

Probabilistische Analysen zum Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager



Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) mbH

Probabilistische Analysen zum Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager

Ingo Kock Stephan Hotzel

April 2014

#### Anmerkung:

Dieser Bericht wurde im Rahmen des FE-Vorhabens 3610 R 03230 mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) erstellt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren. Die hierin geäußerten Meinungen müssen nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

GRS - 325 ISBN 978-3-944161-05-1

#### **Deskriptoren:**

Endlagerung, Gasentwicklung, Kompaktion, Korrosion, Porosität, radioaktiver Abfall, Salzgrus, Sensitivitätsanalyse, SUSA, TOUGH2, Unsicherheitsanalyse, Zweiphasenfluss

## Kurzfassung

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für Endlagersysteme sind für einphasige hydraulische Berechnungen seit langem Stand von Wissenschaft und Technik und werden dementsprechend auch in Langzeitsicherheitsanalysen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle genutzt. Hier wird erstmals eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgewählter Parameter basierend auf Zweiphasenflussberechnungen für ein vollständiges Endlagersystem vorgestellt. Diese Analyse konnte mit akzeptablen Rechenzeiten durchgeführt werden, so dass in Zukunft weitere und umfangreichere Analysen dieser Art möglich sein werden.

Aus insgesamt 100 Modellläufen, mit insgesamt 10 berücksichtigten unabhängigen und abhängigen Parametern, wurden 100 Zeitreihen eines Indikators für die radiologische Konsequenz berechnet. Die Zeitreihen zeichnen sich durch zwei Peaks des Indikators aus, die jeweils zu einem frühen und einem späteren Zeitpunkt während der Modellzeit von 10.000 Jahren erreicht werden.

Mit Hilfe der Unsicherheitsanalyse konnte eine Aussage darüber getroffen werden, welcher Prozentsatz der berechneten Ergebnisse (bei vorgegebener Aussagesicherheit) unterhalb der kritischen Grenze des Indikators bleibt. Mit einer Aussagesicherheit von 99 % ist dies bei 90 % der Ergebnisverteilung der Fall.

Die Sensitivitätsanalyse des Endlagersystems zeigt, dass im Rahmen der gewählten probabilistischen Eingangsparameterverteilung die Parameter Kompaktionszeit des Salzgrusversatzes der Einlagerungsfelder und der Richtstrecken für die Höhe des ersten frühen Peaks verantwortlich sind, und dass praktisch ausschließlich die Restporosität für die Höhe des späten Peaks verantwortlich ist. Die zeitbezogene Analyse des Indikators liefert zusätzlich wichtige Einsichten zum Systemverständnis und stärkt das Vertrauen in die Robustheit der Analyse der korrelierten Parameter.

## Abstract

Uncertainty and sensitivity analyses for hydraulic single-phase models have long been the state of the art and have been employed in safety cases for the disposal of radioactive waste. We present uncertainty and sensitivity analyses of selected parameters for two-phase fluid flow calculations of a full scale repository system. Computing time for these calculations was acceptable, so that in the future, further and more comprehensive analyses will be feasible.

One hundred model runs yielded one hundred time series for a radiological indicator. Overall, 10 independent and dependent parameters were varied. The time series are characterized by two distinct peaks occurring very early and relatively late during the modelled time of 10,000 years.

Using uncertainty analysis it was possible to formulate a statement regarding what fraction of the result's probability distribution falls below the critical limit of our chosen radiological indicator (with a given confidence level). With a confidence level of 99 % this is the case for at least 90 % of the probability distribution of the calculated results.

The sensitivity analysis of the repository system shows that – given the chosen probability distributions of the input parameters – the compaction times of salt grit in emplacement fields and in main drifts are the determinants for the height of the early peak and that final porosity is the by far most important determinant for the height of the second peak. The time-indexed sensitivity analysis of the radiological indicator provides insight into the repository system's behaviour and strengthens the confidence in the robustness of the correlated parameters' analysis.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung1
2	Motivation3
3	Methodik5
3.1	Rechencodes und Rechenmodell5
3.1.1	TOUGH2
3.1.2	SUSA6
3.1.3	Rechenmodell8
3.2	Prozesse und Modellparameter
3.2.1	Prozesse und Parameter der Materialgebiete9
3.2.2	Parameterverteilungen im Rahmen der probabilistischen Berechnungen
3.2.3	Radiologischer Geringfügigkeitsindex 19
3.3	Herleitung von quantitativen Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen 20
4	Ergebnisse und Diskussion
4.1	Ergebnisse aus den TOUGH2 Modellläufen25
4.2	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse
4.3	Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse
4.4	Diskussion der Ergebnisse
4.4.1	Unsicherheitsanalyse
4.4.2	Sensitivitätsanalyse
5	Schlussfolgerungen 43
	Literaturverzeichnis

	Abbildungsverzeichnis	
	Tabellenverzeichnis	51
A	Anhang	53
A.1	Anhang zu Kapitel 3	
A.1.1	Anhang zu Kapitel 3.2.1	53
A.1.2	Anhang zu Kapitel 3.2.2	
A.2	Anhang zu Kapitel 4	
A.2.1	Anhang zu Kapitel 4.2	65
A.2.2	Anhang zu Kapitel 4.3	
A.2.3	Anhang zu Kapitel 4.4	72

## 1 Einleitung

Im April 2009 wurde die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) beauftragt, Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu thermo-hydro-mechanisch-chemisch gekoppelten Prozessen (THMC-Prozessen) nach Verschluss eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der Übergangsphase durchzuführen. Dieses Vorhaben (3610R03230) umfasste mehrere Schwerpunkte, so unter anderem

- (1) die Untersuchung der Auswirkung bestehender Unsicherheiten zum Ablauf der Übergangsphase vor dem Hintergrund starker Prozesswechselwirkungen,
- (2) die Weiterentwicklung und Anwendung numerischer Simulationen f
  ür thermohydrodynamische, geomechanische und geochemische Fragestellungen in der Übergangsphase eines Endlagers und
- (3) die Bewertung und mögliche Anwendung der Ergebnisse in einem Sicherheitsnachweis für radioaktive Abfälle in Steinsalz und Tonstein.

In der vorliegenden Arbeit werden die Ergebnisse umfangreicher probabilistischer Modellrechnungen zum Zweiphasenfluss in einem salinaren Endlager vorgestellt, die die drei oben genannten Aspekte berühren. Im Folgenden wird zunächst die Motivation für die vorliegende Untersuchung beschrieben. Danach wird im Detail auf die verwendete Methodik eingegangen, bevor Ergebnisse und Schlussfolgerungen erläutert werden.

## 2 Motivation

Im Rahmen einer radiologischen Langzeitaussage wie sie für den Nachweis der Langzeitsicherheit eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle notwendig ist /BMU 10/ steht ein möglicher Radionuklidtransport innerhalb der gasförmigen Phase im Fokus aktueller Untersuchungen (zum Beispiel in den Vorhaben "Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG)" und "Fate Of Repository Gases (FOR-GE)" /LAR 13/, /NAV 13a/). Eines der wesentlichen Ergebnisse der radiologischen Konsequenzenanalyse mittels Zweiphasenflussberechnungen des Vorhabens VSG ist, dass Gasbildung und Gastransport dazu führen können, dass in der frühen Nachverschlussphase (ca. bis 100 Jahre nach Verschluss eines Endlagers) sowie bis ca. 10.000 Jahren nach Verschluss eines Endlagers ein – in Relation zu anderen Zeitpunkten – hoher sog. radiologischer Geringfügigkeitsindex (RGI) berechnet wird /LAR 13/. Dieser Sachverhalt ist für einige Rechenfälle aus /LAR 13/ exemplarisch in Abb. 2.1 dargestellt, ohne an dieser Stelle näher auf die Berechnungen einzugehen.





Abb. 2.1 Berechnete <sup>14</sup>C-Freisetzung im Vorhaben VSG, aus /LAR 13/

Zahlreiche Variationsrechnungen mit dem Zweiphasenflusscode TOUGH2 zeigen, dass der errechnete RGI stark durch Parameter beeinflusst wird, die sowohl die Gas-

produktion als auch den Gastransport beeinflussen. Die Gasproduktion hängt beispielsweise von der zur Korrosion zur Verfügung stehenden Lösungs- bzw. Wassermenge und der Korrosionsrate an den zur Einlagerung genutzten Behältern ab. Das Transportverhalten des Gases hängt im Laufe der Berechnung zum Beispiel von der erreichten Porosität am Ende der Salzgrusversatzkompaktion ("Restporosität") und der Kompaktionsrate des Salzgrusversatzes ab /KOK 12/.

Die o. g. Parameter bzgl. Gasentstehung und -transport sind mit großen Ungewissheiten verbunden. Aus diesem Grund werden in Berechnungen zur radiologischen Konsequenzenanalyse Parameterbandbreiten abgeschätzt. Allerdings ist in der Regel eine konservative Abschätzung aufgrund der komplexen, nicht-linearen Prozesse nicht möglich. Eine probabilistische radiologische Konsequenzenanalyse anhand einer quantitativen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zur systematischen Analyse von Parameterungewissheiten in einem vollständigen Endlagersystem wurde für Zweiphasenflussrechnungen bislang noch nicht durchgeführt. Die hier vorgestellten Untersuchungen sollen dazu einen ersten Beitrag liefern.

## 3 Methodik

Für die probabilistische radiologische Konsequenzenanalyse werden zwei numerische Werkzeuge genutzt. Dies sind der Zweiphasenfluss-Code TOUGH2 (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) um den Gas-, Flüssigkeits- und Radionuklidtransport im Endlagersystem zu berechnen und das Programm SUSA (Software für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen) zur Erzeugung von quantitativen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Im Folgenden werden zunächst die Rechenprogramme und das verwendete Rechenmodell kurz vorgestellt (Kap. 3.1). Danach werden Prozesse und Modellparameter und Parameterverteilungen, die in TOUGH2 und in SUSA genutzt werden, erläutert (Kap. 3.2). Wie in der Einleitung erwähnt, dient zur Bewertung der radiologischen Konsequenz der radiologische Geringfügigkeitsindex, dessen Berechnung in Kap. 3.2.3 beschrieben wird. Auf welche Weise die Herleitung der quantitativen Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen geschieht, wird in Kap. 3.3 beschrieben.

#### 3.1 Rechencodes und Rechenmodell

## 3.1.1 TOUGH2

Für alle Zweiphasenflussberechnungen wurde der Code TOUGH2 (Transport of Unsaturated Groundwater and Heat) genutzt. TOUGH2 ist ein am Lawrence Berkeley Laboratory, USA, entwickeltes Programm zur Simulation des zweiphasigen gekoppelten Fluid-, Gas-, Nuklid- und Wärmetransports /PRU 99/.

Für alle zu transportierenden Komponenten werden im TOUGH2 die Massenerhaltungssätze gekoppelt und implizit gelöst. Der Code beschreibt advektive Prozesse für mehrphasige Systeme mit variabler Dichte anhand eines verallgemeinerten Darcy'schen Gesetzes. Durch die sogenannten EOS-Module (EOS: equation-of-state) werden die zur Verfügung stehenden Phasen, Komponenten und die thermodynamische Gleichgewichtsprozesse definiert. Mit dem EOS7R-Modul (Details in /PRU 99/) kann der Radionuklidtransport in der Gas- und Flüssigphase für die Komponenten Luft, Wasser, Lauge, Mutternuklid und Tochternuklid simuliert werden. Für beide Nuklide werden die initialen Massenanteile in der Flüssigphase vorgegeben. Für die vorliegenden Analysen werden Modifikationen des Berechnungsprogramms TOUGH2 mit dem EOS-Modul EOS7R verwendet, die bereits für die Arbeiten, die in /KOK 12/, /LAR 13/ dokumentiert sind, genutzt wurden. Dort sind auch weitere Details zum Rechencode zusammenfassend beschrieben.

#### Beschreibung des physikalischen Modells

In TOUGH2 wird der advektive Transport verschiedener Phasen (i. d. R. Flüssigkeitsund Gasphase) berechnet. Die Phasen bestehen aus Komponenten, die entweder vom advektiven Phasenstrom mitgetragen werden oder aber innerhalb einer Phase diffundieren. Komponenten können auch durch Prozesse wie Kondensation, Evaporation, Lösung oder Entgasung von der einen in die andere Phase wechseln. Als flüssige Phase wird von einer gesättigten Lauge ausgegangen. Im EOS7R-Modul kann die unterschiedliche Viskosität der Lauge zum reinen Wasser durch Korrekturfaktoren modelliert werden. Zu diesem Zweck werden die TOUGH2 Standardparameter zur Viskositätskorrektur verwendet (für NaCI-Lauge).

In den Zustandsvariablen ("Primärvariablen") von TOUGH2 wird lediglich derjenige Teil der Radionuklide spezifiziert, der in der Flüssigkeit gelöst ist, und zwar in Form eines Massenanteils von der Masse der flüssigen Phase. Die Gesamtmenge an Radionukliden errechnet sich dann durch Anwendung des Henry Gesetzes unter Beibehaltung des spezifizierten Massenanteils in der Flüssigkeit.

In EOS7R wird die molekulare Diffusion der Komponenten in den jeweiligen Phasen mit Hilfe eines vereinfachten binären Diffusions-Modells berücksichtigt. Eine Berücksichtigung der Adsorption der Radionuklide an die Festphase ist prinzipiell möglich, wird in den vorliegenden Berechnungen allerdings vernachlässigt, da Adsorption an Steinsalz als vernachlässigbar unterstellt wird und Daten zur Adsorption an anderen Materialien, wie. z. B. Sorelbeton der Streckenverschlüsse, nicht vorliegen.

## 3.1.2 SUSA

SUSA (**S**oftware für **U**nsicherheits- und **S**ensitivitäts**a**nalysen /KLO 08/) ist ein von der GRS entwickeltes Programm zur Untersuchung des Einflusses von Ungewissheiten/Unsicherheiten bzgl. des Kenntnistandes von Parametern (sog. epistemische Unsicherheiten) auf das Rechenergebnis (Unsicherheitsanalyse) und zur Untersuchung der Beiträge der Kenntnisstandungewissheiten auf die Unsicherheit des Rechenergebnis-

ses (Sensitivitätsanalyse). Die Ungewissheiten, die aufgrund von Ungewissheiten in Szenarien entstehen, sind nicht Gegenstand dieser Untersuchung.

Die Schritte, die mit dem Rechenprogramm SUSA im Zuge der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgeführt werden, sind im Folgenden beschrieben, konkretisiert werden diese Schritte in Kapitel 3.2 - 3.3.

- (1) Identifizieren der Kenntnisstand-Unsicherheiten mit potentiell wichtigen Beiträgen zur Ergebnisunsicherheit. Die Kenntnisstand-Unsicherheiten können sich sowohl auf Parameter, Modellannahmen, numerische Algorithmen als auch auf Phänomene beziehen. Diese Untersuchung beschränkt sich auf Kenntnisstand-Unsicherheiten der Parameter.
- (2) Festlegen des Unsicherheitsbereichs und Quantifizieren des Kenntnisstands mittels einer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Dieser Schritt wird für jede in Schritt 1 identifizierte unsichere Eingabegröße des Rechenprogramms durchgeführt.
- (3) Identifizieren und Quantifizieren von Abhängigkeiten. Gemeinsame Beiträge zur Unsicherheit über zwei oder mehrere Eingabegrößen führen zur Abhängigkeit.
- (4) Erzeugen einer Stichprobe (im Folgenden auch "Ausspielen" genannt) von Wertekombinationen für die unsicheren Eingabegrößen des Rechenprogramms. Die Stichprobe wird auf der Basis der in den Schritten 2 und 3 quantifizierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen und Abhängigkeiten generiert.
- (5) Erzeugen einer Stichprobe von Rechenergebnissen. Dafür wird mit jedem Wertesatz der in Schritt 4 erzeugten Stichprobe ein Lauf des Rechenprogramms durchgeführt.
- (6) Herleiten von quantitativen Unsicherheitsaussagen zu den Rechenergebnissen. Der Einfluss der berücksichtigten Kenntnisstand-Unsicherheiten auf die Rechenergebnisse wird auf der Basis der in Schritt 5 erzeugten Stichprobe quantifiziert.
- (7) Herleiten von quantitativen Sensitivitätsaussagen zu den Rechenergebnissen. Sensitivitätsmaße werden auf der Basis der in den Schritten 4 und 5 erzeugten Stichproben ermittelt. Damit erhält man diejenigen unsicheren Eingabegrößen des Rechenprogramms, die den größten Beitrag zur Unsicherheit der Rechenergebnisse liefern.
- (8) Interpretation und Dokumentation der Analyseergebnisse.

## 3.1.3 Rechenmodell

Um langwierige Test- und Kalibrationsrechnungen zu vermeiden, wurden alle Berechnungen mit einem vorhandenen, lauffähigen und gut untersuchten Grubengebäudemodell durchgeführt. Dieses Modell ist das bereits in /KOK 12/, /LAR 13/ im Vorhaben VSG genutzte Gittermodell und ist in Abb. 3.1 dargestellt.



## Abb. 3.1 Aufsicht auf das verwendete Grubengebäudemodell

Das Grubengebäudemodell besteht aus 12 Einlagerungsfeldern (Ost 1 bis Ost 12) mit einer unterschiedlichen Anzahl (8 – 19) von Einlagerungsstrecken, welche über die angeschlossenen Querschläge erreichbar sind. Die Einlagerungsfelder sind über die Querschläge mit 2 Richtstrecken, der nördlichen Richtstrecke und der südlichen Richtstrecke, verbunden. Am nördlichen und südlichen Ende der Querschläge befindet sich jeweils ein sog. Dichtpfropfen. Im westlichen Teil des Grubengebäudes sind die Richtstrecken über zwei Abdichtungen an den sog. Infrastrukturbereich angeschlossen. Die Abdichtungen bestehen jeweils aus einem Abdichtungselement und drei Widerlagern. Die verwendeten Parameter für das jeweilige Material sind in Kapitel 3.2 beschrieben.

In den vorliegenden Berechnungen wird ein Zeitraum bis 10.000 Jahre betrachtet.

## 3.2 Prozesse und Modellparameter

Für die Berechnungen mit TOUGH2 kann jedem Gitterelement, oder einer Anzahl von Gitterelementen im Grubenbau, ein Material mit einem jeweils eigenen Parametersatz zugewiesen werden, im Folgenden "Materialgebiete" genannt. Alle genutzten Parame-

ter sind im Anhang A.1 wiedergegeben. Im Kap. 3.2.1 werden die wesentlichen, für das Verständnis dieser Studie notwendigen Prozesse und die zugehörigen Modellparameter der Materialgebiete näher beschrieben. Außerdem werden die potentiellen Kenntnisstand-Unsicherheiten identifiziert (nach Punkt 1 in Kap. 3.1.2). In Kap. 3.2.2 wird auf die Parameterverteilungen für die probabilistischen Berechnungen eingegangen, dies entspricht Punkten 2 – 4 aus Kap. 3.1.2. Soweit nicht anders angegeben werden alle verwendeten Parameterwerte in den Unterlagen /KOK 12/, /LAR 13/ begründet.

#### 3.2.1 Prozesse und Parameter der Materialgebiete

#### Salzgruskompaktion und hydraulische Prozesse

Im Rahmen der Berechnungen wird angenommen, dass alle Einlagerungsstrecken, Querschläge und Richtstrecken mit Salzgrus versetzt werden, der eine Anfangsporosität von 35 % besitzt (s. Tab. A.2). Weiter wird angenommen, das dieser Salzgrusversatz kompaktionsfähig ist und sich am Ende der Kompaktion, welche durch die Gebirgskonvergenz verursacht wird, eine sog. Restporosität  $\Phi_{\text{Restporosität}}$  einstellt (siehe auch /KOK 12/, /LAR 13/). Die Restporosität ist einer der Parameter, welcher im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse variiert wird (s. Kap. 3.2.2 "Restporosität"). Der Feuchtegehalt des Salzgrusversatzes beträgt für die Querschläge und Einlagerungsstrecken 0,02 Gew.-%, entspricht dem natürlichen, "bergfeuchten" Lösungsgehalt und wird im Folgenden als "trocken" bezeichnet. Für den Salzgrusversatz in den Richtstrecken wird ein Feuchtegehalt von 0,6 Gew.-% postuliert und wird im Folgenden deshalb als "angefeuchtet" bezeichnet.

Die Berechnung der Kompaktionsrate K des Salzgrusversatzes erfolgt nach einem vereinfachten Kompaktionsansatz, welcher in /LAR 13/ beschrieben ist und auf folgendem Ansatz basiert /RÜB 10/:

$$K = K_{\text{ref}} \cdot f_{\text{loc}} \cdot f_t \cdot f_P \cdot f_\phi \cdot f_T \tag{3.1}$$

Dabei sind die Faktoren  $f_{loc}$ ,  $f_t$ ,  $f_p$ ,  $f_{\phi}$  und  $f_T$  jeweils Funktionen, welche die lokalen Eigenschaften des umgebenden Salzgesteins, die Zeitabhängigkeit des Kompaktionsprozesses, die Stützwirkung durch den Fluiddruck p von Flüssigkeiten oder Gasen, die Stützwirkung von trockenem oder angefeuchtetem Versatz mit einer Porosität  $\phi$  sowie die Beschleunigung der Kompaktion bei erhöhter Temperatur T durch wärmeproduzierende Abfälle beschreiben.  $K_{ref}$  beschreibt die Referenzkonvergenzrate welche hier mit 0,01 a<sup>-1</sup> /BUH 91/ angenommen wird.

Die Vereinfachung in dem für diese Berechnungen verwendeten Ansatz ist in /LAR 13/, /NAV 13b/ beschrieben. Diese besteht darin, dass die Funktionen der Temperaturabhängigkeit  $f_T$  und der Zeitabhängigkeit  $f_t$  der Kompaktionsrate in den Berechnungen durch eine Approximation mittels geomechanischer Modellrechnungen ersetzt wird, so dass die Porositäten des Versatzes in den Grubenbauen bei Atmosphärendruck zu unterschiedlichen vorgegebenen Zeitpunkten festgelegte Werte erreichen. Der Zeitpunkt des Erreichens von 5 % Porosität wird als Referenzzeitpunkt für die Approximation der Kurvenverläufe gewählt, da die zeitliche Entwicklung der Porosität bis 5 % nahezu lineares Verhalten zeigt, wohingegen die Kurvenverläufe für Porositäten kleiner 5 % (siehe Abb. 3.8 in /LAR 13/) eine starke nicht lineare Zeitabhängigkeit bis zum Erreichen der Restporosität aufweisen.

Die geomechanischen Kompaktionsberechnungen wurden mit dem Rechenprogramm Code\_Bright /CZA 12/ durchgeführt. Aus den aus diesen Berechnungen resultierenden Porositäts-Zeitverläufen wurden Zeitpunkte identifiziert, zu denen Code\_Bright für unterschiedliche Temperaturbedingungen und Feuchtegehalte des Salzgrusversatzes eine Porosität von 5 % berechnet hat. Die durchgeführte Approximation des in TOUGH2 genutzten Kompaktionsansatzes (s. Formel (3.1)) besteht aus zwei wesentlichen Schritten.

- (1) Die Parameter zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit  $f_T$  und der Zeitabhängigkeit  $f_t$  der Kompaktionsrate werden so gewählt, dass die Faktoren  $f_T$  und  $f_t$  den Wert 1 annehmen.
- (2) Der Faktor  $f_{loc}$  wird jeweils für die unterschiedlichen Temperaturbedingungen und Feuchtegehalte – so gewählt, dass die Porosität von 5 % im Grubengebäude bei Atmosphärendruck zu den identifizierten Zeitpunkten erreicht wird.

Der Einfluss eines abweichenden Fluidinnendrucks  $f_P$  und der Stützwirkung des Versatzes  $f_{\phi}$  wird weiterhin im Modellansatz berücksichtigt. Die Berechnung des Faktors  $f_{\phi}$  ist abhängig vom Feuchtegehalt des Salzgrusversatzes. Für trockenen und angefeuchteten Salzgrusversatz werden deshalb jeweils leicht unterschiedliche parametrisierte Funktionen von  $f_{\phi}$  genutzt (s. Tab. A.1). Das bedeutet, dass die Kompaktion bis zu einer Porosität von 5 % im Wesentlichen durch den Faktor  $f_{loc}$  gesteuert wird. Dieser Faktor ist einer der Parameter, der im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse variiert wird (s. Kap. 3.2.2 "Kompaktion").

Im Zuge der Porositätsverringerung durch die Kompaktion verringert sich ebenfalls die Permeabilität des Salzgrusversatzes. Für die Berechnungen wurde folgende Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (Poro-Perm-Beziehung) verwendet:

$$\mathbf{K} = \mathbf{A} * \Phi^{\mathbf{n}} \tag{3.2}$$

wobei K die intrinsische Permeabilität,  $\Phi$  die Porosität und A und n Materialparameter sind. Die Parametrisierung dieser Beziehung für verschiedene Porositätsbereiche ist in Tab. 3.1 wiedergegeben.

Porositätsbereich	A (m <sup>2</sup> )	n
0,1 < <i>Φ</i> < 1	2,00·10 <sup>-09</sup>	4,8
0,05 <i>&lt; Φ &lt;</i> 0,1	6,70·10 <sup>-05</sup>	9,32
$\Phi_{\rm Restporosit extsf{at}} < \Phi < 0.05$	4,99·10 <sup>-11</sup>	4,61

 Tab. 3.1
 Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung

Für die Dichtpfropfen und Streckenverschlüsse wird im Rahmen der Berechnungen angenommen, dass diese aus Sorelbeton (MgO Beton) /MÜL 12a/, /MÜL 12b/ bestehen. Die Streckenverschlüsse bestehen aus drei Widerlagern, welche jeweils in der Mitte und an den Enden des Streckenverschlusses positioniert sind. Zwischen den Widerlagern liegen die eigentlichen Dichtelemente mit einer Länge von jeweils 50 m. Die Länge der Widerlager beträgt zwischen 13,6 m und 15,2 m. Es wird für diese Materialgebiete eine konstante Porosität von 20 % unterstellt. Integral, das heißt inklusive der umgebenden Auflockerungszone, wird für die Dichtelemente eine konstante Permeabilität von 5·10<sup>-17</sup> m<sup>2</sup> angenommen. Die Widerlager und die Dichtpfropfen besitzen im Modell eine gleichbleibende integrale Permeabilität von 1·10<sup>-15</sup> m<sup>2</sup> (s. Tab. A.2).

Für die Berechnungen wird angenommen, dass der Infrastrukturbereich mit einem nicht kompaktierbaren Basaltschotter versetzt wird, dem zusätzlich Bischoffit beigefügt wird um geochemischen Prozessen, die möglicherweise durch Zutritt von Lösungen ins Grubengebäude ablaufen, Rechnung zu tragen /MÜL 12a/, /MÜL 12b/. Im Modell werden dem Basaltschotter eine Porosität von 38 % und eine Permeabilität von 1·10<sup>-8</sup> m<sup>2</sup> zugewiesen.

Alle weiteren – vorwiegend für den Zweiphasenfluss relevanten – Parameter der o.g. Materialgebiete sind im Anhang A.1 in Tab. A.2 aufgeführt.

#### Radionuklidmobilisierung

Für die Berechnungen wird angenommen, dass Radionuklide, die gasförmig oder als leicht lösliche Phasen in den Einlagerungsbehältern vorliegen, als sogenannte "Instant Release Fraction (IRF)" sofort mobilisiert werden. In den vorliegenden Berechnungen wird der Transport volatilen <sup>14</sup>C als CO<sub>2</sub> angenommen. Analog zum Grubengebäudemodell basieren auch die Parameter zur Radionuklidmobilisierung auf einem bereits gut untersuchten Rechenfall aus dem Vorhaben VSG (Rechenfall Y2 aus /LAR 13/).

In den Berechnungen wird angenommen, dass die Einlagerungsstrecken der Einlagerungsfelder Ost 4 – Ost 11 vollständig mit sog. Pollux®-10 Behältern bestückt sind, die Einlagerungsstrecken von Ost 12 sind zu einem großen Teil und die Einlagerungsstrecken von Ost 3 nur teilweise mit diesen Behältern bestückt. Diese Einlagerungsstrecken sind im Modell zum Materialgebiet EINL3 zusammengefasst (s. auch Tab. 3.2). Insgesamt werden 2120 eingelagerte Pollux®-10 Behälter postuliert. Pro Behälter wird von einer IRF-Masse <sup>14</sup>C von 4,76·10<sup>-5</sup> kg ausgegangen. Freigesetzt wird die IRF instantan nach 500 Jahren, da davon ausgegangen wird, dass die Behälter 500 Jahre lang gasdicht sind. Zusätzlich wird angenommen, dass sich in der nördlichen Einlagerungsstrecke des Feldes Ost 12 ein defekter Behälter befindet, dessen IRF instantan, also bereits zu Beginn der Berechnung, freigesetzt ist.

In den Transportberechnungen wird der radioaktive Zerfall von <sup>14</sup>C berücksichtigt (Halbwertszeit 5730 Jahre). Ebenso berücksichtigt werden die Diffusion der Radionuklide zwischen den Phasen nach dem sog. Henry-Gesetz. Danach ist ein Anteil einer gasförmigen Verbindung physikalisch in einer flüssigen Phase gelöst. Das Henry-Gesetz  $P_g = K_h \cdot x_g^{fl}$  beschreibt die Proportionalität zwischen Partialdruck der gasförmigen Verbindung  $P_g$  über der Flüssigkeit und ihrem Stoffmengengehalt in der Flüssigkeit  $x_g^{fl}$ . Der dabei auftretende Henry-Koeffizient  $K_h$  mit der Dimension eines Druckes ist spezifisch für die gasförmige Verbindung und die Stoffzusammensetzung der Flüssigkeit, temperaturabhängig und TOUGH2-Eingabeparameter für das transportierte Radionuklid. Der Henry-Koeffizient für CO<sub>2</sub> in Wasser wurde der NIST-Datenbank /SAN 99/ entnommen, wobei der dort tabellierte Wert  $k_H^0 = 0,034$  mol kg<sup>-1</sup> bar<sup>-1</sup> (formuliert als Quotient zwischen der pro Masse wässriger Lösung gelösten Stoffmenge und dem Partialdruck der

gasförmigen Verbindung bei 25 °C) mittels der molaren Masse von Wasser und einer ebenfalls in /SAN 99/ angegebenen Temperatur-Korrektur-Funktion in den für TOUGH2 benötigten Eingabeparameter (bei 60 °C als Mittelwert der relevanten Temperaturverteilung) umgerechnet wurde. Chemische Prozesse in der flüssigen Phase werden nicht modelliert.

#### Korrosion der Behälter und Gasbildung

In den Berechnungen wird davon ausgegangen, dass auch geringe Mengen an Flüssigkeit im Grubengebäude an den Behältern zu Korrosionsprozessen führen. Im Modell wird angenommen, dass ausschließlich eine anaerobe Korrosion des Eisens mit Wasser zu Magnetit unter Wasserstoffbildung erfolgt nach der Reaktionsgleichung:

$$3 \text{ Fe} + 4 \text{ H}_2\text{O} \rightarrow \text{Fe}_3\text{O}_4 + 4 \text{ H}_2$$
 (3.3)

Die Feuchtigkeits- bzw. Lösungsmenge ist der limitierende Faktor bei der Korrosion, da in dem hier genutzten Modell genügend Metall zur Verfügung steht /FRI 12/. Das initiale Lösungsangebot ist abhängig von der Feuchtigkeit der mit den Abfallgebinden eingebrachten mobilen Feuchte, der Feuchtigkeit aus dem Salzgrusversatz und dem Prozess der sog. thermochemischen Sulfatreduktion (s. /WOL 12/). Die genaue Menge der zur Verfügung stehenden Feuchte ist mit großen Unsicherheiten behaftet, deshalb wird dieser Parameter im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse variiert (s. Kap. 3.2.2 "Wassermenge").

Durch die Korrosion der Behälter entsteht eine gasförmige Phase, im Modell ist dies Wasserstoff (s. Formel (3.3)). Die Geschwindigkeit, mit welcher die Korrosion abläuft ist je nach den geochemischen Randbedingungen unterschiedlich. Die Bandbreite möglicher, endlagerrelevanter Korrosionsraten für trockene und feuchte Bedingungen und für unterschiedliche Behältermaterialien ist in /MÖH 11/ zusammengestellt. Die Korrosionsrate wird im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse variiert (s. Kap. 3.2.2 "Korrosionsrate").

## 3.2.2 Parameterverteilungen im Rahmen der probabilistischen Berechnungen

In Kap. 3.2.1 wurden für die vorliegenden Berechnungen insgesamt vier Kenntnisstand-Unsicherheiten identifiziert, die nachfolgend im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse betrachtet werden sollen. Diese sind

(1) die Restporosität des Salzgrusversatzes  $\Phi_{\text{Restporosität}}$ ,

- (2) die Kompaktionsrate des Salzgrusversatzes  $f_{loc}$ ,
- (3) die zur Korrosion zur Verfügung stehende Lösungs- bzw. Wassermenge sowie
- (4) die Korrosionsrate an den Einlagerungsbehältern.

An dieser Stelle muss erwähnt werden, dass zahlreiche weitere potentielle Kenntnisstandunsicherheiten existieren. Für die vorliegenden Berechnungen betrifft dies vor allem Parameter, die als "Zweiphasenflussparameter" bezeichnet werden können. Dies sind beispielsweise Parameter die in die Funktionen zur relativen Permeabilität und zum Kapillardruck eingehen. Diese Parameterungewissheiten werden in den vorliegenden Berechnungen nicht betrachtet.

Im Folgenden wird für die betrachteten Parameter eine kurze Beschreibung der Kenntnisstandunsicherheit gegeben und die Parameterbandbreite ermittelt, welche zur Erstellung der Stichprobe von SUSA benötigt wird. Ein Überblick über alle variierten Parameter und ihrer Bandbreiten gibt Tab. A.3.

## Restporosität

Ausgehend von /POP 12/ kann von einer Restporosität des Salzgrusversatzes von 1 %  $\pm$  1 % ausgegangen werden. Für diese Untersuchung läge damit der Wertebereich dieses Parameters zwischen 0 % und 2 % Porosität. Bei einer Porosität von 0 % wäre kein Fluidfluss mehr möglich, so dass sich dazu Berechnungen erübrigen würden. Deshalb und auch aus Gründen der numerischen Stabilität für das Rechenprogramm TOUGH2 wird als untere Grenze der Porosität 0,5 % gewählt, so dass die Eingangsparameterbandbreite für SUSA 0,005 – 0,02 beträgt. Zu einer Wahrscheinlichkeitsverteilung dieser Porositätswertebereiche liegen keine Erkenntnisse vor, deshalb wird in dieser Arbeit von einer Gleichverteilung ausgegangen. Der Parameter ist nicht abhängig von anderen Parametern.

#### Kompaktionsrate

Wie in Kap. 3.2.1 erwähnt, wird die Kompaktion des Salzgrusversatzes durch den Faktor floc gesteuert. Die Approximation der Porositäts-Zeitverläufe mittels dieses Faktors ist ebenfalls in Kap. 3.2.1 beschrieben. Der Wertebereich dieses Faktors hängt von den Eigenschaften des Salzgrusversatzes und somit programmtechnisch von den Materialgebieten ab. Zur Anpassung des Kompaktionsansatzes mittels  $f_{loc}$  wurden die Materialgebiete, in welchen Salzgrus als Versatz genutzt wird, nach ihrem Feuchtegehalt und nach ihrer Temperatur in insgesamt 5 Klassen eingeteilt (siehe auch /NAV 13b/). Zusätzlich wurde in den geomechanischen Modellrechnungen, die zur Kalibration verwendet werden, eine Unsicherheitsbandbreite der Kompaktionsgeschwindigkeit verwendet, so dass für jede Temperatur-Feuchte-Klasse ein hoher und ein niedriger Wert für floc bestimmt wurde. An diesen beiden Werten wurde sich bei der Wahl der Parameterbandbreite (Gleichverteilung) für die Unsicherheitsanalyse orientiert. Tab. 3.2 listet die Temperatur-Feuchte Klassen und die verwendeten Parameterbandbreiten auf. In dieser Tabelle und in der weiteren Arbeit wird zum besseren Verständnis nicht der – sehr abstrakte – Faktor  $f_{loc}$  wiedergegeben, sondern direkt der mit der Änderung des Faktors verbundene Zeitpunkt t<sub>comp</sub> ("Kompaktionszeit") zu welchem der Salzgrusversatz eine Porosität von 5 % erreicht hat. Dabei gilt für die hier vorgestellten Berechnungen:

$$f_{\rm loc} = \begin{cases} \frac{95 a}{t_{\rm comp}} & \text{für trockenen Versatz} \\ \frac{48 a}{t_{\rm comp}} & \text{für angefeuchteten Versatz} \end{cases}$$
(3.4)

Zusätzlich sind in Tab. 3.2 die Materialgebiete wiedergegeben, die in die jeweilige Temperatur-Feuchte Klasse eingruppiert worden waren. Im Ergebnis gibt es demnach nicht einen Parameter der variiert wird, sondern insgesamt 7 (analog zur Anzahl der Materialgebiete). Tab. 3.2Zeitpunkte des Erreichens von 5 % Porosität für einzelne Materialgebiete<br/>und gewählte Parameterbandbreite im Modell

Klassen	Kompaktionszeit t <sub>comp</sub>		Modelldatensatz		
Bedin- gungen	schnelle Kompakti- on (a)	langsame Kompakti- on (a)	Materialgebiete	Genutzte Pa- rameterband- breite $t_{comp}$ (a)	
trocken, heiß	10	50	"EINL2": Teile des Einlage- rungsfeldes Ost 1 und Groß- teil von Ost 3 sowie das Ein- lagerungsfeld Ost 2 (ohne Querschläge) "EINL3": Teile des Einlage- rungsfeldes Ost 3 sowie Ein- lagerungsfelder Ost 4 bis Ost 12 (ohne Querschläge); hier befindet sich das <sup>14</sup> C- Inventar "EINL4": südl. Strecke des Einlagerungsfeldes Ost 12 (ohne Querschlag)	7,5 – 55	
trocken, warm	80	200	"Querschlag" (Querschläge)	75 – 210	
trocken, kalt	800	1.000	EINL1: Großteil der Einlage- rungsstrecken von Ost 1	750 – 1.050	
ange- feuchtet, warm	50	100	"Richtstrecke" (Richtstrecken)	45 – 105	
ange- feuchtet, kalt	80	200	"Schacht" (Salzgrusdichtung in den Schächten)	75 – 210	

Obwohl die genutzten Parameterbandbreiten für die einzelnen Materialgebiete unterschiedlich sind, wird für die Materialgebiete, die als "trocken" klassifiziert sind, postuliert, dass sie nicht voneinander unabhängig sind, da letztlich das gleiche Material verwendet wird. Das heißt, wenn für einen Parameter der höchstmögliche Zeitpunkt bis zum Erreichen einer Porosität von 5 % durch das Programm SUSA ausgespielt wird (z. B. 1.050 a für den Großteil des Einlagerungsfeldes Ost 1), dann werden für andere Materialgebiete ebenfalls die höchstmöglichen Werte aus der Parameterbandbreite gewählt.

In SUSA sind die Stichproben der Kompaktionszeiten der Querschläge und der Einlagerungsstrecken der Einlagerungsfelder Ost 2 – 12 somit vollständig (Abhängigkeit = 1) abhängig vom Ausspielergebnis der Kompaktionszeit des Großteils der Strecken von Ost 1 (Materialgebiet EINL1). Die Stichproben des Großteils der Strecken von Ost 1, der Richtstrecken und der Salzgrusdichtung hingegen werden vollständig unabhängig voneinander ausgespielt. Die Salzgrusdichtung in den Schächten und der Salzgrusversatz in den Richtstrecken werden zwar beide als "angefeuchtet" kategorisiert, werden aber in vollständig unterschiedlichen Verfahren ins Bergwerk eingebracht, so dass deshalb eine Unabhängigkeit des Kompaktionsverhaltens postuliert wird.

Die Parameter Kompaktionszeit und Restporosität sind möglicherweise nicht vollständig unabhängig voneinander. Eine potentielle Abhängigkeit ist jedoch schwer zu quantifizieren, deswegen wird dieser Parameter unabhängig vom Parameter Restporosität ausgespielt. Alle Parameterbandbreiten werden als gleich verteilt angenommen.

#### Wassergehalt

In Berechnungen, die mit diesem Modell bereits durchgeführt wurden /KOK 12/, /LAR 13/ wurde von einem zur Korrosion zur Verfügung stehenden Wassergehalt von insgesamt 37,68 kg bis 55,62 kg pro Behälter ausgegangen. Diese Zahlen setzen sich zusammen /FRI 12/, /LAR 13/ aus dem Wassergehalt von 60 g bis 18 kg pro eingelagerten Pollux®-10-Behälter, aus dem Feuchtegehalt des gesamten Salzgrusversatzes in einer Einlagerungsstrecke mit einem Feuchtegehalt (Massenanteil) von 0,02 % (34,22 kg pro Behälter) sowie aus der thermochemischen Sulfatreduktion, welche 3,4 kg pro Behälter beisteuert. Für die vorliegenden Berechnungen wurde eine Parameterbandbreite von 0 kg bis 60 kg als zur Korrosion zur Verfügung stehendes Wasserangebot angenommen. Dabei wurde berücksichtigt, dass das zur Korrosion zur Verfügung stehende Wasser im Endlager so weit wie möglich reduziert werden soll. Zur Wahrscheinlichkeitsverteilung des Parameters liegen keine Informationen vor, so dass auch hier eine Gleichverteilung angenommen wurde. Der Parameter wird unabhängig von anderen Parametern ausgespielt.

## Korrosionsrate

/MÖH 11/ gibt einen Überblick über die Bandbreite möglicher Korrosionsraten unter Endlagerbedingungen. Für die Korrosionsraten für das sog. "trockene Szenario" werden für den äußeren Behälter ca. 15 μm/a angenommen für das sog. "feuchte Szenario" (mit vollständiger Wassersättigung) 150 μm/a bis 10 Jahren und 100 μm/a nach 10 Jahren /MÖH 11/. Im Vorhaben VSG wurden Korrosionsraten von 0,04; 0,1; 5,1 und 15 μm/a als wahrscheinlich, Korrosionsraten von 100 μm/a als weniger wahrscheinlich beurteilt. Für die vorliegenden Berechnungen wird eine Bandbreite von 0,04  $\mu$ m/a bis 150  $\mu$ m/a gewählt. Da in den vorliegenden Berechnungen keine Lösung von außen zutritt und die initiale Feuchtigkeitsmenge insgesamt sehr gering ist, wird eine Log-Gleichverteilung für die Parameterbandbreite angenommen, so dass das Ausspielen von (im linearen Maßstab) niedrigen Korrosionsraten wahrscheinlicher ist als das Ausspielen hoher Korrosionsraten.

## Ermittlung der Stichprobe zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Aus den obigen Ausführungen folgt, dass insgesamt 10 Eingangsparameter variiert werden, von denen 4 abhängige Eingangsparameter sind. Eine Übersicht aller Eingangsparameter ist in Tab. 3.3 zu finden. Aus den Parameterbandbreiten der Eingangsparameter für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wird mit dem sog. SRS-Verfahren (engl. "Simple Random Sampling") eine Stichprobe erzeugt, die den Umfang einer vorher festgelegten Zahl von Wertesätzen hat. Die Stärke des SRS-Verfahrens besteht darin, dass genau bekannt ist, welche Art von Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen gemacht werden können /HOF 92/.

Parameter Nr.	Parameter	Einheit	Wertebereich	Verteilung	Abhängigkeit
1	Wassermasse pro Behälter	kg	0 – 60	Gleich	0
2	Korrosionsrate	μm/a	0,04 – 150	Log-Gleich	0
3	Restporosität		0,005 - 0,02	Gleich	0
4	Kompaktion EINL1	а	750 – 1.050	Gleich	0
5	Kompaktion EINL2	а	7,5 – 55	Gleich	1, von Pa- rameter 4
6	Kompaktion EINL3	а	7,5 – 55	Gleich	1, von Pa- rameter 4
7	Kompaktion EINL4	а	7,5 – 55	Gleich	1, von Pa- rameter 4
8	Kompaktion Querschlag	а	75 – 210	Gleich	1, von Pa- rameter 4
9	Kompaktion Richtstrecke	а	45 – 105	Gleich	0
10	Kompaktion Schacht	а	75 – 210	Gleich	0

## Tab. 3.3 Übersicht aller Eingangsparameter

In der vorliegenden Untersuchung hat die Stichprobe den Umfang von 100 Wertesätzen. Das bedeutet, dass 100 verschiedene Modellläufe mit definierten Parameterwerten durchgeführt werden. Die Stichprobe ist im Anhang A.1.2 wiedergegeben.

#### 3.2.3 Radiologischer Geringfügigkeitsindex

Zur Herleitung quantitativer Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen muss für die durchgeführten Rechenläufe ein quantitativ vergleichbares Rechenergebnis vorliegen. In den vorliegenden Berechnungen wurde der sog. radiologische Geringfügigkeitsindex (RGI) zu diesem Zweck genutzt, der nach den Vorgaben aus den Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ des Bundesministeriums für Natur, Umweltschutz und Reaktorsicherheit (BMU) für einen vereinfachten radiologischen Nachweis entwickelt wurde.

Der RGI wird wie folgt berechnet:

$$RGI = \sum_{i} \sum_{n=1}^{2} (\tilde{F}_{i,n} / \tilde{c}_i + \bar{F}_{i,n} / \bar{c}_i)$$
(3.5)

Dabei sind  $\tilde{F}_{i,n}$  und  $\bar{F}_{i,n}$  jeweils die Aktivitätsströme in der flüssigen bzw. gasförmigen Phase für das *i*-te Radionuklid durch den *n*-ten Verschluss. Die Integration erfolgt über die Verschlüsse, da in den vorliegenden Berechnungen von einem geomechanisch integren Endlager ausgegangen wird und deshalb der Radionuklidaustrag nur über die (hier 2) Verschlüsse der (beiden) Richtstrecken erfolgen kann (s. Abb. 3.1). Die Konversionskonstanten  $\tilde{c}_i$  and  $\bar{c}_i$  des *i*-ten Radionuklids für die Freisetzung aus der flüssigen und gasförmigen Phase berücksichtigen für jede Phase ein ausgereiftes Expositionsmodell. Dabei wird für die flüssige Phase eine Gruppe von 10 Menschen betrachtet, die ihren Wasserbedarf (z. B. Trinkwasser, Bewässerung für Nahrungsmittelanbau und Tierhaltung) ausschließlich aus einem Brunnen bezieht, in welchen der gesamte Radionuklidstrom aus dem Endlager mündet. Weiter wird angenommen, dass die gasförmige Phase inklusive der in ihr enthaltenen Radionuklide vollständig in ein Haus entweicht und dort die Atemluft dieser Gruppe von 10 (dort wohnenden) Menschen belastet. Weitere Details zum Expositionsmodell sind in /LAR 13/ beschrieben. Die Konversionskonstanten  $\tilde{c}_i$  and  $\bar{c}_i$  sind so gewählt, dass unter Berücksichtigung dieses Expositionsmodells eine kollektive Dosis dieser Gruppe von  $S \le 10^{-4}$  Personen-Sievert pro Jahr (als Maß für eine sog. geringfügige Freisetzung) einem RGI  $\leq$  1 entspricht.

In den vorliegenden Berechnungen wird ausschließlich <sup>14</sup>C als freigesetztes Radionuklid betrachtet. Damit gilt für den hier berechneten RGI:

$$\mathrm{RGI}_{\mathrm{C14}} = \sum_{n=1}^{2} (\tilde{F}_{\mathrm{C14},n} / \tilde{c}_{\mathrm{C14}} + \bar{F}_{\mathrm{C14},n} / \bar{c}_{\mathrm{C14}})$$
(3.6)

mit  $\tilde{c}_{C14} = 1,087 \cdot 10^5 \text{ Bq/a}$  und  $\bar{c}_{C14} = 2,815 \cdot 10^8 \text{ Bq/a}$ .

In jedem Modelllauf wird der  $RGI_{C14}$  für ausgewählte Zeitschritte ermittelt – im Folgenden als  $RGI_{time}$  bezeichnet – und für jeden Modelllauf der maximale Wert von  $RGI_{time}$  – im Folgenden mit  $\widehat{RGI}$  bezeichnet – berechnet.

#### 3.3 Herleitung von quantitativen Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen

Der Satz der (hier 100) Realisationen der Modelleingangsparameter, der mit dem SRS-Verfahren aus den o.g. Parameterverteilungen gewonnen wurde, kann als Stichprobe der "bekannten" (d. h. als bekannt angenommenen) Eingangsparameterverteilung<sup>1</sup> bezeichnet werden. Die Anzahl der Realisationen (nicht die Anzahl der variierten Eingangsparameter) wird auch als Stichprobengröße bezeichnet. Die Modellergebnisgröße, z. B. RGI, kann als unbekannte Ergebnisverteilung interpretiert werden, über welche mit Hilfe der deterministischen Modellrechnungen Aussagen gewonnen werden sollen, welche wiederum Aussagen über das Modell selbst bzw. das Endlagersystem zulassen. Die Ergebnisse dieser Modellrechnungen mit TOUGH2, also der Satz der (hier 100) RGI-Werte, kann dann als Stichprobe der Ergebnisverteilung – im Folgenden auch als "Ergebnisstichprobe" - bezeichnet werden. Eine mit dem SRS-Verfahren generierte Eingangsparameterstichprobe und die zugehörige Ergebnisstichprobe sind geeignet, Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen zu formulieren /HOF 92/. Gibt es verschiedene Modellergebnisgrößen, werden diese separat und zunächst unabhängig voneinander analysiert. Eine zeitindizierte Ergebnisgröße wie RGI<sub>time</sub> wird in diesem Zusammenhang als verschiedene Modellergebnisgrößen (für jeden ausgewählten Zeitschritt eine) behandelt. Erst bei der Diskussion und Interpretation der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse(n) – genau genommen werden für jeden Zeitschritt eigene Sensiti-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Werden die Verteilungen der Eingangsparameter zusammengenommen betrachtet, werden sie häufig als *eine* (sog. "multivariate") Eingangsparameterverteilung bezeichnet.

vitätsaussagen getroffen – werden diese Ergebnisse in ihrem zeitlichen Verlauf betrachtet und interpretiert. Dieser letzte Schritt der Gesamt-Sensitivitätsanalyse kann häufig wichtige Beiträge zum Systemverständnis liefern.

#### Unsicherheitsanalyse

Im hier verwendeten Ansatz der Unsicherheitsanalyse werden für die Ergebnisstichprobe bestimmte Kenngrößen gewählt, die den Eigenschaften der Ergebnisverteilung entsprechen /HOF 92/.

Als Konsequenz aus dem Grenzwert für geringfügige Freisetzung (RGI < 1) ergeben sich beispielsweise folgende Fragen (nach /HOF 92/), die anhand der Kenngrößen beantwortet werden können.

- Mit welcher Wahrscheinlichkeit, bei vorfestgelegter Aussagesicherheit, liegt der RGI unterhalb eines bestimmten Wertes (hier RGI = 1)?
- Unterhalb welchen Wertes (hier RGI = 1) liegt eine bestimmte Prozentzahl der Ergebnisse? Mit welcher Aussagesicherheit lässt sich dies belegen?

Die Kenngrößen, die gewählt werden, werden mit der Methode der sog. verteilungsfreien Toleranzen gebildet (/HOF 92/ sowie darin enthaltene Verweise). Bei dieser Methode spielt die Form der Eingangsparameterverteilung keine Rolle, sondern lediglich das Verfahren, mit dem die zugehörige Stichprobe gewonnen wird (hier SRS-Verfahren). In der vorliegenden Unsicherheitsanalyse werden einseitige obere ( $\beta$ ,  $\gamma$ )-Toleranzgrenzen für unterschiedliche Werte von  $\beta$  und  $\gamma$  berechnet. Dabei ist  $\beta$  ein Anteil der Verteilungsfunktionen der Stichprobe und  $\gamma$  die Aussagesicherheit. Das bedeutet, dass mit dieser Methode beispielsweise folgende Aussage getroffen werden kann: Mit einer Aussagesicherheit von  $\gamma$  liegt ein Anteil von mindestens  $\beta$  der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ergebnisses unterhalb der berechneten Toleranzgrenze.

## Sensitivitätsanalyse

Im hier verwendeten Ansatz der Sensitivitätsanalyse werden die wichtigsten unsicheren Modellparameter bestimmt und gemäß ihres Beitrags<sup>2</sup> zur Ergebnisunsicherheit geordnet /KRZ 90/. Als Basis dienen die Eingangsparameterstichprobe und die Ergebnisstichprobe.

In dieser Arbeit werden zahlreiche Sensitivitätsmaße berechnet, die im Folgenden beschrieben werden:

Mit der Methode der sog. Produkt-Moment-Korrelation (auch "Pearson-Korrelation") werden drei Korrelationskoeffizienten berechnet. Diese liefern ein Maß für eine lineare Abhängigkeit zwischen Parameter und Ergebnis. Dabei wird unterschieden zwischen einfachem ("ordinary") Korrelationskoeffizienten (im Folgenden OCC genannt), partiellem ("partial") Korrelationskoeffizienten (im Folgenden PCC genannt) und standardisiertem ("standardized") Regressionskoeffizienten (im Folgenden SCC genannt). In /KRZ 90/ sind detaillierte Informationen auch zum Berechnungsschema der unterschiedlichen Korrelationskoeffizienten zu finden.

Für die Quantifizierung des Grades monotoner (nicht notwendigerweise linearer) Abhängigkeiten zwischen Parametern und Ergebnis werden in dieser Arbeit Korrelationskoeffizienten aus der Gruppe der Rang-basierten Korrelationen berechnet. Darunter sind der sog. Quadrantkorrelationskoeffizient (OQM für "Ordinary Quadrant Measure"), Kendalls Rangkorrelationskoeffizient (OKC für "Ordinary Kendall's correlation Coefficient") sowie Spearmans Rangkorrelationskoeffizient (OSC für "Ordinary Spearman's correlation Coefficient"). Auch für jede dieser Methoden werden die o. g. unterschiedlichen Korrelationskoeffizienten (ordinary, partial, standardized) berechnet, so dass sich daraus 9 verschiedene Sensitivitätsmaße ergeben<sup>3</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Wenn hier und im Folgenden von Beitrag oder Wichtigkeit eines Parameters gesprochen wird, so ist dieses im Sinne von "Wertebereich des Parameters bzw. Eingangsparameterverteilung bzw. Parameterunsicherheit" zu verstehen, denn ein (nicht variierter) Parameter ohne Unsicherheit kann prinzipiell keinen Beitrag zur Ergebnisunsicherheit liefern.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Der hier aus Gründen der Systematik OSC genannte Rangkorrelationskoeffizient wird in der Literatur häufig als RCC ("(Spearman's) ordinary correlation coefficient on ranks") und der hier PSC genannt Rangkorrelationskoeffizient als RPCC ("(Spearman's) partial correlation coefficient on ranks") bezeichnet.

Zusätzlich von Interesse ist das sog. Bestimmtheitsmaß, "*R*<sup>2</sup>", das für jede der 4 aufgeführten Methoden angibt, welcher Anteil der Ergebnis-Varianz durch die lineare Regressionsfunktion der entsprechenden Methode erklärt werden kann. Es kann als Indikator der Relevanz der linearen Regressionsfunktion für die Beschreibung des Modells und somit als Indikator für die Eignung der aus ihr abgeleiteten Sensitivitätsmaße – direkt aus ihr abgeleitet sind die standardisierten Regressionskoeffizienten SCC, SQM, SKC, SSC – angesehen werden.

Außerdem wird das sog. Korrelationsverhältnis CR ("correlation ratio") berechnet, das den Grad einer (beliebigen) funktionalen Abhängigkeit zwischen Eingabeparameter und Ergebnis quantifiziert, sowie das rangbasierte Korrelationsverhältnis CRR ("correlation ratio on ranks"), bei dem für jeden Parameter die tatsächlichen Werte in der Stichprobe durch ihre Ränge in der Stichprobe ersetzt wurden. Das Korrelationsverhältnis wird manchmal als Varianz-basiertes Maß für "die Sensitivität" eines Modells bzgl. eines Parameters angesehen, da sein Quadrat (CR<sup>2</sup>) den Anteil der Modellvarianz angibt, der allein durch den betrachteten Parameter erklärt werden kann.

Unterschiede zwischen CR und OCC können auf nicht-lineare und nicht-monotone Abhängigkeiten zwischen Parametern und Ergebnis hindeuten. Wichtiger dürfte für diese Untersuchung jedoch sein, dass beide Sensitivitätsmaße, OCC und CR, nicht rang-basiert sind, sondern auf den natürlichen Zahlenwerten der Parameter- und Ergebnis-Stichproben operieren, so dass diese Maße durch die großen Zahlenwerte dominiert werden. Für eine Ergebnisgröße wie den RGI, der eher auf einer logarithmischen Skala variiert als auf einer linearen, können entsprechende Unterschiede zwischen OCC/CR auf der einen und OSC/CRR auf der anderen Seite auftreten. Insgesamt werden in dieser Arbeit somit 14 verschiedene Sensitivitätsmaße sowie die zugehörigen Bestimmtheitsmaße berechnet. Diese sind mit ihrer hier verwendeten Abkürzung in Tab. 3.4 zusammengestellt.

Gruppe	Verwendete Metho- de zur Bestimmung der Korrelations- matrix	Art des Korrelati- onskoeffizienten und Be- stimmtheitsmaß	Abk. für das Sensi- tivitäts- maß	Wer- tebe- reich
Natürliche linea- re Korrelationen (messen Grad einer linearen Beziehung)	Produkt-Moment- Korrelation oder Pearson-Korrelation ("Pearson's (rho) Correlation Coeffi-	Ordinary Partial Standardized par- tial regression	OCC PCC SCC	-1 bis 1
Ordinal invarian- te (Rang- basierte) Korre- lationen (mes- sen Grad einer	cient") Quadrantkorrelati- on("Quadrant Mea- sure")	Ordinary Partial Standardized par- tial regression	OQM PQM SQM	-1 bis 1
monotonen Be- ziehung)	Kendalls Rangkorre- lation (" <b>K</b> endall's (tau) <b>C</b> orrelation")	R Ordinary Partial Standardized par- tial regression	OKC PKC SKC	-1 bis 1
	Spearmans Rang- korrelation (" <b>S</b> pear- man's (rho) <b>C</b> orrela- tion")	<ul> <li><i>R</i><sup>2</sup></li> <li>Ordinary</li> <li>Partial</li> <li>Standardized partial regression</li> <li><i>R</i><sup>2</sup></li> </ul>	OSC PSC SSC	0 bis 1 -1 bis 1 0 bis 1
Varianz-basierte Sensitivitätsma- ße (messen	Korrelationsverhält- nis (" <b>C</b> orrelation <b>R</b> a- tio")		CR	0 bis 1
Grad einer (be- liebigen) funkti- onalen Abhän- gigkeit)	Rang- Korrelationsverältnis ("Correlation Ratio on Ranks")		CRR	0 bis 1

**Tab. 3.4**Übersicht der verwendeten Sensitivitätsmaße

## 4 Ergebnisse und Diskussion

#### 4.1 Ergebnisse aus den TOUGH2 Modellläufen

Aus insgesamt 100 Modellläufen liegen 100 Zeitreihen des jeweils berechneten RGI vor. Alle Zeitreihen sind in Abb. 4.1 dargestellt. Erkennbar ist, dass in nahezu allen Fällen RGI<sub>time</sub> bis zu einem Zeitraum von 75 a – 100 a ansteigt. Teilweise liegt RGI<sub>time</sub> nur leicht unter 1. Spätestens nach 100 Jahren sinkt RGI<sub>time</sub>. Nach diesem Zeitpunkt lassen sich die Kurven grob in zwei Gruppen einteilen: In manchen Fällen sinkt RGI<sub>time</sub> kontinuierlich weiter bis zum Ende der Modelllaufzeit. In den anderen Fällen steigt RGI<sub>time</sub> erneut an. Dieser Anstieg erfolgt frühestens nach 500 Jahren, teilweise auch erst ab 5.000 Jahre.



Abb. 4.1 RGI<sub>time</sub>, d. h. Zeitreihen des RGI, von 100 Modellläufen

Die aus den  $RGI_{time}$  bestimmten Maximalwerte,  $\widehat{RGI}$ , wurden nach ihrer Größe sortiert. Diese Rangliste ist in Abb. 4.2 dargestellt, alle Ergebniswerte finden sich in Tab. A.5 in Anhang A.2.



Abb. 4.2 Rangfolge der berechneten RGI aus 100 Modellläufen

Im Bereich von RGI = 1 liegen folgende, nach ihrer Größe sortierte, Werte: 0,9; 0,96; 1,28; 1,52; 1,73. Das heißt, dass in 3 von den 100 Modellläufen  $\widehat{\text{RGI}} > 1$  ist. Der größte berechnete RGI beträgt 1,73.

#### 4.2 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse

#### RĜI

Es ist für die radiologische Analyse der maximalen RGI ( $\widehat{RGI}$ ) nicht weiter interessant mit welcher Aussagesicherheit ein bestimmter Prozentsatz der Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\widehat{RGI}$  unterhalb des größten berechneten Wertes (1,73) liegt. Vielmehr ist von Interesse mit welcher Aussagesicherheit ein bestimmter Prozentsatz der Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\widehat{RGI}$  unterhalb von 1 liegt. Das heißt, dass entsprechend der Beschreibung in Kap. 3.3 die Werte von  $\beta$  und  $\gamma$  so variiert werden, dass die Unsicherheitsaussage für eine ( $\beta$ ,  $\gamma$ )-Toleranzgrenze von kleiner als 1, aber möglichst nahe an 1, getroffen wird. Entsprechend der Rangliste der sortierten Ergebnisse (s. o.) gilt dies für den 97. Rang mit  $\widehat{RGI} = 0,96$ .
Die Unsicherheitsanalyse kann unter zwei Gesichtspunkten erfolgen, das Ergebnis ist in Tab. 4.1 dargestellt: Wenn für die Fragestellung ein größtmöglicher Wertebereich, in dem ein bestimmter Prozentsatz der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ergebnisses ( $\beta$ ) liegt, von Interesse ist, erniedrigt sich die Aussagesicherheit ( $\gamma$ ) für diesen Wertebereich. Wenn umgekehrt eine hohe Aussagesicherheit Ziel einer Fragestellung ist, gilt diese hohe Aussagesicherheit nur für einen niedrigeren Prozentsatz der Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Anteil der Wahrscheinlich- keitsverteilung des Ergebnis- ses unter $\widehat{\text{RGI}}$ = 0,96 in % ( $\beta$ )	85	87	90	92	93	95	99
Aussagesicherheit in % (γ)	99,99	99,9	99	95	90	74	1,84

Tab. 4.1	Resultat der	Unsicherheitsanalyse	(bzgl. des §	97. Ranges, RGI	= 0,96)
----------	--------------	----------------------	--------------	-----------------	---------

Die Ergebnisse in Tab. 4.1 lassen sich (nach /HOF 92/) beispielsweise folgendermaßen interpretieren:

Für einen Stichprobenumfang von 100 Modellläufen liegen mindestens 90 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung mit einer Aussagesicherheit von 99 % unterhalb eines RGI von 0,96. Dies gilt analog für alle Wertekombinationen in den Spalten von Tab. 4.1. 85 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung liegen sogar mit einer Aussagesicherheit von 99,99 % unter 0,96. Allerdings beträgt die Aussagesicherheit dafür, dass 99 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\widehat{RGI}$  unterhalb von 0,96 liegen, nur 1,84 %; diese Aussage ist also fast sicher falsch und daher nicht sinnvoll.

### **RGI**time

Die Unsicherheitsanalyse liefert mit denselben Werten von  $\beta$  und  $\gamma$  (wie in Tab. 4.1) für alle Ergebnisse, also auch für RGI<sub>time</sub>, denselben Rang (den 97.) als Toleranzgrenze. Das heißt, dass für die Ergebnisaussage zur Unsicherheit ebenfalls die Resultate aus Tab. 4.1 gelten. Der Unterschied zum  $\widehat{RGI}$  liegt ausschließlich in dem Wert des 97. Rangs, der für RGI<sub>time</sub> zu jedem Zeitpunkt anders ist und beispielsweise zum Zeitpunkt t = 1.500 a RGI<sub>time</sub>= 0,82 beträgt. Demnach kann mit einer Aussagesicherheit von 99 % gesagt werden, dass zum Zeitpunkt *t* = 1.500 a 90 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung

von RGI<sub>time</sub> unter 0,82 liegen. Dieser Unterschied ist zur Illustration grafisch in Abb. 4.3 gezeigt.



# Abb. 4.3 Ergebnisse der Modellrechnungen mit den höchsten RGI im Bereich 1.000 bis 5.000 Jahre

Farbige Linien: Modellläufe mit den 4 größten  $\widehat{\text{RGI}}$  (die  $\widehat{\text{RGI}}$ -Ränge sind an den blauen Quadraten markiert); gelbe Kreise: Höchste  $\text{RGI}_{\text{time}}$  für Zeitindex t = 1.500 a inkl.  $\text{RGI}_{\text{time}}$ -Ränge dieses Zeitindexes.

Für die gesamte Zeitreihe ist das Ergebnis grafisch in Abb. 4.4 dargestellt. Die blaue Linie in dieser Abbildung zeigt den 97. Rang des berechneten  $RGI_{time}$  jeweils bezogen auf den Zeit-Index, sie zeichnet also keinen einzelnen Modelllauf nach. Analog zu den getroffenen Aussagen zum  $\widehat{RGI}$  (s. o., auch Tab. 4.1) gelten entsprechende Aussagen für den Bereich unterhalb der blauen Kurve: Mit einer Aussagesicherheit von 99 % liegen 90 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung des berechneten  $RGI_{time}$  unterhalb dieser blauen Linie.



#### Abb. 4.4 Grafische Auswertung der Unsicherheitsanalyse

Schwarze Linien: alle Modellläufe; blaue Linie: 97. Rang bzgl. jeweiligem Zeit-Index; gelbe Linie: 100. Rang bzgl. jeweiligem Zeit-Index.

Für den weitaus größten Teil der Zeitpunkte liegen die errechneten RGI der aller 100 Modellläufe allerdings deutlich unterhalb von 1. Aus diesem Grund ist für diese Zeitpunkte eine Unsicherheitsbetrachtung sinnvoll, in welcher Werte von  $\beta$  und  $\gamma$  gewählt werden, die eine ( $\beta$ ,  $\gamma$ )-Toleranzgrenze bzgl. des 100. Rangs der Modellergebnisse zur Folge haben. Der Prozentsatz der Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ergebnisses ( $\beta$ ) sowie die Aussagesicherheit ( $\gamma$ ) bzgl. einer dem 100. Rang entsprechenden Toleranzgrenze sind in Tab. 4.2 dargestellt. Grafisch ist diese Toleranzgrenze mittels der gelben Kurve in Abb. 4.4 veranschaulicht.

# Tab. 4.2ResultatderUnsicherheitsanalyse(bzgl.des100.RangesderErgebnisstichprobe)

Anteil der Wahrscheinlichkeitsverteilung von RGI <sub>time</sub> unter dem 100. Rang der Ergebnisstichprobe in % (β)	91	93	95	97	99
Aussagesicherheit in % (γ)	99,99	99,9	99	95	63

Das bedeutet, dass beispielsweise mit einer Aussagesicherheit von 99 % mindestens 95 % der Wahrscheinlichkeitsverteilung des berechneten RGI unterhalb dieser gelben Linie liegen.

### 4.3 Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse

### RĜI

In Tab. 4.3 sind die berechneten Ergebnisse aller in Kap. 3.3 beschriebenen Sensitivitätsmaße sowie eine aus den Beträgen der berechneten Werte erstellte Rangfolge angegeben.

Sensitivi- tätsmaß	Berechneter Wert (gerundet) für Parameter Nr.					Resultierende Rangfolge <sup>**</sup>	R <sup>2</sup>	
	1	2	3	4	9	10		
occ	0,18	0,03	0,36	-0,41	0,41 <sup>*</sup>	-0,12	$\begin{array}{c} 9 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 10 \rightarrow 2 \end{array}$	
PCC	0,20	0,08	0,5*	-0,50	0,49	-0,17	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 4 \rightarrow 9 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 10 \rightarrow 2 \end{array}$	0,52
SCC	0,15	0,06	0,41 <sup>*</sup>	-0,40	0,40	-0,12	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 9 \rightarrow 4 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 10 \rightarrow 2 \end{array}$	
OQM	0,16	0,12	0,24	-0,44*	0,36	0,04	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 10 \end{array}$	
PQM	0,29	0,19	0,35	-0,56*	0,49	0,06	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 10 \end{array}$	0,48
SQM	0,22	0,14	0,27	-0,49*	0,40	0,05	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 10 \end{array}$	

Tab. 4.3	Resultat der	Sensitivitätsanaly	yse für	RGI
----------	--------------	--------------------	---------	-----

Sensitivi- tätsmaß	Berechneter Wert (gerundet) für Parameter Nr.						Resultierende Rangfolge <sup>**</sup>	R <sup>2</sup>
	1	2	3	4	9	10		
окс	0,10	0,11	0,23	-0,33*	0,28	-0,03	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	
РКС	0,12	0,13	0,28	-0,36*	0,31	-0,03	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	0,27
SKC	0,10	0,11	0,25	-0,33*	0,28	-0,02	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	
OSC	0,15	0,18	0,34	-0,50 <sup>*</sup>	0,42	-0,05	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	
PSC	0,21	0,26	0,51	-0,62*	0,57	-0,04	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	0,61
SSC	0,14	0.17	0.38	-0,49 <sup>*</sup>	0,44	-0,03	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 10 \end{array}$	
CR	0,29	0,23	0,47	0,48 <sup>*</sup>	0,45	0,41	$4 \rightarrow 3 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 2$	
CRR	0,27	0,25	0,48	0,55*	0,49	0,39	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 3 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \end{array}$	

Tab. 4.3 Resultat der Sensitivitätsanalyse für RGI (Fortsetzung)

\* Größter Koeffizient (Absolutwert)

\*\* Rangfolge ohne abhängige Parameter; Parameter 4 steht hier für die Gesamtheit der Parameter 4 bis 8

Kein berechnetes Sensitivitätsmaß liegt nahe an dem Wert 1. Die höchsten (absoluten) Werte liegen je nach Methode zwischen 0,33 und 0,62.

Bei den rang-basierten Methoden wird stets die Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder (Parameter 4 und dessen Abhängige) als am besten mit dem Ergebnis korrelierter Parameter ermittelt. Bei den nicht rang-basierten Methoden werden hingegen die Parameter 4, 9 und 3, also die Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder, die Kompaktionszeit der Richtstrecken und die Restporosität des Salzgrusversatzes, als praktisch gleich gut mit dem Ergebnis korreliert ermittelt. Dies gilt sowohl für die linearen Korrelationsmaße der Pearson-Korrelation als auch für das Varianz-basierte Korrelationsverhältnis. Bei den Rang-basierten Methoden hingegen belegen die Parameter 4, 9 und 3 zwar auch die vordersten drei Plätze in der Korrelations-Rangfolge, die Rangfolge ist hier aber deutlich aufgefächert in Parameter 4 (beste Korrelation) – Parameter 9 (zweitbeste Korrelation) – Parameter 3 (drittbeste Korrelation).

Die berechneten Bestimmtheitsmaße  $R^2$  in Tab. 4.3 beziehen sich jeweils auf die gesamte Korrelationsmatrix einer jeweiligen Methode (Pearson-Korrelation, Spearmans Rangkorrelation, etc.) und zeigen niedrige ( $R^2 = 0.27$ ) bis mittlere ( $R^2 = 0.61$ ) Werte an. Das bedeutet, dass nur ein niedriger oder mittlerer Anteil der Varianz des Berechnungsergebnisses (RGI) mit der jeweiligen Methode erklärt werden kann.

Die Art oder Richtung der Korrelation der ersten drei Ränge lässt sich folgendermaßen beschreiben:

- 1. Je länger die Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder desto niedriger RGI.
- 2. Je länger die Kompaktionszeit der Richtstrecken desto höher RGI.
- 3. Je größer die Restporosität desto höher RGI.

### **RGI**time

Die in Kap. 3.3 beschriebenen Sensitivitätsmaße und auch die daraus resultierende Rangfolge der einflussgrößten Parameter auf das Modellergebnis sind für jeden Zeitindex berechnet worden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden im Folgenden nur die Ergebnisse ausgewählter Sensitivitätsmaße (OCC, OSC, CR) dargestellt. In Abb. 4.5a ist für jeden Zeitschritt für jedes dieser Sensitivitätsmaße der einflussgrößte Parameter auf den errechneten  $RGI_{time}$  dargestellt. In Abb. 4.5b ist der jeweilige Wert des Sensitivitätsmaßes bezogen auf den zum jeweiligen Zeitpunkt einflussgrößten Parameter abgebildet. In Abb. 4.5c ist das berechnete Bestimmtheitsmaß  $R^2$  gezeigt, welches sich auf alle unabhängigen Parameter bezieht und nicht nur auf den einflussgrößten. Im Anhang A.2 sind diese Ergebnisse für alle Sensitivitätsmaße in Abb. A.1 bis Abb. A.11 gezeigt.

Erkennbar in Abb. 4.5a ist, dass bis zu einer Modellzeit von ca. 80 Jahren die Parameter 4 (inkl. dessen Abhängige, d. h. die Kompaktionszeit aller Einlagerungsfelder inkl. Querschläge) und 2 (Korrosionsrate) den größten Einfluss auf den  $RGI_{time}$  haben. Zu diesem Zeitpunkt entsteht der erste hohe Peak für die errechneten  $RGI_{time}$  (s. Abb. 4.4). Nach dem Zeitpunkt von 80 Jahren und bis zu einem Zeitpunkt von ca. 200 Jahren zeigen die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse, dass der Parameter 9 (Kompaktionszeit der Richtstrecken) und – abhängig vom verwendeten Sensitivitätsmaß – nach ca. 100 Jahren auch der Parameter 2 den größten Einfluss auf den errechneten  $RGI_{time}$  haben. In diesem Zeitrahmen (80 – 200 Jahre) wurde der erste Peak des  $RGI_{time}$  bereits erreicht, zwischen 80 und 200 Jahren sinkt der  $RGI_{time}$  in den meisten Modellläufen deutlich. Ab einem Zeitpunkt von 200 Jahren Modelllaufzeit ist für alle Sensitivitätsmaße mit Ausnahme des CR (vgl. auch Abb. A.9) Parameter 3 (Restporosität des

Salzgrusversatzes) am einflussgrößten. Für ein schmales Zeitfenster zwischen 900 und 1.000 Jahren zeigt als einziges Maß der CR die Kompaktionszeit der Schachtabdichtungen (Parameter 10) als einflussgrößten Parameter an (s. Diskussion in 4.4.2).





ter; b) Berechnete Werte für den einflussgrößten Parameter; c) Bestimmtheitsmaß R<sup>2</sup> für alle unabhängigen Parameter.

An den berechneten Werten der einzelnen Sensitivitätsmaße ist die Stärke der Korrelation erkennbar. Im Vergleich zum  $\widehat{\text{KGI}}$  zeigen sich für den  $\text{RGI}_{\text{time}}$  eher hohe (absolute) Werte der Sensitivitätsmaße. Dies ist vor allem für den OSC ("Ordinary Spearman's Correlation") der Fall. Innerhalb der ersten 100 Jahre werden für die einflussgrößten Parameter (4, 2, 9; siehe Abb. 4.5a) in der Regel (absolute) Werte größer 0,65, zum Teil größer 0,8 ermittelt. Die Korrelation kann zu vielen Zeitpunkten somit als stark bezeichnet werden. Zum Zeitpunkt t = 100 Jahre zeigt z. B. der OSC für Parameter 9 (Kompaktionszeit der Richtstrecken) einen Koeffizienten von 0,94 auf. Ab dem Zeitpunkt t = 200 Jahre weist Parameter 3 (Restporosität des Salzgrusversatzes) einen stetig steigenden OSC auf. Für den OCC und den CR ist dies erst ab ca. 1.000 Jahren der Fall.

Das Bestimmtheitsmaß  $R^2$ , das angibt, welcher Anteil der Ergebnisvarianz durch die Regressionsfunktion der entsprechenden Methode erklärt werden kann, liegt im Allgemeinen für RGI<sub>time</sub> höher als für  $\widehat{\text{RGI}}$  und zeigt für das rangbasierte Sensitivitätsmaß OSC zum Großteil deutlich höhere Werte als für den OCC, der die lineare Korrelation zwischen Parametern und Ergebnis quantifiziert. Bei 80 Jahren und 150 Jahren zeigt  $R^2$  je ein lokales Minimum, bei 100 Jahren ein Maximum. Kleine Werte unter 0,4 erreicht  $R^2$ (OCC) in den Zeitabschnitten t < 30 Jahre und 700 a < t < 1.500 a.

### 4.4 Diskussion der Ergebnisse

### 4.4.1 Unsicherheitsanalyse

3 von den 100 Modellläufen der Stichprobe (Lauf 1, 36, 76) liegen über dem für die radiologische Konsequenz wichtigen Referenzwert von RGI = 1. Diese Aussage lässt sich jedoch nicht direkt auf andere Stichproben übertragen. Die wesentliche Unsicherheitsaussage ist, dass sich mit einer Aussagesicherheit von 99 % feststellen lässt, dass 90 % der Ergebnisse von  $\widehat{RGI}$  (oder 90 % der Ergebnisverteilung von  $\widehat{RGI}$ ) unterhalb von 0,96 liegen, bzw. mit einer Aussagesicherheit von 74 %, dass 95 % der Ergebnisse unterhalb von 0,96 liegen. Diese Aussage wurde zwar anhand der einen Stichprobe gewonnen, sie gilt jedoch unabhängig von der Stichprobe genau für dieses Modell mit dieser Eingangsparameterverteilung. Sie ist das Ergebnis der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Unsicherheitsanalyse.

Für eine vollständige Unsicherheitsanalyse im Rahmen eines Langzeitsicherheitsnachweises müsste auch gezeigt werden, dass dieses Modell und diese Eingangsparameterverteilung "richtig" sind, d. h. es müsste begründet werden, warum dieses Modell für die Prognose der (oder einer) zukünftigen Entwicklung des Endlagersystems adäquat ist, und dass die Unsicherheiten *aller* Modelleingangsparameter auch quantitativ dem aktuellen Kenntnisstand entsprechend berücksichtigt wurden. Eine solch umfassende Unsicherheitsanalyse liegt jedoch außerhalb der Zielsetzung der vorliegenden Arbeit.

### 4.4.2 Sensitivitätsanalyse

#### Unterschiede zwischen den Indikatoren RGI und RGI<sub>time</sub>

Die Sensitivitätsanalyse für  $\widehat{\text{RGI}}$  hat Parameter 4 (Kompaktionszeit des Materialgebiets EINL1)<sup>4</sup> als am stärksten korrelierte Größe identifiziert (mit negativem Korrelationskoeffizient). Dabei treten die größten RGI im Berechnungsverlauf zu zwei Zeitpunkten auf, t = 80 Jahre und t = 1.500 Jahre. Angesichts dessen ist es zunächst überraschend, dass die Sensitivitätsanalyse für RGI<sub>time</sub> genau zu diesen beiden Zeitpunkten Parameter 9 (Kompaktionszeit der Richtstrecken) bzw. Parameter 3 (Restporosität) als die bestkorrelierten Parameter ausweist, und nicht Parameter 4. Dies soll im Folgenden näher beleuchtet werden:

Die Sensitivitätsanalyse für RGI analysiert die Höhe des Maximums des RGI in jedem Rechenlauf, aber nicht, zu welchem Zeitpunkt das Maximum erreicht wird, also ob nach 80 Jahren oder nach 1.500 Jahren. Damit werden die zu den jeweiligen einzelnen Zeitpunkten tatsächlich relevanten Parameterunsicherheiten möglicherweise verwischt. Im Gegensatz dazu sagt die Sensitivitätsanalyse von RGI<sub>time</sub> weder etwas über die maximalen RGI der Rechenläufe noch etwas über die Lage oder Höhe eines lokalen Maximums des RGI aus, sondern analysiert für einen isolierten Zeitpunkt die Höhe des aktuellen RGI in jedem Rechenlauf. Insofern wird ein möglicherweise wichtiges Unterscheidungskriterium: "Welche Parameterkonstellation ist verantwortlich für ein hohes erstes RGI-Maximum und welche ist verantwortlich für ein hohes zweites RGI-Maximum?" von keiner der beiden bisherigen Sensitivitätsanalysen beantwortet.

Um diese Frage zu beantworten wurden zwei weitere Untersuchungen durchgeführt: Für die Zeiträume zwischen 0 bis 500 Jahren und zwischen 500 bis 10.000 Jahren wurden getrennt die maximalen RGI ermittelt – im Folgenden als  $\widehat{\text{RGI1}}$  und  $\widehat{\text{RGI2}}$  bezeichnet – und analysiert. Die Ergebnisse sind in Anhang A.2.3 dargestellt. Im Vergleich zum Ergebnis der Original-Analyse des  $\widehat{\text{RGI}}$  ergibt sich nun eine deutliche Differenzierung.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Parameter 4 steht für die Gesamtheit der Parameter 4 bis 8 (da diese paarweise linear voneinander abhängig sind. Der tatsächlich für die Freisetzung von <sup>14</sup>C relevante Parameter ist Parameter 6 (Kompaktionszeit des Materialgebiets EINL3), da im Materialgebiet EINL3 die Abfälle lagern, aus denen <sup>14</sup>C freigesetzt wird. Eine ausführliche Erklärung wird in /LAR 13/ gegeben.

Für den ersten Peak, RGI1 (Tab. A.6, Anhang A.2.3):

- Bei allen Sensitivitätsmaßen wird der Parameter 4 (Kompaktionszeit des Materialgebiets EINL1) als am besten korrelierte bzw. einflussreichste Größe identifiziert (mit negativem Korrelationskoeffizienten).
- Ebenfalls bei allen Sensitivitätsmaßen befindet sich der Parameter 9 (Kompaktionszeit der Richtstrecken) nur ganz knapp hinter Parameter 4 auf dem 2. Rang in der Rangfolge der bestkorrelierten Parameter (mit positivem Korrelationskoeffizienten).
- Parameter 3 hat keinen Einfluss auf den ersten Peak (Rang 5 oder 6, während er bzgl. RGI auf den vordersten Plätzen rangiert).
- Das Bestimmtheitsmaß  $R^2$  ist für  $\widehat{\text{RG1}}$  tendenziell höher als für  $\widehat{\text{RG1}}$ .

Für den zweiten Peak, RGI2 (Tab. A.7, Anhang A.2.3):

- Bei allen Sensitivitätsmaßen wird der Parameter 3 (Restporosität) als mit großem Abstand am besten korrelierte bzw. einflussreichste Größe identifiziert (mit hohem positiven Korrelationskoeffizienten). Kein anderer Parameter hat auch nur annähernd denselben Einfluss auf die Höhe des zweiten Peaks. (In der Original-Analyse des RGI ist dieser Parameter nur für wenige Sensitivitätsmaße überhaupt auf Rang 1 zu finden, und nie mit deutlichem Abstand.)
- Die Parameter 4 (Kompaktionszeit des Materialgebiets EINL1) und 9 (Kompaktionszeit der Richtstrecken) haben keinen Einfluss auf den zweiten Peak (während sie bzgl. RGI auf den vordersten Plätzen rangieren).
- Das Bestimmtheitsmaß  $R^2$  ist für  $\widehat{\text{RGI2}}$  tendenziell höher als für  $\widehat{\text{RGI}}$ .

Damit zeigt sich, dass die Resultate der Original-Analyse des  $\widehat{\text{RGI}}$  tatsächlich als eine Mischung der Resultate der Einzelpeaks betrachtet werden müssen. Die Höhe der Einzelpeaks ist klar mit bestimmten Parametern korreliert, allerdings nicht mit denselben, weshalb diese Korrelationen in der Analyse des  $\widehat{\text{RGI}}$  – der mal mit  $\widehat{\text{RGI1}}$ , mal mit  $\widehat{\text{RGI2}}$  zusammenfällt – nicht zum Ausdruck kommen:

 Je kürzer die Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder desto höher der erste RGI-Peak. Auf die Höhe des zweiten Peaks hat dieser Parameter keinen wesentlichen Einfluss.

- Je länger die Kompaktionszeit der Richtstrecken desto höher der erste RGI-Peak. Auf die Höhe des zweiten Peaks hat dieser Parameter keinen wesentlichen Einfluss.
- Je größer die Restporosität desto höher der zweite RGI-Peak. Auf die Höhe des ersten Peaks hat dieser Parameter keinen wesentlichen Einfluss.
- Der maximale RGI eines Rechenlaufs (RGI) wird je nach Parameterkonstellation entweder im ersten RGI-Peak (zwischen 60 und 100 Jahren) oder im zweiten RGI-Peak erreicht (zwischen 1.400 und 10.000 Jahren, dem Ende der Modelllaufzeit). In einigen Rechenläufen wird der zweite RGI-Peak innerhalb der Modelllaufzeit nicht mehr erreicht.
- Die absolut größten RGI werden im zweiten Peak erreicht. Bei einer niedrigeren Restporosität würden also die absolut größten RGI niedriger ausfallen.

Die Resultate der Einzelpeaks sind den Ergebnissen für den RGI<sub>time</sub> recht ähnlich. Allerdings liefert die Sensitivitätsanalyse von RGI<sub>time</sub> durchaus noch zusätzliche und für das Systemverständnis wichtige Ergebnisse, die die Sensitivitätsanalysen der Einzelpeaks nicht liefern können.

### Systemverständnis

In Abb. 4.6 sind die Werte der ausgewählten Sensitivitätsmaße (OCC, OSC, CR) von RGI<sub>time</sub> und die Werte der Ergebnisstichprobe von RGI<sub>time</sub> zum einfacheren Vergleich in einer Abbildung übereinander dargestellt. Das prominenteste Merkmal in den Ergebnissen der zeitindizierten Sensitivitätsanalyse ist die sehr plötzliche, sehr kurzzeitige und sehr starke positive Korrelation des Parameters 9 (Kompaktionszeit Richtstrecken) mit RGI<sub>time</sub> bei genau 100 Jahren. Vor diesem Zeitpunkt, etwa bis 70 Jahre, sind Parameter 2 (Korrosionsrate) und 4 (Kompaktionszeit Einlagerungsfelder) mit RGI<sub>time</sub> am besten korreliert. Nach diesem Zeitpunkt nimmt die Korrelation zwischen Parameter 9 und RGI<sub>time</sub> rasch ab und Parameter 3 (Restporosität) wird ab 150 Jahre der bestkorrelierte Parameter.



Abb. 4.6 Ergebnisse aller Modellläufe (a)) und der Sensitivitätsanalyse aller unabhängigen Parameter für ausgewählte Sensitivitätsmaße (b) bis d))
 Dargestellt sind pro Zeitindex: a) RGI<sub>time</sub> (identisch Abb. 4.1); sowie für alle unabhängigen Parameter: b) OCC; c) OSC; d) CR.

Diese Ergebnisse lassen sich unter Einbeziehung der zeitlichen Verläufe von RGI<sub>time</sub> (s. Abb. 4.6) folgendermaßen interpretieren:

- 1. Im Zeitabschnitt 10 bis 50 Jahre steigen alle RGI<sub>time</sub> in ihrem zeitlichen Verlauf sehr stark an, um über 6 Größenordnungen, nachdem das <sup>14</sup>C-Inventar eines defekten Behälters instantan mobilisiert wurde. Die Kurvenform ist dabei recht ähnlich (in doppelt-logarithmischer Skalierung), allerdings beginnt der Anstieg der einzelnen Kurven (über einen unteren Grenzwert von z. B. 10<sup>-6</sup>) unterschiedlich früh. Durch diesen unterschiedlichen Zeitpunkt des Anstiegs in Verbindung mit der starken Steigung der Kurven beträgt die Streuung des RGI zu jedem einzelnen Zeitpunkt ebenfalls viele Größenordnungen. Da RGI<sub>time</sub> positiv mit der Korrosionsrate (Par. 2) korreliert ist, bedeutet das, dass wenn schnell viel Gas entsteht, dies einen hohen Gasdruck erzeugt und dementsprechend einen hohen Druckgradienten mit folgendem schnellen Transport von <sup>14</sup>C in der Gasphase zu den Streckenverschlüssen. Da jedoch die Korrosionsrate nur schwach mit der Höhe des ersten Peaks (RGI1) korreliert ist, kann gesagt werden, dass eine hohe Korrosionsrate zwar für einen raschen Schadstoffaustrag sorgt, aber kaum für einen insgesamt besonders hohen. Anders verhält es sich mit der Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder (Par. 4). Eine niedrige/kurze Kompaktionszeit bedeutet eine schnelle Porenvolumenreduktion und ebenfalls einen hohen Gasdruck in den Strecken, allerdings geht dieser höhere Gasdruck nicht gleichzeitig mit einer Schadstoff-Verdünnung im Fluid (wie bei der Gasproduktionsrate durch Korrosion) einher. Deshalb sorgt dieser Effekt nicht nur für einen raschen Schadstoffaustrag, sondern auch für einen insgesamt (im ersten Peak) besonders hohen.
- 2. Im Zeitabschnitt **50 bis 80 Jahre** erreicht etwa die Hälfte der Rechenläufe ihren ersten Peak; ihr RGI<sub>time</sub> nimmt gegen Ende dieses Zeitabschnittes bereits wieder etwas ab. Die andere Hälfte der Rechenläufe befindet sich noch im Bereich ihres starken Anstiegs vor dem ersten Peak. In diesem Zeitabschnitt geht die Korrelation zwischen Korrosionsrate (Par. 2) und RGI<sub>time</sub> deutlich zurück, während sich der Einfluss der Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder (Par. 4) noch auf hohem Niveau halten kann. Dieses Verhalten unterstützt die These, dass die Korrosionsrate ihren starken Einfluss lediglich auf den Kurvenbereich mit starkem Anstieg von RGI<sub>time</sub> ausübt, aber nicht mehr auf den Kurvenbereich zum Zeitpunkt des ersten Peaks, dass also die Korrosionsrate zwar den Zeitpunkt des ersten Peaks nicht aber dessen Höhe beeinflusst. Gleichzeitig gewinnt die Kompaktionszeit der Richtstrecken stark an positiver Korrelation mit RGI<sub>time</sub>, was bedeutet, dass eine kürzere Kompak-

tionszeit (schnellere Kompaktion) der Richtstrecken den Durchfluss der Gasphase/Schadstoffe zunehmend erschwert.

- 3. Im Zeitabschnitt 80 bis 100 Jahre erreicht die zweite Hälfte der Rechenläufe ihren ersten Peak. Gegen Ende dieses Zeitabschnittes haben die letzten Rechenläufe ihr erstes Maximum gerade hinter sich, während gleichzeitig die Korrelation zwischen Parameter 9 (Kompaktionszeit Richtstrecken) und RGI<sub>time</sub> auf ein Maximum von über 0,9 steigt und gleichzeitig alle anderen Parameter (inkl. der bis kurz zuvor noch wichtigen Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder) ihren Einfluss auf RGI<sub>time</sub> vergleichsweise komplett verlieren. Das bedeutet, dass die Kompaktionszeit des Salzgrusversatzes in den Richtstrecken das Ende des Schadstoffaustrags im ersten Peak praktisch alleine bestimmt. Da die Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung (s. Tab. 3.1) einen Bereich ausweist, wo eine Halbierung der Porosität eine Permeabilitätsreduktion um knapp drei Größenordnungen nach sich zieht, ist klar, dass wenn die Porosität diesen Bereich erreicht hat, andere den Schadstoffaustrag beeinflussende Parameter (wie Druckgradient oder Schadstoffkonzentration) keine Rolle spielen (wenn sie nicht eine ähnlich große Schwankungsbreite haben).
- 4. Im Zeitabschnitt **100 bis 150 Jahre** nimmt RGI<sub>time</sub> in allen Rechenläufen ab; in den meisten Fällen stark, um zwei bis drei Größenordnungen. Die sehr starke Korrelation zwischen Parameter 9 (Kompaktionszeit Richtstrecken) und RGI<sub>time</sub> dominiert in diesem Zeitabschnitt, und geht im Laufe des Zeitabschnitts zurück. Ähnliche Überlegungen wie zum Zeitabschnitt bis 50 Jahre, wo sich die RGI im starken Anstieg zum ersten Peak befanden, gelten nun hier, wo sich die RGI im starken Abfall vom ersten Peak befinden: Die Streuung der RGI zu jedem einzelnen Zeitpunkt, die in den Sensitivitätsmaßen von RGI<sub>time</sub> analysiert wird, kann einen früheren oder späteren Start des Prozesses widerspiegeln, der für den starken Abfall vom Peak verantwortlich ist. Mit anderen Worten: Die analysierte Streuung der RGI-Zeitverläufe nach "oben und unten" (entlang der RGI-Achse) kann als Streuung der RGI Zeitverläufe nach "rechts und links" (entlang der Zeit-Achse) verstanden werden. Eine schnelle Kompaktion der Richtstrecken führt zu einer *frühen* Unterbindung des Schadstoffaustrags und somit an einem festgesetzten Zeitpunkt zu einem *niedrigen* Schadstoffaustrag.
- 5. Im Zeitabschnitt **150 bis 500 Jahre** nimmt RGI<sub>time</sub> in nahezu allen Rechenläufen ab, allerdings mit niedrigerer Potenz (geringerem Gefälle in logarithmischer Darstellung) als im vorangegangenen Zeitabschnitt. Dies ist ein deutliches Zeichen dafür, dass die Porositätsentwicklung den steilen Ast in der Porositäts-Permeabilitäts-

- Beziehung (s. Tab. 3.1) hinter sich gelassen hat und sich im Bereich  $\Phi_{\text{Restporosität}} <$  $\Phi < 0.05$  langsam weiterbewegt. Parameter 3 (Restporosität) ist als einziger Parameter mit dem (in diesem Zeitabschnitt niedrigen) RGI deutlich korreliert. Dafür muss an zumindest einigen Stellen im Endlagersystem die Restporosität tatsächlich erreicht worden sein, denn ansonsten ist ein Einfluss dieses Parameters auf den RGI ausgeschlossen. Dies wird in diesem Zeitabschnitt in einem Großteil der "heißen" Materialgebiete (Einlagerungsstrecken aller Einlagerungsfelder außer "Ost 1", s. Tab. 3.2) bereits geschehen sein. D. h. insbesondere dort, wo der defekte Behälter steht. Gegen Ende des Zeitabschnitts gewinnt auch die Kompaktionszeit der Richtstrecken (Par. 9) an Bedeutung (nun negativ korreliert, d. h. eine schnellere Kompaktion in den Richtstrecken führt zu einem höheren RGI), allerdings befindet sich RGI<sub>time</sub> hier bereits auf sehr niedrigem Niveau. Eine naheliegende Erklärung wäre, dass ähnlich wie im ersten Zeitabschnitt eine schnellere Kompaktion mehr Fluid, das sich noch im Restporenraum befindet, zu den Verschlüssen presst. Allerdings dürfte, gerade für die kleinen Kompaktionszeiten, die Restporosität in den Richtstrecken bereits erreicht sein. Deshalb wird es eher so sein, dass die schnelle Kompaktion, die den Schadstoffaustrag in den früheren Phasen (80 bis 150 Jahre) behindert hat, ein (auf niedrigem Niveau) relativ hohes Schadstoffinventar im Porenraum zurückgelassen hat, das nun in dieser Phase langsam ausgetragen wird.
- 6. Im Zeitabschnitt 500 bis 2.000 Jahre nimmt RGI<sub>time</sub> eine neue Wendung, denn bei t = 500 Jahren wird das <sup>14</sup>C-IRF-Inventar aller Pollux®-10-Behälter instantan freigesetzt, das ist das rund 2.000-fache der zu Simulationsbeginn freigesetzten Menge. Bei t = 600 Jahren steigen die ersten RGI<sub>rime</sub>-Kurven spürbar an, der Anstieg zum zweiten Peak beginnt. Gegen Ende dieses Zeitabschnittes haben die ersten Rechenläufe ihr zweites Maximum gerade hinter sich. Genau in diesen Rechenläufen, die als erstes ihr zweites Maximum erreichen, werden auch die absolut höchsten RGI (und  $\widehat{RGI}$ ) erreicht. In diesem Zeitabschnitt bleibt die Restporosität (Par. 3) der bestkorrelierte Parameter. Auch mit RGI2 ist die Restporosität der mit großem Abstand bestkorrelierte bzw. der einzige korrelierte Parameter. Die Variation der Restporosität zwischen 0,5 % und 2 % (in den meisten Salzgrus-versetzten Materialgebieten wird die Restporosität in diesem Zeitabschnitt erreicht) entspricht einer Permeabilitäts-Variation zwischen 1·10<sup>-21</sup> m<sup>2</sup> und 7·10<sup>-19</sup> m<sup>2</sup>. Bei advektivem Transport mit der Gasphase wird das <sup>14</sup>C dementsprechend langsamer oder schneller zu den Verschlüssen transportiert. Bei einer Restporosität nahe der unteren Grenze kommt es bis zum Ende der Modelllaufzeit bei 10.000 Jahren zu keinem erneuten Anstieg der RGI<sub>time</sub>-Kurven. Bei den frühen Freisetzungen durch eine hohe Restpo-

rosität kommt es nicht nur im zeitlichen Maximum sondern auch integral über die Zeit zu den größten Schadstoffausträgen, da zu den späteren Zeiten der radioaktive Zerfall von <sup>14</sup>C bereits einen spürbaren Einfluss hat. Bei der zeitindizierten Sensitivitätsanalyse fällt auf, dass die nicht rangbasierten Sensitivitätsmaße OCC und CR einen interessanten Unterschied gegenüber OSC zeigen: OSC von Parameter 3 steigt monoton über den ganzen Zeitabschnitt und weiter bis zum Ende der Modellrechnungen an, während OCC und CR von Parameter 3 bei t = 1.000 Jahren ein Minimum durchlaufen. Zur selben Zeit gewinnt bei OCC und CR Parameter 10 (Kompaktionszeit Schachtabdichtungen) kurzzeitig an Bedeutung, während der rangbasierte OSC für Parameter 10 keine Korrelation anzeigt. Teil der Erklärung wird sein, dass die nicht rangbasierten Maße zum Zeitpunkt t = 1.000 Jahre von den wenigen Rechenläufen dominiert werden, deren RGI<sub>time</sub> zu diesem Zeitpunkt bereits deutlich angestiegen ist (alle anderen Rechenläufe haben für diese Maße einen RGI von gleichermaßen praktisch Null). Es bleibt allerdings die Frage, warum selbst für diese wenigen Rechenläufe eine kurze Kompaktionszeit für die Schachtabdichtungen mit einem (besonders frühen) Anstieg des RGI<sub>time</sub> korreliert sein sollte. Mangels einer naheliegenden schlüssigen Antwort sollte an dieser Stelle darauf verwiesen werden, dass die ermittelten Sensitivitätsmaße Stichproben-abhängige Schätzwerte der entsprechenden Maße der (unbekannten) Ergebnisverteilung sind. Da die Güte der Schätzwerte von der Stichprobengröße abhängt, könnte mit einer deutlich größeren Stichprobe überprüft werden, ob das beschriebene Merkmal der zeitindizierten Sensitivitätsanalyse ein reales Merkmal des Modells oder ein Artefakt der Stichprobe ist.

7. Im Zeitabschnitt 2.000 bis 10.000 Jahre erreichen die meisten Rechenläufe ihren zweiten Peak. Im Vergleich zum vorangegangenen Zeitabschnitt geschieht nichts grundlegend Neues mehr. Eine RGI<sub>time</sub>-Kurve nach der anderen knickt plötzlich nach oben ab, wenn die <sup>14</sup>C-Fahne aus der zweiten Freisetzung die Verschlüsse erreicht. Für etwa ein Drittel aller Rechenläufe geschieht dies allerdings nicht mehr innerhalb der ersten 10.000 Jahre. Die Korrelationskoeffizienten der Restporosität (Par. 3) steigen immer weiter an, der OSC liegt gegen Ende der Modelllaufzeit bei 0,94. Ein so hoher Wert bedeutet, dass sowohl die Rangfolge der unteren RGI<sub>time</sub>-Kurven, die noch den Schadstoffaustrag aus der anfänglichen Freisetzung wiederspiegeln, als auch die Rangfolge der oberen RGI<sub>time</sub>-Kurven, die gerade ihren zweiten Peak durchlaufen (haben) mit der Restporosität korreliert sind. Eine Korrelation mit anderen Eingangsparametern ist in diesem Zeitabschnitt nicht erkennbar.

### 5 Schlussfolgerungen

Die Sensitivitätsanalyse des vorliegenden Endlagersystems zeigt, dass im Rahmen der gewählten probabilistischen Eingangsparameterverteilung die Parameter Kompaktionszeit der Einlagerungsfelder und Kompaktionszeit der Richtstrecken für die Höhe des ersten RGI-Peaks – ausgelöst durch einen initial defekten Behälter – verantwortlich sind, und dass praktisch ausschließlich die Restporosität für die Höhe des zweiten RGI-Peaks – ausgelöst durch die Freisetzung zum Ende der angenommenen Gasdichtheitsdauer aller Behälter – verantwortlich ist. Die Analyse des zeitindizierten RGI<sub>time</sub> liefert zusätzlich wichtige Einsichten zum Systemverständnis und stärkt das Vertrauen in die Robustheit der Analyse der mit den RGI-Maxima korrelierten Parameter.

Mit Hilfe der Unsicherheitsanalyse konnte eine Aussage darüber getroffen werden, welcher Prozentsatz der berechneten Ergebnisse (bei vorgegebener Aussagesicherheit) unterhalb einer kritischen Grenze bei RGI = 1 bleibt. Mit einer Aussagesicherheit von 99 % ist dies bei 90 % der RGI-Ergebnisverteilung der Fall. Dieses Resultat kann als Argument für die Robustheit des Endlagersystems gelten.

Im Vergleich mit den in /LAR 13/ beschriebenen Berechnungen ist der Zeitpunkt und die Höhe des zweiten Peaks und in deren Folge auch der Zeitpunkt der berechneten maximalen RGI (ca. 1.500 Jahre) ein unerwartetes Ergebnis. Rechenfälle mit erhöhter Restporosität standen in /LAR 13/ nicht im Fokus der Gastransportberechnungen. So wurden in Abb. 2.1 verschiedene Parametervarianten gerechnet, aber die Restporosität war in allen Rechnungen gleich (bei 1 %). Damit zeigt sich, dass eine probabilistische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse auch dazu dienen kann, ein unerwartetes Systemverhalten eines komplexen Systems aufzuzeigen.

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für Endlagersysteme sind für einphasige hydraulische Berechnungen seit langem Stand von Wissenschaft und Technik und werden dementsprechend auch in Langzeitsicherheitsanalysen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle genutzt. Hier wurde erstmals eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgewählter Parameter basierend auf Zweiphasenflussberechnungen für ein vollständiges Endlagersystem vorgestellt. Diese Analyse konnte mit akzeptablen Rechenzeiten durchgeführt werden, so dass in Zukunft weitere und umfangreichere Analysen dieser Art möglich sein werden. Mit Hilfe der Ergebnisse lässt sich eine bereits anhand de-

43

terministischer Parametervariation erfolgte Systemanalyse des Endlagersystems /KOK 12/, /LAR 13/ sinnvoll ergänzen.

### Literaturverzeichnis

- /BMU 10/ Bundesministerium f
  ür Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung w
  ärmeentwickelnder radioaktiver Abf
  älle. Bonn, Stand: 30. September 2010.
- /BUH 91/ Buhmann, D., Nies, A., Storck, R.: Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagerkonzepten f
  ür w
  ärmeerzeugende radioaktive Abf
  älle. GSF-Bericht 27/91, 216 Seiten, Institut f
  ür Tiefenlagerung: Braunschweig, 1991.
- /CZA 12/ Czaikowski, O., Wieczorek, K.: Salzgruskompaktion Kalibrierung der in CODE\_BRIGHT verwendeten physikalischen Modellansätze zur numerischen Simulation. internes Memo im Arbeitspaket 9.2 des Vorhabens "Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben", Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 15.06.2012 (Rev. 30.08.2012).
- /FRI 12/ Frieling, G., Bracke, G.: Modellaufbau und Randbedingungen f
  ür den zweiphasigen Radionuk-lidtransport (TOUGH2). Memo im Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse f
  ür den Standort Gorleben, Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 04.12.2012.
- /HOF 92/ Hofer, E., Krzykacz, B.: Bewertung von statistischen Methoden für Untersuchungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern. GRS - A 1882, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit: Köln.
- /KLO 08/ Kloos, M., SUSA Software for Uncertainty and Sensitivity Analyses, User's Guide and Tutorial, GRS - P - 5, Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit: K
  öln. 2008.
- /KOK 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley,
   W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: VSG: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. GRS 286, 978-3-939355-62-5, Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.

- /KRZ 90/ Krzykacz, B.: SAMOS: A Computer Program for the Derivation of Empirical Sensitivity Measures of Results from Large Computer Models. GRS - A -1700, Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH.
- /LAR 13/ Larue, J., Baltes, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher,
   H.: VSG: Radiologische Konsequenzenanalyse. GRS 289, 978-3-939355 65-6, Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: K
  öln,
   01.04.2013.
- /MÖH 11/ Mönig, H.: Literaturstudie zur Metallkorrosion im Rahmen der "Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben". Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 2011.
- /MÜL 12a/ Müller-Hoeppe, N., Breustedt, M., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Wolf, J.
   W.: Integrität geotechnischer Barrieren Teil 2: Vertiefte Nachweisführung. Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-288, ISBN: 978-3-939355-64-9, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /MÜL 12b/ Müller-Hoeppe, N., Buhmann, D., Czaikowski, O., Engelhardt, H. J., Herbert, H.-J., Lerch, C., Linkamp, M., Wieczorek, K., Xie, M.: Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 1: Vorbemessung. Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-287, ISBN: 978-3-939355-63-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.
- /NAV 13a/ Navarro, M.: Modelling Gas and Water Flow Through Dilating Pathways in Opalinus Clay: The HG-C and HG-D Experiments, A study within the Euratom 7th Framework Programme Project FORGE. GRS-306, ISBN 978-3-939355-85-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Cologne.
- /NAV 13b/ Navarro, M.: Die vereinfachte Berechnung der Konvergenzrate salzgrusverfüllter Hohlräume im Steinsalz. ISBN 978-3-939355-86-1, GRS - 307, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH: Köln.

- /POP 12/ Popp, T., Salzer, K., Schulze, O., Stührenberg, D.: Hydro-mechanische Eigenschaften von Salzgrusversatz - Synoptisches Prozessverständnis und Datenbasis. Memorandum, Institut für Gebirgsmechanik (IFG), Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR): Leipzig, 30.05.2012.
- /PRU 99/ Pruess, K. O., C.; Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0. LBNL-43134, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California: Berkeley, California, USA, 1999.
- /RÜB 10/ Rübel, A., Mönig, J.: Prozesse, Modellkonzepte und sicherheitsanalytische Rechnungen für ein Endlager im Salz. 142 Seiten, GRS-A-3521, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Braunschweig, 2010.
- /SAN 99/ Sander, R.: Henry's Law Constants. National Institute of Standards and Technology, erreichbar unter: http://webbook.nist.gov, zitiert am 27.09.2012.
- /WOL 12/ Wolf, J., Behlau, J., Beuth, T., Bracke, G., Bube, C., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Kienzler, B., Klinge, H., Krone, J., Lommerzheim, A., Metz, V., Mönig, J., Mrugalla, S., Popp, T., Rübel, A., Weber, J. R.: FEP-Katalog für die VSG. Dokumentation. Bericht zum Arbeitspaket 7, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-283, ISBN: 978-3-939355-58-8, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.

# Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Berechnete <sup>14</sup> C-Freisetzung im Vorhaben VSG, aus /LAR 13/	3
Abb. 3.1	Aufsicht auf das verwendete Grubengebäudemodell	8
Abb. 4.1	RGI <sub>time</sub> , d. h. Zeitreihen des RGI, von 100 Modellläufen	25
Abb. 4.2	Rangfolge der berechneten RGI aus 100 Modellläufen	26
Abb. 4.3	Ergebnisse der Modellrechnungen mit den höchsten RGI im Bereich 1.000 bis 5.000 Jahre.	28
Abb. 4.4	Grafische Auswertung der Unsicherheitsanalyse	29
Abb. 4.5	Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für ausgewählte Sensitivitätsmaße.	33
Abb. 4.6	Ergebnisse aller Modellläufe (a)) und der Sensitivitätsanalyse aller unabhängigen Parameter für ausgewählte Sensitivitätsmaße (b) bis	38
	G)).	50

# Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Parametrisierung der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung.	11
Tab. 3.2	Zeitpunkte des Erreichens von 5 % Porosität für einzelne Materialgebiete und gewählte Parameterbandbreite im Modell	16
Tab. 3.3	Übersicht aller Eingangsparameter	18
Tab. 3.4	Übersicht der verwendeten Sensitivitätsmaße.	24
Tab. 4.1	Resultat der Unsicherheitsanalyse (bzgl. des 97. Ranges, $\widehat{\mathrm{RGI}}$ = 0,96)2	27
Tab. 4.2	Resultat der Unsicherheitsanalyse (bzgl. des 100. Ranges der Ergebnisstichprobe)	30
Tab. 4.3	Resultat der Sensitivitätsanalyse für RGI	30

### A Anhang

### A.1 Anhang zu Kapitel 3

### A.1.1 Anhang zu Kapitel 3.2.1

In Tab. A.2 sind detaillierte Eingabeparameter für die Berechnungen wiedergegeben, welche nicht von den Parametervariationen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse betroffen sind, in Tab. A.3 sind diejenigen Parameter angegeben, welche im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse genutzt wurden. Die Gründe für die Nutzung dieser Werte sind in den Anhängen in /KOK 12/, /LAR 13/ dargelegt und auch in /NAV 13b/ wiedergegeben.

Parameter	Wert
h <sub>0</sub>	1
h <sub>1</sub>	-2
h <sub>2</sub>	1
h <sub>3</sub>	-2
<b>g</b> <sub>0</sub>	1
<b>g</b> <sub>1</sub>	-1
g <sub>2</sub>	100 für trockenen Versatz 10.000 für angefeuchteten Versatz
$\lambda_{s}$	1·10 <sup>-6</sup>
K <sub>ref</sub>	0,01 a <sup>-1</sup>
φ <sub>0</sub>	0,3
K <sub>o</sub>	0,01 a <sup>-1</sup>
m	4
p <sub>ref</sub>	1.10 <sup>5</sup> Pa

Tab. A.1	Parametrisierung des Kompaktionsansatzes
	r aramoundid ang abo nomparaonoanoaizoo

# Tab. A.2 Eingabeparameter f f ir das Programm TOUGH2

Materialgebiet mit Material	Poro- sität	Permeabili- tät (m <sup>2</sup> )	Zweiphasenflussparameter	
Richtstrecken mit Salzgrusversatz	0,35	1,3·10 <sup>-11(**)</sup>	Leverett Skalierungsfunktion mit: $p_{cap} = p_{cap,ref} * \left(\frac{\Phi}{\Phi_{ref}} \\ \frac{k}{k_{ref}}\right)^{\alpha}$ $\Phi = \text{Porosität}$ $\Phi_{ref} = \text{Referenz Porosität 0,05}$ $k = \text{Permeabilität (m^2)}$ $k_{ref} = \text{Referenz Permeabilität (3.10^{-15} \text{ m}^2)}$ $\alpha = \frac{1}{2}$ Kapillardruckkurve: Van-Genuchten mit: $\lambda = 0,73, P_0 = 5 \text{ kPa}, S_{\text{liq,res,pcap}} = S_{\text{gas,res,pcap}} = 0$ Relative Permeabilitäten: Corey-mit: $S_{\text{gas,res,kre I}} = 0,005 \text{ und } S_{\text{liq,res,krel}} = S_{\text{initial}} = 0,001$ Ini. Flüssigkeitssättigung: 0,01809667	
Querschläge mit Salzgrusversatz	0,35	1,3·10 <sup>-11(**)</sup>	Ini. Flüssigkeitssättigung: 0,000677034	
Einlagerungs- strecken mit Salzgrusversatz	0,35	1,3·10 <sup>-11(**)</sup>	Siehe Querschläge	
Dichtelemente mit Sorelbeton	0,2	5·10 <sup>-17(*)</sup>	Gaseindringdruck: 0,22 MPa Kapillardruckkurve: Van-Genuchten mit: $n = 1,5 (d. h. \lambda = 0,333), P_0 = 0,22 MPa,$ $S_{liq,res,pcap} = S_{gas,res,pcap} = 0,$ $p_{cap,cut-off} = 1.10^8 Pa.$ Relative Permeabilitäten: Corey mit: $S_{liq,res,krel} = 0,80$ und $S_{gas,res,krel} = 0$ Ini. Flüssigkeitssättigung: 0,8 (konstant)	
Widerlager und Dichtpropfen mit Sorelbeton	0,2	1·10 <sup>-15(*)</sup>	siehe Dichtelemente	
Infrastrukturbe- reich mit Bischof- fit	0,38	1.10-8(*)	Relative Permeabilitäten: Corey mit: Sgas,res,krel = 0,01 und Sliq,res,krel = Sinitial = 0,01 Ini. Flüssigkeitssättigung: 0,0584	

(\*) nicht kompaktierbar; (\*\*) initiale Permeabilität, veränderlich gemäß Formel (3.2)

Materialgebiet mit Material	Restporo- sität	Kompaktionszeit t <sub>comp</sub> (a)	Wasser- gehalt (kg)	Korrosi- onsrate (µm/a)
Richtstrecken mit Salzgrusversatz	0,005 – 0,02	45 – 105	n.a.	n.a.
Querschläge mit Salzgrusversatz	0,005 – 0,02	75 – 210	n.a.	n.a.
Einlagerungs- strecken mit Salz- grusversatz	0,005 – 0,02	Ost 2 – 12 :7,5 – 55 Ost 1: 750 – 1.050	0 – 60	0,04 – 150
Salzgrusdichtung (Schacht)	0,005 – 0,02	75 – 210	n.a.	n.a.

# Tab. A.3 Variierte Eingabeparameter für das Programm TOUGH2

n.a.: nicht anwendbar

# A.1.2 Anhang zu Kapitel 3.2.2

Zur Dokumentation sind in Tab. A.4 die Werte der Stichprobe wiedergegeben, wie sie für die Berechnung in TOUGH2 genutzt wurden.

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μm)		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
1	5,80E+01	3,42E-01	1,65E-02	9,21E+02	3,45E+01	3,45E+01	3,45E+01	1,52E+02	9,57E+01	8,10E+01
2	5,92E+01	5,64E+00	1,84E-02	8,64E+02	2,56E+01	2,56E+01	2,56E+01	1,26E+02	4,60E+01	1,54E+02
3	2,93E+01	1,61E-01	8,20E-03	8,09E+02	1,68E+01	1,68E+01	1,68E+01	1,02E+02	5,04E+01	1,28E+02
4	2,08E+01	1,29E-01	1,35E-02	1,02E+03	5,02E+01	5,02E+01	5,02E+01	1,96E+02	6,24E+01	1,96E+02
5	1,35E+01	5,85E-02	1,56E-02	1,01E+03	4,90E+01	4,90E+01	4,90E+01	1,93E+02	4,70E+01	1,95E+02
6	2,87E+01	1,11E+01	1,49E-02	9,98E+02	4,68E+01	4,68E+01	4,68E+01	1,87E+02	7,27E+01	1,85E+02
7	3,96E+01	1,61E-01	1,25E-02	9,35E+02	3,68E+01	3,68E+01	3,68E+01	1,58E+02	8,58E+01	1,71E+02
8	2,91E+01	6,10E-02	1,29E-02	9,24E+02	3,51E+01	3,51E+01	3,51E+01	1,53E+02	8,86E+01	1,14E+02
9	5,73E+01	5,69E-02	7,19E-03	8,49E+02	2,32E+01	2,32E+01	2,32E+01	1,20E+02	1,00E+02	9,85E+01
10	4,66E+01	2,07E+00	1,96E-02	1,04E+03	5,27E+01	5,27E+01	5,27E+01	2,04E+02	5,13E+01	8,72E+01
11	4,54E+01	5,73E+01	1,79E-02	1,00E+03	4,79E+01	4,79E+01	4,79E+01	1,90E+02	9,75E+01	1,94E+02
12	2,41E+01	6,11E+00	6,97E-03	1,00E+03	4,74E+01	4,74E+01	4,74E+01	1,88E+02	9,27E+01	8,00E+01
13	4,13E+01	1,49E-01	5,36E-03	7,76E+02	1,17E+01	1,17E+01	1,17E+01	8,69E+01	7,87E+01	1,04E+02
14	1,60E+01	1,29E-01	1,76E-02	8,20E+02	1,86E+01	1,86E+01	1,86E+01	1,06E+02	1,04E+02	1,60E+02

# Tab. A.4 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μm)		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
15	1,12E+01	3,45E+00	6,05E-03	8,07E+02	1,65E+01	1,65E+01	1,65E+01	1,01E+02	4,93E+01	1,37E+02
16	3,24E+01	4,51E+00	9,34E-03	8,19E+02	1,85E+01	1,85E+01	1,85E+01	1,06E+02	5,16E+01	1,22E+02
17	1,53E+01	9,05E-01	6,54E-03	8,62E+02	2,52E+01	2,52E+01	2,52E+01	1,25E+02	1,01E+02	1,66E+02
18	2,27E+01	2,97E+01	1,71E-02	9,86E+02	4,49E+01	4,49E+01	4,49E+01	1,81E+02	8,12E+01	1,72E+02
19	3,44E+01	4,74E+01	1,96E-02	1,04E+03	5,34E+01	5,34E+01	5,34E+01	2,05E+02	6,05E+01	1,80E+02
20	1,14E+00	1,12E+01	1,13E-02	9,49E+02	3,90E+01	3,90E+01	3,90E+01	1,65E+02	1,02E+02	9,64E+01
21	2,36E+01	3,67E+01	9,83E-03	8,71E+02	2,67E+01	2,67E+01	2,67E+01	1,29E+02	4,90E+01	1,02E+02
22	5,92E+01	9,78E+00	1,80E-02	8,94E+02	3,02E+01	3,02E+01	3,02E+01	1,40E+02	5,74E+01	1,03E+02
23	5,49E+01	1,07E+02	1,29E-02	8,72E+02	2,68E+01	2,68E+01	2,68E+01	1,30E+02	7,67E+01	2,08E+02
24	1,79E+01	2,75E-01	5,58E-03	1,02E+03	5,06E+01	5,06E+01	5,06E+01	1,98E+02	5,30E+01	1,22E+02
25	5,38E+01	9,87E-02	1,47E-02	9,59E+02	4,06E+01	4,06E+01	4,06E+01	1,69E+02	9,12E+01	1,48E+02
26	4,90E+01	7,95E+01	1,08E-02	8,77E+02	2,77E+01	2,77E+01	2,77E+01	1,32E+02	8,14E+01	1,67E+02
27	3,02E+01	3,80E+01	6,08E-03	1,04E+03	5,42E+01	5,42E+01	5,42E+01	2,08E+02	9,30E+01	1,89E+02
28	3,36E+01	1,05E+01	6,72E-03	1,02E+03	5,05E+01	5,05E+01	5,05E+01	1,97E+02	5,05E+01	1,41E+02

 Tab. A.4
 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μm)		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
29	5,25E+01	4,58E-02	7,14E-03	8,97E+02	3,08E+01	3,08E+01	3,08E+01	1,41E+02	7,38E+01	1,49E+02
30	1,77E+01	9,18E+00	1,55E-02	8,09E+02	1,69E+01	1,69E+01	1,69E+01	1,02E+02	8,94E+01	1,93E+02
31	1,21E+01	6,68E+00	1,81E-02	9,68E+02	4,20E+01	4,20E+01	4,20E+01	1,73E+02	6,10E+01	1,99E+02
32	2,61E+01	2,24E+01	1,63E-02	8,02E+02	1,57E+01	1,57E+01	1,57E+01	9,83E+01	8,30E+01	1,82E+02
33	4,86E+01	1,15E+01	7,62E-03	8,64E+02	2,55E+01	2,55E+01	2,55E+01	1,26E+02	1,03E+02	7,79E+01
34	2,42E+01	9,55E+00	1,27E-02	8,48E+02	2,30E+01	2,30E+01	2,30E+01	1,19E+02	4,63E+01	1,02E+02
35	1,20E+01	9,93E-02	1,95E-02	9,18E+02	3,41E+01	3,41E+01	3,41E+01	1,51E+02	8,35E+01	1,71E+02
36	4,24E+01	1,67E-01	1,78E-02	8,88E+02	2,93E+01	2,93E+01	2,93E+01	1,37E+02	8,66E+01	8,25E+01
37	3,18E+01	1,92E+01	5,29E-03	7,77E+02	1,18E+01	1,18E+01	1,18E+01	8,73E+01	8,96E+01	1,25E+02
38	2,61E+01	7,75E+00	1,97E-02	8,87E+02	2,91E+01	2,91E+01	2,91E+01	1,37E+02	8,43E+01	1,75E+02
39	2,58E+01	5,18E+01	9,15E-03	7,61E+02	9,22E+00	9,22E+00	9,22E+00	7,99E+01	5,86E+01	1,56E+02
40	3,26E+01	1,57E+01	1,90E-02	9,64E+02	4,14E+01	4,14E+01	4,14E+01	1,71E+02	6,76E+01	1,17E+02
41	5,12E+01	2,05E-01	6,07E-03	9,24E+02	3,50E+01	3,50E+01	3,50E+01	1,53E+02	6,41E+01	1,42E+02
42	5,67E+01	3,64E+00	7,85E-03	9,80E+02	4,39E+01	4,39E+01	4,39E+01	1,79E+02	7,27E+01	1,45E+02

# Tab. A.4 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μm)		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
43	4,32E+01	5,39E+00	1,56E-02	1,03E+03	5,10E+01	5,10E+01	5,10E+01	1,99E+02	8,64E+01	9,40E+01
44	9,56E-01	6,02E+01	8,18E-03	9,89E+02	4,54E+01	4,54E+01	4,54E+01	1,83E+02	8,77E+01	8,58E+01
45	4,48E+01	6,05E-02	1,32E-02	1,00E+03	4,77E+01	4,77E+01	4,77E+01	1,89E+02	7,64E+01	2,03E+02
46	4,66E+01	7,16E-02	7,31E-03	8,83E+02	2,86E+01	2,86E+01	2,86E+01	1,35E+02	5,13E+01	9,03E+01
47	3,14E+01	8,17E+00	1,43E-02	7,86E+02	1,32E+01	1,32E+01	1,32E+01	9,11E+01	8,35E+01	8,41E+01
48	5,97E+01	6,67E-01	8,08E-03	1,03E+03	5,14E+01	5,14E+01	5,14E+01	2,00E+02	6,40E+01	1,59E+02
49	5,43E+01	1,07E-01	7,82E-03	7,55E+02	8,37E+00	8,37E+00	8,37E+00	7,75E+01	8,93E+01	1,12E+02
50	2,73E+01	4,22E+01	1,67E-02	8,43E+02	2,23E+01	2,23E+01	2,23E+01	1,17E+02	1,03E+02	1,96E+02
51	2,93E+00	2,16E+01	5,15E-03	8,57E+02	2,44E+01	2,44E+01	2,44E+01	1,23E+02	1,05E+02	7,92E+01
52	4,15E+01	7,79E-01	1,19E-02	8,74E+02	2,71E+01	2,71E+01	2,71E+01	1,31E+02	8,66E+01	1,56E+02
53	1,40E+01	6,97E-01	1,44E-02	1,04E+03	5,33E+01	5,33E+01	5,33E+01	2,05E+02	1,01E+02	1,40E+02
54	4,74E+01	5,76E+01	1,02E-02	8,33E+02	2,06E+01	2,06E+01	2,06E+01	1,12E+02	6,33E+01	1,18E+02
55	4,26E+01	1,31E+02	1,83E-02	8,77E+02	2,76E+01	2,76E+01	2,76E+01	1,32E+02	4,77E+01	9,87E+01
56	5,70E+01	4,93E-02	1,66E-02	9,69E+02	4,21E+01	4,21E+01	4,21E+01	1,73E+02	8,82E+01	1,40E+02

# Tab. A.4 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μ <b>m</b> )		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
57	4,09E+01	1,28E-01	8,59E-03	8,95E+02	3,04E+01	3,04E+01	3,04E+01	1,40E+02	7,24E+01	9,95E+01
58	2,56E+00	2,96E+01	1,75E-02	8,55E+02	2,41E+01	2,41E+01	2,41E+01	1,22E+02	6,37E+01	1,72E+02
59	5,06E+01	3,46E+01	8,14E-03	1,04E+03	5,34E+01	5,34E+01	5,34E+01	2,05E+02	5,01E+01	1,37E+02
60	3,96E+01	1,74E-01	1,01E-02	9,55E+02	4,00E+01	4,00E+01	4,00E+01	1,67E+02	9,97E+01	1,12E+02
61	1,94E+01	1,95E+01	6,66E-03	8,23E+02	1,91E+01	1,91E+01	1,91E+01	1,08E+02	6,82E+01	1,73E+02
62	1,68E+01	1,39E+02	1,90E-02	9,50E+02	3,92E+01	3,92E+01	3,92E+01	1,65E+02	4,98E+01	1,73E+02
63	5,27E+01	9,69E-01	1,37E-02	1,03E+03	5,12E+01	5,12E+01	5,12E+01	1,99E+02	5,17E+01	8,49E+01
64	5,78E+01	5,27E+01	1,54E-02	8,88E+02	2,94E+01	2,94E+01	2,94E+01	1,37E+02	8,59E+01	1,60E+02
65	1,42E+01	1,71E-01	1,30E-02	8,40E+02	2,17E+01	2,17E+01	2,17E+01	1,15E+02	7,49E+01	1,90E+02
66	5,07E+01	2,21E+01	1,71E-02	1,03E+03	5,15E+01	5,15E+01	5,15E+01	2,00E+02	4,94E+01	1,82E+02
67	4,30E+00	1,19E+00	6,06E-03	8,15E+02	1,78E+01	1,78E+01	1,78E+01	1,04E+02	1,01E+02	1,32E+02
68	4,48E+01	2,46E+00	1,26E-02	9,39E+02	3,74E+01	3,74E+01	3,74E+01	1,60E+02	7,72E+01	1,90E+02
69	2,97E+00	3,05E+00	5,25E-03	9,00E+02	3,13E+01	3,13E+01	3,13E+01	1,43E+02	5,50E+01	1,91E+02
70	7,58E+00	3,81E+00	1,05E-02	1,03E+03	5,20E+01	5,20E+01	5,20E+01	2,02E+02	8,69E+01	1,37E+02

# Tab. A.4 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)

	Parameter Nr.									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht
	(kg)	(μm)		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)
71	1,47E+01	4,27E-01	1,75E-02	8,16E+02	1,79E+01	1,79E+01	1,79E+01	1,05E+02	6,08E+01	7,65E+01
72	3,53E+01	6,34E+01	9,60E-03	8,97E+02	3,08E+01	3,08E+01	3,08E+01	1,41E+02	7,63E+01	1,92E+02
73	4,35E+01	6,22E+00	8,47E-03	9,36E+02	3,69E+01	3,69E+01	3,69E+01	1,59E+02	1,03E+02	9,38E+01
74	1,44E+01	8,45E+01	1,38E-02	9,38E+02	3,73E+01	3,73E+01	3,73E+01	1,60E+02	6,39E+01	1,95E+02
75	3,31E+01	6,22E-01	1,35E-02	1,04E+03	5,33E+01	5,33E+01	5,33E+01	2,05E+02	9,05E+01	8,77E+01
76	5,33E+01	4,27E-01	1,55E-02	8,99E+02	3,11E+01	3,11E+01	3,11E+01	1,42E+02	9,82E+01	1,44E+02
77	1,62E+01	1,03E-01	1,76E-02	8,20E+02	1,86E+01	1,86E+01	1,86E+01	1,07E+02	7,31E+01	1,83E+02
78	5,29E+01	3,12E+00	1,83E-02	8,09E+02	1,69E+01	1,69E+01	1,69E+01	1,02E+02	9,09E+01	8,31E+01
79	3,07E+01	8,69E+01	5,86E-03	1,01E+03	4,89E+01	4,89E+01	4,89E+01	1,93E+02	7,74E+01	1,09E+02
80	6,13E+00	9,17E-02	5,15E-03	7,89E+02	1,37E+01	1,37E+01	1,37E+01	9,26E+01	8,43E+01	1,50E+02
81	5,40E+01	1,10E+00	1,53E-02	7,95E+02	1,46E+01	1,46E+01	1,46E+01	9,53E+01	1,03E+02	1,33E+02
82	3,60E+01	1,26E+00	9,15E-03	9,04E+02	3,19E+01	3,19E+01	3,19E+01	1,44E+02	1,04E+02	1,23E+02
83	1,12E+01	1,19E+00	1,36E-02	1,00E+03	4,73E+01	4,73E+01	4,73E+01	1,88E+02	8,78E+01	1,27E+02
84	9,66E+00	1,83E+01	1,81E-02	7,64E+02	9,72E+00	9,72E+00	9,72E+00	8,13E+01	6,19E+01	1,90E+02

 Tab. A.4
 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)
	Parameter Nr.											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke	Kompaktion Schacht		
	(kg)	(μ <b>m</b> )		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)		
85	5,12E+01	7,51E+01	1,81E-02	8,12E+02	1,73E+01	1,73E+01	1,73E+01	1,03E+02	6,41E+01	1,74E+02		
86	1,94E+01	8,67E-02	1,20E-02	8,79E+02	2,80E+01	2,80E+01	2,80E+01	1,33E+02	9,20E+01	1,26E+02		
87	2,20E+01	9,61E-02	1,29E-02	1,03E+03	5,26E+01	5,26E+01	5,26E+01	2,03E+02	8,32E+01	1,79E+02		
88	5,45E+01	1,16E+01	1,35E-02	9,71E+02	4,25E+01	4,25E+01	4,25E+01	1,74E+02	1,02E+02	1,13E+02		
89	9,82E+00	8,58E-01	1,73E-02	1,04E+03	5,40E+01	5,40E+01	5,40E+01	2,07E+02	5,54E+01	1,67E+02		
90	3,84E+01	4,19E-01	1,06E-02	1,05E+03	5,49E+01	5,49E+01	5,49E+01	2,10E+02	5,04E+01	1,27E+02		
91	3,48E+01	3,00E+01	1,18E-02	9,23E+02	3,49E+01	3,49E+01	3,49E+01	1,53E+02	5,98E+01	1,47E+02		
92	1,89E+01	4,62E-02	8,17E-03	9,74E+02	4,30E+01	4,30E+01	4,30E+01	1,76E+02	9,65E+01	8,99E+01		
93	1,25E+01	1,10E-01	1,81E-02	9,77E+02	4,35E+01	4,35E+01	4,35E+01	1,77E+02	8,27E+01	1,93E+02		
94	4,27E+01	6,55E-02	1,27E-02	1,00E+03	4,72E+01	4,72E+01	4,72E+01	1,88E+02	8,17E+01	1,69E+02		
95	1,05E+01	9,50E-01	1,72E-02	7,64E+02	9,78E+00	9,78E+00	9,78E+00	8,15E+01	7,82E+01	1,75E+02		
96	4,10E+01	6,15E+00	5,51E-03	1,05E+03	5,47E+01	5,47E+01	5,47E+01	2,09E+02	8,69E+01	2,01E+02		
97	3,53E+00	4,27E+01	1,61E-02	9,35E+02	3,67E+01	3,67E+01	3,67E+01	1,58E+02	6,14E+01	1,41E+02		
98	4,91E+01	3,48E+01	1,71E-02	7,71E+02	1,08E+01	1,08E+01	1,08E+01	8,45E+01	1,02E+02	1,86E+02		

## Tab. A.4 Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)

	Parameter Nr.												
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10			
Mo- dell lauf	Wassermas- se pro Behäl- ter (kg)	Korrosi- onsrate	Restpo- rosität	Kompakti- on EINL1	Kompakti- on EINL2	Kompakti- on EINL3	Kompakti- on EINL4	Kompaktion Querschlag	Kompaktion Richtstre- cke (a)	Kompaktion Schacht			
99	1,87E+01	9,27E-02	5,06E-03	8,34E+02	2,07E+01	2,07E+01	2,07E+01	1,13E+02	5,83E+01	1,93E+02			
100	1,79E+01	7,95E+01	1,23E-02	1,04E+03	5,35E+01	5,35E+01	5,35E+01	2,06E+02	1,01E+02	1,56E+02			

ab. A.4	Verwendete Stichprobe aus den Parameterbandbreiten (Fortsetzung)	
---------	--	--

## A.2 Anhang zu Kapitel 4

## A.2.1 Anhang zu Kapitel 4.2

Rang	RGI	Modell- lauf	Rang	RGI	Modell- lauf	Rang	RGI	Modell- lauf
1	0,00597	24	35	0,37101	16	69	0,61351	72
2	0,04617	48	36	0,37355	60	70	0,61686	67
3	0,04982	46	37	0,37684	100	71	0,62382	43
4	0,06565	28	38	0,37916	79	72	0,63458	49
5	0,07448	90	39	0,39561	58	73	0,64231	81
6	0,09222	69	40	0,41083	27	74	0,64514	26
7	0,12315	41	41	0,41367	65	75	0,64518	64
8	0,13339	87	42	0,41734	18	76	0,65074	98
9	0,13477	3	43	0,42112	68	77	0,65611	95
10	0,15073	59	44	0,43633	20	78	0,66088	93
11	0,15913	63	45	0,44140	55	79	0,66756	23
12	0,16428	4	46	0,46397	19	80	0,67827	30
13	0,16501	97	47	0,46559	91	81	0,68180	88
14	0,17332	94	48	0,46952	86	82	0,69494	61
15	0,19361	99	49	0,47023	89	83	0,70962	47
16	0,19806	34	50	0,47087	62	84	0,71168	73
17	0,20735	45	51	0,47831	6	85	0,71526	33
18	0,21487	70	52	0,48027	2	86	0,71823	37
19	0,24140	75	53	0,48250	11	87	0,73621	78
20	0,25170	74	54	0,50444	25	88	0,74532	38
21	0,26033	21	55	0,51858	40	89	0,75515	32
22	0,26066	57	56	0,52448	10	90	0,76529	22
23	0,26199	29	57	0,53226	51	91	0,77141	39
24	0,27464	15	58	0,53383	56	92	0,78832	71
25	0,27487	66	59	0,53403	9	93	0,80365	54
26	0,29574	44	60	0,53409	52	94	0,81849	14
27	0,29775	53	61	0,55242	50	95	0,82106	85
28	0,31014	31	62	0,55287	13	96	0,90642	77
29	0,31306	42	63	0,55775	82	97	0,96175	35
30	0,32040	92	64	0,56419	12	98	1,27936	76
31	0,32305	7	65	0,56496	80	99	1,51966	36
32	0,34374	83	66	0,57077	84	100	1,72968	1
33	0,35096	5	67	0,58417	96			
34	0,35991	8	68	0,58692	17			

**Tab. A.5**Ergebnisse für den RGI als Rangliste, sortiert nach Größe des Werts



Abb. A.1 Einflussgrößter Parameter der Produkt-Moment-Korrelation



Abb. A.2 Wert der Sensitivitätsmaße für den einflussgrößten Parameter der Produkt Moment-Korrelation



Abb. A.3 Einflussgrößter Parameter der rang-basierten Quadrantkorrelation



Abb. A.4 Wert der Sensitivitätsmaße für den einflussgrößten Parameter der Quadrantkorrelation



Abb. A.5 Einflussgrößter Parameter der rang-basierten Kendalls Korrelation



Abb. A.6 Wert der Sensitivitätsmaße für den einflussgrößten Parameter der Kendalls Korrelation



Abb. A.7 Einflussgrößter Parameter der rang-basierten Spearmans Korrelation



Abb. A.8 Wert der Sensitivitätsmaße für den einflussgrößten Parameter der Spearmans Korrelation



Abb. A.9 Einflussgrößter Parameter der Korrelationsverhältnisse



Abb. A.10 Wert der Sensitivitätsmaße für den einflussgrößten Parameter der Korrelationsverhältnisse



Abb. A.11 Bestimmtheitsmaß R<sup>2</sup> bezogen auf alle unabhängigen Parameter für alle Sensitivitätsmaße (außer Korrelationsverhältnis)

## A.2.3 Anhang zu Kapitel 4.4

Sensitivi- tätsmaß	Berec Nr.	hneter	Wert (g	gerundet)	für Pa	rameter	Resultierende Rangfolge <sup>**</sup>	R <sup>2</sup>
	1	2	3	4	9	10		
000	0,15	0,15	0,01	-0,58 <sup>*</sup>	0,55	-0,06	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 1 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
PCC	0,26	0,36	0,06	-0,69*	0,68	0,01	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 3 \rightarrow 10 \end{array}$	0,68
SCC	0,16	0,22	0,04	-0,55*	0,54	0,01	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 3 \rightarrow 10 \end{array}$	
OQM	0,08	0,24	0,04	-0,44 <sup>*</sup>	0,36	0,08	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 3 \end{array}$	
PQM	0,19	0,33	0,07	-0,53 <sup>*</sup>	0,48	0,14	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	0,44
SQM	0,15	0,26	0,05	-0,47*	0,42	0,11	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
ОКС	0,11	0,22	0,01	-0,40*	0,36	-0,04	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
РКС	0,14	0,29	0,02	-0,43*	0,41	0,01	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 3 \rightarrow 10 \end{array}$	0,35
SKC	0,12	0,25	0,02	-0,39*	0,36	0,01	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 3 \rightarrow 10 \end{array}$	
OSC	0,16	0,33	0,01	-0,57*	0,53	-0,06	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
PSC	0,32	0,60	0,04	-0,73 <sup>*</sup>	0,72	0,06	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	0,75
SSC	0.18	0.38	0.02	-0.54 <sup>*</sup>	0.54	0.03	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
ECR	0,30	0,38	0,22	0,62*	0,60	0,30	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 1 \rightarrow 10 \rightarrow 3 \end{array}$	
CRR	0,30	0,38	0,21	0,62*	0,59	0,30	$\begin{array}{c} 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 3 \end{array}$	

**Tab. A.6** Resultat der Sensitivitätsanalyse für  $\widehat{\text{RGI1}}$ , den ersten Peak (t < 500 a)

\* Größter Koeffizient (Absolutwert)

\*\* Rangfolge ohne abhängige Parameter; Parameter 4 steht hier für die Gesamtheit der Parameter 4 bis 8

Sensitivi-	Berec	hneter W	Resultieren-	$R^2$				
tätsmaß	1	2	3	4	9	10	de Rangfol- ge <sup>**</sup>	
occ	0.11	-0.10	0.65 <sup>*</sup>	-0.06	0.05	-0.03	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow \\ 4 \rightarrow 9 \rightarrow 10 \end{array}$	
PCC	0.08	-0.22	0.69*	-0.12	0.06	-0.17	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 10 \\ \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 9 \end{array}$	0,49
SCC	0.06	-0.17	0.70 <sup>*</sup>	-0.09	0.04	-0.13	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 10 \\ \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 9 \end{array}$	
OQM	0.00	-0.08	0.84 <sup>*</sup>	0.12	0.04	0.24	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 10 \rightarrow 4 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 9 \rightarrow 1 \end{array}$	
PQM	0.08	-0.22	0.84 <sup>*</sup>	0.10	0.08	0.19	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 10 \\ \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 9 \end{array}$	0,73
SQM	0.04	-0.12	0.82*	0.05	0.04	0.10	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 10 \\ \rightarrow 4 \rightarrow 1 \rightarrow 9 \end{array}$	
ОКС	0.07	-0.08	0.73 <sup>*</sup>	0.01	-0.10	0.14	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 10 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 2 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	
РКС	0.07	-0.23	0.74 <sup>*</sup>	-0.03	-0.09	0.08	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	0,56
SKC	0.05	-0.16	0.73 <sup>*</sup>	-0.02	-0.06	0.05	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	
OSC	0.09	-0.12	0.91*	0.01	-0.15	0.21	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 10 \rightarrow 9 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	
PSC	0.18	-0.64	0.95*	-0.13	-0.24	0.18	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	0,91
SSC	0.06	-0.26	0.93*	-0.04	-0.08	0.06	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 2 \rightarrow 9 \rightarrow \\ 10 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \end{array}$	
ECR	0,36	0,34	0,71 <sup>*</sup>	0,30	0,20	0,43	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 10 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 9 \end{array}$	
CRR	0,39	0,22	0,92 <sup>*</sup>	0,26	0,24	0,42	$\begin{array}{c} 3 \rightarrow 10 \rightarrow 1 \\ \rightarrow 4 \rightarrow 9 \rightarrow 2 \end{array}$	

**Tab. A.7** Resultat der Sensitivitätsanalyse für  $\widehat{RGI2}$ , den zweiten Peak (t > 500 a)

\* Größter Koeffizient (Absolutwert)

\*\* Rangfolge ohne abhängige Parameter; Parameter 4 steht hier für die Gesamtheit der Parameter 4 bis 8

Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) mbH

Schwertnergasse 1 50667 Köln Telefon +49 221 2068-0 Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum **85748 Garching b. München** Telefon +49 89 32004-0 Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200 **10719 Berlin** Telefon +49 30 88589-0 Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4 **38122 Braunschweig** Telefon +49 531 8012-0 Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de