

# 積層欠陥をもつ最密充てん構造の X 線回折強度 計算の電算機プログラム

高 橋 秀 夫

(1982年10月15日 受理)

## Electronic Computer's Program for Calculation of Diffracted Intensity by Close-packed Structures with Stacking Faults

Hidewo TAKAHASHI

### 1. 緒 言

我国における電算機の普及は目ざましく、電算機は我国の科学技術、産業等あらゆる分野での発展の跳躍台となっている。電算機の普及は同時に各種プログラムの開発につながり、我国には莫大なプログラムの蓄積がある筈である。それらのプログラムは部分的には各種ライブラリーとして編集されているが、国家的規模で編集されるべきであるとの提案は未だなされていないようである。X線回折データを編集した ASTM (American Society for Testing and Materials) カード一つ取り上げても、欧米人は事・物を標準化・規格化し万人に利用しやすい形に仕上げていく努力を積重ねていることがわかる。我国の科学技術における創造性の欠落が常に指摘され、学校教育においても、創造性の開発が常に叫ばれているが、筆者は欧米に見習うべきはむしろ事・物の標準化・規格化の方ではないかと考えている。電算機のプログラムについていえば、企業秘密に属しないものについては全て公表され、利用しやすい形に編集されてあることが望ましい。一方、プログラム作成者にとっては、プログラム公開はプログラムを所有することによる優位を失なうことになるとともに、プログラムには大かれ少かれ誤りがあることを思えば心が臆することである。筆者が所有する、他人に公開できる完成されたプログラムは数少ないのであるが、その一つをあえて公表して、このプログラムの編集化に向けての一石としたい。

本論文のプログラムは積層欠陥をもつ最密充てん構造の X 線回折強度を Allegra (1965) の式の Q 行列の固有値を求めて計算するもので、その理論および計算例は筆者 (1981) が既に記述したものである。Allegra (1965) の理論は柿木一小村 (1952, 1954) の式の簡約化という観点から構成されているため、難解で明確さを欠き、あまり注目されていない。筆者は Allegra の論文が公表された年、彼とは異なる観点から彼と同様な強度式を得て、論文にまとめ Acta Crystallographica に投稿したが、Allegra の論文が既に受理されている理由で却下された。筆者の方法は Allegra のそれとは全く異なるため、形式的には同形の諸行列の解釈が彼とは異なり、この差異が式の取扱いを

極めて簡単且つ容易にする。このことは Howard (1977) の extrinsic faults in face-centered cubic crystals を拡張した筆者の方法 (1978) と柿木-小村の方法による Howard and Kuwano (1979) の方法を比較すれば一目瞭然である。筆者の方法では、彼等の計算の5段階はあらゆる構造に対して予めプログラム化されている。筆者の方法ではPおよびQ行列を得る予備的段階のみが、唯一の作業であるが、これがまた柿木-小村の方法に比較すれば問題にならない程容易にできるように定式化されている。筆者の希望する所は本プログラムの多くの研究者が試され、積層欠陥をもつ多くの試料の解析に役立てて下さることである。

## 2. プログラムの説明

### Card no. 1-35

諸行列の次元は  $20 \times 20$  である。柿木-小村の式を用いた場合の  $60 \times 60$  に対応しているので、本プログラムは過去に考えられたあらゆる型の構造に対して適用可能であろう。入力はQの次元、逆格子点間の分割数および計算開始点である。この開始点は各ピークについてより詳しく計算するために設定されたが、本プログラムでは不必要である。入力される確率変数は  $\beta, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$  であり、 $\beta=1.0$  のとき、入力を停止する。計算例では  $\alpha_1$  のみが用いられている。

### Card no. 36-89

P行列が定義され、F行列が計算される。P行列は構造が異なればカードを入れ換えねばならない。変数  $\alpha_1$  を入力させる方がデータ・カードのタイピングが楽であると考えた。F行列の計算の際、FACOM 230-45S, SSL の GAUSED, GAUELD, SWEEP D を利用している。P行列は極めて特異な形をしているので、連立一次式の全ての解法を用いれば、どれか一つが解くであろうと考えた。

### Card no. 90-104

Q行列が計算される。本プログラムには Prasad & Lele (1971) の dHCP に対するQ行列が用いられている。筆者はQ行列も構造が異なればカードを入れ換えている。Q行列については入れ換えを行う必要は必ずしもなく、P行列の方を変えればよいのであるが、Q行列は構造が異なる毎に入れ換えた方が誤りを犯かす可能性が少ない。

### Card no. 105-186

Q行列の固有方程式の係数と  $B(m) = \text{Spur}(FQ^m)$  が計算される。Card no. 117-123, 148-155, 163-173 は  $B(m)$  についてのもので、これらを抜けば固有方程式の係数を求めるサブルーチンが得られる。

### Card no. 187-216

Q行列の固有値が SSL のヤラット・モデファイ法を用いて計算される。ヤラット・モデファイ法が電算機に格納されていない場合には、複素係数の高次多項式(多くの場合、実係数で充分のよ

うである)の他の解法のサブルーチンを利用すればよい。一般に高次多項式の全ての根が求められるわけではないが、サブルーチン HALSL では、一根でも正しい根が得られれば、組立互除法により方程式の次数を順次低下させて、最終的に全ての正しい根を得る仕組みになっている。また、その根が固有方程式を満たすか否か検算している。

Card no. 217-265, 314-322

C(i) が求められる。SSL の CSWEPD を利用している。Card no. 316-322 は C(i) の検算であるとともに固有値の検算でもある。

Card no. 266-313

ピークの位置 (P.P.), 最大強度, 積分強度幅, 強度分布の重心 (C.G.) と P.P. - C.G. の計算である。P.P. - C.G. が 0 であれば強度分布は P.P. について対称的になる。筆者の式, プログラムに誤りがあるとすれば, この個所であり, 読者は各自検討されたい。

Card no. 323-351

Q 行列の固有値を用いて強度計算を行う。柿木-小村の式 (プログラムは出力の後に付けてある) を用いた場合と一致する。

Card no. 352-440

各種サブルーチンである。HALSL 以外は極めて基礎的なものであるが, プログラム・ミスがある可能性もある。

#### 計 算 例

本例では入力カードは 3 枚で  $N=8$ ,  $N_1=100$ ,  $N_2=1$  が 1 枚に入っており,  $\beta=0.0$ ,  $\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\alpha_4=0.1$  と  $\beta=1.0$  の 2 枚が確率変数として与えられている。 $\beta=1.0$  は読込み中止のためのものである。

#### 付 録

柿木-小村の式を用いた強度計算のプログラムである。先のプログラムの Card no. 161 の後に付けられればよいのであるが, そのとき dimension に注意する必要がある。又, 強度は F5 になっている。

#### 文 献

- Allegra, G. (1964). Acta Cryst. **17**, 579  
Howard, C. J. (1977). Acta Cryst. A **33**, 29  
Howard, C. J. & Kuwano, N. (1979). Acta Cryst. A **35**, 337  
Kakinoki, J. & Komura, Y. (1952). J. Phys. Soc. Japan **7**, 30  
Kakinoki, J. & Komura, Y. (1954). J. Phys. Soc. Japan **9**, 169  
Prasad, B. & Lele, S. (1971). Acta Cryst. A **27**, 54  
Takahashi, H. (1978). Acta Cryst. A **34**, 344  
Takahashi, H. (1981). Bull. Fac. Educ. Univ. Kagoshima (Nat. Sci.) **28**, 1

```

1:C   PROGRAM FOR CALCULATION OF DIFFRACTED INTENSITY BY CLOSE-
2:C   PACKED STRUCTURE WITH STACKING FAULTS
3:     COMPLEX EPS1, EPS2, EXP1, EXP2, S, FX, SB, EXPY
4:     COMPLEX Q, QQ, T, D, B, C, CRT, COAB, PCR, AQ
5:     DIMENSION P(20,20), A(20,20), Q(20,20), QQ(20,20), AB(40,25)
6:     DIMENSION AQ(20,20), SQ(25,25)
7:     DIMENSION F(20), T(25), D(25), B(25), CRT(20), COAB(25), X(20), C(25)
8:     DIMENSION PHAI(1000), FI(1000)
9:     PAI=3.141592653589793
10:    X1=-0.5
11:    Y1=0.86602540378
12:    EPS1=CMPLX(X1,Y1)
13:    EPS2=CMPLX(X1,-Y1)
14:    READ(5,501)N,N1,N2
15: 501  FORMAT(8I10)
16:C   N IS DIMENSION OF Q MATRIX
17:C   N1 IS NUMBER OF POINTS CALCULATED INTENSITY
18:C   N2 IS STARTING POINT OF CALCULATION
19:    N4=N1-N2+1
20:    N5=N-1
21:    N3=N1/2
22:    N6=N+1
23:    N9=N+2
24: 99  READ(5,510)BETA,ALP1,ALP2,ALP3,ALP4
25: 510  FORMAT(SF10.5)
26:    IF(BETA.EQ.1.0)STOP
27:    WRITE(6,650)
28: 650  FORMAT(1H1)
29:    WRITE(6,611)N
30: 611  FORMAT(10X,23HDIMENSION OF Q MATRIX =,15)
31:    WRITE(6,661)
32: 661  FORMAT(///,10X,25HPROBABILITIES OF P MATRIX)
33:    WRITE(6,600)BETA,ALP1,ALP2,ALP3,ALP4
34: 600  FORMAT(3F10.5)
35: 621  FORMAT(SF10.5)
36:    EXP2=(1.0-BETA)*EPS2+BETA*EPS1
37:    EXP1=BETA*EPS2+(1.0-BETA)*EPS1
38:    DO 10 I=1,N
39:    DO 10 J=1,N
40: 10   P(I,J)=0.0
41:C   P MATRIX IS GIVEN HERE.
42:C   DHCP OF LELE, ALP4C
43:    P(1,2)=P(3,4)=P(7,4)=P(8,2)=1.0-ALP1
44:    P(1,5)=P(3,6)=P(7,6)=P(8,5)=ALP1
45:    P(2,3)=P(4,1)=P(5,7)=P(6,8)=1.0
46: 22  CONTINUE
47:C   CALCULATION OF F MATRIX
48:    DO 11 I=1,N
49:    DO 11 J=1,N5
50:    A(J,I)=P(I,J)
51: 11  CONTINUE
52:    DO 12 I=1,N
53:    A(N,I)=1.0
54: 12  CONTINUE
55:    DO 13 I=1,N5
56:    A(I,N6)=0.0
57: 13  CONTINUE
58:    DO 16 I=1,N5
59:    A(I,I)=A(I,I)-1.0
60: 16  CONTINUE
61:    A(N,N6)=1.0
62:    IF(IND.EQ.2) GO TO 23
63:    CALL GAUSED(A,20,N6,1.0D-15,X,ILL)
64:    DO 21 I=1,N
65: 21  F(I)=X(I)

```

```
66:      IND=1
67:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
68:      CALL GAUELD(A,20,N,N6,1.0D-15,ILL)
69:      IND=2
70:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
71:      IF(ILL.NE.0) GO TO 22
72:      23 CONTINUE
73:      CALL SWEEP(A,20,N,N6,1.0D-15,ILL)
74:      IND=3
75:      IF(ILL.EQ.0) GO TO 14
76:      WRITE(6,606)ILL
77:      606 FORMAT(///,10X,5HILL =,I5)
78:      IF(ILL.NE.0) STOP
79:      14 DO 15 I=1,N
80:      F(I)=A(I,N6)
81:      15 CONTINUE
82:      WRITE(6,663)
83:      663 FORMAT(///,10X,25HPROBABILITIES OF F MATRIX)
84:      WRITE(6,610)IND
85:      610 FORMAT(8I10)
86:      WRITE(6,600)(F(I),I=1,N)
87:C     Q MATRIX IS GIVEN HERE.
88:      DO 20 I=1,N
89:C     Q MATRIX OF DHCP
90:      Q(I,1)=P(I,1)*EPS1
91:      Q(I,2)=P(I,2)*EPS2
92:      Q(I,3)=P(I,3)*EPS2
93:      Q(I,4)=P(I,4)*EPS1
94:      Q(I,5)=P(I,5)*EPS1
95:      Q(I,6)=P(I,6)*EPS2
96:      Q(I,7)=P(I,7)*EPS1
97:      Q(I,8)=P(I,8)*EPS2
98:      Q(I,9)=P(I,9)*EPS1
99:      Q(I,10)=P(I,10)*EPS2
100:     Q(I,11)=P(I,11)*EPS1
101:     Q(I,12)=P(I,12)*EPS2
102:     20 CONTINUE
103:C     CALCULATION OF CHARACTERISTIC VALUES OF Q MATRIX
104:C     CALCULATION OF B(M)=SPUR(F*Q**M)
105:     S=0.0
106:     DO 30 I=1,N
107:     S=S+Q(I,I)
108:     30 CONTINUE
109:     T(1)=S
110:     D(1)=1.0
111:     B(1)=1.0
112:     C(1)=1.0
113:     DO 31 I=1,N
114:     DO 31 J=1,N
115:     QQ(I,J)=Q(I,J)
116:     31 CONTINUE
117:     DO 32 I=1,N
118:     S=0.0
119:     DO 33 J=1,N
120:     S=S+Q(I,J)
121:     33 CONTINUE
122:     SQ(I,1)=S
123:     32 CONTINUE
124:     DO 40 M=2,N9
125:     DO 41 I=1,N
126:     DO 41 K=1,N
127:     S=0.0
128:     DO 42 J=1,N
129:     S=S+QQ(I,J)*Q(J,K)
130:     42 CONTINUE
```

```

131:      AQ(I,K)=S
132:      41 CONTINUE
133:      DO 61 I=1,N
134:      DO 61 J=1,N
135:      QQ(I,J)=AQ(I,J)
136:      61 CONTINUE
137:      S=0.0
138:      DO 43 I=1,N
139:      S=S+QQ(I,I)
140:      43 CONTINUE
141:      T(M)=S
142:      S=0.0
143:      MA=M-1
144:      DO 44 I=1,MA
145:      S=S+D(M-I)*T(I)*(-1)**(I+1)
146:      44 CONTINUE
147:      D(M)=S/MA
148:      DO 45 I=1,N
149:      S=0.0
150:      DO 46 J=1,N
151:      S=S+QQ(I,J)
152:      46 CONTINUE
153:      SQ(I,M)=S
154:      45 CONTINUE
155:      40 CONTINUE
156:      DO 50 I=1,N6
157:      C(I)=D(I)*(-1)**(I+1)
158:      50 CONTINUE
159:      WRITE(6,664)
160:      664 FORMAT(///,10X,39HCOEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC EQUATION)
161:      WRITE(6,601)(C(J),J=1,N6)
162:      601 FORMAT(3(2F10.7,5X))
163:      DO 51 M=2,N9
164:      S=0.0
165:      DO 52 I=1,N
166:      S=S+F(I)*SQ(I,M-1)
167:      52 CONTINUE
168:      B(M)=S
169:      51 CONTINUE
170:      WRITE(6,665)
171:      665 FORMAT(///,10X,4HB(M))
172:      WRITE(6,605)(B(J),J=1,N9)
173:      605 FORMAT(2F15.7)
174:C      CALCULATION OF CHARACTERISTIC VALUES
175:C      CALCULATION OF AMPLITUDES AND ARGUMENTS OF CHARACTERISTIC VALUES
176:      NR=N6
177:      DO 100 I=1,N6
178:      J=N6+1-I
179:      CC=REAL(C(J))
180:      SC=AIMAC(C(J))
181:      SQC=CC**2+SC**2
182:      AMC=SQRT(SQC)
183:      IF(AMC.GT.0.1E-5) GO TO 101
184:      NR=NR-1
185:      100 CONTINUE
186:      101 CONTINUE
187:      NNR=NR-1
188:      EPS=0.1E-5
189:      WRITE(6,666)
190:      666 FORMAT(///,5X,65HCHARACTERISTIC VALUES      AMPLITUDES      ARGUMENTS
191:      1 ARGUMENTS/PAI )
192:      CALL HALSL(C,CRT,NR)
193:      DO 400 I=1,NNR
194:      ACR=REAL(CRT(I))
195:      400 CONTINUE

```

```
196: NN=NNR
197: DO 58 I=1,NNR
198: CCR=REAL(CRT(I))
199: SCR=AIMAG(CRT(I))
200: SCRT=CCR**2+SCR**2
201: AMPL=SQRT(SCRT)
202: CALL COARG(CRT(I),ARG)
203: PARG=ARG/PAI
204: WRITE(6,604)CRT(I),AMPL,ARG,PARG
205: 604 FORMAT(5X,2F10.7,3(5X,F10.7))
206: 58 CONTINUE
207:C TEST OF CHARACTERISTIC VALUES
208: WRITE(6,667)
209: 667 FORMAT(///,10X,12HVALUES OF FX)
210: DO 210 I=1,NNR
211: FX=C(NR)
212: DO 211 J=1,NNR
213: FX=FX+C(J)*CRT(I)**(NR-J)
214: 211 CONTINUE
215: WRITE(6,600)FX
216: 210 CONTINUE
217:C CALCULATION OF COEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC VALUES
218: NDW=NN*2
219: NN6=NN+1
220: DO 71 I=1,NDW
221: DO 71 J=1,NN6
222: AB(I,J)=0.0
223: 71 CONTINUE
224: NNN=NN+1
225: DO 53 I=1,NN
226: J=I+1
227: RBM=REAL(B(J))
228: AIBM=AIMAG(B(J))
229: N7=NN+I
230: AB(I,NN6)=RBM
231: AB(N7,NN6)=AIBM
232: 53 CONTINUE
233: DO 54 I=1,NN
234: DO 55 J=1,NN
235: PCR=CRT(J)**I
236: RPCR=REAL(PCR)
237: AIPCR=AIMAG(PCR)
238: N8=NN+I
239: AB(I,J)=RPCR
240: AB(N8,J)=AIPCR
241: 55 CONTINUE
242: 54 CONTINUE
243: 70 CONTINUE
244: WRITE(6,668)
245: 668 FORMAT(///,7X,66HCOEFFICIENTS C(I) AMPLITUDES ARGUMENTS
246: 1 ARGUMENTS/PAI)
247: CALL CSWEPD(AB,40,NN,1,0.1D-6,ILL)
248: IF(ILL.EQ.0) GO TO 57
249: WRITE(6,654)ILL
250: 654 FORMAT(///,10X,9HILL OF AB,I5)
251: IF(ILL.NE.0) STOP
252: 57 CONTINUE
253: DO 56 I=1,NN
254: NI=NN+I
255: NN1=NDW+1
256: CAB=AB(I,NN1)
257: SAB=AB(NI,NN1)
258: DAB=CAB**2+SAB**2
259: ABAMPL=SQRT(DAB)
260: COAB(I)=CMPLX(CAB,SAB)
```

```

261:      CALL COARG(COAB(I),ABARG)
262:      PABARG=ABARG/PAI
263:      WRITE(6,603)CAB,SAB,ABAMPL,ABARG,PABARG
264: 603   FORMAT(5X,2F10.7,3(5X,F10.7))
265:      56 CONTINUE
266:C    CALCULATION OF PEAK POSITIONS (P.P),INTENSITY MAXIMA,INTEGRAL
267:C    BREADTHS,CENTERS OF GRAVITY (C.G.) AND DIFFERENCE BETWEEN
268:C    P.P. AND C.G.
269:      WRITE(6,650)
270:      WRITE(6,669)
271: 669   FORMAT(5X,69HPEAK POSITION MAXIMUM OF I. INTEG. BREADTH CENTER OF
272: 1GRAV. P.P.-C.G.)
273:      DO 60 I=1,NN
274:      CALL COARG(CRT(I),THETA)
275:      CALL COARG(COAB(I),XAI)
276:      RR=REAL(CRT(I))**2+AIMAG(CRT(I))**2
277:      TANAL=TAN(XAI)*(1.0+RR)/(1.0-RR)
278:      PAIF=PAI/2.0
279:      PAIS=3.0*PAI/2.0
280:      PAIT=2.0*PAI
281:      IF(XAI.GE.0.0.AND.XAI.LE.PAIF)ALPHA=ATAN(TANAL)
282:      IF(XAI.GT.PAIF.AND.XAI.LE.PAI)ALPHA=PAI+ATAN(TANAL)
283:      IF(XAI.GE.-PAIF.AND.XAI.LT.0.0)ALPHA=ATAN(TANAL)
284:      IF(XAI.GE.-PAI.AND.XAI.LT.-PAIF)ALPHA=-PAI+ATAN(TANAL)
285:      R=SQRT(RR)
286:      R4=RR**2
287:      SIKH=SIN(XAI)
288:      TXAI=2.0*XAI
289:      SQCR=1.0-2.0*RR*COS(TXAI)+R4
290:      CRR=SQRT(SQCR)
291:      SINP=2.0*R*SIKH/CRR
292:      IF(XAI.GE.0.0.AND.XAI.LT.PAIF)ANGP=ARSIN(SINP)
293:      IF(XAI.GE.PAIF.AND.XAI.LT.PAI)ANGP=PAI-ARSIN(SINP)
294:      IF(XAI.GE.-PAIF.AND.XAI.LT.0.0)ANGP=ARSIN(SINP)
295:      IF(XAI.GE.-PAI.AND.XAI.LT.-PAIF)ANGP=-PAI-ARSIN(SINP)
296:      PHAIM=THETA+ALPHA-ANGP
297:      CX=COS(PHAIM)
298:      CY=SIN(PHAIM)
299:      EXPY=CMPLX(CX,-CY)
300:      S=COAB(I)/(1.0-CRT(I)*EXPY)
301:      FIM=2.0*REAL(S)-REAL(COAB(I))
302:      AINTE=2.0*PAI*REAL(COAB(I))
303:      BRINT=AINTE/FIM
304:      BA=1.0+2.0*R*COS(THETA)+RR
305:      BB=R*SIN(THETA)
306:      BC=1.0+R*COS(THETA)
307:      BD=BB/BC
308:      ONMOM=PAIT*(AIMAG(COAB(I))*ALOG(BA)+2.0*REAL(COAB(I))*ATAN(BD))
309:      PHAIG=ONMOM/AINTE
310:      DPEAK=PHAIM-PHAIG
311:      WRITE(6,607)PHAIM,FIM,BRINT,PHAIG,DPEAK
312: 607   FORMAT(7X,F10.5,4X,F10.5,4X,F10.5,5X,F10.5,5X,F10.5)
313:      60 CONTINUE
314:      WRITE(6,672)
315: 672   FORMAT(///,10X,2HSB)
316:      DO 81 J=1,NNN
317:      SB=0.0
318:      DO 82 I=1,NN
319:      SB=SB+COAB(I)*CRT(I)**J
320:      82 CONTINUE
321:      WRITE(6,600)SB
322:      81 CONTINUE
323:C    CALCULATION OF DIFFRACTED INTENSITY
324:      DO 1 L=N2,N4
325:      PHAI(L)=-PAI+2.0*PAI*(L-1)/FLOAT(N1)

```



```
326:      CX=COS(PHAI(L))
327:      CY=SIN(PHAI(L))
328:      EXPY=CMPLX(CX,-CY)
329:      S=0.0
330:      DO 2 I=1,NN
331:      S=S+COAB(I)/(1.0-CRT(I)*EXPY)
332:    2 CONTINUE
333:      SS=0.0
334:      DO 3 I=1,NN
335:      SS=SS+REAL(COAB(I))
336:    3 CONTINUE
337:      FI(L)=2.0*REAL(S)-1.0
338:      1+2.0*(1.0-SS)
339:    1 CONTINUE
340:      WRITE(6,650)
341:      WRITE(6,670)
342: 670 FORMAT(10X,33HANGLES AND DIFFRACTED INTENSITIES)
343:      DO 410 I=N2,N3
344:      II=I-1
345:      INN=N3+I-N2+1
346:      IN=N3+II-N2+1
347:      WRITE(6,640)II,PHAI(I),FI(I),IN,PHAI(INN),FI(INN)
348: 640 FORMAT(5X,2(I5,2F12.5,5X))
349: 410 CONTINUE
350:      GO TO 99
351:      END
```

```
352:      SUBROUTINE HALSL(A,X,NR)
353:  C TO SOLVE HIGHER ORDER POLYNOMIAL EQUATION
354:  A,B,C,FX,X,XS
355:  DIMENSION A(20),B(20),C(20),X(20),XS(20)
356:  C A IS COEFFICIENTS OF ALGEBRAIC EQUATION
357:  C NR-1 IS ORDER OF EQUATION
358:      EPSD=0.1D-8
359:      EPSD=0.1D-15
360:      CALL CJARTD(A,NR,EPSD,X,ILL)
361:      IF(ILL.NE.30000.AND.ILL.NE.1) GO TO 10
362:      WRITE(6,651) ILL
363: 651 FORMAT(10X,4HILL=,I5)
364:      RETURN
365:    10 CONTINUE
366:      DO 11 I=1,NR
367:      C(I)=A(I)
368:    11 CONTINUE
369:      N=NR-1
370:      INR=NR
371:      IN=N
372:      IX=1
373:    29 CONTINUE
374:      IF(IX.EQ.NR) RETURN
375:      FX=A(NR)
376:      DO 20 I=1,N
377:      FX=FX+A(I)*X(IX)**(NR-I)
378:    20 CONTINUE
379:      RFX=REAL(FX)
380:      AIFX=AIMAG(FX)
381:      SQFX=RFX**2+AIFX**2
382:      AMPFX=SQRT(SQFX)
383:      IF(AMPFX.GT.EPSD) GO TO 40
384:      B(1)=C(1)
385:      DO 30 I=1,IN
386:      J=I+1
387:      B(J)=C(J)+X(IX)*B(I)
```

```
388:    30 CONTINUE
389:    DO 31 I=1,INR
390:    C(I)=B(I)
391:    31 CONTINUE
392:    IX=IX+1
393:    GO TO 29
394:    40 CONTINUE
395:    INR=NR-IX+1
396:    IN=INR-1
397:    CALL CJARTD(C,INR,EPST,XS,ILL)
398:    IF(ILL.NE.30000.AND.ILL.NE.1) GO TO 50
399:    WRITE(6,651) ILL
400:    RETURN
401:    50 CONTINUE
402:    DO 51 I=1,IN
403:    J=IX-1+I
404:    X(J)=XS(I)
405:    51 CONTINUE
406:    GO TO 29
407:    END

408:    SUBROUTINE ARLOGC(A,B,C,D)
409:C    A+IB IS A COMPLEX NUMBER
410:C    LOG(A+IB)=C+ID
411:    COMPLEX CAB
412:    CAB=CMPLX(A,B)
413:    CALL COARG(CAB,D)
414:    SQAB=A**2+B**2
415:    C=0.5*ALOG(SQAB)
416:    RETURN
417:    END

418:    SUBROUTINE COARG(A,THETA)
419:C    TO OBTAIN ARGUMENT OF COMPLEX NUMBER A
420:    COMPLEX A
421:    PAI=3.141592653589793
422:    RA=REAL(A)
423:    AIA=AIMAG(A)
424:    EPS=0.1E-5
425:    ABRA=ABS(RA)
426:    ABIA=ABS(AIA)
427:    IF(ABRA.LT.EPS)RA=0.0
428:    IF(ABIA.LT.EPS)AIA=0.0
429:    IF(RA.EQ.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=PAI/2.0
430:    IF(RA.EQ.0.0.AND.AIA.LT.0.0) THETA=-PAI/2.0
431:    IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.EQ.0.0)THETA=0.0
432:    IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.EQ.0.0)THETA=PAI
433:    IF(RA.EQ.0.0.OR.AIA.EQ.0.0) RETURN
434:    TANA=AIA/RA
435:    IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=ATAN(TANA)
436:    IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.GT.0.0)THETA=PAI+ATAN(TANA)
437:    IF(RA.GT.0.0.AND.AIA.LT.0.0)THETA=ATAN(TANA)
438:    IF(RA.LT.0.0.AND.AIA.LT.0.0) THETA=ATAN(TANA)-PAI
439:    RETURN
440:    END
```

DIMENSION OF Q MATRIX = 8

PROBABILITIES OF P MATRIX  
 .00000 .10000 .10000 .10000 .00000

PROBABILITIES OF F MATRIX  
 2  
 .22500 .22500 .22500 .22500 .02500 .02500 .02500 .02500

COEFFICIENTS OF CHARACTERISTIC EQUATION  
 1.0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000  
 .0000000 .0000000 -.7300000 .0000000 .0000000 .0000000  
 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000 .0000000

B(M)  
 1.0000000 .0000000  
 -.5000000 .0000000  
 .1150000 .0000000  
 -.2300000 .0000000  
 .6625000 .0000000  
 -.3650000 .0000000  
 .0839500 .0000000  
 -.1679000 .0000000  
 .4836250 .0000000  
 -.2664500 .0000000

CHARACTERISTIC VALUES	AMPLITUDES	ARGUMENTS	ARGUMENTS/PAI
.0000000 -.9243378	.9243378	-1.5707963	-.5000000
.0000000 .9243378	.9243378	1.5707963	.5000000
.9243378 -.0000000	.9243378	.0000000	.0000000
-.9243378 .0000000	.9243378	3.1415927	1.0000000

VALUES OF FX  
 -.00000 .00000  
 -.00000 -.00000  
 -.00000 -.00000  
 .00000 -.00000

COEFFICIENTS C(I)	AMPLITUDES	ARGUMENTS	ARGUMENTS/PAI
.1932342 -.0624245	.2030672	-.3124681	-.0994617
.1932342 .0624245	.2030672	.3124681	.0994617
.0524935 .0000000	.0524935	.0000000	.0000000
.4685723 .0000000	.4685723	.0000000	.0000000

