

P10-2026-33

А. С. Кирилов *

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ СИСТЕМ ПРОГРАММНОГО
ОБЕСПЕЧЕНИЯ В НЕЙТРОННЫХ ЦЕНТРАХ

Направлено в журнал «ЭЧАЯ»

* E-mail: akirilov@jinr.ru

Кирилов А. С.

P10-2026-33

Тенденции развития систем программного обеспечения в нейтронных центрах

Тенденции развития систем программного обеспечения (ПО) в нейтронных центрах, начиная с конца прошлого столетия, можно проследить по материалам рабочих совещаний сообщества NOBUGS (New Opportunities for Better User Group Software). Их основной целью является развитие сотрудничества между учеными и IT-специалистами, работающими над ПО для рентгеновских, нейтронных и мюонных источников, для сбора и анализа данных, выработки общих подходов к его возможной унификации.

В работе выделены ключевые особенности или этапы унификации ПО. Процесс унификации позволил сформулировать структуру ПО и успешно реализовать ее. Системы в нейтронных центрах, таких как ESS, PSI, ISIS и др., состоят из конфигурируемых управляемых компонентов, обеспечивающих все этапы от подачи пользователем заявки на эксперимент до оформления его результатов и получения DOI, а сам процесс измерения организован как производственный. Следует отметить, что в настоящее время особое значение придается соблюдению принципов FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) в рамках концепции Open Science.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2026

Kirilov A. S.

P10-2026-33

Trends in the Development of Software Systems at Neutron Centers

The development trends of software systems at neutron centers since the late 20th century can be traced through the proceedings of the NOBUGS (New Opportunities for Better User Group Software) workshop. Its main goal is to foster collaboration between scientists and IT professionals working on software for X-ray, neutron, and muon sources for data acquisition and analysis, as well as to develop common approaches toward its potential standardization.

In the work the key points or stages of software standardization can be identified. The standardization process made it possible to define the software architecture and implement it successfully. Systems at neutron centers such as ESS, PSI, ISIS, and others consist of configurable, manageable components that support all stages of the measurement process — from user proposal submission to data processing and DOI assignment — with the measurement itself organized like an industrial workflow. It should be noted that special attention is currently paid to adhering to the FAIR principles (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) within the framework of the Open Science concept.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2026

ВВЕДЕНИЕ

Тенденции развития систем программного обеспечения (ПО) нейтронных установок, начиная со второй половины 90-х годов прошлого столетия, можно проследить по материалам рабочих совещаний группы NOBUGS (New Opportunities for Better User Group Software) [1], начало которым было положено в 1996 г. в Гренобле по инициативе специалистов из ESRF и ILL и которые с тех пор проводятся регулярно каждые два-три года. Их основным направлением стало развитие сотрудничества между учеными и IT-специалистами, работающими над ПО для рентгеновских, нейтронных и мюонных источников, для сбора и анализа данных, выработка общих подходов к его возможной унификации. На момент подготовки этой статьи последнее совещание состоялось в Гренобле в 2024 г. [2].

Если тематика первых совещаний преимущественно включала управление измерительной установкой (beamline control), форматы сохранения данных, программы визуализации и анализа и т. д., то в последнее время к ним добавились организация механизма рабочих процессов (workflow engine), соответствие принципам FAIR (FAIR data management), использование средств искусственного интеллекта (AI) и машинного обучения (ML). Сравнение тематики первой и последних конференций приведено в таблице. Новые темы выделены курсивом, в скобках приведено количество докладов по указанной теме.

Тематика конференций NOBUGS 1997, 2022 и 2024 гг.

1997 Program Themes	2022 Program Themes	2024 Conference Topics
<ul style="list-style-type: none"> • Data acquisition systems • Beamline control systems 	<ul style="list-style-type: none"> • Data acquisition systems • <i>Data Streaming</i> • User interfaces 	<ul style="list-style-type: none"> • Advanced data acquisition (4) • Beamline control systems (27) • <i>Experiments automation (12)</i>
<ul style="list-style-type: none"> • Data Analysis • Data Formats • Simulation • Data visualisation 	<ul style="list-style-type: none"> • Data reduction • Data catalogs/ Electronic Notebooks 	<ul style="list-style-type: none"> • Data Analysis (13) • Data Reduction (19) • <i>FAIR data management (18)</i> • <i>Metadata + Data Formats (6 + 2)</i> • Data Visualisation (1)
	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Workflow Engines & Tools</i> 	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Workflow engines (6)</i> • <i>AI/ML applications (6)</i>
<ul style="list-style-type: none"> • Web interface • User interface 	<ul style="list-style-type: none"> • Web Tools 	<ul style="list-style-type: none"> • Remote user interfaces (9)
	<ul style="list-style-type: none"> • Other Relevant Topics • Use of (commercial) Cloud Systems 	<ul style="list-style-type: none"> • Software Engineering Research (4) • Open source collaborations (4)

Рассматривая унификацию ПО как процесс, на взгляд автора, следует выделить ключевые особенности или этапы, хотя они не всегда происходили в строго хронологическом порядке:

- унификация систем управления установками;
- организация потоковой передачи данных и службы доставки;
- выбор форматов данных;
- разработка программ визуализации и обработки данных;
- хранение результатов и регистрация измерений;
- применение систем AI +ML элементов;
- организация конвейера измерений (workflow engine).

Рассмотрим эти компоненты и соответствующее ПО подробнее.

УНИФИКАЦИЯ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ УСТАНОВКАМИ

Хотя тема управления установками (beamline control) по-прежнему привлекает большое внимание профессионального сообщества, за прошедшие годы среди подобных систем выделились два явных лидера — Experimental Physics and Industrial Control System (EPICS) [3] и TACO New Generation (Tango) [4]. Несмотря на различия, обе системы имеют много общего. Это распределенные кроссплатформенные системы, в которых управление устройствами организовано через отдельные серверы по унифицированному протоколу. В обеих системах важную роль играют конфигурирование и так называемая база данных. В обеих системах реализовано управление через командную строку, скрипт и графический интерфейс (GUI).

В настоящее время эти и им подобные системы занимают нижний уровень в общей иерархии ПО, причем применение виртуализации устройств, подобной библиотеке `orhyd async` [5], позволяет использовать любую из них. `Orhyd-async` — это уровень аппаратной абстракции. Он предоставляет набор инструментов на языке Python, позволяющих основному программному обеспечению взаимодействовать с лабораторным оборудованием (таким как двигатели, детекторы и камеры) и управлять им, не зная специфических деталей каждого элемента оборудования.

ПОТОВОКОВАЯ ПЕРЕДАЧА ДАННЫХ И СЛУЖБА ДОСТАВКИ

Переход на работу с исходными данными в виде списка событий (event mode) при использовании времяпролетной методики потребовал организации конвейера для гарантированной без потерь передачи данных (streaming). С этой целью в структуру ПО была добавлена служба доставки для потоковой передачи сообщений от источников (DAQ контроллеры и проч., они называются «издателями») к потребителям — «подписчикам» (программам обработки, онлайн-визуализации, репозиториям и т. д.).

В качестве примера рассмотрим схему конвейера, принятого в Data Management & Scientific Computing center (DMSC) ESS (рис. 1) [6, 7]. Сбор данных в режиме событий создает поток пар (идентификатор пикселя,

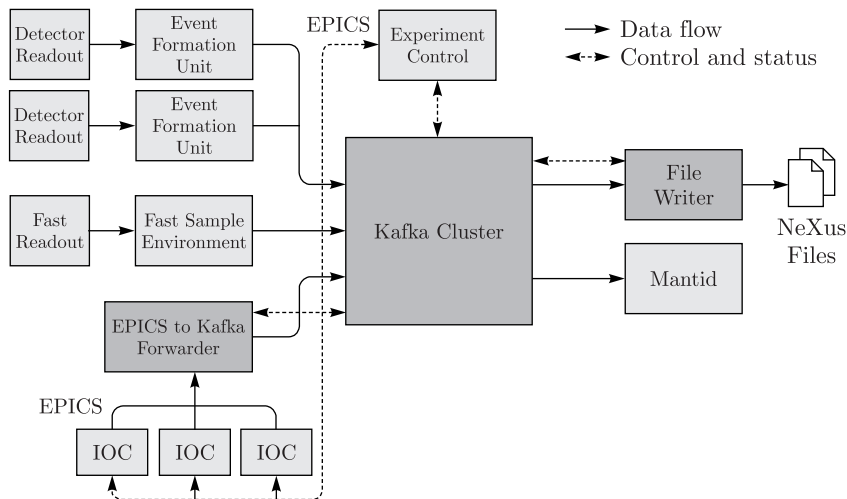


Рис. 1. Организация конвейера передачи данных в виде event-mode в ESS

временная метка), которые впоследствии обрабатываются другими приложениями и объединяются с метаданными. Источниками данных, изображенными на этой диаграмме, являются блоки формирования событий (Event Formation Unit), среда быстрой выборки (Fast Sample Environment), которая отправляет данные событий из систем быстрого считывания, таких как переменные электрические и магнитные поля, и «пересыльщик» (EPICS в Kafka), отправляющий метаданные эксперимента из IOC EPICS. Подписчиками этих данных являются File Writer, формирующий файлы в формате NeXus [8, 9], и приложение Mantid [10], выполняющее в реальном времени предварительную обработку данных для онлайн-визуализации. Потоки данных передаются через кластер брокера Apache Kafka [11], который помимо передачи данных используется для отправки и получения управляющих и статусных сообщений.

Выбор подобной архитектуры, основанной на агрегации и потоковой передаче, в которой издатели данных напрямую не связаны с каждым подписчиком, позволяет разделить эти категории и масштабировать их отдельно. Этот подход был предварительно опробован в ISIS, и его предполагается использовать в PSI.

Более полно роль службы доставки, принятой в ПО ESS, рассмотрена далее в «Workflow engine и экосистема».

ФОРМАТЫ ДАННЫХ

Работа над выбором форматов для возможности обмена исходными данными, а также для организации сотрудничества в разработке программ обработки и анализа данных началась с первых конференций.

В настоящее время среди используемых стандартом де-факто является формат NeXus [8, 9]. Этот проект, реализованный как спецификация HDF5 (Hierarchical Data Format version 5) [12], включает библиотеку и модель для хранения и управления большими объемами сложных научных данных. Согласно концепции NeXus, каждый файл с данными должен содержать исчерпывающую информацию для их интерпретации, что соответствует принципам FAIR data (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable). Помимо «сырых» (raw) данных в файле можно помещать и данные, полученные в результате обработки. NeXus применяется в большинстве центров, а существующие программы обработки, как правило, содержат его конвертеры.

ПРОГРАММЫ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ

Унификация форматов данных, в свою очередь, дала возможность организации сотрудничества в области программ для визуализации и обработки данных для работы как в ручном, так и в автоматическом режиме.

Среди них особое место занимает проект Mantid [10]. Он был инициирован в ISIS в 2007 г. с целью обеспечения преемственности в разработке программного обеспечения для обработки и анализа данных в форме списка событий (event_mode) [13]. Mantid включает библиотеку на языке Python, предоставляющую пользовательские алгоритмы для обработки данных, универсальный GUI (MantidWorkbench) для визуализации «сырых» и обработанных данных, редактор сценариев обработки и их запуск и т. д. Для подключения новой установки к Mantid достаточно составить описание ее геометрии и формата «сырых» данных, если он уникален. На сайте проекта находится подробный демонстрационный курс, а также примеры данных и описание геометрии для целого ряда спектрометров.

Для иллюстрации возможностей Mantid на рис. 2 приведено трехмерное представление спектрометра MARI в ISIS [13]. Компоненты, не являющиеся детекторами (например, прерыватели, направляющие), можно включать и выключать. Цвет детекторов соответствует общему количеству интегрированных отсчетов. В дополнение к трехмерному изображению доступны различные двухмерные проекции детекторов (например, сферическая вдоль оси x , цилиндрическая вдоль оси y). Режим просмотра прибора обеспечивает быстрый доступ к информации о детекторах и предоставляет простой графический интерфейс для маскирования, группировки и просмотра спектров.

Во многих центрах популярна интерактивная веб-среда для разработки кода и анализа данных Jupyter (Notebook/Lab) [14]. Ее гибкий интерфейс позволяет пользователям настраивать и организовывать рабочие процессы в области анализа данных, научных вычислений и машинного обучения. Модульная конструкция допускает расширение функциональности за счет дополнительных компонентов, в том числе таких, как Mantid.

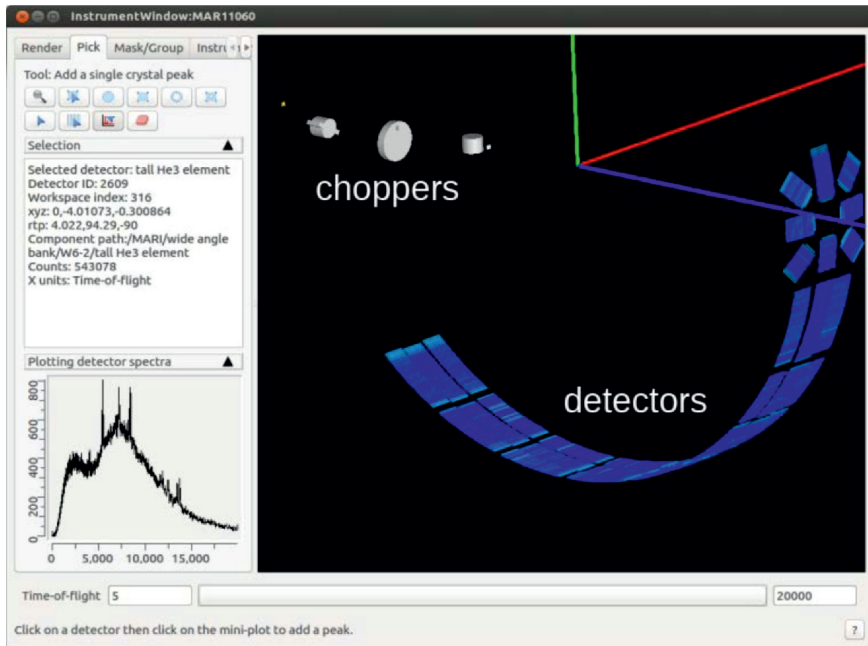


Рис. 2. Представление спектрометра MARI в ISIS в трехмерном режиме с помощью MANTID

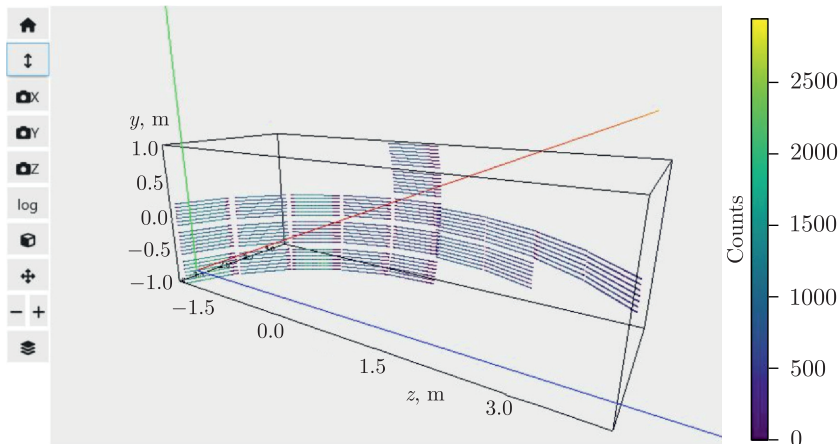


Рис. 3. Представление данных с детектора в трехмерном режиме с помощью scipp

Другим модулем может служить библиотека scipp (Scientific C++ and Python) [15, 16]. Ее основная идея состоит в предоставлении средств, которые одинаково хорошо работают как в Python для анализа и визуализации,

так и на этапах сбора в C++ для скоростных вычислений и обработки данных.

По аналогии с предыдущим примером на рис. 3 изображено представление данных с детектора, построенное с помощью `scipp`. Как и в `Mantid`, его можно использовать для быстрого просмотра количества нейтронов на панелях детектора в трехмерном пространстве или с помощью различных цилиндрических и сферических проекций.

Отмечено, что `scipp` обеспечивает современный и интуитивно понятный способ работы с научными данными в блокнотах `Jupyter`.

РЕПОЗИТОРИИ И РЕГИСТРАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЙ

Современный подход к построению репозитория и регистрации данных для нейтронных исследований кардинально отличается от подходов прошлого. Если раньше данные часто были «привязаны» к конкретному прибору или исследовательской группе, то сегодня ключевым принципом является создание единого, взаимосвязанного и пригодного для машинного анализа пространства данных на основе FAIR-принципов. Репозиторий интегрирован в единый жизненный цикл эксперимента, включающий все этапы, начиная от планирования эксперимента и подачи заявки до обработки, анализа и публикации результатов.

Среди современных проектов репозитория следует отметить ICAT [17, 18], а также SciCat [19].

ICAT (Integrating Catalogue) используется в ISIS и HZB. Подход реализует классическую реляционную модель со схемой, обеспечивающей целостность данных (`MariaDB/MySQL`, `Oracle`). Данные строго структурированы: существует четкая иерархия (исследование → набор данных → файл), и объекты не могут существовать вне своих родительских сущностей. Это обеспечивает целостность данных, но может требовать более сложной настройки под нестандартные типы данных.

Ключевым преимуществом SciCat является архитектура, спроектированная для работы с разнородными данными, легкой интеграции и масштабирования. SciCat — это центральный портал, в котором пользователь может найти все свои данные («сырые» и обработанные). Кроме того, например, в ESS это важнейший элемент инфраструктуры, который организует общую работу всех «подписанных» сервисов по работе с данными, поскольку каждое действие пользователя, начиная с заявки на эксперимент, отмечается в SciCat, что, в свою очередь, побуждает эти сервисы к действию. Например, таким образом можно включить в процесс сканирования онлайн-анализ текущих результатов с помощью средств AI/ML для его оптимизации. Помимо ESS, SciCat используется в PSI.

AI + ML ЭЛЕМЕНТЫ

Применение искусственного интеллекта (AI) и машинного обучения (ML) кардинально меняет подход к управлению нейтронными экспери-

ментами, переводя их из режима ручного управления в режим интеллектуальной автономии, и возможно на всех этапах подготовки и проведения эксперимента [20].

При подготовке задания на эксперимент ML помогает оптимально спланировать его.

Во время самого эксперимента AI может взять на себя функции оператора для оптимального выбора стратегии измерения. Например, в работе [21] рассмотрены схемы синхронного и асинхронного контура, включающие сбор данных, их онлайн-анализ на основе машинного обучения и управление ростом тонкой пленки с помощью обратной связи замкнутого контура. На основе предыдущих измерений устанавливается оценка времени достижения заданной толщины для остановки процесса роста.

WORKFLOW ENGINE И ЭКОСИСТЕМА

Экосистема — это совокупность всех участников, сервисов, программных продуктов, политик доступа и инфраструктуры, которые окружают эксперимент на протяжении всего его жизненного цикла. Примером экосистемы является Bluesky [22, 23] (BNL, APS, HZB).

Если экосистема призвана организовать поток экспериментов, то workflow engine [24] — это управляемый автомат для проведения отдельного эксперимента. Это программная среда, управляющая всем жизненным циклом эксперимента. Она позволяет формализовать и автоматизировать последовательность шагов (операций), необходимых

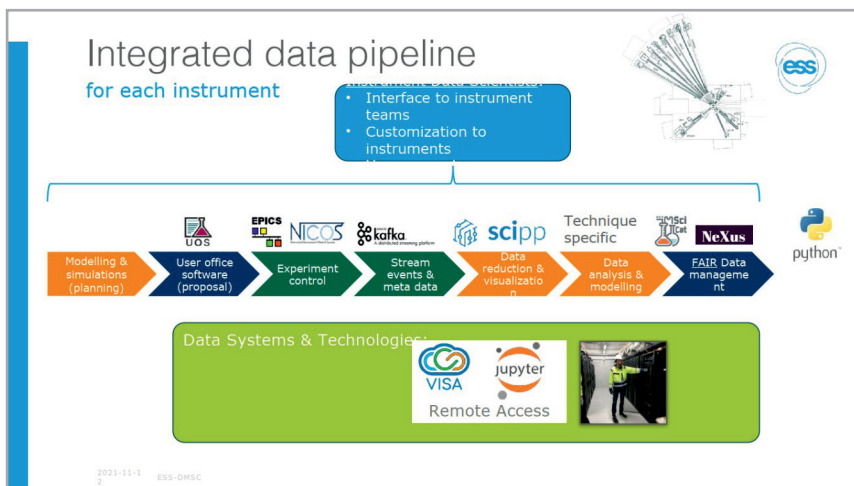


Рис. 4. Конвейер обработки данных в ESS. Каждая стрелка соответствует классу сервисов, необходимых для обработки экспериментальных данных. Программное обеспечение или фреймворки указаны над стрелками

для проведения эксперимента, сбора данных, их обработки и анализа на установке,

На рис. 4 представлена концепция поэтапной обработки информации в workflow engine DMSC ESS [6] от запуска и управления экспериментом до сбора данных, их анализа и архивирования.

После предварительного моделирования будущего эксперимента пользователь оформляет заявку на портале пользователя UOS. Запуск и управление экспериментом выполняются с помощью пользовательского интерфейса NICOS [25] в среде системы EPICS. Далее данные, включая метаданные, через службу доставки (см. «Потоковая передача данных и служба доставки») передаются потребителям, среди которых могут быть сервисы редукции, визуализации и анализа. В конечном счете все данные в формате NeXus сохраняются в репозитории. При этом на всех этапах обработки полученных данных можно задействовать обратную связь для изменения хода эксперимента, например, включить в процесс измерения предварительную обработку и оперативную визуализацию с помощью систем Scipp и Mantid. При необходимости внешний пользователь может оперативно в ходе эксперимента вести обработку данных с помощью сервиса VISA (Virtual Infrastructure for Scientific Analysis) [26] и системы Jupiter.

ВЫВОДЫ

Процесс унификации, объявленный целью NOBUGS, позволил сформулировать ряд решений, которые были постепенно успешно реализованы. Важно, что все этапы унификации взаимосвязаны и взаимно обусловлены. Сложно эффективно организовать workflow без унифицированных компонентов, не имея единого формата данных, в отсутствие возможности применения современных программ обработки и визуализации данных.

В настоящее время организация измерений в нейтронных центрах (ESS, PSI, ISIS и др.) напоминает «производственный» процесс. Современная система ПО состоит из конфигурируемых управляемых компонентов, обеспечивающих все этапы — от подачи пользователем заявки на эксперимент до оформления его результатов и получения DOI. Как правило, эти компоненты являются результатом коллективного творчества с открытым исходным кодом и подробно документированы.

В нейтронном, как и в фотонном, сообществе особое значение придается соблюдению принципов FAIR, полагая, что их внедрение и применение является «большим шагом к открытой науке» [27].

Автор благодарен коллегам за ценные замечания и проявленный интерес к работе, а В. И. Боднарчуку за ценные замечания при подготовке рукописи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-10-2025-153 от 5 июня 2025 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. <https://www.nobugsconference.org/>
2. <https://indico.esrf.fr/event/114/>
3. <https://epics-controls.org/>
4. <https://www.tango-controls.org/>
5. <https://blueskyproject.io/ophyd-async/v0.2.0/index.html>
6. https://indico.esrf.fr/event/114/contributions/763/attachments/588/1119/DMSC_NOBUGS_SMALL_2.pdf
7. *Mukai A. H. C. et al.* Architecture of the Data Aggregation and Streaming System for the European Spallation Source Neutron Instrument Suite // *J. Instrum.* 2018. V. 13, No. 10. P. T10001.
8. <https://www.nexusformat.org/>
9. *Könnecke M. et al.* The NeXus Data Format // *J. Appl. Crystallogr.* 2015. V. 48, No. 1. P. 301–305.
10. <https://www.mantidproject.org/>
11. <https://kafka.apache.org/>
12. <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>
13. *Arnold O. et al.* Mantid — Data Analysis and Visualization Package for Neutron Scattering and μ SR Experiments // *Nucl. Instrum. Meth. A.* 2014. V. 764. P. 156–166.
14. <https://jupyter.org/>
15. <https://scipp.github.io/>
16. <https://scipp.github.io/scippneutron/tutorials/powder-diffraction.html>
17. <https://icatproject.org/>
18. *Flannery D. et al.* ICAT: Integrating Data Infrastructure for Facilities Based Science // Fifth IEEE International Conference on e-Science. IEEE, 2009. P. 201–207.
19. <https://github.com/SciCatProject>
20. *Quinn P.* The State of AI/ML in Photon and Neutron Science. <https://indico.esrf.fr/event/114/contributions/780/>
21. *Pithan L. et al.* Closing the Loop: Autonomous Experiments Enabled by Machine-Learning-Based Online Data Analysis in Synchrotron Beamline Environments // *J. Synchrotron Radiat.* 2023. V. 30, No. 6. P. 1064–1075.
22. <https://blueskyproject.io/>
23. *Allan D., Caswell T., Campbell S., Rakitin M.* Bluesky's Ahead: A Multi-Facility Collaboration for an *a la Carte* Software Project for Data Acquisition and Management // *Synchrotron Radiat. News.* 2019. V. 32, No. 3. P. 19–22; DOI: 10.1080/08940886.2019.1608121.
24. <https://ewoks.esrf.fr/en/latest/>

25. <https://nicos-controls.org/>
26. <https://visa.ess.eu/login?returnUrl=%2Fhome>
27. *Murphy B. M. et al.* FAIR Data — The Photon and Neutron Communities Move Together Towards Open Science // *IUCrJ*. 2025. V. 12, No. 1. P. 8–15.

Получено 19 июня 2026 г.

Редактор *Е. В. Калининкова*

Подписано в печать 3.07.2026.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 0,81. Уч.-изд. л. 1,04. Тираж 105 экз. Заказ № 61335.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru
publish.jinr.ru