MINIMALISASI *OVERFLOW* DAN *UNDERFLOW* DALAM KOMPUTASI KOEFISIEN REKOPLING MOMENTUM SUDUT PARTIKEL BERELEKTRON BANYAK

Sholihun, Pekik Nurwantoro
Departemen Fisika, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta Indonesia
E-mail: sholihun.ahmad@gmail.com

Abstrak

Telah dilakukan operasi aljabar dalam upaya minimalisasi kemungkinan terjadinya *overflow* dan *underflow* dalam komputasi koefisien rekopling momentum sudut. Fokus penelitian ini pada komputasi simbol 6-j dan 9-j. Simbol 6-j muncul ketika terjadi kopling tiga momentum sudut dan simbol 9-j muncul ketika terjadi kopling empat momentum sudut. Penelitian ini menjadi sorotan peneliti khususnya peneliti di bidang komputasi karena kompleksnya persamaan simbol 6-j dan 9-j. Perhitungan secara analitik sulit dilakukan, bahkan tidak mungkin dilakukan karena banyaknya produk faktorial yang terkandung dalam persamaan yang terlibat. Sehingga perhitungan numerik merupakan satu-satunya solusi dalam perhitungan koefisien rekopling tersebut. Kompleksnya persamaan tersebut menyebabkan terjadinya *overflow* dan *underflow* dalam pemprograman. Dua kendala tersebut menuntut adanya metode komputasi yang efektif. Dalam makalah ini dipaparkan metode komputasi yang meliputi pembuatan kaitan rekursif aljabar, operasi aljabar dan konversi logaritmik pada pemprograman dalam upaya meminimalisasi terjadinya *overflow* dan *underflow*.

Kata kunci : koefisien rekopling, kaitan rekursif aljabar, *overflow* dan *underflow*

PENDAHULUAN

Dalam mekanika kuantum dibahas dinamika partikel misalnya, dinamika elektron-elektron dalam sebuah atom. Elektron-elektron ini masing-masing memiliki dua momentum sudut yaitu momentum sudut spin (intrinsik) dan momentum sudut orbital (ekstrinsik) yang keduanya (jika saling mengkopel) akan menghasilkan momentum sudut total. Karena terdapat banyak elektron dalam sebuah atom maka akan terjadi kopling dari momentum sudut total masing-masing elektron. Jadi dalam atom berelektron banyak terjadi dua kopling (jumlahan) yaitu kopling J-J dan kopling L-S. Kopling JJ adalah kopling yang terjadi antara momentum sudut total beberapa elektron. Sedangkan kopling L-S adalah kopling yang terjadi antara momentum sudut orbital total hasil kopling momentum sudut orbital masing-masing elektron dengan momentum sudut spin total hasil kopling momentum sudut spin masing-masing elektron. Perubahan dari kopling LS ke kopling JJ atau sebaliknya dinamakan rekopling [1].

Perhitungan simbol 3n-j ini menjadi sorotan para peneliti khususnya peneliti fisika komputasi karena kompleksnya persamaan yang terkait. Masalah yang dihadapi adalah sulitnya melakukan perhitungan secara analitik bahkan tidak bisa dilakukan untuk bilangan kuantum yang besar mengingat banyaknya produk faktorial dalam persamaan koefisien rekopling tersebut, terlebih untuk simbol 3n-j untuk $n \geq 2$ (misalnya simbol 6-j dan 9-j). Berbagai metode telah dilakukan diantaranya dengan teori group [2], storage scheme [3] dan simbol Pochhammer [4]. Untuk bilangan kuantum kecil, metode tersebut bisa digunakan. Namun kendala yang ada adalah ketidakmungkinan untuk menghitung simbol 6-j dan 9-j pada bilangan kuantum besar. Mengingat ketidakmungkinan melakukan perhitungan secara analitik, satu-satunya cara adalah melakukan perhitungan secara komputasi. Namun kendalapun masih ada yaitu kemungkinan terjadinya *overflow* dan *underflow*. Dalam makalah ini akan disajikan trik untuk memperkecil kemungkinan terjadinya *overflow* dan *underflow* dalam komputasi koefisien rekopling yang muncul dari kopling tiga dan empat momentum sudut yang selanjutnya secara berturut-turut disebut koefisien rekopling 6-j dan 9-j.

DASAR TEORI

Sebelumnya telah dijelaskan bahwa terjadinya perubahan dari kopling J-J ke kopling L-S atau sebaliknya disebut rekopling momentum sudut. Terjadinya rekopling ini melibatkan koefisien rekopling yang biasa disebut dengan simbol 3n-j. Adapun penelitian ini fokus pada permasalahan komputasi koefisien rekopling 6-j dan 9-j.

2.1 Simbol 6-j

Dalam fisika atom sering muncul istilah koefisien Clebsch-Gordan, yaitu koefisien ekspansi yang mentransformasikan ruang vektor dari penyajian terkopel dua momentum sudut ke penyajian tak terkopel, atau sebaliknya. Sedangkan yang dimaksud dengan penyajian terkopel adalah penyajian dalam ruang Hilbert yang tersusun atas basis swa-vektor yang memiliki swa-nilai berupa bilangan-bilangan kuantum total, sedang penyajian tak terkopel adalah penyajian dalam ruang Hilbert yang sama tetapi tersusun atas basis swa-vektor yang memiliki swa-nilai berupa bilangan-bilangan kuantum mandiri milik masing-masing spin atau momentum sudut orbital penyusun spin atau momentum sudut orbital total.

Simbol 6-j merupakan pengembangan dari simbol 3-j. Jika simbol 3-j muncul akibat kopling dari dua momentum sudut, maka simbol 6-j muncul akibat dari kopling tiga momentum sudut. Simbol 6-j mempunyai bentuk eksplisit [5]

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{pmatrix} = \Delta(j_1 j_2 j_3)\Delta(j_1 j_5 j_6)\Delta(j_4 j_2 j_6)$$
$$\times \Delta(j_4 j_5 j_3) \sum_k \frac{(-1)^k (k+1)!}{(k - j_1 - j_2 - j_3)!(k - j_1 - j_5 - j_6)!}$$
$$\times \frac{1}{(k - j_4 - j_2 - j_6)!(k - j_4 - j_5 - j_3)}$$
$$\times \frac{1}{!(j_1 + j_2 + j_4 + j_5 - k)!(j_2 + j_3 + j_5 + j_6 - k)}$$
$$\times \frac{1}{!(j_1 + j_3 + j_4 + j_6 - k)!} \qquad (2)$$

dimana

$$\Delta(abc) = \left[\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (3)$$

Indeks penjumlahan k adalah bilangan nol dan positip pada bentang

$$k_{\min} \le k \le k_{\max} \qquad (4)$$

$$k_{min} = \max(\,j_1 + j_2 + j_3, j_1 + j_5 + j_6, j_2 + j_4 + j_6, j_3 + j_4 + j_5\,)$$
$$k_{\max} = \min(\,j_1 + j_2 + j_4 + j_5, j_1 + j_3 + j_4 + j_6, j_2 + j_3 + j_5 + j_6)$$

2.2 Simbol 9-j

Generasi selanjutnya setelah simbol 6-j adalah simbol 9-j, yang muncul akibat kopling dari empat momentum sudut. Misalnya, kopling momentum sudut spin dan orbital dari dua buah elektron.

Simbol 9-j disajikan dalam ekspresi simbol 6-j [6] berbentuk

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{pmatrix} = \sum_k (-1)^{2k}(2k+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_4 & j_7 \\ j_8 & j_9 & k \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} j_2 & j_5 & j_8 \\ j_4 & k & j_6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_3 & j_6 & j_9 \\ k & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \tag{5}$$

dimana

$$k_{\min} \le k \le k_{\max}$$

dengan

$k_{\min} = \max(|j_8 - j_4|, |j_2 - j_6|, |j_1 - j_9|)$ dan $k_{max} = \min(j_8 + j_4, j_2 + j_6, j_1 - j_9)$

Metode Komputasi

Dalam penelitian ini, komputasi simbol 9-j disajikan dalam ekspresi 6-j (persamaan 2). Sehingga dapat dikatakan bahwa keakuratan perhitungan simbol 3n-j sangat bergantung pada keakuratan perhitungan simbol 6-j.

1.1 Kaitan rekursif aljabar simbol 6-j

Pada persamaan simbol 6-j terlihat bahwa kendala lamanya komputasi serta potensi terjadinya *overflow* dan *underflow* disebabkan karena banyaknya produk bentuk faktorial pada ungkapan tersebut. Dengan memanfaatkan sifat faktorial, penyederhanaan langkah komputasi dilakukan dengan membuat kaitan rekursif yang dapat mewakili persamaan 6-j. Untuk mencari bentuk umum dari kaitan rekursif yang diinginkan, dilakukan dengan menjabarkan bentuk eksplisit dari a_k melalui hubungan antara $a_{k_{\min}}, a_{k_{\min+1}}, a_{k_{\min+2}}$ dan seterusnya. Kami dapatkan hubungan antara argumen-argumen faktorial pada a_{k+1} dan a_k yang memenuhi

$$a_{k+1} = -\frac{(k+2)(j_1+j_2+j_4+j_5-k)(j_2+j_3+j_5+j_6-k)(j_1+j_3+j_4+j_6-k)}{(k+1-j_1-j_2-j_3)(k+1-j_1-j_5-j_6)(k+1-j_2-j_4-j_6)(k+1-j_3-j_4-j_5)}a_k \tag{6}$$

1.2 Operasi aljabar pada $a_{k_{\min}}$

Kemungkinan terjadinya *overflow* saat diberi masukan nilai bilangan kuantum *j* besar akan semakin berkurang bahkan akan dapat dihindari dengan melakukan beberapa operasi aljabar terhadap produk yang melibatkan faktorial sejenis sedemikian sehingga didapatkan argumen terkecil pada semua bentuk faktorial pada persamaan $a_{k_{min}}$.

Dari syarat simbol 6-j,

$k_{min} = \max(j_1 + j_2 + j_3, j_1 + j_5 + j_6, j_2 + j_4 + j_6, j_3 + j_4 + j_5)$

dapat dijabarkan menjadi empat kemungkinan yaitu

- jika $k_{min} = j_1 + j_2 + j_3$ maka bentuk persamaan $a_{k_{min}}$ menjadi

$$a_{k_{min}} = D \times \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3}(j_1+j_2+j_3+1)!}{0!(j_2+j_3-j_5-j_6)!(j_1+j_3-j_4-j_6)!(j_1+j_2-j_4-j_5)!} \times \frac{1}{(j_4+j_5-j_3)!(j_5+j_6-j_1)!(j_4+j_6-j_2)!}$$

dimana $D = \Delta(j_1 j_2 j_3)\Delta(j_1 j_5 j_6)\Delta(j_4 j_2 j_6)\Delta(j_4 j_5 j_3)$

Setelah dilakukan penyederhanaan terhadap argumen-argumen faktorial sejenis, maka persamaan 3.14 menjadi

$$a_{k_{min}} = \frac{(-1)^{j_1+j_2+j_3}\left[(j_1+j_6-j_5)!(j_2+j_6-j_4)!(j_3+j_5-j_4)!(j_1+j_5-j_6)!\right]^{\frac{1}{2}}}{(j_2+j_3-j_5-j_6)!(j_1+j_3-j_4-j_6)!(j_1+j_2-j_4-j_5)!}$$
$$\times\frac{\left[(j_1+j_2+j_3+1).....(j_1+j_5+j_6+2)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_1+j_2-j_3).....(j_4+j_5-j_3+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[(j_2+j_4+j_6+1)....(j_2+j_4-j_6+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_3+j_4+j_5+1)....(j_3+j_4-j_5+1)\right]^{\frac{1}{2}}}$$
$$\times\frac{\left[(j_1+j_3-j_2).....(j_4+j_6-j_2+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_2+j_3-j_1).....(j_5+j_6-j_1+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{1} \tag{7}$$

Dengan cara yang sama

- jika $k_{min} = j_1 + j_5 + j_6$, maka didapat

$$a_{k_{min}} = \frac{(-1)^{j_1+j_5+j_6}\left[(j_1+j_3-j_2)!(j_4+j_6-j_2)!(j_3+j_5-j_4)!(j_1+j_2-j_3)!\right]^{\frac{1}{2}}}{(j_5+j_6-j_2-j_3)!(j_1+j_5-j_4-j_2)!(j_1+j_6-j_4-j_3)!}$$
$$\times\frac{\left[(j_1+j_5+j_6+1).....(j_1+j_2+j_3+2)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_5+j_6-j_1).....(j_2+j_3-j_1+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[(j_2+j_4+j_6+1)....(j_2+j_6-j_4+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_3+j_4+j_5+1)....(j_4+j_5-j_3+1)\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{8}$$
$$\times\frac{\left[(j_1+j_6-j_5).....(j_3+j_4-j_5+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_1+j_5-j_6).....(j_2+j_4-j_6+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{1}$$

- jika $k_{min} = j_2 + j_4 + j_6$, didapat

$$a_{k_{min}} = \frac{(-1)^{j_2+j_4+j_6}\left[(j_2+j_3-j_1)!(j_5+j_6-j_1)!(j_4+j_5-j_3)!(j_1+j_2-j_3)!\right]^{\frac{1}{2}}}{(j_4+j_6-j_1-j_3)!(j_2+j_4-j_5-j_1)!(j_2+j_6-j_5-j_2)!}$$
$$\times\frac{\left[(j_2+j_4+j_6+1).....(j_1+j_2+j_3+2)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_4+j_6-j_2).....(j_1+j_3-j_2+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[(j_1+j_5+j_6+1)....(j_1+j_6-j_5+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_3+j_4+j_5+1)....(j_3+j_4-j_5+1)\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{9}$$
$$\times\frac{\left[(j_2+j_6-j_4).....(j_3+j_5-j_4+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_2+j_4-j_6).....(j_1+j_5-j_6+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{1}$$

- Jika $k_{min} = j_3 + j_4 + j_5$, didapat

$$a_{k_{min}} = \frac{(-1)^{j_3+j_4+j_5}\left[(j_2+j_3-j_1)!(j_5+j_6-j_1)!(j_4+j_6-j_2)!(j_1+j_3-j_2)!\right]^{\frac{1}{2}}}{(j_4+j_5-j_1-j_2)!(j_3+j_4-j_1-j_6)!(j_3+j_5-j_2-j_6)!}$$
$$\times\frac{\left[(j_3+j_4+j_5+1).....(j_1+j_2+j_3+2)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_4+j_5-j_3).....(j_1+j_2-j_3+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[(j_1+j_5+j_6+1)....(j_1+j_5-j_6+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_2+j_4+j_6+1)....(j_2+j_4-j_6+1)\right]^{\frac{1}{2}}} \tag{10}$$
$$\times\frac{\left[(j_5+j_3-j_4).....(j_2+j_6-j_4+1)\right]^{\frac{1}{2}}\left[(j_3+j_4-j_5).....(j_1+j_6-j_5+1)\right]^{\frac{1}{2}}}{1}$$

Langkah terakhir untuk meminimalisasi terjadinya *overflow* adalah dengan melakukan perhitungan secara logaritmik terhadap semua bentuk faktorial yang terdapat pada persamaan (7), (8), (9) dan (10).

1.3 Metode *Continued Fraction*

Hasil komputasi yang akan diperoleh adalah bilangan desimal kurang dari 1 (satu). Untuk mengembalikan ke bentuk pecahan rasional seperti ketika perhitungan dilakukan secara analitik, maka hasil perhitungan numerik akan diproses lebih lanjut dengan metode continued fraction.

Selain dapat disajikan melalui metode deret, sebarang fungsi f (x) dapat disajikan dengan metode continued fraction. Metode yang dimaksud berbentuk [8]

$$f(x) = a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{a_3 + \cfrac{1}{a_4 + \dots}}}} \tag{11}$$

parameter $\{a_i, i = 0,1,2,3,.....\}$ merupakan parameter yang mengandung peubah x.

Uuntuk $f(x) = z = \frac{p}{q}$ yaitu bilangan pecahan rasional dengan p dan q keduanya merupakan bilangan bulat, maka metode continued fraction untuk mendapatkan bentuk pendekatan

$$z \approx z_n = \frac{p_n}{q_n} \tag{12}$$

dengan n bilangan bulat adalah melalui prosedur rekurensi berikut

$$a_0 = [z],\ b_0 = \frac{1}{z - a_0},\ p_0 = a_0,\ q_0 = 1$$

$$a_1 = [b_0],\ b_1 = \frac{1}{b_0 - a_1},\ p_1 = a_1 p_0 + 1,\ q_1 = 1 \tag{13}$$

dan untuk sembarang n berlaku

$$a_n = [b_{n-1}],\ b_n = \frac{1}{b_{n-1} - a_n}$$

$$p_n = a_n p_{n-1} + p_{n-2},\ q_n = a_n q_{n-1} + q_{n-2} \tag{14}$$

Dalam semua ungkapan di atas, simbol $[z]$ berarti bagian bulat dari bilangan z.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Keluaran program yang dihasilkan dari komputasi simbol 6-j dan simbol 9-j merupakan bilangan desimal dan bilangan pecahan hasil konversi metode *Continued Fraction*. Hasil komputasi untuk simbol 6-j disajikan pada Tabel 1 dan untuk simbol 9-j disajikan pada Tabel 2. Sedangkan Tabel 3 merupakan hasil penelitian yang dilakukan oleh Berndt M. Gammel (untuk simbol 6-j) dan Liqiang Wei (untuk simbol 9-j).

Table l Hasil komputasi simbol 6-j

Bil. Kuantum $\{j_1\, j_2\, j_3\, j_4\, j_5\, j_6\}$	**Hasil Komputasi**	**Konversi** ***Continued Fraction***
{9 14 6 12 12 10}	1.23542572577817e 2	$-\frac{89}{7204}$
{9 15 6 12 10 10}	1.54777127778549e 2	$-\frac{133}{8593}$
{9 15 7 12 10 10}	1.87956254766116e-2	$\frac{103}{5480}$

Table 2 Hasil komputasi simbol 9-j

Bil. Kuantum $\{j_1\, j_2\, j_3\, j_4\, j_5\, j_6\, j_7\, j_8\, j_9\}$	**Hasil Komputasi**	**Konversi** ***Continued Fraction***
{5 0.5 4.5 5 0.5 5.5 9 1 10 }	2.57786760370729e-3	$\frac{97}{37628}$
{20 10 30 30 30 60 10 20 30}	2.68744961032048e-4	$\frac{1}{3721}$
{30 20 10 30 10 20 60 30 30}	2.68744961032006e-4	$\frac{1}{3721}$

Tabel 3 Rujukan simbol 6-j dan simbol 9-j

Penelitian B. M. Gammel (Simbol 6 j)	**Penelitian Liqiang Wei (Simbol 9-j)**
-1.235425725778e 2	2.577867603707e-3
-1.547771277785e 2	2.687449610320e-4
1.87956254766117e-2	2.687449610320e-4

Operasi aljabar dilakukan untuk menyederhanakan persamaan simbol 6-j, sehingga bentuk-bentuk faktorial yang sejenis dapat dihilangkan. Pembuatan kaitan rekursif aljabar dilakukan untuk kebutuhan komputasi yaitu ketika ketika melakukan penjumlahan dari bentuk-bentuk produk faktorial yang ada dalam persamaan, sehingga permasalahan komputasi menjadi lebih sederhana. Sedangkan konversi logaritmik dilakukan untuk mengubah perkalian dan pembagian faktorial menjadi penjumlahan dan pengurangan yang secara komputasi lebih efektif dan membutuhkan biaya komputasi kecil. Perpaduan ketiga trik tersebut dilakukan dalam pemprograman dalam upaya memperkecil terjadinya *overflow dan underflow.* Untuk mengetahui ketelitian komputasi dilakukan dengan membandingkan hasil yang didapat dengan hasil dari peneliti lain. Dalam hal ini yang digunakan sebagai rujukan adalah hasil penelitian Berndt M. Gammel (2005) untuk simbol 6-j dan Liqiang Wei untuk simbol 9-j. Dari Tabel 1 dan Tabel 2 terlihat adanya kesesuaian hasil komputasi yang dilakukan pada penelitian ini dengan penelitian lain (Berndt M. Gammel dan Liqiang Wei). Kesesuaian ini merupakan efek dari metode yang digunakan.

KESIMPULAN

Kami telah mensekenario metode komputasi dalam upaya minimalisasi *overflow* dan *underflow* dalam komputasi koefisien rekopling momentum sudut. Operasi aljabar dan konversi logaritmik terbukti memperkecil kemungkinan munculnya kedua kendala tersebut. Untuk bilangan kuantum besar diperlukan pengembangan metode komputasi lebih lanjut dengan menganalisa kemungkinan penyederhanaan aljabar yang mengandung argumen sejenis.

DAFTAR PUSTAKA

[1] Rosyid, M. F., *Mekanika Kuantum*, Laboratorium Fisika Atom dan Inti Jurusan Fisika FMIPA UGM, Yogyakarta, 2005.
[2] Cvitanovic, *Group Theory, Tracts, Lie's and Expectational Groups*, Gone with the Wind Press, Atlanta and Copenhagen, 2004.
[3] Rasch, J. dan Yu, A.C.H, *Efficient Storage Scheme for Recalculated Wigner 3J, 6J and Gaunt Coefficients*, Siam. J.Sci.Comput., 25, 1416, 2003.
[4] Alcaras dan Vanagas, V., *New Algebraic Tables of SU(2) Quantitieo*, Revista Brasileira de Fisica, Vol. 14**,** Instituto de Fisica Teórica, Brasil, 1984.
[5] Landau, L. D. dan Lifshitz, E. M., *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory)*, Course of Theoretical Physics, Volume 3 Third Edition, Pergamon Press, 1977.
[6] Johnson, *Lecture on Atomic Physics*, Department of Physics, University of Notre Dame Notre Dame, Indiana 46556, U.S.A., 2002.
[7] Wei dan Dalgarno, *Universal Factorization of* $3n - j$ $(j > 2)$ *Symbols of the First and Second Kinds for SU(2) Group and Their Direct and Exact Calculation and Tabulatio*, Institute for Theoretical Atomic, Molecular and Optical Harvard University, Cambridge, MA 02138, 2007.
[8] Hirvensalo, *Quantum Computing*, Second Edition, Springer – Verlag Berlin Heidelberg, 2004.