

## Felhasználói dokumentáció

### Bevezetés, a program célja

A program neutrondiffrakciós mérések kiértékelésekor használt módszerek egy részét valósítja meg. Bemenetként random generált párkorrelációs adatokat olvas fel egy fájlból, ezt dolgozza fel. A program Fourier-transzformálja az adatokat, és az így kapott szerkezeti függvényt kiírja egy másik fájlba.

### A program használata

Parancssori futtatás: DFT

A program elvár a futtatható állománnyal azonos könyvtárban egy **input.txt** nevű fájlt. Ebben TAB-bal elválasztva található az r (első oszlop) és gr (második oszlop) adatok értéke.

Példa:

2.240000000 1.344272285

2.310000000 5.080057972

Hasonló módon a program könyvtárában vár egy konfigurációs fájlt **config.txt** néven. Ebben név = érték párok vannak. Ezek a számítások környezeti paraméterei. A fájlban megadható konfigurációs adatok:

Density = 4.3

M= 79

min = 0.36

max= 45

dq = 0.06

A konfigurációs fájl tartalma nem kis-nagybetű érzékeny. A sor minden értelmes pontján lehetnek whitespace karakterek, a sor elején, az egyenlőségjel mindkét oldalán és a konfigurációs értékek után is. Ha valamelyik kötelező értéket kihagyjuk vagy rosszul írjuk be, a program figyelmeztető üzenetet ad és leáll. A paraméterek alapértelmezett értéke 0. Csak a min értéke lehet 0, tehát ez elhagyható a konfigurációból.

### A program kimenete

A program sikeres futtatása után (unix hagyományokhoz híven nem szól semmit, ha sikeresen lefutott) keletkezik egy **output.txt** nevű fájl. A két oszlopos, tab szeparált kimenet a Q és az SQ szerkezeti függvény értékpárjait tartalmazza. Példa kimenet:

0.360 -0.854

0.420 -0.841

0.480 -0.838