

P10-2018-63

И. А. Морковников, А. С. Кирилов

**СИСТЕМА РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ JOURNAL
НА СПЕКТРОМЕТРАХ ИЯУ ИБР-2**

Направлено в журнал «Информационные технологии»

Работа посвящена системе Journal, предназначеннной для автоматизации процесса регистрации измерений на спектрометрах ИЯУ ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ. Рассмотрены концепция системы, требования к модели данных и сервису. Предложенная концепция изначально задумывалась как унифицированная для упрощения при адаптации к специфике спектрометров. В настоящее время система внедрена на спектрометрах ЮМО, ФДВР и ГРЕЙНС. Подготовлена к тестированию версия для спектрометра НЕРА. В ближайшей перспективе система Journal будет дополнена возможностью работы с данными в центральном хранилище результатов измерений ЛНФ.

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

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2018

The work is devoted to the Journal system intended for automation of registration process of measurements performed on the IBR-2 instruments. The system concept, requirements to a data model and service are considered. The offered concept was originally conceived as unified for the simplifying adaptation to instrument specifics. Now the system is implemented on spectrometers of YuMO, HRFD and GRAINS. The version for NERA instrument is prepared for testing. In the near future the Journal system will be supplemented with the ability to work with data in the central repository of FLNP measurement results.

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

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность замены бумажной регистрации измерений на спектрометрах ИЯУ ИБР-2 на электронную была отмечена в работе [1], посвященной системе Journal (далее просто журнал), внедрённой на спектрометре малоуглового рассеяния ЮМО. Регистрируемые данные включали информацию об эксперименте, условиях на образце, имя и комментарий экспериментатора и некоторые другие. База данных (далее БД) для регистрируемой информации первое время размещалась на управляющем компьютере спектрометра, а впоследствии была перенесена на один из серверов ЛНФ. Сервис журнала для ЮМО помимо собственно автоматизации регистрации предлагал также составление отчетов и поиск необходимой информации.

В последнее время появилась необходимость подготовить новую версию журнала. Во-первых, его успешная эксплуатация заинтересовала пользователей, предложивших внедрить ее на ряде других спектрометров (рефлектометры, фурье-инструменты). Во-вторых, для спектрометров ИЯУ ИБР-2 было создано и введено в эксплуатацию центральное хранилище результатов экспериментов [2]. Поэтому в сервис новой версии журнала естественно включить и средства для работы с данными непосредственно в хранилище, что позволяет рассматривать его и как систему каталогизации результатов исследований.

Проблематика создания каталогизированного хранилища экспериментальных данных в настоящее время весьма актуальна [3–5]. Одним из наиболее популярных проектов является ICAT Project [6, 7]. Этот подход предполагает полную автоматизацию регистрации исследований, начиная с подачи заявки на эксперимент и кончая публикацией его результатов после обработки. В связи с известными сложностями, изложенными в работах [8, 9], прямое внедрение этого программного обеспечения в ЛНФ в настоящий момент нецелесообразно. В частности, в лаборатории уже существует своя система подачи и учета заявок на проведение экспериментов на спектрометрах ИЯУ ИБР-2, отсутствует единый формат записи экспериментальных данных и т. д. В этих условиях поддержка и развитие журнала пока остается без альтернативы.

1. ТРЕБОВАНИЯ К ЖУРНАЛУ

В работе [1] были сформулированы основные требования к журналу, а именно:

- журнал должен быть максимально унифицирован для упрощения его адаптации к работе на различных спектрометрах;
- регистрация измерений в процессе эксперимента должна вестись автоматически; следовательно, он должен быть сопряжен с программным ком-

плексом Sonix+ [10], который используется для управления спектрометрами ИЯУ ИБР-2;

- регистрируемые данные должны быть доступны через интернет;
- сервис журнала должен включать поиск измерений по значениям параметров.

Из этого следует, что журнал должен обеспечивать:

- простую адаптацию к конкретному набору данных в связи с имеющимся составом оборудования спектрометра и его специфической методике измерений;
- как запись, так и чтение данных в процессе набора, поскольку актуальная информация измерения может быть востребована в произвольный момент;
- автоматическое резервное копирование данных, так как срок хранения регистрируемой информации должен быть не менее 5–10 лет.

2. КОНЦЕПЦИЯ И ЕЕ РЕАЛИЗАЦИЯ

В основу концепции журнала положена модель его данных (далее модель), которая образована совокупностью выбранных структур данных и операций их обработки. В качестве операций предусмотрены чтение, запись и хранение данных. Операции поиска данных и составления отчетов вынесены в пользовательский интерфейс.

Главной сложностью при разработке модели данных была необходимость обеспечить обработку наборов данных с различных спектрометров с помощью единой модели. Как отмечено в [1], часть регистрационных данных (имя пользователя, название образца и т.д.) действительна для всех установок, в то время как часть данных специфична.

Предложенная модель основана на универсальной структуре данных, в которой информация со всех спектрометров обрабатывается идентичным образом. Преобразование специфических данных в единый формат вынесено в отдельную процедуру, которая после преобразования данных вызывает универсальную функцию записи в БД. Проблема со спецификой отчетов на разных спектрометрах решена аналогично. Преобразование информации из БД в удобный для пользователя вид вынесено в отдельную процедуру.

Для реализации БД выбрана реляционная база данных. Ее структура представлена на рис. 1. Она образована набором таблиц с информацией об измерениях, пользователях, ссылками на файлы с результатами измерений и атрибутами, представленными в виде единой для всех спектрометров модели EAV (Entity–attribute–value model).

В качестве системы управления базами данных (СУБД) рассматривались MySQL и PostgreSQL. Обе СУБД предоставляют достаточный набор функций,

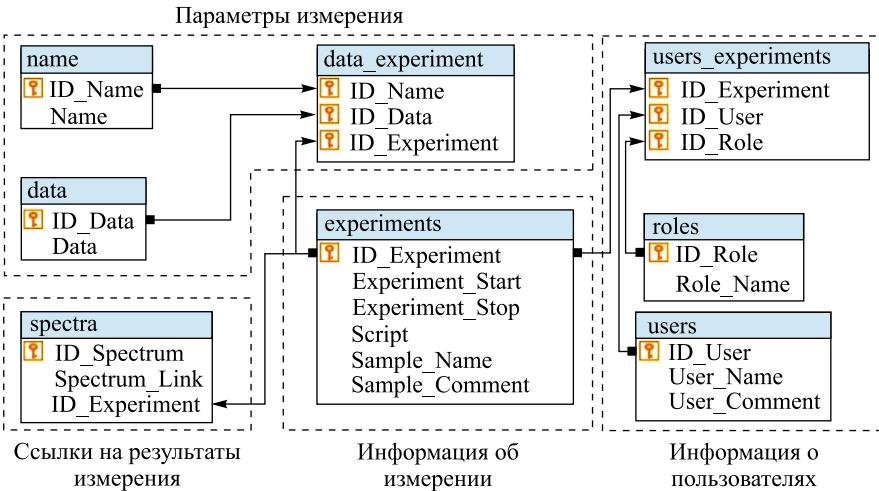


Рис. 1. Структура базы данных журнала

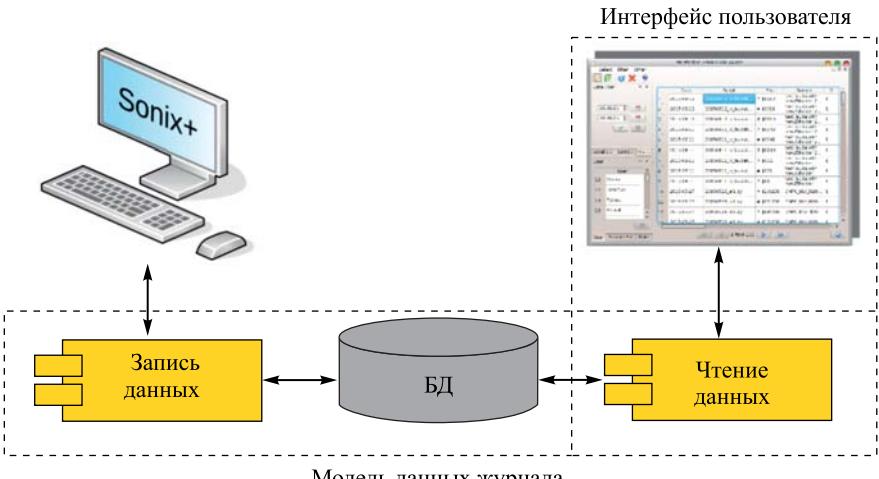


Рис. 2. Структура журнала

необходимых для решения поставленных задач, — надежное хранение, поиск, одновременное чтение и запись, резервное копирование данных. Выбор MySQL обусловлен более широкой поддержкой на момент принятия решения, а также возможностью реализации доступа к БД через интернет на уровне модели через клиентские библиотеки MySQL. При этом сама БД выделена в отдельный элемент.

В Sonix+ процедура измерения записывается в виде скрипта на языке Python. По мере ее выполнения регистрируемая информация в БД обновляется автоматически.

Часть модели, содержащая данные и методы для регистрации измерений и о своевременном ее обновлении, выделена в класс, универсальный для всех спектрометров. Кроме того, для каждого спектрометра составляется дополнительная библиотека для приведения специфических данных спектрометра к единому для журнала формату.

Модель разделена на отдельные части для записи, чтения и хранения данных. Это позволило организовать механизм защиты от несанкционированной записи в БД через пользовательский интерфейс. Идея защиты заключается в разделении пользователей для записи и чтения данных с соответствующими привилегиями. Таким образом, через пользовательский интерфейс изменить данные в БД невозможно ни при каких условиях.

В модели также выделена часть, отвечающая за поиск в БД и составление отчетов.

3. ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ИНТЕРФЕЙС

Пользовательский интерфейс для просмотра БД и составления отчетов реализован в виде многооконного приложения с плавающими подокнами.

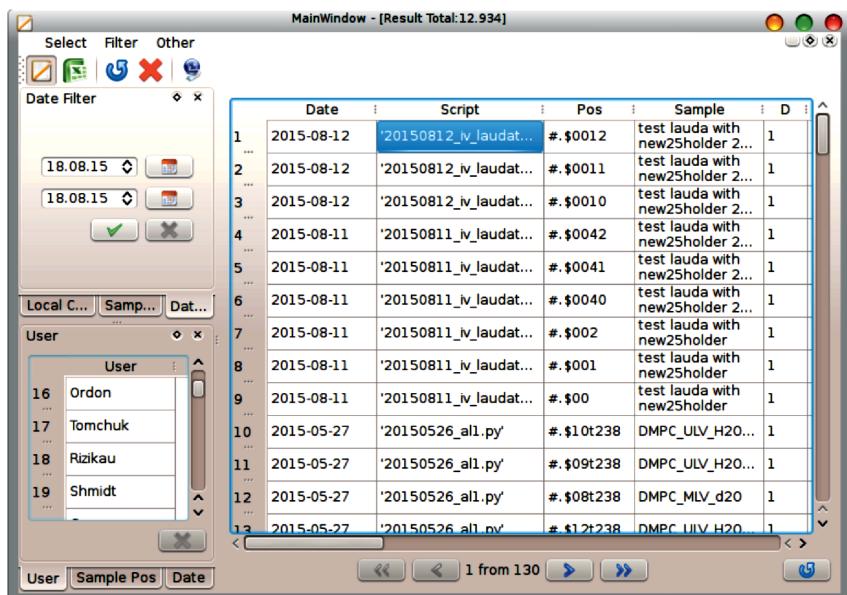


Рис. 3. Пример пользовательского интерфейса журнала

Это позволяет настраивать расположение элементов по усмотрению оператора. Каждое подокно интерфейса взаимодействует с соответствующим компонентом модели данных журнала. Такой подход позволил сделать интерфейс универсальным для всех спектрометров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

За время эксплуатации журнала на спектрометре ЮМО с 2012 по 2018 г. было зарегистрировано 2 тыс. записей в базу данных. В настоящее время журнал внедрен на фурье-дифрактометре высокого разрешения ФДВР и рефлектометре ГРЕЙНС. Подготовлена к практическому тестированию версия для многоцелевого спектрометра с обратной геометрией НЕРА, готовятся версии для рефлектометров РЕМУР и РЕФЛЕКС. Опыт адаптации журнала для спектрометров показал, что основная задача заключается в получении и организации регистрируемых данных, а также настройке генератора отчетов в интерфейсе пользователя. При этом первоначальная архитектура журнала, в целом, сохраняется, что свидетельствует об удачном выборе его концепции.

Дальнейшее развитие журнала связано с его интеграцией в сервис для доступа к центральному хранилищу данных. В случае появления потребностей в более широком наборе функций журнал может быть использован в качестве компонента более комплексной системы, например, ICAT или ее аналога.

Авторы выражают глубокую признательность коллегам, прежде всего из группы информационных технологий, а также нашим пользователям за плодотворное сотрудничество, терпение и постоянную поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Морковников И. А., Иваньков О. И., Кирилов А. С. Программа ведения рабочего журнала на спектрометре ЮМО. Сообщение ОИЯИ Р10-2012-134. Дубна, 2012.
2. Морковников И. А., Кашиунин И. А., Сухомлинов Г. А. Организация передачи данных с Sonix+ на файловый сервер nfserv-b. Сообщение ОИЯИ Р10-2014-101. Дубна, 2014.
3. SciCat Project. https://icatproject.org/wp-content/uploads/2017/12/ICAT_F2F_2017_PSI.pdf.
4. SciCat Documentation. <https://github.com/SciCatProject/documentation>.
5. ILL Scientific Data Policy. https://www.ill.eu/fileadmin/user_upload/ILL/3_Users/User_Guide/After_your_experiment/Data_management/ILL_data_management_policy_July_2017.pdf.
6. ICAT Project. <https://icatproject.org/>.
7. ICAT Project Facilities. <https://icatproject.org/collaboration/facilities/>.

8. Kirilov A. S. Instrument Control Software at the IBR-2: Directions of Development. JINR Commun. E10-2017-89. Dubna, 2017.
9. Кирилов А. С., Морковников И. А. О концепции файлового хранилища для спектрометров ИЯУ ИБР-2. Сообщ. ОИЯИ Р10-2018-23. Дубна, 2018.
10. Sonix+. <http://sonix.jinr.ru/wiki/doku.php?id=en:index>.

Получено 29 ноября 2018 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 13.12.2018.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,68. Уч.-изд. л. 0,77. Тираж 200 экз. Заказ № 59575.

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

E-mail: publish@jinr.ru
www.jinr.ru/publish/