

Инструкция работы с программой Plate

Kochikov I.V., Kovtun D.M., Tarasov Y.I. A new software for processing the radial symmetric diffractograms // Вычислительные методы и программирование. Раздел 2. Программирование. 2008. Т. 9. С. 12-18. <http://num-meth.srcc.msu.su/index.html>

Исходный набор данных для работы с программой Plate:

- 1) серия 16-bit **tif**-файлов (без сжатия), полученных при обработке фотопластинок с помощью сканера или микрофотометра (в программе Photoshop без коррекции) или пленок image plates с помощью ридера с последующим преобразованием в вышеописанный **tif**-формат; серия содержит как пластинки со съемкой исследуемого вещества, так и стандарта для определения **длины волны**, стандарт может отсутствовать если длина волны известна из других источников (?) с точностью до 5-й значащей цифры;
- 2) калибровочная кривая для сканера (ридера) - файл с расширением **.clb** [перевод единиц отсчета сканера в единицы плотности почернения];
- 3) кривая нелинейности фотопластинки (или другого носителя) [кривая преобразования плотности почернения в интенсивность рассеяния];
- 4) файл с данными используемого для определения длины волны стандарта;
- 5) данные по атомному рассеянию...(**inco.dat, feta.dat**)

Порядок работы

Через меню File -> Load calibration загружаем файл калибровки сканера/ридера (**.clb**), с помощью которого получены картинки, затем сам **tif**-файл вещества. Первыми грузим "пластинки" стандарта, а уже потом работаем с пластинками исследуемого вещества. Эта последовательность связана с тем, что при обработке стандарта мы получаем искомую длину волны, которая вносится во внутреннюю базу данных [к бд имеется текстовый доступ через меню Intensity -> Units.] и сохраняется в ней всё время загрузки окна программы до следующего уточнения длины волны. При загрузке очередной "пластинки" калибровка сканера и длина волны наследуются, а **tif**-файл замещается новым. При работе с поименованным файлом создается файл с тем же именем и с расширением **.inf**. В нем содержатся (и постоянно обновляются) результаты всех действий с данным **tif**-файлом (кроме сведений о калибровке сканера), т.е. при очередной загрузке **tif**-файла с данным именем можно согласиться на использование предыдущих результатов (контрастирование и чистка изображения, температура пара, длина волны, позиция центра) и продолжить работу с "пластинкой".

После загрузки новой "пластинки", замещающей в памяти предыдущую, её необходимо приготовить (меню Prepare->) появляется окно с гистограммой значений интенсивности в относительных величинах (0-255). С помощью стрелочек сужаем диапазон до значимых для эксперимента по рассеянию на ансамбле молекул величин, растягивая диапазон измеренных значений интенсивности на весь диапазон (0-255), галочкой Set Maximum Contrast контрастируем изображение. Это соответствует выделению основного "центрального" пика на гистограмме. Далее жмём кнопку Remove (для удаления дефектов, критерий единицы std. dev.), можно поставить галочку Highlight Excluded Areas: выброшенные точки (не учитывающиеся в дальнейших вычислениях) окрашиваются в жёлтый цвет. Закрываем это окно.

Переходим к меню Intensity. Если еще не указан центр, появляется предложение сделать это с помощью мышки, опираясь на аксиальную симметрию картинки. Этим же способом можно переприцелиться, т.е. подвигать центр. Далее вызываем основное окно работы с интенсивностью. Перед дальнейшими шагами, входим в меню Units: вводим точное значение расстояния сопло-пластинка, а также значения других констант. В меню (окно) Units можно войти в любой момент работы с окном Intensities.

Меню в окне Intensities (все меню значимые при работе с пластинками):

- Chart: изменение и восстановление вида графиков интенсивности
- Units: единицы измерения по осям (X, Y), разрешение картинка, длина волны (энергия), расстояние сопло - пластинка
- Save: диалог сохранения интенсивности и сетки по s в виде текстового файла
- Center: диалоговое окно уточнения центра (авто и ручное)
- Wavelength: диалоговое окно уточнения длины волны (на пластинке съемки стандарта)
- Curve Set: диалоговое окно изменения набора используемых кривых (соответствующих различным секторам)
- Nonlinear: выбор кривой преобразования плотности почернения -> в интенсивность

Выбираем сектор усреднения (по умолчанию 30 градусов), используем все сектора (сектора: -60, -30, 0, 30, 60 градусов; галочка Multiple Curves), совмещаем левые и правые стороны секторов (галочка One Side) и убираем низкочастотный тренд (галочка Use Low Freq Filter; этот режим годится для уточнения центра, но не для вычисления интенсивности), с помощью мышки выделяем прямоугольную область на графике, отсекая ненужные и шумные концы диапазона по s и увеличивая масштаб по оси ординат. Сначала уточняем положение центра дифракционной картинка, вызвав небольшое окошко (меню Center). Автоматическая процедура поиска центра хорошо работает для пластинок с сильными кольцами и хорошим начальным приближением координат центра. Ручная процедура предпочтительнее: бегунками влево-вправо, вверх-вниз пытаемся добиться максимального значения коэффициента корреляции (окошко Correlation); так несколько циклов; критерий достижения: любое движение по горизонтали и вертикали должно приводить к уменьшению коэффициента (чем дальше, тем более заметно, т.к. используемый функционал имеет острый максимум в центре достаточно отчетливой дифракционной картинка). Найдя центр, закрываем окошко и не забываем убрать галочку с режима низкочастотного тренда (во избежание дальнейшего неправильного расчета интенсивности рассеяния).

Теперь можно определять **длину волны** (при этом в рабочей директории программы должны присутствовать файлы стандартов с расширением **.edm**). Кликаем меню Wavelength - программа пытается найти и загрузить все стандарты (**C₆H₆, CCl₄, ZnO**) и диагностирует, если отсутствует к. н. Появляется окошко Wavelength Definition: в выпадающем списке выбираем нужный стандарт, далее в соответствующее окошко вводим температуру эксперимента в градусах Цельсия, уточняем интервал и шаг по s, затем подбираем степени полиномов (Background и Additive) – жмем кнопочку Fit Wavelength несколько раз, пока значение длины волны в окошке не стабилизируется, в процессе этого экспериментируем со степенями полиномов, анализируем значение R-фактора, и Back. Принимаем окончательное решение (?).

При выходе из окна уточнения длины волны, значение ее сохраняется до следующей процедуры уточнения (см. меню Units), и далее используется со всеми загружаемыми пластинками.

После определения длины волны, загружаем пластинки с интенсивностями исследуемого вещества: определяем центр (см. выше), после чего выбираем режим усреднения для сохранения интенсивности рассеяния в текстовый файл: 1) усредняем по всем 30-градусным секторам, поставив галочки в Chart Contents (Multiple Curves, для наглядности Show Average – сохраняется именно эта средняя кривая, если выбор Selected Curves -> Average), совмещем левые и правые кривые (галочка One Side); 2) усредняем по одному большому сектору (подгоняем бегунком или вводим цифру вручную), поставив галочки в Chart Contents (Show Average при выборе Selected Curves -> Average), совмещем левые и правые кривые (галочка One Side). Теперь можно перейти к диалогу сохранения интенсивности в текстовый файл через меню Save.