



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

Projektarbeit Nukleare Astrophysik

141.A21

Erstellung eines Human Machine Interfaces zur Eingabe von Parametern für die Berechnung von Kernreaktionen in gekoppelten Kanalsystemen

Von

Thomas Györgyfalvay, B.Sc.

Matrikelnummer 0846328

Aspangstraße 6/3/4, 1030 Wien

Unter Betreuung von

Ao.Univ.-Prof.i.R. Projektass. Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Helmut Leeb,

Atominstitut,

TU Wien

Fertiggestellt am 14.11.2022

Contents

1	Einführung.....	2
2	Physikalische Grundlagen.....	3
2.1	Gekoppelte Kanäle – Drehimpulsquantenzahlen	3
2.1.1	Grundlagen R-Matrix	3
3	Technische Grundlagen	5
3.1.1	GECCCOS	5
4	Aufgabenstellung	6
4.1	Funktionale Anforderungen	6
4.1.1	Kompatibilität mit GECCCOS	6
4.1.2	Speichern und Laden	6
4.1.3	Tabellarische Anzeige	6
4.1.4	Bedeutung der Reaktionskanälen	6
4.1.5	Neue Werte hinzufügen / Werte löschen.....	7
4.2	Technische Anforderungen	7
4.2.1	Qt Bibliothek	7
4.2.2	GECCCOS Interface	7
5	Umsetzung.....	10
5.1	Konfigurierbarkeit	10
5.1.1	Konfigurationsdatei.....	10
5.1.2	Bedeutung der Reaktionskanäle	13
5.2	HMI.....	15
5.2.1	Eingaben Rückgängig machen.....	15
6	Ergebnis.....	16
6.1	Konfiguration	16
6.2	Projekt öffnen	16
6.3	Visualisierung der Dateien.....	17
6.3.1	Listen.....	18
6.3.2	Parameter.....	18
6.3.3	Maps.....	18
6.3.4	Tabellen.....	19
6.3.5	Pole	20
6.3.6	File.....	21

1 Einführung

Ziel dieser Projektarbeit ist die Erstellung eines Benutzer-freundlichen Human-Machine-Interfaces (HMI) für das Programm GECCOS. GECCOS (General Coupled-Channel Code System) ist ein Fortran Programm zur Berechnung von Observablen von Kernreaktionen in gekoppelten Kanalsystemen. Dieses Programm erfordert Eingaben zur genauen Definition der Kanalstruktur, Parameter für die verwendeten Kernmodelle und technische Parameter, z.B. Wahl von Integrationsgitter etc. Derzeit werden diese Informationen sehr unhandlich, wenn die erforderlichen Eingabedaten umfangreich sind und eine Vielzahl von Rechenvorgängen mit unterschiedlichen Werten vorgenommen werden müssen. Dies betrifft insbesondere die Eingabe für den R-matrix Modul. Das Ziel dieser Arbeit ist daher eine graphische Eingabemodul für R-Matrix-Parameter zu entwickeln, welches die Eingabe von Resonanzparameter wesentlich vereinfacht.

Nach dieser kompakten Einleitung in das Thema der vorliegenden Arbeit werden in Kapitel 2 die physikalischen Aspekte und Definitionen dargestellt. Dies betrifft vor allem die Zuordnung der Drehimpulsquantenzahlen im gekoppelten Kanalsystem (Abschnitt 2.1) und die kurze Darstellung der R-Matrix-Theorie und ihrer Parameter (Abschnitt 2.2). In Kapitel 3 wird die Aufgabenstellung und die grundlegende Struktur des graphischen Interfaces dargestellt. Dessen Umsetzung wird in Kapitel 4 im Detail diskutiert. Kapitel 5 zeigt das Ergebnis der Implementierung.

2 Physikalische Grundlagen

2.1 Gekoppelte Kanäle – Drehimpulsquantenzahlen

Atomkerne sind aufgebaut aus Nukleonen und können bei Kollision mit anderen Kernen angeregt werden, oder ihre Zusammensetzung ändern. Für den R-Matrix Modul sind vor allem binäre Reaktionen von Interesse,

$$a + A \rightarrow b + B$$

wobei A der Target kern mit Spin \vec{I}_A und Parität π_A und a das Projektil mit \vec{I}_a und Parität π_a . Außerdem existiert ein Bahndrehimpuls \vec{l}_{aA} der Relativbewegung zwischen a und A. Der Gesamtdrehimpuls im Eingangskanal ist daher $\vec{Y} = \vec{I}_A + \vec{I}_a + \vec{l}_{aA}$.

Geht man auf die zugehörigen Quantenzahlen über, so geben die folgenden Dreiecksungleichungen

$$I_{aA}: \quad |I_a - I_A| \leq I_{aA} \leq I_a + I_A,$$

$$Y: \quad |I_{aA} - l_{aA}| \leq Y \leq I_{aA} + l_{aA},$$

und die Parität

$$\pi: \quad \pi = (-1)^{l_{aA}} \pi_a - \pi_A.$$

Analoge Beziehungen gelten auch für die Teilchen $b + B$ im Ausgangskanal.

Bei Streu- und Reaktionsprozessen, die durch die starke und die Coulomb Wechselwirkung bestimmt sind, sind Y und π Erhaltungsgrößen. Dies bedeutet, dass die Drehimpulse im Ein- und Ausgangskanal zusammenhängen und im graphischen Eingabe Tool abgebildet werden müssen.

2.1.1 Grundlagen R-Matrix

Die Berechnung der Streuwellenfunktion für die Teilchen $b + B$ aus der Wellenfunktion im Eingangskanal erfolgt über die Streumatrix, welche sich aus der R-Matrix berechnen lässt.

Für die Herleitung der R-Matrix wird der betrachtete Raum in eine interne und eine externe Region unterteilt. Die Grenze dazwischen wird durch den Kanalradius beschrieben. Der Ausgangspunkt der Herleitung ist die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(t, \vec{r}),$$

welche an der Grenzfläche zwischen innerer und äußerer Region mit Hilfe des Bloch-Theorems gelöst werden kann. Nach einer Rechnung, die den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde, erhält man schließlich die berechenbare R-Matrix für einen Kanal

$$R_{ij}(E) = \sum_{n=1}^N \frac{\gamma_{nlj}^2}{E_{nlj} - E}, \quad (1)$$

Beziehungsweise, nach geeigneter Umformung, die R-Matrix für mehrere Kanäle

$$R_{cc'}(E) = \sum_n \frac{\gamma_{nc}\gamma_{nc'}}{E_n - E}. \quad (2)$$

Parametrisiert wird die R-Matrix durch die reduzierten Breiten γ_{nc} und die Energien E_n .

Die Energien E_n beschreiben die Polstellen der R-Matrix, also die Energien der einzelnen Resonanzen für jede Partialwelle.

Die reduzierten Breiten γ_{nlj} bzw. γ_{nc} sind ein wichtiger Faktor zum Beschreiben der Breite von Resonanzen. Die absolute Breite Γ einer solchen Resonanz wird berechnet durch

$$\Gamma = 2\gamma_{nlj}^2 P_l$$

wobei P_l der Eindringung entspricht, die alle Effekte der Transmission in die Coulomb Barriere beinhaltet und somit auch von der Energie abhängt. Die Anzahl an reduzierten Breiten pro Partialwelle ist stark abhängig von den gewählten Quantenzahlen. Die konkrete Anzahl an reduzierten Breiten für einige Werte des Gesamtdrehimpulses ist in Abb. 4 angeführt.¹

¹ Vgl. P.Descouvemont & D. Baye, The R-Matrix Theory, 2010

3 Technische Grundlagen

3.1.1 GECCOS

GECCOS ist ein Fortran Computerprogramm, dass beide Arten der R-Matrix, die berechenbare sowie die phänomenologische, zu modellieren beherrscht und daraus die Streumatrix ableiten kann.

Man hat also die Möglichkeit Potentiale und Energien anzugeben, so dass GECCOS eine Spektralzerlegung durchführt und schließlich die R-Matrix generiert. Oder, man gibt direkt reduzierte Breiten und Polpositionen an, damit die Phänomenologische R-Matrix gebildet wird. Unabhängig von der Art der Berechnung der R-Matrix wird dann aus der R-Matrix die Streumatrix abgeleitet und in weiterer Folge Streuamplitude, Wirkungsquerschnitte angegeben.

4 Aufgabenstellung

Im Zuge der Projektarbeit soll ein benutzerfreundliches Human-Machine-Interface für das GECCOS Programm implementiert werden. Diese Benutzeroberfläche soll Eingaben erleichtern und automatisiert einige Zusammenhänge erkennen und Falscheingaben verhindern beziehungsweise erkennen.

Die Anforderungen wurden, ähnlich einem Anforderungsheft in Funktionale und Technische, oft auch als nicht-funktionale Anforderungen bezeichnet, unterteilt. Funktionale Anforderungen beschreiben alle Funktionalitäten, die im fertigen Programm enthalten sein sollen. Technische Anforderungen definieren die Rahmenbedingungen wie etwa die zu verwendende Programmiersprache oder die Schnittstelle zu GECCOS, die verwendet werden soll.

4.1 Funktionale Anforderungen

4.1.1 Kompatibilität mit GECCOS

Die wichtigste Anforderung ist, dass das implementierte HMI mit GECCOS kompatibel sein muss. Das in Abschnitt 2.2 definierte Interface soll so verwendet werden, das GECCOS mit den ankommenden Daten umgehen kann und diese verarbeitet werden können. Dabei sollen alle eingegebenen Werte berücksichtigt werden und keinerlei Fehler auftreten.

4.1.2 Speichern und Laden

Es soll möglich sein, die erstellten Konfigurationen für das GECCOS Programm zu speichern und zu Laden. Auf diese Weise können Anpassungen getätigt werden, ohne die Konfiguration stets neu zu beginnen.

4.1.3 Tabellarische Anzeige

Für eine Berechnung von GECCOS sind sehr viele Werte notwendig. Um die Anzeige der Daten zu erleichtern, sollen diese in sinnvollen Tabellen und Matrizen angeordnet werden.

4.1.4 Bedeutung der Reaktionskanälen

Die einzelnen reduzierten Breiten haben je nach Kombination aus Quantenzahlen des Projektils beziehungsweise des Targets andere Bedeutungen. So kann etwa die siebente reduzierte Breite in einer Konfiguration dem dritten angeregten Zustand, in einer anderen Konfiguration jedoch einem Grundzustand höherer Ordnung.

Den jeweiligen reduzierten Breiten soll deren physikalische Bedeutung zugewiesen werden

4.1.5 Neue Werte hinzufügen / Werte löschen

Es soll möglich sein in allen Tabellen und Listen neue Werte hinzuzufügen und vorhandene Werte zu löschen

4.2 Technische Anforderungen

4.2.1 Qt Bibliothek

Als Programmiersprache wurde C++ unter Verwendung der Qt Bibliotheken empfohlen.

Qt ist ein Open Source GUI-Toolkit mit dem Fokus auf plattformübergreifende Entwicklung von grafischen Benutzeroberflächen. Es ist in C++ programmiert und lässt somit Erweiterungen mit eigenen Programmteilen, oder Teilen von Drittanbietern zu.

Viele der Grundlegenden Funktionalitäten, die für das Programmieren einer Benutzeroberfläche notwendig sind, sind in Qt bereits vorhanden und können oftmals einfach in eigene Implementierungen eingebunden werden. ²

4.2.2 GECCOS Interface

GECCOS verwendet als Eingabewerte eine spezielle Ordnerstruktur mit ASCII formatierten Textdateien. Die Basis der Struktur bilden die drei Ordner „Input“, „Output“ und „Work“. In diesen Ordnern befinden sich bis zu 100 verschiedene Dateien. Auf Grund der Möglichkeit die Benutzeroberfläche zu Konfigurieren ist es nicht notwendig, auf alle verwendeten Dateien einzugehen und ihren Aufbau und Zweck zu erläutern. Die folgenden Dateien jedoch sind in weiterer Folge von besonderem Interesse und werden nun etwas näher beschrieben.

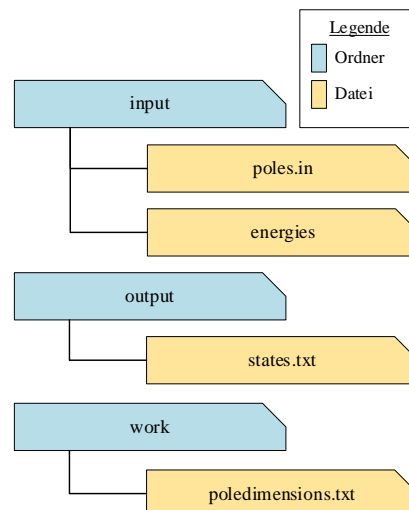


Abb. 1: Ordnerstruktur von GECCOS Eingabewerten mit ausgewählten Dateien

² <https://www.qt.io/>, Abgerufen 20.6.2022

- **Input/poles.in**

```
#poleterms to be added
#number of poles to be taken into account
#J pi E_pole width_1 width2 ...

npoles 51
nwidths 2

1 -1 -20.0   -2.8 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
1 1 -20.0    7.3 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
3 1 -20.0   -0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
3 -1 -0.1    1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 -0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
3 1 -38540.8 149.1 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 -0.5 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
3 -1 1.2     0.3 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
7 -1 1.620   0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
5 -1 1.0     0.5 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
3 1 1.8      0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
1 -1 1.8     0.2 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
```

Abb. 2: Exemplarischer Auszug aus einer poles.in Datei.

Die poles.in Datei enthält alle Polstellen, die für die Berechnung berücksichtigt werden sollen. Für jede Polstelle werden Energie, Gesamtdrehimpuls, Parität sowie die Anzahl an reduzierten Breiten und deren Werte.

- **Output/states.txt**

considered states:												
partitio	A_pr	Pr	A_ta	Ta	Jtot_pi	I_pr_pi	I_ta_pi	I	I	hbc2mc2	Q-val	enerDelta
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	0+	1/2	1	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	0+	1/2	1	22.02796	0.00000	-6.04940
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	3-	5/2	2	22.02796	0.00000	-6.12989
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	3-	7/2	4	22.02796	0.00000	-6.12989
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	2+	3/2	1	22.02796	0.00000	-6.91710
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	2+	5/2	3	22.02796	0.00000	-6.91710
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	0+	1/2	0	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	0+	1/2	0	22.02796	0.00000	-6.04940

Abb. 3: Exemplarischer Auszug aus einer states.txt Datei.

Die states.txt Datei enthält alle berücksichtigten Kanäle und ihre zugehörigen Partitionen und Quantenzahlen. Die Quantenzahlen aus dieser Tabelle können den einzelnen Polen und reduzierten Massen zugewiesen werden.

Spalte	Beschreibung	Beispiel
Partitio	Partitionsnummer	1
A_pr	Nukleonenzahl Projektil	1
Pr	Bezeichnung des Projektils	N
A_ta	Nukleonenzahl Target	16
Ta	Bezeichnung des Targets	O
Jtot_pi	Gesamtdrehimpuls inklusive Parität für die definierte Partialwelle	1/2-
L_pr_pi	Spin und Parität des Projektils	1/2+
L_ta_pi	Spin und Parität des Targets	3-
I	Kanalspin – Koppelt Spin des Projektils und des Targets	1/2
l	Bahndrehimpuls	1
hbc2mc2	Der Wert von $\frac{\hbar c^2}{\mu c^2}$, wobei μ die reduzierte Masse ist	22.02796
Q-val	Energieunterschied durch Massendefekt	0.000
enerDelta	Energieunterschied inklusive Anregungsenergie	-6.12989

Table 1: Beschreibung der einzelnen Spalten der states.txt Datei

- **Work/poledimensions.txt**

Das Poledimensions Dokument definiert wie viele reduzierte Breiten für die verschiedenen durch den Gesamtdrehimpuls beschriebenen Pole notwendig sind.

number of widths required in each partial wave:	
J^pi	n_width

1/2+:	13
1/2-:	13
3/2+:	21
3/2-:	21
5/2+:	25
5/2-:	25

Abb. 4: Exemplarischer Auszug aus einer poledimensions.txt Datei.

5 Umsetzung

Dieses Kapitel beschreibt alle Entscheidungen, die getroffen wurden, um die gegebene Aufgabenstellung zu erfüllen.

5.1 Konfigurierbarkeit

Ein Satz an Eingabewerten für eine GECCOS Berechnung kann über 100 verschiedene Dateien enthalten. Es wäre somit sehr viel Aufwand, alle möglichen Dateien in einem HMI zu konfigurieren. Da das Programm selbst stets weiterentwickelt und angepasst wird, wäre der dafür betriebene Aufwand wohl schon nach kurzer Zeit hinfällig.

Um effizient zu programmieren und für zukünftige Erweiterungen gewappnet zu sein wurde das gesamte HMI konfigurierbar gestaltet.

5.1.1 Konfigurationsdatei

Es wurde eine neue Konfigurationsdatei im JSON Format eingeführt. In dieser Datei wird definiert, welche Dateien vom HMI angezeigt und manipuliert werden sollen.

```
{
  "logFile": "C:/Users/TGyoergy/Desktop/TGyoergy/Privat/Uni/GECCOS/hmi.log",
  "loglevel": "ERROR, INFO, DEBUG",
  "input": [
    {
      "filename": "energies",
      "description": "All energies used in the calculations",
      "content": [
        {
          "name": "energies",
          "type": "list",
          "identiferyer": "",
          "mandatory": "true",
          "description": "a list of all used energies in the calculation"
        }
      ]
    },
    {
      "filename": "GECCOS.in",
      "description": "All energies used in the calculations",
      "content": [
        {
          "name": "energies",
          "type": "list",
          "identiferyer": "",
          "mandatory": "true",
          "description": "a list of all used energies in the calculation"
        }
      ]
    }
  ]
}
```

Abb. 5 Beispielhafter Auszug aus der Konfigurationsdatei

Diese Datei enthält eine hierarchische Beschreibung aller unterschiedlichen Dateien sowie deren jeweiligen Inhalt samt Beschreibung und etwaiger Validierung. Beschreibung und Validierung haben keinen Einfluss auf die Eingabedateien, die generiert werden, sondern sollen lediglich die Anwendung einfacher machen. Alle Blöcke sind Teil von Listen, so dass man in der Anzahl an Dateien und deren Inhalt nicht beschränkt ist.

Um den Dateiinhalt zu Beschreiben machen wir uns zu Nutze, dass die Eingabedateien einer GECCOS Berechnung stets nach dem selbem Prinzip aufgebaut sind und Daten in einem von vier möglichen Formaten abgebildet werden – Liste, Tabelle, Parameter oder Map. Diese Formate werden oft von einem Kommentar eingeleitet, welches als „Identifyer“ in die Konfigurationsdatei eingetragen wird. Gibt es keinen einleitenden Kommentar, bleibt dieser Eintrag leer. Die einzelnen Formate werden nachfolgend beschrieben



Abb. 6: Illustration des hierarchischen Aufbaus der Konfigurationsdatei

- **Liste**

Eine Liste besteht aus einer ununterbrochenen Liste aus unkommentierten Werten. Die einzelnen Werte werden durch einen Zeilenumbruch unterteilt.

```

0.0500000000000000
0.1000000000000000
0.1500000000000000
0.2000000000000000
0.2500000000000000
0.3000000000000000
0.3500000000000000
0.4000000000000000
0.4500000000000000
  
```

Abb. 7: Beispiel einer Liste in einer GECCOS-Datei. Hier fehlt das einleitende Kommentar.

- **Tabelle**

In einer Tabelle werden viele Werte tabellarisch angezeigt (vgl. Abb. 3). Um die Spalten nicht blind einzugeben, ist es notwendig die einzelnen Spalten in der Konfigurationsdatei die einzelnen Spalten näher zu beschreiben, in dem man ihnen einen Namen gibt und eine Beschreibung eingibt. Diese wird später als Eingabehilfe angezeigt.

- **Parameter**

Ein Parameter entspricht einem einfachen Paar aus Variablennamen und Wert. Jedem Parameter kann auch eine Beschreibung gegeben werden, welche später angezeigt wird. Ein

Ngrid	20
a	2.8000000000000000
B	0.0

Abb. 8: Exemplarischer Auszug von mehreren Parametern aus einer GECCOS-Datei. Der Variablen Ngrid wird hier etwa der Wert 20 zugewiesen.

Parameter wird Global für die gesamte Datei aufgelöst. Daher darf jeder angegebene Variablenname nur einmal pro Datei vorkommen. Kommen einzelne Parameter öfter vor, etwa für die Beschreibung mehrerer Partikel, muss das über eine Map geschehen.

- **Map**

Eine Map entspricht einer Ansammlung von mehreren Parametern, die zu einem gemeinsamen Block zusammengefasst sind. Analog zum Parameter darf jeder Variablenname nur einmal pro Map vorkommen, Da eine Datei jedoch mehrere Map's enthalten kann, ist es möglich

```
#Incident channel:
#=====
#
partition      incident
projectile     n
mass           1.008664915880000
charge         0
nucleons       1
levels         1
0.0    1/2    +
# end projectile

target_in      0
mass           15.994914619571700
charge         8
nucleons       16
levels         4
0.0           0  +
6.049400      0  +
6.129890      3  -
6.917100      2  +
# end target
```

Abb. 9: Exemplarischer Auszug einer Datei mit zwei Map's projectile and target. Man beachte, dass Parameter mit Namen "mass" und "charge" in den beiden Map's vorkommen.

denselben Parameter mehrmals in eine Datei zu konfigurieren. Diese müssen sich jedoch in unterschiedlichen Map's befinden, um eindeutig identifiziert werden zu können.

5.1.2 Bedeutung der Reaktionskanäle

Wie in Kapitel 2.1.4 beschrieben, soll die Bedeutung der einzelnen Reaktionskanälen in der Benutzeroberfläche angezeigt werden. Auch dieses Verhalten ist konfigurierbar, auf Grund der Komplexität wird es jedoch separat beschrieben.

Es gibt ein fünftes Dateiinhaltsformat: Pole. Die Pole sind eine spezielle Art einer Tabelle und besitzen zwei extra Parameter, um die Anzahl und die Bedeutung der reduzierten Breiten zu adressieren.

```
{
  "filename": "poles.prototype",
  "description": "All energies used in the calculations",
  "content": [
    {
      "name": "number widths",
      "type": "poles",
      "mandatory": "true",
      "identifier": "E_pole",
      "description": "the number of all used widths for the calculation",
      "poleDimensionFile": "work/poledimensions.txt",
      "poleStatesFile": "output/states.txt"
    }
  ]
}
```

Abb. 10: Exemplarischer Auszug der Konfigurationsdatei. Hier wird eine Datei mit "Poles" konfiguriert. Sowohl das poleDimensionsFile als auch das poleStatesFile wird hierzu angegeben.

- **Anzahl an reduzierten Breiten**

Die Anzahl an Kanälen und damit verbunden reduzierten Breiten ist von dem berechneten Stoß abhängig. Die benötigte Anzahl ist in der Datei poledimensions.txt (vgl. Abb. 4) festgehalten. In der Darstellung als Tabelle, können nur die Anzahl an Spalten beschrieben werden, die dem Wert in der poledimensions.txt Datei entspricht. Alle weiteren Felder sind inaktiv und können nicht beschrieben werden.

Möchte man etwa die Werte eines Poles für den Gesamtdrehimpuls von $+\frac{1}{2}$ bearbeiten, so sind in dieser Zeile der Tabelle lediglich die Einträge der ersten 13 Spalten editierbar.

Möchte man eine neue Polstelle hinzufügen, so muss man zuerst auswählen für welchen Gesamtdrehimpuls die Polstelle gültig sein soll. Das Programm erzeugt dann eine neue Zeile in der Tabelle und limitiert die Anzahl an Einträgen automatisch.

- **Bedeutung der einzelnen Kanäle**

Da die Anzahl an reduzierten Breiten für verschiedene Stößen variiert, verändert sich auch die Bedeutung der einzelnen Kanäle in der Tabelle. Diese Zusammenhänge sind in der Datei states.txt (vgl. Abb. 3) beschrieben.

In dieser Datei sind alle zu berücksichtigenden Zustände geordnet nach ansteigender Energie angegeben. Jede Zeile entspricht einer reduzierten Breite und enthält alle zur Beschreibung notwendigen Quantenzahlen.

Eine Polstelle der Streumatrix wird durch den Gesamtdrehimpuls inklusive Parität beschrieben. Zur Illustration betrachten wir den Pol mit Gesamtdrehimpuls $+1/2$. Aus der poledimensions.txt Datei können wir auslesen, dass diese Polstelle 13 reduzierte Breiten hat. Um nun die Bedeutung der einzelnen Breiten zu bestimmen, extrahieren wir alle Zeilen der states.txt Datei mit Gesamtdrehimpuls $+1/2$.

partitio	A_pr	Pr	A_ta	Ta	Jtot_pi	I_pr_pi	I_ta_pi	I	I	hbc2mc2	Q-val	enerDelta
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	0+	1/2	0	2.202.796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	0+	1/2	0	2.202.796	0.00000	-604.940
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	3-	5/2	3	2.202.796	0.00000	-612.989
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	3-	7/2	3	2.202.796	0.00000	-612.989
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	2+	3/2	2	2.202.796	0.00000	-691.710
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	2+	5/2	2	2.202.796	0.00000	-691.710
2	4	a	13	C	1/2+	0+	1/2-	1/2	1	682.914	-221.51	-221.561
2	4	a	13	C	1/2+	0+	1/2+	1/2	0	682.914	-221.56	-530.505
2	4	a	13	C	1/2+	0+	3/2-	3/2	1	682.914	-221.56	-590.012
3	1	p	16	N	1/2+	1/2+	2-	3/2	1	2.204.432	-963.85	-963.856
3	1	p	16	N	1/2+	1/2+	2-	5/2	3	2.204.432	-963.85	-963.856
4	2	d	15	N	1/2+	1+	1/2-	1/2	1	1.177.060	-990.28	-990.285
4	2	d	15	N	1/2+	1+	1/2-	3/2	1	1.177.060	-990.28	-990.285

Tab. 1: Auszug aller Werte mit Gesamtdrehimpuls $+1/2$ aus poledimensions.txt. Die verschiedenen Farben verdeutlichen die einzelnen Partitionen.

Die Reihenfolge der Einträge in dieser Tabelle entspricht der Reihenfolge der reduzierten Breiten. Die erste reduzierte Breite entspricht also dem elastischen Stoße (Grundzustand) eines Neutrons mit einem Sauerstoff Atom bei Bahndrehimpuls $L=0$ und Kanalspin $I=1/2$. Die zweite reduzierte Breite entspricht dem ersten angeregten Zustand für $L=0$ und $I=1/2$. Dritte und vierte reduzierte Masse entsprechen dem zweiten angeregten Zustand, da beide dieselbe Energie aufweisen, mit $L=3$ und $I=5/2$ bzw. $7/2$. Die reduzierten Breiten 7, 8 und 9 entsprechen dem Grundzustand sowie ersten und zweiten angeregten Zustands eines Stoßes eines Alpha Teilchens mit einem C^{13} Kohlenstoff Atom.

5.2 HMI

Das Human Machine Interface soll bewusst sehr minimalistisch gehalten werden. Es sind viele wissenschaftliche Anzeigen notwendig, um den Aufbau der GECCCOS Eingabewerte zu begreifen. Daher sollen möglichst wenige technische Details sichtbar sein. Etwa sollen alle Beschreibungen, die in der Konfigurationsdatei angegeben werden, lediglich als Tooltip angezeigt werden, um den Benutzer nicht mit zu vielen Texten zu überfordern.

Die Anzeige der Daten selbst soll genau so in Ordner und Dateien gegliedert sein, wie die Eingabewerte selbst. In der Benutzeroberfläche sind die drei Ordner „Input“, „Output“ und „Work“ sowie deren Inhalt sichtbar. Jede Datei, deren Inhalt in der Konfigurationsdatei angegeben wurde, wird nun auch im HMI angezeigt und kann ausgewählt und editiert werden.

5.2.1 Eingaben Rückgängig machen

Um Falscheingaben zu minimieren, soll es die Möglichkeit geben, alle Eingaben rückgängig zu machen und einzelne Dateien wieder auf den letzten Stand bevor man sie manipuliert hat zurückzusetzen.

6 Ergebnis

6.1 Konfiguration

Wie in Abschnitt 3.1 beschrieben, ist das erstellte Programm konfigurierbar. Die Konfigurationsdatei muss sich im selben Ordner, wie das ausführbare Programm befinden. Neben dem beschriebenen Aufbau der GECCCOS Eingabewerte gibt es auch die Möglichkeit allgemeiner Konfiguration. So kann man etwa einstellen, wo die Applikation Aktivitäten aufzeichnen soll und in welchem Detailgrad das passieren soll.

```
{
"logFile":"C:/Users/TGyoergy/Desktop/TGyoergy/Privat/Uni/GECCCOS/hmi.log",
"loglevel":"ERROR,INFO,DEBUG",
  "input":[
    {
      "filename":"energies",
      "description":"All energies used in the calculations",
      "content":[
        {
          "name":"energies",
          "type":"list",
          "identifuer":"","
          "mandatory":"true",
          "description":"a list of all used energies in the
calculation"
        }
      ]
    },
    {
      "filename":"GECCCOS.in",
      "description":"All energies used in the calculations"
```

Abb. 11: Auszug aus der letzten Version der Konfigurationsdatei.

6.2 Projekt öffnen

Öffnet man das Programm wird man zuerst aufgefordert zu wählen, ob man ein neues GECCCOS Projekt mit Eingabewerten erstellen möchte, oder ein bereits bestehendes öffnen und manipulieren möchte.

Es gilt zu beachten, dass im Rahmen dieser Projektarbeit lediglich das Bearbeiten bereits existierender Eingabewerte umgesetzt wurde. Vorerst ist es mit dieser Umgebung nicht möglich, neue Eingabewerte oder Dateien zu erstellen. Man kann lediglich bestehende Dateien manipulieren.

Nach einem Klick auf „Open...“ öffnet sich ein Datei Explorer, mit dem man durch die Ordnerstruktur seines lokalen Rechners navigieren kann. Mit Hilfe dieses Fensters kann man die zu öffnenden GECCCOS Eingabewerte auswählen und öffnen.

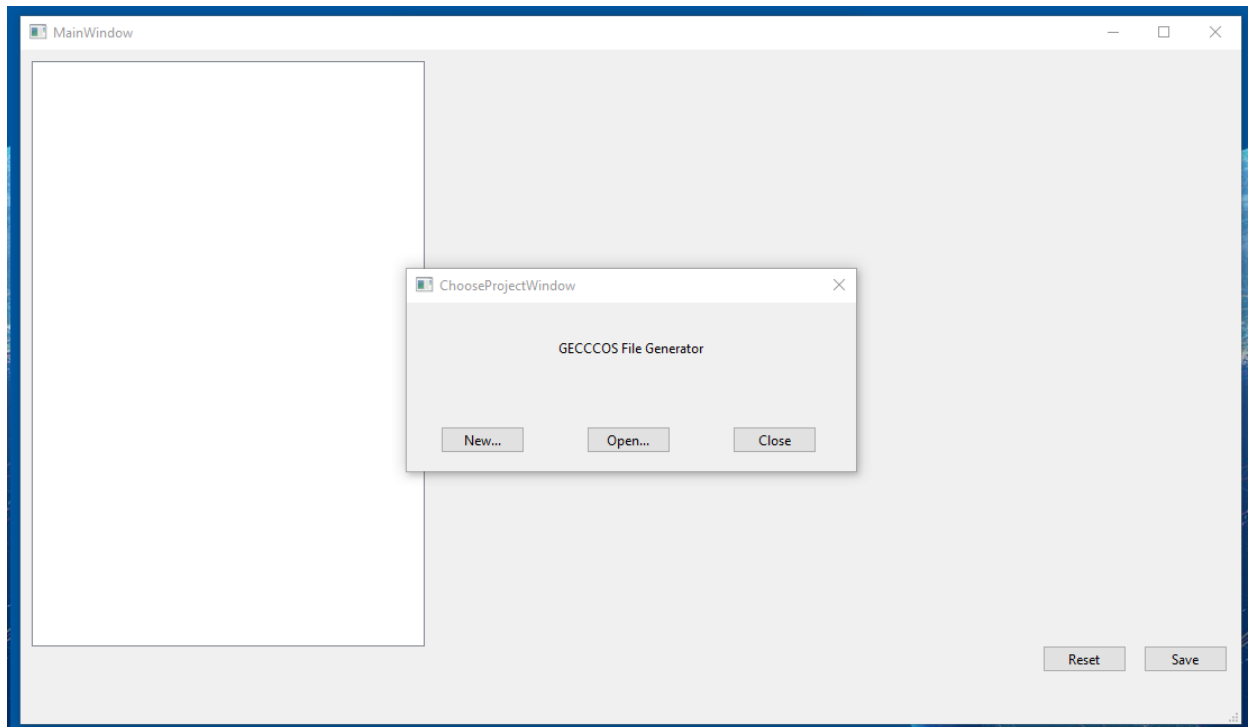


Abb. 12: Das erstellte Programm direkt nach dem öffnen. Man wird aufgefordert, ein bestehendes Set an GECCOS Eingabewerten auszuwählen.

Öffnet man ein valides GECCOS Projekt mit Eingabewerten, so werden die drei Ordner „Input“, „Output“ und „Work“, sowie deren Inhalt in einer hierarchischen Struktur angezeigt. Man sieht den Namen der einzelnen Dateien, sowie eine kurze Beschreibung.

6.3 Visualisierung der Dateien

Wählt man eine Datei aus der Baumstruktur auf der linken Seite, so wird im Hauptfenster der interpretierte Inhalt der Datei angezeigt. Man kann nun also den Inhalt der Datei manipulieren. Es ist wichtig zu erwähnen, dass Änderungen vorerst nur im Arbeitsspeicher geladen bleiben und nicht automatisch in die Datei geschrieben werden. Man hat also stets die Möglichkeit durch einen Klick auf den „Reset“ Knopf alle getätigten Änderungen rückgängig zu machen. Erst, wenn man die Änderungen durch Drücken des „Save“ Knopfes bestätigt, werden alle Änderungen in die gewählte Datei geschrieben und sind somit persistent. Ein Zurücksetzen ist ab diesem Zeitpunkt nichtmehr möglich.

Besteht eine Datei aus mehreren Dateiinhalten, so werden diese in derselben Reihenfolge, in der sie in die Konfigurationsdatei eingetragen wurden, untereinander angezeigt. (vgl. Abb. 12)

6.3.1 Listen

Wählt man eine Datei, die eine Liste enthält, so werden die Einträge der Liste in einer Tabelle mit einer einzigen Spalte angezeigt. Man kann einzelne Einträge bearbeiten und durch mit Hilfe des Knopfes „Add new Entry“ kann man einen neuen Eintrag zu der Tabelle hinzufügen.

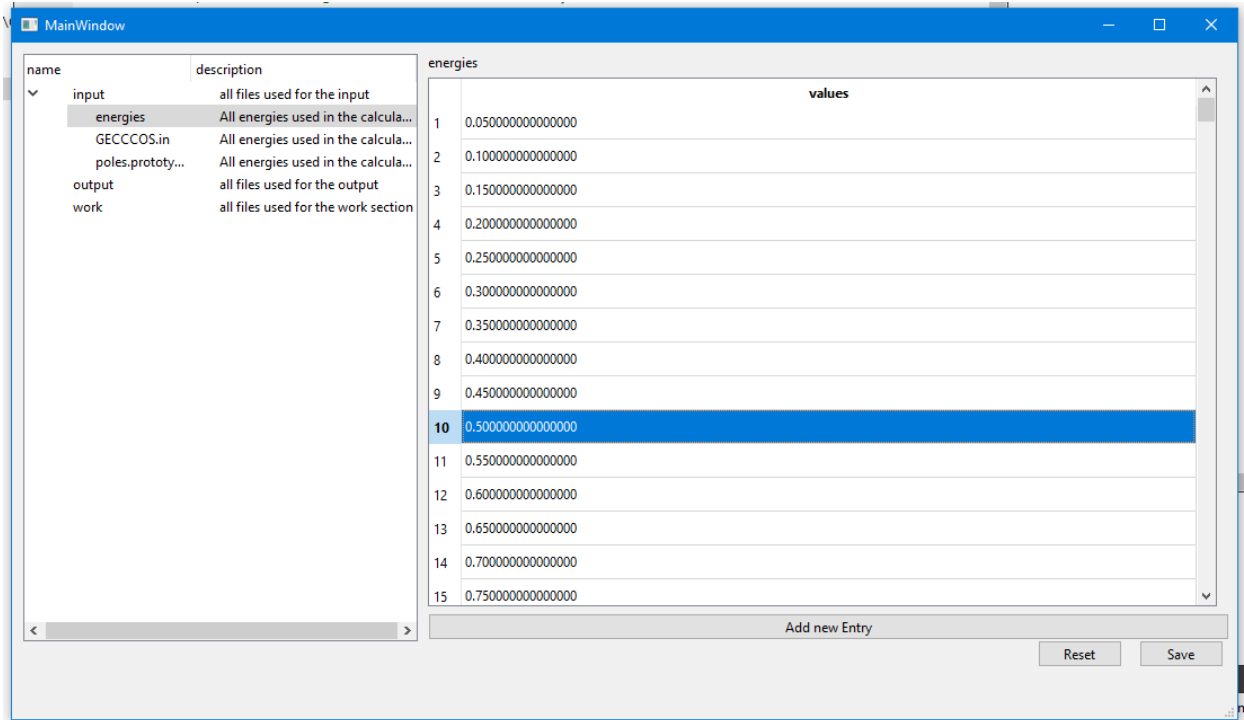


Abb. 13: Visualisierung einer Datei, die lediglich aus einer Liste an Energien besteht. Unter der Tabelle sieht man den Knopf, mit dem ein neuer Eintrag generiert werden kann.

6.3.2 Parameter

Wählt man eine Datei, die eine oder mehrere Parameter enthalten, so werden diese untereinander angezeigt. Jeder Parameter ist mit Namen beschrieben. Hält man die Maus über den Namen erscheint in einem Tool Tip die eingetragene Beschreibung. (Vgl. Abb. 11)

6.3.3 Maps

Analog zu Parametern werden auch die einzelnen Parameter einer Map angezeigt. Zum Unterscheiden werden alle Parameter einer Map unter einer gemeinsamen Überschrift angezeigt, um sie zu gruppieren.

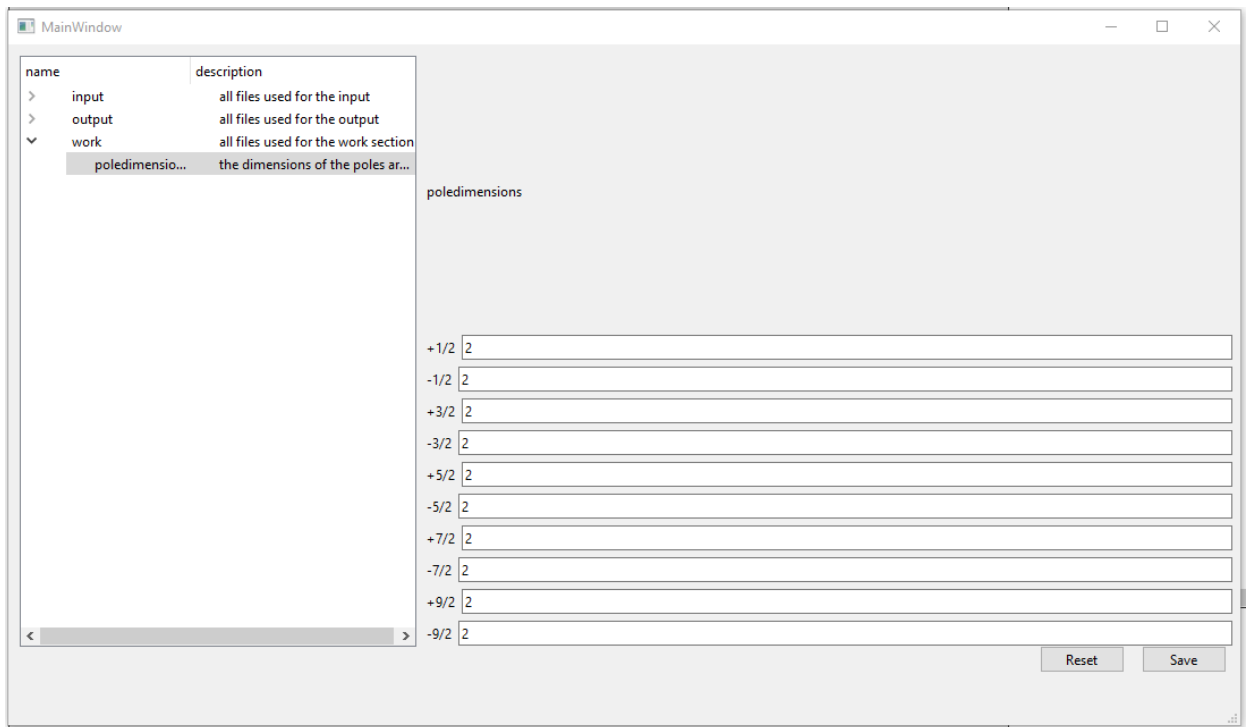


Abb. 14: Alle zusammengehörigen Werte der Map *poledimensions* werden untereinander angezeigt und können einzeln bearbeitet werden.

6.3.4 Tabellen

Auch konfigurierte Tabellen werden interpretiert und tabellarisch angezeigt. Einzelne Felder können bearbeitet werden. Zusätzlich gibt es die Möglichkeit analog zum Listen Typ eine weitere Zeile zur Tabelle hinzuzufügen.

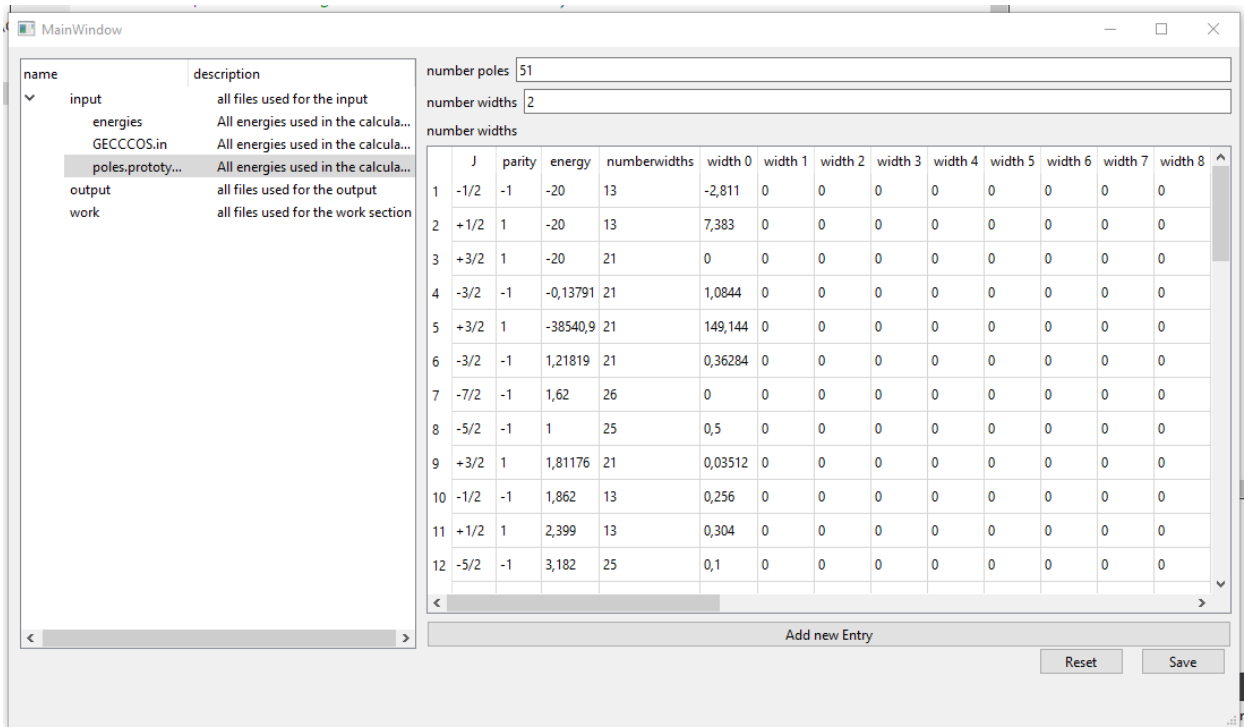


Abb. 15: Visualisierung einer Datei, die aus den beiden Parametern "number poles" und "number widths" sowie einer Tabelle der reduzierten Breiten zusammengesetzt ist.

6.3.5 Pole

Die Anzeige von Polen sieht auf den ersten Blick gleich aus, wie eine normale Tabelle. Es gibt jedoch einige Unterschiede:

- Die Namen der Spalten sind voreingestellt und können nicht konfiguriert werden
- Es können nicht alle Felder der Tabelle beschrieben werden. Jeder Zeile entspricht einer Polstelle und hat daher eine bekannte Anzahl an reduzierten Breiten, die nicht überschritten werden kann. Das Programm liest die Anzahl der möglichen reduzierten Breiten aus. Jede Spalte hat nur eine bestimmte Anzahl an Feldern, die beschrieben werden können.
- Wählt man eine reduzierte Breite aus, erscheint ein zusätzliches Feld unter der Tabelle. Hier werden alle Quantenzahlen der gewählten reduzierten Breite angezeigt, so dass man erkennt um welche Stoßreaktion es sich hier handelt.
- Möchte man eine neue Zeile zur Tabelle hinzufügen, so muss man zuerst in einem weiteren Dialog auswählen, welchen Gesamtdrehimpuls die Polstelle haben soll. Das Programm setzt dann alle weiteren Quantenzahlen ein modelliert die Tabelle entsprechend.

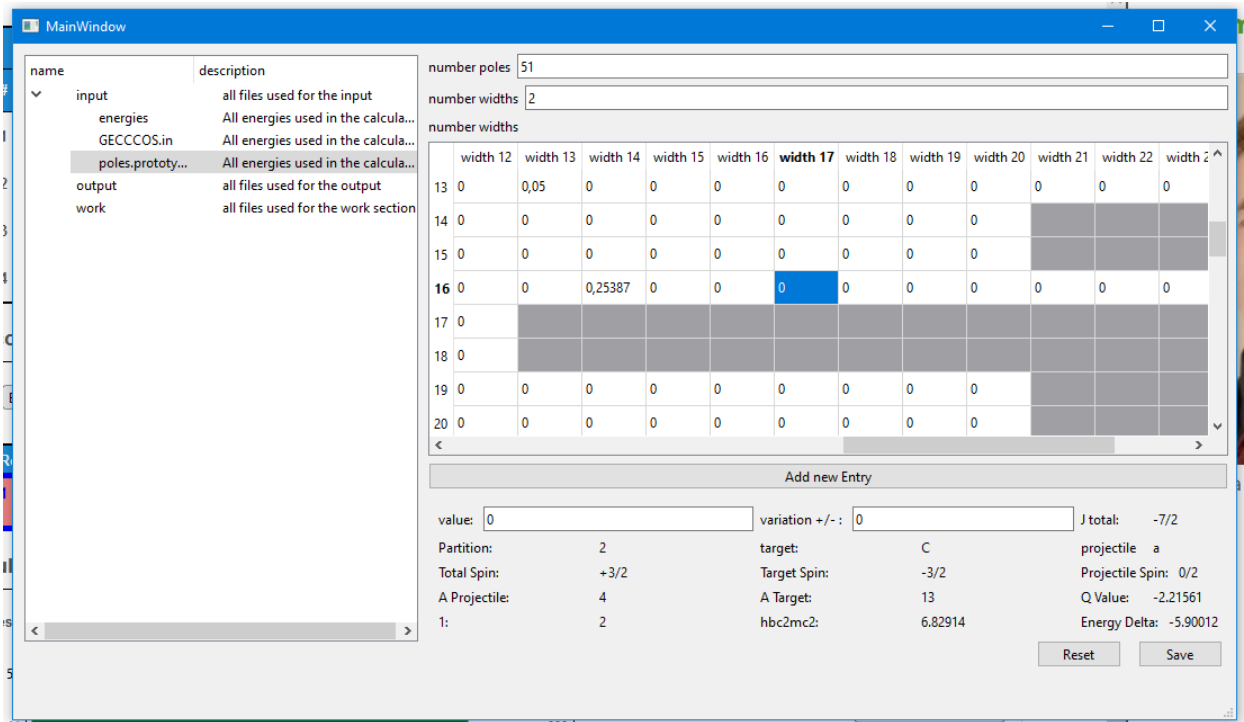


Abb. 16: Anzeige einer Polstellen-Tabelle. Die Pole in den einzelnen Zeilen haben unterschiedliche Anzahl an Spalten. Die Felder, die nicht beschrieben werden können, sind grau eingefärbt. Am unteren Rand sieht man das Feld mit allen Quantenzahlen der Auswahl.

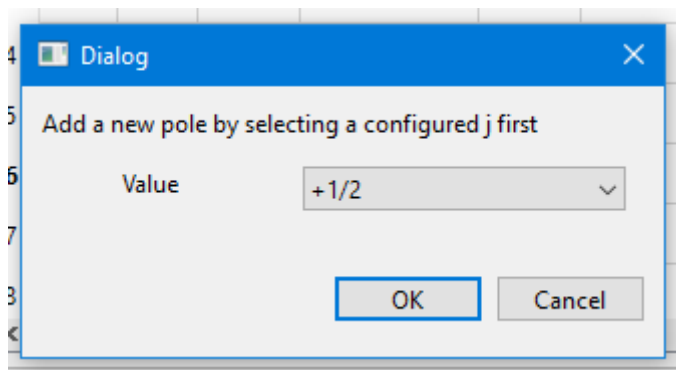


Abb. 17: Dieser Dialog erscheint, wenn man eine neue Polstelle zur Tabelle hinzufügen möchte. Im Drop-Down Menü kann man zwischen allen verfügbaren Gesamtdrehimpulsen auswählen.

6.3.6 File

Um nicht zu stark an die bestehenden Typen des Datei Inhaltes gebunden zu sein, soll es auch die Möglichkeit eine Datei ohne jegliche Interpretation abzubilden. Hierfür wurde eine neuer Datei-Inhalt Typ definiert, der lediglich den Inhalt der Datei anzeigt. Der Text der Datei wird hier in einem großen Eingabefeld angezeigt und kann wie in einem einfachen Texteditor bearbeitet werden.

MainWindow

name

description

>

input

all files used for the input

▼

output

all files used for the output

states.txt

the states of the project

>

work

all files used for the work section

considered states:

partitio	A_pr	Pr	A_ta	Ta	Jtot_pi	L_pr_pi	L_ta_pi	I	I	hbc2mc2	Q-val	enerDelta
1	1	n	16	O	1/2-	1/2+	0+	1/2	1	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	1/2+	1/2+	0+	1/2	0	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	3/2-	1/2+	0+	1/2	1	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	3/2+	1/2+	0+	1/2	2	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	5/2-	1/2+	0+	1/2	3	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	5/2+	1/2+	0+	1/2	2	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	7/2-	1/2+	0+	1/2	3	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	7/2+	1/2+	0+	1/2	4	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	9/2-	1/2+	0+	1/2	5	22.02796	0.00000	0.00000
1	1	n	16	O	9/2+	1/2+	0+	1/2	4	22.02796	0.00000	0.00000
2	4	a	13	C	1/2-	0+	1/2-	1/2	0	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	1/2+	0+	1/2-	1/2	1	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	3/2-	0+	1/2-	1/2	2	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	3/2+	0+	1/2-	1/2	1	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	5/2-	0+	1/2-	1/2	2	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	5/2+	0+	1/2-	1/2	3	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	7/2-	0+	1/2-	1/2	4	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	7/2+	0+	1/2-	1/2	3	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	9/2-	0+	1/2-	1/2	4	6.82914	-2.21561	-2.21561
2	4	a	13	C	9/2+	0+	1/2-	1/2	5	6.82914	-2.21561	-2.21561

Reset

Save

Abb. 18: Anzeige eines Files im HMI. Der Inhalt dieser Datei wird nicht interpretiert, sondern lediglich in einem editierbaren Fenster angezeigt.