



RESSORTFORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

Anwendung der künstlichen Intelligenz (KI) für die Standortauswahl von tiefen geologischen Endlagern (AKI)

Vorhaben FKZ 4721E03210

AUFTRAGNEHMER:IN:

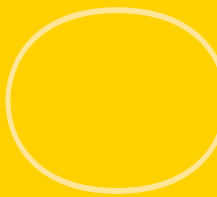
Öko-Institut e.V. Institut für angewandte Ökologie, Darmstadt

UNTERAUFTRAGNEHMER:IN:

Technische Universität Clausthal, Institute for Software
and Systems Engineering, Clausthal-Zellerfeld

Dipl.-Ing. Judith Krohn
Dr. Veronika Ustohalova
Dr. Florian Krob
Dr. Saleem Chaudry

Prof. Dr. Andreas Rausch
Dr. Stefan Wittek
M.Sc. Dimitri Bratzel



Anwendung der künstlichen Intelligenz (KI) für die Standortauswahl von tiefen geologischen Endlagern (AKI)

Untertitel

Dieser Band enthält einen Ergebnisbericht eines vom Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung im Rahmen der Ressortforschung des BMU (ReFoPlan) in Auftrag gegebenen Untersuchungsvorhabens. Verantwortlich für den Inhalt sind allein die Autor:innen. Das BASE übernimmt keine Gewähr für die Richtigkeit, die Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter. Der Auftraggeber behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf dieser Bericht nur mit seiner Zustimmung ganz oder teilweise vervielfältigt werden.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der Auftragnehmer:innen wieder und muss nicht mit der des BASE übereinstimmen.

BASE-RESFOR-025/23

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:
urn:nbn:de:0221-2023082139048

Berlin, September 2023

Impressum

**Bundesamt
für die Sicherheit
der nuklearen Entsorgung
(BASE)**

RESSORTFORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

Auftragnehmer:in:
Öko-Institut e.V. Institut für angewandte Ökologie,
Darmstadt

Unterauftragnehmer:in:
Technische Universität Clausthal, Institute for Software and Systems Engineering, Clausthal-Zellerfeld

Dipl.-Ing. Judith Krohn
Dr. Veronika Ustohalova
Dr. Florian Krob
Dr. Saleem Chaudry

Prof. Dr. Andreas Rausch
Dr. Stefan Wittek
M.Sc. Dimitri Bratzel

030 184321-0
www.base.bund.de

Stand: September 2023

Anwendung der künstlichen Intelligenz (KI) für die Standortauswahl von tiefen geologischen Endlagern (AKI)

Vorhaben mit FKZ 4721E03210 für das Bundesamt für die
Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE).

Darmstadt, 14.11.2022

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers
wieder und muss nicht mit der Meinung der Auftraggeberin
übereinstimmen.

Autorinnen und Autoren

Dipl.-Ing. Judith Krohn
Dr. Veronika Ustohalova
Dr. Florian Krob
Dr. Saleem Chaudry
Öko-Institut e. V.

Prof. Dr. Andreas Rausch
Dr. Stefan Wittek
M.Sc. Dimitri Bratzel
TU Clausthal

Kontakt Unterauftragnehmer

Technische Universität Clausthal
Institute for Software and Systems Engineering
Adolph-Roemer-Straße 2a
38678 Clausthal-Zellerfeld

Kontakt

info@oeko.de
www.oeko.de

Geschäftsstelle Freiburg

Postfach 17 71
79017 Freiburg

Hausadresse

Merzhauser Straße 173
79100 Freiburg
Telefon +49 761 45295-0

Büro Berlin

Borkumstraße 2
13189 Berlin
Telefon +49 30 405085-0

Büro Darmstadt

Rheinstraße 95
64295 Darmstadt
Telefon +49 6151 8191-0

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	5
Tabellenverzeichnis	6
Abkürzungsverzeichnis	9
Zusammenfassung	11
Summary	12
1 Hintergrund und Zielsetzung	13
2 Herangehensweise	14
3 Literaturrecherche und -kategorisierung	15
3.1 Inhalte der Literaturdatenbank	15
3.2 Gliederung der Literaturdatenbank	15
3.2.1 Geowissenschaftliche Kategorien (geoKAT)	17
3.2.2 Kategorien zum Einsatzbereich der KI (KIKAT)	20
4 Schlüsselaktivitäten im Standortauswahlverfahren	22
4.1 Herleitung und Darstellung von Schlüsselaktivitäten	22
4.2 Geowissenschaftliche Aufgaben während der Schlüsselaktivitäten	24
4.2.1 Abschlusskriterien	28
4.2.2 Mindestanforderungen	31
4.2.3 Geowissenschaftliche Abwägungskriterien (geoWK)	34
4.2.4 Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen	39
4.2.5 Über- und untertägige Erkundung	41
5 Erstellen einer Matrix mit Schlüsselaktivitäten, geowissenschaftlichen Fragestellungen und Einsatzbereichen der KI	42
5.1 Vorgehen zur Erstellung der Literaturmatrix	42
5.2 Struktur der Literaturmatrix	42
5.3 Ergebnis: Literaturmatrix	44
6 SWOT-Analyse der KI-Anwendung in den Geowissenschaften mit Blick auf das Standortauswahlverfahren	44
6.1 Chancen und Risiken des Einsatzes von KI für bestimmte Problemstellungen	45
6.1.1 Bewertungsschema	45
6.1.2 Bewertung der KI-Einsatzbereiche	48

6.2	Bewertung konkreter Einsatzmöglichkeiten von KI in Bezug auf einzelne Schlüsselaktivitäten im Standortauswahlverfahren	58
6.2.1	Fokussierung auf Fallbeispiele	58
6.2.2	Bewertungsschema	61
6.2.3	Anwendung von KI für „Optimization“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Hydro“	65
6.2.4	Anwendung von KI für „Generierung“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Petrographie und Stratigraphie“	68
6.2.5	Anwendung von KI für „Surrogate-Modelle“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geochemistry“	78
6.2.6	Anwendung von KI für „Prediction“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geotechnics und Mining“	90
6.2.7	Anwendung von KI für „Prediction“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geomechanics“	99
6.2.8	Anwendung von KI für „Surrogate Modelle“ in der geowissenschaftlichen Kategorie	112
6.3	Identifizierte Potenziale für den Einsatz der KI in den einzelnen geowissenschaftlichen Kategorien	120
6.3.1	Hydro- und Geochemistry	121
6.3.2	Petrography and Stratigraphy	122
6.3.3	Geotechnics and Mining	122
6.3.4	Geomechanics	123
7	Weitere Bereiche der KI-Anwendung mit möglichem Potenzial im StandAV, weiterführende Forschungsfragen	124
8	Einordnung der Ergebnisse in Bezug auf die Anwendung im Standortauswahlverfahren	130
	Literaturverzeichnis	133
	Anhang	136
	Anhang I. Verwendete Fachzeitschriften und -bücher der internationalen Literaturrecherche	136

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 3-1: Keywords der künstlichen Intelligenz	16
Abbildung 4-1: Aktivitäten in den drei Phasen des StandAV	23
Abbildung 4-2: Zuordnung der Gelände- und Labormethoden in den geowissenschaftlichen Aufgaben im StandAV zu den geoKAT	27
Abbildung 4-3: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der Ausschlusskriterien	28
Abbildung 4-4: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der Mindestanforderungen	32
Abbildung 4-5: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien	35
Abbildung 4-6: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben für die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen	40
Abbildung 4-7: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Erkundungen	41
Abbildung 5-1: Schematische Darstellung der Literaturmatrix – Excel-Tabelle mit mehreren verlinkten Arbeitsblättern (Stand Juli 2022)	43
Abbildung 5-2: Anzahl Literatur für die einzelnen Felder der Matrix	44

Tabellenverzeichnis

Tabelle 4-1: Definition von Schlüsselaktivitäten im StandAV	24
Tabelle 6-1: Chancen und Risiken: Regression - Prediction	48
Tabelle 6-2: Chancen und Risiken: Regression - Forecast	49
Tabelle 6-3: Chancen und Risiken: Surrogate Model	50
Tabelle 6-4: Chancen und Risiken: Dimension Reduction	51
Tabelle 6-5: Chancen und Risiken: Classification	52
Tabelle 6-6: Chancen und Risiken: Computer Vision - Erkennung	53
Tabelle 6-7: Chancen und Risiken: Computer Vision - Segmentierung	54
Tabelle 6-8: Chancen und Risiken: Computer Vision - Generierung	55
Tabelle 6-9: Chancen und Risiken: Clustering	56
Tabelle 6-10: Chancen und Risiken: Anomaly Detection	57
Tabelle 6-11: Chancen und Risiken: Optimization	58
Tabelle 6-12: Verteilung der Quellen mit wahrscheinlicher oder sehr wahrscheinlicher Relevanz für das StandAV und Kennzeichnung des Fokus (gelb)	59
Tabelle 6-13: Anzahl bisher ermittelter Literatur pro Feld in der Matrix und Kennzeichnung des Fokus (gelb)	60
Tabelle 6-14: Unterkriterien zur Bewertung der Datengrundlage	62
Tabelle 6-15: Unterkriterien zur Bewertung des technologischen Reifegrads	62
Tabelle 6-16: Unterkriterien zur Bewertung der Nachvollziehbarkeit	63
Tabelle 6-17: Unterkriterien zur Einschätzung der Relevanz für das StandAV	64
Tabelle 6-18: Bewertung der angewandten KI-Methode in (Hou et al. 2021)	67
Tabelle 6-19: Relevanz von (Hou et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	67
Tabelle 6-20: Bewertung der angewandten KI-Methode in Karimpouli und Tahmasebi (2019)	70
Tabelle 6-21: Relevanz von (Karimpouli und Tahmasebi 2019) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	70
Tabelle 6-22: Bewertung der angewandten KI-Methode in Kim et al. (2021)	73
Tabelle 6-23: Relevanz Kim et al. (Kim et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	73

Tabelle 6-24: Bewertung der angewandten KI-Methode in Mosser et al. (2017)	75
Tabelle 6-25: Relevanz von (Mosser et al. 2017) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	75
Tabelle 6-26: Bewertung der angewandten KI-Methode in Mosser et al. (2018)	77
Tabelle 6-27: Relevanz von (Mosser et al. 2018) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	77
Tabelle 6-28: Bewertung der angewandten KI-Methode in Chen et al. (2020)	80
Tabelle 6-29: Relevanz von (Chen et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	80
Tabelle 6-30: Bewertung der angewandten KI-Methode in Lucia und Kühn (2021)	83
Tabelle 6-31: Relevanz von (Lucia und Kühn 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	83
Tabelle 6-32: Bewertung der angewandten KI-Methode in Leal et al. (2020)	86
Tabelle 6-33: Relevanz von (Leal et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	86
Tabelle 6-34: Bewertung der angewandten KI-Methode in Zhang et al. (2021)	89
Tabelle 6-35: Relevanz von Zhang et al. (Zhang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	89
Tabelle 6-36: Bewertung der angewandten KI-Methode in Jalal et al. (2021)	92
Tabelle 6-37: Relevanz der angewandten KI-Methode in Jalal et al. (2021)	92
Tabelle 6-38: Bewertung der angewandten KI-Methode in Yang et al. (2021)	95
Tabelle 6-39: Relevanz von (Yang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	95
Tabelle 6-40: Bewertung der angewandten KI-Methode in Zhang et al. (2022)	98
Tabelle 6-41: Relevanz von (Zhang et al. 2022) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	98
Tabelle 6-42: Bewertung der angewandten KI-Methode in Feng und Seto (1998)	102
Tabelle 6-43: Relevanz von (Feng und Seto 1998) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	102
Tabelle 6-44: Bewertung der angewandten KI-Methode in (Mahmoodzadeh et al. 2021)	105
Tabelle 6-45: Relevanz von (Mahmoodzadeh et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	105
Tabelle 6-46: Bewertung der angewandten KI-Methode in Ogunkunle et al. (2021)	108
Tabelle 6-47: Relevanz von (Ogunkunle et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	108

Tabelle 6-48: Bewertung der angewandten KI-Methode in Sharma et al. (2017)	111
Tabelle 6-49: Relevanz von (Sharma et al. 2017) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	111
Tabelle 6-50: Bewertung der angewandten KI-Methode in Jiang et al. (2021)	114
Tabelle 6-51: Relevanz von (Jiang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	114
Tabelle 6-52: Bewertung der angewandten KI-Methode in Karra et al. (2018)	117
Tabelle 6-53: Relevanz von (Karra et al. 2018) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	117
Tabelle 6-54: Bewertung der angewandten KI-Methode in Prasianakis et al. (2020)	119
Tabelle 6-55: Relevanz von (Prasianakis et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht	119

Abkürzungsverzeichnis

AE	Akustische Emission
AI	Artificial Intelligence (deu. KI)
AK	Ausschlusskriterium
ANFIS	Adaptives Neuro-Fuzzy-Inferenzsystem
ANN	Artificial Neural Net (deu. KNN)
BGE	Bundesgesellschaft für Endlagerung
CK	Citavi Kategorie
CNN	Convolutional Neural Net
DFN	Discrete fracture network
DL	Deep Learning
DNAPL	Dense non aqueous phase liquid (deu. wasserunlösliche Flüssigkeit mit einer Dichte größer als Wasser)
DNN	Deep Neural Net (deu. tiefes neuronales Netzwerk)
DOI	Digital Object Identifier (deu. digitaler Objektbezeichner)
DRP	Digital Rock Physics (deu. digitale Gesteinsphysik)
ewG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich
GAN	Generative Adversarial Networks (deu. generatives adversarielles Netzwerk)
geoKAT	von uns definierte geowissenschaftliche Kategorie
geoWK	Geowissenschaftliches Abwägungskriterium
GIS	Geoinformationssysteme
GNN	Generatives neuronales Netz

GRU	Gated Recurrent Units (deu. Gating-Mechanismus in wiederkehrenden NN)
HYPSS	Hybrid pattern and pixel-based simulation (deu. hybride Pixel-basierte Simulation)
KI	Künstliche Intelligenz (engl. AI)
KIKAT	von uns definierte KI-Kategorie
KNN	Künstliches Neuronales Netz (engl. ANN) In manchen Publikationen auch K-Nearest Neighbourhood
LSTM	Long Short-Term Memory (deu. langes Kurzzeitgedächtnis)
MA	Mindestanforderung
ML	Machine Learning (deu. maschinelles Lernen)
NN	Neural Net (deu. Neuronales Netz)
PCA	Principal component Analysis (deu. Hauptkomponentenanalyse)
PSO	Particle Swarm Optimization
SAGAN	Spatially assembled GAN
StandAV	Standortauswahlverfahren
TBM	Tunnelbohrmaschine
UCS	uniaxial compressive strength (deu. Einachsige Druckfestigkeit)
uvSU	Umfassende vorläufige Sicherheitsuntersuchungen
vSU	Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen
wvSU	Weiterentwickelte vorläufige Sicherheitsuntersuchungen
XAI	Explainable AI (deu. erklärbare KI)

Zusammenfassung

Die Bundesrepublik Deutschland sucht in einem wissenschaftsbasierten Standortauswahlverfahren (StandAV) den Standort, der die bestmögliche Sicherheit zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle über einen Nachweiszeitraum von einer Million Jahre gewährleistet. Dabei ermittelt die Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE) in einem iterativen Prozess den am besten geeigneten Standort für ein Endlager. Dafür muss der geologische Untergrund Deutschlands für potenzielle Gebiete untersucht und bewertet werden. Herausforderungen dabei sind unter anderem die unterschiedliche Qualität und der Detailgrad vorhandener sowie bei der Erhebung und Bewertung neuer großer Mengen heterogener Geodaten, die verarbeitet werden müssen.

Die Anwendung von KI-basierten Methoden bietet Chancen, um bei der Auswertung der großen Datensätze und Modellberechnungen komplexer langfristiger und gekoppelter, geologischer Prozesse die Bewertung und somit das StandAV effizienter und sicherer zu gestalten. Die Forschung zur Anwendung von KI hat entsprechend auch in den Geowissenschaften im Laufe der letzten Jahre deutlich zugenommen.

Diese Studie identifiziert auf Basis einer umfassenden internationalen Literaturrecherche Einsatzbereiche künstlicher Intelligenz (KI) in den Geowissenschaften allgemein und bewertet diese im Hinblick auf den Einsatz für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV. Zudem werden Grenzen und notwendige Voraussetzungen, die sich aufgrund der Risiken des Einsatzes von KI ergeben, im Hinblick auf die Schlüsselaktivitäten im StandAV formuliert.

Die Ergebnisse der Studie zeigen, dass die KI-Einsatzbereiche aus der Literatur generell nur mit methodischen und fachspezifischen Anpassungen auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV übertragbar sind. Bei der Bewertung zeigt sich zudem, dass KI nur als unterstützendes Werkzeug in den Schlüsselaktivitäten zum Einsatz kommen kann und beim Einsatz im StandAV keine Entscheidungen allein über KI getroffen werden dürfen. KI-Methoden, die dem Transparenzanspruch des StandAV nicht genügen, bergen zudem enorme Risiken, die das Vertrauen der Bevölkerung im Beteiligungsprozess aufs Spiel setzen und den generellen Argwohn bzw. die Skepsis gegenüber der KI in der öffentlichen Wahrnehmung nähren.

Chancen bietet die KI insbesondere beim Datenmanagement und bei der Modellberechnung komplexer und langfristiger geologischer Prozesse unter der Voraussetzung, dass das Vorgehen der KI hinreichend transparent dargestellt und validiert werden kann. Deshalb zeigt die Studie auch weiterführende Forschungsfragen auf.

Summary

In a science-based site selection procedure (StandAV), the Federal Republic of Germany searches for the site that guarantees the best possible safety for the final disposal of high radioactive waste (HAW) over a demonstration period of one million years. In this process, the Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE) determines the most suitable site for a repository in an iterative process. For this purpose, the geological subsurface of Germany must be investigated for potential sites and evaluated. Challenges in this process include the varying quality and level of detail of existing geodata, as well as in the collection and evaluation of new large amounts of heterogenous geodata that must be processed.

The application of AI-based methods offers opportunities to make the evaluation and thus the StandAV more efficient and safer when evaluating the large data sets and model calculations of complex long-term and coupled, geological processes. Accordingly, research on the application of AI has also increased significantly in the geosciences over the last few years.

Based on a comprehensive international literature review, this study identifies areas of application of artificial intelligence (AI) in the geosciences in general and evaluates them with regard to their use for geoscientific questions in the StandAV. In addition, limitations and necessary conditions arising from the risks of using AI are formulated with respect to key activities in StandAV.

The results of the study show that the AI application areas from the literature are generally only transferable to the geoscientific questions in the StandAV with methodological and subject-specific adaptations. The evaluation also shows that AI can only be used as a supporting tool in key activities but may not have any decision-making power when used in StandAV.

Opportunities are offered by AI especially in data management and model calculation of complex and long-term geological processes under the condition that the procedure of AI can be presented and validated transparently. Therefore, the study also identifies further research questions.

1 Hintergrund und Zielsetzung

In der Bundesrepublik Deutschland wird in einem wissenschaftsbasierten Standortauswahlverfahren (StandAV) der Standort gesucht, der die bestmögliche Sicherheit zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle für eine Million Jahre gewährleistet (StandAG 2017). Dazu wird der Untergrund des Staatsgebiets wiederholt mittels im Standortauswahlgesetz (StandAG 2017) festgelegter Kriteriensätze und Verfahren hinsichtlich der Eignung zur langfristig sicheren Endlagerung untersucht und überprüft, um in einem iterativen Prozess den am besten geeigneten Standort ermitteln zu können.

Eine besondere Rolle spielen dabei die Anwendung der in den §§ 22 bis 24 StandAG und den Anlagen 1 bis 11 formulierten Ausschlusskriterien, Mindestanforderungen und geowissenschaftlichen Abwägungskriterien sowie die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (siehe dazu §§ 14, 16 und 18 sowie 27 StandAG, sowie die Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (EndlSiUntV 2020) und Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (EndlSiAnfV 2020)). Zur Anwendung der Kriterien müssen im Rahmen des Standortauswahlverfahrens große Mengen vorhandener Geodaten verarbeitet sowie weitere Daten verschiedener wissenschaftlicher Disziplinen erhoben und im Verbund mit zusätzlichen, nicht numerischen Informationen analysiert und bewertet werden.

Die Abdeckung des Bundesgebiets mit zur Beschreibung der Geosphäre und deren Interpretation notwendigen Daten zu relevanten geophysikalischen, geochemischen und hydro-geologischen Parametern erweist sich bereits in der ersten Phase des Standortauswahlverfahrens als heterogen. Unterschiede hinsichtlich Detailtiefe, Art und Umfang der erhobenen Daten sowie deren unterschiedliche Formate erschweren die Vergleichbarkeit. In den beiden weiteren Phasen des Standortauswahlverfahrens werden zudem weitere neue Daten durch ober- und untertägige Erkundungen hinzukommen. Sichere, datengestützte und nachvollziehbare Schlussfolgerungen stellen die Grundlage für alle Entscheidungen im Rahmen des wissenschaftsbasierten StandAV dar. Zur Durchführung vorläufiger Sicherheitsuntersuchungen müssen darüber hinaus mögliche zukünftige geologische Entwicklungen innerhalb der Untersuchungsräume über einen Nachweiszeitraum von einer Million Jahre analysiert werden. Solche Prognosen zur räumlichen und zeitlichen Veränderung sind ebenfalls auf eine umfangreiche und verlässliche Datengrundlage angewiesen. Eine wesentliche Rolle spielt dabei auch die Beschreibung und Bewertung von Ungewissheiten.

Die von der BGE Technology GmbH veröffentlichte Roadmap (Krafczyk et al. 2021) geht davon aus, dass „mit der Förderung der Digitalisierung in der Endlagerforschung im Allgemeinen sowie der Adaption und Anwendung von KI-basierten Methoden im Besonderen mittelbar ein erhebliches technisches Potenzial in der Endlagertechnologie nutzbar werden kann, in dem die Robustheit und damit die Sicherheit des Endlagersystems erhöht werden.“ Die Roadmap bezieht sich dabei auf den gesamten Zeitraum der Endlagerforschung, angefangen von der Standortauswahl bis hin zum Betrieb des Endlagers und schließlich der Nachbetriebsphase.

Bereits in der Phase der Standortauswahl – auf die sich in dieser Arbeit fokussiert wird - können Methoden der künstlichen Intelligenz (KI; Artificial Intelligence, AI), des maschinellen Lernens (ML), Deep Learning (DL) und künstliche neuronale Netze (KNN; Artificial Neural Net, ANN) bei der Auswertung der großen Datensätze im Standortauswahlverfahren eine entscheidende Rolle spielen, angefangen von der Bewertung der Datenqualität über die Analyse von Daten bis hin zu Fragen der Objektivierbarkeit von Entscheidungen. Mustererkennung, das Generieren synthetischer Daten für die Modellierung, Zeitreihenanalysen und Anomalieerkennung haben das Potenzial, wissenschaftsbasierte Verfahren zu unterstützen sowie schneller und präziser zu Entscheidungen zu führen. Die Forschung zur Anwendung von KI hat entsprechend auch in den Geowissenschaften im Laufe der letzten Jahre deutlich zugenommen.

Auf Basis einer Literaturrecherche zum Einsatz von KI in den Geowissenschaften allgemein wird im Folgenden versucht, eine Systematik und Kategorisierung dieser KI-Anwendungen zu erreichen und dabei den Bezug zu einem möglichen Einsatz im Rahmen des Standortauswahlverfahrens herzustellen. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit werden exemplarisch heutige Möglichkeiten von KI aufgezeigt und deren Anwendung in geowissenschaftlichen Fragestellungen evaluiert. In der Rückbindung der Methoden auf die Anforderungen des Standortauswahlverfahrens wird zudem anhand erster Ideen der Stand von Wissenschaft und Technik zu den Möglichkeiten des Einsatzes künstlicher Intelligenz zur Identifikation und Bewertung potenzieller Endlagerstandorte und der Entwicklung eines Endlagers abgebildet. Zugleich werden Grenzen, notwendige Voraussetzungen und Risiken des Einsatzes von KI dargestellt und mit Blick auf das Standortauswahlverfahren eingeordnet und bewertet.

2 Herangehensweise

Für eine inhaltliche Basis wurde zunächst eine internationale Literaturrecherche über die Einsatzbereiche künstlicher Intelligenz in den Geowissenschaften vorgenommen (Kapitel 3) und die dabei gesammelten Quellen in gemeinsam entwickelte geowissenschaftliche Kategorien sowie Kategorien zum KI-Einsatzbereich einsortiert (Kapitel 3.2). Anschließend wurde eine Definition von Schlüsselaktivitäten im StandAV entwickelt (Kapitel 4). Bei dieser Definition war die Detailtiefe, die für die Bewertung der Literatur aus Sicht der KI notwendig sein würde, von entscheidender Bedeutung. Entsprechend mussten Schlüsselaktivitäten ausgewählt werden, deren Problem- und Aufgabenstellungen konkret genug waren, um einen Zusammenhang zu Literaturquellen der Recherche (geowissenschaftliche Kriterien) ohne konkreten StandAV-Bezug herstellen zu können. Es sollte die Anwendung der KI zur Lösung dieser Problemstellungen in der Literatur erkennbar (Kategorien zum Einsatzbereich von KI) sein, damit die Bewertung der Literaturstellen einen Nutzen für das StandAV aufzeigen kann.

Im zweiten Schritt wurde die für die Schlüsselaktivitäten möglicherweise relevante Literatur ausgewählt und in einer Matrix abgebildet, die den Zusammenhang zu den geowissenschaftlichen Kategorien sowie zu den durch die KI-Anwendung gelösten Problemstellungen erkennen lässt (Kapitel 4.3.1).

Anschließend wurde ein systematisches Verfahren entwickelt, um auf einzelne Felder dieser Matrix zu fokussieren. Die Literatur in diesen Feldern wurde im Hinblick auf die Größe der verwendeten Datengrundlage, den technologischen Reifegrad, die allgemeine Anwendbarkeit sowie ihre Nachvollziehbarkeit eingeordnet und eine Einschätzung in Bezug auf die Relevanz der Quelle für Schlüsselaktivitäten im StandAV vorgenommen. Ebenso wurden übergeordnet Chancen und Risiken, Stärken und Schwächen der verschiedenen KI-Einsatzbereiche ermittelt und beschrieben (Kapitel 6).

Auf Basis der Matrix und deren Bewertung wurden mehrere Bereiche identifiziert, in welchen eine weiterführende Forschung zu Potenzialen bei der KI-Anwendung im StandAV aus unserer Sicht sinnvoll ist. Eine Aufstellung sowie Diskussion einiger aus Sicht der Autoren wichtigsten Potenziale finden sich in Kapitel 7.

Abschließend werden die Ergebnisse in Kapitel 8 in Bezug auf Anwendung im StandAV noch einmal zusammengefasst.

3 Literaturrecherche und -kategorisierung

Anhand einer umfangreichen internationalen Literaturrecherche wurde verfügbare Literatur zu geowissenschaftlichen Disziplinen und Themen, bei denen bereits Methoden der KI zum Einsatz kommen, in einer Literaturdatenbank zusammengestellt. Hierfür wurden zunächst Fachzeitschriften und -bücher mit geowissenschaftlicher Fachliteratur identifiziert und diese anhand von Schlagworten durchsucht. Die Recherche umfasst alle geowissenschaftlichen Aufgabenbereiche, in denen KI-Anwendungen bereits genutzt werden, und beschränkt sich nicht auf Themen, die für die Standortauswahl relevant sind. Durchsucht wurden unter anderem Fachjournals, Wissenschaftsverlage mit Schwerpunkt Geowissenschaften sowie Veranstaltungen aus dem Bereich der Geowissenschaften und der Informatik. Als Schlagwörter für die Literaturrecherche wurden „Artificial Intelligence“, „Deep Learning“, „Machine Learning“ sowie „Neural/Neuronal Networks“ genutzt. Entsprechend wurden geowissenschaftliche Fachzeitschriften und -bücher mittels eines KI-Suchstrings „AI OR artificial intelligence OR machine learning OR neural network OR deep learning“ und seines deutschen Pendant durchsucht. Die zunächst allgemein auf alle geowissenschaftlichen Disziplinen ausgerichtete Suche ergab eine Trefferquote im hohen vierstelligen Bereich. Für die weitergehende Analyse der Literatur wurde die Literaturrecherche nach Rücksprache mit dem Auftraggeber Anfang 2022 abgebrochen und in die Datenbank neben den 932 aufgegriffenen Publikationen zudem die wissenschaftlichen Fachzeitschriften und -bücher, aufgenommen, um eine weiterführende Literatursuche zu erleichtern.

Die Literaturdatenbank wurde im Literaturverwaltungsprogramm Citavi angelegt. Inhalte sowie die Gliederung der Literaturdatenbank sind in den nächsten beiden Unterkapiteln näher beschrieben.

3.1 Inhalte der Literaturdatenbank

Neben der ermittelten Literatur wurden auch die verwendeten Fachzeitschriften und -bücher in der Datenbank abgelegt. Diese Fachzeitschriften und -bücher erstrecken sich über alle Fachgebiete der geologischen und geographischen Wissenschaften und der Meteorologie. Die einzelnen Buchverlage, Zeitschriften und Recherche-Plattformen mit entsprechender Fachliteratur wurden in der Datenbank als Internetdokumente aufgenommen. Eine Übersicht über diese Fachzeitschriften und -bücher gibt Anhang I.

Die Fachliteratur selbst wurde mit ihrem Digital Object Identifier (DOI) in die Datenbank eingefügt. Titel und Autoren werden dabei automatisch übernommen. Zusätzlich wurde für alle Publikationen der Abstract eingefügt, um eine effiziente Zuordnung der Quelle zu passenden Kategorien zu ermöglichen. Sofern das Dokument öffentlich zugänglich war, wurde zudem die Datei des Dokuments angehängt.

Die Literaturdatenbank umfasst nur einen Bruchteil der verfügbaren Literatur auf diesem Gebiet und erhebt keinen Anspruch auf Repräsentativität. Die Auswahl der Literatur erfolgte zufällig und wurde im Januar 2022 nach etwa 900 Dokumenten abgebrochen, um für die weitere Analyse in diesem Projekt die noch handhabbare Menge nicht zu überschreiten.

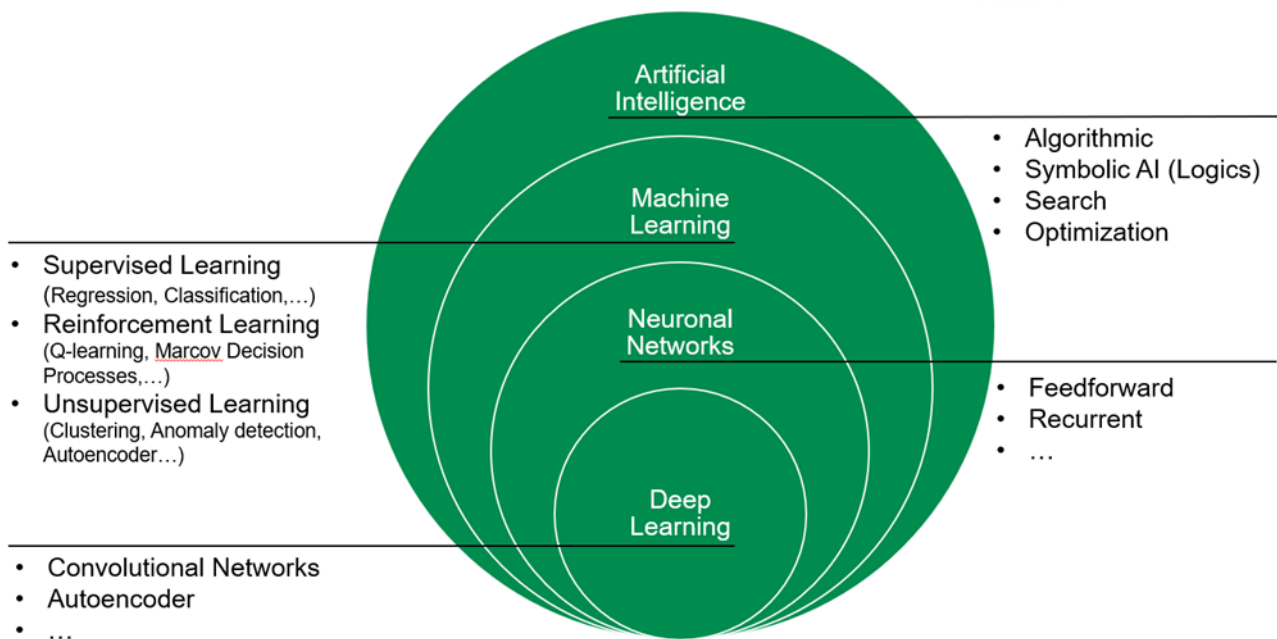
3.2 Gliederung der Literaturdatenbank

Die Gliederung der Literaturdatenbank erfolgte auf zwei Ebenen. Zum einen wurde die Literatur in der Datenbank den von uns definierten jeweiligen geowissenschaftlichen Kategorien (im Folgenden benannt mit geoKAT) zugeordnet (siehe hierzu Kapitel 3.2.1). Zum anderen wurden zunächst die

Schlüsselbegriffe (Keywords), nach denen Publikationen mit einem Bezug zu KI gesucht wurde, als Kategorie vorgegeben und die Publikationen entsprechend eingeordnet. Da die verwendeten Schlüsselbegriffe jedoch ineinander verschachtelt sind (siehe hierzu Abbildung 3-1), wurde zusätzlich nach einer weiteren Möglichkeit der Kategorisierung im Bereich der KI gesucht.

Mit Blick auf die später anvisierte Bewertung der jeweiligen KI-Anwendung bezogen auf ihre Chancen oder ihre Risiken für bzw. ihre Stärken oder Schwächen im StandAV, ist die Problemstellung, die mithilfe von KI gelöst wird, entscheidend. Die dafür angewandte Technologie hingegen ist in einigen Fällen austauschbar. Da zur Einordnung der Stärken, Schwächen, Risiken und Chancen (SWOT¹-Analyse) der KI-Anwendung in den Schlüsselaktivitäten weniger die KI-Technologie als vielmehr ihr Einsatzzweck wichtig ist, wurde eine weitere KI-Kategorieebene eingeführt, die die Einsatzbereiche der KI (im Folgenden benannt mit KIKAT) kategorisiert (siehe hierzu Kapitel 3.2.2).

Abbildung 3-1: Keywords der künstlichen Intelligenz



Quelle: eigene Darstellung der TU Clausthal

Die Zuordnung der Literatur zu den jeweiligen Kategorien erfolgte zunächst auf Basis der Abstracts. Eingeordnet wurde jeweils mit Blick auf die Problemstellung, für die Methoden der künstlichen Intelligenz eingesetzt wurden. Befand sich das geowissenschaftliche Forschungsgebiet in einer der geOKAT, es war aber ersichtlich, dass die Fragestellung einer anderen zugeordnet werden konnte, so wurde die Literatur stets in letztere Kategorie eingeordnet. In Einzelfällen, wenn aus dem Abstract nicht deutlich hervorging, welche konkrete Fragestellung behandelt wurde bzw. offenblieb, auf welchem geowissenschaftlichen Gebiet eine Lösung mithilfe der KI-Methode angestrebt wurde, wurde die Literatur mehreren aus dem Abstract hervorgehenden geOKAT zugeordnet.

Im Folgenden sind der Übersicht halber der Nummerierungen der in Citavi verwendeten Kategorien mit einem vorangestellten „CK“ (steht für „Citavi-Kategorie“) gekennzeichnet.

¹ SWOT: Strengths (Stärken), Weaknesses (Schwächen), Opportunities (Chancen) und Threats (Risiken)

3.2.1 Geowissenschaftliche Kategorien (geoKAT)

Unter der allgemeinen geoKAT „Geoscience“, die in der Literaturdatenbank mit der Citavi-Kategorie 3²(„CK 3“) gekennzeichnet wird, sind 21 geowissenschaftliche Unterkategorien wie folgt definiert:

CK 3. Geoscience

CK 3.1. Remote Sensing (Fernerkundung): Fernerkundung und Auswertung von durch Fernerkundung – bspw. mittels Satelliten oder Flugzeug – gewonnenen Daten

CK 3.2. Hydro: Hydrogeologie, Hydrologie, Grundwasser, Wasserwirtschaft.

CK 3.2.1. Hydrogeology (Hydrogeologie): Beschreibung aller Vorgänge und Faktoren, die auf Grundwasser Einfluss haben. Unterdisziplinen sind Grundwasserhydraulik und Hydrogeochemie. Grundwasserhydraulik befasst sich mit der Wasserbewegung durch die geologischen Schichten, Hydrogeochemie mit der chemischen Zusammensetzung des Grundwassers, chemischen Reaktionen (auch im Austausch mit Gestein) und Stofftransport

CK 3.2.1.1. Transport Modelling (Stofftransport-Modellierung): Transport von Stoffen im Grundwasser bzw. durch das Grundwasser.

CK 3.2.2. Hydrology and Hydrochemistry (Hydrologie und Hydrochemie): Beschreibung von Prozessen wie Stofftransport und Chemismus in oberirdischen Gewässern (Flüsse und Seen). Dabei geht es ausschließlich um Stofftransport in gelöster Form. Nicht in diese Kategorie gehören Prozesse von Erosion und Sedimentation. Artikel zu diesen Phänomenen werden unter CK 3.4 oder CK 3.6 eingeordnet

CK 3.2.2.1. River and Lake (Flüsse und Seen): alle Artikel, die sich mit terrestrischen Gewässern befassen

CK 3.3. Seismic (Geoseismik): Anwendung geoseismischer Verfahren zur Erkundung des Untergrunds. Nicht in diese Kategorie gehören natürliche seismische Ereignisse wie Erdbeben (siehe CK 3.5 und CK 3.18)

CK 3.4. Petrography and Stratigraphy (Petrographie und Stratigraphie): Die Beschreibung von Gesteinen anhand ihrer physikalischen Eigenschaften und die zeitliche Einordnung ihrer Entstehung innerhalb der Erdgeschichte

CK 3.4.1. Stratigraphy (Stratigraphie): Artikel zur zeitlichen Einordnung der Gesteine bzw. ihrer Entstehung. Bei der Kategorisierung wird keine Unterscheidung nach lithostratigraphischen (anhand der räumlichen Abfolge der Gesteinsvorkommen), biostratigraphischen (Datierung anhand des Fossilbestands) oder radiometrischen (Altersbestimmung über den Zerfall natürlicher radioaktiver Isotope) Inhalten der Quellen vorgenommen

CK 3.4.2. Petrology (Petrologie): Im engeren Sinne Themen der Entstehung bzw. Bildungsbedingungen bei der Entstehung von Gesteinen; im Englischen oft

² In der Literaturdatenbank wurden in der Citavi-Kategorie CK1 die Fachzeitschriften und -bücher, die Literatur zu Geowissenschaften und KI enthalten, aufgelistet. Citavi-Kategorie CK2 zeigt die Zuordnung der Literatur zu den zunächst verwendeten KI-Schlagwörtern auf. Beide Kategorien werden im Folgenden nicht mehr verwendet.

Überschneidungen zu den Themen Stratigraphie, Lithologie (eigentlich keine Disziplin, sondern ein Gegenstand der Gesteinsbeschreibung, siehe unten) und Sedimentologie

- CK 3.4.3. Lithology (Lithologie): Die Lehre der Gesteinskunde bzw. der Gesteine und derer Materialarten. Generell wird auf Basis unterschiedlicher geologischer Schichten und deren geologischen Eigenschaften unterschieden
- CK 3.4.4. Sedimentology (Sedimentologie): Die Lehre der Entstehung, Zusammensetzung und Verbreitung von Sedimentgesteinen; im Gegensatz zu der Lithologie immer im Zusammenhang mit der Entstehungsgeschichte und den ursächlichen Prozessen und Ablagerungsmilieus (Fazies) der Entstehung von Sedimentgesteinen
- CK 3.4.5. Clay Science: Tonmineralogie im engeren Sinne. Nicht in diese Kategorie gehören Themen der Bodenkunde (Soil Science).
- CK 3.5. Tectonics/Structural Geology (Tektonik/Strukturgeologie): Die Begriffe Tektonik und Strukturgeologie werden oft synonym gebraucht. Sie umfassen die Beschreibung des Aufbaus der Erdkruste hinsichtlich der Raumlage von Gesteinskörpern, Störung, Faltung, Verstellung, Verbiegung von Schichten und Gesteinsverbänden und den zugrundeliegenden Prozessen
- CK 3.6. Weathering and Erosion (Verwitterung und Erosion): Verwitterung, Erosion, Denudation³
Alle Themen, die klassisch auch mit dem Begriff physikalische Geologie zusammengefasst wurden
- CK 3.7. Geochemistry (Geochemie): Geochemie ist die Disziplin, die sich mit der chemischen Zusammensetzung der gesteinsbildenden Minerale und deren Entstehung beschäftigt. In diese Kategorie wird außerdem Mineralogie eingeordnet sowie alle Literatur, die magmatische Prozesse in Erdkruste und -mantel betrifft, soweit sie nicht der Vulkanologie zuzuordnen sind. Nicht in diese Kategorie gehören aquatische Chemie (siehe CK 3.2.2) sowie organische Geochemie (siehe CK 3.19 und CK 3.20)
- CK 3.7.1. Analytics (Analytische Geochemie): Literatur zur chemischen Analyse der Gesteinsbildenden Minerale
- CK 3.8. Geophysics (Geophysik): In der Geophysik steht die Erkundung der Erde mit geophysikalischen Methoden im Mittelpunkt Geoelektrik, Gravimetrie, Radar, Magnetik etc. gehören auch in diese Kategorie.
- CK 3.9. Well logging (Bohrlochgeophysik): Alle Methoden der geophysikalischen Bohrlochmessung und deren Auswertung
- CK 3.10. Geotechnics and Mining (Geotechnik und Bergbau): Bergbau sowie Geotechnik, also alles von Deponietechnik bis Verschlussbauwerke, geotechnische Messmethoden (bspw. Fisserometer), Gebirgsdruck, Dilatanz, Schachtbau
- CK 3.11. Geomechanics (Geomechanik): Mechanisches Verhalten von festen Gesteinen der Erdkruste; Gegenstand der Geomechanik ist die Reaktion der festen Erde auf Bewegungen, Spannungsänderungen, Änderung des Porendruckes, der Temperaturen und anderer Parameter

³ Flächenhafte Abtragung der Erdoberfläche durch Verwitterung und Erosion

- CK 3.12. Geography and Paleogeography (Geographie und Paläogeographie): Geographie sowie alles, was sich mit der Rekonstruktion der Geographie für die erdgeschichtliche Vergangenheit beschäftigt
- CK 3.13. Drilling Technology (Bohrtechnik): Alles, was mit Bohrlochtechnik/Bohrtechnik zu tun hat. Nicht in diese Kategorie gehört Bohrloch-Geophysik, also die Anwendung geophysikalischer Methoden zur Datenerhebung während des Bohrens oder allgemein aus Bohrlöchern
- CK 3.14. Volcanology (Vulkanologie): nur vulkanische Ereignisse und deren unmittelbare Entstehung bzw. Prognose, d.h. phänomenologisch. Nicht in diese Kategorie gehören magmatische Prozesse des Erdinneren wie Schmelzbildung, Magmenfraktionierung, Plutonismus (siehe CK 3.7)
- CK 3.15. Nuclear Forensics (Nukleare Forensik): Identifizierung der Herkunft von radioaktiven Stoffen
- CK 3.16. Climate (Klimatologie): Alles zur Klimawissenschaft
- CK 3.16.1. Paleo Climate (Paläoklima): Gewinnung und Auswertung von Daten über das Paläoklima, Modellierung von Klimaentwicklung in der erdgeschichtlichen Vergangenheit
- CK 3.17. Soil Science (Bodenkunde): Lehre der Bodenentstehung aus dem Gesteins-untergrund, die Bodenentwicklung, die Bodeneigenschaften sowie alle natürlichen Prozesse in dem Bodenhorizont, zum Teil auch Wasser- und Stofftransport Bodenbiologie und der Bodenklassifizierung. Nicht in diese Kategorie gehören Veröffentlichungen aus den Bereichen Geo-Risiken (Bodenverflüssigung, Erdbebenauswirkungen auf Baugrund und Gebäude, CK 3.18), Tonmineralogie (CK 3.4.5) und Landwirtschaft
- CK 3.18. Geological Hazards (Geo-Risiken): geologische Phänomene, soweit sie zur Gefährdung von Menschen und Lebensraum beitragen können
- CK 3.18.1. Earthquake Detection, Prediction and Civil Engineering (Erdbebengefährdung, -vorhersage und Bauingenieurwesen): Erkennung und Vorhersage von Erdbeben, Katastrophenschutz, Erdbebensicheres Bauen, Geo-Risiken (Bodenverflüssigung, Erdbebenauswirkungen auf Baugrund und Gebäude
- CK 3.19. Exploration (Lagerstättenkunde): Aufsuchung, Erkundung, Beschreibung und Bewertung von Lagerstätten und Rohstoffvorkommen mineralischer Rohstoffe. Nicht in diese Kategorie gehören alle Themen der Kohlenwasserstoff-Industrie bzw. Erdöl- und Erdgasgeologie (CK 3.20)
- CK 3.20. Petroleum Geology (Erdölgeologie): Allgemeine Literatur zur Erdölgeologie sowie alle Themen der Kohlenwasserstoff-Industrie bzw. Erdöl- und Erdgasgeologie
- CK 3.21. Geothermics (Geothermie): alles rund um die Erdwärme-Nutzung. Nicht in diese Kategorie gehört Literatur zu Magmatismus, Mantelkonvektion, Wärmesignatur, geothermischen Gradienten

Der übergeordneten geoKAT CK 3 „Geoscience“ werden in der Literaturliteraturdatenbank ausschließlich Dokumente zugeordnet, die allgemein verfasst sind und keiner der Unterkategorien eindeutig zugeordnet werden können. Dagegen werden Kategorien der dritten oder vierten Ebene jeweils zusätz-

lich der entsprechenden Unterkategorie zugeordnet. So werden beispielsweise in der Unterkategorie „Hydro“ (CK 3.2) alle Dokumente aufgeführt, die in die Kategorie selbst sowie in eine der darunter liegenden Kategorien „Hydrogeology and Hydrogeochemistry“ (CK 3.2.1) mit der Unterkategorie „Transport Modelling“ (CK 3.2.1.1) oder in „Hydrology and Hydrochemistry“ (CK 3.2.2) oder darunter in „River and Lake“ (CK 3.2.2.1) einsortiert wurden.

So kann sichergestellt werden, dass in der zu erstellenden Matrix, deren eine Achse von den geoKAT gebildet wird, alle Dokumente erfasst werden. Die allgemein verfassten Dokumente, die in der geoKAT „Geoscience“ eingeordnet wurden, werden im weiteren Verfahren nicht näher betrachtet, da sie zum Einsatz der Künstlichen Intelligenz in den einzelnen Geowissenschaften zu unspezifisch sind, um eine sachgerechte Bewertung vornehmen zu können.

3.2.2 Kategorien zum Einsatzbereich der KI (KIKAT)

Unter der allgemeinen KIKAT „AI-Einsatzbereiche“, die in der Literaturdatenbank mit der Citavi-Kategorie 4 („CK 4“) gekennzeichnet wird, sind die 9 Unterkategorien zum KI-Einsatzbereich wie folgt definiert:

CK 4. AI-Einsatzbereiche

CK 4.1. Regression:

Auffinden von Zusammenhängen zwischen abhängigen und unabhängigen Variablen. Die unabhängigen Variablen gehen als Eingangsmerkmale in das Modell ein, die abhängigen Variablen werden durch das Modell geschätzt. Als Abgrenzung zu Surrogaten Modellen kann man betrachten, dass das Ziel hier nicht explizit ist, ein experimentierfähiges Modell eines realen oder geplanten Systems zu erstellen (nach VDI-Richtlinie 3633), sondern ein Modell, welches das Verhalten eines Systems nachahmt. Zum Beispiel versucht ein globales Wetter-Temperaturmodell zu erklären, wie die Temperatur sich aufgrund der bekannten Sonneneinstrahlung entwickeln wird. Ein experimentelles Modell würde insofern keinen Sinn machen, weil der Mensch die Sonneneinstrahlung nicht steuern kann.

CK 4.1.1. Prediction:

Im Deutschen eher als „Schätzung“ zu übersetzen. Die zu schätzenden Werte bewegen sich hier innerhalb eines bekannten Bereiches. Teilweise wird der Begriff „Prediction“ auch in anderen Bereichen wie Klassifizierung oder Vorhersage verwendet.

CK 4.1.2. Forecast:

Eher als „Vorhersage“ oder „Prognose“ zu übersetzen, bezieht sich meistens auf Schätzung der Werte außerhalb eines bekannten Bereiches. Zum Beispiel Vorhersage der (zukünftigen) Wetterlage.

CK 4.2. Surrogate Model:

Bei Surrogaten Modellen wird versucht, auf aufwendigere deskriptive Modellierungsmethoden zu verzichten. Dieser Modellierungsaufwand wird durch eine große Menge an empirischen oder synthetischen Daten ersetzt. Ein ML-Modell lernt das Verhalten des Systems und kann es nachbilden. Ergebnis ist eine experimentierfähige Abbildung eines geplanten oder vorhandenen Systems.

CK 4.3. Classification:

Bei der Klassifizierung wird durch besondere Verfahren die Zugehörigkeit eines Objektes in Klassen unterteilt. Die Schätzung zu welcher Klasse ein Objekt gehört, wird an-hand der Eigenschaften (Features) des Objektes vorgenommen.

CK 4.4. Dimension Reduction

Bei der Dimension Reduction werden hochdimensionale Daten in einen niedriger dimensionalen Betrachtungsraum projiziert. Häufig erfolgt die Projektion in einen für den Menschen anschaulichen Raum (2D oder 3D). Dies ist insbesondere für qualitative Analysen von Zusammenhängen in den Daten hilfreich. Zudem kann eine Reduktion als Vorverarbeitungsschritt z. B. für ein Clustering die Genauigkeit bestimmter Verfahren verbessern.

CK 4.5. Computer Vision:

Besonderes Feld des ML, das sich mit der Verarbeitung von Bildern beschäftigt. Dabei kommen spezielle Techniken (meist Convolutional Neural Net (CNN) oder Generative Adversarial Networks (GAN)) ins Spiel.

CK 4.5.1. Erkennung:

Einordnung von Abbildungen in eine der vorgegebenen Klassen. Abbildungen sind ebenfalls Daten und die Erkennung hat eine starke Verwandtschaft zu dem Einsatzbereich „Klassifizierung“. Die Besonderheit bei Abbildungen ist oft das Preprocessing und besondere, auf Abbildungen ausgerichtete Techniken.

CK 4.5.2. Segmentierung:

Unterscheidung und Trennung von bestimmten visuell erkennbaren Bereichen, ähnlich wie Clustering.

CK 4.5.3. Generierung:

Bei der Generierung geht es meistens darum aus vorhandenem Wissen über das System neue synthetische Daten zu generieren. Das vorhandene Wissen kann zu-vor formal modelliert worden sein und durch Zufallsvariablen werden Variationen eingebracht. Bei der Generierung von synthetischen Daten mithilfe der ML-Verfahren werden Surrogate Modelle erzeugt, die auf den gesammelten empirischen Daten beruhen zwecks weiterer Weiterverwendung. Synthetische Daten werden dabei meistens für Balancierung oder Erweiterung eines vorhandenen Datensets benutzt.

CK 4.6. Clustering:

Ein „Unbeaufsichtigtes Verfahren“ (Unsupervised Learning). Dabei wird dem Verfahren ein Datensatz gegeben. Je nach Technik versucht das Verfahren, den Datensatz in eine bestimmte Anzahl von Klassen zu trennen oder eine Anzahl der Klassen zu schätzen, in die der Datensatz aufgeteilt werden kann. Die Klassen sind nicht von Anfang an vorgegeben, sondern werden durch das Verfahren erstellt.

CK 4.7. Anomaly Detection:

Dabei wird durch die Verfahren versucht, Ausreißer oder ungewöhnliche Muster zu erkennen und zu kennzeichnen. Gehört ebenfalls zu den Techniken des Unsupervised Learning.

CK 4.8. Optimization:

Mit Hilfe von Algorithmen wird ein komplexer Lösungsraum abgesucht. Der Algorithmus lernt über Iterationen die Landschaft des komplexen Lösungsraumes und versucht eine bessere Lösung zu erreichen.

CK 4.9. Other

Hier wurden all jene Arbeiten eingruppiert, deren KI-Einsatzbereich nur in einer sehr geringen Anzahl (oft Eins) von Arbeiten vorkommt und keine eigene Kategorie rechtfertigt.

4 Schlüsselaktivitäten im Standortauswahlverfahren

Als Schlüsselaktivitäten werden relevante Prozesse und Arbeitsschritte im Rahmen des StandAV, bei der Entwicklung von Endlagerkonzepten und im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse verstanden. Kapitel 4.1 stellt zunächst vor, auf welcher inhaltlichen Ebene der Begriff „Schlüsselaktivität im StandAV“ festgelegt wurde, um eine Zuordnung der Literatur zu Schlüsselaktivitäten des StandAV zu ermöglichen. Ebenfalls hierfür wurden die geowissenschaftlichen Aufgaben, die während einer Schlüsselaktivität mit hoher Wahrscheinlichkeit und nach jetzigem Kenntnisstand umgesetzt werden, zusammengestellt (Kapitel 4.2) und den geowissenschaftlichen Kategorien der Literaturdatenbank (geoKAT) zugeordnet.

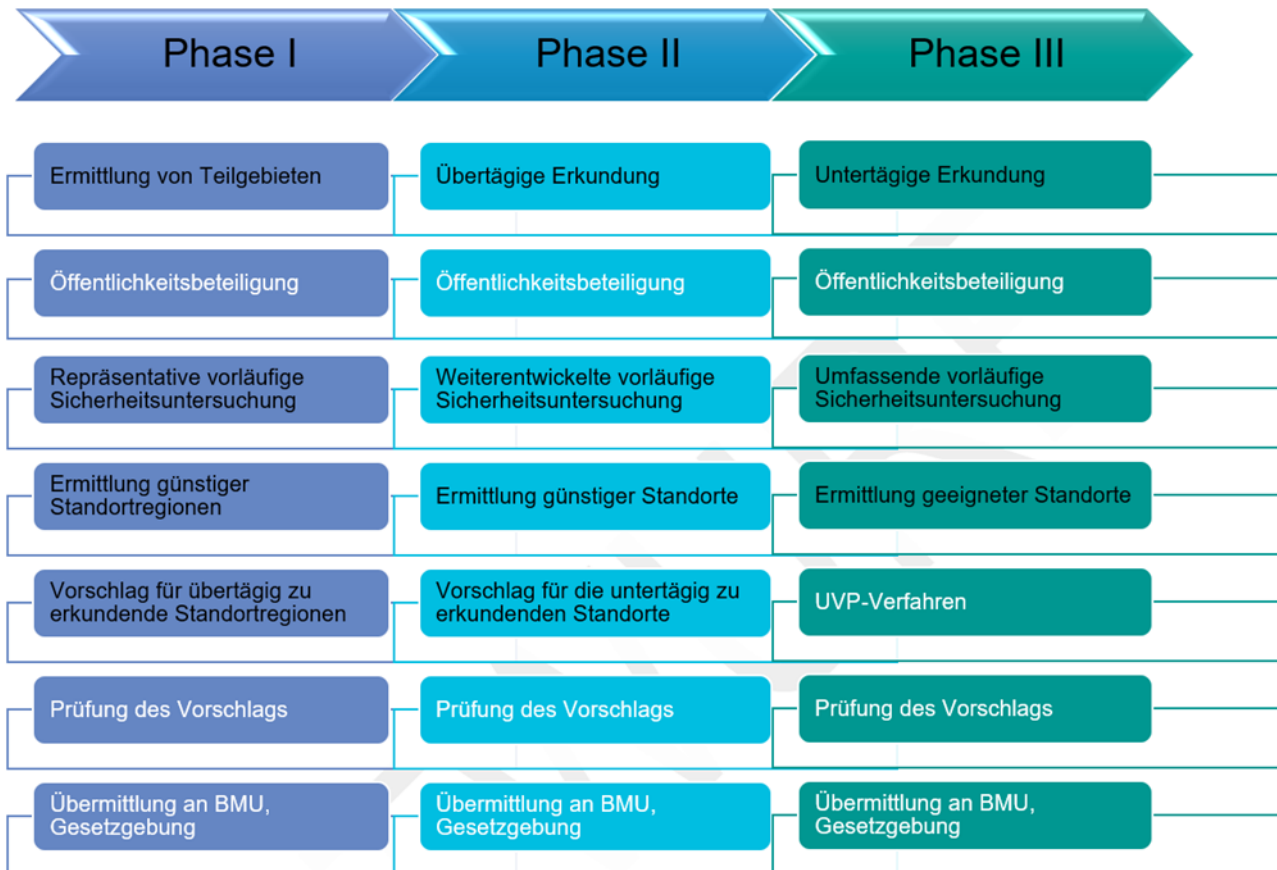
4.1 Herleitung und Darstellung von Schlüsselaktivitäten

Im StandAV werden zur Standortsuche und Erkundung zukünftiger Endlagerstandorte verschiedene übergeordnete Aktivitäten in den drei Phasen des StandAV wiederholt (siehe Abbildung 4-1), innerhalb derer weitere Aktivitäten umgesetzt werden müssen. Wiederkehrend ist beispielsweise die Kriterienanwendung bei der Ermittlung von Teilgebieten sowie günstiger Standortregionen in Phase I, der Ermittlung günstiger Endlagerstandorte in Phase II und der Ermittlung eines geeigneten Endlagerstandortvorschlag in Phase III eine übergeordnete Aktivität des StandAV. In jeder Phase findet zudem eine vorläufige Sicherheitsuntersuchung (vSU) statt, die zunächst repräsentativ (rvSU), dann weiterentwickelt (wvSU) und schließlich als umfassend vorläufige Sicherheitsuntersuchung (uvSU) durchgeführt wird. Dabei wird das Untersuchungsgebiet von Phase zu Phase kleiner, aber dafür deutlich konkreter, da für diese Untersuchungsgebiete in den Phasen II und III jeweils Erkundungen durchgeführt werden sollen. In Phase II werden die aus Phase I hervorgegangenen günstigen Standortregionen obertägig erkundet. In Phase III finden für die günstigen Endlagerstandorte aus Phase II zusätzlich untertägige Erkundungen statt. Auf Basis der wiederholten Kriterienanwendung zum einen und der iterativen Sicherheitsuntersuchungen zum anderen werden aus jeder Phase die Standortregionen oder Standorte ermittelt, die günstig oder schließlich geeignet erscheinen.

Jede Phase endet mit der Prüfung des durch die BGE entwickelten Vorschlags und der Übermittlung desselben sowie der dabei gewonnenen Erkenntnisse an das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) bzw. die Gesetzgebung (Bundesregierung). Diese beiden wiederkehrenden Aktivitäten des StandAV werden im Folgenden zunächst nicht weiter betrachtet, da der Schwerpunkt auf einem Einsatz der KI für geowissenschaftliche Problemstellungen im Fokus liegt. Dies gilt ebenso für die Öffentlichkeitsbeteiligung, die sich als

begleitendes Verfahren über den gesamten Verfahrenszeitraum erstreckt, und die Prüfung der Umweltverträglichkeit, die in Phase III nach der Ermittlung geeigneter Standorte umgesetzt werden muss.

Abbildung 4-1: Aktivitäten in den drei Phasen des StandAV



Quelle: eigene Darstellung

Den übergeordneten Aktivitäten des StandAV wie beispielsweise der Kriterienanwendung zur Ermittlung von Teilgebieten, günstigen Standortregionen, günstigen oder schließlich geeigneten Endlagerstandorten sind untergeordnete Aktivitäten zugeordnet. So gliedert sich die Kriterienanwendung in einzelne Ausschlusskriterien (AK), Mindestanforderungen (MA) und Abwägungskriterien (WK), anhand derer der geologische Untergrund bewertet wird. Während in der Kriterienanwendung als eine Vielzahl an unterschiedlichen Aufgabenbereichen in verschiedenen geowissenschaftlichen Arbeitsfeldern eingesetzt werden, kann den darunterliegenden einzelnen Kriterien/Anforderungen konkrete Tätigkeiten zugeordnet werden, die zum einen einem geowissenschaftlichen Fachbereich zugeordnet werden können. Zum anderen können diese Tätigkeiten zum Teil möglicherweise mit KI umgesetzt werden und sind von daher vergleichbar mit den in der Literatur KI-Einsatzbereichen.

Entsprechend werden auf dieser Ebene für dieses Vorhaben die „Schlüsselaktivitäten des StandAV“ definiert. Als Schlüsselaktivitäten im StandAV für die Einordnung von KI-Anwendungen werden demzufolge die in den Phasen I-III iterativ wiederkehrende Anwendung der Ausschlusskriterien, der Mindestanforderungen und der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien (geoWK), die ebenfalls iterativ wiederkehrende Durchführung der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) sowie

die in den Phasen II und III vorzunehmenden über- und untertägigen Erkundungen (E) definiert (Tabelle 4-1):

Tabelle 4-1: Definition von Schlüsselaktivitäten im StandAV

Bez.	Iterativ wiederkehrende Aktivitäten im StandAV mit geowissenschaftlichem Hintergrund
AK1	Anwendung des Ausschlusskriteriums großräumige Vertikalbewegung
AK2	Anwendung des Ausschlusskriteriums Aktive Störungszonen
AK3	Anwendung des Ausschlusskriteriums Einflüsse aus gegenwärtiger und früherer bergbaulicher Tätigkeit
AK4	Anwendung des Ausschlusskriteriums seismische Aktivität
AK5	Anwendung des Ausschlusskriteriums vulkanische Aktivität
AK6	Anwendung des Ausschlusskriteriums Grundwasseralter
MA1	Anwendung der Mindestanforderung Gebirgsdurchlässigkeit im einschlusswirksamen Gebirgsbereichs
MA2	Anwendung der Mindestanforderung Mächtigkeit des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs
MA3	Anwendung der Mindestanforderung Minimale Tiefe
MA4	Anwendung der Mindestanforderung Fläche des Endlagers
MA5	Anwendung der Mindestanforderung Erhalt der Barrierewirkung
geoWK1	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Transport radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen
geoWK2	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Konfiguration Gesteinskörper
geoWK3	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums räumliche Charakterisierbarkeit
geoWK4	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums langfristige Stabilität der Verhältnisse
geoWK5	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums gebirgsmechanische Eigenschaften
geoWK6	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Fluidwegsamkeiten
geoWK7	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Gasbildung
geoWK8	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Temperaturverträglichkeit
geoWK9	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Rückhaltevermögen
geoWK10	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums hydrochemische Verhältnisse
geoWK11	Anwendung des geowiss. Abwägungskriteriums Schutz des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs
vSU	Untersuchung der Langzeitsicherheit: Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen
E	Über- und untertägige Erkundung

Quelle: eigene Darstellung

4.2 Geowissenschaftliche Aufgaben während der Schlüsselaktivitäten

Während des StandAV stehen zur Datenerhebung und -auswertung innerhalb der einzelnen Schlüsselaktivitäten verschiedene geowissenschaftliche Aufgaben an, die im Verlauf der unterschiedlichen Phasen des StandAV wiederholt angewendet werden. Die geowissenschaftlichen Aufgaben reichen von Geländeerkundungen und Feldversuchen zur ersten Datenerhebung über die Auf- und Entnahme von Probenmaterial bis zur Aufbereitung, Versuchsdurchführung und Analytik im Labor. Anschließend erfolgt die Datenauswertung und gegebenenfalls die Weiterverwendung der Daten bei Modellierungen oder Simulationen. Bei der Durchführung der einzelnen Schritte werden unter

anderem die üblichen geowissenschaftlichen Gelände- und Labormethoden, welche innerhalb der jeweiligen geowissenschaftlichen Teildisziplinen (Kategorien) genutzt werden, angewendet.

Im Folgenden werden die verschiedenen Gelände- und Labormethoden sowie die zu untersuchenden Parameter, die innerhalb der geoKAT und während der einzelnen geowissenschaftlichen Aufgaben anfallen, kurz beschrieben (Abbildung 4-2).

Basis dieser Beschreibung sind die bislang üblichen geowissenschaftlichen Methoden und Verfahren sowie die jeweils bisher gültigen (in den Kapiteln 4.3 bis 4.7 aufgeführte) Gesetze, Richtlinien und Vorschriften für die Umsetzung des StandAV. In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass die Darstellung der Aufgaben sowie der Gelände- und Labormethoden keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV seitens der BGE weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden eingesetzt bzw. entwickelt werden können, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

Im Bereich der **Remote Sensing** erfolgt die Erkundung im Feld mittels Flugzeug- oder Drohnenbefliegung und dem Einsatz von Satelliten, um Informationen über die Beschaffenheit der Erdoberfläche zu erhalten. Geologische Daten werden dabei üblicherweise in Form von Luftbildaufnahmen und Radar- und (Hyper-)Spektralanalysen generiert, die durch die Messung und Interpretation beispielsweise von elektromagnetischen oder mit Schallwellen gewonnen und anschließend ausgewertet und in 2D- und 3D-Modellen interpretiert werden.

Die geowissenschaftlichen Methoden innerhalb der **Hydro(-logy)** umfassen üblicherweise einerseits Erkundungsbohrungen und das Einsetzen von Pegeln⁴ im Gelände, die zur Erhebung erster Daten durch z. B. hydraulische Bohrloch- sowie Pump- und Tracer-versuche dienen und andererseits den Versuchen und Analysen an den genommenen Wasserproben im Labor. Hierbei erfolgen neben der allgemeinen Grundwasseranalytik auch Versuche zur Analyse von beispielsweise Porenwässern oder der (Gesteins-)Durchlässigkeit. Die zu untersuchenden Parameter, welche in die Modellierung zur Bewertung des Transports einfließen, sind z. B. die hydraulische Wasserleitfähigkeit, thermische Belastbarkeit, Porengrößenverteilung oder Permeabilität (siehe auch Kategorien Geochemistry und Geomechanics weiter unten).

Im Bereich **Seismics** werden Methoden, wie die Reflexions-, Refraktions- und Oberflächenwellenseismik⁵ angewendet und in seismischen Profilen ausgewertet, um mit Hilfe von geologischen 3D-Modellen Aussagen über die räumliche Lage und Trennschichten von unterschiedlichen geologischen Formationen im Untergrund treffen zu können.

Zur Erkundung des Geländes innerhalb der weiteren geoKAT, wie der **Geochemistry**, der **Geophysics** und **Geomechanics** sowie bei der Kategorie **Well logging** werden in erster Linie über Erkundungsbohrungen und Bohrlochmessungen erste Daten im Feld gewonnen (z. B. natürliche Gammastrahlung). Diese werden durch die Erstellung von Profilen⁶ und Karten sowie der Auf- und Entnahme von Gesteinsproben vervollständigt. Im Labor folgen anschließend petrologische, geochemische oder geophysikalische bzw. geomechanische Experimente zur Analyse der unter-

⁴ In der angewandten Hydrologie werden Pegel zum Messen von beispielsweise Wasserständen benutzt

⁵ Methoden der Seismik. Dabei werden die Energie und Laufzeiten künstlich angeregter seismischer Wellen gemessen und interpretiert. Es wird unterschieden, ob die seismischen Wellen an Trennschichten im Untergrund reflektiert oder refraktiert (gebrochen) werden. Oberflächenwellen werden an der Erdoberfläche gemessen

⁶ Unter geologischen Profilen versteht man einen grafischen Querschnitt durch die Erdkruste, in welchem die räumliche Anordnung von geologischen Formationen, Störungen und anderen geologischen Strukturen aufgenommen werden

schiedlichen Gesteinseigenschaften (z. B. Dichte, Druckfestigkeit, Porosität und Porengrößenverteilung, Permeabilität). Nach einer ersten Auswertung und Interpretation der Daten folgt meist die Modellierung von beispielsweise Stoff-, Wärme- und Schadstofftransport sowie von Deformationen und Spannungszustände (**Geochemistry** in Kopplung mit Kategorie Hydro, **Geomechanics**) oder die Simulation von Erosionsmodellen (**Petrography** and **Stratigraphy**).

In den Kategorien der **Tectonics/Structural Geology** und **Erosion and Weathering** sowie der **Petrography and Stratigraphy** erfolgt die Geländeerkundung zudem über die Aufnahme von beispielsweise Störungs-, Verwitterungs-, bzw. lithologischen und stratigraphischen Profilen im Feld und der Vermessung und Kartierung der Begebenheiten. Durch geophysikalische Laborversuche werden Aussagen über einzelne Gesteinsparameter, wie z. B. Porosität, Permeabilität und (Gesteins-)Durchlässigkeit getroffen und nach der Auswertung der Daten u. a. Modellierungen von Störungs- und Erosionsmodellen durchgeführt.

Im Bereich der **Geotechnics and Mining** stehen nach der Erkundung im Gelände und dessen Vermessung und Kartierung vor allem die geotechnische und -statische Datenerhebung und Modellierung von Standsicherheit und/oder Spannungen und Verformungen oder auch Grundwasserströmung (vgl. Kategorie Hydro) im Vordergrund. Dabei spielen die geomechanischen oder hydraulischen Parameter wie Porosität, Druck- oder Scherfestigkeit eine Rolle, um die Wechselwirkungen des ewGs mit den Bauwerken vor allem im Untertagebau besser einschätzen zu können.

Abbildung 4-2 gibt einen Überblick über die verschiedenen Gelände- und Labormethoden, die nach heutigem Kenntnisstand für die geowissenschaftlichen Aufgaben in den Schlüsselaktivitäten des StandAV umgesetzt werden und ordnet diese den geoKAT zu.

Abbildung 4-2: Zuordnung der Gelände- und Labormethoden in den geowissenschaftlichen Aufgaben im StandAV zu den geoKAT

geoKAT	Erkundungen im Feld	Feldversuche und Datenerhebung	Proben(auf)nahme und Beschreibung	Laborversuche und -analysen	Modellierung und Verarbeitung
A Remote Sensing	Fernerkundung mittels Flugzeug, Drohnen oder Satelliten	Luftbildaufnahmen, (Hyper-)Spektralanalysen, Radar, etc.	-	-	2D-/3D-Modellierungen
B Hydro	Erkundungsbohrungen, Pegel	Pegelmessungen, Pump-, Bohrloch-, Tracer-Versuche	Wasser-/Gesteinsproben	Grundwasser-analytik, hydraulische Messungen	2D-/3D-Transportmodellierungen
C Seismic	Reflexions-, Refraktions-, Oberflächenwellenseismik	Seismische Profile	-	-	3D-Modellierungen
D Petrography and Stratigraphy	Erkundungsbohrungen	stratigraphische und lithologische Profile, Kartierung, Profilaufnahme	-	geo-physikalische Laborversuche, radiometrische Datierungen, Messungen von Gesteinsparametern	2D-/3D-Erosionsmodellierungen
E Tectonics/ Structural Geology	Gelände-erkundungen	Vermessung von Störungen, Kartierung, Profilaufnahme	Gesteinsproben, -ansprache	-	2D/3D-Modellierung von Störungen
F Erosion and Weathering	Gelände-erkundungen	Vermessung, Kartierung, Verwitterungsprofil	-	-	2D-/3D-Erosionsmodellierungen
G Geo-chemistry	Erkundungsbohrungen	-	Gesteinsproben, -ansprache, Grundwasserproben	geochemische und mineralogische Analysen	2D-/3D-Modellierungen von Stoff- und Wärmetransport
H Geophysics	Erkundungsbohrungen	Bohrlochmessungen	Gesteinsproben, -ansprache	geo-physikalische Analysen	übergreifende 2D-/3D-Modellierungen (vgl. D, E, I, K)
I Well logging	Erkundungsbohrungen	Bohrlochmessungen und -profile	Gesteinsproben, -ansprache	-	2D-/3D-Schichtmodellierungen
J Geotechnics and Mining	Gelände-erkundungen	Vermessung und Kartierung	Gesteinsproben, -ansprache, Wasserproben	geotechnische/ geomechanische Laborversuche	geostatische Modellierungen
K Geo-mechanics	Gelände-erkundungen, Erkundungsbohrungen	Bohrlochversuche, Vermessung von Störungen, Kartierung, Profilaufnahme	Gesteinsproben, -ansprache	geo-mechanische Laborversuche, hydraulische Messungen	2D-/3D-Modellierungen von Standsicherheit, Spannungen, etc.

Datenerfassung, -auswertung und -interpretation

Quelle: Eigene Darstellung

4.2.1 Ausschlusskriterien

Bei der wiederholten Anwendung der Ausschlusskriterien gemäß § 22 StandAG 2017 (2017) während des StandAV werden in den unterschiedlichen Phasen in den einzelnen geoKAT (Kapitel 4.2) verschiedene geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden angewendet (BGE 2022a).

Abbildung 4-3: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der Ausschlusskriterien

Ausschlusskriterien (AK)	<i>Erkundungen im Feld</i>	<i>Feldversuche und Datenerhebung</i>	<i>Proben(aufnahme und -beschreibung</i>	<i>Laborversuche und -analysen</i>	<i>Datenauswertung</i>	<i>Modellierung und Verarbeitung</i>
AK1 großräumige Vertikalbewegung	A E J	A E J		E	A E J	J
AK2 Aktive Störungszone	A C D E I	D E I		D I	A C D E H I	
AK3 Einflüsse bergbaulicher Tätigkeit	B H J	B J	B	B H J	B H J	B
AK4 Seismische Aktivität	C				C	
AK6 Vulkanische Aktivität	A D G	A D G	D G	D G	A D G	
AK5 Grundwasseralter	B	B	B	B	B	B

Quelle: Eigene Darstellung

Im Folgenden werden die einzelnen Ausschlusskriterien adressiert und die Aufgaben in den jeweiligen geoKAT beschrieben, die bei Anwendung der Ausschlusskriterien während des StandAV zum jetzigen Zeitpunkt anstehen (Abbildung 4-3).

In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass diese Übersicht keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV nicht abzusehen ist, ob seitens der BGE für die Anwendung der Ausschlusskriterien auch weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus anderen geoKAT eingesetzt bzw. entwickelt werden, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

4.2.1.1 **AKI – Großräumige Vertikalbewegung**

Aus der Anwendung der Ausschlusskriterien (BGE 2022a) gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 1 StandAG 2017 (2017) geht hervor, dass ein Gebiet nicht als Endlagerstandort geeignet ist, wenn großräumige Vertikalbewegungen⁷ von im Mittel mehr als 1 mm pro Jahr über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahren (=1000 m/1 Ma) zu erwarten sind. Die BGE begründet dies damit, dass durch den Zusammenhang von Hebungsbewegungen und Erosion eine mögliche Freilegung des Endlagers bzw. der Verlust der Schutzwirkung der überdeckenden geologischen Schichten nicht ausgeschlossen werden kann und somit eine Prognose der geologischen Gesamtsituation nicht mit der erforderlichen Sicherheit möglich ist.

Zum jetzigen Zeitpunkt plant die BGE zur Ermittlung geeigneter Gebiete vor allem Gelände- und Labormethoden in den geoKAT der Remote **Sensing** (A) und bei **Geotechnics and Mining** (J) mittels geodätischer Verfahren, wie z. B. der Erhebung von Informationen über großräumige Bodenbewegung mittels Nivellement- und Satellitendaten und der Anwendung von Geoinformationssystemen (GIS), einzusetzen (Abbildung 4-3). Des Weiteren können üblicherweise mit radiometrische Altersbestimmungen an Gesteinen, wie z. B. bei der (U-(Sm)-Th)/Helium- und der Spaltspurdaturierung⁸ in der Kategorie **Tectonics/Structural Geology** (E), Informationen über die Exhumation⁹ geologischer Schichten gewonnen und somit Gesteins- und Oberflächenhebungen quantifiziert werden.

4.2.1.2 **AK2 – Aktive Störungszonen**

Die BGE schließt nach § 22 Abs. 2 Nr. 2 StandAG 2017 (2017) unter dem Ausschlusskriterium „Aktive Störungszone“ diejenigen Gebiete als geeignete Endlagerstandorte aus, in denen die in Frage kommenden Gebirgsbereiche einschließlich eines abdeckenden Sicherheitsabstands, geologisch aktive Störungszonen auftreten, die das Endlagersystem und seine Barrieren beeinträchtigen könnten (BGE 2022a).

Aktive Störungszonen schließen Brüche in Gesteinsschichten der oberen Erdkruste, Verwerfungen mit deutlichem Gesteinsversatz und ausgedehnt Zerrüttungszonen mit tektonischer Entstehung ein, an denen nachweislich oder mit großer Wahrscheinlichkeit im Zeitraum Rupel¹⁰ bis heute Bewegungen stattgefunden haben. Zur Ermittlung dieser Störungszonen wurden bisher von Seiten der BGE mit Hilfe des Geologiedatengesetzes (GeolDG, (GeolDG 2020)) bei den Bundes- und Landesbehörden geologische Daten in Form von digitalen geologischen und tektonischen Karten einbezogen und ausgewertet (**Petrography und Stratigraphy** (D) und **Tectonics/Structural Geology** (E)) (Abbildung 4-3). Die einbezogenen Daten enthalten in der Regel auch Ergebnisse von radiometrische Altersbestimmungen an Gesteinen (siehe Kapitel 4.2.1.1), welche zur Datierung von Störungen und Deformation eingesetzt werden.

⁷ Neben Hebungen sind auch Senkungen inbegriffen

⁸ Mit der (U-(SM)-Th)/Helium- und Spaltspurdaturierung können Informationen über die Abkühlung und Aufheizung von Gesteinen und somit mit Hilfe geothermischer Gradienten Rückschlüsse über die relative Vertikalbewegung von Gesteinen innerhalb der Erdkruste gezogen werden

⁹ In den Geowissenschaften ist mit dem Begriff der Exhumation eine Freilegung geologischer Schichten gemeint, die durch das Zusammenspiel von Gesteinshebung und Erosion entsteht und zur Oberflächenhebung der Erdoberfläche führt

¹⁰ Das Rupelium (deu. meist Rupel) ist ein erdgeschichtliches Zeitintervall des Paläogens und wird dem Unteroligozön gleichgesetzt. Geochronologisch reicht das Rupel von vor etwa 33,9 bis 28,1 Millionen Jahre

Weitere zur Interpretation von Störungen allgemein angewendete Gelände- und Labormethoden umfassen die Erkundungen im Feld – u. a. mittels **Remote Sensing** (A) oder durch Reflexions-, Refraktions-, oder Oberflächenwellenseismik im Bereich **Seismics** (C) und die Auswertung von Daten im Bereich **Well logging** (I) und **Geophysics** (H) (Abbildung 4-3).

4.2.1.3 **AK3 – Einflüsse aus gegenwärtiger oder früherer bergbaulicher Tätigkeit**

In Folge von § 22 Abs. 2 Nr. 3 StandAG 2017 (2017) werden Gebiete ausgeschlossen, in denen das Gebirge durch gegenwärtige oder frühere bergbauliche Tätigkeit so geschädigt ist, dass negative Einflüsse auf Spannungszustand und Permeabilität im ewG/Endlagerbereich zu besorgen sind. Darin eingeschlossen sind neben dem Tiefbau und Tagebau ebenso vorhandene alte Bohrungen aus dem Bohrlochbergbau, die die Barrieren eines Endlagers, die den sicheren Einschluss gewährleisten, in ihrer Einschlussfunktion nachweislich nicht beeinträchtigen dürfen (BGE 2022a)).

Erkenntnisse darüber erhält man in erster Linie auf Basis von Erkundungen, Feld- und Laborversuchen und -analysen im Bereich **Hydro** (B) sowie **Geophysics** (H) sowie den Aufzeichnungen bergbaulicher Tätigkeit im Bereich **Geotechnics and Mining** (J) (Abbildung 4-3).

4.2.1.4 **AK4 – Seismische Aktivität**

Gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 4 StandAG 2017 (2017) werden von der BGE Gebiete mit einer örtlichen seismischen Gefährdung von größer als in Erdbebenzone 1 nach DIN EN 1998-1/NA 2011-01 als möglicher Endlagerstandort ausgeschlossen (BGE 2022a).

In Phase I des Verfahrens wurde der nationale Anhang der o.g. DIN/EN zugrunde gelegt. Mittlerweile wurde der Anhang überarbeitet. In den Phasen II und III des StandAG 2017 (2017) ist die Anwendung des neuen Anhangs zu erwarten. Es müssen jeweils die Raumdaten der Erdbebenzonen in Karten oder Modelle übernommen werden, welche die Nutzung von GIS und 3D-Modellen mit sich bringen. Auch ist davon auszugehen, dass Erkenntnisse zur Bewertung dieses Kriteriums vorrangig durch Erkundungen im Feld und Datenauswertungen im Bereich **Seismics** (C) gewonnen werden (Abbildung 4-3).

4.2.1.5 **AK5 – Vulkanische Aktivität**

Gebiete, in denen quartärer Vulkanismus vorliegt oder zukünftig vulkanische Aktivität über den Nachweiszeitraum von einer Million Jahren zu erwarten ist, sind gemäß § 22 Abs. 2 Nr. 5 StandAG 2017 (2017) von der BGE auszuschließen (BGE 2022a).

In Phase I wurden Gebiete, in denen während des Quartärs¹¹ vulkanische Aktivität stattfand, mit einem Sicherheitssaum (10 km) ausgeschlossen. Aus den Stellungnahmen zur Fachkonferenz Teilgebiete lässt sich die Möglichkeit ableiten, dass die Methodik in den Phasen II und III mit Blick auf mögliche zukünftige vulkanische Aktivität angepasst und beispielsweise um Gebiete erweitert wird, in denen im Tertiär¹² Vulkanismus auftrat (BGE 2022c). Darüber hinaus wurde angeregt, die

¹¹ Das Quartär ist die jüngste erdgeschichtliche Zeitperiode und umspannt geochronologisch die letzten 2.6 Millionen Jahre bis einschließlich des Holozäns (heutige Gegenwart)

¹² Mit Tertiär wurde in der Vergangenheit die zweitjüngste erdgeschichtliche Zeitperiode beschrieben, welche geochronologisch von vor etwa 66 Millionen Jahren bis etwa 2.6 Millionen Jahren andauerte. Mittlerweile wird das Tertiär offiziell in Paläogen (66 Ma-23 Ma) und Neogen (23 Ma – 2.6 Ma) unterteilt. Der Begriff Tertiär ist jedoch gerade in Deutschland noch sehr verbreitet

Sicherheitsabstände, um Ausbruchsherde zu vergrößern. Die erneute Anwendung der solcherart angepassten Methodik erfordert die Nutzung von GIS.

Es ist nicht auszuschließen, dass im Verlauf des StandAV auch weitere Daten durch die Anwendung von Gelände- und Labormethoden in den geoKAT beispielsweise im Bereich **Remote Sensing** (A) oder Analysen und Altersbestimmungen von vulkanischen Gesteinen im Bereich **Petrography und Stratigraphy** (D) und **Geochemistry** (G) erhoben werden sollen (Abbildung 4-3).

4.2.1.6 **AK6 - Grundwasseralter**

Auf der Basis von § 22 Abs. 2 Nr. 6 StandAG 2017 (2017) schließt die BGE Gebiete, in denen in den als ewG/Einlagerungsbereiche in Frage kommenden Bereichen „junge Grundwässer“ nachgewiesen werden, aus (BGE 2022a). Als „junge Grundwässer“ gelten dabei Grundwässer, die in endlagerrelevanten Tiefenbereichen auftreten und auf eine Teilnahme am aktiven hydrologischen Kreislauf und somit auf den unmittelbaren Austausch mit der Erdoberfläche und demnach der Biosphäre hindeuten. Im StandAG selbst findet sich jedoch keine Definition für den Begriff „junge Grundwässer“ (StandAG 2017). Laut der Arbeiten des Arbeitskreises Auswahlverfahren Endlagerstandorte (AkEnd 2002) sowie der Endlagerkommission (Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe 2016) kann die Konzentration der radioaktiven Isotope Tritium (^3H) und Kohlenstoff-14 (^{14}C) im Grundwasser herangezogen werden, um das Grundwasseralter zu bewerten.

Alle in Phase I von der BGE abgefragten Daten zu Grundwasseraltern wurden durch die Analyse von Wasserproben aus Bergwerken oder Bohrungen gewonnen. Da diese Daten zum jetzigen Zeitpunkt keine Interpretation der räumlichen Ausdehnung zulassen, ist ein großräumiger Ausschluss von Gebieten, durch die Anwendung des Ausschlusskriteriums „Grundwasseralter“ zum jetzigen Zeitpunkt wenig zielführend (AkEnd 2002). Im weiteren Verlauf des StandAV wird das Ausschlusskriteriums „Grundwasseralter“ somit eher als eine umfassende Gesamtinterpretation der hydrochemischen und isopenhydrologischen Grundwasserverhältnisse zu verstehen sein und demnach Daten erhoben werden müssen (**Hydro**, B, Abbildung 4-3).

4.2.2 **Mindestanforderungen**

Während die Erfüllung eines Ausschlusskriteriums zum endgültigen Ausschluss aus dem Verfahren führt, ist die Erfüllung aller Mindestanforderungen nach § 23 StandAG 2017 (2017) die Voraussetzung zum weiteren Verbleib im Standortauswahlverfahren. Daher gilt für jedes der verbliebenen Gebiete, dass es zwingend diese fünf Anforderungen erfüllen muss, um als potenzieller Endlagerstandort in Frage zu kommen. Gebiete, die alle Mindestanforderungen erfüllen, werden von der BGE in Anlehnung an § 13 Abs. 2 StandAG 2017 (2017) als Identifizierte Gebiete bezeichnet.

Wie auch bei der Anwendung der Ausschlusskriterien (Kapitel 4.2.1) ist davon auszugehen, dass auch die Mindestanforderungen, während des StandAV wiederholt angewendet werden. Dabei werden in den unterschiedlichen Phasen geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden unterschiedlicher geowissenschaftlicher Kategorien (Kapitel 4.2) angewendet.

Im Folgenden werden die einzelnen Mindestanforderungen adressiert und die geowissenschaftlichen Aufgaben in den jeweiligen geoKAT beschrieben, die bei Anwendung der Mindestanforderungen während des StandAV anstehen (BGE 2020a).

In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass diese Übersicht keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV nicht abzusehen ist, ob seitens der BGE für die

Anwendung der Mindestanforderungen weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus anderen geoKAT eingesetzt bzw. entwickelt werden, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

Abbildung 4-4: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der Mindestanforderungen

Mindestanforderungen (MA)	<i>Erkundungen im Feld</i>	<i>Feldversuche und Datenerhebung</i>	<i>Proben(auf)nahme und -beschreibung</i>	<i>Laborversuche und -analysen</i>	<i>Datenauswertung</i>	<i>Modellierung und Verarbeitung</i>
MA1 Gebirgsdurchlässigkeit	B	B	B	B	B	B
MA2 Mächtigkeit des ewG	C				C	
	D	D			D	
	I	I			I	
MA3 Minimale Tiefe des ewG	C				C	
	D	D			D	
	F	F			F	F
	I	I			I	
MA4 Fläche des Endlagers	B	B	B	B	B	B
	D	D			D	
						G
	I	I	I		I	
MA5 Erhalt Barrierewirkung	K	K	K	K	K	K
	Heranziehung aller geoKAT zu erwarten					

Quelle: Eigene Darstellung

4.2.2.1 MA1 - Gebirgsdurchlässigkeit

Aus der Anwendung der Mindestanforderungen (BGE 2020a) gemäß § 23 Abs. 5 (1) StandAG 2017 (2017) geht hervor, dass der für das Endlager in Frage kommende einschlusswirksame Gebirgsbereich (ewG)¹³ eine möglichst geringe Gebirgsdurchlässigkeit k_f aufweisen muss. Die Mindestanforderung an einem potenziellen ewG ist dann gegeben, wenn die Gebirgsdurchlässigkeit k_f weniger als 10-10 m/s beträgt. Sollte zum Zeitpunkt der Beurteilung kein direkter Nachweis zum Bestehen der Mindestanforderung bestehen, ist sicher zu stellen, dass der ewG aus Gesteinen besteht, denen eine Gebirgsdurchlässigkeit kleiner als 10-10 m/s zugeordnet werden kann. Die Erfül-

¹³ Nach § 2 Nr. 9. StandAG ist der einschlusswirksame Gebirgsbereich „der Teil eines Gebirges, der bei Endlagersystemen, die wesentlich auf geologischen Barrieren beruhen, im Zusammenwirken mit den technischen und geotechnischen Verschlüssen den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle in einem Endlager gewährleistet“

lung des Kriteriums kann auch durch den Einlagerungsbereich überlagernde Schichten nachgewiesen werden.

In Phase I des StandAVs wurden zur Ermittlung der Gebirgsdurchlässigkeit von Seiten der BGE, unter Anwendung des Geologiedatengesetzes (GeolDG 2020), bei den Bundes- und Landesbehörden die bisher erfassten geologische Daten in der geowissenschaftlichen Kategorie **Hydro** (B) abgefragt. Auf dieser Basis ist zu erwarten, dass weitere Gelände- und Labormethoden in dieser Kategorie anfallen werden (Abbildung 4-3.).

4.2.2.2 **MA2 – Mächtigkeit des einschlusswirksamen Gebirgsbereich**

Gemäß § 23 Abs. 5 (2) StandAG 2017 (2017) muss der Gebirgsbereich, der den ewG aufnehmen soll, mindestens 100 Meter mächtig sein. Bei Gesteinskörpern des Wirtsgestein Kristallin mit geringerer Mächtigkeit kann der Nachweis des sicheren Einschlusses auch durch die Kombination der geotechnischen und technischen Barrieren erfüllt werden (BGE 2020a)

Um im Verlauf des StandAV geeignete Gebiete auszuweisen, die die Mindestanforderung „Mächtigkeit des ewG“ erfüllen, wurden seitens der BGE geologische Daten in den Kategorien **Seismics** (C), **Petrography and Stratigraphy** (D) und im **Well logging** (I) abgefragt. Es sind in der Zukunft weitere Gelände- und Labormethoden in den genannten Kategorien zu erwarten (Abbildung 4-3).

4.2.2.3 **MA3 – Minimale Teufe des einschlusswirksamen Gebirgsbereich**

Auf Basis von § 23 Abs. 5 (3) StandAG 2017 (2017) muss die Oberfläche eines ewG mindestens 300 Meter unter der Geländeoberfläche liegen. Gebiete, in denen über den Nachweiszeitraum hinweg mit exogenen Prozessen wie z. B. eiszeitlich bedingter intensiver Erosion zu rechnen ist, welche aufgrund direkter oder indirekter Auswirkungen zu einer Beeinträchtigung der Integrität eines ewGs führen können, können dann die Mindestanforderung erfüllen, wenn die Oberfläche des ewG tiefer als die zu erwartende größte Tiefe der Auswirkungen liegen kann (BGE 2020a).

Die von der BGE zur Anwendung der Mindestanforderung bisher abgefragten geologischen Daten sowie die in Phase II und Phase III zu erwartenden und auszuführenden Gelände- und Labormethoden umfassen die geoKAT **Seismics** (C), **Petrography and Stratigraphy** (D), **Erosion and Weathering** (F) und **Well logging** (I) (Abbildung 4-3).

4.2.2.4 **MA4 – Fläche des Endlagers**

Zu Erfüllung der Mindestanforderung der Fläche des Endlagers muss der ewG gemäß § 23 Abs. 5 (4) StandAG 2017 (2017) über eine Ausdehnung in der Fläche verfügen, welche eine Realisierung des Endlagers ermöglicht. Außerdem umfasst der zu berücksichtigende Flächenbedarf eines Endlagers ebenfalls Flächen, die u. a. für die Realisierung von Maßnahmen zur Rückholung von Abfallbehältern erforderlich ist (BGE 2020a).

Hierzu verwendet die BGE bereits die von den Bundes- und Landesanstalten abgefragten geologischen Daten. Deshalb sind weiterhin Gelände- und Labormethoden aus den geoKAT **Hydro** (B), **Petrography and Stratigraphy** (D), **Geochemistry** (G), **Well logging** (I) sowie **Geomechanics** (K) zu erwarten (Abbildung 4 3).

4.2.2.5 MA5 – Erhalt der Barrierewirkung

In Folge § 23 Abs. 5 (5) StandAG 2017 (2017) muss ein ewG nachgewiesen werden können, dessen Integrität gewährleistet ist. Für die Einhaltung der geowissenschaftlichen Mindestanforderungen zur Gebirgsdurchlässigkeit, Mächtigkeit und Ausdehnung und Fläche des ewGs dürfen keinerlei Erkenntnisse oder Daten existieren, die die Erhaltung der Barrierewirkung innerhalb des Nachweiszeitraums von einer Million Jahre in Frage stellen (BGE 2020a).

Hierfür ist zu erwarten, dass die BGE im Verlauf des StandAV geologische Daten aus allen in Kapitel 4.2 aufgeführten geoKAT heranziehen wird. Zusätzlich kann damit gerechnet werden, dass Gelände- und Labormethoden sämtliche geowissenschaftliche Aufgaben nutzt und gegebenenfalls miteinander kombiniert (Abbildung 4 3).

4.2.3 Geowissenschaftliche Abwägungskriterien (geoWK)

Die identifizierten Gebiete, auf die kein Ausschlusskriterium zutrifft, in denen geeignete Wirtsgesteine vorkommen und die darüber hinaus alle Mindestanforderungen erfüllen, werden mit Hilfe geowissenschaftlicher Abwägungskriterien dahingehend bewertet, ob sie gemäß § 24 StandAG 2017 (2017) „günstige geologische Voraussetzungen für die sichere Endlagerung radioaktiver Abfälle erwarten lassen“. Die geowissenschaftlichen Abwägungskriterien sind jeweils mit Indikatoren unterlegt, die zur Bewertung heranzuziehen sind (BGE 2020c), auf welche innerhalb dieses Berichtes aber nicht näher eingegangen werden soll. Eine Bewertung der Indikatoren und Kriterien erfolgt als günstig, bedingt günstig oder weniger günstig/ungünstig (StandAG 2017) bzw. nicht günstig (Bezeichnung gemäß Umsetzung der BGE).

Für die Bewertung der Abwägungskriterien werden detaillierte, standortspezifische Informationen der geologischen Begebenheiten benötigt, die zum jetzigen Zeitpunkt für die untersuchten identifizierten Gebiete selten oder nur unvollständig vorliegen. Eine gebietspezifische Anwendung der Abwägungskriterien ist daher bei der Ausweisung von Teilgebieten noch nicht möglich. Daher greift die BGE bisher bei der Bewertung der meisten geoWK auf Referenzdatensätze zurück (BGE 2020c). Darin werden die bewertungsrelevanten Eigenschaften der betrachteten Gesteinstypen anhand verfügbarer Informationen beschrieben und die Bandbreite an Werten, die einzelne Indikatoren annehmen können, mit Hilfe von Literaturdaten festgelegt.

Es ist davon auszugehen, dass auch die geowissenschaftlichen Abwägungskriterien wie zuvor die Ausschlusskriterien (Kapitel 4.2.1) und Mindestanforderungen (Kapitel 4.2.2) während des StandAV wiederholt angewendet werden. Dabei werden verschiedene geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus unterschiedliche geoKAT (Kapitel 4.2) angewendet (BGE 2020b).

Im Folgenden werden die einzelnen geowissenschaftlichen Abwägungskriterien adressiert und die geowissenschaftlichen Aufgaben in den jeweiligen geoKAT beschrieben, die bei Anwendung der Abwägungskriterien während des StandAV anstehen (Abbildung 4 5).

In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass diese Übersicht keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV nicht abzusehen ist, ob seitens der BGE für die Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien auch weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus anderen geoKAT eingesetzt bzw. entwickelt werden, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

Abbildung 4-5: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben bei der Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien

Geowissenschaftliche Abwägungskriterien (geoWK)	Erkundungen im Feld	Feldversuche und Datenerhebung	Proben(aufnahme und -beschreibung)	Laborversuche und -analysen	Datenauswertung	Modellierung und Verarbeitung
geoWK1 <i>Transport radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen</i>	B D	B	B	B	B D	B
geoWK2 <i>Konfiguration Gesteinskörper</i>	B D I K	B D I K	B I K	B I K	B D I K	B
geoWK3 <i>räumliche Charakterisierbarkeit</i>	C D E	D E	D E	D G	D E	E
geoWK4 <i>langfristige Stabilität</i>	E H K	E H K	E	K	K H K	E H K
geoWK5 <i>gebirgsmechanische Eigenschaften</i>	E H J K	E H J K	E	H K	K	K
geoWK6 <i>Fluidwirksamkeiten</i>	B G K	B G K	B G K	B G K	B G K	B
geoWK7 <i>Gasbildung</i>	B D	B	B	B D G	B D	B
geoWK8 <i>Temperaturverträglichkeit</i>	K	K	K	K G	K	K
geoWK9 <i>Rückhaltevermögen ewG</i>	B D	B D	B	B G	B D	B

(Fortsetzung nächste Seite)

Geowissenschaftliche Abwägungskriterien (geoWK)	Erkundungen im Feld	Feldversuche und Datenerhebung	Proben(aufnahme und -beschreibung	Laborversuche und -analysen	Datenauswertung	Modellierung und Verarbeitung
	geoWK10 Hydrochemische Verhältnisse	B	B	B	B	B
	D	D	D	D	D	
	G	G	G	G	G	
geoWK11 Schutz des ewG	B	B	B	B	B	B
	C				C	
	D	D	D	D	D	
	G	G	G	G	G	
	H	H		H		
	K	K	K	K	K	

Quelle: eigene Darstellung

4.2.3.1 geoWK1 – Kriterium Transport radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen

Gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 1 (zu § 24 Abs. 3) (StandAG 2017) wird ein ewG als günstig befunden, wenn der Transport radioaktiver Stoffe durch Grundwasserbewegungen und Diffusion im ewG so gering wie möglich ist. Dafür bewertet die BGE geologische Eigenschaften des ewG, wie z. B. die vorherrschende Grundwasserströmung, das Grundwasserangebot und die Diffusionsgeschwindigkeit (BGE 2020b).

In den Geowissenschaften werden hierfür zur Datenerhebung üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in der geoKAT **Hydro** (B) angewandt. Allerdings können diese auch von Methoden in der **Petrography and Stratigraphy** (D) unterstützt werden (Abbildung 4-5).

4.2.3.2 geoWK2 – Kriterium Konfiguration Gesteinskörper

In Folge von § 24 StandAG bzw. Anlage 2 (zu § 24 Abs. 3) (StandAG 2017) müssen die barrierewirksamen Gesteine eines ewG mindestens über eine Mächtigkeit verfügen, die den sicheren Einschluss der Radionuklide über einen Zeitraum von einer Million Jahren bewirkt. Dabei soll das Einschlussvermögen möglichst hoch und zuverlässig prognostizierbar sein. Unter Berücksichtigung der Barrierewirkung soll die unversehrte Barriere mittels Modellrechnungen abgeleitet werden (BGE 2020b).

Für diese Modellrechnungen sind üblicherweise Bewertungen der räumlichen Charakteristika, wie z. B. der Mächtigkeit, der Umschließung, der Tiefenlage und der Ausdehnung des ewG vorzunehmen. Dafür ist zu erwarten, dass vor allem Gelände- und Labormethoden der geoKAT **Hydro** (B), **Petrography and Stratigraphy** (D), **Well logging** (I) sowie **Geomechanics** (K) angewendet werden (Abbildung 4-5).

4.2.3.3 **geoWK3 – Kriterium räumliche Charakterisierbarkeit**

Das Kriterium der räumlichen Charakterisierbarkeit umfasst nach § 24 StandAG bzw. Anlage 3 (zu § 24 Abs. 3) (StandAG 2017), die Charakterisierbarkeit der wesentlichen geologischen Barrieren, die direkt oder indirekt den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle gewährleisten. Dies schließt sowohl den vorgesehenen ewG als auch einen Einlagerungsbereich mit ein. Die Charakterisierbarkeit der wesentlichen geologischen Barrieren muss möglichst zuverlässig sein, da sie für die belastbare Abwägungsentscheidung im Rahmen des StandAV sowie für spätere Sicherheitsbewertungen vorauszusetzen ist (BGE 2020b). Inwiefern die relevanten Gesteinstypen und deren Eigenschaften und Übertragbarkeit auf umliegende Gesteine ermittelt werden können, ist bewertungsrelevant. Zum einen wird die Homogenität des Endlagerbereichs sowohl bezüglich der Variationsbreite und auch der räumlichen Verteilung der Wirtsgesteine untersucht. Andererseits spielen auch die Bewertung der tektonischen Überprägung des ewGs eine Rolle.

Um diese Gesteinseigenschaften zu bestimmen, werden in den Geowissenschaften üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in den geowissenschaftlichen Kategorien **Seismics** (C), **Petrography and Stratigraphy** (D), **Tectonics and Structural Geology** (E) und **Geochemistry** (G) eingesetzt (Abbildung 4-5).

4.2.3.4 **geoWK4 – Kriterium langfristige Stabilität der Verhältnisse**

Gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 4 (zu § 24 Abs. 3) (StandAG 2017) erfasst das Kriterium zur Bewertung der langfristigen Stabilität der Verhältnisse die gebirgsmechanischen Eigenschaften, welche für die Errichtung eines Endlagerbergwerks notwendig sind (BGE 2020b). Voraussetzung für eine günstige Bewertung ist, dass sich die Verhältnisse der wichtigen sicherheitsgerichteten Merkmale in der Vergangenheit über möglichst lange Zeiträume nicht wesentlich verändert haben. Bewertungsrelevante Merkmale einer langfristigen Stabilität sind hierbei die Mächtigkeit, flächenhafte beziehungsweise räumliche Ausdehnung und die Gebirgsdurchlässigkeit des ewG.

In den Geowissenschaften werden hierfür zur Datenerhebung üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in der geoKAT **Tectonics and Structural Geology** (E), **Geophysics** (H) sowie **Geomechanics** (K) angewandt (Abbildung 4-5).

4.2.3.5 **geoWK5 – Kriterium gebirgsmechanische Eigenschaften**

Mit Hilfe des Kriteriums gebirgsmechanische Eigenschaften sollen gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 5 (zu § 24 Abs. 3) (StandAG 2017) die gebirgsmechanischen Voraussetzungen, welche für die Errichtung eines Endlagerbergwerks notwendig sind, bewertet werden (BGE 2020b). Dazu muss u. a. die Neigung zur Ausbildung mechanisch induzierter Sekundärpermeabilitäten¹⁴ im ewG möglichst gering sein.

Erkenntnisse über gebirgsmechanische Eigenschaften erhält man in den Geowissenschaften üblicherweise durch die Anwendung von Gelände- und Labormethoden in den geoKAT **Tectonics and Structural Geology** (E), **Geophysics** (H), **Geotechnics and Mining** (J) sowie der **Geomechanics** (K) (Abbildung 4-5).

¹⁴ Unter Sekundärpermeabilitäten sind durch die Errichtung des Endlagerbergwerks entstehende Wegsamkeiten zu verstehen, durch die später Schadstoffe aus dem Endlager entweichen können

4.2.3.6 **geoWK6 – Kriterium Fluidwegsamkeiten**

Gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 6 (zu § 24 Abs. 4) (StandAG 2017) soll die Neigung des ewG zur Ausbildung von Fluidwegsamkeiten möglichst gering sein, um den sichereren Einschluss der radioaktiven Abfälle zu gewährleisten. Bewertungsrelevante Eigenschaften dafür sind die Veränderbarkeit der Gebirgsdurchlässigkeit sowie die Rückbildbarkeit von Rissen und eine zusammenfassende Beurteilung der Neigung zur Bildung von Fluidwegsamkeiten (BGE 2020b).

In den Geowissenschaften werden hierfür zur Datenerhebung üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in der geoKAT **Hydro** (B), **Geochemistry** (G) sowie **Geomechanics** (K) eingesetzt (Abbildung 4-5).

4.2.3.7 **geoWK7 – Kriterium Gasbildung**

Gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 7 (zu § 24 Abs. 5) (StandAG 2017) soll die Gasbildung unter Endlagerbedingungen möglichst gering sein. Der zu bewertende Indikator hierfür ist das Wasserangebot im Einlagerungsbereich innerhalb der Wirtsgesteine.

Erkenntnisse über die Gasbildung von Gesteinen erhält man in erster Linie auf Basis von Erkundungen, Feld- und Laborversuchen und -analysen in den geoKAT **Hydro** (B) und **Petrography and Stratigraphy** (D) (Abbildung 4-5).

4.2.3.8 **geoWK9 – Kriterium Temperaturverträglichkeit**

Das Kriterium Temperaturverträglichkeit gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 8 (zu § 24 Abs. 5) (StandAG 2017) untersucht das Verhalten der Wirtsgesteine des Endlagersystems bei Temperaturveränderungen infolge der Einlagerung radioaktiver Abfälle (BGE 2020b). Thermodynamische Gebirgsspannungen dürfen dabei nicht zu einem Festigkeitsverlust und der Bildung von Sekundärpermeabilitäten führen. Die Gesteine werden auch hinsichtlich ihrer Temperaturstabilität und Mineralumwandlungen untersucht.

In den Geowissenschaften werden hierfür zur Datenerhebung und Bewertung üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in der geoKAT **Geochemistry** (G) und **Geomechanics** (K) in miteinbezogen (Abbildung 4-5).

4.2.3.9 **geoWK9 – Kriterium Rückhaltevermögen**

Laut § 24 StandAG bzw. Anlage 9 (zu § 24 Abs. 5) (StandAG 2017) sollen die barrierewirksamen Gesteine eines ewG ein möglichst hohes Rückhaltevermögen gegenüber den langzeitrelevanten Radionukliden besitzen. Bewertungsrelevante Indikatoren hierfür sind die Sorptionsfähigkeit der Wirtsgesteine, mit der die Gesteine Radionuklide binden und somit deren Transport verlangsamen bzw. möglichst ganz unterbinden (BGE 2020b).

Dazu werden in den Geowissenschaften unterschiedliche Eigenschaften wie z. B. den Sorptionskoeffizienten für die betreffenden Radionuklide, das Mineralverhalten sowie den Porenraum und die Ionenstärke des Grundwassers untersucht und allgemein Gelände- und Labormethoden in den geoKAT **Hydro** (B), **Petrography and Stratigraphy** (D) und **Geochemistry** (G) angewendet (Abbildung 4-5).

4.2.3.10 **geoWK10 – Kriterium hydrochemische Verhältnisse**

In Folge von § 24 StandAG bzw. Anlage 10 (zu § 24 Abs. 5) (StandAG 2017) bewertet die BGE die chemische Zusammensetzung der Tiefenwässer und die festen Mineralphasen des ewG, welche sich nach dem Einbringen von Behälter- und Ausbaumaterial positiv auf den Rückhalt der Radionuklide auswirken und die technischen und geotechnischen Barrieren chemisch möglichst nicht negativ beeinflussen sollen (BGE 2020b). Bewertungsrelevante Indikatoren sind geochemische Eigenschaften der tiefen Grundwässer, wie z. B. der pH-Wert oder das chemische Gleichgewicht und Milieu.

In den Geowissenschaften werden hierfür zur Datenerhebung üblicherweise vor allem Gelände- und Labormethoden in der geoKAT **Hydro** (B), **Petrography and Stratigraphy** (D) und **Geochemistry** (G) eingesetzt (Abbildung 4-5).

4.2.3.11 **geoWK11 – Kriterium Schutz des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs**

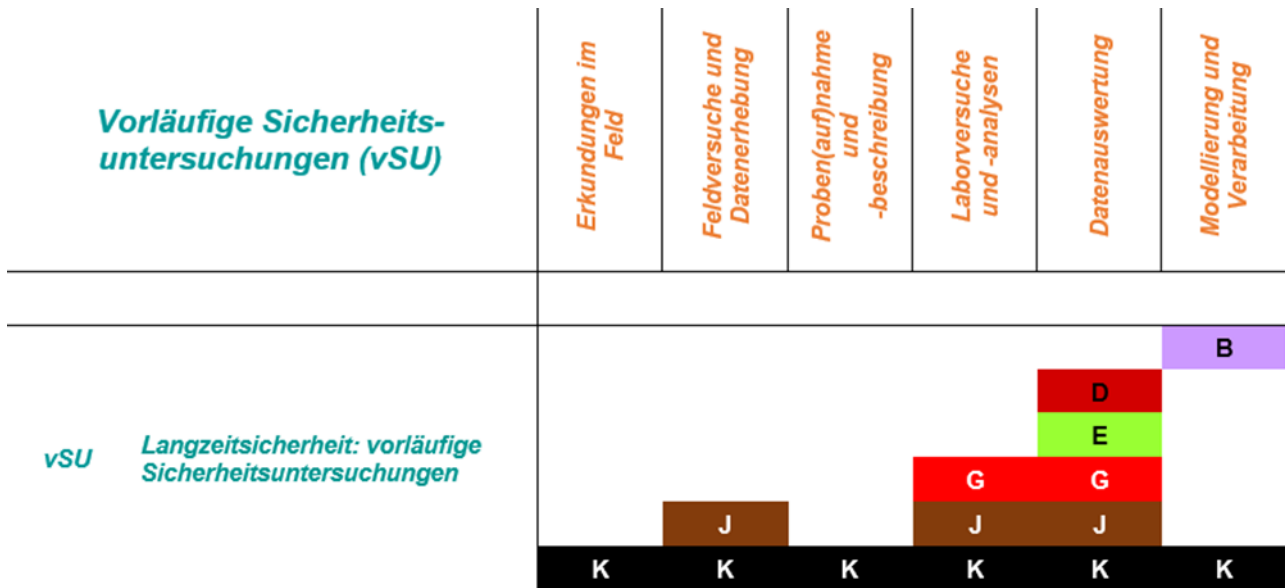
Gemäß § 24 StandAG bzw. Anlage 11 (zu § 24 Abs. 5) (StandAG 2017) soll das Deckgebirge durch seine Mächtigkeit sowie seinen strukturellen Aufbau und seine Zusammensetzung möglichst langfristig zum Schutz des ewG beitragen. Bewertungsrelevante Indikatoren dafür sind die Einschätzung der direkten und indirekten Auswirkungen exogener Vorgänge wie z. B. Erosion und die geologische Beurteilung des Deckgebirges (BGE 2020b).

Erkenntnisse darüber erhält man in den Geowissenschaften in erster Linie auf Basis von Erkundungen, Feld- und Laborversuchen und -analysen in den geoKAT **Hydro** (B), **Seismics** (C), **Petrography and Stratigraphy** (D), **Tectonics and Structural Geology** (E), **Geophysics** (H) sowie **Geomechanics** (K) (Abbildung 4-5).

4.2.4 **Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen**

Gemäß § 27 StandAG Vorläufige Sicherheitsuntersuchungen (StandAG 2017) ist die Bewertung des sicheren Einschlusses der radioaktiven Abfälle unter Ausnutzung der geologischen Standortgegebenheiten Gegenstand der vorläufigen Sicherheitsuntersuchung (vSU). Dabei sind in erster Linie die Sicherheitsanforderungen nach § 26 (StandAG 2017) zugrunde zu legen und die Anforderungen an die Durchführung der Sicherheitsanforderungen nach Absatz 6 einzuhalten. Zudem regelt die Verordnung über Anforderungen an die Durchführung der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen im Standortauswahlverfahren für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle ((EndlSiUntV 2020) die Durchführung.

Abbildung 4-6: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Aufgaben für die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen



Quelle: Eigene Darstellung

Ziel der vSU ist die Bewertung des Endlagersystems in seiner Gesamtheit und entsprechend dem Stand von Wissenschaft und Technik hinsichtlich der langfristigen Sicherheit der geologischen und geotechnischen Barrieren des ewGs. In diesem Sinne steht die Langzeitsicherheit eines möglichen Einlagerungsbereichs im Vordergrund der Untersuchungen. Die vSU bilden dabei eine der Grundlagen für die Entscheidung, ob ein Gebiet weiter im Auswahlverfahren betrachtet wird oder ausscheidet.

Dabei ist zu beachten, dass die vSU in jeder Phase des StandAV wiederholt und unter Zunahme des Detaillierungsgrades durchgeführt werden, wobei vor allem Umfang und Tiefe der heranzuziehenden Daten und Bewertungen von Phase zu Phase ausgeweitet wird. So wird im Verlauf des StandAV die vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen zu repräsentativen Sicherheitsuntersuchung (rvSU), welche dann zu weiterentwickelte vorläufige (wvSU) und schlussendlich zu umfassenden vorläufigen (uvSU) Sicherheitsuntersuchungen werden.

Die Konzepte zur Durchführung der einzelnen vSU werden von Seiten der BGE schrittweise entwickelt und veröffentlicht. Zum jetzigen Zeitpunkt wendet die BGE die repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen an (BGE 2022b). Es ist zu erwarten, dass dafür während des StandAV Gelände- und Labormethoden für Aufgaben verschiedener geoKAT angewendet werden (BGE 2022c). In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass die hier dargestellte Übersicht keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV nicht abzusehen ist, ob seitens der BGE für die Anwendung der unterschiedlichen vSU auch weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus anderen geoKAT eingesetzt bzw. entwickelt werden, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

Da der Fokus der vSU auf der Langzeitsicherheit des Einlagerbereichs liegt, ist zu erwarten, dass vor allem auch Modellierungen von langfristigen endo- und exogenen Prozessen, wie z. B. Klimawandelfolgen wie Eiszeiten oder Meeresspiegelschwankungen eine wichtige Rolle zukommt. Gene-

rell werden Gelände- und Labormethoden in den geoKAT **Hydro (B)**, **Petrography and Stratigraphy (D)**, **Tectonics and Structural Geology (E)**, **Geochemistry (G)** sowie im Bereich **Geotechnics and Mining (J)** und **Geomechanics (J)** von großer Wichtigkeit sein (Abbildung 4-6).

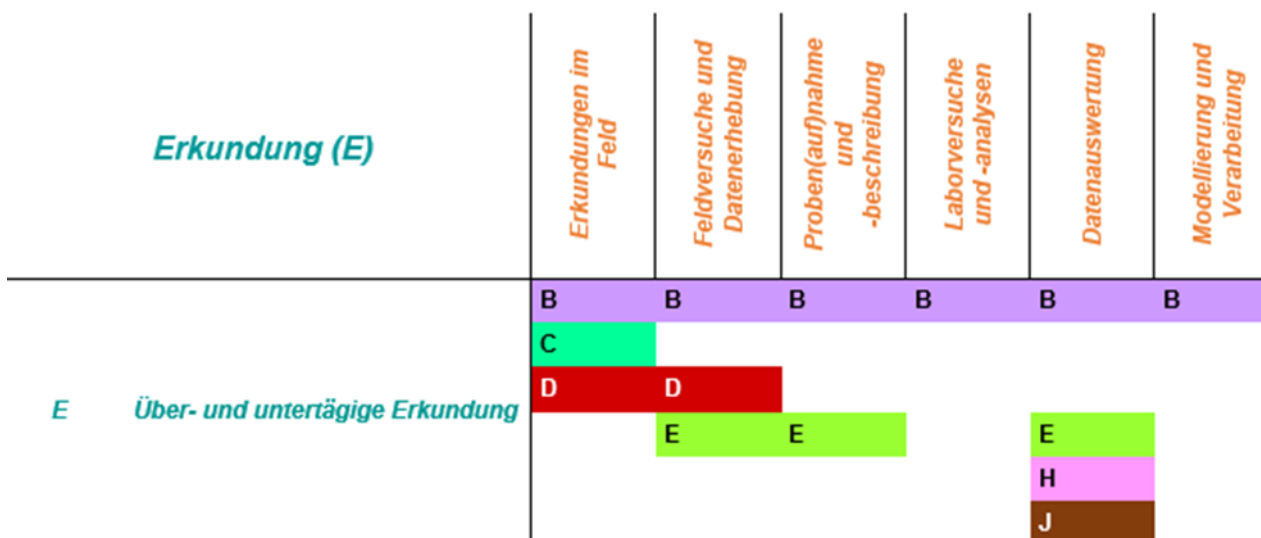
4.2.5 Über- und untertägige Erkundung

Während der Phase II und Phase III ist es die Aufgabe der BGE über- und untertägige Erkunden zur Ermittlung eines Endlagerstandorts gemäß § 16 und § 18 des StandAG 2017 (2017) vorzunehmen. In Phase II soll zunächst mit Hilfe von über- und untertägigen Erkundungen neue Informationen gewonnen werden und günstige Standorte für die untertägigen Erkundungen ausgemacht werden. In Phase III erfolgt dann das Auffahren eines Erkundungsbergwerks zur untertägigen Untersuchung des ewG in den zuvor vorgeschlagenen günstigen Endlagerstandorten zur Ermittlung des geeigneten Standortvorschlags.

Zur Durchführung des weiteren Vorgehens sind von Seiten der BGE zum jetzigen Zeitpunkt noch keine genauen Konzepte entwickelt bzw. veröffentlicht worden. Jedoch ist zu erwarten, dass während dem Verlauf des StandAV wiederholt verschiedene Gelände- und Labormethoden für die Erfüllung der einzelnen geowissenschaftlichen Aufgaben innerhalb der jeweiligen geoKAT angewendet werden. In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass diese Übersicht keinen Anspruch auf Vollständigkeit erhebt, da im Verlauf des StandAV nicht abzusehen ist, ob seitens der BGE für die Anwendung der über- und untertägigen Erkundungen auch weitere geowissenschaftliche Aufgaben bzw. Gelände- und Labormethoden aus anderen geoKAT eingesetzt bzw. entwickelt werden, welche zum jetzigen Zeitpunkt in Form und Anwendung nicht abzusehen sind.

Dennoch kann davon ausgegangen werden, dass vor allem Gelände- und Labormethoden in den geoKAT **Hydro (B)**, **Seismics (C)**, **Petrography and Stratigraphy (D)**, **Tectonics and Structural Geology (E)**, **Geophysics (H)** sowie im Bereich der **Geotechnics and Mining (J)** im Mittelpunkt stehen werden (Abbildung 4-7).

Abbildung 4-7: Übersicht über die wichtigsten geowissenschaftlichen Kategorien während der Bearbeitung der geowissenschaftlichen Erkundungen



Quelle: Eigene Darstellung

5 Erstellen einer Matrix mit Schlüsselaktivitäten, geowissenschaftlichen Fragestellungen und Einsatzbereichen der KI

Die Ergebnisse der Literaturrecherche sollen nun den definierten Schlüsselaktivitäten gegenübergestellt und dabei Literatur, mit potenzieller Relevanz für das StandAV, herausgefiltert werden. Hierzu wurden zunächst die konkreten geowissenschaftlichen Aufgaben oder Fragestellungen innerhalb der Schlüsselaktivitäten, soweit sie im Rahmen des StandAV (bis einschließlich dem am 27. Juni 2022 veröffentlichten Arbeitsstand der Methodik zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (rvSU)) festgelegt wurden, zusammengestellt. Diese Aufgaben/Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten wurden anschließend den geowissenschaftlichen Kategorien der Literatur-Recherche (siehe hierzu Kapitel 3.2.1) zugeordnet. Das genaue Vorgehen hierzu erläutert Kapitel 5.1.

Im Ergebnis wurde eine komplexe Matrix erstellt, anhand derer die Zuordnung der Quellen zu einerseits den geowissenschaftlichen Kategorien und andererseits zu den KI-Einsatzbereichen ersichtlich wird. Außerdem sind in der Matrix in einer dritten Ebene die einzelnen Quellenbezeichnungen mit DOI und die zugehörigen Abstracts sowie die Verknüpfung zu den Schlüsselaktivitäten und den darin enthaltenen geowissenschaftlichen Aufgaben hinterlegt. Die Struktur der Matrix ist in Kapitel 5.1 näher erläutert.

5.1 Vorgehen zur Erstellung der Literaturmatrix

In Kapitel 4 sind die einzelnen Schlüsselaktivitäten des Standortauswahlverfahrens, wie sie im Rahmen dieser Untersuchung definiert wurden, beschrieben. Die darin enthaltenen Fragestellungen und Aufgaben wurden zunächst so konkret und detailliert wie möglich auf einem Whiteboard in den Phasen des Standortauswahlverfahrens visualisiert. Diese Aufgaben/Fragestellungen wurden den in der Literaturrecherche definierten geowissenschaftlichen Kategorien zugeordnet und anschließend geclustert. Diese geowissenschaftlichen Kategorien stellen eine Achse der Literaturmatrix dar.

Den geowissenschaftlichen Kategorien wurden daraufhin die Schlüsselaktivitäten zugeordnet und ein Mapping zwischen Schlüsselaktivitäten und deren Aufgaben sowie den geowissenschaftlichen Kategorien erstellt, um den Bezug sichtbar zu machen.

Die Einordnung der Literatur in beide Kategorien (geoKAT und KIKAT) und damit in die Matrix erfolgte anhand der Abstracts der Quellen. Es ist nicht auszuschließen, dass bei diesem Vorgehen Literaturquellen den Kategorien subjektiv oder ungenau zugeordnet wurden bzw. dass bei ausführlicher Betrachtung der Literaturquelle der Schwerpunkt des Inhalts anders eingeordnet werden könnte.

5.2 Struktur der Literaturmatrix

Die Literaturmatrix besteht aus einer Excel-Tabelle mit mehreren übereinanderliegenden Arbeitsblättern. Auf dem ersten Arbeitsblatt ist eine Tabelle angelegt, über deren Felder ein Zugang zu den weiteren Arbeitsblättern verlinkt ist. Auf der horizontalen Achse dieser Tabelle sind die KIKAT der Matrix aufgetragen, also die Einsatzbereiche der KI. Auf der vertikalen Achse sind die geowissenschaftlichen Kategorien (geoKAT) aufgetragen. In den Feldern der Tabelle ist die Anzahl der Literaturquellen dieses Feldes angegeben, die jeweils auf ein weiteres Arbeitsblatt mit der entsprechenden dahinterliegenden Literaturliste verlinkt ist (siehe Abbildung 5-1).

Das Mapping auf die Schlüsselaktivitäten erfolgt über weitere hinter der auf dem ersten Arbeitsblatt der Tabelle liegende Listen und zeigt auch die Aufgaben innerhalb der Schlüsselaktivitäten, die die Zuordnung der Schlüsselaktivitäten zu den jeweiligen geowissenschaftlichen Kategorien begründen.

Abbildung 5-1: Schematische Darstellung der Literaturmatrix – Excel-Tabelle mit mehreren verlinkten Arbeitsblättern (Stand Juli 2022)

		mit KI-Anwendung umgesetzte Problemstellungen													
Relevanz für folgende Schlüsselaktivitäten im StandAV*		Regression - prediction	Regression - forecast	Surrogate model	Classification - binary	Classification - multiple	Dimension reduction - Computer	Vision - Erkennung - Computer	Vision - Segmentierung - Computer	Vision - Generierung	Clustering	Anomaly Detection	Optimization	Other	Nicht erkennbar aus Abstract
A	Remote Sensing	AK2, AK3, AK6, vSU, E	1	0	0	1	0	1	1	0	1	1	0	0	3
B	Hydro	geoWK1, geoWK2, geoWK6, geoWKS, geoWK10, geoWK11	4	1	6	1	1	0	0	3	0	1	2	1	1
C	Seismic	AK2, MA2, MA3, geoWK3, geoWK11, vSU, E	14	0	8	8	1	5	9	12	6	3	2	6	2
D	Petrography and Stratigraphy	geoWK1, geoWK2, geoWK3, geoWKS, geoWK11, vSU, E	22			0	0	8	2	4	4	4	0	0	5
E	Tectonics / Structural geology	geoWK4, geoWKS, vSU, E	0	0	1	0	0	2	5	0	0	0	1	0	1
F	Erosion and Weathering	MA3, vSU	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
G	Geochemistry	MA4, geoWK3, geoWK9, geoWK10, geoWK11, vSU, E	5	1	4	5	0	2	4	2	1	5	1	0	2
H	Geophysics	AK2, geoWK4, geoWKS, geoWK11, vSU, E	7	0	2	2	0	1	1	2	0	0	0	0	1
I	Well logging	AK2, MA2, MA3, MA4, geoWK2, vSU, E	10	0	1	2	0	1	0	0	1	1	2	2	1
J	Geotechnics and Mining	geoWKS, vSU, E	3	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1
K	Geomechanics	geoWK4, geoWKS, geoWK6, geoWKS, geoWK11, vSU, E	5	0	1	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0

Index	Schlüsselaktivität	Autor, Herausgeber oder Institution	Jahr ermittelt	Titel
BACK				
871		Wang, Yu; Qiu, Kun-Feng; Müller, Axel; Hou, Zhao-Liang; Zhu, Zhi-Hai; Yu, Hao-Cheng	2021	Machine Learning Prediction of Quartz Forming-Environments
872		Wethington, Niles W.; Pranter, Matthew J.	2018	Stratigraphic architecture of the Mississippian limestone through integrated electrofacies analysis, Kansas and Oklahoma
878		AL Rashid, Q. A.; Abuel-Naga, H. M.; Leong, E.-C.; Lu, Y.; Al Abadi, H.	2018	Experimental-artificial intelligence approach for characterizing electrical resistivity of liners
879		Ashraf Ahmed; Hany Gamal; Salaheldin Elkhatatny; Abdelwahab Ali	2022	Bulk density prediction while drilling vertical complex lithology using artificial intelligence
880		Balen, R.; Cloetingh, S.	1995	Neural network analyses of stress-induced overpressures in the Pannonian Basin
895		Jalloh, Abu Bakarr; Kyuro, Sasaki; Jalloh, Yaguba; Barrie, Abubakarr Karim	2016	Integrating artificial neural networks and geostatistics for optimum 3D geological block reserve estimation: A case study
907		Paykov, Oksana; Hawley, Harmonie	2015	Property-based assessment of soil mineralogy using mineralogy charts
910		Shahbazi, Amin; Monfared, Mehrdad Soleimani; Thiruchelvam, Vinesh; Ka Fei, Thang; Babasafari, Amir Abass	2020	Integration of knowledge-based seismic inversion and sedimentological investigation of a reservoir
913		Thanh, Hung Vo; Sugai, Yuichi	2021	Integrated modelling framework for enhancement history matching in fluvial channel
914		Tian, Miao; Omre, Henning; Xu, Huaimin	2021	Inversion of well logs into lithology classes accounting for spatial dependencies by usi and recurrent neural networks
918		Wang, Pu; Chen, Xiaohong; Wang, Benfeng; Li, Jingye; Dai, Hengchang	2020	An improved method for lithology identification based on a hidden Markov model and
928		Bayat, Hossein; Ebrahimi, Eisa; Ersahin, Sabit; Hepper, Estela N.; Singh, Devendra Narain; Amer, Abdel-mohem Mohamed; Yukselen-Aksoy, Yeliz	2015	Analyzing the effect of various soil properties on the estimation of soil specific surface area
930		Blouin, M.; Caté, A.; Perozzi, L.; Gloaguen, E.	2017	Automated facies prediction in drillholes using machine learning

Quelle: eigene Darstellung

5.3 Ergebnis: Literaturmatrix

In Abbildung 5-2 ist das erste Arbeitsblatt der Excel-Tabelle der Matrix dargestellt, in der die Anzahl der Literaturquellen pro Feld in der Matrix abgebildet ist. Sichtbar ist hier auch, dass jedes Feld mit einem Link hinterlegt ist, der auf die Literaturliste dieses Feldes verweist.

Abbildung 5-2: Anzahl Literatur für die einzelnen Felder der Matrix

geowissenschaftliche Kategorien	Regression - prediction	Regression - forecast	Surrogate model	Classification - binary	Classification - multiple	Dimension reduction	Computer Vision - Erkennung	Computer Vision - Segmentierung	Computer Vision - Generierung	Clustering	Anomaly Detection	Optimization	Other	nicht aus Abstract erkennbar
Remote Sensing	1	0	0	1	0	0	1	1	0	1	1	0	0	3
Hydro	4	1	6	1	1	0	0	0	3	0	1	2	1	1
Seismic	14	0	8	8	1	5	9	12	6	3	2	6	2	5
Petrography and Stratigraphy	22	0	3	10	0	0	8	2	4	4	4	0	0	5
Tectonics / Structural geology	0	0	1	0	0	0	2	5	0	0	0	1	0	1
Erosion and Weathering	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Geochemistry	5	1	4	5	0	0	2	4	2	1	5	1	0	2
Geophysics	7	0	2	2	0	0	1	1	2	0	0	0	0	1
Well logging	10	0	1	2	0	0	1	0	0	1	1	2	2	1
Geotechnics and Mining	3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1
Geomechanics	5	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	1	1	0

Quelle: eigene Darstellung

Die Matrix konzentriert sich auf die für die Schlüsselaktivitäten im StandAV (Kap. 4) hauptsächlich relevanten Kategorien. Literatur, die den geoKAT CK 3.12 bis CK 3.21 zugeordnet waren, wurde wenn möglich, diesen Kategorien ebenfalls zugeordnet und sind so in der Matrix berücksichtigt. Beispielsweise wurden Literaturquellen aus der geoKAT „Geological Hazards“ (CK 3.18) je nach inhaltlicher Ausprägung des Abstracts auch den Kategorien „Hydro“ (CK 3.2) „Tectonics / Structural geology“ (CK 3.5), „Erosion and Weathering“ (CK 3.6), „Geophysics“ (CK 3.8) oder „Geotechnics and Mining“ (CK 3.10) zugewiesen.

6 SWOT-Analyse der KI-Anwendung in den Geowissenschaften mit Blick auf das Standortauswahlverfahren

Im Folgenden werden die Chancen, Risiken, Stärken und Schwächen des Einsatzes von KI in den Geowissenschaften insbesondere mit Blick auf einen potenziellen Einsatz im StandAV betrachtet.

Dabei wird einerseits eine SWOT¹⁵-Analyse der in der Literaturrecherche identifizierten KI-Einsatzgebiete vorgenommen (Kap. 6.1), um die grundsätzliche Eignung der einzelnen KI-Einsatzgebiete für einen Einsatz in den Schlüsselaktivitäten des StandAV generell einordnen zu können.

Zum anderen wird ein Teil der Literatur und der darin beschriebene KI-Einsatz in einer bestimmten geowissenschaftlichen Fragestellung detailliert analysiert (Kap. 6.2). Hierzu wird auf einzelne Felder der Matrix ein Fokus gesetzt, deren Literatur zum Teil nach erster Einschätzung ein Potenzial auf in das StandAV übertragbare Ergebnisse aufweist. Anschließend wird jede Literaturquelle in diesen Feldern analysiert. Ziel der Analyse ist zum einen eine Einordnung des Nutzens der KI-Anwendung für das in der Literatur behandelte geowissenschaftliche Problem und die Herausarbeitung der damit einhergehenden Chancen, Risiken, Stärken sowie Schwächen. Zum anderen wird betrachtet, inwieweit eine Übertragung der in der Literatur dargestellten Lösung in das StandAV möglich bzw. sinnvoll ist.

Schließlich werden die Ergebnisse aus der detaillierten Analyse aggregiert und für die einzelnen geowissenschaftlichen Kategorien und die daraus möglicherweise entstehenden Nutzungsmöglichkeiten des KI-Einsatzes für einzelne Fragestellungen im StandAV abgeleitet (Kap. 6.3).

6.1 Chancen und Risiken des Einsatzes von KI für bestimmte Problemstellungen

Die Bewertung von Chancen und Risiken für den Einsatz von KI-Methoden erfolgt auf der Ebene der KI-Problemstellungen, welche bereits als Gliederungskategorien für die Literatursuche sowie als Spalten für die Literaturmatrix Verwendung finden. Der Vorteil dieser Herangehensweise liegt in der Übertragbarkeit der Ergebnisse auf Arbeiten in anderen, nicht detailliert im Rahmen dieser Studie fokussierten Zellen der Matrix sowie auf zukünftige Einsatzbereiche, welche erst im weiteren Verlauf des StandAV entwickelt und untersucht werden.

In einem ersten Schritt der Analyse wird zunächst ein Katalog von Chancen und Risiken definiert, welcher in einem zweiten Schritt dann auf die KI-Einsatzbereiche angewendet wird.

Aufgrund der Heterogenität der „Other“ Kategorie wurde auf die Bewertung dieser Kategorie verzichtet.

6.1.1 Bewertungsschema

Bewertet werden folgende Punkte:

Chancen/Stärken:

Neue Anwendungen. Der Einsatz von KI-Methoden bietet die Chance, eine völlig neue Anwendung zu realisieren.

Neue Datenquellen. Bestimmte Datenquellen, wie Bilder oder hochdimensionale Datenräume lassen sich nur eingeschränkt manuell auswerten. Selbst wenn eine isolierte Betrachtung dieser Datenquellen teilweise noch möglich ist, überschreitet deren integrierte Betrachtung die Möglichkeiten menschlicher Leistungsfähigkeit. KI-Verfahren überwinden diese Grenze und erlauben so die integrierte Nutzung neuer Datenquellen, die nicht manuell erschlossen werden können.

¹⁵ SWOT: Strengths, Weaknesses, Opportunities, Threats (Stärken, Schwächen, Chancen, Risiken)

Erhöhte Objektivität. Da ein KI-Verfahren als Werkzeug nicht über eine subjektive Vorprägung oder Meinung verfügt, kann eine Chance beim Einsatz dieser Methoden in der Erhöhung der Objektivität von Bewertungen liegen. Hierzu ist jedoch erforderlich, das Modell frei von subjektiven Einflüssen (Bias) des (KI) Entwicklers zu halten. Wir werden im Bereich Risiken näher auf diese Phänomene eingehen.

Besseres Verständnis. Grundsätzlich sind viele der sehr erfolgreichen KI-Anwendungen als Black Box¹⁶-Methoden ausgelegt. Das bedeutet, dass es zunächst nicht möglich ist, nachzuvollziehen, warum z. B. ein Neuronales Netz eine bestimmte Entscheidung trifft. Aktuelle Arbeiten auf dem Gebiet der erklärbaren künstlichen Intelligenz (XAI) zielen jedoch darauf ab, hier Abhilfe zu schaffen. Damit ist es möglich, die Zusammenhänge, welche z. B. in Form der Gewichte¹⁷ eines Neuronalen Netzes vorliegen, zu interpretieren und so Wissen für Experten zu extrahieren. Mithilfe dieser Vorgehensweise kann auch ein besseres Verständnis von Gesetzmäßigkeiten und Zusammenhängen der realen/physikalischen Prozesse erzielt werden.

Reduktion Personalaufwand. Automatisierung bisher manueller Tätigkeiten kann zur Reduktion von Personalaufwand führen. Dies sorgt entweder zu einer Reduktion von Kosten, bei gleichbleibender Bearbeitungszeit, oder zu einer Reduktion der Bearbeitungszeit bei gleichbleibenden Kosten.

Reduktion Rechenzeit. Grundsätzlich erlauben viele der bekannten KI- und ML-Ansätze, nach einer initialen Investition in Rechenzeit für eine Trainingsphase, eine sehr ressourcengünstige Inferenz (Auswertung des gelehnten Modells für ggf. Inputs). Dies ist insbesondere für Echtzeitanwendungen relevant, aber auch immer dann, wenn eine gelernte Funktion häufig aufgerufen werden muss, wie dies bei der Optimierung z. B. für die Zielfunktion der Fall ist.

Risiken/Schwächen:

Fehler. Grundsätzlich kann ein Korrektheitsaussage über ML-Verfahren nur statistisch auf Basis einer Testmenge von zurückgehaltenen Trainingsdaten getroffen werden. Dies bedeutet immer, dass es bei einer tatsächlichen Anwendung des Systems einzelne, negative Ausreißer geben kann.

Extrapolation. Man weiß, dass eine Vielzahl von Verfahren innerhalb des Bereiches ihrer Trainingsgeräte (Interpolation) gut funktionieren. Extrapolation ist hingegen häufig durch zufällige Entscheidungen geprägt, da es hier eben keine Stützpunkte in den Trainingsdaten gibt. Hieraus ergibt sich ein Extrapolationsrisiko. Je besser es möglich ist, zu erkennen, ob das Verfahren gerade extrapoliert, und entsprechend nicht eingesetzt werden kann, je kleiner ist dieses Risiko. Gerade bei komplexen Zustandstrajektorien¹⁸ ist dies aber nicht trivial.

Daten Bias. Den Trainingsdaten kommt die zentrale Rolle bei der Entwicklung von KI-Systemen zu. Ein Ungleichgewicht oder eine bestimmte Ausrichtung des Trainingsdatensatzes können zu einem Daten Bias¹⁹ führen. Ein vieldiskutiertes Beispiel hierfür findet sich in der Domäne der Ge-

¹⁶ Unter Black Box versteht man einen Teil eines Systems, dessen Aufbau und innerer Ablauf nur anhand der Reaktionen auf die eingegebenen Signale erschlossen werden können

¹⁷ Die Stärke der Verbindung der Neuronen im neuronalen Netz untereinander wird durch Gewichte repräsentiert. Je größer/kleiner das Gewicht, desto höher/hemmender der Einfluss des Ausgangsneurons auf das Empfängerneuron

¹⁸ Eine Trajektorie ist in der Physik der Verlauf einer differenzialen Raumkurve, entlang der sich ein Körper oder ein Punkt bewegt

¹⁹ Unter einem Bias versteht man die systematische Verzerrung, die durch einen Fehler aufgrund einer unzureichende Versuchsplanung (z. B. nicht repräsentative Stichprobe) oder bei der Informationsverarbeitung durch Rückgriff auf Heuristiken (Urteilsfehler) entstehen kann

sichtserkennung. Da State of the Art Modelle hierfür vorwiegend mit Bildern Weißer Europäerinnen und Europäern trainiert wurden, sind sie signifikant schlechter darin, People of Colour zu erkennen.

Entwickler Bias. Auch der konkreten Auswahl von Verfahrensparametern kommt in vielen KI-Methoden eine zentrale Rolle zu. Sowohl die Auswahl von betrachteten Inputs als auch von Bewertungsfunktionen haben einen großen Einfluss auf die Entscheidungen von KI-Verfahren. Diese werden durch den Entwickler festgelegt, und können somit zu einem Entwickler Bias führen.

Intransparenz. Da viele ML- und KI-Methoden als Black Box betrachtet werden müssen, besteht grundsätzlich das Risiko, dass Entscheidungen nicht transparent für Expertinnen und Experten sowie letztlich Bürgerinnen und Bürger getroffen werden. Bei diesen Black Box-Verfahren kann die Frage nach dem „Warum“ zunächst nur durch einen statistischen Verweis auf die Datenbasis, welche für ein Training eingesetzt wurde, erfolgen.

Öffentliche Wahrnehmung. In Teilen der Öffentlichkeit sind Verfahren der Künstlichen Intelligenz teilweise mit Vorurteilen belegt. Hierzu zählt z. B. ein genereller Technologieergwohn, die Sorge um den Verlust des Arbeitsplatzes in Folge KI-bedingter Automatisierung, die Bedrohung der Privatsphäre, der Kontrollverlust menschlicher und demokratischer Entscheider. Selbst wenn diese Sorgen unbegründet und nicht auf das StandAV übertragbar sind, besteht das Risiko einer negativen Voreingenommenheit der Öffentlichkeit.

Die Bewertung dieser Chancen und Risiken werden auf Basis der verkürzten Likert-Skala²⁰ bewertet. In der Likert-Skala stehen

- „-“ für „(Das Risiko/Die Chance) trifft überhaupt nicht zu“,
- „-“ für „(Das Risiko/Die Chance) trifft eher nicht zu“,
- „+“ für „(Das Risiko/Die Chance) trifft eher zu“ und
- „++“ für „(Das Risiko/Die Chance) trifft voll und ganz zu“.

²⁰ Die Likert Skala ist benannt nach ihrem Begründer, dem amerikanischen Sozialforscher Rensis Likert. Sie besteht aus einer Abfolge von Aussagen, die auf einer vorgegebenen Antwortskala abstuftend zustimmend oder ablehnend bewertet werden. Im Gegensatz zu Binärfragen ermöglicht die Likert Skala eine gestaffelte Bewertung der Aussagen. Am häufigsten werden fünf- oder siebenstufige Likert-Skalen bei Befragungen genutzt. Die mittlere Stufe bietet hierbei eine neutrale Bewertung der Aussage. Bei der verkürzten Likert-Skala steht diese neutrale Bewertung nicht zur Verfügung

6.1.2 Bewertung der KI-Einsatzbereiche

In Tabelle 6-1 bis Tabelle 6-11 erfolgt die Bewertung der KI-Einsatzbereiche auf Basis des in Kapitel 6.1.1 erläuterten Bewertungsschemas inklusive einer knappen Begründung für die vorgenommene Einordnung.

Tabelle 6-1: Chancen und Risiken: Regression - Prediction

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	--	Regression ohne KI/ML in Statistik lange bekannt
Neue Datenquellen	++	KI-basierte Regression ist insbesondere bei Hochdimensionalen Daten klassischen Modellen überlegen
Erhöhte Objektivität.	-	Wenn Prozess Objektiv gestaltet wird, entfällt die Modellwahl, das hängt aber stark vom Verfahren ab
Besseres Verständnis	++	Hier gibt es eine Reihe von XAI Ansätzen, welche genutzt werden können
Reduktion Personalaufwand	--	Häufig mit konventionellen Modellen vergleichbar
Reduktion Rechenzeit	--	Häufig mit konventionellen Modellen vergleichbar
Risiko		
Fehler	-	Gefahr besteht. Regression prinzipiell etwas weniger komplex als z. B. Surrogate. Statistische Bewertung grundsätzlich gut möglich
Extrapolation	-	Risiko besteht, Extrapolation kann aber vergleichsweise einfach erkannt werden
Daten Bias	++	Es werden ausschließlich ML Verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	+	Ohne XAI ist das Risiko groß, und selbst dann stehen diese Methoden noch am Anfang
Öffentliche Wahrnehmung	--	Methodische Vergleichbarkeit mit allgemein anerkannten Verfahren der Statistik wie z. B. Lineare Regression. Fließender Übergang

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-2: Chancen und Risiken: Regression - Forecast

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	--	Forecast ohne KI/ML in Statistik lange bekannt
Neue Datenquellen	++	KI-basierte Regression ist insbesondere bei hochdimensionalen Daten klassischen Modellen überlegen
Erhöhte Objektivität.	-	Wenn Prozess objektiv gestaltet wird, entfällt die Modellwahl, das hängt aber stark vom Verfahren ab
Besseres Verständnis	+	Hier gibt es eine Reihe von XAI Ansätzen, welche genutzt werden können. XAI für Forecast ist komplex
Reduktion Personalaufwand	--	Häufig mit konventionellen Modellen vergleichbar
Reduktion Rechenzeit	--	Häufig mit konventionellen Modellen vergleichbar
Risiko		
Fehler	++	Vorhersage von zukünftigen Entwicklungen anfällig bei geänderten Randbedingungen. Extrem seltene Ereignisse (z. B. Flut, Starkregen, Vulkanismus) immer unterrepräsentiert in Trainings- und Testdaten
Extrapolation	+	Zeitliche Entwicklung kann immer mit unvorhergesehenen Trends einhergehen. Erkennung möglich
Daten Bias	++	Es werden ausschließlich ML verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	+	Teilweise Black Box-Verfahren. Aber XAI möglich
Öffentliche Wahrnehmung	-	Methodische Vergleichbarkeit mit Verfahren der Statistik wie z. B. Trend mit Moving Average. Fließender Übergang

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-3: Chancen und Risiken: Surrogate Model

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	+	Erlaubt Änderung der Input -Output Beziehung (Inversion) Basis für z. B. schnelle Optimierung
Neue Datenquellen	--	Datenquellen entsprechen denen des originären Modelles
Erhöhte Objektivität	--	Objektivität vergleichbar mit der des originären Modelles
Besseres Verständnis	-	Originäres Modell bereits auf Basis verstandener physikalischer Zusammenhänge. U. a. können emergente Zusammenhänge extrahiert werden
Reduktion Personalaufwand	+	Wenn Betrieb des Modells Aufwand erzeugt. Zudem: Wartezeiten zwischen Aufrufen reduziert
Reduktion Rechenzeit	++	Zentraler Zweck von Surrogate Modellen
Risiko		
Fehler	+	Da originäres Modell approximiert wird, Fehler möglich. Bewertung der „Sicherheit“ einer Ausgabe aber möglich. Vergleich mit Modell oft beliebig möglich
Extrapolation	++	Komplexe Zusammenhänge auf Basis von Zeitreihen. Extrapolation nicht trivial zu erkennen. Verfahren wie Novelty Detection möglich
Daten Bias	-	Datenbasis aus einem anderen Modell generiert. Inputs sind in gewissen Grenzen wählbar
Entwickler Bias	-	Originäres Modell erlaubt Validierung mit „neuen“ Daten, durch Dritte
Intransparenz	--	Originäres Modell kann als Vergleich herangezogen werden, dies ist transparent
Öffentliche Wahrnehmung	--	Approximation von klassischem Modell

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-4: Chancen und Risiken: Dimension Reduction

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	--	Erleichtert vor allem das Erfassen hochdimensionaler Daten durch den Menschen
Neue Datenquellen	++	Daten werden für menschliche Analyse greifbarer. Teilweise auch als Vorverarbeitung für weitergehende Verfahren
Erhöhte Objektivität.	+	Bei Reduktion z. B. Bilder zu 2D werden Unterschiede und Kategorien objektiviert
Besseres Verständnis	++	Zusammenhänge können in z. B. 2D besser verstanden werden
Reduktion Personalaufwand	+	Auswertungen können ggf. mit weniger Personal erfolgen
Reduktion Rechenzeit	+	Reduzierter Datenraum kann ggf. mit geringerem Rechenaufwand weiterverarbeitet werden
Risiko		
Fehler	+	Verlust relevanter Informationen prinzipiell möglich (auch wenn Verfahren genau das verhindern wollen)
Extrapolation	--	Nicht relevant
Daten Bias	+	Eine Verzerrung der Datengrundlage kann zu einer Reduktion führen, die Wichtige Informationen verwirft
Entwickler Bias	++	Parameter der Verfahren können beeinflusst werden, um Reduktion zu beeinflussen. Wenn ein Entwickler Sachverhalte als äquivalent einschätzt, kann er hierdurch einen Bias einführen
Intransparenz	+	Teilweise Black Box-Verfahren. Wenn Back Box, dann intransparent. Aber: Vor allem zur vor Verarbeitung, daher Entscheidung erst nächster Schritt
Öffentliche Wahrnehmung	-	Methodische Vergleichbarkeit mit Verfahren der Statistik

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-5: Chancen und Risiken: Classification

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	-	Trainingsdaten mit Label erforderlich, z. B. durch Experten. Nur was ein Experte als Klasse definiert, kann klassifiziert werden
Neue Datenquellen	++	Jede Datenquelle möglich
Erhöhte Objektivität.	+	Es kann manuelle Kategorisierung durch subjektiven Experten ersetzen. Entscheidungsbasis immer ganze Datenbasis
Besseres Verständnis	++	XAI Analysen möglich und gut untersucht
Reduktion Personalaufwand	++	Es kann manuelle Kategorisierung durch Experten ersetzen
Reduktion Rechenzeit	-	Training ggf. rechenintensiv
Risiko		
Fehler	-	Statistische Bewertung gut möglich. Aber ebenso Ausreißer
Extrapolation	-	Prinzipiell ein Problem, kann aber über Ähnlichkeit zu Trainingsdaten erkannt werden
Daten Bias	++	Es werden ausschließlich ML Verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	+	Teilweise Black Box-Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	-	Vergleichbarkeit mit klassischen Algorithmen

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-6: Chancen und Risiken: Computer Vision - Erkennung

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	-	Trainingsdaten mit Label erforderlich, z. B. durch Experten. Nur was ein Experte als Klasse definiert, kann klassifiziert werden
Neue Datenquellen	++	Auch große Archive als Trainingsdaten. Auch hochauflösende Bilder
Erhöhte Objektivität.	++	Es kann manuelle Kategorisierung durch subjektiven Experten ersetzen. Entscheidungsbasis immer ganze Datenbasis
Besseres Verständnis	++	XAI Analysen möglich und gut untersucht
Reduktion Personalaufwand	++	Es kann manuelle Auswertung durch Experten ersetzen
Reduktion Rechenzeit	--	Training sehr rechenintensiv
Risiko		
Fehler	+	Statistische Bewertung gut möglich. Aber ebenso Ausreißer. Genauigkeit insgesamt niedriger als bei z. B. allgemeiner Klassifikation
Extrapolation	+	Prinzipiell ein Problem, kann aber (aufwendig) über Ähnlichkeit zu Trainingsdaten erkannt werden
Daten Bias	++	Es werden ausschließlich ML Verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	++	Vor allem Black Box-Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	+	Resultiert aus Intransparenz. Neuartige Verfahren

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-7: Chancen und Risiken: Computer Vision - Segmentierung

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	+	Erlaubt gezielte Analyse bestimmter Segmente
Neue Datenquellen	++	Auch große Archive als Trainingsdaten. Auch hochauflösende Bilder
Erhöhte Objektivität.	+	Es kann teilweise manuelle Segmentierung durch subjektiven Experten ersetzen. Entscheidungsbasis immer ganze Datenbasis
Besseres Verständnis	++	Segmente verbessern Verständnis der Daten
Reduktion Personalaufwand	+	Es kann teilweise manuelle Segmentierung durch Experten ersetzen
Reduktion Rechenzeit	--	Training sehr rechenintensiv
Risiko		
Fehler	++	Statistische Bewertung eingeschränkt möglich. Eigene Metriken erforderlich
Extrapolation	++	Bedingt festzustellen
Daten Bias	+	Es werden vorwiegend ML-Verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	+	Teilweise Black Box-Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	+	Resultiert aus Intransparenz. Neuartige Verfahren

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-8: Chancen und Risiken: Computer Vision - Generierung

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	++	Indirekte Messungen von Bilddaten werden möglich
Neue Datenquellen	++	Auch große Archive als Trainingsdaten. Auch hochauflösende Bilder
Erhöhte Objektivität.	--	Aufgaben typischerweise nicht mit manueller Tätigkeit vergleichbar
Besseres Verständnis	--	XAI wenig verbreitet
Reduktion Personalaufwand	--	Aufgaben typischerweise nicht mit manueller Tätigkeit vergleichbar
Reduktion Rechenzeit	--	Training sehr rechenintensiv
Risiko		
Fehler	++	Statistische Bewertung eingeschränkt möglich. Eigene Metriken erforderlich
Extrapolation	++	Bedingt festzustellen
Daten Bias	++	Es werden ausschließlich ML Verfahren genutzt
Entwickler Bias	++	Vielzahl von Verfahrens-Parametern und -Architekturen stehen zur Auswahl
Intransparenz	++	Vor allem Black Box-Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	++	Resultiert aus Intransparenz. Neuartige Verfahren. Entscheidung auf Basis von generierten Daten

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-9: Chancen und Risiken: Clustering

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	++	In vielen Bereichen ist das Bereitstellen von Labels ²¹ durch Experten schwierig oder unmöglich. Clustering benötigt diesen Input nicht (Unsupervised) und kann so neue Anwendungen ermöglichen.
Neue Datenquellen	++	Jede Datenquelle möglich
Erhöhte Objektivität.	-	Aufgaben eingeschränkt mit manueller Tätigkeit vergleichbar
Besseres Verständnis	+	Finden von Zusammenhängen und Kategorien möglich
Reduktion Personalaufwand	-	Aufgaben eingeschränkt mit manueller Tätigkeit vergleichbar
Reduktion Rechenzeit	-	Teilweise rechenintensiv
Risiko		
Fehler	-	Eher Qualitative Aussagen, daher einzelne Fehler weniger relevant
Extrapolation	--	Unsupervised
Daten Bias	--	Unsupervised
Entwickler Bias	--	Unsupervised
Intransparenz	--	Hauptsächlich Deterministische Algorithmen
Öffentliche Wahrnehmung	--	Hauptsächlich Deterministische Algorithmen

Quelle: eigene Darstellung

21 Labels sind Einordnungsmerkmale, die eine Gruppierung von Daten mit gleichen Merkmalen ermöglichen

Tabelle 6-10: Chancen und Risiken: Anomaly Detection

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	++	In vielen Bereichen ist das Bereitstellen von Labels für unnormale Daten schwierig oder unmöglich. In diesen Fällen erlaubt Anomaly Detection neue Anwendungen.
Neue Datenquellen	++	Jede Datenquelle möglich
Erhöhte Objektivität.	+	Es kann teilweise manuelle Auswertungen durch subjektiven Experten ersetzen. Entscheidungsbasis immer ganze Datenbasis
Besseres Verständnis	+	Indirekte Definition des „Normalen“. XAI möglich
Reduktion Personalaufwand	-	Es kann teilweise manuelle Auswertungen durch subjektiven Experten ersetzen
Reduktion Rechenzeit	--	Training sehr rechenintensiv
Risiko		
Fehler	-	Falsche Alarme möglich. Aber Kontrolle durch Experten möglich
Extrapolation	--	Unsupervised
Daten Bias	+	Auswahl des Datensatzes prägt, was als „normal“ verstanden wird
Entwickler Bias	--	Unsupervised
Intransparenz	+	Teilweise Black Box-Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	+	Resultiert aus Intransparenz. Neuartige Verfahren

Quelle: eigene Darstellung

Tabelle 6-11: Chancen und Risiken: Optimization

Chance	Bewertung	Begründung
Neue Anwendungen	+	Optimierung ist klassisches Verfahren
Neue Datenquellen	--	Optimierung ist klassisches Verfahren
Erhöhte Objektivität.	+	Aufgaben eingeschränkt mit manueller Tätigkeit vergleichbar. Optimierung kann manueller Auswahl gegenüberstehen
Besseres Verständnis	--	Nicht zu erwarten
Reduktion Personalaufwand	-	Aufgaben eingeschränkt mit manueller Tätigkeit vergleichbar
Reduktion Rechenzeit	--	Teilweise sehr rechenintensiv
Risiko		
Fehler	-	Bei heuristischen Verfahren Ausreißer möglich. Exakte Verfahren auch möglich
Extrapolation	--	Irrelevant
Daten Bias	--	Irrelevant
Entwickler Bias	-	Einfluss im Wesentlichen durch Definition der Zielfunktion
Intransparenz	-	Verfahren transparent, oft deterministische oder heuristische Verfahren
Öffentliche Wahrnehmung	--	Optimierung ist klassisches Verfahren

Quelle: eigene Darstellung

6.2 Bewertung konkreter Einsatzmöglichkeiten von KI in Bezug auf einzelne Schlüsselaktivitäten im Standortauswahlverfahren

Hier erfolgt eine exemplarische Bewertung einzelner Felder in der Matrix, d. h. einer konkreten Kombination eines KI-Einsatzbereichs im Bereich einer geowissenschaftlichen Kategorie anhand der für diese Kombination in der Literaturmatrix hinterlegten Literatur. Dabei wird auch auf die Übertragbarkeit, der in der Literatur diskutierten KI-Anwendung auf die Standortauswahl eingegangen.

6.2.1 Fokussierung auf Fallbeispiele

Zur Auswahl einzelner Felder in der Matrix wurde wie folgt vorgegangen:

Zunächst wurden die einzelnen Tätigkeiten und Fragestellungen innerhalb der Schlüsselaktivitäten im StandAV identifiziert (im Folgenden „Aufgaben“ genannt) und den in unserer Literaturdatenbank verwendeten Kategorien zugeordnet (siehe Matrix Blatt „Schlüsselaktivitäten“). Die geowissenschaftlichen Kategorien, bei denen Aufgaben am häufigsten verschiedenen Schlüsselaktivitäten zugeordnet werden konnten und dementsprechend die Wahrscheinlichkeit zur Nutzung von KI-Anwendungen am höchsten ist, sind

- a) CK 3.2 Hydro
- b) CK 3.4 Petrography und Stratigraphy
- c) CK 3.7 Geochemistry

- d) CK 3.10 Geotechnics and Mining
- e) CK 3.11 Geomechanics

Innerhalb dieser fünf Kategorien (Zeile in der Matrix) wurde anschließend jeweils ein KI-Einsatzbereich (Spalte in der Matrix) ausgewählt. Bei der Auswahl der einzelnen Felder wurde zum einen darauf geachtet, dass ein möglichst breites Spektrum an verschiedenen KI-Einsatzbereichen (Spalten in der Matrix) betrachtet werden kann und dass gleichzeitig eine möglichst hohe Anzahl an Literatur im jeweiligen Feld vorhanden ist, die für das StandAV relevant sein könnte. Zu diesem Zweck war es notwendig, eine Vorbewertung der vorhandenen Literatur in allen fünf geowissenschaftlichen Kategorien im Hinblick auf ihre Relevanz für das StandAV vorzunehmen. Diese Vorbewertung erfolgte ausschließlich cursorisch auf Basis der Abstracts und stellt keine abschließende Einordnung der Literatur dar. Der Literaturlatenbank wurde hierfür ein Feld hinzugefügt, in das die Relevanz der Quelle für das StandAV über einen einfachen numerischen Wert eingeordnet werden konnte. Bewertet wurden die Quellen mit „1“ für „keine Relevanz“ bis „5“ für „hohe Relevanz“.

Mittels eines Scripts wurden die Quellen, die mit 4 oder 5 bewertet wurden und damit eine wahrscheinliche bis sehr wahrscheinliche Relevanz für das StandAV aufweisen können, in eine Zählmatrix übertragen (siehe Tabelle 6-12):

Tabelle 6-12: Verteilung der Quellen mit wahrscheinlicher oder sehr wahrscheinlicher Relevanz für das StandAV und Kennzeichnung des Fokus (gelb)

	prediction	forecast	Surrogate model	Classification	Dimension reduction	Computer Vision	Erkennung	Segmentierung	Generierung	Clustering	Anomaly Detection	Optimization
Remote Sensing	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
Hydro	2	1	2	1	1	0	0	0	2	0	0	5
Seismic	4	0	0	0	0	0	1	2	1	1	0	0
Petrography and Stratigraphy	7	0	0	1	0	0	1	0	3	0	0	0
Tectonics / Structural Geology	0	0	0	0	0	0	1	2	0	0	0	1
Erosion and Weathering	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Geochemistry	2	0	2	1	0	0	0	0	2	0	0	2
Geophysics	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
Well logging	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Geotechnics and Mining	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Geomechanics	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Quelle: Eigene Darstellung

Da in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geotechnics and Mining“ nur eine Quelle mit wahrscheinlicher Relevanz mit einer KI-Kategorie „prediction“ eingeordnet wurde und auch bei „Geomechanics“ die Auswahl nach der Vorbewertung auf die KI-Generierung „prediction“ fiel, wurde in der Kategorie „Petrography and Stratigraphy“ das Feld mit der KI-Kategorie „Generierung“ statt des

Feldes mit der höchsten Anzahl von Quellen in KI-Kategorie „prediction“ ausgewählt, um ein hohes Spektrum verschiedener KI-Kategorien abzudecken.

Da die kursorische Vorbewertung der Quellen nicht ausschließt, dass sich unter den niedrig bewerteten Quellen ein Dokument mit Relevanz für das StandAV verbirgt, werden alle Quellen dieser Felder erneut betrachtet und beginnend mit den hoch vorgewerteten Quellen in Bezug auf die tatsächliche Relevanz beurteilt. Entsprechend werden die Quellen in folgenden Feldern der Matrix (siehe Tabelle 6-13) in den nächsten Unterkapiteln als Fallbeispiele aufgeführt, in Bezug auf eine mögliche Relevanz für den Kontext StandAV eingeordnet und die beschriebenen KI-Einsatzbereiche bewertet.

Tabelle 6-13: Anzahl bisher ermittelter Literatur pro Feld in der Matrix und Kennzeichnung des Fokus (gelb)

	prediction	forecast	Surrogate model	Classification	Dimension reduction	Coabputer Vision	Erkennung	Segmentierung	Generierung	Clustering	Anomaly Detection	Optimization
Remote Sensing	1	0	0	1	0	0	1	1	0	1	1	0
Hydro	4	1	6	1	1	0	0	0	2	0	1	1
Seismic	14	0	8	8	1	5	9	12	6	3	2	6
Petrographie und Stratigraphie	22	0	3	10	0	0	8	2	4	4	4	0
Tectonics / Structural Geology	0	0	0	0	0	0	2	5	0	0	0	2
Erosion and Weathering	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Geochemistry	5	1	2	5	0	0	2	4	2	1	5	2
Geophysics	7	0	2	2	0	0	1	1	2	0	0	0
Well logging	10	0	1	2	0	0	1	0	0	1	1	2
Geotechnics and Mining	3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Geomechanics	5	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0	1

Quelle: Eigene Darstellung

Da die Einordnung in die Kategorien auf Basis der Abstracts erfolgt war, kam es bei näherer Betrachtung der Dokumente vereinzelt zu Verschiebungen in andere Kategorien. Am deutlichsten betroffen waren Dokumente, die in der geowissenschaftlichen Kategorie „Hydro“ im Vorfeld in die KI-Kategorie „Optimization“ eingeordnet worden waren. Von den fünf dort zunächst eingeordneten Dokumenten mussten zwei in die KI-Kategorie „Surrogate Model“, eins in „Segmentierung“ und ein weiteres in „Regression“ verschoben werden. Damit verblieb in diesem Feld nur noch ein einzelnes Dokument (siehe Kapitel 6.2.3).

Um auch in der Kategorie „Hydro“ eine ausreichende Menge an Dokumenten betrachten zu können, wurde entschieden, neben dem Feld „Optimization“ zusätzlich die Dokumente der KI-Kategorie „Surrogate Model“ zu betrachten (siehe Kapitel CK 4.2).

6.2.2 Bewertungsschema

Die Quellen in den unter Kapitel 6.2.1 ausgewählten Feldern beschreiben eine KI-Anwendung zur Lösung einer Problemstellung, die einen Bezug zu einer geowissenschaftlichen Kategorie hat. Zu ermitteln ist nun, inwieweit diese Lösung in einer Schlüsselaktivität des StandAV eingesetzt werden könnte und wie ein solcher Einsatz insbesondere im Hinblick auf mögliche Risiken und Schwächen bewertet werden muss.

Vor diesem Hintergrund wurde ein Bewertungsschema entwickelt, das Bewertungsfragen enthält, die auf Basis der verkürzten Likert-Skala bewertet werden. In der Likert-Skala stehen

- „-“ für „überhaupt nicht günstig“,
- „-“ für „eher nicht günstig“,
- „+“ für „eher günstig“ und
- „++“ für „sehr günstig“

Als Bewertungsfragen wurden Fragen ausgewählt, anhand derer eine eindeutige Aussage

- zu Größe, Verfügbarkeit und Güte der verwendeten Datengrundlage,
- zum technologischen Reifegrad,
- zur Nachvollziehbarkeit und
- zur speziellen Relevanz für das StandAV

getroffen werden können. Bei der Bewertung wurde unterschieden, aus welcher Blickrichtung die Bewertung erfolgte: Zunächst wird eine übergeordnete Sichtweise vorgenommen, bei der der Nutzen der Anwendung von KI-Methoden für die Fragestellung des in der Literaturquelle beschriebenen Verfahrens eingeordnet wird. Dazu zählen die Bewertung der Größe der Datengrundlage, der technologische Reifegrad, die allgemeine Anwendbarkeit und die Nachvollziehbarkeit.

Anschließend wird die Relevanz der in der Literatur beschriebenen Lösung mit Blick auf die speziellen geowissenschaftlichen Fragen und Problemstellungen im StandAV eingeschätzt. Zur Einordnung wurden Fragen zur Erfüllung des wissenschaftlichen Standards und Impacts, zum Vergleich der geologischen Datengrundlage, zur Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung und zur Übertragbarkeit der Methode formuliert.

Dabei gibt bei beiden Bewertungstabellen der jeweils fettgedruckte Punkt an, welche Begründung, im Falle von widersprüchlich aufgeführten Argumenten, für die Bewertung nach Likert ausschlaggebend ist. Gesetzt es werden ausschließlich unterstützenden bzw. entkräftenden Begründungen angeführt, die für eine positive bzw. negative Bewertung angeführt sind, ist eine Hervorhebung in Form eines Fettdruckes nicht vorgesehen.

Abschließend fasst das Fazit die Bewertung mit Blick auf das StandAV zusammen. Dabei werden die in der Literatur beschriebenen Lösungen, die aus Sicht der KI-Methode mit „gut“ bewertet werden können, aber keine Relevanz aus geowissenschaftlicher Sicht für das StandAV haben, ausgeschlossen.

Um ein möglichst einheitliches Bewertungsschema zu erhalten, wurden den Fragen Unterkriterien zugeordnet, anhand derer die Bewertung vorgenommen werden konnte. Die Unterkriterien und die zugeordneten Bewertungssignale nach Likert sind im Folgenden in den Tabellen dargestellt.

Wie groß, wie gut und wie verfügbar ist die **Datengrundlage**?

Eine möglichst große Datengrundlage ist entscheidend für eine hohe Genauigkeit der Ergebnisse aus einer KI-Anwendung. Wenn die verfügbare Datengrundlage klein ist, werden zusätzlich simulierte Daten eingespeist.

Tabelle 6-14: Unterkriterien zur Bewertung der Datengrundlage

Datengrundlage	
Zusätzliche Daten wurden simuliert:	-
• Simulationsprozess ist transparent:	+
• Simulationsprozess ist nicht transparent:	-
Echte Daten wurden benutzt:	+
Daten sind frei verfügbar, Quelle der Daten ist angegeben:	+

Quelle: eigene Darstellung

Ist der technologische **Reifegrad** ausreichend?

Mit dem technologischen Reifegrad der KI-Anwendung steigt auch die Verlässlichkeit der Ergebnisse. Zum technologischen Reifegrad zählt neben dem Stand der Anwendungsreife der KI-Anwendung somit auch die Genauigkeit der damit erzielten Ergebnisse, welche am besten im Vergleich mit anderen Verfahren bewertet werden können. Als objektive Bewertung dabei stellt man sich die Frage, ob der aktuelle Forschungsstand so weit ist, dass diese Technik mit anderen Techniken in Konkurrenz verglichen werden kann. In Fällen, wo die Technik noch keine erwähnenswerte Konkurrenz besitzt, kann man davon ausgehen, dass dort noch weitere Algorithmen erforscht werden müssen, um die Ergebnisse objektiver bewerten zu können, und dass der Reifegrad noch nicht ausreichend ausgeprägt ist.

Tabelle 6-15: Unterkriterien zur Bewertung des technologischen Reifegrads

Technologischer Reifegrad	
Vergleichstechniken sind allgemein vorhanden (allgemeines KI-Wissen):	+
• Diese Techniken im Paper zitiert:	+
• Techniken nicht im Paper zitiert:	-
Technik allgemein erforscht	
• Ja, bekannt, es gibt viele Anwendungsbeispiele in anderen Domänen:	+
• Novum:	-
Andere Techniken in dem Paper als Benchmark benutzt	
• Ja:	+
• Sonst:	-

Quelle: eigene Darstellung

Wie gut ist die **Nachvollziehbarkeit** der KI-Anwendung?

Für den Transparenz-Anspruch des StandAV ist die Nachvollziehbarkeit der Ergebnisse sowie des Weges dorthin gerade bei der Verwendung von KI von großer Bedeutung. Dies spielt eine umso größere Rolle, je größer die Übertragbarkeit der Anwendung für eine Schlüsselaktivität im StandAV ist.

Tabelle 6-16: Unterkriterien zur Bewertung der Nachvollziehbarkeit

Nachvollziehbarkeit	
Deterministischer Algorithmus:	+
Polynomiales Problem:	+
Positives oder negatives Ergebnis erklärbar (mathematisch) und reproduzierbar auch auf anderen Instanzen: Tabelle 6-16 listet Unterkriterien zur Bewertung der Nachvollziehbarkeit auf	+
Black Box-Verfahren:	- -
Neue Technik, wenig Vergleich:	-
Komplexität des Verfahrens	
• Hoch:	-
• Gering:	+

Quelle: eigene Darstellung

Wie **relevant** ist die beschriebene Lösung für Fragestellungen im **StandAV** aus geowissenschaftlicher Sicht?

Um einordnen zu können, inwieweit die jeweils beschriebene Lösung auch im StandAV zur Anwendung kommen kann, muss der wissenschaftliche Standard der Literaturquelle aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet, ein Vergleich der verwendeten mit der im StandAV vorhandenen Datengrundlage und Fragestellung angestellt sowie die Übertragbarkeit der Methode betrachtet werden. Im Einzelnen wurden die Unterkriterien wie folgt nach Likert bewertet:

Tabelle 6-17: Unterkriterien zur Einschätzung der Relevanz für das StandAV**Einschätzung der Relevanz für das StandAV**

Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact aus geowissenschaftlicher Sicht	
Die Veröffentlichung erfüllt die qualitativen Standards für eine Verwendung im StandAV. Dabei wird auch der wissenschaftliche Impact, wie die Reputation der Fachzeitschrift und/oder der Zitationsindex, der Studie für ihr jeweiliges Feld versucht zu berücksichtigen	++
Kleine Abstufungen der oben genannten Bedingungen. Aufbau und Erklärungen/Vorgehen und Text sind aber noch gut nachvollziehbar, sodass eine mögliche Übertragung in das StandAV bewertet werden kann	+
Für die Einschätzung einer möglichen Übertragung in das StandAV sind einzelne geowissenschaftliche Details zu unklar. Reputation der Studie nicht einsehbar	-
Für eine Verwendung im StandAV sind die geowissenschaftlichen Zusammenhänge nicht eindeutig genug beschrieben. Reputation der Studie nicht einsehbar oder gering	--
Vergleich der geologischen Datengrundlage	
Die geologischen Realdaten entsprechen den im StandAV relevanten Wirtsgesteinen bzw. deren Gesteinseigenschaften und die Größe des Datensatzes lässt eine valide wissenschaftliche Einschätzung zu	++
Kleine Abstufungen der oben genannten Bedingungen	+
Die Größe des Datensatzes (z. B. ausschließliche Anwendung von Laborstandards) und/oder die Qualität der verwendeten Daten machen eine Einschätzung schwer und/oder unterscheiden sich zu sehr von den für das StandAV relevanten Gesteinen bzw. Gesteinseigenschaften	-
Deutliche Abweichungen der oben genannten Bedingungen. Daten wurden künstlich erzeugt und haben keine Deckungsgleichheit mit den für das StandAV relevanten Wirtsgesteinen bzw. deren Gesteinseigenschaften. Abweichungen machen eine Einschätzung zur Relevanz schwer ersichtlich	--
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung mit Fragestellungen des StandAV	
Die adressierte geowissenschaftliche Problematik deckt sich eindeutig mit den zu erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV Darüber hinaus wird die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet	++
Die adressierte geowissenschaftlichen Problematik hat eine große Relevanz bei den zu erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird jedoch nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist dennoch ersichtlich und lässt einen Vergleich zu	+
Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist darüber hinaus zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden Nichtsdestotrotz kann die adressierte geowissenschaftlichen Problematik bei den zu erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV durchaus als relevant angesehen werden	-
Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist darüber hinaus zum jetzigen Zeitpunkt nicht ersichtlich/nur schwer vorstellbar Trotz gegebener Bedeutung der adressierten geowissenschaftlichen Problematik ist kein Vergleich möglich	--
Übertragbarkeit der Methode	
Die in der Studie vorgestellte Methode ist auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen des StandAV problemlos anwendbar	++
Das Vorgehen und der Aufbau müssen nur geringfügig angepasst werden, um auf die erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen des StandAV angewendet werden zu können	+
Zur Anpassung sind größere Veränderungen an der Methode notwendig	-
Auf Grund der bereits mangelhaften Erfüllung der Unterkriterien ist eine Übertragbarkeit und Anwendung der Methode schwer oder gar nicht vorstellbar	--

Quelle: eigene Darstellung

6.2.3 Anwendung von KI für „Optimization“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Hydro“

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit „Optimierung“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Hydro“:

- Hou et al. (2021): Hybrid homotopy-PSO global searching approach with multi-kernel extreme learning machine for efficient source identification of DNAPL-polluted aquifer

6.2.3.1 Hou et al. (2021) Hybrid homotopy-PSO global searching approach with multikernel extreme learning machine for efficient source identification of DNAPL-polluted aquifer

Im Folgenden wird die geowissenschaftliche Motivation der Quelle Hou et al. (2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Bei einer Grundwasserverunreinigung mit DNAPL²²-Stoffen (dense non aqueous phase liquid) ist es wichtig, die Quelle dieser Verunreinigung und die Transportwege via Grundwasser zu identifizieren (Groundwater pollution source identification). Die mangelnden Kenntnisse über die strukturellen Merkmale und die hydrogeologischen Eigenschaften des Untergrundes haben zur Folge, dass Simulationsrechnungen große Fehlerspannen aufweisen können. Daher wird in der klassischen numerischen Modellierung eine inverse Lösung des Problems eingesetzt: Anhand festgestellter Kontaminationen im Zielort und der Aquifereigenschaften²³ wird in einem Mehrphasenströmungssimulationsmodell der Ort der Schadstoffquelle identifiziert. Dabei werden das Modell bzw. die Modellparameter so lange iterativ angepasst (Modellrealisierungen), bis der Vergleich zwischen bekannten Messwerten (gemessenem Strömungszustand wie Druckwasserhöhe an Beobachtungsbohrungen) und den entsprechenden Modellgrößen wie hydraulische Leitfähigkeit oder Porosität eine akzeptable Übereinstimmung aufweist.

In der Studie wird der Fall einer Mehrphasenströmung untersucht und dafür zunächst ein numerisches Modell aufgebaut: ein nicht mit Wasser vermischbarer Schadstoff Chlorbenzol gelangt in sehr kurzer Zeit in den Grundwasserleiter und diffundiert dann langsam durch den Porenraum entsprechend den Transportbedingungen, welche durch Parameter wie Porosität, Permeabilität oder Grundwasserfließrichtung bestimmt werden. Die Quelle des DNAPL-Eintrages ist dabei unbekannt und wird zunächst mit Hilfe des klassischen inversen Ansatzes in dem numerischen Modell ermittelt.

²² Dense non aqueous phase liquid: wasserunlösliche Flüssigkeit mit einer größeren Dichte als Wasser, dabei liegen nichtmischbare Flüssigkeiten in deutlich voneinander getrennten Phasen übereinander. Die DNAPL sinken unter den Grundwasserspiegel, wenn sie in großen Mengen freigesetzt werden.
(https://en.wikipedia.org/wiki/Dense_non-aqueous_phase_liquid)

²³ Ein Aquifer (auch Grundwasserleiter), ehemals auch als Grundwasserhorizont oder Grundwasserträger bezeichnet, ist ein Gesteinskörper mit Hohlräumen, der zur Leitung von Grundwasser geeignet ist.
(<https://www.geothermie.de/bibliothek/lexikon-der-geothermie/a/aquifer.html>)

Für die Suche der lokalen Position der Verunreinigung durch DNAPL (Chlorbensol) wird dann statt eines numerischen Modells ein hybrider PSO (Particle Swarm Optimization) Algorithmus verwendet. Mit dem Algorithmus wird die physikalische Entfernung zu der Quelle der Verunreinigung minimiert. Dabei befinden sich die gemessenen Daten an der entsprechenden physikalischen Position in einem abstrakten Suchraum. Die Partikel des PSO-Algorithmus sind eine Koordinate in dem abstrakten Suchraum mit der zugehörigen physikalischen Position. Das heißt: zu jeder physikalischen Position gehört eine Menge an Parametern beziehungsweise Messdaten, die als Partikel bezeichnet wird. Die „Güte“ oder Vorteilhaftigkeit der abstrakten Position im Parameterraum hängt von der Entfernung der zugehörigen physikalischen Position zu der physikalischen Position der Verunreinigungsquelle ab.

Da eine übliche Umsetzung des PSO bei diesem Problem auf mehrere Probleme trifft, wurde ein an das Problem adaptierter PSO-Algorithmus verwendet. Dank der Anwendung des hybriden PSO konnte der relative Fehler bei der Ermittlung der lokalen Position einer Verunreinigung um mehr als die Hälfte reduziert werden.

Bewertung Hou et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-18: Bewertung der angewandten KI-Methode in (Hou et al. 2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Case study wurde modelliert, Modellierung pedantisch erklärt
technologischer Reifegrad	++	PSO ist weitestgehend erforscht Viele Techniken als Vergleich erwähnt
Nachvollziehbarkeit	++	Heuristisches Verfahren PSO ist weitestgehend erforscht und dadurch transparent Algorithmus sehr gut erklärbar

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-19: Relevanz von (Hou et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Computer & Geosciences) mit hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	-	Realdaten werden verwendet Valide Größe des Datensatzes Daten (DNAPL) entsprechen nicht dem geochemischen Verhalten des im StandAV relevanten Schadstofftransports (Radionuklide)
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	-	Deckungsgleichheit in der geowissenschaftlichen Grundproblematik gegeben (Schadstofftransport, Mehrphasenströmung) Grundproblematik mit hoher Bedeutung im StandAV Deutliche Abweichung von der Realproblematik im StandAV im Ausgangsszenario und der Simulation des geologischen Settings bei der geowissenschaftlichen Anwendung
Übertragbarkeit der Methode	+	Übertragbarkeit unter Anpassung des Ausgangsszenarios und der Simulation/Modellierung (inverse zu forward) auf das StandAV generell vorstellbar, wenn die Methode auf die im StandAV

Bewertung	Begründung
	relevanten Schadstoffe und ihrem geochemischen Verhalten anwendbar ist

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Quelle (Hou et al. 2021) kann trotz der fehlenden Deckungsgleichheit in der geowissenschaftlichen Anwendung bzw. geologischen Simulation und dem unterschiedlichen geochemischen Verhalten der verwendeten Daten als relevant eingeschätzt werden. Die hier behandelte geowissenschaftliche Fragestellung ist auch im StandAV von hoher Bedeutung. Für eine Übertragbarkeit auf Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV ist jedoch eine zielgerichtete Anpassung der Methode zwingend notwendig.

6.2.4 Anwendung von KI für „Generierung“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Petrographie und Stratigraphie“

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit der Generierung von Daten in der geowissenschaftlichen Kategorie „Petrographie und Stratigraphie“:

- Karimpouli und Tahmasebi (2019): Image-based velocity estimation of Rock using Convolutional Neural Networks
- Kim et al. (2021): Fast and scalable earth texture synthesis using spatially assembled generative adversarial neural networks
- Mosser et al. (2017): Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks
- Mosser et al. (2018): Conditioning of three-dimensional generative adversarial networks for pore and reservoir-scale models

Davon legen die Abstracts aller Quellen eine Möglichkeit der Anwendbarkeit ähnlicher oder gleicher Verfahren in den Schlüsselaktivitäten des StandAV nahe. Entsprechend werden diese Dokumente betrachtet.

6.2.4.1 Karimpouli und Tahmasebi (2019): Image-based velocity estimation of Rock using Convolutional Neural Networks

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Karimpouli und Tahmasebi 2019) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Zur Charakterisierung der Gesteinseigenschaften auf der Skala der Porengröße hat sich in den letzten zwei Dekaden die Technologie der Digitalen Gesteinsphysik (Digital Rock Physics, DRP) etabliert. Dabei werden die feste Phase des Gesteins sowie sein Porenraum mit der Gas- und Flu-

idphase mithilfe der nicht invasiven Röntgenmikrotomographie erfasst und zu einem digitalen Raumbild verarbeitet. Mit einer numerischen Simulation kann der Fluidtransport oder die Ausbreitung seismischer Wellen²⁴ durch das Gestein berechnet werden. Bei Letzterem werden für jede Phase (Fluid, Minerale) die Elastizitätsmodule²⁵ definiert und die Wellenausbreitungsgeschwindigkeit aus dem bekannten Zusammenhang zwischen den geotechnischen Parametern – dem Kompressionsmodul und dem Schubspannungsmodul – bestimmt. Diese Methode ist viel präziser als klassische Laboruntersuchungen. Die digitale Röntgenmikrotomographie erfordert jedoch bei größeren Raumbereichen deutlich höhere Rechenleistung. Daher werden die bildbasierten Probleme zunehmend mit KI-Methoden behandelt.

Als Input für das Convolutional Neural Net (CNN) werden Abbildungen von Gesteinsproben aus der Röntgenmikrotomographie benutzt. Auf diesen Abbildungen wird das Künstliche Neuronale Netz (KNN) trainiert. Ein Hindernis beim Training des CNN ist in diesem Fall, dass die Datenbasis nicht ausreichend ist. Aus diesem Grund wird die Datengrundlage mithilfe des Algorithmus „Hybrid Pattern and Pixel-based Simulation (HYPPS)“ erweitert. Dabei wird ein tomografisches Bild der Gesteinsprobe genommen und 10 neue Bilder als eine „Simulation“ gebildet. Anschließend wird das künstliche Neuronale Netz auf diese Daten (Bildern) trainiert und evaluiert. Im Anschluss daran werden die Wellengeschwindigkeiten berechnet.

²⁴ Wenn der Untergrund durch eine Erschütterung belastet wird, entstehen zwei grundlegende Arten von elastischen Wellen: P-Wellen (primär, Push-Pull-Wellen), S-Wellen (sekundär, Scherwellen), welche sich durch den Erdkörper ausbreiten. P-Wellen zeichnen sich durch eine Teilchenbewegung in Ausbreitungsrichtung aus, während S-Wellen eine Teilchenbewegung quer zur Ausbreitungsrichtung aufweisen. (adaptiert nach https://archive.epa.gov/esd/archive-geophysics/web/html/seismic_velocities.html)

²⁵ Der Elastizitätsmodul ist ein Materialkennwert aus der Werkstofftechnik, der bei linear-elastischem Verhalten den proportionalen Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung bei der Verformung eines festen Körpers beschreibt. (<https://de.wikipedia.org/wiki/Elastizit%C3%A4tsmodul>)

Bewertung Karimpouli und Tahmasebi 2019

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-20: Bewertung der angewandten KI-Methode in Karimpouli und Tahmasebi (2019)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Datengrundlage abgeleitet von realen Daten Quelle angegeben Generierungsprozess (Parameter) transparent dargestellt
technologischer Reifegrad	+	Prinzip von Datenerweiterung ist bekannt und wird in anderen Domänen angewandt Im Zusammenhang mit Verwendung mit CNN oft verwendet Algorithmus HYPPS ist für diese Anwendung neu
Nachvollziehbarkeit	+	Algorithmus zur Generierung ist zwar einfach aber nur wenig erklärt Deterministisch Verweis auf weiterführende Literatur vorhanden

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-21: Relevanz von (Karimpouli und Tahmasebi 2019) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Neural Networks) mit sehr hohem Impactfaktor Veröffentlichung mit hohem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	3D μ -CT Scan eines Sandstein Standards (Berea Sandstone), deshalb Datensatz aus geowissenschaftlicher Sicht nicht repräsentativ für das StandAV Rohdaten entsprechen nicht den im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	- -	Die Methode wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist daher zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden

	Bewertung	Begründung
Übertragbarkeit der Methode	+	<p>Potenzielle Lösung für das weitverbreitete Problem der mangelnden Datenverfügbarkeit</p> <p>Übertragbarkeit vielversprechend, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist. Anpassung wahrscheinlich unproblematisch</p> <p>Löst nicht die Problematik der räumlichen Varianz geologischer Daten</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

In der Theorie ist die Studie (Karimpouli und Tahmasebi 2019) vielversprechend und durchaus mit Relevanz für das StandAV. Eine Anwendbarkeit auf eine real existierende und für das StandAV relevante geowissenschaftlichen Fragestellung in der Praxis bleibt offen, ist aber dennoch vorstellbar.

6.2.4.2 Kim et al. (2021): Fast and scalable earth texture synthesis using spatially assembled generative adversarial neural networks

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Kim et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Zur Beschreibung und Vorhersage der gekoppelten hydrogeologischen, physikalischen und chemischen Prozesse ist eine realistische Darstellung der Texturstrukturen, Porenologie und -konnektivität erforderlich. Diese Eigenschaften sind jedoch sehr heterogen im Raum verteilt. Um eine Aussage über die Gesteinseigenschaften und Prozesse trotz der häufig begrenzten Datenlage treffen zu können, haben sich geostatistische Methoden etabliert. Methoden wie Zwei-Punkt-Statistiken und insbesondere die fortgeschrittene Multi-Point-Geostatistik beschreiben den untersuchten Raum mit Hilfe von Trainingsbildern. Dabei wird der Wert des nicht beprobten Ortes durch die gleichzeitige Betrachtung mehrerer bekannter Datenpunkte in seiner Umgebung eingeschätzt. Ein Trainingsbild kann ein räumliches Bild der Gesteinsstrukturen oder auch eine Darstellung statistischer Eigenschaften in Raum und Zeit sein. Einschränkungen der Methode sind die hohen Rechenkosten für die hochauflösenden dreidimensionalen Anwendungen oder auch die geringe Varianz der verwendeten modellierten Trainingsbilder, die oft nur begrenzt die reale Variabilität der Begebenheiten im Porenraum widerspiegeln. Zudem beschreiben die Trainingsbilder nur einen kleinen Teil des untersuchten Porenraumes.

Für die Generierung wird auf die Technik der Generative Adversarial Neural Networks (GAN) zurückgegriffen. GANs sind dabei eine generative Technik, die oft in der Bildbearbeitung benutzt wird, um die Datengrundlage zu erweitern oder auszubalancieren. Die GANs selbst bieten dennoch nur wenig Verbesserung im Hinblick auf die hohe Rechenleistung und darüber hinaus keine Möglichkeit der Skalierung. Daher wird in (Kim et al. 2021) eine spezialisierte Technik der „spatially as-

sembled GAN“ (SAGAN) vorgeschlagen, welche eine Verbesserung zur GAN darstellt und die Nachteile ausgleicht. Getestet wird die Technik auf 2- und 3D-Trainingsbildern der Gesteinsmuster. Man muss allerdings beachten, dass der virtuelle erweiterte Datensatz einen realen Datensatz nicht vollständig ersetzen kann und eine bestimmte Datenbasis gemessener Daten vorhanden sein muss.

Bewertung Kim et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-22: Bewertung der angewandten KI-Methode in Kim et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	-	Keine echten Daten für das Training benutzt, Herkunft der Daten transparent Nicht auf echten Daten getestet
technologischer Reifegrad	-	GAN zitiert, es ist kein totales Novum, keine andere Technik als Benchmark benutzt Es gibt andere Techniken für äquivalente Vergleiche
Nachvollziehbarkeit	--	Black Box-Verfahren überdurchschnittliche Komplexität Daten wurden nicht validiert

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-23: Relevanz Kim et al. (Kim et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Wissenschaftlicher Standard gegeben. Aufbau und Ausarbeit eher theoretisch und kurz gehalten Journal (Journal of Contaminant Hydrology) mit eher hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	--	Kein Vergleich möglich, da künstlich erzeugte Daten (Trainingsbilder) benutzt werden und nicht auf realen Gesteinseigenschaften basieren
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	--	Grundproblematik mit Relevanz im StandAV (Auswertung von Bilddateien zur Analyse von Gesteinseigenschaften) Die Methode wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist daher zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden

	Bewertung	Begründung
Übertragbarkeit der Methode	-	<p>Bewertung der Übertragbarkeit und Anwendung ohne gegebene Realdaten und adressierte geowissenschaftliche Fragestellung nicht möglich</p> <p>Die Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten ist erforderlich</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Auf Grund des künstlich erzeugten Datensatzes und dem Fehlen einer praxisorientierten Anwendung auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung bleibt die Frage nach der Relevanz der Studie von (Kim et al. 2021) für das StandAV zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich und daher offen. Für die Beurteilung einer möglichen Übertragbarkeit ist eine Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten erforderlich.

6.2.4.3 Mosser et al. (2017): Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Mosser et al. 2017) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Zur Bestimmung der Mehrphasenströmung im Porenraum des Untergrundes braucht es eine solide Datenbasis, die sich auf eine Vielzahl von repräsentativen Proben stützen muss. Die moderne Röntgen-Computertomographie ermöglicht die Extraktion der dreidimensionalen Bilder des Porenraums einer Probe, die Bewertung der Variabilität der spezifischen Materialeigenschaften in einem größeren Porenraum insgesamt ist allerdings in den meisten Fällen experimentell nicht machbar.

Zur Rekonstruktion der Poren-Festkörper-Struktur und dessen Variabilität wurde ein Generatives Neuronales Netz (GNN) eingesetzt. Dieses GNN ist in der Lage, eine implizite Beschreibung der statistischen Verteilung lokaler Materialeigenschaften, repräsentiert durch dreidimensionale Bilddatensätze, zu erstellen. Als Referenzdatenquelle und Benchmark wurden drei Datensätze mit Bildern der Computertomografie von Laborstandards eines sphärischen Kugelpakets, des Berea-Sandsteins und des oolithischen Ketton-Kalksteins genommen. Die drei Datensätze repräsentieren die verschiedenen Porenraumformen, von einfachen bis hin zu komplexen Poren-Festkörper-Strukturen. Darauf basierend wurde eine umfassende Datenbasis von Trainingsbildern gebildet. Die Kontrollberechnung morphologischer Merkmale und der Permeabilität der Einphasenströmung (ein Fluid) zeigten, dass die mit der GNN erzeugten synthetischen Bilder die wichtigsten charakteristischen statistischen und physikalischen Parameter dieser porösen Medien wiedergeben.

Bewertung Mosser et al. 2017

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-24: Bewertung der angewandten KI-Methode in Mosser et al. (2017)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Echte Daten benutzt Daten (alle) Quelle angegeben
technologischer Reifegrad	++	Die Technik ist bekannt Wird in verschiedenen Domänen für ähnliche Aufgaben angewandt
Nachvollziehbarkeit	--	Black Box-Verfahren überdurchschnittlich komplex Ergebnisse statistisch diskutiert Erklärung der Technik und Parameter transparent

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-25: Relevanz von (Mosser et al. 2017) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Physical Review E) mit eher hohem Impactfaktor Veröffentlichung mit sehr hohem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	--	Verwendung von 3D μ -CT Scans von Standards eines Sandsteins (Berea), eines Kalksteins (Ketton) und eines künstlichen Kugelpakets, daher Datensatz aus geowissenschaftlicher Sicht nicht repräsentativ für das StandAV Rohdaten entsprechen nicht den im StandAV relevanten Gesteinen
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	-	Grundproblematik mit Relevanz im StandAV Die Methode wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist daher zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden

	Bewertung	Begründung
Übertragbarkeit der Methode	+	<p>Methode mit potenzieller Bedeutung für das StandAV</p> <p>Übertragbarkeit vielversprechend, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar. Anpassung wahrscheinlich unproblematisch</p> <p>Die Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten ist erforderlich</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

In der Theorie ist die Studie von (Mosser et al. 2018) sehr vielversprechend und durchaus mit Relevanz für das StandAV. Eine Anwendbarkeit auf eine real existierende und für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung in der Praxis bleibt offen, aber dennoch vorstellbar. Übertragbarkeit der Anwendung auf die potenziellen Wirtsgesteine des StandAV zwingend notwendig. Für die Beurteilung einer möglichen Übertragbarkeit ist eine Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten erforderlich.

6.2.4.4 Mosser et al. (2018): Conditioning of three-dimensional generative adversarial networks for pore and reservoir-scale models

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation von (Mosser et al. 2018) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die mangelnde Kenntnis (Mosser et al. 2018) über die strukturellen Merkmale und die hydrologischen Eigenschaften des geologischen Untergrundes haben zur Folge, dass hydrogeologische Modelle und die Simulationsrechnungen große Fehlerspannen aufweisen können. Anhand von Bohrlochmessungen werden Informationen über die hydrogeologischen Beschaffenheiten am Bohr-punkt und in der direkten Umgebung gewonnen. Bildgebende Verfahren von kleinen Gesteinsproben wie die Mikro-Computertomographie liefern Bilder der Poren-Feststoff-Struktur. Diese Bilder sind aber von ihrer Größe her eingeschränkt und geben Informationen nur über den Raum der untersuchten Probe. Um das Gesamtbild über den geologischen Untergrund zu gewinnen, werden Instrumente der Geostatistik eingesetzt, bei denen mit statistischen Methoden aus den bekannten Daten Informationen über den gesamten Raum der untersuchten Region generiert werden.

In Mosser et al. (2018) wurde statt der Geostatistik die Methode der Generative Adversarial Networks (GAN) angewendet, um die geologischen dreidimensionalen Modelle der kleinen Porenskala auf einen geologischen Raum zu erweitern. Das Verfahren wurde an dreidimensionalen Bildern der Mikro-Computertomographie eines Ketton-Kalksteins und mit Hilfe des Maules Creek Standard sowie an der Simulation des Maules Creek-Aquifers getestet.

Bewertung Mosser et al. 2018

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-26: Bewertung der angewandten KI-Methode in Mosser et al. (2018)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Daten vermutlich generiert Beschreibung der Daten nur sehr knapp, keine Statistischen Analysen vorgestellt Quelle der Daten zitiert Zwei verschiedene Datenset benutzt
technologischer Reifegrad	+	GAN wird oft für generative Techniken angewandt Quellen zitiert Vergleiche fehlen
Nachvollziehbarkeit	- -	Black Box-Verfahren Qualität der Daten kann nicht garantiert werden Überdurchschnittliche Komplexität des Verfahrens Ergebnisse nicht tief genug beschrieben Auswertung, Vergleich, Quantitative und Qualitative Frameworks fehlen

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-27: Relevanz von (Mosser et al. 2018) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet. Studie baut direkt auf (Mosser et al. 2017) auf und Vorgehen und Erklärungen sind daher kürzer gehalten Veröffentlicht in Online Daten Bank (EarthDoc) als Konferenzbeitrag Veröffentlichung mit relativ niedrigem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	Verwendung von 3D μ -CT Scans von Standards eines Kalksteins (Ketton), deshalb Datensatz aus geowissenschaftlicher Sicht nicht repräsentativ für das StandAV Rohdaten entsprechen nicht den im StandAV relevanten Wirtsgesteinen

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	--	Die adressierte geowissenschaftlichen Problematik hat durchaus eine Relevanz bei den zu erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV Die Methode wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist daher zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden
Übertragbarkeit der Methode	+	Übertragbarkeit ist gegeben, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist. Anpassung wahrscheinlich unproblematisch, aber dennoch zwingend notwendig Die Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten ist erforderlich

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

In der Theorie ist die Studie von (Mosser et al. 2018) generell vielversprechend und auf die Ausgangsstudie von (Mosser et al. 2017) aufbauend. Die Methode behält ihre potenzielle Relevanz für das StandAV. Eine praxisorientierte Anwendung auf eine real existierende und für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung bleibt weiterhin offen, ist aber dennoch vorstellbar. Anpassung der Anwendung auf die potenziellen Wirtsgesteine des StandAV ist zwingend nötig. Für die Beurteilung einer möglichen Übertragbarkeit ist eine Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten erforderlich.

6.2.5 Anwendung von KI für „Surrogate-Modelle“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geochemistry“

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit der Bildung von Ersatzmodellen mittels KI in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geochemie“.

- Chen et al. (2020): Three-dimensional modelling of alteration zones based on geochemical exploration data: An interpretable machine-learning approach via generalized additive models
- Lucia und Kühn (2021): DecTree v1.0 – chemistry speedup in reactive transport simulations: purely data-driven and physics-based surrogates
- Mosser et al. (2018): Accelerating Reactive Transport Modeling: On-Demand Machine Learning Algorithm for Chemical Equilibrium Calculations
- Zhang et al. (2021): Detection of the multivariate geochemical anomalies associated with mineralization using a deep convolutional neural network and a pixel-pair feature method

Davon legen die Abstracts aller Quellen eine Möglichkeit der Anwendbarkeit ähnlicher oder gleicher Verfahren in den Schlüsselaktivitäten des StandAV nahe. Entsprechend werden diese Dokumente betrachtet.

6.2.5.1 **Chen et al. (2020): Three-dimensional modelling of alteration zones based on geochemical exploration data: An interpretable machine-learning approach via generalized additive models**

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Chen et al. 2020) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Alterationen sind mineralogische und chemische Veränderungen in einem Erz- bzw. Gesteinskörper oder im Nebengestein, eine Art der Verwitterung in der Tiefe. Dabei werden die ursprünglichen „primären“ Minerale in sekundäre Minerale umgewandelt. Dadurch verändern sich die Eigenschaften des Gesteins und es entstehen unter anderem Fluidwegsamkeiten. Aufgrund der vielfältigen geochemischen Prozesse und wenigen Informationen über die Veränderungen in großen Tiefen ist es schwierig, ein Modell aufzubauen, mit welchem dieses Verhalten vorhergesagt werden könnte.

Die Arbeit (Chen et al. 2020) schlägt eine Machine-Learning-Methode vor, mit der ein dreidimensionales geologisches Modell von Alterationszonen simuliert wird. Als Grundlage wurden dafür reale geochemische Daten aus dem Dayingezhuang-Gebiet in China genommen. Mit Hilfe dieser Bohrlochdaten und geologischen Profilen in Tiefen von 200 bis 1.500 m und aus physikalischen Profilen in Tiefen bis zu 3.000 m wurde ein geologisches dreidimensionales Modell der Zhaoping-Verwerfung und der phyllitischen²⁶ Alterationszonen abgeleitet. Da die geochemischen Datensätze sehr umfangreich sind, müssen die für die Alteration entscheidenden Informationen zunächst herausgefiltert werden. Mit Hilfe eines Modells wurde zunächst der Zusammenhang zwischen den geochemischen Verhältnissen und der Entstehung von Alterationen qualitativ bewertet und danach eine Hauptkomponentenanalyse (principle component analysis, PCA) eingesetzt, um die wesentlichen geochemischen Charakteristiken auszusortieren und die Anomalien zu identifizieren. Ein verallgemeinertes additives Modell (generalized additive model, GAM) in Kombination mit bayesschem Framework wurde dann aufgestellt, um quantitativ den Zusammenhang zwischen den geochemischen Daten und der Oberfläche der Alterationszonen sowie den Faktoren beziehungsweise Parametern, welche die Alterationszone kontrollieren, herzustellen. Dabei wird der Beitrag der Mächtigkeit und der Tiefe der Alterationszone mit den geochemischen Anomalien in Zusammenhang gebracht. Am Beispiel der hydrothermal bedingten Alterationszone wurden die Wegsamkeiten der Fluide bestimmt. Die Autoren der Arbeit weisen auf bestimmte Einschränkungen der Anwendung des Ansatzes hin: es muss u. a. immer neu die Verbindung zwischen dem geologischen Umfeld und den verschiedenen Alterationstypen erstellt werden.

²⁶ Phyllitschiefer (Tonglimmerschiefer) sind niedriggradige metamorphe Gesteine der Grünschiefer-Fazies, die während der Regionalmetamorphose aus Tonschiefern entstanden sind. Durch geochemische Alterationen wurden die primäre Tonminerale zu sekundären umgewandelt

Bewertung Cheh et al. 2020

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-28: Bewertung der angewandten KI-Methode in Chen et al. (2020)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Reale Daten (China) Quellen angegeben Daten werden gut diskutiert
technologischer Reifegrad	-	GAM kein KI-Allgemeinwissen, Quellen angegeben GAM zu wenig und zu knapp erklärt Vergleichbare Techniken zu GAM werden kurz erwähnt PCA wird in vielen Bereichen verwendet konzeptuelle Modelle werden oft benutzt
Nachvollziehbarkeit	-	PCA ist Black Box-Verfahren GAM nicht transparent erklärt Vorteile/Nachteile nicht erkennbar Viele Ergebnisse, diese werden gut diskutiert Es werden auch konzeptuelle Modelle dazu verwendet, Abhängigkeiten zu beschreiben

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-29: Relevanz von (Chen et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Applied Geochemistry) mit eher hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	++	Realdaten aus Bohrlochmessungen werden verwendet Valide Größe des Datensatzes und transparenter Versuchsaufbau Die Daten entsprechen der für das StandAV relevanten Probenahme und den potenziellen Wirtsgesteinen

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	++	<p>Deckungsgleichheit in der geowissenschaftlichen Grundproblematik gegeben (Alterationszonen im Untergrund)</p> <p>Grundproblematik mit hoher Bedeutung im StandAV (Fluidtransport entlang von Klüften/bzw. Stofftransport und Reaktion mit erdoberflächennahen Schichten/der Erdoberfläche)</p> <p>Simulation des geologischen Settings und 3D Modellierung von Gesteinseigenschaftsverteilungen deckt sich mit den Fragestellungen im StandAV</p>
Übertragbarkeit der Methode	++	<p>Hohe Bedeutung und Übertragbarkeit gegeben</p> <p>Hat eventuell das Potenzial die Problematik, Daten für Gebiete zu generieren, wo keine Bohrdaten vorhanden sind, zu lösen</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Es ist aus geowissenschaftlicher Sicht von großer Bedeutung, dass die Methode ermöglicht, Beziehungen zwischen auftretenden geochemischen Anomalien an der Erdoberfläche und möglichen tiefen Alterationszonen zu quantifizieren. Dadurch sind bereits nach den Übertageerkundungen (Phase III des StandAV) Rückschlüsse auf potenzielle Prozesse in tieferen geologischen Schichten möglich. Dies ist besonders für Gebiete mit wenigen Bohrdaten oder für Gebiete, die von Bohrungen unberührt bleiben sollen, nützlich. Daher kann die wissenschaftliche Arbeit (Chen et al. 2020) insgesamt als sehr relevant für die geowissenschaftlichen Fragestellungen des StandAV eingeordnet werden. Übertragung und Anwendbarkeit sind aus geowissenschaftlicher Sicht sehr gut vorstellbar.

6.2.5.2 Lucia und Kühn (2021): DecTree v1.0 – chemistry speedup in reactive transport simulations: purely data-driven and physics-based surrogates

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Lucia und Kühn 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Beim Transport von in Fluiden gelösten chemischen Komponenten im Porenraum kommt es zu vielfältigen Reaktionen der Komponenten untereinander sowie mit den Porenoberflächen. Die Simulationsberechnungen dieses geochemischen gekoppelten reaktiven Transports sind zeitaufwändig und teuer, vor allem aufgrund der mikro-skaligen Beschreibung der chemischen Subsysteme.

Daher wird zunehmend die Option der Hybriden Modellierung untersucht, wobei Teile der klassischen numerischen Simulation mit einem Surrogat bzw. Ersatzmodell ersetzt werden. Weil das Ersatzmodell nicht die tatsächlichen physikochemischen Zusammenhänge beschreibt, entstehen Ungenauigkeiten in der Berechnung, welche sich weiter über die modellierten Räume und die Zeiten

verbreiten können. Die Arbeit schlägt eine Benchmark-Strategie²⁷ vor, mit welcher die Hybridmodellierung weniger fehleranfällig werden soll. Ein hierarchisches Kopplungsschema wird eingeführt, in dem „vollphysikalische“ gleichungsbasierte geochemische Simulationen teilweise durch Surrogate ersetzt werden. Es werden zwei Methoden für einen solchen „Ersatz“ vorgestellt und deren Vorteile sowie Nachteile diskutiert.

Die erste Methode – reiner datengesteuerter Ansatz mit hierarchischer sequenzieller nicht-iterativer Kopplung – wird beispielhaft auf der Überprüfung der Massenerhaltung demonstriert. Dabei wird einer der zentralen Parameter, in diesem Fall die Massenbilanz, geprüft. Sobald der Fehler in der mit dem Surrogat berechneten Massenbilanz einen festgelegten Schwellenwert überschreitet, läuft die Berechnung mit dem klassischen numerischen Modell weiter und das Surrogat wird verworfen. Wenn die berechnete Massenbilanz unter dem Schwellenwert liegt, wird das Surrogat in das Hybridmodell übernommen.

Die zweite Methode verwendet Entscheidungsbäume, eine wissensbasierte Technik des Maschinellen Lernens. Bei dieser Technik wird ein Teil des Wissens bereits als ganzer Entscheidungsbaum vormodelliert. Während des Trainings wird das vorgefertigte Modell entweder durch die Daten angepasst oder vervollständigt. Damit lässt sich nicht nur das Ergebnis berechnen, sondern zum Teil auch erklären, wie das Ergebnis zustande gekommen ist. Ein weiterer Vorteil ist, dass die so vorbereiteten wissensbasierten Techniken einen Geschwindigkeitsvorteil gegenüber den reinen, datengetriebenen Ansätzen besitzen.

Die Arbeit diskutiert darüber hinaus den weiteren Forschungsbedarf bei der Hybridmodellierung im Bereich der Simulationsberechnungen des geochemischen gekoppelten reaktiven Transports.

²⁷ Benchmarking bezeichnet die vergleichende Analyse von Ergebnissen oder Prozessen mit einem festgelegten Bezugswert oder Bezugsprozess. Es sind Bewertungsverfahren, mit deren Hilfe man die Leistung von Programmsubroutinen ermitteln und diese nach bestimmten Kriterien miteinander vergleichen kann. [https://wiko.wiki/de/Benchmark_\(Computer\)](https://wiko.wiki/de/Benchmark_(Computer))

Bewertung Lucia und Kühn 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-30: Bewertung der angewandten KI-Methode in Lucia und Kühn (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Eine etablierte Datenquelle als Benchmark benutzt Quelle zitiert Daten werden beschrieben und erklärt
technologischer Reifegrad	+	Es wird erwähnt, dass es Vergleichstechniken gibt, aber wenig zitiert Technik nicht weit verbreitet Es werden zwei verschiedene Techniken miteinander verglichen
Nachvollziehbarkeit	++	Es wird ein Black Box-Modell mit einem wissensbasierten Modell verglichen Wissensbasierte Modelle berücksichtigen (transparent) Domänenwissen Unterteilung in Trainings- und Testdaten, Preprocessing transparent

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-31: Relevanz von (Lucia und Kühn 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	-	Wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens in Teilen gewährleistet Es handelt sich hierbei um ein Konferenzveröffentlichung. Kein Journal Zitationsindex unbekannt
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	Realdaten wurden verwendet, allerdings nur von Calciten und Dolomiten, daher Datensatz aus geowissenschaftlicher Sicht nicht repräsentativ für das StandAV Rohdaten entsprechen nicht den für das StandAV relevanten Gesteinen bzw. auftretenden Mineralen in den potenziellen Wirtsgesteinen
Deckungsgleichheit der	- -	Die Methode wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist daher zum jetzigen

	Bewertung	Begründung
geowissenschaftlichen Anwendung		Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden
Übertragbarkeit der Methode	-	Grundproblematik mit hoher Bedeutung für das StandAV (reaktiver Stofftransport von ein- oder mehrphasigen chemischen Verbindungen im Festgestein) Übertragbarkeit ist nur bei entsprechender Anpassung der Eingangsdaten bzw. der direkten Anwendung auf eine für das StandAV relevanten geowissenschaftliche Fragestellungen gegeben

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Quelle (Lucia und Kühn 2021) muss mit „eher nicht relevant“ eingeschätzt werden. Gründe hierfür sind die geringe und abweichende Datenlage, das Fehlen einer praxisorientierten Anwendung auf eine klare geowissenschaftliche Fragestellung, bei der eine Deckungsgleichheit zu einer Fragestellung im StandAV gegeben wäre, und damit die Unsicherheit hinsichtlich einer gegebenen Übertragbarkeit. Eine Anwendung der KI-Methode für das StandAV ist deshalb zum jetzigen Zeitpunkt schwer vorstellbar.

6.2.5.3 Leal et al. (2020): Accelerating Reactive Transport Modeling: On-Demand Machine Learning Algorithm for Chemical Equilibrium Calculations

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation von (Leal et al. 2020) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die Modellierung des reaktiven Transportes in geologischen Formationen dient der Bewertung der Verbreitung verschiedener Schadstoffe wie der chemischen Radionuklidverbindungen. Um den Chemismus bzw. die chemischen Reaktionen und Prozesse abzubilden, werden Gleichgewichtsrechnungen durchgeführt und mit der Berechnung der Flüssigkeitsströmung, Wärmeübertragung und dem Transport einzelner chemischer Stoffe über die Zeit gekoppelt. Dazu wird die ganze untersuchte Region in kleine Segmente bzw. Gitterzellen geteilt – diskretisiert. Die Gleichgewichtsrechnungen müssen mindestens einmal pro Gitterzelle der diskretisierten Region²⁸ und einmal pro Zeitschritt der Berechnung durchgeführt werden. Die Rechenkosten der chemischen Gleichge-

²⁸ Liegt das mathematische Modell zur Beschreibung des zu berechnenden Problems in Form von Differential- oder Integralgleichungen mit den zugehörigen Rand- und/oder Anfangsbedingungen fest, besteht der nächste Schritt bei der Anwendung eines numerischen Berechnungsverfahrens darin, das kontinuierliche Gebiet (Raum und Zeit) durch eine endliche Anzahl von Teilgebieten zu approximieren, in denen dann numerische Werte der unbekanntenen Variablen bestimmt werden. Die diskreten Stellen werden üblicherweise in Form eines Gitters über das Lösungsgebiet verteilt, so dass die räumliche Diskretisierung des Problemgebiets oft auch als Gittergenerierung bezeichnet wird. (https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-58416-9_3)

wichtsberechnungen sowie der zeitliche Aufwand steigen daher je nach der Größe der Region und der Anzahl der chemischen Verbindungen immens

Um die Rechenkosten zu reduzieren, wird in der Arbeit (Leal et al. 2020) ein Intelligenter Algorithmus für das Auffinden eines chemischen Gleichgewichtes vorgeschlagen, welcher mit der Strategie des Maschinellen Lernens auf Abruf beschleunigt wird. Dadurch werden die vollständigen chemischen Gleichgewichtsberechnungen während der Simulation des reaktiven Transports so weit wie möglich umgangen.

Für die Ausführung des Algorithmus liegt zunächst eine Datenbank mit verschiedenen Reaktionsgleichungen vor. Zum Beginn der Bestimmung der Lösung wird ein als Matrix kodierter Input, bestehend aus chemischen Variablen, dem Algorithmus übergeben. Der Algorithmus wertet die ihm vorliegende Aufgabe aus und bestimmt, ob es ein Cluster mit chemischen Reaktionsgleichungen in der Datenbank gibt, dass die Aufgabe mit hinreichender Genauigkeit bearbeitet. Ist dies der Fall, wird eine Taylorische Näherungsgleichung angewandt, um die Aufgabe zu lösen und das chemische Gleichgewicht zu bestimmen. Im gegenteiligen Fall, wenn also keine passenden Cluster gefunden werden können, in die sich das Problem einsortieren lässt, wird das Problem berechnet und der Datenbank so hinzugefügt. Da sich die Berechnung des chemischen Gleichgewichtes durch Taylorische Näherungsgleichung bestimmen lässt, wenn sie einer „Klasse“ oder einem Cluster von Problemen zugeordnet werden kann, wird der Rechenaufwand deutlich reduziert. Die Clusterisierung der Datenbank wird mit einem einfachen Clustering Priority Queue Search vorgenommen. Ein Klassifizierungsalgorithmus K-Nearest Neighbor bestimmt, ob und welchem der Cluster das vorliegende Problem zugeordnet werden kann.

Bewertung Leal et al 2020

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-32: Bewertung der angewandten KI-Methode in Leal et al. (2020)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Daten simuliert, Quellen angegeben, Berechnung im Anhang
technologischer Reifegrad	++	Im Grunde, Erweiterung der Datenbank, wenn sich das Ergebnis nicht einordnen lässt Alle Algorithmen weitestgehend erforscht und finden Anwendung in vielen Bereichen
Nachvollziehbarkeit	++	Hauptalgorithmus transparent Clustering-Priority Queue Algorithmus transparent gestaltet (nahezu greedy algorithmus) K-Nearest Neighbor-Algorithmus ist transparent

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-33: Relevanz von (Leal et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Transport in Porous Media) mit eher hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	-	Hohe Varianz an chemischen Verbindungen Nur an einem Gesteins-Standard simuliert (Quarzit) Entspricht nicht den für das StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteinen
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	+	Grundproblematik mit hoher Bedeutung für das StandAV (reaktiver Stofftransport von ein- oder mehrphasigen chemischen Verbindungen im Festgestein) Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist dennoch ersichtlich und lässt einen Vergleich zu

Übertragbarkeit der Methode	+	<p>Übertragbarkeit ist gegeben, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist. Anpassung wahrscheinlich unproblematisch, aber dennoch zwingend notwendig</p> <p>Die Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten ist erforderlich</p>
------------------------------------	---	--

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Trotz der Abweichung in der verwendeten Datengrundlage ist eine große Bedeutung und Relevanz für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen gegeben. Eine Übertragbarkeit ist mit geringen Anpassungen auf, die im StandAV erwarteten, potenziellen Wirtsgesteine sehr gut vorstellbar. Für die Beurteilung einer möglichen Übertragbarkeit ist eine Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten erforderlich.

6.2.5.4 Zhang et al. (2021): Detection of the multivariate geochemical anomalies associated with mineralization using a deep convolutional neural network and a pixel-pair feature method

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Zhang et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Geochemische Anomalien spielen zunehmend eine bedeutende Rolle bei der Mineralienexploration und bei den Beschreibungen der geologischen Formation und deren Eigenschaften im Allgemeinen. Das Prinzip der Identifizierung geochemischer Anomalien im Zusammenhang mit Mineralisierung basiert auf dem Erkennen von Abweichungen zwischen der geochemischen Anomalie und dem Hintergrund. Die Mineralisierung in einer geologischen Formation ist ein geologischer Prozess²⁹, bei dem die Aufbereitung einer ausreichenden Anzahl von Proben für die Bewertung aufwändig ist. Die Anwendung der künstlichen Intelligenz wie maschinelles Lernen (ML) würde sich im Bereich der geochemischen Prospektion und Mineralexploration zwar anbieten, es steht allerdings eine unzureichende Anzahl der Trainingsbilder zur Verfügung.

Das Ziel der Studie (Zhang et al. 2021) ist es, eine alternative Methode zur Erzeugung der Trainingsproben für die Anwendung überwachter ML-Algorithmen in den Geowissenschaften zu entwickeln. Die Untersuchung wurde mit Hilfe der Standortdaten von bekannten Mineralvorkommen aus der südwestlichen Provinz in Fujian durchgeführt, welche eine langfristige strukturelle und geologische Entwicklung durchlief. Mit einem Algorithmus zur Generierung und Vervielfachung wurde eine ausreichende Anzahl von Trainingsbildern ausgehend von realen Daten eruiert. Mithilfe der Neuronalen Netze wurde dann ein Modell erzeugt, welches als Input eine Kartenumgebung analysiert und

²⁹ Mineralisierung in der Geologie ist ein Prozess, durch den ein Mineral oder mehrere Minerale in einen Gesteinsverband eingebracht werden; Typen der Mineralisierung sind dabei Metallisation, Spaltenfüllung, Imprägnation oder Ersatz (<https://www.spektrum.de/lexikon/geographie/mineralisierung/5118>)

in der Lage ist, geochemische Anomalien zu identifizieren und deren Position zu markieren. Mit dem optimierten CNN (Convolutional Neural Net) konnten die multivariaten geochemischen Anomalien im Zusammenhang mit der Mineralisierung identifiziert werden. Sie weisen eine starke räumliche Korrelation zwischen den bekannten Standorten der polymetallischen Eisenlagerstätten und den vorhergesagten Anomaliegebieten auf.

Bewertung Zhang et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-34: Bewertung der angewandten KI-Methode in Zhang et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Anwendung auf echten Daten (Fujian, China) Daten werden erklärt und zitiert
technologischer Reifegrad	++	Convolutional Neural Net sind weit verbreitet und in vielen anderen Domänen für Bildererkennung verbreitet
Nachvollziehbarkeit	-	Black Box-Modell Überprüfbarkeit, zum Beispiel durch Stichproben, umständlich, aber denkbar

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-35: Relevanz von Zhang et al. (Zhang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	- -	Wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens nicht immer gewährleistet Journal (Applied Geochemistry) mit eher hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich Geowissenschaftliche Einschätzungen teilweise schwer nachzuvollziehen bzw. Ausführungen teils lückenhaft
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	Es werden nur geochemische Realdaten anderer Autoren verwendet Digitalisierung der geochemischen Daten schwierig nachzuvollziehen
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	+	Die adressierte geowissenschaftliche Fragestellung repräsentiert die im StandAV auftretenden Fragestellungen nicht direkt Grundproblematik dennoch mit hoher Relevanz für das Stand AV (Identifizierung geochemischer Anomalien)
Übertragbarkeit der Methode	-	Zur Anpassung sind größere Veränderungen an der Methode notwendig

Bewertung	Begründung
	Übertragbarkeit ist gegeben, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist. Anpassung und Übertragbarkeit insgesamt schwer vorstellbar

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

In der Theorie ist die Studie von (Zhang et al. 2021) ein vielversprechender Ansatz. Allerdings führen die, in Teilen, nicht nachvollziehbare Digitalisierung der Daten dazu, dass eine mögliche Übertragbarkeit durch Anpassung der Methode schwer einzuschätzen ist. Eine Relevanz für das StandAV ist durch die bestehend Grundproblematik der vielversprechenden Identifizierung von geochemischen Anomalien gegeben, eine Anwendung auf die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen jedoch schwer vorstellbar.

6.2.6 Anwendung von KI für „Prediction“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geotechnics und Mining“

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit der Vorhersage mittels KI in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geotechnics and Mining“.

- Jalal et al. (2021): Predictive modeling of swell-strength of expansive soils using artificial intelligence approaches: ANN, ANFIS and GEP
- Yang et al. (2021): An intelligent procedure for updating deformation prediction of braced excavation in clay using gated recurrent unit neural networks
- Zhang et al. (2022): Generative adversarial network for geological prediction based on TBM operational data

Davon legen die Abstracts aller Quellen, die oben nicht eingeklammert sind, eine Möglichkeit der Anwendbarkeit ähnlicher oder gleicher Verfahren in den Schlüsselaktivitäten des StandAV nahe. Dennoch werden alle Dokumente betrachtet.

6.2.6.1 Jalal et al. (2021): Predictive modeling of swell-strength of expansive soils using artificial intelligence approaches: ANN, ANFIS and GEP

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Jalal et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Viele tonhaltige Böden und geologische Schichten weisen die Fähigkeit auf, ihr Volumen durch Aufnahme (Quellen) oder Abgabe (Schrumpfen) von Wasser drastisch zu verändern. Die Quell- bzw. Schrumpffähigkeit dieser Böden bzw. Schichten wird durch das Auftreten von hydrophilen Tonmineralen, wie z. B. Montmorillonit, Illit, Smektit und Bentonit beeinflusst, welche unterschiedliche geophysikalische und -chemische Eigenschaften aufweisen. Dies kann unmittelbare Auswir-

kungen auf das geophysikalische Verhalten, wie u. a. die Veränderung von Gesteinsvolumen und -festigkeit sowie der Wasserleitfähigkeit haben und zur Verschlämmung³⁰ bzw. Verdichtung der Böden oder geologischen Schichten führen, welche auch zu Schäden von bestehenden Baustrukturen führen können. Daher ist es wichtig, Gesteinseigenschaften wie den Quelldruck und die Druckfestigkeit zu messen und vorherzusagen. Die Publikation (Jalal et al. 2021) bezieht sich auf das Problem der expansiven Böden, bei denen es zu einer Beschädigung von Konstruktionen im Bauwesen kommt.

In der Studie (Jalal et al. 2021) wurde die Entwicklung neuer empirischer Prognosemodelle zur Bewertung des Quelldrucks und der einaxialen bzw. einachsigen Druckfestigkeit (UCS) expansiver Böden unter dem Einsatz verschiedener Techniken der künstlichen Intelligenz vorgestellt. Es wird versucht, die klassischen Techniken zur Vorhersage der UCS, die Regressionsanalysemethoden, zu ersetzen. Diese sind zum Teil aufwendig und können im Fall komplexer Konstruktionen mit einem großen Rechenaufwand verbunden sein. Eingesetzt wurden künstliche neuronale Netze (KNN), adaptive Neuro-Fuzzy-Inferenzsysteme (ANFIS) und Genexpressionsprogrammierung (GEP).

Als Eingangsvariablen wurden neun der wichtigsten und leicht messbaren geotechnischen Eigenschaften gewählt. Die Vorhersage mit dem Modell wurde verglichen mit Laborbeobachtungen.

³⁰ Unter der Verschlämmung von Böden versteht man die mechanische Verkleinerung und Verlagerung von Bodenteilchen an der Bodenoberfläche, welche hauptsächlich durch die verschiedenen physikalischen Niederschlagserscheinungen (u. a. Hagel, Stark- und oder Dauerregen, etc.) hervorgerufen wird. Die Folgen dieser Reorganisation der Böden können die Einebnung und damit beschleunigter Oberflächenabfluss oder dem Verschluss von Bodenporen und somit zur Verminderung der Wasseraufnahme führen

Bewertung Jalal et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-36: Bewertung der angewandten KI-Methode in Jalal et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Datenbasis wurde aus verschiedenen Quellen konstruiert Verfügbarkeit der Daten nicht sicher (keine Zitationen oder Verweise) haben nach Angaben jedoch eine solide Literaturrecherche als Grundlage. Deskriptive statistische Angaben bezüglich der Daten liegen vor
technologischer Reifegrad	++	Drei Techniken werden miteinander verglichen, mehrere Metriken werden für den Vergleich benutzt Weitere Techniken werden zitiert GEP ist kein KI-Allgemeinwissen
Nachvollziehbarkeit	+	Hardwarevergleich liegt vor Viele Vergleichsmetriken erlauben eine bessere Interpretation der Ergebnisse Metriken anschaulich dargestellt und interpretiert Parameter für Verfahren liegen vor

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-37: Relevanz der angewandten KI-Methode in Jalal et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Journal of Environmental Management) mit sehr hohem Impactfaktor Veröffentlichung mit ordentlichem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	++	Es werden keine eigenen Daten verwendet Breite Datenbank durch Literaturrecherche Rohdaten reflektieren die geophysikalischen Eigenschaften der im StandAV relevanten Gesteine (Quelldruck und Druckfestigkeit)
Deckungsgleichheit der	++	Grundproblematik mit hoher Bedeutung für das StandAV (Schwell- und Schrumpffähigkeit von tonhaltigen Böden oder geologischen Schichten)

	Bewertung	Begründung
geowissenschaftlichen Anwendung		Simulation des theoretischen Versuchsaufbaus deckt sich mit den geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet
Übertragbarkeit der Methode	++	Übertragbarkeit ist gegeben, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist. Anpassung sollte unproblematisch sein, ist aber zwingend notwendig

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist die Studie von (Jalal et al. 2021) von großer Bedeutung für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen bezüglich Tonsteinen als potenzielles Wirtsgestein und deren geomechanischen Eigenschaften. Übertragung und Anwendbarkeit aus geowissenschaftlicher Sicht sehr gut vorstellbar.

6.2.6.2 Yang et al. (2021): An intelligent procedure for updating deformation prediction of braced excavation in clay using gated recurrent unit neural networks

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation von (Yang et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

In der Geotechnik wird der Verbau von vertikalen Baugrubensicherungen angewandt, bei der tiefe Aushubstellen mit geraden vertikalen Flächen seitlich durch ein Verbau- und Abstützungssystem gestützt und gesichert werden, bis das Bauwerk errichtet ist. Dabei können Schäden an den angrenzenden Konstruktionen und unterirdischen Bauwerken entstehen, die durch die laterale Bewegung und Ausbreitung der Böden bzw. der tonhaltigen Schichten verursacht werden. Daher werden Techniken entwickelt, um die Bodenbewegung und -verformung in Baugruben zu quantifizieren und vorherzusagen.

Das Ausmaß, der durch den Aushub ermöglichten Verformung wird im klassischen konstitutiven Bodenmodell unter Anwendung der Finite-Elemente Methode (FEM)³¹ bestimmt. Da die Bedingungen allerdings schwer vorhersehbar sind, leidet die Genauigkeit der Berechnung stark. Für diese Berechnungen muss die Entwässerung während des Aushubs bekannt sein und das geeignete Mo-

³¹ Die Finite-Elemente-Methode (FEM) ist ein allgemeines, bei unterschiedlichen physikalischen Aufgabenstellungen angewendetes numerisches Verfahren. Das Berechnungsgebiet (z. B. der Untergrund) wird in endlich viele Teilgebiete einfacher Form aufgeteilt, z. B. in viele kleine Quader oder Tetraeder. Sie sind die „finiten Elemente“. Ihr physikalisches Verhalten kann aufgrund ihrer einfachen Geometrie mit bekannten Ansatzfunktionen gut berechnet werden. Das physikalische Verhalten des Gesamtkörpers wird dadurch nachgebildet, wie diese Elemente auf die Kräfte, Lasten und Randbedingungen reagieren und wie sich Lasten und Reaktionen beim Übergang von einem Element ins Benachbarte fortpflanzen. (<https://de.wikipedia.org/wiki/Finite-Elemente-Methode>)

dell für die Vorhersage der Verformung oder die Bestimmung relevanter Parameter. In Kombination mit statistischen Methoden, die die Wahrscheinlichkeit der Parameterwerte oder Prozesse bewerten, kann die Vorhersage optimiert werden.

In der Arbeit werden, KNN für die Vorhersage der nächsten Bodenschicht verwendet. Dabei wird eine besondere Art von Neuronen verwendet, GRU (Gated Recurrent Units). Dieses erlauben es dem NN besonderes gut zusammenhängende Datenserien auszuwerten, da sie eine Art von Gedächtnis besitzen und auch die Möglichkeit haben, Informationen zu „vergessen“. Als Input werden Veränderungen in den Erdschichten von der vorherigen bis zur aktuellen Position vergeben, die Vorhersage beschreibt die Veränderungen von der aktuellen bis zur nachfolgenden Gesteinsschicht.

Bewertung Yang et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-38: Bewertung der angewandten KI-Methode in Yang et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Echte Daten benutzt Zitate vorhanden Zwei verschiedene Datasets Autor kann die Daten auf Anfrage zur Verfügung stellen
technologischer Reifegrad	++	Rekurrente Neuronen werden oft in anderen Domänen verwendet und sind weit erforscht Anwendungsgebiete erwähnt und zitiert
Nachvollziehbarkeit	-	Black Box-Verfahren Verfahren und Einsatz des KNN transparent vorgestellt Verwendete Parameter des Neuronalen Netzes gut erklärt, einfacher Nachbau möglich Input/Output nicht gut erklärt Mehrere Metriken zur Analyse genutzt

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-39: Relevanz von (Yang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering) mit sehr hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	Es werden reale Felddaten aus Baugruben und Aushubstellen verwendet Als Proben dienen tonhaltige Böden in Oberflächennähe Rohdaten und Gesteinslithologien entsprechen nicht den für das StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteinen

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	-	<p>Grundproblematik mit hoher Bedeutung im StandAV (horizontale Ausdehnung und Ablenkung von geologischen Schichten während des Aushubes)</p> <p>Die adressierten geowissenschaftlichen Fragestellungen und das geologische Setting deckt sich nicht mit den für das StandAV relevanten Fragestellungen bzw. dem geologisch erwartbaren Setting</p> <p>Allenfalls während der 3. Phase im StandAV (Untertägige Erkundung) interessant, in oberflächennahen Regionen</p>
Übertragbarkeit der Methode	--	<p>Übertragbarkeit ist gegeben, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist</p> <p>Einschätzung der geowissenschaftlichen Anwendung und Übertragbarkeit schwer einzuschätzen auf Grund der Abweichung der untersuchten Lithologien bzw. dem Aufbau. Tendenziell Übertragung eher problematisch und schwer vorstellbar</p>

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist die (Yang et al. 2021) mit geringer Relevanz für die geowissenschaftlichen Fragestellung im StandAV, da hier Eigenschaften von tonhaltigen Böden als Datengrundlage dienen, welche sich von den Tonsteinen, die als potenziellen Wirtsgesteine im StandAV vorkommen, deutlich unterscheiden. Daher sind eine Übertragbarkeit und Anwendbarkeit auf die für das StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen tendenziell eher schwer vorstellbar.

6.2.6.3 Zhang et al. (2022): Generative adversarial network for geological prediction based on TBM operational data

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Zhang et al. 2022) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die im Tunnel- oder auch Bergbau gegenwärtig in den meisten Fällen eingesetzte mechanische Tunnelbauausrüstung ist die Tunnelbohrmaschine (TBM). Die komplexen geologischen Bedingungen wie Wasseraustritt oder Hohlräume verzögern erheblich die Bauzeitpläne, verursachen hohe Zusatzkosten oder Schäden an den Geräten; sie bergen auch ein hohes Risiko für den Aushubprozess mit zusätzlichen Gefahren. Daher spielt die Kenntnis der vorhandenen geologischen Verhältnisse sowie die Vorhersage unerwarteter Veränderungen eine zentrale Rolle. Um diese Kenntnis zu verbessern, werden während des Bohrfortschrittes mittels Sensoren Gesteins- und Bodenproben aus den jeweiligen Tunnelabschnitten entnommen und unmittelbar analysiert. Weiterhin werden mit geophysikalischen Methoden die geologischen Eigenschaften von Tunnelabschnitten durch Messung ihrer physikalischen Eigenschaften untersucht. Diese Analysen müssen vor Ort in einer Dis-

tanz von wenigen Metern vor der aktuellen Verortung der TBM durchgeführt werden. Um diese Limitierungen zu umgehen, werden Modelle für die Vorhersage der geologischen Bedingungen unter Anwendung der Techniken des maschinellen Lernens entwickelt und mit der Sensorik verzahnt.

Dabei wird ein geologisches Modell für die Vorhersage der geologischen Bedingungen mit der Technik GAN erzeugt. Bei dieser Technik gibt es zwei miteinander kommunizierende, künstliche Intelligenzen: Einen Generator, der Informationen generiert und einen Diskriminator, der die generierten Ergebnisse bewertet und den Generator belohnt oder bestraft je nach Güte des generierten Ergebnisses. Der Generator hat dabei zwei Module. Das erste Modul extrahiert die wichtigsten Eigenschaften (Features) aus den von der Tunnelbormaschine gelieferten Daten. Das zweite Modul erzeugt mit den Ergebnissen aus dem ersten Modul eine Schätzung. Diese Schätzung (Mächtigkeit der Gesteinsschichten) wird dann von einem Diskriminator kontrolliert der dem Generator ein Feedback gibt, ob er den generierten Daten „glaubt“ oder nicht. Wenn der Diskriminator das Ergebnis nicht akzeptiert, wird der Generator bestraft. Unabhängig davon wird der Diskriminator bestraft, sollte er am Ende ein richtiges Ergebnis nicht akzeptiert haben oder ein falsches Ergebnis akzeptieren. Dadurch lernen beide KIs voneinander. Der Prozess, bei dem der Generator immer weiter versucht den Diskriminator zu täuschen wiederholt sich bis zu einem Abbruchkriterium. Am Ende wird der Generator von dem System getrennt und ist in der Lage eigenständig Daten zu generieren.

Bewertung Zhang et al. 2022

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-40: Bewertung der angewandten KI-Methode in Zhang et al. (2022)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	-	Vermutlich echte Daten benutzt Quelle der Daten nicht angegeben
technologischer Reifegrad	+	GAN-Ansatz wird in anderen Gebieten eingesetzt und hat breiten Forschungshintergrund Anwendungsgebiete zitiert Vergleichstechniken verfügbar
Anwendbarkeit	-	Andere Techniken werden für die Vorhersage genannt und zitiert Einsatz der generativen Technik im Paper nicht genug begründet Vergleichstechniken in dem Paper auf derselben Instanz benutzt
Nachvollziehbarkeit	--	Mehrere Black Box-Verfahren, die teilweise ineinander verschachtelt sind und co-abhängig, in mehreren Stufen miteinander interagieren Vergleichstechniken sind auch Black Box-Verfahren Keine Erklärung, warum dieses Verfahren den anderen überlegen gewesen ist Angaben zu den Vergleichstechniken (Feed Forward Neural Net) widersprüchlich Überprüfbarkeit der Vorhersage kann erst nach dem Tunnelbaufortschritt vorgenommen werden

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-41: Relevanz von (Zhang et al. 2022) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Mechanical Systems and Signal Processing) mit sehr hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich. Tendenziell in Richtung hoher Zitationsindex

	Bewertung	Begründung
Vergleich geologische Datengrundlage	++	<p>Es wird ein großer Datensatz von Realdaten verwendet</p> <p>Probennahme bzw. Datenentnahme erfolgt während der Bohrung von Tunneln</p> <p>Verwendete geophysikalische Eigenschaften der Daten decken sich mit den, für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV, relevanten Gesteinseigenschaften</p> <p>Gesteinslithologien zwar nicht einsehbar, dennoch ist eine Deckungsgleichheit mit den im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteinen zu erwarten</p>
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	++	<p>Hohe Bedeutung mit der im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Problematik (Unvollständigkeit und Verlust von Probenmaterial, nötige Prospektion ohne Beeinflussung eines möglichen ewGs)</p> <p>Die adressierten geowissenschaftlichen Fragestellungen und das geologische Setting deckt sich mit den für das StandAV relevanten Fragestellungen bzw. dem geologisch erwartbaren Setting</p> <p>Besondere Relevanz während Phase III des StandAV (Untertägige Erkundungen)</p>
Übertragbarkeit der Methode	++	<p>Übertragbarkeit ist höchstwahrscheinlich unproblematisch</p> <p>Keine großen Anpassungen nötig</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist (Zhang et al. 2022) mit sehr hoher Relevanz für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellung einzuordnen, da hier während der Untertageerkundung in Phase III des StandAV beispielsweise relativ problemlos ein großer Datensatz an Realdaten generiert und ausgewertet werden kann. Zudem können bei der Prospektion Daten von geologischen Schichten gewonnen werden, die von der Beeinträchtigung von Bohrungen unberührt bleiben sollen.

6.2.7 Anwendung von KI für „Prediction“ in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geomechanics“

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit der Vorhersage mittels KI in der geowissenschaftlichen Kategorie „Geomechanics“.

- Binal (2009): Prediction of mechanical properties of non-welded and moderately welded ignimbrite using physical properties, ultrasonic pulse velocity, and point load index tests
- Feng und Seto (1998): Neural network dynamic modelling of rock microfracturing sequences under triaxial compressive stress conditions
- Mahmoodzadeh et al. (2021): Artificial intelligence forecasting models of uniaxial compressive strength
- Ogunkunle et al. (2021): Artificial intelligence model for predicting geomechanical characteristics using easy-to-acquire offset logs without deploying logging tools

- Sharma et al. (2017): Developing novel models using neural networks and fuzzy systems for the prediction of strength of rocks from key geomechanical properties

Davon legen die Abstracts aller Quellen, die oben nicht eingeklammert sind, eine Möglichkeit der Anwendbarkeit ähnlicher oder gleicher Verfahren in den Schlüsselaktivitäten des StandAV nahe. Dennoch werden alle Dokumente näher betrachtet.

6.2.7.1 **Binal (2009): Prediction of mechanical properties of non-welded and moderately welded ignimbrite using physical properties, ultrasonic pulse velocity, and point load index tests**

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Binal 2009) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen. Eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) wurde aufgrund der niedrigen Relevanz für das StandAV nicht vorgenommen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Ignimbrite sind Gesteine, welche als bims- oder aschenreiche Ablagerung aus einer Dispersion von Gesteins- und Lavafragmenten in heißen Gasen bei der explosiven Eruption eines Vulkans entsteht. Während der Ablagerung kann es bei hohen Temperaturen zum Verbacken kommen. Ignimbrite werden im Gebäudebau oder zur Denkmalerrichtung verwendet. Insbesondere in historischen Bauwerken ist es wichtig zu testen, inwiefern sich die mechanischen Eigenschaften des Gesteins verändert haben. In der Arbeit (Binal 2009) wurden physikalisch-mechanischen Eigenschaften wie Porosität, Wasseraufnahme nach Gewicht oder Druckfestigkeit von 264 Gesteinskernen labortechnisch ermittelt. Diese wurden dann statistisch ausgewertet und untersucht, wie sich die physikalischen und mechanischen Eigenschaften beeinflussen und sich dadurch z. B. das Spannungs-Dehnungs-Diagramm verändert³². Zudem wurde geprüft, wie die Analyse mit Hilfe von KNN durchgeführt werden kann und im Ergebnis wurden neue Gleichungen zur Schätzung der mechanischen Eigenschaften von Ignimbriten entwickelt.

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist die Quelle (Binal 2009) von keinerlei Relevanz für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen. Die Fallstudie wurde an Ignimbriten (Vulkanite) durchgeführt, welche für das StandAV nicht nur irrelevant sind, sondern als Gebiete mit vulkanischen Gesteinen und somit potenzieller vulkanischer Aktivität für die Standortauswahl ausdrücklich gemieden werden sollen. Somit erfüllen die hier untersuchten Gesteine die Ausschlusskriterien des StandAV, was aber Voraussetzung für eine Untersuchung der Schlüsselaktivitäten (geoWKS) innerhalb des StandAV ist. Eine Bewertung der in der Quelle beschriebenen KI-Methode erfolgt aus diesem Grund nicht.

³² Das Spannungs-Dehnungs-Diagramm ist ein direktes Ergebnis eines Zugversuchs. Beim Zugversuch wird eine Normprobe auf Zug beansprucht. Die Dabei auftretende Dehnung und Spannung wird anschließend in einem Diagramm angetragen (<https://www.precifast.de/elastizitaetsmodul-e-modul/>)

6.2.7.2 **Feng und Seto (1998): Neural network dynamic modelling of rock microfracturing sequences under triaxial compressive stress conditions**

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation von (Feng und Seto 1998) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Mikrobruchvorgänge und Rissentstehung im Gestein (Spröbruch³³) ist für die Erdbebenvorhersage oder bautechnische Umsetzung im Bereich von Untertagebau wie Berg- oder Tunnelbau von wesentlicher Bedeutung. Bei der Errichtung der Konstruktionen im Untertagebau gerät das Gestein während der Ausgrabung der Hohlräume aus dem Gleichgewicht, und es können sich Risse bilden, welche die Barrierewirkung schwächen. In der Forschung zum Spröbruch und zur Rissbildung in druckbelasteten Gesteinskörpern wird der Parameter akustische Emission (AE) bestimmt. Als AE wird ein elastischer Wellenzug definiert, der durch abrupte Freisetzung kinetischer Energie in einem deformierten Material wie einem Gestein erzeugt wird. Durch diese freigesetzte Energie während der Ausbreitung der akustischen Emissionen kann es zu Mikrobruchstrukturen im Gestein kommen und so zum Verständnis der Rissbildung besser bewertet werden.

Die AE während Mikrofrakturierungsprozessen im Gestein wurden mit einem dynamischen Modell der NN nachgebildet. Zur Validierung wurden Triaxialversuche³⁴ an einem Laborstandard eines Gosford Sandsteins verwendet, welche mit einer Messung der AE begleitet wurden. Für das Erstellen des Modells wurde ein einfaches Künstliches Neuronales Netz verwendet. Dabei wurden als Eingangsdaten (Input) vergangene Messungen benutzt. Zusätzlich wurde die vom NN aus dem Schritt zuvor getroffene Vorhersage verwendet, sodass es sich teilweise um eine Autoregression handelt. Um den Lernprozess zu verbessern, wurde ein spezieller Lernalgorithmus verwendet, der aus 12 Schritten besteht und ein Modell mit einer besseren Generalisierungsfähigkeit erzeugt. Dieser Algorithmus ermöglicht es durch ein Feedbacksystem ein besseres Optimum zu finden, in dem der AE-Vorhersagefehler minimal ist.

³³ Fragmentierungsprozess, der keine bleibenden Änderungen im Gestein zulässt, außer seine Teilung in Stücke

³⁴ Belastungsversuche im Labor, bei welchen eine Probe aus drei verschiedenen Richtungen (Achsen) belastet wird, um Aussagen über das Spannungs- und Verformungsverhalten einer Probe zu treffen

Bewertung Feng und Seto 1998

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-42: Bewertung der angewandten KI-Methode in Feng und Seto (1998)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Quelle der Daten zitiert Sammlung der Daten beschrieben Echte Daten
technologischer Reifegrad	++	Einfaches Neuronales Netz, allgemeines KI Wissen spezieller Lernalgorithmus ist kein KI-Allgemeinwissen Verbesserter Lernalgorithmus vorgestellt
Nachvollziehbarkeit	-	Black Box-Verfahren Finden des besten Modells transparent gemacht Verschiedene Architekturen gegenübergestellt Architektur des besten Modells liegt vor Verbesserter Lernalgorithmus ist transparent vorgestellt Notwendigkeit des verbesserten Lernalgorithmus nicht klar ersichtlich, keine Gegenüberstellung zu etabliertem Trainingsverfahren

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-43: Relevanz von (Feng und Seto 1998) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Tectonophysics) mit hohem Impactfaktor Ordentlicher Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	-	Daten von Laborversuchen an einem Standard (Gosford Sandstein) werden verwendet, daher Datensatz aus geowissenschaftlicher Sicht nicht repräsentativ für das StandAV Untersuchte geophysikalische Eigenschaften der Gesteinsproben decken sich mit den für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV relevanten Gesteinseigenschaften Rohdaten reflektieren nicht die im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	+	Hohe Bedeutung mit der im StandAV geowissenschaftlichen Problematik (Untertageerkundung in Phase III des StandAV) Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist dennoch ersichtlich und lässt einen Vergleich zu
Übertragbarkeit der Methode	+	Übertragbarkeit wäre vielversprechend und mit hoher Relevanz, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist Anpassung höchstwahrscheinlich unproblematisch

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Quelle (Feng und Seto 1998) ist trotz des theoretischen Versuchsaufbaus tendenziell als eher relevant einzustufen. Es besteht Deckungsgleichheit in der geologischen Datengrundlage und Anwendung. Die hier adressierten geowissenschaftlichen Fragestellungen sind für Fragestellungen der Schlüsselaktivitäten sowie für die Untertageerkundung und Prospektion geologischer Schichten in Phase III des StandAV interessant. Mit der nötigen Anpassung der geologischen Datengrundlage auf die im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine ist eine generelle Übertragbarkeit und Anwendung vorstellbar.

6.2.7.3 Mahmoodzadeh et al. (2021): Artificial intelligence forecasting models of uniaxial compressive strength

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Mahmoodzadeh et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Im Tief- bzw. Untertagebau wird zur Beschreibung der Gesteinsfestigkeit bzw. Tragfähigkeit der geomechanische Parameter der einaxialen UCS herangezogen. Dies ist die maximale Druckspannung, die ein Gestein bei einer axialen Belastung aufnehmen kann. Der Parameter wird im Labor an Bohrkernproben untersucht. Aufgrund des Aufwands bei der Probenentnahme und den labor-technischen Untersuchungen stehen wenig Messdaten zur Verfügung und dieser Parameter wird häufig geschätzt. Zur Vorhersage bzw. Schätzung der UCS werden probabilistische Methoden eingesetzt, welche zunehmend mit den Methoden der künstlichen Intelligenz ergänzt werden. Ziel der Arbeit (Mahmoodzadeh et al. 2021) war es, solche Methoden zur Abschätzung des UCS auf verschiedene Gesteinstypen aus iranischen Gesteinsbrüchen anzuwenden und im Vergleich zu bewerten. Dafür wurden 170 Datensätze ausgewertet, um Aussagen über verschiedene druckfestigkeits-

bezogene Gesteinsparameter wie Porosität, den Schmidt-Hammer Test³⁵, die P-Wellen-Geschwindigkeit³⁶ und den Punktlastindex³⁷, aus welchen die UCS berechnet wird. Diese Parameter dienen als unabhängige Eingangsvariablen (Input) und haben unterschiedliche physikalische Dimensionen. Die Ausgangsvariable (Output) des Modells ist das UCS in einer Dimension von etwa 0-300 [MPa]. In der Arbeit (Mahmoodzadeh et al. 2021) werden die Ergebnisse der ML-Modelle mit wahren Werten verglichen sowie mit Resultaten der Vorarbeiten und anschließend untereinander. Bewertet wurden die Schätzungen der UCS mit Hilfe der Methoden der long short-term memory Neuronen, der tiefen neuronalen Netze, des K- Nearest Neighbour Regression, der Gaussian Process Regression, der Support Vector Regression und des Decision Trees.

³⁵ Der Rückprallhammer (Schmidt-Hammer) ist ein Instrument zur zerstörungsfreien Werkstoffprüfung, mit dem die Druckfestigkeit z. B. von Beton oder Gestein punktwise gemessen werden kann (<https://de.wikipedia.org/wiki/R%C3%BCckprallhammer>)

³⁶ P-Wellen kurz für Primärwellen, sind Longitudinalwellen, d. h., sie schwingen in Ausbreitungsrichtung. Sie können sich in festen Gesteinen, aber auch in Flüssigkeiten wie Wasser oder den quasi flüssigen Teilen des Erdinneren ausbreiten. Es handelt sich dabei um Verdichtungswellen (auch: Druck- oder Kompressionswellen), ähnlich den Schallwellen in der Luft oder im Wasser. Ausbreitungsgeschwindigkeit der P-Wellen widerspiegelt die Eigenschaften wie z. B. Dichte (In Anlehnung an https://de.wikipedia.org/wiki/Seismische_Wellen#P-Wellen)

³⁷ Punktlastindex wird durch die Bestimmung der Punktlastfestigkeit an Bohrkernen ermittelt (<https://www.spektrum.de/lexikon/geowissenschaften/punktlastversuch/12895>)

Bewertung Mahmoodzadeh et al 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-44: Bewertung der angewandten KI-Methode in (Mahmoodzadeh et al. 2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	++	Datengrundlage ausführlich diskutiert und beschrieben Reale Daten (Iran) Daten in der Studie enthalten Datengrundlage klein, nur 170 Datensätze
technologischer Reifegrad	++	Es wurden viele verschiedene ML-Verfahren angewandt und miteinander verglichen Keiner der Algorithmen ist an sich ein Novum oder hat eine „Besonderheit“ Algorithmen werden vorgestellt und erklärt Weiterführende Literatur wird zitiert
Nachvollziehbarkeit	+	Viele Auswertungskriterien vorgestellt und angewandt Es werden nur Black Box-Modelle verglichen Hyperparameter und Parameter der Modelle angegeben, sogar mit Codebeispiel

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-45: Relevanz von (Mahmoodzadeh et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Sehr hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Transportation Geotechnics) mit hohem Impactfaktor Ordentlicher Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	++	Verwendung von geophysikalischen Daten aus umfangreicher Literaturstudie Untersuchte geophysikalische Eigenschaften der Gesteinsproben decken sich mit den für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV relevanten Gesteinseigenschaften Genutzte Gesteinstypen entsprechen den im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	++	<p>Deckungsgleichheit in der Grundproblematik gegeben (Untertageerkundung in Phase III des StandAV)</p> <p>Hohe Bedeutung mit der im StandAV relevanten geowissenschaftlicher Problematik</p> <p>Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist dennoch ersichtlich und lässt einen Vergleich zu</p>
Übertragbarkeit der Methode	++	<p>Methode mit hoher Relevanz</p> <p>Anwendung und Anpassung generell gut vorstellbar und unproblematisch</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Quelle (Mahmoodzadeh et al. 2021) ist trotz der fehlenden Anwendung der Methode auf eine direkt adressierte geowissenschaftliche Fragestellung als sehr relevant für das StandAV einzuschätzen. Eine Anwendung und Übertragung der Methode auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen während der Untertageerkundung und Prospektion geologischer Schichten in Phase III des StandAV wäre von großer Bedeutung.

6.2.7.4 Ogunkunle et al. (2021): Artificial intelligence model for predicting geomechanical characteristics using easy-to-acquire offset logs without deploying logging tools

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Ogunkunle et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Zur Charakterisierung einer geologischen Formation müssen geophysikalische, petrographische und ingenieurtechnische Daten gewonnen werden. Diese werden im Wesentlichen mit Hilfe verschiedener Bohrlochmessungen erhoben, wobei die geophysikalischen Eigenschaften mit Bohrlochmessgeräten kontinuierlich erfasst werden. Bei den Bohrlochmessungen im Gelände kommt es immer wieder zu Schwierigkeiten, die aus verschiedenen Gründen zur Unvollständigkeit oder sogar dem Verlust der Messdaten oder des Probenmaterials führen können. Fehlende oder unvollständige Daten haben eine ungenaue und fehlerbehaftete Abschätzung der Eigenschaften der geologischen Formation wie Fluidsättigung zu Folge. Daher ist es wichtig, eine Methode zu finden, mit der eine Wiederherstellung von Daten und der Aufbau einer zuverlässigen Datenbasis möglich ist. Bei dieser Methode wurden in letzter Zeit häufig Algorithmen der KI verwendet.

In der Arbeit (Ogunkunle et al. 2021) wurden Random Forest und Neuronale Feed Forward Netze genutzt, um geophysikalische Gesteinseigenschaften vorherzusagen und somit beispielsweise eine Unvollständigkeit bei akustischen und mechanischen Messwerten effizient zu umgehen. Dazu wur-

den Daten aus insgesamt 18 Bohrlochbohrungen in Sandsteinvorkommen des Nigerdeltas mit über 130.000 Datenpunkten ausgewertet, um geophysikalische Messverfahren zur Bestimmung der Bohrlochmessungen, wie z. B. der Erfassung der Teufe und des Durchmessers sowie der Gesteinseigenschaften, wie z. B. der Dichte, der natürlichen Gammastrahlung, der elektrischen Leitfähigkeit und der Laufzeit von Schall- und Kompressionswellen anzuwenden. Letztere werden insbesondere für die Berechnung der mechanischen Eigenschaften des Gesteins wie der Porosität und des Porendrucks genutzt.

Ziel der Arbeit (Ogunkunle et al. 2021) war es, ein „real-time network“ mit Hilfe eines künstlichen Neuronalen Netzes zu entwickeln, mit welchem die Laufzeiten der Schall- und Kompressionswellen im Falle unvollständiger Bohrlochmessdaten abgeschätzt werden können. In dem Paper wurden zwei Methoden der Künstlichen Intelligenz verwendet. Die Technik „Random Forest Decision Tree“ erzeugt beim Training einen Entscheidungsbaum, mithilfe dessen das Modell die ihm gestellte Aufgabe löst. Bei der zweiten Technik, dem Multilayerperceptron, handelt es sich um ein einfaches, mehrschichtiges Neuronales Netz. Beide Modelle bauen auf den oben genannten spezifischen Messwerten der Bohrlochmessungen als unabhängige Eingangsvariablen (Input) auf und generieren Vorhersagen (Output) für die akustischen Messwerte, als abhängige Variable. Die Ergebnisse beider Modelle werden durch Metriken der mittleren quadratischen Abweichung, Bestimmtheitsmaß, und der mittleren absoluten Abweichung dargestellt.

Bewertung Ogunkunle et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-46: Bewertung der angewandten KI-Methode in Ogunkunle et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Reale Daten benutzt (Niger Delta) Statistische Beschreibung der Daten vorgestellt Korrelationen der Daten diskutiert Quelle der Daten nicht eindeutig erkennbar
technologischer Reifegrad	+	Es werden weitere Verfahren genannt und zitiert, eine gute Übersicht über Verfahren, Anwendungsgebiete etc. liegt vor Es werden zwei Verfahren gegenübergestellt Random Forest und Künstliches Neuronales Netz
Nachvollziehbarkeit	-	Random Forest ist zwar Black Box-Verfahren, aber es gibt Arbeiten, die die Entscheidungsbäume zu interpretieren versuchen Künstliches Neuronales Netz ist Black Box-Verfahren Gute Übersicht über Verfahren, Anwendungsgebiete etc. liegt vor Guter Flowchart für Random Forest Parameter der Verfahren angegeben Übersichtlicher Vergleich beider Techniken

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-47: Relevanz von (Ogunkunle et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Petroleum) mit ordentlichem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	+	Realdaten (Sandsteine) Großer Realdatensatz aus geophysikalischen Bohrlochmessungen

		<p>Verwendete geophysikalische Eigenschaften der Daten decken sich mit den für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV relevanten Gesteinseigenschaften</p> <p>Gesteinsproben entsprechen nicht den im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine</p>
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	++	<p>Deckungsgleichheit in der Grundproblematik gegeben (Über-/Untertageerkundung in Phase II und III des StandAV)</p> <p>Hohe Bedeutung mit der im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Problematik</p> <p>Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet</p>
Übertragbarkeit der Methode	++	<p>Übertragbarkeit ist gegeben und von hoher Relevanz, wenn die Methode auf potenzielle Wirtsgesteine des StandAV anwendbar ist</p> <p>Anpassung höchstwahrscheinlich unproblematisch, aber dennoch zwingend notwendig.</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist die Quelle (Ogunkunle et al. 2021) von großer Relevanz für geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV. Eine Anwendung und Übertragung der Methode auf die geoWK sowie während der Über-/Untertageerkundungen und Prospektion geologischer Schichten in Phase II und III des StandAV wäre von großer Bedeutung. Mit der notwendigen Anpassung der geologischen Datengrundlage auf die im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine ist eine generelle Übertragbarkeit und Anwendung sehr gut vorstellbar.

6.2.7.5 Sharma et al. (2017): Developing novel models using neural networks and fuzzy systems for the prediction of strength of rocks from key geomechanical properties

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Sharma et al. 2017) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die UCS ist einer der wesentlichen Parameter zur Beschreibung der Festigkeit bzw. Tragfähigkeit eines Gesteins und im Bereich des Berg- oder Tunnelbaus oder anderen Gebieten der Geotechnik unverzichtbar. Der Parameter wird zum Teil messtechnisch im Labor ermittelt, was aber mit einem erheblichen Aufwand während der Präparation der Proben vor den eigentlichen Tests verbunden ist. Daher haben sich verschiedene probabilistische Methoden etabliert, welche sich an den festigkeitsbezogenen Gesteinsparametern orientieren, aus welchen die USC berechnet wird.

Im Rahmen der Studie (Sharma et al. 2017) wurden 13 Gesteinsprobentypen von fünf geologischen Standorten in Indien entnommen und Laboranalysen durchgeführt. Daraus konnten 94 Datensätze

geotechnischer Eigenschaften, wie die P-Wellen-Geschwindigkeit, die Dichte, der Zerfallsbeständigkeitsindex³⁸ und die einaxiale Druckfestigkeit (UCS) bestimmt werden. Zur Ermittlung etwaig auftretender Korrelationen zwischen den einzelnen Parametern wurde eine Regressionsanalyse durchgeführt. Daraufhin wurde ein Modell unter der Anwendung der ANFIS Methode mit den Werten der P-Wellen-Geschwindigkeit, der Dichte, der Zerfallsbeständigkeit als Eingangsparameter trainiert und anschließend der UCS als Zielgröße vorhergesagt.

Bei der ANFIS-Methode handelt es sich um eine Kombination eines künstlichen Neuronalen Netzes und einem vordefiniertem Regelkatalog. Dabei entscheidet das vorgeschaltete künstliche Neuronale Netz welche Regel aus dem Regelkatalog für den aktuell eingegangenen Input angewandt werden soll.

³⁸ Die Zerfallsbeständigkeit wird durch den Siebtrommelversuch bestimmt. Es ist ein spezieller Versuch in dem die Proben sowohl einer mechanischen Beanspruchung (Rotation der Siebtrommeln), als auch einer Befeuchtung unterzogen werden. Für den aus dem angloamerikanischen Raum stammenden Versuch liegt seit 2002 eine deutsche Versuchsempfehlung vor (Empfehlung Nr. 20 des DGGT-Arbeitskreises 3.3. Versuchstechnik Fels; http://www.geomesstec.de/images/pdfs/2012_tae_veraend.pdf)

Bewertung Sharma et al. 2017

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-48: Bewertung der angewandten KI-Methode in Sharma et al. (2017)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	+	Echte Daten benutzt Daten werden vorgestellt und beschrieben Herkunft und Datengewinnung für Fachleute beschrieben Daten nicht öffentlich bereitgestellt
technologischer Reifegrad	+	ANIFS ist an sich kein Novum Weiterführende Literatur erwähnt
Nachvollziehbarkeit	+	Parameter und Architekturen für Algorithmen bereitgestellt ANFIS wird erklärt ANFIS ist ein Hybrid aus Neuronalem Netz und Regeln Regeln tragen zur Transparenz des Verfahrens bei

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-49: Relevanz von (Sharma et al. 2017) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Measurement) mit hohem Impactfaktor Hoher Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	++	Gesteinsproben unterschiedlicher Lithologien Solider Datensatz geophysikalischer Labormessungen Verwendete geophysikalische Eigenschaften der Daten decken sich mit den für die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV relevanten Gesteinseigenschaften Gesteinsproben entsprechen nur in geringer Anzahl den im StandAV relevanten potenziellen Wirtsgesteine
Deckungsgleichheit der	+	Deckungsgleichheit in der Grundproblematik gegeben (Über-/Untertageerkundung in Phase II und III des StandAV)

	Bewertung	Begründung
geowissenschaftlichen Anwendung		Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist dennoch ersichtlich und lässt einen Vergleich zu
Übertragbarkeit der Methode	+	Übertragbarkeit ist gegeben und von Relevanz Anpassung höchstwahrscheinlich unproblematisch, dennoch aber zwingend notwendig

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Studie von (Sharma et al. 2017) kann generell als relevant eingeschätzt werden. Eine Anwendung und Übertragung der Methode auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen, während der Über-/Untertageerkundungen und Prospektion geologischer Schichten in Phase II und III des StandAV wäre von großer Bedeutung.

6.2.8 Anwendung von KI für „Surrogate Modelle“ in der geowissenschaftlichen Kategorie

Folgende wissenschaftliche Quellen beschäftigen sich mit Ersatzmodellen mittels KI in der geowissenschaftlichen Kategorie „Hydro“:

- Castrillo und García (2020): Estimation of high frequency nutrient concentrations from water quality surrogates using machine learning methods)
- Jiang et al. (2021): Deep residual U-net convolution neural networks with autoregressive strategy for fluid flow predictions in large-scale geosystems
- Karra et al. (2018) Modeling flow and transport in fracture networks using graphs
- Prasianakis et al. (2020): Neural network based process coupling and parameter upscaling in reactive transport simulation

Davon legen die Abstracts aller Quellen, die oben nicht eingeklammert sind, eine Möglichkeit der Anwendbarkeit ähnlicher oder gleicher Verfahren in den Schlüsselaktivitäten des StandAV nahe. Entsprechend werden diese Dokumente betrachtet.

6.2.8.1 Castrillo und García (2020): Estimation of high frequency nutrient concentrations from water quality surrogates using machine learning methods

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Castrillo und García 2020) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen. Eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) wurde aufgrund der niedrigen Relevanz für das StandAV nicht vorgenommen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Eine wichtige Aufgabe des Wassermanagements ist die Überwachung der Wasserqualität. Einige Parameter der Wasserqualität können nur schwierig ermittelt werden oder deren Ermittlung ist unwirtschaftlich. Daher soll die Wasserqualität mit Hilfe eines Modells und mit Ersatzparametern als indirekte Indikatoren eingeschätzt werden. In der Arbeit (Castrillo und García 2020) wurden Variablen, die üblicherweise in-situ gemessen werden, als Surrogate verwendet, um die Nährstoffkonzentrationen in einem ländlichen Einzugsgebiet und in einem städtischen Einzugsgebiet abzuschätzen.

Bewertung und Fazit

(Castrillo und García 2020) adressiert Fragestellungen im Bereich des Oberflächenwasser- oder Grundwassermonitorings und ist daher tendenziell eher irrelevant für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen. Eine genauere Bewertung der in der Quelle beschriebenen KI-Methode erfolgt aus diesem Grund nicht.

6.2.8.2 Jiang et al. (2021): Deep residual U-net convolution neural networks with autoregressive strategy for fluid flow predictions in large-scale geosystems

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Jiang et al. 2021) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Die Beschreibung der Fließwege und Transportvorgänge in einem Grundwassersystem mit Hilfe der Mehrphasenströmungsmodelle ist sehr komplex und die ermittelbaren Informationen über die Heterogenität des Systems mit großen Unsicherheiten behaftet. Um die Kosten der aufwändigen klassischen Modellierung zu reduzieren und die Unsicherheit der Strömungsmodelle zu quantifizieren, wird zunehmend die Option der Surrogat-Strategien bzw. Surrogat-Modellen geprüft.

In der Arbeit (Jiang et al. 2021) wurde ein Deep-Learning-Ersatzmodell entwickelt, mit welchem die Vorhersage der zeitabhängigen Mehrphasenströmung in einem zweidimensionalen Grundwassersystem durchgeführt wurde. Ziel war es, Sättigung und Druckhöhen über der Fläche zu berechnen. In der Studie wurde eine autoregressive Datenverarbeitungsstrategie vor dem DNN-Training angewandt, um die Leistung der DNN-Methode bei der Vorhersage von zeitlich variierender Sättigung und Druck in einem Grundwasserproblem zu verbessern. Für dieses Surrogatmodell wurde die Residual-U-Netz-Architektur gewählt. Sie wandelt die Surrogat-Modellierungsaufgabe in ein Bild-zu-Bild-Regressionsproblem um, um die Eigenschaften von KNN in der Bildverarbeitung zu nutzen. Dabei wurden zweidimensionale Abbildungen zunächst einem Autoregressionsprozess unterzogen, um die Datengrundlage zu erweitern.

Bei dem autoregressive residual U-net (AR-Runet) handelt es sich um ein NN mit einer besonderen Architektur. Zunächst besteht das U-Net aus Residualen Blöcken. Die Informationen können über diese Blöcke in die nächsten oder übernächsten Blöcke überspringen ohne, dass sie durch Zwischenschichten durchlaufen müssen. Außer dem technischen Vorteil, dass sie ein bekanntes Problem des Deep Neural Learnings lösen können (Vanishing Gradient Problem), ermöglicht die besondere U-Form eine bessere Skalierung und Arbeit mit den Bilddaten. Bei dem Verfahren handelt es sich um eine Image-to-Image regression, was bedeutet, dass sowohl Input und Output Bilddaten sind.

Bewertung Jiang et al. 2021

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-50: Bewertung der angewandten KI-Methode in Jiang et al. (2021)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	-	Herkunft und Beschreibung des Datensatzes nicht gegeben Daten künstlich generiert via CCSIM Parameter für Generierung des Modells gegeben
technologischer Reifegrad	+	Physisch-basierte Surrogate Modelle, weiterführende Quellen zitiert U-net ist im Grunde einfaches Neuronales Netz mit einer besonderen Architektur Architektur des U-Net wird erklärt
Anwendbarkeit	+	Berechnungen mit Governing Equations werden ersetzt
Nachvollziehbarkeit	--	Gleichungen, die ersetzt werden müssen, werden beschrieben Hyperparameter und Architektur des Modells werden angegeben Black Box-Modell Es wird nicht erwähnt, warum Autoregression Preprocessing vor dem AR-U-Net davor geschaltet wird Autoregression wird nicht genau beschrieben

Verkürzte Likert-Skala: -- für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-51: Relevanz von (Jiang et al. 2021) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Advances in Water Resources) mit hohem Impactfaktor Veröffentlichung relativ neu, keine verlässliche Aussage über Zitationsindex möglich
Vergleich geologische Datengrundlage	--	Es werden keine Realdaten verwendet Datensatz ist künstlich generiert Daten entsprechen nicht dem geochemischen Verhalten des im StandAV relevanten Fluid- und Stofftransport

	Bewertung	Begründung
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	+	<p>Deckungsgleichheit in der geowissenschaftlichen Grundproblematik gegeben (grundsätzliche Betrachtung von Transport in Grundwassersystemen)</p> <p>Die Methode adressiert eine Problematik mit großer Relevanz bei den zu erwartenden geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV</p> <p>Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist darüber hinaus zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden</p>
Übertragbarkeit der Methode	-	<p>Übertragbarkeit unter Anpassung des Ausgangsszenarios und der Simulation/Modellierung auf das StandAV generell gegeben, wenn die Methode auf die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen anwendbar ist</p> <p>Die Validierung und Evaluation der Methode unter Anwendung von Realdaten ist erforderlich</p>

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Die Studie von (Jiang et al. 2021) ist auf Grund der Bedeutung der geowissenschaftlichen Grundproblematik tendenziell als eher relevant einzuschätzen. Allerdings ist eine genaue Bewertung auf Grund des Fehlens eines realen geologischen Datensatzes und der Tatsache, dass keine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet wird, zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber auch nicht ausgeschlossen werden.

6.2.8.3 Karra et al. (2018): Modeling flow and transport in fracture networks using graphs

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Karra et al. 2018) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Kluft-Systeme sind die wichtigsten Fließ- und Transportwege in Gesteinen und können über Flächen von wenigen Millimetern bis zu Ausmaßen von mehreren Kilometern Gesteinsdurchlässigkeiten erzeugen. Die Beschreibung der detaillierten Strukturen von Kluftsystemen im Rahmen der Diskretisierung (siehe hierzu Erläuterungen in Kapitel) des betrachteten Raums und die Erfassung der Strömung und des Transports in einem Transportmodell sind sehr aufwändig, die Erfassung der Strukturen des Untergrundes im Modell mit Unsicherheiten behaftet. Eine Schwierigkeit ist dabei, die Struktur der kleinen und großen Klüfte sowie deren Vernetzbarkeit als Fluidwege zu beschreiben. Häufig wird daher das Kluftsystem als ein Datensatz von planaren Bildern der Kluftstrukturen in einem dreidimensionalen Raum dargestellt und darüber die Transportgleichungen gelöst. Die Methode heißt Diskretes Frakturnetz (discrete fracture network, DFN). Auch wenn diese Methode gute

Ergebnisse erzielt, bleibt die Diskretisierung der Kluffstrukturen und Erzeugung des dreidimensionalen Raums sehr aufwändig. In dieser Arbeit wird DFN mit einem vorgeschlagenen, neuen Verfahren verglichen, dem „bias correction methodology to the graph algorithm“. Dabei handelt es sich um eine Vorgehensweise, bei der statt der klassischen numerischen Berechnung des gesamten Netzes ein Equivalent-Graph aufgebaut wird. In diesem Equivalent-Graph werden die Schnittlinien der Bruchflächen der tatsächlichen Klüfte durch ihre Mittelpunkte (Graphknoten) repräsentiert. Die Bruchflächen haben dabei eine begrenzte Ausdehnung, sodass jede Bruchfläche nur eine begrenzte Anzahl der übrigen Bruchflächen in einer Schnittlinie (Graphkante) schneidet. Die möglichen Transportpfade des Kluffnetzes werden durch Punktverbindungen repräsentiert und so entsteht ein räumliches Verbindungsnetzwerk. Für jede Graphkante werden die geometrischen Eigenschaften (Länge, Klufföffnung, usw.) sowie die hydraulischen Eigenschaften (Permeabilität, Porosität, usw.) als der Graphkante zugeordnete Parameter gespeichert. Damit vermeidet man das Problem, dass man das gesamte Kluff- bzw. Frakturnetz lösen muss, was sich sehr zeitsparend auswirkt. Anschließend berechnet der Algorithmus in mehreren Schritten das Modell anhand des generierten Graphen.

Bewertung Karra et al. 2018

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-52: Bewertung der angewandten KI-Methode in Karra et al. (2018)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	- -	Daten künstlich generiert Modellierungsprozess nur grob beschrieben Statistische oder ähnliche Beschreibung der Daten nur mangelhaft
technologischer Reifegrad	-	Sehr spezielle Technik Es gibt vergleichbare Techniken
Anwendbarkeit	+	Eine vorhandene Technik wird verbessert
Nachvollziehbarkeit	++	Keine Black Box Algorithmus beschrieben

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-53: Relevanz von (Karra et al. 2018) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	+	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Physical Review E) mit ordentlichem Impactfaktor Veröffentlichung mit hohem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	- -	Es werden keine Realdaten verwendet Datensatz ist künstlich generiert Daten entsprechen nur einer Form des geochemischen Verhaltens des im StandAV relevanten Fluid- und Stofftransport
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	-	Sehr hohe Bedeutung mit der im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Problematik (Fluid- und Stofftransport entlang von Störungszonen) Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist darüber hinaus zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden

	Bewertung	Begründung
Übertragbarkeit der Methode	- -	Übertragbarkeit ist auf Grund der fehlenden Validierung und Evaluation der Methode durch die Anwendung von Realdaten zum jetzigen Zeitpunkt nicht ersichtlich

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist die Bedeutung von (Karra et al. 2018) sehr schwer einzuschätzen. Einerseits wird eine vielversprechende Methode vorgestellt, welche eine sehr hohe Relevanz, für die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen aufweisen könnte. Andererseits bleibt durch den theoretischen Versuchsaufbau, der fehlenden Deckungsgleichheit bei der geowissenschaftlichen Anwendung und dem geologischen Datensatz eine Übertragbarkeit und Anwendung nur schwer vorstellbar. Ohne eine Beschreibung einer möglichen und realen Anwendung und Validierung der Methode seitens der Autoren, muss die Quelle deshalb als eher gering relevant eingestuft werden.

6.2.8.4 Prasianakis et al. (2020): Neural network based process coupling and parameter upscaling in reactive transport simulations

Im Folgenden ist die geowissenschaftliche Motivation der Quelle (Prasianakis et al. 2020) und die konkrete Umsetzung mittels KI zum Zweck der Lösung einer speziellen Problemstellung beschrieben. Anschließend wird eine Bewertung entsprechend dem Bewertungsschema (Kapitel 6.2.2) vorgenommen und auf die Übertragbarkeit auf Verfahren und Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV eingegangen.

Geowissenschaftliche Motivation und mit KI umgesetzte Problemstellung

Der Transport von in Fluiden gelösten chemischen Komponenten im Porenraum eines Gesteins zeichnet sich durch vielfältige Reaktionen der Komponenten untereinander sowie mit den Porenoberflächen aus. Die mehrskalige Modellierung dieser reaktiven Transporte in den Gesteinen beschreibt die Prozesse auf verschiedenen Raumebenen: von der Mikrostruktur einer Pore bis hin zum Porennetz einer betrachteten Region. Einerseits ist es das Ziel, die mikroskopischen geochemischen Speziationen (Formen einer chemischen Substanz) und Oberflächenreaktionen zu betrachten, andererseits den Transport durch ein Porennetzwerk im großen Gesteinsraum (im Größenraum von Kubikdezimetern oder -metern) zu quantifizieren. Dabei figurieren die Parameterwerte wie hydraulische Leitfähigkeit oder Permeabilität als gemittelte, über eine Distanz konstant bleibende Größen (Darcy-Skala im Kontinuum).

Mithilfe eines künstlichen Neuronalen Netzes wird ein datengetriebenes Modell erstellt, welches chemische Variablen als Input benutzt und einen Sättigungsindex als Output herausgibt. Im nächsten Schritt wird das so antrainierte Modell in ein „macroscopic reactive transport“-Modell integriert. Mit dem Verfahren wird das Aufskalieren der chemischen Reaktionsgleichungen ermöglicht und eine schnellere Simulation von großen 3D reaktiven Transporten gewährleistet.

Das damit entwickelte Modell vermittelt den Transfer der Informationen zwischen den physikalischen Teilmodellen auf den unterschiedlichen, räumlichen Skalen. Dabei wird nicht nur die Berechnung ermöglicht, sondern auch die Berechnungsgeschwindigkeit deutlich erhöht.

Bewertung Prasianakis et al. 2020

Zunächst erfolgt eine allgemeine Bewertung der angewandten KI-Methode für die jeweils beschriebene geowissenschaftliche Fragestellung. In einem zweiten Schritt wird die Relevanz der Quelle für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht eingeordnet.

Tabelle 6-54: Bewertung der angewandten KI-Methode in Prasianakis et al. (2020)

	Bewertung	Begründung
Datengrundlage	- -	Herkunft der Daten unbekannt, vermutlich reine Simulation
technologischer Reifegrad	++	Es gibt andere ML- Technologien für dieselbe Aufgabe Einfaches Multi Layer Perceptron Netz
Anwendbarkeit	+	Ein vorhandener Prozess wird ersetzt (Simulation) das Verfahren wird erwähnt und beschrieben Es gibt andere ML- Technologien für selbe Aufgabe Quellen zitiert
Nachvollziehbarkeit	-	Black Box-Verfahren Hyperparameter und Entwicklungsumgebung angegeben Bisherige Prozesse haben auch Mängel, physische Hintergründe zu erklären, deswegen gibt es keine Verschlechterung in der Nachvollziehbarkeit Verfahren löst „nur“ das Problem einer schnellen Berechnung

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Tabelle 6-55: Relevanz von (Prasianakis et al. 2020) für das StandAV aus geowissenschaftlicher Sicht

	Bewertung	Begründung
Erfüllung wissenschaftlicher Standards und Impact	++	Hoher wissenschaftlicher Standard und Nachvollziehbarkeit des Aufbaus und des Vorgehens gewährleistet Journal (Geochimica et Cosmochimica Acta) mit sehr hohem Impactfaktor Veröffentlichung mit hohem Zitationsindex
Vergleich geologische Datengrundlage	-	Es werden keine Realdaten verwendet Datensatz ist künstlich generiert
Deckungsgleichheit der geowissenschaftlichen Anwendung	-	Hohe Bedeutung mit der im StandAV relevanten geowissenschaftliche Fragestellungen (reaktiven Fluid- und Stoff- und Wärmetransport auf verschiedenen Skalen) Die Methodik zur Lösung der geowissenschaftlichen Problematik wird nicht auf eine real existierende bzw. für das

	Bewertung	Begründung
		StandAV relevante geowissenschaftliche Fragestellung angewendet. Eine mögliche Anwendung ist darüber hinaus zum jetzigen Zeitpunkt wenig ersichtlich, soll aber nicht ausgeschlossen werden
Übertragbarkeit der Methode	- -	Übertragbarkeit ist auf Grund der fehlenden Validierung der Methode durch die Anwendung von Realdaten zum jetzigen Zeitpunkt nicht ersichtlich Anwendung ohne gegebene Realdaten und adressierte geowissenschaftlichen Fragestellung schwer vorstellbar

Verkürzte Likert-Skala: - - für „überhaupt nicht günstig“, - für „eher nicht günstig“, + für „eher günstig“ und ++ für „günstig“

Quelle: Eigene Darstellung

Fazit

Aus geowissenschaftlicher Sicht ist (Prasianakis et al. 2020) aus mehreren Gründen schwer einzuschätzen. Einerseits geben die Autoren an, dass Methode für die Anwendung im Bereich des technischen Geoengineerings geeignet ist, andererseits bleibt der gesamte Versuchsaufbau und die Methode sehr theoretisch und das Fehlen einer geowissenschaftlichen Anwendung oder die Beschreibung der Art und Weise einer Anwendung führen dazu, dass eine Übertragbarkeit auf, die im StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellung schwer vorstellbar ist. Deshalb wird die Quelle als eher gering relevant eingestuft.

6.3 Identifizierte Potenziale für den Einsatz der KI in den einzelnen geowissenschaftlichen Kategorien

Die Bewertung der Fallbeispiele zeigt, dass zu den Kernstärken der KI generell das Datenmanagement gehört. Im Bereich der Geodatenverarbeitung gewinnen zunehmend die Analyse von großen Datenmengen sowie auch die Interpretation ungenauer Daten mit Hilfe von KI an Bedeutung. Ein weiterer großer Nutzen der KI-Methoden in den geowissenschaftlichen Kategorien besteht in der Beschleunigung von zeitaufwendigen numerischen Berechnungen oder in der Optimierung der an die Datenverarbeitung anknüpfenden geostatistischen Analyse. Wie bereits in Kapitel 6.1.1 aufgeführt, entstehen hierbei auch Chancen für Bereiche, in denen hochkomplexe und -dimensionale Zusammenhänge bislang mit herkömmlichen Methoden nicht oder nur teilweise erfasst werden können und deswegen in Teilen durch Annahmen und Annäherungen abgebildet werden müssen.

Gleichzeitig zeigt sich aber auch, dass die Anwendung der KI-Methoden fallbezogen einem umfangreichen Validierungsprozess unterzogen werden muss, welcher gegebenenfalls schrittweise Anpassungen der Methoden nach sich zieht. Davon ist auch für den Fall der Anwendung von KI-Methoden im Rahmen der Schlüsselaktivitäten des StandAV auszugehen.

Im Folgenden werden die wesentlichen Erkenntnisse der Fallbeispielbewertung unter den in dieser Studie betrachteten geowissenschaftlichen Kategorien zusammengefasst.

6.3.1 Hydro- und Geochemistry

Fallbeispiele geowissenschaftlicher Fragenstellungen

Im Bereich Hydro und Geochemistry hat die Untersuchung des Wasser- und gekoppelten reaktiven Stofftransportes sowie der Mehrphasenströmung im Grundwasser mit Hilfe numerischer Modellierung einen besonderen Stellenwert. Generell gilt, je größer die modellierte Region, desto zeitaufwändiger die Modellierung. Darüber hinaus muss die Abhängigkeit von unterschiedlich großen Skalen verschiedener Prozesse berücksichtigt werden: Wohingegen der Wasser- und Stofftransport über größere Distanzen stattfindet, spielen sich geochemische Reaktionen eher auf Mikroskalen ab. Ein weiteres Problem bei den Transportberechnungen sind lange Zeitspannen, die das Transportmodell umfassen muss.

Zu dieser Aufgabestellung gehört auch die numerische Modellierung von Klufftströmungen, bei der sich ein oder mehrere Fluide durch den geklüfteten Porenraum fortbewegen. Prinzipiell unterscheiden sich die hier stattfindenden Transportvorgänge in den Klufftsystemen von der Fluidbewegung durch die kleineren Porenräume. Gerade hier gestaltet sich die Beschreibung bzw. Diskretisierung³⁹ eines Klufftsystems im klassischen numerischen Modell ist als sehr komplex und aufwändig.

Anwendung von KI-Methoden innerhalb der Fallbeispiele

Zur Beschleunigung und Vereinfachung der komplexen Modellberechnungen werden zunehmend auch in Zusammenhang mit der Endlagerproblematik verschiedenen KI-Ansätze, insbesondere in der Form von Surrogate (Ersatz-) Modellen, vorgeschlagen und geprüft. Da diese Ersatzmodelle allerdings nicht die tatsächlichen physikochemischen Zusammenhänge des Transportes durch den Grundwasserporenraum abbilden, wird der Ansatz der Hybriden Modellierung genutzt. Dabei hat das Ersatzmodell die Funktion, nur einen Teil der Berechnung im Gesamtmodell zu übernehmen, und zwar nur dort, wo z. B. eine Beschleunigung bzw. Optimierung des numerischen Rechenvorgangs erreicht werden kann, ohne die Ergebnisqualität zu beeinträchtigen. Auch hier gilt aber – zuerst wird der relevante Teil der Berechnung mit einem Ersatzmodell durchgeführt und anschließend mit einer Benchmark-Strategie gekoppelt. Diese Vorgehensweise erlaubt es, die modelltechnische Beschreibung der physikochemischen Zusammenhänge beizubehalten und die Vorteile der Methoden der KI wie z. B. durch die Beschleunigung der Rechenvorgänge zu nutzen. Eine weitere Option ist der Einsatz von unterstützenden Algorithmen bei der Ermittlung der Position einer gesuchten Schadstoffquelle, wie z. B. im Fall der inversen Modellierung hydrogeologischer Probleme.

Im Bereich der Modellberechnungen von Klufftströmungen wird in einem Hybridmodell ein vereinfachender KI-Ansatz unter Anwendung des Equivalent-Graphs eingesetzt. Dieser Ansatz kann die Modellaufstellung und Berechnung vereinfachen, ohne dass die Struktur der Klüfte grob vernachlässigt wird. Diese Art der Vereinfachung der untersuchten Transportvorgänge in Gesteinen könnte zukünftig bei Lösungen realer Probleme im Rahmen der Schlüsselaktivitäten im StandAV eingesetzt werden. Dabei ist jedoch eine sorgfältige und fallbezogenen Validierung erforderlich.

³⁹ Als Diskretisierung bezeichnet man die Gewinnung von endlich vielen (diskreten) Daten aus kontinuierlicher Information. Kontinuierliche Objekte sind immer unendlich und Ziel der Diskretisierung ist es, diese Objekte in endlicher Zeit und mit endlichem Speicherplatz bearbeiten zu können. Diskretisierung ist ein zentraler Begriff in der numerischen Mathematik, wird aber auch in der Kartographie verwendet, wo damit die Zerlegung räumlicher Kontinua wie Oberflächen, geschwungene Linien etc. in kleine Abschnitte bzw. einzelne Punkte bezeichnet wird. (Quelle: www.fremdwort.de)

6.3.2 Petrography and Stratigraphy

Fallbeispiele geowissenschaftlicher Fragenstellungen

Im Bereich Petrography and Stratigraphy haben sich nichtinvasive Methoden wie die Röntgenmikrotomographie zur Beschreibung der Gesteinsstrukturen und des Porenraumes etabliert, welche zum Teil die aufwendige Gesteinsaufbereitung herkömmlicher Laboruntersuchungen ersetzen sollen. Basierend auf einem digitalem 3D-Bild des Porenraums einer realen Gesteinsprobe werden numerische Simulationen des Fluidtransports oder die Bewertung der geotechnischen bzw. mechanischen Gesteinseigenschaften wie z. B. die Elastizität eines Gesteins oder die Ausbreitung von elastischen Wellen durchgeführt. Das erzeugte räumliche Bild bezieht sich dabei jedoch nur auf einen kleinen Raum. Da zu einer validen Untersuchung vor allem größere Flächen eines Raumes berechnet werden müssen, können die erforderliche Rechenzeit und -leistung bei der Anwendung der Röntgenmikrotomographie jedoch in die Höhe schnellen. Um bei diesem Prozess die Heterogenität von Gesteinsporenräumen über größere Flächen im Modell erfassen zu können, müssen die Daten mit Hilfe der geostatistischen Analyse und von den realen Messpunkten auf die Messpunktzwischenräume inter- und extrapoliert werden. Diese geostatistische Analyse ist dann Bestandteil der Simulation.

Anwendung von KI-Methoden innerhalb der Fallbeispiele

Der Einsatz der KI-Methoden hat auch in diesem Fall den Zweck, die Simulation sowie die geostatistische Analyse zu vereinfachen und Rechenzeiten und -leistungen zu verkürzen. Zu einem werden dafür künstliche Bilder des Gesteinsporenraums erzeugt, zum anderem wird die statistische Analyse der Geostrukturvariabilität z. B. mit einem GNN ersetzt. Der Erfolg solcher KI-Anwendung hängt aber immer von der Menge und Qualität der zuvor erfassten realen Daten ab, mit welchem einerseits der Algorithmus trainiert wird, um die künstlichen Raumbilder zu erzeugen und andererseits die Berechnung schließlich validiert werden muss. Mit ausreichend vorhandenem, qualitativ hochwertigem Datenmaterial auf Basis von Messdaten ist der Einsatz von KI als unterstützende Methodik denkbar.

6.3.3 Geotechnics and Mining

Fallbeispiele geowissenschaftlicher Fragenstellungen

In der Kategorie Geotechnics and Mining spielt die Bewertung der Boden- oder Stabilitätsveränderungen von Gesteinskörpern sowie der Grundwasserverhältnisse im Zusammenhang mit Bauelementen im Bergbau (Tief- oder Tagebau) oder bei Bohrungen eine zentrale Rolle.

Anwendung von KI-Methoden innerhalb der Fallbeispiele

Die untersuchten Fallbeispiele befassen sich zum einen mit Lösungen im Bereich der Einschätzung des Quell-/Schrumpfverhaltens tonhaltiger Schichten im Kontext von Entwässerungsvorgängen während des Aushubs bei Bauprojekten sowie mit der Einschätzung der bestimmenden Parameter (wie z. B. der UCS) von Gesteinen. Das Ziel dabei ist die Vorhersage der Verformung bzw. Ausdehnung bodennaher Schichten durch den Aushub in Baugruben. Diese Vorgänge werden in der klassischen Geotechnik mit der numerischen Modellierung in Kombination mit einer statistischen Analyse bewertet.

Die Entwicklung der KI-basierten Ansätze in der Geotechnik fokussiert sich im Wesentlichen auf die Vereinfachung oder Substitution der komplexen numerischen Berechnungen in einem geotechni-

schem Bodenmodell⁴⁰. Die Qualität der Bodenmodelle hängt in erster Linie von der Qualität der Felddaten ab, welche den aktuellen Zustand der betrachteten Boden- oder Gesteinsschicht beschreiben. Dabei werden die Algorithmen mit Hilfe der KI-Methoden, wie KNN oder ANFIS basierend auf realen geologischen Messdaten trainiert, um Parameter wie z. B. den Quelldruck, UCS sowie Verformungsreaktionen vorherzusagen.

Darüber hinaus befassen sich Fallbeispiele mit der Fragenstellung, wie im Tunnel- und Bergbau sichtbare geologische Bedingungen wie z. B. leere Hohlräume oder Wasserdruck in direkter geologischer Umgebung der Bohrvorgänge parallel zum Bohrfortschritt untersucht und bewertet werden kann. In letzter Zeit kommen dafür immer wieder Tunnelbohrmaschinen (TBM) zum Einsatz, die mit datenverarbeitenden Sensoren ausgestattet sind. Mittels dieser Datenverarbeitung können die geologischen Verhältnisse in der direkten geologischen Umgebung des Bohrlochs während des Bohrfortschritts analysiert und darüber hinaus vorhersagt werden. Die räumliche Distanz dieser Vorhersage ist aber begrenzt. Die Reichweite bei dieser Vorhersage der geologischen Bedingungen versucht man mit KI zu erhöhen. Mit Hilfe der sog. GAN-Technik werden, die von der TBM gelieferten Daten wiederholt abgerufen und in einem Lernprozess trainiert, um eine verbesserte Vorhersage der geologischen Verhältnisse über eine längere Distanz zu generieren.

Die Anwendung dieser Prognosemodelle im Bereich von Geotechnics and Mining ist eine Vorgehensweise, welche sich mit dem Fortschritt der herkömmlichen Computertechnik weitgehend etabliert hat. Im Fall von sehr komplexen geologischen Gegebenheiten ist es aber weiterhin problematisch die Stabilitätsverhältnisse des Baugrundes rechtzeitig während dem Baufortschritt zu bewerten. Die unterstützende Funktion der KI-Methoden könnte hier zu einer schnelleren Vorhersage geologischer Verhältnisse beitragen. Die zuverlässige Validierung des Prognoseprozesses mit den Felddaten verbleibt dabei unabdingbar.

6.3.4 Geomechanics

Fallbeispiele geowissenschaftlicher Fragenstellungen

Die aufgeführten Fallbeispiele spiegeln die wesentlichen geowissenschaftlichen Fragestellungen im Bereich Geomechanics wider: Zu einem werden Probleme, wie die Entstehung von Rissen im Gestein (Spröbruch) adressiert, zum anderen stehen die Analyse und Berechnung der Gesteinsfestigkeit bzw. der Tragfähigkeit eines Gesteins unter Belastung im Fokus. Diese Eigenschaften hängen von der Lage, der Geometrie und der räumlichen Verteilung der Diskontinuitäten im Gesteinsgefüge ab. Eine zuverlässige Bewertung dieser Eigenschaften ist nur mit Hilfe von in situ Bohrlochmessungen oder labortechnischen Untersuchungen möglich, bei denen Parameter wie die Dichte, der Porenraum oder die Druckspannung von Gesteinen erfasst werden. Weil diese Analysen zumeist sehr aufwendig oder nur eingeschränkt durchführbar sind, entsteht der Nachteil, dass nur an den tatsächlichen Probenpunkten vertrauenswürdige Information über die geologischen Verhältnisse eines Raumes verfügbar sind. Um die geomechanischen Eigenschaften eines größeren Raumes zu beschreiben, werden bisher probabilistische und statistische Methoden zur Dateninterpolation und Behandlung von Datenunsicherheiten eingesetzt.

⁴⁰ Innerhalb der Geotechnik beziehen sich Bodenmodelle auf den gesamten Untergrund und sind nicht mit dem Begriff von Böden in den Geowissenschaften gleichzusetzen

Anwendung von KI-Methoden innerhalb der Fallbeispiele

Die Methoden der künstlichen Intelligenz zielen auf eine Optimierung der Einschätzung und Bewertung von einerseits lückenhaften Datensätzen und andererseits der Variabilität von Gesteinen und deren Eigenschaften ab. Bei der Anwendung dieser Methoden ist eine grundsätzliche Validierung ebenso von der Forschung akzeptiert, wie in der Praxis erforderlich. Ein wesentlicher Bestandteil der Arbeiten ist die Zusammenstellung gemessener Daten zur Erhebung von Referenzdatensätze, auf deren Basis die Methode validiert werden kann. Ein interessanter Ansatz wurde dabei entwickelt, um die Entstehung von Rissen zu untersuchen, welcher auf dem Zusammenhang von Rissbildung und der daraus resultierenden akustischen Wellen basiert. Als Basis der Validierung dienen Triaxialversuche an einem Laborstandard.

Allgemein spiegeln die Anwendungen der KI-Methoden die geowissenschaftlichen Fragestellungen in der Praxis wider. Darüber hinaus wird auch eine Validierung der Methoden mit zum Teil größeren Datensätzen angestrebt. Da geostatistische und probabilistische Analyse bereits sowohl mathematisch als auch computertechnisch etabliert sind, sollen diese nun zukünftig mit KI-Methoden kombiniert werden, um das Datenmanagement bei der Bewertung großer geologischer Räume und deren Veränderungen über lange Zeitspannen effizienter gestalten und die Datenvorhersage präzisieren zu können. Ein Vorteil daraus wäre die spürbare Beschleunigung der datenintensiven Berechnungen. Eine sorgfältige Validierung ist jedoch für den Einsatz dieser KI-Methoden besonders im Kontext des StandAV unabdingbar.

7 Weitere Bereiche der KI-Anwendung mit möglichem Potenzial im StandAV, weiterführende Forschungsfragen

Aufbauend auf der Analyse der Ergebnisse der Literaturstudie konnten mehrere Bereiche identifiziert werden, welche eine weiterführende Forschung zu Potenzialen bei der KI-Anwendung im StandAV aus unserer Sicht sinnvoll erscheinen lassen. Dabei sollte der Fokus immer auf der Passgenauigkeit der KI-Anwendung im Hinblick auf die Schlüsselaktivitäten im StandAV liegen sowie die Bewertung der Chancen und Risiken für das Verfahren im Mittelpunkt stehen. Um bisher nicht adressierte Potenziale der KI im StandAV zu identifizieren, wurden zum einen die Einsatzbereiche der KI, bei der Literatur mit einer hohen Relevanz für das StandAV vorliegt, näher betrachtet. Dabei wurde erörtert, welche Spezifika für die verschiedenen Schlüsselaktivitäten des StandAV zusätzlich berücksichtigt werden müssen und ob für die Übertragung der Methode bereits ausreichend Grundlagen vorliegen.

Zum anderen wurden weitere Einsatzbereiche betrachtet, in denen bei der Anwendung von KI zur Problembehandlung von Fragestellungen bereits viele deutlich positive Erfahrungen gemacht wurden. So werden beispielsweise mittlerweile erfolgreich KI-Methoden bei der Behandlung von Problemstellungen, wie z. B. bei der Hochwasserprognose, der Prozessoptimierung und der Erkennung von Anomalien in den Forschungsbereichen der Biowissenschaften, der Physik und in der Chemie eingesetzt. Diese Beispiele zeigen, dass eine Übertragung auf geowissenschaftliche Fragestellungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV denkbar wäre.

Die aus unserer Perspektive wichtigsten Fragen wurden als Forschungsfragen in F.1) bis F.6) formuliert.

- F.1): Wie kann KI bei der Bewertung der Konsistenz geologischer Datensätze behilflich sein?
- F.2): Inwiefern können neue Erkenntnisse aus dem Bereich „Data Imputation“ die übliche Vorgehensweise der Geostatistik, mit der fehlenden Daten ergänzt werden, unterstützen?
- F.3): Welche Vorteile sind beim Einsatz von Surrogate Modellen für die Schlüsselaktivitäten des StandAV vorstellbar?
- F.4): Welche Vorteile kann die Anwendung von Hybrider Modellierung für die Schlüsselaktivitäten im StandAV bringen?
- F.5): Wie können Ergebnisse von Black Box-Modellen transparenter vorgestellt werden?
- F.6): Wie können KI-Methoden zur Strukturierung einzelner Schritte im StandAV beitragen? Wie kann z. B. KI die systematische Auswertung der Beiträge seitens der Bevölkerung im begleitenden Öffentlichkeitsbeteiligungsverfahren unterstützen?

Im Folgenden werden die Forschungsfragen genauer betrachtet, Ideen für neue Forschungsschwerpunkte formuliert und Vorschläge gegeben, wie die aufgeworfenen Potenziale der KI-Anwendung während den Schlüsselaktivitäten des StandAV in Zukunft näher untersucht werden können.

F.1) Wie kann KI bei der Bewertung der Konsistenz geologischer Datensätze behilflich sein?

Eine grundsätzliche Herausforderung im StandAV ist die Beurteilung der Datengrundlage. Dies gilt auch und insbesondere bei einem Einsatz von KI, da eine unzureichende quantitative oder qualitative Datengrundlage erhebliche negative Auswirkungen auf die Belastbarkeit der Ergebnisse haben würde.

Entsprechend muss zunächst bewertet werden, ob für die Beurteilung der geologischen Begebenheiten in den jeweiligen Teilgebieten bzw. Standortregionen oder potenziellen Endlagerstandort die zugängliche Datendichte sowie die Qualität der vorhandenen Daten ausreichend sind. Erst dann kann aus Sicht des Datenmanagements diskutiert werden, ob und welche KI-Methode für die Lösung einer geologischen Fragestellung geeignet ist.

Die Bewertung der Konsistenz der Datensätze geschieht dabei häufig bereits während der KI-Modellentwicklung und mit Hilfe des sogenannten „Cross-Industry Standard Process for Data Mining (CRISP-DM)“ -Vorgehensmodells, welches den zyklischen Prozess der KI-Methodenmodellentwicklung verdeutlicht. In diesem Prozess erfolgen die Schritte „Verstehen des Prozesses“ (Process Understanding), „Verstehen der Daten“ (Data Understanding) und die „Aufbereitung der Daten“ (Data Preparation) getrennt von- und nacheinander, wobei durch Rückkopplungen sichergestellt wird, dass Erkenntnisse zur Optimierung des Prozesses aus einem Prozessschritt in den vorgehenden einfließen können (Engel 2020). Die Notwendigkeit für diese Rückkopplungen ergeben sich einer-seits aus der ermittelten Konsistenz der Datensätze sowie andererseits aus der Beurteilung der Qualität und Form der Daten.

Datensätze können mittels KI effizient gefiltert und auf Konsistenz geprüft werden, um beispielsweise Diskrepanzen zu identifizieren, die durch fehlerhafte Digitalisierung von z. B. historischer Daten oder durch unterschiedliche Erhebungsmethoden entstehen. Diese Art der Bewertung von Datensätzen wird im Bereich des Datenmanagement bereits häufig eingesetzt. Deswegen liegen Erfahrungen vor, die im Hinblick auf einen Einsatz für das StandAV ausgewertet werden könnten und bei der Betrachtung der relevanten geowissenschaftlichen Fragestellung hilfreich wären.

Generell müssen im StandAV sehr große Mengen geowissenschaftlicher Daten verarbeitet werden, die zudem aus unterschiedlichen geowissenschaftlichen Bereichen und Quellen herangezogen werden. Darüber hinaus kommen im Verlauf des Verfahrens kontinuierlich weitere Daten für die weiter zu betrachtenden Teilgebiete, Standortregionen oder potenziellen Endlagerstandorte hinzu. Auch dabei ist zu erwarten, dass diese mit unterschiedlichen Methoden erhoben werden, möglicherweise auf unterschiedlichen Wissenschaftsstandards beruhen und trotzdem für die Benutzung konsistent digitalisiert werden müssen. Hier bildet die Anwendung des digitalen Datenmanagements ein theoretisches Potenzial zur Bewertung der Konsistenz der geologischen Daten.

Nicht lesbare oder fehlerhafte Daten sowie Datenlücken können dabei mittels KI aufgespürt und gekennzeichnet werden. Mit Hilfe dieser Technik können zum Beispiel auch Aussagen zur Vergleichbarkeit von Datenqualität und -dichte - der einzelnen Teilgebiete, Standortregionen oder potenziellen Endlagerstandorte untereinander getroffen werden.

F.2) Inwiefern können neue Erkenntnisse aus dem Bereich „Data Imputation“ die übliche Vorgehensweise der Geostatistik, mit der fehlenden Daten ergänzt werden, unterstützen?

Aufbauend auf der Bewertung der Konsistenz der geologischen Datensätze, können diese mit Hilfe von KI-Methoden ergänzt werden. Ergänzend zur herkömmlichen Interpolation von geologischen Daten kann die KI dazu beitragen, Datenlücken zu füllen oder fehlerhaft identifizierte Daten zu korrigieren. In verschiedenen Forschungsgebieten, wie zum Beispiel in den Biowissenschaften und der Chemie wurde zu diesem Zweck KI bereits eingesetzt (Folch-Fortuny et al. 2016).

Für die Schlüsselaktivitäten im StandAV könnte mit Hilfe dieser Techniken eine konsistente Datendichte für die Teilgebiete, Standortregionen oder potenzielle Endlagerstandorte erreicht und Daten an den Stellen ergänzt werden, wo eine Aufnahme von Messdaten durch Erkundung nicht möglich oder gewünscht ist. Dabei kann die KI die klassischen geostatistischen und probabilistischen Methoden zur Behandlung von Datenunsicherheiten bzw. der Interpolation von Daten, welche den untersuchten geologischen Raum beschreiben, deutlich beschleunigen. Ob dies sowohl für den Vergleich der Teilgebiete/Standortregionen/Endlagerstandorte untereinander hilfreich als auch, in Form eines Vorverarbeitungsschrittes (Data Preparation) für eine mögliche weitere KI-Anwendung im Rahmen der Schlüsselaktivitäten im StandAV, sinnvoll wäre und welche Chancen und Risiken sich daraus ergeben, muss ergründet werden.

F.3) Welche Vorteile sind beim Einsatz von Surrogate Modellen für die Schlüsselaktivitäten des StandAV vorstellbar?

Der Einsatz der datengetriebenen Surrogate Modelle kann in Bereichen hilfreich sein, in denen ein, innerhalb eines Modells, stattfindender (Teil-) Prozess zum Stand der aktuellen Wissenschaft noch nicht ausreichend erforscht ist und gleichzeitig aber den Ausgang der gesamten Modellberechnung nicht wirklich oder nur marginal beeinflusst. Insbesondere betrifft dies sehr komplexe Systeme, bei denen der Aufwand der Modellierung eines solchen (Teil-) Prozesses dem Nutzen der Gesamtmodellierung entweder nicht oder gerade so entspricht bzw. der Aufwand der Berechnung den Nutzen der Gesamtmodellierung übersteigen würde. Bei der klassischen Modellierung greift man in solchen Fällen auf Annahmen und Annäherungen zurück.

So wird zum Beispiel bei der klassischen Modellierung eines hydraulischen Systems nicht etwa jede lamellare Schicht in einer Wärmeübertragungsgleichung einzeln modelliert, sondern auf Konstanten zurückgegriffen, die aus empirischen Messungen stammen. Das Auffinden dieser Konstanten be-

darf sorgfältig geplanter Experimente und einer Auswertung der erhobenen Daten, die wiederum aus mehreren Schritten besteht. Mithilfe von datengetriebenen Surrogat Modellen kann durch die Reduzierung der Rechenzeiten eine schnellere und möglicherweise exaktere Lösung geliefert werden. Diese Vorgehensweise ist insbesondere dann interessant, wenn nur Teile eines Systems ersetzt werden.

Innerhalb der Schlüsselaktivitäten des StandAV bieten sich Surrogate Modelle vor allem bei den Fragestellungen an, bei denen sehr komplexe Modellierungen mit sich gegenseitig beeinflussenden Prozessen und einem hohen Datenaufwand in klassischen Modellierungen auf Annahmen und Annäherungen zurückgreifen, die die verketteten Zusammenhänge nicht oder nur unzureichend erfassen und damit fehleranfällig sind. Dies kann verschiedene Modellberechnungen in den Schlüsselaktivitäten des StandAV betreffen, wie z. B. Modellierungen zur langfristigen Stabilität (siehe Kapitel 4.2.3.4) und ist darüber hinaus bei der Anwendung der vSU (Kapitel 4.2.4) sehr gut vorstellbar, da hier hochkomplexe Modelle mit vielfältigen gegenseitigen Bedingungen der einzelnen Komponenten untereinander zum Einsatz kommen.

F.4) Welche Vorteile kann die Anwendung von Hybrider Modellierung für die Schlüsselaktivitäten im StandAV bringen?

Unter Hybrider Modellierung versteht man in den Computerwissenschaften die Kombination von KI-Methoden bzw. maschinellem Lernen mit herkömmlicher, physikalisch basierter Modellierung. Bei der Hybriden Modellierung werden Black Box- und White Box⁴¹-Modelle miteinander gekoppelt. Während bei Black Box-Modelle die KI nur von außen bewertet werden kann, beruhen White Box-Modelle auf der mathematisch-physikalischen Berechnung realer Prozesse. Durch die Kombination in einem Hybriden Modell entsteht der Vorteil, dass Gesetzmäßigkeiten und Zusammenhänge der Modellierung weitestgehend nachvollziehbar bleiben, weil Erfahrungswerte aus der wissenschaftlichen Praxis einfließen. Damit wird eine insgesamt höhere Transparenz der Modellierungen gegenüber einer reinen KI-Modellierung gewährleistet (siehe auch F.5)). Gleichzeitig können die Vorteile der KI durch die Anpassungsfähigkeit von datengetriebenen Modellen zum Tragen kommen. Hybride Modellierung vereinfacht und beschleunigt die ansonsten komplexe und zeitlich aufwendige numerische Modellierung.

Auch die von der BGE Technology GmbH veröffentlichte Roadmap (Krafczyk et al. 2021) hebt besonders die „Kombination von klassischen Modellierungsansätzen mit KI-Methoden unter Berücksichtigung experimenteller Daten“ als interessant und erfolgversprechend heraus. So soll diese Kombination untersucht und validiert werden, „um deren gemeinsames Potenzial für eine möglichst genaue und robuste Prognose des langfristigen Verhaltens zukünftiger Endlager aufzuzeigen“ (Krafczyk et al. 2021).

Auch wenn sich der Einsatz Hybrider Modellierung in den in dieser Studie untersuchten Veröffentlichungen nur in einzelnen Fällen vermuten oder diskutieren lässt, hat sich gerade in diesen gezeigt, dass der Einsatz dieses Modellansatzes im StandAV vielversprechend sein kann.

Ein solches Beispiel für Hybride Modellierung mit hoher Relevanz für das StandAV sind die in (Jalal et al. 2021) beschriebenen Adaptive Neuro-Fuzzy-Inferenzsysteme (ANFIS) (siehe hierzu auch Kapitel 6.2.6.1), welche zur Berechnung der Ausdehnung bzw. Verformung expansiver tonhaltiger Böden und geologischer Schichten beiträgt, um beispielsweise Beschädigungen von Konstruktionen

⁴¹ Im Gegensatz zu Black Box-Modellen innerhalb der KI-Anwendung werden herkömmliche mathematisch-physikalische Modellierungen als White Box-Modellierungen bezeichnet

im Bauwesenquantifizieren zu können. Dieses Beispiel besitzt einerseits im Hinblick auf die Stabilität geotechnischer Barrieren im StandAV hohe Relevanz und kann andererseits auch wichtige Informationen über das geochemische Verhalten der Wirtsgesteine liefern. Die ANFIS setzen sich aus einem Neuronalem Netz und aus einem Katalog von mathematisch formulierten Regeln zusammen. Während das zuvor geschaltete Netz eine große Anpassungsfähigkeit bietet, kann der nachfolgende Katalog die Transparenz verbessern.

Auch in (Leal et al. (2020) beispielsweise wird für die komplexe Berechnung chemischer Transportvorgänge Hybride Modellierung eingesetzt (siehe hierzu Kapitel 6.2.5.3). Allerdings beschränkt sich die Vorgehensweise nur auf einen bestimmten Gesteins-Standard. Eine breitere, systematische Anwendung im Bereich der Geowissenschaften, explizit mit Blick auf die Anwendung im StandAV und den dort untersuchten Wirtsgesteinen, sollte untersucht werden.

Im StandAG ist festgelegt, dass der bestmögliche Standort für ein Endlager zu ermitteln ist. Eine entscheidende Bedingung für diesen bestmöglichen Standort ist, dass der Standort

die bestmögliche Sicherheit für den dauerhaften Schutz von Mensch und Umwelt vor ionisierender Strahlung und sonstigen schädlichen Wirkungen dieser Abfälle für einen Zeitraum von einer Million Jahren gewährleistet (StandAG 2017).

Um eventuell mögliche geologische, hydraulische, klimatische und chemische Veränderungen in diesem Betrachtungszeitraum für die jeweils zu betrachtenden Teilgebiete/Standortregionen/Endlagerstandorte berücksichtigen zu können, müssen in den vSU komplexe Berechnungsmodelle angewandt werden. Auch in anderen Schlüsselaktivitäten ist der Einsatz von Modellierung denkbar, bei den vSU kommt jedoch die Ersparnis an Rechen- und Zeitaufwand durch den Einsatz von KI besonders zum Tragen.

Dabei stellen der vergleichsweise große zu betrachtende geologische Raum sowie die dort stattfindenden, sich teilweise gegenseitig bedingenden Prozesse bereits hohe Ansprüche an die Komplexität der Berechnungs- und Modellierungsverfahren. Die Hybride Modellierung kann eine Unterstützung bei der Verarbeitung dieser großen Datenmengen sein und dazu beitragen, dass die immense Menge an verschiedenen Ereigniswahrscheinlichkeiten innerhalb des Betrachtungszeitraums im Zeitrahmen des StandAV berücksichtigt werden kann. Ob und unter welchen Grundvoraussetzungen und Rahmenbedingungen der Einsatz von Hybrider Modellierung dabei dem hohen Transparenzanspruch des StandAV genügen kann, sollte untersucht werden.

F.5) Wie können Ergebnisse von Black Box-Modellen transparenter vorgestellt werden?

Bei der Anwendung von KI werden im Allgemeinen verschiedene Methoden des maschinellen Lernens als Black Box-Verfahren eingesetzt. Hier kann zur Steigerung der Transparenz die „Explainable AI“ (erklärbare künstliche Intelligenz, XAI (Adadi und Berrada 2018)) eingesetzt werden, um nachvollziehbar zu erklären, wie die Ergebnisse der Künstlichen Intelligenz zustande kommen. Die Zusammenhänge und Gesetzmäßigkeiten der Black Boxen können mittels XAI somit ergründet und beschrieben werden. In der Literatur werden zum Beispiel verschiedene Herangehensweisen für die Erklärung der NN vorgeschlagen.

Bei der Anwendung von KI im Verlauf des StandAV ist die Transparenz der Entscheidungsfindung ein wesentliches Kernelement im lernenden Verfahren, welches nicht nur für die Akzeptabilität der Entscheidungen in der Bevölkerung notwendig ist, sondern einen generellen Anspruch innerhalb der Wissenschaft darstellen sollte. Ob und inwieweit XAI diesen Anspruch im StandAV beim Einsatz von Black Box-Verfahren in den einzelnen Schlüsselaktivitäten ausgleichen kann, ist bisher nicht

ausreichend erforscht. Deswegen sollte in einer weiterführenden Studie gezielt nach Verfahren aus dem Bereich der XAI recherchiert und diese auf eine mögliche Übertragbarkeit in das StandAV hin bewertet werden.

F.6) Wie kann KI bei der begleitenden Öffentlichkeitsbeteiligung im StandAV sinnvoll unterstützen?

Abweichend von den bisher untersuchten geowissenschaftlichen Einsatzbereichen ist der Einsatz von KI auch in anderen Bereichen bereits weit fortgeschritten. KI wird dabei sowohl in der Wissenschaft als auch in der Praxis nicht nur zur konkreten Steuerung von Produktionssystemen genutzt, sondern ebenso in einer unterstützenden oder beratenden Funktion. Dass dieser Bereich mittlerweile bereits häufig zum Einsatz kommt, zeigen KI-Anwendungen, die Nachrichten aus dem E-Mail-Verkehr oder aus den Sozialen Medien für Marketingzwecke auswerten oder z. B. unzulässige oder unerwünschte Nachrichten, wie beispielsweise Spam- oder Fishingmails, aussortieren. Zudem kann KI bei der Digitalisierung von analog vorhandenen Dokumenten assistieren oder auch Dokumente mittels „Unsupervised Machine Learning“ auf Muster hin untersuchen.

Derzeit besteht ein großes Forschungsinteresse daran, wie die künstliche Intelligenz das Ordnungsmanagement von Daten bereichern kann. Dabei handelt es sich prinzipiell um die Auswertung und Analyse von Textnachrichten mit dem Zweck der weiteren Verarbeitung. So können die E-Mails oder Texte nicht nur auf mögliches inhaltlichen „Gefahrenpotenzial“ hin analysiert, sondern zum Beispiel auch nach potenzieller Wichtigkeit vorsortiert werden. Bei dieser Forschungsvertiefung im Bereich des ML handelt es sich um das sogenannte „natural language processing“ (Guida und Mauri 1986).

Ganz allgemein kann Data Science also helfen, große Datenmengen in (historischen) Dokumenten oder aus verschiedenen Quellen mit Textinformationen zu verarbeiten, um daraus Erkenntnisse für die weitere Bearbeitung zu gewinnen.

Der Gesetzgeber hat im StandAV weitreichende Beteiligungsmöglichkeiten für Bürgerinnen und Bürger festgelegt, die das BASE umsetzt. Die Öffentlichkeitsbeteiligung nach StandAG wird sich über den gesamten Zeitraum des Standortauswahlverfahrens erstrecken. Diese Öffentlichkeitsbeteiligung umfasst verschiedene formelle Formen wie auch die Möglichkeiten der Einrichtung weiterer informeller Formen der Öffentlichkeitsbeteiligung sowie Informationsangebote (§§ 5-11), über die sich Bürgerinnen und Bürger kontinuierlich an der Endlagersuche beteiligen können. Konkrete Beispiele für formal vorgesehene Formen der Öffentlichkeitsbeteiligung sind das Nationale Begleitemium, die Fachkonferenz Teilgebiete mit ihren drei bereits stattgefundenen Terminen sowie im weiteren Verfahren die Regionalkonferenzen und die Fachkonferenz Rat der Regionen. Darüber hinaus ermöglicht das StandAG den beteiligten Akteuren des Standortauswahlverfahrens (§ 5, Abs. 1 und 3) die Einrichtung weiterer Formen der Öffentlichkeitsbeteiligung, die nicht formal vorgesehen sind. Dazu gehören beispielsweise der Fortbestand der Beratungs- und Planungsgruppe (jetzt unter dem Namen „Planungsteam Forum Endlagersuche“) sowie die Einrichtung des Fachforums Teilgebiete (jetzt unter dem Namen „öffentliches Forum Endlagersuche“) (BASE 2021).

Ziel ist es, den Auftrag des Gesetzes als Träger der Öffentlichkeitsbeteiligung zu erfüllen und die anstehenden Arbeitsschritte der BGE mbH im Standortauswahlverfahren dialogisch zu begleiten und damit für Nachvollziehbarkeit und Transparenz zu sorgen (BASE 2022). Die verschiedenen Formen der Öffentlichkeitsbeteiligung werden in der Regel umfänglich protokolliert, um eben diesem Ziel gerecht zu werden.

Es ist dabei davon auszugehen, dass beteiligte Bürgerinnen und Bürger, Stakeholder und Interessensgruppen im Laufe des langen Prozesses zur Standortauswahl wechseln und/oder neu hinzukommen werden. Letzteres ist mit der zunehmenden Konkretisierung von Regionen im Verfahrensverlauf und der damit wahrgenommenen Betroffenheiten zu erwarten. Des Weiteren kann davon ausgegangen werden, dass sich einige eingebrachte Fragen und Themen wiederkehrend wiederholen werden.

KI könnte sowohl bei der Transkription der Wortbeiträge als auch bei der Analyse und dem Datenmanagement der großen Datenmengen unterstützend eingesetzt werden. Konkret ist zum Beispiel für die Öffentlichkeitsbeteiligung nach StandAG denkbar, dass vorhandene Protokolle der Sitzungen oder solche von Gesprächen mit beteiligten Bürgerinnen und Bürger sowie unter Umständen auch Chatverläufe aus Online-Veranstaltungen, wie auch soziale Netzwerke und schriftliche Kommentare und Einwendungen von KI selbstständig auf häufig genannte Themenbereiche hin analysiert werden. Ziel dieser Analyse wäre es zunächst, Themenbereiche zu clustern, um z. B. zu ermitteln, welche Themen besonders häufig genannt werden. So könnten z. B. ältere Themen wieder aufgegriffen und mit jüngeren Diskussionen verknüpft werden. Dies wäre nicht nur im Zuge der begleitenden Öffentlichkeitsbeteiligung, sondern auch vor dem Hintergrund des „lernenden Verfahrens“, als welches das StandAV angelegt ist, hilfreich.

Die von der KI ermittelten Cluster könnten zudem als Vorauswahl für möglicherweise für die Öffentlichkeit relevante Themenbereiche interpretiert und als Vorschlag für die Auswahl der Themen für künftige Beteiligungsverfahren genutzt werden. Erfahrungsgemäß ist diese Vorauswahl qualitativ-inhaltlich nicht als alleiniges Ergebnis belastbar und benötigt eine Nachbearbeitung. Wie der Einsatz von KI als Hilfsmittel zur Vorauswahl einen tatsächlichen qualitativen Nutzen erbringen kann, sollte deshalb untersucht werden.

Eine weitere Herausforderung liegt in der transparenten Gestaltungsweise und Einbettung dieser KI-Anwendungen in die bestehenden Prozesse, da z. B. Themen wie der Datenschutz eine nicht zu unterschätzende Rolle für die Akzeptabilität des Verfahrens in der Bevölkerung spielen. Generelle Skepsis, Misstrauen oder gar Ablehnung in der Bevölkerung haben grundsätzlich das Potenzial, den Prozess und Erfolg der gesamten Partizipation während des StandAV in Gefahr zu bringen.

Unter welchen Voraussetzungen und Rahmenbedingungen KI bei der Auswertung der Inhalte mit dem Ziel, zukünftige Themen für die Öffentlichkeitsbeteiligung zu ermitteln, unterstützen kann, ist deshalb eine Forschungsfrage, die transdisziplinär bearbeitet werden sollte.

8 Einordnung der Ergebnisse in Bezug auf die Anwendung im Standortauswahlverfahren

Aus der Bewertung der konkreten Einsatzmöglichkeiten von KI in Bezug auf die Schlüsselaktivitäten im StandAV und der Analyse der identifizierten Potenziale sowie weiterer Lösungen und aktuellen Entwicklungen lässt sich folgende Einordnung der Ergebnisse in Bezug auf die Anwendung von KI-Methoden im StandAV vornehmen.

Die Ergebnisse dieser Studie zeigen, dass sich bereits eine hohe Anzahl von Veröffentlichungen mit KI-Einsatzbereichen in den Geowissenschaften beschäftigen. Dabei werden in vielen Fällen KI-Methoden zur Lösung von real existierenden geologischen Problemen und geowissenschaftlichen Fragestellungen eingesetzt. Auch sind häufig schon Überschneidungen und Übertragbarkeiten mit den für das StandAV relevanten geowissenschaftlichen Fragestellungen gegeben. Häufig handelt

es sich jedoch um eine noch begrenzte Übertragbarkeit, da die geowissenschaftlichen Fragestellungen und die dabei umgesetzte KI-Methoden selten auf die im StandAV untersuchten Wirtsgesteine oder andere für das StandAV relevanten Spezifika ausgerichtet sind.

So ist in einigen Fällen eine Übertragbarkeit beispielsweise aus Sicht der angewandten KI-Methode prinzipiell vorstellbar. Gleichzeitig wird die Bewertung aber dadurch erschwert, dass sich das Vorgehen und die geologischen Daten nicht mit den potenziellen Wirtsgesteinen oder anderen geologisch relevanten Spezifika in Bezug auf das StandAV wie z. B. das geochemische Verhalten oder die Art des Stofftransports decken.

Andererseits können die von den Autoren mit Hilfe der KI angegangen geologische Probleme auch im StandAV von hoher Relevanz sein. Häufig kommt es jedoch vor, dass eine real existierende geowissenschaftliche Fragestellung, die auch im StandAV relevant sein könnte, nicht adressiert wird oder keine Ansätze oder Lösungen geliefert werden, anhand derer nachvollziehbar wird, inwiefern das vorgestellte Vorgehen auf eine solche Fragestellung im StandAV angewendet werden könnte.

Aus diesen Gründen ist eine Bewertung der Anwendungsmöglichkeiten im StandAV nicht immer ohne Weiteres und eindeutig vorzunehmen. Darüber hinaus scheint die Anwendung von KI-Methoden zur Anwendung in den Geowissenschaften – also zur Behandlung real existierender geowissenschaftlicher Fragestellungen – generell noch am Anfang zu stehen. Dies zeigt sich vor allem durch die häufige Verwendung von Probenstandards zur Behandlung einer geologischen Problematik, wie es in der geowissenschaftlichen Grundlagenforschung üblich ist.

Um einen Nutzen für Schlüsselaktivitäten im StandAV aufzuzeigen, braucht es Anwendungen auf z. B. reale Feldkampagnen zur Probennahme, Datenerhebungen und den Einsatz in der Geologie inklusive der Validierung der KI-Eignung für die jeweilige geowissenschaftlichen Problemstellung im StandAV und der Evaluation des jeweiligen Vorgehens. Dies scheint bisher noch nicht ausreichend zu erfolgen. Ausnahmen hierfür sind die Anwendung von KI-Methoden auf real existierende geowissenschaftliche Fragestellungen im Bereich der Geotechnik, des Tunnelbaus und der Ingenieurgeologie. Diese Anwendungen sind jedoch nicht immer ohne größere Anpassungen auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen des StandAV übertragbar, so dass die Möglichkeit einer Nutzung von KI-Methoden in den Schlüsselaktivitäten des StandAV jeweils im Einzelfall geprüft werden muss.

Zweifelsohne bietet die KI-Anwendung in den Geowissenschaften große Vorteile, wie z. B. im Datenmanagement, bei der Reduzierung von Rechenaufwand und -zeit bei aufwendigen und komplexen Berechnungen und damit von Personalaufwand und Kosten. Insbesondere bei komplexen Prozessabläufen und hochdimensionalen Daten im Multiskalen- und Multiphysikbereich bietet KI die Chance, bisher konventionell nicht erfassbare Prozesse zu modellieren und zu berechnen.

In der Literatur werden zur Lösung eines Problems häufig gleichzeitig mehrere KI-Methoden miteinander kombiniert. Das führt zwar einerseits dazu, dass die Bewertbarkeit der Ergebnisse im Hinblick auf eine Übertragung in das StandAV erschwert wird. Andererseits handelt es sich bei den verwendeten KI-Methoden in der Regel aber um solche, die für sich allein gesehen gut erforscht und verifiziert sind. Diese bergen in der Zukunft gerade im Hinblick auf die geowissenschaftlichen Fragestellungen im StandAV viele Potenziale, die mit den notwendigen Anpassungen Abläufe in den Schlüsselaktivitäten des StandAV effizienter gestalten können und gleichzeitig – je nach Ausgestaltung – dem hohen Transparenzanspruch im StandAV genügen (siehe hierzu Kapitel 7).

Dabei ist jedoch stets zu betonen, welche Gefahren und Risiken der Einsatz von KI-Methoden mit sich bringen kann, da vor allem die Transparenz und Überschaubarkeit der Berechnungsabläufe

unter dem Einsatz mehrerer kombinierter KI-Methoden leiden kann. Zudem bestehen grundsätzliche Risiken durch die häufige Intransparenz der ML-Anwendungen, da diese größtenteils als Black Box-Verfahren wenig Aufschluss über ihre inneren Abläufe bieten. In der Folge ist die Transparenz für das Verständnis von Fehlerketten nicht immer gegeben bzw. es besteht sogar die Gefahr, dass Unsicherheiten bei Berechnungen über große Zeiträume verschleiert werden können.

Ebenso ist höchste Vorsicht und Kontrolle geboten, um die Gefahren von Daten- oder Entwickler-BIAS offen zu legen und zu umgehen. Durch einseitige Eingangswerte oder vorgeprägte Verfahrensparameter können die erzielten Ergebnisse der KI erhebliche Fehler aufweisen, die möglicherweise erst mit großer zeitlicher Verzögerung erkannt werden. Die vordergründige Steigerung der Objektivität bei Verwendung von KI-Methoden kann dementsprechend nur zum Tragen kommen, wenn Fehler durch Daten- oder Entwickler-BIAS nahezu ausgeschlossen werden können.

Daher müssen in erster Linie gewisse Voraussetzungen für die KI-Anwendungen in den Geowissenschaften und im Hinblick auf den möglichen Einsatz im StandAV formuliert und eingefordert werden. So müssen KI-Anwendungen immer genauestens an die real existierenden geowissenschaftlichen Problemstellungen und deren Gesteinsspezifika angepasst werden. Bisher besteht innerhalb der Literatur noch wenig Reflexion darüber, was die Qualität und Eignung der KI für eine konkrete geowissenschaftliche Fragestellung angeht.

Darüber hinaus gelten aufgrund des besonders hohen Transparenzanspruchs im StandAV ebenfalls hohe Ansprüche an die Nachvollziehbarkeit der KI-Methoden. So ist beispielweise eine KI-Anwendung im StandAV nur unter der Voraussetzung denkbar, dass es entweder zum Einsatz von XAI kommt oder die Anwendung so ausgelegt ist, dass sie der Detektion von Lücken und Unsicherheiten in den Datensätzen dient und Entscheidungen nicht allein aufgrund der durch KI erzeugten Ergebnisse getroffen werden.

KI-Methoden, die über die ausschließlich unterstützende Kontrolle, Analyse und Auswertung von Datensätzen im Datenmanagement hinaus gehen und/oder dem Transparenzanspruch des StandAV nicht genügen, bergen enorme Risiken, die das Vertrauen der Bevölkerung im Beteiligungsprozess aufs Spiel zu setzen und den generellen Argwohn bzw. die Skepsis gegenüber der KI in der öffentlichen Wahrnehmung nähren.

Resultierend daraus, ist zu betonen, dass KI als unterstützendes Werkzeug durchaus in den Schlüsselaktivitäten zum Einsatz kommen kann, allerdings keine Entscheidungsbefugnisse haben darf. Selbst bei der KI-Anwendung zur Generierung von Daten zum Ausfüllen von Datenlücken und -unsicherheiten dürfen die Ergebnisse nicht unreflektiert weiterverwendet werden, sondern müssen stets einem Plausibilitätscheck unterzogen werden. Beim Einsatz von KI zur großflächigen Inter- und Extrapolation über große geologische Räume jeglicher Skalen ist dies generell äußerst kritisch im Blick zu behalten. Aus diesem Grund ist auch die Nutzung von KI-Methoden für solche Einsatzbereiche zum jetzigen Zeitpunkt und gerade im Hinblick auf die besonderen Voraussetzungen des StandAV wenig vorstellbar oder vertretbar. Sie können allerdings zum Zweck der parallelen Überprüfung der mit herkömmlichen Methoden gewonnenen Ergebnisse eingesetzt werden und dabei einen positiven Beitrag zur Verifikation dieser Ergebnisse leisten.

Insbesondere Transparenz und Erklärbarkeit der KI-Anwendung und der darauf aufbauenden Entscheidungen sind unverzichtbare Attribute für den Einsatz im StandAV, die den Rahmen für einen möglichen Einsatz von KI in Schlüsselaktivitäten des StandAV stecken sollten.

Literaturverzeichnis

- Adadi, A.; Berrada, M. (2018): Peeking Inside the Black-Box: A Survey on Explainable Artificial Intelligence (XAI). In: IEEE Access 6, S. 52138–52160. DOI: 10.1109/ACCESS.2018.2870052.
- AkEnd - Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte (2002): Auswahlverfahren für Endlagerstandorte, Empfehlungen des Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte, 2002.
- BASE - Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (2021): Gemeinsames Beteiligungskonzept für die Öffentlichkeitsbeteiligung in Phase 1, Schritt 2 des Standortauswahlverfahrens. Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (Hg.). Online verfügbar unter https://www.endlagersuche-infoplattform.de/SharedDocs/Downloads/Endlagersuche/DE/konzeptentwicklung/20211103_ergebnisse_workshop.pdf?__blob=publicationFile&v=2#download=1.
- BASE - Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (2022): Endlagersuche - Öffentlichkeitsbeteiligung. Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (Hg.). Online verfügbar unter https://www.base.bund.de/DE/themen/soa/beteiligung/beteiligung_node.html, zuletzt aktualisiert am 28.09.2022, zuletzt geprüft am 28.09.2022.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2020a): Anwendung Mindestanforderungen gemäß § 23 StandAG. Geschäftszeichen: SG02103/9-1/2-2020#12 – Objekt-ID: 828965 – Revision: 001, 28.09.2020.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2020b): Arbeitshilfe zur Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien im Rahmen von § 13 StandAG. Geschäftszeichen: SG02102/5-2/2-2020#7 - Objekt-ID: 825480, 03.09.2020.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2020c): Referenzdatensätze zur Anwendung der geowissenschaftlichen Abwägungskriterien im Rahmen von § 13 StandAG, Grundlagen. Geschäftszeichen: SG02102/5-3/3-2020#26 – Objekt-ID: 825460 – Stand 01.09.2020. Peine, 01.09.2020.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2022a): Anwendung Ausschlusskriterien gemäß § 22 StandAG. Geschäftszeichen: SG02101/32-1/2-2020#15 – Objekt-ID: 829966 – Revision: 001. Peine, 28.09.2022.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2022b): Konzept zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung. Geschäftszeichen: SG02303/97-1/1-2022#1 – Objekt-ID: 913984 – Revision: 00, 28.03.2022.
- BGE - Bundesgesellschaft für Endlagerung mbH (2022c): Methodenbeschreibung zur Durchführung der repräsentativen vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen gemäß EndlSiUntV. Geschäftszeichen: SG02303/97-2/2-2022#10 – Objekt-ID: 919256 – Revision: 00, 28.03.2022.
- Binal, A. (2009): Prediction of mechanical properties of non-welded and moderately welded ignimbrite using physical properties, ultrasonic pulse velocity, and point load index tests. In: Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology 42 (1), S. 107–122. DOI: 10.1144/1470-9326/07-067.

- Castrillo, M.; García, Á. L. (2020): Estimation of high frequency nutrient concentrations from water quality surrogates using machine learning methods. In: *Water Research* 172, S. 115490. DOI: 10.1016/j.watres.2020.115490.
- Chen, J.; Mao, X.; Deng, H.; Liu, Z.; Wang, Q. (2020): Three-dimensional modelling of alteration zones based on geochemical exploration data: An interpretable machine-learning approach via generalized additive models. In: *Applied Geochemistry* 123, S. 104781. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2020.104781.
- Deutscher Bundestag: Verordnung über Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsanforderungsverordnung - EndlSiAnfV), EndlSiAnfV. In: *BGBl. I* S. 2094, 2103.
- EndlSiUntV: Verordnung über Anforderungen an die Durchführung der vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen im Standortauswahlverfahren für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung - EndlSiUntV), EndlSiUntV. In: *BGBl. I* S. 2004.
- Engel, P. (2020): Entwurf einer modellprädiktiven Regelung zur Klimatisierung batterieelektrischer Fahrzeuge durch Verfahren des maschinellen Lernens.
- Feng, X.-T.; Seto, M. (1998): Neural network dynamic modelling of rock microfracturing sequences under triaxial compressive stress conditions. In: *Tectonophysics* 292 (3), S. 293–309. DOI: 10.1016/S0040-1951(98)00072-9.
- Folch-Fortuny, A.; Arteaga, F.; Ferrer, A. (2016): Assessment of maximum likelihood PCA missing data imputation. In: *J. Chemometrics* 30 (7), S. 386–393. DOI: 10.1002/cem.2804.
- GeolDG (2020): Deutscher Bundestag. Geologiedatengesetz vom 19. Juni 2020 (*BGBl. I* S. 1387), GeolDG.
- Guida, G.; Mauri, G. (1986): Evaluation of natural language processing systems: Issues and approaches. In: *Proc. IEEE* 74 (7), S. 1026–1035. DOI: 10.1109/PROC.1986.13580.
- Hou, Z.; Lao, W.; Wang, Y.; Lu, W. (2021): Hybrid homotopy-PSO global searching approach with multi-kernel extreme learning machine for efficient source identification of DNAPL-polluted aquifer. In: *Computers & Geosciences* 155, S. 104837. DOI: 10.1016/j.cageo.2021.104837.
- Jalal, F. E.; Xu, Y.; Iqbal, M.; Javed, M. F.; Jamhiri, B. (2021): Predictive modeling of swell-strength of expansive soils using artificial intelligence approaches: ANN, ANFIS and GEP. In: *Journal of Environmental Management* 289, S. 112420. DOI: 10.1016/j.jenvman.2021.112420.
- Jiang, Z.; Tahmasebi, P.; Mao, Z. (2021): Deep residual U-net convolution neural networks with autoregressive strategy for fluid flow predictions in large-scale geosystems. In: *Advances in Water Resources* 150, S. 103878. DOI: 10.1016/j.advwatres.2021.103878.
- Karimpouli, S.; Tahmasebi, P. (2019): Image-based velocity estimation of rock using Convolutional Neural Networks. In: *Neural Networks* 111, S. 89–97. DOI: 10.1016/j.neunet.2018.12.006.
- Karra, S.; O'Malley, D.; Hyman, J. D.; Viswanathan, H. S.; Srinivasan, G. (2018): Modeling flow and transport in fracture networks using graphs. In: *Physical review. E* 97 (3-1), S. 33304. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.033304.

- Kim, S. E.; Yoon, H.; Lee, J. (2021): Fast and scalable earth texture synthesis using spatially assembled generative adversarial neural networks. In: *Journal of Contaminant Hydrology* 243, S. 103867. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2021.103867.
- Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe (2016): Abschlussbericht, 2016.
- Krafczyk, M.; Brendler, V.; Czaikowski, O.; Gruner, M.; Hoth, N.; Kolditz, O.; Nagel, T.; Herold, P.; Müller, C.; Seher, H.; Simo, E.; Stahlmann, J. (2021): Eine Roadmap zur Entwicklung und Adaption von Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) für die Endlagerforschung, 12.11.2021.
- Leal, A. M. M.; Kyas, S.; Kulik, D. A.; Saar, M. O. (2020): Accelerating Reactive Transport Modeling: On-Demand Machine Learning Algorithm for Chemical Equilibrium Calculations. In: *Transport in Porous Media* 133 (3), S. 161–204. DOI: 10.1007/s11242-020-01412-1.
- Lucia, M. de; Kühn, M. (2021): DecTree v1.0 – chemistry speedup in reactive transport simulations: purely data-driven and physics-based surrogates. In: *Geosci. Model Dev.* 14 (7), S. 4713–4730. DOI: 10.5194/gmd-14-4713-2021.
- Mahmoodzadeh, A.; Mohammadi, M.; Hashim Ibrahim, H.; Nariman Abdulhamid, S.; Ghafoor Salim, S.; Farid Hama Ali, H.; Kamal Majeed, M. (2021): Artificial intelligence forecasting models of uniaxial compressive strength. In: *Transportation Geotechnics* 27, S. 100499. DOI: 10.1016/j.trgeo.2020.100499.
- Mosser, L.; Dubrule, O.; Blunt, M. J. (2017): Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks. In: *Physical review. E* 96 (4-1), S. 43309. DOI: 10.1103/PhysRevE.96.043309.
- Mosser, L.; Dubrule, O.; Blunt, M. J. (2018): Conditioning of three-dimensional generative adversarial networks for pore and reservoir-scale models, 2018. Online verfügbar unter <https://arxiv.org/pdf/1802.05622>.
- Ogunkunle, T. F.; Okoro, E. E.; Rotimi, O. J.; Igbinedion, P.; Olatunji, D. I. (2021): Artificial intelligence model for predicting geomechanical characteristics using easy-to-acquire offset logs without deploying logging tools. In: *Petroleum*. DOI: 10.1016/j.petlm.2021.10.002.
- Prasianakis, N. I.; Haller, R.; Mahrous, M.; Poonosamy, J.; Pfingsten, W.; Churakov, S. V. (2020): Neural network based process coupling and parameter upscaling in reactive transport simulations. In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 291, S. 126–143. DOI: 10.1016/j.gca.2020.07.019.
- Sharma, L. K.; Vishal, V.; Singh, T. N. (2017): Developing novel models using neural networks and fuzzy systems for the prediction of strength of rocks from key geomechanical properties. In: *Measurement* 102, S. 158–169. DOI: 10.1016/j.measurement.2017.01.043.
- StandAG (2017): Deutscher Bundestag. Standortauswahlgesetz, StandAG, Fassung vom 05.05.2017, zuletzt durch Artikel 2 Absatz 16 des Gesetzes vom 20.07.2017 (BGBl. I S. 2808) geändert.
- Yang, J.; Liu, Y.; Yagiz, S.; Laouafa, F. (2021): An intelligent procedure for updating deformation prediction of braced excavation in clay using gated recurrent unit neural networks. In: *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. DOI: 10.1016/j.jrmge.2021.07.011.

Zhang, C.; Liang, M.; Song, X.; Liu, L.; Wang, H.; Li, W.; Shi, M. (2022): Generative adversarial network for geological prediction based on TBM operational data. In: Mechanical Systems and Signal Processing 162, S. 108035. DOI: 10.1016/j.ymssp.2021.108035.

Zhang, C.; Zuo, R.; Xiong, Y. (2021): Detection of the multivariate geochemical anomalies associated with mineralization using a deep convolutional neural network and a pixel-pair feature method. In: Applied Geochemistry 130, S. 104994. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2021.104994.

Anhang

Anhang I. Verwendete Fachzeitschriften und -bücher der internationalen Literaturrecherche

E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung oHG (Hg.): Home — Schweizerbart science publishers

E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung oHG (Hg.): Catena soil science publishers (Catena Verlag) -- book- and serial titles on soil science

E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung oHG (Hg.): Publications of BGR and LBEG

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Applied Clay Science

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Applied Geochemistry

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Artificial Intelligence in Geosciences

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Chemical Geology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Comptes Rendus Geoscience

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Computers & Geosciences

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Computers and Geotechnics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Continental Shelf Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Earth and Planetary Science Letters

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Earthquake Research Advances

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Energy Geoscience

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Engineering Geology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): GCA | Geochimica et Cosmochimica Acta

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geochemistry

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geoderma

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geodesy and Geodynamics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geodinamica Acta

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geoexploration

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geomechanics for Energy and the Environment

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geomorphology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geoscience Frontiers

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geosystems and Geoenvironment

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Geothermics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International Journal of Mining Science and Technology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International Journal of Mining Science and Technology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International Journal of Sediment Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): International journal of soil dynamics and earthquake engineering

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Applied Geophysics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Contaminant Hydrology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Geochemical Exploration

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Geodynamics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Hydrology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Natural Gas Geoscience

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Structural Geology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Journal of Volcanology and Geothermal Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Lithos

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Marine Geology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Ore and Energy Resource Geology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Organic Geochemistry

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Physics of the Earth and Planetary Interiors

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Precambrian Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Quaternary Geochronology

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Quaternary International

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Quaternary Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Quaternary Science Advances

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Quaternary Science Reviews

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Remote Sensing of Environment

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Cretaceous Research

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Earth-Science Reviews

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Results in Chemistry

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Neural Networks - The Official Journal of the International Neural Network Society, European Neural Network Society & Japanese Neural Network Society

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Petroleum

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): The International Journal of Integrated Solid Earth Sciences Tectonophysics

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Transportation Geotechnics

American Physical Society (Hg.): Physical Review Journals

Elsevier B.V. or its licensors or contributors (Hg.): Water Research

Geological Society

Geological Society of Amerika

GeoScienceWorld (GSW) (Hg.): GeoScienceWorld

Walter de Gruyter GmbH: Fachgebiete: Geowissenschaften

Wiley Online Library: Subject: Earth Sciences

Springer: Transport in Porous Media

Journal of Mechanical Systems and Signal Processing (MSSP)

Advances in Water Resources

Geoscientific Model Development

IEEE / Proceedings of the IEEE

Journal of Chemometrics

Journal of Environmental Management

Journal of the International Measurement Confederation (IMEKO)

Lyell Collection – Geological Society Publications (Hg.): Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology

