

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

JOÃO PEDRO IMBRIANI ASTOLFO

ESTUDO ÓPTICO E COMISSIONAMENTO DA LINHA DE LUZ  
CARCARÁ-X DO SIRIUS

SÃO CARLOS - SP

2022

JOÃO PEDRO IMBRIANI ASTOLFO

ESTUDO ÓPTICO E COMISSONAMENTO DA LINHA DE LUZ CARCARÁ-X DO SIRIUS

Trabalho de Conclusão de Curso da Universidade Federal de São Carlos, para obtenção do título de bacharel em Engenharia Física.

Orientador: Marcio Daldin Teodoro  
Coorientador: Bernd Christian Meyer

São Carlos - SP

2022

# Agradecimentos

Aos meus colegas do grupo de óptica de raios-x do LNLS, Bernd, Artur, Sérgio, Stefany e principalmente Humberto, por todo o aprendizado, discussões e conversas que tornaram esse trabalho possível. Meu ambiente de trabalho e desenvolvimento foi o melhor possível junto de vocês.

À toda a “panelinha” do Departamento de Física da UFSCar, por todas as conversas, apoio, risadas e reclamações mútuas do curso. Cada um de vocês me deu força para chegar até aqui.

A Eduardo Bittencourt, pela oportunidade dada a mim no início de 2020 que alavancou meu conhecimento em simulações ópticas.

Aos meus pais, Angélica e Eduardo. Vocês carregam parte da autoria deste trabalho, por todo o amor, carinho, dedicação e apoio nos tempos difíceis e nos mais tranquilos. Cada sacrifício e esforço feitos até aqui valeram a pena.

E por último, a mim mesmo: valeu, João.

*O início do conhecimento é a descoberta de qualquer coisa que não entendemos.*  
*(Frank Herbert)*



# Resumo

Este trabalho descreve o estudo óptico da linha de luz CARCARÁ-X do SIRIUS realizado junto ao grupo de óptica do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). A linha, em fase de comissionamento, será destinada ao diagnóstico da emitância da máquina e emprega cristais magnificadores em seu projeto. Simulações de óptica ondulatória e geométrica para determinação da distribuição de intensidade do feixe de luz em diferentes posições da linha, assim como estudos do comportamento e sensibilidade do feixe em função de rotações e translações dos elementos ópticos foram realizadas para a determinação de parâmetros de configuração e projeto mecânico para os cristais magnificadores da CARCARÁ-X.

Definidos os parâmetros do feixe e de montagem mecânica iniciais, diferentes estudos de caso de posicionamento dos cristais da CARCARÁ-X foram realizados para comparação de fluxo, tolerâncias de alinhamento e facilidade de montagem do ponto de vista de engenharia. Com estas comparações é possível definir a configuração ideal dos cristais magnificadores como sendo de 1 cristal de magnificação  $\times 20$  para cada eixo do feixe, horizontal e vertical.

É discutida a aplicabilidade de algoritmos genéticos em procedimentos de alinhamento automático de sistemas ópticos complexos e perspectivas futuras do código desenvolvido neste trabalho. É nítida a eficiência deste algoritmo para o alinhamento de uma linha de luz simulada, obtendo concordância de 98% com a distribuição de intensidade especificada para a linha de luz ideal, sem desalinhamentos introduzidos.

**Palavras-chave:** Óptica de Raios-X. Síncrotron. Algoritmos genéticos. Otimização.

# Lista de figuras

Figura 1	– Sirius e demais instalações do CNPEM. . . . .	15
Figura 2	– Esquemático de um acelerador síncrotron moderno. . . . .	16
Figura 3	– Distribuição da radiação eletromagnética emitida por uma partícula carregada acelerada a diferentes velocidades. . . . .	18
Figura 4	– Layout dos arranjos de magnetos do Sirius. . . . .	19
Figura 5	– Funções beta e de dispersão de uma célula de magnetos do Sirius. . . . .	19
Figura 6	– Parâmetros que definem as emitâncias de um anel de armazenamento. . . . .	20
Figura 7	– Comparação de geometria esférica e elíptica. . . . .	23
Figura 8	– Geometria de um espelho toroidal. . . . .	24
Figura 9	– Vetores de redes bidimensionais (a) primitivas, (b) não-primitivas e (c) não-convencionais. . . . .	25
Figura 10	– Estrutura cristalina formada pela convolução de uma rede bidimensional com uma base de dois átomos. . . . .	25
Figura 11	– Planos cristalinos bidimensionais. . . . .	26
Figura 12	– Geometria de reflexão de raios-X por um cristal de corte assimétrico. . . . .	27
Figura 13	– Curvas de reflexão nos casos simétrico e assimétrico. Absorção desconsiderada. . . . .	28
Figura 14	– Interfaces do SPECTRA. . . . .	29
Figura 15	– Interface gráfica do OASYS contendo o ambiente da linha de luz SAPUCAIA. . . . .	30
Figura 16	– Fluxograma de um algoritmo genético. . . . .	31
Figura 17	– Tamanho (a) e divergência (b) do feixe na fonte e o fluxo espectral de um dipolo magnético B1 (c). . . . .	33
Figura 18	– Esquema da linha de luz CARCARÁ-X. . . . .	34
Figura 19	– Curvas de refletividade do espelho. . . . .	35
Figura 20	– Comportamento do feixe de fótons na posição focal do espelho ideal. . . . .	38
Figura 21	– Comportamento do feixe de fótons após o primeiro cristal horizontal, para diferentes distâncias entre o espelho e cristal. . . . .	39
Figura 22	– Erro de superfície do espelho. . . . .	40
Figura 23	– Comportamento do feixe em diferentes posições de interesse. . . . .	40
Figura 24	– Divergências do feixe policromático após sucessivos elementos ópticos. . . . .	41
Figura 25	– Divergências do feixe monocromático após sucessivos elementos ópticos. . . . .	42
Figura 26	– Cásticas do feixe após os cristais das configurações originais do projeto. . . . .	42
Figura 27	– Comportamento do feixe de fótons após o primeiro cristal horizontal, para diferentes distâncias entre o espelho e cristal. . . . .	43
Figura 28	– Feixe na posição do detector para as configurações 1 e 2. . . . .	43
Figura 29	– Cásticas do feixe após configurações de quatro cristais posicionados na profundidade de foco. . . . .	44

Figura 30	– Feixe na posição do detector para as configurações 3 e 4. . . . .	44
Figura 31	– Cásticas do feixe após configurações de dois cristais com diferentes fatores de magnificação. . . . .	45
Figura 32	– Perfil do feixe para as novas configurações na posição do detector, com diferentes tamanhos de pixel. . . . .	45
Figura 33	– Curvas de reflexão e aceitação de cristais para 11 keV. A curva vermelha representa a transmissão observada após os elementos ópticos. . . . .	46
Figura 34	– Sistemas de coordenadas do Sirius e correspondentes a cada elemento óptico: (a) espelho, (b) e (c) cristais de magnificação horizontal, (d) e (e) cristais de magnificação vertical. . . . .	48
Figura 35	– Feixe ao final da linha para o primeiro indivíduo encontrado dentro da região de interesse. . . . .	51
Figura 36	– Distribuição de intensidade do feixe ao final de linhas simuladas. . . . .	52
Figura 37	– Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição focal (17 m). . . . .	57
Figura 38	– Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição do DVF-1 (4,9 m). . . . .	58
Figura 39	– Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição do DVF-2 (15,5 m). . . . .	58
Figura 40	– Efeitos de desalinhamentos do primeiro cristal magnificador. . . . .	59
Figura 41	– Efeitos de desalinhamentos do segundo cristal magnificador. . . . .	60
Figura 42	– Efeitos de desalinhamentos do terceiro cristal magnificador. . . . .	60
Figura 43	– Efeitos de desalinhamentos do quarto cristal magnificador. . . . .	61

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Tamanhos de feixe esperados para diferentes ampliações. . . . .	39
Tabela 2 – Parâmetros das configurações dos cristais amplificadores. . . . .	41
Tabela 3 – Tolerâncias de desalinhamento do espelho. . . . .	47
Tabela 4 – Tolerâncias de desalinhamento dos cristais amplificadores para a configuração 4. . . . .	48
Tabela 5 – Estabilidade dos cristais amplificadores para a configuração 4. . . . .	48
Tabela 6 – Tolerâncias de desalinhamento dos cristais amplificadores para a configuração 6. . . . .	49
Tabela 7 – Estabilidade dos cristais amplificadores para a configuração 6. . . . .	49
Tabela 8 – Seleção inicial. . . . .	50
Tabela 9 – Gerações do algoritmo de otimização. . . . .	51

# Lista de abreviaturas e siglas

CNPEM	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais
DoF	Profundidade de foco ( <i>Depth of Focus</i> )
DVF	Dispositivo de visualização de feixe
FWHM	Largura a meia altura ( <i>Full Width at Half Maximum</i> )
KB	Arranjo de espelhos Kirkpatrick-Baez
LINAC	Acelerador Linear
LNBio	Laboratório Nacional de Biociências
LNBR	Laboratório Nacional de Biorrenováveis
LNLS	Laboratório Nacional de Luz Síncrotron
LNNano	Laboratório Nacional de Nanotecnologia
M1	Espelho toroidal da CARCARÁ-X
MCTI	Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações
OASYS	ORange Synchrotron Suite
RF	Cavidade de Radio-frequência

# Lista de símbolos

## Alfabeto latino:

$\vec{a}$	Aceleração
$\vec{B}$	Campo magnético
$B_0$	Campo magnético máximo
$c$	Velocidade da luz
$d_{hkl}$	Distância interplanar
$D$	Fator de demagnificação
$\vec{E}$	Campo Elétrico
$e$	Carga do elétron
$\vec{F}$	Força de Lorentz
$f_m$	Distância focal meridional
$f_s$	Distância focal sagital
$h$	Constante de Planck
$I$	Intensidade
$M$	Fator de magnificação
$m$	Massa de repouso do elétron
$m_e$	Massa relativística do elétron
$n$	Harmônico
$n_i$	Índice de refração do meio i
$n_f$	Índice de refração do meio f
$p$	Distância da fonte ao elemento óptico
$q$	Distância do elemento óptico ao foco
$R_m$	Raio meridional
$R_s$	Raio sagital
$R_x$	Rotação em torno do eixo x

$R_y$	Rotação em torno do eixo y
$R_z$	Rotação em torno do eixo z
$Si$	Silício
$T_x$	Translação no eixo x
$T_y$	Translação no eixo y
$T_z$	Translação no eixo z
$\vec{v}$	Velocidade
x	Eixo horizontal
y	Eixo vertical
z	Eixo de propagação das partículas

**Alfabeto grego:**

$\beta$	Velocidade relativa das partículas
$\beta_x$	Fator beta horizontal
$\beta_y$	Fator beta vertical
$\gamma$	Fator de Lorentz
$\delta$	Decremento do índice de refração
$\varepsilon$	Emitância
$\varepsilon_x$	Emitância horizontal
$\varepsilon_y$	Emitância vertical
$\theta$	Ângulo de emissão
$\theta'$	Ângulo de observação
$\theta_i$	Ângulo do feixe no meio i
$\theta_f$	Ângulo do feixe no meio f
$\lambda$	Comprimento de onda
$\lambda_n$	Comprimento de onda no harmônico n
$\sigma_x$	Tamanho horizontal do feixe
$\sigma_y$	Tamanho vertical do feixe
$\sigma'_x$	Divergência horizontal do feixe
$\sigma'_y$	Divergência vertical do feixe

# Sumário

<b>Resumo</b> . . . . .	<b>5</b>
<b>Lista de figuras</b> . . . . .	<b>5</b>
<b>Lista de tabelas</b> . . . . .	<b>7</b>
<b>Lista de abreviaturas e siglas</b> . . . . .	<b>8</b>
<b>Lista de símbolos</b> . . . . .	<b>9</b>
<b>Sumário</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>Introdução</b> . . . . .	<b>14</b>
<b>I Fundamentos</b> . . . . .	<b>14</b>
<b>1 Sirius</b> . . . . .	<b>15</b>
<b>2 Radiação Síncrotron</b> . . . . .	<b>16</b>
2.1 Aceleradores síncrotrons . . . . .	16
2.2 Radiação síncrotron em uma trajetória circular . . . . .	17
2.2.1 Rede magnética do Sirius . . . . .	19
2.3 Parâmetros da máquina . . . . .	20
2.3.1 Brilho e fluxo . . . . .	20
2.3.2 Emitância e função beta . . . . .	20
<b>3 Óptica de Raios-X</b> . . . . .	<b>22</b>
3.1 Reflexão e Refração . . . . .	22
3.2 Espelhos . . . . .	22
3.2.1 Magnificação . . . . .	23
3.2.2 Espelhos toroidais . . . . .	23
3.3 Cristais . . . . .	25
3.3.1 Cristais de corte assimétrico . . . . .	27
<b>4 Ferramentas Computacionais</b> . . . . .	<b>29</b>
4.1 SPECTRA . . . . .	29
4.2 OASYS . . . . .	29
4.2.1 Shadow . . . . .	30
4.2.2 SRW . . . . .	30
4.3 Algoritmos genéticos . . . . .	31



---

<b>II Desenvolvimento e Discussões</b>	<b>32</b>
<b>5 CARCARÁ-X</b>	<b>33</b>
5.1 Revisão do projeto óptico	33
5.1.1 Fonte da linha	33
5.1.2 Layout óptico	33
<b>6 Metodologia</b>	<b>36</b>
6.1 Estudo do espelho	36
6.2 Estudo dos cristais magnificadores	36
6.3 Análise de desalinhamentos	36
<b>7 Resultados</b>	<b>38</b>
7.1 Estudo do espelho	38
7.2 Estudo dos cristais magnificadores	40
7.3 Análise de desalinhamentos	47
7.3.1 Espelho	47
7.3.2 Cristais magnificadores	47
7.4 Algoritmo genético aplicado a alinhamento	49
<b>Conclusão</b>	<b>53</b>
<b>Referências</b>	<b>54</b>
<b>Apêndices</b>	<b>56</b>
<b>Apêndice A Figuras de Desalinhamentos</b>	<b>57</b>
A.1 Espelho	57
A.2 Cristais	59
<b>Apêndice B Códigos de Simulação</b>	<b>62</b>

# Introdução

A radiação eletromagnética é essencial para a investigação e entendimento da matéria e desde a descoberta dos raios-X por Röntgen diversas técnicas de caracterização foram desenvolvidas e aplicadas ao estudo da microestrutura da matéria. Uma das formas de se investigar tal estrutura é o emprego da radiação síncrotron produzida pela aceleração de partículas carregadas. O acelerador síncrotron brasileiro, o SIRIUS, contém hoje linhas de luz em funcionamento e abertas para a comunidade científica nacional e internacional.

O diagnóstico de grandezas de um acelerador síncrotron, como a emitância da máquina e o *energy spread*, é essencial para a manutenção do acelerador e da qualidade do feixe produzido. A introdução de linhas de luz responsáveis pelo diagnóstico destas grandezas, como a CARCARÁ-X, responsável pelo diagnóstico da emitância, é interessante para esta finalidade. Esta linha utiliza um sistema com cristais magnificadores e o comportamento do feixe após a interação com esses elementos é estudado, a fim de se obter a distribuição de intensidade e divergência em diferentes posições da linha de luz e, assim, determinar a configuração ideal em número de cristais e posicionamento dos mesmos.

O alinhamento do sistema óptico da linha de luz é um fator crucial para a medição precisa da emitância e os procedimentos para alinhar os elementos ópticos são trabalhosos e consomem tempo considerável. Estudos estão sendo atualmente feitos para validar a aplicabilidade de *machine learning* em diferentes aceleradores síncrotrons no mundo. Algoritmos genéticos, em especial, apresentam resultados promissores para a solução de sistemas e espaços de busca complexos. A fim de se avaliar a aplicabilidade deste método no alinhamento de linhas de luz no SIRIUS, utiliza-se uma linha de luz simulada e se avalia tempo de convergência, parâmetros de mutação associados à construção do algoritmo e os procedimentos para se adaptar o algoritmo à CARCARÁ-X.

Parte I

Fundamentos

# 1 Sirius

“O Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) é uma organização social supervisionada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI). Localizado em Campinas-SP, possui quatro laboratórios referências mundiais e abertos à comunidade científica e empresarial. O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) opera a única fonte de luz Síncrotron da América Latina e está, nesse momento, construindo Sirius, o novo acelerador brasileiro, de quarta geração, para análise dos mais diversos tipos de materiais, orgânicos e inorgânicos; o Laboratório Nacional de Biociências (LNBio) desenvolve pesquisas em áreas de fronteira da Biociência, com foco em biotecnologia e fármacos; o Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR) pesquisa soluções biotecnológicas para o desenvolvimento sustentável de biocombustíveis avançados, bioquímicos e biomateriais, empregando a biomassa e a biodiversidade brasileira; e o Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LN-Nano) realiza pesquisas com materiais avançados, com grande potencial econômico para o país” (CNPEM, 2022).

O Sirius (Figura 1) é a infraestrutura científica maior e mais complexa já construída no país e usa aceleradores de partículas para produzir radiação síncrotron, aplicada na investigação da composição e estrutura da matéria em variadas formas, com possibilidade de aplicação em diferentes áreas do conhecimento. A infraestrutura da instalação é aberta à comunidade científica nacional e internacional e permitirá que centenas de pesquisas acadêmicas e industriais sejam realizadas, contribuindo para o desenvolvimento e expansão da ciência e tecnologia (CNPEM, 2021b). A instalação abrigará 38 linhas de luz com aplicação de diversas técnicas de caracterização, como difração e espalhamento de raios-X, espectroscopia, microtomografia, cristalografia, fluorescência, dentre muitas outras. A linha de luz CARCARÁ-X, estudada neste trabalho, será dedicada ao diagnóstico da emitância do feixe de elétrons do acelerador (CNPEM, 2021a; RIGAMONTI, 2018).

Figura 1 – Sirius e demais instalações do CNPEM.



Fonte: Retirado de (CNPEM, 2021b).

## 2 Radiação Síncrotron

A radiação síncrotron é gerada pela aceleração de partículas carregadas com velocidade relativística em uma região com campo magnético aplicado, em uma trajetória circular. Essa radiação é produzida em anéis de armazenamento em aceleradores síncrotrons, a partir de dipolos magnéticos ou dispositivos de inserção, como *wigglers* e onduladores (ALS-NIELSEN; MCMORROW, 2011).

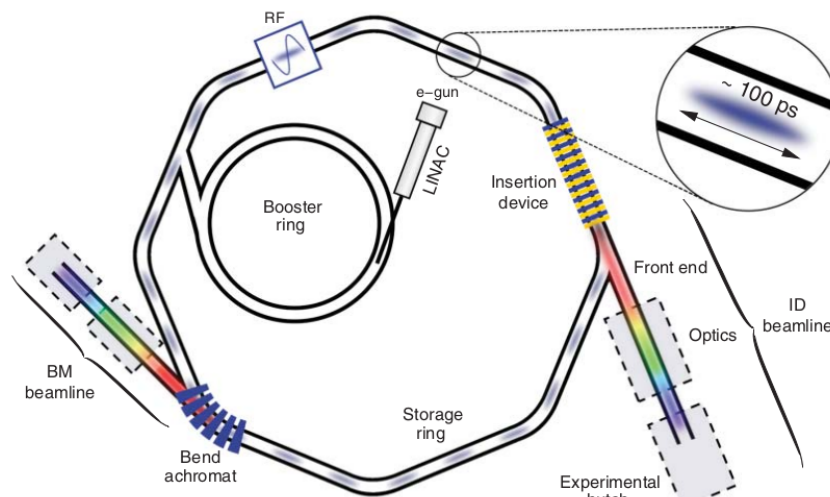
### 2.1 Aceleradores síncrotrons

Aceleradores síncrotrons de terceira e quarta geração são capazes de produzir feixes de raios-X com elevado brilho e, como representado esquematicamente pela Figura 2, consistem em cinco principais componentes: uma fonte de elétrons, um *booster*, anel de armazenamento, cavidades de radio frequência (RFs) e as linhas de luz (WILLMOTT, 2019).

A fonte de um acelerador síncrotron consiste em um canhão de elétrons, que são acelerados com um acelerador linear (LINAC) até energias em torno de 100 MeV e fornecidos regularmente, visto que parcelas das partículas são perdidas por colisões nos anéis de aceleração e armazenamento (WILLMOTT, 2019).

O *booster* recebe os elétrons do LINAC e estes são acelerados até a energia de projeto do acelerador. Os elétrons são injetados periodicamente no anel de armazenamento para que a corrente seja mantida. Em síncrotrons modernos a energia final do *booster* e a do anel de armazenamento são as mesmas e a injeção de partículas é feita de forma que a corrente seja constante, elevando a estabilidade de operação das linhas de luz. Desta forma a distribuição de intensidade do feixe de fótons é mantida constante ao final das linhas de luz e distorções no feixe são minimizadas (WILLMOTT, 2019).

Figura 2 – Esquemático de um acelerador síncrotron moderno.



Fonte: Adaptado de (WILLMOTT, 2019).

O anel de armazenamento mantém os elétrons injetados pelo *booster* em uma trajetória com trechos curvilíneos e retilíneos utilizando uma rede de magnetos, contendo dipolos, quadrupolos e sextupolos. Nos trechos curvilíneos o feixe de elétrons é mantido em trajetória circular pelos dipolos magnéticos, que introduzem determinada dispersão em energia no feixe, sendo este focalizado pelos quadrupolos. Aberrações cromáticas introduzidas pelo elemento anterior são corrigidas pelos sextupolos. Nos trechos retilíneos são empregados dispositivos de inserção (*wigglers* e/ou onduladores), que por meio de campos magnéticos alternados induzem uma trajetória senoidal nos elétrons. Em geral anéis de armazenamento têm energia típica de alguns GeV (WILLMOTT, 2019; RIGAMONTI, 2018).

Cavidades de radio-frequência (RFs) são empregadas para fornecer energia perdida pelos elétrons devido à emissão de radiação síncrotron e impedir que por perda de energia o raio da trajetória circular diminua e provoque colisões dos elétrons com as paredes internas do anel de armazenamento (WILLMOTT, 2019).

Por fim, as linhas de luz são trechos retilíneos tangencialmente bifurcados do anel de armazenamento, e possuem diferentes seções para controle de segurança, colimação e focalização do feixe de fótons e aplicação em técnicas experimentais. O *front end* é a primeira seção de uma linha de luz, localizado no interior da blindagem do anel de armazenamento, e é responsável pela proteção radiológica, assim como o isolamento do vácuo da linha de luz, monitoramento do feixe de fótons, definição da aceitância angular e filtragem de faixas indesejadas de energia. A cabana óptica é responsável pelo tratamento do feixe utilizando elementos ópticos para colimação, focalização e monocromatização da radiação incidente. A estação experimental é onde o feixe tratado é aplicado em técnicas experimentais (WILLMOTT, 2019).

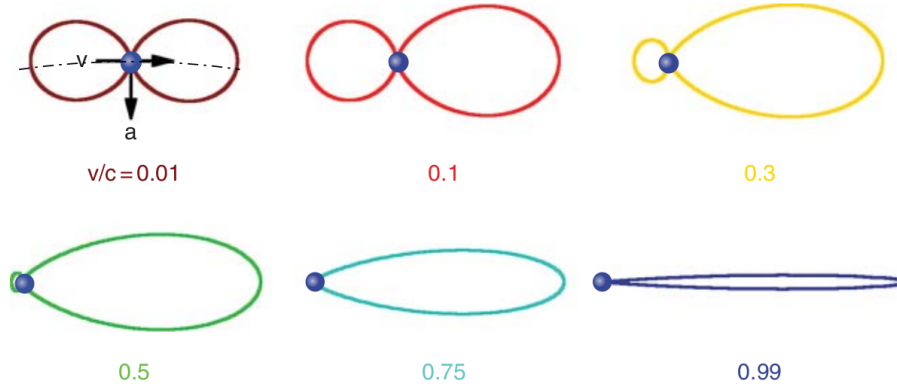
## 2.2 Radiação síncrotron em uma trajetória circular

Um elétron não relativístico com massa  $m$  se movendo com velocidade  $\vec{v}$  em uma região de campo magnético constante  $\vec{B}$  sofre uma força de Lorentz  $\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B}$ , onde  $e$  é a carga da partícula. Em resposta a essa força o elétron é acelerado e se move em uma trajetória circular de raio  $r$  em um plano perpendicular ao campo magnético aplicado. Para partículas não relativísticas a força aplicada é equivalente ao produto da aceleração centrípeta  $v^2/r$  e da massa, de forma que o raio da órbita é dado por  $reB = mv$ . No entanto elétrons relativísticos sofrem uma correção pelo fator de Lorentz  $\gamma = \mathcal{E}/mc^2$  em sua massa, onde  $\mathcal{E}$  é a energia total da partícula e  $c$  a velocidade da luz. Assim, no caso ultra-relativístico ( $v \approx c$ ), o raio da órbita é dado por:

$$r = \gamma mc/eB. \quad (2.1)$$

Os elétrons em uma trajetória circular estão sempre sob a ação de uma aceleração que aponta para o centro da órbita. Dessa forma radiação de dipolo é emitida constantemente na direção perpendicular à aceleração, ou seja, tangencialmente ao raio da curvatura. A potência da radiação emitida por uma partícula relativística com carga  $e$  em trajetória circular de raio  $r$  é dada pela equação de Liénard, Equação (2.2), onde  $a$  é a aceleração aplicada à partícula (WILLMOTT, 2019):

Figura 3 – Distribuição da radiação eletromagnética emitida por uma partícula carregada acelerada a diferentes velocidades.



Fonte: (WILLMOTT, 2019).

$$P = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \gamma^2 a^2, \quad (2.2)$$

em que a aceleração é aproximadamente  $c^2/r$  e, pela Equação (2.1), é equivalente a  $Bec/\gamma m$ . Assim, a potência irradiada pela carga acelerada é dada por:

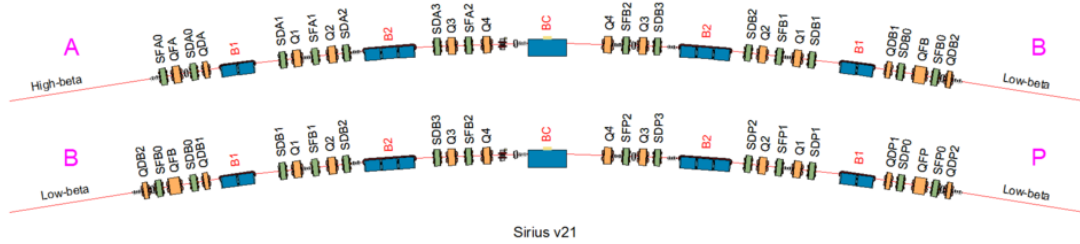
$$P = \frac{2}{3} \frac{e^4 c^3}{(mc^2)^4} \mathcal{E}^2 B^2. \quad (2.3)$$

Note que na Equação (2.3) a potência irradiada é inversamente proporcional à massa da partícula carregada sendo acelerada. Isso explicita a diferença entre aceleradores síncrotron e colisores de partículas: em síncrotrons elétrons são acelerados ao invés de prótons, de forma que o feixe emitido seja intenso. A distribuição angular da potência irradiada por esta partícula se movendo a uma velocidade relativística  $v$  é dada pela Equação (2.4):

$$\frac{dP}{d\Omega} = \kappa a^2 \frac{[(v/c) - \cos \theta]^2}{[1 - (v/c) \cos \theta]^5}, \quad (2.4)$$

onde  $\kappa = e^2/(16\pi^2\epsilon_0 c^3)$  é uma constante (WILLMOTT, 2019). Note que no limite não relativístico ( $v \ll c$ ) a dependência angular da distribuição é reduzida para  $\cos^2 \theta$ . No momento em que o observador se encontra na direção de movimentação do elétron ( $\theta = 0$ ), a equação tem seu máximo e quando se encontra na direção da aceleração ( $\theta = \pi$ ), é nula. Desta forma se observa a distribuição da radiação de um dipolo. A Figura 3 apresenta diferentes alongamentos em função da razão das velocidades. Também se observa a contração de Lorentz e dilatação do tempo no limite relativístico, de forma que a distribuição angular da radiação síncrotron é alongada no sentido da velocidade do elétron. Este alongamento pode ser interpretado como um efeito Doppler relativístico, já que a distância entre frentes de onda da radiação são comprimidas por conta da velocidade dos elétrons, quase tão rápidos quanto a própria propagação das ondas eletromagnéticas.

Figura 4 – Layout dos arranjos de magnetos do Sirius.



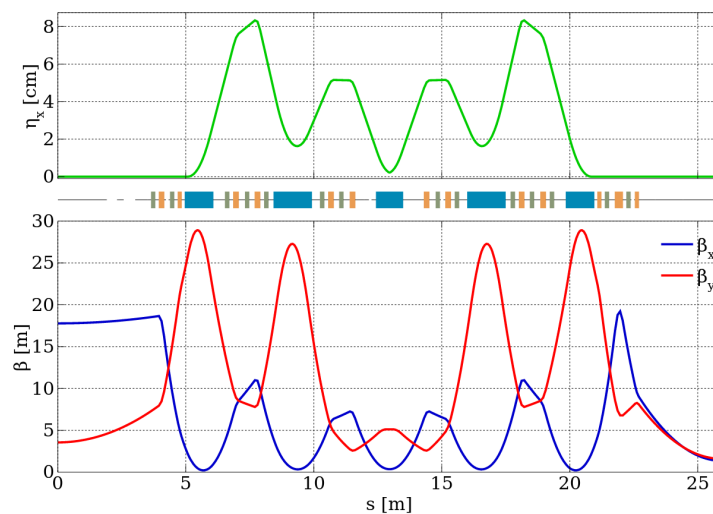
Fonte: (LNLS, 2021).

### 2.2.1 Rede magnética do Sirius

A rede magnética do Sirius é constituída de 20 células de arranjos de magnetos, com uma emitância natural de  $0,25 \text{ nm}\cdot\text{\AA}\cdot\text{rad}$  a 3 GeV e circunferência de 518,4 m. Entre cada célula de magnetos se encontram seções retas com comprimentos alternantes de 7,5 m e 6,5 m, onde dispositivos de inserção e demais elementos da máquina são instalados. O layout das células da rede magnética é dado pela Figura 4, com um dipolo BC central com campo magnético de pico de 3,2 T e dipolos B1 e B2 com campos magnéticos de 0,56 T. Dipolos, quadrupolos e sextupolos magnéticos são representados nas cores azul, amarelo e verde, respectivamente.

A função de dispersão ao longo de uma célula do Sirius se comporta de acordo com a Figura 5, com valor nulo nas seções retilíneas, antes e após os dipolos magnéticos B1. Estes elementos da rede definem uma região ótima para a inserção de uma linha de luz para o diagnóstico da emitância do feixe, sendo esta a CARCARÁ-X. Com a função de dispersão nula a distribuição do feixe de elétrons é dada apenas pela emitância da máquina e assim é possível caracterizar esta grandeza. Outra linha de luz de diagnóstico da máquina pode ser inserida em um dipolo magnético B2, visto que a função beta na horizontal é aproximadamente nula e assim a distribuição do feixe de elétrons é dada pela função de dispersão e *energy spread* da máquina, sendo esta grandeza caracterizável.

Figura 5 – Funções beta e de dispersão de uma célula de magnetos do Sirius.



Fonte: (LNLS, 2021).



## 2.3 Parâmetros da máquina

Algumas características e parâmetros de aceleradores síncrotrons essenciais para o entendimento deste trabalho são discutidos nessa seção.

### 2.3.1 Brilho e fluxo

A qualidade do feixe de raios-X produzido pode ser descrita através do brilho, grandeza definida pelo número de fótons emitidos por segundo, o tamanho da fonte e a divergência do feixe e a distribuição espectral, em geral selecionada para 0,1% da largura de banda de energia. A relação entre estes parâmetros é dada pela [Equação \(2.5\)](#), onde o fluxo espectral é a razão entre o número de fótons emitidos por segundo e a unidade de largura de banda selecionada ([ALS-NIELSEN; MCMORROW, 2011](#)).

$$\text{Brilho} = \frac{\text{fótons/segundo}}{(\text{mrad}^2)(\text{mm}^2 \text{ área})(0.1\% \text{ BW})}. \quad (2.5)$$

### 2.3.2 Emitância e função beta

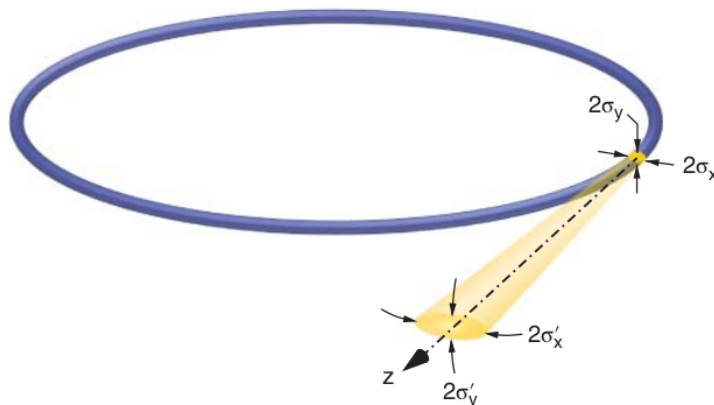
Na [Equação \(2.5\)](#) nota-se que o brilho é inversamente proporcional à distribuição espacial e angular da intensidade do feixe de raios-X e define-se a emitância na horizontal e vertical como o produto destas grandezas. Por simplicidade, chamemos o eixo horizontal de x e o vertical de y:

$$\epsilon_{x,y} = \sigma_{x,y} \sigma'_{x,y}, \quad (2.6)$$

onde  $\sigma_{x,y}$  é a distribuição espacial (chamemos de tamanho) e  $\sigma'_{x,y}$  a distribuição angular (chamemos de divergência) total do feixe, parâmetros visualizados na [Figura 6](#). Síncrotrons de gerações modernas são projetados de forma que a emitância seja a menor possível, com feixe de fótons de tamanho pequeno e altamente colimado.

Os elétrons no anel de armazenamento tendem a circular em uma órbita ideal, porém flutuações na energia da partícula provocam uma oscilação periódica em torno desta órbita,

Figura 6 – Parâmetros que definem as emitâncias de um anel de armazenamento.



Fonte: ([WILLMOTT, 2019](#)).

chamada de oscilação bétatron. A sensibilidade da posição da trajetória do elétron em termos de flutuações  $\Delta p/p_0$  no momento da partícula define a função de dispersão  $\eta$  e a razão entre o tamanho e divergência do feixe de elétrons é dado pela função beta. Em trechos retilíneos a função beta é dada por  $\beta_{x,y} = \sigma_{x,y}/\sigma'_{x,y}$  (WILLMOTT, 2019; KRINSKY; PERLMAN; WATSON, 1983). O tamanho e divergência totais do feixe de luz são resultados da convolução das distribuições do feixe de elétrons e dos fótons, descrito pela Equação (2.7):

$$\sigma_{x,y} = \sqrt{(\sigma_{x,y}^e)^2 + (\sigma^p)^2}, \quad \sigma'_{x,y} = \sqrt{(\sigma_{x,y}'^e)^2 + (\sigma'^p)^2}. \quad (2.7)$$

A contribuição da distribuição do feixe de elétrons  $\sigma_x^e$  para o feixe de luz é resultado dos fatores geométricos do pacote de partículas em determinada posição do anel de armazenamento e da dispersão deste, dada uma variação no momento das partículas, ou *energy spread*  $\delta$  (KRINSKY; PERLMAN; WATSON, 1983):

$$\sigma_x^e = \sqrt{\epsilon_x \beta_x + [\eta \delta]^2}. \quad (2.8)$$

O tamanho e divergência do feixe podem ser entendidos como desvios padrão da curva gaussiana que descreve sua distribuição nas direções horizontal e vertical, pela relação abaixo, também válida analogamente para a divergência do feixe:

$$I = I_0 \cdot \exp(-x^2/2\sigma_x^2) \exp(-y^2/2\sigma_y^2). \quad (2.9)$$

Desta forma a relação entre o tamanho e divergência do feixe e a largura a meia altura da gaussiana é dada pela Equação (2.10):

$$\begin{aligned} FWHM_{x,y} &= \sqrt{8 \ln 2} \sigma_{x,y} = 2.355 \sigma_{x,y}, \\ FWHM_{x,y} &= \sqrt{8 \ln 2} \sigma'_{x,y} = 2.355 \sigma'_{x,y}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

## 3 Óptica de Raios-X

### 3.1 Reflexão e Refração

Os processos de transmissão, reflexão e refração são manifestações macroscópicas de espalhamentos que ocorrem em escala submicroscópica, de acordo com (HECHT, 2017). A interação da radiação eletromagnética com a matéria é descrita pelo índice de refração dos meios com que a luz interage e possui componentes real e imaginária, onde  $\delta$  é o decremento do índice de refração e  $\beta$  o índice de absorção do material (WILLMOTT, 2019):

$$n = 1 - \delta + i\beta. \quad (3.1)$$

A descontinuidade definida pela interface entre dois meios transparentes distintos é responsável pelo espalhamento e retroespalhamento de parte da radiação eletromagnética incidente, definindo os fenômenos de reflexão e refração, respectivamente. O primeiro fenômeno pode ocorrer de forma interna, quando o índice de refração do meio de incidência é maior que o do meio de transmissão, e externa, quando o índice do meio de incidência é menor. A lei da reflexão descreve que o ângulo de reflexão de um feixe de luz é igual ao ângulo de incidência (HECHT, 2017).

A refração, por sua vez, descreve de que forma o caminho óptico de uma frente de onda é defletido ao atravessar a interface entre dois meios materiais, de acordo com a Equação (3.2), lei de Snell, onde  $n$  é o índice de refração do meio e  $\theta$  o ângulo com que a luz se propaga:

$$n_i \sin(\theta_i) = n_f \sin(\theta_f), \quad (3.2)$$

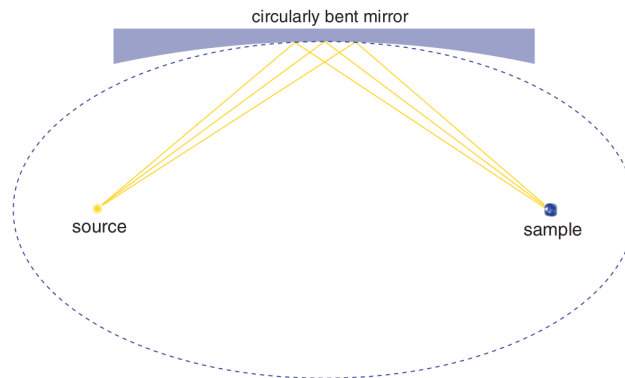
cujos parâmetros apresentam dependência na frequência da frente de onda incidente, devido a efeitos de dispersão, provocando diferentes deflexões para frequências distintas de radiação (HECHT, 2017).

Radiação eletromagnética na faixa dos raios-X apresenta índice de refração um pouco menor que 1 (diferença com ordem de  $10^{-5}$ ) e, por isso, incidência em ângulos rasantes provoca reflexão total externa dos raios-X, fenômeno que é explorado em elementos ópticos focalizadores em aceleradores síncrotron (ALS-NIELSEN; MCMORROW, 2011; RIGAMONTI, 2018).

### 3.2 Espelhos

Espelhos de raios-X, em aceleradores síncrotron, são utilizados para o direcionamento do feixe de luz incidente, redução de potência do feixe, focalização e concentração para aumento do fluxo incidente nas amostras e redução da divergência do feixe de luz (RIGAMONTI, 2018).

Figura 7 – Comparação de geometria esférica e elíptica.



Fonte: (WILLMOTT, 2019).

Elipsoides e paraboloides são geometrias ideais para elementos ópticos de raios-X visto que, desconsiderando efeitos de difração, são capazes de focalizar um feixe de luz em um ponto. Um elipsoide possui dois focos cuja luz emitida de suas posições será sempre perfeitamente refletida pelo elipsoide em direção ao outro foco, independente do perfil de feixe incidente. Um paraboloide focará na posição focal qualquer feixe de luz paralelo (que também o seja em relação ao eixo de simetria da parábola), embora não apresente boa focalização de feixes não paralelos. Esses fenômenos são observados apenas quando o ângulo de incidência é menor que o ângulo crítico do material que compõe o espelho.

A fabricação de espelhos com as geometrias descritas acima são um desafio de engenharia e uma solução é utilizar espelhos esféricos e cilíndricos, de fabricação e tratamento de superfícies mais simples, mesmo que com focalização menos precisa. Estes espelhos provocam aberrações em suas imagens devido à diferença geométrica entre eles e os elementos de focalização ideais. Conforme o aumento da dimensão dos espelhos, maior é a diferença e aberração observada, como pode-se visualizar pela Figura 7 (WILLMOTT, 2019).

### 3.2.1 Magnificação

Pode-se determinar a magnificação ou demagnificação sofrida por um feixe de fótons ao interagir com um elemento óptico. Para se obter um efeito demagnificante, basta posicionar o elemento óptico mais próximo da amostra do que da fonte de luz. O fator de magnificação é dado pela Equação (3.3):

$$M = \frac{q}{p} = \frac{1}{D}, \quad (3.3)$$

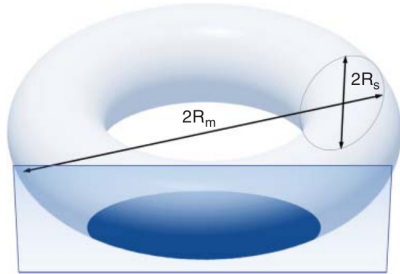
onde  $q$  é a distância do elemento óptico até o foco,  $p$  é a distância da fonte até o elemento óptico e  $D$  o fator de demagnificação (WILLMOTT, 2019).

### 3.2.2 Espelhos toroidais

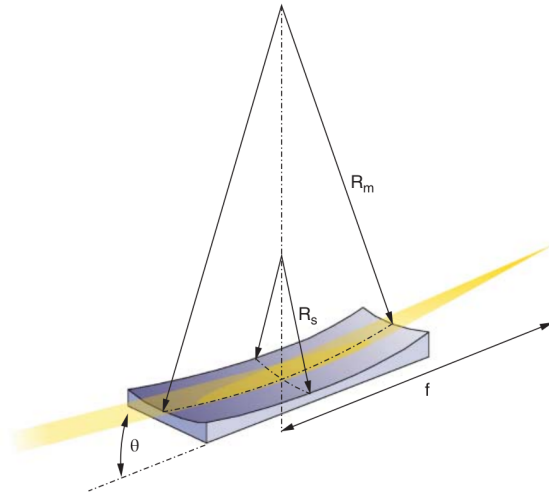
A geometria ideal para focalização é um paraboloide de duas dimensões, um desafio de fabricação. Uma solução simples é utilizar um espelho toroidal, cuja geometria é uma seção de um

Figura 8 – Geometria de um espelho toroidal.

(a) Recorte de um toroide.



(b) Raios meridional e sagital.



Fonte: Adaptado de (WILLMOTT, 2019).

toroide, como mostra a [Figura 8a](#), que se aproxima de uma superfície paraboloidal e apresenta imagem com aberrações esféricas toleráveis. Espelhos toroidais são caracterizados pelos seus raios meridional e sagital (representados graficamente pela [Figura 8b](#)), cujos focos podem ser calculados a partir da [Equação \(3.4\)](#) (WILLMOTT, 2019).

$$f_m = \frac{R_m}{2} \sin(\theta), \quad f_s = \frac{R_s}{2 \sin(\theta)}, \quad (3.4)$$

onde  $\theta$  é o ângulo rasante do feixe incidente e os focos são dados por:

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{q} + \frac{1}{p} = \frac{p+q}{pq}. \quad (3.5)$$

As Equações de Coddington descrevem os raios meridional e sagital de um espelho toroidal em função das distâncias da imagem e objeto e do ângulo rasante do feixe de luz incidente:

$$R_m = \frac{2}{\sin(\theta)} \left( \frac{pq}{p+q} \right) = \frac{2f}{\sin(\theta)}, \quad (3.6)$$

$$R_s = 2 \sin(\theta) \left( \frac{pq}{p+q} \right) = 2f \sin(\theta).$$

Uma outra solução para uma aproximação de espelhos paraboloidais é o emprego de dois elementos cilíndricos em série, sendo o segundo rotacionado em  $90^\circ$  com relação ao primeiro, permitindo o controle da focalização horizontal e vertical de forma individual. Este arranjo de espelho é conhecido como KB (Kirkpatrick-Baez) (WILLMOTT, 2019).

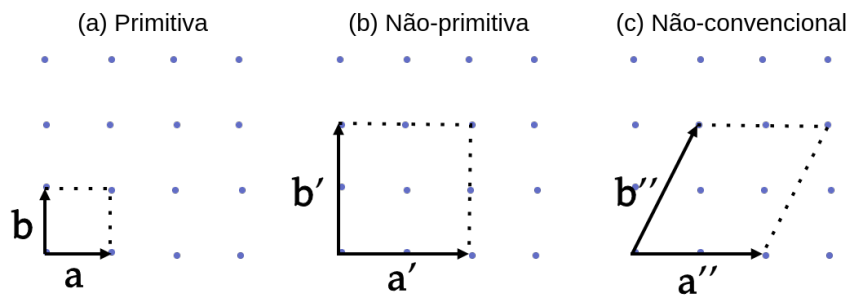
### 3.3 Cristais

Um cristal é um sólido construído por uma estrutura elementar que se repete de forma periódica no espaço, sendo esta composta por um conjunto de átomos ou moléculas. As estruturas dos cristais podem ser descritas por meio de uma rede com grupos de átomos associados à pontos desta rede, definindo a base do cristal (ALS-NIELSEN; MCMORROW, 2011; KITTEL, 2004). Uma rede tridimensional pode ser descrita por um conjunto de vetores  $\vec{R}_n = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ , onde  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  e  $\vec{c}$  são vetores primitivos da rede e  $u$ ,  $v$  e  $w$  valores inteiros. Uma estrutura cristalina deve satisfazer simetrias de translação, rotação e espelhamento, de forma a se obter o mesmo cristal ao submetê-lo às operações de simetria.

A Figura 9 apresenta redes bidimensionais primitivas, não-primitivas e não-convencionais. Os cristais podem ser classificadas, em termos de estrutura, em 14 redes de Bravais. Para completar a descrição de uma estrutura cristalina é preciso associar à rede um conjunto de átomos ou moléculas. A Figura 10 apresenta a construção de um cristal com uma rede bidimensional.

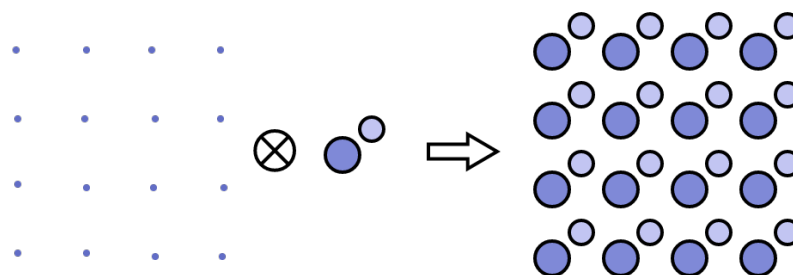
A difração de raios-X por um material cristalino está associada a um fator de espalhamento que é dependente da distância entre planos de determinado cristal. Uma família de planos cristalinos é descrita pelos índices de Miller ( $h, k, l$ ) de forma que o plano mais próximo da origem intercepte os eixos ( $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ) nas posições ( $a/h, b/k, c/l$ ) (ALS-NIELSEN; MCMORROW, 2011). A Figura 11 representa duas famílias de planos cristalinos bidimensionais, juntamente com suas respectivas distâncias interplanares, dadas pela Equação (3.7), onde  $a$  é o parâmetro

Figura 9 – Vetores de redes bidimensionais (a) primitivas, (b) não-primitivas e (c) não-convencionais.



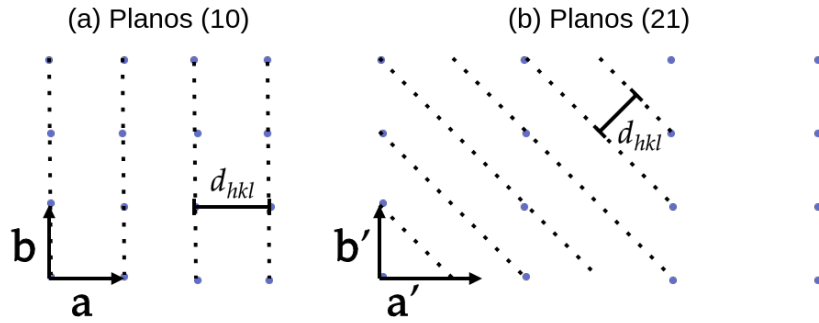
Fonte: Autor.

Figura 10 – Estrutura cristalina formada pela convolução de uma rede bidimensional com uma base de dois átomos.



Fonte: Autor.

Figura 11 – Planos cristalinos bidimensionais.



Fonte: Autor.

de rede, dependente do arranjo da estrutura cristalina:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (3.7)$$

A condição para difração de raios-X ocorrer em uma estrutura cristalina é dada pela [Equação \(3.8\)](#), a lei de Bragg, onde  $\lambda_n$  é o comprimento de onda de radiação incidente,  $n$  um inteiro positivo e  $\theta_B$  o ângulo que o feixe incidente faz com o plano de reflexão que permite a difração:

$$n\lambda_n = 2d_{hkl} \sin(\theta_B), \quad (3.8)$$

e, como o termo senoidal é sempre menor do que 1, apenas comprimentos de onda menores que  $2d_{hkl}$  podem ser refletidos por um cristal. As energias não selecionadas são absorvidas pela estrutura. A resolução em energia de um cristal é aproximadamente constante e, assim, conforme a energia incidente aumenta, a banda filtrada também. Isso se deve a fatores da estrutura cristalina e do sólido utilizado, como parâmetros de absorção e espessura finita ([RIGAMONTI, 2018](#)).

Efeitos de difração no interior do cristal provocam um deslocamento nos comprimentos de onda selecionados e deslocam as curvas de refletividade do elemento óptico. Este fenômeno é intrínseco aos cristais e dependente de fatores da estrutura cristalina. De acordo com o modelo de Darwin para difração cinemática, cristais são formados por um mosaico de blocos de difração independentes e de dimensões comparáveis ao comprimento de atenuação da radiação penetrante ([MATUSHITA; HASHIZUME, 1983](#)). A banda de energia aceita pelo cristal é dada pela largura de Darwin  $\omega$ , definida pela largura a meia altura da curva de refletividade de um cristal e calculada pela [Equação \(3.9\)](#), onde  $r_e = e^2/mc^2$ ,  $V$  o volume da célula unitária,  $C$  o fator de polarização (1 ou  $|\cos 2\theta_B|$ ),  $F_h$  o fator de estrutura do cristal e  $e^{-M}$  o fator de temperatura:

$$\omega = \frac{2}{\sin 2\theta_B} \frac{r_e \lambda^2}{\pi V} C |F_h| e^{-M}. \quad (3.9)$$

O *shift*  $\delta\theta_s$  que a curva de reflexão sofre é dada pela [Equação \(3.10\)](#):

$$\delta\theta_s = \frac{1}{\sin 2\theta_B} \frac{r_e \lambda^2}{\pi V} F_{0r}. \quad (3.10)$$

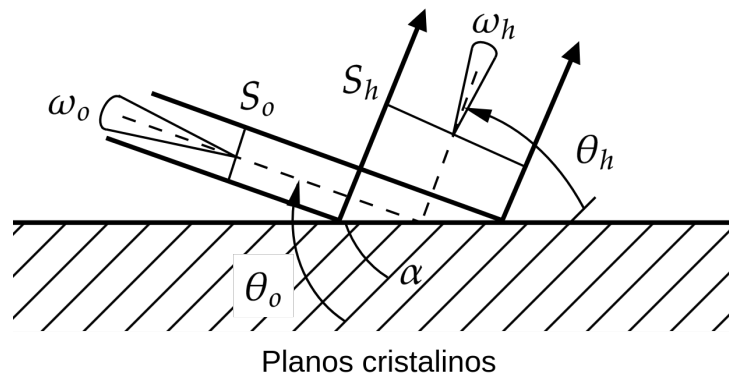
### 3.3.1 Cristais de corte assimétrico

Um cristal de corte assimétrico possui seu plano físico e planos cristalinos não paralelos, com um ângulo  $\alpha$  de assimetria entre eles. Os ângulos de incidência são dados pela soma entre os ângulos de assimetria e de Bragg para a energia desejada. A reflexão de raios-X por um cristal desse tipo é representada pela [Figura 12](#). A assimetria introduzida provoca a magnificação do feixe incidente, por um fator  $m$ :

$$m = \frac{\sin(\theta_B + \alpha)}{\sin(\theta_B - \alpha)}, \quad (3.11)$$

sendo a magnificação do feixe dada por  $S_h = |m|S_o$ , onde  $S_o$  e  $S_h$  são os tamanhos do feixe antes e após a reflexão pelo cristal. Também é observada a alteração das divergências do feixe antes e após a interação com o elemento óptico, associadas à variação das larguras de Darwin, dada por  $\omega_h = \omega_o/|m|$ . O comportamento do feixe deve satisfazer o teorema de Liouville  $\omega_h S_h = \omega_o S_o$  ([MATUSHITA; HASHIZUME, 1983](#)).

Figura 12 – Geometria de reflexão de raios-X por um cristal de corte assimétrico.



**Fonte:** Autor.

As larguras de Darwin do feixe incidente e emergente podem ser descritos em termos da largura no caso de um cristal simétrico, de acordo com a [Equação \(3.12\)](#). *Shifts* são observados nas curvas de refletividade do cristal, dados pela [Equação \(3.13\)](#). É fácil notar que com o fator de magnificação unitário descreve-se o caso simétrico com as mesmas equações. Os *shifts* das curvas de reflexão e alteração nas larguras de Darwin definem a mudança de banda de energia aceita e refletida pelo cristal. Cristais com fatores de assimetria maiores apresentam maior aceitância em energia e menor banda de energia refletida. No caso de sistemas ópticos com apenas um elemento cristalino, a curva de aceitância de um cristal deve ser centralizada na energia de operação do sistema. Com a introdução de mais elementos a interpolação das curvas de aceitância e reflexão de diferentes cristais deve ser analisada para se encontrar a melhor configuração de energia para

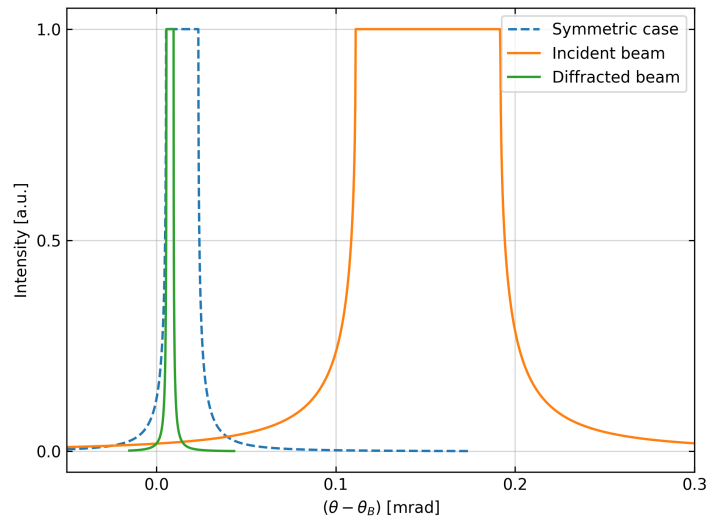


a linha e cristais. Esse procedimento é realizado com mais detalhes na seção 7.2. A Figura 13 apresenta as curvas de refletividade do cristal.

$$\omega_o = \sqrt{|m|}\omega, \quad \omega_h = \frac{1}{\sqrt{|m|}}\omega, \quad (3.12)$$

$$\delta\theta_o = \frac{1}{2}(1+m)\delta\theta\omega, \quad \delta\theta_h = \frac{1}{2}[1+(1/m)]\delta\theta\omega. \quad (3.13)$$

Figura 13 – Curvas de reflexão nos casos simétrico e assimétrico. Absorção desconsiderada.



Fonte: Autor.

As curvas de refletividade desconsideram absorção pelo cristal e são calculadas para um feixe com polarização s, isto é, polarizada perpendicularmente ao plano de reflexão definido pela vetor normal da superfície do cristal e o feixe incidente. Com a absorção considerada o platô de refletividade máxima não seria mais observado, sofrendo um leve decaimento em função do aumento do ângulo de incidência. Os diferentes *shifts* nas curvas do feixe incidente e difratado mostram que energias menores são selecionadas e difratadas de forma que a largura de banda diminui e a energia refletida sofra uma variação na distribuição angular.

## 4 Ferramentas Computacionais

Para este trabalho foram utilizados softwares para simulação de óptica geométrica e ondulatória para raios-X, em especial SPECTRA, SHADOW e SRW. Para automatização de processos e tratamento de dados, utilizou-se códigos em *Python* e o repositório de funções do grupo de óptica de raios-X do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron<sup>1</sup>.

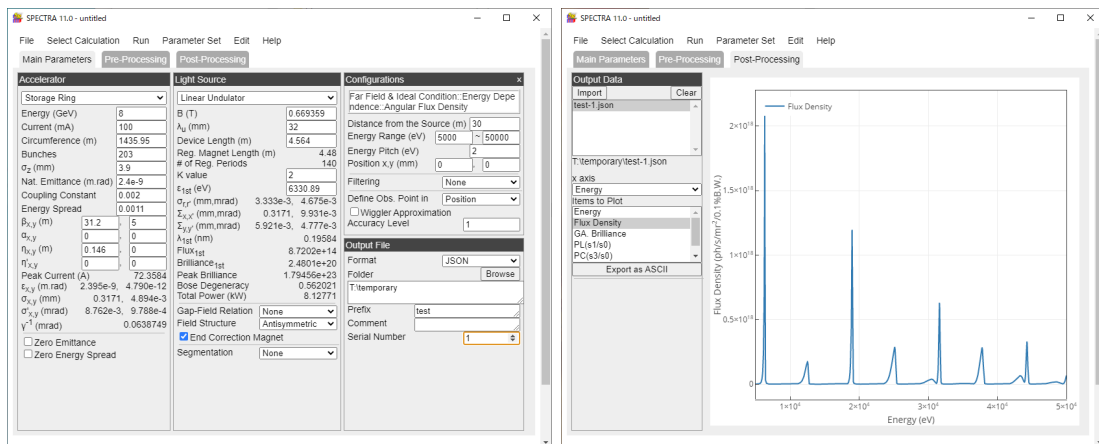
### 4.1 SPECTRA

SPECTRA é um software contendo códigos que calculam propriedades ópticas da radiação síncrotron emitida por diferentes fontes de dipolos magnéticos, *wigglers* e onduladores e permite a parametrização completa de um feixe de elétrons e da fonte deste, possibilitando a visualização dos resultados calculados. A Figura 14 apresenta a interface gráfica do programa para parametrização e configuração de funções, assim como a função de visualização gráfica de resultados. Mais detalhes sobre as funções suportadas pelo software podem ser encontradas em (TANAKA, 2022).

Figura 14 – Interfaces do SPECTRA.

(a) Parametrização de fonte e funções.

(b) Visualização gráfica dos cálculos.



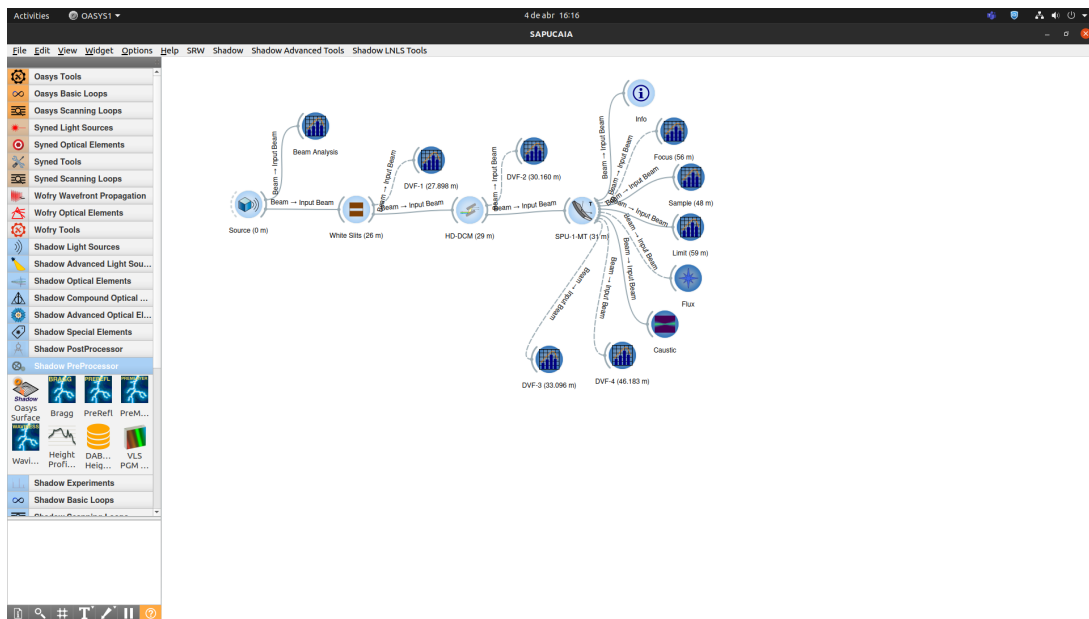
Fonte: (TANAKA, 2022)

### 4.2 OASYS

OASYS (ORange Synchrotron Suite) é um ambiente gráfico desenvolvido para o desenvolvimento de linhas de luz de aceleradores síncrotrons e experimentos envolvendo raios-X, com alta flexibilidade e rapidez de implementação de simulações interativas que integra diferentes estratégias de simulação e ferramentas para óptica de raios-X, como *ray-tracing* para simulações de óptica geométrica e pacotes de óptica ondulatória (REBUFFI; RIO, 2020). A Figura 15 apresenta a interface gráfica do OASYS juntamente com o ambiente construído para a linha de luz

<sup>1</sup> Disponível em: <https://github.com/oasys-lnl-kit/optlnls/tree/master/optlnls>.

Figura 15 – Interface gráfica do OASYS contendo o ambiente da linha de luz SAPUCAIA.



Fonte: Autor.

SAPUCAIA do Sirius. O grupo de óptica do LNLs desenvolveu um pacote contendo ferramentas de visualização e análise do feixe de luz, muito utilizado no andamento deste projeto<sup>2</sup>.

#### 4.2.1 Shadow

ShadowOui é um pacote de funções para o OASYS que contém um ambiente para simulações de experimentos de aceleradores síncrotrons e é baseado no código de *ray-tracing* SHADOW, que gera raios de amostragem por meio do método de Monte Carlo, com variações aleatórias de parâmetros de distribuição espacial, angular e de energia. Com esta aplicação é possível realizar cálculos de propagação de feixes de raios-X ao longo de uma linha de luz. O pacote contém ferramentas complementares para a otimização de sistemas ópticos complexos, como cálculos iterativos e implementação de correções para óptica ondulatoria a partir de um modelo híbrido (REBUFFI; RIO, 2016; RIGAMONTI, 2018).

#### 4.2.2 SRW

O SRW (*Synchrotron Radiation Workshop*) é um *software* científico utilizado para o design de linhas de luz em síncrotrons e otimização das mesmas nas faixas do infravermelho, ultravioleta e raios-X. Com este ambiente é possível calcular as características de polarização, distribuição espacial e espectral da radiação produzida por um feixe de elétrons relativístico atravessando um campo magnético arbitrário. Os códigos simulam o comportamento ondulatório da radiação de forma eficiente e precisa, com diferentes métodos de aproximação e facilidade de customização das funcionalidades, usando C, C++ ou Fortran (CHUBAR; ELLEAUME, 1998).

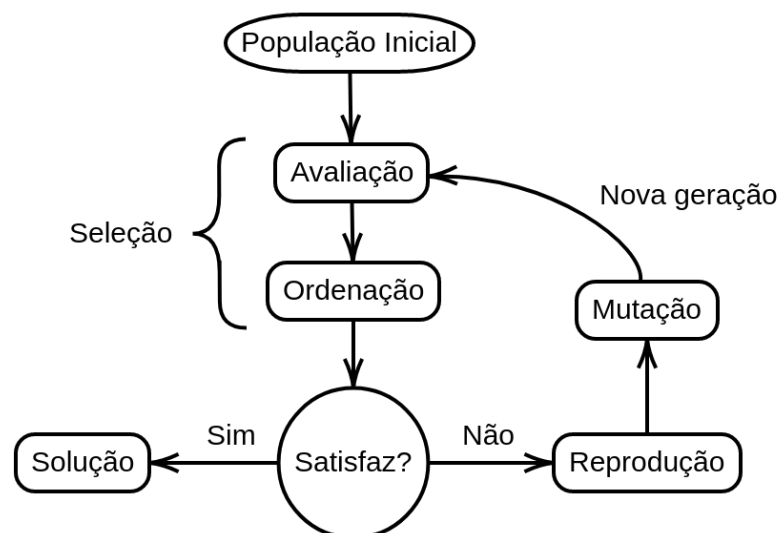
<sup>2</sup> Disponível em: <https://github.com/oasys-lnl-kit/OASYS1-LNLs-ShadowOui>.

### 4.3 Algoritmos genéticos

Algoritmos genéticos fazem parte da família de algoritmos evolutivos, aplicados em problemas de otimização com um espaço de busca muito grande ou complexo. Algoritmos desta família se baseiam em mecanismos da evolução das espécies de Darwin, levando em consideração populações de indivíduos que representam possíveis soluções do problema em questão. Cada indivíduo possui cromossomos, conjuntos de genes em que os parâmetros e variáveis do sistema são inseridos. Dependendo do quão bem adaptado a um objetivo pré estabelecido é um dado indivíduo, um valor de qualidade é atribuído a ele, definido como *fitness* ou índice de adaptação. Esse fator é utilizado para classificar a população e selecionar os melhores indivíduos para produzir uma nova geração da população. A Figura 16 apresenta o fluxograma genérico de um algoritmo genético. Em geral três operadores principais atuam em algoritmos genéticos: seletor, reprodutor e mutador (SLOWIK; KWASNICKA, 2020).

O seletor é responsável por criar uma nova população se baseando no desempenho dos indivíduos da geração anterior (ou gera uma população inicial aleatória). O reprodutor é responsável pela definição de como os indivíduos são utilizados para a geração de novos, isto é, de que forma o material genético é trocado entre parentes e quantos genitores são considerados. O mutador é responsável por gerar variações aleatórias no material genético de cada indivíduo, dada uma probabilidade de isto ocorrer, minimizando a chance do sistema estagnar em uma solução local para o problema. Modificações introduzidas em cada operador provocam mudanças no número de gerações necessárias para o algoritmo convergir à solução do problema, seja ela local ou global.

Figura 16 – Fluxograma de um algoritmo genético.



Fonte: Autor.

## Parte II

### Desenvolvimento e Discussões

# 5 CARCARÁ-X

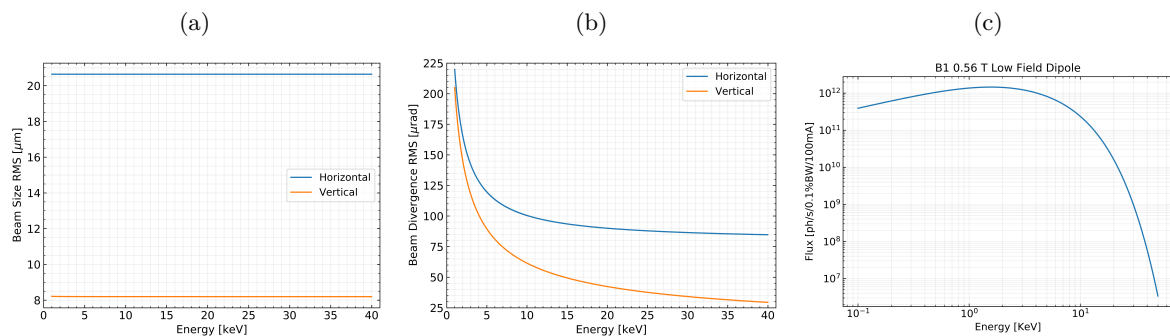
## 5.1 Revisão do projeto óptico

CARCARÁ-X é uma linha de luz de dipolo magnético que faz parte da estrutura do SIRIUS e será dedicada para o diagnóstico transversal e longitudinal do feixe de elétrons do acelerador, assim como o valor de sua emitância. Seu design original é pensado para se obter magnificação de 36 vezes do feixe de fótons na fonte.

### 5.1.1 Fonte da linha

A linha CARCARÁ-X é baseada em um dipolo magnético do tipo B1 com campo magnético de 0,56 T e energia crítica de 3,38 keV. Na região inicial do B1 a função de dispersão se aproxima de zero e, desta forma, apenas a emitância do feixe de elétrons descreve a distribuição de intensidade e divergência do mesmo. O anel de armazenamento do Sirius possui energia de 3 GeV e corrente atual de 100 mA e, no futuro, de 350 mA. A [Figura 17](#) apresenta o comportamento da distribuição de intensidade e divergência do feixe (na fonte) em função da energia utilizada, assim como a curva de fluxo espectral para abertura de  $0,24 \times 0,47 \text{ mrad}^2$  ([MEYER et al., 2021](#)).

Figura 17 – Tamanho (a) e divergência (b) do feixe na fonte e o fluxo espectral de um dipolo magnético B1 (c).



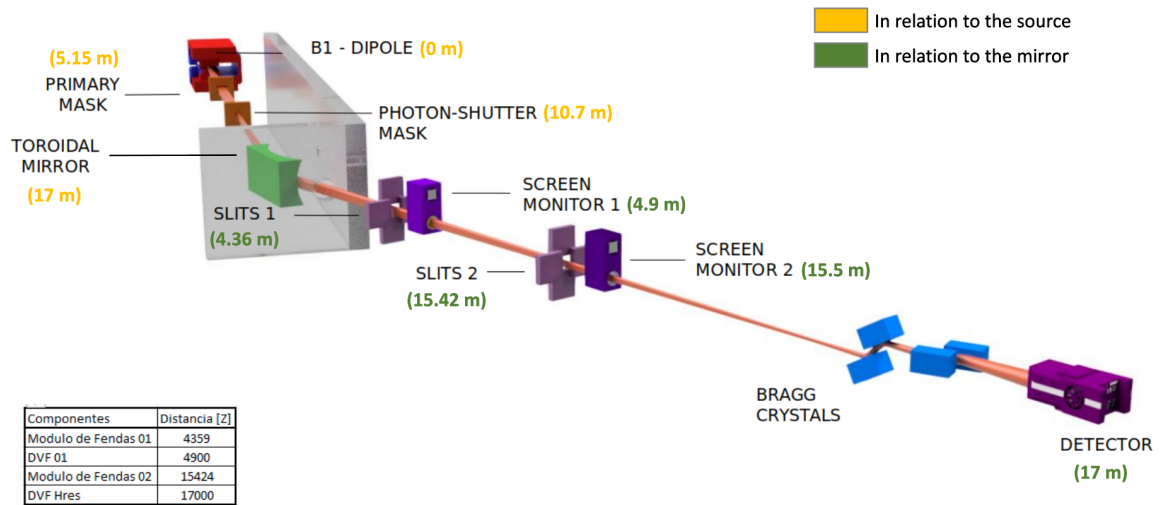
Fonte: ([MEYER et al., 2021](#)).

### 5.1.2 Layout óptico

A linha de luz CARCARÁ-X possui um espelho toroidal de focalização de multicamadas com pico de refletividade de raios-X de 11 keV e magnificação 1:1, posicionado a 17 m da fonte, um dipolo magnético de baixo campo do tipo B1. Na posição focal um cristal de YAG com Cério produz luz fluorescente, que é registrada por uma câmera CCD. A linha de luz também possui cristais de corte assimétrico para a magnificação do feixe. A [Figura 18](#) apresenta o esquemático da linha de luz, com as posições e orientações de seus principais elementos.

O espelho da linha tem geometria toroidal, com raios meridional e sagital de 905,27 m e 0,32 m, respectivamente, e área óptica de  $220 \times 8 \text{ mm}^2$ . A superfície possui um revestimento de multicamadas de Mo/B<sub>4</sub>C, com 150 camadas, e apresenta as curvas de refletividade da [Figura 19](#)

Figura 18 – Esquema da linha de luz CARCARÁ-X.



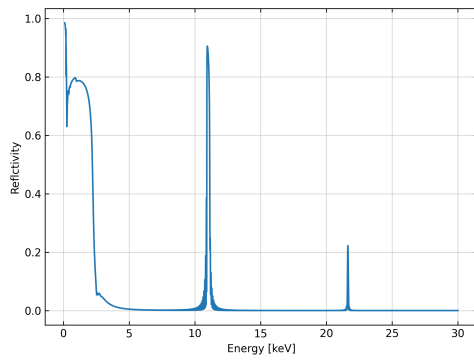
Fonte: (MEYER et al., 2021).

para um ângulo rasante de  $18,78 \text{ mrad}$  ( $1,076^\circ$ ). Estas curvas definem o espectro de energias transmitidas pelo espelho. O máximo de refletividade de  $86,4\%$  ocorre em  $11 \text{ keV}$ . Nesta energia a banda transmitida é equivalente à largura a meia altura do pico, de  $196 \text{ eV}$ , visualizada na Figura 19b. Diferentes ângulos de incidência do feixe provocam deslocamentos em energia do pico de refletividade e variação de sua amplitude. A linha possui dois dispositivos de visualização de feixe (DVF), posicionados a  $4,9 \text{ m}$  e  $15,5 \text{ m}$  após o espelho.

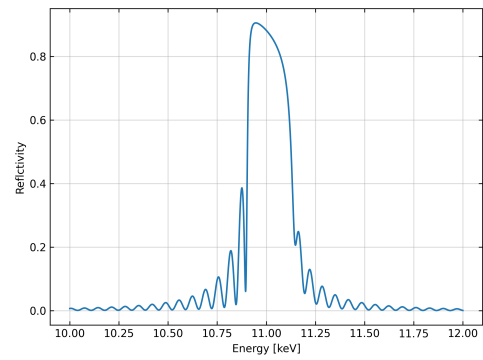
A distribuição de intensidade do feixe de fótons na posição focal do espelho deve apresentar o mesmo tamanho do feixe logo após a fonte da linha, de forma a manter suas propriedades e permitir a determinação da emitância do acelerador. Para isso o espelho deve apresentar uma focalização de 1:1, com distâncias da fonte ao elemento óptico e do elemento até o foco equivalentes a  $17 \text{ m}$ . Contudo, o feixe apresenta um tamanho micrométrico de  $48 \mu\text{m} \times 19 \mu\text{m}$ , dimensões inferiores ao tamanho do pixel do detector a ser utilizado (Medipix), de  $55 \mu\text{m} \times 55 \mu\text{m}$ . Para que seja possível medir o feixe é necessário magnificá-lo e para isso utiliza-se cristais de corte assimétrico de  $\text{Si}(220)$ , com ângulo de assimetria de  $12,37$  graus e fator de magnificação total de  $36$ . O ângulo de assimetria é obtido a partir da Equação (3.11) ao se especificar a energia e magnificação desejadas.

Figura 19 – Curvas de refletividade do espelho.

(a) Refletividade até 30 keV.



(b) Refletividade na região de 10 a 12 keV.



Fonte: Autor.



## 6 Metodologia

O estudo do caso ideal de operação de uma linha de luz (elementos ópticos perfeitamente alinhados e erros de superfície desprezados) é essencial para a definição de parâmetros de comparação para a linha. Com os valores ideais de distribuições espacial e angular de intensidade do feixe de luz ao longo da linha, pode-se comparar as grandezas em comissionamento e auxiliar o processo de alinhamento e montagem da mesma. Ademais, com a definição dos valores ideais é possibilitado a previsão dos efeitos magnificantes e de deslocamento do foco dos magnificadores de Bragg.

### 6.1 Estudo do espelho

Este estudo é iniciado com simulações do espelho da linha sem erros de superfície, determinando-se o comportamento do feixe na posição focal do elemento óptico e desconsiderando os cristais magnificadores. A distribuição de intensidade na posição focal e nos arredores é determinada, juntamente com a profundidade de foco. Nesta etapa define-se os valores tolerados de tamanho de feixe para diferentes magnificações. O espelho possui um erro de superfície resultante de seu processo de fabricação, afinal é infactível se fabricar uma peça sem erros sistemáticos. Este erro deve ser introduzido nas simulações de forma a se analisar os efeitos de difração provocados por nanorugosidades superficiais.

### 6.2 Estudo dos cristais magnificadores

O feixe ao final da linha de luz é definido por diferentes efeitos introduzidos pelos cristais de corte assimétrico de Si(220). Diferentes configurações de posicionamento dos cristais implicam em deslocamentos da posição focal do feixe e variações da distribuição de intensidade da luz nessa região. Comportamentos mais complexos são introduzidos com a sensibilidade da distância interplanar dos planos cristalinos em função da temperatura. Diferentes configurações são testadas, variando o número de cristais e fator de magnificação total de cada configuração, de forma a se verificar os efeitos em tamanho e astigmatismo do feixe.

### 6.3 Análise de desalinhamentos

Os efeitos observados no feixe de luz devido à desalinhamentos sistemáticos (como translação e rotação dos elementos ópticos em relação ao caso perfeitamente alinhado) são investigados por meio de simulação. Introduziu-se diferentes desalinhamentos (combinados ou individuais) e observa-se as alterações em distribuição de intensidade, deslocamento e presença de aberrações no feixe. Esta etapa é crítica para a definição de parâmetros de montagem dos sistemas mecânicos da linha de luz, em especial para os cristais magnificadores por apresentarem alta sensibilidade a rotações. Nesta etapa-se aplica-se conceitos de algoritmos genéticos como possível

solução para sistemas de alinhamento automático das linhas de luz, etapa crucial e desafiadora durante seu comissionamento.

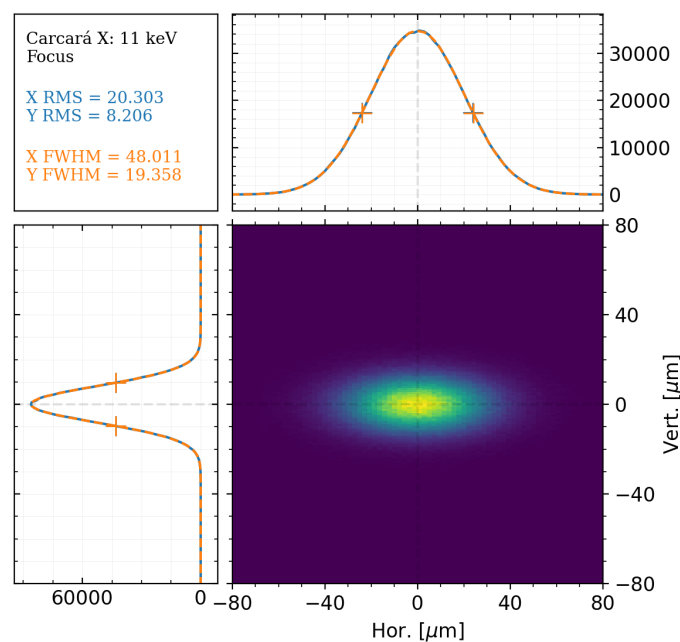
## 7 Resultados

### 7.1 Estudo do espelho

O princípio da CARCARÁ-X é fornecer o diagnóstico transversal e longitudinal do feixe de elétrons do acelerador e a medida da emitância do SIRIUS. É essencial manter a focalização do espelho na proporção 1:1, de forma que a distribuição de intensidade do feixe na posição focal do elemento óptico seja igual à observada imediatamente após a emissão dos fótons pela fonte da linha de luz. De acordo com a [Equação \(2.6\)](#) a emitância da máquina está relacionada com a distribuição de intensidade e divergência dos feixes de elétrons e fótons. Quanto melhor se conhece o termo referente aos fótons, mais precisa é a medição do termo referente aos elétrons, de interesse para esta linha, visto que não há contribuição do termo que depende da função de dispersão.

A linha de luz é simulada considerando um sistema perfeitamente alinhado, sem quaisquer efeitos de erros de superfície ou deformações nos elementos ópticos e desconsiderando os cristais magnificadores. Esta configuração permite a determinação do comportamento do feixe na posição focal do espelho e em sua vizinhança. A [Figura 20](#) apresenta a distribuição de intensidade nesta posição, com tamanho de feixe de  $48 \mu\text{m} \times 19 \mu\text{m}$ . As tolerâncias mínimas e máximas da distribuição de intensidade espacial para o feixe nessa posição (considerando variações de 10% em relação ao caso ideal) são de  $43,2 \mu\text{m} \times 17,1 \mu\text{m}$  e  $52,8 \mu\text{m} \times 20,9 \mu\text{m}$ , respectivamente. A partir da distribuição ideal do feixe na posição focal do espelho definem-se os tamanhos ideais e

Figura 20 – Comportamento do feixe de fótons na posição focal do espelho ideal.



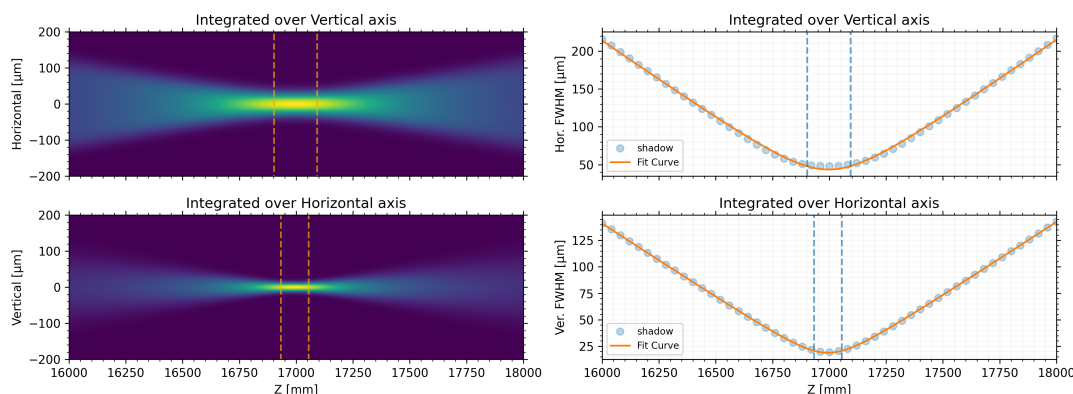
Fonte: Autor.

Tabela 1 – Tamanhos de feixe esperados para diferentes ampliações.

Magnificação	Mínimo	Ideal	Máximo
1	43,2 $\mu\text{m}$ x 17,1 $\mu\text{m}$	48 $\mu\text{m}$ x 19 $\mu\text{m}$	52,8 $\mu\text{m}$ x 20,9 $\mu\text{m}$
6	260 $\mu\text{m}$ x 102 $\mu\text{m}$	288 $\mu\text{m}$ x 114 $\mu\text{m}$	317 $\mu\text{m}$ x 125 $\mu\text{m}$
20	864 $\mu\text{m}$ x 342 $\mu\text{m}$	960 $\mu\text{m}$ x 380 $\mu\text{m}$	1056 $\mu\text{m}$ x 418 $\mu\text{m}$
36	1642 $\mu\text{m}$ x 661 $\mu\text{m}$	1728 $\mu\text{m}$ x 696 $\mu\text{m}$	1814 $\mu\text{m}$ x 731 $\mu\text{m}$

Fonte: Autor.

Figura 21 – Comportamento do feixe de fótons após o primeiro cristal horizontal, para diferentes distâncias entre o espelho e cristal.



Fonte: Autor.

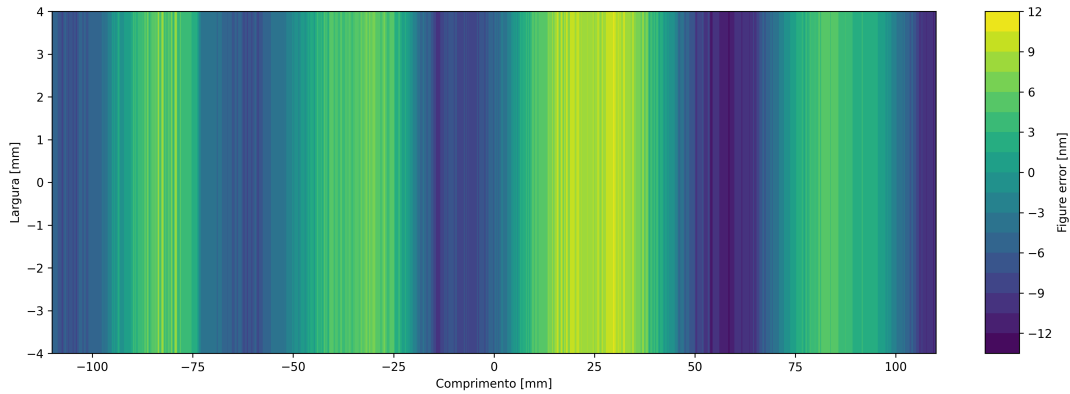
faixas toleradas para os casos magnificados. A [Tabela 1](#) apresenta os tamanhos ideais e tolerados para cada caso de ampliação.

A cáustica do feixe na região próxima do foco é dada pela [Figura 21](#). Pode-se identificar os limites da profundidade de foco (DoF, *Depth of Focus*), dados pela metade da distância entre os pontos de propagação do feixe em que seus tamanhos não excedem um aumento de 10%. Estes pontos são representados pelas linhas tracejadas das cáusticas. Na horizontal a profundidade de foco é de 96 mm e na vertical de 62 mm. O posicionamento de detectores e demais elementos ópticos é ideal na profundidade de foco, por minimizar deformações no tamanho do feixe.

A [Figura 22](#) apresenta o mapa do erro de superfície do espelho medido pela divisão de metrologia do grupo de óptica de raios-X do LNLS, utilizando um interferômetro de Fizeau. A amplitude máxima do erro é de 20 nm em sua extensão e o padrão observado é suficiente para provocar um aumento do feixe no foco para 66  $\mu\text{m}$  x 19  $\mu\text{m}$ . A [Figura 23](#) apresenta o comportamento da distribuição de intensidade do feixe para as posições dos DVFs e foco do espelho, a 4.9 m, 15.5 m e 17 m de distância do primeiro elemento óptico, respectivamente. Os resultados são obtidos com simulações em óptica ondulatória, visto que é necessário analisar com precisão os efeitos das rugosidades superficiais na distribuição e homogeneidade do feixe e estes são superdimensionados em simulações de óptica geométrica.

Simulações com múltiplos elétrons ([Figura 23a](#)) apresentam maior precisão, sendo mais próximas do caso real, embora demandem tempo e poder computacional consideráveis. A homogeneidade do feixe é muito bem descrita com este método computacional e padrões de interferência no feixe são melhor observados. No entanto se for desejado apenas o conhecimento

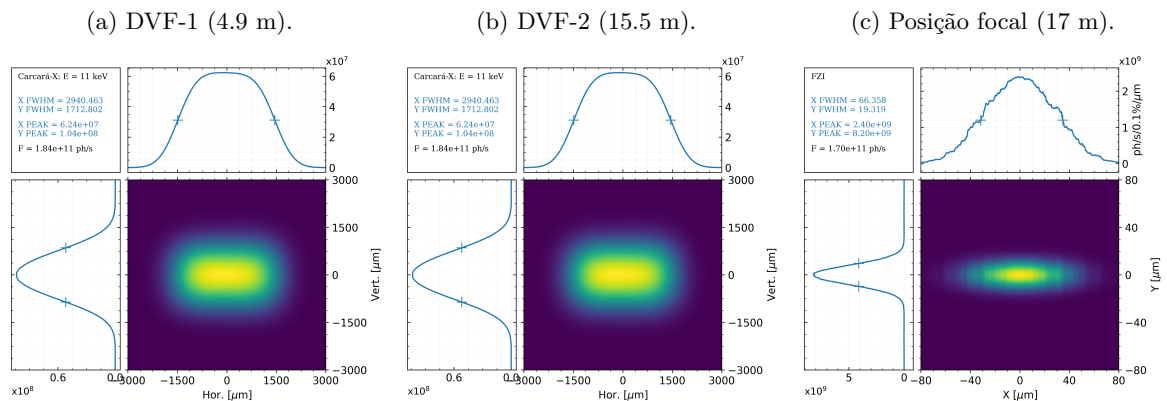
Figura 22 – Erro de superfície do espelho.



Fonte: Autor.

da distribuição de intensidade, convoluções com o tamanho do feixe de elétrons (Figura 23b e Figura 23c) estimam de forma satisfatória o impacto dos erros de superfície no tamanho do feixe, em um tempo extremamente menor que simulações multi-elétron (MEYER et al., 2021).

Figura 23 – Comportamento do feixe em diferentes posições de interesse.



Fonte: Autor.

## 7.2 Estudo dos cristais magnificadores

Os cristais de corte assimétrico devem ser posicionados na linha de luz de forma a manter o tamanho do feixe de fótons dentro dos limites de tolerância definidos na seção 7.1. O projeto original da CARCARÁ-X prevê o posicionamento do detector na posição focal do espelho, com os quatro cristais localizados poucos centímetros antes do foco. Novas configurações são propostas com os cristais posicionados em torno do foco do espelho, em arranjos de quatro e dois cristais e magnificações variadas. A Tabela 2 apresenta as posições e a magnificação total de cada configuração. O fator de magnificação das configurações de 1 a 5 é obtido por meio de um ângulo de corte assimétrico de 12,37 graus. Para a configuração 6 o ângulo de corte assimétrico é de 15,53 graus.

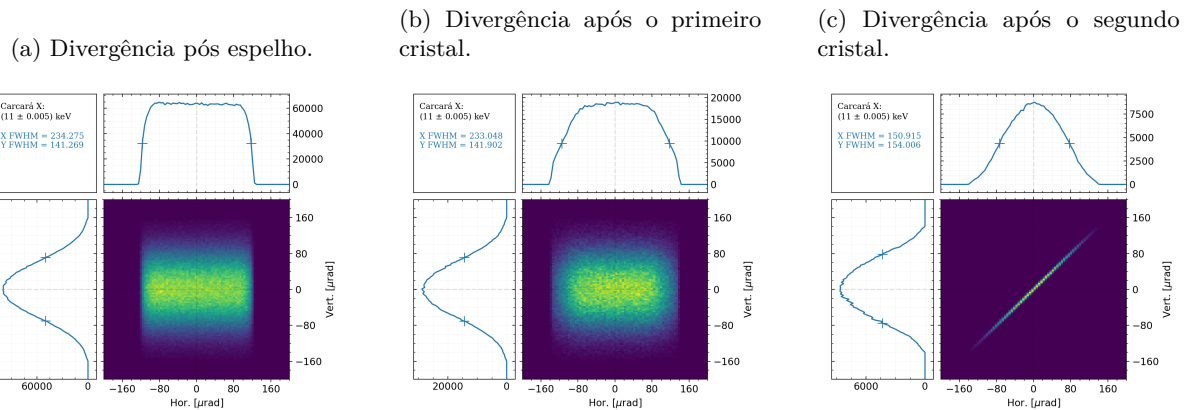
A divergência do feixe é modificada após a interação da radiação com o cristal, associada à mudança da largura de Darwin. Embora seja uma variação pequena, é suficiente para

Tabela 2 – Parâmetros das configurações dos cristais magnificadores.

Conf.	Distância do espelho [m]				Magnificação
	Horizontais		Verticais		
1	16,9	16,94	16,8	16,84	36
2	16,8	16,84	16,9	16,94	36
3	17,05	17,09	16,95	16,99	36
4	16,91	16,95	17,01	17,05	36
5	16,97		17,03		6
6	16,97		17,03		20

Fonte: Autor.

Figura 24 – Divergências do feixe policromático após sucessivos elementos ópticos.



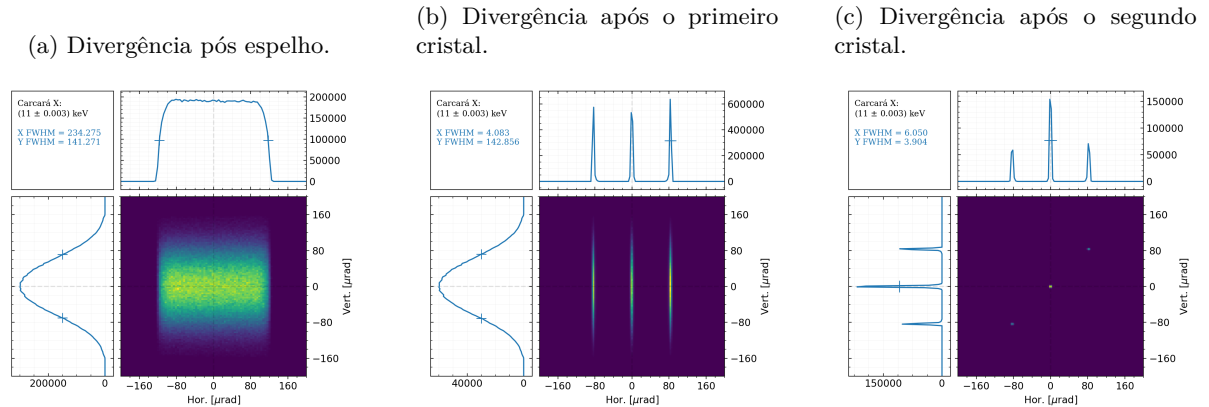
Fonte: Autor.

modificar sua propagação e provocar deslocamentos da posição focal e o astigmatismo do feixe. À primeira vista o comportamento da divergência de um feixe policromático, vide [Figura 24](#), após dois cristais com magnificações horizontal e vertical, respectivamente, não é intuitivo. Após o primeiro cristal a divergência se mantém praticamente constante e após o segundo cristal é modificada para uma estreita reta crescente. Na realidade durante a interação com o primeiro cristal a radiação com maior energia é selecionada pelo cristal em um ângulo menor, quando em comparação com energias menores. A divergência observada após o primeiro cristal é dependente da variação da largura de Darwin, mais estreita para a reflexão, vide [Equação \(3.12\)](#). Dessa forma o que se observa é a soma das divergências de diferentes bandas de energia.

A divergência após o primeiro cristal aparenta se manter constante pois o feixe é policromático e as divergências das bandas de energia selecionadas se somam. Ao passar pelo segundo cristal o mesmo fenômeno acontece, mas agora o estreitamento da largura de Darwin se dá na vertical e em diferentes sentidos, para diferentes bandas de energias. Assim a convolução da divergência após os dois elementos é uma reta crescente. Este comportamento é mais facilmente observado para a propagação de um feixe monocromático. A [Figura 25](#) apresenta três feixes monocromáticos com bandas de energia centralizadas em 10,997 keV, 11 keV e 11,003 keV. Neste caso é facilmente observada a dispersão em energia.

As configurações originais (1 e 2) apresentam um feixe astigmático ([Figura 26](#)), com novas posições focais horizontal e vertical distanciadas de aproximadamente 3 metros. O astigmatismo se dá pela distância dos cristais ao foco do espelho: quanto mais distante, maior é o

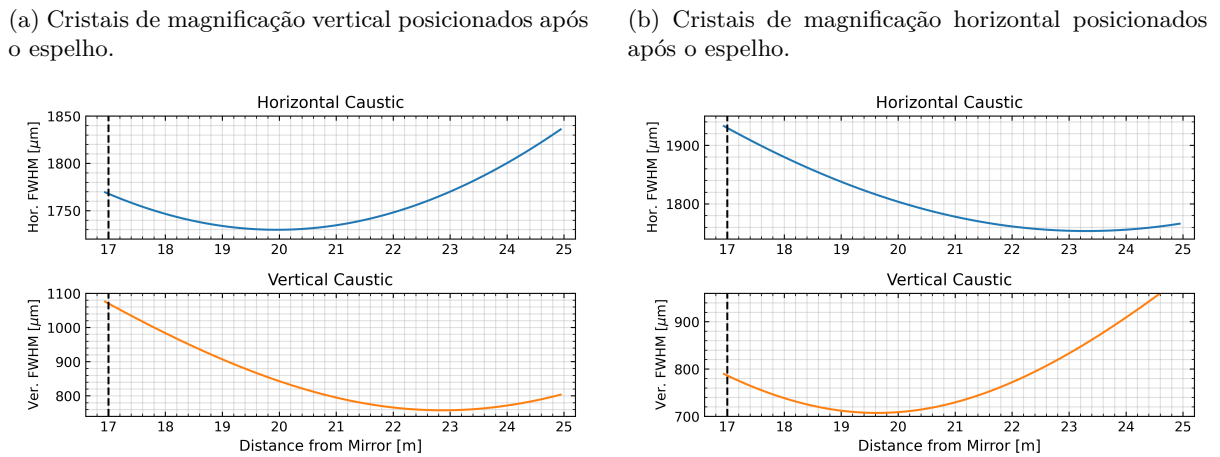
Figura 25 – Divergências do feixe monocromático após sucessivos elementos ópticos.



Fonte: Autor.

deslocamento do novo foco, visto que a divergência do feixe é alterada após o cristal, por efeitos associados à variação das larguras de Darwin. A [Figura 27](#) evidencia este comportamento, onde o primeiro cristal magnificador teve sua posição relativa ao espelho variada (posições na legenda). Não só a distância focal sofre um deslocamento, como também o tamanho feixe no foco varia em função da posição do cristal.

Figura 26 – Cústicas do feixe após os cristais das configurações originais do projeto.

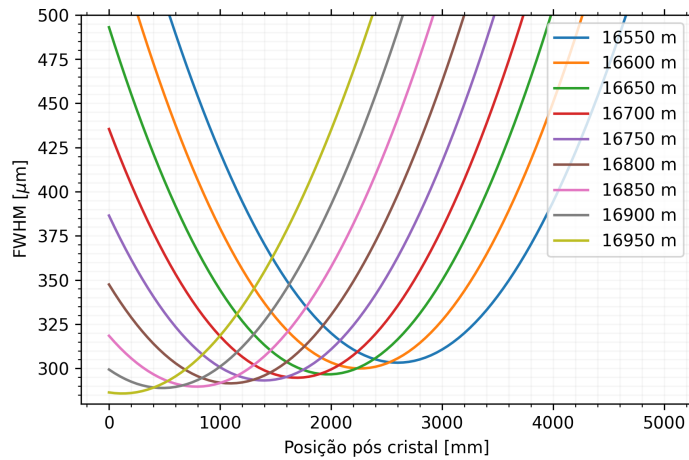


Fonte: Autor.

O tamanho do feixe na posição do detector ([Figura 28](#)) não satisfaz os limites de tolerância, para ambas as configurações, com valores de  $1768 \mu\text{m} \times 1075 \mu\text{m}$  e  $1932 \mu\text{m} \times 786 \mu\text{m}$ , respectivamente. Com esta variação observa-se perda de fidelidade do feixe na nova posição focal com os fótons emitidos na posição da fonte e implicando em erros de medida da emitância do acelerador. Também se observa uma rotação no feixe. É evidente que as configurações originais não se adequam às tolerâncias definidas e que o posicionamento dos cristais em torno da posição focal é crucial para manter a distribuição de intensidade do feixe de fótons proporcional à emitida na fonte da linha de luz.

As novas configurações (3 e 4), agora com os cristais posicionados na região de profundidade de foco, apresentam menor astigmatismo, vide [Figura 29](#). Os tamanhos de feixe ([Figura 30](#)) para as duas configurações estão dentro dos limites de tolerância, com valores de  $1744 \mu\text{m} \times$

Figura 27 – Comportamento do feixe de fótons após o primeiro cristal horizontal, para diferentes distâncias entre o espelho e cristal.

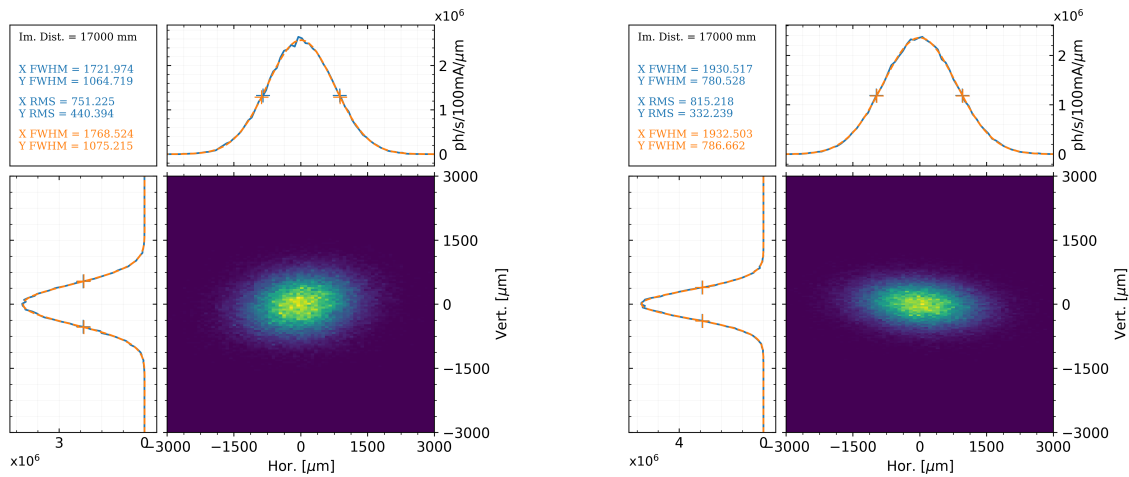


Fonte: Autor.

Figura 28 – Feixe na posição do detector para as configurações 1 e 2.

(a) Configuração 1.

(b) Configuração 2.



Fonte: Autor.

702 μm e 1755 μm x 696 μm. Na configuração 3, com os cristais de magnificação vertical antes do foco, o astigmatismo é menor porém o tamanho de feixe na horizontal maior. Na configuração 4, com os cristais de magnificação horizontais antes do foco, o feixe na horizontal é menor mas o astigmatismo mais proeminente.

Preferencialmente o feixe da CARCARÁ-X deve ter as posições focais vertical e horizontal coincidentes, de forma a medir a distribuição de intensidade do feixe nos dois eixos ao mesmo tempo. Quanto mais próximos do foco do espelho menor é o astigmatismo, mas é infactível aproximar os quatro cristais da posição focal de maneira satisfatória, por limites de construção mecânica e necessidade de rotação e translação dos elementos ópticos. As configurações 5 e 6 são propostas de forma a contornar este problema, com apenas dois cristais centralizados no foco, com fatores de magnificação 6 na primeira configuração e 20 na segunda.

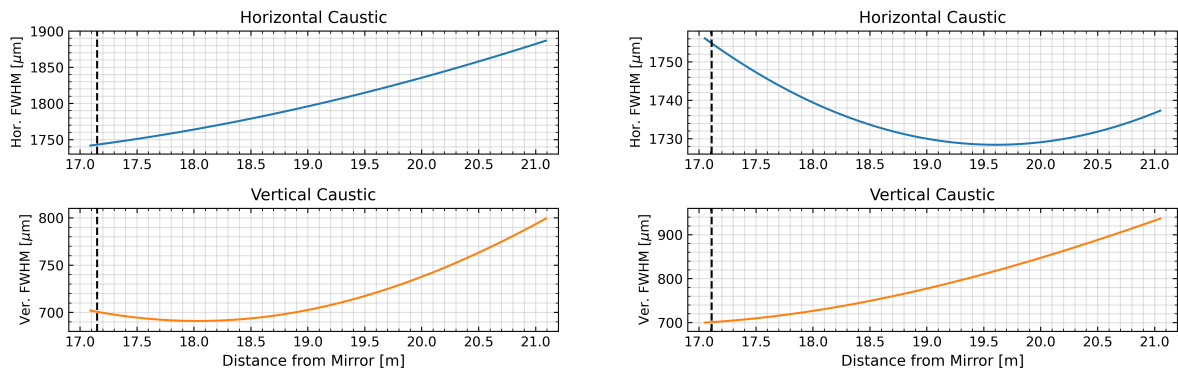
De fato as novas configurações apresentam menor astigmatismo, vide Figura 31, pela



Figura 29 – Cásticas do feixe após configurações de quatro cristais posicionados na profundidade de foco.

(a) Configuração com cristais de magnificação vertical posicionados antes do foco.

(b) Configuração com cristais de magnificação horizontal posicionados antes do foco.

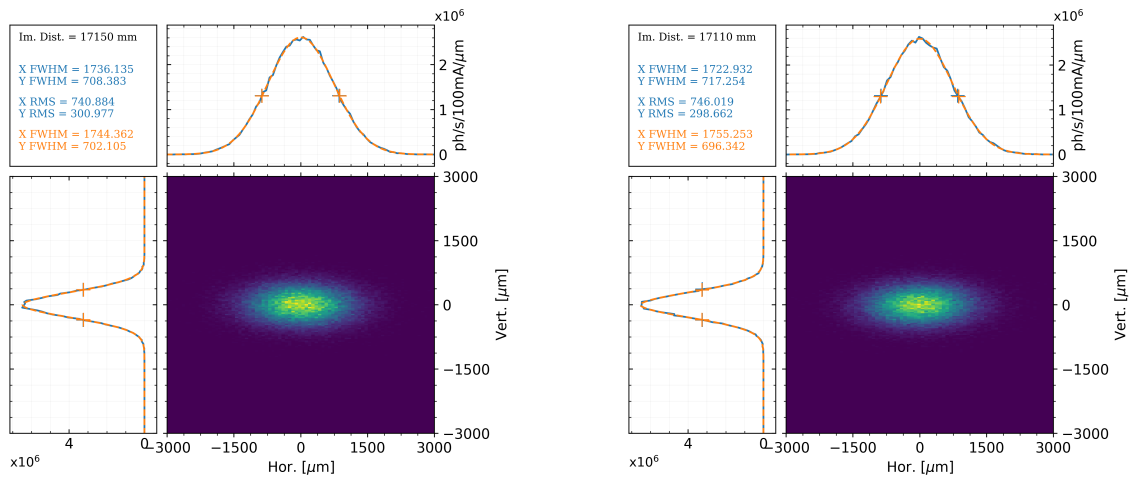


Fonte: Autor.

Figura 30 – Feixe na posição do detector para as configurações 3 e 4.

(a) Configuração 3

(b) Configuração 4.



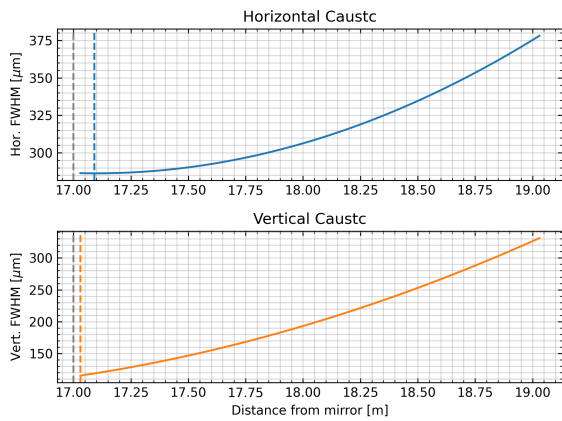
Fonte: Autor.

proximidade dos elementos ópticos ao foco do espelho. Também é evidente que com maior fator de magnificação o efeito astigmático é menor, visto que a largura de Darwin do feixe emergente é proporcional ao inverso da raiz do fator de magnificação, vide [Equação \(3.12\)](#), implicando em menor variação na divergência e propagação do feixe pós cristal. A [Figura 32](#) apresenta os tamanhos do feixe das duas novas configurações, com valores de 286 μm x 122 μm e 949 μm x 399 μm, respectivamente. O feixe é medido em detectores simulados com tamanho de pixel de 20 μm e 55 μm, sendo o segundo equivalente ao projetado para ser utilizado na CARCARÁ-X.

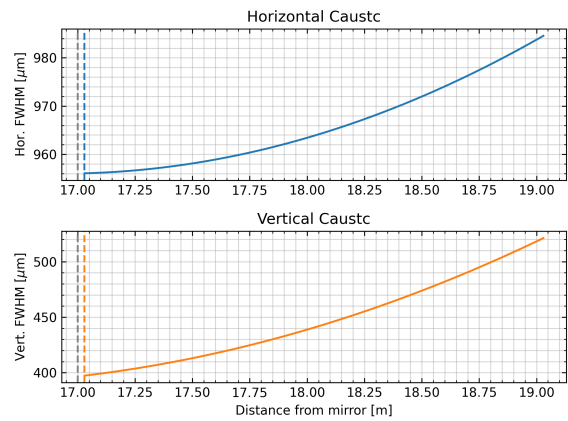
A escolha do detector é crucial para as medidas em cada configuração, pois afeta a estatística dos valores de distribuição de intensidade do feixe coletados e a acurácia das medições. Com fator de magnificação 6 o tamanho do feixe possui a mesma ordem de grandeza da dimensão dos pixels e o erro estatístico de medida aponta um feixe maior que o real. Dessa forma, é preferível a configuração com fator de magnificação 20 por apresentar menor astigmatismo e erro estatístico. As configurações com dois cristais também apresentam menos rigidez nas tolerâncias de alinhamento e estabilidade, como será discutido na [seção 7.3](#).

Figura 31 – Cústicas do feixe após configurações de dois cristais com diferentes fatores de magnificação.

(a) Fator de magnificação 6.



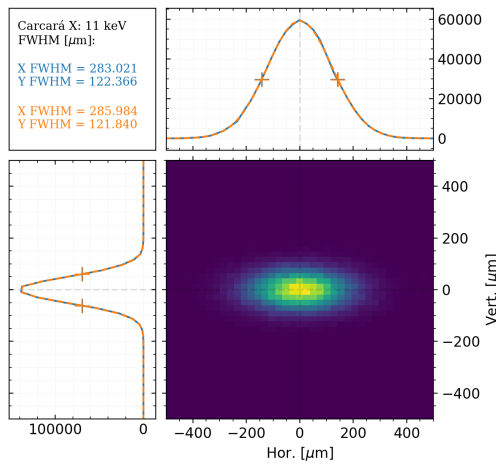
(b) Fator de magnificação 20.



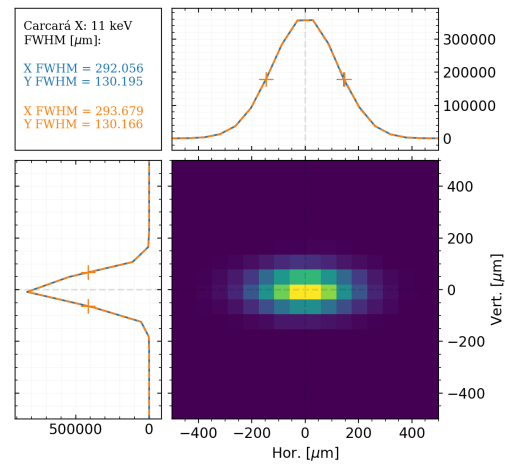
Fonte: Autor.

Figura 32 – Perfil do feixe para as novas configurações na posição do detector, com diferentes tamanhos de pixel.

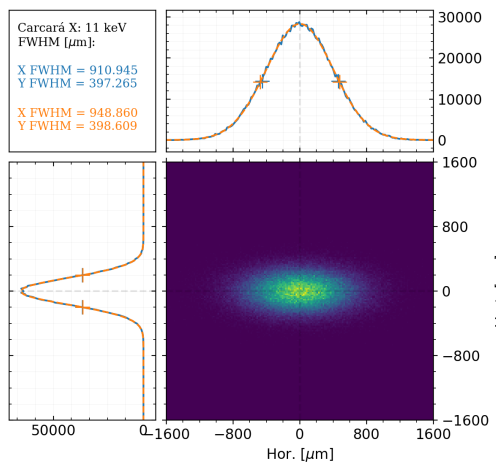
(a) Fator de magnificação 6, pixels de 20  $\mu\text{m}$ .



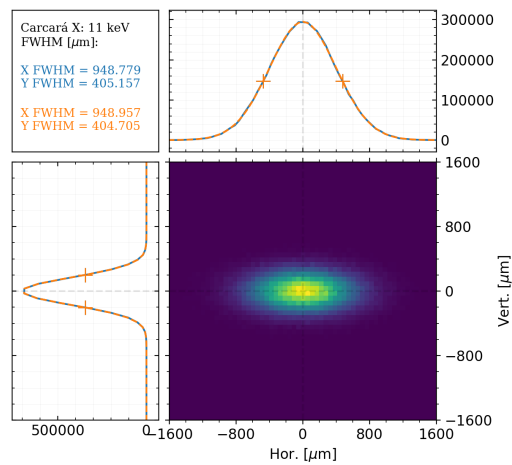
(b) Fator de magnificação 6, pixels de 55  $\mu\text{m}$ .



(c) Fator de magnificação 20, pixels de 20  $\mu\text{m}$ .



(d) Fator de magnificação 20, pixels de 55  $\mu\text{m}$ .

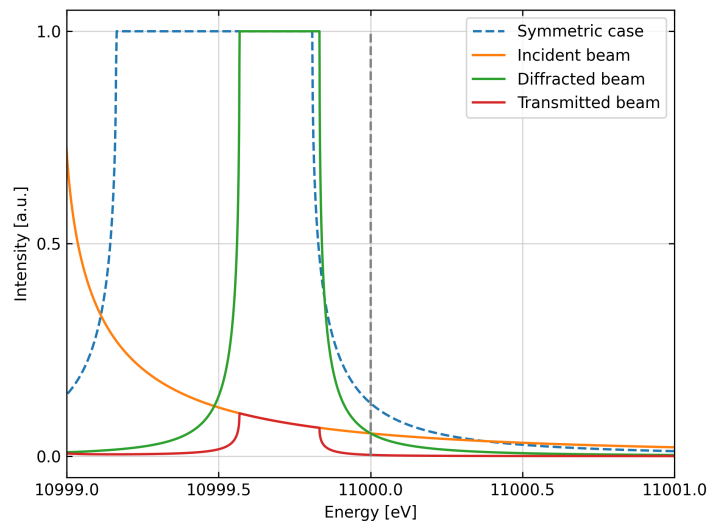


Fonte: Autor.

Cristais apresentam um *shift* em suas curvas de reflexão intrínseco ao elemento óptico, como apresentado na [subseção 3.3.1](#), mesmo no caso de corte simétrico. Para cristais de corte assimétrico as curvas de aceitação e reflexão sofrem *shifts* distintos e proporcionais ao fator de magnificação. Por conta deste deslocamento o ângulo de incidência deve ser corrigido de forma a selecionar a energia desejada. Em sistemas com mais de um cristal deve-se considerar a curva de transmissão dos elementos, resultante da interpolação das curvas de aceitação e reflexão de cada cristal. No caso de dois cristais deve-se interpolar a reflexão do primeiro e aceitação do segundo.

A [Figura 33](#) apresenta as curvas de reflexão e aceitação dos cristais utilizando o ângulo de Bragg para 11 keV, assim como a curva para o caso simétrico. Efeitos de absorção são desconsiderados. Nota-se que as curvas estão deslocadas para energias menores que a desejada, resultado do *shift* da largura de Darwin intrínseco ao cristal. Para maximizar o fluxo do feixe transmitido pelos cristais, as curvas de reflexão e aceitação de dois elementos cristalinos consecutivos devem estar centralizadas na mesma energia. Com a adição de mais cristais no arranjo óptico as curvas de reflexão e aceitação devem ser analisadas de forma intercalada, isto é, a reflexão de um cristal deve ser concomitante com a aceitação do próximo.

Figura 33 – Curvas de reflexão e aceitação de cristais para 11 keV. A curva vermelha representa a transmissão observada após os elementos ópticos.



Fonte: Autor.

O primeiro cristal de cada configuração seleciona uma pequena banda de energia do feixe produzido pela fonte da linha, absorvendo quase toda a potência da radiação incidente. Efeitos térmicos são consideráveis e é necessária a refrigeração deste elemento óptico. Devido à variação de temperatura o material sofre expansão térmica e a distância dos planos cristalinos é alterada, resultando em diferentes comprimentos de onda selecionados pelo cristal, de acordo com a lei de Bragg, [Equação \(3.8\)](#).

### 7.3 Análise de desalinhamentos

O estudo de efeitos de desalinhamentos no sistema óptico é essencial para o estabelecimento de parâmetros de montagem mecânica, como tolerância de desalinhamento e estabilidades de cada elemento óptico e preparação da fase de comissionamento, em especial no alinhamento da linha de luz.

#### 7.3.1 Espelho

A análise de efeitos de desalinhamentos para o espelho da linha de luz é feita com simulações de óptica ondulatória. Devido à amplitude do erro de superfície medido para o espelho, efeitos de difração não são corretamente tratados em simulações de óptica geométrica; os efeitos do erro são superdimensionados. O comportamento do feixe em função dos desalinhamentos visualizados em diferentes posições da linha de luz se encontram no [Apêndice A](#). Considerando um fator de tolerância de variação em 10% no tamanho do feixe, encontram-se os valores de desalinhamentos tolerados para o espelho focalizador, encontrados na [Tabela 3](#).

Tabela 3 – Tolerâncias de desalinhamento do espelho.

	X [ $\mu\text{m}$ ]	Y [ $\mu\text{m}$ ]	Z [ $\mu\text{m}$ ]	Rx [ $\mu\text{rad}$ ]	Ry [ $\mu\text{rad}$ ]	Rz [ $\mu\text{rad}$ ]
<b>Espelho</b>	730	520	3000	30	42	1580

Fonte: Autor.

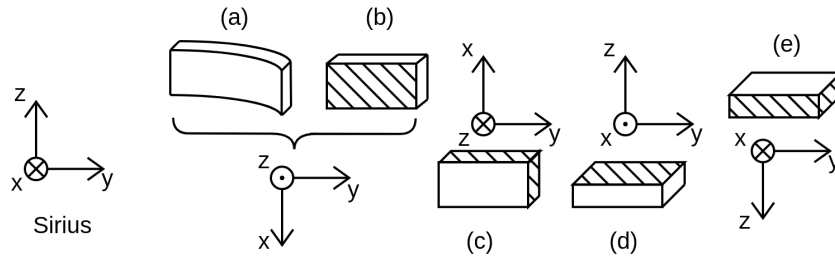
#### 7.3.2 Cristais magnificadores

Para o estudo dos desalinhamentos dos cristais magnificadores duas configurações foram selecionadas, ambas com os elementos posicionados ao redor do foco do espelho. A primeira configuração contendo quatro cristais, com fator de magnificação 6 e a segunda contendo dois cristais, com fator de magnificação 20. O parâmetro de seleção das tolerâncias é a variação em 10% no tamanho do feixe, em ambos os eixos, ou na intensidade ao final da linha de luz. Para a estabilidade, o parâmetro adotado é a variação em 1% nas mesmas grandezas da linha.

Os cristais magnificadores selecionam uma pequena banda de energia em função do ângulo que a radiação incidente faz com os planos cristalinos, cuja relação é descrita pela lei de Bragg, [Equação \(3.8\)](#). A [Figura 34](#) é um esquemático dos sistemas de coordenadas locais de cada elemento óptico e do sistema global do Sirius. Localmente o *pitch*, *roll* e *yaw* referem-se a rotações em torno de  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. As tabelas desta seção estão no sistema de coordenadas global do Sirius, onde  $x$  e  $y$  são as direções horizontal e vertical do feixe e  $z$  a direção de propagação. Rotações em *pitch* alteram o ângulo de incidência de forma que o cristal seleciona uma banda de energia diferente. As demais rotações, em *roll* e *yaw*, afetam o caminho óptico do feixe no interior do cristal e alteram efeitos de difração e a banda de energia selecionada. Como os cristais são planos os efeitos de desalinhamentos em translação são menos críticos em comparação aos de rotação.

A [Tabela 4](#) apresenta as tolerâncias de desalinhamento obtidas para a configuração 4. O *pitch* (Ry para os cristais horizontais e Rx para os verticais) é crítico justamente pela mudança na banda de energia selecionada. Por esse motivo as rotações não provocam mudanças consideráveis

Figura 34 – Sistemas de coordenadas do Sirius e correspondentes a cada elemento óptico: (a) espelho, (b) e (c) cristais de magnificação horizontal, (d) e (e) cristais de magnificação vertical.



Fonte: Autor.

no tamanho do feixe e apenas na intensidade transmitida. Desalinhamentos em translação não modificam o perfil do feixe, consequência da geometria plana do cristal e apenas o corte do feixe nas bordas do elemento provoca queda em tamanho e intensidade. Por razões de modelagem do sistema mecânico as tolerâncias em translação foram truncadas em 1 mm.

Tabela 4 – Tolerâncias de desalinhamento dos cristais magnificadores para a configuração 4.

Crystals	X [ $\mu\text{m}$ ]	Y [ $\mu\text{m}$ ]	Z [ $\mu\text{m}$ ]	Rx [ $\mu\text{rad}$ ]	Ry [ $\mu\text{rad}$ ]	Rz [ $\mu\text{rad}$ ]
<b>Hor. 1</b>	130	1000	1000	200	4	30
<b>Hor. 2</b>	1000	1000	1000	200	4	30
<b>Vert. 1</b>	1000	130	1000	4	200	200
<b>Vert. 2</b>	1000	1000	1000	4	200	200

Fonte: Autor.

Para a determinação de estabilidade de sistema, utiliza-se o método descrito em (GRIZOLLI; SHI; ASOUFID, 2019). No caso dos cristais a influência da estabilidade na intensidade transmitida é bem mais crítica do que a variação no tamanho e deslocamento do feixe. Sendo assim, os parâmetros encontrados pelo método de Grizolli foram truncados para desalinhamentos em que a intensidade cai em 1%. A Tabela 5 apresenta os parâmetros de estabilidade obtidos.

Tabela 5 – Estabilidade dos cristais magnificadores para a configuração 4.

Crystals	X [ $\mu\text{m}$ ]	Y [ $\mu\text{m}$ ]	Z [ $\mu\text{m}$ ]	Rx [ $\mu\text{rad}$ ]	Ry [ $\mu\text{rad}$ ]	Rz [ $\mu\text{rad}$ ]
<b>Hor. 1</b>	10	96	96	20	1	3
<b>Hor. 2</b>	96	96	96	20	1	3
<b>Vert. 1</b>	96	10	96	1	20	20
<b>Vert. 2</b>	96	96	96	1	20	20

Fonte: Autor.

O mesmo procedimento foi adotado para o estudo de desalinhamentos da configuração de dois cristais com fator de magnificação 20 e novamente os desalinhamentos em translação foram truncados em 1 mm. As Tabelas 6 e 7 apresentam as tolerâncias e estabilidades para esta configuração. Note que as rotações críticas do sistema possuem uma amplitude maior tolerada em comparação à configuração anterior. Os *shifts* na banda de energia após a magnificação são menores com menos cristais em série.

Os efeitos dos desalinhamentos no feixe na posição do detector, simulados para a confi-

Tabela 6 – Tolerâncias de desalinhamento dos cristais magnificadores para a configuração 6.

Crystals	X [ $\mu\text{m}$ ]	Y [ $\mu\text{m}$ ]	Z [ $\mu\text{m}$ ]	Rx [ $\mu\text{rad}$ ]	Ry [ $\mu\text{rad}$ ]	Rz [ $\mu\text{rad}$ ]
<b>Hor. 1</b>	500	1000	1000	200	20	80
<b>Vert. 1</b>	1000	500	1000	20	200	200

Fonte: Autor.

Tabela 7 – Estabilidade dos cristais magnificadores para a configuração 6.

Crystals	X [ $\mu\text{m}$ ]	Y [ $\mu\text{m}$ ]	Z [ $\mu\text{m}$ ]	Rx [ $\mu\text{rad}$ ]	Ry [ $\mu\text{rad}$ ]	Rz [ $\mu\text{rad}$ ]
<b>Hor. 1</b>	120	120	120	40	6	20
<b>Vert. 1</b>	120	50	120	6	20	40

Fonte: Autor.

guração 4, podem ser visualizados nas figuras do [Apêndice A](#).

## 7.4 Algoritmo genético aplicado a alinhamento

O alinhamento de elementos ópticos de uma linha de luz é um processo delicado e que consome bastante tempo e uma forma de otimizar este procedimento é utilizar algoritmos genéticos. Neste trabalho é tratado um algoritmo para o alinhamento da linha de luz CARCARÁ-X simulada contendo o espelho e dois cristais magnificadores, com um total de 18 graus de liberdade: os 3 eixos de rotação e 3 translação de cada elemento. O código completo pode ser encontrado no [Apêndice B](#).

Cada grau de liberdade do elemento óptico é considerado um gene no escopo deste código. Um arranjo específico de desalinhamentos na linha de luz é tratado como um Indivíduo, uma entidade que possui um genoma contendo os 18 genes do elemento. Cada arranjo de desalinhamento pode ser associado à uma distribuição de intensidade do feixe que é detectado ao final da linha de luz. Para quantizar o quão adaptado é o indivíduo, leva-se em consideração a intensidade e os tamanhos do feixe, associados pela [Equação \(7.1\)](#) ao índice de adaptação  $i_a$ :

$$i_a = \sqrt{I^2 + FWHM_x^2 + FWHM_y^2}, \quad (7.1)$$

onde  $I$  é a intensidade normalizada e  $FWHM_x$  e  $FWHM_y$  são os valores normalizados de largura a meia altura da distribuição de intensidade do feixe. A normalização adotada é a razão entre o valor calculado para um determinado indivíduo com genes não nulos pelo valor máximo observado em um indivíduo com genes nulos, ou seja, a linha de luz perfeitamente alinhada.

Uma população inicial é gerada de forma aleatória, contendo um número par  $N$  de indivíduos com genes assumindo valores dentro de um limite estabelecido anteriormente. Estes são ordenados em função do índice de adaptação e reproduzidos de forma a criar uma nova geração desta população, com novos indivíduos que sofrem eventuais mutações em um ou mais genes. O processo se repete até que o indivíduo mais adaptado seja gerado ou o número máximo de iterações definido seja atingido.

Caso o algoritmo parta de um caso inicial em que todos os arranjos de alinhamentos são

gerados aleatoriamente, a convergência é dificultada. O espaço de busca é enorme, com ordem descrita pela Equação (7.2):

$$\prod_{i=0}^n a_i, \quad (7.2)$$

onde  $a_i$  é o número de valores de desalinhamento que um grau de liberdade  $i$  pode assumir, dentro de limites estabelecidos. Quanto maior o espaço de busca de cada grau de liberdade do sistema óptico, maior é o espaço total e o tempo computacional necessário para convergência. Esse caso é contraproducente ao objetivo do algoritmo, que é minimizar o tempo de alinhamento de uma linha de luz. Sendo assim, a introdução de um arranjo de alinhamentos conhecido e que esteja próximo do alinhamento ideal é preferível para uma linha de luz simulada. Chamemos essa introdução de pré-elitismo.

Embora um arranjo de alinhamento conhecido seja introduzido, o espaço de busca não é modificado. Esse caso é diferenciado do anterior por indicar uma possível direção de convergência para o algoritmo. Com isso menos tempo é investido em encontrar uma direção partindo do total desconhecimento do comportamento do alinhamento. O indivíduo introduzido pode ser encontrado com uma mudança no cálculo do índice de adaptação: a minimização do deslocamento do feixe em relação à posição de um detector real. A Tabela 8 apresenta os resultados obtidos pelo algoritmo para a seleção de um indivíduo cujo feixe resultante esteja localizado em uma região de  $10 \text{ mm}^2$  em torno da posição que o detector real assumiria. A Figura 35 apresenta a distribuição de intensidade do feixe ao final da linha para o melhor indivíduo da quarta geração.

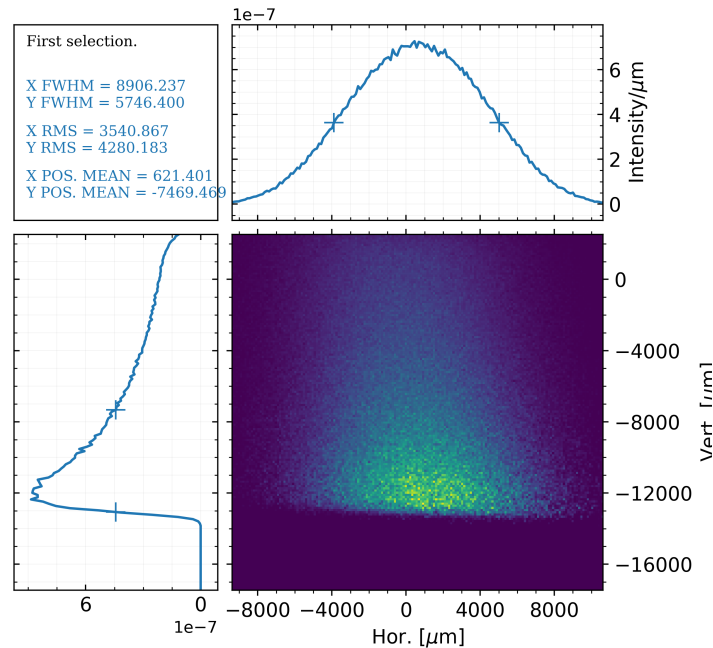
Tabela 8 – Seleção inicial.

Geração	Fitness	Horizontal	Vertical
0	> 10000	Fora	Fora
⋮	> 10000	Fora	Fora
4	7495	621	-7469

Com a introdução do indivíduo pré-selecionado o algoritmo evolui uma população inicial e os índices de adaptação, os tamanhos horizontal e vertical do feixe e intensidade ao final da linha de luz obtidos por geração estão presentes na Tabela 9. As grandezas são normalizadas em relação aos valores nominais da linha, sem desalinhamentos introduzidos, representado na Figura 36a. Após 40 gerações o alinhamento obtido pela otimização genética tem como resultado o feixe da Figura 36b, com resultados em tamanhos de feixe muito próximos do ideal e deslocamento de alguns micrometros. Observa-se que os tamanhos e intensidade apresentam concordância de 99% com os valores nominais da linha e o deslocamento do feixe está associado a rotações em *pitch* dos cristais de Bragg.

O algoritmo para o alinhamento dos elementos ópticos de uma linha de luz em fase de comissionamento é muito semelhante ao escrito para simulações. O que os diferencia, essencialmente, é o método de definição da adaptação de um indivíduo, ou seja, do quão próximo ao caso alinhado é um arranjo de desalinhamentos aleatórios e a quantidade de indivíduos que podem ser estudados em cada geração. No caso simulado apenas os indivíduos que estão definidos pelos ar-

Figura 35 – Feixe ao final da linha para o primeiro indivíduo encontrado dentro da região de interesse.



Fonte: Autor.

Tabela 9 – Gerações do algoritmo de otimização.

Geração	0	5	10	15	20	30	40	50	56
<b>Fitness</b>	0.07	0.76	0.77	0.78	0.8	0.86	0.92	0.97	0.98
<b>Horizontal</b>	0.08	0.86	0.92	0.94	0.98	0.95	0.99	0.98	0.98
<b>Vertical</b>	0.10	0.99	0.98	0.98	0.98	0.98	0.99	0.99	0.99
<b>Intensity</b>	7e-6	8e-3	0.06	5e-3	1e-4	0.61	0.75	0.96	0.96

ranjos arbitrários são avaliados, visto que não há transição entre desalinhamentos consecutivos, estes são configurados instantaneamente. Para uma linha de luz real um dado desalinhamento não pode ser instantaneamente alternado para um novo desalinhamento, isto ocorre de forma contínua. Sendo assim, tem-se diferentes indivíduos definidos entre dois indivíduos consecutivos, aumentando o espaço amostral e acelerando a convergência, por conta da população de desalinhamentos muito maior.

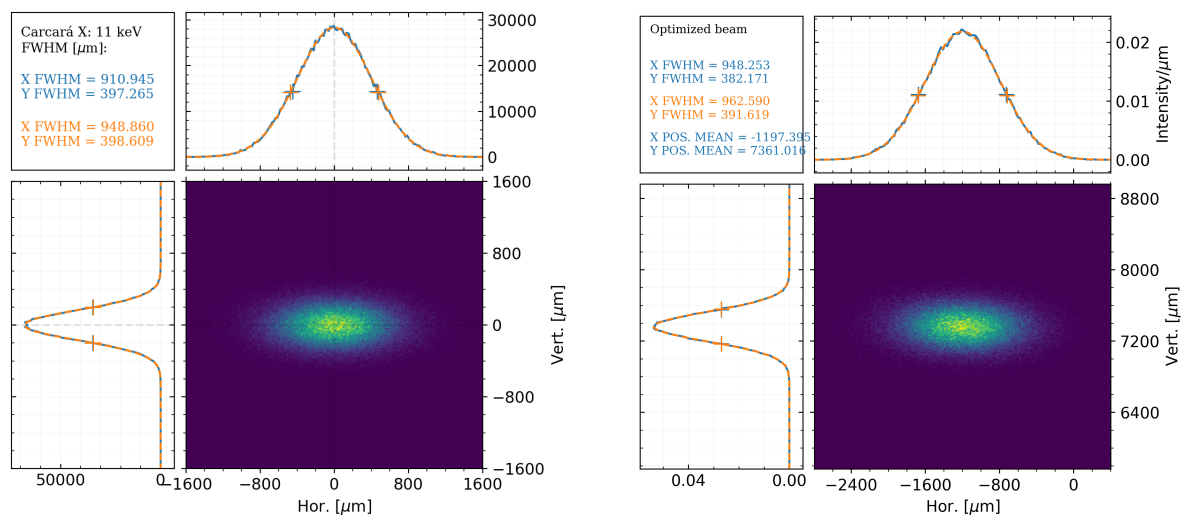
Com a definição de uma função de adaptação mais precisa e a introdução de métodos de mutação mais inteligentes, a procura por um indivíduo mais adaptado globalmente é facilitada. Métodos como mutações locais e globais podem ser introduzidos, assim como a reprodução com mais parentes ou maior troca de genes. A introdução de métodos de elitismo mais sofisticados e escolha de indivíduos iniciais bem adaptados acelera a convergência e diminui o número de gerações e processamento computacional necessários.



Figura 36 – Distribuição de intensidade do feixe ao final de linhas simuladas.

(a) Alinhamento ideal.

(b) Alinhamento encontrado pelo algoritmo.



Fonte: Autor.

## Conclusão

A introdução de linhas de luz para o diagnóstico de grandezas de um acelerador síncrotron é essencial para a manutenção da máquina e qualidade do feixe produzido. Devido à necessidade de se manter a distribuição de intensidade do feixe observada na posição imediatamente após a fonte é importante o controle fino do complexo sistema óptico da linha de luz. Para a CARCARÁ-X, em especial, o ajuste preciso dos alinhamentos dos cristais magnificadores é essencial para se manter a banda correta de energia transmitida ao final da linha. O ajuste dos cristais é um fator crucial para a determinação precisa da emitância do anel de forma a aumentar estatística de medição ao mesmo tempo em que astigmatismo e distorções por magnificação são minimizadas. Conclui-se que para a linha de diagnóstico do SIRIUS a configuração de magnificação ideal é com dois cristais de fator de magnificação 20.

A otimização de problemas complexos, em especial o alinhamento de extensos sistemas ópticos com vários graus de liberdade, é favorecida com a aplicação de *machine learning*. É notável a aplicabilidade de algoritmos genéticos no alinhamento da linha de luz CARCARÁ-X do SIRIUS e o emprego de diferentes métodos de avaliação dos arranjos de alinhamentos pode otimizar o custo computacional e tempo de execução do algoritmo. A combinação de diferentes algoritmos de *machine learning* pode favorecer a convergência. A introdução de método de *descent gradient* pode ser estudada em trabalhos futuros.

# Referências

ALS-NIELSEN, Jens; MCMORROW, Des. **Elements of Modern X-ray Physics**. Hoboken, NJ, EUA: John Wiley & Sons, Ltd, 2011. P. 435.

CHUBAR, O; ELLEAUME, P. Accurate and Efficient Computation of Synchrotron Radiation in the Near Field Region. **Proceedings of the EPAC98 Conference**, p. 1177–1179, jun. 1998.

CNPEM. **Linhas de luz**. [S.l.: s.n.], 2021. Disponível em:

<https://www.lnls.cnpem.br/linhas-de-luz/>. Acesso em 11 de abril de 2022.

\_\_\_\_\_. **Sirius: acelerando o futuro da ciência brasileira**. [S.l.: s.n.], 2021. Disponível em: <https://www.lnls.cnpem.br/sirius/>. Acesso em 11 de abril de 2022.

\_\_\_\_\_. **Sobre o CNPEM**. [S.l.: s.n.], 2022. Disponível em:

<https://cnpem.wpengine.com/cnpem/>. Acesso em 08 de abril de 2022.

GRIZOLLI, Walan; SHI, Xianbo; ASOUFID, Lahsen. Influence of optics vibration on synchrotron beam coherence. **Optics Letters**, v. 44, n. 4, p. 899–902, 2019.

HECHT, Eugene. **Optics**. Harlow, Essex, England: Pearson, 2017. P. 730.

KITTEL, Charles. **Introduction to Solid State Physics**. Hoboken, NJ, EUA: John Wiley & Sons, Ltd, 2004. P. 704.

KRINSKY, S; PERLMAN, M. L.; WATSON, R. E. Characteristics of Synchrotron Radiation and of its Sources. In: E., Koch E. (Ed.). **Handbook on Synchrotron Radiation**. Upton, NY, USA: North-Holland Publishing Company, 1983. v. 1. cap. 2.

LNLS. **Machine Storage Ring**. [S.l.: s.n.], 2021. Disponível em:

[https://wiki-sirius.lnls.br/mediawiki/index.php/Machine:Storage\\_Ring](https://wiki-sirius.lnls.br/mediawiki/index.php/Machine:Storage_Ring). Acesso em 17 de agosto de 2022.

MATUSHITA, Tadashi; HASHIZUME, Hiro-O. X-Ray Monochromators. In: E., Koch E. (Ed.). **Handbook on Synchrotron Radiation**. Upton, NY, USA: North-Holland Publishing Company, 1983. v. 1. cap. 4.

MEYER, Bernd C et al. **CARCARÁ-X Beamline: Optical Comissioning**. Campinas, Brasil, 2021.

REBUFFI, Luca; RIO, Manuel Sanchez Del. **OASYS (OrAnge Synchrotron Suite): an open-source graphical environment for x-ray virtual experiments**. [S.l.: s.n.], 2020. Disponível em: <https://www.aps.anl.gov/Science/Scientific-Software/OASYS>. Acesso em 4 de abril de 2022.

\_\_\_\_\_. ShadowOui: a new visual environment for X-ray optics and synchrotron beamline simulations. **J. Synchrotron Rad**, n. 23, 2016.

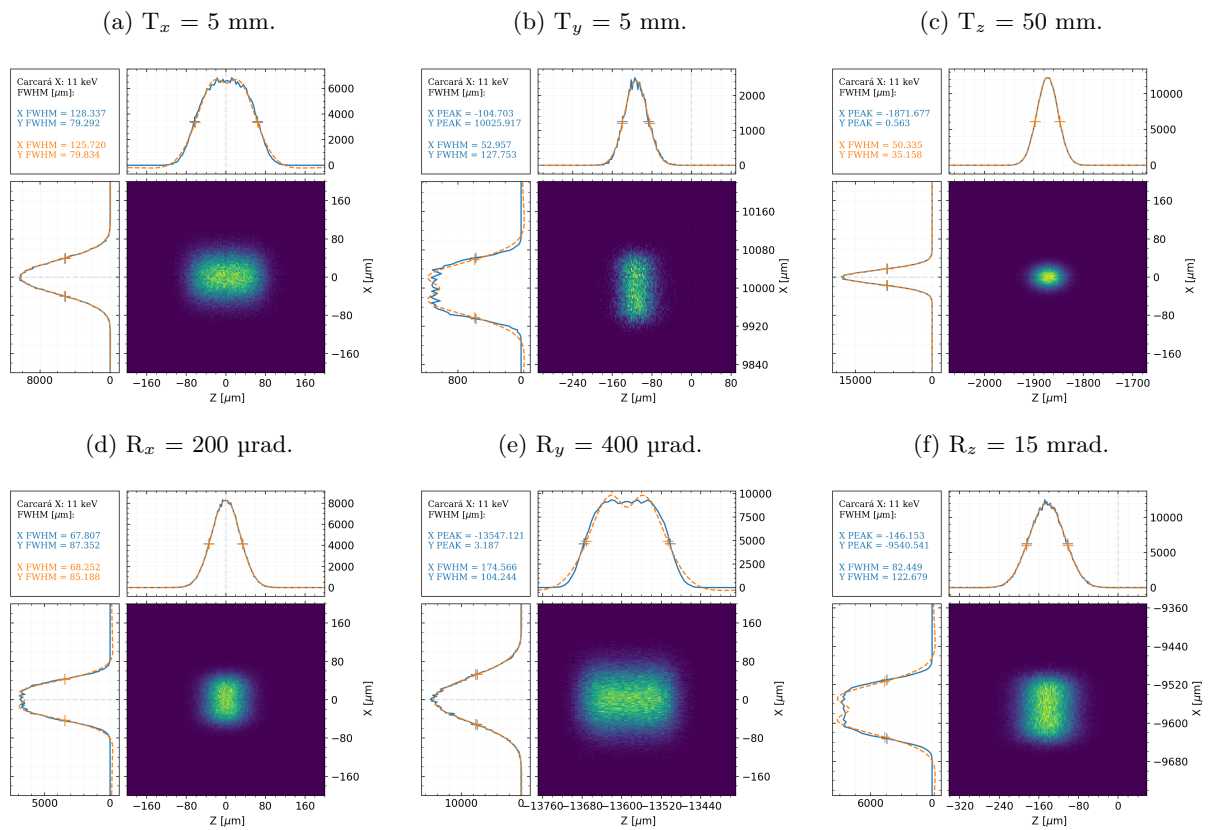
- RIGAMONTI, Humberto Júnior. **Um estudo acerca dos parâmetros ópticos da linha de luz XARU do SIRIUS**. 2018. F. 77. Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso) – Lorena.
- SLOWIK, A; KWASNICKA, H. Evolutionary algorithms and their applications to engineering problems. **Neural Computation and Applications**, v. 32, p. 12363–12379, 2020.
- TANAKA, Takashi. **SPECTRA: a synchrotron radiation calculation code**. [S.l.: s.n.], 2022. Disponível em: <https://spectrax.org/spectra/index.html>. Acesso em 4 de abril de 2022.
- WILLMOTT, Philip. **An Introduction to Synchrotron Radiation: Techniques and Applications**. Hoboken, NJ, EUA: John Wiley & Sons, Ltd, mar. 2019. P. 483.

# Apêndices

# Apêndice A – Figuras de Desalinhamentos

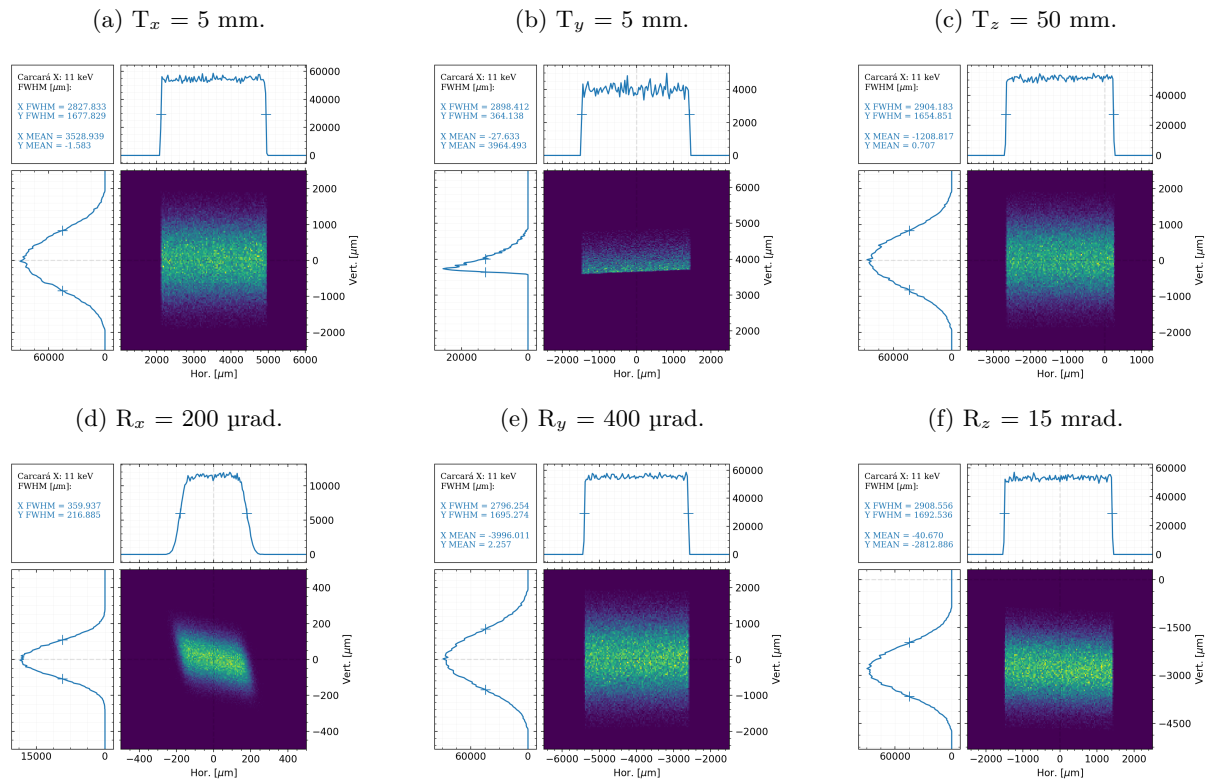
## A.1 Espelho

Figura 37 – Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição focal (17 m).



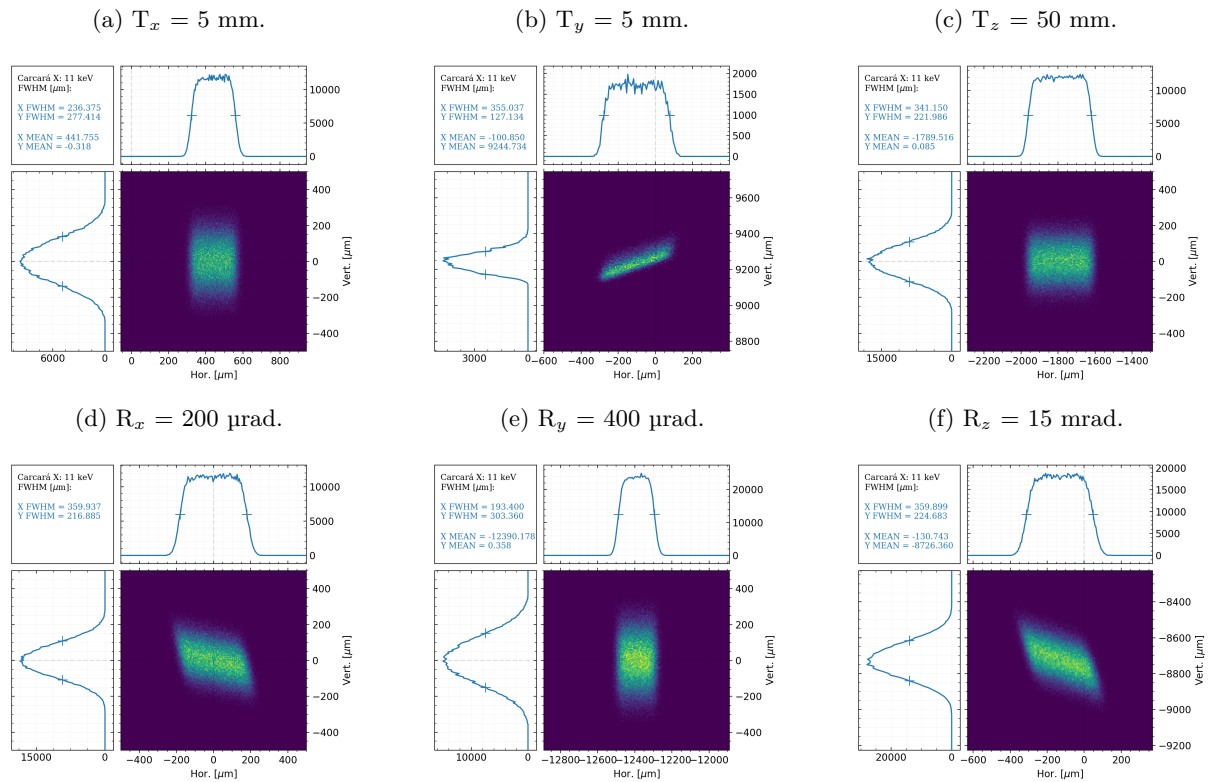
Fonte: (MEYER et al., 2021).

Figura 38 – Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição do DVF-1 (4,9 m).



Fonte: (MEYER et al., 2021).

Figura 39 – Efeitos de desalinhamentos do espelho na posição do DVF-2 (15,5 m).

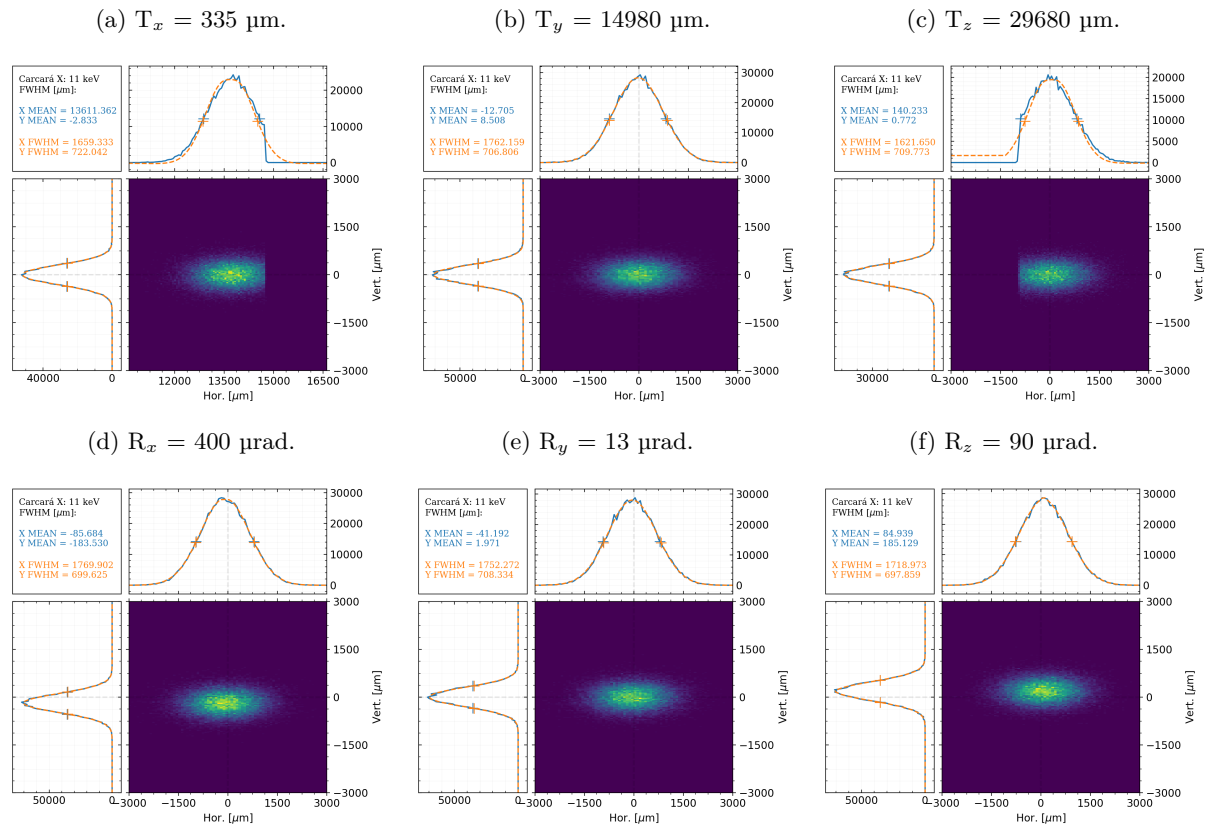


Fonte: (MEYER et al., 2021).

## A.2 Cristais

Note: as distâncias definidas nas legendas das figuras são relativas ao espelho. As figuras de desalinhamento deste apência se referem à configuração 4.

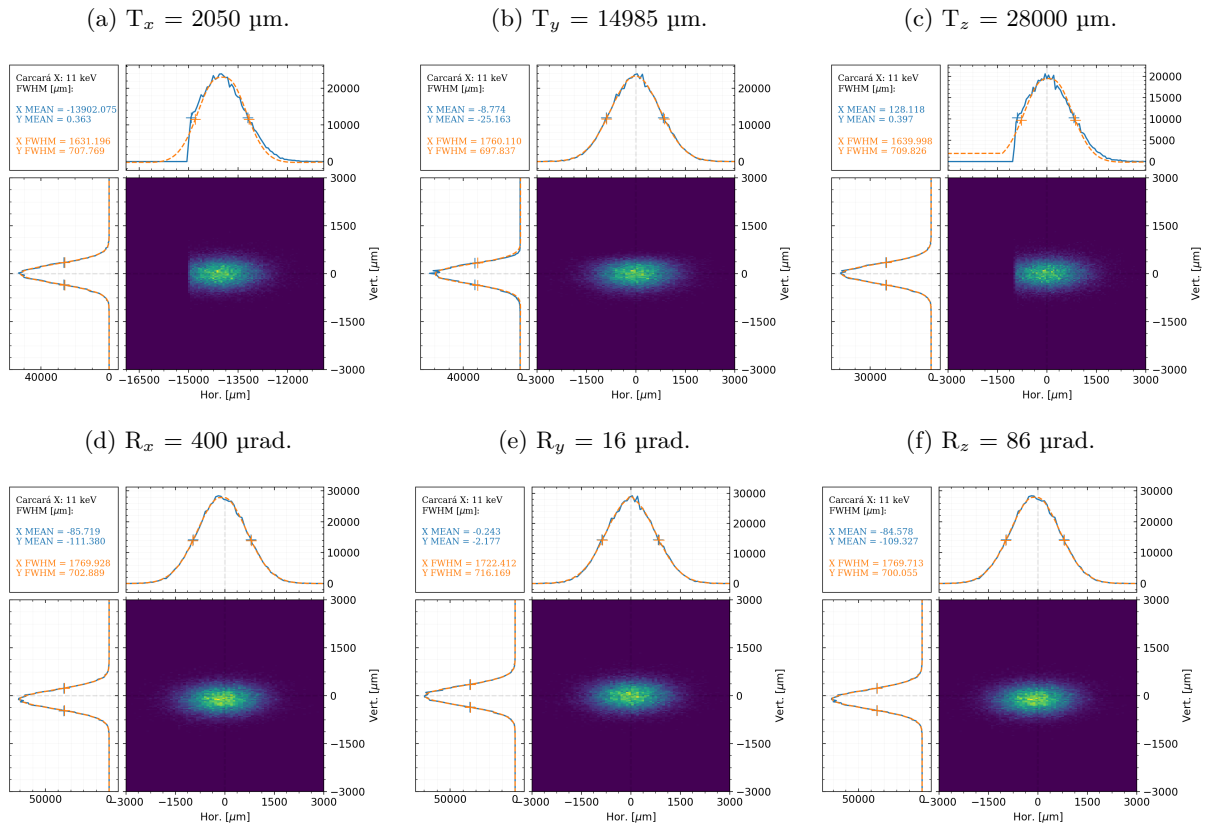
Figura 40 – Efeitos de desalinhamentos do primeiro cristal magnificador.



Fonte: Autor.

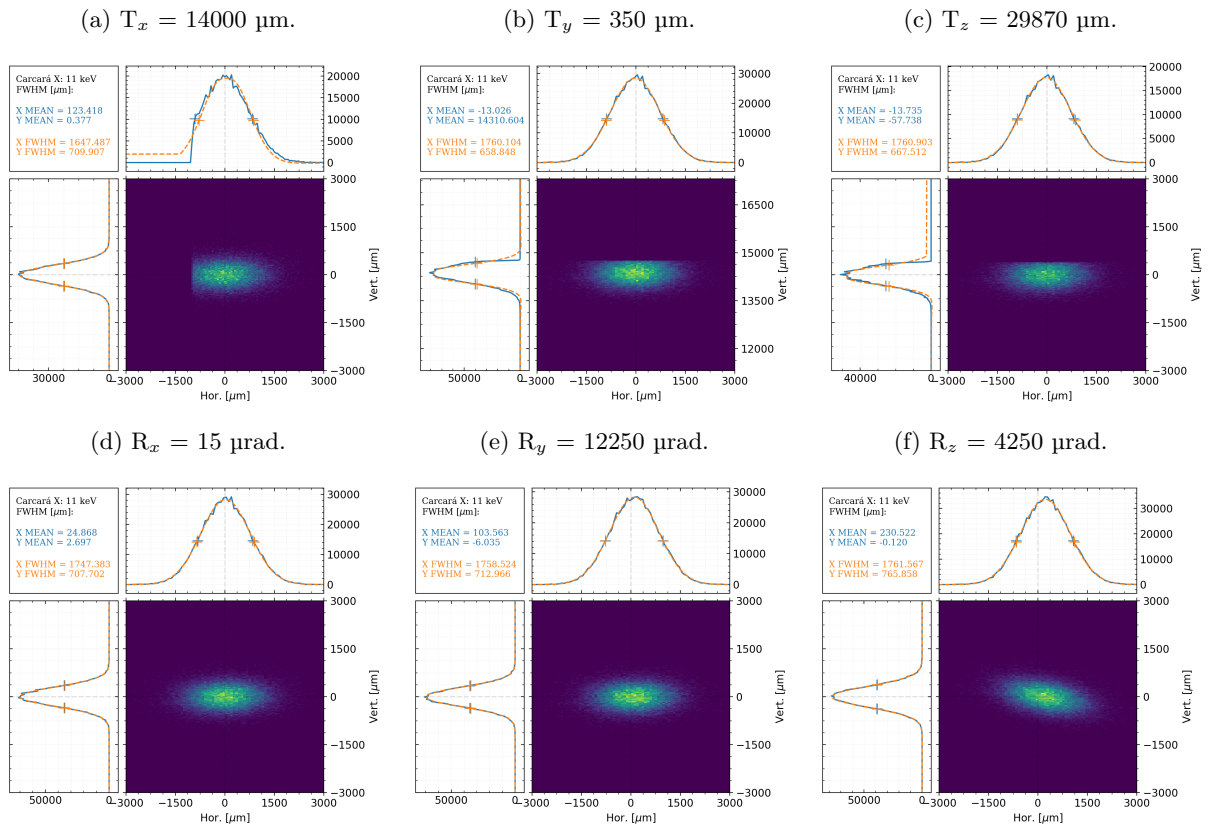


Figura 41 – Efeitos de desalinhamentos do segundo cristal magnificador.



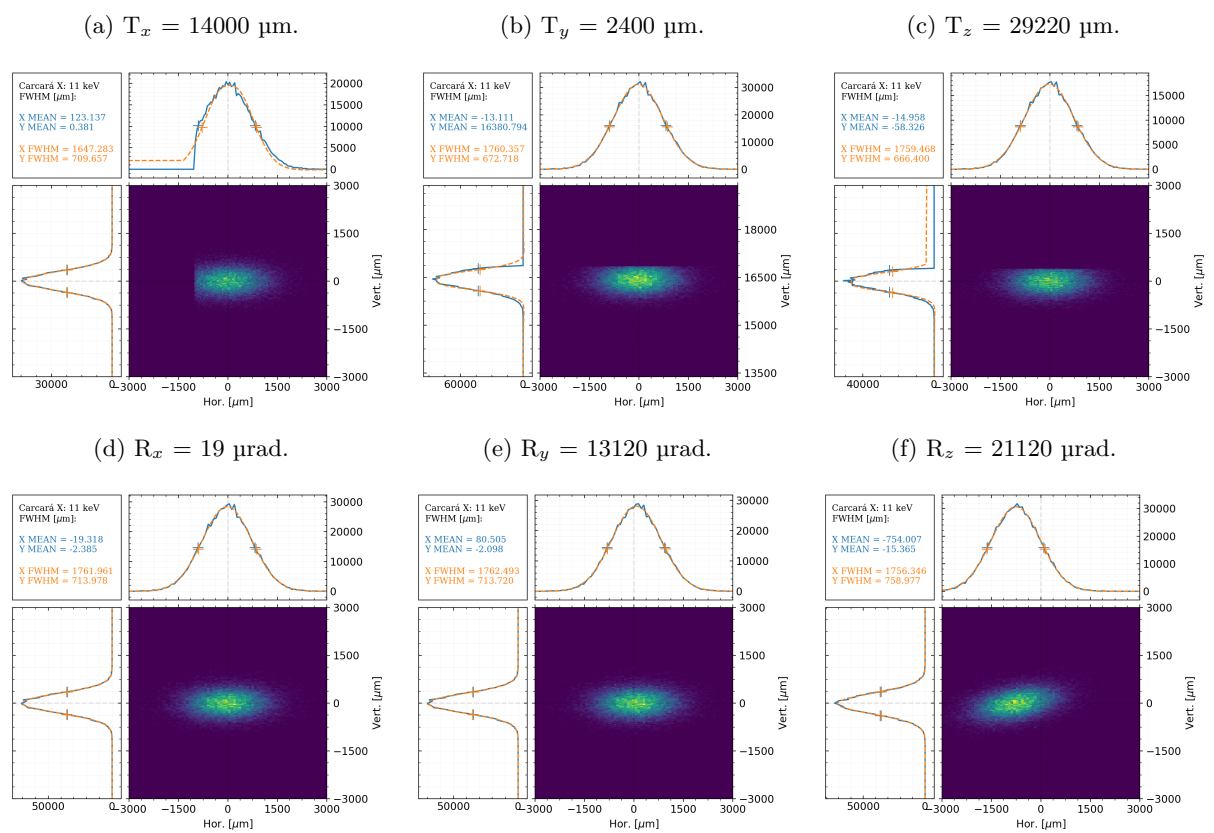
Fonte: Autor.

Figura 42 – Efeitos de desalinhamentos do terceiro cristal magnificador.



Fonte: Autor.

Figura 43 – Efeitos de desalinhamentos do quarto cristal magnificador.



Fonte: Autor.

## Apêndice B – Códigos de Simulação

Este apêndice contém os códigos em Python utilizados para o alinhamento de uma linha de luz simulada. O Listing B.1 apresenta o algoritmo genético escrito e o Listing B.2 a parametrização da linha de luz simulada.

Listing B.1 – Algoritmo genético para alinhamento de linha de luz simulada.

```

1 import time
2 import numpy as np
3 import crossover as cs
4
5 from optnlns.plot import plot_beam
6 from optnlns.importing import read_shadow_beam
7 from run_test import run_source, run_elements
8 from random import random, choices, randint, randrange
9
10 class Individual:
11     def __init__(self, length: int):
12         self.genomes = self.generate_genomes(length)
13
14         if length > 0:
15             self.fitness = self.get_fitness()
16         else:
17             self.fitness = 0
18
19     @staticmethod
20     def generate_genomes(length: int) -> list:
21         return choices(np.linspace(-.1, .1, 10001), k=length)
22
23     def get_fitness(self) -> int:
24
25         def func(x, c):
26
27             if x >= c:
28                 return c/x
29             else:
30                 return c/(2*c - x)
31
32         beam_mirror = run_elements(beam, self.genomes)
33
34         try:
35
36             beam2D_size = read_shadow_beam(beam_mirror, x_column_index=3,
37 y_column_index=1)
38
39             outputs_beam = plot_beam(beam2D_size, plotting=False, fitType=3)

```

```
39
40     fit_fwhm_h = outputs_beam['fit_fwhm_x']
41     fit_fwhm_v = outputs_beam['fit_fwhm_z']
42     mean_h = outputs_beam['mean_x']
43     mean_v = outputs_beam['mean_z']
44
45     # define detector area
46     if mean_h >= 10000 or mean_h <= -10000 or mean_v >= 10000 or mean_v
<= -10000:
47
48         self.hor = 0
49         self.vert = 0
50         self.intensity = 0
51         return 0
52
53     else:
54         if fit_fwhm_h < 0:
55             fit_fwhm_h = 0
56         else:
57             # 48 x 19.6
58             fit_fwhm_h = func(fit_fwhm_h, 399.23)
59
60         if fit_fwhm_v < 0:
61             fit_fwhm_v = 0
62         else:
63             fit_fwhm_v = func(fit_fwhm_v, 954.95)
64
65         self.hor = fit_fwhm_h
66         self.vert = fit_fwhm_v
67
68     except: return 0
69
70     try:
71         intensity = beam_mirror.histo1(1, nolost=1)['intensity'
72 ]/65676.44705660426 # 1_000_000
73
74         self.intensity = intensity
75
76     except: intensity = 0
77
78     #return (mean_h**2 + mean_v**2)**0.5 # to find a individual within the
desired area
79     return (intensity**2 + fit_fwhm_h**2 + fit_fwhm_v**2)**(1/2)/1.732
80
81 def mutate(self, n_mutations=4, probability=.75):
82
83     genome = self.genomes
84
85     for _ in range(n_mutations):
86         index = randrange(len(genome))
87
88         # global mutation
```

```

88         if random() >= probability:
89             genome[index] = genome[index]
90         else:
91             genome[index] = choices(np.linspace(-.1, .1, 100001))[0]
92
93         # local mutation
94         if random() >= 0.9:
95             genome[index] = genome[index]
96         else:
97             genome[index] += genome[index] * choices(np.linspace(-0.0001,
98             0.0001, 1001))[0]
99
100        self.genomes = genome
101        self.fitness = self.get_fitness()
102
103class Population:
104    individuals = []
105
106    def __init__(self, genome_length: int, population_size: int):
107
108        self.individuals = self.generate(genome_length, population_size)
109
110    def status(self):
111        print("""
112=====
113""")
114        for i in self.individuals:
115            print(f"genomes = {i.genomes}, fitness = {i.fitness}. \n")
116        print("""
117=====
118""")
119
120    @staticmethod
121    def generate(length: int, population_size: int):
122
123        return [Individual(length) for _ in range(population_size)]
124
125    def append(self, *args):
126        for i in args:
127            self.individuals.append(i)
128
129    def sort(self):
130
131        self.individuals = sorted(self.individuals,
132            key=lambda individual: individual.fitness,
133            reverse=True)
134
135    def check_null(self):
136
137        print('Checking for unfitted individuals.')
138
139        indexes = []

```

```
135     count = 0
136
137     for i in range(len(self.individuals)):
138
139         if self.individuals[i].fitness == 0:
140
141             indexes.append(i)
142             count += 1
143
144     if count/len(self.individuals) >= .6:
145
146         for i in indexes:
147
148             self.individuals.pop(i)
149
150             new = Individual(0)
151             new.genomes = new.generate_genomes(6)
152             new.fitness = new.get_fitness()
153
154             self.individuals.insert(i, new)
155
156             print(f'{i} unfitted individuals removed.')
157
158     def select_parents(self):
159
160         return choices(
161             self.individuals,
162             weights=[individual.fitness for individual in self.individuals],
163             k=2
164         )
165
166     class History:
167         def __init__(self):
168             self.populations = []
169
170         def append(self, population):
171             self.populations.append(population)
172
173         def gen_report(self, n: int):
174
175             self.populations[n].status()
176
177     class Crossover:
178         def single_point(parent_a, parent_b):
179             if len(parent_a.genomes) != len(parent_b.genomes):
180                 raise ValueError('Genomes must have the same size')
181
182             length = len(parent_a.genomes)
183             if length < 2:
184                 return parent_a, parent_b
185
186             cut_point = randint(1, length - 1)
```

```
187
188     offspring_a = Individual(0); offspring_b = Individual(0)
189
190     offspring_a.genomes = parent_a.genomes[0:cut_point] + parent_b.genomes[
191 cut_point:]
192     offspring_b.genomes = parent_b.genomes[0:cut_point] + parent_a.genomes[
193 cut_point:]
194
195     return offspring_a, offspring_b
196
197 def evolve():
198     generation_limit = 20
199     #fitness_limit = 10000
200     fitness_limit = 0.98
201
202     crossover = Crossover.single_point
203
204     population = Population(18, 8)
205
206     for gen in range(generation_limit):
207         print(f'Generation {gen + 1}')
208
209         population.sort()
210         history.append(population)
211
212         individuals = population.individuals
213
214         if individuals[0].fitness >= fitness_limit:
215             break
216
217         next_gen = Population(18, 0)
218         next_gen.append(individuals[0], individuals[1])
219
220         for j in range(int(len(individuals) / 2) - 1):
221             parents = population.select_parents()
222             offspring_a, offspring_b = crossover(*parents)
223             offspring_a.mutate(6)
224             offspring_b.mutate(6)
225             next_gen.append(offspring_a, offspring_b)
226
227         population = next_gen
228
229     return population, gen
230
231 if __name__ == '__main__':
232     t0 = time.time()
233
234     beam = run_source()
235
236     history = History()
```

```

237
238     population, gen = evolve()
239
240     population.sort()
241
242     print(f"""
=====
243
244 Process took {time.time() - t0:.2f} s to evolve {gen} generation(s).
245
246 The fittest individual is {population.individuals[0].genomes}
247 (fitness = {population.individuals[0].fitness:.6f})
248
249 To see the entire population genomes and fitness, type population.status().
250
251 To see the genomes and fitness of generation n, type gen_report(n).
252
253 =====
    """)

```

Listing B.2 – Algoritmo genético para alinhamento de linha de luz simulada.

```

1 import Shadow
2 import numpy
3
4 def run_source():
5     iwrite = 0
6
7     beam = Shadow.Beam()
8     oe0 = Shadow.Source()
9
10    oe0.BENER = 3.0
11    oe0.EPSI_X = 2.485e-07
12    oe0.EPSI_Z = 2.485e-09
13    oe0.FDISTR = 4
14    oe0.FILE_BOUND = b'/home/astolfo/Documents/OPT/Beamlines/CARCARA/CAX/zip/
Optimize_source_CAX.txt'
15    oe0.FSOURCE_DEPTH = 4
16    oe0.F_BOUND_SOUR = 2
17    oe0.F_COLOR = 3
18    oe0.F_PHOT = 0
19    oe0.HDIV1 = 0.00012
20    oe0.HDIV2 = 0.00012
21    oe0.ISTAR1 = 5676561
22    oe0.NCOL = 0
23    oe0.NPOINT = 1000000
24    oe0.N_COLOR = 0
25    oe0.PH1 = 10993.0
26    oe0.PH2 = 11007.0
27    oe0.POL_DEG = 0.0
28    oe0.R_ALADDIN = 17737.923505116458
29    oe0.R_MAGNET = 17.73792350511646

```



```
30     oe0.SIGDIX = 0.0
31     oe0.SIGDIZ = 0.0
32     oe0.SIGMAX = 0.0203
33     oe0.SIGMAY = 0.0
34     oe0.SIGMAZ = 0.0082
35     oe0.VDIV1 = 0.000235
36     oe0.VDIV2 = 0.000235
37     oe0.WXSOU = 0.0
38     oe0.WYSOU = 0.0
39     oe0.WZSOU = 0.0
40
41     #Run SHADOW to create the source
42
43     if iwrite:
44         oe0.write("start.00")
45
46     beam.genSource(oe0)
47
48     if iwrite:
49         oe0.write("end.00")
50         beam.write("begin.dat")
51
52     return beam
53
54
55 def run_elements(_beam, mis=[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]):
56     beam = _beam.duplicate()
57
58     iwrite = 0
59
60     oe1 = Shadow.OE()
61     oe2 = Shadow.OE()
62     oe3 = Shadow.OE()
63
64     oe1.ALPHA = 90.0
65     oe1.DUMMY = 0.1
66     oe1.FHIT_C = 1
67     oe1.FMIRR = 3
68     oe1.FWRITE = 1
69     oe1.F_EXT = 1
70     oe1.F_MOVE = 1
71     oe1.OFFX = mis[0]
72     oe1.OFFY = mis[1]
73     oe1.OFFZ = mis[2]
74     oe1.RLEN1 = 110.0
75     oe1.RLEN2 = 110.0
76     oe1.RWIDX1 = 4.0
77     oe1.RWIDX2 = 4.0
78     oe1.R_MAJ = 905271.0
79     oe1.R_MIN = 319.2
80     oe1.T_IMAGE = 16970.0
```

```
81   oe1.T_INCIDENCE = 88.92398463124344
82   oe1.T_REFLECTION = 88.92398463124344
83   oe1.T_SOURCE = 17000.0
84   oe1.X_ROT = mis[3]
85   oe1.Y_ROT = mis[4]
86   oe1.Z_ROT = mis[5]
87
88   oe2.A_BRAGG = -15.53
89   oe2.DUMMY = 0.1
90   oe2.FHIT_C = 1
91   oe2.FILE_REFL = b'/home/astolfo/Oasys/Si220.dat'
92   oe2.FWRITE = 1
93   oe2.F_BRAGG_A = 1
94   oe2.F_CENTRAL = 1
95   oe2.F_CRYSTAL = 1
96   oe2.F_MOVE = 1
97   oe2.OFFX = mis[6]
98   oe2.OFFY = mis[7]
99   oe2.OFFZ = mis[8]
100  oe2.PHOT_CENT = 11000.0
101  oe2.RLEN1 = 30.0
102  oe2.RLEN2 = 30.0
103  oe2.RWIDX1 = 15.0
104  oe2.RWIDX2 = 15.0
105  oe2.R_LAMBDA = 5000.0
106  oe2.T_IMAGE = 60.0
107  oe2.T_INCIDENCE = 88.4524409954
108  oe2.T_REFLECTION = 57.4009932882
109  oe2.T_SOURCE = 0.0
110  oe2.X_ROT = mis[9]
111  oe2.Y_ROT = mis[10]
112  oe2.Z_ROT = mis[11]
113
114  oe3.ALPHA = 90.0
115  oe3.A_BRAGG = -15.53
116  oe3.DUMMY = 0.1
117  oe3.FHIT_C = 1
118  oe3.FILE_REFL = b'/home/astolfo/Oasys/Si220.dat'
119  oe3.FWRITE = 1
120  oe3.F_BRAGG_A = 1
121  oe3.F_CENTRAL = 1
122  oe3.F_CRYSTAL = 1
123  oe3.F_MOVE = 1
124  oe3.OFFX = mis[12]
125  oe3.OFFY = mis[13]
126  oe3.OFFZ = mis[14]
127  oe3.PHOT_CENT = 11000.0
128  oe3.RLEN1 = 30.0
129  oe3.RLEN2 = 30.0
130  oe3.RWIDX1 = 15.0
131  oe3.RWIDX2 = 15.0
132  oe3.R_LAMBDA = 5000.0
```

```
133     oe3.T_IMAGE = 30.0
134     oe3.T_INCIDENCE = 88.4524409954
135     oe3.T_REFLECTION = 57.4009932882
136     oe3.T_SOURCE = 0.0
137     oe3.X_ROT = mis[15]
138     oe3.Y_ROT = mis[16]
139     oe3.Z_ROT = mis[17]
140
141     #
142     #run optical element 1
143     #
144     print("    Running optical element: %d"%(1))
145     if iwrite:
146         oe1.write("start.01")
147
148     beam.traceOE(oe1,1)
149
150     if iwrite:
151         oe1.write("end.01")
152         beam.write("star.01")
153
154     #
155     #run optical element 2
156     #
157     print("    Running optical element: %d"%(2))
158     if iwrite:
159         oe2.write("start.02")
160
161     beam.traceOE(oe2,2)
162
163     if iwrite:
164         oe2.write("end.02")
165         beam.write("star.02")
166
167     #
168     #run optical element 3
169     #
170     print("    Running optical element: %d"%(3))
171     if iwrite:
172         oe3.write("start.03")
173
174     beam.traceOE(oe3,3)
175
176     if iwrite:
177         oe3.write("end.03")
178         beam.write("star.03")
179
180
181     return beam
```