Комплекс программ XANSONS для расчетов рентгеновского и нейтронного рассеяния на наноразмерных структурах

Неверов В. С.

НИЦ "Курчатовский институт"

Создан программный комплекс XaNSoNS (X-ray and Neutron Scattering on Nanoscale Structures), включающий (1) параллельный гибридный (вычисляющий как на центральных, так и на графических процессорах) численный код для расчета рентгеновских и нейтронных дифрактограмм от ансамблей наноструктур по точным формулам для интенсивности рассеяния атомным ансамблем, и (2) набор дополняющих модулей для подготовки данных и визуализации результатов.

XaNSoNS использует XML интерфейс, позволяющий задавать параметры источника, дифрактограмм и рассеивающих структур, включая ансамбли регулярных (кристаллы), нерегулярных и смешанных структур. Суммарное число атомов в ансамбле ограничено только вычислительными мощностями. Каждая атомная позиция описывается вероятностью атома находиться в ней, что позволяет учитывать вакансии, замещения и тепловые колебания атома.

В коде использован алгоритм [1] локального перераспределения соседних атомов в стенках углеродных полых sp2 структур с графеноподобной стенкой, что позволяет приближенно рассчитывать их дифрактограммы без знания точного расположения атомов в стенках.

Основной модуль XaNSoNS написан на C++ и существует в трех версиях: однопроцессорной, многопроцессорной (распараллеленной с помощью MPI) и использующей графические процессоры (GPU) Nvidia (с применением CUDA). В версии для GPU получено ускорение вычислений примерно в 100 раз по сравнению с многопроцессорной MPI-версией при одинаковой стоимости вычислителей [2].

Компоненты XaNSoNS были использованы в [3] при идентификации наноструктурного состава углеводородных пленок, осажденных на стенках вакуумной камеры токамака Т-10.

XaNSoNS имеет следующие модули, написанные на языке Python:

Cif2XMLconverter реализует поддержку формата данных CIF (Crystallographic information file), преобразуя данные из CIF в XML и используя библиотеку PyCifRw (http://pycifrw.berlios.de/).

FormFactors заполняет используемые при расчете дифракции таблицы атомных рентгеновских форм-факторов и длин нейтронного рассеяния, используя модуль periodictable (http://www.reflectometry.org/danse/elements.html) и аналитические выражения из [4].

Plotter визуализирует рассчитанные дифрактограммы, используя библиотеку matplotlib (http://matplotlib.org/).

Atoms3DVisualizer визуализирует атомные ансамбли с помощью трассировщика лучей POV-ray, используя библиотеку visual python (http://www.vpython.org/) с дополнением povexport (http://kineticskit.sourceforge.net/).

AMPLconverter преобразует расчетные и экспериментальные данные в единый файл, использующий синтаксис AMPL, для последующего поиска оптимального структурного состава образца с применением оптимизационных пакетов.

Rearrangement готовит данные для расчета дифрактограмм наноструктур из искривленного графена без знания точного расположения атомов.

На основе XaNSoNS в распределенной среде Mathcloud (www.mathcloud.org) созданы веб-сервисы, позволяющие использовать XaNSoNS удаленно, а также интегрировать его модули в распределенные вычислительные сценарии, в том числе и в сценарии обработки экспериментальных данных рентгеновского [5] и нейтронного рассеяния. Простые веб-сервисы, позволяющие использовать модули XaNSoNS по отдельности, доступны по адресу: https://fuji.isa.ru:1998/services/. Композитные веб-сервисы (состоящие из нескольких простых) доступны по адресу: https://mathcloud.isa.ru:8444/services/. Использование сервисов требует регистрации.

Полная инструкция к коду XaNSoNS и веб-сервисам доступна по адресу: http://vo.nfi.kiae.ru/pub/papers/XRD/XaNSoNS_user_manual_rus.pdf.

Автор выражает благодарность А.Б. Кукушкину (НИЦ «Курчатовский институт») за постановку задачи, В.В. Волошинову (ИСА РАН) – за помощь в работе.

Работа поддержана РФФИ (проект РФФИ № 12-07-00529-а).

[1] L.A. Chernozatonskii, V.S. Neverov, A.B. Kukushkin // Phys. B: Cond. Matter 407, 3467-3471 (2012).

[2] В.С. Неверов. Труды VI Международной научно-практической конференции «Современные информационные технологии и ИТ-образование», МГУ, 12-14 декабря 2011 г., М.: ИНТУИТ.РУ, 2011, 973-983.

[3] A.B. Kukushkin, V.S. Neverov, N.L. Marusov, I.B. Semenov, B.N. Kolbasov, V.V. Voloshinov, A.P. Afanasiev, A.S. Tarasov, V.G. Stankevich, N.Yu. Svechnikov, A.A. Veligzhanin, Ya.V. Zubavichus and L.A. Chernozatonskii, Chem. Phys. Lett., 506, 265-268 (2011).

[4] D. Waasmaier, A. Kirfel, Acta Cryst, A51, 416-431 (1995).

[5] В.В. Волошинов, В.С. Неверов. Информационные технологии и вычислительные системы, №4, 10-20 (2011).