch ein Solenoid in die drei Bereiche $z < 0$ (Bereich I), $0 < z < L$ (Bereich II) und $z > L$ (Bereich III) einzuteilen. In den Bereichen I und III wird sich das geladene Teilchen aufgrund von $B = 0$ geradlinig bewegen. Im Bereich II bewegt sich das Teilchen aufgrund des homogenen Magnetfeldes spiralförmig. Im Grenzbereich von I zu II kann das radiale Feld mit einer δ -Funktion (vergleiche Gl. (3.25)) beschrieben werden. Das Teilchen erfährt beim Grenzübergang einen Impuls in Richtung des Azimutalwinkels Θ , was zu einer azimutalen Geschwindigkeitsänderung Δv_Θ mit

$$\Delta v_\Theta = r_0 \frac{qB_0}{2\gamma m} \quad (3.26)$$

führt. Hierbei entspricht q der Ladung des Teilchens, r_0 der radialen Koordinate des Teilchens beim Eintritt in Bereich II, m der Masse des Teilchens und γ dem Lorentzfaktor. Aufgrund der Energieerhaltung folgt auch eine longitudinale Änderung Δv_z der Geschwindigkeit, welche im Rahmen der paraxialen Näherung vernachlässigbar ist. Mit der transversalen Geschwindigkeit aus Gl. (3.26) beginnen die geladenen Teilchen eine spiralförmige Bewegung im Bereich II, deren Radius R_c über

$$R_c = \left| \frac{\gamma m v_\Theta}{e B_0} \right| = \frac{r_0}{2} \quad (3.27)$$

bestimmt werden kann. Aus Gl. (3.27) folgt, dass für jedes Teilchen mit Abstand r_0 zur Sollachse der Radius der Oszillation innerhalb des Solenoids mit dem halben Radius $\frac{r_0}{2}$ oszilliert. Es kann weiterhin gezeigt werden, dass die Sollachse bei dieser Oszillation stets berührt wird. Die sogenannte Synchrotronfrequenz dieser Oszillation ist gegeben über $\omega_c = eB_0/\gamma m$. In Abb. 3.7 ist der transversale Querschnitt eines Teilchenstrahls beim Eintritt in Bereich II dargestellt. Weiterhin wurden die Positionen für die Teilchen A, B, C und D auf dem Rand des Strahls eingezeichnet. Die Projektionen der Synchrotronoszillation in die x - y -Ebene dieser Teilchen sind als fein gepunktete Linien eingezeichnet. Nach einem gewissen Zeitraum t haben sich die Teilchen zu den Positionen A', B', C' und D' bewegt, wodurch sich die Strahlausdehnung effektiv verringert hat (als gestrichelte Linie dargestellt). Der Teilchenstrahl wird somit periodisch fokussiert. Zum besseren Verständnis wurde die Oszillation für einen Punkt E im Inneren des Strahls zusätzlich abgebildet.

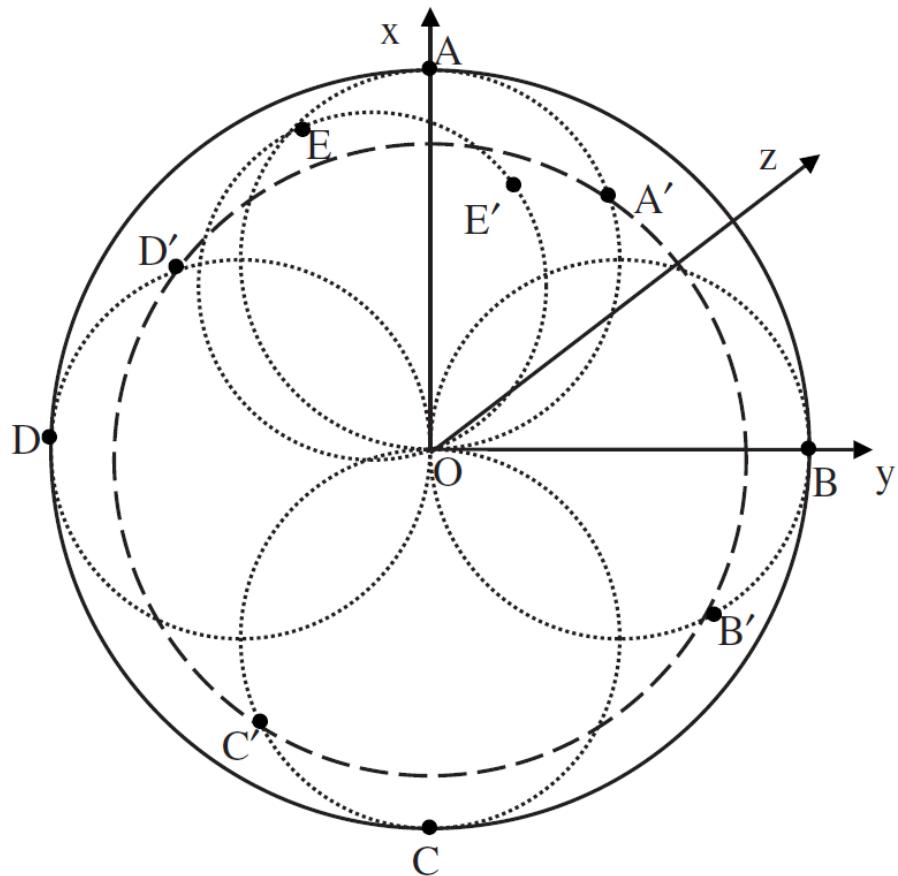


Abbildung 3.7.: Darstellung der Fokussierung eines geladenen Teilchenstrahls in einem Solenoid. Die durchgezogene Linie repräsentiert die Ausdehnung des Strahls beim Eintritt in das Solenoids auf die x - y -Ebene projiziert. Die gepunkteten Linien stellen die Oszillation einzelner Teilchen dar. Die gestrichelte Linie repräsentiert die Ausdehnung des Strahls nach einer Distanz z entlang der Symmetriechse des Solenoids. Grafik entnommen aus [40].

Zusätzlich zur Synchrotronoszillation findet eine Oszillation der Teilchen um die Symmetriechse des Solenoids mit der Larmorfrequenz $\omega_L = eB_0/2\gamma m$ statt, welche jedoch keinen direkten Einfluss auf die Fokussierung nimmt und in Abb. 3.7 nicht berücksichtigt wurde. Die Bewegung der Teilchen setzt sich aus der Überlagerung beider Oszillationen

zusammen.

Die Teilchengeschwindigkeit kann überall im Bereich II in eine radiale und azimutale Komponente zerlegt werden, die über die Zusammenhänge

$$v_r = -r\omega_L \cdot \tan\left(\frac{\omega_L z}{v_z}\right), \quad (3.28)$$

$$v_\Theta = r\omega_L \quad (3.29)$$

gegeben sind [40]. Im Grenzübergang von Bereich II zu III erfährt ein austretendes Teilchen wie zuvor einen Impuls in azimutale Richtung, jedoch mit negativem Vorzeichen: $\Delta v_\Theta = -r_1\omega_L$. Hier entspricht r_1 der radialen Koordinate des Teilchens beim Austritt von Bereich II mit $r_1 \leq R_0$. Unter Hinzunahme von Gl. (3.29) folgt, dass das Teilchen hinter dem Solenoid erneut keine azimutale Geschwindigkeit besitzt. Da die radiale Geschwindigkeit v_r unverändert bleibt und sich die Teilchen wie zuvor betrachtet in Bereich III geradlinig bewegen, bildet sich für positive Ergebnisse des Tangensterms aus Gl. (3.28) ein Brennpunkt hinter der Spule aus. Somit wird ein Teilchenstrahl nach periodischer Fokussierung in der Spule hinter dem Solenoid erneut fokussiert.

3.2.3. Programme zur Strahldynamiksimulation

Am S-DALINAC werden Strahldynamiksimulationen unter Verwendung der Programme ELEGANT (ELECTron Generation AND Tracking) und ASTRA (A Space charge TRacking Algorithm) durchgeführt und ausgewertet.

ELEGANT ist ein 6D-Strahldynamikprogramm, dessen Funktionen Matrixrechnungen bis zur dritten Ordnung, verschiedene numerische Integrationstechniken und Teilchen-Tracking umfasst. Eine Zusammenstellung der Positionen und Parameter (z.B. Strahlstrom, Feldamplitude, Ablenkinkel, Fokussierstärke) aller strahlbeeinflussenden Elemente in einer sogenannten Lattice-Datei stellt den Kern einer ELEGANT-Simulation dar [18].

Das auf Fortran 90 basierende Strahldynamiksimulationsprogramm ASTRA wurde am DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron) in Hamburg entwickelt [19] und bietet ähnliche Funktionen wie ELEGANT. Auch hier werden die Strahlelemente durch Objektklassen dargestellt. Unterschiede in der Qualität der Simulationen sind durch die verschiedenen implementierten Tracking und Integrationsalgorithmen begründet und stark vom Anwendungsbeispiel und den zu simulierenden Strahlelementen abhängig.



4. Algorithmus

Im Folgenden wird der Algorithmus zur Konstruktion und Berechnung der Sensitivität eines Surrogat-Modells dargestellt. Zunächst wird das Framework vorgestellt, auf dem ein wesentlicher Teil der folgenden Skripte basiert.

4.1. UQ-Toolkit

Das hier vorgestellte Framework basiert auf dem Toolkit zur Unsicherheitsquantifizierung (UQTk) der Sandia National Laboratories [41]. Hierbei handelt es sich um eine Sammlung von C++- und Python-Skripten zur Quantifizierung von Unsicherheiten in Modellen und zur Berechnung von Modellvorhersagen. Die Version beinhaltet intrusive und nicht-intrusive Methoden zur Propagierung von Inputunsicherheiten durch Rechenmodelle. Zudem finden sich Techniken zum Konstruieren von Modellen und Berechnung von Sensitivitätsanalysen und Bayes'sche Interferenz Methoden zur Analyse von Parametern. Zusätzlich sind mehrere Optimierungs- und Regressionsskripte in dem Framework enthalten [37].

4.2. Konstruktion eines Surrogat-Modells via PCE

Für die Konstruktion eines Surrogat-Modells müssen Trainingsdaten in folgender Form vorliegen. Sei M eine Blackbox mit d verschiedenen Inputparametern x_i mit $i \in \{0, 1, \dots, d\}$ und L verschiedenen Outputparametern oder QoIs μ_j mit $j \in \{0, 1, \dots, L\}$. Weiterhin wurden für N unterschiedliche Einstellungen λ_{in} von x die Messwerte $\lambda_{\text{out}} = M(\lambda_{\text{in}})$ der QoIs mit der Blackbox M bestimmt. Die Einstellungen λ_{in} und Messwerte λ_{out} bilden die Trainingsdaten $\lambda = (\lambda_{\text{in}}, \lambda_{\text{out}})$.

Somit steht jeweils eine Liste mit Einstellungen λ_{in} der Eingangsparameter x mit $N \cdot d$ Einträgen sowie eine Liste der entsprechenden Werte λ_{out} der QoIs μ mit $N \cdot L$ Einträgen zur Verfügung.

Master-Skript

Die Konstruktion eines Surrogat-Modells wird durch zwei Python-Skripte gesteuert. Das **MASTER-SKRIPT** dient zur automatisierte Konstruktion von Surrogat-Modellen für beliebig viele Trunkierungsordnungen p einer oder mehrerer Messreihen und deren Auswertung. In Teilkapitel 6.1 werden die Funktionen des **MASTER-SKRIPTS** diskutiert. Hierzu zählt unter anderem das Erkennen von Überanpassung (ausführlich in Abs. 6.1.1). Im Folgenden wird der Ablauf der Konstruktion eines Surrogat-Modells für eine Ordnung p dargelegt. Hierfür ruft das **MASTER-SKRIPT** das sogenannte **SLAVE-SKRIPT** auf.

Slave-Skript

Das **SLAVE-SKRIPT** benötigt für die Konstruktion eines Surrogat-Modells nur die beiden Listen der Trainingsdaten λ sowie die gewünschte Trunkierungsordnung p . Mithilfe dieses Skripts werden eine Reihe weiterer Python- und C++-Skripte aufgerufen, die auf dem UQTK basieren und die Schritte zur Konstruktion des Surrogat-Modells abarbeiten.

1. Damit die Trainingsdaten λ in einem späteren Schritt in die gewählten orthogonalen Basisfunktionen (vergleiche Tab. 3.1) eingesetzt werden können, müssen die Trainingsdaten auf die Definitionsbereiche der Polynome skaliert werden. Im Fall von Legendre-Polynomen werden die Trainingsdaten $\lambda \in \mathbb{R}$ mit Hilfe einer linearen Transformation zu $\lambda^* \in [-1; 1]$ transformiert. Hierfür werden die Skripte **GETRANGE** und **SCALE** verwendet.
2. Mit Hilfe des **GEN_MI**-Skripts wird eine Liste von Multiindizes $\mathbb{I}_{d,p}$ für die Polynom-Chaos-Expansionen generiert (vergleiche Gl. (3.6)).
3. Anschließend werden die PCE-Koeffizienten bestimmt. Hierfür stehen die Optionen einer Bayesian least-squares regression (LSQ) und eines weighted Bayesian compressive sensing (BCS) zur Verfügung. In dieser Arbeit wird ausschließlich

die LSQ-Methode verwendet. Die LSQ-Regression wird mit Hilfe des `REGRESSION`-Skripts durchgeführt. Hierbei wird eine Regression der Trainingseinstellungen λ_{in} und Trainingsresultate λ_{out} an die PCE mit

$$\lambda_{\text{out}} \approx \sum_{k=0}^K \alpha_k \Psi_k(\lambda_{\text{in}}) \quad (4.1)$$

und unter Verwendung eines Sets von Basisfunktionen Ψ_k durchgeführt (vergleiche Gl. (3.5) bzw. Gl. (3.6)). Hierbei handelt es sich um ein lineares Regressionsproblem. Es wird der Vektor $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_K)$ gesucht und die Summe ist linear gegenüber α . Die erstellten Polynom-Chaos-Expansionen aller QoIs werden im Folgenden als Surrogat-Modell bezeichnet.

4. Nun wird eine Bewertung der Präzision der PCE-Funktionen durchgeführt. Hierfür werden mit dem `PCE_EVAL`-Skript die Trainingsdaten λ_{in} in die konstruierten PCE-Funktionen aus Gl. (4.1) eingesetzt und die berechneten Werte y_i mit den Trainingsergebnissen λ_{out} verglichen.
5. Schließlich werden die Sobol-Sensitivitäten über das `GEN_SENS`-Skript berechnet. Hierfür werden zunächst der Erwartungswert und die Varianz über Gl. (3.10) berechnet. Anschließend werden die primären und totalen Sobol-Sensitivitäten aus Gl. (3.11), bzw. Gl. (3.12) für jede PCE individuell ausgewertet. Weiterhin werden pro Dimensionspaar (i, j) der Inputparameter die kombinierten Sobol-Sensitivitäten aus Gl. (3.13) berechnet. Dieser Satz an berechneten Sensitivitäten ermöglicht sowohl die primäre, als auch die totale globale Sensitivitätsanalyse.



5. Data-Mining am Injektor

In diesem Kapitel werden die Voraussetzungen, Vorbereitungen, der Aufbau und die Durchführung der Trainingsdatenaufnahme (Data-Mining) am Injektor des S-DALINAC zur Konstruktion von Surrogat-Modellen diskutiert.

In Teilkap. 5.1 wird das Kontrollsysteem des S-DALINAC vorgestellt. Es wird untersucht, welche Möglichkeiten das Kontrollsysteem zur halb- und vollautomatischen Datenaufnahme bietet. In Teilkap. 5.2 wird der Messaufbau des Data-Mining vorgestellt. In Teilkap. 5.3 werden Beobachtungen und Verbesserungen der Datenaufnahme diskutiert, basierend auf mehreren Testmessungen. In Teilkap. 5.4 werden drei Messreihen am Injektor vorgestellt.

5.1. Kontrollsysteem Infrastruktur

Zur Konstruktion von Surrogat-Modellen sind große Mengen an Daten notwendig. Eine schnelle und effektive Datenaufnahme stellt eine Reihe an Anforderungen an das Kontrollsysteem. Damit automatisches Data-Mining möglich ist, muss das Kontrollsysteem eine Kommunikation zwischen externen Geräten, den Netzteilen der Magnete und der Auswertungssoftware ermöglichen. Am S-DALINAC basiert die interne Kommunikation des Kontrollsysteems auf EPICS [42] (Experimental Physic and Industrial Control System), welches diverse Softwareschnittstellen bereitstellt.

Als Auswertungssoftware wird ein Leuchtschirmbilderanalyseprogramm verwendet: der am IKP entwickelte, sogenannte Area-Detektor [43]. Die Funktionsweise des Area-Detektors und die Strahlparameter, die dieser zur Verfügung stellt, werden in Abs. 5.1.3 vorgestellt.

Da während der Messung wichtige Zeit für Experimente am S-DALINAC verloren geht, muss die Dauer für die nachfolgenden Messreihen mit ca. 10^5 Trainingsdaten möglichst kurz sein. Die Zeit zwischen dem Verstellen von Magnetstromsetzwerten und der Änderung von Diagnosedaten des Elektronenstrahls ist durch die Reaktionszeit t_R des Systems

gegeben. Diese Reaktionszeit setzt sich aus der Zeit zur Übermittlung von EPICS-Befehlen, der Zeit, welche die Netzteile brauchen, um den Strom der Magnete zu regeln und der Zeit für die Auswertung der Leuchtschirmbilder zusammen.

5.1.1. EPICS

Das Kontrollsysteem des S-DALINAC basiert auf EPICS [42], einer Open-Source-Softwareumgebung, die Bibliotheken und Werkzeuge zur internen und externen Kommunikation von Kontrollsystemen beinhaltet.

Für die Kommunikation mit Hilfe des Channel-Access-Protokolls werden Channel-Access-Server und Channel-Access-Clients verwendet. Channel-Access-Server werden zur Bereitstellung von Daten im Netzwerk benötigt. Am S-DALINAC sind sie vor allem Bestandteil von sogenannten Input-Output-Controllern (IOCs). Ein IOC übernimmt die Kommunikation mit spezifischen Geräten der Beschleunigeranlage, z.B. von Magnetnetzteilen, über Hardwareschnittstellen (vergleiche Abb. 5.1). Die Bereitstellung der Parameterdaten der Geräte wird von den internen Channel-Access-Servern des IOCs übernommen. Die Parameterdaten werden innerhalb des Kontrollsystems als Prozessvariablen (PVs) gehandhabt. Die PVs bilden die kleinsten Datenstrukturen in EPICS. Sie besitzen einen eindeutigen Namen. Am S-DALINAC folgt die Benennung der Prozessvariablen einer Namenskonvention, welche sich aus der Natur der PV (z.B. Alarm, Magnet), der Dimensionalität (z.B. Status, Strom, Spannung) und dem Ort (z.B. I0, A1) zusammensetzt.

PVs können von Benutzern unter anderem dazu verwendet werden, Informationen über den Zustand von Strahlführungselementen abzurufen oder zu verändern. Channel-Access-Clients senden diese Anfragen an alle IOCs im Netzwerk, jedoch wird nur mit dem antwortenden IOC mit der entsprechenden Konfiguration eine Verbindung aufgebaut.

Am S-DALINAC werden Magnete, Strahlvakua, Ventilsteuerungen, Strahldiagnoseelemente sowie die Elektronenkanone, Hochfrequenz und die Heliumverflüssigungsanlage via EPICS überwacht und gesteuert. Somit stehen die Daten all dieser und untergeordneter Elemente für ML-Ansätze zur Verfügung [44].

5.1.2. Control System Studio

Die Position des Channel-Access-Clients kann durch Schnittstellen von externen Software-Werkzeugen eingenommen werden. Am S-DALINAC wird hierbei vor allem auf Control

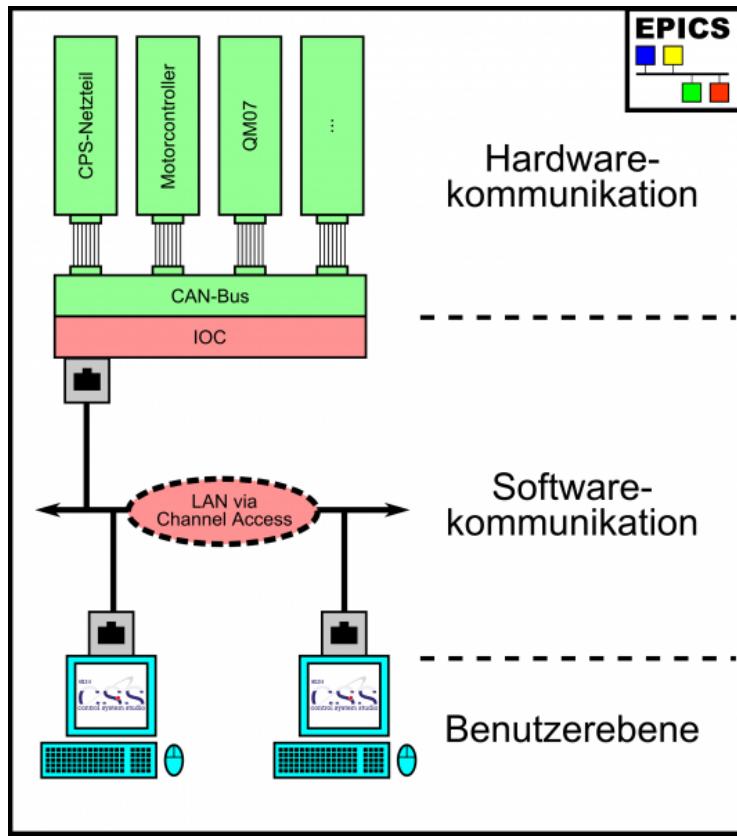


Abbildung 5.1.: Übersicht über ein EPICS-basiertes Kontrollsystem. Es wird in die drei Stufen Hardwarekommunikation, Softwarekommunikation und Benutzerebene eingeteilt. Die Hardwarekommunikation beinhaltet u.a. den Datentransfer der Hardwarekomponenten über CAN-Bus. Die Schnittstelle zur Softwarekommunikation wird über IOCs verwaltet. Die Softwarekommunikation beinhaltet den Datentransfer durch das Channel-Access-Protokoll. Zur Benutzerebene zählen unter anderem CSS-basierte Operator-Interfaces (OPIs) und externe Geräte.

System Studio (CSS) [45] und intern entwickelter Software zurückgegriffen.

CSS ist ein auf Eclipse basierendes Java-Framework für Kontrollsystemoberflächen, welches unter anderem eine grafische Aufbereitung und Weiterverarbeitung von Prozessvariablen ermöglicht. Die grafischen Benutzeroberflächen werden als Operator Interfaces

(OPIs) bezeichnet. Mit Widgets kann die Überwachung und Steuerung von Geräten weiter vereinfacht werden. Zudem wird auch die Implementierung intern entwickelter Skripte unterstützt. In dieser Arbeit wird vor allem auf das folgende Leuchtschirmbilderanalyse-OPI zurückgegriffen.

5.1.3. Area-Detektor

Am S-DALINAC wird das Area-Detektor-OPI zur Auswertung von Leuchtschirmbildern verwendet [43]. Die Oberfläche des OPI ist in Abb. 5.2 dargestellt. Im Zentrum befindet sich das Kamerabild des untersuchten Leuchtschirms, auf dem die Intensitätsverteilung des Elektronenstrahls sichtbar wird. Rechts und über dem Monitor werden das vertikale und horizontale Strahlprofil dargestellt. Rechts neben dem vertikalen Strahlprofil werden jeweils die zeitlichen Verläufe des horizontalen und vertikalen Strahlschwerpunktes und der Strahlausdehnung angezeigt.

Das OPI bietet eine Umrechnung von Pixeln in Millimeter. Die Normierung wird mit Hilfe der Leuchtschirmmarkierungen durchgeführt. Zudem kann der Hintergrund ohne Strahl aufgenommen und vor der Auswertung eines Bildes mit Strahl abgezogen werden. Schließlich muss noch eine ROI (Region of Interest) festgelegt werden. Werte außerhalb der ROI werden nicht berücksichtigt. Es muss sicher gestellt werden, dass sich der Strahl auf dem Leuchtschirm in diesem Bereich befindet. Zusätzlich kann mit dem OPI im unteren mittleren Bereich die Helligkeitsintensitätsschwelle eingestellt werden, ab der Pixel ausgewertet werden.

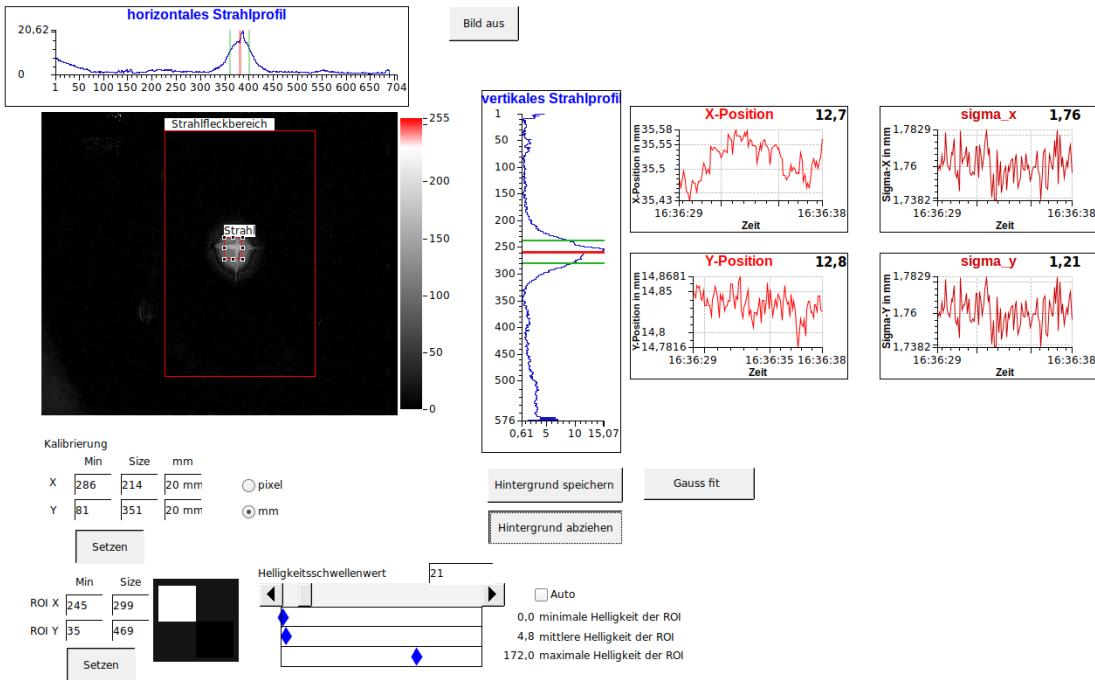


Abbildung 5.2.: Dargestellt ist das am S-DALINAC verwendete OPI zur Auswertung der Leuchtschirmbilder, der sogenannte Area-Detektor. Im Zentrum befindet sich das Kamerabild des untersuchten Leuchtschirms. Rechts und über dem Monitor werden das horizontale und vertikale Strahlprofil dargestellt. Im rechten Bereich werden die zeitlichen Verläufe der Schwerpunktspositionen x und y sowie die Standardabweichungen σ_x und σ_y des horizontalen bzw. vertikalen Strahlprofils dargestellt. Im unteren Bereich des Leuchtschirms befinden sich weitere Funktionen, zu denen eine Kalibrierung (Pixel zu Millimeter), das Setzen der ROI und das Festlegen eines Helligkeitsschwellenwertes gehören.

5.2. Messaufbau

Zunächst wird jenes System M aus d Magnetelementen im Injektor gewählt, das später durch Surrogat-Modelle approximiert werden soll. Die Auswahl der Systeme wird in Kap. 5.4 erläutert. Pro Magnetelement werden l Stromsetzwerte gewählt, welche die Inputparameter x der Datenaufnahme darstellen. Es ergeben sich somit $N = l^d$ Stromsetzwertkombinationen λ_{in} für die Magnete, die im Folgenden auch als Einstellungen bezeichnet werden. Weiterhin werden mit einem Leuchtschirm m Strahleigenschaften pro Einstellung erfasst, welche die Outputparameter y darstellen. Diese Messwerte $\lambda_{\text{out}} = M(\lambda_{\text{in}})$ bilden zusammen mit den Einstellungen λ_{in} die N Trainingsdaten $\lambda = (\lambda_{\text{in}}, \lambda_{\text{out}})$. Im Folgenden wird die Datenaufnahme für die Erstellung der Trainingsdaten erläutert.

Der Messaufbau der Datenaufnahme ist in Abb. 5.3 schematisch dargestellt. Die Datenaufnahme wird von einem externen Gerät im Kontrollraum des S-DALINAC gestartet. Das erlaubt die gleichzeitige Überwachung des Messskriptes MEAS und der Leuchtschirmkamera.

Zur Messdatenaufnahme werden die erstellten Python-skripte PRE_MEAS, MEAS und POST_MEAS verwendet. In dem PRE_MEAS-Skript werden die PVs der Inputparameter x hinterlegt. Zusätzlich werden die PVs Outputparameter y festgelegt. Wie in Abs. 5.1.1 erläutert, stehen hierfür eine Vielzahl von PVs zur Verfügung. In den nachfolgenden Messreihen werden Stromsetzwerte von Magneten variiert und Strahlparameter (QoIs) ausgelesen, welche durch Analyse eines Leuchtschirms mithilfe des Area-Detektors ermittelt wurden. Weiterhin müssen die Bereiche und Messpunkte l pro Inputparameter festgelegt werden. Anschließend wird die Liste der N Einstellungen erstellt. Im Allgemeinen ist es nicht notwendig, für jeden Eingangsparameter die gleiche Anzahl an Setzwerten zu wählen.

Das MEAS-Skript steuert die Messung. Für jede Einstellung λ_{in} wird ein EPICS-Befehl an das Kontrollsysteem gesendet, mit welchem die Stromsetzwerte eines oder mehrerer Elemente verändert werden. Anschließend wird das Skript pausiert, um die Reaktionszeit t_R des Systems abzuwarten. Die Reaktionszeit wird in Abs. 5.3.1 diskutiert. Die Änderung des Magnetfeldes der betroffenen Elemente führt zu einer Änderungen der Strahlparameter auf dem untersuchten Leuchtschirm. Nach Abwarten der Zeit t_R werden die PVs und somit die Werte der zuvor festgelegten Outputparameter ausgelesen und auf dem externen Gerät gespeichert. Dieser Vorgang wird für alle Einstellungen, die in PRE_MEAS festgelegt wurden, wiederholt.

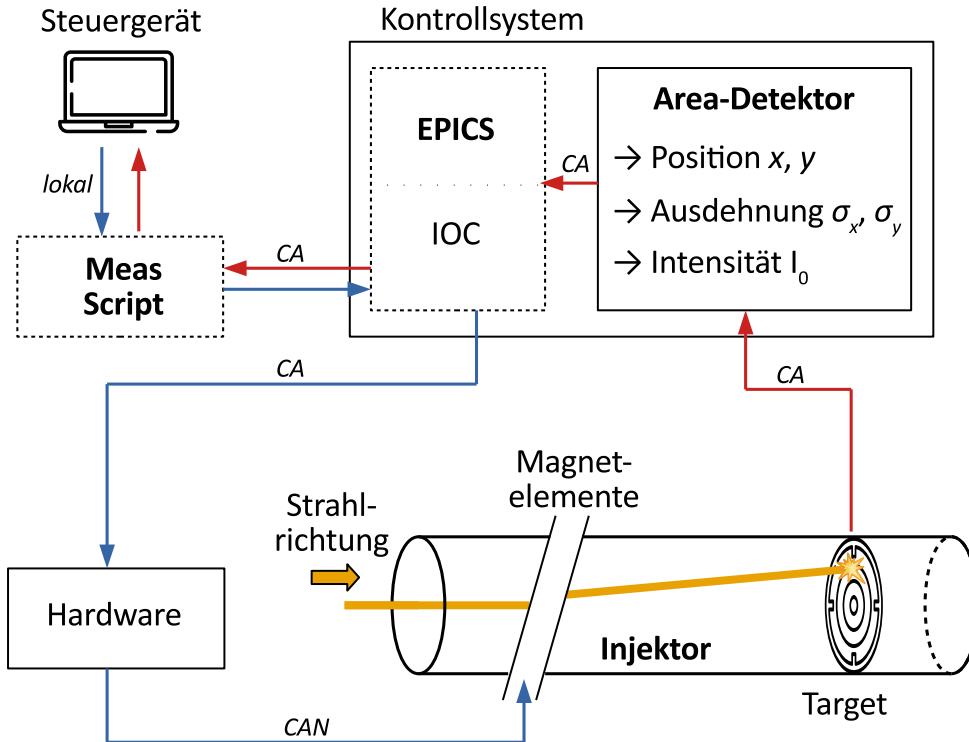


Abbildung 5.3.: Messaufbau zum Data-Mining am Injektor des S-DALINAC. Es wird farblich zwischen dem Setzen einer Einstellungen für die Inputparameter (blau) und der Berechnung und Abfrage der Werte der Qols (rot) unterschieden. Über das pythonbasierte MEAS-Skript werden Ströme verschiedener Magnetelemente gesetzt. Dies führt zu einer Veränderung der Strahleigenschaften auf dem untersuchten Leuchtschirm. Die Bilder werden mit dem Area-Detektor ausgewertet. Die berechneten Qols werden über das Kontrollsysteem zurückgegeben und gespeichert. Die Datenübertragung wird über das Channel-Access-Protokoll (CA) oder über CAN-Befehle (CAN) ausgeführt.

Das Post_MEAS-Skript dient der Konvertierung der N aufgenommen Trainingsdaten λ für die anschließende Konstruktion eines Surrogat-Modells.

5.3. Beobachtungen und Optimierungen

Im Folgenden werden mehrere Testreihen von Daten aufgenommen, um die Datenaufnahme zu optimieren. Hierfür wird die Stromstärke verschiedener Magnetelemente verändert und die Schwerpunktsposition des Strahls auf einem Leuchtschirm beobachtet.

Zunächst muss die Reaktionszeit des Systems erfasst werden. Es gilt die Dauer der Datenaufnahme so gering wie möglich zu halten. Anschließend wird die Auswirkung von Hystereseverhalten der Magnete auf die Datenaufnahme diskutiert.

5.3.1. Reaktionszeit des Systems

Die Messzeit an einer Beschleunigeranlage mit einer strahlzerstörenden Messung ist begrenzt, da in dieser Messperiode wichtige Zeit für Experimentierstätten verloren geht.

Wird ein Befehl zum Setzen einer Einstellung an die Magnetelemente versendet (vergleiche Abb. 5.3) vergeht die Reaktionszeit t_R bis Änderungen im System wirksam werden und die Strahlparameterwerte erfasst werden können. Hierzu zählt die Zeit t_{EPICS} für die Kommunikation innerhalb des Kontrollsystems mittels EPICS, die Zeit t_I , die die Netzteile zur Regelung des Stroms um den angeforderten Betrag ΔI benötigen und die Zeit t_{AD} , die das Area-Detektor OPI benötigt, um die Strahlparameter aus den Kamerabildern zu ermitteln. Es folgt der Zusammenhang:

$$t_R = t_I + t_{AD} + t_{EPICS}. \quad (5.1)$$

Zur Abschätzung der Reaktionszeit wurden die Ströme eines Steerers (IOSV06), Quadrupolmagnets (IOQU06) und eines Solenoids (IOLE03) in einer Messung um jeweils drei Werte für ΔI verändert und die horizontale und vertikale Schwerpunktsposition des Strahls mit dem Area-Detektor OPI bestimmt. Die Messung für den Quadrupolmagnet IOQU06 mit $\Delta I = 3,5 \text{ A}$ ist in Abb. 5.4 exemplarisch dargestellt. Die Ergebnisse der Messung für alle Magnetelemente sind in Tab. 5.1 dargestellt.

Hierbei wird die maximale Differenz ΔI , um die der Strom der einzelnen Elemente variiert werden kann, dadurch beschränkt, dass der Strahl immer auf dem Leuchtschirm bleiben muss. Da in der Messung nicht zwischen t_{AD} und t_{EPICS} unterschieden werden kann, wird die Systemzeit $t_S = t_{AD} + t_{EPICS}$ eingeführt, die die Trägheit des Systems beschreibt.

I0QU06 | $\Delta I = 3.5 \text{ A}$ | $t_S = 0.93 \text{ s}$ | $t_I = 0.79 \text{ s}$ | $t_R = 1.72 \text{ s}$

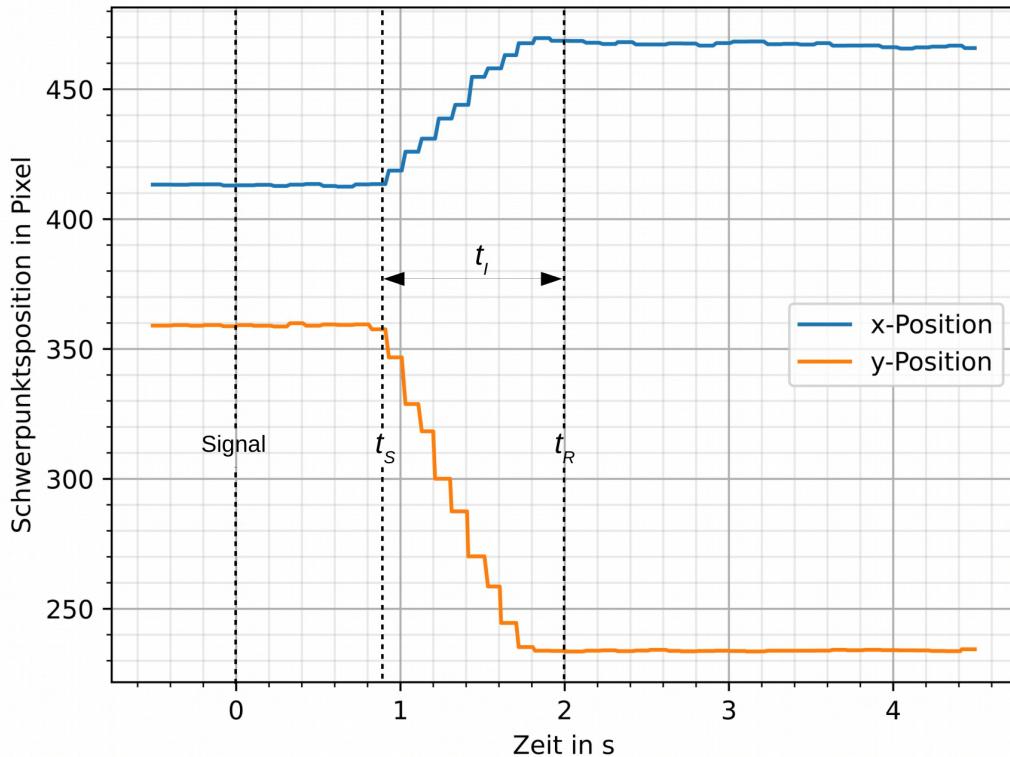


Abbildung 5.4.: Messung zur Bestimmung der Reaktionszeit für den Quadrupolmagneten I0QU06. Zum Zeitpunkt $t = 0$ wurde ein Signal an das Netzteil des Magneten zur Änderung des Stroms um die Differenz $\Delta I = 3,5 \text{ A}$ gesendet. Eine erste Reaktion des Systems kann nach $t_S = 0,93 \text{ s}$ beobachtet werden. Zur Änderung des Stroms benötigt das Netzteil $t_I = 0,79 \text{ s}$. Die vollständige Reaktionszeit beträgt somit $t_R = 1,72 \text{ s}$.

Hierbei ist t_S unabhängig von der Stromdifferenz. Aus den Werten aus Tab. 5.1 folgt für die Systemzeit $t_S = 0,88(3) \text{ s}$.

Die Systemzeit t_S stellt die Mindestzeit der Datenaufnahme eines Datenpunktes dar. Sie kann nicht verbessert werden, ohne die Infrastruktur des Kontrollsysteams zu verändern. Die Zeit t_I zur Regelung des Stroms eines Magnetnetzteils ist von der Stromdifferenz ΔI abhängig. Um die Reaktionszeit des Systems abschätzen zu können, muss daher die

Tabelle 5.1.: Bestimmung der Reaktionszeit t_R eines Steerers (IOSV06), Quadrupolmagnets (IOQU06) und eines Solenoids (IOLE03) in Abhängigkeit der Stromdifferenz ΔI . Die Reaktionszeit setzt sich aus der Trägheit des Systems t_S und der Zeit t_I zusammen, die das Netzteil zur Änderung des Stroms um die Differenz ΔI benötigt (vergleiche Abb. 5.4).

Magnetelement	ΔI in A	t_S in s	t_I in s	t_R in s
IOSV06	0,07	0,82	0,10	0,92
	0,14	0,85	0,00	0,85
	0,35	0,87	0,10	0,97
IOQU06	1,00	0,90	0,18	1,08
	2,50	0,89	0,60	1,49
	3,50	0,93	0,79	1,72
IOLE03	0,50	0,89	0,05	0,94
	3,00	0,92	0,69	1,61
	5,60	0,84	1,42	2,25

Stromdifferenz ΔI bekannt sein.

5.3.2. Hysterese

Die Hysterese von Magneten und metallischen Elementen stellt ein Problem für Surrogatmodelle dar. Die Reproduzierbarkeit eines Systemzustandes bei gleichen Parametereinstellungen ist eine wichtige Voraussetzung hierfür. Da in den folgenden Messungen ausschließlich Ströme von Magnetelementen variiert werden, sind Überlegungen zum Hystereseverhalten notwendig.

Hysterese bedeutet, dass die magnetische Flussdichte B eines ferromagnetischen Materials nicht nur von der Eingangsgröße (Magnetfeldstärke H , erzeugt durch Stromstärke I), sondern auch von ihrer Verlaufsgeschichte abhängt. Wird der Strom eines Ferromagneten zunächst erhöht und anschließend abgeschaltet, so bleibt im Allgemeinen eine Restmagnetisierung (Remanenz) übrig, d.h. eine magnetische Flussdichte ungleich Null.

Im Injektorbereich des S-DALINAC befinden sich Steerermagnete, Quadrupolmagnete und Solenoide (vergleiche Abs. 3.2.1). Aufgrund des fehlenden Eisenjochs zeigen die Steerer kein Hystereseverhalten auf. Sowohl die Quadrupolmagnete als auch die Solenoide nutzen Eisenkerne zur Formung des Magnetfeldes.

Es wird eine Messung zur Untersuchung der Hysterese mit jeweils einem repräsentativen Quadrupolmagneten und Solenoid des Injektors durchgeführt. Hierfür wird der Messaufbau aus Abb. 5.3 verwendet. Um Sättigungseffekte auf dem Leuchtschirmbild gering zu halten, wird der Strom des Elektronenstrahls auf $I = 20 \text{ nA}$ reduziert. Die Stromsetzwerte der Magnete werden so gewählt, dass der Strahl den Leuchtschirm nicht verlässt. Als Strahlparameter werden die x - und y -Positionen des Strahlschwerpunktes und die horizontale und vertikale Ausdehnung σ_x bzw. σ_y erfasst. Weiterhin werden im Folgenden zuvor integrierte Entmagnetisierungsskripte verwendet.

Insgesamt werden drei Szenarien getestet. Im *Best-Case*-Szenario wird der untersuchte Magnet zunächst entmagnetisiert und der Strom anschließend auf einen der Setzwerte eingestellt. Auf diese Weise kann der Einfluss von Hysterese sicher ausgeschlossen werden. Diese Messung wird als Referenz verwendet. Im *Worst-Case*-Szenario wird der Magnet zunächst entmagnetisiert und vor dem Einstellen eines Setzwertes auf den maximalen Strom eingestellt. In diesem Fall sollten maximale Hysterese-Effekte auftreten. Zusätzlich zu diesen Extremfällen wird das Regelverhalten der Operateure untersucht. Eine Entmagnetisierung ist oft zeitaufwendig (ca. 30 s), deshalb wird der Strom im Regelbetrieb vor dem Einstellen neuer Setzwerte zumeist nur auf Null eingestellt. Auf diese Weise sollen Hysterese-Effekte effizient reduziert werden. Im *Operateur*-Szenario wird ein Stromsetz Wert eingestellt, danach der Strom auf Null gesetzt und der Setzwert anschließend erneut eingestellt. Es werden die Strahleigenschaften jeweils nach dem Entmagnetisieren sowie dem Durchlaufen eines Szenarios bestimmt und die Differenz berechnet. Die Messreihen werden zweifach wiederholt. Als Unsicherheit wird die empirische Standardabweichung angegeben.

In Abb. 5.5 sind die Ergebnisse des untersuchten Quadrupolmagneten grafisch dargestellt. Der Quadrupolmagnet bewirkt eine geringe Verschiebung der y -Strahlschwerpunktsposition und zeigt einen starken Einfluss auf die Strahlausdehnung. Die sichtbare Abhängigkeit der horizontalen Strahlschwerpunktsposition x vom Strom I deutet auf einen dezentralen Einschuss in den Quadrupolmagneten hin. Die Änderung der Strahlparameter stimmen unter Berücksichtigung der berechneten Unsicherheiten überein. Die Hysterese des untersuchten Quadrupolmagneten ist somit zu gering, um gemessen werden zu können. Unter Verallgemeinerung der Ergebnisse von QU04 für alle Quadrupolmagnete wird geschlossen, dass die Hysterese-Effekte der Quadrupolmagnete für die nachfolgenden Messreihen vernachlässigt werden können.

Quadrupolmagnet QU04

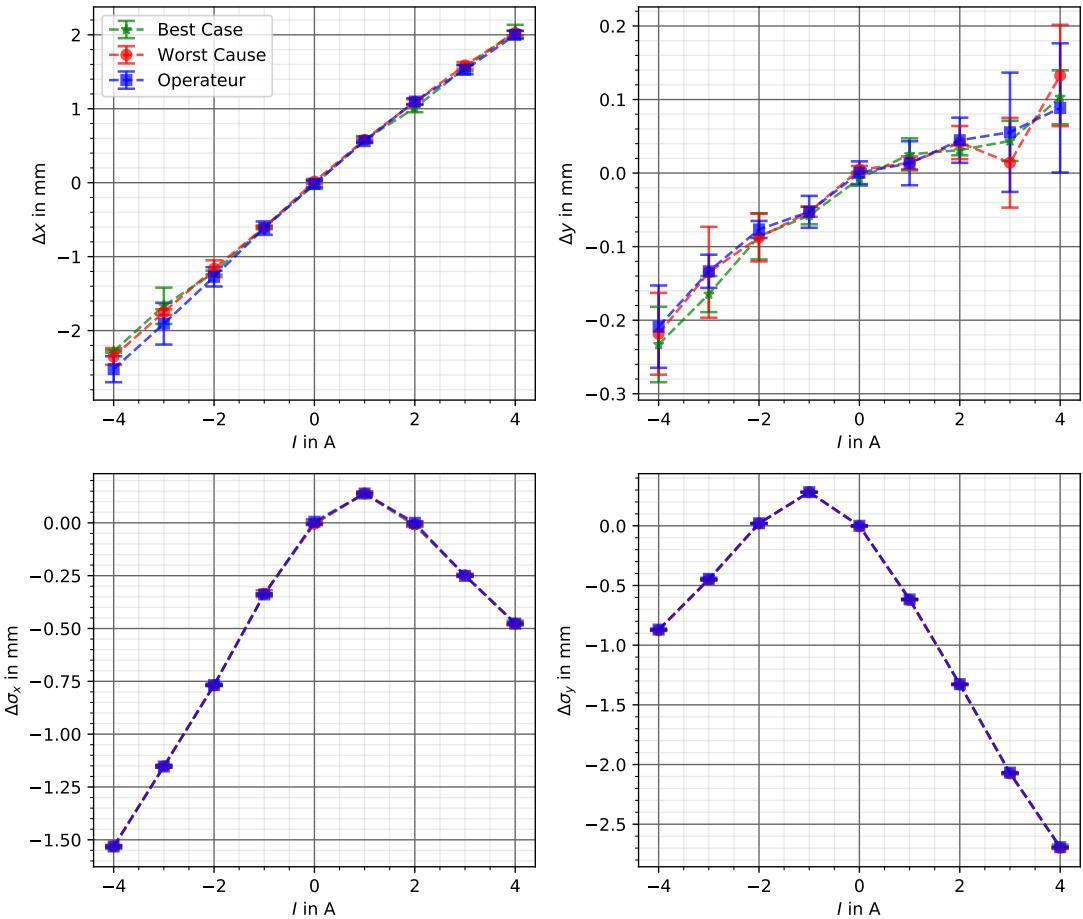


Abbildung 5.5.: Dargestellt ist die Änderung der Strahleigenschaften eines Quadrupolmagneten für eine Stromänderung von 0 A auf den in der Abbildung dargestellten Stromwert I nach verschiedenen Szenarien. Als Referenz dienen die Strahleigenschaften nach dem Entmagnetisierungsvorgang. Hierbei wurden die Änderungen des Strahlschwerpunktes Δx bzw. Δy und der Strahlausdehnung $\Delta \sigma_x$ bzw. $\Delta \sigma_y$ gemessen. Da das Worst-Case-Szenario keine messbaren Unterschiede zum Best-Case-Szenario aufweist, wird die Hysterese der Quadrupolmagnete im Folgenden vernachlässigt.

In Abb. 5.6 sind die Ergebnisse des untersuchten Solenoids grafisch dargestellt. Aufgrund seines komplizierten Verhaltens (vergleiche Abs. 3.2.2) nimmt das Solenoid Einfluss auf alle Strahlparameter. Im Gegensatz zum Quadrupolmagneten weist das Solenoid ein geringes Hystereseverhalten auf. Speziell für die Schwerpunktsposition können Abweichungen von bis zu 0,3 mm beobachtet werden. Für die Strahlausdehnung stimmen die Resultate des *Best-Case*- und *Worst-Case*-Szenarios weitgehend überein. Das erneute Nullen der Stromsetzwerte im *Operateur*-Szenario stellt eine effektive Kompensation der Hysterese dar.

Zwar sind am S-DALINAC Entmagnetisierungsmechanismen für Magnete mit Eisenkernen vorhanden, jedoch würde ein Entmagnetisieren der Magnete zwischen jedem Datenpunkt die Datenaufnahme massiv verlangsamen. Die Hysteresemessungen aus diesem Abschnitt haben gezeigt, dass die Remanenz der untersuchten Magnete vernachlässigbar gering ist. Aus diesen Gründen wird auf eine Entmagnetisierung zwischen Setzpunkten im Folgenden verzichtet. Zwischen und vor den nachfolgenden Messreihen wurden alle nicht verwendeten Magnetelemente entmagnetisiert.

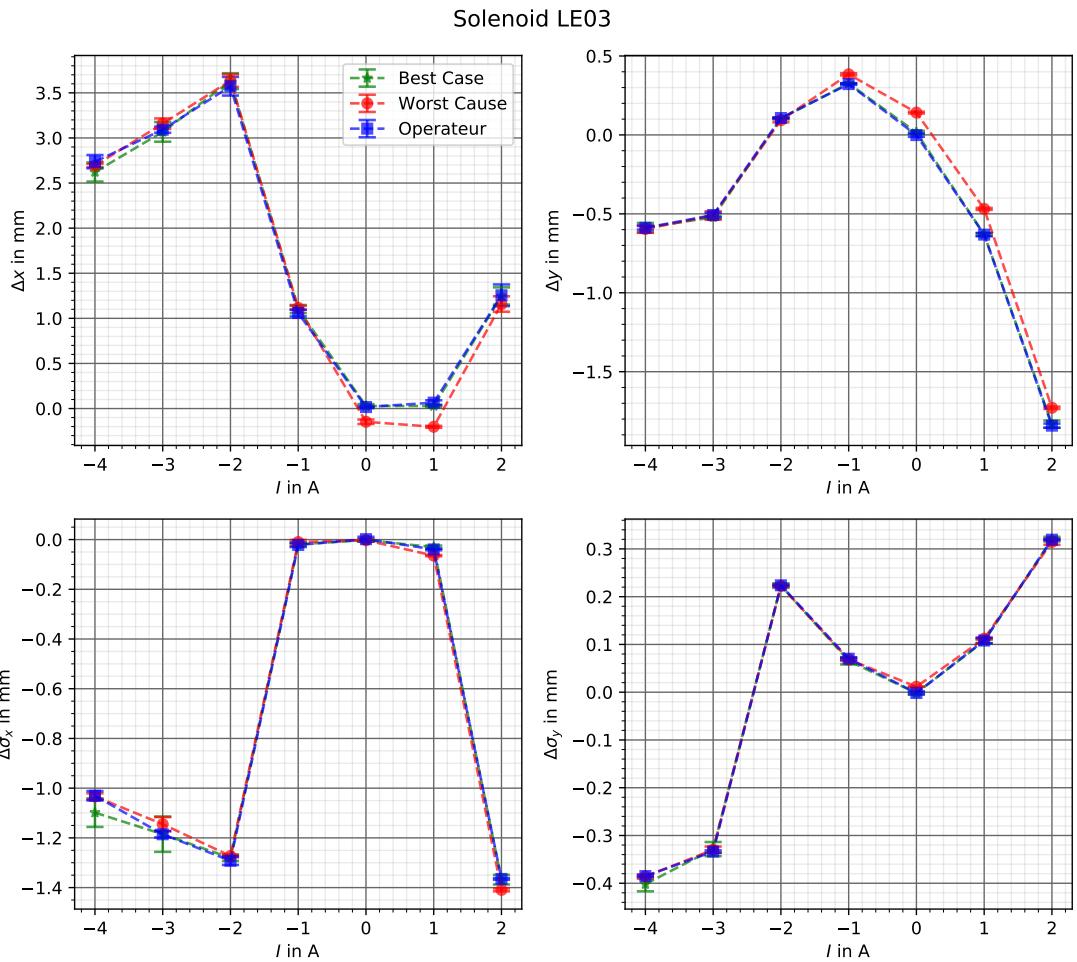


Abbildung 5.6.: Dargestellt ist die Änderung der Strahleigenschaften eines Solenoids für eine Stromänderung von 0 A auf den in der Abbildung dargestellten Stromwert I nach verschiedenen Szenarien. Die Änderungen der Schwerpunktspositionen Δx und Δy weisen geringe Hysterese auf. Das erneute Nullen der Stromsetzweite im Operateur-Szenario stellt eine effektive Kompensation der Hysterese dar.

5.4. Messreihen

Nahezu alle Stellgrößen und Diagnoseparameter des S-DALINAC liegen als PVs vor. Potentiell eignet sich somit jeder Bereich des S-DALINAC zur Datenaufnahme, aus welcher anschließend Surrogat-Modelle konstruiert werden können.

Der Injektorbereich bietet darüber hinaus Vorteile, die die Datenaufnahme begünstigen. Zum einen ist aufgrund der niedrigen kinetischen Strahlenergie $E_{\text{kin}} = 250 \text{ keV}$ die Datenaufnahme über lange Zeiträume bezüglich der Aufaktivierung des beleuchteten Leuchtschirms unkritisch. Außerdem ist der Strahl im Injektorbereich äußerst stabil, da er weniger Störungen (Vibrationen von Vakuumpumpen, Hochfrequenzschwankungen) ausgesetzt ist als z.B. im Hauptbeschleuniger. Darüber hinaus soll in dieser Arbeit auch die Möglichkeit für eine automatische Einstellung der Beschleunigeranlage untersucht werden. Hierfür bietet es sich ebenfalls an, im Injektorbereich zu starten. Zuletzt ist der Strahl hinter der thermionischen Quelle in guter Näherung gaußförmig. Wie in Abs. 5.1.3 dargestellt berechnet der Area-Detektor die Strahlausdehnung aus der empirischen Standardabweichung. Dieser Zusammenhang ist für eine gaußförmige Verteilung erfüllt.

Wie in Abs. 3.2.1 beschrieben, stehen den Operateuren am S-DALINAC im Injektorbereich 29 Magnetelemente zur Verfügung. Selbst bei nur 3 Setzpunkten pro Element entspräche das $3^{29} \approx 68,6 \cdot 10^{12}$ Kombinationen bzw. Messpunkten. Mit der Systemzeit $t_S = 0,88 \text{ s}$ aus Abs. 5.3.1 würde eine Mindestmesszeit von ca. 2 Mio. Jahren folgen. Eine Messreihe, die die Variation aller Elemente beinhaltet, ist somit ausgeschlossen. Wird der Injektor des S-DALINAC eingestellt, so optimieren Operateure derzeit nicht alle Magnetelemente gleichzeitig, sondern wählen Subsysteme von < 10 Elementen, die optimiert werden. Mit dieser Motivation wird ein Subsystem von 6 Elementen in einer ersten Messreihe untersucht.

Da im Folgenden nur Elemente der normal leitenden Injektorsektion behandelt werden, wird im weiteren auf den Präfix 'I0' in der Magnetelementbezeichnung zu Gunsten der Lesbarkeit verzichtet.

Messreihe M1

In der ersten Messreihe **M1** werden jeweils ein horizontaler Steerer (SH06) und vertikaler Steerer (SV06), drei Quadrupolmagnete (QU03-05) und ein Solenoid (LE03) untersucht.

Das gewählte System soll mit möglichst vielen Elementen und Trainingsdaten die erstmalige Konstruktion eines Surrogat-Modells und die detaillierte Analyse der involvierten Strahlführungselemente ermöglichen. Eine Grafik des Injektors mit den gekennzeichneten Elementen ist in Abb. 5.7 dargestellt. Es wurden bewusst Elemente vor der Chopper-Prebuncher-Sektion gewählt. Die Lochblende der Chopper-Prebuncher-Sektion lässt nur geringe Abweichungen des Strahls von seiner Sollbahn zu. Zudem wurde darauf geachtet, mindestens eines von jedem der verschiedenen Magnetelementtypen des Injektors zu verwenden. Es wurde ein Quadrupolmagnet eines Triplets und zwei Quadrupolmagnete eines weiteren Triplets gewählt, um Unterschiede untersuchen zu können. Die Stromwerte der Magnete stellen die Inputparameter x_i dar.

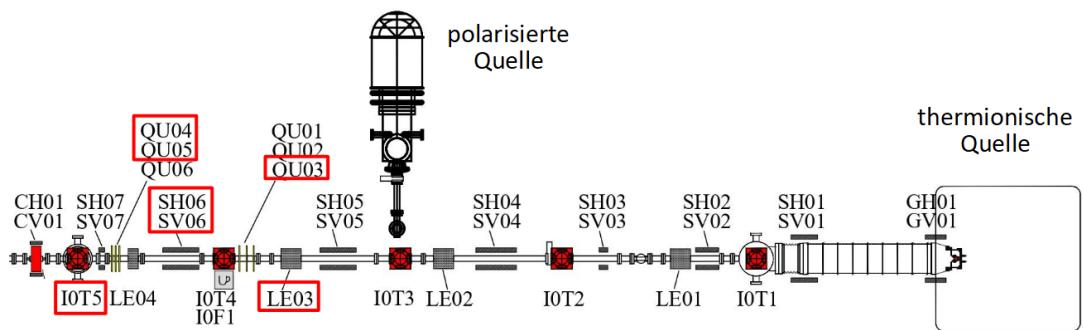


Abbildung 5.7.: Darstellung der Magnetelemente des Injektors im Bereich der ersten Messreihe. In der Messung M1 wird der Einfluss jeweils eines horizontalen Steerers (SH06) und vertikalen Steerers (SV06), dreier Quadrupolmagnete (QU03-05) und eines Solenoids (LE03) auf den Elektronenstrahl mit dem Beobachtungsleuchtschirm (T5) untersucht (alle rot markiert).

Der Leuchtschirm (T5) befindet sich hinter den Magnetelementen vor der Chopper-Prebuncher-Sektion. Als Outputparameter y_j werden die horizontale und vertikale Schwerpunktsposition x bzw. y sowie die horizontale und vertikale Ausdehnung σ_x bzw. σ_y des Strahls auf dem Leuchtschirm aufgenommen. Die Größen $\sigma_{x,y}$ werden als empirische Standardabweichung aus der Intensität der Pixel berechnet. Zusätzlich wird die mittlere Intensität I_0 des Strahls auf dem Leuchtschirm aufgenommen. Es wird untersucht, ob diese Größe als Indikator für die Intensität des Strahls herangezogen werden kann. Aufgrund von Sättigungsverhalten, Hintergrundrauschen und automatischer Helligkeitsanpassung durch die Kamera ist das fragwürdig.

Nachdem die Input- und Outputparameter festgelegt wurden, muss der Area-Detektor

kalibriert und normiert werden. Zur Kalibrierung wird ein Kamerabild ohne Strahl aufgenommen und fortlaufend von allen weiteren Bildern vor der Auswertung abgezogen. Die Kalibrierung ist in Abb. 5.8 dargestellt. Für die Normierung werden die Abstandsmarkierungen auf dem Leuchtschirm genutzt. Die Werte der Strahlschwerpunkte und -breiten werden in Millimeter umgerechnet.

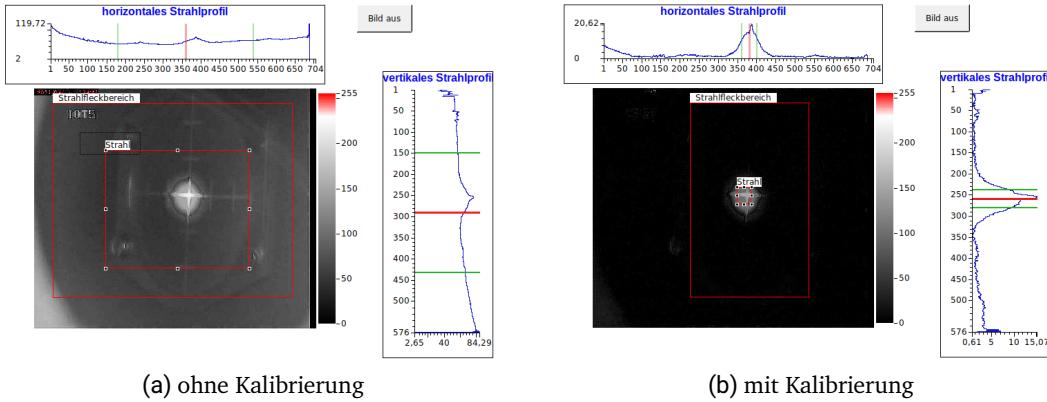


Abbildung 5.8.: Dargestellt ist das Leuchtschirmbild im Area-Detektor-OPI ohne (links) bzw. mit (rechts) Abzug eines zuvor aufgenommenen Hintergrundbildes. Die Verbesserung der Statistik ist im horizontalen und vertikalen Strahlprofil deutlich erkennbar.

In dieser Messreihe werden sieben Stromsetzwerte pro Magnetelement gewählt. Auf diese Weise ergeben sich für die sechs Magnete $N = 7^6 = 117.649$ Einstellungskombinationen λ_{in} . Es sei erwähnt, dass prinzipiell nicht jede Einstellung eines Magnets gegen alle Kombinationen der anderen Elemente erfasst werden muss. Jedoch spannen die so aufgenommenen Daten einen homogenen Modellraum auf. Um die Messdauer zu beschleunigen, wird die Wartezeit t_W an die Schrittweite ΔI der Stromstärken zwischen zwei Messpunkten angepasst. Für Schrittweiten $\Delta I < 0,75 \text{ A}$ wird $t_W = 1,4 \text{ s}$ und für $0,75 \text{ A} \leq \Delta I \leq 5 \text{ A}$ wird $t_W = 2,6 \text{ s}$ gewählt. Die Zeiten wurden gegenüber der Reaktionszeit t_R leicht erhöht um eventuelle Fluktuationen zu berücksichtigen. Hierbei wurde sich an den gemessenen Werten für t_R aus Abs. 5.3.1 orientiert. Die Messreihe wird mit dem in Abs. 5.2 beschriebenen Aufbau durchgeführt. Die Messdauer der Messreihe M1 betrug 52,2 h. Der Messprozesses ist in Abb. 5.9 dargestellt.



Abbildung 5.9.: Bilder des Leuchtschirms T5 einer Testmessung mit Strahl in einen Zeitraum von 28s. Die dargestellten Kamerabilder dienen der Beobachtung der Messung. Die Stromsetzpunkte der Magnetelemente müssen so gewählt sein, dass sich der Strahl für jede Einstellung auf dem Leuchtschirm befindet.

Messreihe M2

Anschließend wird die Messreihe **M2** durchgeführt. Die Durchführung ist ähnlich zu **M1**, so dass im Folgenden nur die Unterschiede erläutert werden.

Das Ziel dieser Messreihe ist zu untersuchen, inwiefern sich Surrogat-Modelle als Diagnosewerkzeug eignen. Vor Durchführung der Messreihe wurden die vier Solenoide (LE01-04) des Injektors neu ausgerichtet. In dieser Messung soll die Positionierung der Solenoide überprüft werden. Insbesondere wurde von Operateuren zuvor ein auffälliges Verhalten des Solenoids LE01 festgestellt, das untersucht werden soll. Hierzu zählen eine schwache Fokussierung und starke Ablenkung des Strahls durch das Solenoid. Die Elemente der Messung **M2** wurden in Abb. 5.10 markiert.

Aufgrund der geringeren Anzahl an Elementen kann die Schrittzahl der Stromsetzpunkte pro Element auf 10 erhöht werden. Somit wurden für $N = 10^4 = 10.000$ Magneteinstellungen die Strahlparameter auf dem Beobachtungsleuchtschirm gemessen. Die gewählten Stromsetzpunkte I sind in Tab. 5.2 dargestellt. Da die maximale Stromdifferenz eines Strahlführungselements nun $\Delta I = 5 \text{ A}$ beträgt, wurden die Wartezeit t_W der Datenaufnahme zwischen zwei Messpunkten angepasst. Für Schrittweiten $\Delta I < 0,75 \text{ A}$ wird $t_W = 1,4 \text{ s}$ und für $0,75 \text{ A} \leq \Delta I \leq 5 \text{ A}$ wird $t_W = 3 \text{ s}$ gewählt. Hierbei wurde sich erneut an den gemessenen Reaktionszeiten aus Abs. 5.3.1 orientiert. Die Messdauer der Messreihe **M2** betrug 4,4 h.

5.1.2.2 Strahlelemente des Injektors

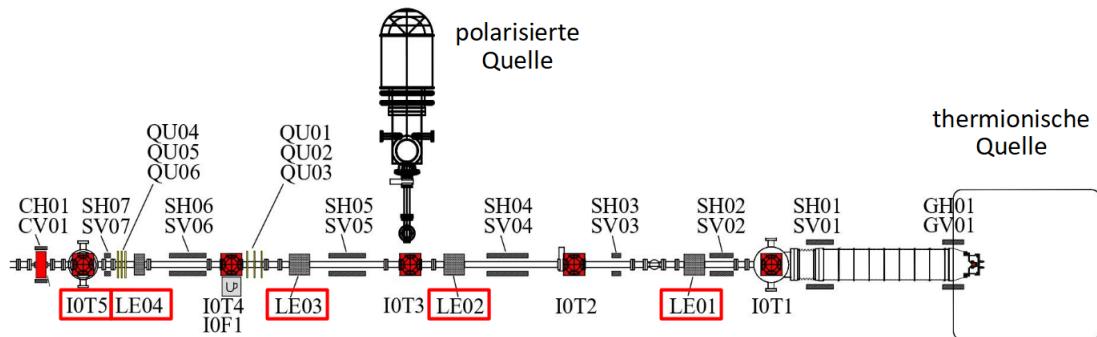


Abbildung 5.10.: Darstellung der Magnetelemente des Injektors im Bereich der zweiten Messreihe. In der Messung **M2** wird der Einfluss von vier Solenoiden (LE01-04) auf den Elektronenstrahl mit einem Leuchtschirm (T5) untersucht (alle rot markiert).

Messreihe M3

Schließlich wird die Messreihe **M3** durchgeführt. Das gewählte System dient als Basis für den Vergleich von Surrogat-Modellen mit nachfolgenden Simulationen.

Aufgrund einer Optimierung von Strahlführungselementen im Injektor des S-DALINAC wird hierfür eine neue Messung benötigt. Die Auswahl der verwendeten Elemente ähnelt jener aus Messung **M1**, weist aufgrund der Hinzunahme und Entfernung von Elementen im Injektorbereich im Rahmen von Umbauarbeiten jedoch geringe Unterschiede auf. Die untersuchten Strahlführungselemente sind in Abb. 5.11 eingezeichnet. Im Anschluss an die Messung wurde der verwendete Strahlführungsabschnitt ausführlich vermessen und die involvierten Magnete charakterisiert (vergleiche Kap. 7).

Es wurden in 5,3 Stunden insgesamt $N = 6^5 = 7.776$ Magneteinstellungen vermessen. Die eingestellten Stromwerte I sind in Tab. 5.2 dargestellt. Die Wartezeit wurde in Abhängigkeit der Differenz der Stromsetzwerte auf $t = 2\text{ s}$ bis $t = 4\text{ s}$ festgelegt.

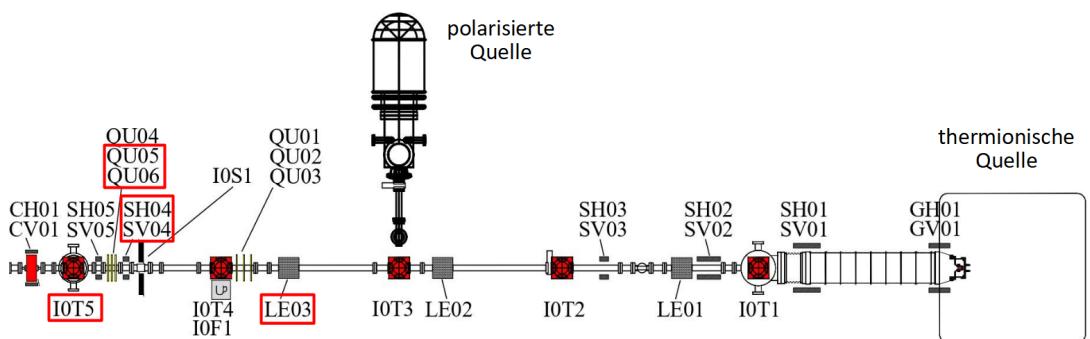


Abbildung 5.11.: Eingezeichnet sind die untersuchten Magnetelemente der dritten Messreihe. In der Messung **M3** wird die Wirkung jeweils eines horizontalen Steerer (SH04) und vertikalen Steerers (SV04), zweier Quadrupolmagnete (QU04-05) und eines Solenoid (LE03) auf den Elektronenstrahl mit einem Leuchtschirm (T5) untersucht (alle rot markiert).

Tabelle 5.2.: Dargestellt sind die gewählten Intervalle und Schrittzahlen der Magnetströme der Messungen **M1**, **M2** und **M3** der normal leitenden Injektorsektion '10'. Die Teilbezeichnungen 'SH' und 'SV' kennzeichnen horizontale bzw. vertikale Steerer. Bei der Abkürzung 'LE' handelt es sich um ein Solenoid, bei 'QU' um einen Quadrupolmagneten. Die Stromstärke der einzelnen Elemente wurde um ΔI von I_{MIN} bis I_{MAX} in l Schritten variiert. Pro Messung wurden für d involvierte Magnetelemente $N = d^l$ Trainingsdaten aufgenommen.

Messung M1

Magnetelement	I_{MIN} in A	I_{MAX} in A	ΔI in A	l
SV06	-0,3	0,3	0,6	7
SH06	-0,25	0,15	0,4	7
LE02	-2,5	2,5	5	7
QU04	-0,5	0,5	1	7
QU05	-0,5	0,5	1	7
QU06	-0,5	0,5	1	7

Messung M2

Magnetelement	I_{MIN} in A	I_{MAX} in A	ΔI in A	l
LE01	-0,5	0,5	1	10
LE02	-3	3	6	10
LE03	-2,5	2,5	5	10
LE04	-2	2	4	10

Messung M3

Magnetelement	I_{MIN} in A	I_{MAX} in A	ΔI in A	l
LE03	-1,5	1,5	3	6
SH04	-2	2	4	6
SV04	-2	2	4	6
QU05	-1,5	1,5	3	6
QU06	-1,5	1,5	3	6

6. Auswertung der Surrogat-Modelle

Nach der erfolgreichen Datenaufnahme am Injektor des S-DALINAC können aus den aufgenommenen Datensätzen Surrogat-Modelle konstruiert werden. Die Konstruktion, Bewertung und anschließende Analyse dieser Modelle ist Gegenstand dieses Kapitels.

6.1. Konstruktion

In diesem Teilkapitel wird die Konstruktion und Bewertung eines Surrogat-Modells anhand der Messreihe **M1** aus Abs. 5.4 beschrieben.

Für die Messreihe **M1** liegen $N = 117.649$ Trainingseinstellungen $\lambda_{\text{in}} \in \mathbb{R}^{N \times d}$ für $d = 6$ Inputparameter und die gleiche Anzahl von Trainingsresultaten $\lambda_{\text{out}} \in \mathbb{R}^{N \times l}$ für $l = 5$ aufgenommene QoI vor (vergleiche Tab. 5.2). Die Trainingseinstellungen λ_{in} und Trainingsresultate λ_{out} bilden die Trainingsdaten $\lambda = (\lambda_{\text{in}}, \lambda_{\text{out}})$.

Der Algorithmus aus Abs. 4.2 bietet Wahlmöglichkeiten, die durch die Anzahl der Trainingsdaten λ teilweise beschränkt werden. Hierzu zählen die Trunkierungsordnung p der Polynom-Chaos-Expansionen, die Wahl der orthogonalen Basisfunktionen innerhalb der PCE und die Wahl der Regressionsmethode.

Wie in Abs. 3.1.4 dargestellt, ist die Wahl der optimalen Polynombasisfunktion von der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Zufallsvariablen x abhängig. Hierbei ersetzen die Inputparameter die Zufallsvariablen. Da die Werte der Inputparameter gleichverteilt generiert wurden, werden dem Wiener-Askey-Schema [35] folgend (vergleiche Tab. 3.1) Legendre-Polynome als Basisfunktionen gewählt.

Die Wahl der Regressionsmethode ist von der Dimension d der Trainingseinstellungen λ_{in} abhängig. Eine effektive Regressionsmethode ist die Methode der kleinsten Quadrate. Um diese Methode auf Polynom-Chaos-Expansionen der Ordnung p anwenden zu können,

müssen mindestens $p + 1$ Messpunkte pro Eingangsgröße aufgenommen werden. Andernfalls ist das System unterbestimmt und die Regression nicht durchführbar. Es wurden sieben Setzpunkte pro Inputparameter eingestellt. Mit der Wahl der kleinsten Quadrate als Regressionsmethode ist die maximale Trunkierungsordnung auf $p_{MAX} = 6$ begrenzt. Wie im Folgenden erläutert wird, ist die maximale Trunkierungsordnung p_{MAX} im Allgemeinen nicht die optimale Ordnung.

6.1.1. Über- und Unteranpassung

Ein Surrogat-Modell mit der maximal möglichen Trunkierungsordnung p_{MAX} führt meist zu einer besseren Repräsentation der Trainingsdaten, aber nicht zwangsläufig zur besten Repräsentation des realen Systems. Eine Trunkierungsordnung p wird als zu hoch bezeichnet, wenn die bestimmten Polynom-Chaos-Expansionen sogenannte irrelevante Freiheitsgrade beinhalten. Irrelevante Freiheitsgrade sind nicht notwendig, um den Zusammenhang der Größen des realen Systems abzubilden, sondern bilden stattdessen statistisches Rauschen der Parameter ab. Man spricht hierbei von Überanpassung. Ist die Trunkierungsordnung zu niedrig, spricht man von Unteranpassung. Eine Illustration der Problematik der Unter- und Überanpassung von Trainingsdaten ist in Abb. 6.1 dargestellt.

6.1.2. Validierungsdiagramm

Es ist konzeptionell schwer, die optimale Trunkierungsordnung zu ermitteln. Zusätzlich muss beachtet werden, dass die Anzahl der PCE-Terme und somit die Laufzeit des Konstruktionsalgorithmus fakultativ mit der Trunkierungsordnung skaliert (vergleiche Gl. (3.7)). Aus den genannten Gründen wird das folgende Verfahren verwendet.

Zunächst wird ein Surrogat-Modell für die Trunkierungsordnung $p = 0$ konstruiert. Anschließend wird die mittlere Abweichung zwischen den Trainingsresultaten λ_{out} und den Werten der konstruierten Polynom-Chaos-Expansionen $\mu(\lambda_{in})$ berechnet. Zusätzlich werden die Werte λ_{out} gegen $\mu(\lambda_{in})$ in einem Validierungsdiagramm aufgetragen. Anhand dieser Maßstäbe wird die Qualität des Modells beurteilt. Ist die Repräsentation nicht ausreichend genau, wird die Trunkierungsordnung erhöht und der Prozess wiederholt. Ist die Qualität des Modells ausreichend, wird der Prozess beendet. Führt die Erhöhung der Ordnung zu keiner Verbesserung der mittleren Abweichung, so wird der Prozess ebenfalls beendet.

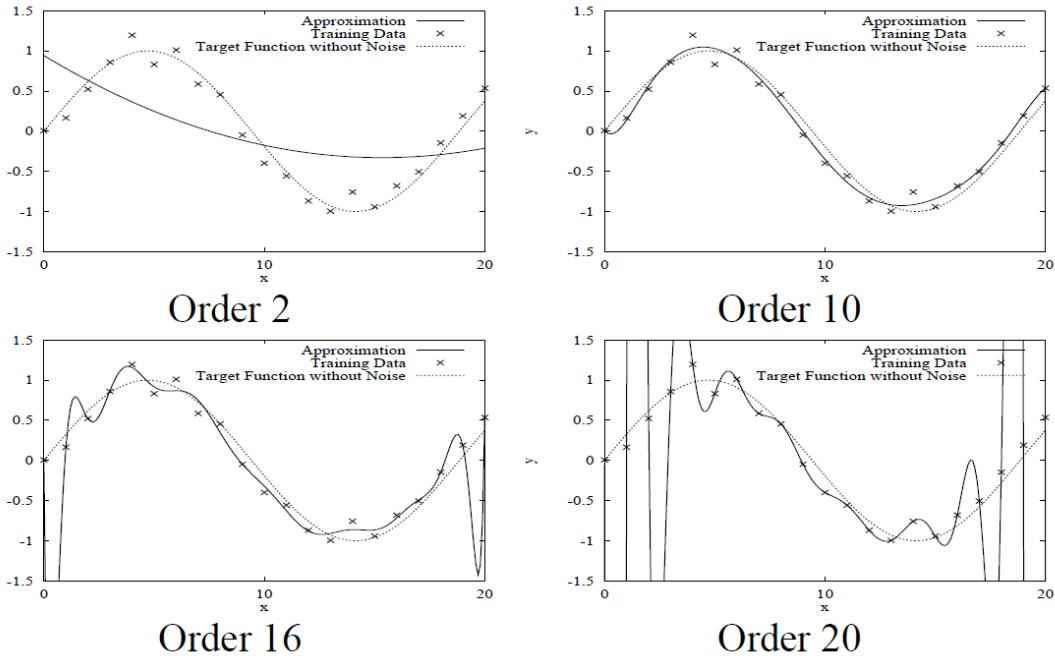


Abbildung 6.1.: Dargestellt ist das Problem der Unter- und Überanpassung anhand eines Beispiele. Mit einer Zielfunktion, überlagert mit gaußschem Rauschen, wurden Trainingsdaten generiert. An diese Daten werden Funktionen verschiedener Ordnungen angepasst. Eine Funktion 2. Ordnung hat nicht genug Freiheitsgrade, um die Zielfunktion zu repräsentieren. Man spricht hierbei von Unteranpassung. Die Funktionen 16. und 20. Ordnung haben irrelevante Freiheitsgrade, die das statistische Rauschen abbilden. Man spricht von Überanpassung. Bild entnommen aus [46].

In Abb. 6.2 ist das Validierungsdiagramm der horizontalen Schwerpunktsposition x des Strahls für die 1., 3. und 5. Ordnung exemplarisch dargestellt. Hierbei werden die Trainingsresultate λ_{out} der Messreihe gegen die aus den Trainingseinstellungen λ_{in} berechneten Werte des Surrogat-Modells $\mu(\lambda_{\text{in}})$ aufgetragen. Bei perfekter Repräsentation liegen diese Punkte auf der Winkelhalbierenden (gestrichelte schwarze Linie). Es ist deutlich zu erkennen, dass eine Erhöhung der Trunkierungsordnung von $p = 1$ auf $p = 3$ zu einer verbesserten Repräsentation der x -Position des Strahls führt. Eine weitere Erhöhung der Trunkierungsordnung von $p = 3$ auf $p = 5$ scheint zu keiner signifikanten Verbesserung

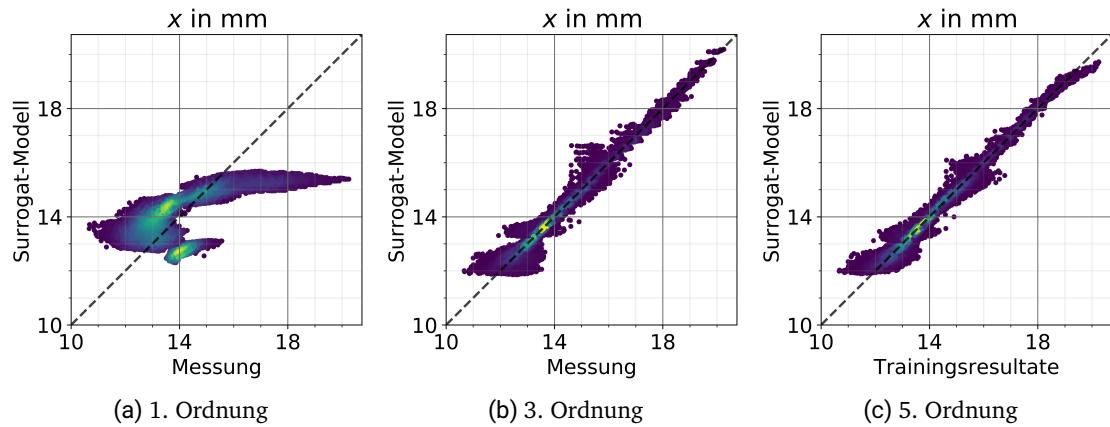


Abbildung 6.2.: Dargestellt ist das Validierungsdiagramm der horizontalen Schwerpunktsposition x des Strahls für die 1., 3. und 5. Ordnung. Es werden die Trainingsresultate λ_{out} der Messung **M1** gegen die aus den Trainingseinstellungen λ_{in} berechneten Werte des Surrogat-Modells $\mu(\lambda_{\text{in}})$ aufgetragen. Wenn für eine Einstellung das Resultat der Messung und des Surrogat-Modells exakt übereinstimmen, so liegt dieser Datenpunkt auf der Winkelhalbierende (gestrichelte Linie).

zu führen. Es besteht die Gefahr der Überanpassung.

In Abb. 6.3 sind die berechneten mittleren Abweichungen der QoIs über die Trunkierungsordnung aufgetragen. Die berechneten Werte sind in Tab. A.1 aufgelistet. Der Strahlenschwerpunkt in x - und y -Richtung kann besser wiedergegeben werden als die restlichen QoIs. Die mittlere Abweichung der Strahlausdehnungen σ_x und σ_y nimmt bis zur 3. Ordnung schnell, danach nur noch langsam ab. Die mittlere Abweichung der Intensität I_0 des Strahls auf dem Leuchtschirm nimmt langsam mit steigender Trunkierungsordnung ab.

Um Überanpassung zu vermeiden, wird das Surrogat-Modell 3. Ordnung für die weitere Untersuchung gewählt. Hiermit wird die Strahlposition x bzw. y mit einer mittleren absoluten Abweichung von 0,14 mm bzw. 0,15 mm außerordentlich gut wiedergegeben. Dies entspricht einer relativen Abweichung von 1,55 % bzw. 1,51 %. Für die Strahlbreite σ_x bzw. σ_y beträgt die Abweichung 0,36 mm bzw. 0,30 mm. Die relative Abweichung von I_0 beträgt 16,42 %. Die Validierungsdiagramme des Surrogat-Modells 3. Ordnung sind in Abb. 6.4 dargestellt.

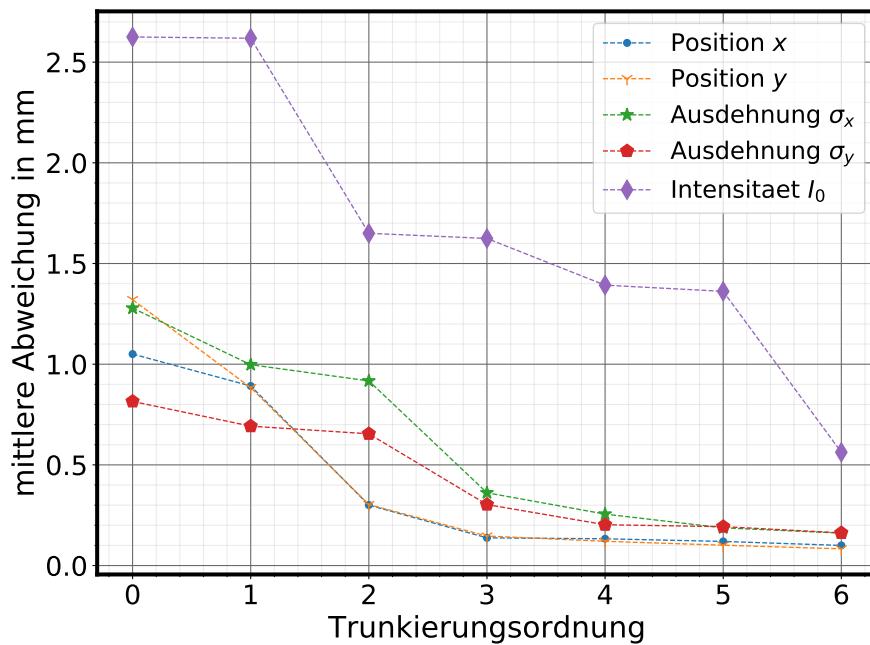


Abbildung 6.3.: Dargestellt ist die mittlere Abweichung der QoIs zwischen den Trainingsresultaten λ_{out} und den berechneten Werten $\mu(\lambda_{\text{in}})$ des Surrogat-Modells in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung p für Messreihe **M1**. Um Überanpassung zu vermeiden wird das Surrogat-Modell 3. Ordnung für die weitere Auswertung verwendet.

6.1.3. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Zusätzlich zu den Validierungsdiagrammen können die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen $\rho(x)$ (probability density functions - PDFs) weiteren Aufschluss über die Messdaten und die Qualität der Surrogat-Modelle geben. Die PDFs der QoIs des Surrogat-Modells 3. Ordnung sind in Abb. 6.5 dargestellt.

Anhand der x - und y -Position des Strahlschwerpunktes ist zu erkennen, dass der Strahl auf dem Leuchtschirm auf einer Position zentriert ist. Für die Schwerpunktsposition des Strahls ist eine deutliche Konzentration bei $x = 13,3$ mm bzw. bei $y = 12,1$ mm erkennbar. Das Maximum der PDF der Strahlausdehnungen befindet sich bei $\sigma_x = 2,4$ mm und

VALIDIERUNG

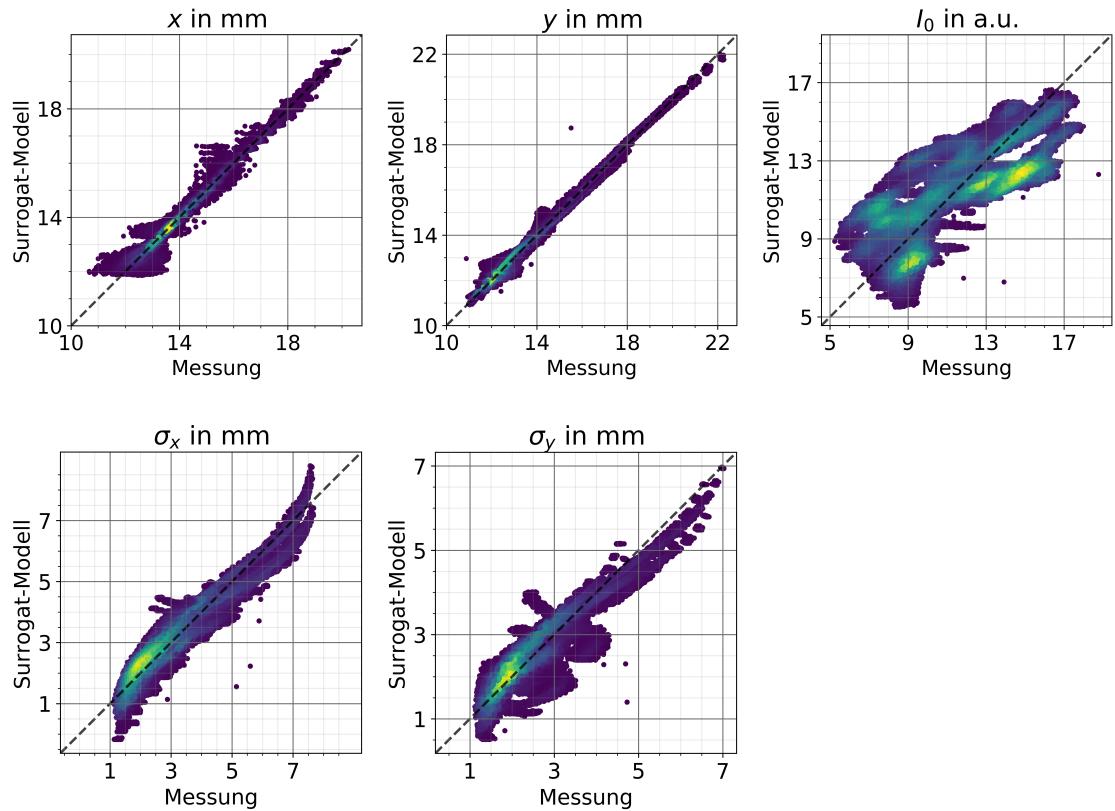


Abbildung 6.4.: Dargestellt sind die Validierungsdiagramme der Qols für das Surrogat-Modell 3. Ordnung. Die x - und y -Position des Strahlschwerpunktes werden mit einer mittleren Abweichung von 0,14 mm bzw. 0,15 mm sehr präzise wiedergegeben. Für σ_x und σ_y sind die mittleren Abweichungen mit 0,36 mm bzw. 0,30 mm akzeptabel. Die Intensität I_0 wird mit einer relativen Abweichung von 16,42 % ungenau durch das Surrogat-Modell reproduziert.

$\sigma_y = 2,1 \text{ mm}$. Zudem können mit Hilfe von $\rho(x)$ die Validierungsdiagramme gewichtet werden.

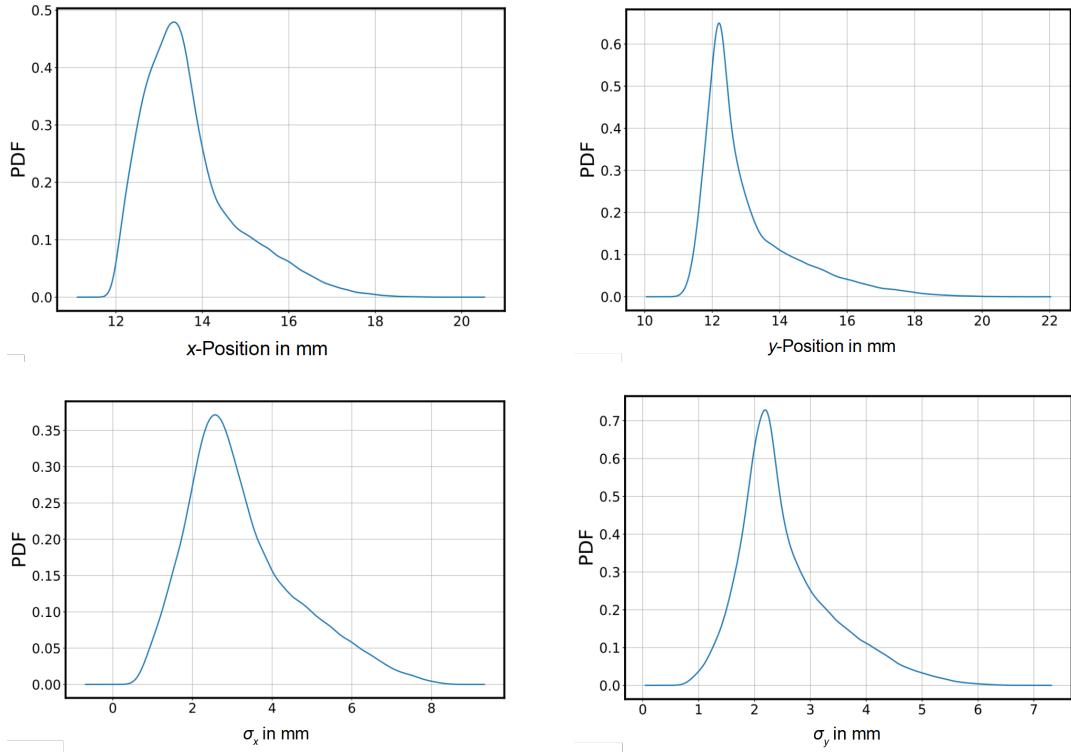


Abbildung 6.5.: Dargestellt sind die PDFs (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen) der QoIs des Surrogat-Modells 3. Ordnung der Messung **M1**. Es ist zu erkennen, dass sich der Strahl vorrangig an einer Position auf dem Leuchtschirm aufhält.

6.1.4. Laufzeiten

Ein Vorteil der verwendeten Surrogat-Modelle auf Basis von Polynom-Chaos-Expansionen liegt in dem geringen Rechenaufwand. In Abb. 6.6 ist die Laufzeit des Algorithmus aus Teilkap. 4.2 zur Berechnung der Modelle für Messreihe **M1** dargestellt.

Es wird zwischen der Zeit zur Regression der Modelle und dem Erstellen der Grafiken unterschieden. Für das zuvor betrachtete Modell 3. Ordnung betrug die Regressionszeit mit $t = 71,13$ s etwas mehr als eine Minute. Für die Berechnungen zum Konstruieren der Grafiken wurden mit $t = 369,31$ s etwa 6 Minuten benötigt. Wie aus Gl. (3.7) folgt, wächst

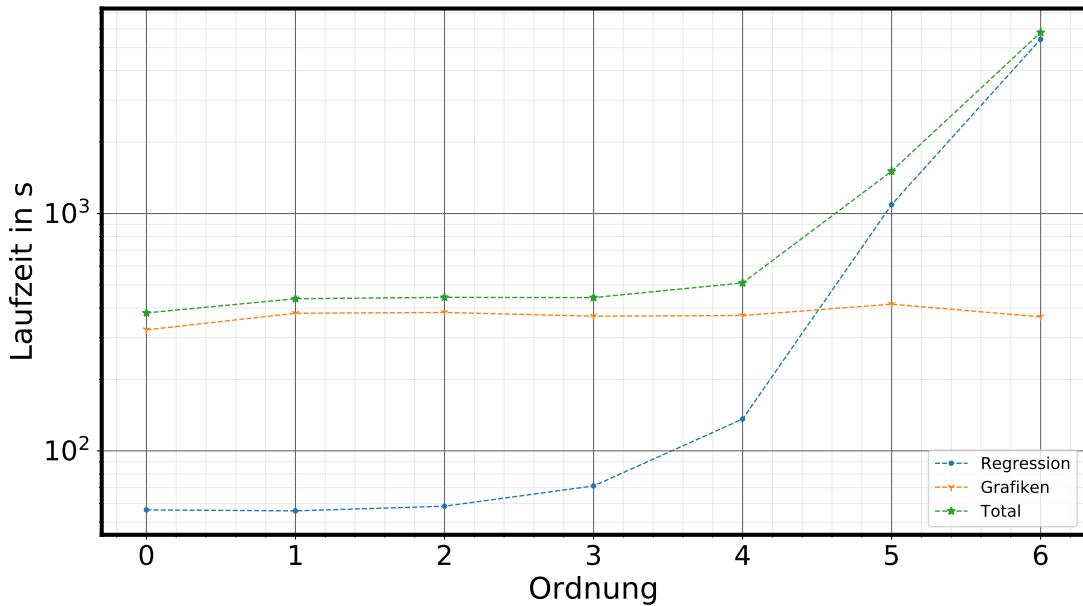


Abbildung 6.6.: Laufzeiten des Algorithmus zur Regression der Modelle für Messreihe M1. Es wird zwischen der Zeit zur Durchführung der Regression (blau) und dem Erstellen der Grafiken (orange) unterschieden. Die Summe beider Zeiten entspricht der totalen Laufzeit (grün).

die Anzahl der Terme der Polynom-Chaos-Expansionen und somit auch die benötigte Rechenzeit schnell mit der Trunkierungsordnung p an. So betrug die Regressionszeit für das Modell 6. Ordnung bereits ca. 1,5 h.

6.2. Globale Sensitivitätsanalyse

Surrogat-Modelle bieten eine breite Facette an Werkzeugen und Analysemöglichkeiten, um Korrelationen und Einflüsse der Inputparameter untereinander und auf die QoIs zu untersuchen. Zunächst wird die globale Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells der Messung **M1** durchgeführt.

6.2.1. Primäre Sensitivitätsanalyse

Die primäre Sensitivitätsanalyse wird auf Basis der primären Sobol-Koeffizienten durchgeführt. Mit Hilfe des Algorithmus aus Abs. 4.2 werden die primären Sobol-Koeffizienten über Gl. (3.11) berechnet. Diese Koeffizienten repräsentieren den alleinigen Einfluss von Eingangsgrößen x_i auf QoIs, d.h. nur Terme der Polynom-Chaos-Expansionen der Gl. (3.6) mit $\Psi_i(x_i)$ werden berücksichtigt. Terme $\Psi_i(x_i, x_j)$ oder $\Psi_i(x_j)$ mit $i \neq j$ werden ignoriert (vergleiche Abs. 3.1.5). In Abb. 6.7 sind die berechneten Sensitivitäten dargestellt. Aufgrund der Normierung der Sobol-Koeffizienten aus Gl. (3.16) ist die Summe der primären Sensitivitäten pro QoI kleiner eins. Die berechneten primären Sensitivitäten sind zur Vollständigkeit in Tab. A.2 aufgelistet.

Es ist deutlich erkennbar, dass das Solenoid LE03 den größten Einfluss auf die Strahlposition in x - und y -Richtung nimmt. Ein Solenoid weist bei mittigem Strahldurchschuss lediglich eine fokussierende Wirkung auf und lenkt den Strahl nicht ab. Da es sich bei dem Solenoid zusätzlich um das erste Magnetelement der Messung aus Sicht des Strahls handelt, ist ein Einfluss durch die anderen Elemente ausgeschlossen. Somit folgt, dass das Solenoid nicht zentral positioniert oder verkippt ist. Da das Solenoid die x -Position stärker beeinflusst als die y -Position, ist die Fehlstellung entlang der horizontalen Achse größer. Es fällt auf, dass der Einfluss des horizontalen Steerers (SH06) und der des vertikalen Steerers (SV06) auf die Strahlschwerpunktsposition gering ausfällt. Die Steerer befinden sich kurz vor dem Leuchtschirm, dass zur Auswertung der Messung verwendet wurde; aufgrund der geringen Driftstrecke liegt ein kleiner Hebel vor und es braucht höhere Ströme um den Strahl abzulenken. Die Quadrupolmagnete nehmen deutlich geringeren Einfluss. Auch hier ist die Wirkung des ersten Quadrupolmagnets am Größten.

Anders als für die Strahlposition ist der Einfluss des Solenoids auf die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y deutlich geringer. Es dominieren die Quadrupolelemente. Wie zu erwarten lässt sich die Sensitivität der Anordnung der Elemente zuordnen. Der Quadrupolmagnet QU03 befindet sich deutlich vor den anderen. Trotz des geringen Abstandes von QU04

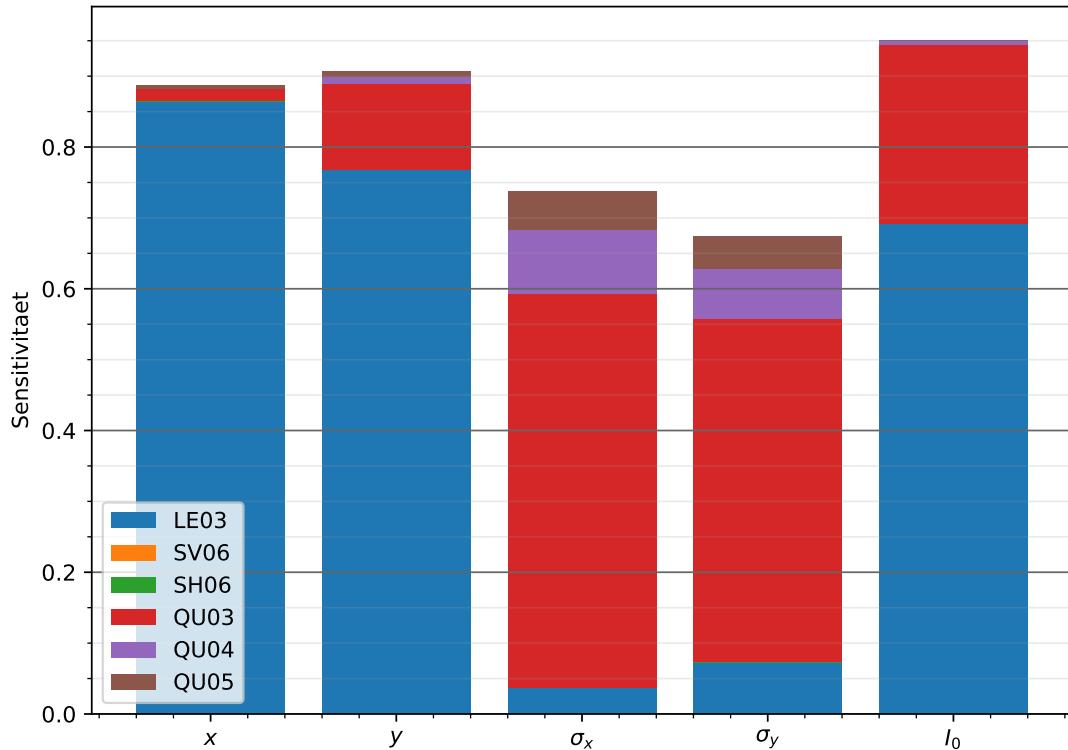


Abbildung 6.7.: Primäre Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Die primäre Sensitivitätsanalyse eignet sich, um den direkten, alleinigen Einfluss von Inputparametern (Magnetströmen) auf Qols (Strahlparameter) einzuschätzen. Der starke Einfluss auf die Strahlposition in x - und y -Richtung deutet auf eine Fehlpositionierung des Solenoids LE03 hin. Der Einfluss der Steerer ist aufgrund des geringen Abstandes zum beobachteten Leuchtschirm auf alle Qols gering.

und QU05 ist ein Unterschied der Sensitivitäten gut erkennbar. Erwartungsgemäß ist der Einfluss der Steerer auf die Strahlausdehnung vernachlässigbar. Die Summe der primären Sobol-Koeffizienten ist nach Gl. (3.16) kleiner eins.

Zur Vollständigkeit wird auch die Sensitivität der mittleren Helligkeit auf dem Leuchtschirm dargestellt. Diese wird erneut von dem Solenoid dominiert. Es konnte in der Messdatenaufnahme beobachtet werden, dass ein Bruchteil des Strahls aufgrund der

starken Ablenkung des Solenoids für einen Teil der Einstellungen den Leuchtschirm nicht getroffen hat. Ob das die starke Sensitivität der mittleren Helligkeit bezüglich des Solenoids verursacht hat, kann aufgrund der schlechten Repräsentation (vergleiche Abb. 6.4) nicht eindeutig festgestellt werden.

6.2.2. Totale Sensitivitätsanalyse

Im Gegensatz zur primären Sensitivitätsanalyse, werden in der totalen Sensitivitätsanalyse auch kombinierte Sobol-Koeffizienten berücksichtigt. Sie stellen den gesamten Einfluss einer Eingangsgröße unter Berücksichtigung der Mischterme $\Psi_i(x_i, x_j)$ der Polynom-Chaos-Expansionen auf eine QoI dar.

Die Resultate der totalen Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells sind in Abb. 6.8 grafisch dargestellt und zur Vollständigkeit in Tab. A.3 aufgelistet. Aus Gl. (3.16) folgt, dass die Summe der totalen Sobol-Koeffizienten pro QoI größer eins ist. Im Vergleich zur primären Sensitivitätsanalyse aus Abb. 6.7 hat der Einfluss des Solenoids auf die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y zugenommen. Da dieser Zuwachs von den kombinierten Sobol-Koeffizienten kommen muss, wird eine Korrelation des Solenoids mit anderen Inputparametern vermutet. Allgemein ist der Beitrag der Inputparameter mit zuvor geringem Einfluss gewachsen. Auch dies ist auf Korrelationsterme zurückzuführen.

Ob die primäre oder totale Sensitivitätsanalyse ein besseres Bild der Sensitivitäten eines Systems gibt, ist von der relativen Größe der vorliegenden kombinierten Sobol-Koeffizienten abhängig, die korrelierte Zusammenhänge implizieren. Während die primäre Sensitivitätsanalyse korrelierte Sensitivität nicht beachtet, kann diese in der totalen Sensitivitätsanalyse überrepräsentiert werden und zu falschen Schlussfolgerungen führen. Eine Möglichkeit beide Darstellungen zu vereinen wird in Abs. 6.3 diskutiert.

6.3. Korrelationsanalyse

Aus mathematischer Sicht können die Sensitivitäts- und die Korrelationsanalyse nicht strikt getrennt werden. Beiden Methoden nutzen sowohl PCE-Koeffizienten und Sobol-Indizes. Während die Sensitivitätsanalyse primär der Untersuchung des Zusammenhangs zwischen Eingangsgrößen und QoIs dient, wird in der Korrelationsanalyse vorrangig der Zusammenhang zwischen den Eingangsgrößen untersucht.

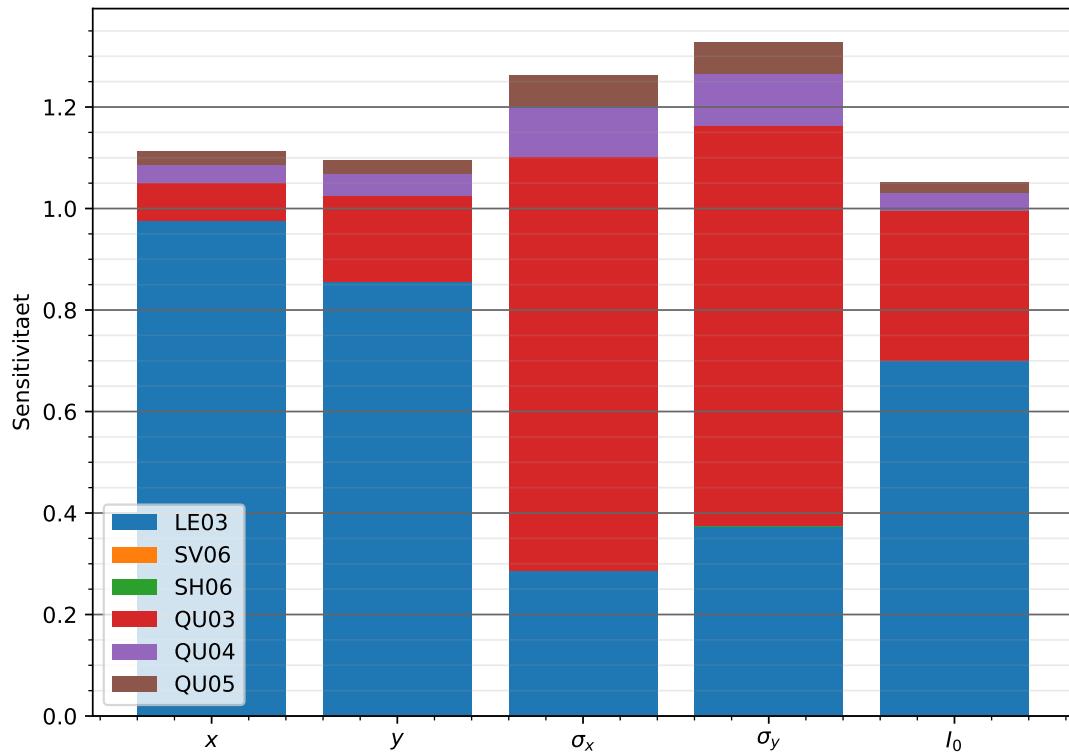


Abbildung 6.8.: Totale Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Im Gegensatz zur primären Sensitivitätsanalyse, werden hier auch sogenannte kombinierte Sobol-Koeffizienten berücksichtigt. Vor allem der Einfluss des Solenoids auf die Strahlausdehnung σ_x bzw. σ_y hat zugenommen.

6.3.1. Kombinierte Sobol-Koeffizienten

Wie in Abs. 6.2 dargestellt, unterscheiden sich die primäre und totale Sensitivitätsanalyse in der Berücksichtigung der kombinierten Sobol-Koeffizienten. Zunächst werden die kombinierten Sobol-Koeffizienten des Surrogat-Modells der Messreihe **M1** nach Gl. (3.13) berechnet.

Eine Darstellung der Sensitivitäten in welcher kombinierte und primäre Sensitivität dargestellt werden ist in Abb. 6.9 für die Strahlposition x und Strahlausdehnung σ_y dargestellt.

Die berechneten Werte der kombinierten Sobol-Koeffizienten sind in den Tabellen A.4-A.7 aufgelistet. Die Fläche der blauen Kreise einer Eingangsgröße entspricht dem Betrag der totalen Sensitivität, die Fläche der grünen Balken jeweils der kombinierten Sensitivität der beiden verbundenen Eingangsgrößen. Es ist zu beachten, dass die totale Sensitivität zusätzlich zu den eingezeichneten Sensitivitäten auch Beiträge von kombinierten Sobol-Koeffizienten zwischen drei und mehr Inputparametern berücksichtigt. Der rote Kreis dient nur der Orientierung.

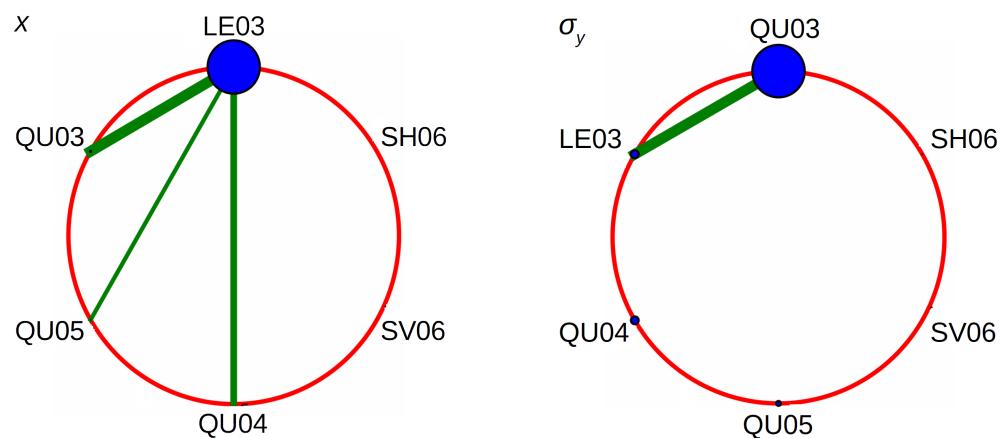


Abbildung 6.9.: Gemeinsame Darstellung der primären Sensitivität (blau) und kombinierter Sensitivität (grün) zwischen jeweils zwei Größen für die x -Position (links) und Strahl ausdehnung σ_y (rechts). Das Solenoid LE03 dominiert sowohl kombinierte und primäre Sensitivität der x -Position. Die starke kombinierte Sensitivität zwischen dem Solenoid LE03 und dem Quadrupolmagnet QU03 für σ_y erklärt die beobachteten Unterschiede zwischen der primären und totalen Sensitivitätsanalyse (vergleiche Abb. 6.7 und Abb. 6.8).

Für die Position x bestätigt das Diagramm aus Abb. 6.9 die Beobachtungen der globalen Sensitivitätsanalysen des vorherigen Kapitels. Das Solenoid dominiert die Sensitivität bezüglich x . Zusätzlich kann beobachtet werden, dass der Beitrag der kombinierten Sensitivitäten für zwei Parameter ebenfalls vom Solenoid dominiert wird. Für die Strahl ausdehnungen σ_x erklärt der große Beitrag des kombinierten Sobol-Koeffizienten zwischen dem Solenoid und dem ersten Quadrupolmagnet die beobachteten Unterschiede in der primären Sensitivitätsanalyse aus Abb. 6.7 und der totalen Sensitivitätsanalyse aus Abb. 6.8.

6.4. Untersuchung der Solenoide des Injektors

Vor Durchführung der Messungen wurden die vier Solenoide (LE01-04) des Injektors neu ausgerichtet. Mithilfe der Messung **M2** wird die Positionierung der Solenoide überprüft. Insbesondere wurde von Operateuren des S-DALINAC vor der Messung ein auffälliges Verhalten des Solenoids LE01 festgestellt, dass untersucht wird. Zudem wird das Verhalten des Solenoids LE03, das in der Auswertung der vorherigen Messreihe **M1** beobachtet wurde, in Relation zu den anderen Solenoiden gesetzt.

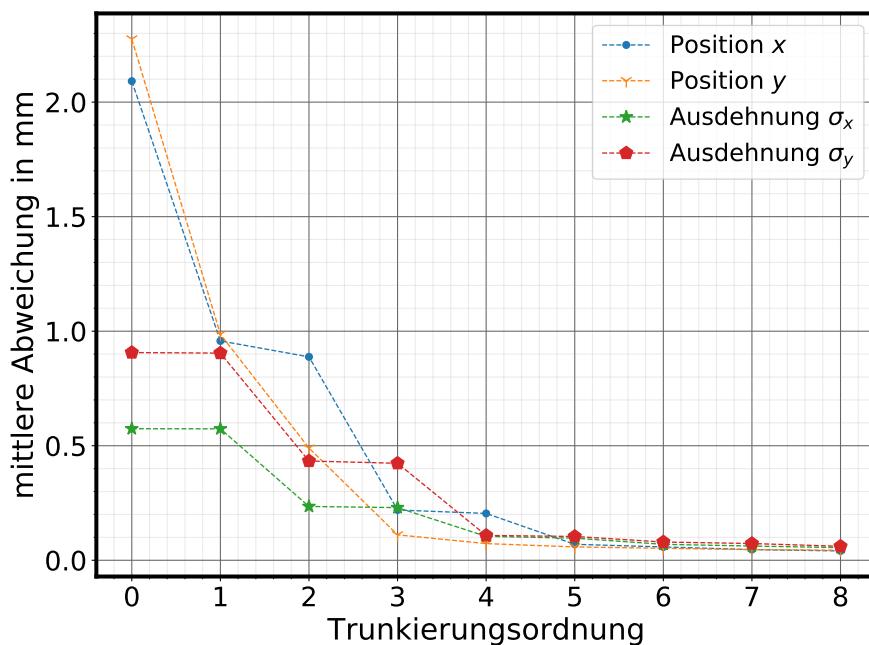


Abbildung 6.10.: Dargestellt ist die mittlere Abweichung der Qols zwischen den Trainingsresultaten λ_{out} und den berechneten Werten $\mu(\lambda_{\text{in}})$ des Surrogat-Modells in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung p für Messreihe **M2**. Zur weiteren Auswertung wird das Modell 4. Ordnung verwendet.

In Messreihe **M2** wurden $N = 10.000$ Trainingsdaten für $d = 4$ Inputparameter aufgenommen. Die mittlere Abweichung zwischen den Ergebnissen der Messung und dem Surrogat-Modell ist in Tab. A.8 in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung aufgelistet und in Abb. 6.10 dargestellt. Da sich die Präzision des Modells ab der 4. Trunkierungs-

ordnung für die meisten QoIs nicht mehr wesentlich verbessert, wird dieses Modell für die folgende Untersuchung verwendet. Die Validierungsdiagramme sind in Abb. 6.11 dargestellt. Die Position des Strahlschwerpunktes in x - und y -Richtung wird mit einer mittleren Abweichung von 0,2 mm bzw. 0,07 mm sehr gut durch das Surrogat-Modell repräsentiert. Für die Strahllausdehnung σ_x bzw. σ_y beträgt die mittleren Abweichung 0,10 mm bzw. 0,11 mm. Es ist überraschend, dass das System aus Solenoiden trotz deren komplizierter Wirkung auf den Elektronenstrahl (vergleiche Kap. 3.2.2) mithilfe von PCE derart genau beschrieben werden kann.

Von besonderem Interesse für die Diagnose der Solenoide ist die globale Sensitivitätsanalyse. Es wird die totale Sensitivitätsanalyse für die weitere Betrachtung verwendet, da sie mehr Effekte als die primäre Sensitivitätsanalyse berücksichtigt (vergleiche Abs. 6.2.2). Die berechneten totalen Sensitivitäten sind in Tab. A.9 aufgelistet und in Abb. 6.12 dargestellt.

Am S-DALINAC werden Solenoide zur Fokussierung des Elektronenstrahls verwendet. Wenn der Strahl ein Solenoid nicht zentral durchläuft wird dieser zusätzlich abgelenkt. Ein optimal positioniertes und durchlaufenes Solenoid hat demzufolge keinen Einfluss auf die Schwerpunktsposition des Strahls. Zusätzlich wurde im vorherigen Kapitel beobachtet, dass die Sensitivität der Inputparameter für eine QoI mit wachsender Distanz zum Leuchtschirm prinzipiell zunimmt. Bei gleicher Einstellung der Solenoide wird das Solenoid LE01 demzufolge den größten Einfluss auf alle QoIs nehmen, gefolgt von LE02 etc..

Wie in Abb. 6.12 zu erkennen ist, weichen die Sensitivitäten von diesem Verhalten deutlich ab. Das erste Solenoid LE01 ist besonders auffällig. Die Positionierung entlang der vertikalen Achse ist optimal, die y -Position des Strahlschwerpunktes zeigt keine Sensitivität für das Solenoid. Anders verhält es sich entlang der horizontalen Achse. Zwar handelt es sich bei der globalen Sensitivitätsanalyse um einen relativen Vergleich der Sensitivitäten. Jedoch konnte in der Auswertung der Messung **M1** bereits ein wesentlicher Einfluss des Solenoids LE03 gegenüber anderer Strahlelemente ausgemacht werden, so dass die größere Sensitivität von LE01 auf die x -Position nicht vernachlässigbar ist. Zudem trägt LE01 keinen messbaren Beitrag zur Fokussierung bei. Das Solenoid wird für den zukünftigen Strahlbetrieb nicht mehr verwendet und in der nächsten Wartungsphase ausgebaut.

Das Solenoid LE02 verhält sich weitestgehend erwartungsgemäß. Trotz seiner Distanz zum Leuchtschirm ist der Einfluss auf die x - und y -Position des Strahlschwerpunktes geringer als der Einfluss des nachfolgenden Solenoids. Ein Einfluss auf die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y kann ebenfalls beobachtet werden.

Mit dieser Messreihe können die Ergebnisse aus Messung **M1** für das Solenoid LE03 bestätigt werden. Der Einfluss des Solenoids auf alle QoIs mit Ausnahme von y ist deutlich

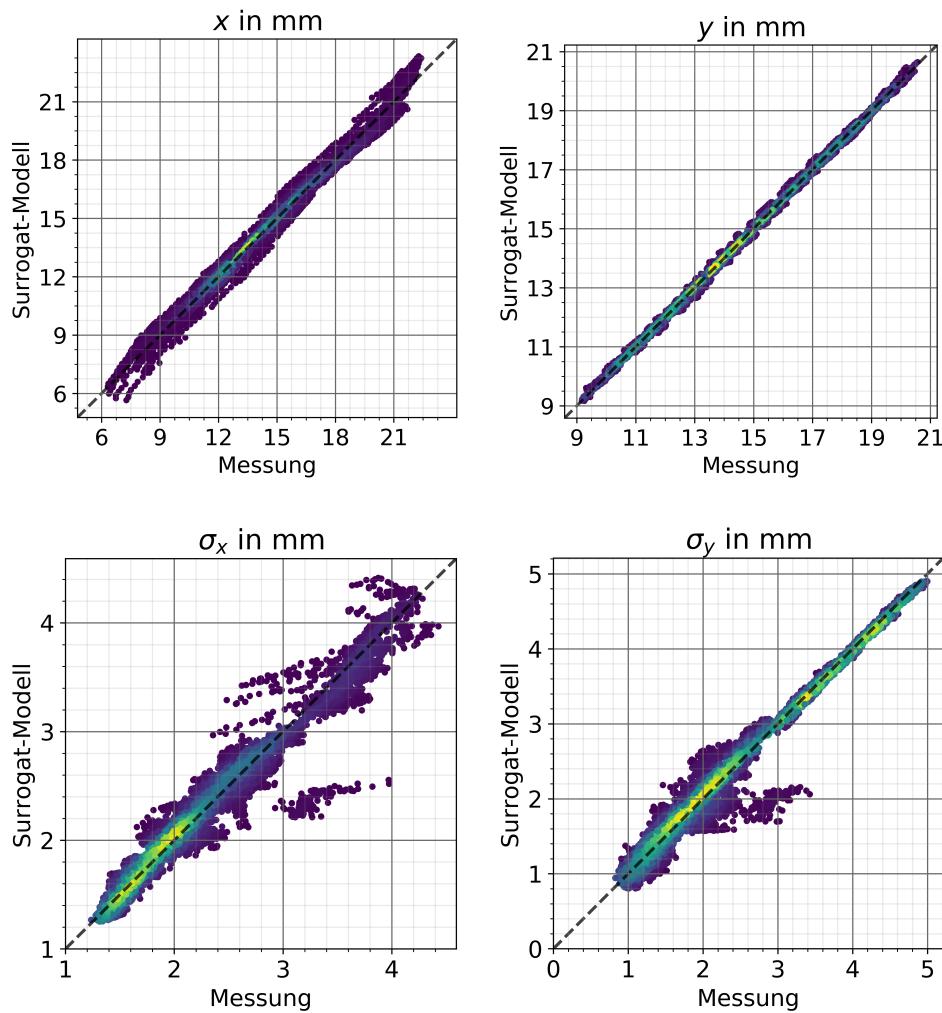


Abbildung 6.11.: Validierungsdiagramme der Qols für das Surrogat-Modell 4. Ordnung der Messreihe **M2**. Die Positionen x und y des Schwerpunktes werden sehr gut repräsentiert. Für die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y gibt es lokale Bereiche, in denen Surrogat-Modell und Trainingsresultate eine größere Abweichung aufzeigen. Die Winkelhalbierende (gestrichelte Linie) entspricht einer perfekten Repräsentation.

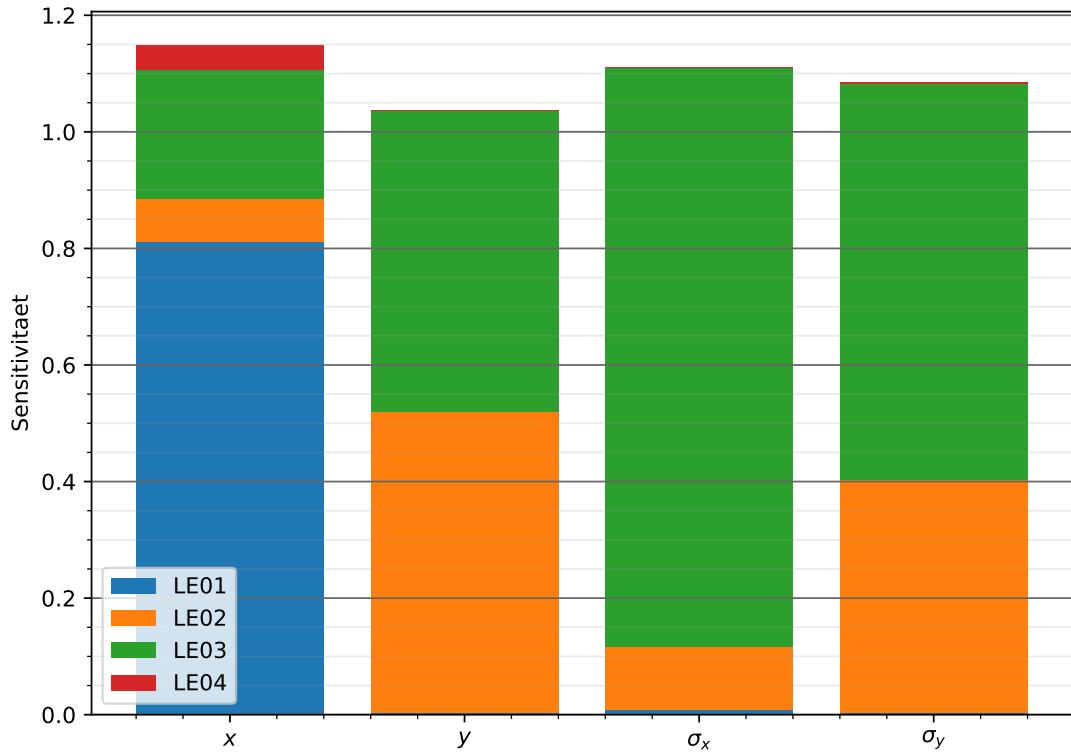


Abbildung 6.12.: Totale Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells 4. Ordnung der Messreihe **M2**. Das erste Solenoid LE01 hat keinen Effekt auf die Strahlausdehnung σ_x bzw. σ_y , dominiert jedoch die Sensitivität bezüglich der x -Position. Der Einfluss des Solenoids auf die QoIs mit Ausnahme von y ist größer als von dem weiter vorne positioniertem Solenoid LE02, was auf ein stärkeres Magnetfeld hindeutet.

größer als von dem weiter vorne positionierten Solenoid LE02, was auf ein stärkeres Magnetfeld hindeutet. In der Messung **M1** wurde ein größerer Einfluss auf die x -Position als auf die y -Position festgestellt. Es ist zu vermuten, dass der enorme Beitrag des Solenoids LE01 zur x -Position dieses Bild verzerrt.

Das Solenoid LE04 befindet sich nur kurz vor dem verwendeten Leuchtschirm T5. Dies führt zu einer geringen Sensitivität aller QoIs bezüglich dieses Solenoids. Differenzierte Aussagen über dieses Solenoid können daher nicht getroffen werden.

6.5. Surrogat-Modell zur Unterstützung von Simulationen

Es wird in dieser Arbeit zusätzlich untersucht wie mithilfe von Surrogat-Modellen zusätzliche Informationen zur Verbesserungen von Strahldynamiksimulationen gewonnen werden können. Im Gegensatz zu Surrogat-Modellen sind für hochpräzise Strahldynamiksimulationen genaue Kenntnisse über das zu simulierende System notwendig. Aus diesem Grund wurde ein System gewählt, dessen Strahlführungselemente im Anschluss an die Messung charakterisiert werden konnten.

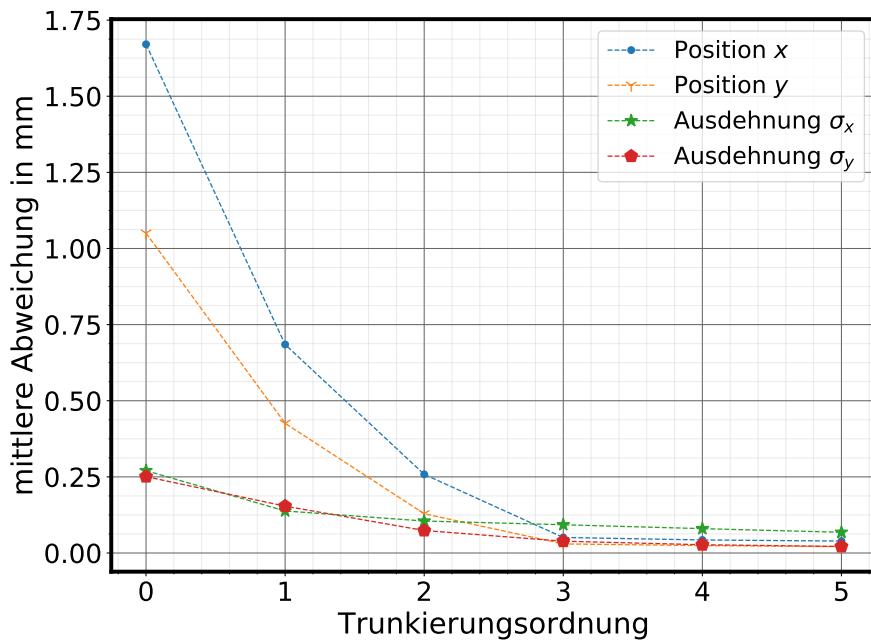


Abbildung 6.13.: Dargestellt ist die mittlere Abweichung der Qols zwischen den Trainingsresultaten λ_{out} und den berechneten Werten $\mu(\lambda_{\text{in}})$ des Surrogat-Modells in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung p für Messreihe M3. Es wird das Modell 3. Ordnung verwendet.

In diesem Kapitel wird das Surrogat-Modell für das untersuchte System aus den Daten der Messung M3 konstruiert und ausgewertet. Es wurden $N = 7.776$ Trainingsdaten für $d = 5$ Inputparameter aufgenommen. Die mittlere Abweichung pro Trunkierungsordnung ist in Tab. A.10 aufgelistet und in Abb. 6.13 dargestellt. Für die Strahlschwerpunktsposition x

bzw. y des Modells 3. Ordnung beträgt die mittlere Abweichung 0,05 mm bzw. 0,03 mm und verbessert sich für höhere Ordnungen kaum noch. Dies entspricht einer relativen Abweichung von 0,56 % bzw. 0,46 %. Die Strahlausdehnung σ_x bzw. σ_y wird mit einer mittleren Abweichung von 0,09 mm bzw. 0,04 mm wiedergegeben.

Die Validierungsdiagramme des Modells 3. Ordnung sind in Abb. 6.14 dargestellt. Der Strahlschwerpunkt wird nahezu optimal wiedergegeben. Die Bereiche mit erhöhter Wertedichte werden auch die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y gut repräsentiert.

Um die Wirkung der betrachteten Strahlführungselemente zu untersuchen, wird die totale Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Die totalen Sobol-Koeffizienten sind in Abb. 6.15 dargestellt. Die Steererelemente haben erwartungsgemäß den größten Einfluss auf die Schwerpunktsposition. Der Einfluss des Solenoids auf die Strahlposition ist im Vergleich zur Messung M2 deutlich zurückgegangen (vergleiche Abb. 6.12). Dies ist eine direkte Folge der durchgeföhrten Neuausrichtung der Solenoide. Der Einfluss der Quadrupole auf die Strahlposition ist deutlich geringer. Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass sich das Solenoid deutlich vor den Quadrupolen befindet und hierdurch einen größeren Hebel besitzt.

Mit Ausnahme der Sensitivität von σ_x gegenüber dem horizontalen Steerer SH04 wird die Ausdehnung des Strahls von den Quadrupolmagneten und dem Solenoid dominiert. Diese Wirkung kann nicht auf das Nachleuchten der Leuchtschirmmarkierungen zurückgeführt werden, da dieser Einfluss in diesem Fall auch für σ_y zu beobachten sein würde. Die Quadrupolmagnete haben eine stärkere Wirkung auf die Strahlbreite als das untersuchte Solenoid.

Der starke Einfluss des Steerermagneten auf die Strahlbreite σ_x ist ungewöhnlich. Um diesen Einfluss zu untersuchen, werden die kombinierten Sobol-Koeffizienten analog zu Kap. 6.3.1 berechnet. In Abb. 6.16 ist die totale Sensitivität (blau) von σ_x bezüglich der Magnetelemente eingetragen. Die kombinierten Sensitivitäten erster Ordnung (grün) stellen die korrelierte Wirkung zweier Magnete auf σ_x dar. Es sei daran erinnert, dass sich die totale Sensitivität als Summe aus primärer und kombinierter Sensitivität darstellen lässt (vergleiche Gl. (3.16)). Hierbei wird deutlich, dass sich die totale Sensitivität von σ_x bezüglich dem Steerermagneten hauptsächlich aus der primären Sensitivität mit geringen korrelierten Mischbeiträgen zwischen dem Steerermagneten und den Quadrupolmagneten zusammensetzt. Es handelt sich hierbei um eine individuelle Eigenschaften des Systems.

Das hier konstruierte Surrogat-Modell dient in Kap. 7 als Ausgangspunkt, um die darin durchgeföhrte Strahldynamiksimulation zu unterstützen.

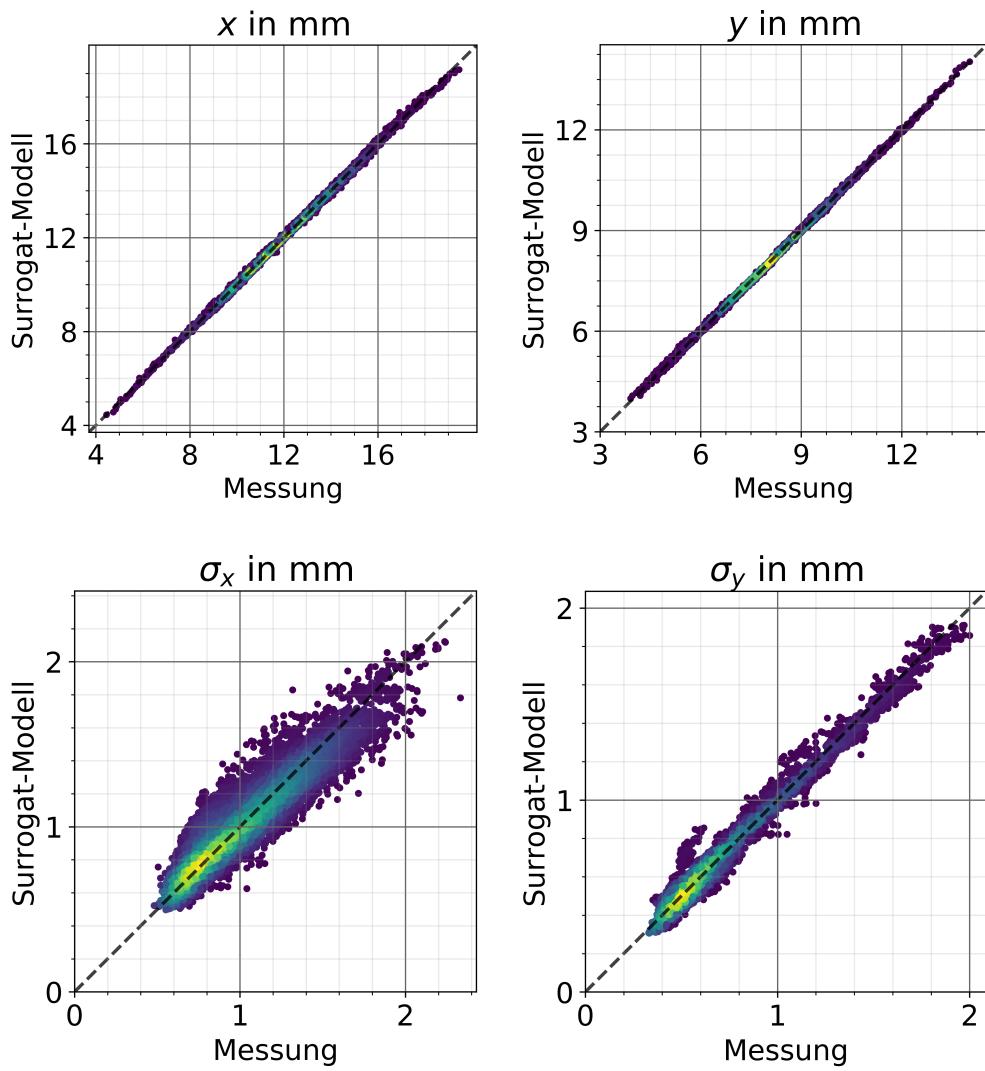


Abbildung 6.14.: Validierungsdiagramme der Qols für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M3**. Die Positionen x und y des Schwerpunktes werden nahezu optimal repräsentiert. Für die Bereiche mit erhöhter Wertedichtheit wird die Strahlausdehnung σ_x und σ_y gut repräsentiert. Die mittlere Abweichung aller Größen liegt unter einem Zehntel Millimeter.

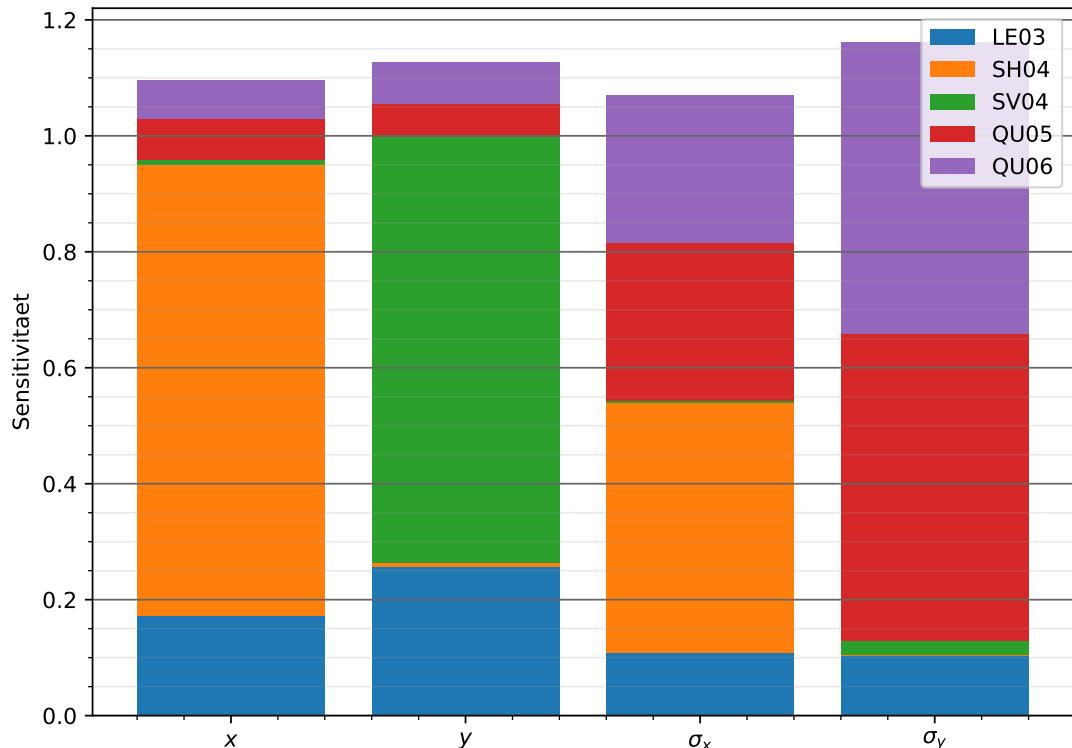


Abbildung 6.15.: Totale Sensitivitätsanalyse des Surrogat-Modells 3. Ordnung der Messreihe **M3**. Die Steerermagnete SH04 und SV04 dominieren die Strahlpositionen x und y . Die Quadrupolmagnete QU05 und QU06 haben einen stärkeren Einfluss auf die Strahlbreite σ_x bzw. σ_y als das Solenoid LE03.

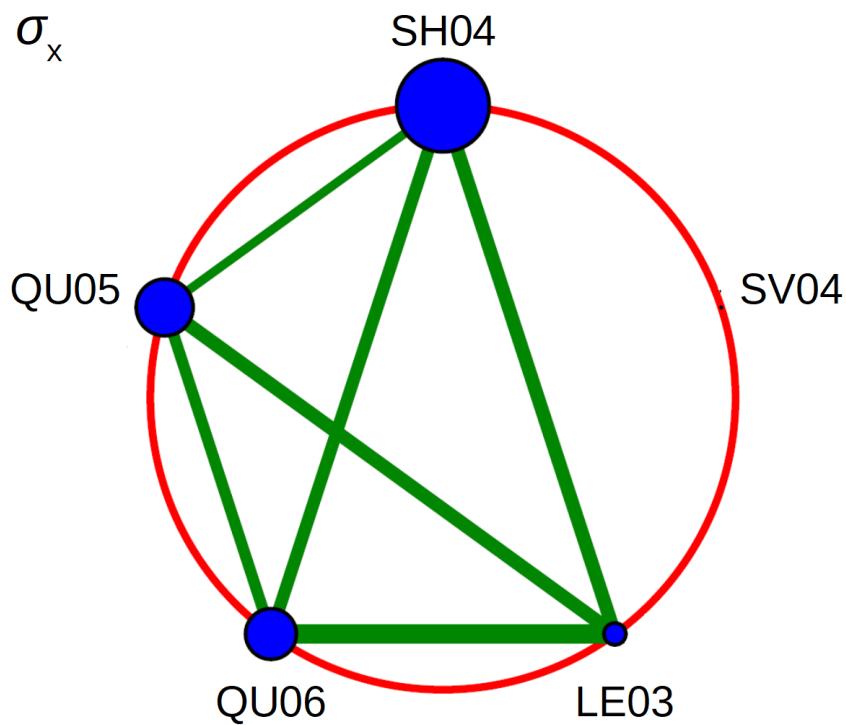


Abbildung 6.16.: Gemeinsame Darstellung der primären Sensitivität (blau) und kombinierten Sensitivität (grün) der Strahlbreite σ_x gegenüber den eingezeichneten Strahlführungselementen. Die kombinierte Sensitivität wurde für jeweils zwei Magnetelemente eingezeichnet. Die Sensitivität von σ_x bezüglich dem Steerermagneten SH04 setzt sich hauptsächlich aus der primären Sensitivität mit geringen korrelierten Mischbeiträgen zwischen dem Steerermagneten und den Quadrupolmagneten zusammen.

7. Strahldynamiksimulation des Injektors

Der modulare Aufbau der Kavitäten des S-DALINAC erlaubt eine effiziente Wartung und einen einfachen Zugang für Verbesserungen in Form von zusätzlichen oder fortgeschrittenen Strahlführungselementen. Mithilfe der eigenen mechanischen und elektronischen Werkstatt ist es zudem möglich defekte Bauteile schnell zu ersetzen und Strahlführungselemente optimal an die Ansprüche und Voraussetzungen des S-DALINAC anzupassen.

Diese Vorteile für den Strahlbetrieb stellen Simulationen am S-DALINAC vor besondere Anforderungen. In deren Zentrum stehen die hohe Individualität von Strahlführungselementen, der regelmäßig modifizierte Aufbau der Strahlführung und das schnelle Veralten von Erkenntnissen. In dieser Arbeit wird ein Vergleich zwischen einer traditionellen Strahldynamiksimulation und einer Analyse mit einem Surrogat-Modell durchgeführt. In Abs. 7.1 werden daher die notwendigen Schritte zur Vorbereitung einer Strahldynamiksimulation dargestellt.

In Abs. 7.2 wird die Simulation mit ELEGANT vorgestellt. Der Prozess der Datenaufnahme orientiert sich dabei stark an dem vorangegangenen Data-Mining.

Auf Basis der produzierten Ergebnisse der Simulation wird anschließend ein Surrogat-Modell erstellt, welches einen Vergleich der Simulation mit der vorangegangenen Messung ermöglicht. Die Diskussion dieser Ergebnisse wird in Abs. 7.3 durchgeführt.

7.1. Charakterisierung des Injektors

Die Qualität einer Strahldynamiksimulation hängt vorrangig vom Informationsgehalt über das zu simulierende System ab. Um einen fundierten Vergleich zwischen den Analysen auf Basis von Surrogat-Modellen und Simulationen durchführen zu können, wird das System analog zu den Messungen aus Abs. 5.4 gewählt. Es wird der normal leitende Injektorbereich

beginnend bei der Elektronenkanone bis zum Beobachtungsleuchtschirm T5 betrachtet. Im Folgenden werden die verwendeten Strahlführungselemente charakterisiert.

7.1.1. Positionsbestimmung der Injektorelemente

Die nachfolgenden Simulationen schließen sich zeitlich an eine Wartungsphase des S-DALINAC an, in welcher einige Elemente der Strahlführung aus- und eingebaut wurden und sich deren Position verändert hat. Aus diesem Grund wurde eine Positionsvermessung der Strahlführungselemente, beginnend bei der Elektronenkanone bis zur ersten Injektorvakuität SC02 (vergleiche Darstellung des S-DALINAC in Abb. 3.3), durchgeführt.

Für diese Messung wurde ein Kreuzlinienlaser mit integriertem Lot verwendet. Der Laser selbst erlaubt keine Distanzmessung sondern wurde verwendet, um die Position der Strahlführungselemente auf eine parallel zur Strahlführung verlaufende Strecke zu projizieren. Die Ungenauigkeit der Positionsbestimmung mit diesem Verfahren wird vom Hersteller mit 0,05 mm/m angegeben. In der Messung wurde deutlich, dass die Unsicherheit der Positionen im Allgemeinen bis zu 1 mm beträgt. Da für die Leuchtschirme nur mangelhafte optische Orientierungspunkte vorliegen, beträgt die Unsicherheit hier bis zu 2 mm. Die vermessenen Positionen dienen als Grundlage für alle folgenden Simulationen.

7.1.2. Messung der magnetischen Flussdichte der Solenoide

Nachdem die Positionen der Strahlführungselemente des Injektors vermessen wurden, werden die Magnetfelder der Elemente bestimmt. Die verwendeten Steerermagnete werden in Abs. 7.1.3 vermessen. Die Annahmen bezüglich der Felder der Quadrupolmagnete werden in Abs. 7.2.2 diskutiert. Innerhalb dieses Abschnitts wird die Vermessung der Magnetfelder der Solenoide diskutiert.

Im Strahldynamiksimulationsprogramm ELEGANT werden vordefinierte Elemente verwendet, um den Effekt von Solenoiden auf geladene Teilchen zu beschreiben. Um dennoch individuelle Eigenschaften der Magnete berücksichtigen zu können, können sogenannte Fieldmaps eingebunden werden.

Bei den Solenoiden des S-DALINAC handelt es sich um zwei einzelne Spulenpaare, die um einen Eisenkern gewickelt wurden. Die Solenoide unterscheiden sich in den verwendeten Materialien und der Anzahl der Windungen. Demzufolge ist es notwendig alle Solenoide zu vermessen. Der Teststand des S-DALINAC zur Magnetfeldvermessung von

Strahlführungselementen ist in Abb. 7.1 (a) abgebildet. Es handelt sich hierbei um eine Positionierungseinheit mit einer länglichen Halterung, welche eine Hall-Sonde an ihrer Spitze bis zu $10 \mu\text{m}$ genau positionieren kann. Mithilfe der Sonde kann das Magnetfeld zugleich in x -, y - und z -Richtung bestimmt werden.



(a) Aufbau zur Feldvermessung.



(b) Magnetfeldmessung eines Solenoids.

Abbildung 7.1.: Dargestellt ist der Messaufbau zur Vermessung der magnetischen Flussdichte von Magnetelementen. In (a) ist die Positionierungseinheit abgebildet. In (b) ist die Sonde innerhalb eines Solenoids während des Messvorgangs abgebildet.

Um die Anzahl der Messpunkte zu reduzieren, wird die Spule als rotationssymmetrisch angenommen. Dies erlaubt es eine Ebene im Zentrum der Spule abzufahren und die Ergebnisse rotationssymmetrisch extrapoliieren zu können. Nachdem das zu vermessende Solenoid parallel zur Halterung der Sonde ausgerichtet wurde (vergleiche Abb. 7.1 (b)) wird ein Strom an die Spule angelegt und entlang des Solenoids die Grenzen bestimmt, ab denen nur noch das Erdmagnetfeld messbar ist. Von dort wird ein zweidimensionaler Bereich gewählt, der das Solenoid möglichst ausfüllt. Die Anzahl der Messwerte in horizontaler Richtung n_x , in Strahlrichtung n_z sowie die Gesamtzahl der Messpunkte $n_{\text{ges}} = n_x \cdot n_z$ sind in Tab. 7.1 dargestellt.

Während der Messung wurde beobachtet, dass sich die Temperatur T der Spulen nach dem Einschalten des Stroms deutlich erhöhte. Mit T erhöht sich der Widerstand R der Spulen, was wiederum den Temperaturanstieg begünstigt. Die Geschwindigkeit des Temperaturanstiegs und die maximale Temperatur T_{\max} hängen stark vom untersuchten Solenoid ab. Die Temperatur des Solenoids LE03 erreichte bei einem Strom von 3 A in drei Stunden $T_{\max} = 68^\circ\text{C}$. Dies bewirkte eine Änderung des Widerstandes von $R = 3,48 \Omega$ auf

Tabelle 7.1.: Angaben zur Magnetfeldmessung der Solenoide. Die Spulen der Magnetelemente wurden während der Messung mit der Stromstärke I betrieben. Innerhalb der x - z -Ebene wurde für $n_x \cdot n_z = n_{\text{ges}}$ Positionen das Magnetfeld aufgenommen. Die z -Achse gibt hierbei die Strahlrichtung an.

Solenoid	I in A	n_x	n_z	n_{ges}
LE01	4	51	591	30141
LE02	3	22	425	9350
LE03	0	49	771	37779
LE03	2	49	771	37779
LE04	4	51	681	34731

$R = 4,15 \Omega$. Im Vergleich dazu erreichte das Solenoid LE01 für $I = 4 \text{ A}$ in 20 Minuten $T_{\max} = 93,1^\circ\text{C}$.

Mithilfe einer Hallsonde wurde die magnetische Flussdichte pro Messposition zeitgleich in x -, y - und z -Richtung aufgenommen. Aus den Werten B_x und B_y wurde anschließend der Beitrag zur magnetischen Flussdichte $|B_r|$ mittels

$$|B_r| = \sqrt{B_x^2 + B_y^2}$$

in Zylinderkoordinaten berechnet. Die Feldverteilung von $|B_r|$ des Solenoids LE03 mit $I = 2 \text{ A}$ ist in Abb. 7.2 dargestellt. Die Strahlachse mit $x = 0$ führt entlang der z -Achse durch das Solenoid. Hierbei wird angenommen, dass sich die Sonde während der Messdatenaufnahme exakt in der horizontalen Symmetrieebene bei $y = 0$ befand. Es kann eine leichte Asymmetrie der Feldverteilung beobachtet werden.

Die Feldverteilung von B_z des Solenoids LE03 bei gleicher Stromstärke ist in Abb. 7.3 dargestellt. Das Spulenpaar wird gegen-polig betrieben. Die Gesamtheit der Werte-Tupel (r, z, B_r, B_z) pro Messposition bilden die Fieldmaps der Solenoide, die im Weiteren verwendet werden.

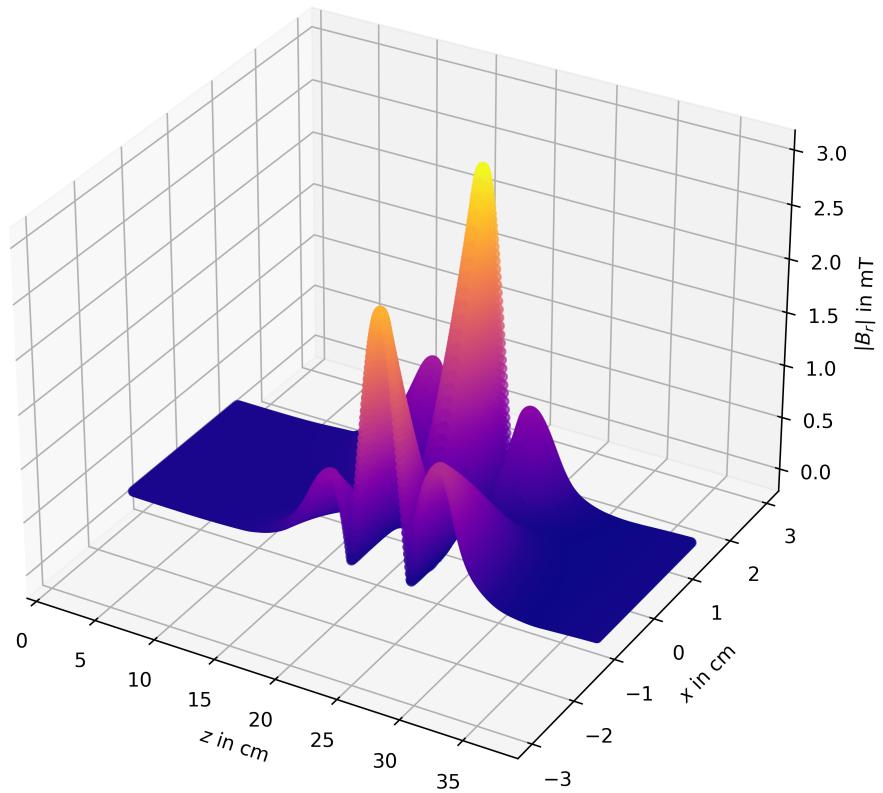


Abbildung 7.2.: Feldverteilung des Betrags $|B_r|$ der magnetischen Flussdichte des Solenoids LE03 für $I = 2\text{ A}$. Der Strahl bewegt sich in z -Richtung durch das Solenoid. Anhand der Maxima kann eine leichte Asymmetrie der Feldverteilung beobachtet werden.

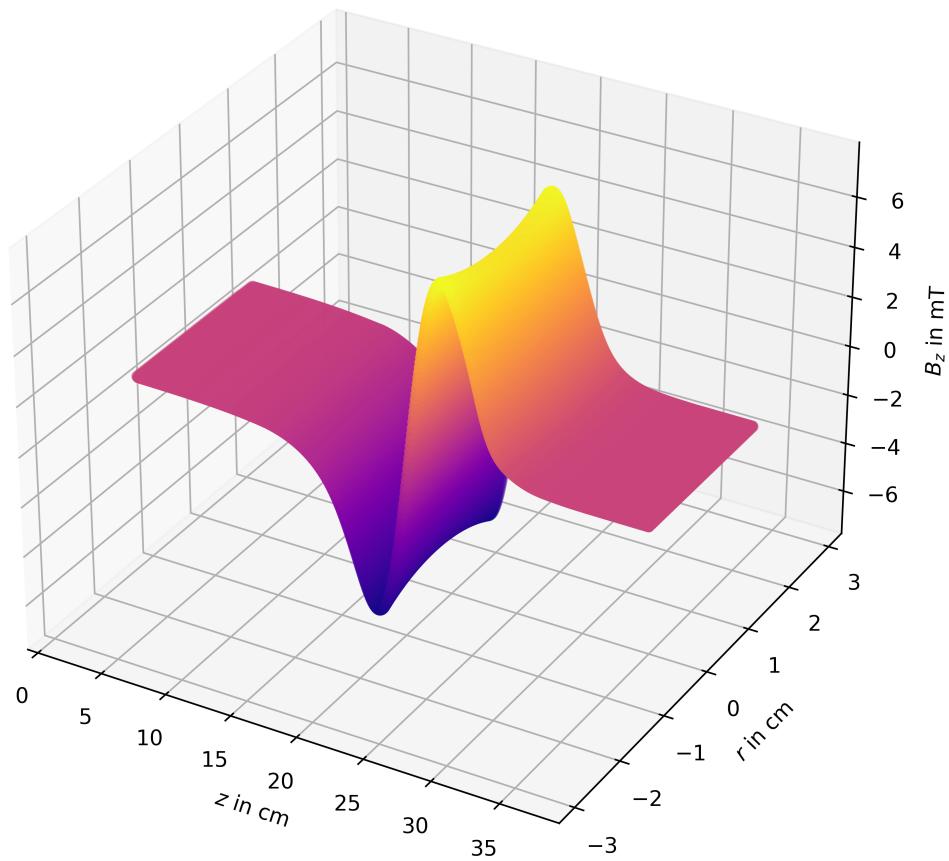


Abbildung 7.3.: Feldverteilung der magnetischen Flussdichte B_z des Solenoids LE03 für $I = 2\text{ A}$. Der Strahl bewegt sich entlang der z -Achse durch das Solenoid.

7.1.3. Bestimmung des Ablenkwinkels der Steerermagnete

Bei den in Messung M3 verwendeten Steerermagneten handelt es sich um die Elemente SH04 und SV04. Um die Stromwerte der Magnete in einen Ablenkinkel übersetzen zu können, wird eine Kalibrationsmessung durchgeführt.

Zunächst wird der Injektor derart eingestellt, dass sich der Strahlschwerpunkt im Mittelpunkt des Leuchtschirms T5 befindet. Anschließend werden die Stromsetzwerte variiert und die x - und y -Position des Strahls auf dem Leuchtschirm aufgezeichnet. Mithilfe der zuvor bestimmten Abstände der Strahlführungselemente des Injektors wird der Ablenkinkel bestimmt. Zur Auswertung der Leuchtschirmbilder wird der Area-Detektor verwendet (vergleiche Abs. 5.1.3).

An den Messpunkten der horizontalen Strahlschwerpunktsposition x des Steerermagneten SH04 wurde in Abhängigkeit der Stromstärke I eine linearen Regression durchgeführt. Sie stellt eine gute Näherung der Messdaten für kleine Winkel dar. Als Unsicherheit wurde die Standardabweichung aus fünf Messdurchgängen pro Stromsetzwert berechnet. Der Kalibrationsfaktor wurde zu $m_x = 1,00(3) \frac{\text{mm}}{\text{A}}$ bestimmt, mit einem Offset von $b_x = 9,90(4) \text{ mm}$.

Der Abstand $a = 36,4 \text{ cm}$ zwischen dem Steerermagnet und dem Beobachtungsleuchtschirm wurde in Abs. 7.1 bestimmt. Der Ablenkinkel α lässt sich somit direkt aus der gemessenen Position d auf dem Leuchtschirm oder mithilfe von m_x bestimmen:

$$\alpha(d) = \arctan\left(\frac{d - b_x}{a}\right) \quad (7.1)$$

$$\alpha(I) = \arctan\left(\frac{m_x \cdot I}{a}\right). \quad (7.2)$$

In Abb. 7.4 sind die berechneten Ablenkinkel über die Stromstärke I dargestellt. Hierbei wurde der Ablenkinkel sowohl direkt aus den gemessenen Positionen d mittels Gl. (7.1) (schwarz), als auch mit m_x über Gl. (7.2) (grün) berechnet. Die Verwendung des Kalibrationsfaktors stellt eine gute Approximation des Ablenkwinkels dar. Die Kalibration des Steerermagneten SV04 wurde analog durchgeführt.

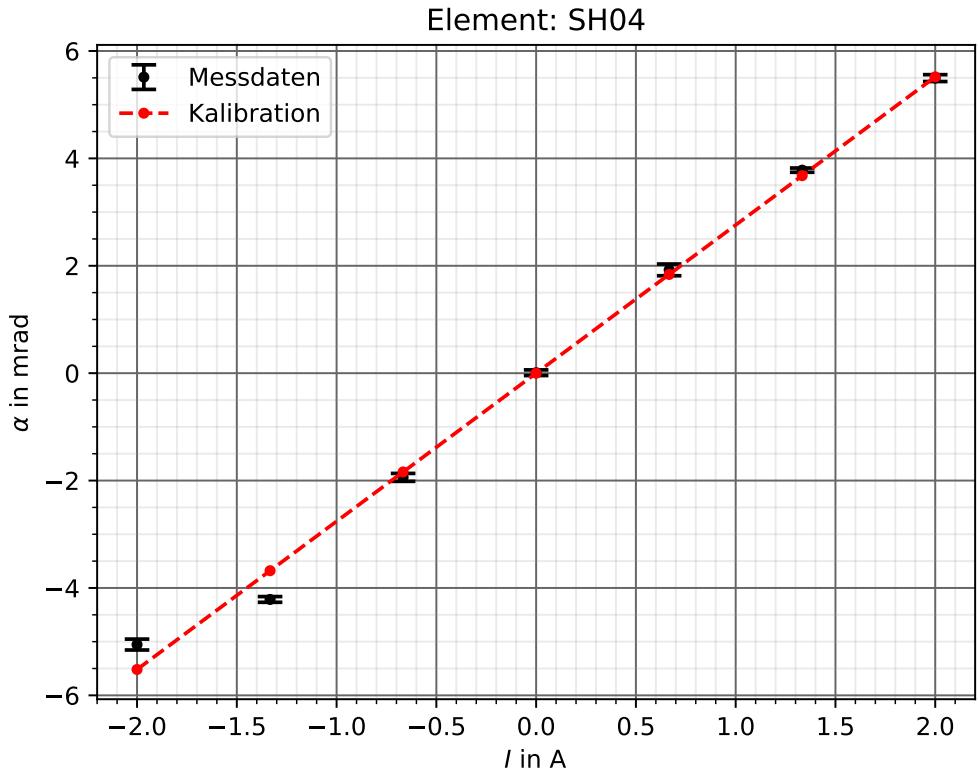


Abbildung 7.4.: Dargestellt ist die Kalibrationsmessung des Steerermagneten SH04. Für sieben Stromsetzpunkte I wurde der horizontale Ablenkinkel α des Elektronenstrahls berechnet. Hierbei wurde der Ablenkinkel jeweils aus den gemessenen Positionen d mittels Gl. (7.1) (schwarz), als auch mit dem Kalibrationsfaktor m_x mittels Gl. (7.2) (rot) berechnet.

7.1.4. Bestimmung der Fokussierstärke der Quadrupolmagnete

In [47] wurde die magnetische Länge l und der Umrechnungsfaktor $g(I, E_{\text{kin}})$ zwischen Stromstärke I und Fokussierstärke k in Abhängigkeit der kinetischen Energie E_{kin} des Quadrupolmagneten QU04 bestimmt. Um diese Eigenschaften zu bestimmen wurde das Element hierbei ausgebaut und am hauseigenen Magnetfeldmessstand (vergleiche Abs. 3.2.2) vermessen.

Für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 250 keV wurde die magnetische Länge

des Quadrupolmagneten zu 4,4 cm bestimmt. Für die Strom-Gradienten-Kalibration wurde eine Gradientenverteilung für verschiedene Stromsetzwerte bestimmt und ausgewertet. Der Durchschnittswert der Kalibration wurde zu $g(I, 250 \text{ keV}) = 0,1186 \frac{\text{T}}{\text{Am}} \cdot I$ bestimmt. Hierbei werden die Ergebnisse für 250 keV kinetische Energie als Designwert der thermionischen Quelle verwendet. Die Ergebnisse des Quadrupolmagneten QU04 werden für alle untersuchten Quadrupolmagnete verallgemeinert. Diese Näherung ist durch die gleiche Bauweise der Quadrupolmagnete begründet.

Für die Fokussierstärke k der Quadrupolmagnete ergibt sich somit:

$$k = \frac{e}{p} \cdot g(I, 250 \text{ keV}) \quad (7.3)$$

$$\approx 63,051 \frac{1}{\text{A m}^2} \cdot I \quad (7.4)$$

Hierbei wurde der Quotient $\frac{e}{p}$ aus der Elementarladung und dem Impuls für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 250 keV berechnet. Gleichung (7.4) erlaubt somit eine direkte Umrechnung der Stromstärke I der Quadrupolmagnete in deren Fokussierstärke k .

7.2. ELEGANT-Simulationen

Für Strahldynamiksimulationen wird das Programm ELEGANT verwendet. Hierfür müssen die Startparameter der Probeteilchen und die Strahlführung festgelegt werden.

7.2.1. Bunchparameter

Zunächst müssen die Startparameter des Anfangsbunches definiert werden. In [48] wurde die thermionische Quelle des S-DALINAC in CST STUDIO SUITE nachgebaut und simuliert. Hierbei wurde die normierte Emittanz des von der thermionischen Gun erzeugten Strahls zu $\epsilon_{n,x} = 0,03\pi \text{ mm mrad}$ horizontal und $\epsilon_{n,y} = 0,031\pi \text{ mm mrad}$ vertikal berechnet. Die Strahlausdehnung entspricht einer Ellipse mit uniformer Strahlausdehnung mit den beiden Halbachsen $r_x = 2,7 \text{ mm}$ und $r_y = 3,3 \text{ mm}$.

Der Mittelwert der kinetische Energie der Teilchen beträgt $E_{\text{kin}} = 250 \text{ keV}$. Zudem wird eine gaußförmige Impulsverteilung der Teilchen mit einer Standardabweichung von

0,5 % des Sollimpulses definiert. Mit diesen Werten kann die geometrische Emittanz zu $\epsilon_x = \frac{r_x}{p_0} = 0,0854 \text{ mm mrad}$ und $\epsilon_y = 0,0883 \text{ mm mrad}$ berechnet werden. Der normierte Impuls p_0 der simulierten Elektronen ist definiert als Quotient aus Impuls p und Ruhemasse m_0 .

Anschließend werden die Twiss-Parameter α , β und γ berechnet. Es handelt sich hierbei um Kenngrößen des Anfangsbunches, die in der Strahldynamik üblicherweise verwendet werden [18]. Die $\beta_{x,y}$ -Parameter können berechnet werden über $\beta_{x,y} = \frac{r_{x,y}^2}{\epsilon_{x,y}}$. Es folgt $\beta_x = 85,36 \text{ m}$ und $\beta_y = 123,39 \text{ m}$. Die $\alpha_{x,y}$ -Parameter werden Null gesetzt. Aufgrund der Korrelation $\beta\gamma - \alpha^2 = 1$ sind die Parameter $\gamma_{x,y}$ somit ebenfalls festgelegt.

Es werden in einem Bunch pro Simulation 1.000 Probeteilchen mit den angegebenen Eigenschaften erzeugt.

7.2.2. Erstellung des Lattice

Die Lattice-Datei stellt eine Liste der zu simulierenden Strahlführungselemente mit ihren Eigenschaften dar. Sie wird mit den Informationen aus den Messungen von Abs. 7.1 gefüllt. Hierzu zählen die Positionen und Dimensionierung der Strahlführungselemente, die Ablenkinkel der Steerermagnete, die Fokussierstärken der Quadrupolmagnete und die Fieldmaps der Solenoide. Da in der Simulation analog zur Vergleichsmessreihe **M3** 7.776 Stromeinstellungskombinationen für die untersuchten Magnete simuliert werden, variieren die Magneteigenschaften.

7.2.3. Durchführung der Simulation

Die Simulation soll das reale System der Messreihe **M3** möglichst optimal repräsentieren. Außer den Elementen, deren Strom in der Messreihe variiert wurde, wurde nur ein weiteres Quadrupoltriplet betrieben. Die Steererelemente direkt hinter der Quelle werden vernachlässigt, da sich die erzeugten Probeteilchen in der Simulation bereits von Anfang an auf der Sollbahn befinden.

Die Durchführung der Strahldynamiksimulationen orientiert sich an dem Data-Mining aus Abs. 5. Der Ablauf ist in Abb. 7.5 als Flussdiagramm dargestellt. Mit einem Python-Skript werden die $\lambda = 7.776$ Stromsetzwertkombinationen der Messreihe **M3** und die statische Lattice-Vorlage aus dem vorherigen Abschnitt eingelesen. Pro Stromeinstellung der fünf

Magnetelemente werden die Eigenschaften der Magnetelemente mit den Kalibrationsfaktoren der vorherigen Abschnitte neu berechnet. Mit diesen Werten wird die Lattice-Vorlage vervollständigt. Anschließend wird die Strahldynamiksimulation mit ELEGANT gestartet. Die Startparameter des erzeugten Anfangsbunches werden nicht variiert. An der Stelle des Beobachtungsleuchtschirms T5 wird der horizontale und vertikale Strahlschwerpunkt sowie die Ausdehnung des Strahls ermittelt und in einer Datei weggeschrieben. Anschließend wird das Lattice gelöscht und der Vorgang für den nachfolgenden Stromsetzwert wiederholt. Auf diese Weise wird ein Datenset aus 7.776 Stromsetzwertkombinationen und der gleichen Anzahl an Strahlparameterresultaten konstruiert. Der Simulationsvorgang dauert auf einem durchschnittlichen PC etwa 1 h.

7.3. Auswertung der Simulation

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation sowohl direkt mit den Messdaten, als auch mit den konstruierten Surrogat-Modelle verglichen. Im Anschluss werden Ansätze diskutiert, wie Surrogat-Modelle dazu beitragen können Simulationen zu unterstützen.

7.3.1. Vergleich der Simulations- und Messergebnisse

In Abb. 7.6 sind die Resultate der Strahldynamiksimulation gegen die Ergebnisse der Messreihe M3 pro Magneteinstellungskombination aufgetragen. Stimmen die Strahlparameter der Simulation und Messung für eine Magneteinstellungskombination der fünf untersuchten Magnetelemente überein, so befinden sich diese Datenpunkte auf der Winkelhalbierenden. Zur besseren Veranschaulichung wurde die Dichte der Ergebnisdaten mit einem Farbschema visualisiert. Hierbei repräsentieren heller werdende Farben einer erhöhte Dichte.

Die Strahlschwerpunktspositionen x und y konnten mit einer durchschnittlichen Abweichung von 1,39 mm bzw. 0,77 mm wiedergegeben werden. Im Vergleich hierzu konnte die Strahlposition mit dem Surrogat-Modell aus Abs. 6.5 mit einer mittleren Abweichung von 0,05 mm bzw. 0,03 mm wiedergegeben werden.

Auffällig ist, dass die Ergebnisse der Simulation für diese Größen ein diskretes Verhalten aufweisen. Es bilden sich deutlich sechs Niveaus aus. Die Ursache dieser Niveaubaustaltung wird im Folgeabschnitt diskutiert.

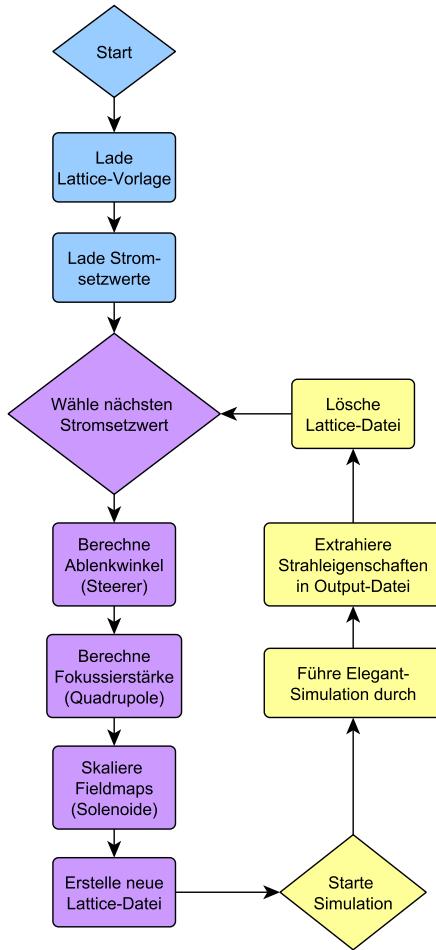


Abbildung 7.5.: Ablauf der Strahldynamiksimulation für 7.776 Magneteinstellungskombinationen. Zunächst wird die Lattice-Vorlage mit statischen Daten und die Stromsetzwerte geladen (blau). Anschließend werden die Parameter der Magnete mit einem Python-Skript aus den Stromsetzwerten berechnet (lila). Schließlich wird die Strahldynamiksimulation mit ELEGANT durchgeführt und die berechneten Strahlparameter exportiert (gelb). Dieser Vorgang wird für alle Magneteinstellungskombinationen wiederholt.

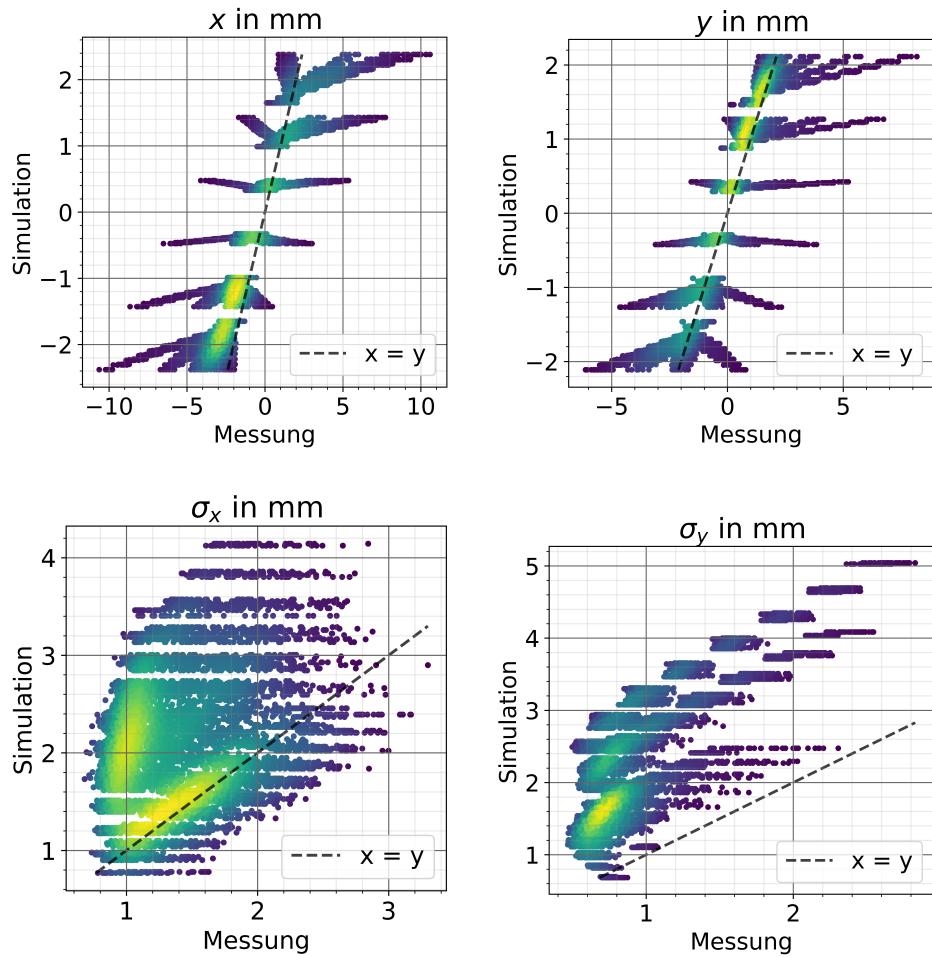


Abbildung 7.6.: Aufgetragen sind die berechneten Strahlparameter der Strahldynamiksimulation gegen die gemessenen Strahlparameter aus Messreihe **M3** pro Einstellung der fünf untersuchten Magnete. Die Orte mit erhöhter Dichte (gelb) befinden sich für die Positionen x und y des Strahls auf der Winkelhalbierenden, welche eine exakte Übereinstimmung repräsentiert. Die Strahlausdehnung σ_x wird für einige Einstellungen gut dargestellt. Für die Strahlausdehnung σ_y ist keine einfache Abhängigkeit zwischen Simulations- und Messdaten erkennbar.

Die Dichtezentren der Ergebnisse (gelb) befinden sich für die Positionen x und y des Strahls auf der Winkelhalbierenden, welche eine exakte Übereinstimmung repräsentiert. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die wesentlichen Zusammenhänge zur Positionsbestimmung in der Simulation wiedergespiegelt werden. Strahlschwerpunktpositionen mit größerer Distanz zum Zentrum des Beobachtungsleuchtschirms werden mit der Simulation schlechter abgebildet. Insgesamt ist die Reichweite der Simulationsergebnisse für die Strahlposition deutlich geringer als in der Messung.

Die Strahlausdehnung σ_x und σ_y wurde mit einer durchschnittlichen Abweichung von 0,76 mm bzw. 1,40 mm in der Simulation schlechter wiedergegeben. Die Dichtezentren weisen in den Diagrammen keinen linearen Verlauf auf, jedoch kann ein Dichtezentrum für σ_x gut dargestellt werden. Die Simulationsergebnisse sind betragsmäßig meist größer als in der Messung beobachtet werden konnte. Zusammengefasst ist eine präzise Vorhersage der Strahlbreite mithilfe der Strahldynamiksimulation nicht möglich.

7.3.2. Auswertung der Strahldynamiksimulation mit Surrogat-Modellen

Eine Strahldynamiksimulation mittels ELEGANT kann ebenfalls als Ersatzmodell aufgefasst werden. Die Stromsetzwerte der Magnete stellen hierbei die Inputparameter und die berechneten Strahlparameter die QoIs oder Outputparameter dar. Somit kann die Strahldynamiksimulation mit einer Polynom-Chaos-Expansion approximiert werden. Dies ermöglicht den Zugang zur Sensitivitätsanalyse der Simulation. Auf diese Weise können Einblicke darüber gewonnen werden, wie die Zusammenhänge der Magnetelemente und deren Wirkung auf die Strahlparameter in der Simulation dargestellt werden. Ein Vergleich mit der Sensitivitätsanalyse der Messdaten aus Abs. 6.5 ermöglicht es diejenigen Elemente zu identifizieren, die in der Simulation nicht ausreichend genau repräsentiert werden.

Sensitivitätsanalyse der Simulation

In der Strahldynamiksimulation wurden 7.776 Trainingsdaten für $d = 5$ Inputparameter aufgenommen. Bei den Inputparametern handelt es sich um die Stromsetzwerte des Solenoids LE03, der Steerermagnete SH04 und SV04 sowie der Quadrupolmagnete QU04 und QU05. Aus diesen Werten werden Surrogat-Modelle konstruiert, welche die Simulation möglichst gut wiedergeben sollen. Dieser Schritt ist notwendig, da die angestrebte globale Sensitivitätsanalyse der Simulationsdaten nur auf Basis eines Surrogat-Modells und nicht aus den Simulationsdaten direkt konstruiert werden kann.

Die mittlere Abweichung der konstruierten Surrogat-Modelle in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung ist in Tab. A.11 aufgelistet und in Abb. 7.7 dargestellt. Um einen guten Vergleich mit der Auswertung der Messreihe **M3** zu ermöglichen, wird auch hier das Modell 3. Ordnung gewählt. Die mittlere Abweichung der Strahlparameter zwischen der Simulation und dem Surrogat-Modell ist für alle Strahlparameter mit unter 0,05 mm sehr gering.

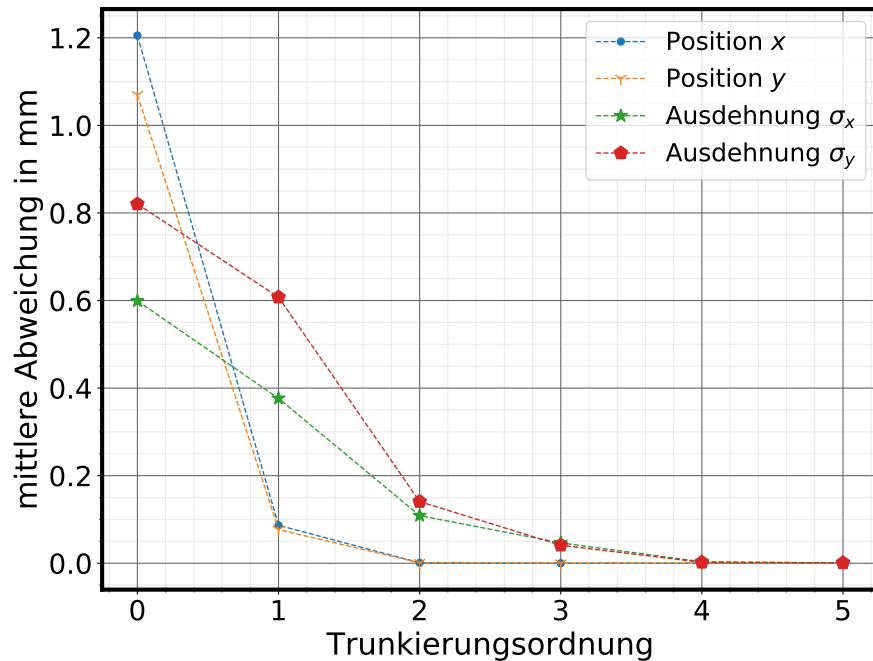


Abbildung 7.7.: Dargestellt ist die mittlere Abweichung der Qols zwischen den Simulationsresultaten λ_{out} und den berechneten Werten $\mu(\lambda_{\text{in}})$ des Surrogat-Modells in Abhängigkeit der Trunkierungsordnung p . Das Surrogat-Modell setzt auf den Simulationsdaten auf, um eine Sensitivitätsanalyse der Simulation zu ermöglichen. Zur weiteren Auswertung wird das Modell 3. Ordnung verwendet. Die Präzision des Modells ist mit einer mittleren Abweichung zwischen Simulation und Surrogat-Modell mit unter 0,05 mm für alle Qols außerordentlich hoch.

Anschließend wird die totale Sensitivitätsanalyse für die Strahldynamiksimulation unter Verwendung des Surrogat-Modells durchgeführt. Die berechneten totalen Sensitivitäten sind in Tab. A.12 aufgelistet und in Abb. 7.8 (oben) dargestellt. Zum Vergleich ist die

Sensitivitätsanalyse der Messdaten mit dem Surrogat-Modell aus Abs. 6.5 dargestellt (unten).

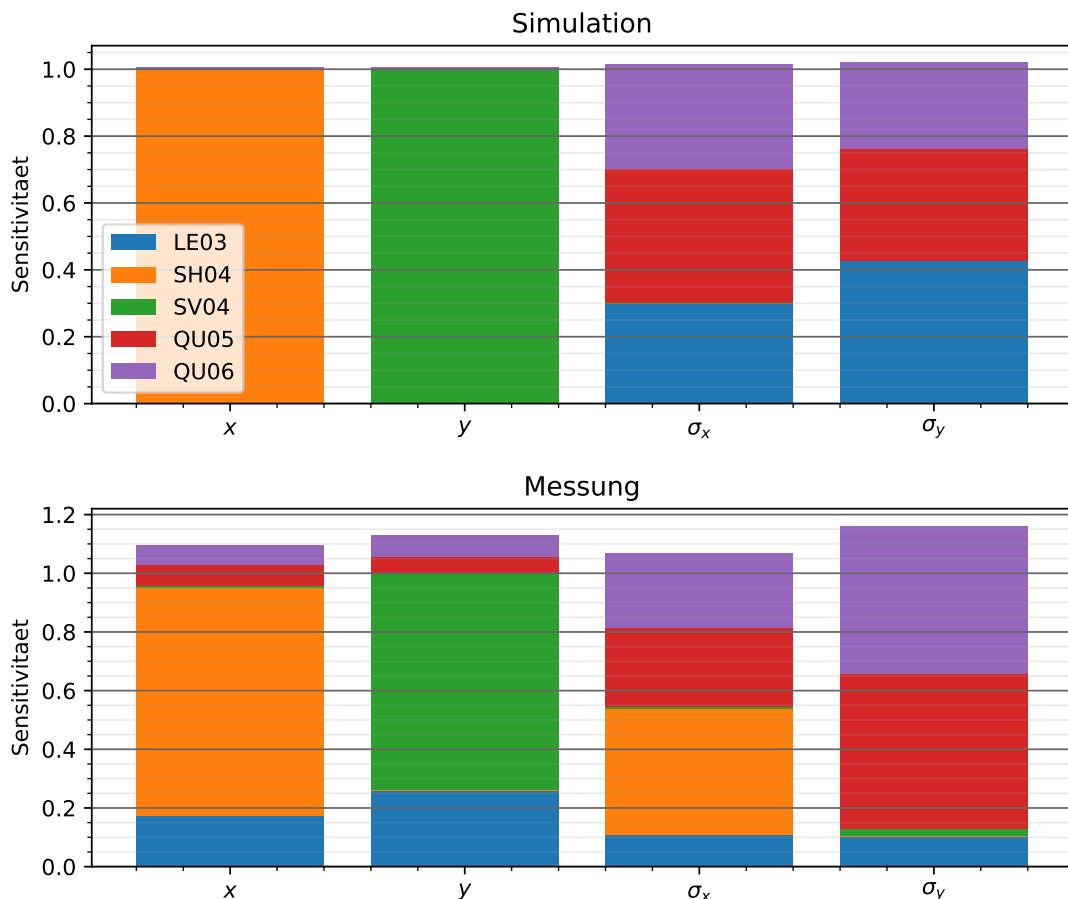


Abbildung 7.8.: Sensitivitätsanalyse zweier Surrogat-Modelle des gleichen Injektorsystems. Das obere Surrogat-Modell wurde auf Basis der Simulationsresultate, das untere Modell auf Basis der Messergebnisse erstellt. Die größte Diskrepanz wird durch die unterschiedlich repräsentierte Wirkung des Solenoids LE03 auf alle Strahlparameter verursacht. Individuelle Effekte des Systems, wie der starke Einfluss des Steerers SH04 auf die Strahl ausdehnung σ_x , werden in der Strahldynamiksimulation nicht wiedergegeben.

In der Simulation werden die Schwerpunktspositionen x und y des Strahls vollständig von den Steerermagneten dominiert. Somit kann mithilfe der Sensitivitätsanalyse die Niveaubaustellung erklärt werden, welche in Abb. 7.6 beobachtet wurde. Ist der Einfluss von Magnetelementen auf die Strahlposition vernachlässigbar, so führen alle Magneteinstellungskombinationen zu ähnlichen Resultaten dieser Größe. Werden für eine Steererstellung die Ströme der anderen Magnete variiert, so bilden sich die beobachteten Niveaus aus. Da für die Steerer jeweils sieben Stromsetzwerte variiert wurden, können sieben Niveaus beobachtet werden. Die gleiche Begründung gilt für die y -Position. Wie in Abs. 6.5 deutlich wird, wirken in der Realität auch die ausschließlich für die Fokussierung vorgesehenen Elemente in nicht-vernachlässigbarer Weise auf die Strahlpositionen x und y ein, so dass die Ergebnisse für die Strahlpositionen in Abb. 7.6 kontinuierlich sind. Eine Ursache hierfür könnte ein dezentraler Einschuss in diese Elemente darstellen. Die Wirkung des Solenoids LE03 wird darüber hinaus in der Simulation schlecht repräsentiert. Während der Einfluss auf die Strahlposition nicht wiedergegeben wird, ist die Sensitivität bezüglich der Strahlaustrittsdehnung überrepräsentiert. Dies kann auf eine Fehlpositionierung oder Verkippung des Elements hinweisen. Der Einfluss des horizontalen Steerermagneten auf die Strahlbreite σ_x konnte in der Simulation nicht wiedergegeben werden.

Überlegungen zur Verbesserung der Simulation

In der Sensitivitätsanalyse zeigte die Wirkung des Solenoids LE03 die größte Diskrepanz zwischen dem realen System und der Simulation. Aus diesem Grund ist eine genauere Charakterisierung dieses Magnetelementes notwendig. Zunächst sollte die Position und eine mögliche Verkippung des Elementes festgestellt werden. Für diesen Fall sollte die Verwendung von spezialisierter Messtechnik mit höherer Genauigkeit als der verwendete Kreuzlinienlaser in Betracht gezogen werden.

Weiterhin war es für das Solenoid LE03 nicht möglich, das Element einzeln auszubauen. Wie in Abb. 7.9 dargestellt, wurde das Solenoid in einem Modul vermessen, zu dem weitere Elemente gehören. Wird das Solenoid mit Strom durchflossen, so kann dessen Magnetfeld durch Restmagnetisierung und Induktionseffekte der übrigen Elemente deformiert werden. Es wird dazu geraten, die Solenoide in der nächsten größeren Wartungsphase des Injektors vollständig auszubauen und auf dem hauseigenen Magnetfeldmessstand zu vermessen.

In dieser Simulation wurde pro Solenoid eine Fieldmap des Magnetfeldes in einer Ebene erstellt und rotationssymmetrisch extrapoliert. Es ist möglich, dass hierdurch Unregelmäßigkeiten im Magnetfeld des Solenoids nicht in der Simulation abgebildet werden können. Das Erstellen einer Fieldmap für das gesamte Innenvolumen der Spule ist bei gleichem

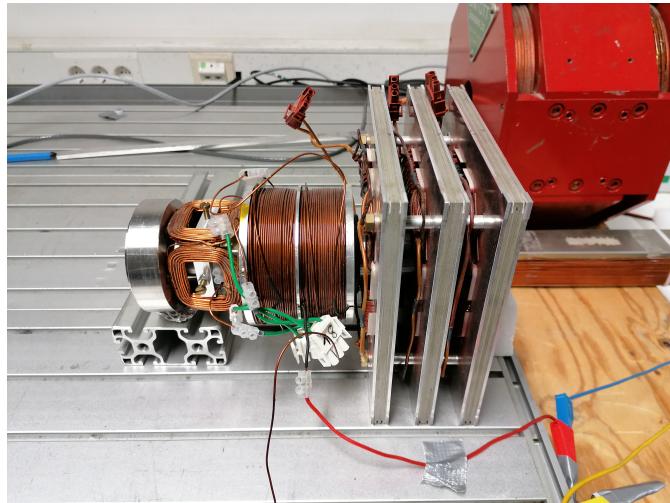


Abbildung 7.9.: Dargestellt ist ein ausgebautes Strahlrohrelement des Injektors mit installierten Magneten. Das Magnetfeld des Solenoids LE03 wurde in dieser Konstellation vermessen. Hierbei wird das Magnetfeld durch Abschirmungen und Hysterese der anderen Magnetelemente verformt. Dies vermindert die Präzision der aufgenommenen Fieldmaps der Sole-noide.

Abstand der Messpunkte enorm zeitaufwendig. Es wird empfohlen, die Magnetfelder der Solenoide in der nächsten längeren Wartungsphase mit erhöhter Präzision zu vermessen.

Darüber hinaus ist anzunehmen, dass sich der Strahl nicht wie in der Simulation ange nommen auf der Sollachse befindet. In der Messung nehmen die fokussierenden Elemente Einfluss auf die Strahlposition (vergleiche Abb. 7.8). Ideale Quadrupolmagnete und Sole noide können nur Einfluss auf die Strahlposition nehmen, wenn der Strahl dezentral oder unter einem Winkel ungleich Null in das Element eintritt. Hinzu kommt, dass der horizontale Steerermagnet bezüglich σ_x stark mit den Quadrupolmagneten korreliert (vergleiche Abs. 6.5) und somit einen starken Einfluss auf die Strahlbreite ausübt. Hierbei wird eine Abweichung des Strahls von der Sollachse in beiden transversalen Ebenen vermutet. Mit einem explorativen Ansatz wurden mehrere Simulationen durchgeführt, in denen der Anfangsbunch mit unterschiedlichen Abständen zur Sollachse generiert wurde. Es konnte jedoch keine Einstellung gefunden werden, in welcher eine gleichzeitige Verbesserung der Präzision aller Strahlparameter erzielt werden konnte. Hierfür ist es empfehlenswert eine Automatisierung zu entwickeln.

8. Fazit & Ausblick

8.1. Fazit

In dieser Arbeit wurde das Zusammenspiel und der Einfluss von Strahlführungselementen auf den Elektronenstrahl des S-DALINAC mithilfe von Surrogat-Modellen auf Basis von Polynom-Chaos-Expansionen erstmals untersucht.

Für die Konstruktion von Surrogat-Modellen müssen Trainingsdaten generiert werden. Hierfür wurde eine Datenaufnahme im Injektorbereich des S-DALINAC umgesetzt und mehrfach optimiert. Der Aufbau erlaubt es Daten in einem beliebigen Teilbereich des Injektors aufzunehmen. Bei den Inputparametern handelt es sich um Magnetströme. Die Outputparameter sind Strahlparameter, die mit einem Leuchtschirm erfasst werden.

Um das Data-Mining im Injektor vorzubereiten wurde die Reaktionszeit t_R der untersuchten Injektorsysteme zwischen dem Senden eines Befehls zum Setzen der Inputparameter und der Auswertung und Übermittlung der untersuchten Strahlparameter bestimmt. Diese setzt sich aus der konstanten Systemzeit t_S und der Zeit t_I , die zum Regeln des Stroms der Netzteile benötigt wird, zusammen. Die Systemzeit wurde zu $t_S = 0,99(3)$ s bestimmt. Sie stellt eine untere Schranke der Geschwindigkeit der Datenaufnahme und somit der Menge an Trainingsdaten dar. Um t_I abschätzen zu können wurde eine Messreihe aufgenommen, in der t_I in Abhängigkeit der Stromdifferenz ΔI gemessen wurde.

Zusätzlich wurde die Hysterese eines Quadrupolmagneten und eines Solenoids repräsentativ untersucht. Für den Quadrupolmagneten konnte keine Auswirkung der Hysterese beobachtet werden. Für das Solenoid können Abweichungen der Strahlschwerpunktsposition von bis zu 0,3 mm beobachtet werden. Zusätzlich wurde ermittelt, dass das kurzfristige Nullen von Stromsetzwerten zwischen zwei Datenpunkten, eine effiziente Lösung für die Datenaufnahme in Systemen mit starker Hysterese darstellen kann.

Es wurden insgesamt drei Messreihen mit jeweils vier bis sechs Strahlführungselementen durchgeführt. In 61,9 h Messzeit wurden insgesamt 135.425 Trainingsdatenpunkte aufgenommen.

Auf Basis der Trainingsdaten wurden Surrogat-Modelle trainiert. Um das Surrogat-Modell mit optimaler Ordnung zu bestimmen und Überanpassung zu vermeiden, wurde die mittlere Abweichung zwischen den Trainingsdatenpunkten und den Werten der Surrogat-Modelle berechnet. Hierbei konnte die Strahlschwerpunktsposition x bzw. y für ein Surrogat-Modell 3. Ordnung bereits mit einer mittleren Abweichung von bis zu 0,05 mm bzw. 0,03 mm wiedergegeben werden. Dies entspricht einer relativen Abweichung von 0,56 % bzw. 0,46 %. Die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y werden mit einer mittleren Abweichung von bis zu 0,09 mm bzw. 0,04 mm wiedergegeben.

Auf Basis des gewählten Modells konnte eine globale Sensitivitätsanalyse unter Bestimmung der sogenannten Sobol-Koeffizienten durchgeführt werden. Anhand der Messreihe **M1** wurden die Unterschiede der primären und totalen Sensitivitätsanalyse aufgezeigt. Zudem konnte ein starker Einfluss des Solenoids LE03 auf den Strahlschwerpunkt festgestellt werden, was auf eine Verschiebung oder Verkippung gegenüber der Strahlachse hindeutet. Zusätzlich wurde auf Basis der kombinierten Sobol-Koeffizienten eine Korrelationsanalyse durchgeführt.

Mit Hilfe des Surrogat-Modells, aufbauend auf Daten der Messreihe **M2**, wurden die Solenoide im Injektorbereich des S-DALINAC untersucht. Zum Einen konnte der ablenkende Charakter des Solenoids LE03 aus der ersten Messreihe bestätigt werden. Zum Anderen wurde die bekannten Probleme des Solenoids LE01 deutlich. Neben dem starken Einfluss auf die Schwerpunktsposition des Strahls in x -Richtung hat das Solenoid keinen Einfluss auf die Strahlausdehnung und somit keinen fokussierenden Effekt. Das Solenoid wurde in der darauf folgenden Wartungsphase ausgebaut.

Schließlich wurde eine Strahldynamiksimulation der Injektorsektion mit dem Programm ELEGANT durchgeführt. Mithilfe dieser Simulation konnten die Strahlschwerpunktspositionen x und y im betrachteten System mit einer durchschnittlichen Abweichung von 1,39 mm bzw. 0,77 mm und die Strahlausdehnungen σ_x und σ_y mit einer Abweichung von 0,76 mm bzw. 1,40 mm wiedergegeben werden. Anschließend wurde in einem Vergleich der Sensitivitätsanalysen der Messreihe und Strahldynamiksimulation ermittelt, dass das Solenoid LE03 in der Simulation unzureichend genau repräsentiert wird. Zudem konnte mithilfe der Sensitivitätsanalyse nachvollzogen werden, dass die Niveaubaustellung in der Strahldynamiksimulation auf eine Überrepräsentation der Steerersensitivitäten auf die Schwerpunktspositionen zurückzuführen ist. Abschließend wurden mehrere Optimierungsmöglichkeiten für die durchgeführte Simulation diskutiert.

8.2. Ausblick

In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass Surrogat-Modelle erfolgreich am S-DALINAC zur Untersuchung von Strahlführungselementen verwendet werden können. In Zukunft sollen mehrere grundlegende Ziele verfolgt werden. Hierzu zählt das Optimieren von Simulationen und Einstellgrößen des S-DALINAC unter Verwendung von Surrogat-Modellen, die automatisierte Einstellung des Injektorbereichs und das Ausweiten der Surrogat-Modelle auf den gesamten Beschleunigerbereich.

Surrogat-Modelle können einen wichtigen Grundstein für die automatisierte Einstellung des Injektorbereichs des S-DALINAC darstellen. Bevor eine solche Automatisierung umgesetzt werden kann, müssen weitere Konzepte geprüft werden. Es ist nicht möglich ein einzelnes Surrogat-Modell für den Injektorbereich mit seinen 33 Freiheitsgraden zu erstellen. Aus diesem Grund wird eine Segmentierung des Injektors in Bereiche mit weniger als zehn Magnetelementen und einem abschließenden Beobachtungsleuchtschirm empfohlen, für welche individuelle Surrogat-Modelle erstellt werden. Dass Surrogat-Modelle sehr präzise Aussagen für diese Einzelmodelle treffen können, wurde in dieser Arbeit bereits gezeigt. Es gilt zu überprüfen, wie eine Verkettung dieser Systeme aussehen und welche Qualität für die Vorhersage der Strahlparameter erzielt werden kann. Um ein solches Gesamtsystem für den Injektor zu erzeugen, ist es zudem wichtig, dass die Systeme im Injektor zeitlich stabil bleiben. Aus diesem Grund sollte ein Surrogat-Modell für ein ausgewähltes Injektorsystem erstellt werden und die Vorhersagen dieses Modells nach regelmäßigen Zeiträumen mit dem realen Injektorzustand verglichen werden. Schließlich wurde in dieser Arbeit ausschließlich die Vorwärtsausbreitung der Unsicherheit betrachtet, d.h. für Magneteinstellungen wurden mithilfe der Modelle Vorhersagen über die Strahlparameter an der Position eines Leuchtschirms getroffen. Für eine automatisierte Einstellung des Injektors müssen die Magneteigenschaften so gewählt werden, dass der Strahl gewünschte Strahlparameter erfüllt. Hierfür muss die inverse Unsicherheitsquantifizierung durch die Surrogat-Modelle untersucht werden.

In dieser Arbeit wurden ausschließlich Leuchtschirme verwendet, um Strahlparameter zu erfassen. Werden die Surrogat-Modelle auf die anderen Bereiche des S-DALINAC ausgeweitet, so können weitere Strahlparameter wie Emittanz oder Schwerpunktsenergie in den Modellen berücksichtigt werden. Hierfür müssen die Inputparameter um entsprechende Einstellgrößen der Elektronenquelle und Kavitäten erweitert werden.

Neben der Optimierung von Einstellgrößen des Injektors sollte die Unterstützung von Strahldynamiksimulationen mit Surrogat-Modellen vorangetrieben werden. Simulationen

erlauben das Testen von alternativen Aufbauten der Strahlführung. Diese Möglichkeit ist für Surrogat-Modelle nicht gegeben, da sie stets nur das System repräsentieren, mit welchem die zugrunde liegenden Trainingsdaten generiert wurden. Wenn stattdessen Simulationen verwendet werden, um Vorhersagen über bestehende Bereiche des Beschleunigers zu treffen, so können Surrogat-Modelle zur Verbesserung der Simulationsresultate verwendet werden. Hierfür können Teile der Simulationen gegen lokale Surrogat-Modelle verglichen und gegebenenfalls angepasst werden. Als mögliche Methoden kommen die globale Sensitivitätsanalyse und die Korrelationsanalyse auf Polynom-Chaos-Basis in Frage. Da die konstruierten Surrogat-Modelle im Allgemeinen eine sehr gute Präzision aufweisen, können sie zur Bewertung von Simulationsergebnissen oder als Referenz für ELEGANT-Optimierungsalgorithmen dienen, ohne den Beschleuniger zu diesem Zeitpunkt einzuschränken.

A. Anhang

Tabelle A.1.: Dargestellt ist die mittlere absolute Abweichung $\tilde{\Delta}$ der Qols zwischen den Strahlparametern, berechneten mit dem Surrogat-Modell, und den gemessenen Werten der Messreihe **M1** in Abhängigkeit von der Trunkierungsordnung. Hierbei legen x und y die Strahlposition und σ_x und σ_y die Strahlbreite fest. I_0 bezeichnet die mittlere Helligkeit des Strahls auf dem Beobachtungssleuchtschirm.

Ordnung p	$\tilde{\Delta}_x$	$\tilde{\Delta}_y$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_x}$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_y}$	$\tilde{\Delta}_{I_0}$
0	1,05 mm	1,32 mm	1,28 mm	0,82 mm	2,63 a.u.
1	0,89 mm	0,88 mm	1,00 mm	0,69 mm	2,62 a.u.
2	0,30 mm	0,30 mm	0,92 mm	0,65 mm	1,65 a.u.
3	0,14 mm	0,15 mm	0,36 mm	0,30 mm	1,62 a.u.
4	0,13 mm	0,12 mm	0,26 mm	0,20 mm	1,39 a.u.
5	0,12 mm	0,10 mm	0,19 mm	0,19 mm	1,36 a.u.
6	0,10 mm	0,08 mm	0,16 mm	0,16 mm	0,56 a.u.

Tabelle A.2.: Sobol-Koeffizienten

Tabelle A.2.: Dargestellt sind die primären Sobol-Koeffizienten S_k der Strahleigenschaften (oben) in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei ist $k \in [1, n]$ der Laufindex der Magnetelemente.

Element	Position x	Position y	Ausdehnung σ_x	Ausdehnung σ_y	Intensität I_0
LE03	0,86	0,77	0,04	0,07	0,69
SV06	0	0	0	0	0
SH06	0	0	0	0	0
QU03	0,02	0,12	0,56	0,48	0,25
QU04	0	0,01	0,09	0,07	0
QU05	0	0,01	0,05	0,05	0

Tabelle A.3.: Dargestellt sind die totalen Sobol-Koeffizienten S_k^T der Strahleigenschaften (oben) in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei ist $k \in [1, n]$ der Laufindex der Magnetelemente.

Element	Position x	Position y	Ausdehnung σ_x	Ausdehnung σ_y	Intensität I_0
LE03	0,98	0,86	0,29	0,37	0,70
SV06	0	0	0	0	0
SH06	0	0	0	0	0
QU03	0,07	0,17	0,82	0,79	0,29
QU04	0,04	0,04	0,1	0,1	0,04
QU05	0,03	0,03	0,06	0,06	0,02

Tabelle A.4.: Dargestellt sind die kombinierten Sobol-Koeffizienten $S_{k,l}$ der x -Strahlposition in Abhangigkeit der n untersuchten Strahlfuhrungselemente (links) fur das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei sind $k, l \in [1, n]$ die Indizes der Magnetelemente mit $l \leq k$. Die Diagonalelemente mit $l = k$ entsprechen den primaren Sobol-Koeffizienten S_k .

	LE03	SV06	SH06	QU03	QU04	QU05
LE03	0,86					
SV06	0	0				
SH06	0	0	0			
QU03	0,06	0	0	0,02		
QU04	0,03	0	0	0	0	
QU05	0,02	0	0	0	0	0

Tabelle A.5.: Dargestellt sind die kombinierten Sobol-Koeffizienten $S_{k,l}$ der y -Strahlposition in Abhangigkeit der n untersuchten Strahlfuhrungselemente (links) fur das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei sind $k, l \in [1, n]$ die Indizes der Magnetelemente mit $l \leq k$. Die Diagonalelemente mit $l = k$ entsprechen den primaren Sobol-Koeffizienten S_k .

	LE03	SV06	SH06	QU03	QU04	QU05
LE03	0,77					
SV06	0	0				
SH06	0	0	0			
QU03	0,04	0	0	0,12		
QU04	0,03	0	0	0	0,01	
QU05	0,02	0	0	0	0	0,01

Tabelle A.6.: Sobol-Koeffizienten für die Strahlausdehnung σ_x

Tabelle A.6.: Dargestellt sind die kombinierten Sobol-Koeffizienten $S_{k,l}$ der Strahlausdehnung σ_x in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei sind $k, l \in [1, n]$ die Indizes der Magnetelemente mit $l \leq k$. Die Diagonalelemente mit $l = k$ entsprechen den primären Sobol-Koeffizienten S_k .

	LE03	SV06	SH06	QU03	QU04	QU05
LE03	0,04					
SV06	0	0				
SH06	0	0	0			
QU03	0,25	0	0	0,56		
QU04	0	0	0	0,01	0,09	
QU05	0	0	0	0,01	0	0,05

Tabelle A.7.: Dargestellt sind die kombinierten Sobol-Koeffizienten $S_{k,l}$ der Strahlausdehnung σ_y in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Messreihe **M1**. Hierbei sind $k, l \in [1, n]$ die Indizes der Magnetelemente mit $l \leq k$. Die Diagonalelemente mit $l = k$ entsprechen den primären Sobol-Koeffizienten S_k .

	LE03	SV06	SH06	QU03	QU04	QU05
LE03	0,07					
SV06	0	0				
SH06	0	0	0			
QU03	0,28	0	0	0,48		
QU04	0,01	0	0	0,02	0,07	
QU05	0,01	0	0	0,01	0	0,05

Tabelle A.8.: Dargestellt ist die mittlere absolute Abweichung $\tilde{\Delta}$ der Qols zwischen den Strahlparametern, berechneten mit dem Surrogat-Modell, und den gemessenen Werten der Messreihe **M2** in Abhängigkeit von der Trunkierungsordnung. Hierbei legen x und y die Strahlposition und σ_x und σ_y die Strahlbreite fest.

Ordnung p	$\tilde{\Delta}_x$	$\tilde{\Delta}_y$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_x}$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_y}$
0	2,09 mm	2,28 mm	0,57 mm	0,91 mm
1	0,96 mm	0,99 mm	0,57 mm	0,90 mm
2	0,89 mm	0,49 mm	0,23 mm	0,43 mm
3	0,22 mm	0,11 mm	0,23 mm	0,42 mm
4	0,02 mm	0,07 mm	0,10 mm	0,11 mm
5	0,07 mm	0,06 mm	0,10 mm	0,10 mm
6	0,06 mm	0,05 mm	0,07 mm	0,08 mm
7	0,05 mm	0,05 mm	0,06 mm	0,07 mm
8	0,04 mm	0,04 mm	0,06 mm	0,06 mm
9	0,04 mm	0,03 mm	0,04 mm	0,05 mm

Tabelle A.9.: Dargestellt sind die totalen Sobol-Koeffizienten S_k^T der Strahleigenschaften (oben) in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 4. Ordnung der Messreihe **M2**. Hierbei bezeichnet $k \in [1, n]$ den Laufindex der Magnetelemente.

Element	Position x	Position y	Ausdehnung σ_x	Ausdehnung σ_y
LE01	0,81	0	0,01	0
LE02	0,08	0,52	0,11	0,40
LE03	0,22	0,52	0,99	0,68
LE04	0,04	0	0	0

Tabelle A.10.: Mittlere absolute Abweichung

Tabelle A.10.: Dargestellt ist die mittlere absolute Abweichung $\tilde{\Delta}$ der Qols zwischen den Strahlparametern, berechneten mit dem Surrogat-Modell, und den gemessenen Werten der Messreihe **M3** in Abhängigkeit von der Trunkierungsordnung. Hierbei legen x und y die Strahlposition und σ_x und σ_y die Strahlbreite fest.

Ordnung p	$\tilde{\Delta}_x$	$\tilde{\Delta}_y$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_x}$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_y}$
0	1,67 mm	1,05 mm	0,27 mm	0,25 mm
1	0,68 mm	0,43 mm	0,14 mm	0,15 mm
2	0,26 mm	0,13 mm	0,11 mm	0,07 mm
3	0,05 mm	0,03 mm	0,09 mm	0,04 mm
4	0,04 mm	0,02 mm	0,08 mm	0,03 mm
5	0,04 mm	0,02 mm	0,07 mm	0,02 mm

Tabelle A.11.: Dargestellt ist die mittlere absolute Abweichung $\tilde{\Delta}$ der Qols zwischen den Strahlparametern, berechneten mit dem Surrogat-Modell und den mit ELEGANT simulierten Strahlparametern in Abhängigkeit von der Trunkierungsordnung. Hierbei legen x und y die Strahlposition und σ_x und σ_y die Strahlbreite fest.

Ordnung p	$\tilde{\Delta}_x$	$\tilde{\Delta}_y$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_x}$	$\tilde{\Delta}_{\sigma_y}$
0	1,21 mm	1,07 mm	0,6 mm	0,82 mm
1	0,09 mm	0,08 mm	0,38 mm	0,61 mm
2	0 mm	0 mm	0,11 mm	0,14 mm
3	0 mm	0 mm	0,05 mm	0,04 mm
4	0 mm	0 mm	0 mm	0 mm
5	0 mm	0 mm	0 mm	0 mm

Tabelle A.12.: Dargestellt sind die totalen Sobol-Koeffizienten S_k^T der Strahleigenschaften (oben) in Abhängigkeit der n untersuchten Strahlführungselemente (links) für das Surrogat-Modell 3. Ordnung der Strahldynamiksimulation mittels ELEGANT. Hierbei ist $k \in [1, n]$ der Laufindex der Magnetelemente.

Element	Position x	Position y	Ausdehnung σ_x	Ausdehnung σ_y	
LE03	0	0	0,30	0,43	0
SH06	1	0	0	0	0
SV06	0	1	0	0	0
QU05	0	0	0,40	0,33	0
QU06	0	0	0,31	0,26	0

Literatur

- [1] I. Goodfellow, Y. Bengio und A. Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. URL: <http://www.deeplearningbook.org>.
- [2] L. Zhou, S. Pan, J. Wang und A. V. Vasilakos. „Machine learning on big data: Opportunities and challenges“. In: *Neurocomputing* 237 (2017), S. 350–361. ISSN: 0925-2312. doi: <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2017.01.026>.
- [3] A. Edelen, N. Neveu, M. Frey, Y. Huber, C. Mayes und A. Adelmann. „Machine learning for orders of magnitude speedup in multiobjective optimization of particle accelerator systems“. In: *Phys. Rev. Accel. Beams* 23 (2020), S. 044601. doi: [10.1103/PhysRevAccelBeams.23.044601](https://doi.org/10.1103/PhysRevAccelBeams.23.044601).
- [4] Q. Qi, F. Tao, T. Hu, N. Anwer, A. Liu, Y. Wei, L. Wang und A.Y.C. Nee. „Enabling technologies and tools for digital twin“. In: *Journal of Manufacturing Systems* 58 (2021). Digital Twin towards Smart Manufacturing and Industry 4.0, S. 3–21. ISSN: 0278-6125. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmsy.2019.10.001>.
- [5] N. Pietralla. „The Institute of Nuclear Physics at the TU Darmstadt“. In: *Nuclear Physics News* 28.2 (2018), S. 4–11. doi: [10.1080/10619127.2018.1463013](https://doi.org/10.1080/10619127.2018.1463013).
- [6] B. Kuske und A. Adelmann. „Commissioning of theBERLinPro Diagnostics Line using Machine Learning Techniques“. In: *63rd ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on Energy Recovery Linacs* (2019). doi: [10.18429/JACoW-ERL2019-WECOYBS04](https://doi.org/10.18429/JACoW-ERL2019-WECOYBS04).
- [7] A. Adelmann. „On Nonintrusive Uncertainty Quantification and Surrogate Model Construction in Particle Accelerator Modeling“. In: *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification* 7.2 (2019), S. 383–416. doi: [10.1137/16M1061928](https://doi.org/10.1137/16M1061928).
- [8] N. Wiener. „The Homogeneous Chaos“. In: *American Journal of Mathematics* 60.04 (1938), S. 897–936. doi: <https://doi.org/10.2307/2371268>.
- [9] M. Arnold, F. Hug, T. Kürzeder und N. Pietralla. „Final Design and Status of the Third Recirculation for the S-DALINAC“. In: *7th International Particle Accelerator Conference* (2016), S. 1717–1719. doi: [10.18429/JACoW-IPAC2016-TUP0R026](https://doi.org/10.18429/JACoW-IPAC2016-TUP0R026).

-
- [10] U. Becker, P. Schütt, S. Setzer, A. Skocic, T. Weiland, R. Eichhorn, H.-D. Gräf, S. Kostial und A. Richter. „New simulation results for the S-DALINAC electron source“. In: *Proceedings of the 1999 Particle Accelerator Conference* 4 (1999). doi: [10.1109/PAC.1999.792993](https://doi.org/10.1109/PAC.1999.792993).
- [11] Y. Fritzsche. „Aufbau und Inbetriebnahme einer Quelle polarisierter Elektronen am supraleitenden Darmstädter Elektronenlinearbeschleuniger S-DALINAC“. Dissertation. Darmstadt: Technische Universität Darmstadt, 2011.
- [12] K. Sonnabend, D. Svran, J. Beller, M. A. Büsing, A. Constantinescu, M. Elvers, J. Endres, M. Fritzsche, J. Glorius, J. Hasper, J. Isaak, B. Löher, S. Müller, N. Pietralla, C. Romig, A. Sauerwein, L. Schorrenberger, C. Wälzlein, A. Zilges und M. Zweidinger. „The Darmstadt High-Intensity Photon Setup (DHIPS) at the S-DALINAC“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A* 640 (2011), S. 6–12. doi: [10.1016/j.nima.2011.02.107](https://doi.org/10.1016/j.nima.2011.02.107).
- [13] J. Foh, R. Frey, R. Scheneider, D. Schüll, A. Schwierczinski, H. Theissen und O. Titze. „High resolution electron scattering facility at the Darmstadt linear accelerator (DALINAC) IV. Data processing“. In: *Nuclear Instruments and Methods* 153.1 (1978), S. 43–50. issn: 0029-554X. doi: [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(78\)90614-6](https://doi.org/10.1016/0029-554X(78)90614-6).
- [14] M. Knirsch. „Konzeption, Aufbau und Erprobung eines hochauflösenden QCLAM-Spektrometers mit großem Raumwinkel und hoher Impulsakzeptanz am Elektronenbeschleuniger S-DALINAC“. Dissertation. Darmstadt: Technische Hochschule Darmstadt, 1991.
- [15] C. Lüttge, C. Hofmann, J. Horn, F. Neumeyer, A. Richter, G. Schrieder, E. Spamer, A. Stiller, D.I. Sober, S.K. Matthews und L.W. Fagg. „Large-aperture system for high-resolution 180° electron scattering“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 366.2 (1995), S. 325–331. issn: 0168-9002. doi: [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(95\)00497-1](https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)00497-1).
- [16] K. Lindenberg. „Development and Construction of the Low-Energy Photon Tagger NEPTUN“. Dissertation. Darmstadt: Technische Universität Darmstadt, 2008.
- [17] D. Savran, K. Lindenberg, J. Glorius, B. Löher, S. Müller, N. Pietralla, L. Schnorrenberger, V. Simon, K. Sonnabend, C. Wälzlein, M. Elvers, J. Enders, J. Hasper und A. Zilges. „The low-energy photon tagger NEPTUN“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 613.2 (2010), S. 232–239. issn: 01689002. url: <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/49015/>.

-
-
- [18] M. Borland. „elegant: A Flexible SDDS-Compliant Code for Accelerator Simulation“. In: *6th International Computational Accelerator Physics Conference (ICAP 2000)* (2000). doi: [10.2172/761286](https://doi.org/10.2172/761286).
 - [19] K. Flottmann, S. Lidia und P. Piot. „Recent improvements to the ASTRA particle tracking code“. In: *Proceedings of the 2003 Particle Accelerator Conference* (2003).
 - [20] I. Elishakoff, R.T. Haftka und J. Fang. „Structural design under bounded uncertainty—Optimization with anti-optimization“. In: *Computers & Structures* 53.6 (1994), S. 1401–1405. issn: 0045-7949. doi: [https://doi.org/10.1016/0045-7949\(94\)90405-7](https://doi.org/10.1016/0045-7949(94)90405-7).
 - [21] R. E. Moore. *Methods and Applications of Interval Analysis*. Philadelphia, USA: Society for Industrial und Applied Mathematics, 1979. doi: [10.1137/1.9781611970906](https://doi.org/10.1137/1.9781611970906).
 - [22] Y. Cao, M. Hussaini und T. Zang. „On the Exploitation of Sensitivity Derivatives for Improving Sampling Methods“. In: *AIAA Journal* 42 (2003). doi: [10.2514/1.2820](https://doi.org/10.2514/1.2820).
 - [23] M. Hanss. *Applied Fuzzy Arithmetic, An Introduction with Engineering Applications*. Berlin: Springer-Verlag, 2005.
 - [24] H.-R. Bae, R. V. Grandhi und R. A. Canfield. „An approximation approach for uncertainty quantification using evidence theory“. In: *Reliability Engineering & System Safety* 86.3 (2004), S. 215–225. issn: 0951-8320. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ress.2004.01.011>.
 - [25] Y. Ben-Haim und I. Elishakoff. *Convex Method in Applied Mechanics*. Bd. 25. Amsterdam, Niederlande: Elsevier, 1990.
 - [26] G. S. Fishman. *Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications*. New York, USA: Springer-Verlag, 1995.
 - [27] O.P. Le Maître, O.M. Knio, H.N. Najm und R.G. Ghanem. „Uncertainty propagation using Wiener–Haar expansions“. In: *Journal of Computational Physics* 197.1 (2004), S. 28–57. issn: 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2003.11.033>.
 - [28] Y.-G. Zhao und T. Ono. „Moment methods for structural reliability“. In: *Structural Safety* 23.1 (2001), S. 47–75. issn: 0167-4730. doi: [https://doi.org/10.1016/S0167-4730\(00\)00027-8](https://doi.org/10.1016/S0167-4730(00)00027-8).
 - [29] A. Giunta, M. Eldred und J. Castro. „Uncertainty quantification using response surface approximations“. In: *9th ASCE Specialty Conference on Probabilistic Mechanics and Structural Reliability* (2004).

-
-
- [30] K. Sepahvand, S. Marburg und H.-J. Hardtke. „Uncertainty quantification in stochastic systems using polynomial expansion“. In: *International Journal of Applied Mechanics* 2.2 (2010), S. 305–353. doi: [10.1142/S1758825110000524](https://doi.org/10.1142/S1758825110000524).
 - [31] L. Ronald und J. Helton. „An Investigation Of Uncertainty And Sensitivity Analysis Techniques For Computer-Models“. In: *Risk Analysis* 8 (2006), S. 71–90. doi: [10.1111/j.1539-6924.1988.tb01155.x](https://doi.org/10.1111/j.1539-6924.1988.tb01155.x).
 - [32] S. Loukas. *What is Machine Learning: Supervised, Unsupervised, Semi-Supervised and Reinforcement learning methods. A short post about what Machine learning is: Supervised, Unsupervised, Semi-Supervised and Reinforcement learning.* towards data science. 10. Juni 2020. URL: <https://towardsdatascience.com/what-is-machine-learning-a-short-note-on-supervised-unsupervised-semi-supervised-and-aed1573ae9bb> (zuletzt besucht am 30.11.2021).
 - [33] H. Gautam. *Machine Learning Overview*. Medium. 20. Juni 2019. URL: <https://medium.com/@hari4om/machine-learning-overview-9e32566ce25f> (zuletzt besucht am 28.11.2021).
 - [34] S. Bhattacharyya. *Ridge and Lasso Regression: L1 and L2 Regularization*. towards data science. 26. Sep. 2018. URL: <https://towardsdatascience.com/ridge-and-lasso-regression-a-complete-guide-with-python-scikit-learn-e20e34bcbf0b> (zuletzt besucht am 28.11.2021).
 - [35] D. Xiu und G. Karniadakis. „The Wiener–Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations“. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 24 (2002), S. 619–644. doi: [10.1137/S1064827501387826](https://doi.org/10.1137/S1064827501387826).
 - [36] B. Sudret. „Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions“. In: *Reliability Engineering and System Safety* 93.7 (2008), S. 964–979. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ress.2007.04.002>.
 - [37] K. Sargsyan, C. Safta, K. S. Chowdhary, S. Castorena, S. De Bord und B. Debusschere. *UQTk Version 3.0.3 User Manual*. Sandia National Laboratories. 2017. doi: [10.2172/1367452](https://doi.org/10.2172/1367452). URL: <https://www.osti.gov/biblio/1367452> (zuletzt besucht am 28.11.2021).
 - [38] N. Somjit, W. F. O. Müller, Thomas Weiland, R. Eichhorn, J. Enders, H.-D. Gräf, C. Heßler, Y. Poltoratska und A. Richter. „Numerical Simulation and Optimization of a 3-GHz Chopper/Prebuncher System for the S-DALINAC“. In: *Joint Accelerator Conferences Website* (2006), S. 2185. URL: <http://tubiblio.ulb.tu-darmstadt.de/32147/>.

-
-
- [39] A. B. El-Kareh und J. C. El-Kareh. *Electron Beams, Lenses and Optics*. Orlando: Academic Press, 1970.
 - [40] V. Kumar. „Understanding the focusing of charged particle beams in a solenoid magnetic field“. In: *American Journal of Physics* 77.8 (2009), S. 737–741. doi: 10.1119/1.3129242.
 - [41] B. Debusschere, H. Najm, P. Pébay, O. Knio, R. Ghanem und O. Le Maître. „Numerical Challenges in the Use of Polynomial Chaos Representations for Stochastic Processes“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 26.2 (2004), S. 698–719. doi: 10.1137/S1064827503427741.
 - [42] *Experimental Physics and Industrial Control System. EPICS Home at Argonne*. Argonne National Laboratory. URL: <https://epics.anl.gov/> (zuletzt besucht am 30.11.2021).
 - [43] M. Fischer. „Design und Aufbau eines Messplatzes zur Strahlqualitätsmessung basierend auf optischer Übergangsstrahlung am S-DALINAC“. Master-Thesis. Technische Universität Darmstadt, 2019.
 - [44] M. Steinhorst. „Entwicklung und Anwendung eines Systems zur Messung von Hochfrequenz-Leistungen und Automatisierung der optimierten Einstellung der digitalen Hochfrequenz-Regelung des S-DALINAC“. Diss. Darmstadt: Technische Universität, 2021. URL: <http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/17594/>.
 - [45] K. Kasemir und G. Carcassi. *Control System Studio Guide. For installers and maintainers of CS-Studio*. 2018. URL: <http://cs-studio.sourceforge.net/docbook/> (zuletzt besucht am 28.11.2021).
 - [46] S. Lawrence, C. Lee Giles und A. Chung Tsoi. „Lessons in Neural Network Training: Overfitting May be Harder than Expected“. In: AAAI Press, 1997, S. 540–545.
 - [47] P. Dijkstal. „Aufbau eines Systems zur Emittanzmessung am Elektronenstrahl des S-DALINAC“. Bachelor-Thesis. Technische Universität Darmstadt, 2014.
 - [48] M. Michael. „Simulationsbasierte Analyse der Strahldynamik im Injektor des S-DALINAC“. Master-Thesis. Technische Universität Darmstadt, 2018.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben. Zuerst möchte ich Herrn Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Norbert Pietralla für die Möglichkeit danken, auf diesem aktuellen Forschungsgebiet an der Beschleunigeranlage und in seiner Arbeitsgruppe arbeiten zu können. Vielen Dank an die Betriebsleiterin der Beschleunigergruppe, Frau Dr. Michaela Arnold, die mich für dieses spannende und anspruchsvolle Thema begeistern konnte und darüber hinaus stets meine fachliche Weiterbildung gefördert hat.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinem Betreuer, Herrn M.Sc. Felix Schließmann. Viele Dank für die kompetente Betreuung während meiner gesamten Masterarbeit, die zahlreichen produktiven und zielführenden Diskussionen sowie die Unterstützung und Einsatzbereitschaft, auf die ich mich zu jedem Zeitpunkt verlassen konnte. Zusätzlich möchte ich mich bei Herrn M.Sc. Felix Schließmann und Herrn Dr. Lars Jürgensen für ihre Hilfe bei der Einstellung der Beschleunigeranlage bedanken. Herrn Dr. Manuel Steinhorst und Herrn Dr. Ruben Grewe möchte ich für ihre unablässige Unterstützung bezüglich des Kontrollsystems danken. Für ihre fachliche Unterstützung möchte ich Herrn Dr. Jonny Birkhan und Frau Dipl.-Math. Bettina Kuske danken. Außerdem möchte ich mich bei der gesamten Beschleunigergruppe dafür bedanken, dass ich so gut aufgenommen wurde, Teil des Teams war und mir solch ein großes Vertrauen bei meiner Arbeit am Beschleuniger entgegengebracht wurde. Ich möchte zusätzlich Frau M.Sc. Isabelle Brandherm und Herrn M.Sc. Adrian Brauch danken, die mit ihren Korrekturen, Vorschlägen und Anmerkungen wesentlich zu dieser Arbeit und ihrem Gelingen beigetragen haben.

Meiner Familie und ganz besonders meiner Freundin Radostina Zidarova danke ich für die moralische Unterstützung und das Verständnis für zahlreiche lange Nächte und Wochenenden im Institut.