



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

97-219

P13-97-219

А.С.Кирилов, Й.Хайнитц

ВИЗУАЛЬНЫЙ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ
В ПРОЦЕССЕ ИЗМЕРЕНИЯ
НА СПЕКТРОМЕТРАХ НСВР И СКАТ

1997

Введение

В последние годы в ЛНФ ОИЯИ, как и в других нейтронных центрах, проводится модернизация систем управления спектрометрами/1/. Прежние системы, основанные на компьютерах типа PC и электронике в стандарте КАМАК, заменяются на модульные компьютеры в стандарте VME/2/. Обновляется и программное обеспечение. Программы, работающие в среде однопользовательской однозадачной операционной системы MS-DOS (MS Windows), заменяются на целый комплекс взаимодействующих задач, созданных на основе современных операционных систем реального времени (OS-9, VxWorks, LynxOS и др.)/3/. К тому же эти комплексы, как правило, предназначены для работы в сетевой среде. Такая замена качественно улучшает возможности систем управления инструментами, обеспечивает их расширяемость, более высокую стабильность и современный интерфейс с пользователем.

Начиная с марта 1995 года, для управления спектрометром HCBP седьмого пучка реактора ИБР-2 ЛНФ используется система накопления, управления и контроля на базе VME/4,5/. С апреля 1997 года аналогичная система применяется для управления новым спектрометром SKAT. Оба инструмента ориентированы на исследование текстуры геологических материалов, металлов и сплавов методом нейтронной дифракции /6/. Программный комплекс системы накопления, управления и контроля этими инструментами описан в цикле работ/4,5,7-9/.

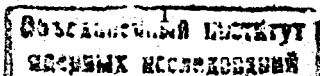
Настоящая публикация посвящена описанию входящей в комплекс задачи Vsp, которая предназначена для:

- визуального контроля за правильностью измерения;
- первичного анализа спектров непосредственно в ходе измерения¹.

Специфика текстурных измерений заключается в следующем. Образец облучается нейтронами в нескольких десятках последовательно выбираемых позиций со временем экспозиции в каждой обычно по 15-30 минут. Общее время измерения составляет около суток. Оперативный контроль и экспресс-анализ корректности получаемых данных позволяют в случае каких-либо неполадок предотвратить потерю дорогостоящего реакторного времени.

Основная ценность Vsp заключена в возможности проведения именно оперативного анализа. Для обработки спектров off-line обычно применяются более мощные программные средства, базирующиеся на рабочих станциях (пакеты PV-WAVE/10/, GenI и другие) или PC. Однако на этапе проведения эксперимента Vsp имеет существенные, на наш взгляд, преимущества. Во-первых, это наличие "прямого" и, следовательно, быстрого доступа к инкрементной памяти, в которой происходит накопление данных, что существенно

¹ Конечно, программа может быть использована для анализа спектров, записанных на диске VME-компьютера, и вне эксперимента, но это не так актуально. Как правило, после сеанса измерения полученные данные перекачиваются из VME-компьютера по сети в архив на рабочей станции или PC, где и производится их окончательная обработка.



повышает оперативность работы. Доступ к данным по сети требует больших программистских издержек и, в принципе, более медлен. Во-вторых, контроль накопления с использованием локальных графических средств VME-компьютера может вестись и автономно при отключении от сети. Такая возможность была особо оговорена при формулировании требований к комплексу НСВР/СКАТ/5/. Это принципиально не возможно при визуализации спектров на рабочих станциях.

Как и другие задачи комплекса, Vsp работает на самом VME-компьютере, но может быть вызвана с любой рабочей станции или X-терминала локальной сети. Существует версия задачи, адаптированная для вызова с PC, что дает пользователю возможность контролировать измерение непосредственно со своего рабочего места. Количество одновременно работающих копий программы Vsp ограничено только размером свободной памяти VME-компьютера. Задача не оказывает никакого негативного влияния на ход измерения.

Работа посвящена описанию основных возможностей задачи Vsp, интерфейсу с пользователем и примерам, иллюстрирующим их. Мы не рассматриваем математического аппарата, используемого для визуализации графиков, так как он подробно изложен в литературе, например, в классической работе Ньюмена и Спрулла/11/. Построение осей с "разумным" выбором масштаба и разметки реализовано в соответствии с алгоритмом/12/, который был нами несколько модифицирован.

Основные возможности

Задача позволяет изображать до восьми спектров одновременно. Данные извлекаются непосредственно из инкрементной памяти или из файлов на диске.

Спектры изображаются тремя различными способами: точками, ломаной, гистограммой.

Пользователю предлагается возможность выполнения некоторых простейших операций, а именно:

- нормировки;
- попарного вычитания спектров друг из друга;
- изображения спектров с вертикальным сдвигом;
- увеличения фрагментов графика;
- измерения пиков;
- периодического построения спектров;
- сравнения с опорными спектрами.

Рассмотрим эти операции подробнее. Отметим, что все они выполняются при построении изображения и не изменяют исходных спектров.

Операция **нормировки** позволяет представить обыкновенные спектры в нормированном виде, определяемом в соответствии с формулой:

$$Sp_i^n = Sp_i / Norm_i,$$

где Sp_i - исходное значение спектра, Sp_i^n - нормированное значение, а $Norm_i$ - нормирующий коэффициент, который извлекается из файла нормировки, заданного в конфигурационном файле/7/. Нормировка не распространяется на опорные спектры, т.к. они могут быть уже нормированы.

При **попарном вычитании** представляются спектры $Sp_1 - w * Sp_2$, $Sp_2 - w * Sp_3$ и т.д., где w - весовой коэффициент, который по умолчанию равен 1 и может быть изменен командой Opt. Эта операция предназначена для сравнения спектров или вычитания фона.

При **изображении со сдвигом** спектры изображаются один над другим. Это удобно для сравнительного анализа положения пиков. Величина относительного сдвига по вертикальной оси задается отдельным параметром в команде Opt.

Увеличение избранного фрагмента спектра позволяет детально проанализировать/измерить отдельный пик или группу пиков. Пользователь может задать интересующий его диапазон с помощью мыши или непосредственно, отредактировав соответствующие параметры (команда Win).

Измерения с помощью мыши выполняются в двух режимах. Значения номера канала (x) и величины в масштабе спектра (y), соответствующие текущей позиции курсора, постоянно выводятся в строке параметров, пока курсор находится в поле изображения спектров. Пользователь может зафиксировать некоторую позицию, после чего изображаются смещения по обеим осям (dx, dy) относительно этой позиции (см. рис.8).

При наблюдении спектров в динамике удобно использовать **периодический режим** построения, в котором обновление графика производится периодически с заданным интервалом времени.

Возможно совместное применение нескольких операций, например, построение со сдвигом фрагмента группы нормированных спектров (см. рис.7).

В момент определения спектры могут быть объявлены **опорными**. Эти спектры независимо от простых изображаются так, чтобы занимать все доступное поле.

Конфигурирование задачи

Задача конфигурируется с помощью файла spectrometer.cnf, общего для всех клиентов комплекса/7/. Среди опций этого файла для Vsp важны следующие:

Параметр	Значение
MEMPOS	Номер позиции спектра, соответствующего первому детектору, в модуле инкрементной памяти (МИП).
MEMSPLIT	Фактор разделения МИП. Указывает количество сегментов, на которые разделена инкрементная память. Должен соответствовать аппаратно установленному разделению.

DATADIR	Имя каталога для записи спектров.
INCIDENT	Имя файла с нормирующим спектром. Файл ищется в текущем каталоге.

Форматы спектров и имен файлов

По традиции HCBP данные записываются в файлы в виде последовательности 16-разрядных чисел, т.е. так, как они накапливаются в инкрементной памяти. Как правило имя файла задается следующим образом:

<имя образца>m.?nn

где имя образца определяется пользователем в задаче управления TOF-анализатором (Tofa)/8/, m означает номер прогона "0" или "1", знаком "?" обозначен символ детектора (a, b,...), а nn - номер позиции, соответствующей позиции измерения - 00, 01, 02 и т.д., например, marble1.c48 .

При изображении спектров непосредственно из инкрементной памяти указывается символ соответствующего детектора (a) или номер спектра (1,...).

При групповом изображении спектров с диска допускаются конструкции типа filename.a/g00, а при работе с памятью - a/g. В этих случаях изображаются все спектры в указанном диапазоне.

Интерфейс

Главное окно задачи представлено на рис.1. Оно состоит из следующих полей:

- имен спектров;
- строки параметров спектров;
- изображения спектров;
- столбца команд;
- строки диагностики.

Поле имен спектров образовано кнопками, обозначенных именами спектров. Они предназначены для выбора текущего спектра, параметры которого (размер, минимум, максимум) и координаты курсора изображаются в строке параметров.

Команды предназначены для задания спектров и выполнения операций над ними. Они выбираются мышью или с клавиатуры. Текущая команда выделена красным цветом. Выбор этой команды производится нажатием клавиши Enter, переход к следующей команде - клавиши Tab.

Клавиши мыши используются следующим образом. Левая клавиша служит для выбора команды, а также для выделения фрагмента изображения. Для этого надо нажать на нее и, не отпуская, провести мышью до желаемой позиции, после чего отпустить клавишу. Во время проводки границы избранной области изображаются черным прямоугольником. Средняя клавиша предназначена для фиксации текущей позиции курсора при

измерениях. После нажатия на нее в избранной позиции рисуется крест во весь график. Правая клавиша отменяет фиксацию.

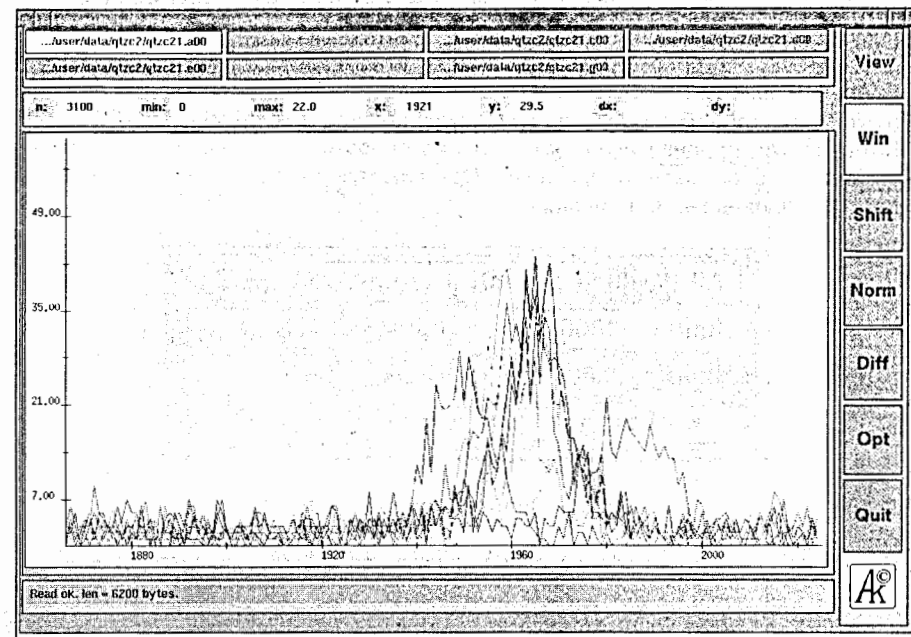


Рис.1. Главное окно задачи Vsp

Kind of spectrum	usual
Representation	lines
Refreshing	off
Source	file
Name	.../user/data/qtzc2/qtzc21.a/h
Ok	Esc

Рис.2. Подокно команды View

При нажатии на кнопку View появляется подокно (рис.2), с помощью которого пользователь может задать имя и параметры спектра. В левом столбце приведены названия режимов и параметров, а в правом - их текущие значения, которые могут быть отредактированы (File name) или изменены с помощью мыши (все остальные).

Для выхода из подокна надо выбрать Ok для подтверждения заданных изменений или Esc - для отмены. В случае подтверждения новый спектр (группа спектров) будет выведен начиная с позиции текущего.

Команда Win предназначена для задания области изображения спектров и выбора способа масштабирования. При нажатии на эту кнопку появляется подокно, приведенное на рис.3.

All	Clip	zoomX	zoomY
Xmin =	1866	Xmax =	2025
Ymin =	0.000	Ymax =	60.518
Ok	Esc		

Рис.3. Подокно команды Win

Строка кнопок вверху предназначена для выбора способа масштабирования:

Название	Способ масштабирования
All	Полное изображение
Clip	Изображение выбранного фрагмента
zoomX	Изображение фрагмента графика в заданном интервале по оси X
zoomY	Изображение фрагмента графика в заданной полосе по оси Y

В полях Xmin, Xmax, Ymin, Ymax приведены текущие значения границ фрагмента, заданные с помощью мыши или сохранившиеся от предыдущего задания. При необходимости пользователь может их отредактировать.

После выхода, если спектр представлен фрагментом, кнопка Win окрашивается в желтый цвет.

Команда Shift предназначена для изображения спектров со сдвигом относительно оси Y. Коэффициент сдвига задается в процентах в команде Opt. При первом нажатии на Shift производится построение со сдвигом, а кнопка окрашивается в желтый цвет. Повторное нажатие отменяет это действие.

Команда Norm предназначена для изображения спектров в нормализованном виде. Она доступна, если задан файл нормализации с помощью опции INCIDENT. При первом нажатии на кнопку спектры изображаются в

нормализованном виде, а сама кнопка окрашивается в желтый цвет. Повторное нажатие отменяет это действие.

Команда Diff предназначена для изображения разностных спектров. При первом нажатии на кнопку необходимое преобразование выполняется, а сама кнопка окрашивается в желтый цвет. Повторное нажатие отменяет это действие.

Команда Opt предназначена для задания параметров задачи. Ее подокно изображено на рис.4.

Negative data range [%]:	0
Shift range [%]:	0
Weighting factor :	1.000000
Refreshing period [s]:	0
Ok	Esc

Рис.4. Подокно команды Opt

Параметр Negative data range определяет часть поля изображения, отводимую для изображения отрицательной части разностных спектров.

Параметр Shift range определяет коэффициент сдвига спектров, изображаемых в режиме Shift.

Параметр Weighting factor задает весовой коэффициент, используемый в команде Diff. Он позволяет сравнить спектры, полученные с разным временем экспозиции.

Параметр Refreshing period задает период построения для спектров.

Примеры

Проиллюстрируем возможности Vsp на примерах.

На рис.5 представлен график группы спектров для детекторов от а до г. Цвета имен файлов соответствуют цветам спектров. В строке над графиком указаны параметры текущего спектра, кнопка с именем которого выделена белым фоном, и текущая позиция курсора (x,y). Сам курсор на рисунках, к сожалению, не изображен, т.к. при сохранении картинки с помощью программы XView, он не записывается.

На следующем рисунке изображена та же группа спектров, представленных в нормализованном виде. Имена спектров помечены звездочкой. Фон кнопки Norm изменен на желтый.

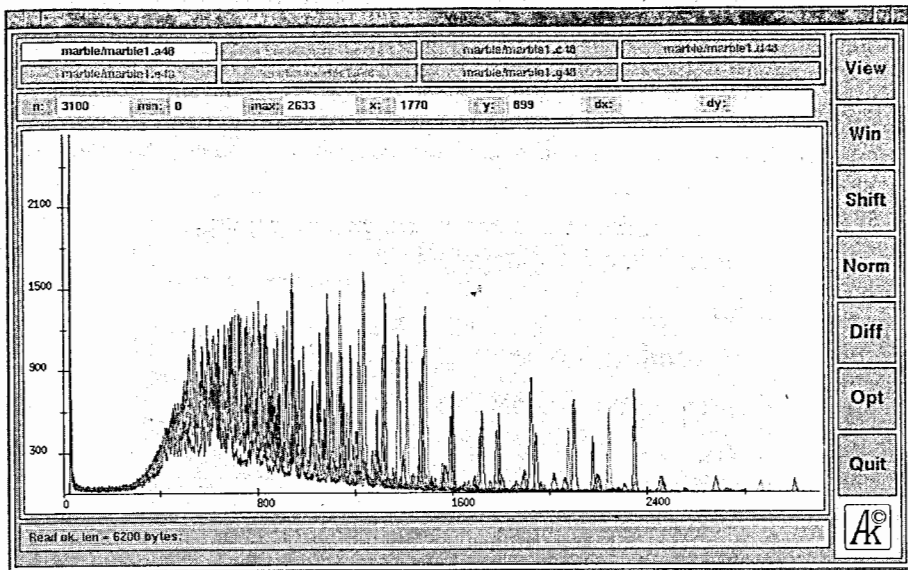


Рис.5. График спектров для детекторов а/г

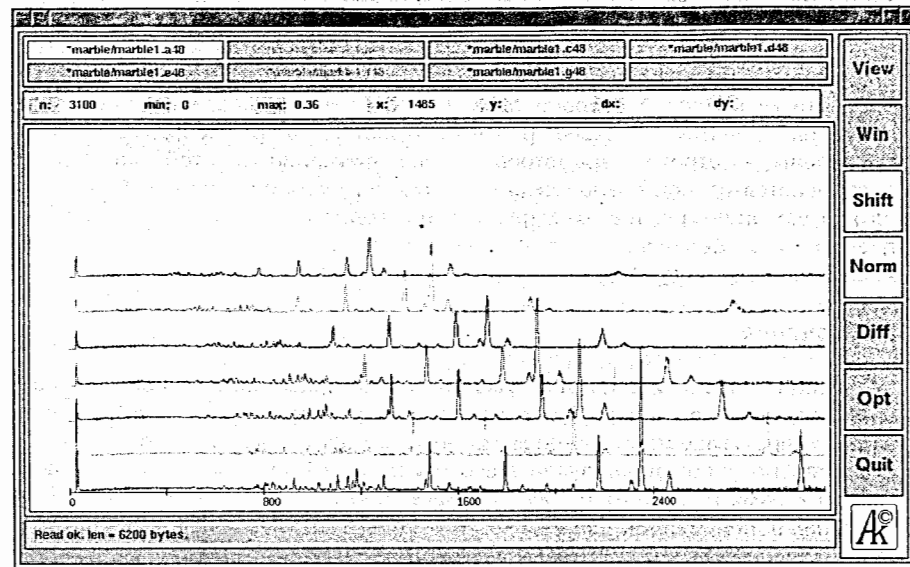


Рис.7. Изображение нормализованных спектров со сдвигом

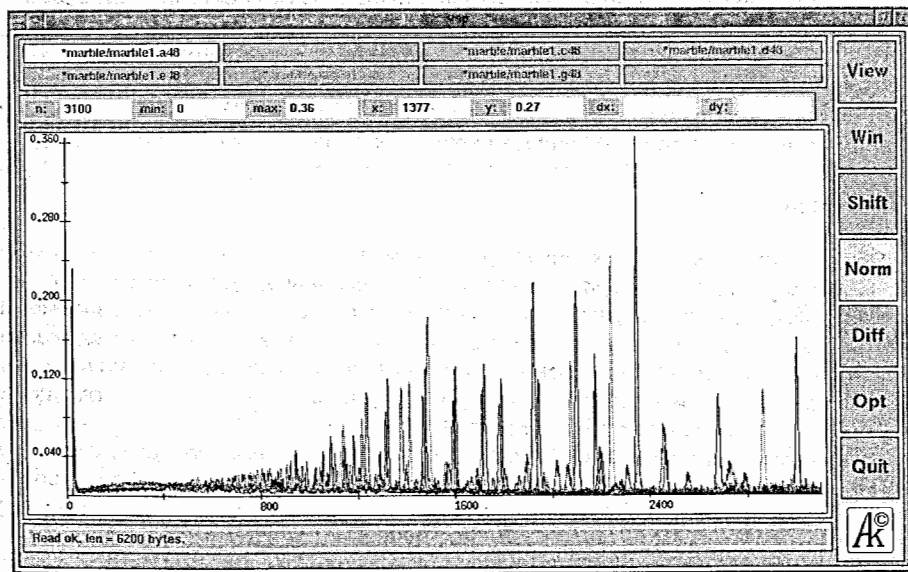


Рис.6. Пример изображения нормализованных спектров

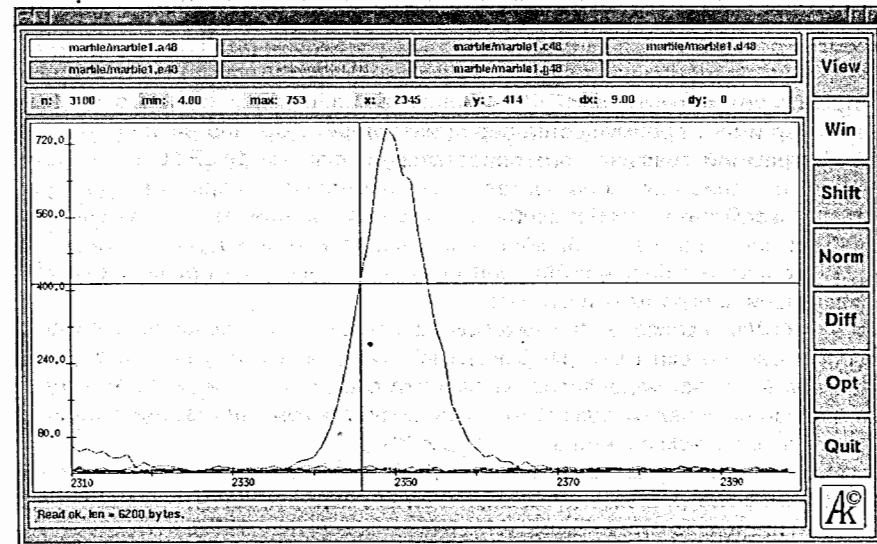


Рис.8. Измерение ширины пика

Соотнесенное положение пиков нагляднее представлено на рис.7, где те же спектры изображены со сдвигом с фактором сдвига 80%.

Заключительный рисунок поясняет как с помощью программы Vsp может производиться измерение, например, ширины пика. Пользователь зафиксировал точку на левой стороне пика, нажав среднюю клавишу мыши. Эта точка на графике отмечена большим крестом, а ее координаты (x,y) приведены в строке параметров. После фиксации в этой же строке показывается относительное смещение (dx,dy) позиции курсора. В данном случае курсор помещен в точку пересечения горизонтальной линии с правым плечом пика. Величина $Dy = 9$ и есть ширина пика на данной высоте. Аналогично можно проводить измерения и вертикальных отрезков.

Заключение

Реализация задачи Vsp на VME-компьютере по сравнению с аналогичными средствами, работающими на рабочих станциях, позволила получить два важных преимущества. Во-первых, наличие быстрого доступа к МИП существенно упрощает визуализацию спектров в процессе их накопления. Доступ к памяти по сети требует больших программистских издержек и, в принципе, более медлен. Во-вторых, контроль накопления может вестись и автономно с использованием локальных графических средств VME-компьютера при отключении от сети, что принципиально невозможно при использовании рабочих станций.

Использование X Window System/15/ позволило создать современный, комфортный интерфейс.

Скорость реакции интерфейса и рисования графиков при работе на CC112 (68030+68882)/13/ вполне удовлетворительна. При переходе на более быстрый процессорный блок E17/14/ удобство работы еще более возрастет. Задача Vsp имеет преимущества перед известной свободно распространяемой программой графического представления данных GnuPlot в скорости реакции на действия пользователя при измерениях параметров пиков, вырезке фрагмента изображения с помощью мыши и т.п. Отработка подобных операций через GnuPlot крайне медленна или даже практически нецелесообразна в силу низкой пропускной способности интерфейса между управляющей программой и GnuPlot.

Программа Vsp написана на языке Си на основе использования X Window System и библиотеки Libsx (D. Giampolo - dbg@sgi.com). Она может быть сравнительно легко перенесена на рабочие станции, но лишится при этом своей главной привлекательности - возможности контроля за непосредственным накоплением спектров.

Программа также может быть легко адаптирована для анализа данных на других спектрометрах. Для этого ее надо дополнить процедурой чтения/записи файлов в принятом на этих инструментах формате и преобразования спектров в массив 16-разрядных данных.

Литература

1. Yu.A.Astakhov, et al.: Development of the FLNP Measurement-and-Computational Complex. Procs. of the ICANS-XIII meeting (Oct. 11-14, 1995, PSI Switzerland), pp.213-227.
2. The VMEbus Specifications, ANSI/IEEE STD1014-1997.
3. P.S.Dayan: The OS-9 Guru.1.The Facts. Galactic Industrial Limited, 1992.
4. Зем Ен Кен и др.: Система накопления, управления и контроля спектрометра HCBP в стандарте VME. Сообщение ОИЯИ, P13-94-73, Дубна, 1994.
5. J.Heinitz, A.S.Kirilov: A software complex for neutron time-of-flight measurements by means of VME based accumulation, control and supervising system. Comm. of the JINR, D13-95-462, Dubna, 1995.
6. K.Feldmann: Texture Investigation by Neutron Time-of-Flight Diffraction. Textures and Microstructures. v.10, n4 (1989), pp.309-323.
7. А.С. Кирилов, Й. Хайниц: Интерпретация процедуры эксперимента в программном комплексе систем накопления, управления и контроля на спектрометрах HCBP и СКАТ (задача Join). Сообщение ОИЯИ, P13-97-161, Дубна, 1997.
8. А.С. Кирилов и др.: Управление экспозицией, записью спектров и текстурным гониометром в программном комплексе систем накопления, управления и контроля спектрометров HCBP и СКАТ (задачи Tofa и Goni). Сообщение ОИЯИ, P13-97-163.
9. А.С.Кирилов: Информирование пользователя о ходе измерения на спектрометрах HCBP и СКАТ по локальной сети (задача Info). Сообщение ОИЯИ, P13-97-162, Дубна, 1997.
10. E.I.Litvinenko: Interactive data analysis for neutron spectrometers data based on Visual Numerics' PV-WAVE software package. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, vol. A 1024, -1997.
11. У.Ньюмен, Р.Спрулл.: Основы интерактивной машинной графики. Мир, Москва, 1976.
12. W.J.Dixon, R.A.Kronmal: The Choice of Origin and Scale for Graphs. Journal of the ACM, Vol.12, N.2, pp.259-261.
13. CompControl International B.V.: Technical Manual CC112-4/16. Version 1.0, 1992.
14. EUROCOM-17-5xx. Dual 68040 CPU Board with Graphics. Hardware Manual. Revision 1A. V-E17.-A995. ELTEC Electronick GmbH.
15. D.A.Young: X Window Systems: programming and Applications with Xt. Prentice Hall, 1989, ISBN 0-13-972167-3.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июля 1997 года.