

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** | V3.0 |
| **状态** | 内部 |
| **创建日期** | 2020-04-10 |
| **修改日期** |  |
| **编号** | CSNS\_DAG\_2020\_01 |
| **文件名** | SANS\_Portal\_Design\_V03.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 |

# 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

透过率页面有“复制参数到IQ/IQ2D”功能

CopyToIQ

CopyToIQ2D

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Is\_emptycell | 类型 | 示例 | 是否有空容器 |
| Is\_solvent | Bool | True | 是否有纯溶剂（若If\_emptycell为False，则该值一定是False） |
| Mask\_File | String | “2019.dat” | Mask文件路径，可选 |
| Calibration\_File | String | “2019.dat” | Cal文件路径，可选 |
| Save\_Path | String |  | 输出文件保存路径，可选 |
| Trans\_EmptyTransRun | List | [003, 021] | 空束透过率号，可用逗号分隔多个，下同 |
| Trans\_SampleTransRun | List | [003, 021] | 样品透过率号 |
| Trans\_EmptycellTransRun | List | [003, 021] | 空容器透过率号（可空，取决于If\_emptycell） |
| Trans\_If\_emptycellIndependentEmpty | Bool | True | 空容器透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| Trans\_EmptycellIndependentEmptyTransRun | No. |  | 计算空容器透过率的空束透过号（可空，取决于If\_emptycellIndependentEmpty） |
| Trans\_SolventTransRun | No. |  | 溶剂透过率号（可空，取决于If\_solvent） |
| Trans\_If\_solventIndependentEmpty | Bool |  | 溶剂透过率计算是否需要单独的空束透过率号 |
| Trans\_SolventIndependentEmptyTransRun | No. |  | 计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决于If\_solventIndependentEmpty） |
| Trans\_TransFittingMethod | String | Raw/Smooth/Linear | 透过率的拟合方法，包含原始数据/平滑化/线性拟合 |
| Trans\_Smooth\_Ns | 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。可空，如果TransFittingMethod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 | 0.2 | 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\_EmptyTransRun | No. |  | IQ计算的空束透过率号，可用逗号分隔多个，下同 |
| IQ\_SampleTransRun | No. |  | IQ计算的样品透过率号 |
| Trans\_EmptycellTransRun | No. |  | IQ计算的空容器透过率号（可空，取决于If\_emptycell） |
| IQ\_If\_emptycellIndependentEmpty | 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\_EmptycellIndependentEmptyTransRun | No. |  | IQ计算的计算空容器透过率的空束透过号（可空，取决于If\_emptycellIndependentEmpty） |
| IQ\_SolventTransRun | No. |  | IQ计算的溶剂透过率号（可空，取决于If\_solvent） |
| IQ\_If\_solventIndependentEmpty | 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\_SolventIndependentEmptyTransRun | No. |  | IQ计算的计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决于If\_solventIndependentEmpty） |
| IQ\_TransFittingMethod | String | Raw/Smooth/Linear | 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 |
| IQ\_Smooth\_Ns | 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。可空，如果TransFittingMethod不是Smooth |
| IQ\_Wavelength\_Min | Float | 0.01 | 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 | 0.5 | 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\_EmptyDirectRun | No. |  | 空束散射号 |
| IQ\_SampleScattRun | No. |  | 样品散射号 |
| IQ\_EmptycellScattRun | No. |  | 空容器散射号（可空，取决于If\_emptycell） |
| IQ\_SolventScattRun | No. |  | 溶剂散射号（可空，取决于If\_solvent） |
| IQ\_Thickness | Float |  | 样品厚度。单位mm |
| IQ\_ScalingFactor | Float |  | 调节绝对散射强度的倍数 |
| IQ\_SolventVolumeFraction | Float |  | 溶剂的体积分数，<1(可空，取决于If\_solvent) |
| IQ\_Q\_Min | Float |  | 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Trans\_Wavelength\_Max计算并获得该值，也可以手动设置 |
| IQ\_Q\_Step | Float |  | 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-Q\_Step),比如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 |  | 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\_EmptyTransRun | No. |  | IQ2D计算的空束透过率号，可用逗号分隔多个，下同 |
| IQ2D\_SampleTransRun | No. |  | IQ2D计算的样品透过率号 |
| IQ2D\_EmptycellTransRun | No. |  | IQ2D计算的空容器透过率号（可空，取决于If\_emptycell） |
| IQ2D\_If\_emptycellIndependentEmpty | Bool | True/False | 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\_EmptycellIndependentEmptyTransRun | No. |  | IQ2D计算的计算空容器透过率的空束透过号（可空，取决于If\_emptycellIndependentEmpty） |
| IQ2D\_SolventTransRun | No. |  | IQ2D计算的溶剂透过率号（可空，取决于If\_solvent） |
| IQ2D\_If\_solventIndependentEmpty | Bool | True/False | 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\_SolventIndependentEmptyTransRun | No. |  | IQ2D计算的计算溶剂透过率的空束透过号（可空，取决于If\_solventIndependentEmpty） |
| IQ2D\_TransFittingMethod | String | Raw/Smooth/Linear | 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 |
| IQ2D\_Smooth\_Ns | 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。可空，如果TransFittingMethod不是Smooth |
| IQ2D\_Wavelength\_Min | Float |  | 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 |  | 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 |  | 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\_EmptyDirectRun | No. |  | 用于二维IQ的空束散射号 |
| IQ2D\_SampleScattRun | No. |  | 用于二维IQ的样品散射号 |
| IQ2D\_EmptycellScattRun | No. |  | 用于二维IQ的空容器散射号（可空，取决于If\_emptycell） |
| IQ2D\_SolventScattRun | No. |  | 用于二维IQ的溶剂散射号（可空，取决于If\_solvent） |
| IQ2D\_Thickness | Float |  | 样品厚度。单位mm |
| IQ2D\_ScalingFactor | Float |  | 调节绝对散射强度的倍数 |
| IQ2D\_SolventVolumeFraction | Float |  | 溶剂的体积分数，<1(可空，取决于If\_solvent) |
| IQ2D\_Q\_Max | Float |  | 二维IQ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透过率参数Trans\_Wavelength\_Min计算并获得该值，也可以手动设置 |
| IQ2D\_Q\_Step | Float |  | 二维IQ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Trans\_Wavelength\_Min，Trans\_Wavelength\_Max计算该值的建议值，也可手动调节 |
|  |  |  |  |

# 返回数据

透过率数据

Trans\_SampleTransRun\_Raw.dat

Trans\_SampleTransRun.dat

Trans\_EmptycellTransRun\_Raw.dat

Trans\_EmptycellTransRun.dat

Trans\_SolventTransRun\_Raw.dat

Trans\_SolventTransRun.dat

IQ数据

IQ\_EmptyDirectRun.dat

IQ\_SampleScattRun\_Raw.dat

IQ\_SampleScattRun.dat (SampleScatt扣除EmptyDirect)

IQ\_EmptycellScattRun\_Raw.dat

IQ\_EmptycellScattRun.dat (Emptycell扣除EmptyDirect)

IQ\_Sample\_Emptycell\_Sub.dat (Sample扣除Emptycell)

IQ\_SolventScattRun\_Raw.dat

IQ\_SolventScattRun.dat (Solvent扣除EmptyDirect)

IQ\_Solvent\_Emptycell\_Sub.dat (Solvent扣除EmptyDirect)

IQ\_Solute.dat (Sample按照溶剂体积分数扣除Solvent，均已扣除Emptycell)

IQ2D，前缀改成”IQ2D”,其他一致