

PERBANDINGAN ALGORITMA VELOCITY VERLET DENGAN ALGORITMA BEEMAN PADA SIMULASI MOLECULAR DYNAMICS

Muchlis Insani¹, Fitriyani M.T², Nurul Ikhsan M.Si³
 Prodi Ilmu Komputasi Telkom University, Bandung
 muklislatif@gmail.com¹, nurul.ikhsan@yahoo.co.id², fitriyani.y@gmail.com³

Abstrak

Simulasi merupakan suatu teknik yang berfungsi untuk merepresentasikan sebuah masalah atau keadaan yang ingin dianalisis. Pada umumnya simulasi dilakukan untuk kondisi-kondisi yang terlalu mahal atau tidak mungkin dilakukan melalui eksperimen. Salah satunya adalah simulasi Molecular Dynamics (MD). MD merupakan simulasi yang biasanya digunakan untuk menyelesaikan masalah yang berbasis hukum fisika dalam kehidupan sehari-hari, seperti gerak partikel, molekul atau protein. Selain itu bisa juga digunakan untuk memprediksi karakteristik zat padat, sampai prediksi lalu lintas. Untuk melakukan simulasi MD dibutuhkan algoritma yang memberikan tingkat akurasi dan efisiensi yang tinggi. Algoritma Velocity Verlet dan algoritma Beeman digunakan untuk mencari kecepatan dan posisi partikel terhadap waktu. Pada tugas akhir ini, kedua algoritma tersebut digunakan untuk melakukan simulasi MD. Parameter input yang digunakan sebesar 32, 108, 256 dan 500. Dengan suhu 0°K, 84,4°K dan 91,8°K. Selama program dijalankan parameter hasil yang akan dicatat berupa Radial Distribution Function (RDF), Mean Square Displacement (MSD) dan suhu aktual. Hasil dibandingkan dengan penelitian yang telah dilakukan sebelumnya [1]. Setelah keluaran yang dihasilkan benar hitung waktu komputasi. Hasil yang didapatkan menunjukkan bahwa algoritma Beeman membutuhkan waktu komputasi yang lebih besar dibandingkan dengan algoritma Velocity Verlet pada keadaan jumlah molekul sebesar 500, 856, 1372, 4000 dan 5324.

Kata kunci : *velocity verlet, beeman, molecular dynamics.*

I. Pendahuluan

1.1 Latar Belakang

Simulasi merupakan suatu teknik yang berfungsi untuk merepresentasikan sebuah masalah atau keadaan yang ingin dianalisis.

Salah satu dari teknik simulasi adalah *Molecular Dynamics* (MD). MD adalah metode simulasi yang digunakan untuk menyelidiki struktur, dinamika dan kompleksitas molekuler dari sejumlah N molekul. Metode ini berbasis hukum fisika dalam kehidupan sehari-hari.

Velocity Verlet dan Beeman merupakan algoritma integrasi persamaan gerak menggunakan metode numerik. Kedua algoritma tersebut digunakan untuk mendapatkan kecepatan, posisi dan percepatan setiap molekul terhadap waktu. Oleh karena itu, pada Tugas Akhir ini, dilakukan perbandingan kedua algoritma tersebut dalam melakukan simulasi MD. Dilakukan pengukuran waktu komputasi untuk menentukan algoritma yang paling optimal terhadap perubahan jumlah molekul sebesar 32, 108, 256 dan 500. Juga, dengan perubahan suhu sebesar 80 Kelvin,

84,4 Kelvin dan 91,8 Kelvin.

dengan MC adalah dapat menentukan rute partikel secara dinamis dalam sistem [1].

Pada MD, melakukan pendekatan yang sama dengan eksperimen nyata. Pertama, mempersiapkan jenis molekul apa yang ingin diteliti. Menentukan sistem model yang terdiri dari N partikel kemudian selesaikan persamaan gerak Newton untuk sistem yang telah dipilih sampai parameter dari sistem tidak lagi berubah terhadap waktu atau bisa juga disebut sebagai mencapai titik kesetimbangan (*equilibrium state*) [2]. Untuk mengamati material yang diteliti dalam MD, sebelumnya sifat pada molekul harus dideklarasikan sebagai fungsi dari posisi dan momentum dari partikel pada sistem.

2.2 Interaksi Molekul

Molecular Dynamics (MD) terdiri dari perhitungan numerik [3]. Untuk menentukan energi partikel yang berinteraksi pada jarak tertentu ditentukan dengan persamaan sebagai berikut:

$$f_i = \ddot{r}_i m_i \quad f_i = - \frac{\delta}{\delta r_i} U(r_i) \quad (2-1)$$

Untuk menentukan persamaan gerak perlu menghitung gaya (f). Biasanya gaya didapatkan dari energi potensial (U) dimana $r = (r_1, r_2, \dots, r_n)$ dengan representasi $3N$ jika simulasi dilakukan dengan tiga koordinat. Interaksi molekul terbagi menjadi dua jenis yaitu *Bonded* dan *Non-Bonded*. Tetapi untuk studi kasus pada Tugas Akhir ini hanya fokus pada interaksi *Non-Bonded*.

II. Dasar Teori

2.1 Molecular Dynamics Simulation

Terdapat dua metode simulasi yaitu *Molecular Dynamics* (MD) dan *Monte Carlo* (MC). Tetapi, dalam Tugas Akhir ini hanya fokus pada *Molecular Dynamics*. Kelebihan metode MD dibandingkan

2.3 Potensial Lennard-Jones

Persamaan Lennard-Jones merupakan persamaan yang digunakan untuk menentukan interaksi potensial antar partikel terhadap jarak. Jumlah potensial didefinisikan sebagai $V(r)$ [5].

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2-2)$$

Dimana $r_{ij} = r_j - r_i$ dan $r_{ij} \equiv |r_{ij}|$. Parameter ϵ digunakan untuk mengatur kekuatan interaksi dan σ mendefinisikan panjang skala. Pada jarak dekat interaksi akan tolak-menolak, kemudian tarik-menarik.

2.4 Velocity Verlet Algorithm

Velocity Verlet adalah algoritma berbasis metode numerik yang dibuat untuk memperbaiki kestabilan numerik dari algoritma Leap-frog. Algoritma ini digunakan untuk menghasilkan parameter kecepatan dan posisi dari setiap partikel. Berikut persamaan untuk posisi.

$$r(t + \delta t) = r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{2} a(t)\delta t^2 + O(\delta t^3) \quad (2-3)$$

Dengan persamaan kecepatan sebagai berikut,

$$v(t + \delta t) = v(t) + \frac{1}{2} [a(t) + a(t + \delta t)]\delta t + O(\delta t^2) \quad (2-4)$$

Algoritma ini memberikan kestabilan dan efisiensi penggunaan memori komputer dan waktu saat jumlah partikel yang besar [7].

2.5 Beeman Algorithm

Algoritma Beeman adalah metode numerik untuk mengintegrasikan persamaan diferensial biasa [8]. Pada umumnya digunakan untuk mencari posisi dan kecepatan, yang hubungannya dekat dengan Verlet Algorithm. Untuk pencarian posisi setiap partikelnya terdapat persamaan:

$$r(t + \delta t) = r(t) + v(t)\delta t + \frac{1}{3} a(t) - \frac{1}{6} a(t - \delta t) \delta t^2 + O(\delta t^3) \quad (2-5)$$

Dan untuk persamaan kecepatannya

$$v(t + \delta t) = v(t) + \left[\frac{1}{3} a(t) + \frac{5}{6} a(t) - \frac{1}{6} a(t - \delta t) \right] \delta t + O(\delta t^2) \quad (2-6)$$

2.6 Periodic Boundary Condition (PBC)

Pada bagian ini dalam sebuah sistem simulasi dengan jumlah partikel n akan di-cluster dan dibagi ke dalam sebuah batas (*bound*). PBC biasanya digunakan ketika molekulnya pada fasa padat.

Pada Lennard-Jones, jika dua partikel berada pada setara dengan atau lebih dari τ maka kedua partikel tersebut tidak berinteraksi satu sama lain [9].

Menurut buku *Molecular Modeling and Simulation An Interdisciplinary Guide* [10] untuk setiap kotak diberikan jarak sebesar 2τ .

2.7 Maxwell Boltzmann Distribution

Maxwell-Boltzmann Distribution atau yang sering dikenal dengan Distribusi Normal menggambarkan kecepatan partikel dalam gas, di mana partikel tidak terus-menerus berinteraksi satu sama lain, tetapi bergerak bebas antara tabrakan pendek. Ini menggambarkan kemungkinan kecepatan partikel (besarnya vektor kecepatannya) yang dekat dengan nilai yang diberikan sebagai fungsi dari suhu dari sistem, massa partikel, dan bahwa nilai kecepatan. Distribusi probabilitas ini dikemukakan pertama kali oleh James Clerk Maxwell dan Ludwig Boltzmann.

2.8 Radial Distribution Function (RDF)

Penyebaran molekul pada suatu sistem molekular tergantung dari jumlah molekul, densitas dan trajektori setiap molekul. Untuk mengetahui penyebaran dan jarak antar molekul menggunakan *Radial Distribution Function* (RDF).

$$g(r) = \frac{1}{4\pi r^2 N \rho} \sum_i n_i(r, \delta r) \quad (2-7)$$

Grafik dari RDF menunjukkan karakteristik kemungkinan keberadaan molekul dari jarak tertentu. Ketika nilai RDF bernilai nol itu berarti ketiadaan molekul pada jarak tersebut [12].

2.9 Mean Square Displacement (MSD)

Dalam sebuah simulasi molekular sebuah molekul dengan trajektori yang dapat ditentukan memiliki posisi yang berbeda-beda setiap iterasi atau waktu. Untuk melihat rata-rata jarak antar atom setiap waktunya digunakan *Mean Square Displacement* (MSD). Dengan menggunakan MSD bisa dilihat perubahan rata-rata jarak setiap waktunya.

$$MSD = \langle |r(t) - r(t-1)|^2 \rangle \quad (2-8)$$

Hasil MSD biasanya digunakan untuk mengukur kepadatan molekul atau dalam

Penyimpanan kecepatan, posisi, percepatan dan percepatan vektor perdetik sebelumnya harus dilakukan.

biomolecular sebagai menentukan struktur. Semakin kecil nilai MSD berarti sistem berada pada keadaan stabil [13].

2.10 Instanteous Temperature

Untuk menghitung suhu molekul pada sistem digunakan persamaan yang diturunkan dari

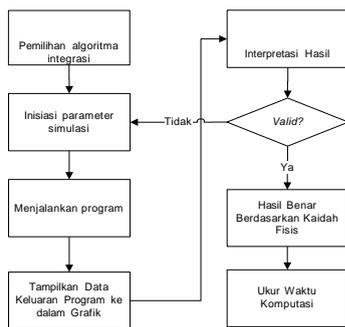
Boltzmann Distribution. Dimana ketika suhu pada sistem dipertahankan stabil pada rata-rata suhu setiap waktunya, energi kinetik akan sama dengan nilai dari ekuipartisi energi untuk setiap derajat kebebasan gerak setiap molekul.

$$3(N-1) \frac{1}{2} k_b T = \left\langle \frac{m}{2} \sum_i^N v_i^2 \right\rangle \quad (2-9)$$

Simbol $\langle \dots \rangle$ menyatakan rata-rata dari kinetic energi dan $3(N-1)$ merupakan derajat kebebasan dari setiap molekul yang berada di dalam sistem.

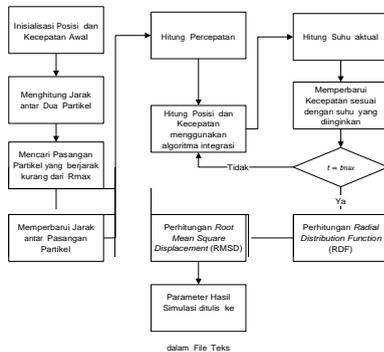
III. Perancangan Sistem

3.1. Deskripsi Sistem



Gambar 3.1 Gambaran Umum Penelitian Yang Dilakukan

3.2. Alur Program

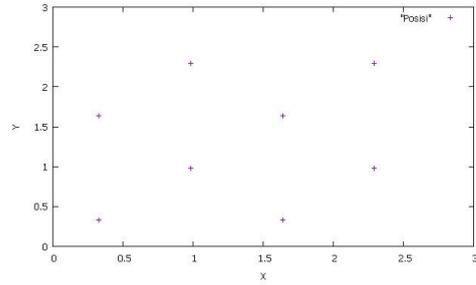


Gambar 3.2 Alur Program Simulasi Dengan Kedua Algoritma

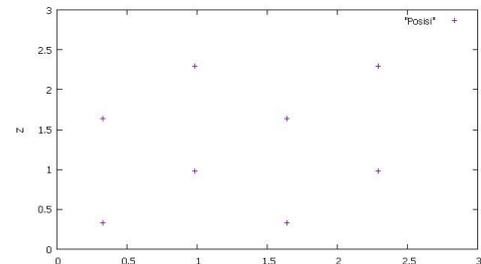
IV. Hasil Simulasi dan Analisis

4.1 Initial Condition

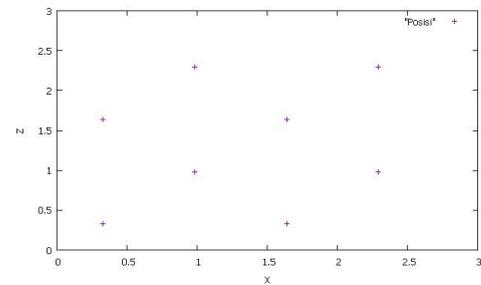
Pada Gambar 4.1.1, 4.1.2 dan 4.1.3 terlihat kondisi awal yang digunakan agar simulasi menghasilkan keluaran yang mendekati keadaan unsur *argon* yang sebenarnya berupa penempatan molekul pada struktur FCC. Dengan posisi sebagai berikut.



Gambar 4.1.1 Posisi molekul FCC dilihat dari sumbu Z



Gambar 4.1.2 Posisi molekul FCC dilihat dari sumbu X

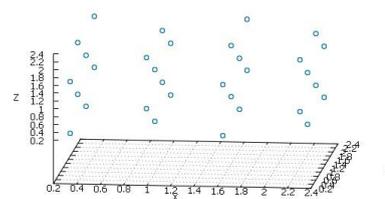


Gambar 4.1.3 Posisi molekul FCC dilihat dari sumbu Y

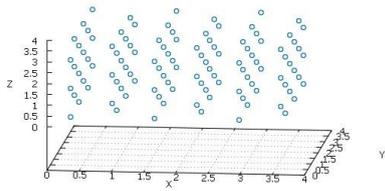
Pada Gambar 4.1.1, 4.1.2 dan 4.1.3 menunjukkan struktur dasar FCC pada sistem yang dilihat dari sumbu X, Y dan Z. Dengan jarak antar partikel yang disesuaikan dengan jumlah partikel dan selang antar partikel yang disesuaikan sehingga sistem berbentuk simetris.

Penempatan awal molekul pada kotak simulasi dengan panjang sisi $l = \sqrt[3]{\frac{N}{\rho}} \text{ \AA}$ dengan jumlah

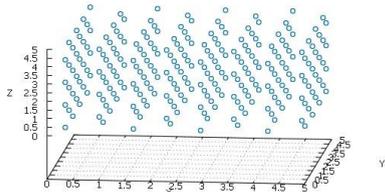
partikel 32, 108, 256500 dan densitas sebesar 1.781 \AA^{-3} . Dihasilkan plot untuk setiap molekul sebagai berikut.



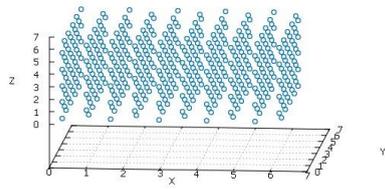
Gambar 4.1.4 Posisi awal Molekul Argon pada N=32



Gambar 4.1.5 Posisi awal Molekul Argon pada N=108



Gambar 4.1.6 Posisi awal Molekul Argon pada N=256



Gambar 4.1.7 Posisi awal Molekul Argon pada N=500

Pada Gambar 4.1.4, 4.1.5, 4.1.6 dan 4.1.7 struktur molekul yang sudah simetris dengan jumlah partikel sebanyak 32, 108, 256 dan 500. Jumlah sub-cell setiap sisi kotak simulasi sebesar $M=(2,...,5)$. Selang antar partikel bernilai $a=L/M$.

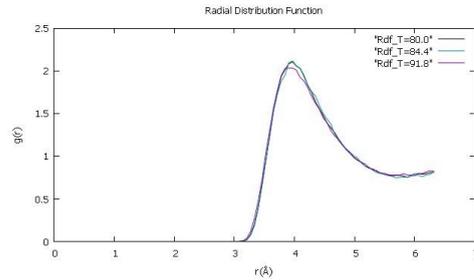
4.2 Hasil Algoritma Velocity Verlet

a. Final Condition

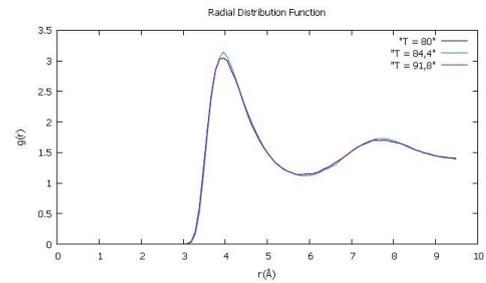
Perubahan posisi yang awalnya simetris kemudian menjadi tidak teratur. Jumlah molekul tidak berkurang ataupun bertambah. Demikian pula volume dari sistem yang dipertahankan konstan. Karena perbedaan suhu yang diatur sebesar 80°K, 84,4°K dan 91,8°K yang tidak terlalu signifikan, jadi tidak terlalu terlihat perubahan pada posisi akhir.

Dari perubahan jumlah molekul terlihat bahwa lebar sisi kotak simulasi selalu menyesuaikan dengan jumlah molekul. Dikarenakan kondisi awal diatur sedemikian sehingga perbandingan jumlah molekul dengan besar kotak simulasi selalu sama. Walaupun pada setiap jumlah molekul yang berbeda memiliki besar kotak simulasi yang berbeda juga, tetapi volume untuk setiap waktunya pada setiap jumlah molekul dipertahankan sehingga volume bernilai konstan.

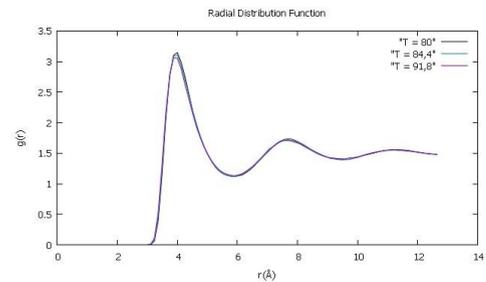
b. Radial Distribution Function (RDF)



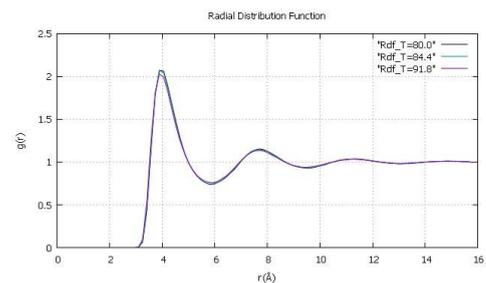
Gambar 4.2.5 RDF pada N=32 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.2.6 RDF pada N=108 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.2.7 RDF pada N=256 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.2.8 RDF pada N=500 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8

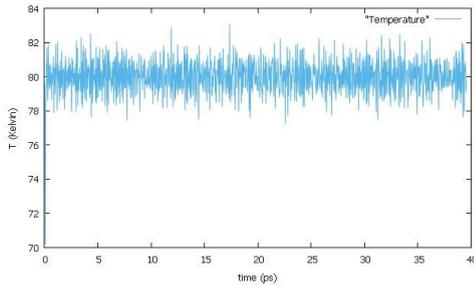
Pada Gambar 4.2.5, 4.2.6, 4.2.7 dan 4.2.8 dengan jumlah partikel sebesar 32, 108, 256 dan 500, perubahannya tidak begitu signifikan.

Tabel 1.1 Jarak pada *peak* RDF dengan algoritma Velocity Verlet

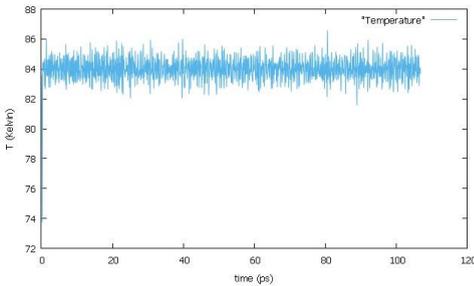
| N Molekul | Suhu | 80 Kelvin | 84.4 Kelvin | 91.8 Kelvin |
|-----------|------|------------|-------------|-------------|
| 32 | | 3.969664 Å | 3.969664 Å | 3.906150 Å |
| 108 | | 3.953786 Å | 3.953786 Å | 3.953786 Å |
| 256 | | 4.001422 Å | 4.001422 Å | 3.874392 Å |
| 500 | | 3.890271 Å | 3.890271 Å | 3.890271 Å |

c. Temperature

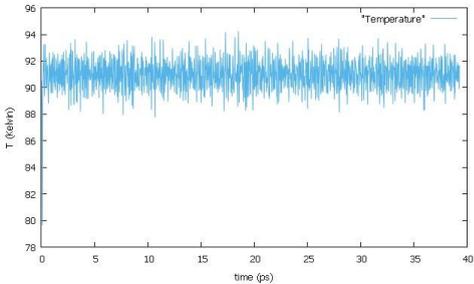
Dilihat dari Gambar 4.2.9, 4.2.10 dan 4.2.11 Suhu Argon sudah berada pada keadaan equilibrium dimana rata-rata suhu pada sistem terhadap waktu sama dengan suhu yang ditentukan. Sistem equilibrium pada waktu 0.02ps.



Gambar 4.2.9 Suhu pada 80 Kelvin



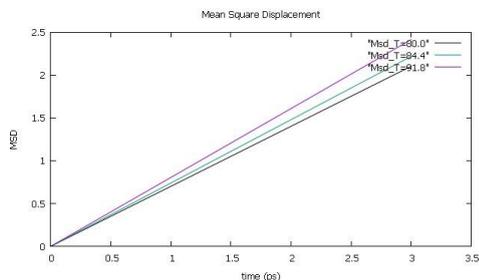
Gambar 4.2.10 Suhu pada 84,4 Kelvin



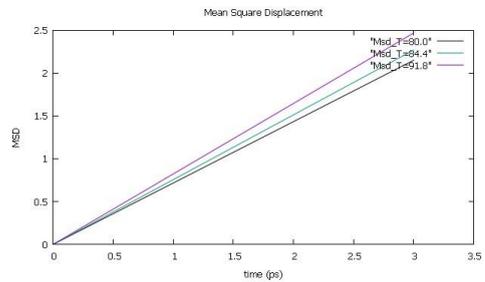
Gambar 4.2.11 Suhu pada 91,8 Kelvin

d. Mean Square Displacement (MSD)

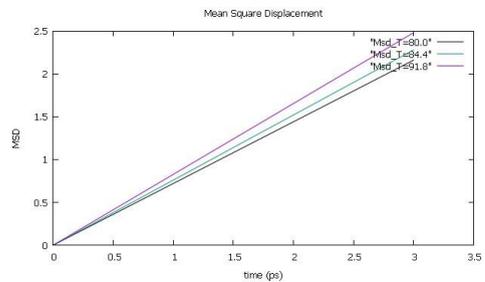
Terlihat pada Gambar 4.1.13, 4.1.14, 4.1.15 dan 4.1.16 perubahan nilai MSD paling besar terdapat pada suhu 91,8°K. Semakin besar suhu perubahan posisi setiap waktunya juga akan semakin besar.



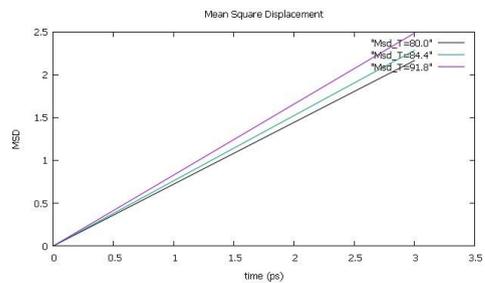
Gambar 4.2.13 MSD pada N=32 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.2.14 MSD pada N=108 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.2.15 MSD pada N=256 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



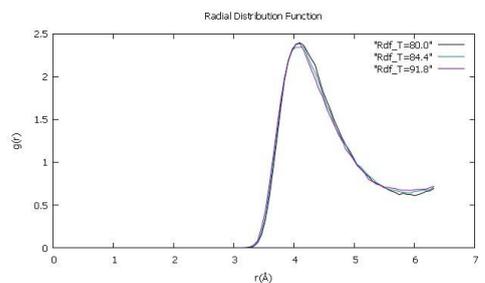
Gambar 4.2.16 MSD pada N=500 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8

4.3 Hasil Algoritma Beeman

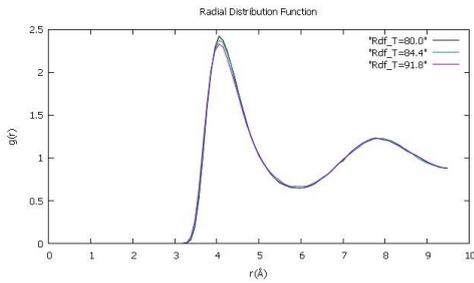
a. Final Condition

Perubahan posisi molekul sama halnya dengan Final Condition yang terjadi pada algoritma Velocity Verlet.

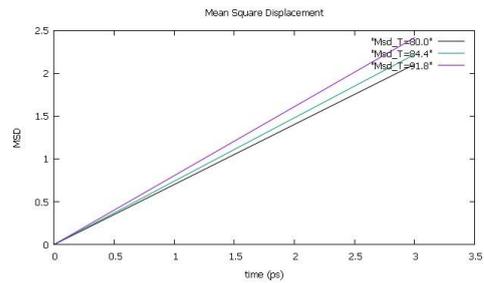
b. Radial Distribution Function (RDF)



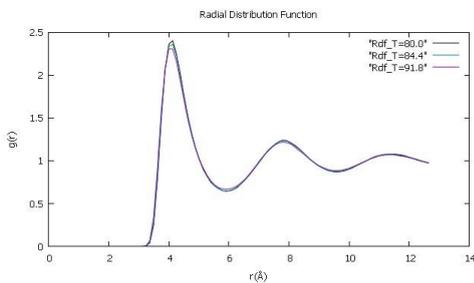
Gambar 4.3.5 RDF pada N=32 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



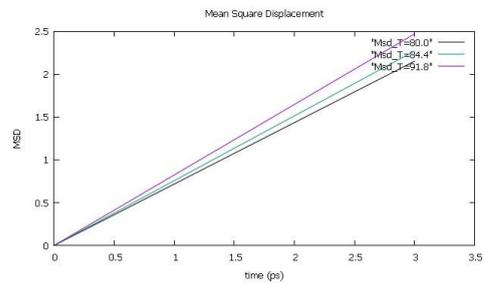
Gambar 4.3.6 RDF pada N=108 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



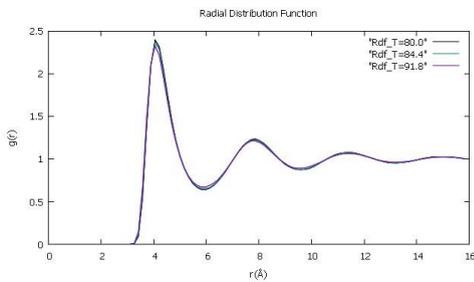
Gambar 4.3.13 MSD pada N=32 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



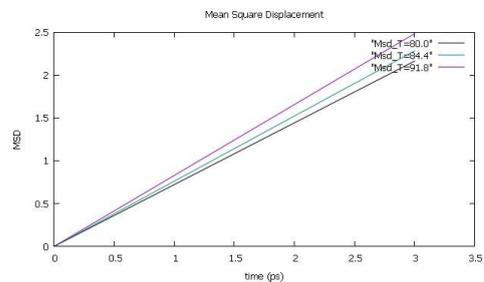
Gambar 4.3.7 RDF pada N=256 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



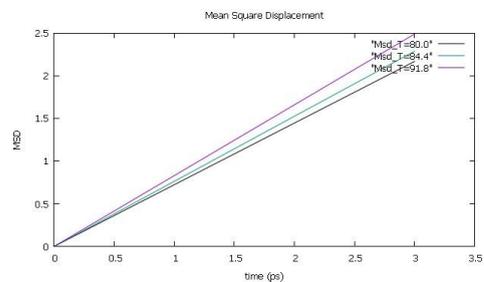
Gambar 4.3.14 MSD pada N=108 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.3.8 RDF pada N=500 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.3.15 MSD pada N=256 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8



Gambar 4.3.16 MSD pada N=500 dengan T=80, T=84,4 dan T=91,8

Pada Gambar 4.2.5, 4.2.6, 4.2.7 dan 4.2.8 dengan jumlah partikel sebesar 32, 108, 256 dan 500, perubahannya tidak begitu signifikan.

Tabel 1.2 Jarak pada *peak* RDF dengan algoritma *Beeman*

| N Molekul | Suhu | 80 Kelvin | 84.4 Kelvin | 91.8 Kelvin |
|-----------|------|------------|-------------|-------------|
| 32 | | 4.096694 Å | 4.160208 Å | 4.096694 Å |
| 108 | | 4.049058 Å | 4.049058 Å | 4.049058 Å |
| 256 | | 4.128451 Å | 4.128451 Å | 4.001422 Å |
| 500 | | 4.049058 Å | 4.049058 Å | 4.049058 Å |

c. Temperature

Hasil perubahan suhu yang terjadi pada simulasi Argon dengan variasi jumlah molekul sebanyak 32, 108 dan 500. Dengan suhu masing perjumlah molekul sebesar 80°K , 84,4°K dan 91,8°K, menghasilkan grafik yang identik dari hasil algoritma *Velocity Verlet*.

d. Mean Square Displacement (MSD)

Terlihat pada Gambar 4.2.13, 4.2.14, 4.2.15 dan 4.2.16 perubahan nilai MSD paling besar terdapat pada suhu 91,8°K. Semakin besar suhu perubahan posisi setiap waktunya juga akan semakin besar.

4.4 Analisis Hasil Simulasi

Dari semua grafik RDF yang dihasilkan dapat dilihat bahwa pada suhu 91,8°K yang merupakan suhu dimana Argon memiliki fasa gas. Memiliki jarak pasangan partikel terdekat dengan probabilitas RDF yang lebih besar dari nol. Fasa gas memiliki perubahan jarak yang lebih besar setiap waktu dibandingkan dengan fasa cair dan padat. Sehingga, kemungkinan pasangan partikel pada fasa gas dengan jarak yang lebih dekat lebih besar. Jumlah puncak (*peak*) dan nilai RDF merepresentasikan karakteristik dari fasa zat tersebut. Jumlah *peak* pada fasa padat akan lebih banyak dari pada fasa cair atau gas. Juga, nilai RDF akan meningkat jika suhu yang diteliti semakin kecil (menuju ke padat). Jumlah *peak* dipengaruhi oleh jumlah molekul dan suhu yang digunakan pada sistem, ketika jumlah molekul bertambah, maka data partikel yang diteliti juga akan bertambah sehingga mempengaruhi banyaknya nilai

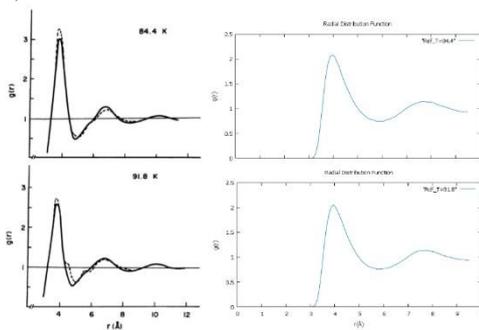
RDF yang dihitung. Kemudian, ketika suhu berada pada tingkat rendah jumlah *peak* akan lebih banyak dibandingkan dengan suhu yang tinggi.

Perubahan suhu sistem pada setiap waktu bernilai stabil pada rata-rata. Hal ini terjadi akibat metode *thermostat* yang digunakan yaitu dengan metode *velocity-rescaling*. Dimana kecepatan setiap molekul mempengaruhi besar suhu pada sistem. Sehingga metode *velocity-rescaling* mengatur suhu sedemikian sehingga suhu yang ada pada sistem akan sesuai dengan suhu yang ingin diteliti. Suhu yang dipertahankan stabil pada rata-rata sehingga memenuhi kriteria dari *canonical ensemble* (NVT). Dari hasil gambar *temperature* keadaan *equilibrium* tercapai dengan waktu kurang dari 0.02ps.

Rata-rata perubahan molekular *argon* pada setiap iterasinya memiliki tingkat perubahan yang berbeda-beda. Pada fasa padat yaitu dalam suhu 80°K memiliki perubahan jarak yang sedikit setiap waktunya dibandingkan dengan fasa gas dan cair. Setiap peningkatan suhu nilai dari *Mean Square Displacement* (MSD) juga semakin meningkat. Hal ini dikarenakan suhu atau fasa suatu molekular menentukan pergerakan setiap molekul. Ketika berada pada suhu tinggi, pergerakan dari molekul akan meningkat sehingga perubahan posisi setiap waktu juga semakin besar.

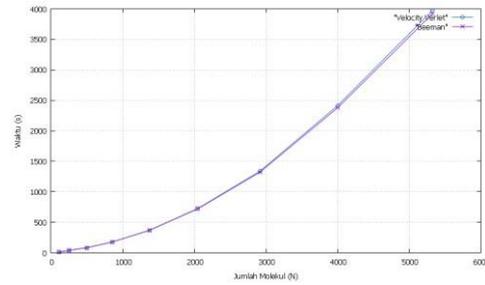
4.5 Analisis Perbandingan Algoritma Velocity Verlet dengan Beeman

Dari hasil RDF pada algoritma *Velocity Verlet* dengan jumlah molekul 108 dan pada suhu 84.4°K dapat disimpulkan bahwa grafik yang dihasilkan oleh program adalah benar. Berikut perbandingan grafik RDF dari hasil simulasi (kanan) dan eksperimen (kiri).



Gambar 4.5.1 Grafik hasil eksperimen [1] (kiri) dan grafik hasil simulasi (kanan)

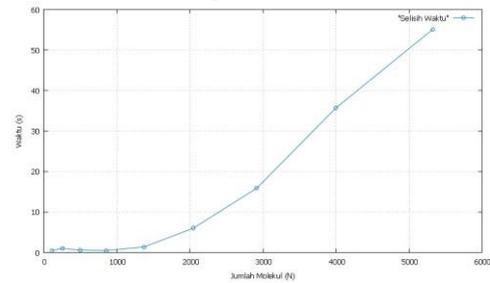
Dari Gambar 4.5.1 dapat dilihat bahwa grafik yang dihasilkan dari simulasi dengan eksperimen menunjukkan hasil yang identik [1]. Dengan *peak* berada pada 3,953786Å dengan suhu 84,4 Kelvin dan 91,8 Kelvin.



Gambar 4.5.2 Waktu simulasi terhadap jumlah molekul

Waktu komputasi yang diperlukan pada algoritma *Velocity Verlet* lebih sedikit dibandingkan dengan algoritma *Beeman*. Dapat dilihat dari Gambar 4.5.2 dimana untuk setiap jumlah partikel, algoritma *Beeman* membutuhkan waktu yang lebih banyak. Hal ini dikarenakan percepatan pada saat, sebelum dan sesudah iterasi diperhitungkan.

Pada setiap skenario jumlah molekul perbedaan waktu eksekusi tidak berbeda jauh. Berikut grafik perbedaan waktu setiap skenario.



Gambar 4.5.3 Selisih waktu simulasi terhadap jumlah molekul

Pada Gambar 4.5.3 terlihat bahwa setiap penambahan jumlah molekul mempengaruhi perbedaan waktu eksekusi program dimana jika jumlah molekul ditambah maka perbedaan waktu juga akan bertambah. Hal ini terjadi karena jumlah molekul menentukan iterasi pada perhitungan jarak dan kecepatan pada setiap molekul.

V. Kesimpulan

Berdasarkan hasil yang telah diperoleh, kesimpulan yang dapat diambil setelah mempelajari dan mengimplementasikan algoritma *Velocity Verlet* dan *Beeman* pada simulasi *Molecular Dynamics* adalah :

1. Dengan menggunakan algoritma *Velocity Verlet* dan *Beeman* dapat diberikan informasi posisi dan jarak setiap molekulnya dengan menggunakan perhitungan percepatan atau gaya dibagi dengan massa atau turunan pertama dari potensial *Lennard Jones*.
2. Berdasarkan analisis grafik waktu simulasi terhadap jumlah molekul dapat disimpulkan bahwa waktu simulasi menggunakan algoritma *Velocity Verlet* lebih kecil dibandingkan dengan waktu

simulasi dengan algoritma *Beeman*. Dengan selisih waktu yang meningkat berbanding lurus dengan jumlah molekul yang digunakan berdasarkan grafik selisih waktu simulasi terhadap jumlah molekul.

3. Berdasarkan analisis grafik *Radial Distribution Function* (RDF) jumlah molekul dan besar suhu pada sistem mempengaruhi puncak (peak) grafik dari RDF. Jumlah peak pada grafik RDF akan bertambah sejalan dengan jumlah molekul yang diteliti. Sedangkan, besar nilai peak RDF dipengaruhi oleh suhu yang diteliti. Besar suhu berbanding terbalik dengan besar nilai RDF. Karena, ketika suhu berada pada tingkat yang rendah, penyebaran molekul tidak akan terlalu jauh sehingga probabilitas untuk molekul yang berada pada jarak yang paling dekat bernilai besar.
4. Berdasarkan analisis grafik Mean Square Displacement (MSD) besar suhu mempengaruhi perubahan nilai MSD. Ketika fasa mendekati padat nilai MSD akan lebih kecil dibandingkan dengan fasa yang mendekati gas. Hal ini terjadi karena pergerakan molekul dipengaruhi oleh kecepatan sehingga ketika kecepatan setiap molekul meningkat berarti suhu juga ikut meningkat.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] B. J. Yoon, Radial distribution function of liquid argon according to significant structure theory, 1981.
- [2] D. F. a. B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2002.
- [3] M. P. Allen, Introduction to Molecular Dynamics Simulation, 2004.
- [4] [Online]. Available: <http://www.cobalt.chem.ucalgary.ca/>. [Accessed 18 September 2015].
- [5] A. Fardiyani, Simulasi Dinamika Molekular Sistem Lennard-Jones Mikrokanonis-NVE, 2011.
- [6] [Online]. Available: <http://karin.fq.uh.cu/>. [Accessed 18 September 2015].
- [7] [Online]. Available: <http://demonstrations.wolfram.com/>. [Accessed 30 Oktober 2014].
- [8] d. Lamberl M. Surhone, Beeman's Algorithm, 2010.
- [9] E. Ippoliti, What is Molecular Dynamics?, 2011.
- [10] d. Tamar Schlick, Molecular Modeling and Simulation An Interdisciplinary Guide, 2010.
- [11] "COMPUTER SIMULATION METHODS IN CHEMISTRY AND PHYSICS," [Online]. Available: <http://www-thphys.physics.ox.ac.uk/>. [Accessed 9 Agustus 2015].
- [12] A. R. Muchtar, SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR SISTEM MOLEKUL ARGON DAN GRAPHENE DENGAN MENGGUNAKAN PERANGKAT LUNAK DL_POLY, 2012.
- [13] [Online]. Available: <http://www.fisica.uniud.it/>. [Accessed 12 September 2015].
- [14] Y. Peter, The leapfrog method and other "symplectic" algorithms for integrating Newton's laws of motion, 2014.
- [15] d. Scott M. Auerbach, Handbook of Layered Materials, 2004.
- [16] [Online]. Available: <http://www.britannica.com/science/argon-chemical-element/images-videos>. [Accessed 26 Agustus 2015].
- [17] [Online]. Available: <https://www.mathesongas.com/>. [Accessed 18 September 2015].
- [18] C. S. Barrett, The Crystal Structures of Argon and Its Alloys, 1965.