ISSN: 2502-2318 (Online)
ISSN: 2443-2911 (Print)
Alamat URL http://omega.uhamka.ac.id/

ω | o m e g a

Omega: Jurnal Fisika dan Pendidikan Fisika **3** (1), 11 - 14 (2017)

Analisis Algoritma Numerov dalam Komputasi Persamaan Schrödinger 1D dengan Teknik Dynamic Programming

Muhammad Faruq Nuruddinsyah*

Program Studi Magister Ilmu Komputer, Universitas Indonesia
Kampus UI Depok, Depok 16424

Abstrak
Di paper ini akan disajikan analisis algoritma Numerov dalam komputasi persamaan Schrödinger 1D dengan teknik Dynamic Programming. Algoritma Numerov merupakan algoritma yang populer untuk menyelesaikan persamaan tersebut. Sebagai pembanding dari implementasi algoritma Numerov adalah berupa hasil solusi eksak dari persamaan Schrödinger yang diselesaikan dengan cara analitis matematis.

Kata kunci: Algoritma Numerov, persamaan Schrödinger 1D, teknik Dynamic Programming

*Penulis koresponden. Alamat email: muhammad.faruq61@ui.ac.id

Pendahuluan

Komputer dan komputasi kuantum mendasarkan dirinya pada hukum mekanika kuantum. Salah satu dasar dari mekanika kuantum adalah persamaan Schrödinger. Selain solusi analitis matematis, persamaan Schrödinger juga membutuhkan solusi numerik yang cepat dan reliabel [1]. Dalam berbagai literatur dijumpai beberapa algoritma yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan tersebut [2] dan salah satu algoritma yang banyak digunakan adalah algoritma Numerov [3,4].

Di paper ini akan dibahas analisis dan implementasi algoritma Numerov dalam komputasi persamaan Schrödinger 1D dengan teknik Dynamic Programming. Sebagai pembanding dari komputasi numerik ini adalah solusi eksak dari persamaan Schrödinger 1D tersebut.

Secara ringkas, paper diorganisasikan ke dalam 6 (enam) bagian, yaitu pendahuluan; persamaan Schrödinger 1D; algoritma Numerov; implementasi algoritma; ilustrasi numerik, analisis dan pembahasan; serta kesimpulan.

Persamaan Schrödinger 1D

Permasalahan dasar utama dalam mekanika kuantum adalah bagaimana menyelesaikan persamaan Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_n(r) + V(r)\Psi_n(r) = E_n\Psi_n(r) \tag{1}$$

dengan $\hbar$ adalah konstanta Plank, m massa partikel, V energi potensial, E_n energi partikel (energi nilai eigen), $\Psi_n(r)$ fungsi gelombang (energi fungsi eigen), dan n adalah bilangan kuantum untuk spektrum energi diskrit.

Untuk partikel tunggal yang bergerak di dalam satu dimensi (1D), pers. (1) di atas akan berbentuk *ordinary differential equation* (ODE), dan lebih dikenal sebagai persamaan Schrödinger 1D *time independent* [5]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \tag{2}$$

Jika fungsi gelombang $\Psi(x)$ mempunyai nilai

$$\Psi(x) = Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{3}$$

maka turunan pertama dari $\Psi(x)$ adalah

$$\frac{\mathrm{d}\Psi(x)}{\mathrm{d}x} = ik \times Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{4}$$

dan turunan kedua fungsi $\Psi(x)$ menjadi

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = ik \times ik \times Ae^{i(kx-\omega t)} \tag{5}$$

sehingga

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\Psi(x). \tag{6}$$

Substitusi pers. (6) ke dalam pers. (2) menghasilkan persamaan

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{7}$$

sehingga

$$k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}. \tag{8}$$

Dalam mekanika kuantum, nilai energi E_n dapat ditulis sebagai

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \tag{9}$$

jika $k_n = \frac{n\pi}{a}$ maka

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}. \tag{10}$$

Pers. (8) dan (10) di atas selanjutnya akan digunakan dalam penyelesaian persamaan Schrödinger 1D secara numerik.

Algoritma Numerov

Algoritma Numerov merupakan algoritma yang populer untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger 1D [6,7]. Algoritma Numerov merupakan formula spesial untuk mengintegrasikan persamaan diferensial dalam bentuk

$$\psi''(x) = f(x)\psi(x). \tag{11}$$

Untuk persamaan Schrödinger 1D *time independent*, nilai $f(x)$ adalah [8,9]

$$f(x) = -\frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}. \tag{12}$$

Algoritma Numerov dapat diturunkan dari ekspansi Taylor fungsi ψ_i [10]:

$$\psi_{i\pm1} = \psi_i \pm \Delta x\psi_i' + \frac{\Delta x^2}{2!}\psi_i'' \pm \frac{\Delta x^3}{3!}\psi_i^{(3)} + \frac{\Delta x^4}{4!}\psi_i^{(4)} \pm \frac{\Delta x^5}{5!}\psi_i^{(5)} + \mathcal{O}\big(\Delta x^6\big) \tag{13}$$

Dengan menambahkan ψ_{i+1} dan ψ_{i-1} maka diperoleh

$$\psi_{i+1} + \psi_{i-1} = 2\psi_i + (\Delta x)^2\psi_i'' + \frac{(\Delta x)^4}{12}\psi_i^{(4)}. \tag{14}$$

Suku derivatif keempat $\psi_i^{(4)}$ dapat juga ditulis sebagai

$$\psi_i^{(4)} = \frac{\psi_{i+1}'' + \psi_{i-1}'' - 2\psi_i''}{\Delta x^2} \tag{15}$$

dan dengan substitusi $-k^2(x)\psi(x)$ untuk $\psi''(x)$ maka diperoleh algoritma Numerov sebagai berikut

$$\begin{aligned}\left(1 + \frac{(\Delta x)^2}{12}k_{i+1}^2\right)\psi_{i+1} = 2\left(1 - \frac{5(\Delta x)^2}{12}k_i^2\right)\psi_i \\ - \left(1 + \frac{(\Delta x)^2}{12}k_{i-1}^2\right)\psi_{i-1} \\ + \mathcal{O}\big(\Delta x^6\big).\end{aligned} \tag{16}$$

Implementasi Algoritma

Implementasi algoritma untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger 1D dalam paper ini terdiri atas 3 (tiga) tahap, yaitu tahap inisialisasi, tahap memoization dan komputasi, serta tahap normalisasi.

NUMEROV

```
// Tahap Inisialisasi
V, k, psi, psi_normalised ← array(N)
V[1], V[n] ← 10^6

N ← 10
n ← 1
E ← n^2 × (π^2/2)

for i ← 1 to N
      do k[i] ← 2 × (E - V[i])

psi[1] ← 0
psi[2] ← 1
dx ← 1 / N

// Tahap Memoization dan Komputasi
for i ← 2 to N - 1
      do psi[i + 1] ← (2 × (1 - (5 × dx^2 / 12)
         × k[i]) × psi[i] - (1 + (dx^2 / 12)
         × k[i - 1]) × psi[i - 1]) / (1 + (dx^2 / 12)
         × k[i + 1])

// Tahap Normalisasi
for i ← 2 to N - 1
      do sum ← sum + psi[i]^2

for i ← 1 to N
      do psi_normalised[i] ← psi[i]^2 / sum
```

Tahap inisialisasi berisi inisialisasi beberapa variabel dalam sistem persamaan Schrödinger yang akan diselesaikan, diantaranya yaitu potensial V, bilangan gelombang k, fungsi gelombang ψ, bilangan kuantum n, energi kuantum E, serta dx. Tahap berikutnya adalah tahap memoization dan komputasi. Tahap ini merupakan implementasi algoritma Numerov dari persoalan dalam sistem persamaan Schrödinger. Tahap terakhir adalah tahap normalisasi. Dalam teori mekanika kuantum, fungsi gelombang akan bernilai (mempunyai arti fisis) jika ia dilakukan proses normalisasi.

Ilustrasi Numerik, Analisis, dan Pembahasan

Bagian berikutnya dari paper ini adalah bagian ilustrasi numerik, analisis, dan pembahasan. Hal yang disajikan dalam bagian ilustrasi numerik adalah berupa hasil implementasi algoritma Numerov dalam komputasi persamaan Schrödinger 1D. Untuk implementasi algoritma tahap ini, persamaan Schrödinger 1D diasumsikan dalam kondisi *stationary state* (yaitu nilai $\hbar = 1$ dan $m = 1$), dengan lebar $a = 1$, $dx = 0.1$, dan bilangan kuantum $n = 1$. Data hasil implementasi algoritma disajikan dalam Tabel 1 dan Gambar 1.

Tabel 1 Data hasil implementasi algoritma Numerov dalam komputasi persamaan Schrödinger 1D.

x	Numerov	Eksak	Error
0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	0.19471177	0.1909830	0.003729
0.2	0.7044708	0.6909830	0.013488
0.3	1.3345588	1.309017	0.025542
0.4	1.848294	1.809017	0.035277
0.5	2.038967	2.0	0.038967
0.6	1.8442168	1.809017	0.0352
0.7	1.334434	1.309017	0.025417
0.8	0.70434594	0.6909830	0.013363
0.9	7.131198E-8	3.000E-32	7.13E-08

Dari Gambar 1 terlihat bahwa terdapat pola grafik yang sama (membentuk pola grafik ternormalisasi), baik hasil algoritma Numerov maupun hasil solusi eksak. Namun demikian, dengan lebar $a = 1$ dan $dx = 0.1$, ada selisih atau error antara kedua metode tersebut dalam penyelesaian persamaan Schrödinger 1D. Jika dirata-rata, error ini sebesar 0.019098.

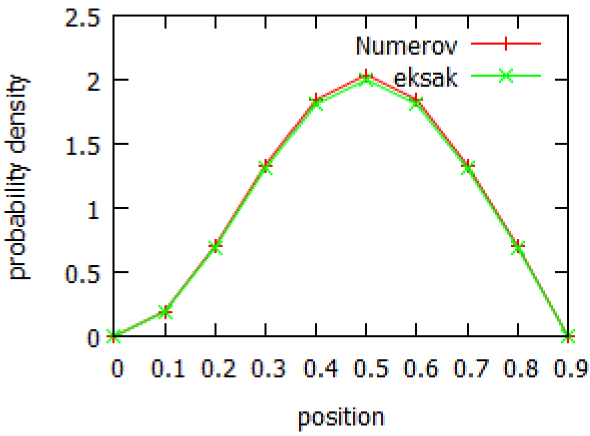
Algoritma Numerov merupakan solusi numerik hasil ekspansi Taylor sampai suku ke-6 sehingga memberikan error sebesar $\mathcal{O}(\Delta x^6)$ seperti yang telah dibahas di bagian sebelumnya. Sedangkan nilai solusi eksak (analitis matematis) didapat dengan menggunakan rumus dari teori mekanika kuantum

$$\frac{|\psi(x)|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{17}$$

dengan

$$|\psi(x)|^2 = |N|^2 \sin^2 k_n x \tag{18}$$

N adalah konstanta normalisasi, yaitu $N = \sqrt{2/a}$ [11,12].

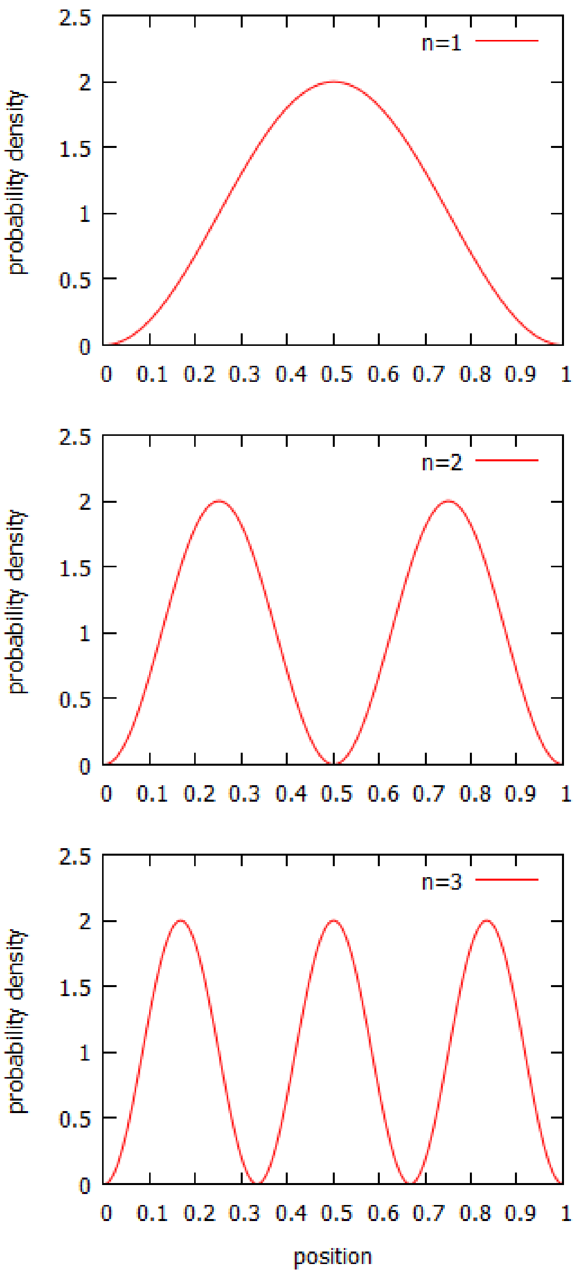


Gambar 1 Grafik *probability density* sebagai fungsi posisi hasil implementasi algoritma Numerov dan solusi eksak dalam penyelesaian persamaan Schrödinger 1D. Grafik hasil komputasi ditunjukkan dengan warna merah, sedangkan hasil solusi eksak berwarna hijau. Ada selisih atau error antara hasil kedua metode tersebut.

Tahapan penelitian berikutnya adalah memanfaatkan implementasi algoritma Numerov yang telah dibuat untuk aplikasi berbagai bilangan kuantum n, sebagai contoh adalah $n = 1, 2, 3$ dengan masing-masing $dx = 0.001$. Hasil komputasi implementasi algoritma Numerov ini ditunjukkan dalam Gambar 2.

Dari Gambar 2 terlihat bahwa dengan nilai $dx = 0.001$, grafik menunjukkan pola yang halus (*smooth*). Pola ini berbeda dengan grafik pada Gambar 1. Gambar 1 sengaja dipilih dengan $dx = 0.1$ karena akan memberikan nilai error yang lebih jelas.

Pada Gambar 2 juga terlihat ada 3 (tiga) grafik, yaitu grafik untuk bilangan kuantum $n = 1$, $n = 2$, dan $n = 3$. Pola yang dibentuk dari ketiga grafik hasil komputasi algoritma Numerov ini sudah sesuai dengan referensi [12] yang berbentuk distribusi normal. Pada grafik dengan $n = 1$, ada satu nilai *probability density* tertinggi, untuk $n = 2$ terdapat dua nilai tertinggi, dan pada $n = 3$ dijumpai tiga rapat peluang tertinggi. Luas area di bawah kurva untuk masing-masing grafik adalah bernilai 1 (grafik ternormalisasi) [12].



Gambar 2 Grafik *probability density* sebagai fungsi posisi hasil implementasi algoritma Numerov dalam penyelesaian persamaan Schrödinger 1D untuk bilangan kuantum $n = 1, 2, 3$ dan $dx = 0.001$. Hasil grafik sesuai dengan referensi [12].

Kesimpulan

Telah dilakukan penelitian tentang analisis algoritma Numerov dalam komputasi persamaan Schrödinger 1D. Langkah-langkah dalam penelitian ini adalah menurunkan metode Numerov dari ekspansi Taylor. Metode tersebut selanjutnya diimplementasikan ke dalam persamaan fungsi gelombang Schrödinger 1D dengan menggunakan teknik Dynamic Programming. Selanjutnya, hasil dari metode numerik ini dibandingkan dengan hasil solusi eksak. Dengan nilai dx pada penelitian sebesar 0.1 menghasilkan error sebesar 0.019098. Jika nilai dx dibuat menjadi 0.001, maka grafik yang dihasilkan menjadi halus dan sesuai dengan referensi yang penulis gunakan.

Referensi

[1] T.E. Simos, Comput. Math. Applic. **33** (10), 67-78 (1997).

[2] T.E. Simos, MATCH Comm. in Math. and in Comp. Chem. **50**, 7-26 (2004).

[3] J. Vigo-Aguiar dan H. Ramos, J. Math. Chem. **37** (3), 255-262 (2005).

[4] A. Soriano, E.A. Navarro, J.A. Porti dan V. Such, J. Appl. Phys. **95** (12), 8011-8018 (2004).

[5] C. Franchini, *Computational Quantum Mechanics*, (University of Vienna). pp.12-24.

[6] C. Tatu, M. Rizea dan N. Puscas, U.P.B. Sci. Bull., Series A, **69** (3), 57-72 (2007).

[7] B.P. Shah, Int. J. Adv. Appl. Math. and Mech. **2** (2), 102-109 (2014).

[8] M. Pillai, J. Goglio dan T.G. Walker, Am. J. Phys. **80**, 1017 (2012).

[9] A.M. Yasser, G.S. Hassan dan T.A. Nahool, Int. J. New. Hor. Phys. **2** (1), 33-36 (2015).

[10] M. Troyer, *Computational Quantum Physics*, (ETH Zürich, 2015). pp.12-13.

[11] N. Zettili, *Quantum Mechanics Concepts and Applications*, (John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2009). pp.165-166.

[12] A.C. Phillips, *Introduction to Quantum Mechanics*, (John Wiley & Sons, Ltd, West Sussex, 2003). pp.44-45.