

4485/2-78

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗ45Н
Б-865

P7 - 11567

Б.Бочев, В.П.Овсянников, Т.Куцарова

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ
ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

2. Анализ обратных задач

1978

P7 - 11567

Б.Бочев,* В.П.Овсянников, Т.Кушарова*

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ
ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ В ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

2. Анализ обратных задач



* Институт ядерных исследований и ядерной энергетики БАН, София.

Бочев Е., Овсянников В.П., Куцарова Т. P7 - 11567

Математические модели многократной ионизации электронным ударом в ионной ловушке. 2. Анализ обратных задач

Приведены текст программы и примеры решения обратных задач ионизации на основе предложенных в работе математических моделей. В результате математической обработки экспериментально полученных картин эволюции спектров могут быть определены сечения глубокой ионизации электронным ударом. Описаны процессы в атомной оболочке и в ионной ловушке. Программа CHARGE основана на методике решения систем нелинейных уравнений при помощи регуляризованных итерационных процессов Гаусса-Ньютона, разработанных в программе COMPIL. Примеры численного решения показывают, что созданные модели достаточно точно описывают экспериментальные результаты. Программа CHARGE может найти широкое применение для определения фундаментальных атомных величин на основе экспериментальных результатов, полученных при помощи методики ионной ловушки.

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Bochev B.Sh., Ovsyannikov V.P., Kutsarova T.Ch. P7 - 11567

Mathematical Models for Multi-Ionization by Electron Impact in the Ion Trap. 2. Back Task Analysis

A program text and examples of calculations of back tasks of ionization on the basis of mathematical models of ionization are presented. As the result of mathematical analysis of the data on experimental charge evolution, cross sections of a deep ionization by electron impact can be obtained, and processes in the atomic shell and ion trap are described. For solving the nonlinear equation system the CHARGE program uses the regularized iteration Gausse-Newton processes, developed in the COMPIL program. Examples of numerical solutions show that our models of ionization agree well with experimental results. The CHARGE program can be widely applied for determining fundamental atomic values obtained by means of the ion-trap method.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. ВВЕДЕНИЕ

В рамках предложенных в работе^{/1/} математических моделей ионизации электронным ударом ставится обратная задача нахождения сечений перехода иона с зарядом i в ион с зарядом ℓ $\{a_{i\ell}\}$ на основе экспериментально определенного числа ионов данной зарядности $i - \{N_i(t_k)\}$ в зависимости от фактора ионизации $(j_r)_k = t_k$.

Численное решение полученных в^{/1/} переопределенных систем уравнений экспоненциального типа является задачей, сильно неустойчивой относительно колебаний входных данных и ошибок округления при выполнении арифметических операций. Опыт^{/2/} показывает, что нахождение приближенного решения поставленных обратных задач с успехом можно осуществить на основе регуляризованных итерационных процессов типа Гаусса-Ньютона^{/3/}. Для численного анализа обратных задач глубокой ионизации электронным ударом нами разработана программа CHARGE^{/4,5/}, базирующаяся на стандартной программе COMPIL^{/4,5/}, в которой реализованы регуляризованные итерационные процессы типа Гаусса-Ньютона.

2. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ CHARGE

Программа CHARGE /Приложение 1/ написана на алгоритмическом языке FORTRAN и вместе со стандартной программой COMPIL^{/4,5/} может быть использована для ЭВМ БЭСМ-6, CDC серии 6000, IBM серии 360 и 370 и ряда ЕС 1020 и 1040.

В структуру программы CHARGE в виде отдельных блоков включены все предложенные в работе^{/1/} математические модели, представляющие некоторый реальный

интерес. Выбор осуществляется оператором NPN, равным 1,2,3,4 для модели 2а, 2б, 3а и 3б соответственно.

Замечание 1. Естественно, при составлении программы можно воспользоваться только моделью 3б, позволяющей реализовать потом все остальные. Такой подход, однако, является весьма неэкономичным с точки зрения затрат машинного времени.

Входные данные /экспериментально определенное число ионов $\{N_i(t_j)\}$, веса $\{\Delta N_i(t_j)\}$, номер заряда $\{i\}$ и величина аргумента фактора ионизации $\{t_j\}$ / имеют четырехмерную структуру и, таким образом, образуют $4 * \bar{j}$ -мерную матрицу, для которой отводится массив YR($4 * \bar{j}$).

В программе предусмотрена возможность в качестве матрицы весов G использовать квадраты стандартных отклонений $\{\sigma_i^2\}$, экспериментальные ошибки $\{\delta N_i(t_j)\}$, экспериментальные величины $\{N_i(t_j)\}$ или единичные веса в соответствии с оператором NW = 1,2,3,4. Приведенные примеры получены для единичных весов.

Замечание 2. При работе с единичными и нестатистическими весами также можно воспользоваться теорией ошибок для оценки решения на основе метода наименьших квадратов, применяемого к наилучшей итерации ^{6,7} /в смысле минимума χ^2 и малости ρ_n и MAX DEF, см. далее/.

Критериями ⁵ успешного решения задач являются малости нормы функционалов

$$RO \equiv \rho_n = \|J^T G(f x_n - y)\|$$

$$\text{и} \quad \text{MAX DEF} = \|f x_n - y\|$$

$$\text{величины} \quad \text{HISQ} \equiv \chi^2 = \sum_{i=1}^{\bar{j}} g_i (f_i x_n - y_i)^2.$$

Для построения приближений матрицы Якоби J_n применяется численное дифференцирование с шагом, зависящим от абсолютных величин неизвестных, который задается оператором D.

Замечание 3. В программе CHARGE предусмотрена возможность полную обратную задачу решать по

частям - с целью уменьшения числа отыскиваемых неизвестных /ограничение по объему памяти используемой ЭВМ/ и экономии машинного времени. Для решаемого участка задачи операторами INI и INF задаются начальный и конечный номера заряда ионов. Далее количество зарядов данного участка обозначаем $IZ = INF - INI + 1$. Массив начальных приближений неизвестных XX размерностью N задается в соответствии с используемой моделью. Для NPN=1 неизвестные величины сечений $\{a_i\}$ заполняют массив XX(N) соответственно

$$XX(i) = a_i \quad (i = INI, \dots, INF).$$

Для NPN=2 имеют место соотношения

$$XX(i) = a_i \quad (i = INI, \dots, INF) \quad \text{и}$$

$$XX(i) = A_i \quad (i = INF + 1, \dots, INF + IZ),$$

где $\{A_i\}$ - начальные условия решаемой задачи. Для NPN=3 имеем соответственно

$$XX(i) = a_{\ell k} \quad (\ell = INI, \dots, INF; \quad k = INI + 1, \dots, INF; \quad i = 1, \dots, \frac{IZ * (IZ - 1)}{2} + 1),$$

$$XX(i) = a_i \quad (i = \frac{IZ * (IZ - 1)}{2} + 2, \dots, N - 4).$$

Для NPN=4 имеем

$$XX(i) = a_{\ell k} \quad (\ell = INI, \dots, INF; \quad k = INI + 1, \dots, INF; \quad i = 1, \dots, \frac{IZ * (IZ - 1)}{2} + 1),$$

$$XX(i) = A_i \quad (i = \frac{IZ * (IZ - 1)}{2} + 2, \dots, \frac{IZ * (IZ + 1)}{2}),$$

$$XX(i) = a_i \quad (i = \frac{IZ * (IZ + 1)}{2} + 1, \dots, N - 4)$$

/а - нормировочные коэффициенты/.

Эффекты нелинейности /до третьего порядка/ в величине фактора ионизации учитываются выражением

$$(j_r)_k \equiv t_k \rightarrow \sum_{m=0}^3 XX(N - m) * t_k^m \quad (k = 1, \dots, \bar{j}).$$

Замечание 4. Наблюдается ослабленная зависимость решения от начального приближения и устойчивость итерационного процесса.

Замечание 5. Все попытки решения данных задач с применением обыкновенного процесса Гаусса-Ньютона /без регуляризации/ приводят к расходимости вычислительного процесса.

Выдача результатов в виде таблицы осуществляется подпрограммой OFR.

3. ПРИМЕР ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Для каждого численного расчета, очевидно, необходимо конкретно подходить к выбору модели, данного итерационного процесса, вида и шага численного дифференцирования, начальных приближений и т.д. Отметим также, что для реализации быстро сходящегося итерационного процесса весьма важными являются перенормировки неизвестных $\{X(i)\}$, входных экспериментальных данных $\{Y_{\text{ЭКСП}}(t_j)\}$, весов $\{\Delta Y(t_j)\}$ и аргумента $\{t_j\}$.

Приведем пример численного расчета обратной задачи отыскания относительных сечений ионизаций $\{a_{ik}\}$ на основе экспериментальных данных о зарядовой эволюции ионов Ar. Измеренные количества ионов $\{N_i(t_j)\}$ /нормированные на единицу/ в зависимости от фактора ионизации $\{t_j\}$ для зарядностей от $INI=2$ до $INF=18$ приведены на рис. 1.

На основании характера эволюции спектров зарядностей, а также теоретических соображений можно предполагать, что с большой вероятностью имеет место процесс многократной ионизации. С другой стороны, начало измерения процесса эволюции заряда ионов начинается при аргументе t , при котором уже в заметном количестве присутствуют зарядности выше второй. Все это дает основания для использования модели 3б-а /в программе CHARGE NPN=4/. Большое количество неизвестных ($N=193$) в этом случае заставило нас решать задачу по

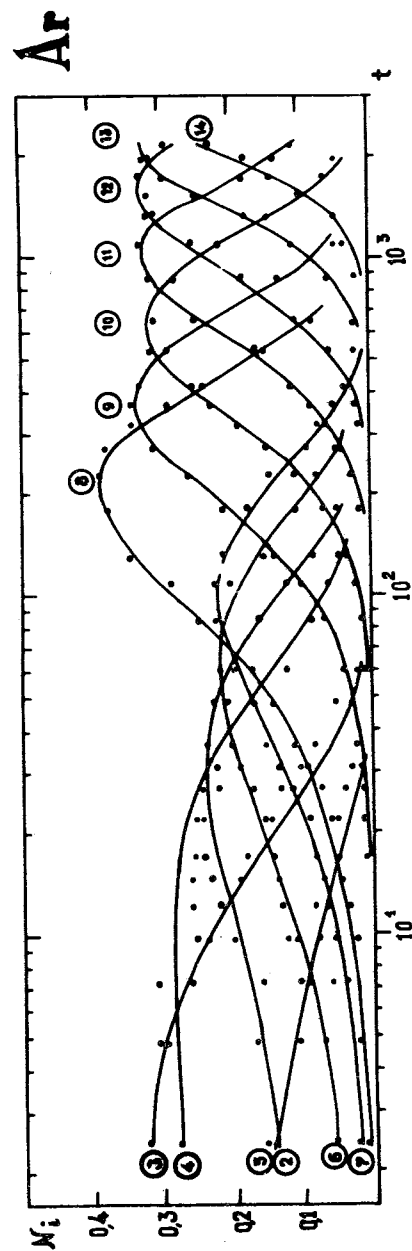


Рис. 1. Результаты решения обратной задачи ионизации для ионизационной цепочки $Ar^{+2} \rightarrow \dots \rightarrow Ar^{+14}$.

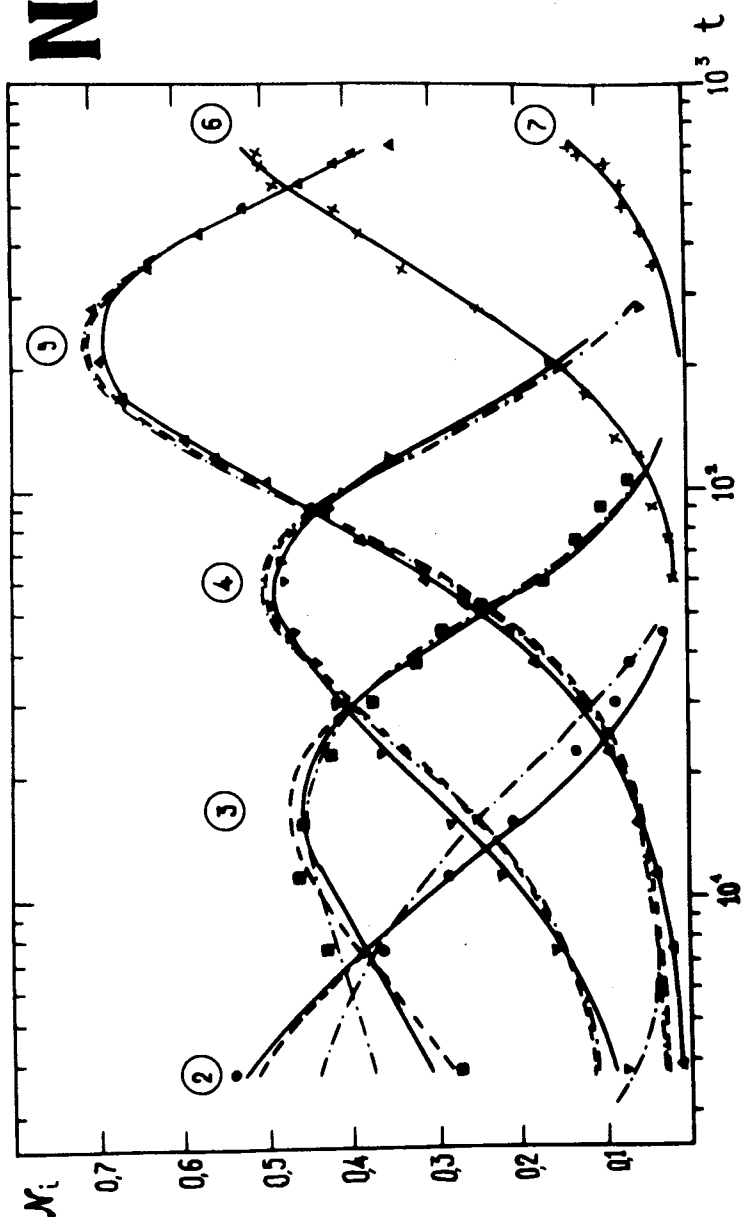


Рис. 2. Результаты решения обратной задачи ионизации для ионизационной цепочки $N^{+2} \rightarrow \dots \rightarrow N^{+7}$ полученные при использовании различных моделей: --- NPN=1, --- NPN=2, — NPN=4.

частям. Это, по-видимому, не может внести больших искажений в окончательное решение, т.к. ионы с зарядностью $Z \geq 11$ появляются при факторах $j\tau$, для которых начальные заряды ($z=2,3,4$) уже практически полностью "выгорели". /При численном анализе соответствующие корреляционные коэффициенты находятся примерно на уровне $10^{-3} - 10^{-4}$ /.

На рис. 1 сплошными кривыми показано восстановление экспериментальной картины эволюции спектра зарядностей ионов Ag по результатам решения обратной задачи ионизации. Небольшие расхождения, которые наблюдаются в "хвостах" для $Z=3,4,5$, могут быть связаны как с неточностью измерения, так и с эффектами нелинейности в факторе ионизации.

Результаты расчета приведены в табл. 1. Ветви с разностью зарядов больше 7 полагались равными нулю и оставались фиксированными все время расчета.

На рис. 2 представлены примеры воспроизведения экспериментальной картины эволюции спектра зарядностей ионов азота по результатам решений обратных задач ионизации для различных моделей ионизационного процесса. Анализ обратных задач проводился на основе моделей 2а, 2б, 3б /в программе CHARGE соответственно NPN=1,2,4/. В табл. 2 сравниваются полученные решения. Можно заметить, что минимальные величины нормированного и абсолютного χ^2 получаются для модели 3б (NPN=4).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанная программа CHARGE позволяет эффективно проводить анализ обратных задач нахождения сечений ионизации ионов электронным ударом на основе экспериментальных эволюций спектров зарядностей. Численное решение задач и его анализ дают возможность выбора конкретной модели для описания ионизационного процесса. Это, со своей стороны, позволяет получить более полную информацию о сечениях и углубить наши представления о механизме ионизации.

Авторы выражают глубокую благодарность Е.Д.Донцу, Л.Александрову, Л.Л.Зиновьевой за полезные обсуждения.

Таблица 1 /продолжение/

Таблица 1

ABSOLUTE HI SQUARE ABS HI SQ= .19400E+03

NORMALIZED HI SQUARE HI SQ= .11547E+01

FROM TO	LAMBDA	DELTA	LAMBDA
2	.75166E+01	+/-	.10169E+02
2 - 3	.58335E+01	+/-	.31984E+01
2 - 4	.18831E+01	+/-	.24229E+01
2 - 5	.28556E+01	+/-	.25351E+01
2 - 6	.21432E+01	+/-	.20118E+01
2 - 7	0.	+/-	0.
2 - 8	0.	+/-	0.
2 - 9	0.	+/-	0.
2 - 10	0.	+/-	0.
2 - 11	0.	+/-	0.
2 - 12	0.	+/-	0.
2 - 13	0.	+/-	0.
2 - 14	0.	+/-	0.
3	.68613E+01	+/-	.73276E+01
3 - 4	.16263E+01	+/-	.88939E+00
3 - 5	.16180E+01	+/-	.11426E+01
3 - 6	.19440E+01	+/-	.95888E+00
3 - 7	.68960E+00	+/-	.14117E+00
3 - 8	.58339E+00	+/-	.14333E+00
3 - 9	0.	+/-	0.
3 - 10	0.	+/-	0.
3 - 11	0.	+/-	0.
3 - 12	0.	+/-	0.
3 - 13	0.	+/-	0.
3 - 14	0.	+/-	0.
4	.20512E+01	+/-	.12821E+01
4 - 5	.17230E+01	+/-	.32042E+00
4 - 6	.12912E+00	+/-	.38632E+00
4 - 7	.14581E+00	+/-	.28963E+00
4 - 8	.53281E+01	+/-	.28574E+00
4 - 9	0.	+/-	0.
4 - 10	0.	+/-	0.
4 - 11	0.	+/-	0.
4 - 12	0.	+/-	0.
4 - 13	0.	+/-	0.
4 - 14	0.	+/-	0.
5	.22231E+01	+/-	.11270E+01
5 - 6	.11310E+01	+/-	.27084E+00
5 - 7	.95129E+00	+/-	.42618E+00
5 - 8	.14076E+00	+/-	.42995E+00
5 - 9	0.	+/-	0.
5 - 10	0.	+/-	0.
5 - 11	0.	+/-	0.
5 - 12	0.	+/-	0.
5 - 13	0.	+/-	0.
5 - 14	0.	+/-	0.

← Ионизационная цепочка

$$A_n^{+2} \equiv \dots A_n^{+12}$$

Ионизационная цепочка

$$A_n^{+4} \equiv A_n^{+14}$$

ABS HI SQ= .10499E+03

NORM HI SQ= .82669E+00

LAMBDA DELTA LAMBDA

.18518E+01 +/- .28864E+01

.17227E+01 +/- .14208E+01

.12907E+00 +/- .14656E+01

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

0. +/- 0.

6	.12729E+01 +/- .77049E+00	.13159E+00 +/- .51744E+00
6 - 7	.65184E+00 +/- .32803E+00	.54274E+00 +/- .32623E+00
6 - 8	.62109E+00 +/- .38846E+00	.77311E+00 +/- .19121E+00
6 - 9	0. +/- 0.	0. +/- 0.
6 - 10	0. +/- 0.	0. +/- 0.
6 - 11	0. +/- 0.	0. +/- 0.
6 - 12	0. +/- 0.	0. +/- 0.
6 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
6 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
7	.11639E+01 +/- .18170E+00	.10394E+01 +/- .13690E+00
7 - 8	.96208E+00 +/- .17535E+00	.10394E+01 +/- .13690E+00
7 - 9	.20181E+00 +/- .63535E-02	0. +/- 0.
7 - 10	0. +/- 0.	0. +/- 0.
7 - 11	0. +/- 0.	0. +/- 0.
7 - 12	0. +/- 0.	0. +/- 0.
7 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
7 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
8	.50955E+00 +/- .76114E-02	.55599E+00 +/- .71952E-02
8 - 9	.47897E+00 +/- .74676E-02	.55599E+00 +/- .71952E-02
8 - 10	.30576E-01 +/- .29349E-02	0. +/- 0.
8 - 11	0. +/- 0.	0. +/- 0.
8 - 12	0. +/- 0.	0. +/- 0.
8 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
8 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
9	.41738E+00 +/- .15261E-01	.43489E+00 +/- .62106E-02
9 - 10	.40620E+00 +/- .77897E-02	.43489E+00 +/- .62106E-02
9 - 11	.11174E-01 +/- .74712E-02	0. +/- 0.
9 - 12	0. +/- 0.	0. +/- 0.
9 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
9 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
10	.30302E+00 +/- .13923E-01	.30366E+00 +/- .42573E-02
10 - 11	.30302E+00 +/- .13923E-01	.30366E+00 +/- .42573E-02
10 - 12	0. +/- 0.	0. +/- 0.
10 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
10 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
11	.19813E+00 +/- .31362E-02	0.20843E+00 +/- .26456E-02
11 - 12	.19813E+00 +/- .21362E-02	.20843E+00 +/- .26456E-02
11 - 13	0. +/- 0.	0. +/- 0.
11 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
12	.10000E-07 +/- 0.	.14440E+00 +/- .18852E-02
12 - 13	.10000E-07 +/- 0.	.14440E+00 +/- .18852E-02
12 - 14	0. +/- 0.	0. +/- 0.
113		.87540E-01 +/- .18647E-02
13 - 14		.87540E-01 +/- .18647E-02
14		.10000E-05 +/- 0.

Таблица 2

NPN = 1

ABSOLUTE HI SQUARE ABS HI SQ= .55018E-01

NORMALIZED HI SQUARE HI SQ= .59802E-03
LAMBDA DELTA LAMBDA

I	.I4425E+00	+/-	.I5430E-01
2	.6I343E-01	+/-	.3I350E-02
3	.34I25E-01	+/-	.90439E-03
4	.I3225E-01	+/-	.26787E-03
5	.I8I09E-02	+/-	.37658E-04
6	.I00000E-07	+/-0.	

ZERO DISTANCE T= .I4793E+02 +/- .I24I2E+0I

NPN = 2

ABSOLUTE HI SQUARE ABS HI SQ= .26626E-01

NORMALIZED HI SQUARE HI SQ= .30605E-03

N	LAMBDA	DELTA LAMBDA	AMPLITUDA			
I	.II262E-01	+/-	.59764E-02	.76I22E-01	+/-	.I0585E-01
2	.85034E-01	+/-	.40092E-02	.5I494E+00	+/-	.II934E-01
3	.32728E-01	+/-	.79270E-03	.28I49E+00	+/-	.I3076E-01
4	.I2775E-01	+/-	.23275E-03	.II740E+00	+/-	.9444I E-02
5	.I8403E-02	+/-	.37256E-04	.30543E-01	+/-	.65I75E-02
6	.67739E-03	+/-	.44498E-04	.66455E-03	+/-	.58842E-02
7	.I0000E-07	+/-0.		0.		0.

ZERO DISTANCE T= .37500E+0I +/- 0.

Таблица 2 /продолжение/

NPN = 4

ABSOLUTE HI SQUARE ABS SQ= .17208E-01

NORMALIZED HI SQUARE HI SQ= .19779E-03

FROM TO	LAMBDA	DELTA LAMBDA	AMPLITUDE FIRST	DELTA AMPLITUDE	
I	.I4400E+00	+/-0.	.96462E-01	+/- .I05I0E-0I	
I - 2	.I4400E+00	+/-0.			
I - 3	0.	+/-0.			
I - 4	0.	+/-0.			
I - 5	0.	+/-0.			
I - 6	0.	+/-0.			
I - 7	0.	+/-0.			
2	.I0255E+00	+/-	.I0338E-01	+/- .53027E+00 +/- .I0980E-0I	
2 - 3	.70742E-01	+/-	.38500E-02		
2 - 4	.2808I E-01	+/-	.377I5E-02		
2 - 5	.3727I E-02	+/-	.27080E-02		
2 - 6	0.	+/-0.			
2 - 7	0.	+/-0.			
3	.26288E-01	+/-	.25862E-02	728899E+00 +/- .I0620E-0I	
3 - 4	.240I4E-01	+/-	.I2786E-02		
3 - 5	.22739E-02	+/-	.I3076E-02		
3 - 6	0.	+/-0.			
3 - 7	0.	+/-0.			
4	.II3I6E-01	+/-	.43I79E-03	.77982E-0I +/- .I02IIE-0I	
4 - 5	.II3I6E-01	+/-	.43I79E-03		
4 - 6	0.	+/-0.			
4 - 7	0.	+/-0.			
5	.I8I24E-02	+/-	.22582E-02	.80000E-02 +/-0.	
5 - 6	.I8I24E-02	+/-	.25582E-04		
5 - 7	0.	+/-0.		+/-0.	
6	.63680E-03	+/-	.34384E-04	0.	+/-0.
6 - 7	.63680E-03	+/-	.734384E-04		
7	.I0000E-07	+/-0.		0.	+/-0.

ZERO DISTANCE T= .37500E+0I +/- 0.

Приложение

```

PROGRAM CHARGE (INPUT,OUTPUT,PUNCH)
C
COMMON/NPN/NPN/TYP/K, KK/OUTH/ITN, KPN, KP FN/LC/LC
1 /CRITH/ROMM, RHW, REVH, CD1, EPS1H, TAU1W/DROPX/DX(100)
2 /X/X(10)/SIGMA/SIGMA(100)/KGSN/KGSN/LCH/LCH
3 /RPBG/ADN, SN, TTN, TTM, C3N/ARPN/TN, A1N/ITS/ITS
4 /IZP/IZI, IZF
DIMENSION Z(82,82), YR(82), XX(82), ER(250), NEXER(250)
DIMENSION ZL(82,82)
C
C INPUT DATA
C
NAE=194
N=82
IZI=2
IZF=12
NW=5
M=4*NAE
RW=1.
RA=100.
RD=.01
DO 1 I=1, NAE
J1=4*(I-1)+1
J2=4*(I-1)+2
J3=4*(I-1)+3
J4=4*I
READ2, YR(J1), YR(J2), YR(J3), YR(J4), NEXER(I)
YR(J1)=YR(J1)*RA
YR(J4)=YR(J4)*RD
ER(I)=YR(J2)
GOTO(10, 20, 30, 40)NW
YR(J2)=RW*YR(J2)
10 GO TO 50
20 YR(J2)=(RW*YR(J2))**2
GO TO 50
30 YR(J2)=RW
GO TO 50
40 YR(J2)=YR(J1)
50 CONTINUE
PRINT3, YR(J1), YR(J2), ER(I), YR(J3), YR(J4), NEXER(I)
1 CONTINUE
C
READ 4, (XX(I), DX(I), I=1, N)
PRINT 5, (1, XX(I), DX(I), I=1, N)
C
NPN=4
EI=-1.
ITN=30
KGSN=1
D=100.000001
K=3
KK=4
KPN=1
KPFN=4
LCH=0
C
CALL COMPII(M, N, D, EI, Z, ZL, XX, YR)
CALL OFRCH(M, N, XX, YR, ER, NAE)
C
2 FORMAT(4F10.3, I10)
3 FORMAT(5F10.3, I10)
4 FORMAT(14X, L15.9, F11.9)
5 FORMAT(5X, I2, 3X, L15.9, F11.9)
END

```

Приложение /продолжение/

```

SUBROUTINE RELADI(N, NP, INDEX, I, Y, DF)
COMMON/X/X(10)
COMMON/IZP/IZI, IZF
DIMENSION T(N), DF(N)
DIMENSION A(11, 11, 11), B(11, 11)
C
K=INT(X(1))-IZI+1
IZ=IZF-IZI+1
Y=0.
AD=T(N-3)+T(N-2)*X(2)+T(N-1)*X(2)**2+T(N)*X(2)**3
BR=200.
GO TO (100, 200, 300, 400), NP
C
100 CONTINUE
DO10 J=1, K
P=1.
P1=1.
DO10 L=1, K
IF(L-J)105, 108, 115
105 P=P*(T(L)-T(J))
108 CONTINUE
P1=P1*T(L)
110 CONTINUE
P1=P1/T(K)
AR=-T(J)*AD
IF(BR-ABS(AR))111, 111, 112
111 EXPO=0.
GO TO 113
112 EXPO=EXP(AR)
113 CONTINUE
Y=Y+P1*EXPO/P
103 CONTINUE
GO TO 500
C
200 CONTINUE
NK=(N-4)/2+K+1
L=K+1
DO20 I=1, K
DO20 II=1, I
P1=1.
P2=1.
DO20 J I2=1, I
IF(I2-II)204, 205, 204
204 P1=P1*(T(L-I2)-T(L-II))
205 CONTINUE
P2=P2*T(L-I2)
203 P2=P2/T(K)
AR=-T(L-II)*AD
IF(BR-ABS(AR))206, 206, 207
206 EXPO=0.
GO TO 208
207 EXPO=EXP(AR)
208 CONTINUE
Y=Y+T(NK-I)*P2*EXPO/P1
201 CONTINUE
GO TO 500
C

```

```

300 CONTINUE
    IZ1=IZ-1
    I3=(IZ*(IZ-1))/2+1
    NTT=0
    DO 350 J1=1,IZ1
    I1=J1+1
    NT=0
    B(J1,J1)=0.
    B(J1,J3)=T(J3-J1+NTT)
    DO 352 J3=1,IZ
    B(J1,J1)=B(J1,J1)+T(J3-J1+NTT)
352 NT=J3/J3
    NTT=NTT+NT
350 CONTINUE
    B(IZ,IZ)=T(I3)
    DO 301 J1=1,K
    DO 301 J3=1,J1
    DO 301 J2=1,J3
    I2=J1-1
    IF(I1-J1) 304,340,304
304 IF(J1-J3) 308,309,308
308 A(J1,J2,J3)=0.
    DO 312 J4=J3,I2
    IF(J2-J3) 313,314,313
314 A(J1,J2,J3)=A(J1,J2,J3)+
    1 A(J4,J2,J3)*B(J4,J1)/(B(J1,J1)-B(J2,J3))
    GO TO 315
313 A(J1,J2,J3)=0.
315 CONTINUE
312 CONTINUE
    GO TO 323
309 IF(J1-J2) 316,317,316
316 A(J1,J2,J3)=0.
    GO TO 323
340 CONTINUE
317 IF(3-J1-J2-J3) 321,322,321
322 A(J1,J2,J3)=1.
    GO TO 323
321 A(J1,J2,J3)=0.
    DO 324 J6=1,I2
324 A(J1,J2,J3)=A(J1,J2,J3)-A(J1,J6,J6)
323 CONTINUE
301 CONTINUE
    DO 361 J3=1,K
    DO 361 J2=1,J3
    AR=-B(J2,J3)*AD
    IF(BR-ABS(AR)) 325,325,326
325 EXPO=0.
    GO TO 327
326 EXPO=EXP(AR)
327 CONTINUE
    Y=Y+A(K,J2,J3)*EXPO*T(I3+K)
361 CONTINUE
C
    GO TO 500
C
400 CONTINUE

```

```

    IZ1=IZ-1
    I3=(IZ*IZ1)/2+1
    I4=I3+IZ
    NTT=0
    DO 450 J1=1,IZ1
    I1=J1+1
    NT=0
    B(J1,J1)=0.
    DO 452 J3=1,IZ
    B(J1,J3)=T(J3-J1+NTT)
    B(J1,J1)=B(J1,J1)+T(J3-J1+NTT)
452 NT=NT+J3/J3
    NTT=NTT+NT
450 CONTINUE
    B(IZ,IZ)=T(I3)
    DO 401 J1=1,K
    DO 401 J3=1,J1
    DO 401 J2=1,J3
    I2=J1-1
    IF(I1-J1) 404,441,404
404 IF(J1-J3) 408,409,408
408 A(J1,J2,J3)=0.
    DO 412 J4=J3,I2
    IF(J2-J3) 413,414,413
414 A(J1,J2,J3)=A(J1,J2,J3)+
    1 A(J4,J2,J3)*B(J4,J1)/(B(J1,J1)-B(J2,J3))
    GO TO 415
413 A(J1,J2,J3)=0.
415 CONTINUE
412 CONTINUE
    GO TO 423
409 IF(J1-J2) 416,417,416
416 A(J1,J2,J3)=0.
    GO TO 423
440 CONTINUE
417 IF(3-J1-J2-J3) 421,422,421
422 A(J1,J2,J3)=T(I3+J1)
    GO TO 423
421 A(J1,J2,J3)=0.
    DO 424 J6=1,I2
424 A(J1,J2,J3)=A(J1,J2,J3)-A(J1,J6,J6)
    A(J1,J2,J3)=A(J1,J2,J3)+T(I3+J1)
423 CONTINUE
401 CONTINUE
    DO 461 J3=1,K
    DO 461 J2=1,J3
    AR=-B(J2,J3)*AD
    IF(BR-ABS(AR)) 425,425,426
425 EXPO=0.
    GO TO 427
426 EXPO=EXP(AR)
427 CONTINUE
    Y=Y+A(K,J2,J3)*EXPO*T(I4+K)
461 CONTINUE
500 CONTINUE
    RETURN
    END

```

Приложение /продолжение/

```

SUBROUTINE OFRCH(M,N,XX,YR,ER,NAE)
COMMON/NPN/NPN/CRITH/ROMW,R1W,REVM,CD1,EPS1W,TAU1W
1 /DROPX/UX(1( )/X/X(10)/SIGMA/SIGMA(100)/IZP/IZI,IZF
DIMENSION XX(N),YR(N),ER(NAE),B(2),20)
C
NZ=IZF-IZI+1
BB=L.
DO 101 I=1,N
101 BB=BB+OX(I)
HSN=REVM/(NAE-N+INT(BB))
PRINT103
PRINT 102,REVM
PRINT103,HSN
GO TO (1000,2000,3000,4000),NPN
1000 CONTINUE
PRINT104
NLA=N-1
DO 301 I=1,NLA
301 PRINT 302,I,XX(I),SIGMA(I)
CONTINUE
GO TO 500
2000 CONTINUE
PRINT 104
NLA=(N-1)/2
DO 106 I=1,NLA
106 PRINT105,I,XX(I),SIGMA(I),XX(I+NLA),SIGMA(I+NLA)
CONTINUE
GO TO 500
3000 CONTINUE
PRINT 355
I3=NZ*(NZ-1)/2+1
IZI=IZF-1
NTT=0
DO 351 J1=IZI,IZI
351 I1=J1+1
NT=L
AB=C.
EAB=0.
DO 352 J3=I1,IZF
352 AB=AB+XX(J3-J1+NTT)
EAB=EAB+SIGMA(J3-J1+NTT)
PRINT 382,J1,AB,EAB,XX(I3+J1-IZI+1),SIGMA(I3+J1-IZI+1)
DO 353 J3=I1,IZF
353 NT=NT+J3/J3
351 NTT=NTT+NT
PRINT 382,IZF,XX(I3),SIGMA(I3),XX(N-4),SIGMA(N-4)
GO TO 500
4000 CONTINUE
PRINT 401
I3=NZ*(NZ-1)/2+1
IZI=IZF-1
I4=I3+NZ
NTT=0
DO 451 J1=IZI,IZI
451 I1=J1+1
NT=0

```

Приложение /продолжение/

```

AB=C.
EAB=0.
DO 452 J3=I1,IZF
452 AB=AB+XX(J3-J1+NTT)
EAB=EAB+SIGMA(J3-J1+NTT)
PRINT 462,J1,AB,EAB,XX(I3+J1-IZI+1),SIGMA(I3+J1-IZI+1),
1 XX(I4+J1-IZI+1),SIGMA(I4+J1-IZI+1)
DO 453 J3=I1,IZF
453 PRINT 363,J1,J3,XX(J3-J1+NTT),SIGMA(J3-J1+NTT)
NT=NT+J3/J3
451 NTT=NTT+NT
PRINT 462,IZF,XX(I3),SIGMA(I3),XX(I4),SIGMA(I4),
1 XX(I4+NZ),SIGMA(I4+NZ)
500 CONTINUE
PRINT 305
DO 333 I=1,4
333 II=I-1
PRINT 334,II,XX(N-4+I),SIGMA(N-4+I)
CONTINUE
PRINT 202
DO 200 I=1,NAE
200 J1=4*(I-1)+1
J2=4*(I-1)+2
J3=4*(I-1)+3
J4=4*I
X(1)=YR(J3)
X(2)=YR(J4)
NP=NPN
CALL RELADI(N,NP,INDEX,XX,Y,DF)
PRINT 201,YR(J1),Y,YR(J2),YR(J4),YR(J3)
CONTINUE
200 PUNCH 600,(I,XX(I),I=1,N)
C
100 FORMAT(1H1,22HINVERSE PROBLEM CHARGE, //15X,22(1H.))
102 FORMAT(10X,29HABSOLUTE HI SQUARE ABS HI SQ=,E12.5,/)
103 FORMAT(12X,27HNORMALIZED HI SQUARE HI SQ=,E12.5,/)
104 FORMAT(11X,11H,6X,6HLAMBDA,11X,22HDELTA LAMBDA,15X,9HAMPLITUDE)
105 FORMAT(10X,12,5X,2(E12.5,5X,3H+/-,E12.5,10X))
201 FORMAT(5X,4(E15.5,5X),E10.3)
202 FORMAT(5X,3HEXP,17X,6HTHEORY,14X,2HER,18X,
1 4HTIME,16X,6HCHARGE,/)
302 FORMAT(11X,12,5X,E12.5,5X,3H+/-,E12.5,2(10X,5(1H*)) )
305 FORMAT(/10X,13HNON LINEARITY)
334 FORMAT(10X,12,5X,E12.5,5X,3H+/-,E12.5)
355 FORMAT(10X,4HFROM,3X,2HTO,5X,6HLAMBDA,14X,12HDELTA LAMBDA,5X,
1 9HAMPLITUDE,11X,15HDELTA AMPLITUDE,/)
382 FORMAT(/10X,12,12X,2(E12.5,5X,3H+/-,E12.5,5X)/)
362 FORMAT(/10X,2(12,5X),2(E12.5,5X,3H+/-,E12.5,5X)/)
363 FORMAT(10X,2(12,5X),E12.5,5X,3H+/-,E12.5)
401 FORMAT(11X,4HFROM,3X,2HTO,5X,6HLAMBDA,14X,12HDELTA LAMBDA,5X,
1 9HAMPLITUDE,11X,15HDELTA AMPLITUDE,5X,9HAMPLITUDE,11X,
2 15HDELTA AMPLITUDE/61X,5HFI=ST,35X,6HSECOND,/)
462 FORMAT(/20X,12,12X,3(E12.5,5X,3H+/-,E12.5,5X)/)
600 FORMAT(7X,3HXX(I,12,2H)=,E15.9)
RETURN
END

```

ЛИТЕРАТУРА

1. Бочев Б., Куцарова Т., Овсянников В.П. ОИЯИ, Р5-11566, Дубна, 1978.
2. Донец Е.Д., Овсянников В.П. ОИЯИ, Р7-10780, Дубна, 1977.
3. Александров Л. ОИЯИ, Р5-10366, Дубна, 1977.
4. Александров Л. ОИЯИ, Р5-7259, Дубна, 1973.
5. Александров Л. ОИЯИ, Б1-5-9969, Дубна, 1976.
Библиотека программ ОИЯИ, Дубна, С-401, F-421.
6. Фергюсон А. Методы угловых корреляций в гамма-спектроскопии. Атомиздат, М., 1969.
7. Химмельблау Д. Анализ процессов статистическими методами. "Мир", М., 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 мая 1978 года.