

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

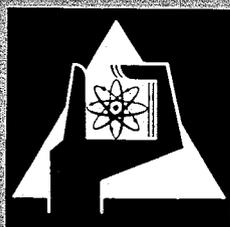
September 1970

KFK 1286

Institut für Radiochemie

PHOTO4 - ein Datenverarbeitungsprogramm zum Berechnen von
Komplexstabilitätskonstanten aus spektralphotometrischen Messungen

S.H. Eberle



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE



KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

September 1970

K F K - 1286

Institut für Radiochemie

PHOTO4 - ein Datenverarbeitungsprogramm zum Berechnen von Komplex-
stabilitätskonstanten aus spektralphotometrischen Messungen

von

S.H. Eberle

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Zusammenfassung

Der Aufbau und die Verwendung des Programmes werden beschrieben. Es ist bestimmt für die Berechnung von Stabilitätskonstanten aus Lichtabsorptionsdaten von Lösungen. Die Anwendung ist auf solche Systeme begrenzt, bei denen nur die Metallion-haltigen Species zur Lichtabsorption bei der Meßwellenlänge beitragen. Die Auswahl der möglichen Komplexe ist durch das Programm festgelegt; eine Erweiterung ist möglich. Ein Rechenbeispiel und eine "Programmliste" sind beigefügt.

Abstract

The program and its use are described. It is destined for the calculation of stability constants from light absorption data of solutions. The program is applicable only to systems where exclusively the metal ion containing species contribute to the light absorption at the wavelength measured. The possible complexes are restricted by the program; an extension is possible. An example and the program list are given.

Inhalt

Seite

1.	Einleitung	1
2.	Programmbeschreibung	3
2.1	Programmaufbau	3
2.2	Interne Organisation der Rechengrößen	5
2.3	Programminterner Rechnungsablauf	5
2.4	Erläuterungen zu ANION3	7
2.5	Erläuterungen zu ANFUN	7
2.6	Erläuterungen zu EMALER	8
3.	Ausführung einer Rechnung	8
3.1	Liste der Eingabedaten	9
3.2	Schema zum Ausfüllen der Datenkarten	13
3.3	Ergebnisausgabe	14
3.4	Fehlernachrichten	15
4.	Rechenbeispiel	16
5.	Programmlisten	21
6.	Anhang	60

1. Einleitung

Das Programm PHOTO4 berechnet aus komplexchemischen photometrischen Titrations die Stabilitätskonstanten der Komplexe nach der Methode der kleinsten Fehlerquadratsumme. Es wird vorausgesetzt, daß zur Lichtabsorption der Titrationslösung, die bei eins bis vier Wellenlängen zu messen ist, nur die Metallion-haltigen Species beitragen; diese werden im folgenden als Komponenten bezeichnet. Außer den Stabilitätskonstanten können auch die molaren Extinktionsmoduln der Komponenten vom Programm berechnet werden.

Die angenommene mathematische Beziehung zwischen der Extinktion, der Ligandenkonzentration und den zu berechnenden "Parametern" (Stabilitätskonstanten und molare Extinktionsmoduln) lautet:

$$(1) \quad E_{\lambda} = M \cdot \frac{\epsilon_0 + \sum_{i=1}^N \epsilon_i \cdot \beta_i \cdot L^i}{1 + \sum_{i=1}^N \beta_i \cdot L^i}$$

- E_{λ} : Extinktion für 1 cm-Schichtdicke ("EX") bei Wellenlänge λ
 M : Einwaagekonzentration des Metallions in Mol/L ("CME")
 ϵ_0 : molarer Extinktionsmodul des "unkomplexen" Metallions ("EM")
 ϵ_i : molarer Extinktionsmodul des i -ten Komplexes
 β_i : Bruttostabilitätskonstante ("B")
 L : Konzentration des Liganden in Mol/L ("CL")
 N : Ligandenanzahl des höchsten Komplexes

Für jeden Parameter (β_i , ϵ_0 , ϵ_i) ist ein Anfangswert festzulegen, der von PHOTO4 auf Wunsch nach der Gauss'schen Methode verbessert oder unverändert gelassen wird. Das Programm sucht die variablen Parameter so zu verändern, daß die gewichtete Fehlerquadratsumme "U" einen Minimalwert erreicht.

$$(2) \quad U = \sum_{\lambda} \sum_j p \cdot (E_{\text{exp}} - E_{\text{ber}})_j^2$$

Der Gewichtungsfaktor "p" kann für jede Wellenlänge beliebige Zahlenwerte haben oder für alle Wellenlängen gleich $1/EX_{\text{exp}}^2$ sein. Im letzteren Fall wird nicht die absolute, sondern die relative Differenz zwischen gemessener und berechneter Extinktion minimalisiert.

PHOTO4 kann bis zu sechs Komplexe berücksichtigen und bis zu 15 Parameter in einem Rechnungsgang verbessern. Berechenbar sind nur monomere Komplexe. Der Ligand kann null bis sechs dissoziierbare Wasserstoffatome enthalten. Die Art der vorhandenen Komplexe ist vom Benutzer des Programmes aus einer vorgegebenen Auswahl festzulegen. Das Maximum ist sechs Komplexe mit bis zu sechs gebundenen Liganden. In begrenztem Ausmaß kann der Benutzer bestimmen, welche Dissoziationsstufe des Liganden in den Komplexen vorhanden ist. Im Normalfall nimmt das Programm an, daß alle durch eine Dissoziationskonstante gekennzeichneten H-Atome des Liganden abdissoziiert sind. Die vorgegebenen Komplextypen sind: "normale" Komplexe ML_i (L kann OH^- sein), Hydrogenkomplexe MHL , $ML_i \cdot HL$ und Komplexhydroxide $ML_i(OH)$. Zur Ausführung einer Rechnung sind folgende Meßdaten und Angaben erforderlich:

- 1) pH-Meßwerte für jeden Meßpunkt
- 2) Die korrespondierenden Extinktionswerte für 10 mm Schichtdicke
- 3) Die Einwaagekonzentration des Metallions und des Liganden für jeden Meßpunkt
- 4) Verschlüsselte Angaben darüber, welche Komplexe vorliegen, welche Parameter zu verbessern sind und welche Wichtung gewünscht wird
- 5) Die "Anfangswerte" der Stabilitätskonstanten und die molaren Extinktionsmoduln der Komponenten
- 6) Die Dissoziationskonstanten des Liganden
- 7) Der Faktor (Aktivitätskoeffizient) für die Umrechnung der Wasserstoffionenaktivität in die Wasserstoffionenkonzentration
- 8) Verschiedene Steuerzahlen, welche den Rechnungsablauf festlegen

Die Stabilitätskonstanten sind entsprechend der Hinreaktion als Bruttostabilitätskonstanten definiert. Sie werden aus den Konzentrationen der beteiligten Ionen berechnet, so daß die Ligandendissoziationskonstanten als Konzentrationsgrößen anzugeben sind.

Das Programm druckt die Eingabedaten, die Resultate, die mittleren quadratischen Fehler der Parameter und Nachrichten über den Rechnungsablauf aus und zeichnet auf Wunsch ein Extinktion/pH-Diagramm mit den gemessenen Extinktionswerten und einer mittels der endgültigen Parameter berechneten durchgehenden Extinktionskurve.

2. Programmbeschreibung

2.1 Programmaufbau

PHOTO4 ist in der FORTRANIV-Sprache abgefaßt und in folgende Teilprogramme gegliedert:

a) Hauptprogramm

liest die Meßdaten, die Steuerzahlen, weitere Angaben und die Anfangswerte der Parameter ein, ruft die Unterprogramme auf und druckt das Ergebnis aus.

b) Unterprogramm ANION3

berechnet aus pH und pK den Quotienten: "Anionenkonzentration durch Einwaagekonzentration des Liganden" für jeden Meßwert ("QL")

c) Unterprogramme ANFUN

diese berechnen mit den jeweiligen Aktualparametern die Extinktion nach Gleichung 1 (EX_{ber}) sowie die Differentialquotienten $\delta EX/dp$ (p: Parameter).

d) Unterprogramme FEQANS und MIKOQS

berechnen die Aktualparameter (verbesserte Parameter) und prüfen ob die Fehlerquadratsumme ein Minimum erreicht hat. FEQANS ruft MIKOQS und ANFUN auf.

e) Unterprogramm EMALER

berechnet mit den letzten Aktualparametern ("Endwerte") die Extinktionskurven für einen vorzugebenden Bereich des pH-Wertes und initiiert das Einzeichnen dieser sowie der Meßwerte in ein Diagramm durch die Karlsruher Bibliotheksroutine PLOTA

Mit dem Unterprogramm ANFUN wird die Zusammensetzung der Komplexe spezifiziert, indem mittels der Angleichsfunktion der abhängige Meßwert aus den Parametern und dem unabhängigen Meßwert berechnet wird. Die Angleichsfunktion enthält implizit die Definitionsgleichungen der Stabilitätskonstanten.

Für jeden vorgegebenen Satz von Komplexen, die gleichzeitig in einer Titrationslösung vorhanden sein können, gibt es ein spezielles ANFUN Programm, das durch eine Steuerzahl "KTR" angewählt wird.

Das Programm verwendet die nachstehend aufgeführten Karlsruher Bibliotheksroutinen und -funktionen:

PLOTA : Zeichenunterprogramm
 IABS(I) : Absolutwert von I
 EXP(x) : e^x
 SQRT(x) : \sqrt{x}
 FLOAT(I) : Umwandlung der Festkommazahl I in Gleitkomma
 MINO(I,K) : Kleinerer Wert von I und K (Festkomma)
 MAXO(I,K) : Größerer Wert von I und K (Festkomma)
 AMAXI(X,Y) : Größerer Wert von X und Y (Gleitkomma)
 FSPIE : Fehlersuchunterprogramm, kann weggelassen werden

Derzeit sind folgende ANFUN-Unterprogramme im PHOTO4-Kartensatz enthalten:

a) ANFUN1 "Normale" Komplexe KTR = +1

Komplexreihe $ML - ML_2 - ML_3 \dots ML_6$ bei KTR = 1
 und $MHL - M(HL)L - M(HL)L_2 \dots M(HL)L_5$ bei KTR = -1

$$\beta_{ML_i} = \frac{|ML_i|}{|M| \cdot |L|^i}$$

$$\beta_{M(HL)L_i} = \frac{|M(HL)L_i|}{|M| \cdot |HL| \cdot |L|^i}$$

HL ist der noch ein dissoziierbares Proton enthaltende Ligand.

b) ANFUN2 "Hydrogenkomplex" KTR = 2

Komplexreihe $MHL - ML - ML_2 - ML_3$

$$\beta_{MHL} = \frac{MHL}{|M| |HL|}$$

c) ANFUN3 "Komplexhydroxide" KTR = 3

Komplexreihe $ML - ML_2 - ML_3 - ML(OH) - ML_2(OH) - ML_3(OH)$

$$\beta_{ML_i(OH)} = \frac{|ML_i(OH)| \cdot |H^+|}{|M| \cdot |L|^i}$$

Sieben weitere Programme (ANFUN4 bis ANFUN0) können noch zusätzlich eingeführt werden, für sie sind derzeit "Blindprogramme" im Kartensatz enthalten.

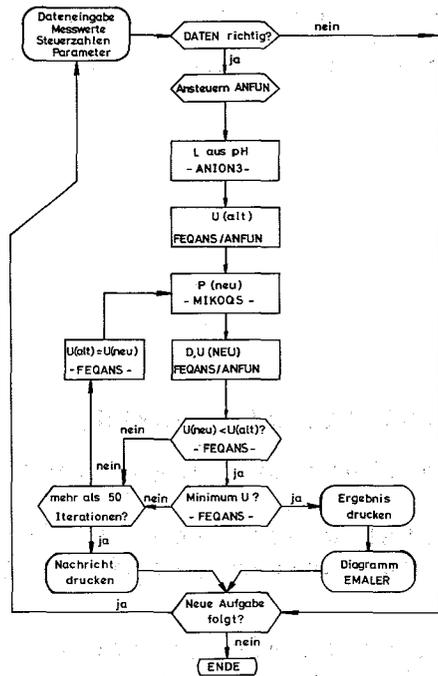
2.2 Interne Organisation der Rechengrößen

Die Parameter sowie die Meßdaten werden in PHOTO4 (ANION3, ANFUN, EMALER) und in FEQANS (MIKOQS) verschieden bezeichnet und angeordnet.

- a) PHOTO4
- B(IK) Aktualwerte der Stabilitätskonstanten. IK ist die Nummer der Komponente, das unkomplexe Metallion hat $B(1) = 1!$
 - EM(IK,IW) Aktualwerte der molaren Extinktionsmoduln. IK ist die Nummer der Komponente; IW die Nummer der Wellenlänge
 - EX(IW,IM) Extinktionsmeßwerte, IW ist die Wellenlängennummer, IM die Meßwertnummer
 - PH(IM) pH-Werte, IM ist die Meßwertnummer
- b) FEQANS
- X(IX) Reihe der zu verbessernden Parameter. Die Einordnung erfolgt so, daß erst die zu verbessernden Parameter der 1. Komponente kommen, dann die der zweiten usw. $B(1)$ kann nicht verbessert werden, da es stets gleich 1 ist. Für jede Komponente kommt gegebenenfalls erst B und dann EM in der Reihenfolge aufsteigender Wellenlängennummern. Diese Einordnung wird vom Hauptprogramm vorgenommen, ANFUN ersetzt bei jedem Schritt die B bzw. EM durch die neuen Aktualparameter X.
 - Y(IY) Reihe der abhängigen Variable, der gemessenen Extinktion. Die Anordnung ist nach aufsteigender Nummer, der IW-Index läuft schneller als der IM-Index.
 - P(IY) Gewichtet der Extinktionen angeordnet wie Y.
 - IY Die fortlaufende Nummer der Y-Werte (Variablenindex)

2.3 Programminterner Rechnungslauf

Der Rechnungsablauf ist in fünf Phasen gegliedert, deren wichtigste Schritte und Entscheidungspunkte schematisch in Abbildung 1 zusammengestellt sind.



Phase 1 Dateneinlesen, Datenkontrolle

Phase 2 Datenvorbereiten

Phase 3 iterative Parameterberechnung

Phase 4 Ergebnisausdruck

Phase 5 Diagrammzeichnen

ABBILDUNG 1 Blockschema des PHOT04-Rechnungsablaufs

"P" : Parametersatz

"D" : Differentialquotienten $\delta EX / \delta P$

Das Hauptprogramm liest die Eingabedaten und prüft diese auf Verträglichkeit mit den Unterprogrammen, ruft die für jede Phase benötigten Unterprogramme auf, kontrolliert die von diesen angelieferten Ergebnisse und steuert den weiteren Programmablauf in Abhängigkeit vom Befund und bewirkt in jeder Phase einen Ausdruck. Für Phase 3 übernimmt FEQANS neben seiner Funktion eines Arbeitsprogrammes die Aufgabe eines Oberprogrammes.

Die Parameterberechnung erfolgt durch iteratives Verbessern der Anfangswerte bis das Minimumskriterium erfüllt oder das Maximum von 50 Iterationsschritten erreicht ist. Zur Festlegung der neuen Aktualparameter "P₁" eines Schrittes wird aus "U" und den Differentialquotienten $\delta EX / \delta P$ ein Satz von Verbesserungsinkrementen ΔP berechnet und zu den alten Aktualparametern "P₀" addiert. Wenn die damit berechnete Fehlerquadratsumme größer ist als die mit den alten Aktualparametern berechnete, wird gedämpft, d.h. die Verbesserungsinkremente werden um den Faktor 1/2,5 verkleinert und danach korrigierte neue Aktualparameter als Summe aus P₀ und Δ_{korr} berechnet. In jedem Schritt kann bis zu zwanzig mal gedämpft werden. Das Fehlerminimum ist erreicht, wenn U(neu) kleiner oder gleich U(alt) - VERB ist, wobei VERB eine aus U und $\delta EX / \delta P$ berechnete Größe ist.

Weitere Einzelheiten zu dem angewandten Minimalisierungsverfahren s. D. Braess Computing 1, 264 (1966).

2.4 Erläuterungen zu ANION3

ANION3 berechnet aus dem pH-Wert die Wasserstoffionenkonzentration und aus dieser sowie den Dissoziationskonstanten die Größe QL.

$$CH(IM) = FH \cdot 10^{-pH}$$

$$QL = \frac{\text{Konz. des vollständig diss. Liganden}}{\text{Einwaagekonzentration des Liganden}}$$

Wenn die Zahl der Dissoziationskonstanten ("ND") 0 ist, so wird QL gleich 1 gesetzt. Bei $ND < 0$ wird QL und CH gleich 1 gesetzt.

2.5 Erläuterungen zu ANFUN

ANFUN wird der Reihe nach für jeden Wert der Reihe Y(IY) (die Extinktionswerte!) aufgerufen, um die "berechnete" Extinktion sowie die Differentialquotienten $\delta EX / \delta P$ aus CL und den Aktualparametern zu berechnen. Der Meßwertindex IM wird in ANFUN aus IY wie folgt durch "Festkommadivision" bestimmt:

$$IM = 1 + (IY - 1) / NW$$

Darin ist NW die Zahl der Meßwellenlängen. Die Formel folgt aus der Einordnung der EX in die Reihe Y.

Die Konzentration der Ligandenanionen "CL" wird in ANFUN unter Berücksichtigung des Verbrauchs durch Komplexbildung berechnet. Die Formel dafür lautet (S.H. Eberle et al. Radiochim. Acta 10, 91 (1968)):

$$(3) \quad CL = QL(CLIG - CME \cdot FZL / FN)$$

$$FZL = \sum_{i=1}^{NB} i \cdot B_i \cdot CL^i$$

$$FN = \sum_{i=1}^{NB} B_i \cdot CL^i$$

Darin bedeutet NB die Anzahl Ligandenmoleküle, welche im höchsten der auftretenden Komplexe gebunden sind und CME bzw. CLIG die Einwaagekonzentration des Metallions bzw. des Liganden. Da CL auf der rechten und der linken Seite der Gleichung 3 auftritt, kann es nicht direkt berechnet, sondern muß durch Iteration angenähert werden. Der Startwert $CL = QL \cdot CLIG$ wird in die rechte Seite der Gleichung 3 eingesetzt, das resultierende CL wird beim nächsten Schritt wieder rechts eingesetzt, bis sich altes und neues

CL um nicht mehr als 0,1% unterscheiden. Es sind maximal 200 Iterationsschritte zulässig, danach wird der Rechnungslauf abgebrochen.

Bei der Differenzierung $\delta EX/\delta B$ ist berücksichtigt, daß aufgrund Gleichung 3 CL von B abhängt. Zähler und Nenner der Extinktionsgleichung (1) werden mit FZE und FN bezeichnet. Die Berechnungsformeln sind:

$$(4) \quad \frac{\delta EX}{\delta B_j} = \frac{CME}{FN^2} \cdot \left[FN \cdot \left[\left(\frac{\delta FZE}{\delta B_j} \right)_{CL} + \left(\frac{\delta FZE}{\delta CL} \right)_{B_j} \cdot \left(\frac{\delta CL}{\delta B_j} \right)_{CL} \right] - FZE \cdot \left[\left(\frac{\delta FN}{\delta B_j} \right)_{CL} + \left(\frac{\delta FN}{\delta CL} \right)_{B_j} \cdot \left(\frac{\delta CL}{\delta B_j} \right)_{CL} \right] \right]$$

$$(5) \quad \frac{\delta CL}{\delta B_j} = \frac{QL \cdot CME \cdot \left(FZL \cdot \left(\frac{\delta FN}{\delta B_j} \right)_{CL} - FN \cdot \left(\frac{\delta FZL}{\delta B_j} \right)_{CL} \right)}{FN^2 + QL \cdot CME \cdot \left(FN \cdot \left(\frac{\delta FZL}{\delta CL} \right)_{B_j} - FZL \cdot \left(\frac{\delta FN}{\delta CL} \right)_{B_j} \right)}$$

2.6 Erläuterungen zu EMALER

EMALER zeichnet die Meßwerte und durchgehende Kurven der berechneten Extinktionen in ein durch Eingabedaten bestimmtes Koordinatensystem mit pH als Abszisse und EX als Ordinate. Die durchgehende Kurve wird aus der berechneten Extinktion an 100 äquidistanten pH-Werten von pH_{min} bis pH_{max} durch das Zeichenunterprogramm PLOTA erzeugt.

3. Ausführung einer Rechnung

Die Eingabedaten sind formatgebunden auf Karten zu lochen. Die einzelnen Zahlen müssen exakt in den für sie vorgesehenen Spalten stehen, von der vorgeschriebenen Reihenfolge darf nicht abgewichen werden. Am Anfang und Ende jeder Datenkarte steht eine Kontrollzahl, für die ein bestimmter Wert vorgeschrieben ist. Die Datenkarten, die Programmkarten und die für die Rechenanlage vorgeschriebenen Kontrollkarten sind in der vorgeschriebenen Reihenfolge anzuordnen und bei der Rechenanlage abzugeben. Für die Karlsruher IBM360/65 s. Anhang.

3.1 Liste der Eingabedaten

Karte	Art der Daten	Größe	Bedeutung	Bem.	
1	Datum	KK1	Kontrollzahl (=1)	(1)	
		ITAG*	Tageszahl		
		MONAT*	Monatszahl		
		JAHR*	Jahreszahl		
		KK2	Kontrollzahl (=1)		
2	Name	KK1	Kontrollzahl (=2)		
		NAME	Beliebiger Text		
		KK2	Kontrollzahl (=2)		
3	Steuerzahlen	KK1	Kontrollzahl (=3)		
		NM	Zahl der Meßwerte (max.=100)		
		NB	Zahl d. Stab.-konst. (max.=6)		
		NW	Zahl der Wellenlängen (max.=4)		
		ND	Zahl d. Diss.-konst. (max.=6)		
		IDIAG	Diagrammsteuerzahl		(2)
		KDO	Rechenkommando		(3)
		KTR	Steuerzahl für ANFUN		(4)
		FH	Akt.-Koeff. des H-Ions		
		LAMBDA(1)*	1. Wellenlänge in Ångström		(5)
		GFE	Gewichtsfaktor für Lambda(1)		(5)
		LAMBDA(2)*	2. Wellenlänge in Ångström		
		GFE	Gewichtsfaktor für Lambda (2)		
		LAMBDA(3)*	3. Wellenlänge in Ångström		
GFE	Gewichtsfaktor für Kambda (3)				
LAMBDA(4)*	4. Wellenlänge in Ångström				
GFE	Gewichtsfaktor für Lambda (4)				
KK2	Kontrollzahl (=3)				
4	Diss.-konst.	KK1	Kontrollzahl (=4)	(6)	
		DK(1)	Diss.-konst. DK(1), DK(2) ...		
		DK(2)	bis DK(ND)		
		DK(3)	ND(max)=6		
		DK(4)			
		DK(5)			
		DK(6)			
		KK2	Kontrollzahl (=4)		
5	Stab.-konst.	KK1	Kontrollzahl (=5)		
		BA(1)*	Ausgangsnäherung d. 1. Stab.-konst.		
		MINB(1)*	Minimalisierungskennzahl zu BA(1)		(7)
		BA(2)*	Ausgangsnäherung d. 2. Stab.-konst.		
		MINB(2)*	Minimalisierungskennzahl zu BA(2)		
		.	usw. bis BA(NB), MINB(NB)		
KK2	Kontrollzahl (=5)				
6	Ext.-Moduln	KK1	Kontrollzahl (=6)	(8)	
		IK	laufende Nr. der Komponente		
		EMA(1)*	Ausgangswert d. Ext.-Moduls von Komponente IK bei der 1. Wellenlänge		
		MINE(1)*	Minimalisierungskennzahl zu EMA(1)		
		EMA(2)*	Ausgangswert des Ext.-Moduls von Komponente IK bei der 2. Wellenlänge		

Karte	Art der Daten	Größe	Bedeutung	Bem.
		MINE(2)*	Minimalisierungskennzahl zu EMA(2)	
		EMA(3)*	Ausgangswert des Ext.-Moduls von Komponente IK bei der 3. Wellenlänge	
		MINE(3)*	Minimalisierungskennzahl zu EMA(3)	
		EMA(4)*	Ausgangswert des Ext.-Moduls von Komponente IK bei der 4. Wellenlänge	
		MINE(4)*	Minimalisierungskennzahl zu EMA(4)	
		KK2	Kontrollzahl (=6)	
7	Meßwerte (für jeden Meßwert eine Karte)	KK1	Kontrollzahl (=7)	
		PH*	pH-Wert	
		EX(1)	Extinktion bei der 1. Wellenlänge	
		EX(2)	Extinktion bei der 2. Wellenlänge	
		EX(3)	Extinktion bei der 3. Wellenlänge	
		EX(4)	Extinktion bei der 4. Wellenlänge	
		CME*	Einwaagekonz. des Kations (Mol/L)	
		CLIG*	Einwaagekonz. des Liganden (Mol/L)	
		KK2	Kontrollzahl (=7)	
8	Diagramm	KK1	Kontrollzahl (=8)	
		PHMIN*	kleinster pH-Wert d. Abszisse	
		PHMAX*	größter pH-Wert der Abszisse	
		PHMST	pH-Maßstabseinteilung	(9)
		EMIN*	kleinster Ext.-Wert der Ordinate	
		EMAX*	größter Ext.-Wert der Ordinate	
		EMST	Ext.-Maßstabseinteilung	(9)
		CMD*	Metallkonzentration	
		CLGD	Ligandenkonzentration	
		KK2	Kontrollzahl (=8)	
9	Folgekarte	KK1	Kontrollzahl (=9)	
		NFOLGE	Folgesteuerzahl	(10)
		NEU(2)	Eingabesteuerzahl für Karte 2	
		NEU(3)	Eingabesteuerzahl für Karte 3	
		NEU(4)	Eingabesteuerzahl für Karte 4	
		NEU(5)	Eingabesteuerzahl für Karte 5	
		NEU(6)	Eingabesteuerzahl für Karte 6	
		NEU(7)	Eingabesteuerzahl für Karte 7	
		NEU(8)	Eingabesteuerzahl für Karte 8	
		KK2	Kontrollzahl (=9)	

*) Kein Eingabewert außer den mit Stern gekennzeichneten sollte den Zahlenwert Null haben, da es sonst zur Division durch Null kommen kann.

Bemerkungen

- (1) Nach dem Lesen jeder Karte kontrolliert PHOTO4, ob die beiden Kontrollzahlen den in der Liste angegebenen Wert haben. Wenn nicht, so wird diese Aufgabe nicht gerechnet.
- (2) IDIAG=0 : kein Ergebnisdiagramm
IDIAG=1 : Ergebnisdiagramm auf mm-Papier mit Kugelschreiber
IDIAG=2 : Ergebnisdiagramm mit $EX/CME = \bar{\epsilon}$ auf der Ordinate
- (3) KDO = 0 : Keine Minimalisierung, jedoch Berechnung der "theoretischen Extinktionswerte" und Erstellung eines Diagrammes
KDO = 1 : Normale Rechnung mit Minimalisierung. Es werden nur die Ergebnisse ausgedruckt
KDO = 2 : Zusätzlich werden in Phase 3 die neu festgesetzten Werte der Parameter und die Fehlerquadratsumme jeder Iteration ausgedruckt
KDO = 3 : Zusätzlich zu obigem werden weitere Zwischenwerte, darunter die Differentialquotienten $\delta y / \delta p$ ausgedruckt
KDO = 4 : Die Werte der Parameter, die Ergebnisse und alle Zwischenergebnisse der einzelnen Iterationsschritte werden ausgedruckt. KDO = 4 darf nur zu Testzwecken verwendet werden
- (4) Über KTR werden die einzelnen ANFUN-Unterprogramme angewählt.
ANFUN1 KTR = 1, Komplexe: $ML - ML_2 - ML_3 \dots ML_i$, KTR = -1
Komplexe $M(HL) - M(HL)L - M(HL)L_2 \dots M(HL)L_5$. ANFUN2, KTR = 2,
Komplexe $M(HL) - ML - ML_2 - ML_3$. ANFUN3, KTR = 3, Komplexe
 $ML - ML_2 - ML_3 - ML(OH) - ML_2(OH) - ML_3(OH)$.
- (5) Die Wellenlänge wird als die Größe LAMBDA(I), I = 1 bis NW, eingegeben. NW kann maximal 4 sein. Zu jeder Wellenlänge wird ein Gewichtsfaktor angegeben, der eine stärkere oder schwächere Berücksichtigung der Meßwerte der betreffenden Wellenlänge bei der Berechnung von "U" bewirkt. Hat der Gewichtsfaktor einen positiv-endlichen Wert, so wird er direkt als Meßwertgewicht p eingesetzt. Wenn $GFE(I)=0$ ist, werden alle Gewichte gleich $1/EX_{exp}^2$ gesetzt (s. Einleitung).
- (6) Die Dissoziationskonstanten werden als Größe DK(I), I = 1 bis ND (Numerus!) im Sinn ansteigender pK-Werte geordnet eingegeben. Wenn ND gleich ≤ 0 ist, so darf keine Karte 4 beigelegt werden. Für ND=0 wird CL=CLIG und für ND<0 wird CL=CLIG und CH=1. Im zweiten Fall kann kein Diagramm gezeichnet werden.

- (7) BA(I) wird bei MINB(I)=1 durch das Programm verbessert, bei MINB(I)=0 bleibt es unverändert.
- (8) Für jede lichtabsorbierende Komponente ist eine Karte 6 beizulegen. Das nicht komplexgebundene Metallion ist stets Komponente 1. Die EMA(I) werden bei MINE(I)=1 durch das Programm verbessert, bei MINE(I)=0 nicht.
- (9) Die Achsen des Diagrammes dürfen maximal 10 Teilungsstriche haben, die im Abstand PHMST bzw. EMST angebracht werden. Der erste Teilungsstrich steht bei PHMIN bzw. EMIN, daher muß gelten
- $$\text{PHMIN} - \text{PHMAX} \leq 10 \cdot \text{PHMST}$$
- $$\text{EMIN} - \text{EMAX} \leq 10 \cdot \text{EMST}$$
- (10) Mit NFOLGE wird gesteuert ob Datenkarten für eine weitere Aufgabe zu lesen sind
- NFOLGE = 0 Ende des Programmlaufes, die NEU(I) sind belanglos
- NFOLGE = 1 Ein neuer, vollständiger Datensatz ohne Karte! (!) folgt. Die NEU(I) sind belanglos.
- NFOLGE = 2 Es wird eine weitere Rechnung mit schon eingelesenen Daten ausgeführt, wobei diejenigen Datenkarten, deren NEU-Steuerzahl gleich 1 ist, neu gelesen werden (sie müssen also hinter dieser Karte liegen). Die neu gelesenen ersetzen die alten Werte. Man kann so z.B. dieselben Meßwerte mit verschiedener vorgegebenen Komplexzahl auswerten.

3.2 Schema zum Ausfüllen der Datenkarten

	10	20	30	40	50	60	70	80										
1	ITAG I10		MONAT I10		JAHR I10													
2	<i>beliebiger Text zur Kennzeichnung der Rechnung</i>																	
3	NM I5	NB I3	NW I3	ND I3	IDIAG I3	KDØ I3	KTR I3	FH F6.3	LAMBDA(1) I6	GFE(1) F5.2	LAMBDA(2) I6	GFE(2) F5.2	LAMBDA(3) I6	GFE(3) F5.2	LAMBDA(4) I6	GFE(4) F5.2		
4	DK(1) E10.3		DK(2) E10.3		DK(3) E10.3		DK(4) E10.3		DK(5) E10.3		DK(6) E10.3							
5	ZA(1) E10.3		* I2	ZA(2) E10.3		* I2	ZA(3) E10.3		* I2	ZA(4) E10.3		* I2	ZA(5) E10.3		* I2	ZA(6) E10.3		* I2
6	IK I2	EMA(1, IW) F10.3		MINE(1, IW) I5		EMA(2, IW) F10.3		MINE(2, IW) I5		EMA(3, IW) F10.3		MINE(3, IW) I5		EMA(4, IW) F10.3		MINE(4, IW) I5		
7	PH F8.3		EX(1) F10.3		EX(2) F10.3		EX(3) F10.3		EX(4) F10.3		CME E10.3		CLIG E10.3					
8	PHMIN F8.3		PHMAX F8.3		PHMST F8.3		EMIN F8.3		EMAX F8.3		EMST F8.3		CMD E10.3		CLGD E10.3			
9	* *	NEU(2) I5		NEU(3) I5		NEU(4) I5		NEU(5) I5		NEU(6) I5		NEU(7) I5		NEU(8) I5				

Anmerkungen

alle Zahlen sind rechtsbündig einzutragen

zu "6" : für jede "Komponente" eine Karte

zu "7" : für jeden Messwert eine Karte

* : MINB(1) usw.

* : NFOEGE : I1

3.3_Ergebnisausgabe

Zu jeder Rechenaufgabe wird eine Ausgabe gedruckt, welche die eingegebenen Daten und die berechneten Konstanten enthält. Bei aufgetretenen Fehlern erscheint eine Fehlernachricht. Das verwendete Unterprogramm ANFUN identifiziert sich in einer Druckzeile selbst.

Folgende Angaben werden außer den Eingabedaten gedruckt:

1. "Minimum gefunden" oder "kein Minimum gefunden":
Damit wird angezeigt, ob das Minimalisierungsverfahren einen Minimalwert der Fehlerquadratsumme finden konnte. Nur bei "ja" werden sinnvolle Parameter B und EM erhalten.
2. NAUS : Bei NAUS=1 ist das Minimalisierungsverfahren positiv zu Ende gekommen, bei NAUS=4 wurde nach 50 Iterationen kein Minimum erreicht und bei NAUS=3 ist die Normalmatrix singular
3. ITR : Anzahl der Neuberechnungen der Parameter
4. NSB : Anzahl der ANFUN-Aufrufe
5. GFQS : Gewichtete Fehlerquadratsumme
6. RFQS : mittl. quadratischer Fehler der Extinktionsmessung
7. Endwerte : Berechnete Parameter und ihre mittleren quadratischen Fehler
8. QL : Der Quotient "Anionenkonzentration/Ligandeneinwaagekonz."
9. CL : Anionenkonzentration des Liganden
10. ED(i): Differenz "gemessene Extinktion - berechnete Extinktion"
11. F : $\sum ED(I)^2$ für i = 1 bis NW
12. Je nach KDO in Phase 3 die neu festgesetzten Werte "X" der zu minimalisierenden Parameter für jeden Iterationsschritt.
Anordnung der zu verbessernden Parameter in der Reihe X: EM für die 1. Komponente, B,EM für die 2. Komponente usw. Die erste Komponente (= unkomplexes Metallion) kann kein zu minimalisierendes B haben!

3.4 Fehlernachrichten

Fehlernachrichten können vom Programm und vom Kontrollsystem der Rechenanlage ausgehen. Das Monitorsystem kennzeichnet u.a. falsche Kontrollkarten, Lochungsfehler ("FORTRAN -Rechtschreibfehler"), falsche Anordnung des Kartensatzes, mathematische Fehler wie Division durch Null und solche Fälle, wo durch Eingabedaten das DIMENSION überschritten wird.

3.4.1 Fehlernachrichten aus PHOTO4 beim Einlesen und bei der Datenkontrolle

Es erscheint der Text: "PHOTO4 EINGABEFEHLER KN1 = x KN2 = Y IM = Z".
Darin ist KN1 die Kontrollzahl der vom Programm erwarteten Datenkarte, KN2 kennzeichnet die Fehlerart und IM ist die Nummer der Karte bei Karten gleicher Kontrollzahl.

KN2 = 1	1. Kontrollzahl falsch
KN2 = 2	2. Kontrollzahl falsch
KN2 = 3	NM > 100
KN2 = 4	NB > 6
KN2 = 5	NB ≤ 0
KN2 = 6	NW > 4
KN2 = 7	NW < 0
KN2 = 8	ND > 6
KN2 = 10	NM*NW > 200
KN2 = 11	Mehr als 15 zu minimalisierende Größen!

Wenn ein Fehler diagnostiziert wurde, sucht das Programm nach der Karte "9" und weist alle anderen Karten zurück. Das bedeutet, daß von mehreren aufeinanderfolgenden Fehlernachrichten nur die erste von Bedeutung ist.

3.4.2 Fehlernachrichten aus ANFUN

- "Kontrollzahl KONAN falsch" bedeutet, daß ein mit PHOTO4 nicht verträgliches (altes) Unterprogramm ANFUN im Kartensatz liegt.
- "Fehler in ANFUN bei CL-Iteration" bedeutet, daß bei der iterativen Berechnung der Anionenkonzentration unter Berücksichtigung des Verbrauches durch Komplexbildung nach 200 Schritten keine Konvergenz erreicht ist. Tritt gelegentlich auf, wenn die Metallkonzentration höher als die Ligandenkonzentration ist. Die "Konvergenz" ist erreicht, wenn zwei aufeinanderfolgend berechnete Werte der Anionenkonzentration sich um weniger als 0,1% unterscheiden.

4. Rechenbeispiel

Als Beispiel einer PHOTO4-Auswertung wird im folgenden eine photometrische Titration mit dreiwertigem Americium und Iminodiessigsäure (H_2IDE) behandelt. Die ersten beiden Blätter sind die Formulare zum Lochen der Datenkarten, dann folgt der von PHOTO4 erstellte Ausdruck und zum Schluß ist die erzeugte Zeichnung abgebildet.

In Abbildung 2 ist der Verlauf der Berechnung am Beispiel der Fehlerquadratsumme und der beiden Stabilitätskonstanten graphisch dargestellt. Insgesamt wurden 8 Parameter berechnet. Die Rechenzeit betrug ca. 30 sec! Das Programm fand ein "Minimum", obwohl der Anfangswert von $B(2)$ um den Faktor ≈ 100 "falsch" war.

Das Resultat des Versuches ist der Nachweis, daß sich die zwei Komplexe $Am(IDE)^+$ und $Am(IDE)_2^-$ gebildet haben, deren Absorptionsmaxima bei 5051 \AA bzw. 5069 \AA liegen. Das Absorptionsmaximum des nicht komplex gebundenen, hydratisierten $Am(III)$ -Kations liegt bei 5032 \AA .

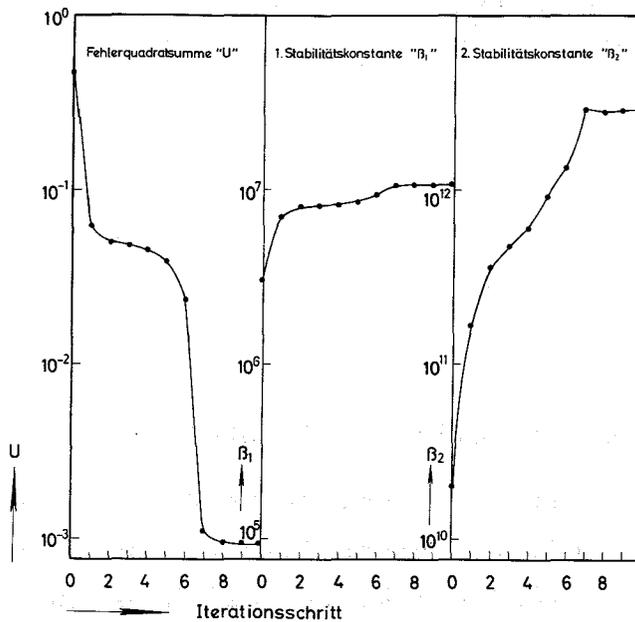


ABBILDUNG 2 Änderung der Fehlerquadratsumme und der Stabilitätskonstanten bei einer PHOTO4-Auswertung mit zwei Komplexen

DATENKARTEN

Programm PHOTØ4 Datum 4.8.70 Name Eberle Blatt-Nr. 1

	101	201	301	401	501	601	701	801
1		051	081	701				1
2	AM(I,II) / H.2 I.D.E. / VERSUCH. HKR. / 1.6.013.7.0. / TESTRECHNUNG / E3IERLE							2
3	11	2	4	2	1	2	1	0.820 5013.2 1.100 5051
4	2.180E-03 4.500E-10							4
5	3.000E+06 0.2.0100E+10 1							5
6	1	430.000	0	250.000	0	172.000	0	77.200 0
6	2	115.000	1	464.000	1	321.000	1	161.000 1
6	3	132.000	1	109.000	1	532.000	1	358.000 1
7	1	975	0.602	0.350	0.241	0.108	1.400E-03	1.400E-02
7	2	819	0.592	0.360	0.248	0.113	1.400E-03	1.400E-02
7	3	560	0.535	0.397	0.272	0.127	1.400E-03	1.400E-02
7	3	840	0.490	0.426	0.293	0.140	1.400E-03	1.400E-02
7	4	142	0.421	0.473	0.326	0.164	1.400E-03	1.400E-02
7	4	427	0.349	0.514	0.361	0.192	1.400E-03	1.400E-02
7	5	027	0.212	0.558	0.447	0.236	1.400E-03	1.400E-02
7	5	362	0.165	0.528	0.497	0.271	1.400E-03	1.400E-02

PROGRAMM PHOTO4 PN05940 AF281069-PHOTO4/3
 BERECHNUNG EINER PHOTOMETRISCHEN TITRATION NACH DER FEHLERQUADRATMETHODE

VERSUCH AM(III)/H2IDE VERSUCH HKR/190370 TEST EBERLE

RECHNUNGSdatum 16. . 9. .1970

VERWENDETE UNTERPROGRAMME

ANION3 05914	AF281069-PHOTO4/2	FUER PHOTO4/JONAS4	BERECHNUNG DES QUOTENTEN QLI=L/HNL EINER SAEURE HNL
FEQANS 05955	AF281069-PHOTO4/3	VERW.MIT MIKOQS	ANGLEICH MITTELS DER FEHLERQUADRATMETHODE -- PJS.PARAMETER
MIKOQS 05956	AF281069-PHOTO4/2	FUER FEQANS 05950	MINIMALISIERUNG EINER KONVEX-QUADRAT.FUNKTION
ANFUN1 05941-S1	AF040670-PHOTO4/3	FUER PHOTO4/FEQANS	REAKTION M-ML--ML6(KTR=1),M-MHL-MHLL-MHLL5(KTR=-1),VD=1-6
EMALER 05942	AF281069-PHOTO4/2	FUER PHOTO4/ANFUNS	ZEICHNET DAS ERGEBNISDIAGRAMM

PHASE 4 ENDERGEBNIS MINIMUM VON GFQS GEFUNDEN

KONTROLLZAHLEN	NM	NB	NW	ND	IDIAG	KDD	KTR	NAUS	ITR	NSB	FH	GFQS	RFQS
	11	2	4	2	1	1	1	1	44	1877	8.200E-01	7.855E-03	1.520E-02

DISS.-KONS. DES LIGANDEN	DK(1)	DK(2)	DK(3)	DK(4)	DK(5)	DK(6)
		2.180E-03	4.500E-10			

GLEICHGEWICHTSKONSTANTEN	KOMPONENTE	1	2	3
	ANFANGSWERTE		3.000E 06	2.000E 10
	ENDWERTE		1.059E 07	2.554E 12
	M.QU.FEHLER		3.531E 05	2.414E 11
	MIN.-KENNZIFFER		1	1

EXT.-MODULN

1. WELLENLAENGE	5032	A	ANFANGSWERTE	430.000	115.000	132.000
GEW.-FAKTOR 0.0			ENDWERTE	430.000	110.822	33.339
			M.QU.FEHLER	0.0	2.691	1.804
			MIN.-KENNZIFFER	0	1	1
2. WELLENLAENGE	5051	A	ANFANGSWERTE	250.000	464.000	109.000
GEW.-FAKTOR 1.000E 00			ENDWERTE	250.000	461.834	101.087
			M.QU.FEHLER	0.0	5.066	8.674
			MIN.-KENNZIFFER	0	1	1
3. WELLENLAENGE	5069	A	ANFANGSWERTE	172.000	321.000	532.000
GEW.-FAKTOR 1.000E 00			ENDWERTE	172.000	320.836	541.907
			M.QU.FEHLER	0.0	4.355	9.716
			MIN.-KENNZIFFER	0	1	1
4. WELLENLAENGE	5092	A	ANFANGSWERTE	77.200	161.000	358.000
GEW.-FAKTOR 1.000E 00			ENDWERTE	77.200	167.197	356.091
			M.QU.FEHLER	0.0	2.554	7.184
			MIN.-KENNZIFFER	0	1	1

MESS- UND RECHENWERTE

IM	PH	EX(1)	EX(2)	EX(3)	EX(4)	CLIG	CME	QL	CL	F	ED(1)	ED(2)	ED(3)	ED(4)
1	1.975	0.602	0.350	0.241	0.108	1.400E-02	1.400E-03	5.019E-09	7.026E-11	1.913E-07	0.0003	-0.0002	0.0000	-0.0002
2	2.819	0.583	0.360	0.248	0.113	1.400E-02	1.400E-03	1.313E-07	1.834E-09	1.456E-04	-0.0105	0.0044	0.0032	0.0025
3	3.560	0.535	0.397	0.272	0.127	1.400E-02	1.400E-03	1.158E-06	1.598E-08	2.304E-05	-0.0021	0.0042	0.0008	0.0005
4	3.810	0.490	0.426	0.293	0.140	1.400E-02	1.400E-03	2.187E-06	2.988E-08	4.482E-05	-0.0038	0.0052	0.0013	0.0010
5	4.142	0.421	0.473	0.326	0.164	1.400E-02	1.400E-03	4.906E-06	6.560E-08	4.909E-05	0.0049	0.0034	-0.0032	0.0020
6	4.427	0.349	0.514	0.361	0.192	1.400E-02	1.400E-03	9.636E-06	1.268E-07	1.446E-04	0.0083	0.0005	-0.0061	0.0062
7	5.027	0.212	0.558	0.447	0.236	1.400E-02	1.400E-03	3.894E-05	4.937E-07	1.634E-05	0.0015	0.0006	0.0001	-0.0037
8	5.362	0.165	0.528	0.497	0.271	1.400E-02	1.400E-03	8.444E-05	1.050E-06	4.441E-05	0.0004	-0.0035	0.0035	-0.0045
9	5.627	0.135	0.479	0.545	0.303	1.400E-02	1.400E-03	1.556E-04	1.901E-06	1.491E-04	-0.0019	-0.0042	0.0086	-0.0073
10	6.066	0.099	0.368	0.625	0.372	1.400E-02	1.400E-03	4.276E-04	5.067E-06	1.054E-04	-0.0007	-0.0006	0.0088	-0.0053
11	6.453	0.076	0.272	0.665	0.446	1.400E-02	1.400E-03	1.042E-03	1.205E-05	4.354E-04	0.0005	0.0010	-0.0136	0.0158

PHASE 5AUFTRUF EMALER FUER ERGEBNISDIAGRAMM

EINGABE FUER DIAGRAMM	PHMIN	PHMAX	PHMST	EMIN	EMAX	EMST	CMD	CLGD
	0.0	10.000	1.000	0.0	1.000	0.100	0.140E-02	0.140E-01

ZEICHNEN DER MESSWERTE

IW = 1 KRZ = 1 IDPLOT = 1
 IW = 2 KRZ = 1 IDPLOT = 2
 IW = 3 KRZ = 1 IDPLOT = 3
 IW = 4 KRZ = 1 IDPLOT = 4

ZEICHNEN DER BERECHNETEN KURVEN

Ausdruck der Rechenaufgabe

ABBILDUNG 3 Von der Maschine erzeugte Zeichnung

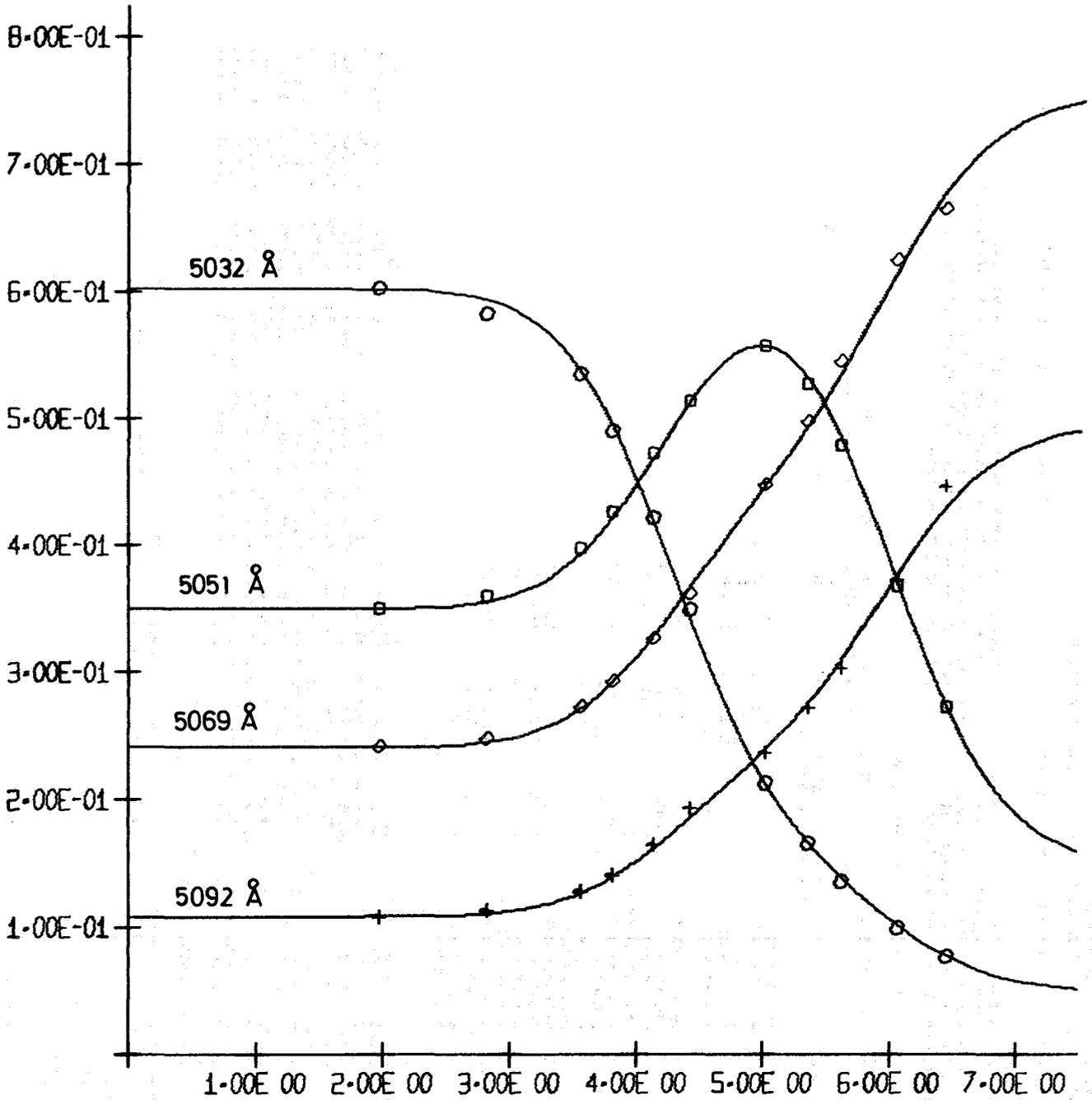


ABB-00001 AM(III)/HEIDE VERSUCH HNR/190370 TEST EBERLE 16. 9. 1970

5. Programmlisten

```
LEVEL 18                MAIN                DATE = 70274

C    PHOTO4/3 05940 VERSION 281069 AF120670 S.H.EBERLE UNK
C    FREIE WAHL DER ZU MINIMALISIERENDEN KONSTANTE
C    MIT VERTRAEGLICHKEITSKONTROLLE FUER ANFUNS
C    FEQANS 05955 VERSION 281069
C    MIKQOS 05956 VERSION 281069
C    ANION3 05914 VERSION 281069
C    EMALER 05942 VERSION 281069
C    ANFUN1 05941 VERSION 281069 M-ML-ML2-ML3-ML4-ML5-ML6
C    ANFUN2 05941 VERSION 281069 M-MHL-ML-ML2-ML3
C    ANFUN3 05941 VERSION 281069 M-ML-ML2-ML3-MLOH-ML2OH-ML3OH
C    REIHE X = B(I),EM(I,M),EM(I,N),B(J),EM(J,M) U.S.W.
    DIMENSION BA(7),EMA(7,4),FB(7),FEM(7,4)
    DIMENSION F(100),ED(4,100),GFE(4),KON(7),LAMBDA(4)
    DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
    DIMENSION B(7),EM(7,4),CL(100),QL(100),CLIG(100),CME(100)
    DIMENSION EX(4,100),PH(100),CH(100),DK(6),MINB(7),MINE(7,4)
    DIMENSION NEU(8),NEW(8)
    DIMENSION NAME(15),NUNT(15)
    DIMENSION DAT(8,100)
    EQUIVALENCE (NUNT(13),ITAG),(NUNT(14),MONAT),(NUNT(15),JAHR)
    COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,EXB,A,NBED,NBG,NF,GFQS,RFQS,FV,FFV,NAUS
    COMMON KTR
    COMMON NM,NW,NB,ND,KDO,LEIT,IDIAG
    COMMON B,EM,CL,QL,CLIG,CME,EX,DK,CH,PH,FH
    COMMON NSB,ITR,KONAN,MINB,MINE,NK
    COMMON NEU,NRECH

C
1000 NFOLGE=0
    DATA NIE/' 1'/
    KONAN=281069
    NRECH=1
    IOUT=6
    DO 1005 I=1,8
1005 NEU(I)=0
1001 WRITE(IOUT,1050)
    WRITE(IOUT,1051)
    IF(NFOLGE.EQ.2) WRITE (IOUT,1006)
1006 FORMAT(1H0,'ANSCHLUSSRECHNUNG')
    NF=0

C
1010 DO 1012 IM=1,100
    PH(IM)=0.
    CLIG(IM)=0.
    CME(IM)=0.
    QL(IM)=0.
1011 CL(IM)=0.
    ED(1,IM)=0.
    ED(2,IM)=0.
    ED(3,IM)=0.
    ED(4,IM)=0.
    EX(1,IM)=0.
    EX(2,IM)=0.
    EX(3,IM)=0.
    EX(4,IM)=0.
1012 F(IM)=0.

C
    DO 1014 IW=1,4
    DO 1013 IK=1,7
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
EM(IK,IW)=0.
KON(IK)=IK
1013 FEM(IK,IW)=0.
1014 CONTINUE
DO 1015 IB=1,7
B(IB)=0.
1015 FB(IB)=0.
IDENT=0
ITR=0
NSB=0
NAUS=0
GFQS=0.
RFQS=0.

C
C DATENEINGABE
1100 IM=0
LEIT=1
JUMP=1
IF(NFOLGE)1102,1101,1102
1101 KN1=1
READ(5,1400) KK1,ITAG,MONAT,JAHR,KK2
1400 FORMAT(I1,9X,3(6X,A4),39X,I1)
GO TO 1200
1102 KN1=2
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1103
READ(5,1401)KK1,(NAME(I),I=1,15),KK2
1401 FORMAT(I1,9X,15A4,9X,I1)
DO 1151 I=1,12
1151 NUNT(I)=NAME(I)
GO TO 1200
1103 WRITE(IOUT,1120)LEIT
1120 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,5X,12H DATENEINGABE)
1104 KN1=3
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1105
NM=0
NB=0
NW=0
ND=0
FH=0.0
IDIAG=0
KDD=0
KTR=0
CALL FSPIE
READ(5,1402)KK1,NM,NB,NW,ND,IDIAG,KDD,KTR,FH,(LAMBDA(I),GFE(I),I=1
1,4),KK2
1402 FORMAT(I1,1X,I5,6I3,F6.3,4(I6,F5.2),I5)
NK=NB+1
GO TO 1200
1105 KN1=4
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1106
IF(ND)1106,1106,9105
9105 READ(5,1403) KK1,(DK(I),I=1,6),KK2
1403 FORMAT(I1,9X,6E10.3,9X,I1)
GO TO 1200
1106 KN1=5
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1107
READ(5,1404) KK1,(BA(I),MINB(I),I=2,7),KK2
1404 FORMAT(I1,3X,6(E10.3,I2),I4)
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

MINB(1)=0
BA(1)=1.
GO TO 1200

1107 KN1=6
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1111
JK=1

1108 READ(5,1405)KK1,IK,(EMA(IK,IW),MINE(IK,IW),IW=1,4),KK2
1405 FORMAT(I1,2X,I2,4(F10.3,I5),10X,I5)
IM=JK
GO TO 1200

1109 IF(NK-JK)1512,1512,1110
1110 JK=JK+1
GO TO 1108

C

C UMWANDLUNG DER BETA IN DIE X

1111 NX=0
DO 1132 I=1,NK
B(I)=BA(I)
IF(MINB(I)) 1121,1130,1121
1121 NX=NX+1
X(NX)=BA(I)
1130 DO 1131 IW=1,NW
EM(I,IW)=EMA(I,IW)
IF(MINE(I,IW))1125,1131,1125
1125 NX=NX+1
X(NX)=EM(I,IW)
1131 CONTINUE
1132 CONTINUE
KN2=11
IF(15-NX)1202,1133,1133
1133 IF(KDO)1140,1119,1119

C

1119 KN1=7
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 1150
IM=1
1112 READ(5,1406) KK1,PH(IM),(EX(IW,IM),IW=1,4),CME(IM),CLIG(IM),
IKK2
1406 FORMAT(I1,1X,F8.3,4F10.3,2E10.3,I10)
GO TO 1200
1113 DAT(1,IM)=PH(IM)
DAT(2,IM)=EX(1,IM)
DAT(3,IM)=EX(2,IM)
DAT(4,IM)=EX(3,IM)
DAT(5,IM)=EX(4,IM)
DAT(6,IM)=CME(IM)
DAT(7,IM)=CLIG(IM)
IF(NM-IM)1524,1524,1115
1115 IM=IM+1
GO TO 1112
1140 WRITE(IOUT,1141)
1141 FORMAT(1H0,30HDA KDO NEGATIV NUR THEOR.KURVE)
LEIT=5
JUMP=2
GO TO 5000

C

1150 DO 1155 IM=1,NM
PH(IM)=DAT(1,IM)
EX(1,IM)=DAT(2,IM)

LEVEL 18 MAIN DATE = 70274

EX(2,IM)=DAT(3,IM)
EX(3,IM)=DAT(4,IM)
EX(4,IM)=DAT(5,IM)
CME(IM)=DAT(6,IM)
CLIG(IM)=DAT(7,IM)

1155 CONTINUE
GO TO 2000

C
C KN2 GIBT AN WELCHE KONTR.-ZAHL FALSCH IST
C EINGABEKONTROLLE
C

1200 IF(KK1-KN1)1201,1204,1201
1201 KN2=1
1202 WRITE(IOUT,1203)KN1,KN2,IM
1203 FORMAT(1H ,22HPHOTO4 - EINGABEFehler,5X,5HKN1 =,I3,5X,5HKN2 =,I3,5
1X,4HIM =,I3)
NF=1
GO TO 6000
1204 KN2=2
IF(KK2-KN1)1202,1206,1202
1206 GO TO(1102,1502,1207,1506,1508,1109,1113),KN1
1207 KN2=3
IF(100-NM)1202,1209,1209
1209 KN2=4
IF(6-NB)1202,1211,1211
1211 KN2=5
IF(NB)1202,1202,1213
1213 KN2=6
IF(4-NW)1202,1215,1215
1215 KN2=7
IF(NW)1202,1202,1217
1217 KN2=8
IF(6-ND)1202,1221,1221
1221 KN2=10
IF(200-NM*NW)1202,1504,1504

C
C
C AUSDRUCKBEFEHLE
C

1501 WRITE(IOUT,1050)
1050 FORMAT(1H1,43HPROGRAMM PHOTO4 PN05940 AF281069-PHOTO4/3)
WRITE(IOUT,1051)
1051 FORMAT(1H ,72HBERECHNUNG EINER PHOTOMETRISCHEN TITRATION NACH DER
1FEHLERQUADRATMETHODE)
1502 WRITE(IOUT,1052) (NAME(IN),IN=1,15),NRECH,ITAG,MONAT,JAHR
1052 FORMAT(1H0,9HVERSUCH ,15A4,5X,'RECHNUNG ',I2,' DATUM ',3A4)
GO TO 1300
1504 WRITE(IOUT,1054)
1054 FORMAT(1H0,14HKONTROLLZAHLEN,3X,2HNM,3X,2HNB,3X,2HNS,3X,2HND,1X,5H
1IDIAG,1X,3HKDO,3X,3HKTR,2X,4HNAUS,2X,3HITR,2X,3HNSB,6X,2HFH,5X,4HG
2FQS,6X,4HRFQS)
WRITE(IOUT,1055) NM,NB,NW,ND,IDIAG,KDO,KTR,NAUS,ITR,NSB,FH,GFQS,RF
1QS
1055 FORMAT(1H ,16X,8(I3,2X),2(I4,2X),3(1PE10.3))
GOTO(1105,1506),JUMP
1506 WRITE(IOUT,1056)
1056 FORMAT(1H0,24HDISS.-KONS. DES LIGANDEN,7X,5HDK(1),5X,5HDK(2),5X,5H
1DK(3),5X,5HDK(4),5X,5HDK(5),5X,5HDK(6))

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
1507 WRITE(IOUT,1057) (DK(I),I=1,ND)
1057 FORMAT(1H ,38X,1P6E10.3)
      GOTO (1106,1508),JUMP
1508 WRITE(IOUT,1058) (KON(I),I=1,NK)
1058 FORMAT(1H0,'GLEICHGEWICHTSKONSTANTEN  KOMPONENTE',7X,7(2X,I2,8X))
1511 WRITE(IOUT,1060) (BA(I),I=2,NK)
1060 FORMAT(1H ,26X,12HANFANGSWERTE,15X,7(2X,1PE10.3))
      WRITE(IOUT,1061) (B(I),I=2,NK)
1061 FORMAT(1H ,26X,8HENDWERTE,19X,6(2X,1PE10.3))
      WRITE(IOUT,1062) (FB(I),I=2,NK)
1062 FORMAT(1H ,26X,11HM.QU.FEHLER,16X,6(2X,1PE10.3))
      WRITE(IOUT,1080) (MINB(I),I=2,NK)
1080 FORMAT(1H ,26X,15HMIN.-KENNZIFFER,10X,6(4X,0PI2,6X))
      GOTO(1107,1512),JUMP
1512 WRITE(IOUT,1071)
1071 FORMAT(1H ,11HEXT.-MODULN)
      DO 1513 IW=1,NW
      WRITE(IOUT,1063) IW,LAMBDA(IW),(EMA(IK,IW),IK=1,NK)
1063 FORMAT(1H ,0PI2,2H. , 12HWELLENLAENGE,1X,I6,1X,'A',1X,'ANFANGSWERT
1E',1X,7(2X,F10.3))
      WRITE(IOUT,1064) GFE(IW),(EM(IK,IW),IK=1,NK)
1064 FORMAT(1H ,11HGEW.-FAKTOR,1PE10.3,5X,8HENDWERTE, 5X,7(2X,OPF10.3))
      WRITE(IOUT,1065) (FEM(IK,IW),IK=1,NK)
1513 WRITE(IOUT,1090) (MINE(IK,IW),IK=1,NK)
1065 FORMAT(1H ,26X,11HM.QU.FEHLER,2X,7(2X,F10.3)/)
1090 FORMAT(1H ,26X,15HMIN.-KENNZIFFER,5X,I1,4X,6(7X,I1,4X))
      GO TO(1111,4006),JUMP
1524 WRITE(IOUT,1068)
1068 FORMAT(1H0,21HMESS- UND RECHENWERTE)
      WRITE(IOUT,1069)
1069 FORMAT(1H ,1X,2HIM,4X,2HPH,5X,5HEX(1),3X,5HEX(2),3X,5HEX(3),3X,5HE
1X(4),3X,4HCLIG,7X,3HCME,6X,2HQL,8X,2HCL,9X,1HF,8X,5HED(1),4X,5HED(
22),4X,5HED(3),4X,5HED(4))
1525 DO 1526 IM=1,NM
1526 WRITE(IOUT,1070) IM,PH(IM),(EX(IW,IM),IW=1,4),CLIG(IM),CME(IM),
1QL(IM),CL(IM),F(IM),(ED(IW,IM),IW=1,NW)
1070 FORMAT(1H ,I3,5F8.3,1P5E10.3,4(1X,OPF8.4))
      GOTO(2000,5000),JUMP
```

C
C
C
C AUFRUF DER UNTERPROG. ZUR IDENTIFIKATION (AUSDRUCKEN)

```
1300 WRITE(IOUT,1301)
1301 FORMAT(1H0,25HVERWENDETE UNTERPROGRAMME)
      IDENT=1
      NTEST=1
      IY=1
      CALLANION3(IDENT,LEIT,ND,NM,DK,PH,CH,QL,FH,MELDE,INDEX)
      CALLFEQANS(NTEST,IDENT)
      CALLMIKOQS(P,FV,X,NTEST,IDENT)
      KTRADR=IABS(KTR)
      GO TO (7001,7002,7003,7004,7005,7006,7007,7008,7009,7010),KTRADR
7001 CALL ANFUN1(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7002 CALL ANFUN2(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7003 CALL ANFUN3(IY,IDENT)
      GO TO 7050
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
7004 CALL ANFUN4(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7005 CALL ANFUN5(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7006 CALL ANFUN6(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7007 CALL ANFUN7(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7008 CALL ANFUN8(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7009 CALL ANFUN9(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7010 CALL ANFUN0(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7050 CALLEMALER(IDENT,IDIAG,NAME)
      IDENT=0
C     SPRUNG IN DEN ARBEITENDEN PROGRAMMTEIL ZUM AUSDRUCKEN DER SEITE
      IF(NAUS+1)1303,1302,1303
1302 STOP
1303 GO TO(1103,4001),JUMP
C
C
C     AUFRUF ANION3 UND DATENVORBEREITUNG
2000 LEIT=2
      JUMP=2
2001 WRITE(IOUT,2003)LEIT
2003 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,5X,17HDATENVORBEREITUNG)
C
2004 CALLANION3(IDENT,LEIT,ND,NM,DK,PH,CH,QL,FH,MELDE,INDEX)
      IF(MELDE)2005,2007,2005
2005 WRITE(IOUT,2006)
2006 FORMAT(1H0,35HRECHENAUFGABE IN PHOTO4 ABGEBROCHEN)
      GO TO 6000
C
2007 DO 2008 IM=1,NM
2008 CL(IM)=QL(IM)*CLIG(IM)
C
C     UMWANDLUNG DER EXTINKTIONEN,GLEICHE GEWICHTE
2010 DO 2012 IM=1,NM
      DO 2011 IW=1,NW
        J=NW*(IM-1)+IW
        Y(J)=EX(IW,IM)
        IF(GFE(1).LE.0.) P(J)=1./(Y(J)*Y(J))
        IF(GFE(1).GT.0.) P(J)=GFE(IW)
2011 CONTINUE
2012 CONTINUE
      WRITE(IOUT,2013)
2013 FORMAT(1H0,12HQL(IM)-WERTE)
      WRITE(IOUT,2014) (QL(IM),IM=1,NM)
2014 FORMAT(1H ,1P10E10.3)
C
C     AUFRUF FEQANS
C
3000 LEIT=3
3001 WRITE(IOUT,3002)LEIT
3002 FORMAT(1H1,6HPHASE ,I2,5X,13HAUFRUF FEQANS)
C
3003 IMAX=NM*NW
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
IF(NX.LE.0) GO TO 3104
IF(KDO)3104,3104,3106
3104 WRITE(IOUT,3105)KDO,NX
3105 FORMAT(1H0,'KEINE MINIMALISIERUNG DA KDO =',I2,'      NX =',I2)
GO TO 4000
3106 NTEST=KDO
WRITE(IOUT,3004)
3004 FORMAT(1H0,7HITR NSB,3X,4HX(1),4X,4HX(2),4X,4HX(3),4X,4HX(4),4X,4H
1X(5),4X,4HX(6),4X,4HX(7),4X,4HX(8),4X,4HX(9),4X,5HX(10),3X,5HX(11)
2,3X,5HX(12),3X,5HX(13),3X,5HX(14),3X,5HX(15))
C
CALLFEQANS(NTEST,IDENT)
IF(NAUS-1)3005,3007,3005
3005 WRITE(IOUT,3006)NAUS
3006 FORMAT(1H0,27HKEIN MIN. GEFUNDEN      NAUS =,I2)
IF(NAUS+1)3009,6000,3009
3007 WRITE(IOUT,3008)
3008 FORMAT(1H0,16HMINIMUM GEFUNDEN)
C
C   EINSETZEN DER FEHLER
3009 IX=0
DO 3014 IK=1,NK
IF(MINB(IK))3010,3011,3010
3010 IX=IX+1
FB(IK)=FV(IX)
C
3011 DO 3013 IW=1,NW
IF(MINE(IK,IW))3012,3013,3012
3012 IX=IX+1
FEM(IK,IW)=FV(IX)
3013 CONTINUE
3014 CONTINUE
C
C   AUSDRUCKEN CER ERGEBNISSE
C
4000 LEIT=4
GO TO 1501
4001 IF(KDO)4002,4004,4002
4002 IF(NAUS-1)4101,4201,4101
4101 WRITE(IOUT,4102)LEIT
4102 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,5X,11HENDERGEBNIS,5X,30HKEIN MINIMUM VON GF
1QS GEFUNDEN)
GO TO 1504
4201 WRITE(IOUT,4202)LEIT
4202 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,5X,11HENDERGEBNIS,5X,25HMINIMUM VON GFQS GE
1FUNDEN)
GO TO 1504
4004 WRITE(IOUT,4005)LEIT
4005 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,5X,46HENDERGEBNIS FUER RECHNUNG OHNE MINIMA
1LISIERUNG)
GO TO 1504
C
C   AUFRUF ANFUNS FUER DIE EXT.-DIFFERENZEN
C
4006 DO 4007 IY=1,IMAX
KTRADR=IABS(KTR)
GO TO (5051,5052,5053,5054,5055,5056,5057,5058,5059,5060),KTRADR
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
5051 CALL ANFUN1(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5052 CALL ANFUN2(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5053 CALL ANFUN3(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5054 CALL ANFUN4(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5055 CALL ANFUN5(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5056 CALL ANFUN6(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5057 CALL ANFUN7(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5058 CALL ANFUN8(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5059 CALL ANFUN9(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5060 CALL ANFUN0(IY,IDENT)
      GO TO 5070
5070 IM=(IY-1)/NW+1
      IW=IY-(IM-1)*NW
      ED(IW,IM)=EX(IW,IM)-EXB
4007 F(IM)=F(IM)+ED(IW,IM)**2
      GOTO 1524
```

C
C AUFBRUF EMALER FUER ERGEBNISDIAGRAMM

C
C
5000 LEIT=5
 IF(IDIAG)5001,5001,5003
5001 WRITE(IOUT,5002)
5002 FORMAT(1H0,32HKEIN ERGEBNISDIAGRAMM DA IDIAG=0)
 GO TO 6000
5003 WRITE(IOUT,5004)LEIT
5004 FORMAT(1H0,6HPHASE ,I2,35HAUFBRUF EMALER FUER ERGEBNISDIAGRAMM)
 CALLEMALER(IDENT,IDIAG,NUNT)

C
6000 KN1=9
9204 DO 6001 I=1,8
6001 NEU(I)=0
 READ(5,1) KK1,NFOLGE,(NEW(I),I=1,8),KK2
 1 FORMAT(I1,1X,I1,2X,8(1X,A4),34X,I1)
 IF(KK1-KN1)9203,6002,9203
9203 KN2=1
 WRITE(IOUT,1203)KN1,KN2,IM
 GO TO 9204
6002 IF(KK2-KN1)6003,6004,6003
6003 KN2=2
 WRITE(IOUT,1203)KN1,KN2,IM
 GO TO 9204
6004 WRITE(IOUT,6005) NFOLGE,(NEW(I),I=1,8)
6005 FORMAT(1H0,'RECHNUNGSENDE NFOLGE =',I2,' NEU(I) =',8(A4,'/'))
 IF(NFOLGE.EQ.0) GO TO 6999
 NRECH=NRECH+1
 IF(NFOLGE.GT.1) GO TO 6100
 GO TO 1001
6100 DO 6101 I=1,8

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
      NEU(I)=1
      IF(NEW(I).EQ.NIE) NEU(I)=0
6101  CONTINUE
      WRITE(IOUT,6010)
6010  FORMAT(1H0,'ANSCHLUSSRECHNUNG FOLGT')
      IF(NF.EQ.0) GO TO 1001
      WRITE(IOUT,6020) NF
6020  FORMAT(1H0,'ANSCHLUSSRECHNUNG NICHT AUSFUEHRBAR DA NF =',I2)
      GO TO 9204
6999  CONTINUE
      STOP
      END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE ANION3 PN05914 AF281069-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C BERECHNUNG DES QUOTIENTEN AUS DER KONZENTRATION DES ND-TEN ANIONS
C UND DER KONZENTRATIONSSUMME ALLER FREIEN IONENFORMEN EINER SAEURE
C EINGABEGROESSEN
C IDENT - ARBEITBEFEHL
C LEIT - AUFRUFZAEHLER
C ND - ZAHL DER DISSOZIATIONSKONSTANTEN, NICHT MEHR ALS 6
C NM - ZAHL DER MESSWERTE, NICHT MEHR ALS 100
C DK(ID) - DISSOZIATIONSKONSTANTEN
C PH(IM) - GEMESSENE PH-WERTE
C AUSGABEGROESSEN
C CH(IM) - KONZENTRATION DER WASSERSTOFFIONEN
C QL(IM) - KONZENTRATIONSQUOTIENT
C FH - DER AKT.-KOEFF.DES H-IONS
C MELDE - FEHLERINDIKATOR
C INDEX ANZEIGER FUER FEHLERPOSITION
C SCHLUESSEL FUER MELDE
C MELDE = 0 ALLE WERTE WURDEN BERECHNET, INDEX=0
C MELDE = 1 BIS 6, ANION3 HAT WEGEN EINES FEHLERS NICHT GERECHNET
C EINE FEHLERNACHRICHT WIRD AUSGEDRUCKT, DANACH WIRD ZUM HAUPTPRO-
C GRAMM ZURUECKGEKEHRT
C 1=FEHLER BEI ND, INDEX=0
C 2=FEHLER BEI NM, INDEX=0
C SUBROUTINE ANION3 (IDENT, LEIT, ND, NM, DK, PH, CH, QL, FH, MELDE, INDEX)
C DIMENSION DK(6), PH(100), CH(100), QL(100), DKPR(6)
C IOUT=6
C IF (IDENT) 100, 200, 100
100 WRITE (IOUT, 101)
101 FORMAT (1H , 109HANION3 05914 AF281069-PHOTO4/2 FUER PHOTO4/JONA
1S4 BERECHNUNG DES QUOTENTEN QLI=L/HNL EINER SAEURE HNL)
RETURN
200 MELDE=0
INDEX=0
IF (6-ND) 1, 5, 5
1 MELDE=1
2 WRITE (IOUT, 3)
3 FORMAT (1H0, 27H05912 ANION3 FEHLERMELDUNG.)
WRITE (IOUT, 4) LEIT, MELDE, INDEX
4 FORMAT (1H , 6HLEIT =, I3, 3X, 7HMELDE =, I2, 3X, 7HINDEX =, I3)
RETURN
5 IF (100-NM) 6, 7, 7
6 MELDE=2
GO TO 2
7 IF (ND) 18, 16, 8
8 DKPR(1)=DK(1)
DO 10 I=2, ND
DKPR(I)=DKPR(I-1)*DK(I)
10 CONTINUE
DO 15 IM=1, NM
CH(IM)=EXP(-2.302*PH(IM))/FH
INDEX=IM
HPR=CH(IM)**ND
12 FN=HPR
DO 13 K=1, ND
HPR=HPR/CH(IM)
13 FN=FN+HPR*DKPR(K)
QL(IM)=DKPR(ND)/FN
```

LEVEL 18

ANION3

DATE = 70274

```
15 CONTINUE
999 RETURN
16 DO 17 IM=1,NM
  CH(IM)=EXP(-2.302*PH(IM))/FH
17 QL(IM)=1.
  RETURN
18 DO 19 IM=1,NM
  CH(IM)=1.
19 QL(IM)=1.
  RETURN
  END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE ANFUN1 05941-S1 AF260170-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C GEEIGNET FUER DAS REAKTIONSSCHEMA M-ML--ML6(KTR=+1),M-MHL-MHLL--MH
C L5(KTR=-1)
C DIFF.QUOT.WERDEN NUR FUER LEIT=3 BERECHNET
C
SUBROUTINE ANFUN1(IY,IDENT)
DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
DIMENSION B(7),EM(7,4),CL(100),QL(100),CLIG(100),CME(100)
DIMENSION EX(4,100),DK(6),CH(100),PH(100),MINB(7),MINE(7,4)
DIMENSION FHK(7)
COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,EXB,A,NBED,NBG,NF,GFQS,PF,FV,FFV,NAUS
COMMON KTR
COMMON NM,NW,NB,ND,KDO,LEIT,IDIAG
COMMON B,EM,CL,QL,CLIG,CME,EX,DK,CH,PH,FK
COMMON NSB,ITR,KONAN,MINB,MINE,NK
C EINSETZEN IM=IY UND IW=-IDENT FUER BERECH. EXB AUS EM UND B UND PH
IOUT=6
IF(IDENT)800,10,1
800 IM=IY
IW=-IDENT
JUMP=2
IF(IW-1)2014,201,2014
C AUSDRUCKEN DER IDENTIFIKATION
1 WRITE(IOUT,2)
2 FORMAT(1H,'ANFUN1 05941-S1 AF040670-PHOTO4/3 FUER PHOTO4/FEQANS
1 REAKTION M-ML--ML6(KTR=1),M-MHL-MHLL-MHLL5(KTR=-1),ND=1-6')
KD=KONAN-281069
IF(KD)3,9,3
3 WRITE(IOUT,4)KD
4 FORMAT('0','KONTROLLZAHL KONAN FALSCH KD =',I7)
NAUS=-1
9 RETURN
C FESTSTELLEN IM UND IW AUS IY
10 IM=1+(IY-1)/NW
IW=IY-(IM-1)*NW
NSB=NSB+1
C RUECKVERWANDLUNG DEX X IN DIE B UND EM
IF(IY-1)200,100,200
100 IX=0
ITR=ITR+1
DO 105 IK=1,NK
IF(MINB(IK))101,102,101
101 IX=IX+1
B(IK)=X(IX)
102 DO 104 JW=1,NW
IF(MINE(IK,JW))103,104,103
103 IX=IX+1
EM(IK,JW)=X(IX)
104 CONTINUE
105 CONTINUE
C BERECHNUNG CL FUER ALLE WERTE MIT IW=1
200 IF(IW-1)400,201,400
C KONTROLLE
201 KTRZ=1
JUMP=1
IF(IABS(KTR)-1)2011,2013,2011
2011 WRITE(IOUT,2012)KTRZ
```

LEVEL 18

ANFUN1

DATE = 70274

```
2012 FORMAT(1H0,23HFALSCHES ANFUNS KTRZ =,I2)
    NAUS=-1
    RETURN
2013 KTRZ=2
    IF(ND)2011,2011,2014
2014 IF(KTR)2015,2017,2017
2015 FHK(1)=1.
    DO 2016 L=2,7
2016 FHK(L)=CH(IM)/DK(ND)
    GO TO 2020
2017 DO 2018 L=1,7
2018 FHK(L)=1.
2020 IT=1
    202 CN=CLIG(IM)
    GO TO (220,203),JUMP
    220 CL(IM)=QL(IM)*CN
    203 CA=CN
    FN=1.
    FZL=0.
    DO 204 I=2,NK
    FI=I-1
    S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**(I-1)
    FN=FN+S
    204 FZL=FZL+S*FI
    GO TO (205,300),JUMP
    205 IT=IT+1
    CN=CLIG(IM)-CME(IM)*FZL/FN
    CL(IM)=QL(IM)*CN
    IF(CN)210,210,211
    210 CN=0.7*CA
    IF(IT.GT.200) GO TO 207
    GO TO 203
    211 FCL=ABS((CN-CA)/CLIG(IM))
    IF(FCL-0.001)212,212,206
    212 JUMP=2
    GO TO 203
    206 IF(200-IT)207,213,213
    213 IF(20-IT)214,203,203
    214 CN=0.5*(CN+CA)
    GO TO 203
    207 WRITE(IOUT,208)IY,IM,IW,CN,CA,FN,FZL,IT
    208 FORMAT(1H ,33HFEHLER IN ANFUNS BEI CL-ITERATION,1X,4HIY =,I3,1X,4H
    1IM =,I3,1X,4HIW =,I2,1X,4HCN =,E10.3,1X,4HCA =,E10.3,1X,4HFN =,E9.
    23,1X,5HFZL =,E9.3,1X,4HIT =,I3)
    NAUS=-1
    GO TO 503
C BERECHNUNG NENNER UND ZAEHLER DER LIGANDENGLEICHUNG
    300 DFZLL=0.
    DFNL=0.
    DO 302 I=2,NK
    S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**(I-2)
    FI=I-1
    DFZLL=DFZLL+FI*FI*S
    302 DFNL=DFNL+FI*S
    400 FDEM=CME(IM)/FN
    FDEB=FDEM/FN
    FZE=EM(1,IW)
    DFZEL=0.
```

LEVEL 18

ANFUN1

DATE = 70274

```
DO 401 I=2,NK
  FI=I-1
  S=EM(I ,IW)*B(I)*FHK(I)
  FZE=FZE+S*CL(IM)**(I-1)
401 DFZEL=DFZEL+S*FI*CL(IM)**(I-2)
  EXB=CME(IM)*FZE/FN
  IF(LEIT-3)402,500,402
402 RETURN
500 DLBN=FN*FN-QL(IM)*CME(IM)*(FZL*DFNL-FN*DFZLL)
  DLBZ=QL(IM)*CME(IM)
C NULLSETZEN DER ABLEITUNGEN A
C EINSETZEN DER ABLEITUNGEN
  IX=0
  DO 510 I=1,NK
    J=I-1
    DLB=DLBZ*(FZL-FLOAT(J)*FN)*FHK(I)*CL(IM)**J/DLBN
    A1=FN*(EM(I,IW)*FHK(I)*CL(IM)**J+DFZEL*DLB)
    A2=FZE*(FHK(I)*CL(IM)**J+DFNL*DLB)
    IF(MINB(I))502,505,502
502 IX=IX+1
    A(IX)=FDEB*(A1-A2)
505 DO 509 LW=1,NW
    IF(MINE(I ,LW))506,509,506
506 IX=IX+1
    IF(LW-IW)508,507,508
507 A(IX)=FDEM*B(I)*FHK(I)*CL(IM)**J
    GO TO 509
508 A(IX)=0.
509 CONTINUE
510 CONTINUE
C AUSDRUCKEN
503 IF(KDO.LE.2) GO TO 700
600 WRITE(IOUT,601)IM,IW,EXB,CL(IM),NK,NW,NX
601 FORMAT(' ', 'IM=', I3, 2X, 'IW=', I3, 2X, 'EXB=', 1PE10.4, 3X, 'CL(IM)=' , 1PE
110.4, 'NK =', I2, 3X, 'NW =', I2, 3X, 'NX =', I3)
  WRITE(IOUT,602) (A(L),L=1,NX)
602 FORMAT(' ', 'DIFF.-QUOT.A(IX)', 10(1X, 1PE10.3)/18X, 5(1X, E10.3))
700 RETURN
  END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE ANFUN2 05941-S2 AF040670-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C GEEIGNET FUER DAS REAKTIONSSCHEMA M-MHL-ML-ML2-ML3
C KTR=2
C DIFF.QUOT.WERDEN NUR FUER LEIT=3 BERECHNET
C
SUBROUTINE ANFUN2(IY,IDENT)
DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
DIMENSION B(7),EM(7,4),CL(100),QL(100),CLIG(100),CME(100)
DIMENSION EX(4,100),DK(6),CH(100),PH(100),MINB(7),MINE(7,4)
DIMENSION FHK(7),IEX(7)
COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,EXB,A,NBED,NBG,NF,GFQS,PF,FV,FFV,NAUS
COMMON KTR
COMMON NM,NW,NB,ND,KDO,LEIT,IDIAG
COMMON B,EM,CL,QL,CLIG,CME,EX,DK,CH,PH,FH
COMMON NSB,ITR,KONAN,MINB,MINE,NK
C EINSETZEN IM=IY UND IW=-IDENT FUER BERECH. EXB AUS EM UND B UND PH
IOUT=6
IF(IDENT)800,10,1
800 IM=IY
IW=-IDENT
JUMP=2
IF(IW-1)2014,201,2014
C AUSDRUCKEN DER IDENTIFIKATION
1 WRITE (IOUT,2)
2 FORMAT(1H,'ANFUN2 05941-S2 AF040670-PHOTO4/3 FUER PHOTO4/FEQANS
1 REAKTION M-MHL-ML ML2-ML3 KTR=2,ND=1-6')
KD=KONAN-281069
IF(KD)3,9,3
3 WRITE (IOUT,4) KD
4 FORMAT('0','KONTROLLZAHL KONAN FALSCH KD =',I7)
NAUS=-1
9 RETURN
C FESTSTELLEN IM UND IW AUS IY
10 IM=1+(IY-1)/NW
IW=IY-(IM-1)*NW
NSB=NSB+1
C RUECKVERWANDLUNG DEX X IN DIE B UND EM
IF(IY-1)200,100,200
100 IX=0
ITR=ITR+1
DO 105 IK=1,NK
IF(MINB(IK))101,102,101
101 IX=IX+1
B(IK)=X(IX)
102 DO 104 JW=1,NW
IF(MINE(IK,JW))103,104,103
103 IX=IX+1
EM(IK,JW)=X(IX)
104 CONTINUE
105 CONTINUE
C BERECHNUNG CL FUER ALLE WERTE MIT IW=1
200 IF(IW-1)400,201,400
C KONTROLLE
201 KTRZ=1
JUMP=1
IF(KTR.EQ.2) GO TO 2013
2011 WRITE (IOUT,2012) KTRZ
```

LEVEL 18

ANFUN2

DATE = 70274

```
2012 FORMAT(1H0,23HFALSCHES ANFUNS KTRZ =,I2)
      NAUS=-1
      RETURN
2013 KTRZ=2
      IF(ND)2011,2011,2014
2014 DO 2018 I=1,NK
      FHK(I)=1.
2018 IEX(I)=1
      FHK(2)=CH(IM)/DK(ND)
      IEX(1)=0
      IEX(2)=0
2020 IT=1
      202 CN=CLIG(IM)
      GO TO (220,203),JUMP
      220 CL(IM)=QL(IM)*CN
      203 CA=CN
      FN=1.
      FZL=0.
      DO 204 I=2,NK
      IP=I-IEX(I)-1
      FI=IP
      S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**IP
      FN=FN+S
      204 FZL=FZL+S*FI
      GO TO (205,300),JUMP
      205 IT=IT+1
      CN=CLIG(IM)-CME(IM)*FZL/FN
      CL(IM)=QL(IM)*CN
      IF(CN)210,210,211
      210 CN=0.7*CA
      IF(IT.GT.200) GO TO 207
      GO TO 203
      211 FCL=ABS((CN-CA)/CLIG(IM))
      IF(FCL-0.001)212,212,206
      212 JUMP=2
      GO TO 203
      206 IF(200-IT)207,213,213
      213 IF(20-IT)214,203,203
      214 CN=0.5*(CN+CA)
      GO TO 203
      207 WRITE (IOUT,208) IY,IM,IW,CN,CA, FN,FZL,IT
      208 FORMAT(1H ,33HFEHLER IN ANFUNS BEI CL-ITERATION,1X,4HIY =,I3,1X,4H
      1IM =,I3,1X,4HIW =,I2,1X,4HCN =,E10.3,1X,4HCA =,E10.3,1X,4HFN =,E9.
      23,1X,5HFZL =,E9.3,1X,4HIT =,I3)
      NAUS=-1
      GO TO 503
C BERECHNUNG NENNER UND ZAEHLER DER LIGANDENGLEICHUNG
      300 DFZLL=0.
      DFNL=0.
      DO 302 I=2,NK
      IP=I-IEX(I)-1
      FI=IP
      S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**(IP-1)
      DFZLL=DFZLL+FI*FI*S
      302 DFNL=DFNL+FI*S
      400 FDEM=CME(IM)/FN
      FDEB=FDEM/FN
      FZE=EM(1,IW)
```

LEVEL 18

ANFUN2

DATE = 70274

```
DFZEL=0.
DO 401 I=2,NK
IP=I-IEX(I)-1
FI=IP
S=EM(I ,IW)*B(I)*FHK(I)
FZE=FZE+S*CL(IM)**IP
401 DFZEL=DFZEL+S*FI*CL(IM)**(IP-1)
EXB=CME(IM)*FZE/FN
IF(LEIT-3)402,500,402
402 RETURN
500 DLBN=FN*FN-QL(IM)*CME(IM)*(FZL*DFNL-FN*DFZLL)
DLBZ=QL(IM)*CME(IM)
C NULLSETZEN DER ABLEITUNGEN A
C EINSETZEN DER ABLEITUNGEN
IX=0
DO 510 I=1,NK
J =I-IEX(I)-1
DLB=DLBZ*(FZL-FLOAT(J)*FN)*FHK(I)*CL(IM)**J/DLBN
A1=FN*(EM(I,IW)*FHK(I)*CL(IM)**J+DFZEL*DLB)
A2=FZE*(FHK(I)*CL(IM)**J+DFNL*DLB)
IF(MINB(I))502,505,502
502 IX=IX+1
A(IX)=FDEB*(A1-A2)
505 DO 509 LW=1,NW
IF(MINE(I ,LW))506,509,506
506 IX=IX+1
IF(LW-IW)508,507,508
507 A(IX)=FDEM*B(I)*FHK(I)*CL(IM)**J
GO TO 509
508 A(IX)=0.
509 CONTINUE
510 CONTINUE
C AUSDRUCKEN
503 IF(KDO.LE.2) GO TO 700
600 WRITE(IOUT,601)IM,IW,EXB,CL(IM),NK,NW,NX
601 FORMAT(' ', 'IM=', I3, 2X, 'IW=', I3, 2X, 'EXB=', 1PE10.4, 3X, 'CL(IM)=' , 1PE
110.4, 'NK =' , I2, 3X, 'NW =' , I2, 3X, 'NX =' , I3)
WRITE(IOUT,602) (A(L),L=1,NX)
602 FORMAT(' ', 'DIFF.-QUOT.A(IX)', 10(1X, 1PE10.3)/18X, 5(1X, E10.3))
700 RETURN
END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE ANFUN3 05941-S3 AF270770-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C GEEIGNET FUER DAS REAKTIONSSCHEMA M-ML-ML2 -ML3-MLOH-ML2OH-ML3OH
C KTR=3
C DIFF.QUOT.WERDEN NUR FUER LEIT=3 BERECHNET
C
SUBROUTINE ANFUN3(IY,IDENT)
DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
DIMENSION B(7),EM(7,4),CL(100),QL(100),CLIG(100),CME(100)
DIMENSION EX(4,100),DK(6),CH(100),PH(100),MINB(7),MINE(7,4)
DIMENSION FHK(7),IEX(7)
COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,EXB,A,NBED,NBG,NF,GFQS,PF,FV,FFV,NAUS
COMMON KTR
COMMON NM,NW,NB,ND,KDO,LEIT,IDIAG
COMMON B,EM,CL,QL,CLIG,CME,EX,DK,CH,PH,FH
COMMON NSB,ITR,KONAN,MINB,MINE,NK
C EINSETZEN IM=IY UND IW=-IDENT FUER BERECH. EXB AUS EM UND B UND PH
IOUT=6
IF(IDENT)800,10,1
800 IM=IY
IW=-IDENT
JUMP=2
IF(IW-1)2014,201,2014
C AUSDRUCKEN DER IDENTIFIKATION
1 WRITE (IOUT,2)
2 FORMAT(1H,'ANFUN3 05941-S3 AF270770-PHOTO4/3 FUER PHOTO4/FEQANS
1 REAKTION M-ML-ML2-ML3-MLOH-ML2OH-ML3OH KTR=3,ND=1-6')
KD=KONAN-281069
IF(KD)3,9,3
3 WRITE (IOUT,4) KD
4 FORMAT('0','KONTROLLZAHL KONAN FALSCH KD =',I7)
NAUS=-1
9 RETURN
C FESTSTELLEN IM UND IW AUS IY
10 IM=1+(IY-1)/NW
IW=IY-(IM-1)*NW
NSB=NSB+1
C RUECKVERWANDLUNG DEX X IN DIE B UND EM
IF(IY-1)200,100,200
100 IX=0
ITR=ITR+1
DO 105 IK=1,NK
IF(MINB(IK))101,102,101
101 IX=IX+1
B(IK)=X(IX)
102 DO 104 JW=1,NW
IF(MINE(IK,JW))103,104,103
103 IX=IX+1
EM(IK,JW)=X(IX)
104 CONTINUE
105 CONTINUE
C BERECHNUNG CL FUER ALLE WERTE MIT IW=1
200 IF(IW-1)400,201,400
C KONTROLLE
201 KTRZ=1
JUMP=1
IF(KTR.EQ.3) GO TO 2013
2011 WRITE (IOUT,2012) KTRZ
```

```
LEVEL 18 ANFUN3 DATE = 70274

2012 FORMAT(1H0,23HFALSCHES ANFUNS KTRZ =,I2)
      NAUS=-1
      RETURN
2013 KTRZ=2
      IF(ND)2011,2011,2014
2014 FHK(1)=1.
      FHK(2)=1.
      FHK(3)=1.
      FHK(4)=1.
      FHK(5)=1./CH(IM)
      FHK(6)=1./CH(IM)
      FHK(7)=1./CH(IM)
      IEX(1)=0
      IEX(2)=1
      IEX(3)=2
      IEX(4)=3
      IEX(5)=1
      IEX(6)=2
      IEX(7)=3
2020 IT=1
202 CN=CLIG(IM)
      GO TO (220,203),JUMP
220 CL(IM)=QL(IM)*CN
203 CA=CN
      FN=1.
      FZL=0.
      DO 204 I=2,NK
      IP=IEX(I)
      FI=IP
      S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**IP
      FN=FN+S
204 FZL=FZL+S*FI
      GO TO (205,300),JUMP
205 IT=IT+1
      CN=CLIG(IM)-CME(IM)*FZL/FN
      CL(IM)=QL(IM)*CN
      IF(CN)210,210,211
210 CN=0.7*CA
      IF(IT.GT.200) GO TO 207
      GO TO 203
211 FCL=ABS((CN-CA)/CLIG(IM))
      IF(FCL-0.001)212,212,206
212 JUMP=2
      GO TO 203
206 IF(200-IT)207,213,213
213 IF(20-IT)214,203,203
214 CN=0.5*(CN+CA)
      GO TO 203
207 WRITE (IOUT,208) IY,IM,IW,CN,CA,FN,FZL,IT
208 FORMAT(1H ,33HFEHLER IN ANFUNS BEI CL-ITERATION,1X,4HIY =,I3,1X,4H
1IM =,I3,1X,4HIW =,I2,1X,4HCN =,E10.3,1X,4HCA =,E10.3,1X,4HFN =,E9.
23,1X,5HFZL =,E9.3,1X,4HIT =,I3)
      NAUS=-1
      GO TO 503
C BERECHNUNG NENNER UND ZAEHLER DER LIGANDENGLEICHUNG
300 DFZLL=0.
      DFNL=0.
      DO 302 I=2,NK
```

LEVEL 18

ANFUN3

DATE = 70274

```
IP=IEX(I)
FI=IP
S=B(I)*FHK(I)*CL(IM)**(IP-1)
DFZLL=DFZLL+FI*FI*S
302 DFNL=DFNL+FI*S
400 FDEM=CME(IM)/FN
FDEB=FDEM/FN
FZE=EM(1,IW)
DFZEL=0.
DO 401 I=2,NK
IP=IEX(I)
FI=IP
S=EM(I,IW)*B(I)*FHK(I)
FZE=FZE+S*CL(IM)**IP
401 DFZEL=DFZEL+S*FI*CL(IM)**(IP-1)
EXB=CME(IM)*FZE/FN
IF(LEIT-3)402,500,402
402 RETURN
500 DLBN=FN*FN-QL(IM)*CME(IM)*(FZL*DFNL-FN*DFZLL)
DLBZ=QL(IM)*CME(IM)
C NULLSETZEN DER ABLEITUNGEN A
C EINSETZEN DER ABLEITUNGEN
IX=0
DO 510 I=1,NK
J=IEX(I)
DLB=DLBZ*(FZL-FLOAT(J)*FN)*FHK(I)*CL(IM)**J/DLBN
A1=FN*(EM(I,IW)*FHK(I)*CL(IM)**J+DFZEL*DLB)
A2=FZE*(FHK(I)*CL(IM)**J+DFNL*DLB)
IF(MINB(I))502,505,502
502 IX=IX+1
A(IX)=FDEB*(A1-A2)
505 DO 509 LW=1,NW
IF(MINE(I,LW))506,509,506
506 IX=IX+1
IF(LW-IW)508,507,508
507 A(IX)=FDEM*B(I)*FHK(I)*CL(IM)**J
GO TO 509
508 A(IX)=0.
509 CONTINUE
510 CONTINUE
C AUSDRUCKEN
503 IF(KDO.LE.2) GO TO 700
600 WRITE(IOUT,601)IM,IW,EXB,CL(IM),NK,NW,NX
601 FORMAT(' ','IM=',I3,2X,'IW=',I3,2X,'EXB=',1PE10.4,3X,'CL(IM)='',:
110.4,'NK =',I2,3X,'NW =',I2,3X,'NX =',I3)
WRITE(IOUT,602) (A(L),L=1,NX)
602 FORMAT(' ','DIFF.-QUOT.A(IX)',10(1X,1PE10.3)/18X,5(1X,E10.3))
700 RETURN
END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C  SUBROUTINE ANFUN4  PN05955  AF260170 PHOTO4/3
   SUBROUTINE ANFUN4(IY,IDENT)
   IOUT=6
   WRITE(IOUT,1)
1  FORMAT(1X,'ANFUN4 EXISTIERT NICHT')
   NAUS=-1
   RETURN
   END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C      SUBROUTINE ANFUN5 : PNO5955 : AF260170 : PHOTO4/3 :  
      SUBROUTINE ANFUN5(IY,IDENT) :  
      IOUT=6 :  
      WRITE(IOUT,1) :  
1  FORMAT(1X,'ANFUN5 EXISTIERT NICHT') :  
      NAUS=-1 :  
      RETURN :  
      END :
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C  SUBROUTINE ANFUN6  PNO5955  AF260170 PHOTO4/3
   SUBROUTINE ANFUN6(IY,IDENT)
   IOUT=6
   WRITE(IOUT,1)
1  FORMAT(1X,'ANFUN6 EXISTIERT NICHT!')
   NAUS=-1
   RETURN
   END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C  SUBROUTINE ANFUN7  PN05955  AF260170 PHOTO4/3  
   SUBROUTINE ANFUN7(IY,IDENT)  
   IOUT=6  
   WRITE(IOUT,1)  
1  FORMAT(1X,'ANFUN7 EXISTIERT NICHT')  
   NAUS=-1  
   RETURN  
   END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C  SUBROUTINE ANFUN8 PNO5955 AF260170 PHOTO4/3
   SUBROUTINE ANFUN8(IY,IDENT)
   IOUT=6
   WRITE(IOUT,1)
1  FORMAT(1X,'ANFUN8 EXISTIERT NICHT')
   NAUS=-1
   RETURN
   END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C  SUBROUTINE ANFUN9  (PN05955  AF260170 PHOTO4/3
    SUBROUTINE ANFUN9(IY,IDENT)
    IOUT=6
    WRITE(IOUT,1)
1  FORMAT(1X,'ANFUN9 EXISTIERT NICHT')
    NAUS=-1
    RETURN
    END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C      SUBROUTINE ANFUNO  PN05955  AF260170 PHOTO4/3
      SUBROUTINE ANFUNO(IY,IDENT)
      IOUT=6
      WRITE(IOUT,1)
1     FORMAT(1X,'ANFUNO EXISTIERT NICHT')
      NAUS=-1
      RETURN
      END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

C SUBROUTINE FEQANS PN05955 AF281069-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C ANGLEICH MITTELS DER FEHLERQUADRATMETHODE FUER POSITIVE PARAMETER
C AN LINEARE ODER QUADRATISCHE FUNKTIONEN
C VEREINFACHTE VERSION DER SUBROUTINE SQFIT VON D.BRAESS
C

SUBROUTINE FEQANS(NTEST,IDENT)
DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
DIMENSION SN(15,15),SN1(15,15),VN(15),VN1(15),VN2(15),X1(15)
COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,FF,A,NB,NBG,NF,Q,PF,FV,FFV,NAUS
COMMON KTR

C
IOUT=6
IF(IDENT)200,200,100
100 WRITE(IOUT,101)
101 FORMAT(1H ,115HFEQANS 05955 AF281069-PHOTO4/3 VERW.MIT MIKOQS
1 ANGLEICH MITTELS DER FEHLERQUADRATMETHODE - POS.PARAMETER)
GO TO 99
200 NB=0
NBG=0
NF=0
NXG=NX
VERB=0.
NX1=NX+1
NDIM=NX+NB
RUND=2.E-7*SQRT(FLOAT(NX*NDIM*IMAX))
ETA=.5
DIAG=1.000001
NUM=0
NAUS=1
NSTEU=1
Q1=1.E38
DO 9999 K=1,15
DO 9999KK=1,15
9999 SN1(K,KK)=0.

C
C NEUER SCHRITT
1 NUM=NUM+1
IDAMAX=20
IDA=0

C
C NEUE PARAMETER
2 Q=0.
QOB=Q1*(1.+RUND)-VERB
QUN=Q1*(1.-RUND)-VERB
DO 3 K=1,NDIM
VN(K)=0.
DO 3 J=1,NDIM
3 SN(J,K)=0.

C
C
C AUFRUF DER ANGLEICHSFUNKTIONEN
10 DO 499 I=1,IMAX
IF(I.NE.1) GO TO 400
IF(NTEST.EQ.1) GO TO 400
WRITE (IOUT,1110) NUM,IDA
1110 FORMAT(1H0,I3,'.ITERATION',5X,I3,' MAL GEDAEMPFT')

LEVEL 18

FEQANS

DATE = 70274

```
WRITE(IOUT,84)(X(K),K=1,NX)
400 KTRADR=IABS(KTR)
GO TO (2001,2002,2003,2004,2005,2006,2007,2008,2009,2010),KTRADR
2001 CALL ANFUN1(I,IDENT)
GO TO 2050
2002 CALL ANFUN2(I,IDENT)
GO TO 2050
2003 CALL ANFUN3(I,IDENT)
GO TO 2050
2004 CALL ANFUN4(I,IDENT)
GO TO 2050
2005 CALL ANFUN5(I,IDENT)
GO TO 2050
2006 CALL ANFUN6(I,IDENT)
GO TO 2050
2007 CALL ANFUN7(I,IDENT)
GO TO 2050
2008 CALL ANFUN8(I,IDENT)
GO TO 2050
2009 CALL ANFUN9(I,IDENT)
GO TO 2050
2010 CALL ANFUN0(I,IDENT)
GO TO 2050
2050 IF(NAUS+1)1001,99,1001
1001 FF=Y(I)-FF
Q=Q+P(I)*FF**2
IF(Q-Q0B)11,14,14
11 DO 76 K=1,NX
76 VN(K)=VN(K)+FF*P(I)*A(K)
78 DO 12 K=1,NX
AP=P(I)*A(K)
DO 12 J=1,NX
12 SN(J,K)=SN(J,K)+AP*A(J)
IF (NTEST.LE.1) GO TO 499
IF (I.NE.IMAX) GO TO 499
WRITE (IOUT,85) Q
85 FORMAT(1H0,'GEWICHTETE FEHLERQUADRATSUMME ',1PE10.3)
499 CONTINUE
IF(Q-QUN)17,13,13
C
C VERKLEINERUNG DER AENDERUNG
13 IDAMAX= MINO(IDAMAX,IDA+2)
14 IF( IDA-IDAMAX)15,40,40
15 IDA=IDA+1
DO 16 K=1,NX
16 X(K)=(X(K)+1.5*X1(K))/2.5
VERB=VERB/2.5
GO TO 2
C
17 Q1=Q
3100 IF(NSTEU-5)20,18,20
18 WRITE(IOUT,19)
19 FORMAT(68H0 TEST DEUTET AUF PATHOLOGISCHEN FALL ODER FEHLER IN DEN
1 ABLEITUNGEN)
NAUS=6
NSTEU=1
20 IF(NAUS-2)28,71,28
28 IF(NUM-50)22,29,29
```

```
LEVEL 18          FEQANS          DATE = 70274

29 NAUS=4
   NSTEU=3
   GO TO 45
C
C   BERECHNUNG NEUER PARAMETER
22 DO 23 K=1,NDIM
   VN1(K)=-X(K)
   VN2(K)=VN(K)
   DO 23 J=1,NDIM
23 SN1(J,K)=(SN(J,K)+SN(K,J))/2.
   DO 24 K=1,NX
   IF(SN(K,K))24,30,24
24 SN1(K,K)=DIAG*SN(K,K)
   IF(NTEST.EQ.4) GO TO 45
25 CALLMIKQQS(SN1,VN,VN1,NTEST,IDENT)
   IF(NAUS-3)26,30,26
26 VERB=0.
   DO 27 K=1,NX
   VERB=VERB+VN1(K)*VN2(K)
   X1(K)=X(K)
27 X(K)=X(K)+VN1(K)
   VERB=AMAX1(ETA*VERB,0.)
   GO TO 1
C
C   SONDERAUSGAENGE
30 WRITE(IOUT,31)
31 FORMAT(26H0 NORMALMATRIX (SINGULAER)/1X)
32 DO 33 K=1,NDIM
33 WRITE(IOUT,34)(SN(J,K),J=1,NDIM)
34 FORMAT(1H ,10E13.5)
   NAUS=3
74 NSTEU=6
   GO TO 45
38 IF(NB+NXG)83,83,51
83 NSTEU=5
   DO 39 K=1,NX
39 X(K)=X1(K)-VN1(K)
   GO TO 1
C
C   NORMALER AUSGANG
40 DO 42 K=1,NX
42 X(K)=X1(K)
43 NSTEU= MAXO(NTEST,NSTEU)
   GO TO (51,45,45,45,51),NSTEU
C
45 CONTINUE
   IF(NB)47,47,46
46 WRITE(IOUT,86)(VN2(K),K=NX1,NDIM)
47 WRITE(IOUT,88)(VN2(K),K=1,NX)
49 GO TO (25,51,51,38,51,99),NSTEU
84 FORMAT(6H   X =8E15.7/(6X,8E15.7))
86 FORMAT(6H   BED8E15.7)
88 FORMAT(6H   ABL8E15.7/(6X,8E15.7))
C
C   FEHLERRECHNUNG
51 Q=Q1
   PF=SQRT(Q/FLOAT(IMAX+NB-NX))
   DO 52 K=1,NX
```

LEVEL 18

FEQANS

DATE = 70274

```
IF(SN1(K,K))56,52,52
52 FV(K)=PF*SQRT(SN1(K,K))
C
61 IF(NTEST-4)99,62,62
62 WRITE(IOUT,65)
63 DO 64 K=1,NX
64 WRITE(IOUT,34)(SN1(J,K),J=1,NX)
65 FORMAT(27H0 INVERSE DER NORMALMATRIX /1H )
99 RETURN
C
56 WRITE(IOUT,57)
57 FORMAT(41H0 INVERSE DER NORMALMATRIX IST INDEFINIT /1X)
NAUS=3
GO TO 63
C
71 IF(NTEST-1)99,99,72
72 WRITE(IOUT,73)
73 FORMAT(38H SQUFIT WIRD AUF WUNSCH ABGEBROCHEN)
GO TO 74
END
```

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE MIKQQS PN05956 AF281069-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C VERWENDUNG MIT SUBROUTINE FEQANS 05955
C MINIMALISIERUNG EINER KONVEXEN QUADRATISCHEN GLEICHUNG
C VERFAHREN NACH WOLFE
C ENTSPRICHT SUBROUTINE BIPLEX VON D.BRAESS
C EINZIGE VERAENDERUNG IST DER DURCH IDENT GESTEUERTE NAMENAUDRUCK
C
C SUBROUTINE MIKQQS(C,RS,X,NTEST,IDENT)
C DIMENSION Y(200),P(200),U(15),A(15),FV(15),FFV(5)
C DIMENSION C(15,15),RS(15),X(15)
C DIMENSION G(16,32),XUNT(15),XNORM(15),KZU(32),INDI(16),INDK(32)
C
C COMMON IMAX,Y,P,NU,NUG,U,FF,A,NB,NBG,NF,Q,PF,FV,FFV,NAUS
C COMMON KTR
C
C IOUT=6
C IF(IDENT)2000,2000,1000
1000 WRITE(IOUT,1001)
1001 FORMAT(1H ,103HMIKQQS 05956 AF281069-PHOTO4/2 FUER FEQANS 0595
10 MINIMALISIERUNG EINER KONVEX-QUADRAT.FUNKTION)
C RETURN
2000 NUR=NU-NUG
C NBR=NB-NBG
C NR=NUR+NBR
C NG=NUG+NBG
C NU1=NU+1
C NG1=NG+1
C NR1=NR+1
C NDIM=NU+NB
C MDIM=NDIM+1
C KO=NDIM+NG
C KOG=NR+NUG
C KPOS=2*MDIM
C KPOS1=KPOS-1
C
C AUSGANGSTABLEAU
C
C DO 12 K=1,KPOS
C INDK(K)=0
C KZU(K)=0
C DO 12 I=1,MDIM
12 G(I,K)=0.
C
C NORMIERUNG
C DO 14 K=1,NU
C I=K
C XNORM(K)=SQRT(C(I,K))
C IF(XNORM(K))14,114,14
114 XNORM(K)=1.
14 CONTINUE
C DO 16 K=NU1,NDIM
C XNORM(K)=0.
C DO 16 I=1,NU
16 XNORM(K)=AMAX1(XNORM(K),ABS(C(I,K))/XNORM(I))
C
C EINBAU DER C(I,K)
C * NUR * NBR * NUG * NBG * NUG * NBG * NR * 1 * 1 *
```

LEVEL 18 MIKOQS DATE = 70274

```
C * NR * NU * NU * NR * 2 *
DO 28 I=1,NDIM
G(I+1,KPOS1)=RS(I)/XNORM(I)
IF(NR)122,24,122
122 DO 22 K=1,NR
KC=K
IF(K-NUR)101,101,102
102 KC=KC+NUG
101 KK=KO+K
G(KC+1,KK)=-1.
22 G(I+1,K)=C(I,KC)/(XNORM(I)*XNORM(KC))
24 IF(NG)128,28,128
128 DO 26 K=1,NG
KK=NDIM+K
KG=NR+K
KC=NUR+K
IF(K-NUG)103,103,104
104 KC=KC+NBR
103 KZU(KG)=KK
KZU(KK)=KG
XUNT(KG)=X(KC)*XNORM(KC)
G(KC+1,KK)=-1.
IF(K-NUG)26,26,106
106 G(KC+1,KK)=1.
26 G(I+1,KG)=C(I,KC)/(XNORM(I)*XNORM(KC))
28 CONTINUE
```

C ELIMINATION DER UNBESCHRAENKTEN VARIABLEN

```
C
C
C ITRAU=2
ITRAO=MDIM
KU=1
ASSIGN 32 TO KONTRA
NN=MDIM
GMIN=1.E-15
32 IF(NN-NG1)40,40,132
132 GMAX=GMIN
DO 36 K=1,NR
IF(INDK(K))134,134,36
134 DO 34 I=2,NN
IF(ABS(G(I,K))-GMAX)34,34,136
136 IP=I
KP=K
GMAX=ABS(G(I,K))
34 CONTINUE
36 CONTINUE
IF(GMAX-GMIN)93,93,137
137 DO 38 K=1,KPOS1
ZW=G(IP,K)
G(IP,K)=G(NN,K)
38 G(NN,K)=ZW
IP=NN
NN=NN-1
GO TO 70
```

C SIMPLEX

C 40 NART=0

LEVEL 18

MIKOQS

DATE = 70274

IF(NG)140,64,140
140 ITRAU=1
ITRAO=NG1
KU=NR1
ASSIGN 50 TO KONTRA

C
C ZIELFUNKTION
DO 44 I=2,NG1
INDI(I)=KPOS
IF(NUG)143,43,143
143 G(I,KPOS)=G(I,KPOS1)
DO 42 K=KU,KOG
42 G(I,KPOS)=G(I,KPOS)-XUNT(K)*G(I,K)
145 NART=1
43 DO 44 K=KU,KPOS
IF(G(I,KPOS)) 144,145,44
144 G(I,K)=-G(I,K)
44 G(1,K)=G(1,K)+G(I,K)

C
C NEUE BASISLOESUNG
50 ZV=0.
DO 59 MODSCH=1,2
DO 58 K=KU,KO
IF(G(1,K))58,58,158
158 INDEX=KZU(K)
INDEX=INDK(INDEX)
GO TO (52,53),MODSCH
52 IF(INDEX)58,54,58
53 IF(INDEX)54,58,54
54 XMIN=ZV/G(1,K)
XX=1.E38
II=0
DO 56 I=2,NG1
IF(G(I,K)-GMIN)56,56,156
156 XNEU=G(I,KPOS)/G(I,K)
IF(XNEU-XMIN)58,58,105
105 IF(XNEU-XX)107,56,56
107 XX=XNEU
II=I
56 CONTINUE
IF(II)170,58,170
170 IF(MODSCH-2)180,171,180
171 IF(II-INDEX)58,180,58
180 IP=II
KP=K
ZV=XX*G(1,K)
58 CONTINUE
IF(ZV)159,59,159
159 INDEX=INDI(IP)
INDK(INDEX)=0
INDI(IP)=KP
GO TO 70
59 CONTINUE

C
C ELIMINATION DER POSITIVEN VARIABELN
C
60 ITRAU=NG+2
ASSIGN 62 TO KONTRA

LEVEL 18 MIKOQS DATE = 70274

```
      ITRAO=MDIM
      IP=ITRAU
62  IP=IP-1
      IF(IP-1)162,64,162
162  KP=INDI(IP)
      IF(KP-KPOS)187,90,187
187  IF(NR)70,62,70
C
C      EINSETZEN DER ERGEBNISSE
C
64  DO 68 I=1,NU
      DO 66 K=1,NU
66  C(I,K)=0.
      KG=I
      IF(I-NUR)108,108,109
109  KG=KG+NBR
108  INDEX=INDK(KG)
      IF(INDEX)168,68,168
168  IF(NUG)169,65,169
169  DO 63 K=KU,KOG
      IF(INDK(K))63,163,63
163  G(INDEX,KPOS1)=G(INDEX,KPOS1)-G(INDEX,K)*XUNT(K)
63  CONTINUE
65  XX=G(INDEX,KPOS1)/XNORM(I)
      IF(I-NUR)110,110,111
111  XX=AMAX1(XX,X(I))
110  X(I)=XX
      DO 67 K=1,NU
      KG=KO+K
      IF(K-NUR)112,112,113
113  KG=K+NDIM-NUR
112  C(I,K)=-G(INDEX,KG)/(XNORM(I)*XNORM(K))
67  CONTINUE
68  CONTINUE
C
C      SYMMETRISIERUNG DER NULLEN (RUNDUNGSFEHLER)
C
      DO 69 I=1,NU
      DO 69 K=1,NU
      IF(C(I,K))69,165,69
165  C(K,I)=0.
69  CONTINUE
      RETURN
C
C      TRANSFORMATION
C
70  INDK(KP)=IP
      ZW=G(IP,KP)
      DO 73 K=KU,KPOS
      IF(K-KP)173,73,173
173  G(IP,K)=G(IP,K)/ZW
      DO 72 I=ITRAU,ITRAO
      IF(I-IP)172,72,172
172  G(I,K)=G(I,K)-G(I,KP)*G(IP,K)
72  CONTINUE
73  CONTINUE
      DO 74 I=ITRAU,ITRAO
74  G(I,KP)=0.
      G(IP,KP)=1.
```

LEVEL 18

MIKOQS

DATE = 70274

GO TO KONTRA,(32,50,62)

C
C
C

FEHLERAUSGAENGE

90 IF(NART)91,92,91

91 WRITE(IOUT,81)

92 WRITE(IOUT,82)

93 WRITE(IOUT,83)

NAUS=3

IF(NTEST-1)94,99,94

94 WRITE(IOUT,84)(INDK(K),KZU(K),K=1,KO)

DO 95 I=1,MDIM

95 WRITE(IOUT,85)INDI(I),(G(I,K),K=1,KPOS)

99 RETURN

C

81 FORMAT(17H0 ENTARTUNG ODER)

82 FORMAT(40H0 UNVERTRAEGLICHE NEBENBEDINGUNGEN ODER)

83 FORMAT(25H0 NORMALMATRIX SINGULAER)

84 FORMAT(1H011(I8,I3)/1X,11(I8,I3))

85 FORMAT(1H012,11E11.3/3X,11E11.3)

END

LEVEL 18

MAIN

DATE = 70274

```
C SUBROUTINE EMALER PN05942 AF281069-PHOTO4/3 S.H.EBERLE UNK
C FUER PHOTO4 05940 VERSION 281069
C ZUM ZEICHNEN DER EXTINKTIONSKURVEN
C
SUBROUTINE EMALER(IDENT,IDIAG,NAME)
DIMENSION ORD(200),ABZ(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5)
DIMENSION B(7),EM(7,4),CL(100),QL(100),CLIG(100),CME(100)
DIMENSION EX(4,100),PH(100),CH(100),DK(6),MINB(7),MINE(7,4)
DIMENSION NEU(8)
DIMENSION NAME(15)
COMMON IMAX,ORD,ABZ,NX,NXG,X,EXB,A,NBED,NBG,NF,Q,RQ,FV,FFV,NAUS
COMMON KTR
COMMON NM,NW,NB,ND,KDO,LEIT,IDIAP
COMMON B,EM,CL,QL,CLIG,CME,EX,DK,CH,PH,PH
COMMON NSB,ITR,KONAN,MINB,MINE,NK
COMMON NEU,NRECH
C PROGRAMMIDENTIFIKATION
IOUT=6
IF(IDENT)100,200,100
100 WRITE(IOUT,101)
101 FORMAT(1H ,8HEMALER 05942 AF281069-PHOTO4/2 FUER PHOTO4/ANFUN
1S ZEICHNET DAS ERGEBNISDIAGRAMM)
RETURN
C DATENEINGABE
200 KN1=8
IF(NEU(KN1).GT.0) GO TO 206
READ(5,210)KK1,PHMIN,PHMAX,PHMST,EMIN,EMAX,EMST,CMD,CLGD,KK2
210 FORMAT(11,4X,6F8.3,2E10.3,6X,11)
IF(KK1-8)201,204,201
201 KN2=1
202 WRITE(IOUT,209)KN1,KN2
209 FORMAT(1H0,23HEINGABEFUEHLER IN EMALER,5X,5HKN1 =,I2,5X,5HKN2 =,I2)
RETURN
204 IF(KK2-8)205,206,205
205 KN2=2
GO TO 202
206 WRITE(IOUT,203)
203 FORMAT(1H0,21HEINGABE FUER DIAGRAMM,3X,5HPHMIN,5X,5HPHMAX,5X,5HPHM
1ST,5X,4HEMIN,7X,4HEMAX,6X,4HEMST,6X,3HCMD,7X,4HCLGD)
WRITE(IOUT,207)PHMIN,PHMAX,PHMST,EMIN,EMAX,EMST,CMD,CLGD
207 FORMAT(1H ,21X,6(1X,F8.3,1X),E10.3,1X,E10.3)
C EINTRAGEN DER MESSWERTE IN DAS DIAGRAMM
WRITE(IOUT,1205)
1205 FORMAT(1H0,22HZEICHNEN DER MESSWERTE)
IF(PHMST)1211,1211,1212
1211 SA=(PHMAX-PHMIN)/800.
GO TO 1220
1212 SA=PHMST/80.
1220 IF(EMST)1221,1221,1222
1221 SO=(EMAX-EMIN)/800.
GO TO 1230
1222 SO=EMST/80.
1230 NLGX=0
NLGY=0
NTXN=0
N=NM
NPG=1
```

LEVEL 18

EMALER

DATE = 70274

```
NT=1
NP=0
INT=2
NPA=1
INDZ=1
IDPLOT=0
KRZ=0
KURVE=1
IW=1
IF(KDO) 310, 300, 300
300 DO 301 I=1, N
ORD(I)=EX(IW, I)
301 ABZ(I)=PH(I)
IF(IDIAG-1) 302, 302, 1300
1300 DO 1301 I=1, N
1301 ORD(I)=ORD(I)/CME(I)
302 IDPLOT=1+IABS(IDPLOT)
CALL PLOTA (ABZ, ORD, N, NT, NP, NPG, INT, NPA, INDZ, PHMAX, PHMIN, SA, EMAX, E
IMIN, SO, NAME, NRECH , NLGX, NLGY, NTXN)
IF(KRZ) 303, 303, 305
303 KRZ=IDPLOT
IF(KRZ) 305, 305, 304
304 INDZ=0
305 WRITE(IOUT, 306) IW, KRZ, IDPLOT
306 FORMAT(1H , 4HIW =, I2, 3X, 5HKRZ =, I2, 3X, 8HIDPLOT =, I2)
GO TO (307, 410), KURVE
307 IF(NW-IW) 310, 310, 308
308 IW=IW+1
NP=NP+1
GO TO 300
C THEORET. KURVE
C KONTROLLE OB ALLE B NULL
310 NULLB=0
DO 312 I=1, NB
IF(B(I)) 312, 312, 311
311 NULLB=1
312 CONTINUE
IF(NULLB) 313, 313, 400
314 FORMAT(1H0, 44HKEINE BERECHNETE KURVE DA ALLE B GLEICH NULL)
313 WRITE(IOUT, 314)
GO TO 500
400 WRITE(IOUT, 401)
401 FORMAT(1H0, 31HZEICHNEN DER BERECHNETEN KURVEN)
ABZDIF=(PHMAX-PHMIN)/100.
ABZ(1)=PHMIN
N=100
DO 402 I=2, 100
402 ABZ(I)=ABZ(I-1)+ABZDIF
C AUFRUF ANION3
CALL ANION3( IDENT, LEIT, ND, N, DK, ABZ, CH, QL, FH, MELDE, INDEX)
IF(MELDE) 403, 405, 403
403 WRITE(IOUT, 404)
404 FORMAT(1H0, 35HRECHENAUFGABE IN EMALER ABGEBROCHEN)
RETURN
405 DO 406 IM=1, N
CL(IM)=QL(IM)*CLGD
CLIG(IM)=CLGD
406 CME(IM)=CMD
```

LEVEL 18

EMALER

DATE = 70274

```
C      AUFBRUF ANFUNS UND PLOT
      KURVE=2
      NT=2
      IW=0
410   IF(NW-IW)500,500,411
411   IW=IW+1
      IDENT=-IW
      DO 7050 IY=1,N
      KTRADR=IABS(KTR)
      GO TO (7001,7002,7003,7004,7005,7006,7007,7008,7009,7010),KTRADR
7001  CALL ANFUN1(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7002  CALL ANFUN2(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7003  CALL ANFUN3(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7004  CALL ANFUN4(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7005  CALL ANFUN5(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7006  CALL ANFUN6(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7007  CALL ANFUN7(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7008  CALL ANFUN8(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7009  CALL ANFUN9(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7010  CALL ANFUN0(IY,IDENT)
      GO TO 7050
7050  ORD(IY)=EXB
      IF(IDIAG-1)302,302,1412
1412  DO 1413 I=1,N
1413  ORD(I)=ORD(I)/CMD
      GO TO 302
      500 WRITE(IOUT,501)
      501 FORMAT(1H0,22HENDE DER RECHENAUFGABE)
      RETURN
      END
```

Anhang

Vorschriften für die Ausführung der Rechnung an der IBM 360/65
des Kernforschungszentrums Karlsruhe nach dem Stand vom 4.9.70

Der Kartensatz ist wie folgt anzuordnen:

1.-----JOBKONTROLL-Karten

- 1.1 //RCH 05996X_JOB_(0059,0,0),NAME,MSGLEVEL=(1,1), (s.Anm.1)
//__REGION=300K,TIME=2
- 1.2 //PHOTO_EXEC_EBCDIC
- 1.3 //S.SYSIN_DD*

2.-----FORTRAN4-Programmkartensatz

- 2.1 Hauptprogramm
- 2.2 ANION3
- 2.3 ANFUN1, ANFUN2 usw. bis ANFUNO
- 2.4 FEQANS
- 2.5 MIKOQS
- 2.6 EMALER

3.-----JOBKONTROLL-Karten

- 3.1 /*-Karte
- 3.2 //PHOTO_EXEC_FGCLG,PARM,C=MAP,TIME.C=(1,00)?PARM.L=MAP
//___TIME.L=(,30),TIME.G=(3,30)
- 3.3 //C.SYSIN_DD_DSN=&&EBCDIC,DISP=(OLD,DELETE)
- 3.4 //G.FTO6FOO1_DD_SYSOUT=A,SPACE=(TRK,400)
- 3.5 //G.FTO7FOO1_DD_SYSOUT=P,DCB=(BLKSIZE=1680,LRECL=80,RECFM=FB)
- 3.6 //G.FTO9FOO1_DD_SYSOUT=A,DCB=*FTO6FOO1
- 3.7 //G.SYSIN_DD_*

4.-----Datenkartensatz

5.-----JOBKONTROLLKARTE

- 5.1 Grüne Endkarte

- Anmerkung:
- 1) "_" ist das Zeichen für eine Leerstelle
 - 2) Die Anordnung des Kartensatzes und die Form der Jobkontrollkarten wird von der IBM 360-Betriebsleitung vorgeschrieben. Es ist die jeweils gültige Eingabeordnung zu beachten.
 - 3) 0596X: Programmnummer, frei wählbar, das X kann ein Buchstabe sein. Diese Nummer wird auf die Frontseite der Ausgabeliste gedruckt
 - 4) NAME : Name des Rechners

