



GYMNÁZIUM, PRAHA 6, ARABSKÁ 14

PŘEDMĚT PROGRAMOVÁNÍ, VYUČUJÍCÍ DANIEL KAHOUN

Rheed

Ročníkový projekt

Marek Bílý,
Jan Schreiber,
Marek Švec
3.E

březen 2025

Prohlášení

Prohlašujeme, že jsme jedinými autory tohoto projektu, všechny citace jsou řádně označené a všechna použitá literatura a další zdroje jsou v práci uvedeny.

Tímto dle zákona 121/2000 Sb. (tzv. Autorský zákon) ve znění pozdějších předpisů udělujeme bezúplatně škole Gymnázium, Praha 6, Arabská 14 oprávnění k výkonu práva na rozmnožování díla (§ 13) a práva na sdělování díla veřejnosti (§ 18) na dobu časově neomezenou a bez omezení územního rozsahu.

Podpis autora: _____

Datum: _____

Obsah

Prohlášení	2
1 Úvod	5
1.1 Zadání práce	5
1.2 Použité technologie	5
1.3 Cíl práce	5
2 Teorie??	6
3 Aplikace Rheed a její struktura	6
3.1 Kamera	6
3.1.1 Ovladače kamery	6
3.1.2 Ukládání a analýza snímků	7
3.1.3 Zpracování obrazu	8
3.2 ROI a jejich správa	8
3.2.1 Ovládací panel	9
4 BORDEL CO JSEM NAPSAL A NÁSLEDNĚ JSEM HO NAPSAL PODOBNĚ V JINÝ KAPITOLE - PO PŘEČTENÍ CELKU VLOŽIT NEBO SMAZAT	9
5 Závěr	10
6 Zdroje	10

Anotace

Název práce: Rheed

autoři: Marek Bílý, Jan Schreiber, Marek Švec

Title: Rheed

authors: Marek Bílý, Jan Schreiber, Marek Švec

Titel: Rheed

autoren: Marek Bílý, Jan Schreiber, Marek Švec

1 Úvod

RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction) je metoda povrchové analýzy krystalických materiálů. Je zde využíván vysokoenergetický elektronový paprsek, který pod velmi malým úhlem dopadá na krystalickou strukturu zkoumaného materiálu. Elektrony se následně odrážejí od atomů na povrchu a vytvářejí tzv. difrakční vzor. Ten obsahuje potřebné informace o vzorku.

RHEED se skládá ze tří hlavních komponent: zdroje elektronového paprsku, vzorku a detekčního systému. Zdroj elektronového paprsku, někdy nazývaný elektronový kanón, je zodpovědný za generování vysokoenergetického svazku přesně zaměřeného na povrch krystalového vzorku. Vzorek je umístěn v ultravysokém vakuu tak, aby s ním bylo možné nadálku manipulovat a otáčet pro získávání informací z více stran. Detekční systém má za úkol zachycovat difrakční vzor vzniklý rozptýlením elektronů po střetu s atomy vzorku. Nejběžnějšími nástroji zde slouží fluorescenční obrazovka, na kterou dopadají zmíněné elektrony, a CCP (charge-coupled device) kamera, která obraz zaznamenává. K analýze sebraných dat nakonec slouží softwarový program, jehož vytvoření je cílem naší práce.

1.1 Zadání práce

Aplikace bude sloužit jako lepší alternativa stávající, z části nefunkční, aplikace v C#. Vývoj bude obsahovat jak hardware interfacing s CCD detektorem, návrh a realizaci GUI, práci s obrazovými daty (integrace snímků), vizualizaci real-time a analýzu real-time obrazových dat, ukládání starších měřených dat do databáze pro další výzkum atd. Aplikace bude implementovat in-situ měřící metodu RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction) využívající difrakci vysokoenergetických elektronů při odrazu od povrchu. Zpracování dat z této metody bude sloužit k charakterizaci celého procesu a spolehlivější predikci výsledku růstu ještě před jeho dokončením. Výsledný program bude využit na vědeckých pracovištích Fyzikálního ústavu AV ČR a to na oddělení spintroniky a kvantových materiálů Dr. Jungwirtha a ve výzkumné skupině Dr. Tima Verhagena zabývající se přípravou sandwichových materiálů s feroelektrickými vlastnostmi.

1.2 Použité technologie

1.3 Cíl práce

Cílem naší ročníkové práce je vytvořit software pro analýzu a vizualizaci obrazových dat z in-situ měření RHEED během růstu monoatomárních vrstev pomocí technologie MBE. Tato aplikace má být schopná pracovat jak s obrázky nebo videy, tak i s živým přenosem. Aplikace má za cíl být co nejpraktičtější nástrojem profesionálů pracujících s technologií RHEED.

2 Teorie??

3 Aplikace Rheed a její struktura

3.1 Kamera

Pro snímání difrakčních vzorků jsme využili kameru **Player One Saturn-C**. Kamera disponuje CMOS snímačem s rozlišením 3856 x 2180 pixelů a velikostí pixelu 3.45 μm . To jí umožňuje detekovat i velmi malé detaily, nezbytný předpoklad při analýze difrakčních struktur. Dále má široký dynamický rozsah, tudíž není problém jak s intenzivními, tak slabými světelnými signály. Zároveň se zde nachází i optimalizovaná citlivost ve viditelném i blízkém infračerveném světle. Vysokorychlostní přenos dat zajišťuje rozhraní USB 3.0. To je důležité zejména pro sledování vzorku v reálném čase, znamená to žádné prodlevy a tudíž menší riziko zkažení vzorku. Výstup se zde nachází dvánáctibitový, tedy každý pixel je schopen zaznamenat až 4096 odstínů intenzity světla. Naprosto klíčový předpoklad v prostředí, kde i minimální rozdíl v intenzitě může nést důležité informace o struktuře vzorku.

3.1.1 Ovladače kamery

Ovladače kamery jsou umístěny ve dvou souborech: "opencv_capture.py" a "playerone_driver.py". Ovladače jsou psány v jazyce Python a jsou rozděleny do dvou hlavních komponent: správu hardwarové inicializace a konfigurace kamery a systém pro snímání a ukládání obrazových dat ve formátu HDF5.

Prvním krokem při práci s kamerou je její inicializace a konfigurace. Implementovaná třída `PlayerOneCamera` zajišťuje detekci a otevření připojené kamery, její inicializaci a nastavení parametrů snímání. Proces začíná voláním metody `initialize_camera()`, která vyhledá dostupné zařízení, získá jeho ID a následně provede jeho otevření a inicializaci. Po otevření kamery je nutné nastavit její parametry. To zajišťuje metoda `_configure_camera()`, která se stará o nastavení formátu obrazu, rozlišení, expozičního času, zisku (gain), barevného vyvážení a třídění (binning). Konfigurace je prováděna postupným voláním konfiguračních metod, které jsou organizovány v seznamu operací.

Kromě základního nastavení expozičních parametrů ovladač umožňuje řízení režimu expozice, zásadní pro přizpůsobení podmínek snímání. Kamera podporuje manuální nastavení expozičního času a automatickou regulaci citlivosti, což umožňuje přizpůsobit se jak nízkointenzitním, tak velmi jasným difrakčním vzorům. Samotné snímání je realizováno metodou `capture_image()`, která provede zahájení expozice, kontrolu jejího dokončení a načtení obrazových dat do struktury `numpy.ndarray`. Obraz je před návratem převeden do 16bitového formátu, umožňujícího zachovat vysokou přesnost zaznamenaných intenzit.

Pro zachování konzistence a správu dlouhých záznamů byl vyvinut modul pro ukládání snímků do souboru ve formátu HDF5, který umožňuje efektivní manipulaci s velkými objemy dat. Tato část je implementována ve třídě `CameraInit`, která kombinuje funkce pro inicializaci záznamu a postupné rozšiřování datasetu. Po spuštění aplikace je vytvořen HDF5 soubor, jehož název odpovídá aktuálnímu datu a času. Soubory jsou ukládány do k tomu určené složky `cacheimg`, zajišťující, že jednotlivé experimentální běhy jsou přehledně odděleny.

Každý nový snímek je nejprve převeden do odstínů šedi a následně může být na žádost uživatele normalizován do formátu s dvojitou přesností (float64), tím je umožněna pozdější analýza bez ztráty detailů. Snímky jsou ukládány do předem alokovaného datasetu, přičemž pokud dojde k jeho naplnění, je dataset automaticky rozšířen o dalších 1000 snímků. Pro delší záznamy je implementována metoda `capture_video()`, která umožňuje kontinuální ukládání snímků po definovanou dobu. Využívá při tom přímý zápis do souboru, čímž snižuje paměťové nároky na běhový systém. Ukládaná data jsou kompatibilní s vizualizačními a analytickými nástroji využívajícími knihovnu Silx, čímž usnadňuje následnou interpretaci výsledků.

Aby byla zajištěna stabilita aplikace a prevence úniku paměti, obsahuje ovladač mechanismus pro správu zdrojů. Metoda `close_camera()` uzavírá připojení ke kameře, zatímco metoda `cleanup()` zajišťuje uzavření HDF5 souboru a uvolnění všech alokovaných prostředků. Tento přístup umožňuje opakované použití kamery v rámci jednoho experimentu bez nutnosti restartování systému.

3.1.2 Ukládání a analýza snímků

Ukládání a následná analýza difrakčních snímků jsou důležitými aspekty při zpracování dat. Pro efektivní správu a organizaci velkého množství získaných obrazových dat využíváme formát HDF5 (Hierarchical Data Format version 5), který umožňuje strukturované ukládání dat s možností rozšiřování a optimalizace výkonu při čtení a zápisu. Veškeré snímky pořízené kamerou Player One Saturn-C jsou ukládány v binárním formátu s vysokou přesností, umožňující jejich následnou analýzu a vizualizaci v interaktivním prostředí aplikace.

Při inicializaci kamery se vytvoří nový soubor ve formátu HDF5, který slouží jako sklad pro všechny snímky pořízené v rámci jedné relace. Každý soubor je uložen ve složce `cacheimg`, přičemž jeho název je generován dynamicky podle aktuálního data a času, aby bylo možné snímky jednoznačně identifikovat. Vytvořený dataset `arrays` je předalokován s definovanou počáteční kapacitou, čímž se minimalizuje latence při zápisu nových snímků. Díky funkci rozšiřitelnosti datasetu je možné dynamicky alokovat další paměť v případě, že počet uložených snímků překročí původní alokaci. Tento proces probíhá automaticky a při dosažení limitu se dataset rozšíří o 1000 snímků.

Každý snímek je před uložením převáděn do stupňů šedi a volitelně může být normalizován s vysokou přesností pomocí 64bitových hodnot. Tento přístup je klíčový pro zachování detailů v intenzitě difrakčních vzorků, které by mohly být při běžném 8bitovém nebo 16bitovém ukládání ztraceny. Uložené snímky lze následně číst a zpracovávat v rámci dalších analýz, aniž by došlo ke snížení kvality záznamu. Vizualizace snímků probíhá v interaktivním grafickém prostředí s možností výběru konkrétních oblastí zájmu, více v kapitole ROI a jejich správa. Pro zajištění plynulé vizualizace a analýzy je veškeré zpracování snímků realizováno v samostatném vláknu, které neblokuje hlavní běh aplikace. Díky tomu je možné sledovat změny v datech bez jakýchkoliv prodlev. Celý proces podporuje automatickou aktualizaci, přičemž uživatel může volit mezi manuálním a automatickým režimem, který průběžně zpracovává nové snímky.

Tento systém umožňuje nejen efektivní ukládání velkého objemu obrazových dat, ale také jejich pokročilou analýzu s využitím interaktivních nástrojů. Kombinace rychlého ukládání, dynamického rozšiřování datasetu a real-time vizualizace poskytuje uživateli výkonný nástroj pro studium difrakčních vzorků s vysokou přesností a flexibilitou.

3.1.3 Zpracování obrazu

V rámci vývoje softwaru pro analýzu RHEED snímků bylo nutné zajistit efektivní zpracování obrazu v reálném čase a jeho vizualizaci. K tomu je využita kombinace OpenCV pro získávání a předzpracování snímků a knihovny Silx pro jejich vykreslování. Důležitým prvkem je implementace Silx Plot2D s využitím OpenGL akcelerace, která umožňuje práci s obrazovými daty i při vysokém objemu snímků. To umožňuje uživateli provádět analýzu snímků bez výrazné latence.

Proces začíná snímáním obrazu pomocí kamery, přičemž data jsou získávána přes OpenCV a jak bylo zmíněno výše, jsou ihned převedena do odstínů šedi. Převod do monochromatické formy snižuje datovou náročnost a zjednodušuje další zpracování, především při analýze intenzity difrakčních vzorů. Pro zachování maximální přesnosti je obraz ukládán v 64bitové velikosti, čímž se minimalizují chyby způsobené konverzí. V této fázi může být prováděna také normalizace obrazu, což umožňuje optimalizaci kontrastu snímků. Po získání a úpravě obrazu je snímek odeslán do Silx Plot2D, který slouží jako vizualizační nástroj pro zobrazení jednotlivých snímků a dat. Zásadní výhodou tohoto řešení je využití OpenGL backendu, což umožňuje hardwarově akcelerované vykreslování. OpenGL významně snižuje nároky na procesor a umožňuje manipulaci se snímky i při vysokém objemu dat.

Pro plynulé zobrazení snímků je implementována vláknová správa aktualizace obrazu, která umožňuje přenos dat mezi OpenCV a Silx Plot2D. Tento přístup zajišťuje, že nově získané snímky jsou ihned přidány do vykreslovacího okna bez nutnosti pozastavení běhu aplikace. Snímky jsou přidávány pomocí asynchronních volání, aby GUI aplikace zůstalo responzivní i při dlouhodobém záznamu. Tím je zajištěno, že všechny vykreslovací operace jsou prováděny na GPU, čímž se významně snižuje zatížení CPU a umožňuje práci i při zobrazení několika snímků najednou. Díky tomu je možné nejen zobrazovat jednotlivé snímky, ale i provádět časovou analýzu sekvenčních dat, což je klíčové pro sledování dynamických změn v difrakčních vzorech.

3.2 ROI a jejich správa

ROI slouží k cílenému vyhodnocování intenzity signálu v konkrétních částech snímku, tím umožňuje izolovat klíčové detaily pro další zpracování. ROI jsou základním nástrojem pro kvantitativní analýzu. Každá ROI je spravována prostřednictvím ROI manažeru, který zajišťuje jejich evidenci a propojení s analytickými funkcemi. Po přidání je automaticky registrována do systému a propojena s nástrojem ROI Stats Widget, který umožňuje výpočet a vizualizaci statistik souvisejících s danou oblastí. Statistické hodnoty zahrnují například průměrnou intenzitu signálu.

Proces přidávání oblastí zájmu je umožněn prostřednictvím interaktivního uživatelského rozhraní. Uživatel má možnost manuálně definovat oblast na snímku pomocí myši a následně ji přizpůsobit podle požadavků analýzy. Po výběru ROI se její data okamžitě zapisují do interního systému aplikace. Každá ROI může být individuálně konfigurována, nebo-li uživatel může upravit její velikost, tvar a přesnou polohu ve snímku.

Aplikace podporuje různé tvary, mezi které patří obdélníkové, eliptické a volně definované, což poskytuje vysokou flexibilitu při analýze. Každá přidaná oblast je evidována ve správci ROI, kde

je možné ji přejmenovat, duplikovat, nebo odstranit, čímž se usnadňuje organizace a porovnávání různých částí snímku.

Díky automatickému režimu aktualizace je jakákoli změna ROI okamžitě reflektována ve výpočtech a vizualizaci dat. Pokud uživatel preferuje manuální režim, je možné aktualizaci řídit pomocí ručně spouštěných výpočtů pro lepší kontrolu nad vyhodnocením výsledků. Všechny změny ROI jsou uchovávány po dobu analýzy a lze je dynamicky měnit podle potřeby.

3.2.1 Ovládací panel

Správa ROI je dále usnadněna ovládacím panelem (ROI Toolbar), který obsahuje sadu ovládacích prvků pro rychlé zacházení. Tato lišta je umístěna v uživatelském rozhraní aplikace a umožňuje intuitivní interakci s analytickými funkcemi.

Každé tlačítko v nástrojové liště odpovídá specifické akci související s manipulací s ROI. Základní funkcionalitou je volba typu oblasti zájmu, to uživateli umožňuje definovat konkrétní oblast analýzy. K dispozici jsou nástroje pro přidání obdélníkových, kruhových nebo vlastnoručně nakreslených ROI. Po aktivaci režimu přidávání ROI uživatel jednoduše vybere oblast v rámci zobrazeného snímku, přičemž její parametry se ihned zobrazí v přehledné tabulce. Pomocí dalších nástrojů v liště lze oblast posouvat, upravovat její velikost, měnit její tvar či otáčet, což zajišťuje maximální flexibilitu při práci. Veškeré změny jsou ihned reflektovány v propojeném statistickém modulu, který umožňuje dynamickou analýzu dat.

Další důležitou funkcí nástrojové lišty je možnost zobrazení nebo skrytí jednotlivých ROI. To umožňuje provádět srovnávací analýzu mezi různými částmi snímku a identifikovat klíčové rozdíly. Pokud uživatel potřebuje pracovat pouze s vybranými ROI, může jednoduše skrýt ostatní oblasti, čímž se usnadní jejich vyhodnocení.

Systém je navržen tak, aby podporoval víceúrovňovou práci s ROI, čili že uživatel může zároveň spravovat několik ROI a analyzovat jejich vzájemné vztahy. Všechny akce v rámci ovládacího panelu jsou synchronizovány s vizualizačním modulem, uživatel má tedy neustálý přehled o tom, jaké oblasti jsou aktivní a jaké parametry jsou vyhodnocovány.

Díky kombinaci interaktivního výběru ROI, pokročilé správy v ovládacím panelu a propojení se statistickým modulem poskytuje aplikace efektivní nástroje pro analýzu difrakčních snímků. Tímto způsobem je možné přesně vyhodnotit rozložení intenzity signálu a získat důležité informace o struktuře analyzovaných vzorků.

4 BORDEL CO JSEM NAPSAL A NÁSLEDNĚ JSEM HO NAPSAL PODOBNĚ V JINÝ KAPITOLE - PO PŘEČTENÍ CELKU VLOŽIT NEBO SMAZAT

Hlavním prvkem interaktivního prostředí je okno vizualizace, které obsahuje nástroje pro správu oblastí zájmu a výpočet souvisejících statistik. Výběr ROI je umožněn prostřednictvím intuitiv-

ního uživatelského rozhraní, kde lze jednotlivé oblasti vytvářet, upravovat a porovnávat. Veškeré vybrané oblasti jsou následně spravovány prostřednictvím specializovaného ROI manageru, který se stará o jejich evidenci a propojení s výpočetními funkcemi. Statistické parametry, např. průměrná intenzita signálu, jsou zobrazovány v přehledné tabulce a umožňují okamžitou interpretaci výsledků.

5 Závěr

6 Zdroje