

The Design of ObjCryst++

(<https://vincefn.net/ObjCryst/a00008.html>)

Overview of the Library

Scatterer

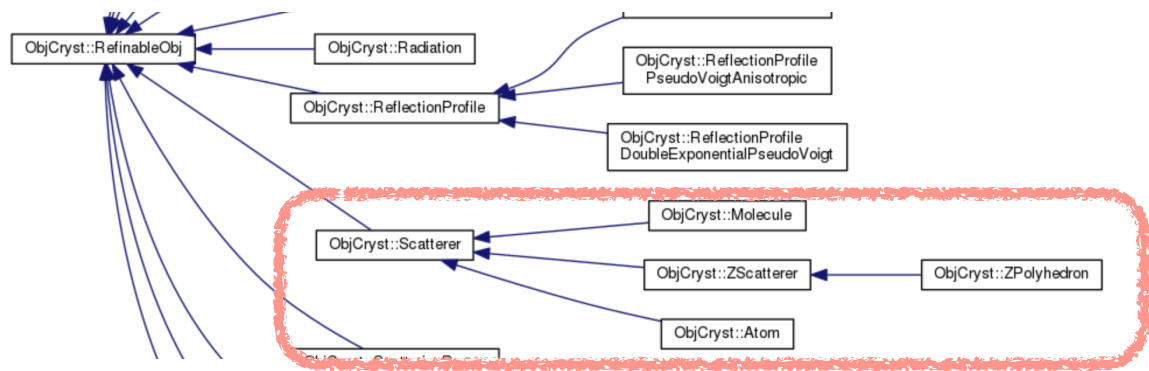
散乱体を表すオブジェクト。

原子の位置とそれに対応した散乱パワーの情報を持つ。

(Scatterer::GetScatteringComponentList())

オブジェクトの3D表示をするための関数もいくつか持つ。

Atom, ZScattererのような全てのScattererはこのクラスを継承している。



ScatteringPower

このクラスはScattering Data オブジェクトの散乱、共鳴、熱因子の計算ができる。

GetScatteringFactor(),

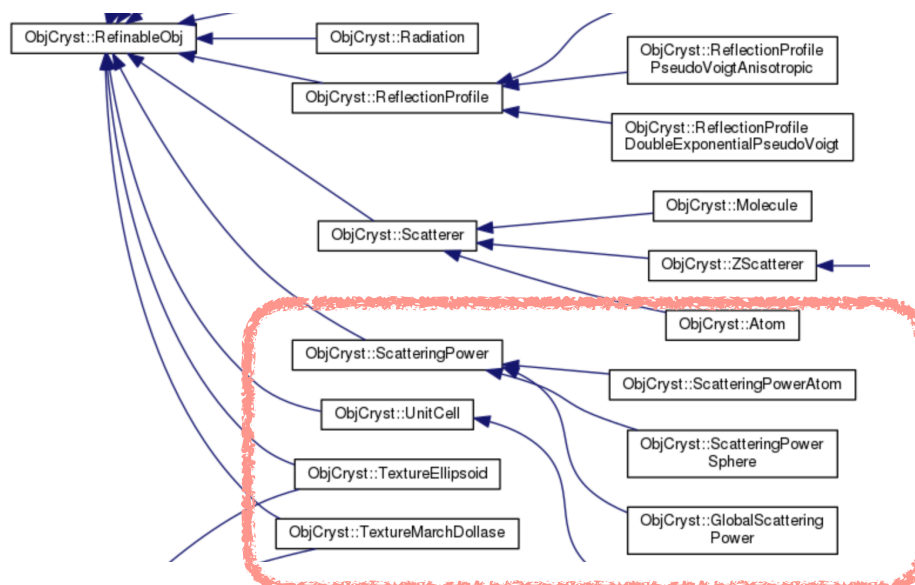
GetTemperatureFactor(),

GetResonantScattFactReal(), and GetResonantScattFactImag()

のメンバー関数を用いて、ScatteringDataオブジェクト中のreflectionのリストに対してこれらの因子を計算できる。

基底クラスは異方性因子を扱うようにデザインされている。

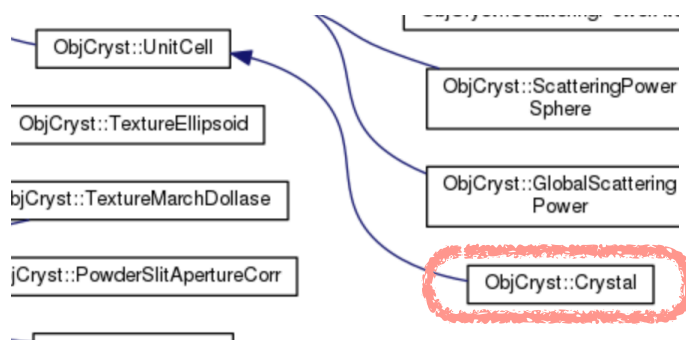
このために、空間群中の対称性のインデックスが与えられている必要がある。



Crystal

CrystalはScattererのリストのある関連した空間群の単位胞である。

(a Crystal is a unit cell with an associated SpaceGroup with a list of Scatterer.)

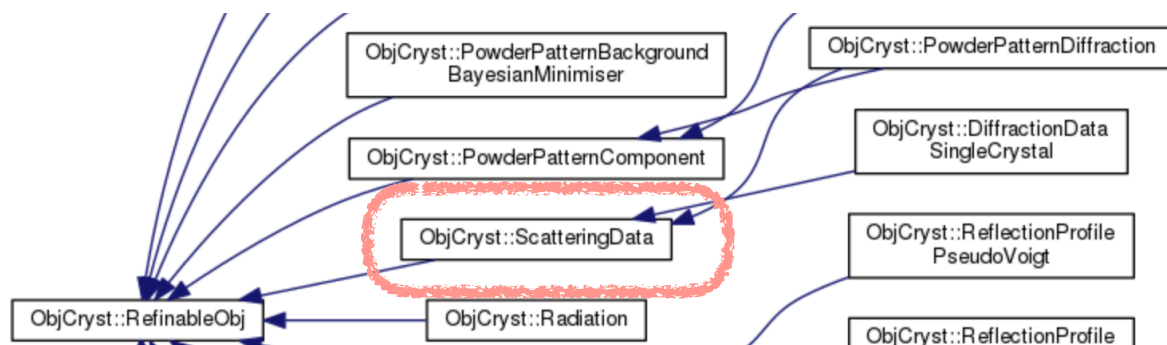


ScatteringData

Scattering Dataは基底クラスである。

これは、基本的にはreflectionのリストであり、構造因子を計算することができる。

DiffractionDataSingleCrystal と PowderPatternDiffractionはこれの子クラスになっている。



Optimization Design

RefinableObj

RefinableObjはライブラリ中のほとんど全てのオブジェクトの基底クラスである。

このような設計にする利点は、アルゴリズムを設計する際にどの種類のオブジェクトが探索されているかを知る必要がないことである。

その際に知っている必要があるのは以下の三点のみである。

- (i) パラメータがいくつあるか
- (ii) これらのパラメータをどのように動かすか
- (iii) どのように最適化されたオブジェクトの、単一または複数の損失関数にアクセスするか。

実際、大域的最適化のクラス（シミュレーティッドアニーリング、交換モンテカルロ法などを行う）は、結晶学的なheaderファイルを持たないが、結晶構造探索を行うことができる。

