XRSProcessTool 使用说明书

> X 射线拉曼散射（XRS）数据处理工具
>
> 版本：1.0

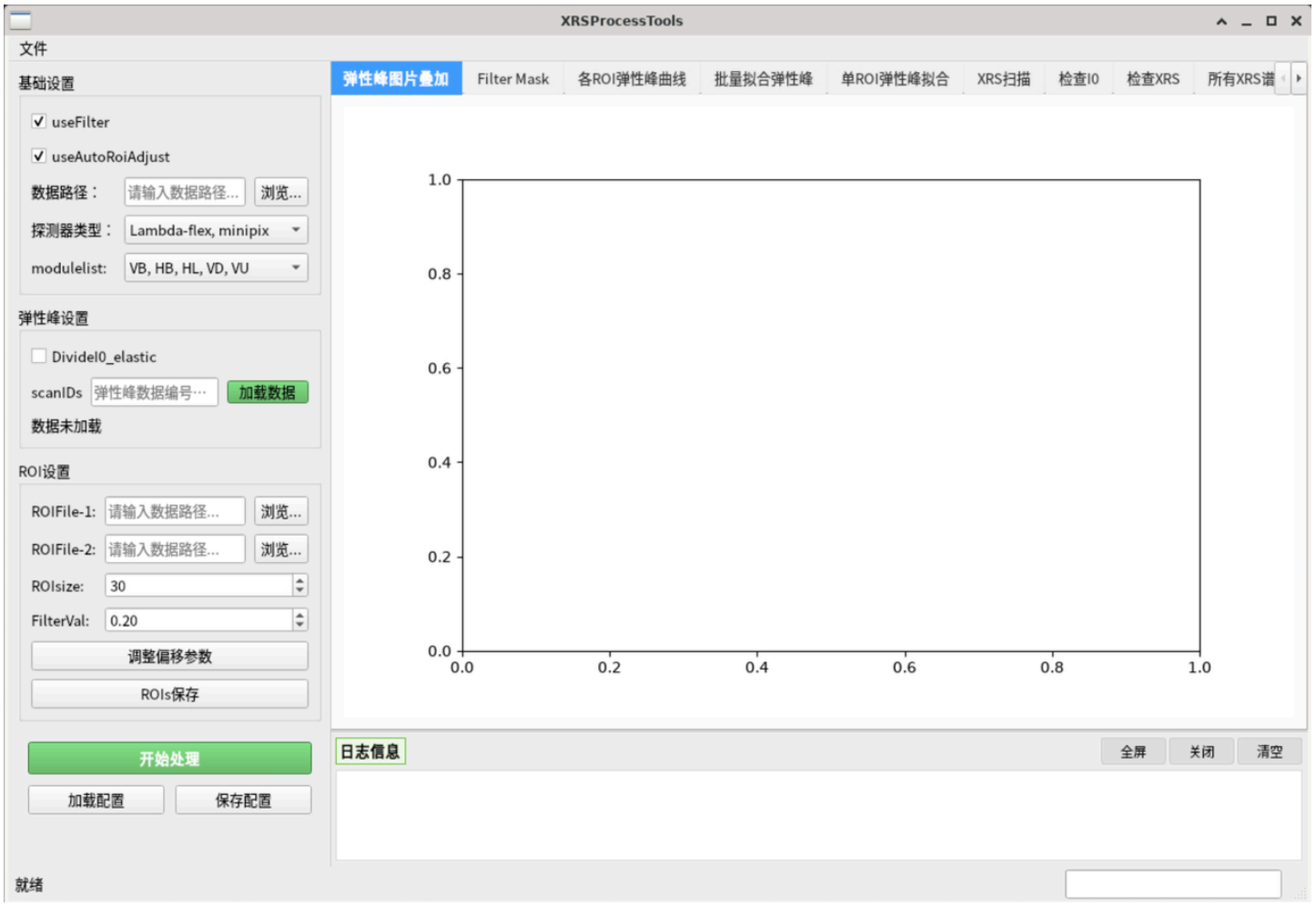
一、软件简介

XRSProcessTool 是用于 B5 光束线 XRS 实验数据处理的桌面软件，主要功能包括：

- 加载弹性峰扫描数据与 XRS 扫描数据（`.nxs` /h5 格式）
- 在 2D 探测器图像上显示/调整 ROI（晶体感兴趣区域）
- 对各 ROI 弹性峰进行洛伦兹拟合，剔除拟合不良的晶体
- 计算动量转移 q，按 q 区间筛选 ROI
- 将多个扫描、多个 ROI 的谱内插叠加，得到最终能量转移谱
- 保存结果(ROI和计算结果)

支持单探测器（det2D）与双探测器（lambda + minipix）两种数据模式，启动时默认为**双探测器模式**。

> 软件主界面全景



二、启动与界面布局

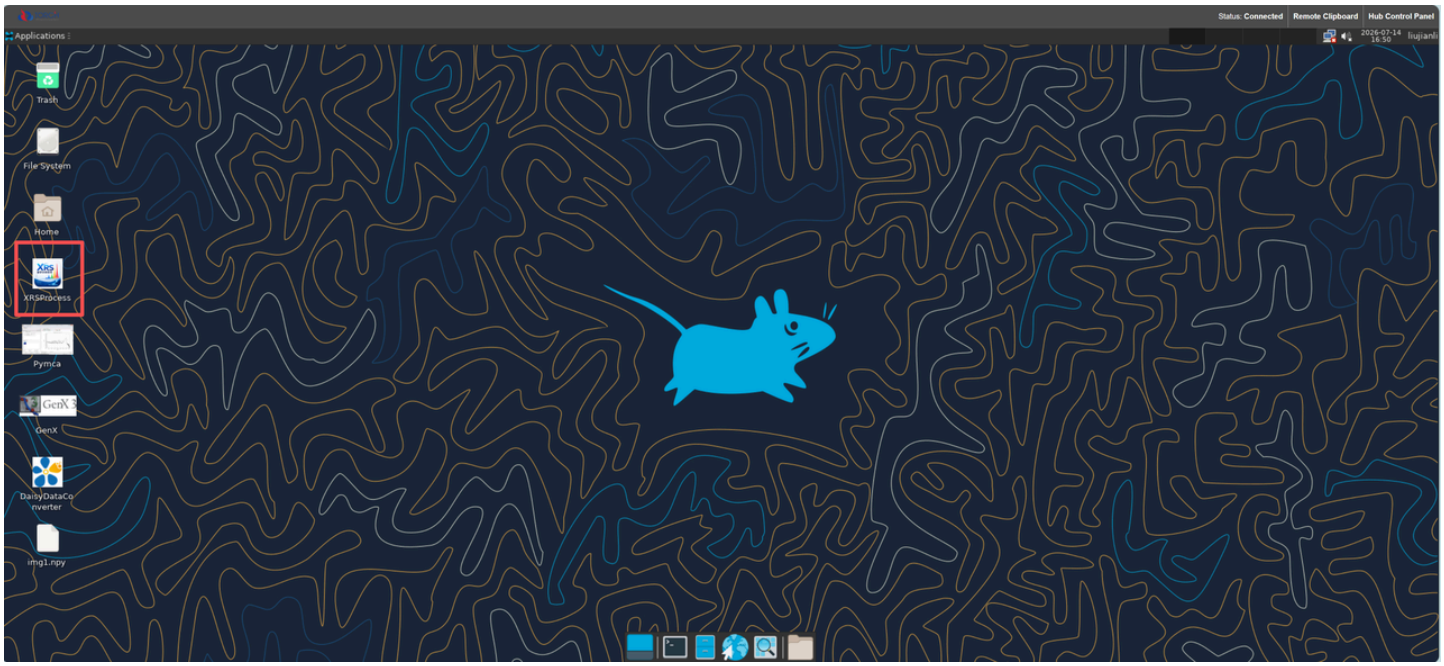
首先在浏览器输入：https://torchdev.heps.ihep.ac.cn/，使用实验账号/统一认证账号登录，在【离线计算服务】选择Genx3这个选项卡：



点击【申请】，一段时间后在页面顶端可以看到已经启动的容器：



点击【访问desktop】，即可在浏览器端打开桌面：



点击桌面图标【XRSProcess】，即可进入软件应用。

容器默认已经加载好/heps/beamline，而且对应的用户目录也已经赋权限，请放心使用。

启动 `XRSProcessTool` 后，主界面分为三部分：

区域	说明
左侧面板	参数设置区，包含若干分组（基础设置、弹性峰设置、ROI设置、拟合设置、XRS扫描设置、最终谱等），随右侧标签页切换而自动显示/隐藏对应分组
右侧上方	标签页区，共 11 个标签页，从左到右对应处理流程的先后顺序

右侧下方	日志面板，记录操作信息与报错（可清空）
底部状态栏	进度条

界面顶部菜单栏：**文件** → 保存结果 / 退出。

三、核心操作逻辑

1.「开始处理」按钮只处理当前标签页

「开始处理」不会自动跑完整个流程，它只会执行**当前选中的右侧标签页**对应的处理步骤。所以完整流程需要**手动、从左到右依次点击各标签页的「开始处理」**。

每个标签页处理时，按钮变红显示「执行中」并禁用，完成后恢复绿色。

2. 两个「加载数据」按钮分别加载不同数据

- **弹性峰设置区** 的「加载数据」：加载弹性峰扫描（用于 ROI 定位、弹性峰拟合）
- **XRS扫描设置区** 的「加载数据」：加载 XRS 扫描（用于最终谱）

两份数据都要加载，缺一不可。

3. 数据复用

加载过的数据会保留在内存中，后续标签页直接复用，无需重复加载。修改左侧参数后，需重新点「开始处理」对应标签页才会生效。

四、数据准备

软件默认数据目录为以下结构（需要将目录选择为raw的上一层目录）：

代码块

```
data/
├── raw/                    # 原始扫描数据
│   └── 11050_scan_*.nxs # 每个扫描一个 .nxs 文件
└── processed/              # 处理结果输出目录
```

- **原始数据**：放在 `raw/` 下，文件名形如 `扫描号_scan_时间戳_序号.nxs`

- **ROI 文件**：制表符分隔的 `.txt`，每行一个晶体，列为 `roi_label, x1, x2, y1, y2, x_shift, y_shift, x_expand, y_expand`。软件自带示例 ROI 文件位于 `XRSProcess/ROI/` 目录（如 `roi_60crystals-v3.txt`、`roi_minipix-v3-2.txt`）。

> ROI 文件示例（前几行）：
>
> 代码块
>
> ```
> roi_label  x1  x2  y1  y2  x_shift  y_shift  x_expand  y_expand
> VB-A1      35  66   3  31    0         0         0         0
> VB-A2     112 144  57  86    0         0         0         0
> ```

五、完整操作流程

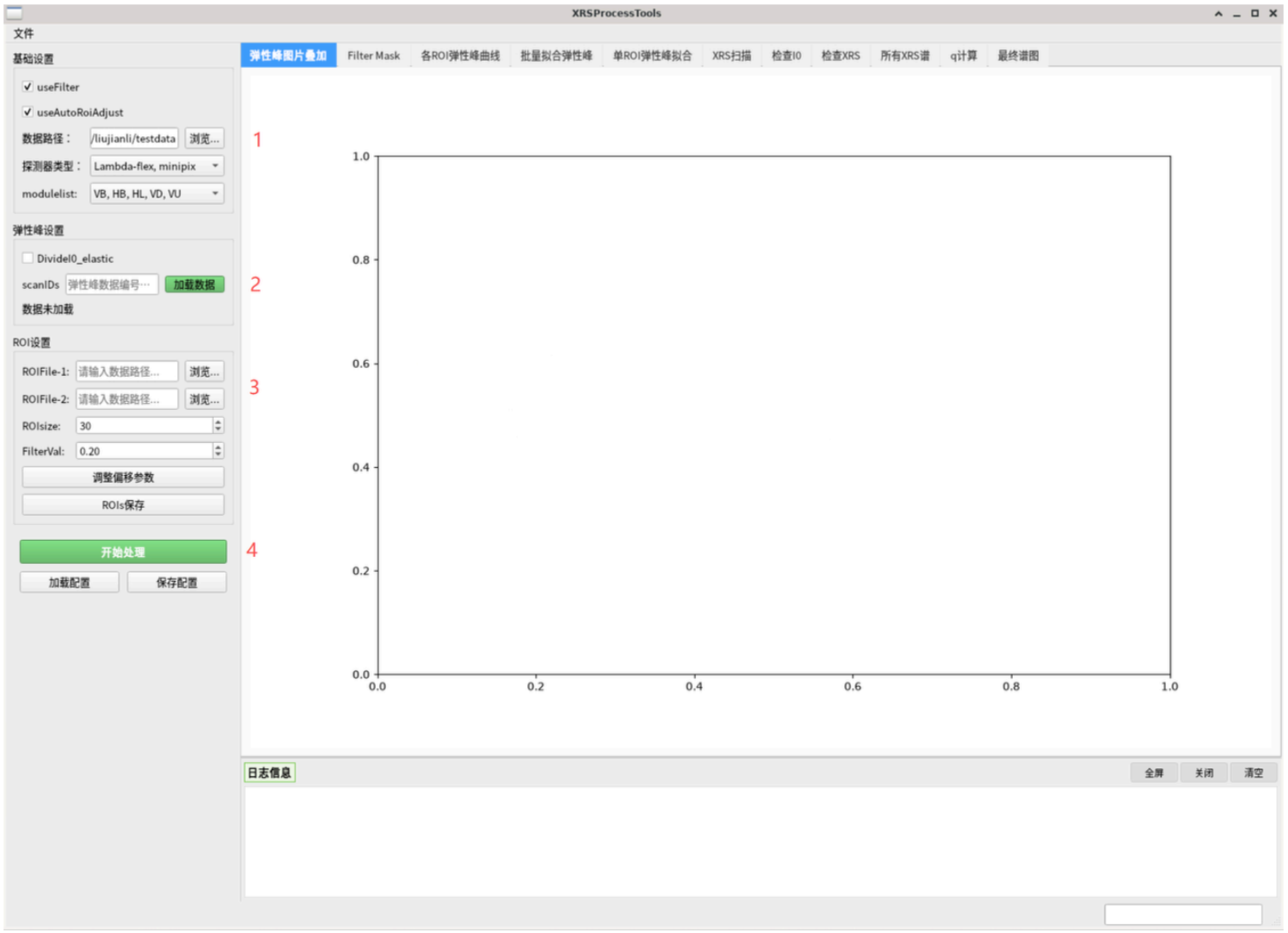
下面按推荐的先后顺序，逐步说明每个标签页的操作。流程主线：

全局的处理顺序：

设基础参数 → 加载弹性峰数据 → (标签0~4) ROI定位与拟合 → 加载XRS数据 → (标签5~8) XRS检查 → (标签9~10) q计算与最终谱 → 保存结果

简单处理总结就是1-2-3-4，设置数据路径-加载具体数据-设置ROI文件-处理

（其他步骤：修改参数-处理）



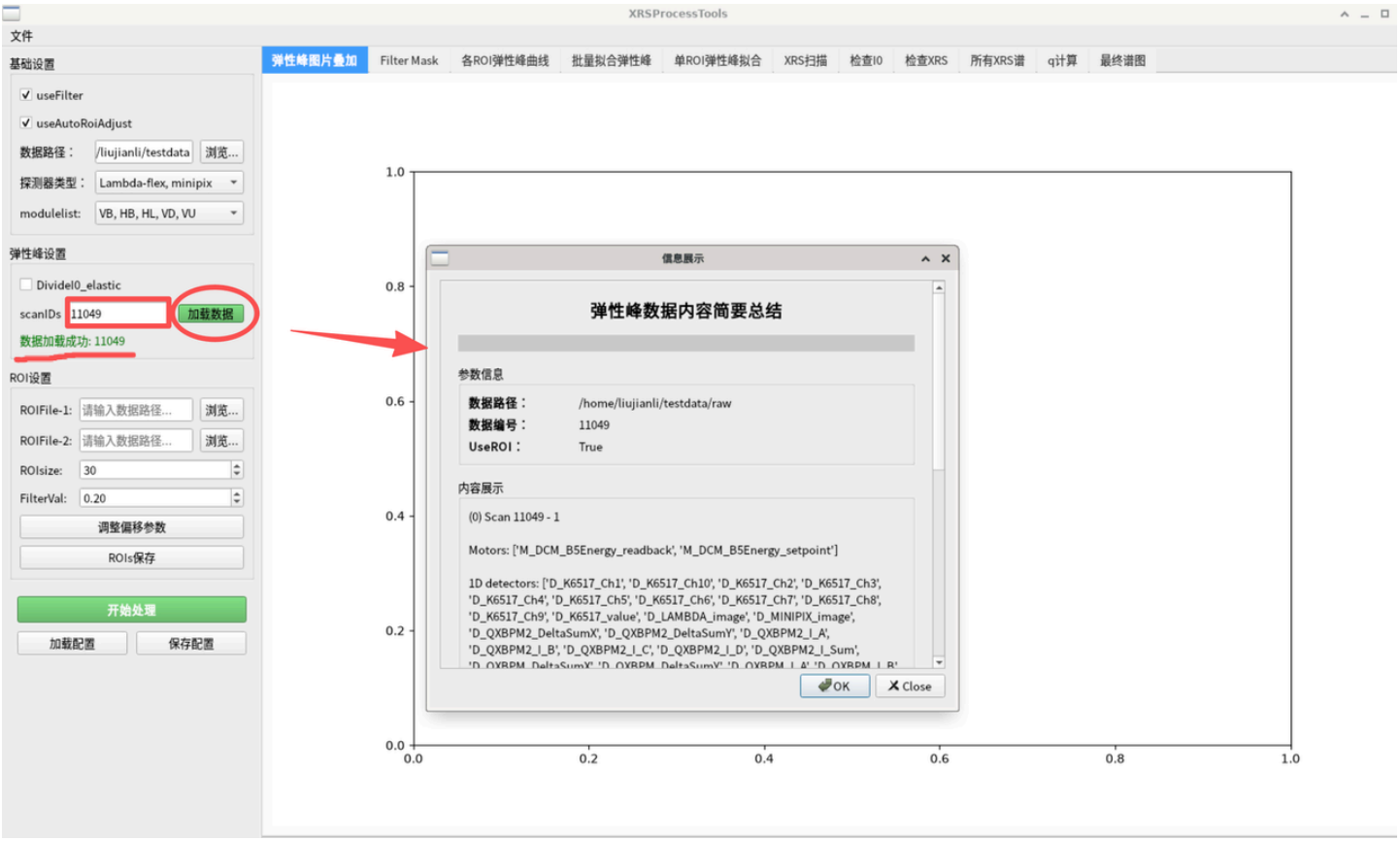
步骤 0：基础设置（基础设置分组）

在左侧「基础设置」分组设置：

参数	说明	默认值
`useFilter`	是否用 ROI 方框内强度高于阈值的像素做 mask 取数（建议勾选）	✅
`useAutoRoiAdjust`	是否自动调整 ROI 方框位置/大小到最亮像素（建议勾选）	✅
数据路径	数据根目录（指向 raw目录的上一层文件夹）	…/data
探测器类型	`Lambda-flex` （单）/ `Lambda-flex, minipix` （双）/ `Lambda-flex-2, minipix` （双）	`Lambda-flex, minipix`
modulelist	选用哪些模组， `VB,HB,HL,VD` 或 `VB,HB,HL,VD,VU`	含 VU

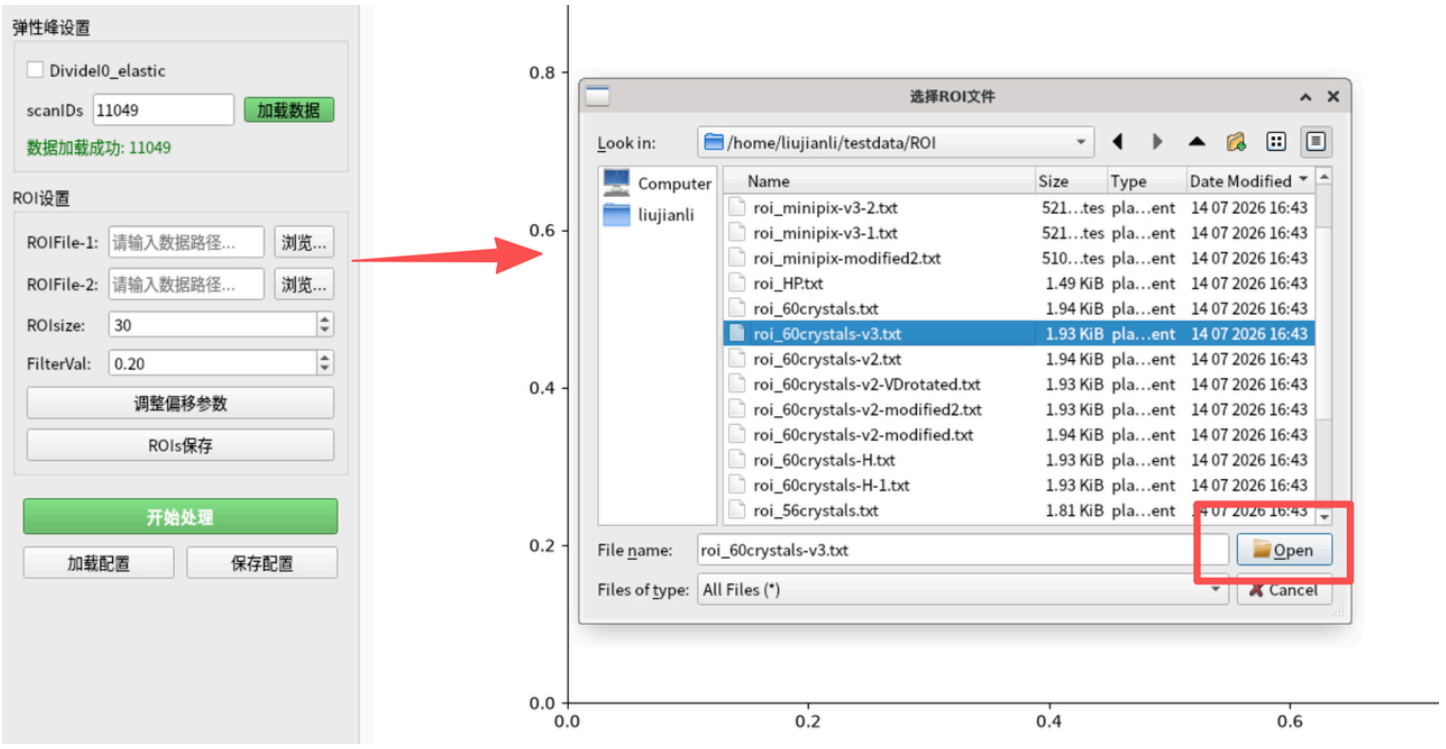
步骤 1：加载弹性峰数据（弹性峰设置分组）

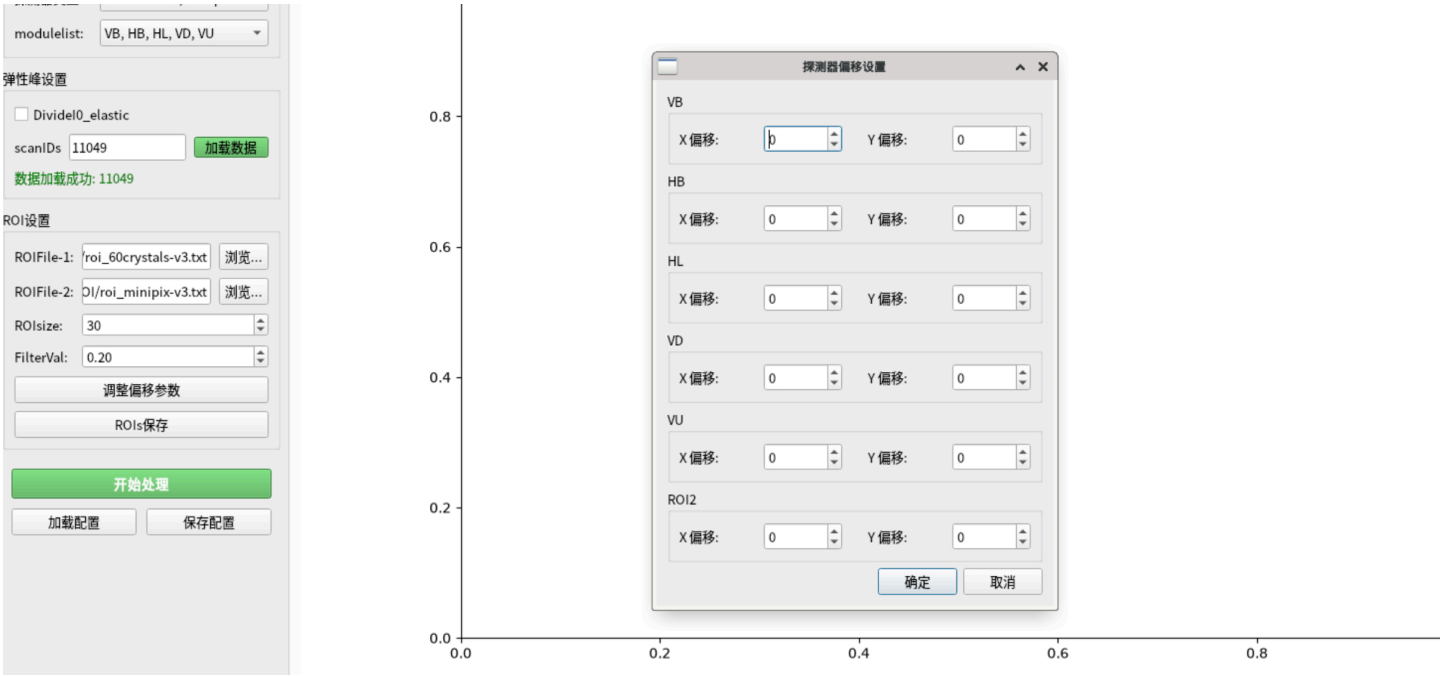
1. 选择数据路径（raw的上一层目录）
2. 在「scanIDs」输入弹性峰扫描号（单个，如 `11049`）
2. 按需勾选 `DivideI0_elastic`（按 I0 归一化弹性峰数据）
3. 点击绿色「加载数据」按钮
4. 状态标签变绿「数据加载成功: 扫描号」即成功，并弹出内容总结窗



步骤 2：ROI 设置（ROI设置分组）

控件	说明
`ROIFile-1` 浏览	选择主探测器 ROI 文件（必填）
`ROIFile-2` 浏览	选择第二个探测器(minipix) ROI 文件（双探测器模式下显示，必填）
`ROIsize`	自动调整时 ROI 方框的像素边长（10–100，默认 30）
`FilterVal`	过滤阈值（0–1，默认 0.2）：ROI 内强度高于 `FilterVal × 最大强度` 的像素才计入
调整偏移参数	弹出对话框，设置各模组（VB/HB/HL/VD/VU/ROI2）的 x、y 偏移，用于对齐
`ROIs保存`	把在标签页0 中拖动调整过的 ROI 几何导出为新文件



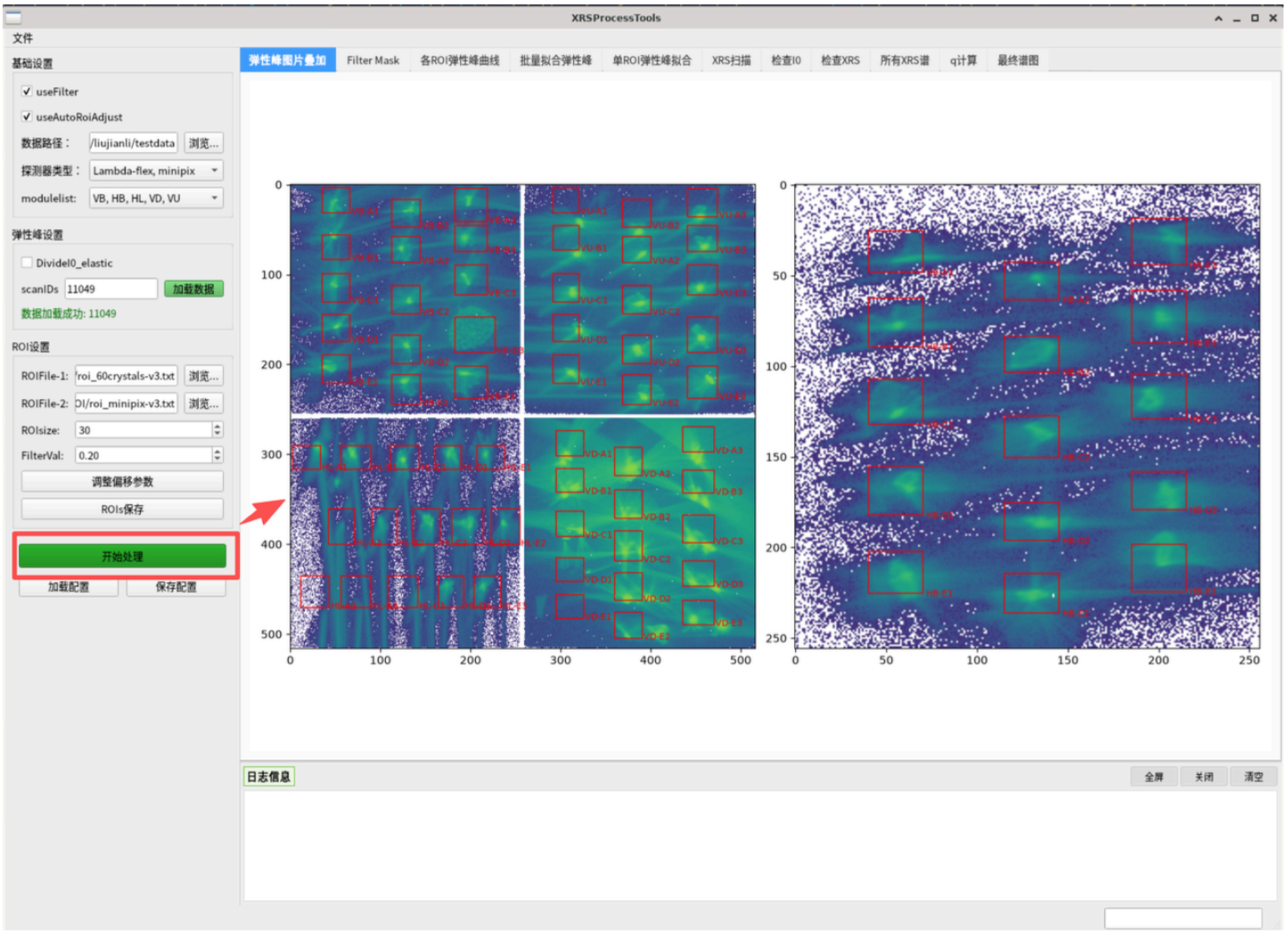


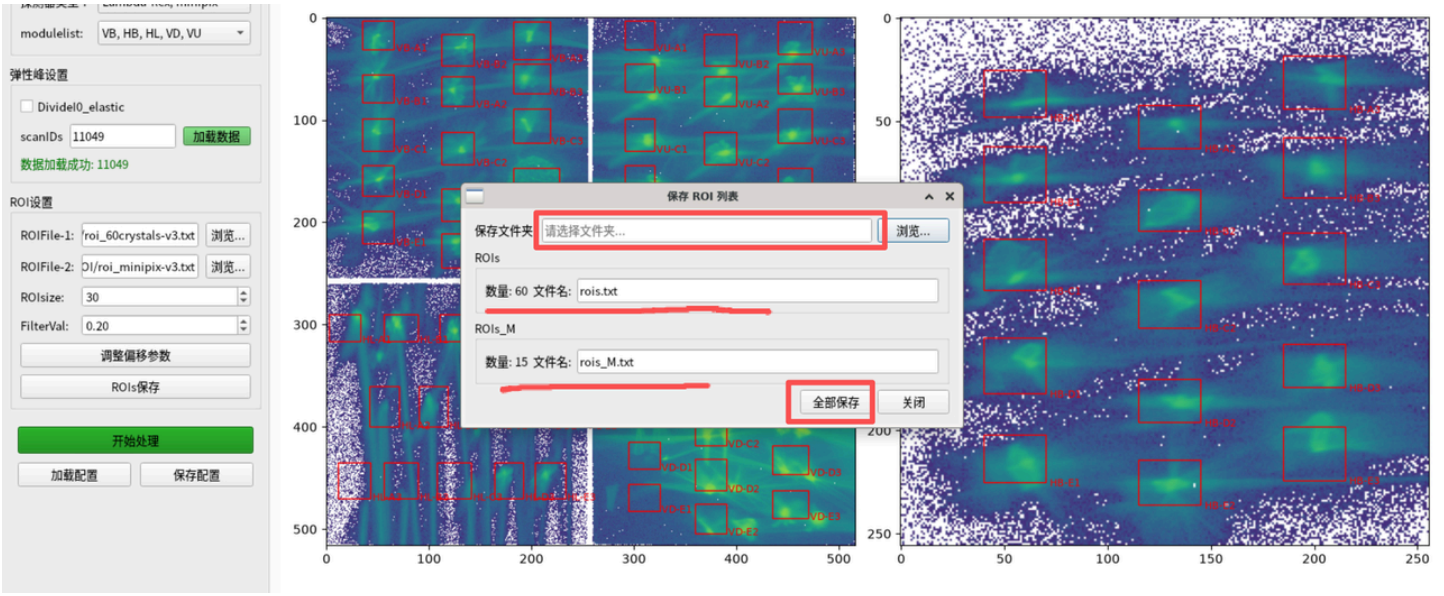
标签页 0：弹性峰图片叠加

第一个可视化步骤。选中本标签后点「开始处理」，显示弹性峰扫描的 2D 探测器图像（对数刻度叠加图），并叠加红色 ROI 方框与标签。双探测器模式下左右各显示一张（lambda / minipix）。

- **ROI 可交互**：可直接在图上拖动 ROI 方框调整位置
- 调整后可用「ROIs保存」导出更新后的 ROI 文件

> **标签页0（2D图像 + ROI 叠加）**



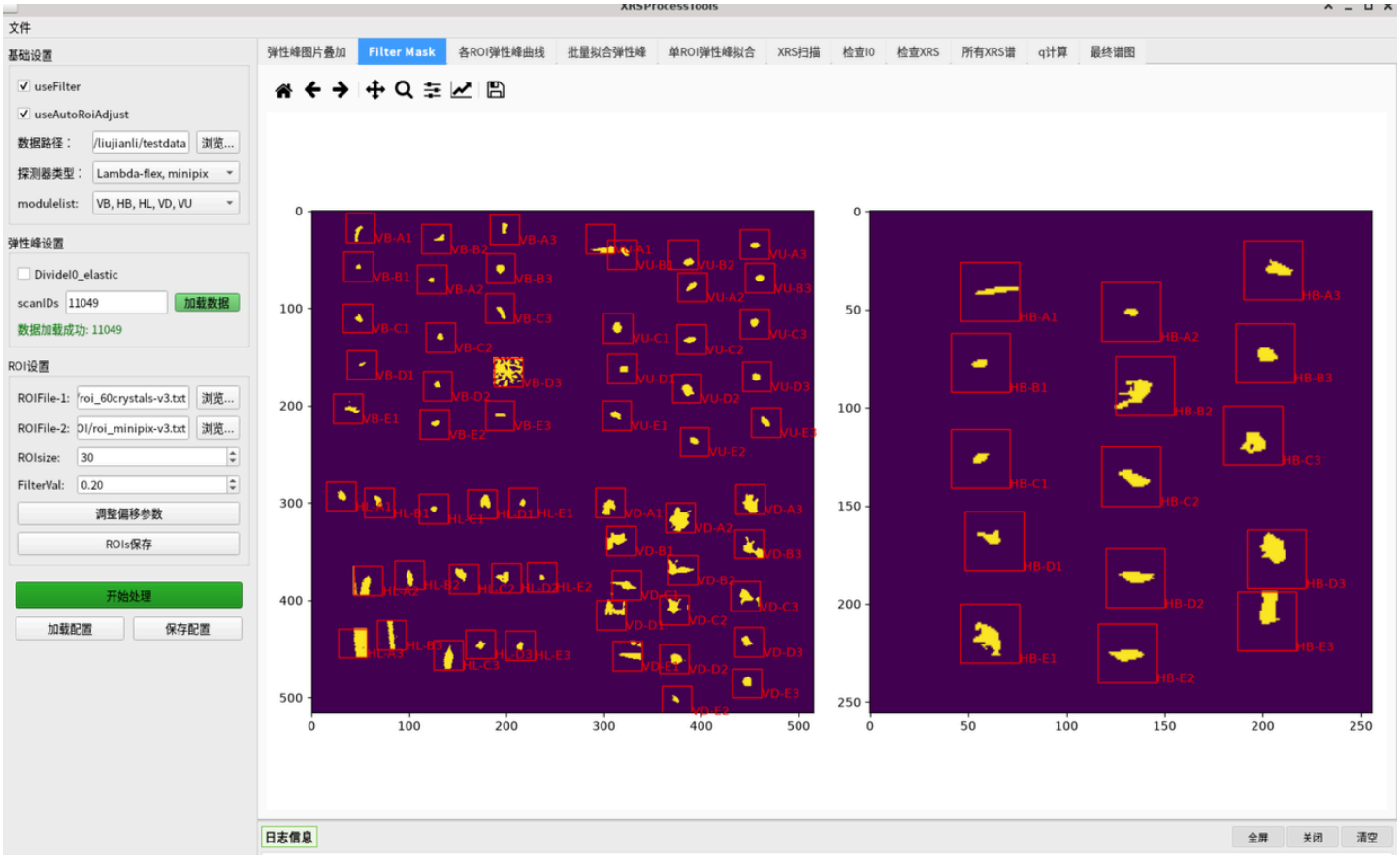


标签页 1：Filter Mask

显示过滤 mask（通过 `FilterVal` 阈值的像素）叠加图，同样叠加 ROI 方框。若勾选了 `useAutoRoiAdjust`，ROI 会自动居中到最亮像素并按 `ROIsize` 重设大小。

- 用此页检查 mask 质量，必要时调大/调小 `FilterVal` 或 `ROIsize` 后重新处理

> 标签页1（Filter Mask 叠加图）



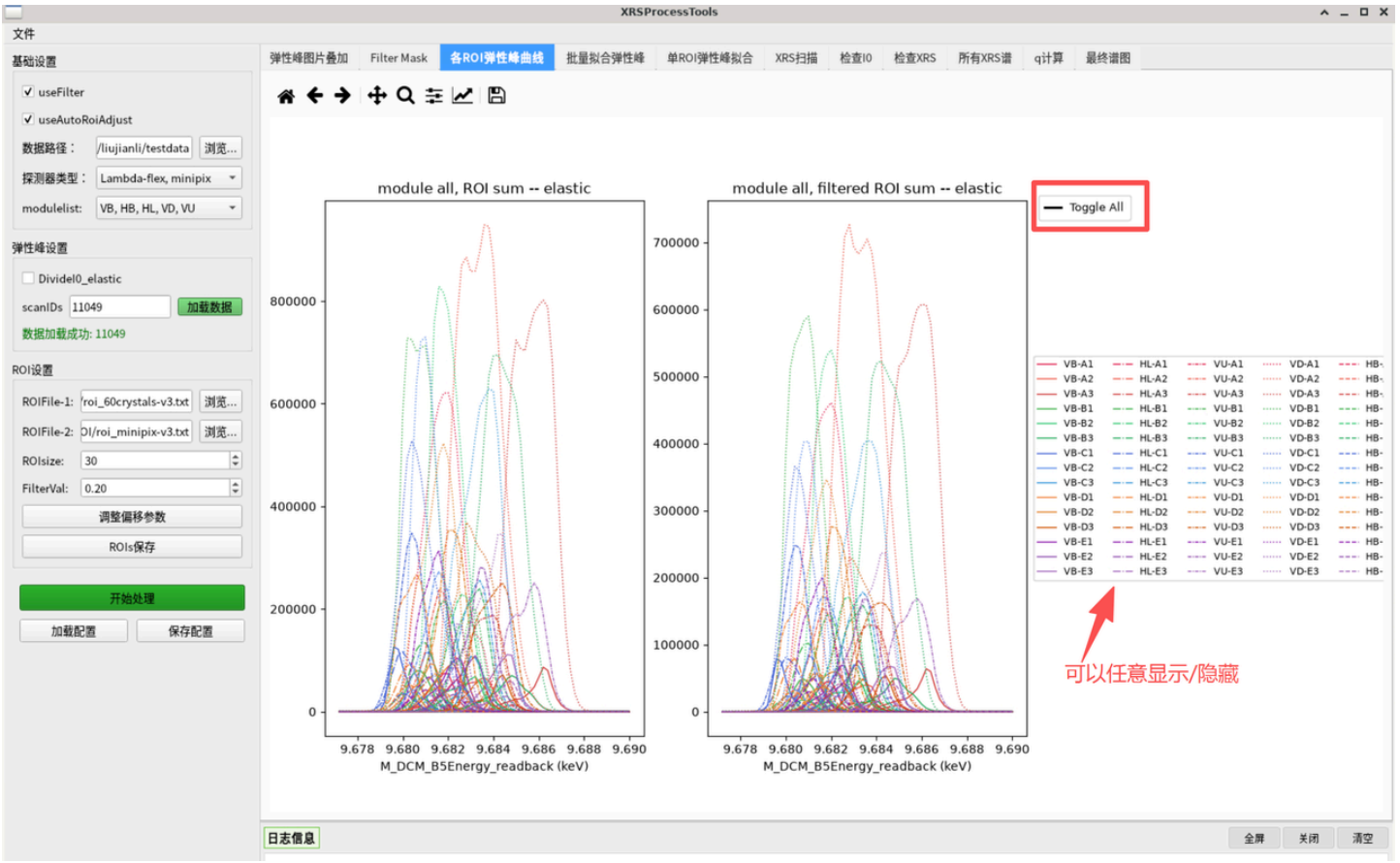
标签页 2：各ROI弹性峰曲线

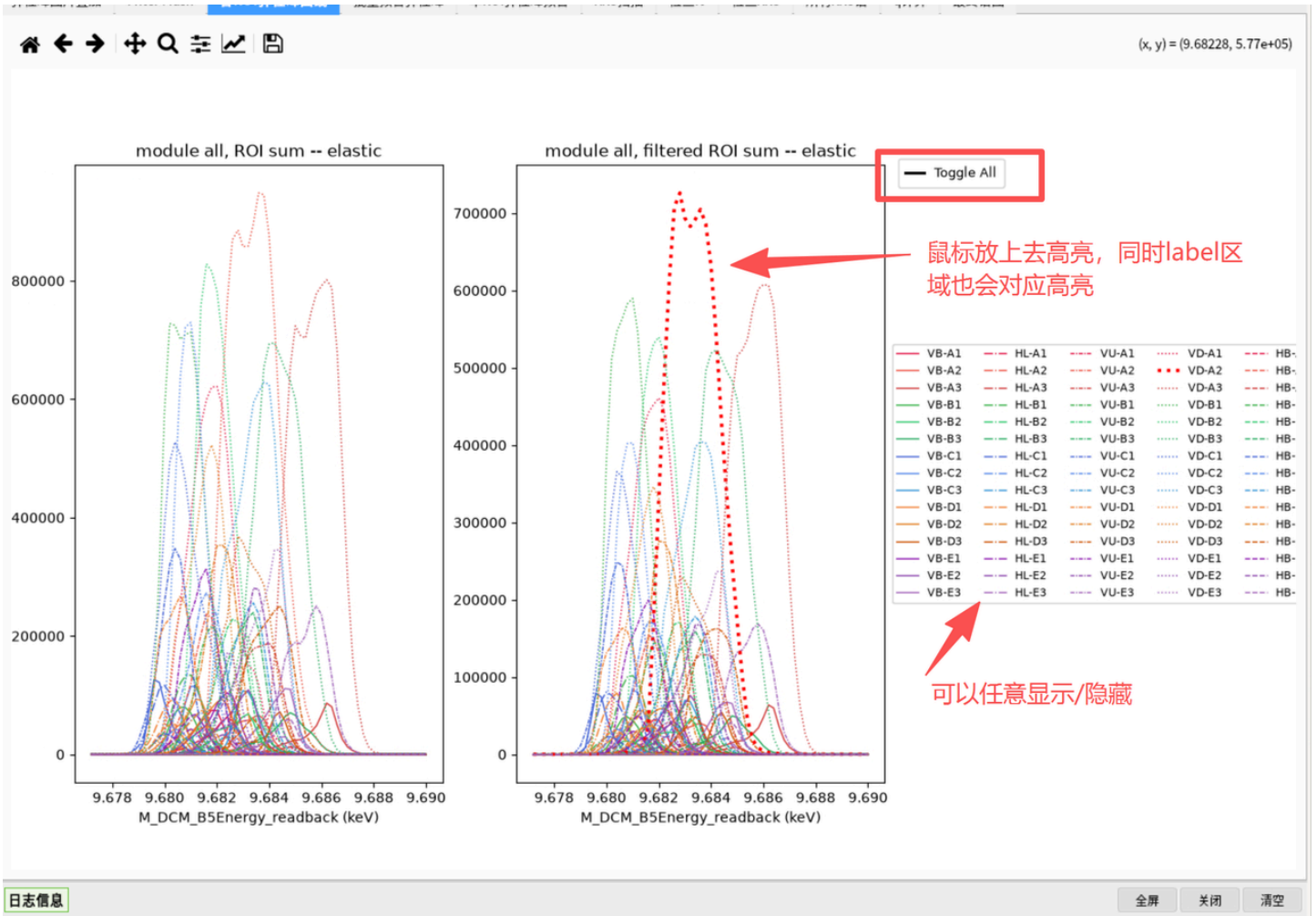
显示每个 ROI 的弹性峰曲线：左图为原始 ROI 求和，右图为过滤后求和。

交互功能：

- **鼠标悬停**曲线 → 高亮变红加粗
- **点击图例短线** → 切换该曲线显示/隐藏
- **点击「Toggle All」图例** → 一键显示/隐藏全部曲线

> 标签页2（各 ROI 弹性峰曲线）





标签页 3：批量拟合弹性峰

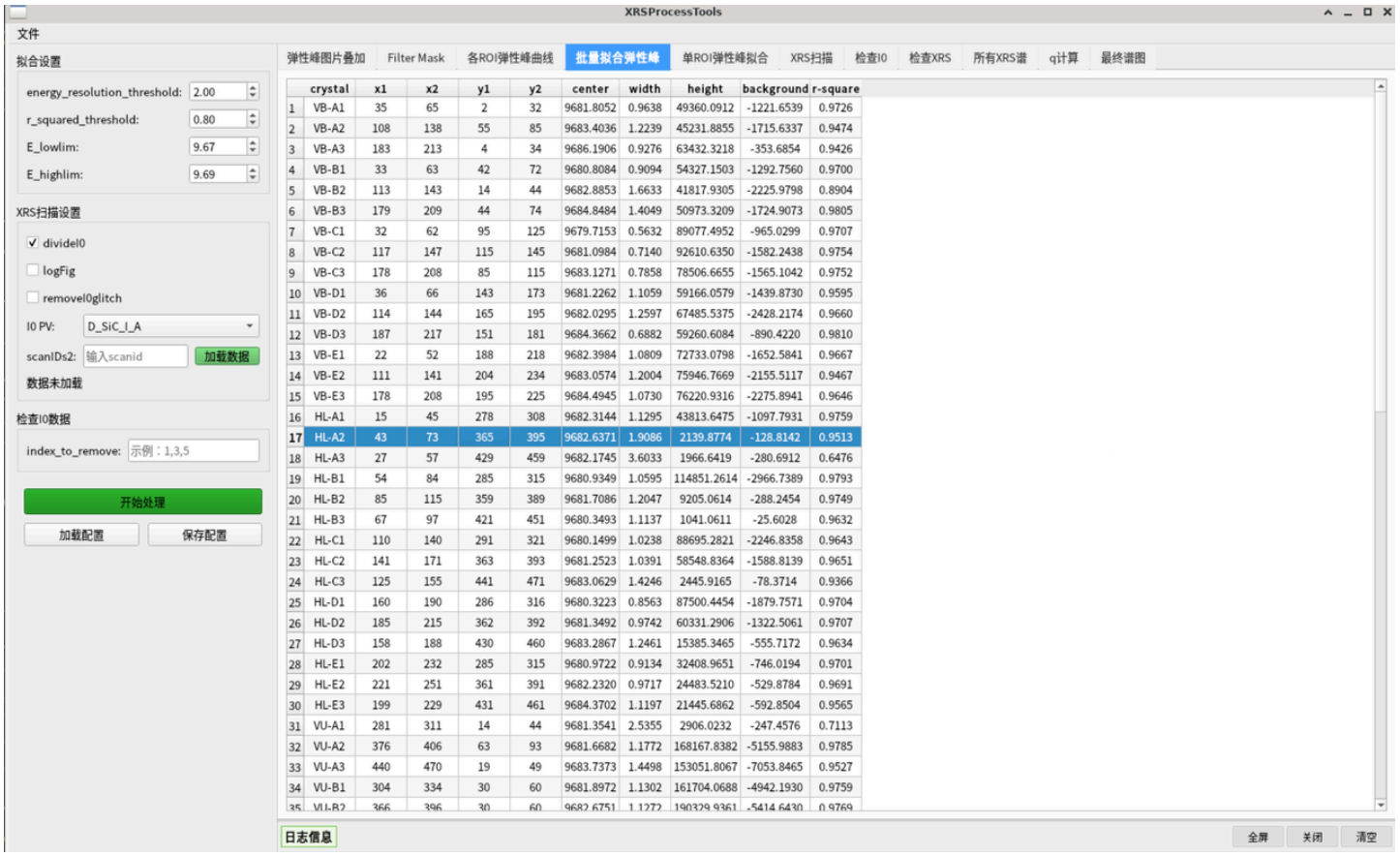
先在「拟合设置」分组设阈值：

参数	说明	默认
`energy_resolution_threshold`	能量分辨率阈值（eV），FWHM 超过则判为坏拟合	2.0
`r_squared_threshold`	拟合 R^2 下限，低于则判为坏拟合	0.8
`E_lowlim` / `E_highlim`	弹性峰中心能量合理范围（keV）	9.67 / 9.69

选中本标签后点「开始处理」，软件对每个 ROI 用**洛伦兹函数**拟合弹性峰，结果以表格显示，包含列：`crystal, x1, x2, y1, y2, center[eV], width[eV], height, background, r-square, NumPixels`。

- 满足任一坏拟合条件（R^2过低、中心越界、振幅为负、FWHM 过大）的 ROI 会被加入 `BadFitList`，**在最终谱中自动排除**

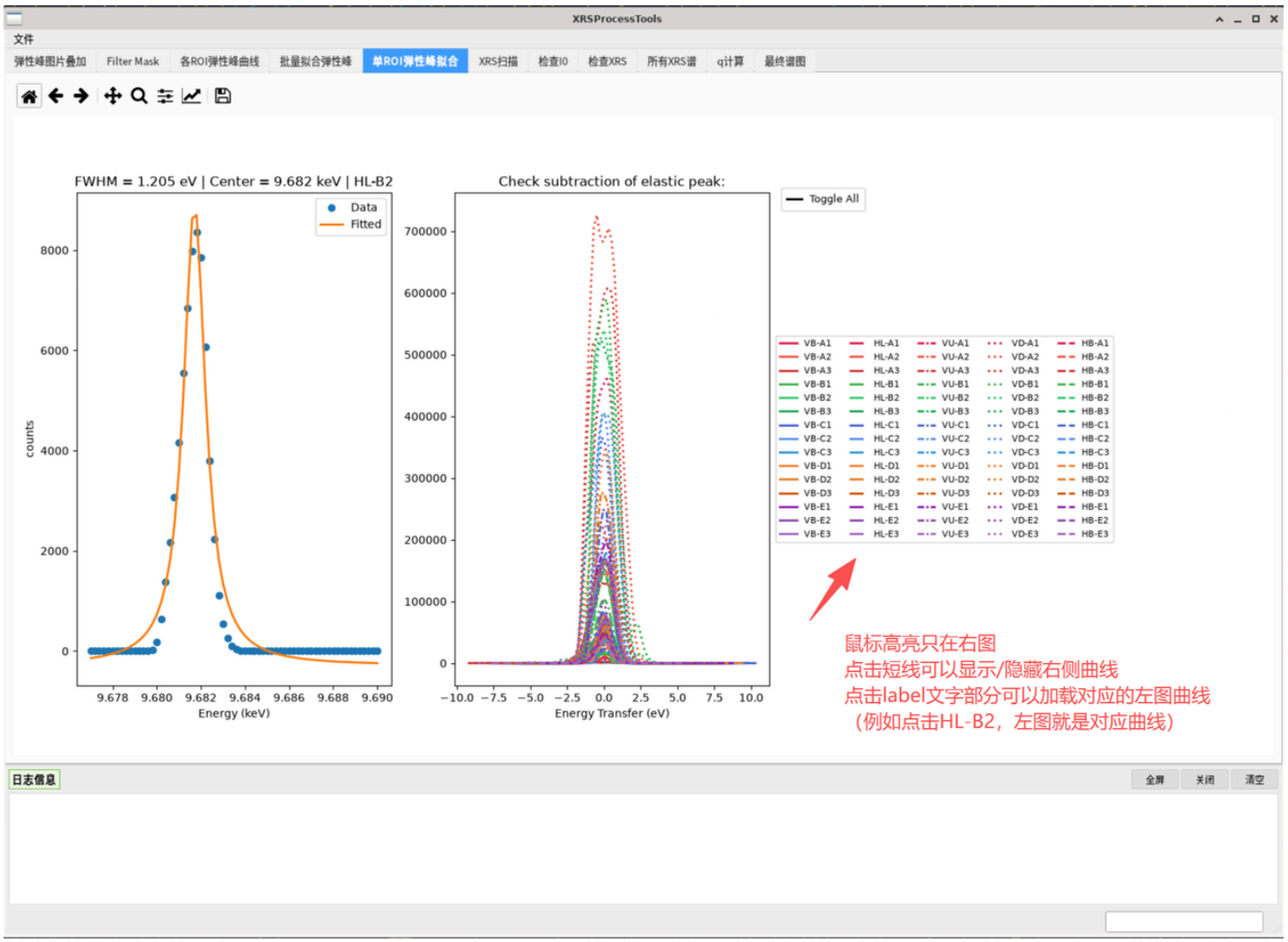
> 标签页3（拟合结果表格）



标签页 4：单ROI弹性峰拟合

用于检查单个 ROI 的拟合质量。左图显示某晶体的数据点与拟合曲线（标注 FWHM、中心能量），右图显示所有 ROI 曲线平移到弹性峰能量为零后的能量转移视图。

> 标签页4（单 ROI 拟合 + 能量转移图）



步骤 3：加载 XRS 数据（XRS扫描设置分组）

1. 在「scanIDs2」输入 XRS 扫描号，**多个扫描用英文逗号分隔**（如 `11050,11052`）

5. 设置：
   - `divideI0`：按 I0 归一化（建议勾选）
   - `removeI0glitch`：剔除 I0 跳变点（相邻点比值 <0.7 视为跳变，用邻域均值替代）
   - `I0 PV`：选择 I0 信号通道（`D_SiC_I_A` / `D_QXBPM_I_Sum` / `D_QXBPM2_I_Sum`）
   - `logFig`：对数绘图

3. 点击「加载数据」，状态标签显示加载结果，并弹出内容总结窗

标签页 5：XRS扫描

选中后点「开始处理」，显示 I0 随能量变化曲线（归一化+去跳变前后两个子图），用于确认 XRS 数据与 I0 质量。

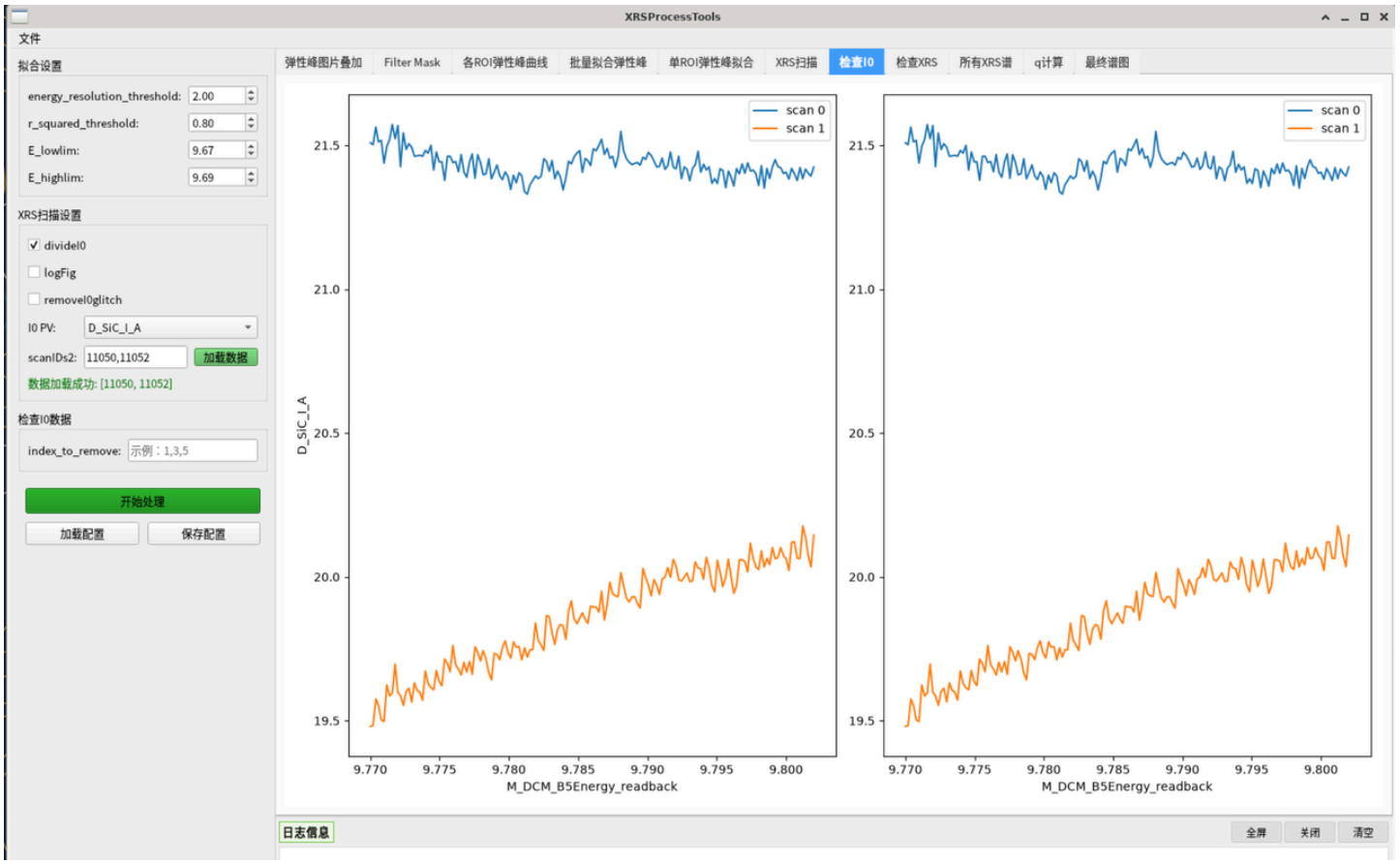
> 标签页5（I0 曲线）



标签页 6：检查I0

在「检查I0数据」分组的 `index_to_remove` 填入要剔除的扫描序号（如 `1,3,5`），点「开始处理」后显示剔除前后的 I0 曲线对比，用于挑出坏扫描。

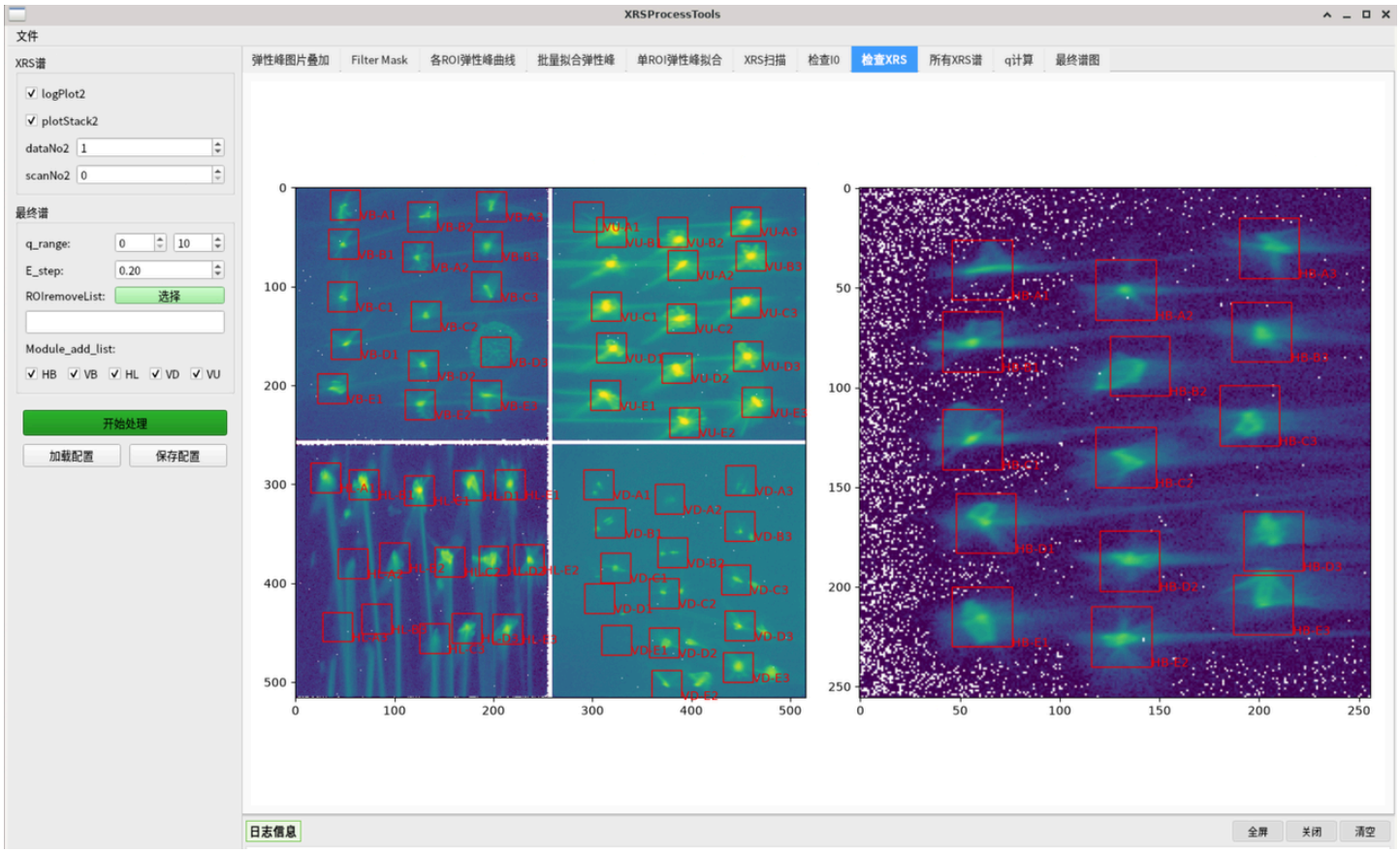
> 标签页6（I0 剔除对比）



标签页 7：检查XRS

显示 2D 叠加的 XRS 探测器图像（对数刻度）并叠加 ROI 方框，双探测器模式下左右各一张。用于检查 XRS 图像质量与 ROI 覆盖情况。

> 标签页7（2D XRS 叠加图）



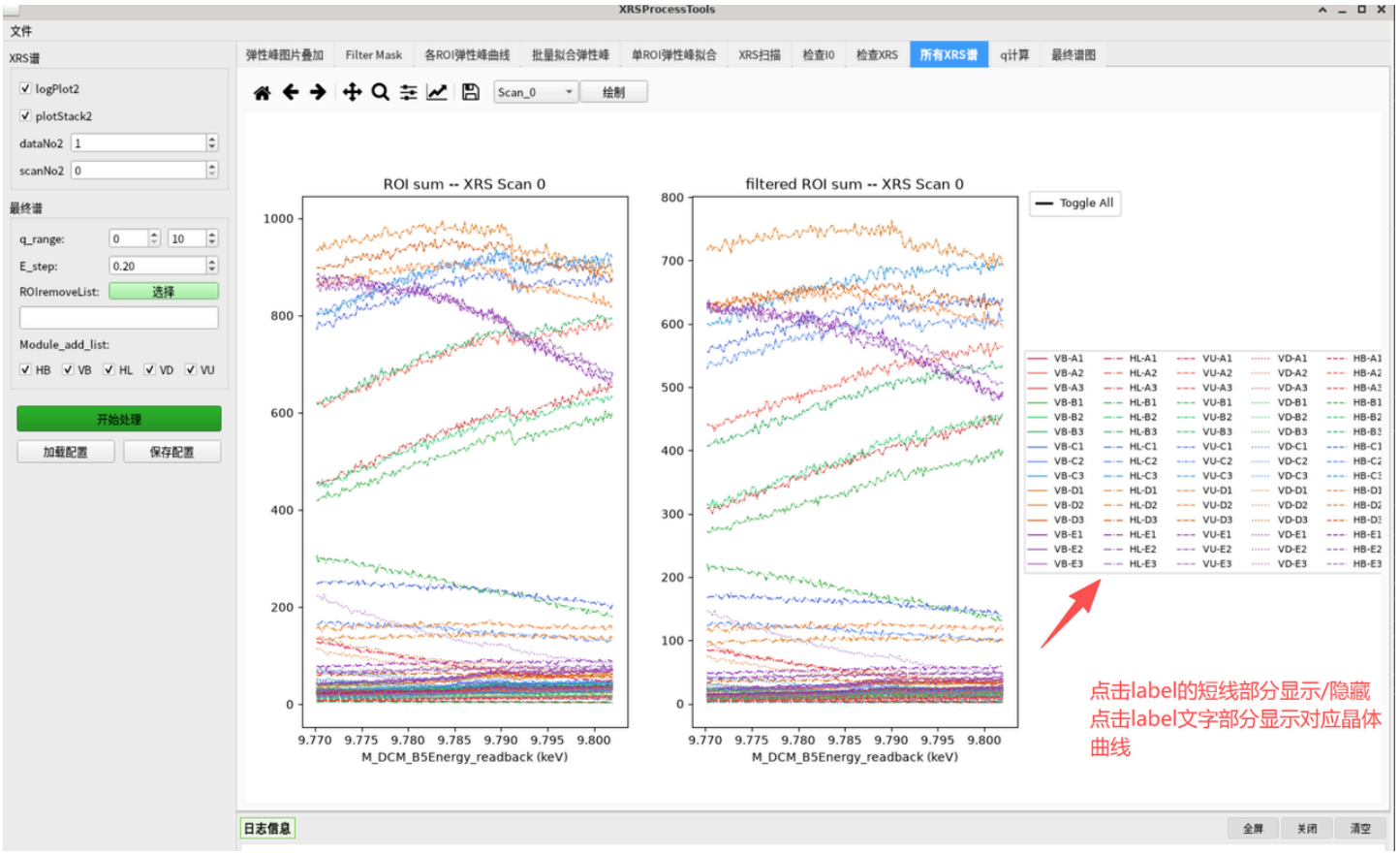
标签页 8：所有XRS谱

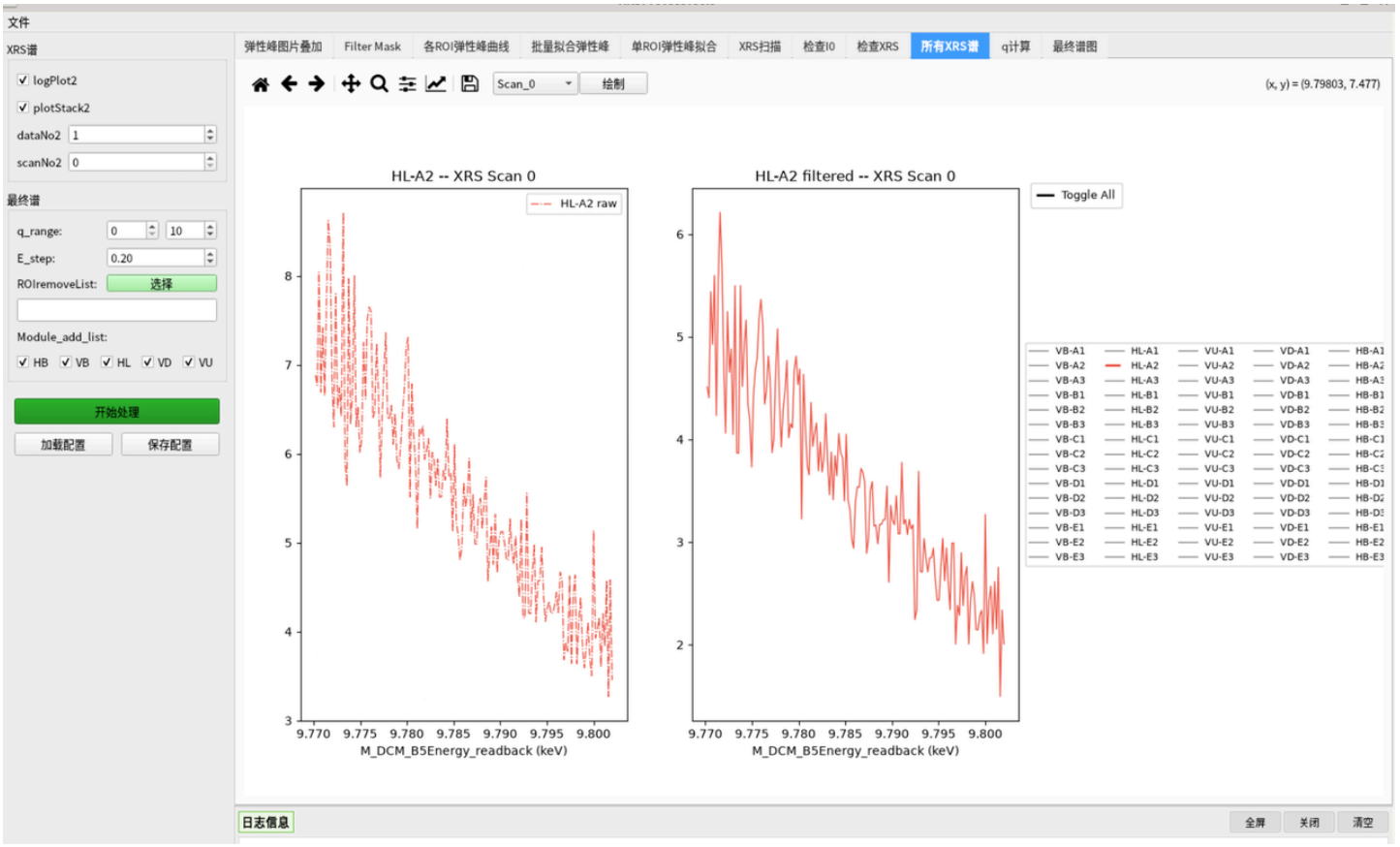
显示各扫描、各 ROI 的 XRS 谱（原始 vs 过滤）。

- 顶部下拉框选扫描号 + 「绘制」按钮重绘
- 鼠标悬停高亮、点图例切换显隐

- **点击图例文字** → 切换到该晶体的单谱视图（左原始、右过滤，标注扫描号）；再点「Toggle All」返回总览

> **标签页8（所有 XRS 谱）**

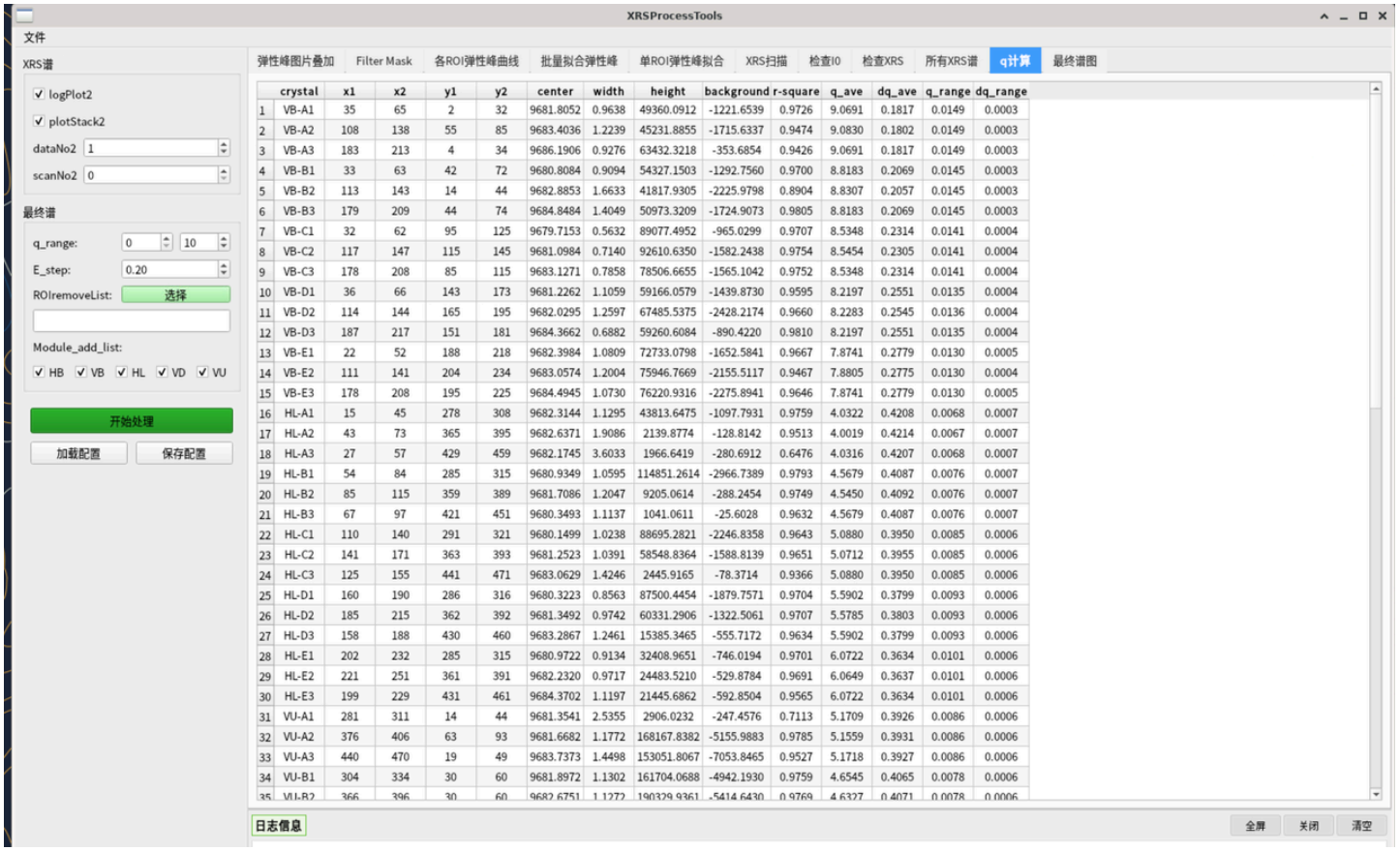




标签页 9：q计算

点「开始处理」，计算每个 ROI 的动量转移 q（基于各模组固定散射角与弹性峰能量），在表格中新增 `q_ave, dq_ave, q_range, dq_range` 列。此步为最终谱的 q 筛选做准备。

> 标签页9（q 计算结果表格）



	crystal	x1	x2	y1	y2	center	width	height	background	r-square	q_ave	dq_ave	q_range	dq_range
1	VB-A1	35	65	2	32	9681.8052	0.9638	49360.0912	-1221.6539	0.9726	9.0691	0.1817	0.0149	0.0003
2	VB-A2	108	138	55	85	9683.4036	1.2239	45231.8855	-1715.6337	0.9474	9.0830	0.1802	0.0149	0.0003
3	VB-A3	183	213	4	34	9686.1906	0.9276	63432.3218	-353.6854	0.9426	9.0691	0.1817	0.0149	0.0003
4	VB-B1	33	63	42	72	9680.8084	0.9094	54327.1503	-1292.7560	0.9700	8.8183	0.2069	0.0145	0.0003
5	VB-B2	113	143	14	44	9682.8853	1.6633	41817.9305	-2225.9798	0.8904	8.8307	0.2057	0.0145	0.0003
6	VB-B3	179	209	44	74	9684.8484	1.4049	50973.3209	-1724.9073	0.9805	8.8183	0.2069	0.0145	0.0003
7	VB-C1	32	62	95	125	9679.7153	0.5632	89077.4952	-965.0299	0.9707	8.5348	0.2314	0.0141	0.0004
8	VB-C2	117	147	115	145	9681.0984	0.7140	92610.6350	-1582.2438	0.9754	8.5454	0.2305	0.0141	0.0004
9	VB-C3	178	208	85	115	9683.1271	0.7858	78506.6655	-1565.1042	0.9752	8.5348	0.2314	0.0141	0.0004
10	VB-D1	36	66	143	173	9681.2262	1.1059	59166.0579	-1439.8730	0.9595	8.2197	0.2551	0.0135	0.0004
11	VB-D2	114	144	165	195	9682.0295	1.2597	67485.5375	-2428.2174	0.9660	8.2283	0.2545	0.0136	0.0004
12	VB-D3	187	217	151	181	9684.3662	0.6882	59260.6084	-890.4220	0.9810	8.2197	0.2551	0.0135	0.0004
13	VB-E1	22	52	188	218	9682.3984	1.0809	72733.0798	-1652.5841	0.9667	7.8741	0.2779	0.0130	0.0005
14	VB-E2	111	141	204	234	9683.0574	1.2004	75946.7669	-2155.5117	0.9467	7.8805	0.2775	0.0130	0.0004
15	VB-E3	178	208	195	225	9684.4945	1.0730	76220.9316	-2275.8941	0.9646	7.8741	0.2779	0.0130	0.0005
16	HL-A1	15	45	278	308	9682.3144	1.1295	43813.6475	-1097.7931	0.9759	4.0322	0.4208	0.0068	0.0007
17	HL-A2	43	73	365	395	9682.6371	1.9086	2139.8774	-128.8142	0.9513	4.0019	0.4214	0.0067	0.0007
18	HL-A3	27	57	429	459	9682.1745	3.6033	1966.6419	-280.6912	0.6476	4.0316	0.4207	0.0068	0.0007
19	HL-B1	54	84	285	315	9680.9349	1.0595	114851.2614	-2966.7389	0.9793	4.5679	0.4087	0.0076	0.0007
20	HL-B2	85	115	359	389	9681.7086	1.2047	9205.0614	-288.2454	0.9749	4.5450	0.4092	0.0076	0.0007
21	HL-B3	67	97	421	451	9680.3493	1.1137	1041.0611	-25.6028	0.9632	4.5679	0.4087	0.0076	0.0007
22	HL-C1	110	140	291	321	9680.1499	1.0238	88695.2821	-2246.8358	0.9643	5.0880	0.3950	0.0085	0.0006
23	HL-C2	141	171	363	393	9681.2523	1.0391	58548.8364	-1588.8139	0.9651	5.0712	0.3955	0.0085	0.0006
24	HL-C3	125	155	441	471	9683.0629	1.4246	2445.9165	-78.3714	0.9366	5.0880	0.3950	0.0085	0.0006
25	HL-D1	160	190	286	316	9680.3223	0.8563	87500.4454	-1879.7571	0.9704	5.5902	0.3799	0.0093	0.0006
26	HL-D2	185	215	362	392	9681.3492	0.9742	60331.2906	-1322.5061	0.9707	5.5785	0.3803	0.0093	0.0006
27	HL-D3	158	188	430	460	9683.2867	1.2461	15385.3465	-555.7172	0.9634	5.5902	0.3799	0.0093	0.0006
28	HL-E1	202	232	285	315	9680.9722	0.9134	32408.9651	-746.0194	0.9701	6.0722	0.3634	0.0101	0.0006
29	HL-E2	221	251	361	391	9682.2320	0.9717	24483.5210	-529.8784	0.9691	6.0649	0.3637	0.0101	0.0006
30	HL-E3	199	229	431	461	9684.3702	1.1197	21445.6862	-592.8504	0.9565	6.0722	0.3634	0.0101	0.0006
31	VU-A1	281	311	14	44	9681.3541	2.5355	2906.0232	-247.4576	0.7113	5.1709	0.3926	0.0086	0.0006
32	VU-A2	376	406	63	93	9681.6682	1.1772	168167.8382	-5155.9883	0.9785	5.1559	0.3931	0.0086	0.0006
33	VU-A3	440	470	19	49	9683.7373	1.4498	153051.8067	-7053.8465	0.9527	5.1718	0.3927	0.0086	0.0006
34	VU-B1	304	334	30	60	9681.8972	1.1302	161704.0688	-4942.1930	0.9759	4.6545	0.4065	0.0078	0.0006
35	VU-B2	366	396	30	60	9682.6751	1.1272	190329.9361	-5414.6430	0.9769	4.6327	0.4071	0.0078	0.0006

标签页 10：最终谱图

在「最终谱」分组设置最终谱参数：

参数	说明	默认
`q_range`	只叠加 q_ave 落在此区间的 ROI	0–10
`E_step`	能量内插步长（eV）	0.2
`ROIremoveList`	手动排除的晶体（点「选择」从晶体网格中勾选）	空
`Module_add_list`	选择参与叠加的模组（HB/VB/HL/VD/VU 复选框）	全选

点「开始处理」生成最终谱：上图为叠加后的总谱，下方为各扫描的子图（用于检查弹性峰能量扣除是否正确）。

工具栏按钮：

- **Scan_N 下拉框**：选扫描号
- **最终图谱**：只显示叠加总谱
- **能移谱**：显示选中扫描号的能量转移子图

最终谱中，满足以下任一条件的 ROI 会被排除：在 `ROIremoveList` 中、在 `BadFitList` 中、模组未选、q 超出 `q_range`。

> 标签页10（最终谱图）



六、保存结果

处理完成后，点顶部菜单 **文件 → 保存结果**，弹出「保存结果」对话框：

1. **保存模式**（三选一）：

模式	说明	输出文件
合并叠加（默认）	所有选中 ROI 叠加为一条谱	`文件名_data.txt`（能量转移 + 强度）
分模组	各模组各一列，存在同一文件	`文件名_data.txt`（能量 + 各模组列）
分晶体	每个晶体单独一个文件 + 汇总	各 `晶体_data.txt` + `文件名_all_data.txt`

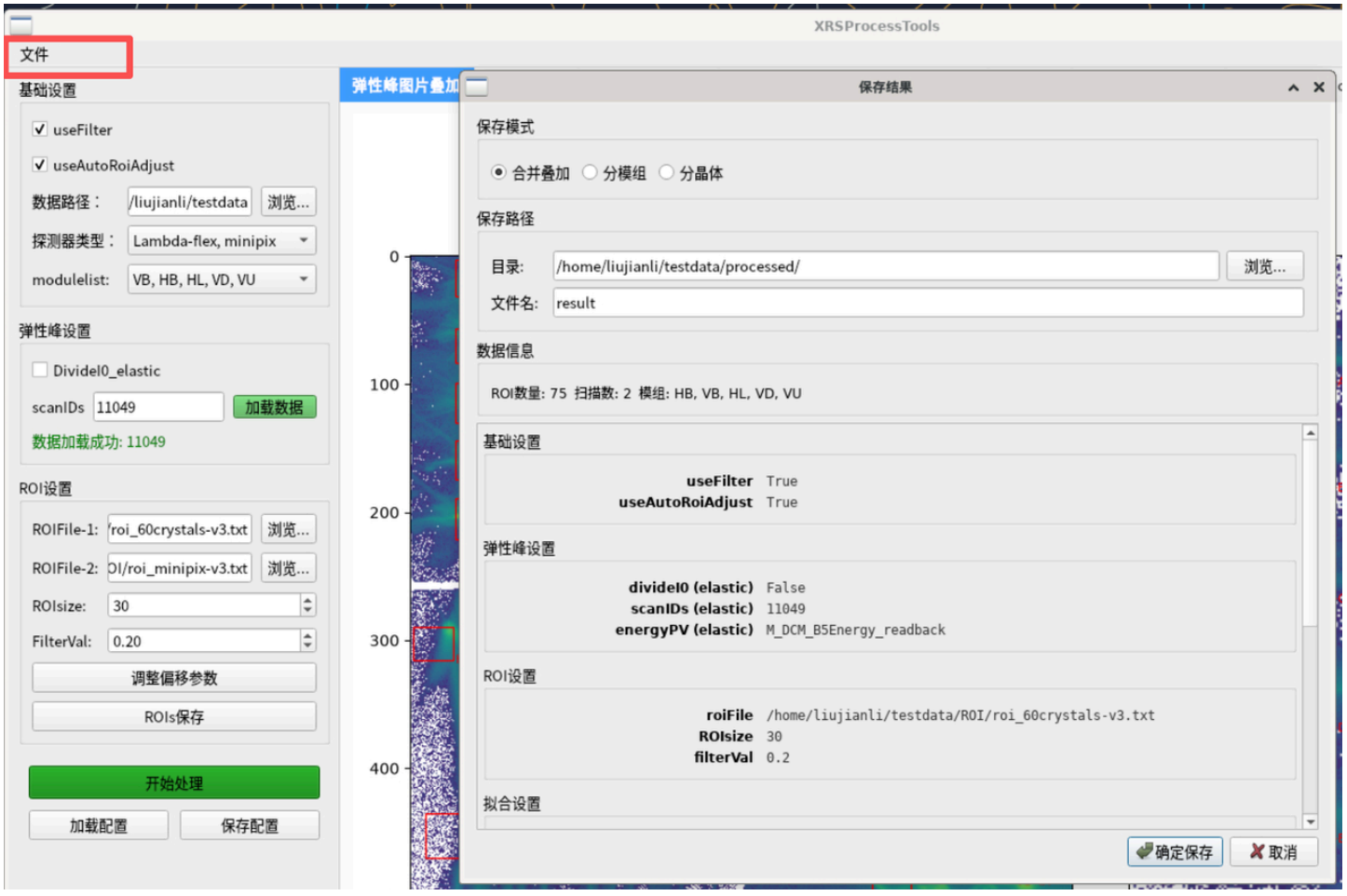
三种模式均额外输出：

- `文件名_rois.txt`：拟合结果（fitResult）
- `文件名_info.txt`：本次所有处理参数记录

2. **保存路径**：目录默认 `数据路径/processed/`，文件名将作为子文件夹名（默认 `result`）

3. 确认后保存，弹出「保存成功」提示

> **保存结果对话框**



输出文件为制表符分隔的文本，示例（`_data.txt`）：

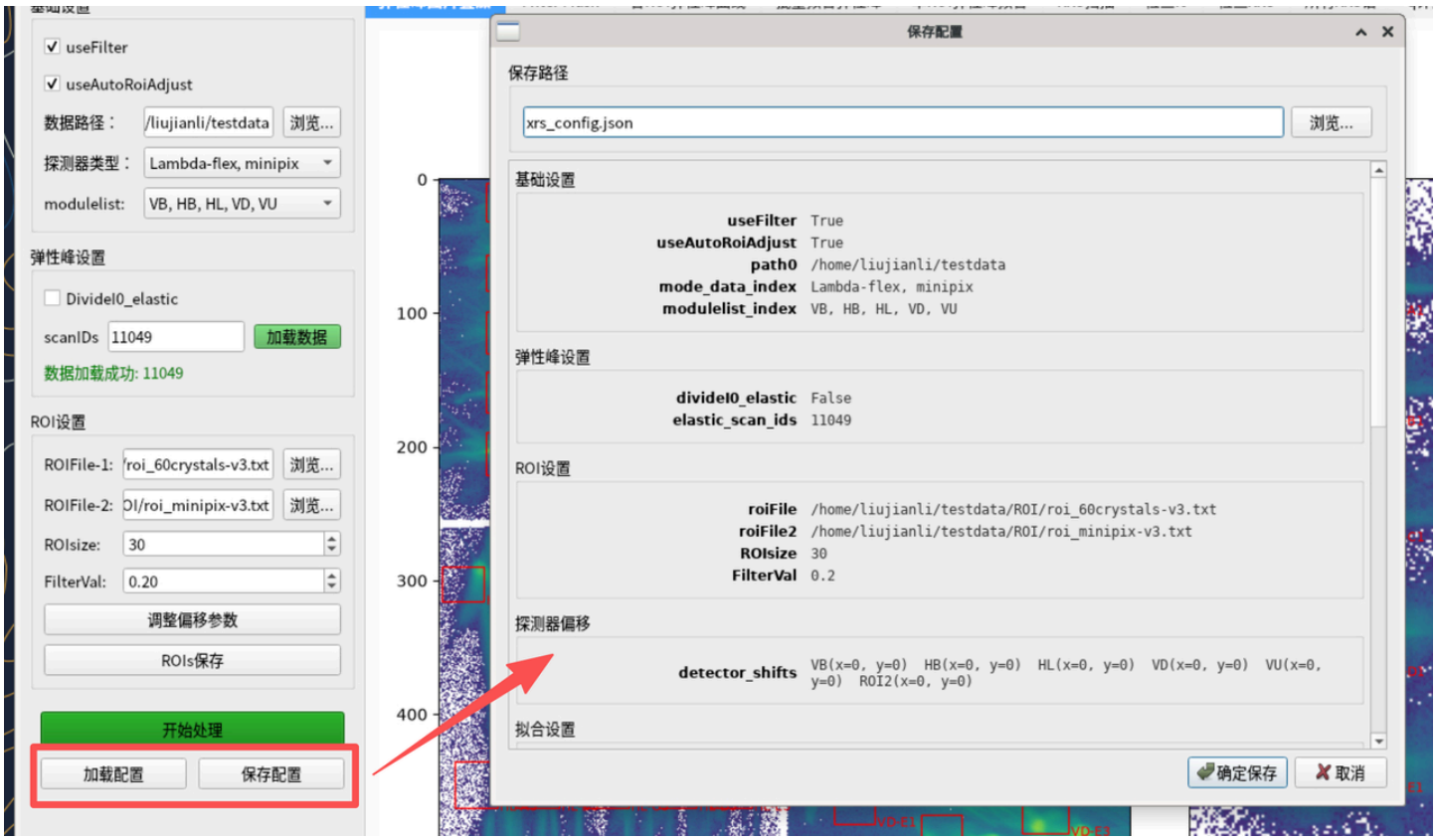
```
Energy Transfer (eV)  Intensity
90.2                  20.33
90.4                  18.41
…
```

七、参数配置保存与加载

左侧底部的「加载配置」「保存配置」按钮，可把当前所有参数（含探测器偏移、拟合阈值、q 范围等）保存为 `.json` 文件，下次直接加载复用，避免重复设置。

- **保存配置**：弹出参数预览，选路径保存为 `.json`
- **加载配置**：选 `.json` 文件，校验后预览（错误项标红、缺失项标灰），确认后应用到界面

> **保存/加载配置对话框**



八、快速操作清单（速查）

步骤	操作
1	基础设置：填数据路径、选探测器类型、选模组
2	弹性峰设置：填 scanIDs → 加载数据
3	ROI设置：选 ROIFile-1（双模式再加 ROIFile-2）、设 ROIsize/FilterVal、按需调偏移
4	标签0 → 开始处理 → 检查/拖动 ROI，按需 ROIs保存
5	标签1 → 开始处理 → 检查 mask
6	标签2 → 开始处理 → 检查各 ROI 弹性峰
7	拟合设置：设阈值
8	标签3 → 开始处理 → 查看拟合表，记录坏拟合
9	标签4 → 开始处理 → 抽查单 ROI 拟合
10	XRS扫描设置：填 scanIDs2 → 加载数据
11	标签5 → 开始处理 → 检查 I0
12	检查I0：填 index_to_remove → 标签6 开始处理
13	标签7 → 开始处理 → 检查 XRS 2D 图
14	标签8 → 开始处理 → 检查所有 XRS 谱
15	标签9 → 开始处理 → 查看q表
16	最终谱：设 q_range / E_step / ROIremoveList / 模组
17	标签10 → 开始处理 → 查看最终谱
18	文件 → 保存结果 → 选模式/路径 → 确定

本说明书随软件版本更新，如有疑问请联系维护人员。

刘建利

liujianli@ihep.ac.cn