

Entwicklung numerischer Verfahren zur Quantifizierung der Auswirkung von Parameterungewissheiten auf die Ergebnisse THM-gekoppelter Berechnungen zur Integrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs im Kontext der sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle

T. Nagel¹, O. Ernst², J. Buchwald³, J. Thiedau⁴, S. Mayer⁴ et al.

¹ Technische Universität Bergakademie Freiberg

² Technische Universität Chemnitz

³ Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ

⁴ Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)

OUTLINE

THM model impressions

What could possibly go wrong?

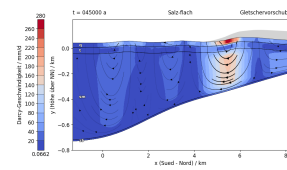
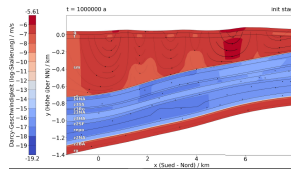
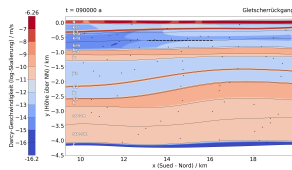
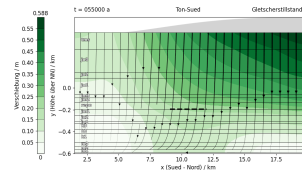
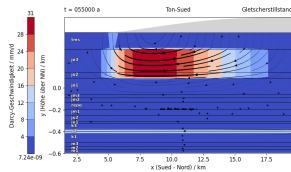
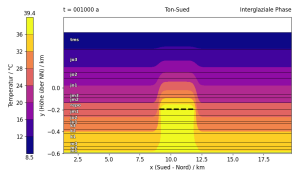
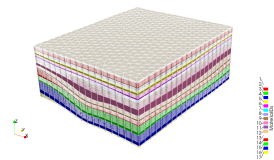
Statistical uncertainty in parameters / transformations

Uncertainty / reliability

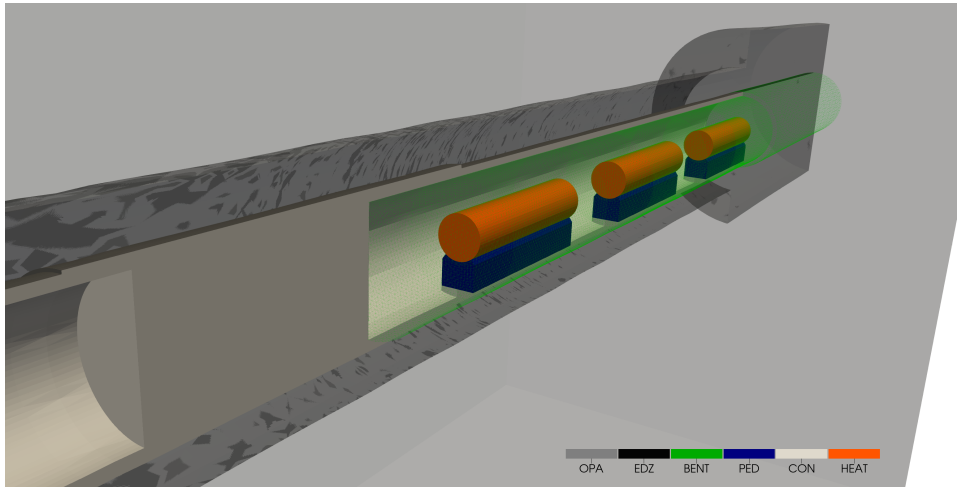
Überblick MeQUR

Ausblick

LARGE-SCALE THM MODELLING

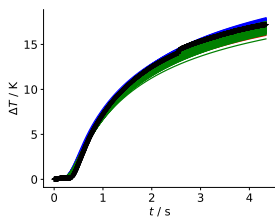


THE MT. TERRI FE EXPERIMENT

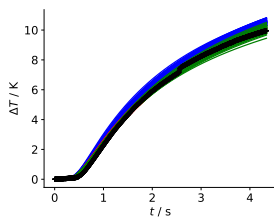


COMPARISON TO IN SITU MEASUREMENTS

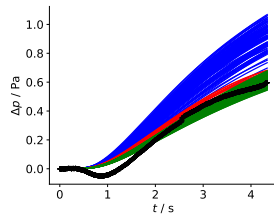
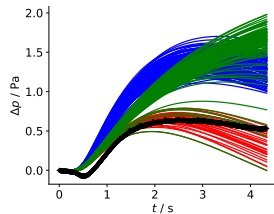
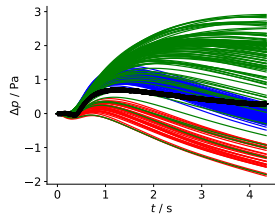
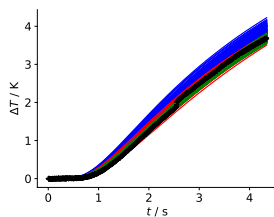
Point 1



Point 2



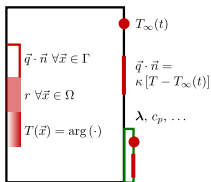
Point 3



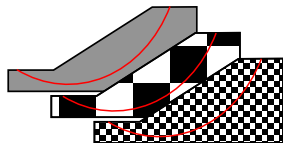
History match subsampling to point 1/2/3.

Buchwald et al. (2022).

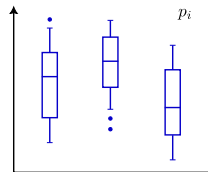
UNCERTAINTY IN PROCESS MODELS



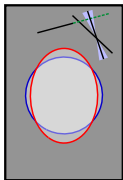
bc representation



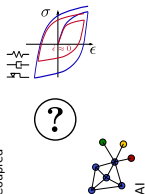
heterogeneity / scale ratios / variance reduction



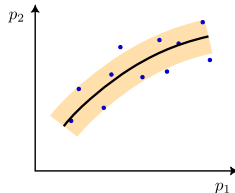
parameters



geometry, connectivity



conceptual modelling choices



transformation

CONFIDENCE AND PREDICTION INTERVALS

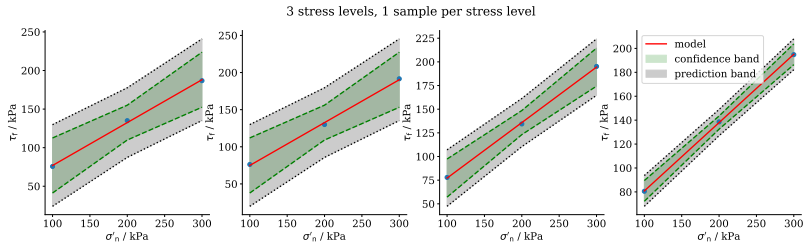
Confidence interval for the average value $E(y|x^*)$:

$$\hat{y}(x^*) \pm t_{n-2}^* \sigma_y \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{(x^* - \bar{x})^2}{(n-1)\sigma_x^2}} \quad \text{with} \quad \sigma_y = \sqrt{\frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}}$$

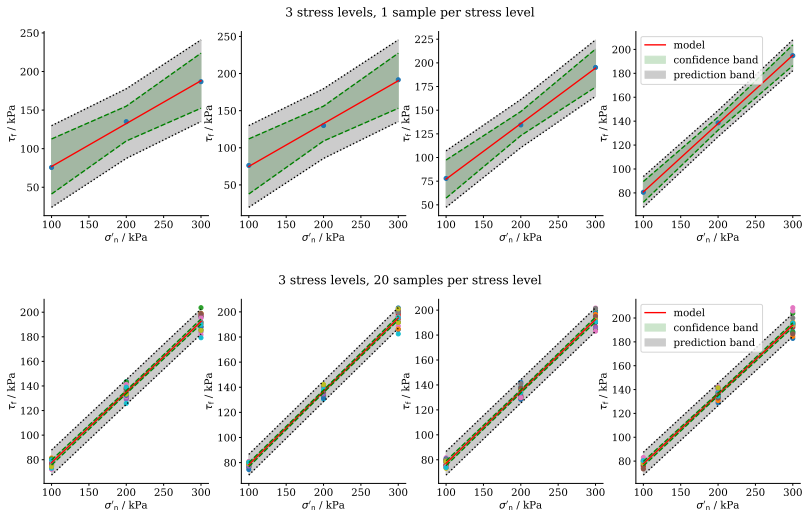
Prediction interval for a specific value $y(x^*)$:

$$\hat{y}(x^*) \pm t_{n-2}^* \sigma_y \sqrt{1 + \frac{1}{n} + \frac{(x^* - \bar{x})^2}{(n-1)\sigma_x^2}} \quad \text{with} \quad \sigma_y = \sqrt{\frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2}}$$

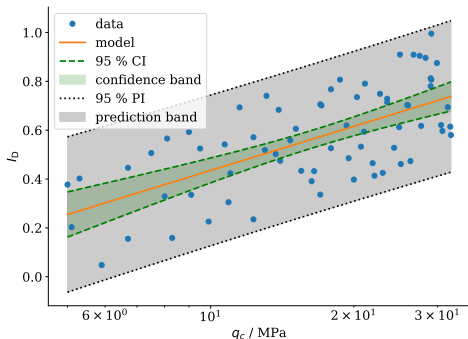
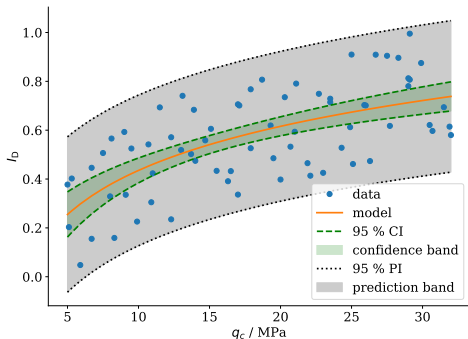
STATISTICAL UNCERTAINTY OF MATERIAL PARAMETERS



STATISTICAL UNCERTAINTY OF MATERIAL PARAMETERS

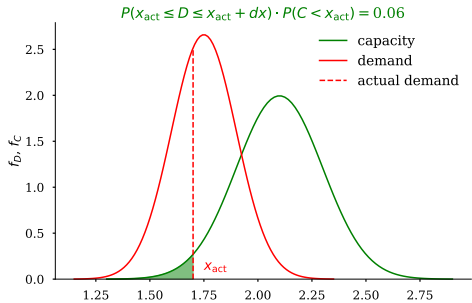
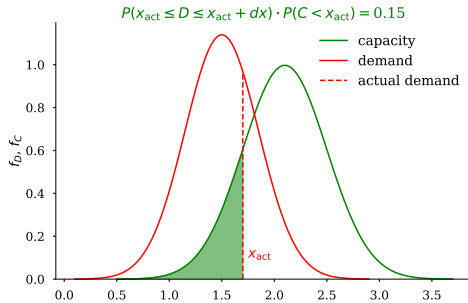


TRANSFORMATION UNCERTAINTY



UQ – WHY BOTHER?

Consider two exemplary cases:

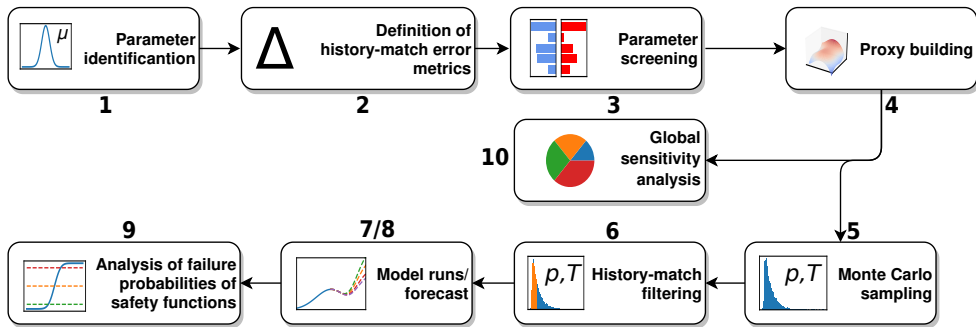


$$P(F) = \int_{-\infty}^{\infty} f_D(x) F_C(x) dx$$

	FOS	β	$P(F)$
Case 1	1.4	1.1	13%

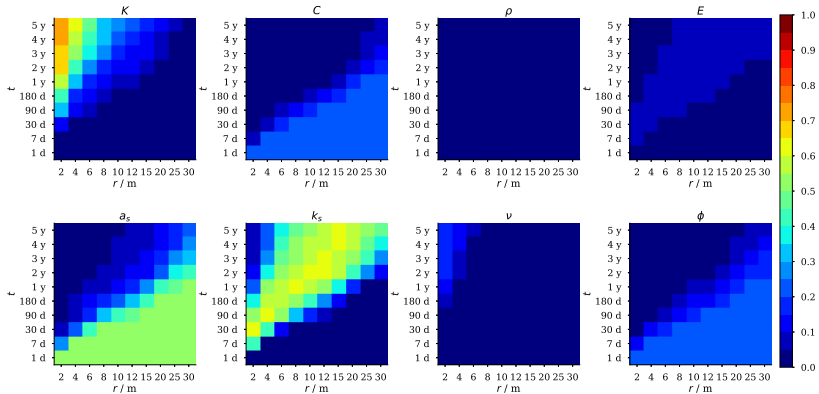
→ Opposite conclusions

UNCERTAINTY QUANTIFICATION



[Buc+20]

WHAT'S IMPORTANT WHEN AND WHERE? SPATIO-TEMPORAL SENSITIVITY ANALYSIS



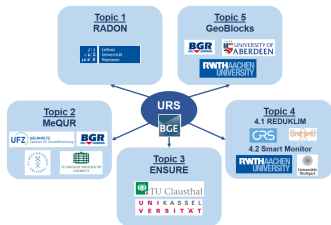
[CBN21]

UQ – HOW CAN IT ENRICH THE PICTURE?

- ...
- Aid model choices (process models, constitutive models, correlations/transformation models)
- Provide natural context for V&V
- Link to parameter identification
- Overall context for relative relevance assessment (ranking)

TOWARDS UNCERTAINTY IN INTEGRITY ANALYSES

Uncertainties and Robustness with regard to the Safety of a repository for high-level radioactive waste



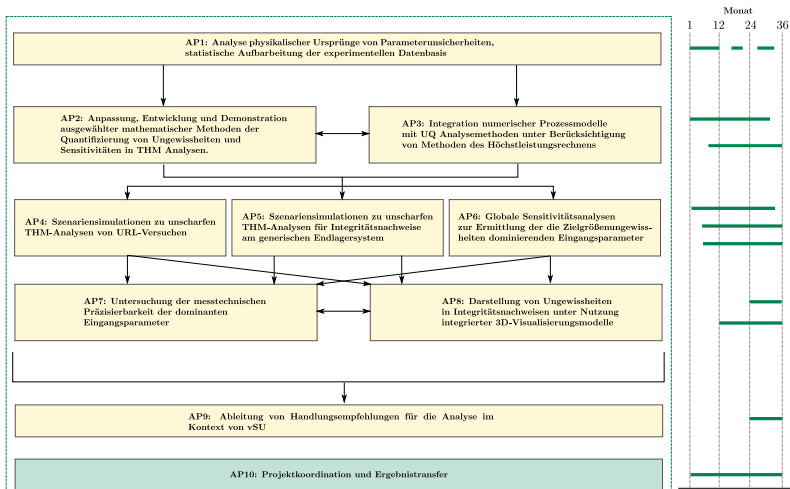
- **RADON**: Risk, reliability, and characterization of uncertainty
- **MeQR**: Methods for the quantification of uncertainty and robustness
- **ENSURE**: Regulatory aspects of uncertainty and robustness
- **REDUKLIM and Smart Monitoring**: Physics-based scenario models and impact models
- **GeoBlocks**: Uncertainty in the spatial description of the subsurface

Project Website: urs.ifgt.tu-freiberg.de

ZIELE

- **Methodenentwicklung** für UQA und SA für THM-gekoppelte numerische Integritätsanalysen der geologischen Barriere im Rahmen von Sicherheitsuntersuchungen
- Verbindung von mathematischer Konsistenz und Praxistauglichkeit der Methoden
- **Prüfung & Demonstration** des Konzepts anhand zweier Fallstudien, die unterschiedliche räumliche und zeitliche Skalen adressieren
- **Visualisierung** ungewissheitenbehafteter Simulationsergebnisse
- **Rückschlüsse** auf verbesserte Untersuchungsprogramme ableiten und sicherheitstechnische Bewertung der Ergebnisse zu unterstützen

GESAMTÜBERBLICK & AP VERNETZUNG





Ausblick

AUSBLICK

Vernetzung innerhalb von URS

DANKSAGUNG



MeQUR wird im Rahmen des URS Verbundprojekts durch die Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE) finanziert und unterstützt.

Wir danken der BGE und dem gesamten OGS Entwicklungsteam für die Unterstützung.

REFERENCES

- [1] J. Buchwald, A. A. Chaudhry, K. Yoshioka, O. Kolditz, S. Attinger, and T. Nagel. "International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences DoE-based history matching for probabilistic uncertainty quantification of thermo-hydro-mechanical processes around heat sources in clay rocks". In: International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 134.May (2020), p. 104481. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2020.104481.
- [2] A. A. Chaudhry, J. Buchwald, and T. Nagel. "Local and global spatio-temporal sensitivity analysis of thermal consolidation around a point heat source". In: International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 139.June 2020 (03/2021), p. 104662. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2021.104662.

Part I.

Appendix

AP STRUKTUR

Bereitstellung konsistenter Eingangsdaten

AP1 Analyse physikalischer Ursprünge von Parameterunsicherheiten, statistische Aufarbeitung der experimentellen Datenbasis

(BGR; TUChem, TUBAF) Teilvorhaben Integrität

Mathematische Methoden und Algorithmen

AP2 Anpassung, Entwicklung und Demonstration ausgewählter mathematischer Methoden der Quantifizierung von Ungewissheiten und Sensitivitäten für gekoppelte THM Analysen

(TUChem; TUBAF, UFZ, BGR)

AP3 Integration numerischer Prozessmodelle mit UQ Analysemethoden unter Berücksichtigung von Methoden des Hochleistungsrechnens

(UFZ; TUBAF, TUChem, BGR)

AP STRUKTUR II

Anwendung der UQ- und SA-Methoden in verschiedenskalgigen Fallstudien

AP4 Szenariensimulationen zu unscharfen THM-Analysen von URL-Versuchen

(TUBAF; BGR)

AP5 Szenariensimulationen zu unscharfen THM-Analysen für Integritätsnachweise am generischen Endlagersystem ohne direkten Standortbezug

(BGR; TUBAF)

AP6 Globale Sensitivitätsanalysen zur Ermittlung der die Zielgrößenungewissheiten dominierenden Eingangsparameter

(BGR; TUBAF, TUChem)

AP STRUKTUR III

Ergebnisinterpretation und -verwertung.

AP7 Untersuchung der „messtechnischen Präzisierbarkeit“ der dominanten Eingangsparameter
(BGR)

AP8 Darstellung von Ungewissheiten in Integritätsnachweisen unter Nutzung integrierter 3D-
Visualisierungsmodelle
(UFZ)

AP9 Ableitung von Handlungsempfehlungen für die Analyse im Kontext von vSU
(BGR; TUBAF, TUChem, UFZ)

Koordination

AP10 Projektkoordination und Ergebnistransfer
(TUBAF; BGR, TUChem, UFZ)

ANSPRECHPARTNER

Direkte Ansprechpartner:

TUBAF : Aqeel Chaudhry, Dr. Kata Kurgyis (Koordination)

TUChem: Dr. Chao Zhang, Prof. Oliver Ernst

UFZ : Feliks Kizskurno, Dr. Jörg Buchwald

BGR SF : Dr. Max Bittens, Dr. Jan Thiedau

BGR JLP : Sibylle Mayr, Werner Gräsle