

**Assallammu'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh**  
**Selamat pagi dan salam sejahtera bagi kita semua**

**Yang terhormat,**

Bapak Koordinator Kopertis Wilayah III, Prof. Dr. ....,  
 Bapak Ketua STIKOM CKI, Prof. Dr. ....  
 Bapak/Ibu Ketua Yayasan Pendidikan STIKOM CKI .....,  
 Bapak/Ibu Anggota Senat Akademik STIKOM CKI,  
 Bapak/Ibu Ketua Jurusan dan Kaprodi di lingkungan STIKOM CKI,  
 Para staff pengajar di lingkungan STIKOM CKI,  
 Para Orang Tua Wisudawan/wati,  
 Para Wisudawan/wati  
 Serta Para Undangan dan Hadirin yang sangat saya hormati,

Pada kesempatan yang berbahagia ini, marilah kita bersama-sama memanjatkan puji syukur kehadirat Allah SWT, yang telah melimpahkan rahmat dan karunia-Nya kepada kita semua, sehingga pada pagi hari ini kita diizinkan dapat berkumpul di ruangan ini, dalam keadaan sehat walafiat, untuk mengikuti upacara Wisuda Angkatan ke 5, STIKOM CKI.

Pertama-tama, perkenankanlah saya mengucapkan terima kasih yang setinggi-tingginya kepada Bapak Ketua STIKOM CKI yang telah memberi kepercayaan dan kesempatan kepada saya untuk menyampaikan orasi ilmiah di hadapan sidang yang terhormat, serta izinkan saya mengucapkan selamat kepada para orang tua wisudawan/wati dan wisudawan/wati.

**Hadirin Yang Mulia,**

Pada kesempatan ini, izinkanlah saya menyampaikan orasi ilmiah, dengan judul

**”PEMANFAATAN SIMULASI KOMPUTER BAGI PENGEMBANGAN  
 SAINS DAN TEKNOLOGI DI INDONESIA”**

Saya membagi orasi ilmiah atas 3 bagian, yaitu 1) *tentang Simulasi Komputer sebagai salah satu teknologi kunci*, 2) *tentang Pencapaian-pencapaian Simulasi Komputer di dalam Sains dan Teknologi*, dan 3) *tentang Potensi Pemanfaatan Simulasi Komputer untuk Pengembangan Sains dan Teknologi di Indonesia*.

**SIMULASI KOMPUTER**  
*Suatu Teknologi Kunci*

**Hadirin Yang Mulia,**

Dalam konteks metoda yang digunakan para ilmuwan untuk mempelajari dan mengembangkan berbagai ilmu pengetahuan, maka selama ini secara umum telah sangat dikenal apa yang disebut sebagai Metoda Pengamatan dan Metoda Eksperimental. Jika dikaitkan pada Ilmu Fisika, maka melalui berbagai Metoda Pengamatan yang dilakukan selama ini para ahli Fisika telah mampu menjelaskan berbagai gejala alam yang terjadi di alam semesta ini menjadi suatu pemahaman-pemahaman dan model-model yang memudahkan banyak pihak untuk mengerti dan mempelajarinya lebih lanjut. Demikian juga halnya dengan hasil dari berbagai Metoda

Eksperimental yang telah dilakukan oleh para ahli fisika untuk memahami dan menjelaskan berbagai kompleksitas gejala alam yang ada di muka bumi ini.

Dalam konteks penggunaan Metoda Pengamatan, maka deretan panjang nama-nama Ahli Fisika Dunia telah menyumbangkan penemuan dan pengembangan bagi Ilmu Fisika Modern. Apa yang ditemukan oleh Galileo dalam pengamatannya tentang gerak jatuh bebas telah menjadi dasar pengetahuan bagi umat manusia untuk mempelajari hukum gravitasi dan sifat-sifat pergerakan benda yang jatuh bebas. Apa yang disimpulkan oleh Kepler dari hasil pengamatannya tentang pergerakan planet tata surya juga telah menjadi dasar pengetahuan bagi kita semua dalam mempelajari hukum dan sifat-sifat pergerakan planet-planet tersebut. Demikian juga halnya dengan apa yang telah ditemukan oleh Newton dalam pengamatannya tentang sifat-sifat dan gaya-gaya benda bergerak adalah sangat diperlukan dan menjadi dasar dalam mempelajari dan mengembangkan pengetahuan tentang hukum-hukum, sifat-sifat dan gaya-gaya yang terlibat pada benda bergerak.

Dalam konteks penggunaan Metoda Eksperimental, maka deretan panjang nama-nama Ahli Fisika Dunia juga telah menyumbangkan berbagai penemuan dan pengembangan bagi Ilmu Fisika Modern. Eksperimen tentang elektron oleh Thomson telah menghasilkan suatu model Atom yang sangat berguna bagi kehidupan modern saat ini. Eksperimen tentang Radiasi Benda Hitam oleh Planck tidak hanya menghasilkan suatu model Kuantum yang sangat berguna bagi berbagai kemajuan Ilmu Fisika Modern tapi juga telah menuntun pengetahuan manusia ke arah yang lebih baik dalam mempelajari berbagai fenomena alam di jagad raya ini. Demikian juga halnya hasil eksperimen yang dilakukan oleh Röntgen tentang Sinar-X.

### **Hadirin Yang Mulia,**

Tanpa bermaksud untuk mengurangi nilai berbagai kelebihan dan manfaat temuan-temuan yang telah dihasilkan oleh para Ahli Fisika Dunia tersebut di atas, maka secara objektif harus dikatakan bahwa saat ini perkembangan Ilmu Fisika Modern ternyata membutuhkan suatu pendekatan baru, yaitu Pendekatan Simulasi Komputer, dalam mempelajari berbagai fenomena alam yang belum terkuak melalui pendekatan Metoda Pengamatan dan Metoda Eksperimental yang telah banyak dilakukan selama ini. Hal tersebut bukan hanya sebagai wujud dari implikasi logis atas semakin kompleksnya tuntutan dan kebutuhan hidup manusia modern, namun juga sebagai konsekuensi dari berbagai keterbatasan yang ada pada Metoda Pengamatan dan Metoda Eksperimental.

Dalam menggunakan Metode Pengamatan, para ilmuwan menemukan dan kemudian mencatat bagaimana kejadian suatu sistem yang diobservasi bergantung pada kondisi yang dipilih dan memungkinkan penarikan kesimpulan tentang prinsip yang menjadi dasar perilaku sistem yang diamati tersebut. Tujuannya adalah formulasi matematis dari prinsip-prinsip pokok, yang kemudian dikenal sebagai suatu teori dari fenomena yang diselidiki. Pada teori tersebut, ilmuwan mendeskripsikan bagaimana variabel-variabel tertentu bergantung satu sama lainnya dan bagaimana mereka berubah menurut waktu di bawah kondisi-kondisi tertentu. Deskripsi ini kebanyakan dilakukan dengan menggunakan persamaan differensial dan integral. Persamaan-persamaan hasil yang menyimpulkan deskripsi sistem atau proses tersebut dikenal sebagai *model matematis*.

Suatu *model matematis* yang telah ditetapkan tidak hanya menghasilkan deskripsi yang presisi dari proses yang diamati, tetapi juga memungkinkan prediksi hasil proses fisis serupa di dalam batas tertentu. Selanjutnya, suatu *model matematis* diujicobakan ke dalam dinamika dari variabel yang berbeda di alam semesta melalui Metoda Eksperimental, Demikianlah Metoda Pengamatan yang memberikan penemuan prinsip dasar berdasarkan hasil pengukuran, dan Metoda Eksperimental yang memberikan penerjemahan prinsip itu semua ke dalam variabel dan persamaan matematis bekerja bersama-sama dan saling timbal balik. Oleh karenanya, pendekatan eksperimen dan teoritis terhubung dengan erat satu dengan lainnya.

Dalam fisika dan kimia, fenomena yang dapat diselidiki dengan cara ini meluas berdasarkan satuan besaran yang sangat berbeda. Mereka dapat ditemukan mulai dari rentang pengamatan terkecil sampai yang terbesar, dari penyelidikan materi dalam mekanika kuantum sampai studi mengenai bentuk alam semesta. Jangkauan dimensi yang terjadi mulai dari jangkauan satuan nanometer ( $10^{-9}$  meter) pada studi materi pada level molekular sampai satuan  $10^{23}$  meter dalam studi kluster galaksi. Hal yang sama, skala waktu yang terjadi pada model-model ini (yaitu, interval waktu khas terjadinya fenomena yang diamati) adalah sangat berbeda. Mereka mencakup dalam contoh tersebut di atas mulai  $10^{-12}$  atau bahkan  $10^{-15}$  detik sampai  $10^{17}$  detik, jadi mulai dari piko-detik atau bahkan femto-detik sampai satuan interval waktu beberapa milyar tahun. Massa-massa yang terlibat dalam model juga berbeda, mulai  $10^{-27}$  kg untuk atom tunggal sampai  $10^{40}$  kg untuk keseluruhan galaksi.

Jangkauan yang luas dari fenomena yang digambarkan menunjukkan bahwa eksperimen tidak dapat selalu dilaksanakan dengan cara yang biasa dilakukan. Sebagai contoh dalam astrofisika, kemungkinannya hanya sedikit untuk membuktikan kebenaran model-model melalui pengamatan dan eksperimen. Pada sisi lain, model-model yang mendeskripsi alam cukup baik biasanya sangat rumit sehingga tidak dapat ditemukan solusi analitisnya. Sebagai contoh kasus persamaan Van der Waals (untuk mendeskripsikan gas-gas mapat) atau persamaan Boltzman untuk mendeskripsikan transport gas-gas atmosfer. Oleh karenanya, ilmuwan biasanya mengembangkan suatu model baru dan sederhana yang lebih mudah untuk menyelesaikannya.

Akan tetapi validitas model yang disederhanakan secara umum lebih terbatas. Untuk menurunkan model yang demikian ilmuwan biasanya menggunakan teknik-teknik misalkan metode perata-rataan, metode aproksimasi suksesif, metode pencocokan, analisis asimptotis dan homogenisasi. Sayangnya, banyak fenomena penting hanya dapat dideskripsikan melalui model yang lebih rumit. Tetapi kemudian model teoritis ini biasanya dapat hanya diuji dan dibuktikan dalam beberapa kasus sederhana. Sebagai contoh gerakan planet dan gaya gravitasi yang bekerja antara planet mengikuti hukum Newton. Seperti diketahui, orbit-orbit yang mengikuti hukum Newton dapat diturunkan dalam bentuk tertutup hanya berlaku pada kasus dua benda. Untuk kasus tiga benda, solusi analitis dalam bentuk tertutup tidak pernah ada. Hal ini berlaku bagi sistem tata surya kita dan sistem perbintang pada galaksi kita.

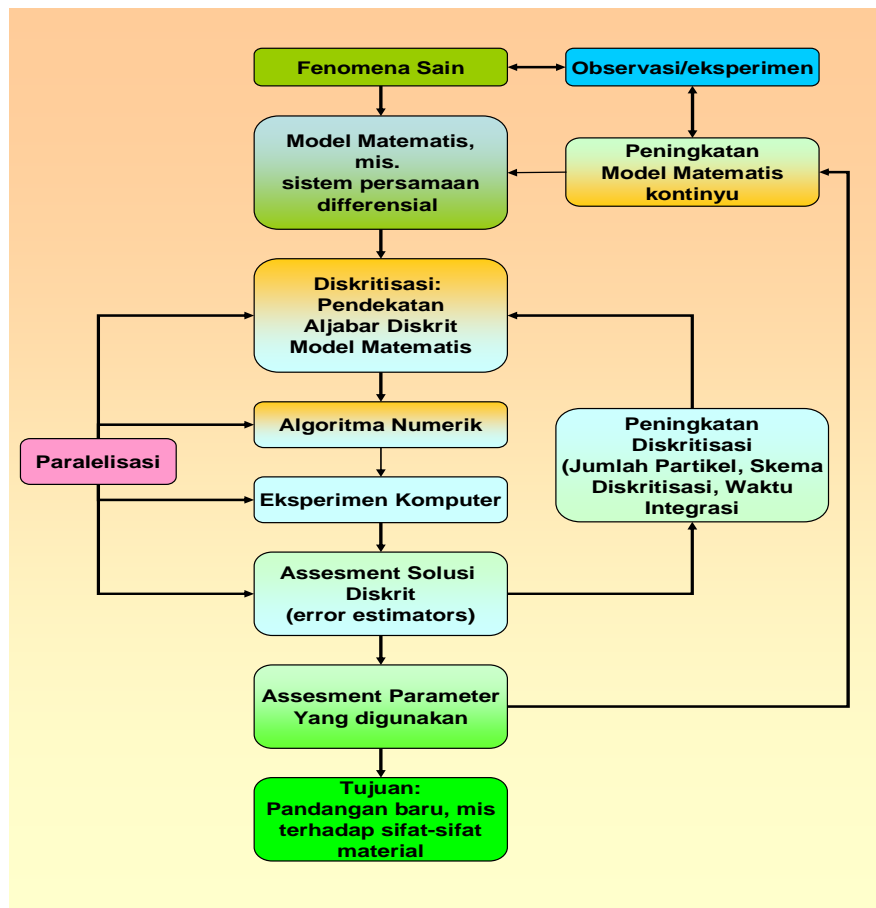
Banyak model, sebagai contoh pada ilmu material atau pada astrofisika, terdiri dari sejumlah besar benda (partikel) yang saling berinteraksi, benda ini misalkan bintang-bintang dan galaksi-galaksi atau atom-atom dan molekul-molekul. Dalam banyak kasus jumlah partikel dapat mencapai jutaan atau lebih. Sebagai contoh setiap meter kubik gas dalam keadaan normal ( temperatur 273,15 Kelvin dan tekanan 101,325

kilopascal) memuat  $2,68678 \times 10^{25}$  atom (konstanta Loschmidt). 12 gram carbon isotop  $C_{12}$  memuat  $6,02214 \times 10^{23}$  (konstanta Avogadro). Tetapi jumlah besar partikel tidak hanya terdapat pada skala mikroskopis. Galaksi kita, MilkyWay, terdiri dari 200 milyar bintang. Pandangan sekejap ke langit yang penuh bintang di suatu malam cerah mengandung pengertian bahwa dalam kasus ini tidak ada harapan sama sekali untuk menentukan suatu solusi persamaan pokok dengan hanya menggunakan secarik kertas dan pensil.

### **Hadirin Yang Mulia,**

Kasus-kasus di atas adalah sebagian dari alasan mengapa *simulasi komputer* sekarang telah muncul sebagai jalan masuk ilmu pengetahuan ketiga di samping pendekatan teoritis dan eksperimen. Bertahun-tahun sudah, simulasi komputer menjadi tool yang diperlukan untuk penyelidikan dan prediksi proses kimia dan fisika. Pada konteks ini simulasi komputer berarti prediksi matematis dari proses teknis atau fisika pada sistem komputer modern.

Suatu model fisika-matematis dikembangkan dari pengamatan. Persamaan yang diperoleh, pada kebanyakan kasus berlaku pada waktu dan ruang yang kontinyu, dianggap berada pada titik-titik diskrit terpilih dalam ruang dan waktu. Sebagai contoh, jika waktu didiskritisasi, solusi persamaan tidak dapat dihitung pada seluruh titik dalam waktu, tetapi hanya pada titik-titik terpilih pada sumbu waktu. Solusi persamaan kontinyu dihitung kira-kira pada titik-titik terpilih tersebut. Semakin rapat titik-titik itu dipilih, semakin akurat solusi dapat diaproksimasi. Perkembangan cepat teknologi komputer, yang telah mendorong peningkatan yang sangat besar pada kecepatan komputasi dan kapasitas memori sistem komputasi, memungkinkan simulasi yang semakin lebih realistis. Hasil-hasilnya dapat diinterpretasikan dengan bantuan teknik visualisasi yang sesuai. Jika hasil eksperimen fisis terkait tersedia, maka hasil simulasi komputer dapat dibandingkan secara langsung. Hal ini ditujukan untuk memverifikasi hasil simulasi komputer atau untuk meningkatkan metode yang digunakan atau modelnya. Gambar.1 menampilkan suatu gambaran skematis langkah-langkah simulasi numerik.



Gbr. 1. Presentasi skematis pendekatan khusus bagi simulasi numerik (Griebel et.al., 2007)

Untuk semua metoda yang ada, termasuk untuk suatu eksperimen komputer, suatu model matematis adalah selalu diperlukan. Bedanya adalah bahwa dalam Metoda Simulasi Komputer suatu solusi yang diharapkan diperoleh melalui komputasi yang dilakukan oleh suatu program komputer. Hal ini memungkinkan untuk mempelajari model yang secara signifikan lebih kompleks dan tentunya lebih realistis ketimbang model yang dapat diakses melalui pendekatan analitik. Di samping itu, hal ini menghindari setup eksperimen yang mahal. Sebagai tambahan, situasi dapat dipertimbangkan bahwa sebaliknya tidak dapat direalisasikan karena kekurangan teknis atau karena mereka dibuat mustahil karena konsekuensinya.

Jika kondisi berikut terjadi dalam suatu pengamatan atau eksperimen, maka Metoda Simulasi Komputer akan membantu dengan sangat baik, yaitu : (1) jika terdapat kesulitan atau mustahil menciptakan kondisi-kondisi yang diperlukan dalam laboratorium, (2) jika pengukuran hanya dapat dilakukan dengan tingkat kesulitan yang tinggi atau sangat sulit sekali, (3) jika eksperimen berlangsung terlalu lama atau berlangsung terlalu cepat untuk dapat diamati, atau (4) jika hasil-hasilnya sulit diinterpretasikan. Dengan kondisi seperti ini, simulasi komputer menjadikannya mungkin untuk mempelajari fenomena yang sebelumnya tidak dapat diakses melalui eksperimen.

Lebih jauh, jika model matematis yang handal tersedia untuk mendeskripsikan situasi yang ada cukup akurat, secara umum tidak menjadi suatu perbedaan bagi eksperimen komputer, apakah suatu eksperimen dilakukan pada tekanan satu atmosfer atau 1000 atmosfer. Namun hal ini akan berbeda, jika eksperimen benar-benar dilaksanakan

secara nyata. Simulasi yang berjalan pada temperatur kamar atau pada 10000 kelvin secara prinsip dapat diperlakukan dengan cara yang sama. Eksperimen komputer dapat menjangkau  $\mu$ -meter atau meter, fenomena yang berlangsung dalam femto-detik ( $10^{-15}$ ) atau beberapa juta tahun. Terlebih lagi, parameter eksperimen dapat dengan mudah diubah. Dan perilaku solusi model matematis terhadap perubahan parameter tersebut juga dapat dipelajari dengan mudah.

Pada saat ini, simulasi numerik juga menyediakan bantuan dan petunjuk bagi pemodelan yang benar dalam bidang seperti astronomi, dimana terdapat hanya sedikit kemungkinan untuk memverifikasi model. Pada teknologi nano, simulasi numerik dapat membantu memprediksi sifat-sifat material baru yang belum ada pada dunia nyata. Dan simulasi numerik dapat membantu mengidentifikasi material-material yang paling menjanjikan atau cocok. Kecenderungannya adalah menuju laboratorium virtual dimana material dirancang dan dipelajari pada komputer. Lebih lagi, simulasi menawarkan kemungkinan untuk menentukan rata-rata sifat-sifat karakteristik makroskopis dari material tersebut. Fakta sekarang, eksperimen komputer berfungsi sebagai link antara eksperimen laboratorium dan teori.

### **Hadirin Yang Mulia,**

Setiap langkah bagian dari komputer eksperimen harus memenuhi sejumlah persyaratan. Pertama dan terpenting, model matematis sebaiknya mendeskripsikan realitas seakurat mungkin. Secara umum, kompromi tertentu antara akurasi dalam solusi numerik dan kompleksitas pada model matematis harus diterima. Pada banyak kasus, kompleksitas model mengarah ke persyaratan memori dan waktu komputasi yang besar, khususnya jika fenomena bergantung waktu diamati. Tergantung pada formulasi masalah diskrit, beberapa "*nested-loops*" harus dieksekusi bagi ketergantungan waktu, bagi aplikasi operator, atau juga bagi perlakuan non-linieritas.

Dengan demikian riset saat ini terfokus pada pengembangan metode dan algoritma yang memungkinkan untuk menghitung solusi masalah diskrit secepat mungkin dan yang dapat mendekati solusi masalah kontinyu dengan sesedikit mungkin memori. Jadi secara umum model-model yang lebih kompleks dan lebih realistis memerlukan algoritma yang lebih cepat dan lebih "*powerful*". Sebaliknya, algoritma yang lebih baik memungkinkan penggunaan model yang lebih kompleks. Kemungkinan lain untuk merealisasikan masalah yang lebih besar adalah penggunaan "*komputer vektor*" dan "*komputer paralel*". Komputer vektor meningkatkan kinerjanya melalui pengolahan instruksi aritmatika yang mirip pada data yang disimpan dalam suatu vektor. Pada komputer paralel, beberapa lusin sampai ribuan prosesor yang "*powerful*" di rakit ke dalam satu sistem komputer. Prosesor-prosesor ini dapat bekerja secara bersamaan (*concurrently*) dan bebas (*independently*) dan dapat berkomunikasi satu dengan yang lainnya. Reduksi waktu komputasi bagi simulasi dicapai dengan pendistribusian komputasi yang penting ke beberapa prosesor. Sampai suatu derajat tertentu, kemudian komputasi dapat dieksekusi secara bersamaan. Sebagai tambahan, sistem komputer paralel secara umum memiliki suatu memori yang jauh lebih besar daripada komputer sekuensial. Dengan demikian, masalah-masalah besar dapat ditanganinya.

Sebagai contoh, ASC Red System merupakan komputer pertama yang memiliki kecepatan pemrosesan dalam teraflops per detik, artinya ia dapat memroses operasi  $10^{12}$  floating point per detik. Komputer ini memuat 9216 prosesor dan dirakit dalam kerangka kerja "Advanced Simulation and Computing Program (ASC)" di USA.

Inisiatif ini bertujuan untuk membangun serial komputer dengan kecepatan pemrosesan dengan jangkauan mulai satu teraflops/dtk, 100 teraflops/dtk sampai petaflop/s. Tahun 2007, komputer dari serial ini yaitu sebuah sistem komputer IBM BlueGene/L diinstal pada Lawrence Livermore National Laboratory. Sampai saat ini sistem ini merupakan komputer yang paling powerful di dunia. Ia memuat 65.536 node dual processor. Node-node dikoneksi dengan 3D-torus  $32 \times 32 \times 64$ . Total memori yang dimiliki 32 terabyte. BlueGene/L mencapai 280.6 teraflop/dtk, yaitu sekitar 76 % kinerja teoritisnya (367 teraflop/dtk). Komputer pertama dengan kinerja lebih dari satu petaflop/s ( $10^{15}$  operasi floating point per detik) kemungkinan akan terinstall awal 2009. Sebuah komputer dengan kinerja puncak 10 petaflop/dtk is direncanakan direalisasi tahun 2012. Kemajuan pesat juga terjadi pada personal komputer dan workstation. Sehingga simulasi yang memuaskannya telah menjadi mungkin dilaksanakan pada komputer-komputer kecil ini.

**Hadirin Yang Mulia,**

Dari uraian tersebut di atas, mudah-mudahan kiranya bisa tampak jelas bahwa metode simulasi komputer memiliki peran yang sangat penting, di samping metode teori dan eksperimen, bagi perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi di masa depan, yaitu sejalan dengan adanya kemajuan teknologi komputer yang sangat pesat, baik hardware maupun software.

**PENCAPAIAN SIMULASI KOMPUTER**  
*Dalam Sains dan Teknologi*

**Hadiri Yang Mulia,**

Di dalam sains dan teknologi terdapat beberapa teknik simulasi numerik yang handal untuk dapat diterapkan, diantaranya yaitu : 1). Teknik Dinamika Molekular (DM), 2). Simulasi Monte Carlo (MC), 3). Metode Elemen Terbatas (MET), 4). Otomata Selular, 5) Metode Vortex, dan 6) Metode smoothed particle hydrodynamics (SPH) Dari penerapan dan pengembangan teknik-teknik tersebut di atas banyak sekali hasil-hasil telah dicapai dalam rangka pengembangan sains dan teknologi. Salah satu diantaranya pada tahun 1998 John Pople menerima Hadiah Nobel bidang Kimia untuk pengembangan teknik simulasi dan komputasi numerik sifat-sifat molekul.

Pople juga telah menjadikan teknik komputasi mudah diakses oleh para peneliti dengan merancang program komputer GAUSSIAN. Versi pertamanya yang dipublikasi tahun 1970. Program tersebut sampai sekarang digunakan oleh ribuan ilmuwan pada Universitas dan perusahaan komersial dari segala penjuru dunia.

**Hadirin Yang Mulia,**

Sejalan dengan kegiatan dan studi kami selama ini lebih banyak dilakukan pada Teknik Dinamika Molekular (DM), maka tulisan ini terfokus pada hasil-hasil dari teknik Dinamika Molekular.

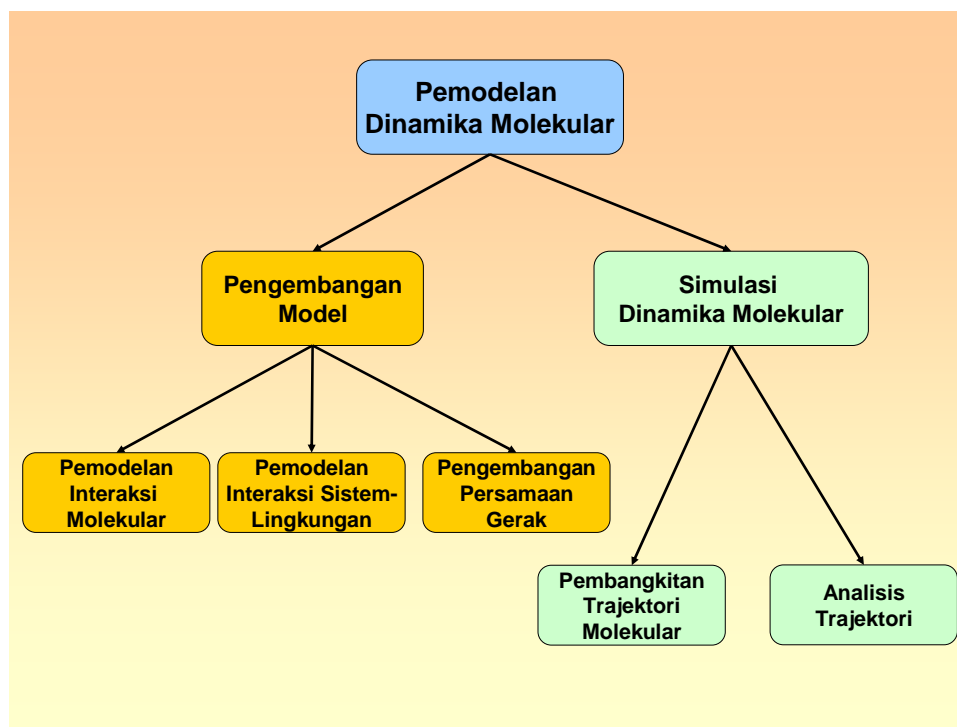
**Hadirin Yang Mulia,**

Pada teknik DM, evolusi waktu dari sekumpulan atom yang saling berinteraksi disimulasikan melalui pengintegrasian persamaan geraknya. Jika kita menganggap atom adalah partikel klasik, maka persamaan gerak yang digunakan persamaan gerak Newton:

$$m_i d^2 \vec{r}_i / dt^2 = -\nabla_i \phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

Persamaan ini diintegrasikan, dan kemudian ditampilkan konfigurasi-konfigurasi yang dihasilkan ( $\vec{r}_i(t)$ ;  $i=1, \dots, N$ ), begitu juga trajektor  $\vec{r}_i(t)$  dari masing-masing atom.  $m_i$ ,  $\vec{r}_i(t)$  menunjukkan massa dan posisi partikel ke- $i$ , dan  $\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  potensial interaksi antar atom. Adapun prinsip pemodelan DM, seperti tampak pada Gambar.2, dibagi menjadi dua langkah utama, yaitu : a). pengembangan model yang cocok dengan permasalahan dan b). penerapan model untuk disimulasikan.

Pada tahap pengembangan model terdapat tiga langkah penting yang harus dilakukan: a). pemodelan interaksi antar atom/molekul, b). pemodelan interaksi antara sistem dengan lingkungannya, c). pengembangan persamaan gerak berdasarkan pemodelan interaksi sebelumnya. Selanjutnya model diterapkan untuk disimulasikan. Pada tahap simulasi terdapat langkah-langkah: a). pembangkitan trajektori molekul melalui integrasi persamaan gerak dan b). analisis trajektori yang dihasilkan. Hal penting yang perlu dicatat dalam rangka pembangkitan trajektori adalah pemilihan algoritma integrasi persamaan gerak. Beberapa algoritma yang dikemukakan oleh Allen & Tildesley (1982) adalah sangat baik dan biasa digunakan dalam DM.



Gbr. 2. Hirarki langkah utama dalam pemodelan Dinamika Molekular (Haile 1992)

### Hadirin Yang Mulia,

Dalam bidang Molekular Biologi, pada tahun 2007 kami telah melakukan Analisis Kinerja Aplikasi Biomolekul NAMD-MPI pada sistem Linux PC-Cluster. Dalam bidang ini telah dilakukan pengimplementasian aplikasi simulasi dinamika molekular Nanoscale Molecular Dynamics (NAMD) pada sistem PC-Cluster berbasis Linux dalam rangka pensimulasian suatu struktur molekular biologi, misalkan berbagai



molekul protein. Tujuan utama penelitian adalah menguji kinerja aplikasi simulasi dinamika NAMD pada sistem PC-Cluster berbasis Linux.

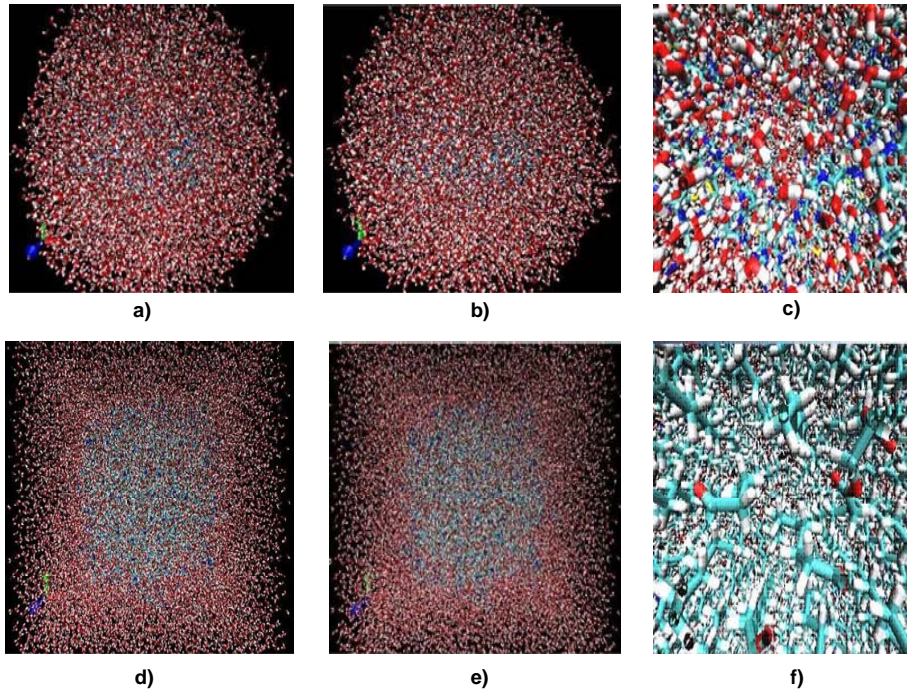
Program Simulasi Dinamika Molekular (SDM) dirancang untuk mempelajari perilaku dari suatu sistem banyak atom (N-Body-System) dan memahami fungsi-fungsinya. Simulasi ini menghitung kedudukan atom dengan memecahkan persamaan geraknya secara numerik. Proses perhitungan ini dibantu oleh rumus medan gaya empiris yang memperkirakan gaya antar atom dalam sistem dengan banyak atom secara aktual.

Tingkat kompleksitas dari perhitungan semacam ini membutuhkan mesin pemroses dengan kemampuan yang sangat besar. Mesin-mesin paralel terbukti memiliki potensi untuk menjawab tantangan komputasi ini. Untuk memanfaatkan potensi ini secara maksimal, diperlukan suatu program paralel dengan tingkat efisiensi, efektifitas, skalabilitas, dan ekstensibilitas yang maksimal pula.

Program NAMD yang dibahas pada penelitian ini dianggap mampu untuk memenuhi semua kriteria yang diinginkan (Nelson et.al 2003 dan Isgro et.al. 2003). Program ini dirancang dengan mengimplementasikan pustaka MPI untuk pembagian tugas perhitungan secara paralel. NAMD memiliki sistem *automatic load balancing* secara periodik yang cerdas, sehingga dapat memaksimalkan penggunaan kemampuan mesin yang tersedia. Program ini juga dirancang secara modular, sehingga dapat dimodifikasi dan ditambah dengan sangat mudah. NAMD menggunakan banyak kombinasi algoritma perhitungan dan teknik-teknik numerik lainnya dalam melakukan tugasnya. NAMD 2.5 mengimplementasikan semua teknik dan persamaan perhitungan yang digunakan dalam dunia SDM saat ini.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa NAMD dapat berjalan di atas arsitektur cluster (5 PC-Cluster), dengan hasil *speedup* yang cukup tinggi. Dengan menggunakan aplikasi Visual Molecular Dynamics (VMD) (Caddigen et.al 2003), visualisasi hasil simulasi molekul protein ER-GRE (36.573 atom, spherical) dan ApoA1 (92.224 atom, periodic) pada temperatur kamar 300 °K dan 500 time-steps dapat dilihat pada Gambar.3.

Meskipun penelitian ini baru pada tahap pengujian kinerja aplikasi pada sistem PC-Cluster untuk simulasi molekular biologi, namun aplikasi dan sistem PC-cluster yang dikembangkan dapat digunakan untuk melakukan simulasi molekular biologi lebih lanjut, berikut analisis hasil simulasinya. Manfaat utama dari hasil penelitian tersebut adalah adanya pemahaman dan informasi serta bukti yang menunjukkan bahwa aplikasi NAMD dapat berjalan pada PC-Cluster, sehingga penelitian lanjut pada bidang biologi molekular dengan menggunakan NAMD berbasis PC-Cluster dapat dilakukan dengan cara yang lebih mudah.



Gbr 3. Snapshot simulasi pada  $T= 300^0\text{K}$  dan 500 numsteps, a) molekul protein ER-GRE sebelum simulasi, b) molekul protein ER-GRE sesudah simulasi, c) tampak dekat simulasi ER-GRE, e) molekul protein ApoA1 sebelum simulasi, e) molekul protein ApoA1 sesudah simulasi, f) tampak dekat simulasi ApoA1

### **Hadirin Yang Mulia,**

Pada tahun 2000 dan 2001, kami telah menggunakan Metoda Simulasi Komputer untuk menjelaskan Temperatur Kritis  $T_c$  Transisi Gelas dengan Sistem Simulasi DM Gelas Logam NiZr.

Gelas telah menjadi suatu kelas material yang penting dan pembentukan gelas dari berbagai kelas substansi yang berbeda juga telah ditemukan, namun fenomena transisi gelas dan karakteristik keadaan gelas (glass states) belum sepenuhnya dimengerti. Dengan alasan ini maka kami telah melakukan simulasi transisi gelas suatu cairan pembentuk gelas  $\text{Ni}_{20}\text{Zr}_{80}$  yang didinginkan diteliti dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekular (DM).

Secara umum, transisi fasa material secara struktural terdiri dari transisi fasa cair ke gas, fasa cair ke padat dan fasa padat ke gas. Hal tersebut tidak terjadi pada gelas. Transisi gelas dikarakteristikan dengan adanya perubahan cairan secara kontinu menjadi zat padat amorph tanpa memerlukan panas laten. Transisi ini tidak menunjukkan adanya panjang korelasi (correlation length) divergen yang merupakan karakteristik transisi fasa struktural, perubahan simetri (symmetry changes), atau suatu parameter keteraturan (order parameter) struktural. Di samping itu sifat penting lainnya, misal temperatur gelas kalorik, tergantung pada laju pendinginan (cooling rate). Dengan demikian transisi gelas secara umum dipandang bukan sebagai transisi fase termodinamis konvensional. Berbagai aspek akan dimengerti lebih baik, jika kita menganggapnya sebagai suatu fenomena dinamik, dengan kata lain transisi gelas muncul sebagai transisi dalam dinamika.

Penelitian-penelitian pada 10 tahun terakhir, terutama juga menyangkut Teori *mode coupling* telah menunjukkan, bahwa kebanyakan detail dari transisi gelas terjadi pada skala waktu dan ruang yang memungkinkan diteliti melalui pemodelan-DM saat ini. Dalam studi ini metode-DM juga digunakan untuk mensimulasikan struktur-struktur dari gelas dan cairan dari sistem NiZr. Simulasi-DM untuk gelas transisi pada sistem NiZr juga dijumpai pada berbagai literatur, seperti yang dipaparkan oleh Teichler (1996). Selama proses simulasi konfigurasi cairan dan konfigurasi bertipe gelas di hasilkan.

Simulasi kami lakukan pada ensembel-NpT. Persamaan gerak dari 648 atom (130 Ni dan 518) diintergrasikan dengan algoritma gear-predictor-corrector orde-5 dengan time-step  $\Delta t = 2.5 \times 10^{-15}$  dtk dalam suatu kubus dengan “periodic boundary conditions” dan panjang sisi kubus  $L = 26,25 \text{ \AA}$ . Sebagai potensial interaksi digunakan potensial dengan bentuk dari Stillinger-Weber (Stillinger & Weber, 1985) yang diadaptasikan pada potensial teoritis Hausleitner-Hafner (1992), untuk sistem NiZr oleh Teichler (1992).

Simulasi diawali dengan memanaskan konfigurasi awal pada temperatur 2000 K. Pada 2000 K atom-atom bergerak dengan cepat, dan sistem berada dalam keadaan cair yang homogen. Pemanasan ini perlu dilakukan agar diperoleh konfigurasi-awal yang terrelaksasi dengan baik. Setelah konfigurasi-awal dihasilkan, pendinginan kontinu dilakukan dengan laju  $1,5 \times 10^{12} \text{ K/s}$ , untuk memperoleh konfigurasi-awal pada beberapa temperatur pengamatan. Setelah konfigurasi awal untuk masing-masing temperatur (1500-800 K) dihasilkan, simulasi dilanjutkan untuk masing-masing temperatur dan terakhir data konfigurasi dianalisis.

Hasil penelitian kami tersebut menunjukkan bahwa :

- a. Terdapat konsistensi prediksi temperatur kritis transisi gelas  $T_c$  dari sistem simulasi dinamika molekular gelas logam  $\text{Ni}_{20}\text{Zr}_{80}$  sekitar  $\approx 1050^0 \text{ K}$  dari beberapa besaran fisis (yaitu Parameter Non-Ergodizitat, parameter- $g_m(q,T)$ , Koefisien Diffusi Komponen Sistem, dan Waktu Relaksasi Komponen Sistem) sebagai hasil analisis data simulasi.
- b. Didapatkan bahwa besaran pengukuran sebagai analisis data simulasi bekerja seperti apa yang telah diprediksi Teori *mode coupling*.
- c. Ditemukannya suatu parameter baru yaitu parameter- $g_m(q,T)$  sebagai besaran relatif untuk memprediksi temperatur kritis transisi gelas  $T_c$ . Parameter ini bergantung bilangan gelombang  $q$  dan  $T$  pengamatan. Selama parameter ini lebih kecil dari 1, maka sistem pembentuk gelas masih berada dalam cair, dan ketika parameter mendekati dan sama dengan 1, sistem pembentuk gelas telah berada dalam kondisi gelas.

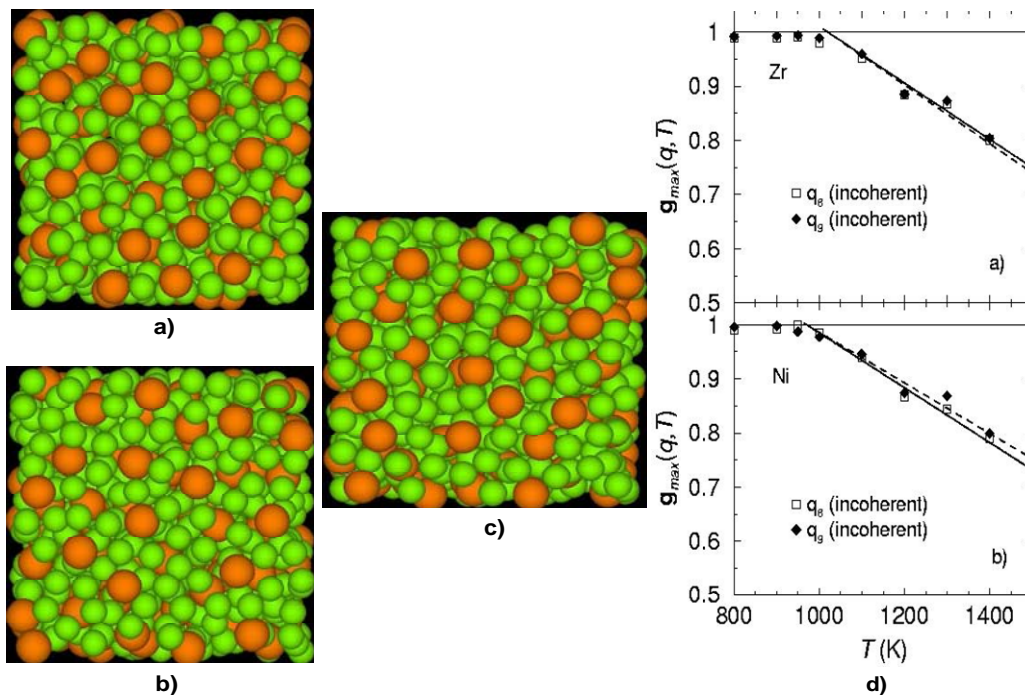
Dengan temuan yang didapat pada penelitian tersebut, maka beberapa hal berikut dapat dicuatkan sebagai manfaat dari simulasi tersebut, yaitu :

- a. Terdapat informasi bahwa sistem dinamika molekular merupakan salah satu tool yang handal dalam rangka penelitian transisi gelas.
- b. Terdapat pemahaman yang lebih baik tentang proses transisi gelas pada sistem yang menjadi pusat perhatian.
- c. Terdapat informasi bahwa hasil simulasi berjalan sesuai dengan apa yang diprediksi teori kopplung mode gelas transisi, sehingga teori ini boleh

dikatakan teori yang cukup handal dan layak digunakan untuk menjelaskan terjadi proses gelas transisi secara makroskopis.

- d. Metode yang digunakan dalam rangka pencarian temperatur kritis transisi gelas dapat digunakan pula pada sistem gelas yang lainnya

Gambar.4 menampilkan snapshot hasil simulasi untuk beberapa temperatur dan  $g_m(q, T)$ – parameter sistem simulasi dinamika molekular gelas logam  $Ni_{20}Zr_{80}$ .

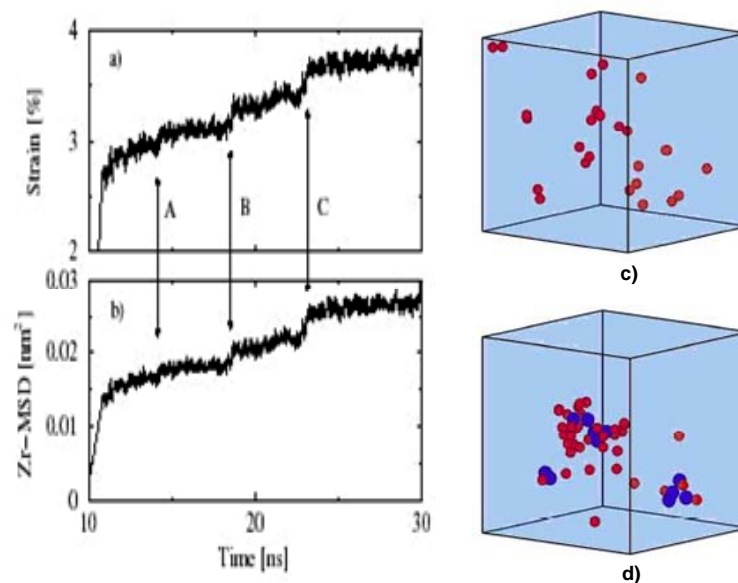


Gbr 4. Snapshot simulasi pada berbagai temperatur a)  $T = 1500$  K, b)  $T = 1200$  K, c)  $T = 1000$  K, d) Parameter-  $g_m(q, T)$

### Hadirin Yang Mulia,

Pada tahun 2004, kami telah menggunakan simulasi komputer untuk melakukan Pemodelan Deformasi pada Sistem Simulasi DM Gelas Logam NiZr. Penelitian ini bertujuan untuk menjelaskan seberapa besar tanggapan plastis yang dapat dilakukan oleh keadaan amorph yang terelaksasi awal, dan seberapa besar perubahan keadaan dapat terjadi di bawah pengaruh deformasi untuk menuju suatu konfigurasi gelas yang mobile.

Simulasi dilakukan pada sistem dengan ensemble yang terdiri dari 5184 atom. Dua proses deformasi telah dilakukan dalam simulasi, yaitu deformasi dengan *shear-stress* konstan dan deformasi dengan *laju shear-strain* konstan. Simulasi *shear-strain* konstan dilaksanakan dengan tiga laju deformasi ( $\partial\epsilon/\partial t = 0.013$  ns<sup>-1</sup>,  $0.035$  ns<sup>-1</sup>, and  $0.13$  ns<sup>-1</sup>) masing-masing pada dua temperatur (1000 K and 810 K). Deformasi dengan *shear-stress* dimodelkan untuk enam nilai stress (dalam jangkauan 200 sampai 1200 MPa) pada dua temperature tersebut di atas. Dalam rangka mempelajari dinamika makroskopik dari sistem dibawah pengaruh beban yang realistis, simulasi dilaksanakan dalam time windows 40 ns, yang setara dengan  $2 \times 10^7$  langkah integrasi DM dari sistem. Beberapa hasil dan analisis data dilihat pada Gambar.5.



Gbr 5. a) Evolusi strain selama proses pembebanan dengan shear-stress konstan  $\sigma = 1150$  MPa. b) Mean square displacements (MSD) dari atom-Zr vs waktu untuk simulasi yang digambarkan pada a). c) Snapshot dari gerakan atom yang penting untuk time window antara lompatan yang ditandai A dan B. d) sama seperti c) tapi untuk time window termasuk lompatan yang ditandai C

Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa: a). Terdapat perubahan keadaan akibat pengaruh adanya deformasi shear mekanis, b). Terdapat dinamika relaksasi dari keadaan viskos setimbang di bawah pengaruh beban, dan di samping itu c). Deformasi strain konstan dapat digunakan untuk mendeskripsikan suatu perubahan keadaan amorph menuju ke suatu keadaan yang mudah terdeformasi.

Atas berbagai hasil penelitian tersebut, maka setidaknya hal-hal berikut dapat disimpulkan sebagai manfaat penelitian dari penelitian tersebut, yaitu: a). Terdapat informasi mengenai pengaruh yang signifikan dari efek deformasi terhadap keadaan viskos, berupa adanya dinamika relaksasi dan b). Terdapat informasi mengenai deskripsi perubahan keadaan amorph menuju ke keadaan mudah terdeformasi melalui perlakuan deformasi shear konstan pada bahan gelas

#### **Hadirin Yang Mulia,**

Di samping berbagai hasil penelitian yang telah kami kemukakan di atas, maka sesungguhnya sudah sangat banyak pula penelitian lain yang telah dilakukan oleh para ahli dengan mengandalkan Metoda Simulasi Komputer. Untuk memperkaya khasanah pengetahuan dan meningkatkan motivasi pemanfaatan Metoda Simulasi Komputer, maka barangkali tidak ada salahnya jika kita mencermati pula berbagai hasil penelitian berikut.

**Bidang Biokimia dan Biofisika.** Penelitian mengenai *Bovine Pancreatic Trypsin Inhibitor* (BPTI) oleh Griebel et.al (2007). Hasil penelitiannya menunjukkan bahwa

molekul-molekul berelaksasi akibat pengaruh air dan berubah bentuknya. Hasil penelitian ini sangat berguna untuk mempelajari struktur dan stabilitas BPTI pada kondisi yang berbeda-beda.

Pada tahun yang sama Griebel et.al (2007) juga telah melakukan penelitian mengenai Bio-membran. Penelitian tersebut telah menunjukkan bahwa Penyerapan dan penggabungan molekul-molekul yang lebih kecil ketika melintasi lapisan ganda lipid. Hasil penelitian tersebut sangat berguna untuk memahami fungsionalitas dan mekanisme membran lebih dalam. Selanjutnya, penelitian mengenai struktur, konformasi, dan un-folding dari peptida dan protein oleh Griebel et.al (2007) juga telah menghasilkan sesuatu yang sangat berguna untuk a) memprediksi struktur makromolekul biologis dengan adanya struktur primer. Prediksi ini secara praktis bermanfaat bagi dunia farmasi dan biotech; b) mempelajari jalur folding makromolekul biologis.

Demikian pula dengan penelitian mengenai ikatan dan kompleks Ligan-Protein oleh Griebel et.al (2007). Juga tidak kalah pentingnya dan sangat berguna untuk merekonstruksi reaksi kimiawi antara enzim dan substratnya. Sedangkan simulasi protein pada komputer paralel super (*massively parallel computers*) oleh Meinke (2008) yang menemukan algoritma-algoritma baru yang sangat berguna untuk memprediksi struktur domain yang stabil pada protein-protein.

**Bidang Kimia.** Simulasi reaksi kimiawi dalam fasa Gas yang dilakukan oleh Entel et.al (2004) juga telah menghantarkan ilmu pengetahuan ke dalam suatu pemahaman yang lebih baik tentang reaksi kimiawi secara rinci. Hal ini sangat berguna untuk mengoptimalkan kondisi-kondisi terjadinya reaksi, dan tentunya akan meningkatkan produktivitas.

**Bidang Fisika Material.** Simulasi diagram fasa alloy Fe-Ni dan Ni-Mn-Ga oleh Entel et.al (2004) dan Simulasi transformasi struktural pada Partikel Fe-Ni oleh Entel et.al (2004) telah membantu dunia ilmu pengetahuan untuk memahami secara lebih baik tentang ketidakstabilan fasa martensik, efek-efek *shape-memory* dan *magnetovolume* pada alloy berbasis besi yang bermanfaat untuk memahami pengontrolan oleh medan luar efek-efek *shape-memori* yang diakibatkan transformasi martensik. Sedangkan Simulasi Peleburan dari Kluster-Al oleh Entel et.al (2004) telah berhasil menjelaskan secara lebih baik tentang perpindahan dari material curah (bulk) menjadi partikel nano, dan juga perubahan ukuran partikel dari suatu transformasi struktural yang berguna untuk mendesain material nano. Adapun apa yang telah dilakukan oleh Maguire (2004) telah menghasilkan suatu metode baru simulasi dinamika molekular pada material nano.

**Bidang Kedokteran dan Kesehatan.** Ai (2001) telah melakukan suatu simulasi dinamika molekular pada lingkungan virtual. Di dalamnya membahas interaksi dinamik antara suatu "*AIDS antiviral drug*" dan "*reverse transcriptase enzyme*", sedangkan Valadez (2008) telah melakukan Pemodelan dan simulasi dinamika molekular pada reseptor hormone penghasil gonadotropin manusia pada suatu bilayer lipid. Sedangkan apa yang dilakukan oleh NEC (2005) bisa diandalkan untuk mempermudah biaya penelitian penemuan obat, yaitu dengan ditemukannya server simulasi dinamika molekular untuk penemuan obat (*drug discovery*)

**Bidang Teknik dan Ilmu Sosial.** Dalam ranah teknik, Ungerer (2006) telah mengaplikasikan simulasi dinamika molekular pada produksi dan pemrosesan gas dan minyak. Hasil studinya menunjukkan bahwa simulasi dinamika molekular sangat berguna dalam pemrosesan *hydrocarbon* untuk memprediksi kesetimbangan fasa pada kondisi-kondisi proses (sekitar 400°C), dimana eksperimen sulit dilakukan akibat degradasi *hydrocarbon* yang cepat. Dalam ranah Ilmu sosial, Apel (2004) telah mensimulasikan aliran/arus pejalan kaki berdasarkan model gaya Sosial dengan menggunakan algoritma *Link Cell Verlet* (suatu algoritma simulasi dinamika molekular). Hasil studinya menunjukkan bahwa implementasi algoritma *Link Cell Verlet* mereduksi waktu komputasi. Hal ini sangat berguna untuk memprediksi berbagai fenomena yang terjadi selama perpindahan yang cukup realistis dari para pejalan kaki.

## **POTENSI PEMANFAATAN SIMULASI KOMPUTER** *Untuk Pengembangan Sains di Indonesia*

### **Hadirin Yang Mulia,**

Memperhatikan berbagai pencapaian yang telah didapat oleh para ahli dalam memanfaatkan Metoda Simulasi Komputer dalam berbagai bidang ilmu pengetahuan dan teknologi, maka kiranya kehandalan Metoda Simulasi Komputer sesungguhnya juga dapat digunakan untuk melakukan berbagai percepatan pembangunan dan pengembangan ilmu pengetahuan dan teknologi di Indonesia. Sebagai contoh, berbagai peluang pemanfaatan simulasi komputer pada berbagai bidang di Indonesia, dapat kita pada uraian berikut.

**Bidang Ekonomi.** Dalam konteks pengembangan Model Monitor Ekonomi Negara, sesungguhnya teknik komputasi numerik dan penggunaan pemodelan dan simulasi makro-ekonomi juga dapat digunakan untuk menganalisis proses-proses nasional dan internasional, dan untuk mengevaluasi pengaruh pergerakan yang mungkin dalam aturan moneter (monetary policy) melalui cara mengelaborasi persamaan-persamaan model untuk merepresentasikan asumsi alternatif mengenai variabel-variabel seperti aturan fiskal, *business output*, *cost of capital*, pendapatan rumah tangga, harga listrik, gas dan bahan bakar dan suku bunga ( interest rates). Selanjutnya, suatu simulasi yang dapat memprediksi untuk waktu tertentu keluaran dari interaksi antar variabel tersebut di atas dan yang dapat menguji pengaruh gejolak ekonomi seperti penurunan harga sahan yang mendadak atau laju inflasi yang tajam dapat dijalankan dengan mudah. Dengan cara yang sama, model dapat digunakan untuk memprediksi pengaruh yang mirip terhadap kinerja ekonomi akibat adanya perubahan moneter.

Dalam konteks analisa resiko, maka a). strategi-strategi Quasi-Monte Carlo untuk optimisasi stokastik, b). simulasi Monte Carlo Simulation Difusi-Difusi, c). simulasi Monte Carlo pada resiko kredit dan sensitivitas, d). simulasi Monte Carlo untuk pengukuran resiko dan analisis resiko berbasis Monte Carlo pada keuangan, operasi dan optimisasi sesungguhnya adalah pendekatan-pendekatan dan metoda yang dapat diandalkan untuk mendapatkan pemahaman yang lebih detail dan lebih baik tentang semua variable resiko sehingga dapat memprediksi dan mengantisipasi berbagai resiko secara lebih akurat.

**Bidang Pelayanan Masyarakat.** Pendekatan berbasis simulasi pada pemodelan Inventory Bahan-bahan farmasi mudah rusak dan sistem pendukung keputusan berbasis simulasi untuk manajemen farmasi rumah sakit adalah contoh sederhana dari

penggunaan Metoda Simulasi Komputer dalam bidang pelayanan kesehatan di suatu rumah sakit. Sedangkan evaluasi aturan-aturan berbasis simulasi untuk pengontrol penyakit infeksi, simulasi berbasis agent Pandemi (misalnya Tanggapan *Influenza*) dan simulasi Parallel Epidemiologi *Global Influenza Avian* serta Model Epidemik Hybrid (Gabungan pendekatan-pendekatan berbasis agent dan berbasis persamaan) dan model epidemic berbasis agent terdistribusi fleksibel skala besar adalah dapat dijadikan sebagai metoda dan pendekatan untuk meningkatkan efisiensi dan efektifitas berbagai aturan-aturan tentang kontrol penyakit dan model-model epidemi.

**Bidang Biologi Kimia.** Dalam konteks Bio-kimia, maka biaya penemuan dan pembuatan suatu jenis obat yang selama ini sangat mahal barangkali dapat dipermurah dengan menggunakan Bio-komputasi dan Perancangan Obat Komputasional. Sebagaimana telah diketahui bersama, input utama bio-komputasi dalam penemuan obat ada dua, yaitu : a). komputer dapat membantu mengoptimasi profil obat-obatan yang ada dengan panduan sintesis dari senyawa baru dan lebih baik, b). semakin banyak informasi mengenai struktur target protein dan perannya dalam biokimia yang tersedia, konsep terapi baru dapat dikembangkan sepenuhnya. Penggunaan simulasi komputer adalah sangat membantu kedua langkah tersebut dalam hal : a). untuk menyelidiki tentang fungsi biologis dari suatu protein dengan membandingkan urutan asam aminonya ke basis data protein yang telah diketahui fungsinya, dan b.) untuk memahami aktivitas molekular dari struktur protein yang diberikan. Kemudian pemahaman mekanisme biokimia dari suatu penyakit biasanya membantu dalam pemilihan tipe molekul yang diperlukan untuk obat-obat baru.

Dari seluruh kasus, tujuan pemanfaatan komputer dalam desain obat adalah untuk menganalisis interaksi antara obat dengan situs reseptornya, dan untuk mendesain molekul-molekul yang cocok dan sesuai. Teknik-teknik desain telah disediakan oleh metode komputasional termasuk grafik komputer untuk visualisasi dan juga metodologi kimia teoritis. Dalam kerangka mekanika kuantum struktur molekul kecil dapat diprediksikan sesuai akurasi eksperimental. Untuk itu, sebagai langkah awal yang baik adalah jika tersedianya hasil X-ray dari struktur kristal dari situs target. Jika model molekular dari sisi ikatannya cukup presisi, kita dapat menerapkan algoritma-algoritma untuk mensimulasikan ikatan obat-obatan pada situs reseptor masing-masing.

**Bidang Lingkungan dan Iklim.** Sebagai negara yang dipengaruhi oleh iklim Moonson yang menghasilkan dinamika yang sangat variatif dalam tekanan udara (konvergen dan divergen) yang sangat mempengaruhi keadaan iklim, maka sesungguhnya suatu simulasi evolusi dinamika ekologis dan kimiawi dari sistem iklim adalah tidak terlalu sulit untuk dilaksanakan. Simulasi komputer yang menggabungkan berbagai data empiris yang ada serta dinamika sesaat yang sedang terjadi akan sangat membantu untuk menghasilkan suatu prakiraan cuaca yang akurat pada suatu unit ruang dan waktu tertentu. Hal ini tidak hanya bermanfaat guna berbagai proses pembangunan pertanian, namun juga sangat bermanfaat bagi proses antisipasi berbagai bencana alam.

**Bidang Keamanan Nasional.** Sebagai salah satu cabang teknik intelijen, Signal Intelligen (SigInt) terbilang berkembang cukup pesat. Sejatinya, SigInt merupakan



satu bentuk aktifitas pengumpulan data intelijen yang dilakukan melalui teknik pemintasan lalu lintas sinyal (*interception of signals*) yang memuat informasi penting. Lalu lintas sinyal itu bisa terjadi di antara dua manusia (dikenal sebagai ComInt), di antara dua mesin mekanik maupun elektronik (ElInt), atau bahkan campuran di antara dua jenis sumber sinyal tersebut. Kerena yang dipintas adalah informasi penting nan peka yang kebanyakan wujud fisiknya telah diubah dalam bentuk bahasa sandi (*encrypted*) maka kegiatan SigInt biasanya juga melibatkan para analis sandi (*cryptanalysis*). Tugas para analis sandi ini tak lain adalah membuat satu bentuk informasi yang semula ‘ter-tutup’ menjadi ‘terbuka’ semata karena sistem persandian informasi tersebut telah dapat diuraikan (*decrypted*).

SigInt memiliki dua cabang, yakni ComInt dan ElInt. ComInt merupakan kependekan dari Communications Intelligence sedangkan ElInt adalah Electronic Signals Intelligence. Jika ComInt berurusan dengan pernak-pernik penyadapan terhadap lalu lintas pesan atau informasi verbal yang dilansir lewat perangkat komunikasi konvensional, maka ElInt lebih memfokuskan diri pada perkara menyabet informasi yang terkandung dalam lalu lintas alat komunikasi elektronik non verbal di mana perangkat komunikasi tersebut memancarkan radiasi elektromagnetik yang bukan dihasilkan lewat detonasi sirkuit peledak bertenaga nuklir (*nuclear detonation*) atau bahan radioaktif. ComInt sendiri memiliki (sedikitnya) tiga cabang disiplin ilmu. Yaitu bidang pemintasan suara (*voice interception*), pemintasan teks (*text interception*), dan pemintasan saluran sinyal (*signaling channel interception*).

Sementara itu cabang ElInt ada lima. Terdiri atas kegiatan pemintasan pola dan kedudukan suatu transmisi elektronik (*pattern and locations of electronic transmission interception*), pemintasan sinyal kendali senjata (*weapons control signals interception*), kegiatan dukungan elektronik dalam rangka gelar perang elektronik (*electronic support measures - ESM*), hingga pemantauan atas segala kegiatan bantuan navigasi sekaligus merancukannya lewat pengiriman informasi palsu (*meaconing*), dan pemantauan terhadap segala bentuk sinyal instrumen komunikasi asing (FISInt – Foreign Instrumentation Signals Intelligence). Kegiatan ESM berperan untuk memasok informasi yang dibutuhkan saat melancarkan serangan elektronik (*electronic attack – EA*). Salah satu contoh EA yang kerap dijumpai adalah jurus penindihan sinyal alias *signals jamming*. Selain EA, ESM juga bertugas menyediakan informasi yang dipakai dalam kegiatan lawan gelar perang elektronik (*electronic counter-counter measures – ECCM*). Yang masuk ke dalam kategori instrumen komunikasi asing yang digarap teknik FISInt di antaranya perangkat telemetri (kini membentuk cabang ElInt baru yakni TelInt), alat penjejak (*tracking device*), dan jalur pasokan data lewat sarana tayang video (*video data link*).

### **Hadirin Yang Mulia,**

Semua contoh penerapan di atas dapat kita lakukan dengan pemanfaatan solusi murah baik dalam arti murah dari segi hardware maupun dari segi software, yaitu pemanfaatan hardware PC-cluster berbasis Linux dan software-software open-source seperti yang telah kami paparkan di atas. Lebih lanjut, pada saat ini di Indonesia sesungguhnya juga telah memiliki para peneliti yang siap dan dapat diandalkan untuk melakukan itu semua.

## KESIMPULAN DAN SARAN

### **Hadirin Yang Mulia,**

Simulasi komputer adalah menjadi kebutuhan masa depan, dan telah banyak pula bukti-bukti studi yang menggambarkan bahwa simulasi komputer dapat diandalkan sebagai jembatan yang mampu menghubungkan dan mengeliminasi berbagai keterbatasan metode pengamatan dan eskperimental. Mempelajari berbagai studi yang ada, juga dapat disimpulkan bahwa simulasi komputer adalah relatif sangat murah untuk pengembangan ilmu. Kebutuhan akan superkomputer untuk simulasi yang sangat rumit ternyata dapat disubstitusi dengan PC-Cluster berbasis Linux yang berbiaya murah.

Memperhatikan berbagai sumber daya yang dimiliki Indonesia, dan juga mempertimbangkan berbagai keterbatasan yang ada, maka pemanfaatan simulasi komputer adalah salah satu potensi yang sangat baik dan perlu dioptimalkan dalam berbagai usaha pembangunan dan pengembangan ilmu, teknologi, ekonomi, sosial dan budaya untuk masa depan. Untuk mengoptimalkan dan mengefektifkan proses pemanfaatan simulasi komputer untuk pembangunan di Indonesia, maka kiranya pemerintah perlu secara formal membangun dan mengembangkan suatu Dewan *Computational Science*<sup>1</sup> Nasional (DCSN).

Dewan ini diharapkan dapat menjadi : (a) koordinator dan pengarah penelitian di bidang *computational science* (CoS), sehingga penelitian-penelitian yang tersebar diberbagai lembaga penelitian dan perguruan tinggi menjadi lebih fokus, tepat guna dan sesuai dengan kebutuhan, (b). menjadi koordinator dalam perencanaan sumber pendanaan penelitian di bidang CoS, dan sekaligus jika mungkin dalam pencarian sumber pendanaan dari berbagai pihak, dan (c). menjadi motor penggerak penelitian di bidang CoS, karena hasil-hasilnya diharapkan dapat bermanfaat secara umum bagi kelangsungan hidup, ketahanan dan keamanan bangsa. Sesuai dengan karakter dan dinamika kegiatan yang akan ditangani oleh DCSN ini adalah dapat bersifat sangat rahasia dan sangat strategi dalam pembangunan dan pertahanan serta keamanan bangsa, maka seyogyanya struktur organisasi DCSN adalah seyogyanya langsung berada di bawah Presiden.

---

<sup>1</sup> Computational Science adalah cabang ilmu multidisplin yang merupakan irisan antar science (science di sini bisa fisika, kimia, biologi, ekonomi, dan science lainnya), matematika dan ilmu komputer (computer science) dengan pemodelan dan simulasi berbasis komputer menjadi inti dari ilmu ini. (Gotwal, 2007)

**Hadirin Yang Mulia,**

Sebagai penutup, maka izinkan saya sekali lagi untuk menyampaikan ucapan selamat kepada para orang tua wisudawan/wati serta wisudawan/wati pada hari yang berbahagia ini

**Hadirin Yang Mulia,**

Semoga kiranya ALLAH tetap memberi kita semua petunjuk Nya, tuntunan Nya, izin Nya, bantuan Nya dan kekuatan Nya agar kita semua dapat melaksanakan berbagai tugas dan tanggungjawab kita dengan baik dan benar dengan tetap berjalan lurus menuju Dia dalam melaksanakan berbagai amanah hidup dan kehidupan yang telah Dia tetapkan bagi kita semua.

Akhirnya, wa billahi taufik wal hidayah, wassallammu'alaikum warohmatullahi wabarakaatuh. Terima kasih atas perhatian Bapak/Ibu/Hadirin sekalian.

**Daftar Pustaka**

- Ai, Z., Fröhlich, T. (2001), *Molecular Dynamics Simulation in Virtual Environments*, *Computer Graphics Forum*, 17 (3), pp.267-273.
- Allen, M.P. and Tildesley, D.J. (1987), *Computer simulation of liquids*, Clarendon Press, Oxford.
- Apel, M. (2004), *Models for pedestrian flow and crowd dynamics* University of Applied Sciences, Faculty of Traffic and Transportation, Karl-Scharfenberg-Str. 55-57, 38229 Salzgitter, Germany, Technical Report 01-2004.
- Caddigan, E., Cohen, J., Gullingsrud, J., Stone, J. (2003), *VMD User's Guide*, Theoretical Biophysics Group, University of Illinois and Beckman Institute, Urbana, Illinois.
- Entel, P., Adeagbo, W.A., Sugihara, M., Rollmann, G., Zayak, A.T., Kreth, M, Kadau, K. (2004), *Molecular Dynamics Simulations in Biology, Chemistry and Physics*, *Lect. Notes Phys.*, 642, pp.177–206. Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- Gotwal, R.R., Sendlinger, S. (2008), *A Chemistry Educator's Guide to Molecular Modeling*, The North Carolina School of Science and Mathematics
- Griebel, M., Knapek, S., Zumbusch, G. (2007), *Numerical Simulation in Molecular Dynamics*, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- Haile, J.M. (1992), *Molecular dynamics simulation*, Wiley, New York.
- Hausleitner, Ch., Hafner, J. (1992), Hybridized nearly-free-electron tight-binding-bond approach to interatomic forces in disordered transition-metal alloys. II. Modeling of metallic glasses, *Phys.Rev. B* 45, pp.128-135.
- Isgro, T., Phillips, J., Sotomayor, M., Villa, E. (2003), *NAMD TUTORIAL*, Theoretical and Computational Biophysics Group, University of Illinois and Beckman Institute, Illinois.
- JCN (2005), *NEC Launches Molecular Dynamics Simulation Server for Drug Discovery*, JCNN News Summaries - Japan Corporate News Network.
- Maguire, J.F. (2004), *New Methods for Molecular Dynamics Simulation of Nanomaterials*, Seminar Series IX, Center for Nanoscience and Technology, Rice University.
- Meinke, J.H., Mohanty, S., Nadler, W., Neuhaus, Th., Zimmermann, O., Hansmann, U.H.E. (2008), *Protein Simulations on Massively Parallel, Computers*, *NIC Symposium 2008*, G. Münster, D. Wolf, M. Kremer (Editors), John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, Vol. 39, pp. 9-16.

- Mutiara, A.B. (2000), Korrelationsfunktion und Memory Funktionen in MD-Simulierten Glasbildenden NiZr-Schmelzen, Dr.rer.nat.-Thesis, University of Goettingen
- Mutiara, A.B., Teichler, H. (2001), Critical Temperature  $T_c$  and Memory Kernel in MD-simulated Glass-Forming  $Ni_{0,2}Zr_{0,8}$ , Phys. Rev E 64, pp. 46133-46140.
- Mutiara, A.B., Teichler, H., Modelling Deformations on a MD-Simulated NiZr-Glass System, In Proceeding of the 7th International Conference (QIR 2004), Faculty of Engineering, University of Indonesia, Depok, Jakarta
- Mutiara, A.B. (2007), Analisis Kinerja Sistem LINUX-Cluster Terhadap Aplikasi Simulasi Dinamika Molekular NAMD-MPI, Prosiding Seminar Seminar Nasional Sistem & Teknologi Informasi 2007 (SNASTI 2007), 22 Agustus 2007, Surabaya, STIKOM Surabaya
- Nelson, M., Phillips, J., Shinozaki, A., Zheng, G., Zhu, F. (2003), *NAMD User's Guide Version 2.5*, Theoretical Bophysics Group, University of Illinois and Beckman Institute, Urbana, Illinois.
- Teichler, H. (1992), Molecular dynamics Simulation on NiZr-Alloy, phys.stat.sol. (b) 172, pp.325-331.
- Teichler, H. (1996), Evaluation of the memory kernel for fluctuation decay in simulated glass-forming  $Ni_{0,5}Zr_{0,5}$  liquids, Phys.Rev. E 53, pp.4287-4297.
- Ungerer, P., Lachet, V., Tavitian, B. (2006), Applications of Molecular Simulation in Oil and Gas Production and Processing, Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP, 61 (3), pp. 387-403.
- Valadez, E.J., Aguirre, A.U., Pineiro, A. (2008), Modeling and molecular dynamics simulation of the human gonadotropin-releasing hormone receptor in a lipid bilayer, J. Phys. Chem. B, 112 (34), pp 10704-10713.
- Weber, T.A., Stillinger, F.H. (1985), Local order and structural transitions in amorphous metal-metalloid alloys, Phys.Rev. B 31, pp.1954-1960.