

IDENTIFIKASI SIFAT MATERIAL NUKLIR TERHADAP HASIL SIMULASI MOLEKULER DINAMIK DENGAN JARINGAN SYARAF TIRUAN MENGGUNAKAN METODA BACKPROPAGATION

Mike Susmikanti¹, Dinan Andiwijayakusuma²

¹Pusat Pengembangan Informatika Nuklir, Badan Tenaga Nuklir Nasional
Kawasan PUSPIPTEK Serpong, Tangerang Selatan
E-mail: mike@batan.go.id

²Pusat Pengembangan Informatika Nuklir, Badan Tenaga Nuklir Nasional
Kawasan PUSPIPTEK Serpong, Tangerang Selatan
e-mail: dinan@batan.go.id

ABSTRAK

Molekuler Dinamik merupakan teknik simulasi komputer yang direpresentasikan oleh interaksi sejumlah atom dalam jangka waktu tertentu. Hasil simulasi ini merupakan parameter-parameter dalam fungsi distribusi radial dan Mean Square Displacement sebagai fungsi dari waktu yang mencerminkan karakteristik material. Jaringan Syaraf Tiruan dapat digunakan sebagai pendukung keputusan untuk mengidentifikasi sifat material nuklir diantaranya yang bersifat korosif. Terdapat beberapa material nuklir yang menjadi kandidat pendingin untuk reaktor juga bersifat korosif terhadap bahan penyusun Stainless Steell, karena adanya proses difusi antara atom pendingin dengan atom penyusun Stainless Steell tersebut. Peristiwa korosif tersebut diasumsikan sebagai peristiwa difusi cairan pendingin kedalam komponen Stainless Steell disebabkan gaya tarik-menarik atom pendingin kedalam Stainless Steel atau sebaliknya. Dalam Jaringan Syaraf Tiruan, akan dilakukan pengujian untuk mengidentifikasi sifat material nuklir dari hasil simulasi molekuler dinamik menggunakan metoda back propagation. Sebagai pembandingan dilakukan pula pengujian identifikasi menggunakan metoda perceptron. Dalam pembelajaran dan pelatihan diambil data pembelajaran dan pelatihan, kemudian dilakukan simulasi. Keseluruhan proses identifikasi tersebut diatas menggunakan MATLAB. Diperoleh hasil identifikasi pada temperatur tertentu, apakah material akan bersifat padat atau cair, sehingga dalam penelitian selanjutnya dapat diselidiki sifat material yang bersifat korosif.

Kata kunci : Korosi, Molekuler Dinamik, Jaringan Syaraf Tiruan, Back Propagation

1. PENDAHULUAN

Molekuler Dinamik merupakan teknik simulasi komputer yang direpresentasikan oleh interaksi sejumlah atom dalam jangka waktu tertentu. Paket program Moldy adalah suatu program *open source* yang dipakai untuk simulasi dinamika molekul bahan cair atau padat. Hasil simulasi ini merupakan parameter-parameter dalam fungsi distribusi radial dan Mean Square Displacement sebagai fungsi dari waktu yang mencerminkan karakteristik material [1, 2].

Terdapat beberapa material nuklir yang menjadi kandidat pendingin untuk reaktor juga bersifat korosif terhadap bahan penyusun Stainless Steell, karena adanya proses difusi antara atom pendingin dengan atom penyusun Stainless Steell tersebut. Peristiwa korosif tersebut diasumsikan sebagai peristiwa difusi cairan pendingin kedalam komponen stainless steell disebabkan gaya tarik-menarik atom pendingin kedalam stainless steel atau sebaliknya [3].

Simulasi dapat merupakan konfigurasi atom-atom bahan diantaranya Fe, Pb, Bi yang diperoleh dari data *crystal structure* yang berupa parameter kisi dengan jenis strukturnya. Interaksi antar atom-atom misalnya Fe-Fe, Pb-Pb dan Bi-Bi diasumsikan memenuhi potensial Lennard-Jones. Parameter Lennard-Jones masing-masing atom diambil dengan melalui *fitting data* yang terdapat dalam literatur yang menghitung interaksi antar-atom [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 Fe pada temperatur 300K, 773K, 1000K dan 1809K.

Penelitian ini ditujukan untuk memahami mekanisme atomik fenomena korosi *Stainless Steel* dalam Fe cair sebagai fungsi dari temperatur dan waktu. Sebagai langkah awal akan dilihat sifat pelelehan bahan diatas dengan menghitung karakteristik bahan melalui perhitungan *Radial Distribution Function (RDF)*.

Jaringan Syaraf Tiruan dapat digunakan sebagai pendukung keputusan untuk mengidentifikasi sifat material nuklir diantaranya yang bersifat cair dan padat sehingga dalam penelitian selanjutnya dapat diselidiki sifat material yang bersifat korosif [5, 6]. Dalam Jaringan syaraf tiruan, akan dilakukan pengujian untuk mengidentifikasi sifat material nuklir dari hasil simulasi molekuler dinamik menggunakan metoda *backpropagation*. Sebagai pembanding dilakukan pula pengujian menggunakan metoda *perceptron* [7, 8]. Dalam pembelajaran dan pelatihan diambil data pembelajaran dan pelatihan, kemudian dilakukan simulasi. Keseluruhan proses identifikasi tersebut diatas menggunakan *MATLAB*. Diperoleh hasil identifikasi pada temperatur tertentu, apakah material akan bersifat padat atau cair, sehingga dalam penelitian selanjutnya dapat diselidiki sifat material yang bersifat korosif.

2. DASAR TEORI

2.1 Molekuler Dinamik

Simulasi menggunakan metoda dinamika molekul pada dasarnya dimulai dengan menentukan konfigurasi atom-atom bahan yang ditinjau [2]. Masing-masing atom tersebut saling berinteraksi satu sama lain yang dalam hal ini diasumsikan memenuhi potensial Lennard-Jones, kemudian atom-atom tersebut diberikan kecepatan awal secara random. Persamaan gerak sistem diatas dipecahkan secara numerik dengan komputer. Konfigurasi awal bahan Fe ditentukan dari tabel kristalografi sbb:

Tabel 1. Parameter Kisi Fe

| No | Nama Unsur | Struktur | Parameter Kisi (Angstrom) | Sudut |
|----|------------|----------|---------------------------|--------------------------------------|
| 1 | Fe | BCC | 2,8665 2,8665 2,8665 | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |

Dari data diatas ditentukan koordinat posisi atom untuk masing-masing unsur dalam satu sel satuan. Setelah satu sel satuan diperoleh maka sel satuan tersebut diperbanyak dalam arah XYZ sehingga jumlah sel satuan tersebut menjadi bertambah sesuai dengan yang diinginkan. Posisi awal atom Fe dalam simulasi ini ditetapkan menempati kisi kubus sederhana secara berulang dalam arah 3 Dimensi. Kecepatan awal masing-masing atom diberikan secara random dengan nilai antara 0-1, melalui *random generator*. Sehingga titik potong terhadap sumbu horizontal dan kedalaman sumur potensial dianggap sebagai parameter Lennard-Jones. Potensial interaksi antar Fe-Fe diambil dari literatur. Data ini *fitting* menggunakan persamaan potensial Lennard-Jones seperti pada persamaan (1) [1, 9],

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

$u(r)$ adalah energi potensial, ε adalah parameter energi, σ adalah parameter jarak terdekat antar atom dan r menunjukkan posisi. Hasil *fitting* tampak dalam tabel 2.

Tabel 2. Parameter Lennard-Jones

| No | Unsur | ε (eV) | σ (Å) |
|----|-------|--------------------|--------------|
| 1 | Fe-Fe | -0,62 | 2,26 |
| 2 | Pb | -0,125 | 2,75 |
| 3 | Bi | -0,075 | 2,8 |
| 4 | Bi | -0,12 | 2,75 |

Dari Tabel 2 tampak kedalaman sumur potensial Fe paling tinggi diantara yang lain yang secara kualitatif berarti ikatan antar Fe-Fe lebih kuat dari yang lain. Dari energi potensial diatas dapat diperoleh gaya antar atom yang dinyatakan dalam persamaan (2) [1, 2],

$$\vec{F} = -\frac{du}{dr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (2)$$

Gaya yang dialami oleh atom i akibat berinteraksi dengan N atom dinyatakan pada persamaan (3),

$$\vec{F}_i = \sum_{i \neq j} F_{ij} \quad (i, j=1, \dots, N) \quad (3)$$

\vec{F}_{ij} adalah gaya yang dialami oleh atom i akibat atom j yang mana atom $i \neq j$.

Untuk mengetahui posisi dan kecepatan atom i setelah mengalami gaya dari N atom lain maka diperlukan persamaan gerak Newton dalam persamaan (4) [2, 9],

$$T = \frac{1}{k_b(3N - N_c)} \sum_i m_i v_i^2 \quad (4)$$

m_i massa atom partikel v_i dan r_i adalah kecepatan dan posisi atom i .

Persamaan diferensial ini dalam paket program MOLLY dipecahkan secara numerik melalui algoritma Beeman. Dari simulasi diatas dapat diperoleh posisi dan kecepatan dari masing masing atom setiap saat. Dari mekanika statistik dapat dihubungkan kuantitas mikroskopik ini dengan kuantitas makroskopik seperti temperatur, tekanan, Fungsi Distribusi Radial (*RDF*), *Mean Square Displacement (MSD)* dan lainnya. Dalam hal ini difokuskan pada hasil perhitungan *RDF*. Hubungan antara temperatur dengan kuantitas mikroskopik diatas adalah sebagai berikut, N adalah jumlah atom dalam simulasi, N_c jumlah *constraint*, k adalah konstanta Boltzmann dan v_i adalah kecepatan atom i . Temperatur sistem dapat diset sesuai sistem yang ditinjau. Dalam MOLLY terdapat beberapa metoda untuk menentukan temperatur tersebut diantaranya *Scaling* dan *Noose-Hoover thermostat*.

Persamaan Fungsi distribusi radial (*RDF*) dinyatakan pada persamaan (5) berikut [2],

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

Dimana 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 dan waktu tertentu, sehingga dapat dibedakan secara kualitatif apakah suatu sistem dalam keadaan padat atau cair.

2.2 Jaringan Syaraf Tiruan

Pemodelan berbasis jaringan syaraf tiruan merupakan pembelajaran dan adaptasi suatu obyek. Terdapat beberapa metode dalam pembelajaran dengan pengawasan pada jaringan syaraf tiruan diantaranya metode *back propagation*. Metode pembelajaran *backpropagation* diperoleh dengan melakukan keadaan umum terhadap aturan *Widrow-Hoff* pada jaringan layer banyak. Jika $d(k)$, keluaran yang diinginkan untuk masukan $y(k)$ dan $w(k)$ adalah fungsi bobot yang sesuai. Maka, error pada iterasi ke- k (perbandingan antara nilai masukan dengan harapan) dinyatakan pada persamaan (6),

$$e_k = d(k) - w(k) \bullet y(k) \quad (6)$$

Dengan aturan *Widrow-Hoff*, error pada persamaan (6) diminimalkan melalui fungsi error pada persamaan (7) [10]

$$e_k^2 = (d(k) - w(k) \bullet y(k))^2 = (d(k) - w^T(k) y(k))^2 \quad (7)$$

Dengan demikian, aturan *Widrow-Hoff* disebut juga algoritma kuadrat terkecil (*Least Mean Square*) atau *Gradient Descent Rule*. Selanjutnya, pada setiap iterasi, digunakan persamaan (8) untuk memperoleh nilai keluaran yang baru,

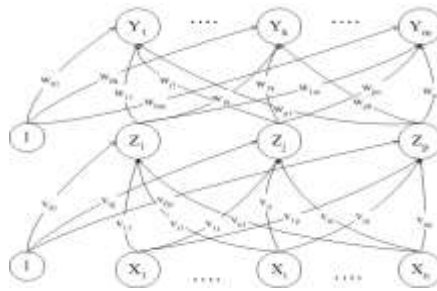
$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad (8)$$

dengan g_k adalah gradient nilai keluaran ke $k+1$ terhadap nilai keluaran ke k dan α_k adalah kecepatan pembelajaran. Aturan *Widrow-Hoff* tersebut dimodifikasi untuk mendapatkan titik di mana gradient (g_k) sama dengan nol. *Stopping criteria* yang digunakan menggabungkan persamaan (9) dan (10) [10],

$$|f(x_{k+1}) - f(x_k)| < \varepsilon \quad (9)$$

$$|x_{k+1} - x_k| < \delta \quad (10)$$

Jaringan neuron yang menggunakan metode pembelajaran backpropagation dengan *multi-layer* dinyatakan pada gambar 1 .



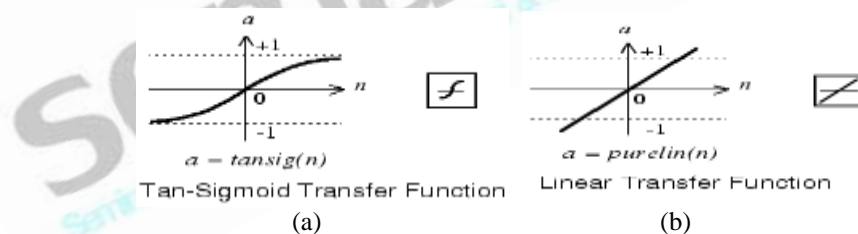
Gambar 1. Jaringan neuron dengan metode backpropagation

Jaringan neuron ini dicirikan dengan arah aliran sinyal berasal dari arah masukan menuju keluaran tanpa ada arah sebaliknya. Aliran sinyal dapat melalui *intermediate layer* dari *hidden unit*. Selama proses *backpropagation*, unit masukan (X) menerima sinyal dan menyebarkan sinyal tersebut ke unit hidden (Z). Unit *hidden* menentukan sinyal aktivasi (z_j) sebagai respon dari unit masukan. Selanjutnya, unit *hidden* akan menyebarkan sinyal respon tersebut ke unit keluaran (Y). Unit keluaran juga menentukan sinyal aktivasi (y_k) sebagai respon terhadap sinyal yang berasal dari unit *hidden* untuk pola yang diberikan.

Selama pelatihan, setiap unit membandingkan nilai aktivasi y_k dengan nilai target untuk mendapatkan nilai *error* yang berhubungan dengan pola yang diberikan. Hal ini dilakukan dengan menggunakan prinsip minimisasi fungsi *error* seperti pada persamaan (6). Berdasarkan nilai *error* ini, faktor δ_k dihitung. Nilai δ_k akan digunakan untuk memodifikasi fungsi bobot antara unit *hidden* dan unit keluaran.

Dengan cara yang sama, δ_j digunakan untuk mendistribusikan *error* pada unit *hidden* ke unit masukan, juga untuk memodifikasi fungsi bobot antara unit *hidden* dengan unit masukan. Setelah semua nilai δ ditentukan, fungsi bobot untuk semua unit diatur secara simultan. Pengaturan fungsi bobot w_{jk} (dari unit *hidden* ke unit keluaran) didasarkan pada faktor δ_k dan nilai aktivasi z_j . Demikian pula dengan pengaturan fungsi bobot v_{ij} (dari unit masukan ke unit *hidden*) didasarkan pada faktor δ_j dan nilai aktivasi x_i .

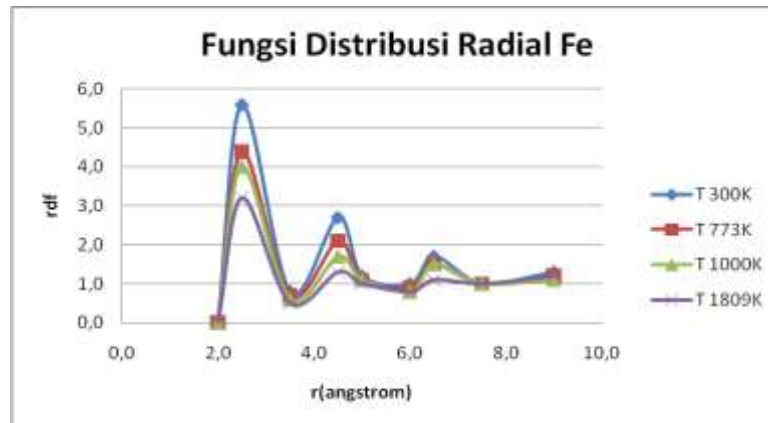
Fungsi aktivasi yang dapat digunakan pada setiap unit antara lain *Tan-Sigmoid* dan *Linear* [10]. Kedua fungsi aktivasi dinyatakan pada gambar 2 masing-masing untuk *Tan-Sigmoid* dan *Linear*,



Gambar 2. Fungsi aktivasi (a) Tan-Sigmoid dan (b) Linear

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini ditujukan untuk memahami mekanisme atomik fenomena korosi *Stainless Steel* dalam Fe-Fe sebagai fungsi dari temperatur dan waktu. Sebagai langkah awal akan dilihat sifat pelelehan masing-masing bahan diatas dengan menghitung *Radial Distribution Function* (RDF). Hasil perhitungan menggunakan simulasi molekuler dinamik yang diperoleh tampak pada gambar 3 dibawah ini yang merupakan nilai-nilai fungsi distribusi radial kristal Fe. Pada suhu 300 K puncak fungsi distribusi radial lebih banyak yang muncul dengan intensitas yang tinggi menandakan sistem dalam keadaan padat. Demikian juga untuk temperatur 773 K dan 1000 K puncaknya banyak tetapi intensitasnya berkurang dengan naiknya temperatur. Sedangkan pada temperatur 1809 K puncak kurva fungsi distribusi radial menjadi berkurang dan intensitasnya semakin menurun. Hal ini terjadi karena posisi atom-atom Fe pada temperatur ini semakin acak yang berarti sistem dalam keadaan cair. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen yang mana titik leleh Fe adalah 1809 K.

Gambar 3. Fungsi Distribusi Radial (*RDF*) Fe

Sebagai data masukan diambil nilai-nilai parameter posisi r dengan beberapa nilai intensitas yang dominan atau tinggi yang dapat mewakili karakteristik Fe-Fe pada masing-masing temperatur yang dinyatakan pada tabel 3,

Tabel 3. Nilai *RDF* pada posisi (r) dan Temperatur (Kelvin)

| Posisi (r) | 300 K | 773 K | 1000 K | 1089 K |
|----------------|-------|-------|--------|--------|
| 2.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 2.5 | 5.6 | 4.4 | 4.0 | 3.2 |
| 3.5 | 0.8 | 0.7 | 0.6 | 0.5 |
| 4.5 | 2.7 | 2.1 | 1.7 | 1.3 |
| 5.0 | 1.2 | 1.1 | 1.1 | 1.0 |
| 6.0 | 1.0 | 0.9 | 0.8 | 0.8 |
| 6.5 | 1.7 | 1.5 | 1.5 | 1.1 |
| 7.5 | 1.0 | 1.0 | 1.0 | 1.0 |
| 9.0 | 1.3 | 1.2 | 1.1 | 1.2 |

3.1 Identifikasi dengan metoda *Backpropagation*

Sebelum mulai melakukan perancangan jaringan perlu dilakukan identifikasi masalah. Dalam hal ini dilakukan identifikasi apakah pada temperatur tertentu Fe 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 2 neuron untuk setiap input yang diwakili dengan nilai-nilai *RDF* pada beberapa temperatur tertentu dan delapan neuron dalam *hidden-layer* menggunakan metoda *back propagation*. Output yang diperoleh terdiri dari 2 neuron yaitu padat atau cair. Sebagai pembandingan dengan menggunakan metoda *perceptron* digunakan satu neuron untuk *hidden-layer*. Sedangkan untuk banyaknya neuron yang digunakan sebagai input dan output adalah sama.

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 [5, 6]. Langkah selanjutnya adalah deklarasi variabel yang akan digunakan. Dalam hal ini adalah jaringan neuron layer tunggal, nilai masukan untuk pembelajaran serta target. Untuk deklarasi jaringan neuron, terdapat fasilitas menggunakan algoritma pembelajaran berbeda. Misalnya algoritma *gradient descent (traingd)*, *gradient descent (traingdm)* dengan momentum atau algoritma pembelajaran lain. Dalam hal ini diambil algoritma pembelajaran yang pertama. 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 masing-masing untuk 8 neuron pada satu *hidden-layer* Nilai masukan identifikasi adalah input P_i . Sebagai pembelajaran dan pelatihan, target yang diambil meliputi;

$$P1=[5.6 \ 0.8 \ 2.7 \ 1.2 \ 1.0 \ 1.7 \ 1.0 \ 1.3];$$

$$P4=[3.2 \ 0.5 \ 1.3 \ 1.0 \ 0.8 \ 1.1 \ 0.8 \ 1.0];$$

$$P11=[5.6 \ 0.8 \ 2.6 \ 1.3 \ 1.1 \ 1.8 \ 1.0 \ 1.3];$$

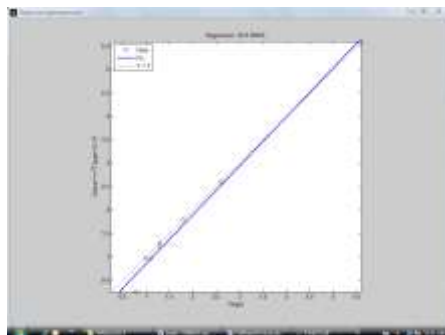
$$P41=[2.9 \ 0.5 \ 1.3 \ 1.0 \ 0.6 \ 1.2 \ 0.8 \ 1.0];$$

Parameter pembelajaran yang perlu didefinisikan adalah,

`net.trainParam.epochs=500;` → banyaknya epoch

Menggunakan metoda *backpropagation*, pertama-tama dilakukan proses pembelajaran, pelatihan, simulasi pertama, kedua, ketiga dan seterusnya untuk beberapa temperatur diantaranya pada 300K, 773 K, 1000K dan 1089 K..

Salah satu hasil identifikasi dari 16 sampel, menghasilkan grafik plot regresi hingga *gradient* yang diinginkan sebesar $1e-20$, yang salah satunya dinyatakan pada gambar 4.



Gambar 4. 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 ($R = 0,99645$) yang menunjukkan bahwa trend hasil simulasi hampir tepat dengan trend hasil pelatihan. Nilai regresi menyatakan koefisien kesesuaian R . Iterasi dinyatakan dengan jumlah *epoch*. Ditampilkan pula nilai-nilai *performance*, *gradient* dan regresi dalam MATLAB.

Identifikasi pola dengan metoda *backpropagation*, digunakan untuk mengenali sifat material padat atau cair. Sebanyak 16 sampel dipilih masing-masing 4 sampel pada temperatur 300K, 773K, 1000K dan 1809K. Identifikasi sifat material padat atau cair menghasilkan keluaran yang sesuai dengan target dinyatakan pada tabel 4. Proses pembelajaran, pelatihan, simulasi pertama, kedua dan ketiga dan hasil dinyatakan dalam program yang telah disusun menggunakan instruksi-instruksi dalam MATLAB. Sampel yang mempunyai koefisien kesesuaian R mendekati 1 sebanyak 14, sedangkan 2 sampel kurang mendekati 1.

Tabel 4. Hasil Identifikasi padat atau cair dengan metoda *backpropagation*

| Fe pada Temperatur | Jumlah sampel | Jumlah benar | Jumlah salah | Sesuai Target |
|--------------------|---------------|--------------|--------------|---------------|
| 300 K | 4 | 4 | 0 | 100% |
| 773 K | 4 | 3 | 1 | 75% |
| 1000 K | 4 | 3 | 1 | 75% |
| 1809 K | 4 | 4 | 0 | 100% |

3.2 Identifikasi dengan Metoda *Perceptron*

Identifikasi pola dengan metoda *perceptron*, digunakan untuk mengenali sifat material padat atau cair, sebanyak 16 sampel masing-masing 4 sampel pada temperatur 300K, 773K, 1000K dan 1809K. Identifikasi sifat material padat atau cair menghasilkan keluaran yang sesuai dengan target dinyatakan pada tabel 5. Proses pembelajaran, pelatihan, simulasi pertama, kedua dan ketiga dan hasil dinyatakan dalam program yang telah disusun menggunakan instruksi-instruksi dalam MATLAB. Diperoleh bahwa terdapat 2 sampel yang seharusnya teridentifikasi padat tetapi bersifat cair.

Tabel 5. Hasil identifikasi padat atau cair dengan metoda *perceptron*

| Fe pada Temperatur | Jumlah sampel | Jumlah benar | Jumlah salah | Sesuai Target |
|--------------------|---------------|--------------|--------------|---------------|
| 300 K | 4 | 4 | 0 | 100% |
| 773 K | 4 | 3 | 1 | 75% |
| 1000 K | 4 | 3 | 1 | 75% |
| 1809 K | 4 | 4 | 0 | 100% |

4. PENUTUP

Proses identifikasi pola terhadap sifat material padat atau cair menggunakan metode *backpropagation* diperoleh total kesalahan relatif sebesar 12,5%. Demikian pula pada proses identifikasi pola terhadap sifat material padat atau cair menggunakan metode *perceptron* diperoleh total kesalahan relatif sebesar 12,5%. 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.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Alan Maulana, Zaki Suud, Hermawan K.D, Khairurijal , "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, Agustus 2006 (119-130)
- [2] Allen, Michael P. , "Introduction to Molecular Dynamics Simulation", John Von Neuman Institute for computing Vol 23, 2004
- [3] Donald R. Askeland, Phule, P. Pradeep, " The Science and Engineering Of materials", Nelson, a division of Thomson Canada, 2006
- [4] James Adler, " Molecular Dynamic of Simulations of Copper using Moldy", Research Expeience for Undergraduates , National High Magnetic Field Laboratory, 2003
- [5] Serkan Toros, Fahrettin Ozturk, "Flow curve prediction of A-Mg alloys under warm forming conditions at various strain rates by ANN", Journal Applied Soft Computing 11 (2011) homepage : www.elsevier.com/locate/asoc
- [6] Sumantra Mandal, P.V. Sivaprasa, S. Venugopal, K.P.N. Murthy, "Artificial neural network modeling to evaalate and predict the deformation behavior of stainless steel type AISI 304L during hot torsion", Journal Applied Soft Computing 9 (2009) homepage : www.elsevier.com/locate/asoc
- [7] Susmikanti, M; Entin H, "Identifikasi Pengaruh Umur, Suhu dan Radiasi terhadap strukturmikro Ferritic Steel Berbasis Kecerdasan Buatan", Jurnal Sains Materi Indonesia, Edisi khusus, PTBIN-BATAN, Desember 2008,
- [8] Susmikanti, M; Sitompul, A; Handayani, A; "Pattern Recognition of Material Creep and Fatigue used in Nuclear Power Plant", Proceedings International Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering (ICANSE), November 2007, ITB Bandung
- [9] Yingxia Qi, Minoru Takahashi, "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, April 14-18, 2002
- [10] Zilouchian, Ali, "Fundamentals of Neural Networks", CRC Press LLC, 2001