

Modificación del programa S. F. L. S. de F. R. AHMED

por XAVIER SOLANS * y CARLOS MIRAVITLLES **

RESUMEN

Se presenta una modificación del programa S.F.L.S., con la cual ha quedado reducido a una ocupación de memoria de 83 K, permitiendo así su empleo en ordenadores de reducida capacidad de memoria. Se ha aumentado el número de ciclos de afinamiento que se pueden efectuar en una ejecución, y de un ciclo que realiza el programa original, se ha pasado a un número indeterminado de ciclos.

RÉSUMÉ

On présente une modification du programme S. F. L. S., La capacité de mémoire a été réduite à 83 K, que correspond à celle du ordinateur de la Faculté des Sciences de l'Université de Barcelone, et le numero de cycles qu'on peut faire est indéterminé.

INTRODUCCIÓN

El programa S.F.L.S. (Structure factors least squares) de F. R. AHMED (1969) es un programa para ordenador que efectúa el afinamiento de las coordenadas y de los factores isotrópicos o anisotrópicos de temperatura de los átomos de una estructura cristalina ya resuelta. Aplica el método de mínimos cuadrados entre los factores de estructura calculados a partir de los átomos y los observados experimentalmente por difracción de Rayos X en el cristal. El programa se encuentra escrito en FORTRAN IV, ocupando 124 K de memoria.

Se ha modificado para que pueda ejecutarse en el ordenador IBM 360/30 de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Barcelona. Al poder ejecutar varios ciclos de afinamiento se reduce considerablemente el tiempo de gasto de ordenador.

DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

Los datos de entrada del programa son las coordenadas de los átomos de la unidad asimétrica con sus

factores de temperatura, los cuales pueden ser isotrópicos o anisotrópicos. Estos datos son leídos de fichas perforadas, mientras que se lee de una cinta magnética generada por el programa NRC-2 de F. R. AHMED (1969) los parámetros de la red, las matrices que definen la simetría de ésta, y los factores de estructura observados.

Calcula los factores de estructura a partir de las coordenadas de los átomos y de sus factores de temperatura, minimiza la diferencia entre los cuadrados del factor de estructura calculado y el observado para cada plano de reflexión, generando unas formas funcionales de variación, con las cuales calcula las nuevas coordenadas de los átomos con sus factores de temperatura. Estas son perforadas por el programa en fichas. También genera una cinta magnética con los factores de estructura calculados y los observados.

Es electivo para quien utilice el programa las coordenadas y, los factores de temperatura a ser afinados, los átomos con factor de estructura isotrópico, o anisotrópico, y que reflexiones han de ser despreciadas. El programa no presenta ninguna restricción respecto al tipo de red o a las posiciones de los átomos.

MODIFICACIONES EFECTUADAS

El programa ha sido re-escrito en F-FORTRAN, lo cual ha reducido el número de sentencias de ejecución, y su ocupación en memoria.

Ha sido re-estructurado para poder aplicar las técnicas del "overlay", en la figura 1 se muestra el árbol

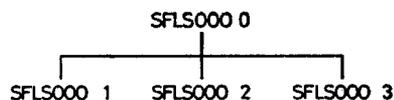


FIG. 1. — Árbol de Fases.

de fases, esta re-estructuración ha consistido en modificar el orden de proceso, para así agrupar los distintos cálculos y variables dentro de cada fase del "overlay". La figura 2 muestra la distribución de las

* Departamento de Cristalografía y Mineralogía de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Barcelona.

** Sección de Cristalografía del Instituto "Jaime Almera".

sub-rutina en cada una de las fases. Así la sub-rutina SFLS1 efectúa la lectura de la cinta de entrada, y

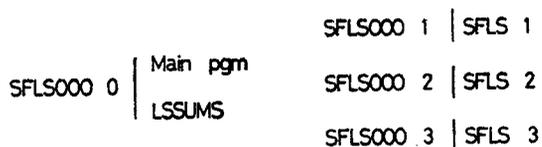


FIG. 2. — Subrutinas.

los cálculos preliminares. La sub-rutina SFLS2 calcula los factores de estructura a partir de los datos de entrada y efectúa el afinamiento por mínimos cuadrados. La sub-rutina SFLS3 genera las nuevas coordenadas con sus factores de temperatura.

Ha sido suprimida la generación de la cinta magnética de salida en cada ciclo, lo cual sólo se efectúa en el último ciclo procesado.

La cinta magnética de trabajo ha sido convertida en un archivo de disco, lo cual permite ejecutar el programa en centros de cálculo con pocos armarios de cintas magnéticas, siendo esta modificación opcional.

Con dichas modificaciones se ha conseguido reducir la ocupación de memoria del programa en 83 K, no habiéndose modificado las dimensiones de las variables que utiliza.

El número máximo de átomos que puede procesar es de 60 por unidad asimétrica.

RESULTADOS OBTENIDOS

El programa se ha aplicado a las estructuras resueltas en la Sección, 2-Cloro isonitroso acetanilada y Dihidracida Malónica anhídrica, con buenos resultados.

El tiempo aproximado de ejecución de cinco ciclos de afinamiento, con todos los factores de temperatura anisotrópicos es de 3 horas para una estructura cristalina de 20 átomos por unidad asimétrica del grupo $P2_1/a$. Mientras que el mismo número de ciclos en las mismas condiciones para una estructura de nueve átomos en la unidad asimétrica es de 40 minutos.

El programa original ejecuta un ciclo de afinamiento del primer ejemplo en un tiempo aproximado de 15 minutos en un ordenador del tipo 50 y 30 minutos en uno del tipo del 40.

BIBLIOGRAFÍA

AHMED, F. R. (1969): Crystallographics programs for a IBM 360 system. *National Research Council of Canada*.

Recibido para su publicación 11 marzo 1974.