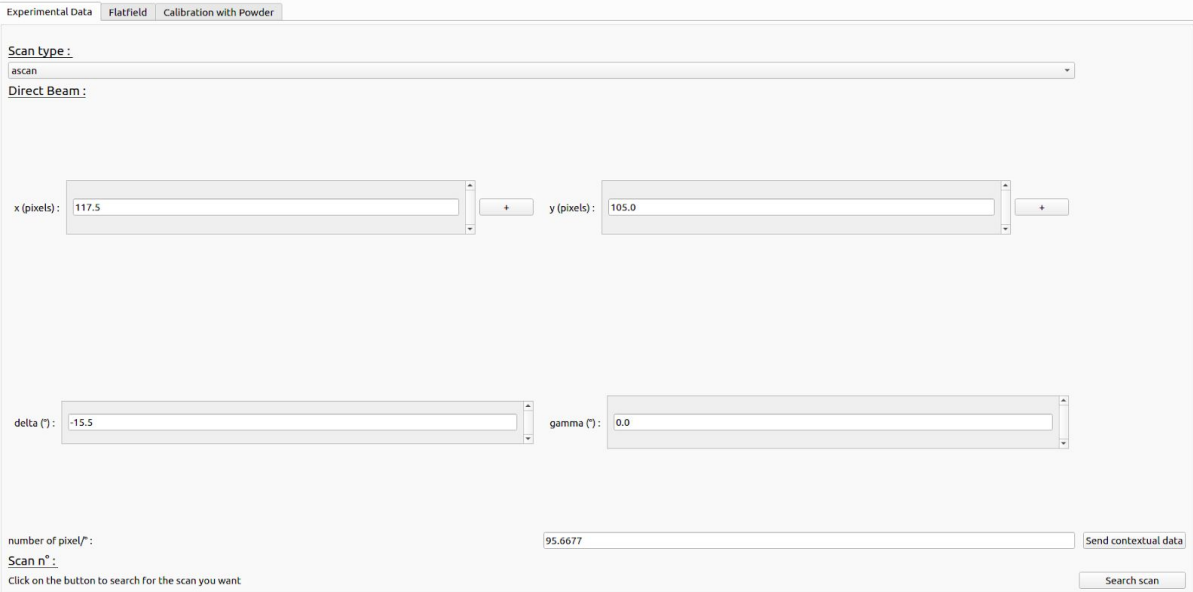


Pour commencer, vous devez lancer l'application comme suit :

- Si vous utilisez spyder, il faut lancer le fichier "nexVisu_start.py" qui se trouve dans le dossier "nexVisu/src".
- Si vous utilisez les lignes de commandes, vous pouvez taper directement la commande :

```
python3 nexVisu/src/nexVisu_start.py
```

Vous obtiendrez l'affichage suivant :



Experimental Data | Flatfield | Calibration with Powder

Scan type :
ascan

Direct Beam :

x (pixels) : 117.5 y (pixels) : 105.0

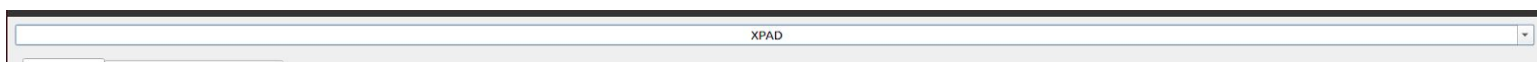
delta (°) : -15.5 gamma (°) : 0.0

number of pixel/° : 95.6677 Send contextual data

Scan n° :
Click on the button to search for the scan you want Search scan

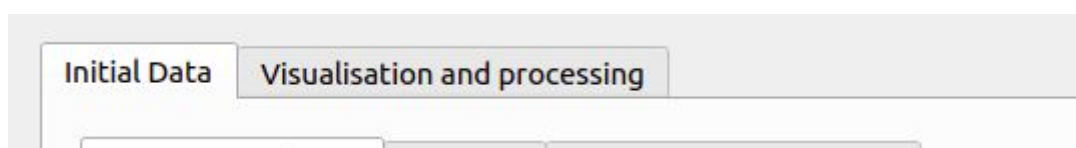
Vous voilà sur la première vue du logiciel, celle qui correspond aux données expérimentales de votre manipulation.

Pour commencer, tout en haut du logiciel, il y a un menu déroulant qui vous permet de choisir le détecteur qui va avec les images de la manipulation :



Si vous cliquez sur la flèche à droite, un menu déroulant avec les détecteurs présent dans le logiciel s'affiche, et vous pourrez alors cliquer sur le détecteur de votre choix.

Ensuite nous allons nous intéresser à la première vue "Initial data" :



TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

Cette vue va vous laisser le choix entre trois vues différentes, les données expérimentales (experimental data), le flatfield, et la calibration avec poudre.

Commençons par les données expérimentales.

Vous pouvez commencer par choisir le type de scan que vous voulez étudier, comme par exemple le timescan (tscan).

Ensuite viennent les variables permettant de définir la position du détecteur, en fonction du faisceau direct (direct beam).

Vous devez donc entrer les coordonnées x et y du faisceau direct sur le détecteur, en pixel. Si vous voulez que l'application calcule le nombre de pixel par degré, vous pouvez cliquer sur le "+" de la coordonnée qui vous intéresse (X, ou Y) et remplir les nouvelles zones avec vos valeurs. Chaque nouvelle zone va correspondre à un décalage d'un degré :



Pour le moment, vous pouvez entrer jusqu'à dix coordonnées X (ou Y) maximum, sachant que le logiciel va faire la moyenne de toutes les différences entre deux coordonnées succinctes.

Enfin, lorsque toutes les données utilisateurs ont été entrés, vous pouvez choisir le fichier contenant les images brutes, que vous désirez charger dans le logiciel :

Scan n° :

Click on the button to search for the scan you want

Vous pouvez cliquer sur le bouton "Search scan", le logiciel va alors ouvrir une fenêtre de dialogue, permettant de naviguer dans l'arborescence des fichiers de l'ordinateur. Double-cliquer sur le fichier .nxs de votre choix, ou bien sélectionnez le et cliquez sur "open".

La phrase "click on the button to search for the scan you want" devrait avoir été remplacée par le nom de votre fichier. Si ce n'est pas le cas, c'est que vous n'avez pas chargé de fichier.

Il reste un bouton, "Send contextual data". Ce bouton n'est cliquable que si vous avez déjà chargé un fichier, sinon il vous demandera de bien vouloir en charger un.

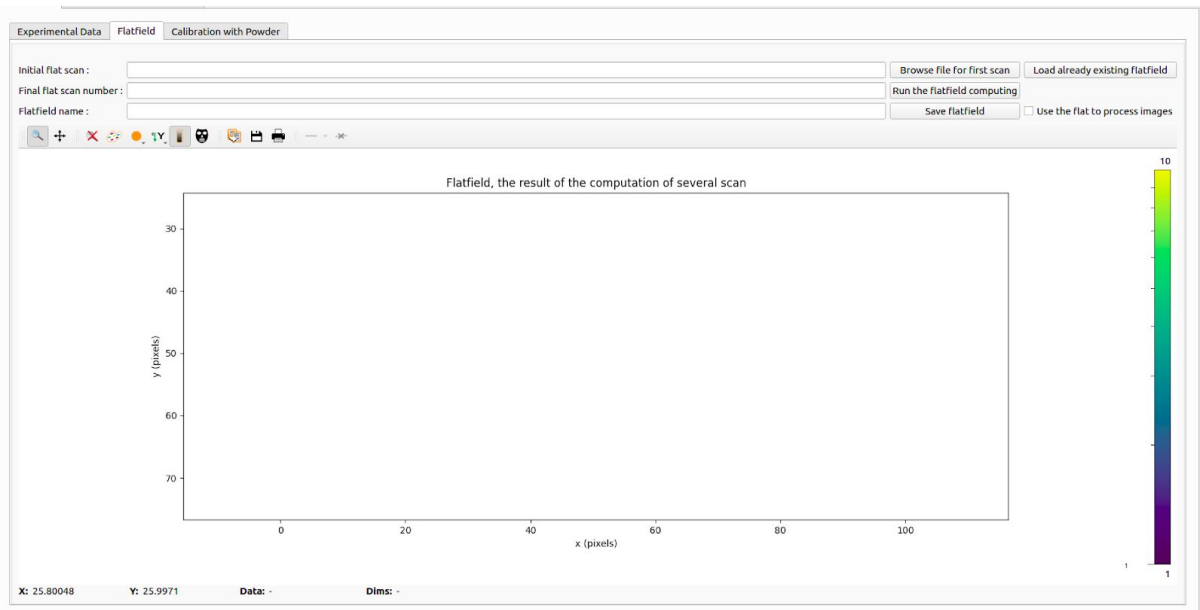
Si vous désirez charger un fichier de flatfield, ou en générer un avec l'application, ne cliquez pas sur le bouton mais plutôt sur la deuxième vue "Flatfield", à droite de l'onglet "Experimental data".

TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

Sinon, vous pouvez cliquer sur le bouton “Send contextual data” pour lancer la correction et le déploiement des images.

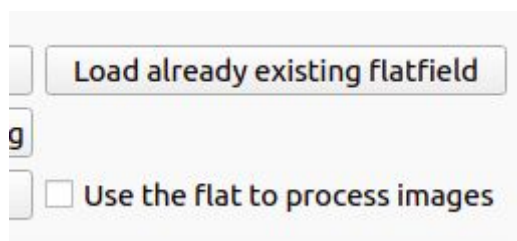
Voyons maintenant la partie flatfield. Si vous n’en avez pas, ou que vous ne voulez pas en générer, vous pouvez tout de suite passer à l’étape suivante.

Après avoir cliquer sur l’onglet “flatfield”, vous aurez cette vue :



Cette vue permet deux fonctionnements différents.

Si vous avez déjà un fichier flatfield :



Vous n’avez qu’à cliquer sur le bouton “Load already existing flatfield”, qui va ouvrir une fenêtre de dialogue où vous pourrez encore chercher dans vos fichiers pour double-cliquer sur le scan du flatfield, ou bien le sélectionner et cliquer sur “open”.

Le flatfield va alors s’afficher dans le graphe prévu à cet effet, et vous n’aurez plus qu’à cocher la case “use the flat to process images”. Si vous ne cochez pas cette case, alors le flatfield ne sera pas utilisé dans les calculs de géométrie.

Si vous désirez générer un flatfield :

TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

| | | |
|--------------------------|----------------------|--|
| Initial flat scan : | <input type="text"/> | <input type="button" value="Browse file for first scan"/> |
| Final flat scan number : | <input type="text"/> | <input type="button" value="Run the flatfield computing"/> |
| Flatfield name : | <input type="text"/> | <input type="button" value="Save flatfield"/> |

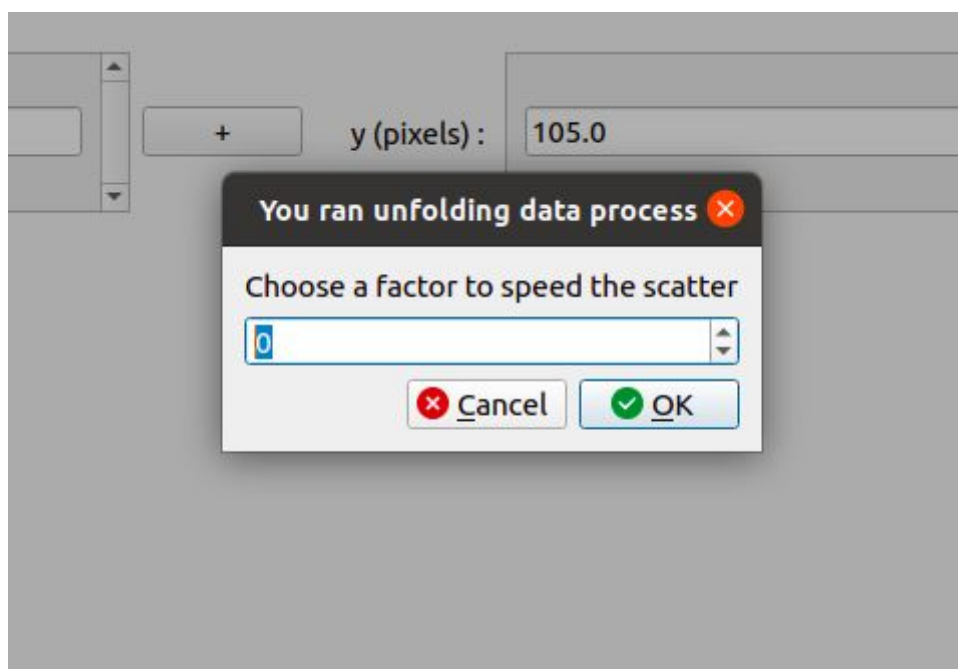
Cliquez sur le premier “Browse file for first scan” ce qui va ouvrir une fenêtre de dialogue qui va vous permettre de charger le premier fichier, dont le nom sera alors inscrit dans la première zone “initial flat scan :”. Dans la seconde zone d’entrée “Final flat scan number”, vous pouvez entrer le numéro (et seulement le numéro) du scan final que vous désirez pour générer le flat. Une barre de chargement s’affiche alors en dessous du bouton “load already existing file”, vous permettant de contrôler l’avancée de la génération.

Imaginons que vous avez chargé le scan_521.nxs et que vous écrivez 533 dans la seconde zone, alors le logiciel va prendre toutes les images de tous les scans du numéro 521 au numéro 533 et générer le flatfield, en l’affichant dans la zone prévue à cet effet. Les scans doivent tous être dans le même dossier, mais le logiciel ne plantera pas s’il manque par exemple le scan numéro 524.

Il ne vous reste qu’à cocher la case “use the flat to process images” si le résultat vous plaît.

Pour la suite, retournez sur l’onglet “experimental data” et cliquez sur le bouton “Send contextual data”.

Vous aurez une nouvelle fenêtre de dialogue qui apparaît. Cette fenêtre vous demande si vous voulez ajouter un facteur de réduction pour le déploiement des images (qui peut être long).



Si vous laissez 0, il n’y aura pas de facteur, sinon, l’affichage des résultats (images corrigées et déployées) n’affichera qu’un point sur le facteur choisi. Si vous mettez 10, alors 1 point sur 10 sera affiché sur la vue secondaire “unfolded data”, ce qui rendra cet affichage plus rapide mais moins précis.

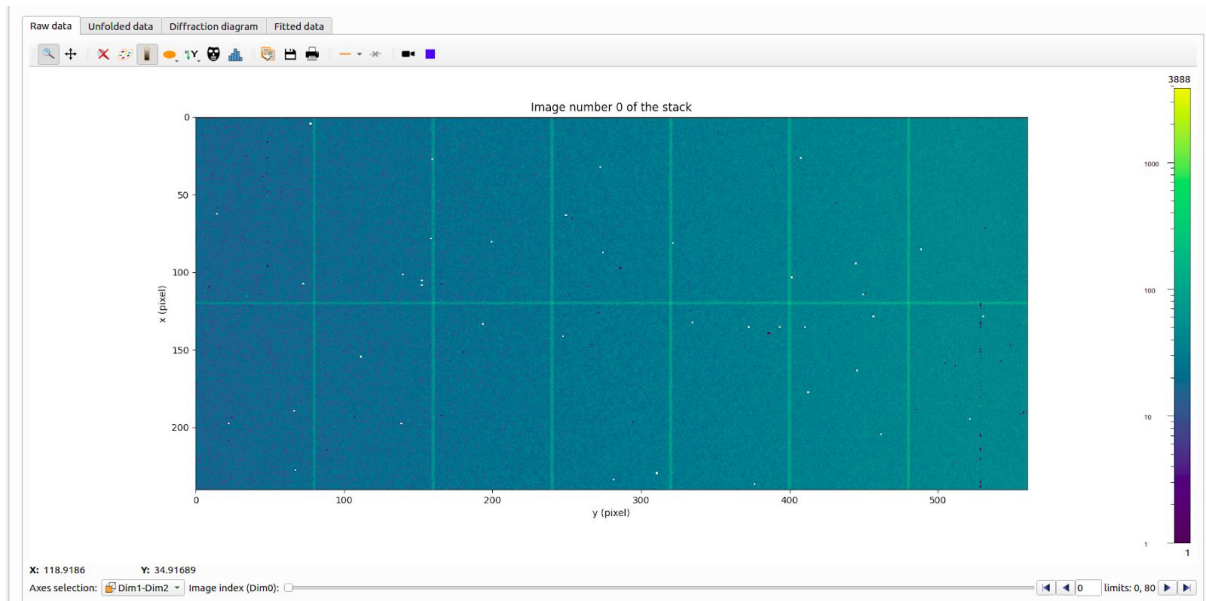
Passons maintenant au second onglet principal :

TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

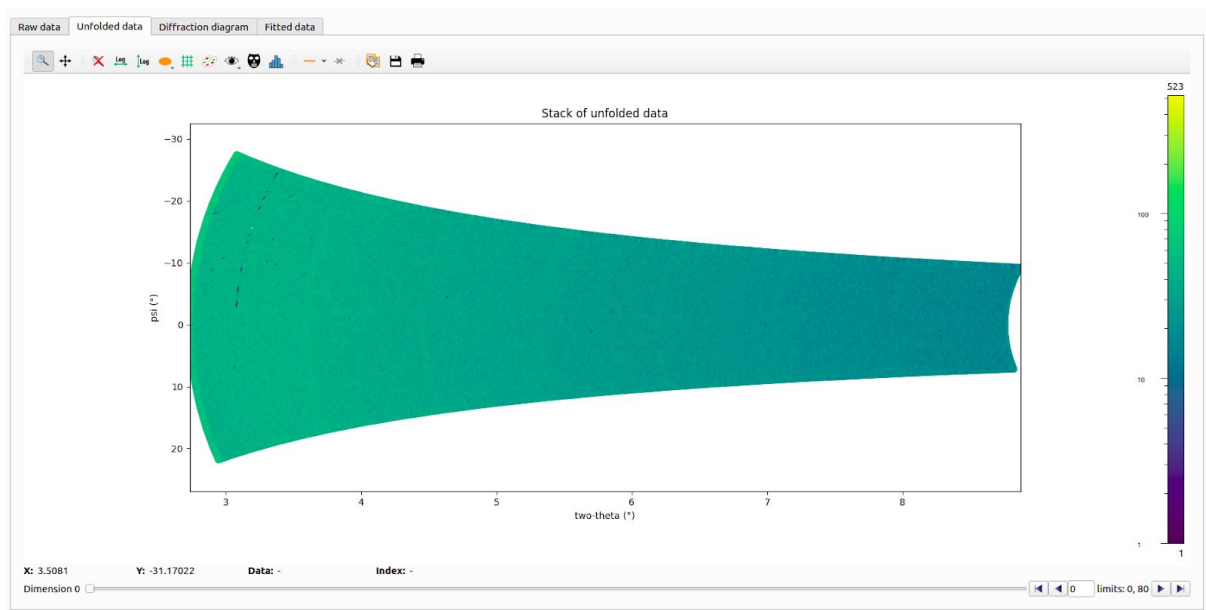


Quatre nouveaux onglets secondaires vous sont alors proposés.

Le premier, “raw data” vous permet de vérifier que le fichier des images brutes que vous avez chargé est bien le bon. Vous pouvez visualiser toutes les images du fichier dans leur forme brute :



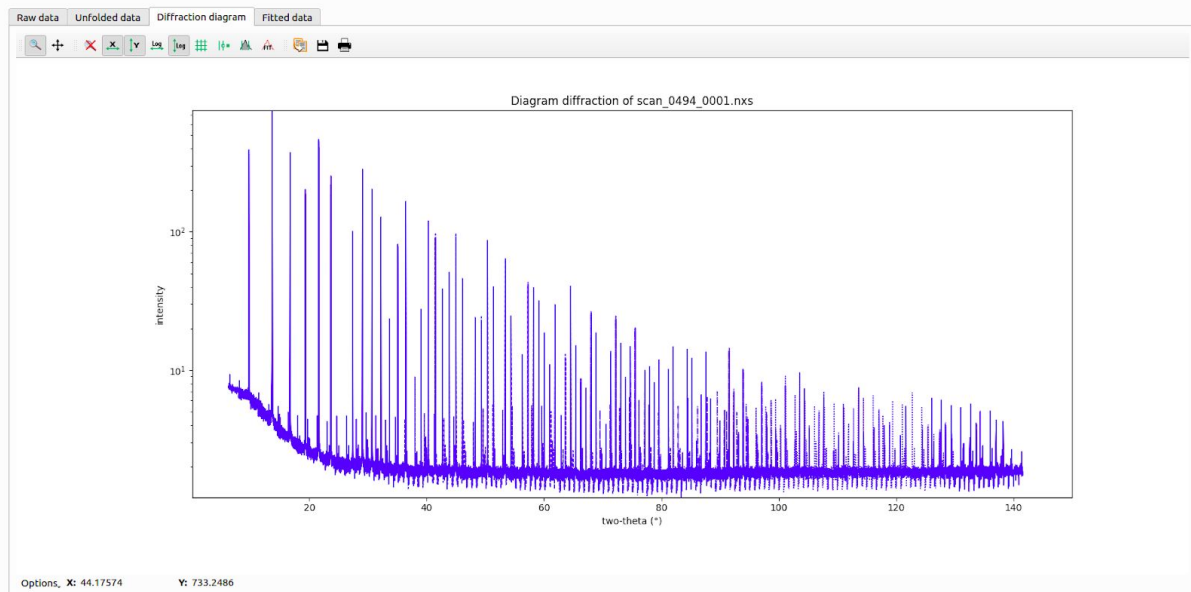
Le second, “unfolded data” pour données dépliées, va vous permettre de visualiser les images après correction (géométrique) et traitement. Les images issues sont affichées en angles, c’est-à-dire PSI en fonction de TWO TETHA :



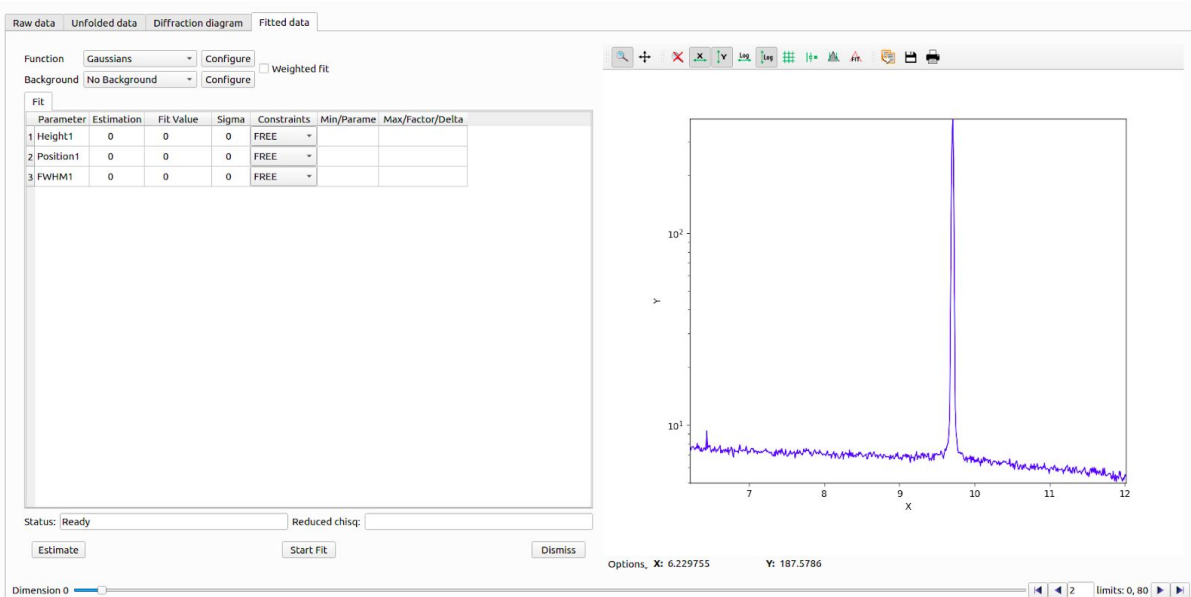
TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

Comme pour “raw data”, vous pouvez naviguer entre les différentes images du fichier (s’il y en a plus d’une) à l’aide du slider en dessous des images, où des flèches à droite du slider.

Le troisième onglet “diagram” va détenir l’intégration de toutes les images (après correction et déploiement) qui nous donne le diagramme de diffraction, avec les pics caractérisant :



Le dernier onglet va vous permettre de “fitter” les données, pic par pic, ou plutôt image par image :



Ici, l’intérêt est de choisir la fonction que l’on souhaite utiliser pour “fitter” les données en haut à gauche (gaussienne, laurentzienne, etc...), de choisir s’il y a un background ou non. Puis de choisir l’image que l’on veut intégrer à l’aide du slider tout en bas.

TUTORIEL LOGICIEL DIFFABS

Enfin, il faudra alors cliquer sur “Estimate”, puis sur “Start fit” pour voir apparaître la courbe résultat qui utilise les paramètres trouvés (Largeur à mis hauteur, hauteur, etc...) par le logiciel lorsque vous avez cliqué sur “Estimate”.