

SFF ANALYSIS OF A SMALL-ANGLE SCATTERING DATA FROM PHOSPHOLIPID VESICLES SYSTEMS: ONLINE INTERFACE AND PARALLEL IMPLEMENTATION

M. Bashashin^{a,b,1}, *E. Zemlyanaya*^{a,b}, *M. Kiselev*^{a,b},
K. Lukyanov^{a,b}, *K. Turapbay*^c

^a Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

^b Dubna State University, Dubna, Russia

^c National Research Oncology Center, Nur-Sultan

The study of phospholipid vesicles is one of the hot topics of modern nano- and biophysics in connection with the numerous applications of these objects in medicine, pharmacology, and cosmetology. One of the most effective and intensively used methods for studying the structure and properties of vesicles from small-angle neutron scattering (SANS) data is the separated form factor (SFF) method. Effect of the MPI-based parallel implementation of the SFF analysis of the SANS data is demonstrated. Also, a Windows-based online interface for convenient work with a respective local minimization procedure is presented, and the perspective of extension of such an interface within the HybriLIT platform of the MICC JINR is discussed.

Изучение фосфолипидных везикул — одна из актуальных тем современной нано- и биофизики в связи с их широким применением в медицине, фармакологии и косметологии. Одним из наиболее эффективных и широко используемых методов исследования структуры и свойств везикул по данным малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) является метод разделенных формфакторов (РФФ). В работе продемонстрирована эффективность параллельной реализации РФФ-анализа данных МУРН на основе технологии MPI. Также представлен разработанный на базе ОС Windows онлайн-интерфейс для удобной работы с соответствующими процедурами локальной минимизации, и рассматривается перспектива создания подобной информационной системы в рамках платформы HybriLIT МИВК ОИЯИ.

PACS: 07.05.-t; 07.05.Bx

Received on January 26, 2022.

¹E-mail: bashashinmv@jinr.ru