**Разработка подхода к поиску составов алюмо-железо-фосфатных оксидных стекол для иммобилизации радиоактивных отходов на основе методов машинного обучения**

***Султановская А.С.***

*Студентка, 1 курс магистратуры*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*

*Факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: sult\_alexa@mail.ru*

Важной проблемой атомной энергетической отрасли является накопление значительного объема отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Согласно концепции замкнутого ядерного топливного цикла, необходима переработка ОЯТ и выделение из него ряда компонентов. Оставшаяся фаза, называемая радиоактивными отходами (РАО), должна быть изолирована от биосферы. Включение высокоактивных РАО в твердые матрицы необходимо для уменьшения их объема и перевода в стабильную форму перед долговременным захоронением в геологических формациях. Такие матрицы должны отвечать ряду требований: обладать высокой гидролитической и радиационной устойчивостью, механической прочностью, термической стабильностью и масштабируемой технологией производства. Перспективными кандидатами являются стеклообразные матрицы на основе алюмо-железо-фосфатных оксидных систем.

Пространство теоретически возможных составов стекол является очень широким. Экспериментальный подбор состава стеклянной матрицы, оптимального по совокупности физико-химических свойств, и измерение этих свойств является длительным и ресурсозатратным процессом. Перспективным способом увеличения эффективности поиска состава является использование методов машинного обучения. Таким образом, целью представленной работы является создание подхода к поиску алюмо-железо-фосфатных оксидных стеклянных матриц для иммобилизации РАО на основе методов машинного обучения.

В работе использовали модели, основанные на алгоритмах классического машинного обучения. Для предсказания модуля Юнга, температуры плавления, коэффициента теплового расширения была использована база данных Sciglass (> 5 тыс. составов). В качестве входных данных использовались составы стекол, представленные в виде вектора из мольных долей элементов. 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), расширенная вручную данными из научных публикаций (58 составов). При объединении баз данных было достигнуто высокое качество моделей. (*R*2 = 0.81 для прогнозирования выщелачивания натрия и*R*2 > 0.9 для алюминия).

Для создания генеративной модели, предлагающей состав стекла по заданным свойствам, был использован алгоритм оптимизации Tree-structured Parzen Estimator. По итогу работы алгоритма были предложены и синтезированы стекла следующих составов.: 1,34Al2O3–1Fe2O3–2,29Na2O–2,23P2O5; 1Fe2O3–2Na2O–2P2O5–0,04Cs2O3–0,11SrO; 1,36Al2O3–1Fe2O3–2,28Na2O–2,16P2O5–0,09CeO2. Они потенциально пригодны в качестве матриц для иммобилизации радиоактивных отходов.