

INTISARI

SIMULASI DIFUSI MOLEKUL AROMATIS DENGAN PENDEKATAN GERAK ACAK MENGGUNAKAN METODE MONTE CARLO

Oleh

Bobby Rachman Hanafi
15/383165/PA/16825

Difusi merupakan fenomena fisis yang sering ditemukan sehari-hari dimana suatu partikel bergerak acak untuk berpindah konsentrasi. Telah dilakukan penelitian untuk melakukan simulasi difusi pada molekul aromatis dengan menggunakan metode Monte Carlo. Simulasi difusi ini menggunakan model gerak acak yang memainkan peran penting karena mampu mewakili gerak partikel yang mirip pada kondisi nyata. Sampel lintasan pada simulasi ini dibangkitkan dengan bilangan acak yang sudah tersedia pada pustaka bahasa *Python*. Modifikasi pada simulasi ini juga dilakukan dengan memodifikasi ruang gerak molekul menjadi 3 bagian yaitu bagian sumber yang memiliki ukuran langkah panjang, bagian penyerap yang memiliki ukuran langkah terpendek dan bagian normal yang memiliki ukuran langkah yang panjang namun tidak sepanjang bagian sumber. Modifikasi ruang gerak tersebut akan mempengaruhi distribusi molekul aromatis, dimana probabilitas tertinggi menemukan molekul berada pada bagian penyerap karena molekul “terjebak” pada bagian tersebut. Pada simulasi ini juga didapatkan variabel yang mempengaruhi yaitu jarak tempuh R , *mean free path* λ , dan jumlah langkah N , dimana hubungan antar variabel tersebut digambarkan dengan grafik fungsi akar kuadrat.

Kata-kata kunci: Difusi, Bilangan acak, Gerak acak, Molekul aromatis, Monte Carlo

ABSTRACT

DIFUSSION SIMULATION OF AROMATIC MOLECULES WITH RANDOM WALK MODEL USING MONTE CARLO METHOD

By

Bobby Rachman Hanafi
15/383165/PA/16825

Diffusion is a physical phenomenon, in which the molecules move randomly moving to the different concentrations. Research to simulating diffusion of aromatic molecules using Monte Carlo method has been well-conducted. Such a diffusion simulation using a random walk model that plays an important role because it is able to represent the motion of particles that are similar in real conditions. The sample paths was generated by random numbers that was already available in the Python library. The idea to modificate such a simulation was to divide the molecular motion space into 3 parts, that part is the source part which has the longest step size, the absorbent part which has the shortest step size and the normal part which has a long step size but not as long as the source part. The modification of the molecular motion space affects the distribution of aromatic molecules, where the highest probability of finding molecules is in the absorbent part because the molecules has been "trapped" in that part. In this simulation was also found the variables that affecting the simulation, these variables are the distance traveled R , mean free path λ , and the number of molecule steps N . The relationship between these variables was illustrated by the graph of the square root function.

Keywords : Diffusion, Random Number, Random Walk, Aromatic Molecules, Monte Carlo