



*Facultad de Ciencias*

**Aplicación de modelos de machine learning  
para predecir la fragilización de aceros de  
vasijas nucleares**  
(Application of machine learning models in  
the prediction of the embrittlement of reactor  
pressure vessel steel)

Trabajo de Fin de Máster  
para acceder al

**MÁSTER EN DATA SCIENCE**

Autor: Miguel Madueño Sanz

Director\es: Diego Ferreño Blanco

Junio - 2024

## Resumen

En las centrales nucleares, el uso de modelos para predecir el nivel de fragilización del acero de sus vasijas es necesario para garantizar unas condiciones de operación seguras. En este trabajo, se pretende comparar uno de los modelos usados en la práctica hoy en día, el modelo ASTM E900-15, con un conjunto de modelos de machine learning entrenados, y ver cuál de ellos consigue un mejor rendimiento. Se ha prestado especial atención a técnicas basadas en la agrupación de datos provenientes de centrales cuyas vasijas se fragilizan de una forma similar.

Palabras clave: Fragilización, modelo, agrupación de datos.

## Abstract

In nuclear power plants, the use of models to predict what level of embrittlement the reactor pressure vessel has is necessary to guarantee safe operation conditions. In this project, we aim to compare one of the models used currently in real situations, the ASTM E900-15 model, with a set of trained machine learning models, and see which ones obtain the best performance. We have paid special attention to techniques based on the gathering of data from power plants whose vessel materials behave similarly when irradiated.

Keywords: Embrittlement, model, gathering of data.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. La fragilización del acero por irradiación . . . . .	1
1.2. El modelo ASTM E900-15 . . . . .	4
<b>2. Motivación de los primeros modelos: KNN y KNT</b>	<b>6</b>
2.1. Inspección del dataset . . . . .	6
<b>3. Aplicación de KNN y KNT</b>	<b>12</b>
3.1. Metodología . . . . .	12
3.2. Análisis de resultados . . . . .	12
<b>4. Aplicación de otros modelos de machine learning</b>	<b>15</b>
4.1. Metodología . . . . .	15
4.2. Análisis de resultados . . . . .	16
<b>5. Aplicación de KNT usando gradient boosting</b>	<b>17</b>
<b>6. Conclusiones</b>	<b>19</b>

# 1. Introducción

## 1.1. La fragilización del acero por irradiación

Los reactores de agua ligera (Light Water Reactors, LWRs) son responsables de una parte importante de la energía nuclear generada hoy en día. Dentro de estos reactores, el núcleo es la parte que contiene el combustible con el que se produce la reacción de fisión, generalmente uranio enriquecido, y se encuentra rodeado por un refrigerante, en el caso de los LWR, agua ligera.

El refrigerante se utiliza para transferir el calor producido durante la fisión desde el núcleo a los generadores eléctricos. Después de esto, termina de enfriarse y vuelve al reactor, donde empieza el ciclo de nuevo. Por otro lado, el refrigerante también se usa como moderador de neutrones: la reacción en cadena del uranio es más eficiente cuando los neutrones que se difunden por el medio se mueven a ciertas velocidades, y, en cambio, los que se producen durante la fisión de un núcleo se suelen mover a mayores velocidades, por lo que es energéticamente favorable para la central reducir la velocidad de los neutrones del medio.

El uso del agua ligera como refrigerante en reactores nucleares está extendido, por un lado, porque es un recurso abundante y relativamente barato, por lo que es una opción viable desde el punto de vista económico y, por otro, porque el agua tiene una capacidad calorífica alta, que ayuda a transferir el calor generado por el núcleo.

El refrigerante y el núcleo se encuentran en el interior de una vasija. Este recipiente tiene forma cilíndrica, con una altura que ronda los diez metros, aunque puede llegar a superar los veinte metros en algunos casos, y un diámetro de unos cinco metros [1]. La vasija está hecha de acero, con impurezas de diferentes elementos que determinan algunas características físicas de interés.

Para que la central opere de forma eficiente, el refrigerante debe encontrarse a una cierta presión y temperatura. El interior de la vasija suele alcanzar presiones de entre 7 y 14 MPa, dependiendo del tipo de vasija, y una temperatura en torno a los 290 °C [2]. Por ello, si se quiere una producción de energía óptima, es necesario que la vasija pueda aguantar estas condiciones de presión y temperatura durante el mayor espacio de tiempo posible sin que se comprometa la seguridad, lo que depende, entre otras cosas, de la resistencia de la vasija.

Uno de los métodos usados para medir la resistencia de un material son los ensayos Charpy. En este tipo de pruebas se utiliza un péndulo, cuya masa y longitud se conocen, y se deja caer desde una altura dada sobre la muestra de material que se estudia. Antes del ensayo, se hace una hendidura al trozo de material en su parte posterior.

Cuando el péndulo rompe la muestra, la altura máxima que alcanza después es menor que la inicial debido a la energía que el material absorbe durante el impacto. Esta energía puede calcularse a partir de la diferencia de alturas, y da una medida de la resistencia o tenacidad del material, es decir, de la capacidad del material de absorber energía antes de romperse.

En el caso del acero al carbono, que es el que se usa en las vasijas nucleares, su tenacidad cambia con la temperatura siguiendo una curva como la de la figura 1.

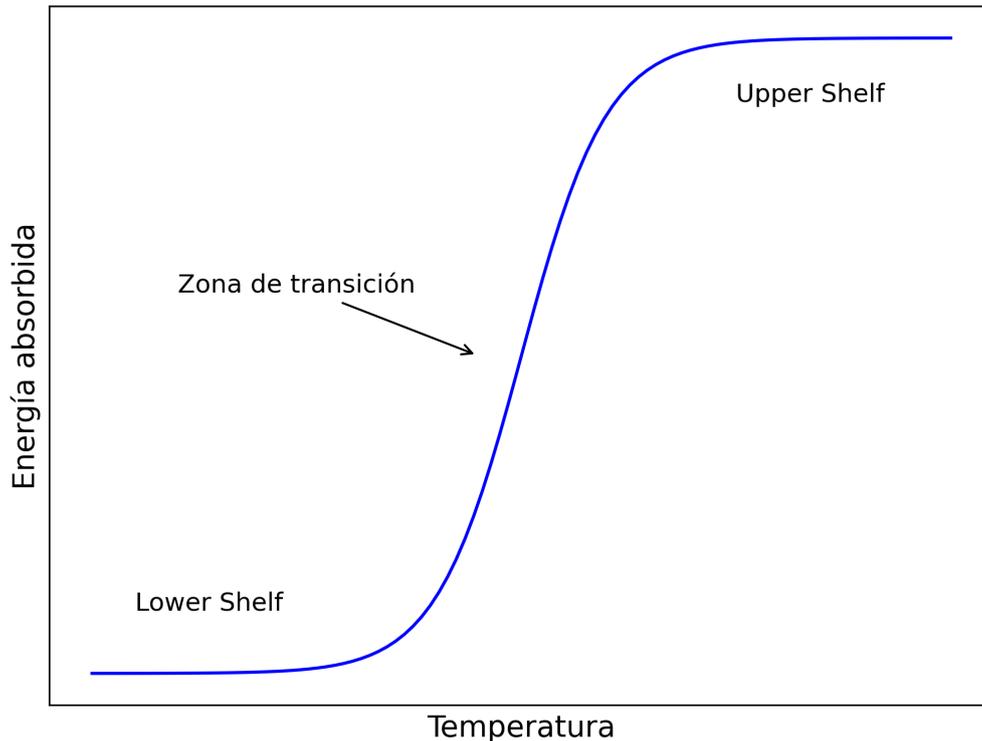


Figura 1: Aproximación de la tenacidad del acero al carbono en función de la temperatura.

Se distinguen dos partes en la curva, una de tenacidad baja y otra de tenacidad alta, separadas por una zona de transición. Dependiendo de la temperatura, el mecanismo a nivel microscópico por el que el material se rompe varía: a temperaturas bajas el acero tiene poca resistencia, y se rompe principalmente por clivaje, que es un tipo de fractura que se produce a lo largo de planos cristalográficos del material. A esta zona se le llama lower shelf. A medida que aumenta la temperatura, la tenacidad crece, hasta que se alcanza una zona dúctil, el upper shelf, donde el valor de la tenacidad se mantiene constante aproximadamente y la forma de fractura más común es la fractura dúctil. Esta forma de fractura tiene que ver con la formación de huecos microscópicos durante la deformación del material.

Cuando el acero está expuesto a radiación, como es el caso del acero de las vasijas cuando el reactor opera, la tenacidad generalmente disminuye: durante la fisión en el núcleo del reactor, parte de los neutrones que se generan llegan a la vasija. Al penetrar el acero, los neutrones son dispersados por los átomos del material, y estos a su vez son desplazados de sus posiciones originales. Esto, además, puede originar desplazamientos de otros átomos en forma de cascada.

Estas colisiones producen varios cambios en la red: algunos de los huecos generados no son recombinados, con lo que los átomos correspondientes quedan en posiciones fuera de la red (átomos intersticiales). Además, estos huecos facilitan la movilidad de solutos, que parte de las veces acaban concentrándose en zonas concretas de la red.

En una red cristalina, las dislocaciones son defectos en un plano de átomos determinado. Cuando esto ocurre, los átomos de las capas de alrededor se desplazan hacia las vacantes, con lo que la estructura del material se vuelve más irregular en esta zona.

Por otro lado, en metales, la movilidad de las dislocaciones puede aumentar la capacidad de deformación plástica del material [6]. Por tanto, cualquier factor que dificulte el movimiento de las dislocaciones puede disminuir la plasticidad del material. Esto le ocurre al acero de vasija cuando es irradiado: los clusters de solutos que se forman cuando el material es irradiado dificultan la movilidad de las dislocaciones [4]. Posteriormente, este hecho facilita la formación de microfisuras, que hacen que el acero se vuelva más frágil.

El cambio en la tenacidad del acero tras ser irradiado durante un cierto tiempo tiene una apariencia similar a la que muestra la figura 2. Como se ve en la gráfica, la energía absorbida después de la irradiación es menor a cualquier temperatura. Además, se observa una reducción especialmente grande de la energía absorbida en la zona del upper shelf, y un desplazamiento de la zona de transición hacia temperaturas mayores.

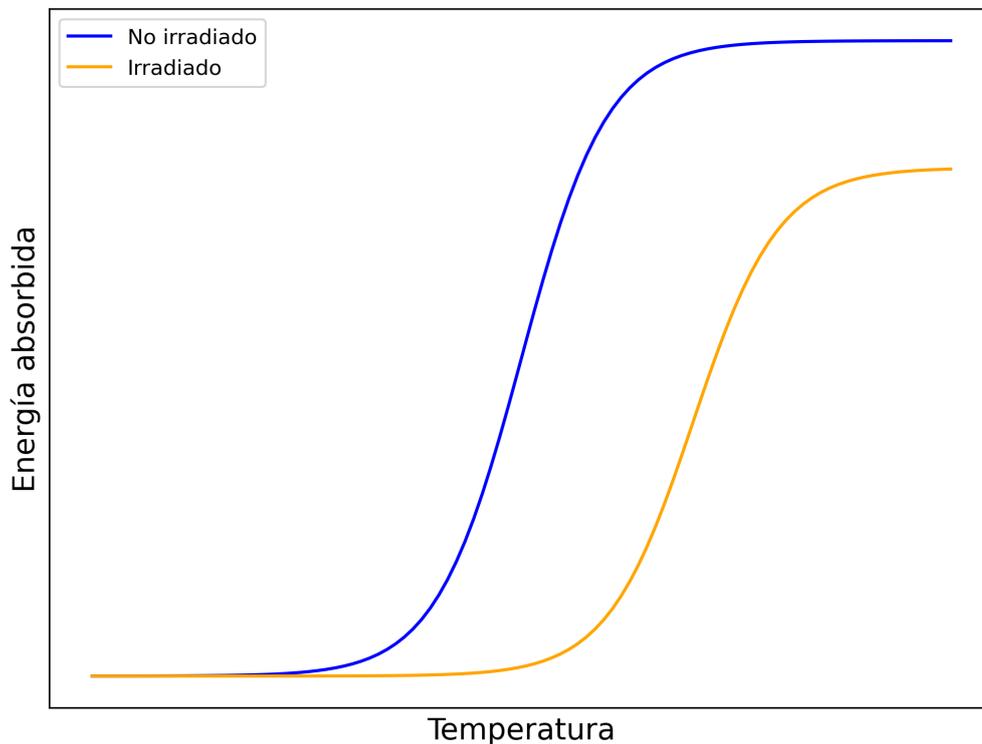


Figura 2: Curvas de la tenacidad del acero antes y después de un tiempo de irradiación.

A medida que un material es irradiado, la capacidad de absorción de energía disminuye, desplazándose la curva de energía absorbida frente a temperatura hacia la derecha. El hecho de que cuanto mayor es la fragilización, mayor es el desplazamiento de la curva puede usarse para definir parámetros que permitan cuantificar el grado de fragilización del material. En nuestro caso se ha usado el parámetro  $T_{41J}$ , que es la temperatura a la que la energía máxima que absorbe el acero en un ensayo Charpy es de  $41J$ . De esta forma, el aumento de fragilización se puede medir con el desplazamiento de  $T_{41J}$ ,  $\Delta T_{41J}$ , que representa el desplazamiento que sufre la zona de transición de la curva conforme el material es irradiado.

En la práctica, para medir el valor de  $\Delta T_{41J}$  de una vasija, se usan probetas del mismo material y se mantienen dentro de esta durante el tiempo de operación del reactor que sea conveniente. Conocido el nivel de irradiación del material, el valor de  $\Delta T_{41J}$  correspondiente se estima con ensayos Charpy realizados sobre las probetas.

## 1.2. El modelo ASTM E900-15

Para evitar un exceso de presión en la vasija que pudiera aumentar el riesgo de fractura, se ponen unos límites de presión y temperatura para la operación de los reactores. Por otro lado, a medida que pasa el tiempo, es necesario reajustar estos límites debido al efecto de la radiación en el acero. La forma de hacerlo actualmente se basa en hacer predicciones del nivel de fragilización de la vasija, para lo que se usan diferentes modelos.

Uno de ellos es el modelo ASTM E900-15, un modelo semiempírico que describe la evolución de  $\Delta T_{41J}$  de aceros con diferentes composiciones químicas. Este modelo ha sido desarrollado por el subcomité E10.02 de la ASTM International, una organización que establece estándares a nivel internacional para el estudio de materiales. El dataset con el que se obtuvo el modelo contiene estimaciones de  $\Delta T_{41J}$  hechas con ensayos Charpy y una serie de variables predictoras relacionadas con la composición química y condiciones de irradiación del material. Estos datos vienen principalmente de programas de vigilancia de reactores de agua ligera de diseño occidental procedentes de 13 países: Alemania, Bélgica, Brasil, Corea del Sur, Estados Unidos, Francia, Italia, Japón, México, Países Bajos, Suecia, Suiza, y Taiwan [3].

Las variables que utiliza el modelo ASTM para predecir el valor de  $\Delta T_{41J}$  son: el contenido en el acero, en porcentajes en masa, de cobre, níquel, manganeso, y fósforo, debido al impacto que se ha visto que tienen estos elementos en la fragilización del material; la temperatura de irradiación, en grados centígrados; y la fluencia,  $\Phi$ , definida como el número de neutrones rápidos ( $E \geq 1$  MeV) absorbidos por metro cuadrado de acero a lo largo del tiempo que haya sido irradiado. Con métodos estadísticos, puede escribirse el parámetro  $\Delta T_{41J}$ , en grados centígrados, en función de estos parámetros a través de una curva de ajuste:

$$\Delta T_{41J} = \Delta T_{41J}^1 + \Delta T_{41J}^2,$$

donde los términos del miembro derecho vienen dados por las siguientes expresiones.

Por un lado,

$$\Delta T_{41J}^1 = \frac{5}{9} \cdot A \cdot 1.8943 \cdot 10^{-12} \cdot \Phi^{0.5695} \left( \frac{1.8T + 32}{550} \right)^{-5.47} \cdot \left( 0.09 + \frac{P}{0.012} \right)^{0.216} \left( 1.66 + \frac{Ni^{8.54}}{0.63} \right)^{0.39} \left( \frac{Mn}{1.36} \right)^{0.3},$$

con

$$A = \begin{cases} 1.011 & \text{para forjas} \\ 1.080 & \text{para láminas y láminas SRM} \\ 0.919 & \text{para soldaduras} \end{cases}.$$

Por otro lado,

$$\Delta T_{41J}^2 = \frac{5}{9} \cdot M \cdot \max(\min(Cu, 0.28) - 0.053, 0),$$

donde

$$M = B \cdot \max(\min(113.87 \cdot (\ln\Phi - \ln(4.5 \cdot 10^{20})), 612.6), 0) \cdot \left(\frac{1.8T + 32}{550}\right)^{-5.45} \left(0.1 + \frac{P}{0.012}\right)^{-0.098} \left(0.168 + \frac{Ni^{0.58}}{0.63}\right)^{0.73}$$

y

$$B = \begin{cases} 0.738 & \text{para forjas} \\ 0.819 & \text{para láminas y láminas SRM} \\ 0.968 & \text{para soldaduras} \end{cases}$$

Hay que tener en cuenta que el modelo ASTM está ajustado a partir de un conjunto de datos cuyas variables toman valores en rangos determinados:

- Contenido de cobre menor o igual al 0.4 %.
- Contenido de níquel menor o igual al 1.7 %.
- Contenido de fósforo menor o igual al 0.03 %.
- Contenido de manganeso entre el 0.55 % y 2 %.
- Temperatura de irradiación entre los 255 y 300 °C.
- Fluencia entre los  $10^{21}$  y  $10^{24}$  n/m<sup>2</sup>.

Por ello, no se deben considerar igual de fiables las predicciones de  $\Delta T_{41J}$  hechas con valores de los predictores que quedan fuera de estos rangos.

A raíz de este problema, en este Trabajo Fin de Máster desarrollamos varios modelos basados en técnicas de machine learning, y comparamos su rendimiento con el del modelo ASTM.

## 2. Motivación de los primeros modelos: KNN y KNT

Los primeros modelos que se han estudiado usan el hecho de que hay aceros con composiciones químicas diferentes cuyos comportamientos en cuanto a la fragilización son similares. Esto nos lleva a plantear la posibilidad de que las medidas de fragilización de unos puedan complementar las de otros a la hora de ajustar modelos. Así, dado un material, si queremos estimar su fragilización, en nuestro caso medida con  $\Delta T_{41J}$ , podríamos hacer un modelo más robusto si tenemos más datos incluyendo las medidas de  $\Delta T_{41J}$  de otros materiales con formas de fragilizarse parecidas.

Esto nos lleva a la cuestión de cómo medir la similitud entre dos materiales en cuanto a su fragilización. Se han considerado dos formas de medirla, que dan lugar a dos modelos diferentes.

Por un lado, podemos comparar los procesos de fragilización de dos materiales en función de sus propiedades, ya que si los valores de estas propiedades son parecidos, entonces es razonable asumir que se van a fragilizar de forma parecida. Se han considerado como propiedades relevantes la concentración de solutos, la temperatura de irradiación, y el tipo de acero (forja, lámina o soldadura). De esta forma, una combinación concreta de ellas es a lo que nos referiremos como material de aquí en adelante. Así, una manera de medir similitudes entre materiales es con la distancia euclídea en el espacio de las propiedades del material, estando cada material representado en este espacio por un único punto. Al modelo correspondiente lo hemos llamado KNN.

Por otro lado, la segunda forma de medir distancias entre materiales que se ha usado es calculando la diferencia entre las áreas bajo la curva ASTM (AUC) de cada material. A este modelo lo hemos llamado KNT (k-nearest travellers, por estar basada la distancia en la evolución temporal de la fragilización de los materiales).

La ventaja de usar el AUC frente a usar un valor concreto de  $\Delta T_{41J}$  para comparar materiales es que el AUC tiene en cuenta los valores de  $\Delta T_{41J}$  en todo el intervalo de fluencias. De esta forma, esta cantidad es sensible a diferencias en los valores de  $\Delta T_{41J}$  a lo largo del tiempo, que no se tendrían en cuenta si se tomara como referencia el grado de fragilización en un punto determinado.

### 2.1. Inspección del dataset

Antes de la implementación de KNN y KNT, dedicamos este apartado a conocer un poco la estructura del dataset con el que trabajamos, y a discutir el tema de los viajeros cercanos y cómo elegirlos.

Este dataset está incluido en el software Plotter-22, desarrollado en 2022 por el comité E10.02 de ASTM International [5], y contiene 2053 observaciones de varias variables, entre las que están los predictores que usa el modelo ASTM y que se van a utilizar para implementar los diferentes modelos de machine learning del trabajo.

La figura 3 muestra las distribuciones de  $\Delta T_{41J}$  y de las variables predictoras para las observaciones del dataset de Plotter-22. En el caso del cobre y la fluencia, las medidas se concentran en torno a valores pequeños, mientras que para el resto de variables se tienen distribuciones más centradas, con forma de campana aproximadamente. Para el níquel y el manganeso, además, se obtiene un pequeño grupo para valores bajos de

concentración separado del resto de observaciones. Por último, si nos fijamos en los intervalos en los que deben estar los valores de los predictores para aplicar el modelo ASTM, vemos que las medidas de los predictores en este caso también cumplen estas condiciones.

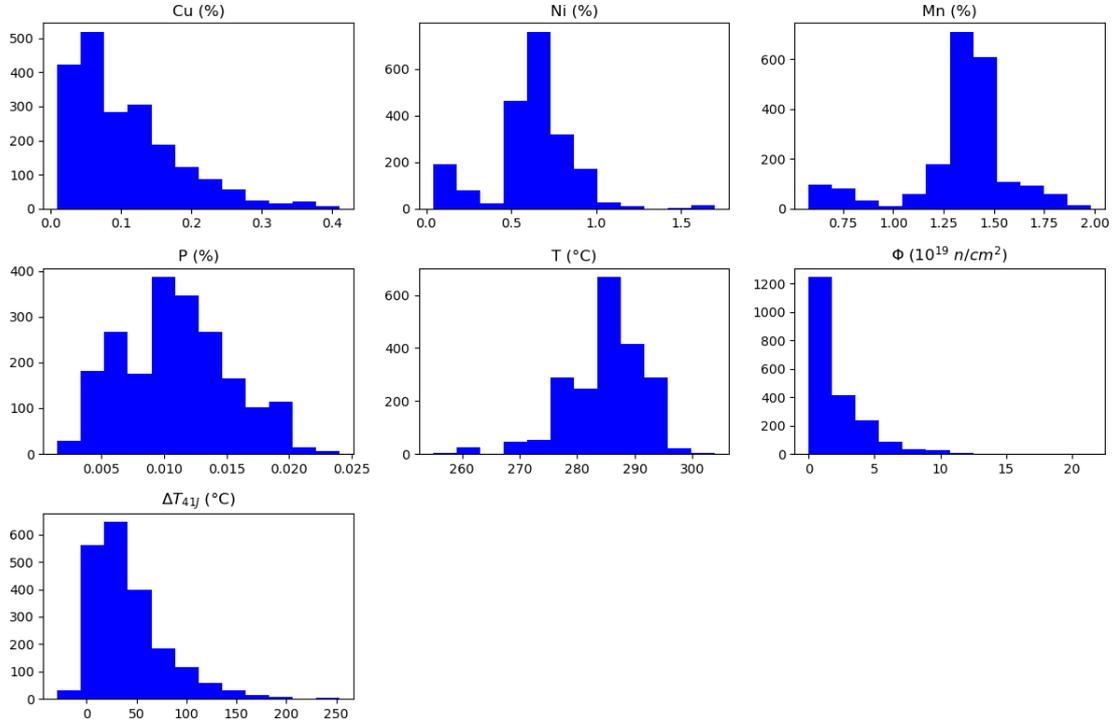


Figura 3: Distribución de las variables del dataset de Plotter-22.

De los predictores anteriores, el cobre y el níquel son los que mayor influencia tienen en la fragilización del acero. Se ha estimado la correlación entre cada predictor y el AUC de los materiales, obteniéndose para el cobre valores tanto del coeficiente de Spearman como del de Pearson mayores que los de los otros predictores: 0.82 y 0.85 para el cobre respectivamente, frente al resto de predictores, cuyos coeficientes están entre el 0.1 y 0.6 para el coeficiente de correlación de Spearman y entre 0.1 y 0.5 para Pearson.

Como se ha comentado durante la introducción, la formación de clusters de solutos tiene un papel importante en la fragilización del acero, y la mayor parte de estos clusters son precipitados ricos en cobre. Sin embargo, estos precipitados pueden presentar también níquel, que al añadirse al cluster aumenta su volumen, y con ello contribuye a la fragilización del acero.

Para visualizar diferentes grupos de viajeros cercanos y hacernos una idea de las diferencias entre KNN y KNT, se han representado los materiales del dataset de Plotter-22 en el espacio Cu-Ni y se ha calculado el AUC en el intervalo de fluencias  $\Phi = 10^{18} - 10^{20} \text{ n/cm}^2$  para cada uno. Como se ha comentado ya, esta magnitud representa el valor de  $\Delta T_{41J}$  de un material acumulado en el tiempo y valores similares entre distintos materiales se pueden asociar a procesos de fragilización similares.

Por otro lado, a partir de un grid de valores del cobre y níquel, se han trazado curvas de nivel del AUC para ver cómo cambia de forma aproximada esta cantidad en el espacio Cu-Ni. Se han fijado el fósforo, el manganeso y la temperatura de irradiación, que son

menos relevantes, a sus valores medios calculados con el dataset. La figura 4 muestra curvas de nivel de 250 en 250 grados centígrados para un acero en forma de lámina.

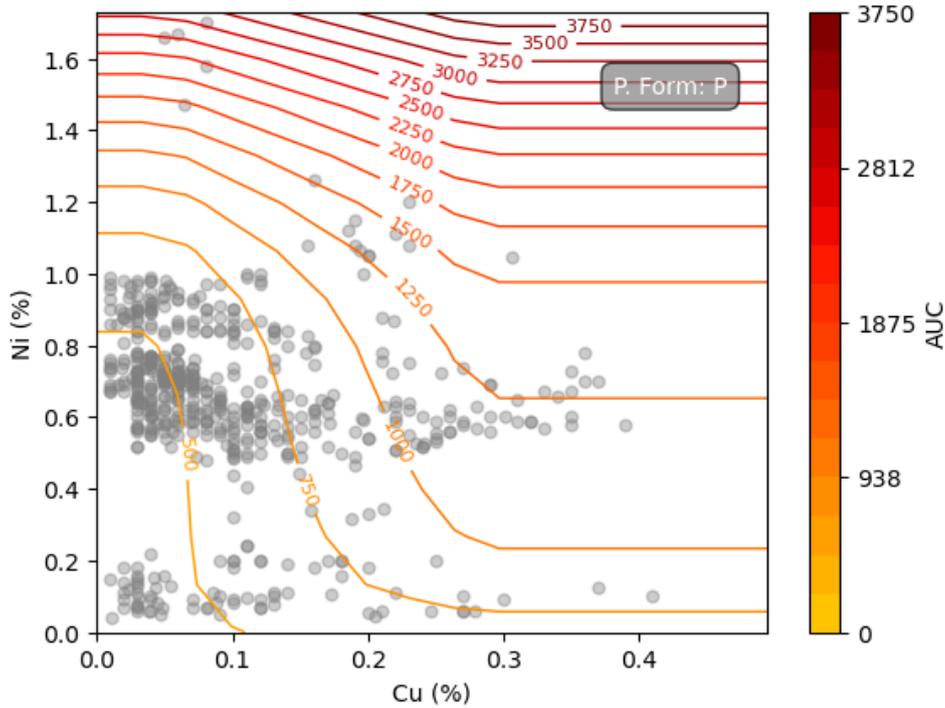


Figura 4: Curvas de nivel del AUC en el espacio Cu-Ni.

Las regiones de materiales con AUC parecido, que son las que están entre curvas de nivel adyacentes, representan grupos de viajeros cercanos. Vemos que los puntos de una misma región no tienen por qué tener coordenadas similares, es decir, los materiales que son viajeros cercanos no tienen por qué tener concentraciones de cobre o níquel parecidas, y por tanto ser vecinos cercanos en el sentido de KNN.

Se observa que las curvas de nivel descienden conforme el porcentaje de cobre aumenta, lo que indica que el aumento en una variable se compensa de cierta forma con la disminución de la otra para dar lugar a una fragilización parecida.

De esta forma, los vecinos cercanos y los viajeros cercanos de un material determinado no tienen por qué coincidir. Como ejemplo, se ha seleccionado un material cualquiera, en este caso el material con etiqueta ZN1-P1 en el dataset, y se han marcado los primeros  $K = 100$  materiales cercanos atendiendo por un lado al AUC y por otro a las diferencias de cobre y níquel. Con ello se obtiene la figura 5.

No obstante, la diferencia de AUC como forma de medir cómo de similar es la fragilización de dos materiales es una cantidad poco intuitiva, y, en un caso práctico, para una central, puede ser interesante usar otro parámetro cuya interpretación física sea más directa.

Si consideramos el intervalo de fluencias sobre el que calculamos el AUC para elegir los viajeros cercanos, y nos quedamos con el extremo superior,  $\Phi_{cut} = 10^{20}$  n/cm<sup>2</sup>, podemos ver que existe una dependencia bastante grande entre el AUC y el valor de  $\Delta T_{41J}$

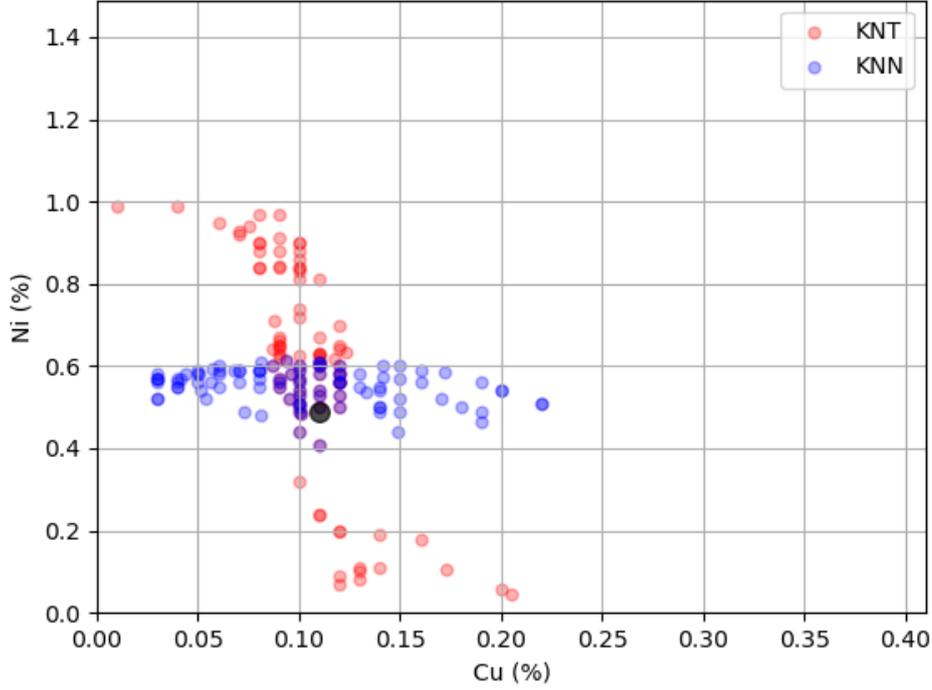


Figura 5: Grupo de vecinos y viajeros cercanos de un material de ejemplo.

del modelo ASTM en esta fluencia de corte,  $\Delta T_{41Jcut} = \Delta T_{41J}(\Phi_{cut})$  (figura 6).

Cada punto de la gráfica representa el par de valores de  $\Delta T_{41J}$  en  $\Phi_{cut}$  estimado con el modelo ASTM y del AUC para una combinación de valores de cobre, níquel, fósforo, manganeso y temperatura de irradiación concreta. Recorriendo todas las combinaciones de valores de estas variables en los intervalos de la tabla 1 se obtiene la nube de puntos que se muestra.

Así, se pueden ajustar estos puntos con un polinomio, que en nuestro caso se ha elegido de grado dos, lo que permite establecer una equivalencia entre AUC y  $\Delta T_{41Jcut}$  que representa de forma aproximada la relación entre estas variables:

$$AUC = -0.003 \cdot \Delta T_{41Jcut}^2 + 8.934 \cdot \Delta T_{41Jcut} - 109.621.$$

De esta forma, se puede usar esta relación para establecer conjuntos de viajeros cercanos dando un intervalo de temperaturas admisibles, en vez de uno de áreas, lo cual da una idea más intuitiva de cómo de diferentes serían los materiales que se elegirían y luego, usando el ajuste, ponerlo en términos del AUC. Cuanta más incertidumbre se introduzca en el valor de  $\Delta T_{41Jcut}$ , se elegirán materiales cuyas curvas ASTM, y por tanto, cuyas medidas de  $\Delta T_{41J}$  dataset, estarán más dispersas.

Por último, se han representado las medidas de  $\Delta T_{41J}$  hechas sobre probetas provenientes de la central estadounidense Diablo Canyon, y se han añadido las medidas correspondientes a una serie de viajeros cercanos. Para elegir los viajeros cercanos, se ha utilizado el valor de  $\Delta T_{41Jcut}$  del acero de Diablo Canyon y se ha usado la relación anterior estableciendo una diferencia máxima de quince grados para el intervalo de temperaturas. Vemos que los puntos representados se distribuyen aproximadamente de la

	Mínimo	Máximo
Cu	0.05	0.4
Ni	0.1	1.3
Mn	0.5	2.5
P	0.005	0.03
T	270	300

Tabla 1: Intervalos considerados para la estimación de AUC en función de  $\Delta T_{41Jcut}$ .

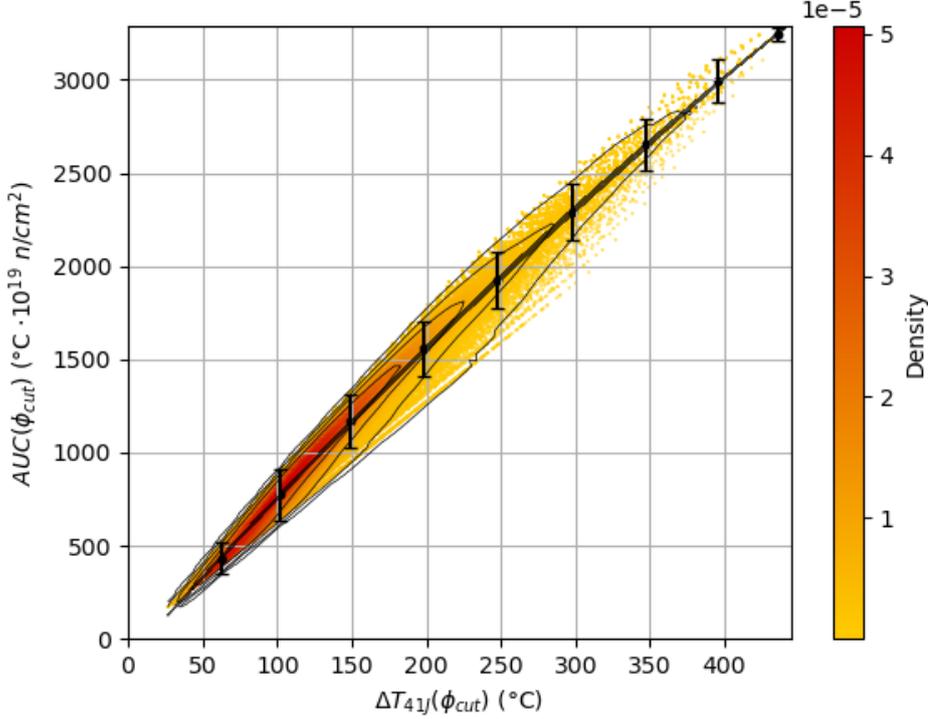


Figura 6: AUC frente a  $\Delta T_{41Jcut}$  para el grid de materiales considerado.

misma forma.

En la figura se representan en rojo los puntos de la central de Diablo Canyon, y la banda que se incluye marca el valor máximo y mínimo en cada fluencia de los modelos ASTM de los viajeros cercanos. Para una fluencia de  $10^{20}$  n/cm<sup>2</sup> se observa una diferencia que ronda los treinta grados, ajustándose al margen de temperatura establecido de quince grados. En otras gráficas, la diferencia puede ser mayor debido a que la nube de puntos de la figura 6 tiene una anchura determinada que, aunque no es grande, introduce un cierto error. De esta forma, para un AUC dado, aunque la relación entre AUC y  $\Delta T_{41Jcut}$  la asumamos uno a uno, en la práctica hay materiales con  $\Delta T_{41Jcut}$  por encima y por debajo del valor estimado, que también se incluirían en el grupo de viajeros cercanos.

Por otro lado, hay que tener en cuenta que al representar puntos experimentales de los materiales seleccionados, la dispersión de estos tendrá, además, el efecto usual del ruido de una medida, por lo que el margen de  $\Delta T_{41J}$  en general no se corresponde con la desviación máxima de los puntos experimentales.

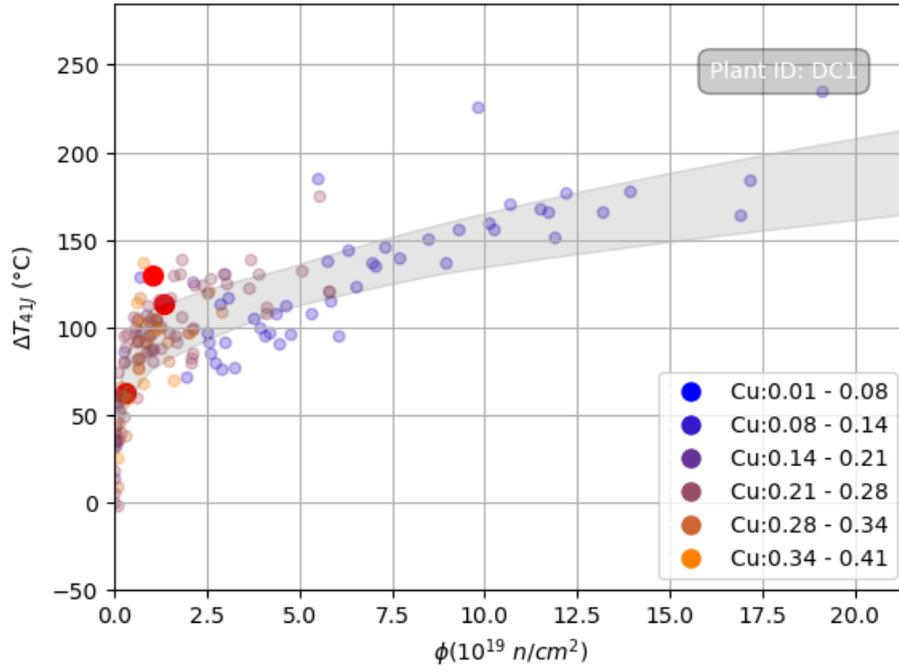


Figura 7: Valores de  $\Delta T_{41J}$  en función de la fluencia para los viajeros cercanos de Diablo Canyon.

### 3. Aplicación de KNN y KNT

Este apartado lo dedicamos a la implementación y evaluación de los métodos KNN y KNT sobre el dataset de Plotter-22. Primero, explicamos cómo se ajusta la curva de  $\Delta T_{41J}$ , dados un material y un número de materiales cercanos concretos. Después, analizamos los resultados obtenidos.

#### 3.1. Metodología

Para un material y un entero  $K$  dados, la curva estimada de  $\Delta T_{41J}$  frente a  $\Phi$  se obtiene, primero, seleccionando los datos de Plotter-22 asociados a los  $K$  materiales más próximos al acero de interés en términos del AUC o de las diferencias en composición según se aplique KNT o KNN. En el caso de KNN, al ser la variable ‘Product Form’ categórica, se ha representado con unos y ceros mediante One Hot Encoding.

Posteriormente, se considera una expresión analítica en función de  $\Phi$  que pueda aproximar el comportamiento de  $\Delta T_{41J}$ , y se hace un ajuste con los datos seleccionados. En nuestro caso, se ha tomado la función dada por la ecuación (1).

$$y = a \cdot x^\alpha + b(1 - e^{c \cdot x}). \quad (1)$$

#### 3.2. Análisis de resultados

Para evaluar la precisión de los modelos se ha aplicado validación cruzada Leave One Out sobre los datos de cada material, tomando como medida del error de predicción el Root Mean Squared Error (RMSE).

Con esto, se obtienen curvas del error para cada material que tienden a alcanzar un mínimo en algún  $K$  intermedio. Como ejemplo se muestra en la figura 8 la curva del RMSE aplicando KNT a un material concreto del dataset de Plotter-22.

Calculando la posición del mínimo del error en cada material de Plotter-22 puede estimarse en cuántos casos aumentar la cantidad de datos mediante el método KNN o KNT es favorable a la hora de hacer predicciones. Como vemos en la figura 9, tanto para KNN como KNT, la proporción de materiales en los que sí hay mejora introduciendo datos de vecinos en el ajuste ( $K > 0$ ) es notablemente mayor que la de materiales cuyo modelo óptimo se da sin vecinos ( $K = 0$ ).

A continuación, calculamos el error que se obtiene sobre Plotter-22 entero usando los modelos KNT y KNN. Para ello, se hacen los ajustes correspondientes para cada material, y se calcula el RMSE global con los residuos de cada material. Después, comparamos los errores calculados con el del modelo ASTM, distinguiendo dos casos según si aplicamos los modelos con un valor de  $K$  común a todos los materiales, o eligiendo para cada material su  $K$  óptimo.

La figura 10 muestra la evolución del error de predicción en función de  $K$  para el caso en que se elige un  $K$  común para todos los materiales.

Se obtiene un mínimo en ambos modelos para  $K = 5$ , consiguiendo KNT un error menor que KNN. A partir de ahí, el error comienza a crecer en ambos casos, aunque siendo el crecimiento en el caso de KNN mayor que en KNT, ya que el criterio de selección de materiales de KNN puede dar lugar a materiales con curvas de fragilización más

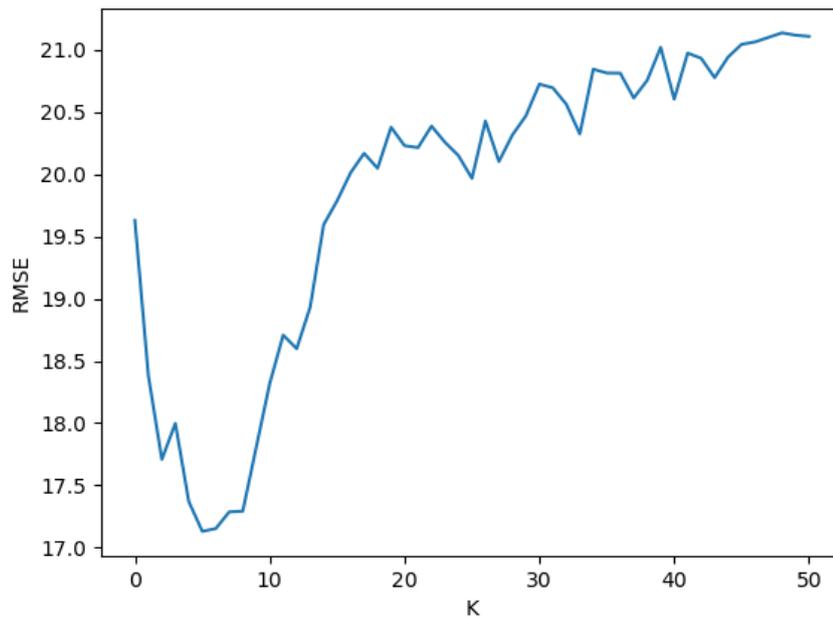


Figura 8: Error de test con KNT para un material de ejemplo en función de  $K$ .

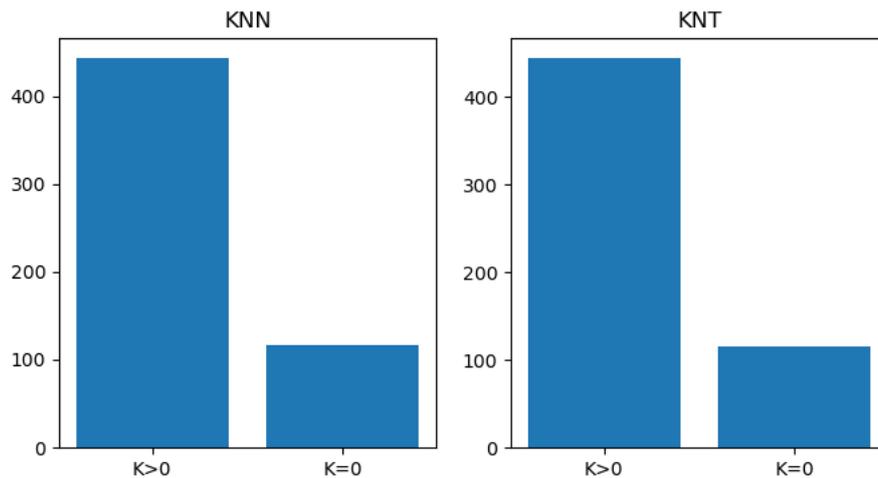


Figura 9: Proporción de materiales para los que los modelos mejoran sus predicciones al considerar materiales cercanos.

dispersas y por tanto puntos menos agrupados. En cualquier caso, los errores mínimos conseguidos están por encima de los catorce grados, y por tanto no mejoran el error de 13.7 grados centígrados que consigue el modelo ASTM sobre Plotter-22. Así, KNT o KNN con un  $K$  común no superan en rendimiento al ASTM a la vista de estos cálculos.

Por otro lado, el valor de  $K$  en que se alcanza el menor error varía entre los diferentes materiales, por lo que cabe esperar una mejora en el RMSE con la segunda forma de implementar KNT y KNN, usando el  $K$  óptimo de cada material. Con este método, se obtienen los errores que se ven en el diagrama 11, indicados bajo las etiquetas KNT y KNN. Como vemos, mejoran los resultados, en este caso superando tanto KNN como

KNT la precisión de ASTM.

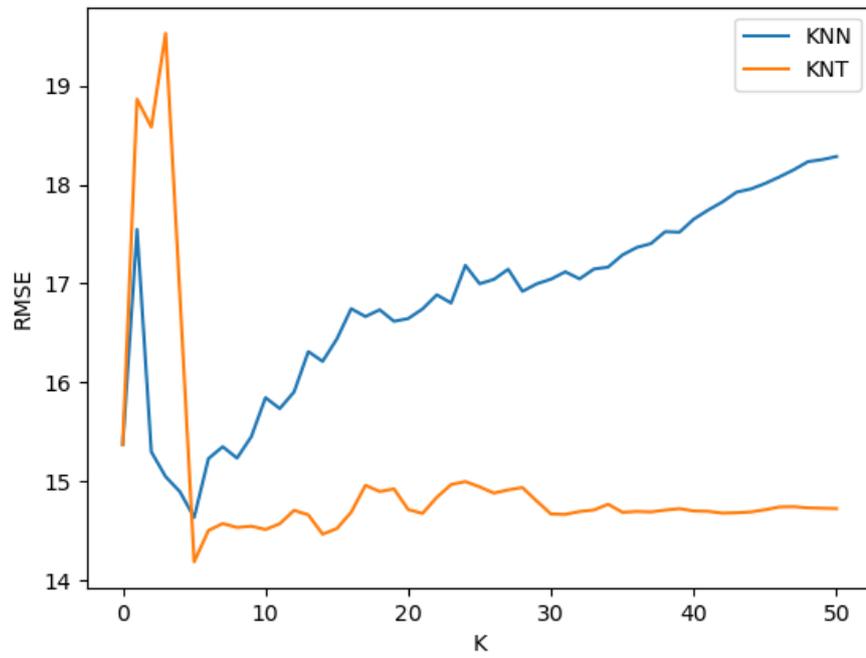


Figura 10: Error de test sobre Plotter-22 en función de  $K$ .

## 4. Aplicación de otros modelos de machine learning

En este apartado se aplican otras técnicas de machine learning vistas a lo largo del máster, y se comparan los resultados obtenidos con los de los métodos KNN y KNT ya expuestos.

### 4.1. Metodología

Las técnicas utilizadas son las siguientes:

- Árboles de regresión.
- Regresión con KNN. En este caso, se aplica KNN de la manera usual, es decir, se toma un dato y una serie de vecinos, y se hace una regresión a partir de sus etiquetas. A diferencia del método KNN basado en materiales vecinos, esta implementación sí tiene en cuenta la fluencia en el cálculo de la distancia, y el resultado de la predicción es un valor concreto de  $\Delta T_{41J}$ , y no un modelo como tal para el material.
- Gradient boosting y extreme gradient boosting.
- Random forest.
- Kernel ridge regression.
- Redes neuronales densas.

Respecto al entrenamiento de los modelos, se ha hecho una división train-test del dataset, y se han optimizado los hiperparámetros con validación cruzada, previamente estandarizando los predictores cuando ha sido necesario.

Para regresión con árboles, KNN, y gradient boosting se ha usado validación cruzada K-fold, buscando, para los árboles, el número óptimo de hojas, y para gradient boosting el número de árboles y su profundidad. En el caso de KNN, se ha optimizado el número de vecinos y para su implementación se han calculado las distancias entre observaciones con todos los predictores, incluyendo la fluencia y el tipo de acero (Product Form). Para ello, esta última variable, que es categórica, se ha expresado numéricamente mediante la representación One Hot Encoding.

Por otro lado, respecto a random forest, se ha usado el Out Of Bag error (OOB) para optimizar el número de árboles, y, para la red neuronal, se ha utilizado un grid search para optimizar un conjunto de parámetros considerado.

Para el ajuste de la red, se ha fijado como máximo de épocas cien, y se ha usado, además, la función EarlyStopping monitorizando el error sobre el conjunto de validación. De esta forma, el entrenamiento se detiene cuando el error de test cumple alguna condición, que, en nuestro caso, se ha fijado que sea que el error de validación no disminuya durante al menos veinte épocas consecutivas.

Este entrenamiento se ha repetido para todas las combinaciones de valores de los parámetros del grid establecido, escogiendo como óptima la combinación que minimiza el error de validación. Los parámetros considerados en el grid search han sido: el learning rate del optimizador, el número de capas de la red, el número de neuronas de cada capa, el parámetro  $\lambda$  de regularización, y las funciones de activación, distinguiendo entre activación en la capa de salida y en las capas ocultas.

Para las funciones de activación, se ha elegido entre la función ReLu y la función Leaky ReLu, ya que evitan el problema de anulación del gradiente, y respecto a la regularización, se ha considerado el problema sin regularización, con regularización L1, o con regularización L2.

Otros aspectos importantes sobre la estructura y el entrenamiento de la red son el uso de batch normalization entre cada capa, que hace que el proceso de entrenamiento sea más estable, y el optimizador usado, en nuestro caso el Adam optimization algorithm, que mejora el método del stochastic gradient descent permitiendo ajustar un learning rate a cada peso y adaptarlo a medida que el entrenamiento avanza.

Para la implementación de los modelos, en el caso de las redes neuronales, se ha usado la librería keras de tensorflow. Por otro lado, el modelo con kernel ridge regression se ha programado con la función KernelRidge de la librería sklearn. Por último, para el resto de modelos aplicados, se han utilizado las librerías usuales de R correspondientes a cada caso.

## **4.2. Análisis de resultados**

Una vez han sido optimizados los hiperparámetros de los modelos, se ha entrenado cada uno. Después, se han aplicado sobre el conjunto de test y se han calculado los errores de predicción. El RMSE obtenido en cada caso se muestra en el diagrama de barras de la figura 11. Se incluyen los errores para KNT y KNN, así como para el modelo ASTM cuando se evalúa sobre el dataset de Plotter-22 completo.

El diagrama muestra una mejora del error respecto del modelo ASTM para algunos de los modelos aplicados. En concreto, los modelos KNN y KNT obtienen los mejores valores del RMSE, seguidos del gradient boosting.

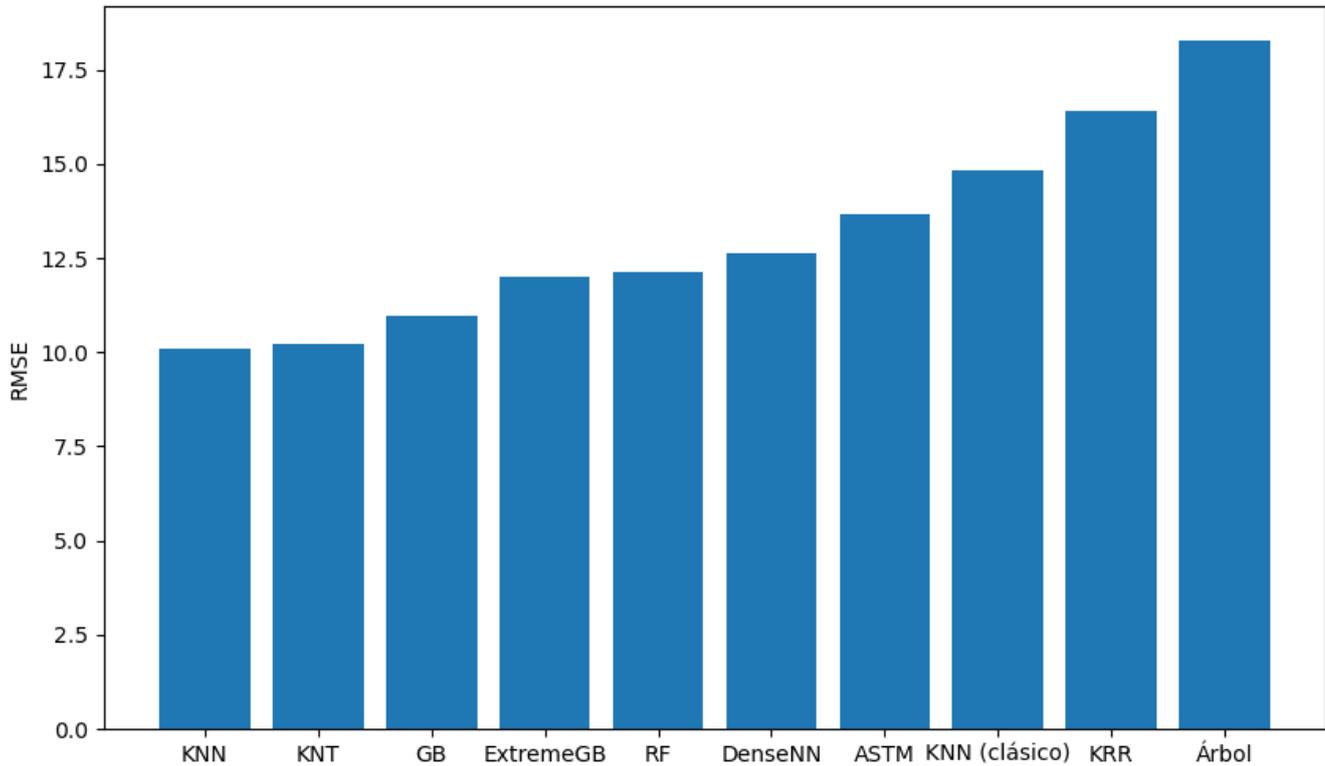


Figura 11: Error de test para los diferentes modelos aplicados.

## 5. Aplicación de KNT usando gradient boosting

Por último, se plantea una modificación en la implementación de KNT, que, como se va a ver, mejora los resultados de test obtenidos.

Como se ha explicado, KNT basa la elección de materiales cercanos en el área bajo la curva del modelo ASTM. Esto nos lleva a la posibilidad de modificar el cálculo del área cambiando el modelo que se usa, ya que cuanto mejor sea el ajuste de un modelo a los datos, más representativa es el AUC del comportamiento del material, y por tanto mejor es la elección de viajeros cercanos.

Se repite la implementación de KNT con esta modificación del cálculo de área. Se ha sustituido el modelo ASTM por el modelo de machine learning más preciso entre los probados, que es gradient boosting.

De esta forma, se distinguen, como ya se ha hecho antes, dos casos, en función de si el valor de  $K$  se fija para todos los materiales, o de si se elige el óptimo en función del material. Para el primer caso se obtiene la figura 12.

Se observa un valor óptimo del número de viajeros cercanos de aproximadamente treinta, con un error asociado menor a doce grados. A diferencia de la implementación inicial de KNT y KNN, esta sí mejora el error del modelo ASTM sobre Plotter-22.

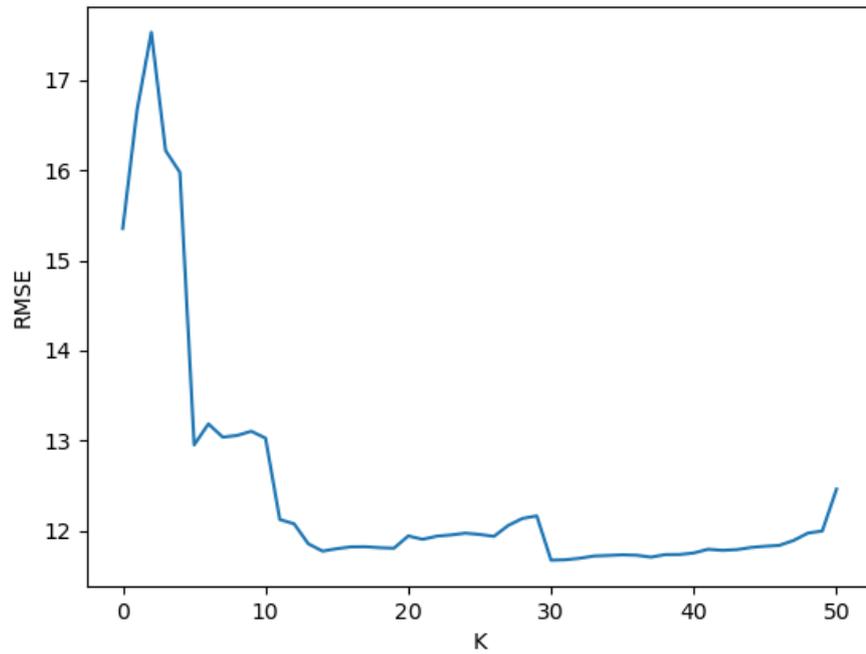


Figura 12: Error de test sobre Plotter-22 para KNT basado en gradient boosting.

Por otro lado, para el caso de elegir el  $K$  óptimo de cada material, el RMSE de test obtenido es de 9.2 grados, lo que mejora los resultados conseguidos tanto con ASTM como con el resto de modelos implementados anteriormente.

## 6. Conclusiones

Se han aplicado diferentes modelos de machine learning en la predicción del parámetro  $\Delta T_{41J}$ , y se ha comparado la precisión conseguida con cada uno y con el modelo analítico actual, el modelo ASTM E900-15, viéndose una mejora significativa de la precisión de las predicciones con los modelos nuevos en comparación con el modelo ASTM.

Una ventaja que tienen los modelos de machine learning es la posibilidad de describir dependencias entre variables más complejas en comparación con modelos analíticos como el modelo ASTM, que describen relaciones en base a expresiones en forma cerrada, en general más simples.

Otra diferencia entre estos dos tipos de modelos es que los modelos analíticos como el ASTM dan un peso al conocimiento físico que los modelos de machine learning no dan. De esta forma, un tema de interés es experimentar con modelos de machine learning que incluyan restricciones de carácter físico, y que se usen de manera combinada con el modelo estadístico.

El modelo de fragilización del acero que se usa en una central es un elemento importante porque afecta a las medidas de seguridad que se toman en ella. Un modelo cuyas predicciones tienen mucha incertidumbre puede obligar a actuar de forma conservadora, no optimizando la cantidad de energía que puede producir a la central. Así, un modelo más preciso puede permitir a la central operar durante más años o de forma más eficiente.

Por otro lado, existen los llamados programas de vigilancia integrada, en los que varias centrales colaboran en diferentes tareas relacionadas con su funcionamiento y seguridad. En nuestro caso, se consigue un buen rendimiento de los modelos KNN y KNT, entrenados con datos de varios materiales cercanos, que vienen en general de diferentes centrales. Por tanto, si se aplicaran estos modelos, podrían dar lugar a programas integrados en los que las centrales compartieran información sobre la fragilización de sus vasijas.

## Referencias

- [1] aris.iaea.org. ARIS - Technical Data. Disponible en: <https://aris.iaea.org/sites/RPV.html>.
- [2] Ferreño, D. (2007) ‘Integridad estructural de vasijas nucleares en base a la curva patrón obtenida mediante probetas reconstruidas’. Disertación. Universidad de Cantabria, Santander.
- [3] ‘Guide for predicting radiation-induced transition temperature shift in reactor vessel materials’ (2015) ASTM International. doi:10.1520/e0900-15.
- [4] ‘Integrity of reactor pressure vessels in nuclear power plants: Assessment of irradiation embrittlement effects in reactor pressure vessel steels’ (2009). Vienna: International Atomic Energy Agency.
- [5] Lee, G.-G. et al. (2023) ‘Determining the adjusting bias in reactor pressure vessel embrittlement trend curve using Bayesian multilevel modelling’, *Nuclear Engineering and Technology*, 55(8), pp. 2844–2853.
- [6] Mohamadnejad, S., Basti, A. y Ansari, R. (2020) ‘Analyses of dislocation effects on plastic deformation’, *Multiscale Science and Engineering*, 2(2–3), pp. 69–89. doi:10.1007/s42493-020-00037-2.