

第二十一届全国科学计算与信息化会议

长春2025年08月26日



# X射线自由电子激光 束线站数据采集软件建设与展望

SHINE束线站数据采集与分析系统

上海科技大学大科学中心



# 目录

一

背景介绍

二

SHINE数据采集系统

三

SXFEL智能化

三

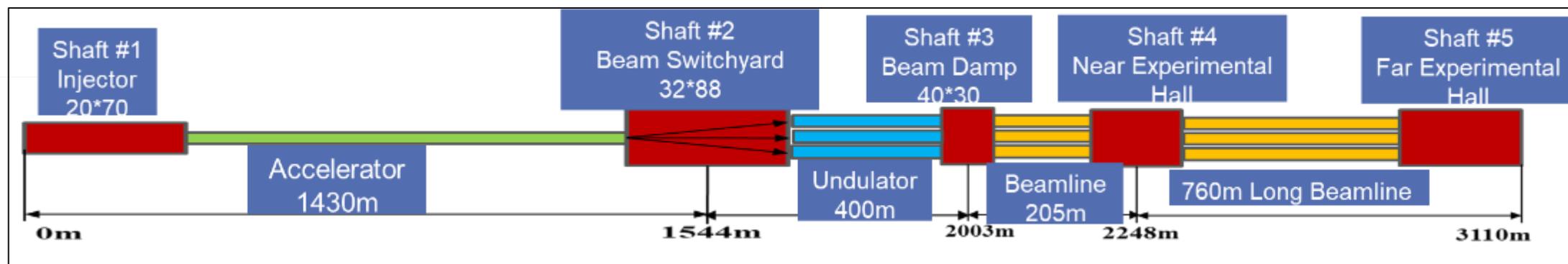
总结与展望

# SHINE



## Shanghai High repetition rate XFEL and Extreme light facility (2018.4 ground breaking)

- SC 8GeV linac, 2 undulator lines, photons from 0.2-15 keV
- 2 X-ray beamlines, 6 endstations, 100 PW laser facility



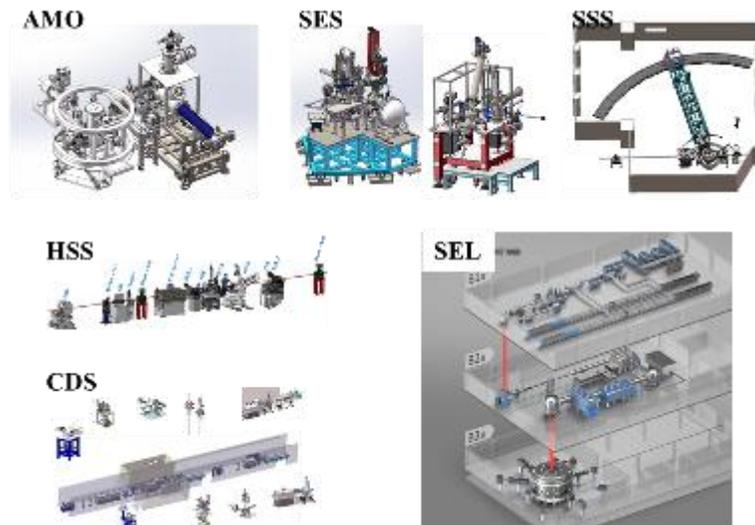
### FEL-I Hard X-ray Endstation

- HSS: Hard X-ray Scattering and Spectroscopy Endstation
- CDS: Coherent Diffraction Endstation for Single Molecules and Particles
- SEL: Station of Extreme Light

### FEL-II Soft X-ray Endstation

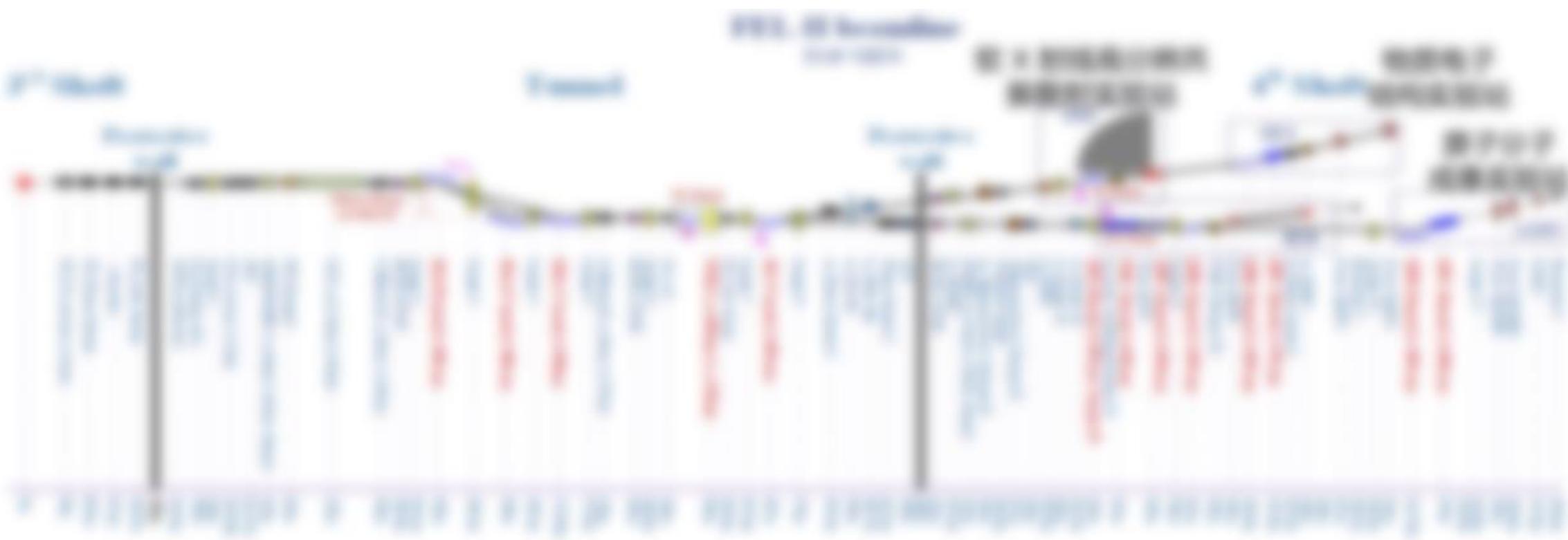
- AMO: Atomic, Molecular, and Optical Science Endstation
- SES: Spectrometer for Electronic Structure
- SSS: Soft X-ray Scattering and Spectroscopy Endstation

X射线自由电子激光的高亮度、短脉冲、强相干、高重频、连续可调等优势能够极大提升探索物质的精细结构、捕捉物质世界的瞬间过程的能力



# SHINE数据采集挑战

- SASE模式XFEL每发光脉冲的能量、谱宽、到达时间、空间位置涨落大，需要对单脉冲进行诊断
- 科学实验多模态、单脉冲等特点，需要分析实验站探测器的数据，也需要整合各类诊断、控制、样品环境等数据进行联合分析
- 重复频率达1.0030864MHz，需要硬件时间束团编号，高数据吞吐，泵浦探测技术

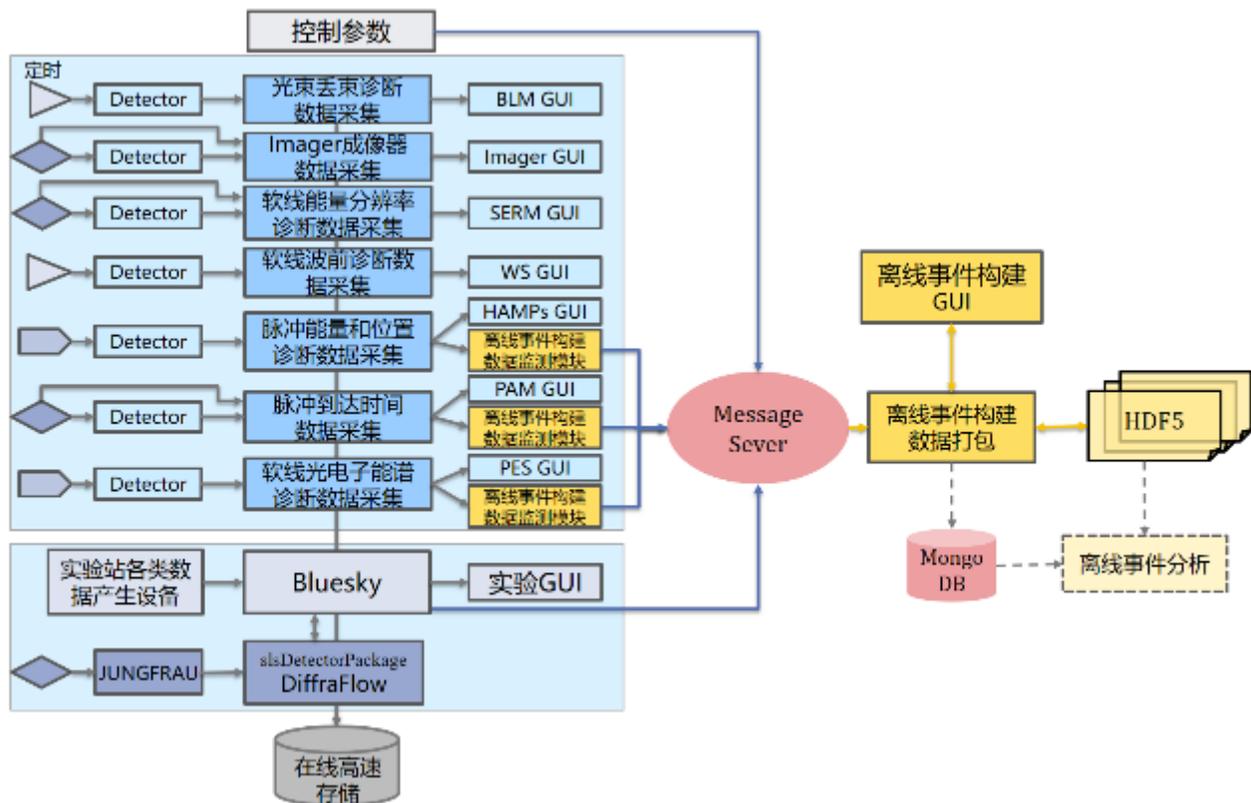


# SHINE数据采集总体架构

□ SHINE束线站数据采集在定时触发下为光束线和实验站提供**数据采集、联动控制、存储、显示**等功能

## □ 设计原则

- ✓ **诊断设备和实验站调束设备**：单独数据采集和监控界面，多类设备界面尽量统一
- ✓ **实验站实验在线设备**：以**实验过程**为中心，联动控制、数据采集和界面显示
- ✓ **离线事件构建**：实验开始时进行事件构建、数据打包、光束线诊断数据界面显示



# 定时系统架构

- SHINE定时系统参考信号来自于**同步系统**，与加速器基准信号锁相。
- **束线站定时系统**保证来自加速器定时系统的定时信号能够准确而稳定的传输到束线站需要触发的设备，提供**脉冲触发信号**和**束团编号**，为设备提供统一的参考时间坐标。
- **定时系统架构**
  - ✓ **WR定时设备**：采用白兔定时技术，实现定时系统的时钟同步
  - ✓ **定时设备控制软件**：实现定时设备的远程监测和参数配置
  - ✓ **BunchID数据采集**：用于商用探测器BunchID的采集



白兔定时交换机 (WRS)



扇出型定时从节点 (WRF Node)



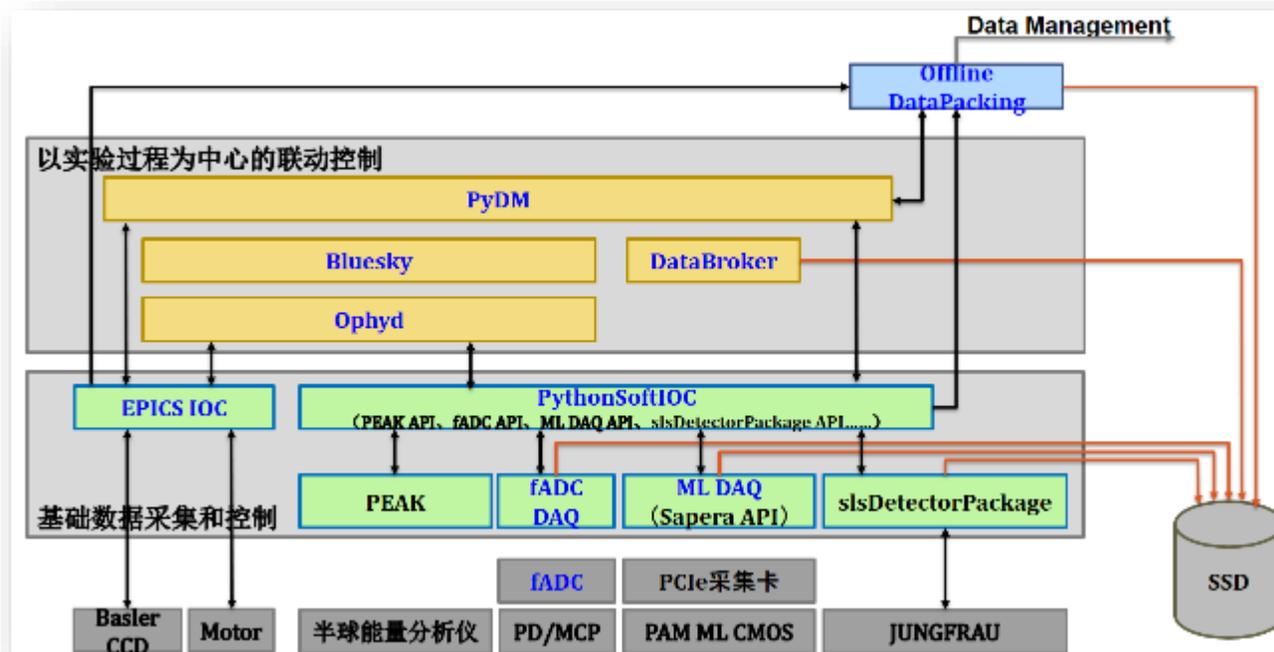
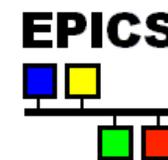
嵌入式定时从节点 ( WRE Node )



# SHINE数据采集软件架构

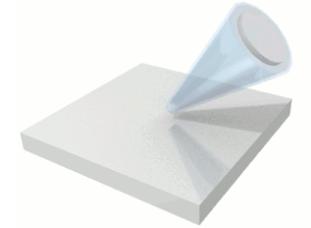
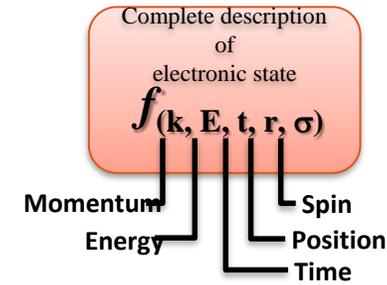
## □ 软件架构

- ✓ 所有设备控制参数和抽帧数据以EPICS PV呈现
- ✓ 基于Bluesky架构，以实验过程控制为中心，多设备联控
- ✓ 为实验数据完整性，高通量探测器数据优先在基础数据采集阶段进行存盘
- ✓ 制定《SHINE数据格式与存储规范》，统一目录结构，统一数据文件命名

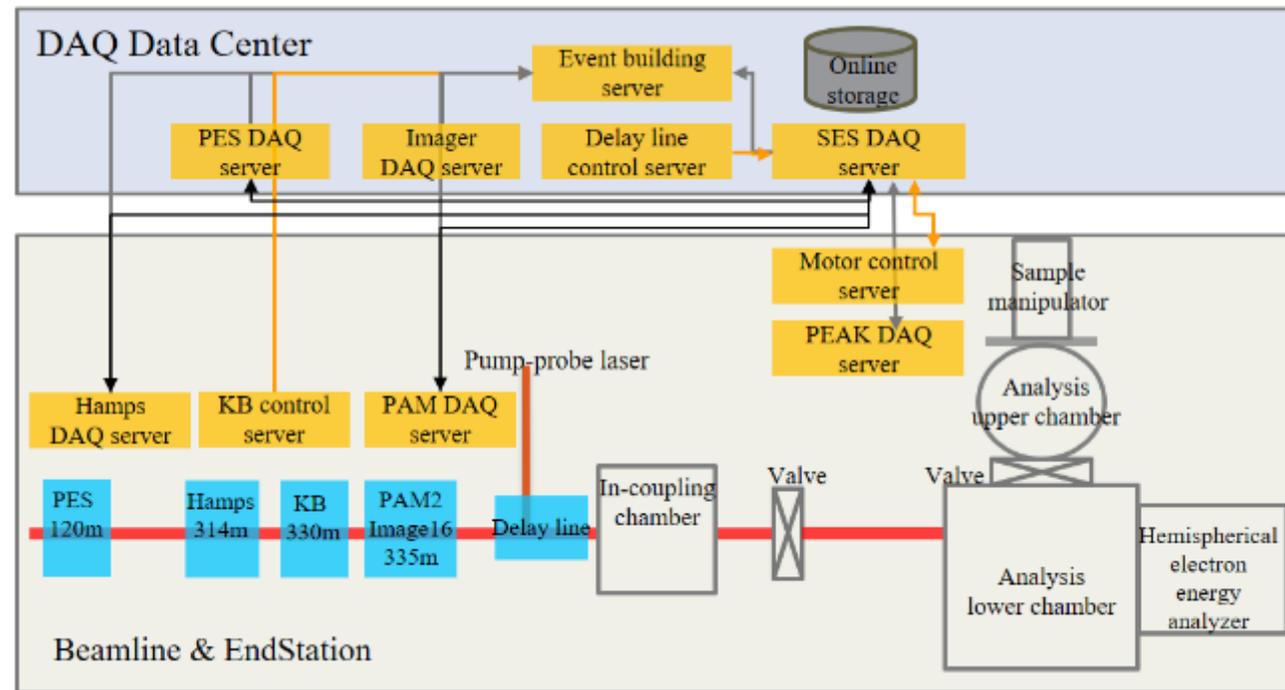


# 物质电子结构实验站

- SES实验站利用自旋和空间分辨的光电子能谱技术对物质电子结构进行多自由度，高分辨率的测量。同时结合激光泵浦-X射线探测技术开展时间分辨的电子和自旋动力学研究。



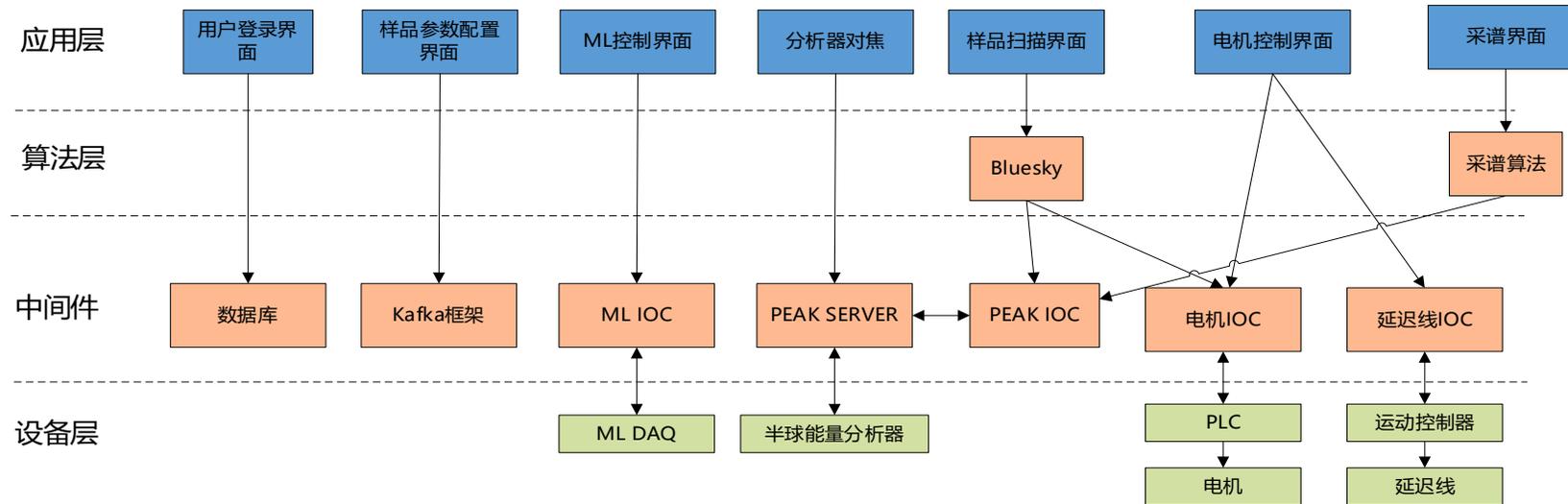
from SES Endstation



DAQ for SES End-station

# 物质电子结构实验站

## □ 架构设计

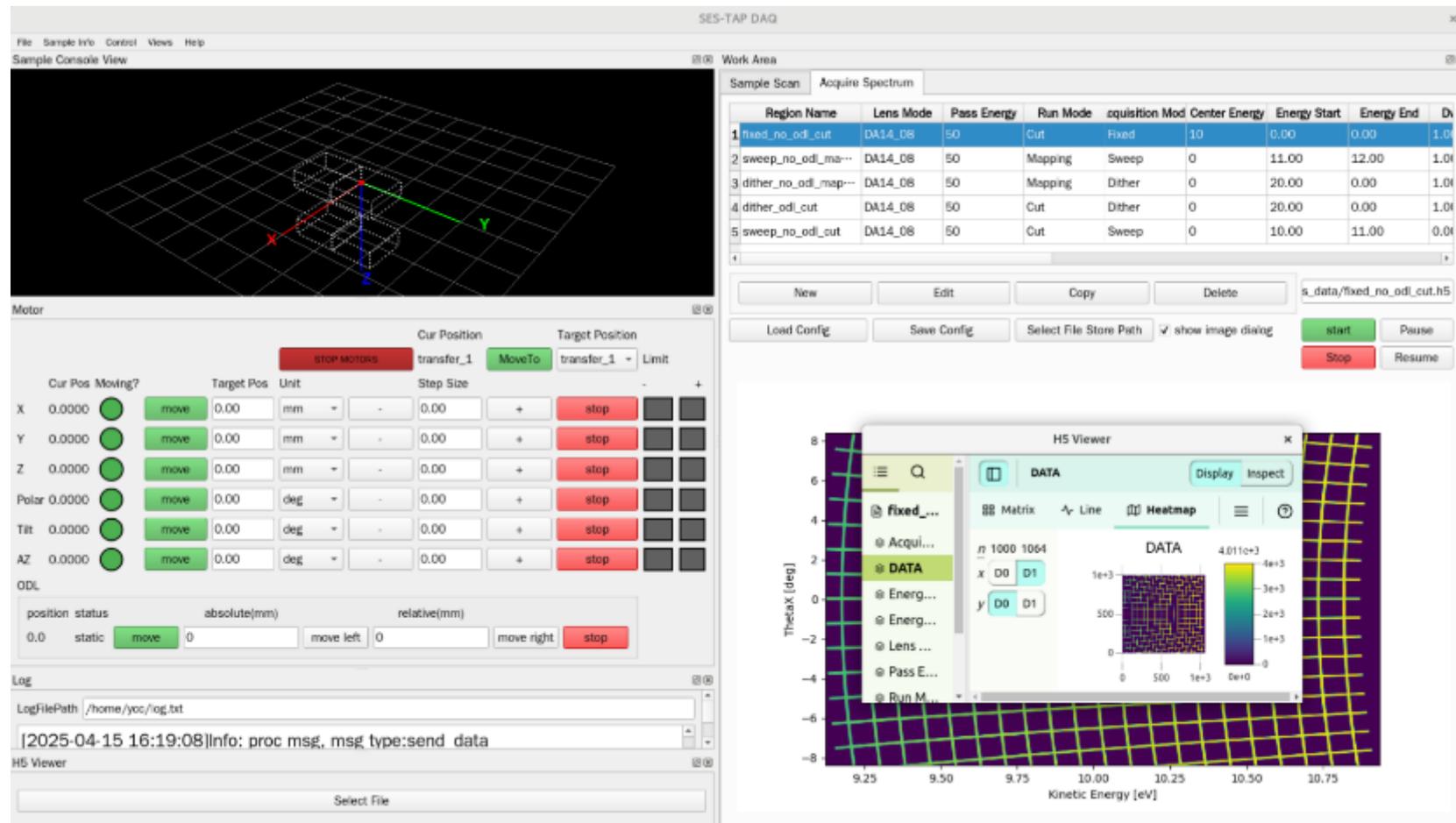
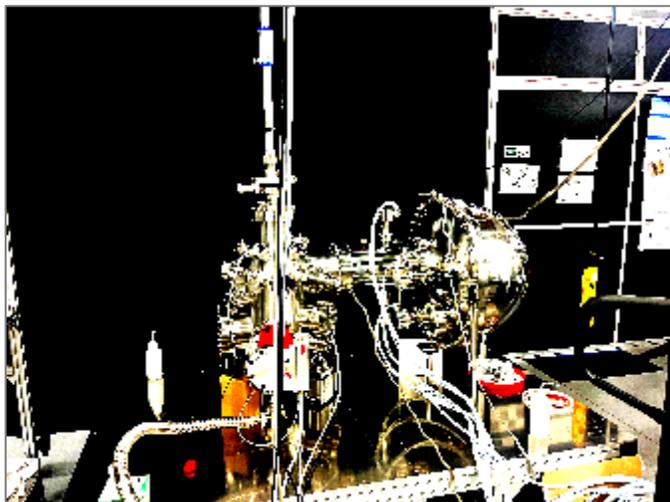


- ✓ 设备层：光学延迟线、各类诊断设备、样品操纵台、半球能量分析器
- ✓ 中间件：EPICS IOC、PEAK SERVER和Kafka通信框架等
- ✓ 算法层：样品扫描和采谱算法
- ✓ 应用层：用户进行数据采集实验时操作的各种可视化界面

# 物质电子结构实验站

□ 半球能量分析器实时数据采集，多设备联动控制，多维样品扫描，采谱灵活可配置，数据存储和智能化显示

1. 主界面的各子界面支持拖拽/缩放/开关
2. HDF5数据可视化
3. 样品操纵台三维可视化
4. 采谱三维数据可视化
5. 问题上报功能
6. 日志功能



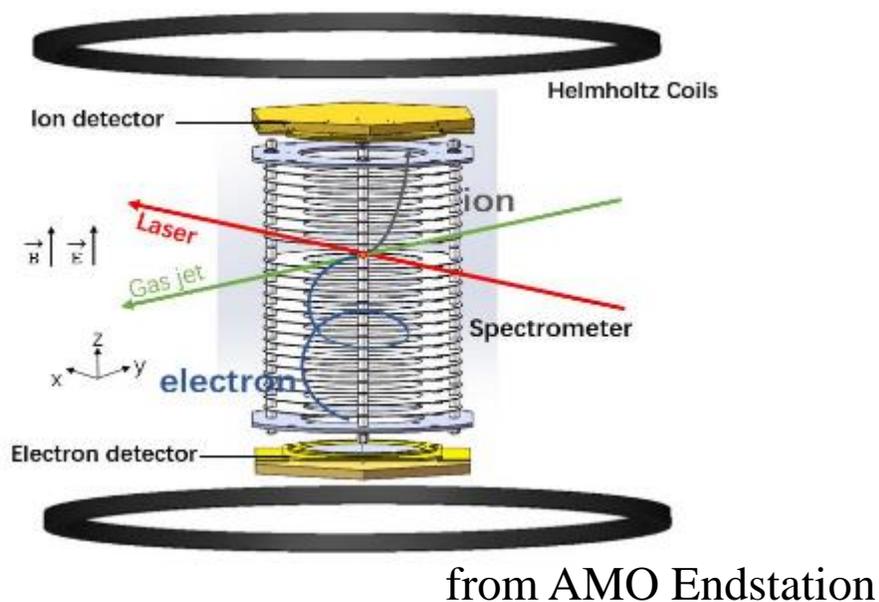
已完成实验站所有软件开发、实验室联合测试，正在现场安装

# 原子分子反应成像实验站

## AMO实验站

SHINE光子波长达到原子尺度的量级，时间脉宽可以达到几个飞秒乃至阿秒

AMO在飞秒时间尺度和原子空间尺度上直接观察复杂原子分子反应过程，实现硬 X 射线单原子单分子单脉冲成像



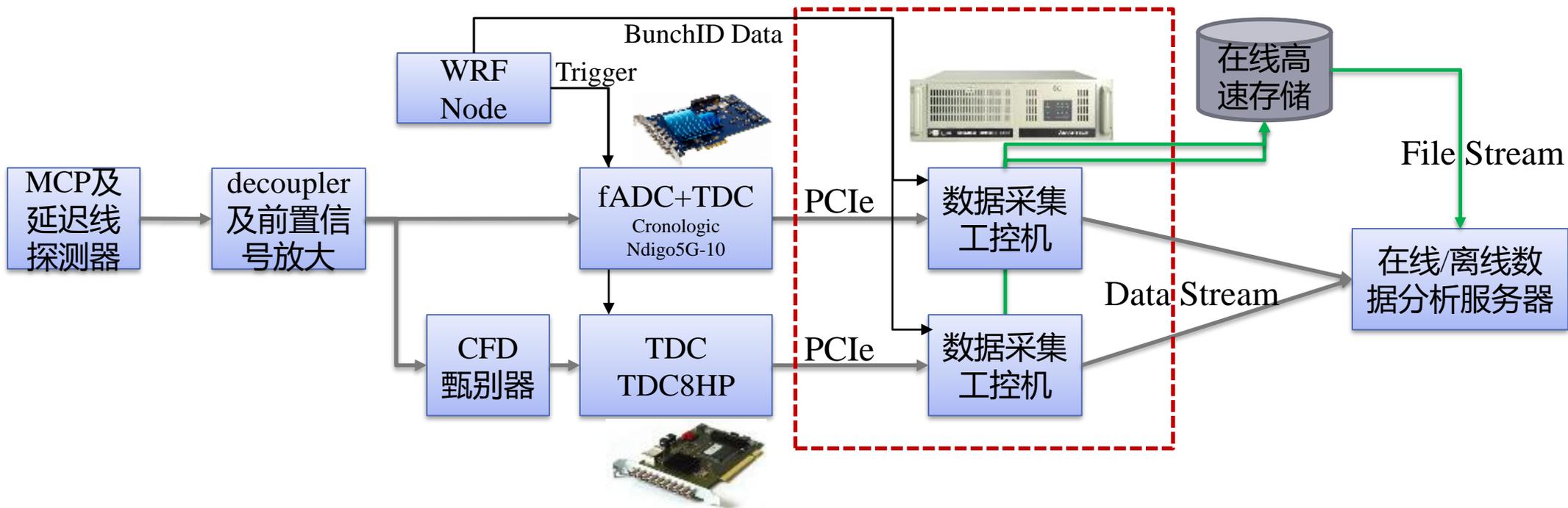
实验软件需求	相关设备	相关软件
光束线设备运动控制权限	Imager、KB	运动控制界面
光束线诊断设备数据查看权限	PES、HAMPs、PAM、Imager	离线事件构建界面
光束线数据打包	PES、HAMPs、PAM、KB Parameter	离线事件构建
泵浦光延时控制	光学延迟线	实验站数据采集界面
AMO实验站探测器设备监控、数据采集显示	TDC、fADC	实验站数据采集界面



# 原子分子反应成像实验站

## 实验站数据采集软件功能：

- ✓ 样品环境参数实时获取和配置（KB镜参数、探测器电压、电流回读值、引出场电压等）
- ✓ TDC和fADC参数配置、数据采集、实验数据与BunchID的一一对应
- ✓ 与在线分析软件交互数据流



# SXFEL智能化

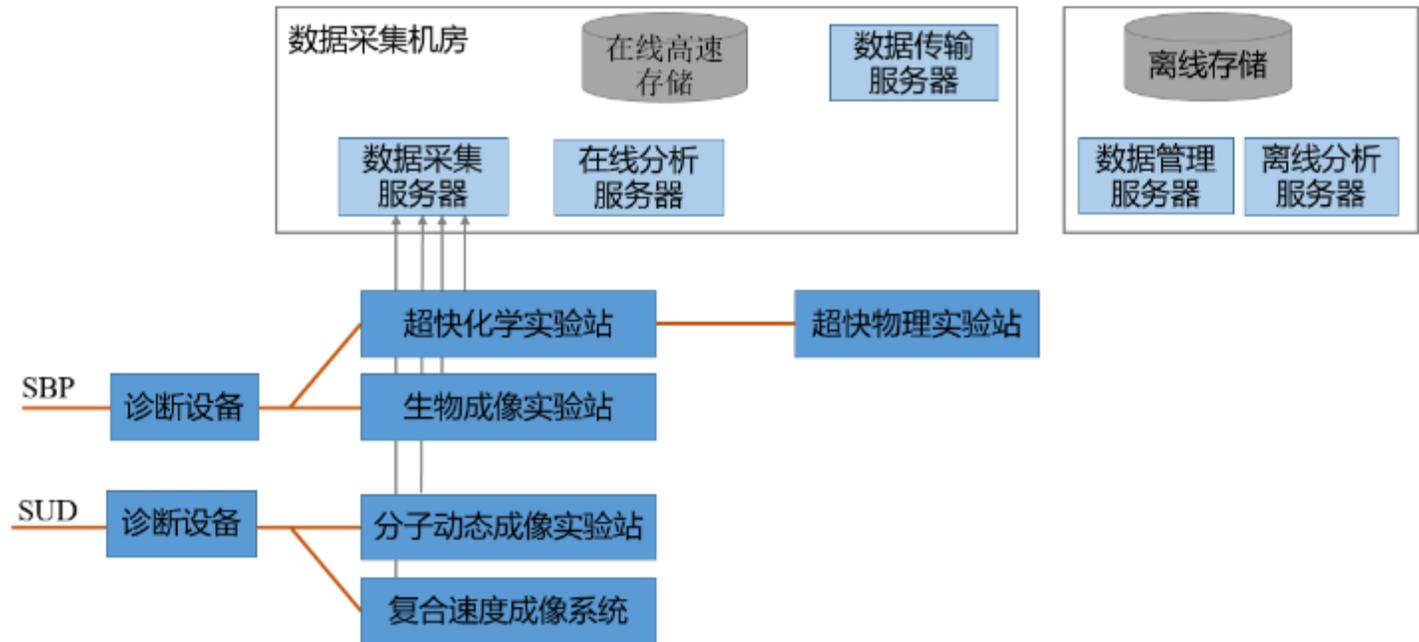
- 原因：定时系统无束团编号功能，数据时间标记易错；设备多，数据分散，控制不集中
- 实验数据采集和智能筛选系统：基于定时系统，采用EPICS、Bluesky、事件构建和科学数据智能管理技术实现实验站基于Bunch-ID数据采集、联动控制、实验和诊断数据统一管理、以及科学数据智能筛选。

## ➤ 硬件：

- ① 实验站探测器、诊断设备、定时系统
- ② 数据采集服务器、在线高速存储、在线分析服务器
- ③ 数据管理服务器、离线存储

## ➤ 主要功能：

- ① 数据采集
- ② 科学数据智能管理
- ③ 智能数据筛选



# 总结与展望

-  实验过程控制
-  用户界面
-  多维度样品扫描技术
-  高通量数据实时采集和高速存储
-  基于BunchID的多设备数据事件构建
-  全面自动化元数据采集
-  数据在线分析
-  便捷的实验模式切换
-  智能化在线反馈控制
-  多样实验数据处理方法支撑

SHINE全自动化实时数据采集软件规划

# 致谢

高能所、高研院、中科大、清华等院内单位和学校的关心与支持

SHINE数据采集与分析系统，研制定时系统、束线站数据采集、数据存储、数据分析、智能控制等科学数据软硬件系统。

软件全方面自研、高通量数据采集等挑战，希望建立更好的合作关系



尹聪聪 数据采集与分析系统负责人



张晓峰 AI数据分析



殷亚茹 数据应用



姜栋 数据采集



郑寄托 数据采集电子学



海雪 数据采集



**谢谢聆听!**