METODE PERSAMAAN INTEGRAL FREDHOLM DALAM HAMBURAN KUANTUM SENTRAL

Budi Santoso
Pusat Pengkajian Teknologi Nuklir - Badan Tenaga Atom Nasional

ABSTRAK

METODE PERSAMAAN INTEGRAL FREDHOLM DALAM HAMBURAN QUANTUM SENTRAL. Metode persamaan integral (FIM) telah memberikan hasil sebaik harga eksak yang diperoleh dengan metode numerik Runge-Kutta, bahkan baru-baru ini digunakan untuk menghitung hamburan radar oleh partikel tetes air hujan dengan hasil yang tepat. Metode ini belum diuji ketelitiannya secara lebih luas. Maksud penelitian ini adalah menguji ketelitian metode persamaan integral Fredholm (FIM) dengan poetnsial hamburan Yukawa dan eksponensial dengan memvariasikan tetapan-tetapan (A dan α) yang memberikan ukuran kuat dan jangkau dari potensial-potensial yang digunakan. Dari hasil pengujian ini terlihat bahwa dalam jangkau parameter pengujian, hasil-hasil yang diperoleh seteliti hasil eksak yang diperoleh dengan metode numerik Runge-Kutta.

ABSTRACT

Fredholm Integral Equation Method (FIM) had been developed to give results as accurate as the exact values computed from Runge- Kutta numerical method. Recently this method has been applied to the calculation of radar scattering by hydrometeors with good results. However the accuracy of this method has not been tested for a broader of interest. The purpose of this study is to assess the accuracy of the FIM for Yukawa and exponensial potensials with different parameters A and α, that measure the strength and range of the potential. From the results of tests, it is shown that FIM is as accurate as the Runge-Kutta numerical method.

PENDAHULUAN

Metode persamaan integral merupakan *komplimen* terhadap metode numerik penyelesaian persamaan diferensial. Dalam metode numerik diperlukan harga awal dari fungsi beserta derivatifnya untuk membangun seluruh penyelesaian titik demi titik dengan panjang langkah yang telah ditetapkan. Metode persamaan integral di lain pihak tidak memerlukan titik awal, tetapi seluruh penyelesaian pada titik-titik kwadratur dilakukan sekaligus berdasar suatu penyelesaian persamaan linier. Penyelesaian demikian memerlukan memori komputer yang cukup besar dan tidak praktis dilakukan dengan komputer mini. Baik metode numerik diferensial maupun integral memerlukan titik-titik interval yang dalam hal metode diferensial kesalahan mengestimasi penyelesaian tiitk berikutnya bergantung pada besar kecilnya interval (h) yang digunakan. Metode numerik Runge-Kutta yang digunakan di sini mengestimasi kesalahan setiap langkah dengan h^6 sehingga apabila diambil h = 0,1 orde kesalahan dalam penyelesaian berikutnya adalah 10^{-6}.Tidaklah jelas dengan metode penyelesaian persamaan integral, karena dengan semakin kecil interval yang digunakan, semakin tidak stabil kondisi matriks yang muncul dalam persamaan integral. Namun dari hasil-hasil perhitungan, representasi penyelesaian di daerah pedalaman di mana potensial masih punya harga yang tak terabaikan, penyelesaian persamaan integral seteliti penyelesaian numerik. Kelebihan dari penyelesaian dengan persamaan integral adalah diperolehnya representasi analitik dari fungsi gelombang yang akurat di daerah pedalaman (inner region) yaitu daerah dimana harga potensial tidak terabaikan. Kelemahannya adalah bahwa metode ini hanya praktis bagi model-model potensial yang matriks elemen Born pertama dan kedua *off shell* dapat dihitung secara analitik. Di samping itu diperlukan memori komputer yang cukup besar untuk menyelesaikan persamaan linier yang timbul.

Metode persamaan integral Fredholm (FIM) telah dikembangkan oleh Holt dan Santoso (1973) sebagai jalan keluar untuk mengatasi timbulnya singularitas pada kernel dalam persamaan integral yang dikembangkan oleh Walters (1971). Akhir-akhir ini FIM telah digunakan dengan hasil yang bagus bagi hamburan radar oleh partikel-partikel tetes hujan. Dari pengamatan yang diperoleh dalam memecahkan persamaan linier yang muncul, selalu ditemui matriks yang berkondisi jelek (ill conditioned). Anehnya penyelesaian fungsi gelombang yang diperoleh tetap akurat pada contoh-contoh yang telah diberikan. Belumlah jelas jangkau ketelitian metode FIM untuk kasus yang lain. Maksud dari penelitian ini adalah menguji metode FIM untuk potensial dengan kekuatan dan jangkau yang berbeda-beda dalam model potensial Yukawa dan exponensial. Kedua potensial ini dipilih karena penyelesaian matriks elemen Born yang pertama dan kedua *off-shell* dapat dihitung secara analitik. Ternyata dari model-model yang dipakai di sini, hasil-hasil yang diperoleh masih seteliti metode numerik Runge-Kutta yang dianggap sebagai harga eksak.

Metode Persamaan Integral Fredholm

Suatu hamburan kuantum sentral non- relativistik baik itu hamburan atom, nuklir maupun gelombang elektromagnetik dapat dilukiskan oleh persamaan

$$(\nabla^2 + k_o^2)\psi(\bar{r}) = U(\bar{r})\psi(\bar{r}') \qquad (1)$$

k_o adalah vektor gelombang zarah terhambur dan U adalah potensial penghambur $\psi(\bar{r})$ adalah fungsi gelombang yang melukiskan keadaan sistem hamburan. Persamaan integral yang memenuhi (1) adalah

$$\psi(\bar{r}) = e^{i\bar{k}_o\cdot\bar{r}} + \int G(\bar{r}\bar{r}')\, U(\bar{r})\psi(\bar{r}')\, \psi(\bar{r})\, d\bar{r}' \qquad (2)$$

G(r,r') adalah fungsi Green dari operator $\nabla^2 + k_o^2$ yang diberikan oleh

$$G(\bar{r},\bar{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik_o|\bar{r},\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|} = \frac{1}{2\pi^3}\int \frac{d\bar{p}\, e^{ip.(-r')}}{p^2 - k_o^2 - i\xi} \qquad (3)$$

$\bar{p}$ adalah variabel integrasi $d\bar{p} = p^2\, dp, dx_p\, d\varphi_p$

Persamaan (2) termasuk persamaan integral Fredholm karena batas-batas integrasi adalah harga yang tertentu. Secara formal persamaan (2) ditulis sebagai

$$\psi = \Phi_o + GU\psi \qquad (4)$$

dimana $\Phi_o = e^{\bar{k}_o\cdot\bar{r}}$ dan operator $GU = \int G(\bar{r},\bar{r}')\, U(\bar{r}')\, U(\bar{r})\, d\bar{r}'$ yang harus bekerja pada $\psi(\bar{r},)$.

Ekspansi Born dapat dilakukan dari persamaan (4) yaitu dari $(1 - GU)psy = \Phi_o$ menjadi

$$\psi = (1 - GU)^{-1}\Phi_o =$$

$$(1 + GU + GU.GU + ...)\Phi_o \qquad (5)$$

Amplitudo hamburan yang harus dihitung adalah,

$$f(\vartheta) = \frac{1}{4\pi} < k_s | U | \psi > =$$

$$-\frac{1}{4\pi}\int e^{i\bar{k}_s\cdot\bar{r}}\, U(.r)\, \psi(\bar{r})\, d\bar{r} \qquad (6)$$

k_s adalah vektor gelombang terhambur, yang oleh Born diberikan sebagai:

$$f_1(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} < \bar{k}_s | U | \bar{k}_o > \quad \text{Born pertama} \qquad (7)$$

yang oleh Born diberikan sebagai

$$f_2(\vartheta) = f_1(\vartheta) - \frac{1}{4\pi} < \bar{k}_s | UGU | \bar{k}_o > \quad \text{Born kedua} \qquad (8)$$

Deret yang diberikan oleh Born tidak dapat menjamin keakuratan perhitungan karena operator GU tidak dapat langsung dilihat apakah ia jauh lebih kecil dari pada satu.

Metode FIM mengatasi problema ini dengan mengekspansikan $\psi(\bar{r})$ dan tidak mengekspansikan operator $(1 - GU)^{-1}$. Ekspansi $\psi(\bar{r})$ yang dimaksud adalah

$$\psi(\bar{r}) = \int C(\bar{q})\, e^{i\bar{q}\cdot\bar{r}}\, d\bar{q} \qquad (9)$$

$\bar{q}$ adalah variabel interaksi $d\bar{q} = g^2\, dq\, dx_q\, d\varphi_q$. Apabila pada persamaan (2) atau (4) dikenakan pengoperasian $\int e^{-\bar{k}\cdot\bar{r}}\, U(r)\, d\bar{r}$ dengan $\bar{K}$ sementara sembarang , maka diperoleh

$$< \bar{K} | U - UGU | \psi > = < \bar{K} | U | \bar{k}_o > \qquad (10)$$

Dengan memasukkan ekspansi (9) maka diperoleh persamaan integral untuk mencari harga $C(\bar{q})$.

$$\int C(\bar{q}) < \bar{K} | U - GU | \bar{q} > d\bar{q} = < \bar{K} | U | \bar{k}_o > \qquad (11)$$

Integrasi dalam,

$d\bar{q}$ ($\int d\bar{q} = \int_0^\infty\int_{-1}^1\int_0^{2\pi} q^2\, dq\, dx_q\, d\varphi_q$) dapat didekati dengan titik kwadratur, sehingga (11) menjadi

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} A_{klij}\, \widetilde{C}_{ij} = b_{kl} \qquad (12)$$

N dan M adalah jumlah titik kwadratur sepanjang q dan x_q, $\widetilde{C}_{ij} = p_{ij}\, C(q_i, x_j)$; $A_{klij} = < q_k, x_l | U - UGU | q_i, x_j >$; p_{ij} = faktor berat dan $b_{kl} = < q_i x_l | \underline{U} | k_{o,} 1 >$.

Penyelesaian $\widetilde{C}_{ij}$ dari persamaan (12) memberikan penyelesaian $\psi(\bar{r})$ dalam bentuk :

$$\psi(r) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} C_{ij} < k_s, X_s \,|U\,| q_i, X_j >$$

(13)

sehingga amplitudo hamburan $f(\vartheta)$ diberikan oleh:

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} C_{ij} < k_s, x_s \,|\, U \,|\, q_i, x_j > \tag{14}$$

atau

$$f(\vartheta) = f_1(\vartheta) - \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{M} C_{ij} < k_s, x_s \,|\, UGU \,|\, q_i, x_j > \tag{15}$$

Sudah barang tentu kalau pendekatan ψ seperti diberikan oleh (13) cukup akurat maka perhitungan $f(\vartheta)$ memakai bentuk Born pertama (14) akan memberikan hasil yang sama apabila dihitung dengan Born kedua (15).

Hasil-hasil pengujian dan diskusi.

Pengujian dilakukan untuk potensial-potensial model Yukawa $U(r) = Ae^{-\alpha r}/r$ dan eksponensial $U(r) = Ae^{-\alpha r}$ dimana A dan α tetapan yang memberikan ukuran kekuatan dan jangkau potensial. Pada tabel 1 (lampiran) ditunjukkan hasil-hasil perhitungan dengan metode Born pertama dan kedua. FIM dan Numerik Runge-Kutta (eksak).

Ternyata pendekatan Born sampai orde dua, kurang memberikan hasil ketepatan yang cukup sedangkan untuk FIM terlihat seakurat metode Runge-Kutta. Untuk potensial repulsif, ternyata harga imaginer Born kedua tidak berbeda dan mereka juga masih kurang cukup akurat dibandingkan dengan FIM yang seakurat metode numerik Runge-Kutta. Pada daerah energi dimana metode Born mendekati hasil eksak, jumlah kuadrat $|C_{ij}|^2$ mendekati satu. Pada titik ekstrimnya tentu fungsi gelombang ψ mendekati $e^{i\vec{k}_o r}$ sehingga $|C_{ij}|^2 \rightarrow 1$.

KESIMPULAN

Sebagai satu konklusi dapat dikonfirmasikan di sini bahwa FIM tetap memberikan hasil seakurat metode numerik Runge-Kutta untuk pengujian yang telah dilakukan dengan berbagai energi zarah, sudut dan potensial penghambur sebagai tertera dalam tabel-tabel pengujian. Dari hasil uji coba ini ternyata FIM memberikan hasil seakurat metode numerik diferensial seperti terlihat dalam tabel-tabel terlampir.

DAFTAR PUSTAKA

1. Walters HJR, Journal Phys B, Atom Molec Phys.1971.
2. Holt AR, Santoso B, A.Fredholm Integral Equation Method for Scattering Phase Shifts, Journal Phys B, Atom, Molec Phys, 1972.
3. Holt AR, Santoso B, The Fredholm Integral Method II, Scattering Amplitudes for Potential Scattering, Journal Phys B, Atom Molec Phys, 1973.
4. Uzunoglu N.K, et.al, Scattering of Electronic Radiation, Proc IEE, vol 124, 1977.
5. Holt AR, et.al,Some Resonance Effect in Scattering of Microwaves by Hidrometeors, Proc IEE vol 124, 1977.
6. Salvat F, et.al, Phys Rev. A.36, 1987.

Tabel 1. Harga-harga $f(\theta)$ untuk potensial $U(r) = -2.365e^{-r}/r$

nomor gel k_o	θ	Pendekatan Born B_1	B_2	WALTERS (1971)	FIM	RUNGE KUTTA
0.663	0	2.365	3.379+1.344i	1.116+1.671i	1.136+1.673i	1.134+1.673i
	π/2	1.259	2.120+1.231i	-0.159+1.503i	-0.138+1.504i	-0.140+1.504i
	π	0.857	1.619+1.139i	-0.689+1.356i	-0.667+1.358i	-0.669+1.358i
1.816	0	2.365	2.562+0.716i	2.186+0.739i	2.187+0.739i	2.188+0.739i
	π/2	0.311	0.388+0.379i	0.079+0.349i	0.079+0.347i	0.079+0.347i
	π	0.167	0.214+0.270i	-0.050+0.215i	-0.049+0.213i	-0.050+0.213i
3.0	0	2.365	2.441+0.454i	2.296+0.445i	2.299+0.459i	2.30 +0.459i
	π/2	0.125	0.138+0.139i	0.053+0.125i	0.053+0.124i	0.053+0.125i
	π	0.064	0.072+0.089i	0.008+0.071i	0.008+0.071i	+0.072i
4.0	0	2.365	2.408+0.344i	2.323+0.308i	2.238+0.346i	+0.347i
	π/2	0.072	0.077+0.072i	0.039+0.066i	0.039+0.065i	+0.065i
	π	0.036	0.039+0.042i	0.013+0.037i	0.012+0.037i	+0.037i
5.0	0	2.365	2.393+0.277i	2.337+0.216i	2.341+0.278i	+0.278i
	π/2	0.046	0.048+0.042i	0.029+0.039i	0.029+0.038i	+0.039i
	π	0.023	0.025+0.025i	0.012+0.022i	0.011+0.022i	+0.022i

Tabel 2. Harga-harga $f(\theta)$ untuk $U(r) = -2e^{-r}$

nomor gel k_o	θ	Pendekatan Born B_1	B_2	FIM	Runge-Kutta
1.0	0	4.000	4.275+1.323i	3.772+1.287i	3.773+1.289i
	π/2	0.444	0.428+0.564i	0.116+0.403i	0.116+0.403i
	π	0.160	0.102+0.297i	-0.069+0.102i	-0.069+0.102i
2.0	0	4.000	4.064+0.667i	3.942+0.661i	3.941+0.661i
	π/2	0.049	0.037+0.051i	0.019+0.036i	0.019+0.036i
	π	0.014	0.008+0.016i	0.004+0.008i	0.005+0.008i
3.0	0	4.000	4.028+0.444i	3.972+0.442i	+0.443i
	π/2	0.011	0.009+0.008i	0.007+0.006i	+0.006i
	π	0.003	0.002+0.002i	0.002+0.002i	+0.002i
4.0	0	4.000	4.016+0.333i	3.986+0.332i	+0.333i
	π/2	0.004	0.003+0.0002i	0.003+0.002i	+0.002i
	π	0.001	0.0008+0.0005i	0.0007+0.0004i	+0.0005i
5.0	0	4.000	4.010+0.267i	3.993+0.266i	
	π/2	0.0015	0.0014+0.0007i	0.0013+0.0006i	
	π	0.0004	0.0003+0.0002i	0.0003+0.0001i	

Tabel 3. Harga-harga f(0) untuk potensial $U(r) = -2(1 + \frac{1}{r})\, e^{-2r}$

nomor gel k_o	(θ)	Pendekatan Born B_1	B_2	FIM	Runge-Kutta
1.0	0	1.000	1.287+0.385i	0.935+0.657i	0.935+0.658i
	•/2	0.556	0.800+0.355i	0.443+0.617i	0.443+0.618i
	•	0.375	0.586+0.329i	0.226+0.582i	0.225+0.583i
2.0	0	1.000	1.094+0.261i	0.979+0.299i	0.979+0.2[illegible]i
	•/2	0.222	0.269+0.174i	0.163+0.197i	0.163+0.197i
	•	0.120	0.150+0.132i	0.051+0.144i	0.051+0.145i
3.0	0	1.000	1.044+0.185i	0.991+0.196i	0.991+0.196i
	•/2	0.107	0.119+0.085i	0.079+0.087i	0.079+0.087i
	•	0.055	0.061+0.057i	0.028+0.055i	0.028+0.055i
4.0	0	1.000	1.025+0.142i	0.995+0.147i	0.995+0.147i
	•/2	0.062	0.066+0.046i	0.047+0.045i	0.047+0.045i
	•	0.031	0.033+0.029i	0.019+0.027i	0.019+0.027i
5.0	0	1.000	1.016+0.115i	0.997+0.117i	+0.117i
	•/2	0.040	0.041+0.027i	0.031+0.027i	0.031+0.027i
	•	0.020	0.021+0.017i	0.014+0.016i	0.014+0.016i

Tabel_4 . Amplitudo Hamburan Untuk U(r) = 2.365.exp(-r)/r

k	cos(t)	Born-1	Born-2	F I M	Runge-Kutta
0.663	1.0	-2.365	-1.3511+i1.3444	-1.5559+i.49915	-1.5558+i.49994
	0.0	-1.2586	-.38914+i1.2314	-.57493+i.41571	-.5747+i.41570
	-1.0	-0.85742	-.09605+i1.1387	-.26523+i.35062	-.2652+i.35060
1.0	1.0	-2.365	-1.8057+i1.1186	-1.7451+i.53484	-1.7490+i.5352
	0.0	-0.78833	-.39794+i.89161	-.33277+i.36228	-.33270+i.36230
	-1.0	-0.4730	-.17306+i.75016	-.10656+i.26489	-.10640+i.26490
1.816	1.0	-2.365	-2.1679+i.71573	-2.0221+i.48979	-2.0280+i.48720
	0.0	-0.31136	-.23471+i.37783	-.12265+i.20522	-.12260+i.20520
	-1.0	-0.16665	-.11907+i.26890	-.027335+i.1262	-.02731+i.12620
2.0	1.0	-2.365	-2.2005+i.65803	-2.0672+i.46898	-2.0680+i.46940
	0.0	-0.26278	-.20646+i.31685	-.10471+i.18010	-.10460+i.18010
	-1.0	-0.13912	-.10514+i.22009	-.016992+i.0542	
3.0	1.0	-2.365	-2.2894+i.45350	-2.1948+i.37724	-2.1940+i.3777
	0.0	-0.12447	-.11052+i.13871	-.05712+i.09400	-.05669+i.09407
	-1.0	-0.63919	-.056236+i.0885	-.016992+i.0542	-.01528+i.05432
4.0	1.0	-2.365	-2.3320+i.34420	-2.2588+i.30738	-2.2210+i.3079
	0.0	-0.71667	-.06684+i.07225	-.038522+i.0554	-.03726+i.05438
	-1.0	-0.036385	-.03381+i.04422	-.01388+i.03090	+i.03095
5.0	1.0	-2.365	-2.3373+i.27689	-2.2932+i.25674	+i.2580
	0.0	-0.046373	-.04431+i.04241	-.0288+i.033872	-.02730+i.0344
	-1.0	-.023416	-.022344+i.0253	-.011294+i.0192	+i.0200

Tabel 5. Amplitudo Hamburan Untuk $U(r) = -2.365.exp(-al*r)/r$

k	cos(t)	Born-1	Born-2	F I M	Runge-Kutta
al=.50	1.0	9.4600	9.8761+i.3.0227	8.4836+i2.6727	8.381+i.2.682
1.816	0.0	0.34547	.40085+i.72297	-.20724+i.31123	.2071+i.3133
	-1.0	0.17595	.20561+i.44818	-.18088+i.09223	-.2023+i.09196
al=.75	1.0	4.2044	4.4756+i.1.3129	3.8224+i1.2504	3.830+i1.2530
1.816	0.0	0.33039	.400779+i.51695	-.0388+i.36693	-.04035+i.2681
	-1.0	0.17195	.21240+i.34386	.12141i.17699	-.1238+i.17790
al=1.5	1.0	1.0511	1.7190+i.29235	1.084+i.35405	1.021+i.35450
1.816	0.0	0.26736	0.34025+i.21031	0.19290+i.25649	0.1929+i:25680
	-1.0	0.15316	0.20517+i.16766	0.06411+i.20227	.06408+i.20260
al=2.0	1.0	0.59125	0.67259+i.14771	0.60606+i.20341	
1.816	0.0	0.22320	0.28356+i.12277	0.21693+i.17405	
	-1.0	0.13757	0.18556+i.10596	0.11909+i.15338	

Tabel 6. Amplitudo Hamburan Untuk $U(r) = -2.0.exp(al*r)$

k	cos(t)	Born-1	Born-2	F I M	Runge-Kutta
al=0.6	1.0	18.519	18.810+i5.1440	17.296+i4.7606	
2.0	0.0	0.03434	.017784+i.06472	-.00506+i.02085	
	-1.0	0.0089669	.003528+i.01634	-.00057+i.00495	
al=0.7	1.0	11.662	11.846+i2.7765	11.134+i2.6513	11.020+i2.6770
2.0	0.0	0.038846	.022676+i.06230	-.001258+i.0269	-.006505+i.0274
	-1.0	0.010297	.0044990+i.0162	-.0004559+i.005	-.02351+i.00594
al=0.8	1.0	7.8125	7.9364+i1.6275	7.5685+i1.5830	7.5480+i1.5910
	0.0	0.042867	0.027704+i.0591	.0049725+i.0315	+i.03188
	-1.0	0.011577	.0055765+i.0161	.0015723+i.0067	+i.0067