

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
Nuclear Safety Institute (IBRAE)



ИБРАЭ

Обращение с неопределенностями в задачах обоснования долговременной радиационной и экологической безопасности





В.С. Свительман, Е.А. Савельева
Институт безопасного развития атомной
энергетики РАН, г. Москва

Обоснование долговременной безопасности

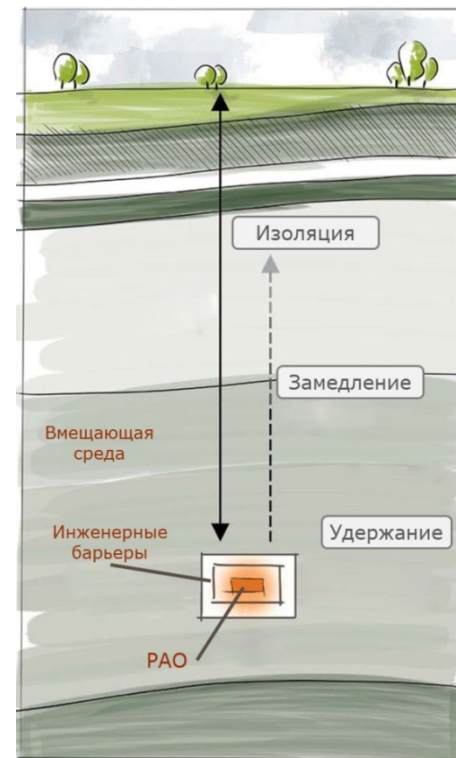


- Длительный период потенциальной опасности ОИЯЭ и невозложение бремени на будущие поколения → задача обоснования долговременной безопасности
- ОДБ – анализ выполнения природными и инженерными барьерами функций безопасности + оценка влияния на окружающую среду на протяжении длительного времени.
- Неопределенности – везде. Управление ими – ключевой элемент процесса формирования доверия к результатам.

Из чего состоит обращение с неопределенностями

- Идентифицировать источники неопределенностей 
- Для каждой группы неопределенностей понять:
 - Могут ли они быть оценены количественно? 
 - Насколько они существенны? 
 - Можно ли их избежать или уменьшить? 

- Нужен прогноз эволюции сложной природно-техногенной системы с огромным периодом потенциальной опасности.
- Все (и известные, и неизвестные) влияющие на эволюцию факторы разделяют на:
 - *Особенности*: неопределенности из-за недостаточности/ неточности измерений, либо в силу естественной вариабельности.
 - *События*: учесть неопределенности нетривиально, т.к. проектируем, чтобы событий было как можно меньше, но редкие события сложно прогнозировать.
 - *Процессы*: любая модель процесса – упрощение, нужно детальное понимание взаимодействия элементов системы (и данные!).
- Два типа неопределенностей:
 - Эпистемические – недостаток знания о моделируемых явлениях, отсутствие необходимых данных.
 - Алеаторные – случайная природа какого-либо естественного объекта или процесса.



Численное моделирование как центральный элемент ОДБ

- Основной инструмент ОДБ – численное моделирование:

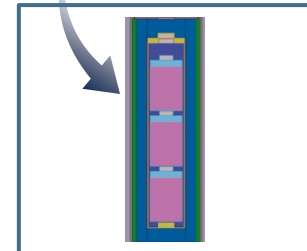
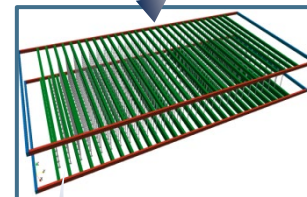
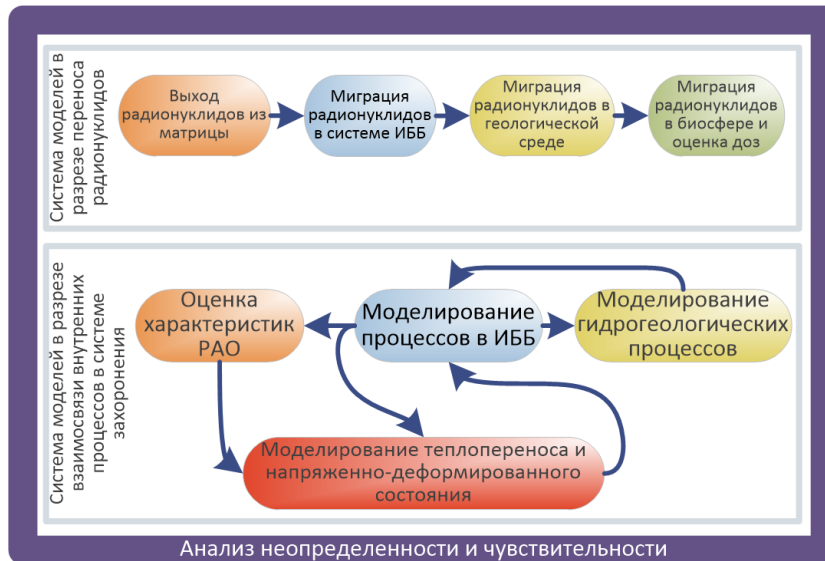
- много процессов, которые влияют на разных пространственных и временных масштабах.
- ограниченные экспериментальные возможности.

- Систематизация влияющих на безопасность факторов → сценарии

- Сценарии – постулируемые альтернативные варианты эволюции системы,
- каждый сценарий «разбирается» на модели

- Взаимосвязанные, но разные понятия:

- концептуальная модель=набор предположений
- численная модель=реализация концептуальной модели на компьютере
- расчетный код=специальное ПО
- результат расчета



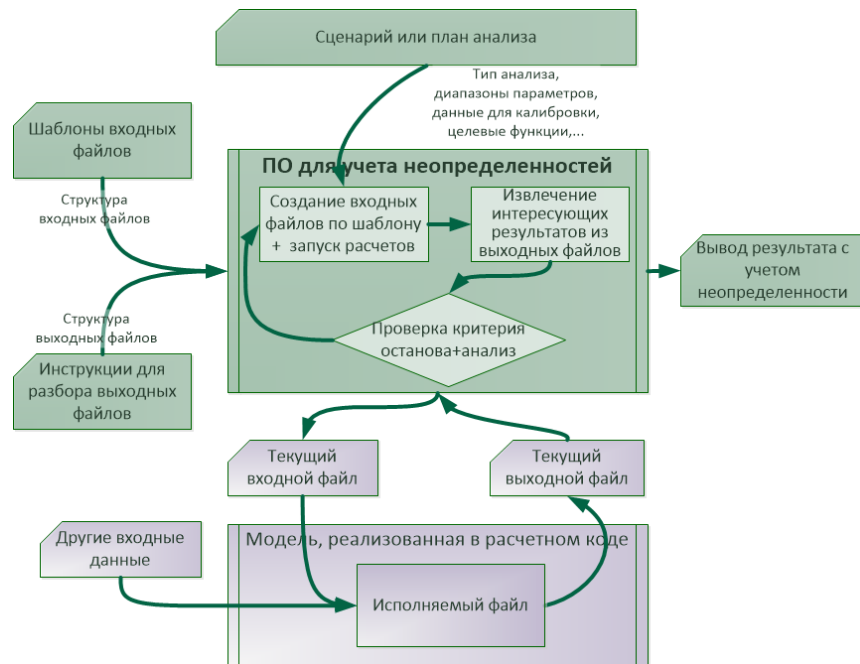
Многомасштабность в обосновании долговременной безопасности

Учет неопределенностей отдельной модели

- На уровне одной модели обращение с неопределенностями в целом отработано:
 - **Идентификация:** очерчивается набор параметров, которые известны не точно
 - **Численная оценка:** варьирование неопределенных входов + статистический анализ соответствующих выходов
 - **Значимость:** анализ чувствительности дает вклад каждого из параметров в неопределенность результата
 - **Уменьшение:** уточнение значимых параметров с помощью новых данных или калибровки



Как реализовано взаимодействие с «черным ящиком»



Практические сложности: форматы

Примеры форматов файлов моделей

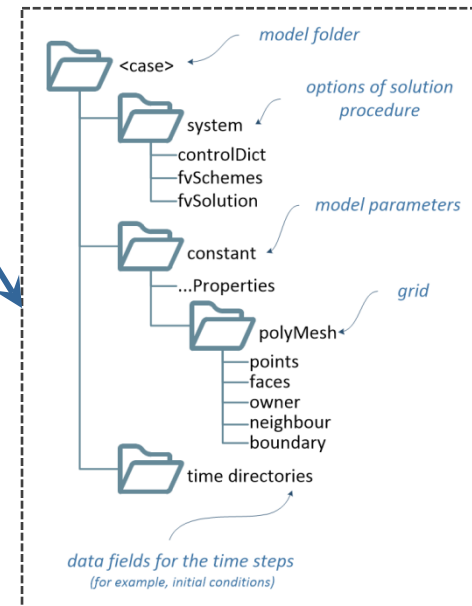
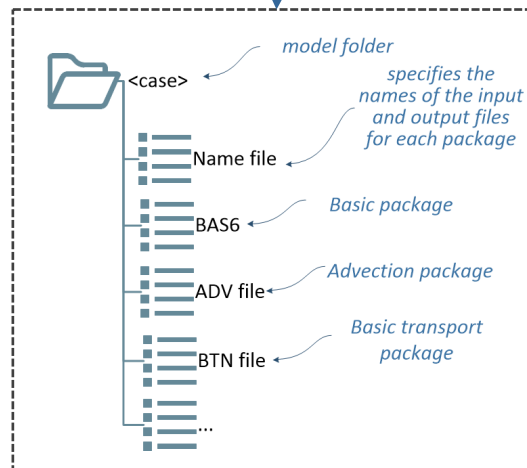
DATABASE	database for the simulations
SOLUTION	composition of an aqueous solution
...	
END	
REACTION	irreversible reactions
...	
END	
EXCHANGE	exchange assemblage composition
...	
END	
...	
USER PUNCH	Print user-defined quantities to the selected-output file
...	
END	

Один файл с ключевыми словами

"case name"	
"case description"	
AMBER_VERSION: version №	Case Information
GENERATED_BY: who	
DATE: text entry for date	
TIME: text entry for time	
CONTAMINANT name	
atomic_mass	Contaminants
"description"	
DECAY parent daughter rate	
name	
"description"	
COMPARTMENT name	Decays
"description"	
...	

Source Terms, Transfers, Submodels, Calculation Options, User Units, Export Files, etc.

Папки с множеством специальных файлов



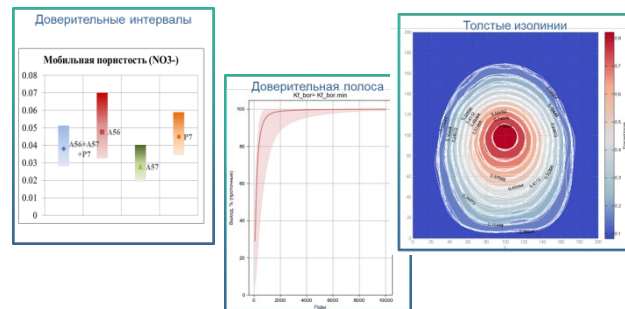
Практические сложности: размерность и разномасштабность

- Результаты моделирования: ► несколько значений
► временной ряд ► пространственное поле ► зависимость величин друг от друга:

- Даже визуализация разброса – разная.
- Анализ чувствительности: влияние параметров в каждой точке отдельно или интегрально?
- Калибровка: как сравнивать фактические и модельные данных (метрика, целевая функция)?

- Варьируемые параметры:

- в одном ли масштабе меняются? известны ли распределения? независимые или наоборот, заведомо скоррелированные?
- В зависимости от этого – дополнительные шаги обработки или даже совершенно другие методы анализа чувствительности или калибровки.



Разные визуализации разброса

Разные целевые функции

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^N (obs_i - sim_i)^2}{N}$$

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (obs_i - sim_i)^2}{N}}$$

$$R_{adj}^2 = (1 - R^2) \frac{N-1}{N-k}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (obs_i - \overline{obs})^2}{\sum_{i=1}^N (obs_i - \overline{obs_i})^2}, \quad \overline{obs} = \frac{\sum_{i=1}^N obs_i}{N}$$

Практические сложности: выбор метода

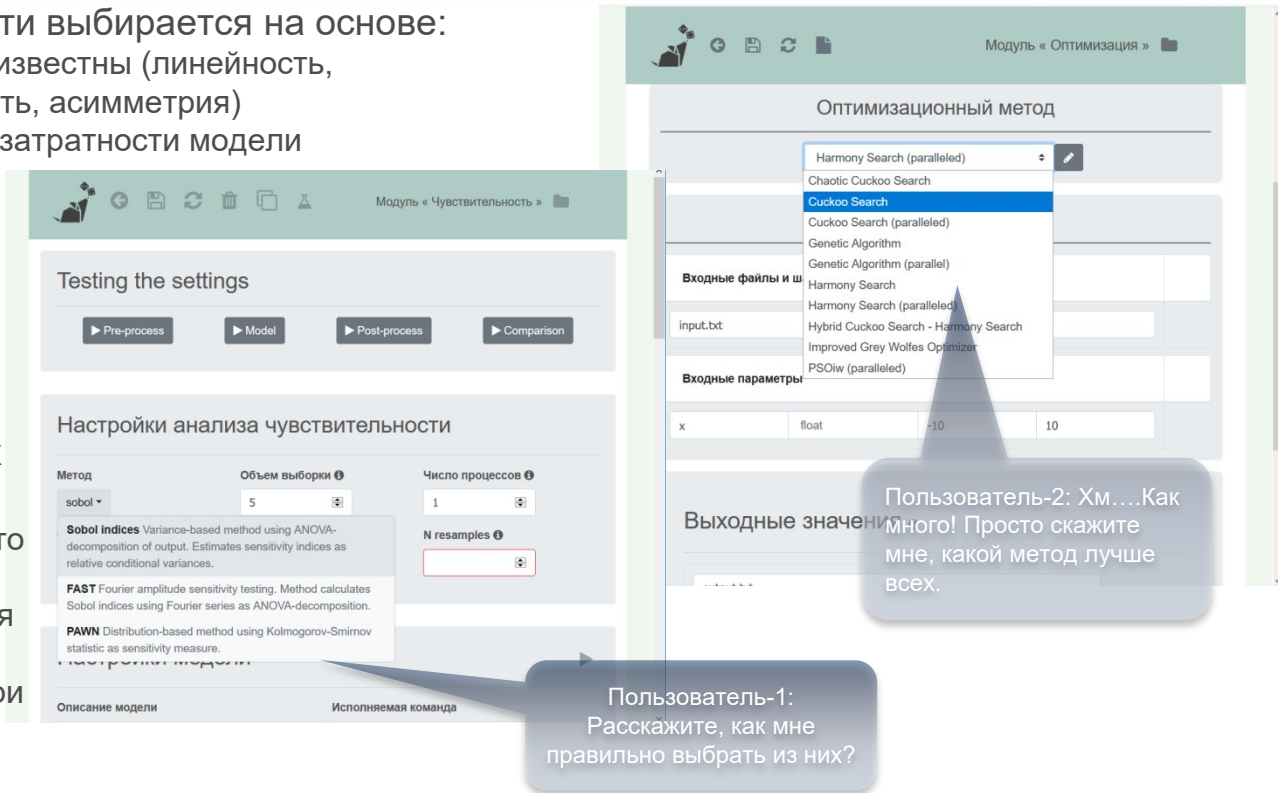
- Метод анализа чувствительности выбирается на основе:

- особенностей модели, если они известны (линейность, монотонность, мультимодальность, асимметрия)
- к сожалению – вычислительной затратности модели

- Выбор метода калибровки – почти всегда эмпирический: метод может быть лучше других только если он «специализирован» под конкретную задачу (“no free lunch”).

- Стратегии построения случайных выборок:

- для анализа чувствительности часто нужны спец. выборки, можно ли использовать те, что построены для оценки неопределенностей?
- можно ли мы увеличить выборку при необходимости?



The screenshot displays two side-by-side windows of a software application titled 'Сложности выбора метода'.

Left Window: 'Модуль « Чувствительность »'

- Testing the settings:** Includes buttons for 'Pre-process', 'Model', 'Post-process', and 'Comparison'.
- Настройки анализа чувствительности:**
 - Метод:** A dropdown menu currently showing 'sobel'.
 - Объем выборки:** A text input field containing the number '5'.
 - Число процессов:** A text input field containing the number '1'.
 - N resamples:** An empty text input field.
 - Descriptions:**
 - Sobel indices:** Variance-based method using ANOVA-decomposition of output. Estimates sensitivity indices as relative conditional variances.
 - FAST:** Fourier amplitude sensitivity testing. Method calculates Sobol indices using Fourier series as ANOVA-decomposition.
 - PAWN:** Distribution-based method using Kolmogorov-Smirnov statistic as sensitivity measure.
- Footer:** 'Описание модели' and 'Исполняемая команда'.

Right Window: 'Модуль « Оптимизация »'

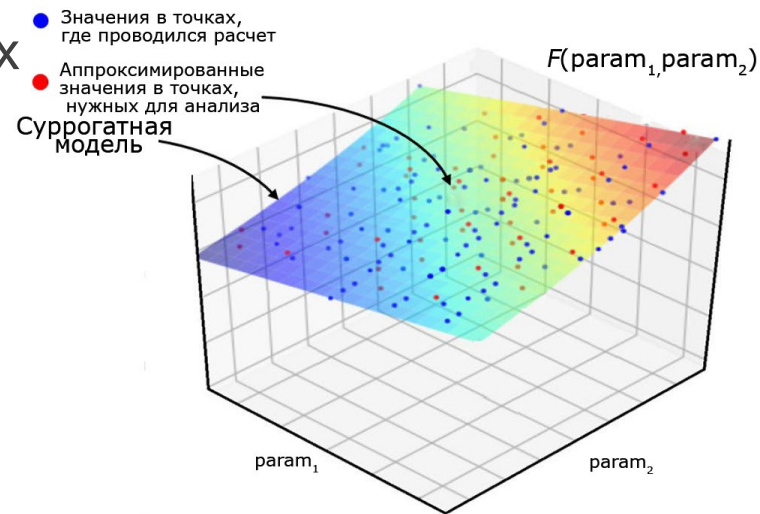
- Оптимизационный метод:** A dropdown menu is open, showing a list of optimization methods:
 - Harmony Search (paralleled)
 - Chaotic Cuckoo Search
 - Cuckoo Search** (highlighted)
 - Cuckoo Search (paralleled)
 - Genetic Algorithm
 - Genetic Algorithm (parallel)
 - Harmony Search
 - Harmony Search (paralleled)
 - Hybrid Cuckoo Search - Harmony Search
 - Improved Grey Wolfes Optimizer
 - PSOiw (paralleled)
- Входные файлы и ш:** A text input field containing 'input.txt'.
- Входные параметры:** A table with one row:

x	float	-10	10
---	-------	-----	----
- Выходные значения:** A section for output results.

Пользователь-2: Хм....Как много! Просто скажите мне, какой метод лучше всех.

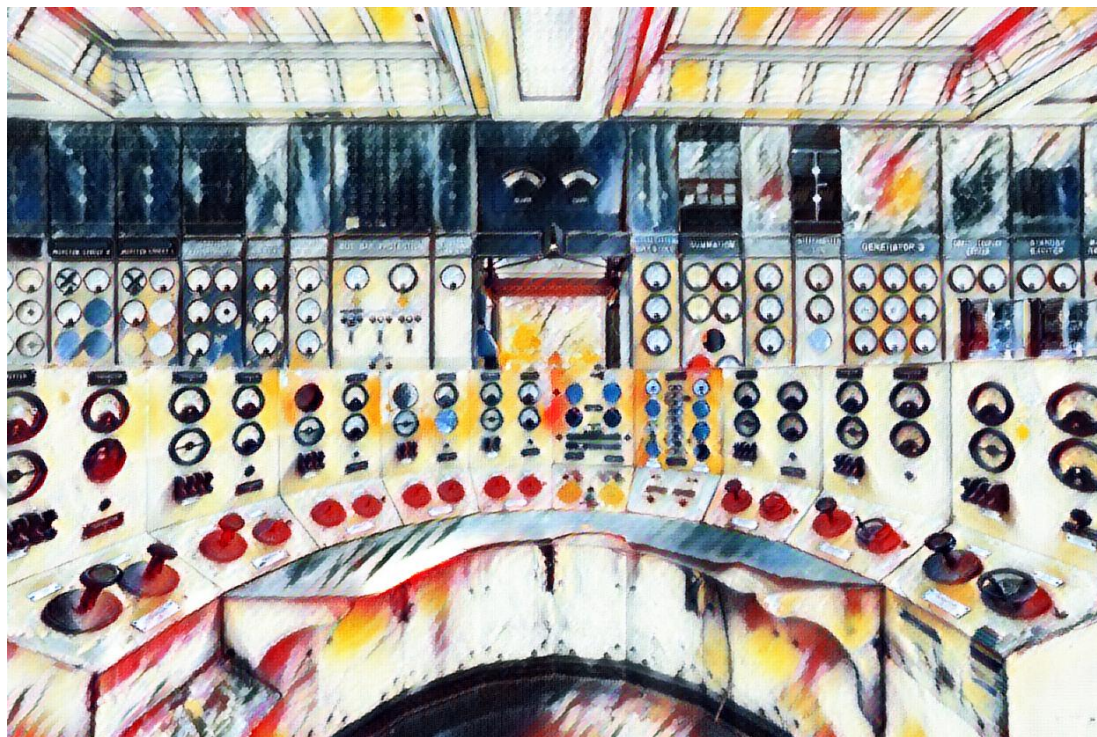
Пользователь-1: Расскажите, как мне правильно выбрать из них?

- Для любого представительного статистического анализа необходимы тысячи реализаций модели при различных комбинациях параметров.
- Выход: метамоделли (или суррогатные модели) – методы относительно быстрой аппроксимации вычислительно сложной численной модели по уже насчитанному набору данных.
- Аппроксимировать можно множеством простых и сложных методов со своими достоинствами и недостатками (снова – сравнивать и выбирать!).



Гипотетическое абсолютно универсальное ПО для учета неопределенностей

Пользователь-1: Не могли бы вы мне помочь выбрать правильные настройки? Только в этот раз, дальше я скопирую.

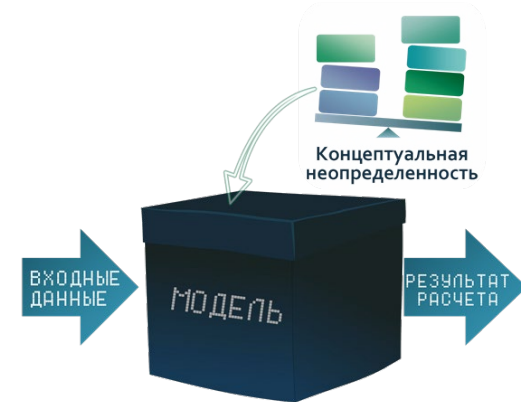


Пользователь-2: Хм....Это очень сложно. Наверное, мне проще откалибровать модель вручную.

Концептуальная неопределенность: что делать с альтернативными моделями

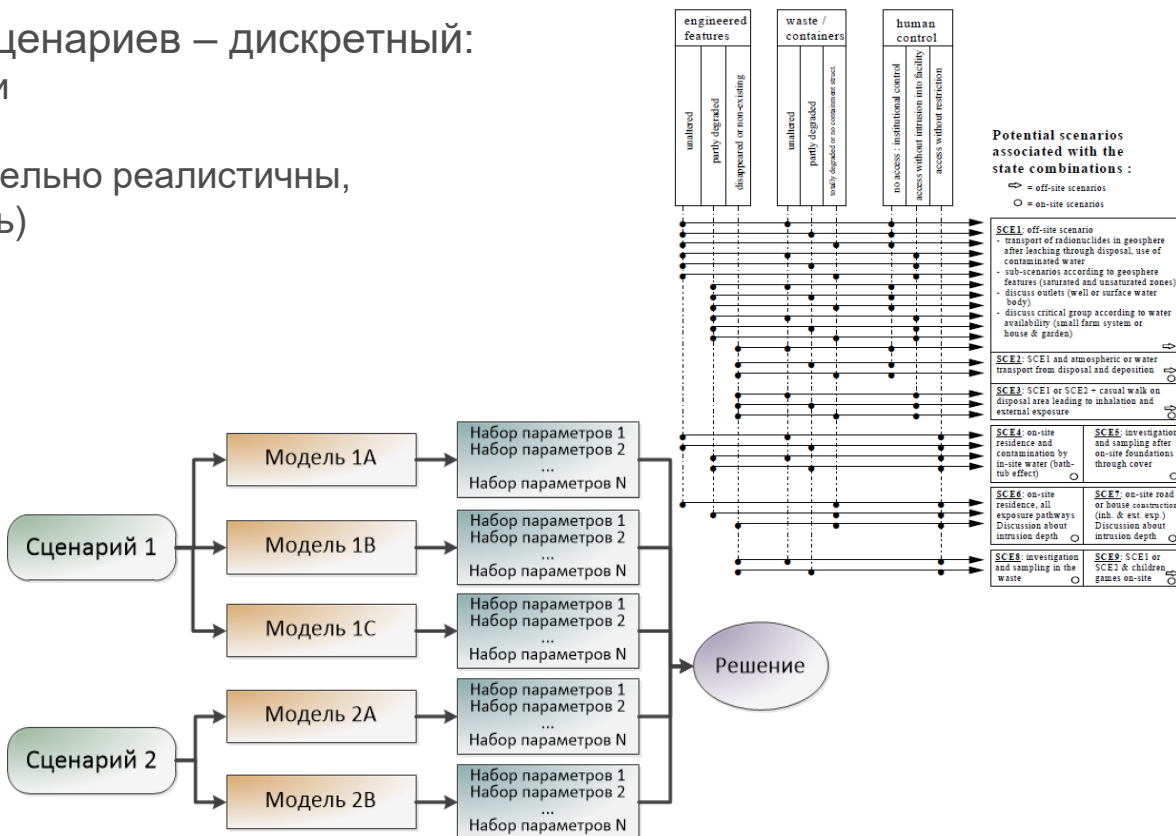


- Сценарии можно декомпозировать на модели процессов или подсистем множеством способов.
- Идентификация неопределенностей: явное рассмотрение набора альтернативных моделей.
- Уменьшение: аргументированное сужение выбора
 - Итеративный подход: на начальных этапах – более простые модели, а по мере накопления данных – более детальные
 - Анализ чувствительности и калибровка могут помочь
 - Численное выражение сложности модели численно при помощи информационных критериев (мультимодельный анализ)
 - Альтернатива – байесовское усреднение ансамбля моделей
- Сложности:
 - Заведомо неполный набор альтернатив – их может быть бесконечно много.
 - Разные модели из-за отличий и ограничений используемого ПО, а не на базе исчерпывающего анализа системы



Сценарные неопределенности

- Современный подход к анализу сценариев – дискретный:
 - сценарий нормальной эволюции
 - альтернативные сценарии
 - сценарии «что-если» (не обязательно реалистичны, демонстрируют робастность)
- Вероятностный подход пока затруднителен:
 - сгенерировать и просчитать все возможные сценарии невозможно.
 - практически нет информации о характерных вероятностях факторов (позволило бы адаптировать методы ВАБ)
 - попытки такую информацию каким-либо образом выявить продолжаются



- Анализ чувствительности и калибровка – не финальный шаг, а неотъемлемые части итеративной разработки модели, позволяют протестировать и улучшить модель.
- К сожалению, невозможно реализовать полностью универсальную программу для анализа неопределенностей – нужен компромисс.
- Вопросы обращения с неопределенностями нельзя полностью переложить на «экспертов по неопределенностям», это всегда совместная работа с разработчиками моделей.
- Базовые знания в этой области нужны практически всем, кто задействован в формировании ОДБ.

- The Safety Case and Safety Assessment for the Disposal of Radioactive Waste. Specific Safety Guide № SSG-23. IAEA Safety Standards Series / International Atomic Energy Agency. – Vienna, 2012.
- Vigfusson J. et al. European Pilot Study on The Regulatory Review of the Safety Case for Geological Disposal of Radioactive Waste. Case Study: Uncertainties and their Management – 2007.
- Линге И. И. и др. Расчетное обоснование долговременной безопасности и оптимизация решений по захоронению РАО и выводу из эксплуатации: тенденции, потребности, возможности //Радиоактивные отходы. – 2020. – №. 2. – С. 85-98. – DOI: 10.25283/2587-9707-2020-2-85-98.
- Janssen H. Monte-Carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence //Reliability Engineering & System Safety. – 2013. – Vol. 109. – P. 123-132. – DOI: 10.1016/j.ress.2012.08.003.
- Swiler L.P. et al. Sensitivity Analysis Comparisons on Geologic Case Studies: An International Collaboration: Technical Report SAND2021-11053. – Albuquerque, NM: Sandia National Laboratories, 2021. – 169 P.
- Hill M. C., Tiedeman C. R. Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty. – John Wiley & Sons, 2006.
- Svitelman, V. et al. Uncertainty analysis tool as part of safety assessment framework: model-independent or model-tailored? // EGU General Assembly 2020, Online. –2020. – P. 4485. – DOI: 10.5194/egusphere-egu2020-4485.
- Wolpert D. H., Macready W. G. No free lunch theorems for optimization //IEEE transactions on evolutionary computation. – 1997. – Vol. 1. – №. 1. – P. 67-82. – DOI: 10.1109/4235.585893.
- Савельева Е. А. и др. О выборе метода оценки чувствительности модели к ее параметрам при обосновании безопасности пунктов захоронения РАО //Радиоактивные отходы. – 2021. – №. 2. – С. 73-89. – DOI: 10.25283/2587-9707-2021-2-73-89.
- Kamal A. et al. Recent advances and challenges in uncertainty visualization: a survey //Journal of Visualization. – 2021. – Vol. 24. – P. 861–890. – DOI: 10.1007/s12650-021-00755-1.
- Alizadeh R., Allen J. K., Mistree F. Managing computational complexity using surrogate models: a critical review //Research in Engineering Design. – 2020. – Vol. 31. – №. 3. – P. 275-298. – DOI: 10.1007/s00163-020-00336-7.
- Saveleva E. et al. Sensitivity analysis and model calibration as a part of the model development process in radioactive waste disposal safety assessment //Reliability Engineering & System Safety. – 2021. – Vol. 210. – P. 107521. – DOI: 10.1016/j.ress.2021.107521
- Höge M., Wöhling T., Nowak W. A primer for model selection: The decisive role of model complexity //Water Resources Research. – 2018. – Vol. 54. – №. 3. – P. 1688-1715. – DOI: 10.1002/2017WR021902.
- Höge M., Guthke A., Nowak W. Bayesian Model Weighting: The Many Faces of Model Averaging //Water. – 2020. – Vol. 12. – №. 2. – P. 309. – DOI: 10.3390/w12020309.
- Finsterle S. et al. Conceptual uncertainties in modelling the interaction between engineered and natural barriers of nuclear waste repositories in crystalline rocks //Geological Society, London, Special Publications. – 2019. – Vol. 482. – №. 1. – P. 261-283. – DOI: 10.1144/SP482.12.
- Tosoni E. et al. Comprehensiveness of scenarios in the safety assessment of nuclear waste repositories //Reliability Engineering & System Safety. – 2019. – Vol. 188. – P. 561-573. – DOI: 10.1016/j.ress.2019.04.012.