



УДК 539.261, 539.264, 539.215.3, 004.78, 519.688

## SAXSEV 2.1 КРОССПЛАТФОРМЕННОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА ДАННЫХ РЕНТГЕНОВСКОГО МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ОТ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

А.В. Кучко<sup>a</sup>, А.В. Смирнов<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> ЗАО «Рамакс Интернейшнл», Санкт-Петербург, 195197, Российская Федерация

<sup>b</sup> Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Российская Федерация

Адрес для переписки: artemkav@gmail.com

### Информация о статье

Поступила в редакцию 21.10.14, принята к печати 12.01.15

doi:10.17586/2226-1494-2015-15-2-267-274

Язык статьи – русский

**Ссылка для цитирования:** Кучко А.В., Смирнов А.В. SAXSEV 2.1 Кроссплатформенное приложение для анализа данных рентгеновского малоуглового рассеяния от полидисперсных систем // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2015. Том 15. № 2. С. 267–274.

**Аннотация.** Обсуждается опыт разработки и внедрения кроссплатформенного приложения с графическим пользовательским интерфейсом, предназначенного для поиска функции распределения объемных долей частиц и вычисления площади удельной поверхности, связанной с этим распределением. В основе разработанного приложения SAXSEV лежит программная реализация метода статистической регуляризации для решения некорректных математических задач с использованием библиотек Numpy, Scipy, Matplotlib. Отличительными чертами приложения являются возможность интерактивной корректировки сетки аргументов искомой функции и выбор оптимального значения параметра регуляризации на основе поведения нескольких отдельных и одного общего критериев качества найденной функции распределения. Приложение представляет собой программный пакет, состоящий из модулей, написанных на языке Python3, объединенных общим интерфейсом на основе библиотеки Tkinter. Текущая версия SAXSEV 2.1 апробирована на базе Windows XP/Vista/7/8, Ubuntu 14.1. SAXSEV 2.1 был успешно применен в исследовании эффективности метода статистической регуляризации для анализа малоуглового рентгеновского рассеяния дисперсной системой, в исследовании порошков из наночастиц и композитных материалов с включением наночастиц.

**Ключевые слова:** малоугловое рентгеновское рассеяние, полидисперсная система, распределение объемных долей, удельная поверхность, критерии выбора параметра регуляризации.

## SAXSEV 2.1 CROSS-PLATFORM APPLICATION FOR DATA ANALYSIS OF SMALL-ANGLE X-RAY SCATTERING FROM POLYDISPERSE SYSTEMS

A.V. Kuchko<sup>a</sup>, A.V. Smirnov<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> ZAO «Ramax International», Saint Petersburg, 195197, Russian Federation

<sup>b</sup> Institute of Problems of Mechanical Engineering Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 199178, Russian Federation

Corresponding author: artemkav@gmail.com

### Article info

Received 21.10.14, accepted 12.01.15

doi:10.17586/2226-1494-2015-15-2-267-274

Article in Russian

**For citation:** Kuchko A.V., Smirnov A.V. SAXSEV 2.1 cross-platform application for data analysis of small-angle X-ray scattering from polydisperse systems. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2015, vol.15, no. 2, pp. 267–274. (in Russian)

**Abstract.** The present paper discusses development and implementation of the cross-platform application with a graphical user interface for estimation of the particle volume fraction distribution function and fitting specific surface area to this distribution pattern. SAXSEV implements the method of statistical regularization for ill-posed mathematical tasks being solved with the use of Numpy, Scipy and Mathplotlib libraries. The main features of this software application are the ability to adjust the arguments grid of the desired function and the ability to select the optimal value of the regularization parameter. This parameter is selected by several specific and one common criteria. The software application consists of modules written in Python3. The modules are combined by common interface based on Tkinter library. Current version SAXSEV 2.1 was tested on the basis of Windows XP / Vista / 7/8, Ubuntu 14.1. SAXSEV 2.1 was used successfully at effectiveness study of statistical regularization method for analyzing dispersed system by SAXS, at research of the powder consisting from nanoparticles and composite materials with nanoparticles inclusion.

**Keywords:** small-angle X-ray scattering, polydisperse system, distribution of volume fractions, specific surface area, selection criteria for regularization parameter.

## Введение

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) широко применяется для изучения наноструктур самой разнообразной природы – от биологических макромолекул и полимеров до композитных наноматериалов и агломератов частиц неорганического состава [1–3]. Благодаря прогрессу в приборостроении значительно улучшилось качество экспериментальных данных, современные вычислительные средства позволили оперировать большими объемами данных, и существенно возросли возможности извлечения структурной информации из профиля МУРР [4–7]. В частности, заметно расширился круг моделей одиночных рассеивателей, для которых разработаны как аналитические, так и вычислительные процедуры нахождения форм-факторов [6, 8, 9].

Одной из важных задач структурного анализа, решаемых с помощью МУРР, является задача нахождения функции распределения по размерам частиц в нанопорошках, используемых, например, в качестве предкерамических материалов [10, 11], сырья для пористых структур [12] или наполнителей для композитных материалов [13, 14]. Современные программные продукты, зачастую поставляемые вместе с аппаратурой для измерения МУРР, предоставляют широкие возможности подбора наилучших параметров для распределений заданного вида (Шульца–Зимма, нормального, логнормального и т.д.) [15, 16]. Такой подбор параметров оправдан, если есть математическая модель процесса формирования нанопорошка, предсказывающая конкретный вид распределения. Но в большинстве случаев это не так, и представляют интерес методы поиска распределения, не привязанные к его конкретному аналитическому виду. Использование заранее определенного вида распределения может приводить, например, к таким парадоксальным ситуациям, когда электронная микроскопия показывает присутствие в образце групп наночастиц, существенно различающихся по размерам, а исследователи вычисляют параметры заданного мономодального распределения и вынуждены оговаривать значительную условность найденных параметров (порошок чистого оксида церия в работе [17]).

Большинство программных пакетов, поставляемых с оборудованием для исследования МУРР, имеет ограниченные возможности для модификации, что в первую очередь обусловлено закрытым программным кодом. Кроме того, использование программного обеспечения, привязанного к оборудованию, не позволяет обрабатывать результаты эксперимента независимо от используемой установки.

Таким образом, возникает необходимость разработки программного обеспечения, удовлетворяющего следующим требованиям: использование математического метода, не зависящего от аналитического вида распределения, независимость от экспериментального оборудования, кроссплатформенность, открытый исходный код. Разработанный программный пакет SAXSEV – не имеющее аналогов кроссплатформенное приложение с графическим интерфейсом, удовлетворяющее указанным требованиям.

Приложение SAXSEV ориентировано в первую очередь на анализ результатов МУРР от изотропных полидисперсных систем. При этом данные о форме и анизотрии отдельных частиц должны быть заданы заранее. В структурных исследованиях такие данные можно получить, например, из электронной микроскопии. Ядром анализа в SAXSEV является восстановление для частиц одинаковой формы и анизотрии функции распределения относительных объемных долей частиц на основе метода статистической регуляризации. Этот метод был предложен для обработки результатов МУРР в работе [18] и подробно рассмотрен в работе [19]. Метод позволяет найти распределение, не предполагая для него какого-то конкретного вида.

В качестве языка программирования для создания кроссплатформенного программного обеспечения с открытым исходным кодом был выбран Python 3<sup>1</sup>, активно используемый в научных вычислениях. Благодаря открытому исходному коду и применению библиотек для научных вычислений NumPy<sup>2</sup>, Scipy<sup>3</sup> программный пакет SAXSEV легко модифицируем для решения других вычислительных задач, связанных с функцией распределения по размерам (расширение на другие формы частиц, вычисление моментов распределения и т.д.). Использование Python 3 и модулей NumPy, Scipy, Matplotlib позволяет реализовать сценарии обработки и представления числовых данных, не уступающие по своей функциональности программным сценариям, написанным в такой хорошо развитой математической среде, как MathLab.

### Общий сценарий решения задачи

Экспериментально измеряемая интенсивность МУРР связана с искомой функцией распределения  $f(Rg)$  объемных долей по радиусам  $Rg$  инерции рассеивающих частиц интегральным уравнением [19]

<sup>1</sup> Официальный сайт сообщества Python.org [Электронный ресурс]. Режим доступа:

<https://www.python.org/download/releases/3.2/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

<sup>2</sup> Официальный сайт библиотеки NumPy [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.numpy.org/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

<sup>3</sup> Официальный сайт библиотеки Scipy [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.scipy.org/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

$$I(q) = \tilde{A} \int_{Rg_{\min}}^{Rg_{\max}} f(Rg) F_{ft}(q, Rg, \varepsilon) V_{ft}(Rg, \varepsilon) dRg . \quad (1)$$

Здесь  $I(q)$  – значение интенсивности рассеяния для данного модуля  $q$  вектора рассеяния;  $F_{ft}(q, Rg, \varepsilon)$  – интенсивность рассеяния одной частицей с заданным радиусом инерции  $Rg$ , формой  $ft$  и коэффициентом анизотропии  $\varepsilon$ ;  $V_{ft}(Rg, \varepsilon)$  – объем одной частицы,  $\tilde{A}$  – постоянная, зависящая от геометрии съемки и электронного контраста на границах частиц,  $Rg_{\min}$  и  $Rg_{\max}$  – минимальное и максимальное значения радиуса инерции.

Задача нахождения функции  $f(Rg)$  по интенсивности  $I(q)$  из уравнения (1) относится к классу некорректных математических задач [20] и требует использования регуляризирующих функционалов. В качестве такого функционала выбран интеграл от второй производной искомой функции, ограничивающий ее интегральную кривизну.

Решение задачи состоит из нескольких этапов, представленных в интерфейсе программной среды. На первом этапе задается диапазон и шаг значений параметра регуляризации, и для каждого значения параметра вычисляется наиболее вероятное распределение. Входными данными служат индикатриса рассеяния  $I(q)$ , предполагаемая геометрическая форма  $ft$  частиц и коэффициент анизотропии  $\varepsilon$ .

На втором этапе реализован интерактивный выбор наиболее правдоподобного распределения на основе нескольких отдельных и одного общего критериев качества найденного решения. Конкретный вид критериев указан ниже.

На заключительном этапе для выбранного распределения вычисляется удельная поверхность. Если известна неопределенность исходной индикатрисы, то SAXSEV позволяет оценить неопределенность функции распределения и найденной удельной поверхности.

Как показано в работе [19], надежность выбора оптимального значения параметра регуляризации в значительной степени определяется правильным выбором сетки аргументов искомой функции. В соответствии с этим существенным элементом программы является модуль, позволяющий «улучшить» решение с помощью корректировки сетки аргументов искомой функции. Первоначальная сетка аргументов выбирается автоматически, исходя из исследуемого диапазона модуля вектора рассеяния.

Поскольку поиск истинного решения осуществляется в интерактивном режиме, взаимодействие оператора с программной средой можно классифицировать как «интеллектуализированная информационная система» [21].

### Критерии выбора оптимального значения параметра регуляризации

В выражениях критериев, обсуждаемых ниже, использованы так называемая оценочная функция и норма искомой функции. В качестве оценочной функции  $\Phi$  выбран средний квадрат нормированного на дисперсию расхождения между экспериментальными и восстановленными значениями интенсивности рассеяния:

$$\Phi(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(I_j^{(\alpha)} - I_j^{(src)})^2}{S_j^2} . \quad (2)$$

Здесь  $\alpha$  – параметр регуляризации;  $N$  – общее число точек индикатрисы рассеяния;  $I^{(\alpha)}$  – интенсивность, восстановленная на основе наиболее вероятной функции распределения при данном значении  $\alpha$ ;  $I_j^{(src)}$  и  $S_j^2$  – значения экспериментальной индикатрисы и дисперсии экспериментальной индикатрисы соответственно. Норма функции  $\|f\|$  определяется соотношением

$$\|f\| = \sqrt{\int_{Rg_{\min}}^{Rg_{\max}} \|f(Rg)\|^2 dRg} .$$

Программа позволяет контролировать следующие критерии (см. [22, 19]) для функции распределения, найденной при данном  $\alpha$ .

- Критерий доли положительных значений в найденном решении:

$$POSITIV = \frac{\|f_+\|}{\|f\|} , \quad (3)$$

где  $f_+$  – функция распределения, в которой все отрицательные значения заменены нулевыми.

- Критерий отсутствия систематических отклонений интенсивности, найденной на основе выбранного решения, от экспериментальной интенсивности:

$$SYSDEV = \frac{2N_s}{N}, \quad (4)$$

где  $N_s$  – количество изменений знака разности  $I_j^{(\alpha)} - I_j^{(src)}$  для соседних углов рассеяния.

- Критерий скорости изменения выбранного решения в зависимости от параметра регуляризации:

$$STABIL = \frac{\|f_{i+1} - f_i\| \alpha_i}{\|f_i\| (\alpha_{i+1} - \alpha_i)}, \quad (5)$$

где  $\alpha_i$  и  $f_i$  – одно из набора последовательных значений параметра регуляризации и отвечающий этому значению экземпляр функции распределения.

- Критерий расходимости оценочной функции:

$$DISCRP = \sqrt{\Phi^2 - \Phi_0^2}, \quad (6)$$

где  $\Phi$  и  $\Phi_0$  – оценочные функции для данного решения  $f$  и для решения при минимальном значении  $\alpha$ , соответственно.

- Критерий существенности выбранного диапазона радиусов инерции:

$$VALCEN = \frac{\|f_{trunc}\|}{\|f\|}. \quad (7)$$

Здесь  $f_{trunc}$  – «усеченная» функция распределения, совпадающая с  $f$  во второй и третьей четвертях диапазона радиусов и равная нулю в первой и четвертой четвертях.

- Критерий количества осцилляций в данной функции распределения:

$$OSCIL = \frac{\|f'\| (Rg_{max} - Rg_{min})}{\pi \|f\|}, \quad (8)$$

где  $f'$  – производная найденного распределения  $f$ .

Кроме перечисленных выше шести критериев, обсуждаемых в работе [22], в процессе сравнения найденных экземпляров распределения вычисляются еще два оригинальных критерия, указанные ниже.

- Критерий существенности отрицательных значений функции распределения для отклонения восстановленной интенсивности рассеяния от экспериментальной интенсивности [19]:

$$IMPMIN = \frac{\Phi_+ - \Phi}{\Phi}. \quad (9)$$

Здесь  $\Phi$  и  $\Phi_+$  – значения оценочной функции, вычисленные для функции распределения  $f$  и  $f_+$  соответственно. Искомая функция распределения по определению неотрицательна, в то же время решение интегрального уравнения (1) при неудачном выборе сетки аргумента и (или) параметра регуляризации может содержать отрицательные значения, дающие существенный вклад в интенсивность рассеяния. Заметное отклонение критерия (9) от нуля позволяет исключить эти неудачные решения.

- Критерий присутствия больших отклонений восстановленной интенсивности рассеяния от экспериментальной интенсивности:

$$ERRDEV = \frac{Nerr}{N}, \quad (10)$$

где  $Nerr$  – количество точек, в которых модуль разности  $I_j^{(\alpha)} - I_j^{(src)}$  превышает удвоенное (утроенное) значение корня из дисперсии  $S_j$ . Введение этого критерия обусловлено необходимостью исключить экземпляры искомой функции распределения, порождающие интенсивность рассеяния, значительная часть точек которой лежит вне полосы погрешности.

Необходимость добавления критериев (9) и (10), более жестких, чем (3) и (4), была выяснена при исследовании эффективности метода статистической регуляризации. Она обусловлена расширением круга возможных решений, сравнение которых реализует этот метод.

Следуя работе [22], в программный пакет также включен расчет обобщающего критерия:

$$TOTAL = \sum_i w_i \exp\left(-\frac{(criterion_i - a_i)^2}{c_i^2}\right) / \sum_i w_i, \quad (11)$$

где  $criterion_i$  – значение  $i$ -го критерия;  $a_i$  – ожидаемое значение соответствующего критерия;  $c_i$  – «ширина» распределения значений соответствующего критерия;  $w_i$  – вес соответствующего критерия. Значения параметров  $a_i$ ,  $c_i$ ,  $w_i$  устанавливаются по умолчанию, но могут быть изменены на основе априорной информации о свойствах искомого распределения объемных долей.

### Процедуры обращения с данными

Пакет представляет собой систему модулей, написанных на языке Python 3.2 и объединенных общим интерфейсом.

Для реализации операций над матрицами используются библиотеки Numpy и Scipy, являющиеся расширениями языка Python, для построения графиков – библиотека Pylab<sup>1</sup>.

При построении системы использовались классические возможности объектно-ориентированного программирования, такие как наследование, декораторы классов и методов. Такой подход позволяет минимизировать трудозатраты на поддержку и модификацию системы. Интерфейс реализован с помощью модуля, входящего в стандартную сборку Tkinter<sup>2</sup>. Это делает интерфейс доступным под различными платформами.

Основные модули, входящие в текущую версию программного пакета:

- модуль, содержащий общие вспомогательные функции для проведения вычислений (**cast**);
- модуль, содержащий общие вспомогательные функции для работы с элементами интерфейса (**icast**);
- модуль, позволяющий генерировать композиции из стандартных элементов интерфейса модуля Tkinter (**layout**);
- модуль генерации единого интерфейса системы (**fbrowser**);
- модуль задания общих настроек (**settings**);
- модуль генерации коллекции наиболее вероятных распределений и их неопределенности для набора значений параметра регуляризации (**res\_vfdf**);
- модуль вычисления интенсивности рассеяния от одиночно хаотично ориентированной частицы заданной формы и степени анизотропии (**single\_body**);
- модуль вычисления значений критериев в зависимости от параметра регуляризации (**percept\_criteria**);
- модуль вычисления площади и погрешности площади удельной поверхности (**surface\_area**);
- модуль генерации сетки значений радиуса инерции (**grid\_generator**);
- модуль редактирования сетки значений радиуса инерции (**grid\_corrector**);
- модуль, позволяющий просматривать «историю», т.е. предыдущие действия пользователя (**history**);
- модуль, реализующий доступ к дополнительной документации (**about**);

Диаграмма пакетов [23], иллюстрирующая связи модулей, доступна по адресу <http://ev.saxslab.org/package>. Эта диаграмма создана при помощи утилиты Pyreverse<sup>3</sup>, входящей в пакет Pyint<sup>4</sup>. Соответствующая диаграмма классов доступна по адресу <http://ev.saxslab.org/class>.

### Организация хранения данных

Найденные экземпляры искомой функции и соответствующие им индикатрисы сохраняются в виде матриц в отдельных текстовых файлах. Имена файлов содержат информацию об основных параметрах искомой функции и содержании столбцов сохраняемой матрицы. Формат имени файла функции распределения –

vfdf\_alpha\_fi\_fiplus\_[Rmin,Rmax]@Rg\_vfdf\_vfdfVal\_vfdfPos\_vfdfPosVal\_integralAmbiguity.txt  
и соответствующей восстановленной интенсивности –  
i[vfdf]\_alpha\_fi\_fiplus\_[Rmin, Rmax]@Q\_IResPos\_IRes\_ISrc.txt.

Здесь alpha – значение параметра регуляризации; FI – функция оценки [19]; Rmin – минимальное значение радиуса инерции; Rmax – максимальное значение радиуса инерции.

После значка «@» в имени файла указана последовательность колонок таблицы, хранящейся в файле:

- радиус инерции (Rg);
- функция распределения (vfdf);
- нормированная функция распределения (vfdfVal);
- функция распределения с отброшенными отрицательными значениями (vfdfPos);
- нормированная функция распределения с отброшенными отрицательными значениями (vfdfPosVal);
- неопределенность нормированной функции распределения (integralAmbiguity);
- модуль вектора рассеяния (Q);

<sup>1</sup>Официальный сайт библиотеки Matplotlib [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://matplotlib.org/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

<sup>2</sup>Документация по библиотеке Tkinter [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://wiki.python.org/moin/TkInter>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

<sup>3</sup>Официальный сайт утилиты Pyreverse [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.logilab.org/blogentry/6883>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

<sup>4</sup>Официальный сайт утилиты Pyint [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.pyint.org/>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

- интенсивность, восстановленная на основе функции распределения с отброшенными отрицательными значениями (IResPos);
- интенсивность, восстановленная на основе функции распределения с отрицательными значениями (IRes);
- исходная интенсивность (ISrc).

Запись и чтение из файлов с данными реализованы с помощью стандартного механизма модуля `numpy.savetxt`<sup>1</sup>. Это позволяет в независимых пользовательских программах, использующих модуль `numpy`, извлекать из файла сохраненные данные в виде матрицы.

### Проверка эффективности программного пакета

SAXSEV 2.1 был успешно применен в исследованиях эффективности метода статистической регуляризации для анализа МУРР дисперсной системой [19], при изучении порошков из наночастиц, формирующихся в системе  $ZrO_2-Gd_2O_3-H_2O$  в гидротермальных условиях [11], для исследования порошка из углеродных частиц, полученных восстановлением карбидных наноматериалов [12], а также наполнителей для композитных материалов [13, 14]. На рисунке представлены результаты работы программы для одного из нанопорошков, исследованного в работе [11]. Кроме найденной функции распределения и соответствующих интенсивностей, на рисунке представлены нормированные отклонения от экспериментальной интенсивности  $I^{(src)}$  для восстановленных интенсивностей  $I^{(\alpha)}$ ,  $I_+^{(\alpha)}$ :

$$\delta I_j^{(\alpha)} = \left| \frac{I_j^{(\alpha)} - I_j^{(src)}}{S_j} \right|, \delta I_{+j}^{(\alpha)} = \left| \frac{I_{+j}^{(\alpha)} - I_j^{(src)}}{S_j} \right|, j = 1 \dots N.$$

Из рисунка видно, что нормированные отклонения близки друг к другу и по модулю не превосходят значения 1,5. Последнее означает, что абсолютные отклонения восстановленных интенсивностей не превосходят полуторакратного стандартного отклонения почти для всех экспериментальных углов рассеяния, что подтверждает высокое качество найденной функции распределения.

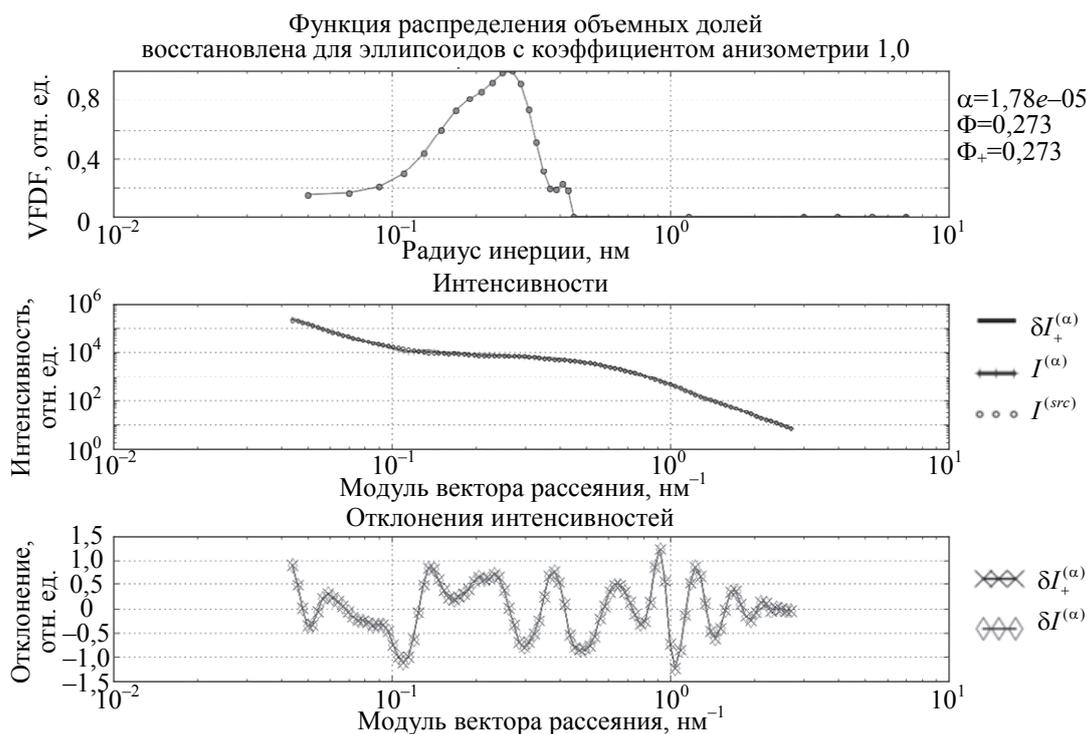


Рисунок. Графическое представление результатов работы программы для одного из порошков  $ZrO_2-Gd_2O_3$ , исследованного в работе [11]: функция распределения объемов наночастиц по радиусам инерции (верхний график); экспериментальная  $I^{(src)}$  и восстановленные  $I^{(\alpha)}$ ,  $I_+^{(\alpha)}$  интенсивности малоуглового рассеяния (средний график); нормированные отклонения  $\delta I^{(\alpha)}$ ,  $\delta I_+^{(\alpha)}$  восстановленных интенсивностей от экспериментальной (нижний график)

<sup>1</sup>Документация по библиотеке Scipy [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.savetxt.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).

### Заключение

Разработан программный пакет SAXSEV, предназначенный для поиска распределения  $f(Rg)$  объемных долей наночастиц по данным рентгеновского малоуглового рассеяния. В SAXSEV реализован метод статистической регуляризации для решения уравнения (1). Отличительными чертами пакета, позволяющими увеличить надежность найденного распределения, являются возможность редактирования сетки аргумента в интерактивном режиме и возможность оценить правильность выбора значения параметра регуляризации и качество найденного распределения на основе критериев (2)–(11). Текущая версия пакета позволяет найти распределение для частиц трех разных форм (цилиндры, параллелепипеды, эллипсоиды вращения) с произвольной анизотропией. Кроме самого распределения, пакет позволяет считать неопределенность распределения, связанную с распределением площади удельной поверхности частиц и неопределенность этой площади.

Эффективность программного пакета была проверена при решении задач, связанных как с апробацией метода статистической регуляризации, так и с исследованием распределений частиц в нанопорошках предкерамических оксидов, нанопорошках из углеродных частиц, частиц наполнителей для композитных материалов.

Пользователь, знакомый с основами объектно-ориентированного программирования и языка Python, может расширить общую функциональность пакета, задействовать лишь часть функций среды для решения своих задач или использовать каждый класс как отдельную утилиту при запуске из командной строки. Пакет организован таким образом, что пользователь может использовать его целиком (посредством GUI) или только те модули, которые требуются для решения локальной задачи.

Работоспособность текущей версии пакета SAXSEV 2.1 протестирована для платформ Windows XP/Vista/7/8, Ubuntu 14.1. Полная документация к программному пакету SAXSEV доступна по адресу <http://ev.saxslab.org>.

### Литература

1. Guinier A., Fournet G. Small-Angle Scattering of X-rays. New-York: Wiley, 1955. 268 p.
2. Glatter O., Kratky O. Small Angle X-ray Scattering. London: Academic Press, 1982. 515 p.
3. Свєргун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986. 280 с.
4. Pauw B.R. Everything SAXS: small-angle scattering pattern collection and correction // Journal of Physics Condensed Matter. 2013. V. 25. N 38. Art. 383201. doi:10.1088/0953-8984/25/38/383201
5. Pavsky J., Jemian P.R. Irena: tool suite for modeling and analysis of small-angle scattering // Journal of Applied Crystallography. 2009. V. 42. N 2. P. 347–353. doi: 10.1107/S0021889809002222
6. Kohlbrecher J., Bressler I. Software package SASfit for fitting small-angle scattering curves [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://kur.web.psi.ch/sans1/SANSSoft/sasfit.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).
7. Petoukhov M.V., Franke D., Shkumatov A.V., Tria G., Kikhney A.G., Gajda M., Gorba C., Mertens H.D.T., Konarev P.V., Svergun D.I. New developments in the ATSAS program package for small-angle scattering data analysis // Journal of Applied Crystallography. 2012. V. 45. N 2. P. 342–350. doi: 10.1107/S0021889812007662
8. Data Analysis Software ATSAS 2.5.2 [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.embl-hamburg.de/biosaxs/software.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).
9. Alves C., Pedersen J.S., Oliveira C.L.P. Modelling of high-symmetry nanoscale particles by small-angle scattering // Journal of Applied Crystallography. 2014. V. 47. N 1. P. 84–94. doi: 10.1107/S1600576713028549.
10. Альмяшева О.В., Федоров Б.А., Смирнов А.В., Гусаров В.В. Размер, морфология и структура частиц нанопорошка диоксида циркония, полученного в гидротермальных условиях // Наносистемы: физика, химия, математика. 2010. Т. 1. № 1. С. 26–36.
11. Смирнов А.В., Федоров Б.А., Томкович М.В., Альмяшева О.В., Гусаров В.В. Наночастицы со строением типа «ядро–оболочка», формирующиеся в системе  $ZrO_2-Gd_2O_3-H_2O$  в гидротермальных условиях // Доклады Академии Наук. 2014. Т. 456. № 2. С. 171–173. doi: 10.7868/S0869565214140138
12. Смирнов А.В., Федоров Б.А., Петров Н.А., Соколов В.В., Томкович М.В., Гусаров В.В. Особенности строения углеродных наночастиц, полученных хлорированием нанопорошка  $\beta$ -sic // Доклады Академии Наук. 2014. Т. 458. № 4. С. 430–435. doi: 10.7868/S0869565214280135
13. Фомичева Е.Е., Темнов Д.Э., Смирнов А.В., Федоров Б.А. Влияние дисперсионного наполнителя на основе алюминия на структуру и свойства полипропилена // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2009. № 6 (64). С. 59–65.
14. Смирнов А.В., Федоров Б.А., Темнов Д.Э., Фомичева Е.Е. Структурные и электретные свойства полипропилена с различным содержанием аморфного диоксида кремния // Наносистемы: физика, химия, математика. 2012. Т. 3. № 2. С. 65–72.

15. Small-Angle Scattering - SAXS, XRD, SC-XRD, MICRO [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.bruker.com/products/x-ray-diffraction-and-elemental-analysis/small-angle-x-ray-scattering/saxs/small-angle-scattering.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).
16. Multipurpose X-ray Diffraction System [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://rigaku.com/products/xrd/ultima>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 04.10.2014).
17. Tyrsted C., Becker J., Hald P., Bremholm M., Pedersen J.S., Chevallier J., Cerenius Y., Iversen S.B., Iversen B.B. In-situ synchrotron radiation study of formation and growth of crystalline  $Ce_xZr_{1-x}O_2$  nanoparticles synthesized in supercritical water // *Chemistry of Materials*. 2010. V. 22. N 5. P. 1814–1820. doi:10.1021/cm903316s
18. Плавник Г.М., Кожевников А.И., Шишкин А.В. Применение метода статистической регуляризации для обработки данных малоуглового рассеяния рентгеновских лучей. Нахождение распределения неоднородностей по размерам // Доклады Академии Наук СССР. 1976. Т. 226. № 3. С. 630–633.
19. Кучко А.В., Смирнов А.В. Расчет функции распределения объемов наночастиц и удельной поверхности методом статистической регуляризации из индикатрисы рентгеновского малоуглового рассеяния // *Наносистемы: физика, химия, математика*. 2012. Т. 3. № 3. С. 76–91.
20. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 284 с.
21. Лисьев Г.А., Попова И.В. Технологии поддержки принятия решений: учебное пособие. М.: ФЛИНТА, 2011. 133 с.
22. Svergun D.I. Determination of the regularization parameter in indirect-transform methods using perceptual criteria // *Journal of Applied Crystallography*. 1992. V. 25. N 4. P. 495–503. doi: 10.1107/S0021889892001663
23. Pilone D., Pitman N. UML 2.0 in a Nutshell. Sebastopol: O'Reilly Media, 2005. 234 p.

- |                                     |  |
|-------------------------------------|--|
| <i>Кучко Артём Владимирович</i>     | – программист, ЗАО «Рамакс Интернейшенл», Санкт-Петербург, 195197, Российская Федерация, artemkav@gmail.com  |
| <i>Смирнов Александр Витальевич</i> | – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация; старший научный сотрудник, Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Российская Федерация, smirnav@phd.ifmo.ru                                    |
| <i>Artem V. Kuchko</i>              | – programmer, ZAO «Ramax International», Saint Petersburg, 195197, Russian Federation, artemkav@gmail.com  |
| <i>Alexander V. Smirnov</i>         | – PhD, Associate professor, Associate professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation; Senior scientific researcher, Institute of Problems of Mechanical Engineering Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, 199178, Russian Federation, smirnav@phd.ifmo.ru |