

小角中子散射SANS前端参数定义

中国散裂中子源中子科学部谱仪数据分析系统

Data Analysis Group, Neutron Science Division of CSNS

|  |  |
| --- | --- |
| **版本** | V4.0 |
| **状态** | 内部 |
| **创建日期** | 2020-04-17 |
| **修改日期** |  |
| **编号** | CSNS\_DAG\_2020\_01 |
| **文件名** | SANS\_Portal\_Design\_V04.docx |
| **作者** | 王致远 |
| **审阅** | 张俊荣，杜蓉，唐明 |

**版本历史**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **版本** | **修改者** | **日期** | **联系方式** | **备注** |
| 1.0 | 王致远 | 2020-04-09 | wangzhiyuan@ihep.ac.cn | 起草 |
| 2.0 | 张俊荣 | 2020-04-09 | jrzhang@ihep.ac.cn | 修改 |
| 3.0 | 张俊荣 | 2020-04-10 | jrzhang@ihep.ac.cn | 修改 |
| 4.0 | 王致远 | 2020-04-17 | wangzhiyuan@ihep.ac.cn | 修改 |

# 摘 要

本文档给出了基于NEIW框架的SANS数据分析前端、中间件、后端的动作（Action），事件（Event），参数（Dict）的定义。前后端的交互全部以该文档定义为准。

**关键词**：SANS，NEIW

目录

1 摘 要 3

# 任务参数列表：

实现三个基础功能：

透过率计算

TransCal

IQ计算

IQCal

IQ2D计算

IQ2DCal

1. SANS-Web传输字典表

‘form’

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 变量名 | 类型 | 示例 | 描述 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
| is\_emptycell | Bool | True | 是否有空容器 |
| is\_solvent | Bool | True | 是否有纯溶剂（若is\_emptycell为False，则该值一定是False） |
| mask\_file | String | “2019.dat” | Mask文件名 |
| calibration\_file | String | “2019.dat” | Cal文件名 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
| trans\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 空束透过率号，可用逗号分隔多个，对应取平均值，下同 |
| trans\_sample\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 样品透过率号 |
| trans\_emptycell\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 空容器透过率号（可空，取决于is\_emptycell） |
| trans\_is\_emptycell\_independent\_empty | Bool | True | 空容器透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| trans\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 计算空容器透过率的空束透过号（可空，取决trans\_is\_emptycell\_independent\_empty） |
| trans\_solvent\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 溶剂透过率号（可空，取决于is\_solvent） |
| trans\_is\_solvent\_independent\_empty | Bool | True | 溶剂透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| trans\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决于trans\_is\_solvent\_independent\_empty） |
| trans\_fitting\_method | String | “Raw” | 透过率的拟合方法，包含原始数据/平滑化/线性拟合(Raw/Smooth/Linear) |
| trans\_smooth\_npoints | Int | 3 | 透过率平滑化拟合时对应的点数，该值越大，平滑时考虑的临近点越多。必须大于等于3。可空，如果trans\_fitting\_method不是Smooth。 |
| trans\_wavelength\_min | Float | 1.5 | 透过率测量时对应的最小波长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
| trans\_wavelength\_step | Float | 0.1 | 透过率测量时对应的波长步长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节，但必须为calibration文件中wavelength\_step的倍数。单位为埃 |
| trans\_wavelength\_max | Float | 8.0 | 透过率测量时对应的最大波长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
| iq\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq计算的空束透过率号，可用逗号分隔多个，下同 |
| iq\_sample\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq计算的样品透过率号 |
| iq\_emptycell\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq计算的空容器透过率号（可空，取决于is\_emptycell） |
| iq\_is\_emptycell\_independent\_empty | Bool | True | iq计算的空容器透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| iq\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq计算的空容器透过率的空束透过号（可空，取决于iq\_is\_emptycell\_independent\_empty） |
| iq\_solvent\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq计算的溶剂透过率号（可空，取决于is\_solvent） |
| iq\_is\_solvent\_independent\_empty | Bool | True | iq计算的溶剂透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| iq\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq的计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决iq\_is\_solvent\_independent\_empty） |
| iq\_trans\_fitting\_method | String | “Raw” | iq计算的透过率的拟合方法，包含原始数据/平滑化/线性拟合(Raw/Smooth/Linear) |
| iq\_trans\_smooth\_npoints | Int | 3 | iq计算的透过率平滑化拟合时对应的点数，该值越大，平滑时考虑的临近点越多。必须大于等于3。可空，如果iq\_trans\_fitting\_method不是smooth |
| iq\_wavelength\_min | Float | 1.2 | iq计算测量对应的最小波长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
| iq\_wavelength\_step | Float | 0.1 | iq计算测量对应的波长步长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节，但必须为calibration文件中wavelength\_step的倍数。单位为埃 |
| iq\_wavelength\_max | Float | 8 | iq计算测量对应的最大波长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
| iq\_empty\_direct\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 空束散射号 |
| iq\_sample\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 样品散射号 |
| iq\_emptycell\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 空容器散射号（可空，取决于is\_emptycell） |
| iq\_solvent\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 溶剂散射号（可空，取决于is\_solvent） |
| iq\_thickness | Float | 1.0 | 样品厚度。单位mm |
| iq\_scalingfactor | Float | 1.0 | 调节绝对散射强度的倍数 |
| iq\_solvent\_volumefraction | Float | 0.99 | 溶剂的体积分数，<1(可空，取决于is\_solvent) |
| iq\_q\_min | Float | 0.005 | 最小q值，可以通过读取Mask\_File及Calibration\_File中的探测器尺寸等参数及透过率参数iq\_wavelength\_max计算并获得该值，也可以手动设置 |
| iq\_q\_step | Float | -0.08 | q步长。当该值为正时，不同q点之间的间隔为线性的；当该值为负时，不同q点之间的比例为(1- iq\_q\_step),比如iq\_q\_step=-0.08时，则每个相邻q点之间的比值为1.08。该值默认为-0.08,可以根据需要手动调节 |
| iq\_q\_max | Float | 0.6 | 最大q值，可以通过读取mask\_file及calibration\_file中的探测器尺寸等参数及透过率参数trans\_wavelength\_min计算并获得该值，也可以手动设置 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
| iq2d\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的空束透过率号，可用逗号分隔多个，下同 |
| iq2d\_sample\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的样品透过率号 |
| iq2d\_emptycell\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的空容器透过率号（可空，取决于is\_emptycell） |
| iq2d\_is\_emptycell\_independent\_empty | Bool | True | iq2d计算的空容器透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| iq2d\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的计算空容器透过率的空束透过号（可空，取决 于iq2d\_is\_emptycell\_independent\_empty） |
| iq2d\_solvent\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的溶剂透过率号（可空，取决于is\_solvent） |
| iq2d\_is\_solvent\_independent\_empty | Bool | True | iq2d计算的溶剂透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| iq2d\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | iq2d计算的计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决于iq2d\_is\_solvent\_independent\_empty） |
| iq2d\_trans\_fitting\_method | String | “Raw” | iq2d计算的透过率的拟合方法，包含原始数据/平滑化/线性拟合(Raw/Smooth/Linear) |
| iq2d\_trans\_smooth\_npoints | Int | 3 | iq2d计算的透过率平滑化拟合时对应的点数，该值越大，平滑时考虑的临近点越多。必须大于等于3。可空，如果iq2d\_trans\_fitting\_method不是Smooth |
| iq2d\_wavelength\_min | Float | 1.5 | iq2d计算测量对应的最小波长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
| iq2d\_wavelength\_step | Float | 0.01 | iq2d计算测量对应的波长步长，可以通过读取calibration文件获得该值，也可手动调节，但必须为calibration文件中wavelength\_step的倍数。单位为埃。 |
| iq2d\_wavelength\_max | Float | 8.5 | iq2d计算测量对应的最大波长，可以通过读取Calibration文件获得该值，也可手动调节。单位为埃 |
| iq2d\_empty\_direct\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 用于iq2d的空束散射号 |
| iq2d\_sample\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 用于iq2d的样品散射号 |
| iq2d\_emptycell\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 用于iq2d的空容器散射号（可空，取决于is\_emptycell） |
| iq2d\_solvent\_scatt\_runno | List | [‘003’, ‘021’] | 用于二维IQ的溶剂散射号（可空，取决于is\_solvent） |
| iq2d\_thickness | Float | 1.0 | 样品厚度。单位mm |
| iq2d\_scalingfactor | Float | 1.0 | 调节绝对散射强度的倍数 |
| iq2d\_solvent\_volumefraction | Float | 0.99 | 溶剂的体积分数，<1(可空，取决于is\_solvent) |
| iq2d\_q\_max | Float | 0.4 | iq2d计算时在每一个方向的最大Q值，可以通过读取mask\_file及calibration\_file中的探测器尺寸等参数及波长参数iq2d\_wavelength\_min计算并获得该值，也可以手动设置 |
| iq2d\_q\_step | Float | 0.005 | iq2d的q步长，该值只能为正数，可以通过读取mask\_file及calibration\_file中的探测器尺寸等参数及透过率参数iq2d\_wavelength\_min，iq2d\_wavelength\_max计算该值的建议值，也可手动调节 |
|  |  |  |  |

1. 相关按键动作及返回结果

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 变量名 ‘action’ | 传输相关变量 | 输出数据文件 ‘event’ | 功能 |
| plot\_trans\_empty\_trans | trans\_empty\_trans\_runno | trans\_empty\_trans\_m2  trans\_empty\_trans\_m3 | 绘制trans\_empty\_trans对应的M2及M3数据 |
| plot\_trans\_sample\_trans | trans\_sample\_trans\_runno | trans\_sample\_trans\_m2  trans\_sample\_trans\_m3 | 绘制trans\_sample\_trans对应的M2及M3数据 |
| plot\_trans\_emptycell\_trans | trans\_emptycell\_trans\_runno | trans\_emptycell\_trans\_m2  trans\_emptycell\_trans\_m3 | 绘制trans\_emptycell\_trans对应的M2及M3数据 |
| plot\_trans\_solvent\_trans | trans\_solvent\_trans\_runno | trans\_solvent\_trans\_m2  trans\_solvent\_trans\_m3 | 绘制trans\_solvent\_trans对应的M2及M3数据 |
| cal\_trans | is\_emptycell  is\_solvent  trans\_empty\_trans\_runno  trans\_sample\_trans\_runno  trans\_emptycell\_trans\_runno  trans\_is\_emptycell\_independent\_empty  trans\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno  trans\_solvent\_trans\_runno  trans\_is\_solvent\_independent\_empty  trans\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno  trans\_fitting\_method  trans\_smooth\_npoints  trans\_wavelength\_min  trans\_wavelength\_step  trans\_wavelength\_max | trans\_transmission\_cal\_sample\_raw  trans\_transmission\_cal\_sample\_fitted  (取决于is\_emptycell)  trans\_transmission\_cal\_emptycell\_raw  trans\_transmission\_cal\_emptycell\_fitted  (取决于is\_solvent)  trans\_transmission\_cal\_solvent\_raw trans\_transmission\_cal\_solvent\_fitted | 绘制sample (可能还包含emptycell及solvent) 的透过率曲线 |
| plot\_iq\_empty | mask\_file  calibration\_file  iq\_empty\_direct\_runno  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max  iq\_thickness  iq\_scalingfactor  iq\_q\_min  iq\_q\_step  iq\_q\_max | iq\_empty\_scale | 绘制空束的散射曲线，考虑了所有归一化参数。 |
| plot\_iq\_sample | mask\_file  calibration\_file  iq\_empty\_trans\_runno  iq\_sample\_trans\_runno  iq\_sample\_scatt\_runno  iq\_trans\_fitting\_method  iq\_trans\_smooth\_npoints  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max  iq\_thickness  iq\_scalingfactor  iq\_q\_min  iq\_q\_step  iq\_q\_max | iq\_sample\_scale | 绘制样品的散射曲线，考虑了所有归一化参数（包括样品透过率）。 |
| plot\_iq\_emptycell | mask\_file  calibration\_file  iq\_empty\_trans\_runno  iq\_emptycell\_trans\_runno  iq\_is\_emptycell\_independent\_empty  iq\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno  iq\_emptycell\_scatt\_runno  iq\_trans\_fitting\_method  iq\_trans\_smooth\_npoints  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max  iq\_thickness  iq\_scalingfactor  iq\_q\_min  iq\_q\_step  iq\_q\_max | iq\_emptycell\_scale | 绘制空容器的散射曲线，考虑了所有归一化参数（包括空容器透过率）。 |
| plot\_iq\_solvent | mask\_file  calibration\_file  iq\_empty\_trans\_runno  iq\_solvent\_trans\_runno  iq\_is\_solvent\_independent\_empty  iq\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno  iq\_solvent\_scatt\_runno  iq\_trans\_fitting\_method  iq\_trans\_smooth\_npoints  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max  iq\_thickness  iq\_scalingfactor  iq\_q\_min  iq\_q\_step  iq\_q\_max | iq\_solvent\_scale | 绘制溶剂的散射曲线，考虑了所有归一化参数（包括空容器透过率）。 |
| auto\_iq\_q\_value | mask\_file  calibration\_file  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max | update\_iq\_q\_min  update\_iq\_q\_max | 根据输入的参数计算优化的q范围并输入表中  \*该值并不更新到图中，而是表中 |
| cal\_iq | is\_emptycell  is\_solvent  mask\_file  calibration\_file  iq\_empty\_trans\_runno  iq\_sample\_trans\_runno  iq\_emptycell\_trans\_runno  iq\_is\_emptycell\_independent\_empty  iq\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno  iq\_solvent\_trans\_runno  iq\_is\_solvent\_independent\_empty  iq\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno  iq\_trans\_fitting\_method  iq\_trans\_smooth\_npoints  iq\_wavelength\_min  iq\_wavelength\_step  iq\_wavelength\_max  iq\_empty\_direct\_runno  iq\_sample\_scatt\_runno  iq\_emptycell\_scatt\_runno  iq\_solvent\_scatt\_runno  iq\_thickness  iq\_scalingfactor  iq\_solvent\_volumefraction  iq\_q\_min  iq\_q\_step  iq\_q\_max | iq\_sam\_eb\_sub  (取决于is\_emptycell)  iq\_emptycell\_eb\_sub  iq\_sam\_eb\_ec\_sub  (取决于is\_solvent)  iq\_solvent\_eb\_ec\_sub  iq\_solute | 绘制sample (可能还包含emptycell及solvent等)在扣除各类相关背底后 的iq曲线 |
|  |  |  |  |
| plot\_iq2d\_empty | mask\_file  calibration\_file  iq2d\_empty\_direct\_runno  iq2d\_trans\_fitting\_method  iq2d\_trans\_smooth\_npoints  iq2d\_wavelength\_min  iq2d\_wavelength\_step  iq2d\_wavelength\_max  iq2d\_thickness  iq2d\_scalingfactor  iq2d\_q\_max  iq2d\_q\_step | iq2d\_empty\_scale | 绘制空束的二维散射曲线，考虑了所有归一化参数。 |
| plot\_iq2d\_sample | mask\_file  calibration\_file  iq2d\_empty\_trans\_runno  iq2d\_sample\_trans\_runno  iq2d\_sample\_scatt\_runno  iq2d\_trans\_fitting\_method  iq2d\_trans\_smooth\_npoints  iq2d\_wavelength\_min  iq2d\_wavelength\_step  iq2d\_wavelength\_max  iq2d\_thickness  iq2d\_scalingfactor  iq2d\_q\_max  iq2d\_q\_step | iq2d\_sample\_scale | 绘制样品的二维散射曲线，考虑了所有归一化参数。 |
| plot\_iq2d\_emptycell | mask\_file  calibration\_file  iq2d\_empty\_trans\_runno  iq2d\_emptycell\_trans\_runno  iq2d\_is\_emptycell\_independent\_empty  iq2d\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno  iq2d\_emptycell\_scatt\_runno  iq2d\_trans\_fitting\_method  iq2d\_trans\_smooth\_npoints  iq2d\_wavelength\_min  iq2d\_wavelength\_step  iq2d\_wavelength\_max  iq2d\_thickness  iq2d\_scalingfactor  iq2d\_q\_max  iq2d\_q\_step | iq2d\_emptycell\_scale | 绘制空容器的二维散射曲线，考虑了所有归一化参数。 |
| plot\_iq2d\_solvent | mask\_file  calibration\_file  iq2d\_empty\_trans\_runno  iq2d\_solvent\_trans\_runno  iq2d\_is\_solvent\_independent\_empty  iq2d\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno  iq2d\_solvent\_scatt\_runno  iq2d\_trans\_fitting\_method  iq2d\_trans\_smooth\_npoints  iq2d\_wavelength\_min  iq2d\_wavelength\_step  iq2d\_wavelength\_max  iq2d\_thickness  iq2d\_scalingfactor  iq2d\_q\_max  iq2d\_q\_step | iq2d\_solvent\_scale | 绘制溶剂的二维散射曲线，考虑了所有归一化参数。 |
| cal\_iq2d | is\_emptycell  is\_solvent  mask\_file  calibration\_file  iq2d\_empty\_trans\_runno  iq2d\_sample\_trans\_runno  iq2d\_emptycell\_trans\_runno  iq2d\_is\_emptycell\_independent\_empty  iq2d\_emptycell\_independent\_empty\_trans\_runno  iq2d\_solvent\_trans\_runno  iq2d\_is\_solvent\_independent\_empty  iq2d\_solvent\_independent\_empty\_trans\_runno  iq2d\_trans\_fitting\_method  iq2d\_trans\_smooth\_npoints  iq2d\_wavelength\_min  iq2d\_wavelength\_step  iq2d\_wavelength\_max  iq2d\_empty\_direct\_runno  iq2d\_sample\_scatt\_runno  iq2d\_emptycell\_scatt\_runno  iq2d\_solvent\_scatt\_runno  iq2d\_thickness  iq2d\_scalingfactor  iq2d\_solvent\_volumefraction  iq2d\_q\_max  iq2d\_q\_step | iq2d\_sam\_eb\_sub  (取决于is\_emptycell)  iq2d\_emptycell\_eb\_sub  iq2d\_sam\_eb\_ec\_sub  (取决于is\_solvent)  iq2d\_solvent\_eb\_ec\_sub  iq2d\_solute | 绘制/输出sample (可能还包含emptycell及solvent等)在扣除各类相关背底后 的iq2d结果 |