



北京正负电子对撞机国家实验室

HANDBOOK OF BEIJING SYNCHROTRON  
RADIATION FACILITY

# 北京同步辐射装置 操作手册

X 射线荧光微分析实验站

北京正负电子对撞机国家实验室办公编印

2023 年06 月

## 用户注意事项

1. 课题申请时，尽量写清楚您所需要的实验设备、实验模式与实验参数，并注明您的样品是否具有危险性（毒性、放射性、腐蚀性、易燃易爆等）。
2. 实验前请尽量与实验站沟通，确保您的实验进展顺利。
3. 请您按预先通知的时间来做实验，准时与其他用户交接班。新用户最好提前到实验站熟悉实验设备、操作方法等。
4. 实验前请认真学习实验站操作手册，并接受辐射防护安全培训、领取计量卡。
5. 实验中，爱护实验站设施和运行设备。
6. 请您认真填写《北京同步辐射实验室用光情况登记表》和《北京同步辐射装置实验情况记录表》，记录字迹要工整清楚。
7. 发生故障时请及时与本站工作人员联系，并做好记录。
8. 实验完成后，请您搞好用光期间的实验站卫生，将样品回收处理，保持实验台桌面整洁。
9. 实验结果发表后，请您将发表文章的相关信息发送给用户办公室和实验站工作人员，以便我们对您的课题进行存档和评价。
10. 欢迎您参加北京同步辐射装置组织的同步辐射应用用户会和学术讨论会。

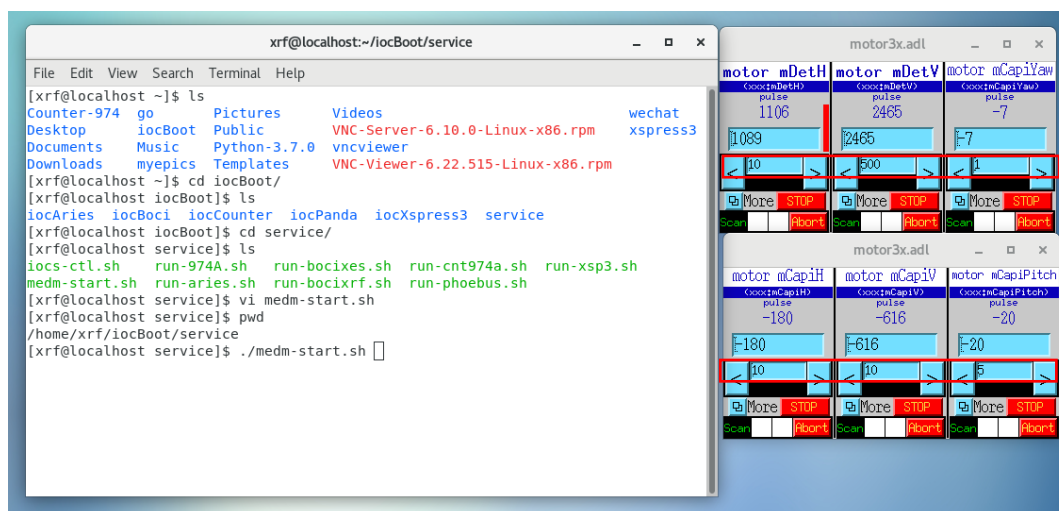
# BSRF-4W1B 荧光站软件操作手册

XRF 站目前对用户开放两种实验方法，一是  $\mu$ -XRF，二是 XES。 $\mu$ -XRF 主要利用飞扫模式测 mapping 获得 2D/3D 元素分布。XES 做高压、高温、电/光催化原位 ctc-XES 和 vtc-XES，其软件操作是 SOPHIA-XO-面探的执行界面。本手册主要介绍基于粉光的飞扫软件操作。

## 一、实验站 XRF 实验显示界面和操作电脑说明



## 二、调光（线站工作人员进行，电脑 2）



打开 Terminal，通过以下命令运行调光界面：

```
$ cd /home/xrf/iocBoot/service
```

```
$ ioc-start bocixrf
```

```
$ ./medm-start.sh
```

上图右侧界面中，motor\_mDetH 和 motor\_mDetV 为探测器调姿，单位为 pulse，推荐调节时步长设为 100。其他 4 个电机为毛细管调姿，单位为 pulse，推荐调节时步长设为 5 以下。上图红色框内为步长设置，修改步长时鼠标必须在相应的框内，修改完成后回车才能生效。

## 三、启动 Mamba 相关 IOC（线站工作人员进行，电脑 1）

打开 Terminal，通过以下命令运行各 IOC：

1. 启动自动找样用相机 IOC，相关命令可以从桌面的 imagingsource.txt 中复制

```
$ cd /opt/epics/aravisIOC/iocBoot/iocAravis
```

```
$ ../../bin/linux-x86_64/ADAravisApp ~/iocBoot/iocAravis/st.cmd
```

2. 其他 IOC 启动，相关命令可以从桌面的 readme.txt 中复制

```
$ ioc-stop aries panda cnt974a xsp3
```

```
$ ioc-start aries panda cnt974a xsp3
```

## 四、自动找样程序校准（线站工作人员进行，电脑 1）

实验站目前配有两台相机观察样品，相机 1 视场大、分辨率低，用于观察样品整体情况和软件自动找样，Mamba 软件中的 Monitor 界面可以观察相机 1（Monitor 界面内 Count 后

更新图像)；相机 2 视场小、分辨率高，用于调节 m3 看清样品，棚屋内外的两个显示器可以同时观察相机 2 (实时更新图像)。

(1) 启动 Mamba 的前后端 (详见第六部分步骤 2.1、2.2、2.3)；

(2) 点击菜单栏中的 View—>Monitor，打开 Monitor 窗口；

(3) 在样品架上粘贴两张曝光纸，横竖各一张，将样品架置于样品台上，调节 m3 使得相机 2 能清晰地看到曝光纸上的条纹；

(4) 进行一次 X 射线曝光 (光斑尽量放在相机 1 视野中央，可方便用户选区)；

(5) 点击工具栏的 Count 按钮，找到光斑的位置 (找到光斑后不要移动任何电机的位置)；

(6) 点击工具栏的 Spot 按钮，标记光斑位置。若当前没有标记光斑位置：Spot 按钮选中状态下，可标注光斑位置；若当前已标注光斑位置：Spot 按钮选中状态下，显示已经标注的光斑图标。Spot 按钮为未选中状态不显示光斑图标，但光斑位置信息依然存在，如果光斑标记位置有误，可以点击旁边的下拉三角，点击 reset 重新标记；

(7) 点击工具栏的 ROI 按钮，选中曝光纸的 ROI；(最好包括曝光纸左侧和上侧的外轮廓)

(8) 点击工具栏的 Calib 按钮，完成自动校准；

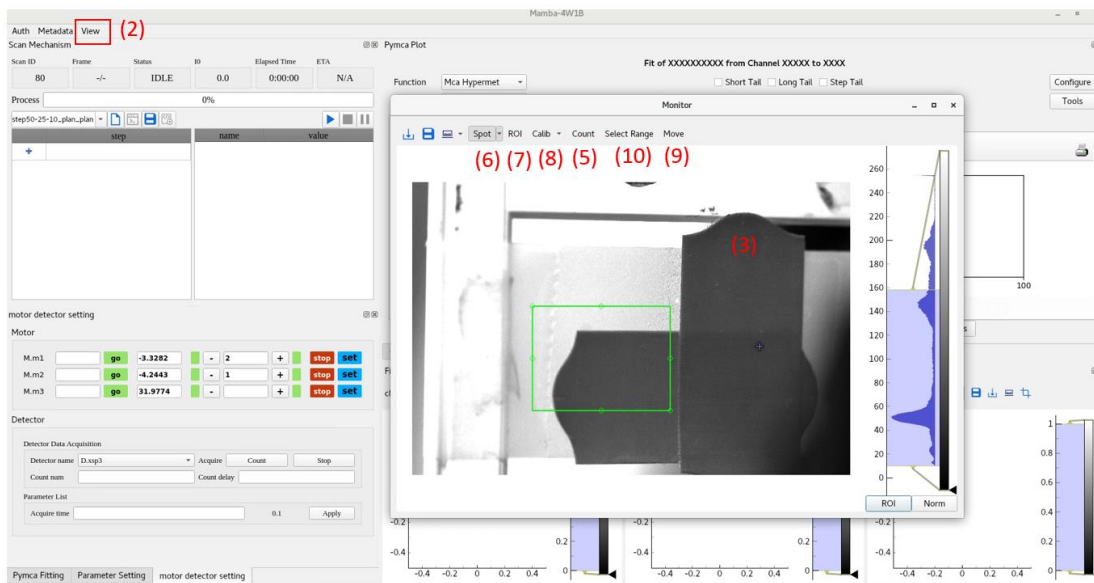
(9) 点击工具栏的 Move 按钮使其成为选中状态，在 Monitor 窗口当前显示的图片上点击任意位置，电机停止移动后(通过 Mamba 主界面 Motor 栏中的电机位置数值是否变化判断)，点击 Count 按钮，如果光斑的位置为点中的位置，则表示校准成功。Move 使用结束后建议再次点击该按钮，使其变成未选中状态，避免误操作；

(10) 将标样 (如铜网) 放在样品台上，调整 m3 使样品清晰，使用选区功能 (详见第六部分步骤 2.7)，进行 XRF 扫描，根据 Mamba 主界面右下侧 plot2d 中的图片判断电机 m1 的偏移量，填入 m1 的 Offset 文本框中(参见第六部分步骤 2.7 的截图)。偏移一般体现在水平方向，如果观察到 X 射线照片相对 Monitor 界面中设定的选区向左偏移，则 offset 应当设为正值，反之设为负值。

**注意：线站人员在每次调整相机 1 位置或放大倍率之后，需要重新完成过程 (3)、(4)、**

**(5)、(6)、(7)、(8)、(9)、(10)；光斑位置如果偏移，仅需重新完成过程 (4)、**

**(5)、(6)、(10)。**



## 五、用户实验步骤：

1. 查找分配机时 BeamtimeID
2. 移动电机确定扫描区域
3. 打开实验软件 Mamba 开始实验
4. 查看和下载实验数据
5. 利用 PyMca 软件进行数据处理

## 六、用户操作详细说明：

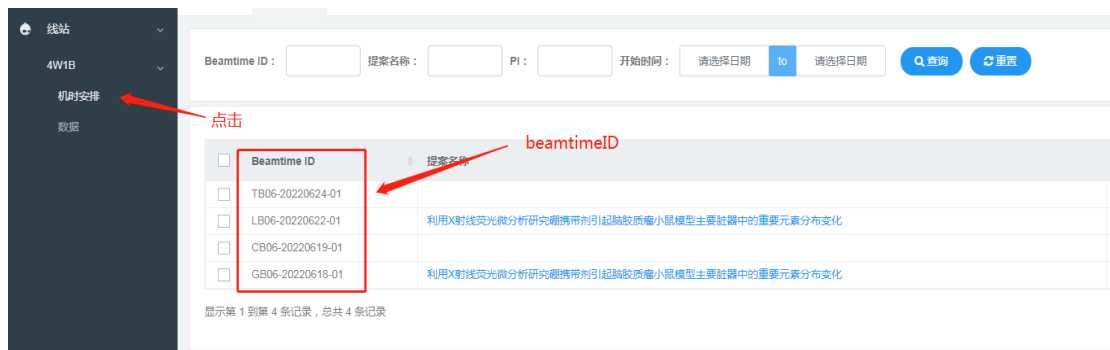
### 1. 查找分配机时 BeamtimeID（电脑 1）：

使用浏览器打开网站 <http://4w1b.ihep.ac.cn>

登录账号：[bsrf4w1b@ihep.ac.cn](mailto:bsrf4w1b@ihep.ac.cn) 密码通过线站人员或计算中心同事获取。



登录后，选择“线站”→“4W1B”→“机时安排”，根据提案名称、PI 姓名、实验时间查找实验对应的 BeamtimeID



## 2. 进行实验（电脑 1）：

2.1 启动 Mamba 后端。桌面右击选择 Open Terminal。如下图输入（注意下划线）：

```
IPython: mamba/mamba
File Edit View Search Terminal Help
[mamba@localhost ~]$ mamba_cli
Python 3.6.8 (default, Oct 13 2020, 16:18:22)
Type 'copyright', 'credits' or 'license' for more information
IPython 7.16.1 -- An enhanced Interactive Python. Type '?' for help.
Example beamline init script loading...
/usr/local/lib/python3.6/site-packages/pims/image_reader.py:26: RuntimeWarning:
PIMS image reader.py could not find scikit-image. Falling back to matplotlib's
imread(), which uses floats instead of integers. This may break your scripts.
(To ignore this warning, include the line "warnings.simplefilter("ignore", RuntimeWarning)" in your script.)
  warnings.warn(RuntimeWarning(ski_preferred))
/home/mamba/.mamba/init.py:23: DeprecationWarning: Use importlib.util.find_spec() instead.
  from mdw import *
/home/mamba/.mamba/init.py:23: DeprecationWarning: Use importlib.util.find_spec() instead.
  from mdw import *
M.m1.motor_drpv - D.panda.inenc1.val.value = 0
M.m2.motor_drpv - D.panda.inenc2.val.value = 29
Beamline init script loaded.
In [1]:
```

2.2 启动 Mamba Data Worker。桌面右击选择 Open Terminal。如下图输入（注意大小写）：

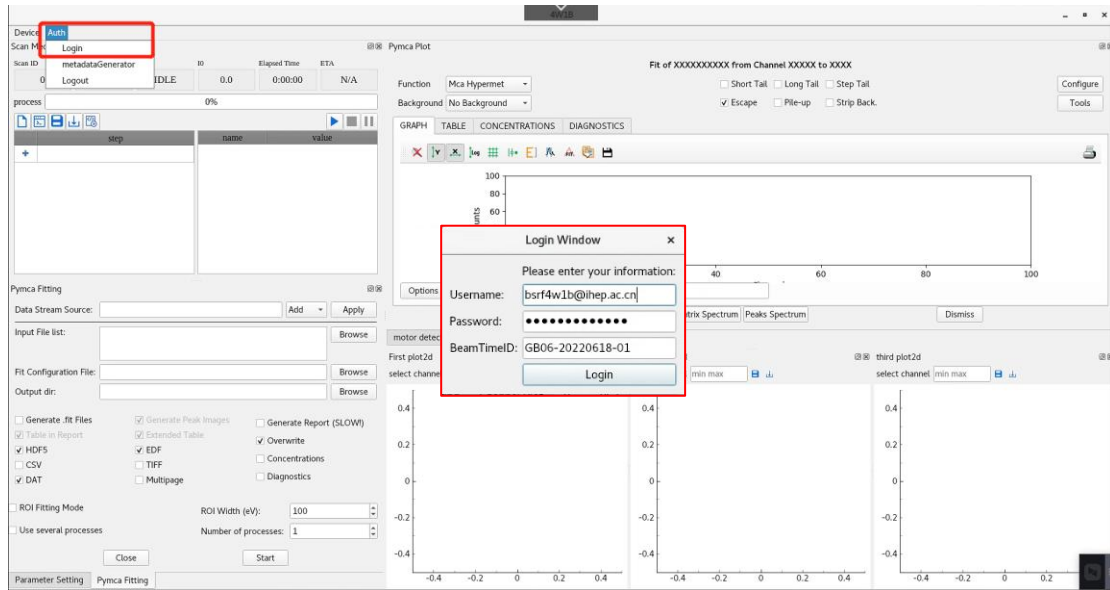
```
mamba@localhost:~
File Edit View Search Terminal Help
[mamba@localhost ~]$ detectorWorker
```

2.3 启动 Mamba 前端。

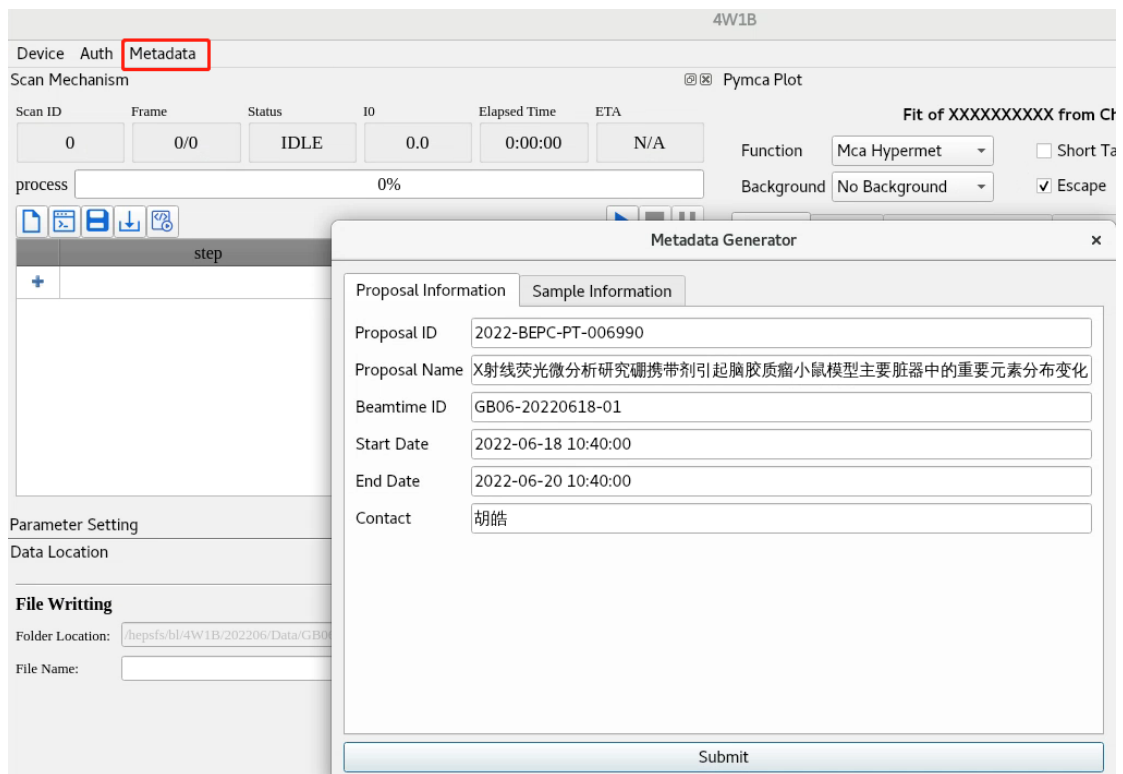
双击桌面上的 Mamba 图标，启动后会显示 Mamba 的用户界面。

2.4 如下图点击 Auth-Login，输入用户名、密码及 BeamtimeID，成功登录后即可进行实

验。



2.5 查看和填写元数据信息。点击 Metadata-metadata generator, 打开下图窗口, 自动获取 proposal information。用户手动填写 sample information, 点击 submit 提交填写的信息。



Metadata Generator

Proposal Information Sample Information

Sample Name

Sample Position

Size

Interest Zone

Type

Situation

Mass

Density

Chemical Formula

Description

Submit

## 2.6 选择文件存储位置

(1)选择左下角 **Parameter Setting**，进入文件存储窗口，点击 **open** 按钮，打开文件存储位置界面，**File Name** 位置填写保存的文件名。如果文件名为空，则默认生成“test+时间戳.nxs”形式的文件名。所有文件默认储为 **nx** 格式，如果需要存储为 **h5** 格式的文件，须在文件名后加 **h5** 或者 **hdf5** 后缀（例：**aaa.h5**）

Data Location

File Writing

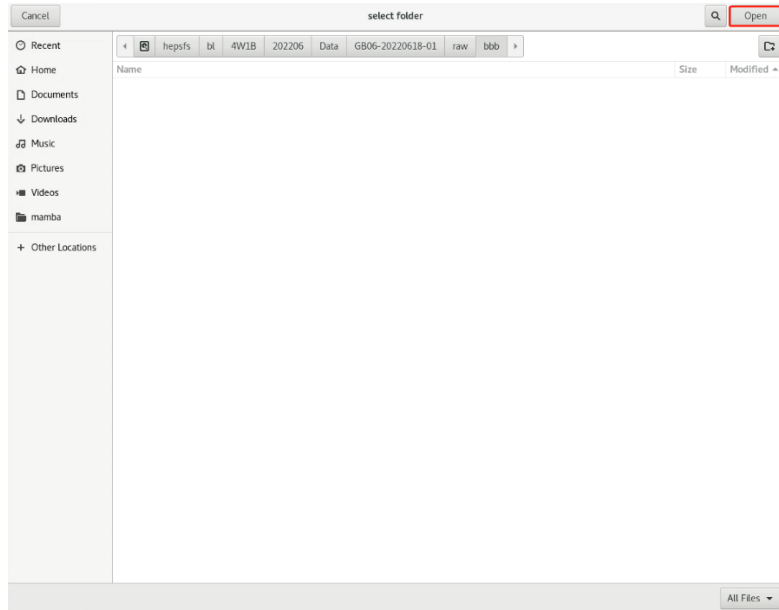
Folder Location:  open

File Name:

Apply

Parameter Setting Pymca Fitting

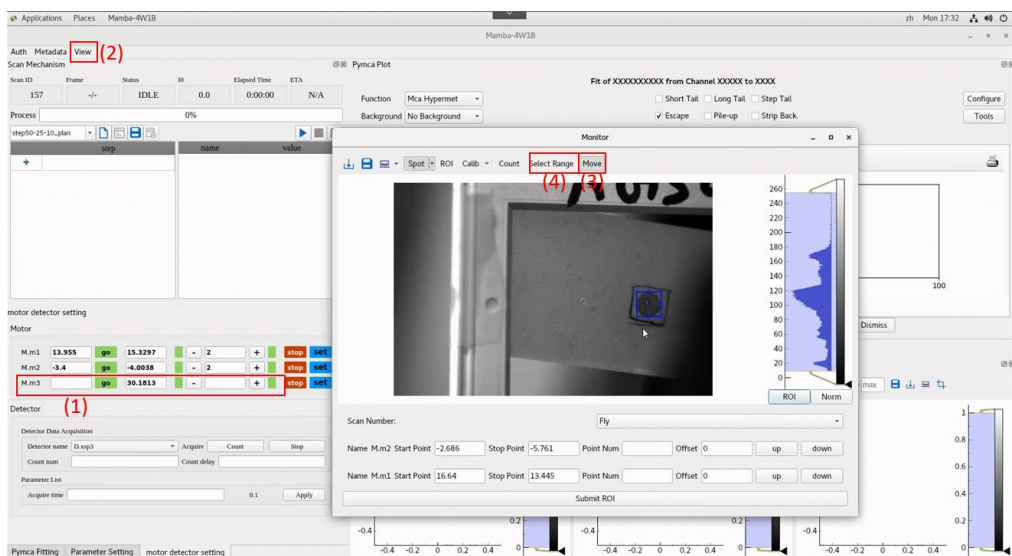
(2)点击 **open** 即可选择当前路径，点击 **open** 下的添加文件夹按钮，可在当前目录添加文件夹。



## 2.7 选择扫描区域

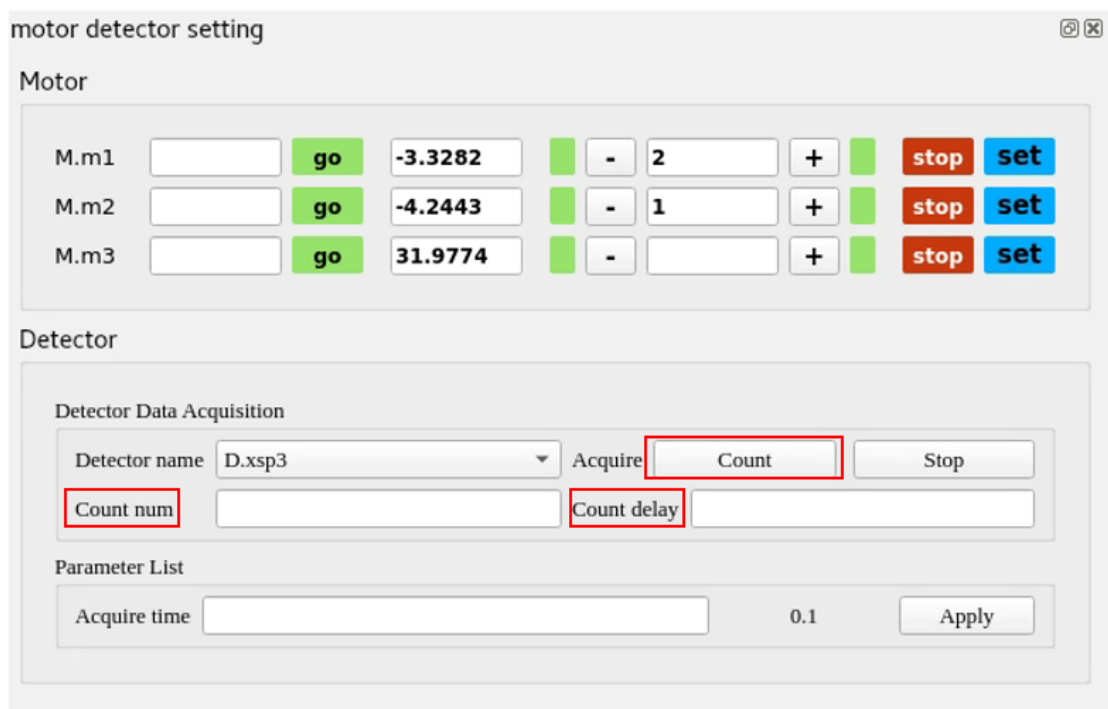
- (1) 将样品放置在样品架上，调整 motor m3，使样品在显微镜下更清晰。
- (2) 点击菜单栏中的 View—>Monitor，打开 Monitor 窗口。
- (3) 用户可点击工具栏的 Move 按钮使其成为选中状态，在 Monitor 窗口当前显示的图片中选中想要将光斑移动到的位置，电机停止移动后（通过 Mamba 主界面 Motor 栏中的电机位置数值是否变化判断），点击 Count 按钮，可以查看当前电机位置的相机图像，方便
- (4) 步选区。该步骤完成后，建议再次点击 Move 按钮，将其变成未选中状态，避免误操作。

(4) 点击工具栏的 Select Range 按钮（务必在点击 Select Range 按钮之前，点击 Count 按钮以更新图像），出现选区 ROI，移动 ROI 框，选择扫描区域，点击 Submit ROI 按钮，即可在 Scan Mechanism 中看到扫描区域的参数，补全其它参数，即可开始扫描。特别注意，在点击 Select Range 按钮后不可再移动电机位置，如果有移动，请点击 Monitor 界面右下角的 Cancel，取消后重复本步骤的操作（先点击 Count 按钮，再点击 Select Range 按钮）。



## 2.8 采集前的 count 操作

(1) 在实验开始前可进行 count。如下图所示，count num (count 的次数，必填，如果不填，默认为 1) 和 count delay (进行两次及以上 count 时，每两次 count 之间的时间间隔，选填)，然后点击 count。如需要改变探测器的曝光时间，可以输入 Acquire time。



(2) 点击 PyMca Plot 即可看到 count 的结果。

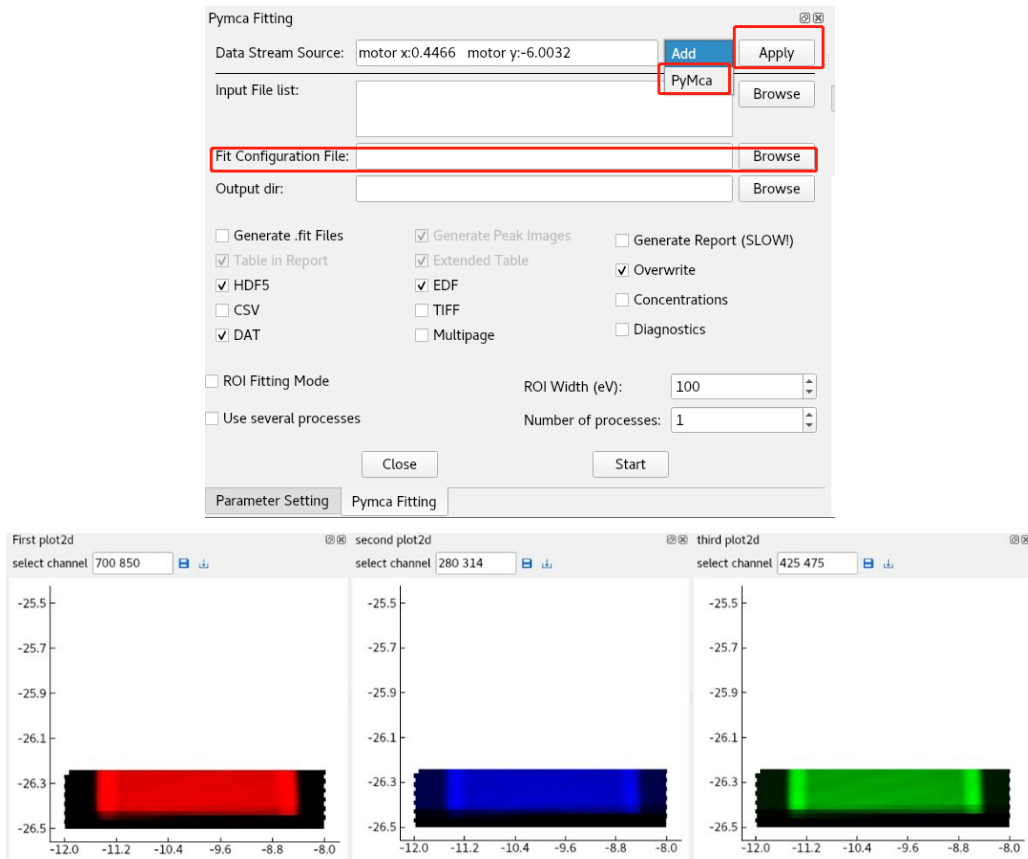
如果用户需要使用 PyMca 进行在线分析，可在该步骤完成 PyMca 的 cfg 配置文件生成工作 (详细请参看 4.5)，为保证数据采集与分析的同步性，请尽量选择少于 5 个元素。

## 2.9 在线分析设置

在线分析目前支持两种方式，如下图所示“Add”和“PyMca”。

(1) 如果进行粗略的在线分析，那么选择通道加和方式(Add)。

需设置加和通道数。左侧为较小的值，右侧为较大的值（不可大于 4095）。通道数可在执行 count 后，通过观察特征峰的位置确定。



(2) 如果做精确的在线分析，那么选择 PyMca。

选择 PyMca Fitting，选择 PyMca，在 Fit Configuration File 处选择 2.8（2）步分析得到的 cfg 文件，点击 Apply，即可在 plot2d 窗口看到配置的元素。

2.10 设置扫描参数。左侧选择实验模式，右侧填入相关参数。

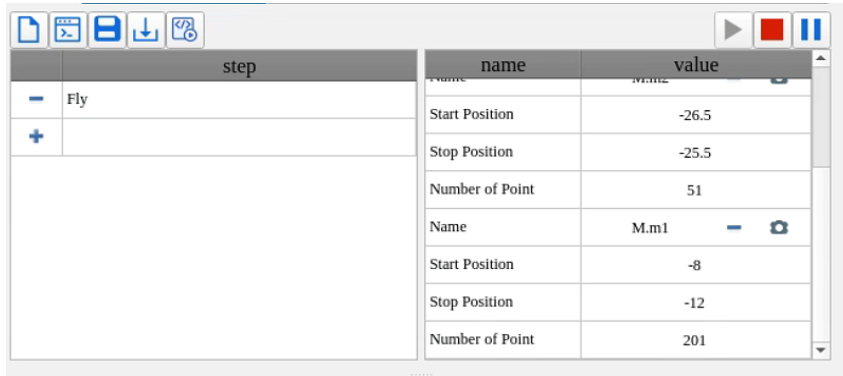
目前支持飞扫（Fly）、蛇形步进扫描（Grid scan snake）、Count 等多种采集模式。

如需使用飞扫，需要选择 Fly，在填写飞扫参数时：

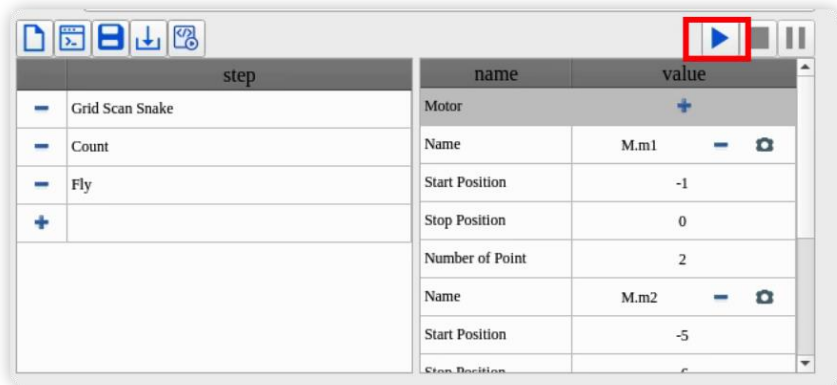
1. 右侧填入参数时，首先填入周期 Period，占空比 Duty。Period 是每一步所需要花费的时间，Period\*Duty 是每一步的探测器曝光时间；
2. 先选择 m2（纵轴），并填入起始和终止坐标、扫描点数；再选择 m1（横轴），填入参数。
3. 参考移动电机确定扫描区域章节记录的数据，m2 的起点为 b，终点为 d；m1 的起点



为 a，终点为 c。依次填入即可。

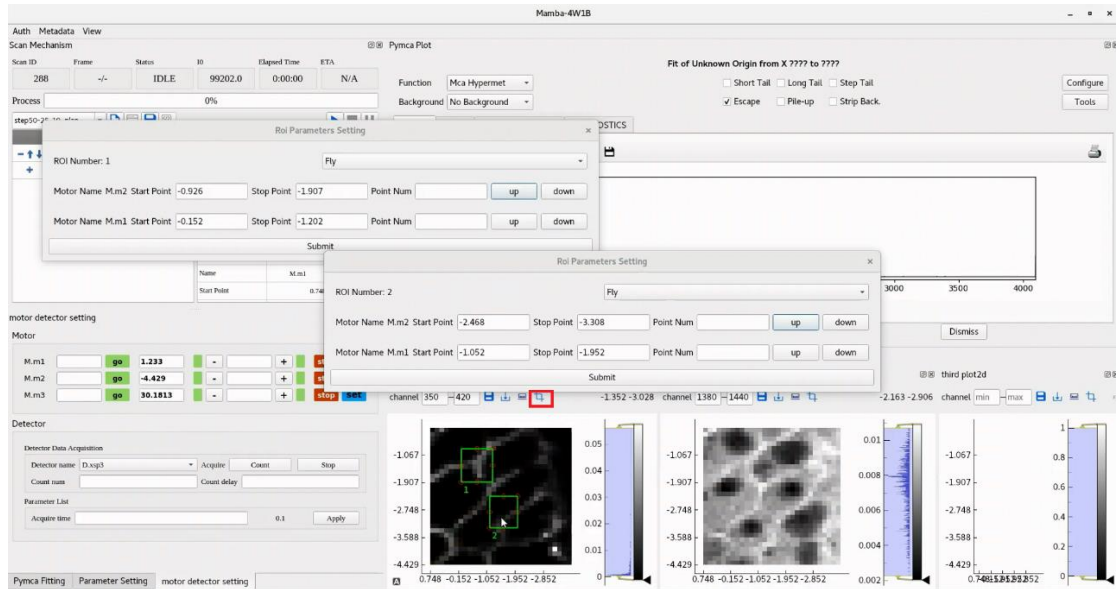
4. 扫描点数= ((终止坐标 - 起始坐标) / 步长) + 1



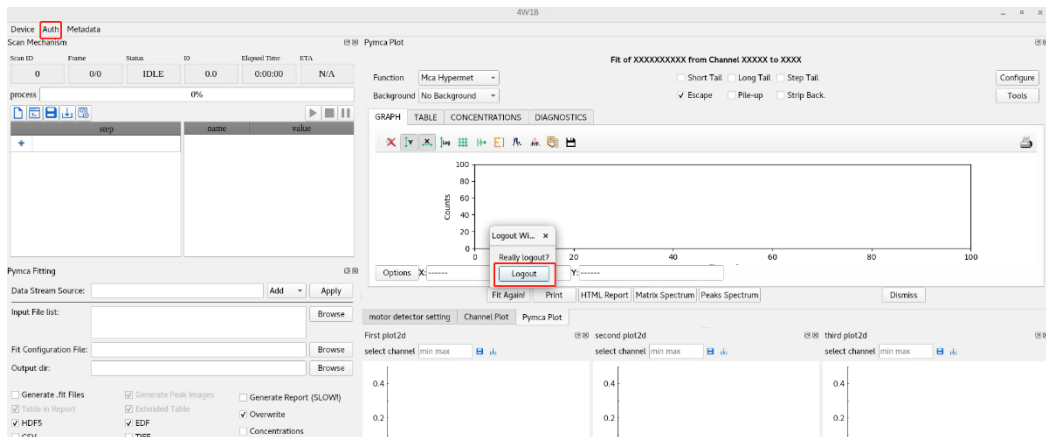
2.11 点击红框按钮启动采集。



2.12 二次选区扫描功能。用户在进行某一区域的粗扫之后，如果想对该区域内的某部分细节进行精细扫描，可以利用二次选区扫描功能。用户点击右下角任意一个 plot2d 控件工具栏中的 Select Range 按钮 ，即可在 plot2d 控件中生成一个 ROI 框，用户拖动 ROI 框，选中想要二次扫描的区域，并利用 Point Num 设置扫描点数，然后点击 Submit 按钮，即可将选择区域发送到扫描控件 Scan Mechanism 中，每次点击 Submit 按钮，会在 Scan Mechanism 后追加新的扫描，重复 2.10、2.11 步骤即可完成二次扫描。用户可以通过在一个 plot2d 控件中多次点击 Select Range  按钮，选择多个区域，通过双击 ROI 区域，可以打开 ROI 选择对话框。



2.13 用户登出。实验结束后如下图点击 Auth-Logout, 点击 logout 即可登出 Mamba 系统。



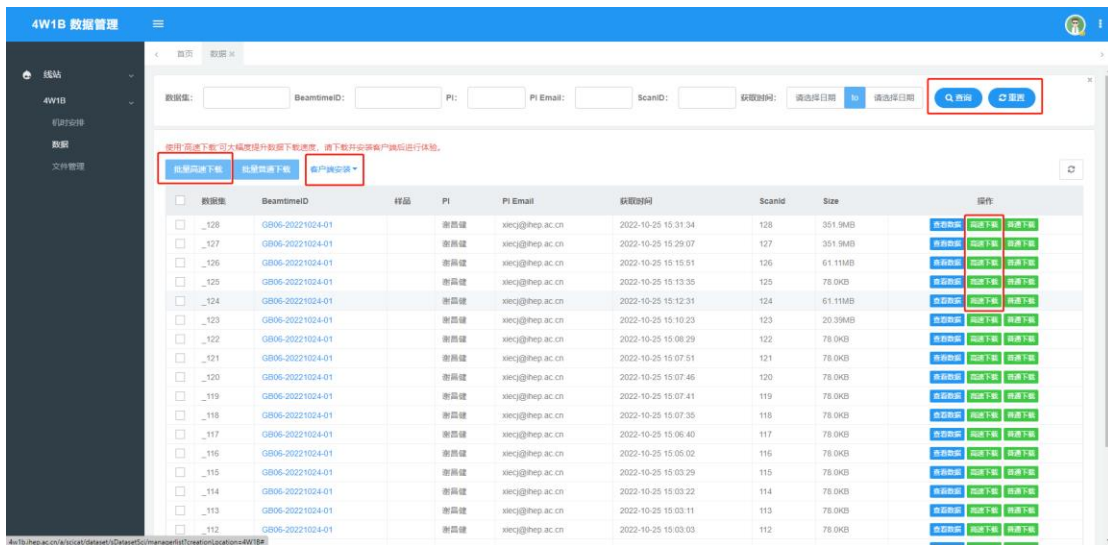
### 3. 查看和下载实验数据（电脑 1 或用户自带电脑）：

3.1 使用浏览器打开网站 <http://4w1b.ihep.ac.cn>

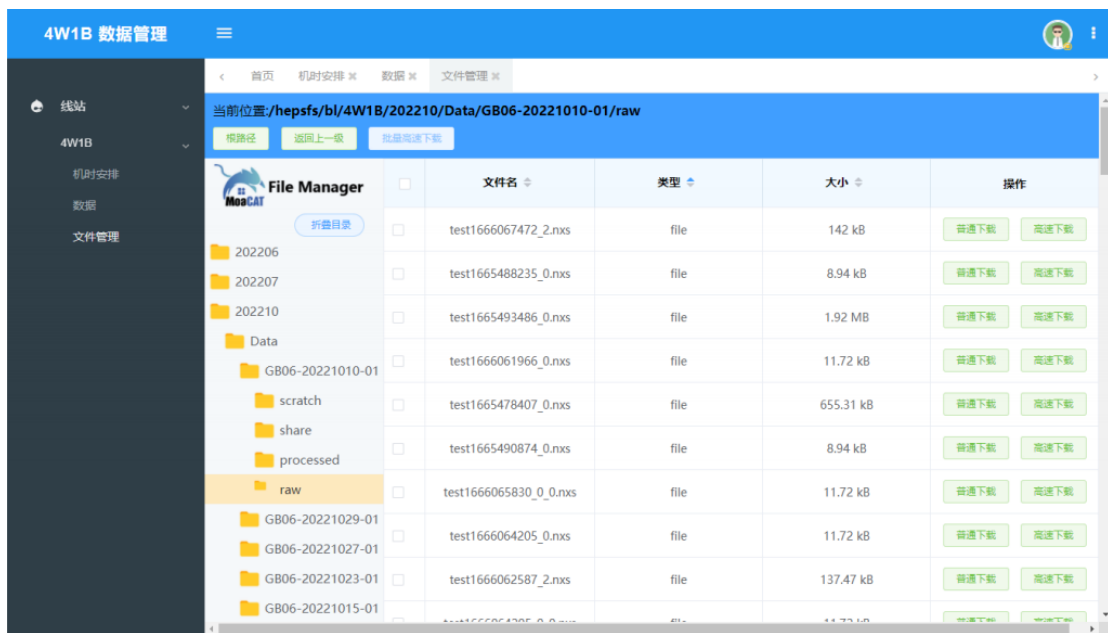
登录账号：**bsrf4w1b@ihep.ac.cn** 密码通过线站人员或计算中心同事获取。

3.2 查看并下载实验数据，对于数据量较大的数据，可以下载客户端后进行高速下载。

3.2.1 用户可在线站-> 4W1B ->数据菜单下查询所需数据并下载；此页面仅展示/raw 实验目录下的原始数据。



3.2.2 用户可在线站-> 4W1B ->文件管理菜单下根据数据存储目录查看所需数据并下载；此页面下用户可以根据数据存储位置查找并下载/processed、/scratch 以及/share 实验目录下进行数据处理后的临时数据。



#### 4. 数据处理（电脑 2 或用户自带电脑）：

##### 1) 利用 4W1B-XRF1.0 软件进行数据处理

由于飞扫速度快，一些元素的荧光峰的统计不够，利用 PyMCA 拟合谱效果不好，所以 4W1B 与软件组同事合作开发了由实验数据生成 2D/3D 图，以及元素关联分析软件包 4W1B-XRF1.0A 和 B。这个软件适合飞扫模式以及元素含量过低谱峰统计不够的情况。实验数据生成 2D 图的使用说明如下：

##### A. 查看和下载实验数据：

使用浏览器打开网站 <http://4w1b.ihep.ac.cn>

登录账号: [bsrf4w1b@ihep.ac.cn](mailto:bsrf4w1b@ihep.ac.cn) 密码: **Bsrf4w1b@2022**



①登录后, 选择“线站”→“4W1B”→“机时安排”, 根据提案名称、PI 姓名、实验时间查找实验对应的 BeamtimeID

②选择“线站”→“4W1B”→“数据”, 输入实验对应的 BeamtimeID 查看并下载实验数据, 对于数据量较大的数据, 可以下载客户端后进行高速下载

数据集:  BeamtimeID:  PI:  PI Email:  ScanID:  获取时间:

使用“高速下载”可大幅度提升数据下载速度, 请下载并安装客户端后进行体验。

<input type="checkbox"/>	数据集	BeamtimeID	PI	PI Email	获取时间	ScanId	Size	操作
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 15:44:08	27	112.33MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 15:33:37	26	112.33MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 15:10:12	25	66.93MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 15:06:41	24	66.93MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 14:46:39	23	64.58MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 14:29:26	22	759.76MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 13:58:37	21	759.76MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>
<input type="checkbox"/>	20221013	GB06-20221013-01	焦春磊	jiaoc@ihep.ac.cn	2022-10-13 13:44:06	20	850.28MB	<input type="button" value="查看数据"/> <input type="button" value="高速下载"/> <input type="button" value="普通下载"/>

B. 利用 4W1B-XRF1.0A 进行数据处理:

 ChannelAddPlusDeconv_Ar_Normalization.exe	2023/5/11 10:51	应用程序	105,268 KB
 config.ini	2023/5/11 10:36	配置设置	2 KB

该程序结合了通道加和程序和过采样退卷积程序，包括一个可执行程序 (ChannelAddPlusDeconv\_Ar\_Normalization.exe)和配置文件(config.ini)。

用户需要将这两个文件放在**同一个文件夹**下面，在配置文件中**修改相应的参数**之后，**双击可执行文件**即可处理数据，得到最后的元素分布图和输出数据文件。

### ①在配置文件中修改相应的参数

配置文件里面有相应的参数说明：

```
config.ini - 记事本
文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)
# 配置文件说明
# file_h5_path: 输入HDF5数据文件路径, 可修改
# out_roi_path: 输出数据文件路径, 用于Origin作图的Z坐标, 不需修改
# roi_min, roi_max: 通道范围, 可修改
# vmin, vmax: 绘图颜色所涵盖的数据范围, 可修改
# step_x, step_y: 横轴间隔,纵轴间隔, 用于Origin画图, 可修改
# dpi: 绘图像素数, 可修改
# colormap: 颜色配置方案, 可修改, 参见 https://blog.csdn.net/weixin\_51111267/article/details/122605388

# file_img_path: 输入图像文件路径, 暂时不需要修改
# iterations: 迭代次数, 可修改
# PSF_size: 初始PSF的大小, 可修改
# sigma: 初始PSF的标准差, 可修改

[Configuration]
file_h5_path = A2-1-2_0.h5
out_roi_path = out_roi_adding.txt
figure_axis_on_path = adding_axis_on.png
figure_axis_off_path = adding_axis_off.png
roi_min = 630
roi_max = 690
step_x = 50
step_y = 50
vmin = 0
vmax = 1
dpi = 300
colormap = magma

file_img_path = adding_imageonly.png
iterations = 10
PSF_size = 10
sigma = 10
```

修改文件名

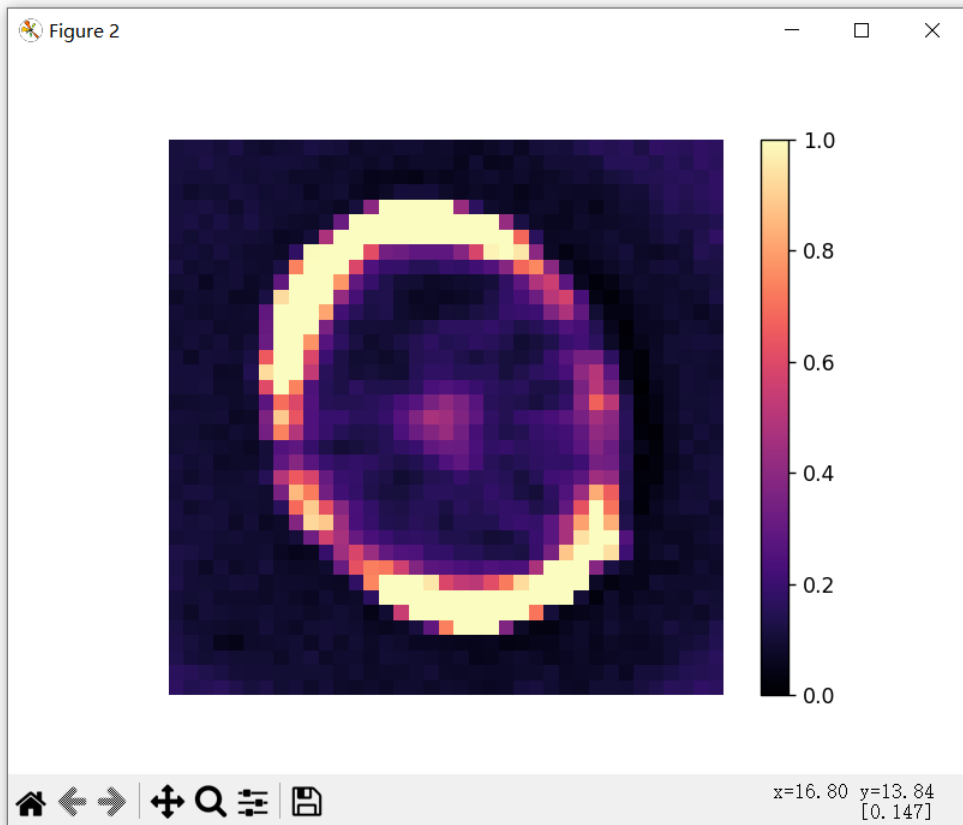
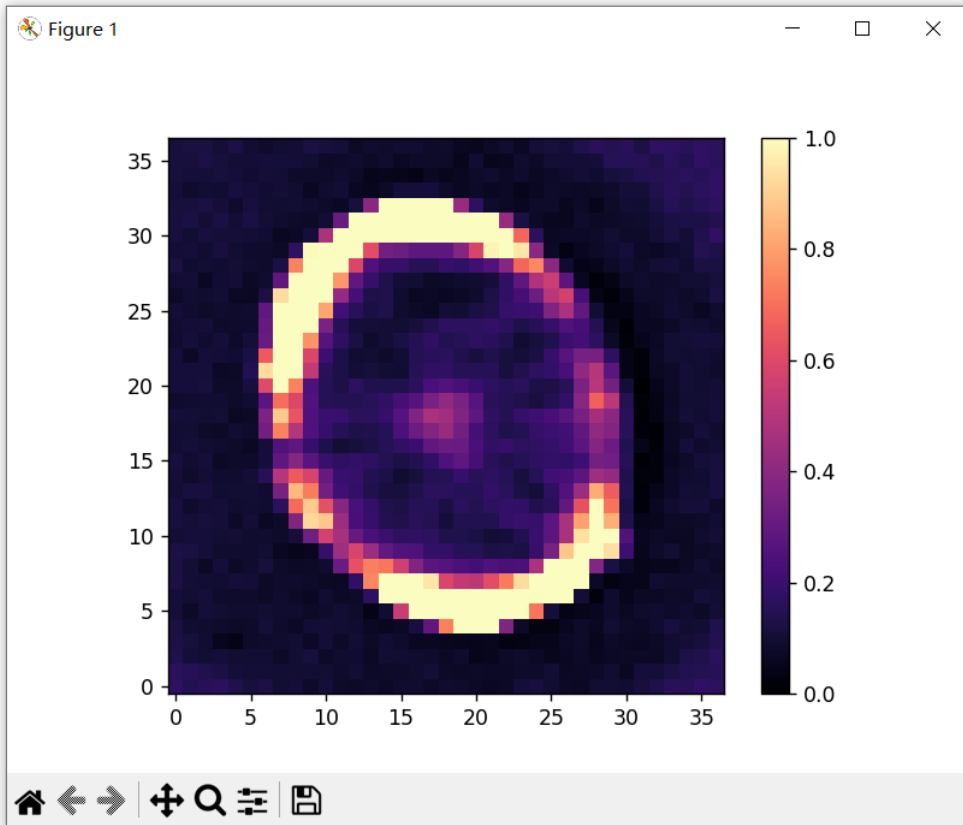
修改为所需通道数, 一般是所需元素能量±20

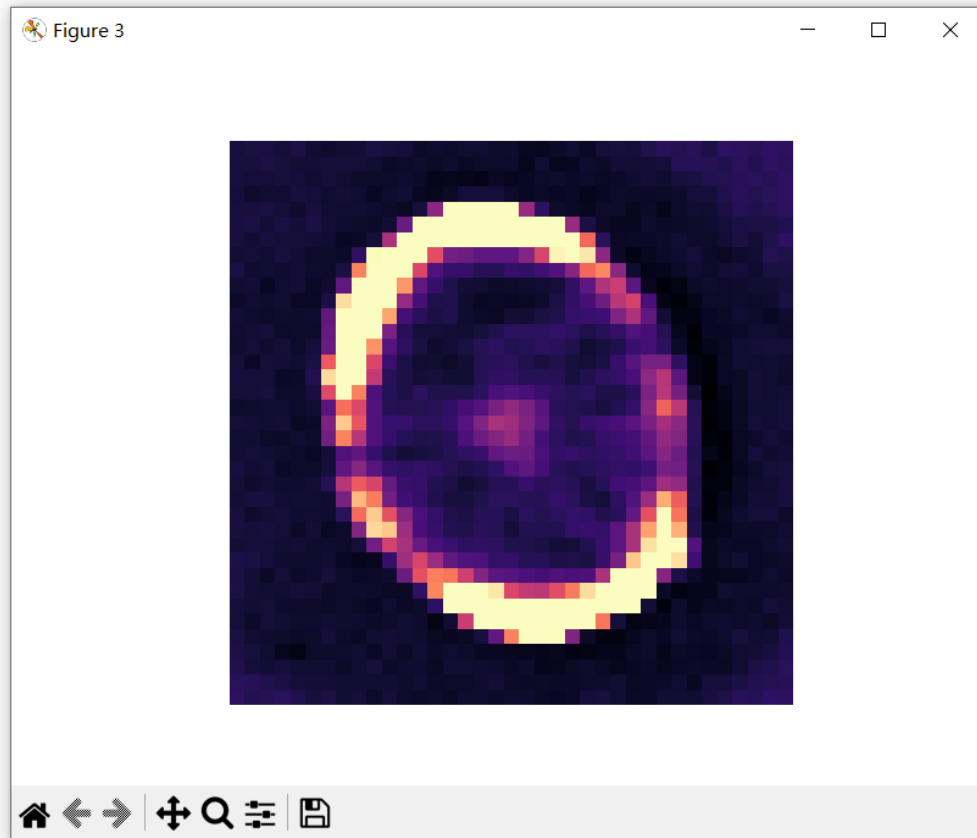
根据实际样品数据调整

根据实际样品数据调整  
(建议: 三个参数可适当设小。  
若结果不理想, 再改大)

②设置好参数后, 保存并关闭配置文件。

③双击可执行程序, 稍作等待, 弹出图片(Figure 1, Figure 2 和 Figure 3)





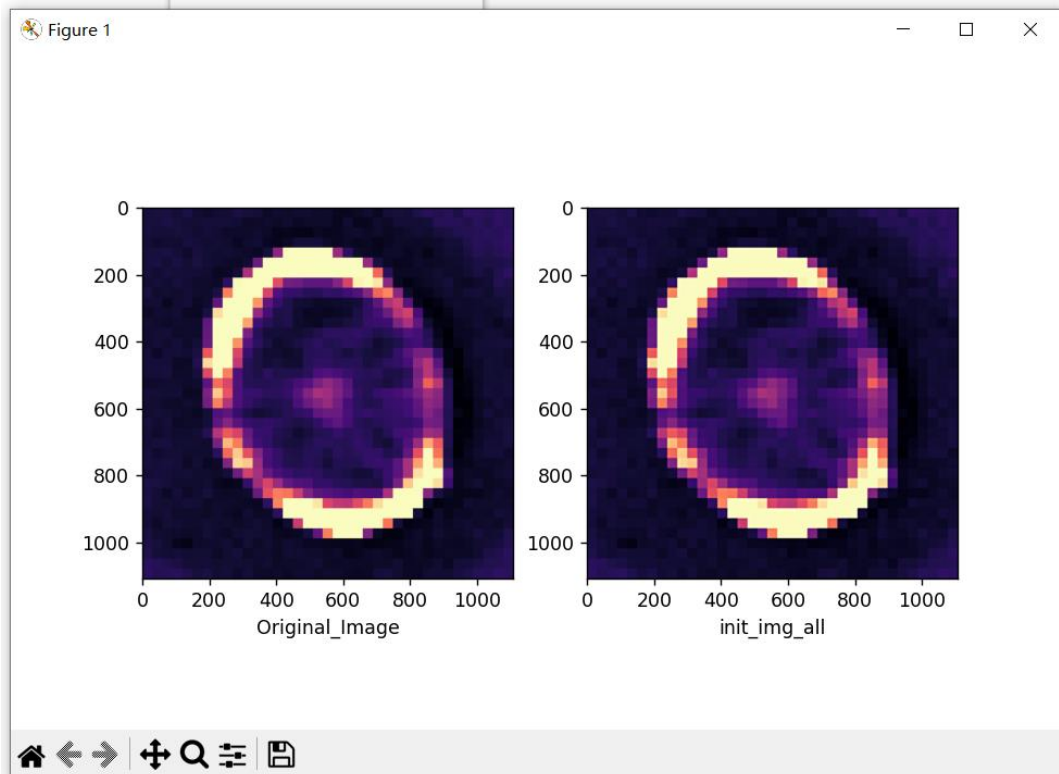
这三幅图是通道加和后的数据处理结果：

Figure 1：带有坐标轴和 color bar








Figure 2：仅有 color bar，没有坐标轴

Figure 3：以上均无，同时该图片作为退卷积的输入图片

④关掉 Figure 3 后，再次弹出图片 Figure 1 (左图为退卷积的输入图片，右图为退卷积的输出图片)



⑤关掉该图片后，在该文件夹下会生成所有的 txt 文件和 png 文件

- 
deconvolved.tif
退卷积的输出图片
- 
adding\_imageonly.png
Figure 3
- 
adding\_axis\_off.png
Figure 2
- 
adding\_axis\_on.png
Figure 1
- 
motor\_relative.txt
电机相对位置
- 
motor\_relative\_raster.txt
电机相对光栅位置
- 
out\_roi\_adding.txt
输出数据文件路径，可用于Origin作图的Z坐标

## 2) 利用 PyMca 软件进行数据处理

对于谱峰新信噪比足够好，并且用户希望做定量分析的数据，可利用 PyMCA 处理。具体数据处理可以通过线站上的电脑，利用高能所计算中心提供的计算资源进行在线数据处理（速度较快），用户也可以在自带电脑上安装 PyMca 软件进行离线数据处理。

4.0 如果需要利用高能所计算中心提供的计算资源进行在线数据处理，首先需要在电脑 2 上登录计算中心服务器，打开终端通过用户 bsrf4w1b 登录 192.168.68.16 服务器，即输入命令如下：

```
$ ssh bsrf4w1b@192.168.68.16 -X
```

输入密码（密码请联系计算中心同事获取）即可登录成功。此时输入命令的行首显示 (base)字样，输入

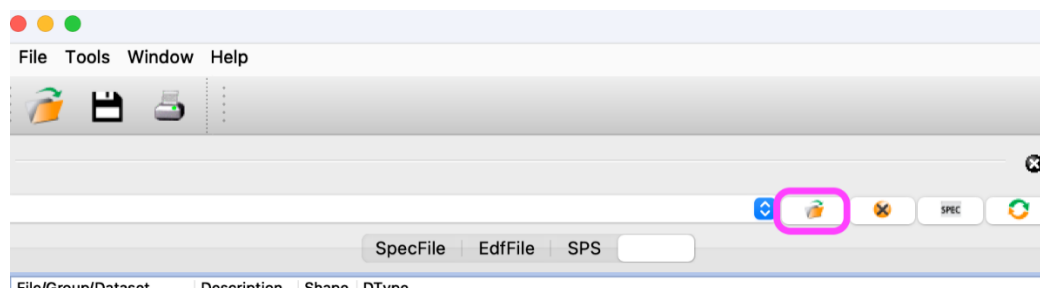
```
$ pymca
```

后启动 PyMca 软件。

如果在自己的电脑上数据处理，则可以自行下载安装 PyMca 软件：

<https://sourceforge.net/projects/pymca/>

### 4.1 导入原始数据（.h5 或.nxs 格式）

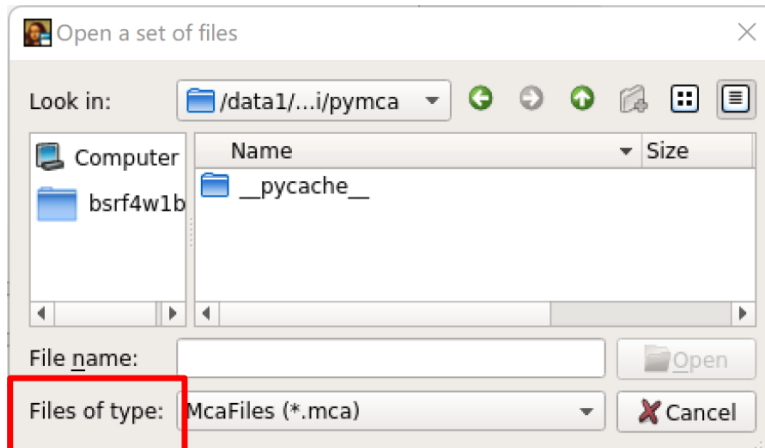


当高能所计算中心提供的计算资源进行在线数据处理时，需要从数据存储服务器中寻找实验数据。用户数据存放在 /hepsfs/bl/4W1B/202210/Data/beam-time-id/raw/（此后简称 **raw** 文件夹）

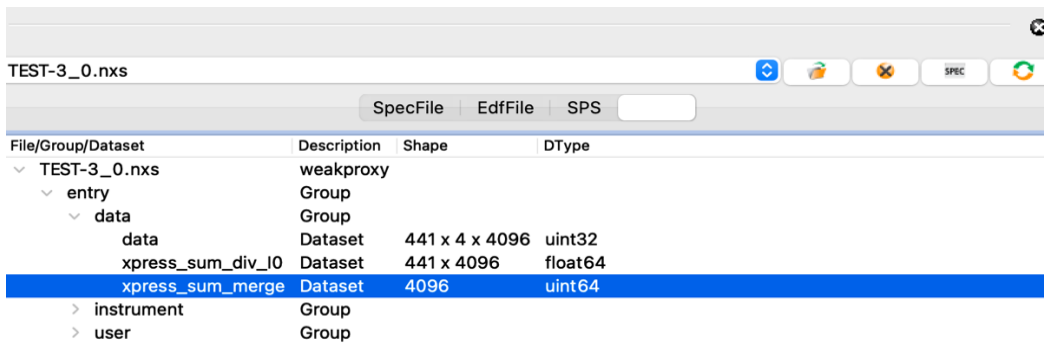
例如： /hepsfs/bl/4W1B/202210/Data/**GB06-20221010-01**/raw/

注：红色加粗部分为 BeamtimeID 示例，不同用户有自己的 BeamtimeID，需要确认该路径中的 BeamtimeID 为自己对应的 ID。

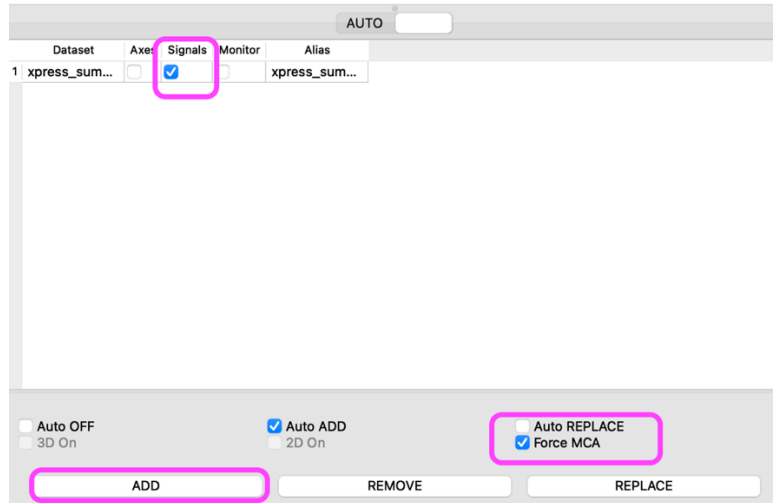
可通过 Files of type 选择输入文件类型，可设置为 All Files(\*)。



4.2 展开数据，双击 xpress\_sum\_merge



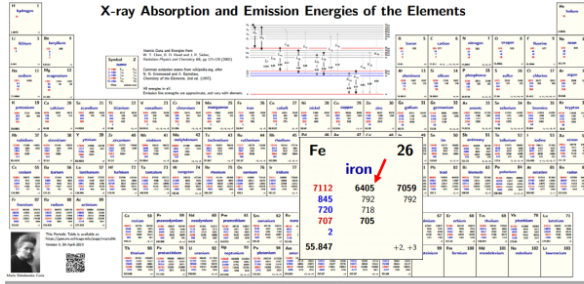
4.3 勾选 Signals，选中 Force MCA，点击 ADD，右侧将出现一维谱



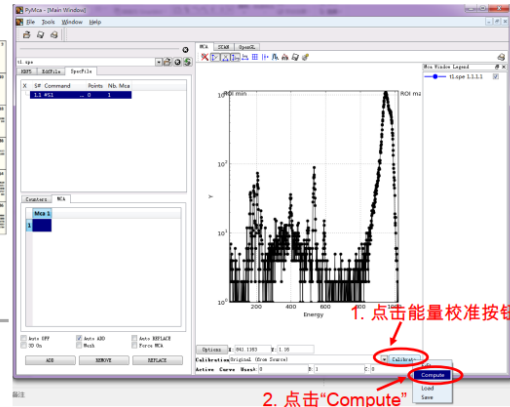
4.4 能量标定

由于 文件中只记录通道数与光子数的信息，因此需要通过“元素发射能量周期表”来确定通道数对应的光子能量

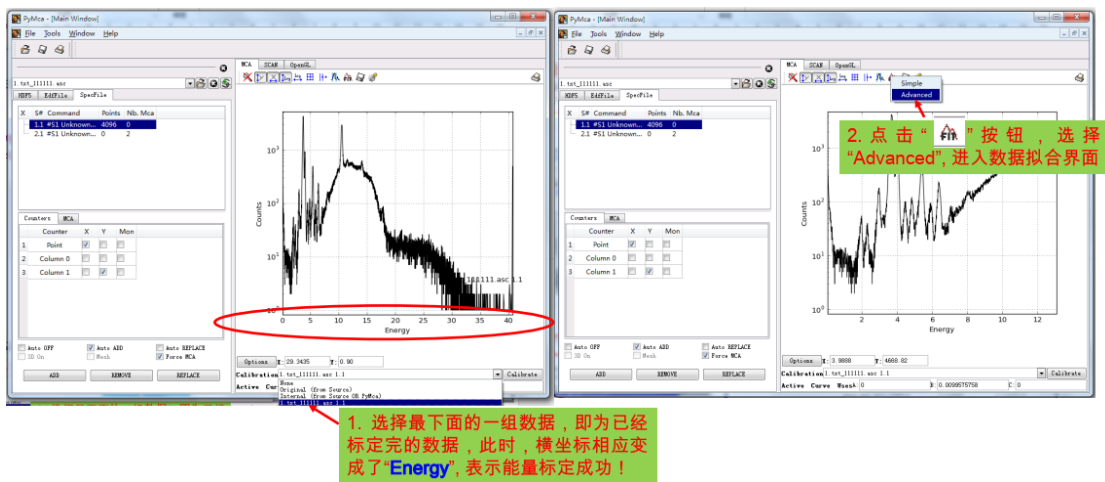
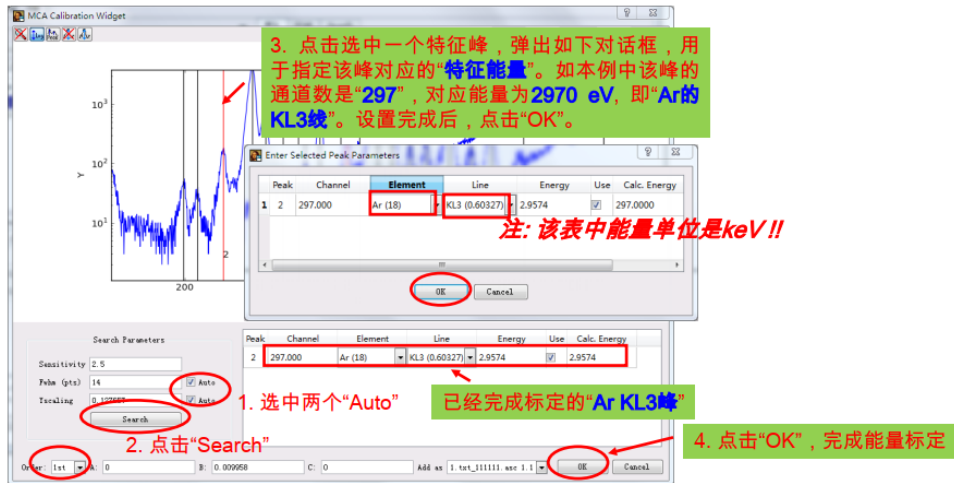
### 元素发射能量周期表



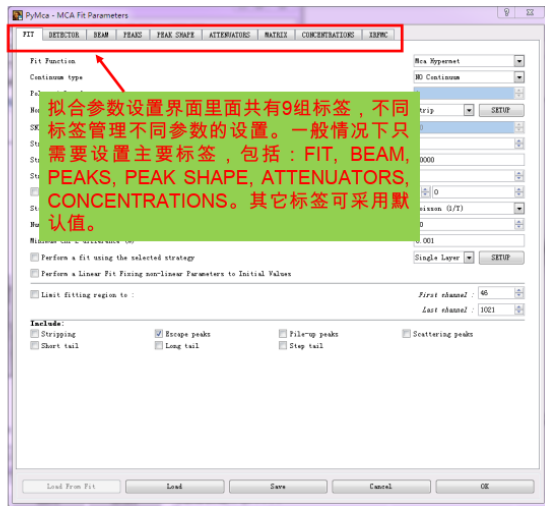
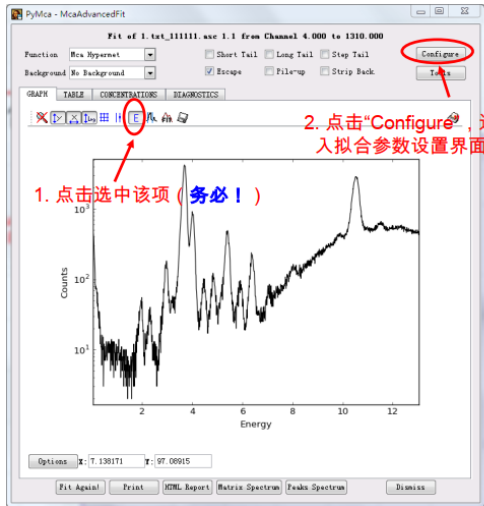
- 表中给出的是每一元素特征谱线对应的能量，单位是eV；
- 以Fe为例，其Kα1对应的能量为6405 eV，则其对应的通道数为6405/10 = 640.5，即两者是10倍的关系！



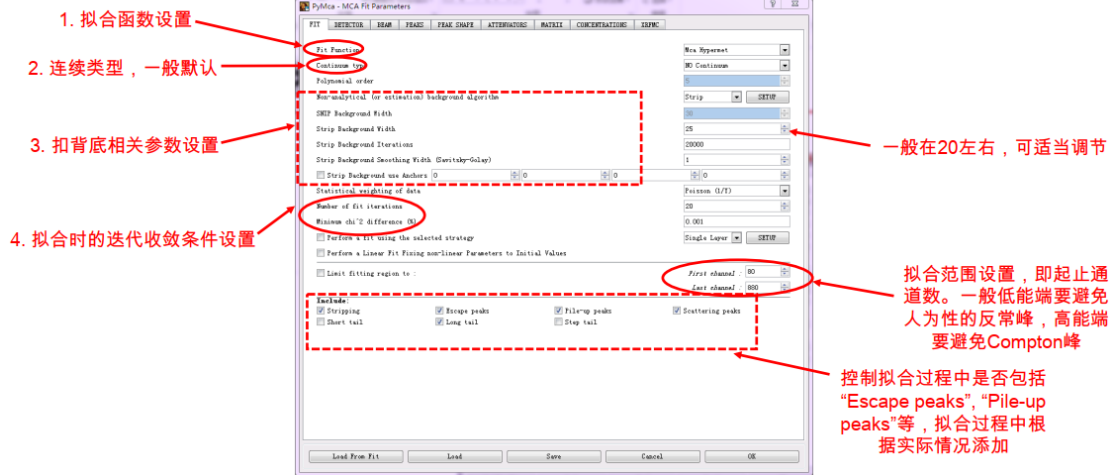
能量标定的基本思想是：仅选中一个特征峰，确定其对应的通道数，标定出能量。最后通过线性函数插值的方法来建立通道数与能量之间一一对应的关系。



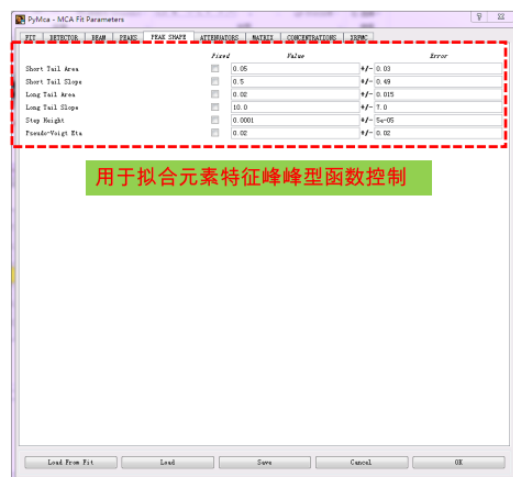
4.5 拟合并生成.cfg 文件（此处仅展示一些基本配置，具体见荧光站数据处理教程第五版）



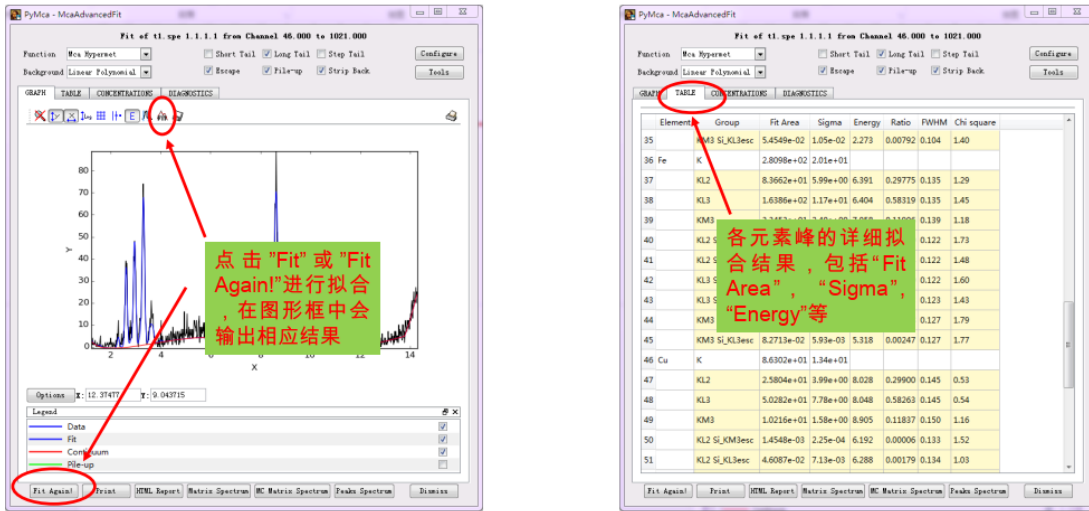
## “FIT”标签设置



## “PEAKS”和“PEAK SHAPE”标签设置

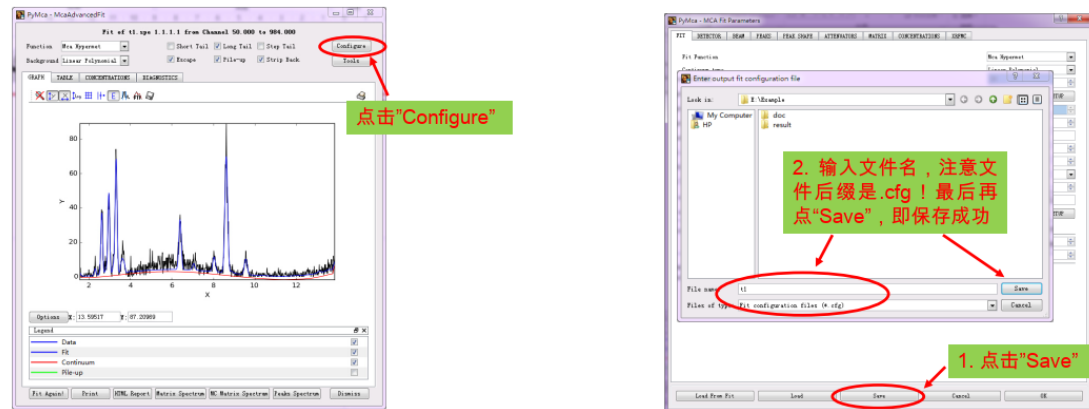


# 拟合



# 保存拟合参数

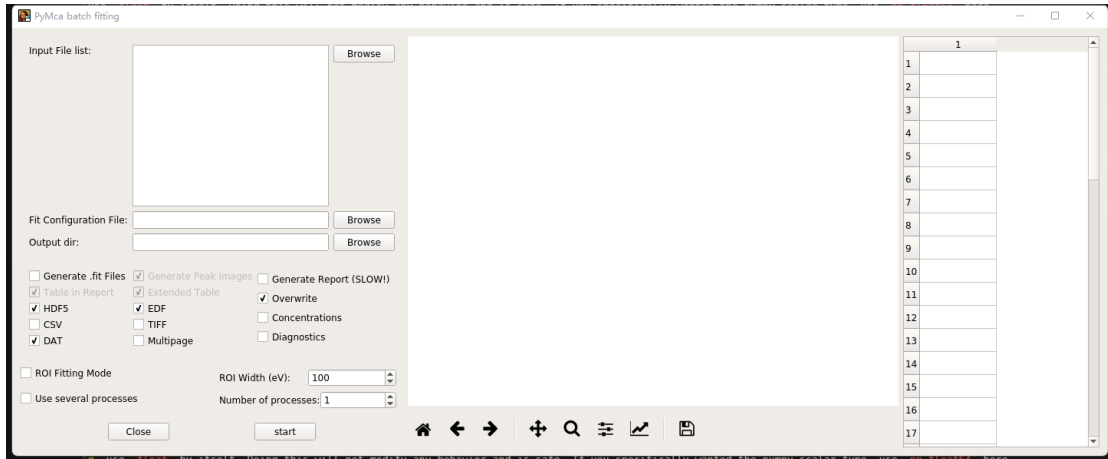
- 保存拟合参数 (文件后缀是.cfg) 的目的:
1. 为下一次拟合提供便利, 只需要对此次参数作相应修改即可;
  2. 批处理数据时需要



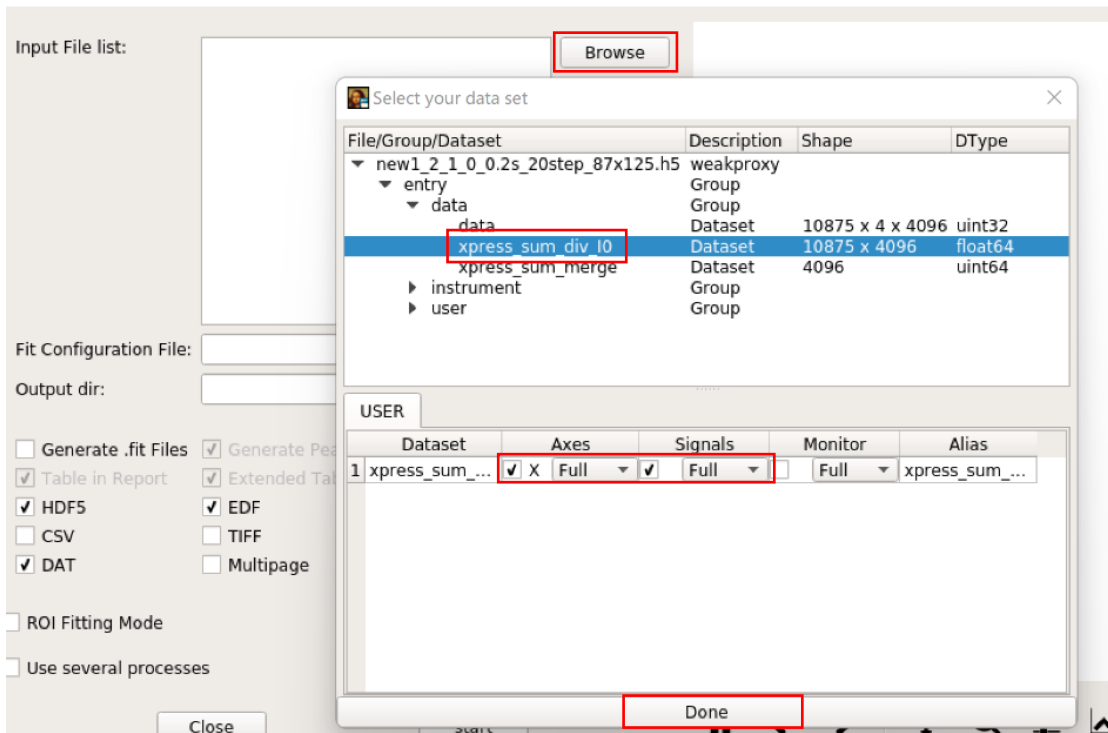
需要注意的是, 在利用高能所计算中心提供的计算资源进行在线数据处理时, 并不是所有的位置都可以存储.cfg 文件。只有/hepsfs/bl/4W1B/202210/Data/beam-time-id/processed/ (此后简称 **processed 文件夹**) 具有写权限, .cfg 文件必须存储在此路径。

## 4.6 批处理

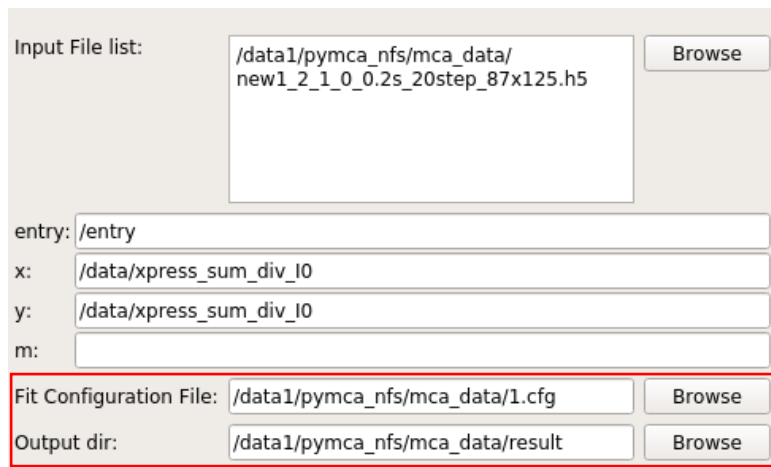
(1) 在上方菜单栏选择 Tools→Batch Fitting, 进入批处理界面 (此处以利用高能所计算中心进行在线数据处理为例, 本机 PyMca 软件没有右侧的图像显示功能)。



(2) 点击最上方的 Browse，在 raw 文件夹中选择输入文件，可通过 Files of type 选择输入文件类型，可设置为 All Files(\*)。展开数据，并在 xpress\_sum\_div\_I0 处双击，下方会出现数据相关信息，按下图进行勾选后点击 Done。

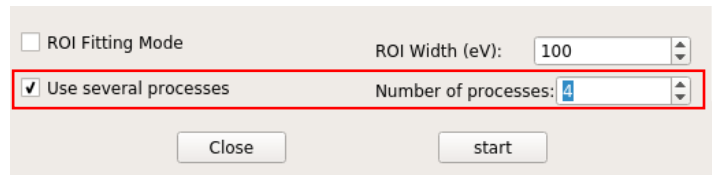


(3) 然后选择.cfg 文件路径和输出文件路径（均在 processed 文件夹中）



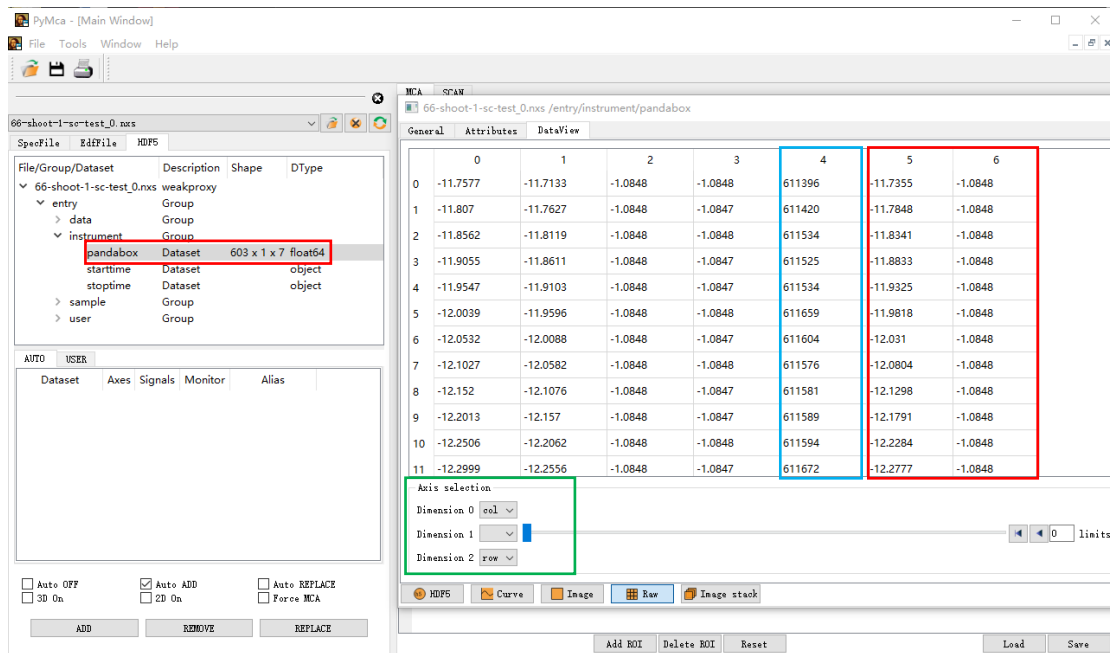
(4) 利用高能所计算中心进行在线数据处理时，可以通过勾选 Use several processes 提高处理速度，需要设置 Number of processes 的数值（100 以内）。

注：processes 数值越大，处理速度越快，但是过多 process 会对进度条弹窗的时间和最后画图数据显示的时间有所影响，只需等待几秒钟即可。



(5) 点击 start 开始批处理，会弹出进度条窗口。（可能需要等待几秒钟，请勿重复点击 start 按钮）

(6) 运行完毕后，会在输出文件路径产生一系列文件，其中.DAT 文件可以用于制图，利用 Origin 制图的方法请参照荧光站数据处理教程第五版。需要注意的是，电机位置存储于原始数据中/entry/instrument/pandabox 中的最后两列。查看该数据时，右键点击 pandabox，选择 show information，然后在下图右侧窗口的 DataView 栏可以查看数据。注意图中下方绿色框中的设置。另外，批处理使用的 xpress\_sum\_div\_I0 数据已经用电离室计数进行过归一化，无需用户再重复进行归一化，直接进行批处理即可。下图蓝色框中的第 4 栏数据为电离室计数，供用户参考。



(7) 利用高能所计算中心进行在线数据处理时，运行完毕后右方表格会自动加载元素数据，可勾选对应元素绘制图像。

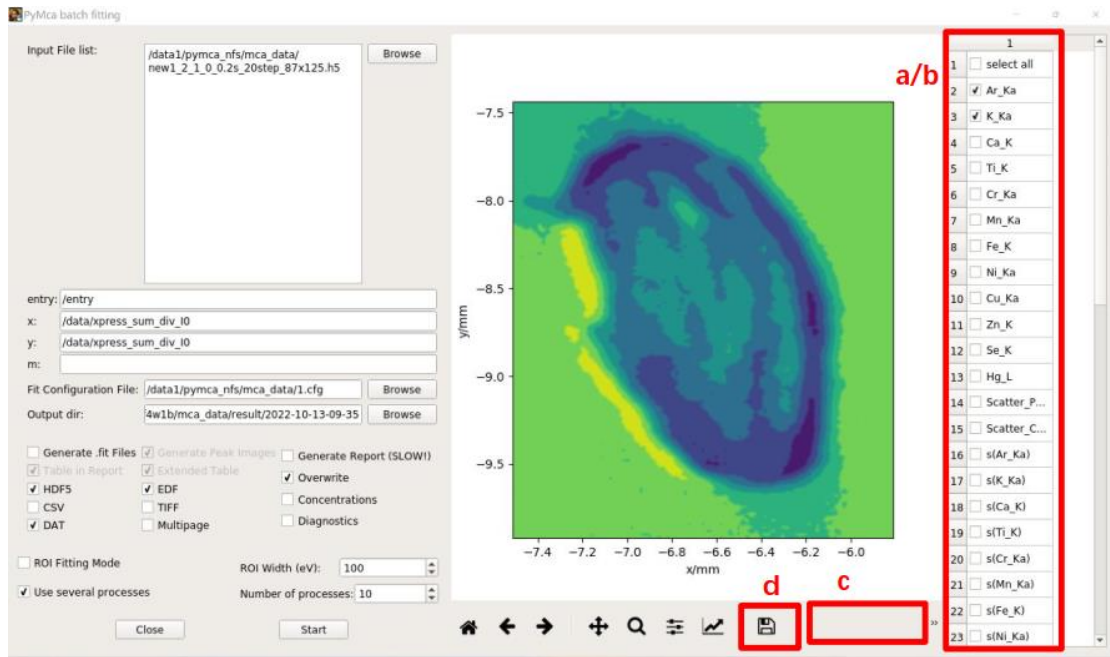
a) 勾选 select all 绘制所有元素重叠的图像，再次点击取消勾选，图像清空。

注：select all 计算会慢一些，需要等待几秒钟出图。

b) 勾选其中一个或多个元素绘制图像。

c) 下方可追随鼠标显示纵横坐标轴及对应像素值数据

d) 可保存当前图像（只能存在 processed 文件夹中）



## 常见故障:

1. 探测器 IOC 故障, Mamba 后端报如下图的错误, Mamba 前端卡死:

```

File Edit View Search Terminal Tabs Help
IPython: mamba/... x mamba@compute... mamba@compute... mamba@compute...

/usr/local/lib/python3.6/site-packages/bluesky/run_engine.py in run(self)
1423
1424     # exceptions (coming in via throw) can be
-> 1425     # raised
1426     new_response = await coro(msg)
1427
# special case 'CancelledError' and let the outer

/usr/local/lib/python3.6/site-packages/bluesky/run_engine.py in _configure(self, msg)
2150     _, obj, args, kwargs, _ = msg
2151
-> 2152     old, new = obj.configure(*args, **kwargs)
2153     if current_run:
2154         await current_run.configure(msg)

/usr/local/lib/python3.6/site-packages/ophyd/device.py in configure(self, d, action)
1425     "configuration fields, so it cannot be "
1426     "changed using configure" % key)
-> 1427     getattr(self, key).set(val, timeout=10).wait()
1428     new = self.read_configuration()
1429     return old, new

/usr/local/lib/python3.6/site-packages/ophyd/status.py in wait(self, timeout)
412     raise WaitTimeoutError("Status has not completed yet.")
413     if self._exception is not None:
--> 414         raise self._exception
415
416     @property

UnknownStatusFailure: The status Status(obj=EpicsSignalWithRBV(read_pv='13XSP3:cam1:Acquire RBV', name='D xsp3 cam acquire', parent='D xsp3 cam', value=1, timestamp=1666520072.516244, auto_monitor=False, string=False, write_pv='13XSP3:cam1:Acquire', limits=False, put_complete=False), done=False, success=False) has failed. To obtain more specific, helpful errors in the future, update the Device to use set_exception(...) instead of _finished(success=False).

In [23]:

```

按以下步骤恢复软件:

- (1) 关闭 Mamba 前端, 在 Mamba Data Worker 的终端窗口中 ctrl+c 终止程序, 在 Mamba

后端的终端窗口 `python` 命令行中输入 `exit`，回车后退出 Mamba 后端；

(2) 打开一个新终端，运行如下命令重启探测器 IOC：

```
$ ioc-stop xsp3
```

```
$ ioc-start xsp3
```

(3) 此时再按照本文档第 3 部分，重新开启 Mamba 并继续实验