

Рис. 1. Эффективность построенных моделей МО для предсказания био-медицинских свойств магнитных наночастиц (закрашенная область соответствует разбросу данных, равному RMSE на кросс-валидации)

ется ресурсозатратной эмпирической задачей. Методы машинного обучения (МО) могут быть использованы для более эффективного получения наночастиц с заданными свойствами путем предсказания значений удельного коэффициента поглощения (SAR) для приложений гипертермии или r_1/r_2 релаксаций для МРТ, основываясь на параметрах наночастицы.

В данной работе были разработаны регрессионные модели МО для предсказания значений SAR, r_1 и r_2 релаксаций наночастиц. В ходе проведенного исследования, используя данные из научных статей, была собрана база данных, содержащая в себе 1071 образец. Полученные данные после обработки были использованы для обучения и тестирования алгоритмов МО. Процедура кросс-валидации с разбиением дан-

ных на 10 секций использовалась для анализа моделей МО. Такие метрики как коэффициент детерминации R^2 и среднеквадратичная ошибка (RMSE) были использованы для оценки правильности полученных предсказаний.

Лучшей моделью МО для предсказания значения SAR является LGBMRegressor, а для предсказания значений r_1/r_2 релаксаций – ExtraTreesRegressor (значения метрик полученных моделей представлены на рис. 1).

Для оценки точности предсказаний полученных моделей для ранее не виденных данных, была проведена процедура валидации на новых образцах. Основываясь на полученных значениях используемых метрик, можно сделать вывод о высокой предсказательной точности полученных в данной работе моделей МО.

ОЦЕНКА РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ ФТОРОПЛАСТА–4МБ – К

Н. М. Ключин, Д. С. Теляшкин

Научный руководитель – д.т.н., профессор отделения химической инженерии В. Г. Бондалетов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет»
г. Томск, проспект Ленина, дом 30, tpu@tpu.ru

Представлены результаты исследования влияния различных доз гамма-излучения в воздушной среде на физико-механические и теплофизические свойства материала Фторопласт–4МБ-К.

Первичное действие излучения на органические полимеры сводится к ионизации и возбуждению атомов и фрагментов, образующих эти материалы, при этом оба процесса могут приводить к разрыву химических ковалентных

связей с образованием свободных радикалов. Дальнейшие вторичные процессы представляют собой реакции взаимодействия активированных фрагментов молекул друг с другом и с другими молекулами полимера.

В качестве источника использовался изотопный источник непрерывного гамма-излучения ГУ-200 (изотоп излучателя Co^{60}). Диапазон доз облучения от $3 \cdot 10^3$ Гр до $5 \cdot 10^5$ Гр.

Физико-механические свойства

Образцами для испытаний выбраны пластины, изготовленные из исследуемого материала в обогреваемой пресс-форме с помощью гидравлического пресса.

На рисунке 1 представлен график зависимости предела прочности при разрыве от дозы облучения для образцов фторопласт-4МБ-К. Снижение величины предела прочности при разрыве свидетельствует о происходящей деструкции материала. Увеличение дозы приводит к усилению деструкции. Зависимость величины удлинения от дозы облучения также подтверждает факт происходящих процессов деструкции, которые у данного материала приобретают необратимый характер. Из зависимости удлинения полимера от дозы облучения (рисунок 2) следует, что при относительно небольших дозах облучения (10^3 Гр) материал становится более эластичным, практически не теряя при этом устойчивости к нагрузке при разрыве, а значение дозы $4 \cdot 10^4$ Гр является критической точкой начала деструкции. Исходя из полученных результатов можно сделать вывод, что величина предела прочности при разрыве снижается почти в 2 раза для образца, облученного дозой в $5 \cdot 10^5$ Гр, по сравнению с исходным образцом, а удлинение падает более чем в 3 раза.

В отличие от материала Фторопласт-4, Фторопласт-4МБ-К имеет большее значение предела прочности при нагрузке и удлинения и может быть использован при повышенных температу-

рах и зонах с невысокой интенсивностью ионизирующего излучения.

Теплофизические свойства

Для измерения теплофизических характеристик полимерных материалов использовали дифференциальный сканирующий микрокалориметр ДСМ-2М.

При анализе зависимости энтальпии плавления образцов полимера от дозы облучения (рисунок 3) очевидно, что с увеличением дозы облучения возрастает величина энтальпии плавления. Полученный эффект объясняется тем, что параллельно с деструкцией в материале протекает процесс кристаллизации. Этот процесс находит своё отражение в изменении свойств образцов полимеров: увеличивается его плотность, растёт модуль упругости и т. д.

Таким образом, полученные в ходе работы результаты указывают на перспективность использования данной модификации материала Фторопласт-4. Полимер достаточно устойчив к воздействию ионизирующего излучения, что подтверждают физико-механические испытания. Диэлектрические характеристики материала не отражены в статье, однако значения тангенса угла диэлектрических потерь и диэлектрической проницаемости практически неизменны во всём диапазоне облучения, что даёт полимеру Фторопласт-4МБ-К преимущество при использовании в производстве проводниковой продукции.

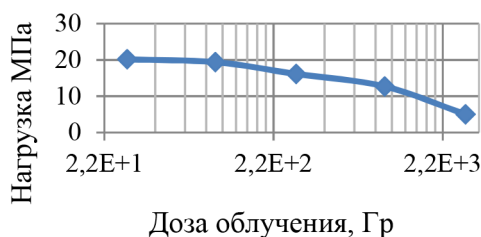


Рис. 1. Зависимость нагрузки при разрыве от дозы облучения

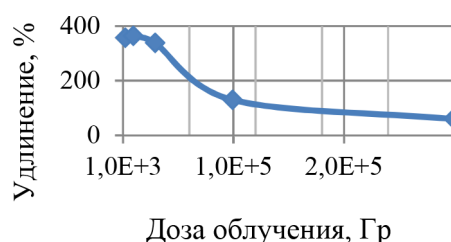


Рис. 2. Зависимость удлинения от дозы облучения

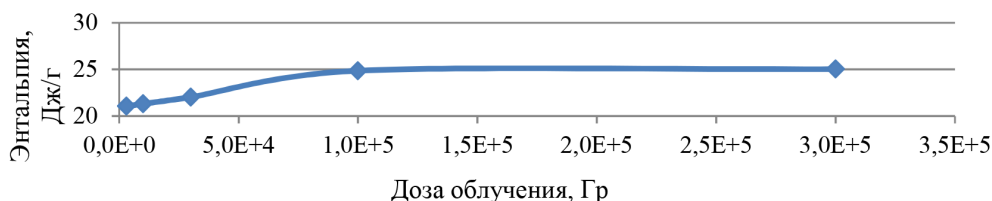


Рис. 3. Зависимость энтальпии от дозы облучения