
КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 517.968;539.261

Д. Д. ЗАХАРОВ

ПРОГРАММНАЯ СРЕДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ УСТРАНЕНИЯ КОЛЛИМАЦИОННЫХ ИСКАЖЕНИЙ ПРИ РЕНТГЕНОВСКОМ МАЛОУГЛОВОМ РАССЕЙАНИИ

Приводится описание программной среды, которая может быть использована для решения задачи устранения коллимационных искажений, возникающих при рентгеновском малоугловом рассеянии на анизотропных объектах. Описаны ключевые моменты построения программных компонентов среды и порядок ее использования.

Ключевые слова: программная среда, сценарий обработки экспериментальных данных, устранение коллимационных искажений, анизотропное малоугловое рентгеновское рассеяние.

Некорректно поставленная задача [1] связана с интегральным уравнением, решение которого позволяет устранить коллимационные искажения при анизотропном малоугловом рассеянии [2, 3]. Для численного решения этой задачи разработана интерактивная программная среда. Существует немало программных систем широкого применения, позволяющих решать такие интегральные уравнения. Для конкретных физических задач часто используются специализированные программы. Однако существуют требования, которые не могут быть выполнены одновременно ни системами широкого применения, ни специализированными программами, — это простота изменения сценария вычислений, интерактивность в процессе его выполнения, свобода расширения набора методов и быстроедействие.

Разработанный *конструктор* вычислений удовлетворяет перечисленным требованиям. В его основе лежит концепция составления и выполнения сценария вычислений — последовательности операторов с матричными данными на входе и выходе. Операторами являются определенные специализированные программы, которые могут запускаться на выполнение как автоматически, так и вручную. В ручном режиме предусмотрены просмотр и сохранение текущих результатов или прерывание выполнения сценария, а также на каждом шаге могут быть переопределены входные параметры оператора. Набор операторов может быть дополнен новым, который будет выполнять иные программные действия.

Программный код операторов составлен на языке общего назначения (C++), что позволяет организовать оптимальное выполнение каждого оператора, в частности использовать параллельные вычисления. Если набор операторов меняется редко (как в случае коллимационной обработки результатов рентгеновского эксперимента), то при использовании программной среды не требуется участие программиста.

Рассмотренная программная среда была успешно использована для внесения коллимационных поправок при расчете интенсивности рассеяния ряда анизотропных систем [3].

Исходный код программной среды находится в открытом доступе: <<http://code.google.com/p/adri/>>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 285 с.
2. Захаров Д. Д., Сизиков В. С., Смирнов А. В., Федоров Б. А. Решение двумерной коллимационной задачи рассеяния рентгеновских лучей с использованием нестандартных интегральных уравнений // Науч.-техн. вестн. СПбГУ ИТМО. 2006. Вып. 32. С. 144—153.
3. Захаров Д. Д., Смирнов А. В., Федоров Б. А. Решение коллимационной задачи при малоугловом рентгеновском рассеянии на анизотропных объектах // Наносистемы: физика, химия, математика. 2011. Т. 2, № 3. С. 26—44.

Сведения об авторе

Денис Дмитриевич Захаров — аспирант; Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, кафедра физики;
E-mail: denzakharov@gmail.com

Рекомендована кафедрой
физики

Поступила в редакцию
07.06.11 г.