

Эве ТАММЕТ, Х. ТАММЕТ

ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ СЛОЖЕНИЯ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ

Эве ТАММЕТ, Х. ТАММЕТ. IMPULSIMOMENTIDE SUMMEERIMISKOEFIITSIENTIDE ARVU-
 TAMINE

Эве ТАММЕТ, Х. ТАММЕТ. COMPUTING OF ANGULAR MOMENTA COUPLING COEFFICIENTS

Решение прикладных задач квантовой механики нередко приводит к выражениям, содержащим коэффициенты Клебша—Гордана, $3j$ -коэффициенты Вигнера, $6j$ - и $9j$ -коэффициенты. Практическая применимость таких результатов существенно зависит от возможности определения численных значений коэффициентов. Для этого составлены объемистые таблицы (см., напр., [1, 2]), однако они содержат лишь долю необходимых на практике значений и почти бесполезны при расчетах на ЭВМ. В последнем случае взамен таблиц необходимы подпрограммы или процедуры вычисления коэффициентов сложения угловых моментов.

Удовлетворительные подпрограммы известны лишь для коэффициентов Клебша—Гордана [3].

Ниже описывается универсальная процедура, позволяющая вычислить все перечисленные и треугольные коэффициенты. Процедура реализована в МАЛГОЛ-системе [4], которая базируется на определенном диалекте языка АЛГОЛ-60 и отличается особым удобством при решении задач физики.

Алгоритм исходит из известных определений и соотношений (см., напр., в [5] формулы 12.15, 13.1а, 18.1, 22.1а, 24.33). Применен метод подготовленного массива логарифмов факториалов, который использован также в [3]. Начальная длина массива включает всего 51 число, но в случае больших значений аргументов он автоматически расширяется до необходимого объема. Это обеспечивает практически неограниченный диапазон допустимых значений аргументов.

Процедура используется в программах как функция, принимающая значение вычисляемого коэффициента. Обращение записывается следующим образом:

коэффициент	запись на языке МАЛГОЛ
$\Delta(abc)$	САМ('3', A, B, C)
$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m_1+m_2 \end{bmatrix}$	САМ('CG', J1, J2, J, M1, M2)
$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & -m_1 - m_2 \end{pmatrix}$	САМ('3J', J1, J2, J3, M1, M2)

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{array} \right\} \quad \text{CAM('6J', J1, J2, J3, L1, L2, L3)}$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \\ k_1 & k_2 & k_3 \end{array} \right\} \quad \text{CAM('9J', J1, J2, J3, L1, L2, L3, K1, K2, K3)}$$

Расчет исходит из значений параметров, округленных до ближайшего целого или полуцелого числа. В ходе вычислений проверяются всевозможные ограничения, накладываемые на аргументы. При обнаружении недопустимой комбинации аргументов результат будет равен нулю, и если на пульте ЭВМ включен ключ 100, то одновременно выводится сообщение

ERROR CAM: X P1 P2. . . . ,

где X — признак конкретного вида коэффициента и P1, P2, ... — значения аргументов. При обращении с неправильным признаком происходит то же самое, но сообщение ограничивается словами «ERROR CAM:».

Процедура вместе с собственными переменными и постоянными занимает 1227₈ ячеек в первом блоке МОЗУ ЭВМ «Минск-22» и если аргументы небольшие, то 63₈ ячеек во втором блоке. Кроме того, используются стандартные функции и процедура вывода общей длиной 750₈ ячеек. Эти функции и процедура вывода, как правило, вызываются в МОЗУ уже по требованию других частей программы. Все длины приведены для системы МАЛГОЛ-72. Для сравнения укажем, что, по данным [3], программа вычисления только коэффициентов Клебша—Гордана ОИЯИ имеет длину 1445₈, а такая же программа ЦЕРН — длину 13545₈.

Время вычисления сложным образом зависит от набора аргументов. Ограничиваемся примерами (для ЭВМ «Минск-32»):

$$\Delta \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3,5 & 1,5 & 4 \\ 2,5 & -0,5 & 2 \end{pmatrix} \quad 16 \text{ мс}$$

$$\left[\begin{array}{ccc} 2 & 2,5 & 3,5 \\ 1,5 & 3 & 3 \end{array} \right] \quad 54 \text{ мс}$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} 2 & 2,5 & 3,5 \\ 1,5 & 3 & 3 \end{array} \right\} \quad 67 \text{ мс}$$

$$\left\{ \begin{array}{ccc} 2 & 2 & 3 \\ 2,5 & 1,5 & 3 \\ 0,5 & 0,5 & 1 \end{array} \right\} \quad 270 \text{ мс}$$

Расчет можно существенно ускорить, если писать подпрограмму F (см. приложение) на машинном языке.

В приложении представлен текст процедуры, используемый в системе МАЛГОЛ-72. Для согласования процедуры с описанием [1] достаточно заменить выражение R'(LOGF.,X+1) на LOGF.(X). и слово O' на OСТАЛ'.

Приложение

```

PROCEDURE CAM (P0, P1, P2, P3, P4, P5, P6, P7, P8, P9); BEGIN
  SUBROUTINE PP; Y := 0.5 * ENTIER (X + X + 0.5);
  SUBROUTINE MN; IF X < MIN THEN MIN := X;
  SUBROUTINE MX; IF X > MAX THEN MAX := X;
  SUBROUTINE CH; IF MAX - MIN THEN GOTO ERROR;
  SUBROUTINE F; BEGIN
    IF X THEN GOTO ERROR;
    IF FRAC X = 0 THEN GOTO ERROR;
    IF X = ) XMAX THEN GOTO EXTEND;
    Y := R (LOGF .X + 1) END;
  SUBROUTINE FP; BEGIN F; S := S + Y END;
  SUBROUTINE FM; BEGIN F; S := S - Y END;
  SUBROUTINE TRI2; BEGIN
    X := A + B + C + 1; F; S := -Y;
    FOR X := A + B - C, A - B + C, -A + B + C DO FP END;
  SUBROUTINE TS; BEGIN TRI2; SS := SS + S END;
  SUBROUTINE XP; XX := XX + (1 - 4 * FRAC (K/2)) * EXP S;
  SUBROUTINE J6; BEGIN
    SS := 0;
    A := I1; B := I2; C := I3; TS; U1 := A + B + C;
    B := M2; C := M3; TS; U2 := A + B + C;
    A := M1; B := I2; TS; U3 := A + B + C;
    B := M2; C := I3; TS; U4 := A + B + C;
    CONST := SS/2;
    V1 := I1 + I2 + M1 + M2; V2 := I1 + I3 + M1 + M3;
    V3 := I2 + I3 + M2 + M3;
    MIN := U1; FOR X := U2, U3, U4 DO MN;
    MAX := V1; FOR X := V2, V3 DO MX; CH;
    XX := 0;
    FOR K := MIN STEP 1 UNTIL MAX DO BEGIN
      X := K + 1; F; S := CONST + Y;
      FOR X := K - U1, K - U2, K - U3, K - U4, V1 - K, V2 - K, V3 - K
        DO FM;
      XP END;
    END;
  IF TTT = /PI THEN BEGIN
    TTT := PI;
    XMAX := 50;
    PREPARATION:
    ARRAY LOGF (0 : XMAX);
    LOGF (0) := 0;
    FOR I := 1 STEP 1 UNTIL XMAX DO
      LOGF (I) := LOGF (I - 1) + LN I;
    GOTO CALCUL;
  EXTEND:
  DELETE (LOGF);
  XMAX := ENTIER (1.25 * X);
  GOTO PREPARATION END;
  CALCUL:
  Q := P0;
  X := P1; PP; A := Y;
  X := P2; PP; B := Y;
  X := P3; PP; C := Y;
  IF Q = 0'200000000000 THEN BEGIN
    TRI2;
    XXX := EXP (S/2);
    GOTO EXIT END;
  X := P4; PP; M1 := Y;
  X := P5; PP; M2 := Y;
  IF Q = 0'565300000000 + Q = 0'207200000000 THEN BEGIN
    J1 := A; J2 := B; J := C;
    M := M1 + M2;
    TRI2; S := S + LN (2 * J + 1);
    FOR X := J1 + M1, J1 - M1, J2 + M2, J2 - M2, J + M, J - M DO FP;
    CONST := S/2;
    MIN := 0; MAX := J1 + J2 - J;
    FOR X := -J + J2 - M1, -J + J1 + M2 DO MN;
    FOR X := J1 - M1, J2 + M2 DO MX; CH;

```

```

XX: = 0;
FOR'K: = MIN STEP'1 UNTIL'MAX DO'BEGIN'
  S: = CONST;
  FOR'X: = K, J - J2 + M1 + K, J - J1 - M2 + K,
  J1 + J2 - J - K, J1 - M1 - K, J2 + M2 - K DO'FM;
  XP END';
XXX: = XX;
IF'Q = O'207200000000 THEN'
XXX: = XX × (1 - 4 × FRAC' ((J1 - J2 + M)/2))/SQRT'(2 × J + 1);
GOTO'EXIT END';
X: = P6; PP: M3: = Y;
IF'Q = O'257200000000 THEN'BEGIN'
  I1: = A; I2: = B; I3: = C;
  J6;
  XXX: = XX;
  GOTO'EXIT END';
IF'Q = O'037200000000 THEN'BEGIN'
  J1: = A; J2: = B; J3: = C;
  L1: = M1; L2: = M2; L3: = M3;
  X: = P7; PP: K1: = Y;
  X: = P8; PP: K2: = Y;
  X: = P9; PP: K3: = Y;
  IF'KEY'O' 100 THEN'
  ELSE'IF'FRAC'((K1 + K2 + K3)/2) = /0
  THEN'BEGIN'XXX: = 0; GOTO'EXIT END';
  MIN: = 0; MAX: = J1 + K3;
  FOR'X: = J1 - K3, J2 - L3, L1 - K2 DO'
  IF'ABS'X:)MIN THEN'MIN: = ABS'X;
  FOR'X: = J2 + L3, L1 + K2 DO'MX; CH;
  KKMAX: = MAX; XXX: = 0;
  FOR'KK: = MIN STEP'1 UNTIL' KKMAX DO'BEGIN'
    T: = (2 × KK + 1) × (1 - 4 × FRAC'KK);
    I1: = J1; I2: = J2; I3: = J3;
    M1: = L3; M2: = K3; M3: = KK; J6; T: = T × XX;
    I1: = L1; I2: = L2; I3: = L3;
    M1: = J2; M2: = KK; M3: = K2; J6; T: = T × XX;
    I1: = K1; I2: = K2; I3: = K3;
    M1: = KK; M2: = J1; M3: = L1; J6; T: = T × XX;
    XXX: = XXX + T END';
  GOTO'EXIT END';
ERROR:
XXX: = 0;
IF'KEY'O'100 THEN'BEGIN'
  OUTPUT'(1);
  TEXTRI'('ERROR CAM: ');
  IF'Q = O'200000000000 THEN'
  TEXTRI'(3, 1, '3', P1, P2, P3);
  IF'Q = O'565300000000 THEN'
  TEXTRI'(3, 1, 'CG', P1, P2, P3, P4, P5);
  IF'Q = O'207200000000 THEN'
  TEXTRI'(3, 1, '3J', P1, P2, P3, P4, P5);
  IF'Q = O'257200000000 THEN'
  TEXTRI'(3, 1, '6J', P1, P2, P3, P4, P5, P6);
  IF'Q = O'037200000000 THEN'
  TEXTRI'(3, 1, '9J', P1, P2, P3, P4, P5, P6, P7, P8, P9);
  OUTPUT'(1) END';
EXIT: X: = XXX END';

```

ЛИТЕРАТУРА

1. Tables of the Clebsh-Gordan coefficients, Science Press, Peking, 1965.
2. Визбарайте Я. И., Глембоцкий И. И., Каразия Р. И., Строкките Т. Д., Улдуките В. И. (под ред. А. П. Юциса), Таблицы $9j$ -коэффициентов для целых значений параметров с одним параметром, равным единице, ВЦ АН СССР, М., 1968.
3. Ширикова Н. Ю., ОИЯИ, П-5735, Дубна, 1971.
4. Система автоматического программирования для ЭВМ «Минск-22», ВЦ ЭРСПО, Программы для ЭВМ «Минск-22», № 4, Таллин, 1969.
5. Юцис А. П., Бандзайтис А. А., Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, 1965.

Институт кибернетики
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
26/IX 1973