Le présent fichier PDF décrit une application d'informatique scientifique temps réel, réalisée à Grenoble, application qui en 1985 a utilisé une carte micro-ordinateur SBC-11/21 de Digital.

Pour cela, Pierre Wolfers, concepteur de l'application de pilotage s'est grandement appuyé, pour la mise en œuvre sur ce micro-ordinateur, sur le guide d'utilisation suivant :

M8063 Falcon, SBC-11/21 Single-Board Computer user's Guide

Guide en version préliminaire, édité par Digital Equipment Corporation en 1981.

Ce guide est structuré en 9 chapitres et 5 annexes. Il comporte 358 pages, avec de nombreuses figures et schémas, mais pas de photos.

Ce guide est disponible dans la collection de l'ACONIT, Association pour un Conservatoire de l'informatique et de la télématique, Grenoble, **fiche n°26776**.

Le présent fichier PDF décrit comment a été conçu par Pierre Wolfers, responsable des systèmes informatiques à l'ancien laboratoire de Cristallographie du CNRS-Alpes, **le pilotage temps réel par cet ordinateur de l'équipement de mesure** goniométrique utilisé pour la recherche en cristallographie.

Il décrit le fonctionnement et l'historique de l'équipement de mesure concerné. Et à partir des informations données dans le présent guide d'utilisation du SBC-11/21, il montre comment le concepteur du pilotage du système de mesure a su utiliser ce micro-ordinateur, en particulier les interfaces d'entrées-sorties qui sont de type soit parallèle, soit série.

Pour utiliser le présent document, mentionnez Digital Equipment Corporation, le laboratoire de Cristallographie (aujourd'hui Institut Louis Néel) du CNRS de Grenoble, ainsi que la Base de Données ACONIT n° 26776.

Il est rappelé que la loi sur les droits d'auteur n'autorise que les reproductions partielles de documents à titre individuel et pour des motifs de recherche.

Description du besoin pour l'équipement de mesure et son historique.

Le laboratoire de Cristallographie (aujourd'hui inclus dans l'Institut Louis Néel) du CNRS de Grenoble (situé Avenue des Martyrs) a disposé à partir de 1977 d'un diffractomètre à Rayons X de type « 4 cercles », modèle CAD4, conçu et vendu par la société Enraf-Nonius (Delft, Pays Bas).

Ce diffractomètre permettait d'étudier les variations des structures, en fonction de paramètres physiques tels que la pression et/ou la température, avec divers équipements (dont plusieurs développés au sein du laboratoire : basses et hautes températures, pression ...). Le diffractomètre était géré comme un service de mesure, mis à la disposition des différentes équipes de recherche du laboratoire.

Le faisceau de mesure était fourni par un tube rayons-X (40 à 100 K-Volts) choisi en fonction de la longueur d'onde souhaitée (λ). Un monochromateur sélectionne la raie d'émission choisie en fonction de l'anticathode du tube (typiquement, les raies Ag K_{α},: λ = 56 nm, ou Cu K_{α} : λ = 154 nm).

Ce type de diffractomètre utilise une variante de la classique géométrie des angles d'Euler ω, χ, φ et 2θ. Cette variante, appelée la géométrie Kappa (selon l'appellation de l'angle κ), est identifiée par les angles ω_{κ}, κ, φ_{κ} et 2θ. Ces angles permettent de dégager davantage d'espace autour de l'échantillon (le monocristal), en évitant que les faisceaux, incident ou réfracté, ne soient masqués. Cette géométrie permet aussi d'installer plus facilement de petits équipements de conditionnement de l'échantillon (cryostat, four, enclume, … etc). Les trois angles ω_{κ}, κ, et φ_{κ} permettent d'orienter, dans toutes les directions, l'échantillon (un monocristal d'une taille typique de quelques dixièmes de mm). L'angle 2θ permet de positionner le détecteur, un compteur de rayons X, afin de mesurer les intensités des raies de diffractions (réflexions de Bragg).

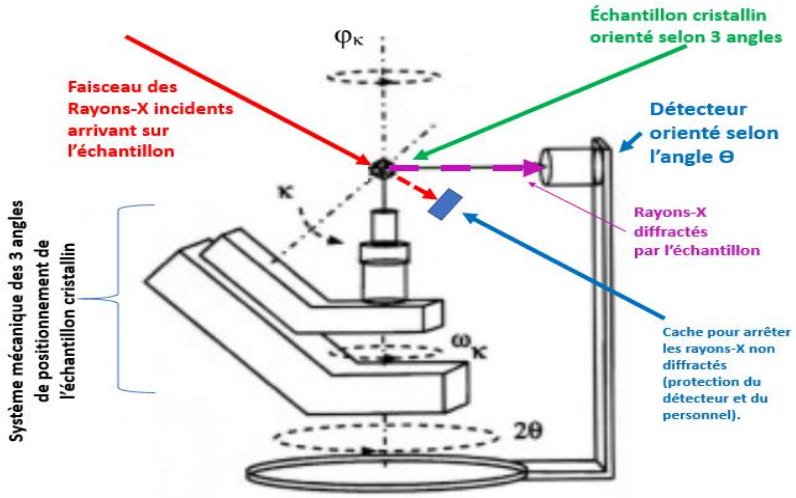

Image construite en partant de http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_06-en.html

Figure 1 : Schémas des angles de la géométrie Kappa utilisée par le diffractomètre CAD4 de Enraf-Nonius.

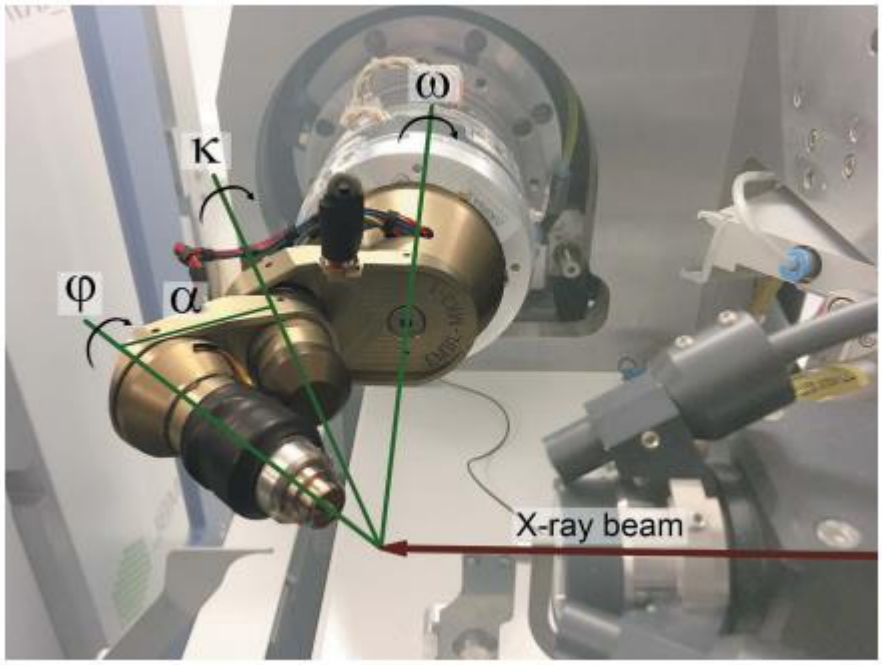

Figure 2 : Axes de rotation en géométrie Kappa d'un diffractomètre à rayons X à l'ESRF (Synchrotron Grenoble).
Photo provenant de J. Appl. Cryst. (2018). 51, 1421–1427

Figure 3 : Diffractomètre CAD4 Enraf-Nonius avec son détecteur.
Photo provenant de http://docnum.univ-lorraine.fr/public/DDOC_T_2015_0050_WENGER.pdf

Historique du pilotage de l'équipement

Au départ en 1977 le pilotage du diffractomètre utilisait un PDP-8 (muni d'un *OMNIBUS* en 12-bits) avec une console de contrôle LA36. Il était connecté à un PDP-11/70, mini-ordinateur 16 bits avec processeur flottant 32 et 64 bits fonctionnant sous le système d'exploitation RSX11M+ de Digital. Ce PDP-11/70, qui occupait une pièce climatisée (consommation ~7kw), avait comme fonction de :

- Piloter le diffractomètre CAD4 et en transcrire les résultats dans des fichiers exploitables par divers programmes de cristallographie.
- Servir de mini centre de calculs scientifiques, ouvert à toutes les équipes de recherches du laboratoire. Cela incluait l'exploitation des résultats des mesures réalisées avec le CAD4.

Sur le PDP-11/70, un programme Fortran livré par Enraf-Nonius assurait le contrôle du diffractomètre en fournissant un ensemble complet de commandes sur une console LA36. Ce programme permettait de déterminer les caractéristiques de l'échantillon, de définir la liste des raies de diffraction à mesurer, puis d'en assurer le bon déroulement. Tous les calculs des paramètres nécessaires à la mesure étaient effectués pour être envoyés au PDP-8, qui en retour de chaque mesure, renvoyait ses résultats. Ceux-ci étaient traités et inscrits sur des fichiers (sur les disques du PDP-11/70) pour être exploités par des ensembles très divers de logiciels de cristallographie.

Le logiciel du PDP-8 assurait le contrôle des organes du diffractomètre CAD4 à partir des commandes et paramètres fournis par le PDP-11/70. Le contrôle de l'appareil comprenait les commandes :

- de l'obturateur, de la collimation et de l'atténuateur du faisceau de rayons X ;
- du détecteur de rayons X : initialisation, arrêt et lecture ;
- des mouvements des quatre angles pour des positionnements rapides et des mouvements plus lents à vitesses prédéfinies ;

Sur les diffractomètres CAD4, l'asservissement en position des quatre angles ω_κ, κ, φ_κ et 2θ est réalisé au moyen d'un algorithme PID (Proportionnel, Intégrale, Dérivé) mis en œuvre initialement avec le PDP-8 (Digital Equipement). L'interface Enraf-Nonius assurait le contrôle complet du diffractomètre : les moteurs à aimants permanents, la lecture des différents codeurs (des potentiomètres), le comptage des photons X, le choix des collimateurs et de l'atténuateur des rayons X. La précision des positionnements était meilleure que le centième de degré sur chacun des quatre angles.

Le logiciel du PDP-8, sous le contrôle de programme Fortran du PDP-11/70, assurait la mesure de chaque raie de diffraction à partir des commandes entrées sur la console LA36 du PDP-8 qui dialoguait avec le PDP-11/70. C'est ce programme Fortran du PDP-11/70 qui réalisait les calculs d'angles, ainsi que ceux de tous les autres paramètres et permettait ainsi de mesurer jusqu'à plusieurs milliers de réflexions de Bragg (raies de diffractions) par 24 heures.

Un besoin d'évolution

Dans les années qui ont suivi, le volume des calculs scientifiques effectués sur le PDP-11/70 a considérablement augmenté. C'est pourquoi en 1982, il a été convenu de séparer la fonction de pilotage du diffractomètre de celle des calculs scientifiques afin de pouvoir remplacer le PDP-11/70 par un système plus puissant. Le choix pour les calculs scientifiques s'est porté sur un cluster de plusieurs Micro-Vax et Vax-Stations (Digital Equipement) avec leur système d'exploitation 32 bits VMS.

Le PDP-11/70, devenu obsolète, encombrant, et coûteux à entretenir, a été arrêté et remplacé par sa version micro-processeur, le PDP-11/73 (avec le même système RSX11M+) pour continuer à assurer le pilotage du diffractomètre quatre cercles CAD4.

Ce changement a incité à moderniser la commande du diffractomètre. Pour cela le PDP-8 a été remplacé par le SBC-11/21, petit micro-PDP-11 basé sur le processeur LSI-11/03, réalisé en mono-carte, avec le QBUS des PDP-11 inclus, ce qui est bien adapté au pilotage d'appareils industriels. L'interface parallèle de l'OMNIBUS 12-bits du PDP-8 (qui assurait le pilotage du CAD4 au travers de l'électronique ENRAF-NONIUS) a été simulé avec une carte d'interface parallèle (avec 64 fils d'entrée/sortie). Cette dernière a été insérée dans le fond de panier du boîtier du SBC-11/21.

Enraf-Nonius a fourni sa version du programme pour LSI-11 (en MACRO 11, l'assembleur des PDP-11s), et il a suffi de le transcrire en l'adaptant à un petit système d'exploitation temps réel conçu au laboratoire.

Ce système a fonctionné de façon très satisfaisante pendant près de cinq ans jusqu'au remplacement du diffractomètre par une nouvelle version du même appareil permettant des mesures beaucoup plus rapides avec un multi-détecteur à deux dimensions au lieu du simple compteur à rayons X, ainsi que d'un tube à cathode tournante offrant un faisceau de rayons X nettement plus intense.

Pour le diffractomètre *CAD4 Enraf-Nonius* voir :
https://www.google.com/search?client=firefox-b-d&q=fonctionnement+du+CAD4+Enraf+Nonius

L'ordinateur SBC-11/21

Le KXT11-AA (M8063 revision C), "Digital Equipment Corporation's Falcon SBC-11/21", regroupe sur une carte électronique unique (SBC signifie « Single Board Computer ») les fonctions centrales d'un ordinateur dérivé des puissants ordinateurs de la ligne des PDP-11 de la Digital Equipment Corporation.

Disposer sur une seule carte, munie d'un Bus d'interface, d'un ordinateur complet offre la possibilité de regrouper sous un volume réduit les fonctions informatiques et les fonctions d'interfaces électroniques en liens avec l'équipement de mesure.

L'ordinateur SBC-11/21 regroupe (cf. le guide page 1-1), sur une carte électronique, de dimensions 8.5 x 5.2 pouces, le système informatique d'un ordinateur complet (processeur, mémoire vive et morte pour le *bootstrap*) qui exécute le jeu de base des instructions d'un PDP-11. Il dispose de :

24 lignes d'entrées-sorties parallèles réparties en :
- deux ports 8-bits bidirectionnels,
- un port 8-bits de contrôle.

Deux interfaces d'entrée-sortie série de type RS-423.
Une horloge temps réel à 800 Hz.
16 ou 32 ko de mémoire centrale.
Un port QBUS, bus de 16/18/22 bits, compatible avec toute la gamme des périphériques QBUS de Digital Equipement.
Il supporte 4 niveaux d'interruptions vectorisées, et la DMA (Direct Memory Access) pour des échanges rapides de données entre les périphériques et la mémoire centrale.

Le processeur central comporte les 8 registres généraux de tout PDP-11 et le jeu de base des instructions, augmenté de la multiplication entière et du décalage arithmétique multiple. Il ne dispose pas des instructions de calculs en virgule flottante, ni de certaines autres instructions (en voir la liste dans la guide d'utilisation).

Pilotage d'un diffractomètre quatre cercles Enraf Nonius type CAD4.

Le pilotage d'un diffractomètre à rayons X pour la détermination de structures cristallines exige le positionnement précis des quatre angles (trois pour l'orientation du cristal dans l'espace et un pour le compteur de rayons X qui doit capter les réflexions de Bragg des raies de diffraction). La précision requise doit être au minimum de l'ordre du centième de degré, et les mouvements pour passer de la mesure d'une raie à la suivante doivent se faire rapidement, afin de mesurer le plus de raies possibles dans un temps donné (typiquement au moins 800 à 1200 réflexions de Bragg par 24h, mais cela peut être beaucoup plus long pour certains échantillons à faible pouvoir de diffraction). De ce fait, il est nécessaire que les quatre mouvements puissent avoir lieu simultanément. Enfin le

logiciel doit aussi contrôler les systèmes des fentes de collimation, l'obturateur du faisceau, ainsi que les atténuateurs qui permettent de diminuer l'intensité du faisceau incident afin de mesurer les réflexions les plus fortes sans saturer le compteur de rayons X (tout cela est aussi valable pour un diffractomètre à neutron).

Le diffractomètre CAD4 utilise pour chacun des quatre angles un moteur à aimants permanents couplé avec deux potentiomètres circulaires (alimentés entre 0 et 5V) selon un diamètre avec deux curseurs à 90°. Un potentiomètre de « positionnement grossier » tourne sur 360°, tandis qu'un potentiomètre « positionnement fin » correspond à 128 tours par déplacement du potentiomètre de « positionnement grossier ». Les deux curseurs de chaque potentiomètre fournissent des tensions électriques entre 0 et 5V, des « pseudo » sinus et cosinus d'angles (pseudo car avec des fonctions linéaires et non pas de vraies fonctions sinus et cosinus). Les tensions « sinus » d'une part et « cosinus » d'autre part sont envoyées à deux commutateurs analogiques dont la sortie de chacun est connectée à un convertisseur analogique digital (ADC). Les commutateurs permettent au SBC-11/21 de sélectionner un potentiomètre « grossier » ou « fin » pour chacun des mouvements afin de déterminer l'angle atteint.

Lors d'un positionnement, dans une première phase, les potentiomètres « grossiers » sont utilisés tandis que les moteurs sont lancés à grande vitesse afin d'atteindre rapidement une position proche de celle requise. Dans une deuxième phase, le même processus est réalisé avec les potentiomètres « fins ». Dans notre cas, chacun des ajustements de la vitesse (tension aux bornes) de chaque moteur est réalisé toutes les 0,1s ce qui correspond à 25ms pour l'ensemble des quatre moteurs. La dernière position d'un angle est déduite des signaux sinus et cosinus linéaires et, en fonction de l'écart avec la consigne la tension à appliquer au moteur est déduite.

Le calcul, de type PID, devant être réalisé en 25ms cela a nécessité de tabuler le résultat d'une division, celle-ci ne faisant pas partie du jeu d'instruction LSI-11/03 du SBC-11/21. C'était le point le plus critique du logiciel afin d'assurer des positionnements ayant des précisions meilleures que le 1/100 de degré.

Ces contraintes de temps d'exécutions sont typiques dans les applications temps réel où le logiciel doit impérativement répondre dans un délai précis. Ce point est encore beaucoup plus critique dans certaines applications où l'on doit traiter les données expérimentales « au vol » car les données brutes sont tellement volumineuses que l'on ne pourrait les stocker assez rapidement.

Lors de la mesure d'une réflexion de Bragg (raie), un programme Fortran sur le PDP-11/73 (comme avant sur le PDP-11/70) fournit au SBC-11/21 : les quatre angles de la position centrale de la réflexion, les décalages de départ et d'arrivé de chaque angle afin de pouvoir faire tout un balayage (scan) de la raie (typiquement 2θ, ω couplets ou l'un des deux seulement). Il est possible (et parfois fort utile) de faire des balayages plus compliqués impliquant les quatre angles. Sont aussi fournies les conditions de collimation, d'atténuation et de vitesse de mesure. Le pilotage consiste à positionner chaque mouvement sur l'angle de départ, à ouvrir l'obturateur du faisceau X, avec ou sans atténuateur, à assurer la vitesse requise de chacun des angles par variations progressives des consignes. Quand les angles de fins de balayages sont atteints, le faisceau est obturé, et les différents points de comptage obtenus durant le balayage sont transmis au programme

Fortran. Le système du SBC-11/21 se met alors en attente d'une nouvelle commande de mesure.

Tout en réalisant ce pilotage, ce système temps réel est en permanence apte à interpréter, et suivant les cas à transmettre au PDP-11/73 tout caractère qui serait entré sur la console de contrôle (un LA36) et de même il transmettra tout caractère venant du PDP-11/73 vers le LA36. Les commandes du diffractomètre sont transmises en binaire avec somme de contrôle (pour détecter d'éventuelles erreurs de transmissions sur la ligne RS232) et elles sont envoyées avec un bit de parité inversé, ce qui permet de les distinguer des caractères à imprimer sur la console LA36.

Lors d'une session de mesure, le programme de contrôle en Fortran sur le PDP-11/73 permet dans une première phase, de trouver l'orientation des axes propres du cristal (paramètres), d'en contrôler la symétrie, et d'en déduire la liste des différentes réflexions de Bragg que l'on peut mesurer (limites liées au diffractomètre, à la longueur d'onde, au temps disponible …). Chaque réflexion de Bragg (raie) est identifiée par un triplet d'entiers (couramment nommés les indices « h, k, l ») à partir desquels on peut calculer les quatre angles pour lesquels la réflexion apparaîtra.

En début de session de mesure, le programme Fortran du PDP-11/73 dresse la liste des raies mesurables dans les conditions prescrites par l'utilisateur et les trie de manière à minimiser les déplacements angulaires lors des passages d'une raie à la suivante. Puis pour chaque réflexion, il calcule tous les paramètres de mesure (dont les quatre angles ω_κ, κ, φ_κ et 2θ), les envoie au SBC-11/21 et attend les résultats. A partir de ces derniers, l'intensité intégrées de la raie est corrigée de divers facteurs et les résultats détaillés sont transcrits dans un fichier avant de passer à la raie suivante. Ce fichier est conçu pour être facilement exploité par divers ensembles de logiciels de cristallographie.

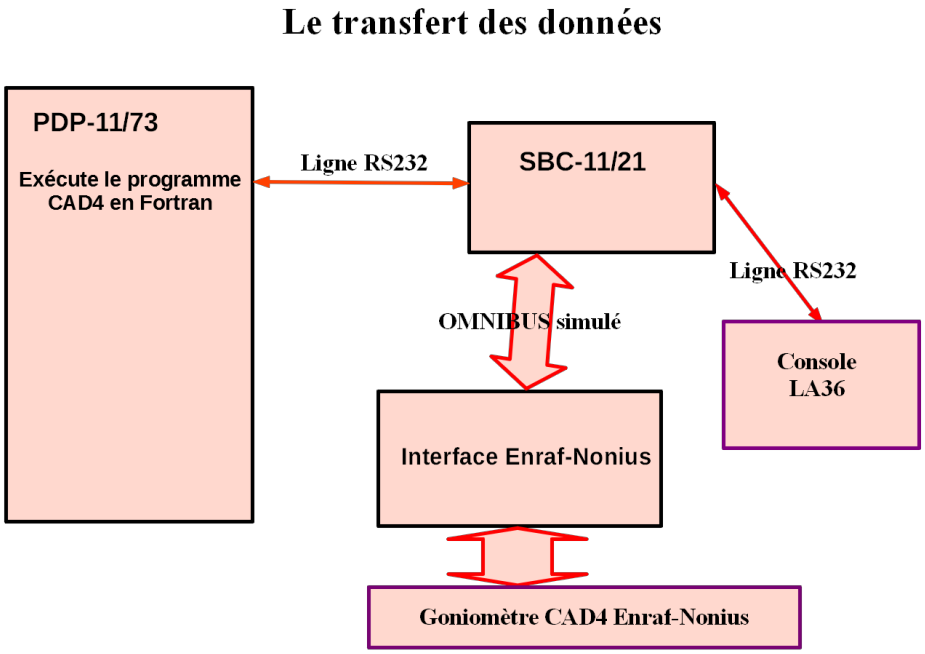

Figure 4 : Le transfert des données

Schémas des connections qui assurent le fonctionnement du diffractomètre (années 1980s).

La liaison du PDP-11/73 avec le réseau (pour transférer les fichiers de mesure vers les autres systèmes informatiques) n'est pas représentée.

Le port parallèle du SBC-11/21 n'a pas été utilisé dans cette application parce qu'il était insuffisant (avec ses 30 connexions, il n'a pas assez de fils de signaux) et une carte QBUS d'interface parallèle à 64 fils d'entrées/sorties a été ajoutée sur le fond de panier.

Ports d'entrée sorties du SBC-11/21

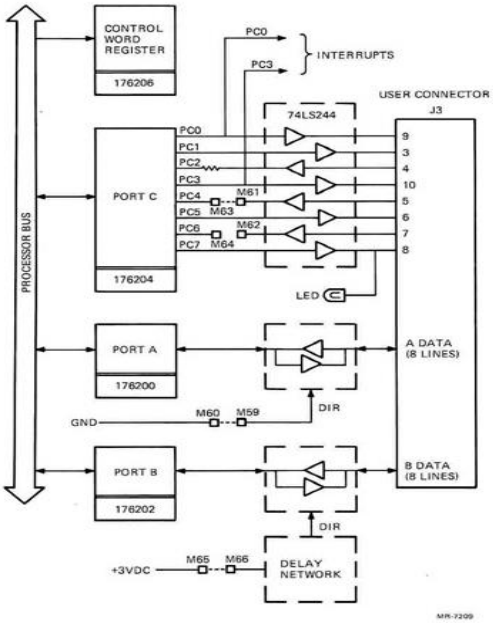

Figure 6-3 Parallel I/O Interface

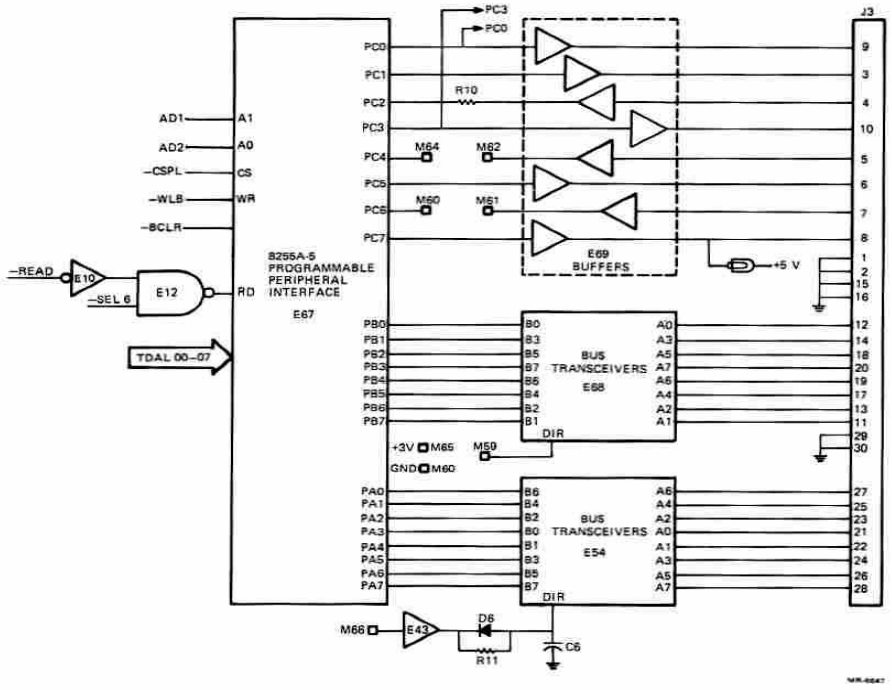

Figure 8-19 Parallel I/O Interface

Le port série utilisé pour communiquer avec le PDP-11/73

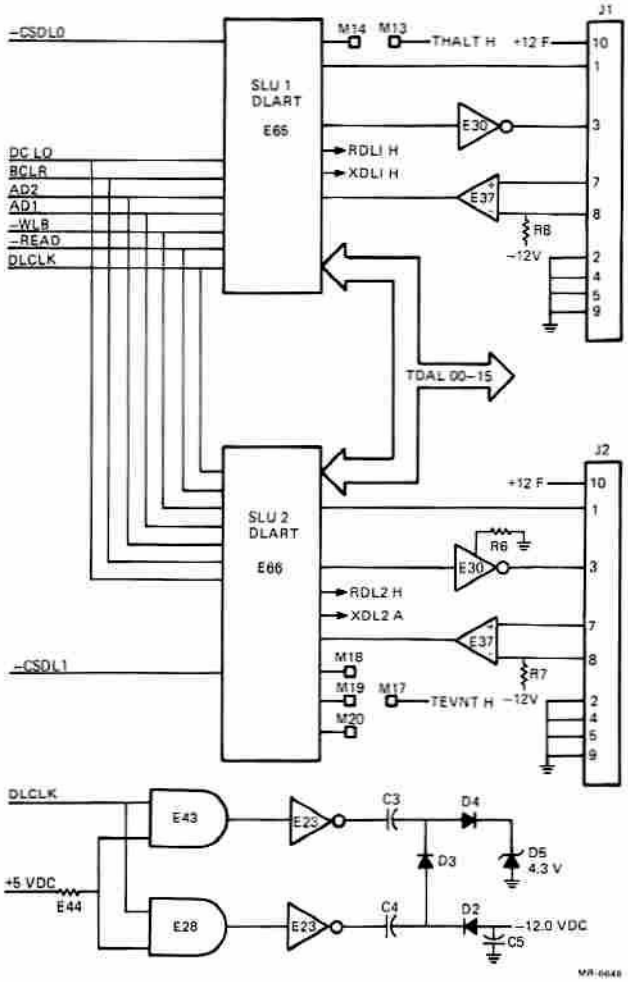

Figure 8-18 Serial Line Interface Units