

ОБРАЩЕНИЕ С НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЯМИ В ЗАДАЧАХ РАСЧЕТНОГО ОБОСНОВАНИЯ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ БЕЗОПАСНОСТИ

Е. А. Савельева, В. С. Свительман

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 15 августа 2022 г.

Учет неопределенностей – ключевой элемент процесса формирования доверия к численным оценкам долговременной безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов. Данная статья представляет обзор подходов к обращению с неопределенностями на разных этапах процесса обоснования долговременной безопасности с акцентом на анализ и уменьшение неопределенностей на уровне отдельно взятой численной модели.

Ключевые слова: обоснование безопасности, расчётные коды, численное моделирование, анализ неопределенностей, анализ чувствительности, оптимизация параметров, радиоактивные отходы.

Введение

Атомная энергетика при безопасном обращении почти не оказывает воздействия на экосистемы. Однако если в процессе эксплуатации объектов отрасли безопасное обращение с ядерными материалами можно организовать и проконтролировать, то обеспечить такой контроль на весь период потенциальной опасности радиоактивных отходов не представляется возможным. Поэтому в свете принципа невозложения бремени на будущие поколения возникает задача обоснования долговременной безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО) [1].

В основе безопасности ПЗРО лежит идея многобарьерной защиты: удержание радионуклидов и замедление их миграции обеспечивается как вмещающей средой, так и множественными

элементами системы инженерных барьеров. Соответственно, обоснование долговременной безопасности представляет собой всесторонний анализ выполнения природными и инженерными барьерами их функций безопасности, а также оценку влияния ПЗРО на окружающую среду на протяжении длительного времени [2].

Обращение с неопределенностями является неотъемлемой частью такого анализа [1, 2] как из-за непосредственно многообразия релевантных явлений, так и ввиду необходимости оценить их влияние на различных пространственных и временных масштабах. В данной работе рассматриваются аспекты учета неопределенности в процессе разработки и использования численных моделей для оценки и обоснования безопасности.

Разнообразие источников неопределенностей

Неопределенности, возникающие при решении задачи прогнозирования поведения сложной природно-техногенной системы, период потенциальной опасности которой может составлять десятки тысяч лет, многообразны и по своему происхождению, и по подходам к их учету.

Все факторы (и известные, и неизвестные), которые могут повлиять на эволюцию пункта захоронения и, соответственно, должны быть учтены при обосновании безопасности, традиционно разделяют на особенности, события и процессы [3, 4]. Соответствующие им источники неопределенностей тоже будут отличаться [5].

Так, неопределенности в характеристике особенностей тех или иных составляющих системы могут быть связаны либо с недостаточностью или неточностью измерений, либо с естественной вариабельностью измеряемых свойств.

Неопределенности в описании процессов обусловлены тем, что любая модель, описывающая сложную многокомпонентную систему, является упрощением, причем только одним из множества вариантов упрощений, для выбора из которых необходимо детальное понимание того, как взаимодействуют элементы этой системы, и соответствующие данные.

Учет неопределенностей, связанных с событиями, нетривиален потому, что в целом выбор площадки и проектирование системы инженерных барьеров осуществляются таким образом, чтобы событий было как можно меньше, но обратная сторона этого — сложность прогноза редких событий.

В качестве еще одного взгляда на систематизацию неопределенностей имеет смысл упомянуть дихотомию эпистемических и алеаторных неопределенностей. Граница между ними не всегда четкая и опирается сразу на ряд признаков. Так, те из них, которые связаны с недостатком информации о каком-либо свойстве моделируемого явления, относят к эпистемическим. Полагается, что такие неопределенности характеризуются (нам известно, какую именно величину мы не знаем), измеримы (известно, насколько мы ее не знаем) и в конечном счете могут быть уменьшены (например, за счет более точных измерений) [6]. Им противопоставляют алеаторные неопределенности, которые вытекают из случайности (например, система трещин в горной породе) или непредсказуемости явления как такового (например, действия человека через несколько сотен лет).

В свете вышесказанного неудивительно, что под термином «обращение с неопределенностями» в контексте различных этапов и аспектов процесса обоснования безопасности часто понимают очень разные действия. Тем не менее, если попытаться их обобщить с точки зрения необходимости учета неопределенностей как ключевого элемента процесса формирования доверия [2, 7] к получаемым оценкам безопасности, то можно выделить определенные шаги.

В любом случае самый первый шаг в работе с неопределенностями — это их идентификация. После того как источники неопределенностей очерчены, для каждого из них необходимо ответить на несколько основных вопросов: 1) могут ли соответствующие неопределенности быть оценены количественно; 2) насколько они существенны; 3) можно ли их избежать или по крайней мере уменьшить [5]. Полученные ответы позволяют продемонстрировать учет неопределенностей каждого из рассмотренных факторов в системе аргументов обоснования безопасности, что необходимо в соответствии как с российскими нормативными требованиями, так и с международными практиками.

Численное моделирование как центральный элемент обоснования долговременной безопасности

В силу уже упомянутых разнообразия и многомасштабности релевантных процессов основным инструментом обоснования безопасности систем захоронения РАО является моделирование. Даже результаты полномасштабных экспериментов, длящихся несколько десятилетий, не могут дать исчерпывающую для оценки безопасности информацию, поэтому на основе фактических данных строятся разнообразные численные модели [8, 9].

В конечном счете, для того чтобы полученные оценки безопасности могли считаться достоверными, эти модели должны охватить все разнообразие комбинаций влияющих на безопасность факторов. В качестве инструмента систематизации применяются сценарии — постулируемые альтернативные варианты эволюции системы, каждый из которых затем может быть декомпозирован на набор сначала концептуальных, а затем соответствующих численных моделей [3].

Здесь стоит разграничить несколько тесно переплетенных и потому иногда вызывающих путаницу понятий: концептуальная модель, численная модель, расчетный код и результат расчета [8]. Под концептуальной моделью, как правило, понимается сформулированный

набор предположений о моделируемой подсистеме (в том числе учет отдельных факторов или, наоборот, пренебрежение ими, тип начальных и граничных условий и т. д.). Численная модель — это реализация концептуальной модели в расчетном коде, т. е. специализированном программном средстве. При этом для одной и той же модели может быть проведен ряд отличающихся численных расчетов (например, с различными значениями параметров, временным шагом или даже способами численного решения заложенных в модель дифференциальных уравнений).

В контексте данной работы явно выделить составляющие численной оценки безопасности необходимо еще и потому, что на соответствующих им уровнях анализа будут отличаться и подходы к обращению с неопределенностями (рис. 1).

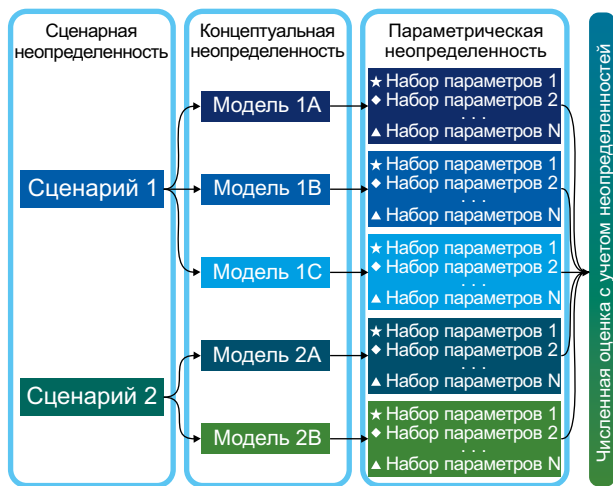


Рис. 1. Разные уровни обращения с неопределенностями

Так, неоднозначность возможной эволюции системы захоронения в целом формализуется в виде набора сценариев, в каждом из которых рассматривается какой-то конкретный вариант предполагаемого исхода из имеющейся информации развития событий. При этом понятно, что любой из рассматриваемых сценариев эволюции многокомпонентной природно-техногенной системы можно декомпозировать на модели отдельных процессов или подсистем далеко не единственным образом [3] — это уровень концептуальных неопределенностей. И, наконец, для каждой из моделей необходимо проработать неопределенности, связанные с параметрами: какие-то из параметров могут быть общими для нескольких моделей или в рамках различных сценариев, какие-то специфическими для конкретной модели, какие-то могут быть известны достаточно точно для получения

достоверных оценок безопасности, для каких-то потребуется дополнительная информация. На этом уровне шаги цепочки обращения с неопределенностями (идентификация — численная оценка — оценки значимости — уменьшение) наиболее прозрачны и проработаны, поэтому мы остановимся на них подробнее.

Обращение с неопределенностями для отдельно взятой модели

На уровне отдельно взятой численной модели шагом идентификации неопределенностей будет процесс параметризации, когда разработчик модели очерчивает набор модельных переменных и выделяет те из них, значения которых известны не точно.

Три последующих шага так или иначе содержат: варьирование выявленных неопределенных параметров случайным образом, многократный запуск расчетной модели, реализованной в некотором программном средстве, с различными комбинациями этих параметров, и, наконец, анализ соответствующих результатов расчетов.

Здесь стоит отметить, что исторически подходы, в основе которых лежит стохастическое варьирование параметров, часто объединялись словосочетанием «метод Монте-Карло», но в силу многообразия научных областей, в которых такой подход нашел применение, обобщенное название часто теряет смысл и вытесняется (или как минимум дополняется) конкретными названиями определенных групп методов или шагов анализа.

Оценка неопределенности

Общая канва этапа оценки неопределенности изображена на рис. 2. Численная модель рассматривается как «черный ящик», у которого можно изменять переменные на входе и анализировать соответствующие им значения на выходе. Для неопределенных параметров на основе экспертных оценок, справочных данных или результатов аналогичных исследований задаются диапазоны варьирования. Затем



Рис. 2. Оценка неопределенности численной модели

в заданных диапазонах генерируется случайная выборка возможных комбинаций параметров, ее часто представляют в виде набора точек в многомерном пространстве. После того, как для всех построенных комбинаций параметров выполнен расчет, производится статистический анализ полученной выборки результатов моделирования. В зависимости от конкретной задачи описанная простая схема может обогатиться множеством нюансов. Так, например, может понадобиться учесть то, что для одних параметров диапазон подразумевает линейный масштаб, а для других — логарифмический. Кроме того, иногда у эксперта могут быть предположения о функциях распределения отдельных параметров, которые также необходимо учесть при генерации выборки.

Анализ чувствительности

Ответами на весь спектр вопросов о связи неопределенности результата моделирования с влиянием конкретного параметра занимается анализ чувствительности. Его общая схема приведена на рис. 3: как и при оценке неопределенностей, генерируется выборка наборов входных параметров и вычисляются соответствующие выходные величины, но затем эти две выборки анализируются совместно.



Рис. 3. Анализ чувствительности численной модели

Анализ чувствительности — активно развивающаяся область исследований, и на первый взгляд разнообразие существующих подходов ошеломляет. Их ключевое различие в том, какой математической функцией будет описана степень влияния неопределенности параметра на неопределенность результата. Например, методы Пирсона и Спирмена используют для этого корреляции выходных значений с входными параметрами, метод Соболя оценивает вклад параметра в вариацию результата, метод PAWN — соотношение безусловной и условной функций распределения выходной величины. Отдельные

методы могут лучше подходить для ответов на различные вопросы, связанные с влиянием параметров на неопределенность результата, и могут быть в разной степени применимы в зависимости от свойств модели [10, 11].

Однако существенная общая черта большинства современных алгоритмов оценки чувствительности — это то, что они относятся к классу методов глобального анализа чувствительности. Слово «глобальный» означает, что при построении случайной выборки все параметры варьируются одновременно — в отличие от локальных методов, в которых параметры варьируются по одному вокруг реперного значения. Понятно, что в силу экспоненциального увеличения объема параметрического пространства с увеличением количества параметров (так называемого «проклятия размерности»), уже даже для нескольких параметров локальный подход приводит к потере существенной доли информации об их совместном влиянии. По этому несмотря на то, что локальный анализ чувствительности в силу своей кажущейся простоты и понятности все еще очень распространен (как правило, в больших многофункциональных программных пакетах, где анализ чувствительности — одна из необязательных опций), важно понимать его ограничения и по возможности использовать глобальные методы [12].

Оптимизация параметров

Шагом уменьшения неопределенностей на уровне отдельной модели является уточнение параметров. Инструментом для этого (помимо непосредственного получения новой информации путем дополнительных экспериментальных или полевых исследований) часто выступает калибровка (или оптимизация параметров) модели, в ходе которой значения неизвестных входных параметров подбираются так, чтобы модельные выходные величины наилучшим образом совпали с имеющимися фактическими данными о них [13]. Схематически это изображено на рис. 4.

Ключевым отличием калибровки от процессов анализа неопределенности и чувствительности является то, что вся выборка комбинаций параметров не генерируется заранее. Этот процесс осуществляется итерационно, и набор параметров для расчета на текущей итерации определяется полученными ранее результатами. На каждой итерации после завершения модельного расчета для одной или нескольких текущих комбинаций параметров вычисляется целевая функция, характеризующая отличие результата моделирования от соответствующего



Перемещение в параметрическом пространстве:
поиск минимума целевой функции

Рис. 4. Оптимизация параметров численной модели

ему заранее заданного значения (чаще всего это экспериментальные или полевые данные, но могут быть и величины, полученные с помощью аналитических оценок или других моделей). Наилучшее совпадение модельных и фактических данных означает минимум целевой функции, соответственно, исходя из того, как меняется целевая функция, принимается решение о том, куда переместиться дальше в параметрическом пространстве (т. е. какие комбинации параметров проверить) на следующей итерации. Процесс повторяется до тех пор, пока не будут выполнены критерии останова: например, достигнута желаемая точность или превышен вычислительный бюджет.

Стратегии перемещений в параметрическом пространстве в процессе поиска минимума целевой функции определяются конкретным оптимизационным алгоритмом, и они не менее разнообразны, чем методы анализа чувствительности. Исторически первой попыткой [14] придумать более эффективные методы, чем простой перебор, стали подходы, основанные на движении вдоль градиента оптимизируемой функции (например, градиентный спуск [15] или алгоритм Левенберга-Марквардта [16]). Эти методы являются быстрыми и эффективными, легко справляются с большим количеством параметров и обычно не требуют специальной настройки. К сожалению, с их помощью можно найти только локальный (ближайший к точке начального приближения) оптимум, и они неприменимы для решения недифференцируемых задач или задач с несколькими оптимумами. Следующим поколением оптимизационных алгоритмов стали методы, не требующие вычисления производных (например, симплекс-методы [17], основанные на переборе вершин выпуклого многогранника в многомерном

пространстве). Они снимали требование дифференцируемости, но также были локальными. Попытки преодолеть локальность поиска с помощью множественных запусков локальных методов из разных случайных точек в параметрическом пространстве постепенно породили отдельный класс псевдослучайных методов — так называемые эвристические алгоритмы [18]. Основная идея такого подхода к оптимизации заключается в том, что стохастическое поведение многих природных систем успешно решает возникающие на их пути оптимизационные задачи, и идеализированные стратегии такого поведения могут быть воспроизведены в алгоритмах поиска минимума или максимума для неизвестной недифференцируемой функции с несколькими локальными оптимумами. Формулировка последовательности действий для такого алгоритма обычно опирается на метафору — сопоставление терминов оптимизационной задачи (целевой функции и перебираемых в параметрическом пространстве возможных решений) и идеализированного описания различных природных стратегий и процессов. Основным недостатком всего класса этих алгоритмов заключается в том, что универсальной оптимизационной стратегии не существует [19], и один эвристический метод может превзойти другой, только если он специализирован под конкретную задачу, т. е. каким-либо образом «знает» ее особенности. На практике это означает необходимость экспертного выбора подходящего метода для каждой новой задачи.

Практические сложности

Несмотря на теоретическую простоту перечисленных шагов и на то, что реализующие их программные средства зачастую позиционируются как моделенезависимые, практическая реализация не всегда так однозначна и часто требует ощутимой адаптации общих подходов для каждого конкретного случая [20].

Далеко не исчерпывающий список таких практических отличий начинается с разнообразия форматов — любой анализ неопределенностей начинается с разбора формата входных и выходных данных, специфичного для конкретного расчетного кода, в котором реализована модель. Необходимые для работы с неопределенностями входы и выходы модели могут находиться в одном или нескольких текстовых или бинарных файлах, а иногда и в удаленной базе данных.

Следующая практическая сложность — это размерность анализируемого результата расчета и, соответственно, численное и визуальное представление его неопределенности. Даже для

одномерной величины варианты не ограничиваются изображением его разброса, а на выходе модели могут быть и временной ряд, и зависимость одной величины от другой, и даже пространственное поле. Понятно, что этот вопрос возникает практически во всех научных областях и активно обсуждается в публикациях, но универсального ответа на него нет [21–24]. Аспекты выбора визуализаций, которые бы помогали прокоммуницировать полученные оценки безопасности, продемонстрировать те или иные аргументы обоснования безопасности, могли бы послужить инструментом поддержки принятия решений, заслуживают отдельного обзора. При переходе к анализу чувствительности возникнет вопрос о том, всегда ли оценивать влияние параметров на результат в каждой точке отдельно или в случае многомерных результатов достаточно ввести какую-то интегральную характеристику и оценивать влияние на нее. Аналогично для калибровки необходимо задать метрику сравнения фактических и модельных данных.

Также возникает группа вопросов уже непосредственно о варьируемых входных параметрах: в одном ли масштабе они меняются и известно ли что-нибудь об их распределениях, можно ли считать их независимыми или, наоборот, заведомо известно, что они меняются скоррелированно. В зависимости от ответов на эти вопросы могут понадобиться как дополнительные шаги обработки, так и совершенно другие методы.

Еще одна точка принятия решений — какую стратегию построения случайной выборки использовать. В первую очередь этот вопрос возникает в контексте шага оценки неопределенностей [25] в связи с необходимостью как можно более равномерно исследовать параметрическое пространство за насколько это возможно меньшее количество реализаций. Аналогичные вопросы, хотя и несколько под другим углом, возникают и в анализе чувствительности и оптимизационных методах. Так, для ряда алгоритмов, реализующих методы анализа чувствительности, необходима выборка, обладающая определенными свойствами. Большая часть оптимизационных алгоритмов также содержит шаги случайного розыгрыша параметров, которые в силу конечности вычислительных ресурсов хотелось бы сделать более эффективными. В любом случае, было бы логично использовать на этапах анализа чувствительности и оптимизации параметров в том числе и реализации, уже сгенерированные на этапе оценки неопределенности, а значит, они должны быть совместимы.

Проблема вычислительных затрат в целом для задач учета неопределенностей стоит довольно остро, так как для любого хоть сколько-нибудь представительного статистического анализа необходимы тысячи реализаций модели при различных комбинациях параметров. В этой связи активно развиваются подходы метамоделирования (или суррогатного моделирования) — методы относительно быстрой аппроксимации вычислительно сложной численной модели [10, 26]. Для этого может быть использовано множество подходов из различных областей математики [26] со своими достоинствами и недостатками, а значит снова встает вопрос выбора.

Концептуальные и сценарные неопределенности

Следующий уровень обращения с неопределенностями связан с выбором концептуальной модели. На этом уровне явное рассмотрение набора альтернативных моделей — это шаг идентификации неопределенностей, а соответствующее их уменьшение — аргументированное сужение выбора.

Анализ чувствительности и калибровка в определенной степени могут быть полезны и здесь [27], тем не менее основное соображение насчет выбора модели, диктуемое и здравым смыслом, и руководствами по безопасности, состоит в использовании итеративного и поэтапного подхода. Это значит, что на начальных стадиях работы над обоснованием долговременной безопасности предпочтительны более простые модели, а по мере накопления релевантной информации их следует развивать и детализировать. Способы выражения сложности модели численно (и, соответственно, сравнимо) при помощи информационных критериев развиваются в подходе мультимодельного анализа [28]. Также заслуживает упоминания Байесовское усреднение [29] — подход, в котором, наоборот, не выбирается единственно верная модель, а оценка интересующей величины получается на основе всего ансамбля альтернативных моделей. Аналогичные методы применяют для анализа чувствительности одновременно к параметрам и к концептуальной структуре модели [30].

К вышесказанному следует добавить, что шаг численной оценки для концептуальной неопределенности остается проблематичным, даже если доступен для сравнения набор альтернативных концептуализаций [31]. Понятно, что пространство возможных моделей по сути бесконечно, соответственно, любой рассматриваемый набор альтернатив вряд ли является

полным. Однако одна из основных сложностей состоит скорее в том, что разные концептуальные модели чаще возникают на основе отличий и ограничений соответствующих программных средств, а не на базе исчерпывающего анализа релевантных факторов.

Еще менее тривиально обстоят дела со сценарными неопределенностями. Изначально применение сценариев для анализа долговременной безопасности направлено на обеспечение полноты учета всех релевантных особенностей, событий и процессов или, по крайней мере, на приближение к этому.

Тем не менее до сих пор основным способом обращения с такими неопределенностями является формулирование одного основного сценария (сценария нормальной эволюции), плюс набора альтернативных сценариев и сценариев «что-если» [3, 8, 32]. При этом сценарии «что-если», как правило, нацелены скорее на демонстрацию робастности какой-то из подсистем, а не на рассмотрение реалистичных вариантов эволюции системы [5].

Практические сложности всеобъемлющего анализа возможных сценариев обусловлены несколькими факторами. Например, получение численных оценок сценарных неопределенностей осложняется тем, что невозможно на практике сгенерировать и просчитать все возможные сценарии. Также существенную роль играет отсутствие информации о характерных вероятностях большинства факторов — ее наличие позволило бы адаптировать многие методы вероятностного анализа безопасности, и поэтому в этом направлении исследования продолжают [33, 34].

Заключение

Целью данной статьи было в одном тексте и единых терминах очертить шаги обращения с неопределенностями в процессе получения численных оценок долговременной безопасности. В силу многогранности темы в таком кратком обзоре невозможно объяснить каждый из методов и подходов, поэтому многие аспекты упоминаются в статье только для того, чтобы заинтересовавшийся читатель знал, что они существуют и как их можно найти.

Подытожить все вышеизложенное хотелось бы несколькими общими соображениями. Первое и основное: несмотря на широко признанный тезис о том, что обоснование безопасности в целом и моделирование в частности по своей сути итеративны, учет неопределенностей зачастую ошибочно рассматривается как один из финальных и не всегда обязательных этапов

численного моделирования. И в рамках данного обзора хотелось бы специально заострить внимание на том, что такие шаги, как визуализация неопределенностей, анализ чувствительности и оптимизация параметров — не завершающие стадии, а неотделимые составляющие процесса разработки моделей, интерпретация которых позволяет протестировать те или иные гипотезы и понять, как модель может быть улучшена.

Еще один момент — это то, что универсальных инструментов для анализа и уменьшения неопределенностей, к сожалению, не бывает. В каких-то случаях необходимо выбирать подходящий метод, и для этого необходима дополнительная информация о модели или исходных данных. Также довольно часто выбор инструмента анализа — это компромисс между тем, что нужно применить, и тем, что можно себе позволить с точки зрения вычислительных затрат. Кроме того, в каких-то случаях результат интерпретируется не так однозначно, как в теории, — так или иначе приходится приоткрывать «черный ящик», в виде которого традиционно изображается модель.

Из этого следует, что вопросы обращения с неопределенностями нельзя полностью переложить на отдельных «экспертов в области неопределенностей», это всегда совместная работа с разработчиками моделей, то есть базовые знания в этой сфере нужны практически всем задействованным в формировании обоснования долговременной безопасности специалистам.

Литература

1. The Environmental and Ethical Basis of Geological Disposal of Long-lived Radioactive Wastes: A Collective Opinion of the Radioactive Waste Management Committee of the Nuclear Energy Agency. Paris, France, OECD Nuclear Energy Agency, 1995. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_34631.
2. The Safety Case and Safety Assessment for the Disposal of Radioactive Waste : Specific Safety Guide No SSG-23 : IAEA Safety Standards Series. Vienna, Austria, 2012. — URL: <https://www.iaea.org/publications/8790/the-safety-case-and-safety-assessment-for-the-disposal-of-radioactive-waste>.
3. Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities: Review and enhancement of safety assessment approaches and tools. Vienna, Austria, 2004. — URL: <https://www.iaea.org/publications/6971/safety-assessment-methodologies-for-near-surface-disposal-facilities>.
4. Radioactive Waste Management and Decommissioning. International Features, Events and Processes (IFEP) List for the Deep Geological Disposal of

- Radioactive Waste. Version 3 : NEA/RWM/R(2019)1. Paris, France: OECD Nuclear Energy Agency, 2019. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_19906.
5. *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.
 6. *Bevan L. D.* The ambiguities of uncertainty: A review of uncertainty frameworks relevant to the assessment of environmental change // *Futures*. 2022. Vol. 137. 102919.
 7. Confidence in the long-term safety of deep geological repositories: Its development and communication. Paris, France: OECD Nuclear Energy Agency, 1999. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_13274.
 8. Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste: Outcomes of the NEA MeSA Initiative : Radioactive Waste Management; NEA No. 6923. Paris, France, OECD Nuclear Energy Agency, 2012. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_14608.
 9. *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 (11). С. 85–98. DOI: 10.25283/2587-9707-2020-2-85-98.
 10. *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.
 11. *Савельева Е. А. и др.* О выборе метода оценки чувствительности модели к ее параметрам при обосновании безопасности пунктов захоронения РАО // *Радиоактивные отходы*. 2021. № 2 (15). С. 73–89. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-2-73-89.
 12. *Saltelli A. et al.* Why so many published sensitivity analyses are false: A systematic review of sensitivity analysis practices // *Environmental modelling & software*. 2019. Vol. 114. Pp. 29–39.
 13. *Hill M. C., Tiedeman C. R.* Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty. John Wiley & Sons, 2006.
 14. *Venter G.* Review of optimization techniques / in *Encyclopedia of aerospace engineering*. Ed. R. Blockley, W. Shyy. John Wiley & Sons, 2010. DOI: 10.1002/9780470686652.eae495.
 15. *Ruder S.* An overview of gradient descent optimization algorithms // *arXiv preprint arXiv:1609.04747*. 2016.
 16. *Moré J. J.* The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory // *Numerical analysis*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1978. Pp. 105–116.
 17. *Xiong Q., Jutan A.* Continuous optimization using a dynamic simplex method // *Chemical Engineering Science*. 2003. Vol. 58. No. 16. Pp. 3817–3828.
 18. *Yang X. S.* Nature-inspired optimization algorithms. Academic Press, 2020.
 19. *Wolpert D. H., Macready W. G.* No free lunch theorems for optimization // *IEEE transactions on evolutionary computation*. 1997. Vol. 1. No. 1. Pp. 67–82. DOI: 10.1109/4235.585893.
 20. *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.
 21. *Wilke C. O.* Fundamentals of data visualization: a primer on making informative and compelling figures. O'Reilly Media, 2019.
 22. *Padilla L., Kay M., Hullman J.* Uncertainty visualization. In: *Piegorsch W. W. et al. (ed.). Computational Statistics in Data Science*. John Wiley & Sons, 2022.
 23. *Kehrer J., Hauser H.* Visualization and visual analysis of multifaceted scientific data: A survey // *IEEE transactions on visualization and computer graphics*. 2012. Vol. 19. No. 3. Pp. 495–513.
 24. *Kamal A. et al.* Recent advances and challenges in uncertainty visualization: a survey // *Journal of Visualization*. 2021. Vol. 24. Pp. 861–890. DOI: 10.1007/s12650-021-00755-1.
 25. *Janssen H.* Monte-Carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence // *Reliability Engineering & System Safety*. 2013. Vol. 109. Pp. 123–132. DOI: 10.1016/j.res.2012.08.003.
 26. *Alizadeh R., Allen J. K., Mistree F.* Managing computational complexity using surrogate models: a critical review // *Research in Engineering Design*. 2020. Vol. 31. № 3. Pp. 275–298. DOI: 10.1007/s00163-020-00336-7.
 27. *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. Pp. 107521. DOI: 10.1016/j.res.2021.107521.
 28. *Höge M., Wöhling T., Nowak W.* A primer for model selection: The decisive role of model complexity // *Water Resources Research*. 2018. Vol. 54. No. 3. Pp. 1688–1715. DOI: 10.1002/2017WR021902.
 29. *Höge M., Guthke A., Nowak W.* Bayesian Model Weighting: The Many Faces of Model Averaging // *Water*. 2020. Vol. 12. No. 2. P. 309. DOI: 10.3390/w12020309.
 30. *Mai J., Craig J. R., Tolson B. A.* Simultaneously determining global sensitivities of model parameters and model structure // *Hydrology and Earth System Sciences*. 2020. Vol. 24. No. 12. Pp. 5835–5858.

31. 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. No. 1. Pp. 261–283. DOI: 10.1144/SP482.12.
32. Wakasugi K. et al. A methodology for scenario development based on understanding of long-term evolution of geological disposal systems // Journal of nuclear science and technology. 2012. Vol. 49. № 7. Pp. 673–688.
33. Tosoni E. et al. Comprehensiveness of scenarios in the safety assessment of nuclear waste repositories // Reliability Engineering & System Safety. 2019. Vol. 188. Pp. 561–573. DOI: 10.1016/j.res.2019.04.012.
34. Tosoni E. et al. Definition of the data for comprehensiveness in scenario analysis of near-surface nuclear waste repositories // Data in Brief. 2020. Vol. 31. P. 105780.

Информация об авторах

Савельева Елена Александровна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующая лабораторией, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: esav@ibrae.ac.ru.

Свительман Валентина Семеновна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: svitelman@ibrae.ac.ru.

Библиографическое описание статьи

Савельева Е. А., Свительман В. С. Обращение с неопределенностями в задачах расчетного обоснования долговременной безопасности // Радиоактивные отходы. 2022. № 3 (20). С. 61–71. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-3-61-71.

UNCERTAINTY MANAGEMENT IN THE CONTEXT OF LONG-TERM SAFETY ASSESSMENT

Saveleva E. A., Svitelman V. S.

Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Article received on August 15, 2022

Uncertainty management is a key element of a confidence-building process in the context of the numerical safety assessment of radioactive waste disposal facilities. This paper presents an overview of the approaches for uncertainty treatment at different stages of a safety assessment with a focus on the characterization and reduction of uncertainties of a particular numerical model.

Keywords: safety assessment, computational codes, numerical modelling, uncertainty analysis, sensitivity analysis, parameter optimization, radioactive waste.

References

1. The Environmental and Ethical Basis of Geological Disposal of Long-lived Radioactive Wastes: A Collective Opinion of the Radioactive Waste Management Committee of the Nuclear Energy Agency. Paris, France, OECD Nuclear Energy Agency, 1995. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_34631.
2. The Safety Case and Safety Assessment for the Disposal of Radioactive Waste : Specific Safety Guide No SSG-23 : IAEA Safety Standards Series. Vienna, Austria, 2012. — URL: <https://www.iaea.org/>

publications/8790/the-safety-case-and-safety-assessment-for-the-disposal-of-radioactive-waste.

3. Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities: Review and enhancement of safety assessment approaches and tools. Vienna, Austria, 2004. — URL: <https://www.iaea.org/publications/6971/safety-assessment-methodologies-for-near-surface-disposal-facilities>.

4. Radioactive Waste Management and Decommissioning. International Features, Events and Processes (IFEP) List for the Deep Geological Disposal of Radioactive Waste. Version 3 : NEA/RWM/R(2019)1. Paris, France: OECD Nuclear Energy Agency, 2019. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_19906.

5. 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.

6. Bevan L. D. The ambiguities of uncertainty: A review of uncertainty frameworks relevant to the assessment of environmental change. *Futures*, 2022, vol. 137, article 102919.

7. Confidence in the long-term safety of deep geological repositories: Its development and communication. Paris, France: OECD Nuclear Energy Agency, 1999. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_13274.

8. Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste: Outcomes of the NEA MeSA Initiative : Radioactive Waste Management; NEA No. 6923. Paris, France, OECD Nuclear Energy Agency, 2012. — URL: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_14608.

9. Linge I. I. et al. Raschetnoe obosnovanie dolgovremennoi bezopasnosti i optimizatsiya reshenii po zakhoroneniyu RAO i vyvodu iz ehkspluatatsii: tendentsii, potrebnosti, vozmozhnosti [Numerical Safety Assessment and Optimization of Decisions on Radioactive Waste Disposal and Nuclear Decommissioning: Trends, Needs, Opportunities]. *Radioaktivnyye otkhody — Radioactive Waste*, 2020, no. 2 (11), pp. 85—98. DOI: 10.25283/2587-9707-2020-2-85-98.

10. 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.

11. Saveleva E. A. et al. O vybore metoda otsenki chuvstvitel'nosti modeli k ee parametram pri obosnovanii bezopasnosti punktov zakhoroneniya RAO [On the selection of a method allowing to evaluate the sensitivity of a model to its parameters within the safety assessment of RW disposal facilities]. *Radioaktivnyye otkhody — Radioactive Waste*, 2021, no. 2 (15), pp. 73—89. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-2-73-89.

12. Saltelli A. et al. Why so many published sensitivity analyses are false: A systematic review of

sensitivity analysis practices. *Environmental modeling & software*, 2019, vol. 114, pp. 29—39.

13. Hill M. C., Tiedeman C. R. Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty. John Wiley & Sons, 2006.

14. Venter G. Review of optimization techniques / in Encyclopedia of aerospace engineering. Ed. R. Blockley, W. Shyy. John Wiley & Sons, 2010. DOI: 10.1002/9780470686652.eae495.

15. Ruder S. An overview of gradient descent optimization algorithms. arXiv preprint arXiv:1609.04747. 2016.

16. Moré J. J. The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory. Numerical analysis. Springer, Berlin, Heidelberg, 1978. Pp. 105—116.

17. Xiong Q., Jutan A. Continuous optimization using a dynamic simplex method. *Chemical Engineering Science*, 2003, vol. 58, no. 16, pp. 3817—3828.

18. Yang X. S. Nature-inspired optimization algorithms. Academic Press, 2020.

19. Wolpert D. H., Macready W. G. No free lunch theorems for optimization. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 1997, vol. 1, no. 1, pp. 67—82. DOI: 10.1109/4235.585893.

20. 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.

21. Wilke C. O. Fundamentals of data visualization: a primer on making informative and compelling figures. O'Reilly Media, 2019.

22. Padilla L., Kay M., Hullman J. Uncertainty visualization. In: Piegorsch W. W. et al. (ed.). Computational Statistics in Data Science. John Wiley & Sons, 2022.

23. Kehrer J., Hauser H. Visualization and visual analysis of multifaceted scientific data: A survey. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, 2012, vol. 19, no. 3, pp. 495—513.

24. Kamal A. et al. Recent advances and challenges in uncertainty visualization: a survey. *Journal of Visualization*, 2021, vol. 24, pp. 861—890. DOI: 10.1007/s12650-021-00755-1.

25. Janssen H. Monte-Carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence. *Reliability Engineering & System Safety*, 2013, vol. 109, pp. 123—132. DOI: 10.1016/j.res.2012.08.003.

26. Alizadeh R., Allen J. K., Mistree F. Managing computational complexity using surrogate models: a critical review. *Research in Engineering Design*, 2020, vol. 31, no. 3, pp. 275—298. DOI: 10.1007/s00163-020-00336-7.

27. 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, pp. 107521. DOI: 10.1016/j.ress.2021.107521.
28. Höge M., Wöhling T., Nowak W. A primer for model selection: The decisive role of model complexity. *Water Resources Research*, 2018, vol. 54, no. 3, pp. 1688–1715. DOI: 10.1002/2017WR021902.
29. Höge M., Guthke A., Nowak W. Bayesian Model Weighting: The Many Faces of Model Averaging. *Water*, 2020, vol. 12, no. 2, pp. 309. DOI: 10.3390/w12020309.
30. Mai J., Craig J. R., Tolson B. A. Simultaneously determining global sensitivities of model parameters and model structure. *Hydrology and Earth System Sciences*, 2020, vol. 24, no. 12, pp. 5835–5858.
31. 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, no. 1, pp. 261–283. DOI: 10.1144/SP482.12.
32. Wakasugi K. et al. A methodology for scenario development based on understanding of long-term evolution of geological disposal systems. *Journal of nuclear science and technology*, 2012, vol. 49, no. 7, pp. 673–688.
33. Tosoni E. et al. Comprehensiveness of scenarios in the safety assessment of nuclear waste repositories. *Reliability Engineering & System Safety*, 2019, vol. 188, pp. 561–573. DOI: 10.1016/j.ress.2019.04.012.
34. Tosoni E. et al. Definition of the data for comprehensiveness in scenario analysis of near-surface nuclear waste repositories. *Data in Brief*, 2020, vol. 31, p. 105780.

Information about the authors

Saveleva Elena Aleksandrovna, PhD, Senior researcher, Head of laboratory, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulkaya st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: esav@ibrae.ac.ru.

Svitelman Valentina Semenovna, PhD, Research associate, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulkaya st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: svitelman@ibrae.ac.ru.

Bibliographic description

Saveleva E. A., Svitelman V. S. Uncertainty management in the context of long-term safety assessment. *Radioactive Waste*, 2022, no. 3 (20), pp. 61–71. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-3-61-71. (In Russian).