

Также были получены такие характеристики, как средние значения скоростей и направлений движения клеток, их траектории, площади и эквивалентные радиусы, которые также могут быть использованы при изучении свойств живых клеточных популяций.

Разработанный метод отслеживания позволяет собирать информацию для получения представления о характере развития исследуемой популяции эмбриональных клеток мыши. В дальнейшем при поддержке Института генетики и цитологии НАН Беларуси [2] эти сведения будут использованы при разработке математической модели поведения и непосредственном моделировании данной клеточной популяции.

Литература

1. *Дромашко С. Е.* Компьютерная видеомикроскопия живых клеток : учеб.-метод. пособие. Минск, ИПНК, 2010.
2. Интернет-адрес: <http://labmcp.at.tut.by/>.
3. *Yaeger S., Song Q., Chen S.-S.* DYNAMIK: a software for cell DYNAmics, Motility, and Information tracking, with an application on Ras pathways. *Bioinformatics*. 2009. Vol. 25, № 18. P. 2383–2388.
4. *Meijering E., Dzyubachyk O., Smal I.* Methods for cell and particle tracking. Elsevier. 2012. Vol. 504, Ch. 9, P. 183–200.
5. *Sacan A., Ferhatosmanoglu H., Coskun H.* CellTrack: an open-source software for cell tracking and motility analysis. *Bioinformatics*. 2008. Vol. 24, № 4. P. 20–33.
6. *Гонсалес Р., Вудс Р., Эддингс С.* Цифровая обработка изображений в среде MATLAB. Москва, Техносфера, 2006.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ СТРУКТУРАХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

**Ю. Р. Яскевич, Н. В. Серикова, П. В. Петров,
Н. Н. Кольчевский, И. Л. Мудрецов**

На сегодня весь ряд модификаций рентгеновских линз можно разделить на одномерные, двумерные и трехмерные фокусирующие линзы. К одномерным фокусирующим линзам относятся плоскостные параболические конструкции [1], линзу-аллигатор [2], линза-клессидра [3], планарные рентгеновские линзы, которые способны фокусировать или коллимировать рентгеновские лучи. К двумерным фокусирующим линзам относят систему из отверстий в материале [4] (в одной из разновидностей данной линзы отверстия просверливаются в двух перпендикулярных друг к другу плоскостях), составные параболические линзы [5], линзу-аллигатор, линза-клессидра, составная линза-киноформ [6], планарные рентгеновские линзы [7], микрокапиллярные преломляющие линзы [8], адиабатические линзы [9], на основе которых можно создать

рентгеновский микроскоп. Трехмерные фокусирующие линзы представляют собой пространственные трехмерные массивы из линз, к которым можно отнести метаматериалы, 3D-линзу [10] и линзу-клессидра. Основными проблемами при создании рентгенооптических систем и элементов является: сложность их изготовления и недолговечность многих конструкций. Структура рентгенооптических линз должна быть практически идеальной. Большое количество разнообразных конструкций линз показывают, что работы направлены на создание преломляющих линз и их оптимизация является важной задачей. Поэтому актуальным является использование методов компьютерного моделирования, особенно на этапах планирования эксперимента и априорной (теоретической) оценке ожидаемых результатов. Расчеты для рентгенооптических систем ведутся в приближении геометрической оптики ($\lambda \ll$ линейных размеров) методом Монте-Карло в структурах с большим числом преломляющих поверхностей.

Программа «Xray-SKIF» предназначена для моделирования распределения интенсивности излучения в многоэлементных преломляющих линзах. Программа «Xray-SKIF» написана на языке программирования C++. Для распараллеливания программы применялся интерфейс MPI, в частности библиотека MPICH2. Запуск и выполнение программы производились удаленно из локальной сети БГУ на суперкомпьютере СКИФ-БГУ. СКИФ-БГУ имеет следующие характеристики:

- Пиковая производительность, Гфлопс – 1267,2;
- Реальная производительность, Гфлопс – 1016;
- Число вычислительных узлов/процессоров – 144/288;
- Тип процессоров – AMD Opteron 248 (2.2 ГГц);
- Оперативная память на узле, Гб – 4.

Процесс работы программы «Xray-SKIF» состоит из 3 этапов:

1. Задание начальных данных (кол-во линз, поглощения, кол-во лучей и др.).
2. Моделирование прохождения лучей через составную линзу и сохранение выходных векторов и интенсивностей в динамический массив.
3. Расчет распределения интенсивности на экране.

При запуске программы инициализируются входные параметры составной линзы, количество используемых процессоров и динамические массивы для хранения результатов. Далее пересылаем входные данные во все процессоры, определяем количество лучей, которое будет рассчитывать каждый процессор. Генерируем случайные числа для задания направления векторов рентгеновских лучей на входной апертуре преломляющей рентгеновской линзы.

На втором этапе моделируем прохождение лучей через составную линзу. Результат данного моделирования сохраняем в динамических массивах. Каждый динамический массив содержит интенсивность прошедших лучей и вектора их направлений на выходе из составной линзы. Запись в динамический массив позволяет восстанавливать распределение интенсивности излучения на детекторе в произвольном сечении за линзой. Это позволяет сэкономить время, не выполняя повторных расчетов большого числа лучей.

На третьем этапе задаем расстояние от линзы до детектора, его разрешение и, используя данные динамических массивов, вычисляем распределение интенсивности излучения в каждом процессоре. Суммируем полученные результаты из каждого процессора и формируем итоговое распределение интенсивности излучения на детекторе.

В программе делались засечки для точного определения времени выполнения основных частей программы, а также для обнаружения проблемных областей вызывающих замедление работы программы. Наибольшее время затрачивалось на расчеты прохождения лучей через составную линзу. Время построения результатов на детекторе занимает несколько секунд для количества лучей более 10^8 . Для подсчета времени выполнения применялась функция библиотеки MPICH2 `MPI_Wtime()`.

При моделировании производилось большое количество запусков программы «Xray-SKIF» на суперкомпьютере СКИФ-БГУ. Во время запусков менялось количество моделируемых лучей и количество используемых процессоров. Количество лучей, используемое в расчетах, варьировалось от 10^3 до 10^8 , количество процессоров – от 1 до 30.

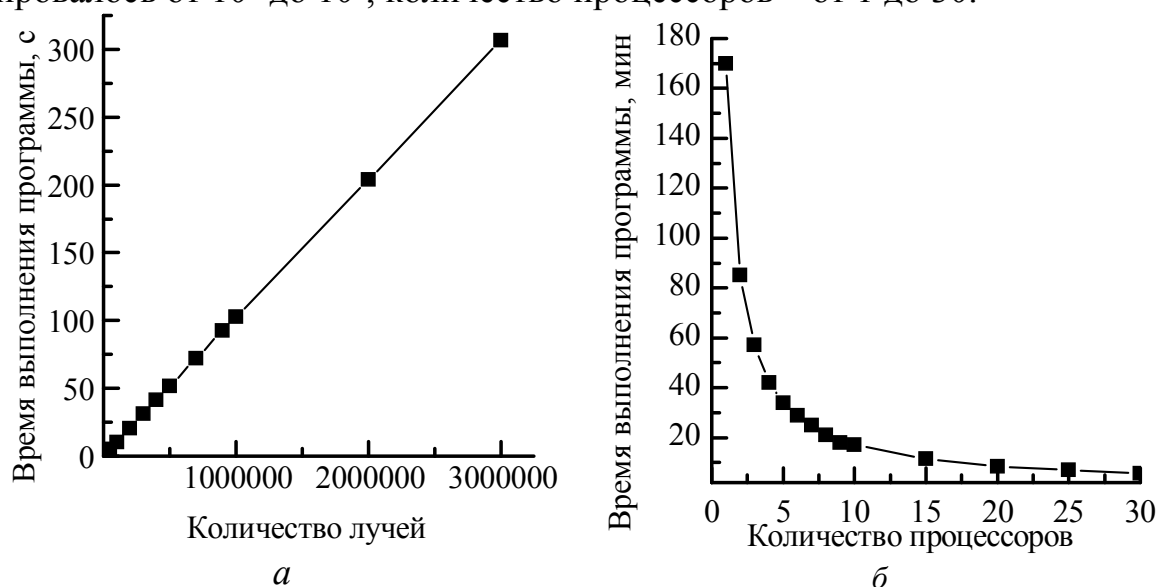


Рис. 1. Зависимость времени: а) от количества лучей на одном процессоре, б) от количества процессоров при количестве лучей равном 10^8

На основе полученных данных были построены графики зависимости времени от количества лучей (рис 1 а) и зависимости времени от количества процессоров (рис 1 б). Анализируя полученные графики можно увидеть, что зависимость времени расчета от количества лучей является линейной, а зависимость количества лучей от числа процессоров – гиперболической, что говорит об эффективности применения параллельных алгоритмов расчета и позволяет заранее оценить время расчета заданного количества лучей.

Установлено, что увеличение числа процессоров ведет к пропорциональному уменьшению времени расчетов: при расчете 10^8 лучей и числа процессоров от 1 до 30 время выполнения программы уменьшилось с 3 часов до 6 минут. С использованием разработанной параллельной программы «Xray-SKIF» были рассчитаны распределения интенсивности излучения в преломляющей рентгеновской линзе в приближении геометрической оптики для 10^8 лучей. Полученные данные позволяют восстанавливать распределение поля рентгеновской составной линзы на детекторе с разрешением 10 нм. Можно ожидать, что применения суперкомпьютера с характеристикой производительности 10 PFlop/s программа «Xray-SKIF» позволит выполнить расчеты поля для 10^{13} лучей, что соответствует разрешению 0.1 А.

Литература

1. *Lengeler B., Schroer C., Tümmler J., Benner B., Richwin M., Snigirev A., Snigireva I., and M. Drakopoulos*, Imaging by parabolic refractive lenses in the hard X-ray range, *J. Synchrotron Rad.* (1999) vol. 6 P. 1153–1167.
2. *Jark W.*, A simple x-ray monochromator based on an alligator lens, *X-Ray Spectrom.* (2004), vol 33. P. 455–461.
3. *Jark W., Pérennès F., Matteucci M., De Caro L.*, CLESSIDRA: focusing hard x-rays efficiently with small prism arrays, *Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics*, Springer Series in Optical Sciences, (2008), vol. 137. Pp. 331–351. Springer.
4. *Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B.*, (1996), *Nature*, V. 384. P. 49.
5. *Nazmov V., Reznikova E., Somogyi A., Mohr J., Saile V.* Planar sets of cross x-ray refractive lenses from SU-8 polymer, *Proceedings of SPIE*, (2004), vol. 5539. Pp. 235–243.
6. *Evans-Lutterodt K., Stein A., Ablett J. M., Bozovic N.* Using Compound Kinoform Hard-X-Ray Lenses to Exceed the Critical Angle Limit, *Phys. Rev. Lett.*, (2007). P. 99. 134801.
7. *Aristov V., Grigoriev M., Kuznetsov S., Shabelnikov L., Yunkin V.* X-ray refractive planar lens with minimized absorption, *Applied physics letters* v. 77, (2000), n. 24. P. 4058–4060.
8. *Dudchik Yu. I. and Kolchevsky N. N.* A microcapillary lens for X-rays, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*, (1998), vol. A 421 P. 361. (1998).
9. *Schroer C. G., Lengeler B.*, Focusing Hard X Rays to Nanometer Dimensions by Adiabatically Focusing Lenses, *Phys. Rev. Lett.*, (2005). P. 94. 054802.

10. *Жданович И. В., Мудрецов И. Л., Петров П. В., Кольчевский Н. Н.*, Расчет геометрических характеристик 3D-линзы, Молодежь в науке – 2012: прил. к журн. «Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі» В 5 ч. Ч 3., сер. физ.-мат. наук / Нац. акад. наук Беларусі, (2013). С. 88–90.