
УДК 004.023,004.942,556

**РАЗРАБОТКА ГЕОФИЛЬТРАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ УЧАСТКА
“ЕНИСЕЙСКИЙ” И ОПТИМИЗАЦИЯ ЕЕ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ПОМОЩИ
 ГИБРИДНОГО ОПТИМИЗАЦИОННОГО АЛГОРИТМА**

© 2020 г. Д. К. Валетов^{1, *}, Г. Д. Неуважаев^{1, **}, В. С. Свительман^{1, ***}

¹*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики (ИБРАЭ РАН), Москва, Россия*

**e-mail: valetovdk@ibrae.ac.ru*

***e-mail: neyvazhaev@ibrae.ac.ru*

****e-mail: svitelman@ibrae.ac.ru*

Поступила в редакцию 13.09.2019 г.

После доработки 05.11.2019 г.

Принята к публикации 14.12.2019 г.

В статье рассматривается задача моделирования фильтрации в неоднородной геологической среде на основе данных исследований участка потенциального размещения глубинного пункта захоронения РАО. В силу наличия неопределенностей при описании геологической среды, калибровка, т.е. подбор параметров численной модели по экспериментальным данным, является существенным этапом для получения достоверных оценок в процессе обоснования долговременной безопасности. На данном примере продемонстрированы возможности эвристических оптимизационных алгоритмов как эффективного инструмента подбора параметров.

Ключевые слова: геофильтрационное моделирование, калибровка, оптимизационные методы, обоснование безопасности, неопределенности

DOI: 10.31857/S0002331019050170

ВВЕДЕНИЕ

Безопасное обращение с радиоактивными отходами и их финальная изоляция являются актуальными вопросами для всех государств, использующих атомную энергию. На сегодняшний день международным научно-техническим сообществом признано [1], что наиболее эффективным и безопасным решением проблемы окончательной изоляции долгоживущих и высокоактивных РАО и ОЯТ является их захоронение в глубинных геологических формациях с соблюдением принципа многобарьерной защиты.

Численное моделирование процессов, определяющих перенос радионуклидов в геологической среде, является одним из основных инструментов при обосновании безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов. Расчетные модели требуют параметризации, то есть задания параметров (фильтрационных и миграционных характеристик, начальных значений, граничных условий и так далее), значения которых не могут быть измерены точно (обладают неопределенностью). А то, насколько значения параметров, используемых в модели, соответствуют реальным свойствам моделируемого объекта, во многом определяет достоверность получаемого результата. В случае моделирования геологической среды существует сложность задания адекватных параметров, которая складывается как из изменчивости свойств геологической структуры, так и невозможности измерить необходимые характеристики в каждой точке и связанного с этим упрощенного их задания в модели при помощи конечного

числа параметров. Отсюда традиционно возникает задача калибровки модели, состоящая в том, чтобы установить параметры, позволяющие модели наилучшим образом соответствовать имеющимся данным наблюдений и, тем самым, уменьшить неопределенность, связанную с ее параметризацией. В качестве инструмента подбора параметров в гидрогеологическом моделировании широко используются эвристические оптимизационные методы [2].

В данной работе рассматривается задача разработки и параметризации профильной модели фильтрации в неоднородной геологической среде на основе данных геологических исследований потенциального участка размещения пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов. Для калибровки этой модели применен гибридный эвристический алгоритм, сочетающий преимущества двух хорошо зарекомендовавших себя в различных областях эвристических оптимизационных методов – Cuckoo search [2] и Harmony search [3].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящее время реализуется проект по созданию в гранитогнейсовых породах Нижнеканского массива (Красноярский край) подземной исследовательской лаборатории (ПИЛ), результаты исследований в которой смогут подтвердить возможность размещения на данном участке пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов 1 и 2 классов (ПГЗРО). Характеристики рассматриваемой концепции потенциального ПГЗРО: два горизонта на глубине 450–525 м, расположение РАО 1 класса в вертикальных 75-метровых скважинах, РАО 2 класса – в горизонтальных выработках длиной 15–20 м [4], что соответствует концепции матричного типа (mined deep borehole matrix), которая рассматривалась отдельными странами [5].

При геологическом исследовании участка было произведено бурение скважин на глубину до 700 м, в которых был выполнен комплекс гидрогеологических работ, включающий, в том числе, кустовые и одиночные откачки, а также пакерные исследования [6].

Рассматриваемая в данной работе геофильтрационная схематизация была основана на геологическом разрезе, построенном по данным паспортов скважин [7] (рис. 1). В моделируемой среде было выделено несколько элементов геологического строения, обладающих различными фильтрационными свойствами (четвертичные отложения, кора выветривания, дайки среднетрещиноватые, дайки монолитные, плагиогнейсы, гнейсы сильнотрещиноватые, гнейсы монолитные, зоны дробления). В процессе калибровки модели их коэффициенты фильтрации варьировались в диапазонах, заданных на основе опытно-фильтрационных работ и расчета коэффициента фильтрации по результатам пакерных исследований.

В ходе моделирования численно решалась стационарная задача напорной фильтрации. Уравнение напорной фильтрации описывается законом сохранения массы (уравнением неразрывности):

$$\nabla \cdot \vec{u} = Q,$$

где \vec{u} – вектор скорости фильтрационного потока, определяемый законом Дарси:

$$\vec{u} = -K\nabla h.$$

Здесь h – напор; Q – источники и стоки; K – коэффициент фильтрации.

В качестве наблюдений для калибровки геофильтрационной модели использовались данные поинтервальных пакерных исследований по четырем скважинам (35 значений напоров – уровней подземных вод [м]).

Для решения фильтрационной задачи использовалась схема метода конечных объемов с двухточечной аппроксимацией потока, расчеты выполнялись при помощи кода для геофильтрационного и геомиграционного моделирования GeRa [9].

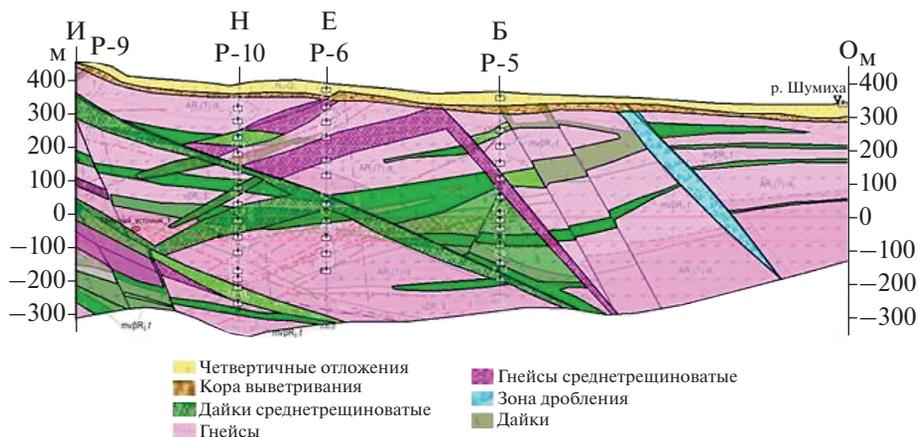


Рис. 1. Расчетная область на основе геологического разреза [8].

Граничные условия для модели задавались следующим образом:

- Правая граница была проведена по линиям тока, замыкающимся на водотоке первого порядка р. Шумиха, линии тока с гидродинамической точки зрения являются непроницаемыми границами второго рода.

- Нижней границе модели соответствовало условие II рода с нулевым расходом (непроницаемая) в связи с тем, что породы, которые залегают на глубине 700 метров от устья скважин, непроницаемы.

- На верхней границе задавалось инфильтрационное питание 10^{-5} м/сут.

- На левой границе в первоначальной версии модели задавался средний напор по скважине P-9, который составил $H = 400$ м. Однако при таких условиях калибровка не давала удовлетворительных результатов, что послужило основанием для изменения модели с учетом неопределенностей. В окончательной версии рассматривалось условие 2-го рода на левой границе для каждого гидрогеологического подразделения (горизонт четвертичных отложений, водоносная зона раннеархейских пород, водонепроницаемая зона раннеархейских пород). Для каждого из соответствующих горизонтов задавался и варьировался в процессе калибровки свой расход.

ПРОЦЕСС КАЛИБРОВКИ МОДЕЛИ И ИСПОЛЪЗУЕМЫЕ ОПТИМИЗАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

Калибровка модели представляет собой процедуру подбора параметров таким образом, чтобы в точках наблюдения (т.е. там, где есть результаты фактических измерений) результат моделирования был наиболее близок к наблюдаемым значениям [9]. В процессе калибровки вектор входных параметров модели изменяется по определенному алгоритму, по результатам моделирования при этих значениях параметров рассчитывается целевая функция, задающая меру близости модельных и экспериментальных значений (чаще всего это взвешенная сумма квадратов их разностей по всем точкам наблюдения или среднеквадратичное отклонение). В результате выполнения алгоритма необходимо минимизировать целевую функцию.

Таким образом, калибровка – это частный случай довольно распространенной при моделировании сложных природных и искусственных систем задачи непрерывной глобальной оптимизации. Для задачи оптимизации расчетный код, в котором реали-



Рис. 2. Схема взаимодействия оптимизационного алгоритма и расчетного кода, осуществляющего численное моделирование.

зуется численная модель, представляет собой “черный ящик”, у которого есть многомерный вектор входных параметров и один отклик – значение целевой функции. Их взаимодействие схематично показано на рис. 2. Математически процесс оптимизации представляет собой поиск оптимумов в пространстве решений, где каждая точка (решение) представляет собой пару из вектора параметров и соответствующего этому вектору значения целевой функции.

Отсутствие универсального метода оптимизации и, напротив, наличие чрезвычайно большого числа алгоритмов и их модификаций объясняются такими особенностями задачи [10], как нелинейность, недифференцируемость, многоэкстремальность, высокая вычислительная сложность оптимизируемых функций, высокая размерность пространства поиска и т.д.

Для эффективного решения задач глобальной оптимизации в 1980-х годах начали интенсивно разрабатывать класс эвристических методов – стохастических поисковых алгоритмов оптимизации. Различные эвристические методы обладают особенностями, которые могут быть как преимуществами, так и недостатками, в зависимости от решаемой задачи, и следующий логический шаг после того, как эти особенности выявлены – гибридизация [11], подразумевающая совмещение нескольких алгоритмов для использования их преимуществ и компенсации недостатков.

Гибридный алгоритм [12], рассматриваемый в настоящей работе, является комбинацией двух алгоритмов, его блок-схема приведена на рис. 3.

Основной алгоритм в гибриде – это Cuckoo search [2]. Он воспроизводит поведение кукушек, цель которых поместить свои яйца в лучшие гнезда. Характерные черты процесса гнездования кукушек: подбрасывание яйца, с некоторой вероятностью его обнаружение хозяином гнезда и последующее выбрасывание чужака из гнезда или покидание скомпрометированного гнезда. Перевод метафоры в термины оптимизационной задачи такой: каждая кукушка представляет собой точку в пространстве решений, в случае если яйцо не было обнаружено, то оно остается, и в данной точке простран-

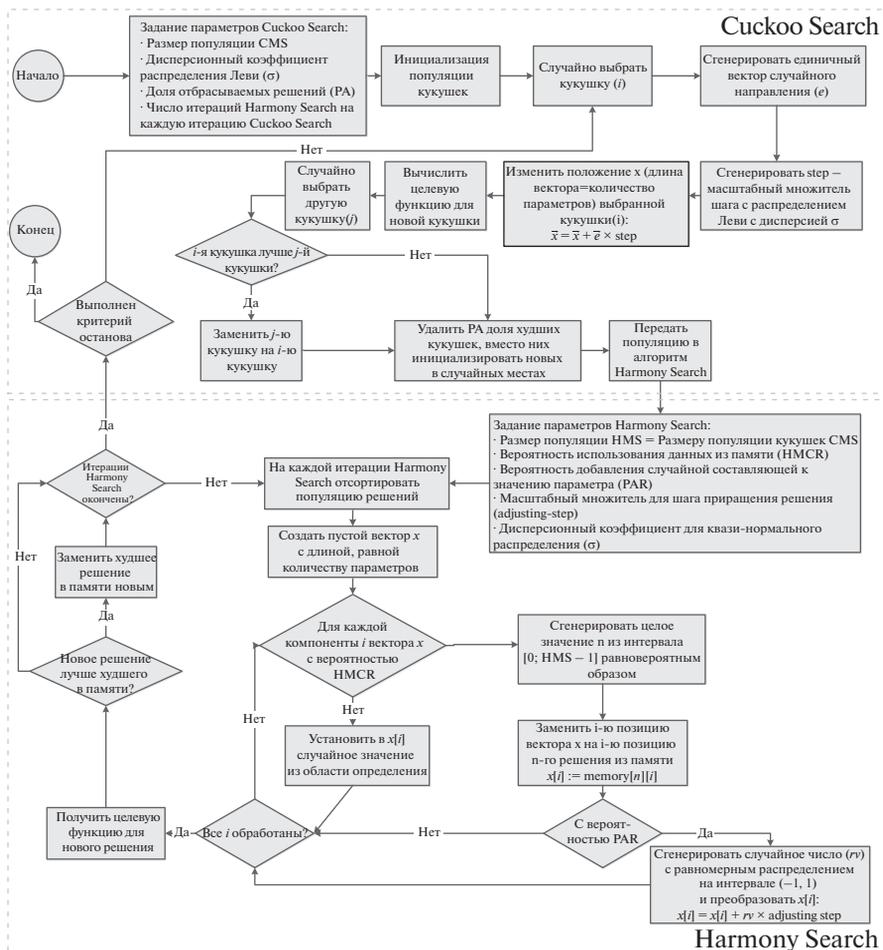


Рис. 3. Блок-схема гибридного алгоритма.

ства параметров (положение гнезда) появляется новая кукушка. Целевой функцией в данной метафоре считается качество расположения гнезда – отсутствие хищников, наличие пищи и т.д. Настройки, т.е. степени свободы, от которых может зависеть получаемый результат, алгоритма Cuckoo search следующие:

- количество одновременно рассматриваемых решений (CMS – Cuckoo Memory Size);
- доля отбрасываемых решений (PA – abandon probability);
- дисперсионный коэффициент распределения Леви (σ).

Последняя величина необходима в связи с тем, что при генерации нового набора параметров применяется распределение Леви [13, 14]. Это непрерывное распределение, в силу своих особенностей широко используемое для моделирования случайных блужданий в животном мире, например, поиска животными пищи. Такие особенности, как бесконечные математическое ожидание и дисперсия, а также “тяжелый правый хвост” (т.е. большой коэффициент эксцесса) и положительный коэффициент асимметрии, позитивно сказываются на глобальном поиске в пространстве параметров. Процесс случайного блуждания с шагом, определяемым таким распределением,

Таблица 1. Используемые настройки алгоритмов

Алгоритм	Настройки	Значение
Cuckoo Search	Численность популяции CMS	60
	Доля отбрасываемых решений PA	0.3
	Дисперсионный коэффициент распределения Леви σ	2
Harmony Search	Число мелодий в памяти HMS	60
	Вероятность выбрать старую ноту HMCR	0.6
	Вероятность выбрать старую ноту HMCR (в гибридном алгоритме)	1.0
	Вероятность исказить мелодию PAR	0.6
	Понижающий множитель α	0.001

охватывает рассматриваемые области быстрее, чем при использовании нормального распределения, в то же время колоколообразность распределения Леви чаще дает случайные величины небольшого порядка, что способствует локальному поиску. Данный алгоритм эффективно применяется для решения оптимизационных задач большой размерности во многих областях, в том числе и в задачах гидрогеологического моделирования, например оценки запасов подземных вод [15, 16].

Вторичным алгоритмом в гибриде является Harmony Search [3], в его основе лежит метафора поиска гармонии посредством перебора мелодий, искажения имеющихся мелодий и импровизации. Нота в метафоре обозначает отдельный параметр, мелодия – вектор параметров, ее гармоничность – соответствующую целевую функцию. Настройки алгоритма:

- число мелодий, хранимых в памяти (HMS – Harmony Memory Size);
- вероятность выбрать старую “ноту” – параметр оптимизируемой модели – при построении новой мелодии (HMCR – Harmony Memory Criterion Rate) либо взять эту ноту равновероятным образом из заданного диапазона;
- вероятность исказить ноту при условии, что она берется из прошлой итерации (PAR – Pitch Adjusting Rate);
- понижающий множитель для контроля шага при искажении ноты (α).

Алгоритм поиска гармонии широко применяется в медицине, инженерно-технической оптимизации, показывает высокую эффективность на задачах оптимизации гидрогеологических моделей [3], но имеет склонность к вырождению набора решений – когда все решения спустя некоторое число итераций становятся едва отличимыми от лучшего найденного, что может оказаться замыканием алгоритма в локальном оптимуме. Эта особенность может оказаться не недостатком, а достоинством при применении этого алгоритма совместно с другим методом, у которого глобальный поиск более выражен.

Гибридизация двух описанных алгоритмов происходит следующим образом: в конце каждой итерации алгоритма Cuckoo Search вызывается алгоритм Harmony Search, который подхватывает имеющиеся решения, производит несколько своих итераций и затем возвращает решения обратно алгоритму Cuckoo Search. При этом настройки вторичного алгоритма существенно влияют на качество оптимизации: он может как ускорить нахождение глобального оптимума, так и сконцентрировать все решения в окрестности локальных оптимумов.

Значения всех настроек алгоритмов приведены в табл. 1, они подбирались с учетом результатов работ [2], [12], а также на основе собственных тестов на многоэкстремальных аналитических функциях. Кроме того, чтобы предотвратить вырождение, но воспользоваться преимуществами Harmony Search, в гибридном алгоритме вероятность выбора из памяти HMCR устанавливалась равной 1. Это было необходимо для комби-

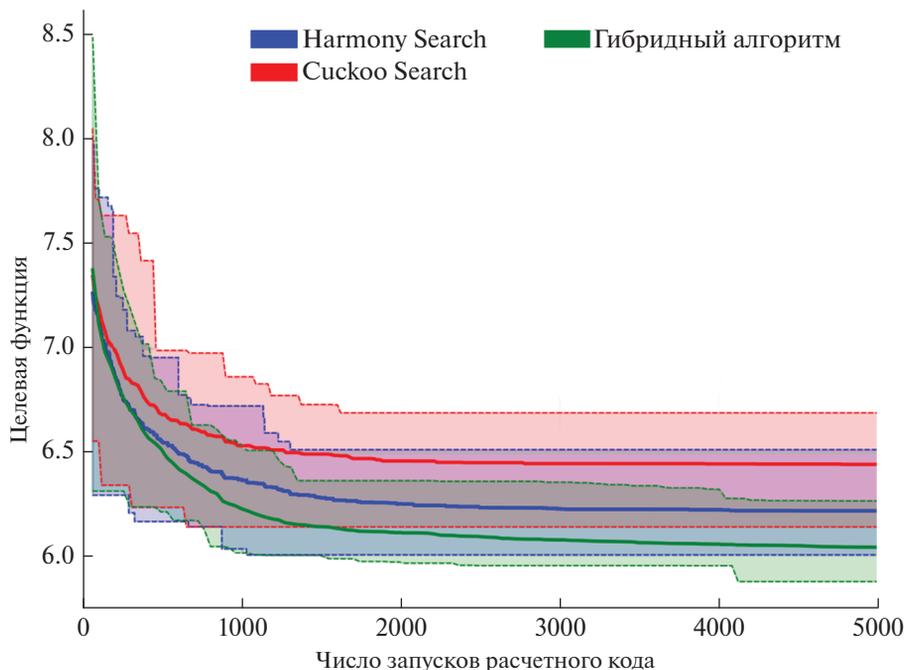


Рис. 4. Изменение целевой функции от числа запусков расчетного кода.

нирования новых решений строго из имеющегося набора, что способствует поиску вблизи уже найденных оптимумов. Также число итераций вторичного Harmony search на каждую итерацию Cuckoo Search устанавливалось сравнительно небольшим, порядка трети от числа популяции, чтобы набор решений не успевал вырождаться за шаг вторичного алгоритма.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для описанной выше модели было проведено сравнение эффективности предлагаемого гибридного алгоритма и его составляющих по отдельности. Расчеты начинались с одних начальных наборов параметров и проводились многократно для каждого алгоритма.

Для сравнения эффективности алгоритмов на рис. 4 представлен график зависимости целевой функции от числа запусков расчетного кода, для которого осуществляется калибровка параметров. На графике сплошным цветом заполнена область между наиболее быстрой и наиболее медленной кривыми калибровки, яркой же линией обозначена средняя динамика калибровки соответствующего алгоритма. Критерием остановки для оптимизации было достижение лимита на 1000 запусков модели, в течение которых целевая функция не улучшилась. Усредненная динамика изменения целевой функции позволяет утверждать, что гибридный алгоритм в среднем справляется с данной задачей быстрее составляющих его алгоритмов по отдельности.

Неопределенные и, соответственно, варьировавшиеся в процессе калибровки параметры модели приведены в табл. 2. Диапазоны изменения выбирались исходя из данных исследований и экспертной оценки. В качестве критерия для сравнения модельных решений и, соответственно, минимизируемой целевой функции использовалось

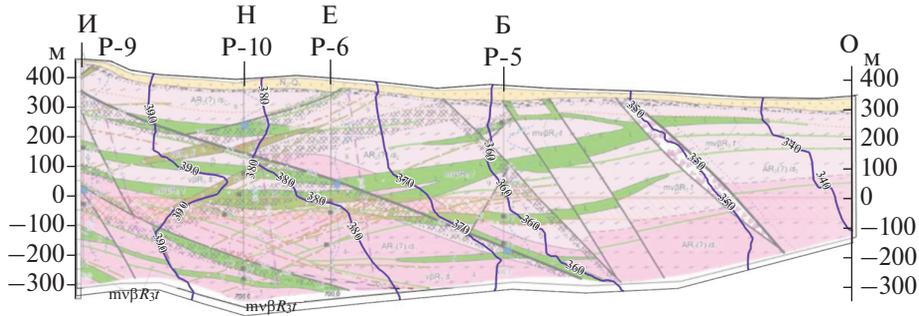


Рис. 5. Распределение напоров, полученное на основе моделирования.

среднеквадратичное отклонение 35 значений рассчитанных напоров от соответствующих значений экспериментальных наблюдений:

$$RMS = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (cal_i - obs_i)^2 \right]^{1/2},$$

где *cal* и *obs* – расчетные и фактические напоры, концентрации, *N* – общее количество наблюдений.

В результате было получено наименьшее значение среднеквадратичного отклонения $RMS = 5.86$. Анализ полученных значений (также в табл. 2) позволяет сделать следующие выводы. Коэффициенты фильтрации для пород одного литологического типа с разной трещиноватостью существенно отличаются. Это говорит о том, что для построения геофильтрационной модели выделение элементов геологического строения с различными уровнями трещиноватости существенно важно. Также полученные коэффициенты фильтрации позволяют предположить, что дайки с низкой трещиноватостью будут выступать в роли естественных барьеров безопасности. Распределение напоров (изолинии синего цвета) приведено на рис. 5.

Таблица 2. Диапазоны варьирования параметров и результаты калибровки

Коэффициенты фильтрации, м/сут		
Материал	диапазон варьирования	результат калибровки
Четвертичные отложения	$(1.0 \times 10^{-3}, 5.0 \times 10^{-1})$	0.051
Кора выветривания	$(1.0 \times 10^{-3}, 1)$	0.1
Дайки среднетрещиноватые	$(1.0 \times 10^{-6}, 3.5 \times 10^{-2})$	0.028
Дайки монокристаллические	$(1.0 \times 10^{-6}, 1.0 \times 10^{-2})$	0.000005
Плаггиогнейсы, гнейсы сильнотрещиноватые	$(5.0 \times 10^{-3}, 1.0 \times 10^{-1})$	0.0018
Зоны дробления	$(1.0 \times 10^{-2}, 1.0)$	0.99
Гнейсы монокристаллические	$(1.0 \times 10^{-6}, 1.0 \times 10^{-3})$	0.00099
Расходы, м ³ /сут		
Гидрогеологическое подразделение	диапазон варьирования	результат калибровки
Горизонт четвертичных отложений	$(1.0 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-2})$	0.0000371
Водоносная зона раннеархейских пород	$(1.0 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-2})$	0.00099
Водонепроницаемая зона раннеархейских пород	$(1.0 \times 10^{-6}, 1 \times 10^{-2})$	0.00069

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был продемонстрирован один из возможных вариантов геофильтрационной модели на основе имеющихся данных потенциального участка размещения ПГЗРО в Нижнеканском массиве. В целях уменьшения параметрической неопределенности разработанной модели была применена калибровка посредством ряда оптимизационных алгоритмов, что позволило достичь хорошего приближения имеющихся экспериментальных данных. С помощью оптимизационных алгоритмов были определены возможные фильтрационные характеристики для различных элементов геологического строения. Полученные результаты могут быть использованы для последующего моделирования распространения загрязнения.

Для калибровки модели был реализован алгоритм на основе методов Cuckoo Search и Harmony Search, и приведенное сравнение гибридного алгоритма с его составляющими демонстрирует потенциал подходов гибридизации эвристических оптимизационных методов. Дальнейшая работа по развитию этих подходов возможна как в направлении подбора наилучшим образом дополняющих друг друга алгоритмов, так и в направлении переключения между компонентами гибрида не по заведомо заданным правилам, а адаптивно – исходя из оценки прогресса на текущем шаге оптимизации.

Калибровка численных моделей наряду с исследованиями характеристик геологической среды очень важна для уменьшения неопределенности оценок безопасности, получаемых при помощи геофильтрационного и геомиграционного моделирования. А с учетом нарастающей вычислительной сложности расчетов (неизбежной на более продвинутых стадиях обоснования безопасности) развитие эффективных методов калибровки может стать существенным вкладом в улучшение их качества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nuclear Energy Agency, Radioactive Waste Management Committee. The Environmental and Ethical Basis of Geological Disposal of Long-lived Radioactive Wastes. Paris, 1995.
2. Haddad O.B. et al. Groundwater model calibration by meta-heuristic algorithms // Water resources management. 2013. V. 27. № 7. P. 2515–2529.
3. Gandomi A.H., Yang X.S., Alavi A.H. Cuckoo search algorithm: a metaheuristic approach to solve structural optimization problems // Engineering with computers. 2013. V. 29. № 1. P. 17–35.
4. Ayvaz M.T. Application of harmony search algorithm to the solution of groundwater management models // Advances in Water Resources. 2009. V. 32. № 6. P. 916–924.
5. Laverov N.P., Yuditseva S.V., Kochkin B.T., Malkovsky V.I. The Russian strategy of using crystalline rock as a repository for nuclear waste // Elements. 2016. V. 12(4). P. 253–256.
6. Baldwin T., Chapman N., Neall F. Geological disposal options for high-level waste and spent fuel: Report for the UK Nuclear Decommissioning Authority. 2008.
7. НО РАО, Материалы обоснования лицензии на размещение и сооружение не относящегося к ядерным установкам пункта хранения РАО, создаваемого в соответствии с проектной документацией на строительство объектов окончательной изоляции РАО (Красноярский край, Нижнеканский массив) в составе подземной исследовательской лаборатории. Т. 1, гл. 2 – Общая характеристика объекта. 2015 г. – URL: <http://www.norao.ru/ecology/mol/> (дата обращения 22.01.2019).
8. Neuvazhaev G., Rastorguev A. Substantiation of the rock massif permeability based on packer tests (Tomsk region, Russia) [Электронный ресурс] // E3S Web of Conferences. 16th International Symposium on Water-Rock Interaction (WRI-16) and 13th International Symposium on Applied Isotope Geochemistry (1st IAGC International Conference) (Tomsk, Russia, July 21–26, 2019). 2019. Т. 98. С. 10004.
9. Капырин И.В. и др. Интегральный код GeRa для обоснования безопасности захоронения радиоактивных отходов // Горный журнал. 2015. № 10. С. 44–50. <https://doi.org/10.17580/gzh.2015.10.08>
10. Hill M.C. Methods and guidelines for effective model calibration: US Geological Survey Water-Resources Investigations Report 98-4005. – Denver, Colorado: USGS. – 2000.
11. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации: учеб. пособие. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.
12. Fister I., Fister Jr I. (ed.). Adaptation and hybridization in computational intelligence. – Springer, 2015.

13. *Gai-Ge Wang, Amir H. Gandomi, Xiangjun Zhao, Hai Cheng Eric Chu.* Hybridizing harmony search algorithm with cuckoo search for global numerical optimization // *Soft Computing*. 2016. V. 20. P. 273–285.
14. *Blaine J. Cole.* Fractal time in animal behavior: the movement activity of *Drosophila* // *Animal Behaviour*. 1995. V. 50. P. 1317–1324.
15. *Rhee I. et al.* On the levy-walk nature of human mobility // *IEEE/ACM transactions on networking (TON)*. 2011. V. 19. № 3. P. 630–643.
16. *Yang X.S., Deb S.* Cuckoo search: recent advances and applications // *Neural Computing and Applications*. 2014. V. 24. № 1. P. 169–174.
17. *Walton S. et al.* Modified cuckoo search: a new gradient free optimisation algorithm // *Chaos, Solitons & Fractals*. 2011. V. 44. №. 9. P. 710–718.

Groundwater Flow Model Development for the Yeniseisky Site and Its Parameters Optimization Using a Hybrid Optimization Algorithm

D. K. Valetov^{a, *}, G. D. Neuvazhaev^{a, **}, and V. S. Svitelman^{a, *}**

^a*Nuclear Safety Institute Russian academy of sciences (IBRAE RAN), Moscow, Russia*

**e-mail: valetovdk@ibrae.ac.ru*

***e-mail: neyvazhaev@ibrae.ac.ru*

****e-mail: svitelman@ibrae.ac.ru*

The topic of this paper is groundwater flow modelling in heterogeneous media based on the data of the geological engineering survey for the prospective site of the radioactive waste deep geological disposal. Due to inherent uncertainties associated with the groundwater system characterization, the model calibration is the significant step for the obtaining of the reliable predictions that could be used in long-term safety assessment. This case study illustrates the efficiency of heuristic optimization methods and hybridization approach for the calibration of groundwater models.

Keywords: groundwater flow modelling, model calibration, optimization methods, safety assessment, uncertainties