Разработанное программное средство для расчета величины распухания было использовано для расчета распухания стал марки AISI613. Аустенитные стали демонстрируют схожие свойства и похожее поведение при радиационном облучении. Для класса аустениитных сталей была разработана модель расчета распухания, которая включает в себя данные о физических свойствах материала: коэффициентов диффузии дефектов в стали и коэффициента самодиффузия, плотности дислокаций, концентраций включений, энергии образования дефектов, энергии взаимодействия гелия с железом, байас факторы для дефектов, силы стока на дислокации поверхность зерен, а также размеры зерен. Важнейшим параметром модели является, безусловно, состав стали. Кроме того, в качестве параметром модели выступают и условия облучения: скорость набора дозы, скорость заработки гелия, спектр реактора и температура. Набор параметров, описывающих материал задавался исходя из анализа научной литературы и проведения молекулярно динамических расчетов. Параметры, относящиеся к условиям облучения подбираются исходя из поставленной задачи.

Программное средство для расчета распухания позволяет рассчитать не только величину распухания для стали при заданных условиях, но и другие важные характеристики микроструктуры материала, такие как концентрация и средний размер вакансионных пор и гелий-вакансионных пузырей. Для валидации модели и самого программного средства необходимо сопоставить величины, рассчитанные программным средством с экспериментальными данными. Наиболее большой объем экспериментальных данных представлен результатами измерений распухания стали при некоторых условиях облучения. Поэтому целесообразно проводить вариацию именно на этих данных. Хотя сопоставление данных о микроструктуре стали при облучении с результатами расчета программного средства могут дать больше уверенности в работоспособности и уровне точности программного средства, экспериментальные данные о микроструктуре сталей представлены не в таком большом объеме, как данные о величине распухания, кроме того такое сопоставление требует больших усилий. Таким образом валидация программного средства была проведена сопоставлением экспериментальных данных о величине распухания стали AISI613 с расчетным значениями.

Экспериментальные данные были получены из Базы данных материалов ВНИИА. Базза данных агрегирует экспериментальные данные, опубликованные в научной литературе и содержит более 700 записей со значением распухания стали AISI613 прии различных условиях. Большинство записей представлены экспериментами на быстром реакторе EBR-2. База данных содержит измерения величина разпухания в широко температурном дииапазоне при различных максимальных дозах. На **рисунке 1 и 2** представлены занчения величины распухания в заивисимости от дозы и температуры, экспортированные из базы данных.

Для валидации программного средства была проведена серия расчетов величины распухания стали AISI613 при различных температурах и максимальных дозах. Далее рассчитанные значения сравнивались с экспериментальным и определялась абсолютная ошибка величины распухания. Однако в первую очередь необходимо провести точную настройку модели, подобрать параметры модели, которые сложно было определить точно при разработке модели, например плотность дислокации и сила стока на дислокации, скорость набора дозы и скорость заработки гелия. Для этой задачи были проведены расчеты с различными значениями этих параметров при заданных температуре и максимальной дозе. Рассчитанные величины распухания сопоставлялись с эксперементтальными значениями, определялась абсолютная ошибка определения величины распухания. Далее параметры модели корректировалиись с целью миниимизации ошибки.

После подбора параметров и окончательной настройки модели проводилась вариация программного средства. На **рисунке 3 и 4** показаны рассчитанные зависимости величины распухания от температуры и дозы в сравнении с экспериментальным значениями. Хорошо видно согласие расчетов с экспериментальными данным. Во-первых, расчет дает адекватное значение положения температурного пика распухания, которое находится в хорошем соответсвиии с экспериментальными данным. Во-вторых, программное средство достаточно точно расйитыавает величину инкубационного периода и наклон вид зависимости величины распухания от дозы. Для оценки точности модели и программного средства необходимо рассчитать среднюю абсолютную ошибку расчета величины распухания. В данном случае былии проведены расчет величины распухания при условиях, отвечающих условиям проведения экспериментов для некоторых особо важных точек — в области температурного пика величины распухания. Средняя величина абсолютной ошибки расчета величины распухания составила **3-7%** для различных доз. В дальнейшем необходимо провести расчеты величины распухания при всех условиях, для которых в базе данных существуют записи о величиине распухания для более точной оценки ошибки расчета величины распухания.

Для того, чтобы оценить эффективность программного средства, сравним результаты, полученные в ходе расчетов с результатами, которые можно получить из аналитического приближения зависимости величины распухания от дозы и температуры.

Чаще всего аналитическое приближение зависимости величины распухания от температуры представлено **гауссианой**. Зависимость величины распухания от дозы приближается **степенной функцией**. **В работе \_\_\_\_** проведен анализ таких приближений и выведены параметрические функции для аналитического приближения зависимости величины распухания от температуры и дозы для стали **состава**. Была проведена параметризация аналитической модели распухания для стали AISI613. Для этого миниимизровалась ошибка между величиной распухания, рассчитанной с использованием аналитической модели и экспериментальными данными. **На рисунках 5 и 6** представлены параметризованные для стали AISI613 аналитические модели в сравнении с экспериментальными данными и рассчитанными с использованием программного средства. Из рснков видно, что такой вид аналитической модели достаточно хорошо описывает вид зависимости величины распухания от температуры и дозы. Однако, аналитическая модель неточно описывает вид пика распухания и его положение при различных условиях опиисывается с переменным успехом. Абсолютная ошибка величины распухания в области пика распухания составляет от 5 до 10 % пр различных значениях дозы. Ошибка в определении положения пика распухания составляет до 50 К.

Сравнивая аналитическую модель с результатами расчета программного средства можно сделать вывод, что аналитечкая модель недостаточно полно описывает процесс распухания. Действительно, модель распухания, используемая в программном средстве во-первых, параметризуется большим числом параметров, во-вторых, имеет четкое физическое обоснование и хорошо иинтерприттируется и в-третьеих учитывает как свойства материала, так и условия облучения, включая спектр обучения. Аналитическая модель в широком диапазоне температур и доз дает большую абсолютную ошибку величины распухания, хуже определяет положение и форму пика распухания по сравнению с результатами расчетов с использованием программного средства. Таким образом, программное средство не только успешно решает поставленную задачу — расчет величины распухания стали под облучением, но и делает это достаточно точно, по крайней мере значительно точнее аналитического приблжения.

Существует еще один подход для аналитического определения величины распухания. Была обучена модель машинного обучения на экспериментальных данных, представленных в базе данных. Абсолютная ошибка предсказанной обученной моделью величины распухания на этих же данных составила 3%. Этот значение меньше абсолютной ошибки расчета величины распухания с использованием прггрманого средства. Однако абсолютная ошибка в данном случае считалась на данных, которые участвовали в обучениии модели. Для более адекватной оценки точности модели необходимо провести расчет ошибки на валиидацииионном наборе экспериментальных данных. Учитывая, что объем экспериментальных данных невелик, валидациия модели машинного обучения может быть неточной. Более того, модель машинного обучения для предсказания величины распухания сложно интерпретировать и она не имеет физического обоснования.

Абсолютная ошибка расчета величины распухания с иииспольщованиием программного средства незначительно выше ошибки при иииспользщовании модель машинного обучения, однако программное средства и компьютерная модель распухания имеет ряд преимуществ перед моделью машинного обучения как и перед аналитической моделью.