Shape2SAS——一种用于模拟用户定义形状的小角散射数据和对距离分布的网络应用程序

Andreas Haahr Larsen[a*]、Emre Brookes[b]、Martin Cramer Pedersen[c] 和 Jacob Judas Kain Kirkensgaard[c, d]

[a] 哥本哈根大学，神经科学系，丹麦哥本哈根

[b] 蒙大拿大学，美国蒙大拿州米苏拉

[c] 哥本哈根大学，尼尔斯·玻尔研究所，丹麦哥本哈根

[d] 哥本哈根大学，食品科学系，丹麦哥本哈根

* 通讯作者：andreas.larsen@sund.ku.dk

摘要

Shape2SAS 是一款网络应用程序，可帮助研究人员和学生培养对小角散射的直觉和理解。该应用程序可通过 https://somo.chem.utk.edu/shape2sas 访问。用户通过组合几何子单元来定义任意形状的模型，随后 Shape2SAS 会计算并显示散射强度、对距离分布，以及用户定义形状的可视化图像。它还会生成带有真实噪声的模拟数据。我们展示了 Shape2SAS 如何计算并显示各种几何形状（例如球体和圆柱体）对应的不同散射图样，也展示了如何将结构因子的影响可视化。最后，我们展示了如何轻松生成多对比度粒子，以及如何利用计算出的散射结果验证和可视化分析软件中为拟合小角散射数据而建立的解析模型。

引言

我们介绍 Shape2SAS，这是一个用于模拟各种形状的小角散射数据和对距离分布的网站。Shape2SAS 可作为网络应用程序轻松访问（https://somo.chem.utk.edu/shape2sas），该应用程序使用 GenApp框架 [1] 构建科学软件的图形用户界面。用户可以通过组合球体、圆柱体、立方体或椭球等几何子单元来构建任意形状。每个子单元都被赋予一个过量散射长度密度（对比度），并据此计算由这些子单元组成的指定形状的小角散射强度。该网站对组织小角散射数据分析入门或进阶课程的教育工作者尤其有用。由于它是一款独立网络应用程序，使用时只需具备网络浏览器即可。如本文所示，该程序也可用于开发解析形状因子。

Shape2SAS 应用了此前在 McSim 程序中实现的方法 [2,3], ，并采用了类似的用户输入界面来生成和定位形状。不过，McSim 的网络应用程序现已无法使用；此外，该程序使用 Fortran 编写，除相关论文外没有其他文档。因此，Shape2SAS 使用 Python3 编写，以便更广泛的开发者能够对其进行调整和维护，其网络应用程序则通过 GenApp 提供 [1]。这使我们能够添加若干核心功能，包括直接比较两个模型以及纳入结构因子。

Shape2SAS 可用于教程，通过计算并比较一种或两种不同形状的散射。可以调整参数或模型，以直观了解这些因素的影响。随后，可将模拟数据用作虚拟实验的输出，用于后续教程，或测试分析实验小角散射数据的程序，例如用于拟合解析形状因子的程序，如 SasView (https://www.sasview.org/)、SASfit [4] 或 WillItFit [5], ，或用于从头算建模的程序[6,7]。

应用小角散射理论

本节介绍 Shape2SAS 的理论与计算基础，并说明其实现。

溶液中相同粒子的散射

溶液中相同粒子稀释样品的散射强度由德拜方程 [6], 给出，即对每个粒子中的 N 散射体进行双重求和：

$$I(q) = n \sum_{j,k=1}^{N} \Delta b_j \Delta b_k \frac{\sin(qr_{jk})}{qr_{jk}},$$

其中，n 是粒子的数密度，Δb_j 是 j^{th}散射体的过量散射长度，r_{jk} 是 j^{th} 与 k^{th} 散射体之间的距离，q 是动量转移$q = 4\pi\sin(\theta)/\lambda$，其中$2\theta$ 是散射角，λ 是入射X射线或中子束的波长。

对距离分布

按照散射对之间的距离对其进行分箱后，r，双重求和可以简化为对分箱数量进行单重求和：

$$I(q) = n \sum_{i=1}^{N_{bins}} p_i \frac{\sin(qr_i)}{qr_i},$$

其中 $r_i = \left(i - 1/2\right) dr$，$dr$ 是分箱宽度。p_i 是每个分箱中的配对数量，并按其过量散射长度的乘积加权：

$$p_i = \sum_{j,k=1}^{N} f\left(r_{jk}\right) \Delta b_j \Delta b_k, \qquad \text{where } f\left(r_{jk}\right) = \begin{cases} 1, & \text{if } (i-1)\cdot dr \le r_{jk} < i \cdot dr, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

我们假设散射体为点散射体，因此忽略原子形状因子的影响。这同样是一个双重求和，但与 Debye 求和不同，sin(x)/x 并非针对每个距离进行计算，而只针对分箱直方图进行计算。

对距离分布 $p(r)$ 是 $p = \{p_1, p_2, \ldots, p_{N_{bins}}\}$ 的连续极限，其中 $N_{bins} \to \infty$ 和 $N \to \infty$。在这一极限下，自项（$i = j$）的贡献可以忽略。因此，在 Shape2SAS 中估算 $p(r)$ 和 $I(q)$ 时，求和中不包含自项，并将 $p(0) = 0$ 加入分布中。

用户将散射长度密度作为输入，$\Delta\rho_i = \Delta\, b_i/V_i$，其中 V_i 是i^{th} 散射体的有效体积。点密度保持不变，因此 V_i 也保持不变。计算得到的散射以向前散射归一化，因此 $I(0) = 1$。因此，输出为粒子的无量纲形状因子 $P(q)$，除非选择了可选的结构因子（参见“结构因子”一节）。在此归一化步骤中，散射体的有效体积会消去，数密度也会消去。

分子中的最大距离 D_{max}作为输出给出，同时还会给出回转半径：

$$R_g^2 = \frac{1}{2}\frac{\int_0^{D_{max}} r^2 p(r) dr}{\int_0^{D_{max}} p(r) dr}.$$

输出 $p(r)$ 已归一化，因此最大值为 1。

多分散性

样品中的多分散性意味着所有分子并不完全相同。尺寸、聚集数、一个或多个轴向上都可能存在多分散性；也可以假设模型中的某个参数服从高斯分布，以此近似多分散性。在 Shape2SAS 中，实现了一种通用的多分散性类型：

$$p_{poly}(r) \propto \int_{1-3\sigma_{poly}}^{1+3\sigma_{poly}} p_s(r) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{s-1}{\sigma_{poly}}\right)^2} v^2 ds,$$

其中，s 是对用户定义形状中所有对距离的缩放。$p_s(r)$是形状按 s 缩放后的对距离分布，σ_{poly} 是相对多分散性。$v = s^3$ 是相对（无量纲）体积，用于考虑分子散射强度与分子体积的平方成正比这一事实。相对体积是一种近似，只有对球体而言才精确。相对多分散性 σ_{poly} 是 Shape2SAS 中可选的用户输入，默认情况下不存在多分散性。

虽然这过度简化了样品可能呈现多分散性的多种方式，但这种实现简单易行，可让用户和学生探索多分散性对小角散射数据的影响。此外，与生成一系列描述所需多分散性的结构这一替代方案相比，这种方法的计算效率更高。

结构因子

粒子间相互作用可以用结构因子表示，散射强度则可以表示为形状因子与结构因子的乘积[4]:

$$I(q) \propto P(q) \cdot S(q).$$

目前，Shape2SAS 中实现了两种结构因子：一种是描述粒子间排斥的硬球结构因子[7], ，另一种是描述粒子聚集的二维分形结构因子[8]。此外，还采用了解耦近似来处理非球形或多分散粒子[8,9]。尽管这类粒子间相互作用会影响有效成对距离分布，该程序仅将结构因子应用于计算得到的散射强度。也就是说，如果选择了结构因子，输出的$p(r)$来自非相互作用分子，而$I(q)$来自含有相互作用分子的样品。相互作用分子的$p(r)$可通过 BayesApp [10], 生成；BayesApp 同样可作为 GenApp 中的网络应用程序使用。

界面粗糙度

复合粒子可以通过组合几何子单元来建模。如果子单元具有不同的对比度，模型中子单元之间的锐利边界可能与实际粒子中组件之间较柔和、较平滑的边界存在差异。可以通过在模型中加入表面粗糙度来弥补这一点[11,12],，从而有效地模糊界面:

$$I_{rough}(q) = I(q) \cdot e^{-\frac{1}{2}(q\sigma_R)^2},$$

其中，σ_R 是正态分布的模糊参数。在 Shape2SAS 中，可以选择加入表面粗糙度；与结构因子一样，它只影响$I(q)$，不影响$p(r)$。

模拟实验噪声

Shape2SAS 输出模拟数据，$I(q)$，这些数据由计算得到的散射$I(q)$和经验估算的误差[13]生成：

$$\sigma(q) = s \cdot \sqrt{\frac{5 \cdot 10^6 + I(q)}{0.05\ \text{Å} \cdot q}},$$

其中，s 为缩放常数，用户可对其进行调整以改变相对噪声。常数$5 \cdot 10^6$ 和 0.05 Å 的选取旨在模拟典型同步辐射小角X射线散射数据的噪声。模拟数据$I_{si,}$ (q)取自均值为$I(q)$、标准差为$\sigma(q)$的正态分布。

实现

架构

该程序的设计注重易用性和易维护性。输入参数通过在线图形用户界面（图1）提供。程序通过 Python 封装脚本读取输入。该脚本调用执行计算的 Python 函数，并将输出文件、图表和值返回给封装脚本。最后，封装脚本将输出返回给图形用户界面，由其显示给用户。因此，该程序采用模块化设计，函数可以修改、测试、扩展或新增。

核心功能描述

Shape2SAS 的核心元素之一是用于根据给定子单元生成点的 Python 函数。首先，使用笛卡尔坐标、极坐标或球坐标定义几何子单元的边界。然后，在子单元所定义的体积内生成均匀分布的随机点。最后，如有选择，则将这些点平移至新的质心。为确保点密度恒定（见理论部分），首先计算各子单元的体积，并相应调整插入各子单元的点数，从而使点密度保持恒定。模型中的点总数（模型由一个或多个子单元组成）为 $N = 5000$。选择这一点数是为了兼顾精度与计算成本，计算成本随 N^2 变化。使用 5000 个点时，计算得到的强度在约 $q = 0.2$ Å^{-1} 范围内可精确重现，具体取决于用户定义形状的复杂程度和大小（图S1）。如有重叠，默认会在此阶段移除重叠点；但在多重对比情况下，也可以保留并加以利用（见示例3）。

另一个核心要素是计算模型中所有点之间的距离。这一步既耗时又耗内存，因此是程序的计算瓶颈之一。不过，借助 NumPy 的 [14] 函数 meshgrid()，在 GenApp服务器上计算 5000 个点之间的所有距离不到一秒。另一个计算瓶颈是计算 $p(r)$。这一步使用 NumPy 函数 histogram() 完成。纳入多分散性时，需要计算多个直方图；在这种情况下，Shape2SAS 使用 histogram1d( ) 函数（https://github.com/astrofrog/fast-histogram），速度更快

比 NumPy 的 histogram() 快，但不会输出 r 值。因此，计算多分散性的 $p(r)$ 只需几秒钟。

用户界面

该项目的一个关键目标是提升可访问性和易用性。因此，该程序以网络应用程序的形式实现，无需安装。这种方式非常适合在课程和教程中使用。该程序是 GenApp [1] 愿景的一部分，旨在让所有人都能使用小角散射软件。

用户可以使用一组预定义的几何子单元构建模型，目前包括：球体、三轴椭球、圆柱体、圆盘、立方体、长方体、空心球体、空心立方体、圆柱环和圆盘环。随后可以更改子单元的几何参数，使其偏离默认值，也可以调整其对比度和质心。模型由子单元所跨越体积中的点组成。默认情况下，重叠区域中的点会被删除，但如上所述，此操作为可选项。如果选中了结构因子，图中将同时显示结构因子的散射贡献和总散射。

用户可以选择使用另一个模型计算 $p(r)$ 和 $I(q)$，操作步骤与第一个模型相同。两个模型的 $p(r)$ 和 $I(q)$会同时绘制在图形用户界面中，因此可以直接进行比较，无需在第三方软件中绘图。默认情况下，绘图中模型 2 的模拟数据会缩放 100 倍（图1E），但可以在图形用户界面中调整此缩放比例。

所有输出数据（p（r）、I（q）和 I_{si}、（q）），以及用于可视化的图表和 3D 模型，均可从网络界面下载，以便进行进一步分析、绘图等。

文档和验证

图形用户界面中的所有菜单和输入框均配有帮助文本，将鼠标悬停在相应元素上即可显示。源代码中附有详尽的注释，包括对所有函数的文档说明。图形用户界面中还直接提供了核心参考文献。

每个模型都通过 Jmol（http://www.jmol.org/）插件以三维点模型的形式进行可视化，并生成二维投影。三维模型还会以标准蛋白质数据库（PDB）格式导出，以便进行自定义可视化和渲染。

Shape2SAS 模型和结构因子通过与解析模型对比进行了测试，使用的软件为 SasView（https://www.sasview.org）。

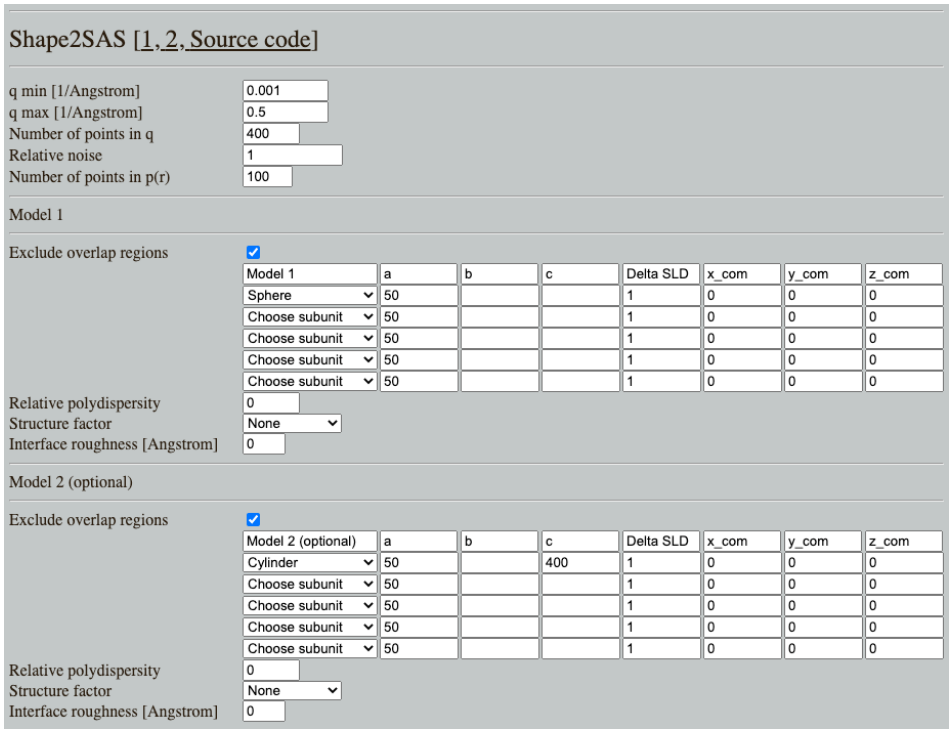
源代码可在 GitHub（https://github.com/ehb54/GenApp-Shape2SAS）上获取，遵循 GNU 通用公共许可证 v3.0。

使用示例

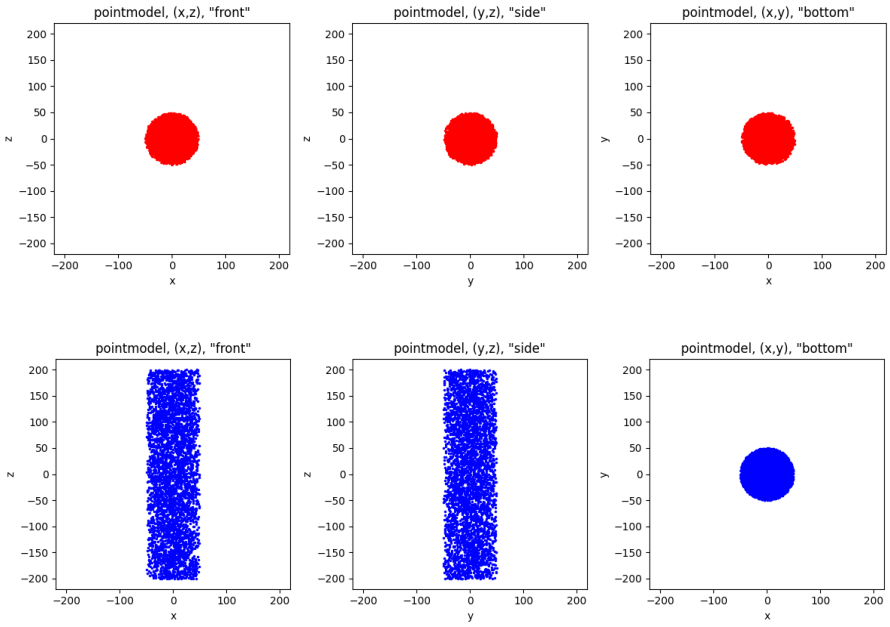
这些示例旨在与科研以及基于科研的教学相关。第一个示例展示了如何使用 Shape2SAS 形成对不同形状小角散射强度的直观认识，第二个示例演示了粒子间相互作用的影响。最后一个示例展示了如何构建更复杂的粒子，以及如何利用 Shape2SAS 测试解析形状因子。

示例 1：比较不同形状产生的散射

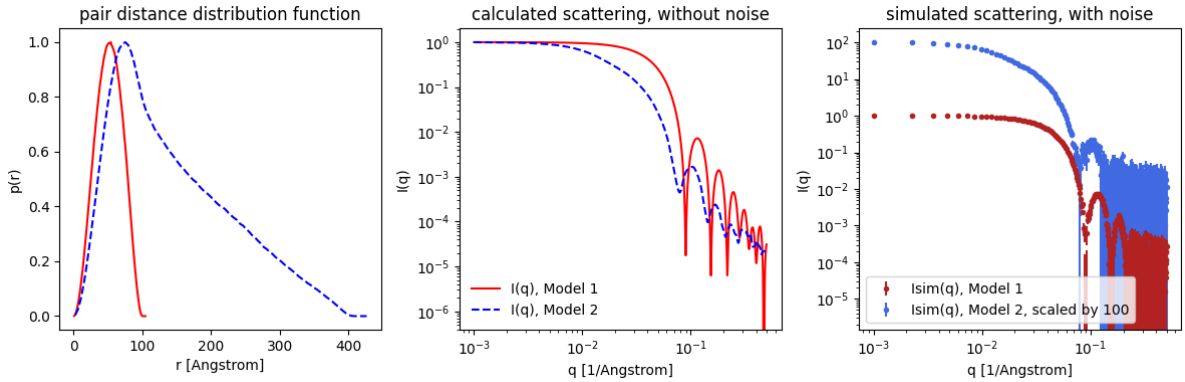
Shape2SAS 可用于快速计算并比较各种几何体的 $p(r)$ 和 $I(q)$。例如，比较半径为 50 Å 的球体与半径相同、长度为 400 Å 的圆柱体所产生的散射（图1）。这样的示例有助于学生建立直观认识，了解球形、细长形或中空体的散射和成对距离分布函数。此外，图形用户界面还会计算并显示 R_g 和 D_{max}，以便快速比较。



(a)



(b)



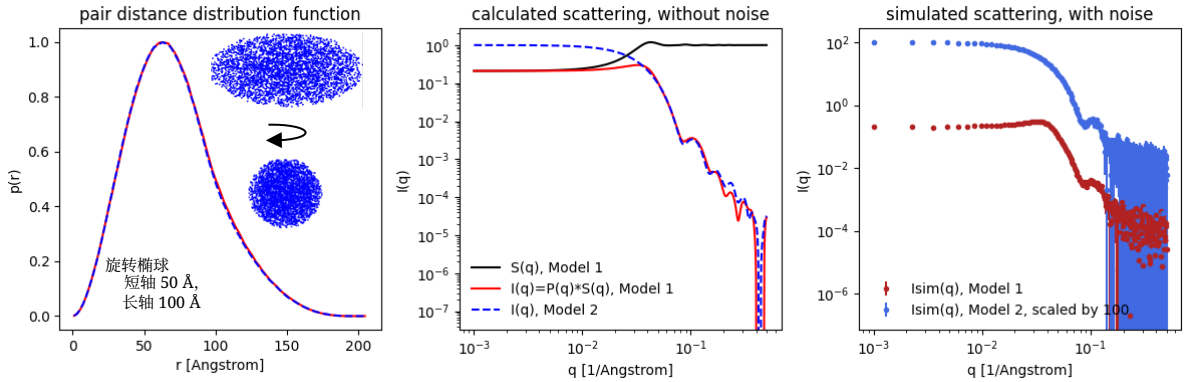
(c) (d) (e)

图1. 使用球体（红色）和圆柱体（蓝色）模拟散射，采用的是 Shape2SAS。（a）带有输入参数的图形用户界面。（b）模型的二维投影。（c）对距离分布。（d）计算得到的散射。（e）带噪声的模拟散射强度。图中显示的内容与其在 Shape2SAS 中的显示方式一致。

示例2：硬球结构因子

Shape2SAS 可利用内置的结构因子，将粒子间相互作用纳入散射计算。图2展示了一个示例：计算旋转椭球体样品（短轴为 50 Å，长轴为 100 Å）在有和没有

粒子间相互作用由硬球结构因子和解耦近似描述，硬球半径为 70 Å，体积分数为 0.2。这样的练习可以帮助学生或研究人员理解结构因子的影响，并在测量的小角散射数据中识别粒子间相互作用。



（a） （b） （c）

图2. 有粒子间排斥和无粒子间排斥时椭球的散射强度。

(a) 两种旋转椭球实例的对距离分布，未考虑粒子间排斥。插图：椭球沿短轴和长轴方向的二维投影。(b) 计算得到的有粒子间排斥和无粒子间排斥时椭球的散射强度。(c) 带有噪声的模拟散射。粒子间排斥由硬球结构因子描述。

示例3：验证解析形状因子

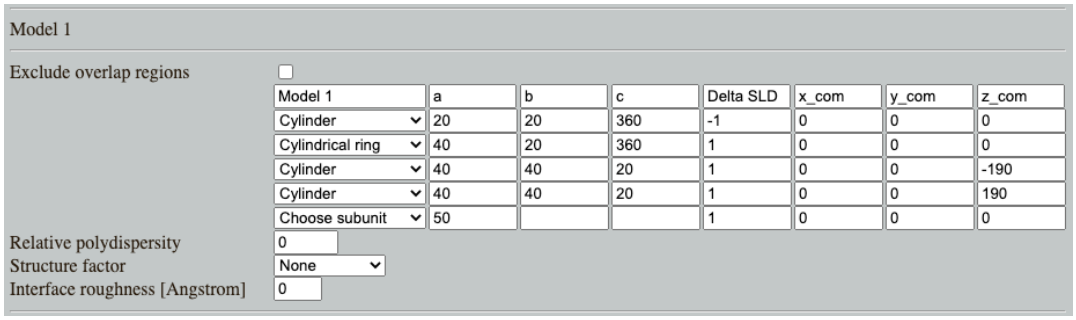
Shape2SAS 可用于开发解析形状因子或推导新的解析形状因子。通过在 Shape2SAS 中生成与解析模型相同的形状，可以对 Shape2SAS 生成的模拟数据进行拟合。本例模拟了一个核壳圆柱（核半径 20 Å、核长度 360 Å、壳层厚度 20 Å、核对比度 -1，壳层对比度为 +1）。本例还展示了如何通过两种方式在 Shape2SAS 中生成多对比度粒子。第一种方法是组合互不重叠的子单元来生成核壳圆柱：一个圆柱核、一个中空圆柱壳，以及两个质心偏移的小圆柱作为端盖（图3a）。第二种方法是组合一个较大的壳层圆柱体和一个较小的核圆柱体，并移除壳层圆柱体中的点

重叠区域内的点（图3b）。两种方法得到相同的模型，$p(r)$ 和 $I(q)$（图3c-d）。如果存在重叠，且未选择排除重叠点，那么重叠区域的对比度实际上将是重叠亚单元对比度之和。

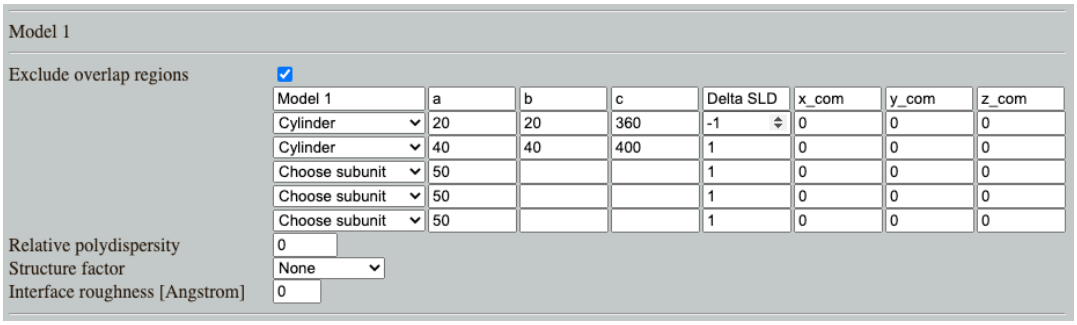
使用 SasView 的解析模型核_壳层_圆柱体（http://www.sasview.org/sasmodels/model/core_shell_cylinder.html）对模拟数据进行了拟合。该模型对数据的描述效果良好（图3d），且模型参数精修后的数值与输入参数一致（核半径 20.10 ± 0.07 Å、核长度 363 ± 2 Å、壳层厚度 20.1 ± 0.1 Å、壳层对比度 +0.97 ± 0.01）。误差为标准差。核对比度固定为 -1，因为同时拟合核对比度、壳层对比度和缩放会导致参数之间高度相关。

所展示的流程可用于测试新的、更复杂的解析模型 [15], ，也可用于将其可视化为珠子模型。

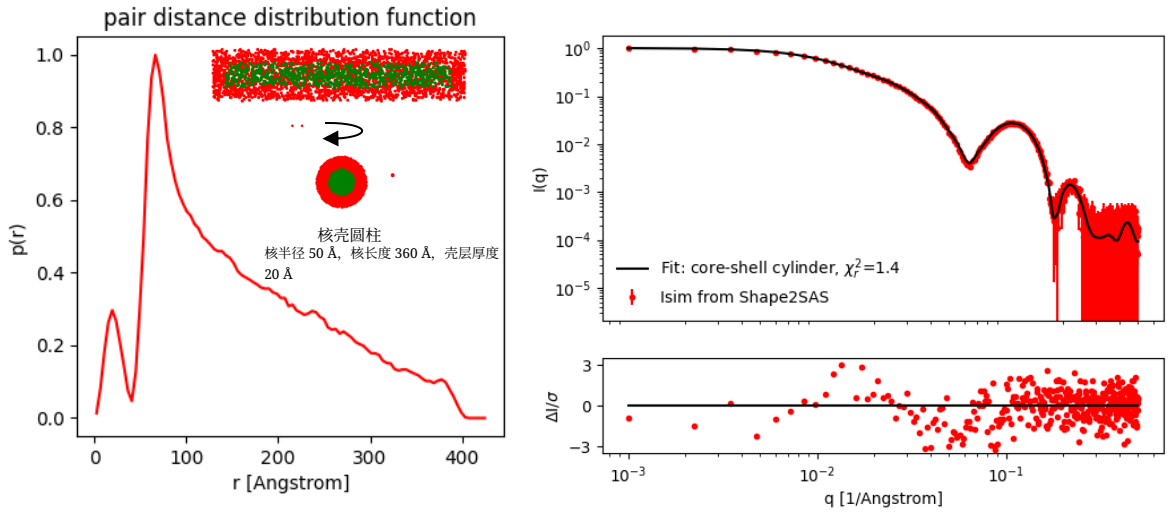
在为溶液中的分子编写小角散射解析模型时，这一工作流程很有帮助。解析模型通常适合在模型精修框架（例如 SasView）中实现，而 Shape2SAS 则提供了一种简单、直观的图形化方式，可在实空间中测试实现及其准确性。



(a)



(b)



(c) (d)

图3。使用 Shape2SAS 模拟并用解析模型。 (a) 未使用排斥时的核壳圆柱输入。(b) 使用排斥时的核壳圆柱输入。(c) Shape2SAS 得出的对距离分布，以及模拟珠子的二维投影（红色：正对比度，绿色：负对比度）。(d) 使用 SasView 的解析模型 核_壳层_圆柱体对模拟数据进行拟合。

讨论

Shape2SAS 可用于演示和教程，这一点通过三个示例得到了展示：示例1比较了球体与圆柱体的小角散射强度；示例2展示了硬球结构因子体现的粒子间排斥效应；示例3展示了如何构建更复杂的形状、赋予其不同的过量散射长度密度，以及如何在开发解析形状因子的过程中使用 Shape2SAS 对其进行测试。

需要注意的是，由于 Shape2SAS 具有随机性，模拟散射与解析模型之间可能存在差异（图3d）。此外，如果拟合多分散性，其实现方式在不同解析模型中可能有所不同，也可能因此产生差异。

Shape2SAS 是众多用于开展虚拟实验的程序之一[16], 其中一些程序还可以生成二维X射线[17,18] 或中子[19] 散射数据。Shape2SAS 专注于数据分析步骤，即将二维数据缩减为一维数据之后，以及可能进行的缓冲液扣除之后。此类虚拟实验软件的共同目标，是帮助用户为充分利用宝贵的束流时间做好准备，并帮助用户更好地理解和分析测量数据。

原则上，可以将 Shape2SAS 的输入参数转换为可变参数，并通过添加缩放项和常数背景，使修改后的程序能够用于拟合。此前已有研究表明，蒙特卡罗珠子建模方法对小角散射分析很有用[20], ，尤其适用于生成难以用解析形状因子描述的复杂模型（例如穿孔囊泡[21] 或蛋白质-脂质复合物[22]）。然而，也有其他采用相同原理、并以拟合为目标开发的程序，包括 CDEF[23] 和 SPONGE

(https://github.com/bamresearch/sponge），我们建议使用这些工具进行拟合。CDEF 与 Shape2SAS 一样，采用散射对分箱的原理，而 SPONGE 则直接应用德拜公式，因此精度更高，但计算时间更长。在拟合实际数据时，我们还鼓励将模型参数化，使其反映物理性质而非几何性质，以便更好地约束和验证精修参数，例如通过生物物理测定（参见例如 [11,24]）。Shape2SAS 无法实现这一点，而通常需要根据具体情况进行调整；若不使用图形用户界面，调整会更容易。

Shape2SAS 也可供下载，并且得益于其模块化架构，其他用户可以轻松复用其功能，以满足特定需求。总而言之，Shape2SAS 让小角散射理论变得直观、可视化、富有趣味且易于新手和经验丰富的用户理解。

致谢

本研究使用了极端科学与工程发现环境（XSEDE）[25]，该环境由美国国家科学基金会资助（资助编号 ACI-1548562）；此外，本研究还通过分配编号 TG-MCB17057，为 EB 使用了印第安纳大学的 Jetstream2 [26] 。本研究受益于 CCP-SAS [27] 软件，该软件由英国工程与物理科学研究委员会（EPSRC，EP/K039121/1）和美国国家科学基金会（NSF，CHE-1265821）联合资助开发。AHL 获得伦德贝克基金会资助，资助编号为 R347- 2020-2339。EB 获得美国国立卫生研究院下属美国国立普通医学科学研究所的资助（编号 GM120600），以及美国国家科学基金会的资助（编号 1912444）。作者谨此感谢 Steen Hansen 提供宝贵的讨论与启发，并感谢哥本哈根大学多门散射技术课程的学生对该程序进行测试。

参考文献

1. Savelyev, A.; Brookes, E. GenApp：用于快速生成 Web 和原生图形用户界面应用程序的可扩展工具。《未来一代计算机系统》 **2019年**，*94*，929–936，doi:10.1016/j.future.2017.09.069。2. Hansen, S. 使用蒙特卡罗模拟计算小角散射轮廓。《应用晶体学杂志》 **1990**，*23*，344–346，doi:10.1107/s0021889890002801。3. Hansen, S. BayesApp 更新：一个用于分析小角散射数据的网站。《应用晶体学杂志》 **2014年**，*47*，1469–1471，doi:10.1107/S1600576714013156。4. Breßler, I.; Kohlbrecher, J.; Thüne mann, A.F. SASfit：一个使用解析表达式库进行小角散射数据分析的工具。《应用晶体学杂志》 **2015**，*48*，1587–1598，doi:10.1107/S1600576715016544。5. Pedersen, M.C.; Arleth, L.; Mortensen, K. WillItFit：一种将受约束模型拟合到小角散射数据的框架。《应用晶体学杂志》 **2013**，*46*，1894–1898，doi:10.1107/S0021889813026022。6. Debye, P. X射线的散射。《物理年鉴》 **1915**，*351*，809–823。7. Kinning, D.J.; Thomas, E.L. 二嵌段共聚物中球形区域之间的硬球相互作用。《大分子》 **1984**，*17*，1712–1718，

doi:10.1021/ma00139a013。

8. Larsen, A.H.; Pedersen, J.S.; Arleth, L. 评估用于分析理想或非理想聚集体小角散射数据的结构因子。《应用晶体学杂志》 **2020年**, *53*, 991–1005, doi:10.1107/s1600576720006500. 9. Kotlarchyk, M.; Chen, S.H. 多分散相互作用胶体的小角中子散射谱分析。《化学物理杂志》 **1983**, *79*, 2461–2469, doi:10.1063/1.446055. 10. Hansen, S. BayesApp：用于小角散射数据间接变换的网站。《应用晶体学杂志》 **2012年**, *45*, 566–567, doi:10.1107/S0021889812014318. 11. Skar-Gislinge, N.; Arleth, L. 磷脂纳米盘的小角散射：分子约束解析模型形状因子的推导与优化。《物理化学化学物理》 **2011**, *13*, 3161–3170, doi:10.1039/c0cp01074j. 12. Als-Nielsen, J. 液-气界面的同步辐射X射线研究。《*Physica*》 **1986**,*140A*, 376–389.

13. Sedlak, S.M.; Bruetzel, L.K.; Lipfert, J. 小角X射线散射测量中统计误差的定量评估。《应用晶体学杂志》 **2017**，*50*，621– 630，doi:10.1107/S1600576717003077。

14. Harris, C.R.; Millman, K.J.; van der Walt, S.J.; Gommers, R.; Virtanen, P.; Cournapeau, D.; Wieser, E.; Taylor, J.; Berg, S.; Smith, N.J.; 等。使用 NumPy 进行数组编程。《自然》 **2020年**，*585*，357–362, doi:10.1038/s41586-020- 2649-2。

15. Jakubauskas, D.; Kowalewska, Ł.; Sokolova, A. V.; Garvey, C.J.; Mortensen, K.; Jensen, P.E.; Kirkensgaard, J.J.K. 光合膜小角散射的超微结构建模。《*Sci. Rep.*》 **2019**，*9*，1–13，doi:10.1038/s41598-019- 55423-0. 16. Lefmann, K.; Willendrup, P.K.; Udby, L.; Lebech, B.; Mortensen, K.; Birk, J.O.; Klenø, K.; Knudsen, E.; Christiansen, P.; Saroun, J.; 等。虚拟实验：中子射线追踪模拟的终极目标。《中子研究杂志》 **2008年**，*16*，97–111, doi:10.1080/10238160902819684。

17. Knudsen, B.E.; Prodi, A.; Willendrup, P.K.; Lefmann, K. McXtrace X射线追踪软件包组件手册，版本 1.0_rc1。**2012年**，*1538*，1–72。18. Franke, D.; Hajizadeh, N.R.; Svergun, D.I. 溶液中生物大分子小角X射线散射数据的模拟。《应用晶体学杂志》 **2020年**，*53*，536–539，doi:10.1107/S1600576720000527。19. Willendrup, P.K.; Lefmann, K. McStas（II）：组件概述、使用方法及用户贡献建议。《中子研究杂志》 **2021**，*23*，7–27，doi:10.3233/JNR- 200186。

20. Pedersen, J.S. 应用于胶体和聚合物系统小角散射数据分析的蒙特卡罗模拟技术。载于中子、*X*射线与光：软凝聚态物质的散射方法；Lindner, P., Zemb, T., 编；爱思唯尔：阿姆斯特丹，2002年；第381–390页 ISBN 0-444-51122-9。

21. Pedersen, J.S.; Oliveira, C.L.P.; Hübschmann, H.B.; Arleth, L.; Manniche, S.; Kirkby, N.; Nielsen, H.M. 通过小角X射线散射确定悬浮液中免疫刺激复合物基质和免疫刺激复合物的结构。《生物物理学杂志》 **2012年**，*102*，2372–2380，doi:10.1016/j.bpj.2012.03.071。

22. Pedersen, M.C.; Johansen, N.T.; Roche, J.; Järvå, M.; Törnroth-Horsefield, S.; Arleth, L. 在磷脂纳米盘中精修含无序结构域的膜蛋白结构模型。*bioRxiv* **2022年**，2022.10.28.512841，doi:10.1101/2022.10.28.512841。

23. Deumer, J.; Pauw, B.R.; Marguet, S.; Skroblin, D.; Taché, O.; Krumrey, M.; Gollwitzer, C. 小角X射线散射：使用德拜散射公式表征立方金纳米颗粒。《应用晶体学杂志》 **2022年**, *55*, 993– 1001, doi:10.1107/S160057672200499X.

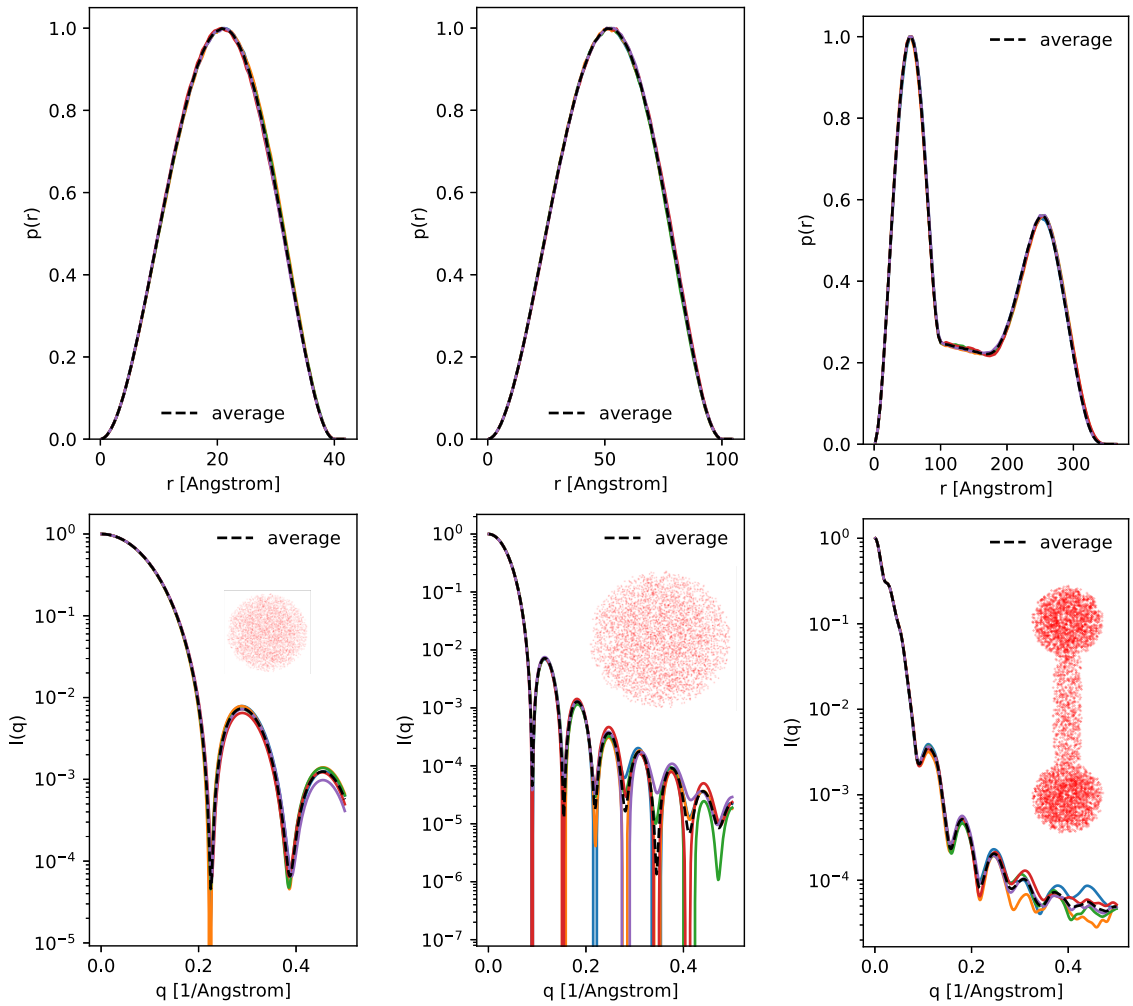
24. Larsen, A.H.; Arleth, L.; Hansen, S. 使用模型拟合和贝叶斯正则化分析小角散射数据。《应用晶体学杂志》 **2018年**, *51*, 1151– 1161, doi:10.1107/S1600576718008956.

25. Towns, J.; Cockerill, T.; Dahan, M.; Foster, I.; Gaither, K.; Grimshaw, A.; Hazlewood, V.; Lathrop, S.; | D.L.; Peterson, G.D.; 等. XSEDE：加速科学发现。计算机科学与工程 **2014年**, *16*, 62–74.

26. Hancock, D.Y.; Fischer, J.; Lowe, J.M.; Snapp-Childs, W.; Pierce, M.; Marru, S.; Coulter, J.E.; Vaughn, M.; Beck, B.; Merchant, N.; 等. Jetstream2：通过 Jetstream 加速云计算。载于《高级研究计算实践与经验》（PEARC '21）论文集；纽约，2021年；第 1–8 页。

27. Perkins, S.J.; Wright, D.W.; Zhang, H.; Brookes, E.H.; Chen, J.; Irving, T.C.; Krueger, S.; Barlow, D.J.; Edler, K.J.; Scott, D.J.; 等。小角散射协作计算项目（CCP-SAS）中的散射数据原子级建模。《应用晶体学杂志》 **2016**，*49*，1861–1875，doi:10.1107/S160057671601517X。

补充图



图S1. 使用5000个点时Shape2SAS的精度。五次重复模拟计算得到的对距离分布和强度。(a) 半径为20 Å的球体；(b) 半径为50 Å的球体。(c) 哑铃形结构，由一个半径为50 Å、长度为200 Å的圆柱体和两个半径为20 Å的球体组成，其质心偏移了±125 Å。