

P10-2015-39

А. С. Кирилов, С. М. Мурашкевич, Т. Б. Петухова

**АДАПТАЦИЯ Sonix+ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ
ДИФРАКТОМЕТРОМ ДЗ**

Кирилов А. С., Мурашкевич С. М., Петухова Т. Б.
Адаптация Sonix+ для управления дифрактометром ДЗ

P10-2015-39

Работа посвящена адаптации программного комплекса Sonix+ для управления порошковым дифрактометром ДЗ, установленным на одном из пучков реактора ИВВ-2М Нейтронного материаловедческого комплекса Института физики металлов УрО РАН (г. Заречный). Комплекс Sonix+ был разработан для установок реактора ИБР-2, использующих режим накопления time-of-flight. Однако решения, положенные в основу комплекса, позволили сравнительно просто адаптировать его для работы на стационарном реакторе.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2015

Kirilov A. S., Murashkevich S. M., Petukhova T. B.
Adaptation of Sonix+ to Control the D3 Diffractometer

P10-2015-39

The work is devoted to the adaptation of the Sonix+ software tool kit to control the powder diffractometer D3 at one of the beams of the IVV-2M reactor at the Neutron Complex for Materials Research in the Institute of Metal Physics (Zarechny). Sonix+ was designed for instruments at the IBR-2 reactor using the time-of-flight mode of spectra accumulation. However, the underlying solutions simplified the software adaptation for use at stationary reactors.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2015

Порошковый дифрактометр ДЗ установлен на одном из пучков реактора ИВВ-2М Нейтронного материаловедческого комплекса Института физики металлов УрО РАН (г. Заречный). Схема дифрактометра приведена на рис. 1.

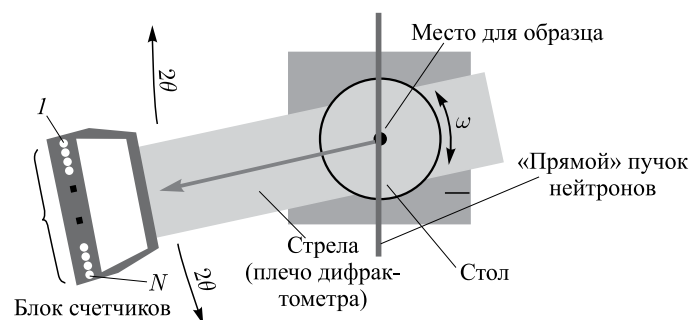


Рис. 1. Схема нейтронного дифрактометра ДЗ

Особенностью дифрактометра ДЗ является наличие двух длин волн нейтронов: падающий пучок с длиной волны $\lambda = 2,43 \text{ \AA}$ и пучок с $\lambda = 1,7 \text{ \AA}$. На рис. 1 показан вертикальной линией пучок с $\lambda = 2,43 \text{ \AA}$. Пучок с $\lambda = 1,7 \text{ \AA}$ составляет с пучком $\lambda = 2,43 \text{ \AA}$ угол приблизительно 90° .

В состав оборудования спектрометра входят блок монодетекторов (20 шт.), монитор, два двигателя для блока детекторов (Theta) и стола образца (Omega).

В связи с модернизацией аппаратной части системы управления дифрактометра возникла необходимость в разработке и нового программного обеспечения. Оно должно осуществлять:

- ручной режим управления двигателями для их установки в «нулевое» положение;
- два режима измерения:
 - «пошаговый» (сканирование с постоянным шагом по одной из осей в заданном диапазоне);
 - по заданной «траектории» (сканирование по произвольной последовательности точек, координаты которых предварительно записаны в файле в формате ASCII);
- задание экспозиции по монитору или по времени;
- запись спектров в формате ASCII с заголовком, содержащим информацию об измерении и комментарий пользователя (см. приложение 1);
- по возможности возобновление измерения с места, прерванного по независящим от экспериментатора причинам (например, после отключения электроэнергии);
- визуализацию экспериментальных данных;
- протоколирование хода эксперимента.

Реализация. За основу создаваемого программного обеспечения был взят программно-инструментальный комплекс Sonix+ [1], разработанный в ЛНФ ОИЯИ и используемый на спектрометрах реактора ИБР-2. Комплекс имеет иерархическую модульную структуру (рис. 2), что, наряду с широким использованием конфигурирования модулей и управлением через скрипт на языке Python [2], позволяет сравнительно легко адаптировать его к составу оборудования конкретного спектрометра и особенностям методики измерений.

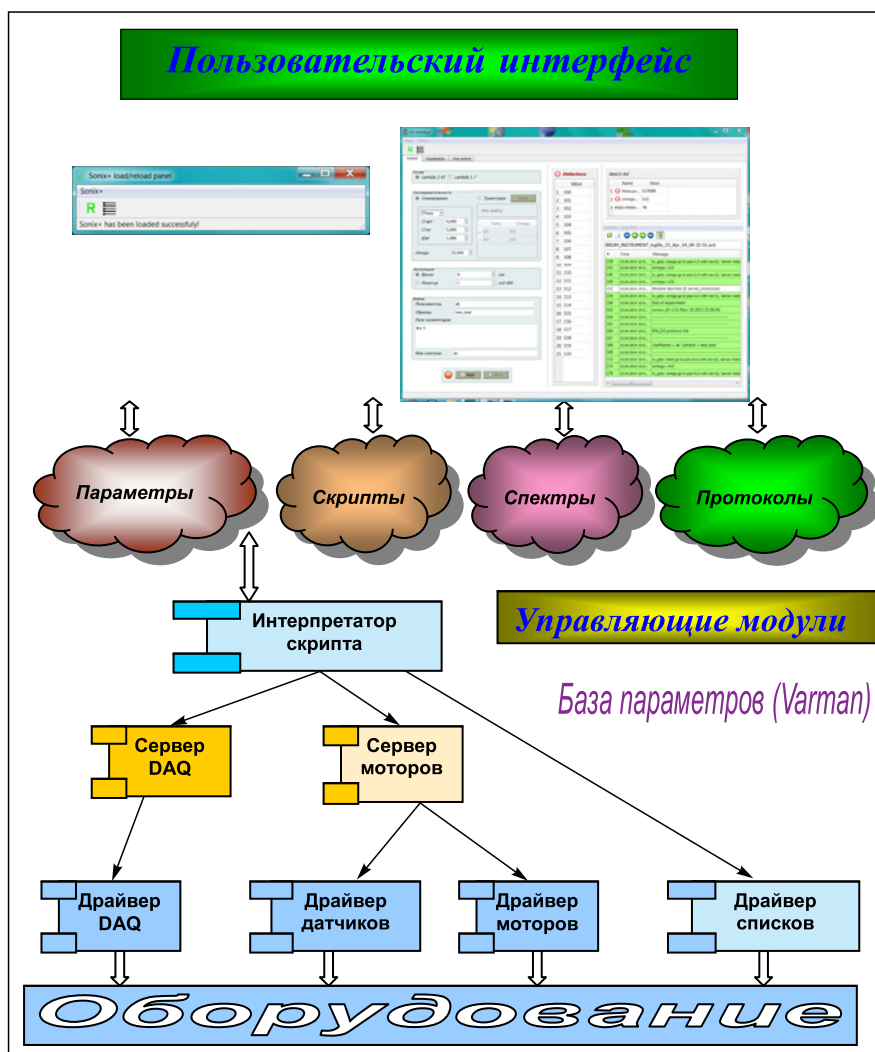


Рис. 2. Структура программного комплекса Sonix+

В частности, для ДЗ были использованы готовые модули интерпретатора скрипта, сервера моторов и драйвера списков. Для контроллера моторов и датчиков, не применяемых на установках реактора ИБР-2, были разработаны соответствующие модули низкого уровня. Кроме того, для обеспечения накопления без ТОФ-режима был написан специальный драйвер для модуля MPD-32. В сервер накопления добавлена функция для отсчета экспозиции по монитору.

Интерфейс пользователя. На большинстве спектрометров реактора ИБР-2 управление измерением ведется с помощью универсального графического интерфейса (GUI) [3], реализующего все необходимые основные функции. При этом для каждого эксперимента, как правило, пользователем предварительно составляется программа измерения (скрипт). Это позволяет ее легко варьировать.

Учитывая то, что процедура измерения на дифрактометре ДЗ имеет фактически две модификации (сканирование с постоянным шагом, либо сканирование по «траектории») и небольшое количество изменяемых параметров, для упрощения работы персонала мы отказались от использования универсального GUI. С использованием набора виджетов [3], из которого собран этот GUI, и дополнением его специфическими для ДЗ компонентами был разработан специализированный GUI.

Это решение позволило воспользоваться отработанной схемой управления экспериментом, избавив при этом пользователя от необходимости составления скрипта, что призвано упростить его работу.

Рассмотрим программы интерфейса более подробно.

Загрузка комплекса. После включения компьютера необходимо загрузить управляющие модули Sonix+, предварительно включив все рабочее оборудование. Если необходимое оборудование не включено, программа автоматически перейдет в режим симуляции «отсутствующих» компонентов.

Для загрузки/перезагрузки/выгрузки комплекса использована готовая программа s+load_panel (рис. 3). В меню программы включены следующие функции:

- *Load/Reload Sonix+* для загрузки(перезагрузки комплекса),
- *Unload* для выгрузки комплекса,
- *Check* для отдельной проверки корректности загрузки,

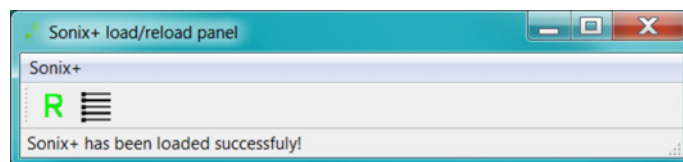


Рис. 3. Программа загрузки Sonix+ на дифрактометре ДЗ

- *Check DEBUG* для вывода списка устройств, работающих в режиме симуляции.

Управление экспериментом. Для управления собственно экспериментом предназначена программа D3_GUI, общий вид которой представлен на рис. 4, 7, 9 и 10.

Интерфейс включает три вкладки:

- составление задания, запуск и контроль эксперимента («Control»);
- просмотр графиков («Visualization»);
- ручное управление моторами («Axis Control») (если необходимо).

На первой вкладке расположены поля (слева направо):

- для составления задания и его запуска;
- для вывода текущих значений детекторов (в настоящий момент монитор подключен как детектор с номером 0);
- для вывода текущих значений параметров по выбору пользователя (Watch list) и просмотра протокола измерения.

Для составления задания пользователь должен заполнить все поля. После нажатия кнопки «Start» измерение запускается, красная лампочка меняет цвет на мерцающий зеленый до завершения измерения. После завершения

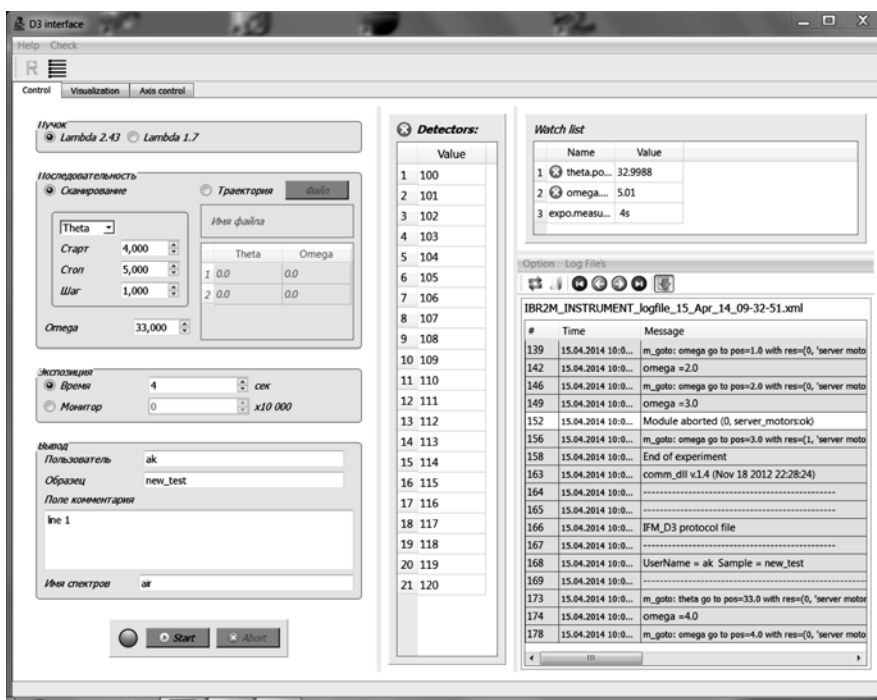


Рис. 4. Общий вид GUI дифрактометра

измерения автоматически по всем детекторам и позициям подсчитывается суммарный спектр.

Измерение может быть принудительно прервано кнопкой «Abort». Позднее по просьбе пользователей была добавлена кнопка «Pause» для временной приостановки измерения.

В режиме «Сканирование» (одномерное сканирование по одной из осей) предварительно проверяется корректность параметров цикла. В режиме «Траектория» (сканирование по парам позиций Omega, Theta) необходимо указать файл с записью этих позиций. Пример такого файла дан в приложении 2.

Результаты измерений записываются в каталог «e:/d3/data». При каждом запуске в нем создается подкаталог с именем образца. Формат файлов указан в приложении 1.

При повторном запуске измерения с теми же параметрами файлы данных не переписываются, а дополняются с неизменным заголовком. Это позволило реализовать возможность «дозапуска» измерения после внеплановой остановки. Конечно, при повторном запуске надо скорректировать параметры цикла сканирования, чтобы избежать дублирования.

Просмотр списка параметров. Во время эксперимента все параметры

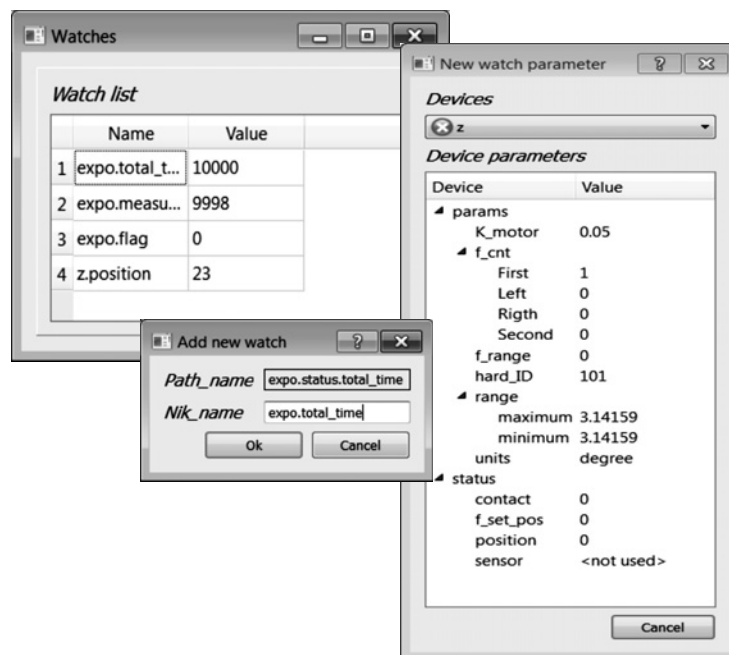



Рис. 5. Просмотр списка параметров

измерения хранятся в особом хранилище (Varman), к которому возможен быстрый доступ. Окно Watch list (рис. 5) позволяет составить список интересных параметров и вести слежение за ними в реальном времени. Изменение его содержимого производится с помощью контекстного меню (правая кнопка мыши). Доступные команды — Add new, Remove, Up, Down.

При добавлении нового параметра (Add new) появляется окно New watch parameter. В списке Devices можно выбрать нужное устройство, а из древовидного списка Device parameters двойным кликом левой кнопки мыши — конкретный параметр. Далее (окно Add new watch) можно подтвердить выбор, заодно задав имя параметра вместо предлагаемой подсказки.

Значок  для устройств или параметров напоминает, что данное устройство работает в режиме «симуляции».

Список параметров для оперативного просмотра выбирается пользователем и может быть изменен в любое время.

Протокол измерения. История всех измерений сохраняется в лог-файлах. Новый файл автоматически создается при загрузке/перезагрузке Sonix+.



#	Time	Message
139	15.04.2014 10:0...	m_goto: omega go to pos=1.0 with res=(0, 'server moto
142	15.04.2014 10:0...	omega =2.0
146	15.04.2014 10:0...	m_goto: omega go to pos=2.0 with res=(0, 'server moto
149	15.04.2014 10:0...	omega =3.0
152	15.04.2014 10:0...	Module aborted (0, server_motors:ok)
156	15.04.2014 10:0...	m_goto: omega go to pos=3.0 with res=(1, 'server moto
158	15.04.2014 10:0...	End of experiment
163	15.04.2014 10:0...	comm_dll v.1.4 (Nov 18 2012 22:28:24)
164	15.04.2014 10:0...	-----
165	15.04.2014 10:0...	-----
166	15.04.2014 10:0...	IFM_D3 protocol file
167	15.04.2014 10:0...	-----
168	15.04.2014 10:0...	UserName = ak Sample = new_test
169	15.04.2014 10:0...	-----
173	15.04.2014 10:0...	m_goto: theta go to pos=33.0 with res=(0, 'server motor
174	15.04.2014 10:0...	omega =4.0
178	15.04.2014 10:0...	m_goto: omega go to pos=4.0 with res=(0, 'server moto

Рис. 6. Просмотр протокола измерений

Окно в правом нижнем углу предназначено для вывода текущего протокола (рис. 6). Этим окном можно также воспользоваться для выбора и просмотра протокола любого ранее выполненного измерения. Предусмотрены поиск по заданному шаблону, фильтрация записей по типу, уровню.

Цвет сообщений соответствует их типу:

- зеленый или белый — все в порядке,
- красный — ошибка,
- желтый — предупреждение.

Визуализация спектров. Для визуализации спектров виджет был адаптирован к формату дифрактометра. На второй вкладке D3_GUI можно посмотреть накопленные спектры (рис. 7), а также суммарный спектр (рис. 9).

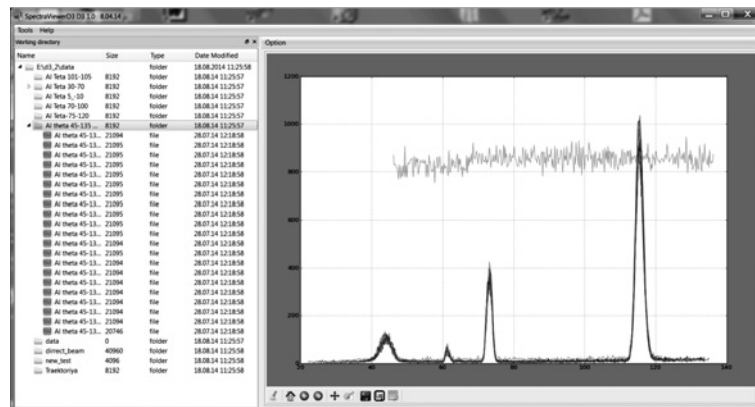


Рис. 7. Визуализация спектров. Верхний график соответствует мониторингу детектору

Title	Visible	Color	Style line	Line width	Marker type	Marker width
det 0	Show	blueviolet	-	1	None	3
det 1	Show	brown	-	1	None	3
det 2	Show	burlywood	-	1	None	3
det 3	Show	cadetblue	-	1	None	3
det 4	Show	chartreuse	-	1	None	3
det 5	Show	chocolate	-	1	None	3
det 6	Show	coral	-	1	None	3
det 7	Show	cornflowerblue	-	1	None	3
det 8	Show	cornsilk	-	1	None	3
det 9	Show	crimson	-	1	None	3
det 10	Show	cyan	-	1	None	3
det 11	Show	darkblue	-	1	None	3
det 12	Show	darkcyan	-	1	None	3
det 13	Show	darkgoldenrod	-	1	None	3
det 14	Show	darkgray	-	1	None	3
det 15	Show	darkgreen	-	1	None	3
det 16	Show	darkgrey	-	1	None	3
det 17	Show	darkhaki	-	1	None	3
det 18	Show	darkmagenta	-	1	None	3
det 19	Show	darkolivegreen	-	1	None	3
det 20	Show	darkorange	-	1	None	3

Рис. 8. Таблица параметров кривых

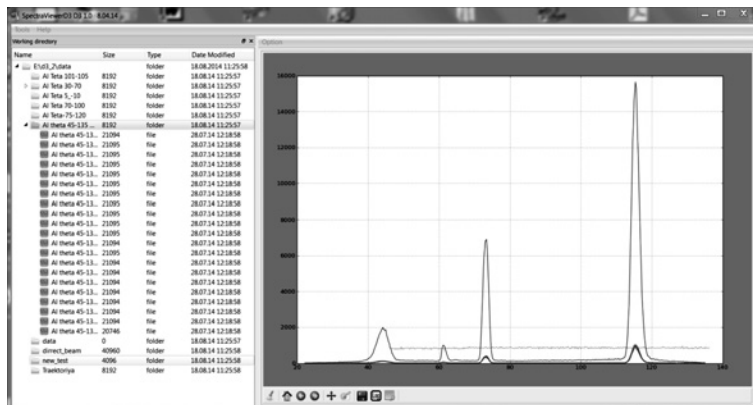


Рис. 9. Визуализация спектров. Вывод суммарного спектра

Слева расположен список для выбора каталога или отдельного спектра. Для выбора используется контекстное меню (правая кнопка). При двойном нажатии левой кнопки мыши выбранный каталог раскрывается. Панель под графиком позволяет, в частности, стереть поле графиков, выбрать и увеличить фрагмент картинки (проводкой правой кнопкой мыши) и т. д.

В меню «Options» есть команда «Show/Hide Control lines», которая открывает дополнительное окно для включения/выключения отдельных графиков, замены цвета линий, добавления маркеров и т. п. (рис. 8).

С помощью команды «Show combined spectrum» из контекстного меню можно нарисовать суммарный спектр измерения.

Ручное управление моторами. На третьей вкладке D3_GUI размещено окно ручного управления моторами. Поскольку у дифрактометра всего два

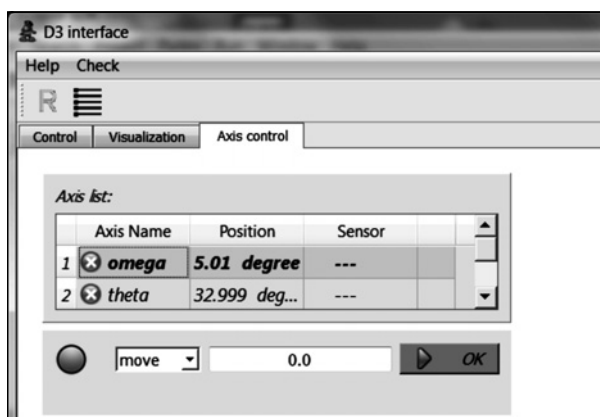


Рис. 10. Ручное управление моторами

двигателя, соответствующий виджет из набора [3] был модифицирован: combo box со списком доступных моторов был для наглядности заменен таблицей.

Выбрав мотор из списка, команду и, если необходимо, задав значение параметра, можно запустить ее, нажав кнопку «ОК». Во время перемещения красная лампочка меняет цвет на мигающий зеленый, а кнопка «ОК» меняет название на «Abort». Текущая позиция отображается автоматически. Во время сканирования кнопка «ОК» блокируется.

Использование готовых модулей Sonix+, отработанных решений по структуре программного комплекса и готовых компонентов GUI позволило значительно сократить срок разработки и отладки программ. В июле 2014 г. программное обеспечение вместе с новой аппаратной частью было установлено на дифрактометре, проверено и сдано в опытную эксплуатацию. В процессе этой эксплуатации выявились некоторые проблемы, вызванные сбоями в работе уникального оборудования. Поиск решений для нейтрализации последствия сбоев усложнялся отсутствием прямого доступа к управляющему компьютеру, что затянуло практическую отладку. В конечном счете все проблемы были решены, и в настоящее время дифрактометр работает в штатном режиме.

Авторы выражают признательность всем коллегам, участвовавшим в наладке новой системы управления, а также персоналу, обслуживающему дифрактометр, за помощь в работе и полезные обсуждения.

Приложение 1. Формат файлов данных. Сканирование по одной из осей (пример для первого детектора)

```
#
# Beam: 2.43
# Date: 15Apr14_10:01:22:
# User: ak
# Sample: new_test
# File: e:/d3/data/new_test/air.1
#
# Commentary (any number of lines)
#
# Theta = 33.0
#
# Omega   Count   Monitor   Time
#-----
1.000    101      0         3
2.000    101      0         3
3.000    101      0         3
4.000    101      0         3
5.000    101      0         3
```

Сканирование по набору позиций (пример для первого детектора)

```
#
# Beam: 2.43
# Date: 04Apr14_15:56:46:
# User: ak
# Sample: air_t
# File: e:/d3/data/air_t/hhhhhh.1
#
# Commentary line 1
# Commentary line 2
# Commentary line 3
# Commentary line 4
# Commentary line 5
#
# Omega + Theta
#
# Theta   Omega   Count   Monitor   Time
#-----
 46.540  19.960    101      0         4
 47.030  19.930    101      0         4
    ...
 71.220  23.500    101      0         4
 71.810  23.670    101      0         4
 72.400  23.840    101      0         4
 72.990  24.010    101      0         4
```

Приложение 2. Формат файлов с записью позиций (Тета, Омега)

```
1 46.54 19.96
2 47.03 19.93
3 47.52 19.9
  ...
42 68.31 22.72
43 68.89 22.87
44 69.47 23.02
45 70.05 23.18
46 70.63 23.34
47 71.22 23.5
48 71.81 23.67
49 72.4 23.84
50 72.99 24.01
```

Список литературы

1. [Sonix+] http://sonix.jinr.ru/wiki/doku.php?id=ru:ru_new_gui.
2. [Python] <http://www.python.org>.
3. [набор GUI] http://sonix.jinr.ru/wiki/doku.php?id=ru:ru_new_gui.

Получено 22 мая 2015 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 02.07.2015.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 0,74. Тираж 225 экз. Заказ № 58588.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/