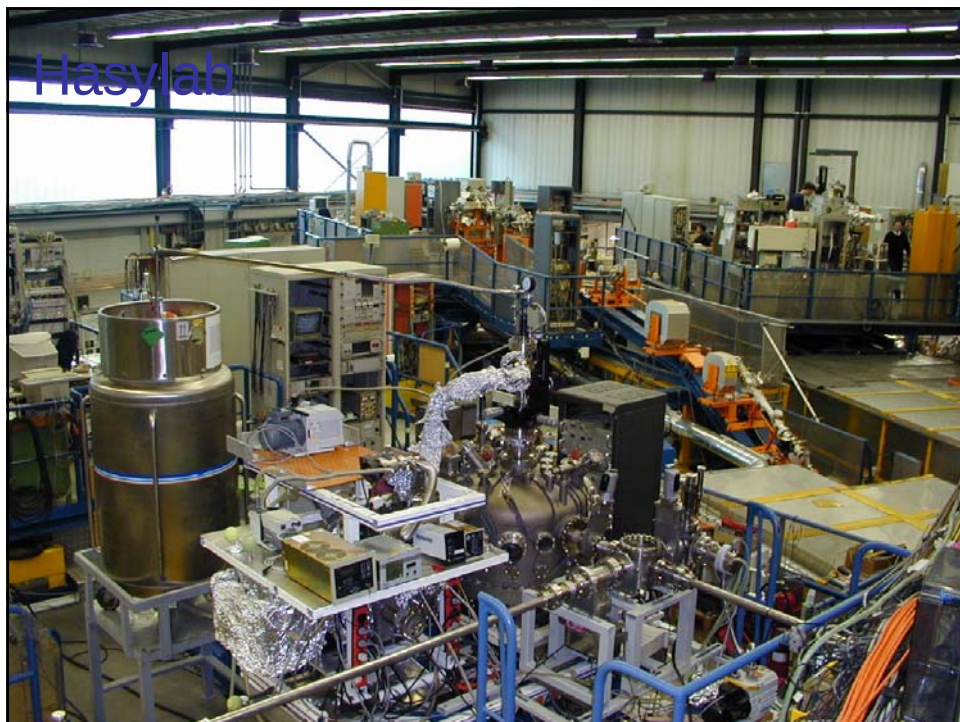


Computing am Hasylab

Jetzt und in der Zukunft

Technisches Seminar in Zeuthen am 8.10.2002
Thorsten Kracht

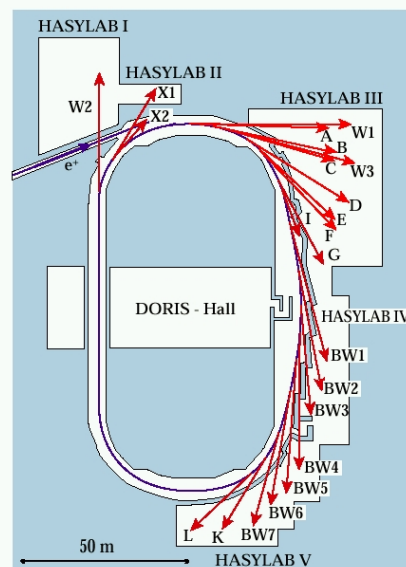


Hasylab

- Desy
- European Molecular Biology Laboratory (EMBL)
- Arbeitsgruppen für strukturelle Molekularbiologie (ASMB), MPG
- Uni HH
- FZ Jülich
- ...

Die Aufgabe

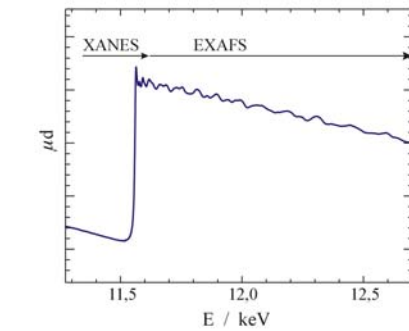
- 1662 Nutzer pro Jahr, aus 252 Instituten
- Messzeiten: 1 Tage – 3 Wochen
- 289 Rechner, davon 180 NT PCs, 598 IP Adr.
- Hasylab Rechnergruppe: Otto Beimgraben, Jan-Peter Kurz, Julia Medved, Thorsten Kracht



DORIS III
and Beamlines

XAFS

Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAFS)

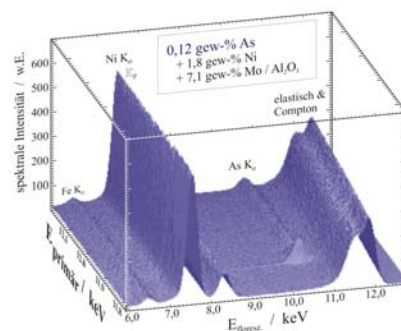


- XAFS-Spektrum von Platin ($T=15K$)
- Charakteristika:
 - Absorptionskante
 - XAFS-Oszillationen oberhalb der Absorptionskante
- Informationsgehalt:
 - lokale Nahordnung auf atomarer Skala (elementspezifisch)

(P. Kappen, HASYLAB)

Fluoreszenz XAFS

Fluoreszenz-XAFS



Aufzeichnen vollständiger Fluoreszenzspektren

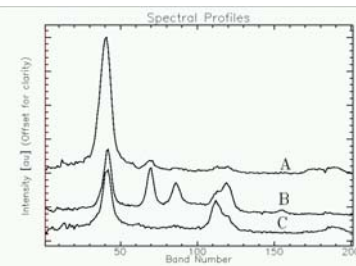
Nachteile: - technisch aufwendig, Datenmengen

Vorteile: - volle spektrale Information erlaubt

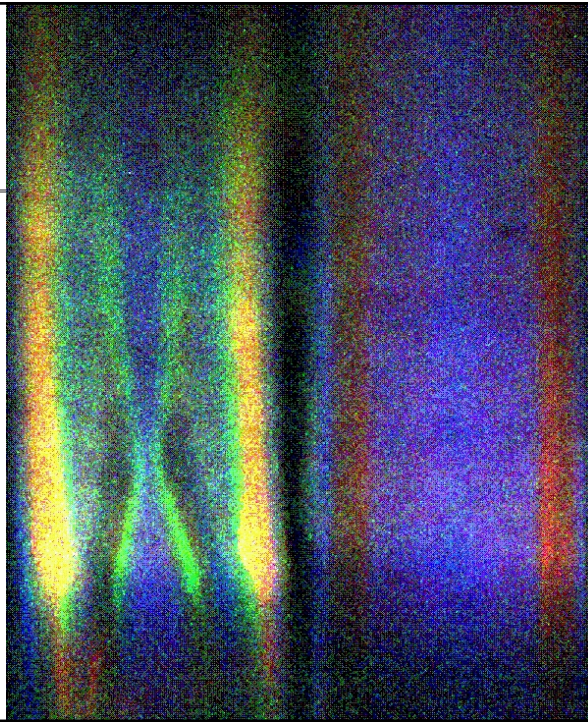
- XAFS bei dicht benachbarten Absorptionskanten
- XAFS bei überlappenden Fluoreszenzlinien
- simultane Untersuchung mehrerer Spezies

(P. Kappen, HASYLAB)

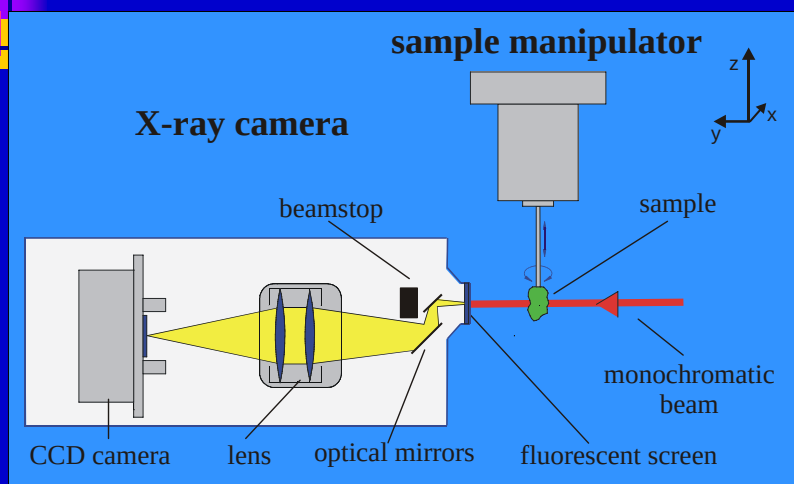
Spritzgussprobe



Thomas Wroblewski, Hasylab



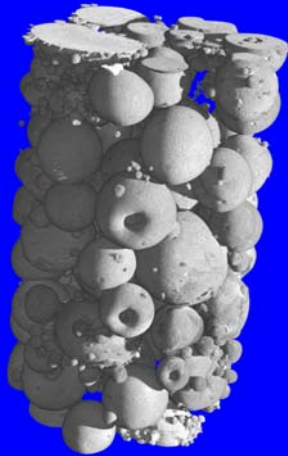
Microtomography at HASYLAB/DESY



Felix Beckmann, Hasylab

Titania hollow spheres (TiO_2)

(In cooperation with E. Wintermantel, B. Müller, ETH Zürich, Switzerland)



μ CT at BW2
photon energy: 19 keV

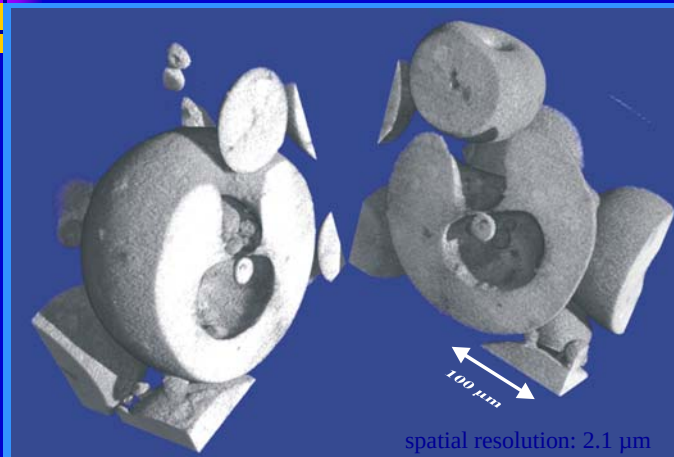
sample height: 1.05 mm

spatial resolution: 2.1 μm

Felix Beckmann, Hasylab

Titania hollow spheres (TiO_2)

(In cooperation with E. Wintermantel, B. Müller, ETH Zürich, Switzerland)



μ CT at
BW2

using
19 keV

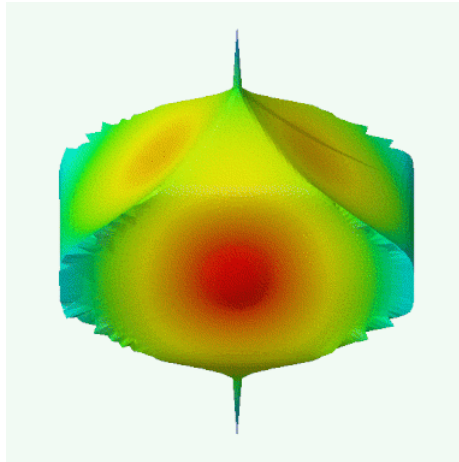
spatial resolution: 2.1 μm

Felix Beckmann, Hasylab



Ladungsdichte: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.98}$

Sauerstoffatom im Gitter



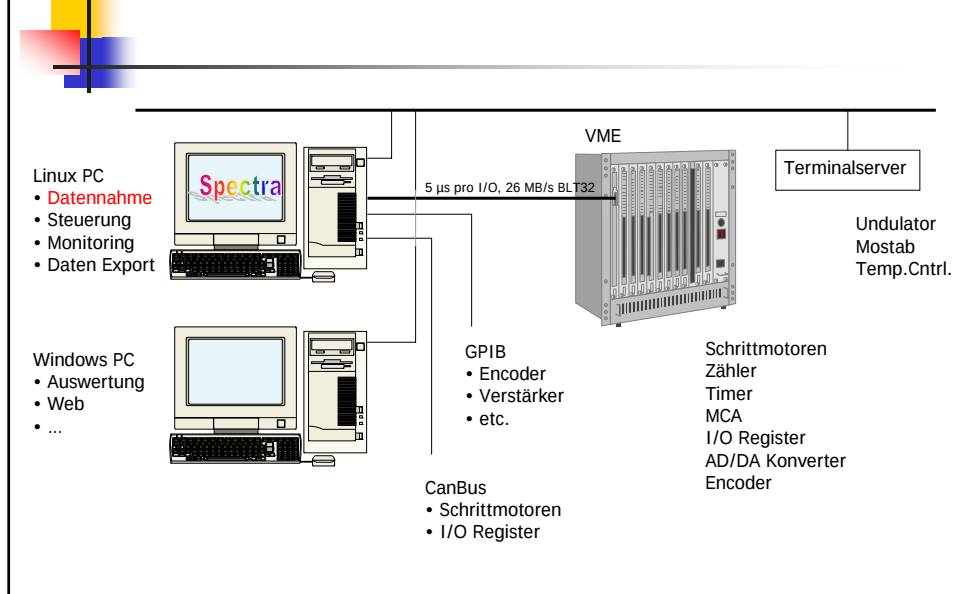
Thomas Lippmann, Hasylab



Überlegungen zur Experimentsteuerung und Datennahme

- Nutzerbetreuung, Wartung: Flexibilität
- Performance
 - I/O Bandbreite
 - Graphik
 - Disk I/O
 - Netzwerk
- Kosten
- Historisch:
 - μVax (QBus)
 - SBC (Lynx) + X-Terminal
 - PC (ATBus, PCI)

Die Rechnerumgebung an den Experimentierplätzen





Messgeräte/Datenbusse

- VME (Camac)
 - Motorcontroller
 - Zähler
 - Timer
 - MCA
 - ADC/DAC
 - I/O
- PCI
 - CCD Kamera
- GPIB
 - Verstärker
 - Messgeräte
 - Temperaturcontroller
- CanBus
 - Motorcontroller
 - I/O Register
- RS232 (TS)
 - Undulatoren
 - Handterminals
 - Mostab



CanBus

- (Automobil-) Industriebus
 - Geräte günstig
- Bit seriell
- Durchsatz $\leq 1\text{Mb}$, je nach Kabellänge
- Kabellängen bis $\sim 1\text{km}$
- PCI Interface



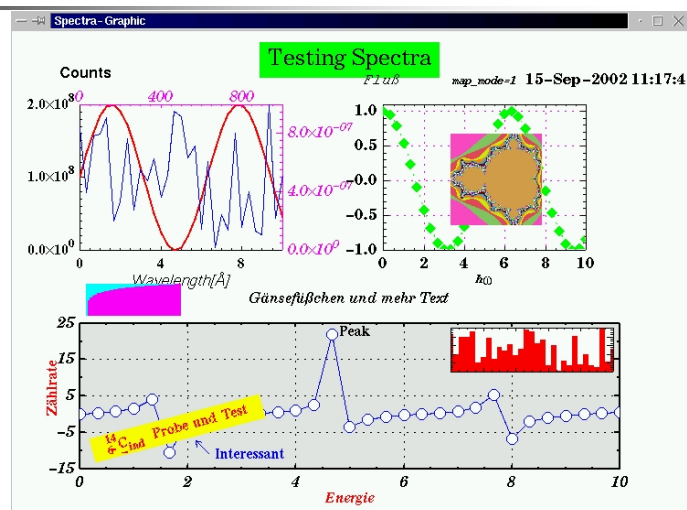
Online Software: Spectra

- Schnittstellen zu: VME, Camac, GPIB, Canbus, RS232
- Interpreter
 - Kommandozeile
 - Scripts
- Graphik
- Datenverwaltung
 - Verschiedene Datentypen
 - Disk I/O: Formatiert oder binär
- Arithmetik
- Simulationsversion



Spectra Graphik: Testbild

Treiber
• X
• Postscript

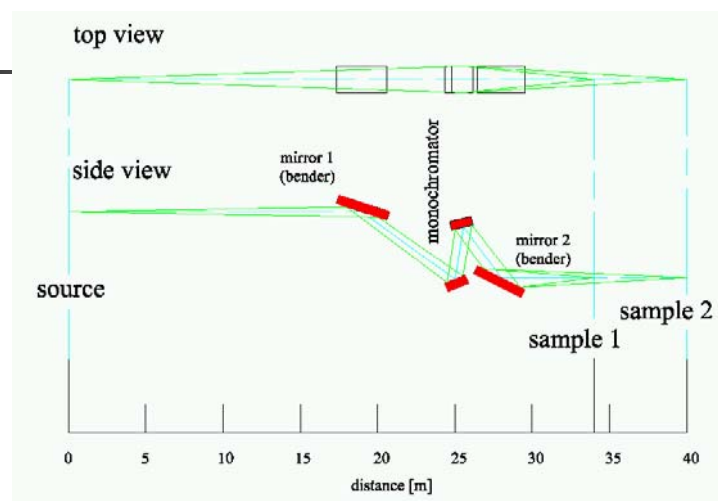




Spectra: Experimentsteuerung

- Direkter Zugriff auf Register u.ä. möglich
 - i.a. angewendet: GPIB, RS232 und CanBus
- Device Library: Bedienung unabhängig vom Experiment und dem speziellen Gerätetyp
 - Motoren
 - Timer/Counter
 - ...
- Zusammengesetzte Geräte
 - Monochromator
 - Diffractometer

Spiegel-Monochromator System



Horst Schulte-Schrepping, Hasylab



Spectra: Messungen

- Menüs
 - scan/energy
 - scan/motor
 - scan/q
 - ...
- Scripte
 - Einzelaufrufe
 - scan/energy/exec/_start=.../_stop=...



Spectra: Messungen

- Auswahl der Geräte, Festlegung des Ablaufs, Online Display, Datenverwaltung:
 - Standardverfahren
 - Erweiterte Standardverfahren
 - Freistil



Spectra: Fast scans

- Macros: Before~, During~, After-scan
- Counter, timer, MCAs werden durch Symboldefinitionen spezifiziert.
- Datenverwaltung und Graphik automatisch
- Optionen:
 - Wiederholungen
 - SSA
 - Schritt-für-Schritt/Kontinuierlich
 - Automatischer Beamshutter
 - ...



Spectra: Nutzerschnittstellen

- Interaktiv
 - Kommandozeile
 - Menüs
 - Scripts
 - GUI
- Socketinterface
 - Spectra als Server: Clients unter Linux, Windows, Labview/W98, Labview/Mac
 - Spectra als Client



Spectra: Nutzerschnittstellen

- Usercode → Spectra
 - Diffractometersoftware
 - Massenspektrometerüberwachung
 - Auswertesoftware
- Spectra → Usercode
 - Userfunctions



Eine neue Script Sprache für Spectra

- Eine 2. Chance
 - Syntaktisches Vorbild hilfreich
 - Spectra:
 - Online Funktionalität
 - Interpreter
 - Utilities: Socket Interface, Arithmetik, I/O ...
- Unter dem eigenen Gewicht ...



Warum Perl?

- “Richtige” Sprache, gleichzeitig Interpreter
- Verbreitung
- Verfügbar unter Linux und Windows
- Spin-offs
 - Administrationstools
 - CGI Programmierung
 - Utilities
- GUIs mit PerlTk
- Perl Module aus dem Web



Perl: Eigenschaften

- Verschiedene Datentypen
- Kontrollstrukturen
- Funktionen
- Operatoren
- Reguläre Ausdrücke
- ...



Perl: Besondere Eigenschaften

- Listen und Hashes

```
@files = <*.fio>;  
foreach $file (@files)  
{...}
```

- Tied variables

```
$EXP{energy} = 8980;  
print "E = $EXP{energy}\n";  
  
print "Home = $ENV{HOME}\n";
```

- Vorbild:

- Objekte

```
$m = Motor::locate( name => "mot12");  
$ret = $m->configure( slew => "20000");
```



Perl

Reading the source: There was the programmer, the story goes, who was deeply mystified by a piece of code. It had no comments at all, and he couldn't for the life of him figure out how it did what it did. For years, he cursed the author of that code, but it continued to fascinate and trouble him. One day, it came to him in a flash. He understood it all. In fact, it was so obvious that he also understood why it didn't need any comments. (The panther book)



PerlTk

Move Menü:

The screenshot shows a window titled "Move Motor" with a menu bar containing "File", "Options", and "Help". The main area is titled "Move MOT13 (UPS)". It displays the current "Position" as -9.76625. Below this is a "Move to" input field followed by a "Go!" button. A horizontal slider is positioned at -9.5, with tick marks at -18.2, -10.9, -3.6, 3.6, 10.9, and 18.2. Below the slider are two buttons: "Slew: 100%" and "Range: 100%". At the bottom of the slider section are three buttons: "Left", "Stop", and "Right". A text box shows the "Signal: [vfc(c16, t1, 0.1)]". Below this is a "Maximum:" label, a "Go to Maximum" button, and a checkbox labeled "Display Signal" which is currently checked. At the very bottom is an "Exit" button.



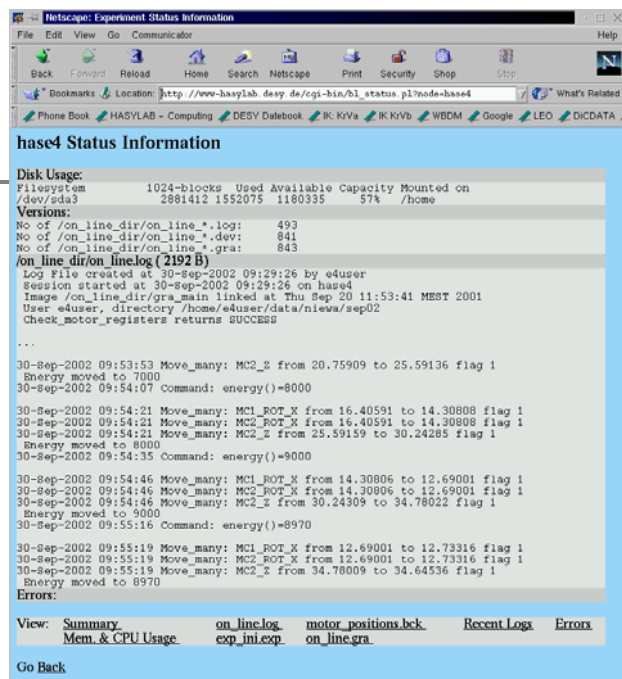
PerlTk: Scan Menü

Mainloop ↔
Scan Routine:
Update durch
Signal Handler

The screenshot shows a window titled "Scan Energy" with a menu bar containing "File", "Options", and "Help". The main area has a status bar at the top showing "Scan Energy", "Scan name: tst_0003", and "Idle". Below this is a "Position" section with "Energy : 39925.2" and a "Move to:" input field followed by a "Go!" button. The "Limits" section contains input fields for "Start" (55000), "Stop" (55100), and "Delta" (1), along with a "Start/Stop" button. The "Parameter" section has input fields for "Sample time" (0.1), "Update" (1), and "Repeats" (1). It also has "Auto return" (Yes), "Wait time" (0), and "Scan par." (empty). Below these are three buttons: "Scanning", "Step-by-step", and "Stop repeats". At the bottom is a "Comment" input field and two buttons: "Start/Stop" and "Exit".

Spectra: Web Interface

- Log-Files, Konfigurationsdateien, Fehlermeldungen, Status des Rechners, etc. sind interessant für BL Betreiber



Datenexport

- Netzwerk
- CDs
- Tapes

Meistens werden Daten über das Netz exportiert. Deshalb ist es naheliegend die Experimentrechner (SCSI) durch standardisierte PCs zu ersetzen und für den Bedarfsfall einen Medienserver bereitzustellen.



Rechnersicherheit

- Problem am Hasylab:
Experimentrechner (Linux PCs) werden
von vielen Gästen genutzt
→ Tägliche Überprüfung 'interessanter'
Programme



Auswertung

- Desktop PCs, Linux und Windows
- WGS: hasyw03/04
- An den Heimatinstitutionen



Oracle

- Nutzerverwaltung
- Projektverwaltung
- Messzeitverwaltung
- Jahresbericht



Linux ↔ Windows

Linux

Messplatzrechner
Schreibtisch
Programmentwicklung
Auswertung

VMware ⇒

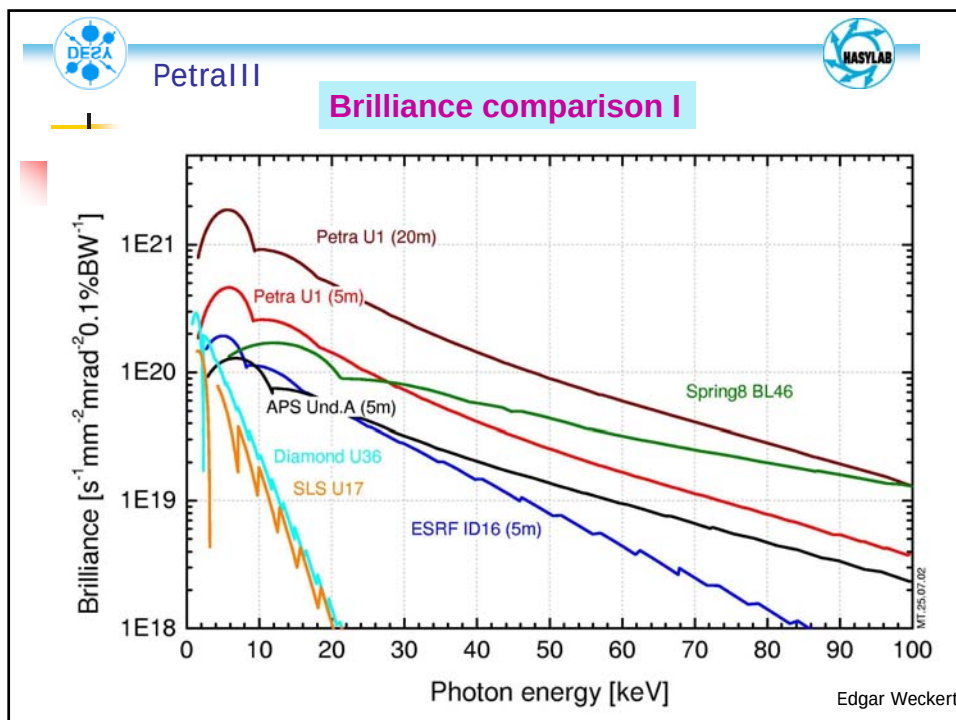
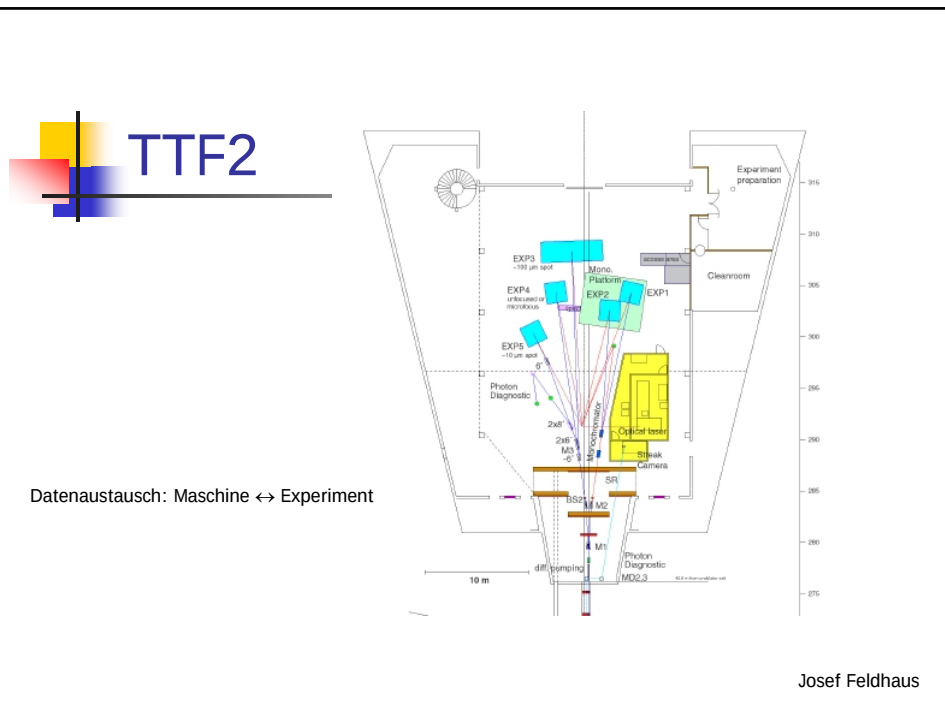
Windows

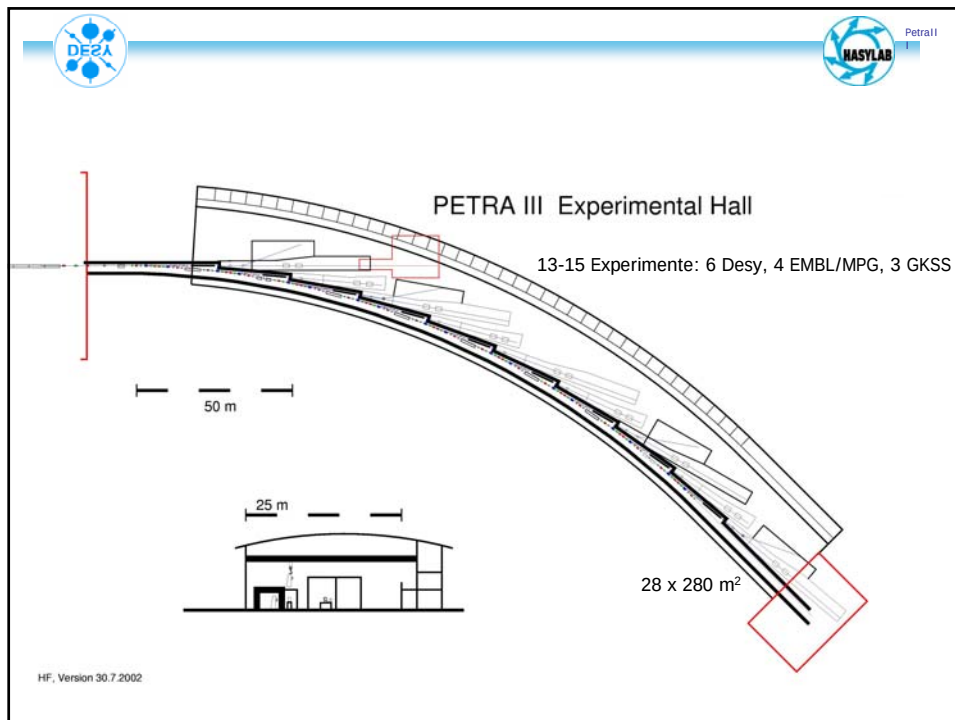
Schreibtisch
Messplatz
Auswertung
Office

⇐ Exceed

Datenaustausch

Samba
Afs
Ftp





Petra III

- Datenrate, z.B.: CCD Detektor mit 4 x 4 Chips, jeweils 1k x 1k Pixel (16b), also 32 MB/Bild, Auslesezeit 1 s, Bildrate 1 – 5 s
- Fragen:
 - Service level
 - File Server: Lokal oder zentral
 - Rechner: Lokal oder zentral



Grid

- Foster, Kesselmann, Tuecke: "...flexible, secure, coordinated resource sharing among dynamic collections of individuals, institutions and resources – what we refer to as virtual organizations ..."
- Ab wann lohnt sich der Einsatz von Grid Werkzeugen?
- Zur Zeit und in naher Zukunft wird es keine Anwendungen geben, die auf Grid-Techniken angewiesen sind.
- Desy sollte Erfahrung mit dem Grid sammeln.