

E-QEGS Train Integration

UsersManual

目次

1. 更新履歴.....	1
2. 概要.....	1
3. 起動手順.....	2
4. 画面構成.....	4
5. Input / Output.....	5
5.1. 各項目	5
5.2. 設定ファイル.....	5
5.3. 出力先の仕様.....	6
6. Execute / Terminate.....	7
6.1. Default.....	7
6.2. Fresh Start.....	8
6.3. Single Sample Reintegration	8
6.4. Sum up Integrated Samples.....	9
6.5. Terminate	9
7. Integrated List.....	10
8. 出力ファイル	11
9. 積算ロジック	12
10. 積算処理時間	13

1. 更新履歴

Version	Date	説明
1.1.0	Sept. 30, 2025	・ ジョブ終了処理改善 ・ 同一アカウントによる GUI 二重起動防止 ・ 積算対象トレイン指定機能追加 ・ Sample ID 同士の結合機能追加 ・ パーティション (cpu168h、cpu) 選択機能追加
1.0.1	July 22, 2025	GUI が起動しない場合がある不具合を修正
1.0.0	May 12, 2025	初版リリース

2. 概要

E-QEGS Train Integration（以降、「本アプリ」と呼ぶ）は、BL35XU における CITIUS を用いたガンマ線準弾性散乱による計測システムのうち、SP8DC にて解析の前処理として行う、トレイン積算を行うアプリである。本アプリは SP8DC OnDemand 環境で利用できる。

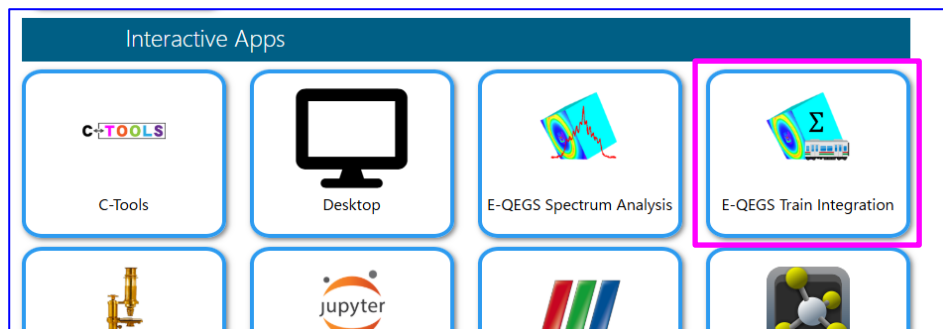
※「トレイン」とは、CITIUS 撮像データの一つのまとまりを表す。

3. 起動手順

- ① SP8DC にアクセスできる環境において、以下の URL で OnDemand にアクセスする。

<https://ondemand.dmz.dc.spring8.or.jp>

- ② Sign In したら、トップページ（dashboard）にある Interactive Apps から E-QEGS Train Integration のアイコンをクリックする。



- ③ 必要に応じて以下を指定する。

E-QEGS Train Integration
integrating CITIUS images into datasets in repeating units called trains.
[E-QEGS Portal page](#)

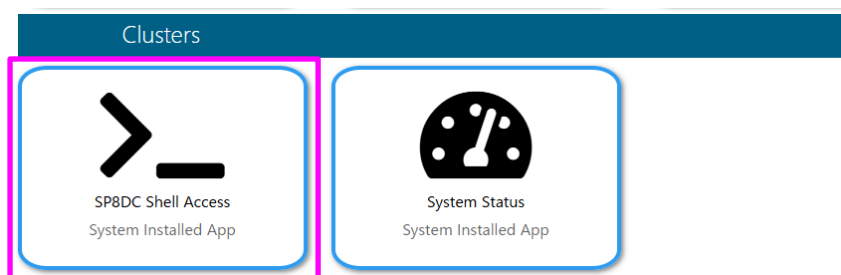
Queue
cpu168h

Parent directory of raw data (Advanced setting: Only specify if using a custom data storage location)

Launch

Queue :

cpu168h か cpu の 2 択で、前者は 168h 即ち 1 週間起動したままにできる。後者は 1 日である。cpu168h は起動可能な node 数が定められており、またユーザあたり同時には 1 つしか起動できない。cpu168h を指定して⑤で Launch ボタンがなかなか出てこない場合は node に空きがない可能性が考えられる。混雑していて自分のジョブが待ち状態になっているかどうかは以下の手順で調べることができる。トップページにある Clusters から SP8DC Shell Access のアイコンをクリックする。



表示される黒い画面（ターミナル）で「squeue」と打って Enter を押下する。

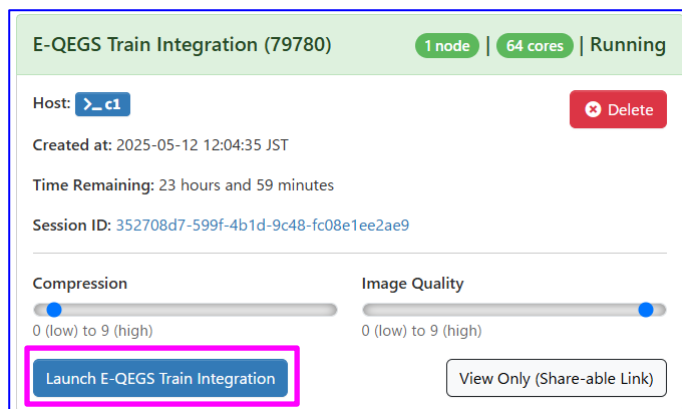
表示される情報のうち、「PARTITION」列に「cpu168h」が多くあり、「USER」列が自分のアカウントである行の「ST」列が「Q」になっていたら、空きがなくて待ち状態である。

Parent directory of raw data～：

入力生データの親ディレクトリを特定の場所に変えたい場合、そのディレクトリを入力する。通常は /ExpData であり、空欄のままで良い。※以降の説明で「/ExpData」と記載しているところは、ここで

別のディレクトリを指定している場合はそのディレクトリとなる。WinSCP 等でパス先頭に付く「/lustre
〇」は OnDemand では認識されないため、パスに含めないこと。

- ④ Launch ボタンをクリックする。
- ⑤ 計算ノードが確保（※）されたら、Compression=0 (min)、Image Quality=9 (max)として、Launch E-QEGS Train Integration をクリックすると、GUI が起動する。



※使用リソースは以下が自動で指定される。全て、OnDemand で指定できる最大値である。

- ・ queue に「cpu168h」を指定していれば Elapsed time=168h、「cpu」を指定していれば Elapsed time=24h
- ・ Number of CPU cores=64
- ・ Required memory=224GB

GUI を起動してから Elapsed time 経過時に、GUI を起動しているジョブは強制的に終了する。

積算実行中に終了した場合、積算実行中の Sample ID は途中で終了し、その Sample ID は次回に積算し直しとなる。従って放置しても問題はないが、「cpu168h」が混んでいて「cpu」を指定している場合は、1 日に 1 回は GUI を起動して Start ボタンをクリックすることになる。

なお SP8DC OnDemand ではセッション情報はサーバ側で保持されるため、ブラウザを閉じたりユーザ側の PC をシャットダウンしたりしても、再度アクセスすれば前回の画面状態が継続されている。用が済んだ時は、GUI 起動時（上述④の画面）の Delete ボタンをクリックすることで、GUI ジョブが削除される。

同一アカウントで複数の本アプリを起動することは禁止している（エラーが出て GUI が表示されない）。

4. 画面構成

E-QEGS Train Integration Ver.1.1.0

Input / Output, Execution		Integrated List						
FY	2024	Proposal No.	2024F0001			Update		
Directory of configuration files								
Output directory (specify account)		/UserData/ s0010005 /E-QEGS/\$PROPOSAL_NO/\$SAMPLEID/train_integration						
Notes								
Integration mode								
☒ Default - infinite loop								
☐ Fresh Start (Overwrite) - infinite loop								
☐ Single Sample Reintegration (Overwrite)								
Sample ID		test002			Update (Raw data directory)			
Train range								
☒ All								
☐ Specify		Start position (starting with zero)			13000			
		Number of trains (-1 : to the end)			-1			
		--> New Sample ID			test1000			
☐ Sum up Integrated Samples (Overwrite)								
Sample ID 1		test000			Update (output directory)			
Sample ID 2		test1000						
		--> New Sample ID			test1001			
Execute		Terminate						

Sample ID	Datetime from	Datetime to	Number of trains	Integration done
test000	2025-03-18 09:37:50	2025-03-18 09:37:54	10	2025-09-19 08:24:33
test001	2025-03-18 09:44:14	2025-03-18 10:40:49	7200	2025-09-19 08:33:26
test1000	2025-03-18 15:16:45	2025-03-18 15:27:45	1400	2025-09-19 08:39:49
test1001	-	-	1410	2025-09-19 08:40:47

Input / Output, Execution

入出力に関する情報の指定・情報表示、またトレイン積算の実行/停止を操作する。

Integrated List

左側で指定した課題番号について、これまでに実行完了した積算情報を表示する。

また積算実行中など、何らかの処理を行っている時は、画面最下部（ステータスバー）に実行中の内容が簡潔に表示される。

5. Input / Output

Input / Output, Execution

FY

2024

Proposal No.

2024F0001

Directory of configuration files

/home/s0010005/EQEGS/conf

...

Output directory (specify account)

/UserData/

s0010005

/EQEGS/\$PROPOSAL_NO/\$SAMPLEID/train_integration

Notes

5.1. 各項目

項目	説明
FY	積算対象の課題番号が属する年度を指定する。Proposal No.の選択肢を絞る目的でこの項目を設けている。/ExpData/ 配下を選択肢としている。
Proposal No.	積算対象の課題番号を指定する。課題番号配下のディレクトリ、例えば「test000」を Sample ID と呼んでいるが、積算対象の Sample ID は自動的に列挙される仕様のため、指定箇所はない。/ExpData/<FY>/ 配下を選択肢としている。
Directory of configuration files	各種設定ファイル（後述）が格納されているディレクトリを指定する。 ※WinSCP 等でパス先頭に付く「/lustre〇」は OnDemand では認識されないため、パスに含めないこと。
Output directory (specify account)	出力先のアカウントを指定する。詳細は後述する。 /UserData/ 配下を選択肢としている。
Notes	マウスポインタを置くことで、各種仕様の概略がポップアップ表示される。

5.2. 設定ファイル

設定ファイルは次の通りで、全て必須である。

基本的には施設スタッフが用意し、これらを例えば /home/<ACCOUNT>/EQEGS/conf/ など任意の場所に設置して、前述の Directory of configuration files で指定して使う。

ファイル	内容	例
param.json	Lower_ROI_Gray_Energy	エネルギー指定範囲の下限を指定する。
	Upper_ROI_Gray_Energy	エネルギー指定範囲の上限を指定する。
	elecon_LIST	elecon 値のリスト。電荷値の補正係数 (keV と電荷値の換算) で、sensor0、sensor1、sensor2 の順に指定する。
	FF_LIST	flat field 補正用データのファイル名を、sensor0、sensor1、sensor2 の順に指定する。param.json と同じディレクトリに存在することを前提としている。
flat field 補正用データ	上述の param.json の「FF_LIST」で指定した各ファイル。	

```
{
  "Lower_ROI_Gray_Energy": 9.5,
  "Upper_ROI_Gray_Energy": 16,
  "elecon_LIST": [
    37.26183931,
    37.53014569,
    37.25377135
  ],
  "FF_LIST": [
    "sensor0_flat_field.bin",
    "sensor1_flat_field.bin",
    "sensor2_flat_field.bin"
  ]
}
```

なお後述 (8. 出力ファイル) の通り、設定ファイルは記録の意味でトレイン積算結果とともに出力先 Sample ID ディレクトリ配下にコピーしているため、ユーザ自ら毎回どれを使ったか記録する必要はない。

設定ファイルの example は以下（前述の起動手順に記載した GUI 起動ページにも、E-QEGS Portal page

というリンクを掲載している) からダウンロードすることも可能である。

<https://dc-portal.spring8.or.jp/apps/e-qegs/>



5.3. 出力先の仕様

積算結果の出力先ディレクトリは以下である。

`/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/<Sample ID>/train_integration`

ここで「Account」とは SP8DC のユーザアカウントだが、本アプリは同一課題番号グループに属するメンバが同じ場所に積算結果を出力することを想定している。

当該課題番号において、最初に本アプリを実行するメンバが自分のアカウント（デフォルト）を指定し、積算を実行すると、`/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>` ディレクトリに対して共有設定（及び課題番号メンバのみが閲覧できる制御設定）が行われる。その状態で他のメンバは自分ではなく上述で最初に行ったアカウントを指定することで、同じ場所に出力できる。共有設定を行うのは後述の Execute をクリックした時で、設定を行う条件は以下である（全て満たせば設定が行われる）。

- ① 指定したアカウントが自分のアカウント（本アプリを起動したアカウント）
- ② `/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>` が存在しない
- ③ 自分のアカウントが、指定した課題番号のセカンダリグループ（例：g2024B9999）に属する。

これを満たさない場合、自分のアカウント指定時に限り、「共有設定を行わずに処理を続けるかどうか」の確認メッセージで YES を選ぶことで、積算を実行できる。ただし後から共有設定を行う手順は設けていないため、それはあくまでテスト的な機能となる。

条件②を設けている理由は以下で、これを防ぐために「初回のみ実行」としている。

権限設定は一発のコマンドでは行うことができず、複数のコマンドを順に実行している。もし他者がここに出力中に権限設定すると、権限設定中の中途半端な状態でアクセスされてしまう可能性があり、出力処理の失敗が起こりうる。

6. Execute / Terminate

Integration mode

☒ Default - infinite loop

☐ Fresh Start (Overwrite) - infinite loop

☐ Single Sample Reintegration (Overwrite)

Sample ID

Train range

☒ All

☐ Specify Start position (starting with zero)

 Number of trains (-1 : to the end)

--> New Sample ID

☐ Sum up Integrated Samples (Overwrite)

Sample ID 1

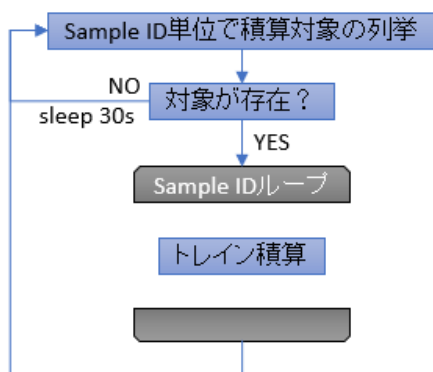
Sample ID 2

--> New Sample ID

積算モードを選択し、必要な指定をして Execute ボタンクリックで積算を開始する。

6.1. Default

通常の積算はこれを選択する。処理フローの概略を以下に示す。



測定データの「終わり」を表す情報はないため、無限ループとなっている。

前述の出力先が空の場合、列挙された Sample ID 配下の先頭から末尾までのデータが積算対象となる。

既に積算済のデータが存在する場合、列挙処理の中で未積算の train が抽出され、その train を積算して既存の積算データに加算する。

従ってこのボタンをクリックしておくことで、生データが SPring-8 から SP8DC に転送されながら順次積算していくことが可能である。[なお出力データは全て上書きされる。](#)

既存の積算済データからの追加がない場合は、その Sample ID の積算は skip される（列挙されない）。

列挙される生データ（Sample ID ディレクトリ）のパスは以下である。

/ExpData/<FY>/<Proposal No.>/citius/img/<Proposal No.>/<Sample ID>

なお積算処理は、GUI からマルチノード使用のジョブが投入され、最大で

$\text{sensor 数} \times 7 \text{ ジョブ(ノード)} \times 20 \text{ コア}$ で並列計算される。

ノードが混み合っている場合は処理待ちになる可能性があるが、 $\text{sensor 数} \times 7 \text{ ノード}$ が確保できるまで待つわけではなく、空いているノードに順次各ジョブが投入される。

6.2. Fresh Start

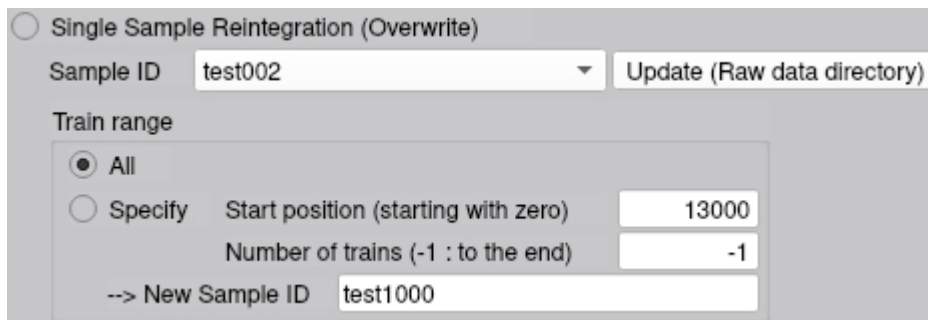
前述の Default とほとんど同じ処理だが、既存の積算データに加算するのではなく、先頭から末尾までの全データが積算対象となり、既存の積算データがあれば上書きされる。Fresh Start の場合、Default の処理フローにおいて、最初の Sample ID ループが終わった後は、Default と同じく既存の積算データに加算するモードになる。

従って出力先ディレクトリが空（手動で /UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.> ディレクトリを削除またはリネームすることも同じ）の場合は Default と全く同じ動作である。

これは設定ファイルを修正して全て最初から積算し直したいシーンを想定した機能である。

意図せず誤って Fresh Start を選択した状態で Execute ボタンをクリックした場合に備えて、ボタンクリック時には確認メッセージを表示しており、そこで YES をクリックしたら処理が開始される。

6.3. Single Sample Reintegration



一つの Sample ID だけを積算したい場合にこれを使用する。

Sample ID のコンボボックスは /ExpData/<FY>/<Proposal No.>/citius/img/<Proposal No.>/ 配下から列挙したもので、Update ボタンクリックで最新化される。

積算対象とするトレイン範囲を指定することが可能で、All と Specify のどちらかを選ぶ。

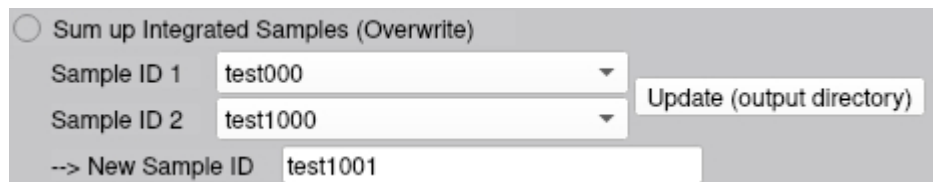
All

全トレインを対象とし、出力先の Sample ID は入力 Sample ID（コンボボックスで指定）と同じ。

Specify

積算開始位置（先頭トレインなら 0 を指定）、積算トレイン数（末尾トレインまでを対象にするなら-1 を指定）、出力先とする新 Sample ID を指定する。新 Sample ID を指定可能にしてある理由は、例えば 1 つの入力 Sample ID から複数の範囲を別々の積算結果として保持したいようなシーンを想定したため。新 Sample ID に入力 Sample ID を指定することも可能だが、その後に Default や Fresh Start で実行したら上書きされる。

6.4. Sum up Integrated Samples



○ Sum up Integrated Samples (Overwrite)

Sample ID 1 test000

Sample ID 2 test1000

--> New Sample ID test1001

Update (output directory)

2 つの Sample ID の積算結果を合算したい場合にこれを使用する。

Sample ID 1、2 のコンボボックスは /UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/ 配下から積算済のものだけ列挙したもので、Update ボタンクリックで最新化される。

Single Sample Reintegration と同様に、出力先とする新 Sample ID を指定する。

2 つの Sample ID を合算するが、合算後の Sample ID を使って更に合算すれば、実質何個でも合算できる。

6.5. Terminate



Execute Terminate

設定ファイルを修正してやり直したい場合や、指定を誤っていた場合など、何らかの事情で処理を中止したい場合は Terminate ボタンをクリックする。Execute 中のみこのボタンをクリックできる。

意図せず誤ってクリックした場合に備えて、ボタンクリック時には確認メッセージを表示しており、そこで YES をクリックしたら処理が中止される。対象列挙中や積算処理中など、即座に中止できないシーンは YES クリック後に少し間が空く（黒い「Wait...」画面が表示される）。

7. Integrated List

Integrated List				
Proposal No. 2024F0001		<button>Update</button>		
Sample ID	Datetime from	Datetime to	Number of trains	Integration done
test000	2025-03-18 09:37:50	2025-03-18 09:37:54	10	2025-09-19 08:24:33
test001	2025-03-18 09:44:14	2025-03-18 10:40:49	7200	2025-09-19 08:33:26
test1000	2025-03-18 15:16:45	2025-03-18 15:27:45	1400	2025-09-19 08:39:49
test1001	-	-	1410	2025-09-19 08:40:47

Update ボタンクリックで、Input / Output で指定した課題番号配下の、積算済みリストが一覧表示される。表の各列のヘッダ部分をクリックすることで、表示順を各項目の昇順/降順と変更することが可能である。

なお積算処理において何らかの異常でエラーが発生した Sample ID は赤字で表示され、その Sample ID は次回から列举対象外となる。Single Sample Reintegration モードなら、retry が可能である。通常は発生しないが、例えば flat field 補正用データが不正な場合等には発生する。

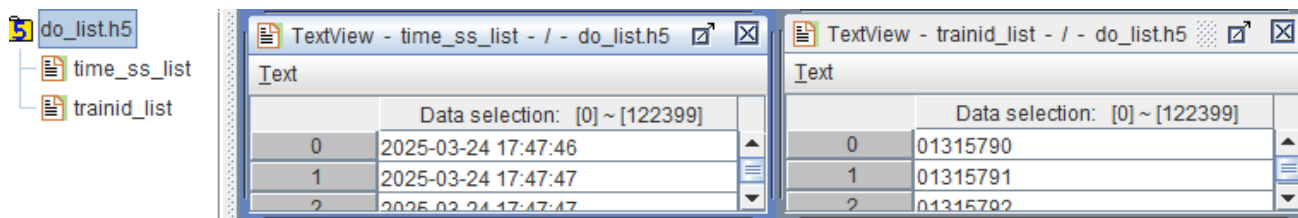
また Sum up Integrated Samples で合算した結果の Sample ID（上図の例の test1001）は、Datetime from と Datetime to が「-」で表示される。これは合算した 2 つの Sample ID のデータが連続しているとは限らないことを考慮した仕様である。

8. 出力ファイル

/UserData/<Account>/EQEGS/<Proposal No.>/ 配下に出力されるデータを以下に示す。

ディレクトリ、ファイル			説明
start.json			積算モード共通の情報。入出力ディレクトリ、積算モード番号。
<Sample ID>	info	do_list.h5	積算対象の train ID リストと、それと対を成す日時リスト。
		info.json 、 start.json	入出力ディレクトリ、Sample ID。 start.json は上記と同じものを記録用にコピー設置している。
		param.json	使用した param.json のコピー。記録用。
		*.bin	使用した flat field 補正用データのコピー。記録用。
	log	*	各種ログ。記録用。
	.ng_flag		積算処理で何らかの異常でエラーが発生した場合に出力される。 Single Sample Reintegration モードの Execute で削除される（それでも再度エラーが出たら、再度出力される）。
	done_list.h5		積算完了時に出力される積算済情報で、do_list と同じ書式。積算対象 対象列挙時の、未積算 train を抽出する際に使用する。
	done.json		積算完了時に出力される積算済情報。Integrated List 生成時や、ス ペクトル解析アプリで読まれる。
	sensor*.npy		積算画像データ。4092×728×384 など、3 次元の numpy 形式。ス ペクトル解析アプリで読まれる。
	sensor*_th.json		CITIUS のトレインヘッダ情報。スペクトル解析アプリで読まれる。 ※本アプリで出力することにより、スペクトル解析アプリで再度生 データにアクセスしなくて済むようにしている。

do_list.h5（done_list.h5 も同じ）の例 ※HDFView 使用



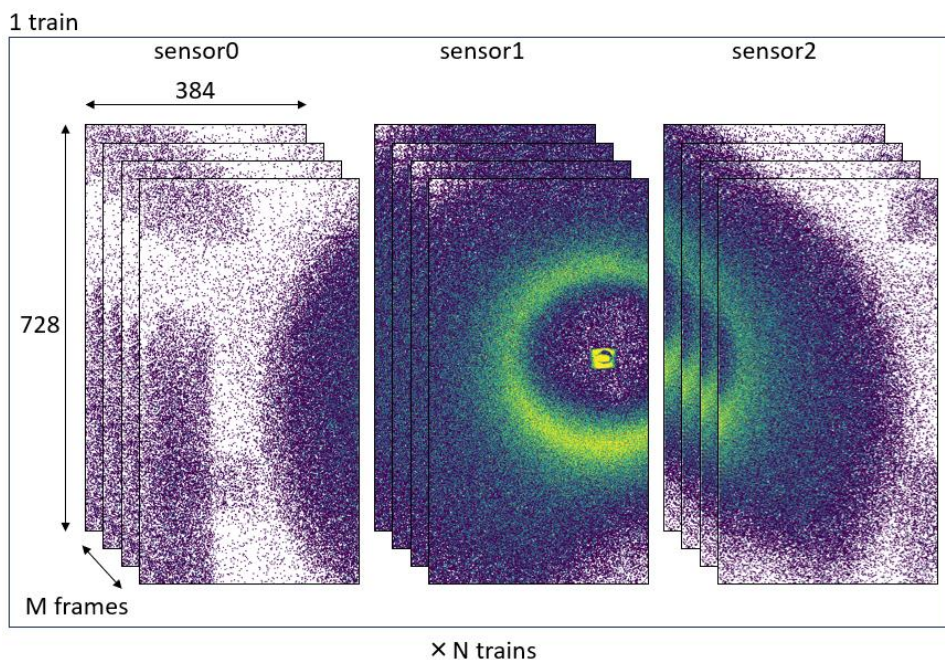
	Data selection: [0] ~ [122399]
0	2025-03-24 17:47:46
1	2025-03-24 17:47:47
2	2025-03-24 17:47:47

	Data selection: [0] ~ [122399]
0	01315790
1	01315791
2	01315792

9. 積算ロジック

本アプリの積算は、各トレインの同じ frame 番号を足し合わせる。

下図は、CITIUS の生データをフレーム再構成したときのイメージである（生データの構成説明は割愛する）。



積算式は以下である。※実際には単に足すだけではなく、flat field 補正、閾値補正も行っている。

$$\text{sensor}^* \quad \sum_{i=0}^{n-1} \text{image}_{i0}, \quad \sum_{i=0}^{n-1} \text{image}_{i1}, \quad \dots, \quad \sum_{i=0}^{n-1} \text{image}_{i(m-1)} \rightarrow \text{sensor}^*. \text{numpy}$$

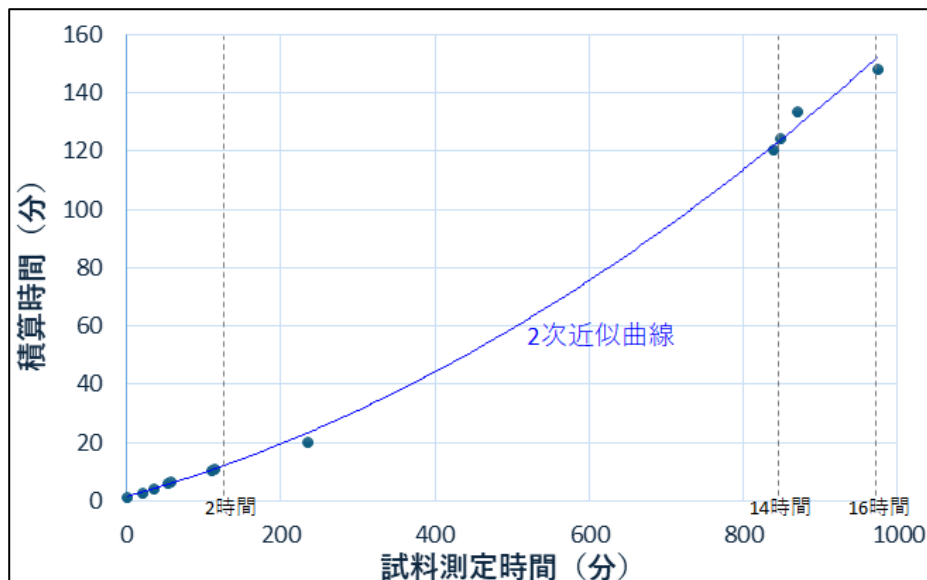
つまり、sensor*.numpy は numpy 配列の shape 順に書くと、M×728×384 の 3 次元データ（uint32bit）となる。データ量は、例えば 2024 年度までは、M=4092、測定約 1 秒につき 2 トレイン、生データは 1 トレイン 1 ファイルである（将来的にはデータ量が増える(config 6)可能性がある）。

なお補正処理のロジックにより、1 つの画像が足されるときに 1 ピクセル最大値は 1 であるため、積算後の 1 ピクセル最大値はトレイン数に等しくなる。従って、実用上 uint32bit でオーバーフローすることはない（16 時間の測定でも 122400 トレイン、uint32bit の上限は 42 億台）。

10. 積算処理時間

sample の測定時間に対する、積算処理時間の例を以下に記す。

※2025 年 3 月下旬の統合試験データ、2024F0001 配下の test000～test023 を使用。



測定時の他者との競合や、並列化のバランスの違いがあるため単純な考察はできないが、並列数上限が決まっていることが影響してか、線形ではなく 2 次近似的な推移となっている。

ただしこれは全 sample に対して、先頭から末尾までの全データを積算対象とした場合（つまり全データが転送されてからの Fresh Start モード相当）の処理時間である。

通常の運用は Default モードで転送しながらの積算であり、その場合の積算対象は 10 分～20 分の量で、1 回の積算処理は 2～3 分である。