

PEMODELAN JARINGAN SYARAF TIRUAN UNTUK MENGEVALUASI DAN MEMPREDIKSI SIFAT BAHAN PENDINGIN REAKTOR

Mike Susmikanti

Pusat Pengembangan Informatika Nuklir, Badan Tenaga Nuklir Nasional
Kawasan PUSPIITEK Serpong, Tangerang Selatan
e-mail: mike@batan.go.id

ABSTRAK

Dalam beberapa penelitian, campuran bahan Timbal-Bismuth (Pb-Bi) cair merupakan kandidat kuat untuk menjadi pendingin Fast Breeder Reactor (Reaktor Pembiak Cepat). Simulasi perhitungan Molekuler Dinamik terhadap Pb, Bi dan campuran Pb-Bi merupakan penelitian korosi baja dalam Pb-Bi cair. Sifat yang menguntungkan pada Pb-Bi cair sebagai pendingin reaktor nuklir mempunyai titik leleh pada temperatur 123,5^oC dan titik didih mencapai temperatur 1670^oC. Kelemahan cairan logam ini, sangat cepat menyerap terhadap besi dan stainless steel terutama pada temperatur tinggi. Oleh karena itu dalam reaktor dengan berpendingin Pb-Bi, stainless steel akan mengalami korosi. Penelitian fenomena korosi stainless steel dalam Pb-Bi cair umumnya dilakukan secara eksperimen. Kegiatan ini belum memungkinkan di Indonesia karena fasilitas belum memadai. Akan tetapi simulasi dengan komputer harus dilakukan sebagai faktor alternatif. Penelitian ini ditujukan mendukung pemahaman mekanisme atomik fenomena korosi stainless steel dalam Pb-Bi cair sebagai fungsi dari temperatur dengan Jaringan Syaraf Tiruan. Sebagai langkah awal akan diselidiki sifat pelelehan masing-masing bahan dengan simulasi molekuler dinamik menggunakan hasil paket program MOLLY melalui perhitungan Radial Distribution Function (RDF). Dalam identifikasi sifat material nuklir terhadap hasil simulasi digunakan metoda feedforward. Sebagai pembandingan identifikasi digunakan metoda multilayer perceptron. Diperoleh hasil identifikasi pada temperatur tertentu, apakah material akan bersifat padat atau cair, sehingga dapat mendukung penelitian selanjutnya yang menyelidiki sifat material yang bersifat korosif.

Kata kunci: jaringan syaraf tiruan, molekuler dinamik, korosi

1. PENDAHULUAN

Dalam beberapa penelitian campuran bahan Timbal-Bismuth (Pb-Bi) cair merupakan calon yang sangat kuat untuk menjadi pendingin Fast Reactor (Reaktor Cepat). Simulasi perhitungan Molekuler Dinamik terhadap Pb, Bi dan campuran Pb-Bi dengan menggunakan paket program MOLLY merupakan penelitian awal tentang korosi baja dalam Pb-Bi cair. Sifat-sifat yang menguntungkan pada Pb-Bi Cair dalam aplikasi pendingin reaktor nuklir adalah dengan titik lelehnya pada temperatur 123,5^oC dan titik didihnya dengan temperatur mencapai 1670^oC. Kelemahan cairan logam ini adalah sangat cepat menyerap terhadap besi dan stainless steel terutama pada temperatur tinggi. Oleh karena itu dalam reaktor berpendingin Pb-Bi, Stainless Steel akan mengalami korosi. Penelitian fenomena korosi Stainless Steel dalam Pb-Bi cair pada umumnya dilakukan secara eksperimen. Kegiatan ini masih belum memungkinkan di Indonesia karena fasilitas belum memadai tetapi harus dilakukan sebagai faktor pendukung antara lain dapat dengan simulasi komputer. Penelitian ini ditujukan untuk memahami mekanisme atomik fenomena korosi stainless steel dalam Pb-Bi cair sebagai fungsi dari temperatur dan waktu dengan Jaringan Syaraf Tiruan.

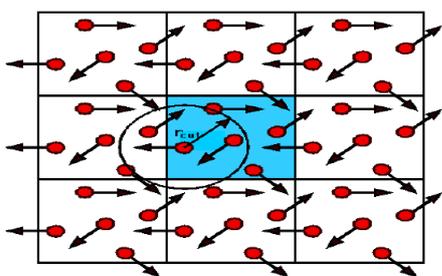
Sebagai langkah awal akan dilihat sifat pelelehan bahan di atas dengan menghitung karakteristik bahan melalui perhitungan *Radial Distribution Function (RDF)*. Simulasi dapat merupakan konfigurasi atom-atom bahan Pb dan Bi yang diperoleh dari data *crystal structure* yang berupa parameter kisi dengan jenis strukturnya. Interaksi antar atom-atom Pb-Pb, Bi-Bi dan Pb-Bi diasumsikan memenuhi potensial Lennard-Jones. Parameter Lennard-Jones masing-masing atom diambil dengan melalui *fitting data* yang terdapat dalam literatur yang menghitung interaksi antaratom [4]. Hasil yang diperoleh dalam simulasi ini adalah kurva fungsi distribusi radial sebagai fungsi dari posisi yang dapat dipakai untuk melihat keadaan fase sistem serta sebagai fungsi dari temperatur. Dalam hal ini diselidiki khususnya kristal Pb dan Bi pada temperatur 300K, 773K, 1000K dan 1809K.

Dalam Jaringan Syaraf Tiruan dilakukan pengujian untuk mengidentifikasi sifat material nuklir dari hasil simulasi molekuler dinamik dengan paket program MOLLY menggunakan metoda *new feedforward*. Sebagai pembandingan dilakukan pengujian identifikasi menggunakan metode *multilayer perceptron*. Diambil data pembelajaran, pelatihan dan simulasi. Keseluruhan proses identifikasi menggunakan MATLAB.

2. DASAR TEORI

Molekuler Dinamik merupakan teknik simulasi yang direpresentasikan oleh interaksi sejumlah atom dalam jangka waktu tertentu. Metode untuk menyelidiki struktur dari zat padat, cair dan gas. Paket program Moldy adalah suatu program *open source* yang dipakai untuk simulasi dinamika molekul bahan cair atau padat. Secara umum simulasi dengan menggunakan metode molekuler dinamik memerlukan kondisi awal yang diketahui di antaranya adalah posisi dan kecepatan awal dari seluruh atom serta energi potensial antaratom yang merupakan fungsi dari jarak.

Syarat batas kondisi sangat penting dalam simulasi dinamika molekuler, terutama untuk menghilangkan efek permukaan. Simulasi sangat terpengaruh oleh efek permukaan. Ini menyebabkan informasi yang didapatkan adalah sifat materi dekat permukaan, padahal yang lebih penting diamati adalah sifat materi itu sendiri. Gambar 1 mengilustrasikan bagaimana konsep syarat batas periodik. Kotak yang diberi warna mendefinisikan sistem yang digunakan untuk simulasi, sedangkan kotak yang tidak berwarna akan berisi duplikat setiap partikel yang ada dalam kotak simulasi dengan informasi yang sama (kecepatan, posisi relatif, jumlah). Dalam konsep syarat batas periodik terdapat asumsi bahwa setiap atom yang meninggalkan sel akan digantikan oleh atom lain dengan kecepatan sama dan masuk dari sel yang berlawanan. Sehingga jumlah atom dalam sel tetap.



Gambar 1. Syarat Batas periodik

Terdapat beberapa material nuklir yang menjadi kandidat pendingin untuk reaktor juga bersifat korosif terhadap bahan penyusun *stainless steel*, karena adanya proses difusi antara atom pendingin dengan atom penyusun *stainless steel* tersebut. Peristiwa korosif tersebut diasumsikan sebagai peristiwa difusi cairan pendingin ke dalam komponen *stainless steel* disebabkan gaya tarik-menarik atom pendingin ke dalam *stainless steel* atau sebaliknya. Hasil simulasi merupakan parameter-parameter dalam fungsi distribusi radial sebagai fungsi dari waktu yang mencerminkan karakteristik material.

2.1 Prosedur eksperimen

Posisi awal atom Pb dan Bi dalam simulasi ini ditetapkan menempati kisi kubus sederhana secara berulang dalam arah 3-dimensi. Kecepatan awal masing-masing atom ditentukan secara random dengan random generator yang bernilai antara 0 sampai 1.

Dalam penelitian ini energi potensial atom Pb-Pb, Bi-Bi dan Pb-Bi diambil dari literatur. Data ini kemudian difitting sebagai potensial Lennard-Jones yang memenuhi persamaan berikut:

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

$u(r)$ adalah energi potensial, ε adalah parameter energi, σ adalah parameter jarak terdekat antar atom dan r menunjukkan posisi. Sehingga titik potong terhadap sumbu horizontal dan kedalaman sumur potensial dianggap sebagai parameter Lennard-Jones. Hasilnya terlihat dalam Tabel 1,

Tabel 1. Parameter Lennard Jones

No	Unsur	ε (eV)	σ (A)
1	Pb-Pb	-0.125	2,75
2	Bi-Bi	-0.075	2,8
3	Pb-Bi	-0,12	2,75

Dari energi potensial antar atom dapat diperoleh gaya seperti pada persamaan (2),

$$\vec{F} = - \frac{du}{dr} \quad (2)$$

Dari energi potensial di atas dapat diperoleh gaya antaratom yang dinyatakan dalam persamaan (3),

$$\vec{F} = \sum_{j \neq i}^N \vec{F}_{ij} = - \sum_{j \neq i}^N \frac{\partial u(\vec{r})}{\partial(\vec{r})} \quad (3)$$

N adalah jumlah simulasi atom. \vec{F}_{ij} adalah gaya yang dialami oleh atom i yang diakibatkan oleh atom j . Atom-atom ini diasumsikan merupakan partikel klasik dan gerakannya memenuhi hukum Newton. Untuk mengetahui posisi dan kecepatan atom i setelah mengalami gaya dari N atom lain maka diperlukan persamaan gerak Newton dalam persamaan (4),

$$\vec{F}_i = m_i \frac{\partial \vec{v}_i}{\partial t} = m_i \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}; (i = 1, \dots, N) \quad (4)$$

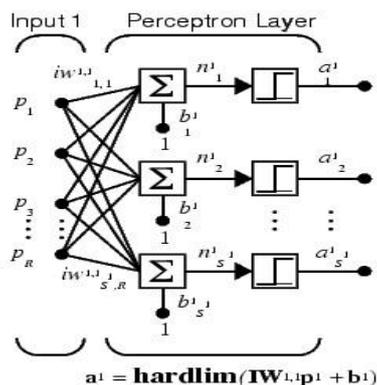
m_i massa atom i , v_i dan r_i adalah masing-masing kecepatan dan posisi atom i . Persamaan Fungsi distribusi radial (RDF) dinyatakan pada persamaan (5) berikut,

$$g(r) = \frac{N(r, \Delta r)}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)} \sum_i m_i v_i^2 \quad (5)$$

di mana ρ adalah rapat atom, $V(r)$ volume kulit bola pada jarak r . Fungsi distribusi radial $g(r)$ merupakan ukuran untuk melihat sejauh mana atom-atom mengatur posisinya pada temperatur tertentu, sehingga dapat dibedakan lebih lanjut secara kualitatif apakah suatu sistem dalam keadaan padat atau cair.

2.2 Model Jaringan Syaraf Tiruan

Sifat bahan padat cair dapat diprediksi menggunakan pendekatan berdasarkan pada penggunaan jaringan syaraf tiruan. Struktur dari suatu jaringan syaraf tiruan adalah hirarki dengan kumpulan neuron dalam layer yang berbeda yang dirancang sebagai suatu input layer, hidden layer dan pada output layer seperti pada Gambar 2. Posisi, kecepatan awal dan nilai intensitas pada posisi tertentu yang diperoleh dari nilai fungsi distribusi radial merupakan variabel masukan. Hasil identifikasi sifat bahan dalam keadaan padat dan cair dipilih menjadi tingkat output. Dilakukan analisis statistik dari data masukan dan data keluaran.



Gambar 2. Hirarki kumpulan neuron dengan layer yang berbeda

Tingkatan masukan dan keluaran dihubungkan melalui hidden layer h_i di mana masukan x_i dioperasikan dengan suatu fungsi transfer berikut pada persamaan (6),

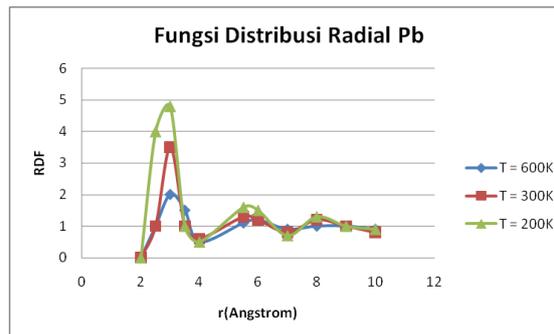
$$h_i = f\left(\sum_{j=1}^N w_{ij} x_j + \theta_{ij}\right) \quad (6)$$

Dimana θ_{ij} didefinisikan sebagai nilai bias dan w_{ij} didefinisikan sebagai bobot.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini ditujukan untuk memahami mekanisme atomik fenomena korosi *Stainless Steel* dalam Pb, Bi dan Pb-Bi sebagai fungsi dari temperatur dan waktu. Sebagai langkah awal akan dilihat sifat pelelehan masing-masing bahan di atas dengan menghitung *Radial Distribution Function* (RDF). Hasil perhitungan menggunakan simulasi molekuler dinamik yang diperoleh tampak pada

Gambar 3, merupakan nilai-nilai fungsi distribusi radial kristal Pb-Pb. Pada suhu 200 K puncak fungsi distribusi radial yang muncul dengan intensitas yang tinggi menandakan sistem dalam keadaan padat. Demikian juga untuk temperatur 300 K. Sedangkan pada 600 K intensitasnya berkurang dengan naiknya temperatur. Hal ini terjadi karena posisi atom-atom Pb pada temperatur ini semakin acak yang berarti sistem dalam keadaan cair. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen yang mana titik leleh Pb adalah 600 K.



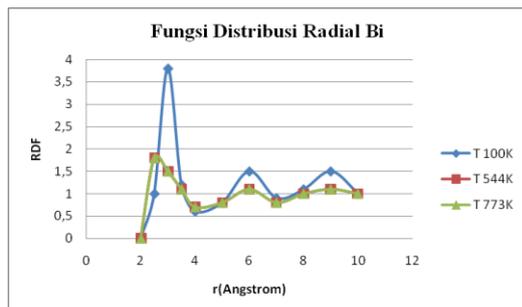
Gambar 3. Fungsi Distribusi Radial Kristal Pb

Sebagai data masukan diambil nilai-nilai parameter posisi r dengan beberapa nilai intensitas yang dominan atau tinggi yang dapat mewakili karakteristik Pb-Pb pada masing-masing temperatur dan posisi yang dinyatakan pada Tabel 2,

Tabel 2. Nilai RDF Pb pada posisi (r) dan Temperatur (Kelvin)

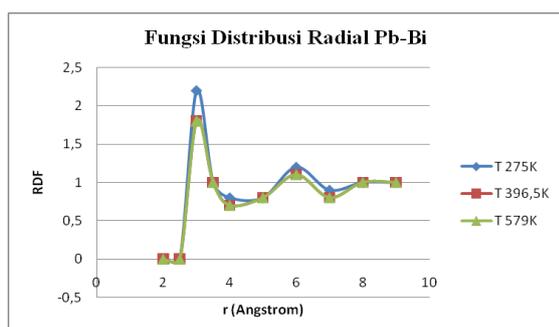
Posisi (r)	200 K	300 K	600K
2,0	0,0	0,0	0,0
2,5	1,0	1,0	4,0
3,0	2,0	3,5	4,8
3,5	1,5	1,0	1,0
4,0	0,5	0,6	0,5
5,5	1,1	1,3	1,6
6,0	1,2	1,2	1,5
7,0	0,9	0,8	0,7
8,0	1,0	1,2	1,3
9,0	1,0	1,0	1,1
10,0	0,9	0,8	0,9

Hasil perhitungan yang diperoleh pada Gambar 4 merupakan nilai fungsi distribusi radial kristal Bi-Bi. Pada suhu 100 K puncak fungsi distribusi radial yang muncul dengan intensitas yang tinggi menandakan sistem dalam keadaan padat. Pada temperatur 544 K dan pada 773 K, intensitasnya berkurang dengan naiknya temperatur. Hal ini terjadi karena posisi atom-atom pada temperatur ini semakin acak yang berarti sistem dalam keadaan cair. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen yang mana titik leleh Bi adalah 544 K.



Gambar 4. Fungsi Distribusi Radial Kristal Bi

Simulasi perhitungan pada Gambar 5, merupakan nilai fungsi distribusi radial kristal Pb-Bi. Pada temperatur 275 K, puncak fungsi distribusi radial yang muncul dengan intensitas yang tinggi menandakan sistem dalam keadaan padat. Pada temperatur 396,5K dan 579,7K, intensitas berkurang dengan naiknya temperatur. Hal ini terjadi karena posisi atom-atom pada temperatur ini semakin acak yang berarti sistem dalam keadaan cair. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen yang mana titik leleh Pb-Bi adalah 396,5K.



Gambar 5. Fungsi Distribusi Radial Kristal Pb-Bi

3.1 Identifikasi dengan *new feedforward*

Sebelum mulai melakukan perancangan jaringan perlu dilakukan identifikasi masalah. Dalam hal ini dilakukan identifikasi apakah pada temperatur tertentu Pb-Pb, Bi-Bi dan Pb-Bi bersifat padat atau cair. Selanjutnya banyaknya neuron yang akan digunakan untuk pembelajaran, pelatihan dan simulasi pada jaringan. Untuk kasus ini, akan dibuat jaringan neuron layer tunggal dengan dua *neuron* untuk setiap *input* yang diwakili dengan nilai-nilai *RDF* pada beberapa temperatur tertentu dan delapan neuron dalam *hidden-layer* menggunakan metoda *new feedforward*. Output yang diperoleh terdiri dari 2 neuron yaitu padat atau cair.

Kemudian, yang perlu diperhatikan adalah fungsi aktivasi yang akan digunakan pada setiap layer. Dalam kasus ini, akan digunakan fungsi *tansig* untuk *hidden-layer* dan fungsi *purelin* untuk *layer* keluaran. Selain itu, berdasarkan fungsi aktivasi yang digunakan, nilai target ditentukan untuk masing-masing jenis material. Langkah selanjutnya adalah deklarasi variabel yang akan

digunakan.. Variabel lain yang perlu diidentifikasi adalah batas nilai gradient yang ingin dicapai. Digunakan fasilitas yang telah tersedia dalam MATLAB untuk proses deklarasi jaringan *neuron*. Jaringan *neuron* dengan 2 input atau lebih untuk masing-masing 10 neuron pada satu *hidden-layer*. Nilai masukan identifikasi adalah input P_i .

Salah satu simulasi pada interaksi Bi-Bi contoh untuk pembelajaran dan pelatihan, target yang diambil meliputi;

$$P1=[0 \ 1.0 \ 3.8 \ 1.2 \ 0.6 \ 0.8 \ 1.5 \ 0.9 \ 1.1 \ 1.5];$$

$$P2=[0 \ 1.8 \ 1.5 \ 1.1 \ 0.7 \ 0.8 \ 1.1 \ 0.8 \ 1.0 \ 1.1];$$

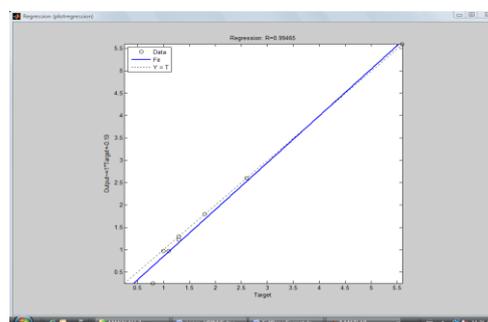
$$P3=[0 \ 1.8 \ 1.4 \ 1.1 \ 0.6 \ 0.8 \ 1.1 \ 0.9 \ 1.0 \ 1.2];$$

$$P11=[0 \ 1.0 \ 3.9 \ 1.1 \ 0.7 \ 0.8 \ 1.4 \ 0.9 \ 1.0 \ 1.6];$$

$$P21=[0 \ 1.8 \ 1.5 \ 1.0 \ 0.7 \ 0.9 \ 1.0 \ 0.8 \ 1.0 \ 1.2];$$

$$P31=[0 \ 1.7 \ 1.5 \ 1.0 \ 0.6 \ 0.9 \ 1.0 \ 0.9 \ 1.0 \ 1.3];$$

Parameter pembelajaran yang perlu didefinisikan adalah, *net.trainParam.epochs*=500 (banyaknya epoch). Menggunakan metoda *new feedforward*, pertama-tama dilakukan proses pembelajaran, pelatihan, simulasi pertama, kedua, ketiga dan seterusnya untuk beberapa temperatur diantaranya pada 100K, 544 K dan 773 K untuk Bismuth (Bi). Salah satu hasil identifikasi dari 30 sampel, untuk masing-masing Pb, Bi dan Pb-Bi menghasilkan grafik plot regresi hingga *gradient* yang diinginkan sebesar $1e-20$, yang salah satunya dinyatakan pada gambar 6.



Gambar 6. Hasil Plot Regresi

Selain plot regresi, diperoleh pula keluaran koefisien kesesuaian R seperti yang diperoleh pada salah satu trend untuk target simulasi dengan koefisien kesesuaian simulasi mendekati satu ($R = 0,9654$) yang menunjukkan bahwa trend hasil simulai hampir tepat dengan trend hasil pelatihan. Nilai regresi menyatakan koefisien kesesuaian R . Iterasi dinyatakan dengan jumlah *epoch*. Identifikasi sifat material padat atau cair menghasilkan keluaran yang sesuai dengan target dinyatakan pada Tabel 3. Proses pembelajaran, pelatihan, simulasi pertama, kedua dan ketiga dan hasil dinyatakan dalam program yang telah disusun menggunakan instruksi dalam MATLAB.

Tabel 3. Hasil Identifikasi padat atau cair dengan new feedforward

Unsur	Jumlah Sampel	Benar	Salah	Target
Pb-Pb	30	27	3	90%
Bi-Bi	30	26	4	87%
Pb-Bi	30	25	5	83%

3.2 Identifikasi dengan multilayer perceptron

Identifikasi dengan metoda *multilayer perceptron*, digunakan untuk mengenali sifat material padat atau cair, sebanyak 30 sampel masing-masing untuk Pb, Bi dan Pb-Bi pada beberapa temperatur. Identifikasi sifat material padat atau cair menghasilkan keluaran yang sesuai dengan target dinyatakan pada Tabel 4.

Tabel 4. Hasil identifikasi padat atau cair dengan multilayer perceptron

Unsur	Jumlah Sampel	Benar	Salah	Target
Pb-Pb	30	27	3	90%
Bi-Bi	30	27	3	90%
Pb-Bi	30	25	5	83%

4. KESIMPULAN

Proses identifikasi terhadap sifat material padat atau cair menggunakan *new feedforward* diperoleh total kesalahan relatif sebesar 13,3%. Demikian pula pada proses identifikasi terhadap sifat material padat atau cair menggunakan *multilayer perceptron* diperoleh total kesalahan relatif sebesar 12,2%. Dalam penelitian selanjutnya akan dilakukan identifikasi lebih lanjut menggunakan perhitungan *Mean Square Displacement* berdasarkan fungsi dari waktu sehingga dapat diketahui koefisien difusi untuk menentukan sifat material yang bersifat korosif.

UCAPAN TERIMA KASIH

Terima kasih disampaikan kepada Kementerian RISTEK yang telah memberikan bantuan dana penelitian Program Insentif Tahun 2011 sehingga terlaksananya salah satu tulisan ini.

PUSTAKA

- Alan Maulana, Zaki Suud, Hermawan K.D, Khairurijal (2006), *Aplikasi Paket Program MOLDY Untuk Karakteristik Sifat Bahan Fe, Pb, Bi dan Pendingin Reaktor Pb-Bi*, Risalah Lokakarya Komputasi dalam Sains dan Teknologi Nuklir XVII
- Allen, Michael P. (2004), *Introduction to Molecular Dynamics Simulation*, John Von Neuman Institute for computing, Vol 23
- Donald R. Askeland, Phule, P. Pradeep (2006), *The Science and Engineering Of materials*, Nelson, a division of Thomson Canada,
- James Adler (2003), *Molecular Dynamic of Simulations of Copper using Moldy*, Research Expeience for Undergraduates , National High Magnetic Field Laboratory
- Serkan Toros, Fahrettin Ozturk (2011), *Flow curve prediction of A-Mg alloys under warm forming conditions at various strain rates by ANN*, Journal Applied Soft Computing 11 homepage : www.elsevier.com/locate/asoc
- Sumantra Mandal, P.V. Sivaprasa, S. Venugopal, K.P.N. Murthy (2009), *Artificial neural network modeling to evaualate and predict the deformation behavior of stainless steel type AISI 304L during hot torsion*, Journal Applied Soft Computing 9 www.elsevier.com/locate/asoc
- Susmikanti, M; Entin H (2008) *Identifikasi Pengaruh Umur, Suhu dan Radiasi terhadap strukturmikro Ferritic Steel Berbasis Kecerdasan Buatan*”, Jurnal Sains Materi Indonesia, Edisi khusus, PTBIN-BATAN
- Susmikanti, M; Sitompul, A; Handayani, A (2007) *Pattern Recognition of Material Creep and Fatigue used in Nuclear Power Plant*, Proceedings International Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering (ICANSE), November, ITB Bandung
- Yingxia Qi, Minoru Takahashi, (2002), *Computer Simulation of Diffusion Of Pb- Bi Eutectic in Liquid Sodium by Molecular Dynamics Method* “.Proceedeng of ICONE 10, 10TH International Conference on Nuclear Engineering, Arlington, VA, USA
- Zilouchian, Ali, (2001). *Fundamentals of Neural Network*, CRC Press LLC