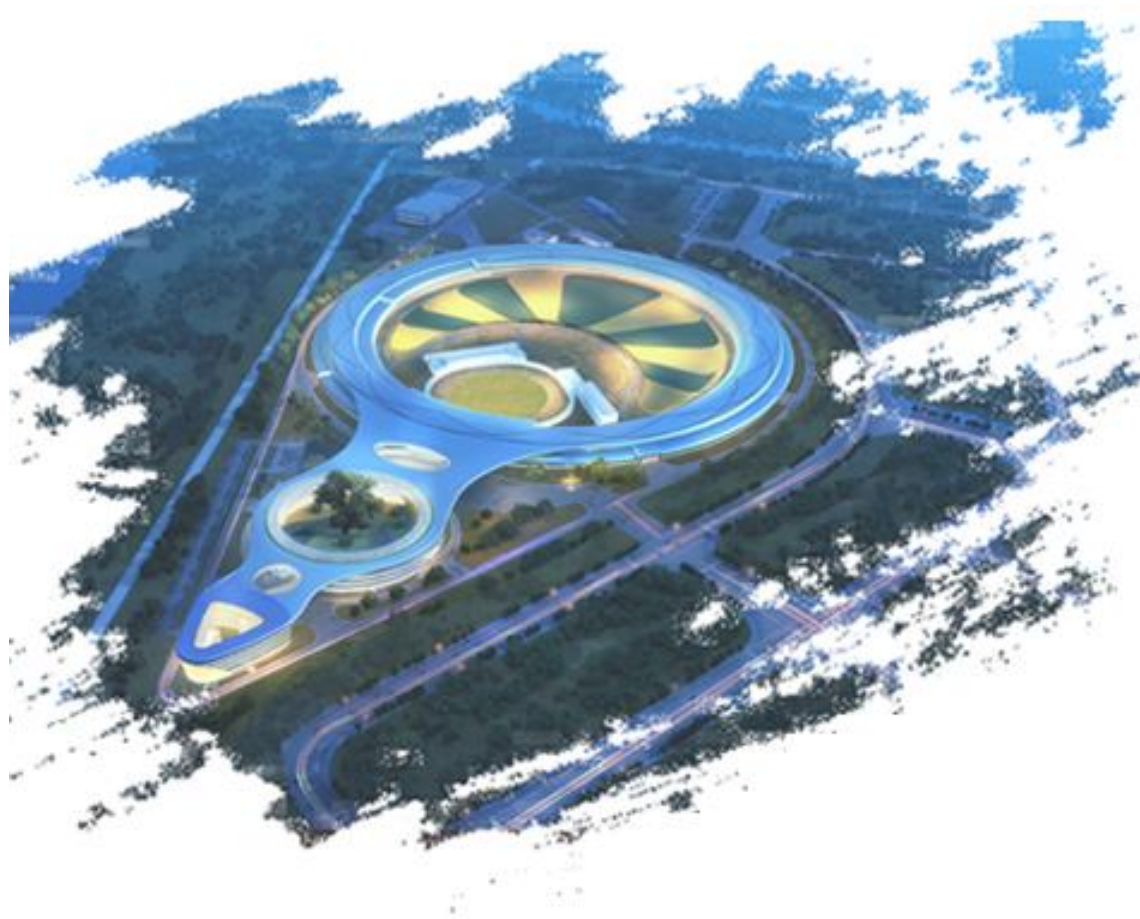


# AI赋能的HEPS新一代实验操作 软件系统

张一

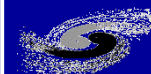
HEPS光束线软件系统

2024年5月21日

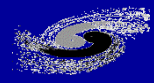
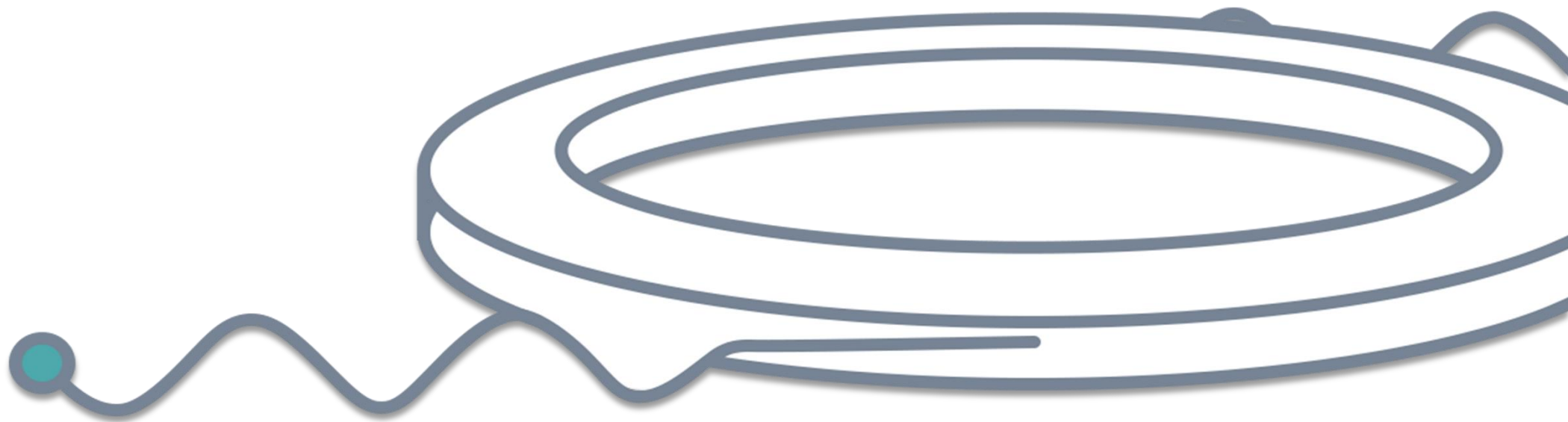


# 报告内容

1. Mamba实验操作软件系统
2. AI for Science研究
3. 智慧光源展望

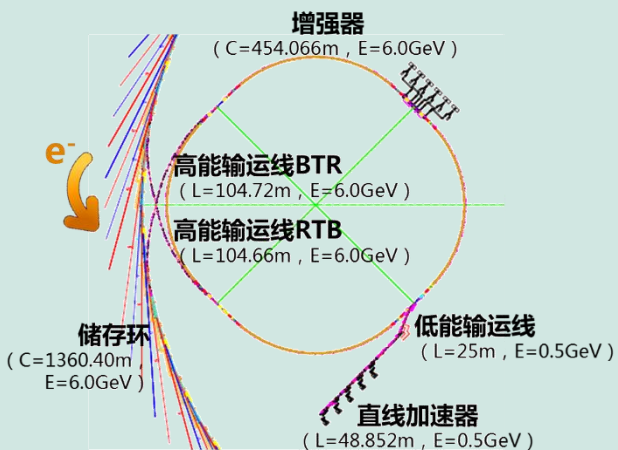


# Mamba实验操作软件系统



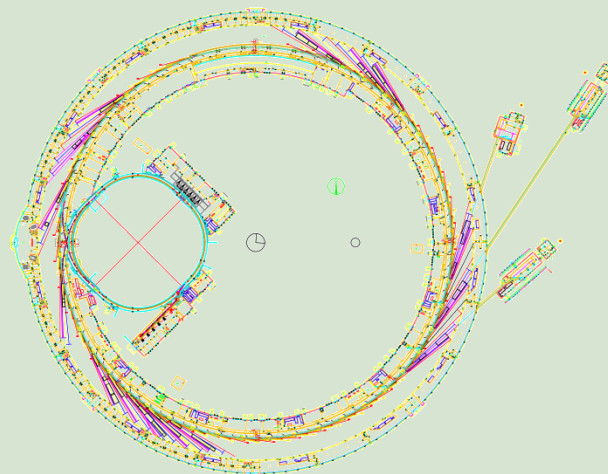
## 加速器

- 电子能量**6GeV**的储存环
- 为储存环提供束流的直线加速器、输运线和增强器等



## 光束线站

- 光束线站首批建设**14条**光束线和相应的实验站等



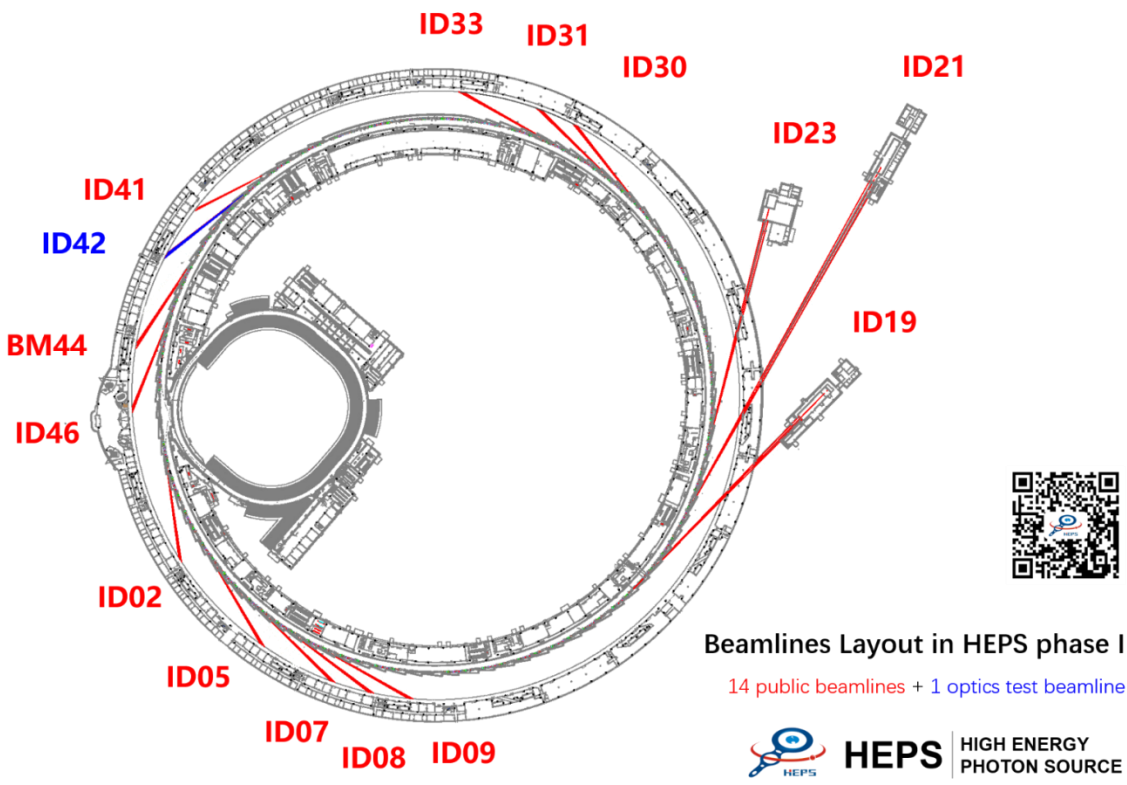
## 配套设施

- 主体环形同步辐射光源实验建筑、配套附属建筑物，以及供水、供电、空调、辐射防护等通用设施。



# 首期线站列表

首期建设 **14**个用户线站 + **1**个测试线站



**12** 实验大厅内 **3** 超长线

序号	线站名称	国家需求	工业应用	可持续发展	科学前沿	高能	低发射度	用户广泛
1	工程材料线站	√	√	√		√	√	√
2	硬X射线纳米探针线站			√	√	√	√	
3	结构动力学线站	√	√		√	√	√	√
4	硬X射线相干散射线站				√	√	√	
5	高分辨谱学线站	√			√	√	√	
6	高压线站	√			√	√	√	√
7	硬X射线成像线站	√	√		√	√	√	√
8	X射线吸收谱学线站			√	√			√
9	低维结构探针线站	√		√	√			√
10	生物大分子微晶衍射线站	√		√	√			√
11	粉光小角散射线站	√	√		√			√
12	高分辨纳米电子结构线站		√		√		√	√
13	通用环境谱学线站			√	√			√
14	X射线显微成像线站		√	√	√			√

**8**个performance线站（首期），和国外四代光源同类线站水平相当或超出

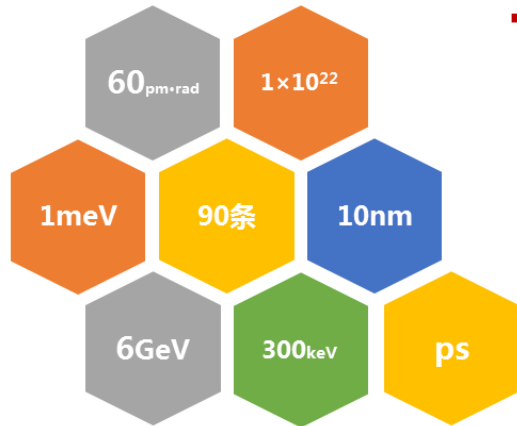




## 科学目标

- 通过对微观结构多维度、实时、原位表征，解析物质结构生成及其演化的全周期全过程。
- 揭示微观物质结构生成演化的机制，剖析微观物质构成，为物质调控提供基础支撑。

## 工程目标



- 建设国际领先的高能同步辐射光源，储存环能量达6GeV，亮度达 $1 \times 10^{22}$  phs/s/mm<sup>2</sup>/mrad<sup>2</sup>/0.1%BW，发射度优于0.06nm rad，**高性能光束线站容量不少于90个**，可提供能量达300keV的X射线。
- 设施空间分辨能力达到10nm量级，具备单个纳米颗粒探测能力；能量分辨能力达到1meV伏量级；时间分辨达到ps量级，具备高重复频率的动态探测能力。



# 先进光源科学实验模式发生重大变革

## 全新升级的光源装置需要配备一流的科学软件系统



**1 小光斑多维度**



**2 高通量多模态**



**3 原位动态**



**4 自动智能**



**5 国家数据政策**



```
444_0.nxs
├── entry
│   ├── data
│   ├── instrument
│   └── sample
│       ├── chemicalformula
│       ├── density
│       ├── description
│       ├── interestzone
│       ├── mass
│       ├── samplename
│       ├── sampleposition
│       ├── situation
│       ├── size
│       └── type
└── user
    ├── beamtimeId
    ├── contact
    ├── endDate
    ├── proposalcode
    ├── proposalname
    └── startDate
```

科学实验向高（数据）通量、多模态、超快频率、原位及动态加载的形式转变

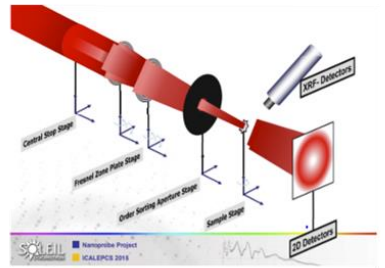
大科学装置需响应科学数据管理与开放政策，发挥引领作用



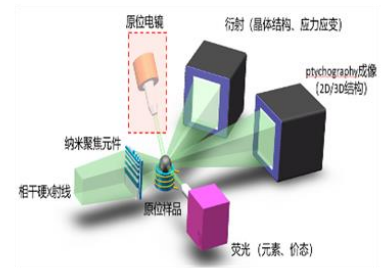
# 发展趋势 高度集成化的科学实验全生命周期软件系统

← 在线数据处理反馈原位动态加载实验过程控制

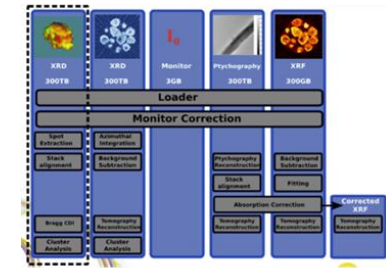
## 实验控制



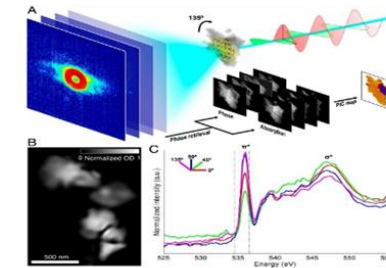
## 数据采集



## 在线数据分析



## 学科算法



全新需求

光斑聚焦 ( ≤10nm)  
系统稳定性 ( ≤3nm)  
调姿维度 ( 可达15)

探测器量 ( >10)  
图像数量 ( >百万张/次)  
线站通量 ( >500TB/天)

数据维度 ( 3-5)  
数据模态 ( >5)  
算力需求 ( >50 GPU)

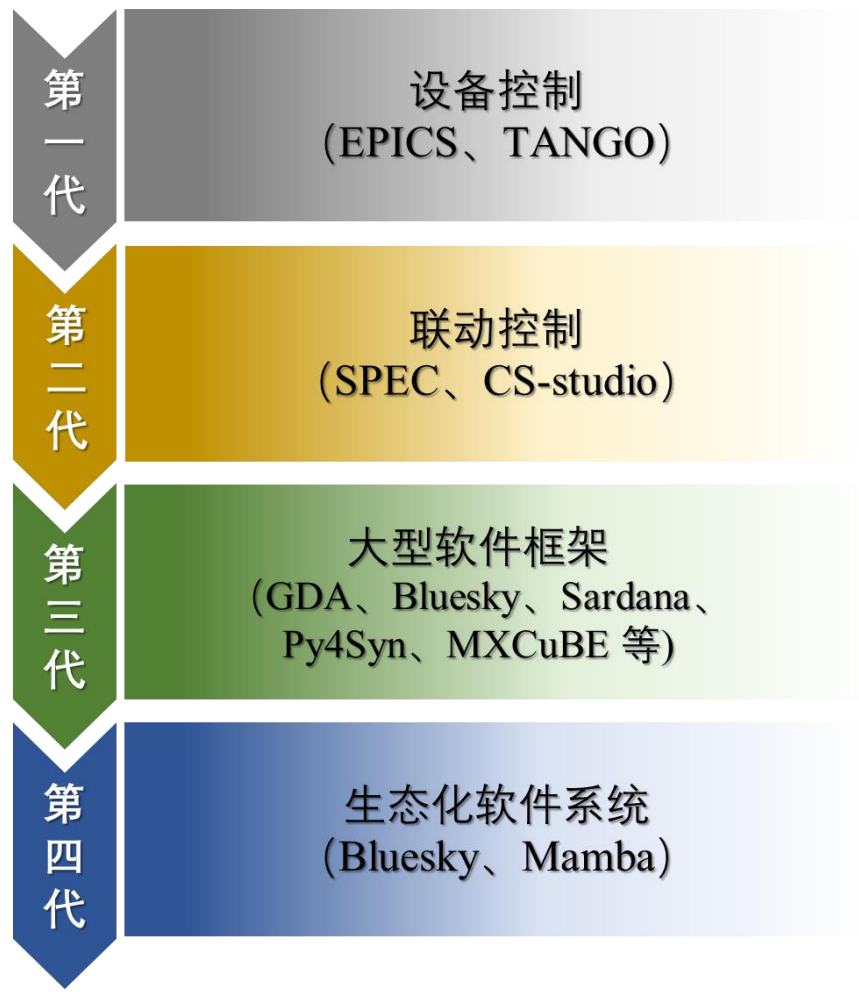
学科软件 ( >10)  
算法优化 ( 全流程AI化)

元数据及实验数据管理 →

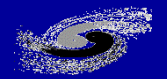
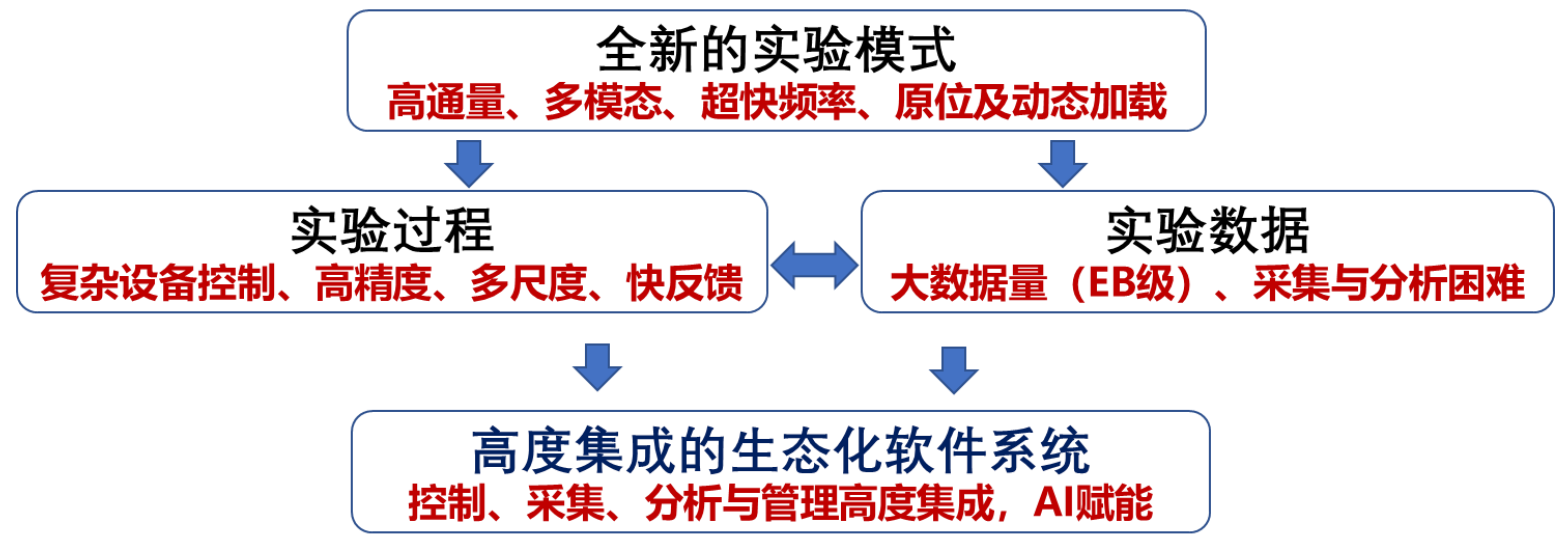
□ 第四代光源对科学实验将高度依赖集成化的软件生态系统，借助大数据、人工智能等先进技术实现原位动态化实验的海量数据在线处理及实验过程中的实时反馈调控，满足实验过程的自动化与智能化需求。





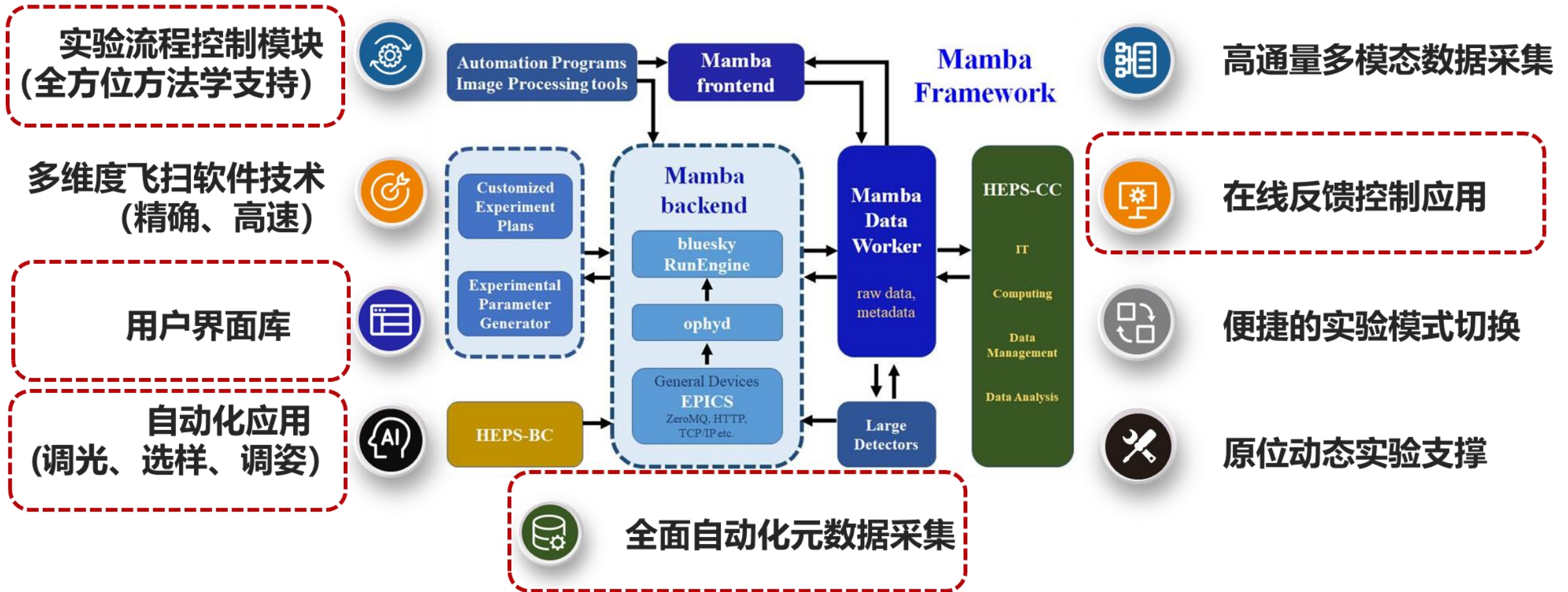


□ 我国长期以来在光源软件体系的构建上处于用户的角色，主要工作集中在学科数据处理软件与数据管理及服务软件上，缺乏具有国际影响力的工作



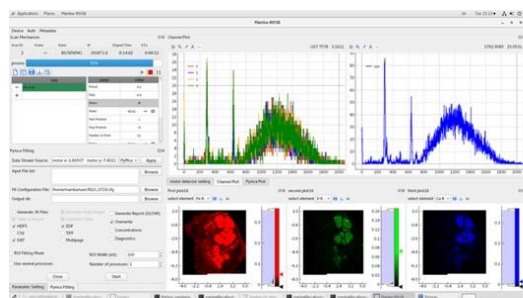
# 新一代实验控制与数据采集软件框架 *Mamba*

□ 为HEPS线站打造统一的自动智能化实验操作系统

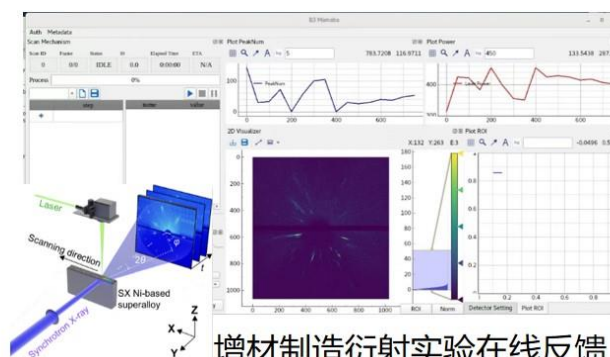


# 有望成为最早在四代光源全面部署应用的大型科学软件系统

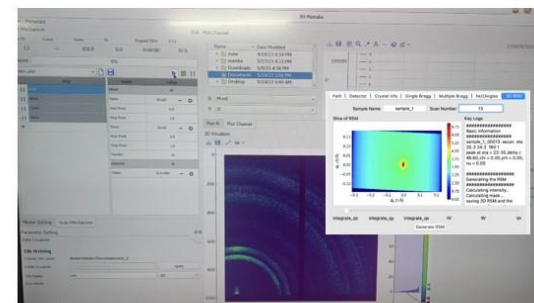
- 已在 BSRF 多条线站验证与开放部署
- HEPS 第一批软件也即将上线



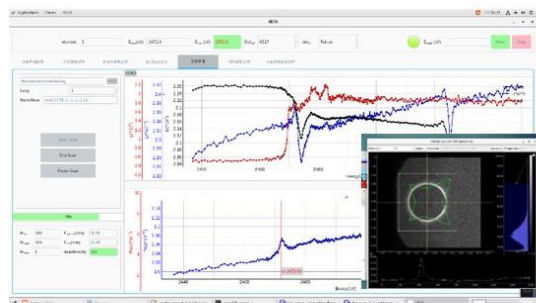
荧光“飞扫”



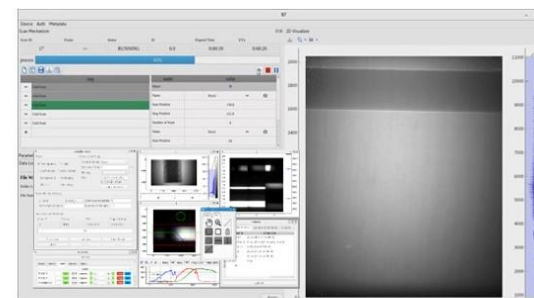
增材制造衍射实验在线反馈



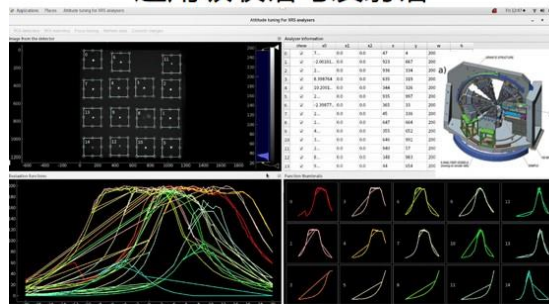
表面衍射



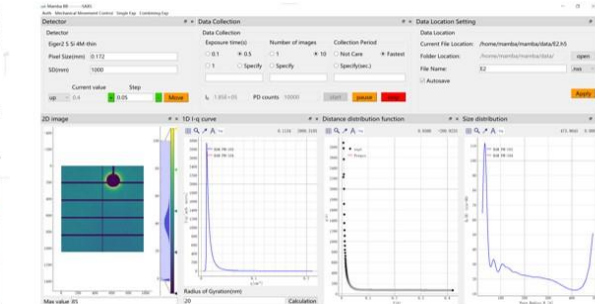
通用吸收谱与发射谱



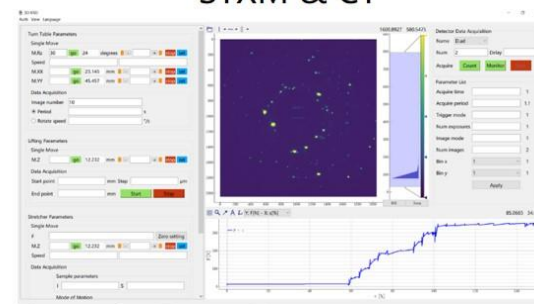
STXM & CT



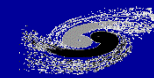
一键式拉曼谱仪调姿

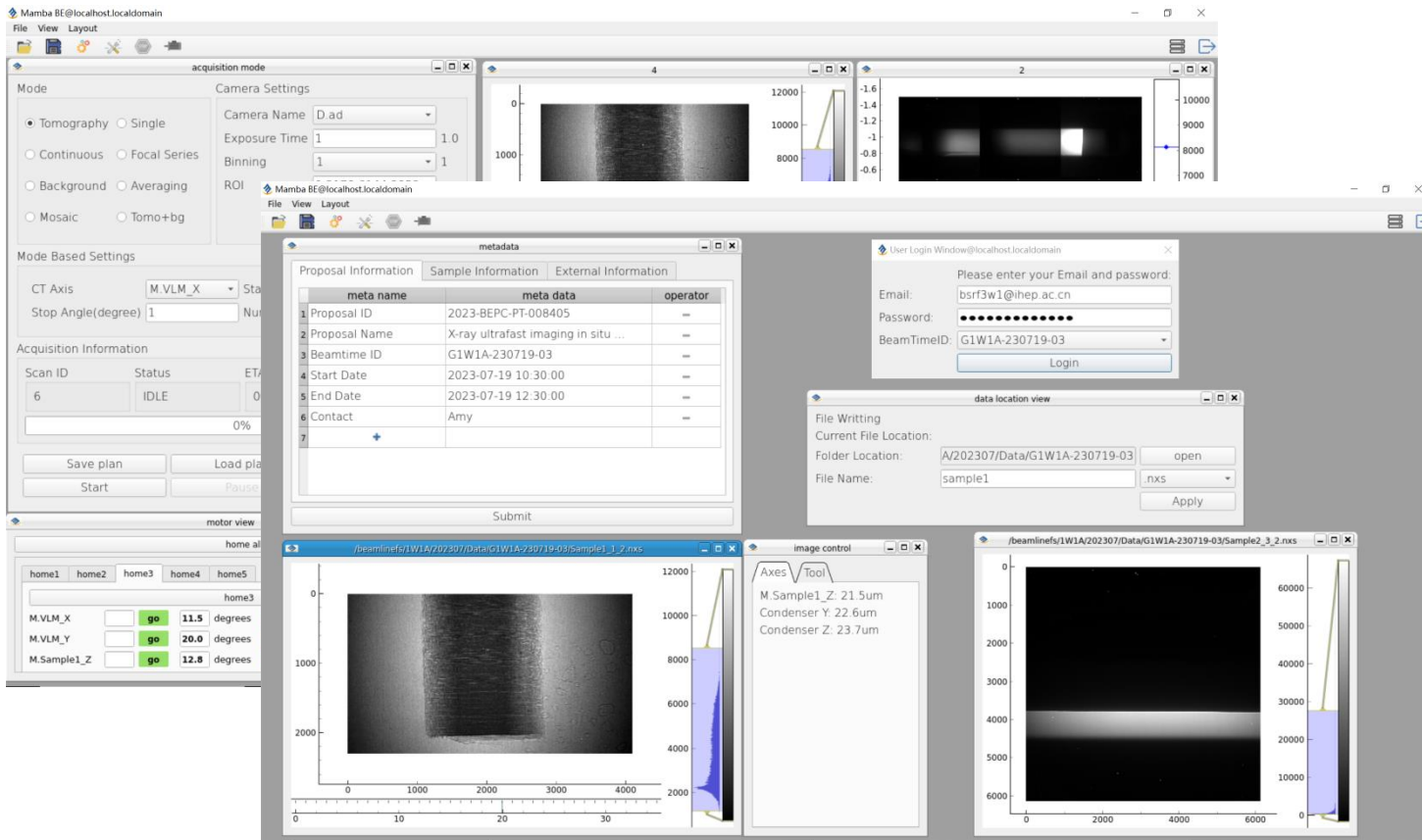


SASX/WAXD联动



原位 3DXRD





10个.hdf5  
300个dataset/.hdf5  
Dataset:  
6144 × 6144

.hdf5

- 假设每300张（可调）存成一个data文件，
- 文件（1个master文件， 10个hdf5文件）
  - ✓ ID21\_count(scan)\_Dhyana\_RunID\_master.h5
  - ✓ ID21\_count(scan)\_Dhyana\_RunID\_00000\_data.h5
  - ✓ ID21\_count(scan)\_Dhyana\_RunID\_00001\_data.h5
  - ✓ ...
  - ✓ ID21\_count(scan)\_Dhyana\_RunID\_00009\_data.h5

444\_0.nxs

- entry
- data
- instrument
- sample
- chemicalformula
- density
- description
- interestzone
- mass
- samplename
- sampleposition
- situation
- size
- type
- user
- beamtimeid
- contact
- endDate
- proposalcode
- proposalname
- startDate

Single nxs file

HDFView 3.1.3

Recent Files: /hepsfs/bl/3W1/202210/Data/TB14-20221026-01/raw/bra...

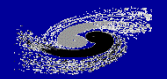
- ID21\_Projection\_2.nxs
- entry 元数据 nxs 文件 nxs file: metadata
- beamline
- beamtimeID
- end\_time
- experiment
- instrument
- instrument\_definition
- instrument\_file
- method
- proposal\_id
- run\_no
- sample
- start\_time
- user
- ID21\_Dhyana\_Projection\_2\_master.h5
- entry 图像数据 master 文件 图像数据 master 文件
- data
- data\_0000
- data\_0001
- data\_0002
- data\_0003
- data\_0004
- ...

master file: image subdata link  
master文件外部链接到图像数据。

图像大数据分文件存储，每个文件5GB(100张)  
image subdata files: real image data

nx+master+ data0+data1+...

□ HEPS产生的每一张图、每一条谱线都将携带丰富的元数据信息：样品、线站、设备、数据处理、实验方法、操作流程等。



# 突破第四代光源“操作系统”软件关键技术



- 多模态数据处理可视化工作流引擎
- 虚拟束线
- 通用自动化调姿系统
- 束线智能

Liu et al. *J. of Synchrotron Radiat.* **29**(3), 664-669 (2022);

Liu et al. *J. of Synchrotron Radiat.* **29**(3), (2022);

Zhang et al. *J. of Synchrotron Radiat.* **30**(1), (2023);

Li et al. *J. of Synchrotron Radiat.* **30**(6), (2023);

Wang et al. *J. of Synchrotron Radiat.*, (2024);



- 入选2024年世界同步辐射大会（SRI2024）邀请报告。
- 先后获得所创新、重点研发青年科学家等项目支持。
- Mamba 获得 Synchrotron Radiation News 期刊 “Modern beamline control software” 专刊报道，全球共6个项目入选。
- 受邀与多个光源装置举行双边论坛



主 题: Re: Learning more about Mamba and Bluesky  
 发件人: "Roland Mueller" <Roland.Mueller@helmholtz-berlin.de> 2023-3-3 18:51:43  
 收件人: "ZHANG YI" <zhangyi88@hep.ac.cn>; "Daniel Allan" <dallan@bnl.gov>  
 抄 送: "Liu Yu" <liuyu91@hep.ac.cn>; "Smith, William" <william.smith@helmholtz-berlin.de>; "Bi Xiaoxue" <bxoo@hep.ac.cn>; "Viefhaus, Jens" <jens.viefhaus@helmholtz-berlin.de>; "He, Huling" <huling\_he@helmholtz-berlin.de>; "tom.cobb@diamond.ac.uk" <tom.cobb@diamond.ac.uk>; callum.forrester@diamond.ac.uk; "Maxim Brendler" <maxim.brendler@helmholtz-berlin.de>  
 附 件: smime.p7s



Dr. Roland Müller  
 BESSY II Light Source

德国BESSY光源控制组组长、  
 加速器及大型实验物理控制  
 系统国际协会（ICALEPS）  
 终身成就奖获得者



Great news. The time line of one month is extremely promising. Looking forward learning details on your fly scan implementations in Bluesky and Mamba. To my mind reliable fly scans based on FPGA configurable orchestration of mechatronics and fast detector DAQ are essential to 4th generation and other high through-put light sources.

**认为Mamba 在飞扫、快速数据采集等方面的工作引领了四代光源实验控制与数据采集软件的发展趋势**

>We are very happy to accept your invitation to the Bluesky Community Talk. May we ask for a suggestion for the expected contents? If 30 mins is arranged for the first talk, I would like to give a 15 mins introduction of the whole Mamba projects, which will be quite different with the one I gave in the NOBES2022 conference. Instead I will focus on our development plan to optimize the Mamba framework, and the difficult tasks we need to deliver for HEPS workshop by 2025, hoping for there are some ready-to-use solutions already available in the community. And of course Dr. Yu Liu will introduce the work which will be open source in the near future. We are also going to try out the Slack workspace mentioned with **英国Diamond光源**、**美国NSLS-II光源科学软件开发的专家共同邀请Mamba团队加入目前国际最大的上层实验控制与数据采集软件开发联盟（Bluesky）**

加入目前国际最大的上层实验控制与数据采集软件开发联盟（Bluesky）

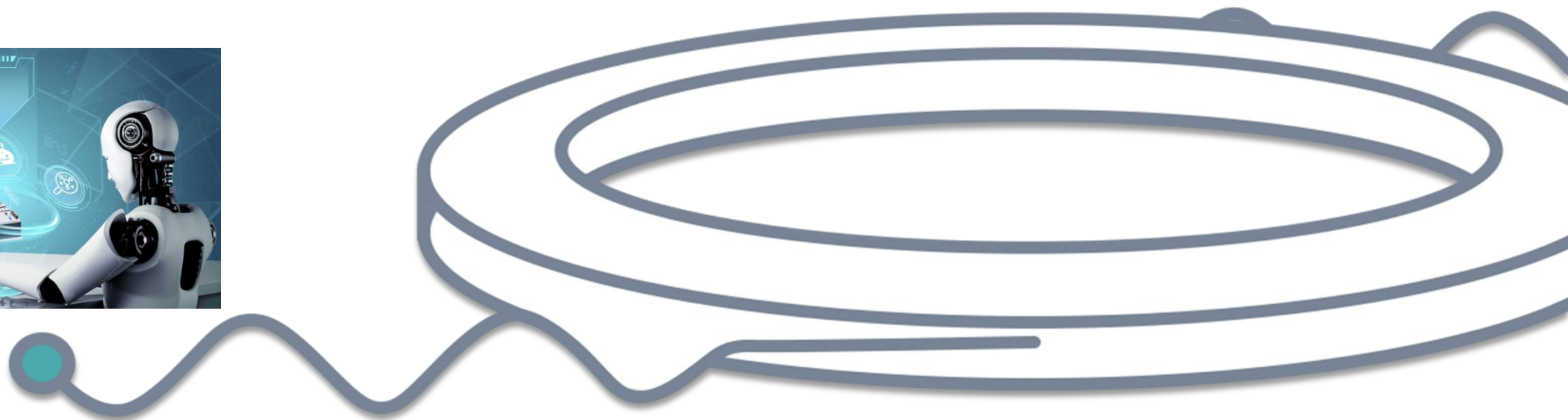
## □ 专职科学软件团队



## □ 受邀出席首届Diamond-HEPS科学软件合作论坛



# AI for Science研究



## 打造线站智能，助力新的科学发现



**nature reviews physics**

Explore content ▾ About the journal ▾ Publish with us ▾ Subscribe

nature > nature reviews physics > comment

Comment | Published: 18 May 2022

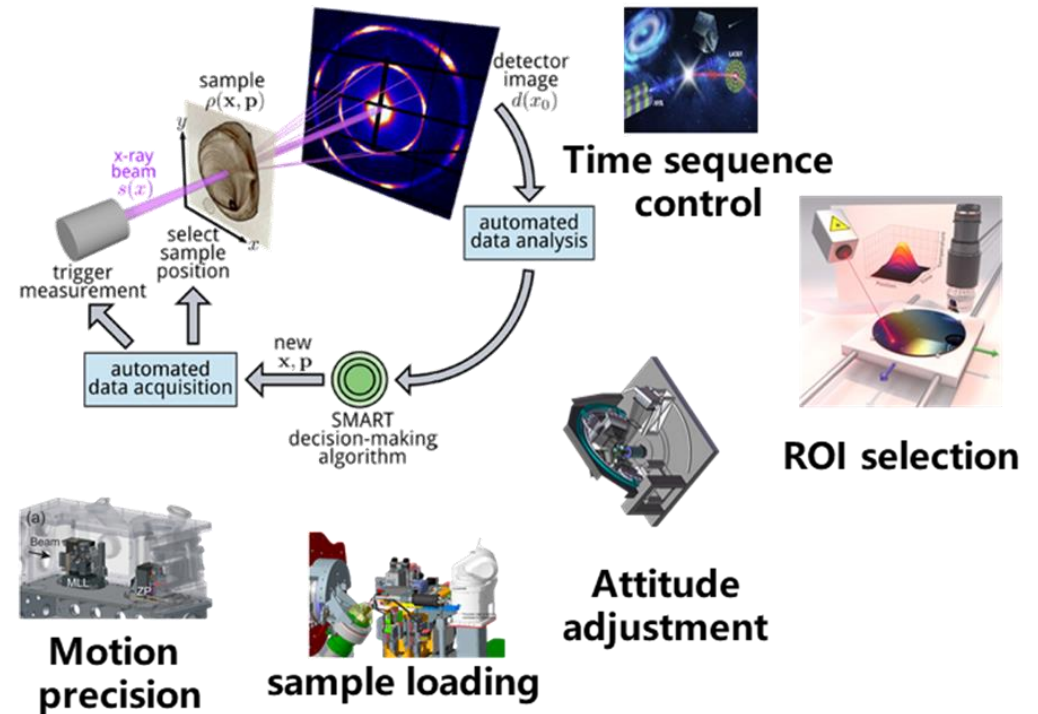
**Exascale image processing beamlines in advanced...**

Yuhui Dong, Chun Li, Yi Zhang, Pengchen...

Nature Reviews Physics (2022) | Cite this article

come from various research backgrounds, and do not necessarily have the knowledge and computational resources to handle such big data. Therefore, a common approach is to incorporate state-of-the-art image processing algorithms into the integrated large-scale data acquisition and analysis software framework developed for the next-generation synchrotron and XFEL facilities. These ambitious software projects, such as Bluesky (NSLS-II, APS), Mamba (HEPS) and Karabo (Eu-XFEL), are designed to interface naturally with the new scientific algorithms and programs. They are being developed to provide a universal platform to collect, manage, visualize and process big data. The power of these platforms

**团队在 Nature Reviews Physics 上阐述先进算法与全生命周期软件框架相结合是解决先进光源“EB”量级数据挑战的最佳途径**



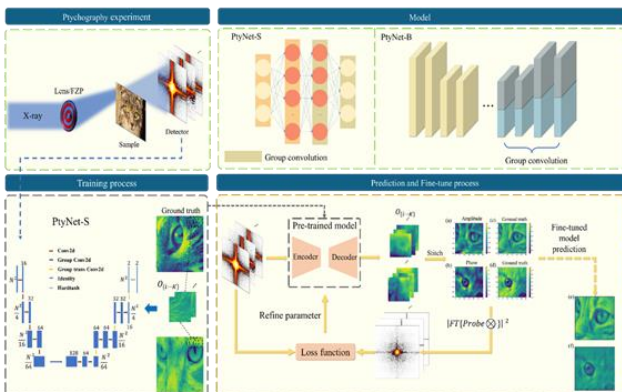
研制基于长期迭代学习、多线站边缘部署的大数据实时解析与智能实验控制AI大模型系统，应用于：

- 智能调光、选区与系统姿态优化
- 流程控制与实验决策
- 科学预警与交互





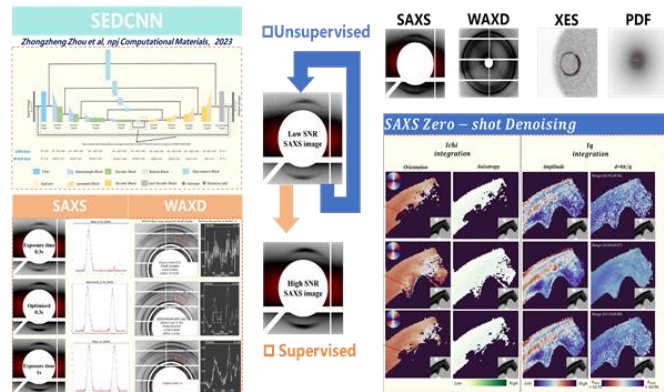
## AI大模型解决Ptychography相位恢复难题



X.Y. Pan et al. *iScience*, 2023

X.Y. Pan et al. *Acta Physica Sinica*, 2023

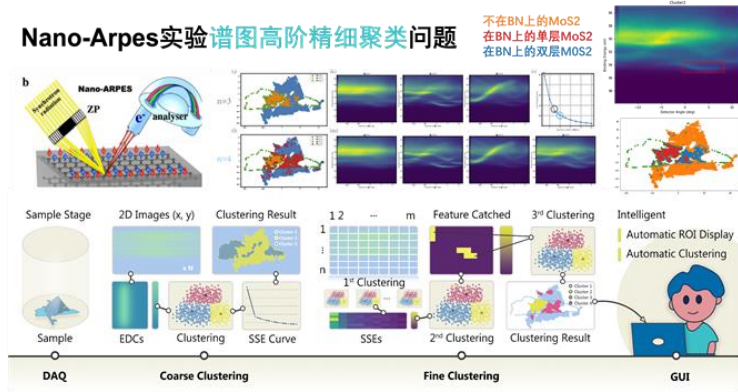
## 物理信息嵌入的通用衍散射图像降噪模型



Z.Z. Zhou et al. *npj Comp. Mater.*, 2023

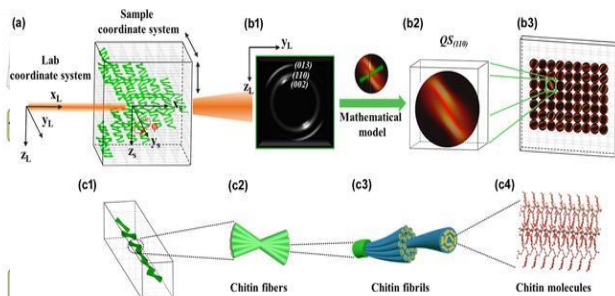
Z.Z. Zhou et al. *Journal of Appl. Cryst.*, 2024

## Nano-ARPES实验谱图高阶精细聚类问题



L.Z. Bian et al. *Commun. Phys.*, under review

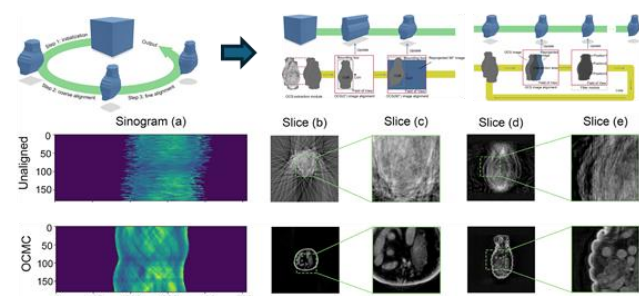
## 深度学习手段提取海量衍射图像中的物理信息



X.Y. Zhao et al. *IUCrJ*, 2024

M.H. Sun et al. *IUCrJ*, 2023

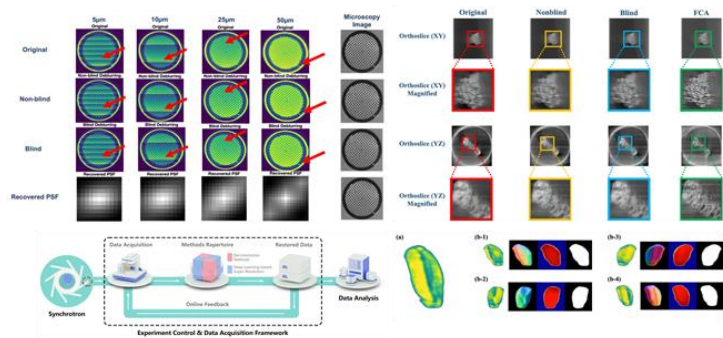
## 端到端的Tomography图像混合抖动与偏移矫正



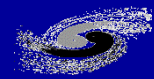
Z. Zhang et al. *The Innovation*, 2023

Z. Zhang et al. *iScience*, 2023

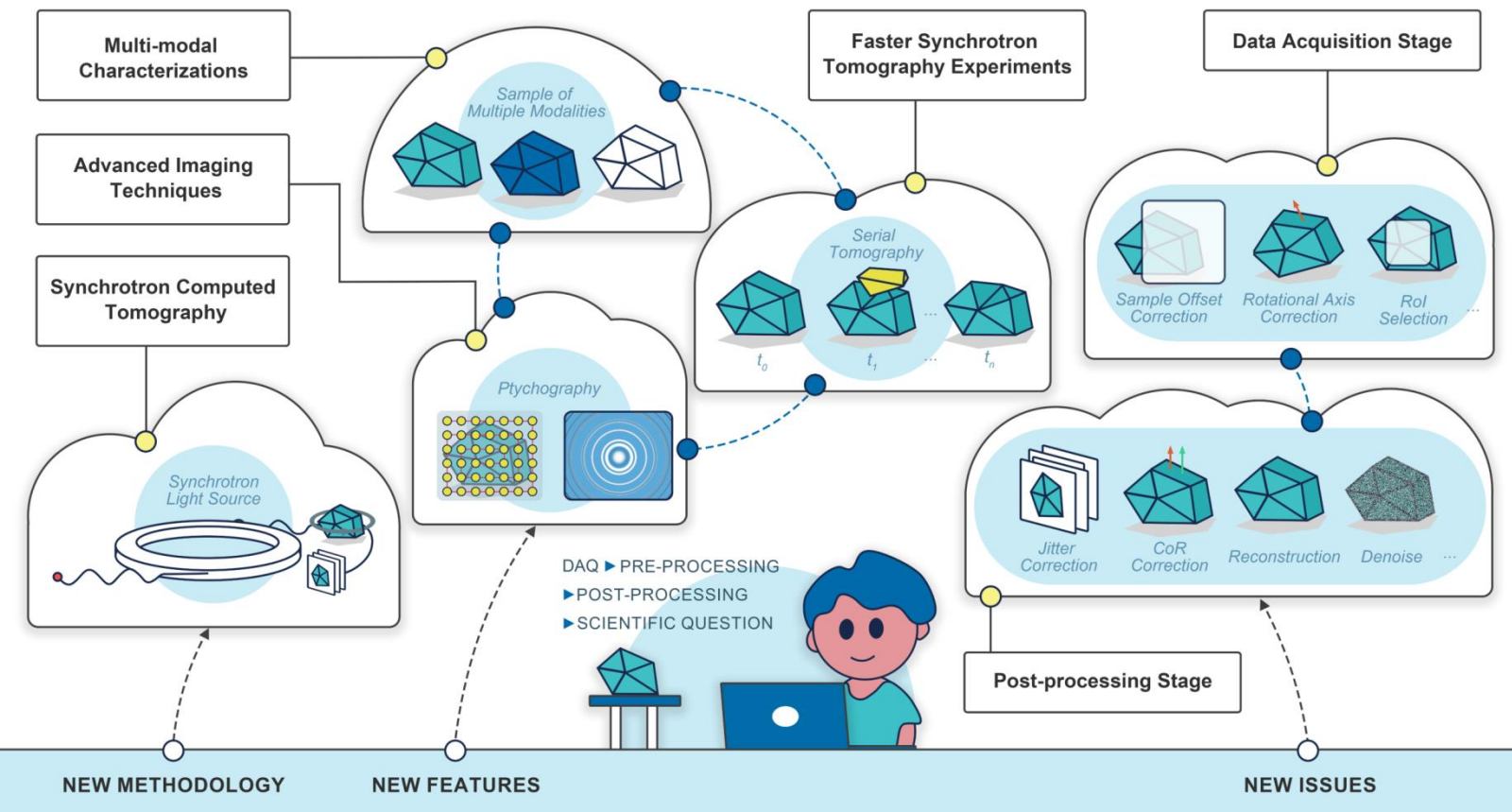
## 数据自适应的退卷积与超分辨率图像复原 workflow



C. Li et al. *Nucl. Sci. Tech.*, 2024



# 1. 同步辐射成像全栈式数据处理 workflows



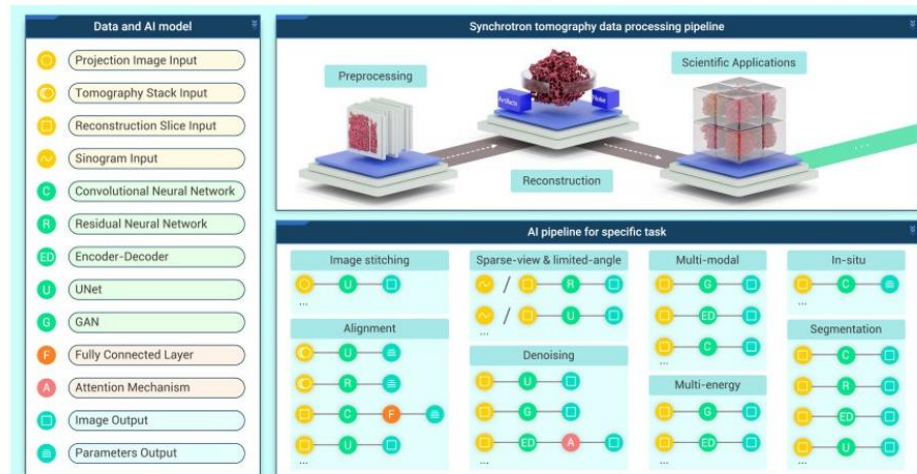
## 深度学习赋能的同步辐射成像实验全栈式数据处理管道

The Innovation Open access

Towards full-stack deep learning-empowered data processing pipeline for synchrotron tomography experiments

Zhen Zhang<sup>3</sup> • Chun Li<sup>3</sup> • Wenhui Wang • ... Gongfa Liu • Yuhui Dong • Yi Zhang

Show all authors • Show footnotes



Sample without offsets

Sample with tilted aixe

Sample with sample offset

Sample with joint offset

Sample with axis offset

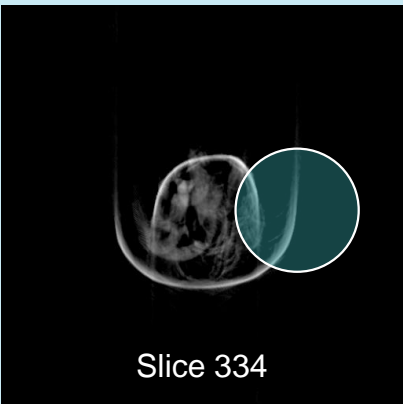
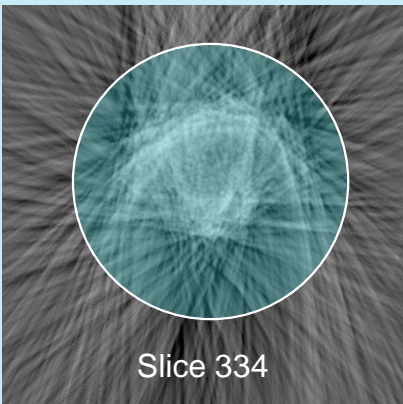
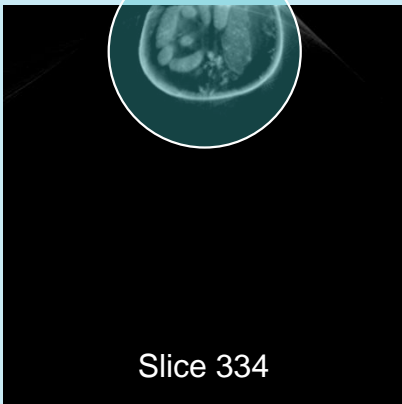
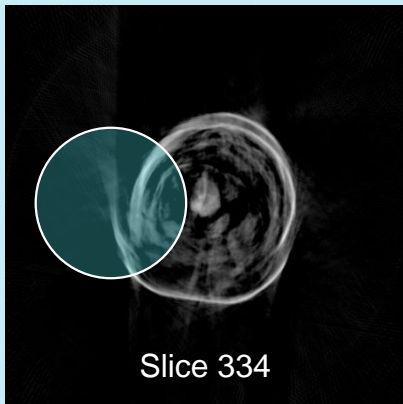
**No.1** Without offsets

**No.2** Tilted axis (z)

**No.3** Sample offset

**No.4** Joint offset

**No.5** Axis offset



## 贯穿SRCT数据采集和数据处理阶段的空间配准技术.

准确且高效的空间配准技术提高SRCT的实验效率，助力SRCT实验实现极高时空分辨率的表征。

### 旋转轴 倾斜矫正

数据采集阶段的配准。  
提出了一种基于特征点  
轨迹模型和遗传算法的  
旋转轴倾斜矫正算法。

### 样品 中心偏移矫正

数据采集阶段的配准。  
提出了一种基于样品位  
置检测和遗传算法的样  
品中心偏移矫正算法。

### 视场内样品 的混合偏移矫正

数据后理阶段的配准。  
提出了一种基于外轮  
廓结构的视场内样品  
的混合偏移矫正算法。

### 超视场样品 的混合偏移矫正

数据处理阶段的配准。  
提出了一种基于全局信  
息编码的超视场样品的  
混合偏移矫正算法。



# 1. 同步辐射成像全栈式数据处理 workflows

## 粗配准和精配准结合的旋转轴倾斜配准方法

粗对准算法**大步长**的对旋转轴的倾斜进行调整。

精对齐算法通过遗传算法**小步长**的寻找最佳调整角度。

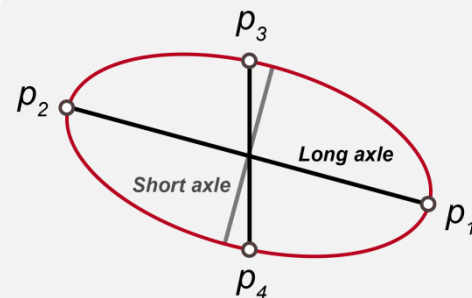
Zhang Z, Bi X, Li P, et al.

*J Synchrotron Radiat.* 2023;30: 169-178.

doi:10.1107/S1600577522011067

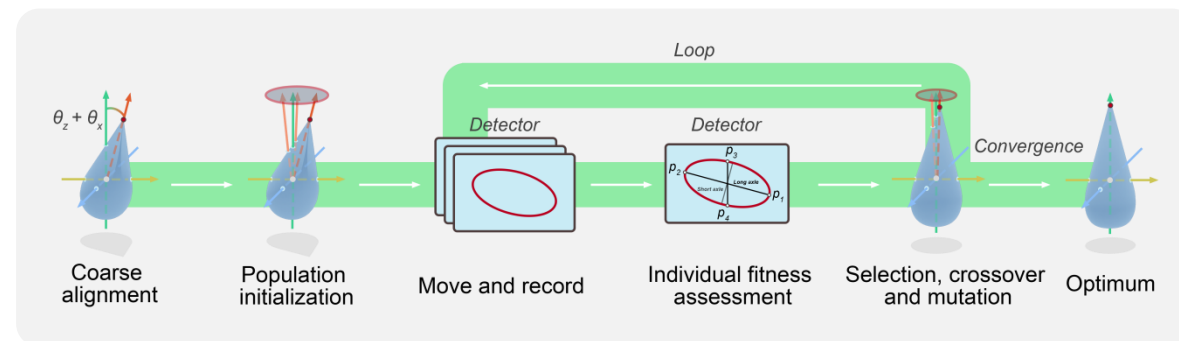
### 粗配准

基于特征点运动轨迹模型计算旋转轴的倾斜角



$$\theta_x \approx \arctan\left(\frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2}\right) \times \frac{180}{\pi}$$

$$\theta_z \approx \arcsin\left(\frac{\sqrt{(x_3 - x_4)^2 + (y_3 - y_4)^2}}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}}\right) \times \frac{180}{\pi}$$

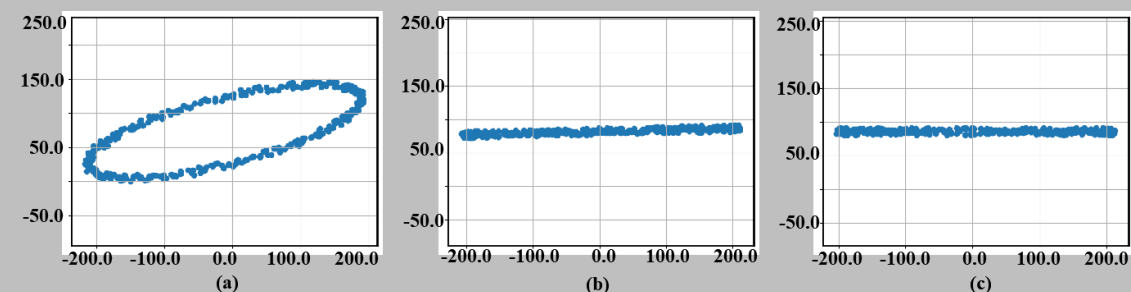


### 精配准

基于遗传算法迭代出最优的旋转轴矫正角度

### 实验结果

HEPS VBS上测试, 矫正后旋转轴得到较好矫正 (0°)



# 1. 同步辐射成像全栈式数据处理 workflow

## 粗配准和精配准结合的样品偏移配准方法

粗对准算法**大步长**的对样品的位置进行调整，将其移动至FoV内。

精对齐算法通过遗传算法**小步长**的寻找样品最佳位置，将其移动至旋转中心。

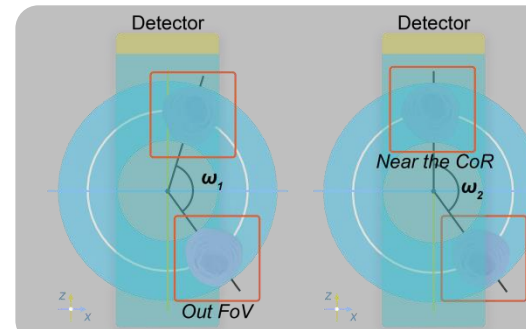
Zhang Z, Bi X, Li P, et al.

*J Synchrotron Radiat.* 2023;30: 169-178.

doi:10.1107/S1600577522011067

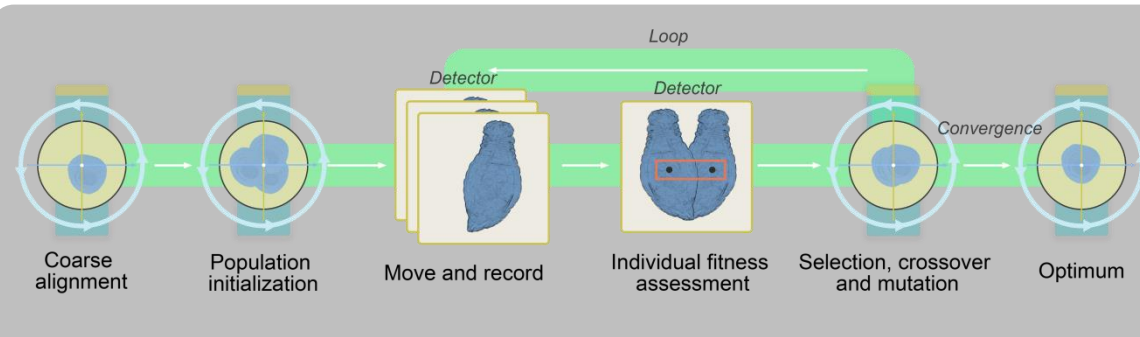
### 粗配准

基于样品物理模型  
计算样品与FoV的  
偏移距离



$$\Delta x \approx \frac{distance(\omega_1)}{\sin(\omega_1) - \cos(\omega_1) \tan(\omega_2)}$$

$$\Delta z \approx -offset\_x * \tan(\omega_2)$$

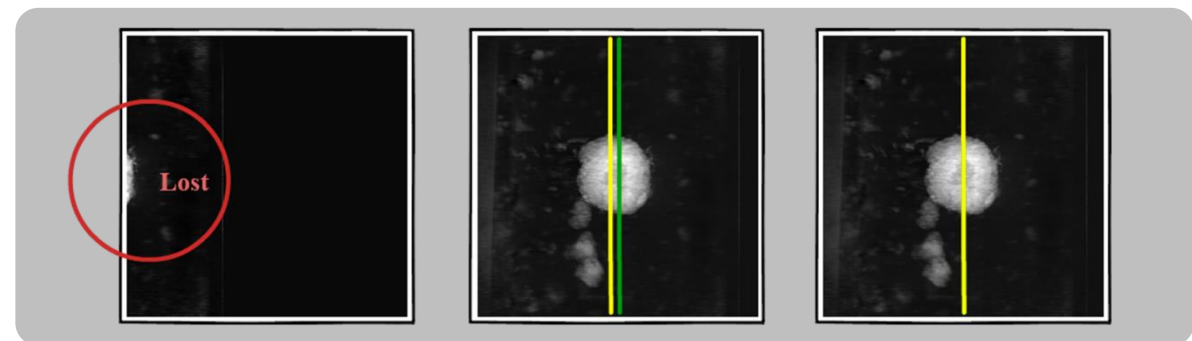


### 精配准

基于遗传算法迭代  
出最优的样品偏移  
矫正距离

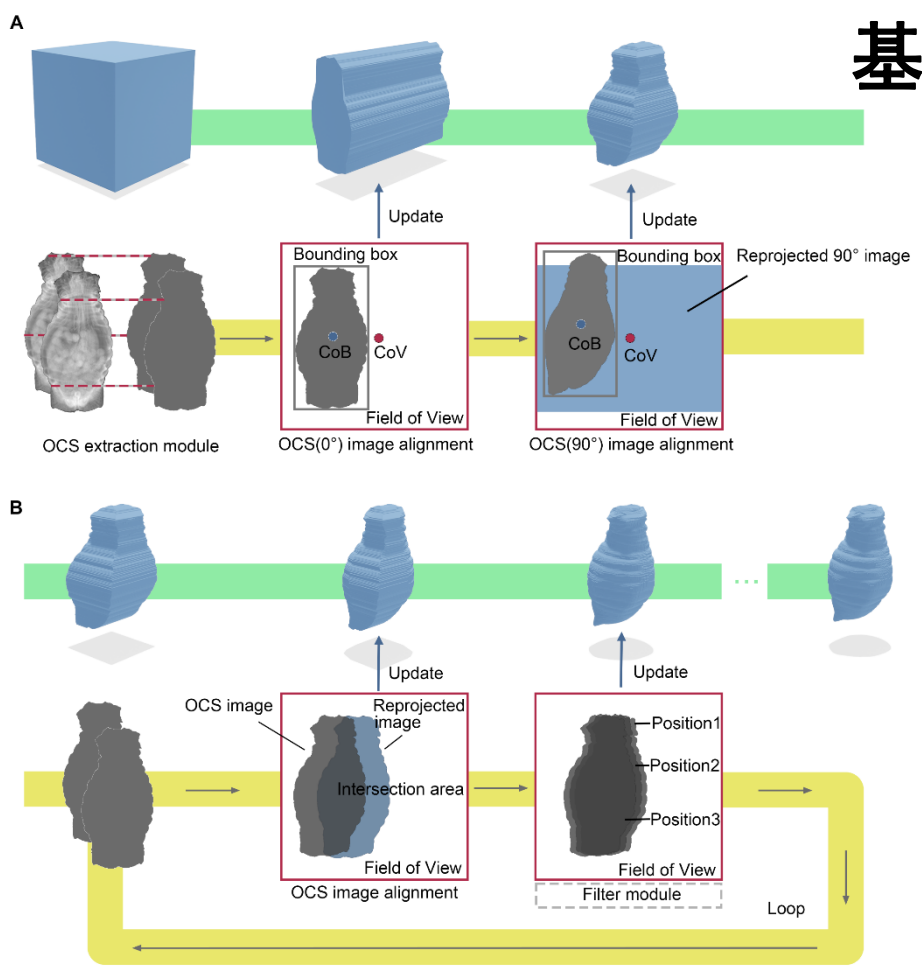
### 实验结果

XRF实验数据配准。  
NCM从视场外移至  
中心 (<1px)



# 1. 同步辐射成像全栈式数据处理 workflow

## 基于外轮廓结构的混合偏移校正方法 (OCMC)



### Full-field Tomography

Nano-CT dataset of a NMC cathode particle.



### Scanning Tomography

3D-XRF dataset of a particle.



### Electron Tomography

ET dataset of SARS-CoV-2 particles.



多种成像技术 (Nano-CT、3D-XRF 和 ET) 获得的实验数据集和模拟数据集的测试中, OCMC 在混合偏移的校正上表现出极高的精度和效率。

与互相关方法 (*cross-correlation*)、*TomoPy* 提供的混合校正方法 (*joint correction*) 以及 *StackReg* 提供的刚体校正方法 (*rigid correction*) 和平动校正方法 (*translation correction*) 相比, OCMC 展现出最优的校正效果。

Zhang Z, et al. *iScience*, 2023



# 1. 同步辐射成像全栈式数据处理 workflow

## 基于全局编码信息和外轮廓结构的纳米探针断层扫描实验混合偏移校正 (NTMC)

在纳米探针断层扫描成像实验中，样品一般会从底部超出成像视场。

OCCMC 无法获取足够的样品外轮廓信息对混合偏移进行配准，从而导致精度降低。

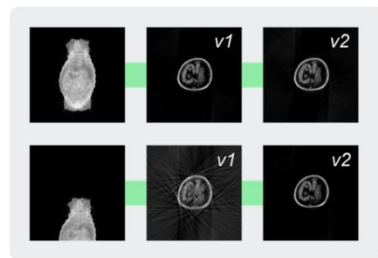
NTMC 同时利用投影图像的全局编码信息和样品的外轮廓信息对投影图像间的混合偏移进行配准。

NTMC 既具有 OCCMC 的优点，又能解决纳米探针CT实验中样品超出视场的问题。

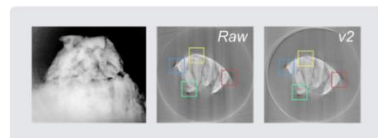
### 实验验证 (NTMC)



1st



2nd



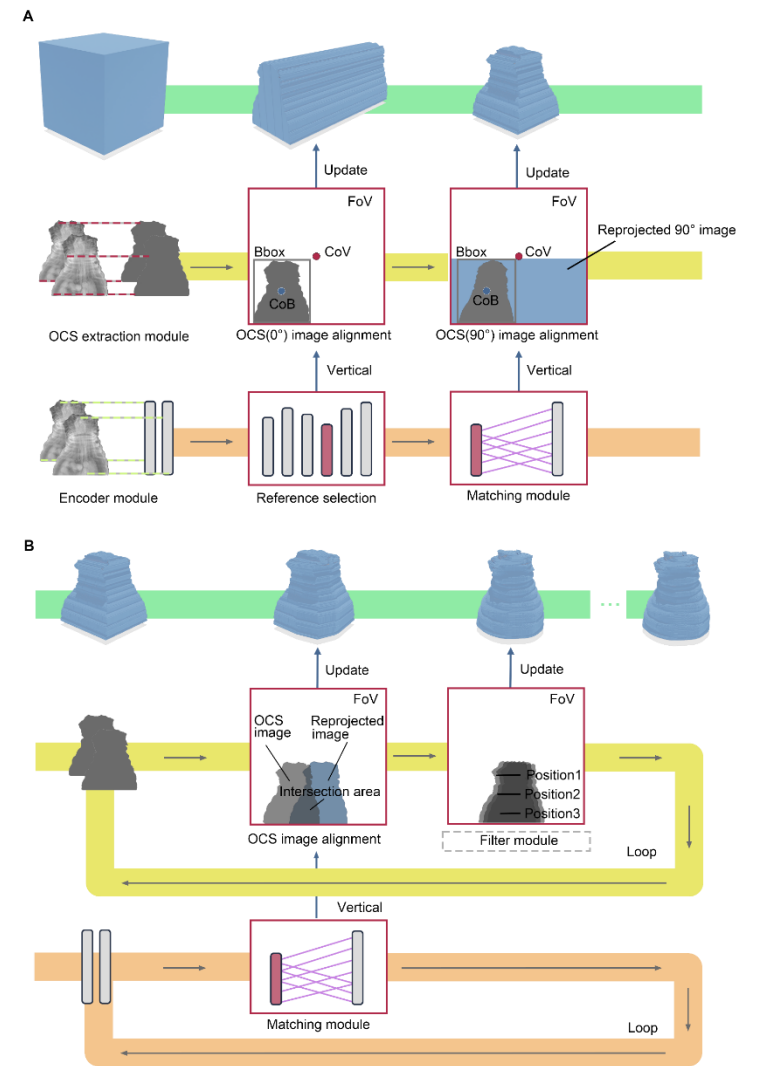
### 模拟数据的定量比较

在成像视场内：NTMC 的配准精度与 OCCMC 相当

超出成像视场：NTMC 的配准精度远高于 OCCMC，与“在成像视场内”时一样好。

### 纳米探针CT实验数据验证

重建后的伪影减少，空间分辨率提高。

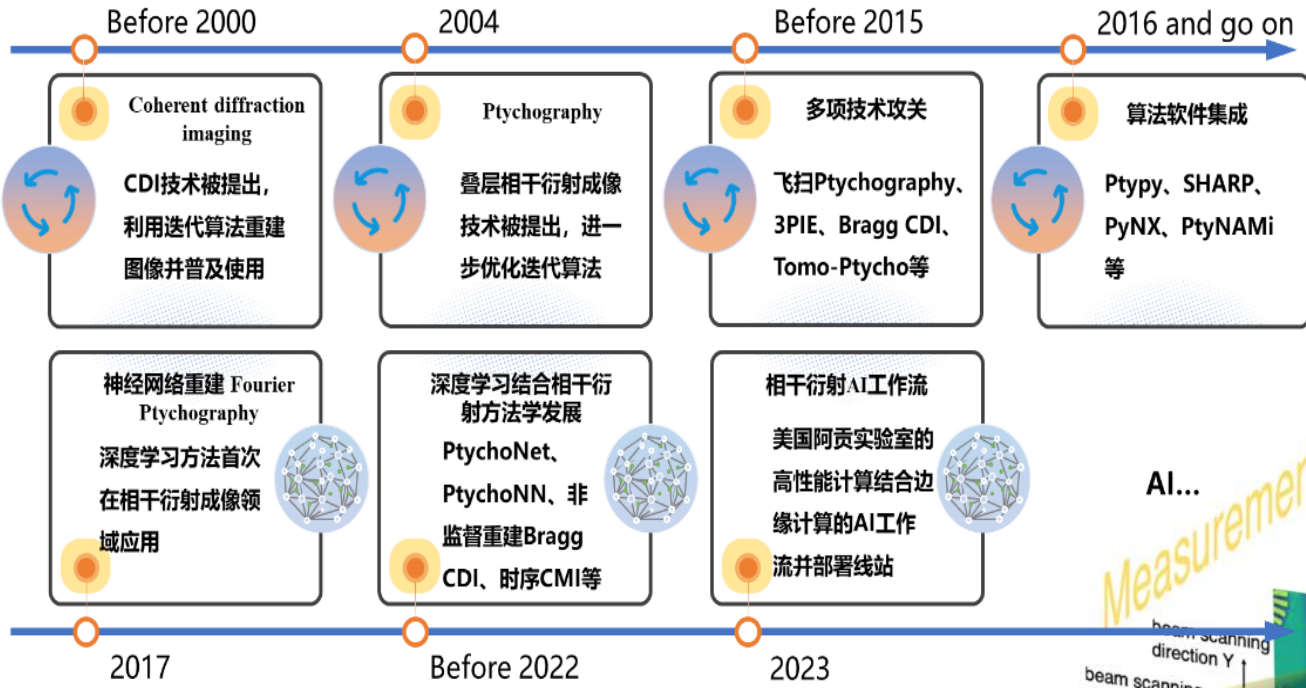


科大联培学生张震获得国家奖学金

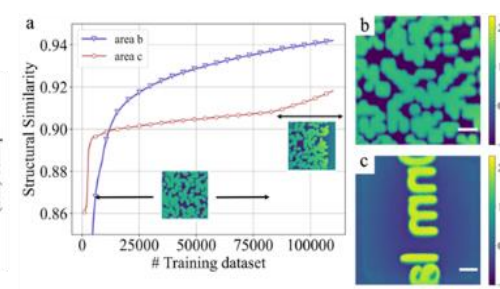
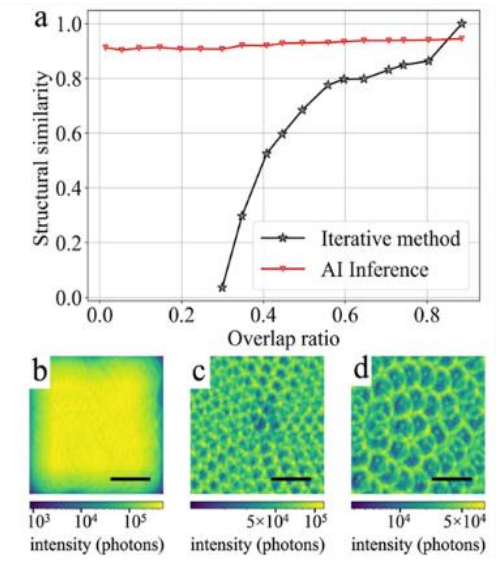
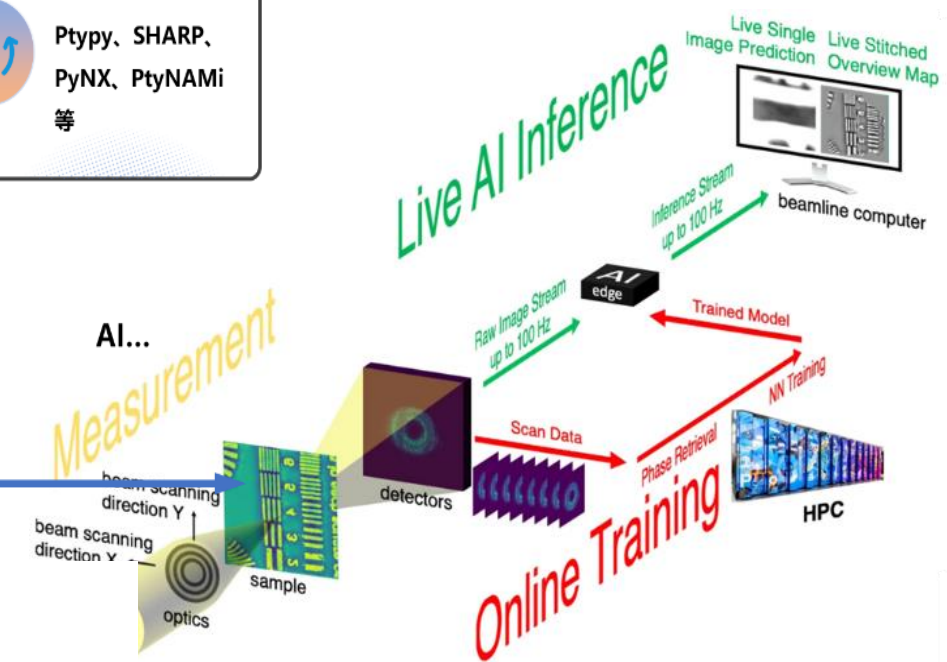




# 2. X射线相干衍射大模型研究

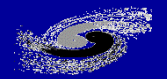
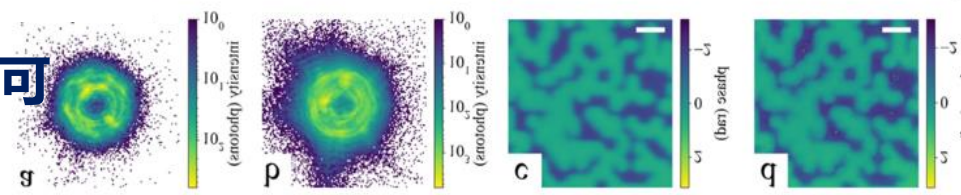


Anakha et al., Nature Communication, (2023)



## 相干衍射成像的相位恢复算法

目前国内外建立的AI相位重建算法仍然存在可迁移性较差的问题



# 2. X射线相干衍射大模型研究

## HEPS相干衍射大模型研制

面向实时数据解析、在线反馈应用的，能在多线站边缘部署，可长期更新迭代的相干衍射成像数据解析AI大模型

方法学优化

大模型训练数据集的构建与预处理流程建立

物理信息嵌入的相干衍射AI预训练策略优化

不同需求的定制化微调技术优化迁移性能

性能提升及长期更新策略优化

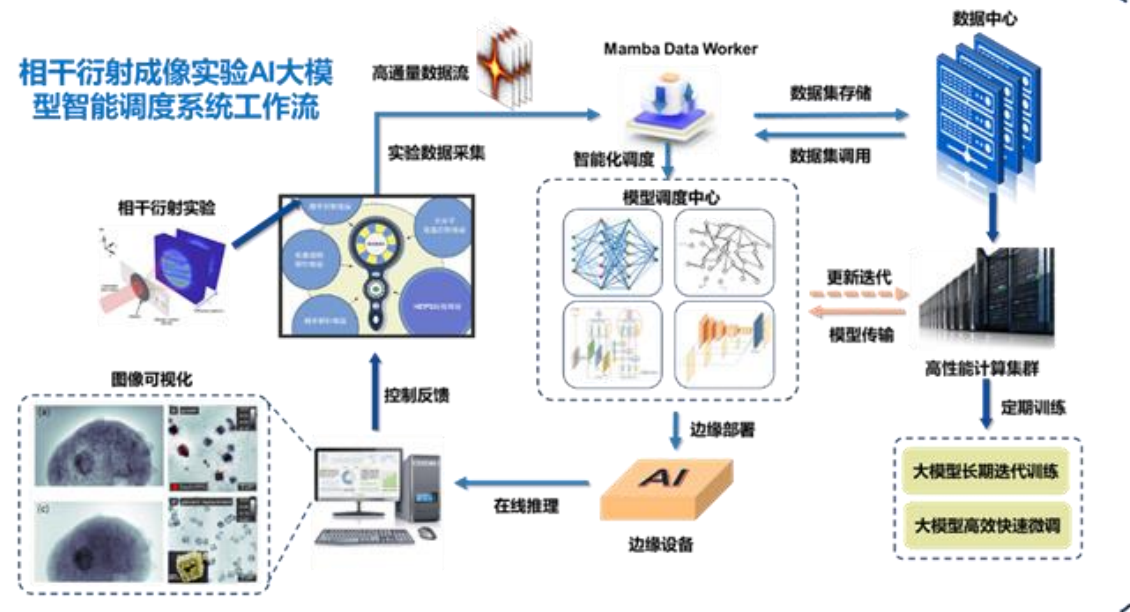
大模型架构的优化

大模型参数量的拓展

大模型自我迭代更新机制

数据重建自动化

相干衍射成像实验AI大模型智能调度系统 workflow



实验验证与应用部署



实验样品数据验证

长期迭代模型性能验证

线站软件应用部署



# 2. X射线相干衍射大模型研究

## 利用 AI 大模型训练技术解决 Ptychography 相位恢复问题

iScience

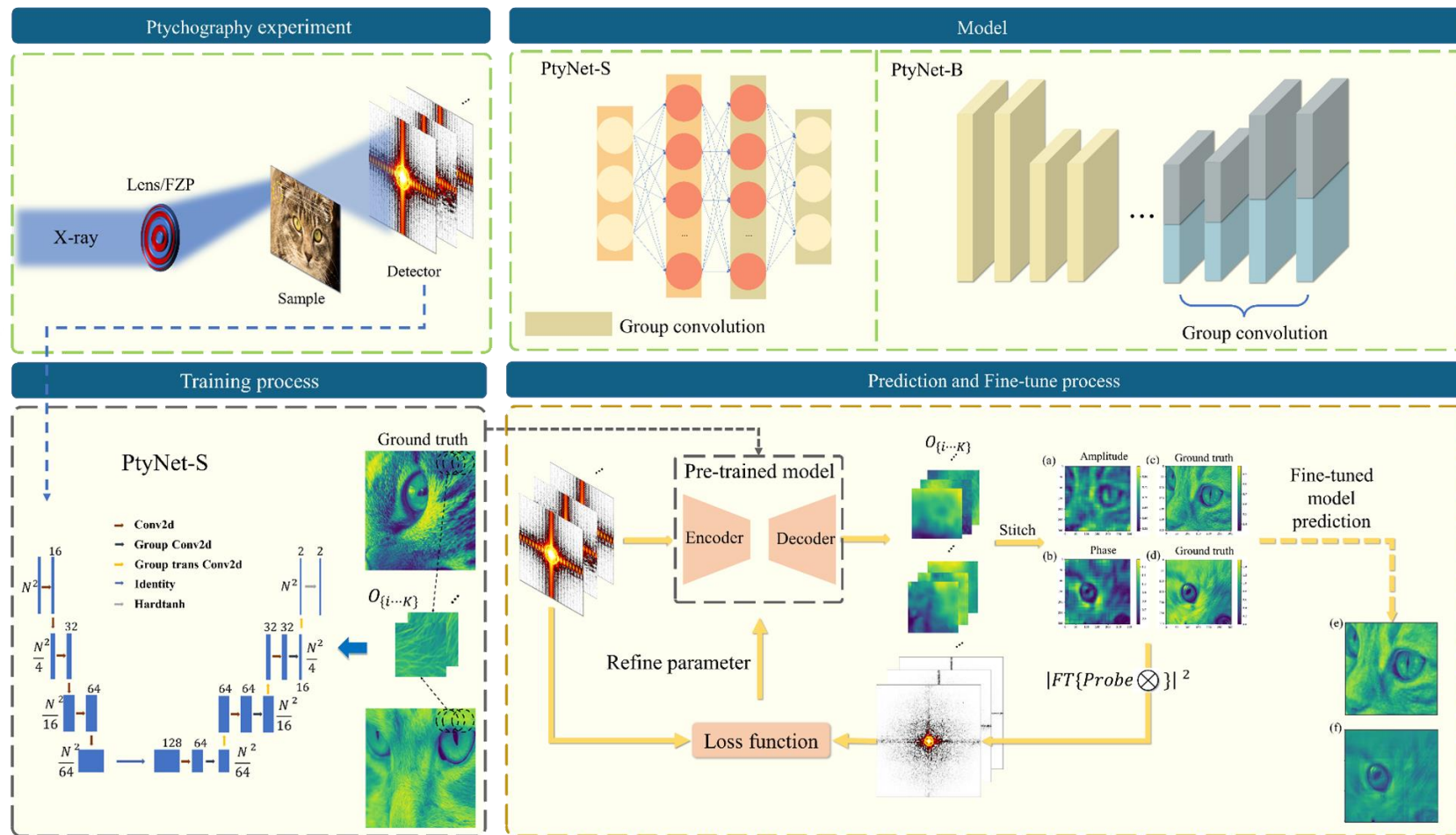
CellPress  
OPEN ACCESS

Article

An efficient ptychography reconstruction strategy through fine-tuning of large pre-trained deep learning model

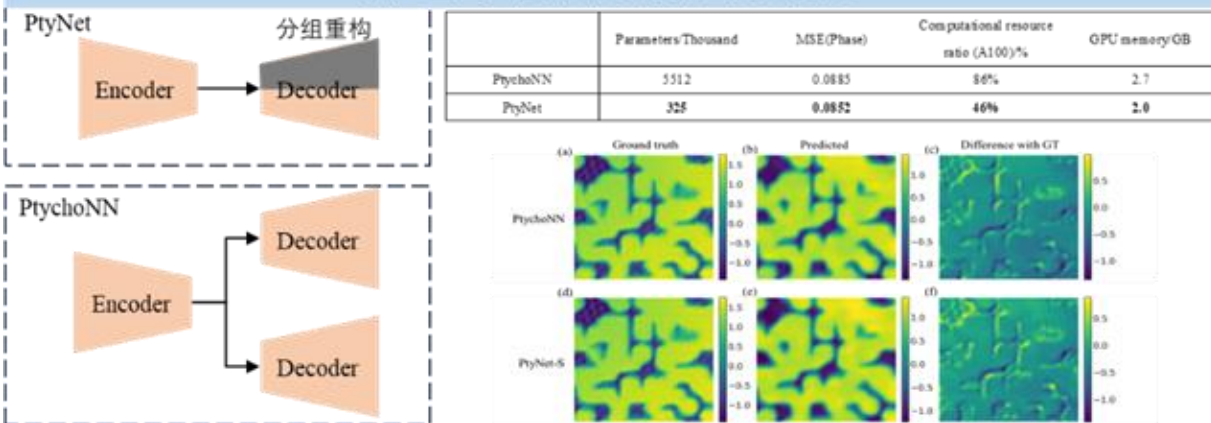
Pan X Y, et al. *iScience*, 2023

X. Y. P et al, *Acta Physica Sinica*, 2023



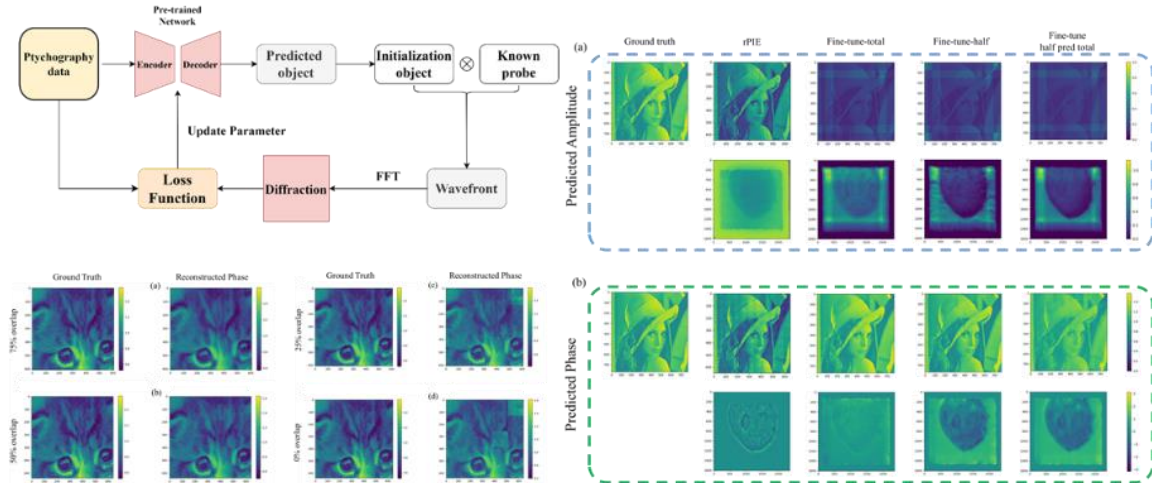
# 2. X射线相干衍射大模型研究

## 神经网络架构和性能对比

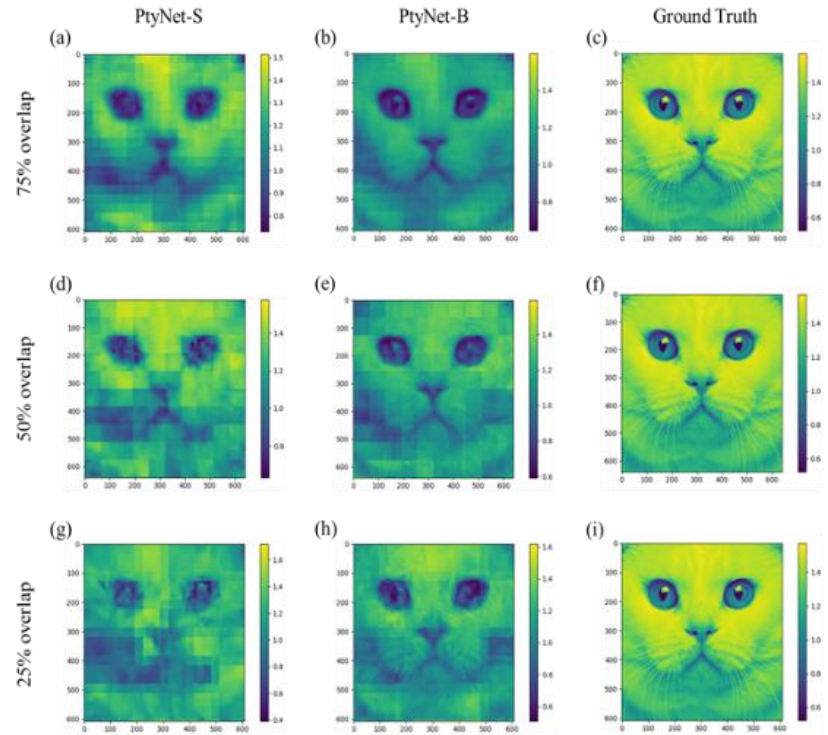


## 微调方法提高分辨率和泛化能力

微调方法在低重叠率下也有较好的重构表现，并且适用于不同的数据。



## 模型参数增加，性能提高

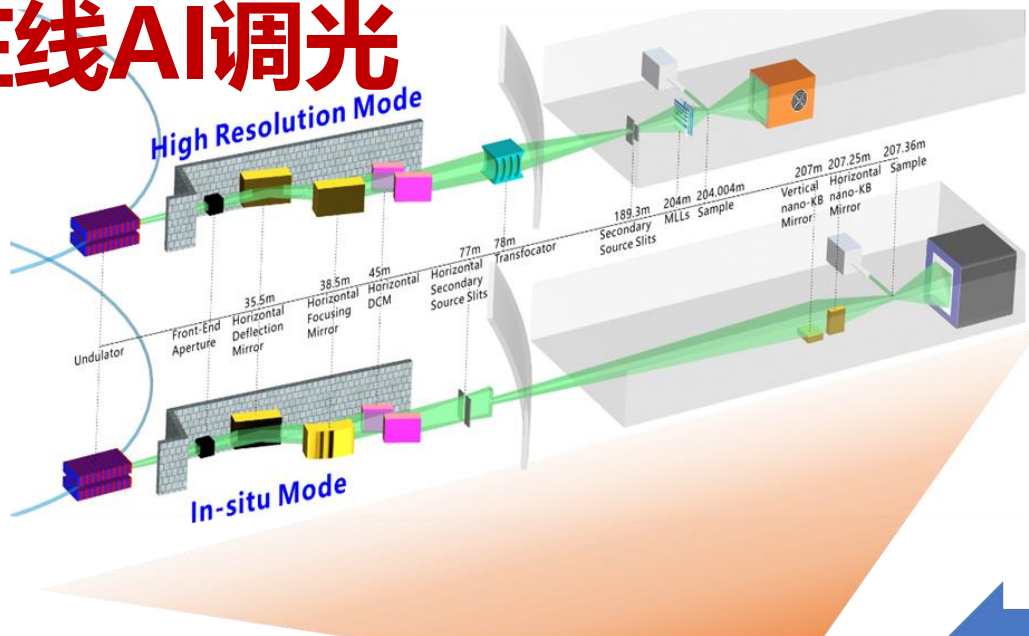


- 探针自适应方法可以让训练策略变为无监督训练，使得网络可以学习到更好的映射
- 多切片ptycho的AI重建



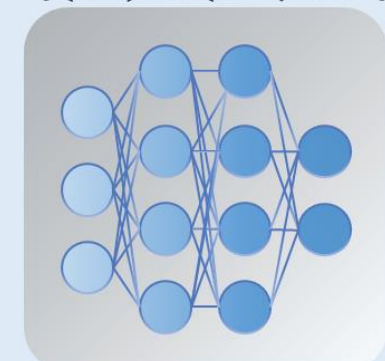
# 2. X射线相干衍射大模型研究

## 在线AI调光

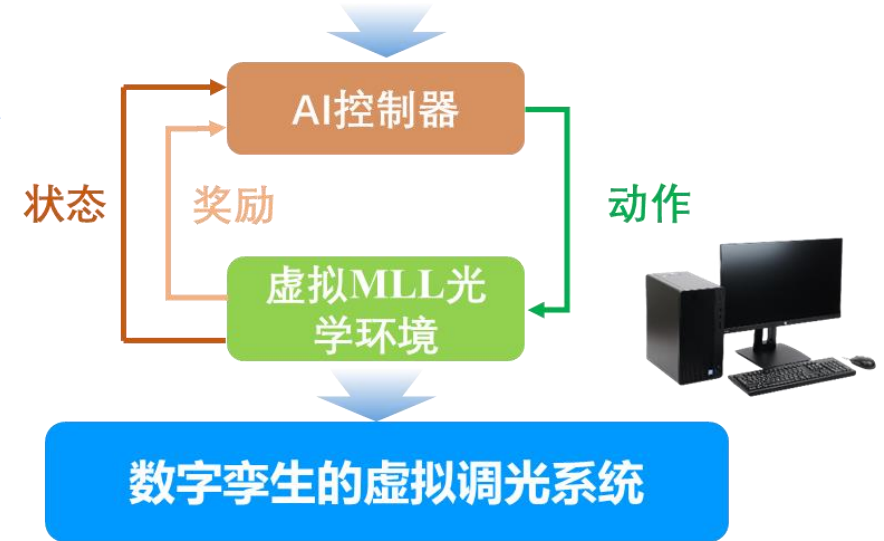


实时在线同步辐射光束线的真实调光系统



$$A = \pi r^2 Q(s, a) = Q(s, a) + \alpha(r + \gamma \max_{a'} Q(s', a') - Q(s, a))$$


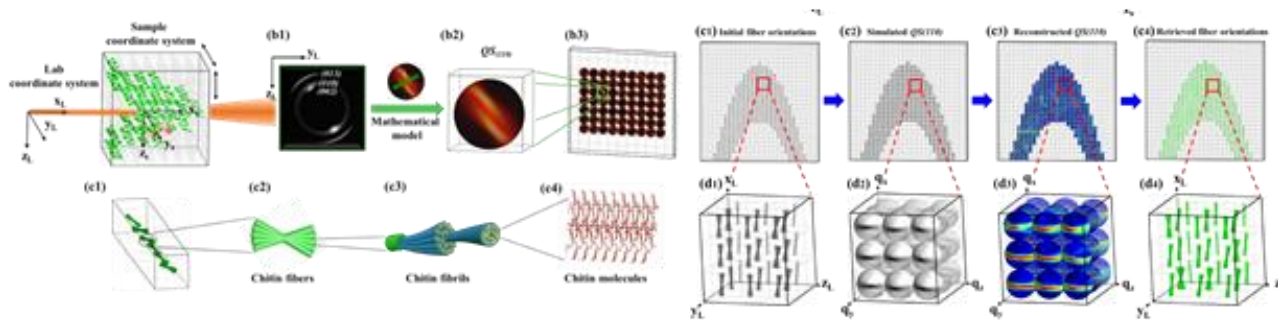
基于Transformer的深度强化学习网络模型



# 3. 数学建模在六维衍射张量成像中的应用

## 6D SAXS/WAXD张量成像成为新的结构与功能表征手段

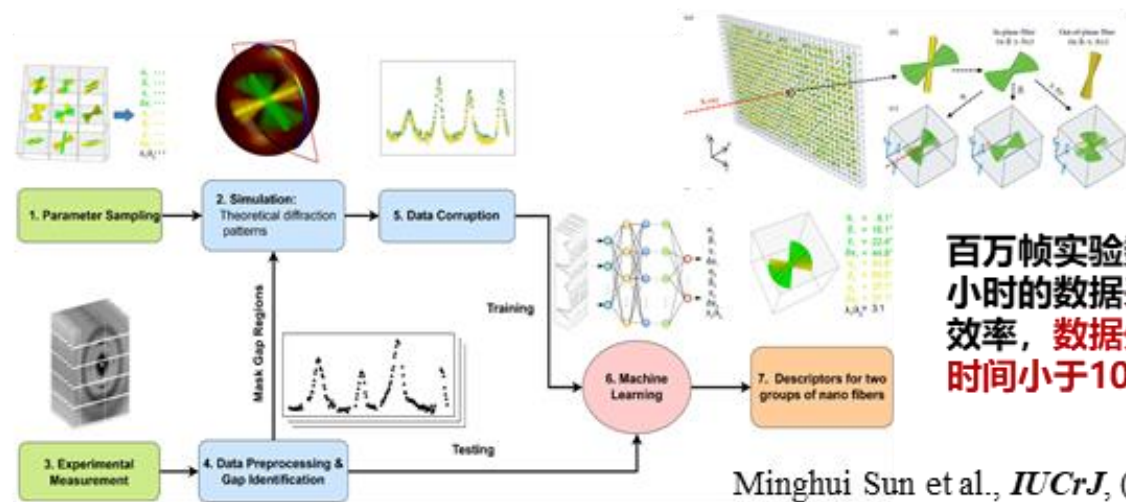
基于“虚拟倒空间扫描”六维张量成像新方法



无需Tilt角度扫描、实验效率提升一个量级

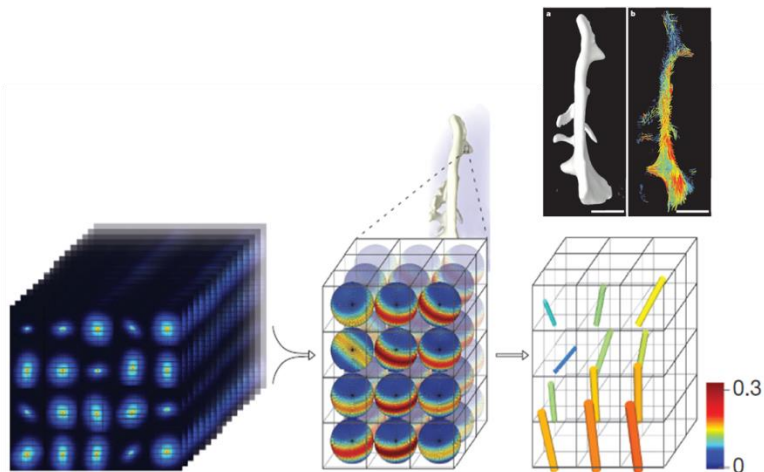
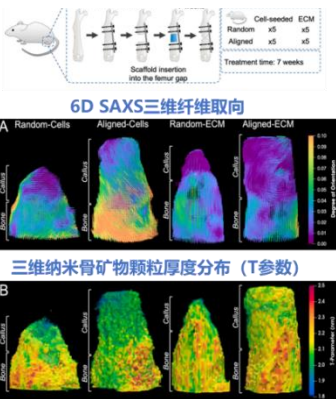
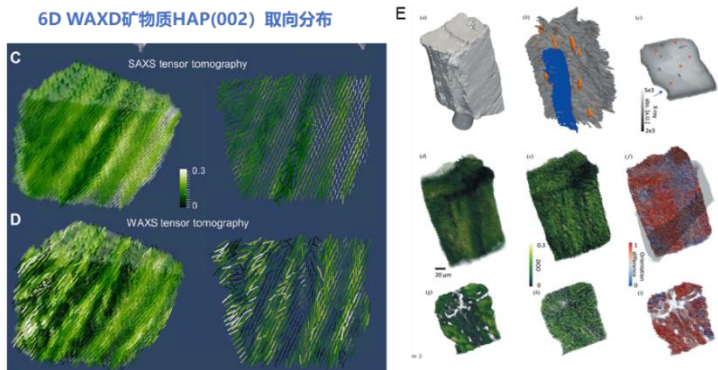
Xiaoyi Zhao et al., *IUCrJ*, (2024)

### 深度学习用于海量衍射数据物理信息提取(与赵丽娜课题组合作)



百万帧实验数据/  
小时的数据采集  
效率, 数据处理  
时间小于10 s

Minghui Sun et al., *IUCrJ*, (2023)

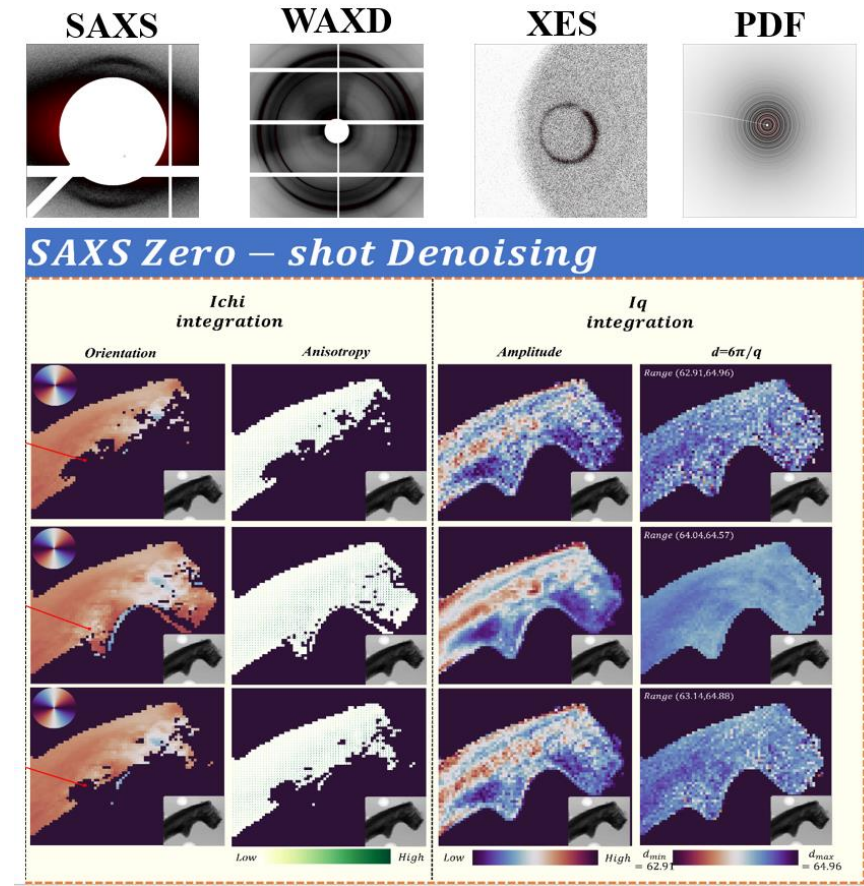
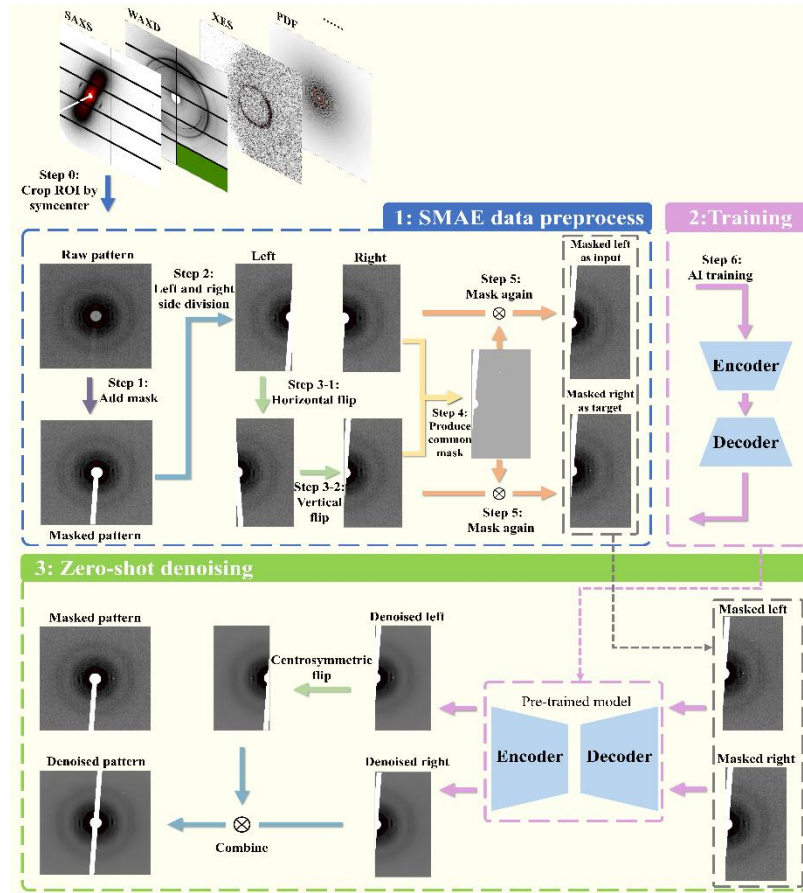
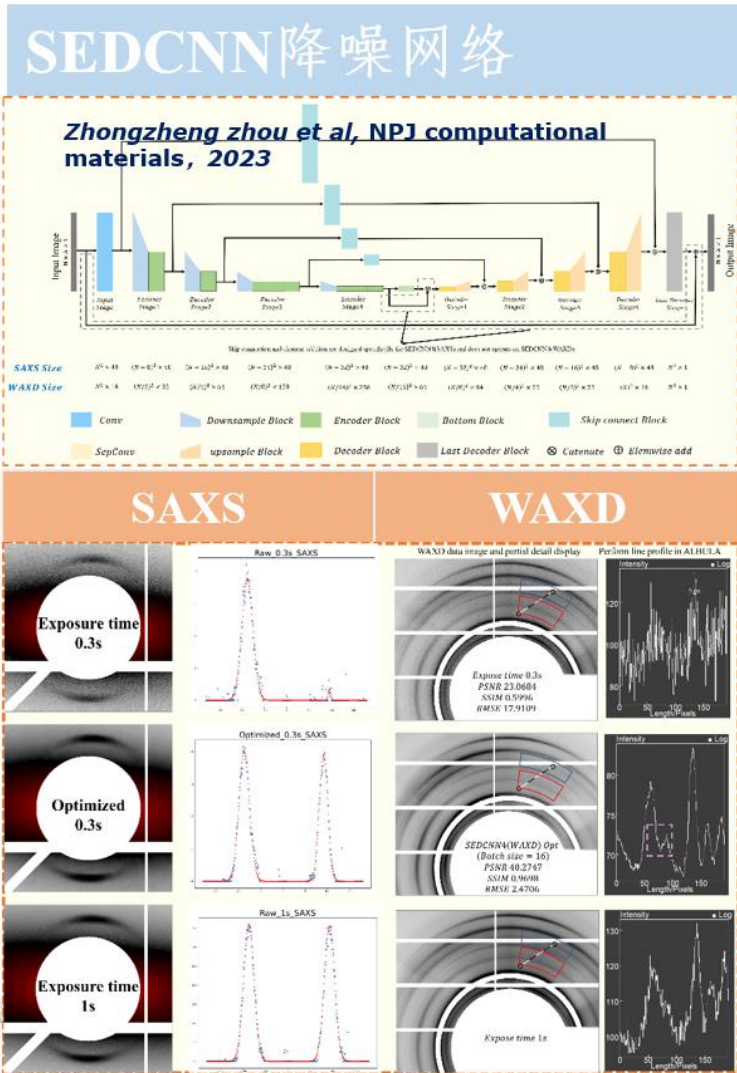


Florian Schaff et al., *Nature*, 2015

Liebi, M. et al. *Nature*:2015 527, 349-352



# 3. 数学建模在六维衍射张量成像中的应用

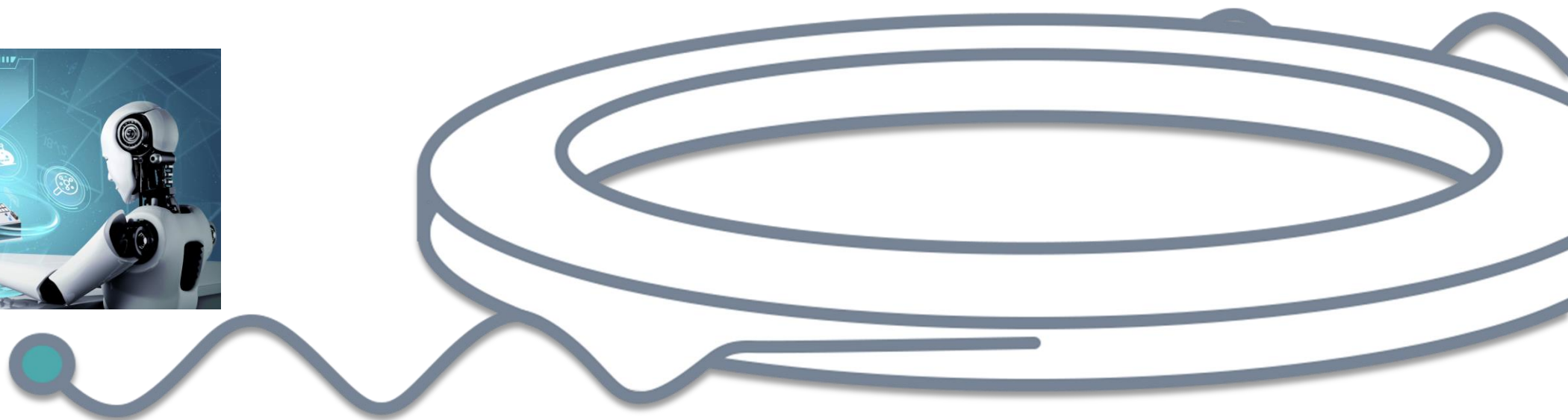


Zhou et al., *npj computational materials*, (2023)

Zhou et al., *Journal of Applied Crystallography*, (2024)



# 展望

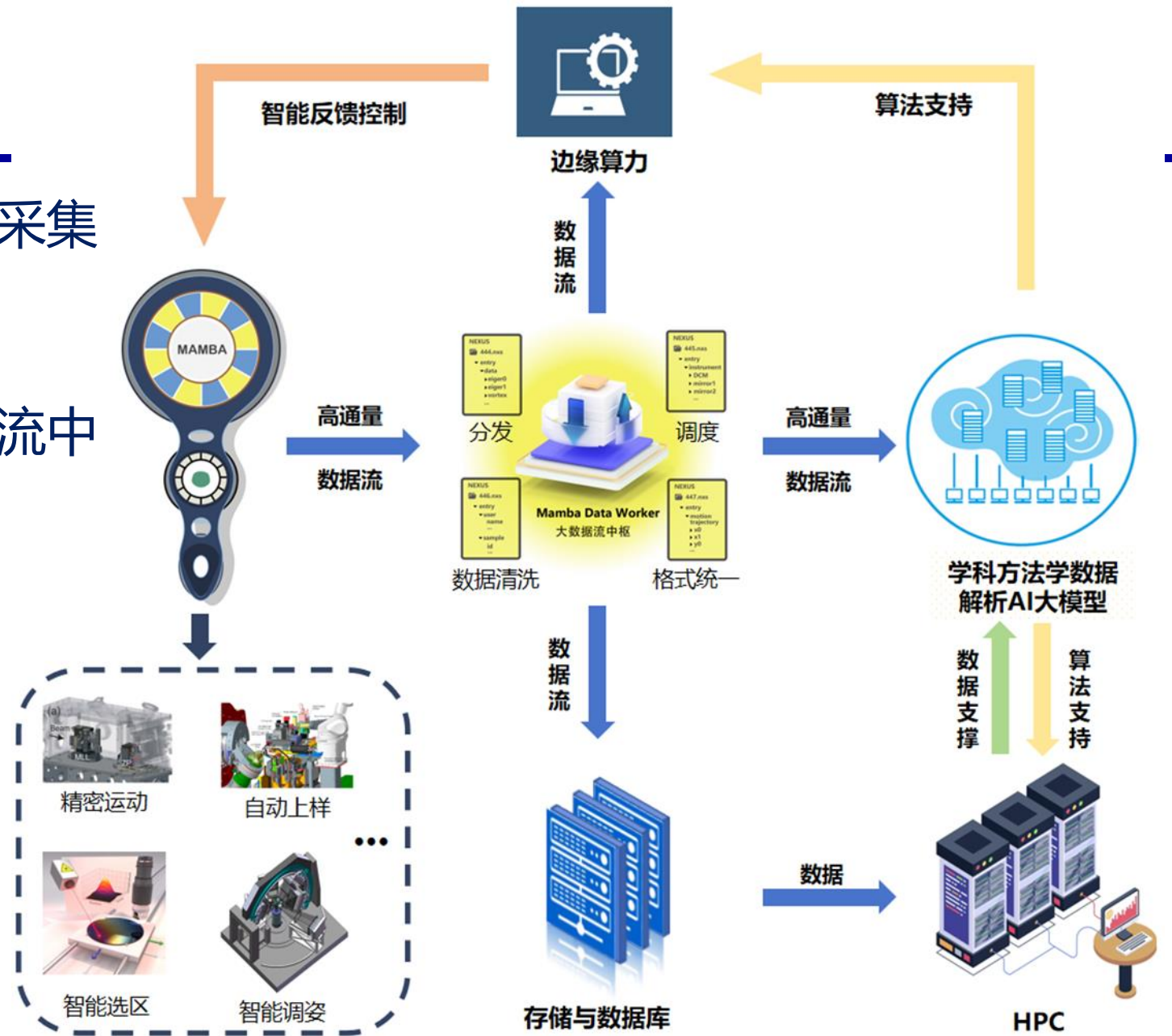






# 智慧光源HEPS

- AI赋能的同步辐射实验全栈式数据采集与分析 workflows
- 面向AI for Science研究的大数据流中枢系统
- 物理方法学学科AI大模型
- 智能束线
- 光源与实验室设施软件与算法融合
- 智慧型科学设施装置群



# Mamba 2025

实验流程控制模块  
(全方位方法学支持)



多维度飞扫软件技术  
(精确、高速)



自动化应用  
(调光、选样、调姿)



# Mamba 2025



高通量多模态数据采集



在线反馈控制应用



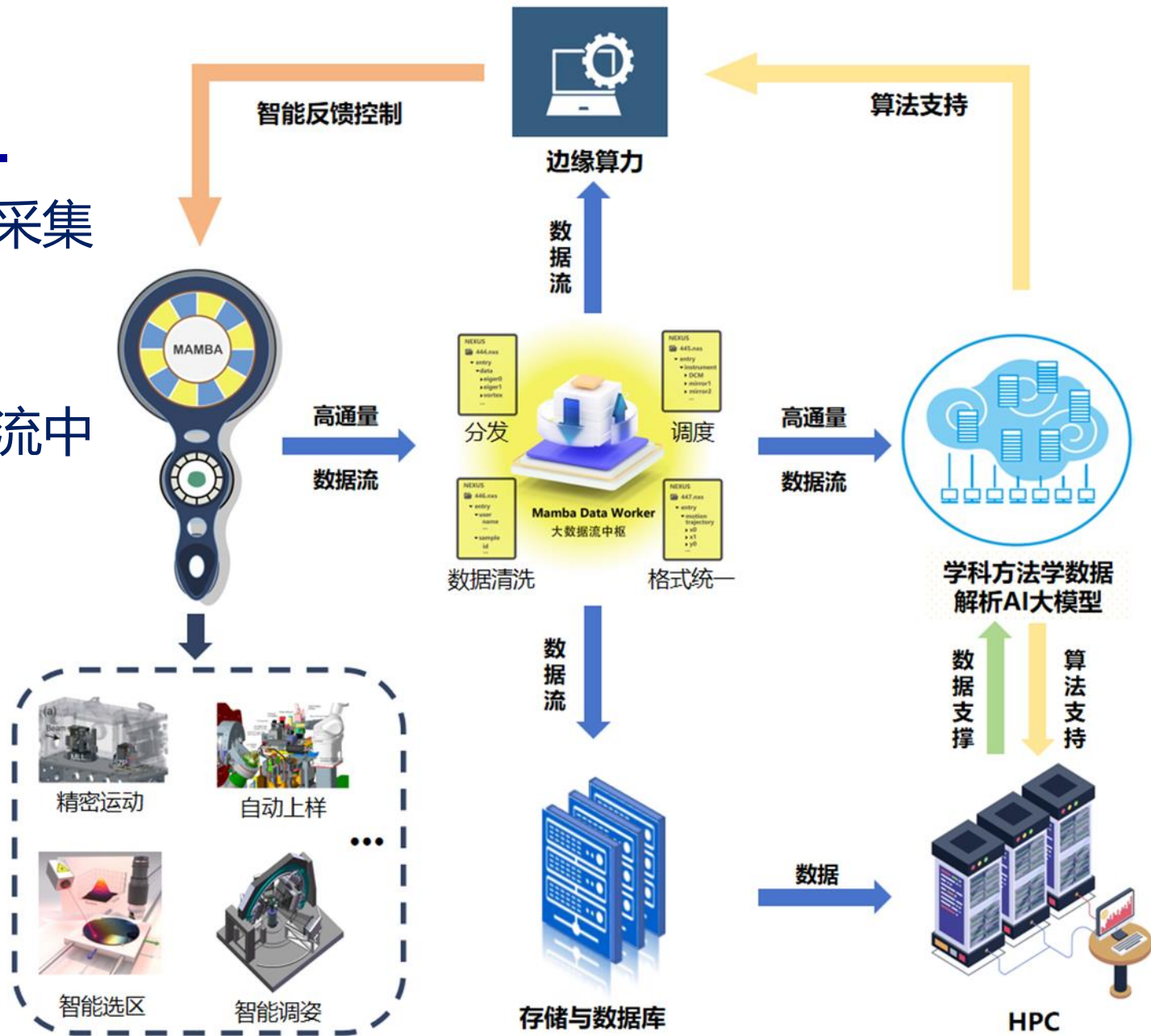
便捷的实验模式切换



原位动态实验支撑



- AI赋能的同步辐射实验全栈式数据采集与分析 workflows
- 面向AI for Science研究的大数据流中枢系统
- 物理方法学学科AI大模型
- 束线智能
- 光源与实验室设施软件与算法融合
- 智慧型科学设施装置群

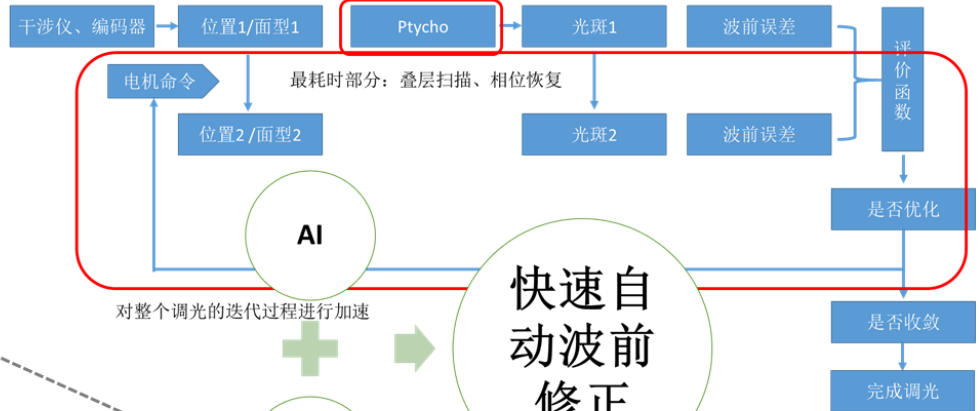
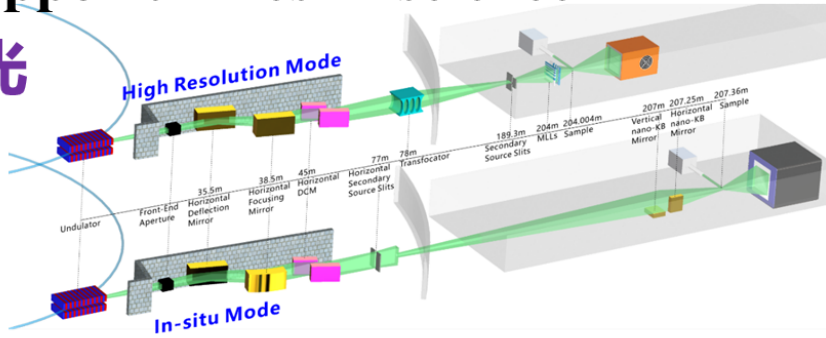


## 打造线站智能 (Beamline Intelligence)

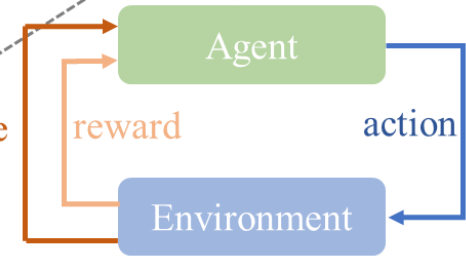
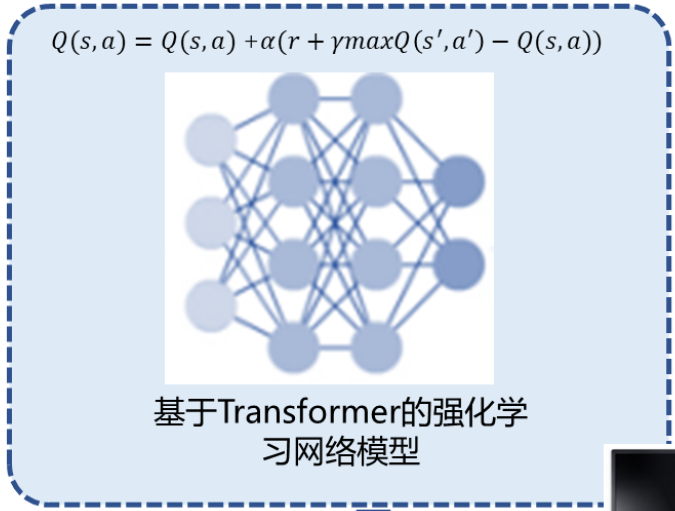
Open new opportunities in science

### A: 智能调光

9nm衍射  
极限聚焦

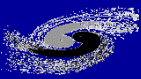


实时在线X射线的  
调光系统



虚拟数字孪生的  
调光系统

预训练好的模型进  
一步在线优化

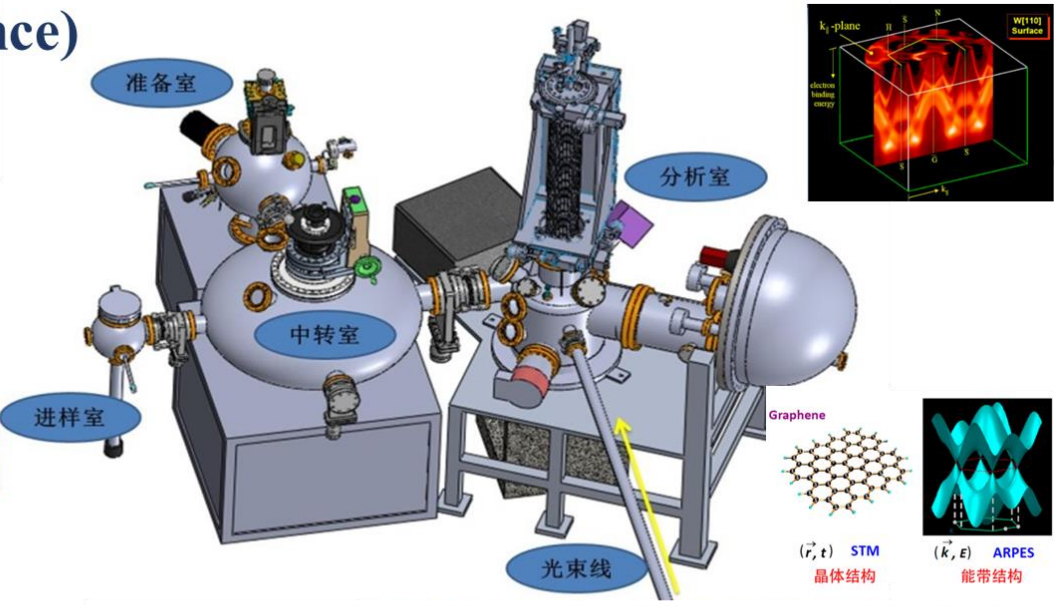
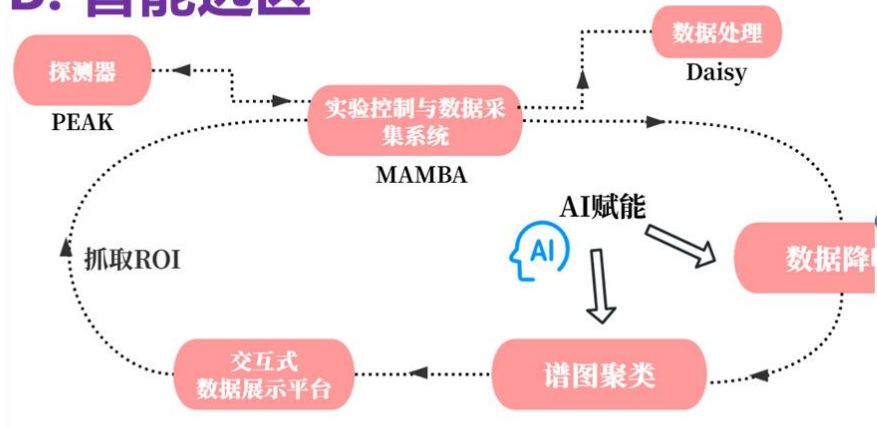


## 打造线站智能 (Beamline Intelligence)

Open new opportunities in science

### B: 智能选区

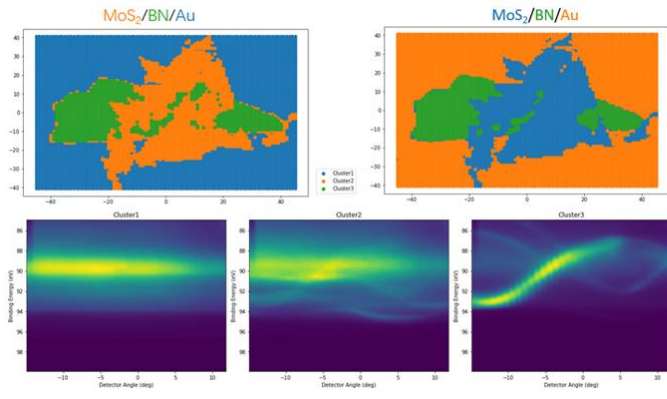
场景: Nano-Arpes实验



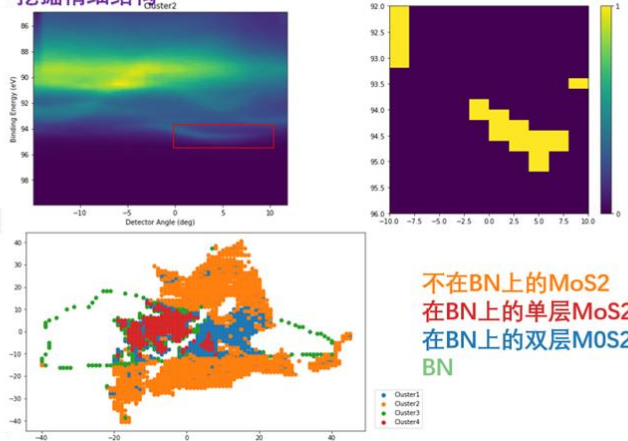
□ Noise2Noise算法配合SEDCNN4网络优化



□ Kmeans以及谱聚类算法对MoS2/BN/Au实验数据进行划分



□ 对能带划分20\*10个小区域进行二次聚类---捕捉重要区域, 挖掘精细结构



不在BN上的MoS2  
在BN上的单层MoS2  
在BN上的双层MoS2  
BN

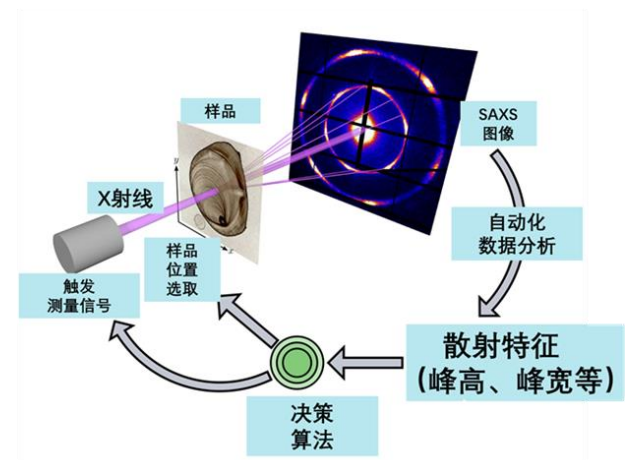
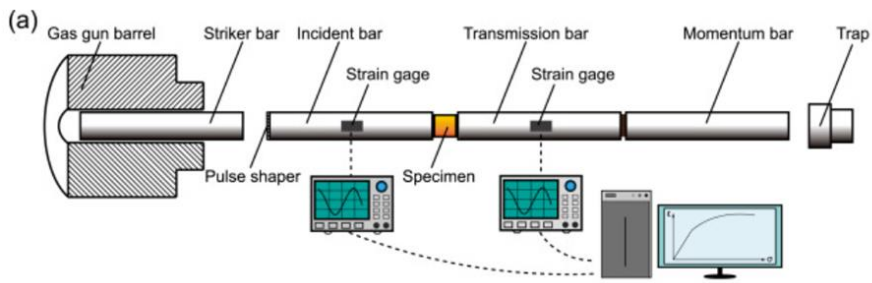


## 打造线站智能 (Beamline Intelligence)

Open new opportunities in science

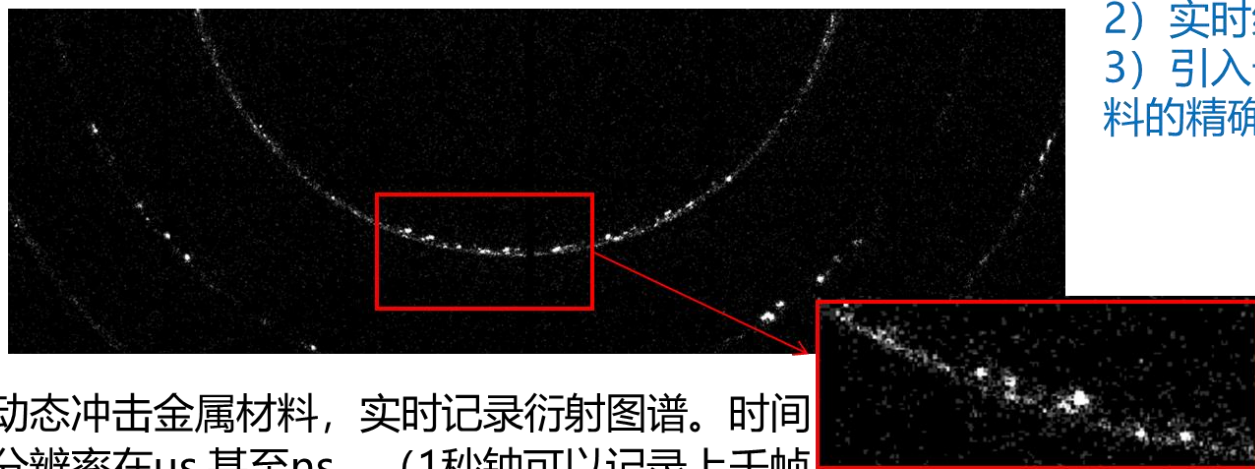
### C: 智能调控

场景: 动态2D XRD实验

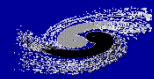
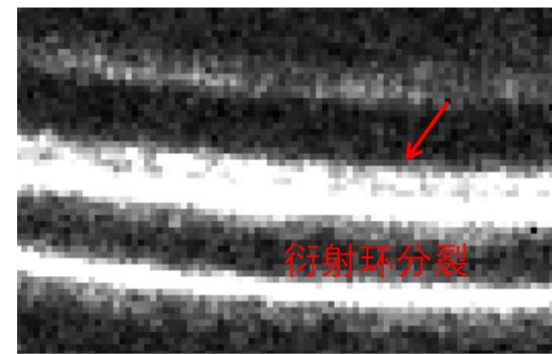


需求:

- 1) 动态衍射数据的在线分析与特征提取
- 2) 实时给予实验调控参数推荐
- 3) 引入长期学习机制, 构建支持多种材料的精确、普适性智能化衍射实验系统



动态冲击金属材料, 实时记录衍射图谱。时间分辨率在us,甚至ns。(1秒钟可以记录上千帧实验数据)

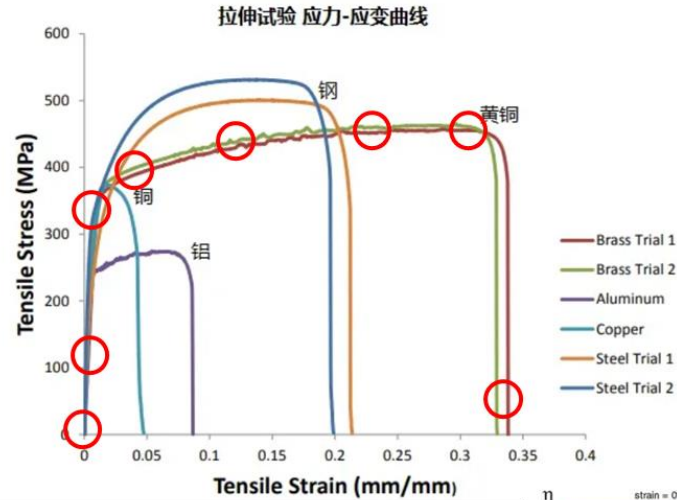
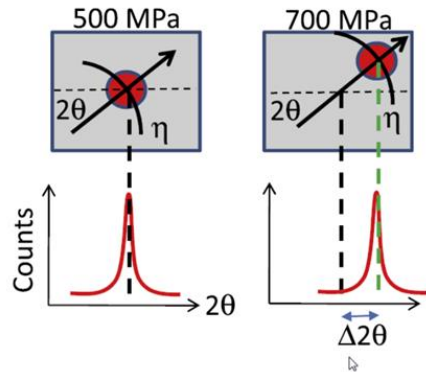
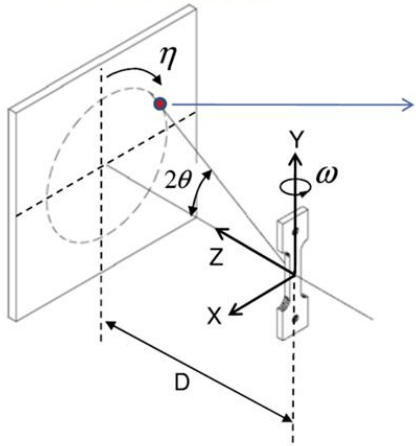


## 打造线站智能 (Beamline Intelligence)

Open new opportunities in science

### D: 科学预警

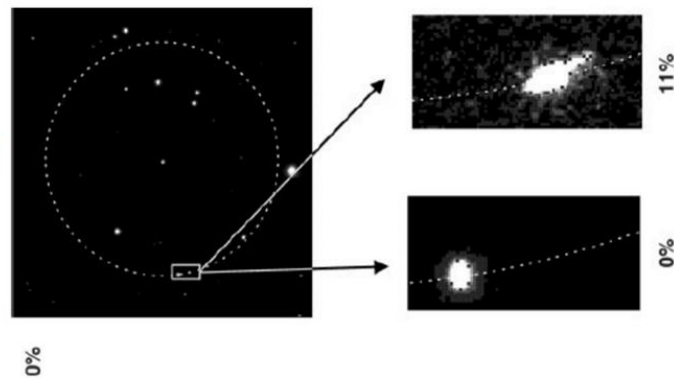
场景: 3DXRD



准静态压缩/拉伸过程中, 在不同的应力应变节点, 停止拉伸, 旋转360度拍摄3DXRD

需求:

- 1) 如何科学的选取采样节点
  - 2) **预判**: 在样品屈服或者断裂前给予用户预警信息
- 在线数据解析指导实验进程, 让数据在第一时间发挥价值



弹性变形阶段

移动/变形

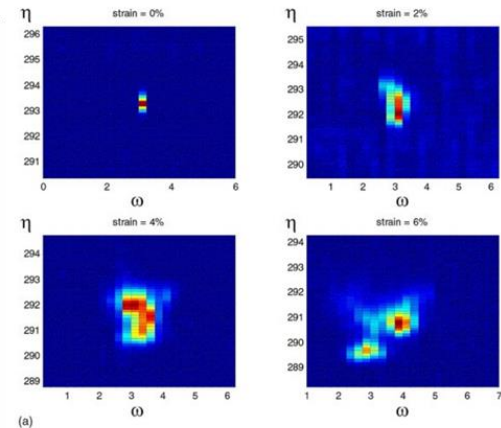


Figure 1.16: Shift and split of reflection spot in  $\omega$  and  $\eta$  with strain [30]

屈服, 断裂

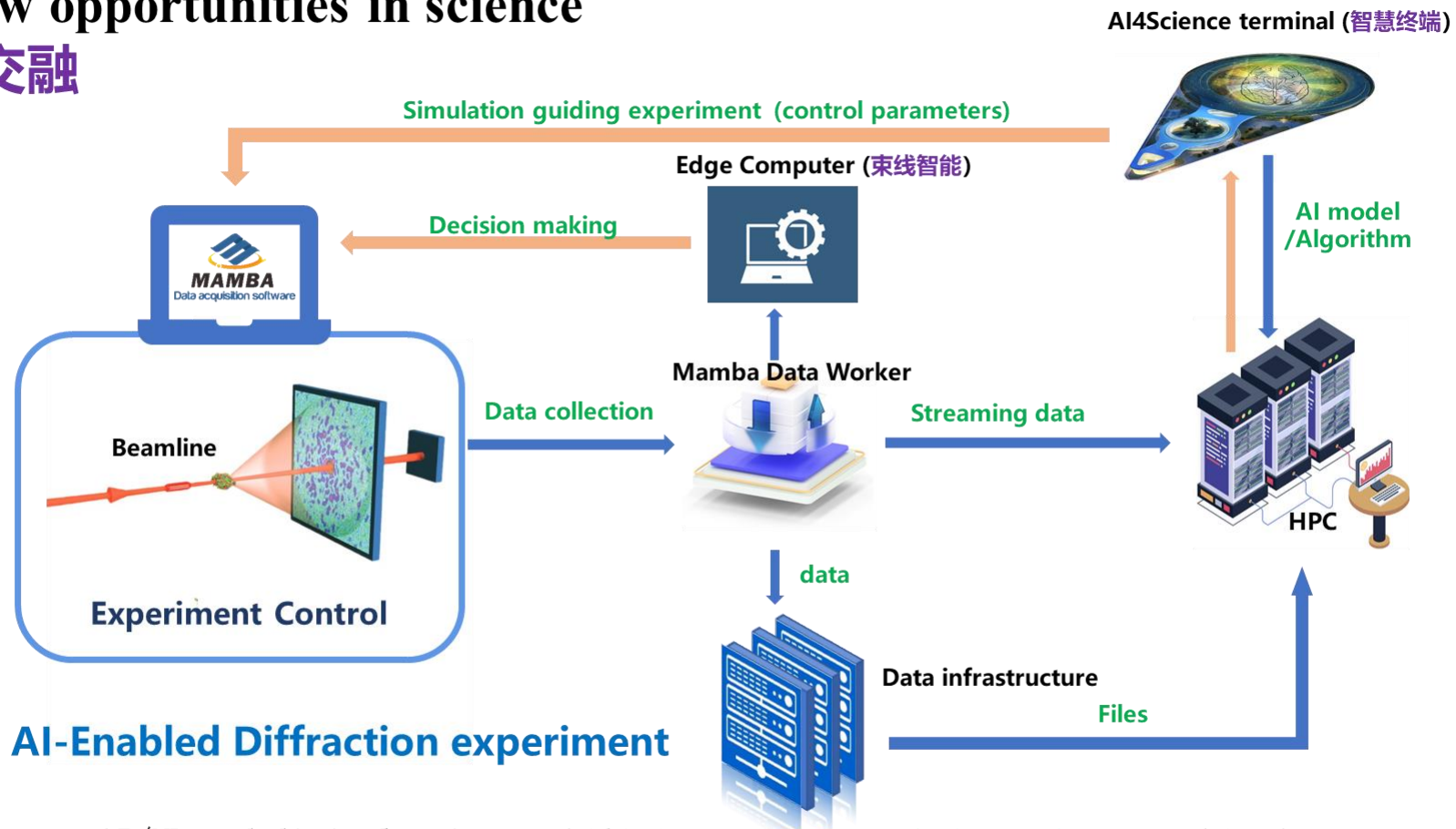
孪晶/晶粒劈裂



## 打造线站智能 (Beamline Intelligence)

Open new opportunities in science

E: 理实交融



Fully leverage AI/ML and digital twin capabilities to extract information from big data streams, steer experiments, design experiments, and use on-demand data for ML-driven discovery







Thanks