

Short Communications

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1971). A27, 492

Application de la transformée de Fourier performante aux calculs cristallographiques. Par P. BONDOT, *Laboratoire de Minéralogie et de Cristallographie, associé au C.N.R.S., Faculté des Sciences, Tour 16, 9 quai Saint-Bernard, Paris 5, France*

(Reçu le 8 septembre 1970)

Published some years ago, the fast Fourier transform algorithm is not yet greatly used by crystallographers. However, applied to crystallographic calculus, this remarkable algorithm gives, with a better accuracy, an important improvement in time of computation. After a description of the FFT method, the following is applied to the computation of a cosine Fourier transform: $G(x, y, z) = \sum_h \sum_k \sum_l f(h, k, l) \cos 2\pi(hx + ky + lz)$.

Publié depuis maintenant plusieurs années (Cooley & Tukey, 1965; *IEEE Trans.* 1967; Cooley, Lewis & Welch, 1969), l'algorithme de la transformée de Fourier performante (TFP) est un outil d'une puissance remarquable et il est assez étonnant qu'il soit encore peu utilisé par les cristallographes qui sont pourtant au premier chef intéressés par tout progrès dans les techniques de transformation de Fourier.

Principe de la TFP

$$\text{Soit à calculer } g(j) = \sum_{h=0}^{H-1} f(h) \exp \{2\pi i j h / H\} \\ = \sum_{h=0}^{H-1} f(h) W_H^{jh} \text{ avec } W_H = \exp \{2\pi i / H\}.$$

La première condition que nous nous fixons est d'avoir le même nombre d'éléments dans les ensembles g et f , soit $0 \leq j < H$. Si le nombre d'éléments désiré pour g est supérieur au nombre d'éléments disponibles f , il est évident qu'il suffira de compléter ce dernier ensemble par un nombre adéquat de zéro.

La seconde condition imposée est que H ne soit pas premier, soit par exemple $H = r_1 r_2$. Nous pouvons alors développer j et h selon r_1 et r_2 et écrire

$$j = j_1 r_1 + j_0 \text{ et } h = h_1 r_2 + h_0 \\ \text{avec } j_0 = 0, 1, \dots, r_1 - 1 \quad j_1 = 0, 1, \dots, r_2 - 1 \\ \text{et } h_0 = 0, 1, \dots, r_2 - 1 \quad h_1 = 0, 1, \dots, r_1 - 1 \\ \text{d'où } g(j) = g(j_1, j_0) = \sum_{h_0=0}^{r_2-1} \sum_{h_1=0}^{r_1-1} f(h_1, h_0) W_H^{jh}.$$

Remarquons que $W_H^H = 1$ et que

$$jh = (j_1 r_1 + j_0) h_1 r_2 + (j_1 r_1 + j_0) h_0 = j_0 h_1 r_2 + (j_1 r_1 + j_0) h_0 \\ \text{modulo } H$$

on obtient

$$g(j_1, j_0) = \sum_{h_0=0}^{r_2-1} W_H^{j_0 h_0} \sum_{h_1=0}^{r_1-1} W_H^{j_1 r_1 h_1} f(h_1, h_0) \\ = \sum_{h_1=0}^{r_1-1} f_1(j_0, h_0) W_H^{j_1 r_1 h_1}$$

avec

$$f_1(j_0, h_0) = \sum_{h_1=0}^{r_1-1} f(h_1, h_0) W_H^{j_0 r_2 h_1}.$$

Tandis que le calcul classique nécessite H^2 opérations pour obtenir les H éléments de g à partir des H éléments de f , il en faut ici $H r_1$ pour calculer f_1 puis $H r_2$ pour obtenir g soit un total $T = H(r_1 + r_2) < H^2$ si $H > 4$ ce qui est pratiquement toujours le cas.

Par une généralisation immédiate, en prenant $H = r^\gamma$, on aura $T = H \gamma r$; le rapport des nombres d'opérations devient $H^2 / T = r^{\gamma-1} / \gamma$. Par exemple, avec $r = 2$, ce rapport est égal à 51 pour $H = 1024$ et atteint 170 pour $H = 4096$. On voit donc que la TFP permet une réduction très sensible du nombre d'opérations se traduisant non seulement par un sérieux gain de temps mais également par un gain de précision.

Enfin $T = H \gamma r = H \log H \cdot r / \log r$ permet de montrer qu'à H constant le meilleur rendement est obtenu en prenant $r = 3$. Cependant l'utilisation de $r = 2$ donne un gain très comparable ($T_3 / T_2 = 0,94$) tout en apportant une plus grande souplesse dans la réalisation des calculs sur ordinateurs.

Première application

L'exposé de l'application de la TFP aux calculs cristallographiques nécessitant une écriture assez lourde, nous allons d'abord prendre un exemple simple qui permettra de bien comprendre le mécanisme de la méthode et d'obtenir des résultats utilisables pour la suite. Prenons le calcul de la TF $G(r)$ d'une fonction paire $F(s) = F(-s)$, à support borné $s \leq s_M$: $G(r) = \int_0^{s_M} F(s) \cos 2\pi r s \, ds$. Sur l'intervalle $[0, s_M]$ on prend $H = 2^\gamma$ intervalles équidistants et l'on approche $G(r)$ par la somme

$$G'(r) = \frac{\Delta s}{2} \left[\sum_{h=0}^{H-1} f(h) \exp \{2\pi i r h s_M / H\} \right. \\ \left. + \sum_{h=0}^{H-1} f(h) \exp \{-2\pi i r h s_M / H\} \right] = \frac{\Delta s}{2} [g'(r) + g'(-r)]$$

avec $f(h) / F(h s_M / H) = 1$ pour $h \in [0, H-1]$ [et $\frac{1}{2}$ aux bornes, et $g'(r) = \sum_h f(h) \exp \{2\pi i r h s_M / H\}$.

L'historiographie de pas $\Delta s = s_M / H$ entraîne une périodicité de $g(r)$ avec une période $r_M = H / s_M$. En accord avec la première condition, on partage l'intervalle $[0, r_M]$ en H intervalles équidistants de $\Delta r = 1 / s_M$. Désignant par $g(j)$ les valeurs de $g(r)$ aux points $r = j / s_M$, avec $j = 0, 1, \dots, H-1$, on a

Il ressort de ces exemples que la TFP constitue un outil particulièrement adapté aux calculs cristallographiques. Le fait que, contrairement aux méthodes classiques, elle travaille sur des nombres complexes et qu'elle exige l'expansion des ensembles introduits jusqu'à une puissance entière de 2 altère à peine ses performances. Si nous considérons, par exemple, un ensemble de 3000 points traités d'une part classiquement et d'autre part par TFP après complémentation à 4096 points, le rapport des temps reste supérieur à 40. De telles performances rendent également

précieuse l'emploi de la TFP dans la convolution de 2 fonctions pour peu que leurs supports soient assez larges.

Références

- COOLEY, J. W., LEWIS, P. A. W. & WELCH, P. D. (1969). *IEEE Trans.* E-12, 27.
 COOLEY, J. W. & TUKEY, J. W. (1965). *Math. Comput.* 19, 297.
IEEE Trans. (1967). AU-15, October.

Acta Cryst. (1971). A27, 494

A redetermination of the coherent neutron scattering amplitude of Cs*. By D. E. COX and V. J. MINKIEWICZ, *Physics Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, U.S.A.*

(Received 25 February 1971)

The coherent neutron scattering amplitude of Cs has been determined by a least-squares refinement of powder neutron diffraction data from CsCl at 4.2°K. The value obtained was $0.55 \pm 0.02 \times 10^{-12}$ cm, which differs considerably from the value currently tabulated in the literature.

There is a great deal of current interest in double halides of the type CsNiCl₃, which exhibit pronounced one-dimensional magnetic behavior. In the course of neutron diffraction investigations of several of these compounds, it became evident that the recently reported value of 0.75×10^{-12} cm for the coherent neutron scattering amplitude of cesium (Zivadinovic & Prelesnik, 1966; Neutron Diffraction Commission, 1969) was seriously in error. Preliminary calculations showed, in fact, that the intensity data in each case could be accounted for much more satisfactorily with a figure closer to the original value of 0.49×10^{-12} cm determined by Shull & Wollan (1951).

This is strikingly similar to the history of rubidium, for which an accurate scattering amplitude value has very recently been determined (Wang & Cox, 1970; Copley, 1970; Meriel, 1970), and a similar determination of b_{Cs} was therefore undertaken. Since the double halides are rather difficult to handle and characterize, CsCl was chosen as the most suitable standard. High-purity material is readily available, and also b_{Cl} , relative to which b_{Cs} is determined, is known quite accurately. A polycrystalline sample of Johnson-Matthey 'Specpure' material was used (Ca, Mg, Rb, Na < 1 ppm, other cations below limits of detection by spectrographic analysis). This was heated at 550°C in an atmosphere of hydrogen chloride to convert any oxide or hydroxide to chloride, transferred to a glove bag to avoid pick-up of moisture, and loaded into an aluminum sample holder $\frac{3}{8}$ inch in diameter and 3 inches long. Powder data were collected with neutrons of wavelength 1.031 Å as described previously in the case of RbCl (Wang & Cox, 1970), except that the sample was maintained at a temperature of 4.2°K rather than at room temperature in order to minimize thermal diffuse scattering. The diffraction pattern showed a single body-centered cubic phase with a lattice parameter of 4.08_8 Å. A total of thirteen peaks were used in a least-squares refinement based upon intensities, the scattering amplitude of Cl being taken as 0.963×10^{-12} cm (Koester,

1967). Final parameter values are listed in Table 1, and the corresponding observed and calculated intensities in Table

Table 1. *Parameter values from least-squares refinement of neutron powder data from CsCl at 4.2°K*

Standard errors are given in parentheses.

b_{Cs} ($\times 10^{12}$ cm)	0.549 (7)
B_{Cs} (Å ²)	0.23 (13)
B_{Cl} (Å ²)	0.36 (8)
R value	0.025
Weighted R value	0.036

Table 2. *Comparison of observed and calculated intensities for CsCl at 4.2°K*

Space group $Pm\bar{3}m$; Cs in 1(a) at 0, 0, 0; Cl in 1(b) at $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$. Parameters as in Table 1.

<i>hkl</i>	<i>I</i> _{calc}	<i>I</i> _{obs}
100	68	67
110	918	906
111	overlap with Al	
200	overlap with Al	
210	53	54
211	610	604
220	overlap with Al	
300	36	37
221		
310	366	372
311	23	26
222	102	113
320	19	18
321	523	515
400	overlap with Al	
410	overlap with Al	
322		
411		
330	307	283
331	13	13
420	overlap with Al	
421	overlap with Al	
332	169	172

* Work performed under the auspices of the U.S. Atomic Energy Commission.