

P10-2012-134

И. А. Морковников, О. И. Иваньков, А. С. Кирилов

**ПРОГРАММА ВЕДЕНИЯ РАБОЧЕГО ЖУРНАЛА
НА СПЕКТРОМЕТРЕ ЮМО**

Морковников И. А., Иваньков О. И., Кирилов А. С.

P10-2012-134

Программа ведения рабочего журнала на спектрометре ЮМО

Работа посвящена автоматизации процесса регистрации измерений, проводимых на спектрометрах реактора ИБР-2. Сохраняемая информация предназначена для ответственных за установки, чтобы упростить учет проведенных измерений, обеспечить поиск информации и помочь в составлении отчетов. Рассматривается общий подход к решению задачи, который на первом этапе был реализован на спектрометре ЮМО с использованием Python, PyQt, MySQL.

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

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2012

Morkovnikov I. A., Ivankov O. I., Kirilov A. S.

P10-2012-134

The Program for Measurement Registration at the YuMO Instrument

The work is dedicated to the automation of the registration process of measurements performed on the IBR-2 instruments. Stored information is intended for those responsible for the instruments, in order to simplify measurements accounting, provide information search and assist in the preparation of reports. The general approach to the problem is considered, which in the first phase was implemented on YuMO spectrometer using Python, PyQt, MySQL.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2012

ВВЕДЕНИЕ

О необходимости автоматизации регистрации измерений, проводимых на спектрометрах реактора ИБР-2 [1], некоторые ответственные за установки высказывались давно. В самом деле, в то время как сам процесс управления спектрометрами полностью автоматизирован [2], учет измерений ведется с помощью архаичных бумажных журналов. При этом целостность и полнота регистрируемой информации во многом определяется аккуратностью и добросовестностью ведущих эксперименты, чего, как показывает практика, не вполне достаточно. Особенно актуальна эта проблема для спектрометров с большим потоком измерений (пользователей).

Для определения реального интереса со стороны ответственных за установки данная проблема обсуждалась на тематическом семинаре НЭОКС ЛНФ по методике и технике нейтронного эксперимента в марте текущего года. Дискуссия показала значительную поляризованность во мнениях. Представители части установок (ЮМО, РЕМУР) [3] выразили сильную заинтересованность автоматизации регистрации и высказали важные предложения. Другие, напротив, высказались в пользу продолжения практики с бумажными журналами. С учетом этой ситуации было принято решение о реализации данной программы сначала на одном спектрометре — ЮМО, в предположении максимально возможной универсальности разрабатываемого подхода, чтобы в будущем распространить его и на другие спектрометры.

НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ

Основным назначением программы является автоматизация регистрации данных о проведенных экспериментах на каждом спектрометре. Сохраняемая информация должна быть разумно полной, чтобы в любое время можно было выяснить, какие эксперименты проведены, кто их проводил, с какими образцами и в каких файлах сохранены результаты измерений.

Программа должна обеспечивать поиск информации по основным критериям и помогать в составлении отчетов по запросам ответственных за установку.

ВЫБОР РЕГИСТРИРУЕМЫХ ДАННЫХ

Анализ поступивших предложений показал, что для разных спектрометров желателен различный набор данных для регистрации. Вместе с тем в этих данных можно выделить общую часть, а именно:

- имя пользователя (с возможным комментарием),
- время начала эксперимента,
- время окончания эксперимента,
- строку комментария, в которой пользователь в произвольной форме может описать суть проводимых измерений,
- имя файла с программой эксперимента (далее — пользовательского скрипта),
- имя файла с протоколом эксперимента (лог-файла),
- название образца (с возможным комментарием),
- имена файлов с результатами измерений (спектрами).

Для полноты информации к этим данным следует добавить имя спектрометра.

Кроме того, для каждого спектрометра может быть определен свой дополнительный список данных. Например, для спектрометра ЮМО это

- имя папки со спектрами,
- позиции детекторов,
- толщина образца,
- температура проведения эксперимента,
- позиция образца,
- номер используемого коллиматора.

Важно, что подход, как с основными, так и с дополнительными данными, должен быть единым для всех спектрометров, чтобы обеспечить универсальность разрабатываемых программных средств.

ОБЩИЕ ИДЕИ

Одним из первых был вопрос выбора способа сохранения информации. В Sonix+ вся история измерений сохраняется в файлах протоколов, которые ведутся автоматически. Эти файлы весьма объемны, поскольку в них записывается и подробная «техническая» информация о работе измерительной системы. Несмотря на это, эти файлы неудобны для наших целей, поскольку для извлечения регистрационных данных потребовалось бы введение новых структурных принципов организации этих файлов. К тому же сохранность файлов на длительный период не гарантируется.

Поэтому было решено организовать специализированную базу регистрационных данных (далее БРД).

Одним из предложений по интеграции в Sonix+ было перестроить весь пользовательский интерфейс так, чтобы каждое измерение начиналось с занесения необходимых данных в программу регистрации. Реализация этого предложения потребовала бы полной переработки пользовательского интерфейса и была отложена на будущее. При этом учитывалось, что данная разработка выполнялась в качестве дипломной работы и была ограничена по времени.

Особенностью Sonix+ является наличие «процедуры измерения», записанной в виде скрипта на языке Python [4]. Для каждого спектрометра разработана библиотека типовых операций, в которой, в частности, задается большинство из необходимых регистрационных данных. Добавление недостающих данных может быть выполнено незначительной коррекцией библиотеки. При этом блок регистрационных данных может быть сохранен добавлением вызова специальной процедуры в момент сохранения спектров, что также легко реализуется.

На основе полученных данных создается SQL-запрос, который передается серверу БРД для записи необходимой информации.

Общая схема взаимодействия компонентов системы приведена на рис. 1.

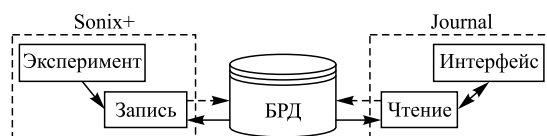


Рис. 1. Схема взаимодействия различных компонентов измерительной системы для автоматической регистрации

Таким образом, наиболее простой способ внедрения автоматической регистрации на спектрометрах ИБР-2 потребует

- создания БРД,
- разработки процедуры записи блока параметров,
- разработки клиентской программы для просмотра сохраненных данных, организации поиска и формирования отчетов.

РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОЕКТА ДЛЯ СПЕКТРОМЕТРА ЮМО

Запись данных. При внедрении программы на спектрометре ЮМО следовало учитывать следующие обстоятельства. Во-первых, на спектрометре используется кассетный держатель образцов. Каждый образец предназначен для проведения независимого измерения. Поэтому пользовательский скрипт может включать целую серию разных экспериментов. Причем, возможны повторные облучения образцов в других условиях, например при другой темпе-

ратуре. Порядок облучения образцов выбирается по усмотрению экспериментатора и может быть произвольным. Таким образом, скрипт, описывающий всю серию экспериментов, может быть весьма объемным и сложным. Впрочем, на этом спектрометре пользовательский скрипт составляется вручную, поэтому очень желательно минимизировать изменения, привносимые использованием регистрации.

Для этого вначале скрипта размещается описание всех используемых образцов, которые в дальнейшем передаются в БРД по мере выполнения экспериментальной программы. Для описания в библиотеку операций спектрометра добавлена функция `Sample`, в которой задаются

- номер позиции (образца в кассете),
- имя образца,
- толщина (ранее этот параметр отсутствовал),
- имя ответственного за эксперимент (ранее этот параметр отсутствовал),
- имя пользователя (для которого проводится эксперимент).

Ниже приведен пример блока описания:

```
Sample(1, "TTAB/NaBr 50mM", 2, "Ivankov", "Islamov")
```

```
Sample(4, "air", 2, "Ivankov", "Kirilov")
```

```
Sample(3, "poosto", 2, "Ivankov", "user")
```

```
Sample(8, "Emptyness", 2, "Ivankov", "kto-to")
```

В остальном содержание пользовательского скрипта не изменяется.

Собственно запись данных включена в процедуру элементарного измерения после его окончания. Для этого на языке Python был составлен модуль `add_YuMO`, включающий все необходимые операции. Каждый отдельный эксперимент на ЮМО может выполняться в виде серии измерений с чередованием облучения с ванадиевым стандартом и без него. До начала эксперимента выполняется подключение к БРД, соответствующее этому эксперименту:

```
zap = add_YuMO.Sql_For_Add() # Подключение к БРД
```

После каждого такого облучения вновь измеренные спектры дозаписываются в общий файл. При этом производится коррекция значений в БРД:

```
idExp = zap.Use(val) # Запись блока в БРД
```

где `val` — блок соответствующих данных.

Таким образом обеспечивается достоверность содержания БРД.

В модуле `add_YuMO` специфическими являются только контактные данные для подключения к серверу БРД и название спектрометра, на котором проводятся эксперименты. В остальном его содержание универсально и может быть легко адаптировано для работы на других спектрометрах.

Создание базы данных. Наиболее простым способом создания базы данных было написание простого скрипта, который считывает файлы с SQL-запросами для создания базы данных и передает их MySQL.

Файлы с SQL-запросами для создания таблиц размещены в папке `tables`. Названия файлов соответствуют названиям создаваемых таблиц.

При создании БРД в нее из файла conf.txt записывают права пользователей, список дополнительных данных и названия спектрометра.

При использовании скрипта (рис. 2) требуется указать host, на котором будет создаваться БРД, login и пароль пользователя. При этом пользователь должен обладать достаточными правами для выполнения SQL-запросов.

После указания всех необходимых данных скрипт подключится к MySQL и выполнит необходимые запросы.

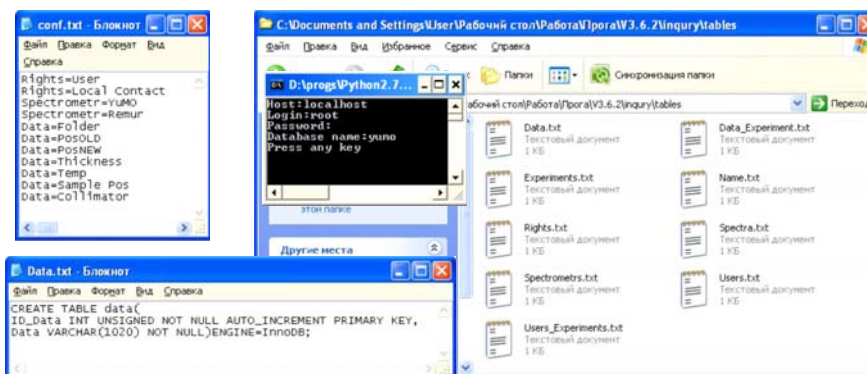


Рис. 2. Создание базы данных

Программа Journal для работы с БРД. Интерфейс пользователя (рис. 3) состоит из главного окна, в котором компонуются окна с фильтрами и результирующее окно. Для создания фильтров используются два типа окон —

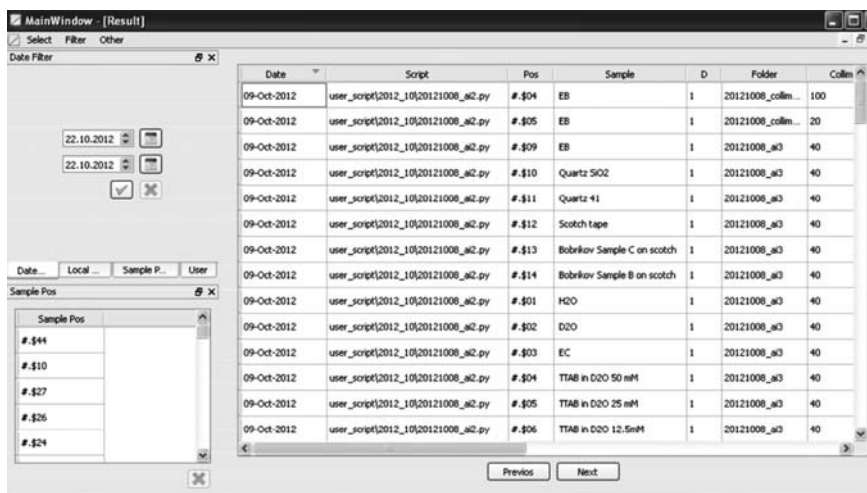


Рис. 3. Примерный вид программы Journal

с текстовым вводом и выбором одного из нескольких значений. Результирующее окно осуществляет вывод всех данных, необходимых пользователю с учетом фильтров. Данные выводятся страницами, до сотни строк на каждой странице.

Интерфейс пользователя можно использовать для удаленного подключения к базе данных. Для подключения требуется указать ip-адрес или url компьютера с базой данных, название базы данных, к которой выполняется подключение, а также login и пароль пользователя, через которого осуществляется подключение.

Детали реализации. Для хранения данных была выбрана клиент-серверная СУБД MySQL [5], с использованием таблиц типа InnoDB [6] (из-за поддержки внешних ключей), для которых размер базы данных может достигать 64 Гб. При связи скрипта с базой данных через библиотеки MySQL-Python была реализована возможность настройки удаленного подключения к базе данных. В первоначальном варианте база данных располагалась на управляющем компьютере спектрометра. В дальнейшем возможен перенос баз данных всех спектрометров на один из серверов ЛНФ.

В качестве средства реализации был выбран язык Python 2.6 (так как эта версия используется в Sonix+) с дополнительными модулями MySQL-Python-1.2.3 [7] и xlwt-0.7.2. Для реализации графического интерфейса использована библиотека PyQT v 4.8.5 [8].

При разработке программы просмотра базы данных использован проект Py2exe [9], который позволяет создавать проекты с исполняемыми файлами для Windows. Основным преимуществом данного подхода является возможность использования программы на компьютере без установки интерпретатора языка Python 2.6 и библиотек, необходимых для него.

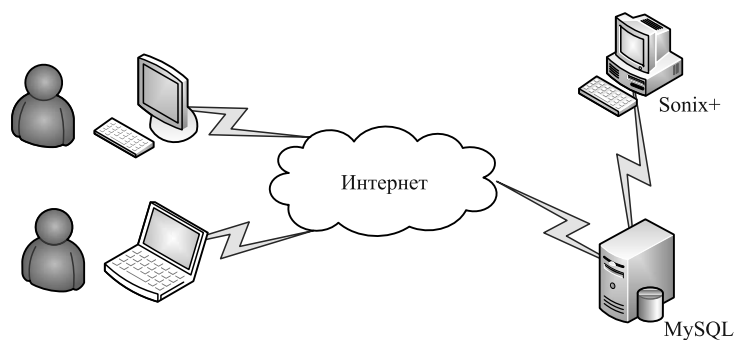


Рис. 4. Обеспечение удаленного доступа пользователей к РБД с помощью отдельного MySQL-сервера

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен общий подход к организации автоматической регистрации измерений на спектрометрах ИБР-2 на основе СУБД MySQL. Подход реализован и внедрен на спектрометре ЮМО. Для этого

- составлен скрипт для создания базы данных,
- разработан модуль add_YuMO на языке Python для записи в базу данных,
- написана клиентская программа Journal для просмотра содержимого базы данных поиска необходимой информации и составления отчетов в виде файлов в формате Excel.

Авторы признательны всем коллегам из отделов НЭОНИКС и НЭОКС ЛНФ за участие и помощь в работе. Особенно полезными были обсуждения проблемы с А. В. Петренко, который являлся одним из инициаторов данной разработки.

ЛИТЕРАТУРА

1. [ИБР-2] <http://ibr-2.jinr.ru/>
2. [Sonix+] <http://sonix.jinr.ru/>
3. [ЮМО, РЕМУР] <http://flnp.jinr.ru/558/>
4. [Python] <http://www.python.org/>
5. [MySQL] <http://www.mysql.com/>
6. [InnoDB] <http://www.innodb.com/>
7. [MySQL-Python] <http://mysql-python.sourceforge.net/>
8. [PyQt4] <http://www.riverbankcomputing.com>
9. [Py2exe] <http://www.py2exe.org/>

Получено 13 декабря 2012 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 25.01.2013.

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

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,61. Тираж 225 экз. Заказ № 57899.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/