**Создание предиктивных и генеративных моделей машинного обучения для поиска составов стеклянных матриц для иммобилизации радиоактивных отходов**

***Султановская А.С.***

*Студентка, 1 курс магистратуры*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*

*Факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: kazamakira18@gmail.com*

Перспективной альтернативой традиционным углеродным источникам энергии является атомная энергетика. Однако, нерешенной проблемой атомной отрасли является необходимость изолирования радиоактивных отходов (РАО) от биосферы. Согласно существующей концепции обращения с высокоактивными РАО, они должны быть включены в твердые матрицы и захоронены в геологические породы. Матрицы должны отвечать ряду требований: быть радиационно- и гидролитически устойчивыми, механически прочными, стабильными и обладать простой технологией получения.

Пространство теоретически возможных составов стекол является очень широким. Экспериментальный подбор оптимального состава стеклянной матрицы, является длительным и ресурсозатратным процессом. Использование методов машинного обучения позволит увеличить эффективность поиска и снизить количество неудачных экспериментов. Таким образом, целью представленной работы является разработка подхода на основе методов машинного обучения к поиску алюмо-железо-фосфатных стеклянных матриц для иммобилизации РАО.

 Для создания предсказательных моделей использовались архитектуры, основанные на алгоритмах к-ближайших соседей, случайного леса и градиентного бустинга, с оптимизацией гиперпараметров методами полного или случайного перебора по решетке и с применением кросс-валидации. В качестве входных данных использовались составы стекол, представленные в виде вектора из мольных долей элементов. Для предсказания температуры плавления, модуля Юнга, коэффициента теплового расширения (КТР) была использована база данных Sciglass (> 5 тыс. составов). Для предсказания этих свойств на предварительно отделенном тестовом наборе был достигнут коэффициент детерминации *R*2 > 0.88. Для предсказания выщелачивания алюминия и натрия использовалась база данных Altglass (253 состава), дополненная вручную данными из научных публикаций (58 составов).

 Предсказания как на исходном наборе, так на собранном по отдельности привели к низким метрикам качества модели. Только при их объединении было достигнуто высокое качество моделей. В случае предсказания выщелачивания алюминия был достигнут коэффициент детерминации *R*2 > 0.9. В случае предсказания выщелачивания натрия – *R*2 = 0.81. Для создания генеративной модели, предлагающей состав стекла по заданным свойствам, был использован алгоритм оптимизации Tree-structured Parzen Estimator, реализованный в библиотеке Optuna. По итогу работы алгоритма был предложен и экспериментально проверен ряд стеклянных матриц.