

УДК 535.417; 004.428.4

КОДИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ КЛАССАМИ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ В ОПТИКЕ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Л.А. АРУТЮНЯН

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: levon.har@gmail.com

(Поступила в редакцию 28 октября 2015 г.)

Рассмотрена целесообразность использования принципов объектно-ориентированного программирования при численном моделировании в оптике жесткого рентгеновского излучения. Предлагаемый подход продемонстрирован на примере двухлучевого интерферометра с преломляющей призмой. Показано, что представленный метод кодировки существенно упрощает код основной программы, повышает его читабельность и легкость модификации.

1. Введение

Использование современных средств программирования, в частности объектно-ориентированного программирования (ООП), в численных задачах математической физики и при моделировании физических процессов долгое время ограничивалось такими простыми средствами, как создание типов для представления комплексных чисел, векторов, тензоров и т.д. Традиция была нарушена в 2007 г. третьим изданием программного обеспечения «Numerical Recipes» [1], в котором принципы ООП были использованы как для представления математических функций, так и для реализации численных алгоритмов.

Кодирование математических функций классами удобно для представления физических данных, задаваемых функциональной зависимостью (пространственное распределение плотности вещества, электромагнитное поле, волновая функция и т.д.). Такой подход позволяет: скрывать глобальные параметры, необходимые для вычисления функций; предоставляет удобное средство для предварительных вычислений, направленных на уменьшение процессорного времени при многократном вызове функции; способствует простоте и компактности кода программы. Введение абстрактного класса для таких функций позволяет абстрагироваться от способа представления функций (представление в виде таблицы с постоянным или переменным шагом, суперпозиция базисных функций, сплайн интерполяция и т.д.) и сосредоточиться на физической сущности основной за-

дачи. В представленной работе демонстрируется развитие такого подхода на примере оптики жесткого рентгеновского излучения.

В диапазоне длин волн, соответствующем жесткому рентгеновскому излучению, коэффициент преломления веществ мало отличается от единицы ($|n - 1| \ll 1$). Почти всегда это приводит к пренебрежимо малому смещению траектории рентгеновских лучей при распространении в веществе и отсутствию отраженной волны (исключение составляет брэгговская дифракция, падение излучения на объект под экстремально малым углом скольжения и т.д.). С другой стороны, в большинстве экспериментальных установок рентгеновской оптики расстояние объектов от источника излучения намного больше ширины рентгеновского пучка, так что угловое расхождение пучка, падающего на объект слишком мало. Таким образом, можно считать, что рентгеновский пучок распространяется по прямой вдоль оптической оси устройства, а объекты, расположенные на его пути плоскими. Влияние этих объектов на рентгеновское излучение можно описывать комплексным амплитудным коэффициентом пропускания, являющимся функцией от поперечных координат (координат в плоскости, перпендикулярной оптической оси). Фаза этого коэффициента описывает фазовый сдвиг излучения в объекте, а амплитуда – поглощение [2,3]. Эти допущения сильно упрощают задачу численного моделирования в области оптики жесткого рентгеновского излучения.

В данной работе предлагается пакет классов для таких задач, основанный на вышеприведенных принципах об использовании ООП в физике. Рассмотрим этот пакет на примере простого двухлучевого интерферометра с призмой [4].

2. Код основной программы и использованные классы для интерферометра с призмой

На рис.1 приведена схема устройства отображения рентгеновского фазового контраста с помощью двухлучевого интерферометра с призмой. Опорная волна образуется частью исходного пучка, падающего на призму и преломленного в ней, а объектная волна – частью пучка, проходящего выше призмы. При отсутствии тестируемого фазового объекта (объект из легких элементов, как

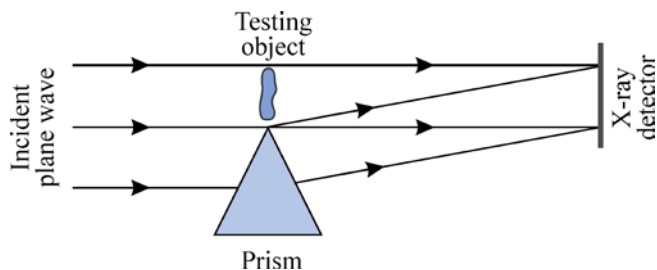


Рис.1. Принципиальная схема отображения фазового контраста с помощью двухлучевого интерферометра с призмой.

например, мягкие биологические ткани) на детекторе образуется интерференционная картина в виде параллельных полос с шагом $d = \lambda/\varphi$, где λ – длина рентгеновской волны, а φ – угол преломления рентгеновских лучей в призме. Наличие тестируемого фазового объекта на пути объектной волны приводит к перераспределению фазы объектной волны, что отражается на интерференционной картине соответствующим искривлением интерференционных полос. Восстановление двумерного распределения фазового сдвига, произведенного тестируемым объектом, по регистрируемой интерференционной картине, осуществляется специальными алгоритмами «Метод преобразования Фурье» [5] и «Метод сканирования полос» [6].

Ниже приводится упрощенный код основной программы для вычисления интерференционной картины, образованной в вышепредставленном интерферометре:

```
#include "X_Ray_Opt.h"
int main() {
    Rectangle wave_dom( ... );           // X-ray domain
    Test_obj object( ... );              // the test object
    Priam_obj prism( ... );              // the refracting prism
    X_Ray wave( &wave_dom, ... );        // initial plain wave
    wave.put_object( object );            // test object crosses the beam
    wave.put_object( prism );             // prism crosses the beam
    wave.propagation( /*distance prism - detector*/ );
    wave.output_intens( /*file name*/ ); }
```

Иерархия использованных в программе классов приведена на рис.2. Здесь Funct_2D – абстрактный класс, представляющий комплексную функцию от двух вещественных переменных:

```
class Funct_2D {
    Funct_2D( const Domain * = 0 );
    std::complex<double> operator() ( double, double ) const=0;
    ..... };
```

Вызов значений функции осуществляется простым выражением $F(x,y)$, где x и y – аргументы функции, а F – объект потомка класса Funct_2D, реализующий

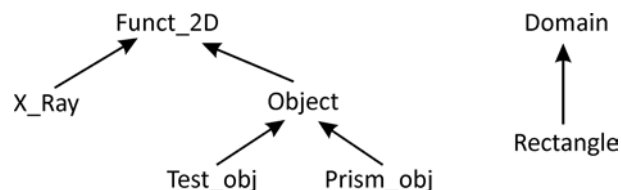


Рис.2. Иерархия наследования использованных классов.

данную функцию.

Абстрактный класс `Domain` предоставляет двумерную область, а `Rectangle` – его реализация в виде прямоугольника. Класс `Domain` используется в `Funct_2D` для задания области определения функции.

Класс `Object` представляет общий интерфейс для различных объектов, расположенных на пути рентгеновского пучка. Его цель – вычисление амплитудного коэффициента пропускания объектов, задаваемого в виде функции от двух пространственных координат. Помимо используемых в этой задаче тестового фазового объекта (`Test_obj`) и призмы (`Prism_obj`), потомками этого класса могут быть различные диафрагмы, ножи, френелевские зонные пластины, рефракционные линзы и другие устройства, используемые в рентгеновской оптике для управления пучком излучения.

Класс `X-Ray` описывает когерентный рентгеновский пучок:

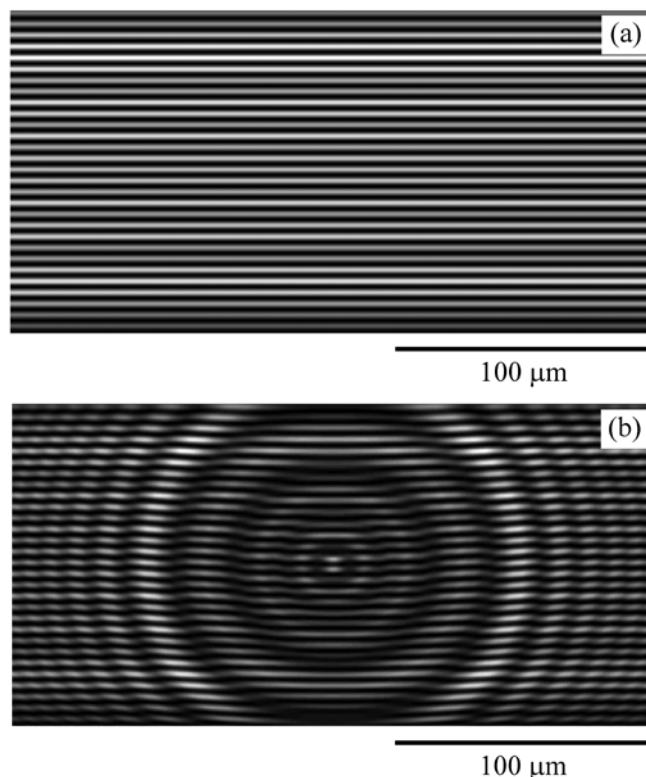


Рис.3. Численно моделированная интерференционная картина при (a) отсутствии и (b) наличии тестируемого объекта. Значения основных параметров интерферометра выбраны согласно [4]: длина волны рентгеновского излучения – 0.1 нм, удаление рентгеновского детектора от призмы – 5.4 м, угол преломления рентгеновских лучей в призме – 23 мкрад. Тестовый объект является шаром из акриловой смолы диаметром 49.6 мкм. Смещение фазы рентгеновского луча при прохождении по центру шара составляет -10.1 рад.

```

class X_Ray :public Funct_2D {
    .....;
    X_Ray( const Rectangle*, /* incident wave parameters */...);
    void put_object( Object & );
    void propagation( double /*prop. Distance*/ );
    void output_intens( const char * /*output file name*/ ); };

```

В зависимости от параметров инициализации объекты этого класса могут представлять как плоскую волну, так и волну со сферическим или цилиндрическим волновым фронтом. Член-функция `put_object(Object &)` описывает влияние на рентгеновскую волну объекта, расположенного на его пути. Его задача сводится к умножению электрической напряженности рентгеновской волны на амплитудный коэффициент пропускания этого объекта. Член-функция `propagation(double)` описывает распространение рентгеновского пучка в вакууме, а `output_intens(const char *)` записывает на жесткий диск двумерный массив, представляющий распределение интенсивности рентгеновского излучения на плоскости, перпендикулярной оптической оси, в частности, распределение интенсивности на детекторе рентгеновского излучения.

На рис.3 представлены численно моделированные интерференционные картины при (а) отсутствии и (б) наличии тестируемого объекта. Искривление интерференционных полос во втором случае обусловлено смещением фазы объектной волны в шарообразном тестируемом объекте.

3. Заключение

Таким образом, использование принципов ООП в численном моделировании задач оптики жесткого рентгеновского излучения позволяет создавать библиотеку классов, в которой каждому оптическому устройству соответствует определенный класс. При этом основная программа сводится к определению и последовательному «включению» в программу устройств, используемых в экспериментальной установке по ходу распространения рентгеновского пучка вдоль оптической оси. В результате программа становится компактной и хорошо отражает физическую сущность задачи, код программы выигрывает в читабельности и легкости модификации.

ЛИТЕРАТУРА

1. **W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery.** Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing. New York, Cambridge University Press, 2007.
2. **В.Г. Кон, М.А. Орлов.** Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **11**, 76, 2010.
3. **V.G. Kohn, I.I. Snigireva, A.A. Snigirev.** Crystallography Reports, **51**, S4 (2006).
4. **Y. Suzuki.** Jpn. J. Appl. Phys., **41**, L1019 (2002).

5. **M. Takeda, H. Ina, S. Kobayashi.** J. Opt. Soc. Am., **72**, 156 (1982).
6. **J.H. Bruning, D.R. Herriott, J.E. Gallagher, D.P. Rosenfeld, A.D. White, D.J. Brangaccio.** Appl. Opt., **13**, 2693 (1974).

ՖՈՒՆԿՑԻԱՆԵՐԻ ԿՈԴԱՎՈՐՈՒՄԸ ԴԱՍԵՐՈՎ,
ԿՈՇՏ ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՃԱՌԱԳԱՅԹՆԵՐԻ ՕՊՏԻԿԱՅԻ
ԹՎԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՄԱՆ ԽՆԴԻՐՆԵՐՈՒՄ
Լ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Դիտարկված է կոշտ ռենտգենյան ճառագայթների օպտիկայի թվային մոդելավորման խնդիրներում օբյեկտային-կողմնորոշված ծրագրավորման սկզբունքների կիրառման նպատակահարմարությունը: Առաջարկված մոտեցումը ցուցադրված է հատվածակողմով երկճառագայթային ինտերֆերաչափի օրինակի վրա: Ցույց է տրված, որ կոդավորման առաջարկված եղանակը էապես պարզեցնում է հիմնական ծրագրի կոդը, այն դարձնելով հեշտ ընթեռնելի և հեշտ ձևափոխելի:

CODING OF FUNCTIONS BY CLASSES FOR NUMERICAL SIMULATION IN HARD X-RAY OPTICS

L.A. HAROUTUNYAN

The advantage of implementation of object-oriented programming principles in numerical simulation in the hard X-ray optics was considered. The suggested approach was demonstrated on the example of the two-beam X-ray interferometer with refracting prism. It was shown that the proposed coding technique significantly simplifies the main program code by reducing its size, as well as making it easier to read and modified.