

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В.Ю.ЛУНИН

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ
“БЫСТРОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ”

ФОРТРАН

МАТЕРИАЛЫ ПО
МАТЕМАТИЧЕСКОМУ
ОБЕСПЕЧЕНИЮ ЭВМ

3

ПУЩИНО• 1979

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
НАУЧНЫЙ ЦЕНТР БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ
ЦЕНТР

В.Ю.ЛУНИН

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ
"БЫСТРОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ"
Программное обеспечение структурных
исследований

ПУЩИНО · 1979

УДК 517.52:681.3.06

В выпуске описан комплекс программ Л.Тен Эйка, осуществляющих преобразование Фурье на основе алгоритма быстрого преобразования Фурье. В комплекс входят программы трехмерного дискретного преобразования, ориентированные на использование в задачах рентгеноструктурного анализа, и программы одномерного дискретного преобразования Фурье, которые могут быть использованы в широком классе задач.

This issue contains a description of L.Ten Eyck's program complex for the Fourier transform. These programs use Cooley - Tukey fast Fourier transform algorithm. The complex consists of some three-dimensional discrete Fourier transform programs, specified for the crystallographic tasks; and some one-dimensional ones, which may be widely applied.

Научный редактор Э.Э.ШНОЛЬ

© Научный центр биологических исследований АН СССР
в Пушкине, 1979

В В Е Д Е Н И Е

Данный выпуск посвящен описанию комплекса программ, осуществляющих дискретное преобразование Фурье, на базе алгоритма быстрого преобразования Фурье. Комплекс состоит из нескольких программ трехмерного преобразования Фурье для различных пространственных групп симметрии, шести подпрограмм одномерного дискретного преобразования Фурье комплексных последовательностей, имеющих различную симметрию, и ряда вспомогательных подпрограмм. Все программы написаны на алгоритмическом языке Фортран IV.

Программы комплекса синтеза Фурье были созданы доктором Л.Тен Эйком /1,2/ с использованием алгоритмов Кули-Тукея быстрого преобразования Фурье /3-5/ и с кратким описанием любезно переданы заведующему лабораторией структурного анализа Института белка АН СССР Ю.Н.Чиргадзе в декабре 1975 г. Этот комплекс программ был подробно изучен, адаптирован к ЭВМ серии ЕС и проверен на тестах сотрудниками лаборатории вычислительной математики Научно-исследовательского вычислительного центра АН СССР Л.В.Луневской и В.Ю.Луниным. В ходе проверки в программах были обнаружены и устранены некоторые неточности. Совместно с сотрудниками Института белка АН СССР Ю.Н.Чиргадзе и Ю.В.Сергеевым комплекс был опробован в практической работе для пространственной группы $P4_12_1^2$ с использованием программ для групп $P2_12_1^2$, $Pmmm$, $P1$.

Ядро комплекса составляет ряд высокопрофессионально написанных программ одномерного дискретного преобразования Фурье, вычисляемого как очередной этап в многомерном

синтезе. Эти программы будут, наверное, полезны в любой задаче, требующей вычисления дискретного преобразования Фурье.

Включенные в комплекс программы трехмерного преобразования Фурье имеют более конкретное назначение – задачи кристаллографии. Их специфика заключается в том, что либо результат преобразования, либо преобразуемые величины являются вещественными. Если это условие выполнено, программы могут, конечно, использоваться и для "некристаллографических" задач. Формально эти программы могут осуществлять двумерное и одномерное преобразования Фурье, как частный случай трехмерного, но использование их для таких задач будет, как правило, неэффективно. Здесь лучше написать самим небольшую организующую программу, воспользовавшись имеющимися в комплексе подпрограммами одномерного преобразования Фурье.

Данный выпуск состоит из двух глав. В первой главе дано описание программ, осуществляющих трехмерное дискретное преобразование Фурье в ситуации, когда результат преобразования вещественен. Имея в виду применение этих программ в первую очередь в задачах рентгеноструктурного анализа, в этой главе мы используем принятую в рентгеноструктурном анализе терминологию. В частности, коэффициенты Фурье именуются в этой главе структурными факторами. Автор полагает, что ознакомления с первыми двумя параграфами будет достаточно для того, чтобы начать работать с наиболее универсальной программой трехмерного синтеза. В третьем параграфе приводятся дополнительные сведения, позволяющие учесть в работе симметрию данных. У каждого, кто работает с большими массивами данных, есть своя точка зрения на то, как должны быть организованы входные и выходные данные. С целью свести к минимуму усилия по изменению формата входных и выходных данных в главу включены параграфы 4, 5 и 6, содержащие описание обращения к подпрограммам ввода и вывода.

Вторая глава выпуска посвящена описанию программ одномерного дискретного быстрого преобразования Фурье. Здесь центральное место – первый параграф, где описано вычисление дискретного преобразования Фурье для комплексной последовательности общего вида. Во втором параграфе описан ряд подпрограмм, использование которых позволяет сокра-

тить время вычислений за счет учета свойств симметрии преобразуемой последовательности. Наиболее распространенный случай симметрии такого рода – эрмитова симметричность (что имеет место, когда результат преобразования должен быть вещественным). Третий параграф посвящен более тонкому вопросу – организации одновременного вычисления нескольких преобразований Фурье.

В приложении 1 даны краткие сведения о трех программах, в некотором смысле "обратных" программам, описанным в главе I. Они организуют вычисление трехмерного дискретного преобразования Фурье в случае, когда преобразуемые величины – вещественные числа, а результаты – комплексные.

Алгоритмы работы программ описаны в /1-5/. В настоящем выпуске даны лишь минимальные сведения, необходимые для работы с комплексом. Более подробно все программы комплекса описаны в соответствующем отчете НИВЦ АН СССР (авторы: В.Ю.Лунин, Л.В.Луневская).

ГЛАВА I. ДИСКРЕТНОЕ ТРЕХМЕРНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

В этой главе речь пойдет о программах, осуществляющих преобразование:

$$p_{jx,jy,jz} = \sum_{h=0}^{NX-1} \sum_{k=0}^{NY-1} \sum_{l=0}^{NZ-1} \hat{F}_{hkl} e^{-2\pi i (h \frac{jx}{NX} + k \frac{jy}{NY} + l \frac{jz}{NZ})} \quad (1)$$

в случае, когда результат $p_{jx,jy,jz}$ – вещественная функция. Здесь jx, jy, jz – целые индексы ($0 \leq jx \leq NX-1$, $0 \leq jy \leq NY-1$, $0 \leq jz \leq NZ-1$).

Отметим сразу, что структура описываемых здесь программ предполагает, что размеры массивов коэффициентов Фурье \hat{F}_{hkl} и результата $p_{jx,jy,jz}$ столь велики, что эти массивы не могут быть размещены целиком в доступной для работы области оперативной памяти. Это заставляет использовать рабочий файл для хранения промежуточных результатов. Если же память столь велика, что может вместить массив результата полностью (такая ситуация будет на практике всегда иметь место для двумерных синтезов), то после стандартного сведения преобразования (1) к последовательности одномерных синтезов (см. § 4 этой главы) расчеты могут быть осуществлены сравнительно простой программой без использования рабочих файлов. Примеры такого рода программ даны в § 1 п. 8 второй главы.

На различных этапах работы по расшифровке структуры методом рентгеноструктурного анализа возникает потребность вычисления трехмерного преобразования Фурье:

$$\rho(x,y,z) = \sum_{h,k,l} F_{hkl} e^{-2\pi i (hx + ky + lz)} , \quad (2)$$

где $\rho(x,y,z)$ – искомая периодическая функция с периода-

ми, равными единице по всем переменным; F_{hkl} - заданные (вообще говоря, комплексные) числа. Мы будем далее, как это принято в кристаллографии, называть величины F_{hkl} структурными факторами, хотя, конечно, это могут быть и интенсивности (при расчете функции Патерсона), и вообще произвольные коэффициенты Фурье в некристаллографических задачах.

В силу периодичности функция $\rho(x,y,z)$ определяется своими значениями в "элементарной ячейке" $\{0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1\}$. На практике для изучения функции $\rho(x,y,z)$ ее вычисляют, обычно, на равномерной трехмерной сетке, то есть разбивают ребра элементарной ячейки, идущие вдоль осей x, y, z на N_x, N_y, N_z частей, соответственно, и вычисляют величины

$$\rho_{jx,jy,jz} = \rho\left(\frac{jx}{N_x}, \frac{iy}{N_y}, \frac{iz}{N_z}\right)$$

для $j_x = 0, 1, \dots, N_x - 1; j_y = 0, 1, \dots, N_y - 1; j_z = 0, 1, \dots, N_z - 1$
по формуле (1), где, если говорить строго, должно быть

$$\hat{F}_{hkl} = \sum_{m_1, m_2, m_3 = -\infty}^{+\infty} F_{h+m_1 \times N_x, k+m_2 \times N_y, l+m_3 \times N_z}. \quad (3)$$

Однако на практике мы всегда имеем ограниченный набор структурных факторов F_{hkl} , причем число точек, в которых мы хотим определить функцию $\rho(x,y,z)$, как правило, пре-восходит число известных структурных факторов. Заменяя неизвестные нам структурные факторы нулями, мы сводим, таким образом, сумму в (3) к одному слагаемому. (Обсуждение этого вопроса см., например, в /2/).

Спецификой выполнения преобразования (2) в кристаллолографических задачах является то, что результат $\rho(x,y,z)$ - вещественная функция, имеющая, как правило, некоторую симметрию. Учет этого обстоятельства позволяет в несколько раз сократить время вычислений. Кроме того, симметрия $\rho(x,y,z)$ приводит к определенной симметрии структурных факторов F_{hkl} /3/, что позволяет осуществлять преобразование (1), имея в наличии лишь "независимую часть" набора F_{hkl} .

В комплексе имеются программы, осуществляющие вычисления по формуле (1) с использованием алгоритма быстрого

преобразования Фурье в случае, когда результат $\rho(x,y,z)$ – вещественная функция, имеющая симметрии одной из следующих пространственных групп: P1, $P\bar{1}$, P2, $P2_1$, $P2/m$, P222, $P2_12_12_1$, Pmmm. При работе в пространственной группе, отличной от указанных выше, целесообразно использовать при расчете синтеза (1) программу для наиболее симметричной из перечисленных групп, содержащейся в требуемой группе.

Замечание. Поскольку группа P1 содержится в любой пространственной группе, то все синтезы можно вычислять по программе TRI для группы P1. Недостаток такого подхода – увеличение времени вычислений, а также необходимость генерации недостающей части величин F_{kl} . В случае высокосимметричных групп обычно используют лишь "независимую часть" экспериментальных данных. Для того чтобы воспользоваться программой TRI, надо иметь полный набор данных F_{kl} (то есть имеющуюся "независимую часть" данных нужно предварительно размножить по симметрии).

§ 1. ОБРАЩЕНИЕ К ПРОГРАММАМ ТРЕХМЕРНОГО СИНТЕЗА

В комплексе имеются восемь программ трехмерного дискретного преобразования Фурье, оформленных как подпрограммы. Имена подпрограмм:

TRI	- для пространственной группы	P1,
P1BAR	- для пространственной группы	$P\bar{1}$,
TWOFLD	- для пространственной группы	P2,
P21	- для пространственной группы	$P2_1$,
P20VM	- для пространственной группы	$P2/m$,
P222	- для пространственной группы	P222,
ORTH21	- для пространственной группы	$P2_12_12_1$,
PMMM	- для пространственной группы	Pmmm.

Каждая из программ занимает в памяти (55 K+ размер рабочей области) байт памяти.

1. Вызов подпрограмм.

CALL * (X,NSIZE)**

Здесь *** – означает одно из перечисленных выше имен подпрограмм;

X – вещественный рабочий массив (буфер) размерности NSIZE;

NSIZE - размерность массива X.

Скорость работы программы увеличивается с увеличением размера NSIZE и становится максимальной, когда массив X в состоянии вместить весь результат синтеза.

2. Пример 1. Программа, осуществляющая синтез (1) для группы Р1.

```
DIMENSION X(20000)
CALL TRI(X,20000)
STOP
END
```

3. Ввод управляющих данных. Управляющие данные (на перфокартах или в образах перфокарт) вводятся программами синтеза из файла с форTRANовским ссылочным номером 1. Набор управляющих карт одинаков для всех программ синтеза. Все вещественные числа вводятся по формату 8F10.0, все целые - по формату 16I5. Заголовок вводится по формату 20A4.

Требуется семь управляющих карт.

1. TITLE: 80 символов - заголовок. Для работы программы несущественен; выводится на печать для идентификации результата.
2. MAXH, MAXK, MAXL: три целых числа, определяющие верхние значения индексов h,k,l. В синтез (1) берутся F_{hkl} с $|h| \leq MAXH$, $|k| \leq MAXK$, $|l| \leq MAXL$. Все остальные структурные факторы F_{hkl} в (3) полагаются равными нулю. (Также полагаются равными нулю величины F_{hkl} , не найденные в файле со входными данными).
3. NX, NY, NZ: три целых числа. Ребра вдоль осей x,y,z элементарной ячейки $\{0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1\}$ разбиваются соответственно на NX, NY, NZ частей.
4. MINX, MAXX, MINY, MAXY, MINZ, MAXZ: шесть целых чисел, определяющих область расчета функции ρ . Результат $\rho_{jx,jy,jz}$ в (1) вычисляется для $MINX \leq jx \leq MAXX$, $MINY \leq jy \leq MAXY$, $MINZ \leq jz \leq MAXZ$.
5. NTYPE, NLINES, NCOL: три целых числа. Контролируют вывод результата $\rho_{jx,jy,jz}$ на печать. Результат выводится на печать страницами по NLINES строк и NCOL столбцов. Если NLINES и (или) NCOL не заданы, принимается NLINES = 54, NCOL = 30.

NTYPE – контролирует шкалирование результата и описано ниже.

6. **V, F000, RMAX, RMIN:** четыре вещественных числа. Задают шкалирование результата. Если ρ – результат расчета по формуле (1), то в выводные файлы выводятся величины $E = (F000 + \rho)/V$.

При $NTYPE < 0$ величины V и $F000$ берутся, как указано в данной карте, а $RMAX$ и $RMIN$ игнорируются.

При $NTYPE = 0$ устанавливается $F000 = 0$, а V подбирается так, чтобы в первой "порции" выводимых сечений (см. ниже § 4) было $\max|E| = RMAX$. Величины V , $F000$ и $RMIN$, взятые с карты, игнорируются.

При $NTYPE > 0$ величины V и $F000$ подбираются так, чтобы в первой "порции" выводимых сечений было $\max E = RMAX$, $\min E = RMIN$. Величины V и $F000$, взятые с карты, игнорируются.

7. **NT1, NT2, NT3, NT4:** четыре целых числа, дающих форTRANовские ссылочные номера используемых программ внешних файлов.

NT1 – номер файла, содержащего структурные факты F_{hkl} .

NT2 – рабочий файл.

NT3 – файл, содержащий шкалированный результат синтеза в двоичном (неформатированном) виде. Если $NT3 = 0$, двоичный вывод результата не производится и соответствующий файл не используется.

NT4 – файл, содержащий шкалированный результат синтеза в десятичном форматированном виде, округленный до целых чисел. Если $NT4 = 0$, вывод в десятичном виде не производится и файл не используется.

Все четыре файла **NT1, NT2, NT3, NT4** предполагаются файлами последовательного доступа и могут быть расположены на магнитных лентах либо магнитных дисках. Для файла **NT4** может быть назначено (и обычно назначается) печатающее устройство.

4. Ограничения на управляющие данные. Для всех программ синтеза числа NX , NY , NZ должны разлагаться

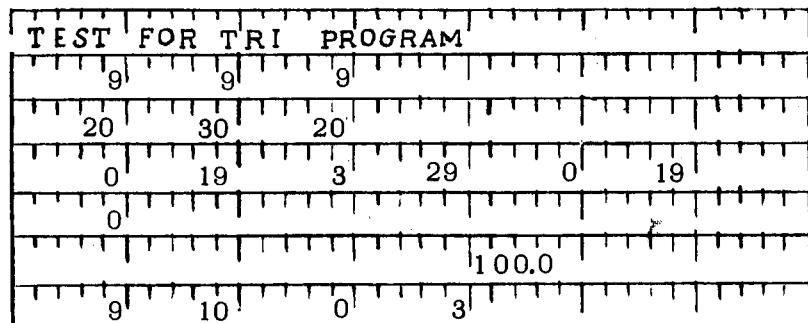
в произведение не более чем четырнадцати простых сомножителей, причем среди этих сомножителей не должно быть множителей, превосходящих 19.

Величины MAXH, MAXK, MAXL, NX, NY, NZ, MINX, MAXX, MINY, MAXY, MINZ, MAXZ должны удовлетворять некоторым соотношениям. Для программы TRI это:

- a) $NX \geq 2 * MAXH + 1$, $NY \geq 2 * MAXK + 1$,
 $NZ \geq 2 * MAXL + 1$, NZ – четно;
- b) $0 \leq MINX \leq MAXX \leq NX - 1$, $0 \leq MINY \leq MAXY \leq NY - 1$,
 $0 \leq MINZ \leq MAXZ \leq NZ - 1$.

Если не выполнены условия а), программа сама увеличивает NX, NY, NZ, а при невыполнении б) изменяет MINX, MAXX, MINY, MAXY, MINZ, MAXZ так, чтобы условия выполнялись.

5. Пример 2. Управляющие карты для синтеза по программе TRI.



Здесь величины NLINES и NCOL опущены, то есть для них будут взяты стандартные значения. Величины V, F000 и RMIN опущены, поскольку при NTYPE=0 они не используются для шкалирования.

Входные данные (структурные факторы) здесь будут браться из файла 9 (устройство SYS006 в ДОС ЕС), в качестве рабочего будет использоваться файл 10 (устройство SYS007 в ДОС ЕС), двоичного вывода результатов производиться не будет, десятичный вывод будет производиться в файл 3 (устройство печати в ДОС ЕС).

6. Используемые внешние файлы. Программы синтеза ис-

пользуют от двух до четырех файлов последовательного доступа на внешних носителях:

- файл со структурными факторами F_{hkl} ;
- рабочий файл;
- файл для двоичного вывода результатов синтеза;
- файл для десятичного вывода результатов синтеза.

Первые два из указанных файлов требуются всегда, третий и четвертый – если требуется соответствующий вывод. Все файлы могут располагаться либо на магнитных лентах, либо на магнитных дисках. Файл для десятичного вывода может также назначаться на печатающее устройство.

7. Организация файла со структурными факторами (коэффициентами Фурье) F_{hkl} . Структурные факторы F_{hkl} предполагаются отсортированными в порядке возрастания индекса h (упорядоченность по k и l не предполагается) и разбитыми на блоки. Для каждого блока структурных факторов F_{hkl} во входном файле имеется две записи, выведенные бесформатным оператором WRITE:

- 1 запись: M – целое; число структурных факторов в блоке
- 2 запись: $(AH(J), AK(J), AL(J), AA(J), AB(J))$ – все вещественные числа. AH , AK , AL – индексы h , k , l в вещественном формате; AA и AB – вещественная и мнимая части величины F_{hkl} .

Если F_{hkl} – вещественное число, $AB=0.0$ должно все равно присутствовать в записи. Число M структурных факторов в блоке не должно превосходить 100.

Конец данных во входном файле сигнализируется значением $M \leq 0$.

Если какой-либо структурный фактор F_{hkl} присутствует во входном файле несколько раз, то берется его последнее значение. Если структурный фактор отсутствует во входном файле – он полагается равным нулю.

Такая организация файла входных данных позволяет иметь в нем лишь те структурные факторы, которые нам удалось определить (или те, которые мы сочли нужным включить в синтез) и не заботиться о "дополнении набора" нулями.

В зависимости от используемой программы синтеза накладываются дополнительные ограничения на входной файл. Так, для программы TRI требуется обязательно, чтобы во входном файле присутствовали лишь структурные факторы F_{hkl} с $l \geq 0$.

8. Пример 3. Программа, готовящая тестовый файл структурных факторов.

```

DIMENSION AH(100),AK(100),AL(100),AA(100),AB(100)
DATA X1,X2,X3,Y1,Y2,Y3,Z1,Z2,Z3,W1,W2,W3,TWOP1
*      /0.2,0.375,0.75,0.1,0.1,0.2,0.55,0.20,0.75,10.0,20.0,30.0,
*      6.283185/
C
I=0
DO 100 JH=1,19
DO 100 JK=1,19
DO 100 JL=1,10
C
I=I+1
AH(I)=JH-1
AK(I)=JK-10
AL(I)=JL-1
R1=TWOP1*(AH(I)*X1+AK(I)*Y1+AL(I)*Z1)
R2=TWOP1*(A+(I)*X2+AK(I)*Y2+AL(I)*Z2)
R3=TWOP1*(AH(I)*X3+AK(I)*Y3+AL(I)*Z3)
AA(I)=W1*COS(R1)+W2*COS(R2)+W3*COS(R3)
AB(I)=W1*SIN(R1)+W2*SIN(R2)+W3*SIN(R3)
IF(I.NE.100) GOTO 100
WRITE(*)
100  WRITE(*)(AH(J),AK(J),AL(J),AA(J),AB(J),J=1,I)
I=0
CONTINUE
C
WRITE(*)
WRITE(*)(AH(J),AK(J),AL(J),AA(J),AB(J),J=1,I)
I=-1
WRITE(*)
STOP
END

```

9. Двоичный вывод результатов синтеза. Двоичный выводной файл (если требуется) содержит запись с заголовком (20 слов) и по две записи на каждое выводимое сечение результата $\rho_{jx,jy,jz}$. (Все программы синтеза, кроме ORTH21, выводят результат сечениями $jy = \text{const}$; программа ORTH21 - сечениями $jz = \text{const}$ функции $\rho_{jx,jy,jz}$).

Для программ, выводящих y -сечения:

1 запись: JY, MINX, MAXX, MINZ, MAXZ - все целые;

2 запись: ((REZ(I, J), I=XL, XU), J=ZL, ZU) - все вещественные, где XL=MINX+1, XU=MAXX+1, ZL=MINZ+1, ZU=MAXZ+1.

Здесь REZ - массив результата; JY - значение индекса jy функции $\rho_{jx,jy,jz}$ для выводимого сечения; MINX, MAXX, MINZ, MAXZ определяют граничные значения индексов jx и jz функции

Для программы ORT21, выводящей z -сечения:

запись 1: JZ, MINX, MAXX, MINY, MAXY;

запись 2: ((REZ(I, J), I=XL, XU), J=YL, YU), где XL=MINX+1, XU=MAXX+1, YL=MINY+1, YU=MAXY+1; JZ - значение индекса jx функции $\rho_{jx,jy,jz}$ для выводимого сечения.

После вывода последнего сечения выводится запись $(-1, -1, -1, -1)$, означающая конец данных, и записывается ленточная марка.

10. Десятичный вывод результатов. Десятичный вывод содержит шкалированные сечения функции $r_{\mu, \nu, \eta}$ (μ - сечения для всех программ, кроме ORTH21; η - сечения для программы ORTH21), разбитые на страницы согласно NLines и NCOL (рис. 1) и округленные до ближайшего целого числа. Сечения выводятся по формату 14.

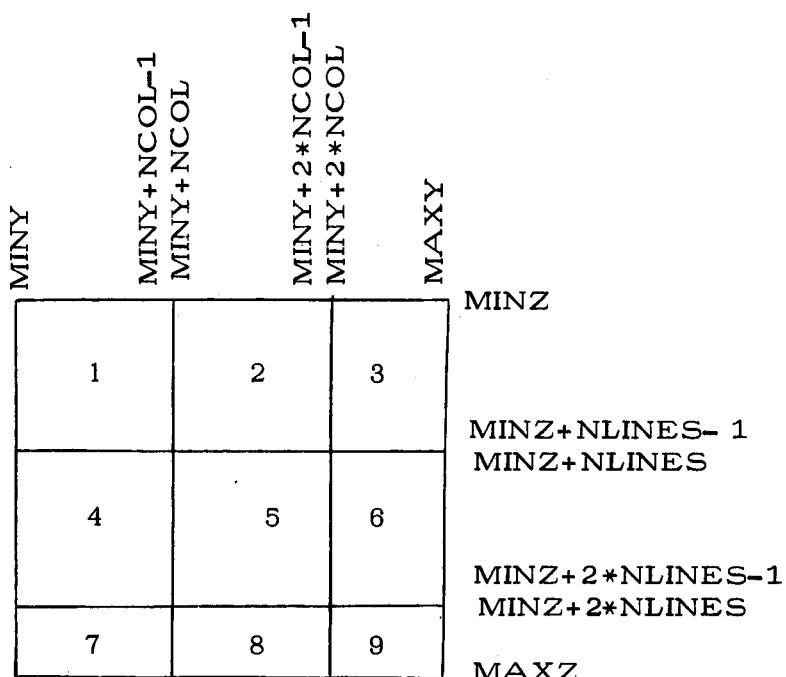


Рис. 1. Разбивка μ -сечения на страницы (цифры указывают порядок вывода страниц)

11. Объем занимаемой оперативной памяти. Каждая из программ синтеза требует около (55K+ размер буфера X в байтах) байт памяти*.

*Объем, занимаемый программой в памяти, может быть уменьшен путем введения оверлейной структуры программы.

12. Пример 4. Пример работы программы TRI. На рис. 2 приведен протокол работы программы из примера 1 с управляющими картами из примера 2 и входными данными, подготовленными программой из примера 3. Программа выполнялась на ЕС-1040.

Описание сообщений программы дано ниже в § 2.

13. Системно-зависимая функция ITIME. Для ведения статистики времени выполнения отдельных этапов синтеза программы используют системно- зависимую функцию ITIME. При выполнении фортрановского оператора

$N=ITIME(2)$

переменная N должна получать значение времени суток в миллисекундах.

Подпрограмма ITIME должна быть написана отдельно для каждой конкретной операционной системы, либо заменена фиктивной:

```
FUNCTION ITIME (J)
ITIME=0
RETURN
END
```

§ 2. СООБЩЕНИЯ ПРОГРАММ

Сообщения программ синтеза выводятся в файл с фортрановским ссылочным номером 3.

1. Сообщения при нормальном ходе работы. На рис. 2 приведен протокол нормальной работы программы синтеза. Здесь:

- 1) Заголовок (вводимый с перфокарт).
- 2) Название программы синтеза.
- 3) Максимальные значения индексов h, k, l (MAXH, MAXK, MAXL).
- 4) Число делений по осям x, y, z (NX, NY, NZ).
- 5) Пределы по x, y, z, в которых рассчитывается синтез (MINX, MAXX, MINY, MAXY, MINZ, MAXZ).
- 6) Ссылочные номера входного и рабочего файлов, файлов для двоичного и десятичного вывода результатов синтеза (в данном примере 0 для двоичного вывода означает, что двоичного вывода не будет).
- 7) Количество структурных факторов, взятых из входного файла в синтез, и общее количество структурных факторов во входном файле.

TEST FOR TRI PROGRAM
BY FOURIER SYNTHESIS
LIMITS ON H, K, AND L ARE 9 9 9
DIVISIONS OF UNIT CELL EDGES ARE 20 30 20
LIMITS ALONG X, Y, AND Z ARE 0 TO 10 3 TO 20 0 TO 10
INPUT UNIT = 9 SCRATCH FILE = 10
BINARY OUTPUT UNIT = 0 BCD OUTPUT UNIT = 3
3610 STRUCTURE FACTORS USED OUT OF 3610 ON THE INPUT FILE.
E0000 = 0.0 V = 2.058E 03
SCALING BASED ON VALUES IN THE FIRST 27 SECTIONS.
TEST FOR TRI PROGRAM

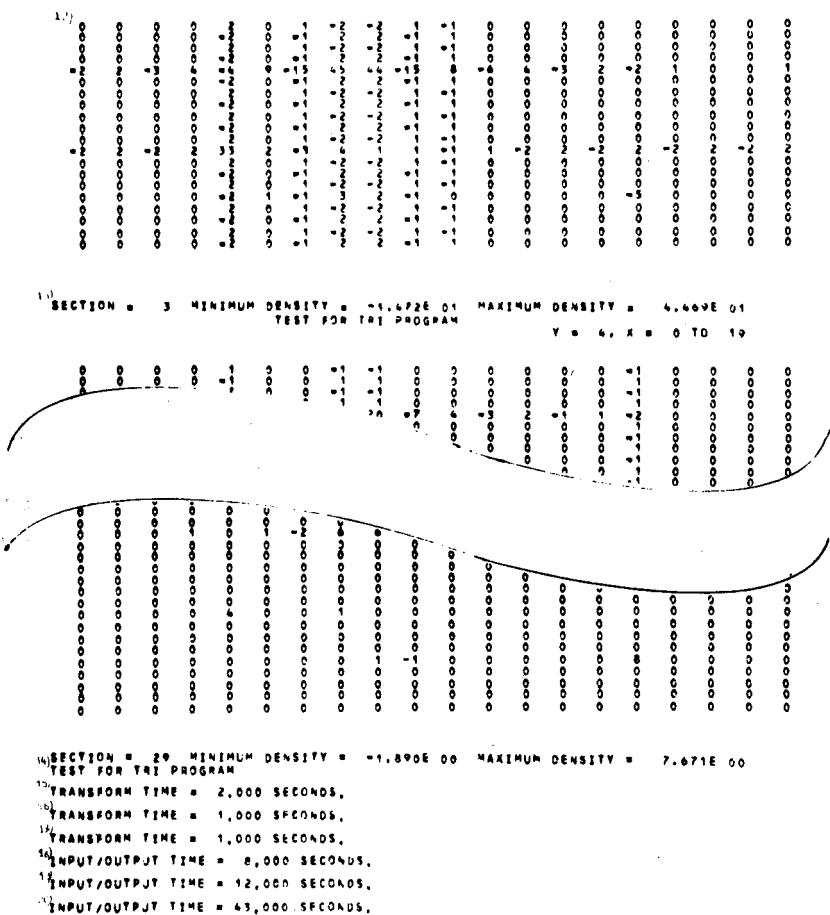


Рис. 2. Протокол нормальной работы программы синтеза

- 8) Шкальные коэффициенты V и $F000$, которые будут использоваться при шкалировании результата синтеза.
- 9) Число сечений функции $\rho_{jx,jy,jz}$, по которым определены шкальные коэффициенты (см. § 4).
- 10) Заголовок (вводимый с перфокарт).
- 11) Данное сечение соответствует значению индекса $jy = 3$ при индексе jx , меняющемся от 0 до 19. Это значит, что для данного сечения координата $y = \frac{3}{30}$, координата x меняется от 0 до $\frac{19}{20}$. Координата z здесь меняется от 0 до $\frac{19}{20}$, как это указано в строке 5 протокола.
- 12) Шкалированное сечение $jy = 3$ электронной плотности,
- 13) Индекс jy сечения; минимальное и максимальное значения функции $\rho_{jx,jy,jz}$ в данном сечении.
- 14) Заголовок (вводимый с перфокарт).
- 15) Время, затраченное на выполнение преобразования по первой координате (здесь по y).
- 16) Время, затраченное на выполнение преобразования по второй координате (по x).
- 17) Время, затраченное на выполнение преобразования по третьей координате (по z).
- 18) Время, затраченное на ввод структурных факторов.
- 19) Время, затраченное на вывод промежуточных результатов в рабочий файл и ввод их из рабочего файла обратно в память.
- 20) Время, затраченное на вывод результатов синтеза (здесь – время печати на АЦПУ).

2. Сообщения об аварийном завершении работы.

REQUEST TOO LARGE, BUFFER=nsize

nx ny nz maxk

Выдается программами синтеза TRI, P1BAR, TWOFLD, P21, P2OVM, P222, PMMM в случае, когда отведенный им для работы буфер X слишком мал. Здесь nsize – размер буфера; nx, ny, nz, maxk – числовые значения величин NX, NY, NZ, MAXK (§ 1, п. 3). Для выполнения программы надо увеличить размер буфера по крайней мере до величины $\max\{NY*NZ, NZ*NX\}$.

TRANSFORM TOO LARGE FOR BUFFER.

SIZE=nsize.

Выдается программой синтеза ORTH21 в случае, когда отведенный для работы буфер X слишком мал. Для выполнения программы надо увеличить размер буфера по край-

ней мере до величины $\max \{ NY * NZ, NZ * NX \}$.

REFLECTION OUT OF ORDER HKL=h k l

Выдается программами ввода структурных факторов при нарушении упорядоченности по возрастанию индекса h во входном файле; h, k, l - значения индексов последнего считанного структурного фактора.

STRUCTURE FACTOR RECORD OF LENGTH
nn MAXIMUM IS 100

Выдается программами ввода структурных факторов, если встретился блок структурных факторов длиной $nn > 100$.

NEGATIVE L NOT PERMITTED. HKL=h k l

NEGATIVE K OR L NOT PERMITTED HKL=h k

NEGATIVE INDICES NOT PERMITTED.

HKL= h k l

Эти сообщения выдаются подпрограммами ввода структурных факторов в случае, когда для выполняемой программы синтеза не выполнены ограничения на входные данные; h, k, l - индексы структурного фактора, считанного последн

LARGEST FACTOR EXCEEDS 19 N=nn

Выдается подпрограммами одномерного преобразования Фурье в случае, когда в разложении на множители одного из чисел NX, NY, NZ встретился множитель $nn > 19$.

FACTOR COUNT EXCEEDS 14 N=nn

Выдается подпрограммами одномерного преобразования Фурье в случае, когда одно из чисел NX, NY, NZ разлагается в произведение $nn > 14$ простых сомножителей.

§ 3. СВЕДЕНИЯ О ПРОГРАММАХ СИНТЕЗА

1. Назначение программ синтеза. Перечисленные ниже программы выполняют преобразование (2) в случае, когда результат $\rho_{jx,jy,jz}$ должен обладать следующими свойствами:

TRI - функция $\rho_{jx,jy,jz}$ - вещественная;

P1BAR - $\rho_{jx,jy,jz}$ - вещественная функция, обладающая симметрией группы $P1$, то есть

TWOFLD - $\rho_{jx,jy,jz}$ - вещественная функция, обладающая симметрией группы $P2$, то есть

$$\rho_{N\bar{x}-j\bar{x},N\bar{y}-j\bar{y}} = \rho_{jx,jy,jz};$$

$P_{21} = \rho_{jx, jy, jz}$ – вещественная функция, обладающая симметрией группы P_{21} , то есть
 $\rho_{Nx-jx, \frac{1}{2}Ny+jy, Nz-jz} = \rho_{jx, jy, jz};$
 $P_{2OVM} = \rho_{jx, jy, jz}$ – вещественная функция, обладающая симметрией группы $P_{2/m}$, то есть
 $\rho_{Nx-jx, jy, Nz-jz} = \rho_{jx, jy, jz} = \rho_{jx, Ny-jy, jz};$
 $P_{222} = \rho_{jx, jy, jz}$ – вещественная функция, обладающая симметрией группы P_{222} , то есть
 $\rho_{Nx-jx, Ny-jy, jz} = \rho_{jx, jy, jz} = \rho_{Nx-jx, jy, Nz-jz};$
 $ORTH21 = \rho_{jx, jy, jz}$ – вещественная функция, обладающая симметрией группы P_{212121} , то есть
 $\rho_{\frac{1}{2}Nx-jx, Ny-jy, \frac{1}{2}Nz+jz} = \rho_{jx, jy, jz} = \rho_{\frac{1}{2}Nx+jx, \frac{1}{2}Ny-jy, Nz-jz};$
 $PMMM = \rho_{jx, jy, jz}$ – вещественная функция, обладающая симметрией группы Pmm , то есть
 $\rho_{Nx-jx, jy, jz} = \rho_{jx, jy, jz} = \rho_{jx, Ny-jy, jz} = \rho_{jx, jy, Nz-jz}.$

2. Ограничения на файл, содержащий структурные факторы. Входной файл должен содержать только независимую (для данной пространственной группы) часть структурных факторов F_{hkl} . Поэтому, в зависимости от выполняемой программы синтеза, должны выполняться условия:

$TRI, P1BAR$ – должны присутствовать только F_{hkl} с $l \geq 0$. Случай $l < 0$ рассматривается как ошибка и приводит к прекращению выполнения программы. Рефлексы F_{hkl} с $h < 0, l=0$ и рефлексы с $h=0, k < 0, l=0$ могут присутствовать во входном файле, но программы их не используют (эти структурные факторы получаются по симметрии из F_{hkl} с $h \geq 0, l=0$). При синтезе по программе $P1BAR$ (здесь F_{hkl} должны быть вещественными) мнимые части структурных факторов во входном файле игнорируются.

$TWOFLD, P21, P2OVM$ – должны присутствовать только F_{hkl} с $k \geq 0, l \geq 0$. Наличие отрицательных индексов k или l рассматривается как ошибка и приводит к прекращению выполнения программы. Рефлексы с $h < 0, l=0$ могут присутствовать во входном файле, но программы их не используют (эти структурные факторы получаются по симметрии из F_{hkl} с $h \geq 0, l=0$). При синтезе по программе $P2OVM$ (здесь F_{hkl} – вещественные числа) мнимые части структурных факторов во входном файле игнорируются.

$P222, ORTH21, PMMM$ – должны присутствовать только

ко F_{hkl} с $h \geq 0$, $k \geq 0$, $l \geq 0$. Наличие отрицательных индексов рассматривается как ошибка и приводит к прекращению выполнения программы. При синтезе по программе РМММ (здесь F_{hkl} – вещественные числа) мнимые части структурных факторов во входном файле игнорируются.

Если какой-либо структурный фактор встречается во входном файле несколько раз, то в синтезе берется его значение, встретившееся последним.

3. Ограничения на управляющие данные. Ниже приведен ряд ограничений для различных программ синтеза. Если эти ограничения не выполняются, программа сама меняет управляющие данные так, чтобы ограничения выполнялись.

Общими для всех программ синтеза являются условия:

$$\begin{aligned} NX &\geq 2 * MAXH + 1, \quad 0 \leq MINX \leq MAXX \leq NX - 1; \\ NY &\geq 2 * MAXK + 1, \quad 0 \leq MINY \leq MAXY \leq NY - 1; \\ NZ &\geq 2 * MAXL + 1, \quad 0 \leq MINZ \leq MAXZ \leq NZ - 1. \end{aligned}$$

Дополнительные требования отдельных программ синтеза

$$\begin{aligned} TRI: \quad NZ &- \text{четно}; \\ P1BAR: \quad NX, \quad NY, \quad NZ &- \text{четные числа}, \quad MAXX \leq \frac{NX}{2} \\ TWOFLD: \quad NX, \quad NY, \quad NZ &- \text{четные числа}, \\ &MAXX \leq \frac{NX}{2}; \\ P21: \quad NY &- \text{кратно четырем}; \quad NZ - \text{четно}; \quad MAXY \leq \frac{NY}{2} \\ P2OVM: \quad NX, \quad NZ &- \text{четные числа}; \quad NY - \text{кратно} \\ &\text{восьми}; \quad MAXX \leq \frac{NX}{2}, \quad MAXY \leq \frac{NY}{2}; \\ P222: \quad NX, \quad NY, \quad NZ &- \text{четные числа}; \quad MAXX \leq \frac{NX}{2}; \\ ORTH21: \quad NY &- \text{четно}; \quad NZ - \text{кратно четырем}; \\ &MAXZ \leq \frac{NZ}{2}; \\ PMMM: \quad NX, \quad NY, \quad NZ &- \text{кратны восьми}; \quad MAXX \leq \frac{NX}{2}; \\ &MAXY \leq \frac{NY}{2}, \quad MAXZ \leq \frac{NZ}{2}. \end{aligned}$$

4. Требуемые подпрограммы. Список требуемых подпрограмм для каждой из программ синтеза дан в Приложении 2.

§ 4. СТРУКТУРА ПРОГРАММ СИНТЕЗА

Выполнение преобразования (2) состоит из последовательного выполнения трех одномерных преобразований Фурье:

$$J_{h,jy,\ell}^{(2)} = \sum_{k=0}^{Ny-1} \hat{F}_{hkl} e^{-2\pi i \left(\frac{k jy}{Ny} \right)}; \quad jy = 0, 1, \dots, Ny-1; \quad (4)$$

$$J_{jx,jy,\ell}^{(1)} = \sum_{h=0}^{Nx-1} J_{h,jy,\ell}^{(2)} e^{-2\pi i \left(\frac{h jx}{Nx} \right)}; \quad jx = 0, 1, \dots, Nx-1; \quad (5)$$

$$J_{jx,jy,jz}^{(0)} = \sum_{l=0}^{Nz-1} J_{jx,jy,\ell}^{(1)} e^{-2\pi i \left(\frac{l jz}{Nz} \right)}; \quad jz = 0, 1, \dots, Nz-1. \quad (6)$$

При этом, поскольку $F_{hkl}=0$ для $|h| > \text{MAXH}$, либо $|k| > \text{MAXK}$, либо $|l| > \text{MAXL}$ и результат $J_{jx,jy,jz}$ интересует нас для значений индексов jx, jy, jz в пределах, определяемых величинами $\text{MINX}, \text{MAXX}, \text{MINY}, \text{MAXY}, \text{MINZ}, \text{MAXZ}$, то преобразование (4) необходимо выполнить для всех $|h| \leq \text{MAXH}, 0 \leq k \leq \text{MAXL}$. Преобразование (5) надо выполнить для всех $\text{MINY} \leq jy \leq \text{MAXY}, 0 \leq l \leq \text{MAXL}$, а преобразование (6) для $\text{MINX} \leq jx \leq \text{MAXX}, \text{MINY} \leq jy \leq \text{MAXY}$.

Как правило, размер буфера X недостаточен, чтобы полностью вмещать трехмерный набор результата

Поэтому при выполнении синтеза используется рабочий файл для хранения промежуточных результатов.

Вычисление синтеза (2) начинается с ввода в буфер первой "порции" h -сечений массива структурных факторов: $\{F_{hkl} : h = \text{const}\}$ для $-\text{MAXH} \leq h \leq h^{(1)}$, где $h^{(1)}$ определяется исходя из размера буфера X так, чтобы вместить в буфер максимальное число h -сечений.

После этого для введенных сечений выполняется преобразование (4), и результат выводится в рабочий файл.

Далее в буфер X вводится следующая "порция" h -сечений для $h^{(1)} + 1 \leq h \leq h^{(2)}$ для этой "порции" выполняется преобразование (4), и результат выводится в рабочий файл. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будут обработаны все h -сечения. В результате мы имеем в рабочем файле величины $J_{h,jy,\ell}^{(2)}$ для всех требуемых значений индексов.

После этого мы вводим из рабочего файла в буфер X первую "порцию" y -сечений: $\{J_{h,jy,\ell}^{(2)} : jy = \text{const}\}$ для $\text{MINY} \leq jy \leq y^{(1)}$, где $y^{(1)}$ определяется, исходя из размера буфера X так, чтобы в буфер было помещено максимально возможное число y -сечений. Для введенных y -сечений в буфере выполняются преобразования (5) и (6), после чего

окончательный результат $\rho_{jx, jy, jz}$ (для $\text{MINY} \leq jy \leq y^{(1)}$) выводится из буфера в выводные файлы. При этом, если необходимо, по первой "порции" у-сечений результата определяются шкальные коэффициенты V и F000.

После того как из буфера выведена первая "порция" у-сечений результата, туда из рабочего файла вводится следующая "порция" величин $J_{k, jy, l}^{(2)}$ для $y^{(1)} + 1 \leq jy \leq y^{(2)}$ и так далее, пока не будут обработаны все величины $J_{k, jy, l}^{(2)}$.

Изложенная схема работы иллюстрируется рис. 3.

Указанную организацию имеют все программы синтеза, кроме программы ORTH21. Отличие программы ORTH21 в том, что первым вычисляется одномерное преобразование по переменной z (а затем по x и y) и результат $\rho_{jx, jy, jz}$ выводится сечениями $jz = \text{const.}$

§5. ПОДПРОГРАММЫ ВВОДА СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ (КОЭФФИЦИЕНТОВ ФУРЬЕ)

Подпрограммы ввода структурных факторов считывают структурные факторы из входного файла, отбирают из них факторы, удовлетворяющие ограничениям, и помещают их в буфер в оперативной памяти.

Имеется шесть подпрограмм ввода структурных факторов:

TRISF1 - для триклинных групп без центра симметрии;

TRISF2 - для триклинных групп с центром симметрии;

MONSF1 - для моноклинных групп без центра симметрии;

MONSF2 - для моноклинных групп с центром симметрии;

ORTSF1 - для ромбических групп без центра симметрии;

ORTSF2 - для ромбических групп с центром симметрии.

Обращение к подпрограммам:

```
CALL TRISF1(X, NY, NZ, NX, MAXK, MAXL,  
             NHSTRT, NTR, FIRST)
```

```
CALL TRISF2(X, NY, NZ, NX, MAXK, MAXL,  
             NHSTRT, NTR, FIRST)
```

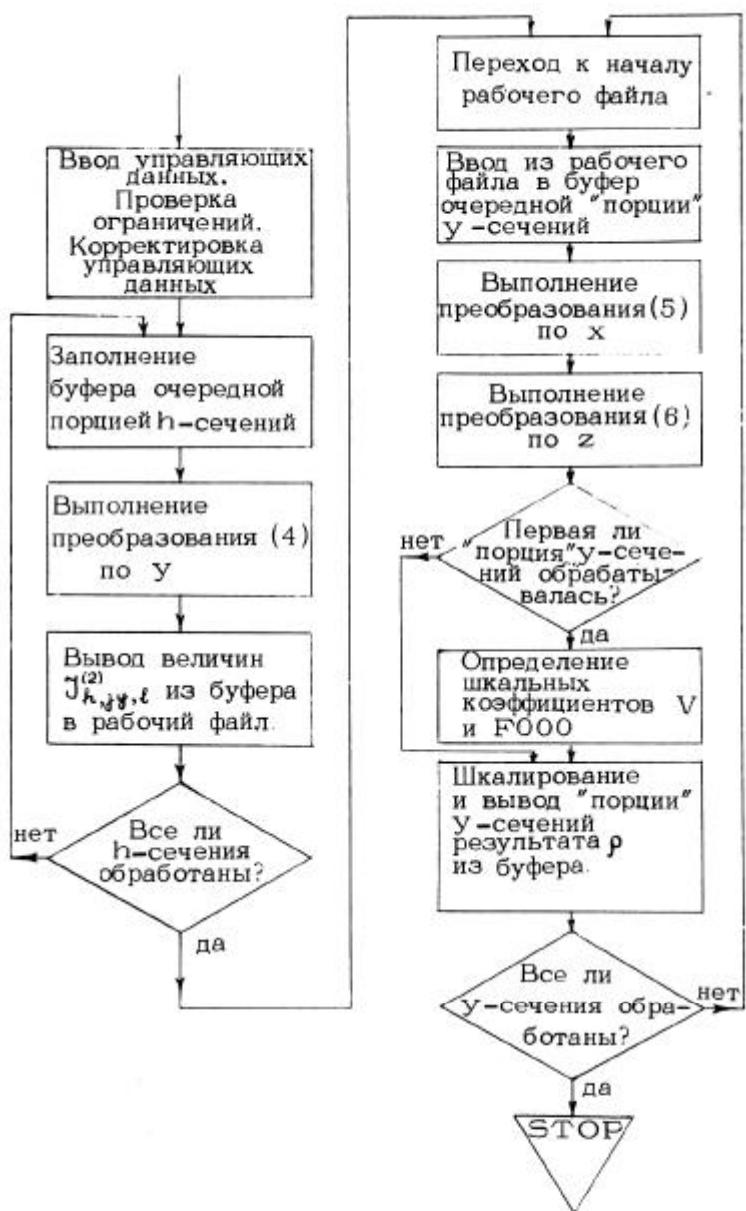


Рис. 3. Схема работы программы

```

CALL MONSF1(X, NY, NZ, NX, MAXK, NHSTR
            NTR, FIRST)
CALL MONSF2(X, NY, NZ, NX, MAXK, NHSTR
            NTR, FIRST)
CALL ORTSF1(X, NY, NZ, NX, MAXK, MAXL,
            NHSTRT, NTR)
CALL ORTSF2(X, NY, NZ, NX, MAXK, MAXL,
            NHSTRT, NTR).

```

Подпрограммы заполняют структурными факторами массив X (комплексный для подпрограмм TRISF1, MONSF1, ORTSF1; вещественный для подпрограмм TRISF2, MONSF2, ORTSF2) размерности $NY \times NZ \times NX$. Структурные факторы берутся из файла с форTRANовским ссылочным номером NTR .

Из входного файла в массив X переносятся только структурные факторы, удовлетворяющие условиям:

```

для TRISF1 и TRISF2: NHSTRT ≤ h ≤ NHSTRT +
                     + NX - 1, -MAXK ≤ k ≤ MAXK, 0 ≤ l ≤ MAXL;
для MONSF1 и MONSF2: NHSTRT ≤ h ≤ NHSTRT -
                     + NX - 1, 0 ≤ k ≤ MAXK, 0 ≤ l ≤ NZ - 1;
для ORTSF1 и ORTSF2: NHSTRT ≤ h ≤ NHSTRT +
                     + NX - 1, 0 ≤ k ≤ MAXK, 0 ≤ l ≤ MAXL.

```

При этом структурный фактор F_{hkl} помещается в элемент $X(JK, JL, JH)$ массива X , где:

```

для TRISF1: JK = { 1+k для k ≥ 0,
                    { 1+NY+k для k < 0;
                    JL = 1+1; JH = 1+h - NHSTRT;

```

```

для TRISF2: JK = { 1+k для k ≥ 0,
                    { NY+k для k < 0;
                    JL = 1+1; JH = 1+h - NHSTRT;

```

```

для MONSF1, MONSF2, ORTSF1, ORTSF2:
    JK = 1+k; JL = 1+1; JH = 1+h - NHSTRT.

```

Логическая переменная $FIRST$ при обращении к подпрограммам ввода структурных факторов имеет значение .TRUE., если это первое обращение к подпрограмме ввода, и .FALSE.- в противном случае.

В элементы массива X , в которые не были занесены структурные факторы, заносятся нули.

§ 6. ПОДПРОГРАММЫ ВЫВОДА РЕЗУЛЬТАТОВ СИНТЕЗА

Имеются две подпрограммы вывода результатов синтеза:
PRINTY для вывода у-сечений результата $\rho_{jx, jy, jz}$
и PRINTZ - для вывода z-сечений.

Обращение:

```
CALL PRINTY (X, NZ, NX, NY, JY, NTBIN,  
            NTBCD),  
CALL PRINTZ (X, NY, NX, NZ, JZ, NTBIN,  
            NTBCD).
```

Подпрограммы PRINTY и PRINTZ пользуются общим блоком

```
/OUT/ MINX, MAXX, MINY, MAXY, MINZ,  
      MAXZ, NTYPE, NLINES, NCOL, TITLE(20),  
      V, F000, RMAX, RMIN,
```

в котором передаются управляющие данные (§ 1, п. 3), регулирующие вывод результата.

Подпрограмма PRINTY выводит из вещественного массива размерности $NZ \cdot NX \cdot NY$ результат синтеза (2)

$\rho_{jx, jy, jz}$. При этом элемент $X(IZ, IX, IY)$ массива X содержит $\rho_{jx-1, jy-1, jz-1}$, где JY (номер выводимого первым при данном обращении к подпрограмме у-сечения) является входным параметром подпрограммы.

Подпрограмма PRINTZ выводит из вещественного массива размерности $NY \cdot NX \cdot NZ$ результат синтеза (2)

$\rho_{jx, jy, jz}$, предполагая, что элемент $X(IY, IX, IZ)$ массива X содержит величину $\rho_{jx-1, jy-1, jz-1}$; здесь номер выводимого первым (при данном обращении к подпрограмме) z-сечения JZ является входным параметром подпрограммы.

Входные параметры NTBIN и NTBCD дают фортрановские ссылочные номера для выводных файлов в двоичном и десятичном видах.

ГЛАВА II. ОДНОМЕРНОЕ БЫСТРОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ

В этой главе мы дадим описание ряда программ, осуществляющих одномерное дискретное преобразование Фурье:

$$Y_3 = \sum_{t=0}^{N-1} X_t e^{-2\pi i \frac{3t}{N}} \quad (7)$$

Здесь X_t и Y_3 – (вообще говоря, комплексные) последовательности, которые мы будем считать определенными для всех целых значений индексов t и 3 и периодическими с периодом N , то есть

$$X_{t+N} = X_t, Y_{3+N} = Y_3.$$

Программы, описываемые ниже, решают более общую задачу. Они одновременно вычисляют несколько одномерных преобразований Фурье:

$$Y_{\alpha; b; b} = \sum_{t=0}^{N-1} X_{\alpha; t; b} e^{-2\pi i \frac{bt}{N}}, \quad b=0, 1, \dots, N-1 \quad (8)$$

при различных значениях параметров α и b . Мы будем считать далее, что α и b – целочисленные индексы, и величины $X_{\alpha; t; b}$ заданы для всех значений $0 \leq \alpha \leq K_\alpha - 1$, $0 \leq b \leq K_b - 1$. В частности, при $K_\alpha = K_b = 1$ программы вычисляют одно преобразование (7).

§ 1. ПРОГРАММА ОДНОМЕРНОГО БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ СМПЛФТ

Подпрограмма СМПЛФТ вычисляет для комплексной последовательности серию преобразований Фурье (8) при всевозможных значениях параметров

1. Хранение преобразуемых величин и результата в памяти. При входе в программу СМПЛФТ, выполняющую преобразование (8), мы имеем $K_\alpha * N * K_b$ комплексных

чисел $X_{a;t;b}$. Возможны два варианта расположения величин X в памяти. В первом случае в памяти отводятся два трехмерных вещественных массива R и E размерности $K_a * N * K_b$, в которых размещаются вещественные и мнимые части величин X (величина $ReX_{a;t;b}$ попадает в элемент $R(a+1, t+1, b+1)$ массива R ; величина $ImX_{a;t;b}$ в элемент $E(a+1, t+1, b+1)$ массива E). В этом случае после выполнения программы $C MPLFT$ мы находим $ReY_{a;s;b}$ в элементе $R(a+1, s+1, b+1)$, а $ImY_{a;s;b}$ в $E(a+1, s+1, b+1)$.

Во втором случае величины $X_{a;t;b}$ хранятся в трехмерном комплексном массиве Z размерности $K_a * N * K_b$ (величина $X_{a;t;b}$ хранится в элементе $Z(a+1, t+1, b+1)$ массива Z). В этом случае после выполнения программы $C MPLFT$ мы находим величину $Y_{a;s;b}$ в элементе $Z(a+1, s+1, b+1)$ комплексного массива Z .

2. Управление перебором параметров. Для управления перебором параметров a и b при выполнении преобразования (8) на входе в программу $C MPLFT$ задается целый массив K длины 5. Организация перебора параметров программой будет описана в § 3. Здесь мы ограничимся примером задания величин K в наиболее распространенных случаях.

Во всех случаях, когда требуется выполнить преобразование (8) для всех $0 \leq a \leq K_a - 1$, $0 \leq b \leq K_b - 1$, можно задать:

$$\left. \begin{array}{l} K(1)=K_a * N * K_b, \\ K(2)=K_a, K(3)=K_a * N, \\ K(4)=K_a, K(5)=1 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{в случае отдельного размещения} \\ \text{вещественных и} \\ \text{мнимых частей величин} \\ X_{a;t;b}; \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l} K(1)=2 * K_a * N * K_b, \\ K(2)=2 * K_a, K(3)= \\ 2 * K_a * N, K(4)= \\ =2 * K_a, K(5)=2 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{в случае размещения величин} \\ X \text{ в комплексном массиве.} \end{array}$$

В случае, когда величина $K_a = 1$ (по параметру a перебор не производится), программа будет работать быстрее, если задать:

$$\left. \begin{array}{l} K(1)=K(3)=K(4)=N * K_b, \\ K(2)=1, K(5)=N \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{в случае отдельного размещения} \\ \text{вещественных и мнимых} \\ \text{частей величин} X_{a;t;b}; \end{array}$$

$K(1)=K(3)=K(4)=2*N*K_b$ } в случае размещения величин
 $K(2)=2, K(5)=2*N$ } X в комплексном массиве.

В частности, для выполнения одного преобразования (7) можно положить $K(1)=K(3)=K(4)=K(5)=N$, $K(2)=1$, если для величин X_t вещественные и мнимые части хранятся отдельно; и $K(1)=K(3)=K(4)=K(5)=2*N$, $K(2)=2$, если величины X_t размещены в комплексном массиве.

3. Обращение к программе. В случае, когда вещественные и мнимые части преобразуемых величин хранятся отдельно, программа вызывается оператором:

CALL CMPLFT(R, E, N, K).

Здесь:

R, E - вещественные массивы разм^{тности} K_a*N*K_b , содержащие на входе - вещественные и мнимые части величин $X_{a;t;b}$; на выходе - величин $Y_{a;s;b}$;
N - целое; длина преобразования (8);
K - целый массив длины 5; содержит информацию, управляющую перебором параметров.

В случае хранения величин X в трехмерном комплексном массиве Z вызов программы CMPLFT может быть организован следующим образом:

```
.....  
DIMENSION A(2)  
EQUIVALENCE (A(1), Z(1, 1, 1))  
.....  
CALL CMPLFT (A(1), A(2), N, K)  
.....
```

4. Ограничения. В разложении числа N на простые множители не должно быть сомножителей больших чем 19. Общее число сомножителей не должно превосходить 14.

5. Сообщения программы. Если не выполнены ограничения, программа прекращает работу и выдает в файл 3 соответствующее сообщение (глава I, § 2, п. 2).

6. Требование к компилятору с Фортрана. Компилятор с Фортрана должен допускать существование в фортранной программе четырнадцати вложенных циклов.

7. Требуемые подпрограммы. SRFP, MDFTKD, DIPRP, R2CFTK, R3CFTK, R4CFTK, R5CFTK, R8CFTK, RPCFTK.

8. Пример 5. Приведем пример программ, осуществляющих трехмерное преобразование Фурье, используя подпрограмму CMPLFT.

а) отдельное хранение вещественных и мнимых частей величин X (массивы R и E):

```
DIMENSION R(30, 20, 40), E(30, 20, 40), K(5)
K(1)=30*20*40
K(2)=30*20
K(3)=30*20*40
K(4)=30*20
K(5)=1
CALL CMPLFT (R, E, 40, K)
K(2)=30
K(3)=30*20
K(4)=30
CALL CMPLFT (R, E, 20, K)
K(2)=1
K(3)=K(1)
K(4)=K(1)
K(5)=30
CALL CMPLFT (R, E, 30, K)
STOP
END
```

б) хранение величин X в комплексном массиве Z:

```
DIMENSION Z (30, 20, 40), A(2), K(5)
COMPLEX Z
EQUIVALENCE (A(1), Z(1, 1, 1))
K(1)=2*30*20*40
K(2)=2*30*20
K(3)=2*30*20*40
K(4)=2*30*20
K(5)=2
CALL CMPLFT (A(1), A(2), 40, K)
K(2)=2*30
K(3)=2*30*20
K(4)=2*30
CALL CMPLFT (A(1), A(2), 20, K)
K(2)=2
K(3)=K(1)
K(4)=K(1)
```

```

K(5)=2*30
CALL CMPLFT (A(1), A(2), 30, K)
STOP
END

```

Замечание. Пусть мы имеем набор величин $\chi_{h_1, \dots, h_k, l_{k+1}, \dots, l_n}$ ($0 \leq h_i, l_i \leq N_i - 1$), который хранится в n -мерном массиве размерности $N_1 * N_2 * \dots * N_n$, и мы хотим вычислить преобразование Фурье по "к-му аргументу":

$$y_{h_1, \dots, h_{k-1}, l_k, \dots, l_n} = \sum_{h_k=0}^{N_k-1} e^{-2\pi i \frac{h_k l_k}{N_k}} \chi_{h_1, \dots, h_k, l_{k+1}, \dots, l_n}; \quad (9)$$

$$l_k = 0, 1, \dots, N_k-1;$$

при всевозможных значениях параметров $h_1, h_2, \dots, h_{k-1}, l_{k+1}, \dots, l_n$.

С одной стороны, введя обозначения:

$$\alpha = h_1 + h_2 N_1 + h_3 N_2 N_1 + \dots + h_{k-1} N_{k-2} \dots N_1,$$

$$\beta = l_{k+1} + l_{k+2} N_{k+1} + \dots + l_n N_{n-1} N_{n-2} \dots N_{k+1},$$

$$K_\alpha = N_1 N_2 \dots N_{k-1}, K_\beta = N_{k+1} N_{k+2} \dots N_n,$$

$$\chi_{h_1, \dots, h_k, l_{k+1}, \dots, l_n} = \chi_{\alpha; h_k; \beta} (\ell_{k+1}, \dots, \ell_n),$$

мы можем записать (9) в виде:

$$y_{\alpha; l_k; \beta} = \sum_{h_k=0}^{N_k-1} e^{-2\pi i \frac{h_k l_k}{N_k}} \chi_{\alpha; h_k; \beta},$$

эквивалентном (8). С другой стороны, n -мерный массив расположен в памяти линейно и положение элемента

$\chi_{h_1, \dots, h_k, l_{k+1}, \dots, l_n}$ определяется порядковым номером

$$\alpha = 1 + (h_1 + h_2 N_1 + h_3 N_2 N_1 + \dots + h_{k-1} N_{k-2} \dots N_1) + h_k (N_{k-1} \dots N_1) +$$

$$+ (l_{k+1} + l_{k+2} N_{k+1} + \dots + l_n N_{n-1} N_{n-2} \dots N_{k+1}) N_k (N_{k-1} \dots N_1).$$

Это эквивалентно расположению величин $\chi_{\alpha; h_k; \beta}$ в трехмерном массиве размерности $K_\alpha * N * K_\beta$.

Тем самым, вычисление преобразования (9) эквивалентно вычислению преобразования (8) с $K_\alpha = N_1 N_2 \dots N_{k-1}$, $K_\beta = N_{k+1} \dots N_n$, и здесь непосредственно применимы все описанные выше программы. (Описанная здесь ситуация имела место при выполнении первого одномерного преобразования в примере 5. Там $n=3$, $N_1=30$, $N_2=20$, $N_3=40$ и при первом вызове программы CMPLFT было положено $K_\alpha = N_1 * N_2$, $K_\beta = 1$).

§2. ПРОГРАММЫ ОДНОМЕРНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ, УЧИТЫВАЮЩИЕ СИММЕТРИЮ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ

В этом параграфе мы опишем ряд программ комплекса, осуществляющих преобразование (8) при всевозможных значениях параметров $0 \leq a \leq K_a - 1$, $0 \leq b \leq K_b - 1$ в случае, когда преобразуемые величины имеют некоторую симметрию. Использование свойств симметрии позволяет сократить время вычислений и уменьшить размеры используемых массивов данных. Техника использования свойств симметрии изложена в работе [1]. Здесь мы ограничимся описанием обращения к программам.

В комплексе имеется пять специальных программ:

HERMFT – применяется, когда преобразуемые величины при всех a и b эрмитово-симметричны, то есть $\tilde{X}_{a;N-t;b} = (\tilde{X}_{a;t;b})^*$ (здесь $*$ – комплексное сопряжение); N – четно;

REALFT – применяется, когда преобразуемые величины при всех a и b – вещественные числа; N – четно;

RSYMFT – применяется, когда преобразуемые величины при всех a и b – вещественные числа, причем $\tilde{X}_{a;N-t;b} = X_{a;t;b}$; N – кратно восьми;

SDIAD – применяется, когда при всех a и b имеет место симметрия: $\tilde{X}_{a;N-t;b} = (-1)^t (\tilde{X}_{a;t;b})^*$; N – кратно четырем;

INV21 – применяется, когда при всех a и b имеет место симметрия: $\tilde{X}_{a;\frac{N}{2}+t;b} = (\tilde{X}_{a;t;b})^*$; N – кратно четырем. Отметим, что программа INV21 в отличие от предыдущих программ вычисляет шкалированное преобразование:

$$Y_{a;s;b} = \frac{1}{2} \sum_{t=0}^{N-1} \tilde{X}_{a;t;b} e^{-2\pi i \frac{st}{N}}, \quad s = 0, 1, \dots, N-1.$$

1. Хранение преобразуемых величин X и результата Y в памяти.

a) HERMFT

Здесь в силу симметрии преобразуемая последовательность определяется значениями $\tilde{X}_{a;t;b}$ с $0 \leq t \leq M = \frac{N}{2}$, причем $\tilde{X}_{a;0;b}$ и $\tilde{X}_{a;M;b}$ – вещественные числа. При входе в программу предполагается, что величины $\tilde{X}_{a;M;b}$ расположены на местах, соответствующих мнимым частям величин $\tilde{X}_{a;0;b}$. В таком

случае для хранения преобразуемых величин можно выделить либо два трехмерных вещественных массива R и E , либо один комплексный трехмерный массив Z размерности $K_\alpha * \frac{N}{2} * K_b$ каждый. При этом величина $R_\ell X_{\alpha;t;b}$ помещается в $R(\alpha+1, t+1, b+1)$, $I_m X_{\alpha;t;b}$ — в $E(\alpha+1, t+1, b+1)$, либо $X_{\alpha;t;b}$ помещается в $Z(\alpha+1, t+1, b+1)$.

Из эрмитовой симметричности преобразуемых данных следует вещественность результата $Y_{\alpha;s;g}$. При раздельном расположении вещественных и мнимых частей величин X в памяти мы получим после выполнения программы HERMFT в массиве R величины $Y_{\alpha;s;b}$ с четными $s: s=0, 2, \dots, N-2$, а в массиве E — с нечетными $s: s=1, 3, \dots, N-1$. (Величину $Y_{\alpha;2k;g}$ мы получим в $R(\alpha+1, k+1, b+1)$ а $Y_{\alpha;2k+1;g}$ в $E(\alpha+1, k+1, b+1)$, где $k=0, 1, \dots, M-1; M=\frac{N}{2}$). При хранении величин в комплексном массиве мы после выполнения программы найдем в вещественных частях элементов массива Z величины $Y_{\alpha;s;b}$ с $s=0, 2, 4, \dots, N-2$, а в мнимых частях элементов массива Z — $Y_{\alpha;s;b}$ с $s=1, 3, \dots, N-1$. Во втором случае, если трактовать массив Z как вещественный массив Q размерности $K_\alpha * 2M * K_b$, то мы найдем величину $Y_{\alpha;s;g}$ в элементе $Q(\alpha+1, s+1, b+1)$ для $s=0, 1, \dots, N-1$. (Напомним, что в Фортране комплексные числа располагаются в памяти в виде двух вещественных чисел: вещественной и мнимой частей).

б) REALFT

Здесь преобразуемая вещественная последовательность X хранится либо в двух вещественных массивах R и E размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2}+1) * K_b$ (тогда $X_{\alpha;2k;g}$ хранится в $R(\alpha+1, k+1, b+1)$, $X_{\alpha;2k+1;g}$ в $E(\alpha+1, k+1, b+1)$, где $k=0, 1, \dots, \frac{N}{2}-1$), либо в комплексном массиве Z размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2}+1) * K_b$ ($X_{\alpha;2k;g}$ хранится в вещественной, а $X_{\alpha;2k+1;g}$ в мнимой части элемента $Z(\alpha+1, k+1, b+1)$). Элементы массивов вида $R(\alpha+1, \frac{N}{2}+1, b+1)$, $E(\alpha+1, \frac{N}{2}+1, b+1)$, $Z(\alpha+1, \frac{N}{2}+1, b+1)$ используются при работе программы, но при вызове программы REALFT они могут не определяться.

Результатом выполнения программы будет эрмитово-симметричная последовательность $Y_{\alpha;s;g}$. Ее независимая часть ($Y_{\alpha;s;b}$ при $s=0, 1, \dots, \frac{N}{2}$) будет размещена либо в массивах R и E ($\operatorname{Re} Y_{\alpha;s;b}$ в $R(\alpha+1, s+1, b+1)$),

$I_m Y_{\alpha;s;b}$ в $E(\alpha+1, s+1, b+1)$), либо в массиве Z ($Y_{\alpha;s;b}$ в $Z(\alpha+1, s+1, b+1)$).

в) SDIAD

Здесь независимая часть преобразуемых величин ($X_{\alpha;t;\beta}$ при $0 \leq t \leq \frac{N}{2}$) располагается либо в двух вещественных массивах R и E размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2} + 1) * K_\beta$ ($Re X_{\alpha;t;\beta}$ в $R(\alpha+1, t+1, \beta+1)$, $Im X_{\alpha;t;\beta}$ в $E(\alpha+1, t+1, \beta+1)$) либо в комплексном массиве Z размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2} + 1) * K_\beta$ ($X_{\alpha;t;\beta}$ в $Z(\alpha+1, t+1, \beta+1)$).

Результат преобразования будет иметь симметрию $Y_{\alpha; \frac{N}{2} + t; \beta} = (Y_{\alpha; t; \beta})^*$, и его часть, соответствующая значениям $t = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}$, будет располагаться аналогично расположению величин X на входе в программу.

г) INV21

Здесь независимая часть преобразуемых величин ($X_{\alpha;t;\beta}$ с $0 \leq t \leq \frac{N}{2} - 1$) располагается либо в виде двух вещественных массивов R и E размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2} + 1) * K_\beta$ ($Re X_{\alpha;t;\beta}$ в $R(\alpha+1, t+1, \beta+1)$, $Im X_{\alpha;t;\beta}$ в $E(\alpha+1, t+1, \beta+1)$; для $0 \leq t \leq \frac{N}{2} - 1$), либо в комплексном массиве Z той же размерности ($X_{\alpha;t;\beta}$ в $Z(\alpha+1, t+1, \beta+1)$). Элементы массивов вида $R(\alpha+1, \frac{N}{2} + 1, \beta+1)$ (то же для E и Z) используются программой, но при обращении к программе INV21 могут не определяться.

Результат выполнения программы имеет симметрию $Y_{\alpha; N-1; \beta} = (-1)^{\alpha} (Y_{\alpha; 1; \beta})^*$, и его независимая часть ($Y_{\alpha; 1; \beta}$ с $0 \leq \beta \leq \frac{N}{2}$) располагается либо в массивах R и E ($Re Y_{\alpha; 1; \beta}$ в $R(\alpha+1, 1+1, \beta+1)$, $Im Y_{\alpha; 1; \beta}$ в $E(\alpha+1, 1+1, \beta+1)$), либо в массиве Z ($Y_{\alpha; 1; \beta}$ в $Z(\alpha+1, 1+1, \beta+1)$).

д) RSYMFТ

Здесь независимая часть ($X_{\alpha;t;\beta}$ при $0 \leq t \leq \frac{N}{2}$) преобразуемых величин располагается в вещественном массиве R размерности $K_\alpha * (\frac{N}{2} + 1) * K_\beta$ ($X_{\alpha;t;\beta}$ в $R(\alpha+1, t+1, \beta+1)$).

Результатом преобразования будут вещественные величины $Y_{\alpha; 1; \beta}$ (причем $Y_{\alpha; N-1; \beta} = Y_{\alpha; 1; \beta}$), которые будут располагаться в памяти аналогично величинам X .

2. Управление перебором параметров. Как и в программе СМРФТ, для управления перебором параметров при выполнении преобразования (8) задается целый массив K длины 5. Примеры задания значений элементов K в случае отдельного хранения вещественных и мнимых частей величин X и Y даны в табл. 1. В случае хранения величин X и Y в комплексном массиве все элементы массива K нужно удвоить:

Примеры задания значений элементов К
в случае отдельного хранения вещественных
и мнимых частей величин X и Y

Программа		K(1)	K(2)	K(3)	K(4)	K(5)
CMPLFT	Общий случай	$K_a * N * K_b$	K_a	$K_a * N$	K_a	1
	$K_a = 1$	$N * K_b$	1	$N * K_b$	$N * K_b$	N
HERMFT	Общий случай	$K_a * \frac{N}{2} * K_b$	K_a	$K_a * \frac{N}{2}$	K_a	1
	$K_a = 1$	$\frac{N}{2} * K_b$	1	$\frac{N}{2} * K_b$	$\frac{N}{2} * K_b$	$\frac{N}{2}$
REALFT RSYMFY SDIAD INV21	Общий случай	$(\frac{N}{2} + 1) * K_a * K_b$	K_a	$K_a * (\frac{N}{2} + 1)$	K_a	1
	$K_a = 1$	$(\frac{N}{2} + 1) * K_b$	1	$(\frac{N}{2} + 1) * K_b$	$(\frac{N}{2} + 1) * K_b$	$\frac{N}{2} + 1$

3. Обращение к программам HERMFT, REALFT, SDIAD, INV21. В случае, когда вещественные и мнимые части величин хранятся отдельно, программа вызывается оператором:

CALL* (R, E, M, K)**

Здесь *** - одно из имен HERMFT, REALFT,
SDIAD, INV21;

R, E - вещественные массивы (размерности $K_a * \frac{N}{2} * K_b$ для HERMFT, $K_a * (\frac{N}{2} + 1) * K_b$ для остальных программ), содержащие на входе преобразуемые величины $X_{a;t;b}$ на выходе $Y_{a;s;b}$;

M - целое; длина преобразования (8) $N=2M$;

K - целый массив длины 5; содержит информацию, управляющую перебором параметров.

В случае хранения величин X и Y в трехмерном комплексном массиве Z вызов программ может быть организован следующим образом:

```

. . . . .
DIMENSION A(2)
EQUIVALENCE (A(1), Z(1, 1, 1, ))
. . . . .
CALL *** (A(1), A(2), M, K)
. . . . .

```

Здесь *** - означает имя программы.

4. Обращение к программе RSYMFT.

CALL RSYMFT (R, M, K)

Здесь R - вещественный массив размерности $K_a * \frac{N+1}{2} * K_b$, содержащий на входе преобразуемые величины, на выходе - результат синтеза;

M - целое; N=2M - длина преобразования (8);

K - целый массив длины 5; содержит информацию, управляющую перебором параметров.

5. Ограничения. В разложении числа M(N=2M) на простые множители не должно быть сомножителей больших чем 19, и общее число сомножителей не должно превышать 14.

Кроме того, в программах SDIAD, INV21 число M должно быть четно, а в программе RSYMFT - должно быть кратно четырем.

6. Сообщения программ. Если не выполнены ограничения, программа прекращает работу и выдает в файл 3 соответствующее сообщение.

7. Требуемые подпрограммы. Программы HERMFT, REALFT, SDIAD, INV21, RSYMFT вызывают подпрограмму CMPLFT.

8. Пример 6. Пусть в комплексном массиве Z длины 21 помешены члены эрмитово-симметричной последовательности $\{x_t\}_{t=0}^{39}$, отвечающие значениям $t = 0, 1, \dots, 20$ (x_t содержится в $Z(t+1)$). После выполнения программы:

```

DIMENSION Z(21), Q(40), B(2), K(5)
COMPLEX Z
EQUIVALENCE (Q(1), Z(1)), (B(1), Z(21))
Q(2)=B(1)
K(1)=40
K(2)=2
K(3)=40
K(4)=40
K(5)=40

```

```

CALL HERMFT (Q(1), Q(2), 20, K)
STOP
END

```

в вещественном массиве Q длины 40 будет храниться результат синтеза:

$$Y_s = \sum_{t=0}^{39} X_t e^{-2\pi t \frac{st}{40}}, \quad s = 0, 1, \dots, 39.$$

§ 3. УПРАВЛЕНИЕ ПЕРЕБОРОМ ПАРАМЕТРОВ

В этом параграфе мы остановимся на организации перебора параметров в процессе вычисления преобразования (8).

В подпрограммах одномерного синтеза не используется комплексная арифметика, а работа идет отдельно с вещественными и мнимыми частями величин $X_{a;t;b}$ и $Y_{a;s;b}$. Пусть $R_{a;t;b}$ – вещественные части величин $X_{a;t;b}$. Мы будем далее говорить о размещении в памяти и работе с величинами R , хотя то же самое относится, конечно, и к работе с мнимыми частями величин X .

Пусть мы имеем некоторый четырехмерный массив Q размерности $L*K_a*N*K_b$ такой, что величины $R_{a;t;b}$ содержатся в нем, причем величина $R_{a;t;b}$ хранится в элементе $Q(1, a+1, t+1, b+1)$ массива, где 1 – фиксированное для всех индексов a, t и b число. (То есть величины $R_{a;t;b}$ заполняют, вообще говоря, не весь массив Q).

Пример 7. Пусть X – вещественный трехмерный массив размерности K_a*N*K_b ; тогда мы можем его трактовать как четырехмерный массив Q размерности $1*K_a*N*K_b$.

Пример 8. Пусть Z – комплексный трехмерный массив размерности K_a*N*K_b ; тогда мы можем трактовать его как четырехмерный вещественный массив Q размерности $2*K_a*N*K_b$. При этом в элементах вида $Q(1, I, J, K)$ содержатся вещественные части элементов массива Z , а в элементах вида $Q(2, I, J, K)$ – мнимые части элементов массива Z .

Вне зависимости от того, какую размерность мы приписываем массиву Q , в памяти он располагается как линейный (одномерный) массив, и порядковый номер в этом ли-

нейном массиве элемента $Q(1, a+1, t+1, b+1)$ есть
 $d=1+a*L+t*L*K_a+b*L*K_a*N$ (то есть величины R располагаются в памяти на равном "расстоянии" L друг от друга).

Допустим, что у нас имеется некоторый алгоритм вычисления преобразования (7) и на каком-то шаге этого алгоритма нам нужно совершить некоторую операцию над R_f (вещественной частью величины X_f). Желая выполнить преобразование (8) для различных наборов параметров, мы должны совершить аналогичную операцию над всеми элементами массива Q , имеющими порядковый номер (в линейном массиве) вида:

$d = (1+t*L*K_a)+a*L + b*(L*K_a*N)$,
где a и b пробегают все допустимые значения. Такое вычисление может быть организовано в программе следующим образом:

```
      . . .
      DO 100 JB=1+t*L*K_a, L*K_a*N*K_b, L*K_a*N
      DO 100 JA=JB, JB+L*K_a-1, L
      [требуемая операция над элементом с порядковым
      номером  $d=1-1+JA$ ]
      100 CONTINUE
      . . . . .
```

В подпрограммах одномерного преобразования Фурье для управления перебором параметров задается массив K из пяти целых чисел, и перебор осуществляется в цикле вида:

```
      . . .
      J1=1+t*K(2)
      DO 100 JB=J1, K(1), K(3)
      J2=JB+K(4)-1
      DO 100 JA=JB, J2, K(5)
      [требуемая операция над элементом  $P(JA)$ ]
      100 CONTINUE
      . . . . .
```

Здесь P - вспомогательный массив, первый элемент которого совпадает в памяти с элементом $Q(1)$. (Указанное совмещение $P(1)$ с $Q(1)$ может быть, например, выполнено оператором EQUIVALENCE См. примеры 5 и 6).

Приложение 1

ПРОГРАММЫ РАСЧЕТА СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ

Назначение. Программы P1SF, P21SF и SFORTH рассчитывают по заданной функции электронной плотности $\rho_{r,s,t}$ структурные факторы:

$$F_{\text{fact}} = \frac{\text{SCALE}}{N_x * N_y * N_z} \sum_{r=0}^{N_x-1} \sum_{s=0}^{N_y-1} \sum_{t=0}^{N_z-1} \rho_{r,s,t} e^{2\pi i \left(\frac{rx}{N_x} + \frac{sy}{N_y} + \frac{tz}{N_z} \right)}.$$

Здесь $\rho_{r,s,t} = \rho\left(\frac{r}{N_x}, \frac{s}{N_y}, \frac{t}{N_z}\right)$, $\rho(x, y, z)$ – вещественная функция с периодом 1 по всем осям; SCALE – шкальный коэффициент.

Программа P1SF вычисляет структурные факторы в общем случае; программа P21SF – в случае наличия у функции $\rho(x, y, z)$ симметрии группы P_2 , то есть $\rho_{Nx-r, \frac{1}{2}Ny+s, Nz-t} = \rho_{r, s, t}$; программа SFORTH – при наличии у $\rho(x, y, z)$ симметрии группы P_{212121} , то есть $\rho_{\frac{1}{2}Nx-r, Ny-s, \frac{1}{2}Nz+t} = \rho_{r, s, t} = \rho_{\frac{1}{2}Nx+r, \frac{1}{2}Ny-s, Nz-t}$.

Обращение к программе.

CALL *** (X, N)

Здесь *** – одно из имен P1SF, P21SF, SFORTH;

X – вещественный рабочий массив размерности N;

N – целое; размер отводимого программе для работы вещественного массива X.

Ввод функции электронной плотности $\rho_{r,s,t}$.

a) P1SF, P21SF.

Функция электронной плотности $\rho_{r,s,t}$ вводится бесформатным оператором READ из файла последовательного доступа, ссыльный номер которого N'Г1 задается в управляющих картах.

Файл начинается 80-байтовой записью, содержащей заголовок. Далее следуют сечения $s=\text{const}$ для $s=0, 1, \dots, NY-1$ (для P21SF: $s=0, 1, \dots, \frac{NY}{2}$). Для каждого сечения в файле имеется две записи:

Запись 1. NS – целое; значение индекса s для сечения;

Запись 2. $\rho_{r,ns,t}$ для $0 \leq r \leq Nx-1, 0 \leq t \leq Nz-1$ (r меняется более быстро, t – медленнее).

Конец данных обозначается отрицательным значением NS либо ленточной маркой.

6) SFORTH

Здесь отличие от программ P1SF и P21SF в том, что во входном файле записаны сечения $t=const$ для $t=0, 1, \dots, \frac{Nz}{4}$. Для каждого сечения первая запись содержит NT-значение индекса t для сечения, вторая - значение $\rho_{r,s,NT}$ ($0 \leq r \leq NX-1, 0 \leq s \leq NY-1$) так, что r меняется наиболее быстро, s - медленнее.

Вывод структурных факторов.

Двоичный вывод рассчитанных структурных факторов производится бесформатным оператором WRITE в файл последовательного доступа, ссылочный номер которого NT3 задается в управляющих картах (при NT3=0 - двоичный вывод не производится).

Структурные факторы выводятся в таком порядке, что для них наиболее медленно меняется индекс h, затем k, затем l.

a) P1SF, P21SF.

В управляющих картах программы задаются параметры элементарной ячейки, по которым для каждого вычислительно-го структурного фактора определяется разрешение d и выводятся только те факторы, для которых $l \geq 0$ (для P21SF: $l \geq 0, k \geq 0$) и d лежит в заданных пределах: $DMIN \leq d \leq DMAX$.

Структурные факторы выводятся оператором

```
IF (NT3.NE.0) WRITE (NT3) M, INDEX, A,  
B, F, PHASE,
```

где M - целое; число структурных факторов в записи (M<0 означает конец данных);

INDEX, A, B, F, PHASE - массивы размерности 100;

INDEX(I)=((h+128)*256+k+128)*256+l - целое;
A(I), B(I) - вещественная и мнимая части F_{hkl} ;

F(I), PHASE(I) - модуль и фаза (в радианах) F_{hkl} .

Независимо от значения M в записи присутствуют все 100 элементов массива.

b) SFORTH

Выводятся F_{hkl} с $0 \leq h \leq MAXH, 0 \leq k \leq MAXK, 0 \leq l \leq MAXL$, где MAXH, MAXK, MAXL задаются в управляющих картах. Формат вывода совпадает с входным форматом программы ORTH21 (см. Глава 1, § 1, п. 7).

Программы P1SF и P21SF допускают десятичный вывод результата F_{hkl} в файл с задаваемым в управляю-

ших картах ссылочным номером NT4 (при NT4=0 десятичный вывод отсутствует). Десятичный вывод представляет собой список величин h, k, l, F и PHASE (в градусах) по одному рефлексу на строку.

Управляющие данные на перфокартах.

Программы вводят управляющие данные из файла с номером 1.

a) P1SF, P21SF.

- 1) TITLE(20) (20A4) - заголовок;
- 2) A, B, C, ALPHA, BETA, GAMMA (8F10.0)
(для P21SF:A,B,C,BETA) - параметры элементарной ячейки в ангстремах и градусах;
- 3) DMIN, DMAX, SCALE (3F10.0) - границы разрешения (в ангстремах) и шкальный коэффициент;
- 4) NX, NY, NZ (3I5) - числа делений по осям элементарной ячейки;
- 5) NT1, NT2, NT3, NT4 (4I5) - ссылочные номера файлов:

NT1 - для ввода электронной плотности;

NT2 - рабочего файла;

NT3 - для двоичного вывода структурных факторов;

NT4 - для десятичного вывода структурных факторов.

б) SFORTH

- 1) TITLE(20) (20A4) - заголовок;
- 2) NX, NY, NZ (3I5) - число делений по осям элементарной ячейки;
- 3) MAXH, MAXK, MAXL (3I5) - величины, ограничивающие значения индексов h, k, l для рассчитываемых структурных факторов;
- 4) NT1, NT2, NT3 (3I5) - ссылочные номера файлов:
NT1 - для ввода электронной плотности;
NT2 - рабочего файла;
NT3 - для вывода структурных факторов;
- 5) SCALE (F10.0) - шкальный коэффициент.

Ограничения

P1SF: NZ - четно;

P21SF: NZ - четно; NY - кратно четырем;

SFORTH: NZ - кратно четырем, NY - четно.

Размер N буфера X должен быть достаточно велик.

Сообщения программы

Выводятся в файл 3.

Требуемые подпрограммы

Список требуемых подпрограмм дан в приложении 2.

Приложение 2

**СПИСОК ПРОГРАММ, ВЫЗЫВАЕМЫХ
ПРОГРАММАМИ ТРЕХМЕРНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
ФУРЬЕ**

Имя программы	Число вызываемых подпрограмм	Вызываемые подпрограммы			
TRI	16	TRISF1	CMPLFT	R2CFTK	
		YOUT2	DIPRP	R3CFTK	
		YIN1	MDFTKD	R4CFTK	
		HERMFT	SRFP	R5CFTK	
			ITIME	R8CFTK	
P1BAR	17		PRINTY	RPCFTK	
		TRISF2	CMPLFT	R2CFTK	
		YOUT2	DIPRP	R3CFTK	
		YIN2	MDFTKD	R4CFTK	
		HERMFT	SRFP	R5CFTK	
		REALFT	ITIME	R8CFTK	
P21	17		PRINTY	RPCFTK	
		MONSF1	CMPLFT	R2CFTK	
		YOUT2	DIPRP	R3CFTK	
		YIN2	MDFTKD	R4CFTK	
		HERMFT	SRFP	R5CFTK	
		SDIAD	ITIME	R8CFTK	
TWOFLD	17		PRINTY	RPCFTK	
		MONSF1	CMPLFT	R2CFTK	
		YOUT1	DIPRP	R3CFTK	
		YIN1	MDFTKD	R4CFTK	
		HERMFT	SRFP	R5CFTK	
		REALFT	ITIME	R8CFTK	
			PRINTY	RPCFTK	

		MONSF2	CMPPLFT	R2CFTK
		YOUT1	DIPRP	R3CFTK
P20VM	18	YIN1	MDFTKD	R4CFTK
		HERMFT	SRFP	R5CFTK
		REALFT	ITIME	R8CFTK
		RSYMFT	PRINTY	RPCFTK
		ORTSF1	CMPPLFT	R2CFTK
		MULTI	DIPRP	R3CFTK
ORTH21	20	DIVI	MDFTKD	R4CFTK
		TRNSP2	SRFP	R5CFTK
		ZOUT2	ITIME	R8CFTK
		ZIN4	PRINTZ	RPCFTK
		HERMFT		
		SDIAD		
		ORTSF1	CMPPLFT	R2CFTK
		YOUT1	DIPRP	R3CFTK
P222	18	TRNSP1	MDFTKD	R4CFTK
		YIN3	SRFP	R5CFTK
		HERMFT	ITIME	R8CFTK
		REALFT	PRINTY	RPCFTK
		ORTSF2	CMPPLFT	R2CFTK
		YOUT1	DIPRP	R3CFTK
PMMM	17	READHL	MDFTKD	R4CFTK
		HERMFT	SRFP	R5CFTK
		RSYMFT	ITIME	R8CFTK
			PRINTY	RPCFTK
		READY	CMPPLFT	R2CFTK
		WRITEH	DIPRP	R3CFTK
P1SF	16	READH	MDFTKD	R4CFTK
		REALFT	SRFP	R5CFTK
			ITIME	R8CFTK
			OUTSF	RPCFTK
		READY	CMPPLFT	R2CFTK
		WRITEH	DIPRP	R3CFTK
P21SF	17	READ2H	MDFTKD	R4CFTK
		REALFT	SRFP	R5CFTK
		INV21	ITIME	R8CFTK
			OUTSF	RPCFTK

SFORTH	16	READZ	CMPPLFT	R2CFTK
		WRITET	DIPRP	R3CFTK
		READTL	MDFTKD	R4CFTK
		REALFT	SRFP	R5CFTK
		INV21	WRITES	R8CFTK
				RPCFTK

Приложение 3

СПИСОК ПРОГРАММ КОМПЛЕКСА

(В скобках дан размер в байтах модуля после трансляции в ДОС ЕС).

- | | |
|-------------------|-------------------|
| 1. CMPPLFT (886) | 29. READHL (1406) |
| 2. DIPRP (2730) | 30. READTL (1494) |
| 3. DIVI (796) | 31. READY (1206) |
| 4. HERMFT (1276) | 32. READZ (878) |
| 5. INV21 (2108) | 33. READ2H (1148) |
| 6. MDFTKD (2172) | 34. REALFT (1362) |
| 7. MONSF1 (3982) | 35. RPCFTK (4428) |
| 8. MONSF2 (3514) | 36. RSYMFT (2806) |
| 9. MULTI (834) | 37. SDIAD (2582) |
| 10. ORTH21 (4276) | 38. SFORTH (2652) |
| 11. ORTSF1 (3950) | 39. SRFP (1878) |
| 12. ORTSF2 (3474) | 40. TRI (3918) |
| 13. OUTSF (3940) | 41. TRISF1 (4254) |
| 14. P1BAR (3990) | 42. TRISF2 (3774) |
| 15. P1SF (5714) | 43. TRNSP1 (1654) |
| 16. P21 (3986) | 44. TRNSP2 (1766) |
| 17. P21SF (5154) | 45. TWOFLD (4126) |
| 18. P222 (4238) | 46. WRITEH (1326) |
| 19. P20VM (4086) | 47. WRITES (3640) |
| 20. PMMM (3886) | 48. WRITET (1626) |
| 21. PRINTY (3560) | 49. YIN1 (2836) |
| 22. PRINTZ (3460) | 50. YIN2 (2204) |
| 23. R2CFTK (1302) | 51. YIN3 (1948) |
| 24. R3CFTK (1802) | 52. YOUT1 (766) |
| 25. R4CFTK (2018) | 53. YOUT2 (766) |
| 26. R5CFTK (2724) | 54. ZIN4 (1946) |
| 27. R8CFTK (3758) | 55. ZOUT2 (766) |
| 28. READH (934) | |

Приложение 4

ИСПРАВЛЕНИЯ, ВНЕСЕННЫЕ В ПРОГРАММЫ КОМПЛЕКСА

В связи с тем, что тексты программ комплекса получили широкое распространение, мы укажем здесь основные исправления, внесенные в программы комплекса.

Подпрограмма TRISF1

После карты №44: IF(L.LT.0) GO TO 700
добавлен оператор: IF(-K.GT.KMAX) GO TO 300

Подпрограмма TRISF2

После карты №40: IF(L.LT.0) GO TO 700
добавлен оператор: IF(-K.GT.KMAX) GO TO 300

Подпрограмма PRINTY

Карта №104: WRITE(BCD, 4000) (LINE(J), J=1, L)
замена на: WRITE(BCD, 4000) (LINE(J), J=2, L)
Оператор формата: 4000 FORMAT (4H Z=,13,3H, ,30I4)
заменен на: 4000 FORMAT (1X, 30I4)

Подпрограмма PRINTZ

Карта №100: WRITE (BCD, 4000) (LINE(I), I=1, L)
заменена на: WRITE (BCD, 4000) (LINE(I), I=2, L)
Оператор формата: 4000 FORMAT (4H X=,13,3H, ,30I4)
заменен на: 4000 FORMAT (1X, 30I4)

Подпрограмма PMMM

Карта №138: D(5)=NX
заменена на: D(5)=NZ

Подпрограмма SDIAD

После карты №40: C
вставлены карты: N1=NOVER2/2
S=1.0

IF(2*N1.NE.NOVER2) S-- S

Перед картой: 100 CONTINUE
вставлена карта: X(L)=S*X(K)
Карта перед оператором 250 CONTINUE: X(L)-- X(L)
заменена на карты: L1=L+D2
X(L)=Y(L1)-X(L)

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Lynn F. Ten Eyck - Acta Cryst., 1973, v. A29, p. 183- 191.
2. Lynn F. Ten Eyck - Acta Cryst., 1977, v. A33, p. 486- 492.
3. Bienenstock A., Ewald P.P. - Acta Cryst., 1962, v. 15, p. 1253- 1261.
4. Cooley J.W., Tukey J.W. - Math. Comput., 1965, v. 19, p. 297- 301.
5. Gentieman W.M., Sande G. Fast Fourier Transform - for Fun and Profit, Proceedings of Fall Joint Computer Conference, 1966, v. 29, p. 563- 578.

С О Д Е Р Ж А Н И Е

Введение	3
ГЛАВА I. Дискретное трехмерное преобразование Фурье	6
§ 1. Обращение к программам трехмерного синтеза	8
§ 2. Сообщения программ	15
§ 3. Сведения о программах синтеза	18
§ 4. Структура программ синтеза	20
§ 5. Подпрограммы ввода структурных факторов (коэффициентов Фурье)	22
§ 6. Подпрограммы вывода результатов синтеза	25
ГЛАВА II. Одномерное быстрое преобразование Фурье	26
§ 1. Программа одномерного быстрого преобразования Фурье СМPLFT	26
§ 2. Программы одномерного преобразования Фурье, учитывающие симметрию исходных данных	31
§ 3. Управление перебором параметров	36
Приложение 1. Программы расчета структурных факторов	38
Приложение 2. Список программ, вызываемых программами трехмерного преобразования Фурье	41
Приложение 3. Список программ комплекса	43
Приложение 4. Исправления, внесенные в программы комплекса	44
Литература	45

Владимир Юрьевич Лунин
КОМПЛЕКС ПРОГРАММ "БЫСТРОЕ
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ"
Программное обеспечение структурных
исследований - ФОРТРАН

Отредактировано и подготовлено к печати
в Отделе научно-технической информации НЦБИ

Редактор Т.К.Тевзиеva
Технический редактор С.М.Ткачук
Корректор Л.М.Орлова

Подписано в печать 12/IX-79 г. Т-13484.
Уч.-изд.л. 2,65. Формат 60x90/16.
Тираж 300 экз. Заказ 6099Р.
Бесплатно. Ред. № 106.

Отпечатано на ротапринте в Отделе научно-
технической информации Научного центра
биологических исследований АН СССР в Пущине