

**Разработка метода применения технологий машинного обучения для
термодинамических моделей**

Попов Н.С. (ИТМО)

**Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент Новотельнова А.В.
(ИТМО)**

Введение. Определение свойств смесей, таких как растворы и сплавы, в зависимости от состава, является важным аспектом инженерных изысканий. Одной из задач, которая требует точного прогноза, является обоснование безопасности атомных станций на этапе проектирования, в частности – в случае аварии с расплавлением активной зоны реактора. Возникающие при этом смеси компонентов, таких как уран, цирконий, кислород и железо, формируют множество фаз, понимание поведения которых необходимо для эффективного обеспечения всех мер безопасности. В настоящее время основным подходом к решению подобных задач является определение минимума свободных энергий Гиббса в смеси. Этот метод, однако, плохо подходит для многокомпонентных смесей, так как с увеличением количества компонентов возникает сложная параметризация, требующая существенных вычислений и делающая сам расчёт несоразмерно более длительным.

В свете повышения доступности новых методов анализа данных, предлагается рассмотреть возможность применения методов машинного обучения для предсказания интересующих нас свойств смесей. Применение подобных методик в настоящий момент уже зарекомендовало себя как эффективный инструмент в области материаловедения [1-4]

Основная часть. Был подготовлен набор фазовых диаграмм для обучения модели, одна из которых не была включена в основной массив данных и использовалась для проверки способности к обобщению. Фазовые диаграммы были оцифрованы в форму файлов таблиц, содержащих информацию о веществах в смесях, их свойствах, содержании одного из компонентов и температуре линии ликвидус. Полученный массив данных использовался для обучения нейронной сети и тестирования. Была сравнена точность при количестве скрытых слоёв от 1 до 50, где наиболее точным оказался вариант с 44 слоями и 11 нейронами в каждом. Модель была сохранена и протестирована на новых данных.

Выводы. После получения результатов были выявлены как существенные отклонения, так и позитивные наблюдения. Были предложены подходы по улучшению итоговых подходов.

Список использованных источников:

1. Kasturi Narasimha Sasidhar et al. Enhancing corrosion-resistant alloy design through natural language processing and deep learning. Sci. Adv. 9, eadg7992 (2023). DOI:10.1126/sciadv.adg7992
2. Lu, Z.; Kapoor, I.; Li, Y.; Liu, Y.; Zeng, X.; Wang, L. Machine learning driven design of high-performance Al alloys. J. Mater. Inf. 2024, 4, 19. <http://dx.doi.org/10.20517/jmi.2024.21>
3. Huang G, Guo Y, Chen Y, Nie Z. Application of Machine Learning in Material Synthesis and Property Prediction. Materials (Basel). 2023 Aug 31;16(17):5977. doi: 10.3390/ma16175977. PMID: 37687675; PMCID: PMC10488794.
4. Automating alloy design with advanced AI that can produce its own data on-the-fly [Электронный ресурс]. URL - <https://cee.mit.edu/automating-alloy-design-with-advanced-ai-that-can-produce-its-own-data-on-the-fly/>, (дата обращения 14.02.2025).

Попов Н.С. _____
Новотельнова А.В. _____