

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 , $84,4^{\circ}\text{K}$ dan $91,8^{\circ}\text{K}$. 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*