Ressortforschungsberichte zur kerntechnischen Sicherheit und zum Strahlenschutz

Vergleichende Betrachtung der probabilistischen/stochastischen und deterministischen Modellierung von Expositionen im Hinblick auf die Belastbarkeit des Modellergebnisses und die Anforderung an die Qualität der Eingangsdaten - Vorhaben 3609S50002

Auftragnehmer:

Brenk Systemplanung GmbH, Aachen

R. Barthel
S. Thierfeldt

Das Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) und im Auftrag des Bundesamtes für Strahlenschutz (BfS) durchgeführt.

Bundesamt für Strahlenschutz

Dieser Band enthält einen Ergebnisbericht eines vom Bundesamt für Strahlenschutz im Rahmen der Ressortforschung des BMUB (UFOPLAN) in Auftrag gegebenen Untersuchungsvorhabens. Verantwortlich für den Inhalt sind allein die Autoren. Das BfS 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 des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der des BfS übereinstimmen.

BfS-RESFOR-101/15

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:
urn:nbn:de:0221-2015012712260

Salzgitter, Januar 2015

Endbericht zum Vorhaben
FKZ: 3609S50002

Vergleichende Betrachtung der probabilistischen/stochastischen und deterministischen Modellierung von Expositionen im Hinblick auf die Belastbarkeit des Modellergebnisses und die Anforderungen an die Qualität der Eingangsdaten

BS-Projekt-Nr. 0903-01

erstellt im Auftrag des

Bundesamt für Strahlenschutz
Willy-Brandt-Straße 5
38226 Salzgitter

durch die

Brenk Systemplanung GmbH
Heider-Hof-Weg 23
D-52080 Aachen

Aachen, 07.09.2012

Hinweis:
Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers (Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit) übereinstimmen.

AUTOREN

Dr. R. Barthel

Dr. S. Thierfeldt

Es wird versichert, dass dieser Bericht nach bestem Wissen und Gewissen, unparteiisch und ohne Ergebnisweisung angefertigt worden ist.

DANKSAGUNG

Die Autoren bedanken sich bei Herrn Prof. Dr. R. Michel, Institut für Radioökologie und Strahlenschutz der Universität Hannover, für anregende Diskussionen sowie für die sorgfältige Durchsicht des Berichtes und seine hilfreichen Hinweise.

Zusammenfassung

Die Abschätzung von Strahlenexpositionen kann Szenario-, Modell- und Parameterunsicherheiten der Expositionsmodelle aufweisen. Schwerpunkt des vorliegenden Berichts ist die Untersuchung und vergleichende Bewertung von Methoden zur Berücksichtigung von Parameterunsicherheiten durch konservative deterministische Ansätze bzw. durch probabilistische Modellrechnungen mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen und BAYES-Verfahren. Darüber hinaus werden alternative Methoden wie Evidenz- und Möglichkeitstheorie zur Modellierung von Unsicherheiten sowie konzeptionelle Unterschiede von probabilistischen und stochastischen Modellierungsansätzen behandelt. Mit dem Vorhaben sollte geklärt werden, unter welchen Randbedingungen (Fragestellung, Zweck, Expositionssituation, Qualität der Eingangsdaten etc.) radioökologischen Modellen zur Expositionsberechnung deterministische bzw. probabilistische Ansätze zugrunde gelegt werden können oder sollten. Die probabilistische Modellierung von Unsicherheiten wurde bzgl. Mindestanforderungen an die Qualität der Eingangsdaten und weiterer methodischer Aspekte untersucht und im Vergleich zur deterministischen Expositionsmodellierung bzgl. ihrer Belastbarkeit bewertet.

Parameterunsicherheiten sind meistens durch die Variabilität von Parametern bedingt, mit denen die Ausbreitung von Schadstoffen in den Umweltmedien und in der Biosphäre sowie die Exposition von Personen modelliert werden. Sie resultieren bei gegebener Datenbasis aber auch aus Unsicherheiten der Identifikation der Verteilungsart von Modellparametern sowie der Schätzung entsprechender Verteilungsparameter. Als weitere Ursachen von Parameterunsicherheiten sind Messunsicherheiten, eine unzureichende Repräsentativität der Ergebnisse von Beprobungen sowie die Übertragung von empirischen Daten früherer Untersuchungen auf neue Situationen zu nennen. Ein spezieller Aspekt betrifft die Unsicherheit von Expertenschätzungen, die benötigt werden, wenn das Systemverhalten nur unzureichend bekannt ist oder für Modellparameter generische Aussagen zu treffen sind. Gemäß ihren Konsequenzen sind aleatorische Unsicherheiten (Variabilität eines Parameters, z. B. durch die Heterogenität in einer Grundgesamtheit/Population oder stochastische Prozesse bedingt, objektiv vorliegend und nicht reduzierbar) und epistemische Unsicherheiten (z. B. durch ungenaue Daten bzw. beschränktes Wissen bedingt, subjektiv geprägt und durch zusätzliche Daten/Informationen reduzierbar) voneinander zu unterscheiden und bzgl. ihrer Auswirkungen auf die Unsicherheit der Zielgröße "Exposition" möglichst separat zu analysieren und darzustellen.

Teil I des vorliegenden Berichts gibt eine Übersicht zum Stand von Wissenschaft und Technik zur probabilistischen/stochastischen Modellierung von Expositionen. Anhand einer schematischen Darstellung mathematischer Strukturen von komplexen (radio-)ökologischen Expositionsmodellen bzw. von Expositionsmodellen im engeren Sinn werden wesentliche Unterschiede deterministischer und probabilistischer Expositionsberechnungen diskutiert. Bezüglich probabilistischer Ansätze wird die vielfach angewandte einfache (1-dimensionale) Monte-Carlo-Simulation, die oft nur in grober Näherung die Variabilität von Modellparametern erfasst, mit Methoden zur Berücksichtigung und separaten Bewertung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten verglichen, wozu auf die 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation, auf BAYES-Verfahren sowie auf Verallgemeinerungen der Wahrscheinlichkeitstheorie zur mathematischen Modellierung von epistemisch unsicherem Wissen (Evidenztheorie, Möglichkeitstheorie, p-Box-Methode) eingegangen wird. Ausführlich werden auch diverse Methoden der Sensitivitätsanalyse erläutert, mit denen z. B. beurteilt werden kann, wie sich die Varianz der Zielgröße eines Modells aus einzelnen Beiträgen der Variation bzw. Unsicherheit von Inputvariablen zusammensetzt, um für deren Sensitivität eine Rangfolge zu bestimmen.

Im Ergebnis einer Recherche zum Stand der Anwendung probabilistischer Methoden bzw. auch alternativer Verfahren zur Berücksichtigung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten bei der Modellierung von Expositionen, wozu neben Anwendungen im Strahlenschutz auch Entwicklungen im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz untersucht wurden, ist festzustellen, dass bei überwiegender Nutzung von deterministischen Ansätzen in den letzten Jahrzehnten die Anwendung von probabilistischen Expositionsmodellen zunimmt, wobei im Strahlenschutz 1D-Monte-Carlo-Simulationen dominieren und nur vereinzelte Anwendungen von BAYES-Methoden, probabilistisch-possibilistischen Hybrid-Modellen bzw. der 2D-Monte-Carlo-Simulation erfolgten. Demgegenüber finden im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz Methoden, die eine separate Bewertung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten ermöglichen, eine stärkere Anwendung, was nicht zuletzt auf dbzgl. Empfehlungen der WHO und EPA zurückzuführen sein dürfte. Im internationalen Vergleich werden probabilistische und possibilistische Methoden für Expositionsmodellierungen in den USA, aber z. B. auch in Frankreich und Großbritannien, stärker genutzt als in Deutschland.

In **Teil II** des vorliegenden Berichts wird zur Aussagekraft von Modellprognosen bei unsicheren Eingangsdaten zunächst auf die Spezifizierung von Wahrscheinlichkeitsdichten (Kapitel 4) eingegangen. Insbesondere für Expositionsmodelle im engeren Sinn wird für sensitive Modellparameter die Bestimmung des Typs von univariaten statistischen Verteilungen, die Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen unsicheren Verteilungsparametern sowie die Analyse und Simulation von Abhängigkeiten zwischen Modellparametern mit Copulas behandelt. Für die probabilistische und stochastische Simulation von Prozessen (Kapitel 5) werden danach Verdünnungs- und Ausbreitungsmodelle untersucht, die mit gewöhnlichen und stochastischen Differentialgleichungen, mit Differentialgleichungssystemen oder mit partiellen Differentialgleichungen beschrieben werden.

Für die probabilistische Beschreibung von Modellparametern stehen oft mehrere Verteilungsarten zur Auswahl, die sich weitgehend ähneln, insbesondere in den Randbereichen jedoch voneinander unterscheiden. Zur Auswahl der Verteilungsart und Anpassung der Verteilungsparameter an Stichprobendaten sollten vornehmlich solche Verteilungen in die engere Wahl einbezogen werden, die auf Basis fachspezifischer Überlegungen zur Genesis der jeweiligen Verteilungsart plausibel sind. Verteilungen, die nach gängigen Goodness-of-Fit-Tests (vorzugsweise Anwendung des Anderson-Darling-Tests) mit einer geringen Irrtumswahrscheinlichkeit abgelehnt werden, stellen i. d. R. kein sinnvolles statistisches Modell für den untersuchten Modellparameter dar. Nach Anwendung dieser Kriterien können mehrere Verteilungsarten in der engeren Auswahl verbleiben. In der Regel sollten dann Verteilungen mit möglichst wenigen anzupassenden Parametern bevorzugt werden, die mit der Maximum-Likelihood-Methode geschätzt werden können. Der darauf basierende Log-Likelihood-Test ist eine effiziente Methode zur Selektion aus verschiedenen, möglichen Verteilungsarten. Für eine hohe Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion der Verteilungsart sind häufig Stichprobenumfänge von 200 (oder mehr) erforderlich. Der benötigte Stichprobenumfang wird durch mehrere Faktoren bestimmt, wie der Anzahl und Art von Verteilungsfamilien, mit denen die untersuchte Zufallsgröße ähnlich gut modelliert werden kann, sowie dem Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichte der "wahren" Verteilungsfamilie in Relation zu den alternativen Verteilungen. Hierzu stellt sich die Frage, ob für die probabilistische (Expositions-)Modellierung weitere Gesichtspunkte für die Wahl einer speziellen Verteilung aus ähnlichen Alternativen relevant sind. Diesbezügliche Kriterien sind die Eignung der Verteilungsart für andere Datensätze des gleichen Typs sowie die Konsequenzen für die Bewertung von extremen Ereignissen.

1D-Monte-Carlo-Simulationen nutzen Punktschätzer der Verteilungsparameter, die z. B. mit der Maximum-Likelihood-Methode berechnet werden können. Mit Ansätzen der klassischen Statistik können dazu zwar Konfidenzintervalle für die einzelnen Verteilungsparameter berechnet werden, es werden jedoch keine Abhängigkeiten zwischen unsicheren Verteilungsparametern bestimmt. Diese werden aber für eine korrekte Erfassung der epistemischen Unsicherheiten dieser Schätzungen mit Hilfe von 2D-Monte-Carlo-Simulationen benötigt. Eine gängige Methode zur Bestimmung solcher Abhängigkeiten ist das Bootstrapping. Aus der für eine Stichprobe geschätzten Verteilung wird hierbei eine große Anzahl neuer Stichproben simuliert, mit denen die Verteilungsparameter erneut geschätzt werden, um epistemische Unsicherheiten der ursprünglichen Schätzung zu quantifizieren. Diese Vorgehensweise ist aber in vielen Fällen unzureichend, wobei nominelle Vorgaben zum Vertrauensniveau von Konfidenzgrenzen erheblich verfehlt werden können. Eine mathematisch konsistente Lösung dieses Problems ist die Berechnung der BAYES'schen Posteriordichte für die aus einer Stichprobe resultierende Wahrscheinlichkeit, dass die Verteilungsparameter der zugrunde liegenden Population in einem bestimmten Bereich des Parameterraumes liegen. Die Analyse und Simulation von unsicheren Verteilungsparametern unter Beachtung gegenseitiger Abhängigkeiten ist Kern der BAYES-Theorie, die für probabilistische Modellierungen vorzugsweise genutzt werden sollte. Bei Ansatz geeigneter nicht-informativer Priorverteilungen für die unbekannten Verteilungsparameter resultieren auch gute frequentistische Eigenschaften für Konfidenzintervalle. Zur Berechnung und Simulation von Posteriordichten können neben allgemeinen Markov-Chain-Monte-Carlo-Methoden in vielen Fällen relativ einfach realisierbare spezielle Verfahren genutzt werden.

Zwischen Inputvariablen von Expositionsmodellen können statistische Abhängigkeiten vorliegen, die sich insbesondere auf die Randbereiche der Verteilung der Zielgröße stark auswirken können. Solche Abhängigkeiten werden oft vernachlässigt oder mit stark vereinfachten Ansätzen modelliert, die zu Fehleinschätzungen bzgl. der Wahrscheinlichkeit des Auftretens extremer Ereignisse führen. Für die Analyse und Simulation von Abhängigkeiten zwischen Modellparametern kann die Copula-Theorie genutzt werden. Copulas sind spezielle Funktionen, mit denen gemeinsame Verteilungsfunktionen von Zufallsvariablen mit Hilfe ihrer Randverteilungen dargestellt werden können. Zur Auswahl und Anpassung von Copulas an multivariate Stichproben wurden im vorliegenden Bericht die wichtigsten mathematischen Methoden dargelegt und beispielhaft veranschaulicht. Die mit Hilfe von Copulas mögliche Separation der statistischen Inferenz zu Randverteilungen und Abhängigkeitsstrukturen gestattet eine wesentliche Vereinfachung der Analyse, Modellierung und Simulation voneinander abhängiger Zufallsgrößen. Zur Auswahl und Anpassung von Copulas an Stichproben sind jedoch große Datensätze erforderlich (mindestens Stichprobenumfänge von 50 bis 200). Wenn Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren nicht auszuschließen sind, jedoch weder fachliche Ansätze noch ausreichendes Datenmaterial zur Modellierung der Abhängigkeit zur Verfügung stehen, sind konservative Berechnungen über FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken möglich, die alle denkbaren Abhängigkeitsstrukturen (Copulas) abdeckend einschließen.

Für komplexe Expositionsmodelle sind i. A. verschiedene Verdünnungs- und Ausbreitungsprozesse zu erfassen, die deterministisch mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen bzw. mit entsprechenden Gleichungssystemen beschrieben werden können. Die Parameter solcher Modelle können bei Betrachtung einer Population gleichartiger Prozesse (z. B. für eine Vielzahl von Standorten) unterschiedliche Werte aufweisen bzw. epistemisch unsicher sein, woraus sich probabilistische oder possibilistische Verallgemeinerungen der deterministischen Modelle ergeben. In vielen Fällen sind einzelne Modellparameter jedoch als stochastische Prozesse zu betrachten, die z. B.

durch zeitlich schwankende Umwelteinflüsse verursacht werden können. Die Zielgröße ist dann als Lösung einer stochastischen Differentialgleichung bzw. eines entsprechenden Gleichungssystems zu bestimmen. Anhand diverser Beispiele zeitlich-stochastischer Verdünnungs- und Ausbreitungsprozesse, die u. a. durch Kompartiment-Modelle beschrieben werden, wird verdeutlicht, dass die strukturell unterschiedlichen Modellierungsansätze (stochastisch, deterministisch, probabilistisch) in Abhängigkeit von den Gegebenheiten und der jeweiligen Fragestellung ihre spezielle Berechtigung haben können. Es ist jedoch wichtig, die den drei Modellierungsansätzen zugrunde liegenden Annahmen und deren Relevanz für eine konkrete Fragestellung sachgerecht einzuschätzen. Neben der Beurteilung von stochastischen Schwankungen mit Hilfe stochastischer Differentialgleichungen (im Vergleich zum Erwartungswert eines stochastischen Modells, der einem deterministischen Modell entspricht) dient die Entwicklung von stochastischen Modellen nicht zuletzt dem Verständnis der realen Prozesse und damit auch der Begründung vereinfachter deterministischer Ansätze.

Zur Behandlung von Parameterunsicherheiten in Ausbreitungsmodellen, die durch partielle Differentialgleichungen beschrieben werden, wurde die Migration von Radionukliden in porösen Medien als Anwendungsfall betrachtet. Hierbei ist insbesondere die hydraulische Leitfähigkeit ein räumlich-stochastischer Prozess, der zu Abweichungen vom "normalen" (GAUSS'schen) Transport führen kann. Zur Modellierung solcher Gegebenheiten/Prozesse gewinnen neben der Lösung stochastischer partieller Differentialgleichungen Random-Walk-Transportmodelle an Bedeutung, mit denen der in diesen Fällen häufig beobachtete Effekt der Superdiffusion relativ einfach erfasst werden kann.

Teil III des vorliegenden Berichts betrifft Entscheidungshilfen und Kriterien zur Anwendung deterministischer, probabilistischer bzw. stochastischer Expositionsmodelle. Die Eignung deterministischer, probabilistischer, possibilistischer und stochastischer Expositionsmodelle (Kapitel 6) wird in Abhängigkeit von der Art der Bezugspersonen (hypothetische bzw. reale Personen oder Personengruppen), der Aufgabenstellung von Expositionsabschätzungen (Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten, Berechnung von mittleren individuellen Expositionen, Ermittlung hoher Perzentile der individuellen Strahlenexposition, Ermittlung der Variabilität bzw. Unsicherheit von individuellen Strahlenexpositionen) sowie der Art von realen bzw. hypothetischen Expositionssituationen und dem Umfang der Modellierung bewertet. Abschließend werden Schlussfolgerungen und Empfehlungen für weitere Arbeiten (Kapitel 7) zusammengefasst.

Deterministische Expositionsmodelle sind für einige der genannten Ziele und Randbedingungen von Expositionsabschätzungen nicht geeignet, wogegen mit probabilistischen bzw. possibilistischen Ansätzen alle Aufgaben gelöst werden können. Für den Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten erscheint unter Beachtung wesentlicher Vor- und Nachteile von deterministischen bzw. probabilistischen Expositionsabschätzungen eine gestufte Vorgehensweise angebracht, die von konservativen deterministischen Ansätzen (auch bzgl. der Szenarien und Modelle) bis hin zu realitätsnahen standortspezifischen probabilistischen Expositionsabschätzungen reicht.

Die Empfehlungen für weitere Arbeiten betreffen die Modellierung statistischer Abhängigkeiten zwischen Verzehrsraten verschiedener Lebensmittelklassen, die stochastische Modellierung radioökologischer Kompartiment-Modelle, die Nutzung stochastischer Modelle zur Radionuklidausbreitung im Grundwasser, die Methoden zur Verknüpfung von probabilistischen und possibilistischen Verteilungen, praxisrelevante Anwendungen probabilistischer bzw. possibilistischer Expositionsmodelle und die Bewertung der Ergebnisse von probabilistischen Expositionsabschätzungen.

Summary

The estimation of radiation exposures may exhibit uncertainties concerning the scenario, the model and the parameters of exposure models. The present report is focused on the investigation and comparative assessment of techniques for the consideration of parameter uncertainties by means of conservative deterministic approaches and probabilistic model calculations using Monte Carlo simulations and Bayesian methods, respectively. In addition, alternative methods for uncertainty modelling like evidence and possibility theory, and the conceptual disparities between probabilistic and stochastic modelling approaches are considered. The project had the aim to clarify under which constraints (purpose, objective, exposure situation, input data quality etc.) radioecological models for exposure calculations can or should be based on deterministic or probabilistic approaches. The probabilistic modelling of uncertainties was investigated with respect to minimum requirements concerning the quality of input data and further methodical aspects, and its reliability was compared to the deterministic exposure modelling.

Parameter uncertainties are mostly caused by the variability of parameters that are used for the modelling of pollutant transport in environmental media and in the biosphere as well as the exposure of persons. Based on given data, they also result from uncertainties concerning the identification of distribution types for model parameters and the estimation of the parameters characterising the distributions. Further reasons for parameter uncertainties are measurement uncertainties, an insufficient representativeness of sampling results and the transfer of empirical data from former investigations to another situation. A specific aspect concerns the uncertainty of expert judgements, which may be necessary if the system behaviour is not known sufficiently or if generic assumptions have to be made for model parameters. Subject to their consequences, aleatoric uncertainties (parameter variability, e. g. due to the heterogeneity within a population or generated by stochastic processes – this uncertainty exists in reality and cannot be reduced) and epistemic uncertainties (owing to imprecise data or incomplete knowledge – this uncertainty depends on the subjective approach and may be reduced by additional data/information) have to be distinguished, analysed and presented separately, as far as possible, with respect to their impact on the uncertainty of the output variable "exposure".

Part I of the present report provides an overview about the state of the scientific and technical knowledge concerning the probabilistic/stochastic modelling of exposures. Essential differences between deterministic and probabilistic exposure calculations are discussed by means of schematic representations of mathematical structures of complex (radio-)ecological exposure models and of exposure models in the narrow sense, respectively. With respect to probabilistic approaches, the frequently used simple (one-dimensional) Monte Carlo simulation that often performs only a rough approximation of the variability of model parameters, is compared with methods that account for and allow separate assessments of aleatoric and epistemic uncertainties, for which the two-dimensional Monte Carlo simulation, Bayesian methods and some generalizations of probability theory for epistemic uncertain knowledge (evidence theory, possibility theory, p-box method) are addressed. Diverse methods of sensitivity analysis are explicated, which allow, e. g., to assess how individual contributions from the variability and uncertainty of the input variables contribute to the variance of the output variable of a model, allowing a sensitivity ranking.

Research on the state of implementation of probabilistic methods and alternative methods for the consideration of aleatoric and epistemic uncertainties in exposure modelling revealed that the

application of probabilistic exposure models increased during the last decades, with due dominance of deterministic approaches. This research comprised applications relevant for radiation protection as well as models for conventional environmental and health protection issues. Concerning the framework of radiation protection, 1D Monte Carlo simulation is dominant. Bayesian methods, probabilistic-possibilistic hybrid methods or 2D Monte Carlo simulations are conducted occasionally. In contrast, in the frame of conventional environmental and health protection, methods that allow for separate assessments of aleatoric and epistemic uncertainties are used more frequently. This seems to be promoted by respective WHO and EPA recommendations. In comparison to Germany, probabilistic and possibilistic methods of exposure modelling are more frequently used internationally, mainly in the USA but e.g. also in France and in the UK.

Part II of the present report deals with the significance of model predictions based on uncertain input data, considering first the specification of probability distributions (Chapter 4). The specification of the type of univariate statistical distributions, the observance of dependencies between uncertain distribution parameters, and the analysis and simulation of dependencies between model parameters by means of copulas are considered mainly with respect to sensitive parameters of exposure models in the narrow sense. Thereafter, dilution and transport models are considered with respect to probabilistic and stochastic simulations of processes (Chapter 5), which are described by ordinary and stochastic differential equations, by systems of differential equations, or by partial differential equations.

For the probabilistic description of model parameters, various distribution types are often available, which are widely similar, but differ especially in the tails. For the selection of distribution types and the estimation of distribution parameters from sampling data, primarily those distributions should be taken into consideration that are plausible because they are commensurate with the data origin and genesis. Distributions being rejected by common Goodness-of-Fit tests with small error probability (the Anderson-Darling test should be applied preferentially), in general do not constitute a reasonable statistical prototype for the model parameter considered. After application of these fit criteria, several types of distributions may remain on the shortlist. In this case, as a general rule, distributions with an as small as possible number of parameters should be preferred, which can be estimated by means of the maximum likelihood method. Based on this approach, the log-likelihood test presents an effective method for selecting an appropriate distribution from several possible types. To assure a high probability of a correct selection of the distribution type, a relatively large sample number of 200 (or more) may be necessary. The sample number required depends on various factors, like the number and types of distribution families that appropriately could be used for modelling the random variable considered, as well as the characteristics of the probability density function of the "correct" distribution compared to the alternatives. A further question is, whether additional criteria exist for the selection of a specific distribution for probabilistic (exposure) modelling from similar alternatives. Such criteria may be the appropriateness of the distribution type for other data sets of the same kind and the consequences for the assessment of extreme events.

1D Monte Carlo simulation utilizes point estimates of the distribution parameters, which can be calculated e. g. by means of the maximum likelihood method. Confidence intervals for individual distribution parameters can be calculated in the framework of classical statistics. However, dependencies between uncertain distribution parameters are not taken into account in this way. These have to be considered by means of 2D Monte Carlo simulations in order to cover epistemic

estimation uncertainties correctly. Bootstrapping represents a popular method for the determination of such dependencies. From a distribution that has been estimated from sampling data, a large number of samples is simulated and utilized for re-estimations of the distribution parameters to quantify the epistemic uncertainties of the original estimation. However, this approach often fails, as it may not meet the nominal specifications of the confidence level for confidence limits. A mathematically consistent solution for this problem can be achieved by calculating the Bayesian posterior density for the given sample data, which represents the probability that the distribution parameters of the underlying population are located in a certain part of the parameter space. The analysis and simulation of uncertain distribution parameters with consideration of mutual dependencies belongs to the core of the Bayesian theory, which should be preferred for probabilistic modelling. By means of appropriate non-informative priors for the unknown distribution parameters, the resulting confidence intervals show adequate frequentistic properties. For calculating and simulating posterior densities, in addition to the general Markov-Chain-Monte-Carlo methods, specific relatively simple procedures can be realised in numerous cases.

Statistical dependencies between input variables of exposure models may be present, which may strongly affect especially the tails of the output variable distribution. Such dependencies are often neglected or modelled by oversimplified approaches, leading to misjudgements concerning the probability of occurrence of extreme events. The copula theory provides appropriate tools for the analysis and simulation of dependencies between model parameters. Copulas are specific functions, which allow the determination of the multivariate distribution function of random variables via their marginal distributions. With respect to the selection and adaptation of copulas to multivariate sampling data, the most important mathematical methods are outlined in the present report and demonstrated exemplarily. The separation of the statistical inference with respect to marginal distributions and dependency structures by means of copulas enables substantial simplifications for the analysis, modelling and simulation of mutually dependent random variables. However, the selection and adaptation of copulas for sampling data requires large datasets (at least with sampling volumes from 50 to 200). If dependencies between model parameters cannot be excluded, but if neither technical information nor sufficient data are available for modelling an appropriate dependence structure, conservative calculations can be performed by means of FRÉCHET-HOEFFDING bounds, which encompass all possible dependence structures (copulas).

Complex exposure models comprise, in general, various dilution and transport processes, which can be described deterministically by means of ordinary or partial differential equations or by respective equation systems. Considering a population of similar processes (e. g. for a large number of sites), the parameters of such models may exhibit different values or be epistemically uncertain, which leads to probabilistic or possibilistic generalisation of the deterministic model. However, in many cases particular model parameters have to be considered as stochastic processes generated by environmental conditions varying in time. In such cases, the output variable is represented by the solution of a stochastic differential equation or a respective system of equations. By means of diverse examples of dilution and transport processes that have a stochastic behaviour in time, amongst others those described by compartment models, it has been illustrated that structurally different modelling approaches (stochastic, deterministic, probabilistic) may be justifiable, depending on the specific conditions and questions to be answered. Of course, assumptions underlying these three modelling approaches and their relevance for practical questions have to be assessed appropriately. In addition to the assessment of stochastic variations by means of stochastic

differential equations (compared to the expectation value of a stochastic model that corresponds to a deterministic model), the development of stochastic models also aims at improving understanding of real processes and thereby substantiating simplified deterministic approaches.

Concerning the treatment of parameter uncertainties in transport models, which may be described by means of partial differential equations, the migration of radionuclides in porous media has been considered as an example. Here, the hydraulic conductivity represents a spatial stochastic process that may result in deviations from the "normal" (Gaussian) transport. For the modelling of such conditions/processes, in addition to the solution of stochastic partial differential equations, random walk transport models that facilitate a relative simple description of the super-diffusion effect observed in many cases become more important.

Part III of the present report concerns decision support and criteria for the use of deterministic, probabilistic and stochastic exposure models. The adequacy of deterministic, probabilistic, possibilistic and stochastic exposure models (Chapter 6) is assessed depending on the category of exposed persons to which the model relates (hypothetical or real persons or person groups), the objective of exposure estimations (proof of compliance with exposure limits or constraints, calculation of the mean or of a high percentile of individual radiation exposures, assessment of the variability and uncertainty of individual radiation exposures), as well as on the kind of real or hypothetical exposure situations and the scope of modelling. Finally, conclusions and recommendation for further investigations (Chapter 7) are provided.

Deterministic exposure models are inappropriate for some of the mentioned objectives and conditions of exposure estimations, while all tasks can be resolved by probabilistic or possibilistic approaches. Concerning the proof of compliance with exposure limits or constraints, and taking into account the advantages and disadvantages of deterministic and probabilistic exposure estimations, a tiered procedure seems to be adequate, ranging from conservative deterministic approaches (also concerning the scenarios and models) to realistic, site-specific probabilistic exposure estimations.

Recommendations for further investigations are related to modelling of statistical dependencies between consumption rates for different food classes, the stochastic modelling of radioecological compartment models, the utilization of stochastic models concerning the migration of radionuclides in groundwater, methods for the combination of probabilistic and possibilistic distributions, practice-oriented implementations of probabilistic and possibilistic exposure models, and the evaluation of the results of probabilistic exposure estimations.

Abkürzungen

ADE	advection dispersion equation (Advektions-Dispersions-Gleichung)
ANOVA	analysis of variance (Varianzanalyse)
ARMA	Autoregressive Moving Average (Modell der Zeitreihenanalyse)
ARS	adaptive rejection sampling
AVV	Allgemeine Verwaltungsvorschrift
BfS	Bundesamt für Strahlenschutz
BMU	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit
BS	Brenk Systemplanung GmbH
cdf	cumulative distribution function (Verteilungsfunktion)
CTRW	continuous time random walk (zeitkontinuierlichen Zufallsbewegungen)
EKF	erweiterter KALMAN-Filter
EPA	U. S. Environmetal Protection Agency
EPP	elementarer POISSON-Prozess
FEM	Finite-Elemente-Methode
GW	Grundwasser
HLW	High Level Radioactive Waste (deutsch: hochaktive Abfälle
IAEA	International Atomic Energy Agency
ICRP	International Commission on Radiation Protection
iid	independent and identically distributed
LLW	Low Level Radioactive Waste (deutsch: schwachaktive Abfälle)
LHS	Latin-Hypercube-Sampling
MC	Monte Carlo (in Zusammensetzungen)
	1D-MC-Simulation: 1-dimensionale Monte-Carlo-Simulation
	2D-MC-Simulation: 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation
	MCS: Monte-Carlo-Sampling
MCMC	Markov-Chain-Monte-Carlo
ML	Maximum Likelihood
ODE	ordinary differential equation (gewöhnliche Differentialgleichung)
PAE	potentielle α-Energiekonzentration
PBPK	physiologisch basierte pharmakokinetische (Modelle)
PCS	probability of correct selection (von Verteilungen)
PDE	partial differential equation (partielle Differentialgleichung)
pdf	probability density function (Wahrscheinlichkeitsdichte)
PIS	probability of incorrect selection (von Verteilungen)

RSM	Response Surface Methode
SADE	stochastic advection dispersion equation (stochastische ADE)
SDE	stochastic differential equation (stochastische Differentialgleichung)
SSK	Strahlenschutzkommission
SWP	Standard-WIENER-Prozess
WHO	World Health Organization
ZPP	zusammengesetzter POISSON-Prozess (engl.: compound POISSON process)

INHALTSVERZEICHNIS

Seite:

1. EINLEITUNG 1

1.1. PROBLEMSTELLUNG 1
1.2. ZIELSTELLUNG 7
1.3. RAHMEN ZUR UMSETZUNG DER ZIELSTELLUNG 8
1.4. ÜBERSICHT ZUM VORLIEGENDEN BERICHT 10

2. METHODISCHE ASPEKTE DER MODELLIERUNG VON EXPOSITIONEN 13

2.1. EINORDNUNG VON EXPOSITIONSMODELLEN IN RISIKOABSCHÄTZUNGEN 13
2.2. MATHEMATISCHE STRUKTUREN VON (RADIO-)ÖKOLOGISCHEN EXPOSITIONSMODELLEN 14
2.2.1. Schadstofftransport zwischen Kompartimenten 14
2.2.2. Komplexität von Expositionsmodellen 15
2.2.3. Expositionsmodelle im engeren Sinn 18
2.2.3.1. Expositionsabschätzungen im konventionellen Gesundheitsschutz 18
2.2.3.2. Expositionsabschätzungen im Strahlenschutz 20
2.3. DETERMINISTISCHE EXPOSITIONSABSCHÄTZUNGEN 22
2.4. PROBABILISTISCHE EXPOSITIONSABSCHÄTZUNGEN 25
2.4.1. Einfache Monte-Carlo-Simulation 25
2.4.2. 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation 29
2.4.2.1. Stichprobenunsicherheiten der quantitativen Charakterisierung der Variabilität 29
2.4.2.2. Weitere Ursachen von Unsicherheiten der Quantifizierung der Variabilität 34
2.4.2.3. Methode der 2-dimensionalen Monte-Carlo-Simulation 35
2.5. SENSITIVITÄTSANALYSE 43
2.5.1. Deterministische Methoden 44
2.5.2. Methoden für 1-dimensional probabilistische Modelle 45
2.5.2.1. Verhältnis der Variationskoeffizienten 45
2.5.2.2. Varianzanalyse (ANOVA) 46
2.5.2.3. Multivariate Regressions- und Korrelationsanalyse 48
2.5.2.4. Analyse von nichtlinearen Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen 49
2.5.2.5. Analyse bedingter Varianzen 1. Ordnung 49
2.5.2.6. Analyse bedingter Varianzen höherer Ordnung 50
2.5.2.7. FOURIER-Amplituden-Sensitivitätstest (FAST) 56
2.5.2.8. Verteilungsbasierte Sensitivitätsmaße 57
2.5.3. Methoden für 2-dimensional probabilistische Modelle 58
2.5.3.1. 2D-MC-Simulation 58
2.5.3.2. Varianzanalyse zur Separation von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten 59
2.6. SPEZIFIKATION STATISTISCHER VERTEILUNGEN FÜR EXPOSITIONSFAKTOREN 63
2.6.1. Verwendung von Literaturangaben 64
2.6.2. Auswahl und Anpassung von Verteilungen an Messwerte 65
2.6.3. Berücksichtigung von Abhängigkeiten/Korrelationen zwischen Inputvariablen 71
2.6.4. Verteilungen für epistemisch unsichere Parameter 72
2.6.5. Stochastische Differentialgleichungen 74
2.6.6. Bootstrapping zur Analyse der Unsicherheit statistischer Kenngrößen 76

2.7. BAYES-METHODEN 78
2.7.1. Grundlegende Ansätze der BAYES-Theorie 78
2.7.2. BAYES'sche Statistik 81
2.7.3. Anwendung von BAYES-Methoden 85
2.8. METHODEN ZUR BERÜCKSICHTIGUNG DER UNGENAUIGKEIT VON WAHRSCHEINLICHKEITEN 87
2.8.1. Modellierung von epistemisch unsicherem Wissen 87
2.8.2. Evidenztheorie 88
2.8.3. Möglichkeitstheorie 91
2.8.4. p-Box-Methode 92

3. ANWENDUNG PROBABILISTISCHER EXPOSITIONSABSCHÄTZUNGEN 97

3.1. STAND IM KONVENTIONELLEN UMWELT- UND GESUNDHEITSSCHUTZ 97
3.2. STAND IM STRAHLENSCHUTZ 100
3.2.1. Vorbemerkungen 100
3.2.2. Normative Anforderungen und Anwendungen 101
3.2.2.1. Anforderungen aus Regelwerksteilen 101
3.2.2.2. Anwendung als Grundlage für Regelwerksteile 103
3.2.2.3. Sonstige allgemeine Darstellungen 104
3.2.3. Anwendungen 105
3.2.3.1. Übersicht 105
3.2.3.2. Modellierung der Ausbreitung von Quellen zu und in Umweltmedien 106
3.2.3.3. Modellierung der Ausbreitung zwischen Quelle und Expositionsmedien bzw. Biosphäre 107
3.2.3.4. Modellierung der Ausbreitung in/zwischen Umweltmedien und Biosphäre 109
3.2.3.5. Modellierung der Ausbreitung zwischen Umweltmedien und Expositionsmedien 110
3.2.3.6. Modellierung der Exposition des Menschen 111
3.2.4. Vergleichende Bewertung des nationalen/internationalen Standes 116

4. SPEZIFIZIERUNG VON WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNGEN 119

4.1. BESTIMMUNG DES TYPS VON UNIVARIATEN STATISTISCHEN VERTEILUNGEN 119
4.1.1. Vorausetzungen zur Anpassung von Verteilungsfunktionen an vorhandene Daten 120
4.1.2. Goodness-of-Fit Tests 121
4.1.2.1. PEARSON'scher Chi-Quadrat-Test (χ^2-Test) 121
4.1.2.2. KOLMOGOROV-SMIRNOV-TEST (K-S-TEST) 121
4.1.2.3. ANDERSON-DARLING-TEST (A-D-TEST) 122
4.1.2.4. Probleme der Anwendung von Goodness-of-Fit Tests 123
4.1.3. Auswahl von Verteilungen mit Hilfe der Likelihood-Funktion 123
4.1.3.1. Log-Likelihood-Test (LL-Test) 124
4.1.3.2. AKAIKE-Informations-Kriterium (AIC-Test und AIC_c-Test) 124
4.1.4. Identifikation der Verteilungsart anhand von Stichproben 125
4.1.4.1. Anmerkungen zu früheren Untersuchungen 126
4.1.4.2. Auswahl von Verteilungsfamilien für positiv definierte Zufallsgrößen 134
4.1.4.3. Auswahl von Verteilungsfamilien für beidseitig begrenzte Zufallsgrößen 165
4.1.4.4. Auswahl von Verteilungsfamilien für diskrete Zufallsgrößen 170
4.1.5. Schlussfolgerungen und Empfehlungen 175

4.2. BERÜCKSICHTIGUNG VON ABHÄNGIGKEITEN ZWISCHEN UNSICHEREN VERTEILUNGSPARAMETERN 176
4.2.1. Ansätze der frequentistischen und der BAYES'schen Statistik 176
4.2.2. BAYES-Methoden zur Analyse/Simulation von unsicheren Verteilungsparametern 180
4.2.2.1. Verteilungen mit Posteriordichten aus bekannten Verteilungsfamilien 180
4.2.2.2. Allgemeine MCMC-Methoden 182
4.2.2.3. Verteilungen mit log-konkaver Posteriordichte 186
4.2.2.4. Spezielle MCMC-Methoden, Slice-Sampling 198
4.2.3. BAYES-Methode und Bootstrapping zur Ermittlung von Parameterunsicherheiten 207
4.2.3.1. Verteilungsarten mit analytisch quantifizierbaren Parameterunsicherheiten 208
4.2.3.2. Quantifizierung von Parameterunsicherheiten für weitere Verteilungsfamilien 214
4.2.3.3. Zusammenfassende Bewertung 218
4.2.4. Beachtung von Parameterunsicherheiten bei der Schätzung statistischer Kenngrößen und der Auswahl von Verteilungsarten für probabilistische Expositionsfaktoren 218
4.2.4.1. Unsicherheitsverteilungen für Kennwerte von Zufallsgrößen 219
4.2.4.2. Berechnung von Grenzverteilungen und von Posterior-Prognoseverteilungen 231
4.3. ANALYSE/SIMULATION VON ABHÄNGIGKEITEN ZWISCHEN MODELLPARAMETERN MIT COPULAS 237
4.3.1. Statistische Kennwerte zur Charakterisierung von Abhängigkeiten 238
4.3.2. Anpassung von Copulas an multivariate Stichproben 244
4.3.3. Fachbezogene Modellierung von Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren 250
4.3.4. Anforderungen an eine probabilistische Modellierung von Abhängigkeiten 258

5. PROBABILISTISCHE UND STOCHASTISCHE SIMULATION VON PROZESSEN 259

5.1. MODELLE MIT GEWÖHNLICHEN UND STOCHASTISCHE DIFFERENTIALGLEICHUNGEN 259
5.1.1. Stochastische und probabilistische Modelle mit gewöhnlichen Differentialgleichungen 260
5.1.1.1. Lineare ODE mit stochastischer/probabilistischer Inhomogenität 261
5.1.1.2. Lineare ODE mit stochastischer/probabilistischer Abbaurate 265
5.1.2. Modelle mit stochastischen Differentialgleichungen 270
5.1.2.1. SDE mit WIENER-Prozess 270
5.1.2.2. SDE mit POISSON-Prozessen 276
5.1.3. Probabilistische Unsicherheiten stochastischer Modelle 292
5.1.3.1. Parameterschätzung für SDE-Modelle bei bekannter Übergangswahrscheinlichkeit 293
5.1.3.2. Behandlung epistemischer Unsicherheiten zu Parametern von SDE-Modellen 300
5.2. MODELLE MIT DIFFERENTIALGLEICHUNGSSYSTEMEN 303
5.2.1. Punktmodelle 305
5.2.1.1. Lineare Punktmodelle 305
5.2.1.2. Nichtlineare Punktmodelle 313
5.2.2. Deterministische Kompartiment-Modelle 316
5.2.2.1. Bestimmung von Transferfaktoren aus dynamischen Kompartiment-Modellen 319
5.2.2.2. Identifikation und Parameterunsicherheit dynamischer Kompartiment-Modelle 323
5.2.2.3. Possibilistische und probabilistische Simulation von Unsicherheiten 326
5.2.3. Stochastische Kompartiment-Modelle 330
5.2.3.1. Fremderregte Systeme 331
5.2.3.2. Parametererregte Systeme 333
5.2.3.3. Aspekte weiterführender Untersuchungen 335

5.3. MODELLE MIT PARTIELLEN DIFFERENTIALGLEICHUNGEN 336
5.3.1. Deterministische Advektions-Dispersions-Gleichung mit konstanten Parametern 336
5.3.2. Bestimmung und Behandlung von Parameterunsicherheiten 341
5.3.2.1. Fließgeschwindigkeit und Dispersion 342
5.3.2.2. K_d-Werte 344
5.3.3. Stochastische Modellierungsansätze 345
5.3.3.1. Stochastische Advektions-Dispersions-Gleichung (SADE) 346
5.3.3.2. Random-Walk-Transportmodelle 347

6. AUSWAHL DETERMINISTISCHER, PROBABILISTISCHER, POSSIBILISTISCHER UND STOCHASTISCHER EXPOSITIONSMODELLE 359

6.1. SCHLUSSFOLGERUNGEN ZUR NUTZUNG DETERMINISTISCHER UND PROBABILISTISCHER MODELLE 359
6.2. SCHLUSSFOLGERUNGEN ZUR NUTZUNG PROBABILISTISCHER UND STOCHASTISCHER MODELLE 365
6.3. AUSWAHLKRITERIEN FÜR DETERMINISTISCHE UND PROBABILISTISCHE/POSSIBILISTISCHE MODELLE 367
6.3.1. Ziele und Randbedingungen von Expositionsabschätzungen 367
6.3.2. Auswahlkriterien gemäß Festlegung von Bezugspersonen 368
6.3.3. Auswahlkriterien gemäß Aufgabenstellung von Expositionsabschätzungen 373
6.3.3.1. Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten 373
6.3.3.2. Ermittlung durchschnittlicher individueller Expositionen 375
6.3.3.3. Ermittlung eines hohen Perzentils der individuellen Strahlenexposition 375
6.3.3.4. Ermittlung der Variabilität bzw. Unsicherheit von individuellen Strahlenexpositionen 379
6.3.3.5. Zusammenstellung der Bewertungen 379
6.3.4. Auswahlkriterien gemäß Art der Expositionssituation und Umfang der Modellierung 380
6.3.4.1. Reale Expositionssituationen 380
6.3.4.2. Hypothetische Expositionssituationen 380
6.3.5. Bewertung von probabilistischen bzw. possibilistischen Expositionsabschätzungen 382

7. SCHLUSSFOLGERUNGEN UND EMPFEHLUNGEN FÜR WEITERE ARBEITEN 383

8. LITERATUR 386

Anhang A: GLOSSAR 456

Anhang B: GRUNDLAGEN DER STATISTIK 462

Anhang C: UNIVARIATE PARAMETRISCHE VERTEILUNGEN 512

1. EINLEITUNG

1.1. Problemstellung

Zur Beurteilung von gesundheitlichen Risiken, denen der Mensch durch unterschiedlichste radio-, chemo- oder biotoxische Schadstoffe in Umweltmedien oder Gebrauchsgütern ausgesetzt ist oder sein kann, sowie für die nach gesellschaftlich akzeptierten Maßstäben erforderliche Beschränkung bzw. Reduzierung solcher Risiken, stellt die quantitative Abschätzung der Exposition von real oder potentiell betroffenen Einzelpersonen oder Personengruppen eine wesentliche Voraussetzung dar.

Gemäß [WHO 04] wird als Exposition die Konzentration oder die Menge eines speziellen Stoffes, der ein Zielorganismus, ein System oder eine (Sub-)Population mit bestimmter Häufigkeit und Dauer erreicht, bezeichnet. Analog wird z. B. in [UBA 07] Exposition als *"Ausgesetztsein des Schutzgutes gegenüber Schadstoffen oder Noxen"* bzw. als *"Kontakt zwischen einer Person und einer biologischen, chemischen oder physikalischen Noxe über Zeit und Raum"* oder auch als *"Kontakt einer Umweltkontaminante mit den äußeren Grenzflächen des menschlichen Körpers (Haut, Atemtrakt, Magen-Darm-Trakt)"* definiert. Die StrlSchV [BMU 01] bestimmt den Begriff der Strahlenexposition entsprechend als *"Einwirkung ionisierender Strahlung auf den menschlichen Körper"*, wobei Ganz- und Teilkörperexpositionen sowie äußere und innere Strahlenexpositionen unterschieden werden.

In Abhängigkeit von Stärke und Dauer der Exposition, von Verhalten und Lebensgewohnheiten der betroffenen Personen sowie ihren anatomischen und physiologischen Besonderheiten resultieren Dosen, die im konventionellen Gesundheitsschutz die im Körper oder in einzelnen Organen absorbierte Schadstoffmenge und im Strahlenschutz die absorbierte Strahlenenergie beschreiben. Die Beurteilung daraus resultierender gesundheitlicher Schäden oder Risiken erfolgt über Dosis-Wirkungs-Beziehungen. Die im vorliegenden Bericht behandelten Aspekte der Abschätzung von Expositionen betreffen somit nur einen Teil der für eine Risikoanalyse nötigen Bewertungen.

Für Expositionsabschätzungen können die folgenden drei Methoden anwendet werden [EPA 92]:

- direkte Messungen der Schadstoffkonzentration (bzw. der äußeren Strahlung) am Kontaktpunkt über den Zeitraum der Exposition (Monitoring);
- Abschätzung der Schadstoffkonzentration (bzw. externen Strahlung) am Kontaktpunkt und der Expositionszeit für relevante Expositionsszenarien (Expositionsmodellierung);
- Abschätzung der Exposition/Dosis über Indikatoren, wie der Konzentration von Schadstoffen oder Biomarkern in Ausscheidungen oder in bestimmten Körperorganen (Rekonstruktion).

Die Anwendung dieser Methoden wird nicht zuletzt vom Ziel und den für die Abschätzung von Expositionen zu berücksichtigenden Gegebenheiten bestimmt. Die Ergebnisse von Expositionsabschätzungen können insbesondere

- Risikobewertungen (z. B. zur Festlegung von Konzentrations- oder Dosisbegrenzungen, zum Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten, zur Ableitung von Anforderungen an Intervention/Sanierung oder zur Prognose von potentiellen Expositionen),

- Dokumentationen des Ist-Zustandes und Trendbeurteilung (z. B. zur Beurteilung der Relevanz bestehenden Expositionen, der Zweckmäßigkeit/Dringlichkeit von Monitoringprogrammen oder von detaillierter Untersuchungen möglicher Schadstoffquellen und Ausbreitungsmechanismen),
- epidemiologischen Studien (z. B. zur Beurteilung früherer Expositionen und oder zur Ableitung bzw. Überprüfung von Dosis-Wirkungs-Beziehungen)

dienen. Strahlenexpositionen von Arbeitskräften und von Einzelpersonen der Bevölkerung, die durch Tätigkeiten oder Arbeiten, in Interventionssituationen oder durch natürliche Gegebenheiten verursacht werden, können überwiegend nicht direkt und auch in einfachen Fällen nur unvollständig gemessen werden. Für ihre Abschätzung sind radioökologische Modelle erforderlich, welche die folgenden Elemente der Kausalkette einer Exposition erfassen:

- die primären Strahlenquellen, von denen eine radiologisch relevante Direktstrahlung ausgeht und/oder radioaktive Stoffe in die Umweltmedien freigesetzt werden,
- die Ausbreitung von Radionukliden in den Umweltmedien Geosphäre/Grundwasser, Oberflächenwasser/Sediment, Luft sowie in der Biosphäre bis hin zu den Expositionsmedien,
- die Exposition von Einzelpersonen oder von Personengruppen über Expositionsrouten[1] (äußere Exposition, Inkorporation von Radionukliden durch Inhalation und Ingestion bzw. dermale Aufnahme) und definierte Expositionspfade entsprechend ihren individuellen Charakteristika (Verhaltensparameter wie z. B. Aufenthaltsort und -dauer, Verzehrsmengen, Atemrate usw.).

Die Abschätzung von Expositionen basiert dann auf zusammenfassenden Expositionsmodellen. Aus Modellrechnungen zur Strahlenexposition können mit Hilfe von Dosiskoeffizienten die für eine radiologische Bewertung benötigten Dosisgrößen (z. B. Energie- oder Äquivalentdosis, Organdosen bzw. die effektive Dosis; siehe § 3 StrlSchV [BMU 01]) bzw. mit Hilfe von Dosis-Wirkungs-Relationen [ICRP 07] auch radiotoxisch bedingte gesundheitliche Risiken bestimmt werden.

Gegenstand der radiologischen Modellierung können die Expositionen von Referenzpersonen mit normativ festgelegten Verhaltensparametern, aber auch realer Personen, Gruppen von Beschäftigten bzw. der allgemeinen Bevölkerung oder einer Populationen sein. Abhängig von den Gegebenheiten sind dazu Expositionsszenarien zu spezifizieren, welche die Gesamtheit relevanter Gegebenheiten bzw. Annahmen zu den möglichen Expositionspfaden und den real oder potentiell exponierten Personen umfassen.[2]

---

[1] In Anlehnung an Definitionen der U.S. EPA (vgl. z. B. [EPA 89], [EPA 92], [EPA 01A]) und weitere Publikationen unterscheiden wir die beiden Begriffe "Expositionsroute" und "Expositionspfad", die in der Fachliteratur allerdings auch synonym verwendet werden. Die Expositionsrouten sind Ingestion, Inhalation und dermale Aufnahme sowie die äußere Exposition durch Strahlung und kennzeichnen den Mechanismus der Exposition. Als Expositionspfad wird dagegen der gesamte Weg bezeichnet, den ein Schadstoff von der Quelle bis zum exponierten Körper oder Organ nimmt; er beinhaltet eine detaillierte Beschreibung des Schadstofftransfers. ([EPA 92]: *"An exposure pathway is the course a chemical takes from its source to the person being contacted. An exposure route is the particular means of entry into the body, e.g., inhalation, ingestion, or dermal absorption."*)

[2] Nach der Definition von WHO/IPCS [WHO 04] ist ein Expositionsszenario *"A set of conditions or assumptions about sources, exposure pathways, amounts or concentrations of agent(s) involved, and exposed organism, system, or (sub)population (i.e., numbers, characteristics, habits) used to aid in the evaluation and quantification of exposure(s) in a given situation."*

Die Modellierung von Strahlenexpositionen kann sowohl auf die Beschreibung von vergangenen Situationen gerichtet sein (z. B. Rekonstruktion von Strahlenexpositionen im Rahmen epidemiologischer Untersuchungen), der Erfassung existierender Situationen dienen (z. B. Strahlenexpositionen durch natürliche Quellen oder infolge genehmigter Ableitungen aus kerntechnischen Anlagen, in Interventionssituationen oder durch radiologische Verfahren der medizinischen Diagnostik bzw. Therapie) oder die Prognose zukünftiger Expositionen zum Ziel haben (z. B. Bau neuer Anlagen oder Veränderung bestehender Anlagen, Produkte oder Verfahren, Betrieb und Langzeitverhalten von Endlagern für radioaktiver Abfälle, Bewertung und Optimierung der Sanierung radiologisch relevanter Altlasten). In Abhängigkeit vom Zweck der Expositionsmodellierung können sich dabei sehr unterschiedliche Anforderungen an den Grad der Konservativität von Modellrechnungen bzw. an eine realitätsnahe Ermittlung der statistischen Verteilung von Expositionen ergeben. Dies trifft in ähnlicher Weise auf chemotoxische und mikrobielle Schadstoffe zu.

Von der Europäischen Union wird in Artikel 45 der EURATOM-Grundnormen [EU 96] gefordert, dass die aus Tätigkeiten resultierenden Strahlenexpositionen der Bevölkerung *"in ihrer Gesamtheit und für Bezugsbevölkerungsgruppen überall dort, wo gegebenenfalls solche Gruppen bestehen, so realistisch wie möglich vorgenommen werden."* In [EU 96] wurde zwar nicht festgelegt, wie dies praktisch umgesetzt werden soll, zu dieser Frage liegen aber Empfehlungen der EU und IAEA vor, in denen grundsätzliche, methodische sowie fachspezifische Aspekte der Expositionsmodellierung dargelegt sind (siehe u. a. [EC 02], [IAEA 89]).

Wie in anderen gesellschaftlichen Bereichen besteht auch im Strahlenschutz die Notwendigkeit, Bewertungen und Entscheidungen bei unsicherem Wissen vorzunehmen.[3] Dies betrifft Szenario-, Modell- und Parameterunsicherheiten, die zur Analyse und Bewertung möglicher Quellen, Arten und Auswirkungen von diversen Unsicherheiten der Expositionsmodellierung hierarchisch geordnet untersucht werden können, wie u. a. in [EPA 92], [CUL 99], [IAEA 04A] und [WHO 08] empfohlen.

Szenariounsicherheiten sind Auswirkungen fehlender, unvollständiger oder fehlerhafter Angaben, die für eine adäquate Beschreibung der Expositionssituation erforderlich wären. Sie können z. B. die Unvollständigkeit der bezüglich einer primären Quelle erfassten Schadstoffe (hier: relevanter Radionuklide), eine unzureichende Beschreibung von räumlichen und zeitlichen Gegebenheiten der Schafstoffausbreitung in den Umweltmedien, unzutreffende Annahmen zu den Lebensbedingungen betroffener Personen sowie zur Erfassung möglicher Expositionspfade, oder die Spezifikation der exponierten Personen bzw. Personengruppen (z. B. nach Geschlecht, Alter, Tätigkeitsmerkmalen), für die Expositionsabschätzungen vorgenommen werden sollen, betreffen (siehe z. B. [FRO 00]).

Modellunsicherheiten resultieren überwiegend aus vereinfachenden Ansätzen (Modellannahmen), mit denen real komplexere Strukturen von Ausbreitungs- und Expositionsbedingungen in einem Modell abgebildet werden. Hierzu gehören auch Auswirkungen einer Extrapolation von Modellen über den Rahmen hinaus, in dem diese anhand empirischer Untersuchungen bzw. Daten geprüft wurden. Neben definierten Vereinfachungen, auf die jede Modellierung angewiesen ist, können daraus Abweichungen von den realen Gegebenheiten resultieren, die dem (partiellen) Unwissen bei

---

[3] Dies betrifft ein breites Spektrum von Fragestellungen, wie z. B.: Wurde ein Nachweis zur Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten "ausreichend sicher" erbracht? Welcher Aufwand (finanziell und zeitlich) ist in einer bestimmten Situation für die Reduzierung von Unsicherheiten durch ergänzende Untersuchungen (Durchführung von weiteren Recherchen, Analyse zusätzlicher Stichproben, etc.) als gerechtfertigt anzusehen?

der Nutzung von Modellen zuzuschreiben sind. In [KIR 08] wird deshalb noch einmal zwischen der Unsicherheit von Modellstrukturen für eine adäquate Darstellung des Untersuchungsgegenstandes und der Unsicherheit der Anwender radioökologischer Modelle bei der Spezifizierung früherer, aktueller oder zukünftiger Situationen für Modellrechnungen unterschieden, wozu auf Vergleiche der Anwendung von Modellen auf eine definierte Fragestellung/Situation durch unterschiedliche Experten verwiesen wird (wie z. B. in [KIR 99] dargelegt).

Eine unzutreffende Spezifizierung von Modellparametern als deterministische Größen (konstante Werte oder zeit-/ortsabhängige Variable) bzw. Zufallsvariable oder eine unzureichende Erfassung von Abhängigkeiten zwischen Modellparametern kann Unsicherheiten bewirken, die teilweise als Modellunsicherheiten bezeichnet werden können [WHO 08], [EPA 01B], bei der probabilistischen Expositionsmodellierung aber auch als Parameterunsicherheiten in Erscheinung treten. Ein weiterer Problemkreis ist die mathematisch korrekte Umsetzung probabilistischer/stochastischer Ansätze der Expositionsmodellierung, die besonders für komplexe Systeme hohe Anforderungen stellt.

Erhebliche Unsicherheiten in den Ergebnissen von Modellrechnungen zu (Strahlen-)Expositionen können insbesondere durch verschiedenartige **Parameterunsicherheiten** resultieren. Diese können ihre Ursache in der Variabilität von Parametern haben, mit denen die Ausbreitung von Schadstoffen in den Umweltmedien und in der Biosphäre sowie die Exposition von Personen modelliert werden, resultieren bei gegebener Datenbasis aber auch aus Unsicherheiten der Schätzung von Werten für Modellparameter (z. B. für deterministische Größen, für Punktschätzer der Parameter statistischer Verteilungen von Zufallsvariablen und für Korrelationen). Parameterunsicherheiten resultieren auch aus Messunsicherheiten, aus unzureichender Repräsentativität der Ergebnisse von Beprobungen oder der Übertragung von statistischen Daten aus früheren Untersuchungen. Ein spezielles Problem sind Unsicherheiten von Expertenschätzungen, die unumgänglich sein können, wenn die zukünftige Entwicklung eines Systems zu prognostizieren ist, wenn keine (zerstörungsfreien) Messungen für bestimmte Parameter möglich sind oder auch wenn generisch bzw. über Analogien Aussagen zu Modellparametern zu treffen sind, weil keine Zeit oder Mittel für Untersuchungen des konkreten Einzelfalls verfügbar sind.

Zur Beschreibung und Analyse von Parameterunsicherheiten und zur Bewertung von Möglichkeiten einer Reduzierung von Unsicherheiten der Abschätzung von Expositionen durch Modellrechnungen wird zwischen "Variabilität" und "Unsicherheit" von Parametern unterschieden (vgl. [BOG 87], [IAEA 89], [FREY 92], [EPA 92], [HEL 94], [HOFF 94], [HAT 94B], [EPA 95], [BUR 96], [FREY 96], [NCRP 96], [HER 99], [FREY 99], [CUL 99], [EPA 01B], [WHO 08]):

- Als **Variabilität** der Parameter von Expositionsmodellen werden ihre räumliche Heterogenität, zeitliche Veränderungen physikalischer Parameter und zufällige Schwankungen bezeichnet, wie z. B. individuelle Unterschiede der Mitglieder einer Grundgesamtheit/Population beim Verzehr von Lebensmitteln oder der Art und Dauer expositionsrelevanter Handlungen. Sie kann durch zusätzliche Messungen nicht reduziert werden. Für Parameter mit ausgeprägter Variabilität kann entsprechend ihrer Ursache eine Stratifizierung der Modelle sinnvoll sein, z. B. durch räumliche Abgrenzungen oder durch Unterteilung nach Jahreszeiten bzw. Altersgruppen. Parameter, deren Variabilität im Rahmen eines klar umrissenen Modells als "zufällig" erscheint, werden als Zufallsvariable mit statistischen Verteilungen beschrieben, die auch als Häufigkeitsverteilungen bezeichnet werden.

- **Unsicherheiten** der Schätzung der Art sowie der statistischen Kenngrößen von Verteilungen resultieren oft aus einem relativ geringen Umfang an verfügbaren Daten und unzureichender Analyse/Kenntnis von Abhängigkeiten. Neben diesen statistischen Unsicherheiten können sich Messunsicherheiten auswirken [MICH 99], [WEIS 99], [ISO 08A], [ISO 08B]. Qualitative Ursachen, wie die Übertragung von Daten aus früheren Untersuchungen auf eine aktuelle Situation (ungewisse Repräsentativität) oder Expertenschätzungen (bei partielle Unkenntnis/Unschärfe der Information) können ebenfalls zu Parameterunsicherheiten beitragen [CUL 99].

Im Unterschied zur "Variabilität", die im Rahmen eines Modells als objektive Eigenschaft der jeweiligen Parameter angesehen wird, wird die "Unsicherheit" subjektiven Merkmalen der Analyse zugeschrieben. Soweit Unsicherheiten mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen modelliert werden, liegt diesen Verteilungen eine andere Interpretation zugrunde. Sie werden nicht mehr als relative Häufigkeit von Ereignissen, sondern als Maß des subjektiven Glaubens/Zutrauens (engl.: degree of belief) an das Eintreten der Ereignisse angesehen ([IAEA 89], [HEL 94], [HOFF 94], [NCRP 96]).[4]

Diese Unterscheidung ist für viele Anwendungen insbesondere aus pragmatischer Sicht sinnvoll, weil Unsicherheiten im obigen Sinne mit zusätzlichem Aufwand reduziert werden können, z. B. durch weitere Beprobung [GIL 87], verbesserte Messgeräte und Messmethoden oder zusätzliche standortbezogene Untersuchungen.[5] Andererseits ist jedoch anzumerken, dass die Variabilität eines Parameters nicht nur von objektiven Eigenschaften der (physikalischen, chemischen etc.) Größe abhängen muss, sondern auch durch die (subjektive) Definition der betrachteten Grundgesamtheit des Parameters beeinflusst wird. Diese Problematik betrifft zwar nicht alle Parameter natürlicher Populationen (z. B. Unterschiede des Körpergewichts von Personen bestimmten Alters/Geschlechts in einer Gesellschaft), wohl aber solche Parameter, für deren Messung räumliche oder zeitliche Mittelungen unumgänglich sind (wie z. B. bei der Bestimmung von Verzehrsmengen für definierte Personengruppen, bei der Festlegung der Einzelprobenmenge von Materialstichproben, etc.).

Für eine quantitative Charakterisierung der Variabilität eines Modellparameters werden empirische Daten verwendet, die als repräsentative Stichprobe aus einer Grundgesamtheit interpretiert werden können. Die auf diese Basis gewonnenen Aussagen zur Variabilität enthalten jedoch subjektive Unsicherheiten, wie Mess- und Sampling-Unsicherheiten. Hinzu kommen weitere Unsicherheiten, die z. B. aus der Wahl des statistischen Modells resultieren. Eine Separation von "Variabilität" und "Unsicherheit" ist deshalb in vielen Fällen nur bedingt gerechtfertigt.

Für "Variabilität" bzw. "Unsicherheit" werden diverse Begriffe verwendet. "Variabilität" wird auch als stochastische [HEL 94], aleatorische[6] [HEL 96] oder auch als objektive bzw. nicht-reduzierbare Unsicherheit bezeichnet, wobei der Begriff "aleatorische Unsicherheit" am häufigsten verwendet wird. Durch eingeschränktes Wissen bedingte Unsicherheiten werden analog als epistemische[7] oder

---

[4] In [FREY 96] werden demgemäß konsequent parametrische Verteilungen, die zur Beschreibung der Variabilität eines Modellparameters genutzt werden, als Häufigkeitsverteilungen bezeichnet (engl.: frequency distribution), wogegen für Verteilungen, mit denen Unsicherheiten beschrieben werden, der Begriff Wahrscheinlichkeitsverteilung genutzt wird (engl.: probability distribution).

[5] "Variabilität" und "Unsicherheit" sollten ggf. separiert, getrennt analysiert und im Ergebnis einer probabilistischen Risiko- bzw. Expositionsmodellierung speziell dargestellt werden [EPA 92], [FREY 96], [CUL 99], [WHO 08].

[6] vom lateinischen Wort alea (Würfelspiel)

[7] vom griechischen Wort επιστημη (episteme, Wissen)

subjektive bzw. reduzierbare Unsicherheiten bezeichnet [HEL 08], wobei der Begriff "epistemische Unsicherheit" zur Abgrenzung von der aleatorischen Unsicherheit verwendet wird. Im Unterschied zu aleatorischen Unsicherheiten, deren Erfassung und Analyse mit den Methoden der Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik unstrittig ist, gibt es zur mathematischen Darstellung und Analyse von epistemischen Unsicherheiten gegensätzliche Ansichten (vgl. [COL 08], [AVEN 10], [DUB 10], [NOR 10]), auf die in der vorliegenden Untersuchung noch genauer eingegangen wird. Es sei bereits hier vermerkt, dass die Einteilung in aleatorische bzw. epistemische Unsicherheiten oft relativ ist und vom Blickwinkel der Analyse eines Problems abhängt.[8]

Während Szenarien- und Modellunsicherheiten offensichtlich epistemisch bedingt sind (hierzu gibt es in der Fachliteratur auch keinen Disput), ist die Unterteilung von Parameterunsicherheiten als "epistemisch" bzw. "aleatorisch" jedoch nicht unstrittig. Nach dem BAYES'schen Paradigma ist die Wahrscheinlichkeit ein Maß für die Beurteilung der Unsicherheit des Eintretens eines bestimmten Ereignisses, das vom Wissen über relevante Informationen (Daten, Randbedingungen Annahmen etc.) abhängt und damit immer ein epistemisch bedingtes Maß ist. Eine grundsätzliche Diskussion dieser Problematik enthält [O'HAG 04] und kommt zu dem Ergebnis, dass eine Unterscheidung nach aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten aus praktischer Sicht nützlich ist, dass aber generell jede Unsicherheit epistemisch ist. Diese Feststellung steht unseres Erachtens nicht im Widerspruch zur frequentistischen (klassischen) Statistik, die auf empirische Modellierungen von Häufigkeiten (Frequenzen) des Eintretens von Ereignissen fokussiert und Methoden zur Analyse von Daten und daraus abzuleitender Bewertungen von Ereignissen oder Hypothesen bereitstellt. Dabei wird, was praktisch oft unumgänglich ist, von diversen Randbedingungen, die sich auf die untersuchten Daten ausgewirkt haben, vollständig abstrahiert, wodurch die Daten zufällig/stochastisch erscheinen.[9]

Modelle zur Abschätzung von (Strahlen-)Expositionen müssen zwangsläufig auf die Erfassung diverser Faktoren, die sich auf die Freisetzung, Ausbreitung bzw. Aufnahme von Radionukliden auswirken, verzichten, weil die in der Umwelt ablaufenden Prozesse so komplex sind, dass nicht alle relevanten Parameter erfasst und in Modelle integriert werden können (siehe z. B. [EHL 04]). Deshalb sind viele Modellparameter als aleatorische Zufallsgrößen anzusehen. Ihre Variabilität ist jedoch nicht grundsätzlich; sie kann mit wissenschaftlichen Untersuchungen durch die Aufklärung des Einflusses von bislang "versteckten" Parametern reduziert werden. Deren Berücksichtigung würde aber eine Modifizierung/Ergänzung des bisherigen Modells erfordern (siehe z. B. [EPA 99] zum Einfluss der Eigenschaften von Böden auf den K_d-Wert für radiologisch relevante Elemente).

Die unterschiedlichen Ansätze (mit frequentistischer oder BAYES'scher Wahrscheinlichkeitstheorie) zur probabilistischen Modellierung von Expositionen verfolgen das gemeinsame Ziel, für Risiko-

---

[8] In [WHE 09] werden z. B. Unterschiede der Messergebnissen zu gleichen Proben aus mehreren Laboratorien als "lab-to-lab variability" bezeichnet, in diesem Fall als durch Heterogenität bzgl. der angewandten Messmethoden, der Qualifikation der Bearbeiter etc. verursachte Unsicherheit. Bei einer "Black-Box"-Sicht auf die Laboratorien (Probe ist Input, Messergebnis ist Output) kann die statistische Verteilung der Messergebnisse von den unterschiedlichen Laboratorien sicherlich als "aleatorisch" bezeichnet werden. Anderseits sind diese Unsicherheiten reduzierbar und damit "epistemisch". In Auswertung von Benchmark-Versuchen können die Ursachen der Abweichungen zwischen den Messergebnissen aufgeklärt werden und Unsicherheiten zukünftiger Labormessungen durch Standardisierung der Messmethoden und Verbesserung des Qualitätsmanagements reduziert werden.

[9] Hätte man genügend Zeit und Mittel zur Bestimmung sämtlicher physikalischer Randbedingungen, die den Ausgang eines Münzenwurfes oder des Würfelns beeinflussen, wäre theoretisch eine genaue Berechnung des Ergebnisses realisierbar (zumindest eine relativ treffsichere auf deterministischen Modellrechnungen basierende Prognose).

analysen, die bis in die 80-er Jahre fast nur mit Hilfe von Punktschätzern erfolgten, Methoden für realistische(re) Quantifizierungen zu entwickeln [BOG 87].

Im Zusammenhang mit der oben zitierten Anforderung der EURATOM-Grundnormen wird in der deutschen Strahlenschutzkommission (SSK) die Problematik der realistischen Ermittlung von Strahlenexpositionen für die verschiedenen Bereichen des Strahlenschutzes und unterschiedlichen Zielstellungen intensiv diskutiert. Eine Bestandsaufnahme zu dieser Thematik lieferten Beiträge einer in 2003 durchgeführten Klausurtagung des Ausschusses Radioökologie der SSK [SSK 03].

Vor diesem Hintergrund wurde vom Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) der Forschungsauftrag "Vergleichende Betrachtung der probabilistischen/stochastischen und deterministischen Modellierung von Expositionen im Hinblick auf die Belastbarkeit des Modellergebnisses und die Anforderungen an die Qualität der Eingangsdaten" erteilt.

1.2. Zielstellung

Mit dem aktuellen Vorhaben soll vornehmlich geklärt werden, unter welchen Randbedingungen (Fragestellung/Zweck, Expositionssituation, Qualität der Eingangsdaten etc.) den radioökologischen Modellen zur Expositionsberechnung deterministische bzw. probabilistische Ansätze zugrunde gelegt werden können oder sollten. Zu dieser Thematik sollen in drei Arbeitspaketen (AP)

- der nationale/internationale Stand von Wissenschaft und Technik zur probabilistischen bzw. stochastischen Modellierung von Expositionen recherchiert, beschrieben und vergleichend gegenübergestellt werden (**AP 1**),
- die Aussagekraft von Modellprognosen bei unsicheren Eingangsdaten, die mit Hilfe deterministischer bzw. probabilistischer/stochastischer Modellierungsansätze erreicht werden kann, für verschiedene Klassen relevanter Unsicherheiten, Modellierungsansätze, Modellstrukturen, Fragestellungen und Bezugspersonen untersucht und vergleichend bewertet werden (**AP 2**),
- Entscheidungshilfen/Kriterien erarbeitet werden, nach denen unter gegebenen Randbedingungen beurteilt werden kann, welchem Modellierungsansatz der Vorzug zu geben ist (**AP 3**).

Dabei soll idealisiert davon ausgegangen werden, dass die mathematische/numerische Beschreibung der Expositionssituation inhaltlich und strukturell valide ist. Die in Abschnitt 1.1 angesprochenen Szenariounsicherheiten sind somit nicht Gegenstand des Vorhabens. Modellunsicherheiten werden betrachtet, wenn sie zum Vergleich deterministischer bzw. probabilistischer Ansätzen relevant sind. Dies betrifft z. B. Unsicherheiten der Erfassung statistischer Abhängigkeiten zwischen Modellparametern, wie sie u. a. zwischen Verzehrsmengen unterschiedlicher Lebensmittelarten bestehen. Unsicherheiten zu statistischen Modellen bzw. Verteilungen werden den Parameterunsicherheiten zugerechnet und sind dementsprechend Gegenstand der vorliegenden Untersuchung.

Insgesamt liegt der Schwerpunkt der durchzuführenden Arbeiten bei den Parameterunsicherheiten, wozu insbesondere auch die epistemischen Unsicherheiten zum Typ parametrischer Verteilungen und den Werten der jeweiligen Verteilungsparameter gehören. Dazu sind für probabilistische bzw. stochastische Modellierungsansätze Mindestanforderungen an die Qualität der Eingangsdaten sowie methodische Aspekte, insbesondere zur Monte-Carlo-Simulation und zur Anwendung von BAYES-Methoden, zu untersuchen und im Vergleich zur deterministischen Expositionsmodellierung bzgl. ihrer Belastbarkeit zu bewerten.

Das Vorhaben ordnet sich in Ziele des BfS ein, zur Ermittlung potentieller Strahlenexpositionen solche Modellierungsansätze heranzuziehen, mit denen Dosisgrenzwerte entsprechend Atomgesetz oder nachgeordneter Rechtsvorschriften sicher eingehalten und gleichzeitig übermäßig konservative Berechnungsverfahren vermieden werden können.

Der 1. Zwischenbericht konzentrierte auf die Recherche, Beschreibung und vergleichende Gegenüberstellung methodischer Ansätze zur probabilistischen/stochastischen Expositionsmodellierung. Der 2. Zwischenbericht war gemäß Aufgabenstellung des BfS primär auf die *"formale mathematische/numerische Untersuchung, welchen Ansprüchen probabilistische/stochastische Modellierungsansätze bezüglich der Qualität der Eingangsdaten und des Typs des probabilistische/stochastischen Modells genügen müssen, um die Aussagekraft deterministischer Verfahren zu erreichen oder zu übertreffen"*, fokussiert. Der vorliegende Endbericht schreibt den 2. Zwischenbericht fort und behandelt auch die Auswahl von vorzugsweise anzuwendender Modellierungsansätze in Abhängigkeit von der radiologischen Fragestellung, Expositionssituation und Datenqualität.

1.3. Rahmen zur Umsetzung der Zielstellung

Im Hinblick auf die Projektziele wurde bereits im 1. Zwischenbericht der Rahmen der Bearbeitung relativ breit abgesteckt. Zur Beurteilung ihrer Eignung für probabilistische Expositionsabschätzungen wurden diverse Methoden dargestellt und diskutiert, wozu insbesondere die 1-dimensionale Monte-Carlo-Simulation (1D-MC-Simulation), die für eine Separierung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten entwickelte 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation (2D-MC-Simulation), BAYES-Methoden sowie Verfahren zur Behandlung epistemischer Unsicherheiten mit Ansätzen aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz gehören. Spezielle methodische Fragen wurden zur Ermittlung statistischer Verteilungen und ihrer Parameter sowie zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mathematischer Modelle diskutiert.

Diese breite Fächerung der Untersuchung von methodischen Ansätzen ist erforderlich, weil sehr unterschiedliche Modelle bzw. Submodelle für Expositionsmodellierungen eingesetzt werden, für die Aussagen zu geeigneten Verfahren, speziellen Anforderungen und potentiellen Vorteilen einer probabilistischen (oder adäquaten) Abschätzung von (Strahlen-)Expositionen abzuleiten sind.

- Mathematische Modellstrukturen sind:
  - Summen multiplikativer bzw. analytisch formulierter Expositionsbeiträge (z. B Rechenvorschriften der AVV zu § 47 StrlSchV);
  - Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung (z. B. Kompartiment-Modelle);
  - Systeme partieller Differentialgleichungen (z. B. zur Schadstoffmigration im Boden);
  - komplexe Computerprogramme (Kombinationen der o. g. explizit formulierten Strukturen).
- Qualitätsmerkmale der verfügbaren Daten/Informationen sind:
  - Repräsentativität von Messungen und empirischen Informationen für den konkreten Fall;
  - Übertragbarkeit von empirischen Daten/Informationen aus anderen Untersuchungen;
  - Vollständigkeit und Art der statistischen Beschreibung der Daten;
  - Umfang und Relevanz von Expertenschätzungen zu Modellparametern.

- Mögliche Anwendungsgebiete sind:
  - vergangene Strahlenexpositionen (z. B. für epidemiologische Untersuchungen);
  - existierende Strahlenexpositionen aus Arbeiten und Tätigkeiten sowie durch natürliche Strahlenquellen (z. B. für den praktischen Strahlenschutz in kerntechnischen Anlagen, für die radiologische Bewertung von Hinterlassenschaften des Uranbergbaus und der Förderung von Erdöl/Erdgas etc., zur Beurteilung natürlichen Strahlenexposition durch Radon);
  - potentielle zukünftige Strahlenexpositionen (z. B. zur Begründung von Freigabewerten, zur Beurteilung geplanter Änderungen an kerntechnischen Anlagen oder für die Risikoanalyse zur Planung von Endlagern für radioaktive Abfälle).
- Unterschiedliche Ziele und Zielgrößen von Expositionsabschätzungen können sein:
  - standort- und einzelfallspezifische Dosisabschätzungen für konkrete Entscheidungen;
  - generische Dosisabschätzungen (z. B. zur Ableitung von Freigabewerten oder auch für reine Informationszwecke);
  - Dosisverteilung, Erwartungswert oder höhere Perzentile der Exposition realer Personen bzw. von Personengruppen/Populationen[10];
  - Dosisverteilung, Erwartungswert oder höhere Perzentile der Exposition von hypothetischen Personengruppen/Populationen bzw. von Einzelpersonen (Referenzpersonen).
- Nutzer von Expositionsmodellen mit unterschiedlichen Kenntnissen und Zeitbudgets sind u. a.:
  - Spezialisten für den betrieblichen Strahlenschutz;
  - Experten aus wissenschaftlichen Abteilungen von Betrieben, wissenschaftlichen Instituten sowie spezialisierten Planungs- und Beratungsfirmen;
  - Entscheidungsträger von Genehmigungs- und Aufsichtsbehörden und Institutionen.[11]

Wegen der Vielfältigkeit dieser Aspekte können probabilistische Expositionsmodelle sicherlich nicht allen Anforderungen optimal genügen. Eine Beurteilung der Eignung und der Praktikabilität verfügbarer Methoden unter Beachtung der genannten Aspekte ist aus unserer Sicht daher wichtig.

---

[10] Anforderungen an die Datenbasis und Zielgrößen von probabilistischen Expositionsabschätzungen sind maßgeblich durch die zugrunde liegende Fragestellung bedingt. Im Unterschied zur Berechnung der statistischen Verteilung von Expositionen in einer größeren Population, die maßgeblich durch die Heterogenität von Schadstoffverteilungen und individuelle Lebensbedingungen bzw. Verhaltensmerkmale der Personen geprägt werden, sind Dosisabschätzungen für Personen mit extremer bzw. einer relativ zum Erwartungswert der Populationsverteilung hohen Exposition auf epistemische Unsicherheiten jene Parameter zu fokussieren, welche die Unsicherheit der Schätzung hoher Perzentile der Populationsverteilung bestimmen. In [NCRP 96] wird hierzu festgestellt: *"Distributions that are centered on the "average" or "typical" person may not be adequate representations of the state of knowledge for uncertain parameters intended to be representative of maximally exposed persons. In other words, if there is interest in values occurring in the extremes of a distribution, the conditions that bring about these extremes should be modeled explicitly, and the uncertainty analysis should be centered on these conditions."*

[11] Eine Diskussion spezieller Anforderungen an "regulatorische "Modelle und damit zusammenhängender Aspekte der Analyse und Bewertung von Unsicherheiten enthält [HOL 09].

1.4. Übersicht zum vorliegenden Bericht

Die Kapitel 2 und 3 entsprechen bis auf Korrekturen und einigen Ergänzungen den Kapiteln 2 und 3 des 1. Zwischenberichts.

Das **Kapitel 2** gibt eine Übersicht zu Methoden der probabilistischen Modellierung und Simulation, insbesondere zu Monte-Carlo-Verfahren, die für die weiteren Untersuchungen benötigt werden. Zur Ermittlung von Verteilungsfunktionen für relevante Modellparameter mit verfügbaren Daten werden klassische und BAYES-Methoden unterschieden, Auf die alternative Anwendung empirischer Verteilungsfunktionen wird eingegangen. Zur Darstellung des methodischen Sachstandes wird die Anwendung stochastischer Differentialgleichungen zur theoretischen Bestimmung des Typs von parametrischen Verteilungen betrachtet.

Exemplarisch werden deterministische und probabilistische Ansätze anhand einfacher Beispiele illustriert. Neben der Sensitivitätsanalyse und Spezifizierung statistischer Verteilungen für sensitive Parameter stellen die Beurteilung der Variabilität sowie der vom Stichprobenumfang abhängigen Unsicherheit der Schätzung von Verteilungsparametern wichtige Themen dar. Zur Bewertung von Unsicherheiten der Parameterschätzung werden neben der klassischen Statistik BAYES-Methoden und das so genannte "Bootstrapping" erläutert. Ein spezieller Abschnitt ist der Modellierung von "unscharfem" Expertenwissen gewidmet.

Die Darstellungen in Kapitel 2 dienen der Einführung bzw. Übersicht zu grundlegenden Aspekten der Modellierung von (Strahlen-)Expositionen und hierfür nutzbarer bzw. in Betracht zu ziehender probabilistischer/stochastischer Methoden. Es erfolgt noch keine abschließende Bewertung dieser Methoden.

Untersetzt wird das Kapitel 2 durch ein **Glossar**, das dem vorliegenden Bericht als **Anhang A** beigefügt ist. Eine Übersicht zu wichtigen Begriffen und Eigenschaften von Zufallsgrößen enthält **Anhang B**. Er behandelt auch grundlegende Ansätze und Begriffe der Copula-Theorie, wichtige Copula-Familien sowie Methoden ihrer Analyse und Simulation. Mit diesem Zugang zur Theorie multivariater Zufallsgrößen kann die Analyse, Modellierung und Simulation von Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren effektiv behandelt werden. Anhang B gibt auch eine Übersicht zur Modellierung von stochastischen Prozessen. Im **Anhang C** sind diverse univariate parametrische Verteilungen erläutert, die für probabilistische Expositionsmodelle von besonderem Interesse sind.

In **Kapitel 3** werden die Ergebnisse unserer Recherche zur Beschreibung und zum Vergleich des nationalen/internationalen Standes der Anwendung von deterministischen (auf Punktschätzern basierenden) und probabilistischen/possibilistischen (auf Verteilungen basierenden) Methoden der Expositionsmodellierung dargelegt. Neben den für das aktuelle Vorhaben relevanten radiologischen Belastungen wurden auch Untersuchungen zur Modellierung von chemotoxischen Belastungen in die Recherche einbezogen. Dies ist sinnvoll, weil methodisch keine substantiellen Unterschiede zwischen der probabilistischen Modellierung chemotoxischer bzw. radiologischer Expositionen bestehen, und insbesondere deshalb erforderlich, weil im Bereich des konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutzes probabilistische Expositionsabschätzungen eine breite Akzeptanz gefunden haben (siehe [EPA 97B], [EPA 01B], [CUL 99], [IEFS 03], [NCM 07], [UBA 07] und [WHO 08]). Dies ist sicherlich auch in Unterschieden der Häufigkeit und praktischen Relevanz chemotoxischer bzw. radiologischer Umweltbelastungen begründet. Auf die vielfältigen Anwendungen probabilistischen Abschätzungen von Expositionen durch chemotoxische Stoffe wird jedoch überwiegend aus methodischer Sicht schon in Kapitel 2 eingegangen. Das Kapitel 3 ist deshalb auf radiologische Anwendungen fokussiert.

Das **Kapitel 4** enthält detaillierte Untersuchungen zu drei für die probabilistische Modellierung und Simulation von Expositionen grundlegenden Fragestellungen. Sie betreffen: (1) die Auswahl von univariaten parametrischen Verteilungsfamilien für die Modellierung von Expositionsfaktoren anhand von Stichproben, (2) die Analyse und Behandlung von Unsicherheiten zu den Parametern dieser Verteilungen und der für Simulationsrechnungen relevanten Abhängigkeiten zwischen den (unsicheren) Verteilungsparametern, sowie (3) die Analyse, Modellierung und Simulation von multivariaten Zufallsgrößen in Expositionsmodellen, wenn gegenseitige statistische Abhängigkeiten zwischen Modellparameter nicht vernachlässigt werden können, weil sie insbesondere die höheren Quantile von Zielgrößen maßgeblich bestimmen. Zu diesen drei Schwerpunkten werden

- Auswahlkriterien, Goodness-of-Fit Tests, Maximum-Likelihood-Methoden etc. für stetige und diskrete Zufallsgrößen mit unterschiedlichen Definitionsbereichen und Eigenschaften behandelt,
- Methoden der Analyse und Simulation von unsicheren Verteilungsparametern genauer erläutert und verglichen (insbesondere MCMC-Verfahren im Rahmen des BAYES'schen Zugangs sowie das auf frequentistischen Ansätzen basierende Bootstrapping), wozu auch die resultierende Konservativität von probabilistischen Simulationsrechnungen untersucht wird, und
- Copula-Modelle mit gängigen Ansätzen zur Berücksichtigung von Korrelationen verglichen und hinsichtlich dbzgl. Anforderungen an den Umfang bi-/multivariater Stichproben eingeschätzt.

Zur Behandlung dieser Fragestellungen werden verschiedene aus der statistischen Fachliteratur bekannte Ansätze und Methoden verfolgt und im Hinblick auf ihre Anwendung zur Analyse von Stichproben bzw. für eine probabilistische Modellierung genauer untersucht. Daraus werden Anforderungen an die zur probabilistischen Modellierung von Expositionen benötigte Datenbasis abgeleitet, deren Erfüllung die Belastbarkeit der Ergebnisse bestimmt. Beispielhaft werden auch Vergleiche mit deterministischen Modellrechnungen vorgenommen.

In diesem Rahmen werden gängige statistische Methoden kritisch geprüft, mit der Aussagekraft alternativer Verfahren verglichen und Beschränkungen ihrer Anwendbarkeit bzw. zu beachtende Voraussetzungen einer gerechtfertigten Nutzung herausgearbeitet. Hierzu werden theoretische Ansätze und Methoden der Analyse und Simulation von Zufallsgrößen detailliert erläutert sowie durch Beispielrechnungen untersetzt und veranschaulicht.

Das **Kapitel 5** behandelt Anwendungen der in den Kapiteln 2 und 4 erläuterten Methoden für unterschiedliche mathematische Strukturen von Ausbreitungsmodellen (gewöhnliche/stochastische Differentialgleichungen, Kompartiment-Modelle, Modelle mit partiellen Differentialgleichungen), wobei die Anwendung stochastischer Modelle und ihr Vergleich mit gängigen deterministischen Ansätzen der Modellierung von Verdünnungs- und Ausbreitungsprozessen einen Schwerpunkt der Untersuchungen darstellen.

In **Kapitel 6** werden Entscheidungshilfen zur Auswahl von geeigneten Modellierungsansätzen der probabilistischen Simulation dargelegt, die in Abhängigkeit von den radiologischen Fragestellungen zur Strahlenexposition von Einzelpersonen der Bevölkerung und hierzu relevanter Bezugspersonen sowie für unterschiedliche Expositionssituationen diskutiert und mit gängigen deterministischen Ansätzen zur Modellierung von Strahlenexpositionen verglichen werden.

Einige generelle Schlussfolgerungen aus der vorliegenden Untersuchung und Empfehlungen für weiterführende Arbeiten sind in **Kapitel 7** zusammengefasst.

Zur zitierten Literatur sei auf **Kapitel 8** verwiesen.

Teil I

Stand von Wissenschaft und Technik
zur probabilistischen/stochastischen Modellierung von Expositionen

2. METHODISCHE ASPEKTE DER MODELLIERUNG VON EXPOSITIONEN

2.1. Einordnung von Expositionsmodellen in Risikoabschätzungen

Die Modellierung von Expositionen durch chemo- und radiotoxische Stoffe oder Mikroorganismen ist ein zentrales Element von Risikobewertungen zu erhöhten Konzentrationen solcher Schadstoffe in Lebensmitteln, Gebrauchsgütern und Umweltmedien [SHEL 09]. Die Relevanz von Unsicherheiten der Expositionsmodellierung für Entscheidungen zur Begrenzung/Reduzierung gesundheitlicher Risiken wird grundsätzlich auch von der interindividuellen Variabilität und Unsicherheiten weiterer Elemente von Risikoabschätzungen bestimmt [HAT 99]. Dies betrifft sowohl die Abschätzung der aus Expositionen resultierenden Dosen mit physiologisch basierten pharmakokinetischen Modellen (PBPK-Modelle) als auch die Modellierung von Dosis-Wirkungs-Beziehungen auf der Basis von Ergebnissen biologischer Experimente, klinischer Studien und epidemiologischer Untersuchungen. Bei integrierten Risikobewertungen bestimmen die Unsicherheiten in ihrer Gesamtheit den Rahmen für Entscheidungsfindungen (siehe hierzu u. a. [BRA 95], [SLOB 98], [SWA 98]).

Zu Unsicherheiten der Abschätzungen von Expositions-Dosis-Beziehungen mit PBPK-Modellen findet man in der Fachliteratur eine wachsende Anzahl von Untersuchungen, wobei ähnlich zur Expositionsmodellierung neben Monte-Carlo-Simulationen [CLE 99] auch hierarchisch strukturierte BAYES-Modelle mit Markov-Chain-Monte-Carlo (MCMC) untersucht werden (vgl. z. B. [BOIS 00], [ALLE 07]). Ein wichtiges Resultat solcher Untersuchungen ist die Verdeutlichung von erheblichen interindividuellen Unterschieden der physiologischen Parameter und entsprechender Auswirkungen auf die Expositions-Dosis-Beziehungen. Dies betrifft auch geschlechtsspezifische Besonderheiten, denen zunehmend Bedeutung beigemessen wird [BRO 98], [ICRP 02], [CLO 10].

Die für Risikoabschätzungen verwendeten Dosis-Wirkungs-Beziehungen weisen konzeptionelle Unsicherheiten auf, insbesondere wegen der Übertragung der Ergebnisse von Tierversuchen auf den Bereich niedriger Dosen für Menschen [BUK 01], [WHI 09]. Die aus epidemiologischen Studien abgeleiteten linearen Dosis-Wirkungs-Beziehungen im Niedrigdosisbereich resultieren maßgeblich durch statistische Mittelungen über sehr große Personengruppen [ICRP 05]. Das individuelle Risiko vergleichbar exponierter Personen weist dagegen eine starke Variabilität auf, die physiologisch und genetisch bedingt ist sowie von Vorerkrankungen und dem generellen gesundheitlichen Zustand abhängt [ICRP 98], [DEM 07]. Nach statistischen Analysen und Modellrechnungen zur Variabilität der individuellen Suszeptibilität können daraus Unterschiede des individuellen Risikos im Bereich mehrerer Größenordnungen resultieren [HAT 94A], [HAT 01].

Nach [ICRP 98] ist bei ca. 1% der Bevölkerung genetisch bedingt mit erhöhtem Krebsrisiko zu rechnen. Niedrige Strahlenexpositionen führen nur zu relativ geringen Anstiegen des Krebsrisikos. In [ALLI 08] wird zu dieser Thematik angemerkt, dass sich regulatorische und wissenschaftliche Ziele von Dosis- und Risikoabschätzungen unterscheiden. Gemäß [ICRP 07] ist die mit generischen Koeffizienten berechnete effektive Dosis für regulatorische Zwecke bestimmt, nicht jedoch für epidemiologische Evaluierungen oder detaillierte retrospektive Ermittlungen von individuellen Expositionen und Risiken. Eine Vernachlässigung der Unsicherheiten von Dosis- und Risikoabschätzungen erscheint somit nur im Hinblick auf regulatorische Zwecke gerechtfertigt.

2.2. Mathematische Strukturen von (radio-)ökologischen Expositionsmodellen

2.2.1. Schadstofftransport zwischen Kompartimenten

Expositionsmodelle können hierarchisch strukturiert werden und abhängig davon, in welcher Ebene der Ausbreitung von Schadstoffen von einer Quelle bis zum Menschen Schadstoffkonzentrationen gemessen werden, unterschiedlich viele Ebenen der Modellierung aufweisen. Abbildung 2-1 zeigt ein einfaches Schema zur Verzweigung von Schadstoffausbreitungen über die Umweltmedien (Geosphäre/Grundwasser, Oberflächenwasser/Sediment und Luft) und die Biosphäre bis zu den Expositionsmedien (Luft am Expositionsort, Trinkwasser, Lebensmittel, etc.), wobei bestimmte Kompartimente entfallen können. Für schadstoffhaltige Konsumgüter ist z. B. nur der direkte Pfad von der Quellen zur Person von Bedeutung; bei einer Nutzung kontaminierter Grundwasserleiter zur Trinkwasserversorgung entfällt die Biosphäre, wenn mit diesem Wasser weder eine Beregnung landwirtschaftlich genutzter Flächen noch eine Viehtränke erfolgen.

Beim Transport von der Quelle zum Expositionsort sind Umwandlungen von Schadstoffen durch chemische Reaktionen oder radioaktiven Zerfall möglich. Die Schadstoffkonzentrationen $\mathbf{C_k}$ in den vier Kompartimenten von Abbildung 2-1 sind deshalb als vektorielle Größen ($\mathbf{C_Q}$, $\mathbf{C_U}$, $\mathbf{C_B}$, $\mathbf{C_M}$) zu verstehen, deren Elemente unterschiedlichen Schadstoffen zugeordnet sind. Die zur Bezeichnung der vier Kompartimente verwendeten Indizes können ebenfalls vektorielle Größen sein, wenn z. B. mehrere Quellen (**Q**) zu betrachten sind, der Schadstofftransport über verschiedene Umweltmedien (**U**) erfolgt, unterschiedliche Pflanzen/Tiere als Zwischenwirt der Biosphäre (**B**) zu berücksichtigen sind bzw. wenn gleichzeitig mehrere Expositionsmedien (**M**) zur Exposition beitragen können.

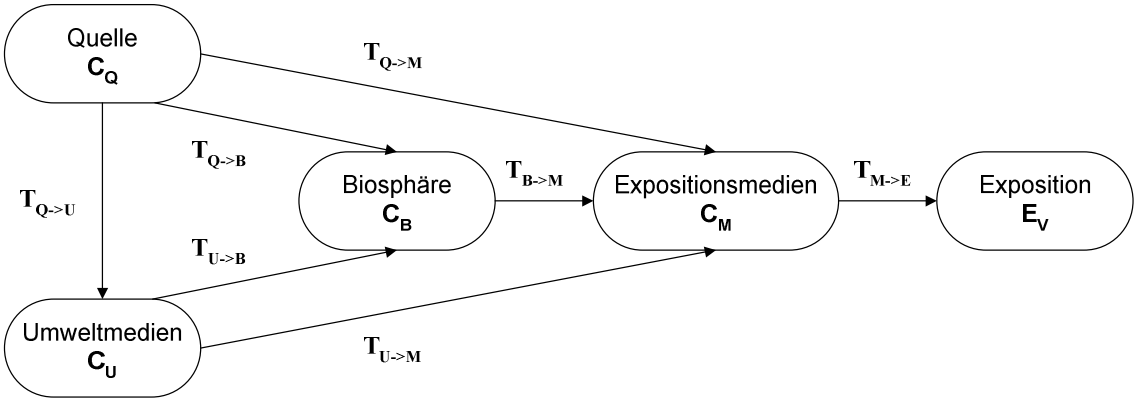


Abbildung 2-1: Schema der Hierarchie (radio-)ökologischer Expositionsmodelle; $\mathbf{C_K}$ bezeichnet den Vektor der Schadstoffkonzentrationen **C** im Kompartiment **K**; deren Transfer zu anderen Kompartimenten durch Matrixfunktionen $\mathbf{T_{K\rightarrow K'}}$ symbolisiert ist, $\mathbf{E_V}$ ist die durch $\mathbf{C_M}$ und individuelle Verhaltensparameter bedingte Exposition

Der Transfer (**T**) der Schadstoffe wird durch Modelle dargestellt, wozu funktionale Abhängigkeiten durch eine Vielzahl von Parametern $\mathbf{X_{K;K'}}$ zu erfassen sind, die generell auch ortsabhängig (**r**) und zeitabhängig (t) sein können. Die in den Gleichungen (2-1) bis (2-3) mit $\mathbf{T_{K\rightarrow K'}}$ symbolisierten Transfermodelle können analytische Funktionen, Lösungen von gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen bzw. auch komplexe Computerprogramme mit vielen Submodellen sein:

$$\mathbf{C_U} = \mathbf{T_{Q\rightarrow U}}(\mathbf{C_Q}; \mathbf{X_{Q;U}}; \mathbf{r}; t), \tag{2-1}$$

$$\mathbf{C_B} = \mathbf{T_{Q\rightarrow B}}(\mathbf{C_Q}; \mathbf{X_{Q;B}}; \mathbf{r}; t) + \mathbf{T_{U\rightarrow B}}(\mathbf{C_U}; \mathbf{X_{U;B}}; \mathbf{r}; t), \tag{2-2}$$

$$\mathbf{C_M} = \mathbf{T_{Q\rightarrow M}}(\mathbf{C_Q}; \mathbf{X_{Q;M}}; \mathbf{r}; t) + \mathbf{T_{U\rightarrow M}}(\mathbf{C_U}; \mathbf{X_{U;M}}; \mathbf{r}; t) + \mathbf{T_{B\rightarrow M}}(\mathbf{C_B}; \mathbf{X_{B;M}}; \mathbf{r}; t). \tag{2-3}$$

Der Umfang der in die Berechnung von $\mathbf{C_M}$ eingehenden Modellparameter $\mathbf{X_{Q;U}}$, $\mathbf{X_{Q;B}}$, $\mathbf{X_{U;B}}$, $\mathbf{X_{Q;M}}$, $\mathbf{X_{U;M}}$ und $\mathbf{X_{B;M}}$ kann für komplexe Expositionsmodelle sehr groß werden. In Abhängigkeit von der Problemstellung und den konkreten Gegebenheiten kann die Anzahl der Modellparameter durchaus im zwei- bis dreistelligen Bereich liegen. Die mit $\mathbf{X_{K;K'}}$ symbolisierten Parametermengen beschreiben Charakteristika der Kompartimente **K** und **K'** und des Transfers der Schadstoffe mit den Konzentrationen $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \ldots)$ vom Kompartiment **K** zum Kompartiment **K'**.

Die Exposition von Personen oder Personengruppen kann ausgehend von Modellabschätzungen oder Messungen der Schafstoffkonzentrationen $\mathbf{C_M}$ in den Expositionsmedien modelliert werden, wozu für die einzelnen Expositionspfade diverse individuelle Expositions- und Verhaltensparameter $\mathbf{X_V}$ benötigt werden, welche die Höhe der Exposition beeinflussen:

$$\mathbf{E_V} = \mathbf{T_{M\rightarrow E}}(\mathbf{C_M}; \mathbf{X_V}; \mathbf{r}; t). \tag{2-4}$$

Ein Modell $\mathbf{T_{M\rightarrow E}}$ nach Gl. (2-4) wird nachfolgend "Expositionsmodell im engeren Sinn" genannt. Die Modellparameter $\mathbf{X_V}$ heißen Expositionsfaktoren [EPA 97C], [EPA 08], [UBA 07], [VUO 06]. Das Modell $\mathbf{T_{M\rightarrow E}}$ stellt den Zusammenhang zwischen den Schadstoffkonzentrationen $\mathbf{C_M}$ in den betrachteten Expositionsmedien zu den Expositionen $\mathbf{E_V}$ von Personen oder Personengruppen unter Beachtung der individuellen Expositions- und Verhaltensparameter $\mathbf{X_V}$ dar.

2.2.2. Komplexität von Expositionsmodellen

Zur Abschätzung von (Strahlen-)Expositionen werden in Abhängigkeit vom Zweck und der zur Verfügung stehenden Datenbasis Modelle mit sehr unterschiedlicher Komplexität genutzt.

Die Abbildung 2-2 zeigt beispielhaft die für Hinterlassenschaften des Uranbergbaus wesentlichen Expositionspfade auf. Es ist ersichtlich, dass Wechselwirkungen der Aktivitätskonzentrationen in den Umweltmedien vorliegen, die in Ausbreitungsmodellen erfasst werden müssen. Expositionsabschätzungen (deterministische bzw. probabilistische) müssen die funktionalen Zusammenhänge diverser Modellparametern beachten. Hierzu sind z. B. in [O'BRI 98] detaillierte Schemata erläutert.

Das Handbuch [CUL 99] enthält Hinweise zur Komplexität von Modellen und ihrer Auswirkungen auf deterministische bzw. probabilistische Expositionsabschätzungen. Nach [CUL 99] wird die Komplexität bestimmt durch:

- die Anzahl im Modell erfasster Kompartimente, Expositionspfade und Zustände,
- die Anzahl von Eingabevariablen des Modells und
- die funktionale Form der Modellgleichungen.

Der letztgenannte Aspekt betrifft Modelleigenschaften wie lineare/nichtlineare Abhängigkeiten und Korrelationen zwischen den Variablen, die mathematische Struktur von Transfermodellen (einfache algebraische Funktionen mit Transferfaktoren, gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen)

sowie Zeit- und Ortsabhängigkeiten. Auswirkungen von Parameterunsicherheiten hängen von der Modellstruktur ab, weshalb Modell- und Parameterunsicherheiten oft zusammen analysiert werden (vgl. [ELE 99]). Die Unsicherheit von Parameterschätzungen wächst mit der Modelkomplexität.

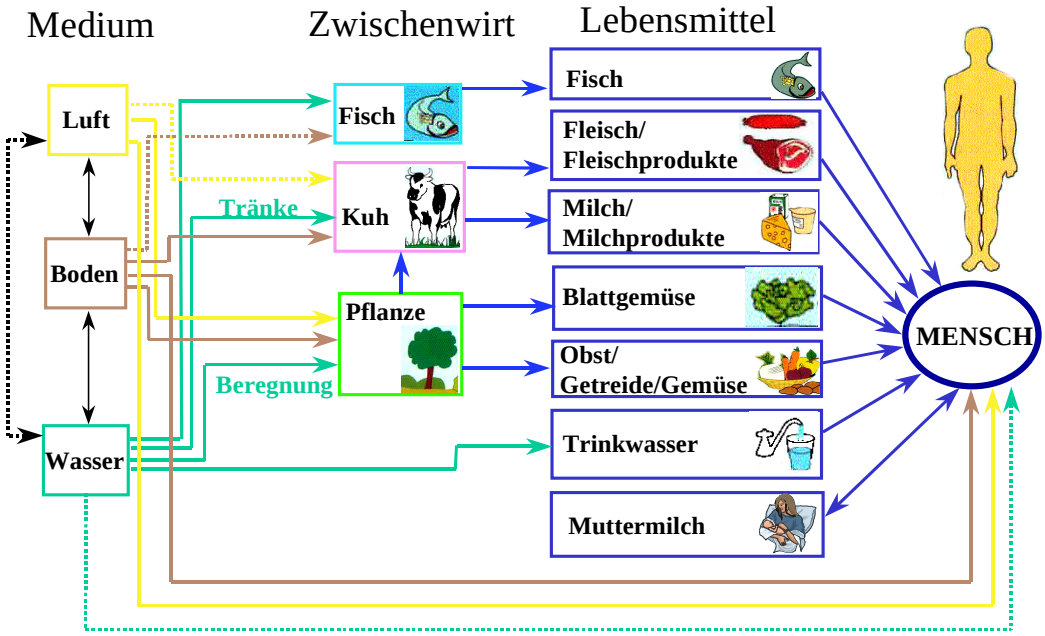


Abbildung 2-2: Expositionspfade für Hinterlassenschaften des Uranbergbaus (aus [BAR 03])

Der Grad der Komplexität und Realitätsnähe eines Modells wird i. d. R. iterativ durch Vergleich von Berechnungsergebnissen mit der Zielstellung der Expositionsmodellierung bestimmt. Wie in [BAR 03] beispielhaft für die Abschätzung von Strahlenexpositionen, die aus Hinterlassenschaften des Uranbergbaus resultieren, im Rahmen einer deterministischen Modellierung veranschaulicht, muss die Realitätsnähe eines Expositionsmodells, das zur Bewertung der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten dient, nur dann verbessert werden, wenn auf der Basis einfacher, konservativer generischer Modelle die Einhaltung des angestrebten Schutzniveaus nicht sicher nachgewiesen werden kann. Schritte der weiteren Modellspezifizierung können z. B. die Einbeziehung realer standortbezogener Nutzungen oder die Entwicklung standortspezifischer Ausbreitungsmodelle sein.

Parallel zur Verfeinerung deterministischer Modelle können probabilistische Expositionsmodelle zur Anwendung kommen, wodurch ggf. schon bei geringerem Grad der Modellkomplexität durch Nutzung realer statistischer Verteilungen für sensitive Variable (mit dem Abbau der Konservativität von Punktschätzern) die Einhaltung des Schutzniveaus gezeigt werden kann. Aus unserer Sicht wäre es angebracht, im Hinblick auf den Zweck von Expositionsabschätzungen auch diese Aspekte für deterministische und probabilistische Modellierungen zu untersuchen. Nach [CUL 99] sind die Auswirkungen von Modellunsicherheiten, der Variabilität von Parametern und der Unsicherheiten ihrer Spezifizierung im Zusammenhang mit der Modellkomplexität zu sehen. Zur Berechnung von Expositionen gibt es keine validen Modelle "an sich". Einfache Modellstrukturen erfassen ggf. nicht alle wesentlichen Prozesse. Zu komplexe Modelle können bei einer großen Zahl mit Unsicherheiten

behafteter Parameter zu unsicheren Prognosen führen. Die Modellvalidität (Güte/Genauigkeit im Hinblick auf ein Kriterium) hängt wesentlich vom Zweck der Anwendung des Modells ab.[12]

Gemäß Aufgabenstellung des BfS für das aktuelle Vorhaben sollen Modellunsicherheiten nur dann betrachtet werden, wenn diese für die Bewertung deterministischer bzw. probabilistischer Ansätze relevant sind. Dies betrifft insbesondere ihre Eignung zur Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen, worauf in nachfolgenden Darlegungen genauer eingegangen wird. Es sei aber darauf hingewiesen, dass es mit zunehmender Komplexität der Modelle immer schwieriger wird, auf der Grundlage von Punktschätzern für Inputvariable den Grad der Konservativität der berechneten Zielgröße(n) zu beurteilen. Obwohl für Expositionsabschätzungen mit zunehmendem Grad der Modellkomplexität die Anforderungen an die Datenbasis für probabilistische Berechnungen stark zunehmen, zeigen sich gerade hier die Vorteile probabilistischer Ansätze, mit denen nicht zuletzt effektive Methoden der Sensitivitätsanalyse verbunden sind. Diese sind für Abschätzungen potentieller Strahlenexpositionen durch Endlager für radioaktive Abfälle, für die auf weitgehend unsicheres Wissen zurückgegriffen werden muss, sehr wichtig, um vertiefende Untersuchungen auf die entscheidenden Modellansätze und Annahmen zu Modellparametern zu fokussieren.

Zur Einordnung von aleatorischen und epistemischen Parameterunsicherheiten radioökologischer Expositionsmodelle sei an dieser Stelle angemerkt, dass strukturelle Modellunsicherheiten erheblich zur Gesamtunsicherheit von Expositionsabschätzungen beitragen können. In [LINK 03], [LINK 05] sind hierzu Ergebnisse der im Rahmen des IAEA-Projekts BIOMASS (BIOsphere Modelling and ASSessment) durchgeführten Vergleiche zur Modellierung der Akkumulation von Radionukliden in der Biosphäre für zwei unterschiedliche Szenarien (kurzzeitige bzw. kontinuierliche Deposition von Radionukliden) dargelegt und diskutiert, an dem sich Experten aus sechs Länder mit ihren Modellen beteiligt haben. Nach Beseitigung anfänglich unterschiedlicher Interpretationen der Szenarien, die Abweichungen der Modellergebnisse über einen Bereich von sechs Größenordnungen bewirkt hatten, resultierten als Modellunsicherheit interpretierte Abweichungen über drei Größenordnungen, wozu die diversen Parameterunsicherheiten mit ca. einer Größenordnung beigetragen haben. In [YAN 10] wird über ähnliche Abweichungen der Modellierung der Radionuklidakkumulation in Süßwasserlebewesen im Perch Lake (Ableitungen von Co-60, Sr-90, Cs-137 und H-3 von den Chalk River Laboratories, Kanada) berichtet, wozu im Rahmen des IAEA-Projekts EMRAS (Environmental Modelling for Radiation Safety) ein Vergleich von 11 Modellen erfolgte.

Ähnlich zur Modellierung des Schadstofftransfers in der Biosphäre sind auch bei der Modellierung des Schadstofftransports in der Geosphäre neben erheblichen Parameterunsicherheiten, wie sie z. B. für K_d-Werte[13] in [EPA 99], [EPA 04] ausführlich diskutiert sind, Modellunsicherheiten zu beachten, die für konkrete Gegebenheiten aus Grenzen des Modellkonzeptes folgen [BAR 06]; z. B. können Elemente trotzt großem K_d-Wert durch Kolloidtransport eine hohe Mobilität aufweisen.

---

[12] Dies kann z. B. der sichere Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten für Referenzpersonen sein, aber auch die Ermittlung der Variabilität von Strahlenexposition in realen Bevölkerungsgruppen für eine Statistik oder die Sensitivitätsanalyse für Modelle zur Beurteilung potentieller langfristiger Strahlenexpositionen.

[13] Zur Modellierung der Retardation des Radionuklidtransports über den Wasserpfad wird häufig der so genannte K_d-Ansatz genutzt, mit dem eine konstante Relation der Konzentration C im Wasser bezogen auf die am Feststoff sorbierte Stoffkonzentration A angenommen wird ($A = K_d \cdot C$). Mit dem K_d-Ansatz wird die Sorption gelöster Stoffe an die festen Bestandteile des Bodens oder des Grundwasserleiters durch eine Näherung beschrieben, die eine relativ einfache Modellierung der Schadstoffausbreitung durch lineare Advektions-Dispersions-Gleichungen ermöglicht.

2.2.3. Expositionsmodelle im engeren Sinn

Die Expositionsmodellierung zielt auf eine formalisierte mathematische Beschreibung relevanter Expositionsszenarien (siehe Fußnote 2), mit deren Hilfe bei einer Auswahl angemessener Werte der Modellparameter konservative bzw. realitätsnahe Abschätzungen der Exposition einzelner Personen oder bestimmter Bevölkerungsgruppen möglich sind. Entsprechend den dbzgl. Ausführungen in [WHO 05] wird dabei zwischen der Entwicklung von Expositionsmodellen und deren Anwendung zur Expositionsabschätzung klar unterschieden. Dies ist im Hinblick auf die Durchführung von deterministischen bzw. probabilistischen Expositionsabschätzungen von Bedeutung. In beiden Fällen kann auf die gleichen Modellstrukturen Bezug genommen werden. Für die Modellparameter kommen jedoch im Fall deterministischer Berechnungen definierte Schätzwerte (Punkschätzer) zur Anwendungen, wogegen bei probabilistischen Berechnungen statistische Verteilungsfunktionen für alle, mehrere oder zumindest einen der Modellparameter zugrunde gelegt werden.

Gemäß Gl. (2-4) in Abschnitt 2.2.1 gestatten "Expositionsmodelle im engeren Sinn" Abschätzungen zur gleichzeitigen Exposition einer Person durch mehrere Schadstoffe sowie über unterschiedliche Expositionspfade, wozu die Schadstoffkonzentrationen $\mathbf{C_M}$ in den für betrachtete Expositionspfade relevanten Expositionsmedien (Luft, Trinkwasser, Lebensmitteln, etc.) bekannt sein müssen. Sie können mit (radio-)ökologischer Modellen zum Schadstofftransport nach den Gleichungen (2-1) bis (2-3) berechnet oder direkt gemessen werden. Die Unsicherheiten von Expositionsabschätzungen werden umso kleiner sein, je besser durchgeführte Messungen die tatsächlichen Konzentrationen in den Expositionsmedien erfassen. Deren direkte Messung ist somit zu bevorzugen. Wenn dies nicht möglich ist, müssen Modelle zum Transport bzw. Transfer der Schadstoffe in den Umweltmedien und in der Biosphäre genutzt werden.

Nachfolgend wird auf Expositionsmodelle (im engeren Sinn) eingegangen, die im konventionellen Gesundheitsschutz bzw. im Strahlenschutz verwendet werden. Sie sind sich ähnlich, weisen aber auch gewisse Besonderheiten auf.

2.2.3.1. Expositionsabschätzungen im konventionellen Gesundheitsschutz

Im konventionellen Gesundheitsschutz werden die folgenden drei Expositionsrouten betrachtet:

- Inhalation,
- Ingestion und
- dermale Aufnahme.

Neben dem Begriff der "Exposition"[14], der gemäß [WHO 04] die Konzentration oder die Menge eines speziellen Stoffes bezeichnet, der ein Zielorganismus, ein System oder eine (Sub-)Population mit bestimmter Häufigkeit und Dauer erreicht, ist im Rahmen von Risikoanalysen die "Dosis"[15] zur Quantifizierung der über relevante Expositionspfade aufgenommenen und resorbierten Menge des jeweiligen Schadstoffs ein zentraler Begriff.

---

[14] Exposure: *"Concentration or amount of a particular agent that reaches a target organism, system, or (sub)population in a specific frequency for a defined duration"* [WHO 04].

[15] Dose: *"Total amount of an agent administered to, taken up by, or absorbed by an organism, system, or (sub)population"* [WHO 04].

Für die Bewertung von akuten Gefährdungen durch chemotoxische Stoffe bzw. von langfristigen Risiken durch Aufnahme kanzerogener Stoffe werden Dosen für unterschiedliche Bezugszeiträume betrachtet, wie z. B. die Tages-, die Jahres- oder die Lebenszeitdosis [EPA 97C].

Als ein einfaches Modell für eine Expositionsabschätzung dient z. B. die folgende Formel für die Prognose von potentiellen mittleren Tagesdosen (ADD = Average Daily Dose, nach [EPA 89][16], [UBA 07] und [WHO 08]), die hier für einen Schadstoff angegeben ist, der aber über mehrere Expositionsmedien (m = 1 bis M) aufgenommen werden kann:

$$ADD_{pot} = \frac{1}{BW \cdot AT} \cdot \sum_{m=1}^{M} C_m \cdot IR_m \cdot ED_m \cdot EF_m \ . \qquad (2\text{-}5)$$

In Gl. (2-5) bezeichnen C_m die Konzentration des Kontaminanten im Expositionsmedium "m" (Atemluft, Lebensmittel, etc.), IR_m (= Intake Rate) die Aufnahmemenge des Expositionsmediums pro Zeiteinheit, ED_m (= Exposure Duration) die Expositionsdauer, EF_m (= Exposure Frequency) die für einzelne Expositionspfade spezifizierte Häufigkeit der Exposition, BW (= Body Weight) das Körpergewicht der exponierten Person und AT (= Averaging Time) den Bezugszeitraum, für den bzgl. karzinogener Schadstoffe die Lebenszeit der exponierten Person (70 a) angesetzt wird. Durch den Bezug der Exposition auf das Körpergewicht wird näherungsweise eine Normierung auf das Verteilungsvolumen bzw. die Konzentration im kritischen Organ erreicht. Mit den Parametern BW, IR_m, ED_m und EF_m (m = 1 bis M) enthält das Modell (2-5) insgesamt $3 \cdot M+1$ Expositionsfaktoren. Bei Anwendung des Modells auf unterschiedliche Personen (z. B. J nach Alter und/oder Geschlecht definierte Referenzpersonen) erhöht sich die Anzahl der benötigten Expositionsfaktoren um den entsprechenden Faktor auf $J \cdot (3M+1)$.

Zur Bewertung von Risiken durch chemotoxische Umweltbelastungen, insbesondere in Studien zur Lebensmittelsicherheit, wird oft von Daten zur Schadstoffkonzentration in den Expositionsmedien ausgegangen, womit sich Expositionsmodellierungen auf relativ einfache algebraische Beziehungen in der Form von Gl. (2-5) beschränken (siehe z. B. [IEFS 03], [UBA 07], [NCM 07], [WHO 08]). In anderen Fällen, wie zur Bewertung von Altlasten, müssen aber auch komplexe ökologische Modelle untersucht werden, in denen z. B. der Transfer von Schadstoffen aus kontaminierten Böden in lokal angebaute pflanzliche Nahrungsmittel modelliert wird [CUL 99].

Expositionsmodelle vereinfachen sich wesentlich, wenn nur einzelne Expositionsrouten bzw. -pfade und spezielle Kontaminanten betrachtet werden. Für Pestizide wurde in den USA mit dem im Jahre 1996 verabschiedeten "Food Quality Protection Act" gefordert, auch die Risiken von gleichzeitigen Expositionen über mehrere Routen/Pfade (aggregate exposures) und durch unterschiedliche Spezies mit gleichartigen toxischen Wirkungen (cumulative risk assessment) zu bewerten, wozu die EPA Grundsätze und Richtlinien publizierte (siehe [EPA 01A], [EPA 02], [EPA 09]). Der konzeptionelle Rahmen zur Modellierung derartig komplexer Expositionssituationen ist u. a. in [PRI 05] dargestellt.

---

[16] In [EPA 89] wird für ADD_{pot} die adäquate Bezeichnung "Schadstoffaufnahme" I (= Intake) verwendet, angegeben in mg(Schadstoff) pro kg (Körpergewicht) und Tag. ADD_{pot} bzw. I stehen für die in [WHO 04] als "verabreichte" ("administered") Dosis bezeichnete Größe. Die "absorbierte" Dosis ist jener Anteil der Schadstoffaufnahme, der vom Körper/Organ gemäß der für die Expositionsrouten spezifizierten Resorptionsverfügbarkeit aufgenommen wird (vgl. [EPA 89], Appendix A "Adjustment for Absorption Efficiency" bzw. [UBA 07], Teil 1, S. 39).

2.2.3.2. Expositionsabschätzungen im Strahlenschutz

Strahlenexpositionen werden durch Dosen quantifiziert (siehe § 3(2) Nr. 9 StrlSchV), wodurch äußere und innere Expositionen, die auch gleichzeitig durch verschiedene Radionuklide bzw. Strahlungsarten erfolgen können, einheitlich quantifiziert werden.

Als Zielgröße wird überwiegend die effektive Dosis betrachtet. Organdosen sind für spezielle Fälle und Expositionsszenarien von Interesse (z. B. Haut bei Szenarien, wo die Kontamination der Haut eine wesentliche Expositionsroute darstellt, wobei Höhe/Fläche der Kontamination stark variieren können). In der vorliegenden Untersuchung, die auf methodische Aspekte der probabilistischen Analyse von Strahlenexpositionen fokussiert ist, werden beispielhaft nur effektive Dosen betrachtet.

Die für Dosisabschätzung benötigten Dosiskoeffizienten bzw. Dosiskonversionsfaktoren können erhebliche Unsicherheiten aufweisen.[17] Die vorliegende Untersuchung blendet Unsicherheiten zu Dosiskoeffizienten/Dosiskonversionsfaktoren, die ein eigenständiges Thema darstellen würden, aus. Für diese Parameter werden deterministische Werte nach aktueller Rechtsgrundlage genutzt.

Die im Strahlenschutz für Dosisabschätzungen verwendeten "Expositionsmodelle im engeren Sinn" sind i. d. R. relativ einfache Faktorgleichungen, wie z. B. in [IAEA 01], [BMU 05] oder in [BFS 10] angegeben. Im Unterschied zur Gl. (2-5) bzw. zu ähnlichen Dosismodellen, wie sie zur Abschätzung von Expositionen durch chemotoxische Schadstoffe für einzelne Expositionspfade angepasst werden (vgl. [EPA 01B]), sind einige Besonderheiten hervorzuheben:

(1) Für den Strahlenschutz werden Dosen nicht explizit auf das Körpergewicht bezogen. Die zur Abschätzung von effektiven (Folge-)Dosen[18] verwendeten Dosiskoeffizienten beziehen sich auf Referenzpersonen mit definierten anatomischen Merkmalen (siehe [ICRP 02], [ICRP 07]).

(2) Für die Anwendung von Grenz- bzw. Richtwerten zur Strahlenexposition werden in nationalen Regelungen zum Teil sehr unterschiedliche Konzepte verfolgt (z. B. Bezugnahme auf eine reale kritische Gruppe oder auf in Regelwerken definierte Referenzpersonen). So sind in Deutschland gemäß [BMU 01] und [BMU 05], ebenso wie für Strahlenexpositionen durch bergbauliche Hinterlassenschaften gemäß [BFS 10], effektive Dosen für 6 Altersgruppen der allgemeinen Bevölkerung sowie für Beschäftigte in den radiologischen Bewertungen zu berücksichtigen. Effektive Dosen werden dabei nicht geschlechtsspezifisch berechnet.

(3) Neben den in Abschnitt 2.2.3.1 genannten Expositionsrouten (Inhalation, Ingestion und dermale Aufnahme) ist im Strahlenschutz noch die äußere Exposition durch weitreichende Strahlungen zu berücksichtigen (insbesondere γ-Strahlung, ggf. auch Neutronen- und Ionenstrahlung).

---

[17] Gemäß [ICRP 07] untersucht eine ICRP-Arbeitsgruppe, ob der Risikofaktor für Radon/PAE-Exposition korrigiert werden sollte. Nach Ergebnissen einer Synthese epidemiologischer Studien werden jetzt Dosiskonversionsfaktoren vorgeschlagen, die für die allgemeine Bevölkerung um den Faktor 2,25 und für Arbeitsplätze um den Faktor 2,4 über den aktuell gültigen Werten, wie z. B. in [EU 96] angegeben, liegen [TIR 08]; siehe auch [HARR 09]. Analoge Schlussfolgerungen sind [JACO 09] zur LDRMD (low-dose-rate moderate-dose) durch Gammaexposition zu entnehmen. Unsicherheiten der Risikobewertung der Strahlenexposition gelangen stärker ins Blickfeld [UN 10].

[18] Die "effektive Folgedosis" betrifft innere Expositionen. Beiträge zur effektiven Dosis durch äußere γ-Strahlung oder durch β-Submersion resultieren entsprechend der momentanen Dosisleistung. Nachfolgend wird i. d. R. der Begriff "effektive Dosis" verwendet, auch wenn eine "effektive Folgedosis" gemeint ist.

(4) Die Grenz- bzw. Richtwerte zur Strahlenexposition beziehen sich überwiegend auf die effektive Dosis pro Kalenderjahr, die für die Referenzpersonen abzuschätzen ist. Im Rahmen definierter Expositionsszenarien sind dazu alle (potentiell) relevanten Expositionspfade und Radionuklide in die Dosisabschätzung einzubeziehen. Expositionsmodelle zur Abschätzung effektiver Dosen für eine bestimmte Referenzperson/Altersgruppe ("< 1 a"; "1 – 2 a"; "2 – 7 a"; "7 – 12 a"; "12 – 17 a"; "> 17 a") beinhalten deshalb Summen über relevante Expositionspfade und Radionuklide.

(5) Insbesondere bei der Abschätzung von Strahlenexpositionen durch bergbauliche Hinterlassenschaften mit erhöhter Aktivitätskonzentration natürlicher Radionuklide sind die für die jeweilige Region typischen Untergrundwerte der Aktivitätskonzentration, die nicht als bergbaubedingte Belastungen anzusehen sind, abzuziehen [BFS 10].

Dies sei durch das nachfolgende Expositionsmodell aus [BFS 10] zur Abschätzung der effektiven Dosis infolge bergbaubedingter Erhöhung der Aktivitätskonzentration natürlicher Radionuklide in lokal erzeugten Lebensmitteln verdeutlicht:

$$E_{Ing,j} = \sum_n p_n \cdot U_{n,j} \cdot \sum_r \left(C_{n,r} - C_{n,r}^U\right) \cdot g_{Ing,r,j} \,. \qquad (2\text{-}6)$$

Die in Gl. (2-6) verwendeten Bezeichnungen sind:

$E_{Ing,j}$: effektive Jahresdosis der Referenzperson/Altersgruppe j durch Ingestion lokal erzeugter Lebensmittel (in Sv);

$C_{n,r}$: spezifische Aktivität (in Bq/kg) bzw. Aktivitätskonzentration (in Bq/l) des Radionuklids r im Lebensmittel n; der Index n kennzeichnet Lebensmittelklassen wie Trinkwasser, Milch und Milchprodukte, Fleisch und Fleischwaren, Fischfleisch, die verschiedenen Arten pflanzlicher Lebensmittel (Blattgemüse, Wurzelgemüse, andere Gemüsesorten, Obst) sowie Muttermilch bzw. Säuglingsmilchnahrung (für Altersgruppe "< 1 a");

$C_{n,r}^U$: spezifische natürliche Untergrundaktivität (in Bq/kg) bzw. -Aktivitätskonzentration (in Bq/l) des Radionuklids r im Lebensmittel n;

p_n: Anteil an lokaler Produktion des Lebensmittels n am Jahresverbrauch (dimensionslos, es wird angenommen, dass die Anteile für alle Referenzpersonen/Altersgruppen den gleichen Wert haben);

$U_{n,j}$: Jahresverbrauch des Lebensmittels n durch die Referenzperson j (in kg bzw. l);

$g_{Ing,r,j}$: Ingestionsdosiskoeffizient für das Radionuklid r und die Referenzperson/Altersgruppe j (in Sv/Bq).

Sofern für die spezifische Aktivität bzw. Aktivitätskonzentration $C_{n,r}$ und dbzgl. Untergrundwerte keine Messwerte vorliegen, was i. d. R. zutrifft, sind diese Parameter mit Hilfe radioökologischer Modelle, wie z. B. in Abbildung 2-2 schematisch dargestellt, abzuschätzen (vgl. [BMU 05]).

Dies ist hinsichtlich der Anwendung deterministischer bzw. probabilistischer Expositionsmodelle insofern von Bedeutung, als der Grad der Konservativität deterministischer Berechnungen umso schwieriger beurteilt werden kann, je komplexer das zugrunde liegende Expositionsmodell ist und je größer die Anzahl der Modellparameter ist.

2.3. Deterministische Expositionsabschätzungen

Auf der Grundlage eines bestimmten Expositionsmodells, das in Abhängigkeit von den jeweiligen Gegebenheiten durch mehr oder weniger komplexe radioökologische Modelle untersetzt ist, wie in Abbildung 2-1 und in den Gleichungen (2-1) bis (2-4) skizziert, können Expositionsabschätzung sowohl deterministisch als auch probabilistisch vorgenommen werden. Für die Modellparameter, auch "Variable" genannt, können feste Werte oder statistische Verteilungen verwendet werden.

Bei einer deterministischen Expositionsabschätzung werden für die Modellparameter feste Werte verwendet, die z. B. aus Daten einer Stichprobe als Punktschätzer für statistische Kenngrößen der Variablen bestimmt wurden (siehe Erläuterungen zu Punktschätzern in Abschnitt B.2). Oft werden konservative Annahmen getroffen (auf Expertenschätzungen basierende Werte). Je nach Zweck der Expositionsabschätzung können dazu Kennwerte genutzt werden, die eine zentrale Tendenz der statistischen Verteilung charakterisieren (z. B. arithmetischer Mittelwert oder Medianwert der Daten), oder auch Kennwerte, die eher ungünstige bzw. extreme Ereignisse beschreiben (ein hohes Perzentil der statistischen Verteilung oder der Maximalwert vorliegender Daten). Im Ergebnis einer deterministischen Expositionsabschätzung erhält man für die Zielgröße (z. B. effektive Dosis einer Referenzperson) einen Wert, der je nach Spezifikation der verwendeten Punktschätzer als mittlerer oder konservativer Schätzwert der Verteilung real möglicher Expositionen interpretiert wird. Das tatsächlich erreichte Niveau an Konservativität ist aber insbesondere für komplexe Modelle kaum noch einzuschätzen oder gar quantifizierbar. Es sei bereits an dieser Stelle angemerkt, dass auch aus probabilistischen Expositionsabschätzungen i. A. erhebliche Unsicherheiten resultieren, da diverse Modellparameter mit z. T. substantiellen epistemischen Unsicherheiten behaftet sind.

Werden für viele Modellvariable konservative Werte verwendet, so kann man zumindest qualitativ davon ausgehen, dass das Ergebnis der Expositionsabschätzung einem ungünstigen Einzelfall entspricht, dessen Eintreten weitgehend unwahrscheinlich ist. Häufig werden für die einzelnen Variablen eines Expositionsmodells Werte verwendet, die sich im Grad der Konservativität unterscheiden, indem z. B. für einige Variable Mittelwerte, für andere dagegen hohe Perzentile angesetzt werden. Dies kann zur Vermeidung einer zu großen Konservativität der Expositionsabschätzung gerechtfertigt sein, ermöglicht jedoch ebenfalls keine nachvollziehbare Bewertung der Ergebnisse bzgl. des damit erreichten Niveaus an Konservativität.

Beispiel 2.1-1

Zur Veranschaulichung dieser Problematik sei ein einfaches analytisches Beispiel betrachtet. Die zu bestimmende Zielgröße Z (z. B. eine effektive Dosis) sei das Produkt von vier voneinander unabhängigen jeweils lognormal verteilten Variablen A, B, C, und D:

$$Z = A \cdot B \cdot C \cdot D \,. \tag{2-7}$$

Erläuterungen zu wichtigen Eigenschaften von lognormal verteilten Zufallsgrößen enthält Anhang C. Im hier betrachteten Beispiel wird ausgenutzt, dass das Produkt von gegenseitig unabhängigen lognormal verteilten Größen wieder lognormal verteilt ist. Ist $A \sim Ln(\mu_A,\sigma_A)$, $B \sim Ln(\mu_B,\sigma_B)$ usw., dann ergibt sich für Z eine Lognormalverteilung $Z \sim Ln(\mu_Z,\sigma_Z)$ mit den Verteilungsparametern

$$\mu_Z = \mu_A + \mu_B + \mu_C + \mu_D \quad \text{und} \quad \sigma_Z^2 = \sigma_A^2 + \sigma_B^2 + \sigma_C^2 + \sigma_D^2 \,. \tag{2-8}$$

In der Tabelle 2-1 sind für den Erwartungswert und das 95%-Perzentil beispielhaft Werte für die fünf Zufallsgrößen zusammengestellt und Resultaten von deterministischen Berechnungen für Z, denen unterschiedliche statistische Kenngrößen für A, B, C und D zugrunde liegen, gegenübergestellt.

Die Lageparameter μ sind für diese Betrachtung nicht von Bedeutung, da sie in die Berechnung der beiden Kenngrößen nur als Faktoren der Form $\exp(\mu)$ eingehen (siehe Anhang C). Für sie wurde zur Vereinfachung der Darstellung $\mu_X = 0$ gesetzt (X = A, B, C, D), was dann gemäß Gl. (2-8) auch für die Zielgröße Z gilt. Für den Parameter σ, der die Variabilität der lognormal verteilten Größen bestimmt, wurden für die Inputvariablen A, B, C und D des Modells Gl. (2-7) unterschiedliche Werte angesetzt.

Tabelle 2-1: Numerisches Beispiel zur deterministischen Expositionsberechnung; E[X] bezeichnet den Erwartungswert und X_P das P%-Perzentil der Zufallsgröße $X \sim Ln(\mu_X,\sigma_X)$

X:	**A**	**B**	**C**	**D**	**Z**	**entspricht**
μ_X	0	0	0	0	0	
σ_X	2,0	1,5	1,0	0,5	2,74	
E[X]	7,389	3,080	1,649	1,133	42,5	
X_{95}	26,84	11,79	5,180	2,276	90,4	
Input & Output	E[A]	E[B]	E[C]	E[D]	42,5	$Z_{91,5}$ =E[Z]
Input & Output	A_{95}	B_{95}	C_{95}	D_{95}	3.730	$Z_{99,9}$
Input & Output	A_{95}	E[B]	E[C]	E[D]	154,4	$Z_{96,7}$
Input & Output	E[A]	B_{95}	E[C]	E[D]	162,8	$Z_{96,9}$
Input & Output	E[A]	E[B]	C_{95}	E[D]	133,6	$Z_{96,3}$
Input & Output	E[A]	E[B]	E[C]	D_{95}	85,41	$Z_{94,8}$

Aus den Angaben der Tabelle 2-1 ist zunächst ersichtlich, dass der Erwartungswert der Zielgröße Z gleich dem Produkt der Erwartungswerte der 4 Inputvariablen ist (dies gilt generell für das Produkt unabhängig verteilter Zufallsgrößen). In den letzten sechs Zeilen der Tabelle 2-1 sind Ergebnisse deterministischer Berechnungen für auf verschiedene Weise gewählte Kenngrößen der Inputvariablen angegeben. In der letzten Spalte ist angegeben, welchem Perzentil der Verteilung von Z der jeweilige Wert des Produkts der 4 Faktoren entspricht. In diesem Beispiel entspricht der Erwartungswert von Z dem 91,5%-Perzentil. Das Produkt der 95%-Perzentile der 4 Inputvariablen entspricht dem 99,9%-Perzentil der Zielgröße und stellt folglich einen sehr konservativen Wert dar. Im betrachteten Beispiel resultieren für die Zielgröße Werte, die deutlich näher bei ihrem 95%-Perzentil liegen, wenn nur für eine Inputvariable das 95%-Perzentil, für die drei anderen dagegen deren Erwartungswerte angesetzt werden.

Das Beispiel 2.1-1 verdeutlicht, dass schon für sehr einfache Modelle mit den für deterministische Abschätzungen verwendeten Kenngrößen der Inputvariablen eine Aussage zur Konservativität der berechneten Zielgröße ohne Kenntnis ihrer statistischen Verteilung nicht mehr möglich ist.

Die Anwendung deterministischer Expositionsabschätzungen geriet schon in den 80-er Jahren in starke Kritik, weil damit z. B. für Entscheidungen zu Sanierungsmaßnahmen keine ausreichenden Informationen zu den tatsächlich existierenden gesundheitlichen Risiken bereitgestellt werden.

In [BOG 87] sind zu dieser Problematik Worte des früheren Administrators der U.S. EPA (William D. Ruckleshaus) aus dem Jahr 1984 zitiert, die hier wegen ihrer Klarheit wiedergegeben sind:

> *"First, we must insist on risk calculations being expressed as distributions of estimates and not as magic numbers that can be manipulated without regard to what they really mean. We must try to display more realistic estimates of risk to show a range of probabilities. To help do this, we need new tools for quantifying and ordering sources of uncertainty and for putting them into perspective."*
> (Ruckleshaus, W.D.; "Managing Risk in a Free Society", Princeton Alumni Weekly, March 7, 1984)

Eine Diskussion zur Eignung und Interpretation von deterministischen Expositionsabschätzungen wurde in den USA zu Beginn der 90-er Jahre insbesondere im Zusammenhang mit der Begründung von Sanierungsmaßnahmen für Altlasten-Standorte geführt. Sie bezog sich auf das in [EPA 89] definierte RME-Konzept einer vernünftigen Abschätzung von maximalen Expositionen (RME = "Reasonable Maximum Exposure") als Basis für Sanierungsentscheidungen. Die RME ist qualitativ definiert als die maximale Exposition, die an einem Standort vernünftiger Weise zu erwarten ist. Sie sollte also ausreichend konservativ abgeschätzt werden (*"well above the average case"*), jedoch noch im Bereich des Möglichen liegen. Diese qualitative Definition wurde für Entscheidungen zu den Superfund-Standorten zunächst als 95%-Perzentil einer probabilistisch berechneten Verteilung der potentiellen individuellen Expositionen interpretiert. Mit den in [EPA 91] festgelegten Default-Werten für drei maßgebliche Expositionsfaktoren (Aufnahmerate IR, Expositionsdauer ED sowie Expositionshäufigkeit EF; siehe Gl. (2-5)), für die jeweils ein oberer Wert ("upper-bound value") angesetzt wurde, der ca. dem 95%-Perzentil der statistischen Verteilung des jeweiligen Parameters entspricht, resultieren dann nach Gl. (2-5) Dosen, die eher dem 99,9%-Perzentil der statistischen Verteilung der Zielgröße entsprechen. Hierzu u. a. in [BUR 93], [BOG 94] und [CUL 94] angeführte Berechnungen und abgeleitete Konservativitätsmaße entsprechen i. W. dem obigen Beispiel 2.1-1.

In [EPA 01B] wird zur RME ein Bereich vom 90%- bis zum 99,9%-Perzentil genannt, wobei für die Altlastensanierung das 95%-Perzentil der Dosisverteilung als Startpunkt der RME-Risikobewertung empfohlen wird. Das 99%- bzw. das 99,9%-Perzentil werden als sehr hohes bzw. extremes Risiko bewertet. In [EPA 00A] wurde z. B. zur Risikobewertung der Aufnahme von Pestiziden mit Lebensmitteln die Überschreitung der so genannten "acute Population Adjusted Dose" (aPAD) durch das 99,9%-Perzentil der probabilistischen Expositionsberechnung als Kriterium für eine Besorgnis ("threshold of regulatory concern") formuliert. Als ausreichendes Vertrauensniveau der Schätzung von statistischen Kenngrößen (Mittelwert, Perzentile) wird in [EPA 01B] ein Niveau von 95% empfohlen. Dieses Vertrauensniveau wurde z. B. auch in [SSK 05A] zur Bestimmung der mittleren spezifischen Aktivität für den Nachweis der Einhaltung von Überwachungsgrenzen für NORM-Rückstände gemäß § 97 i. V. m. Anlage XII Teil B StrlSchV empfohlen.

Im Gegensatz zur Diskussion zu hoher Konservativitäten deterministischer Berechnungen wird in [UBA 07] darauf hingewiesen, dass *"fachlich ansonsten gut begründete Expositionsabschätzungen in der öffentlichen Diskussion sehr schnell unglaubwürdig werden können, falls auch nur Verdacht aufkommt, die tatsächliche Variation in der Bevölkerung würde durch RME-Angaben nicht hinreichend erfasst und berücksichtigt."* Bei der Verwendung von festen Default-Werten wird zwar davon ausgegangen, *"dass die tatsächliche Variation in den Expositionsfaktoren hierbei ausreichend [konservativ] abgebildet würde"*, wie unwahrscheinlich eine Überschreitung des angestrebten Schutzziels ist, kann im Rahmen deterministischer Ansätze aber kaum belastbar beurteilt werden, auch wenn eine denkbare Überschreitung im konkreten Fall höchst unrealistisch sein mag.

2.4. Probabilistische Expositionsabschätzungen

Probabilistische Ansätze zur Expositionsabschätzung behandeln zumindest einige Modellparameter als Zufallsgrößen, wodurch auch die Zielgröße (z. B. die effektive Dosis) eine Zufallsvariable wird. Wenn die Verteilungen von Inputvariablen durch analytische Funktionen dargestellt werden (man spricht dann von parametrischen Verteilungen; siehe Anhang C), so ist in einfachen Fällen eine direkte Berechnung der statistischen Verteilung der Zielgröße möglich. Dies gilt z. B. für die Summe voneinander unabhängiger, normal verteilter oder das Produkt unabhängiger, lognormal verteilter Zufallsgrößen, die wieder normal bzw. lognormal verteilt sind, was mit Gl. (B-23) bzw. Gl. (B-25) gezeigt werden kann. Für unabhängige, lognormal verteilte Zufallsgrößen sind die daraus resultierenden Beziehungen zwischen den Verteilungsparametern der Inputvariablen und der Zielgröße für das Beispiel 2.1-1 in Gl. (2-8) angegeben.

In der Regel liegen aber für Expositionsabschätzungen nach den Modellgleichungen (2-1) bis (2-4) viele unterschiedlich verteilte und kompliziert verknüpfte Modellparameter vor, so dass eine direkte (analytische oder numerische) Berechnung der statistischen Verteilung der Zielgröße mit Hilfe von Faltungsintegralen der in Gl. (B-23) bis (B-26) dargestellten Art mit vertretbarem Aufwand nicht mehr möglich ist. Hinzu kommt, dass die anhand von Stichproben ermittelten Parameter von statistischen Verteilungen epistemische Unsicherheiten aufweisen können (wie Messunsicherheiten, Stichprobenunsicherheiten sowie die Unsicherheit der Wahl des Typs parametrischer Verteilungen) und dass ggf. für bestimmte Modellparameter nur grobe Expertenschätzungen vorliegen, aus denen nicht auf eine bestimmte statistische Verteilung geschlossen werden kann.

Für probabilistische Expositionsabschätzungen, mit denen diese Probleme numerisch behandelt werden, können verschiedene Methoden genutzt werden. Nachfolgend werden hierzu in Abschnitt 2.4.1 die einfache Monte-Carlo-Simulation (MC) und in Abschnitt 2.4.2 die zur Separierung von Variabilität und Unsicherheit entwickelte 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation (2D-MC) erläutert. Anschließend wird in Abschnitt 2.5 auf probabilistische Sensitivitätsanalysen, in Abschnitt 2.6 auf generelle Probleme der frequentistischen Expositionsmodellierung und in Abschnitt 2.7 auf die Anwendung von BAYES-Methoden eingegangen. Methoden zur Einbindung von Expertenschätzungen werden in Abschnitt 2.8 erläutert.

2.4.1. Einfache Monte-Carlo-Simulation

Eine numerisch relativ einfache Methode zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte oder der Verteilungsfunktion einer Zielgröße Z, die als Funktion/Transformation von n Modellparametern, den Inputvariablen ($X_1, X_2, \ldots, X_n$), dargestellt werden kann,

$$Z = T(X_1, X_2, \ldots, X_n) \tag{2-9}$$

ist die Monte-Carlo-Simulation. Bei dieser Methode werden gleichzeitig für alle Inputvariable, die durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen spezifiziert sind, zufällig Werte gemäß ihren Verteilungen generiert, woraus zufällige Realisierungen der Zielgröße resultieren. Nach vielen Wiederholungen dieser Prozedur erhält man für die Zielgröße (z. B. die effektive Dosis) eine Verteilung möglicher Werte, die als Wahrscheinlichkeitsdichte oder Verteilungsfunktion dargestellt werden kann (siehe Erläuterungen zu grundlegenden Begriffen und Definitionen der Statistik in Abschnitt B.1 von Anhang B). Sie nähert sich der im Sinne des zugrunde gelegten Modells wahren Verteilung, die

durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_Z(z)$ bzw. die Verteilungsfunktion $F_Z(z)$ bestimmt ist, mit zunehmender Anzahl von Simulationsläufen immer besser an.

Für solche Monte-Carlo-Simulationen kann kommerziell verfügbare Software genutzt werden (z. B. die EXCEL-Add-ins Crystal Ball und @Risk oder die Programme Analytica und GoldSim, letzteres ist auch für die Simulation von komplexen zeit- und ortsabhängigen Systeme/Prozesse unter Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls gut geeignet).

Am einfachsten funktioniert die Methode, wenn die Inputvariablen voneinander unabhängig sind und durch parametrische Verteilungsfunktionen $F_{X_i}(x_i,\boldsymbol{\theta}_i)$ charakterisiert sind. Mit den verfügbaren Programmen können jedoch auch nicht-parametrische, so genannte empirische Verteilungen für die Modellvariablen genutzt werden. Mit Korrelationsmatrizen können auch Abhängigkeiten zwischen den Inputvariablen simuliert werden, wozu üblicherweise der SPEARMAN'sche Rangkorrelations-koeffizient (siehe Gl. B-48 in Anhang B) genutzt wird, der nicht auf lineare Abhängigkeiten beschränkt ist. Spezielle Methoden der Analyse von empirischen Verteilungen (siehe z. B. [HOLL 99]) sind jedoch meist nicht in diesen Programmen implementiert.

Aus mathematischer Sicht stellt die Monte-Carlo-Simulation ein effektives numerisches Verfahren zur Untersuchung von Modellen mit Zufallsvariablen dar, wobei im Resultat exakte Lösungen von Integralen, wie sie beispielhaft in Anhang B mit Gl. (B-23) bis (B-26) angegeben sind, approximiert werden. Ein wesentlicher Vorteil der Monte-Carlo-Simulation besteht darin, dass auch beliebig komplexe (Expositions-)Modelle mit den gleichen Methoden untersucht werden können. Dabei ist es problemlos möglich, für verschiedene Modellvariable verschiedenartige statistische Verteilungen anzusetzen, wogegen analytische Lösungen nur für bestimmte Verknüpfungen von parametrischen Verteilungen existieren (z. B. für die Summe von normal verteilten oder das Produkt von lognormal verteilten Zufallsgrößen, nicht jedoch für das Produkt von normal verteilten oder die Summe von lognormal verteilten Zufallsgrößen).

Der Begriff "Monte Carlo" steht im engeren Sinne für die Art des zufälligen Samplings aus den Wahrscheinlichkeitsverteilungen der einzelnen Inputvariablen. Das Monte-Carlo-Sampling (MCS) beruht auf dem traditionellen Probenerhebungsverfahren, bei dem im Intervall [0, 1] gleichverteilte Zufallszahlen generiert werden, mit denen jeweils aus den inversen Verteilungsfunktionen der Inputvariablen zufällige Realisierungen x_i berechnet werden, deren Verteilung nach ausreichend vielen Durchläufen die Wahrscheinlichkeitsverteilung von X_i approximiert. Bei der MCS ist also die Probenerhebung völlig dem Zufall überlassen. Um auch die Randbereiche aller Verteilungen hinreichend zu erfassen, muss eine sehr große Anzahl an Durchläufen realisiert werden. Die MCS verlangt dazu eine Kontrolle der Konvergenz der simulierten statistischen Verteilung der Zielgröße.

Eine effektivere, in [McK 79] entwickelte Art des Samplings, die ebenfalls in den o. g. Programmen implementiert ist, wird als Latin-Hypercube-Sampling (LHS) bezeichnet. Hierbei werden Werte der Inputvariablen aus Abschnitten gleicher Wahrscheinlichkeit ihrer Verteilungsfunktionen gewählt. Alle n Verteilungsfunktionen werden dazu in k Sektoren so unterteilt, dass diesen die gleiche Wahrscheinlichkeit (1/k) zukommt. Dann wird für jede Zufallsvariable aus diesen Sektoren zufällig ein Wert erhoben (dies erfolgt anlog zum MCS unter Beachtung der Wahrscheinlichkeitsverteilung in den Sektoren). Damit wird erreicht, dass für jede der n Inputvariablen k zufällige Werte vorliegen, welche die jeweilige Verteilungsfunktion hinreichend genau nachbilden. Die k Werte für X_1 werden nun auf zufällige Weise mit den k Werten von X_2 gepaart. Diese k Paare werden wieder

auf zufällige Weise mit den k Werten von X_3 kombiniert usw., bis schließlich k n-Tupel vorliegen, die k zufälligen n-dimensionalen Stichproben entsprechen. Dies ist zwar nur ein relativ geringer Teil der insgesamt möglichen Anzahl von $(k!)^{n-1}$ möglichen Kombinationen der n·k Werte; es zeigt sich jedoch, dass auf diese Weise auch für vielen Inputvariable (mit n im zwei- bis dreistelligen Bereich) mit akzeptablem Aufwand eine relativ gute Approximation der statistischen Verteilung der Zielgröße erreicht wird. Das LHS gestattet nach einer in [IMAN 82] entwickelten Methode die Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen den Inputvariablen, wenn die Rang-Korrelationen vorgegeben werden können.

Mit LHS wird eine deutlich bessere Konvergenz für die Verteilungsfunktion $F_Z(z)$ erreicht als mit dem traditionellen MCS. Zu weiteren Erläuterungen des LHS mit methodischen Beispielen zur Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen den Inputvariablen und zum Vergleich von LHS mit MCS sowie weiteren Simulationsverfahren sei auf [IMAN 88] und [HEL 02A] sowie auf den ausführlichen Bericht [HEL 02B] verwiesen.

Die Berechnungen nach LHS sind zwar nicht mehr "Monte Carlo" im engeren Sinne, es ist aber üblich, die Bezeichnung Monte-Carlo-Simulation unabhängig vom Verfahren des Samplings (MCS bzw. LHS) zu verwenden.

Bei der einfachen Monte-Carlo-Simulation wird vorausgesetzt, dass die Verteilungsfunktionen der Inputvariablen in parametrischer Form oder als empirische Verteilungen bekannt sind. Hiermit wird also ausschließlich die Variabilität der Modellparameter (in Gl. (2-9) der Variablen X_1 bis X_n) berücksichtigt. Wenn für bestimmte Variable nur Bandbreiten bzw. zusätzlich auch Modalwerte angegeben werden können (z. B. durch Expertenschätzung), werden dazu oft Gleichverteilungen bzw. Dreiecksverteilungen angesetzt und wie statistische Verteilungen behandelt. Damit resultiert aber eine i. A. inkonsistente Vermischung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten, die zudem Fragen zur Interpretation der Ergebnisse aufwirft, weil auf Expertenaussagen basierende Verteilung i. d. R. keine probabilistischen Verteilungen sind. Werden solche Ansätze vermieden, so ist festzustellen, dass schon mit der relativ einfachen Monte-Carlo-Simulation im Vergleich zu deterministischen Expositionsabschätzungen wesentlich mehr Informationen zur Bewertung von Expositionen zur Verfügung gestellt werden. Dieser Zugang gestattet auch Sensitivitätsanalysen, in denen unterschiedliche statistische Verteilungen der Inputvariablen bzgl. ihrer Auswirkungen auf die Verteilung der Zielgröße untersucht werden.

Beispiel 2.1-2

Zur Veranschaulichung der probabilistischen (Expositions-)Berechnung betrachten wir Ergebnisse von zwei Monte-Carlo-Simulationen (mit LHS) für das Modell nach Gl. (2-7). Für die Inputvariablen A, B, C und D wird exakte Kenntnis der Verteilungsparameter mit den in Abschnitt 2.3.1 zum Beispiel 2.1-1 genannten Werten angenommen (Lognormalverteilungen $X \sim Ln(\mu_X,\sigma_X)$ für X = {A, B, C, D} mit $\mu_X = 0$ sowie $\sigma_A = 2{,}0$; $\sigma_B = 1{,}5$; $\sigma_C = 1{,}0$ und $\sigma_D = 0{,}5$). In der Abbildung 2-2 sind die aus Monte-Carlo-Simulationen mit 100 und 1000 Läufen resultierenden Verteilungsfunktionen der exakten Verteilungsfunktion der Zielgröße $Z \sim Ln(\mu_Z,\sigma_Z)$ mit $\mu_Z = 0$ und $\sigma_Z = 2{,}74$ (vgl. Tabelle 2-1) gegenübergestellt.

Aus Abbildung 2-2 ist gut ersichtlich, dass mit zunehmender Anzahl von Simulationsläufen die (im gegeben Beispiel bekannte) Verteilungsfunktion der Zielgröße immer genauer approximiert wird, wobei aber schon bei 100 Simulationsläufen ein weitgehend richtiger Eindruck zur statistischen Verteilung der Zielgröße Z vermittelt wird.

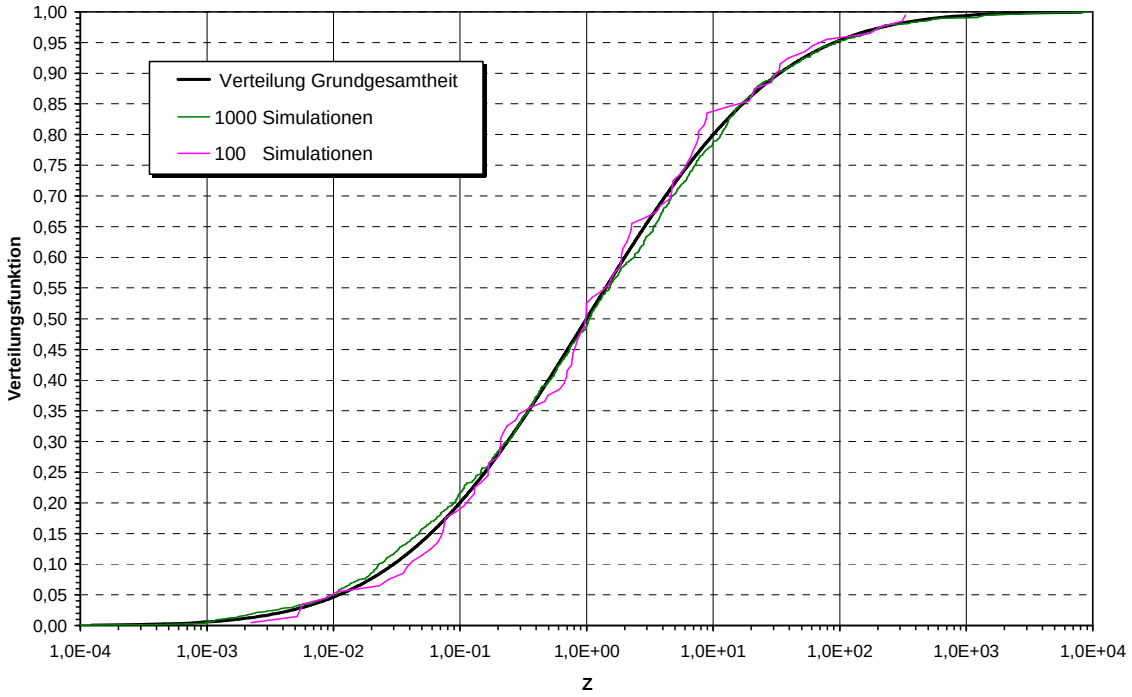


Abbildung 2-2: Vergleich der mittels Monte-Carlo-Simulation berechneten Verteilungsfunktionen mit der exakten statistischen Verteilung der Zielgröße Z; gemäß Gl. (2-7) mit den Verteilungsparametern aus Tabelle 2-1

Da Rechenzeiten mit heute verfügbarer Technik sehr klein sind, werden Monte-Carlo-Simulationen üblich mit wesentlich höherer Anzahl von Simulationsläufen durchgeführt. Genauere Festlegungen sinnvoller Simulationsumfänge erfolgen i. d. R. auf der Grundlage von Konvergenzkriterien.

Das Beispiel 2.1-2 verdeutlicht auch, dass zur Berechnung von sehr kleinen bzw. hohen Perzentilen eine relativ große Anzahl an Simulationsläufen erforderlich ist. Andererseits stellt sich natürlich die Frage, ob Extremwerte der berechneten Verteilungen (also z. B. Werte über dem 99%-Perzentil und unter dem 1%-Perzentil) noch reale Ereignisse repräsentieren oder nicht vielmehr nur eine Folge der mathematischen Modellierung statistischer Verteilungen realer Variabler durch parametrische Verteilungsfunktionen sind, die, wie z. B. die Lognormalverteilung, einen Wertebereich von Null bis Unendlich haben. Grundsätzlich besteht natürlich die Möglichkeit, mit an den Randbereichen abgeschnittenen Verteilungen zu arbeiten. Für Simulationsrechnungen würden sich daraus jedoch neue Fragen bzgl. der Festlegung und der Auswirkungen solcher Modifikationen ergeben, weshalb im vorliegenden Bericht dieser Ansatz nicht weiter verfolgt wird.

Von einigen Autoren wird zur Entschärfung dieser Problematik die direkte Nutzung der für die einzelnen Variablen verfügbaren Daten für Simulationsrechnungen vorgeschlagen. Damit würden zumindest irreal große Realisierungen der Modellvariablen infolge ihrer Approximation durch idealisierte parametrische Verteilungen ausgeschlossen. Diese Vorgehen ist zwar naheliegend, hat jedoch u. a. den Nachteil, dass anstelle von wenigen statistischen Kenngrößen, mit denen parametrische Verteilungen bestimmt sind, jeweils alle Daten kommuniziert werden müssten. Die

Verwendung von empirischen Verteilungen statt aus diesen Daten abgeleiteter parametrischer Verteilungen stellt aber rechentechnisch kein Problem dar. Bei der Monte-Carlo-Simulation werden dann für die einzelnen Modellvariablen auf zufällige Weise Werte aus dem jeweiligen Datensatz gezogen, wobei den für die jeweilige Variable verfügbaren Daten gleiche Wahrscheinlichkeiten ($1/n_X$, wenn n_X die Anzahl der Daten für die Variable X bezeichnet) beigemessen werden. Nach vielen Wiederholungen resultiert aus diesen zufälligen Realisierungen eine rein auf den empirischen Daten der Inputvariablen basierende Verteilung für die Zielgröße.

2.4.2. 2-dimensionale Monte-Carlo-Simulation

2.4.2.1. Stichprobenunsicherheiten der quantitativen Charakterisierung der Variabilität

Das folgende Beispiel verdeutlicht, dass die Charakterisierung der Variabilität der Zielgröße nicht nur von der Genauigkeit der Simulation (insbesondere für die Randbereiche, die durch das zufällige Zusammentreffen mehrerer kleiner bzw. großer Werte der Inputvariablen bestimmt werden), sondern substantiell von der Repräsentativität der Daten abhängt, mit denen die Parameter der statistischen Verteilungen der Inputvariablen geschätzt wurden.

Beispiel 2.1-3

Für das durch Gl. (2-7) definierte Modell mit den in Tabelle 2-1 für die Inputvariablen X = {A, B, C, D} spezifizierten Verteilungen $X \sim Ln(\mu_X,\sigma_X)$ wird nun nicht mehr die Kenntnis der Werte der Verteilungsparameter angenommen. Für die Zielgröße Z werden Monte-Carlo-Simulationen auf der Basis von Stichproben der Inputvariablen berechnet. Die damit verbundenen Unsicherheiten werden anhand von zwei Stichproben-Datensätzen SP1 und SP2 mit jeweils $n_X = 20$ Daten demonstriert. Die einzelnen Werte der nach dem Zufallsprinzip gewonnenen Stichproben enthält Tabelle 2-2.

In Tabelle 2-3 sind die zu den Stichproben berechneten Schätzwerte m_X und s_X der Parameter μ_X und σ_X der Lognormalverteilungen zusammengestellt (zur Berechnung dieser Schätzwerte siehe Anhang B) und den wahren Werten der Ausgangsverteilungen der jeweiligen Grundgesamtheit gegenübergestellt.

Die Abbildungen 2-3A bis 2-3D zeigen die empirischen Verteilungsfunktionen der Stichprobenwerte sowie die an die Stichproben angepassten Lognormalverteilungen im Verglich zur exakten Verteilung der Inputvariablen.

Aus den Abbildungen 2-3A bis 2-3D sowie aus Tabelle 2-3 ist klar ersichtlich, dass die Stichproben und die daran angepassten Lognormalverteilungen z. T. erheblich von der Verteilung der Grundgesamtheit der jeweiligen Inputvariablen abweichen.

Die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für die Zielgröße Z sind in Abbildung 2-4 dargestellt und mit der wahren Verteilung der Grundgesamtheit von Z verglichen. Die Simulationsrechnungen wurden mit den Stichprobendaten aus Tabelle 2-2 für die Variablen A, B, C und D durchgeführt. Zum Vergleich sind in Abbildung 2-4 für beide Stichproben-Datensätze auch jene Lognormalverteilungen gezeigt, die sich gemäß Gl. (2-8) mit den aus den Stichproben gewonnenen Schätzwerten der Verteilungsparameter μ_Z und σ_Z analytisch berechnen lassen.

Tabelle 2-2: Nach der Größe geordnete Werte der Stichproben SP1 und SP2 für X ={A, B, C, D} aus den in Tabelle 2-1 definierten Lognormalverteilungen; Stichprobenumfang $n_X = 20$

Stichprobe SP1				**Stichprobe SP2**			
A	**B**	**C**	**D**	**A**	**B**	**C**	**D**
0,0111	0,0290	0,264	0,350	0,107	0,255	0,108	0,487
0,0391	0,0957	0,415	0,401	0,170	0,378	0,217	0,502
0,0471	0,151	0,473	0,535	0,381	0,510	0,271	0,513
0,0473	0,177	0,509	0,583	0,403	0,534	0,277	0,535
0,0742	0,184	0,555	0,642	0,595	0,625	0,464	0,594
0,150	0,223	0,581	0,681	0,630	0,683	0,750	0,609
0,200	0,226	0,602	0,716	0,681	0,796	0,847	0,699
0,226	0,227	0,675	0,751	0,721	0,814	0,860	0,742
0,323	0,350	0,726	0,772	0,895	0,856	0,990	0,749
0,351	0,397	0,726	0,823	0,957	0,918	1,11	0,804
0,873	0,436	0,889	0,891	1,19	1,02	1,16	0,833
1,12	0,462	1,32	1,04	3,16	2,40	1,49	0,939
1,20	0,501	1,41	1,14	3,56	2,46	1,65	0,946
1,43	1,20	1,43	1,14	4,24	2,65	2,44	0,949
1,57	1,57	1,73	1,21	4,50	3,14	2,67	0,960
2,81	1,82	2,19	1,29	4,84	4,57	2,69	1,01
3,04	3,68	2,37	1,30	5,45	5,94	3,25	1,03
3,71	3,99	2,74	1,41	5,59	15,0	4,68	1,25
14,9	6,52	3,42	1,64	16,5	17,9	6,64	1,33
46,6	10,96	4,25	2,71	16,9	24,1	8,53	1,47

Tabelle 2-3: Kennwerte der Lognormalverteilungen $X \sim Ln(\mu_X,\sigma_X)$, X = {A, B, C, D, Z} und aus den Stichproben SP1 und SP2 (siehe Tabelle 2-2) berechnete Schätzwerte m_X und s_X

	Grundgesamtheit		**Stichprobe SP1**		**Stichprobe SP2**	
X:	μ_X	σ_X	m_X	s_X	m_X	s_X
A	0	2,0	-0,6330	2,1204	0,4223	1,4247
B	0	1,5	-0,5877	1,5288	0,5413	1,3260
C	0	1,0	0,0217	0,7757	0,1520	1,1710
D	0	0,5	-0,1145	0,4910	-0,2173	0,3305
Z[1)]	0	2,7386	-1,3135	2,7706	0,8984	2,2953
Z[2)]			-1,3135	2,5774	0,8984	2,2442

[1)] Berechnung nach Gl.(2-8); [2)] Schätzung aus Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulation mit empirischen Inputdaten

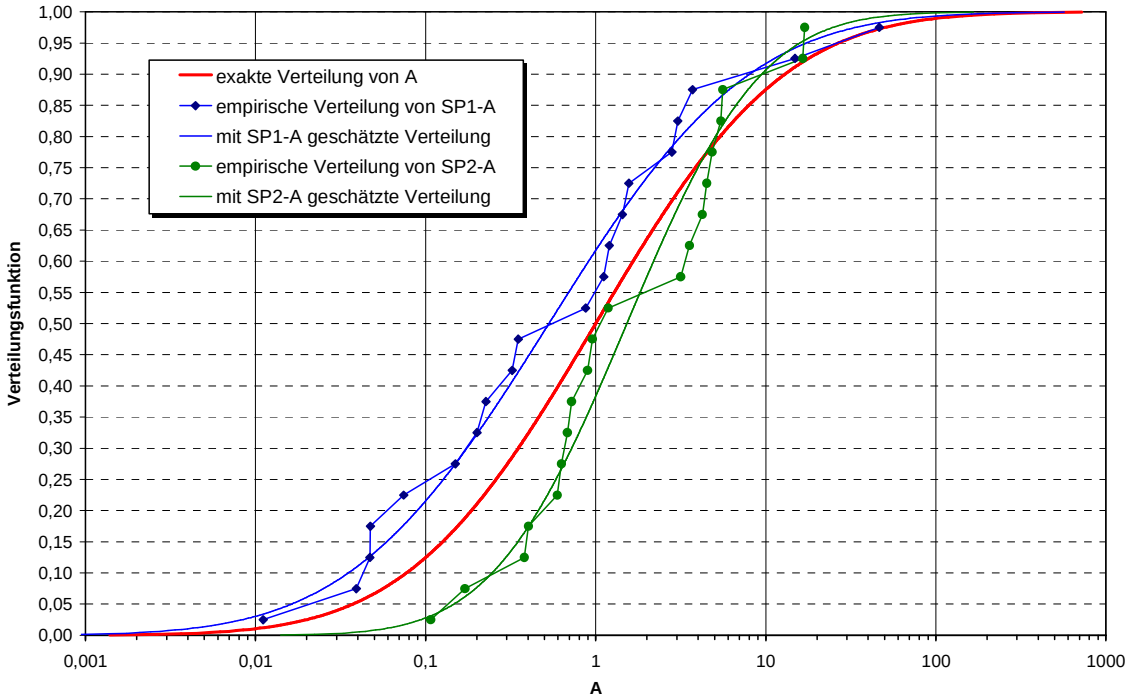


Abbildung 2-3A: Empirische Verteilungen für zwei Stichproben (SP1-A und SP2-A) der Variablen A und mit den Stichproben geschätzte parametrische Verteilungen im Vergleich zur exakten Verteilung (gemäß Tabelle 2-1) der Variablen A

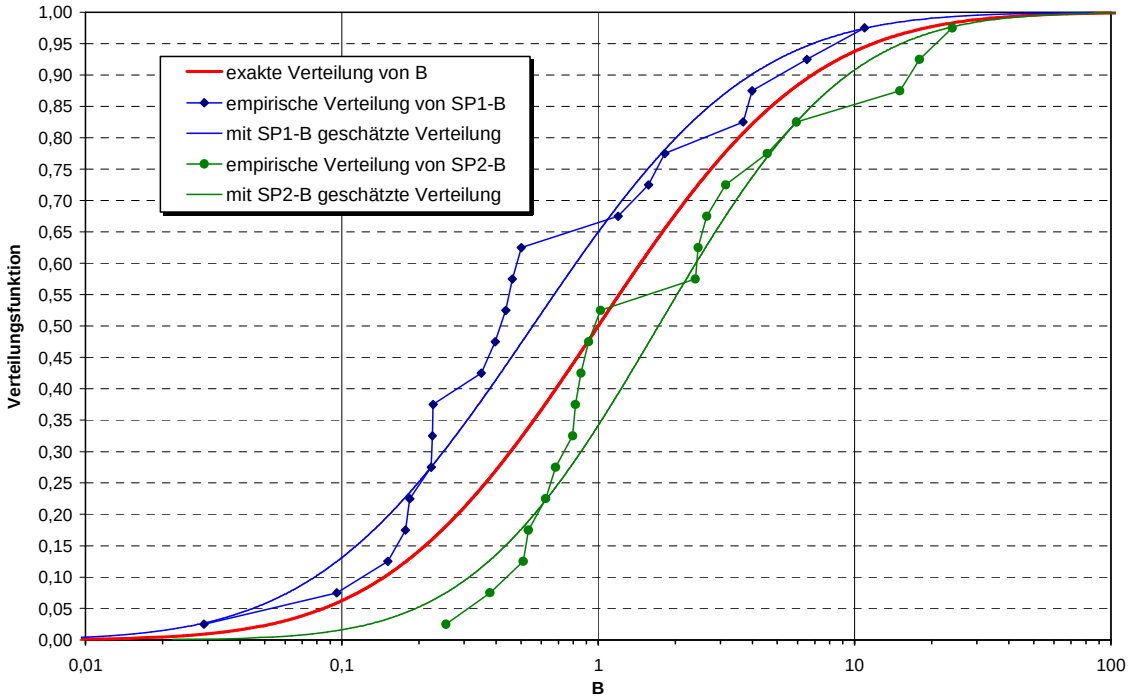


Abbildung 2-3B: Empirische Verteilungen für zwei Stichproben (SP1-B und SP2-B) der Variablen B und mit den Stichproben geschätzte parametrische Verteilungen im Vergleich zur exakten Verteilung (gemäß Tabelle 2-1) der Variablen B

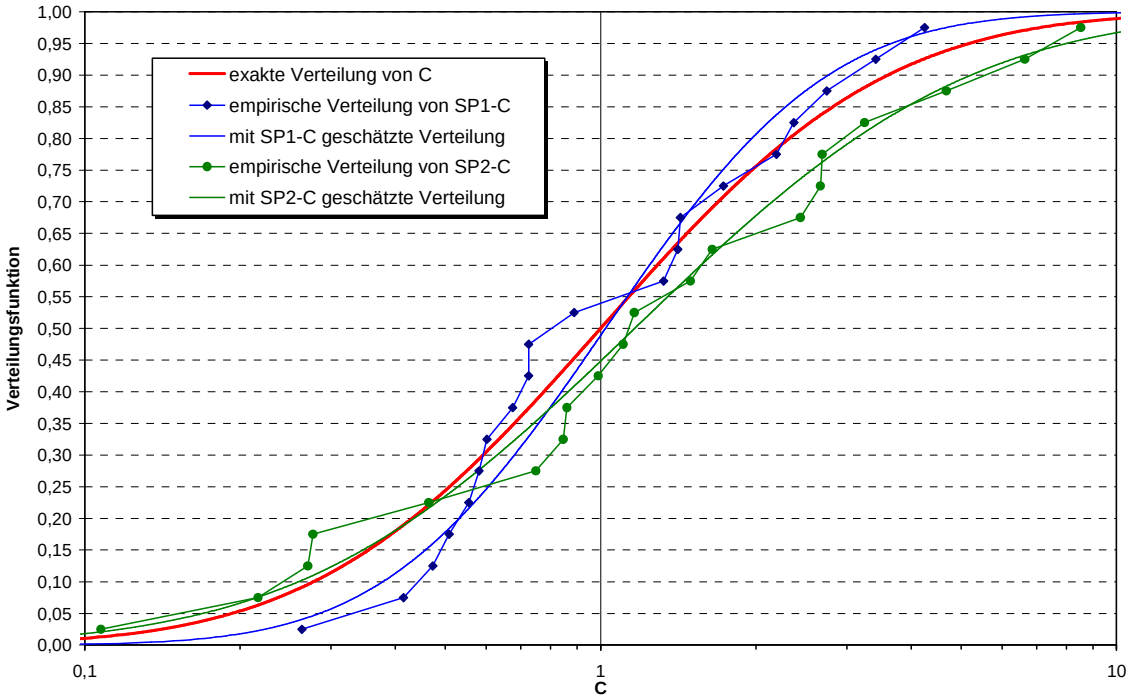


Abbildung 2-3C: Empirische Verteilungen für zwei Stichproben (SP1-C und SP2-C) der Variablen C und mit den Stichproben geschätzte parametrische Verteilungen im Vergleich zur exakten Verteilung (gemäß Tabelle 2-1) der Variablen C

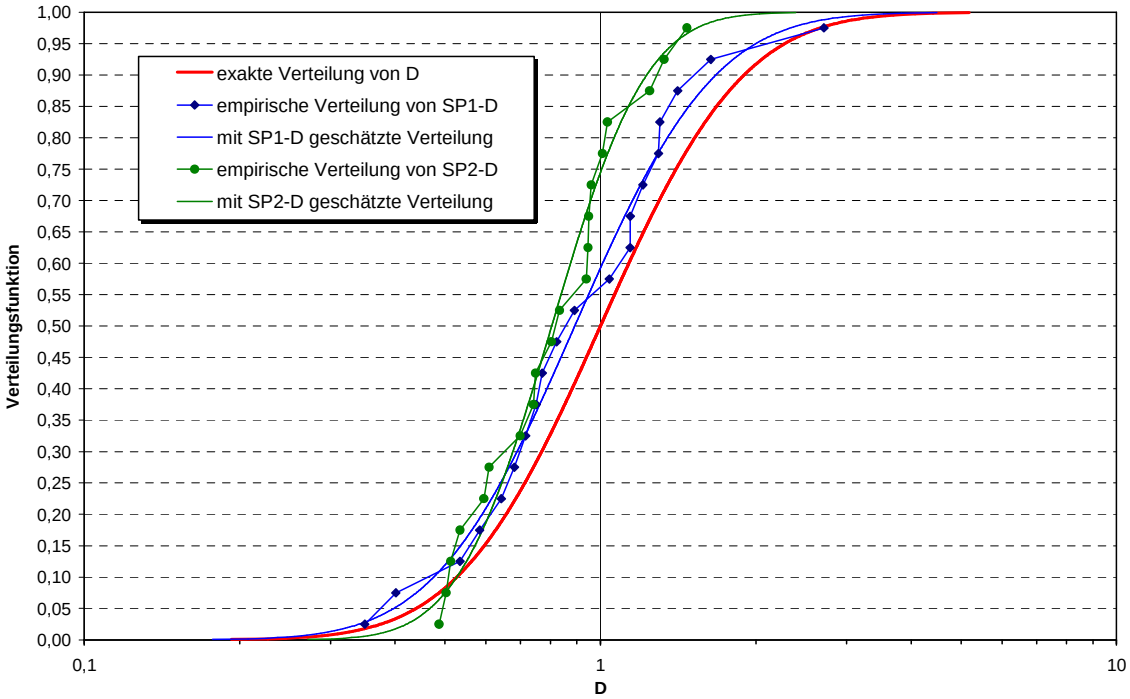


Abbildung 2-3D: Empirische Verteilungen für zwei Stichproben (SP1-D und SP2-D) der Variablen D und mit den Stichproben geschätzte parametrische Verteilungen im Vergleich zur exakten Verteilung (gemäß Tabelle 2-1) der Variablen D

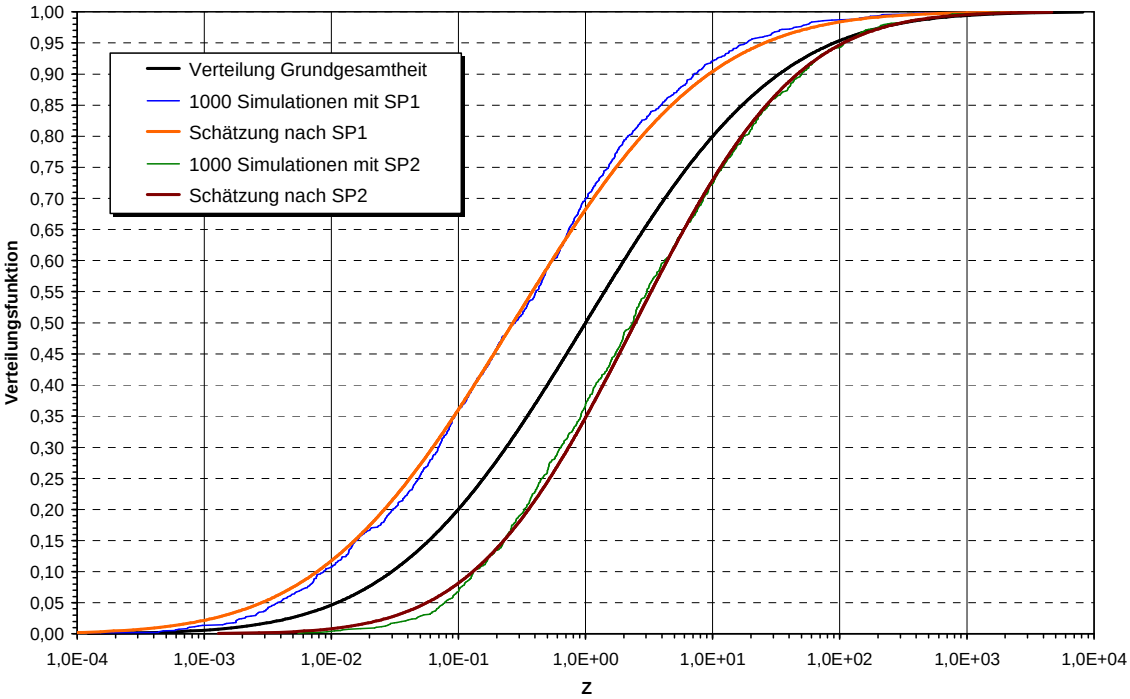


Abbildung 2-4: Vergleich der anhand der Stichproben SP1 und SP2 (siehe dbzgl. Angaben in den Tabellen 2-2 und 2-3) berechneten Verteilungen der Zielgröße Z des in Gl. (2-7) definierten Modells mit seiner wahren Verteilung

Mit den nach dem Zufallsprinzip gewonnen Stichproben ergeben sich in diesem Beispiel für die Zielgröße Z signifikante Abweichungen von ihrer wahren statistischen Verteilung. Die Stichprobe SP1 ergibt eine generelle Unterschätzung um den Faktor $\exp(m_Z) = \exp(-1{,}3135) \cong 0{,}27$, wogegen die durch s_Z charakterisierte Variabilität der aus den Stichproben berechneten Zielgröße relativ gut mit der wahren Variabilität von Z übereinstimmt (vgl. Angaben zu den statistischen Kenngrößen für Z in Tabelle 2-3). Aus der Stichprobe SP2 resultiert dagegen tendenziell eine Überschätzung der Zielgröße Z um den Faktor $\exp(m_Z) = \exp(0{,}8984) \cong 2{,}5$. Da mit SP2 jedoch gleichzeitig die wahre Variabilität von Z unterschätzt wird, resultiert für die hohen Perzentile eine relativ gute Übereinstimmung mit der wahren Verteilung von Z, wogegen sich im Bereich der kleinen Perzentile die Überschätzung verstärkt.

Im Vergleich zu den durch die Stichprobennahme bedingten Unsicherheiten erscheinen die methodisch bedingten Abweichungen zwischen den Ergebnissen einer Monte-Carlo-Simulation mit den empirischen Verteilungen der Inputvariablen bzw. an die Stichprobendaten angepassten parametrischen Verteilungen relativ gering (vgl. Abbildung 2-4). Es ist jedoch festzuhalten, dass Monte-Carlo-Simulationen mit den für die einzelnen Inputvariablen angepassten parametrischen Verteilungsfunktionen bzw. mit empirischen Verteilungen nicht zu identischen Ergebnissen führen.

Das Beispiel 2.1-3 verdeutlicht, dass einfache Monte-Carlo-Simulationen von Expositionsmodellen zwar informativere Ergebnisse liefern als Berechnungen mit Punktschätzern, dass sie aber keine Aussagen zu Auswirkungen epistemischer Unsicherheiten gestatten, die bei relativ kleinen Stichprobenumfängen der Inputparameter aus der begrenzten Repräsentativität der Daten resultieren.

Die Unsicherheit bzgl. der mit Hilfe von Stichproben gewonnenen Schätzwerte für die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ der parametrischen Verteilung eines Modellparameters X (der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ bzw. der kumulativen Verteilungsfunktion $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$; siehe Abschnitt B.1 in Anhang B) können mit Hilfe von Vertrauensintervallen quantifiziert werden. Aus den Stichprobenwerten $\{x\}_n$ werden dazu für die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ Vertrauensintervalle $[\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\alpha/2};\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1-\alpha/2}]$ berechnet, welche die "wahren" Werte $\boldsymbol{\theta}$ mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit von $P = (1-\alpha)$ überdecken.[19].

Nach der klassischen (frequentistischen) Wahrscheinlichkeitstheorie sind Vertrauensintervalle, die auch Konfidenz- oder Mutungsintervalle genannt werden, nicht als Aussage zu einer Verteilung der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ zu verstehen, die als feste (jedoch unbekannte) Größen angesehen werden. Sie sagen lediglich aus, dass die Anwendung einer Prozedur zur Berechnung von Vertrauensintervallen aus Stichproben in $P \cdot 100\%$ der Fälle dazu führt, dass die "wahren" Werte der Verteilungsparameter innerhalb der Vertrauensintervalle liegen. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zur BAYES'schen Wahrscheinlichkeitstheorie, nach deren Konzept Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ bestimmt werden (vgl. Abschnitt 2.7). Weitgehend ähnlich dazu kann man auch durch Variation von P mit Hilfe der Vertrauensintervalle Verteilungen für $\boldsymbol{\theta}$ berechnen, die dann als "subjektive" Wahrscheinlichkeitsverteilungen zur Berücksichtigung der Stichprobenunsicherheit interpretiert werden (siehe z. B. [FREY 96]).

2.4.2.2. Weitere Ursachen von Unsicherheiten der Quantifizierung der Variabilität

Neben den im vorigen Abschnitt diskutierten Stichprobenunsicherheiten, die durch den begrenzten Umfang von Stichproben bedingt sind und mit Hilfe von Vertrauensintervallen quantifiziert werden können, gibt es weitere Ursachen, die zu Unsicherheiten der Charakterisierung der Variabilität von Modellparametern beitragen. Dies sind insbesondere Messunsicherheiten sowie Unsicherheiten, die aus zeitlichen bzw. räumlichen Mittelungen der Bestimmung der Stichprobenwerte resultieren.

Messunsicherheiten können zufällig sein und von der Messzeit abhängen, wie z. B. bei zählenden Kernstrahlungsmessungen [MICH 99]; sie können jedoch auch systematische Ursachen haben, wie bei der Bestimmung von Ingestionsraten für Bodenmaterial oder Staub, wo mit unterschiedlichen Tracern gewonnene Messergebnisse erhebliche Abweichungen voneinander aufweisen können (siehe z. B. [THO 91], [STAN 00]). Während die rein statistisch bedingten Messunsicherheiten mit Hilfe statistischer Verteilungen dargestellt werden können, sind bei systematischen Ursachen der Unsicherheiten oft nur Expertenschätzungen zur Quantifizierung der Messunsicherheiten möglich.

Für die Ermittlung der Variabilität von Expositionsfaktoren in einer Population können spezielle Anforderungen an die zeitliche Mittelung von Messungen bestehen. Während für Expositionsabschätzungen zu chronischen Belastungen (z. B. kanzerogener Stoffe) Raten der Schadstoffaufnahme im Sinne individueller Jahresmittelwerte genutzt werden, ist zur Bewertung akuter Gefährdungen die interindividuelle Variabilität der über kürzere Zeitintervalle gemittelten Expositionsfaktoren wichtig. Empirische Studien zu Expositionsfaktoren basieren häufig auf kurzzeitigen Messungen. Deshalb kann eine direkte Nutzung dieser Daten bzw. daraus abgeleiteter Verteilungen erhebliche Überschätzungen der Variabilität im Sinne langzeitiger interindividueller Unterschiede bewirken [HAT 94B], [STAN 96], [BUCK 97], [TRAN 04].

---

[19] Der Parameter α wird "Irrtumswahrscheinlichkeit" genannt.

Unter bestimmten Voraussetzungen können zwar statistische Methoden genutzt werden, um aus relativ wenigen Wiederholungen von Kurzzeitmessungen für die Mitglieder einer Personengruppe auf die langzeitige interindividuelle Variabilität von Expositionsfaktoren in der Gruppe zu schließen (vgl. [SLOB 93], [SLOB 96] sowie [WAL 94], [WAL 05]), die damit verbundenen Unsicherheiten lassen sich jedoch kaum ausreichend sicher quantifizieren.[20]

Ebenso muss die räumliche Mittelung bei Entnahme von Stichproben bzw. In-Situ-Messungen von Modellparametern der jeweiligen Zielstellung der Untersuchung entsprechen. Die Herstellung von Mischproben aus einer bestimmten Anzahl von Einzelproben bewirkt z. B. eine Reduzierung der Heterogenität und damit eine geringere Variabilität, als man sie bei der Analyse aller Einzelproben festgestellt hätte. Dies kann für bestimmte Zwecke sinnvoll sein, muss aber bei anderweitiger Nutzung der Daten beachtet werden.[21]

Zu diversen Parametern von Expositionsmodellen werden für konkrete Anwendungen keine neuen, standortspezifischen Daten erhoben, sondern es werden statistische Verteilungen übernommen, die aus den Ergebnissen anderer Untersuchungen abgeleitet wurden. Mitunter stehen hierfür mehrere voneinander abweichende statistische Verteilungen zur Auswahl. Auch wenn die Art der Verteilung übereinstimmt (z. B. Anpassung der Daten an Lognormalverteilungen), können die Werte der Verteilungsparameter, mit denen die Variabilität des Modellparameters bestimmt wird, voneinander abweichen. Es liegt dann oft in der Verantwortung von Experten, für den untersuchten Einzelfall plausible Ansätze für die Verteilungsparameter zu begründen und die Unsicherheit der getroffenen Wahl mit subjektiven (Wahrscheinlichkeits-)Verteilungen zu charakterisieren.

2.4.2.3. Methode der 2-dimensionalen Monte-Carlo-Simulation

Die für kleine Stichprobenumfänge erheblichen statistischen Unsicherheiten der Charakterisierung der Variabilität von Modellparametern und die Unsicherheiten der Übertragung generischer Ansätze für statistische Verteilungen von Expositionsfaktoren auf spezielle Anwendungen waren wichtige Gründe für die Entwicklung einer 2-dimensionalen Monte-Carlo-Simulation. Diese Methode zielt auf eine Darstellung und separate Analyse der Auswirkungen von "Variabilität" und "Unsicherheit". Sie wurde in verschiedenen Veröffentlichungen, die konzeptionell weitgehend übereinstimmen, ausführlich beschrieben und mit methodischen bzw. realen Beispielen veranschaulicht (siehe z. B. [FREY 92], [HOFF 94], [BRAT 96], [BUR 96], [COH 96], [FREY 96], [EPA 01B]) und inzwischen auch durch die WHO empfohlen [WHO 08]. In den nachfolgenden Erläuterungen werden hierzu die aus unserer Sicht wesentlichen Aspekte zusammengefasst. Hierzu gehen wir von einer allgemeinen Form des Expositionsmodells in der Darstellung von Gl. (2-9) aus.

In Abschnitt 2.4.1 wurde angenommen, dass die Inputparameter X_1 bis X_n Zufallsgrößen sind, deren Variabilität durch bekannte statistische Verteilungen (Häufigkeitsverteilungen) charakterisiert werden kann. Für diese Annahme sind 1-dimensionale Monte-Carlo-Simulationen adäquat.

Ein weiterer Fall, der mit 1-dimensionalen Simulationsrechnungen behandelt werden kann, wurde in [HOFF 94] angesprochen. Wenn die Zielgröße Z ein fester, jedoch unbekannter Wert ist, wie z. B. die jährliche Exposition einer speziellen Person durch eine definierte Quelle an einem bestimmten

---

[20] Eine alternative Vorgehensweise ist die detaillierte Modellierung zeitlicher Variationen von Expositionen [PRI 96B].

[21] Die Variabilität eines räumlich gemittelten Modellparameters ist im Bezog auf den Mittelungsraum eine objektive Eigenschaft; subjektive Faktoren der Probengewinnung und Datenanalyse können aber Unsicherheiten bewirken.

Standort (oder auch die mittlere bzw. maximale Exposition an diesem Standort lebender Personen), so sind in den Expositionsabschätzungen ausschließlich epistemische Unsicherheiten zu beachten (Unsicherheiten der Bestimmung der Quellstärke, der Ausbreitungsparameter und der personenbezogenen Expositionsfaktoren). Werden alle Unsicherheiten durch subjektive Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben, so können ihre Auswirkungen mit Hilfe 1-dimensionaler Monte-Carlo-Simulationen abgeschätzt werden. Für die Zielgröße lassen sich aus der daraus resultierenden Verteilung auch Vertrauensintervalle berechnen.

Besteht das Ziel der Modellierung in der Ermittlung von Verteilungen der Expositionen für eine Personengruppe/Population, so sind i. A. drei verschiedene Arten von Inputgrößen der Gl. (2-9) zu berücksichtigen:

Typ **(a)**: Parameter mit rein aleatorischer Unsicherheit (z. B. bei sehr genauer Bestimmung der statistischen Verteilung des Körpergewichts in einer Personengruppe oder von Schadstoffkonzentrationen an relevanten Expositionsorten durch umfangreiche Messungen)[22].

Typ **(e)**: Parameter mit ausschließlich epistemischer Unsicherheit (z. B. Stärke einer definierten Schadstoffquelle oder Ergiebigkeit eines durch die Schadstoffausbreitung kontaminierten Grundwasserleiters);

Typ **(ae)**: Parameter mit aleatorischer Unsicherheit, deren Variabilität jedoch epistemisch unsicher ist (z. B. unsichere Verteilungen zu Expositionszeiten, Atemraten, Verzehrsmengen etc. für eine Personengruppe/Population; variable Emissionen, deren statistische Verteilung nur unsicher quantifizierbar ist, da sie von zukünftigen Gegebenheiten abhängt);

Die mathematische Beschreibung dieser drei Parametertypen kann mit Wahrscheinlichkeitsdichten vorgenommen werden:

$$X_i \sim f_i(x_i \mid \boldsymbol{\theta}_i), \tag{2-10}$$

$$\boldsymbol{\theta}_i \sim g_i(\boldsymbol{\theta}_i \mid \zeta_i). \tag{2-11}$$

Wenn die Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}_i$ in Gl. (2-10) bekannte, fixierte Werte sind (die in Gl. (2-11) angegebene Verteilung von $\boldsymbol{\theta}_i$ ist dann auf Punktewerten $\boldsymbol{\theta}_i^f$ konzentriert), so liegt der oben unter **(a)** beschriebene Typ eines Modellparameters mit rein aleatorischer Unsicherheit vor.

Bezeichnet f_i eine (unbekannte) Konstante, deren Wert durch den Parameter $\boldsymbol{\theta}_i$ bestimmt ist, für den jedoch mit Gl. (2-11) nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage getroffen werden kann, so liegt der oben unter **(e)** beschriebene Typ eines Modellparameters mit rein epistemischer Unsicherheit vor. In der Gl. (2-11) bezeichnet $\boldsymbol{\zeta_i}$ die Parameter von g_i zur Beschreibung der Unsicherheit von $\boldsymbol{\theta_i}$. Ist gi eine BAYES'sche Posteriordichte (vgl. Abschnitte 2.7 und 4.2.2), so erfasst $\boldsymbol{\zeta_i}$ die Stichprobenstatistiken.

---

[22] Theoretisch könnte dieser Fall ausgeschlossen werden, weil die Quantifizierung von heterogenen, zeitlich variablen oder stochastischen Parametern mit Hilfe von statistischen Verteilungen kaum mit absoluter Sicherheit realisiert werden kann. Deshalb wird dieser Parametertyp in vielen Darstellungen zur 2D-Monte-Carlo-Simulation auch nicht speziell genannt. Im Ergebnis von Sensitivitätsanalysen zu Auswirkungen der Variabilität und von Unsicherheiten der Quantifizierung von Inputvariablen bzw. von Verteilungsparametern auf die Zielgröße ist es sinnvoll, praktisch irrelevante Unsicherheiten zu vernachlässigen, um den Aufwand für die Berechnungen zu reduzieren. Grundsätzlich kann jedoch der Parametertyp (a) auch dem Parametertyp (ae) zugeordnet werden.

Allgemein beschreibt die Gl. (2-10) mit Gl. (2-11) den oben unter **(ae)** beschriebenen Typ eines variablen Modellparameters, dessen Variabilität jedoch nur unsicher quantifiziert werden kann. Für Parameter dieses Typs sind sowohl aleatorische als auch epistemische Unsicherheiten relevant.

Mit einer 2-dimensionalen Monte-Carlo-Simulation (2D-MC) werden die unterschiedlichen Typen von Inputparameter in einem Rechenprogramm auf verschiedene Weise so verarbeitet, dass für die Verteilung der Zielgröße eine Separation von Unsicherheit und Variabilität erfolgen kann. Die dazu übliche Vorgehensweise ist in Abbildung (2-5) skizziert.

Zunächst werden die n Inputgrößen der Gl. (2-9) den drei o. g. Parametertypen (a), (e) und (ae) zugeordnet. Enthält das Expositionsmodell n_a Variable vom Typ (a), n_e Variable vom Typ (e) und n_{ae} Variable vom Typ (ae), $n = n_a + n_e + n_{ae}$, so ergibt sich für die Zielgröße Z die Funktion:

$$Z = T(X_1^{(a)},...,X_{n_a}^{(a)},X_1^{(e)},...,X_{n_e}^{(e)},X_1^{(ae)},...,X_{n_{ae}}^{(ae)}) . \qquad (2\text{-}12)$$

Für die einzelnen Variablen sind dann entsprechend ihrem Typ die Verteilungen $f_i(x_i|\boldsymbol{\theta}_i)$ und/oder $g_i(\boldsymbol{\theta}_i,\boldsymbol{\zeta}_i)$ gemäß Gl. (2-10) und Gl. (2-11) zu spezifizieren. Für die 2D-MC-Simulation sind die Anzahl der Simulationsläufe K_a für aleatorische Verteilungen und K_e für epistemische Verteilungen zu definieren. Für Variable vom Typ (e) und Typ (ae) sind zwei Berechnungsschleifen erforderlich. Für rein aleatorische Variable könnten ggf. mit der üblichen 1D-MC-Simulation für die jeweilige Verteilungsfunktion vorab Wertemengen/Verteilungen $\{x_{i_a}^{(a)}\}_{K_a}$ berechnet und gespeichert werden, die dann für die weiteren Berechnungen genutzt werden. Um jedoch mögliche Abhängigkeiten zwischen diesen und den anderen Modellvariablen berücksichtigen zu können, wird auf diese (bei Unabhängigkeit der Variablen zulässige) numerische Vereinfachung verzichtet.

In einer äußeren Schleife der 2D-MC-Simulation (für $k_e = 1$ bis K_e) werden für die epistemisch unsicheren Parameter $\boldsymbol{\theta}_i$ entsprechend der jeweiligen Verteilungsfunktion $g_i(\boldsymbol{\theta}_i,\boldsymbol{\zeta}_i)$ auf zufällige Weise Werte $\boldsymbol{\theta}_{i;ke}$ simuliert. Für rein epistemische Variable werden die Werte $x_{i_e;k_e}^{(e)}$ berechnet (für $i_e = 1$ bis n_e).

In einer inneren Schleife werden für Variable vom Typ (ae) Wertemengen/Verteilungen $\{x_{i_{ae};k_e}^{(ae)}\}_{K_a}$ ($i_{ea} = 1$ bis n_{ea}) und für rein aleatorische Variable vom Typ (a) Wertemengen/Verteilungen $\{x_{i_a}^{(a)}\}_{K_a}$ ($i_a = 1$ bis n_a) berechnet, wobei definierte Abhängigkeiten/Korrelationen zwischen Inputvariablen berücksichtigt werden. Gemäß Gl. (2-12) lässt sich dann eine Verteilung $\{z_{k_e}\}_{K_a}$ der Zielgröße berechnen, die gespeichert wird. Sie ist i. W. das Ergebnis einer 1D-MC-Simulation, in der aber für epistemische Variable und Verteilungsparameter jeweils ein zufällig gewählter Wert verwendet wurde. Durch weitere Iterationen in der äußeren Schleife der 2D-MC-Simulation erhält man schließlich K_e Verteilungen $\{z_{k_e}\}_{K_a}$ ($k_e =$ bis K_e) für die Zielgröße Z.

Aus diesen K_e Verteilungen können Konfidenzverteilungen für Z berechnet werden, die für ein vorgegebenes Vertrauensniveau als untere bzw. obere Schranke der wahren (jedoch unbekannten) Verteilungsfunktion von Z interpretiert werden. Analog zu den zweiseitigen Vertrauensbereichen der Schätzung von Verteilungsparametern aus einer Stichprobe werden daraus Konfidenzbereiche abgeleitet, welche die (wahre) Verteilungsfunktion von Z mit bestimmter Sicherheit einschließen.

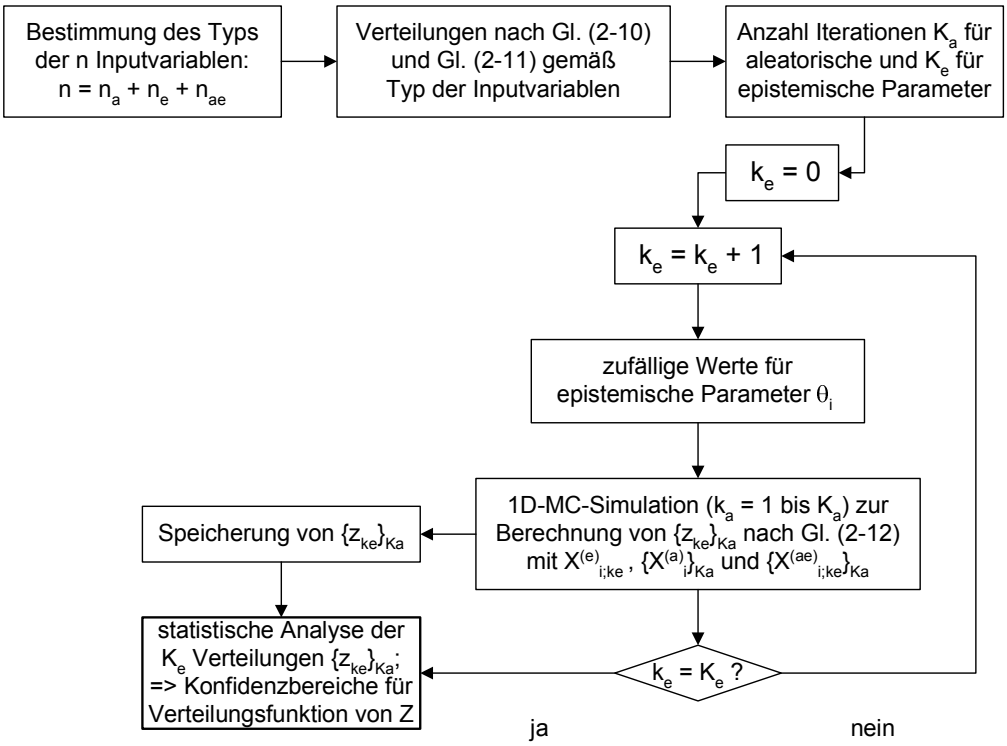


Abbildung 2-5: Schema einer 2-dimensionalen Monte-Carlo-Simulation

Beispiel 2.1-4

Für die beiden in Abbildung 2-4 auf Basis der Stichproben SP1 und SP2 geschätzten Verteilungen der Zielgröße Z des nach Gl. (2-7) definierten Modells (vgl. Beispiel 2.1-3) wurden durch 2D-Monte-Carlo-Simulation Perzentil-Konfidenz-Verteilungen (PKV) berechnet, die in Abbildung 2-6.1 (für SP1) und Abbildung 2-6.2 (für SP2) dargestellt sind. Hierzu wurden die statistischen Unsicherheiten der Schätzung der Verteilungsparameter μ und σ von normal (bzw. lognormal) verteilten Zufallsvariablen zugrunde gelegt, die aus der klassischen bzw. BAYES'schen Statistik resultieren (siehe Abschnitt 2.7).

Die Abbildungen 2-6.1 und 2.6-2 zeigen neben der wahren Verteilungsfunktion der Grundgesamtheit von Z und den für die Stichproben SP1 bzw. SP2 mit 1D-MC-Simulation geschätzten Verteilungsfunktionen sechs zugehörige PKV zu den Vertrauensniveaus von 1%, 5%, 25%, 75%, 95% und 99%. Die PKV sind Verteilungen der einseitigen Vertrauensgrenzen für Perzentile der Population. Die beiden äußeren PKV (1%-PKV und 99%-PKV) bestimmen dann z. B. einen 98%-Konfidenzbereich, für den auf Basis der jeweiligen Stichprobe anzunehmen ist, dass er mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 2% die wahre (i. A. jedoch unbekannte) Verteilungsfunktion der Zielgröße Z einschließt. Für die Stichproben SP1 und SP2 liegt die wahre Verteilungsfunktion von Z vollständig im jeweiligen 98%-Konfidenzbereich. Dies gilt in den betrachteten Beispielen aber schon nicht mehr vollständig für die 90%-Konfidenzbereiche, die durch die 5%- und die 95%-PKV eingeschlossen werden.

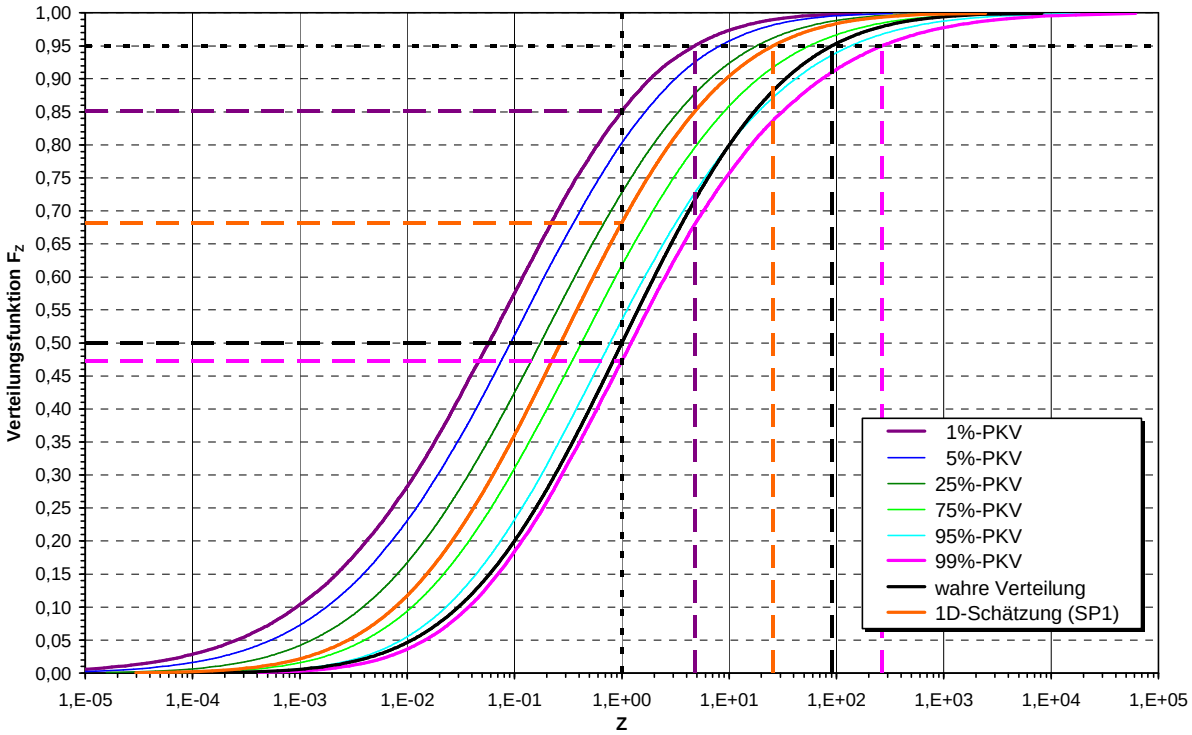


Abbildung 2-6.1: Perzentil-Konfidenz-Verteilungen für die Stichprobe SP1 im Vergleich zur wahren Verteilung von Z und der mittels 1D-MC-Simulation geschätzten Verteilung

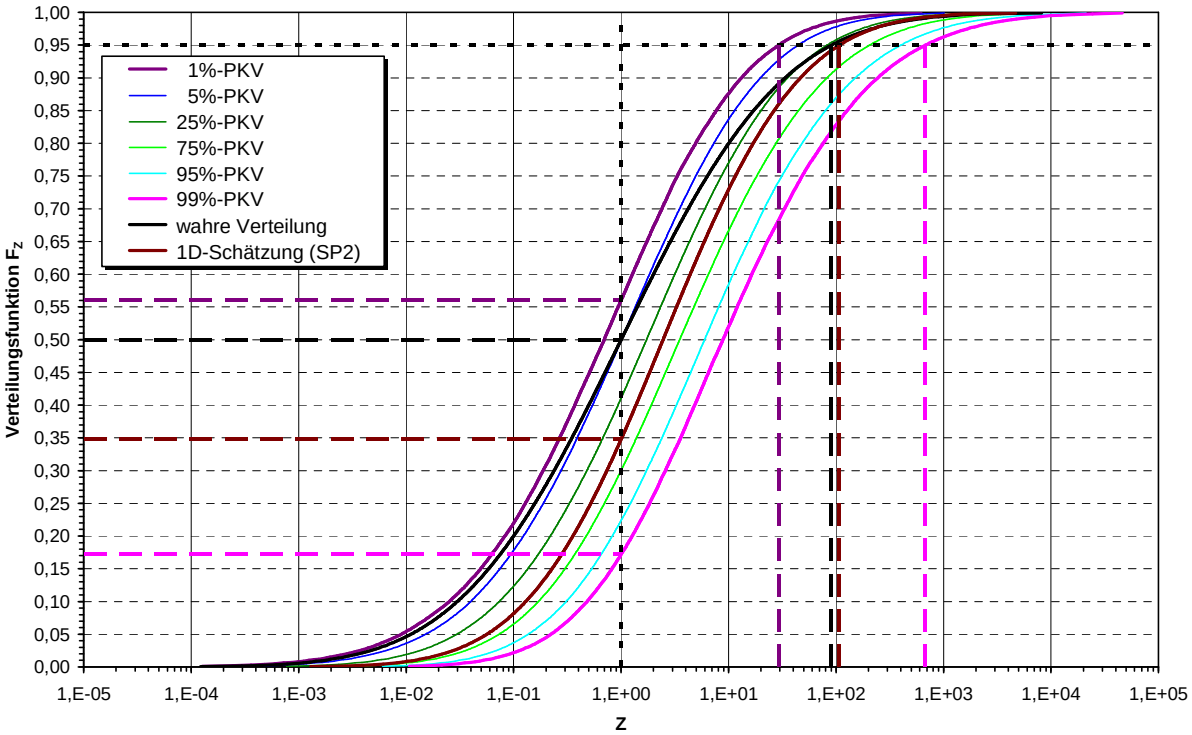


Abbildung 2-6.2: Perzentil-Konfidenz-Verteilungen für die Stichprobe SP2 im Vergleich zur wahren Verteilung von Z und der mittels 1D-MC-Simulation geschätzten Verteilung

Aus den Schnittpunkten der Verteilungen mit einer horizontalen Linie, die einen Anteil der untersuchten Grundgesamtheit von Z festlegt (im Beispiel wurde der Anteil $F_Z = 0{,}95$ gewählt), sind durch Projektion auf die Z-Achse die 95%-Perzentile der jeweiligen Verteilung ablesbar. Das 95%-Perzentil der wahren Verteilung ist $z_{0,95} = 90{,}4$. Ohne Beachtung der Stichprobenunsicherheiten ergeben die mittels 1D-MC-Simulation (bzw. analytisch) berechneten Verteilungsfunktionen für das 95%-Perzentil Schätzwerte von 25,6 (SP1) bzw. 107 (SP2). Aus den PKV lassen sich hierzu durch Berücksichtigung der Stichprobenunsicherheit Konfidenzbereiche abschätzen. Für das hier betrachtete Vertrauensniveau von 98%, das durch die Schnittpunkte von $F_Z = 0{,}95$ mit der 1%-PKV und der 99%-PKV gegeben ist, resultieren für das 95%-Perzentil von Z die Konfidenzbereiche (4,76; 265) nach SP1 bzw. (29,2; 676) nach SP2.

Besonders aufschlussreich sind die Ergebnisse der 2D-MC-Simulation für die folgende Fragestellung: "Für welchen Anteil der untersuchten Population (oder: Mit welcher Wahrscheinlichkeit für ein aus dieser Population zufällig gewähltes Individuum) wird ein bestimmter (Grenz-)Wert eingehalten bzw. überschritten?". In den Abbildung 2-6.1 und 2-6.2 wurde hierzu der Wert $Z_G = 1$ betrachtet.

Es sei H die Hypothese H = "$Z \leq Z_G$". Deren Negation ist die komplementäre Hypothese H^c = "$Z > Z_G$". In der üblichen (1D-)Wahrscheinlichkeitstheorie gilt immer die Beziehung

$$Pr(H) + Pr(H^c) = 1, \qquad (2\text{-}13)$$

d. h., die Wahrscheinlichkeit dafür, dass eine Hypothese H <u>oder</u> ihre Negation H^c zutrifft, ist gleich 1 (absolut sicher). Mit der in den Abbildungen 2-6.1 und 2-6.2 dargestellten wahren Verteilungsfunktion für Z und den beiden anhand der Stichproben SP1 und SP2 geschätzten (1D-)Verteilungen ergeben sich die in Tabelle 2-4 zusammengefassten Werte.

<u>Tabelle 2-4:</u> Wahrscheinlichkeiten Pr(H) und $Pr(H^c)$ für H = "$Z \leq Z_G$" (H^c = "$Z > Z_G$"); $Z_G = 1$

Wahrscheinlichkeit	**Grundgesamtheit**	**Stichprobe SP1 (1D)**	**Stichprobe SP2 (1D)**
$Pr(H) = F_Z(Z_G)$	0,50	0,68	0,35
$Pr(H^c) = 1 - F_Z(Z_G)$	0,50	0,32	0,65

Unter Berücksichtigung epistemischer Unsicherheiten (im aktuellen Beispiel Stichprobenunsicherheit der Schätzung von Verteilungsparametern) lässt sich die obige Fragestellung nicht mehr direkt beantworten. Man kann (bei einer akzeptierten Irrtumswahrscheinlichkeit; hier: 1% für einseitige Fragen) nur noch eine Aussage dazu treffen, mit welcher Glaubwürdigkeit ("Wahrscheinlichkeit") der Grenzwert Z_G mindestens bzw. höchstens eingehalten wird oder mindestens bzw. höchstens überschritten wird. Wir bezeichnen einstweilen diese Glaubwürdigkeiten mit minPr und maxPr. Damit resultieren aus den in Abbildung 2-6.1 und Abbildung 2-6.2 für Z = 1 eingetragenen Schnitten die in Tabelle 2-5 zusammengefassten Aussagen.

<u>Tabelle 2-5:</u> Untere und obere "Glaubwürdigkeiten" minPr(H) und maxPr(H) bzw. $minPr(H^c)$ und $maxPr(H^c)$ für H = "$Z \leq Z_G$" (H^c = "$Z > Z_G$"); $Z_G = 1$

Glaubwürdigkeit	**Stichprobe SP1 (2D)**	**Stichprobe SP2 (2D)**
$minPr(H) = 99\%\text{-}PKV(Z_G)$	0,473	0,172
$maxPr(H) = 1\%\text{-}PKV(Z_G)$	0,851	0,561
$minPr(H^c) = 1 - 1\%\text{-}PKV(Z_G)$	0,149	0,439
$maxPr(H^c) = 1 - 99\%\text{-}PKV(Z_G)$	0,527	0,828

Zu den Angaben in Tabelle 2-5 sei angemerkt, dass die Funktionen minPr(H) und maxPr(H) nicht dem für Wahrscheinlichkeiten Pr(H) geltenden Axiom Gl. (2-13) genügen müssen, wonach die Summe der Wahrscheinlichkeiten komplementärer Ereignisse 1 ergibt. Für die zur Quantifizierung epistemischer Unsicherheiten verwendeten zwei Maße minPr(H) und maxPr(H) gelten jedoch die folgenden Beziehungen:

$$\mathrm{minPr}(H) + \mathrm{maxPr}(H^c) = 1 \quad \text{bzw.} \tag{2-14a}$$

$$\mathrm{minPr}(H^c) + \mathrm{maxPr}(H) = 1 \quad \text{sowie} \tag{2-14b}$$

$$\mathrm{minPr}(H) + \mathrm{minPr}(H^c) \leq 1 \quad \text{sowie} \tag{2-15a}$$

$$\mathrm{maxPr}(H) + \mathrm{maxPr}(H^c) \geq 1, \tag{2-15b}$$

wobei die Gleichheitszeichen in Gl. (2-15a) und Gl (2-15b) nur für den Grenzfall vernachlässigbar kleiner epistemischer Unsicherheiten gelten, in dem die Funktionen minPr(H) und maxPr(H) zu der durch aleatorische Unsicherheiten (Variabilität) bedingten Wahrscheinlichkeit Pr(H) konvergieren.

Diese dualen Beziehungen finden sich in anderen Konzepten zur mathematische Modellierung von epistemischen Unsicherheiten analog wieder; in der Evidenztheorie [SHA 76] mit dem Glaubensmaß (belief) Bel(H) und dem Plausibilitätsmaß (plausibility) Pl(H), in der Möglichkeitstheorie [DUB 88] mit dem Notwendigkeitsmaß (necessity) Nec(H) und dem Möglichkeitsmaß (possibility) Pos(H) (siehe Abschnitt 2.8). Die für einen Wertebereich von 0 bis 1 definierten Funktionen ($H \rightarrow [0,1]$) minPr(H), Bel(H) und Nec(H) sind Maße für die Informationen/Daten, welche für die Hypothese H sprechen, wogegen die Funktionen maxPr(H), Pl(H) und Pos(H) Maße jener Informationen/Daten sind, die nicht gegen die Hypothese H sprechen.

Bei dem im Beispiel 2.1-4 betrachteten Modell ist die Variabilität der Zielgröße, die ungefähr über sechs Größenordnungen geht, deutlich größer als ihre Unsicherheit, die im Bereich von ein bis zwei Größenordnungen liegt. Wie oben bereits erläutert, ist die Variabilität der Zielgröße bei gegebenen Bedingungen der Probenahme/Messung der Inputvariablen als objektive Eigenschaft anzusehen, wogegen die Unsicherheit i. W. subjektiv bedingt ist und durch zusätzliche Datenerhebung reduziert werden könnte. Zur Veranschaulichung dieser Aussage wird im folgenden Beispiel die Auswirkung eine Verdopplung des Stichprobenumfangs auf die Reduzierung der Unsicherheit betrachtet.

Beispiel 2.1-5

In den Beispielen 2.1-3 und 2.1-4 wurden zur Modellgleichung Gl. (2-7) für die vier Inputvariablen A, B, C und D die in Tabelle 2-2 angegebenen Stichproben SP1 und SP2 zugrunde gelegt, deren Umfang n = 20 ist. Wir betrachten nun für die vier Inputvariablen die Stichprobe SP3 vom Umfang n = 40, wozu die Werte aus den beiden Stichproben SP1 und SP2 zusammengelegt wurden. In der Tabelle 2-6 sind die für zur Stichprobe SP3 berechneten Schätzwerte m_X und s_X der Parameter μ_X und σ_X der lognormal verteilten Inputvariablen und der Zielgröße zusammengestellt und (analog zur Tabelle 2-3) den wahren Werten der Ausgangsverteilungen der jeweiligen Grundgesamtheit gegenübergestellt. Die Abbildung 2-7 zeigt neben der wahren Verteilungsfunktion der Grundgesamtheit von Z und der für die Stichprobe SP3 mit 1D-MC-Simulation geschätzten Verteilungsfunktion die sechs zugehörigen PKV zu den Vertrauensniveaus von 1%, 5%, 25%, 75%, 95% und 99%.

Tabelle 2-6: Kennwerte der Lognormalverteilungen $X \sim Ln(\mu_X,\sigma_X)$, X = {A, B, C, D, Z} und für die Stichprobe SP3 (Zusammenlegung von SP1 und SP2 gemäß Tabelle 2-2) berechnete Schätzwerte m_X und s_X

	Grundgesamtheit		**Stichprobe SP3**	
X:	μ_X	σ_X	m_X	s_X
A	0	2,0	-0,1053	1,8614
B	0	1,5	-0,0232	1,5235
C	0	1,0	0,0869	0,9826
D	0	0,5	-0,1659	0,4164
Z[1)]	0	2,7386	-0,2076	2,6317
Z[2)]			-0,2076	2,6201

[1)] Berechnung nach Gl.(2-8); [2)] Schätzung aus Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulation mit empirischen Inputdaten

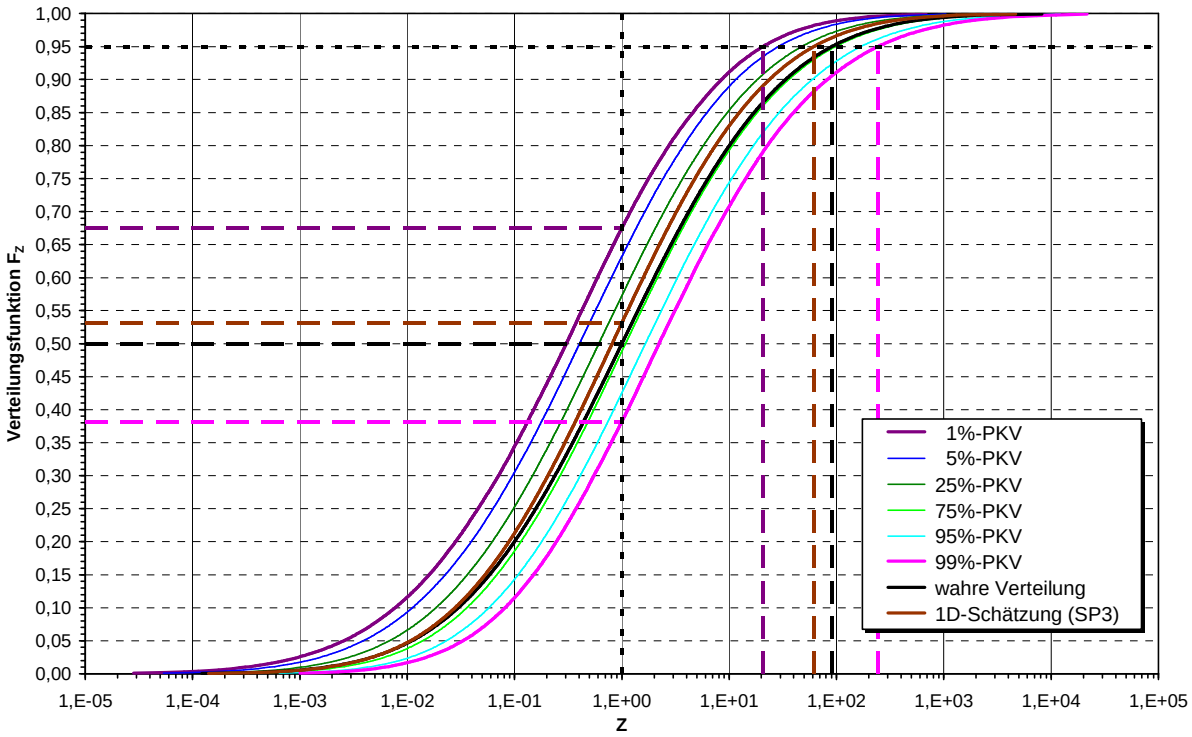


Abbildung 2-7: Perzentil-Konfidenz-Verteilungen für die Stichprobe SP3 im Vergleich zur wahren Verteilung von Z und der mittels 1D-MC-Simulation geschätzten Verteilung

Der Vergleich von Abbildung 2-7 mit den Abbildungen 2-6.1 und 2-6.2 macht zunächst deutlich, dass durch die Verdopplung des Stichprobenumfangs der durch die 1%-PKV und 99%-PKV eingeschlossene Konfidenzbereich deutlich enger geworden ist, wobei die wahre Verteilungsfunktion F_Z jetzt sogar vollständig in dem durch die 25%-PKV und die 75%-PKV definierten 50%-Konfidenzbereich liegt. Die für die Stichprobe SP3 mittels 1D-MC-Simulation geschätzte Verteilungsfunktion liegt (zufällig) sehr dicht bei der wahren Verteilungsfunktion, wobei daraus für die Hypothese H = "$Z \leq Z_G$" mit $Z_G = 1$ nun eine Wahrscheinlichkeit von Pr(H) = 0,53 resultiert (vgl. Angaben für SP1 und SP2 in Tabelle 2-4).

Das 95%-Perzentil der mittels 1D-MC-Simulation (bzw. analytisch) für die Stichprobe SP3 berechneten Verteilungsfunktion liegt bei 61,6. Der für ein Vertrauensniveau von 98% aus den Schnittpunkten der Linie F_Z = 0,95 mit der 1%-PKV und der 99%-PKV berechnete Konfidenzbereich von (20,7; 243) bildet jetzt für das 95%-Perzentil der Zielgröße einen Unsicherheitsbereich von ca. einer Größenordnung.

Für die anhand des Beispiels 2.1-4 erläuterten Glaubwürdigkeitsmaße minPr und maxPr resultieren zur Hypothese H = "$Z \leq Z_G$" mit Z_G = 1 die in Tabelle 2-7 zusammengefassten Aussagen. Der Vergleich mit den Angaben für die Stichproben SP1 und SP2 in Tabelle 2-5 macht deutlich, dass die Reduzierung der epistemischen Unsicherheiten (hier durch Erhöhung des Stichprobenumfangs) für SP3 eine Annäherung der Glaubwürdigkeitsmaße minPr und maxPr bewirkt hat. Der Abstand maxPr(H) – minPr(H) hat sich von ca. 0,4 für die Stichproben SP1 und SP2 auf ca. 0,3 für die Stichprobe SP3 verringert.

Tabelle 2-7: Untere und obere "Glaubwürdigkeiten" minPr(H) und maxPr(H) bzw. minPr(H^c) und maxPr(H^c) für H = "$Z \leq Z_G$" (H^c = "$Z > Z_G$"); Z_G = 1

Glaubwürdigkeit	Stichprobe SP3 (2D)
minPr(H) = 99%-PKV(Z_G)	0,382
maxPr(H) = 1%-PKV(Z_G)	0,675
minPr(H^c) = 1 - 1%-PKV(Z_G)	0,325
maxPr(H^c) = 1 - 99%-PKV(Z_G)	0,618

2.5. Sensitivitätsanalyse

Für komplexe Expositionsmodelle, wie in Abbildung 2-1 und Gl. (2-1) bis Gl. (2-4) schematisch dargestellt, aber auch für Expositionsmodelle im engeren Sinn (siehe Abschnitt 2.2.3) hat eine Beurteilung der Auswirkungen von Änderungen bzw. von Unsicherheiten einzelner oder mehrerer Inputparameter auf die Zielgröße große Bedeutung, um sensitive Modellparameter zu identifizieren, für die ggf. vertiefende Untersuchungen zur Reduzierung von epistemischen Unsicherheiten sinnvoll sind. Für Variable, deren aleatorische Unsicherheit maßgeblich die Unsicherheit der Zielgröße bestimmt, könnte sich im Ergebnis der Sensitivitätsanalyse eine Aufteilung in Schichten als ratsam erweisen. Die Sensitivitätsanalyse kann auch auf die Beantwortung der Frage gerichtet sein, wie sich die Art der probabilistische Modellierung von Inputparametern (z. B. Anpassung von Daten an ähnliche statistische Verteilungen, die für höhere Perzentile relativ stark voneinander abweichen können) auf die Verteilung der Zielgröße auswirkt. Die Sensitivitätsanalyse hilft, die Belastbarkeit von zugrunde gelegten Modell- und Parameteransätzen sowie der Ergebnisse von Modellrechnungen zu beurteilen und herauszufinden, wie das untersuchte System effektiv beeinflusst/geregelt werden kann. Während die Unsicherheitsanalyse auf die Quantifizierung der Unsicherheit der Zielgröße(n) fokussiert ist, dient die Sensitivitätsanalyse der Quantifizierung ihrer Ursachen.

Nach [EPA 01B] und [WHO 08] soll die Sensitivitätsanalyse (qualitativ oder quantitativ) beurteilen, wie Veränderungen der Zielgröße eines Modells den verschiedenen Quellen der Variation bzw. der Unsicherheit von Inputvariablen zuzuordnen sind, und eine Rangfolge der Inputgrößen nach ihrem relativen Beitrag zur Variabilität und Unsicherheit der Zielgröße ermitteln. Sie steht damit in enger Verbindung zur Unsicherheitsanalyse, hat aber die inverse Fragestellung zum Gegenstand.

Sensitivitätsanalysen sind nicht nur für Nutzer von Modellen von Bedeutung, da sie das Verständnis zum Verhalten des untersuchten Systems unterstützen, sondern auch für die Modellentwicklung, weil damit zwischen den einflussreichen bzw. für die Zielgröße weitgehend irrelevanten Faktoren unterschieden werden kann, wonach eine Weiterentwicklung des Modells sinnvoll auf maßgebliche Variable und dbzgl. Annahmen oder Submodelle konzentriert werden kann.

Für Sensitivitätsanalysen wurden vielfältige Methoden entwickelt, die in Abhängigkeit von der Modellstruktur und speziellen Fragestellungen unterschiedlich geeignet sind. Eine Übersicht zu gängigen Methoden der Sensitivitätsanalyse findet man u. a. in [CUL 99], [SAL 00A], [EPA 01B], [FREY 02], und [HEL 06]. Übersichtliche grafische Darstellungen der Ergebnisse von Sensitivitätsanalysen (Tornado-Diagramme, Radar-Plots etc.) sind in [COO 00] erläutert. Nachfolgend wird auf ausgewählte Methoden der Sensitivitätsanalyse für deterministische bzw. 1- und 2-dimensionale probabilistische (Expositions-)Modelle eingegangen.

2.5.1. Deterministische Methoden

Geht man von der allgemeinen Modellgleichung Gl. (2-9) aus, und sind $x_{1;p}$ bis $x_{n;p}$ die für eine deterministische Dosisabschätzung verwendeten (nominalen) Punktschätzer mit dem Ergebnis

$$z_p = T(x_{1;p}, x_{2;p}, \ldots x_{n;p}), \tag{2-16}$$

so stellt das Verhältnis der relativen Änderung der Zielgröße zur relativen Änderung einer der Inputgrößen,

$$SV_i = \frac{z_v - z_p}{z_p} \cdot \frac{x_{i;p}}{x_{i;v} - x_{i;p}}, \tag{2-17}$$

ein einfaches Sensitivitätsmaß dar, wobei $x_{i;v}$ den variierten Wert der untersuchten Inputgröße und z_v den damit resultierenden Wert der Zielgröße bezeichnen. Es wird als Sensitivitätsverhältnis [EPA 01B] oder "nominale Bereichssensitivität" [CUL 99], [FRY 02] bezeichnet.

Zu den Berechnungsvorschriften der AVV zu § 47 StrlSchV [BMU 05] wird über Ergebnisse einer dbzgl. Untersuchung in [TÜV 05B] berichtet. Im Rahmen des deterministischen Ansatzes für Expositionsabschätzungen wurden gemäß Gl (2-17) Einzelsensitivitäten von Parametern bzgl. der effektiven Dosis (Zielgröße) untersucht. Abhängigkeiten zwischen Modellparametern wurden nicht berücksichtigt. Schwachpunkte der deterministischen Sensitivitätsanalyse nach Gl (2-17) bestehen darin, dass die für einzelne Parameter X_i ggf. sehr unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten kleiner bzw. größerer Abweichungen von ihren nominalen Punktschätzungen $x_{i;p}$ nicht berücksichtigt werden. Außerdem können kombinierte Auswirkungen auf die Zielgröße von gleichzeitigen Veränderungen mehrerer Inputgrößen nicht beurteilt werden.

Für große nichtlineare Systeme werden Methoden der automatischen Berechnung der 1. partiellen Ableitung der Zielgröße nach Inputvariablen angewandt, um die lokale Sensitivität der Parameter zu untersuchen. Für ein Modell nach Gl. (2-9) erhält man das lokale Sensitivitätsmaß

$$AD_i = \frac{x_i}{T(x_1, x_2, \ldots, x_n)} \cdot \frac{\partial T(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\partial x_i}, \tag{2-18}$$

das u. a. zur Untersuchung von Modellen der Schadstoffausbreitung in der Atmosphäre eingesetzt wird [CARM 97], [HWA 97].

Für eine gleichzeitige Analyse der Auswirkungen von mehreren (ggf. allen) Inputvariablen auf die Zielgröße eines Modells wird häufig die so genannte Response Surface Methode (RSM) angewandt, bei der das ursprüngliche Modell durch eine multivariate lineare oder quadratische Gleichung ersetzt wird. Für das mit Gl. (2-9) beschriebene Modell wäre für eine Näherung 2. Ordnung zunächst folgende "Antwortfläche" zu bestimmen:

$$z = T(x_1, x_2, ..., x_n) \cong \alpha_0 + \sum_{i=1}^{n} \beta_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{i} \gamma_{ij} \cdot x_i \cdot x_j \,. \qquad (2\text{-}19)$$

Sind die Koeffizienten α_o, β_i und γ_{ij} der Gl. (2-19) einmal bestimmt, so können für diese Näherung verschiedene Methoden der Sensitivitätsanalyse angewandt werden (vgl. z. B. [IMAN 88], [ISU 00]), insbesondere auch statistische probabilistische Verfahren.

Ein Konzept für Sensitivitätsanalysen sind Grenzwertuntersuchungen (engl. break-even analysis), die das Ziel haben, die Robustheit von Entscheidungen einzuschätzen, die auf Modellrechnungen für die Zielgröße Z basieren, bzw. die Nähe zu entscheidungsrelevanten Grenzwerten für mögliche Kombinationen der Werte von Inputvariablen zu beurteilen. Ist Z_G Grenzwert der Zielgröße für eine bestimmte Entscheidung (z. B. im Hinblick auf die Einhaltung von Dosisbegrenzungen oder die Auswahl zwischen Auslegungs- oder Sanierungsoptionen), so können z. B. mit Gl. (2-19) solche Parameterkonstellationen bzw. Wertebereiche gesucht und anschaulich dargestellt werden, die im Hinblick auf den Grenzwert Z_G entscheidungsrelevant sind oder sein könnten.

2.5.2. Methoden für 1-dimensional probabilistische Modelle

Werden die Inputvariablen eines (Expositions-)Modells als Zufallsgrößen mit rein aleatorischer oder auch rein epistemischer Unsicherheit durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben, so werden diverse statistische Methoden wie Varianz-, Regressions- bzw. Korrelationsanalyse genutzt, um den absoluten bzw. relativen Einfluss der (unabhängigen) Inputvariablen auf die Zielgröße zu quantifizieren. Beispiele mit Vergleichen unterschiedlicher Methoden der Sensitivitätsanalyse für probabilistische Modelle finden sich u. a. in [SAL 00A], [HEL 02A], [PATI 04] und [HEL 06].

Für ein Modell nach Gl. (2-9) werden hierzu für die Inputgrößen X_i (i = 1 bis n) auf zufällige Weise - meistens mittels Monte-Carlo-Sampling - Stichproben von einem bestimmten Umfang K erzeugt ($x_{i;k}$ mit k = 1 bis K) und mit Gl. (2-9) die resultierenden Werte z_k der Zielgröße berechnet. Dazu wird überwiegend angenommen, dass die Inputgrößen voneinander unabhängig sind. Sofern dies nicht zutrifft, können ggf. gemeinsame Verteilungsfunktionen oder Korrelationen zwischen den Inputparametern rekonstruiert werden.

2.5.2.1. Verhältnis der Variationskoeffizienten

Der Variationskoeffizient CV ist das Verhältnis der Standardabweichung (Wurzel der Varianz) zum Erwartungswert und ein normiertes Maß für die Dispersion von Wahrscheinlichkeitsverteilungen:

$$CV_X = \frac{\sqrt{Var[X]}}{E[X]}. \tag{2-20}$$

Für die allgemeine Modellgleichung Gl. (2-9) ist der Reziprokwert des Verhältnisses RCV_i des Variationskoeffizienten der i-ten Inputvariablen zum Variationskoeffizienten der Zielgröße,

$$RCV_i = \frac{CV_{X_i}}{CV_Z}, \tag{2-21}$$

ein Analogon zum deterministischen Sensitivitätsverhältnis nach Gl. (2-17), wenn für die anderen Inputparameter deren Nominalwerte (z. B. Erwartungswerte) fixiert bleiben. Im Unterschied zum deterministischen Fall werden die Sensitivitätsmaße RCV_i bei gleichzeitiger MC-Simulation aller probabilistischen Inputgrößen betrachtet. Für einfache Faktormodelle,

$$Z = c \cdot \frac{X_1 \cdot X_2 \cdot \ldots \cdot X_l}{X_{l+1} \cdot X_{l+1} \cdot \ldots \cdot X_n}, \tag{2-22}$$

insbesondere wenn die Inputgrößen lognormal verteilt sind, ist zum Vergleich eine Sensitivitätsanalyse für die logarithmisch transformierte Modellgleichung

$$W = \ln(c) + (Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_l) - (Y_{l+1} + Y_{l+2} + \ldots + Y_n), \tag{2-23}$$

mit $W = \ln(Z)$ und $Y_i = \ln(X_i)$ angebracht.

2.5.2.2. Varianzanalyse (ANOVA)

Die Varianzanalyse [KRI 81] ist eine effektive Methode der Sensitivitätsanalyse für lineare Systeme mit (näherungsweise) normal verteilten Inputparametern. Es wird vorausgesetzt, dass die Zielgröße einer Normalverteilung genügt. Als Sensitivitätsmaß wird der absolute oder relative Beitrag der Varianz einer Inputvariablen zur Varianz der Zielgröße verwendet, für Gl. (2-9) z. B. die Relation

$$RVar_i = \frac{Var[X_i]}{Var[Z]}. \tag{2-24}$$

Wie bei der Sensitivitätsanalyse mit dem relativen Variationskoeffizienten nach Gl. (2-21) sollten für Faktormodelle vergleichend auch die logarithmisch transformierten Modelle betrachtet werden. Sind die Voraussetzungen der ANOVA (analysis of variance) nicht gegeben, so sind die Ergebnisse dieses Verfahrens nicht mehr robust und mit Vorsicht zu interpretieren.

In [TÜV 05B] wurden für Sensitivitätsbetrachtungen zu Expositionsmodellen der AVV zu §47 StrlSchV [BMU 05] auch (1-dimensionale) MC-Simulationen durchgeführt, wozu für diverse Inputgrößen verschiedenartige Verteilungsfunktionen angenommen wurden (Normalverteilungen, Lognormalverteilungen, Dreiecksverteilungen) und Beiträge der Inputvariablen zur resultierenden Varianz der Zielgröße untersucht wurden. Wichtige Voraussetzungen der ANOVA wurden dazu allerdings nicht geprüft.

Beispiel 2.1-6

Für das in Beispiel 2.1-1 erläuterte Faktorenmodell mit vier unterschiedlich lognormal verteilten Größen A, B, C, und D lassen sich die in den Gl. (2-21) und Gl. (2-24) angegebenen Sensitivitätsmaße sowohl für die originären Variablen als auch für ihre Logarithmen analytisch berechnen (die Formeln zur Berechnung der Erwartungswerte und der Varianzen sind in den Abschnitten C.1 und C.2 von Anhang C angegeben). Für die Zielgröße Z bzw. für W = ln(Z) gelten die unter Gl. (2-8) angegebenen Summenformeln für die Verteilungsparameter μ und σ^2.

In Tabelle 2-8a sind die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen für das gemäß Gl. (2-23) logarithmierten Modell zusammengestellt. Die Summe der Varianzrelationen $RVar_i$ ergibt hier natürlich den Wert 1, was bedeutet, dass die Varianz von ln(Z) vollständig durch die Varianzen der Inputvariablen erklärt ist. Die Summation der relativen Variationskoeffizienten der logarithmierten Größen ergibt zwar einen Wert über 1; die Relationen zwischen den RCV_i-Werten entsprechen aber denen der Standardabweichungen der Inputvariablen und sind somit gut interpretierbar.

Tabelle 2-8a: Sensitivitätsmaße für das gemäß Gl. (2-23) logarithmierte Faktorenmodell Gl. (2-7)

	Inputvariable ln(X) des logarithmierten Modells			
Sensitivitätsmaß	**ln(A)**	**ln(B)**	**ln(C)**	**ln(D)**
$\mathbf{RVar_{ln(X)}}$	0,533	0,300	0,133	0,033
$\mathbf{RCV_{ln(X)}}$	0,730	0,548	0,365	0,183

Tabelle 2-8b: Sensitivitätsmaße für das originäre Faktorenmodell Gl. (2-7)

	Inputvariable X des originären Modells			
Sensitivitätsmaß	**X = A**	**X = B**	**X = C**	**X = D**
$\mathbf{RVar_X}$	8,96E-04	2,46E-05	1,43E-06	1,12E-07
$\mathbf{RCV_X}$	0,172	0,069	0,031	0,013

In Tabelle 2-8b sind die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen für das originäre Modell Gl. (2-7) aus dem Beispiel 2.1-1 zusammengestellt. Abgesehen von der richtigen Rangfolge der Sensitivitätsmaße für die vier Inputvariablen ist insbesondere zu den Varianzrelationen der vier Modelvariablen festzustellen, dass ihre Summe viel kleiner als 1 ist. Dies ist ein charakteristisches Merkmal für multiplikative Modelle, bei denen, im Gegensatz zu additiven Modellen, gleichzeitige Variationen von mehreren Variablen viel größere Auswirkungen auf die Zielgröße haben als es die Summe der Auswirkungen bei alleiniger Variation der einzelnen Inputgrößen erwarten lassen würde. Die Resultate in Tabelle 2-8b zur ANOVA für ein elementares Beispiel verdeutlicht, dass gängige Methoden der Varianzanalyse nur bei Einhaltung der diesen Methoden zugrunde liegenden Voraussetzungen angewandt werden sollten.

2.5.2.3. Multivariate Regressions- und Korrelationsanalyse

Die multivariate Regressionsanalyse basiert auf einer Zerlegung der Modellfunktion, z. B. Gl. (2-9), in ein additives Modell[23], d. h. in eine Summe von Funktionen der einzelnen Inputvariablen,

$$Z = T(X_1, X_2, \ldots, X_n) \cong \tilde{Z} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \beta_i \cdot T_i(X_i) . \qquad (2\text{-}25)$$

Mit $T_i(X_i) = X_i$ wäre Gl. (2-25) ein lineares multivariates Regressionsmodell. Die Koeffizienten β_i (i = 0 bis n) können im Ergebnis einer MC-Simulation, bei der $x_{i,k}$ und z_k die Inputwerte bzw. den mit der exakten Modellgleichung berechneten Zielwert der k-ten Simulation bezeichnen, durch Minimierung der mittleren quadratischen Abweichung

$$\sum_{k=1}^{K} (z_k - \tilde{z}_k)^2 = \sum_{k=1}^{K} \left(z_k - \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \beta_i \cdot T_i(x_{i,k}) \right)^2 \qquad (2\text{-}26)$$

bestimmt werden. Hierzu sind die partiellen Ableitungen der rechten Seite von Gl. (2-26) nach den Koeffizienten β_i zu bilden und gleich Null zu setzen, wonach das daraus resultierende Gleichungssystem (n+1)-ter Ordnung bzgl. der Regressionskoeffizienten β_i zu lösen ist.

Die im Ergebnis der Regressionsanalyse bestimmte Modellapproximation Gl. (2-25) ähnelt der in Abschnitt 2.5.1 erläuterten RSM, hat jedoch den Vorteil, dass zur Berechnung der approximativen Antwortfläche mögliche Variationen der Inputgrößen gemäß ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilung in einfacher Weise berücksichtigt werden. Die Güte der Anpassung des Regressionsmodells an das originäre Modell ist gut kontrollierbar. Eine Konsequenz der Anpassung des Regressionsmodells durch Minimierung der mittleren quadratischen Abweichung Gl. (2-26) ist die folgende Zerlegung der Stichprobenvarianz s^2 der Zielgröße (siehe Gl. (B-40)):

$$s^2 = \sum_{k=1}^{K} (z_k - \bar{z})^2 = \sum_{k=1}^{K} (\tilde{z}_k - \bar{z})^2 + \sum_{k=1}^{K} (z_k - \tilde{z}_k)^2 . \qquad (2\text{-}27)$$

Die erste Summe auf der rechten Seite von Gl. (2-27) heißt Regressionsvarianz s^2_{reg}; die zweite Summe ist die Restvarianz (der Anpassung) s^2_{res}. Das Verhältnis der Regressionsvarianz s^2_{reg} zur totalen Varianz s^2 ist das Bestimmtheitsmaß

$$R^2 = s^2_{reg} / s^2 = \sum_{k=1}^{K} (\tilde{z}_k - \bar{z})^2 / \sum_{k=1}^{K} (z_k - \bar{z})^2 . \qquad (2\text{-}28)$$

Dessen Wert (möglichst nahe bei 1) ist ein Maß dafür, wie gut das Regressionsmodell das originäre Modell (die Daten der MC-Simulation) abbildet.

Der Einfluss von Veränderungen bzw. Unsicherheiten der Inputvariablen auf die Zielgröße ist aus der Struktur der rechten Seite von Gl. (2-25) ersichtlich. Mit den transformierten Größen $Y_i = T_i(X_i)$

---

[23] Ein Modell ist genau dann additiv, wenn alle gemischten zweiten partiellen Ableitungen des Modells (Ableitungen nach zwei verschiedenen Inputgrößen) den Wert Null ergeben. Ist ein Modell additiv, so kann jede Eingangsgröße auch einzeln variiert werden, um das Modellverhalten korrekt zu analysieren.

lassen sich durch Varianzanalyse (ANOVA, s. o.) oder Korrelationsanalysen weitere Aussagen zur Sensitivität gewinnen.

Die Korrelation (vgl. Abschnitt B.1.3 in Anhang B) zwischen der Zielgröße Z und den Inputgrößen X_i bzw. ihren Transformierten $T_i(X_i)$ aus Gl. (2-25) ist ein normiertes Sensitivitätsmaß, das sehr anschaulich den Anteil der Inputvariablen auf die Varianz der Zielgröße darstellt. Es sei aber darauf hingewiesen, dass der PEARSON'sche Korrelationskoeffizient nur den linearen Zusammenhang erfasst, weshalb der Wert des Korrelationskoeffizienten $\rho_{x,z}$ für Inputvariable, die nichtlinear in das Model eingehen, zu Fehleinschätzungen führen kann. Der SPEARMAN'sche Korrelationskoeffizient bleibt dagegen bei monotonen Transformationen unverändert, weil er auf den Rängen basiert.

2.5.2.4. Analyse von nichtlinearen Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen

Grundsätzlich wird empfohlen, mögliche nichtlineare Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen mit Hilfe von Streudiagrammen (engl. Scatterplot) zu prüfen. Dbzgl. Beispiele enthalten Abschnitt 4.3 und Anhang B. Durch das Muster der Punkte im Streudiagramm, in dem die Stichprobenwerte $x_{j,k}$ gegen $x_{i,k}$ (k = 1 bis K) dargestellt werden, lassen sich Abhängigkeitsstrukturen der Variablen gut erkennen. In [CUL 99], [HEL 02A] und [HEL 06] sind hierzu interessanter Beispiele erläutert. Methoden zur (quantitativen) statistischen Analyse von Streudiagrammen für die Identifizierung von Strukturen aus Modellsimulationen sind in [KLE 99A], [KLE 99B] erläutert und durch viele Beispiele zur Verhaltensbewertung (Performance Assessment) von 1996 zum Endlager für radioaktive Abfälle "Waste Isolation Pilot Plant" (WIPP) verdeutlicht.

Während lineare Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen für MC-Simulationen und Sensitivitätsanalysen mit Hilfe von Korrelationsmatrizen berücksichtigt werden können, ist die Behandlung von nichtlinearen Abhängigkeiten mit einem relativ hohen Aufwand verbunden. Nach [McK 99] kann man jedoch versuchen, die Sensitivitätsanalyse durch Gruppierung abhängiger Parameter so zu realisieren, dass die Gruppen voneinander unabhängig sind. Dies entspricht einer Dekomposition der ANOVA für verschachtelte oder hierarchische Modelle.

2.5.2.5. Analyse bedingter Varianzen 1. Ordnung

Als Alternative zur ANOVA, bei der Varianzen der Inputvariablen mit der Varianz der Zielgröße verglichen werden siehe Gl. (2-24), kann ein in [IMAN 87] für Fehlerbaumanalysen eingeführtes Einflussmaß (engl. importance measure) verwendet werden, mit dem die bedingten Varianzen des Systemoutputs (bei Fixierung einzelner Inputs) in Relation zur vollständigen Varianz der Zielgröße gesetzt werden. Für ein Modell nach Gl. (2-9) wird dazu das Einflussmaß

$$I_i = Var_Z - E_{X_i}[Var_{Z|X_i}] = Var_{X_i}[E_{Z|X_i}] \qquad (2\text{-}29)$$

aus der Zerlegung der (unbedingten, vollständigen) Varianz der Zielgröße Z in den Erwartungswert der bzgl. X_i bedingten Varianz (bei fixiertem X_i berechnete Varianz von Z) und die Varianz des bzgl. X_i bedingten Erwartungswertes von Z genutzt (siehe Abschnitt B.1.4 in Anhang B; Gl. (2-29) gilt verteilungsunabhängig). Der auf die Varianz von Z bezogene (relative) Einfluss,

$$RI_i = Var_{X_i}[E_{Z|X_i}]/Var_Z = 1 - E_{X_i}[Var_{Z|X_i}]/Var_Z\,, \qquad (2\text{-}30)$$

ist ein globales Sensitivitätsmaß, das auch für nicht-additive Modelle für ein Ranking genutzt

werden kann. Es charakterisiert eine erwartete Reduzierung der Outputvarianz bei Elimination der Unsicherheit des Inputparameters X_i. Die Sensitivitätsmaße RI_i liegen immer zwischen 0 und 1. Ein großer Wert von RI_i signalisiert, dass Xi ein sensitiver Parameter ist. Für additive Modelle gilt

$$\sum_{i=1}^{n} RI_i = 1. \tag{2-31}$$

Für nichtlineare Modelle muss ein kleiner Wert von RI_i jedoch nicht bedeuten, dass sich diese Variable kaum auf die Varianz der Zielgröße auswirkt. Sie kann durchaus sensitiv sein, wenn eine starke Wechselwirkung mit anderen Inputvariablen vorliegt, die sich ggf. auf die Unsicherheit der Zielgröße erheblich auswirken kann, wie im nachfolgenden Abschnitt erläutert wird. In solchen Fällen darf auch eine Variable X_i mit kleinem Wert des Sensitivitätsmaßes RI_i nicht durch einen konstanten (nominalen) Wert $x_{i;p}$ fixiert werden. Die Bedeutung von Wechselwirkungen zwischen (aleatorischen und/oder epistemischen) Unsicherheiten der Inputvariablen lässt sich oft dadurch erkennen, dass die Summe der Einzelmaße in Gl. (2-31) deutlich kleiner als 1 ist, wie z. B. aus den Angaben von Tabelle 2-8b für das Beispiel 2.1-6 ersichtlich.

Zur Sensitivitätsanalyse mit bedingten Varianzen 1. Ordnung für multiplikative Modelle, für die oft linkssteile Verteilungen resultieren (Z ist z. B. annähernd lognormal verteilt), wurde in [IMAN 90] angeregt, die logarithmierte Modellgleichung zu analysieren, wofür sich ein zu Gl. (2-30) analoges Sensitivitätsmaß für logarithmierte Variable ergibt. Eine Rücktransformation zur linearen Skala ist zwar nicht möglich; die Ergebnisse wären aber für logarithmisch basierte Risikoanalysen adäquat.

2.5.2.6. Analyse bedingter Varianzen höherer Ordnung

Eine Verallgemeinerung des im vorigen Abschnitt erläuterten Sensitivitätsmaßes ist die Beachtung von bedingten Varianzen höherer Ordnung, mit denen der Einfluss von Wechselwirkungen zweier (oder mehrerer) Inputgrößen auf die Zielgröße quantifiziert werden kann. Mit den Bezeichnungen

$$V_i = Var_{X_i}[E_{Z|X_i}], \tag{2-32a}$$

$$V_{i,j} = Var_{X_i,X_j}[E_{Z|X_i,X_j}] - V_i - V_j, \tag{2-32b}$$

$$V_{i,j,k} = Var_{X_i,X_j,X_k}[E_{Z|X_i,X_j,X_k}] - (V_{i,j} + V_{i,k} + V_{j,k}) + (V_i + V_j + V_k), \tag{2-32c}$$

usw., kann eine vollständige Zerlegung der Varianz der Zielgröße in bzgl. der Inputgrößen bedingte Varianzen wachsender Ordnung vorgenommen werden:

$$Var[Z] = \sum_{i=1}^{n} V_i + \sum_{i<j} V_{i,j} + \sum_{i<j<k} V_{i,j,k} + \ldots + V_{1,2,\ldots,n} \quad . \tag{2-33}$$

Vorausetzung der Zerlegung ist die gegenseitige statistische Unabhängigkeit der Inputvariablen. Im allgemeinen Fall enthält die Varianzzerlegung Gl. (2-33) n bedingte Varianzen 1. Ordnung V_i, die den isolierten Einfluss der Inputvariablen auf die Unsicherheit der Zielgröße präsentieren. Die Anzahl der bedingten Varianzen $V_{i,j}$ ist gleich $n \cdot (n-1)/2$. Sie beschreiben Wechselwirkungseffekte von jeweils zwei Inputvariablen auf Varianz der Zielgröße, die Wechselwirkungseffekte 1. Ordnung

genannt werden. Wechselwirkungseffekte 2. Ordnung ($V_{i,j,k}$) werden auf der Basis der bedingten Varianzen 3. Ordnung beschrieben, wozu es n·(n-1)·(n-2)/(1·2·3) verschiedene Indexkombinationen gibt. Zur Quantifizierung der Wechselwirkungseffekten (m-1)-ter Ordnung sind n!/(m!·(n-m)!) bedingte Varianzen m-ter Ordnung zu betrachten. Insgesamt enthält Gl. (2-33) 2^k-1 bedingte Wahrscheinlichkeiten.

Zerlegungen von Funktionen mit n Inputvariablen in die Form von Gl. (2-33) wurden bereits im Zusammenhang mit dem FOURIER-Amplituden-Sensitivitätstest [CUK 78] (siehe Abschnitt 2.5.2.7) sowie der Stichprobenumfangsplanung [MOR 91] angegeben. Die mathematische Grundlage für die Varianzzerlegung Gl. (2-33) ist [SOB 93] [24] und gilt für statistisch unabhängige Variable, d. h. dann, wenn ihre gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte das Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten der einzelnen Variablen ist.

Dividiert man Gl. (2-33) durch Var[Z], so erhält man eine Gleichung für globale Sensitivitätsmaße GS[25] (siehe z. B. [HOM 96], [ARCH 97],

$$GS_{i_1,i_2,\dots,i_m} = V_{i_1,i_2,\dots,i_m} / V[Z] \;, \quad \text{mit } 1 \le m \le n \tag{2-34}$$

$$1 = \sum_{i=1}^{n} GS_i + \sum_{i<j} GS_{i,j} + \sum_{i<j<k} GS_{i,j,k} + \dots + GS_{1,2,\dots,n} \;. \tag{2-35}$$

Die Berechnung der Sensitivitätsmaße kann mittels Monte-Carlo-Simulation erfolgen und benötigt hierzu $K*2^n$ Systemläufe für einen Stichprobenumfang von K. Für sehr große/komplexe Systeme kann dieser Aufwand über dem praktisch realisierbaren Maß liegen. In [HOM 96], [ARCH 97] wurde deshalb eine weitere Statistik zur Beurteilung des Einflusses von einzelnen Inputvariablen vorgeschlagen: ein Maß für den Einfluss von X_i unter Berücksichtigung aller Wechselwirkungen mit anderen Variablen. Bezeichnet man mit dem Index "ci" die Menge aller anderen Indizes (das Komplement ci = {1, 2, …, i-1, i+1, …, n} bzgl. i), so kann man die Varianz von Z analog zu Gl. (2-33) zerlegen und nach Division durch Var[Z] Sensitivitätsmaße GS_i, GS_{ci} und $GS_{i,ci}$ sowie ein Maß GS_{Ti} für die totale Sensitivität der Inputvariablen X_i definieren:

$$Var[Z] = V_i + V_{ci} + V_{i,ci} \,. \tag{2-36}$$

$$1 = GS_i + GS_{ci} + GS_{i,ci} \,. \tag{2-37}$$

$$GS_{Ti} = GS_i + GS_{i,ci} = 1 - GS_{ci} \,. \tag{2-38}$$

---

[24] In [SOB 93] wurde das grundlegende Theorem bewiesen, wonach beliebige nichtlineare, integrierbare Funktionen von n Variablen eindeutig in eine Summe von Funktionen wachsender Ordnung zerlegt werden können (konstanter Term, Summen von Funktionen, die eine, zwei, drei usw. Variable enthalten) die zueinander orthogonal sind. Für diese Zerlegung wurden Sensitivitätsmaße zur Bewertung des Einflusses von einzelnen Variablen bzw. von Gruppen mit unterschiedlichen Ordnungen der Wechselwirkung zwischen Inputvariablen entwickelt und ein Algorithmus ihrer Berechnung durch Monte-Carlo-Simulation dargelegt. [SOB 99] und [SOB 01] gehen auf Weiterentwicklungen der Theorie globaler Sensitivitätsmaße für nichtlineare Funktionen und ihrer Schätzung mittels MC-Simulation ein.

[25] Wir benutzen hier für die globalen Sensitivitätsmaße die Bezeichnung "GS" und nicht das übliche "S", um eine Verwechslung mit der Stichproben-Standardabweichung auszuschleißen (vgl. Anhang B).

Beispiel 2.2

Für eine Funktion von 4 Variablen, $Z = T(X_1, X_2, X_3, X_4)$ sind nach Gl. (2-35) insgesamt 2^4-1 = 15 globale Sensitivitätskoeffizienten zu berücksichtigen:

- 4 Koeffizienten 1. Ordnung: GS_1, GS_2, GS_3, GS_4;
- 6 Koeffizienten 2. Ordnung: $GS_{1,2}$, $GS_{1,3}$, $GS_{1,4}$, $GS_{2,3}$, $GS_{2,4}$, $GS_{3,4}$;
- 4 Koeffizienten 3. Ordnung: $GS_{1,2,3}$, $GS_{1,2,4}$, $GS_{1,3,4}$, $GS_{2,3,4}$;
- 1 Koeffizient 4. Ordnung: $GS_{1,2,3,4}$.

Zur Bestimmung der totalen Sensitivität von X_i sind von diesen 15 Koeffizienten jene zu summieren, die im Index ein i enthalten. So ist z. B.

$$GS_{T1} = GS_1 + GS_{1,2} + GS_{1,3} + GS_{1,4} + GS_{1,2,3} + GS_{1,2,4} + GS_{1,3,4} + GS_{1,2,3,4}.$$

Zur Berechnung der totalen Sensitivitäten GS_{Ti} ist es jedoch nicht erforderlich, alle oben aufgeführten Sensitivitätsmaße zu ermitteln. Gemäß Gl. (2-38) müssen nur die Maße GS_{ci} für die Komplemente bestimmt werden. Für deren Berechnung mittels Monte-Carlo-Simulation benötigt man für einen Stichprobenumfang von K insgesamt nur K·(n + 1) Systemläufe [HOM 96] (jeweils eine Simulation für die n Koeffizienten GS_{ci} und den Erwartungswert der Zielgröße Z).

Das folgende Beispiel illustriert den Einfluss von Wechselwirkung in nichtlinearen Modellen.

Beispiel 2.3

Die Zielgröße Z sei das Produkt von zwei voneinander unabhängigen Faktoren,

$$Z = T(X_1, X_2) = X_1 \cdot X_2, \tag{2-39}$$

ihre Erwartungswerte und Varianzen seien E_1 bzw. E_2 sowie Var_1 bzw. Var_2. Wir betrachten für dieses, Modell, zunächst ohne spezielle Annahmen zum Typ der Verteilungen von X_1 und X_2,

- die bedingten Varianzen 1. Ordnung und Sensitivitätsmaße RI_i nach Gl. (2-30)
- die vollständige Zerlegung der Varianz Var_Z nach Gl. (2-33) und die Sensitivitätsmaße GS_i und $GS_{i,j}$ nach Gl. (2-34), sowie
- die Maße GS_{Ti} für die totale Sensitivität nach Gl. (2-38).

Anschließend werden diese Ergebnisse für lognormal verteilte Inputvariable X_1 und X_2 ausgewertet. Zur Berechnung von Erwartungswerten und Varianzen sei auf Abschnitt B1.2 in Anhang B verwiesen.

Da die beiden Inputvariablen unabhängig sind, erhält man für den Erwartungswert und die Varianz von Z:

$$E_Z = E[X_1 \cdot X_2] = E[X_1] \cdot E[X_2] = E_1 \cdot E_2 , \tag{2-40a}$$

$$Var_Z = E[Z^2] - E_Z^2 = E[X_1^2] \cdot E[X_2^2] - (E_1 \cdot E_2)^2 = (Var_1 + E_1^2) \cdot (Var_2 + E_2^2) - E_1^2 \cdot E_2^2 ,$$

$$Var_Z = Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2 . \tag{2-40b}$$

Für die bedingten Varianzen 1. Ordnung der Zielgröße Z aus Gl. (2-39) resultieren folgende Formeln:

$$E_{Z|X1} = X_1 \cdot E[X_2] = X_1 \cdot E_2, \quad \text{und} \quad E_{Z|X2} = X_2 \cdot E[X_1] = X_2 \cdot E_1 \tag{2-41a}$$

$$Var_{X1}[E_{Z|X1}] = Var_{X1}[X_1 \cdot E_2] = Var_{X1}[X_1] \cdot E_2^2 = Var_1 \cdot E_2^2, \quad (2\text{-}41b)$$

$$Var_{X2}[E_{Z|X2}] = Var_{X2}[X_2 \cdot E_1] = Var_{X2}[X_2] \cdot E_1^2 = Var_2 \cdot E_1^2. \quad (2\text{-}41c)$$

Aus Gl. (2-40) und Gl. (2-41) resultieren folgende Sensitivitätsmaße 1. Ordnung nach Gl. (2-30):

$$RI_1 = Var_1 \cdot E_2^2 / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2), \quad (2\text{-}42a)$$

$$RI_2 = Var_2 \cdot E_1^2 / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2). \quad (2\text{-}42b)$$

Offensichtlich ist

$$RI_1 + RI_2 = 1 - (Var_1 \cdot Var_2) / (Var_1 \cdot Var_2 + Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2) < 1.$$

Da das Modell von Gl. (2-39) nicht additiv ist, gilt auch Gl. (2-31) nicht. <u>Anmerkung:</u> Bei einer lokalen (linearisierten) Sensitivitätsanalyse, wie nach [ISO 08A], approximiert man die Varianz von Z nach einer Linearisierung von Gl. (2-39) durch TAYLOR-Entwicklung 1. Ordnung, $Z \cong E_1 \cdot E_2 + X_1 \cdot E_2 + X_2 \cdot E_1$, mit $Var_Z \cong E_2^2 \cdot Var_1 + E_1^2 \cdot Var_2$. Das entspricht einer Vernachlässigung des Produktes $Var_1 \cdot Var_2$. Wenn dieser Term in Gl. (2-42) vernachlässigt würde, wäre die Summe der Einzelsensitivitäten gleich 1.

Zum Einfluss von Wechselwirkung der Inputvariablen X_1 und X_2 auf die Varianz von Z ist die bedingte Varianz 2. Ordnung zu berechnen, was für das Model Gl. (2-39) jedoch trivial ist. Zunächst ist

$$E_{Z|X1,X2}[X_1 \cdot X_2] = X_1 \cdot X_2,$$

$$Var_{X1,X2}[E_{Z|X1,X2}] = Var_Z[X_1 \cdot X_2] = Var_Z.$$

Für die Zerlegung der Varianz von Z nach Gl. (2-33) folgt daraus nach Gl. (2-32a) und Gl. (2-32b) unter Beachtung von Gl. (2-40) und Gl. (2-41):

$$V_1 = Var_{X1}[E_{Z|X1}] = Var_1 \cdot E_2^2, \quad (2\text{-}43a)$$

$$V_2 = Var_{X2}[E_{Z|X2}] = Var_2 \cdot E_1^2, \quad (2\text{-}43b)$$

$$V_{1,2} = Var_{X1,X2}[E_{Z|X1,X2}] - V_1 - V_2 = Var_1 \cdot Var_2. \quad (2\text{-}43c)$$

Aus der vollständige Varianzzerlegung nach Gl. (2-33)

$$Var_Z = V_1 + V_2 + V_{1,2} \quad (2\text{-}44)$$

resultieren nach Gl. (2-34) gemäß Gl. (2-43) und Gl. (2-40) die Sensitivitätsmaße

$$GS_1 = V_1 / Var_Z = Var_1 \cdot E_2^2 / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2), \quad (2\text{-}45a)$$

$$GS_2 = V_2 / Var_Z = Var_2 \cdot E_1^2 / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2), \quad (2\text{-}45b)$$

$$GS_{1,2} = V_{1,2} / Var_Z = Var_1 \cdot Var_2 / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2). \quad (2\text{-}45c)$$

Für die Summe dieser Sensitivitätskoeffizienten gilt Gl. (2-35). Die globalen Sensitivitätsmaße erklären V_z vollständig. Für die beiden totalen Sensitivitäten resultieren nach Gl. (2-38) die folgenden Formeln:

$$GS_{T1} = (V_1 + V_{1,2}) / Var_Z = (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_1 \cdot Var_2) / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2), \quad (2\text{-}46a)$$

$$GS_{T2} = (V_2 + V_{1,2}) / Var_Z = (Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2) / (Var_1 \cdot E_2^2 + Var_2 \cdot E_1^2 + Var_1 \cdot Var_2). \qquad (2\text{-}46b)$$

Die beiden Sensitivitätskoeffizienten sind < 1, ihre Summe ist aber >1. Für eine zahlenmäßige Illustration dieses Beispiels sei angenommen, dass X_1 und X_2 lognormal verteilte Größen sind. Analog zu den Annahmen in den Beispielen 2.1-1 bis 2.1-6 sei $X_1 \sim Ln(\mu_1,\sigma_1)$ und $X_2 \sim Ln(\mu_2,\sigma_2)$ mit $\mu_1 = 0$ und $\mu_2 = 0$. Für die Standardabweichungen der Logarithmen der beiden Inputvariablen wählen wir $\sigma_1 = 1{,}5$ und $\sigma_2 = 1{,}0$. Die Ergebnisse der Berechnungen sind in Tabelle 2-9 zusammengefasst.

Tabelle 2-9: Beispielberechnung von Sensitivitätsmaßen für das Modell Gl. (2-39) für $X_1 \sim Ln(0, 1{,}5)$ und $X_1 \sim Ln(0, 1{,}0)$

	X_1	X_2	Z
μ (Variable: X_1, X_2, Z)	0	0	0
σ (Variable: X_1, X_2, Z)	1,5	1	1,80
σ^2 (Variable: X_1, X_2, Z)	2,25	1	3,25
E (Variable: X_1, X_2, Z)	3,08	1,65	5,08
Var (Variable: X_1, X_2, Z)	80,5	4,7	639,4
V_i (i = 1, 2)	219	44	
$RI_i = GS_i$ (i = 1, 2)	0,34	0,07	
$V_{1,2}$	376		
$GS_{1,2}$	0,59		
GS_{Ti} (i = 1,2)	0,93	0,66	

Aus den in der Tabelle 2-9 zusammengefassten Ergebnissen ist ersichtlich, dass die vollständige Varianzzerlegung sehr anschaulich die isolierten Einflüsse der Inputparameter und ihre durch Wechselwirkung bedingte Beeinflussung der Varianz der Zielgröße zum Ausdruck bringt. Mit den Sensitivitätsmaßen 1. Ordnung GS_i bzw. den totalen Sensitivitätsmaßen GS_{Ti} kann zwar qualitativ eine Rangfolge der Sensitivität angegeben werden, ihre quantitative Interpretation ist aus unserer Sicht jedoch nicht sehr anschaulich, weil ihre Summen kleiner bzw. größer als 1 sind. Die Probleme der Interpretation dieser mittels MC-Simulation berechenbaren Sensitivitätsmaße dürften verstärkt für komplexe Modelle zutreffen, wobei der Aufwand nur linear mit der Anzahl der Inputvariablen (n) und dem Stichprobenumfang (K) wächst und deshalb vertretbar erscheint,.[26]

Zu weiteren methodischen Aspekten der globalen Sensitivitätsanalyse mittels Varianzzerlegung sei auf [SAL 08] verwiesen, wo auch viele Beispielrechnungen zu finden sind. Interessante praktische Anwendungen dieser Methode finden sich u. a. in den nachfolgenden Arbeiten.

- [HOM 96]: Neben einem analytischen (methodischen) Beispiel und der Sensitivitätsanalyse eines chemischen kinetischen Modells zur Oxidation von Dimethylsulfid, das durch 37 gekoppelte Differentialgleichungen beschrieben wird, enthält diese Arbeit auch eine Sensitivitätsanalyse für eine stark vereinfachte Version des für die Endlagerforschung von OECD/NEA entwickelten Level E Modells. Es enthält ein Submodell (gewöhnliche Differentialgleichung) zur Freisetzung von Radionukliden nach einem Verlust der Integrität der technischen Barrieren zu einem

[26] Zu dieser Problematik wären aus unserer Sicht weiterführende Untersuchungen angebracht.

unsicheren Zeitpunkt T mit unsicherer Freisetzungsrate (hierzu wurde nur I-129 betrachtet), ein Submodell (partielle Differentialgleichung) zum Radionuklidtransport in der Geosphäre mit unsicheren Annahmen für die Fließgeschwindigkeit, die Abflussrate, den Retardationsfaktor und die Länge des Transportweges, sowie deterministische Modelle zur Radionuklidfreisetzung in die Biosphäre (hier: Eintrag in ein Fließgewässer) und zu einer resultierenden potentiellen Strahlenexposition durch Nutzung des kontaminierten Trinkwasser. Ein interessantes Ergebnis dieser Modellanalyse war z. B., dass sich die Unsicherheiten zur Fließrate (Annahme einer log-Gleichverteilung mit den Randwerten 10^5 und 10^7 m^3/a) für bestimmte Zeitabschnitte nur im Zusammenwirken mit Unsicherheiten anderer Inputgrößen auf die Zielgröße auswirkten. Die Sensitivität der einzelnen Inputvariablen weist für derartige dynamische Systeme generell eine Zeitabhängigkeit auf. Für das vollständige Level E Modell war dies bereits aus einer früheren Untersuchung bekannt [SAL 93], in der allerdings noch keine Wechselwirkungen zwischen den Unsicherheiten der Inputvariablen betrachtet worden waren.

- [SAL 02A] und [SAL 02B]: Diese Arbeiten enthalten eine erweiterte Sensitivitätsanalyse des Level E Modells, in der nun neben I-129 auch die Zerfallskette Np-237 → U-233 → Th-229 untersucht wird. Für die Geosphäre wird im Unterschied zu [HOM 96] ein Zwei-Schicht-Modell angesetzt.
- [HAK 03]: In dieser Arbeit wird die Zeitabhängigkeit von Sensitivitätsmaßen für ein Modell zur atmosphärischen Schadstoffausbreitung (partielle Differentialgleichungen) untersucht Es wird gezeigt, dass die Sensitivitätsmaße ähnlichen Differentialgleichungen genügen und empfohlen, deren Berechnung parallel zur Lösung der Modellgleichungen vorzunehmen.

Die SOBOL'sche Zerlegung Gl (2-33) verlangt, dass die Inputvariablen unabhängig sind. Wenn dies zutrifft, reflektiert sie adäquat die Struktur des untersuchten Modells. Wenn Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen vorliegen, ist die Zerlegung nicht mehr eindeutig, sondern hängt von der gewählten Reihenfolge der Inputgrößen ab. Diese Problematik wird in [SAL 02A] und [SAL 02B] im Hinblick auf zwei verschiedene Ziele der Sensitivitätsanalyse für das Level E Modell untersucht:

Ziel 1: Die für die Varianz der Zielgröße maßgeblichen Inputvariablen sind zu identifizieren.

Ziel 2: Es ist die minimale Anzahl (und Auswahl) von Inputvariablen zu bestimmen, nach deren Fixierung (Elimination von Unsicherheiten) die Varianz der Outputvariablen Z unter einem Zielwert V_r liegt, der kleiner als die ursprüngliche Varianz V_z ist. Der Index r bezeichnet die Menge der ausgewählten Variablen mit den Indizes $r = \{i_1, i_2, \ldots, i_r\}$.

Wenn Inputvariable korreliert sind, so erhöht sich nicht nur der Aufwand für die MC-Simulation zur Berechnung der Sensitivitätskoeffizienten; die totalen Sensitivitäten GS_{T_i} können in diesem Fall nicht mehr berechnet werden, und die bedingten Varianzen $V_{X_i,X_r}[E_{Z|X_i,X_r}]$ repräsentieren nicht mehr den Effekt der Wechselwirkung von X_i und X_r auf Z. Ist X_i oder X_r mit einer Inputvariablen X_j korreliert, so hängt die bedingte Varianz $V_{X_i,X_r}[E_{Z|X_i,X_r}]$ sowohl von der Stärke dieser Korrelation als auch von der Verteilung der Inputvariablen X_j ab. Eine Darstellung des in [SAL 02A] zur Lösung dieser Problematik entwickelten Verfahrens, das Methoden der Rangordnungsstatistik nutzt, würde den Rahmen des vorliegenden Berichtes sprengen.

2.5.2.7. FOURIER-Amplituden-Sensitivitätstest (FAST)

Die FAST-Methode wurde zuerst für die Sensitivitätsanalyse gekoppelter Reaktionssysteme mit unsicheren Reaktionsraten entwickelt und auf Modelle chemischer Reaktionen mit vielen Spezies angewandt [CUK 73], [SCH 73], [CUK 75], die mit nichtlinearen Differentialgleichungen der Form

$$d\mathbf{z}(t)/dt = \mathbf{T}(\mathbf{z},\mathbf{x}), \quad \mathbf{z}(t=0) = \mathbf{z_0} \tag{2-47}$$

beschrieben werden, wobei hier mit $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \ldots, z_m)$ und $\mathbf{z_0}$ die Vektoren der Outputvariablen zum Zeitpunkt t bzw. zum Systemstart bei t = 0 bezeichnet sind und $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ ein Vektor von n Systemparametern ist, dessen Elemente die durch **T** beschriebenen Kopplungen der Variablen bestimmen. Die Unsicherheit der Reaktionsparameter wird mit Hilfe voneinander unabhängiger Verteilungen $x_l \sim g_l(u_l)$ beschrieben. Zur Untersuchung der Auswirkungen dieser Unsicherheiten werden diese Verteilungen zu Funktionen $u_l = G_l(\sin\omega_l \cdot s)$ transformiert (l = 1 bis n). Dazu werden Frequenzen ω_l so gewählt, dass auch für ihre Harmonischen keine Übereinstimmungen zwischen verschiedenen Modellparametern resultieren. Die Änderung des skalaren Parameters s ergibt eine (Such-)Trajektorie, die den gesamten Phasenraum "durchmustert". Die resultierenden FOURIER-Koeffizienten der Outputvariablen hängen vom Einfluss der (unsicheren) Modellparameter ab. Aus ihnen können insbesondere die Erwartungswerte und Varianzen der Outputvariablen sowie die hierzu von den einzelnen Parameterunsicherheiten verursachten Beiträge berechnet werden, woraus sich für die Sensitivitätsanalyse über Varianzrelationen die Einflussmaße für Inputvariable ergeben.

Neben der Sensitivitätsanalyse von chemischen Reaktionssystemen wurde die FAST-Methode für weitere Anwendungsgebiete erschlossen, u. a. zur Analyse von Modellrechnungen des Verhaltens von Endlagern für radioaktive Abfälle, der atmosphärischen Schadstoffausbreitung und des Schadstofftransports im Grundwasser (siehe dbzgl. Angaben in [FREY 02]).

Da bei den Simulationsrechnungen nur ein Parameter (s: $-\infty < s < +\infty$) variiert werden muss, ist die FAST-Methode sehr effizient. Ursprünglich wurde für die Modellparameter x_l ein einheitlicher Typ zur Beschreibung von Parameterunsicherheiten angesetzt (Exponentialverteilung). In [CUK 78] wurde die FAST-Methode für beliebige Verteilungsformen verallgemeinert. Außerdem wurde auf Basis des PARCEVAL'schen Theorems, wonach die Varianz der Zielfunktionen aus der Summe der Quadrate der FOURIER-Amplituden berechnet werden kann, gezeigt, dass die Gesamtvarianz als eine Reihe von Summen partieller Varianzen unterschiedlicher Ordnung dargestellt werden kann, die den separaten Beiträgen der Parameterunsicherheiten bzw. den gemeinsamen Wirkungen von zwei, drei, vier u. s. w. Parametern entsprechen.

Die hierzu in [CUK 78] enthaltene Erläuterung[27] wurde in [SAL 98] detailliert untersucht. Es wurde gezeigt, dass die in [CUK 78] angesprochene Zerlegung der SOBOL-Zerlegung entspricht und die bis dato mit der FAST-Methode berechneten Sensitivitätsmaße äquivalent zu den bedingten Varianzen 1. Ordnung (s. o.) sind. In vergleichenden Testrechnungen bestätigte sich die hohe Effizienz der FAST-Methode. Es wurde aber auch auf eine Tendenz zu Verzerrungen (Bias) im Vergleich zu analytischen Lösungen und den SOBOL'schen Koeffizienten hingewiesen.

---

[27] These higher partial variances are thus seen to contain increasingly more detailed information about the coupling of sensitivity among larger and larger groups of parameter uncertainties. In our own investigations to date we have not exploited these higher partial variances to obtain more detailed information about the sensitivity of our test systems but we hope to explore their properties in some subsequent studies." (Zitat aus [Cuk 78], Seite 16)

Mit [SAL 99] wurden zwei substantielle Verbesserungen der FAST-Methode erreicht. Die Analyse der für die Suchtrajektorie im Frequenzraum maßgeblichen Funktionen G_l (s. o.) zeigte, dass mit dbzgl. früheren Ansätzen der Phasenraum nicht ausreichend gleichmäßig erfasst wurde, wodurch in Abhängigkeit vom Typ der Verteilung der Modellparameter Verzerrungen in unterschiedlichem Ausmaß resultieren. Mit Suchtrajektorien höherer Qualität konnte diese Problematik wesentlich entschärft werden. Außerdem wurde in [SAL 99] die FAST-Methode für die Berechnung bedingter Varianzen höherer Ordnung erweitert ("extended FAST"), wodurch aus den FOURIER-Amplituden auch totale Varianzen[28] bestimmt werden können, die den Berechnungen mit SOBOL-Zerlegung entsprechen. Damit stehen zwei alternative Methoden zur Verfügung, die in Abhängigkeit von den Eigenschaften der zu untersuchenden Systeme/Modelle optimale genutzt werden können.[29]

Interessante Anwendungen der eFAST-Methode enthalten die folgenden zwei Arbeiten.

[SAL 00B]: In dieser Arbeit wird in Ergänzung zu [HOM 96] die Sensitivitätsanalyse für das so genannte Level E/G Modell für Endlager radioaktiver Abfälle diskutiert. Neben I-129 wird auch die Zerfallskette Np-237 → U-233 → Th-229 untersucht. Zur Geosphäre wird im Unterschied zu [HOM 96] ein Zwei-Schicht-Modell angesetzt. Zudem enthält das Modell Verzweigungen. Danach kann sich das System im Laufe der MC-Simulation zufällig nach unterschiedlichen Szenarien entwickeln, deren Wahrscheinlichkeiten p_i vorgegeben sind. Das Modell enthält 54 unsichere Inputvariable, wozu neben physikalischen Parametern auch inhärente Parameterunsicherheiten für Zeitpunkte des Eintretens von geologischen Ereignissen und für 6 unterschiedliche Szenarien gehören. Weitere in [SAL 00B] erläuterte Anwendungen der Sensitivitätsanalyse mittels eFAST betreffen einen Vergleich zwischen den Optionen Müllverbrennungsanlage oder Mülldeponie sowie die Analyse von Modellen zur Oxidation des klimatisch relevanten Spurengases Dimethylsulfid.

[KIO 04]: Die eFAST-Methode wird hier für eine globale Sensitivitätsanalyse eines Modells zur Emission von mehreren Schadstoffen durch den Kraftfahrzeugverkehr genutzt. Das Modell enthält 40 unsichere Inputparameter.

2.5.2.8. Verteilungsbasierte Sensitivitätsmaße

Die o. g. Sensitivitätsmaße basieren auf den zweiten Momenten der statistischen Verteilungen der Inputgrößen und Zielgröße. Sie sind global und verteilungsunabhängig. Mit welcher Genauigkeit dabei auch extreme Werte (Randbereiche) der Zielgröße erfasst werden, ist mit der Analyse von Varianzen jedoch nicht zu beurteilen. Wie alle Momente von Zufallsvariablen ist auch die Varianz nur eine summarische Statistik, die viele Informationen der Verteilungsfunktion nicht mehr enthält.

Nach [BOR 07] sollten Sensitivitätsanalysen, mit denen die Unsicherheiten des Modelloutputs den verschiedenen Ursachen von Unsicherheiten der Inputvariablen zugeordnet werden, nicht nur modellunabhängig, quantitativ und global (die Verteilungen der Inputvariablen berücksichtigend)

---

[28] "Total" bedeutet hier, dass neben dem Haupteffekt des jeweiligen Parameters auch Effekte berücksichtigt werden, die durch Wechselwirkung mit den Unsicherheiten anderen Parameter zustande kommen (siehe Abschnitt 2.5.2.6).

[29] Im Rahmen weiterführender Untersuchungen sollten beide Methoden hinsichtlich ihrer Eignung für unterschiedliche Teile von komplexen radioökologischen Expositionsmodellen (siehe Abbildung 2-1) betrachtet werden. Aus gegenwärtiger Sicht könnte sich die eFAST-Methode (extended FAST) besonders für Modelle zur Ausbreitung von Radionukliden/Zerfallsketten in Umweltmedien und in der Biosphäre eignen, in denen langzeitige Prozesse der Rückhaltung (z. B. durch Sorption), Anreicherung (z. B. in Sedimenten) und des Zerfalls/Aufbaus von Radionukliden zu berücksichtigen sind.

sein, sondern auch die gesamte Verteilung der Zielgröße zum Gegenstand haben (nicht nur ihre Varianz).

Verteilungsbasierte Sensitivitätsmaße nutzen auch die SOBOL-Zerlegung nichtlinearer Funktionen. In [CHUN 00] wird der Einfluss der Inputvariable X_i auf die Zielgröße über die mittlere quadratische Abweichung der vollständigen und der bezüglich X_i bedingten Verteilungsfunktion der Zielgröße Z gemessen. In [BOR 06], [BOR 07] wird die Fläche zwischen den Wahrscheinlichkeitsdichten,

$$\Delta(X_i) = \int \left| f_Y(y) - f_{Y|X_i}(y) \right| dy, \tag{2-48}$$

betrachtet, mit der sich nach Mittelung über die Marginalverteilung von X_i das Sensitivitätsmaß δ_i definieren lässt ($0 \le \delta_i \le 1$).

$$\delta_i = \frac{1}{2} \cdot E_{X_i}[\Delta(X_i)] = \frac{1}{2} \int f_{X_i}(x_i) \cdot \Delta(X_i) dx_i \ . \tag{2-49}$$

Analog zu Gl. (2-49) werden Sensitivitätsindikatoren höherer Ordnung definiert (z. B. $\delta_{i,j}$ und $\delta_{j|i}$ als Sensitivitätsmaße 2. Ordnung für den gemeinsamen Einfluss von X_i und X_j bzw. für den Einfluss von X_j nach Fixierung von X_i) und ihre Eigenschaften untersucht/interpretiert. Zu dieser Methodik ist festzustellen, dass sie auch für korrelierte Inputgrößen eindeutig angewandt werden kann.

In [LIU 07B] wird gezeigt, dass das Sensitivitätsmaß δ_i als eine Verfeinerung der KOLMOGOROV-SMIRNOV-Teststatistik dargestellt werden kann, und es wird eine vereinfachte Berechnungsmethode für δ_i durch Monte-Carlo-Simulationen vorgestellt. In [LIU 07A] wird alternativ ein Sensitivitätsmaß vorgeschlagen, das den Einfluss der Inputvariablen auf die Zielgröße über die Fläche zwischen der vollständigen und der bedingten Verteilungsfunktion der Zielgröße misst (also mit $|F_Y(y) - F_{Y|Xi}(y)|$ analog zu Gl. (2-48)). Dieser Ansatz ist sehr plausibel und dürfte sich gut in die Behandlung von unsicheren Wahrscheinlichkeiten (vgl. Beispiel 2.1-5 und die weitere Diskussion dieser Problematik in Abschnitt 2.8) einordnen lassen.[30]

2.5.3. Methoden für 2-dimensional probabilistische Modelle

Für Inputvariable mit aleatorischer Unsicherheit, deren Variabilität jedoch epistemisch unsicher ist (in Abschnitt 2.4.2.3 als Typ (ae) bezeichnet), sind die in Abschnitt 2.5.2 erläuterten Methoden nicht direkt anwendbar. Nachfolgend werden zwei Methoden der Sensitivitätsanalyse erläutert, mit denen der Einfluss von Parametern des Typs (ae) auf die Zielgröße untersucht werden kann.

2.5.3.1. 2D-MC-Simulation

In [MOKH 05] wird eine auf Ziele der Sensitivitätsanalyse ausgerichtete Methode der 2D-Monte-Carlo-Simulation dargelegt, die zur Analyse mikrobiologischer Risiken des Tierfuttermanagements angewandt wurde. Das ursprüngliche deterministische Modell wurde zur Anwendung der ANOVA für probabilistische Simulationen durch ein System approximiert, mit dem die Haupteffekte der

[30] Die praktische Anwendung der in [BOG 05], [BOG 06] sowie [LIU 07A], [LIU 07B] dargelegten Methoden sollte für Sensitivitätsanalysen probabilistischer Expositionsmodelle genauer untersucht werden.

Inputparameter sowie Wechselwirkungen 1. Ordnung berücksichtigt werden. Hierzu wurde statt der additiven Modellapproximation Gl. (2-25) die Näherung

$$Z = T(X_1, X_2, \ldots, X_n) \cong \tilde{Z} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n} \beta_i \cdot T_i(X_i) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} \beta_{i;j} T_{i,j}(x_i, x_j) \qquad (2\text{-}50)$$

genutzt, in der die erste Summe die Haupteffekte von Veränderungen der Inputvariablen X_i darstellt und die zweite (Doppel-)Summe Effekte von Wechselwirkungen 1. Ordnung zwischen X_i und X_j zum Ausdruck bringt. Die Anzahl der durch Regression anzupassenden Parameter β_0, β_i und $\beta_{i,j}$ erhöht sich durch die Berücksichtigung von Wechselwirkungen 1. Ordnung auf $1 + n \cdot (n+1)/2$. Zur Sensitivitätsanalyse der Simulationsergebnisse wurden die ANOVA sowie die PEARSON'sche und die SPEARMAN'sche Korrelationsanalyse angewendet.

Das in Abschnitt 2.4.2.3 erläuterte Schema der 2D-MC-Simulation (siehe Abbildung 2-5) wurde für zwei unterschiedliche Ziele der Sensitivitätsanalyse modifiziert, wobei in beiden Fällen in der äußeren Schleife die zufällige Auswahl von Werten für epistemische Verteilungsparameter erfolgt und in der inneren Schleife die damit resultierenden aleatorischen Verteilungen der Inputgrößen sowie der Zielgröße berechnet werden.

In einem ersten Schritt der Sensitivitätsanalyse kann der Einfluss epistemischer Unsicherheiten auf die Stabilität des Rankings der Inputvariablen untersucht werde. Demgemäß wurden in [MOKH 05] mit der ANOVA die Rangfolgen in der inneren Schleife berechnet, in der äußeren Schleife abgespeichert und erst abschließend statistisch analysiert, wozu Bereiche, Mittelwerte und diskrete Häufigkeitsverteilungen der Ränge der Inputvariablen angegeben wurden. In einem zweiten Schritt der Sensitivitätsanalyse können die gemeinsamen Auswirkungen von Variabilität und Unsicherheit der Inputvariablen auf die Zielgröße untersucht werden. Dazu wurden die Ergebnisse aller (inneren) 1D-MC-Simulationen in der äußeren Schleife in einer Datenmatrix zusammengeführt, für die abschließend mit der ANOVA eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt wurde. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen verdeutlichen, dass aleatorische und epistemische Unsicherheiten gemäß den jeweiligen Verteilungen unterschiedlichen Einfluss auf die Zielgröße haben und beide das Ranking der Inputgrößen beeinflussen. Mit den drei angewandten Sensitivitätsmaßen resultieren ähnliche, aber teilweise auch voneinander abweichende Rankings. Insgesamt belegen die Ergebnisse von [MOKH 05], dass die 2D-Monte-Carlo-Simulation sowohl für separierende als auch vereinigende Sensitivitätsanalysen von aleatorisch und epistemisch unsicheren Modelparametern geeignet ist.

2.5.3.2. Varianzanalyse zur Separation von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten

Die in Abschnitt B.1.4 von Anhang B dargestellte Zerlegung der Varianz einer von mehreren Parametern abhängigen Zufallsgröße in bedingte Varianzen kann für Variable vom Typ (ae) genutzt werden, um deren Varianz in einen aleatorischen und einen epistemischen Anteil zu zerlegen. Mit den Bezeichnungen von Gl. (2-10) und Gl. (2-11) gilt die folgende Beziehung, die hier für beliebige Variable X (ohne den Index i) angegeben ist:

$$Var_X = E_\theta[Var_{X|\theta}] + Var_\theta[E_{X|\theta}]. \qquad (2\text{-}51)$$

Die Varianz von X setzt sich aus dem Erwartungswert der mit θ bedingten Varianz von X und der Varianz des mit θ bedingten Erwartungswertes von X zusammen. Wenn θ ein bekannter Wert (bzw.

Vektor $\boldsymbol{\theta}$ von Verteilungsparametern) ist, so ist der zweite Summand der rechten Seite in Gl (2-51) gleich Null, weil dann $E_{X|\theta}$ eine feste (bekannte) Zahl ist. Der erste Term ist dann die Varianz $Var_{X|\theta}$ und charakterisiert die Variabilität von X. Im allgemeinen Fall der Variablen X vom Typ (ae), deren epistemische Unsicherheit bzgl. θ mit einer Verteilung nach Gl. (2-11) beschrieben wird, stellt folglich der erste Summand den (mittleren) aleatorisch bedingten Anteil der (Gesamt-)Varianz dar. Der zweite Summand ist der epistemisch bedingte Anteil von Var_X. Diese Varianzzerlegung sei anhand eines elementaren Beispiels veranschaulicht.

Beispiel 2.4-1

Für eine positive Zufallsgröße X wird mit einer Gleichverteilung in einem Intervall [0, B] gerechnet, dessen obere Grenze nicht präzise bestimmt ist, sondern in einem Bereich [b_{min}, b_{max}] liegt, wozu ebenfalls eine Gleichverteilung angenommen wird. Da die untere Begrenzung von X fest ist, wird die aleatorische Verteilung Gl. (2-10) mit einem skalaren Parameter definiert ($\theta \equiv B$). Zur Bestimmung der epistemischen Unsicherheit nach Gl. (2-11) werden dagegen zwei Werte benötigt, $\boldsymbol{\zeta} = (b_{min}, b_{max})$. Die bedingten Wahrscheinlichkeitsdichten, mit denen die Unsicherheiten von X beschrieben werden, sind:

$$f_X(x \mid b) = \begin{cases} 1/b & \text{für } 0 \le x \le b \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \tag{2-52}$$

$$g_B(b \mid b_{min}, b_{max}) = \begin{cases} 1/(b_{max} - b_{min}) & \text{für } b_{min} \le b \le b_{b\,max} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \tag{2-53}$$

(zur Rechteck- bzw. Gleichverteilung siehe Anhang C). Die nach Gl. (2-51) zur Zerlegung der Varianz Var_X in einen aleatorisch und einen epistemisch bedingten Anteil erforderlichen Integrationen mit den Wahrscheinlichkeitsdichten aus Gl. (2-52) bzw. (2-53) sind elementar und ergeben:

$$E_B[Var_{X|B}] = \frac{1}{36}\frac{b_{max}^3 - b_{min}^3}{b_{max} - b_{min}} \quad \text{(aleatorischer Anteil von } Var_X\text{)}, \tag{2-54a}$$

$$Var_B[E_{X|B}] = \frac{1}{48}(b_{max} - b_{min})^2 \quad \text{(epistemischer Anteil von } Var_X\text{)}. \tag{2-54b}$$

In der folgenden Tabelle 2-10 sind die Varianzanteile nach Gl. (2-54) zur Illustration zahlenmäßig für drei Datensätze bzgl. b_{min} und b_{max} angegeben. Der Erwartungswert von X ist $E_X = (b_{min} + b_{max})/4$.

Tabelle 2-10: Beispielwerte für den aleatorisch und den epistemisch bedingten Anteil der Varianz von X

b_{min}	b_{max}	E_X	Var_X	$E_B[Var_{X\|B}]$	(Anteil)	$Var_B[E_{X\|B}]$	(Anteil)
0,3	1,7	0,5	0,1378	0,0969	(70%)	0,0408	(30%)
0,5	1,5	0,5	0,1111	0,0903	(81%)	0,0208	(19%)
0,7	1,3	0,5	0,0933	0,0858	(92%)	0,0075	(8%)

Im Hinblick auf eine separierte Darstellung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten bei der probabilistischen Modellierung von Expositionen stellt sich allerdings die Frage, ob bzw. wie die Auswirkungen der Varianz einer Inputvariablen nach aleatorischen und epistemischen Anteilen auch mit einfacheren Mitteln untersucht werden können, da eine 2D-Monte-Carlo-Simulation (siehe

Abschnitt 2.5.3.1) für größere Modelle mit zunehmender Anzahl der Inputvariablen kaum noch praktikabel sein dürfte. Eine Lösung dieser Problematik könnte die hierarchische Strukturierung von Expositionsmodellen bieten, um die Anzahl der Variablen in den einzelnen Kompartimenten gering zu halten. Auswirkungen von aleatorischen und epistemischen Anteilen der Varianz einer Inputvariablen könnten in der Varianz des Kompartiment-Outputs zusammengefasst und mit Hilfe einer entsprechend strukturierten Matrix bis zur Zielgröße verfolgt werden.

Für einfache Expositionsmodelle im engeren Sinne, die durch wenige Expositionsfaktoren bestimmt sind, wird die Aufteilung der Varianz für Inputvariable und die Zielgröße in aleatorisch und epistemisch bedingte Anteile u. a. in [RAI 96] und [RAI 98] untersucht. In [RAI 96] wird hierzu eine Linearisierung der Modellgleichung (TAYLOR-Entwicklung 1. Ordnung um die Erwartungswerte) durchgeführt; in [RAI 98] werden multiplikative Risikomodelle betrachtet, deren Linearisierung durch Logarithmieren vorgenommen wird. In beiden Fällen wurde somit zur Vereinfachung der Verfolgung der Varianzanteile bis zur Zielgröße eine Näherung bzw. eine Transformation vorgenommen, wonach eine additive, lineare Modellgleichung vorliegt. Damit wird die separate Analyse der Sensitivität von aleatorischen bzw. epistemischen Unsicherheiten für die resultierende Unsicherheit der Zielgröße auf die übliche ANOVA reduziert.

In beiden Arbeiten wurde diese Methodik beispielhaft für Risikoabschätzungen demonstriert. In [RAI 96] wurde das in [HOFF 94] angegebene Modell zur Abschätzung von Gesundheitsrisiken infolge Ingestion von mit Blei kontaminiertem Fisch verwendet. Die Zielgröße (Hazardrate Z) wird als Quotient des Produkts der Schadstoffkonzentration (X_1) und der Ingestionsrate (X_2) zum Produkt der Körpermasse (X_3) und der Referenzdosis (X_4) berechnet, d. h. $Z = (X_1 \cdot X_2)/(X_3 \cdot X_4)$. Für die drei erstgenannten Inputvariablen wurden Lognormalverteilungen angesetzt, deren Parameter unsicher sind und durchgängig mit Dreiecksverteilungen spezifiziert wurden. Die Referenzdosis wurde als Konstante betrachtet, deren Wert jedoch epistemisch unsicher ist und mit einer Log-Dreiecksverteilung beschrieben wurde. In [RAI 98] wurde ein 4-Faktoren-Modell zur Beurteilung des Krebsrisikos durch Aufnahme von Radon mit dem Trinkwasser betrachtet. Die Faktoren sind: die Radonkonzentration im Wasser, die Trinkwasseraufnahme, der Anteil des absorbierten (nicht ausgegasten) Radons und der Krebsrisikofaktor. Die Spezifizierung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten ist ähnlich zum Modell von [HOFF 94], [RAI 96] strukturiert; allerdings wurden in [RAI 98] zu den epistemischen Unsicherheiten der Parameter der aleatorischen Verteilungen aus unserer Sicht eher fragwürdige Ansätze gewählt. Auf diese Problematik wird in Abschnitt 2.6 näher eingegangen. Nachfolgend wird nur die Darstellung der Ergebnisse der separierten Analyse der Sensitivität von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten erläutert, wozu beispielhaft auf die Ergebnisse der in [RAI 96] durchgeführten (lokalen) Sensitivitätsanalyse Bezug genommen wird.

Zur Verkürzung der Darstellung werden die nach Gl. (2-51) für die Inputgrößen X_i separierten Anteile der Varianz Var_{X_i}, die aus aleatorischen bzw. epistemischen Unsicherheiten resultieren, mit

$$V_i = E_{\theta_i}[Var_{X_i|\theta_i}] \quad \text{(aleatorischer Anteil der Varianz von } X_i\text{)}, \tag{2-55a}$$

$$U_i = Var_{\theta_i}[E_{X_i|\theta_i}] \quad \text{(epistemischer Anteil der Varianz von } X_i\text{)}, \tag{2-55b}$$

bezeichnet (V und U stehen für die Begriffe "Variabilität" bzw. "Unsicherheit"; die als Synonyme für aleatorische bzw. epistemische Unsicherheiten genutzt werden; siehe Abschnitt 1.1).

Da in linearen bzw. linearisierten Modellen die Varianz der Zielgröße die Summe der Varianzen der Inputvariablen ist, kann mit

$$Var_{X_i} = V_i + U_i \tag{2-56}$$

(Gl. (2-51) mit den Bezeichnungen von Gl. (2-55)) die Varianz Var_Z der Zielgröße ebenfalls in einen aleatorischen Anteil V_Z und einen epistemischen Anteil U_Z separiert werden:

$$Var_Z = V_Z + U_Z \quad \text{mit} \quad V_Z = \sum_{i=1}^{n} V_i \quad \text{und} \quad U_Z = \sum_{i=1}^{n} U_i \,. \tag{2-57}$$

Beispiel 2.5

In Tabelle 2-11 sind die Ergebnisse der in [RAI 96] durchgeführten Sensitivitätsanalyse für das oben erläuterte (hypothetische) Beispiel aus [HOFF 94] zusammengestellt. Die Varianz Var_i der Inputvariablen X_1 und X_3 ist mit 92,8% bzw. 73,7% durch deren aleatorische Unsicherheit bestimmt, wogegen für die Inputvariablen X_2 und X_4 die epistemischen Unsicherheiten maßgeblich sind (mit 98,1% bzw. 100%). Die durch Var_i/Var_Z bestimmte Rangfolge des Einflusses der vier Inputvariablen auf die Varianz Var_Z der Zielgröße ist: X_1 (41,3%), X_4 (39,0%), X_2 (15,5%) und X_3 (4,2%). Der aleatorische Anteil der Varianz von Z, V_Z, wird mit 91,8% durch V_1 bestimmt, der epistemische Anteil U_Z mit 66,9% durch U_4. Für die Gesamtvarianz Var_Z sind die aleatorische Unsicherheit von X_1 mit 38,3% und die epistemische Unsicherheit von X_4 mit 39% maßgeblich. Insgesamt haben für Var_Z epistemisch bedingte Unsicherheiten mit 58,3% ein etwas größeres Gewicht als die aleatorisch bedingten Unsicherheiten mit 41,7%.

Tabelle 2-11: Ergebnisse einer Varianz-Sensitivitätsanalyse für die separierten Anteile von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten in einem einfachen Risikomodell zur Ingestion von kontaminiertem Fisch (Zahlenangaben in Prozent, aus [RAI 96])

	aleatorische Unsicherheit			**epistemische Unsicherheit**			**beide**
Risikofaktor	V_i/Var_Z	V_i/V_Z	V_i/Var_i	U_i/Var_Z	U_i/U_Z	U_i/Var_i	Var_i/Var_Z
X_1: Bleikonzentration	38,3	91,8	92,8	3,0	5,1	7,2	41,3
X_2: Ingestionsrate	0,3	0,7	1,9	15,2	26,1	98,1	15,5
X_3: Körpergewicht	3,1	7,5	73,7	1,1	1,9	26,3	4,2
X_4: Referenzdosis	0	0	0	39,0	66,9	100	39,0
Summe	41,7	100	n. a.*)	58,3	100	n. a.*)	100

*) nicht anwendbar

Für eine Reduzierung von Unsicherheiten der Expositionsabschätzung für Personengruppen/Populationen (statistische Verteilung) bzw. für besonders exponierte Einzelpersonen (hohes Perzentil der Verteilung) wären eine genauere Bestimmung der Referenzdosis[31] sowie der möglichen Ursachen der Variabilität der Bleikonzentration in Fischen sinnvoll. Dbzgl. Fragen sind: Woher stammen die Daten und wie wurden sie gemessen? Sind die daraus bestimmten Verteilungsparameter auf den untersuchten Fall anwendbar?

[31] Die Referenzdosis (RfD) ist eine Exposition, bis zu der gesundheitliche Schäden unwahrscheinlich sind [EPA 89]. Die probabilistische Behandlung von Referenzdosen wird u. a. in [SWA 98] und [SLOB 98] diskutiert.

2.6. Spezifikation statistischer Verteilungen für Expositionsfaktoren

In diesem Abschnitt wird eine erste Übersicht zu Aspekten der Spezifikation von statistischen Verteilungen für Expositionsfaktoren, die für MC-Simulationen im Rahmen von probabilistischen Expositionsabschätzungen benötigt werden, gegeben. Deren ausführlichere Untersuchung erfolgt in Kapitel 4 des vorliegenden Berichts im Zusammenhang mit der Ableitung von Anforderungen an die Datenbasis und der Bewertung von Unsicherheiten. Der vorliegende Abschnitt behandelt den klassischen (frequentistischen) Zugang der Statistik. Methodisch alternative Ansätze werden in den Abschnitten 2.7 (BAYES-Methoden) und 2.8 (Modelle zu epistemisch unsicherem Wissen) erläutert.

Für Unsicherheitsanalysen mit Hilfe der 1D-MC-Simulation können seit vielen Jahren kommerziell verfügbare Programme genutzt werden, insbesondere werden Crystal Ball (Decisioneering Inc.) und @Risk (Palisade Corporation) häufig angewendet. Zu den Faktoren von Expositionsmodellen "im engeren Sinne" (siehe Gl. (2-4)) ist eine Vielzahl von Veröffentlichungen zugänglich, wozu in den EPA-Handbücher [EPA 97C] und [EPA 08] eine gute Übersicht gegeben wird, und auf deren Basis generische Verteilungsfunktionen angegeben sind. Damit bzw. mit Verteilungsfunktionen, die aus standortspezifischen Untersuchungen abgeleitet wurden, können relativ einfach MC-Simulationen durchgeführt werden. Überwiegend wird dabei angenommen, dass die Inputfaktoren der Modelle voneinander unabhängig sind. Epistemische Unsicherheiten der verwendeten Verteilungsparameter bzw. zu Modellparametern, die eigentlich Konstanten sind, deren Werte jedoch nicht bekannt sind, werden dabei oft durch einfache "subjektive" Verteilungen spezifiziert, wie Rechteck- und Dreiecksverteilungen (seltener durch eine Trapezverteilung) und im Rahmen von MC-Simulationen wie probabilistische Parameter behandelt. Dies kann aus unserer Sicht zu Missverständnissen und nicht korrekten Bewertungen führen. "Subjektive" Verteilungen sollten u. E. mit adäquaten Methoden behandelt werden, auf die in den nachfolgenden Abschnitten noch eingegangen wird.

Im Rahmen eines festgelegten Expositionsmodells werden die Ergebnisse von MC-Simulationen, sieht man von rechentechnischen Aspekten der Umsetzung ab, durch die Wahl der Verteilungen für die Inputparameter inklusive der Berücksichtigung gegenseitiger Abhängigkeiten (Korrelationen) bestimmt. Die hierzu nötigen Spezifikationen stellen somit inhaltlich den Dreh- und Angelpunkt jeder Simulationsrechnung dar.[32]

In der Regel wird es praktisch nicht möglich sein, für alle sensitiven Parameter eine Datenbasis zu gewinnen, die für eine konkrete Anwendung den jeweiligen Gegebenheiten voll gerecht wird, also nachweislich spezifisch und präzise ist. Sieht man von einfachen Expositionsabschätzungen für den betrieblichen Strahlenschutz ab, wo in der Regel nur wenige Expositionspfade zu betrachten sind, deren Modellierung durch Nutzung von personen- und ortsdosimetrischen Messungen zudem auf wenige Variable beschränkt ist, sind für komplexere Modelle, wie z B. in [BMU 05] dargestellt, viele Parameter zu spezifizieren, deren normative Werte auf umfangreichen Untersuchungen und diversen Quellen der Fachliteratur basieren. Für einzelne sensitive Parameter werden natürlich auch standortspezifische Daten erhoben (beispielsweise zu meteorologischen Parametern), insbesondere für Verhaltensparameter muss jedoch häufig auf Literaturangaben zurückgegriffen werden. Hierzu enthält Abschnitt 2.6.1 einige Anmerkungen. Danach wird auf die Auswahl und die Anpassung von

---

[32] An dieser Stelle wird angenommen, dass eine übliche 1D- oder 2D-MC-Simulation durchgeführt wird. Alternativen wie die Nutzung von BAYES-Methoden oder Verfahren mit unscharfen Wahrscheinlichkeiten werden nachfolgend in den Abschnitten 2.7 bzw. 2.8 angesprochen.

Verteilungen an Daten aus Stichproben (Abschnitt 2.6.2), auf die Behandlung von Abhängigkeiten (Abschnitt 2.6.3) sowie auf oft genutzte Ansätze für epistemisch unsichere Parameter eingegangen, die nicht aus der Stichprobenunsicherheit resultieren (Abschnitt 2.6.4). In Abschnitt 2.6.5 wird auf die Anwendung stochastischer Differentialgleichungen für die Spezifikation des Typs statistischer Verteilungen eingegangen. Abschließend wird in Abschnitt 2.6.6 die Methode des Bootstrapping erläutert, die häufig zur Abschätzungen von Unsicherheiten statistischer Kenngrößen genutzt wird, für die gemessene oder mittels MC-Simulationen berechnete Stichproben vorliegen.

2.6.1. Verwendung von Literaturangaben

Mit den Handbüchern zu Expositionsfaktoren [EPA 97c] und [EPA 08] ist ein sehr umfangreiches Kompendium zu Statistiken von Verhaltensparametern aus den USA verfügbar; die Datenbanken ExpoFacts (siehe [VUO 06]) und RefXP (siehe [UBA 07]) fassen ähnliche Angaben für europäische bzw. für deutsche Verhältnisse zusammen. Damit kann grundsätzlich davon ausgegangen werden, dass zumindest für generische MC-Simulationen für die Verhaltensparameter auf repräsentative Daten bzw. ihre statistischen Verteilungen zugegriffen werden kann. Zu den Unsicherheiten dieser Verteilungen liegen leider oft nur wenige Informationen vor. Als Beispiel einer auffällig positiven Ausnahme sei in diesem Zusammenhang auf [FIL 10] hingewiesen. In dieser Publikation sind neue Ergebnisse zu Expositionsfaktoren für Schweden zusammengestellt. Die statistischen Angaben umfassen jeweils Stichprobenanzahl, Mittelwert, Varianz, Schiefe und Kurtosis, die 1%-, 5%-, 10%-, 25%-, 50%-, 75%-, 90%-, 95%- und 99%-Perzentile der empirischen Verteilungen sowie zu all diesen Statistiken jeweils die 95%-Konfidenzintervalle, die durch Bootstrapping (siehe hierzu Abschnitt 2.6.6) berechnet wurden.

Epistemische Unsicherheiten zu Verteilungen und Verteilungsparametern für viele veröffentlichte Expositionsparameter resultieren meist weniger aus dem zugrunde liegenden Stichprobenumfang, der i. A. ausreichend groß ist, sondern betreffen vielmehr die Methoden der Datenerhebung, deren Kenntnis zur Einschätzung der Variabilität in Abhängigkeit von Mittlungszeiträumen nötigt ist.

In [STAN 96] werden wesentliche Probleme der Nutzung empirischer Daten aus Kurzzeitmessungen für die Beurteilung der auf ein Jahresmittel bezogenen interindividuellen Variabilität, die aus der zeitlichen (intra-)individuellen Variabilität der Verhaltensparameter von Personen resultieren, am Beispiel der Rate der Ingestion von Bodenmaterial durch Kinder verdeutlicht. Neben der reinen Stichprobenunsicherheit entsprechend der Anzahl in die Untersuchung einbezogener Personen und der regional oder lokal bedingten Heterogenität dieses Parameters, hat seine individuelle zeitliche Variabilität einen erheblichen Einfluss auf Verzerrungen der auf Kurzzeitmessungen basierenden Verteilung. Den beiden Randbereichen (kleiner und großer Werte) der Verteilung wird eine deutlich höhere Wahrscheinlichkeit beigemessen, als sie im Jahresmittel latent vorhanden ist. Dieser Effekt entspricht der bekannten Tatsache, dass Mischproben eine geringere Variabilität aufweisen als die zugrunde liegenden Einzelproben.

Neben anderen Ursachen dürfte dieser Effekt mitverantwortlich für die in [BIN 01] aufgezeigten Unstimmigkeiten zur Spezifizierung von Verteilungsarten und von Verteilungsparametern (bei Übereinstimmung der Verteilungsart) für fünf wichtige Expositionsparameter[33] sein, die aus einem

[33] In [BIN 01] wurden untersucht: Körpergewicht, Lebensmittelverzehr (Fleisch und Eier), Atemrate, Aufnahme von Flüssigkeiten (Leitungs- und Trinkwasser) sowie Bodeningestion.

Vergleich dbzgl. Angaben in mehr als 20 Veröffentlichungen aus dem Zeitraum 1990 bis 1996 resultierten. Zu den angegebenen statistischen Kenngrößen (Mittelwerte, Standardabweichungen, 5%-, 50%- und 95%-Perzentile, z. T. auch Minimum und Maximum) liegen z. T. Abweichungen über Größenordnungen vor.

Wie bereits in Abschnitt 2.4.2.2 angemerkt, können unter bestimmten Voraussetzungen (z. B. wenn eine Lognormalverteilung des Parameters anzunehmen ist) statistische Methoden genutzt werden, um aus relativ wenigen Wiederholungen von Kurzzeitmessungen für die Mitglieder einer Personengruppe auf die interindividuelle Langzeit-Variabilität zu schließen [WAL 05].

Die für radiologische Bewertungen übliche Bezugnahme auf eine zeitliche Mittelung der Exposition über ein Jahr entspricht nicht den im konventionellen Gesundheitsschutz für akute Risiken durch chemotoxische Stoffe zugrunde gelegten Mittelungszeiträumen. Da viele Veröffentlichungen zu Expositionsfaktoren im Zusammenhang mit Untersuchungen chemotoxischer Risiken stehen, sollte vor einer Verwendung dieser Ergebnisse in probabilistischen Rechnungen zu Strahlenexpositionen eine Prüfung der Übertragbarkeit erfolgen, um nicht gerechtfertigte Überschätzungen der höheren Perzentile zu vermeiden. Die Problematik der Mittelung zeitlich variierender Größen ist aber nicht nur für Verhaltensparameter, sondern z. B. auch bei intermittierenden Emissionen [LOR 05] oder bei saisonalen Schwankungen der Bioakkumulation [SPE 01] von Bedeutung.

Nach den obigen Darlegungen könnte es aus unserer Sicht hilfreich sein, für die probabilistische Modellierung/Simulation von Strahlenexpositionen auf der Basis von veröffentlichten Studien und zugänglicher Datenbanken Metaanalysen zu den wichtigsten Verhaltensparametern durchzuführen, um daraus unter Beachtung der Anforderungen des Strahlenschutzes für generische Analysen geeignete Verteilungen zu aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten abzuleiten. Zu wichtigen hydrogeochemischen und radioökologischen Transferfaktoren existieren bereits umfangreiche Datensammlungen (zum K_d-Wert z. B. in [EPA 99]). Für Parameter, deren Werte in Abhängigkeit vom Standort über mehrere Größenordnungen variieren können, erscheinen generische Ansätze für statistische Verteilungen jedoch fragwürdig. In solchen Fällen kann auf spezielle standortbezogene Untersuchungen und Expertenschätzungen kaum verzichtet werden.

2.6.2. Auswahl und Anpassung von Verteilungen an Messwerte

Werden für eine Expositionsanalyse (einzelfall-, standort-)spezifische Daten für Modellvariable erhoben, so können diese in MC-Simulationsrechnungen über die empirische Verteilungsfunktion genutzt werden, oder es erfolgt eine Anpassung von geeigneten parametrischen Verteilungen an diese Daten. Für die Extraktion der in den Daten enthaltenen statistischen Informationen und eine kondensierte Informationsvermittlung haben parametrische Verteilungen viele Vorteile. In allen Standardwerken zur statistischen Datenanalyse werden zur Anpassung von Verteilungen an die Stichprobendaten so genannte Anpassungstests (Goodness-of-Fit Tests) beschrieben, unter denen der Chi-Quadrat-Test, der KOLMOGOROV-SMIRNOV-Test und der ANDERSON-DARLING-Test wohl am bekanntesten sind und auch in kommerzieller MC-Software enthalten sind. Sie sind spezielle Anwendungen von Hypothesentests, mit denen geprüft wird, ob die empirische Verteilung ausreichend genau einer bestimmten Verteilungsform folgt. Ob eine bestimmte Verteilungshypothese überhaupt sinnvoll ist, kann vorab durch grafische Gegenüberstellung der empirischen und theoretischen Perzentile geprüft werden. Eine Zusammenfassung wichtiger grafischer und quantitativer

Methoden der Analyse von Stichprobendaten für die Anpassung von parametrischen Verteilungen enthält [EPA 00B]. Eine ausführliche Diskussion der Goodness-of-Fit Tests erfolgt in Abschnitt 4.1.

Beispiel 2.1-7

Zur Veranschaulichung dieser grafischen Methode sind in der Abbildung 2-8 so genannte Q-Q-Plots für die Prüfung der Stichprobendaten aus der Stichprobe SP1 für die Parameter A und D aus Tabelle 2-2 dargestellt. Hierzu wurden die jeweils 20 Daten nach ihrer Größe geordnet und logarithmiert. Die geordneten Daten erhalten einen laufenden Index i, der in diesem Fall von 1 bis 20 geht. Im Idealfall entsprechen die geordneten und logarithmierten Daten den Perzentilen einer Normalverteilung mit einem Erwartungswert μ und einer Standardabweichung σ für

$$p_i = \frac{2 \cdot i - 1}{2n} \qquad \text{mit } i = 1 \text{ bis } n \text{ (n = Stichprobenumfang).} \tag{2-58}$$

Trägt man sie über den Perzentilen κ_{pi} der Standardnormalverteilung auf, so ergibt sich näherungsweise eine Gerade (siehe Gl. (C-6) in Anhang C). In Abbildung (2-8) sind hierzu für beide Stichproben die Regressionsgeraden angegeben, aus denen sich Schätzwerte für die Parameter μ und σ ablesen lassen. Der Vergleich mit den für diese Parameter in Tabelle 2-3 angegebenen Schätzwerten zeigt, dass sich für μ aus der Regressionsgeraden die gleichen Werte ergeben wie aus einer Berechnung der arithmetischen Mittelwerte m_x der logarithmierten Stichprobendaten. Für die Stichproben-Standardabweichung s_x sind geringe Unterschiede zwischen den Schätzwerten nach der Momentenmethode in Tabelle 2-3 und dem Anstieg der Regressionsgeraden in Abbildung 2-8 festzustellen. Dies verdeutlicht, dass verschiedene Schätzfunktionen für die Standardabweichung existieren, die etwas voneinander abweichen.

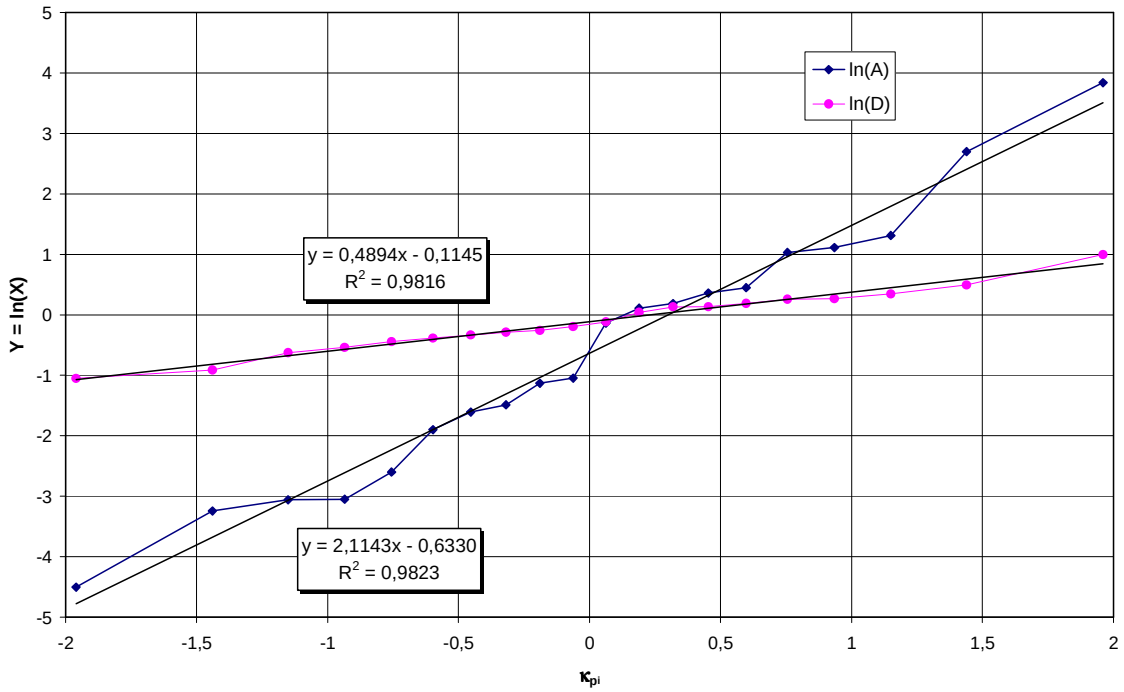


Abbildung 2-8: Q-Q-Plot zur Prüfung der Daten zu den Parametern A und D der Stichprobe SP1 auf lognormale Verteilung

Vor einer Anpassung von Verteilungen an Messergebnisse sollte geprüft werden, ob Unsicherheiten der Messungen so groß sind, dass sie sich signifikant auf die Auswahl der Verteilungsart oder die Schätzung der Verteilungsparameter auswirken. Der Einfluss von Messunsicherheiten auf die Ermittlung von Verteilungen wird häufig nicht beachtet, kann aber in bestimmten Fällen durchaus beachtlich sein. Eine statistische Methode zur Berücksichtigung von bekannten Messunsicherheiten bei der Berechnung von statistischen Kennwerten für Stichproben ist in [ZHEN 05] dargelegt.

Zur Vorauswahl von Verteilungen bzw. Verteilungsfamilien, für die Anpassungstests durchgeführt werden sollen, können fachspezifische und statistische Überlegungen einbezogen werden. Die oft anzutreffende rein statistische Vorgehensweise (Welcher Verteilungstyp lässt sich am besten an vorliegende Daten anpassen?) wird in [HAT 94B] diskutiert und kritisiert. Sie resultiert aus dem positivistischen Ansatz der frequentistischen Statistik/Wahrscheinlichkeitstheorie, dass die Modelle (hier: Wahrscheinlichkeitsdichte/Verteilungsfunktion eines Parameters) möglichst genau/effizient eine komprimierte Darstellung der empirischen Daten liefern sollen. Die Bemühungen, anhand der Daten ein besseres Verständnis der physikalischen, chemischen, biologischen etc. Prozesse zu gewinnen, welche die zeitliche Variabilität, die räumliche Heterogenität bzw. die als stochastisch bezeichneten Schwankungen[34] verursachen, verlangen aber die Einbeziehung aller Vorkenntnisse (engl. "total body of evidence") zum untersuchten Parameter. Dies entspricht dem Paradigma der BAYES'schen Wahrscheinlichkeitstheorie, die in Abschnitt 2.7 beschrieben wird. Anhaltpunkte, für welche Modellparameter auf Basis fachspezifischer Überlegungen bestimmte Verteilungsarten als plausible Kandidaten anzusehen sind, finden sich u. a. in [HAT 94B], [BRAT 96] und [CUL 99] (siehe Anhang C). Logische Ableitungen zu fundamentalen statistischen Verteilungen enthält [JAY 03].

Ausgehend von fachlichen Überlegungen sind statistische Analysen der Inputdaten natürlich sehr hilfreich. So können aus der Gegenüberstellung von Schätzwerten zur Schiefe und Wölbung Schlüsse dazu gezogen werden, ob Verteilungsarten ausgeschlossen sind oder sinnvolle Kandidaten darstellen [CUL 99]. Aus Q-Q-Plots ist oft ersichtlich, ob Annahmen zur Art der Verteilung revidiert werden müssen. Ein Beispiel hierfür sind Untergrundwerte in der natürlichen Aktivität von Proben, die eine Erweiterung des üblichen Ansatzes 2-parametriger auf eine 3-parametrige Lognormalverteilung verlangen können [BAR 01]. Vergleicht man Schätzwerte für Momente empirischer Verteilungen mit unteren sowie oberen Perzentilen, so lässt sich oft erkennen, dass die Stichprobe nicht aus einer einfachen Grundgesamtheit stammen kann, sondern einer Mischung aus mehreren Verteilungen entspricht. In solchen Fällen sind ursprüngliche Annahmen zu revidieren und Stratifizierungen angebracht, wozu gemischte Verteilungen in ihre "einfachen" Bestanteile zerlegt werden können (siehe z. B. [ZHEN 04]).

Einer sachgerechten Behandlung der Mischungen von Verteilungen ist besondere Aufmerksamkeit zu widmen, wenn Entscheidungen von den höheren Perzentilen probabilistischer Expositionsabschätzungen abhängen. Für konservative Expositionsbewertungen werden üblicherweise höhere Perzentile, wie das 95%- oder das 99%-Perzentil herangezogen. Folglich sind Konfidenzintervalle auch für diese Perzentile zu bestimmen. In Stichproben aus einer Population werden jedoch die Randbereiche extrem kleiner bzw. großer Werte oft nur unzureichend erfasst. Subpopulationen mit anderen Verhaltensparametern müssten z. B. durch andere Verteilungen spezifiziert werden als die Gesamtpopulation. Bekannte Beispiele hierfür sind die höhere Bodeningestion durch Kinder mit

---

[34] Die "stochastische" Variabilität ist i. A. eine Folge von nicht kontrollierten/gemessenen Einflussfaktoren.

Pica-Verhalten [LAG 87], ein höherer Fischverzehr von Anglern [MAY 96], [BUR 99] oder unter Küstenbewohnern sowie die Subpopulationen von Vegetariern bzw. Veganern, die den Verzicht auf Ernährung mit tierischen Produkten durch erhöhten Verzehr pflanzlicher Produkte kompensieren. In diesem Zusammenhang sind drei Aspekte zu berücksichtigen:

- Werden Subpopulationen bei Stichprobenerhebungen zwar einbezogen, jedoch nicht separat betrachtet, kann dies bei sehr großen Stichproben, die prozentual auch extreme Subpopulationen erfassen, zur Überschätzung der Variabilität für den Hauptanteil der Population führen.
- Bei Stichproben mit mittlerem bzw. geringem Umfang ist die Wahrscheinlichkeit der Erfassung von extremen Subpopulationen gering. Wenn sie in einer Stichprobe vorkommen, werden sie oft als "Ausreißer" eliminiert, ohne den Ursachen des Extremverhaltens nachzugehen.
- Extrem (hohe bzw. niedrige) Parameterwerte der Verteilung von Subpopulationen werden mit den für die Gesamtpopulation geschätzten Verteilungsparametern unzureichend berücksichtigt.

Diese Problematik betrifft die Wahrscheinlichkeit nicht beobachteter/gemessener systematischer Abweichungen ("Wahrscheinlichkeit der Überraschung", [HAT 94B], [BIER 99], [HAMM 99]).

Bei kleinem bis mittlerem Stichprobenumfang sind fachliche Begründungen der Verteilungsart besonders wichtig, da sich einige Verteilungen, abhängig von den Parameterwerten, stark ähneln, so dass aus dem Anpassungstest auch eine unzutreffende Auswahl des Verteilungstyps resultieren kann. Für MC-Simulationen können dabei erhebliche Fehler resultieren, wenn nach einer nur auf den Daten basierenden Bestimmung des Verteilungstyps epistemische Unsicherheiten zu den Verteilungsparametern (z. B. durch eine Metastudie oder Expertenschätzungen) in das Modell integriert werden. Dies wird im folgenden Beispiel verdeutlicht.

Beispiel 2.6

Zur vereinfachten Illustration dieser Problematik betrachten wir keine Stichproben, sondern vergleichen die Lognormalverteilung mit der WALD-Verteilung (die auch als inverse Normalverteilung bzw. inverse GAUSS-Verteilung bezeichnet wird; siehe Anhang C) für zwei unterschiedliche Werte des Parameters σ der Lognormalverteilung. Die Parameter ε und τ der WALD-Verteilung (siehe Abschnitt C.3.7 im Anhang C; üblich werden für diese Parameter die Buchstaben μ und λ verwendet) wurden so bestimmt, dass die Erwartungswerte und die Varianzen der beiden Verteilungen jeweils übereinstimmen:

$$\text{Ln:} \quad E[X] = \exp(\mu + \sigma^2/2) \quad \text{und} \quad Var[X] = \exp(2\cdot\mu + \sigma^2)\cdot\left(\exp(\sigma^2) - 1\right), \tag{2-59}$$

$$\text{Wa:} \quad \varepsilon = E[X] \quad \text{und} \quad \tau = \varepsilon^3 / Var[X]. \tag{2-60}$$

In Tabelle 2-12 sind zwei Parametersätze für alle Parameter zusammengestellt. Abbildungen 2-9 zeigt die damit berechneten Wahrscheinlichkeitsdichten der Lognormal- und der WALD-Verteilung.

Tabelle 2-12: Zwei Parametersätze zum Vergleich der Lognormal- und der WALD-Verteilung

	X ~ Ln(μ,σ)		**beide Verteilungen**		**X ~ Wa(ε,τ)**	
Parametersatz	**μ**	**σ**	**E[X]**	**Var[X]**	**ε**	**τ**
a: $f_X(x)$ fast übereinstimmend	5	0,5	168,17	8.033,0	168,17	592,1
b: $f_X(x)$ voneinander abweichend	5	1,5	457,14	1.773.800	457,14	53,86

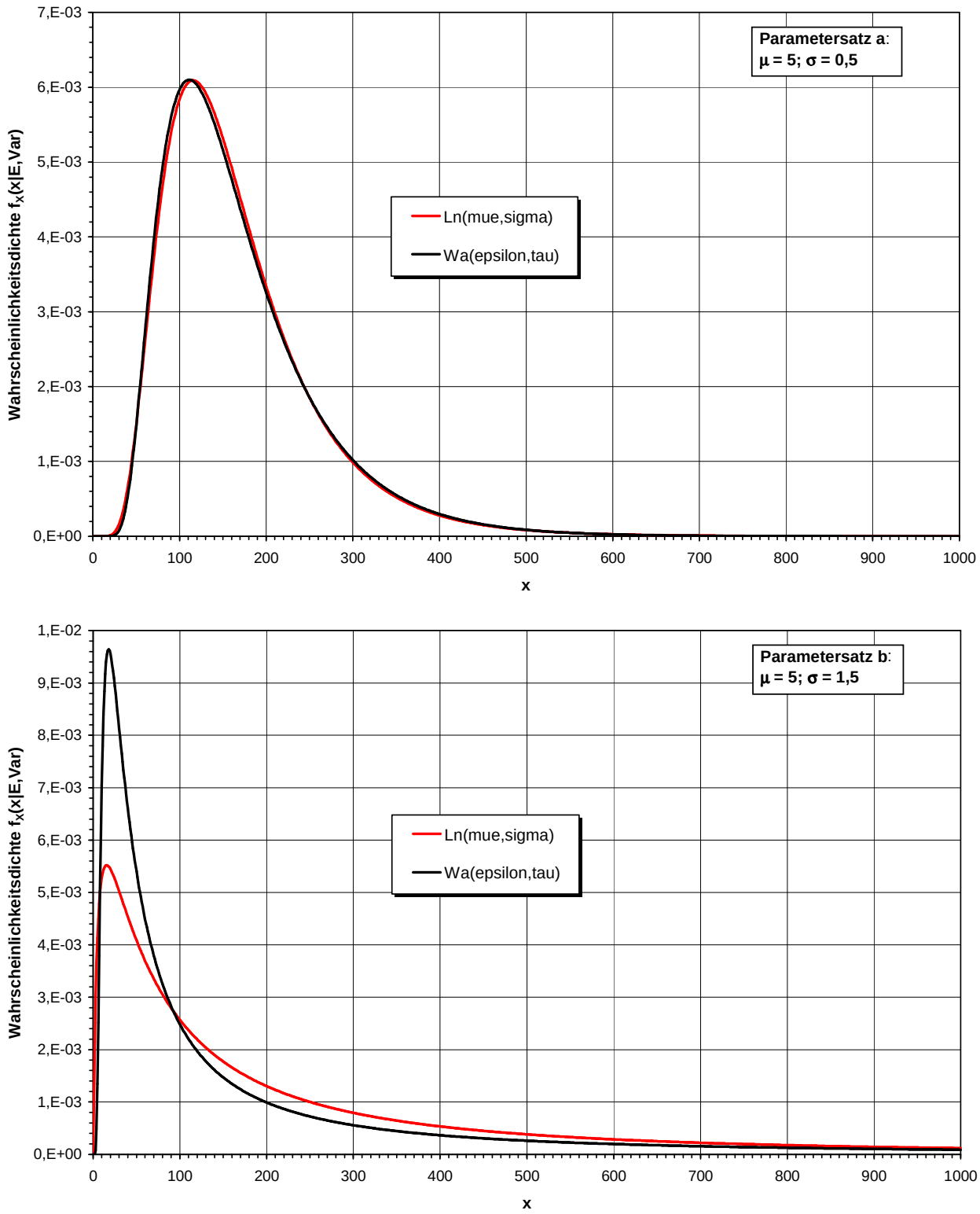


Abbildung 2-9: Gegenüberstellung der Wahrscheinlichkeitsdichten der Lognormal- und der WALD-Verteilung für zwei Parametersätze; Erwartungswert E[X] und Varianz Var[X] jeweils gleich; zu den Werten der Verteilungsparameter siehe Tabelle 2-12

Aus Abbildung 2-9 ist ersichtlich, dass für den Parametersatz "a" beide Verteilungen fast perfekt übereinstimmen. Bei einem Anpassungstest anhand von Stichproben hängt es in diesem Parameterbereich vom Zufall ab, welche der beiden Verteilungstypen rechnerisch favorisiert wird. Legt man nun z. B. für den Parameter X den Typ "WALD-Verteilung" fest und bestimmt anschließend für dessen Verteilungsparameter (ε und τ) oder für den Erwartungswert der Modell-Inputvariablen X epistemisch begründete Unsicherheitsbereiche, so resultieren andere Ergebnisse der MC-Simulation des Modells, als wenn man sich in Auswertung der Messungen für $X \sim Ln(\mu,\sigma)$ entschlossen hätte. Die Auswirkungen einer falschen Wahl des Verteilungstyps hängen dabei von der Struktur des Gesamtmodells ab.

Ähnliche Vergleiche können unter Einbeziehung weiterer 2-parametriger linkssteiler Verteilungen vorgenommen werden, wie der Gamma-Verteilung und der WEIBULL-Verteilung (siehe Abschnitt 4.1). Aus unserer Sicht sind Empfehlungen wie in [EPA 00B] und [UBA 07], die Anpassung von Verteilungen an Messwerte mit einer 4-parametigen GF-Verteilung (generalisierte F-Verteilung) vorzunehmen, aus der sich die o. g. und weitere Verteilungen als spezielle Fälle (Unterfamilien) ergeben, zu hinterfragen. Ausschließlich statistisch basierte Vergleiche zur Auswahl und Anpassung von Verteilungen für expositionsrelevante Parameter, bei denen fachspezifische (wie physikalische, chemische, biologische, ökologische etc.) Überlegungen und Ansätze zur Auswahl von bestimmten Verteilungsarten außer Acht gelassen werden, sind jedoch weit verbreitet.

In [HAAS 97] wurde zu diesem Thema ein instruktiver Vergleich zur statistischen Identifikation von vier linkssteilen Verteilungen (Lognormal-, Gamma-, WEIBULL- und WALD-Verteilung) anhand numerisch simulierter Stichproben dargestellt. Es wurden jeweils Stichproben aus einer dieser vier Verteilungen erzeugt und damit Anpassungstests für alle vier Verteilungen durchgeführt. Hierzu wurden die Stichprobenumfänge zwischen 10 bis 200 variiert, die Werte der Variationskoeffizienten VC (siehe Gl. (2-20)) von 0,1 bis 100. Erwartungsgemäß steigt der Anteil von korrekten Identifikationen des (erzeugenden) Verteilungstyps sowohl mit dem Umfang der Stichprobe als auch mit zunehmendem Wert des Variationskoeffizienten, weil mit einem höheren Stichprobenumfang Abweichungen zwischen den Verteilungstypen besser erkannt und mit zunehmendem Wert des Variationskoeffizienten die Wahrscheinlichkeitsdichten der untersuchten Verteilungstypen stärker voneinander abweichen (vgl. Abbildung 2-9, in der die betrachteten Fälle a und b VC-Werten von 0,53 bzw. 2,9 entsprechen). Bei VC =1 und einem Stichprobenumfang von 50 ergaben die Simulationsrechnungen von [HAAS 97] z. B. Anteile korrekter Identifikationen von 0,4 bis 0,7. Aus diesem Ergebnis wurde gefolgert, dass auf kleinen Stichprobenumfängen basierende Anpassungen für eine Nutzung in MC-Simulationen suspekt sind, und es wurde eine Formalisierung der Auswahl zwischen ähnlichen Verteilungen durch Anpassungstests empfohlen. Diese Schlussfolgerungen sind aus unserer Sicht unzureichend, da sie keine Einbindung des fachspezifischen oder anderweitigen Vorwissens zu den Inputparametern anstreben (siehe hierzu Abschnitt 2.7).

Liegen Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen vor, so können sich fehlerhafte Bestimmungen ihrer Verteilungen in verstärktem Maße auf die Zielgröße auswirken, weil ein häufigeres gleichzeitiges Erscheinen von Werten aus Randbereiche der Verteilungen der Inputvariablen die Varianz und die hohen/kleinen Perzentile der Zielgröße erheblich beeinflussen können. Auswirkungen der Variabilität und Unsicherheit von Inputvariablen auf die Zielgröße, die additiv oder multiplikativ in das Modell eingehen, können sich verstärken (bei positiver Korrelation) bzw. abschwächen (bei negativer Korrelation). Die Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen ist ein grundsätzliches Problem der probabilistischen Expositions- und Risikomodellierung.

2.6.3. Berücksichtigung von Abhängigkeiten/Korrelationen zwischen Inputvariablen

Zur Abhängigkeit bzw. Korrelation[35] zwischen Inputvariablen liegen oft nur wenige Informationen vor. Für viele Inputvariable kann zwar eine statistische Unabhängigkeit plausibel begründet werden; wenn dies aber nicht der Fall ist, sind Aussagen zu ihrer gegenseitigen Abhängigkeit erforderlich. Aus gemeinsamen Messungen von betroffenen Inputvariablen kann ihre Korrelation statistisch geschätzt werden. Dies verlangt aber einen darauf ausgerichteten Beprobungsplan, wonach aus den gewonnenen Daten gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichten bzw. Verteilungsfunktionen (vgl. Abschnitt B.1.3 in Anhang B) ermittelt oder Korrelationskoeffizienten berechnet werden können.

Neben einer direkten Abhängigkeit zwischen zwei Variablen oder ihrer gemeinsamen Abhängigkeit von einer dritten (versteckten) Variablen, können Abhängigkeiten zwischen mehreren Variablen auch implizit aus gemeinsamen Beschränkungen resultieren.[36]

Wenn genügend statistische Informationen zu Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen vorhanden sind, werden meistens SPEARMAN'sche Rangkorrelationskoeffizienten berechnet, mit denen nach einem Verfahren aus [IMAN 82] Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen bei der MC-Simulation berücksichtigt werden können. Anhand von Daten und/oder auf der Basis von fachspezifischen Modellen können gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilungen auch mit Hilfe von so genannten Copulas[37] konstruiert werden. Diese Methode wird im Abschnitt 4.3 behandelt.

Aus dem oft unzureichenden Wissen zu Abhängigkeiten zwischen Inputvariablen resultieren für die probabilistische Expositionsmodellierung ggf. schwer lösbare Probleme. Nach [SMI 92] stellen die Probleme der Spezifizierung von gemeinsamen Verteilungsfunktionen oft ein Hindernis für die Akzeptanz von MC-Simulationen für regulatorische Zwecke dar. Methodische Beispiele, welche die Auswirkungen einer Vernachlässigung existierender Korrelationen quantitativ verdeutlichen, sind u. a. in [SMI 92], [BUK 95] und [HAAS 99] enthalten. Das folgende Beispiel verdeutlicht die Auswirkung von Korrelationen für das Produkt von zwei Lognormalverteilungen.

---

[35] Wir benutzen den Begriff "Abhängigkeit" zur Beschreibung deterministischer oder statistischer Zusammenhänge zwischen Inputvariablen in einem allgemeinen Sinn, wogegen mit "Korrelation" ein mathematischer Begriff zur Quantifizierung von Abhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen gemeint ist (z. B. Korrelation zwischen Atemrate und Körpergewicht, wie in [BEA 96] für Frauen, Männer und Kinder bei unterschiedlicher Aktivität analysiert).

[36] So sind in MC-Simulationen zur probabilistischen Schätzung der über verschiedene Pfade möglichen Expositionen z. B. Beschränkungen zur Verteilung von Expositionszeiten (Summe ist durch Anzahl der Stunden im Jahr begrenzt) oder zu Verzehrsmengen für unterschiedliche Lebensmittelklassen (physiologisch bedingte Beschränkungen für die Summe aller verzehrten Lebensmittel) zu berücksichtigen. Zur Berücksichtigung gemeinsamer Beschränkungen für Inputvariable, z. B. in der Form $B(X_{c1}, \ldots, X_{cn}) = b$ (oder $\leq b$), wobei b ein konstanter Wert ist oder einer bestimmten Verteilung genügt liegt nach unserem Kenntnisstand noch keine abgesicherte Methodik vor. Eine Diskussion der Auswirkungen von gemeinsamen Beschränkungen (engl. constraints) auf die Sensitivitätsanalyse von Modellen der Form von Gl. (2-9) bei konstantem Wert der Beschränkungsfunktion enthält [BOR 08].

[37] Ein Problem der probabilistischen Modellierung resultiert daraus, dass die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{\mathbf{X}}(X_1, X_2, \ldots, X_n)$ der n Inputvariablen eines Modells bei gegenseitigen nichtlinearen Abhängigkeiten i. A. nicht eindeutig durch die Randverteilungsfunktionen $F_i(x_i)$ und die Korrelationskoeffizienten bestimmt ist. Nach dem Satz von SKLAR existiert jedoch immer eine Funktion C: $[0,1]^n \rightarrow [0,1]$, mit der die gemeinsame Verteilungsfunktion über die Randverteilungen dargestellt werden kann: $F_{\mathbf{X}}(X_1, X_2, \ldots, X_n) = C(F_1(X_1), F_2(X_2), \ldots, F_n(X_n))$. Diese als "Copula" bezeichnete Funktion ist eindeutig, wenn alle Randverteilungsfunktionen stetig sind. Copulas können z. B: genutzt werden, um Abhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen gezielt zu modellieren [NEL 07].

Beispiel 2.7

Sind $X_1 \sim Ln(\mu_1,\sigma_1)$ und $X_2 \sim Ln(\mu_2,\sigma_2)$ zwei linear mit dem Korrelationskoeffizienten $\rho_{1,2}$ abhängige lognormal verteilte Parameter, so ist ihr Produkt $Z = X_1 \cdot X_2$ lognormal verteilt, $Z \sim Ln(\mu_Z,\sigma_Z)$, mit $\mu_Z = \mu_1 + \mu_2$ und $\sigma_Z = (\sigma_1^2 + \sigma_1^2 + 2 \cdot \rho_{1,2} \cdot \sigma_1\ \sigma_2)^{1/2}$. Ist z. B. $\sigma_1 = 1$ und $\sigma_2 = 1{,}5$, dann nimmt σ_Z für $\rho_{1,2} = -1$ den Wert 0,5 an, im Fall $\rho_{1,2} = 0$ den Wert 1,8 und für $\rho_{1,2} = 1$ einen Wert von 2,5 an.

2.6.4. Verteilungen für epistemisch unsichere Parameter

Epistemische Parameterunsicherheiten können qualitativ nach ihrer Ursache in drei verschiedene Klassen eingeteilt werden [HOFF 99], [OBER 04]:

1. Werden für eine Expositionsmodellierung standortspezifische Messungen durchgeführt, wobei hier deren Repräsentativität vorausgesetzt sei, so resultieren Stichprobenunsicherheiten, die vom Stichprobenumfang abhängen, sowie von der Messzeit bestimmte Messunsicherheiten. Dies sind statistische Unsicherheiten, deren Verteilungen i. d. R. charakterisiert und quantifiziert werden können. Hierzu werden gängige Methoden der klassischen Statistik oder der BAYES-Statistik zur Datenanalyse angewandt, deren Ergebnisse in diesen Fällen i. d. R. gut übereinstimmen. (siehe Abschnitt 4.2). Unsicherheiten dieser Klasse haben eine solide empirische Basis und sind weitgehend objektiv, also unabhängig von subjektiven Einflüssen der Analyse.[38] Diese betrifft die "Unsicherheit statistischer Schätzungen".
2. Ein sehr häufig auftretender Fall sind Unsicherheiten der Übertragung von empirischen Daten und Informationen bzw. daraus abgeleiteter statistischer Verteilungen für Inputvariable von Expositionsmodellen, die aus anderen Untersuchungen stammen und für den konkreten Fall nicht repräsentativ sein müssen (z. B. wegen nationaler oder regionaler Besonderheiten bzgl. der menschlichen Verhaltensparameter, weil die geologischen, geochemischen oder biologischen Gegebenheiten standortspezifisch sind, weil in den anderen Untersuchungen zeitliche oder räumliche Mittelungen vorgenommen wurden, die für den konkreten Fall nicht passend sind, oder weil z. B. Ansätze zu Verteilungstypen oder Angaben zu Verteilungsparametern in der ausgewerteten Fachliteratur voneinander abweichen). Zu dieser Klasse von Unsicherheiten kann durch eine sorgfältige Analyse i. d. R. eine subjektiv bedingte, jedoch auf empirischem und fachspezifischem Wissen basierende Verteilung für die untersuchte Inputvariable bzw. einen unsicheren Verteilungsparameter einer Inputvariablen im Sinne eines BAYES-Priors abgeleitet werden (siehe Abschnitt 2.7). Selbst bei gleicher Informationsbasis können jedoch verschiedene Analysten zu unterschiedlichen Verteilungen gelangen, wenn die Informationsverarbeitung nicht auf standardisierten Methoden basiert (einen Ansatz zur standardisierten Ableitung von Verteilungsfunktionen für Expositionsfaktoren enthält [MADD 04]). Die Unsicherheiten der Quantifizierung von Parameterverteilungen haben zwar eine empirische Basis; die abgeleiteten Wahrscheinlichkeitsdichten sind aber subjektiv geprägt und nicht als Häufigkeitsverteilungen im Sinne der frequentistischen Statistik zu interpretieren. Die Unsicherheiten resultieren aus

[38] Ein typisches Beispiel hierzu ist die χ^2-Verteilung mit n-1 Freiheitsgraden für den Schätzer der Varianz einer normal verteilten Zufallsgröße bei einem Stichprobenumfang von n (siehe z. B. [RIN 97] oder [CAS 02]).

partiellem Unwissen. Abgeleitete Verteilungsfunktionen sind ein Maß der subjektiven Überzeugung des Analysten.[39] Diese Klasse betrifft die "Unsicherheit der Informationsassimilation".

3. Die dritte Klasse epistemischer Unsicherheiten betrifft Angaben zu Modellparametern, für deren Schätzung zwar auf fachliches Wissen und Erfahrungen Bezug genommen werden kann und wozu oft Expertenmeinungen erhoben werden, die aber genau genommen nur Vermutungen sind, deren Wahrheitswert zum aktuellen Zeitpunkt nicht überprüft, sondern nur vage beurteilt werden kann. Solche Unsicherheiten können z. B. zu hydrogeologischen Parametern für nicht zugängliche oder noch nicht untersuchte Bereiche in der Umgebung eines Tiefenlagers für radioaktive Abfälle vorliegen, den Zeitraum und die Ausmaße der nächsten Eiszeit oder auch die Lebensweise, Ernährungsgewohnheiten etc. der Menschen in 10.000 Jahren betreffen. Ihre Quantifizierung beschränkt sich i. d. R. auf die Angabe eines vermuteten Wertebereiches für den Parameter, der u. U. aber auch konservativ durch physikalische Grenzen untersetzt werden kann. Die Angabe derartiger Wertebereiche ist für Sensitivitätsanalysen sinnvoll, aus deren Ergebnissen eine Einschätzung zur Relevanz dieser Unsicherheit für die Zielgröße gewonnen werden kann.[40] Diese Klasse betrifft die "Unsicherheit von Vermutungen".

Epistemische Unsicherheiten werden in MC-Simulationsrechnungen häufig analog zur Variabilität von Modellparametern behandelt. Für solche Parameter wird dann z. B. eine Modellierung mit Gleichverteilungen oder Dreiecksverteilungen vorgenommen, wenn die zugrunde liegende Information eine Begrenzung des Wertebereiches ist, bzw. wenn außerdem ein "wahrscheinlichster" Wert geschätzt wurde. Reichen epistemische Unsicherheiten über Größenordnungen, werden auch Log-Gleichverteilungen bzw. Log-Dreiecksverteilungen angesetzt (siehe z. B. [BUR 96], [CUL 99]). Gemäß [FER 96] sollten für Unsicherheiten der Informationsassimilation bzw. von Vermutungen für epistemisch unsichere Parameter angenommene Verteilungen jedoch nicht mit den Methoden der klassischen Statistik (z. B durch MC-Simulation) behandelt und interpretiert werden. Auch aus unserer Sicht sollten epistemische Unsicherheiten (unzureichendes Wissen) mit anderen Methoden behandelt und interpretiert werden als statistisches Wissen zur Variabilität von Parametern.

Im Hinblick auf die o. g. zweite Klasse epistemischer Unsicherheiten (auf empirischem Wissen basierende subjektive Verteilungen) wird in [SEI 96] die Verwendung einfacher Verteilungstypen kritisiert, weil sie nicht das gesamte verfügbare Wissen zum jeweiligen Parameter darstellen. Ihre exakten Begrenzungen sind zudem nicht plausibel, wenn mit diesen Verteilungen zum Ausdruck gebracht werden soll, dass man sehr geringe/unsichere Kenntnisse über einen Parameter hat. Bei genauerer Analyse der verfügbaren Informationen sollte nach [SEI 96] eher von stetigen, stetig

---

[39] Eine daraus für ein Ereignis abgeleitete Wahrscheinlichkeit, z. B. $Pr(X \leq x)$, hat etwa den Sinn eines fairen Wetteinsatzes in %, den man (der Analyst) bei einer Wette auf das Eintreten des Ereignisses bereit wäre zu setzen, wenn man dafür bei tatsächlichem Eintreten dieses Ereignisses einen Betrag von 100% erhalten würde.

[40] Ein pragmatisches Ergebnis von Sensitivitätsanalysen zu Unsicherheiten dieser Klasse kann z. B. sein, dass man sich in einem Variantenvergleich nicht für eine Handlungsoption mit unvorhersehbaren Risiken großen Ausmaßes entscheidet. Ein Beispiel für die Unsicherheit der Eingrenzung von Unsicherheiten dieser Klasse ist die Untersuchung von Cl-36 für das Endlagerprojekt Yucca Mountain in Nevada (USA). Für die TSPA (Total System Performance Assessment) zur Sicherheitsanalyse wurde zunächst für das Deckgebirge mit einer Unsicherheit der Perkolation von ca. zwei Größenordnungen gerechnet. Nach der Detektion von hohen Cl-36-Konzentrationen in einem Versuchsstollen, die früheren Atombomben-Versuchen zugeschrieben wurde, musste diese Schätzung um Größenordnungen erhöht werden.

differenzierbaren Wahrscheinlichkeitsdichten mit flachen Verläufen gerechnet werden. Der Ansatz von Gleichverteilungen bei alleiniger Kenntnis von Begrenzungen ist zudem widersprüchlich.[41]

2.6.5. Stochastische Differentialgleichungen

Neben empirischen Erfahrungen, logischen Ableitungen und der Bezugnahme auf den zentralen Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie (vgl. Anmerkungen in Anhang C zur Normal- und Lognormalverteilung) ist die Modellierung der Parametervariabilität mit Hilfe von stochastischen Differentialgleichungen eine weitere Methode zur Begründung von Verteilungsarten.

Die Untersuchung stochastischer Differentialgleichungen geht auf die mathematische Modellierung der BROWN'schen Molekularbewegung zurück (Anfang des vorigen Jahrhunderts), deren Trajektorie mit der LANGEVIN-Gleichung

$$dx = a \cdot x \cdot dt + b \cdot dw \tag{2-61a}$$

beschrieben wird. In der ursprünglichen Anwendung der Gl. (2-61) steht x für die Geschwindigkeit eines Teilchens, $a \cdot x$ (mit $a < 0$) für die Reibungskraft, mit der das Teilchen abgebremst wird, und $b \cdot dw$ beschreibt thermische Zufallskräfte, denen das Teilchen ausgesetzt ist. Darin ist w(t) ein stochastischer Prozess (thermisches Rauschen). Man geht davon aus, dass w(t) mit w(0) = 0 ein so genannter WIENER-Prozess ist, ein Rauschprozess mit unabhängigen, normalverteilten Zuwächsen $dw \sim N(0, \sqrt{dt})$, für dessen Erwartungswert und Varianz die Beziehungen

$$E[w(t)] = 0, \quad Var[w(t)-w(s)] = t - s \quad \text{für } 0 \le s \le t \tag{2-62}$$

gelten (siehe z. B. [KLOE 95], [VANK 07], [JAC 10]). Die Differentialform der Gl. (2-61a) ist für stochastische Differentialgleichungen (SDE, stochastic differential equation) üblich, da der Prozess w(t) nicht differenzierbar ist. In der Fachliteratur findet man aber auch die formale Schreibweise

$$\frac{dx}{dt} = a \cdot x + b \cdot \xi(t)\,, \tag{2-61b}$$

(siehe [KLOE 95], [ØKS 03]) mit $E[\xi(t)] = 0$ und $E[\xi(t) \cdot \xi(t')] = \delta(t-t')$, wobei $\delta(t-t')$ die DIRAC'sche δ-Funktion bezeichnet, die für $t \neq t'$ den Wert Null hat, deren Integral über eine Umgebung von $t = t'$ jedoch den Wert 1 annimmt. Mit w(t) bzw. ξ(t) wird auch x(t) ein stochastischer Prozess. Mit der Anfangsbedingung $x(0) = x_0$ erhält man für Gl. (2-61) unter Beachtung von Gl. (2-62) folgende Lösung für den Erwartungswert und die Varianz von x(t),

$$E[x(t)] = x_0 \exp(a \cdot t)\,, \qquad Var[x(t)] = \frac{b^2}{2a}\left(\exp(2 \cdot a \cdot t) - 1\right). \tag{2-63}$$

---

[41] Der Ansatz einer Gleichverteilung bei ausschließlicher Kenntnis von Bereichsgrenzen enthält mehr Informationen als gegeben und führt zu Inkohärenzen. Sind z. B. für zwei unabhängige Parameter X_1 und X_2 ausschließlich die Intervallgrenzen $[a_1, b_1]$ bzw. $[a_2, b_2]$ gegeben, so resultiert für die Summe $X_1 + X_2$ das Intervall $[a_1+a_2, b_1+b_2]$. Setzt man für beide Variable Gleichverteilungen in ihren Begrenzungen an, so resultiert durch die Faltung nach Gl. (B-23) von Anhang B eine Trapezverteilung und keine Gleichverteilung in dem für die Summe $X_1 + X_2$ gültigen Intervall. Analoge Inkohärenzen resultieren z. B. auch für das Produkt oder den Quotienten der beiden Variablen. Führt man eine nichtlineare monotone Transformation $Y_1 = g(X_1)$ aus, so liegt Y_1 offenbar im Intervall $[g(a_1), g(b_1)]$; mehr ist zu Y_1 nicht bekannt. Dann könnte aber nur eine der beiden Variablen (X_1 oder Y_1) gleichverteilt sein.

Die höheren zentralen Momente von x(t) verschwinden. Für a < 0 strebt der Erwartungswert für $t \to \infty$ gegen Null und die Varianz strebt gegen $b^2/2|a|$. Der Prozess x(t) kann dann für große Zeiten ($t >> 1/2|a|$) durch eine Normalverteilung $N(0,\sigma)$ mit $\sigma^2 = b^2/2|a|$ beschrieben werden. Die Variable x ist eine Zufallsgröße, deren stochastische Eigenschaften gemäß Gl. (2-61) durch Addition vieler voneinander unabhängiger zufälliger Ereignisse resultieren. Für a > 0 definiert a die Drift und $b^2/2a$ die Volatilität des Prozesses x(t), für den in diesem Fall keine stationäre Lösung resultiert.

Mit Gl. (2-61) und Gl. (2-62) wird ein MARKOV-Prozess beschrieben. So nennt man Prozesse "ohne Gedächtnis", bei denen ein Folgezustand nur durch den aktuellen Zustand $x(t_n)$ bestimmt wird, jedoch nicht mehr von der Vorgeschichte abhängt, die mit $x_i = x(t_i)$ durch die diskretisierte Trajektorie $\{x_i, t_i\}$ mit i von 0 bis n-1 gegeben ist. Damit gilt:

$$f(x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; ...; x_0, t_0) = f(x_{n+1}, t_{n+1} \mid x_n, t_n). \qquad (2\text{-}64)$$

Zu SDE mit MARKOV-Eigenschaft lassen sich oft statistische Kennwerte (Mittelwert, Varianz, etc.) ableiten. Eine besondere Bedeutung hat hierbei die FOKKER-PLANCK-Gleichung. Dies ist eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Für die allgemeine SDE

$$dx = A\big(x(t), t\big) \cdot dt + B\big(x(t), t)\big) \cdot dw \qquad (2\text{-}65)$$

kann die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, t|x_0, t_0)$ mit der FOKKER-PLANCK-Gleichung

$$\frac{\partial f(x, t \mid x_0, t_0)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(A\big(x(t), t\big) \cdot f(x, t \mid x_0, t_0)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(B^2\big(x(t), t)\big) \cdot f(x, t \mid x_0, t_0)\big) \qquad (2\text{-}66)$$

berechnet werden. Gl. (2-66) ist keine stochastische, sondern eine partielle Differentialgleichung 2. Ordnung. Für die LANGEVIN-Gleichung Gl. (2-61) lässt sich leicht zeigen, dass mit A(x(t),t) = a und B(x(t),t) = b die oben für x angegebene Normalverteilung die stationäre Lösung von Gl. (2-66) ist. Allgemein beschreiben der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (2-66) die Drift und der zweite Term die Fluktuationen (die Volatilität). Ist $B(x(t),t) = b \cdot x$, so ergibt sich eine geometrische BROWN'sche Bewegung mit multiplikativen Zuwächsen, deren stationäre Lösung durch eine Lognormalverteilung beschrieben wird.[42]

Insgesamt ist ein breites Feld praktischer Anwendungen der Modellierung von dynamischen stochastischen Systemen mit zeitlichem oder räumlichem Rauschen zu verzeichnen (z. B. Neutronenrauschen in der Reaktorphysik, thermisches Rauschen in der Elektronik, Modellierung von Wirkungsmechanismen in der Pharmakologie, Korrosion von Materialoberflächen etc.).

Bzgl. der Modellierung von (Strahlen-)Expositionen sind stochastische Differentialgleichungen aus unserer Sicht für zwei Aufgabenbereiche von Bedeutung: (1) Modellierung von Transportprozessen, (2) Bestimmung des Typs parametrischer Verteilungen von Modellvariablen, die als stochastisch parameter- oder fremderregte Systeme beschrieben werden können.

---

[42] Eine bekannte Anwendung solcher stochastischer Differentialgleichungen kommt aus der Finanzmathematik. Mit dem BLACK-SCHOLES-Modell wird die Entwicklung von Aktienkursen analog zur geometrischen BROWN'schen Bewegung beschrieben (Nobelpreis für Wirtschaftswissenschaften 1997).

Im Rahmen der vorliegenden Untersuchung ist nur der letztgenannte Punkt relevant. Generell ist hierzu anzumerken, dass viele bekannte statistische Verteilungen (z. B. Normal-, Lognormal- und Exponentialverteilung) Lösungen von SDE sind, die den zugrunde liegenden Prozess beschreiben. Diesbezügliche Kenntnisse sind für die sinnvolle Auswahl von Verteilungsarten wichtig. Auf die Ableitung von Normal- bzw. Lognormalverteilungen aus stochastischen Differentialgleichungen wurde bereits eingegangen. Die WALD-Verteilung (inverse Normalverteilung) resultiert z. B. auch aus der LANGEVIN-Gleichung und beschreibt hier die Wahrscheinlichkeit des Zeitpunktes, zu dem die Trajektorie einen bestimmten Wert überschreitet.

Zur Bestimmung von Wahrscheinlichkeitsdichten probabilistischer Modellparameter mit Hilfe von SDE liegen zur Modellierung von Expositionen einige Ansätze vor, die z. B. die berufsbedingte Aufnahme toxischer Aerosole durch Inhalation betreffen (siehe [KOI 00], [FLY 04]). Diese Ansätze lassen sich auch auf die Inhalation radioaktiver Aerosole (z. B. bei Tätigkeiten/Arbeiten in Räumen) übertragen.

Das eigentliche Problem solcher Ansätze liegt in der Modellierung der jeweiligen Prozessfaktoren. Informationen, die aus stochastischen Differentialgleichungen zur Verteilungsart des untersuchten Prozesses resultieren, können qualitativ hilfreich sein, hängen jedoch auch erheblich von diversen Annahmen zu den untersuchten dynamischen Prozesse und den Eigenschaften ihrer stochastischen Beeinflussung (Rauschprozesse mit speziellen Autospektraldichten) ab.

2.6.6. Bootstrapping zur Analyse der Unsicherheit statistischer Kenngrößen

Für eine Zufallsgröße X, für die eine Stichprobe des Umfangs n, $\{x\}_n = (x_1, \ldots, x_n)$ vorliegt, können der Erwartungswert E[X] und die Varianz Var[X] mit den bekannten verteilungsunabhängigen Stichprobenfunktionen geschätzt werden (siehe Abschnitt B.2.1 in Anhang B). Die Unsicherheit der Schätzung des Erwartungswertes kann nach Gl. (B-39) beurteilt werden; die Standardabweichung des geschätzten arithmetischen Mittelwertes ist die Wurzel des durch n geteilten Schätzwertes der Varianz von X. Für einige statistische Verteilungen (z. B. Normalverteilung) stehen analytische Methoden auch zur Schätzung von Konfidenzbereichen für die üblichen statistischen Kenngrößen (Punktschätzer) zur Verfügung. Dies gilt aber nicht für alle wichtigen statistischen Kenngrößen von gebräuchlichen Verteilungen. Für einige Verteilungen mit komplizierter Parametrisierung, und wenn die einer Stichprobe zugrunde liegende Verteilungsfunktion $F_X(x)$ unbekannt ist, müssen verteilungsunabhängige Verfahren benutzt werden, um Konfidenzgrenzen oder andere Maße für die Unsicherheit von Schätzungen statistischer Kenngrößen (Erwartungswert, Varianz, Perzentile, etc.) oder für Funktionen dieser Kenngrößen zu bestimmen. Für die Zielgröße von probabilistischen (Expositions-)Modellen, für die Stichproben durch MC-Simulation berechnet werden, wird nur in elementaren Fällen ein bekannter Verteilungstyp vorliegen, weshalb die statistische Analyse dieser Ergebnisse i. d. R. auf verteilungsunabhängige Verfahren angewiesen ist.

Das wohl wichtigste und am häufigsten genutzte Verfahren zur Lösung dieser Aufgabe ist das so genannte Bootstrapping[43] [EFRO 79], wozu eine Vielzahl von Methoden entwickelt wurde, um auch für spezielle Kenngrößen und bei Besonderheiten der Stichprobe (z. B. für Verteilungen mit ausgeprägter Schiefe) anhand der vorliegenden Daten hinreichend genaue Abschätzungen von

[43] Bootstrapping (engl. bootstrap = Stiefelschlaufe; in der englischen Version zieht sich Baron Münchhausen an den eigenen Stiefeln aus dem Sumpf) bedeutet sinngemäß, statistische Analysen mit vorhandenen Daten vorzunehmen.

Konfidenzgrenzen oder für andere statistische Kenngrößen berechnen zu können (siehe [EFRO 86], [EFRO 93], [DIC 96], [HOLL 99]). Die Grundidee des Bootstrapping besteht darin, die empirische Verteilung der Stichprobendaten $F_{\{x\}n}$ als ausreichend guten Repräsentanten der wahren (aber unbekannten) Verteilungsfunktion F_X zu verwenden.

In der Inferenzstatistik interessiert man sich für die Verteilung statistischer Kenngrößen, um von einer Stichprobe auf die Grundgesamtheit zu schließen. Während den parametrischen Verfahren eine analytisch definierte Verteilungsfunktion der Zufallsgröße mit wenigen Verteilungsparametern zugrunde gelegt wird, wobei die Werte der Verteilungsparameter nur geschätzt werden können, nutzt das Bootstrapping die empirische Verteilung der Stichprobenwerte aus, denen jeweils diskrete Wahrscheinlichkeiten von 1/n beigemessen werden. Aus der empirischen Verteilung (Stichprobe) wird dazu eine sehr große Anzahl K von Bootstrap-Stichproben vom Umfang n durch zufälliges Ziehen aus der Datenmenge $\{x\}_n$ "mit Zurücklegen" erzeugt. In einer solche Bootstrap-Stichprobe $\{x\}_{k;n}$, wobei k ein laufender Index für die Bootstrap-Stichproben ist (k = 1 bis K), sind sicherlich einige Daten aus $\{x\}_n$ zwei- oder mehrmals vertreten, andere dagegen nicht. Berechnet man nun mit allen K Bootstrap-Stichproben für die Schätzfunktion W aus Gl. (B-34) (siehe Anhang B) die Werte $w_k = \Psi(x_{k;1}, \ldots , x_{k;n})$, so streuen diese um den Stichprobenschätzwert $w = \Psi(x_1, \ldots, x_n)$. Aus der statistischen Verteilung der Werte w_k kann ein Konfidenzbereich für den Schätzwert w bestimmt werden, der als Bootstrap-Intervall bezeichnet wird. Zur Berechnung von Bootstrap-Intervallen für höhere Perzentile der empirischen Verteilung $F_{\{x\}n}$ muss die Anzahl K der Bootstrap-Stichproben natürlich größer sein als für die Bestimmung der Unsicherheit der Schätzung des Medianwertes. Die Güte der Unsicherheitsanalyse mittels Bootstrapping hängt von K ab, wird aber wesentlich durch den Stichprobenumfang n und die Eigenschaften der zugrunde liegenden Verteilung F_X der untersuchten Grundgesamtheit bestimmt, die zwar nicht bekannt ist, für die jedoch mit den höheren Momenten der Stichprobe $\{x\}_n$ wichtige Kenngrößen wie Schiefe und Kurtosis geschätzt werden können. Asymptotisch, d. h. für große Werte von n und K, konvergieren mit Bootstrapping berechnete Konfidenzgrenzen zu den Werten der klassischen Inferenzstatistik (vgl. [FREY 99], [SCHU 99]).

Analog können für multivariate Stichproben mit Hilfe des Bootstrappings auch Konfidenzbereiche zur Schätzung von Korrelationskoeffizienten ermittelt werden, z. B. für die Sensitivitätsanalyse mittels Vergleich von Korrelationen zwischen den Inputvariablen X_i und der Zielgröße Z eines (Expositions-)Modells (vgl. Abschnitt 2.5.2.3). Das Bootstrapping ist eine flexible und vielseitig einsetzbare Methode zur Analyse der Unsicherheit von Stichprobenschätzungen. Neben gängigen Anwendungen zur Schätzung von Konfidenzbereichen für statistische Kenngrößen aus Stichproben (z. B. in [JAC 98], [FIL 10]) wird das Bootstrapping für die Untersuchung spezieller Kenngrößen genutzt; z. B. für die Auswertung von Stichproben mit "zensierten" Daten ("Messwert kleiner als Erkennungsgrenze") [ZHAO 04], zur Quantifizierung der Unsicherheit geschätzter Gewichtsanteile gemischter Verteilungen [ZHEN 04] und zur Unsicherheit von Sensitivitätskoeffizienten [MOKH 05].

In Abschnitt 4.2.3 werden Anwendungen des Bootstrappings zur Quantifizierung von Parameterunsicherheiten untersucht, woraus sich Vorbehalte zur Anwendung dieser Methode ergeben. Dies betrifft insbesondere die Interpretation von Ergebnissen zur Schätzungen von Konfidenzbereichen.

2.7. BAYES-Methoden

Die BAYES-Theorie ist ein Zweig der Wahrscheinlichkeitstheorie/Statistik, deren grundlegende Ansätze und Methoden sich von denen der klassischen (frequentistischen) Theorie unterscheiden ([JEFF 61], [SAV 72], [FIN 74], [BOX 92], [BERN 00], [MARI 01], [CONG 01], [JAY 03], [GREG 05] ist eine Auswahl empfehlenswerter Monographien zur BAYES-Theorie und ihren Anwendungen)[44].

BAYES-Methoden stehen nicht im Gegensatz zur MC-Simulation probabilistischer Modelle. Beide Methoden können sinnvoll kombiniert werden, indem z. B. zu epistemischen Unsicherheiten der Schätzungen von Verteilungsparametern aus Stichproben Methoden der BAYES-Inferenz verwendet und die daraus resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die MC-Simulationsrechnungen genutzt werden. Zur Umsetzung von BAYES-Methoden werden ebenfalls Monte-Carlo-Verfahren genutzt, insbesondere zur Berechnung komplizierter Integrale mit Markov-Chain-Monte-Carlo-Sampling (MCMC), [CHEN 00], [ROB 04]. Mit diesem sehr effektiven Verfahren der Berechnung von Integralen über Wahrscheinlichkeitsdichten wurde die Nutzung der BAYES-Theorie zur Modellierung und Analyse von Systemen mit unsicheren Parametern für viele Anwendungsgebiete praktikabel. Damit können für große, hierarchisch strukturierte Systemmodelle probabilistische Berechnungen mit relativ geringem Aufwand realisiert werden.

Die nachfolgenden Darlegungen sind aber weniger auf die rechentechnischen Vorteile der BAYES-Methoden ausgerichtet. Im Vordergrund stehen die Erläuterung konzeptioneller Unterschiede zur klassischen (frequentistischen) Statistik sowie einiger Aspekten, die in der Fachliteratur auch als Schwachpunkte der BAYES-Theorie diskutiert werden.

2.7.1. Grundlegende Ansätze der BAYES-Theorie

Der grundsätzliche Unterschied zwischen der frequentistischen und der BAYES'schen Wahrscheinlichkeitstheorie ist konzeptionell und betrifft die Definition des Begriffs der "Wahrscheinlichkeit". Nach dem frequentistischen Ansatz wird die Wahrscheinlichkeit für zufällige Ereignisses definiert, und zwar als Grenzwert der Häufigkeit in einem Ensemble bei (unendlich) vielen Wiederholungen von Versuchen/Messungen, bei denen dieses Ereignis möglich ist (z. B. Wahrscheinlichkeit für das Ereignis "Kopf" beim Münzwurf). Nach dem BAYES-Ansatz wird Wahrscheinlichkeit als "Maß für eine begründete Erwartung" zu einem Ereignis verstanden [COX 46], wobei mit "begründet" die Einbeziehung des dbzgl. vorhandenen Wissens gemeint ist. Die BAYES'sche Definition orientiert sich an der Umgangssprache und wird auch auf Aussagen angewandt. Der frequentistische Begriff der Wahrscheinlichkeit ist dagegen auf Ereignisse beschränkt, deren Eintreten wiederholt untersucht werden kann.

Damit ist es in der BAYES-Theorie auch sinnvoll, von der Wahrscheinlichkeit zu sprechen, dass eine nicht genau bekannte Konstante Θ kleiner als der Wert θ ist oder im Intervall $[\theta, \theta + d\theta]$ liegt. Mit Θ kann ein physikalischer Parameter in einem Ausbreitungsmodells (z. B. der K_d-Wert) gemeint sein; er kann aber auch für die Parameter einer Verteilungsfunktion stehen (z. B. für den Erwartungswert μ und die Standardabweichung σ einer Normalverteilung, deren "wahre" Werte mit Messungen von Stichproben zwar nie exakt bestimmt, aber im Sinne von begründeten Erwartungen quantifiziert werden können). Dementsprechend befasst sich die BAYES-Theorie konzeptionell auch

---

[44] Eine prägnante Übersicht zu wesentlichen Aspekten der BAYES-Theorie gibt [LIN 90].

mit epistemischen Unsicherheiten, wogegen die frequentistische Statistik konzeptionell auf die Quantifizierung von aleatorischen Unsicherheiten ausgerichtet ist.[45]

Im Unterschied zu anderen Theorien, die auch epistemische Unsicherheiten zum Gegenstand haben (siehe Abschnitt 2.8), basiert die BAYES-Theorie auf der BOOL'schen Algebra der symbolischen Logik, wonach z. B. der Wahrheitswert einer doppelt verneinten Aussage dem Wahrheitswert der ursprünglichen Aussage entspricht: $A \Leftrightarrow \neg(\neg A)$. Zudem wird immer von einem abgeschlossenen Raum Ω der Menge aller möglichen Aussagen A, B, C usw. (bzw. aller möglichen Werte einer Größe X) ausgegangen, dem das Wahrscheinlichkeitsmaß 1 zugeordnet wird: $P(\Omega) = 1$. Dies besagt, dass Ω eine wahre, absolut sichere Aussage ist (wie z. B. "$-\infty < X < +\infty$" für eine Zufallsgröße).

<u>Anmerkung zur axiomatischen Definition von Wahrscheinlichkeiten</u>

Wahrscheinlichkeiten können nach KOLMOGOROV [KOL 33] für eine Menge Σ von Untermengen aus Ω definiert werden, die auch die mit $\varnothing$ bezeichnete "leere" Menge enthalten, die mit $A \in \Sigma$ (d. h. A ist in Σ enthalten) auch dessen Negation/Komplement A^c enthalten, und die für eine abzählbare Menge $\{A_i\}_{i=1,\,2,\ldots} \in \Sigma$ auch deren logische Summe/Vereinigung $\bigcup_i A_i$ (d. h. "A_1 oder A_2 oder …") enthält. Eine solche Menge definiert in Ω eine so genannte Σ-Algebra. Für diese haben Wahrscheinlichkeitsfunktionen/Wahrscheinlichkeiten P die folgenden Eigenschaften:

(1): $P(A) \geq 0$ für alle $A \in \Sigma$.

(2): $P(\Omega) = 1$.

(3): Für eine Menge $\{A_i\}_{i=1,\,2,\ldots} \in \Sigma$ disjunkter Elemente (d. h. $A_i \cap_{i \neq j} A_j = \varnothing$; A_i und A_j haben keine gemeinsame Schnittmenge) gilt $P\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i P(A_i)$.

Aus den KOLMOGOROV-Axiomen kann auch die Wahrscheinlichkeit für bedingte Aussagen bzw. Ereignisse A|B (d. h. A, wenn B gegeben/bekannt ist) abgeleitet werden. Sie basiert auf der Berechnung der Wahrscheinlichkeit des logischen Produkts von A und B ($A \cap B$, d. h. "A und B", wofür auch die Schreibweisen "$A \cdot B$" bzw. "A, B" verwendet werden):

$$P(A \cap B) \equiv P(A \cdot B) = P(A \mid B) \cdot P(B) = P(B \mid A) \cdot P(A). \qquad (2\text{-}67a)$$

Ist $P(B) \neq 0$, so kann man den rechten Teil von Gl. (2-67a) umstellen, womit das BAYES-Theorem

$$P(A \mid B) = \frac{P(B \mid A) \cdot P(A)}{P(B)} \qquad (2\text{-}67b)$$

---

[45] Die im Rahmen von klassischen (frequentistischen) Ansätzen durchgeführte MC-Simulation für Modelle, in denen Inputgrößen oder deren Verteilungsparameter epistemische Unsicherheiten aufweisen, für die mit statistischen Verteilungen gerechnet wird, nimmt Anleihe vom BAYES'schen Begriff der Wahrscheinlichkeit, ohne dies immer deutlich zu machen. Für die Interpretation der Ergebnisse ist dies aber wichtig. Die Wahrscheinlichkeit, dass in einer definierten Situation die effektive Dosis für eine bestimmte Person unter bzw. über einem Grenzwert liegt, ist als begründete Erwartung unter Berücksichtigung der verbliebenen epistemischen Unsicherheiten zu verstehen. Eine Wahrscheinlichkeitsaussage im Sinne einer Häufigkeit des frequentistischen Ansatzes macht in diesem Fall keinen Sinn, weil es sich um ein einmaliges Ereignis handelt. Die Dosis liegt über oder unter dem Grenzwert; wir wissen es nur nicht ganz genau - und quantifizieren diese Unsicherheit mit Wahrscheinlichkeiten im BAYES'schen Sinne.

resultiert. Wie in [COX 46] und [JAY 03] gezeigt, kann das BAYES-Theorem auch ohne Bezugnahme auf die KOLMOGOROV'schen Axiome durch logisches und konsistentes Schließen abgeleitet werden. In üblichen Anwendungen des BAYES-Theorems bedeutet A eine Aussage über eine epistemisch unsichere Größe und B eine Aussage, die neue (empirische) Informationen über diese Größe liefert. Dann ist A|B die unter Berücksichtigung von B aktualisierte (bedingte) Aussage zu A. Mit dem BAYES-Theorem wird somit der Prozess des Lernens formalisiert dargestellt.

Ist $\{A_i\}_{i=1,2,\ldots}$ eine vollständige Menge von disjunkten Aussagen,

$$P\left(\bigcup_i A_i\right) = 1 \text{ und } P\left(A_i \cap A_j\right) = 0 \quad \text{für } i \neq j\,, \tag{2-68}$$

so kann P(B) immer folgendermaßen zerlegt werden:

$$P(B) = \sum_j P(B \mid A_j) \cdot P(A_j)\,. \tag{2-69}$$

Mit Gl. (2-69) nimmt Gl. (2-67b) für eine spezielle Aussage A_i die Form

$$P(A_i \mid B) = \frac{P(B \mid A_i) \cdot P(A_i)}{\sum_j P(B \mid A_j) \cdot P(A_j)} \tag{2-70}$$

an. Die Gl. (2-70) stellt die Revision von ursprünglichen Hypothesen zu den Wahrscheinlichkeiten $P(A_i)$ des Zutreffens von alternativen Aussagen A_i in Auswertung neuer Erkenntnisse B dar. Die im Nenner von Gl. (2-70) stehende Summe ist offensichtlich nur ein Normierungsfaktor, P(B), der nicht von den Hypothesen $\{A_i\}_{i=1,2,\ldots}$ abhängt, sondern die Normierung der Wahrscheinlichkeiten $P(A_i|B)$ gewährleistet:

$$\sum_i P(A_i \mid B) = 1\,. \tag{2-71}$$

Die Werte $P(A_i)$ werden in der BAYES-Theorie als <u>Prior</u>-Wahrscheinlichkeit bezeichnet, die Werte $P(A_i|B)$ heißen <u>Posterior</u>-Wahrscheinlichkeit. Der Zusammenhang zwischen diesen Größen wird durch die Größen $P(B|A_i)$ vermittelt, welche die "Likelihood" von B unter der Annahme A_i zum Ausdruck bringen.

Das hauptsächliche Problem der BAYES-Theorie und die wesentliche Kritik an ihren Ansätzen betrifft die Festlegung der Prior-Wahrscheinlichkeiten. Unter den Anhängern der BAYES-Theorie existieren hierzu zwei verschieden Schulen, die üblich als "objektive" bzw. "subjektive" Bayesianer bezeichnet werden. Die "objektiven Bayesianer" verwenden überwiegend nicht-informative Priorverteilungen, die sich aus allgemeinen logischen Überlegungen und Kriterien wie der maximalen Informationsentropie (entspricht der völligen "Konfusion" bei der Auswahl von Priorwerten) und der Invarianz für bestimmte Transformationen der Variablen ableiten lassen (siehe z. B. [JEFF 61], [BERN 00], [JAY 03]). Auf diesem Wege resultiert oft eine gute (z. T. genaue) Übereinstimmung mit Ergebnissen der frequentistischen Statistik. Die "subjektiven Bayesianer" bevorzugen dagegen Priorverteilungen, die auf persönlichen Einschätzungen oder Expertenschätzungen basieren (siehe

z. B. [SAV 72], [FIN 74], [LIN 90]) und gehen auf Interpretationen der Wahrscheinlichkeit als Maß für den Preis von fairen Wetten zurück.[46]

2.7.2. BAYES'sche Statistik

Ein wesentlicher Unterschied zur klassischen Inferenzstatistik, in der die Parameter einer Verteilung als feste (wenn auch unbekannte) Größen und die Realisierungen einer Stichprobe als Zufallsgrößen betrachtet werden, besteht darin, dass in der BAYES-Statistik die Daten einer Beprobung als feste Werte betrachtet werden, mit denen die Kenntnis über die Verteilungsparameter, denen hier eine Wahrscheinlichkeitsverteilung zugeordnet wird, verbessert wird. Sie zeichnet methodisch den Weg der Verbesserung von Kenntnissen durch neue empirische Daten/Messungen nach. Mit der aus der klassischen Statistik bekannten Likelihood-Funktion wird über das normierte Produkt mit einer Priordichte der Verteilungsparameter deren Posteriordichte berechnet. Es sei $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsgröße X, die eine parametrische Verteilung mit dem Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ spezifiziert. Für eine zufällige (iid[47]) Stichprobe $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ vom Umfang n aus dieser Verteilung entspricht die Likelihood-Funktion

$$L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) = \prod_{i=1}^{n} f_X(x_i \mid \boldsymbol{\theta}) \tag{2-72}$$

formal der gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsdichte der n Stichprobenwerte bei gegebenem $\boldsymbol{\theta}$. In der Likelihood-Funktion $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ werden aber im Unterschied zur rechten Seite von Gl. (2-27) die Stichprobenwerte $\mathbf{x}$ als fixierte und die Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ als variable Größen betrachtet. Bezeichnet man mit $f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta})$ die Priordichte des Verteilungsparameters, so kann analog zur Gl. (2-70) die Posteriordichte von $\boldsymbol{\theta}$ gemäß

$$f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) = \frac{L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) \cdot f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta})}{\int L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) \cdot f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}} \tag{2-73}$$

berechnet werden. Das im Nenner der rechten Seite von Gl. (2-73) stehende Integral hängt explizit nur noch von den Stichprobenwerten $\mathbf{x}$ ab, stellt eine mit der Priordichte $f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta})$ gewichtete mittlere Verteilung der Stichprobenwerte dar und gewährleistet die Normierung der Posteriordichte.

Aus Gl. (2-73) können u. a. Punktschätzer für $\boldsymbol{\theta}$ (z. B. Erwartungswert, Perzentile) auf die übliche Weise berechnet werden (vgl. Anhang B). Aus den Perzentilen von $\boldsymbol{\theta}$ lassen sich "glaubhafte" (engl. credible) Intervalle für $\boldsymbol{\theta}$ zu vorgegeben Irrtumswahrscheinlichkeiten α bestimmen.[48]

---

[46] Eine aufschlussreiche Diskussion prominenter Vertreter dieser beiden Richtungen der BAYES-Theorie ist in der Zeitschrift Bayesian Analysis(2006) **1**(3)385-471 mit den Hauptbeiträgen [BER 06] und [GOLD 06] veröffentlicht.

[47] iid (independent and identically distributed) bedeutet, dass die einzelnen Messwerte x_i voneinander unabhängig sind und aus der gleichen Wahrscheinlichkeitsverteilung stammen. Die iid-Annahme ist für die klassische statistische Inferenz von grundlegender Bedeutung. Die BAYES-Statistik kann dagegen mit der etwas schwächeren Forderung der Austauschbarkeit (engl. "exchangeability") begründet werden, die besagt, dass die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte der Stichprobenwerte invariant gegenüber Permutationen ist (siehe z. B. [FIN 74], [LIN 81], [BERN 00]).

[48] Nach ISO wird für frequentistisch abgeleitete Vertrauensintervalle traditionell der Begriff Konfidenzintervall (confidence interval) beibehalten, wogegen für BAYES-Intervalle (aus der Verteilung von θ berechnet), der Begriff "Überdeckungsintervall" (coverage interval) gewählt wird. Nach dem Sinn der Worte müsste es genau anders herum sein. Deshalb wird hier der von Bayesianern geprägte Begriff "glaubhaftes" (credible) Intervall verwendet.

Die glaubhaften Intervalle lassen sich oft einfach und anschaulich bestimmen. Im klassischen Verfahren ist dagegen für das vorgegebene Vertrauensniveau ein Testverfahren mit Hilfe einer "Teststatistik" anzuwenden, die jedoch in vielen Fällen unbekannt ist.[49]

Mit Gl. (2-73) kann unter Berücksichtigung der Stichprobenwerte **x** auch eine erwartete Verteilung zum Wert x_* einer zukünftigen Probe berechnet werden, die als Posterior-Prognosedichte bezeichnet wird (engl.: posterior predictive distribution):

$$f_{Prog}(x_* \mid \mathbf{x}) = \int f_X(x_* \mid \boldsymbol{\theta}) \cdot f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) d\boldsymbol{\theta}. \tag{2-74}$$

Setzt man in Gl. (2-74) $f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ gemäß Gl. (2-73) ein, so ist ersichtlich, dass in der BAYES-Theorie für die Vorhersage der Verteilung von Zufallsgrößen (hier: x_*) immer über die Priordichten der epistemisch unsicheren Verteilungsparameter integriert wird. Es wird ein mit den Priordichten gewichtetes Mittel der Likelihood-Funktion berechnet. Im Unterschied zur 2D-MC-Simulation (vgl. Abschnitt 2.4.2.3) ist eine separierte Darstellung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten nicht Gegenstand der BAYES-Methoden. Das Resultat ist eine bestimmte Wahrscheinlichkeitsdichte oder Verteilungsfunktion für die Zielgröße, in der alle Unsicherheiten der Inputvariablen verarbeitet sind. Dies entspricht der engen Verknüpfung der BAYES-Methoden mit der Entscheidungstheorie.

Nicht-informative Priorverteilungen

Zur Ableitung von Priorverteilungen, die für Parameter von statistischen Verteilungsfunktionen möglichst vollständiges Nicht-Wissen repräsentieren sollen, gibt es diverse Regeln und Ansätze, die allerdings auch für einfache Fälle zu voneinander abweichenden Ergebnissen führen [BERN 00], [JAY 03]. Häufig angewandt wird der so genannten JEFFREYS-Prior der hier für eine Verteilung, die nur von einem skalaren Parameter θ abhängt, angegeben wird. Für eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\theta)$ ist hierzu das FISHER-Informationsmaß

$$h(\theta) = \int f_X(x \mid \theta) \cdot \left(-\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log(f_X(x \mid \theta) \right) dx \tag{2-75}$$

zu berechnen, aus dem sich bis auf einen konstanten Normierungsfaktor die Priordichte

$$f_\Theta(\theta) \propto \sqrt{h(\theta)} \tag{2-76}$$

berechnen lässt. Für die Normalverteilung ist $f(\mu,\sigma) \propto 1/\sigma$ ein nicht-informativer Prior. Dem Umstand, dass dieser Prior nicht auf 1 normiert werden kann, wird keine substantielle Bedeutung beigemessen, weil sich Normierungskonstanten in Gl. (2-37) wegkürzen. Genau genommen ist jedoch immer ein Grenzübergang von einem normierbaren Prior durchzuführen. In [JAY 03] wird gezeigt, dass diese Prozedur ohne weitergehende Annahmen nicht eindeutig ist, jedoch mit Hilfe von Forderungen zur Invarianz gegenüber bestimmten Transformationen durch die Lösung der daraus resultierenden Funktionalgleichung definiert werden kann.

---

[49] Der Unterschied zwischen der Berechnung von Konfidenzgrenzen für Schätzungen von statistischen Kenngrößen ("Punktschätzern") nach der klassischen bzw. der BAYES'schen Methode wurde z. B. in [BAR 01] bzgl. der Schätzung des Erwartungswertes lognormal verteilter Zufallsgrößen aus Stichprobendaten dargestellt.

Konjugierte Priordichten

Für einige (einfache) Anwendungen der BAYES-Formel Gl. (2-70) bzw. Gl. (2-73) kann die Priordichte für die Parameter von statistischen Verteilungen sinnvoll so gewählt werden, dass die resultierende Posteriordichte vom gleichen Verteilungstyp ist, wodurch sich die Aktualisierung bei Eingang neuer Stichprobenwerte extrem vereinfacht und analytisch vorgenommen werden kann. So ist für normal verteilte Zufallsgrößen $X \sim N(\mu,\sigma)$ mit bekannter Standardabweichung σ der Prior $\mu \sim N(\nu,\tau)$ konjugiert und führt zu einer Posteriordichte $f(\mu|x)$ mit $\mu \sim N(\rho(\nu\cdot\sigma^2+x\cdot\tau^2),\rho\cdot\sigma^2\cdot\tau^2)$ mit $\rho = 1/(\sigma^2+\tau^2)$. Genügt die diskrete Zufallsgröße X einer Binomialverteilung, $X \sim Bin(n, \theta)$, so ist die Beta-Verteilung $\theta \sim Bt(\alpha,\beta)$ eine konjugierte Priordichte, mit der bei x (von n) erfolgreichen Versuchen die Posteriordichte $\theta|x \sim Be(\alpha + x, \beta + n - x)$ resultiert.

Ein Überblick zu konjugierten Priordichten kann z. B. [ROB 07] entnommen werden. Generell ist eine Anwendung konjugierter Priordichten sorgfältig zu prüfen, da sie oft weder nicht-informativ sind oder nicht zur Beschreibung subjektiver Einschätzungen passen. Eine dbzgl. Ausnahme ist u. a. die Beta-Verteilung als Prior für dichotome Zufallsgrößen (BERNOULLI- bzw. Binomialverteilung), mit der sowohl nicht-informative ("objektive", formale) als auch subjektive Priorverteilungen zur Wahrscheinlichkeit θ des Ausgangs von BERNOULLI-Versuchen adäquat dargestellt werden können.

Beispiel 2.8

Zur Diskussion der statistischen Inferenz für BERNOULLI-Prozesse nach klassischem (frequentistischen) Ansatz bzw. nach der BAYES-Theorie wird in [LIN 76] ein Beispiel diskutiert, das hier zur Illustration des Einflusses von Priordichten auf die Ergebnisse von Berechnungen mit BAYES-Methoden genutzt sei. Es werden n BERNOULLI-Versuche durchgeführt, für die sich x als Anzahl des beobachteten (positiven) Ereignisse ergeben hat. Im Beispiel von [LIN 76] wurden n = 12 Reißzwecken zufällig auf einen Tisch geworfen, wobei das Ereignis x = "Nadel zeigt nach oben" 9-mal beobachtet wurde. Welche Aussage kann daraus zum Verteilungsparameter θ ($0 \le \theta \le 1$) der Binomialverteilung $X \sim Bin(n, \theta)$ abgeleitet werden? Wir vergleichen hierzu 4 Annahmen zur Priordichte $\theta \sim Bt(\alpha,\beta)$:

1. LINDLEY setzt nach Vermutung einen subjektiven Prior von $\theta \sim Bt(2,2)$ an, der bei 0,5 ein Maximum hat und nach beiden Seiten auf Null abfällt.
2. Nach dem LAPLACE-Prinzip würde man bei Unwissen für θ mit einer Gleichverteilung rechnen, also mit $\theta \sim Bt(1,1) = 1$.
3. Nach der JEFFREYS-Regel ergibt sich ein nicht-informativer Prior $\theta \sim Bt(1/2,1/2)$.
4. Nach [JAY 03] wäre mit einer nicht-informativen Priordichte von $f(\theta) = \dfrac{\text{const}}{\theta\cdot(1-\theta)} \sim Bt(0, 0)$

   zu rechnen, die nicht normierbar ist und als Grenzverteilung von $Bt(\alpha,\beta)$ für $\alpha, \beta \to 0$ mit $\alpha/\beta = 1$ zu verstehen ist.

Die Abbildung 2-10 zeigt oben die drei erstgenannten Priordichten und die Näherung Bt(0,01, 0,01) für den JAYNES-Prior. Im unteren Bild sind die mit n = 12 und x = 9 resultierenden vier Posteriordichten $\theta|x \sim Bt(\alpha + x, \beta + n - x)$ für die vier Varianten $\alpha = \beta = 2$ (nach LINDLEY), $\alpha = \beta = 1$ (nach LAPLACE), $\alpha = \beta = ½$ (nach JEFFREYS) und $\alpha = \beta = 0$ (nach JAYNES) dargestellt.

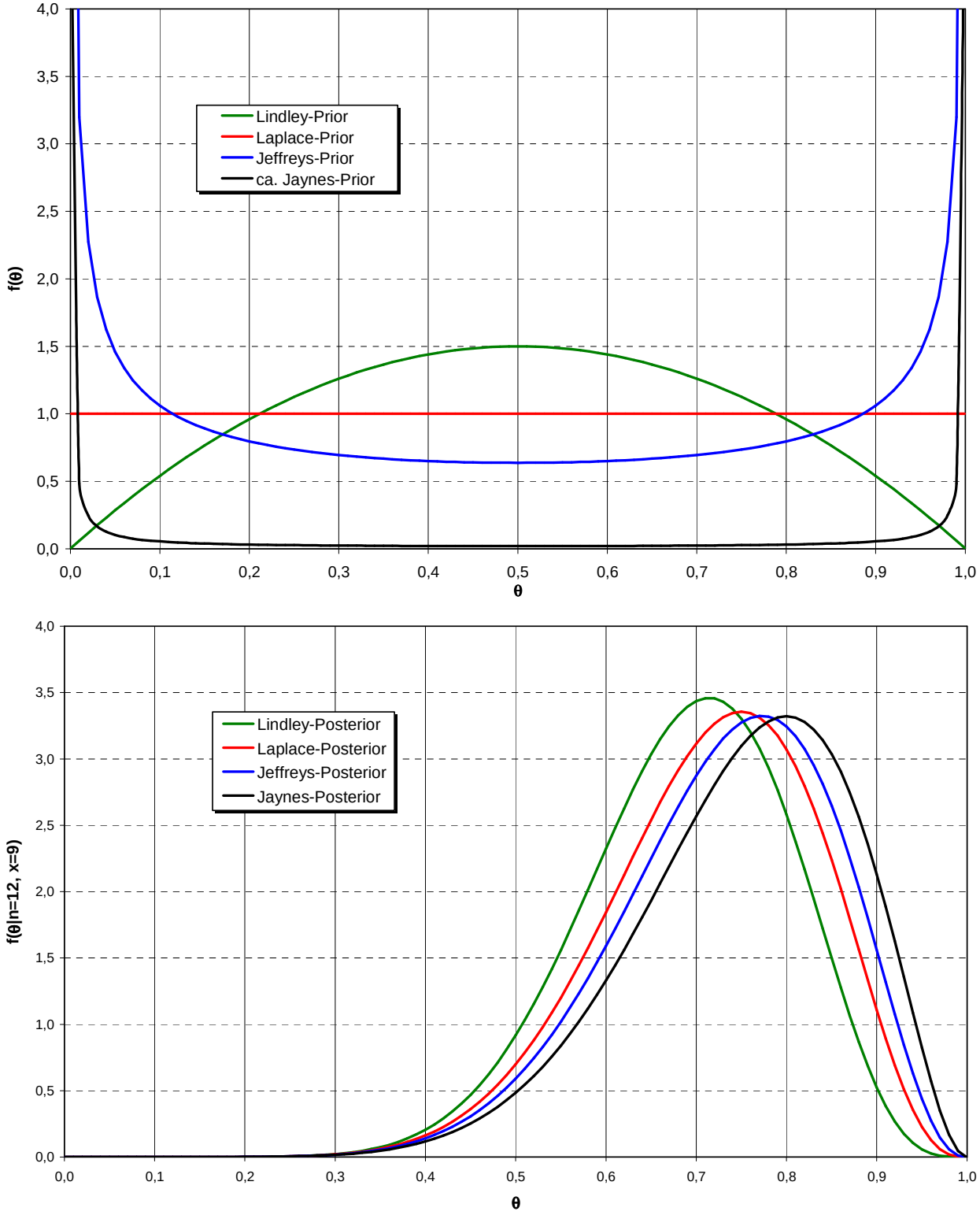


Abbildung 2-10: Verschiedene Priordichten für Bernoulli-Versuche (oben); für den uneigentlichen JAYNES–Prior ist zur Illustration Bt(0,01, 0,01) dargestellt; Posteriordichten (unten) nach n = 12 Versuchen mit x = 9 Erfolgen (siehe Erläuterungen zu Beispiel 2.8)

Zu den in Abbildung 2-10 dargestellten Prior- und Posteriordichten ist zunächst anzumerken, dass sich die Posteriordichten sehr ähnlich sind, obwohl die Priordichten erheblich voneinander abweichen. Dies ist eine allgemeine Eigenschaft von nicht-informativen bzw. wenig informativen Priordichten (wie in diesem Beispiel LINDLEY's subjektiver Prior), mit denen die Posteriordichte mit zunehmendem Umfang der Stichprobe relativ schnell von den Daten bestimmt wird. Trotzdem liegt auch bei n =12 noch ein deutlich erkennbarer Einfluss der Priordichten auf die Posteriordichten vor. Würde man z. B. anhand eines Perzentils der Posteriordichten entscheiden wollen, ob die Hypothese θ_0 = 0,5 hinreichend sicher ausgeschlossen werden kann, so könnte in diesem Beispiel die Entscheidung vom Prior abhängen.

Zu diesem Beispiel sei noch angemerkt, dass der mit dem JAYNES-Prior bestimmte Erwartungswert von θ mit dem üblichen Schätzer $\hat{\theta} = x / n$ (im Beispiel: $\hat{\theta} = 0{,}75$) übereinstimmt. Bei Ansatz des LAPLACE-Priors entspricht dieser Wert dem Modus der Posteriordichte (siehe hierzu auch [TUYL 08]).

Zur Anwendung von BAYES-Methoden ist die Problematik der Auswahl von Priordichten der am häufigsten und heftigsten kritisierte Aspekt. In [FER 05] wird dbzgl. das Beispiel der Nutzung von konjugierten Priordichten für normal verteilte Zufallsgrößen diskutiert. Wie oben für diesen Fall angegeben, ergibt sich der Erwartungswert der Posteriordichte als mit den Varianzen gewichtetes Mittel der Erwartungswerte der Priordichte und der Messergebnisse einer Stichprobe. Wenn die Messergebnisse stark vom Zentrum der Priordichte entfernt sind, resultiert eine Posteriordichte, deren Schwerpunkt zwischen den Schwerpunkten der Priordichte und der empirischen Verteilung der Messwerte liegt, also weder mit der ursprünglichen Vermutung (dem subjektiven Prior) noch mit den empirischen Erkenntnissen (Verteilung der Stichprobenwerte) übereinstimmt. Aus unserer Sicht ist diese Kritik jedoch fragwürdig und stellt keine "Besonderheit" der BAYES-Methoden dar. Wenn "begründete Erwartungen" und Wirklichkeit divergieren, resultieren ähnliche Diskrepanzen in jedem Ansatz, der "Expertenschätzungen" zur Quantifizierung von epistemischen Unsicherheiten nutzt. Bei Anwendung der BAYES-Methoden werden solchen Diskrepanzen schnell sichtbar und können dementsprechend für die Identifikation von Überraschungen (bzw. "Ausreißern") effektiv genutzt werden. Eine "Black-Box-Anwendung" von BAYES-Methoden ist natürlich nicht ratsam.

Der häufig zu Methoden der BAYES-Statistik geäußerte Vorbehalt, dass diese durch die subjektive Wahl der Priordichte (sie repräsentiert die "Vorkenntnisse") nur eingeschränkte Objektivität aufweise, ist aus unserer Sicht nicht korrekt, da auch nicht-informative ("objektive") Priordichten verwendet werden können [JEF 61], [CONG 01], [CAS 02]. Zudem kann der BAYES-Ansatz zur Einbindung von subjektiven Vorkenntnissen für die Lösung einer statistischen Fragestellung eher als Vorteil angesehen werden. Eine Übersicht zu den verschiedenen Methoden der Auswahl von Priordichten gibt [KASS 96].

2.7.3. Anwendung von BAYES-Methoden

Eine typische Anwendung von BAYES-Verfahren besteht in der Kombination neuer Messergebnisse mit bisherigen Modellvorhersagen, um a-posteriori Schätzer mit höherer Genauigkeit und kleinerer Unsicherheit zu erhalten.[50] Im Bereich des Strahlenschutzes werden Verfahren der Datenassimilation in Entscheidungshilfesystemen für nuklearen Notfallschutz (z. B. RODOS/ARGOS) genutzt, um die Vorhersagen von Expositionsmodellen durch Einbindung von Messergebnissen zu

[50] Für Wettervorhersagen wird dieser Prozess der Datenassimilation standardmäßig durchgeführt.

verbessern [KAI 08]). Beispielsweise können Vorhersagen über die radioaktive Kontamination von Lebensmitteln durch Messungen der Aktivitätskonzentration korrigiert werden. Dadurch wird die Entscheidungsgrundlage für die Planung von landwirtschaftlichen Gegenmaßnahmen verbessert.

Wesentliche Vorteile weisen die BAYES-Methoden auch bei Hypothesentests zu Modellen, der Analyse und Anwendung von gemischten Verteilungen sowie bei der Einbindung der statistischen Berechnungen in Entscheidungsfindungsprozesse auf.[51]

Nachfolgend seien beispielhaft einige Anwendungen von BAYES-Methoden genannt, woraus die Vielseitigen von Möglichkeiten ihrer Nutzung hervorgeht.

- Ein konzeptioneller Rahmen zur Analyse von Unsicherheiten von Risikobewertungen mit Hilfe von BAYES-Methoden wird in [BRA 95] erläutert. Die Verfolgung der Auswirkungen von Unsicherheiten einzelner Inputgrößen bzw. der Outputs von Submodellen auf die Zielgröße von komplexen Programmen kann durch die Analyse der Posteriordichten sensitiver Parameter vorgenommen werden. Ein wesentlicher Vorteil der BAYES-Methoden ist die Möglichkeit, hierzu Vor- und Rückrechnungen durchführen zu können

- Vergleiche von BAYES-Analysen mit MC-Simulationen und Sensitivitätsanalysen verdeutlichen, dass die zur Spezifikation von Priordichten für BAYES-Anwendungen erforderliche Analyse von Unsicherheiten der Vorkenntnisse sehr wichtig ist. In [GREE 01] wird empfohlen, analoge Untersuchungen auch für die MC-Simulationen und Sensitivitätsanalysen vorzunehmen. Eine BAYES-Methode zur Aggregation von Expertenschätzungen enthält [STI 04]. Zur Einbeziehung von Modellunsicherheiten in die Analyse der Unsicherheit der modellierten Zielgröße wird in [DRO 08] eine BAYES-Methode vorgestellt und beispielhaft demonstriert.

- Aktuelle Anwendungen von BAYES-Methoden für die Analyse bzw. Reduzierung von Messunsicherheiten werden z. B. in [WEIS 06], [KIR 09] und [KENN 09] vorgestellt. In [KENN 09] wird verdeutlicht, dass Messunsicherheiten z. T. erhebliche Auswirkungen auf die Unsicherheit von Expositionsabschätzungen haben können. Mit Hilfe von BAYES-basierte Modellen können die Auswirkungen der vielfältigen Quellen von Unsicherheiten effektiv analysiert werden.

- Einen Überblick zur Anwendung von BAYES-Methoden zur Sensitivitätsanalyse geben [INS 00] und [OAK 04]. In der Arbeit [RAT 01] werden Anwendungen zur Modellkalibrierung diskutiert.

- Auf die Modellierung und Analyse von Korrelationen zwischen Modellparametern im Rahmen von MCMC-Modellrechnungen wird z. B. in [ADES 03] eingegangen. [MOL 07] demonstriert Anwendungen der Modellierung räumlicher/zeitlicher Korrelationen für Expositionsmodelle der atmosphärischen Schadstoffausbreitung.

- Gegenüber anderen Methoden der probabilistischen Modellierung zeigen BAYES-Methoden ihre wesentlichen Vorteile bei der Analyse komplexer, hierarchischer Modelle, die durch azyklische Graphen dargestellt werden können. Aus einer großen Anzahl von Veröffentlichungen solcher Anwendungen sei hier auf [BATE 03], [ALB 08], [CHA 08] und [DON 09] verwiesen.

- Eine Anwendung der BAYES-Analyse zur Entscheidungsfindung demonstriert [DAK 96].

---

[51] Hierzu gehört z. B. die Beurteilung des wahrscheinlichen Nettogewinns von zusätzlichen Untersuchungen für eine Verbesserung der Datenbasis zu einem Modell unter Beachtung des dafür erforderlichen Aufwandes und des durch verbesserte Kenntnisse möglichen Nutzens (siehe z. B. [DAK 96], [BERN 00], [MARI 01]).

2.8. Methoden zur Berücksichtigung der Ungenauigkeit von Wahrscheinlichkeiten

2.8.1. Modellierung von epistemisch unsicherem Wissen

Neben der Variabilität der Eingangsparameter von (Expositions-)Modellen und der Unsicherheit der probabilistischen Schätzung ihrer Verteilungsparameter gemäß dem beschränkten Datenumfang von Stichproben können weitere Ursachen ungenauen Wissens zu Werten bzw. Verteilungen von sensitiven Modellparametern vorliegen, die als (partielle) Unkenntnis (ignorance) oder Ungenauigkeit (imprecision) bezeichnet werden. Deren Ursachen können u. a.

- die Unmöglichkeit einer adäquaten Datenbeschaffung sein, z. B. für Prognosen von potentiellen Strahlenexpositionen zukünftiger Generationen in der Langzeitsicherheitsanalyse (LSA) für ein Endlager, da LSA für sehr lange Zeiträume vorzunehmen sind (bis 10^6 Jahre; siehe [BMU 09]),
- aus dem Ziel der Expositionsberechnungen resultieren, z. B. bei generischen Abschätzungen von Strahlenexpositionen zur Berechnung von Freigabewerten für radioaktiv kontaminierte Abfälle, wozu nicht nur zu den denkbaren Expositionsszenarien, sondern auch zu diversen Modellparametern (partielle) Unkenntnis vorliegt, oder
- weil für die (radiologische) Beurteilung einer bestimmten Situation weder Zeit noch Aufwand für die Beschaffung einer realistischen, standortbezogenen Datenbasis vorhanden ist.

In solchen Fällen sind Expertenschätzungen oder andere ("unscharfe") Informationen zu nutzen, die z. B. auf Angaben aus anderen Ländern, Erfahrung etc. basieren, woraus zumindest auf plausible Parameterwerte geschlossen werden kann. Subjektiv geschätzte Parameterverteilungen können auch mit BAYES-Verfahren durch entsprechende Priordichten für die epistemisch unsicheren Modellparameter berücksichtigt werden. Es ergeben sich aber informationstheoretische Fragen bzgl. ihrer Wertigkeit gegenüber "scharfen" Informationen.

Durch "Bayesianer" wird mitunter der Standpunkt vertreten, dass die Wahrscheinlichkeitstheorie in der BAYES'schen Interpretation zumindest theoretisch für die mathematische Modellierung sowohl von aleatorischen als auch von epistemischen Unsicherheiten vollkommen ausreichend ist (vgl. [O'HAG 04]). Dabei wird oft auf das COX-Theorem [COX 46] verwiesen, das in etwa besagt, dass alle Maße des begründeten Glaubens (engl. belief measures) isomorph zu einem Maß der Wahrscheinlichkeit sind. Der hierzu dargelegte mathematische Beweis enthält allerdings Annahmen, die, wie in [COL 08] gezeigt wurde, nicht zwingend sind. So schließt z. B. die Annahme, dass "Belief" eine Funktion mit reellen Wert ist, alle Ansätze mit 2-dimensionalen Wahrscheinlichkeiten, wie z. B. die DEMPSTER-SHAFER-Theorie (DST oder Evidenztheorie genannt), die Möglichkeitstheorie (engl. Possibility Theory) und ähnliche mathematische Modelle von vornherein aus. Die für den Beweis in [COX 46] getroffene Annahme, dass diese Funktion zweifach differenzierbar ist, führt ebenfalls zum Ausschluss bestimmter alternativer Theorien.

Die Existenzberechtigung von alternativen mathematischen Modellen für die Quantifizierung von Unsicherheiten hat sich aber auch in der Praxis gezeigt, insbesondere in den vielfältigsten Anwendungen von Methoden der künstlichen Intelligenz (KI). Diese basieren auf grundlegenden Arbeiten von ZADEH [ZAD 65], [ZAD 75] zu fuzzy sets/logic (Erweiterungen der klassischen Mengenlehre und der binären BOOLE'schen ja/nein-Logik) mit denen die Possibility Theory entwickelt wurde [ZAD 78], [DUB 88].

Risiko- und speziell Expositionsmodelle können qualitativ verschiedenartige Parameter enthalten, die probabilistisch oder possibilistisch zu behandeln sind. Für eine Zusammenführung beider Informationsmodelle wurden Theorien/Methoden entwickelt wie die DEMPSTER-SHAFER-Theorie [DEMP 67], [DEMP 68], [SHA 76], [SHA 81]. Sie entspricht i. W. einer Erweiterung der Wahrscheinlichkeitstheorie durch ein zweites Maß für den Grad des Vertrauens in probabilistische Aussagen.

Die BAYES-Theorie hat eine enge Verbindung mit der Entscheidungstheorie. In [SME 94] wurde dbzgl. gezeigt, dass die Belief-Funktion der DST durch Wahrscheinlichkeitsfunktionen quantifiziert werden muss, wenn Wettstrategien, die zu einem sicheren Verlust führen (so genannte "Dutch Books"), vermieden werden sollen.

Eine Übersicht zu den Ansätzen und Besonderheiten, Stärken und Beschränkungen der Theorien zur Modellierung von epistemisch unsicherem Wissen enthält [WALL 96]. Darin wird gezeigt, dass diese Theorien spezielle Fälle der Theorie ungenauer Wahrscheinlichkeiten [WALL 91] sind. Die darin definierten Begriffen der unteren und oberen Voraussicht (engl. lower and upper previsions) für eine Aussage (bzw. ein Ereignis) A werden mit $\underline{P}(A)$ bzw. $\overline{P}(A)$ bezeichnet[52] (vgl. Definition von minPr und maxPr in Abschnitt 2.4.2.3). Für die unteren und oberen Voraussichten gilt u. a.:

$$\underline{P}(A) + \overline{P}(A^c) = 1 \tag{2-77}$$

2.8.2. Evidenztheorie

Zur Erläuterung des grundlegenden Ansatzes der Evidenztheorie beschränken wir uns hier auf die Behandlung von Evidenzen für Elemente und Untermengen einer endlichen Menge Ω von k unterschiedlichen Objekten, Aussagen, Ereignissen etc. X_i (i = 1 bis k). Im Unterschied zur Wahrscheinlichkeitstheorie wird nicht allen einzelnen Elementen von Ω eine Wahrscheinlichkeit p_i zugemessen, deren Summe 1 ergibt, sondern es wird eine Maßfunktion m(A) für alle Untermengen A von Ω definiert. Schließt man die leere Menge $\varnothing$ und Ω mit ein, so gibt es 2^k verschiedene Untermengen. Allgemein schreibt man dafür 2^Ω. Analog zur Wahrscheinlichkeitstheorie werden für m(A) Werte zwischen 0 und 1 zugelassen, d. h., m(A) ist eine Maßfunktion für die 2^Ω Teilmengen, die als Potenzmenge P_Ω bezeichnet wird, auf das Einheitsintervall:

$$m : P_\Omega \rightarrow [0, 1]. \tag{2-78}$$

Zur Normierung wird die folgende Bedingung festgelegt:

$$\sum_{A \subseteq \Omega} m(A) = 1. \tag{2-79}$$

---

[52] Eine anschauliche Interpretation dieser beiden Größen kann auch hier mit dem Bild der Preise von Wettspielen gegeben werden. Die Wahrscheinlichkeit P(A) im Sinne der BAYES-Theorie entspricht einem fairen Preis. Man wäre bereit, zu diesem Preis zu kaufen, wenn man bei Eintreten von A eine ganze Geldeinheit erhält; aber auch bereit, zu diesem Preis zu verkaufen. $\underline{P}(A)$ beschreibt nun eine obere Grenze für die Bereitschaft, das Spiel A zu kaufen, wogegen $\overline{P}(A)$ den Mindestpreis für die Bereitschaft zum Verkauf des Spiels darstellt. Das Modell sagt nichts darüber aus, ob man bereit wäre das Spiel A zu kaufen oder zu verkaufen, wenn der Preis zwischen $\underline{P}(A)$ und $\overline{P}(A)$ liegt. Es gibt einen Bereich, in dem keine Entscheidung getroffen werden kann. Dazu gilt $\underline{P}(A) \leq P(A) \leq \overline{P}(A)$.

Teilmengen A, für die "Evidenzen" mit m(A) > 0 vorliegen, heißen fokale Mengen. Es werden nun zwei weitere Funktionen mit der Maßfunktion m(A) definiert, mit denen zum Ausdruck gebracht wird, wie glaubhaft (belief) bzw. wie plausibel eine bestimmte Teilmenge aus Ω ist:

$$\mathrm{Bel}(A) = \sum_{\emptyset \neq B \subseteq A} m(B) \qquad \text{für alle } A \subseteq \Omega, \tag{2-80}$$

$$\mathrm{Pl}(A) = \sum_{B \cap A \neq \emptyset} m(B) \qquad \text{für alle } A \subseteq \Omega. \tag{2-81}$$

Die Funktion Bel(A) ist ein Maß dafür, wie stark die Evidenzen für A sprechen (also wie stark man daran glaubt); Pl(A) ist eine oberes Maß dafür, wie stark der Glaube an A werden könnte, wenn noch neue Informationen hinzukommen würden, oder anders ausgedrückt, wie wenig die vorhandenen Evidenzen gegen A sprechen. Es gilt deshalb immer

$$\mathrm{Pl}(A) \geq \mathrm{Bel}(A). \tag{2-82}$$

Zwischen den drei Funktionen Bel(A), Pl(A) und m(A) bestehen folgende Zusammenhänge, wobei mit A^c wieder das Komplement von A bezeichnet sei:

$$\mathrm{Bel}(A) = \mathrm{Pl}(\Omega) - \mathrm{Pl}(A^c) \qquad \text{für alle } A \subseteq \Omega, \tag{2-83a}$$

$$m(A) = \begin{cases} \sum_{\emptyset \neq B \subseteq A} (-1)^{|A|-|B|} \cdot \mathrm{Bel}(B) & \text{für } A \neq \emptyset \\ 1 - \mathrm{Bel}(\Omega) & \text{für } A = \emptyset \end{cases} . \tag{2-84}$$

Wenn m(∅) = 0 ist so folgt Bel(Ω) = Pl(Ω) = 1, Bel(∅) = Pl(∅) = 0 und

$$\mathrm{Bel}(A) = 1 - \mathrm{Pl}(A^c) \quad \text{und} \quad \mathrm{Pl}(A) = 1 - \mathrm{Bel}(A^c) \qquad \text{für alle } A \subseteq \Omega, \text{ wenn } m(\emptyset) = 0. \tag{2-83b}$$

Wir nehmen nachfolgend m(∅) = 0 an. Der leeren Menge <u>kann</u> aber eine Masse > 0 zugeordnet werden, womit zum Ausdruck gebracht würde, dass die betrachtete "Welt" Ω nicht abgeschlossen ist (Raum für "probability of surprise").

<u>Beispiel 2.9</u>

Das folgende elementare Zahlenbeispiel soll die obigen Definitionen und Beziehungen veranschaulichen. Es wird eine aus 3 Elementen X_1, X_2, X_3 bestehender Grundgesamtheit Ω betrachtet, die abgeschlossen ist. Damit gilt m(∅) = 0 und Gl. (2-83b) ist gültig.

<u>Tabelle 2-13:</u> Zahlenbeispiel zu den grundlegenden Definitionen und Beziehungen der Evidenztheorie; $\{X_i, X_j\}$ bezeichnet die aus den Elementen X_i und Xj bestehende Untermenge

A	**∅**	**X_1**	**X_2**	**X_3**	**$\{X_1, X_2\}$**	**$\{X_2, X_3\}$**	**$\{X_1, X_3\}$**	**Ω**
m(A)	0	0	0	0,1	0,4	0,3	0	0,2
Bel(A)	0	0	0	0,1	0,4	0,4	0,1	1
Pl(A)	0	0,6	0,9	0,6	0,9	1	1	1

Der nächste Schritt ist die Kombination von Evidenzen. Zwei Experten können unterschiedliche Meinungen zur Glaubwürdigkeit der Untermengen von Ω haben und diese mit ihrer Maßfunktion $m_1(A)$ bzw. $m_2(A)$ quantifizieren. Zur Kombination dieser "Meinungen" gibt es unterschiedliche Regeln (DEMPSTER's Regel, YAGER's Regel, Mittelungs-Regel etc.), die sich darin unterscheiden, wie spezielle Probleme (z. B. widersprüchliche Einschätzungen) behandelt werden. Theoretisch gibt es ein Kontinuum solcher Regeln, die zwischen der konjunktiven Aggregation (A und B: $A \cap B$, wenn $A \cap B \neq \emptyset$), der disjunktiven Aggregation (A oder B: $A \cup B$) bzw. zwischen diesen beiden liegenden Kompromisslösungen liegen. Wenn alle Experten als zuverlässig eingeschätzt werden, ist z. B. die konjunktive Kombination der Evidenzen adäquat. Übersichten zu diesen Regeln sind z. B. in [SEN 02] und [AYY 06] dargelegt. Die DEMPSTER-Regel setzt voraus, dass die Spezifizierung der Maßfunktion durch verschiedene Experten unabhängig voneinander erfolgt und wendet dann eine konjunktive Zusammenführung der Evidenzen an; DEMPSTER-Regel:

$$m_{1,2}(A) = \begin{cases} 1/(1-K) \cdot \sum\limits_{B \cap C = A} m_1(B) \cdot m_2(C) & \text{für } A \neq \emptyset \\ 0 & \text{für } A = \emptyset \end{cases} \quad \text{mit} \tag{2-85}$$

$$K = \sum_{B \cap C = \emptyset} m_1(B) \cdot m_2(C) \,. \tag{2-86}$$

Die vor dem Summenzeichen in Gl. (2-85) stehende Größe $(1\text{-}K)^{-1}$ ist ein Normierungsfaktor zur Einhaltung der Bedingung (2-79) für die kombinierte Maßfunktion $m_{1,2}(A)$. Dies hat jedoch den Effekt, dass widersprüchliche Evidenzen ignoriert werden; sie werden nach der DEMPSTER-Regel der leeren Menge zugeordnet. Bei erheblichen Konflikten zwischen den Experteneinschätzungen kann dies zu Resultaten führen, die konträr zur natürlichen Intuition sind (siehe z. B. [HAE 05]). Nach [YAG 87] können Widersprüche jedoch auch der "Welt" Ω zugeordnet werden. Dazu wird eine weitere Funktion $q_{1,2}(A)$ definiert (ground probability mass function), mit der die kombinierten Evidenzen modifiziert werden (zu weiteren Erläuterungen siehe [SEN 02], [AYY 06]):

$$q_{1,2}(A) = \sum_{B \cap C = A} m_1(B) \cdot m_2(C) \,, \tag{2-87}$$

$$m_{1,2}(A) = q_{1,2}(A) \quad \text{für} \quad A \neq \emptyset \ \text{ und } A \neq \Omega, \tag{2-88}$$

$$m_{1,2}(\Omega) = q_{1,2}(\Omega) + q_{1,2}(\emptyset). \qquad (2\text{-}89$$

$q_{1,2}(\emptyset) \geq 0$ entspricht Gl. (2.86) und quantifiziert die Konfliktmasse (K). Sie wird jetzt jedoch nicht mehr, wie in Gl. (2-85) zur Normierung aller kombinierten Evidenzen eingesetzt, sondern Ω beigemessen, wodurch $m_{1,2}(\Omega)$, ein Maß der Ignoranz, größer wird.

Aus den obigen Darlegungen wird deutlich, dass die Evidenztheorie insbesondere zur Einbeziehung von Expertenwissen in Modelle mit epistemischen Unsicherheiten geeignet ist. Für die Berechnung von bedingten Evidenzen, von gemeinsamen Evidenzen zu vielen unsicheren Inputgrößen etc. wurde ein Formalismus entwickelt, mit dem alle wesentlichen Verknüpfungen beschrieben werden können (wie in der Wahrscheinlichkeitstheorie, die immer als Spezialfall enthalten ist, wenn Maßfunktionen m(A) für alle einfachen Elemente X_i von Ω definiert werden).

Anmerkung: Die DEMPSTER-SHAFER-Theorie (DST) ist natürlich nicht nur auf endliche Mengen von Aussagen, Ereignissen etc., sondern auch für stetige Variable (X) anwendbar. Ein wesentlicher Anlass für die Entwicklung der DST war die Tatsache, dass reale Messungen nicht perfekt, sondern mit Unsicherheiten behaftet sind. Zum Wert der untersuchten Größe X kann dann nur ein Bereich angegeben werden, der als fokale Menge möglicher Werte x anzusehen ist, in der aber auf Basis der vorhandenen Evidenz die epistemische Unsicherheit nicht weiter aufgelöst werden kann. Für variable Größen X können DEMPSTER-SHAFER-Strukturen aus fokalen Mengen konstruiert werden, die Intervalle $[x_i, x_i + \Delta_i]$ (i = 1 bis n) sind, denen Werte $m_i = m([x_i, x_i + \Delta_i])$ einer Intervall-Maßfunktion m() zugeordnet werden, welche die Normierungsbedingung Gl. (2-79) erfüllt.

In [SOU 04] werden für eine Reihe methodischer Beispiele die mit der BAYES-Theorie berechneten Wahrscheinlichkeitsverteilungen mit den nach der Evidenztheorie resultierenden Belief- und Plausibilitätsverteilungen verglichen. Es wird empfohlen, die zu einer Zielgröße der Modellierung bestehenden (aleatorischen und epistemischen) Unsicherheiten sowohl nach den Ergebnissen der BAYES-Theorie als auch nach der Evidenztheorie darzustellen und für Entscheidungsfindungen heranzuziehen. Dies entspricht den schon angesprochenen Empfehlungen zur separaten Darstellung von Variabilität und Unsicherheit für probabilistische Expositionsabschätzungen mit Hilfe der 2D-MC-Simulation. Für eine 2D-MC-Simulation steigt der numerische Aufwand jedoch massiv mit der Anzahl epistemisch unsicherer Parameter. Durch Anwendung der Evidenztheorie (bzw. einer ihrer Spezialfälle, wie der Möglichkeitstheorie, s. u.) dürfte die Praktikabilität von Berechnungen mit der Möglichkeit, Auswirkungen von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten auf die Zielgröße der Modellierung separat darzustellen, besser zu erreichen sein. Ein praktisches Beispiel für solche Anwendungen der Wahrscheinlichkeits- und der Evidenztheorie gibt [BARA 10] mit einem Ansatz für die Unsicherheitsanalyse zum Verhalten eines Endlagers für radioaktive Abfälle.

2.8.3. Möglichkeitstheorie

Die Möglichkeitstheorie (engl.: Possibility Theory) [ZAD 78], [DUB 88], [DUB 06] ist ein Spezialfall der Evidenztheorie, der sich bei Definition verschachtelter fokaler Mengen $A_1 \subset A_2 \subset \ldots \subset A_n$ ergibt. Die entsprechenden Maße sind dann konsonant, d. h. sie beschreiben widerspruchsfreie Evidenzen. Damit gilt für zwei beliebige Teilmengen aus Ω:

$$Pl(A \cup B) = \max\{Pl(A), Pl(B)\}, \quad \forall\, A, B \subseteq \Omega. \tag{2-90}$$

Das Plausibilitätsmaß Pl(A) wird dadurch ein Möglichkeitsmaß, das mit Pos(A) bezeichnet wird. Das duale Maß, das aus der Belief-Funktion Bel(A) resultiert, wird Notwendigkeit (Necessity) genannt und mit Nec(A) bezeichnet. Für die einfachen Elemente X aus Ω resultiert eine so genannte Möglichkeitsverteilung $\pi(X)$:

$$\pi(X) = Pl(\{X\}) \quad \forall\, X \in \Omega. \tag{2-91}$$

Für eine stetige Variable X (z. B. mit Definitionsbereich $-\infty < x < +\infty$) wird eine Notation für die Möglichkeitsverteilung verwendet, die der für Wahrscheinlichkeitsdichten ähnelt: $\pi_X(x)$. Dies ist eine Abbildung des Werteraums Ω auf das Intervall [0,1], die für mindestens einen Wert x_0 den Wert 1 annimmt. In der Sprache der Mathematik:

$$\exists\, x_0 \in \Omega: \pi_X(x_0) = 1. \tag{2-92}$$

Mit dieser Funktion ist auch die Möglichkeitsfunktion für alle Teilmengen A aus der Potenzmenge P_Ω eindeutig definiert:

$$\mathrm{Pos}(A) = \max_{x \in A}(\pi_X(x)) \quad \text{für } \forall\, A \in P_\Omega. \tag{2-93}$$

Die Notwendigkeit Nec(A) resultiert analog aus der Beziehung

$$\mathrm{Nec}(A) = \min_{x \notin A}(1 - \pi_X(x)) \quad \text{für } \forall\, A \in P_\Omega. \tag{2-94}$$

Es gelten immer die folgenden Beziehungen:

$$\mathrm{Pos}(A \cup B) = \max\{\mathrm{Pos}(A), \mathrm{Pos}(B)\} \quad \forall\, A, B \in P_\Omega, \tag{2-95}$$

$$\mathrm{Nec}(A \cap B) = \min\{\mathrm{Nec}(A), \mathrm{Nec}(B)\} \quad \forall\, A, B \in P_\Omega, \tag{2-96}$$

$$\mathrm{Nec}(A) = 1 - \mathrm{Pos}(A^c) \quad \text{und} \quad \mathrm{Pos}(A) = 1 - \mathrm{Nec}(A^c) \quad \forall\, A \in P_\Omega, \tag{2-97}$$

$$\mathrm{Nec}(A) \le \mathrm{Pos}(A) \quad \forall\, A \in P_\Omega, \tag{2-98}$$

wobei in Gl. (2-98) das Gleichheitszeichen gilt, wenn Nec(A) und Pos(A) Wahrscheinlichkeiten sind. Generell können sie als untere (Nec) bzw. obere (Pos) Schranken von Wahrscheinlichkeiten interpretiert werden. Damit werden also auf einer Skala von 0 bis 1 nach unten (Notwendigkeit) bzw. oben (Möglichkeit) beschränkte Verteilungen über den Wertebereich eines Parameters berechnet, die ein Maß der Plausibilität der Parameterwerte ergeben. Zu weitere Beziehungen und zur Kombination von Möglichkeitsmaßen sei auf [DUB 88], [DUB 06] und [AYY 06] verwiesen.

Die possibilistischen Methoden werden zunehmend für Risikoanalysen und Umweltbewertungen genutzt [LIU 03] und gewinnen auch für eine realistische Ermittlung von Strahlenexpositionen an Bedeutung [MER 03], [KIST 03].

Eine Zusammenführung probabilistischer und possibilistischer Verteilungen zur Berücksichtigung von Variabilität, statistischer Unsicherheit und "unscharfen" Expertenschätzungen erfolgt auch mit Hybrid-Verfahren [COOP 96], [BAUD 02], [KATO 02], [BARA 08], deren Praktikabilität für Risikoanalysen im Umweltschutz und für technische Systeme demonstriert wurde [KATO 02], [GUY 03], [CHEN 03], [ANO 08]. Eine Übersicht zu einem Rahmen der gemeinsamen/kombinierten Modellierung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten von Risikoanalysen mit Hilfe probabilistischer und possibilistischer Methoden gibt [BAUD 07].[53]

2.8.4. p-Box-Methode

Als p-box (probability box) wird eine Begrenzung von Verteilungsfunktionen $F_X(x)$ bezeichnet, die im Rahmen der vorhandenen Evidenzen theoretisch möglich wären. Dazu werden eine linke (obere) $\overline{F}(x)$ und eine rechte (untere) $\underline{F}(x)$ kumulative Verteilungsfunktion bestimmt, durch welche die "wahre", jedoch nicht exakt bekannte probabilistische Verteilungsfunktion $F_X(x)$ begrenzt wird.

---

[53] Dieser Zugang könnte auch für die Modellierung von Strahlenexpositionen eine effiziente Einbeziehung verfügbarer Daten und Expertenschätzungen unter Beachtung der verschiedenartigen Datenqualität bieten.

Eine p-Box kann aus DEMPSTER-SHAFER-Strukturen für die Größe X (vgl. dbzgl. Anmerkung in Abschnitt 2.8.2), aus possibilistischen Verteilungen oder z. B. auch durch eine Kombination von probabilistischen Verteilungsfunktionen mit der Intervall-Arithmetik erzeugt werden.

Aus einer DEMPSTER-SHAFER-Struktur $\{([x_i, x_i+\Delta_i], m_i)\}$ (i = 1 bis n) lassen sich die obere und die untere Grenzverteilungen wie folgt bestimmen [FER 03]:

$$\overline{F}(x) = \sum_{x_i \le x} m_i \ , \qquad \underline{F}(x) = \sum_{x_i + \Delta_i < x} m_i \ . \tag{2-99}$$

Beispiel 2.10

Die Tabelle 2-14 enthält Angaben zu einer DEMPSTER-SHAFER-Struktur für eine im Intervall [0, 1] definierte (Zufalls-)Größe X. Die Abbildung 2-11 zeigt die dazu nach Gl. (2-99) berechnete p-Box.

Tabelle 2-14: Zahlenbeispiel für eine DEMPSTER-SHAFER-Struktur auf dem Intervall [0, 1]

i	1	2	3	4	5	6	7	8
$\mathbf{x_i}$	0,05	0,19	0,33	0,47	0,55	0,64	0,79	0,91
$\mathbf{x_i+\Delta_i}$	0,31	0,42	0,67	0,67	0,83	0,89	0,95	0,98
$\mathbf{m_i}$	0,12	0,17	0,13	0,15	0,08	0,10	0,16	0,09

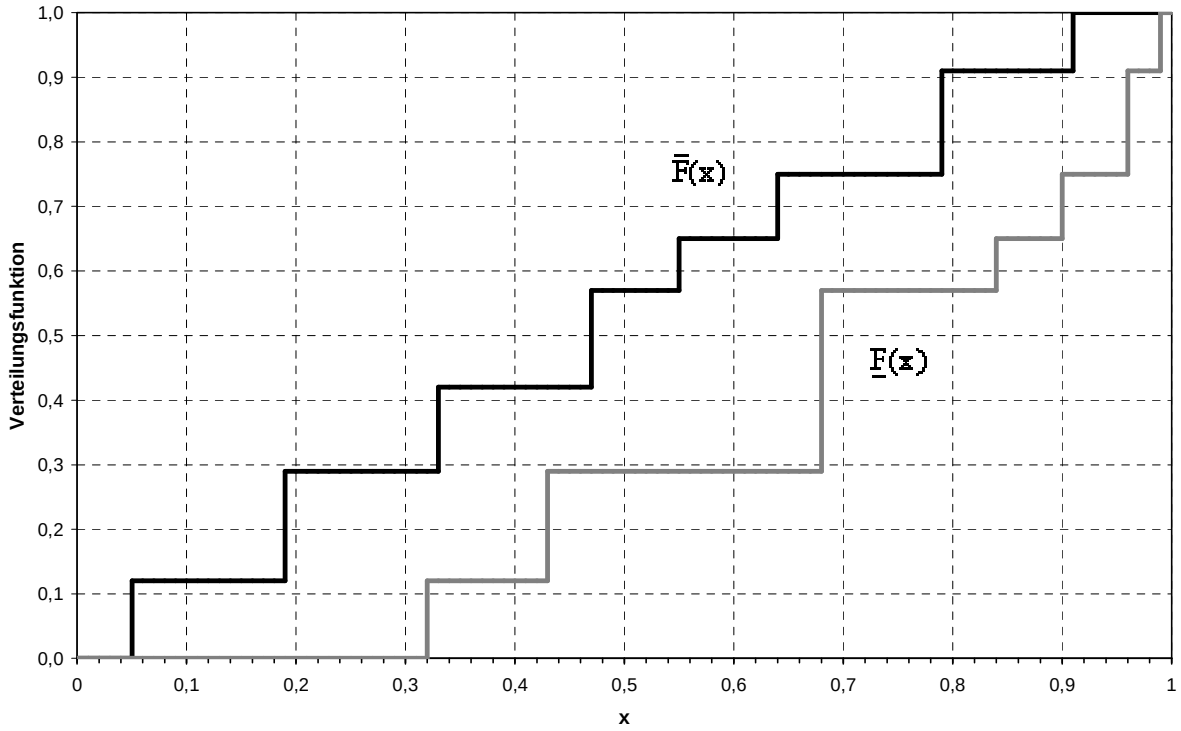


Abbildung 2-11: p-Box zu der in Tabelle 2-14 definierten DEMPSTER-SHAFER-Struktur

Die Erzeugung einer p-Box aus possibilistischen Verteilung wird in [BAUD 06] gezeigt. Ist X eine reelle Variable, so kann man beweisen, dass mit

$$\overline{F}(x) = \mathrm{Pos}(X \in (-\infty, x]), \qquad \underline{F}(x) = \mathrm{Nec}(X \in (-\infty, x]) \tag{2-100}$$

eine p-Box definiert ist, die alle mit der vorliegenden Evidenz verträglichen probabilistischen Verteilungsfunktionen $F_X(x)$ begrenzt.

In [FER 03] werden mehrere Methoden zur Konstruktion von p-Boxen erläutert. Basierend auf [WIL 90] wird gezeigt, wie p-Boxen für mehrere Variable bei einfachen algebraischen Operationen zusammengefügt (gefaltet) werden. Wenn Abhängigkeiten/Korrelationen zwischen Variablen (den Inputgrößen eines Models) nicht ausgeschlossen werden können, so können FRÉCHE-HOEFFDING-Grenzen für Copulas für deren abdeckende Berücksichtigung genutzt werden.[54]

Die p-Boxen stellen i. A. sehr konservative Schranken für die Verteilung von Zielgrößen dar, wenn mehrere Inputvariable von (Expositions-)Modellen nur mit Beschränkungen in die Berechnungen eingehen. Dies ist der Fall, wenn Expertenschätzungen nur (min, max)-Grenzen für Inputvariable liefern. Grundsätzlich ist dazu jedoch anzumerken, dass mit der p-Box-Methode nur das tatsächlich vorhandene Wissen bzw. Unwissen dargestellt wird. Die für probabilistische MC-Simulationen und für BAYES-Methoden meist verwendeten Ansätze einer Gleichverteilung der Variablen in den (min, max)-Grenzen berücksichtigen die Auswirkungen der vorhandenen epistemischen Unsicherheit nicht adäquat. Während im BAYES'schen Verständnis zur Wahrscheinlichkeit (im Sinne begründeter Erwartungen) diese Vorgehensweise zumindest kohärent ist, muss im Rahmen der frequentistischen Interpretation der Ergebnisse auf Inkonsistenz hingewiesen werden.

Das folgende elementare Beispiel dient zur Illustration der Anwendung der p-Box-Methode im Vergleich zur 2D-MC-Simulation und zur Anwendung der BAYES-Methode.

Beispiel 2.4-2

Das in Abschnitt 2.5.3.2 betrachtete Beispiel 2.4-1 einer mit der bedingten Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|b)$ im Intervall [0, b] gleichverteilten Zufallsgröße X, deren obere Grenze jedoch in einem Bereich $[b_{min}, b_{max}]$ epistemisch unsicher ist, stellt ein einfaches hierarchisches Modell dar, dass hier für den Vergleich der p-Box-Methode mit der 1D- bzw. 2D-MC-Simulationen herangezogen wird. Die p-Box-Methode geht nicht von einer Gleichverteilung von b im Intervall $[b_{min}, b_{max}]$ aus, sondern repräsentiert nur die aleatorische Unsicherheit von X und die epistemische Unsicherheit zum Parameter B der oberen Grenze der Gleichverteilung von X. Die obere (linke) und untere (rechte) Begrenzung der Verteilung von X ergibt sich dann gemäß

$$\overline{F}(x) = F_X(x \mid b_{min}), \qquad \underline{F}(x) = F_X(x \mid b_{max}). \tag{2-101}$$

---

[54] Jede Copula $C(u_1, u_2, \ldots, u_n)$, $0 \le u_i \le 1$ (siehe Anhang B, Abschnitt B.3) erfüllt die sog. FRÉCHE-HEOFFDING-Ungleichung $\max(u_1 + u_2 + \ldots + u_n - n + 1; 0) \le C(u_1, u_2, \ldots, u_n) \le \min(u_1, u_2, \ldots, u_n)$. Die auf der linken Seite stehende Untergrenze ist bei n = 2 eine Copula und entspricht dann einer perfekten negativen Abhängigkeit von zwei Verteilungen (Kontramonotonie). Die auf der rechten Seite stehende Obergrenze ist in jeder Dimension eine Copula und entspricht der perfekten positiven Abhängigkeit (Komonotonie).

Für die probabilistische Simulation wird dagegen eine Gleichverteilung von B im Intervall [b_{min}, b_{max}] gemäß Gl. (2-53) angesetzt. Mit dieser Annahme kann auch die exakte Lösung des durch Gl. (2-52) und Gl.(2-53) definierten hierarchischen probabilistischen Modells bestimmt werden. Die dazu erforderlichen Integrationen

$$f_X(x \mid b_{min}, b_{max}) = \int_{b_{min}}^{b_{max}} f_X(x \mid b) \cdot g_B(b \mid b_{min}, b_{max}) db \,, \quad F_X(x \mid b_{min}, b_{max}) = \int_0^x f_X(x \mid b_{min}, b_{max}) dx$$

ergeben die erwartete Verteilungsfunktion

$$F_X(x \mid b_{min}, b_{max}) = \begin{cases} x \cdot \dfrac{\ln(b_{max}) - \ln(b_{min})}{b_{max} - b_{min}} & \text{für } x \le b_{min} \\ \dfrac{x \cdot (\ln(b_{max}) - \ln x) + x - b_{min}}{b_{max} - b_{min}} & \text{für } b_{min} \le x \le b_{max} \end{cases} . \qquad (2\text{-}102)$$

In Abbildung 2-12 ist diese Verteilung im Vergleich zur p-Box nach Gl. (2-101) sowie den Ergebnissen der 1D-MC-Simulation (LHS mit Stichprobenumfang 1000) und 10 Verteilungen der 2D-MC-Simulation (10 Werte von b für äußere Schleife, Verteilungen für innere Schleife nach Gl. (2-52)) dargestellt. Es ist der Fall b_{min} = 0,5 , b_{max} =1,5 dargestellt. Die Varianz der 1D-MC-Simulation stimmte mit Var_X = 0,1107 gut mit der exakten Berechnung überein (vgl. Tabelle 2-10).

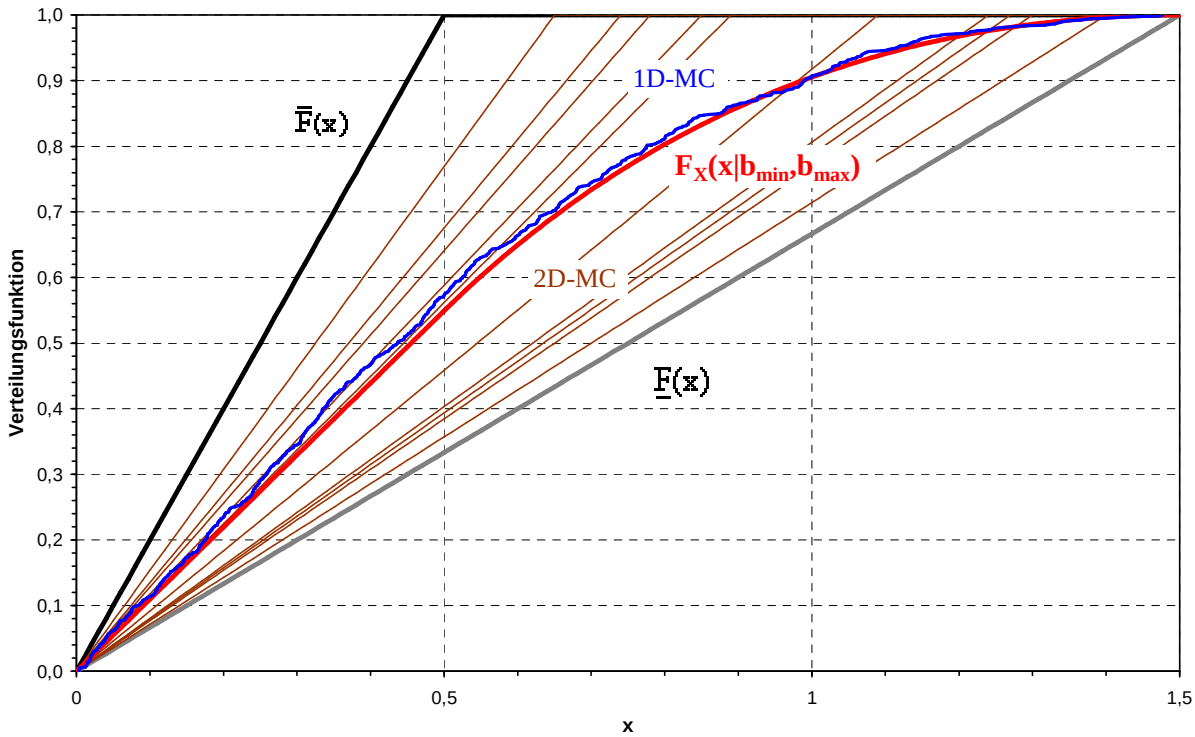


Abbildung 2-12: p-Box, erwartete Verteilung $F_X(x|b_{min},b_{max})$ und Ergebnisse der 1D-MC-Simulation (Stichprobenumfang von 1.000) und der 2D-MC-Simulation (10 Läufe für b)

Wie aus Abbildung 2-12 ersichtlich, begrenzt die p-Box alle denkbaren Verteilungen mit $b \in [b_{min}, b_{max}]$, wie sie aus der 2D-MC-Simulation resultieren. Sie stellt die vorhandene epistemische Unsicherheit zu b dar. Unter der Annahme einer Gleichverteilung für die obere Grenze des Parameters der aleatorischen Verteilung von X ergibt sich eine "glaubwürdig erwartete" Verteilungsfunktion. Die Ergebnisse der 1D-MC-Simulation stimmen dabei gut mit der exakten Lösung des hierarchischen probabilistischen Modells überein. Würde man für den Verteilungsparameter b beliebig alternative Wahrscheinlichkeitsverteilungen annehmen, deren Auswahl nur durch die Bedingung $b \in [b_{min}, b_{max}]$ limitiert ist, so könnte man beliebig komplizierte Verteilungsfunktionen für X konstruieren, die aber immer innerhalb der in Abbildung 2-12 dargestellten p-Box verlaufen müssten.

Für die Darstellung von vorhandenen epistemischen Unsicherheiten ist die p-Box-Methode aus unserer Sicht eine effektive Methode, die nicht zuletzt für Sensitivitätsanalysen bestens geeignet ist [FER 06], um den Einfluss dieser Unsicherheiten auf probabilistische Expositionsberechnungen zu verdeutlichen oder auch um zu zeigen, wie die Ergebnisse von deterministischen bzw. mit MC-Simulation durchgeführten Expositionsberechnungen einzuordnen sind. Die p-Box-Methode wird für die Analyse von Risiken durch Umweltbelastungen [TUCK 03] sowie auch für probabilistische Sicherheitsanalysen [KAR 09] eingesetzt. Einen Vergleich verschiedener Ansätze und Methoden zur Expositionsabschätzung für einen mit Cadmium kontaminierten Standort gibt [SAN 06]. Es wurden deterministische Expositionsberechnungen, 1D-MC-Simulationsrechnungen und p-Box-Analysen für relevante Expositionspfade durchgeführt. Aus den Ergebnissen dieser Untersuchung wurde geschlussfolgert, dass mit üblichen Expositionsabschätzungen die realen Unsicherheiten erheblich unterschätzt werden, und dass deren Quantifizierung und Darstellung neue Handlungsspielräume für Entscheidungsfindungen aufzeigt.

3. ANWENDUNG PROBABILISTISCHER EXPOSITIONSABSCHÄTZUNGEN

Der Schwerpunkt dieses Kapitels ist die Darlegung der Ergebnisse unserer Recherche zum Stand der Anwendung probabilistischer Methoden bzw. auch alternativer Verfahren zur Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Modellierung von Strahlenexpositionen. Die dbzgl. Ergebnisse enthält Abschnitt 3.2. Daneben wurden für das aktuelle Vorhaben auch Untersuchungen zur Modellierung von chemotoxischen Belastungen recherchiert. Der wesentliche Grund dafür resultierte daraus, dass im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz relativ frühzeitig damit begonnen wurde, probabilistische Methoden für Expositions- und Risikoabschätzungen zu entwickeln und in der Praxis anzuwenden, so dass gerade hierzu viele Fachartikel vorliegen, die sowohl aus methodischer Sicht, wie in Kapitel 2 dargelegt, als auch hinsichtlich der praktischen Anwendung von großem Interesse sind. Der Abschnitt 3.1 enthält hierzu einige Anmerkungen, eine Darstellung der dazu gesichteten Literatur hätte jedoch den Rahmen des aktuellen Projektes gesprengt.

Aus methodischer Sicht sind auch Anwendungen probabilistischer und possibilistischer Methoden bei der Modellierung und Analyse allgemeiner ökologischer Prozesse für radioökologische Aspekte der Expositionsmodellierung von großem Interesse. Hierzu konnte im Rahmen des aktuellen Projektes noch keine systematische Recherche durchgeführt werden. Es sei jedoch vermerkt, dass in einigen der auf diese Gebiete spezialisierten Fachzeitschriften viele Beiträge veröffentlicht werden, die methodisch bzw. thematisch die im aktuellen Projekt zu untersuchenden Fragestellungen betreffen (siehe z. B. [NAU 00], [ANN 01], [WU 04], [KENT 04] und [KENT 05]).

3.1. Stand im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz

Die in Kapitel 2 dargelegten Methoden zur Modellierung und Analyse von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten und ihrer Nutzung für Expositionsabschätzungen resultieren zu einem beachtlichen Teil aus den seit Ende der 80-er durch die U.S. EPA forcierten Anstrengen, die Unzulänglichkeiten deterministischer Expositionsabschätzungen zu überwinden. Ein wesentlicher Hintergrund waren die Superfund-Projekte zur Sanierung von Altlasten. Dies erforderte nicht nur eine Vereinheitlichung der Methodik für Umwelt- und Risikoanalysen, sondern auch ein genaueres Wissen über die tatsächlich bestehenden Umweltbelastungen und Gesundheitsrisiken. Spezielle Programme zur Analyse und Reduzierung von Gesundheitsrisiken durch chemotoxische Substanzen (wie z. B. durch Einsatz von Pestiziden in der Landwirtschaft, [EPA 98]) haben diese Entwicklung gefördert. Auf der Basis dbzgl. Richtlinien und Empfehlungen hat sich in den 90-er Jahren in den USA die Akzeptanz zur Anwendung von probabilistischen Expositionsabschätzungen entwickelt. Zugleich wurden die dafür erforderlichen Datenbanken, z. B. des National Health and Nutrition Survey (NHANES) ausgebaut und breiten Anwenderkreisen zugänglich gemacht.

Im letzten Jahrzehnt hat sich international der Trend durchgesetzt, neben einfachen konservativen Expositionsabschätzungen für Screeninganalysen und den sicheren Nachweis der Einhaltung von Grenzwerten mit deterministischen Modellen, für komplexe Situationen und zur genaueren Analyse von Einzelfällen, für die Entscheidungen über Maßnahmen zur Reduzierung von Emissionen oder zur Sanierung mit Schadstoffen kontaminierter Standorte zu treffen sind, probabilistische oder auch possibilistische Methoden der Analyse von Unsicherheiten der Expositionsmodellierung zu nutzen (siehe z. B. [CUL 99], [IEFS 03], [NCM 07], [UBA 07] und [WHO 08]).

Für eine sachgemäße Anwendung probabilistischer Expositionsberechnungen wurden durch die U.S. EPA grundsätzliche Anforderungen und Kriterien formuliert [EPA 97B], die auch international akzeptiert und inzwischen durch weitere Studien bzw. Empfehlungen untersetzt und ergänzt wurden [IEFS 03], [NCM 07], [UBA 07], [WHO 08].

In [WHO 08] wurden im Rahmen des International Programme on Chemical Safety (IPCS) 10 Prinzipien zur Charakterisierung und Bewertung von Unsicherheiten bei Expositionsabschätzungen formuliert:

Principle 1: *Uncertainty analysis should be an integral part of exposure assessment.*

Principle 2: *The level of detail of the uncertainty analysis should be based on a tiered approach and consistent with the overall scope and purpose of the exposure and risk assessment.*

Principle 3: *Sources of uncertainty and variability should be systematically identified and evaluated in the exposure assessment.*

Principle 4: *The presence or absence of moderate to strong dependencies between model inputs is to be discussed and appropriately accounted for in the analysis.*

Principle 5: *Data, expert judgement or both should be used to inform the specification of uncertainties for scenarios, models and model parameters.*

Principle 6: *Sensitivity analysis should be an integral component of the uncertainty analysis in order to identify key sources of variability, uncertainty or both and to aid in iterative refinement of the exposure model. The results of sensitivity analysis should be used to identify key sources of uncertainty that should be the target of additional data collection or research, to identify key sources of controllable variability that can be the focus of risk management strategies and to evaluate model responses and the relative importance of various model inputs and model components to guide model development.*

Principle 7: *Uncertainty analyses for exposure assessment should be documented fully and systematically in a transparent manner, including both qualitative and quantitative aspects pertaining to data, methods, scenarios, inputs, models, outputs, sensitivity analysis and interpretation of results.*

Principle 8: *The uncertainty analysis should be subject to an evaluation process that may include peer review, model comparison, quality assurance or comparison with relevant data or independent observations.*

Principle 9: *Where appropriate to an assessment objective, exposure assessments should be iteratively refined over time to incorporate new data, information and methods to better characterize uncertainty and variability.*

Principle 10: *Communication of the results of exposure assessment uncertainties to the different stakeholders should reflect the different needs of the audiences in a transparent and understandable manner.*

Diese 10 Prinzipien sind grundsätzlich auch auf die Ermittlung bzw. Abschätzung von Strahlenexpositionen übertragbar.

Beispielhaft sei hier auf fünf Arbeiten zu probabilistischen Expositionsabschätzungen eingegangen:

- In [PRI 96] werden die Dioxin-Expositionen durch Emission von Müllverbrennungsanlagen modelliert. Das ökologische Modell umfasst die atmosphärische Ausbreitung, die nasse und trockene Deposition auf Weideland, den Biotransfer von Dioxin in die Futterpflanzen und zum Vieh bis hin zur Exposition des Menschen durch den Fleischverzehr. Das Berechnungsmodell ist relativ komplex.[55] Die Expositionsabschätzung wurde mit 2D-MC-Simulation ausgeführt. Die Ergebnisse weisen eine Variabilität der Dosis über vier Größenordnungen aus. Durch die epistemischen Unsicherheiten resultiert für das 95%-Perzentil der Dosisverteilung ein 90%-Konfidenzintervall über eine Größenordnung.
- Zum Transfer von PCB[56] aus Schlämmen durch aquatische Nahrungsketten bis zur Exposition des Menschen durch den Verzehr von kontaminiertem Fisch wurde in [STA 02] eine Analyse der Auswirkungen der Variabilität relevanter Einflussfaktoren im Vergleich zu epistemischen Unsicherheiten der Modellierung durchgeführt. Diese Analyse erfolgte für eine Entscheidungsfindung zu einem standortspezifischen Vorhaben, ausgebaggerte Hafenschlämme in einem offenen Gewässer zu deponieren. Zur Analyse der Erhöhung des Krebsrisikos wurde eine 2D-MC-Simulationen angewandt. Die Sensitivitätsanalyse zur Spezifizierung des Typs parametrischer Verteilungen einzelner Modellparameter zeigte einen relativ geringen Einfluss epistemischer Unsicherheiten im Vergleich zur Variabilität der Zielgröße, für deren Perzentile (in Schritten von 5%) neben dem Median auch 50%-und 90%-Konfidenzintervalle bestimmt wurden.
- In [SASS 08] wurden in der GUM [ISO 08A] dargelegte Methoden für eine Bewertung von Unsicherheiten der Risikoanalyse zu chemischen Schadstoffen genutzt, deren Transfer über mehrere Expositionspfade erfolgen kann. Die mit dieser relativ einfachen Sensitivitätsanalyse gewonnenen Ergebnisse wurden mit Monte-Carlo-Simulationsrechnungen verglichen. Es ergab sich eine gute Übereinstimmung in der Bewertung der Sensitivität einzelner Substanzen.
- In [ALB 08] wird erläutert, wie komplexe Analysen zu Gesundheitsrisiken durch kontaminierte Nahrungsmittel mit Hilfe von BAYES-Methoden durchgeführt werden können. Hierzu wurde am Beispiel der bakteriellen Kontamination von Geflügelfleisch ein BAYES-Netzwerk mit sechs Kompartimenten untersucht (Hühnerfarm, Herstellung von Geflügelfleisch, Konsumtion, Querkontamination bei der Zubereitung von Speisen, Exposition des Menschen, Erkrankungen). Eine wesentliche Stärke dieser Methodik besteht darin, dass bereits in einem ersten Schritt eine Modellanalyse ohne spezifische Daten auf der Basis des vorhandenen (Experten-)Wissens mit den Priordichten der Inputparameter durchgeführt werden kann. Im zweiten Schritt wird dieses Wissen durch die verfügbaren Daten ergänzt. Das hierarchisch strukturierte Gesamtmodell, in dem auch die einzelnen Kompartimente als hierarchische BAYES-Netzwerke modelliert sind, erlaubt Vor- und Rückrechnungen und ermöglicht damit detaillierte Analysen zu Auswirkungen von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten sowie der Relevanz einzelner Parameter und neuer Daten für die Zielgröße. Die wesentlichen Ergebnisse dieser Untersuchung für eine komplexe Expositionssituation werden mit Hilfe der Posterior-Randverteilungen dargestellt und mit Scatterplots illustriert.

---

[55] Das Modell ist ähnlich zu Berechnungsvorschriften der AVV zu § 47 StrlSchV.

[56] Polychlorierte Biphenyle sind giftige und krebsauslösende Chlorverbindungen.

- Eine Kombination von BAYES-Methoden mit 2D-MC-Simulationsrechnungen wird in [RIM 10] für die Analyse gesundheitlicher Risiken durch Allergene vorgestellt. Für die Inputvariablen des Modells wird die BAYES'sche Inferenzstatistik zur Spezifizierung der aleatorischen Verteilungen mit epistemisch unsicheren Parametern genutzt. Dies ermöglicht eine separierte Verfolgung des Einflusses der Variabilität bzw. der dbzgl. Unsicherheiten auf die Verteilung der Exposition im Rahmen von 2D-MC-Simulationen. Die resultierende Expositionsverteilung wurde schließlich noch mit Dosis-Wirkungs-Beziehungen für eine probabilistische Analyse der gesundheitlichen Risiken verknüpft. Die Methode wird am Beispiel des Verzehrs von erdnusshaltiger Schokolade durch Kinder bzw. Erwachsene demonstriert. Die epistemische Unsicherheit der durch die Variabilität der Inputvariablen bestimmten Risikoverteilung wird durch BAYES'sche glaubhafte (credible) Intervalle für Perzentile charakterisiert. Bei dieser Untersuchung zeigte sich, dass die epistemische Unsicherheit deutlich größer ist als die Variabilität des Risikos.

Diese Beispiele verdeutlichen den gegenwärtigen "Standard" der Anwendung von probabilistischen Expositions- und Risikoanalysen im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz. Auf die Anwendung possibilistischer Methoden bzw. kombinierter Ansätze (Hybride von Möglichkeit und Wahrscheinlichkeit) wurde in Abschnitt 2.8.3 eingegangen. Hierzu zeichnet sich in der Fachliteratur ein ansteigender Trend ab.

Zum internationalen Stand probabilistischer Expositions- und Risikoanalysen im konventionellen Umwelt- und Gesundheitsschutz sei abschließend auf den Übersichtsartikel [LES 07] hingewiesen, in dem auf viele Veröffentlichungen in spezialisierten Fachjournalen eingegangen wurde, die nicht in unsere Recherche einbezogen wurden. Von wenigen Veröffentlichungen im Jahr 1990 stieg die Anzahl der Publikationen zu standortspezifischen probabilistischen Expositions- und Risikoanalysen auf ca. 100 pro Jahr ab 2001.

3.2. Stand im Strahlenschutz

3.2.1. Vorbemerkungen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse einer Durchsicht einschlägiger Fachzeitschriften und Tagungen im Hinblick auf die Behandlung von Unsicherheiten in Parametern und Modellen, die sich im weitesten Sinne dem Bereich Strahlenschutz zuordnen lassen, dargestellt. Diese Durchsicht umfasste die folgenden Zeitschriftenserien:

- Applied Radiation and Isotopes,
- Health Physics,
- Journal of Radiation Protection (IOP Science),
- Journal of Environmental Radioactivity,
- Radiation and Environmental Biophysics,
- Radiation Protection Dosimetry,
- Radiation Research und
- Risk Analysis.

Die Mehrzahl der nachfolgend angesprochenen Publikationen stammt aus der *Health Physics*. Außerdem wurden die Proceedings der folgenden Fachtagungen recherchiert:

- Proceedings des Third European IRPA Congress 2010 June 14−16, Helsinki, Finland,
- Proceedings der ICEM Conference 2009 October 11-15, Liverpool, UK,
- Proceedings der ICEM Conference 2007 September 2-6, Bruges, Belgium,
- Proceedings der ICEM Conference 2003 September 21 - 25, Oxford, UK,
- Proceedings der ICEM Conference 2001 September 30 - October 4, Bruges, Belgium.

Diese Durchsicht erfolgte mit dem Ziel, zu den einzelnen in Abschnitt 2.2 definierten Teilen von radioökologischen Expositionsmodellen (einschließlich der Expositionsmodelle im engeren Sinne) Vorgehensweisen zusammenzustellen, mit denen die Unsicherheiten im Modell und bei der Wahl der Parameterwerte sowie die Variabilität einzelner Parameter erfasst und behandelt werden. Die ausgewählten Zeitschriftenserien bieten hierbei einen repräsentativen Querschnitt von Themen der Strahlenwirkungen, der Messtechnik, der radiologischen und radioökologischen Modellierung. Es wurden jeweils ein bzw. zwei Jahrzehnte durchgesehen. Die Tagungen der ICEM-Serie sowie die ausgewählte IRPA-Tagung bieten ein breites Themenspektrum u. a. zur Umweltsanierung einschl. der hierzu notwendigen Modellierungen sowie zu aktuellen Entwicklungen auf allen Gebieten des Strahlenschutzes.

Die aus der Durchsicht gewonnenen Ergebnisse sind aufgegliedert nach methodischen Aspekten sowie praktischen Anwendungen in den Abschnitten 3.2.3 und 3.2.4 dargestellt. Zunächst werden in Abschnitt 3.2.2 normative Anforderungen, die sich aus dem deutschen Atom- und Strahlenschutzrecht ergeben, aufgeführt. Eine Übersicht zur historischen Entwicklung von Anforderungen an die Analyse radiologischer Risiken in den USA mit dem Schwerpunkt der Bewertung von Endlagern für radioaktive Abfälle gibt [RECH 99]. Einen Vergleich in Europa angewandter Berechnungsmethoden zur Abschätzung von Strahlenexpositionen enthält [TÜV 05A].

Probabilistische Expositionsabschätzungen werden insbesondere zur radiologischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Endlagern für radioaktive Abfälle (LLW bis HLW) in probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA) integriert. Hierzu sei beispielhaft auf die Publikationen [HEL 99A], [HEL 99B] und [PAT 99] zum Waste Isolation Pilot Plant, WIPP, [KES 99] zur PSA für das HLW-Endlager Yucca-Mountain, [ALBR 10] zum französischen HLW-Endlagerprojekt, und [GAR 10] zur PSA für ein LLW-Endlager verwiesen. Diese Thematik wird in vielen Publikationen zu Endlagern für radioaktive Abfälle behandelt. Dies ist ein wichtiger Anwendungsbereich probabilistischer und possibilistischen Modelle zur Abschätzung potentieller Strahlenexpositionen, der aber substantiell durch epistemische Szenario- und Modellunsicherheiten geprägt ist, die nicht Gegenstand der vorliegenden Untersuchung sind.

3.2.2. Normative Anforderungen und Anwendungen

3.2.2.1. Anforderungen aus Regelwerksteilen

Im deutschen Regelwerk finden sich Anforderungen beziehungsweise Aussagen zur Anwendung von probabilistischen Vorgehensweisen sowie die Anwendung derartiger Methoden bei radioökologischen Modellen im weitesten Sinne nur an wenigen Stellen auf der untergesetzlichen (technischen) Ebene. Im Folgenden soll vor diesem Hintergrund nur auf vier Teile des Regelwerks eingegangen werden:

- AVV zu § 47 StrlSchV: Die AVV zu § 47 StrlSchV beinhaltet ein komplexes Modell zur Herstellung einer Beziehung zwischen den Ableitungen mit Luft und Wasser aus einer kerntechnischen Anlage der daraus resultierenden Dosis. Die Rechenvorschrift stellt das komplexeste im Bereich des Strahlenschutzes verrechtlichte Modell dar. Es ist vollständig deterministisch aufgebaut, Unsicherheiten der Parameter werden durch konservative Wahl der zugehörigen Werte behandelt.
- SSK-Stellungnahme zum Freigabeverfahren im KKS [SSK 05B]: In dieser Stellungnahme wird festgelegt, dass für den Nachweis der Einhaltung der Freigabewerte eine statistische Sicherheit von 95% anzusetzen ist. Diese bezieht sich auf das gesamte Freigabeverfahren und umfasst die Betrachtung von Typ-A- und Typ-B-Messunsicherheiten im Sinne des GUM. Hinsichtlich der Verteilungen, die für Parameter anzusetzen sind und die sich für das Ergebnis der Aktivitätsmessungen ergeben, wird ausgeführt: „Da die Schätzung des Erwartungswertes und seines Vertrauensbereichs von der statistischen Verteilung der Messwerte abhängt, erfordert die Berechnung von Konfidenzgrenzen für den Erwartungswert den Ansatz eines bestimmten Modells der statistischen Verteilung der Stichprobenwerte. Im Allgemeinen kann davon ausgegangen werden, dass die spezifische Aktivität eine lognormal verteilte Zufallsgröße ist. In bestimmten Fällen kann die spezifische Aktivität auch durch eine Normalverteilung modelliert werden. Für eine Anwendung des Ansatzes der Normalverteilung statt des generellen Ansatzes einer Lognormalverteilung ist es erforderlich, dessen bessere Eignung durch einen Anpassungstest nachzuweisen.“
- SSK-Empfehlung bzgl. NORM-Rückständen [SSK 04]: Diese Empfehlung der SSK behandelt die Ermittlung der Aktivität von NORM-Rückständen, die je nach Ursprung oder Bearbeitung des Materials sehr inhomogen in der Konzentration der radioaktiven Stoffe sein können. Wegen der Inhomogenität des Materials gibt es nicht einen Wert, sondern eine ganze Verteilung von Konzentrationswerten, aus denen ein repräsentativer Wert ermittelt werden muss. Die Berechnung von Konfidenzgrenzen für den Erwartungswert erfordert den Ansatz eines bestimmten Modells der statistischen Verteilung der Stichprobenwerte. Im Allgemeinen kann davon ausgegangen werden, dass die spezifische Aktivität eine lognormal verteilte Zufallsgröße ist. In bestimmten Fällen kann die spezifische Aktivität von Rückständen durch eine Normalverteilung modelliert werden. Die SSK-Empfehlung stellt weiterhin dar, dass die Konfidenzgrenzen zur Schätzung des Erwartungswerts der spezifischen Aktivität sollten zum Vertrauensniveau P = 0,95 bestimmt werden sollen.
- DIN 25457 [DIN 25457]: Die DIN 25457 „Aktivitätsmessverfahren für die Freigabe von radioaktiven Reststoffen und kerntechnischen Anlagenteilen“ enthält in ihren Teilen zur Freigabe von Bauschutt und Gebäuden (Teil 6) sowie von Bodenflächen (Teil 7) statistische Verfahren zur Auswertung von gemessenen Aktivitäten im Hinblick auf den Vergleich mit Freigabewerten nach Anl. III Tab. 1 StrlSchV. Der gegenwärtig abgeschlossene Entwurf von Teil 1 („Grundlagen der Beta- und Gamma-Aktivitätsmessverfahren“) enthält darüber hinaus eine vollständige Behandlung der Messunsicherheiten im Sinne des GUM [ISO 08].

Die grundlegende Frage, wie mit Unsicherheiten bei der Formulierung von Grenz- und Richtwerten für Personal und Bevölkerung zu verfahren ist, wird in [BAI 02] anhand von nicht krebsauslösenden chemischen Noxen diskutiert. Während in bisherigen rein deterministischen Modellen die Unsicherheiten durch die Wahl von konservativen Parameterwerten aufgefangen wurden, erlauben

probabilistische Modelle, die Unsicherheiten in Parameterwerten unmittelbar im Rahmen des Modells zu behandeln. Dabei werde jedoch oft der Fehler begangen, die resultierende Wirkung bzw. Dosis (im Vergleich zur Anwendung von Messwerten) erheblich zu überschätzen, wenn die zugrunde liegenden Parameter als lognormal verteilt angenommen werden und als Ergebnis der Mittelwert (oder gar das 95. Perzentil) der sich ergebenden Verteilung betrachtet wird. Es wird der Schluss gezogen, dass für zukünftige Fälle, in denen Grenz- und Richtwerte auf Basis probabilistischer Modelle abgeleitet werden sollen, Leitlinien erarbeitet werden sollten, wie in diesen Fällen mit der Einbeziehung der Parameterunsicherheit zu verfahren ist. Hiermit weist diese Arbeit, wie auch [THI 03], darauf hin, dass nicht die Festlegung des Vertrauensniveaus der einzelnen Parameter, von denen das Ergebnis abhängt, sondern einzig das Vertrauensniveau des Ergebnisses die für die Bewertung relevante Größe ist.

Wie auch schon in den Empfehlungen [SSK 04] und [SSK 05B] angesprochen und häufig in Deutschland angewendet, wird das 95%-Perzentil für probabilistische Betrachtungen im Strahlenschutz als sinnvolles Vertrauensniveau angewendet. Zu diesem Ergebnis kommt auch [EPA 01], wo als sinnvolle maximale Exposition RME (Reasonable Maximum Exposure) ein Bereich vom 90%- bis zum 99,9%-Perzentil genannt wird. Für die Altlastensanierung wird das 95%-Perzentil als Startpunkt der RME-Risikobewertung empfohlen. Das 99%- bzw. das 99,9%-Perzentil können im Sinne eines sehr hohen bzw. extremen Risikos bewertet werden. In [EPA 00A] wurde z. B. zur Risikobewertung der Aufnahme von Pestiziden mit Lebensmitteln die Überschreitung der so genannten „acute Population Adjusted Dose“ (aPAD) durch das 99,9%-Perzentil der probabilistischen Expositionsberechnung als Kriterium für eine Besorgnis („*threshold of regulatory concern*“) formuliert. Als ausreichendes Vertrauensniveau der Schätzung statistischer Kenngrößen (Mittelwert, Perzentile) wird in [EPA 01] ein Niveau von 95% empfohlen.

3.2.2.2. Anwendung als Grundlage für Regelwerksteile

Probabilistische Modelle zur Herleitung von Freigabewerten wurden in Deutschland bereits frühzeitig angewendet. Hierzu zählen die Arbeiten [GÖR 89] und [GÖR 90], die in die SSK-Empfehlungen zur Freigabe von Metallschrott 1988 (Eisenmetalle) und 1992 (Nichteisenmetalle) gemündet sind [SSK 88]. In diesen Modellen wurde allen Parametern Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugewiesen, die sowohl die Variabilität der Parameter (z B. Verteilung der Typen von Schmelzöfen in Deutschland auf der Basis einer umfangreichen Recherche mit allen relevanten Details wie Größe, Geometrie, Durchsatz, Anzahl Belegschaft usw.) als auch die Unsicherheit (z. B. Nutzung von Produkten, Expositionszeiten usw.) abbildeten.

Während das probabilistische Modell (nach Modifikationen) im Auftrag des BMU noch für die Bearbeitung weiterer Fragestellungen zur Freigabe von Metallschrott angewendet wurde, erfolgten spätere Modellierungen etwa zur Freigabe von Abfällen zur Beseitigung oder von Bauschutt sowie die Herleitung der Freigabewerte für die uneingeschränkte Freigabe auf der Basis deterministischer Modelle [DEC 98] [SSK 98]. Hierbei wurden die zuvor mit dem – wesentlich aufwändigeren – probabilistischen Modell ermittelten Ergebnisse weiterhin als Referenz und Benchmark herangezogen. Erst im Falle der Untersuchung der Kollektivdosis durch Freigaben in Deutschland wurde wieder auf durchgängig probabilistische Modelle zurückgegriffen [THI 03].

Derartige Modellierungen im internationalen Kontext (Europäische Kommission, IAEA) werden ebenfalls rein deterministisch durchgeführt. Hierzu zählen z. B. die Empfehlungen [IAEA 04B],

[IAEA 05] sowie [EC 98], [EC 00A] und [EC 00B] sowie für NORM-Rückstände [EC 01]. Ähnliches gilt für die Ausbreitungsmodelle, die z. B. die IAEA vorschlägt [IAEA 01].

Diese kurze Übersicht zeigt bereits, dass die Anwendung probabilistischer Modelle für die Herleitung von rechtlich verbindlichen Grenz- oder Richtwerten nur selten angewendet wird. Auf internationaler Ebene ist die Einigung auf komplexe probabilistische Modelle praktisch nicht durchführbar, so dass hier grundsätzlich deterministische Modelle zur Anwendung gelangen.

3.2.2.3. Sonstige allgemeine Darstellungen

Bevor in Abschnitt 3.2.3 eine breit angelegte Übersicht der Anwendung probabilistischer Modelle und der hierbei erfolgenden Behandlung von Unsicherheiten und Variabilitäten der Parameter gegeben wird, werden hier noch einmal einige Arbeiten zitiert, die sich mit grundlegenden und übergreifenden Fragen der Behandlung von Unsicherheit befassen, wie sie in Kapitel 2 des vorliegenden Berichts ausführlich dargestellt und erläutert wurden.

- Eine Abschätzung von Unsicherheiten und Darstellung nach [ISO 08A] (**GUM:** Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement) wird in [ALI 08] beschrieben.
- Eine grundlegende Betrachtung zur Behandlung von Unsicherheiten als Folge von Messfehlern mittels **Monte-Carlo-Simulationen** gibt [HOF 08]. Hierin wird zur Behandlung von Unsicherheiten insbesondere der Ansatz nach BERKSON[57] (der wahre Wert ist die Summe oder das Produkt des Messwerts und einer Zufallsvariable, die vom Messwert unabhängig ist) und der klassische Ansatz (der Messwert ist die Summe oder das Produkt des wahren Werts und einer Zufallsvariable, die vom wahren Wert unabhängig ist) verglichen. Die Anwendung beider Methoden für die Unsicherheitsanalyse mittels MC-Simulation wird dargestellt und mit Beispielen illustriert.
- [MILL 08A] stellt die Anwendung der **Hypothesen-Tests nach BAYES** zur qualitativen Interpretation eines Satzes von Messwerten dar, mit denen festgestellt werden soll, ob ein bestimmtes Merkmal vorliegt oder nicht. Das Verfahren wird in seiner allgemeinen Anwendung beschrieben, wird jedoch auch beispielhaft auf die Interpretation von Messwerten bei Inkorporationsanalysen angewendet. Ansätze, wie Datensätze mittels der **BAYES-Statistik** im Vergleich zur Bestimmung der Mittelwerte und Standardabweichung *a posteriori* unter Anwendung der exakten Verteilung der Daten sowie unter Anwendung der diskreten empirischen Verteilung, die aus der Analyse einiger Stichproben gewonnen wurde, analysiert werden können, gibt [MILL 08E].
- Grundlagen für die statistische Modellierung von Daten, die einer POISSON- bzw. einer Lognormalverteilung folgen, werden in [MILL 07] diskutiert. Für diese Datenverteilungen wird ein **Monte-Carlo-Verfahren** entwickelt und dargestellt.
- Die Faltung von Verteilungen verschiedener Parameter (propagation of distributions) wird

---

[57]) Wikipedia: "The Berkson error model is a description of random error (or misclassification) in measurement. Unlike classical error, Berkson error causes little or no bias in the measurement. It was proposed by Joseph Berkson in a paper entitled Are there two regressions?, published in 1950. An example of Berkson error arises in exposure assessment in epidemiological studies. Berkson error may predominate over classical error in cases where exposure data are highly aggregated. While this kind of error reduces the power of a study, risk estimates themselves are not themselves attenuated (as would be the case where random error predominates)."

in [COX 06] behandelt. Grundlegende Ansätze sowie die Realisierung mittels **Monte-Carlo-Methode** werden beschrieben und verglichen.

- Auf das Problem, wie Hypothesen zu testen sind, die statistische *Power* sowie die Angabe von Konfidenzbereichen bei Vorliegen von epistemischer Unsicherheit (also der Unsicherheit bzgl. des Wissens um die Eingangsgrößen und um die Parameterwerte usw.) geht [HOF 07] ein. Hierin sind in generischer Weise verschiedene Ansätze beschrieben: **Sensitivitätsanalyse**, Einfluss auf die Power eines **Hypothesentests** (Annahme oder Verwerfen der Hypothese), Einfluss auf den anzugebenden **Konfidenzbereich**.
- Die Anwendung des Konzepts der **vollständigen Unsicherheitsbetrachtung**, d. h. von Typ-A- und Typ-B-Unsicherheiten, wird in [LEM 07C] im Hinblick auf die Anwendung bei Modellen für Endläger beschrieben. Durch die gleichartige Behandlung rein aleatorischer als auch von epistemischen Unsicherheiten, die auf unvollständiger Kenntnis einzelner Parameter beruhen kann, kann nach Einschätzung in [LEM 07C] eine höhere Akzeptanz von Sicherheitsbewertungen erzielt werden.
- Auf plausibilistische Ansätze wird in [BENI 01] eingegangen. Hierin wird die Wahrscheinlichkeit betrachtet, dass ein einzelnes Ereignis (X) mit zugehöriger Wahrscheinlichkeit P(X) nur unter der Bedingung einer Annahme (A) eintritt. Die zugehörige Wahrscheinlichkeit ist $P(X|A)$. Die Richtigkeit dieser Annahme ist nicht bekannt, kann aber mit einer Gewichtung $\psi(A)$ versehen werden, die das Vertrauen des Beobachters in die Richtigkeit ausdrückt. Der gewichtete Ausdruck $\psi(A)\cdot P(X|A)$ ist keine Wahrscheinlichkeit im herkömmlichen Sinne. Für sie wird der Name „Plausibilität“ (*plausibility*) vorgeschlagen.
- Die gemeinsame Anwendung von **probabilistischen** und **possibilistischen Ansätzen** in Sicherheitsanalysen beschreibt [KATO 02]. Hierdurch lassen sich sowohl Unsicherheit als auch Variabilität sowie Expertenschätzungen gemeinsam auswerten.
- Grundlagen zur Behandlung der Unsicherheiten von Messungen werden im *Environmental Radiation Survey and Site Execution Manual* (EURSSEM) [EUR 10] behandelt. Diese sehr umfangreiche und aktuelle Publikation widmet sich allen Themen der Sanierung von radioaktiv belasteten Altlasten, darunter auch Modellierungen zur Herleitung von standortbezogenen Sanierungswerten sowie Messverfahren zum Nachweis betreffender Werte. Hierbei werden auch diverse Verfahren zur Behandlung von Unsicherheiten in der Modellierung sowie der Variabilität der Messwerte angegeben.

3.2.3. Anwendungen

3.2.3.1. Übersicht

In den folgenden Unterabschnitten werden die Ergebnisse einer Vielzahl von Publikationen hinsichtlich des Umgangs mit Unsicherheiten und Variabilitäten zusammengestellt. Die Gliederung erfolgt dabei danach, welche Teile der radiologischen Expositionsmodelle gemäß Abschnitt 2.2.1 im betreffenden Artikel hauptsächlich behandelt werden (Modellierung innerhalb einzelner Kompartimente, Transfer zwischen Kompartimenten, Exposition des Menschen usw.). Eine Arbeit wurde nur dann aufgenommen, wenn klar dargestellt wurde, mit welchen Methoden die Modellierung und die Behandlung von Unsicherheiten erfolgten. Durch diesen Ansatz wird es ermöglicht zu untersuchen, welche Methoden innerhalb bestimmter Teile des Gesamtmodells

vorzugsweise bzw. selten zur Anwendung kommen. In jedem Abschnitt wurden einleitend die Befunde zusammengefasst.

3.2.3.2. Modellierung der Ausbreitung von Quellen zu und in Umweltmedien

Modelle, die die Ausbreitung von Radionukliden zwischen Quelle und Umweltmedien beschreiben, stellen zumeist eine Vielzahl von einzelnen Szenarien, Ausbreitungspfaden usw. nebeneinander und führen die Ergebnisse (z. B. die insgesamt in einem Gewässer eintreffenden Nuklide) später zusammen. Derartige Modelle eignen sich gut für die zunächst deterministische Formulierung der einzelnen Szenarien und deren Verknüpfung, wobei nachträglich jeder Parameter mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung versehen werden kann. Da die Modelle oft in einem leistungsfähigen und programmierbaren Tabellenkalkulationsprogramm wie Microsoft EXCEL ausgeführt werden, eignen sich für die probabilistische Modellierung Aufsätze wie Crystal Ball und @Risk, die sich vollständig in die Programmumgebung integrieren.

Dieselben Überlegungen gelten auch für die nachfolgenden Modellteile, die die Ausbreitung zu Expositionsmedien bzw. der Biosphäre beschreiben. Dementsprechend finden sich in diesem und den folgenden Unterabschnitten vorwiegend Monte-Carlo-Methoden, daneben auch die Anwendung der Fuzzy-Logik sowie einige Ansätze in analytischer Form.

- Ein Beispiel für die Behandlung von Variationen der gemessenen Freisetzungsrate von Rn-222 in die Raumluft von Gebäuden wird in [JONG 06] gegeben. Bei den Untersuchungen wurde festgestellt, dass die Rn-Exhalationsrate für die untersuchten Materialarten abhängig von Herkunft und Zusammensetzung des Materials (Dichte, Aktivitätsgehalt usw.) erhebliche Schwankungen aufweisen kann. Diese Variation bestimmte mittels Berechnung der **Fehlerfortpflanzung** die Unsicherheit des Dosisfaktors für jede Materialklasse.
- Die Unsicherheit bei atmosphärischen Ausbreitungsrechnungen hinsichtlich der räumlichen Verteilung der abgelagerten Aktivitätsmenge wird in [SAJO 03] behandelt. Im Ansatz des Ausbreitungsmodells nach GAUSS wird ein Parameter eingeführt, der die Abweichung zwischen wahrer und berechneter Konzentration (lokale Fluktuation) beschreibt. Die räumliche Unsicherheit in der berechneten Konzentrationsverteilung stellt sich so als Folge der Unsicherheit bzw. Variation in der Windverteilung dar. Sie wird **analytisch** innerhalb der Ausbreitungsgleichungen gelöst.
- Eine **2D-Sensitivitätsanalyse** zur atmosphärischen Ausbreitung von Radionukliden nach der Freisetzung aus einem Kernkraftwerk enthält [QUE 05].
- In [HAM 02] wird über die Anwendung von Parametervariationen (Windgeschwindigkeit, Windrichtung usw.) gegenüber den für Rechnungen verwendeten langjährigen Mittelwerten und die Analyse des Einflusses dieser Variabilität auf das Ergebnis (Konzentration in Abwindrichtung) mittels **Monte-Carlo-Methoden** berichtet. Die Ergebnisse waren lognormal verteilt.
- Monte-Carlo-Simulationen für die Radon-Emanation aus trockenen Baustoffen beschreibt [SUN 95]. Die **Monte-Carlo-Simulation** bezieht sich in diesem Fall ähnlich wie bei der Anwendung zur Modellierung der externen Exposition auf die einzelnen Wechselwirkungen zwischen der Erzeugung eines Rn-Atoms, seiner Migration im Baustoff und der evtl. Freisetzung in die Raumluft.

- Der korrekten Behandlung von Unsicherheiten in den Prozessen, die zur Freisetzung von Radionukliden aus des Abfallmatrix sowie zur Migration beitragen, widmet sich [LEM 07A] und [LEM 07B]. Die Unsicherheitsanalyse erfolgt hier mit Werkzeugen der **Fuzzy-Logik**, insbesondere **Fuzzy Cognitive Maps (FCM)**[58].
- Ebenfalls mit der **Fuzzy-Logik** werden in [KATO 03] die Unsicherheit und die Variabilität der Parameter, die für die Ausbreitung aus einem Endlager relevant sind (insbesondere die hydraulische Leitfähigkeit und die Grundwasserfließgeschwindigkeit), behandelt.
- Die Unsicherheiten bei der Analyse der Aktivitätsgehalte radioaktiver Abfälle (als potentieller Quellterm von Endlagern sowie für sonstige Sicherheitsanalysen) werden in [GIG 07] behandelt. Unsicherheiten entstehen sowohl aus der gammaspektrometrischen Messung des Abfallgebindes als auch aus der Korrelation der hierdurch nicht messbaren Radionuklide mittels Korrelationsfaktoren. In dem hier vorgestellten probabilistischen Ansatz zur Behandlung der Unsicherheiten mit **Monte-Carlo-Methode** wird die Analyse so modifiziert, dass ein Dosisrichtwert 0,1 mSv/a auf dem 97,5-Perzentil unter Berücksichtigung beider Unsicherheitsbeiträge eingehalten ist.
- Für die Modellierung der Leckage aus Abfallfässern wird in [KALI 01] die Software GOLDSIM verwendet, wobei die Unsicherheit im Auftreten von Leckagen (Anzahl der betroffenen Fässer) durch einen **probabilistischen Ansatz** beschrieben wird.

3.2.3.3. Modellierung der Ausbreitung zwischen Quelle und Expositionsmedien bzw. Biosphäre

Für die Ausgestaltung der Modellierung der Ausbreitung zwischen Quelle und Expositionsmedien bzw. der Biosphäre gelten ähnliche Erwägungen wie in Abschnitt 3.2.3.2 beschrieben. Für die Ausbreitung bis zur Biosphäre wurden zudem standardisierte und weit verbreitete Programme entwickelt (insbesondere die RESRAD-Programmfamilie, *Residual radioactivity model and code*), welche eine aussagekräftige Modellierung auch dem hierin nicht geübten Anwender ermöglichen sollen. Die Programme der RESRAD-Familie beinhalten teilweise probabilistische Modelle auf Basis der Monte-Carlo-Methode. Auch bei Arbeiten, die nicht auf RESRAD zurückgreifen, wird dieses Verfahren bevorzugt eingesetzt.

- Eine Modellierung der Dosis als Folge der Inkorporation von abgereichertem Uran (DU, *Depleted Uranium*) wird in [MILL 09] beschrieben. Im Modell wird die Unsicherheit verschiedener Parameter berücksichtigt, insbesondere für die Verteilung der Partikelgröße und die Expositionsumstände (Aufenthaltszeiten, Atemraten, Konzentrationen usw.). Zur Analyse der Unsicherheiten insbesondere der Konzentration an DU, woraus die nachfolgende Exposition resultiert, werden verschiedene Verfahren (insbesondere **Likelihood-Funktion** und **BAYES-Methode**) diskutiert und verglichen.
- Bei der Modellierung der Auswirkungen von radioaktivem Material in Klärschlamm und Asche aus der Klärschlammverbrennung wurde in [WOL 06] das Modell RESRAD

---

[58]) Fuzzy cognitive map (Wikipedia): A Fuzzy cognitive map is a cognitive map within which the relations between the elements (e.g. concepts, events, project resources) of a “mental landscape” can be used to compute the “strength of impact” of these elements. The theory behind that computation is fuzzy logic. Fuzzy cognitive maps are signed fuzzy digraphs. Spreadsheets or tables are used to map FCMs into Matrices for further computation.

verwendet. Für einzelne Parameter der Verzehrsmengen wurde die Unsicherheit mittels (Dreiecks-)Verteilungen ausgedrückt und im Modell durch **Monte-Carlo-Methode** (in RESRAD enthalten) bei der Dosisberechnung berücksichtigt. Des Weiteren wurde die Variationsbreite möglicher Expositionsumstände durch Betrachtung mehrerer Szenarien berücksichtigt.

- Ein komplexes Ausbreitungsmodell für die Hanford Site (USA) als Folge des PUREX-Störfalls von 1963 wird in [APO 05] beschrieben. Es werden die Ausbreitungen von der Quelle über die Umweltmedien bis zu den Expositionsmedien sowie die Dosisberechnung für die Schilddrüse modelliert. Zur Analyse der Unsicherheiten wurden den wesentlichen Parametern Verteilungen verschiedener Formen (Dreieck, Lognormal) zugewiesen und **Monte-Carlo-Analysen** durchgeführt. Für das Ergebnis wurden Konfidenzbereiche angegeben. Die Ausbreitungsannahmen werden mit Messungen in heutigen Umwelt- und Expositionsmedien verglichen, wobei sich gute Übereinstimmung mit den Modellergebnissen zeigte. Die Modellierung erfolgte im Rahmen des IAEA-Projekts BIOMASS. Auf die Behandlung von Unsicherheiten mittels **Monte-Carlo-Analysen** in den anderen BIOMASS-Studien geht [PRÖ 05] ein.
- In analoger Weise wird in [SIM 03] die Dosis durch Freisetzung von I-131 nahe der Savannah River Site in den 1950er-Jahren modelliert. Alle Parameter im Modell (Freisetzungsraten, Transferfaktoren, Anteil Selbstversorgung usw.) werden mit Verteilungen und Wertebereichen versehen. Der Schwerpunkt der Analyse liegt auf der Unsicherheit der Faktoren, die den Transport in den Medien bestimmen. Die Unsicherheitsanalyse wurde mit **Monte-Carlo-Methode** unter Verwendung der Software Crystal Ball durchgeführt.
- Unsicherheiten in Expositionsmodellen insbesondere durch Variabilität der Transferfaktoren werden in [ROC 98] diskutiert. Für die Modelle werden Computerprogramme PRISM und PARATI angegeben, die die **Monte-Carlo-Methode** verwenden.
- Eine Sensitivitätsanalyse des radioökologischen Modells ECOSYS-87 erfolgt in [HIN 94]. Dort wird die Methode der **Rangkorrelationskoeffizienten** verwendet, um ein einem komplexen Modell den Grad des Einflusses einzelner Parameter auf das Ergebnis zu analysieren und daran anschließend die Unsicherheiten der relevantesten Parameter zu diskutieren.
- Die Anwendung probabilistischer Analysen für die Unsicherheiten bei komplexen Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager wird in [WOLL 09] beschrieben. Die Unsicherheiten und Variabilitäten werden durch Betrachtung einer größeren Zahl von Szenarien sowie durch **probabilistische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse** behandelt.
- Die Anwendung der **Monte-Carlo-Methode** für ein Kompartiment-Modell, das die zeitliche Entwicklung der Ausbreitung von Radionukliden aus einem Endlager beschreibt, wird in [ZIO 09] vorgestellt. Die Flexibilität, die durch Einbindung der Monte-Carlo-Simulation für die Modellierung erzielt wird, wird hervorgehoben.
- Die Anwendung von **Monte-Carlo-Verfahren** lediglich auf den Teilaspekt der Auswirkungen von Erdbeben auf ein Endlager beschreibt [PEN 07], wobei ein Verfahren entwickelt wird, wie die Anzahl der Modellläufe gering gehalten werden kann.

- Untersuchungen zur Unsicherheit und Sensitivität von Parameter für die **probabilistische Modellierung der Verteilung von Radionukliden zwischen Feststoff und Wasser** in Sedimenten bzw. in Grundwasserleitern stellen [PERI 04] bzw. [CIFF 09] vor.

3.2.3.4. Modellierung der Ausbreitung in/zwischen Umweltmedien und Biosphäre

Die Modellierung der Ausbreitung in/zwischen Umweltmedien und Biosphäre lässt sich oft nicht klar von den zuvor in den Abschnitten 3.2.3.2 und 3.2.3.3 genannten Modellteilen abgrenzen. In den nachstehend aufgeführten Arbeiten finden sich jedoch vor allem solche, bei denen das Hauptziel die Modellierung bis zur Biosphäre war. In vielen Fällen geht es dabei eher um die Erstellung einer Beziehung zwischen Aktivitätskonzentrationen z. B. in Lebensmitteln bzw. Tieren und Pflanzen für den menschlichen Verzehr einerseits und der Konzentration in Umweltmedien andererseits. Auch jüngste Arbeiten betrachten daher oft nicht die Unsicherheiten explizit, sondern verwenden rein deterministische Berechnungen.

- Die Anwendung der Software RESRAD (*Residual radioactivity model and code*) zur Berechnung der Aktivitätskonzentrationen von U und seinen Zerfallsprodukten in verschiedenen Umweltmedien sowie in der Biosphäre mit anschließender Abschätzung der Dosis (Szenario eines bäuerlichen Betriebs mit weitgehender Selbstversorgung und andere Szenarien) wird in [BEAU 09] beschrieben. Das in RESRAD implementierte Modell basiert auf einer **deterministischen** Berechnung aller Schritte zwischen Quelle und exponierten Personen. Die Dosisberechnung für alle Szenarien erfolgt auf Basis begründet gewählter Einzelparameter (entsprechend der für die Anwendung von RESRAD festzulegenden Eingangsdaten). Eine Variation der Parameter oder Betrachtung von Unsicherheiten erfolgt nicht.

- In gleicher Weise wird in [MOE 07] die Ausbreitung von Radionukliden in der Umgebung von Yucca Mountain **ohne die Einbeziehung von Unsicherheiten** von Parametern analysiert. Vielmehr wird hierbei untersucht, welche Konservativitäten in den einzelnen Modellannahmen bestehen und welche Parameter einen hohen Einfluss auf das Ergebnis der Dosisberechnung haben. Auch eine Verbesserung des radioökologischen Modells für die nordischen Länder im Rahmen der ARGOS- und RODOS-Entscheidungshilfesysteme wird in [ANDE 10] rein **deterministisch** ohne Behandlung von Unsicherheiten modelliert.

- Ein Kompartiment-Modell des menschlichen Stoffwechsels für die Berechnung der U-Konzentration in menschlichem Haar als Folge der langfristigen Aufnahme von U mit dem Trinkwasser wird in [LI 09] vorgestellt. Diese Modellierung dient dazu, die Verwendung der U-Konzentration in Haar als Bioindikator für Umweltnoxen zu verbessern. Das **deterministische** Modell wird hierbei an vorliegende Messdaten angefittet, die bei Personen der Bevölkerung sowie bei Personal in Bergwerken gewonnen wurden und für die die Eingangsdaten gut bekannt waren. Die Parametervariation (Aufnahmemenge, Transferfaktoren zwischen den Kompartimenten) wurde hierbei durch Vorgabe einer Serie von Werten und Berechnung der Modellergebnisse für jeden Wertesatz durchgeführt.

- Die Unsicherheit der Aktivitätsangaben für I-131 in Pflanzenbewuchs rund um die Hanford-Site, insbesondere für die Dosisrekonstruktion, wird in [GIL 96] betrachtet. Hierzu werden die Prozeduren für die ab 1944 angewendeten Probenentnahme- und Messverfahren analysiert und jedem Parameter wird eine Wahrscheinlichkeitsverteilung zugeordnet. Die

Berechnung der Unsicherheit der Ergebnisse erfolgte für jede Betriebsepoche, in der die Messmethodik gleich blieb, mittels **Monte-Carlo-Methode** mit einem selbst erstellten Computerprogramm. Im Ergebnis wurden Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die I-131-Konzentration in verschiedenen Pflanzen angegeben.

- Die Anwendung der Software GOLDSIM zur Freisetzung von Radionukliden in einem hypothetischen Endlager wird in [PRV 03] beschrieben. Zur Behandlung von Unsicherheiten werden den Parametern Verteilungen zugewiesen. Die Analyse erfolgt mit **Monte-Carlo-Methode**. In der Modellierung werden insbesondere die Expositionsrouten Verzehr von Wurzelgemüse, von Fleisch und Trinkwasser aus einem Brunnen berücksichtigt.

3.2.3.5. Modellierung der Ausbreitung zwischen Umweltmedien und Expositionsmedien

Sofern eine Abgrenzung der Modellierung der Ausbreitung zwischen Umweltmedien und Expositionsmedien von den vorhergehend genannten Modellierungen möglich ist, lassen sich die folgenden Beispiele eher dem Bereich der Ermittlung von Aktivitätskonzentration in den Expositionsmedien zuordnen. Hierbei sind vor allem Ausbreitungen in der Luft sowie die Raumluftkonzentration von Radon und seiner Folgeprodukte zu nennen. Die Monte-Carlo-Methode kommt auch hier bevorzugt zur Anwendung, daneben werden auch BAYES-Statistik sowie wesentlich einfachere Methoden verwendet.

- Die quantitative Beziehung zwischen der Konzentration von Radon-Gas, der auf Oberflächen abgelagerten Aktivität von Radon-Folgeprodukten (RFP), der Dosisleistung durch RFP in der Luft sowie verschiedenen Faktoren, die die Exposition in Wohnbereichen beeinflussen, wird in [SUN 10] untersucht. Für die Behandlung von Unsicherheiten wird eine **Monte-Carlo-Simulation** unter Verwendung der mit Excel verwendeten Software Crystal Ball verwendet. Wahrscheinlichkeitsverteilungen werden zu Raumgröße, Luftwechselrate, Ablagerungsrate und Anlagerungsrate von RFP an Aerosolen angesetzt.
- Die Depositionsrate von Folgeprodukten von Radon und Thoron in Räumen wurde in [STEV 09] modelliert, bei dem die stochastische Bewegung der Partikel in der Luft mittels eines **Monte-Carlo-Verfahrens** simuliert wurde.
- Die Radonkonzentration in Häusern in verschiedenen Distrikten in Minnesota wird in [PRIC 96] modelliert. Hierbei wird die Unsicherheit für den natürlichen Urangehalt sowie die Parameter, die die Rn-Konzentration im Haus bestimmen, mittels **BAYES-Statistik** behandelt.
- Die **Anpassung von parametrischen Verteilungen** an Messergebnisse zur Radonkonzentration in Gebäuden wird in [MUR 08] diskutiert, wozu die Eignung unterschiedlicher linkssteiler Verteilungsarten untersucht wurde.
- Eine Anwendung der **2D-MC-Simulation** zur Unsicherheitsanalyse der Feldradiographie stellt [JANG 09] vor.
- Die Dosis für die Bevölkerung durch Tritium in der Atmosphäre als Folge der Ableitungen von der Savannah River Site (USA) wurde in [HAM 93] mit probabilistischen Methoden bestimmt. Hierzu wurde den relevanten Parametern Verteilungen (Normal, Lognormal, Dreieck) zugewiesen und das Ergebnis mittels **Monte-Carlo-Methode** berechnet. Für die

sich ergebende Verteilung der Dosen wurden die relevanten Perzentile sowie die Abhängigkeit von einzelnen Parametern bestimmt.

- Die Dosen durch Trinkwasserkonsum auf Basis einer breit angelegten Bestimmung der Aktivitätskonzentration in Trinkwässern in Österreich im Hinblick auf einen Vergleich mit der Europäischen Trinkwasserrichtlinie werden in [GRUB 10] abgeschätzt. Die Variabilität in den Ausgangsdaten sowie in den berechneten Dosisbeiträgen der verschiedenen einbezogenen Radionuklide wird in einem **Streudiagramm** sowie Vergleich mit dem Dosisgrenzwert der Richtlinie (0,1 mSv/a) veranschaulicht.
- Ein vollständiges Ausbreitungsmodell für ein oberflächennahes Endlager in Japan für U-haltige Abfälle beschreibt [TAK 01]. Es werden alle Expositionspfade und –routen einbezogen. Die Unsicherheitsanalyse wird mittels Zuweisung von Verteilungen zu den Parametern sowie **Monte-Carlo-Verfahren** durchgeführt.
- Eine rein deterministische Betrachtung von Unsicherheiten durch **Parametervariation** und Betrachtung des Auftretens bestimmter Szenarien in einem Ausbreitungsmodell für Grundwasser wird in [PRÖ 96] beschrieben.

3.2.3.6. Modellierung der Exposition des Menschen

Für die Modellierung der Exposition des Menschen liegt die größte Vielzahl von Anwendungen und Methoden zur Behandlung von Unsicherheiten vor. Die Darstellung wurde daher nochmals unterteilt nach

- Exposition durch Inhalation, Atemtrakt- und Lungenmodelle, für die eine große Vielzahl von Modellen und Methoden, vorwiegend jedoch Monte-Carlo-Methoden zur Anwendung kommen;
- Exposition durch sonstige Inkorporation, worunter sowohl radioökologische Modelle als auch Kompartiment-Modelle zur Beschreibung der Biokinetik im Menschen zu verstehen sind; auch hier ist die Monte-Carlo-Methode die am weitesten verbreitete;
- Berechnung von Dosisleistungen und Dosen, wobei die probabilistischen Ansätze sich hierbei auf die Verfolgung einzelner Teilchen in seinen verschiedenen Wechselwirkungen beziehen; derartige Modelle sind nicht im engeren Sinne Gegenstand der Betrachtung des vorliegenden Berichts und werden daher nur am Rande erwähnt;
- Exposition durch externe Bestrahlung, wobei sich hier die Modellierung und Unsicherheitsbetrachtung auf die Expositionsumstände bei der externen Bestrahlung beziehen und für die Monte-Carlo-Methoden und BAYES-Statistik zur Anwendung kommt.

Exposition durch Inhalation, Atemtrakt- und Lungenmodelle

- Eine Unsicherheitsanalyse für die Exposition durch abgereichertes Uran (DU) wird in [PUN 08] vorgestellt. Hierbei werden insbesondere die Parameter, die die Partikelverteilung, die Ablagerung in der Lunge bestimmen (Atemrate, Atemmodus, nasale Ablagerung, Partikeltransport im Atemtrakt) sowie die Absorption (Übergang aus dem Atemtrakt ins Blut, Aufnahme im Verdauungstrakt) diskutiert und einer Variation unterzogen. Die Modellierung erfolgt mit **Monte-Carlo-Methode**, wobei den genannten Parametern

Verteilungen (Lognormal, Dreieck) mit Mittelwert und Standardabweichung zugewiesen werden. In der Ergebnisdarstellung werden der Verlauf des Medians sowie der 0,975- und 0,025-Quantile angegeben.

- In analoger Weise zu [PUN 08] werden Unsicherheiten in der Deposition von Aerosolen im Atemtrakt bei strahlenexponiertem Personal kerntechnischer Anlagen in [FRI 06] betrachtet. Den Einzelparametern (Transferfaktoren, Körpermaße, Arbeitsumfeld usw.) werden Verteilungen zugeordnet (Dreieck, Normal, Lognormal, Gleichverteilung). Die Analyse wurde mittels **Monte-Carlo-Methode** mit einem selbst erstellten Computerprogramm durchgeführt. Für ähnliche Aufgabenstellungen in Bezug auf die Inhalation von waffenfähigem PuO_2 wird in [ADEN 03] ebenfalls die **Monte-Carlo-Methode** unter Anwendung der Software Crystal Ball verwendet. Für die Analyse der Dosis durch Inkorporation von Pu-239/240 einer Kohorte von strahlenexponiertem Personal aus den Jahren 1944/45 verwendet [MILL 08B] die **BAYES-Statistik**.
- Ein Beispiel, wie die Messungen der Raumluftkonzentration und die Ergebnisse von Inkorporationsmessungen für strahlenexponiertes Personal in kerntechnischen Anlagen in Beziehung gesetzt werden können, gibt [LOP 05]. Den Parametern (Aktivitätsverteilung, Aufnahmerate usw.) werden **Lognormal-Verteilungen** zugeordnet. Aus den Verteilungen wird das **obere Konfidenzniveau** berechnet.
- Ein vollständiges Computerprogramm auf Basis des Atemtraktmodells nach ICRP 66 wird in [FAR 05] dargestellt. Zur Analyse der Unsicherheiten der Modellergebnisse werden den relevanten Parametern (Eigenschaften des Gewebes) Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf Basis der beobachteten Variation der Eigenschaften zugewiesen. Die Unsicherheiten der Modellergebnisse werden mittels **Monte-Carlo-Methode** durch vielfache Modellläufe ermittelt. Eine vergleichbare Methode, bei der den Parametern ebenfalls Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugewiesen wurden, wurde in [HAR 04] und [HAR 03] angewendet, wobei in [HAR 03] neben der Software Crystal Ball auch die Methode der **Rangkorrelationskoeffizienten** verwendet wird. Die Verteilung des sich ergebenden Dosiskonversionsfaktors für I-131 ist eine Lognormalverteilung. Eine weitere Analyse mittels **Monte-Carlo-Methode** findet sich in [HUS 03], in welcher zusätzlich die Methode der **Rangkorrelationskoeffizienten** verwendet wird. Hierdurch wird die Abhängigkeit des Modellergebnisses von einzelnen Parametern und deren Variation ermittelt. Eine analoge Anwendung (Zuweisung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu Parametern, **Monte-Carlo-Methode**) unter Anwendung des Computerprogramms **LUDUC** (*Lung Dose Uncertainty Code*) wird in [BOL 03], [FAR 03] und [BOL 01] berichtet.

<u>Exposition durch sonstige Inkorporation</u>

- In [MOLO 10] wird ein Ansatz dargestellt, wie Unsicherheiten in den Modellparametern behandelt werden können, wenn Befunde einer Inkorporationsmessung (Ausscheidungsanalysen, Urin) bei strahlenexponiertem Personal kerntechnischer Anlagen mit den Fakten einer Expositionssituation auf Basis des biokinetischen Modells des Menschen in Beziehung gesetzt werden sollen. Die Rekonstruktion der aufgenommenen Aktivitätsmenge und ihrer Unsicherheit ist hierbei gleichbedeutend zur Rückwärtsrechnung des üblichen Problems, aus einer bekannten aufgenommenen Aktivitätsmenge die Aktivität

in den Ausscheidungen zu berechnen. Es werden die Methoden der **direkten numerischen Integration** unter Verwendung der **Likelihood-Funktion**, **Monte-Carlo-Simulationen** und **BAYES-Ansatz** dargestellt. Alle genannten Methoden führen zu ähnlichen Ergebnissen. Anwendungen für die Aufnahme von H-3 und Pu werden beschrieben.

- Die Unsicherheiten, die sich für die prospektive Dosisberechnung als Folge von Inkorporationen aus den Modellansätzen in biokinetischen und dosimetrischen Modellen ergeben, werden in [DAVE 09] dargestellt und verglichen. Nach der Diskussion der relevanten Unsicherheiten werden probabilistische Modellierungen, possibilistische Methoden und die **Evidenztheorie von DEMPSTER und SHAFER** dargestellt und ihre Anwendbarkeit verglichen. Die Ansätze werden dann für konkrete Fälle (U_3O_8 in einer französischen Konversionsanlage, U-Staub in Bergwerken), für die die Daten zur U-Aufnahme gut bekannt waren, angewendet und diskutiert.
- Einen ebenfalls grundlegenden Ansatz zur Behandlung von Unsicherheiten bei der Berechnung von Dosen durch Inkorporation stellt [PUN 07] vor. Die verschiedenen Ansätze für die durchgehende Behandlung von Unsicherheiten von Parameterwerten bis zum Ergebnis einschl. der **schließenden Statistik nach BAYES** werden diskutiert. Ein Computerprogramm, das alle genannten Ansätze zur Behandlung der Unsicherheiten umfasst, wird dargestellt.
- Zur Rekonstruktion der Dosis für die Schilddrüse der Bevölkerung in der am höchsten kontaminierten Umgebung von Tschernobyl werden in [DROZ 10] **Monte-Carlo-Verfahren** verwendet, mit deren Hilfe aus dem Aufenthaltsort, der Altersverteilung der dort lebenden Bevölkerung, dem dort gemessenen Fallout, den Verzehrs- und sonstigen Lebensgewohnheiten und anderen Parametern die Dosis über Ingestions- und Direktstrahlungspfade abgeschätzt wurde. Basierend auf diesen Daten wurde eine Kontrollstudie für Schilddrüsenkrebs durchgeführt.
- Ein probabilistisches Modell zur Aufnahme von F-18 bei Behandlung mit Radiopharmazeutika wird in [LI 10] beschrieben. Die erfolgt mittels **Monte-Carlo-Methode**. Eine Sensitivitätsanalyse zeigt, dass die Transferrate vom Plasma zu den anderen Gewebearten der Parameter mit dem größten Einfluss auf das Ergebnis ist.
- In [BESS 07] werden die Unsicherheiten in den Ergebnissen analysiert, die für die Dosis durch Pu-Inkorporation mittels eines dosimetrischen Modells auf Basis einer Kohorte von strahlenexponiertem Personal aus der kerntechnischen Anlage Mayak gewonnen wurden. Die Unsicherheitsanalyse erfolgte mit **Monte-Carlo-Verfahren**. Als Hauptursachen für die Unsicherheit des Ergebnisses wurden die Urinmessungen, die Modellparameter sowie die Referenzgewichte für die Organe identifiziert. Für die gleiche Aufgabenstellung wird in [KRA 05] die **Störungstheorie**[59] 1. Ordnung (*perturbation theory*) verwendet. Die Unsicherheiten der einzelnen Parameter werden als Störungen der idealen Lösung aufgefasst und auf diese Weise die Konfidenzbereiche des Ergebnisses berechnet. Einen Ansatz mit

---

[59]) Störungstheorie (Wikipedia): „Ein kompliziertes Problem wird zunächst solange durch ignorieren kleiner Einflüsse idealisiert, bis es auf ein Problem mit bekannter Lösung reduziert ist. Danach werden die zuvor ignorierten Einflüsse als kleine Störungen dem System hinzugefügt und eine Näherungslösung berechnet.“

BAYES-Statistik für die Analyse der internen Dosis für strahlenexponiertes Personal aus Mayak verfolgt [MILL 08D].

- Ebenfalls für die Umgebung von Mayak wurde ein radioökologisches Modell entwickelt, das die Exposition der entlang des Flusses Techa lebenden Bevölkerung durch externe Bestrahlung und Ingestion von Trinkwasser beschreibt [NAP 01]. Den Parametern, die die Expositionsumstände beschreiben, werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugeordnet. Die Analyse wird mit **Monte-Carlo-Methode** mittels der Software Crystal Ball durchgeführt. Die Besonderheit dieser Untersuchung ist, dass neben der durch Inhalation folgenden Dosis auch die Dosis durch externe Bestrahlung probabilistisch modelliert wurde.
- Die Anwendung des von der ICRP empfohlenen Modells zur Interpretation der Messergebnisse aus Ganzkörpermessungen für eine kleine Gruppe von strahlenexponiertem Personal, die eine bekannte Menge Co-60 inhaliert hatten, beschreibt [DAVI 07]. Da die Standardwerte für die Parameter im genannten Modell nicht zu befriedigenden Ergebnissen führten, wurden diese **Parameterwerte** (AMAD; Transferfaktoren usw.) **variiert** und die Ergebnisse des Modells mit den tatsächlichen Messwerten verglichen. Diese Prozedur wurde fortgeführt, bis eine gute Übereinstimmung zwischen Modellvoraussagen und tatsächlichen Messwerten erzielt wurde.
- Den Unsicherheiten bei Dosiskoeffizienten für ^{131}I, ^{137}Cs und ^{90}Sr widmet sich [APO 04]. Die Radionuklide wurden als die für die Bevölkerung relevantesten bei Ableitungen aus kerntechnischen Anlagen betrachtet. Den Parametern der biokinetischen Modelle werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugewiesen, mit denen die Variabilität der Vorgänge im menschlichen Organismus beschrieben wird. Die Analyse wurde mittels **Monte-Carlo-Methode** durchgeführt und für die Ergebnisse das 95%-Vertrauensniveau angegeben.
- Die Unsicherheiten im Dosiskonversionsfaktor für Tritium werden in [HAM 99] untersucht. Den Parametern, die den Wert des Dosiskonversionsfaktors beeinflussen (biologische Halbwertszeit, Gewebemasse, Bewertungsfaktoren, aufgenommener Anteil, mittlere Zerfallsenergie), wurden Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugeordnet. Die Analyse wurde mittels **Monte-Carlo-Methode** durchgeführt. Es ergibt sich, dass der vom DOE und der EPA (USA) angegebene Wert dem 77. Perzentil der Ergebnisverteilung entspricht.
- Die Unsicherheiten in der Radionuklidaufnahme des Körpers und der hieraus folgenden Dosen durch diskrete, stochastische Zufuhr unter Berücksichtigung des Metabolismus des menschlichen Körpers wurde in [KER 93] bestimmt. Hierbei wurden die Fälle einer konstanten und einer zufällig verteilten Zufuhr verglichen. Die Behandlung von Unsicherheiten wurde hierbei durch **Betrachtung mehrerer Grenzfälle** sowie die Berechnung eines Faktors, der die Unsicherheit ausdrückt, in analytischer Form durchgeführt.
- Die Unsicherheiten der Modellierung des Übergangs von Aktiniden in das Skelett des Menschen werden in [VRBA 10] mittels eines einfachen **POISSON-Ansatzes** zur Berechnung der Streubreite der Ergebnisverteilung (bei kleinen Fehlern) sowie mittels der **Monte-Carlo-Methode** modelliert.
- Einen anderen Ansatz zur Behandlung von Unsicherheit bei Dosimetrie nach Inkorporation verfolgt [HATO 10]. Hier werden Expertenschätzungen der Unsicherheit für das biokinetische Modell für Cs-137 und die Methode der probabilistischen Inversion mittels

des **PARFUM-Algorithmus** (PARameter Fitting for Uncertain Models) genutzt. Es wird davon ausgegangen, dass die notwendige, aber unbekannte Wahrscheinlichkeitsverteilung der wesentlichen Parameter im biokinetischen Modell in den meisten Fällen nicht aus den Messdaten abgeleitet werden kann. **Expertenschätzungen** werden dann verwendet, um die **Verteilungen der Parameter** abzuleiten. Die Methode wurde auf die zeitliche Entwicklung der im Gewebe verbleibenden Aktivitäten angewendet (1 Tag, 1 Woche, 1 Monat, 1 Jahr, 5 Jahre), für die Erfahrungswerte vorliegen. Im Ergebnis wurde die Verteilungsfunktion für den Ingestionsdosiskoeffizient für Cs-137 berechnet. [MILL 08C] stellt ein biokinetisches Kompartiment-Modell für Cs-137 auf Basis der **BAYES-Statistik** vor. Zur Parameterwahl wird die Methode des Latin hypercube sampling verwendet.

Berechnung von Dosisleistungen und Dosen

- Der Verlauf der Dosisleistungsverteilungen im Raum als Folge verschiedener Geometrien zwischen Bestrahlungsquelle und bestrahlten Produkten in einer Bestrahlungsanlage in Indien wird in [BIJU 09] einerseits mit der Software **MCNP** sowie andererseits mit der Punkt-Kern-Integration (Software GUI2QAD) berechnet. Während die Anwendung von MCNP für komplexe Bestrahlungsgeometrien Standard ist und daher hier nicht weiter aufgeführt werden müsste, ist der in [BIJU 09] enthaltene detaillierte Vergleich der Ergebnisse beider Verfahren relevant, der sehr gute Übereinstimmung zeigt. In ähnlicher Weise zeigt [KAM 02] einen Vergleich zwischen deterministisch berechneten Dosen, die im Modell RESRAD verwendet werden, und MCNP-Rechnungen, die ebenfalls zu guten Übereinstimmungen führen.
- Eine erweiterte Anwendung von **MCNP**, bei der der hypothetische Fall einer Kontamination eines städtischen Umfelds als Folge eines kerntechnischen Unfalls und die Dosen durch Cs-137-Kontamination sowie die Vermeidung von Dosen durch Dekontamination untersucht wurden, stellt [KIS 04] dar. Hierbei wurden auch die Expositionsumstände und die Anzahl der jeweils exponierten Personen einbezogen. Auf dieser Basis wurden Individual- und Kollektivdosen ermittelt.
- Analoge Simulationen mit Software, die auf **Monte-Carlo-Algorithmen** basiert, wird auch für Gammastrahlung durchgeführt (ein Beispiel hierfür gibt [GIA 08]). Des Weiteren werden mit gleichartigen Algorithmen Expositionen durch Elektronen samt aller Wechselwirkungen (Energiedeposition, Sekundärelektronen usw.) modelliert (ein Beispiel hierfür gibt [FUSS 10]), ebenso durch Neutronen (Beispiele geben [BEC 10] und [MORR 10]). Vergleichbare Modellierungen werden in der Literatur für diverse Anwendungsfälle dargestellt. Hierauf wird im Folgenden nicht weiter eingegangen.

Exposition durch externe Bestrahlung

- Unsicherheiten bei der Auswertung von Personendosimetern für externe Bestrahlung werden in [DIJK 06] mittels **Monte-Carlo-Methode** behandelt. Den relevanten Parametern (spektrale Verteilung der Strahlung, Parameter der Detektoren) werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen zugewiesen. Auf dieser Basis werden die Verteilung der gemessenen Dosis und das Konfidenzintervall ermittelt.

- Ein Beispiel für die Modellierung der Expositionsumstände bei externer Bestrahlung mittels Zuordnung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Parameterwerte des Szenarios und Analyse mittels **Monte-Carlo-Methode** wird in [NAP 01] für die entlang des Flusses Techa bei Mayak lebende Bevölkerung beschrieben. Auf dieses Modell wird in Abschnitt 0 näher eingegangen.
- Zur Ermittlung der Unsicherheit der Dosis, die bei der Auswertung von Personendosimetern zur Anwendung in Studien zur Dosisrekonstruktion zu unterstellen ist, werden geeignete Methoden in [GILB 96] untersucht. Diese Fehlerquellen sind z. B. die Auswertung der Filme (chemische Entwicklung, Auswertung der optischen Dichte) sowie die Filme als solche (ungleiche Response auf verschiedene Energiebereiche, Abnutzung, Feuchtigkeit, Lichteinstrahlung). Für historische Abschätzungen werden systematische Faktoren der Variabilität der Auswertung und Filme sowie **stochastische Faktoren** für die **Unsicherheit** bzgl. der **Expositionsumstände** angegeben und zu einer Gesamtunsicherheit kombiniert.
- Die Analyse in [BEH 10], der ein Vergleich zwischen den analytisch bestimmten Unsicherheiten der Dosiswerte für Personal kerntechnischer Anlagen und einer probabilistischen Auswertung zugrunde liegt, kommt zu dem Ergebnis, dass die herkömmliche analytische Methode die Unsicherheiten in den tatsächlichen Dosen um 10 – 30% überschätzt. Die probabilistische Analyse wurde mit **Monte-Carlo-Methoden** durchgeführt.
- Der Berechnung der charakteristischen Größen bei zählenden Messverfahren (Nachweisgrenze, Erkennungsgrenze) widmet sich [WEIS 09]. Diese Grenzen werden mathematisch unter Anwendung von **Monte-Carlo-Methoden** sowie Quantilen der **BAYES-Verteilungen** definiert.
- Unsicherheiten in der quantitativen Auswertung von Dosen durch Neutronen werden in [REGI 06] mit **BAYES-Statistik** behandelt. Alle Unsicherheiten, die in das Modell für die Messung eingehen, werden mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschrieben. Die Vorteile des Ansatzes nach BAYES liegen darin, dass Störungen von Parametern sowie vorliegende Informationen einbezogen werden können und die Modellierung flexibel erfolgen kann.

3.2.4. Vergleichende Bewertung des nationalen/internationalen Standes

Die in den Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3 gegebene Übersicht. zu normativen Anforderungen und Anwendungen probabilistischer radioökologischer Expositionsmodelle hat folgendes gezeigt:

- Für die Erstellung von Modellen, die zur Verrechtlichung von Zusammenhängen zwischen Quelle und Dosis sowie zur Herleitung von Richt- oder Grenzwerten kommen in der Regel rein deterministische Modelle zur Anwendung, etwa zur Herleitung von Freigabewerten nach § 29 StrlSchV oder zur Berechnung der Dosis durch Ableitungen nach § 47 StrlSchV. Die Behandlung von Unsicherheiten erfolgt in diesem Zusammenhang dann meist durch Diskussion der im Modell enthaltenen Konservativitäten, d. h. der Darstellung, dass die Parameter im Vergleich zu Mittelwerten von zugrunde liegenden Verteilungen auf einem hohen Perzentil gewählt wurden usw.

- Sofern in normativen Texten auf die Frage Behandlung von Unsicherheiten und des Vertrauensniveaus für die Angabe der Ergebnisverteilung eingegangen wird, wird übereinstimmend vom 95%-Perzentil ausgegangen.
- In der wissenschaftlichen Literatur der letzten zwei Jahrzehnte bzgl. aller Arten von radioökologischen Modellen kommen bei probabilistischer Modellierung vorwiegend MC-Simulationen zum Einsatz. Unsicherheiten im epistemischen Sinne und Variabilitäten von Parametern werden oft nicht genau unterschieden, sondern es werden den Parametern Werteverteilungen zugewiesen, die beide Arten von Unsicherheit beschreiben. Die Behandlung und Propagierung dieser Unsicherheit im Rahmen der Modellierung ergibt sich zwangsläufig durch die Ausgestaltung des Modells bis hin zur berechneten Verteilung des Ergebnisses (z. B. einer Dosis oder einer Aktivitätskonzentration in einem Medium wie der Raumluft, einem Tier, einer Pflanze usw.).
- Weitere genutzte Methoden sind: rein deterministische Berechnung der Fehlerfortpflanzung, Parametervariationen, deterministische Betrachtungen mehrerer Grenzfälle, Fuzzy-Logik, Likelihood-Funktionen, BAYES-Statistik, Methode der Rangkorrelationskoeffizienten sowie die DEMPSTER-SHAFER-Evidenztheorie bzw. darin enthaltene spezielle Ansätze wie die Möglichkeitstheorie (siehe Abschnitt 2.8). Neben der rein deterministischen Behandlung ist nicht erkennbar, dass einer der probabilistischen Ansätze eine systematisch größere Verbreitung aufweist. Neben der 1D- und 2D-MC-Simulation sind diverse Anwendungen von BAYES-Methoden gängig.
- Es ist deutlich zu beobachten, dass die Komplexität und Häufigkeit der probabilistischen Modellierungen, insbesondere die Anwendung der Monte-Carlo-Methode, seit den 1990er Jahren erheblich zugenommen hat. Dies liegt sicher auch an der Verfügbarkeit geeigneter Werkzeuge auch für einfach ausgestatte Rechner. Trotzdem sind im gleichen Zeitraum auch viele andere Auswerteverfahren beschrieben und diskutiert worden.

In den USA, aber z. B. auch in Frankreich und Großbritannien sind Anwendungen probabilistischer und possibilistischer Methoden zur Expositionsmodellierung fortgeschrittener als in Deutschland. Dies betrifft insbesondere komplexe Analysen zu Expositionen durch Ableitungen künstlicher Radionuklide aus kerntechnischen Anlagen (vgl. [CIFF 05], [CIFF 06]), gilt aber auch für natürliche Radionuklide (siehe z. B. [CHOW 04], [CHOW 06]). In Deutschland finden sich dbzgl. Ansätze u. a. im universitären Bereich (siehe z. B. [VAHL 04]) sowie in Forschungseinrichtungen.

Teil II

Aussagekraft von Modellprognosen bei unsicheren Eingangsdaten

4. SPEZIFIZIERUNG VON WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNGEN

Für probabilistische Modelle und darauf basierende Simulationsrechnungen mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden ist es erforderlich,

- für maßgebliche/sensitive Modellparameter den Typ der statistischen Verteilung zu bestimmen,
- die Verteilungsparameter zu schätzen, welche die Variabilität des jeweiligen Modellparameters bestimmen, wobei anhand der verfügbaren empirischen Daten neben den Punktschätzern für Verteilungsparameter auch epistemische Unsicherheiten dieser Schätzungen durch Konfidenzbereiche bzw. durch BAYES'sche Posteriorverteilungen[60] zu bestimmen sind, und
- mögliche statistische Abhängigkeiten zwischen Modellparametern zu analysieren und für die Simulationsrechnungen durch gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu modellieren.

Es sei an dieser Stelle noch einmal vermerkt, dass neben statistischen Verfahren zur Quantifizierung epistemischer Unsicherheiten von Modell- und Verteilungsparametern auch Expertenschätzungen verwendet und z. B. mit Hilfe von DEMPSTER-SHAFER-Strukturen quantifiziert werden können (vgl. Abschnitt 2.8). Im vorliegenden Kapitel wird jedoch nur auf statistische Methoden eingegangen, wozu die drei oben genannten Schwerpunkte in den nachfolgenden Abschnitten insbesondere unter dem Blickwinkel der Ableitung von Anforderungen an die Qualität der Datenbasis diskutiert und in Ergänzung von dbzgl. generellen Ausführungen in Kapitel 2 methodisch weiter vertieft werden.

Zur Lösung der oben genannten Aufgaben, die seit Jahrzehnten als Schwerpunkte der statistischen Inferenz gelten (siehe z. B. [FISH 54]), existiert eine kaum überschaubare Fülle von Fachbüchern und Veröffentlichungen in fachwissenschaftlichen Zeitschriften. Die nachfolgend zu den einzelnen Problemen angeführten Referenzen können deshalb nicht umfassend sein; sie sind als Verweise auf grundlegende Arbeiten, interessante Übersichtsartikel und (aus unserer Sicht) gut verständliche Abhandlungen zu speziellen Themen zu verstehen.

4.1. Bestimmung des Typs von univariaten statistischen Verteilungen

Die unterschiedlichen Familien diskreter und stetiger Verteilungen sind in diversen Fachbüchern zur Wahrscheinlichkeitstheorie und statistischen Inferenz ausführlich erläutert (siehe z. B. [BAL 03], [CAS 02], [FOR 11], [JOH 94], [JOH 95], [JOH 05], [KEEP 95], [KRI 06], [RIN 97]). Im Anhang C des vorliegenden Berichts sind wesentliche Angaben zu ausgewählten Verteilungen zusammengefasst. Erläuterungen zu grundlegenden sowie in jüngerer Zeit entwickelten Verteilungsarten enthalten auch die Hilfen in kommerziell verfügbarer Software zur Anpassung statistischer Verteilungen an Daten; siehe z. B. @Risk von Palisade Corporation (www.palisade.com) oder EasyFit Professional von MathWave Technologies (www.mathwave.com).

---

[60] Ist X ein Parameter eines Expositionsmodells (z. B. Aktivitätskonzentration, Expositionszeit, Verzehrsmenge etc.), der durch eine statistische Verteilung mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\theta)$ beschrieben wird, dann bezeichnet θ den/die Verteilungsparameter. θ kann i. A. jedoch nicht genau bestimmt werden. Mit den vorliegenden empirischen Daten $\mathbf{x}$ kann aber im Sinne der klassischen Statistik für ein vorgegebenes Vertrauensniveau ein Konfidenzintervall $[\theta_L, \theta_U]$ geschätzt werden, dass den "wahren" Wert von θ mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit überdeckt, oder im Sinne der BAYES'schen Statistik durch eine Posteriorverteilung mit Wahrscheinlichkeitsdichte $f_\theta(\theta|\mathbf{x})$ als eine Zufallsvariable charakterisiert werden ($\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ ist der Datenvektor einer Stichprobe aus n Messwerten).

Viele Verteilungsfamilien können über andere Verteilungen durch arithmetische Operationen, wie z. B. durch die Bildung von Summen oder Quotienten von Zufallsvariablen, als Spezialfälle für bestimmte Werten der Verteilungsparameter oder als Grenzfälle bei Ansatz bestimmter Relationen der Verteilungsparameter dargestellt werden. Hierzu gibt [LEEM 86] eine interessante Übersicht, die in [LEEM 08] weiter vervollständigt wurde. Außerdem können einige Verteilungsfamilien durch einfache Transformationen ineinander überführt werden. Neue Familien von Verteilungen können durch Transformationen aus bekannten Verteilungen erzeugt werden (siehe z. B. [JOH 49]) oder durch Verallgemeinerung/Ergänzung der mathematischen Form von Wahrscheinlichkeitsdichten bekannter Verteilungsfamilien abgeleitet werden.

Das Konzept der statistischen Verteilung basiert auf dem Begriff der statistischen Grundgesamtheit (kurz: Population), die bzgl. einer untersuchten Eigenschaft (z. B. Konzentration eines Schadstoffs in einem Umweltmedium, Verzehrsmenge einer Lebensmittelart durch Individuen der Bevölkerung etc.) durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte mit bestimmten Verteilungsparametern charakterisiert werden kann. Liegt nun für diese Population eine Stichprobe $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ von n Daten vor, so stellt sich die Frage, ob und mit welcher Bestimmtheit aus diesen Daten auf die Eigenschaften (das statistische Modell) der Population geschlossen werden kann. Die Beantwortung dieser Frage hängt auch vom Ziel der statistischen Inferenz ab. Besteht das primäre Ziel z. B. nur einer kompakten Präsentation (durch Angabe von wenigen Verteilungsparametern statt Auflistung einer sehr großen Anzahl einzelner Daten), so ist eher unwichtig, welcher Verteilungstyp durch eine Anpassung der Verteilungsparameter an die Daten bestimmt wurde. Soll jedoch, wie bei der probabilistischen Modellierung von Expositionen, das anhand der Daten bestimmte Populationsmodell für weitere Simulationsrechnungen zur Einschätzung von potentiellen Expositionen und insbesondere der Wahrscheinlichkeit einer Überschreitung von Richt- bzw. Grenzwerten genutzt werden, so ist einer zuverlässigen Modellierung der Randbereiche statistischer Verteilungen besonderes Augenmerk zu widmen, wobei in den zur Modellanpassung verfügbaren Daten gerade extreme Randbereiche oft nur vereinzelt oder nicht präsent sind. Auch die Bewertung von Parameterunsicherheiten hat hier eine hohe Priorität. Der Auswahl statistischer Verteilungen für Modellparameter anhand von Daten wird im vorliegenden Bericht relativ viel Platz eingeräumt, weil damit die Basis für alle weiteren Schritte der probabilistischen/stochastischen Simulation von Expositionen gelegt wird.

4.1.1. Vorausetzungen zur Anpassung von Verteilungsfunktionen an vorhandene Daten

Die im folgenden Abschnitt diskutierten klassischen Anpassungstests (die üblichen Goodness-of-Fit Tests wie Chi-Quadrat-Test, KOLMOGOROV-SMIRNOV-Test, ANDERSON-DARLING-Test, aber auch die auf der Likelihood-Funktion basierenden Tests) gehen von der Annahme aus, dass die einzelnen Werte der dem Test zugrunde liegenden Stichprobe aus einer Population stammen und voneinander unabhängig sind, d. h., dass sie eine iid Stichprobe darstellen (siehe Fußnote 47 in Abschnitt 2.7.2). Die Annahme einer Zugehörigkeit zur gleichen Verteilung ist i. d. R. kaum prüfbar, wird aber durch die Anwendung qualifizierter Sampling-Methoden [GIL 87] und eine (ggf. nachträgliche) Prüfung der Stichprobe auf einzelne Ausreißer (siehe z. B. [GRU 69]) als erfüllt angesehen. Zur Prüfung der gegenseitigen Unabhängigkeit der Stichprobenwerte können verschiedene statistische Verfahren angewandt werden, sofern eine natürliche Reihenfolge der einzelnen Werte vorhanden ist, z. B. entsprechend dem Zeitpunkt der Probenahme oder räumlich geordnet. Bekannte Verfahren zur Prüfung der Zufälligkeit (gegenseitigen Unabhängigkeit) der einzelnen Werte sind der Run-Test

(basiert auf der Statistik der Anzahl oder der Länge aufeinander folgender Sequenzen mit Werten über bzw. unter dem Median der Stichprobe) sowie die Analyse der seriellen Korrelation bzw. Rangkorrelation (siehe z. B. [WALD 43], [BART 82], [GIB 03]). Wenn nach einem solchen Test auf statistische oder gar deterministische Abhängigkeiten (Korrelationen, Trends) zwischen aufeinander folgenden Stichprobenwerten zu schließen ist, so sind Ergebnisse der klassischen Anpassungstests zumindest zu hinterfragen. Serielle Korrelationen lassen darauf schließen, dass aus stochastischen Prozessen stammende Daten nicht voneinander unabhängig sind und deshalb mit Methoden der Zeitreihenanalyse untersucht werden sollten (siehe z. B. [BOX 94], [LIND 04], [KIRC 07], [BIS 11]).

4.1.2. Goodness-of-Fit Tests

Für die statistische Datenanalyse und probabilistischen Modellierung mit Hilfe von parametrischen Verteilungen stellt die Auswahl bzw. Bestimmung der "passenden" Verteilungsfamilie ein zentrales Problem dar, zu dessen Lösung häufig die klassischen Anpassungstests genutzt werden. Die drei gängigsten Methoden für "Goodness-of-Fit", die auch in bekannten Programmen zur statistischen Datenanalyse implementiert sind, werden nachfolgend kurz erläutert und danach kritisch bewertet.

4.1.2.1. PEARSON'scher Chi-Quadrat-Test (χ^2-Test)

Der χ^2-Test wurde um 1900 von PEARSON entwickelt [PLA 83]. Er verlangt eine Aufteilung des Definitionsbereichs der Zufallsgröße X in K Intervalle/Klassen $[X_{i-1}, X_i]$ (i = 1, 2, …, K). Für eine Stichprobe vom Umfang n werden für die zu testende Verteilungsfunktion $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ für alle K Klassen theoretisch erwartete Anteile der Daten berechnet, $E_i = n\cdot(F_X(X_i|\boldsymbol{\theta}) - F_X(X_{i-1}|\boldsymbol{\theta}))$. Es sei B_i die Anzahl der zur i-ten Klasse beobachteten Daten. Stammt die Stichprobe aus einer Population, die durch die Verteilungsfunktion $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ charakterisiert ist, dann genügt die Testfunktion

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{K} \frac{(E_i - B_i)^2}{E_i} \tag{4-1}$$

für große Stichprobenumfänge n (asymptotisch) einer χ^2–Verteilung mit $\nu = K - 1$ Freiheitsgraden. Wird die Stichprobe auch zur Schätzung der Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ genutzt, so ist ν um die Anzahl dieser Parameter zu reduzieren. Sehr große Werte der Testgröße, z. B. größere als das $(1-\alpha)$-Quantil der $\chi^2(\nu)$-Verteilung für $\alpha = 0{,}05$ wären sehr unwahrscheinlich. Im Sinne des klassischen Tests von Hypothesen wäre die angenommene Verteilung $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ als Population für die Stichprobe mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von α für den Fehler 1. Art abzulehnen, wenn, $\chi^2 > \chi^2(\nu)_{1-\alpha}$ ist.

Eine für den χ^2-Test wichtige Frage betrifft die Anzahl der Intervalle/Klassen. Hierzu gibt es zwar verschiedene Empfehlungen, diese sind aber nicht eindeutig und z. T. widersprüchlich. [RIN 97] verlangt z. B. $B_i \geq 10$ und $E_i > 4$ für alle Klassen. Nach [SACH 99] sollte $E_i > 1$ erfüllt sein, wobei diese Anforderung für $n \geq 40$ und $\nu \geq 8$ nicht zwingend ist. Das Programm EasyFit bestimmt die Anzahl der Intervalle/Klassen über die Beziehung $K \approx 1 + \mathrm{Log}_2(n)$ und verlangt zudem $B_i \geq 5$.

4.1.2.2. KOLMOGOROV-SMIRNOV-TEST (K-S-TEST)

Der K-S-Test (siehe [KOL 41], [SMIR 48], [BIRN 54], [MIL 56]) nutzt die Statistik D_n des maximalen (vertikalen) Abstandes zwischen der empirischen Verteilungsfunktion der Stichprobe (Gl. (B-7) in Anhang B) und der zu prüfenden Verteilungsfunktion $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$:

$$D_n = \sup_x \left| F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) - F_n(x) \right| = \max_{1 \le i \le n} \left\{ F_X(x_{(i)} \mid \boldsymbol{\theta}) - (i-1)/n;\ i/n - F_X(x_{(i)} \mid \boldsymbol{\theta}) \right\}, \tag{4-2}$$

wobei letztere bzgl. der Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ vollständig spezifiziert sein muss. Abweichungen zwischen der zu prüfenden theoretischen/hypothetischen Verteilungsfunktion und der empirischen Verteilungsfunktion für andere Werte von x als dem mit dem maximalen Abstand werden dabei nicht berücksichtigt. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der K-S-Statistik D_n ist verteilungsfrei, hängt also nur von der Stichprobengröße n ab. Die Annahme, dass die angenommene Verteilung $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ die Population beschreibt, aus der die Stichprobe entnommen wurde, wird bei vorgegebener Irrtumswahrscheinlichkeit von α für den Fehler 1. Art abgelehnt, wenn D_n über dem kritischen Perzentil $\Delta_{n;1-\alpha}$ der Verteilungsfunktion der K-S-Statistik liegt (zur Berechnung der Verteilung dieser Prüfstatistik sei auf [BIRN 52] und [DREW 00] verwiesen). Es wird i. A. nicht berücksichtigt, dass die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ der angenommenen Verteilung $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ i. d. R. aus der Stichprobe geschätzt werden müssen. Dbzgl. Korrekturen liegen für wenige Verteilungstypen vor (für Normalverteilung, Exponentialverteilung und Logistische Verteilung siehe [STE 74], [STE 79]).

Ein wesentliches Manko des K-S-Tests ist die Reduzierung auf den Wert $x_{(i)}$ der Stichprobe, der gemäß Gl. (4-2) die Distanz D_n bestimmt. Die Varianz des Abstandes $|F_X(x|\boldsymbol{\theta}) - F_n(x)|$ hängt von der Form der Verteilungsfunktion $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ ab und beträgt $F_X(x|\boldsymbol{\theta})\cdot(1 - F_X(x|\boldsymbol{\theta}))/n$. Folglich sind Abweichungen zwischen der empirischen und der theoretischen Verteilung in den Randbereiche nur sehr selten für den K-S-Tests relevant. Dies schränkt seine Anwendung für die Unterscheidung von Verteilungsfunktionen ein, die insbesondere in den Randbereichen voneinander abweichen.

4.1.2.3. ANDERSON-DARLING-TEST (A-D-TEST)

Der A-D-Test (siehe [AND 52], [AND 54], [LEW 61], [SINC 88]) beseitigt wesentliche Nachteile des K-S-Tests, in dem als Maß für den Abstand zwischen der empirischen und theoretischen Verteilung eine funktionale Metrik gewählt wird:

$$A_n^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) - F_n(x) \right)^2 \cdot \Psi\left(F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) \right) \cdot f_X(x \mid \boldsymbol{\theta})\, dx\,, \tag{4-3}$$

wobei mit

$$\Psi(u) = \frac{1}{u \cdot (1-u)} \tag{4-4}$$

den Randbereichen der Verteilungen besonderes Gewicht beigemessen wird. Sind die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ bekannt, so kann die Integration von Gl. (4-3) ausgeführt werden und liefert die A-D-Teststatistik

$$A_n^2 = -n - \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (2 \cdot i - 1) \cdot \left(\ln(z_i) + \ln(1 - z_{n+1-i}) \right) \quad \text{mit} \quad z_i = F_X(x_{(i)} \mid \boldsymbol{\theta})\,. \tag{4-5}$$

Die statistische Verteilung der A-D-Teststatistik und kritische Werte für A_n^2 wurden für größere Stichprobenumfänge asymptotisch exakt und für kleine Stichproben durch Monte-Carlo-Simulation bzw. analytische Approximation des oberen Bereichs der Verteilung berechnet. Korrekturen wegen der i. A. erforderlichen Schätzung der Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ sind zu einigen Verteilungstypen bekannt (für Normalverteilung, Exponentialverteilung und Logistische Verteilung siehe [STE 74],

[STE 79]). Die asymptotische Näherung der A-D-Statistik ist schon für kleine Stichproben (etwa ab n von 5 bis 8) für praktische Anwendungen ausreichend genau.

4.1.2.4. Probleme der Anwendung von Goodness-of-Fit Tests

(1) Die Goodness-of-Fit Tests sind klassische Hypothesentests, wobei die Null-Hypothese, dass die Stichprobe aus einer bestimmten parametrischen statistischen Verteilung stammt, verworfen wird, wenn für eine unter dieser Annahme gültige Prüfstatistik ein Wert im kritischen Bereich resultiert, der einem sehr hohen Perzentil der Verteilungsfunktion dieser Statistik entspricht. Die Ablehnung geht dann mit einer entsprechend kleinen Irrtumswahrscheinlichkeit α für den Fehler 1. Art einher. Es wird jedoch keine Aussage über den Fehler 2. Art (β) getroffen, der bei Nicht-Ablehnung der Null-Hypothese auftreten kann (also bei Annahme der Null-Hypothese, obwohl sie falsch ist).

(2) Um aus mehreren Verteilungsarten mit einem Anpassungstest die "passende" auszuwählen, wird als gängige Vorgehensweise aus den Verteilungen, die durch den Test nicht abgelehnt werden, jene bevorzugt, für die der kleinsten Wert der Teststatistik resultiert. Diese Methode ist begründet, wenn alle Parameter der zu prüfenden Verteilungen bekannt sind; sie ist jedoch zu hinterfragen, wenn die Verteilungsparameter aus der Stichprobe geschätzt werden, wobei auch unterschiedliche Schätzverfahren (z. B. über Momente, Quantile oder das Maximum der Likelihood-Funktion) genutzt werden. Dadurch können sich voneinander abweichende Ergebnisse der Anpassungstests ergeben. Die Parameterschätzung erfolgt nach anderen Kriterien als die Bewertung der Güte der Anpassung der Verteilungsfunktion an die empirische Verteilung der Stichprobe. Methoden, bei denen die Parameterschätzung auch im Sinne der Optimierung des Prüfkriteriums erfolgt wären dagegen konsistent (siehe Abschnitt 4.1.3).

(3) Neben den spezifischen Nachteilen des χ^2-Tests (gilt streng nur asymptotisch, verlangt eine nicht standardisierte Aufteilung der Daten in Intervalle/Klassen) und des K-S-Tests (berücksichtigt die Randbereiche der Verteilungen unzureichend), besteht ein Nachteil aller drei Methoden darin, dass die Anzahl der Verteilungsparameter der in einen Vergleich einbezogenen Verteilungsfamilien nicht durch die Prüfstatistik bewertet wird. Dies begünstigt, Verteilungsarten mit vielen Parametern, die dann eine größere Chance haben, den Vergleichstest zu gewinnen.

(4) In einigen Programmen zur statistischen Datenanalyse werden die Ergebnisse für die drei o. g. Anpassungstests nebeneinander gestellt, wobei für jedes Kriterium eine Rangfolge mitgeteilt wird. Solche Darstellungen sind oft eher verwirrend als informativ, weil einer bestimmten Verteilung je nach Testverfahren oft unterschiedliche Ränge zugeordnet werden. Dies tritt umso häufiger auf, je mehr Verteilungsarten gleichzeitig in den Anpassungstest einbezogen werden, weil diese sich nach den Kriterien der Tests unterschiedlich gut an eine konkrete Stichprobe anpassen.

4.1.3. Auswahl von Verteilungen mit Hilfe der Likelihood-Funktion

Der mit [FISH 22] in der mathematischen Statistik etablierte Begriff der Likelihood-Funktion ist von zentraler Bedeutung sowohl in der frequentistischen als auch in der BAYES'schen Statistik. Für eine univariate Zufallsgröße X, die durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ mit den Parametern $\boldsymbol{\theta}$ charakterisiert ist, beschreibt $L(\boldsymbol{\theta}|x) = f_X(x|\boldsymbol{\theta})$, als Funktion von $\boldsymbol{\theta}$ bei gegebenem x, wie plausibel (naheliegend, engl.: likely) ein bestimmter Wert von $\boldsymbol{\theta}$ für das Zustandekommen von x ist. Liegt nun eine iid Stichprobe $\mathbf{x} = \{x\}_n$ aus n Einzelwerten vor, so stimmt die Likelihood-Funktion $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$

mit der gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte der n Probenwerte, die wegen der iid-Annahme das Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten für die einzelnen Stichprobenwerte ist (siehe Gl. (2-72)), formal überein, wobei jedoch $\boldsymbol{\theta}$ als variable (bzw. unbekannte) Größe zu betrachten ist. $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ ist bzgl. $\boldsymbol{\theta}$ aber keine Wahrscheinlichkeitsdichte (ist nicht normiert), weshalb die absolute Größe der Likelihood-Funktion keine Bedeutung hat. Der Parameterwert $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, für den $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ maximal wird, ist der aus der Stichprobe resultierende Maximum-Likelihood-Schätzer für $\boldsymbol{\theta}$ (kurz: ML-Schätzer).

4.1.3.1. Log-Likelihood-Test (LL-Test)

Stehen zwei verschiedenartige Verteilungsfamilien $A(X|\boldsymbol{\theta}_A)$ und $B(X|\boldsymbol{\theta}_A)$ als mögliche Modelle für die Population zur Wahl, aus der die Stichprobe $\mathbf{x}$ stammt, so stellt der Quotient der Likelihood-Funktionen an ihrem jeweiligen Maximum (Likelihood-Ratio) bzw. der Logarithmus dieser Größe,

$$LR_{A;B} = \frac{L_A(\hat{\boldsymbol{\theta}}_A \mid \mathbf{x})}{L_B(\hat{\boldsymbol{\theta}}_B \mid \mathbf{x})}, \tag{4-6}$$

wenn die Anzahl unbekannter skalarer Verteilungsparameter übereinstimmt ($\dim(\boldsymbol{\theta}_A) = \dim(\boldsymbol{\theta}_B)$), ein Maß zur Eignung der beiden Modell dar. Wenn $LR_{A;B} > 1$ ist, so sprechen die Daten eher für das Modell A; bei $LR_{A;B} < 1$ würde dem Modell B eine größere Plausibilität zugebilligt werden. Für den Vergleich der Eignung parametrischer Modelle zur Charakterisierung von Stichprobendaten wird üblich das Zweifache des negativen Logarithmus des Maximums der Likelihood-Funktion (der Log-Likelihood-Funktion) als Prüfgröße verwendet:

$$LL_X = -2 \cdot \ln\left(L_X(\hat{\boldsymbol{\theta}} \mid \mathbf{x})\right). \tag{4-7}$$

Je kleiner LL_X ist, umso plausibler ist es, dass die Stichprobe aus der entsprechenden Verteilungsfamilie stammt. Zur Berechnung der Statistik der Prüfgröße LR wurde in [COX 61]/[COX 62] für deren Logarithmus eine asymptotische Näherung abgeleitet, die für große Stichprobenumfänge unter der Annahme gilt, dass LL durch eine Normalverteilung approximiert werden kann. Diese Statistik ist jedoch nicht unabhängig von der Art der Verteilung(en), wie anhand einfacher Beispiele demonstriert wurde. In [COX 61]/[COX 62] wurde die asymptotische Verteilung für die auf ln(LR) basierende Prüfstatistik für den Vergleich von Lognormal- und Exponentialverteilung abgeleitet. Für den Vergleich von Lognormal- und Gammaverteilung wurde die Teststatistik in [JACK 68] berechnet. Zum Vergleich von Gamma- und WEIBULL-Verteilung siehe [PER 78] und [FEA 91].

Ein wesentlicher Vorteil des LL-Tests ist die Konformität der Schätzung der Modellparameter aus einer Stichprobe und des Tests zur Eignung der jeweiligen parametrischen Verteilung. Die Anzahl der Verteilungsparameter ist aber in der Prüfgröße LL nicht berücksichtigt. Deshalb können damit direkte Vergleiche nur zwischen Verteilungsfamilien mit gleicher Anzahl unbekannter Parameter vorgenommen werden. (Anmerkung: Die COX-Statistik berücksichtigt dagegen eine Verschiebung der Differenz $LL_A - LL_B$ bei zwei Verteilungen mit unterschiedlicher Parameterzahl.)

4.1.3.2. AKAIKE-Informations-Kriterium (AIC-Test und AIC_c-Test)

Das in [AKAI 74] entwickelte Informationskriterium berücksichtigt im Unterschied zu Gl. (4-7) die Anzahl der in einem statistischen Modell anhand der Daten anzupassenden Parameter. Dies war insbesondere für die Anpassung von Modellen zur Zeitreihenanalyse (ARMA) von Bedeutung, weil

hier ein Über-Fitting durch Wahl von Modellen höherer Ordnung ein spezifisches Problem ist. Ist k die Anzahl der unbekannten (anzupassenden) Modellparameter, so ist

$$\mathrm{AIC} = -2 \cdot \ln\left(\mathrm{L}(\hat{\boldsymbol{\theta}} \mid \mathbf{x})\right) + 2 \cdot \mathrm{k}\,. \tag{4-8}$$

Das Kriterium (4-8) basiert auf der KULLBACK-LEIBLER-Distanz (siehe [KULL 51], [BURN 02]), die ein informationstheoretisches Maß für den Informationsverlust von statistischen Verteilungen durch Approximationen ist. Es stellt ein asymptotisches Kriterium für große Stichprobenumfänge n dar. Der Vergleich von Gl. (4-8) mit Gl. (4-7) zeigt, dass Modelle mit vielen anzupassenden Parametern mit dem AIC "bestraft" werden.

Für die Modellauswahl bei kleinen Stichprobenumfängen n wurde eine Korrektur für den "Penalty"-Term des AIC abgeleitet [SUG 78], [HUR 89]. Das resultierende korrigierte AKAIKE-Informations-Kriterium wird mit $\mathrm{AIC_c}$ bezeichnet:

$$\mathrm{AIC_c} = -2 \cdot \ln\left(\mathrm{L}(\hat{\boldsymbol{\theta}} \mid \mathbf{x})\right) + 2 \cdot \mathrm{k} \cdot \frac{\mathrm{n}}{\mathrm{n} - \mathrm{k} - 1}\,. \tag{4-9}$$

Anmerkung: Für bestimmte Anwendungen/Methoden der statistischen Inferenz wurden weitere informationstheoretisch begründete Kriterien abgeleitet, worauf an dieser Stelle hingewiesen sei, ohne auf diese Kriterien näher einzugehen. Hierzu gehören insbesondere das dem AIC ähnliche BAYES'sche Informationskriterium (BIC; [SCHW 78]) und das für den Vergleich von komplexen hierarchischen Modelle mit nicht klar definierter Anzahl von Modellparametern im Rahmen der BAYES-Theorie abgeleitete Devianz-Informationskriterium (DIC; [SPIE 02]). Mit diesen Kriterien werden Modelle mit höherer Anzahl anzupassender Parametern noch stärker "bestraft" als mit dem AIC/$\mathrm{AIC_c}$. Im Hinblick auf Vergleiche von ähnlichen Verteilungsfamilien zur probabilistischen Modellierung von Expositionsparametern wurden diverse Simulationsrechnungen zum Vergleich der o. g. Kriterien durchgeführt. Im Ergebnis ist festzustellen, dass das AIC bzw. $\mathrm{AIC_c}$ aus unserer Sicht am ehesten geeignet ist, um bei der Auswahl von Verteilungsfamilien ein Über-Fitting durch Auswahl verallgemeinerter Verteilungen mit erhöhter Anzahl freier Parameter zu vermeiden. Mit dem BIC wird dagegen eine Auswahl von Verteilungen, die mit einem zusätzlichen Parameter für bestimmte Populationen der Genesis der Verteilung besser gerecht werden können (siehe z. B. Anmerkungen zur Genesis der LOMAX-Verteilung in Anhang C, AbschnittC.3.6) durch eine sehr hohe "Bestrafung" des zusätzlichen Parameters zu stark behindert.

4.1.4. Identifikation der Verteilungsart anhand von Stichproben

Die Frage, ob bzw. unter welchen Voraussetzungen anhand von Stichproben aus einer Population deren Verteilungstyp bestimmt werden kann, wurde bereits in Abschnitt 2.6 des vorliegenden Berichts angesprochen. Das Beispiel 2.6 verdeutlicht, dass eine Identifikation des Verteilungstyps nicht losgelöst von konkreten Parameterwerten, welche die Form der in Vergleiche einbezogenen Arten statistischer Verteilungen bestimmen, vorgenommen werden sollte. In Abhängigkeit von den Relationen zwischen grundlegenden statistischen Kenngrößen einer Stichprobe, wie Mittelwert, Varianz, Schiefe und Kurtosis (siehe dbzgl. Angaben im Anhang C), kann eine Vorauswahl der in die engere Auswahl einzubeziehenden Verteilungsfamilien getroffen werden. In den nachfolgenden Abschnitten 4.1.4.2 bis 4.1.4.4 werden zur Verteilung stetiger Zufallsgrößen, die für $0 < x < \infty$ bzw. $0 < x < 1$ definiert sind, sowie für diskrete Zufallsgrößen, deshalb nur solche Verteilungsarten und

Parameterbereiche in die Untersuchung der Anforderungen an die Datenbasis zur Identifikation der Verteilungsart einbezogen, die nicht von vornherein durch einen Vergleich der vier ersten zentralen Momente einer Stichprobe ausgeschlossen werden können. Zuvor wird noch auf einige Arbeiten eingegangen, in denen Simulationsrechnungen zur Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion von Verteilungsfamilien PCS (engl.: probability of correct selection) analysiert wurden.

4.1.4.1. Anmerkungen zu früheren Untersuchungen

Die Identifikation einer Verteilungsart wird als zentrales Problem der statistischen Inferenz in der Fachliteratur häufig diskutiert, wobei durch Simulationsrechnungen Anforderungen und Grenzen der Identifikation von grundlegenden Verteilungsarten im Vergleich mit ähnlichen Verteilungen untersucht werden. In Abschnitt 2.6.2 wurde dbzgl. auf [HAAS 97] eingegangen. Hier werden noch die Arbeiten [BAIN 80], [KAPP 82], [TAY 85] und [MAR 01] bzgl. methodischen Ansätze diskutiert.

In **[BAIN 80]** wurden die Gamma- und die WEIBULL-Verteilung als Alternativen zur Anpassung an Stichproben positiv definierter Zufallsgrößen gegenübergestellt. Für beide Verteilungen wurden Stichprobenumfänge von n = (10, 20, 40, 80, 160) simuliert, wobei die Formparameter α der beiden Verteilungen mit α = (0.5, 1, 2, 4, 8, 16) variiert und der Skalenparameter mit $\beta = 1$ fixiert wurden. Für alle 30 Fälle, bis auf n = 160, wurden jeweils 4000 Stichproben mit MC-Rechnung simuliert; für n = 160 je 1000 Stichproben. Die Simulation erfolgte separat für die Gamma- und die WEIBULL-Verteilung. Alle simulierten Stichproben wurde mit dem LL-Test einer der beiden Verteilungen als "plausiblere" Population zugeordnet, wonach durch statistische Auswertung Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion PCS bestimmt wurden. Für die weitere Diskussion sind diese Ergebnisse von [BAIN 80] in der Tabelle 4-1 wiedergegeben.

Tabelle 4-1: Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion von Stichproben aus Gamma- bzw. WEIBULL-Populationen in Abhängigkeit vom Formparameter und vom Stichprobenumfang; **in %**; aus [BAIN 80]

	α = 0,5	**α = 1**	**α = 2**	**α = 4**	**α = 8**	**α = 16**
n	**PCS für Gamma-Population X ~ Ga(α,1)**					
10	60	51	53	57	61	64
20	66	50	58	64	68	71
40	70	49	62	72	77	81
80	76	50	67	81	87	89
160	83	48	75	89	95	97
n	**PCS für WEIBULL-Population X ~ We(α,1)**					
10	53	49	59	63	65	66
20	59	50	65	70	73	74
40	70	51	70	81	84	87
80	80	50	80	89	93	95
160	90	52	86	96	99	99

Zum Ansatz von [BAIN 80] für Werte des Formparameters α und des Stichprobenumfangs n sowie zu den in Tabelle 4-1 dargestellten Ergebnissen ergeben sich folgende Anmerkungen:

- Die für α betrachteten Werte sind instruktiv; sie decken für beide Verteilungsarten interessante Bereiche ab ($\alpha < 1$ mit Singularität für $x \rightarrow 0$; Bereiche, in denen die WEIBULL-Verteilung leptokurtisch bzw. platykurtisch ist, sowie links- bzw. rechtssteil ist, und damit bzgl. der Form deutlich von der Gammaverteilung abweichen kann; siehe Anhang C, Abschnitt C.3.5).
- Mit n = 10 wurde auch ein sehr kleiner Stichprobenumfang betrachtet. Die hierzu resultierende PCS ist entsprechend gering und verdeutlicht, dass für die Identifikation der Verteilungsart bei Betrachtung ähnlicher Verteilungsfamilien größere Stichprobenumfänge erforderlich sind. Bei unseren nachfolgenden Simulationsrechnungen wird nur $n \geq 20$ betrachtet.
- Für $\alpha = 1$ sind beide Verteilungen identisch (gleich der Exponentialverteilung), so dass hierfür die PCS zwangsläufig bei ca. 50% liegt.
- Für eine weitgehend zuverlässige Identifikation (PCS über 90%) sind für die Gamma- und die WEIBULL-Verteilung Stichprobenumfänge n im Bereich von 100 bis 200 erforderlich. Je mehr sich beide Verteilungen ähneln (α gegen 1), umso größer ist der zur Identifikation erforderliche Stichprobenumfang.
- Die PCS ist für WEIBULL-Populationen fast durchgängig (mit Ausnahme des Bereichs $\alpha < 1$ und $n < 80$) größer als für Gamma-Populationen. Die WEIBULL-Verteilung hat offenbar eine bessere Flexibilität zur Anpassung an Stichproben als die Gamma-Population.

In **[KAPP 82]** wurden die Simulationsrechnungen von [BAIN 80] auf Untersuchungen zur PCS bei Betrachtung von drei alternativen Verteilungsfamilien ausgedehnt - neben Gamma- und WEIBULL-Verteilung wurde die Lognormalverteilung in den Vergleich einbezogen. Für die drei Verteilungen wurden Stichprobenumfänge von n = (10, 50, 100 und 200) simuliert, wobei die Formparameter α der Gamma- und WEIBULL-Verteilung mit α_{Ga} = (0.5, 1, 2, 3, 4) bzw. α_{We} = (0.5, 1, 1.5, 2, 3) variiert und der Skalenparameter mit $\beta = 1$ fixiert wurden. Für die Lognormalverteilung wurden die Simulationsrechnungen mit $\mu = 0$ (entspricht einem Skalenparameter von $\beta_{Ln} = \mathrm{Exp}[\mu] = 1$) und σ = (0.25, 0.5, 1, 1.5, 3) durchgeführt. Für diese Fälle wurden jeweils 1000 Stichproben mit MC-Rechnung simuliert. Alle simulierten Stichproben wurden mit dem LL-Test der "plausibleren" Population zugeordnet, wobei zwei unterschiedliche Vorgehensweisen untersucht wurden. Nach der üblichen Methodik wurden nur jeweils zwei Verteilungsarten betrachtet, also z. B. Stichproben aus einer Gammaverteilung erzeugt und die PCS für Gamma vs. WEIBULL bzw. Gamma vs. Lognormal berechnet. Die alternative Methode bestand im Vergleich Gamma vs. "WEIBULL und Lognormal". Diese Betrachtung ist von Interesse, weil bei rein statistisch basierter Auswahl von Verteilungen anhand einer Stichprobe immer mehrere ähnliche Verteilungsfamilien in Betracht kommen. Auf die Diskussion der Ergebnisse von [KAPP 82] wird an dieser Stelle verzichtet, weil zu diesen Methoden und Verteilungen in Abschnitt 4.1.4.2 eigene Rechnungen diskutiert werden, deren Parameter besser für eine vergleichende Bewertung geeignet sind (so ist z. B. ein Ansatz von $\sigma = 3$ für die Lognormalverteilung im Vergleich mit Gamma- und WEIBULL-Verteilung wenig sinnvoll, weil sich die Lognormalverteilungen für derartig große σ-Werte erheblich von den beiden "Konkurrenten" unterscheidet). Die Statistik der Testrechnungen ist bei 1000 MC-Simulationen ebenfalls noch nicht stabil. Zur WEIBULL-Verteilung ist der in [BAIN 80] für α betrachtete (größere) Bereich sinnvoll.

Zwei qualitativ wesentliche Ergebnisse von [KAPP 82] sind:

- Die größere Flexibilität der WEIBULL- gegenüber der Gammaverteilung bei der Anpassung an die Stichproben (s. o.) zeigt sich auch in der Konkurrenz "1 gegen 2".
- In Konkurrenz zur Lognormalverteilung ist die PCS der WEIBULL-Verteilung für $\alpha > 1$ höher als die der Gammaverteilung; die PCS der Lognormalverteilung jedoch bei Konkurrenz durch die WEIBULL-Verteilung substantiell höher als bei Konkurrenz durch die Gammaverteilung.

Das Ziel von [**TAY 85**] war die Unterscheidung von Verteilungsarten, die für eine probabilistische Modellierung von Schadstoffkonzentrationen in der Luft von besonderem Interesse sind. Unter Anwendung der Vorgehensweise der gleichzeitigen Anpassung aller berücksichtigten Verteilungen an eine Stichprobe und Auswahl der Verteilungsart, für die das Anpassungskriteriums den kleinsten Wert ergibt, wurde in [TAY 85] zusätzlich zur Gamma-, WEIBULL-, und Lognormalverteilung auch die Exponentialverteilung als Option in die Betrachtungen einbezogen. Zur Untersuchung der PCS wurde neben dem LL-Test der K-S-Test betrachtet. Abgesehen davon, dass die Parameterwahl für diese Vergleichsrechnungen z. T. ungünstig erscheint (für die Lognormalverteilung wurden σ-Werte von $\sigma = (0.5, 1, 2, 3, 4)$ verwendet, von denen die drei hohen Werte für einen Vergleich mit der Gamma- und der WEIBULL-Verteilung wenig Sinn ergeben), sind die Ergebnisse zur PCS der Exponentialverteilung nicht nachvollziehbar (es wurden zu hohe PCS-Werte für die Anwendung des K-S-Tests berechnet) bzw. unzutreffend erklärt. Beim LL-Test wurde in [TAY 85] für die Exponentialverteilung zwar korrekt ein PCS-Wert von Null berechnet, aber unzutreffend auf den Bias der Maximum-Likelihood-Schätzer für die Parameter der Gamma- und WEIBULL-Verteilung zurückgeführt. Da diese beiden Verteilungen die Exponentialverteilung als Spezialfall enthalten, ist offensichtlich, dass sie mit zwei Parametern immer eine bessere Anpassung an Besonderheiten der einzelnen Stichproben haben. Die Maximum-Likelihood-Schätzer beider Verteilungen basieren entsprechend auf zwei Stichprobenstatistiken, wogegen der Parameter der Exponentialverteilung (nur) auf dem Mittelwert der Stichprobenwerte basiert.

Der Titel von **[MAR 01]** wirft die grundsätzliche Frage auf, ob bzw. wie sicher die statistischen Verteilungen von Populationen mit Hilfe von Stichproben identifiziert werden können. Wenn nicht auf der Basis von physikalischen Modellen eine Spezifikation der Verteilungsart einer Zufallsgröße vorgenommen werden kann, was häufig der Fall ist, so muss auf klassische Anpassungstests bzw. den LL-Test zurückgegriffen werden. Eine Auswahl der in einen Vergleich einzubeziehenden Verteilungsfamilien kann zwar nach unterschiedlichen Kriterien erfolgen, wobei auch die möglichst einfache mathematische Handhabung eine Rolle spielen kann, es sollten aber nur Verteilungen mit gleicher Anzahl unbekannter Parameter in den Vergleich einbezogen werden, z. B. nicht neben der Gamma- und WEIBULL-Verteilung auch die Exponentialverteilung, die eine Subfamilie der beiden anderen Verteilungen ist.

Ähnlich zu den o. g. Arbeiten wurden on [MAR 01] MC-Simulationsrechnungen zur Bestimmung der PCS durchgeführt, wozu neben der Lognormal-, Gamma- und WEIBULL-Verteilung eine weiter Verallgemeinerung der Exponentialverteilung in den Vergleich einbezogen wurde. Hierbei handelt es sich um die in [MAR 97] eingeführte "geometric extreme exponential distribution". Als Kriterien zur Selektion einer Verteilung wurden der LL-Test und der K-S-Test betrachtet. Die relative Stärke dieser Kriterien ist in speziellen Bereichen der Verteilungsparameter z. T. sehr unterschiedlich.

Im Ergebnis der Simulationsrechnungen wird die im Titel der Arbeit [MAR 01] gestellte Frage positiv beantwortet: *"Yes, subject to the qualification that the sample size be sufficiently large – larger than many datasets encountered in practice. In general, with the understanding that there are many exceptions and qualifications, a sample size of 200 yields a reasonably high probability of correct selection."*

Dieses Statement muss aus unserer Sicht jedoch zumindest dahingehend relativiert werden, dass mit den statistischen Methoden nicht die "korrekte" Verteilungsfamilie anhand von Stichprobendaten erkannt wird, sondern nur aus einer bestimmten Anzahl in die Betrachtungen einbezogener Arten von parametrischen Verteilungen die am besten passende selektiert werden kann. Dies sei anhand des folgenden Beispiels verdeutlicht.

Beispiel 4.1-1

In [BARTL 63] wurde zur Veranschaulichung der Analyse von stochastischen Prozessen eine Stichprobe aufgeführt, deren Zuordnung zu einer parametrischen Verteilung der Demonstration dabei auftretender Unsicherheiten dienen kann. Bei den Daten handelt es sich um die Zeitpunkte t_i (i = 0 bis 128), zu denen aufeinander folgende Autos einen bestimmten Punkt einer Straße passieren. Die Differenzen $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$ (i = 1 bis 128) sollten nach dem in [BARTL 63] betrachteten Modell für stochastische Prozesse, die bestimmte Abweichungen vom klassischen POISSON-Prozess aufweisen, durch eine Gamma-Verteilung charakterisiert sein (ein reiner POISSON-Prozess würde für die Zufallsgröße Δt_i eine Exponentialverteilung ergeben). Die Stichprobe der 128 Zeitdifferenzen ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Die einzelnen Werte sind in der chronologischen Anordnung in [BARTL 63] sowie in [BAIN 80] angegeben.

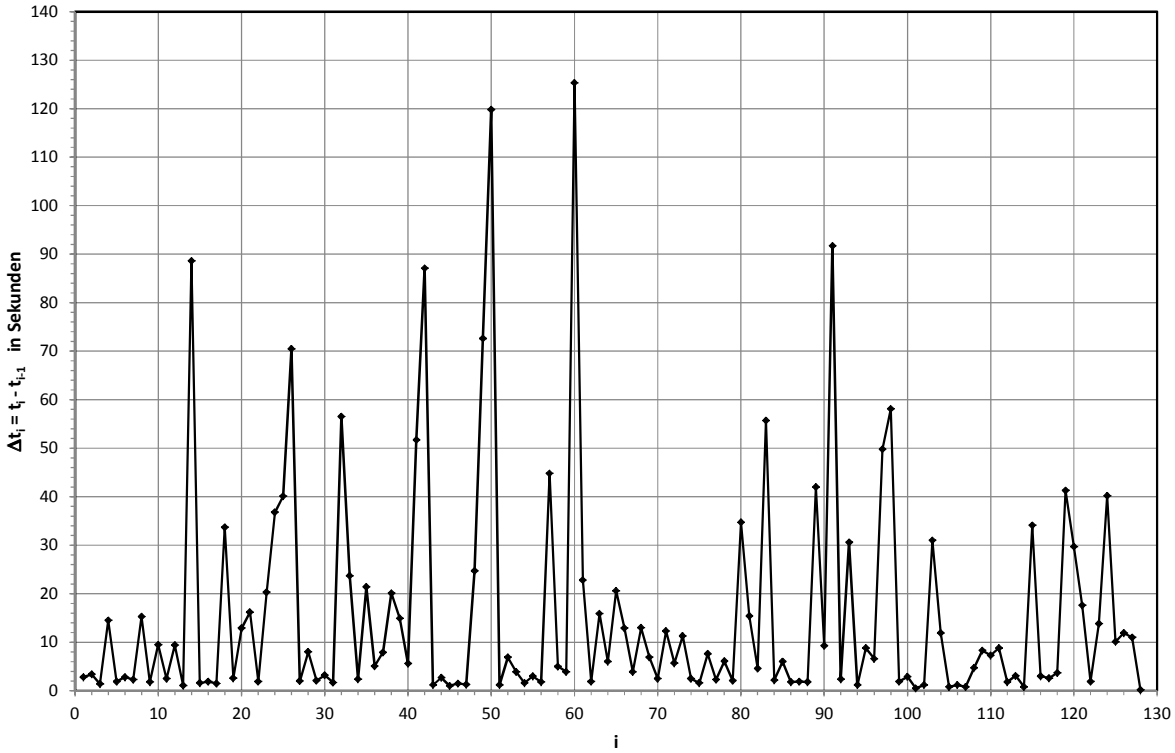


Abbildung 4-1: Chronologische Abfolge der Stichprobenwerte Δt_i (i = 1 bis 128) zur Zeitdifferenz, mit der Autos einen Messpunkt passierten (Daten aus [BARTL 63], siehe auch [BAIN 80]).

In [BAIN 80] wurde im Ergebnis einer Anwendung des LL-Tests auf diese Stichprobe festgestellt, dass sie mit signifikant größerer Wahrscheinlichkeit einer WEIBULL-Population zuzuordnen ist. In [KAPP 82] wurde als weitere Alternative die Lognormalverteilung betrachtet und festgestellt, dass diese nach dem Kriterium der maximalen Likelihood wesentlich besser zur Charakterisierung der Stichprobe geeignet ist.

Wie in Abschnitt 4.1.1. vermerkt, sollten die Daten der aus einer chronologischen Messung stammenden Stichprobe zunächst bzgl. ihrer statistischen Unabhängigkeit geprüft werden. Sowohl der einfache Runs-Test (siehe [GIB 03]) als auch der Rang-Korrelationstest nach [BART 82] ergeben keinen Anlass für eine Ablehnung der Annahme der statistischen Unabhängigkeit der Stichprobenwerte. Für den letztgenannten Test genügt die Prüfstatistik

$$\mathrm{RVN} = \frac{\sum_{i=1}^{n-1}\left(r_i - r_{i+1}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(r_i - (n+1)/2\right)^2}, \tag{4-10}$$

wobei mit r_i die Ränge der Zufallswerte der Stichprobe bezeichnet sind, für hinreichend große Werte von n (etwa für n > 100) mit sehr guter Genauigkeit eine Normalverteilung, RVN ~ $N(\mu_{RVN},\sigma_{RVN})$ mit

$$\mu_{RVN} = 2 \quad \text{und} \quad \sigma_{RVN} = \sqrt{\frac{4\cdot(n-2)\cdot(5\cdot n^2 - 2\cdot n - 9)}{5\cdot n\cdot(n+1)\cdot(n-1)^2}}\,. \tag{4-11}$$

Liegen die Ränge von aufeinander folgenden Stichprobendaten infolge von Trends/Korrelationen zu dicht beieinander, so wird der jeweilige Beitrag zu der im Zähler von Gl. (4-10) stehenden Summe entsprechend klein. Der kritische Bereich ist somit das untere α-Quantil der Verteilung der Prüfstatistik. Für das aktuelle Beispiele mit n = 128 ist σ_{RVN} = 0,1758. Für eine Irrtumswahrscheinlichkeit von α = 0,05 resultiert ein kritischer Wert für RVN von 1.711. Der RVN-Wert für die Stichprobe aus [BARTL 63] liegt mit 1.943 deutlich über dem kritischen Wert (entspricht einem p-Wert von 0,372), so dass die Hypothese der statistischen Unabhängigkeit der aufeinander folgenden Stichprobendaten nicht abgelehnt wird und die Voraussetzungen für Anpassungstests bzw. den LL-Test erfüllt sind.

Für die statistisch begründete Auswahl einer passenden Verteilungsfamilie haben wir den A-D-Test sowie den LL-Test auf die 128 Daten dieser Stichprobe angewandt, wobei die (je 2) unbekannten Parameter der Verteilungen mit der Maximum-Likelihood-Methode geschätzt wurden. Neben der Gamma-, WEIBULL- und Lognormalverteilung wurde auch die WALD-Verteilung in den Vergleich einbezogen. Die Ergebnisse enthält Tabelle 4-2. Abbildung 4-2 zeigt die empirische und die vier angepassten Verteilungsfunktionen.

Tabelle 4-2: Ergebnisse der Parameterschätzungen, des A-D-Tests und des LL-Tests

Art der	**ML-Schätzwert der**	**A-D-Test**		**LL-Test**
Verteilung	**Verteilungsparameter**	**Prüfwert Gl. (4-5)*)**	**p-Wert**	**Prüfwert Gl. (4-7)**
Wa(μ; λ)	(15,81; 3,603)	0,9707	0,3727	912,6
Ln(μ; σ)	(1,858; 1,361)	1,5837	0,1577	917,8
We(α; β)	(0,7463; 12,85)	2,9577	0,0288	939,4
Gam(α; λ)	(0,6731; 0,04258)	4,2139	0,0069	947,1

*) Kritischer Wert zum Fehler 1. Art von α = 0.05 für n = 128 ist AD_{krit} = 2,5. Skalenparameter: $\beta = 1/\lambda$ = 23,49

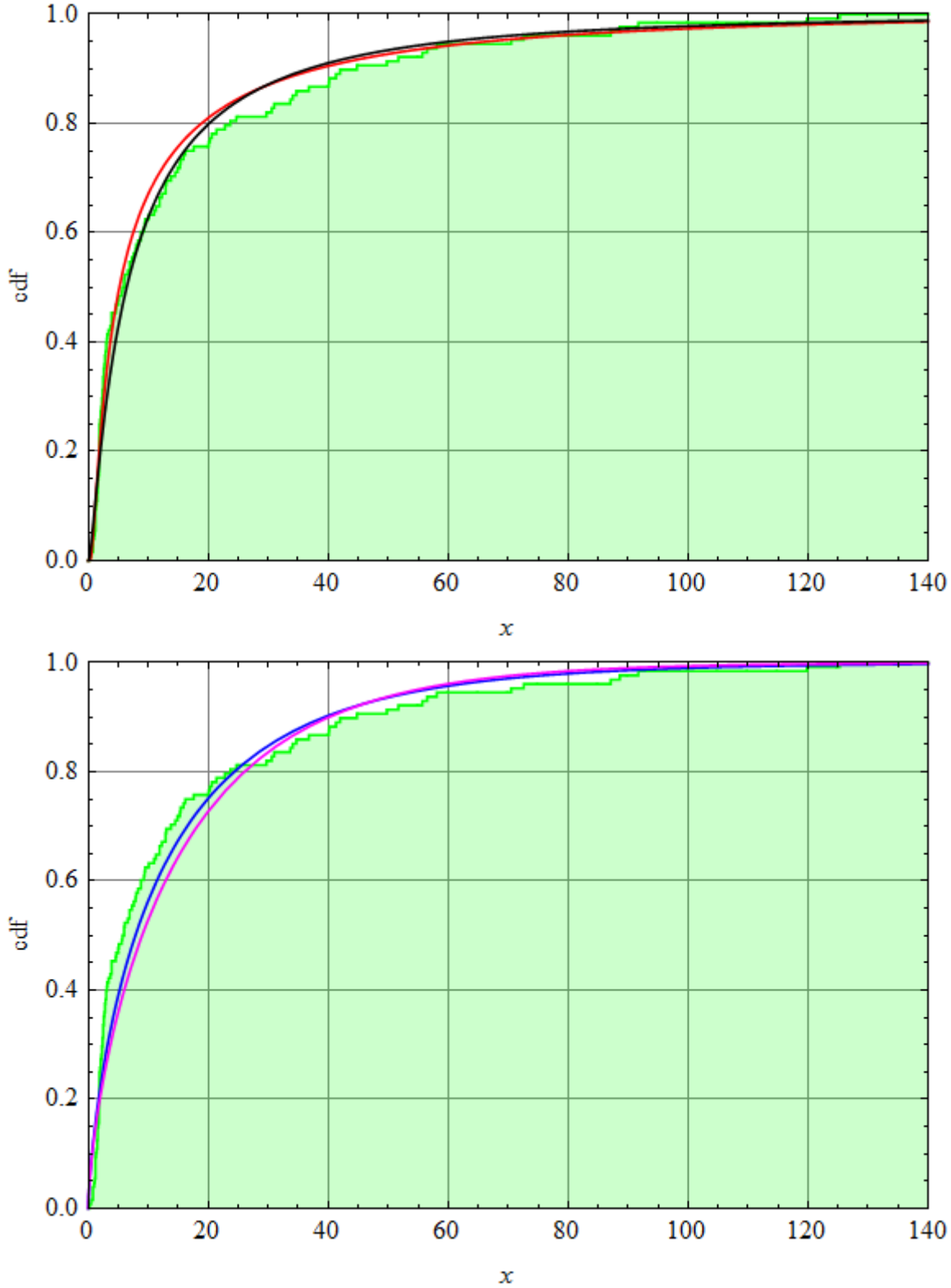


Abbildung 4-2: Vergleich der empirischen Verteilung der Stichprobendaten aus [BARTL 63] mit den angepassten Verteilungsfunktionen Wa(μ; λ) (oben, rot), Ln(μ; σ) (oben, schwarz), We(α; β) (unten, blau) und Ga(α; β) (unten, magenta)

Aus den Angaben von Tabelle 4-2 folgt klar, dass nach dem ANDERSON-DARLING-Anpassungstest die ursprüngliche Hypothese von [BARTL 63], dass die Stichprobe der 128 Zeitdifferenzen entsprechend dem angewandten stochastischen Modell durch eine Gammaverteilung als Populationsverteilung bestimmt ist, mit sehr großer Sicherheit abgelehnt werden kann (die Irrtumswahrscheinlichkeit der Ablehnung liegt bei 0,7%). Ebenso ist die in [BAIN 80] im Ergebnis des LL-Tests vertretene Hypothese, dass die Daten einer WEIBULL-Verteilung folgen, mit einer geringen Irrtumswahrscheinlichkeit von 2,9% sicher abzulehnen. Die in [KAPP 82] getroffene Aussage, dass die Daten wesentlich besser durch eine Lognormalverteilung beschrieben werden (im LL-Vergleich zur Gamma- und WEIBULL-Verteilung), wird durch die obigen Ergebnisse zwar bestätigt; allerdings resultiert mit der WALD-Verteilung (inversen GAUSS-Verteilung) ein noch kleinerer Wert des LL-Tests und ein deutlich größerer p-Wert aus dem A-D-Test. Da die WALD-Verteilung im Resultat stochastischer Prozesses entstehen kann, wäre zu diesem Beispiel ggf. zu prüfen, ob die hier betrachtete Zufallsgröße z. B. als Prozess einer BROWN'schen Bewegung mit Drift modelliert werden kann. Rein statistisch wäre in jedem Fall die WALD-Verteilung im Vergleich zu den anderen betrachteten Verteilungsfamilien zu bevorzugen.

Die potentiellen Auswirkungen einer fehlerhaften Wahl der Verteilungsfamilie werden aus dem Vergleich der vier angepassten Wahrscheinlichkeitsdichten (siehe Abbildung 4-3) sowie der entsprechenden Verteilungsfunktionen für die Bereiche kleiner und hoher Quantile deutlich (siehe Abbildung 4-4).

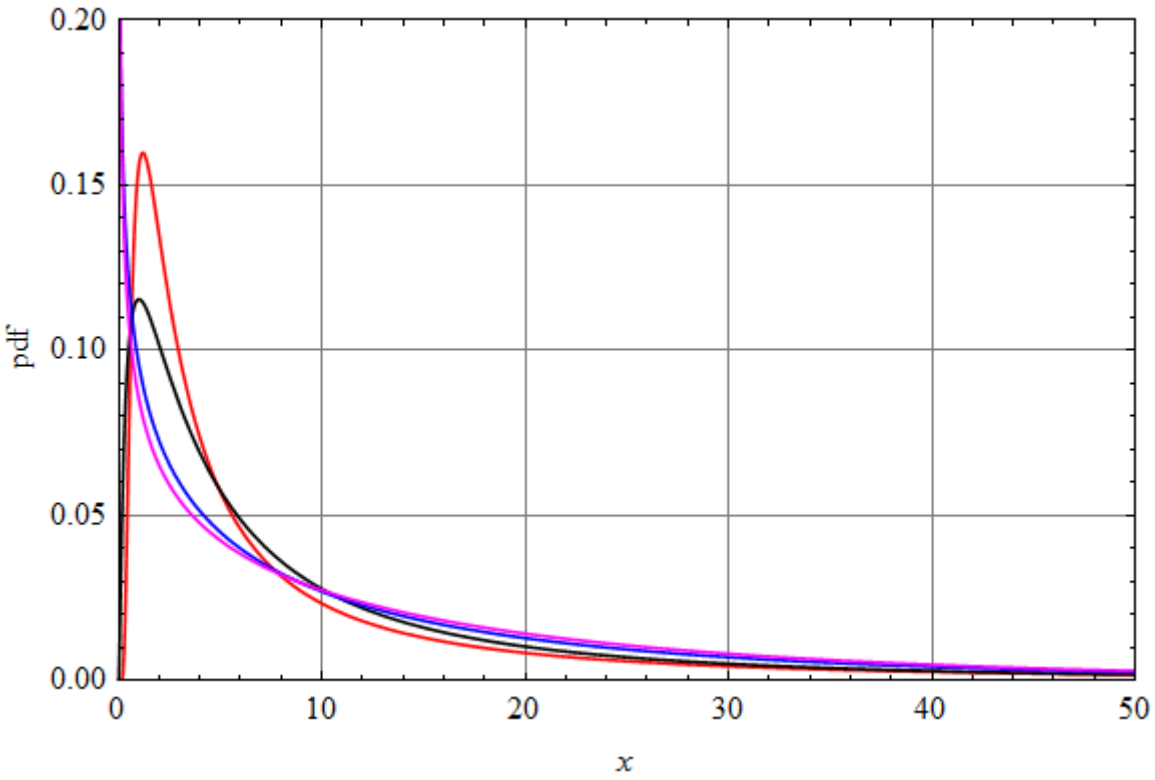


Abbildung 4-3: Gegenüberstellung der Wahrscheinlichkeitsdichten der an die Stichprobendaten aus [BARTL 63] angepassten Verteilungsfamilien; rot: Wa(μ; λ); schwarz: Ln(μ; σ); blau: We(α; β); magenta: Ga(α; β)

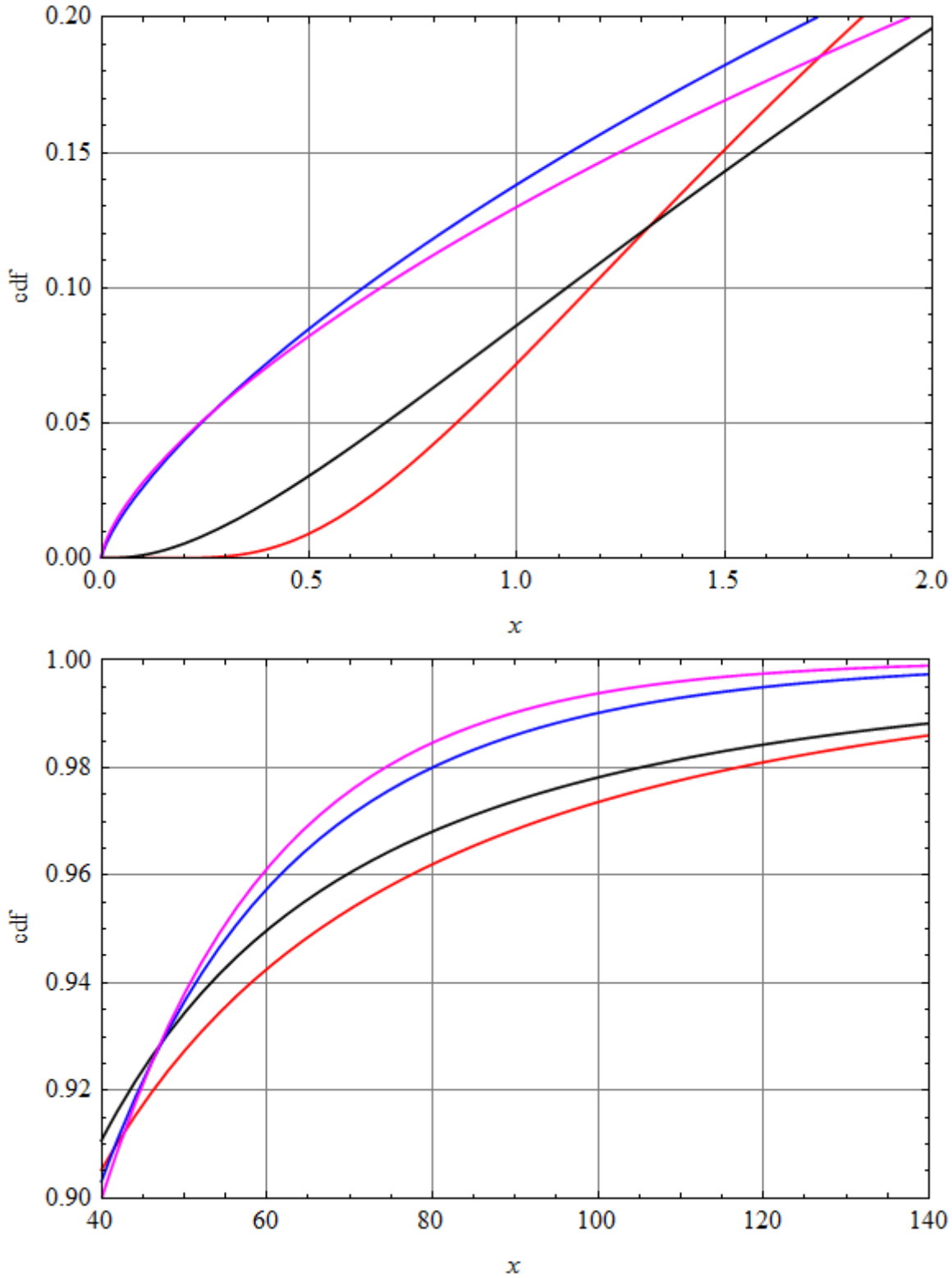


Abbildung 4-4: Gegenüberstellung der Verteilungsfunktionen für kleine Quantile (oberes Bild) bzw. für große Quantile (unteres Bild) der an die Stichprobe aus [BARTL 63] angepassten Verteilungen; rot: Wa(μ; λ); schwarz: Ln(μ; σ); blau: We(α; β); magenta: Ga(α; β)

Aus den Abbildungen 4-3 und 4-4 ist ersichtlich, dass bei Ansatz der Gamma- oder WEIBULL-Verteilung sowohl kleine Quantile als auch große Quantile unterschätzt werden. Würde die Zufallsgröße im Rahmen eines (Expositions-) Modells im Nenner einer algebraischen Beziehung stehen, wären Überschätzungen der hohen Quantile der Gesamtgröße bei einer probabilistischen Modellierung zu erwarten. Würde die Zufallsgröße dagegen proportional in das Gesamtmodell eingehen, so hätte dies eine Unterschätzung von hohen Quantilen zur Folge. Aus den Abbildungen 4-3 und 4-4 ist auch ersichtlich, dass die Spezifikation der Zufallsgröße als Lognormalverteilung im Vergleich zur Spezifikation als WALD-Verteilung relativ geringe Unterschiede für die probabilistische Modellierung in einem Gesamtmodell bewirken dürfte (die Frage, ob sich die Unsicherheiten der Parameterschätzungen für vergleichbar gut angepasste Verteilungen erheblich unterscheiden können, wird in Abschnitt 4.2 des vorliegenden Berichts diskutiert).

4.1.4.2. Auswahl von Verteilungsfamilien für positiv definierte Zufallsgrößen

Für die probabilistische Modellierung von Expositionen sind Zufallsgrößen X, die positive reelle Werte ($0 < x < \infty$) annehmen können, von besonderer Bedeutung. Der Abschnitt C.3 des Anhangs C enthält hierzu eine Auswahl gebräuchlicher Verteilungsfamilien. Aus den in Abschnitt 4.1.4.1 zu früheren Untersuchungen enthaltenen Anmerkungen sowie aus den Darlegungen in Abschnitt 4.1.2 zu klassischen Anpassungstests bzw. in Abschnitt 4.1.3 zu auf der Likelihood-Funktion basierenden Methoden der Auswahl geeigneter Verteilungsfamilien ergeben sich für den vorliegenden Abschnitt die folgenden vier Schlussfolgerungen und Fragestellungen:

1. In einen Vergleich von Verteilungsfamilien zur Auswahl einer bestimmten Verteilungsart zur probabilistischen (Expositions-)Modellierung sollten Verteilungsarten einbezogen werden, die für relevante Parameterbereiche nicht substantiell voneinander abweichen, weil die Auswahl sonst natürlich trivial wird. Gibt es eine einfache Methode für eine sinnvolle Zusammenstellung alternativer Verteilungen?

2. Werden nur Verteilungsarten mit gleicher Anzahl unbekannter (anzupassender) Parameter betrachtet, so sind der K-S-Test, der A-D-Test und der LL-Test gut praktikable Methoden zur statistisch basierten Auswahl geeigneter Verteilungen, auch wenn die beiden Anpassungstests primär für den Ausschluss von Hypothesen konzipiert wurden. Welche dieser drei Methoden verspricht die höchste Wahrscheinlichkeit einer korrekten Auswahl (PCS)?

3. Für probabilistische Modelle sollten möglichst einfache Verteilungsmodelle (mit einer geringen Anzahl unbekannter Parameter) ausgewählt werden, z. B. auch die Exponentialverteilung im Vergleich zu deren Verallgemeinerungen wie die Gamma-, WEIBULL- oder LOMAX-Verteilung. Andererseits sollte eine der genannten 2-parametrigen Verteilungen genutzt werden, wenn die empirischen Daten signifikante Abweichungen von der Exponentialverteilung aufweisen. Die drei o. g. Auswahlmethoden sind aber für dbzgl. statistische Analysen nur bedingt geeignet, weil die Exponentialverteilung in den drei anderen Verteilungsarten als Grenzfall enthalten ist. Hierzu ergibt sich folgende Frage: Ist das AKAIKE-Informations-Kriterium (AIC bzw. AIC_c, siehe Abschnitt 4.1.3.2) für die Lösung dieses Problems geeignet?

4. Im Unterschied zu MC-Simulationsrechnungen für die Bestimmung der PCS von Verteilungen steht bei praktischen Anwendungen i. d. R. nur eine bestimmte Stichprobe zur Verfügung. Wie kann auf dieser Basis die Bewertung der Plausibilität/Korrektheit der Auswahl einer bestimmten Verteilungsfamilie erfolgen, und wie groß sollte der Stichprobenumfang sein, um die getroffene Wahl als belastbar ansehen zu können?

Zusammenstellung alternativer Verteilungsfamilien

Die unter Punkt 1 angesprochene Frage kann z. B. durch eine grafische Gegenüberstellung von Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen für alternative Verteilungsfamilien, die über Gleichheit der Erwartungswerte und Varianzen bzgl. einer vorgegeben Verteilungsart angepasst wurden, gelöst werden. Aus der Darstellung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen (jeweils für einen Satz der Verteilungsparameter) lassen sich qualitative Unterschiede der Verteilungen relativ leicht erkennen. Aus der Darstellung der entsprechenden Verteilungsfunktionen kann darauf geschlossen werden, für welche Wertebereiche der untersuchten Zufallsvariablen die größten Abweichungen zwischen den in den Vergleich einbezogenen Verteilungsarten zu erwarten sind. Das folgende Beispiel veranschaulicht diese Vorgehensweise anhand der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung. Die Einbeziehung der WALD-Verteilung wäre sachgemäß (siehe Beispiel 4.1-1); die grafischen Darstellungen und Tabelle würden dadurch aber unübersichtlicher, weshalb hier auf diese Ergänzung verzichtet wird. Ein weiterer Grund für die Beschränkung auf die genannten drei Verteilungen besteht darin, dass dieses Beispiel nachfolgend auch zur Diskussion der weiteren Fragen herangezogen wird und außerdem für Vergleiche mit den Ergebnissen der im vorigen Abschnitt diskutierten Arbeiten [BAIN 80], [KAPP 82], [TAY 85] und [MAR 01] genutzt werden soll.

Beispiel 4.2-1

Für die qualitative Gegenüberstellung der Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen werden für die Gamma- und die WEIBULL-Verteilung die in [BAIN 80] für den Formparameter α untersuchten Werte α = (0.5, 1, 2, 4, 8, 16) betrachtet, wobei für den Skalenparameter β der vorgegebenen Verteilung jeweils $\beta = 1$ gesetzt wird. Bei Vorgabe einer Lognormalverteilung wird deren Skalenparameter Exp(μ) mit $\mu = 0$ auf Eins gesetzt, für die Standardabweichung σ der logarithmierten Zufallsgröße wurden die sechs Werte σ = (0.25, 0.5, 0.75, 1, 1.25, 1.5) für den Vergleich ausgewählt. In den Tabellen 4-3a bis 4-3c sind die durch Gleichsetzung von Erwartungswert und Varianz an die dbzgl. Werte der vorgegeben Verteilungen berechneten Verteilungsparameter der "konkurrierenden" Verteilungen aufgeführt. Es sei darauf hingewiesen, dass in diesem Beispiel die Gammaverteilung mit den Skalenparameter $\beta = 1/\lambda$ parametrisiert wurde (siehe dbzgl. Anmerkung in Abschnitt C.3.4 des Anhangs C).

Tabelle 4-3a: Anpassung der Verteilungsparameter der Lognormal- und WEIBULL-Verteilung an den Erwartungswert und die Varianz der vorgegebenen Gammaverteilungen

X ~ Ga(α,β); vorgegeben		**X ~ Ln(μ,σ); angepasst**		**X ~ We(α,β);angepasst**	
α_{Ga}	β_{Ga}	μ	σ	α_{We}	β_{We}
0,5	1	-1,242	1,048	0,7209	0,4059
1	1	-0,3466	0,8326	1	1
2	1	0,4904	0,6368	1,436	2,203
4	1	1,275	0,4724	2,101	4,516
8	1	2,021	0,3432	3,094	8,946
16	1	2,742	0,2462	4,542	17,52

Tabelle 4-3b: Anpassung der Verteilungsparameter der Gamma- und WEIBULL-Verteilung an den Erwartungswert und die Varianz der vorgegebenen Lognormalverteilung

X ~ Ga(α,β);angepasst		**X ~ Ln(μ,σ);vorgegeben**		**X ~ We(α,β);angepasst**	
α_{Ga}	β_{Ga}	μ	σ	α_{We}	β_{We}
15,51	0,06654	0	0,25	4,464	1,131
3,521	0,3218	0	0,5	1,957	1,278
1,324	1,000	0	0,75	1,154	1,393
0,5820	2,833	0	1	0,7718	1,417
0,2652	8,236	0	1,25	0,5550	1,301
0,1179	26,14	0	1,5	0,4189	1,047

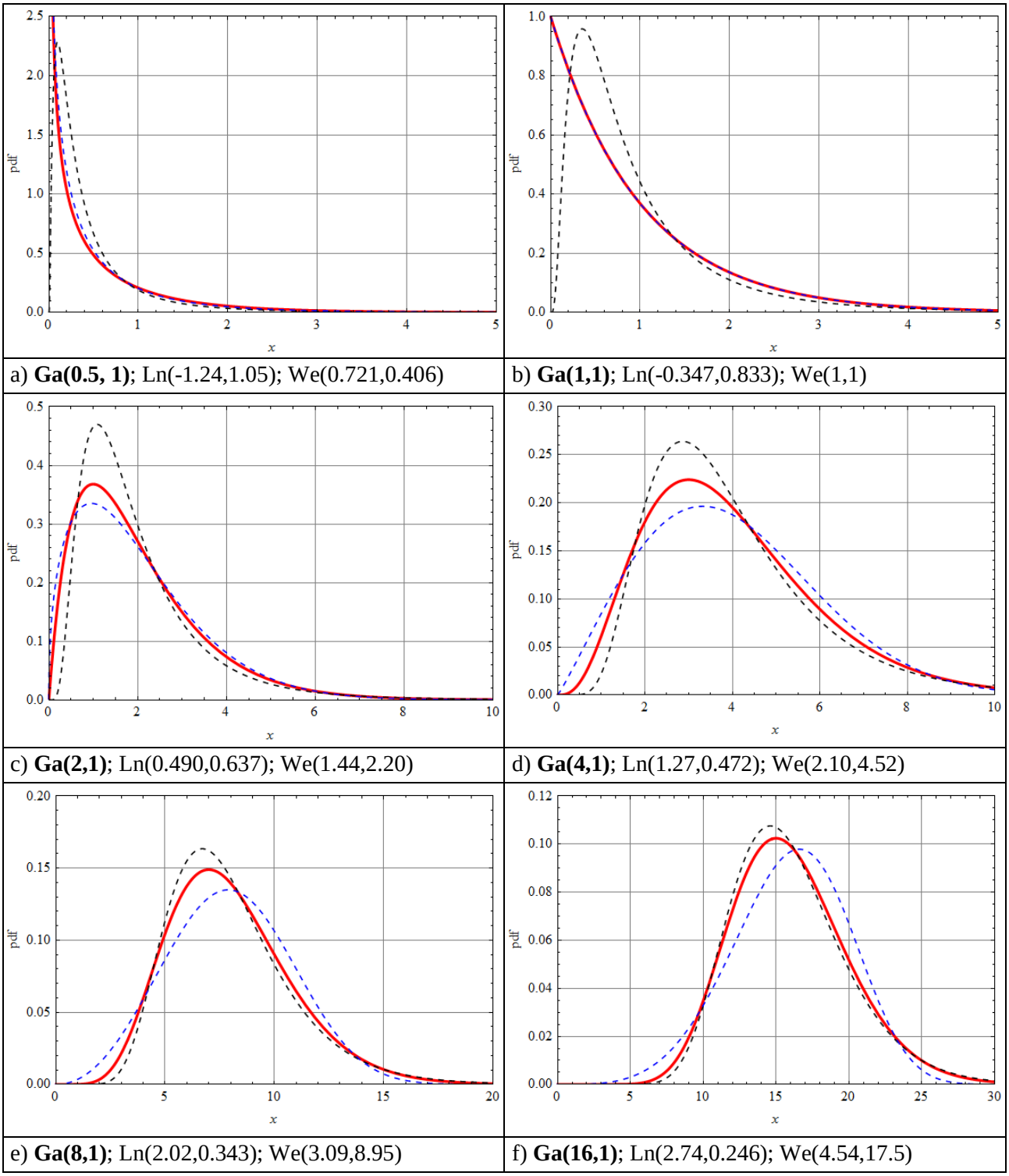
Tabelle 4-3c: Anpassung der Verteilungsparameter der Gamma- und Lognormalverteilung an den Erwartungswert und die Varianz der vorgegebenen WEIBULL-Verteilung

X ~ Ga(α,β);angepasst		**X ~ Ln(μ,σ);angepasst**		**X ~ We(α,β);vorgegeben**	
α_{Ga}	β_{Ga}	μ	σ	α_{We}	β_{We}
0,2	10	-0,2027	1,339	0.5	1
1	1	-0,3466	0,8226	1	1
3,660	0,2422	-0,2416	0,4915	2	1
12,71	0,0713	-0,1362	0,2752	4	1
45,43	0,02073	-0,07091	0,1476	8	1
169,2	0,005717	-0,03590	0,07675	16	1

In den Abbildungen 4-5(a,b,c) sowie 4-6(a,b,c) sind die Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen für die in den Tabellen 4-3(a,b,c) angegebenen Verteilungsparameter der drei betrachteten Verteilungsarten gegenübergestellt. Auf diese Abbildungen wird in der weiteren Diskussion zu Ergebnissen der MC-Simulation zur Berechnung der PCS noch genauer eingegangen. Hier sei zunächst auf folgende Besonderheiten zum Verlauf der betrachteten Verteilungen sowie ihrer gegenseitigen Lage hingewiesen:

- Bei Vorgabe der Parameter der Gammaverteilung resultieren angepasste Lognormal- und WEIBULL-Verteilungen, welche für $\alpha_{Ga} > 1$ die entsprechende Gammaverteilung weitgehend einschließen. Im Fall $\alpha_{Ga} = 1$ stimmen Gamma- und WEIBULL-Verteilung überein.
- Bei Vorgabe der Parameter der Lognormalverteilung resultieren angepasste Gamma- und WEIBULL-Verteilungen, die i. W. immer gemeinsam unter bzw. über der Lognormalverteilung verlaufen.
- Bei Vorgabe der Parameter der WEIBULL-Verteilung resultieren angepasste Gamma- und Lognormalverteilungen, die für $\alpha_{We} > 1$ jeweils gemeinsam unter bzw. über der WEIBULL-Verteilung verlaufen. Im Fall $\alpha_{We} = 1$ stimmen WEIBULL- und Gammaverteilung überein. Bei großen Werten von α_{We} (Fälle $\alpha_{We} = 8$ bzw. 16) resultieren für die Lognormalverteilung sehr kleine σ-Werte und für die Gammaverteilung sehr große α-Werte bei annähernder Konstanz des Produktes $\alpha_{Ga} \cdot \beta_{Ga}$, wobei sich diese beiden Verteilungen stark annähern und allmählich die Form einer Normalverteilung annehmen.

Diese Abbildungen zeigen, dass die betrachteten Verteilungen "konkurrenzfähig" sind. Bei Vorgabe der Lognormalverteilung weist der Fall $\sigma = 1{,}5$ (vgl. Abbildung 4-6b(f)) schon gravierende Unterschiede auf.



a) **Ga(0.5, 1)**; Ln(-1.24,1.05); We(0.721,0.406)

b) **Ga(1,1)**; Ln(-0.347,0.833); We(1,1)

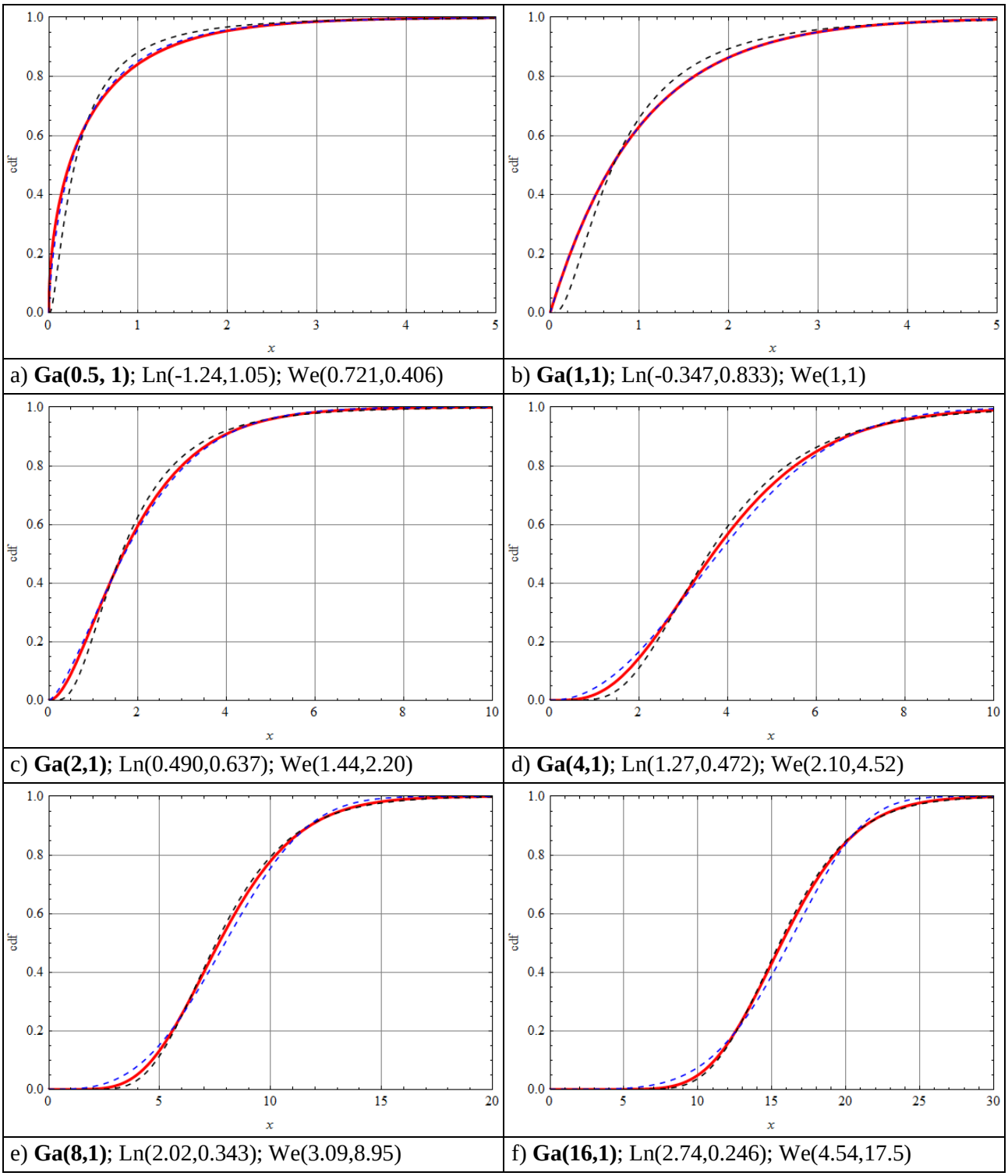
c) **Ga(2,1)**; Ln(0.490,0.637); We(1.44,2.20)

d) **Ga(4,1)**; Ln(1.27,0.472); We(2.10,4.52)

e) **Ga(8,1)**; Ln(2.02,0.343); We(3.09,8.95)

f) **Ga(16,1)**; Ln(2.74,0.246); We(4.54,17.5)

Abbildung 4-5a: Wahrscheinlichkeitsdichten der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von Ga(α,β)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]



a) **Ga(0.5, 1)**; Ln(-1.24,1.05); We(0.721,0.406)

b) **Ga(1,1)**; Ln(-0.347,0.833); We(1,1)

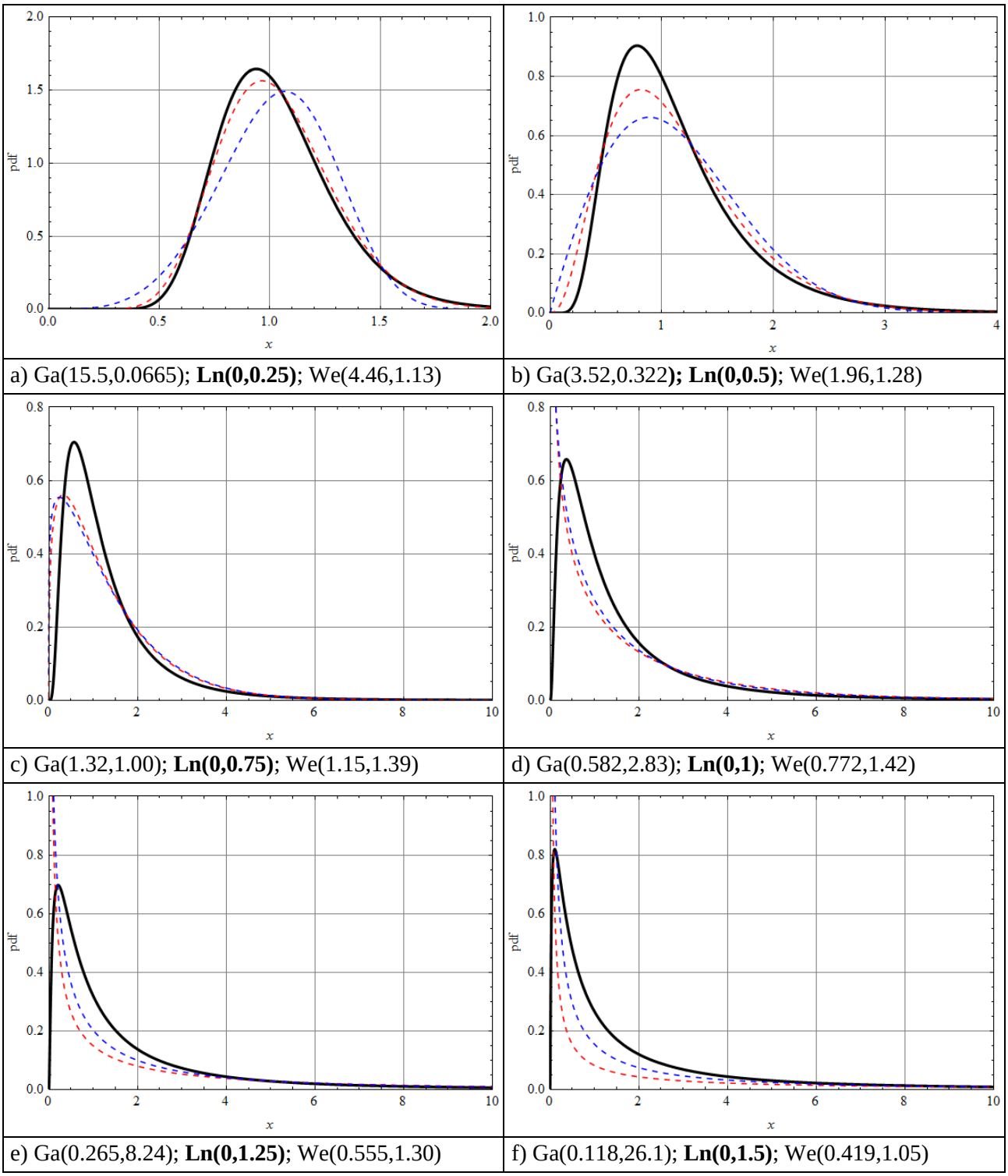
c) **Ga(2,1)**; Ln(0.490,0.637); We(1.44,2.20)

d) **Ga(4,1)**; Ln(1.27,0.472); We(2.10,4.52)

e) **Ga(8,1)**; Ln(2.02,0.343); We(3.09,8.95)

f) **Ga(16,1)**; Ln(2.74,0.246); We(4.54,17.5)

Abbildung 4-6a: Verteilungsfunktionen der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von Ga(α,β)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]



a) Ga(15.5,0.0665); **Ln(0,0.25)**; We(4.46,1.13)

b) Ga(3.52,0.322**); Ln(0,0.5)**; We(1.96,1.28)

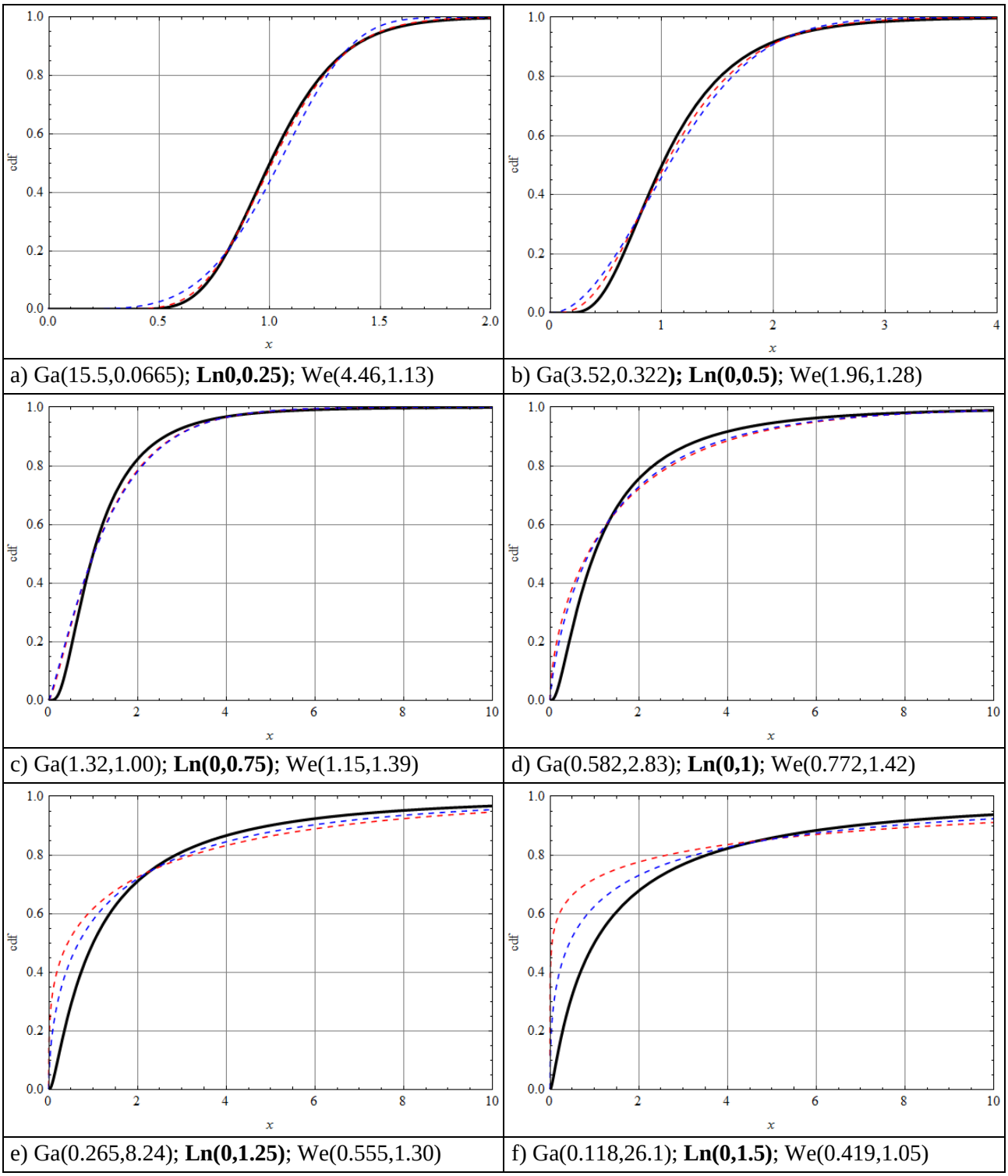
c) Ga(1.32,1.00); **Ln(0,0.75)**; We(1.15,1.39)

d) Ga(0.582,2.83); **Ln(0,1)**; We(0.772,1.42)

e) Ga(0.265,8.24); **Ln(0,1.25)**; We(0.555,1.30)

f) Ga(0.118,26.1); **Ln(0,1.5)**; We(0.419,1.05)

Abbildung 4-5b: Wahrscheinlichkeitsdichten der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von Ln(μ,σ)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]



a) Ga(15.5,0.0665); **Ln0,0.25)**; We(4.46,1.13)

b) Ga(3.52,0.322**); Ln(0,0.5)**; We(1.96,1.28)

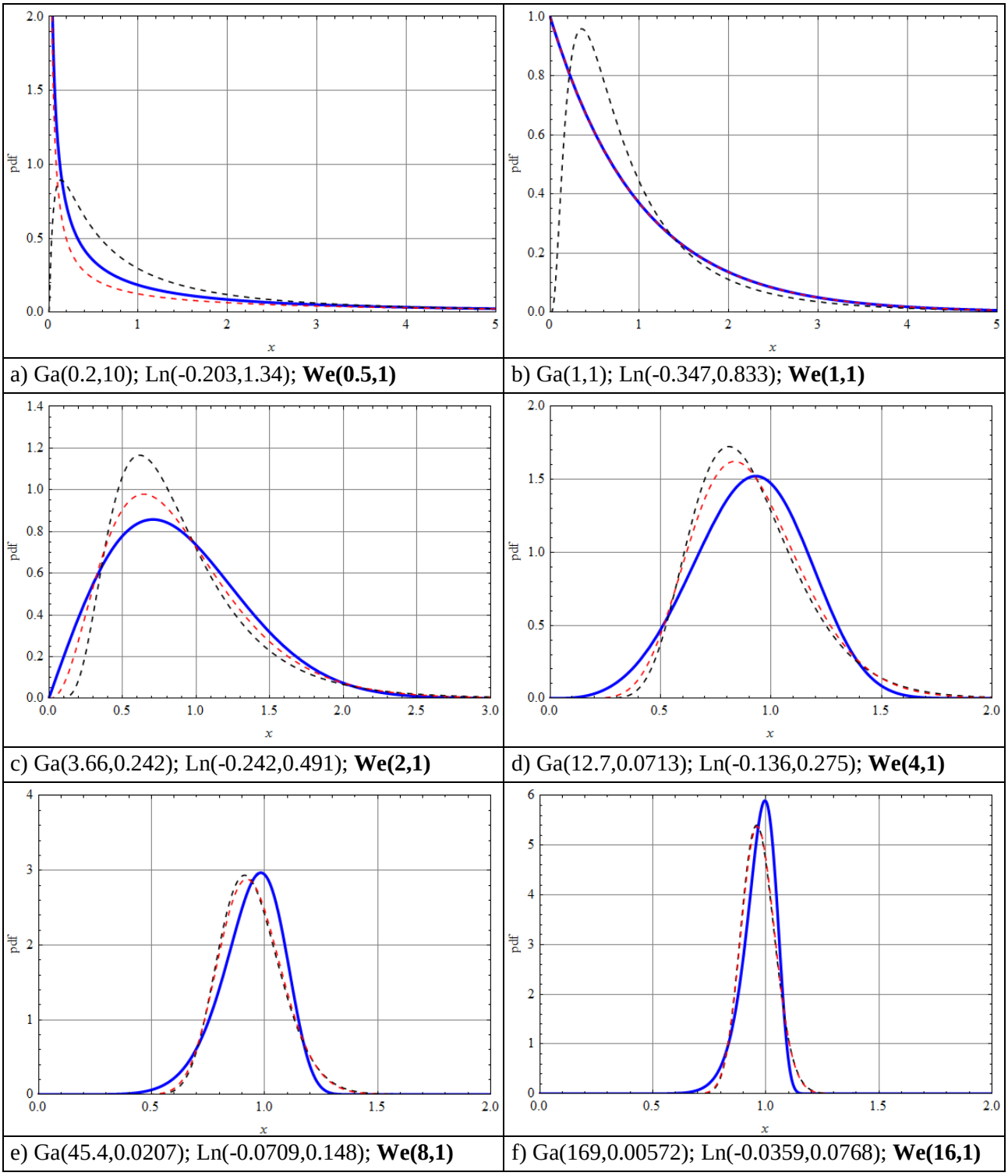
c) Ga(1.32,1.00); **Ln(0,0.75)**; We(1.15,1.39)

d) Ga(0.582,2.83); **Ln(0,1)**; We(0.772,1.42)

e) Ga(0.265,8.24); **Ln(0,1.25)**; We(0.555,1.30)

f) Ga(0.118,26.1); **Ln(0,1.5)**; We(0.419,1.05)

Abbildung 4-6b: Verteilungsfunktionen der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von Ln(μ,σ)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]



a) Ga(0.2,10); Ln(-0.203,1.34); **We(0.5,1)**

b) Ga(1,1); Ln(-0.347,0.833); **We(1,1)**

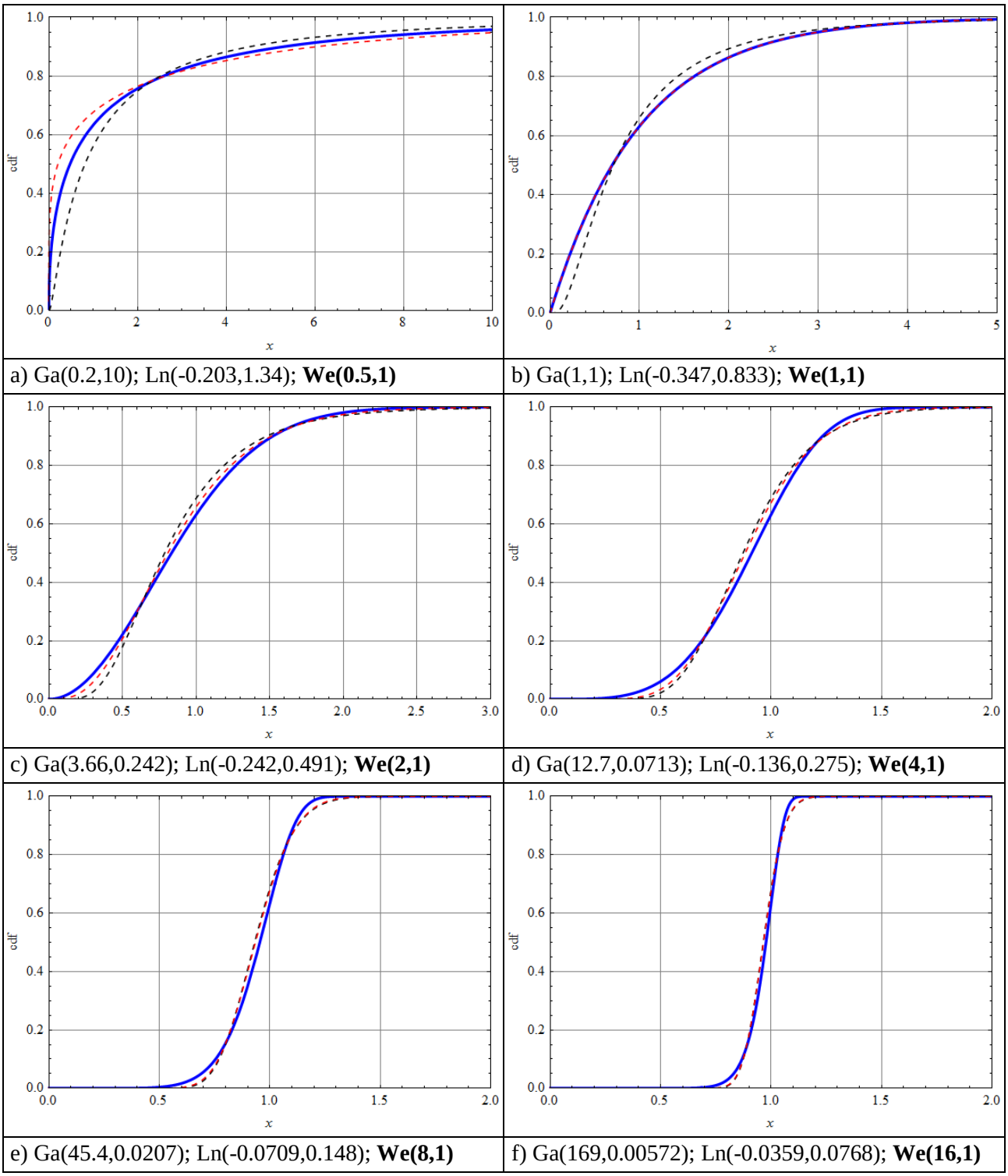
c) Ga(3.66,0.242); Ln(-0.242,0.491); **We(2,1)**

d) Ga(12.7,0.0713); Ln(-0.136,0.275); **We(4,1)**

e) Ga(45.4,0.0207); Ln(-0.0709,0.148); **We(8,1)**

f) Ga(169,0.00572); Ln(-0.0359,0.0768); **We(16,1)**

Abbildung 4-5c: Wahrscheinlichkeitsdichten der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von We(α,β)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]



a) Ga(0.2,10); Ln(-0.203,1.34); **We(0.5,1)**

b) Ga(1,1); Ln(-0.347,0.833); **We(1,1)**

c) Ga(3.66,0.242); Ln(-0.242,0.491); **We(2,1)**

d) Ga(12.7,0.0713); Ln(-0.136,0.275); **We(4,1)**

e) Ga(45.4,0.0207); Ln(-0.0709,0.148); **We(8,1)**

f) Ga(169,0.00572); Ln(-0.0359,0.0768); **We(16,1)**

Abbildung 4-6c: Verteilungsfunktionen der Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung (rot, schwarz, blau); **Vorgabe von We(γ,β)**, Anpassungen über gleiche E[X] und Var[X]

Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion einer Verteilung

Zur Beantwortung der unter Punkt 2 aufgeworfenen Frage wurden in Anlehnung an die Methodik, die in Abschnitt 4.1.4.1. zu den Arbeiten [BAIN 80], [KAPP 82], [TAY 85] und [MAR 01] diskutiert wurde, Monte-Carlo-Simulationsrechnungen zur Schätzung der Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) von Populationsverteilungen anhand von Stichproben durchgeführt, wozu für alle simulierten Stichproben der K-S-Test, der A-D-Test und der LL-Test parallel erfolgten, um Aussagen zur Abhängigkeit der Stärke dieser Auswahlkriterien vom Typ der Populationsverteilung und von der konkreten Parameterkonstellation zu gewinnen. Die Ergebnisse für den Vergleich von Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung sind in den folgenden zwei Beispielen dargelegt.

Beispiel 4.2-2

Dieses Beispiel dient dem direkten Vergleich mit den in Tabelle 4-1 für die Auswahl zwischen Gamma- und WEIBULL-Verteilung dargelegten Ergebnissen aus [BAIN 80]. Für die jeweils 6 in den Tabellen 4-3a und 4-3c als "vorgegeben" gekennzeichneten Verteilungen wurden jeweils 10.000 Zufallsstichproben mit Umfängen von n = (20, 40, 80, 160) erzeugt und an die Gamma- sowie die WEIBULL-Verteilung durch Parameterschätzung mit der Maximum-Likelihood-Methode angepasst. Zu jeder Stichprobe resultieren dann zwei Verteilungen, die mit dem K-S-, dem A-D- und dem LL-Test zur Selektion der jeweils am besten "passenden" Verteilung geprüft wurden. Hierzu wurde jeweils die Prüfstatistik zur Anpassung an die erzeugende Population mit der Prüfstatistik für die konkurrierende Verteilungsart verglichen. Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen zur PCS der Gamma- und WEIBULL-Verteilung sind direkt mit den Angaben aus Tabelle 4-1 vergleichbar. Die Unterschiede zu den Berechnungen von [BAIN 80] bestehen darin, dass für alle Fälle 10000 MC-Simulationen berechnet wurden, dass auf Berechnungen zur Stichprobenzahl n = 10 verzichtet wurde, und dass alle Stichproben zusätzlich zum LL-Test auch mit dem K-S-Test sowie dem A-D-Test geprüft wurden.

Tabelle 4-4: Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion (PCS) für Stichproben aus Gamma- bzw. WEIBULL-Populationen in Abhängigkeit vom Formparameter und Stichprobenumfang; **Angaben in Prozent in der Reihenfolge (K-S; A-D; LL)**

	α = 0,5	**α = 1**	**α = 2**	**α = 4**	**α = 8**	**α = 16**
n	**PCS für Gamma-Population X ~ Ga(α,1)**					
20	(49; 60; 65)	(35; 45; 50)	(50; 55; 57)	(58; 63; 64)	(62; 67; 69)	(65; 70; 72)
40	(58; 66; 71)	(35; 44; 50)	(55; 61; 63)	(65; 70; 72)	(71; 76; 78)	(74; 78; 80)
80	(65; 71; 76)	(34; 43; 50)	(60; 67; 68)	(72; 78; 80)	(79; 84; 86)	(83; 88; 90)
160	(73; 79; 84)	(36; 44; 50)	(68; 74; 76)	(81; 87; 89)	(88; 93; 95)	(91; 95; 97)
n	**PCS für WEIBULL-Population X ~ We(α,1)**					
20	(68; 64; 60)	(66; 56; 50)	(62; 63; 64)	(68; 70; 71)	(69; 73; 73)	(71; 75; 75)
40	(75; 74; 69)	(64; 56; 49)	(67; 70; 71)	(75; 78; 80)	(79; 82; 84)	(81; 84; 85)
80	(83; 83; 80)	(65; 57; 50)	(74; 76; 79)	(84; 87; 89)	(88; 91; 93)	(90; 93; 94)
160	(92; 92; 90)	(64; 55; 49)	(82; 85; 88)	(93; 95; 96)	(95; 97; 98)	(96; 98; 99)

Zunächst ist festzustellen, dass die Werte in Tabelle 4-4 zur PCS nach dem LL-Test sehr gut mit [BAIN 80] übereinstimmen (siehe Tabelle 4-1). Die für einige Fälle auftretenden Abweichungen um 1%

(in fünf Fällen um 2%) dürften neben Rundungsfehlern aus Unsicherheiten der MC-Simulation resultieren, wobei der hier realisierte Umfang von jeweils 10000 Stichproben kleine statistische Unsicherheiten gewährleistet.

Die Gegenüberstellung der mit dem K-S-, dem A-D- und dem LL-Test berechneten PCS-Werte verdeutlicht für die Fälle α = (2, 4, 8, 16) zu beiden Verteilungen, dass der K-S-Test schwächer ist als der K-D-Test, dieser aber vom LL-Test übertroffen wird.

Die PCS der Gammaverteilung ist für α = (2, 4, 8, 16) nach allen drei Kriterien kleiner als die PCS der WEIBULL-Verteilung. Die Ergebnisse für $\alpha = 1$ sind insofern sehr interessant, weil hier beide betrachteten Populationen identisch sind (es sind nun einfache Exponentialverteilungen). Mit dem K-S-Test (schwächer ausgeprägt auch mit dem A-D-Test) resultieren aber unterschiedliche PCS-Werte für die beiden Verteilungen. Dies veranschaulicht die in Abschnitt 4.1.2 getroffene Einschätzung, dass beide Goodness-of-Fit Tests streng genommen nur für den Hypothesentest zu vollständig bestimmten Verteilungen gültig sind. Müssen die Verteilungsparameter anhand der zu prüfenden Stichprobe geschätzt werden, so sind Korrekturen der Prüfstatistiken erforderlich, die von der Verteilungsart abhängig sind. Der LL-Test liefert dagegen für den Fall $\alpha = 1$ erwartungsgemäß gleiche PCS-Werte von jeweils 50%. Im Fall $\alpha = 0{,}5$ ist die mit K-S- sowie A-D-Tests bestimmte PSC für die WEIBULL-Verteilung für alle Stichprobenumfänge größer als für die Gammaverteilung, wogegen dies nach LL-Test nur für die beiden kleineren n-Werte gilt. Für die WEIBULL-Verteilung ist im Fall $\alpha = 0{,}5$ außerdem eine größere Stärke des K-S- und des A-D-Tests im Vergleich zum LL-Test festzustellen.

In Auswertung des Beispiels 4.2-2 kann u. E. eine grundsätzliche Schlussfolgerung zur Anwendung der klassischen Goodness-of-Fit Tests für die Selektion von "passenden" Verteilungsarten getroffen werden. Sofern keine verteilungsartspezifischen Korrektoren vorliegen, sollten diese Methoden, insbesondere der K-S-Test, nur mit größter Vorsicht für die Auswahl von Verteilungsarten genutzt werden. Da der LL-Test i. d. R. (insbesondere für die glockenförmig verteilten Zufallsgrößen) eine größere Stärke der Selektion von Verteilungen aufweist, bietet sich dessen vorrangige Nutzung an.

Zum LL-Test ergibt sich anhand des Beispiels 4.2-2 die Frage, warum auch bei klar voneinander abweichenden Formen der Wahrscheinlichkeitsdichten von Gamma- und WEIBULL-Verteilung die PCS zur Gammaverteilung deutlich kleiner ist als für die WEIBULL-Verteilung. Die Antwort auf diese Frage folgt u. E. aus der Struktur der jeweiligen Likelihood-Funktion bzw. der resultierenden ML-Schätzer der jeweiligen Verteilungsparameter α (Formparameter) und β (Skalenparameter). Für die Gammaverteilung reduziert sich der Informationsgehalt einer Stichprobe **x** auf zwei einfache suffiziente Statistiken, den arithmetischen Mittelwert T_1 und den geometrischen Mittelwert T_2,

$$T_1 = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i \,, \quad T_2 = \left(\prod_{i=1}^{n} \right)^{\frac{1}{n}} . \tag{4-12}$$

Die ML-Schätzer der Parameter der Gammaverteilung sind die Lösung der Gleichungen,

$$\ln(T_1) - \ln(T_2) = \ln(\alpha) - \frac{\Gamma'(\alpha)}{\Gamma(\alpha)} , \quad \beta = \frac{T_1}{\alpha} , \tag{4-13}$$

wobei $\Gamma(\alpha)$ die Gammafunktion darstellt (siehe Gl. (C-8) in Anhang C). Die ML-Schätzung für die Parameter der WEIBULL-Verteilung verlangt die Lösung folgender (komplizierten) Gleichungen:

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i^{\alpha} \cdot \ln(x_i)}{\sum_{i=1}^{n} x_i^{\alpha}} - \ln(T_2) = \frac{1}{\alpha}, \qquad \beta = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^{\alpha} \right)^{\frac{1}{\alpha}}. \tag{4-14}$$

In Gl. (4-14) sind die Verteilungsparameter enger an die einzelnen Stichprobenwerte gebunden, woraus in gewissem Sinne eine größere "Flexibilität" der Anpassung an die Besonderheiten einer Stichprobe resultiert als bei der Gammaverteilung, für deren Parameter lediglich der arithmetische und der geometrische Mittelwert der Stichprobendaten von Bedeutung sind. Derartige qualitative Unterschiede der Schätzung von Verteilungsparametern unterschiedlicher Verteilungsfamilien sind für die Identifikation einer Population anhand von Stichproben durchaus relevant, was insbesondere Stichproben mit relativ geringem Umfang betrifft.

Mit dem folgenden Beispiel soll ein weiteres Problem statistischer Methoden zur Identifikation von Verteilungsarten verdeutlicht werden. Es betrifft den Vergleich von mehr als zwei verschiedenen Verteilungsfamilien, wobei sich Synergieeffekte der konkurrierenden Verteilungen ergeben können, welche die Identifikation der "wahren" Population erschweren. In diesem Beispiel werden die Gamma-, die WEIBULL- und die Lognormalverteilung als potentielle Populationen für positiv definierte Zufallsgrößen betrachtet. Es ist weitgehend analog zu [KAPP 82]. Einige der in [KAPP 82] publizierten Ergebnisse können direkt mit denen des folgenden Beispiels verglichen werden.

Beispiel 4.2-3

Für die je 6 in den Tabellen 4-3a bis 4-3c als "vorgegeben" gekennzeichneten Verteilungen wurden jeweils 10.000 Zufallsstichproben mit Umfängen von n = (25, 50, 100, 200) Werten erzeugt und an die Gamma-, Lognormal- sowie WEIBULL-Verteilung durch Parameterschätzung mit der Maximum-Likelihood-Methode angepasst. Die zu jeder Stichprobe resultierenden 3 Verteilungen wurden mit dem K-S-, dem A-D- und dem LL-Test zur Selektion der jeweils am besten "passenden" Verteilung geprüft. Hierzu wurde jeweils die Prüfstatistik für die erzeugende Population mit den Prüfstatistiken der beiden anderen Verteilungsarten verglichen (z. B. "Ga vs. Ln & We") sowie auch jeweils separat bewertet (also z. B. "Ga vs. Ln" sowie "Ga vs. We"). Dies ist für die Bewertung der resultierenden PCS-Werte sinnvoll, da sich bei zwei "Konkurrenten" Synergieeffekte ergeben, wenn diese für unterschiedliche Stichproben der Ausgangsverteilung nach den berücksichtigten Kriterien eine bessere Anpassung zeigen als die für die erzeugende Population geschätzte Verteilung. Außerdem werden auch die Wahrscheinlichkeiten für eine inkorrekte Selektion (PIS) angegeben, die sich immer dann ergibt, wenn die der Stichprobe zugrunde gelegt Population nicht in den Vergleich einbezogen wird (z. B. Erzeugung der Stichprobe aus "Ga", aber Vergleich "Ln vs. We".)

Die Unterschiede zu den Berechnungen von [KAPP 82] bestehen darin, dass für alle Fälle 10000 MC-Simulationen berechnet wurden. Der Stichprobenumfang n unterscheidet sich für kleine Werte (in [KAPP 82] wurden hierzu die Fälle n = (10, 30) betrachtet). Die betrachteten Parameterkonstellationen stimmen nur teilweise überein (siehe dbzgl. Anmerkungen in Abschnitt 4.1.4.1). Alle Stichproben werden hier zusätzlich zum LL-Test auch mit dem K-S-Test sowie dem A-D-Test geprüft, und es wird auch die PIS berechnet. Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen sind in den folgenden Tabellen 4-5(a,b,c) zusammengefasst.

Tabelle 4-5a: Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion (PCS) für **Stichproben aus Gamma-Populationen X ~ Ga(α,1)** in Abhängigkeit vom Formparameter und Stichprobenumfang sowie der in den Vergleich einbezogenen Konkurrenten, Wahrscheinlichkeiten der inkorrekten Selektion (PIS) bei Nicht-Einbeziehung der Populationsverteilung; **Angaben in Prozent;** geordnet nach angewandter **Testmethode in Reihenfolge (K-S; A-D; LL)**

	α = 0,5	**α = 1**	**α = 2**	**α = 4**	**α = 8**	**α = 16**
n	**PCS für Gammaverteilung bei Vergleich "Ga vs. Ln & We"**					
25	(52; 63; 68)	(28; 38; 39)	(28; 30; 32)	(28; 30; 33)	(30; 31; 33)	(28; 30; 33)
50	(60; 67; 71)	(31; 40; 45)	(39; 43; 47)	(39; 45; 48)	(40; 44; 48)	(38; 43; 46)
100	(67; 73; 78)	(34; 43; 49)	(50; 58; 63)	(54; 61; 66)	(53; 61; 66)	(50; 57; 61)
200	(76; 82; 86)	(35; 44; 49)	(64; 72; 77)	(70; 79; 84)	(68; 75; 80)	(65; 70; 74)
n	**PCS für Gammaverteilung bei Vergleich "Ga vs. Ln"**					
25	(82; 86; 89)	(75; 79; 82)	(69; 72; 74)	(63; 66; 67)	(60; 62; 62)	(57; 59; 59)
50	(90; 94; 96)	(85; 89; 91)	(77; 80; 82)	(69; 72; 75)	(64; 66; 67)	(60; 62; 63)
100	(97; 99; 100)	(93; 96; 98)	(85; 89; 92)	(77; 81; 84)	(70; 73; 76)	(64; 66; 68)
200	(100;100;100)	(98; 99; 100)	(93; 96; 98)	(87; 90; 93)	(78; 81; 84)	(71; 73; 76)
n	**PCS für Gammaverteilung bei Vergleich "Ga vs. We"**					
25	(53; 63; 68)	(35; 44; 50)	(51; 57; 58)	(60; 64; 66)	(65; 70; 71)	(67; 71; 74)
50	(60; 67; 71)	(34; 44; 49)	(57; 63; 65)	(67; 72; 74)	(73; 78; 81)	(76; 81; 83)
100	(67; 73; 78)	(35; 44; 50)	(63; 69; 71)	(76; 81; 83)	(82; 87; 89)	(86; 91; 93)
200	(76; 82; 86)	(35; 44; 49)	(71; 76; 79)	(83; 89; 91)	(90; 95; 96)	(94; 97; 98)
n	**PIS für Lognormalverteilung bei Vergleich "Ln vs. We" *)**					
25	(13; 9; 8)	(24; 20; 19)	(37; 36; 35)	(48; 48; 49)	(57; 58; 60)	(61; 64; 67)
50	(5; 2; 2)	(13; 11; 9)	(32; 30; 29)	(48; 49; 49)	(61; 64; 65)	(68; 72; 74)
100	(1; 0; 0)	(6; 4; 2)	(24; 22; 20)	(47; 50; 48)	(65; 70; 70)	(76; 82; 83)
200	(0; 0; 0)	(1; 1; 0)	(16; 14; 11)	(45; 50; 47)	(70; 78; 78)	(84; 90; 92)

*) Die PIS für die WEIBULL-Verteilung ergibt sich aus PIS(We) = 100 – PIS(Ln)

Zu den in Tabelle 4-5a zusammengefassten Ergebnissen der MC-Simulation aus Gamma-Populationen seien folgende Resultate hervorgehoben (siehe hierzu Abbildungen 4-5a und 4-6a).

- Bezüglich der Testverfahren bestätigt sich für die PCS die Stärkerangfolge K-S < A-D < LL.
- Die PCS steigt kontinuierlich mit dem Stichprobenumfang n, für den Vergleich "Ga vs. Ln & We" werden jedoch für viele Parameterkonstellationen deutlich geringere PCS erreicht als beim Vergleich mit nur jeweils einer der beiden konkurrierenden Verteilungen. Dies betrifft nicht den Fall $\alpha = 0{,}5$, da hier die Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Konkurrenten durchgängig gleichzeitig über bzw. unter der Wahrscheinlichkeitsdichte der Gammaverteilung verlaufen.
- Bei $\alpha = (2, 4, 8, 16)$ verläuft $f_{Ga}(x|\alpha,1)$ zwischen den (angepassten) Wahrscheinlichkeitsdichten der Lognormal- und WEIBULL-Verteilung, wobei für $\alpha = (2, 4)$ f_{We} und für $\alpha = (8, 16)$ f_{Ln} näher liegen. Damit verliert die WEIBULL-Verteilung in unterschiedlichem Maße Stichproben an die Konkurrenten.

Tabelle 4-5b: Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion (PCS) für **Stichproben aus Lognormal-Populationen X ~ Ln(0,σ)** in Abhängigkeit vom Formparameter und Stichprobenumfang sowie der in den Vergleich einbezogenen Konkurrenten; Wahrscheinlichkeiten der inkorrekten Selektion (PIS) bei Nicht-Einbeziehung der Populationsverteilung; **Angaben in Prozent;** geordnet nach angewandter **Testmethode in Reihenfolge (K-S; A-D; LL)**

	σ = 0,25	**σ = 0, 5**	**σ = 0,75**	**σ =1**	**σ =1,25**	**σ = 1,5**
n	**PCS für Lognormalverteilung bei Vergleich "Ln vs. Ga & We"**					
25	(54; 58; 59)	(60; 65; 66)	(67; 72; 73)	(71; 76; 78)	(74; 78; 80)	(73; 78; 80)
50	(58; 60; 62)	(69; 72; 74)	(76; 80; 82)	(82; 86; 87)	(84; 88; 90)	(84; 88; 90)
100	(65; 67; 69)	(77; 80; 83)	(86; 90; 91)	(92; 95; 96)	(92; 96; 97)	(92; 96; 97)
200	(70; 73; 75)	(86; 89; 91)	(94; 96; 97)	(98; 99; 99)	(98; 99; 100)	(98; 99; 100)
n	**PCS für Lognormalverteilung bei Vergleich "Ln vs. Ga"**					
25	(57; 58; 59)	(63; 65; 66)	(70; 72; 73)	(76; 77; 78)	(80; 81; 81)	(84; 85; 84)
50	(59; 60; 62)	(70; 72; 74)	(78; 80; 82)	(85; 87; 87)	(90; 91; 91)	(93; 94; 93)
100	(65; 67; 69)	(77; 80; 83)	(87; 90; 91)	(93; 95; 96)	(97; 98; 98)	(98; 99; 99)
200	(70; 73; 75)	(86; 89; 91)	(95; 96; 97)	(98; 99; 99)	(99; 100;	(100;100;100)
n	**PCS für Lognormalverteilung bei Vergleich "Ln vs. We"**					
25	(74; 78; 81)	(74; 78; 80)	(74; 78; 81)	(73; 79; 81)	(74; 78; 81)	(73; 78; 80)
50	(83; 88; 90)	(84; 88; 90)	(83; 88; 90)	(84; 88; 90)	(84; 88; 90)	(84; 88; 90)
100	(92; 96; 97)	(93; 96; 97)	(92; 96; 97)	(92; 96; 97)	(92; 96; 97)	(92; 96; 97)
200	(98; 99; 100)	(98; 99; 100)	(98;100;100)	(98; 99; 100)	(98; 99; 100)	(98; 99; 100)
n	**PIS für Gammaverteilung bei Vergleich "Ga vs. We" *)**					
25	(77; 83; 86)	(75; 86; 89)	(60; 82; 91)	(28; 40; 69)	(10; 12; 23)	(6; 5; 7)
50	(87; 92; 94)	(87; 96; 97)	(67; 95; 98)	(23; 44; 72)	(4; 4; 12)	(1; 1; 1)
100	(95; 98; 99)	(95; 99; 100)	(75;100;100)	(17; 48; 74)	(1; 1; 3)	(0; 0; 0)
200	(99;100;100)	(99;100;100)	(82;100;100)	(11; 51; 77)	(0; 0; 0)	(0; 0; 0)

*) Die PIS für die WEIBULL-Verteilung ergibt sich aus PIS(We) = 100 – PIS(Ga)

Zu den in Tabelle 4-5b zusammengefassten Ergebnissen der MC-Simulation aus Lognormal-Populationen seien folgende Resultate hervorgehoben (siehe hierzu Abbildungen 4-5b und 4-6b).

- Bezüglich der Testverfahren bestätigt sich für die PCS die Stärkerangfolge K-S < A-D < LL.
- Die PCS steigt kontinuierlich mit dem Stichprobenumfang n. Da die Wahrscheinlichkeitsdichten der Konkurrenten immer gleichgerichtet von $f_{Ln}(x|0,\sigma)$ abweichen, gehen der Lognormalverteilungen für die PCS kaum verschiedene Stichproben an die Konkurrenten verloren. Bei kleinen σ-Werten liegt die Gamma-, bei großen σ-Werten die WEIBULL-Verteilung näher an der Lognormalverteilung. Dies zeigt sich sowohl in den gegenläufigen PCS-Werten bei Vergleich mit nur einem Konkurrenten, als auch in den PIS-Werten für Gamma- bzw. WEIBULL-Verteilung (wenn die Lognormalverteilung nicht in den Vergleich einbezogen wird).
- Die PCS der Lognormalverteilung nimmt bei gleichem Stichprobenumfang mit dem σ-Wert zu.

Tabelle 4-5c: Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion (PCS) für **Stichproben aus WEIBULL-Populationen X ~ Wa(α,1)** in Abhängigkeit vom Formparameter und Stichprobenumfang sowie der in den Vergleich einbezogenen Konkurrenten; Wahrscheinlichkeiten der inkorrekten Selektion (PIS) bei Nicht-Einbeziehung der Populationsverteilung; **Angaben in Prozent;** geordnet nach angewandter **Testmethode in Reihenfolge (K-S; A-D; LL)**

	α = 0,5	**α = 1**	**α = 2**	**α = 4**	**α = 8**	**α = 16**
n	**PCS für WEIBULL-Verteilung bei Vergleich "We vs. Ga & Ln"**					
25	(47; 47; 43)	(50; 42; 43)	(61; 65; 66)	(69; 72; 74)	(73; 77; 78)	(74; 78; 78)
50	(63; 65; 63)	(54; 49; 46)	(69; 72; 74)	(77; 80; 83)	(82; 85; 86)	(84; 88; 89)
100	(80; 82; 81)	(60; 54; 50)	(76; 79; 81)	(87; 90; 92)	(91; 93; 95)	(93; 95; 96)
200	(92; 93; 92)	(64; 56; 50)	(85; 87; 90)	(94; 97; 98)	(97; 98; 99)	(98; 99; 100)
n	**PCS für WEIBULL-Verteilung bei Vergleich "We vs. Ga "**					
25	(70; 67; 63)	(66; 55; 50)	(63; 65; 66)	(69; 72; 74)	(73; 77; 78)	(74; 78; 78)
50	(77; 76; 73)	(65; 56; 50)	(69; 72; 74)	(77; 80; 83)	(82; 85; 86)	(84; 88; 89)
100	(86; 86; 83)	(65; 56; 51)	(76; 79; 81)	(87; 90; 92)	(91; 93; 95)	(93; 95; 96)
200	(94; 94; 93)	(65; 56; 50)	(85; 87; 90)	(94; 97; 98)	(97; 98; 99)	(98; 99; 100)
n	**PCS für WEIBULL-Verteilung bei Vergleich "We vs. Ln"**					
25	(76; 80; 81)	(77; 80; 80)	(76; 79; 80)	(76; 80; 80)	(77; 80; 81)	(76; 80; 80)
50	(85; 88; 90)	(86; 89; 90)	(86; 89; 91)	(85; 89; 90)	(86; 89; 90)	(86; 89; 91)
100	(94; 96; 97)	(94; 96; 97)	(94; 96; 97)	(94; 96; 97)	(94; 96; 97)	(94; 96; 97)
200	(98; 99;100)	(99; 99;100)	(99;100;100)	(99; 99; 100)	(98; 99; 100)	(98; 99; 100)
n	**PIS für Gammaverteilung bei Vergleich "Ga vs. Ln" *)**					
25	(57; 61; 68)	(75; 79; 81)	(83; 87; 89)	(86; 91; 92)	(87; 92; 94)	(88; 93; 94)
50	(59; 65; 73)	(84; 88; 91)	(93; 96; 97)	(94; 97; 98)	(95; 98; 99)	(95; 98; 99)
100	(63; 70; 81)	(93; 96; 97)	(98; 99; 100)	(99;100;100)	(99;100;100)	(99;100;100)
200	(67; 77; 90)	(98; 99;100)	(100;100;100)	(100;100;100)	(100;100;100)	(100;100;100)

*) Die PIS für die Lognormalverteilung resultiert gemäß PIS(Ln) = 100 – PIS(Ga)

Zu den in Tabelle 4-5c zusammengefassten Ergebnissen der MC-Simulation aus WEIBULL-Populationen seien folgende Resultate hervorgehoben (siehe hierzu Abbildungen 4-5c und 4-6c).

- Abgesehen von kleinen Werte des Formparameters α bestätigt sich für die PCS die Stärkerangfolge K-S < A-D < LL.
- Die Wahrscheinlichkeitsdichte der WEIBULL-Verteilung verläuft für α = 0,5 zwischen denen der beiden Konkurrenten, weshalb hierfür eine relativ kleine PCS resultiert. Zum Fall α = 1 sei auf die Erläuterungen zum Beispiel 4.2-2 verwiesen.
- Für die größeren Werte des Formparameters α weichen die Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Konkurrenten gleichgerichtet von $f_{We}(x|\alpha,1)$ ab, wobei f_{Ga} immer näher verläuft. Dies zeigt sich in den PCS-Werten der WEIBULL-Verteilung bei Vergleich mit nur einem Konkurrenten sowie in der hohen PIS der Gammaverteilung (sie wird fast immer im Vergleich mit der Lognormalverteilung selektiert).

Die im Beispiel 4.2-3 für die Gamma-, Lognormal- und WEIBULL-Verteilung erläuterten Ergebnisse von MC-Rechnungen zur Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion PCS (1 – PCS entspricht dem Fehler 1. Art) sowie der Wahrscheinlichkeit der inkorrekten Selektion PIS (entspricht dem Fehler 2. Art), können sich erheblich verändern, wenn eine weitere Verteilungsfamilie in die Betrachtungen einbezogen wird. Die größten Veränderungen zur PCS bzw. PIS sind dann für die Verteilung zu erwarten, die dem neuen Konkurrenten am ähnlichsten ist. Dies wird im nachfolgenden Beispiel anhand der PCS und PIS nach Einbeziehung der WALD-Verteilung zur Bestimmung des für eine linkssteile, positiv definierte Zufallsgröße am besten geeigneten statistischen Modells deutlich.

Beispiel 4.3-1

In der Praxis steht man häufig vor der Aufgabe, anhand einer relativ kleinen Stichprobe abzuschätzen, wie viele weitere Messwerte ungefähr erforderlich sein dürften, damit die Daten mit hinreichender Sicherheit einer bestimmten Verteilungsart zugeordnet werden können. In diesem Sinne sei hier z. B. angenommen, dass die vorhandenen Daten auf eine linkssteile, positiv definierte Zufallsgröße hinweisen, deren Erwartungswert bei 3 liegt und deren Varianz ungefähr 2,5 beträgt. Davon ausgehend soll die Frage beantwortet werden, in welchem Umfang weitere Daten aus dieser Population zu erheben sind, um bei vorgegebenen Wahrscheinlichkeiten für die Fehler 1. und 2. Art eine Entscheidung zwischen folgenden vier Hypothesen treffen zu können: $X \sim Ga(\alpha,\beta)$; $X \sim Ln(\mu,\sigma)$; $X \sim Wa(\mu,\lambda)$ oder $X \sim We(\alpha,\beta)$. In der Tabelle 4-6 sind die mit den obigen Ansätzen für Erwartungswert und Varianz resultierenden Werte der Verteilungsparameter sowie zur Schiefe und Kurtosis zusammengestellt. In der Abbildung 4-7a sind ihre Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen gegenübergestellt. Der Bereich hoher Quantile ist in Abbildung 4-7b vergrößert dargestellt.

Tabelle 4-6: Verteilungsparameter sowie Schiefe und Kurtosis der Gamma-, Lognormal-, WALD- und WEIBULL-Verteilung bei Ansatz von **E[X] = 3** und Varianz **Var[X] = 2,5** sowie damit resultierende Werte zur Schiefe (γ_1) und Kurtosis (γ_1).

Verteilungsart	**Verteilungsparameter**		**Schiefe γ_1**	**Kurtosis γ_2**
$X \sim Ga(\alpha,\beta)$;	α = 3,600	β = 0,833	1,054	4,667
$X \sim Ln(\mu,\sigma)$	μ =0,9761	σ = 0,4951	1,728	8,736
$X \sim Wa(\mu,\lambda)$	μ = 3,0	λ = 10,8	1,581	7,167
$X \sim We(\alpha,\beta)$	α = 1,982	β = 3,385	0,6434	3,268

Aus Abbildung 4-7 ist klar ersichtlich, dass im vorliegenden Beispiel die Lognormalverteilung und die WALD-Verteilung fast perfekt übereinstimmen (auch im Bereich der hohen Quantile). Deshalb ist zu erwarten, dass diese beiden Verteilungsarten nur bei sehr großen Stichprobenumfängen unterscheidbar sind. Interessant ist in diesem Zusammenhang jedoch, dass sich die mit dem LL-Test anhand von MC-Simulationen berechneten Wahrscheinlichkeiten der korrekten bzw. inkorrekten Selektion deutlich voneinander unterscheiden.

Für die 4 Verteilungen wurden jeweils 10.000 Stichproben mit Umfängen von n = (25, 50, 100, 200, 400) berechnet. Zu jedem Berechnungssatz wurde mit dem LL-Test die PCS für die Verteilung, aus der die iid Stichproben erzeugt wurden, und die PIS für die drei anderen Verteilungen berechnet. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 4-7a bis 4-7d zusammengefasst.

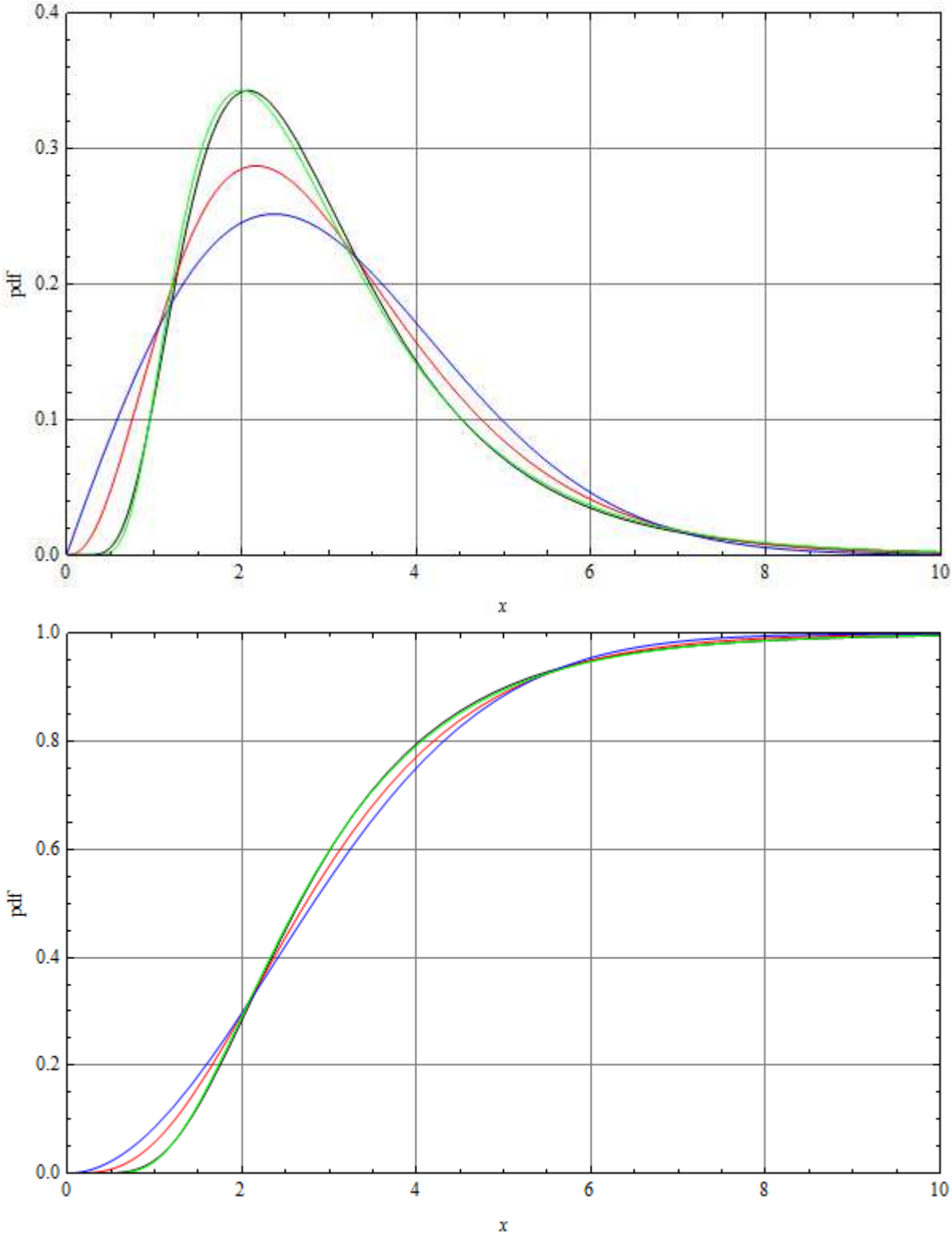


Abbildung 4-7a: Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichten (oben) und Verteilungsfunktionen (unten) der Gammaverteilung (rot), Lognormalverteilung (schwarz), WALD-Verteilung (grün) und WEIBULL-Verteilung (blau) bei Ansatz von E[X] = 3 und Var[X] = 2,5 (siehe Angaben zu den Verteilungsparametern in Tabelle 4-6)

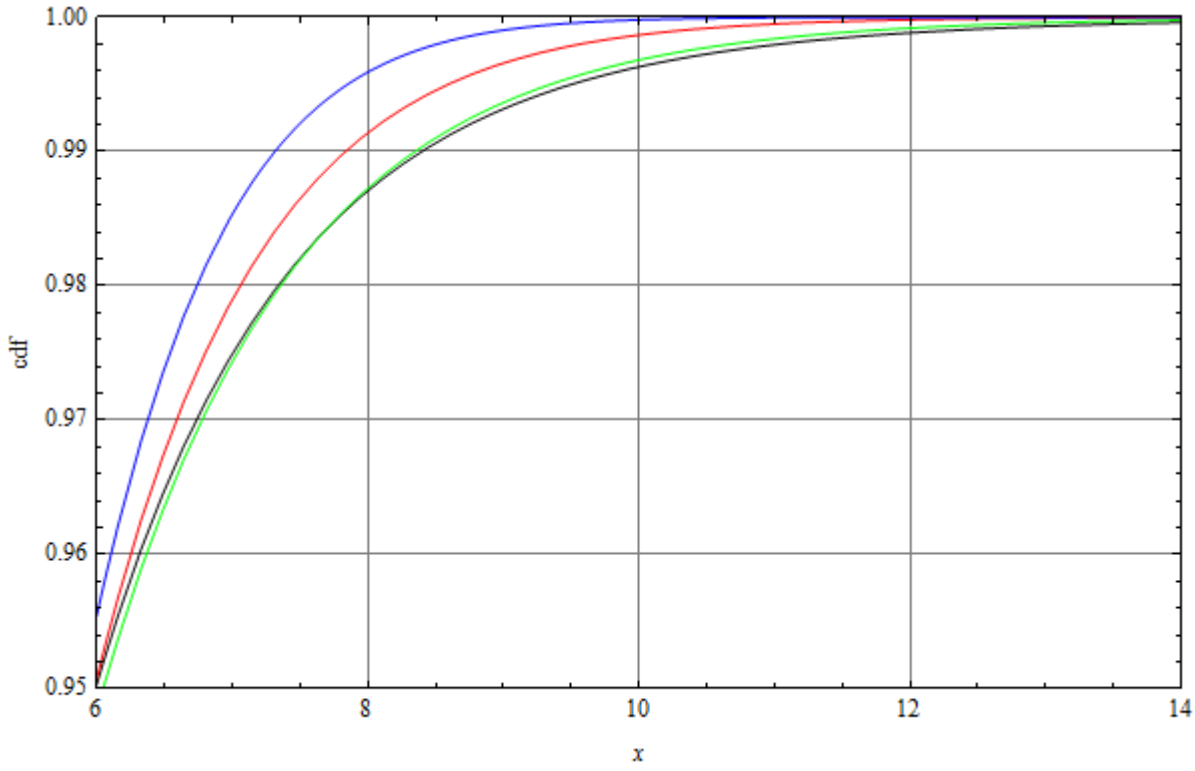


Abbildung 4-7b: Vergrößerte Darstellung der Verteilungsfunktionen aus Abbildung 4-7a für den Bereich hoher Quantile.

Tabelle 4-7a: Ergebnisse der Berechnungen zur **PCS und PIS** für Stichproben vom Umfang n aus der **Gamma-Population**; Angaben **in Prozent**

n	PCS (Ga)	PIS(Ln)	PIS(Wa)	PIS(We)
25	**29,5**	6,4	29,0	35,1
50	**47,1**	8,2	17,7	27,0
100	**65,1**	8,0	7,7	19,2
200	**82,9**	5,1	2,3	9,7
400	**95,4**	1,3	0,2	3,1

Tabelle 4-7b: Ergebnisse der Berechnungen zur **PCS und PIS** für Stichproben vom Umfang n aus der **Lognormal-Population**; Angaben **in Prozent**

n	PIS (Ga)	PCS(Ln)	PIS(Wa)	PIS(We)
25	19,3	**14,5**	55,7	10,5
50	20,8	**23,3**	52,9	3,0
100	16,1	**34,2**	49,4	0,3
200	8,6	**46,6**	44,8	0,0
400	3,0	**59,0**	38,0	0,0

Tabelle 4-7c: Ergebnisse der Berechnungen zur **PCS und PIS** für Stichproben vom Umfang n aus der **WALD-Population**; Angaben **in Prozent**

n	PIS (Ga)	PIS(Ln)	PCS(Wa)	PIS(We)
25	17,6	11,8	**61,8**	8,8
50	17,0	17,7	**63,2**	2,1
100	11,2	23,1	**65,6**	0,1
200	4,1	27,6	**68,3**	0,0
400	0,7	26,7	**72,6**	0,0

Tabelle 4-7d: Ergebnisse der Berechnungen zur **PCS und PIS** für Stichproben vom Umfang n aus der **WEIBULL-Population**; Angaben **in Prozent**

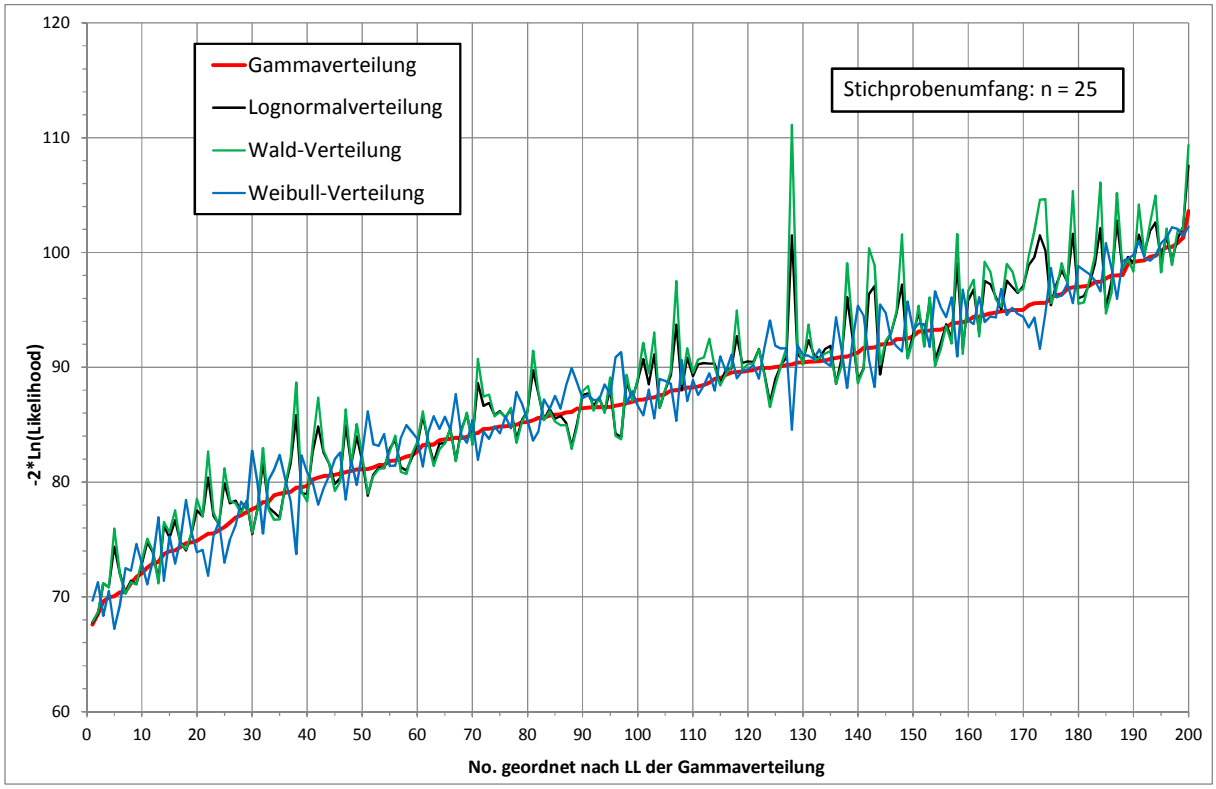
n	PIS (Ga)	PIS(Ln)	PIS(Wa)	PCS(We)
25	19,8	2,0	11,8	**66,4**
50	23,1	0,8	3,0	**73,1**
100	17,9	0,2	0,2	**81,7**
200	10,7	0,0	0,0	**89,3**
400	3,7	0,0	0,0	**96,3**

Zur Erläuterung der Ergebnisse aus den Tabellen 4-7a bis 4-7d zeigen die Abbildungen 4-8a bis 4-8b nach dem LL-Wert für die erzeugende Population geordnete Gegenüberstellungen mit den LL-Werte der jeweils drei anderen Verteilungen für jeweils 200 Stichproben mit Umfängen von n = 25 und n = 200. Zu den Ergebnissen dieses Beispiels ergeben sich folgende Anmerkungen:

- Die Wahrscheinlichkeitsdichte/Verteilungsfunktion der Gammaverteilung liegt zwischen WEIBULL- und der Lognormal-/WALD-Verteilung. Bei kleinen Stichprobenumfängen ist die PCS(Ga) relativ klein, weil vom "Ideal" (nach beiden Seiten) abweichende Stichproben an die anderen Verteilungen fallen (gegenläufig). Für große Stichprobenumfänge (n > 200) wird eine akzeptable PCS erreicht.

- Die Wahrscheinlichkeitsdichten/Verteilungsfunktionen der Lognormal- und WALD-Verteilung liegen sehr eng beieinander. Bei kleinen bis mittleren Stichprobenumfängen ist PCS(Ln) < PIS_{Ln}(Wa). Dies dürfte (ähnlicher zu den bzgl. Beispiel 4.2-2 vermerkten strukturellen Besonderheiten der Likelihood-Funktionen der Gamma- und WEIBULL-Verteilung) durch die Struktur der Likelihood-Funktion der WALD-Verteilung bedingt sein, die eine höhere "Flexibilität" der Anpassung an Besonderheiten von Stichproben bietet. Selbst für Stichproben mit n = 400 wird deshalb für die Lognormalverteilung nur eine PCS von 59% erreicht (bei PIS der WALD-Verteilung von 38%), wogegen bei Erzeugung der Stichproben mit n = 400 aus der WALD-Population PCS(Wa) bei 72,6% liegt (PIS_{Wa}(Ln) = 26,7%). Die Relevanz einer korrekten Unterscheidung zwischen Lognormal- und WALD-Population hängt von der konkreten Anwendung ab.

- Die Wahrscheinlichkeitsdichte/Verteilungsfunktion der WEIBULL-Verteilung verläuft entgegengesetzt zu den drei anderen Verteilungen. Demgemäß erreicht sie schon bei kleinen/mittleren Stichprobenumfängen eine ansprechende PCS. Wie auch ein Vergleich der Abbildungen 4-8a und 4-8d deutlich macht, bedingt ihre ausgeprägte "Flexibilität" aber auch relativ hohe PIC_{Ga}(We)-Werte.



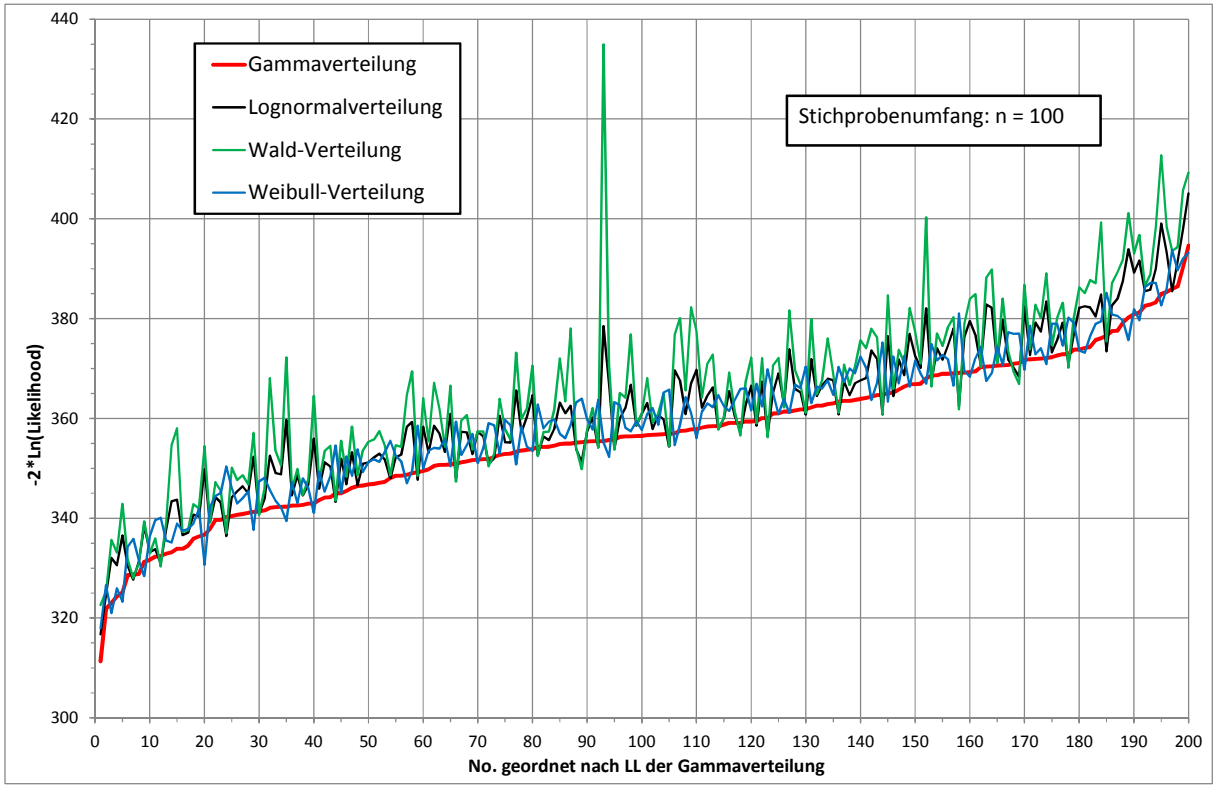
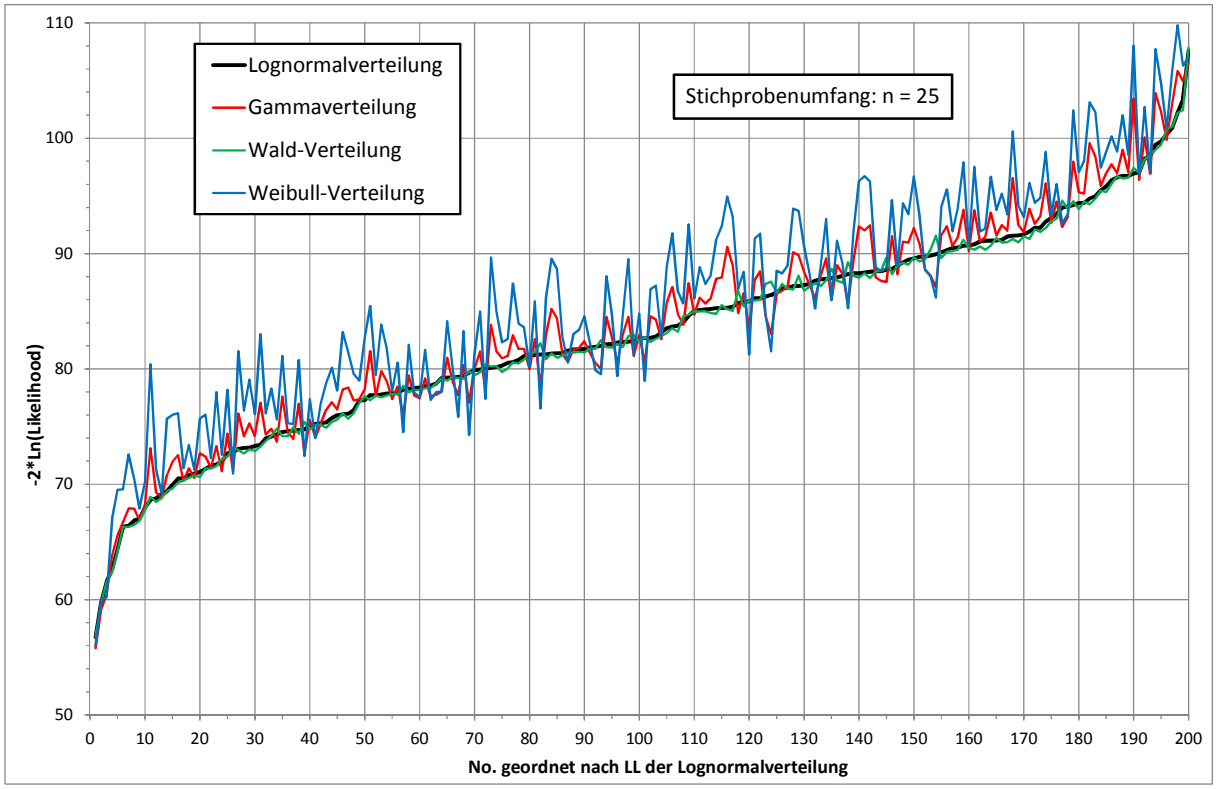


Abbildung 4-8a: Vergleich der Log-Likelihood-Werte nach Gl. (4-7) für Gamma-, Lognormal, WALD- und WEIBULL-Verteilung für 200 simulierte Stichproben aus der **Gamma-Population** mit Umfängen von n = 25 (oben) bzw. n = 200 (unten)



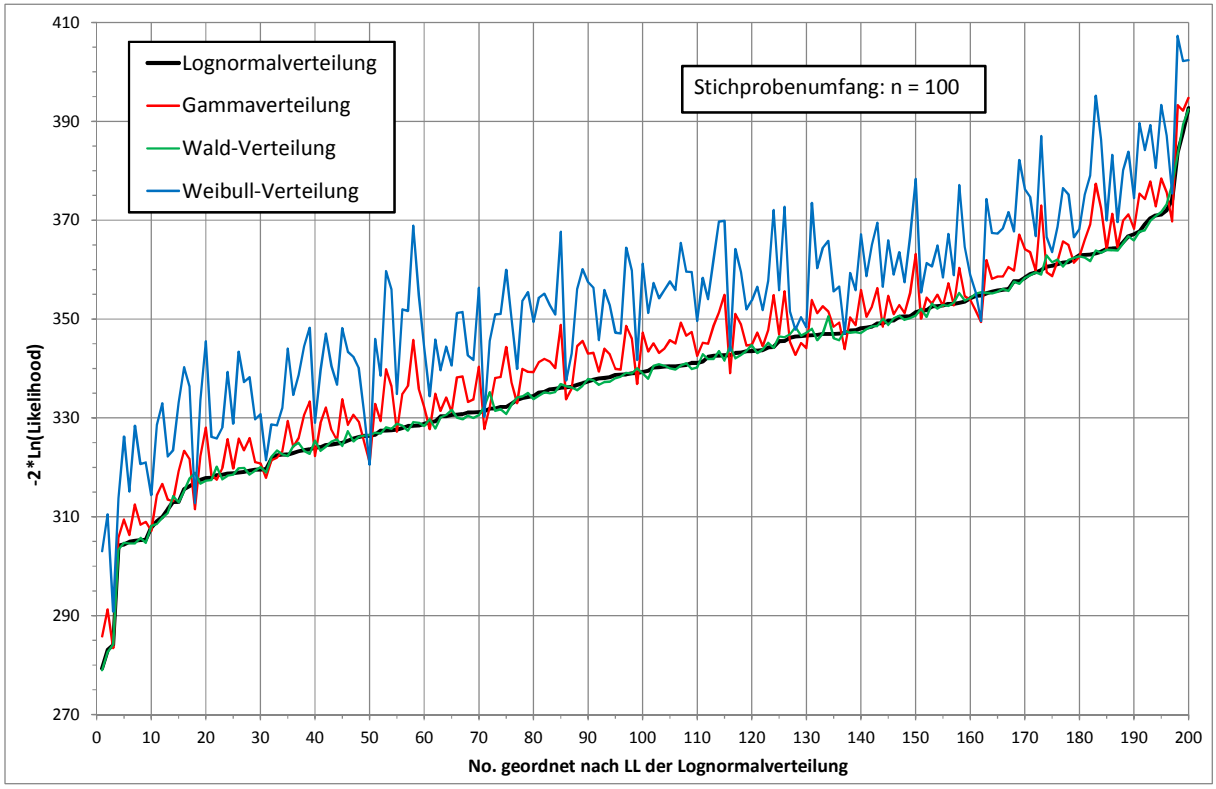
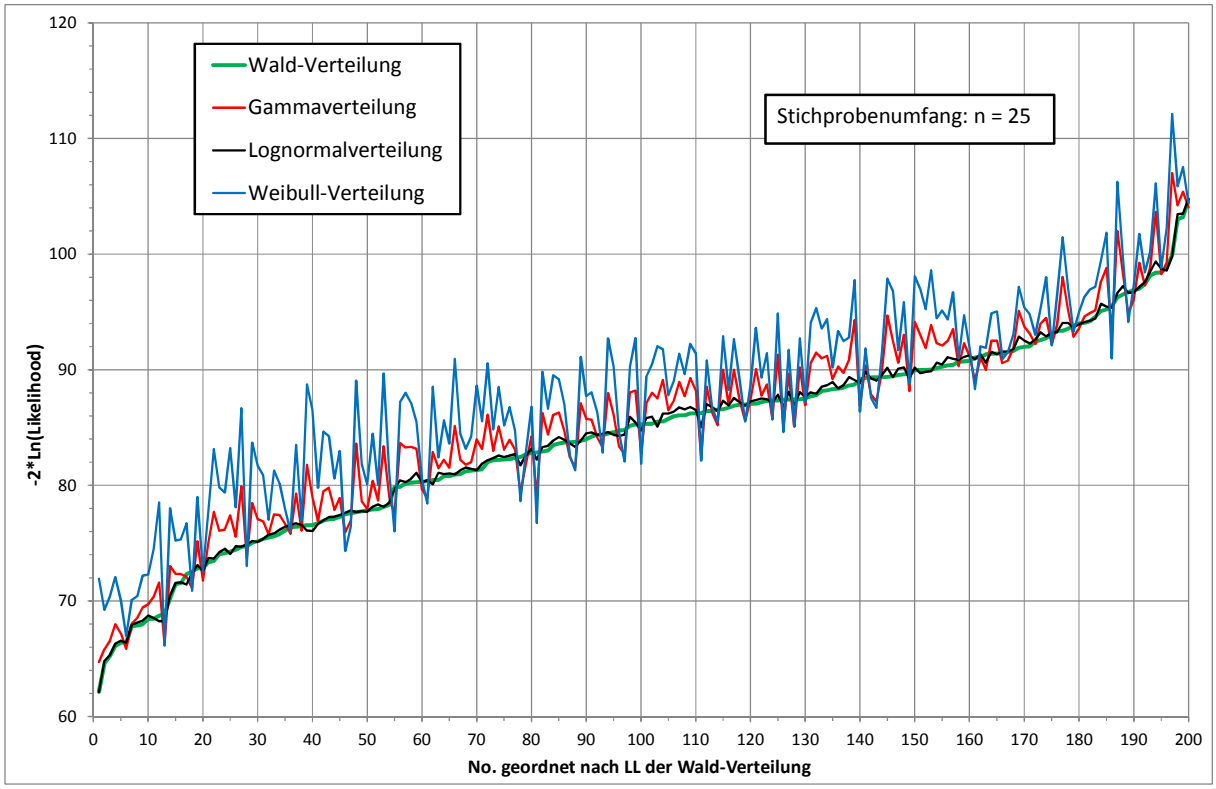


Abbildung 4-8b: Vergleich der Log-Likelihood-Werte nach Gl. (4-7) für Gamma-, Lognormal, WALD- und WEIBULL-Verteilung für 200 simulierte Stichproben aus **Lognormal-Population** mit Umfängen von n = 25 (oben) bzw. n = 200 (unten)



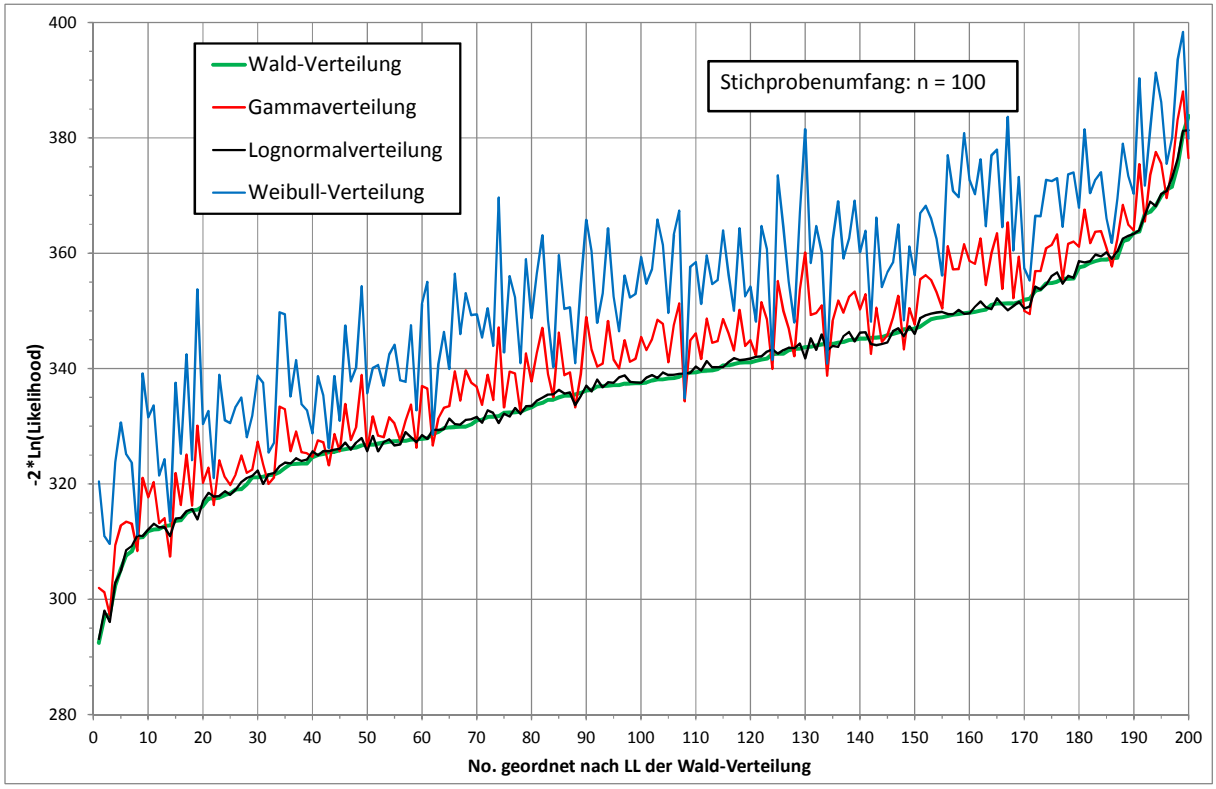
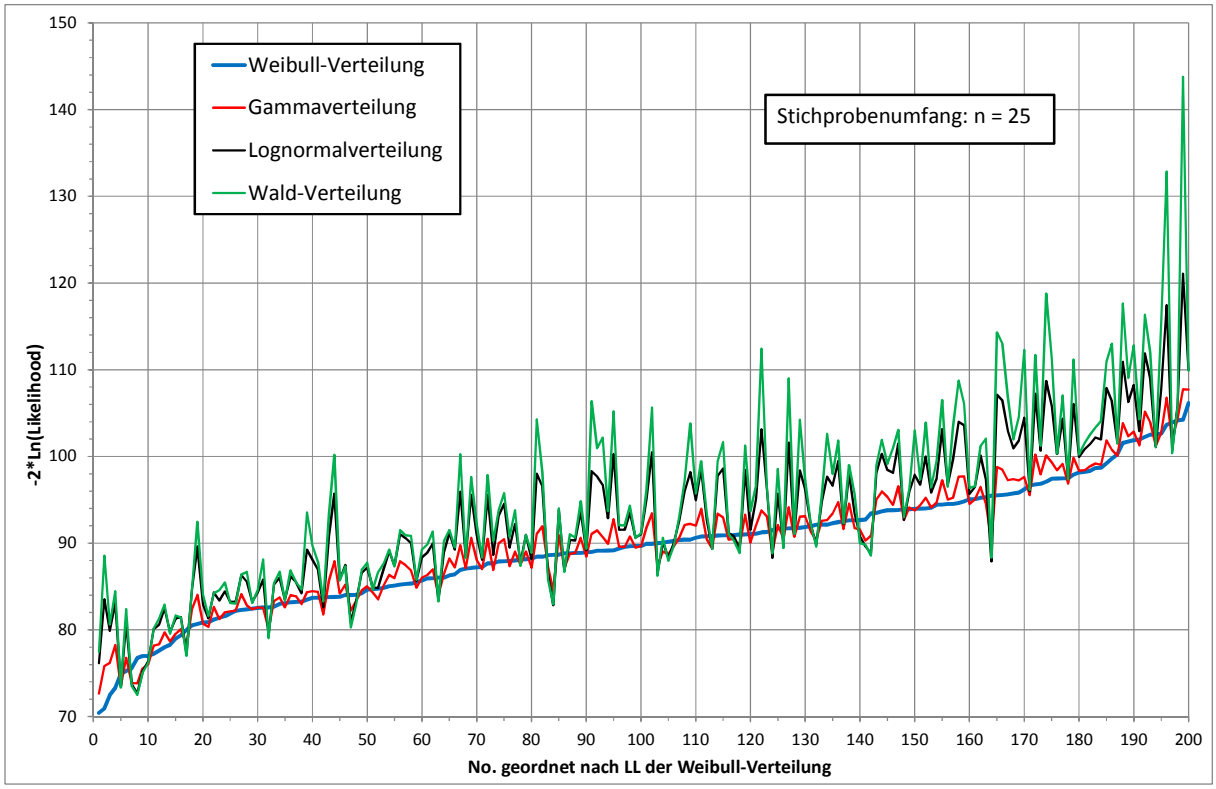


Abbildung 4-8c: Vergleich der Log-Likelihood-Werte nach Gl. (4-7) für Gamma-, Lognormal, WALD- und WEIBULL-Verteilung für 200 simulierte Stichproben aus der **WALD-Population** mit Umfängen von n = 25 (oben) bzw. n = 200 (unten)



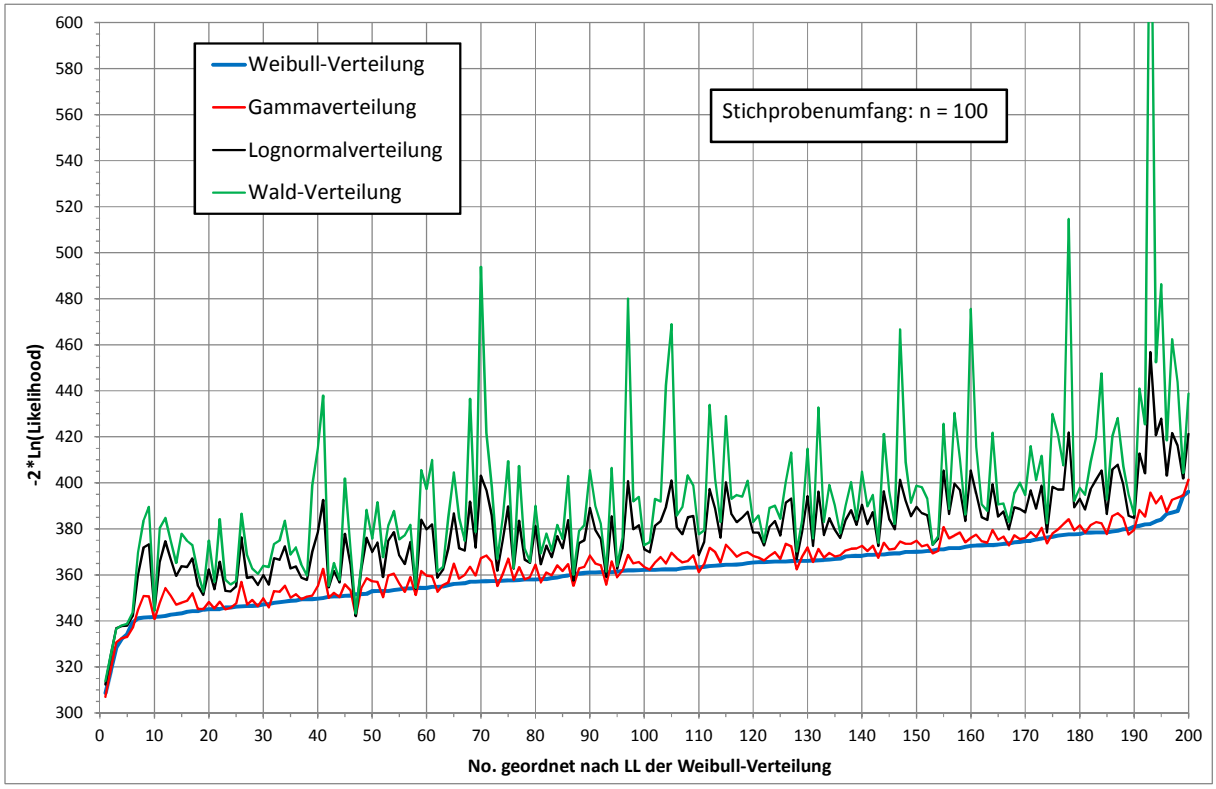


Abbildung 4-8d: Vergleich der Log-Likelihood-Werte nach Gl. (4-7) für Gamma-, Lognormal, WALD- und WEIBULL-Verteilung für 200 simulierte Stichproben aus **WEIBULL-Population** mit Umfängen von n = 25 (oben) bzw. n = 200 (unten)

Die Besonderheiten der WALD-Verteilung bei der Anpassung an Stichproben sind ein interessantes Problem, dessen genauere Untersuchung allerdings über den Rahmen des vorliegenden Berichts hinausgeht. Da die WALD-Verteilung durch stochastische Prozesse entstehen kann, die auch für die Modellierung der Schadstoffausbreitung in Umweltmedien geeignet sein können, sollte diese Thematik jedoch in weiterführenden Untersuchungen behandelt werden.

Die beiden nachfolgenden Beispiele verdeutlichen dieses Problem durch Vergleiche der PCS/PIS der WALD- und der Lognormalverteilung ohne den Einfluss weiterer Verteilungsfamilien bei der Identifikation anhand von Stichproben.

Beispiel 4.3-2

Zur Einschätzung einer nicht durch andere Verteilungen "gestörten" Entscheidung einer Zuordnung von Stichproben zur WALD- bzw. Lognormalverteilung wird in diesem Beispiel zunächst der Fall betrachtet, dass die Wahrscheinlichkeitsdichten/Verteilungsfunktionen beider Verteilungen fast identisch verlaufen. Mit den Verteilungsparametern für die Lognormal- und WALD-Verteilung aus Tabelle 4-6 resultieren für den direkten ("ungestörten") Vergleich der korrekten bzw. inkorrekten Selektion der beiden Verteilungen die in Tabelle 4-8 zusammengestellten Werte. Zu allen betrachteten Fällen wurden 10.000 zufällige Stichproben simuliert, für n =25 zum Erreichen einer ausreichenden Stabilität 100.000 Stichproben.

Tabelle 4-8: Vergleich der PCS bzw. PIS der Lognormal- und WALD-Verteilung bei Simulation von Stichproben mit den in Tabelle 4-6 für die jeweilige Population angegebenen Werten der Verteilungsparameter für Stichprobenumfänge n von 25 bis 400; Angaben **in Prozent**

	n = 25	**n = 50**	**n = 100**	**n = 200**	**n = 400**
	Erzeugung der Stichproben aus Lognormalverteilung X ~ Ln(μ,σ)				
PCS(Ln)	33,6	40,6	47,5	54,0	61,7
PIS_{Ln}(Wa)	66,4	59,4	52,5	46,0	38,3
	Erzeugung der Stichproben aus WALD-Verteilung X ~ Wa(μ,λ)				
PCS(Wa)	72,8	70,0	68,4	70,3	72,8
PIS_{Wa}(Ln)	27,2	30,0	31,6	29,7	27,2

Aus den in Tabelle 4-8 zusammengefassten Ergebnissen resultieren vier Schlussfolgerungen für den hier betrachteten Fall fast identisch verlaufender Wahrscheinlichkeitsdichten/Verteilungsfunktionen:

- Die PCS der Lognormalverteilung ist deutlich kleiner, insbesondere für kleine bis mittlere Stichprobenumfänge, als die PCS der WALD-Verteilung.
- Die PCS der Lognormalverteilung steigt kontinuierlich mit Zunahme des Stichprobenumfangs an, erreicht jedoch auch bei n = 400 nur einen Wert von 61,7%.
- Die PCS der WALD-Verteilung liegt im gesamten Bereich der betrachteten Stichprobenumfänge bei ca. 70%, wobei für n = 100 ein Minimum festzustellen ist. Für n = 400 werden 72,8% erreicht.
- Selbst bei sehr großen Stichprobenumfängen von n = 400 ist noch keine sichere Identifikation der Population möglich, aus der die Stichproben erzeugt wurden. Der Fehler 2. Art liegt bei n = 400 für die Lognormalverteilung bei 27,2% und für die WALD-Verteilung bei 38,3%.

Beispiel 4.1-2

Zur Einschätzung einer nicht durch andere Verteilungen "gestörten" Entscheidung einer Zuordnung von Stichproben zur WALD- bzw. Lognormalverteilung wird hier die in [BARTL 63], [BAIN 80] angegebene Stichprobe (n = 128) zum zeitlichen Abstand des Passierens eines Straßenmesspunktes durch aufeinander folgende Autos zugrunde gelegt, für die sich die angepassten Wahrscheinlichkeitsdichten der Lognormal- bzw. WALD-Verteilung deutlich unterscheiden. Im Unterschied zum Beispiel 4.1-1 wurde hier jedoch die Anpassung der jeweiligen Populationsparameter durch Gleichsetzung mit dem Mittelwert (15,81) und der Varianz (561,6) der Stichprobe vorgenommen. Daraus resultieren folgende Populationsparameter:

- $X \sim Ln(\mu,\sigma)$: $\mu = 2{,}172$; $\sigma = 1{,}085$;
- $X \sim Wa(\mu,\lambda)$: $\mu = 15{,}81$; $\lambda = 7{,}035$.

Die Abbildung 4-9a zeigt die resultierenden Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen; in der Abbildungen 4-9b sind vergrößerte Ausschnitte zu den Verteilungsfunktionen für große bzw. kleine Quantile dargestellt. Die relativen Abweichungen erreichen für kleine Quantile 20% für das 0,02-Quantil bzw. 30% für das 0,01-Quantil. Im Bereich der großen Quantile (0.95- bis 0,98-Quantil) liegen die relativen Abweichungen bei ca. 10%.

Mit den o. g. Verteilungsparametern zur Lognormal- und WALD-Verteilung resultieren für den direkten ("ungestörten") Vergleich der korrekten bzw. inkorrekten Selektion der beiden Populationen die in der Tabelle 4-9 zusammengestellten Werte. Zu allen betrachteten Fällen wurden 10.000 zufällige Stichproben simuliert; für n =25 und n = 50 zum Erreichen einer ausreichenden Stabilität 100.000 Stichproben. Neben den Stichprobenumfängen von n = (25, 50, 100, 200, 400) wurde auch der Umfang der diesem Beispiele zugrunde liegenden Stichprobe von n = 128 betrachtet, um den Fehler 1. und 2. Art der in Beispiel 4-1 getroffenen Auswahl zu beurteilen.

Tabelle 4-9: PCS bzw. PIS der Lognormal- und WALD-Verteilung bei Simulation von Stichproben aus den an Erwartungswert und Varianz der Stichprobe aus [BARTL 63]/[BAIN 80] angepassten Populationen für Stichprobenumfänge n von 25 bis 400; Angaben **in Prozent**

	n = 25	**n = 50**	**n = 100**	**n = 128**	**n = 200**	**n = 400**
	Erzeugung der Stichproben aus Lognormalverteilung $X \sim Ln(\mu,\sigma)$					
PCS(Ln)	50,2	63,1	76,2	**81,7**	88,7	96,6
$PIS_{Ln}(Wa)$	49,8	36,9	23,8	**18,3**	11,3	3,4
	Erzeugung der Stichproben aus WALD-Verteilung $X \sim Wa(\mu,\lambda)$					
PCS(Wa)	79,3	82,6	87,9	**90,5**	94,1	97,9
$PIS_{Wa}(Ln)$	20,7	17,4	12,1	**9,5**	5,9	2,1

Anmerkungen zu den in Tabelle 4-9 zusammengefassten Ergebnissen:

- Die PCS nimmt für beide Populationen mit dem Stichprobenumfang n kontinuierlich zu, wobei der Stichprobenumfang n für eine ausreichend sichere Identifikation der Population zwischen 200 und 400 liegen sollte.
- Für die in Beispiel 4.1-1 genannte Zuordnung der Stichprobe aus [BARTL 63], [BAIN 80] zu einer WALD-Population resultieren Wahrscheinlichkeiten von 9,5% zum Fehler 1. Art und von 18,3% für den Fehler 2. Art (bei Annahme Lognormal-Population: umgekehrte Fehlerwahrscheinlichkeiten).

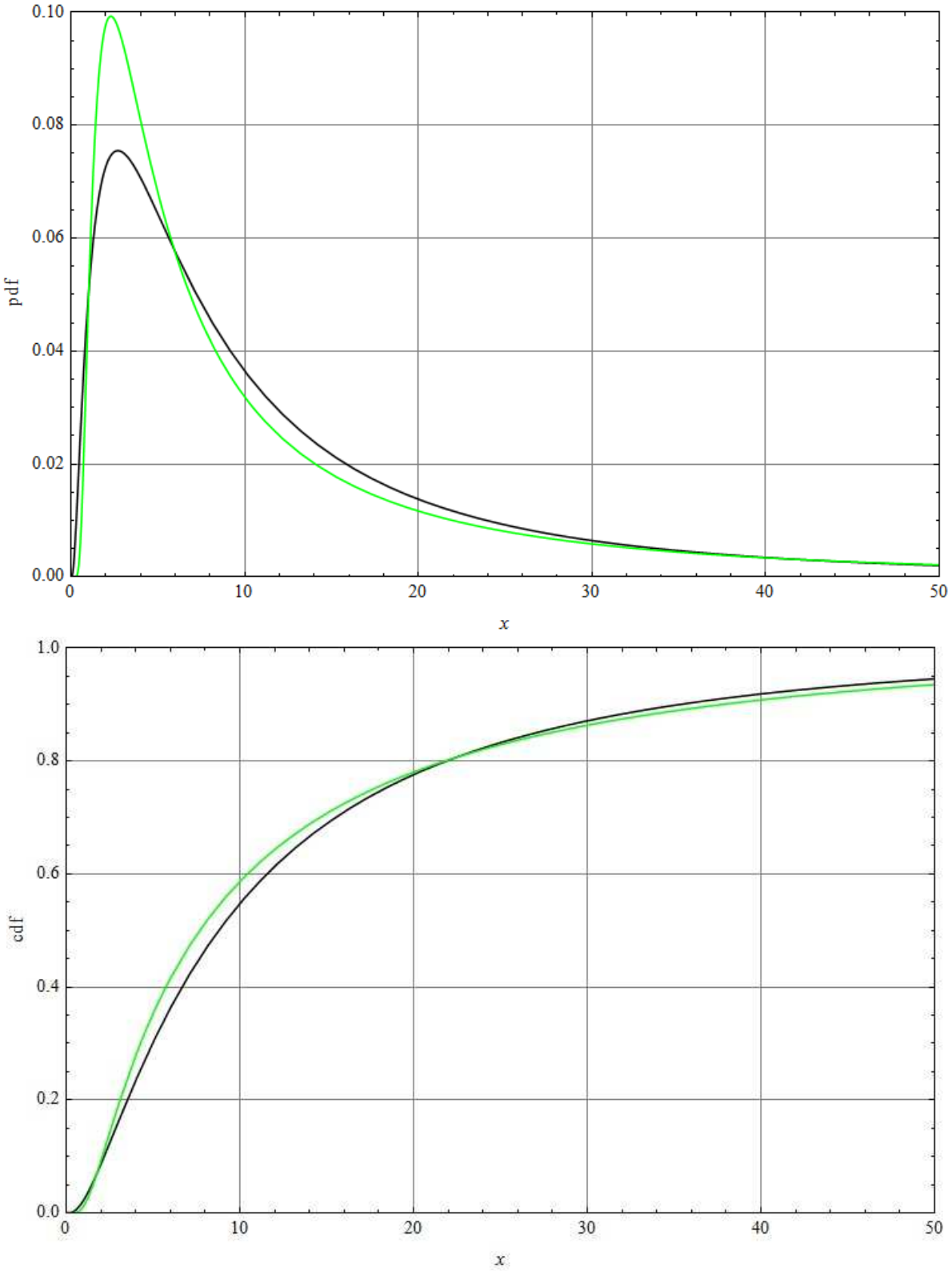


Abbildung 4-9a: Wahrscheinlichkeitsdichte (oben) und Verteilungsfunktion (unten) der Lognormalverteilung (schwarz) und WALD-Verteilung (grün) zum Beispiel 4.1-2

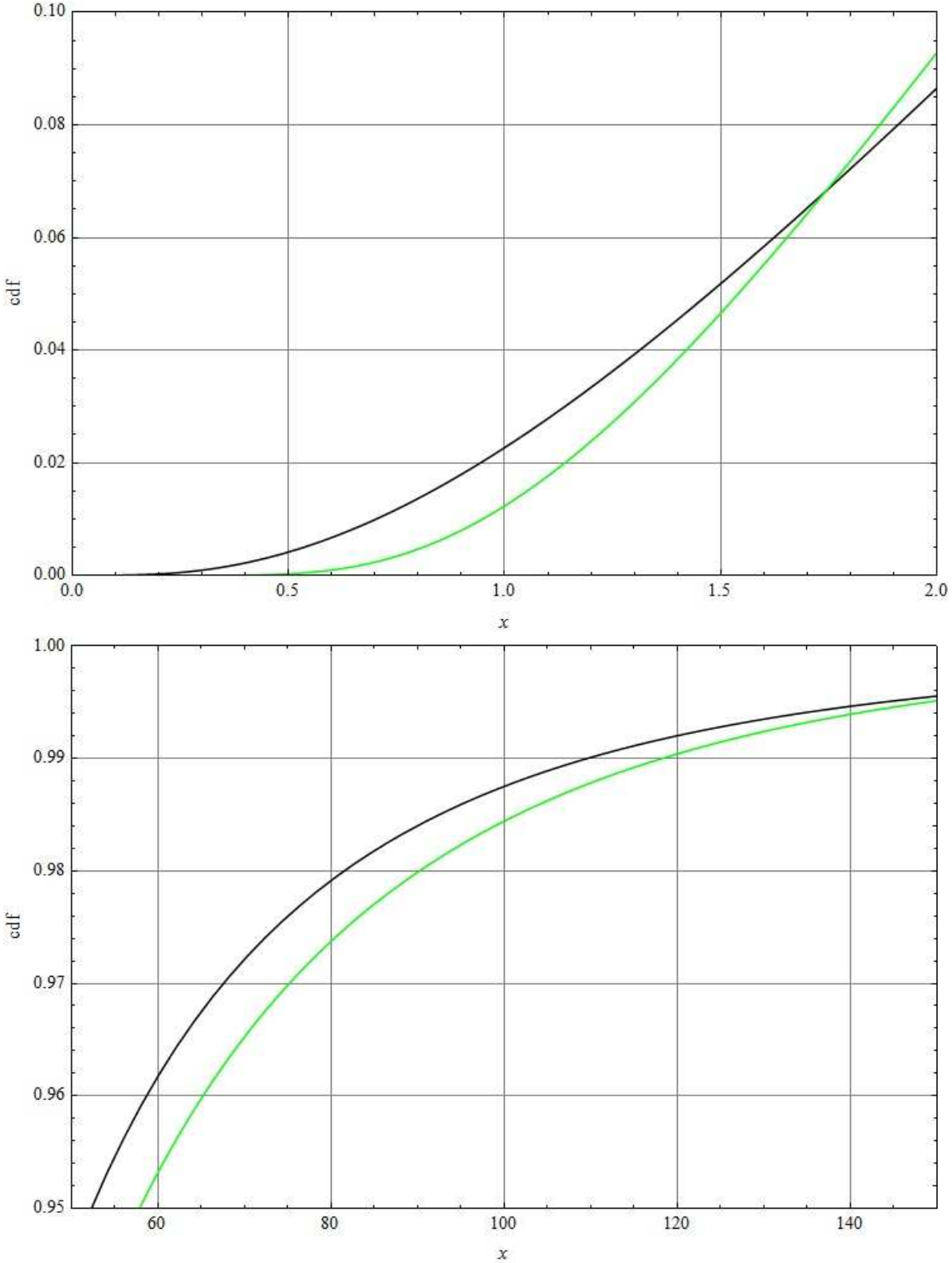


Abbildung 4-9b: Bereiche kleiner (oben) bzw. hoher (unten) Perzentile der Verteilungsfunktion für die Lognormalverteilung (schwarz) und WALD-Verteilung (grün) zum Beispiel 4.1-2

Das Beispiel 4.1-2 hat gezeigt, wie die am Anfang dieses Abschnitts unter Punkt 4 aufgeworfene Frage gelöst werden kann. Aus den Ergebnissen der vorherigen Beispiele ist dbzgl. jedoch auch klar geworden, dass die Antwort auf diese Frage nicht allgemein formuliert werden kann, sondern von den (unbekannten) statistischen Eigenschaften der beprobten Population sowie von Anzahl und Art der für eine Untersuchung berücksichtigten Verteilungsfamilien abhängt.

Selektion einer Verteilung mit dem AKAIKE-Informations-Kriterium

Die zu Beginn dieses Abschnitts unter Punkt 3 angesprochene Problematik wird nachfolgend am Beispiel der Unterscheidung von Exponential- und LOMAX-Verteilung diskutiert. Letztere entsteht durch Mittelung von Exponentialverteilungen, wenn für deren Parameter λ kein fester Wert angenommen wird, sondern dieser selbst als unsichere Größe betrachtet wird, die durch eine Gammaverteilung beschrieben werden kann (siehe Abschnitt C.3.6 im Anhang C).

Beispiel 4.4

Für diesen Vergleich werden Stichproben aus zwei Populationen analysiert; die Exponentialverteilung $X \sim Ex(\lambda)$ mit $\lambda = 1$ sowie die LOMAX-Verteilung $X \sim Lox(\alpha,\lambda)$ mit $\lambda = 1$ und $\alpha = 5$. Die unterschiedlichen Verläufe der Verteilungsfunktionen dieser beiden Verteilungen sind aus Abbildung C-7 (siehe Anhang C) ersichtlich. Abbilddung 4-10 zeigt ihre Wahrscheinlichkeitsdichten. Für die beiden Populationen wurden je 1000 zufällige Stichproben mit Umfängen von n = (25, 50, 100, 200, 400) erzeugt und mit dem A-D-Test, dem LL-Test sowie dem AIC-Test bzgl. ihrer Zuordnung zu einer der beiden Verteilungsarten geprüft. Anmerkung: Mit dem A-D-Test kann auch die Zuordnung einer Stichprobe zu einer der beiden Verteilungsart nach Festlegung einer Wahrscheinlichkeit für den Fehler 1. Art abgelehnt werden. Dies wurde hier nicht getan; es wurde – wie beim LL- und AIC-Test - nur die Differenz der Statistiken für die beiden Verteilungsarten als Entscheidungskriterium betrachtet.

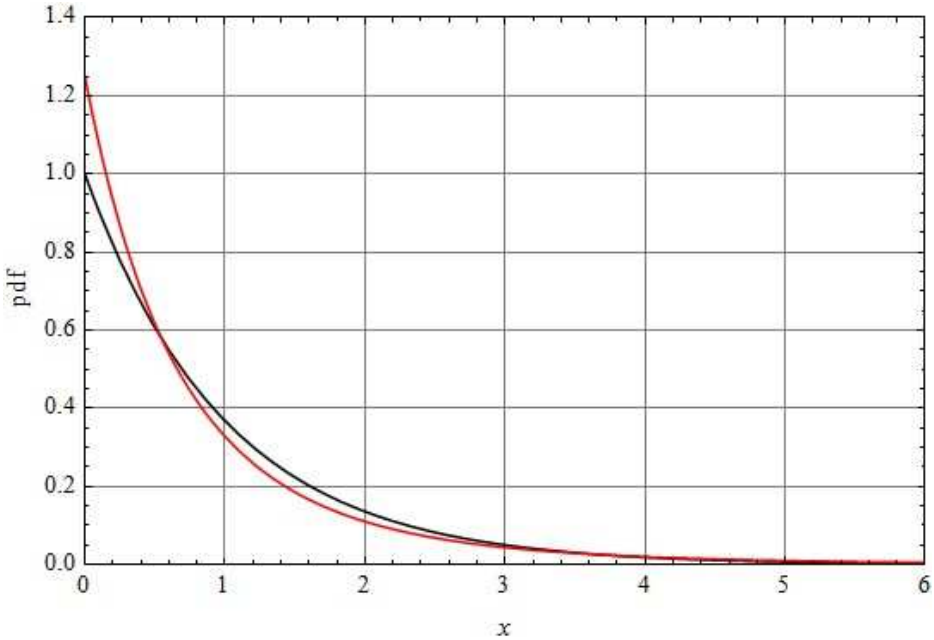


Abbildung 4-10: Wahrscheinlichkeitsdichten der Exponentialverteilung $X \sim Ex(1)$ (schwarz) und der LOMAX-Verteilung $X \sim Lox(5,1)$ (rot).

Die auf diese Weise für die beiden Verteilungsarten berechneten Wahrscheinlichkeiten der korrekten Selektion (PCS) sind in Tabelle 4-10 zusammengestellt. Die Differenz zu 100% entspricht der PIS für die jeweils andere Verteilungsart.

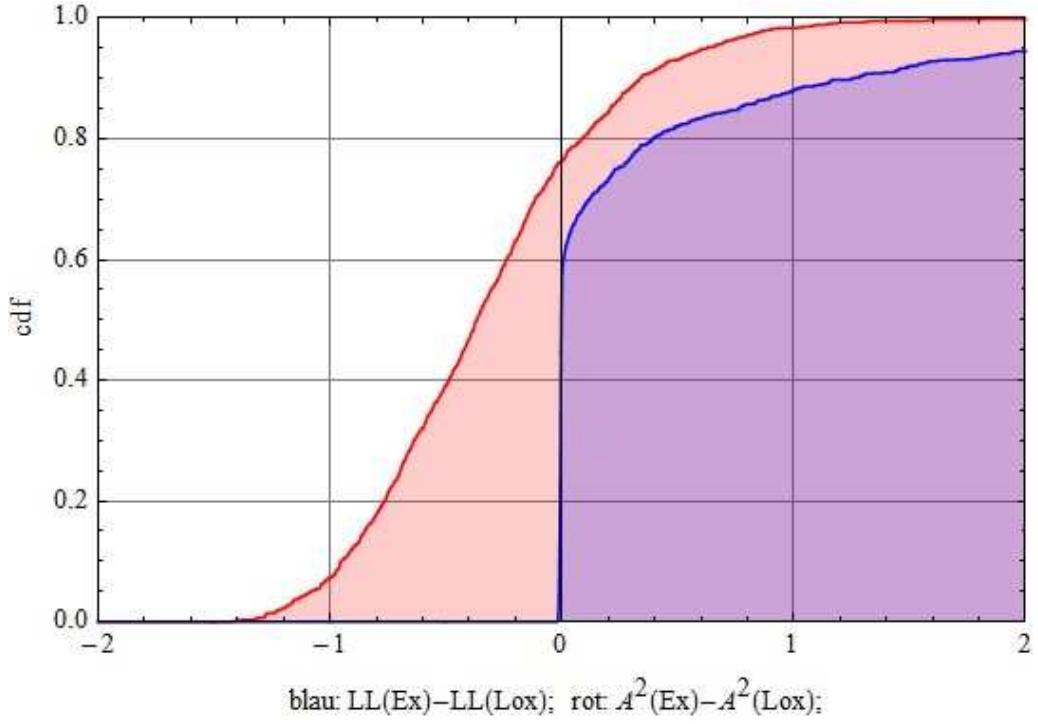
Tabelle 4-10: PCS der Exponentialverteilung bzw. LOMAX-Verteilung bei Simulation von Stichproben aus jeweils einer der beiden Verteilungsarten und Selektion nach A-D-Test, LL-Test bzw. AIC-Test für unterschiedliche Stichprobenumfänge n; Angaben **in Prozent**

Parameter	**Methode**	**n = 25**	**n = 50**	**n = 100**	**n = 200**	**n = 400**
	Erzeugung der Stichproben aus Exponentialverteilung X ~ Ex(1)					
PCS(Ex)	**A-D-Test**	67	71	76	85	94
	LL-Test	68	64	57	56	56
	AIC-Test	96	95	95	94	94
	Erzeugung der Stichproben aus Lomax-Verteilung X ~ Lox(5,1)					
PCS(Lox)	**A-D-Test**	36	48	59	74	90
	LL-Test	58	77	89	97	100
	AIC-Test	20	37	60	82	97

Aus den Angaben von Tabelle 4-10 folgt, dass keine eindeutige Entscheidung zur Wahl eines geeigneten Testverfahrens getroffen werden kann. Ihre Vor- bzw. Nachteile hängen erheblich davon ab, aus welcher der betrachteten Verteilungsarten die Stichproben tatsächlich stammen und wie groß ihr Umfang ist. Zur Anwendung der drei Auswahlkriterien ergeben sich folgende Anmerkungen:

- Die PCS des A-D-Tests steigt für beide Verteilungsarten monoton mit dem Stichprobenumfang n, es werden aber sehr große Stichprobenumfänge (n > 200) benötigt, um mit diesem Test eine hinreichend zuverlässige Entscheidung treffen zu können.
- Der LL-Test bietet für eine Entscheidung zwischen Exponential- und LOMAX-Verteilung keine zuverlässige Basis, da er für Populationen, die einer Exponentialverteilung folgen, keinen Anstieg der PCS mit dem Stichprobenumfang zeigt. Ein weiterer Nachteil das LL-Tests besteht zudem darin, dass seine Statistik im Entscheidungsbereich fast sprungartig verläuft (siehe hierzu Abbildung 4-11).
- Die PCS des AIC-Tests ist im Fall der Exponentialverteilung zwar für alle Stichprobenumfänge relativ hoch, steigt aber nur für die LOMAX-Population mit dem Stichprobenumfang monoton an, wobei hier für kleinere Stichprobenumfänge eine sehr geringe PCS festzustellen ist.

Für ausreichend große Stichproben mit Umfängen von n > 200 liefern sowohl der A-D-Test als auch der AIC-Test nach den vorliegenden Testrechnungen eine akzeptable PCS für die Unterscheidung zwischen der LOMAX- und der Exponentialverteilung. Beide Kriterien können entsprechend (ggf. kombiniert) genutzt werden. Für kleine bzw. mittlere Stichprobenumfänge (n < 100) dürfte dagegen eine hinreichend sichere Unterscheidung der beiden Verteilungsarten kaum möglich sein.



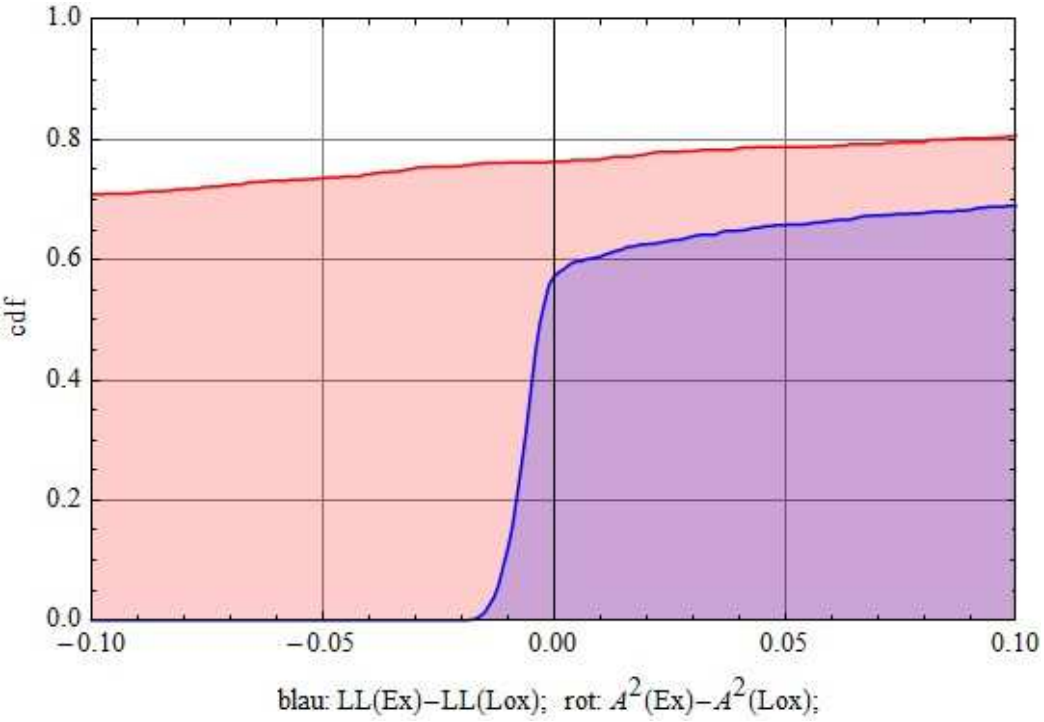
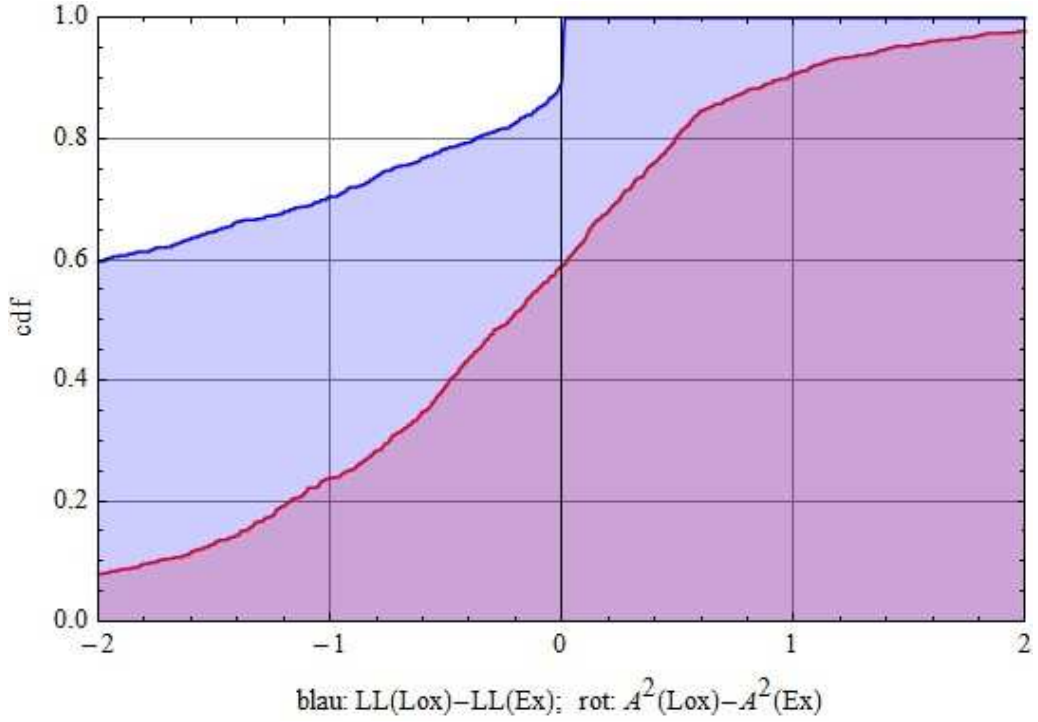


Abbildung 4-11a: Statistik des A-D-Tests und des LL-Tests für Stichproben aus Exponentialverteilung X ~ Ex(1) mit Stichprobenumfang n = 100. Das untere Bild ist eine Vergrößerung des Entscheidungsbereichs. Die PCS für den AIC-Test lässt sich aus dem oberen Bild an der rechten Diagrammseite ablesen (Verschiebung des LL-Tests um Werte von -2).



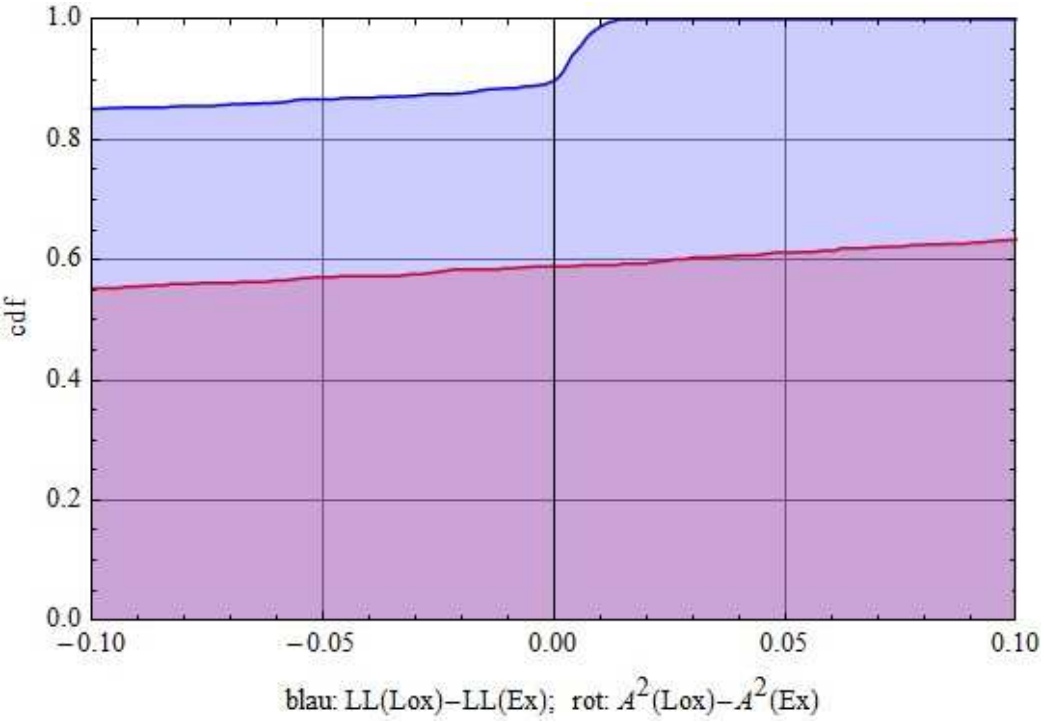


Abbildung 4-11b: Statistik des A-D-Tests und des LL-Tests für Stichproben aus LOMAX-Verteilung X ~ Lox(5,1) mit Stichprobenumfang n = 100. Das untere Bild ist eine Vergrößerung des Entscheidungsbereichs. Die PCS für den AIC-Test lässt sich aus dem oberen Bild an der linken Diagrammseite ablesen (Verschiebung des LL-Tests um Werte von 2).

4.1.4.3. Auswahl von Verteilungsfamilien für beidseitig begrenzte Zufallsgrößen

Für Zufallsgrößen, die beidseitig begrenzt sind, ist die Betaverteilung $X \sim Bt(\alpha,\beta)$ ein üblicher Ansatz, da mit ihr sehr flexibel verschiedenste Formen links- und rechtssteiler bzw. symmetrischer Wahrscheinlichkeitsdichten modelliert werden können. Für den gleichen Zweck können jedoch auch einige andere Verteilungsfamilien genutzt werden, die insbesondere bzgl. der Schätzung der Verteilungsparameter anhand von Stichproben bzw. auch für die Berücksichtigung von statistischen Unsicherheiten dieser Schätzungen (siehe Abschnitt 4.2.2) gewisse Vorteile aufweisen.

Die nachfolgenden Darlegungen dieses Abschnitts beschränken sich auf den Fall einer bekannten Begrenzung der Zufallsgröße X auf das Intervall [0, 1]. Dieser Fall betrifft z. B. die Modellierung von Expositionsfaktoren, die einem Anteil einer bestimmten Größe entsprechen.

In der Abbildung C-9 (siehe Anhang C) sind verschiedenen Verläufe der Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion der Betaverteilung dargestellt, mit denen beispielhaft die Eignung dieser Verteilungsfamilie für die Modellierung von sehr unterschiedlichen Verteilungsformen demonstriert wurde; mit $X \sim Bt(\alpha, \beta)$ für $\alpha = 2$ und $\beta = (1/2, 1, 2, 5, 10)$. Die Erwartungswerte und Varianzen dieser 5 Verteilungen ergeben sich aus Gl. (C-53). Die Abbildungen 4-12, 4-13 und 4-14 zeigen für einen Vergleich die Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen der KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$, JOHNSON-S_B-Verteilung $X \sim JS_B(\gamma,\delta)$ sowie Log-PEARSON-3-Verteilung $X \sim LP3(\alpha,\lambda)$, deren Parameter an die fünf. o. g. Betaverteilungen durch Gleichsetzung von Erwartungswert und Varianz angepasst wurden, sowie die jeweiligen Betaverteilungen. Während in den Wahrscheinlichkeitsdichten zumindest teilweise noch Abweichungen von den Verläufen der Betaverteilungen zu erkennen sind, lässt die sehr gute Übereinstimmung der Verteilungsfunktionen darauf schließen, dass in diesen Fällen eine Identifikation der "wahren" Population anhand von Stichproben kaum bzw. nur für extrem große Stichprobenumfängen möglich ist.

Die Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) einer Verteilungsfamilie aus verschiedenen in Betracht zu ziehenden, konkurrierenden Verteilungsfamilien wird weitgehend analog zu den in Abschnitt 4.1.4.2 bzgl. der Auswahl statistischer Verteilungen für positiv definierte Zufallsgrößen ausführlich diskutierten Einflussfaktoren bestimmt, insbesondere durch

- die konkreten Verteilungsparameter der Population, aus der die Stichprobe stammt,
- Anzahl und Arten der in den Vergleich einbezogenen Verteilungsfamilien,
- den Stichprobenumfang sowie
- das für die Auswahl zugrunde gelegte Testverfahren.

Infolge der Begrenzung der im vorliegenden Abschnitt betrachten Zufallsgrößen auf das Intervall [0, 1] sind die Unterschiede zwischen den o. g. vier Verteilungsfamilien i. A. kleiner als bei den in Abschnitt 4.1.2.2 betrachteten positiv definierten Zufallsgrößen. Dies wirft natürlich die Frage auf, welche Relevanz eine ggf. "inkorrekte" Selektion einer bestimmten Verteilungsfamilie für damit durchzuführende probabilistische (Expositions-)Modellrechnungen hat. Insbesondere könnten sich unterschiedliche statistische Unsicherheiten der Parameterschätzungen auswirken, worauf in Abschnitt 4.2.3 näher eingegangen wird. Hier sei zur Selektion von Verteilungsfamilien für beidseitig begrenzte Zufallsgrößen nur ein einfaches Demonstrationsbeispiel betrachtet.

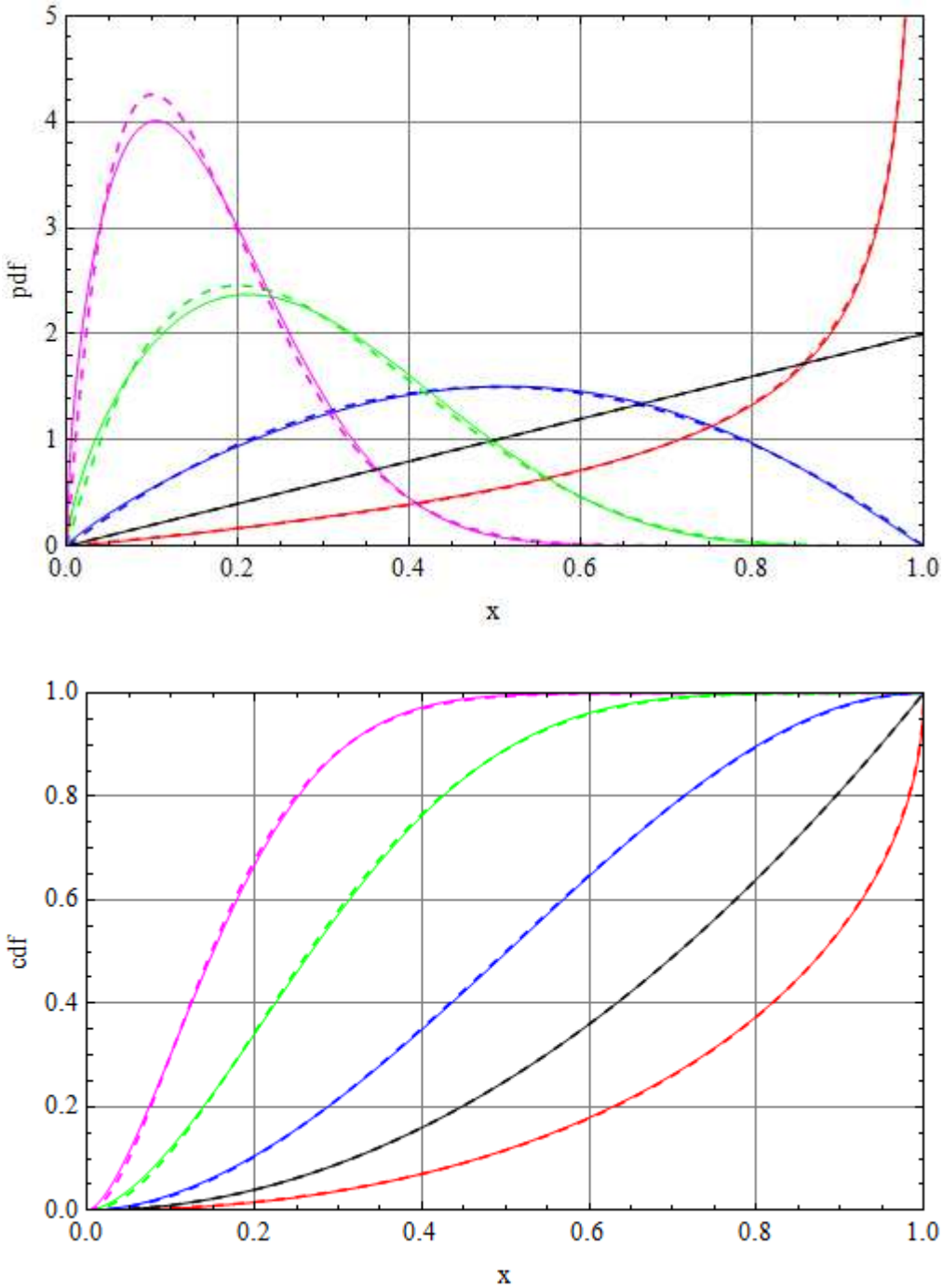


Abbildung 4-12: Vergleich von KUMARASWAMY-Verteilungen $X_{Ku} \sim Ku(\alpha_{Ku}, \beta_{Ku})$ mit Betaverteilungen $X_{Bt} \sim Bt(\alpha_{Bt}, \beta_{Bt})$ aus Abbildung C-9 (hier: gestrichelt) bei Anpassung der Parameter $\{\alpha_{Ku}, \beta_{Ku}\}$ durch $E_{Ku}[X_{Ku}] = E_{Bt}[X_{Bt}]$ und $Var_{Ku}[X_{Ku}] = Var_{Bt}[X_{Bt}]$; angepasste Wertepaare $\{\alpha_{Ku}, \beta_{Ku}\}$: {2,1525, 0,48752} (rot), {2, 1} (schwarz), {1,8376, 2,0938} (blau), {1,6596, 5,8327} (grün) und {1,5693, 13,2404} (magenta); oberes Bild: Wahrscheinlichkeitsdichte; unteres Bild: Verteilungsfunktion

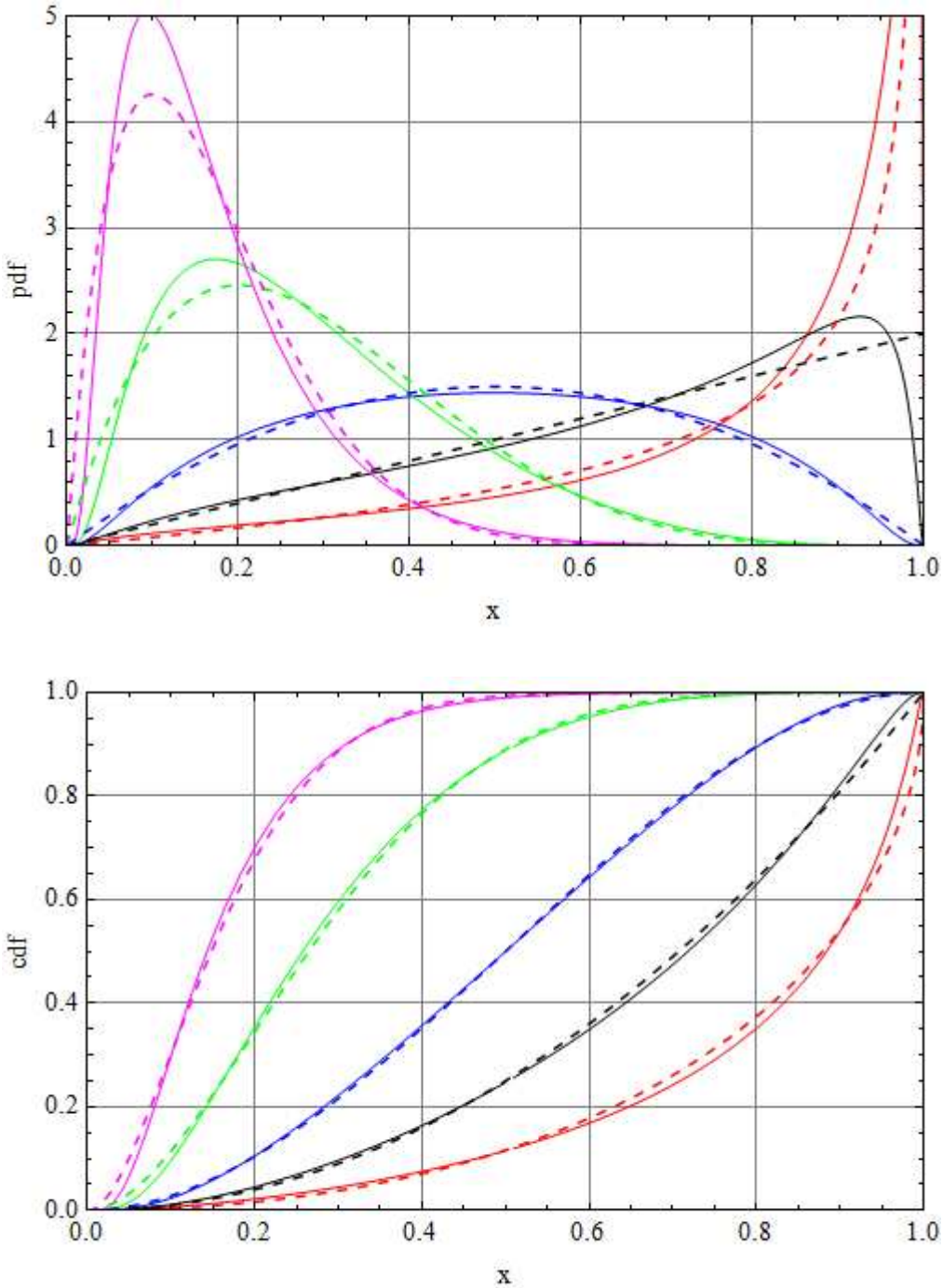


Abbildung 4-13: Vergleich von JS_B-Verteilungen $X_{JSB} \sim JS_B(\gamma,\delta)$ mit Betaverteilungen $X_{Bt} \sim Bt(\alpha, \beta)$ aus Abbildung C-9 (hier: gestrichelt) bei Anpassung der beiden Parameter $\{\gamma, \delta\}$ durch Gleichsetzung der Erwartungswerte, $E_{JSB}[X_{JSB}] = E_{Bt}[X_{Bt}]$, sowie der Varianzen beider Verteilungsfamilien, $Var_{JSB}[X_{JSB}] = Var_{Bt}[X_{Bt}]$; die angepassten Wertepaare von $\{\gamma, \delta\}$ sind: {-1,2004, 0,59054} (rot), {-0,68368, 0,73134} (schwarz), $\{3{,}74 \cdot 10^{-9}$, 0,90375} (blau), {1,2149, 1,1455} (grün) und {2,3316, 1,3009} (magenta); oberes Bild: Wahrscheinlichkeitsdichte; unteres Bild: Verteilungsfunktion

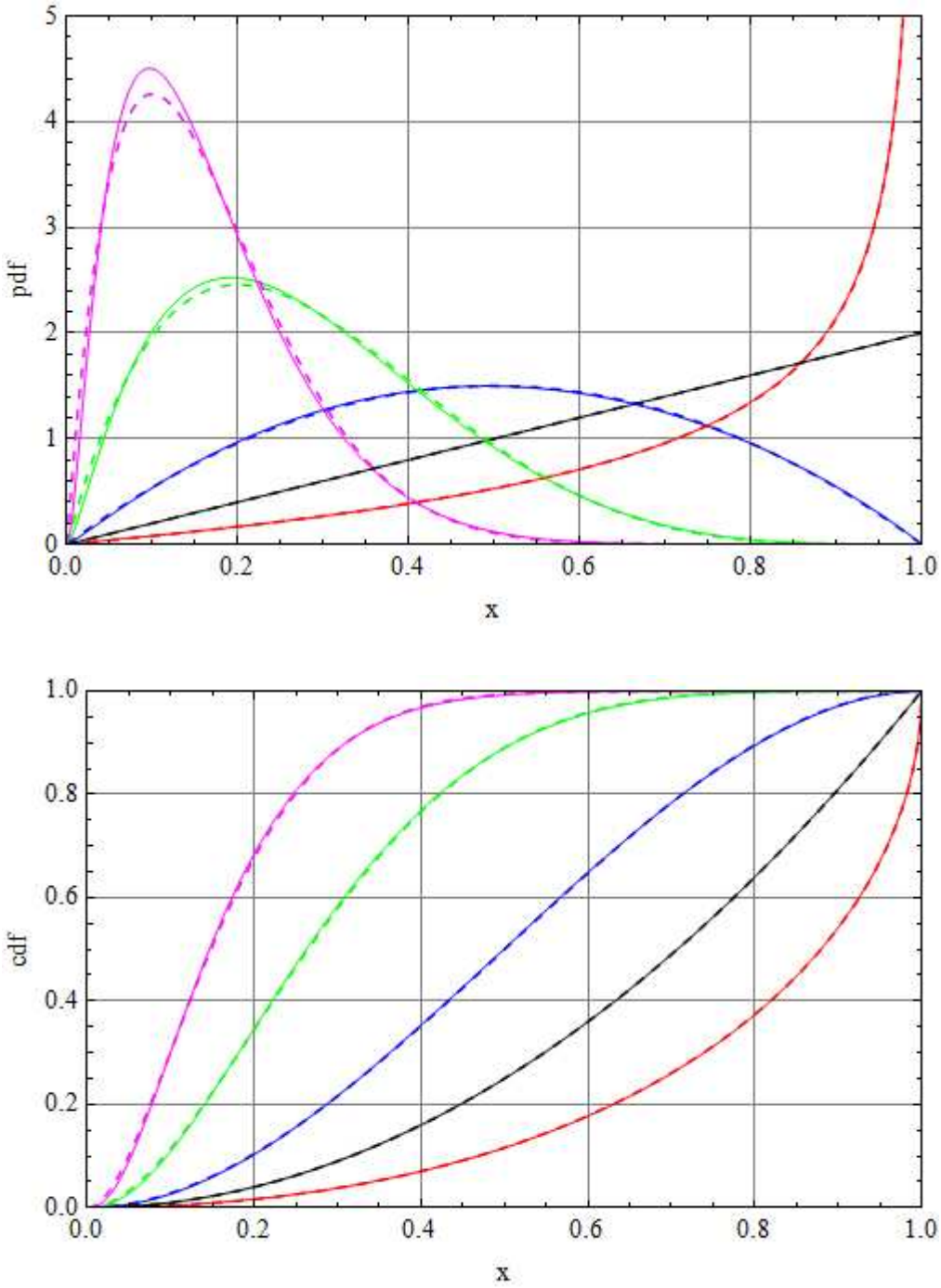


Abbildung 4-14: Vergleich von LP3-Verteilungen $X_{LP3} \sim LP3(\alpha, \lambda)$ mit den Betaverteilungen $X_{Bt} \sim Bt(\alpha_{Bt}, \beta_{Bt})$ aus Abbildung C-9 (hier: gestrichelt) bei Anpassung der beiden Parameter $\{\alpha, \lambda\}$ durch Gleichsetzung der Erwartungswerte, $E_{LP3}[X_{LP3}] = E_{Bt}[X_{Bt}]$, sowie der Varianzen beider Verteilungsfamilien, $Var_{LP3}[X_{LP3}] = Var_{Bt}[X_{Bt}]$; die angepassten Wertepaare von $\{\alpha, \lambda\}$ sind: {0,50521, 1,7964} (rot), {1, 2} (schwarz), {1,9571, 2,3529} (blau), {4,5410, 3,1478} (grün) und {8,1006, 4,0394} (magenta); oberes Bild: Wahrscheinlichkeitsdichte; unteres Bild: Verteilungsfunktion

Beispiel 4.5

Zur Veranschaulichung der Schwierigkeit, aus mehreren ähnlichen, auf dem Intervall [0, 1] definierten Verteilungen anhand von Stichproben die erzeugende Population zu identifizieren, wurden zufällige Stichproben mit Umfängen n = (25, 50, 100, 200, 400) aus der Betaverteilung X ~ Bt(5, 10) simuliert und die Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) mit Hilfe des LL-Tests über je 10000 Simulationen berechnet. Als "Konkurrenten" wurden die JOHNSON-S_B und die KUMARASWAMY-Verteilung betrachtet. Wie aus Abbildung 4-15 ersichtlich, verläuft die Wahrscheinlichkeitsdichte der Betaverteilung zwischen den Wahrscheinlichkeitsdichten der zwei anderen Verteilungen, deren Parameter durch Gleichsetzung des Erwartungswertes und der Varianz angepasst sind. Diese Konstellation erschwert eine Identifikation der Betaverteilung als erzeugende Population. Die PCS-Werte für die Betaverteilung und die PIS-Werte für die beiden anderen Verteilungen sind in Tabelle 4-11 angegeben. Nach diesen Ergebnissen ist die Beta-Population selbst für Stichprobenumfänge von n = 400 noch nicht sicher identifizierbar.

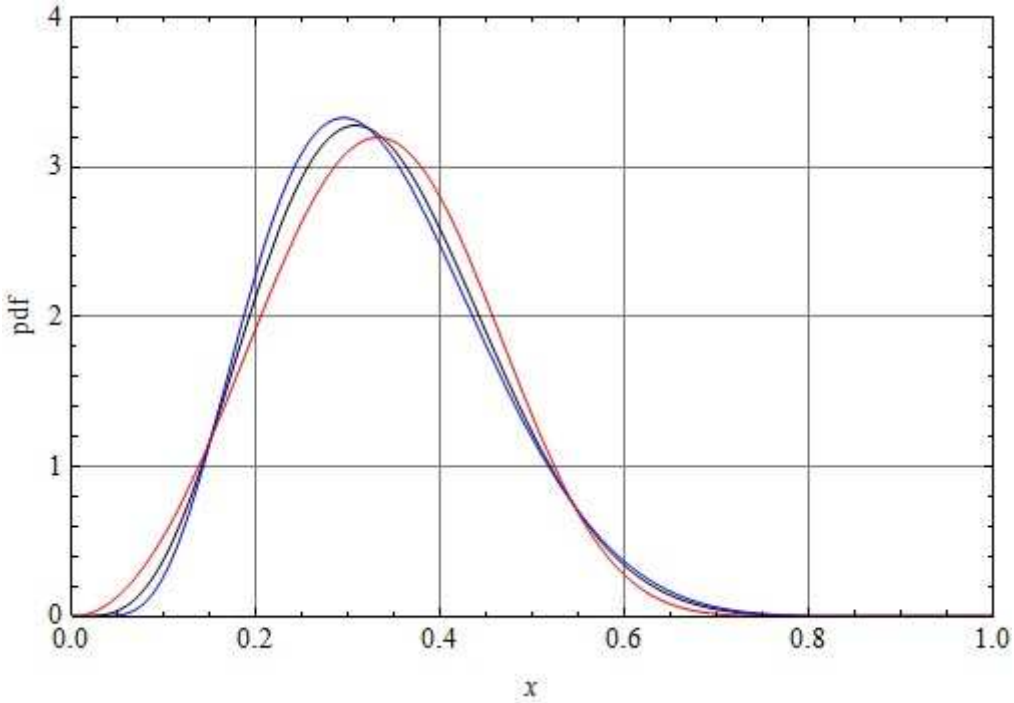


Abbildung 4-15: Wahrscheinlichkeitsdichte der Betaverteilung (schwarz), X_{Bt} ~ Bt(5, 10) im Vergleich zu den über Gleichsetzung von Erwartungswert (= 1/3) und von Varianz (= 1/72) angepassten Verteilungen JS_B(1,323; 1,781) (blau) und Ku(3,009; 18,74) (rot)

Tabelle 4-11: PCS der Betaverteilung und PIS der JOHNSON-S_B- sowie der KUMARASWAMY-Verteilung für Stichproben aus einer Betaverteilung X_{Bt} ~ Bt(5, 10) nach LL-Test für unterschiedliche Stichprobenumfänge n; Angaben **in Prozent**

Parameter	**n = 25**	**n = 50**	**n = 100**	**n = 200**	**n = 400**
PCS(Bt)	12,0	22,3	35,4	51,4	67,7
PIS(JS_B)	51,5	46,2	39,2	32,4	23,9
PIS(Ku)	36,5	31,5	25,4	16,2	8,4

4.1.4.4. Auswahl von Verteilungsfamilien für diskrete Zufallsgrößen

Bzgl. diskreter Zufallsgrößen probabilistischer Expositionsmodelle ist insbesondere die Unterscheidung zwischen der POISSON-Verteilung und der Negativer Binomialverteilung von Interesse. Für letztere wird hier die Form $X \sim NegB(\alpha,\beta)$ betrachtet, die in Populationen resultiert, für deren Individuen die Anzahl selten auftretender Ereignissen durch eine POISSON-Verteilung modelliert werden kann, deren Parameter λ jedoch nicht einheitlich ist, sondern für die Population durch eine Gammaverteilung $\lambda \sim Ga(\alpha,\beta)$ dargestellt wird, wodurch insgesamt eine Negative Binomialverteilung resultiert (siehe Anhang C, Abschnitt C.5.5).

Während die Schätzung des Verteilungsparameters der POISSON-Verteilung elementar ist (der Mittelwert einer Stichprobe aus dieser Verteilung stellt eine suffiziente Statistik dar und entspricht auch dem Maximum-Likelihood-Schätzer), ist die Schätzung der Verteilungsparameter α und β der Negativen Binomialverteilung relativ schwierig (siehe z. B. [LAW 87], [CLA 89], [PIE 90]).

Anmerkung: Parameterschätzungen durch Anpassung an den Mittelwert und die Varianz einer Stichprobe einer diskreten Zufallsgröße unterliegen bestimmten Einschränkungen. Dies folgt z. B. aus den Relationen zwischen diesen Kenngrößen für die Binomial-, die POISSON- und die Negative Binomialverteilung:

Binomialverteilung: $E_{Bin}[X] = n \cdot p > Var_{Bin}[X] = n \cdot p \cdot (1-p)$,

POISSON-Verteilung: $E_{Poi}[X] = \lambda = Var_{Bin}[X]$,

Negative Binomialverteilung: $E_{NegB}[X] = \alpha \cdot \beta < Var_{NegB}[X] = \alpha \cdot \beta \cdot (1+\beta)$

(siehe Anhang C, Abschnitte C.5.3, C.5.4 und C.5.5), wobei die Schätzung des Parameters λ der POISSON-Verteilung nur über den Mittelwert der Stichprobe erfolgt. Goodness-of-Fit Tests bieten deshalb nach der Momentenmethode nur eine Wahl zwischen POISSON- und Binomialverteilung oder POISSON- und Negativer Binomialverteilung (abhängig davon, ob die Varianz der Stichprobe kleiner oder größer ist als ihr Mittelwert). Für Maximum-Likelihood-Schätzer ist diese Einschränkung zwar nicht gegeben; die Schätzwerte für die Parameter α und β hängen jedoch sehr stark von den Besonderheiten der jeweiligen Stichprobe ab (weisen somit eine hohe Stichprobenunsicherheit auf). Es besteht eine sehr starke Antikorrelation zwischen den Schätzwerten für α und β über ihre Beziehung zum Mittelwert der Stichprobe, $\hat{\alpha} \cdot \hat{\beta} = \bar{x}$. Zur ML-Schätzung der Verteilungsparameter der Negativen Binomialverteilung ist deshalb eine Parametrisierung über $\lambda = \alpha \cdot \beta$ und z. B. α als zweiten Parameter sinnvoll.

Das folgende Beispiel soll verdeutlichen, dass für eine korrekte Entscheidung der Zuordnung einer Stichprobe zur POISSON- bzw. Negativen Binomialverteilung in Abhängigkeit von den konkreten Verteilungsparametern und dem angewandten Kriterium (LL-Test bzw. AIC-Test) unterschiedliche Anforderungen an den Stichprobenumfang resultieren.

Beispiel 4.6

Zur Abschätzung von Anforderungen an den Stichprobenumfang, der für eine hinreichend zuverlässige Entscheidung zwischen POISSON- und Negativer Binomialverteilung nötig ist, werden drei Populationen betrachtet: $X \sim Poi(4)$; $X \sim NegB(4,1)$ und $X \sim NegB(16,1/4)$. Die Wahrscheinlichkeitsmassenfunktionen sind in Abbildung 4-16 dargestellt. Die Erwartungswerte dieser Verteilungen stimmen überein.

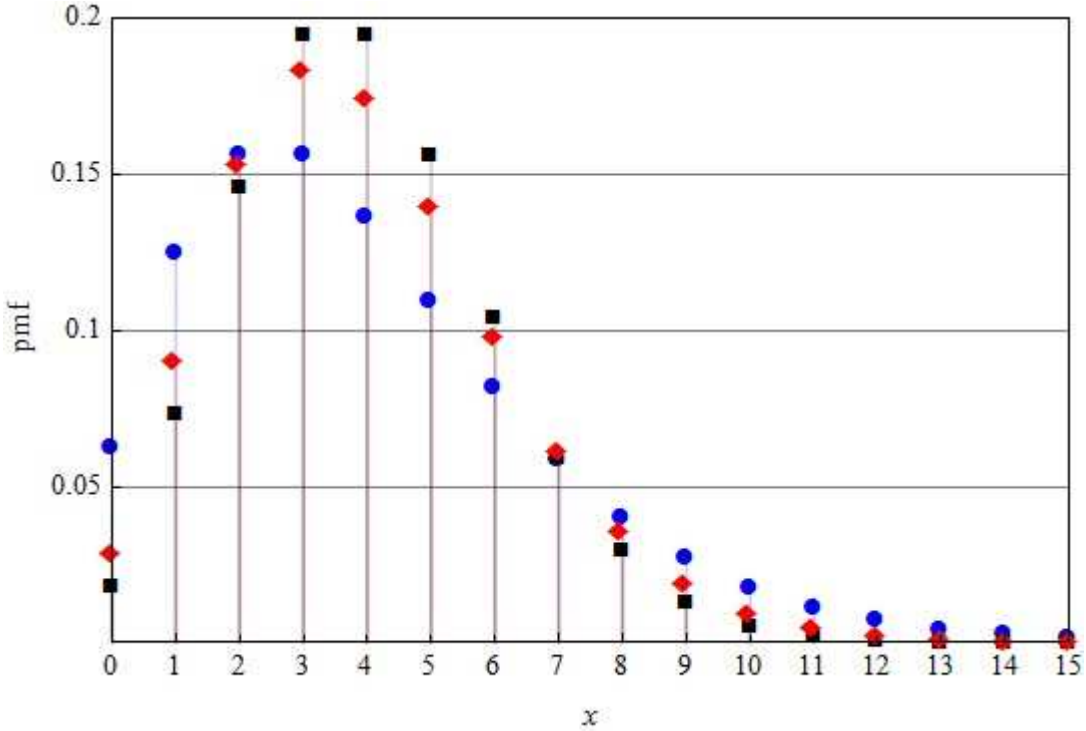


Abbildung 4-16: Diskrete Verteilungen für die Schätzung der PCS anhand von Stichproben; schwarz: X ~ Poi(4); blau: X ~ NegB(4,1); rot: X ~ NegB(16,1/4)

Für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100, 200) wurden aus den beiden Verteilungen Poi(4) und NegB(16,1/4) jeweils 10000 und aus der Verteilung NegB(4,1) jeweils 1000 zufällige Stichproben erzeugt, um daraus mit dem LL- bzw. dem AIC-Test die Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) der Population abzuschätzen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4-12 zusammengefasst.

Tabelle 4-12: PCS der POISSON-Verteilung bzw. Negativen Binomialverteilung bei Simulation von Stichproben aus jeweils einer der beiden Verteilungsarten und Selektion nach LL-Test bzw. AIC-Test für unterschiedliche Stichprobenumfänge n; Angaben **in Prozent**

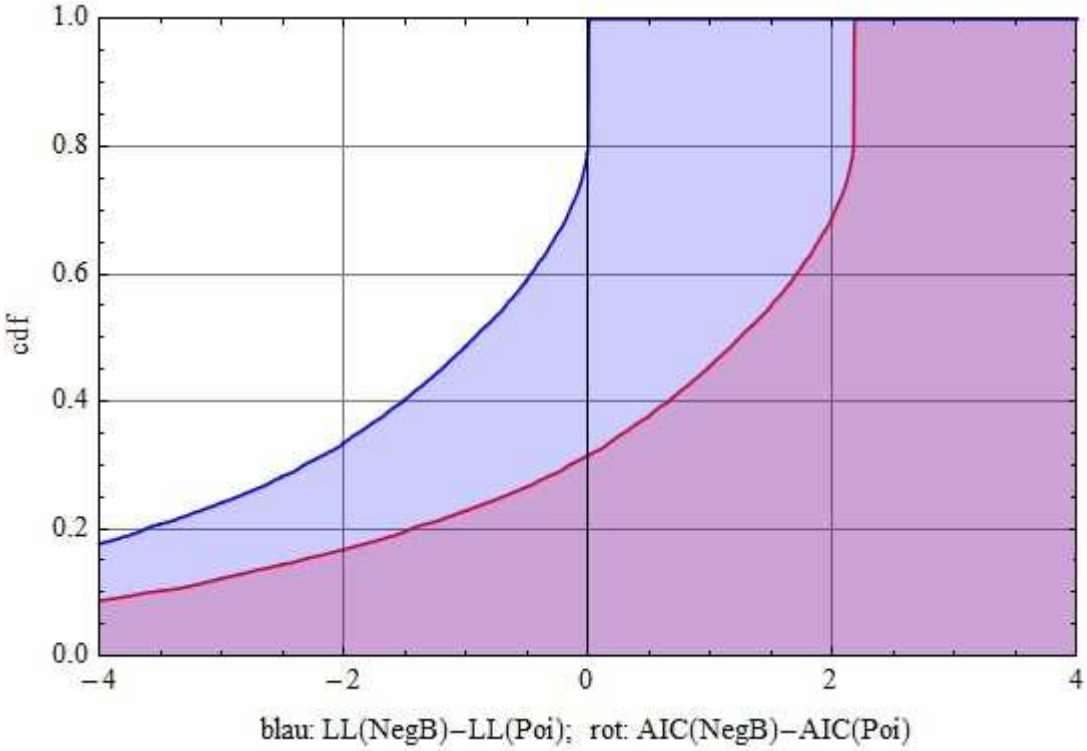
Parameter	**Methode**	**n = 25**	**n = 50**	**n = 100**	**n = 200**
Erzeugung der Stichproben aus Negativer Binomialverteilung: X ~ NegB(4,1)					
PCS(NegB)	**LL-Test**	98	100	100	100
	AIC-Test	74	94	100	100
Erzeugung der Stichproben aus Negativer Binomialverteilung: X ~ NegB(16,1/4)					
PCS(NegB)	**LL-Test**	69	81	91	98
	AIC-Test	19	31	51	51
Erzeugung der Stichproben aus POISSON-Verteilung: X ~ Poi(4)					
PCS(Poi)	**LL-Test**	61	57	55	54
	AIC-Test	96	95	94	98

Aus den Angaben von Tabelle 4-12 folgt zunächst für den Fall der Population X ~ NegB(4,1), dass bei erheblichen Abweichungen von einer POISSON-Verteilung die PCS für die Negative Binomialverteilung schon bei relativ kleinen Stichprobenumfängen hoch ist, wobei für n > 50 die "Bestrafung" des zusätzlichen Parameters nach dem AIC-Test die PCS nicht wesentlich beeinträchtigt.

Dies ändert sich jedoch grundlegend, wenn, wie im Beispiel der Population X ~ NegB(16,1/4), deren Abweichung von einer POISSON-Verteilung deutlich schwächer ist (vgl. Abbildung 4-16). In diesem Fall kann zwar mit dem LL-Test durch Vergrößerung des Stichprobenumfangs die PCS verbessert werden, wobei für n > 100 eine ausreichend hohe PCS vorliegt, mit dem AIC-Test werden aber auch bei großen Stichprobenumfängen keine akzeptablen PCS-Werte erreicht, weil die POISSON-Verteilung mit nur einem Verteilungsparameter deutlich besser bewertet wird als im LL-Test. In der Abbildung 4-17a ist der Effekt dieser Verschiebung beispielhaft für den Stichprobenumfang n = 50 dargestellt. Durch die sprungartige Form der Verteilungsfunktion der LL-Statistik im Entscheidungsbereich von LL(NegB) – LL(Poi) ~ 0 wirkt sich die im AIC-Test erfolgte "Bestrafung" der Negativen Binomialverteilung mit einem 2,175 höheren Wert (siehe Gl. (4-9) erheblich aus.

Die unterschiedliche Zuordnung von Stichproben nach dem LL- bzw. AIC-Test zeigt sich noch klarer für Stichproben aus einer POISSON-Population. Mit dem LL-Test resultieren PCS in der Größenordnung von 50 bis 60%, wogegen beim AIC-Test durch die Verschiebung des Entscheidungskriteriums um 2 mit hoher Wahrscheinlichkeit die korrekte Zuordnung getroffen wird (siehe Abbildung 4-17b).

Ausgehend von den Ergebnissen des Beispiels 4.6 ist festzuhalten, dass für eine sichere Zuordnung von Stichproben diskreter Zufallsgrößen zu einer POISSON- bzw. Negativen Binomialverteilung weder der LL-Test noch der AIC-Test ausreichend geeignet erscheinen, sofern die Abweichungen zwischen den beiden Verteilungen nicht sehr groß sind (große Abweichungen sind für einzelne Stichproben z. B. am Verhältnis zwischen Varianz und Mittelwert erkennbar). Aus unserer Sicht sollten zur Lösung dieser Problematik weitere Untersuchungen durchgeführt werden.



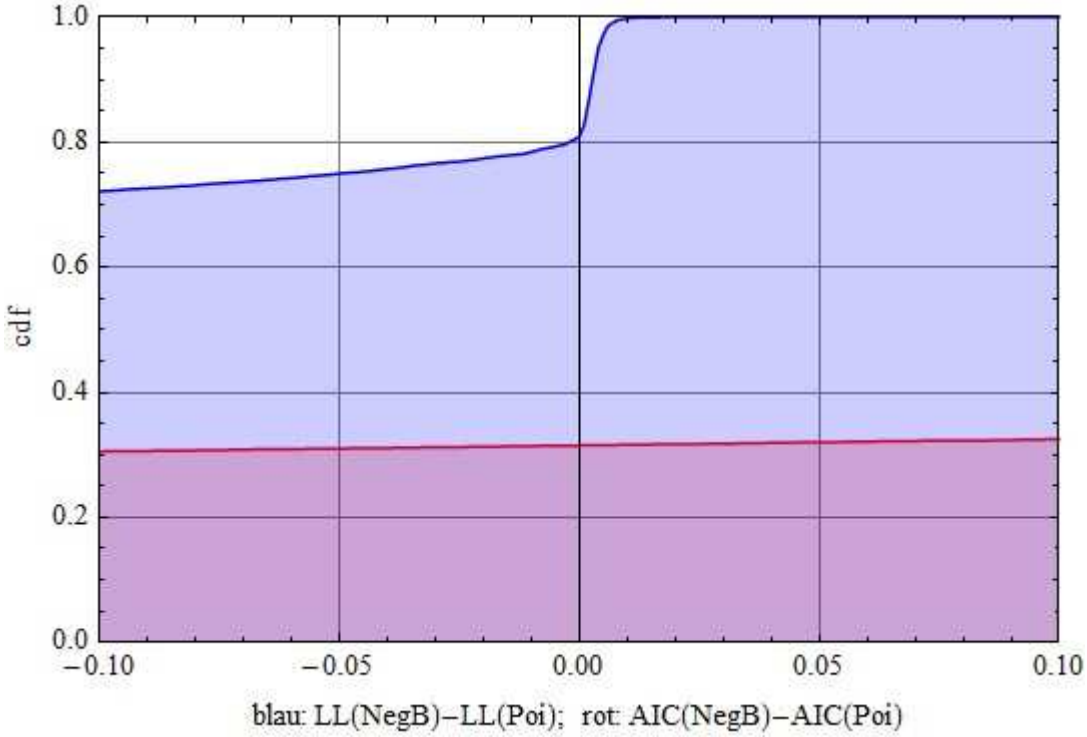
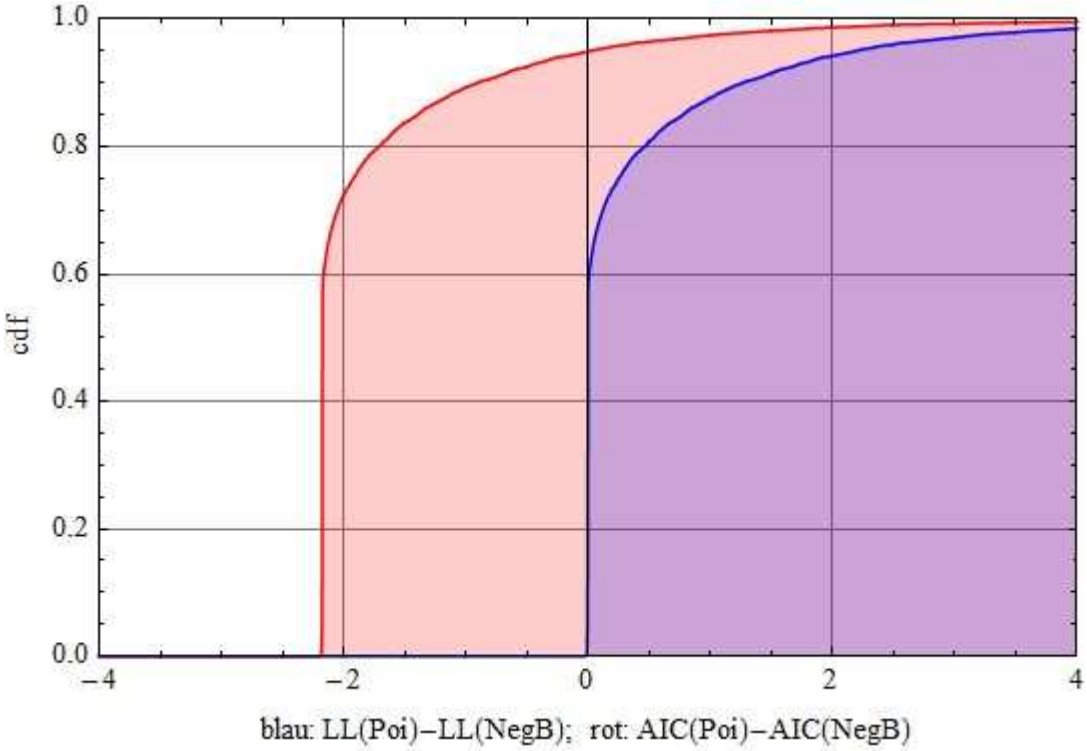


Abbildung 4-17a: Statistik des LL-Tests und des AIC-Tests für Stichproben aus der Negativen Binomialverteilung X ~ NegB(16,1/4) mit Stichprobenumfang n = 50. Das untere Bild ist eine Vergrößerung des Entscheidungsbereichs.



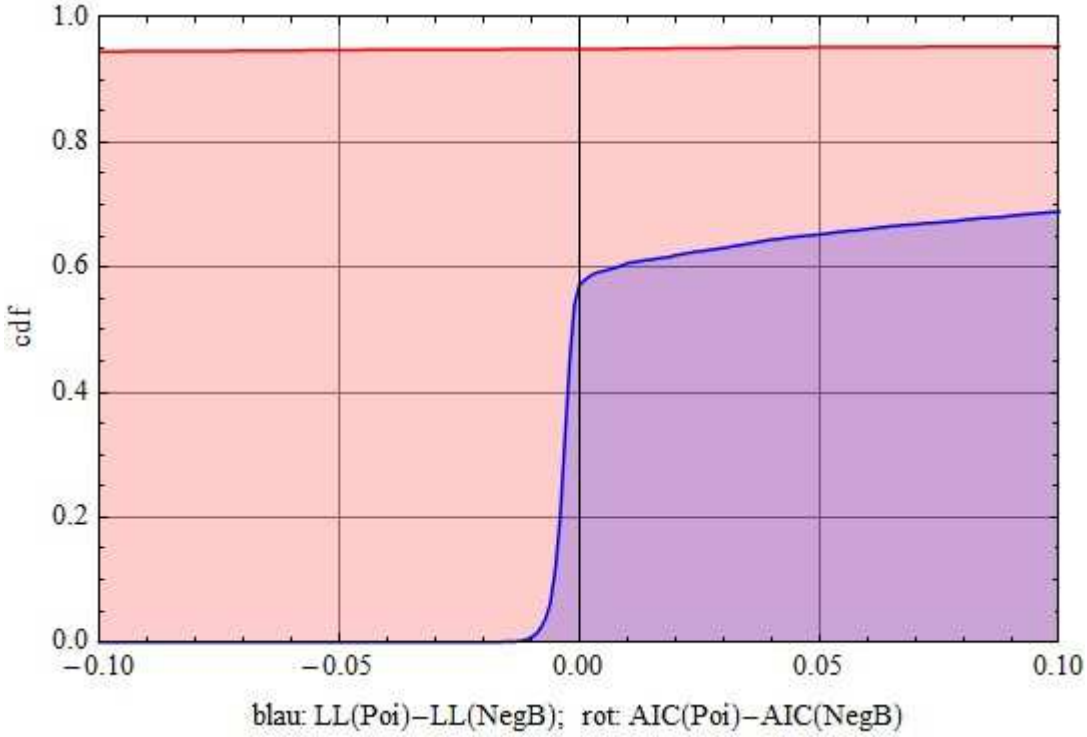


Abbildung 4-17b: Statistik des LL-Tests und des AIC-Tests für Stichproben aus der POISSON-Verteilung X ~ Poi(4) mit Stichprobenumfang n = 50. Das untere Bild ist eine Vergrößerung des Entscheidungsbereichs.

4.1.5. Schlussfolgerungen und Empfehlungen

Zur Auswahl von statistischen Verteilungen und Anpassung der Verteilungsparameter an die Daten von Stichproben sollten aus unserer Sicht drei grundlegende Kriterien berücksichtigt werden.

1. Es sollten vornehmlich solche Verteilungen in die engere Auswahl einbezogen werden, die nach fachspezifischen Überlegungen entsprechend der Genesis der jeweiligen Verteilungsart auf der Basis bekannter statistischer Modellansätze als plausibel angesehen werden können.
2. Verteilungen, die im Ergebnis von gängigen Goodness-of-Fit Tests, wobei vornehmlich der Anderson-Darling-Test genutzt werden sollte, mit geringer Irrtumswahrscheinlichkeit (z. B. von 5%) abgelehnt werden, stellen i. d. R. kein sinnvolles statistisches Modell für den untersuchten Parameter dar und können aus den weiteren Betrachtungen ausgeschlossen werden.
3. In vielen Fällen können nach Anwendung der beiden o. g. Kriterien mehrere Verteilungsarten in der engeren Auswahl verbleiben, wobei in der Regel solche Verteilungen bevorzugt werden sollten, die nicht zu viele freie Parameter enthalten. Hierzu ist jedoch anzumerken, dass mit zu einfachen Verteilungen reale Gegebenheiten ggf. unzureichend abgebildet werden. In vielen Anwendungen dürften durch zwei Verteilungsparameter charakterisierte Familien geeignet sein, deren Werte mit der Maximum-Likelihood-Methode geschätzt werden können. Die Prüfung der Relation der Maxima der Likelihood-Funktionen bzw. der Differenz ihrer Logarithmen (Log-Likelihood-Test) ist wohl die effizienteste Methode für eine Selektion aus verschiedenen, als möglich betrachteten Verteilungsfamilien. Zu weiteren Selektionsmethoden, die im vorliegenden Bericht nicht diskutiert wurden, sei u. a. auf [DYER 73], [QUES 82] und [GEN 08] verwiesen.

Aus den diversen Beispielen, die in den vorherigen Abschnitten für positiv definierte bzw. für beidseitig begrenzte stetige Zufallsgrößen sowie für diskrete Zufallsgrößen untersucht wurden, muss zusammenfassend der Schluss gezogen werden, dass keine einheitlichen Anforderungen an den Stichprobenumfang für eine ausreichend sichere Sektion der "richtigen" Verteilungsfamilie existieren. Der für eine hohe Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) erforderliche Stichprobenumfang wird durch verschiedene Faktoren bestimmt. Dies sind insbesondere:

- die Anzahl und Art von unterschiedlichen Verteilungsfamilien, mit denen die untersuchte Zufallsgröße ähnlich gut modelliert werden kann, und
- die Lage der Wahrscheinlichkeitsdichte/Verteilungsfunktion der "wahren" Verteilungsfamilie in Relation zu den alternativen Verteilungen.

Wenn mehrere ähnlich verlaufende Verteilungen in eine vergleichende Bewertung einbezogen werden, sind häufig Stichprobenumfänge von 200 (oder auch mehr) für eine korrekte Selektion der Verteilungsart erforderlich. In diesem Zusammenhang stellt sich natürlich die Frage, ob in solchen Fällen die "korrekte" Wahl für die probabilistische (Expositions-)Modellierung relevant ist, oder ob nicht auch mehr oder weniger willkürlich eine (z. B. mathematisch einfach handhabbare) Verteilung aus ähnlichen Alternativen gewählt werden kann. Die Antwort auf diese Frage wird u. E. durch drei wichtige Aspekte beeinflusst: (1) die weitere Anwendung der Verteilungsart in einem größeren Rahmen mit anderen Werten der Populationsparameter, (2) Konsequenzen für die Modellierung von extremen Ereignissen, (3) unterschiedliche Unsicherheiten der Parameterschätzung. Auf die beiden zuletzt genannten Aspekte wird in Abschnitt 4.2 noch genauer eingegangen.

4.2. Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen unsicheren Verteilungsparametern

In Kapitel 2 wurde auf Basis genereller Überlegungen und verschiedener Beispiele dargelegt, dass es für eine sachgemäße probabilistische Modellierung von Expositionen erforderlich ist, neben der aleatorischen Unsicherheit (stochastischen Variabilität) von Modellparametern auch epistemische Unsicherheiten der Spezifizierung der Verteilungsparameter zu berücksichtigen, die insbesondere aus den Unsicherheiten der auf Stichproben basierenden Schätzungen dieser Parameter resultieren. Während einfache 1D-MC-Simulationen für Expositionsmodelle nur auf den Punktschätzern der Parameter statistischer Verteilungen basieren, sind für eine realistische Bewertung auch die dbzgl. Unsicherheiten zu berücksichtigen, wozu 2D-MC-Simulationen oder im Rahmen BAYES'scher Ansätze MCMC-Modellrechnungen (Markov-Chain-Monte-Carlo) genutzt werden können.

Im vorliegenden Abschnitt werden Methoden der klassischen und der BAYES'schen Statistik zur Berücksichtigung von Parameterunsicherheiten für Wahrscheinlichkeitsverteilungen verglichen, die aus den Unsicherheiten der Schätzung der Verteilungsparameter anhand von Stichproben folgen. Hierzu wird insbesondere die Frage behandelt, wie Abhängigkeiten zwischen diesen (unsicheren) Parametern analysiert und berücksichtigt werden können. Zunächst werden in Abschnitt 4.2.1 zu dieser Frage die generellen Ansätze der frequentistischen bzw. BAYES'schen Statistik skizziert. In Abschnitt 4.2.2 wird detailliert auf Monte-Carlo-Methoden zur Berechnung BAYES'scher Posterior-verteilungen für die Verteilungsparameter eingegangen. Eine vergleichende Bewertung der BAYES-Methode und des Bootstrapping zur Quantifizierung von Parameterunsicherheiten unter Beachtung gegenseitiger Abhängigkeiten der Verteilungsparameter erfolgt in Abschnitt 4.2.3. Der Abschnitt 4.2.4 befasst sich mit der Berücksichtigung dieser Parameterunsicherheiten bei der Schätzung von statistischen Kenngrößen und der Auswahl von Verteilungsarten zur probabilistischen Modellierung von Expositionsfaktoren.

4.2.1. Ansätze der frequentistischen und der BAYES'schen Statistik

Wird aus einer Grundgesamtheit (Population), die durch eine bestimmte Verteilungsfunktion mit dem Parameter θ spezifiziert sei[61], auf zufällige Weise eine Stichprobe des Umfangs n gewonnen, so ist die klassische Statistik darauf gerichtet, auf den unbekannten, jedoch als fest determiniert betrachteten Wert des Verteilungsparameters θ zu schließen. Alle Wahrscheinlichkeitsaussagen beziehen sich immer auf die Stichprobe und damit berechnete Statistiken. Wird für eine gegebene Stichprobe $\mathbf{x} = \{x\}_n = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ eine Statistik S_n berechnet (z. B. Summe, arithmetisches Mittel, Varianz oder ein bestimmtes Quantil der Stichprobe), so ist S_n wieder eine Zufallsvariable, deren statistische Verteilung über alle denkbaren Stichproben $\{X\}_n$ vom unbekannten Parameter θ der Verteilung der untersuchten Population abhängt. Mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte $f_S(s,n|\theta)$ wird beschrieben, wie die Statistik S_n bei gegebenem θ für den Stichprobenumfang von n variieren kann. Sie beschränkt sich nicht auf die tatsächlich vorliegende Stichprobe, sondern beschreibt die Eigenschaften der Statistik S_n für den gesamten Raum aller denkbaren Stichproben des Umfangs n. Unsicherheiten der Schätzung eines Verteilungsparameters θ, der die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\theta)$ einer Zufallsgröße X spezifiziert, werden durch so genannte Konfidenzgrenzen quantifiziert,

---

[61] Generell kann θ als vektorielle Größe auch mehrere skalare Parameter enthalten, wie z. B. die beiden Parameter μ (Erwartungswert) und σ (Standardabweichung) bei der Normalverteilung (siehe Anhang C). An dieser Stelle sei aber vereinfachend der Fall betrachtet, dass die statistische Verteilung nur durch einen Parameter spezifiziert wird.

wobei θ als feste (aber unbekannte) Größe angesehen wird, wogegen die anhand einer Stichprobe $\{x\}_n$ für ein bestimmtes Vertrauensniveau (1-α) geschätzten Konfidenzgrenzen als Zufallsgrößen betrachtet werden, da sie von der zufälligen Zusammensetzung der Stichprobe abhängen (α stellt hierbei die Irrtumswahrscheinlichkeit für den Fehler 1. Art dar). In einfachen Fällen können die resultierenden Beziehungen für die untere Konfidenzgrenze θ_L (Index L für "lower") und die obere Konfidenzgrenze θ_U (Index U für "upper")

$$\theta_L = \theta_{\alpha/2;n} \le \theta \quad \text{und} \quad \theta_U = \theta_{1-\alpha/2;n} \ge \theta \tag{4-15}$$

in Abhängigkeit von α und n invertiert werden, woraus eine statistische Verteilungsfunktion für den unbekannten Parameter θ resultiert. Damit erfolgt oft die im Sinne der klassischen Statistik falsche Interpretation, dass θ mit einer Wahrscheinlichkeit von (1-α) im Intervall $[\theta_L, \theta_U]$ liegt. θ ist jedoch nach dem frequentistischen Ansatz eine feste Größe. Die eigentliche Aussage von Gl. (4-15) ist, dass unter der Annahme, dass θ der Wert des betrachteten Verteilungsparameters ist, die zufällig für Stichproben resultierenden Konfidenzintervalle den Wert θ mit einer Wahrscheinlichkeit von (1-α) überdecken. Abgesehen von diesem Aspekt der Interpretation besteht jedoch ein wesentlicher Nachteil dieses Ansatzes darin, dass Konfidenzintervalle immer nur für einen Parameter bestimmt werden können. Zur Unsicherheit der Schätzung von zwei Parametern (z. B. der Parameter (μ,σ) der Normal- bzw. Lognormalverteilung oder der Parameter (α,β) der Beta- oder Gammaverteilung), sind Abhängigkeiten zwischen den Verteilungsparametern zu beachten, wobei für die zwei letztgenannten Verteilungen eine starke Abhängigkeit zwischen den Schätzungen der Verteilungsparameter vorliegt. Die Berücksichtigung solcher Abhängigkeiten ist aber schon für den einfachen Fall der Normal- bzw. Lognormalverteilung erforderlich, wie das folgende Beispiel verdeutlicht.

Beispiel 4.7

Ist X eine normalverteilte Zufallsgröße X ~ N(μ,σ) und $\{x\}_n$ eine Stichprobe vom Umfang n aus dieser Population, dann sind der Stichprobenmittelwert m und die Stichprobenvarianz s^2 zwei suffiziente Statistiken, die zudem voneinander unabhängige Zufallsgrößen darstellen. Die Größe $(n-1)\cdot s^2/\sigma^2$ folgt dabei einer χ^2-Vereitung mit (n-1) Freiheitsgraden, und die Größe $(m - \mu)/(s/n^{1/2})$ einer STUDENT'schen t-Verteilung mit (n-1) Freiheitsgraden (siehe Abschnitte C.2.2 und C.3.1 im Anhang C; eine detaillierte Ableitung dieser Verteilungen enthält [BOX 92]). Durch eine Inversion werden diese Beziehungen oft in Anwendungen zur Berücksichtigung von Unsicherheiten der Schätzung der Verteilungsparameter μ und σ für 2D-MC-Simulationen verwendet, wobei μ und σ als voneinander unabhängige Größen betrachtet werden (siehe z. B. [BRAT 96]). Dies ist aber nicht korrekt, weil die Verteilung für μ vom jeweiligen Wert für σ abhängt. Bezeichnet man mit $f(\mu,\sigma|m,s,n)$ die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte der Verteilungsparameter μ und σ für die aus einer Stichprobe mit Umfang n gegebenen Statistiken m (Mittelwert) und s (Standardabweichung), so gilt nach den Regeln für bedingte Wahrscheinlichkeiten:

$$f(\mu,\sigma \mid m,s,n) = f_\mu(\mu \mid \sigma,m,n) \cdot f_\sigma(\sigma \mid s,n)\,, \tag{4-16}$$

wobei $f_\sigma(\sigma|s,n)$ eine inverse χ-Verteilung mit (n-1) Freiheitsgraden für die Größe $\sigma/(s\cdot(n-1)^{1/2})$ darstellt und $f_\mu(\mu|\sigma,m,n)$ einer Normalverteilung mit Mittelwert m und Standardabweichung $\sigma/n^{1/2}$ genügt. μ hängt somit von σ ab. Die bedingte Wahrscheinlichkeit $f_\mu(\mu|\sigma,m,n)$ für μ bei gegebenem σ ist eine Normalverteilung: $\mu|\sigma \sim N(m,\sigma/n^{1/2})$. Die STUDENT'schen t-Verteilung ist nur die Randverteilung von μ, die durch Integration der Gl. (4-16) über σ resultiert.

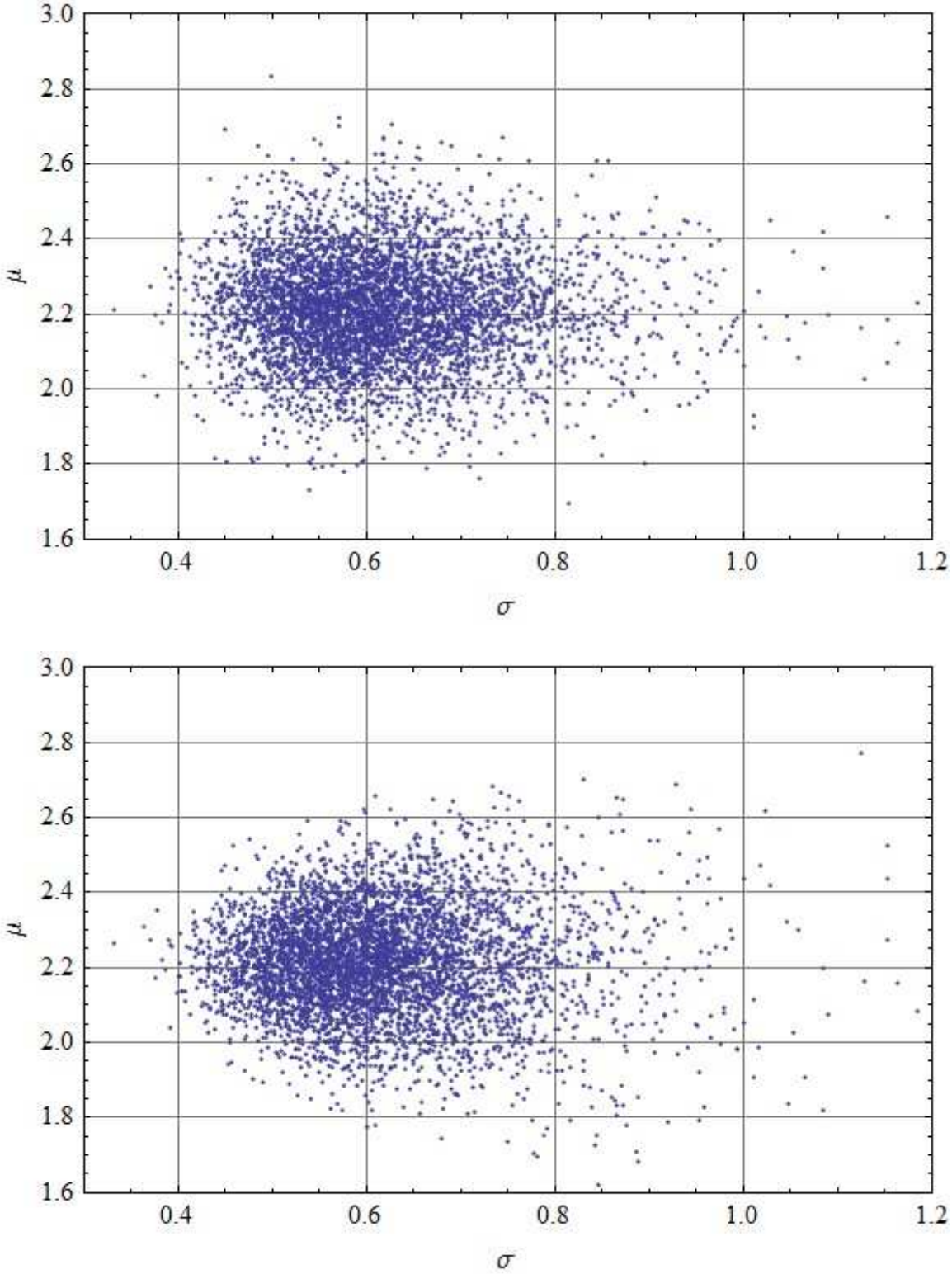


Abbildung 4-18: Scatterplots für 5000 Simulationen der unsicheren Verteilungsparameter (μ,σ) einer Normalverteilung auf Basis der inkorrekten Annahme der Unabhängigkeit beider Parameter (oberes Bild) bzw. bei korrekter Simulation nach Gl. (4-16) (unteres Bild)

Die Abbildung 4-18 zeigt den Unterschied zwischen einer inkorrekten 2D-Simulation von (μ,σ), wie z. B. in [BRAT 96] erfolgt, zur korrekten Simulation nach Gl. (4-16). Hierzu wurde eine zufällige Stichprobe vom Umfang n = 20 aus X ~ N(2, 0,5) erzeugt, für die sich die Schätzwerte m = 2,214 und s = 0,5918 ergaben. Der Unterschied zwischen der inkorrekten Annahme einer von σ unabhängigen Verteilung von μ zur korrekten Berücksichtigung dieser Abhängigkeit nach Gl. (4-16) zeigt sich insbesondere im Bereich kleiner σ-Werte, wo μ nach der korrekten Simulation weniger streut, sowie für große σ-Werte, bei denen μ nach der korrekten Simulation stärker streut als bei (inkorrekter) Annahme der Unabhängigkeit der beiden Verteilungsparameter.

Für andere Verteilungsfamilien, wie z. B. die Beta- und die Gammaverteilung, ist die Abhängigkeit zwischen den Verteilungsparametern wesentlich stärker ausgeprägt und offensichtlich nicht mehr zu vernachlässigen. Diese Verteilungen werden in Abschnitt 4.2.2 betrachtet.

Einen Ansatz, um im Rahmen der frequentistischen Statistik Unsicherheiten der Schätzung von mehreren Verteilungsparametern und deren gegenseitige Abhängigkeit zu berücksichtigen, bietet das Bootstrapping (siehe Abschnitt 2.6.6). Da diese Methode relativ einfach anzuwenden ist, wurde sie u. a. in [FREY 96], [FREY 98] und [CUL 99] für probabilistische Expositionsmodellierungen empfohlen. Dabei wird jedoch eine Repräsentativität der Stichprobe oder der damit geschätzten Verteilungsparameter für die gesamte Population unterstellt, was jedoch nur asymptotisch (für sehr große Stichprobenumfänge, im Limes $n \rightarrow \infty$) zutrifft. In [SCHE 85] wurde zu Methoden des nicht-parametrischen Bootstraps kritisch darauf hingewiesen, dass die diesen Methoden zugrunde liegenden Annahmen oft kaum/nicht anhand von Stichproben überprüfbar sind und nicht selten zu falschen Ergebnissen führen. Insbesondere für komplexe Modelle sollten sie deshalb sehr vorsichtig angewandt werden. In [CHER 08] wird u. a. auf Schwächen des Bootstrapping auf Basis zu kleiner Stichproben sowie die geringe Eignung zur Bewertung der Verteilungsränder (Extremwerte) eingegangen. In Abschnitt 4.2.3 des vorliegenden Berichts wird gezeigt, dass die Anwendung des Bootstrapping zur MC-Simulation der Abhängigkeit zwischen Verteilungsparametern insbesondere dann kritisch zu hinterfragen ist, wenn mit einer probabilistischen (Expositions-)Modellierung die Frage zur Wahrscheinlichkeit des Auftretens von relativ seltenen Ereignissen der Überschreitung von Grenz- bzw. Richtwerten beantwortet werden soll.

Die Analyse/Simulation von Unsicherheiten zu Verteilungsparametern unter Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Abhängigkeit stellt den Kern der BAYES'schen Inferenzstatistik dar (siehe Abschnitt 2.7). Diese sollte deshalb aus unserer Sicht vorrangig zur Lösung entsprechender Aufgaben der probabilistischen Modellierung genutzt werden. Die hierzu erforderliche Spezifizierung geeigneter Priordichten kann dabei für viele Verteilungsarten so vorgenommen werden, dass die mit BAYES-Methoden berechneten glaubhaften Intervalle (bzw. "Konfidenzbereiche", siehe Fußnote 48 in Abschnitt 2.7.2 bzgl. dieser Bezeichnungen) sehr gute frequentistische Eigenschaften aufweisen, was nach [BER 06] die Belastbarkeit von Berechnungen mit BAYES-Methoden unterstreicht. Häufig wird auf Schwierigkeiten der Anwendung von BAYES-Methoden hingewiesen, weil hierzu Integrale über komplizierte Wahrscheinlichkeitsdichten zu berechnen sind. Wesentliche Vereinfachungen lassen sich hierzu auch für komplexe Anwendungen durch MCMC-Methoden erreichen. Soweit möglich, sollten jedoch einfacher kontrollierbare BAYES-Methoden der Analyse und Simulation von Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Verteilungsparameter von probabilistischen Modellen genutzt werden, worauf im nachfolgenden Abschnitt für wichtige parametrische Verteilungen genauer eingegangen wird.

4.2.2. BAYES-Methoden zur Analyse/Simulation von unsicheren Verteilungsparametern

Ist $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Zufallsgröße X, die durch die Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ spezifiziert sei, $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ die damit für eine iid Stichprobe $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ resultierende Likelihood-Funktion (siehe Gl. 2-72)), und bezeichnet man mit $f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta})$ die gemeinsame Priordichte der Verteilungsparameter, so hat die Posteriordichte von $\boldsymbol{\theta}$ die Form

$$f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) \propto L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) \cdot f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta}), \tag{4-17}$$

die ggf. durch Berechnung des Integrals

$$I(\mathbf{x}) = \int L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{x}) \cdot f_{\boldsymbol{\Theta}}(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} \tag{4-18}$$

als normierte multivariate Wahrscheinlichkeitsdichte dargestellt werden kann, indem die rechte Seite von Gl. (4-17) durch das Integral $I(\mathbf{x})$ geteilt wird (siehe Gl. (2-73)). Für MC-Simulationen ist diese Normierung oft nicht erforderlich, um für $\boldsymbol{\theta}$ aus dem Produkt von Likelihood-Funktion und Priordichte zufällige Realisierungen zu berechnen. Hierzu existieren verschiedene Methoden, die sich generell in zwei Klassen einteilen lassen:

- Verwerfungsmethode oder darauf basierende Verfahren, mit denen voneinander unabhängige (iid) Realisierungen von $\boldsymbol{\theta}$ berechnet werden, sowie
- Markov-Ketten (MCMC), bei denen aufeinander folgende Realisierungen von $\boldsymbol{\theta}$ auf Übergangswahrscheinlichkeiten basieren, $\boldsymbol{\theta}^{(i+1)} \sim K(\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}|\boldsymbol{\theta}^{(i)})$, die Zufallsbewegungen (engl.: random walk) durch die Posteriordichte so ausführen, dass durch eine lange Folge von Realisierungen $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ die Posteriorverteilung hinreichend genau approximiert wird.

Einige dieser Methoden werden in den weiteren Abschnitten erläutert. Eine weitgehend komplette Übersicht dieser Methoden findet man z. B. in [ROB 04]. Im folgenden Abschnitt wird aber zuvor noch auf einige Verteilungsfamilien eingegangen, für die Unsicherheiten der Verteilungsparameter mit elementaren Methoden analysiert und simuliert werden können.

4.2.2.1. Verteilungen mit Posteriordichten aus bekannten Verteilungsfamilien

In einigen einfachen Fällen lässt sich die Posteriordichte der Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ auf bekannte Verteilungsfamilien zurückführen, wonach für Simulationsrechnungen Zufallswerte von $\boldsymbol{\theta}$, die iid sind, mit den hierfür gängigen Methoden (Inversionsmethode auf Basis der Verteilungsfunktion bzw. Verwerfungsmethode auf Basis der Wahrscheinlichkeitsdichte) direkt erzeugt werden können. Hierzu gehören z. B. die Posteriorverteilungen für den Parameter p der BERNOULLI- und der Binomialverteilung, für die mit dem nicht-informativen Prior nach der JEFFREYS-Regel Gl. (2-76), $p \sim Bt(1/2,1/2)$ wieder eine Betaverteilung resultiert (siehe Beispiel 2.8). Die im Beispiel 4.7 mit Gl. (4-16) angegebene Posteriordichte für die Parameter (μ,σ) der Normalverteilung gilt auch für die Parameterunsicherheiten der Lognormalverteilung und der JOHNSON-S_B-Verteilung, wobei hierzu natürlich die Stichprobenwerte durch die Transformationen ln(x) (für Lognormalverteilung) bzw. ln(x/(1-x)) (für JS_B-Verteilung) auf normalverteilte Zufallsgrößen zurückzuführen sind, für die dann der Mittelwert m und die Standardabweichung s zu bestimmen sind, die in Gl. (4-16) als suffiziente Stichprobenstatistiken eingehen.

Zwei weitere Verteilungen, für deren Parameter elementare Posteriordichten resultieren, sind die Exponential- und die POISSON-Verteilung, was in den beiden folgenden Beispielen gezeigt wird.

Beispiel 4.8

Ist X eine exponentiell verteilte Zufallsgröße X ~ Ex(λ), so ergibt die Anwendung der JEFFREYS-Regel (siehe Gl. (2-75) und (2-76) in Abschnitt 2.7.2) auf die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{Ex}(x|\lambda) = \lambda \cdot \mathrm{Exp}(-\lambda \cdot x)$

$$h(\lambda) = \int_0^\infty \lambda \cdot e^{-\lambda \cdot x} \cdot \left(-\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \left(\ln(\lambda) - \lambda \cdot x \right) \right) dx = \frac{1}{\lambda^2} \quad \text{und} \quad f_\lambda(\lambda) \propto 1/\lambda. \tag{4-19}$$

Aus der Tatsache, dass die Priordichte $f_\lambda(\lambda)$ nicht normierbar ist (dies ist eine übliche Eigenschaft von vielen nicht-informativen Priordichten), ergeben sich keine Problem für die Berechnung der Posteriordichte. Für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) ergibt sich die Likelihood-Funktion

$$L(\lambda \mid \mathbf{x}) = \lambda^n \cdot e^{-\lambda \cdot T}, \text{ wobei } \; T = \sum_{i=1}^{n} x_i \tag{4-20}$$

die suffiziente Statistik der Stichprobendaten ist. Aus Gl. (4-19) und (4-20) folgt für die Posteriordichte

$$f_\lambda(\lambda \mid \mathbf{x}) \propto \lambda^{n-1} \cdot e^{-\lambda \cdot T}, \tag{4-21}$$

bzw. nach der in diesem Fall elementar durchzuführenden Normierung:

$$f_\lambda(\lambda \mid \mathbf{x}) = \frac{\lambda^{n-1} \cdot T^n}{\Gamma(n)} \cdot e^{-\lambda \cdot T}. \tag{4-22}$$

Die Posteriorverteilung für den Verteilungsparameter λ der Exponentialverteilung ist somit eine Gammaverteilung, λ ~ Gam(n,T), wobei T die Summe der n Stichprobenwerte ist und die Rolle einer Rate in der Darstellung nach Gl. (C-26) hat; n ist hier der Formparameter der Gammaverteilung.

Zu diesem Beispiel sei angemerkt, dass die Posterior-Prognosedichte, siehe Gl. (2-74), gemäß Gl. (C-41) von Anhang C einer LOMAX-Verteilung entspricht.

Beispiel 4.9

Ist X eine diskrete Zufallsgröße, die einer POISSON-Verteilung genügt (siehe Abschnitt C.5.4 im Anhang C), dann ergibt die Anwendung der JEFFREYS-Regel Gl. (2-75):

$$h(\lambda) = \sum_{x=0}^{\infty} \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^x}{x!} \cdot \left(-\frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} \left(x \cdot \ln(\lambda) - \lambda - \ln(x!) \right) \right) = \frac{1}{\lambda^2} \cdot \sum_{x=0}^{\infty} \frac{x \cdot e^{-\lambda} \cdot \lambda^x}{x!} = \frac{1}{\lambda}$$

und damit gemäß Gl. (2-76) die (nicht-informative) Priordichte

$$f_\lambda(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}. \tag{4-23}$$

Für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) ergibt sich die Likelihood-Funktion

$$L(\lambda \mid \mathbf{x}) = \frac{\lambda^{T} \cdot e^{-n\cdot\lambda}}{\prod_{i=1}^{n} x_i!}, \text{ mit } T = \sum_{i=1}^{n} x_i \,. \tag{4-24}$$

Aus Gl. (4-23) und (4-24) ergibt

$$f_\lambda(\lambda \mid \mathbf{x}) \propto \lambda^{T-1/2} \cdot e^{-n\cdot\lambda}, \tag{4-25}$$

bzw. nach der in diesem Fall elementar durchzuführenden Normierung:

$$f_\lambda(\lambda \mid \mathbf{x}) = \frac{\lambda^{T-1/2} \cdot n^{T+1/2}}{\Gamma(T+1/2)} \cdot e^{-n\cdot\lambda}. \tag{4-26}$$

Die Posteriorverteilung des Verteilungsparameters λ der POISSON-Verteilung ist eine Gammaverteilung, $\lambda \sim \mathrm{Gam}(T+1/2, n)$, wobei T die Summe der n Stichprobenwerte ist. Im Unterschied zur Gl. (4-22) hat hier der Stichprobenumfang n die Rolle eines Ratenparameters, wogegen T+½ der Formparameter der resultierenden Gammaverteilung ist.

Zu diesem Beispiel sei angemerkt, dass die Posterior-Prognosedichte einer Negativen Binomialverteilung entspricht (siehe Gl. (2-74) und Gl. (C-88) von Anhang C).

Mit den in Beispiel 4.8 bzw. 4.9 für den Parameter λ der Exponential- bzw. POISSON-Verteilung angegebenen Posteriordichten lassen sich auf einfache Weise BAYES'sche glaubhafte Intervalle berechnen. Diese stimmen übrigens in beiden Fällen mit den Konfidenzbereichen überein, die aus der frequentistischen Inferenzstatistik resultieren (zu deren Ableitung siehe z. B. [CAS 02]).

4.2.2.2. Allgemeine MCMC-Methoden

Zur Analyse und Simulation BAYES'scher Posteriordichten $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ für mehrere, i. A. voneinander abhängige skalare Verteilungsparameter θ_k, k = 1 bis K, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_K)$, können allgemeine MCMC-Methoden genutzt werden, wozu insbesondere der METROPOLIS-HASTINGS-Algorithmus [MET 53], [HAS 70], [CHIB 95] und der GIBBS-Sampler [GEM 84], [GEL 90], [CAS 92] gehören.[62]

METROPOLIS-HASTINGS-Algorithmus (MH-Algorithmus)

Für den MCMC MH-Algorithmus ist es erforderlich, eine bedingte Übergangswahrscheinlichkeit, $K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta})$ zu spezifizieren, mit der aus einer gegebenen Realisierung der Zufallsgröße $\boldsymbol{\theta}$, die durch die Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ definiert ist, eine neue, zufällige Realisierung $\boldsymbol{\theta}'$ erzeugt wird. Im Idealfall wäre dies eine Übergangswahrscheinlichkeit, welche die Reversibilitätsbedingung

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}'|\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta}) = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}')$$

erfüllt. Für diesen Fall kann man unter relativ schwachen zusätzlichen Annahmen zeigen, dass die mit der Markov-Kette $\boldsymbol{\theta}^{(i+1)} \sim K(\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}|\, \boldsymbol{\theta}^{(i)})$ erzeugte Folge von Realisierungen der Zufallsgröße $\boldsymbol{\theta}$ der vorgegebenen Posteriorverteilung entspricht. Eine so gut "passende" Übergangswahrscheinlichkeit wird man jedoch nur in den einfachsten Fällen finden. Ist nun z. B.

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}'|\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta}) > f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}'),$$

---

[62] Die Arbeiten [CHIB 95] und [CAS 92] bieten gut verständliche Einführungen in diese MCMC-Methoden.

so verläuft die Zufallsbewegung zu oft von $\boldsymbol{\theta}$ nach $\boldsymbol{\theta}'$ sowie zu selten von $\boldsymbol{\theta}'$ nach $\boldsymbol{\theta}$. Um die Wahrscheinlichkeiten möglicher Bewegungen in eine ausgeglichene Balance zu bringen, wird eine Wahrscheinlichkeit $\rho(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}')$ der Ausführung eines Schritts der Markov-Kette eingeführt:

$$\rho(\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\theta}') = \min\left\{\frac{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}'|\,\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}\,|\,\boldsymbol{\theta}')}{f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}\,|\,\mathbf{x})\cdot K(\boldsymbol{\theta}'|\,\boldsymbol{\theta})},1\right\}. \tag{4-27}$$

Ausgehend von einer bestimmten Realisierung $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ wird für die nachfolgende Realisierung zunächst ein (zufälliger) Vorschlag $\boldsymbol{\theta}^{(v)} \sim K(\boldsymbol{\theta}^{(v)}|\,\boldsymbol{\theta}^{(i)})$ mit der spezifizierten Übergangswahrscheinlichkeit K generiert. Dieser wird mit Wahrscheinlichkeit $\rho(\boldsymbol{\theta}^{(i)},\boldsymbol{\theta}^{(v)})$ angenommen und mit Wahrscheinlichkeit $1-\rho(\boldsymbol{\theta}^{(i)},\boldsymbol{\theta}^{(v)})$ abgelehnt, wobei im Fall der (zufällig entschiedenen) Ablehnung $\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}$ gleich $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ gesetzt wird. Mittels einer Realisierung u der im Intervall [0,1] gleichverteilten Zufallsvariablen U ergibt sich somit folgende Entscheidung zur nächsten Realisierung der Zufallsgröße $\boldsymbol{\theta}$:

$$\boldsymbol{\theta}^{(i+1)} = \begin{cases} \boldsymbol{\theta}^{(v)} & \text{wenn } u \le \rho(\boldsymbol{\theta}^{(i)},\boldsymbol{\theta}^{(v)}) \\ \boldsymbol{\theta}^{(i)} & \text{wenn } u > \rho(\boldsymbol{\theta}^{(i)},\boldsymbol{\theta}^{(v)}) \end{cases}. \tag{4-28}$$

Anmerkungen zum MH-Algorithmus:

- Die Ausführung des MH-Algorithmus wird durch die Übergangswahrscheinlichkeit $K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta})$ bestimmt. Hierzu existieren viele strukturell unterschiedliche Ansätze (siehe [TIE 94]), deren Effizienz fallspezifisch zu beurteilen ist.
- Der MH-Algorithmus verlangt gemäß Gl. (4-27) keine Normierung der Posteriordichte.
- Für symmetrische Übergangswahrscheinlichkeiten $K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta})$ vereinfacht sich Gl. (4-27). Die Wahrscheinlichkeit der Ausführung eines Schrittes hängt dann nur noch von der Relation der Posteriordichten für den aktuellen und den neu vorgeschlagenen Zustand der Markov-Kette ab. Eine vorgeschlagene Bewegung "bergauf" wird dann immer realisiert, eine Bewegung "bergab" im Fall $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}^{(v)}|\mathbf{x}) < f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}^{(i)}|\mathbf{x})$ nur mit der aus Gl. (4-27) folgenden Wahrscheinlichkeit.
- Eine Bewertung dazu, wann und wie gut mit der berechnete Markov-Kette $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ die Posteriordichte approximiert ist und dieser Prozess beendet werden kann, verlangt spezielle Kontrollen der Konvergenz. Für eine umfassende Übersicht und Diskussion zu diversen Methoden der Konvergenzdiagnostik sei auf [COW 96] verwiesen.

<u>GIBBS-Sampling-Algorithmus</u>

Der GIBBS-Sampler ist eine spezielle Variante des MH-Algorithmus, für den die Übergangswahrscheinlichkeiten $K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta})$ durch vollständige, bedingte Wahrscheinlichkeiten der Posteriordichte für alle skalaren Parameter θ_k (k = 1 bis K) des Parametervektors $\boldsymbol{\theta}$ definiert werden. Er ist z. B. in dem frei zugänglichen Programm WinBUGS[63] implementiert (siehe [SPIE 03], [COW 04], [NTZ 09].

Für diesen Algorithmus sind zur Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ für alle K Verteilungsparameter θ_k die bedingten Wahrscheinlichkeiten

[63] "BUGS" ist das Akronym für "<u>B</u>ayesian inference <u>U</u>sing <u>G</u>ibbs <u>S</u>ampling"

$$f_k(\theta_k \mid \theta_1,...,\theta_{k-1},\theta_{k+1},...,\theta_K,\mathbf{x}) = f_k(\theta_k \mid \boldsymbol{\theta}_{-\mathbf{k}},\mathbf{x}), \tag{4-29}$$

zu bestimmen, wobei mit $\boldsymbol{\theta}_{-\mathbf{k}}$ der um den (skalaren) Parameter θ_k reduzierte Vektor $\boldsymbol{\theta}$ aller K Verteilungsparameter bezeichnet sei. Ausgehend von einem beliebigen Startwert $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$ werden zufällige Realisierungen $\boldsymbol{\theta}^{(1)}$, $\boldsymbol{\theta}^{(2}$, …, $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$, $\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}$, …,$\boldsymbol{\theta}^{(n)}$ durch den folgenden Algorithmus erzeugt.

$$\begin{aligned}
&\theta_1^{(i+1)} \text{ aus Verteilung mit Dichte } f_1(\theta_1 \mid \boldsymbol{\theta}_{-1}^{(i)},\mathbf{x});\\
&\theta_2^{(i+1)} \text{ aus Verteilung mit Dichte } f_2(\theta_2 \mid \theta_1^{(i+1)},\theta_3^{(i)},...,\theta_K^{(i)},\mathbf{x});\\
&...\\
&\theta_k^{(i+1)} \text{ aus Verteilung mit Dichte } f_k(\theta_k \mid \theta_1^{(i+1)},\theta_2^{(i+1)},...,\theta_{k-1}^{(i+1)},\theta_{k+1}^{(i)},...,\theta_K^{(i)},\mathbf{x});\\
&...\\
&\theta_K^{(i+1)} \text{ aus Verteilung mit Dichte } f_K(\theta_K \mid \boldsymbol{\theta}_{-K}^{(i+1)},\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{4-30}$$

Als spezieller Fall des MH-Algorithmus werden mit Gl. (4-30) Übergänge realisiert, die für jede einzelne Komponente des Parametervektors $\boldsymbol{\theta}$ durch (vollständige) bedingte Wahrscheinlichkeiten nach Gl. (4-29) definiert sind, wobei die bedingten Wahrscheinlichkeiten in dem durch Gl. (4-30) definierten Zyklus permanent "aktualisiert" werden. Man kann zeigen, dass damit die Ausführungswahrscheinlichkeit nach Gl. (4-27) den Wert 1 hat und somit die auf $\boldsymbol{\theta}^{(i)}$ folgende, nach Abarbeitung des Zyklus von Gl. (4-30) erzeugte Realisierung $\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}$ akzeptiert wird [GELM 95].

Die zur Anwendung des GIBBS-Sampling-Algorithmus erforderliche Bestimmung der K bedingten Wahrscheinlichkeiten aus Gl. (4-29) stellt relativ hohe Anforderungen an die Modellierung. Eines der Hauptanwendungsgebiete ist deshalb die Analyse und Simulation von hierarchischen Modellen, in denen sich die bedingten Wahrscheinlichkeiten systematisch aufbauen lassen [SPIE 03]. Für sehr komplexe Modelle wird es jedoch zunehmend schwierig, die notwendige Kontrolle der Konvergenz des Samplings vorzunehmen und die Ergebnisse zu bewerten [COW 96].

Zur Erzeugung von zufälligen Werten aus den einzelnen Verteilungen gemäß Gl. (4-30) können alle gängigen Verfahren genutzt werden. Neben den bekannten Methoden für Standardverteilungen sind dies u. a. die adaptive Verwerfungsmethode für log-konkave Wahrscheinlichkeitsdichten nach [GILK 92] und das so genannte Slice-Sampling für Wahrscheinlichkeitsdichten, die nicht log-konkav sind nach [NEAL 97], [NEAL 03]. Auf diese Methoden wird nachfolgend noch eingegangen.

Neben der Notwendigkeit, die Konvergenz des GIBBS-Sampling-Algorithmus zu kontrollieren [COW 96], sind weitere Probleme, die bei der Anwendung dieser Methode auftreten können, zu beachten. So kann z. B. durch serielle Korrelationen der erzeugten Markov-Kette die Effektivität dieser Methode erheblich beeinträchtigt werden und unter ungünstigen Umständen auch zu einem Abbruch der Simulation oder zu Fehleinschätzungen der Ergebnisse führen.[64]

Wenn zwischen Verteilungsparametern starke Abhängigkeiten vorliegen, kann es hilfreich sein, diese zunächst zu transformieren, um für die Posteriordichte eine Form zu erhalten, die für den MH-Algorithmus bzw. die Anwendung des GIBBS-Sampling besser geeignet ist.

---

[64] Der in [SPIE 03] enthaltene Disclaimer "Beware: MCMC sampling can be dangerous!" ist zu beachten.

Beispiel 4.10

Für die Betaverteilung X ~ Bt(α,β) (siehe Anhang C, Abschnitt C.4.2) kann man durch Anwendung der JEFFREYS-Regel für die Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta} = (\alpha,\beta)$ eine nicht-informative Priordichte ableiten, die in guter Näherung durch

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta) \propto \frac{1}{\alpha \cdot \beta} \tag{4-31}$$

approximiert werden kann. Für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) ergibt sich gemäß Gl. (C-50) die Likelihood-Funktion

$$L(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) = \left(\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\cdot\Gamma(\beta)}\right)^n T_1^{\alpha-1} \cdot T_2^{\beta-1}, \text{ mit } T_1 = \prod_{i=1}^{n} x_i \text{ und } T_2 = \prod_{i=1}^{n}(1-x_i)\,. \tag{4-32}$$

Die aus Gl. (4-31) und (4-32) resultierende Posteriordichte der Verteilungsparameter (α,β),

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) \propto \left(\frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\cdot\Gamma(\beta)}\right)^n \frac{T_1^{\alpha-1} \cdot T_2^{\beta-1}}{\alpha \cdot \beta}\,, \tag{4-33}$$

ist für eine zufällige Stichprobe aus Bt(4,8) mit n = 20 Einzelwerten in Abbildung 4-19a dargestellt; **x** = (0,2065; 0,5447; 0,3448; 0,2393; 0,3482; 0,2886; 0,3331; 0,4411; 0,4194; 0,3119; 0,2834; 0,2700; 0,4224; 0,7503; 0,2805; 0,2235; 0,3290; 0,5067; 0,5152; 0,3575); ML-Schätzer: $\hat{\alpha} = 5{,}2$ und $\hat{\beta} = 8{,}7$.

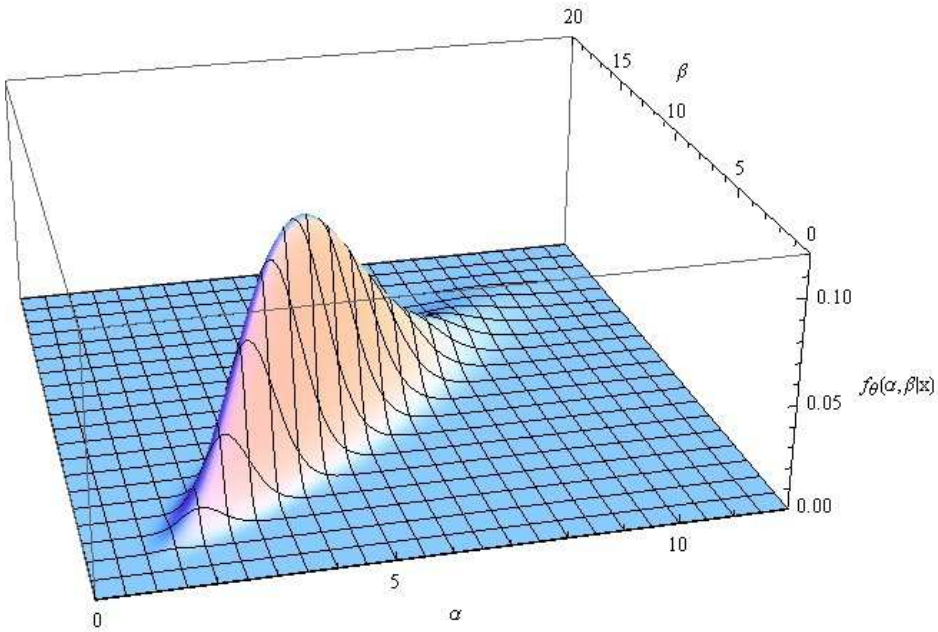


Abbildung 4-19a: Normierte Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ der Parameter der Betaverteilung entsprechend der zufälligen Stichprobe aus Beispiel 4.10.

Aus Abbildung 4-19a ist klar zu erkennen, dass die beiden Verteilungsparameter α und β extrem stark voneinander abhängen, wodurch die Konvergenz des MH-Algorithmus bzw. des GIBBS-Sampling beein-

trächtigt wird. Man kann jedoch diese starke Korrelation durch eine Transformation der beiden Variablen umgehen. Setzt man z. B.

$$\alpha = \rho \cdot \cos(\varphi) \quad \text{und} \quad \beta = \rho \cdot \sin(\varphi)\,, \tag{4-34}$$

dann ergibt sich für die transformierten Verteilungsparameter

$$\rho = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \quad \text{und} \quad \varphi = \arctan(\beta / \alpha)\,, \qquad \rho > 0,\ 0 < \varphi < \pi/2, \tag{4-35}$$

die in Abbildung 4-19b dargestellte Posteriordichte, aus der man ohne größere Schwierigkeiten zufällige Realisierungen von (ρ,φ) mit Hilfe der o. g. Algorithmen erzeugen kann. Mit Gl. (4-34) können dann daraus die Realisierungen von (α,β) bestimmt werden, die der in Abbildung 4-19a dargestellten Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ entsprechen.

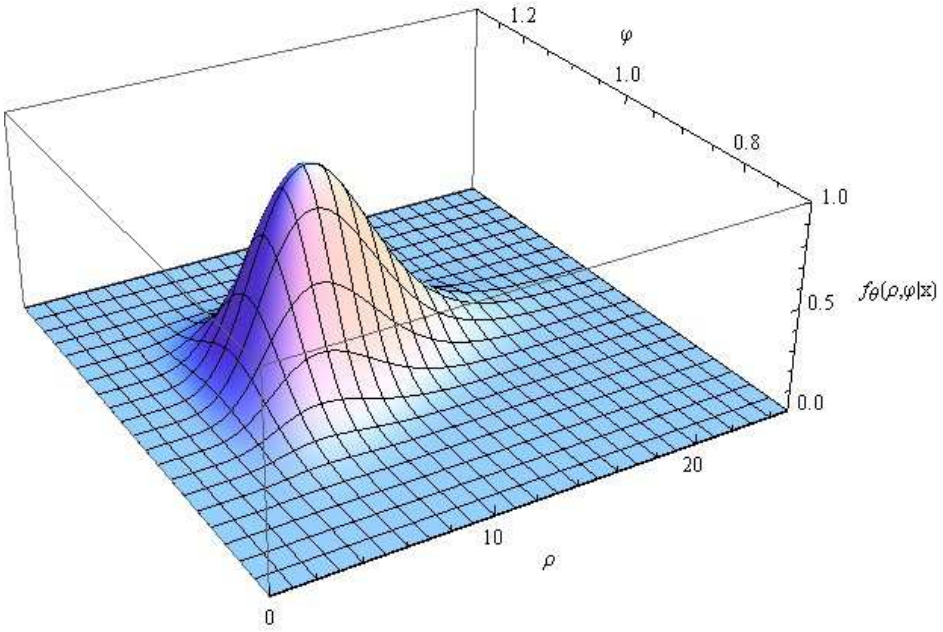


Abbildung 4-19b: Normierte Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\rho,\varphi|\mathbf{x})$ der nach Gl. (4-35) transformierten Parameter der Betaverteilung entsprechend der zufälligen Stichprobe aus Beispiel 4.10.

4.2.2.3. Verteilungen mit log-konkaver Posteriordichte

Für die Analyse von Abhängigkeiten zwischen Verteilungsparametern und für die Simulation von Zufallsgrößen aus gängigen statistischen Verteilungen unter Berücksichtigung der aus Stichproben resultierenden epistemischen Unsicherheiten zu den Verteilungsparametern sowie ihrer gegenseitigen Abhängigkeit ist es für einige Verteilungsfamilien möglich, die mit relativ großem Aufwand verbundenen Methoden der MCMC-Simulation zu umgehen und voneinander unabhängige (iid) Realisierungen von $\boldsymbol{\theta}$ zu berechnen. Hierzu gehören z. B. die Gammaverteilung und die KUMARASWAMY-Verteilung, die für nachfolgende Beispiele genutzt werden. Ebenso wie für die Parameter (μ,σ) der Normalverteilung, können selbstverständlich auch für die Parameter dieser

Verteilungsfamilien GIBBS-Sampler genutzt werden wie z. B. in [SON 06] und [PRAD 11] für die Parameter der Gammaverteilung $X \sim Ga(\alpha,\beta)$ dargelegt[65]. Es ist jedoch nicht nur einfacher, sondern auch sinnvoll, analog zur Vorgehensweise für die Parameter der Normalverteilung gemäß Gl. (4-16) iid Zufallsgrößen für (α,β) aus deren Posteriordichte zu erzeugen, indem diese als Produkt einer bedingten und einer Marginalverteilung dargestellt wird,

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) = f_{\beta}(\beta \mid \alpha,\mathbf{x}) \cdot f_{\alpha}(\alpha \mid \mathbf{x}) \,, \tag{4-36}$$

wonach zunächst ("auf einen Schlag") beliebig viele zufällige α-Werte aus der Marginalverteilung $f_{\alpha}(\alpha|\mathbf{x})$ generiert werden können, um danach von diesen abhängige, zufällige β-Werte entsprechend der bedingten Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{\beta}(\beta|\alpha,\mathbf{x})$ zu erzeugen. Hierzu werden analytische Darstellungen für beide Funktionen benötigt. Auch wenn die Marginalverteilung $f_{\alpha}(\alpha|\mathbf{x})$ nicht zu einer Standard-Verteilungsfamilie gehört (im Unterschied z. B. zur Verteilung des Parameters σ der Normalverteilung) lassen sich iid Realisierungen aus $f_{\alpha}(\alpha|\mathbf{x})$ relativ einfach auf effektive Weise realisieren, wenn diese Verteilung log-konkav ist, d. h., wenn die Bedingung

$$\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} \ln\left(f_{\alpha}(\alpha \mid \mathbf{x})\right) < 0 \tag{4-37}$$

für den gesamten Definitionsbereich des Parameters α (hier: $\alpha > 0$) erfüllt ist. Der hierzu in [GILK 92] entwickelte Algorithmus des "Adaptive Rejection Sampling" (ARS) ist eine interessante Weiterentwicklung der bekannten Verwerfungsmethode, die zunächst kurz erläutert sei.

Verwerfungsmethode

Ist f(x) die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Zufallsgröße X, deren Verteilungsfunktion F(x) nicht invertierbar ist (ansonsten erzeugt man zufällige Realisierungen von X am einfachsten über die Beziehung $x = F^{-1}(u)$, wobei u eine zufällige Realisierung der Gleichverteilung auf dem Intervall [0,1] ist), so können nach der Verwerfungsmethode Zufallszahlen aus f(x) generiert werden, wenn eine Verteilung g(x) bekannt ist, für die Zufallszahlen leicht generierbar sind, wenn mit dieser die Bedingung $f(x) \le c \cdot g(x)$ mit einer bestimmten Konstante $c \ge 1$ erfüllt wird. Dann generiert man je eine Zufallszahl x aus g(x) sowie u aus der Gleichverteilung $U_{[0,1]}$. Ist die Bedingung

$$u \le \frac{f(x)}{c \cdot g(x)} \tag{4-38}$$

erfüllt, dann ist x eine zufällige Realisierung von f(x). Dieser Algorithmus ist sehr einfach, hat aber den Nachteil, dass ein großer Anteil von Versuchen verworfen wird, wenn g(x) nicht sehr nahe bei f(x) liegt. Außerdem muss f(x) für diesen Algorithmus auf 1 normiert sein.

Beispiel 4.11

Zur Veranschaulichung der Verwerfungsmethode sei ein elementares Beispiel betrachtet. Für $X \sim Bt(4,8)$ sollen 1000 zufällige Realisierungen erzeugt werden. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{Bt}(x|4,8)$ hat den

---

[65] Die Inferenz zu den Parametern (α,β) der Gammaverteilung wird in der Fachliteratur seit vielen Jahren sowohl im Rahmen der frequentistischen Statistik (siehe z. B. [ENG 78], [KEAT 90], [BHAU 09], [APOL 09]) als auch mit Hilfe der BAYES-Theorie (siehe z. B. [DAMS 75], [MIL 80], [SON 06], [PRAD 11]) diskutiert.

Modalwert $x_{Mod} = (\alpha-1)/(\alpha+\beta-2) = 0{,}3$ (siehe Gl. (C-55)), und erreicht dort einen Wert von 2,935. Da X auf das Einheitsintervall beschränkt ist, bietet sich mit c = 3 für g(x) die Gleichverteilung an. Dann sind aber ca. 3000 Versuche nötig, um 1000 Zufallswerte aus Bt(4,8) zu erzeugen, wie aus Abbildung 4-20 leicht zu erkennen ist, da die Fläche unter $f_{Bt}(x|4,8)$ gleich 1 ist, insgesamt aber gleichmäßig aus einer Fläche von $c \cdot 1 = 3$ "Vorschläge" für X generiert werden (von denen 2000 abgelehnt werden).

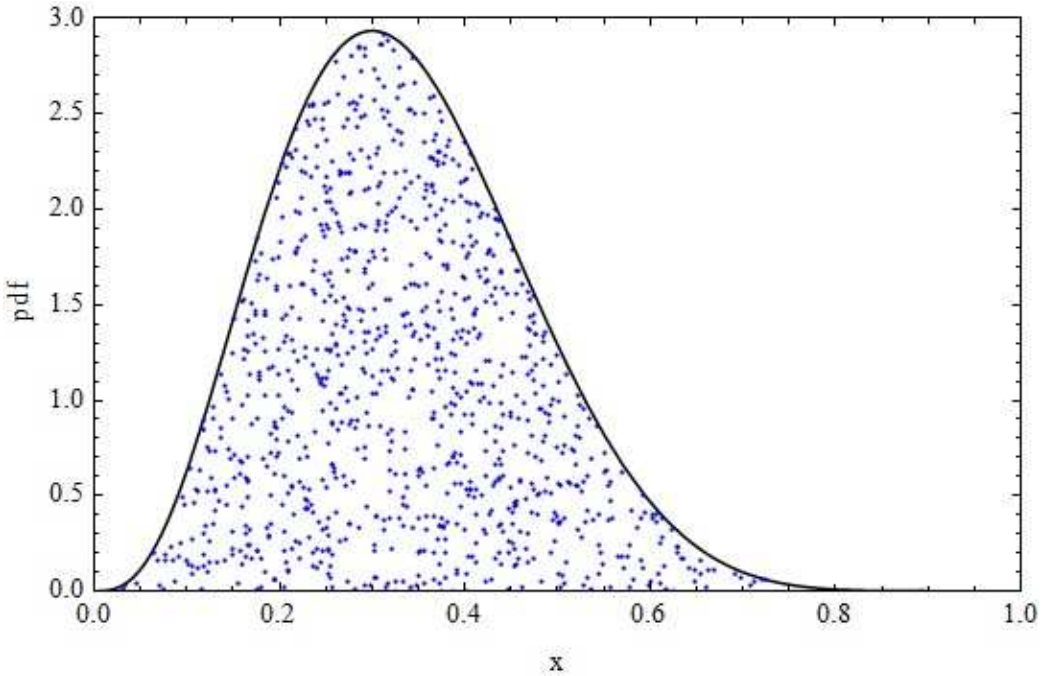


Abbildung 4-20: Darstellung der mit der Verwerfungsmethode erzeugten 1000 Zufallszahlen aus der Verteilung X ~ Bt(4,8).

ARS-Methode (Adaptive Rejection Sampling)

Es seien f(x) eine log-konkave Funktion, die proportional zur Wahrscheinlichkeitsdichte der zu simulierenden Zufallsgröße X ist, und h(x) = ln(f(x)) ihr Logarithmus. Für einige vorzugebende, nach der Größe geordnete Werte $x_{(i)}$ (i = 2 bis k - 1) wird $h_i = h(x_{(i)})$ berechnet. Der Index i = 1 bleibt für den kleinstmöglichen Wert von x (x_{min}, z. B. gleich 0 oder ggf. $-\infty$), der Index k bleibt für den größtmöglichen Wert von x (x_{max}, ggf. gleich ∞) reserviert. Für die Punkte $(x_{(i)}, h_i)$, mit i von 2 bis k – 1 werden die Tangenten der Kurve h(x) berechnet. Da h(x) konkav ist, schneiden sich diese und bilden insgesamt eine stückweise lineare Funktion von $x_{(1)}$ bis $x_{(k)}$ die immer $\geq h(x)$ ist. Sie wird als obere (upper) Hüllenfunktion mit $h_u(x)$ bezeichnet. Zwischen den benachbarten Punkten $(x_{(i)}, h_i)$ und $((x_{(i+1)}, h_{i+1})$ mit i von 2 bis k – 2 werden die Sehnen berechnet, die zusammen eine stückweise stetige Funktion bilden, die immer $\leq h(x)$ ist und als untere (lower) Hüllenfunktion mit $h_l(x)$ bezeichnet sei (siehe Abbildung 4-21a zum Beispiele 4-12). In den Randintervallen $[x_{(1)}, x_{(2)}]$ und $[x_{(k-1)}, x_{(k)}]$ wird $h_l(x) = -\infty$ gesetzt. Die Funktion

$$s(x) = e^{h_u(x)} \tag{4-39}$$

ist eine stückweise Exponentialfunktion, welche die betrachtete (Dichte-)Funktion f(x) einhüllt (siehe Abbildung 4-21b). Für die Funktion s(x) kann das bestimmte Integral von $x_{(1)}$ bis $x_{(k)}$ leicht berechnet werden, woraus sich eine Normierungskonstante c_s ergibt, mit der $f_s(x) = s(x)/c_s$·eine Wahrscheinlichkeitsdichte wird. Deren Verteilungsfunktion $F_s(x)$ lässt sich invertieren und dient der Erzeugung eines Zufallswertes x_z aus dem Intervall $[x_{(1)}, x_{(k)}]$. Die weiteren Schritte des ARS-Algorithmus [WILD 93] sind:

1. Erzeugung eines Zufallswertes x_z sowie einer Zufallszahl $u \sim U_{[0,1]}$;
2. Ist $u < \mathrm{Exp}(h_l(x_z) - h_u(x_z))$, so wird x_z akzeptiert, und es kann mit Punkt 1 fortgesetzt werden; sonst folgt Punkt 3.
3. Es wird $h(x_z)$ berechnet. Ist $u < \mathrm{Exp}(h(x_z) - h_u(x_z))$, so wird x_z akzeptiert, sonst abgelehnt. Es wird mit Punkt 4 fortgesetzt.
4. Der Wert x_z wird in die Reihe der Punkte x(0) bis x(k) nach der Größe eingeordnet ($k \rightarrow k+1$) und der berechnete Funktionswert $h(x_z)$ wird zur entsprechenden Aktualisierung/Verbesserung der Hüllenfunktionen $h_u(x)$ und $h_l(x)$ sowie der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_s(x)$ genutzt. Danach kann wieder zu Punkt 1 gegangen werden, um weitere Zufallswerte zu generieren.

Das nachfolgende Beispiel dient der Illustration der ARS-Methode.

Beispiel 4.12

Die Betaverteilung (siehe Anhang C, C.4.2) ist für $\alpha > 1$ und $\beta > 1$ log-konkav (die zweite Ableitung des Logarithmus ihrer Wahrscheinlichkeitsdichte ist $h''(x) = -(\alpha-1)/x^2 - (\beta-1)/(1-x)^2$). Wir betrachten den Fall $\alpha = 4$; $\beta = 8$ ($x_{Mod} = 0{,}3$) und initiieren das ARS mit den vier Werten: $x_{(2)} = 0{,}1$; $x_{(3)} = 0{,}2$; $x_{(4)} = 0{,}4$ und $x_{(5)} = 0{,}6$. Die Abbildung 4-21a zeigt den Verlauf von h(x) und der Einhüllenden hu(x) und hl(x).

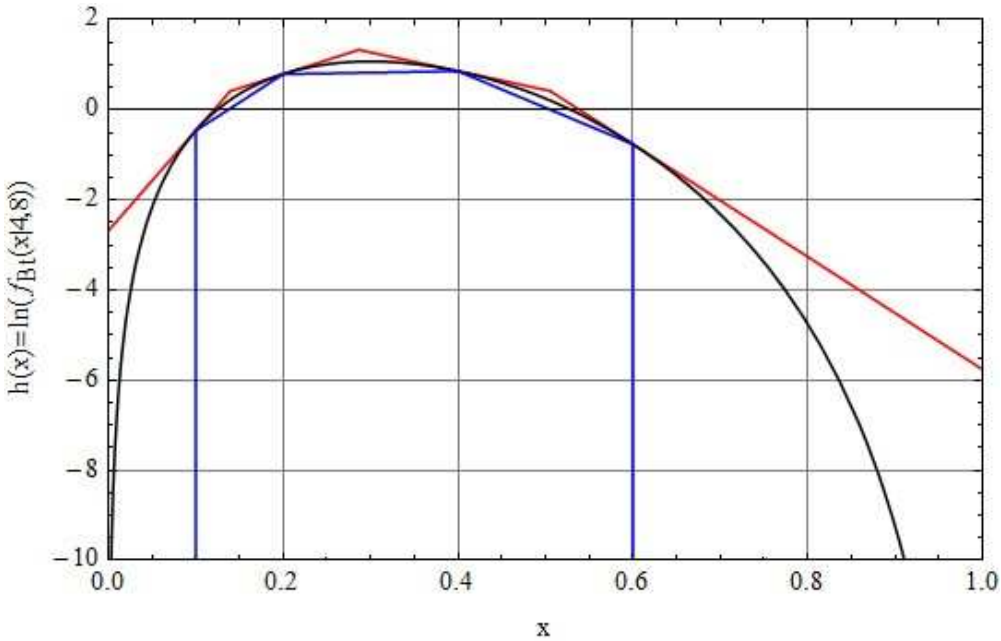


Abbildung 4-21a: h(x) (schwarz) sowie Einhüllende $h_u(x)$ (rot) und $h_l(x)$ (blau) nach der Initialisierung mit den o. g. vier Werten

Die Abbildungen 4-21b und 4-21c zeigen neben der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{Bt}(x|4,8)$ die nicht normierte obere Einhüllende s(x) nach Initialisierung bzw. nach 30 Durchläufen des ARS-Algorithmus, in denen sich 2 Aktualisierungen/Ergänzungen der Stützstellen ergaben, was i. d. R. zunächst in Bereichen mit der höchsten Wahrscheinlichkeit erfolgt. Bei der Generierung von 1000 iid Zufallsgrößen werden etwa 15 $f_s(x) = s(x)/c_s \cdot$generierte Vorschläge abgelehnt (also ca. 1,5%).

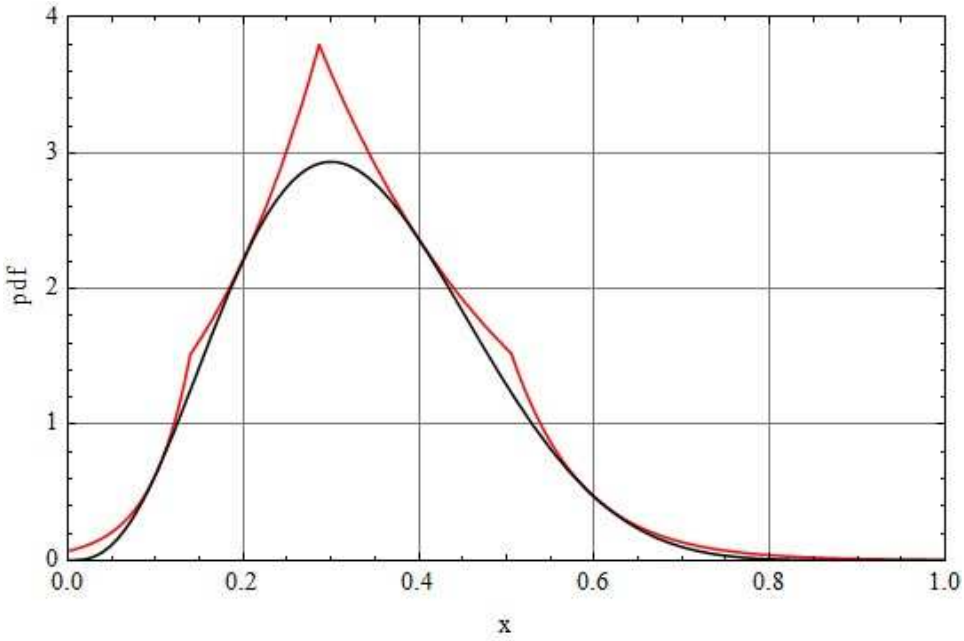


Abbildung 4-21b: $f_{Bt}(x|4,8)$ (schwarz) sowie Einhüllende $s(x) = \exp(h_u(x))$ (rot) nach Initialisierung

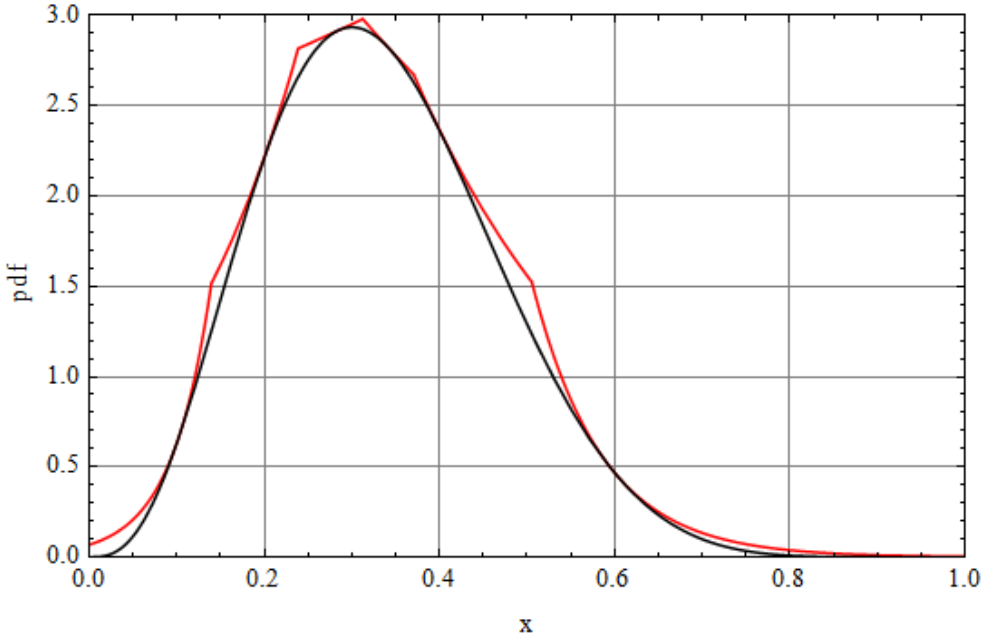


Abbildung 4-21c: $f_{Bt}(x|4,8)$ (schwarz) sowie Einhüllende $s(x) = \exp(h_u(x))$ (rot) nach 30 Durchläufen des ARS-Algorithmus, wonach 2 zusätzliche Stützstellen (0,2845 und 0,3421) resultierten

<u>Posteriordichte der Parameter (α,λ) der Gammaverteilung</u>

Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte der Gammaverteilung X ~ Gam(α,λ),

$$f_{Gam}(x \mid \alpha,\lambda) = \frac{\lambda^{\alpha} \cdot x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \cdot \exp(-\lambda \cdot x), \quad 0 \le x < \infty, \quad \alpha > 0, \lambda > 0, \tag{4-40}$$

wobei hier der Ratenparameter λ verwendet wurde (alternative Schreibweise mit Skalenparameter β = 1/λ), resultiert für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) die Likelihood-Funktion

$$L(\alpha,\lambda \mid \mathbf{x}) = \frac{\lambda^{\alpha \cdot n} \cdot T_2^{\alpha-1} \cdot e^{-\lambda \cdot T_1}}{\Gamma(\alpha)^n}, \text{ mit } T_1 = \sum_{i=1}^{n} x_i \text{ und. } T_2 = \prod_{i=1}^{n} x_i\,. \tag{4-41}$$

Die Summe T_1 und das Produkt T_2 der Stichprobenwerte sind suffiziente Statistiken. Durch Anwendung der JEFFREYS-Regel für die Verteilungsparameter θ = (α,λ) kann ein nicht-informativer Prior abgeleitet werden, der in guter Näherung durch

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\lambda) \propto \frac{1}{\alpha \cdot \lambda} \tag{4-42}$$

approximiert werden kann. Damit resultiert die Posteriordichte

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\lambda \mid \mathbf{x}) \propto \frac{\lambda^{\alpha \cdot n-1} \cdot e^{-\lambda \cdot T_1} \cdot T_2^{\alpha-1}}{\alpha \cdot \Gamma(\alpha)^n}. \tag{4-43}$$

Im Zähler von Gl. (4-43) wurde im Vergleich zu Gl. (4-41) die Exponentialfunktion nach vorn gezogen, um deutlich zu machen, dass die Abhängigkeit der Posteriordichte von λ (bei fixiertem α) die Form einer Gammaverteilung hat. Die gemeinsame Posteriordichte der Verteilungsparameter kann offenbar als Produkt einer bedingten Wahrscheinlichkeitsdichte für λ und der Randverteilung für α dargestellt werden:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\lambda \mid \mathbf{x}) = f_{\lambda}(\lambda \mid \alpha, T_1, n) \cdot f_{\alpha}(\alpha \mid T_1, T_2, n) \tag{4-44}$$

mit der normierten, bedingten Wahrscheinlichkeitsdichte für λ

$$f_{\lambda}(\lambda \mid \alpha, T_1, n) = \frac{\lambda^{\alpha \cdot n-1} \cdot T_1^{\alpha \cdot n} e^{-\lambda \cdot T_1}}{\Gamma(\alpha \cdot n)} = f_{Gam}(\lambda \mid \alpha \cdot n, T_1) \tag{4-45}$$

sowie mit der folgenden nicht normierten Randverteilung für α:

$$f_{\alpha}(\alpha \mid T_1, T_2, n) \propto \frac{\Gamma(\alpha \cdot n)}{\alpha \cdot \Gamma(\alpha)^n} \cdot \frac{T_2^{\alpha-1}}{T_1^{\alpha \cdot n}}. \tag{4-46}$$

Man kann nun zeigen, dass die Randverteilung für α (α>0) mit n ≥ 3 log-konkav ist. Damit können iid Zufallswerte für α effektiv mit der oben erläuterten ARS-Methode generiert werden, wonach mit Gl. (4-45) für jeden dieser α-Werte ein zufälliger λ-Wert generiert werden kann. Aus der Gl. (C-30) von Anhang C ist übrigens zu entnehmen, dass die Korrelation zwischen den Verteilungsparameter

α und λ für große Stichprobenumfänge mit n wächst und sich der Beziehung $\lambda \sim \alpha \cdot n/T_1$ nähert, also $\lambda \sim \alpha/\bar{x}$, wobei $\bar{x}$ den Stichprobenmittelwert bezeichnet. Das folgende Beispiel verdeutlicht die Abhängigkeit der beiden Parameter α und λ.

Beispiel 4.13

Aus $X \sim Gam(4,1)$ wurde eine Zufallsstichprobe vom Umfangt n = 25 generiert, deren empirische Verteilungsfunktion zusammen mit der an die Stichprobe über die ML-Schätzwerte $(\hat{\alpha}, \hat{\lambda})$ angepassten Verteilungsfunktion und der Populations-Verteilungsfunktion $F_{Gam}(x|4,1)$ in Abbildung 4-22 dargestellt ist. Es wurde eine Stichprobe ausgewählt, deren ML-Schätzer mit $\hat{\alpha} = 4{,}231$ und $\hat{\lambda} = 1{,}002$ relativ gut mit den "wahren" Werten der beiden Verteilungsparameter übereinstimmen, auch wenn dies für die weiteren Betrachtungen nicht maßgeblich ist.

Die Abbildung 4-23a zeigt die mit Hilfe der ARS-Methode berechnete Posteriordichte $f_\theta(\alpha,\lambda|\mathbf{x})$. Die starke lineare Korrelation zwischen den beiden Verteilungsparametern ist klar ersichtlich. In Abbildung 4-24a sind 1000 Zufalls-Wertepaare (α,λ) aus dieser Posteriordichte dargestellt (blau), sowie 1000 Wertepaare (α_b,λ_b), die nach der Bootstrap-Methode erzeugt wurden. Hierzu wurden aus $Gam(\hat{\alpha}, \hat{\lambda})$ 1000 Stichproben mit n = 25 generiert, deren ML-Schätzer die Werte (α_b,λ_b) ergeben. Es ist gut zu erkennen, dass mit dem Bootstrapping eine andere Verteilung für die beiden Verteilungsparameter (α,λ) in Richtung höherer Werte resultiert (eine statistische Bewertung erfolgt in Abschnitt 4.2.3). In den Abbildungen 4-23b und 4-24b sind für die weitere Diskussion noch die Posteriordichte sowie die Stichprobenwerte (nach BAYES-Methode bzw. Bootstrapping) dargestellt, wenn für die Gammaverteilung die alternative Parametrisierung $X \sim Ga(\alpha,\beta)$ über den Skalenparameter $\beta = 1/\lambda$ erfolgt.

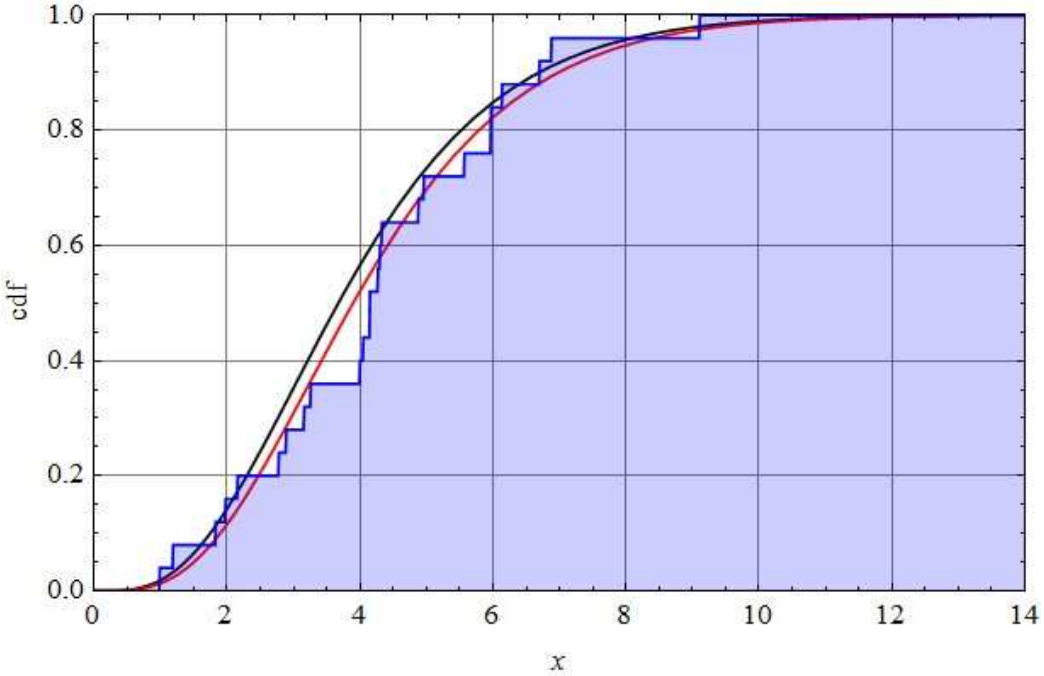


Abbildung 4-22: Empirische Verteilungsfunktion (blau) für eine Stichprobe vom Umfang n = 25 aus der Population X ~ Gam(4,1) im Vergleich zur angepassten parametrischen Verteilung (rot) sowie der Populations-Verteilung (schwarz)

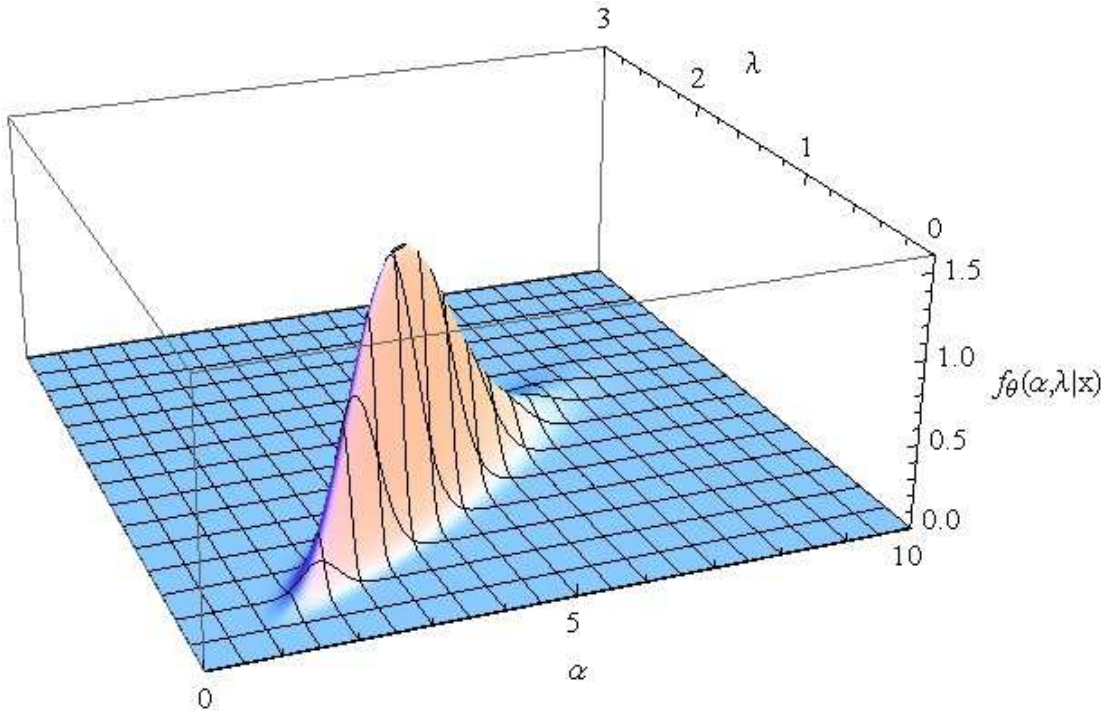


Abbildung 4-23a: Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\lambda|\mathbf{x})$ der Parameter der Gammaverteilung Gam(α,λ) basierend auf der in Abbildung 4-22 dargestellten Stichprobe mit n = 25.

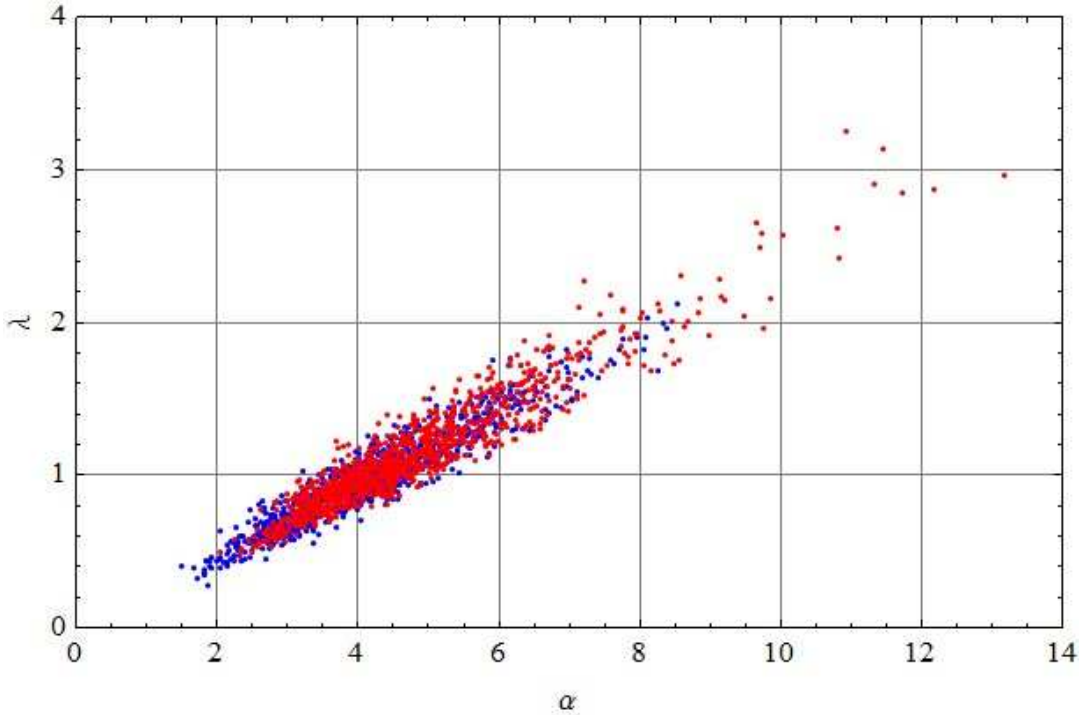


Abbildung 4-24a: Scatterplot für 1000 zufällige Wertepaare (α,λ) aus der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\lambda|\mathbf{x})$ von Abbildung 4-23a (blau) im Vergleich mit 1000 nach der Bootstrap-Methode aus der angepassten Gammaverteilung (Abbildung 4.22) erzeugten Wertepaaren (α_b,λ_b) (rot)

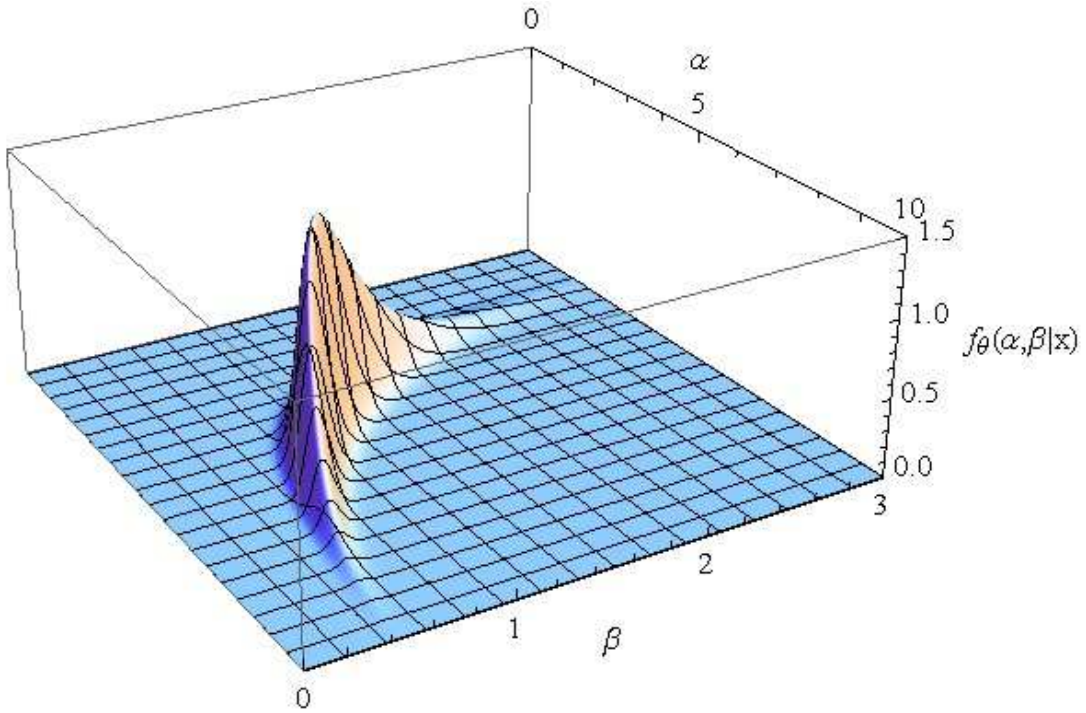


Abbildung 4-23b: Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ der Parameter der Gammaverteilung Ga(α,β) basierend auf der in Abbildung 4-22 dargestellten Stichprobe mit n = 25.

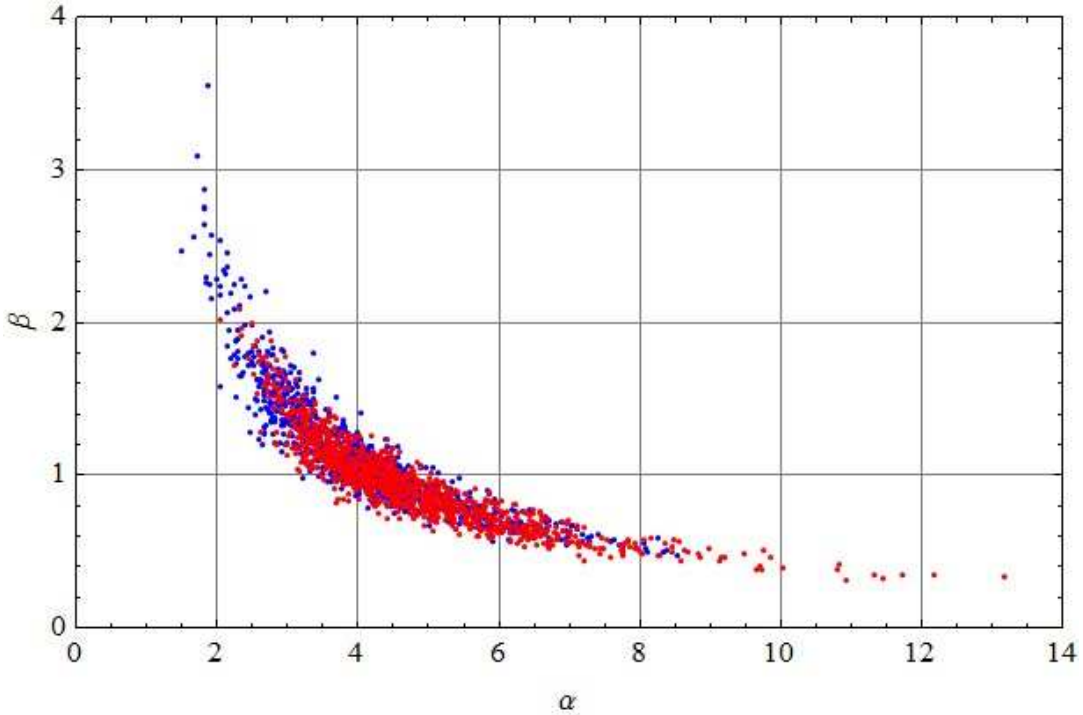


Abbildung 4-24b: Scatterplot für 1000 zufällige Wertepaare (α,β) aus der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ von Abbildung 4-23b (blau) im Vergleich mit 1000 nach der Bootstrap-Methode aus der angepassten Gammaverteilung (Abbildung 4-22) erzeugten Wertepaaren (α_b,β_b) (rot)

Für eine Zufallsgrößen X der Gammaverteilung sind zwei verschiedene Parametrisierungen gebräuchlich: neben dem Formparameter α kann der Ratenparameter λ oder der Skalenparameter β verwendet werden (siehe Anhang C, Abschnitt C.3.4). Zur Unterscheidung dieser Parametrisierung werden im vorliegenden Bericht die Bezeichnungen $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ bzw. $X \sim Ga(\alpha,\beta)$ verwenden. Solange nur die Zufallsgröße X analysiert/simuliert wird, ist es unerheblich, welche Variante verwendet wird, solange $\beta = 1/\lambda$ beachtet wird. Unterschiede ergeben sich allerdings für die Analyse der Parameterunsicherheiten. Die zur Gl. (4-45) äquivalente Verteilung für β ist eine inverse Gammaverteilung. Aus dem Vergleich der Abbildungen 4-23a/4-24a mit 4-23b/4-24b ist zu entnehmen, dass die Parametrisierung über (α,λ) vorteilhafter ist, weil dann eine lineare Korrelation zwischen den Verteilungsparametern resultiert. Für die Analyse der Ergebnisse von Simulationsrechnungen ist dies durchaus von Bedeutung, da z. B der Mittelwert der Stichprobe einer Zufallsgröße nicht mit dem Reziprokwert des Mittelwertes der inversen Zufallsgröße übereinstimmt. Für die 1000 Zufalls-Wertepaare (α,λ) bzw. (α,β) aus den Abbildungen 4-24a und 4-24b resultieren z. B. folgende Mittelwerte m_p und Variationskoeffizienten v_p (Verhältnisse der Standardabweichungen zu den Mittelwerten) der Randverteilungen der drei Parameter (p): $m_\alpha = 4{,}131$; $v_\alpha = 0{,}2876$; $m_\lambda = 0{,}9746$; $v_\lambda = 0{,}3047$; $m_\beta = 1{,}1303$; $v_\beta = 0{,}3374$. Der Reziprokwert von m_β, $1/m_\beta = 0{,}8847$, weicht deutlich von m_λ ab.

<u>Posteriordichte der Parameter (α,β) der KUMARASWAMY-Verteilung</u>

Mit der Wahrscheinlichkeitsdichte der KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$,

$$f_{Ku}(x \mid \alpha,\beta) = \alpha \cdot \beta \cdot x^{\alpha-1} \cdot (1 - x^{\alpha})^{\beta-1}, \qquad 0 \le x \le 1, \quad \alpha,\beta > 0, \tag{4-47}$$

(siehe Anhang C, Abschnitt C.4.3) resultiert für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) die Likelihood-Funktion

$$L(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) = \alpha^n \cdot \beta^n \cdot T^{\alpha-1} \cdot T_\alpha^{\ \beta-1}, \quad \text{mit} \quad T = \prod_{i=1}^{n} x_i \quad \text{und} \quad T_\alpha = \prod_{i=1}^{n} \left(1 - x_i^{\ \alpha}\right). \tag{4-48}$$

Während die Statistik T nur die Stichprobenwerte enthält, ist T_α keine reine Stichprobenstatistik, da hier die direkte Abhängigkeit vom (unbekannten) Populationsparameter α nicht separiert werden kann. Durch Anwendung der JEFFREYS-Regel für die Verteilungsparameter $\theta = (\alpha,\beta)$ kann ein nicht-informativer Prior abgeleitet werden, der in guter Näherung durch

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta) \propto \frac{1}{\alpha \cdot \beta} \tag{4-49}$$

approximiert werden kann. Mit diesem Prior und nach Einführung der Bezeichnung

$$\tau = \tau(\alpha,\mathbf{x}) = -\ln\left(T_\alpha\right) = -\sum_{i=1}^{n} \ln\left(1 - x_i^{\ \alpha}\right) \tag{4-50}$$

kann die Posteriordichte in der folgenden Form dargestellt werden:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) \propto \frac{\beta^{n-1} \cdot \tau^n \cdot e^{-\tau \cdot \beta}}{\Gamma(n)} \cdot \frac{\alpha^{n-1} \cdot T^{\alpha-1}}{T_\alpha \cdot \tau^n}. \tag{4-51}$$

Der Parameter β ist nur im ersten Teil von Gl. (4-51) enthalten, der die Form einer Gamma-verteilung hat und die bedingte Wahrscheinlichkeit für β darstellt. Der zweite Teil ist proportional zur Randverteilung des Parameters α:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta \mid \mathbf{x}) \propto f_{\beta}(\beta \mid \alpha,\mathbf{x},n) \cdot f_{\alpha}(\alpha \mid \mathbf{x},n) \tag{4-52}$$

mit

$$f_{\beta}(\beta \mid \alpha,\mathbf{x},n) = \frac{\beta^{n-1} \cdot \tau^{n} \cdot e^{-\tau\cdot\beta}}{\Gamma(n)} = f_{Gam}(\beta \mid n,\tau), \quad f_{\alpha}(\alpha \mid \mathbf{x},n) \propto \frac{\alpha^{n-1} \cdot T^{\alpha-1}}{T_{\alpha} \cdot \tau^{n}}. \tag{4-53}$$

Bislang liegt zwar noch kein allgemeingültiger Nachweis dafür vor, dass die Randverteilung für den Verteilungsparameter α der KUMARASWAMY-Verteilung log-konkav ist, dies kann aber zumindest für jeden Einzelfall geprüft/gezeigt werden.

Beispiel 4.14

Da die KUMARASWAMY-Verteilung der Betaverteilung ähnlich ist, wird hier die im Beispiel 4-10 für die Betaverteilung Bt(4,8) angegebene Stichprobe (n = 20) verwendet. Die zur KUMARASWAMY-Verteilung berechneten ML-Schätzer sind: $\hat{\alpha} = 2{,}78$ und $\hat{\beta} = 10{,}5$. Die empirische Verteilungsfunktion der Stichprobe ist zusammen mit den über ML-Schätzer angepassten Verteilungsfunktionen der Betaverteilung sowie der KUMARASWAMY-Verteilung in Abbildung 4-25 dargestellt. Abbildung 4-26 zeigt die für diese Stichprobe resultierende Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ und Abbildung 4-27 den Logarithmus der Randverteilung $f_{\alpha}(\alpha|\mathbf{x})$, die offensichtlich log-konkav ist und deshalb zur Anwendung der ARS-Methode geeignet ist.

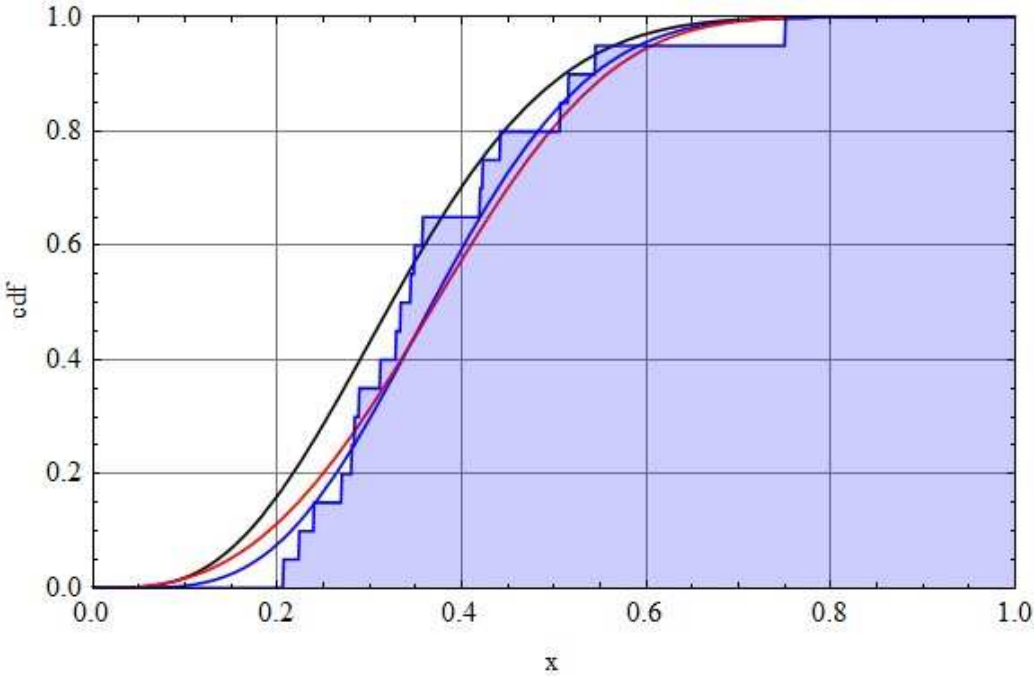


Abbildung 4-25: Empirische Verteilungsfunktion (blau) der Stichprobe (n = 20) aus X ~ Bt(4,8) von Beispiel 4-10; Populations-Verteilung (schwarz) sowie über ML-Schätzer angepasste Betaverteilung (blau) und KUMARASWAMY-Verteilung (rot)

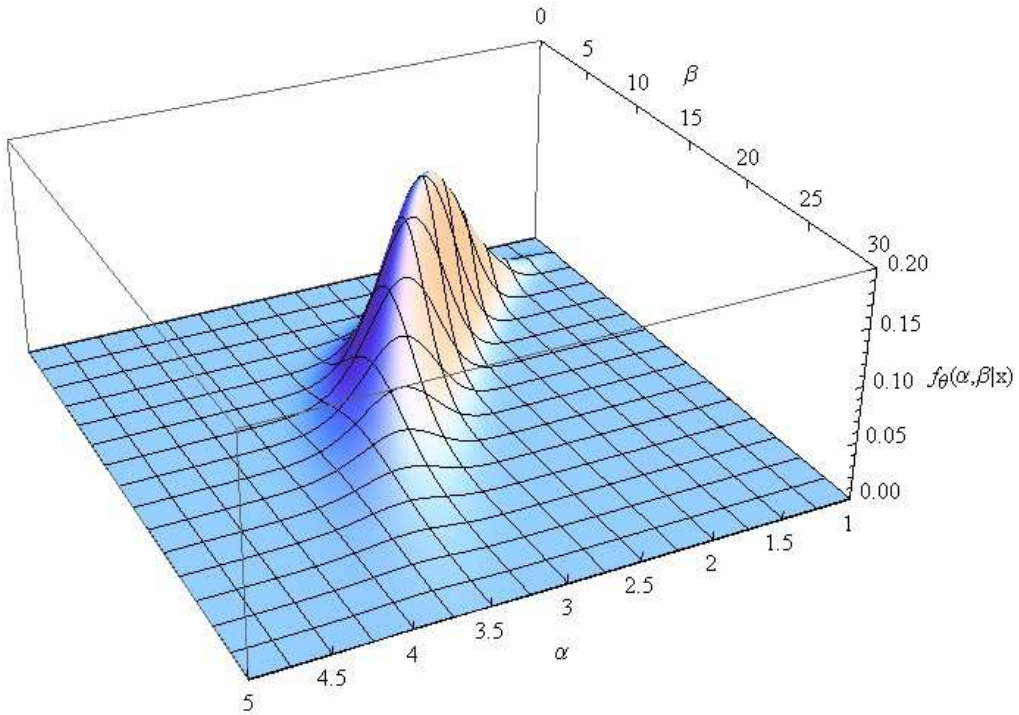


Abbildung 4-26: Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ der Parameter der KUMARASWAMY-Verteilung $Ku(\alpha,\beta)$ basierend auf der in Abbildung 4-25 dargestellten Stichprobe mit n = 20.

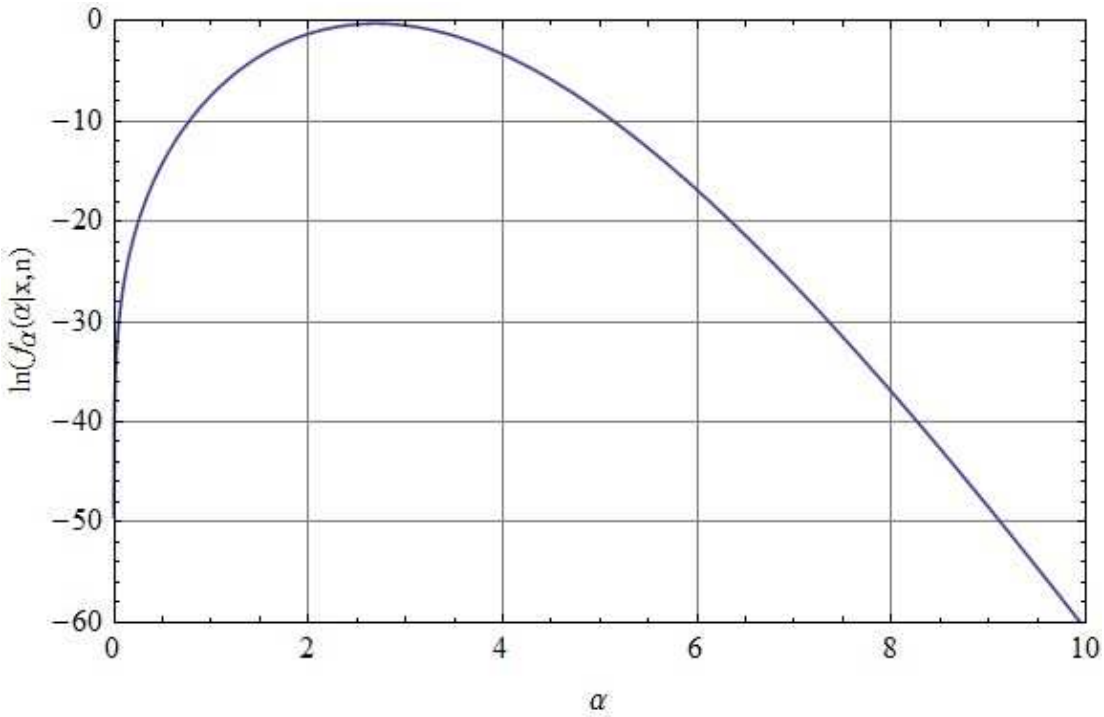


Abbildung 4-27: Logarithmus $h(\alpha)$ der Randverteilung $f_\alpha(\alpha|\mathbf{x})$ der Posteriordichte aus Abbildung 4-26 zur Überprüfung des log-konkaven Verlaufs von $f_\alpha(\alpha|\mathbf{x})$ (Maximum auf Null gesetzt)

Aus Abbildung 4-26 ist klar ersichtlich, dass die Verteilungsparameter der KUMARASWAMY-Verteilung voneinander abhängig sind, allerdings nicht linear (vgl. mit Abbildung 4-19a zur Posteriordichte der Parameter der Betaverteilung für die gleiche Stichprobe).

In Abbildung 4-28 sind 1000 Zufalls-Wertepaare (α,β) aus dieser Posteriordichte dargestellt (blau), sowie 1000 Wertepaaren (α_b,β_b), die nach der Bootstrap-Methode erzeugt wurden. Hierzu wurden aus $Ku(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ 1000 Stichproben mit n = 20 generiert, deren ML-Schätzer die Werte (α_b,β_b) ergeben. Es ist gut zu erkennen, dass mit dem Bootstrapping eine andere Verteilung für die Verteilungsparameter (α,β) in Richtung höherer Werte resultiert (eine statistische Bewertung insbesondere der Randbereiche beider Verteilungen erfolgt in Abschnitt 4.2.3).

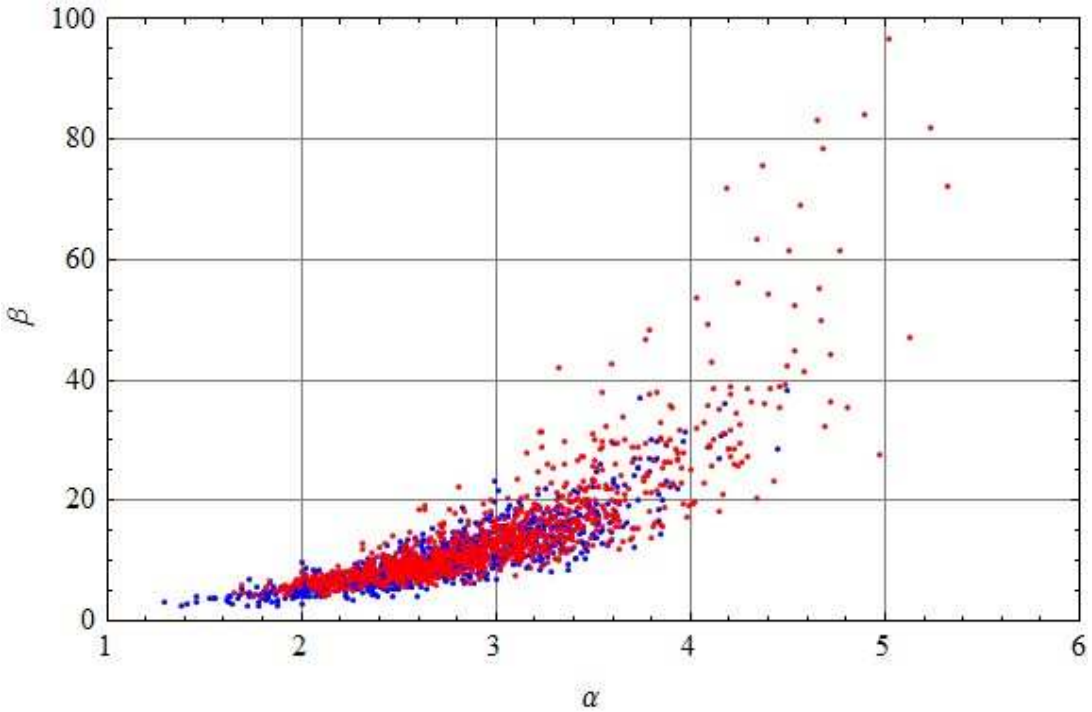


Abbildung 4-28: Scatterplot für 1000 zufällige Wertepaare (α,β) aus der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\alpha,\beta|\mathbf{x})$ von Abbildung 4-26 (blau) im Vergleich mit 1000 nach der Bootstrap-Methode aus der angepassten KUMARASWAMY-Verteilung (Abbildung 4-25) erzeugten Wertepaaren (α_b,β_b) (rot)

4.2.2.4. Spezielle MCMC-Methoden, Slice-Sampling

Zur Lösung spezieller Probleme der Anwendung der in Abschnitt 4.2.2.2 erläuterten allgemeinen Algorithmen des MH- und des GIBBS-Sampling wurden verschiedene spezielle MCMC-Methoden entwickelt, so z. B.:

- ADR-Algorithmus (Adaptive Direction Sampling), beschleunigt die Konvergenz von Markov-Ketten durch Optimierung der Richtung der Zufallsbewegungen [GILK 94];
- AMCR-Algorithmus (Adaptive Markov Chain Regeneration), Übergangswahrscheinlichkeiten $K(\boldsymbol{\theta}'|\boldsymbol{\theta})$ werden im Laufe des Samplings insbesondere bzgl. ihrer Varianz optimiert [GILK 98];

- RJ-Algorithmus (Reversible Jump) zur Spezifizierung komplexer BAYES-Modelle, so z. B. für stochastische Prozesse mit multiplen Wechseln der Verteilungsparameter [GREE 95];
- AV-Methoden (Auxiliary Variable Methods), mit denen Markov-Ketten durch Einführung von Hilfsvariablen zu einem vollständigen System bedingter Wahrscheinlichkeiten ergänzt werden, wonach durch Anwendung des GIBBS-Sampling eine beschleunigte Konvergenz im Vergleich zum MH-Sampling erreicht wird [BES 93], [HIG 98], [DAM 99];
- Slice-Sampling zur Simulation von Zufallsgrößen aus nicht-log-konkaven Verteilungen (auch für multivariate/multimodale Verteilungen geeignet) [NEAL 97], [NEAL 03], ist eine spezielle Anwendung der AV-Methode.

Zu weiteren MCMC-Methoden sei auf [ROB 04] und [LIA 10] verwiesen.

Für die Analyse und probabilistische Modellierung der aus beschränkten Stichprobenumfängen resultierenden epistemischen Unsicherheiten zu Verteilungsparametern von Expositionsfaktoren ist es wichtig, auch für Posteriordichten, die nicht auf Standardverteilungen bzw. auf log-konkave Dichten zurückgeführt werden können, effektive Methoden zur Simulation dieser Zufallsgrößen anzuwenden. Zu diesem Zweck wird nachfolgend das Slice-Sampling erläutert und anhand von relativ einfachen Beispielen für unimodale Wahrscheinlichkeitsdichten veranschaulicht.

Slice-Sampling

Die Methode des Slice-Sampling basiert auf der Realisierung eines ergodischen Prozesses von Zufallsbewegungen in dem durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x)$ begrenzten Raum.[66] Hierzu wird als Hilfsgröße eine weitere Zufallsgröße $Z(x)$ eingeführt, die (in Abhängigkeit von x) im Intervall $[0, f(x)]$ gleichverteilt ist, $Z(x) \sim U_{[0,f(x)]}$. Dann ergibt sich für das Slice-Sampling der folgende Algorithmus:

1. Zur Initialisierung werden ein beliebiger Wert $x_{(1)}$ aus dem Definitionsbereich von X gewählt und eine Zufallszahl $z_{(1)}$ aus der Gleichverteilung $U_{[0,f(x(1))]}$ erzeugt, die den Ordinatenwert des ersten Punktes $(x_{(1)}, z_{(1)})$ unter der Dichte $f_X(x)$ liefert.
2. Zur Generierung der nächsten zufälligen Realisierung von X wird zunächst eine Zufallszahl $z_{(i+1)}$ aus der Gleichverteilung $Z \sim U_{[0,f(x(i))]}$ erzeugt.
3. Zum Wert $z_{(i+1)}$ wird das Intervall
   $$D_{(i+1)} = \{x : f(x) \geq z_{(i+1)}\}$$
   berechnet. Hierzu müssen die Lösungen x_L und x_U der Gleichung $f(x) = z_{(i+1)}$ bestimmt werden, die dieses Intervall von unten (x_L) bzw. oben (x_U) begrenzen. Danach wird $x_{(i+1)}$ als zufällige Realisierung einer in $D_{(i+1)}$ gleichverteilten Zufallszahl $U_{D(i+1)}$ erzeugt. Der Algorithmus wird mit Punkt 2 fortgesetzt, bis die gewünschte Anzahl zufälligen Realisierungen von X erreicht ist.

In Abbildung 4-29 ist der Prozess des Slice-Sampling für die ersten 7 zufälligen Realisierungen der Zufallsgröße $X \sim Gam(5;\ 0{,}2)$ illustriert. Nach genügend vielen Schritten resultiert eine gleichmäßige Verteilung von Punkten unter der Wahrscheinlichkeitsdichte (analog zur Abbildung 4-20).

---

[66] Die nachfolgenden Darlegungen beschränken sich auf den einfachsten Fall einer univariaten sowie unimodalen Zufallsgröße. Zum Slice-Sampling für multivariate und multimodale Zufallsgrößen sei auf [NEAL 03] verwiesen.

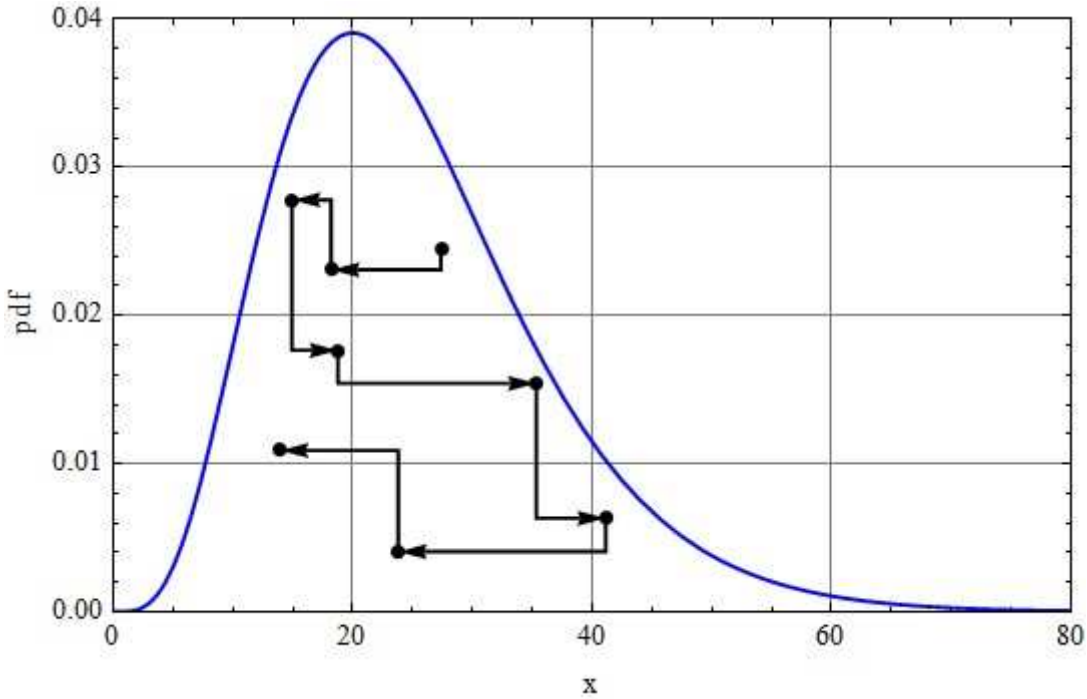


Abbildung 4-29: Illustration zum Slice-Sampling anhand der ersten 7 zufälligen Realisierungen für die Zufallsgröße X ~ Gam(5, 0,2); Startwert x_1 = 27,4; zufällige Realisierungen von X in der Reihenfolge (18,2; 14,9; 18,8; 35,3; 41,1; 23,8; 13,9).

Posteriordichte der Parameter (λ,δ) der Negativen Binomialverteilung

Die Negative Binomialverteilung wird hier in der Parametrisierung X ~ NB(λ,δ) betrachtet, in der sich die folgende Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt (siehe Anhang C, Abschnitt C.5.5)

$$f_{NB}(x \mid \lambda, \delta) = \left(\frac{1}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{1/\delta} \cdot \left(\frac{\delta\cdot\lambda}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{x} \cdot \frac{\Gamma(x+1/\delta)}{x!\cdot\Gamma(1/\delta)}, \qquad \lambda,\ \delta > 0. \tag{4-54}$$

Die NB-Verteilung geht mit $\delta \to 0$ in eine POISSON-Verteilung über. Für eine Stichprobe **x** aus n Einzelwerten x_i (i = 1 bis n) resultiert die Likelihood-Funktion

$$L(\lambda, \delta \mid \mathbf{x}) = \left(\frac{1}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{n/\delta} \cdot \left(\frac{\delta\cdot\lambda}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{T} \cdot T_\delta, \quad \text{mit} \tag{4-55}$$

$$T = \sum_{i=1}^{n} x_i \quad \text{und} \quad T_\delta = \prod_{i=1}^{n} \frac{\Gamma(x_i + 1/\delta)}{\Gamma(x_i+1)\cdot\Gamma(1/\delta)}. \tag{4-56}$$

Während T eine reine Stichprobenstatistik ist, kann in T_δ die Abhängigkeit vom (unbekannten) Populationsparameter δ nicht separiert werden.

Die Anwendung der JEFFREYS-Regel auf den Vektor **θ** = (λ,δ) der Verteilungsparameter führt nicht zu einer handhabbaren Priordichte. Wendet man sie dagegen nur auf λ bei gegebenem δ an, indem

die gemeinsame Priordichte als Produkt einer bedingten Dichte für λ bei gegebenem δ sowie einer Marginalverteilung für δ dargestellt wird,

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta) = f_{\lambda}(\lambda \mid \alpha) \cdot f_{\delta}(\delta). \tag{4-57}$$

so erhält man nach Gl. (2-75) und (2-76) die bedingte Priordichte

$$f_{\lambda}(\lambda \mid \delta) \propto \frac{1}{\sqrt{\lambda \cdot (1+\delta \cdot \lambda)}}. \tag{5-58}$$

Für $\delta \to 0$ geht Gl. (5-58) in den Prior der POISSON-Verteilung über (siehe Gl (4-23)), weshalb es sinnvoll sein könnte, für δ eine unbestimmte Gleichverteilung anzunehmen:

$$f_{\delta}(\delta) \propto \text{const}. \tag{5-59}$$

Mit dem Gl. (5-57) bis (5-59) kann nun die Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$ wie folgt dargestellt werden:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta \mid \mathbf{x}) = f_{\lambda}(\lambda \mid \alpha,\mathbf{x}) \cdot f_{\delta}(\delta \mid \mathbf{x}) \quad \text{mit} \tag{4-60}$$

$$f_{\lambda}(\lambda \mid \alpha,\mathbf{x}) = \frac{\Gamma(T+1/2+n/\delta)}{\Gamma(T+1/2)\cdot\Gamma(n/\delta)} \cdot \left(\frac{\delta\cdot\lambda}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{(T+1/2)-1} \cdot \left(\frac{1}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{n/\delta-1} \cdot \frac{\delta}{(1+\delta\cdot\lambda)^2}, \tag{4-61}$$

$$f_{\delta}(\delta \mid \mathbf{x}) \propto \frac{\Gamma(T+1/2)\cdot\Gamma(n/\delta)}{\Gamma(T+1/2+n/\delta)} \cdot \frac{T_{\delta}}{\sqrt{\delta}} \tag{4-62}$$

und T bzw. T_{δ} gemäß Gl. (4-56). Diese Darstellung hat den großen Vorteil, dass λ bei gegebenem Wert von δ mit Hilfe einer Betaverteilung erzeugt werden kann. Durch Substitution $y = \delta\cdot\lambda//(1+\delta\cdot\lambda)$ geht Gleichung (4-61) unter Beachtung von $dy/d\lambda = \delta/(1+\delta\cdot\lambda)^2$ in die Wahrscheinlichkeitsdichte der Betaverteilung $Y \sim Bt(T+1/2, n/\delta)$ über (vgl. Anhang C, Gl. (C-50). Für die Realisierungen von δ kann dann λ (in Abhängigkeit von δ) erzeugt werden, indem zunächst eine zufällige Realisierung y aus der Betaverteilung $Y \sim Bt(T+1/2, n/\delta)$ generiert wird und anschließend $\lambda = \delta^{-1}\cdot y/(1-y)$ gesetzt wird. Dies kann dann auch "auf einen Schlag" für beliebig viele Realisierungen von δ aus der mit Gl. (4-62) definierten (marginalen) Posteriordichte erfolgen. Die Vorgehensweise ist somit ähnlich zu dem in Beispiel 4-7 zur Erzeugung zufälliger Realisierungen der Parameter (μ,σ) der Normalverteilung dargestellten Weg (wobei dort auch σ aus einer Standardverteilung generiert werden konnte) sowie zu der in Abschnitt 4.2.2.3 zur Erzeugung zufälliger Realisierungen der Parameter (α,β) der Gamma- und der KUMARASWAMY-Verteilung erläuterten Methode (wobei dort α sehr einfach/effektiv mittels ARS-Methode für die log-konkaven Posteriordichten erzeugt werden konnte).

Die mit Gl. (4-26) für den Parameter δ der Negativen Binomialverteilung definierte Dichtefunktion ist nicht log-konkav. Durch Anwendung der Methode des Slice-Sampling ist jedoch auch hierfür ein relativ einfacher/effektiver Weg zur Erzeugung von zufälligen Realisierungen aus der Posteriordichte gegeben (die dann für die Analyse/Simulation von Unsicherheiten der Verteilungsparameter zur Verfügung stehen, siehe Abschnitt 4.2.3). Dies wird im folgenden Beispiel demonstriert.

Beispiel 4.15

Zur Negativen Binomialverteilung X ~ NBin(r,p) = NB(λ,δ) mit λ = r·(1-p)/p und δ = 1/r (siehe Anhang C, Abschnitt C.5.5) wird eine zufällige Stichprobe **x** mit dem Umfang n = 50 aus einer durch die Verteilungsparameter r = 10 und p = 0,3 (bzw. λ = 70/3 ≅ 23,3 u δ = 0,1) definierten Population betrachtet. Die Stichprobenwerte sind: **x** = (25, 30, 35, 19, 30, 10, 30, 19, 26, 38, 27, 33, 20, 31, 23, 26, 12, 19, 9, 42, 21, 31, 18, 20, 13, 23, 12, 20, 37, 18, 28, 28, 14, 11, 16, 37, 22, 35, 24, 14, 25, 31, 30, 16, 32, 9, 24, 18, 16, 26). Erwartungswert und Standardabweichung der Stichprobe sind 23,5 und 8,38. Die Maximum-Likelihood-Schätzer der Verteilungsparameter sind $\hat{r}$ = 11,1 und $\hat{p}$ = 0,322 bzw. $\hat{\lambda}$ = 23,5 und $\hat{\delta}$ = 0,0897.

In Abbildung 4-30 ist die empirische Verteilungsfunktion zusammen mit der über die ML-Schätzer angepassten Verteilungsfunktion dargestellt. Abbildung 4-31 zeigt die für diese Stichprobe resultierende Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$. Abbildung 4-32 verdeutlicht, dass die Randverteilung der Posteriordichte für δ, $f_{\boldsymbol{\delta}}(\delta|\mathbf{x})$, nicht log-konkav ist, weshalb in diesem Fall das Sampling nicht mit der ARS-Methode erfolgen kann. Durch Anwendung des Slice-Sampling resultiert für δ jedoch ebenfalls eine perfekte Verteilung der zufälligen Realisierungen entsprechend der Randdichte, wie aus Abbildung 4-33 ersichtlich (für diese Darstellung wurde $f_\delta(\delta|x)$ normiert, und es wurden 2000 Zufallswerte erzeugt. In Abbildung 4-34 sind die resultierenden 2000 Zufalls-Wertepaare (λ,δ) aus der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$ dargestellt (blau), sowie 2000 Wertepaaren (λ_b,δ_b), die nach der Bootstrap-Methode erzeugt wurden. Hierzu wurden aus NB($\hat{\lambda}$, $\hat{\delta}$) 2000 Stichproben mit n = 50 generiert, deren ML-Schätzer die Werte (λ_b,δ_b) ergeben. Die Abbildung 4-35 zeigt die aus den je 2000 Werten für δ und δ_b bzw. λ und λ_b resultierenden Verteilungsfunktionen.

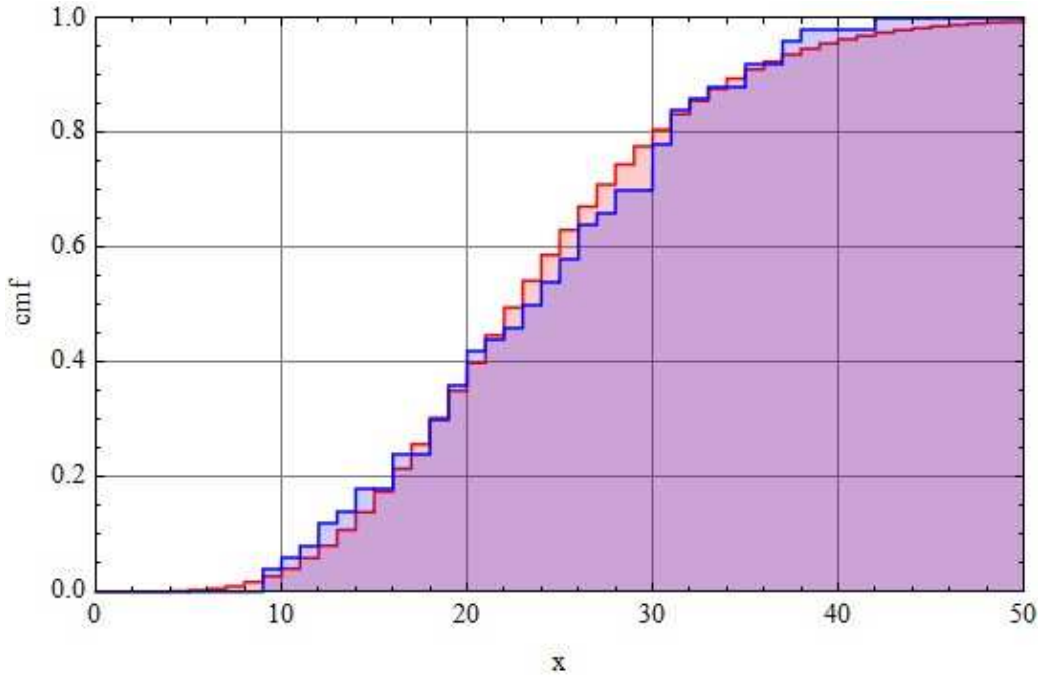


Abbildung 4-30: Empirische Verteilungsfunktion (blau) der Stichprobe (n = 50) aus X ~ NBin(10;0,3) zusammen mit der über die ML-Schätzwerte der Verteilungsparameter angepassten Negativen Binomialverteilung (rot)

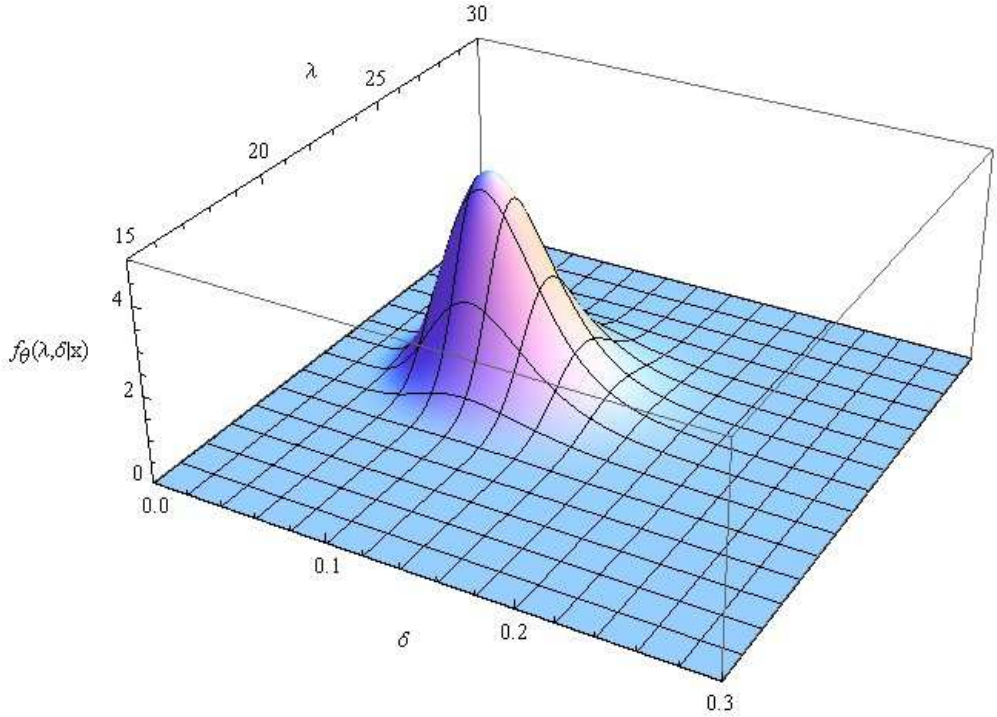


Abbildung 4-31: Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$ der Parameter der Neg-Binomialverteilung $X \sim NB(\lambda,\delta)$ basierend auf der in Abbildung 4-30 dargestellten Stichprobe mit n = 50.

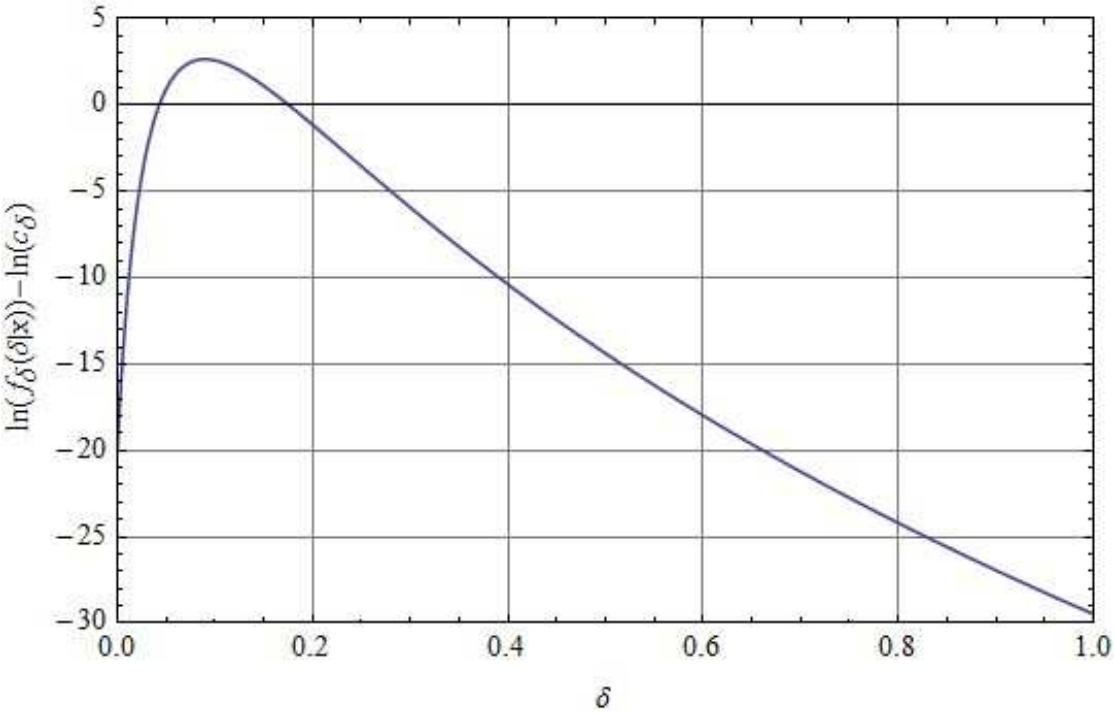


Abbildung 4-32: Logarithmus der Randverteilung $f_\delta(\delta|\mathbf{x})$ der Posteriordichte aus Abbildung 4-31; $f_\delta(\delta|\mathbf{x})$ ist offenbar keine log-konkave Funktion von δ

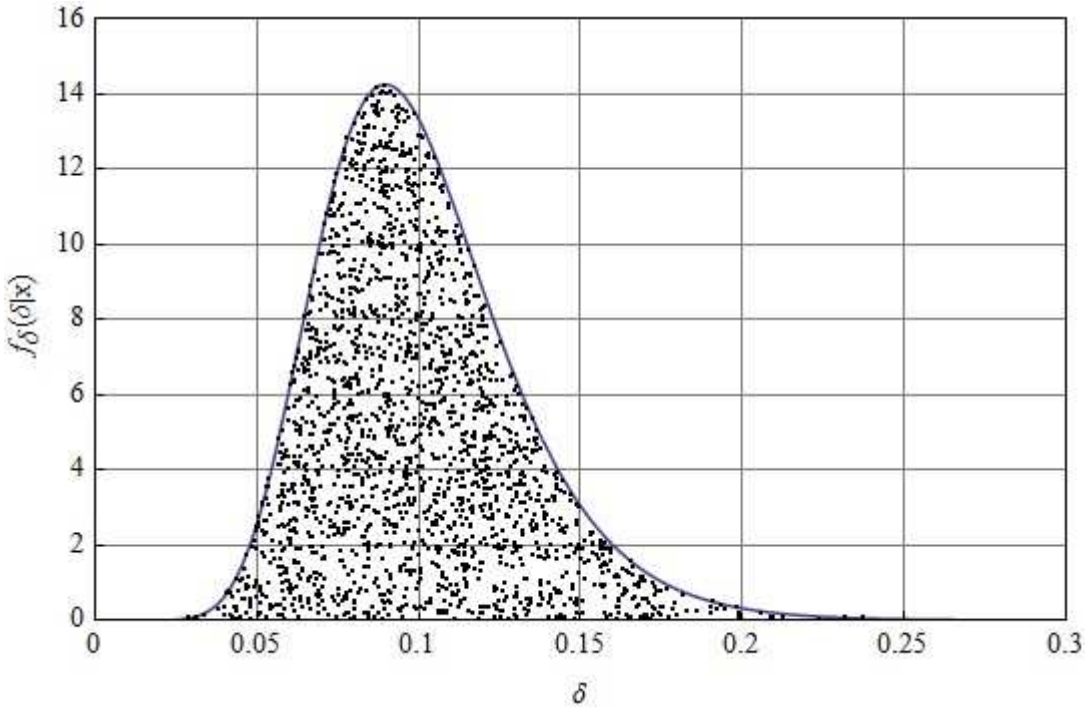


Abbildung 4-33: Darstellung der mittels Slice-Sampling aus $f_{\boldsymbol{\delta}}(\delta|\mathbf{x})$ erzeugten 2000 Zufallswerte

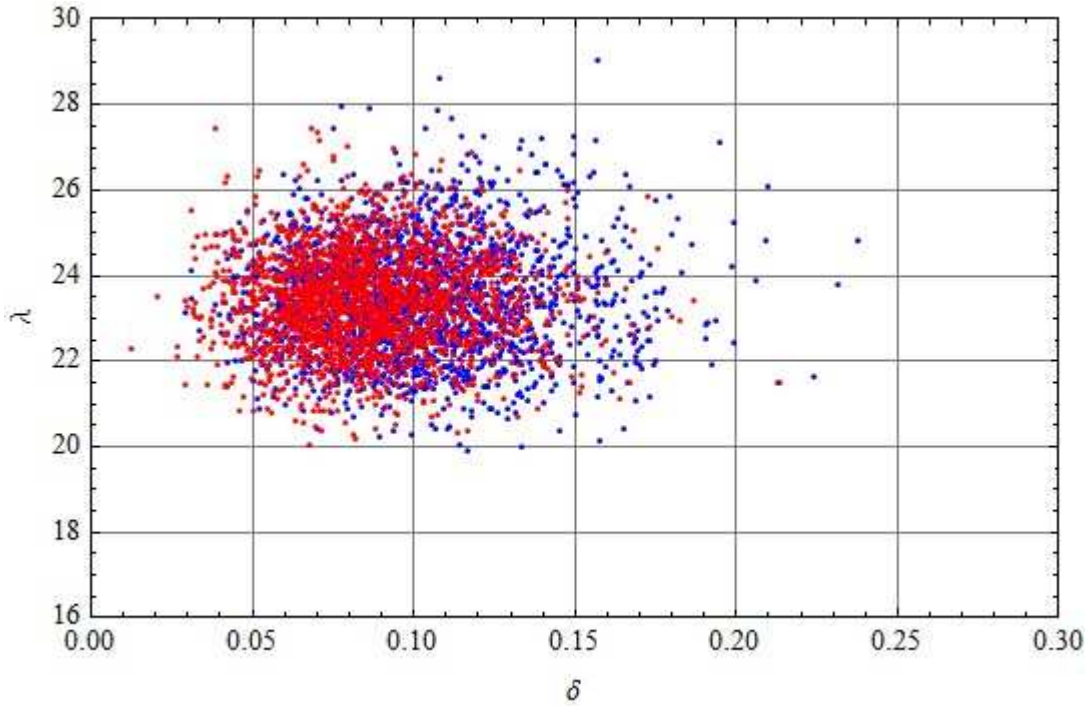


Abbildung 4-34: Scatterplot für 2000 zufällige Wertepaare (λ,δ) aus der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$ von Abbildung 4-31 (blau) im Vergleich mit 2000 mittels Bootstrapping der angepassten Negativen Binomialverteilung $X \sim NB(\hat{\lambda}, \hat{\delta})$ erzeugten Wertepaaren (λ_b,δ_b) (rot)

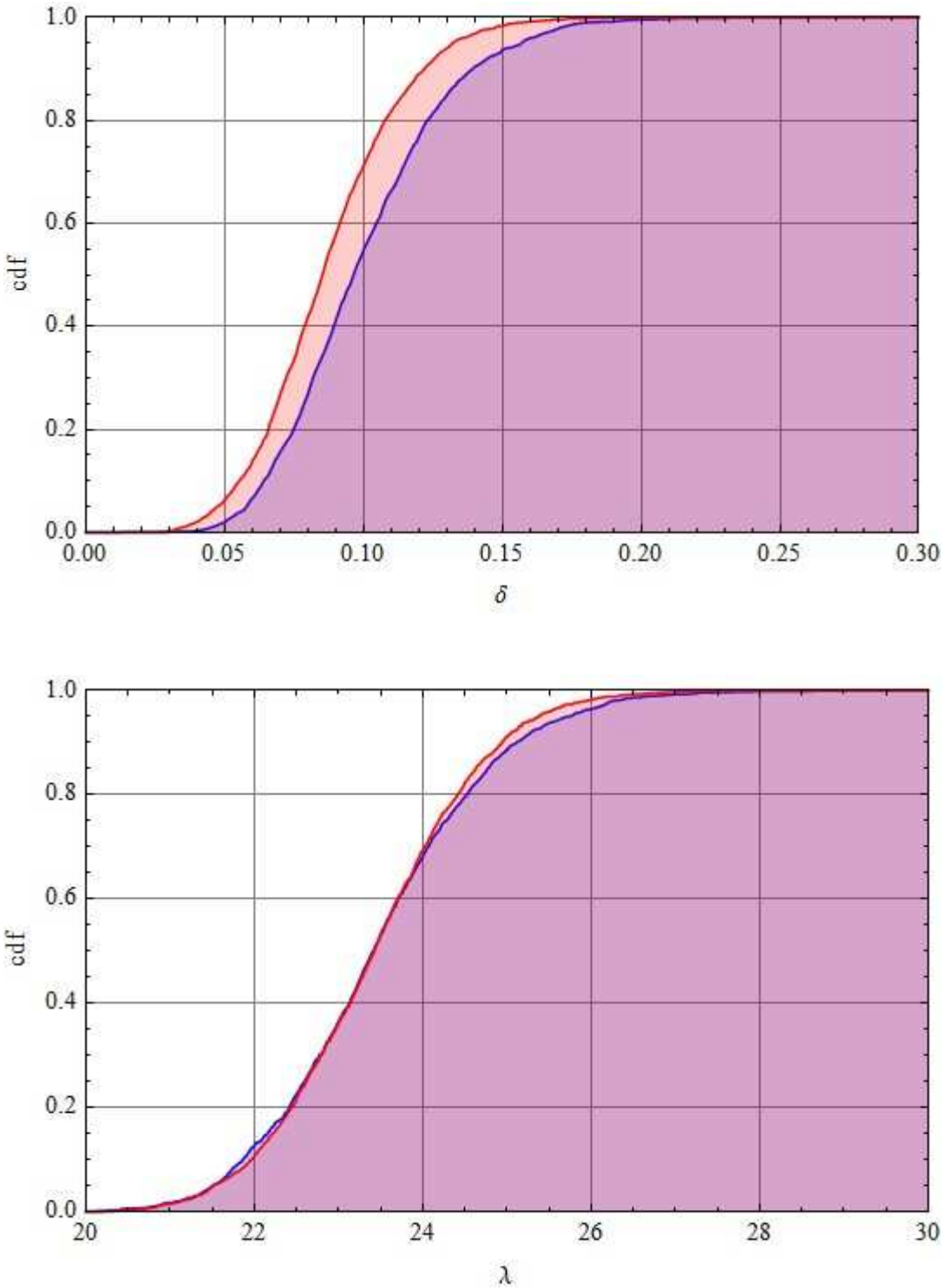


Abbildung 4-35: Randverteilungen der mit BAYES-Verfahren (blau) bzw. mittels Bootstrapping (rot) auf Basis der Stichprobe **x** (mit n = 50) erzeugten zufälligen Realisierungen der Verteilungsparameter der Negativen Binomialverteilung NB(λ,δ);
oberes Bild: Dispersionsparameter δ; unteres Bild: Ratenparameter λ

Aus Abbildung 4-34 ist zu erkennen, dass mit dem Bootstrapping insbesondere für die Dispersion δ der Negativen Binomialverteilung im Vergleich zu BAYES'schen Posteriorverteilung eine in Richtung kleinerer Werte versetzte Verteilung resultiert. Dies wird aus den Randverteilungen für δ und δ_b (siehe Abbildung 4-35, oben) noch deutlicher und auch quantitativ bewertbar. Die Mittelwerte der beiden Verteilungen liegen bei $\overline{\delta} = 0{,}0999$ bzw. $\overline{\delta}_b = 0{,}0870$. Für den Ratenparameter λ resultieren dagegen nach den beiden Verfahren ähnliche Verteilungsfunktionen, wobei mittels Bootstrapping die oberen Perzentile etwas unterschätzt werden (siehe Abbildung 4-35, unten). Die Mittelwerte der beiden Verteilungen liegen bei $\overline{\lambda} = 23{,}5$ bzw. $\overline{\lambda}_b = 23{,}4$.

Zu diesem Beispiel sei noch vermerkt, dass die (λ,δ)-Parametrisierung der Negativen Binomialverteilung nach Gl. (4-54) zur Schätzung der Verteilungsparameter vorteilhaft ist, weil die Abhängigkeit zwischen diesen Parametern sehr schwach ist, wie gut aus der Form der Posteriordichte (Abbildung 4-31) bzw. dem Scatterplot (Abbildung 4-34) ersichtlich ist. Zum Vergleich sind in Abbildung 4-36 die Scatterplots für die (α,β)- sowie für die gängige (r,p)-Parametrisierung dargestellt ($X \sim NegB(\alpha,\beta)$ bzw. $\sim NBin(r,p)$; siehe Anhang C, Gl. (C-89) bzw. (C-85)), die sich aus den 2000 Wertepaaren (λ,δ) von Abbildung 4-34 durch die Transformationen $\alpha = 1/\delta$ und $\beta = \delta\cdot\lambda$ bzw. $r = 1/\delta$ und $p = 1/(1+\delta\cdot\lambda)$ ergeben. Eine direkte Berechnung der Posteriorverteilungen dieser Parameter wäre mit erheblichen Problemen verbunden.

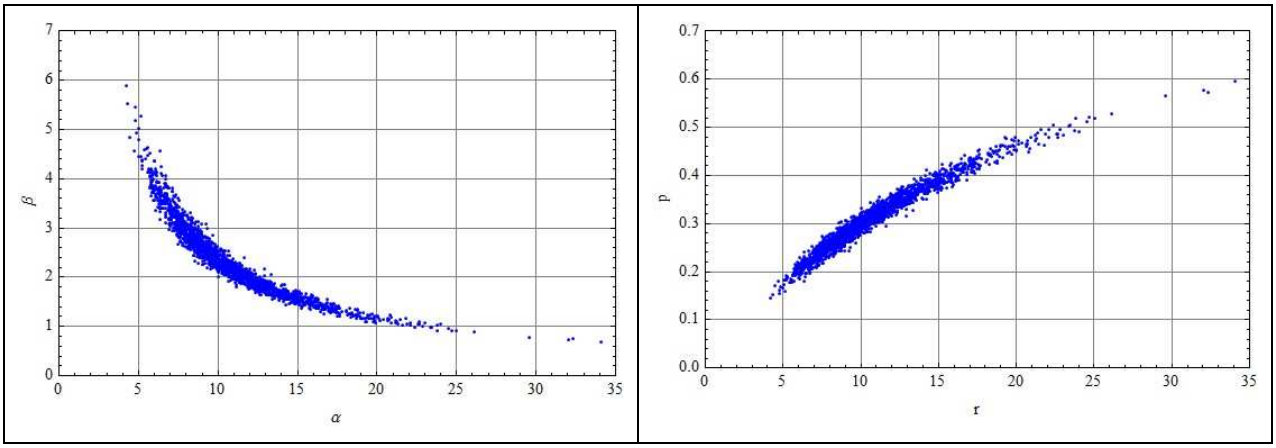


Abbildung 4-36: Scatterplots zur Posteriorverteilung der Verteilungsparameter (α,β) (links) bzw. (r,p) (rechts) der alternativen Parametrisierungen der Negativen Binomialverteilung (siehe Anhang C, Abschnitt C.5.5) entsprechend den aus der BAYES'schen Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\lambda,\delta|\mathbf{x})$ erzeugten 2000 Zufallswertepaaren (λ,δ) aus Abbildung 4-34.

Eine wichtige Schlussfolgerung aus dem Beispiel 4-15 besteht somit darin, dass zur Quantifizierung der epistemischen Unsicherheiten zu Parametern von Verteilungsfamilien eine Parametrisierung gewählt werden sollte, in der die Verteilungsparameter möglichst keine starken gegenseitigen Abhängigkeiten aufweisen und mit effektiven (MCMC-)Methoden generiert werden können. Zur anschließenden Erzeugung von Zufallswerten für die eigentliche Größe X (z. B. im Rahmen von 2D-MC-Simulationen für probabilistische Expositionsmodelle) kann dann eine Transformation zu jenen Verteilungsparametern erfolgen, die in der verwendeten Software implementiert sind.

4.2.3. BAYES-Methode und Bootstrapping zur Ermittlung von Parameterunsicherheiten

Wie bereits in Abschnitt 4.2.1 vermerkt, ist für mehrparametrige statistische Verteilungsfamilien die Beurteilung von Unsicherheiten der Schätzung dieser Parameter auf der Basis von Stichproben nur in wenigen Fällen mit den klassischen Methoden der Berechnung von Konfidenzbereichen möglich. Sehr verbreitet ist deshalb das Bootstrapping zur Quantifizierung von Parameterunsicherheiten unter Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Abhängigkeit, da es eine relativ einfach zu realisierende Methode darstellt. Im Abschnitt 4.2.2 wurde bei den Erläuterungen zur Anwendung von BAYES-Methoden im Rahmen einiger Beispiele bereits gezeigt, dass die durch Bootstrapping erzeugten Verteilungen für die Parameter diverser Verteilungsfamilien z. T. erheblich von den BAYES'schen Posteriordichten abweichen, wovon insbesondere die Randbereiche betroffen sind. Damit war noch keine Bewertung verbunden. Hierzu ist die Frage zu beantworten, welche der Verteilungen die Parameterunsicherheiten korrekt bzw. genauer erfassen.

Gibt es zur Beantwortung dieser Frage ein objektives Kriterium? Wenn man die unterschiedliche Interpretation des Begriffs "Wahrscheinlichkeit" nach klassischem bzw. BAYES'schem Verständnis berücksichtigt (siehe Abschnitt 2.7.1), so kann eine dbzgl. Bewertung als problematisch angesehen werden. Solange im Rahmen der BAYES-Methode jedoch keine "subjektiven" Priorverteilungen zur Anwendung kommen, sondern mit nicht-informativen Priorverteilungen gerechnet wird, kann aber die Konformität von Ergebnisseen des Bootstrapping bzw. von BAYES'schen Berechnungen mit den nominellen Aussagen zu Konfidenzbereichen bzw. "glaubwürdigen" Intervallen im Sinne des frequentistischen Verständnisses verglichen werden. Wie in [BER 06] verdeutlicht, sprechen gute frequentistische Ergebnisse von BAYES'schen Berechnungen für diesen Ansatz und stellen zugleich eine Brücke zwischen der klassischen und der BAYES'schen statistischen Inferenz dar.

In diesem Sinne wird nachfolgend beispielhaft für einige wichtige Verteilungsarten frequentistisch durch Simulationsrechnungen überprüft, wie gut untere und obere Quantile BAYES'scher Posterior-verteilungen bzw. die jeweils durch Bootstrapping geschätzten Konfidenzgrenzen der klassischen Definition von Konfidenzgrenzen entsprechen, wonach eine vergleichende Bewertung der Eignung dieser Methoden zur Quantifizierung von Parameterunsicherheiten erfolgt.

Hierzu wird für parametrische Verteilungsarten $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ eine große Anzahl N von Stichproben $\mathbf{x}$ mit einem bestimmten Umfang n erzeugt. Für die skalaren Verteilungsparameter θ_1, θ_2 werden aus den Posteriordichten $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ durch MC-Simulation oder ggf. auch analytisch die Quantile $\theta_{i;p}$ und $\theta_{i;1-p}$ für drei vorgegebene Wahrscheinlichkeiten von p = (0,025; 0,05; 0,1) bestimmt. Im Sinne nomineller frequentistischer Konfidenzaussagen sollten dann die wahren Parameterwerte θ_i, (die hier ja bekannt sind und der Erzeugung der zufälligen Stichproben $\mathbf{x}$ zugrunde liegen) bei N Versuchen nicht häufiger als in p·100% der Versuche durch die drei unteren Quantile überschritten und durch die drei oberen Quantile unterschritten werden.

Ähnlich wird die Einhaltung von Konfidenzgrenzen durch die mittels Bootstrapping berechneten Quantile der Verteilungsparameter θ_i überprüft, wobei hier für jede der N Stichproben eine große Anzahl B von Bootstrap-Replikationen mit den aus der Originalstichprobe geschätzten Werten der Verteilungsparameter erforderlich ist, um daraus auf die Unsicherheitsverteilung zu schließen und

Quantile dieser Verteilung zu berechnen.[67] Der Simulationsaufwand für die Realisierung der Bootstrap-Methode überschreitet dadurch den der BAYES'schen Berechnungen um ein Vielfaches.

Grundsätzlich muss zu diesem Vergleich angemerkt werden, dass die frequentistische Interpretation von Konfidenzgrenzen, wonach diese mit den vorgegebenen Häufigkeiten unter bzw. über dem wahren Wert eines Verteilungsparameters liegen, wenn diese Prüfung sehr oft wiederholt wird (die Aussage bezieht sich also auf den Raum aller denkbaren Stichproben), nicht dem Verständnis der BAYES-Theorie entspricht. Hier werden Wahrscheinlichkeitsaussagen nicht auf Basis von unendlich vielen (bzw. einer großen Zahl N) hypothetischer Stichproben getroffen, sondern nur die real mit einer Stichprobe vorliegenden Daten zur Ableitung von Wahrscheinlichkeitsaussagen zu den unbekannten Verteilungsparametern zugrunde gelegt. Die nachfolgende frequentistische Bewertung BAYES'scher Posteriordichten entspricht deshalb nicht dem eigentlichen Sinn dieser Theorie.

In den Abschnitten 4.2.3.1 und 4.2.3.2 werden nur die Randverteilungen der Verteilungsparameter betrachtet. Auf die Quantifizierung der Stärke ihrer Abhängigkeit nach BAYES'schen Modellen bzw. den Ergebnissen des Bootstrappings wird in Abschnitt 4.3 mit Hilfe von Copulas eingegangen.

Soweit nicht anders vermerkt, basieren die nachfolgend dargestellten Ergebnisse auf Berechnungen für jeweils N = 1000 Stichproben. Zur nominellen Einhaltung einer unteren Konfidenzgrenze zum Vertrauensniveau von (1-p) darf dann die Anzahl der Stichproben, für die das p-Quantil über dem wahren Wert des entsprechenden Verteilungsparameters liegt, nicht größer als p·N sein (bei N = 1000 sind dies für p = 0,05 z. B. 50 Fälle). Analog darf zur nominellen Einhaltung einer oberen Konfidenzgrenze zum Vertrauensniveau (1-p) die Anzahl der Stichproben, für die das (1-p)-Quantil unter dem wahren Wert des entsprechenden Verteilungsparameters liegt, nicht größer als p·N sein (bei N = 1000 sind dies für p = 0,025 z. B. 25 Fälle).

Für das Bootstrapping werden für jede Stichprobe B Replikationen berechnet, aus denen die p- bzw. (1-p)-Quantile geschätzt werden. Für BAYES'sche Berechnungen werden B zufällige Realisierungen entsprechend der Posteriorverteilung der Verteilungsparameter erzeugt, mit denen die benötigten Quantile der Posteriorverteilung geschätzt werden. Es wird hauptsächlich mit B = 1000 gerechnet.

Die mit N = 1000 und B = 1000 erzielbaren Aussagen weisen zwar noch signifikante statistische Unsicherheiten auf (die z. B. bei Verzehnfachung von N und B deutlich geringer ausfallen würden); für den hier angestrebten Vergleich zwischen den BAYES'schen Berechnungen und den Ergebnissen des Bootstrappings sind sie jedoch akzeptabel.

4.2.3.1. Verteilungsarten mit analytisch quantifizierbaren Parameterunsicherheiten

Zunächst wird die Konformität von unteren und oberen Quantilen mit der klassischen Definition von Konfidenzgrenzen für einige einfache Verteilungen betrachtet, für die Posteriordichten der Verteilungsparameter für Stichproben auch analytisch angegeben werden können. Hierzu werden die Exponential-, die POISSON- und die Normalverteilung betrachtet (analytische Beziehungen zu den Posteriordichten der jeweiligen Verteilungsparameter wurden in den Beispielen 4.8, 4.9 bzw.

---

[67] Sind z. B. $\hat{\theta}_1$ und $\hat{\theta}_2$ die Punktschätzer für eine (der N) Originalstichproben, so werden B Replikationen mit dem gleichen Stichprobenumfang n aus der Verteilung $V(\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)$ erzeugt, für die wiederum Punktschätzer $\hat{\theta}_{1,b}$ und $\hat{\theta}_{2,b}$ (b von 1 bis B) berechnet werden, aus denen dann die Quantile $\theta_{1,p}$ und $\theta_{1,p}$ bestimmt werden.

4.7 angegeben). Da in diesen drei Fällen die klassischen Konfidenzgrenzen mit den entsprechenden Quantilen der Posteriorverteilung übereinstimmen, vermitteln diese Beispiele einen Eindruck zu den statistischen Unsicherheiten der Überprüfung bei N = 1000 Stichproben sowie B = 1000 zufälligen Realisierungen der Posteriorverteilung. Zum Vergleich sind deshalb auch analytische Berechnungen der p-Quantile für die N Stichproben durchgeführt worden.

Parameter λ der Exponentialverteilung $X \sim Ex(\lambda)$

Die Tabelle 4-13 enthält die Ergebnisse zur Exponentialverteilung, für die mit einem Populationswert von $\lambda = 1$ gerechnet wurde. Die statistischen Unsicherheiten dieser Simulationsrechnungen machen sich zwar noch deutlich bemerkbar, es ist aber zu erkennen, dass die betrachteten Quantile der Posteriorverteilung relativ gut mit den nominellen Wahrscheinlichkeiten der Über- bzw. Unterschreitung von Konfidenzgrenzen übereinstimmen. Zu den durch Bootstrapping berechneten p-Quantilen/Konfidenzgrenzen ist dagegen festzustellen, dass die unteren Quantile zu häufig über dem wahren Wert des Verteilungsparameters λ liegen, wogegen die oberen Quantile im Vergleich zu den nominellen Wahrscheinlichkeiten zu selten kleiner als λ sind. Ursache ist eine Verschiebung der aus dem Bootstrapping resultierenden Verteilungen der Schätzwerte λ_b hin zu größeren Werten, wie in Abbildung 4-37 für ein typisches Beispiel dargestellt.

Tabelle 4-13: Anteil von Überschreitungen des Parameterwertes $\lambda = 1$ der Exponentialverteilung $X \sim Ex(\lambda)$ durch untere Quantile bzw. Unterschreitungen durch obere Quantile bei Schätzung von λ_p aus der analytischen Posteriordichte $f_\lambda(\lambda|\mathbf{x})$, aus Zufallswerten für die Posteriorverteilung bzw. durch Bootstrapping; N = 1000; B = 1000; für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100, 200); Angaben **in Prozent von N**

Stichproben-umfang	**p = 0,025**	**p = 0,05**	**p = 0,1**	**p = 0,9**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
	für N analytisch berechnete Posteriordichten					
n = 25	2,8	4,5	9,9	11,5	5,6	3,0
n = 50	2,6	5,0	9,1	9,1	4,1	1,9
n = 100	2,5	5,3	9,9	11,1	5,8	3,3
n = 200	2,8	5,6	11,6	9,5	4,9	2,2
	mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,7	4,7	10,4	11,6	5,8	2,8
n = 50	2,9	5,3	9,2	9,2	4,2	1,9
n = 100	2,8	5,5	10,3	11,2	6,1	3,6
n = 200	2,9	5,5	11,7	9,4	4,7	2,4
	mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	4,7	8,0	14,6	6,5	3,0	0,7
n = 50	4,3	7,0	11,8	6,3	2,4	1,1
n = 100	4,6	7,1	12,7	9,3	4,3	2,5
n = 200	3,6	6,9	13,6	8,1	3,7	1,7

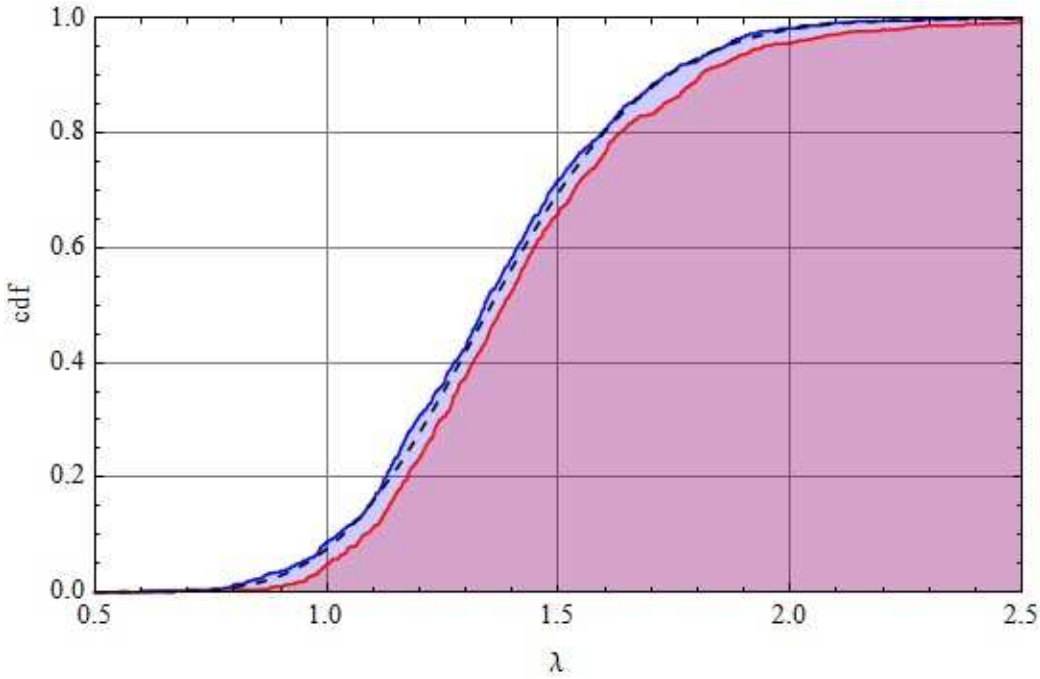


Abbildung 4-37: Posteriorverteilung $F_\lambda(\lambda|\mathbf{x})$ (schwarz, gestrichelt) für eine Stichprobe der Exponentialverteilung Ex(1) (n = 25) mit zufällig relativ vielen hohen Werten ($\hat{\lambda}$ = 1,37); mit 1000 zufällig aus der Posteriorverteilung generierten Werten resultierende Verteilung für λ (blau); sowie mit 1000 Bootstrap-Replikationen erzeugte Verteilung (rot), deren 5%-Perzentil knapp über dem wahren Wert von λ = 1 der Populationsverteilung liegt.

Aus den Angaben von Tabelle 4-13 ist auch zu entnehmen, dass sich die mit dem Bootstrapping für den Parameter λ der Exponentialverteilung resultierende Verschiebung hin zu größeren Werten mit Zunahme des Stichprobenumfangs nur langsam verringert.

Parameter λ der POISSON-Verteilung X ~ Poi(λ)

Die Tabelle 4-14 enthält die Ergebnisse zur POISSON-Verteilung, für die mit einem Wert von λ = 10 gerechnet wurde. Trotz statistischer Unsicherheiten dieser Simulationsrechnungen ist aus diesen Angaben zu erkennen, dass für den Parameter der POISSON-Verteilung sowohl durch BAYES'sche Simulation der Posteriorverteilung wie auch durch Bootstrapping p-Quantile erzeugt werden, die den nominalen Werten von Unter- bzw. Überschreitungen von Konfidenzgrenzen in etwa gleichem Maße gut entsprechen. Es ist keine Abhängigkeit vom Stichprobenumfang zu erkennen, weshalb auf Berechnungen für n = 200 verzichtet wurde.

Eine Analyse der mittels Bootstrapping für den POISSON-Parameter resultierenden Verteilung zeigt, dass diese im Rahmen der statistischen Unsicherheiten (entsprechend der hier gewählten Anzahl von 1000 Replikationen) sehr gut mit der BAYES'schen Posteriorverteilung übereinstimmt.

Tabelle 4-14: Anteil von Überschreitungen des Parameterwertes $\lambda = 10$ der POISSON-Verteilung $X \sim Poi(\lambda)$ durch untere Quantile bzw. Unterschreitungen durch obere Quantile bei Schätzung von λ_p aus der analytischen Posteriordichte $f_\lambda(\lambda|\mathbf{x})$, aus Zufallswerten für die Posteriorverteilung bzw. durch Bootstrapping; N = 1000; B = 1000; für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100); Angaben **in Prozent von N**

Stichproben-umfang	**p = 0,025**	**p = 0,05**	**p = 0,1**	**p = 0,9**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
	für N analytisch berechnete Posteriordichten					
n = 25	2,6	5,1	9,9	10,0	5,2	2,6
n = 50	2,3	4,1	9,4	9,2	4,5	2,2
n = 100	2,9	4,9	9,3	9,2	5,0	2,2
	mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,9	5,2	10,2	10,2	5,1	2,4
n = 50	2,4	4,3	9,1	9,3	4,5	2,2
n = 100	3,2	4,7	9,1	9,2	4,9	2,1
	mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	2,3	5,1	9,3	10,8	5,2	2,6
n = 50	2,2	3,9	8,6	9,5	4,5	2,5
n = 100	2,8	4,6	8,9	9,4	5,4	2,4

Parameter μ und σ der Normalverteilung $X \sim N(\mu,\sigma)$

Die Tabelle 4-15 enthält die Ergebnisse zur Bewertung der Konformität BAYES'scher Schätzungen bzw. auf Bootstrapping basierender Schätzungen der Unsicherheitsverteilung der Parameter der Normalverteilung mit nominellen Häufigkeiten der Über- bzw. Unterschreitung daraus abgeleiteter Konfidenzgrenzen. Für diesen Vergleich wurde mit den Parameterwerten $\mu = 0$ und $\sigma = 1$ der Standardnormalverteilung gerechnet. Zur Reduzierung der statistischen Unsicherheiten der Simulationsrechnungen wurden N = 4000 Stichproben sowie je B = 4000 Bootstrap-Replikationen bzw. zufällige Realisierungen aus den Posteriorverteilungen erzeugt.

Die p-Quantile, die sich aus den analytischen Darstellungen der Posterior-Randverteilungen für μ und σ ergeben, stimmen mit den klassischen Konfidenzgrenzen für Parameter der Normalverteilung überein. Die aus Tabelle 4-15 ersichtlichen Abweichungen von den Nominalwerten kennzeichnen die verbliebenen statistischen Unsicherheiten bei N = 4000. Trotz dieser Unsicherheiten geht daraus klar hervor, dass für μ sowohl nach BAYES'schen Berechnungen als auch mittels Bootstrapping unabhängig vom Stichprobenumfang korrekte p-Quantile/Konfidenzgrenzen bestimmt werden. Für den Parameter σ trifft dies nur für die aus Posteriorverteilungen bestimmten p-Quantile zu. Mit dem Bootstrapping werden dagegen zu kleine p-Quantile berechnet, wodurch die nominellen Werte zur Häufigkeit von Überschreitungen des wahren σ-Wertes durch unteren Quantile nicht erreicht, dafür aber zu große Häufigkeiten der Unterschreitung von σ durch die oberen Quantile verursacht werden. Die Verschiebung der Verteilungsfunktion für σ durch Bootstrapping ist in Abbildung 4-38 beispielhaft für eine Stichprobe dargestellt. Die mittels Bootstrapping bestimmte Verteilung für μ ist dagegen korrekt und entspricht sehr gut dem Verlauf der Posteriorverteilung.

Tabelle 4-15: Anteil von Überschreitungen der Parameter $\mu = 0$ bzw. $\sigma = 1$ der Normalverteilung $X \sim N(\mu,\sigma)$ durch untere Quantile bzw. Unterschreitungen durch obere Quantile bei Schätzung von μ_p und σ_p aus den analytischen Posteriordichten, aus Zufallswerten für die Posteriorverteilungen bzw. durch Bootstrapping; N = 4000; B = 4000; für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100, 200); Angaben **in Prozent von N**

Stichproben-umfang	**p = 0,025**	**p = 0,05**	**p = 0,1**	**p = 0,9**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
	μ: für N analytisch berechnete Posteriordichten					
n = 25	2,6	4,6	10,6	10,0	4,8	2,4
n = 50	2,7	5,1	9,4	11,0	5,6	3,1
n = 100	2,9	5,6	11,0	9,4	4,7	2,3
n = 200	2,2	4,5	10,4	10,4	4,9	2,7
	μ: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,7	4,6	10,6	10,2	4,9	2,3
n = 50	2,5	5,2	9,6	10,9	5,5	3,1
n = 100	3,0	5,5	11,0	9,4	4,7	2,3
n = 200	2,1	4,6	10,5	10,4	5,1	2,6
	μ: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	3,1	5,2	11,1	10,9	5,5	3,0
n = 50	3,2	5,4	9,9	11,2	6,0	3,4
n = 100	3,0	5,7	11,2	9,7	4,8	2,6
n = 200	2,3	4,7	10,5	10,5	5,0	2,7
	σ: für N analytisch berechnete Posteriordichten					
n = 25	2,1	4,5	9,8	9,8	4,8	2,5
n = 50	2,7	5,1	10,4	9,8	5,1	2,5
n = 100	2,5	4,8	9,3	10,5	5,2	2,7
n = 200	2,3	4,7	9,6	10,2	5,2	2,2
	σ: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,1	4,6	9,9	9,8	4,9	2,4
n = 50	2,6	5,1	10,5	9,8	5,1	2,5
n = 100	2,5	4,7	9,3	10,6	5,2	2,6
n = 200	2,3	4,8	9,6	10,3	5,3	2,2
	σ: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	0,3	1,0	4,2	16,3	10,1	6,8
n = 50	0,9	2,5	6,2	14,2	8,6	5,7
n = 100	1,0	2,9	6,6	14,2	7,9	4,8
n = 200	1,4	3,3	7,9	12,6	7,1	3,9

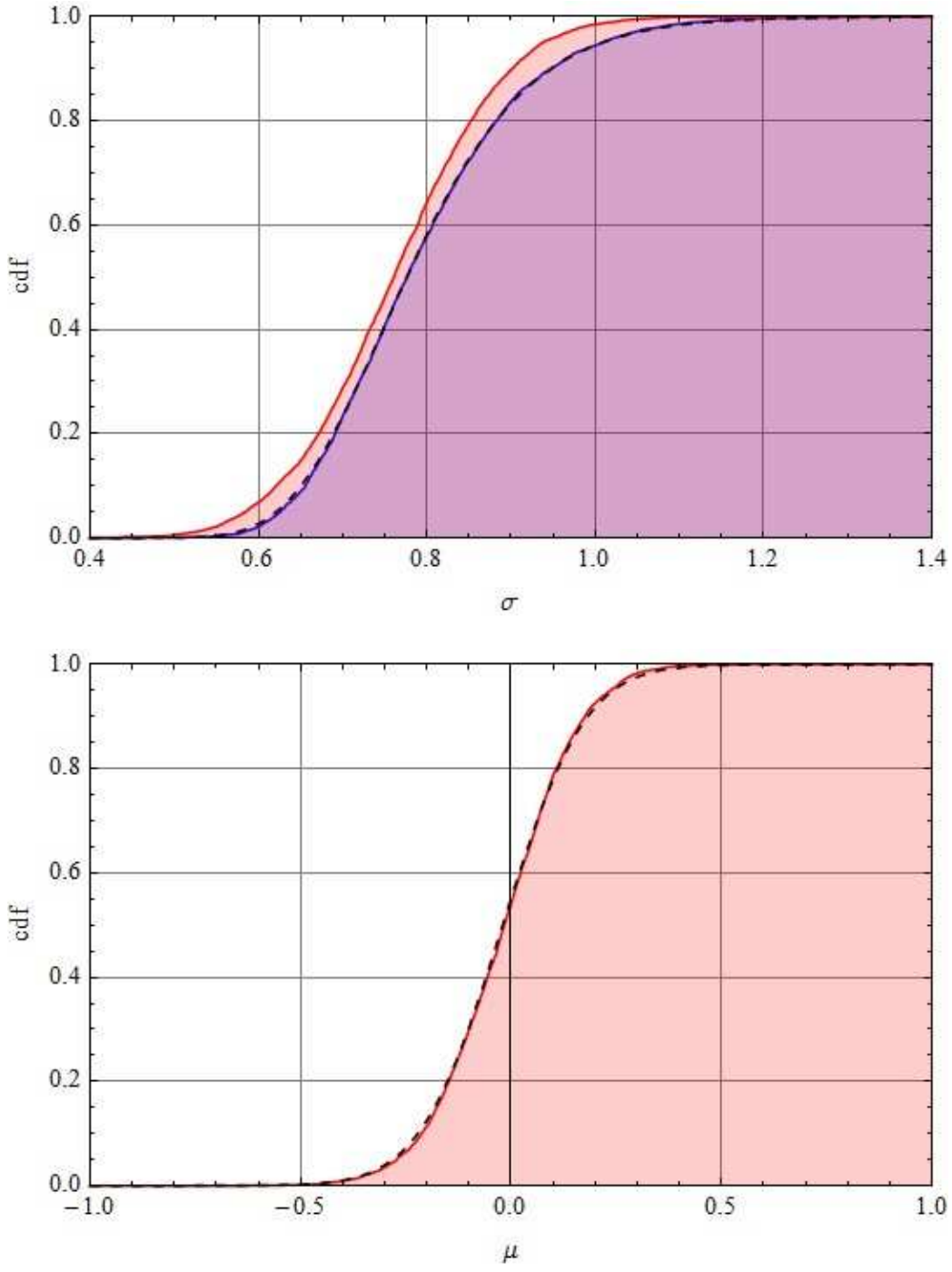


Abbildung 4-38: Posteriorverteilungen $F_\sigma(\sigma|\mathbf{x})$ und $F_\mu(\mu|)$ (schwarz, gestrichelt) für eine Stichprobe der Normalverteilung N(0,1) (n = 25) mit zufällig relativ geringer Standardabweichung von $\hat{\sigma}$ = 0,765 ($\hat{\mu}$ = -0,02); mit 4000 Zufallsrealisierungen aus der σ-Posteriorverteilung resultierende Verteilungsfunktion (blau, oberes Bild); für σ und μ mit 4000 Bootstrap-Replikationen erzeugte Verteilungen (rot); bei σ = 1 erreicht die Bootstrap Verteilung einen Wert von 0,985 (Überschreitung durch das 0.975-Quantil), die Posteriorverteilung dagegen einen Wert von 0,946 (noch keine Überschreitung durch das 0,95-Quantil).

Zum oberen Bild von Abbildung 4-38 sei darauf hingewiesen, dass die durch Bootstrapping für diese Stichprobe bestimmte Verteilungsfunktion für σ nicht nur bzgl. der Posteriorverteilung in Richtung kleinerer Werte verschoben ist, sondern auch eine andere Form aufweist. Außerdem sei vermerkt, dass die zur Normalverteilung resultierenden systematischen Fehler des Bootstrappings bei der Bestimmung von Verteilungen/Konfidenzgrenzen für den Parameter σ in gleicher Weise auf diesen Parameter in der Lognormalverteilung bzw. der JOHNSON-S_B-Verteilung übertragbar sind.

4.2.3.2. Quantifizierung von Parameterunsicherheiten für weitere Verteilungsfamilien

Für die im vorigen Abschnitt betrachteten Verteilungen (Exponential-, POISSON-, Normalverteilung) wäre es nicht nötig, durch Bootstrappings oder MC-Simulation Quantile/Konfidenzgrenzen für die Unsicherheitsverteilungen der Verteilungsparameter zu bestimmen, da hierfür auch analytische Beziehungen existieren. Für die Parameter der meisten anderen Verteilungsarten müssen dagegen BAYES'sche Posteriordichten durch MC-Simulation approximiert oder Bootstrap-Verteilungen bestimmt werden, wobei letztere oft wegen ihrer einfachen Berechnung bevorzugt werden (siehe z. B. [FREY 96], [FREY 98], [CUL 99]). Wenn Bootstrapping aber schon für einfache Verteilungen zu relativ großen Fehleinschätzungen führen kann (wie zum Parameter λ der Exponentialverteilung oder dem Parameter σ der Normalverteilung), muss damit gerechnet werden, dass die Methode des Bootstrapping für komplizierter strukturierte Verteilungen noch weniger geeignet ist. Nachfolgend werden zur Untermauerung dieser Aussage noch die GAMMA- und die KUMARASWAMY-Verteilung betrachtet, zu denen in Abschnitt 4.2.2.3 für je eine Stichprobe anhand von Scatterplots erhebliche Abweichungen zwischen den Posteriordichten der Verteilungsparameter und den auf Bootstrap-Replikationen basierenden Verteilungen dargestellt wurden (siehe Abbildungen 4-24a/b und 4-28 zu den Beispielen 4-13 und 4-14).

Die Ergebnisse zum Vergleich der Konformität der mit BAYES'schen Posteriordichten bzw. mittels Bootstrapping berechneten p-Quantile/Konfidenzgrenzen der Verteilungsparameter mit nominalen Häufigkeiten ihrer Über- bzw. Unterschreitung des wahren Wertes sind in der Tabelle 4-16 für die Gammaverteilung $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ und in Tabelle 4-17 zur KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$ zusammengestellt. Es wurden jeweils $N = 1000$ zufällige Stichproben aus der Population erzeugt und dazu jeweils $B = 1000$ zufällige Realisierungen der Posteriorverteilung bzw. Bootstrap-Replikationen berechnet.

Zur Interpretation der in den Tabellen 4-16 bzw. 4-17 zusammengefassten Ergebnisse sei noch auf zwei Aspekte hingewiesen:

- Die Anzahl der Stichproben von $N = 1000$ ist nicht ausreichend für einen exakten Nachweis der Einhaltung nomineller Häufigkeiten der Über- bzw. Unterschreitung von Konfidenzgrenzen. Wie aus den Angaben von Tabelle 4-15 zu den analytisch aus den exakten Posteriordichten berechneten p-Quantilen/Konfidenzgrenzen folgt, weisen selbst bei $N = 4000$ die Anteile der Über- bzw. Unterschreitung der wahren Parameterwerte durch untere bzw. obere Quantile noch deutlich statistische Unsicherheiten auf. Die nachfolgenden Ergebnisse dienen deshalb primär dem Vergleich der Qualität/Eignung von BAYES'schen bzw. Bootstrap-Berechnungen. Für beide Methoden (Nutzung BAYES'scher Posteriordichten bzw. Bootstrapping) wurden die gleichen Stichproben verwendet, so dass dbzgl. ein fairer Vergleich vorliegt (eine zufällige Häufung von extremen Stichproben betrifft in gleichem Masse die Ergebnisse beider Methoden).

- Für das Bootstrapping können grundsätzlich unterschiedliche Schätzer der Verteilungsparameter genutzt werden (neben dem ML-Schätzer z. B. auch Momentenschätzer oder Quantilschätzer). Für die Replikationen muss dann die gleiche Methode wie für die ursprüngliche Stichprobe genutzt werden. Für eine gute Vergleichbarkeit der Posterior- mit den Bootstrap-Verteilungen der Verteilungsparameter für einzelne Stichproben, wie z. B. in den Abbildungen 4-37 und 4-38 dargestellt, wurde hier das Bootstrapping mit ML-Schätzern vorgenommen. Es ist anzumerken, dass ML- und Momentenschätzer zwar korrelieren, für einzelne Stichproben jedoch erheblich voneinander abweichende Schätzwerte für die Verteilungsparameter liefern können. Im Rahmen einer vergleichenden Untersuchung wurden analoge Berechnungen mit Momentenschätzern durchgeführt. Dies ergab überwiegend größere Abweichungen von den nominellen Häufigkeiten der Über- bzw. Unterschreitung von Konfidenzgrenzen als auf Basis der ML-Schätzer.

Parameter α und λ der Gammaverteilung $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$

Tabelle 4-16: Anteil von Überschreitungen der Parameter $\alpha = 4$ bzw. $\lambda = 1$ der **Gammaverteilung** $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ durch untere Quantile bzw. Unterschreitungen durch obere Quantile bei Schätzung von α_p und λ_p aus Zufallswerten der Posteriorverteilung bzw. durch Bootstrapping; N = 1000; B = 1000; für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100, 200); Angaben **in Prozent von N**

Stichproben-	**p = 0,025**	**p = 0,05**	**p = 0,1**	**p = 0,9**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
umfang	**α: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten**					
n = 25	1,9	4,2	8,2	11,7	5,8	2,9
n = 50	2,6	5,9	10,4	9,7	4,9	2,2
n = 100	2,1	6,0	10,5	8,8	4,1	2,8
n = 200	2,2	5,1	11,0	9,2	5,2	2,8
	α: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	8,9	14,2	21,9	2,8	0,6	0,1
n = 50	8,1	12,1	19,5	3,4	1,3	0,7
n = 100	6,7	9,9	15,2	4,4	2,2	0,5
n = 200	4,8	8,3	14,5	7,0	3,3	1,4
	λ: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,2	4,6	9,4	10,7	5,8	2,7
n = 50	2,6	5,8	10,7	8,3	4,1	2,1
n = 100	2,9	5,3	9,9	8,5	3,9	1,9
n = 200	2,6	5,1	11,4	9,9	4,8	2,5
	λ: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	9,6	13,4	22,6	2,2	0,2	0,0
n = 50	8,2	12,5	20,7	3,2	1,2	0,3
n = 100	5,7	9,7	16,5	4,5	1,4	0,4
n = 200	4,5	8,8	15,3	6,3	2,6	1,5

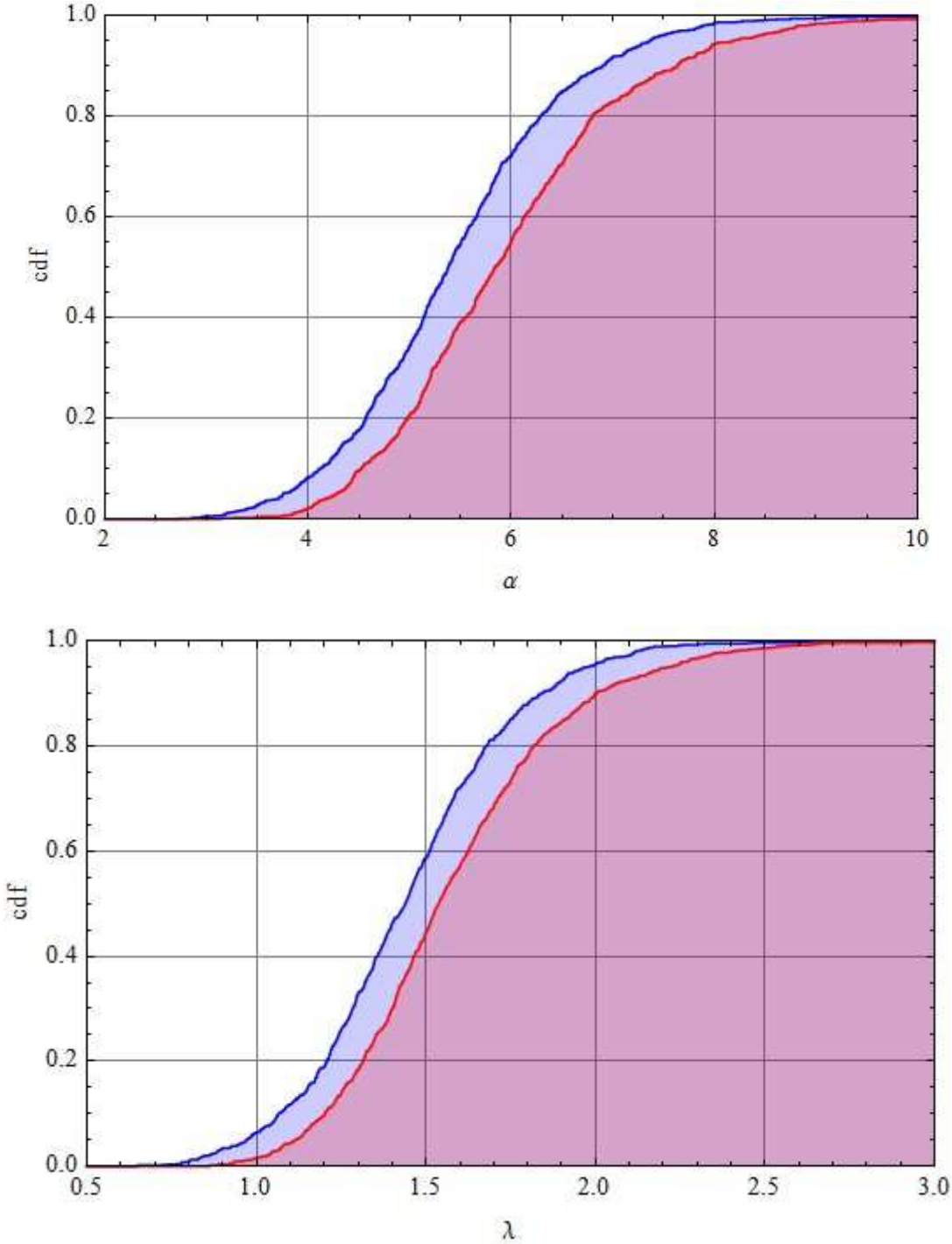


Abbildung 4-39: Geschätzte Posterior-Randverteilungen $F_\alpha(\alpha|\mathbf{x})$ (oben) und $F_\lambda(\lambda|\mathbf{x})$ (unten) für eine Stichprobe(n = 50) aus $X \sim Gam(4,1)$ mit zufällig relativ großen Abweichungen der ML-Schätzer von den Populationswerten ($\hat{\alpha}$ = 5,59 und $\hat{\lambda}$ = 1,48) auf Basis von jeweils 1000 Zufallsrealisierungen der Posteriorverteilung (blau) bzw. Bootstrap-Replikationen (rot);
BAYES: $F_\alpha(4|\mathbf{x}) = 0{,}083$ und $F_\lambda(1|\mathbf{x}) = 0{,}063$;
Bootstrap: $F_\alpha(4|\mathbf{x}) = 0{,}021$ und $F_\lambda(1|\mathbf{x}) = 0{,}015$.

Aus Tabelle 4-16 folgt, dass mit Posteriorverteilungen geschätzte p-Quantile/Konfidenzgrenzen den nominalen Häufigkeiten von Über- bzw. Unterschreitungen der wahren Werte der Verteilungsparameter gut entsprechen, wogegen mittels Bootstrapping erhebliche Abweichungen resultieren, die einer ausgeprägten Verschiebung der geschätzten Randverteilungen in Richtung größerer Werte für α und λ entsprechen (vgl. Abbildung 4-24a). Die Abbildung 4-39 zeigt hierzu die durch MC-Simulation aus der Posteriordichte bzw. mittels Bootstrapping geschätzten Randverteilungen der Verteilungsparameter α und λ für eine ausgewählte Stichprobe, deren relative Verschiebung aber typisch ist. Für das dargestellte Beispiel folgt aus den Angaben zu den Werten der Verteilungsfunktionen bei den (wahren) Werten der Populationsparameter, dass nach der Bootstrap-Schätzung schon die 2,5%-Perzentile über den wahren Werten von α sowie λ liegen, wogegen dies nach BAYES'schen Schätzungen erst auf die 10%-Perzentile zutrifft.

Parameter α und β der KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$

Tabelle 4-17: Anteil von Überschreitungen der Parameter $\alpha = 5$ bzw. $\beta = 3$ der KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$ durch untere Quantile bzw. Unterschreitungen durch obere Quantile bei Schätzung von α_p und β_p aus Zufallswerten der Posteriorverteilung bzw. durch Bootstrapping; N = 1000; B = 1000; für Stichprobenumfänge von n = (25, 50, 100, 200); Angaben **in Prozent von N**

Stichproben-umfang	**p = 0,025**	**p = 0,05**	**p = 0,1**	**p = 0,9**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
	α: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,9	5,6	11,5	7,4	4,1	2,4
n = 50	2,4	5,4	10,8	9,0	5,3	2,6
n = 100	2,6	5,8	10,8	9,3	4,0	1,8
n = 200	2,6	5,7	10,6	8,0	4,3	1,6
	α: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	8,9	14,0	22,2	3,3	0,8	0,3
n = 50	6,8	11,2	17,0	5,1	1,9	0,6
n = 100	5,4	8,2	15,7	5,3	1,7	1,0
n = 200	4,9	7,6	13,9	6,2	2,4	0,7
	β: mit B zufälligen Realisierungen der N Posteriordichten					
n = 25	2,5	5,3	11,3	9,8	4,6	2,3
n = 50	3,3	5,8	10,2	9,5	5,1	3,3
n = 100	2,4	5,8	10,8	10,1	5,2	2,9
n = 200	2,8	5,5	10,7	9,9	4,6	2,1
	β: mit B Bootstrap-Replikationen aus den N angepassten Verteilungsfunktionen					
n = 25	10,5	16,9	25,1	2,6	0,9	0,3
n = 50	7,7	11,4	18,8	4,6	2,2	0,8
n = 100	6,5	9,9	15,4	5,8	2,4	1,2
n = 200	4,8	8,2	15,2	5,9	2,4	0,9

Aus Tabelle 4-17 ist zu entnahmen, dass die mit Posteriorverteilungen geschätzten p-Quantile den nominalen Häufigkeiten von Über- bzw. Unterschreitungen der wahren Werte der Verteilungsparameter gut entsprechen, auch wenn sich eine geringe Verschiebung der Verteilungen in Richtung höherer Werte andeutet. Dies könnte ggf. durch eine Präzisierung der Priordichte behoben werden. Die Häufigkeiten der Über- bzw. Unterschreitung der wahren Parameterwerte durch die mittels Bootstrapping berechneten unteren bzw. oberen p-Quantile weichen erheblich von den nominalen Werten ab und weisen auf starke Verzerrungen der geschätzten Randverteilungen in Richtung größerer Werte für α und β hin (vgl. auch Abbildung 4-28). Mit zunehmendem Stichprobenumfang werden diese zwar kleiner, sind jedoch selbst für Stichprobenumfänge von n = 200 noch signifikant.

4.2.3.3. Zusammenfassende Bewertung

Auf Basis der in den Abschnitten 4.2.3.1 und 4.2.3.2 für einige Verteilungsfamilien dargestellten Ergebnisse des Vergleichs der frequentistischen Konformität der für 6 gebräuchliche p-Quantile (Konfidenzgrenzen) entsprechend ihrer Schätzung mit BAYES'schen Methoden bzw. Bootstrapping resultierenden Häufigkeiten von Über- bzw. Unterschreitungen der wahren Werte der Verteilungsparameter mit den jeweiligen nominellen Häufigkeiten ist zusammenfassend festzustellen, dass mittels Bootstrapping i. A. keine quantitativ belastbaren Aussagen zur Unsicherheit der geschätzten Werte von Verteilungsparametern resultieren. Diese Aussage trifft zwar auf ein paar spezielle Fälle nicht zu (z. B. auf die Parameter μ der Normalverteilung und λ der POISSON-Verteilung), generell sind aber mittels Bootstrapping geschätzte Randverteilungen für unsichere Verteilungsparameter selbst bei großen Stichprobenumfängen (von n = 100 oder 200) im frequentistischen Sinne nicht korrekt. Diese Einschätzung könnte zumindest teilweise bei Anwendung von Schätzern mit Bias-Korrektur zu relativieren sein; da aber z.B. für den Parameter σ der Normalverteilung ein erwartungstreuer Schätzer verwendet wurde, sind keine generellen Verbesserungen zur Bootstrap-Methode zu erwarten. Die aus den Posteriorverteilungen bestimmten Quantile erfüllen dagegen die frequentistischen Anforderungen an Konfidenzgrenzen gut.

Ausgehend von diesen Ergebnissen ist somit zu empfehlen, die Unsicherheiten der Schätzung von Verteilungsparametern gemäß BAYES-Theorie über deren Posteriordichten zu quantifizieren. Mit den geeigneten nicht-informativen Priordichten können auf diesem Wege auch Konfidenzgrenzen bestimmt werden, die im Sinne der klassischen (frequentistischen) Statistik interpretierbar sind.

4.2.4. Beachtung von Parameterunsicherheiten bei der Schätzung statistischer Kenngrößen und der Auswahl von Verteilungsarten für probabilistische Expositionsfaktoren

Wird zur probabilistischen Modellierung von Expositionen für einen bestimmten Expositionsfaktor von einer durch den Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ spezifizierten Verteilung $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ ausgegangen (mit $\boldsymbol{\theta}$ sei hier der Vektor der skalaren Verteilungsparameter $\theta_1, \theta_2, \ldots$ bezeichnet), und kann anhand einer Stichprobe $\mathbf{x}$ die Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|x)$ des Verteilungsparameters $\boldsymbol{\theta}$ direkt berechnet oder mit Hilfe von MC-Simulationen über eine große Anzahl (B) zufälliger Realisierungen $\{\boldsymbol{\theta}\}_B$ dargestellt werden, so können auch für beliebige Kenngrößen von X Verteilungen berechnet werden, die den Unsicherheiten zum Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ entsprechen, z. B. für den Erwartungswert von X, $E_V[X|\boldsymbol{\theta}]$, oder bestimmte p-Quantile $x_{p|\boldsymbol{\theta}}$. Da die Posteriorverteilungen i. A. nur durch eine große Anzahl zufälliger Realisierungen $\{\boldsymbol{\theta}\}_B$ approximiert werden kann, resultieren zu den statistischen Kenngrößen von X diskrete Verteilungsfunktionen, die jedoch durch geeignete Wahl der Anzahl B

beliebig genau berechnet werden können. Dies wird nachfolgend in Abschnitt 4.2.4.1 anhand von Beispielrechnungen veranschaulicht. Auf diesem Wege kann auch die Sensitivität probabilistischer Modellrechnungen bzgl. epistemischer Unsicherheiten zu den Verteilungsparametern für wichtige statistische Kennwerte von Expositionsfaktoren analysiert werden.

Ein weiterer Aspekt der Berücksichtigung von Unsicherheiten zu Verteilungsparametern betrifft die Auswahl aus ähnlichen Verteilungsfamilien zur Modellierung von Expositionsfaktoren, wenn zur Genesis der Verteilung kein spezielles Modell vorliegt und mit einer gegebenen Stichprobe auch die in Abschnitt 4.1 dargelegten statistischen Tests nicht zu eine belastbaren Auswahl führen. In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, ob sich Parameterunsicherheiten für in Betracht zu ziehende Verteilungsarten auf unterschiedliche Weise auf relevante statistische Kenngrößen auswirken. Wenn dies so wäre, würde für eine angestrebte Konservativität von Expositionsabschätzungen ggf. ein weiteres Kriterium zur Auswahl zwischen ähnlichen Verteilungsfamilien zur Verfügung stehen. Diese Frage wird in Abschnitt 4.2.4.1 anhand methodischer Beispiele diskutiert.

Schließlich ist noch zu untersuchen, wie epistemische Unsicherheiten zu Verteilungsparametern möglichst effektiv in komplexen Expositionsmodellen, die neben probabilistisch erfassten Faktoren auch Modellgrößen beinhalten, für die quantitative Angaben nur aus Expertenschätzen verfügbar sind, berücksichtigt werden können. Eine Reduzierung der Datenfülle von Posteriorverteilungen wäre auch für Sensitivitätsanalysen zu Ergebnissen von 1D-MC-Simulationsrechnungen hilfreich. Eine Möglichkeit zur drastischen Reduzierung der Datenfülle ist die Berechnung oberer und unterer Grenzverteilungen (siehe Abschnitt 2.4.2.3), die im Sinne der in Abschnitt 2.8 angesprochenen DEMPSTER-SHAFER-Strukturen genutzt werden können. Auf diesen Aspekt der Modellierung von Unsicherheiten zu Verteilungsparametern wird in Abschnitt 4.2.4.2 eingegangen.

4.2.4.1. Unsicherheitsverteilungen für Kennwerte von Zufallsgrößen

Im Anhang C wurden für diverse Verteilungen stetiger und diskreter Zufallsgrößen X die für diese Populationen geltenden Beziehungen für wichtige statistische Kennwerte angegeben, die von den jeweiligen Verteilungsparametern abhängen. Zur Charakterisierung von Stichproben können zwar die entsprechenden Punktschätzer verwendet werden (siehe Anhang B), diese liefern aber keine Aussagen zur Unsicherheit der Schätzungen. Mit der für eine vorliegende Stichprobe resultierenden Posteriordichte der Verteilungsparameter lassen sich jedoch auch die Verteilungen für statistische Kennwerte der Zufallsgröße X relativ einfach durch MC-Simulation berechnen.

Statistische Kennwerte K, wie z. B. Mittelwert, Varianz bzw. Standardabweichung, Modalwert oder gängige p-Quantile sind für eine Zufallsgrößen X, die durch eine parametrische Verteilung $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ beschrieben wird, Funktionen des Verteilungsparameters $\boldsymbol{\theta}$, $K_X = K(\boldsymbol{\theta})$. Mit einer ausreichend großen Anzahl B von zufälligen Realisierungen $\boldsymbol{\theta}_b$ (b = 1 bis B) entsprechend der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x})$ erhält man durch Einsetzen dieser Werte in die Beziehung für K_X eine Verteilung dieses Kennwertes, die der Unsicherheit der Schätzung des Verteilungsparameters $\boldsymbol{\theta}$ anhand der Stichprobe $\mathbf{x}$ entspricht. Abgesehen von einfachen Fällen, bei denen der Kennwert K_X direkt durch einen skalaren Verteilungsparameter bestimmt wird (wie z. B. der Mittelwert μ und die Standardabweichung σ der Normalverteilung oder der Mittelwert λ der POISSON-Verteilung), stehen i. A. keine analytischen Beziehungen zur Quantifizierung von Unsicherheiten der Schätzung von statistischen Kennwerten entsprechend der Unsicherheit der Schätzung von Verteilungsparametern

zur Verfügung. Eine auf Posteriordichten der Verteilungsparameter basierende Quantifizierung von epistemischen Unsicherheiten der Schätzung statistischer Kennwerte bietet sich deshalb an.

Diese Vorgehensweise wird nachfolgend anhand von zwei Beispielen demonstriert, mit denen auch auf die oben gestellte Frage, ob sich z. B. die Unsicherheiten der Schätzung hoher (bzw. niedriger) Quantile als Kriterium für die Auswahl von Verteilungsfamilien für Expositionsfaktoren nutzten lassen, eingegangen wird. Hierzu wird zunächst für positiv definierte Zufallsgrößen ein Vergleich zwischen Lognormal- und Gammaverteilung vorgenommen; anschließend werden als Beispiele für beidseitig begrenzte Zufallsgrößen, mit denen z. B. Expositionsfaktoren modelliert werden können, die als Anteile definiert sind, die KUMARASWAMY- und die JOHNSON-S_B-Verteilung verglichen.

Beispiel 4.16

Aus einer Gammaverteilung $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ mit den Populationsparameterwerten $\alpha = 4$ und $\lambda = 1$ wurde eine Zufallsstichprobe mit Umfang n = 50 erzeugt, die aus methodischen Gründen aus mehreren Stichproben so ausgewählt wurde, dass sich die Maxima der Likelihood-Funktionen für die Gamma- und die Lognormalverteilung kaum unterscheiden. Mit dem in Abschnitt 4.1.3.1 erläuterten LL-Test ergibt sich für die beiden Verteilungen ein Unterschied von 0,017%, was praktisch bedeutet, dass beide Verteilungsarten gleich gut zur Stichprobe passen. Die empirische sowie die beiden über ML-Schätzer angepassten Verteilungsfunktionen sind in Abbildung 4-40 dargestellt. Die ML-Schätzwerte für die Gammaverteilung sind $\hat{\alpha} = 5{,}477$ und $\hat{\lambda} = 1{,}511$, für die Lognormalverteilung resultierten sie Schätzwerte $\hat{\mu} = 1{,}194$ und $\hat{\sigma} = 0{,}4451$. Die beiden angepassten Wahrscheinlichkeitsdichten sind in Abbildung 4-41 dargestellt.

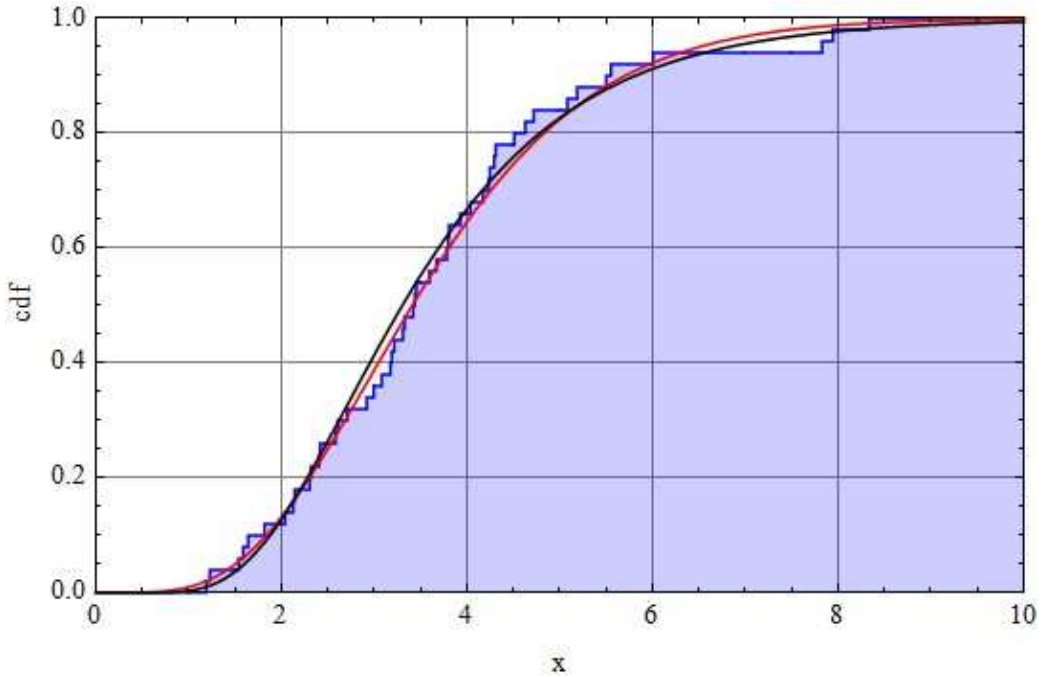


Abbildung 4-40: Empirische Verteilungsfunktion der Stichprobe aus $X \sim Gam(4,1)$ mit Umfang n = 50 (blau) und über ML-Schätzer angepasste Verteilungsfunktionen der Gammaverteilung (rot) und der Lognormalverteilung (schwarz)

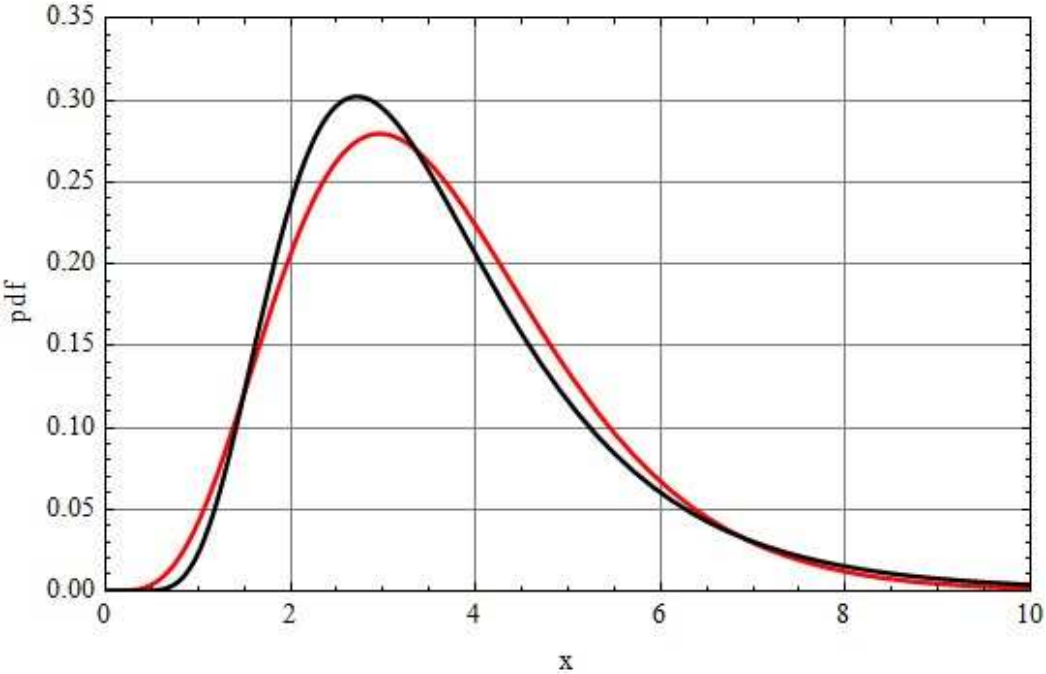


Abbildung 4-41: Wahrscheinlichkeitsdichten der an die Stichprobe aus Abbildung 4-40 angepassten Gammaverteilung (rot) und Lognormalverteilung (schwarz)

Aus dem Verlauf der beiden Verteilungsfunktionen bzw. Wahrscheinlichkeitsdichten ist ersichtlich, dass mit der Lognormalverteilung für hohe Quantile größere Werte resultieren als für die Gammaverteilung, wobei sich mit dieser für kleine X-Werte eine höhere Wahrscheinlichkeit ergibt. In Abhängigkeit davon, ob nun die Zufallsgröße X in einem Expositionsmodell z. B. im Zähler oder Nenner einer Dosisgleichung steht, kann dann entweder die Lognormal- bzw. die Gammaverteilung im Sinne der Konservativität von Dosisabschätzungen bevorzugt werden. Diese Aussage trifft auch unter Berücksichtigung der Unsicherheiten der Parameterschätzungen zu, wie nachfolgen anhand der Unsicherheitsverteilungen für das 0,95- und das 0,05-Quantil ($x_{0,95}$ bzw. $x_{0,05}$) gezeigt wird.

In Abbildung 4-42 sind hierzu Scatterplots zu den Posteriorverteilungen der Verteilungsparameter dargestellt, wozu jeweils B = 4000 zufällige Realisierungen erzeugt wurden. Die Abbildungen 4-43 und 4-44 zeigen damit resultierende Histogramme bzw. kumulative Verteilungsfunktionen für die Quantile $x_{0,95}$ und $x_{0,05}$ für beide Verteilungen. Die aus diesen Verteilungen berechneten Mittelwerte sind:

$$E_{Gam}[x_{0,95}] = 6{,}596; \quad E_{Ln}[x_{0,95}] = 6{,}965; \qquad (4\text{-}63)$$

$$E_{Gam}[x_{0,05}] = 1{,}477; \quad E_{Ln}[x_{0,05}] = 1{,}579.$$

In Abbildung 4-45 sind noch die Histogramme zur Unsicherheit der Schätzung des Erwartungswertes E[X] dargestellt, die sich jedoch kaum unterscheiden. Die daraus resultierenden Mittelwerte sind:

$$E_{Gam}[E[X]] = 3{,}641; \quad E_{Ln}[E[X]] = 3{,}665.$$

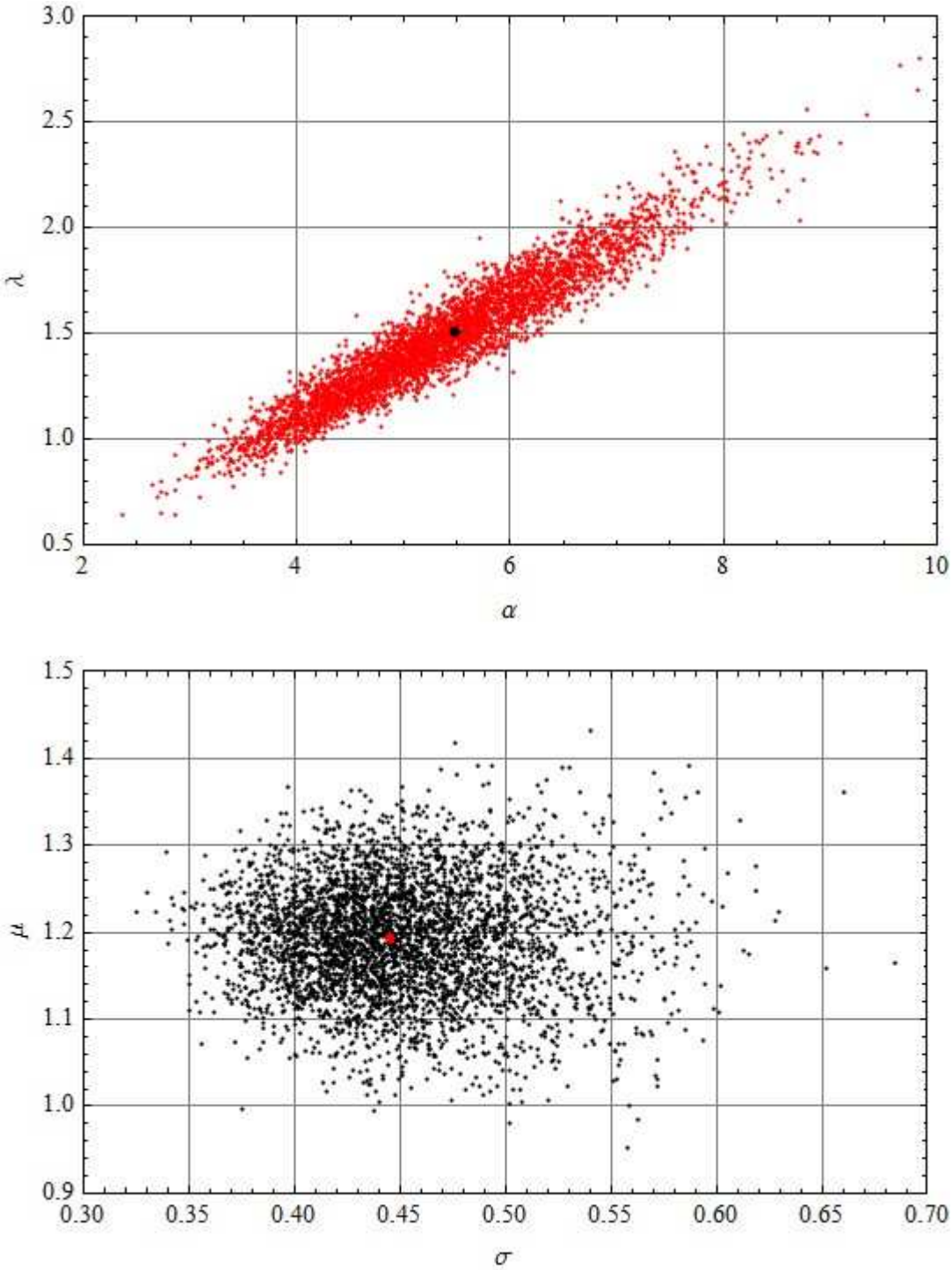


Abbildung 4-42: Scatterplots zu den Posteriorverteilungen der Parameter der Gammaverteilung (oben) und der Lognormalverteilung (unten) für jeweils 4000 zufällige Realisierungen; Werte der Punktschätzer sind für beide Verteilungen markiert

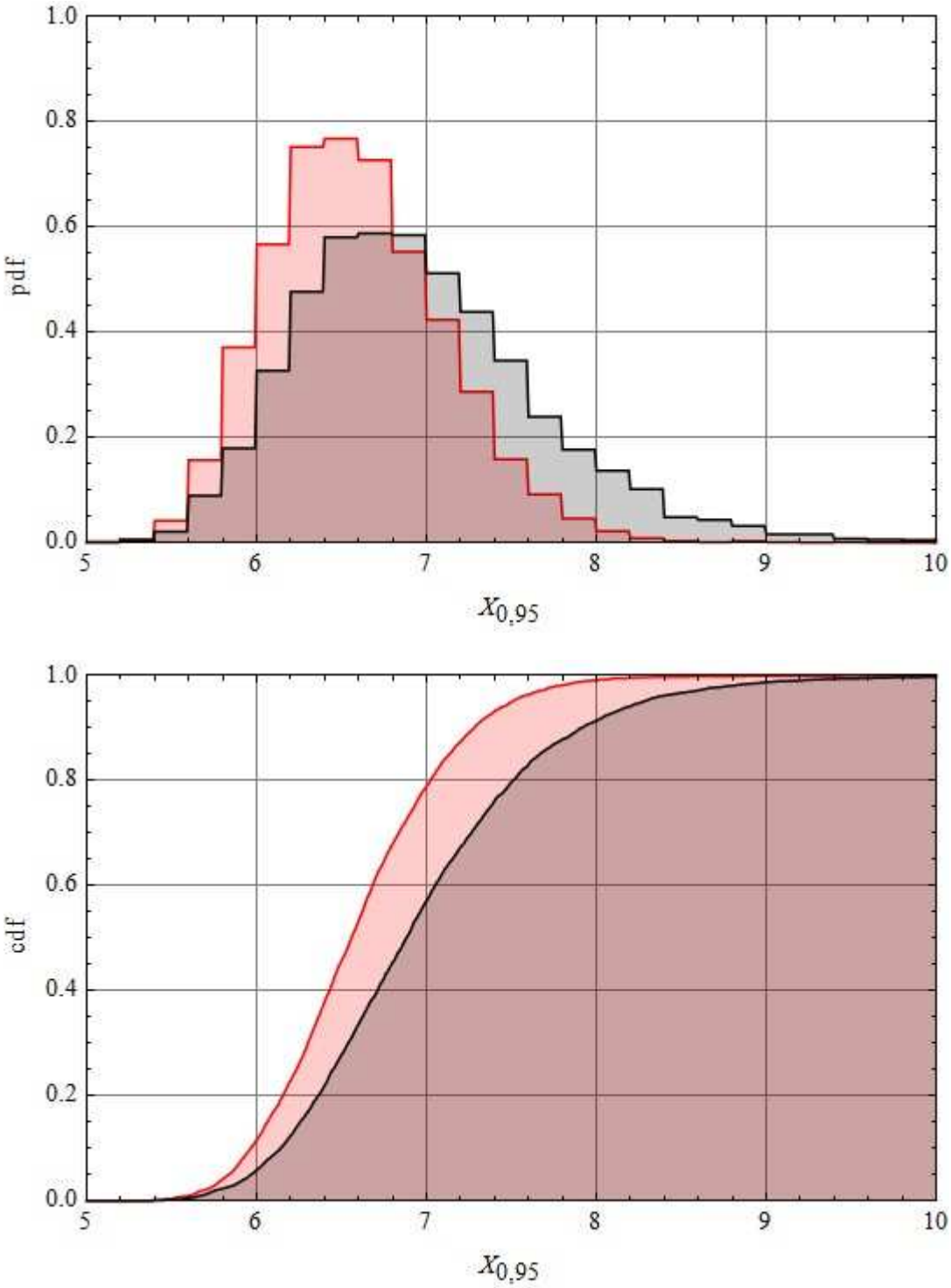


Abbildung 4-43: Histogramme (oberes Bild) und Verteilungsfunktionen (unters Bild) zur Unsicherheit der Schätzung der 0,95-Quantile bei Annahme einer Gamma- (rot) bzw. Lognormalverteilung (schwarz) der Zufallsgröße X zu den in der Abbildung 4-42 dargestellten Parameterunsicherheiten

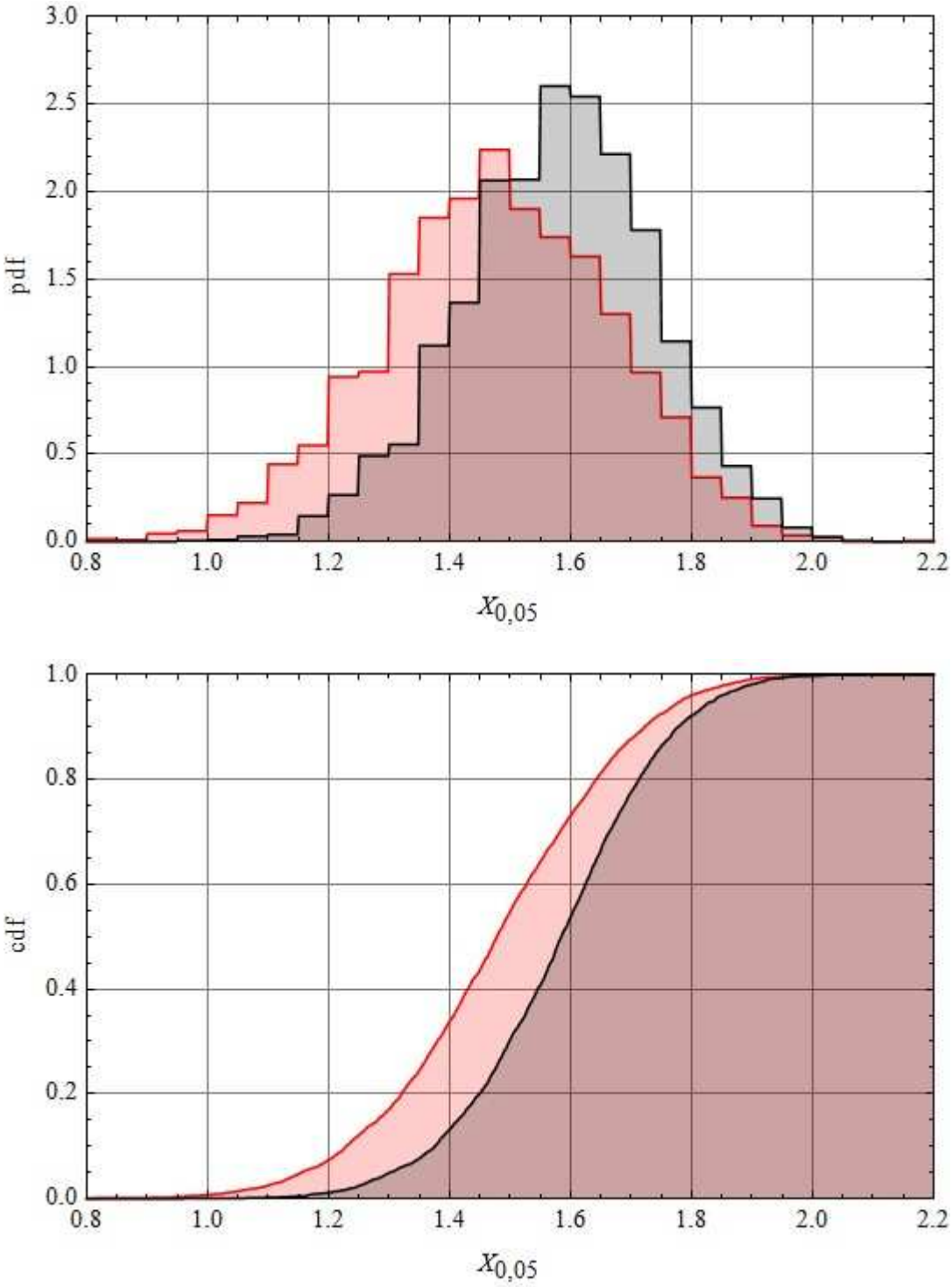


Abbildung 4-44: Histogramme (oberes Bild) und Verteilungsfunktionen (unters Bild) zur Unsicherheit der Schätzung der 0,05-Quantile bei Annahme einer Gamma- (rot) bzw. Lognormalverteilung (schwarz) der Zufallsgröße X zu den in der Abbildung 4-42 dargestellten Parameterunsicherheiten

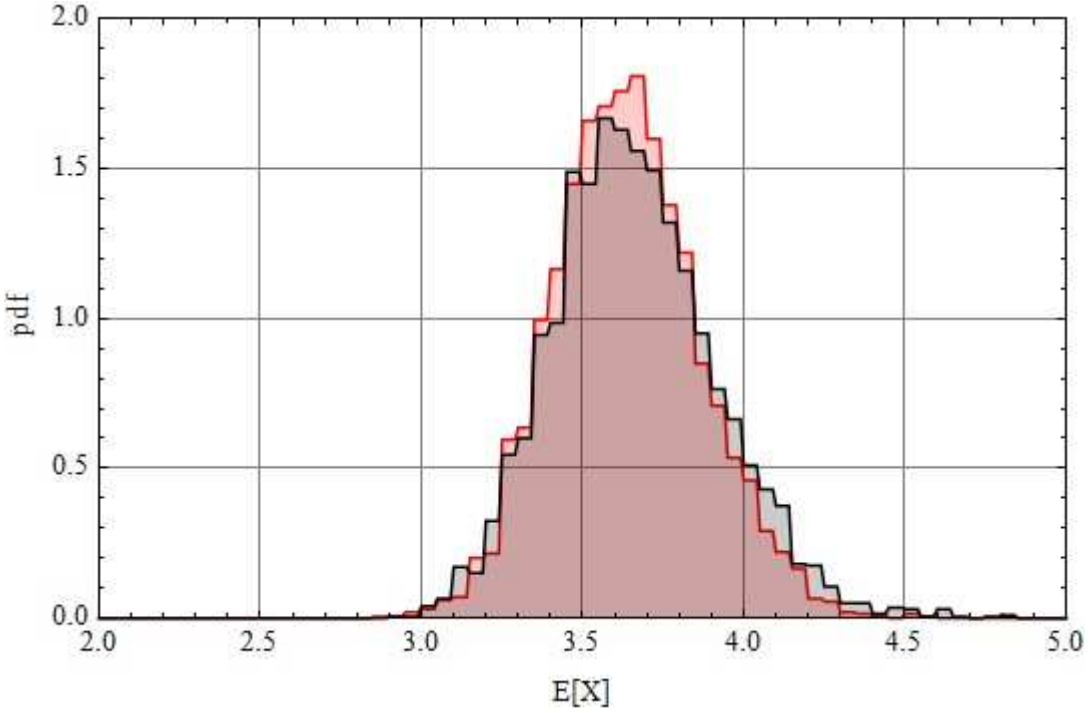


Abbildung 4-45: Histogramme zur Unsicherheit der Schätzung des Erwartungswertes der Zufallsgröße X bei Annahme einer Gamma- (rot) bzw. Lognormalverteilung (schwarz) zu den in Abbildung 4-42 dargestellten Parameterunsicherheiten

Aus den Abbildungen 4-43 und 4-44 ist ersichtlich, dass sich die Formen der aus den jeweiligen Posteriorverteilungen resultierenden Verteilungen der 0,95- bzw. 0,05-Quantile für die beiden Verteilungsarten unterscheiden. Bezüglich $x_{0,95}$ resultiert zur Gammaverteilung eine geringere Streuung als für die Lognormalverteilung (die Standardabweichungen sind 0,515 bzw. 0,726). Zum 0,05-Quantil ergibt sich dagegen für die Gammaverteilung eine etwas größere Streuung (hier liegen die Standardabweichungen bei 0,190 und 0,158). Außerdem sei noch vermerkt, dass sich die unter Berücksichtigung der Posteriorverteilungen der Verteilungsparameter berechneten Erwartungswerte der 0,95- und 0,05-Quantile etwas von den entsprechenden Quantilen der über die ML-Schätzer angepassten Verteilungen der Zufallsgröße X unterscheiden, die z. B. für $x_{0,95}$ zu beiden Verteilungsarten um ca. 0,1 unter den in Gl. (4-63) angegebenen Werten liegen.

Beispiel 4.17

Aus einer Betaverteilung $X \sim Bt(\alpha,\beta)$ mit den Populationsparameterwerten $\alpha = 3$ und $\beta = 7$ wurde eine Zufallsstichprobe mit Umfang n = 25 erzeugt, die aus methodischen Gründen aus mehreren Stichproben so ausgewählt wurde, dass die Maxima der Likelihood-Funktionen der Beta-, KUMARASWAMY- und JOHNSON-S_B-Verteilung relativ groß sind und sich nur geringfügig unterscheiden (der LL-Test zeigt mit relativen Abweichungen < 0,4% keine statistisch signifikanten Unterschiede). Die empirische sowie die beiden über die ML-Schätzung angepassten Verteilungsfunktionen der KUMARASWAMY- und der JS_B-Verteilung sind in Abbildung 4-46 dargestellt. Abbildung 4-46 zeigt den Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichten für alle drei angepassten Verteilungsarten. Die ML-Schätzer der Verteilungsparameter sind: $\hat{\alpha}_{Bt} = 3{,}404$ und $\hat{\beta}_{Bt} = 7{,}917$; $\hat{\gamma}_{JS_B} = 1{,}334$ und $\hat{\delta}_{JS_B} = 1{,}429$; $\hat{\alpha}_{Ku} = 2{,}373$ und $\hat{\beta}_{Ku} = 12{,}174$.

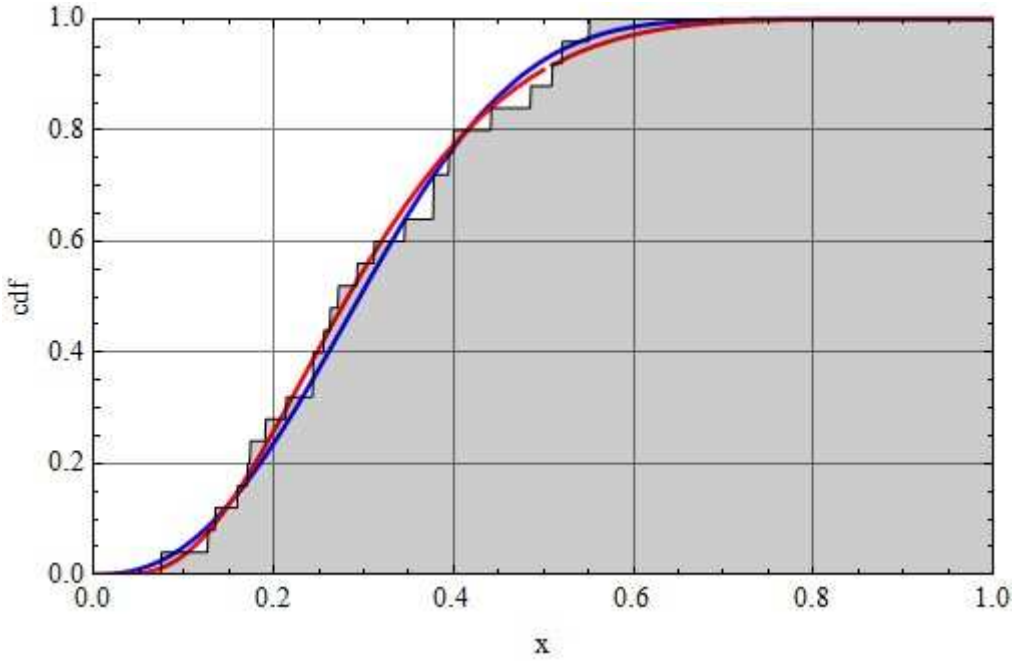


Abbildung 4-46: Empirische Verteilungsfunktion der Stichprobe aus X ~ Bt(3,7) mit Umfang n = 25 (schwarz) und über ML-Schätzer angepasste Verteilungsfunktionen der JOHNSON-S_B- (rot) und der KUMARASWAMY-Verteilung (blau)

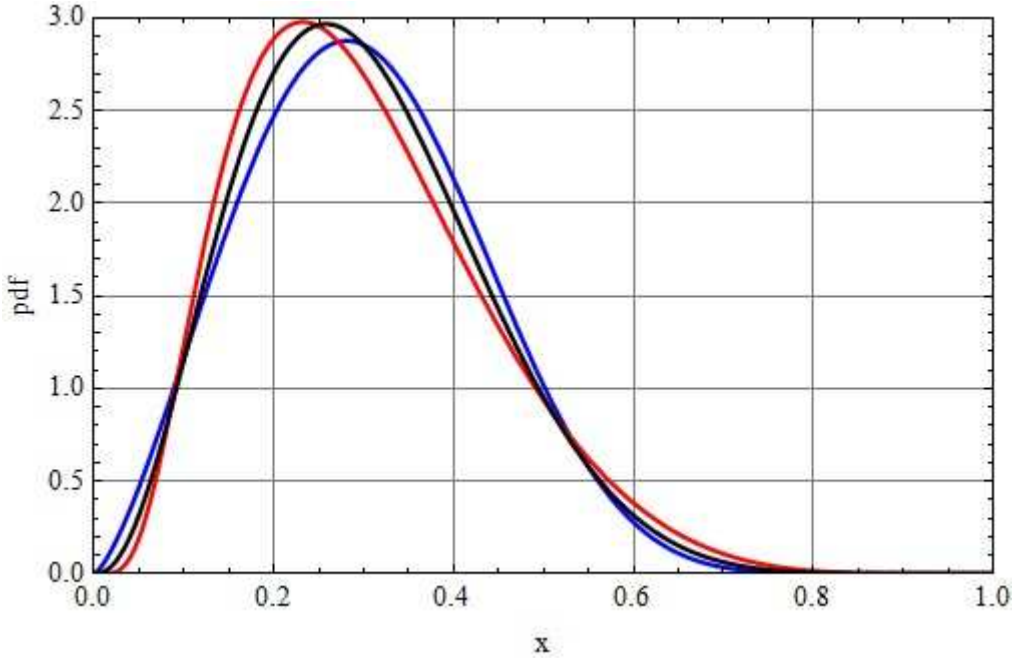


Abbildung 4-47: Wahrscheinlichkeitsdichten der an die Stichprobe aus Abbildung 4-46 angepassten Beta-, (schwarz), JOHNSON-S_B- (rot) und KUMARASWAMY-Verteilung (blau)

Gemäß Verlauf der drei Wahrscheinlichkeitsdichten ist offenbar, dass mit der JOHNSON-S_B-Verteilung für hohe Quantile die größten Werte resultieren, wogegen die KUMARASWAMY-Verteilung für kleine X-Werte die größte Wahrscheinlichkeit aufweist. Die Betaverteilung verläuft zwischen den beiden anderen Verteilungen. Somit könnten unter dem Gesichtspunkt der Konservativität von Dosisabschätzungen die JS_B- bzw. die KUMARASWAMY-Verteilung für ein probabilistisches Expositionsmodel ausgewählt werden (in Abhängigkeit davon, ob große oder kleine Werte des entsprechenden Faktors zu höheren Expositionen führen). Die weiter Diskussion zu Unsicherheiten statistischer Kennwerte (insbesondere von Quantilen), die für diese Stichprobe resultieren, wird deshalb auf diese beiden Verteilungsarten beschränkt.

In Abbildung 4-48 sind hierzu Scatterplots zu den Posteriorverteilungen der Verteilungsparameter dargestellt, wozu jeweils B = 4000 zufällige Realisierungen erzeugt wurden. Die Abbildungen 4-49 und 4-50 zeigen damit resultierende Histogramme bzw. kumulative Verteilungsfunktionen für die Quantile $x_{0,95}$ und $x_{0,05}$ für beide Verteilungen. Die aus diesen Verteilungen berechneten Mittelwerte sind:

$$E_{JSB}[x_{0,95}] = 0{,}5626; \quad E_{Ku}[x_{0,95}] = 0{,}5366; \tag{4-64}$$

$$E_{JSB}[x_{0,05}] = 0{,}1086; \quad E_{Ku}[x_{0,05}] = 0{,,}0990.$$

In Abbildung 4-51 sind noch die Histogramme zur Unsicherheit der Schätzung des Erwartungswertes E[X] dargestellt, die sich nur geringfügig unterscheiden. Die daraus resultierenden Mittelwerte sind:

$$E_{JSB}[E[X]] = 0{,}3023; \quad E_{Ku}[E[X]] = 0{,}3048.$$

Aus den Abbildungen 4-49 und 4-50 ist erkennbar, dass sich die Formen der aus den jeweiligen Posteriorverteilungen resultierenden Verteilungen der 0,95- bzw. 0,05-Quantile für die beiden Verteilungsarten unterscheiden. Bezüglich $x_{0,95}$ resultiert zur KUMARASWAMY-Verteilung eine geringere Streuung als für die JS_B-Verteilung (die Standardabweichungen sind 0,0473 bzw. 0,0561), wogegen die Schiefe der $x_{0,95}$-Verteilung auf Basis der KUMARASWAMY-Verteilung mit einem Wert von0,67 deutlich größer ist als für den Ansatz einer JSB-Verteilung mit 0,50. Für die Verteilung des 0,05-Quantils ergibt sich dagegen auf Basis der KUMARASWAMY-Verteilung eine etwas größere Streuung als bei Ansatz der JS_B-Verteilung (die beiden Werte zur Standardabweichungen sind 0,0244 bzw. 0,0216), wobei die $x_{0,05}$-Verteilungen im Fall $X \sim Ku(\alpha,\beta)$ mit einer Schiefe von 0,14 leicht linkssteil, für den Ansatz $X \sim JS_B(\gamma,\delta)$ dagegen mit einer Schiefe von -0,10 leicht rechtssteil ist.

Abschließend sei vermerkt, dass die auf Basis der Posteriorverteilungen der Verteilungsparameter berechneten Erwartungswerte insbesondere für das 0,95-Quantile von den entsprechenden Quantilen der über die ML-Schätzer angepassten Verteilungen der Zufallsgröße X abweichen, die im Unterschied zu den Werten aus Gl. (4-64) für die JOHNSON-S_B-Verteilung mit 0,5542 und für die KUMARASWAMY-Verteilung mit 0,5264 etwas kleiner sind.

Zusammenfassend kann auf Basis der beiden Beispiele zur Berechnungen statischer Kennwerte von Zufallsgrößen unter Berücksichtigung der epistemischen (Stichproben-) Unsicherheiten zu den Verteilungsparametern eingeschätzt werden, dass über die Posteriorverteilungen der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ einer Verteilung $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ auch damit verbundenen Unsicherheiten der Schätzung von statistische Kennwerten der Zufallsgröße X analysieren lassen. Bezüglich der Auswahl von Verteilungsfamilien für Expositionsfaktoren resultieren daraus aber zumindest qualitativ keine anderen Aussagen, als sie bereits aus den über ML-Schätzer angepassten Verteilungen gewonnen werden können.

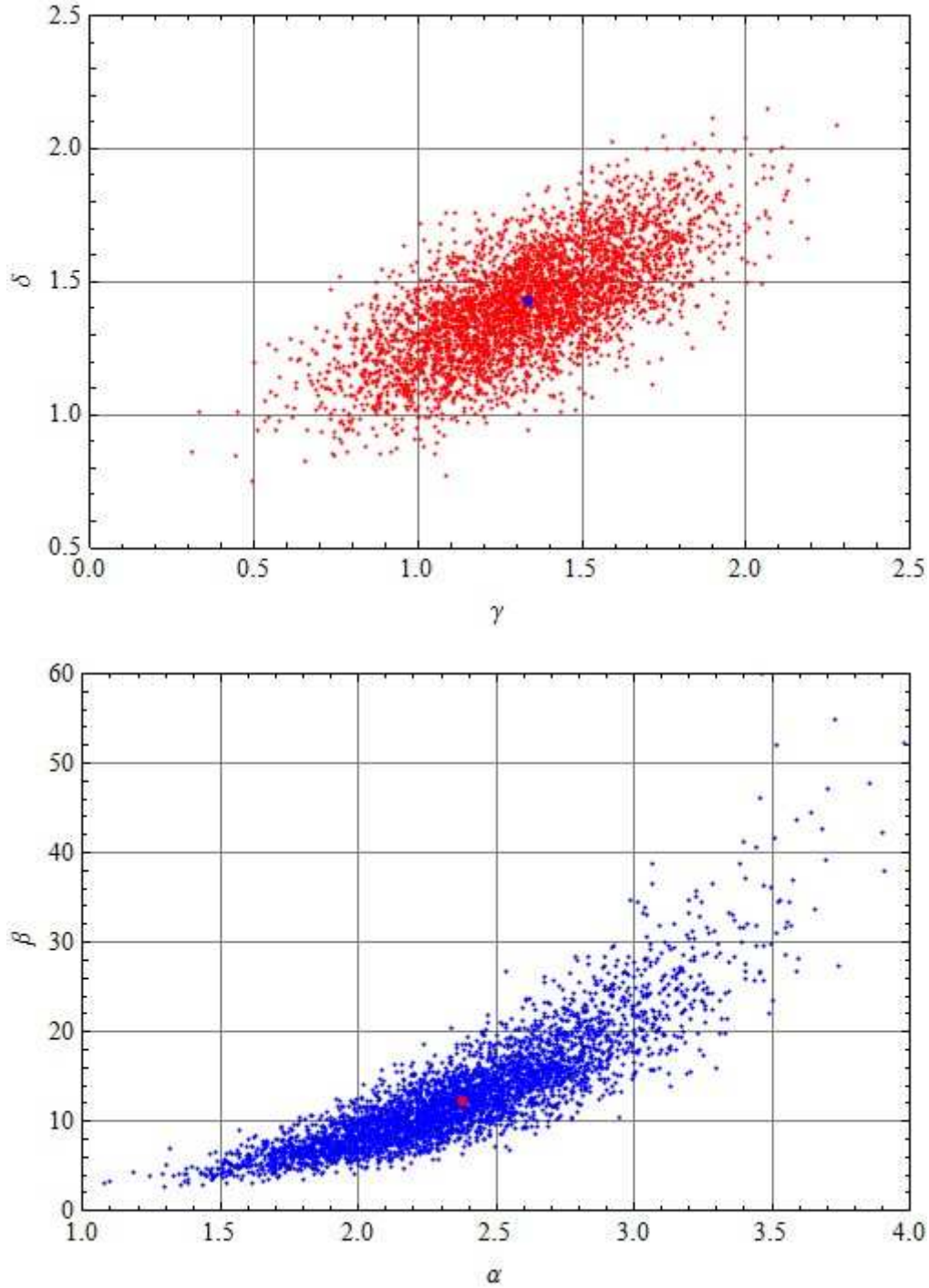


Abbildung 4-48: Scatterplots zu den Posteriorverteilungen der Parameter der JOHNSON-S_B-Verteilung (oben) und der KUMARASWAMY-Verteilung (unten) für jeweils 4000 zufällige Realisierungen; Werte der Punktschätzer sind für beide Verteilungen markiert

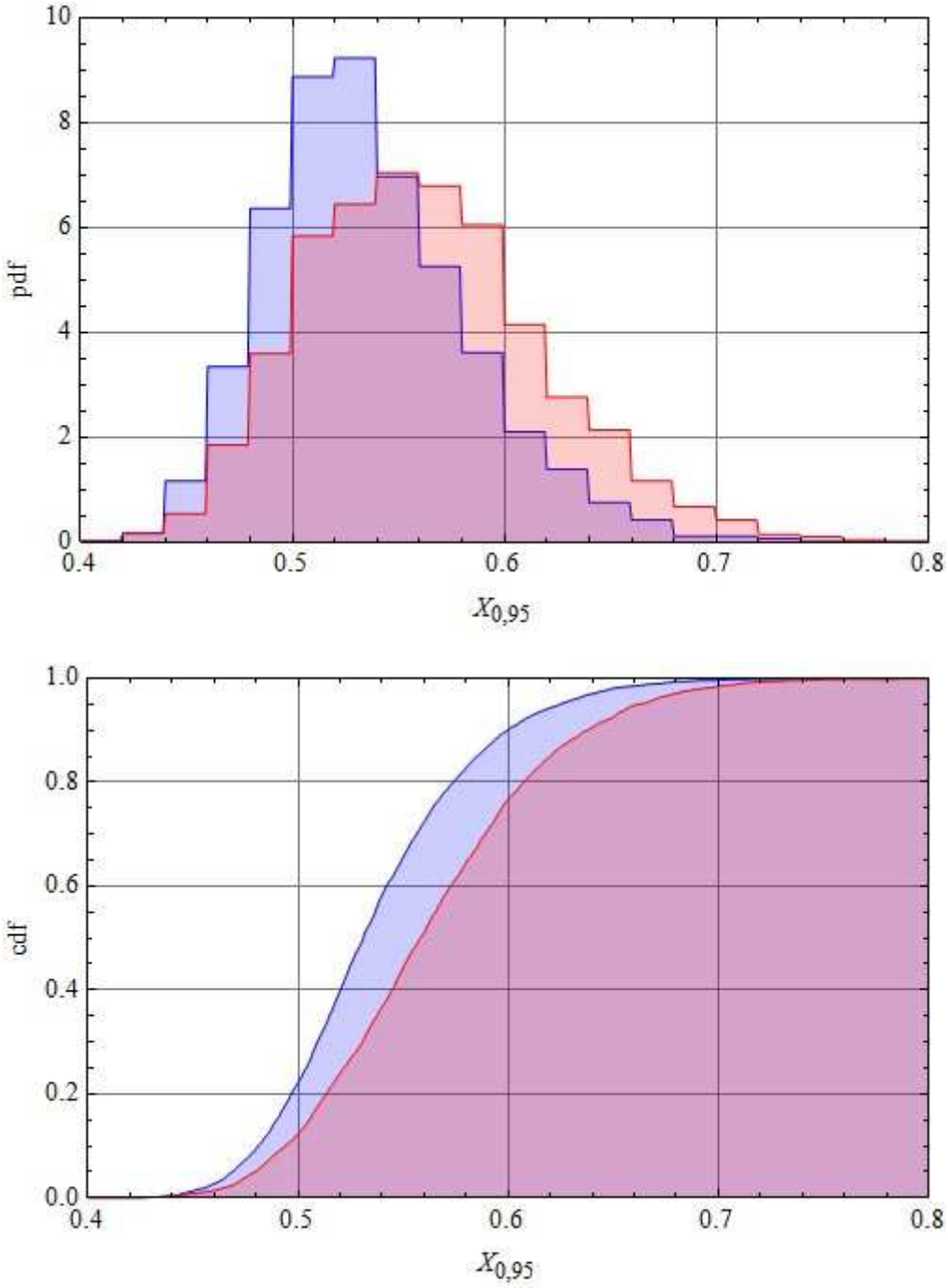


Abbildung 4-49: Histogramme (oberes Bild) und Verteilungsfunktionen (unters Bild) zur Unsicherheit der Schätzung der 0,95-Quantile bei Annahme einer JOHNSON-S_B-Verteilung (rot) bzw. KUMARASWAMY-Verteilung (blau) der Zufallsgröße X zu den in Abbildung 4-48 dargestellten Parameterunsicherheiten

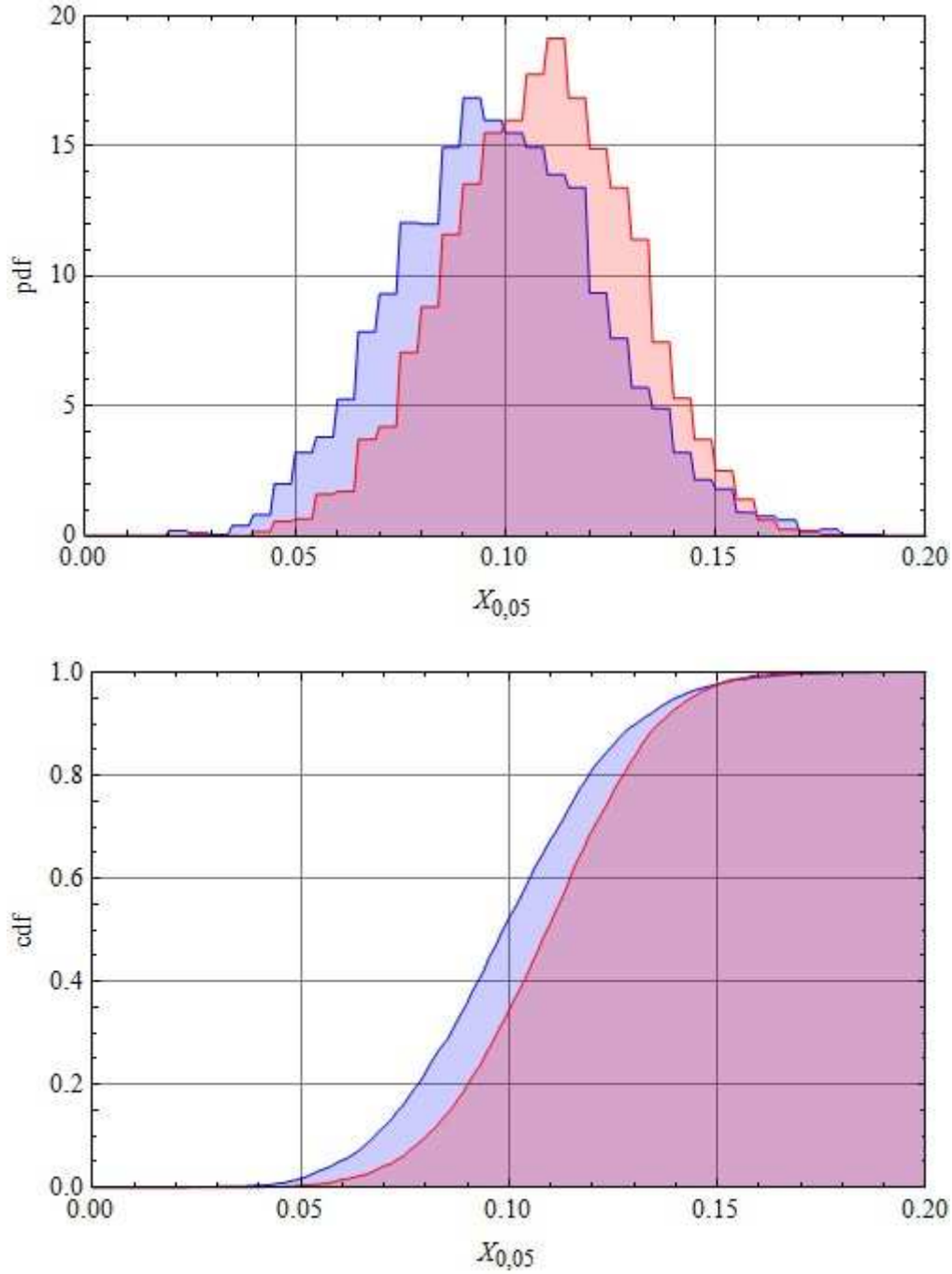


Abbildung 4-50: Histogramme (oberes Bild) und Verteilungsfunktionen (unters Bild) zur Unsicherheit der Schätzung der 0,05-Quantile bei Annahme einer JOHNSON-S_B-Verteilung (rot) bzw. KUMARASWAMY-Verteilung (blau) der Zufallsgröße X zu den in Abbildung 4-48 dargestellten Parameterunsicherheiten

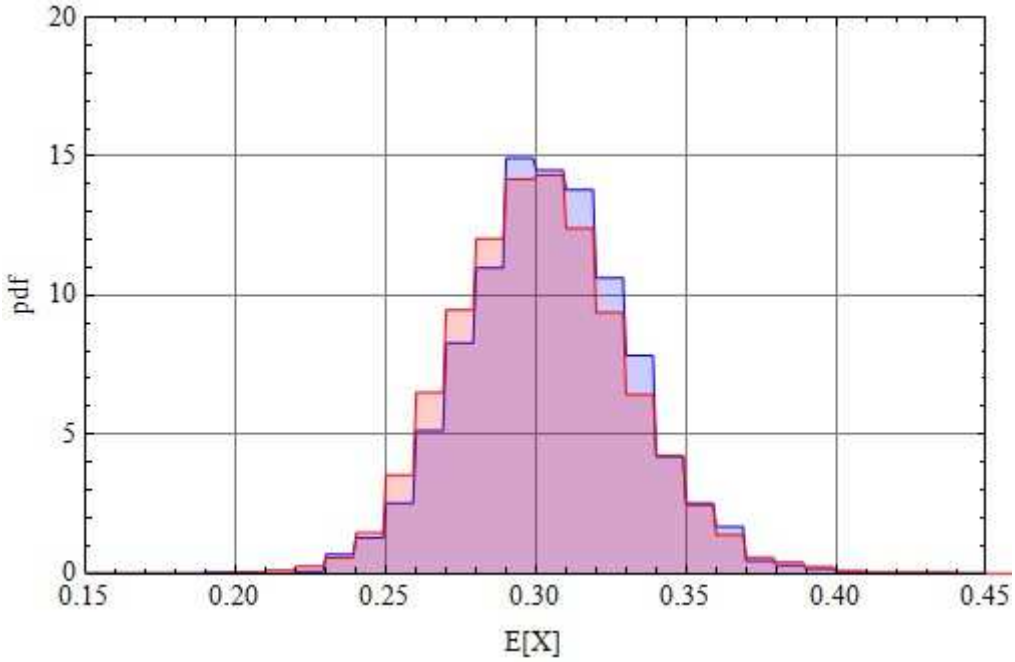


Abbildung 4-51: Histogramme zur Unsicherheit der Schätzung des Erwartungswertes der Zufallsgröße X bei Annahme einer JOHNSON-S_B-Verteilung (rot) bzw. KUMARASWAMY-Verteilung (blau) der Zufallsgröße X zu den in Abbildung 4-48 dargestellten Parameterunsicherheiten

4.2.4.2. Berechnung von Grenzverteilungen und von Posterior-Prognoseverteilungen

Zur Analyse und Bewertung der Auswirkungen epistemischer Unsicherheiten zu mehreren Faktoren eines komplexen (Expositions-)Models ist es hilfreich, für relevante Faktoren Grenzverteilungen zu bestimmen, die den aus Unsicherheiten zu Verteilungsparametern resultierenden Raum möglicher Realisierungen von Verteilungsfunktionen begrenzen. Zur Verknüpfung von verschiedenartigen epistemischen Unsicherheiten können dann diverse mathematische Methoden angewandt werden, (siehe z. B. [REG 04]), worauf in Kapitel 5 näher eingegangen wird.

Gegenüber der Untersuchung hierarchischer BAYES-Modelle sind Betrachtungen auf der Basis von Grenzverteilungen zwar mit einem Verzicht von Informationen verbunden; für eine vereinfachte Sensitivitätsanalyse und Prognosen zu den Effekten einer Erhöhung des Stichprobenumfangs kann dies aber durchaus nützlich sein. Ein gängiger Weg zur Reduzierung der mit Posteriorverteilungen verbundenen Datenfülle ist auch die Mittelung der Wahrscheinlichkeitsdichte einer Zufallsgröße X, $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$, mit der Posteriordichte $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{\theta}|x)$ des Verteilungsparameters $\boldsymbol{\theta}$ gemäß G. (2-74), woraus eine für 1D-MC-Simulationen geeignete Posterior-Prognoseverteilung resultiert, mit der Unsicherheiten zum Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ im Sinne mittlerer Auswirkungen berücksichtigt werden.

Die Abbildungen 4-52 bis 4-55 zeigen für die vier in den Beispielen 4-16 bzw. 4-17 betrachteten Verteilungsarten berechnete Grenzverteilungen, die aus den 0,025- und 0,975-Quantilen der für alle 4000 zufällige Realisierungen der jeweiligen Posteriordichte berechneten p-Quantile (mit p von 0,005 bis 0,995 in Schritten von 0,01) resultieren.

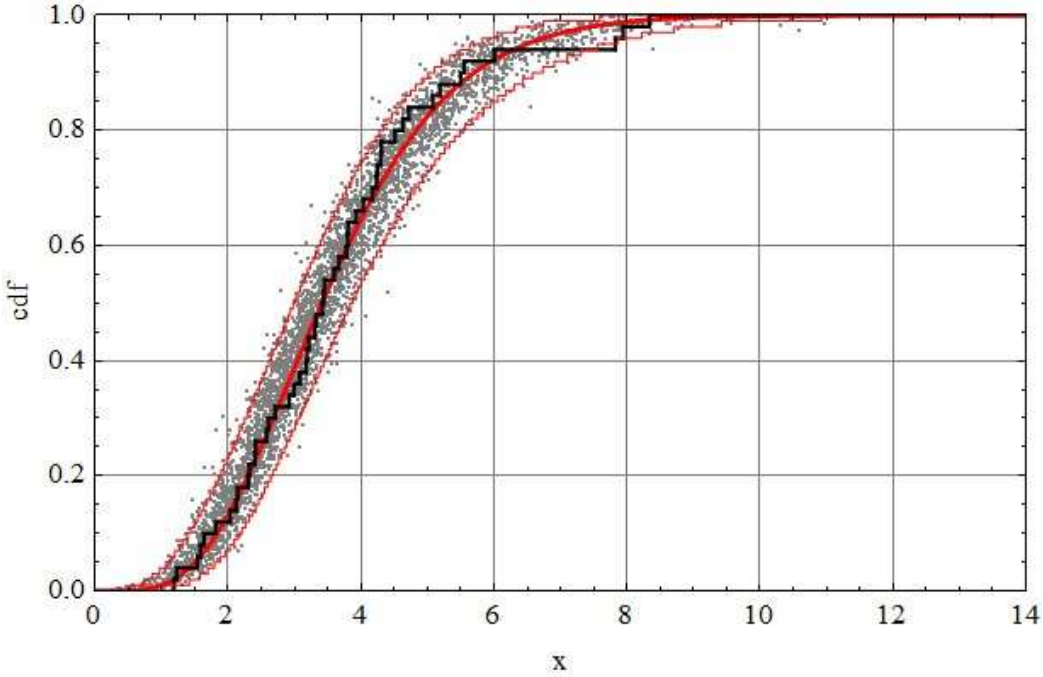


Abbildung 4-52: Verteilung von Zufallswerten X ~ Gam(α,λ) für zufällige Realisierungen (α,λ) gemäß Abbildung 4-42, empirische und angepasste Gammaverteilung aus Abbildung 4-40; mit Grenzverteilungen, die 95% aller Zufallswerte von X einschließen.

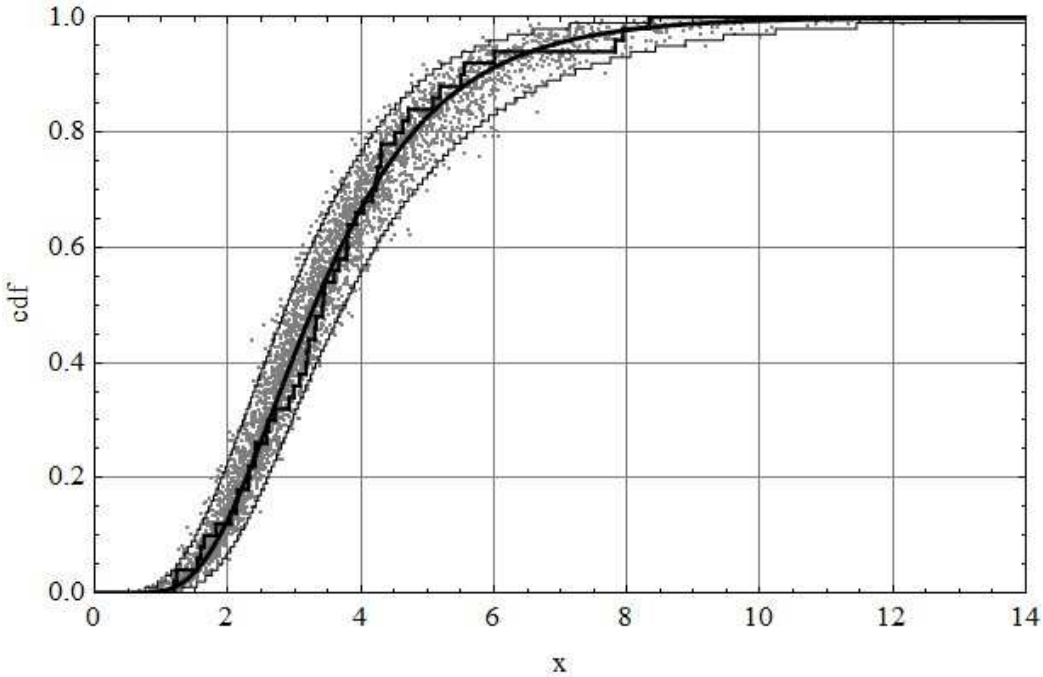


Abbildung 4-53: Verteilung von Zufallswerten X ~ Ln(μ,σ) für zufällige Realisierungen von (μ,σ) gemäß Abbildung 4-42; empirische und angepasste Lognormalverteilung aus Abbildung 4-40; mit Grenzverteilungen, die 95% aller Zufallswerte von X einschließen.

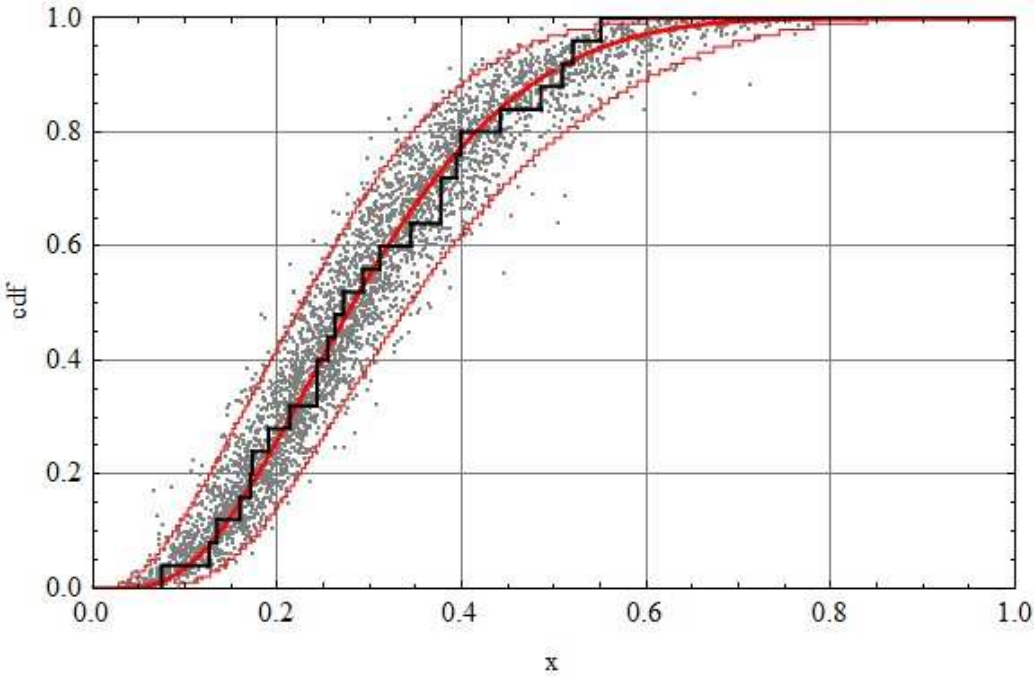


Abbildung 4-54: Verteilung von Zufallswerten X ~ $JS_B(\gamma,\delta)$ für zufällige Realisierungen von (γ,δ) gemäß Abbildung 4-48; empirische und angepasste JOHNSON-S_B-Verteilung aus Abbildung 4-46; mit Grenzverteilungen, die 95% aller Zufallswerte von X einschließen.

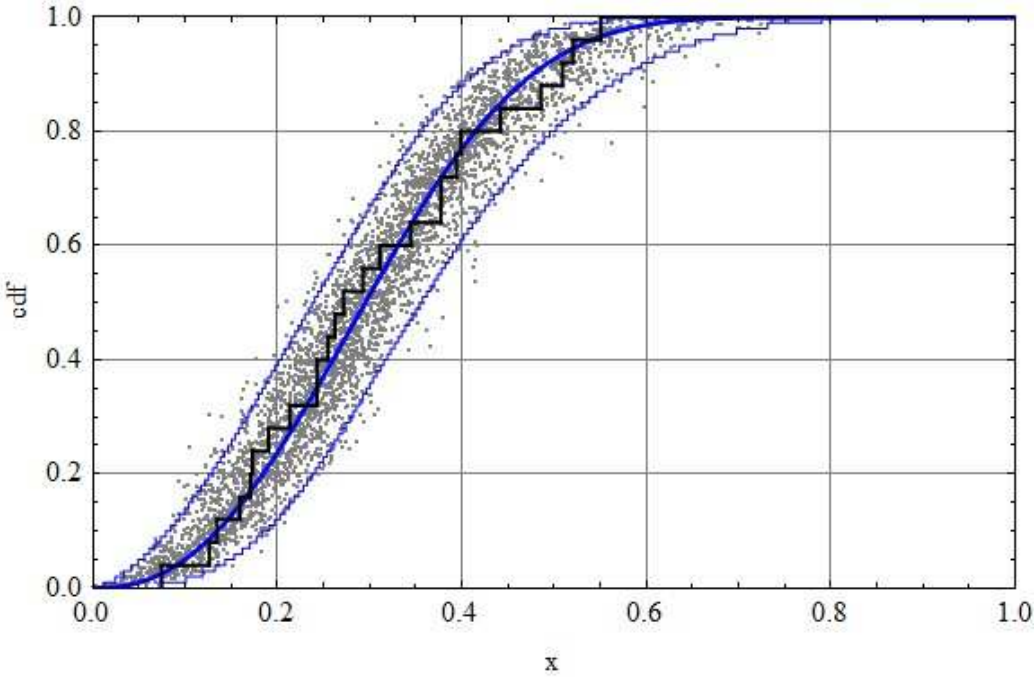


Abbildung 4-55: Verteilung von Zufallswerten X ~ $Ku(\alpha,\beta)$ für zufällige Realisierungen von (α,β) gemäß Abbildung 4-48; empirische und angepasste KUMARASWAMY-Verteilung aus Abbildung 4-46; mit Grenzverteilungen, die 95% aller Zufallswerte von X einschließen.

Erläuterungen zu den Abbildungen 4-52 bis 4-55:

- Die empirischen Verteilungsfunktionen aus den Beispielen 4-16 bzw. 4-17 sowie die über ML-Schätzer jeweils angepassten Verteilungsfunktionen für die Gamma- und Lognormalverteilung bzw. für die JS_B- und KUMARASWAMY-Verteilung wurden mit dargestellt, um den Vergleich mit den zufälligen Realisierungen von X sowie den Grenzverteilungen zu erleichtern.
- Es wurde jeweils eine Zufallszahl aus $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ für jeweils eine zufällige Realisierung $\boldsymbol{\theta}_b$ (b von 1 bis B, B = 4000) mit den in den Abbildungen 4-42 bzw. 4-48 zu den Posteriorverteilungen der Verteilungsparameter dargestellten Scatterplots berechnet. Diesem Wert x_b wurde die Wahrscheinlichkeit $F_X(x_b|\boldsymbol{\theta}_b)$ zugeordnet und im Diagramm als Punkt $(x_b, F_X(x_b|\boldsymbol{\theta}_b))$ dargestellt. Dadurch entsteht in der Darstellung der kumulativen Verteilungsfunktionen ein Scatterplot, der die Auswirkungen der Parameterunsicherheiten auf die Zufallsgröße X deutlich macht.
- Zur Berechnung der Grenzverteilungen wurden zunächst zu jeder der jeweils 4000 Verteilungsfunktionen 100 p-Quantile mit $p_i = (2 \cdot i - 1)/2 \cdot I$ (mit i von 1 bis I und I = 100) berechnet. Die für jedes p_i resultierenden B = 4000 Werte wurden in aufsteigende Größe geordnet, um aus diesen Verteilungen das 0,025-Quantil $p_{i;0,025}$ und das 0,975-Quantil $p_{i;0,975}$ zu bestimmen. Diesen Quantilen wurden die Wahrscheinlichkeiten $q_i = i/I$ (mit i von 1 bis I und I = 100) zugeordnet, woraus zwei Verteilungen (mit der üblichen Definition für empirische Verteilungen) resultieren, die als Stufenfunktion mit $(p_{i;0,025}, q_i)$ die linke/obere bzw. mit $(p_{i;0,975}, q_i)$ die rechte/untere Grenzverteilung ergeben. Von den 4000 zufälligen Realisierungen $(x_b, F_X(x_b|\boldsymbol{\theta}_b))$ liegen dann im statistischen Mittel jeweils 3800 Punkte (entspricht einem Anteil von 95%) in dem durch die beiden Grenzverteilungen eingefassten Bereich und jeweils 100 Punkte (jeweils 2,5%) über der linken/oberen sowie unter der rechten/unteren Grenzverteilung, wie aus den Abbildungen 4-52 bis 4-55 gut zu erkennen ist (die statistischen Schwankungen um die Anzahl von jeweils 100 weisen Standardabweichung von 7 bis 8 auf, sind also relativ unbedeutend).

Auf ähnliche Weise können natürlich auch andere Grenzverteilungen bestimmt werden, die einen anderen Anteil (als die hier betrachteten 95%) aller unter Beachtung der Parameterunsicherheiten von $\boldsymbol{\theta}$ resultierenden Zufallswerte von $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ einfassen, z. B. nur 90% oder 80%. Das damit definierte Maß an "Sicherheit", das mit den Grenzverteilungen erreicht werden soll (analog zu der in Abbildung 2-11 für eine DEMPSTER-SHAFER-Struktur dargestellte p-Box), ist problemspezifisch festzulegen. Im Grunde kann auf Basis einer Posteriorverteilung für den Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ jede Vorgabe zur Berechnung von Grenzverteilungen für die Zufallsgröße $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ erfüllt werden.

Für 1D-MC-Simulationen können die durch die Posteriorverteilung zum Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ charakterisierten Parameterunsicherheiten dadurch berücksichtigt werden, dass die Simulation nicht mit der über ML-Schätzer angepassten Verteilung, sondern mit der Posterior-Prognoseverteilung durchgeführt wird. In einigen einfachen Fällen kann das Integral in Gl.(2-74) analytisch berechnet werden. So resultiert für eine exponentiell verteilte Zufallsgröße gemäß Gl. (4-22) und Gl. (C-41) eine Posterior-Prognosedichte, die einer LOMAX-Verteilung folgt. Für eine POISSON-verteilte Größe resultiert analog nach Gl. (4-26) und Gl. (C-88) eine Posterior-Prognosedichte, die einer Negativen Binomialverteilung folgt. Wie in diesen beiden Fällen weicht die Posterior-Prognosedichte i. A. nur wenig von der über ML-Schätzer angepassten Verteilung ab. Für die vier Verteilungen aus den Beispielen 4-16 und 4-17 ist dies in den Abbildungen 4-56 bis 4-59 veranschaulicht.

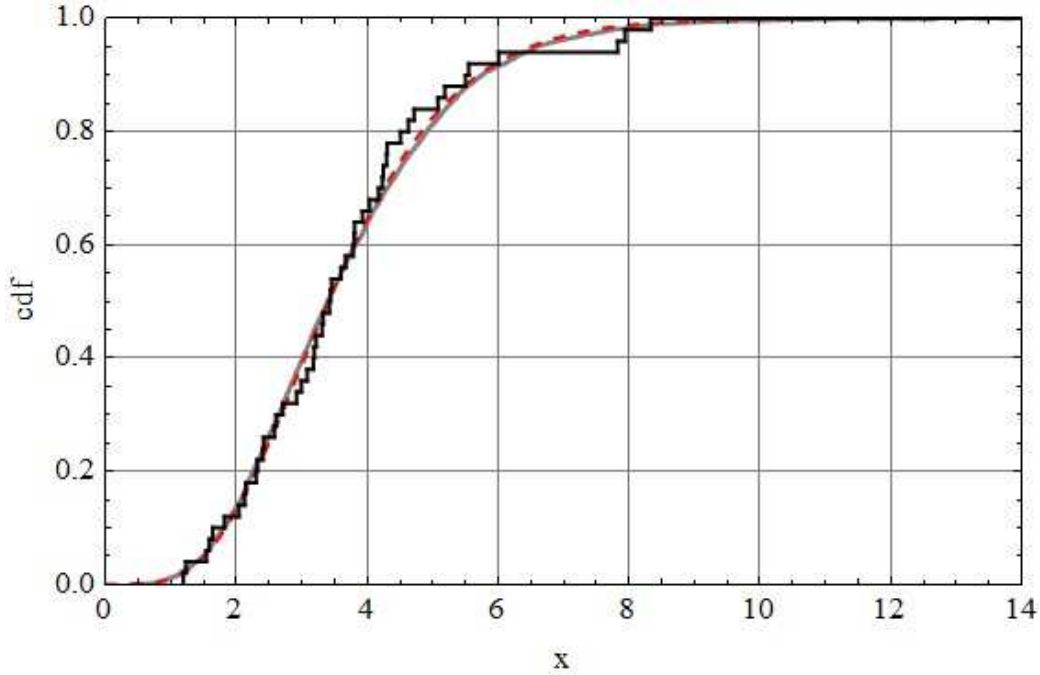


Abbildung 4-56: Posterior-Prognoseverteilung (grau) für $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ gemäß Mittelung über zufällige Realisierungen von (α,λ) aus Abbildung 4-42, empirische(schwarz) und angepasste Gammaverteilung (rot, gestrichelt) nach Abbildung 4-40

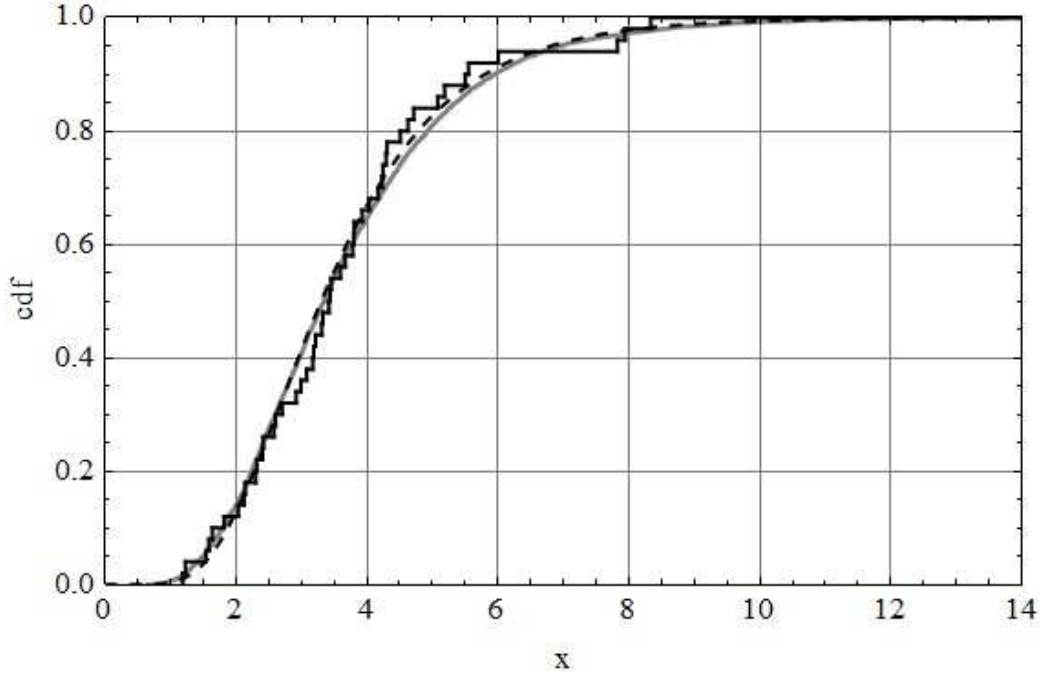


Abbildung 4-57: Posterior-Prognoseverteilung (grau) für $X \sim Ln(\mu,\sigma)$ gemäß Mittelung über zufällige Realisierungen von (μ,σ) aus Abbildung 4-42, empirische (schwarz) und angepasste Lognormalverteilung (schwarz, gestrichelt) nach Abbildung 4-40

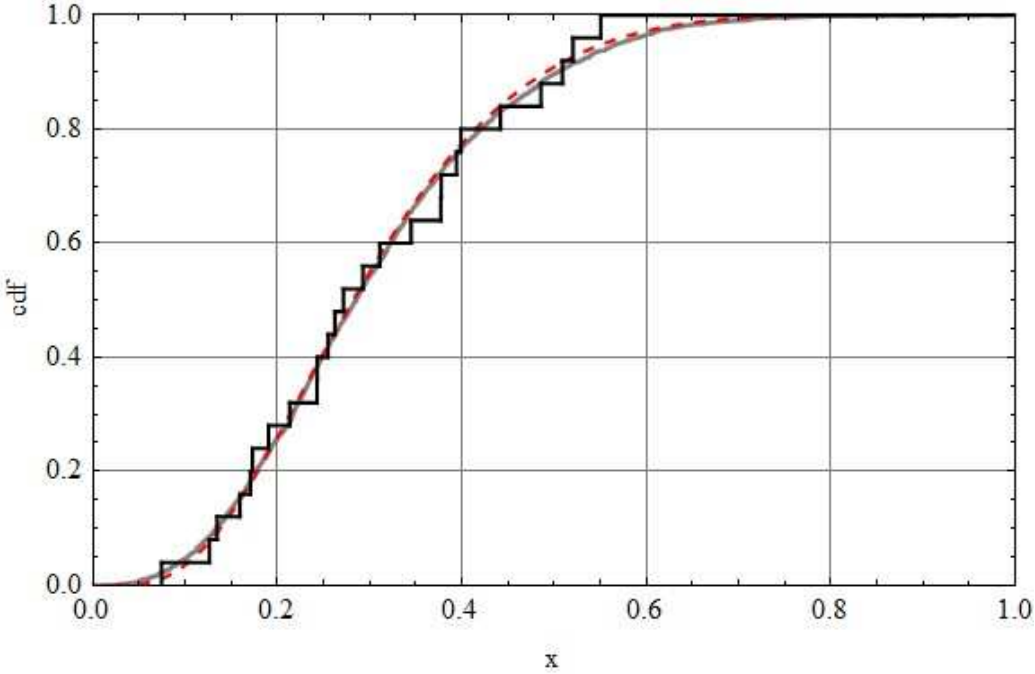


Abbildung 4-58: Posterior-Prognoseverteilung (grau) für $X \sim JS_B(\gamma,\delta)$ gemäß Mittelung über zufällige Realisierungen von (γ,δ) aus Abbildung 4-48, empirische (schwarz) und angepasste JOHNSON-S_B-Verteilung (rot, gestrichelt) nach Abbildung 4-46

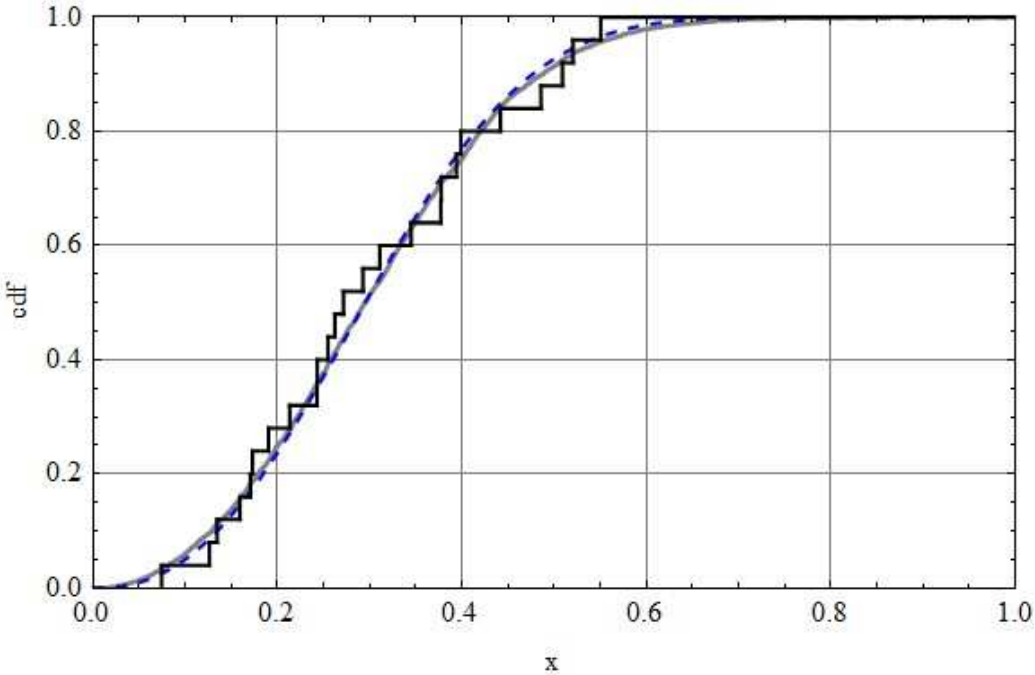


Abbildung 4-59: Posterior-Prognoseverteilung (grau) für $X \sim Ku(\alpha,\beta)$ gemäß Mittelung über zufällige Realisierungen von (α,β) aus Abbildung 4-48; empirische (schwarz) und angepasste KUMARASWAMY-Verteilung (blau, gestrichelt) nach Abbildung 4-46

4.3. Analyse/Simulation von Abhängigkeiten zwischen Modellparametern mit Copulas

In Abschnitt 2.6.3 wurde darauf hingewiesen, dass Abhängigkeiten zwischen Modellparametern (z. B. physikalischen oder Verhaltensparametern eines Expositionsmodells) in probabilistischen Simulationsrechnungen zu berücksichtigen sind. Gemeint sind dabei statistische Abhängigkeiten, die nicht bereits in deterministischen Modellansätzen durch mathematische Beziehungen dargestellt sind. Dies betrifft z. B. statistische Abhängigkeiten zwischen meteorologischen und hydrologischen Parametern, zwischen hydrogeochemischen und hydrogeologischen Parametern (wie z. B. den K_d- und k_f-Werten für unterschiedliche Bodenarten) sowie unterschiedliche Verhaltensparameter, wie Verzehrsraten für unterschiedliche Lebensmittelklassen oder auch die Häufigkeit und Dauer des Aufenthalts von Personen an Orten mit erhöhten radiologischen Belastungen.

Sind X_1, X_2, …, X_d Expositionsfaktoren, die aufgrund ihrer Variabilität und/oder epistemischer Unsicherheiten im Rahmen einer probabilistischen Modellierung als Zufallsvariable zu betrachten sind, dann können aus sehr unterschiedlichen Gründen statistische Abhängigkeiten zwischen diesen Variablen vorliegen. Nach dem in Abbildung 2-1 dargestellten hierarchischen Expositionsmodell können z. B. zwei Expositionsfaktoren X und Y in bestimmter Weise von einem anderen Faktor Z beeinflusst sein, der nicht explizit im Modell enthalten ist. Aus physikalischen, chemischen oder anderen Gründen kann eine gewisse Konkurrenz bzw. Konkordanz zwischen Variablen vorliegen, die aus gemeinsamen Beschränkungen (z. B. bzgl. verfügbarer Sorptionsplätze oder chemischer Spezies für K_d-Werte, durch ein Zeitbudget für Expositionszeiten, durch die Gesamtmenge der Nahrungsaufnahme etc.) oder auch durch befördernde bzw. beeinträchtigende Randbedingungen (z. B. geochemisches Milieu, Wetter, regionale und soziologische Situation) resultieren.

Neben dem klassischen Zugang zu multivariaten statistischen Verteilungen (siehe z. B. [JOE 97], [JOH 97], [KOTZ 00B]) wird zunehmend die auf dem Satz von SKLAR [SKL 59]/[SKL 73] basierende Copula-Theorie genutzt. Eine solide Einführung zu den mathematischen Grundlagen der Copulas bietet [NEL 07] (siehe auch [TRI 05], [ALS 06], [GEN 07A], [GEN 07B], [BAL 09]). Die traditionellen Methoden der multivariaten statistischen Inferenz ordnen die Analyse der Abhängigkeit zwischen Zufallsvariablen der Untersuchung ihrer Randverteilungen unter. Mit Hilfe von Copulas wird die multivariate Datenanalyse in zwei unabhängige Schritte unterteilt, wobei mit Copulas nur die Struktur von Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Zufallsvariablen analysiert/modelliert wird. Von der Art der jeweiligen Randverteilungen kann dabei völlig abstrahiert werden. Mit dieser Methode können die beiden unterschiedlichen Aspekte von multivariaten Verteilungen in vielen Fällen wesentlich effektiver (und übersichtlicher) behandelt werden.

Im Hinblick auf praktische Anwendungen der Analyse von multivariaten Datensätzen sowie dbzgl. Simulationsrechnungen mit Copulas, die für die probabilistische Modellierung meteorologischer und hydrologischer Ereignisse auch für expositionsrelevante Parameter von Interesse sind, liegen aus den letzten Jahren sehr viele Untersuchungen vor (siehe z. B. [SALV 07], [DUP 07], [ZHAN 07], [BARD 09], [VAND 10] und [BALI 11]).

Kommerzielle Programme zur MC-Simulation (wie Crystal Ball, @Risk) bieten zur Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen die Spezifizierung von Korrelationen an, wobei jedoch nur ein bestimmtes Modell zur Abhängigkeit, die so genannte GAUSS-Copula, aus diversen möglichen Abhängigkeitsfunktionen genutzt wird. Die GAUSS-Copula hat keine besondere Ausprägung der Abhängigkeit in den Randbereichen (den Tails). Gerade die Tails sind aber für

extreme Ereignisse von besonderer Bedeutung, wenn hier - stärker als im Mittel - eine erhöhte Konkordanz zwischen Zufallsvariablen vorliegt, durch die Überschreitungen von Grenzwerten für Risikoparameter resultieren können [POU 07].

Grundlegende Begriffe und Aussagen der Copula-Theorie sowie darauf basierende Methoden der Analyse und Simulation von Abhängigkeiten sind in Abschnitt B.3 des Anhangs B erläutert. In den nachfolgenden Darlegungen wird beispielhaft auf Copulas unterschiedlicher Tail-Abhängigkeiten eingegangen. Eine wichtige Frage ist hierbei, welche Anforderungen an die Datenbasis zu stellen sind, um anhand von multivariaten Stichproben hinreichend zuverlässig auf eine bestimmte Copula schließen zu können. Die Bestimmung statistischer Kennwerte zur quantitativen Beschreibung von Abhängigkeiten und die Methoden zur Auswahl einer "passenden" Copula sind dabei wesentliche Aspekte, die in den nachfolgenden Abschnitten diskutiert werden.

4.3.1. Statistische Kennwerte zur Charakterisierung von Abhängigkeiten

Werden Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren nicht korrekt berücksichtigt, so können probabilistische Simulationsrechnungen zu erheblichen Fehleinschätzungen führen. Dies betrifft nicht nur die generelle Vernachlässigung von Abhängigkeiten bei (fälschlicher) Annahme der Unabhängigkeit von Zufallsgrößen, sondern auch Annahmen zur Art der Abhängigkeit bei Ansatz eines Wertes für die Korrelation zwischen zwei Zufallsgrößen. Auch dadurch können für obere bzw. untere Quantile der resultierenden Variablen (Exposition) Fehleinschätzungen resultieren. Da häufig auf statistische (Rand-)Verteilungen für einzelne Expositionsfaktoren zurückgegriffen wird (z. B. nach [EPA 97c], [EPA 08]), wobei oft nur dafür empirische Daten zur Verfügung stehen, besteht eine gewisse Gefahr, dass durch eine probabilistische Simulationsrechnung statistische Verteilungen für Zielgrößen erzeugt werden, die erheblich von der Realität abweichen, wenn die Stärke von Abhängigkeiten (ausgedrückt durch Korrelations- oder Konkordanzkoeffizienten) oder auch deren Form (dargestellt durch eine Copula) nicht oder unzureichend berücksichtigt werden. Diese Problematik sei zunächst anhand eines einfachen Beispiels verdeutlicht.

Beispiel 4.18

Es seien X und Y zwei Zufallsgrößen, die einer Lognormalverteilung bzw. einer Betaverteilung folgen, z. B. $X \sim Ln(0, 1)$ und $Y \sim Bt(2, 8)$. Die Zielgröße sei $Z = X \cdot Y$. Die Abhängigkeit zwischen X und Y sei durch eine JOE-Copula (siehe Abschnitt B.3.2.2) mit einem Konkordanzkoeffizient $\tau = 0{,}4$ charakterisiert. Was passiert, wenn für eine MC-Simulation zur Zielgröße Z die Abhängigkeit zwischen den Größen X und Y vernachlässigt wird oder von der - in diesem Fall unzutreffenden - Annahme ausgegangen wird, dass die Abhängigkeit zwischen X und Y durch eine GAUSS-Copula beschrieben werden kann? Hierzu sei angenommen, dass der Wert des Konkordanzkoeffizient τ aus Daten bestimmt wurde. Für das Modell der GAUSS-Copula entspricht $\tau = 0{,}4$ einem Wert des Korrelationskoeffizienten von $r = 0{,}588$. Dies folgt aus der ersten Beziehung in Gl. (B-69).

Es sei angemerkt, dass die für dieses Beispiel beschriebenen Annahmen durchaus einem realen Fall der Simulation einer Strahlenexpositionen entsprechen könnten, wenn z. B. X eine Aktivitätskonzentration der Luft in einem belasteten Raum beschreibt und Y den Anteil der Zeit eines Betrachtungszeitraumes, in dem sich eine Person in diesem Raum aufhält. Die positive Konkordanz/Korrelation zwischen beiden Expositionsfaktoren könnte dann z. B. damit zusammenhängen, dass bei längerem Aufenthalt in einem Wohnraum die Fenster geschlossen bleiben und dadurch die Radonkonzentration steigt, oder weil in einer

kerntechnischen Anlage im Fall einer erhöhten Aktivitätsfreisetzung in die Raumluft länger andauernde Wartungsarbeiten durchzuführen sind. Die spezielle Form der JOE-Copula (siehe Abbildung B-5), die einer besonders starken Abhängigkeit von hohen Werten der Zufallsvariablen und vernachlässigbarer Abhängigkeit bei kleinen Werten entspricht, könnte für diese Expositionssituationen zutreffen.

Die Abbildung 4-60 zeigt zunächst zu den obigen Annahmen die Randverteilungen der Zufallsgrößen X und Y als Wahrscheinlichkeitsdichten. Ihre Mittelwerte sind: $E_{Ln}[X] = e^{1/2} = 1{,}65$; $E_{Bt}[Y] = 2/(2+8) = 0{,}2$ (siehe dbzgl. Gl. (C-15) und Gl. (C-53) in Anhang C). Bei Annahme der Unabhängigkeit von X und Y resultiert für Z ein Erwartungswert von $E_Z[Z] = E_{Ln}[X] \cdot E_{Bt}[Y] = 0{,}33$. Die zu den drei Ansätzen (1) Π-Copula (Unabhängigkeit von X und Y), (2) GAUSS-Copula C_G mit r = 0,588 (entspricht $\tau = 0{,}4$) sowie (3) JOE-Copula C_J mit $\theta = 2{,}22$ (entspricht $\tau = 0{,}4$; siehe Tabelle B-2) auf der Basis von 10.000 MC-Simulationen für Z berechneten Mittelwerte m_z und p-Quantile z_p für p = {0,025; 0,05; 0,1; 0,5; 0,9; 0,95; 0,975) sind in der Tabelle 4-18 zusammengestellt. Die Abbildung 4-61 zeigt die jeweils resultierenden empirischen Verteilungsfunktionen von Z. Aus Tabelle 4-18 und Abbildung 4-61 ist zu erkennen, dass die Berücksichtigung der Korrelation der Zufallsvariablen X und Y durch eine GAUSS-Copula C_G im Vergleich zur Annahme der Unabhängigkeit von X und Y (Ansatz von Π) einen wesentlichen Teil der nötigen Korrektur erbringt. Sowohl für den Mittelwert als auch für die höheren Quantile liegen aber noch deutliche Abweichungen zu den mit der JOE-Copula resultierenden Kennwerten der Zielgröße Z vor.

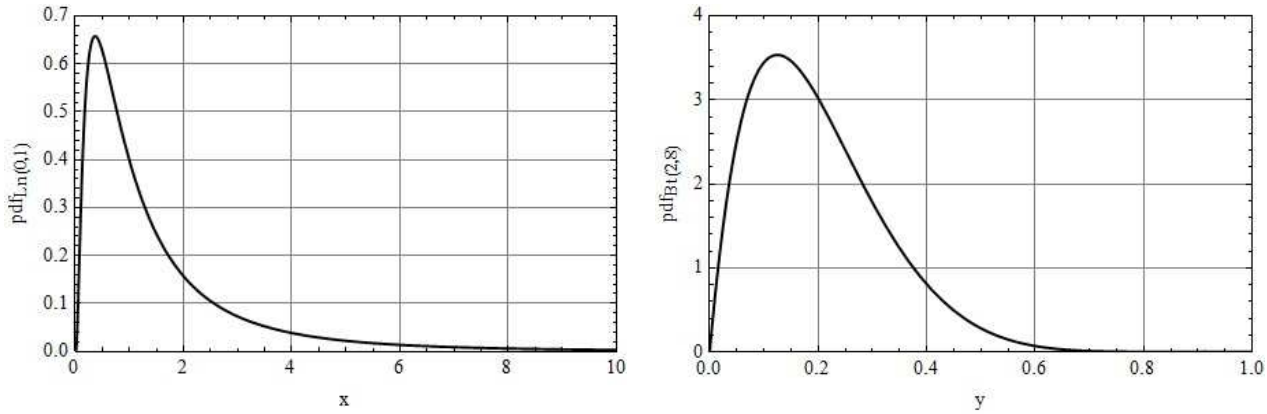


Abbildung 4-60: Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Zufallsgrößen X ~ Ln(0, 1) und Y ~ Bt(2, 8)

Tabelle 4-18: Erwartungswerte m_z und Quantile z_p der Größe Z = X·Y für drei Ansätze zur Abhängigkeit zwischen X und Y gemäß der Produkt-, GAUSS- bzw. JOE-Copula zur Modellierung der bivariaten Verteilungsfunktion $H(x, y) = C(F_{Ln}(x), F_{Bt}(y))$ mit Randverteilungen der dbzgl. Ansätze für X und Y; auf Basis von 10.000 zufälligen Realisierungen; $\tau = 0{,}4$

p		**0,025**	**0,05**	**0,1**	**0,5**	**0,9**	**0,95**	**0,975**
Copula	$\mathbf{m_z}$	$\mathbf{z_p}$						
Π	0,331	0,0112	0,0196	0,0327	0,168	0,770	1,16	1,66
$\mathbf{C_G}$	0,451	0,0063	0,0113	0,0216	0,177	1,09	1,75	2,65
$\mathbf{C_J}$	0,509	0,0085	0,0135	0,0225	0,155	1,20	2,11	3,20

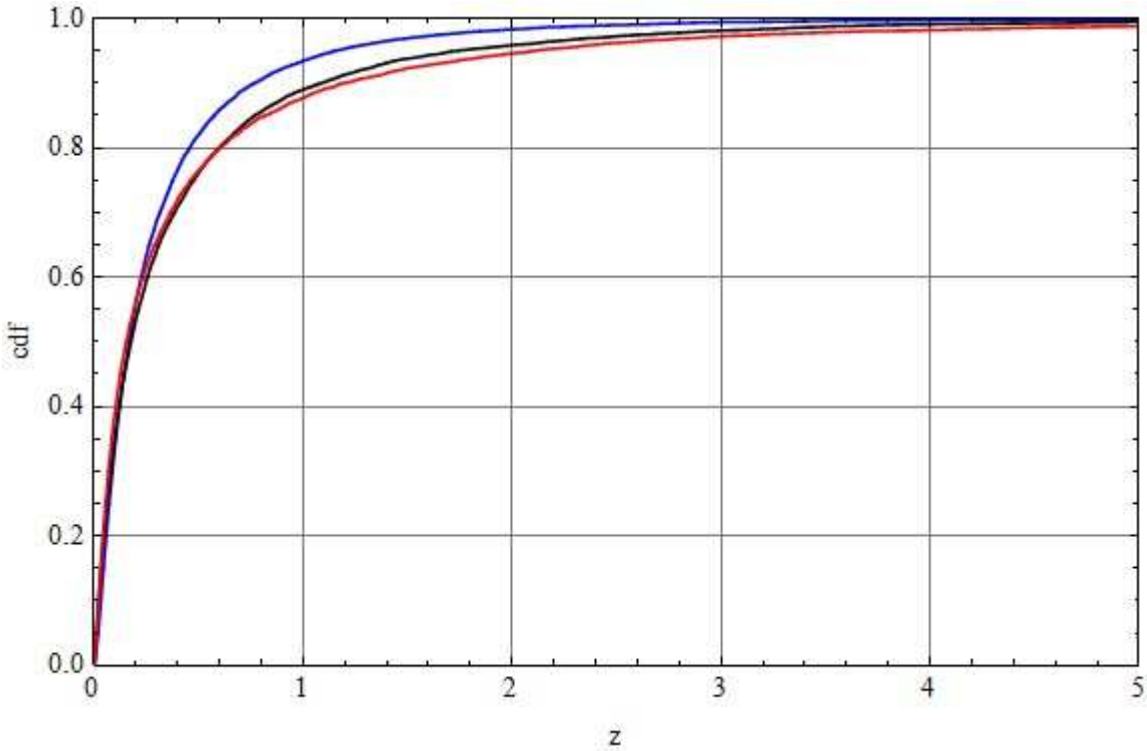


Abbildung 4-61: Empirische Verteilungsfunktionen für die Zielgröße Z = X·Y auf der Basis von jeweils 10.000 MC-Simulationen für unterschiedliche Annahmen zur Abhängigkeit zwischen den Input-Variablen X und Y: (1) Annahme der Unabhängigkeit (blau); (2) Ansatz der GAUSS-Copula mit korrekter Konkordanz/Korrelation (schwarz); (3) Ansatz der JOE-Copula mit korrekter Konkordanz (rot).

Anmerkung: Die Relevanz der für die drei Berechnungsvarianten festgestellten Unterschiede würde im Fall einer auf reale Situationen bezogenen Expositionsmodellierung von der Relation zu einem Grenz- oder Richtwert abhängen. Entsprächen die statistischen Kennwerte in Tabelle 4-18 der Einheit µSv/a, so wären die Unterschiede vmtl. unerheblich, sollten es jedoch mSv/a sein, so wären möglichst korrekte Berechnungen sicherlich wichtig. Anhand dieses Beispiels kann auch die Frage diskutiert werden, wie für ein deterministisches Expositionsmodell konservative Annahmen zu treffen wären. Ein plausibler Ansatz wäre, konservativ für den Faktor Y dessen Extremwert 1 anzunehmen, für den Faktor X (hier z. B. eine Aktivitätskonzentration) jedoch mit dem Mittelwert der Daten zu rechnen, aus denen auch die Randverteilung bestimmt wurde. Somit könnte mit $Y_{kons.} = 1$ und $E_X[X] = 1{,}65$ für Z ein "konservativer" Wert des deterministischen Modells von $z_{det} = 1{,}65$ resultieren. Dieser Wert liegt jedoch sogar unter dem mit der GAUSS-Copula berechneten 0,95-Quantil und etwa bei der Hälfte des "realen" 0,975-Quantils.

Die praktische Bedeutung einer möglichst realistischen Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen den Faktoren eines (Expositions-)Modells wird durch die jeweiligen Gegebenheiten bestimmt. Läge bei den obigen Ansätzen zu den Randverteilungen für X und Y eine Situation vor, in der kleine Werte dieser Variablen eine größere Konkordanz aufweisen als große Werte, so könnte z. B. die in Abschnitt B.3.2.2 beschriebene Copula C_{19} realitätsnah sein. Bei gleichem Wert des (integralen) Konkordanzkoeffizienten von $\tau = 0{,}4$ würden dann aus der MC-Simulation die in der Tabelle 4-19 aufgeführten Kennwerte für die Zielgröße Z resultieren.

Tabelle 4-19: Erwartungswerte m_z und Quantile z_p der Größe Z = X·Y bei Ansatz einer Abhängigkeit zwischen X und Y gemäß der Copula C_{19} für die bivariate Verteilungsfunktion H(x, y) = $C(F_{Ln}(x), F_{Bt}(y))$ mit Randverteilungen der dbzgl. Ansätze für X und Y; auf der Basis von 10.000 zufälligen Realisierungen; $\tau = 0{,}4$

p		**0,025**	**0,05**	**0,1**	**0,5**	**0,,9**	**0,95**	**0,975**
Copula	$\mathbf{m_z}$	$\mathbf{z_p}$						
$\mathbf{C_{19}}$	0,409	0,0046	0,0091	0,0200	0,192	1,00	1,45	2,11

Der Mittelwert und die höheren Quantile liegen bei Ansatz der Copula C_{19} zwar über den Ergebnissen der Simulationsrechnung für unabhängige Variable X und Y (Π-Copula), aber unter jenen Kennwerten, die bei Ansatz der GAUSS-Copula resultieren. Dies zeigt, dass die GAUSS-Copula zum vorgegebenen Wert des Korrelationskoeffizienten unspezifisch bzgl. besonderer Abhängigkeiten in den unteren sowie oberen Randbereichen ist. (Anmerkung: Würde durch die Copula C_{19} die reale Abhängigkeit zwischen den Variablen X und Y korrekt abgebildet, dann wäre der o. g. deterministische Ansatz mit z_{det} = 1,65 konservativ im Sinne der Abdeckung des 0,95-Quantils.)

Zur realistischen Simulation der statistischen Abhängigkeit von Expositionsfaktoren könnte es ggf. erforderlich sein, spezielle Modelle zu entwickeln, wie in Abschnitt B.3.2.3 anhand der MARSHALL-OLKIN-Copula gezeigt. In vielen Fällen kann es jedoch auch ausreichend sein, einen vorliegenden Datensatz aus n Wertpaaren (x_i, y_i), i = 1 bis n bei Stichprobenumfang von n, mit relativ einfachen elliptischen oder archimedischen Copulas darzustellen. Hierzu sollte zunächst für den jeweiligen Datensatz ein Streudiagramm zu den Wertepaaren ($F_X(x_i)$, $F_Y(yi)$) der empirischen Verteilungsfunktionen erstellt werden, das allerdings oft nur für größere Stichprobenumfänge aussagekräftig ist. Hierfür ist z. B. folgender Algorithmus geeignet, mit dem den Daten Wahrscheinlichkeiten

$$F_i = \frac{2 \cdot i - 1}{2 \cdot n}, \quad i = 1 \text{ bis } n, \tag{4-65}$$

zugeordnet werden:

1. Die Wertematrix (x_i, y_i), i = 1, …, n, wird zunächst nach aufsteigenden x-Werten geordnet, wodurch eine Matrix ($x_{(i)}$, $y_{x(i)}$) resultiert.
2. In dieser Matrix wird $x_{(i)}$ durch F^x_i gemäß Gl. (4-65) ersetzt, woraus (F^x_i, $y_{x(i)}$) resultiert. (Eine Alternative ist die Ergänzung von ($x_{(i)}$, $y_{x(i)}$) durch eine dritte Spalte mit den Werten F^x_i; aber die erste Spalte mit den geordneten Werten $x_{(i)}$ wird nicht mehr benötigt.)
3. Die Matrix (F^x_i, $y_{x(i)}$) wird nach aufsteigenden y-Werten geordnet, wodurch ($F^x_{y(i)}$, $y_{(i)}$) entsteht.
4. In dieser Matrix wird $y_{(i)}$ durch F^y_i gemäß Gl. (4-65) ersetzt, woraus ($F^x_{y(i)}$, F^y_i) resultiert.
5. Mit der Zuordnung (u_i, v_i) = ($F^x_{y(i)}$, F^y_i) (i = 1 bis n) kann ein Scatterplot zur Dichte $c_{x,y}(u,v)$ der empirischen Copula $C_{x,y}(u, v)$ erzeugt werden.

Aus solchen Streudiagrammen kann man bei hinreichend großem Stichprobenumfang bereits erkennen, ob in einem bestimmten Randbereich (z. B. kleiner x- und kleiner y-Werte) eine erhöhte Konkordanz vorliegt (siehe z. B. Abbildung B-5).

Beispiel 4.19

Zur Veranschaulichung der obigen Erläuterungen werden hier noch einmal Daten zu den in Abschnitt 4.2 diskutierten bivariaten Verteilungen von Verteilungsparametern univariater Verteilungen betrachtet (aus methodischer Sicht ist es nebensächlich, welche Bedeutung voneinander abhängige Zufallsgrößen haben).

Für die in Beispiel 4-17 angegebenen bivariaten Verteilungen der Parameter (γ, δ) der JOHNSON-S_B Verteilung und (α, β) der KUMARASWAMY-Verteilung (siehe Abbildung 4-48) resultieren mit dem oben erläuterten Algorithmus die in der Abbildung 4-62 dargestellten Streudiagramme zu den Dichten der Copulas $C_{JSB(\gamma,\delta)}(u, v)$ und $C_{Ku(\alpha,\beta)}(u, v)$. Für eine quantitative Analyse dieser Diagramme können der Konkordanzkoeffizient τ und die Koeffizienten λ_L und λ_U für beide Datensätze berechnet werden. Für τ kann die Berechnung natürlich auch mit den Originaldatensätzen zu (γ, δ) bzw. (α, β) erfolgen; es resultieren die gleichen Werte wie für die (strikt monoton steigend) transformierten Variablen (u, v). Zur Berechnung der Koeffizienten λ_L und λ_U kann direkt auf die Definitionsgleichungen Gl. (B-66a/b) Bezug genommen werden. Dabei ist es zweckmäßig, beide Koeffizienten als Funktionen von t ($0 < t < 1$) zu berechnen und für t eine Schrittweite zu wählen, mit der die Grenzwerte für $t \to 1^-$ bzw. $t \to 0^+$ gut geschätzt werden können. Die Schrittweite sollte nicht zu klein sein (etwa $\Delta t = 1/n$), weil dann in den Randbereichen wegen der für Stichproben unvermeidlichen statistischen Unsicherheiten zu starke Schwankungen auftreten. In Abbildung 4-63 sind für beide empirische Copulas berechnete Funktionen $\lambda_L(t)$ und $\lambda_U(t)$ dargestellt. Daraus folgt, dass für beide Copulas die Koeffizienten der unteren und oberen Tail-Abhängigkeit in etwa gleich sind, wobei für den JS_B-Datensatzes $\lambda_L \approx \lambda_U \approx 0{,}2$ und für den Datensatz zu den Parametern der KUMARASWAMY-Verteilung $\lambda_L \approx \lambda_U \approx 0{,}5$ geschätzt wird. Die Stichprobenschätzwerte für den Konkordanzkoeffizient sind $\tau_{JSB(\gamma,\delta)} = 0{,}4835$ sowie $\tau_{Ku(\alpha,\beta)} = 0{,}6977$.

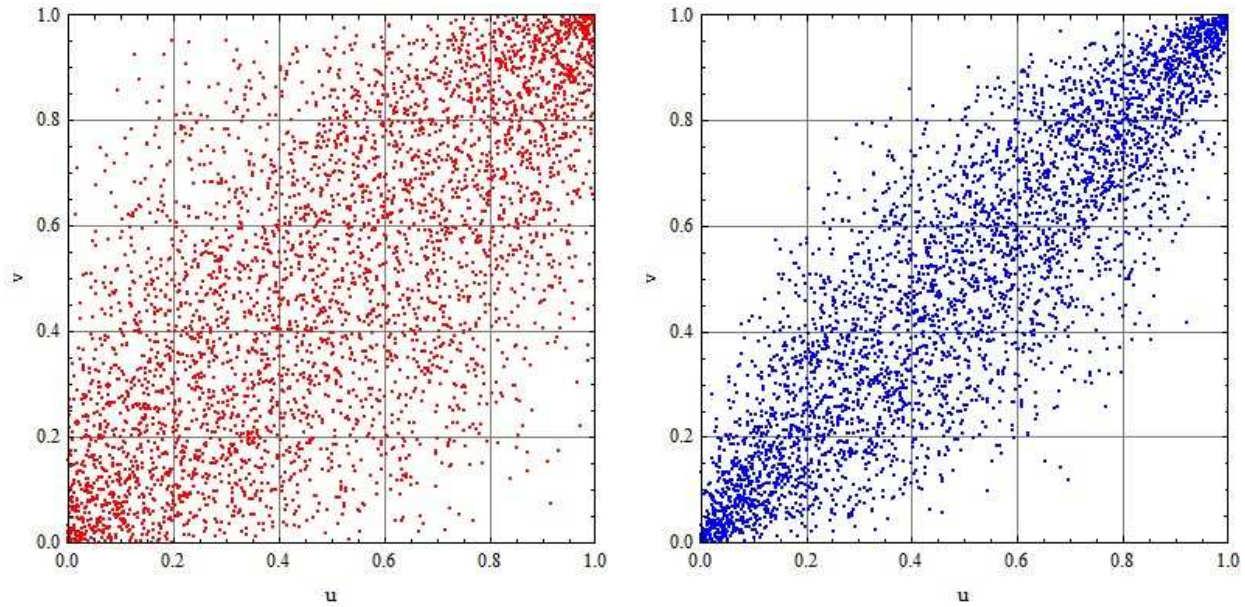


Abbildung 4-62: Scatterplots zu den Copulas $C_{JSB(\gamma,\delta)}(u, v)$ (links, rot) und $C_{Ku(\alpha,\beta)}(u, v)$ (rechts, blau) für die in Abbildung 4-48 dargestellten Datensätze zu den Verteilungsparameter (γ, δ) der JOHNSON-S_B- bzw. (α, β) der KUMARASWAMY-Verteilung aus dem Beispiel 4-17

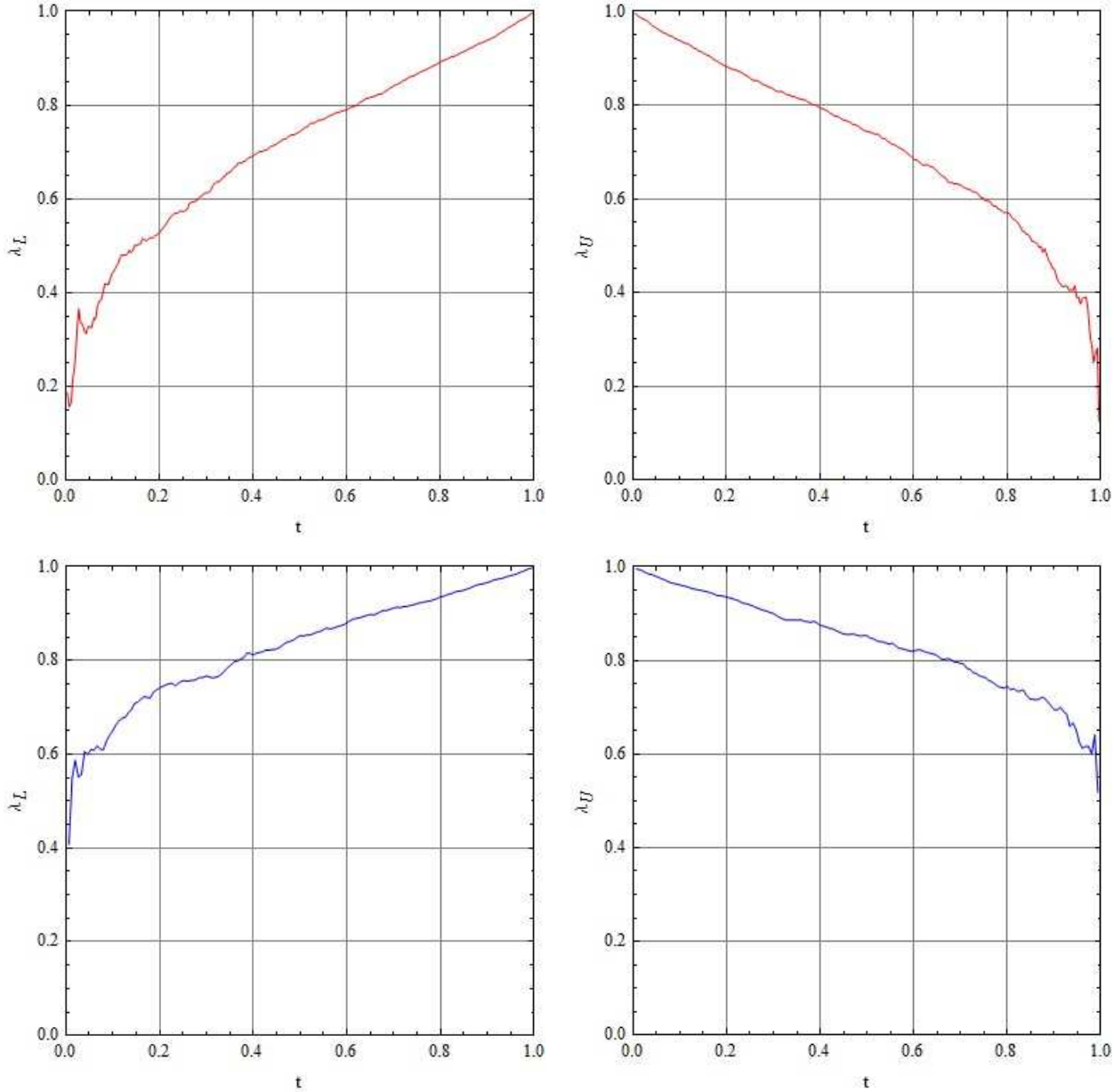


Abbildung 4-63: Funktionen $\lambda_L(t)$ (links) und $\lambda_U(t)$ (rechts) zu den in Abbildung 4-62 dargestellten zu den Copulas $C_{JSB(\gamma,\delta)}(u, v)$ (oben, rot) und $C_{Ku(\alpha,\beta)}(u, v)$ (unten, blau) zur Schätzung der Koeffizienten der unteren bzw. oberen Tail-Abhängigkeit gemäß Gl. (B-66a/b)

Aus den o. g. Schätzwerten für λ_L und λ_U folgt u. a., dass die Abhängigkeit zwischen den jeweiligen Verteilungsparametern nicht durch GAUSS-Copulas korrekt erfasst werden kann, da für diese $\lambda_L \approx \lambda_U \approx 0$ gelten müsste (siehe Abschnitt B.3.2.1). Von den in Abschnitt B.3.2 in Anhang B erläuterten Copula-Familien bietet sich zur Modellierung die STUDENT-Copula Gl. (B-70) an. Gemäß Gl. (B-69) entsprächen die o. g. τ-Werte Korrelationskoeffizienten von $r_{JSB(\gamma,\delta)} = 0{,}689$ bzw. $r_{Ku(\alpha,\beta)} = 0{,}889$. Durch Lösung von Gl. (B-71) ergeben sich Freiheitsgrade der STUDENT-Copula von $\nu_{JSB(\gamma,\delta)} \approx 9$ bzw. $\nu_{Ku(\alpha,\beta)} = 7$. Scatterplots von Simulationsrechnungen zu diesen Copulas stimmen sehr gut mit Abbildung B-62 überein.

Die Schätzung der Koeffizienten λ_L und λ_U der Tail-Abhängigkeit, wie in Beispiel 4.19 gezeigt, ist oft ein wichtiger Schritt zur Charakterisierung empirischer Copulas und Auswahl einer "passenden" analytischen Copula-Funktion für Simulationsmodelle. Die Schätzung der Koeffizienten λ_L und λ_U nach den Definitionsgleichungen (B-66a/b) verlangt allerdings relativ große Stichprobenumfänge. Zu speziellen Schätzmethoden dieser Parameter und dbzgl. Problemen sei auf [FRA 05], [SCHM 06] und [EIN 08] verwiesen.

4.3.2. Anpassung von Copulas an multivariate Stichproben

Die Anpassung von parametrischen Copulas an multivariate Stichproben, die einen bestimmten Umfang n haben, basiert auf der Bestimmung der empirischen Copula $C_n(u, v)$ bzw. daraus abgeleiteter Funktionen, wie der empirischen KENDALL-Verteilungsfunktion $K_n(t)$, und auf statistischen Kennwerten, wie dem empirisch geschätzten Wert τ_n des Konkordanzkoeffizienten oder Schätzwerten für Verteilungsparameter θ der betrachteten Copulas, wozu u. a. ML-Schätzer angewandt werden können [GEN 95]. Zur Berechnung dieser Funktionen bzw. Kennwerte sei auf den Abschnitt B.3.3 des Anhangs B verwiesen. Ausführlichere Erläuterungen und Ableitungen zu den empirischen Funktionen findet man z. B. in [NEL 07].

Ein Test der Anpassung parametrischer Copulas an Stichproben erfolgt i. d. R. in zwei Schritten. Im ersten Schritt wird die empirische Copula aus den über die empirischen Randverteilungen der Zufallsgrößen X und Y transformierten Wertepaaren (u_i, v_i) berechnet (siehe Abschnitt 4.3.1). Über den Stichprobenschätzwert τ_n und daraus für betrachtete Copulas abgeleitete Schätzwerte θ_n der jeweiligen Copula-Verteilungsparameter sowie mit einem Abstandsmaß zwischen C_n und $C(u,v|\theta_n)$ bzw. zwischen $K_n(t)$ und $K_C(t)$ wird dann im zweiten Schritt beurteilt, welche der betrachteten Copulas am besten zur Stichprobe passt. Zur Prüfung der Eignung einer Copula für die Anpassung an Daten wurden diverse Methoden und Algorithmen für Goodness-of-Fit Tests entwickelt, die der in Abschnitt 4.1.2 für univariate Verteilungen erläuterten Vorgehensweise ähnlich sind. Da eine Beschreibung dieser Methoden den Rahmen des vorliegenden Berichts sprengen würde, sei hierzu auf die Arbeiten [FERM 05], [GEN 06], [BERG 07], [GEN 09], [WANG 10] verwiesen. Zur Bewertung von Unsicherheiten der Modellauswahl werden (wie für univariate Verteilungen) hauptsächlich Bootstrapping- und BAYES-Methoden angewandt (siehe hierzu z. B. [NIK 08] bzw. [HUA 06]).

Die aus dem endlichen (oft relativ geringen) Umfang von multivariaten Stichproben resultierende Unsicherheit zur Schätzung der Parameter der Randverteilungen der einzelnen Zufallsgrößen sowie zur Schätzung der Verteilungsparameter von Copulas, mit denen deren gegenseitige Abhängigkeit erfasst und modelliert wird, können mit Hilfe hierarchischer BAYES-Modelle zusammen untersucht werden, indem Posteriordichten für alle Verteilungsparameter (der einzelnen Randverteilungen und der Copula) gemeinsam berechnet werden. Arbeiten in dieser Richtung (siehe z. B. [SIL 08]) befinden sich zwar noch in einem relativ frühen Entwicklungsstadium, bieten jedoch die Aussicht auf eine zukünftig vereinheitlichte Methodik zur Berücksichtigung von Unsicherheiten bei der Simulation von multivariaten Verteilungen.

Die weiteren Darlegungen konzentrieren sich auf die Anpassung von archimedischen Copulas, für die durch ihrer spezielle mathematischen Form (siehe Abschnitt B.3.2.2) einige Vereinfachungen resultieren. Für archimedische Copulas kann für eine Anpassung an Stichproben auf den Vergleich der empirischen und theoretischen Copula verzichtet werden, weil alle relevanten Informationen in

den KENDALL'schen Verteilungsfunktionen $K_n(t)$ bzw. $K_C(t)$ enthalten sind. Dadurch können auch mit geringeren Stichprobenumfängen effektive Anpassungstests durchgeführt werden.

Zum Verständnis der "Topographie" von Copulas sowie der zur Anpassung archimedischer Copulas nutzbaren Besonderheiten sind in Abbildung 4-64 Höhenlinien der vier parameterfreien Copulas W, Π, Σ und M sowie in Abbildung 4-65 Höhenlinien der vier in Abschnitt B.3.2.2 erläuterten archimedischen Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} (jeweils für $\tau = 0{,}6$) dargestellt.

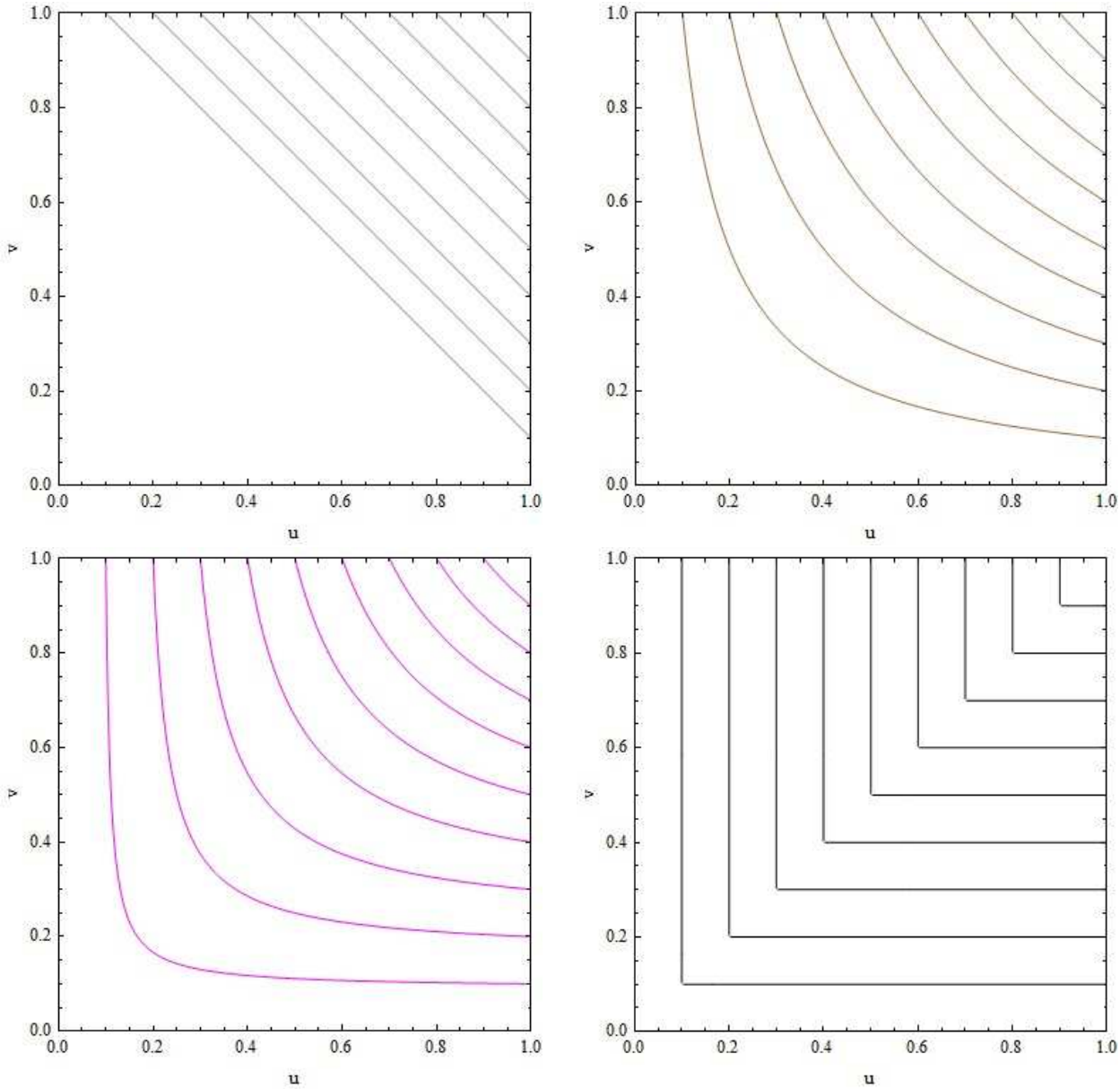


Abbildung 4-64: Höhenlinien für t-Werte von 0,1 bis 0,9 für die Copulas W (links oben, untere Schranke, $\tau = -1$), Π (rechts oben, Produkt-/Unabhängigkeits-Copula, $\tau = 0$), Σ (links unten, $\tau = 1/3$) sowie M (rechts unten, obere Schranke, $\tau = 1$)

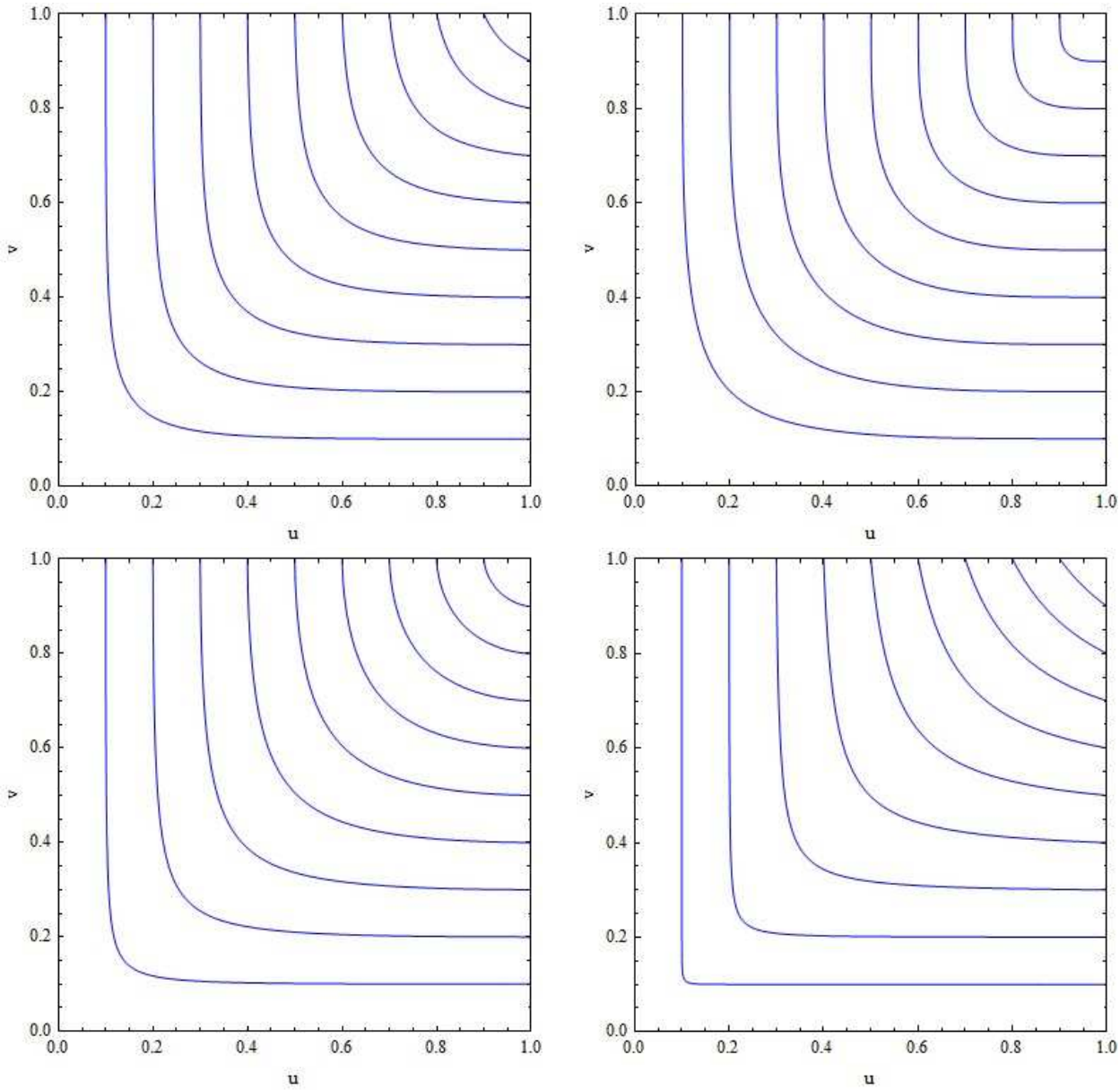


Abbildung 4-65: Höhenlinien für t-Werte von 0,1 bis 0,9 für die Copulas C_F (links oben), C_J (rechts oben), C_{12} (links unten) und C_{19} (rechts unten) jeweils für $\tau = 0{,}6$

Die Höhenlinien aller Copulas liegen zwischen den entsprechenden Höhenlinien der FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken W und M. Für $0 < \tau < 1$ liegen die Höhenlinien von archimedischen Copulas (die wie W, Π, Σ und M symmetrische sind), zwischen Π und M. Für die Copulas C_{12} und C_{19} gilt $1/3 < \tau < 1$ (siehe Abschnitt B.3.2.2); ihre Höhenlinien für ein bestimmtes Niveau t liegen zwischen den entsprechenden Höhenlinien der Copulas Σ und M. Die unterschiedlichen Tail-Abhängigkeiten der Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} sind aus größeren Ähnlichkeit der Höhenlinien für kleine bzw. große t-Werte mit den entsprechenden Höhenlinien von Π bzw. Σ und M gut zu erkennen.

Nach Gl. (B-64) wächst die KENDALL-Verteilungsfunktion $K_C(t)$ von 0 bis 1. Mit $K_M(t) = t$ und $K_W(t) = 1$ folgt für alle Copulas $t \leq K_C(t) \leq 1$. Die Besonderheit archimedischer Copulas besteht nun darin, dass mit $K_C(t)$ die gesamte Copula C(u, v) definiert ist. Gemäß Gl. (B-73) ist die generierende Funktion $\varphi_C(t)$ der archimedischen Copula durch Integration dieser Gleichung bestimmt [GEN 93]. In Abbildung 4-66 sind die Verläufe von $K_C(t)$ für die Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} für drei τ-Werte (0,4; 0,6; 0,8) im Vergleich zu $K_M(t)$ und $K_\Pi(t)$ (für C_{12} und C_{19} auch bzgl. $K_\Sigma(t)$) dargestellt.

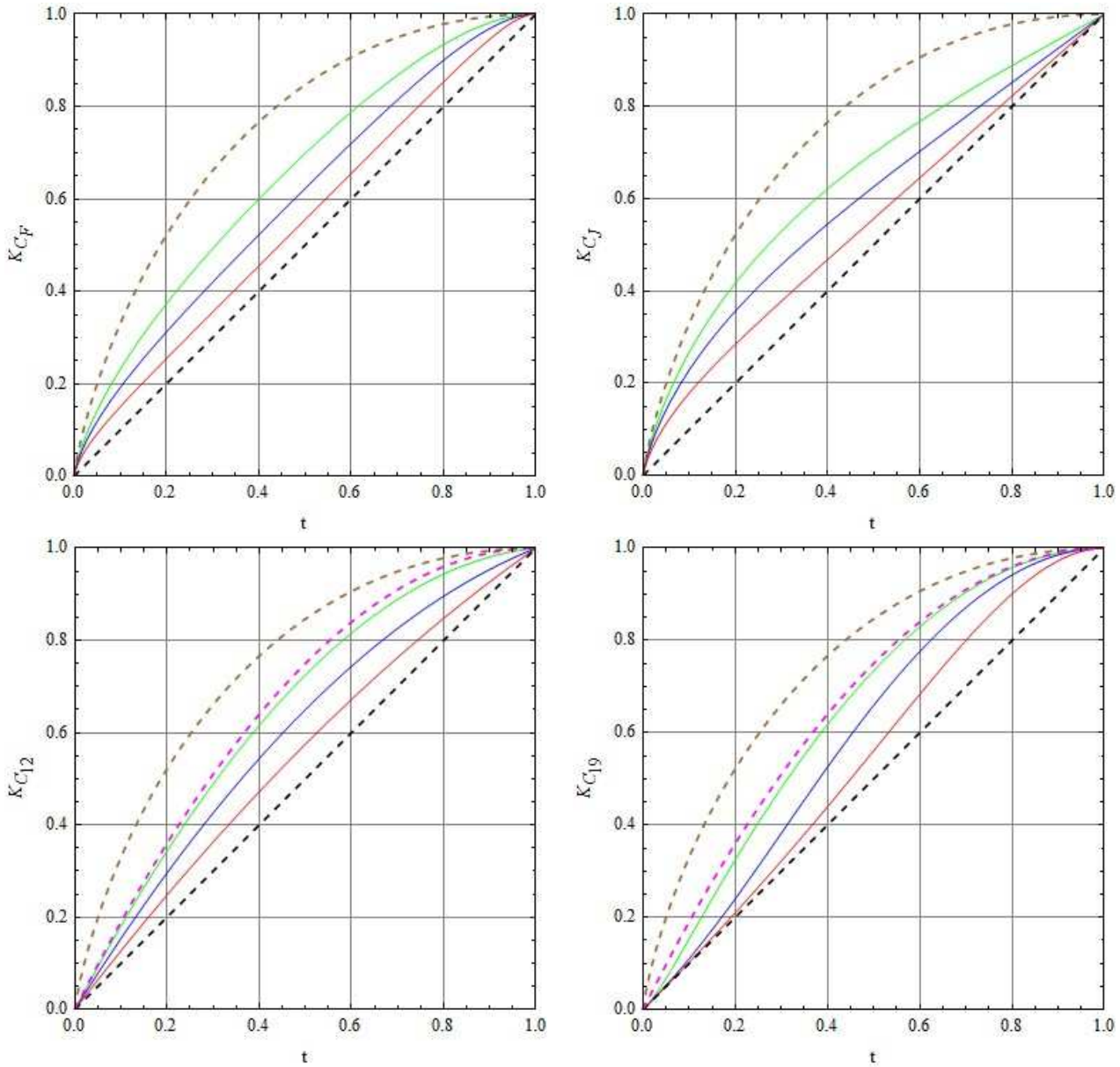


Abbildung 4-66: Verläufe von $K_C(t)$ für die Copulas C_F (links oben), C_J (rechts oben), C_{12} (links unten) und C_{19} (rechts unten) jeweils für drei τ-Werte von 0,4 (grün), 0,6 (blau) und 0,8 (rot), von $K_M(t) = t$ ($\tau = 1$, schwarz gestrichelt) und $K_\Pi = t\cdot(1-\ln(t))$ ($\tau = 0$, braun gestrichelt) sowie in den beiden unteren Bildern von $K_\Sigma(t) = t\cdot(2-t)$ ($\tau = 1/3$, magenta gestrichelt)

Aus Abbildung 4-66 sind die unterschiedlichen Eigenschaften der vier ausgewählten Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} klar zu erkennen. Während die FRANK-Copula C_F keine Tail-Abhängigkeit hat, schmiegt sich bei der JOE-Copula $K_J(t)$ für $t \to 1$ an $K_M(t)$ an (verstärkt für große τ); für $t \to 0$ an $K_\Pi(t)$. Dies beschreibt die obere Tail-Abhängigkeit der JOE-Copula (aber $\lambda_L = 0$). Zur Copula C_{19} ist eine umgekehrte Tail-Abhängigkeit erkennbar, $K_{19}(t)$ strebt für $t \to 0$ zu $K_M(t)$ ($\lambda_L = 1$, $\lambda_U = 0$). Die Copula C_{12} hat sowohl untere als auch obere Tail-Abhängigkeit (vgl. Tabelle B-2).

Diese vier archimedischen Copulas sind somit geeignet, auch für bivariate Stichproben bei "normal" großen Stichprobenumfängen n von ca. 50 bis 200 unterschiedliche Abhängigkeitstypen zu erkennen und für probabilistische Simulationsrechnungen zu nutzen. Für deutlich größere Stichprobenumfänge ist es natürlich möglich, auch feinere Unterschiede herauszufinden, wie z. B. zwischen der FRANK- und der GAUSS-Copula, die beide keine Tail-Abhängigkeit aufweisen.

Sehr ähnlich zu den bzgl. der Auswahl von univariaten Verteilungen in Abschnitt 4.1 diskutierten Problemen hängen auch die Möglichkeiten einer statistisch signifikanten Unterscheidung von Copulas von deren Ähnlichkeit und vom Stichprobenumfang ab. Um eine erste Bewertung dbzgl. Anforderungen an die Datenbasis vorzunehmen, wurden mit den vier o. g. archimedischen Copulas Simulationsrechnungen zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeit der korrekten Selektion (PCS) bzw. einer inkorrekten Selektion (PIS) durchgeführt (analog zu den Simulationsrechnungen für die Auswahl zwischen univariaten Verteilungen in Abschnitt 4.1.4). Hierzu wurden für jede der vier Verteilungen für die τ-Werte 0,4, 0,6 und 0,8 und Stichprobenumfänge von n = 25, 50, 100 und 200 jeweils 100 zufällige Realisierungen simuliert. Für die 12 unterschiedlichen Populationen (definiert durch die erzeugende Copula und die Werte des Konkordanzkoeffizienten) wurden in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang die PCS und PIS (in %) aus den jeweils 100 Realisierungen entsprechend der Anzahl von Bestwerten des jeweiligen Copula-Typs nach dem Anpassungskriterium bestimmt. Als Kriterium wurde die mittlere quadratische Abweichung zwischen der empirischen und der theoretischen KENDALL-Verteilungsfunktion gewählt, also der Mittelwert von $(K_n(t) - K_C(t))^2$, wobei für alle vier in den Vergleich einbezogenen Copulas mit dem gleichen empirischen Wert τ_n des Konkordanzkoeffizienten der jeweiligen Stichprobe gerechnet wurde. Diese Methode basiert u. a. auf [WANG 00]. Die bei 100 zufälligen Realisierungen pro Fall resultierenden statistischen Unsicherheiten der Schätzung der PCS bzw. PIS sind zwar nicht zu vernachlässigen; die in den nachfolgenden Tabellen 4-20 bis 4-23 zusammengefassten Ergebnisse lassen jedoch die Tendenzen klar erkennen und wesentliche Schlussfolgerungen zu.

Tabelle 4-20: Ergebnisse der Simulationsrechnungen zur Bestimmung von **PCS** bzw. **PIS** (in %) bei Erzeugung von je 100 zufälligen Realisierungen bivariater Verteilungen aus der Copula $\mathbf{C_F}$

	τ = 0,4				**τ = 0,6**				**τ = 0,8**			
n	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**
PCS C_F	45	72	91	92	54	73	84	93	64	69	92	98
PIS C_J	12	7	3	0	16	6	1	0	8	8	3	0
PIS C_{12}	24	19	6	8	20	20	14	7	24	19	5	2
PIS C_{19}	19	2	0	0	10	1	1	0	4	4	0	0

Tabelle 4-21: Ergebnisse der Simulationsrechnungen zur Bestimmung von **PCS** bzw. **PIS** (in %) bei Erzeugung von je 100 zufälligen Realisierungen bivariater Verteilungen aus der Copula $\mathbf{C_J}$

	τ = 0,4				**τ = 0,6**				**τ = 0,8**			
n	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**
PIS C_F	24	14	7	3	13	7	1	0	10	4	2	1
PCS C_J	59	85	92	97	78	91	99	100	80	89	96	99
PIS C_{12}	15	1	1	0	7	2	0	0	10	7	2	0
PIS C_{19}	2	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0

Tabelle 4-22: Ergebnisse der Simulationsrechnungen zur Bestimmung von **PCS** bzw. **PIS** (in %) bei Erzeugung von je 100 zufälligen Realisierungen bivariater Verteilungen aus der Copula $\mathbf{C_{12}}$

	τ = 0,4				**τ = 0,6**				**τ = 0,8**			
n	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**
PIS C_F	19	20	14	3	25	14	3	4	21	5	2	1
PIS C_J	5	2	0	0	5	4	1	0	10	1	1	0
PCS C_{12}	42	44	58	79	50	68	93	96	61	90	97	99
PIS C_{19}	34	34	26	18	20	14	3	0	8	4	0	0

Tabelle 4-23: Ergebnisse der Simulationsrechnungen zur Bestimmung von **PCS** bzw. **PIS** (in %) bei Erzeugung von je 100 zufälligen Realisierungen bivariater Verteilungen aus der Copula $\mathbf{C_{19}}$

	τ = 0,4				**τ = 0,6**				**τ = 0,8**			
n	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**	**25**	**50**	**100**	**200**
PIS C_F	12	5	0	0	9	0	0	0	4	0	0	0
PIS C_J	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
PIS C_{12}	19	33	24	17	18	10	2	0	10	4	0	0
PCS C_{19}	68	62	76	83	73	90	98	100	86	96	100	100

Aus den Angaben zur PCS und PIS in den Tabellen 4-20 bis 4-23 lassen sich Tendenzen erkennen:

- Die PCS nimmt weitgehend für alle Copulas und Stichprobenumfänge mit τ zu. Dies ist nach den in Abbildung 4-66 dargestellten Verläufen der KENDALL'schen Verteilungsfunktion $K_C(t)$ auch plausibel, weil für größere τ-Werte die Besonderheiten der Copulas stärker hervortreten.
- Während sich die Copulas mit entgegen gesetzter Tail-Abhängigkeit gut unterscheiden lassen (C_J und C_{19}; siehe Angaben in den Tabellen 4-21 und 4-23), stehen Copulas mit zum Teil ähnlichen Eigenschaften (wie weitgehende Symmetrie bei C_F und C_{12}; für einen Randbereich

ähnliche Tail-Abhängigkeit wie C_{12} und C_{19}) insbesondere bei kleineren Stichprobenumfängen und Werten des Konkordanzkoeffizienten τ in starker Konkurrenz.

- Mit zunehmendem Stichprobenumfang steigt die PCS und fällt die PIS für alle betrachteten Copulas und τ-Werte.

Die Ergebnisse der für vier archimedische Copulas mit unterschiedlichen Abhängigkeiten in den Randbereichen (kleiner bzw. großer Werte der beiden gekoppelten Zufallsgrößen) durchgeführten Simulationsrechnungen zur PCS bzw. PIS lassen darauf schließen, dass Copulas mit größerer Ähnlichkeit (wie sie z. B. zwischen GAUSS- und FRANK-Copula oder zwischen STUDENT- und C_{12}-Copula bestehen) schwerer anhand von Stichproben zu unterscheiden sind und für eine korrekte Identifikation größere Stichprobenumfänge und/oder spezielle Analysemethoden verlangen. Für die probabilistische Modellierung von Expositionen wäre es aus unserer Sicht jedoch ein wesentlicher Fortschritt, wenn deutlich unterschiedliche Abhängigkeitsstrukturen erkannt und berücksichtigt werden, und nicht ausschließlich nur die GAUSS-Copula entsprechend des Korrelationskoeffizienten von Stichproben für MC-Simulationsrechnungen genutzt wird. Unter diesem Gesichtspunkt und weil zur Anpassung von archimedischen Copulas relativ geringe Stichprobenumfänge ausreichen, wurden die vier Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} aus einer Vielzahl von Modellen ausgewählt. Trotzdem ist festzustellen, dass je nach den konkreten Gegebenheiten (τ-Wert, tatsächlich zugrunde liegende Form der Abhängigkeit bi- oder multivariater Zufallsgrößen) mindestens 50 bis 200 Stichproben für eine belastbare Bestimmung einer dieser vier Copulas erforderlich sind.

4.3.3. Fachbezogene Modellierung von Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren

Neben der rein statistischen Analyse von bi-/multivariaten Stichproben zur Untersuchung von Abhängigkeitsstrukturen können statistische Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren auch auf Basis fachspezifischer Überlegungen modelliert werden. Ein klassisches Beispiel enthält dbzgl. Abschnitt B.2.3.2 mit der MARSHALL-OLKIN-Copula.

In diesem Abschnitt wird als methodisches Beispiel eine Abhängigkeit zwischen Zufallsvariablen betrachtet, die aus einer gemeinsamen Beschränkung resultiert. Eine Anwendung könnte dieses Modell z. B. bei der Abschätzung von Strahlenexpositionen durch Ingestion von kontaminierten Nahrungsmitteln finden. Die in der StrlSchV (Anlage VII Teil B Tabelle 1) für unterschiedliche Lebensmittelklassen angegebenen mittleren bzw. konservativen Werte zu Verzehrsmengen stellen maßgebliche Expositionsfaktoren in deterministischen Modellen dar. Damit ergibt sich die Frage, wie konservativ damit abgeschätzte Dosen sind, wenn gleichzeitig mehrere Lebensmittelklassen zu relevanten Strahlenexpositionen führen (vgl. Abbildung 2-2). Im Rahmen des vorliegenden Berichts kann und soll diese Frage nicht beantwortet werden. Anhand eines methodischen Beispiels wird jedoch untersucht, ob und wie Copulas zur Behandlung dieser Problematik genutzt werden könnten.

Es seinen X und Y zwei Zufallsgrößen, deren Summe durch eine bestimmte univariate Verteilung definiert ist. Unter Bezugnahme auf die oben angesprochenen Verzehrsmengen könnten z. B. X und Y Verzehrsmengen für 2 alternative Lebensmittelklassen sein (z. B. Fleisch- bzw. Milchprodukte, tierische bzw. pflanzliche Nahrungsmittel etc.), wobei die Summe $V = X + Y$ den Gesamtverzehr in einer bestimmten Einheit (z.B. kg oder kcal pro Betrachtungszeitraum) beschreibt. Die in einer Population hinsichtlich V vorhandene Variabilität sei hier beispielhaft durch eine Betaverteilung $V \sim Bt(10, 10; 50, 150)$ beschrieben, wobei die beiden ersten Parameter den für Beta-Verteilungen

üblichen Parametern α und β entsprechen (siehe Gl. (C-50)), und die beiden folgenden Parameter die untere Grenze "a" bzw. die obere Grenze "b" einer auf dem Intervall [a, b] definierten Betaverteilung sind (im Sinne von Gl. (C-47)). Der Anteil A_X von X an V, $A_X = X/V$, sei ebenfalls eine Zufallsvariable ($A_Y = Y/V$ ist dann durch $A_Y = 1 - A_X$) bestimmt. Für die Zufallsgröße A_X sei hier eine auf dem Einheitsintervall [0, 1] definierte Betaverteilung $A_X \sim Bt(2, 6)$ angenommen. Ihr Erwartungswert ist gleich 0,25. Die Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Verteilungen sind in Abbildung 4-67 dargestellt. Es wird weiterhin angenommen, dass die beiden Zufallsgrößen V und A_X voneinander unabhängig sind (übertragen auf Verzehrsmengen sei die Vorliebe einer Person für eine der beiden Nahrungsmittelklassen "X" und "Y" unabhängig von Gesamtverzehr "V").

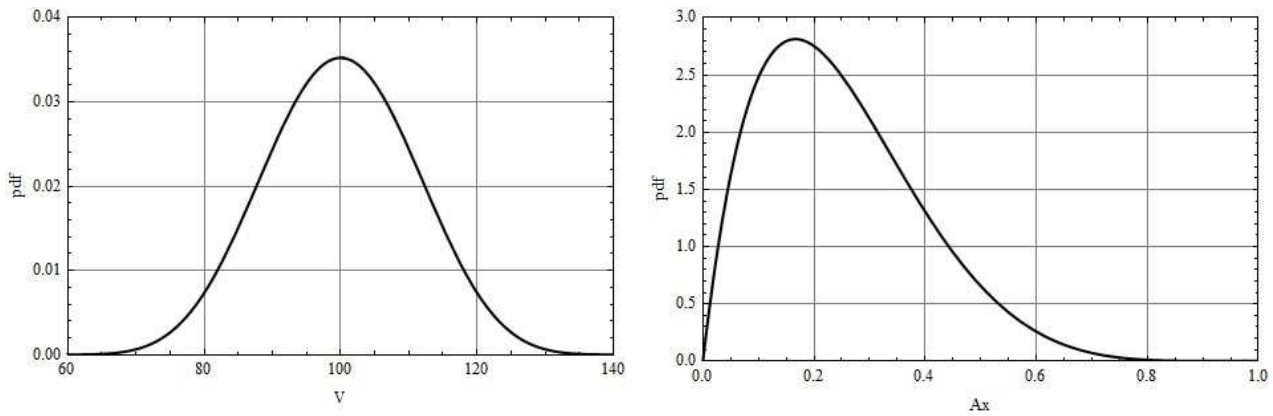


Abbildung 4-67: Wahrscheinlichkeitsdichten von $V \sim Bt(10, 10; 50, 150)$ und $A_X \sim Bt(2, 6)$

Mit den obigen Annahmen ist das Modell vollständig definiert; die interessierenden Zufallsgrößen X und Y können durch zufällige Realisierungen von V und A_X simuliert werden. Die interessante Frage, der weiter nachgegangen werden soll, besteht nun darin, wie aus einer großen Stichprobe von Wertepaaren (x_i, y_i), i von 1 bis n, die zwischen X und Y resultierende Abhängigkeitsstruktur durch eine Copula nachgebildet werden kann. Hierzu zeigt Abbildung 4-68 die Scatterplots einer Stichprobe für (X, Y) mit 1000 Wertepaaren sowie zur daraus mit der in Abschnitt 4.3.1 erläuterten Methode resultierenden empirischen Copula. Wegen der Gegenläufigkeit von X und Y wird jedoch eine Copula für die transformierte Variable ut = 1 – u betrachtet (siehe Gl. (B-55c), damit die für archimedische Copulas erforderliche Symmetrie vorliegt. Aus dem Scatterplot für die empirische Copula $C_n(ut, v)$ ist ersichtlich, dass diese Symmetrie für Wertepaare (u, v) nicht gegeben wäre. Der negative Wert des empirischen Konkordanzkoeffizienten $\tau_n(X, Y) = -0{,}541$ entspricht dann dem positiven Wert $\tau_n(Ut, V) = 0{,}541$.

In Abbildung 4-69 sind zur Schätzung der Koeffizienten der unteren und oberen Tail-Abhängigkeit berechnete Funktionen $\lambda_L(t)$ und $\lambda_U(t)$ dargestellt. Daraus ist zu entnehmen, dass für (ut, v) keine obere Tail-Abhängigkeit vorliegt ($\lambda_U(1^-) \approx 0$), jedoch mit einem Wert des Koeffizienten zur unteren Tail-Abhängigkeit $\lambda_L(0^+)$ im Bereich von 0,4 bis 0,5 zu rechnen ist. Diese Aussage wird durch die Berechnungen zur empirischen KENDALL'schen Verteilungsfunktion $K_n(t)$ bestätigt, die in Abbildung 4-70 im Vergleich zu den über τ_n angepassten Verteilungsfunktionen der FRANK- und C_{12}-Copula dargestellt sind (die JOE- und die C_{19}-Copula wurden gemäß Testergebnis abgelehnt).

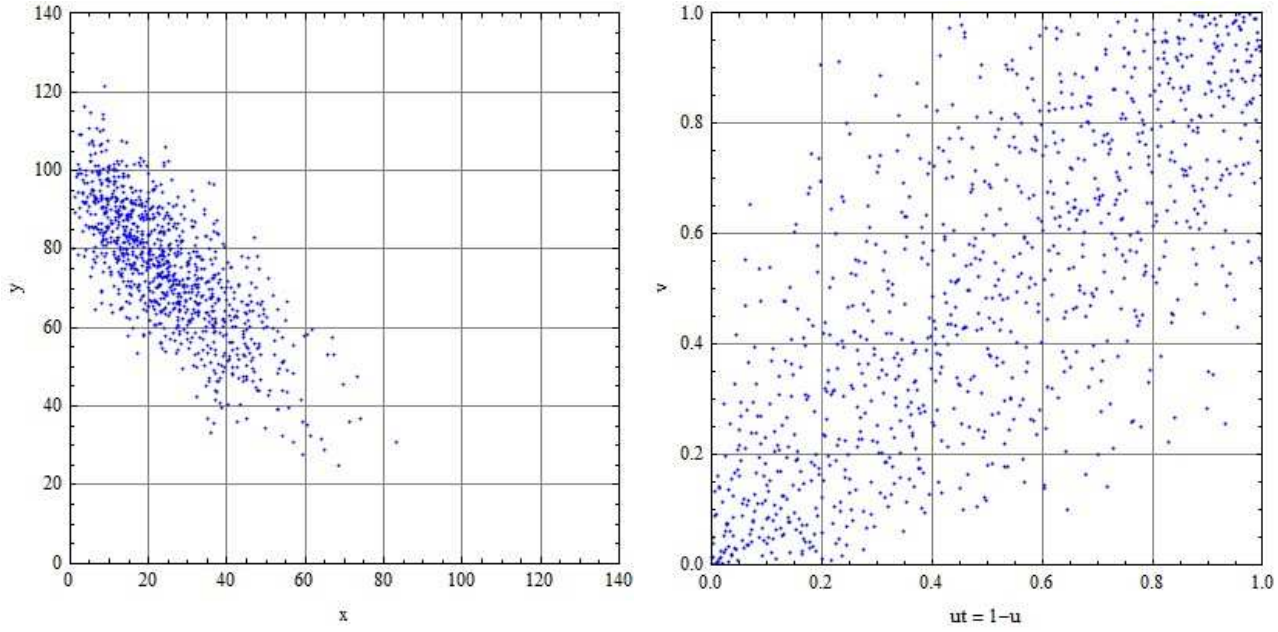


Abbildung 4-68: Scatterplot der 1000 Stichprobenwerte (x_i, y_i) (links) und zur resultierenden empirischen Copula nach Transformation ut = 1 – u (rechts)

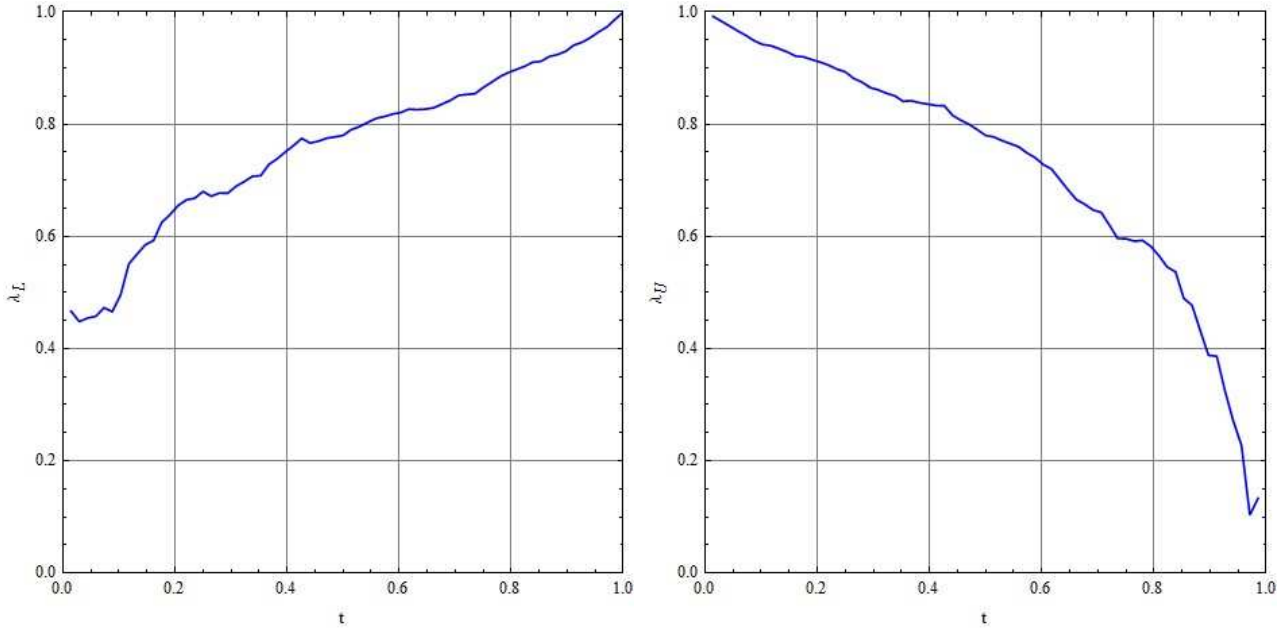


Abbildung 4-69: Funktionen $\lambda_L(t)$ (links) und $\lambda_U(t)$ (rechts) zu der in Abbildung 4-68 dargestellten empirischen Copula $C_n(ut, v)$ zur Schätzung der Koeffizienten der unteren bzw. oberen Tail-Abhängigkeit

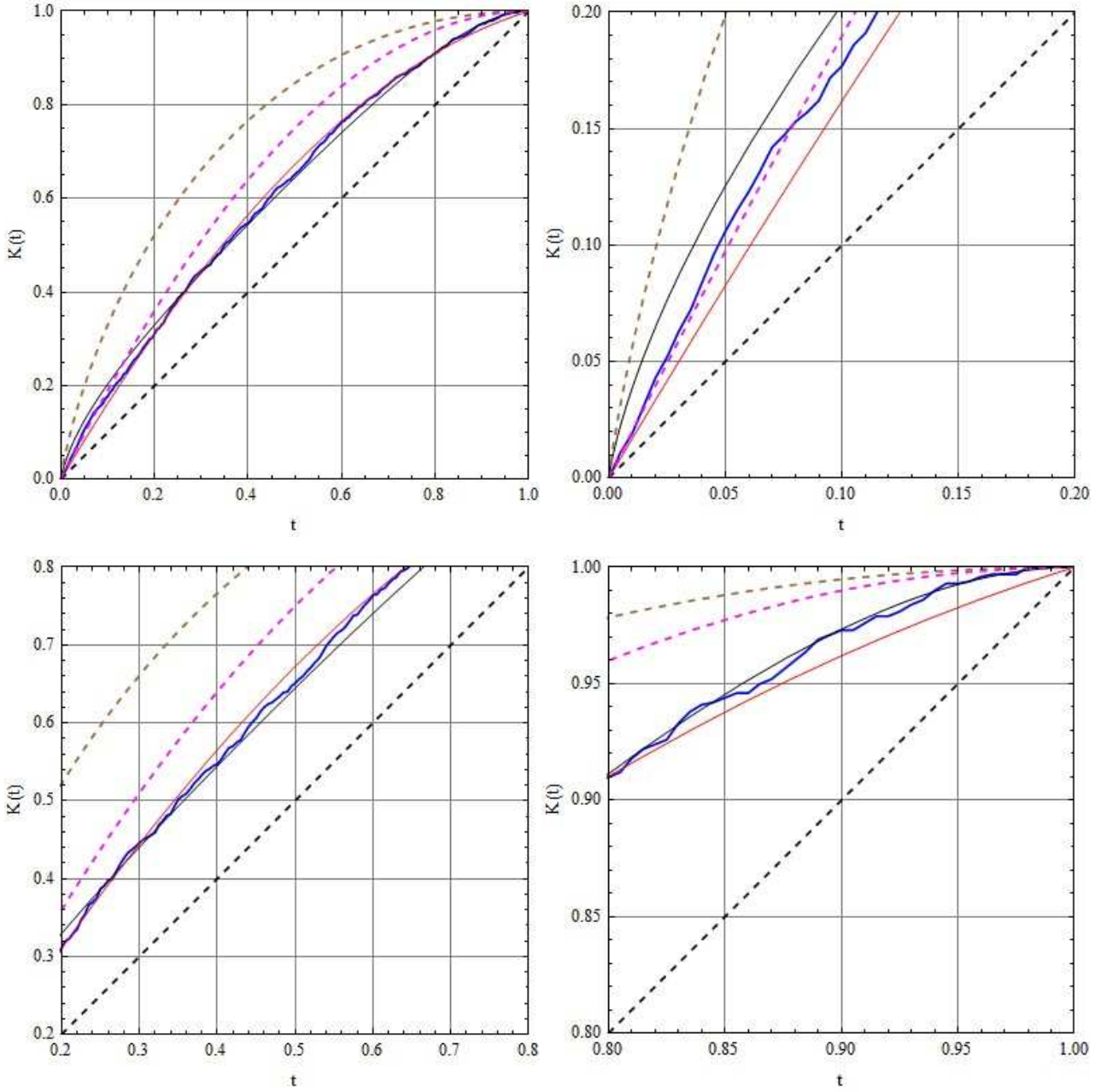


Abbildung 4-70: Verläufe der empirischen KENDALL-Verteilungsfunktion $K_n(t)$ (blau) im Vergleich zu den Verteilungsfunktionen K_{CF} (schwarz) und K_{C12} (rot) der über τ_n angepassten Copulas C_F und C_{12}; zudem $K_M(t) = t$ ($\tau = 1$, schwarz gestrichelt), $K_\Pi = t\cdot(1-\ln(t))$ ($\tau = 0$, braun gestrichelt) sowie $K_\Sigma(t) = t\cdot(2-t)$ ($\tau = 1/3$, magenta gestrichelt); vollständige Darstellungen (links oben) sowie Ausschnitte zum unteren Randbereich (rechts oben), zum zentralen Bereich (links unten) und zum oberen Randbereich (rechts unten)

Zur Abbildung 4-70 ergeben sich folgende Anmerkungen:

- Im unteren Randbereich nähert sich die empirischen KENDALL-Verteilung $K_n(t)$ an $K_\Sigma(t)$ an und verläuft zwischen $K_{CF}(t)$ und $K_{C12}(t)$. Da für die Copula Σ der Koeffizient der unteren Tail-Abhängigkeit gleich 1/2 ist (siehe Tabelle B-2), wird die dbzgl. auf Abbildung 4-69 basierende Schätzung bestätigt.
- Im mittleren Bereich verläuft $K_n(t)$ weiter zwischen $K_{CF}(t)$ und $K_{C12}(t)$. $K_\Sigma(t)$ ist hier bereits deutlich größer.
- Im oberen Randbereich nähert sich $K_n(t)$ an die KENDALL-Verteilung $K_{CF}(t)$ der FRANK-Copula an, die im Limes $t \rightarrow 1^-$ den gleichen Anstieg (von 0) wie $K_\Sigma(t)$ und $K_\Pi(t)$ erreicht. Diese drei Copulas haben keine obere Tail-Abhängigkeit, womit die dbzgl. auf Abbildung 4-69 basierende Schätzung bestätigt wird.
- Der Anpassungstest ergab für die Copula C_{12} einen kleineren Wert als für C_F, wobei natürlich statistische Unsicherheiten dieser Schätzung bestehen. Bei einer genaueren Analyse würde sich vmtl. herausstellen, dass zur optimalen Anpassung an $K_n(t)$ eine 2-parametrige archimedische Copula erforderlich ist, mit der die oben angesprochenen Übergänge zwischen den Copulas C_Σ, C_{12} und C_F beschrieben werden. Dies ist für den hier angestrebten Zweck aber nicht nötig. Die beste Wahl zwischen den hier betrachteten Copulas ist C_{12}, auch wenn deren Koeffizienten der unteren und oberen Tail-Abhängigkeit von den empirischen Werten abweichen.

Für eine Simulation der Zufallsgrößen X und Y werden neben der Copula noch die Inversen der beiden Randverteilungen $F_n(x)$ und $F_n(y)$ benötigt. Hierzu kann entweder direkt auf die aus der Stichprobe resultierenden empirischen Randverteilungen zurückgegriffen werden, oder es müssen parametrische Verteilungen angepasst werden. Im vorliegenden Beispiel wurden Betaverteilungen des Typs $Bt(\alpha, \beta; 0, b)$ angepasst, wie in Abbildung 4-71 dargestellt. Abbildung 4-72 zeigt darauf basierende Simulationsrechnungen für X und Y, wozu 4000 zufällige Realisierungen aus der Copula C_{12} bzw. alternativ aus der Copula C_F zur Berücksichtigung der Abhängigkeit zwischen X und Y berechnet wurden. Abbildung 4-73 zeigt analoge Scatterplots auf Basis der GAUSS-Copula C_G (mit $r_n = -0.747$) bzw. bei (unbegründeter) Annahme der Unabhängigkeit von X und Y.

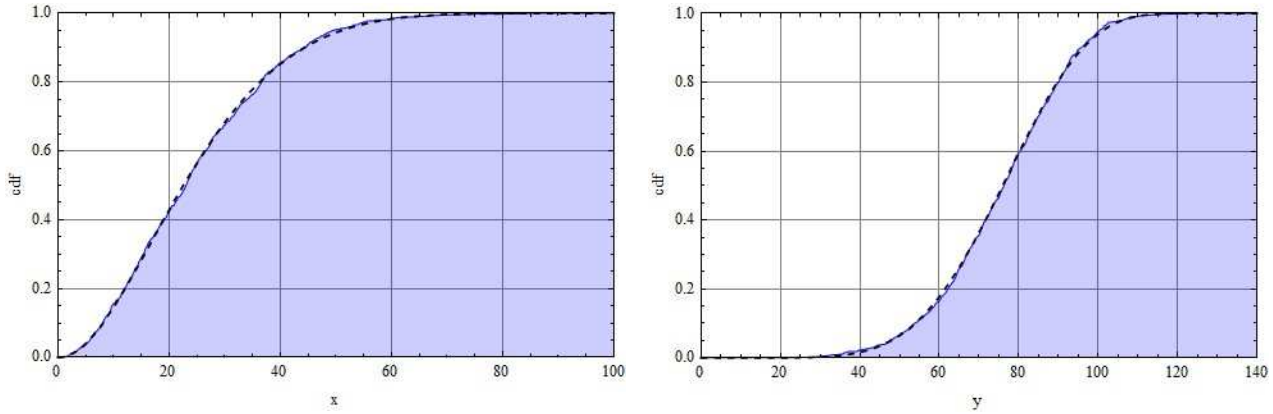


Abbildung 4-71: Anpassung von Betaverteilungen an die empirischen Randverteilungen der Zufallsgrößen X und Y; links: $F_n(x) \approx Bt(2{,}1, 7{,}1; 0, 106)$; rechts: $F_n(y) \approx Bt(8{,}4, 5{,}9; 0, 128)$

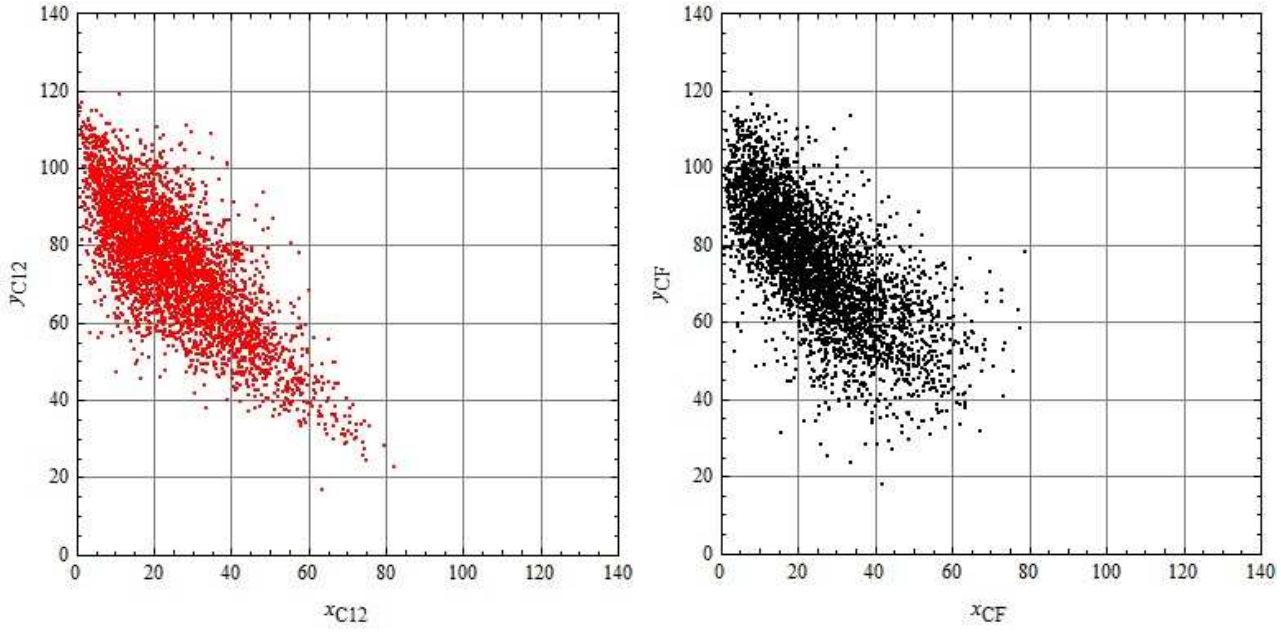


Abbildung 4-72: Scatterplot von 4000 simulierten Realisierungen von (X,Y) mit Abhängigkeiten gemäß der Copula C_{12} (links) bzw. der FRANK-Copula C_F (rechts)

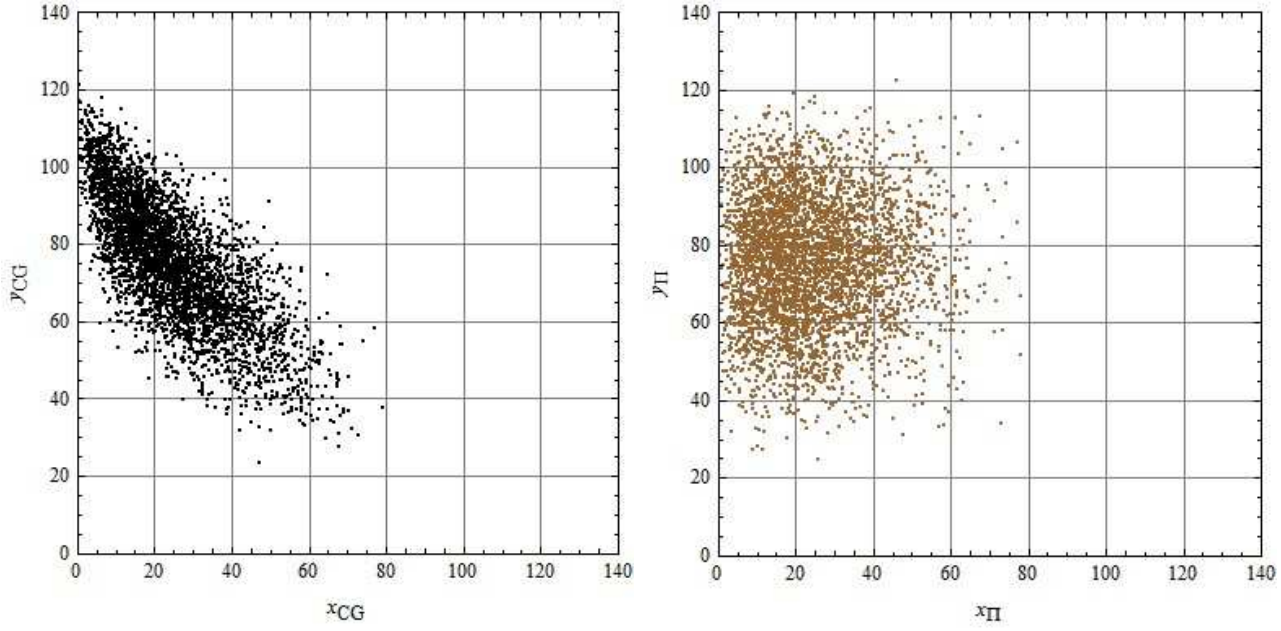


Abbildung 4-73: Scatterplot von 4000 simulierten Realisierungen von (X,Y) mit Abhängigkeiten gemäß einer GAUSS-Copula C_G (links, r_n = - 0,747) bzw. der Produkt-Copula Π (rechts)

Aus dem Vergleich der Abbildungen 4-72 und 4-73 mit dem Scatterplot der Ausgangsstichprobe im linken Bild von Abbildung 4-68 lässt sich erkennen, dass im hier betrachteten Fall die C_{12}- und die GAUSS-Copula am besten für MC-Simulationen der bivariaten Zufallsgröße geeignet wären. Eine Ignorierung der Abhängigkeit zwischen den Zufallsgrößen X und Y würde offensichtlich den hier betrachteten Populationseigenschaften nicht gerecht.

Im Hinblick auf die eingangs angesprochene mögliche Interpretation der Zufallsgrößen X und Y als Verzehrsmengen für bestimmte Lebensmittelklassen ist abschließend ein Vergleich konservativer deterministischer Ansätze mit den probabilistischen MC-Simulationsrechnungen von Interesse. Hierzu wird für die resultierende Ingestionsdosis H die Beziehung,

$$H = c_x \cdot X + c_y \cdot Y \qquad (4\text{-}66)$$

angesetzt, in der c_x und c_y für das aktuelle Beispiel Konstanten sind, welche die jeweiligen Werte der Aktivitätskonzentration und der Dosiskoeffizienten beinhalten. Hierzu wird (willkürlich) $c_x = 1$ und $c_y = 0{,}5$ angenommen. In der 2. und 3. Zeile der Tabelle 4-24 sind zunächst p-Quantile der empirischen Randverteilungen von X und Y entsprechend der Stichprobe aus Abbildung 4-68 angegeben (für p = 0,9, 0,95 und 0,975). Eine deterministische Expositionsberechnung könnte mit Gl. (4-66) auf diesen Quantilen basieren und würde die in der 4. Zeile angegebenen Werte für H ergeben. In der 5. Zeile sind Quantile für H gemäß Gl. (4-66) angegeben, die unmittelbar auf der bivariaten Stichprobe basieren und deren Abhängigkeit zwischen X und Y berücksichtigen. In den weiteren Zeilen sind dann die aus MC-Simulationen mit den o. g. Copulas resultierenden Quantile für H aufgeführt, wobei die in der letzten Zeile zum Fall einer Vernachlässigung der Abhängigkeit zwischen X und Y angegebenen Quantile mit den in Abbildung 4-71 gezeigten Randverteilungen der unbegründeten Annahme einer Π-Copula entsprechen.

Tabelle 4-24: Berechnung von Quantilen H_p nach Gl. (4-66); für deterministischen Ansatz Resultat mit den p-Quantilen x_p und y_p der Randverteilungen der Stichprobendaten; weiter nach vollständigen Stichprobendaten bzw. nach MC-Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen Copulas; Ergebnisse für $c_x = 1$ und $c_y = 0{,}5$

Berechnungsgrundlage	**p = 0,90**	**p = 0,95**	**p = 0,975**
Quantile x_p der Stichprobenwerte für X	*44,3*	*49,4*	*55,2*
Quantile y_p der Stichprobenwerte für Y	*95,6*	*100*	*103*
deterministische Berechnung mit x_p und y_p	92,1	99,6	107
Berechnung mit den Stichprobenwerten (x_i, y_i)	75,5	79,7	82,7
MC-Simulation von (X, Y) mit C_{12}-Copula	75,5	79,9	83,6
MC-Simulation von (X, Y) mit GAUSS-Copula	76,1	80,9	84,7
MC-Simulation von (X, Y) mit FRANK-Copula	76,2	81,6	86,3
MC-Simulation bei Annahme unabhängiger X und Y	84,0	91,3	97,3

Aus den Angaben von Tabelle 4-24 folgt für das betrachtete Beispiel eine deutliche Überschätzung hoher Quantile von H bei deterministischer sowie unabhängiger Berechnung von X und Y.

In Kapitel 5 wird im Rahmen der Untersuchungen zur probabilistischen bzw. stochastischen Modellierung von Expositionen auf die Fortpflanzung der Variabilität und Unsicherheit einzelner Expositionsfaktoren in komplexeren Expositionsmodellen eingegangen. Ein wichtiger Aspekt ist in diesem Zusammenhang die Behandlung von möglichen Abhängigkeiten, zu denen aber keine Informationen vorliegen. In solchen Fällen können auf der Basis der Randverteilungen für einzelne Expositionsfaktoren FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken zu den bi-/multivariaten Verteilungen von Expositionsfaktoren berechnet werden, die alle denkbaren Abhängigkeitsstrukturen eingrenzen. In [WIL 90] sind hierzu wesentliche mathematische Grundlagen dargelegt. Wenn keine Informationen oder plausibel belastbare Annahmen zur Abhängigkeit zwischen Inputvariablen vorliegen, können auf dieser Basis konservative Abschätzungen für die Zielgröße vorgenommen werden. Sind z. B. $F_X(x)$ und $F_Y(y)$ die Randverteilungen der Zufallsgrößen X und Y und ist die Zielgröße Z = X + Y ohne jegliche Kenntnis zu möglichen Abhängigkeiten zwischen X und Y zu bewerten, so sollten (siehe z. B. [FER 04], [REG 04]) folgende untere (rechte) sowie obere (linke) Schranke für die Verteilungsfunktion $F_Z(z)$ betrachtet werden:

$$\underline{F}_Z(z) = \sup_{x+y=z} \left(\max\{F_X(x) + F_Y(y) - 1; 0\}\right), \tag{4-67a}$$

$$\overline{F}_Z(z) = \inf_{x+y=z} \left(\min\{F_X(x) + F_Y(y); 1\}\right). \tag{4-67b}$$

Für das oben betrachte Beispiel sind die für H gemäß Gl. (4-66) resultierenden Schranken in der Abbildung 4-74 zusammen mit den für H auf Basis der C_{12}-Copula sowie der Π-Copula durch MC-Simulation berechneten Verteilungsfunktion dargestellt. Die FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken sind nicht identisch mit den aus der W- bzw. M-Copula resultierenden Verteilungsfunktionen, die zur Veranschaulichung dieser Aussage ebenfalls in Abbildung 4-74 dargestellt sind.

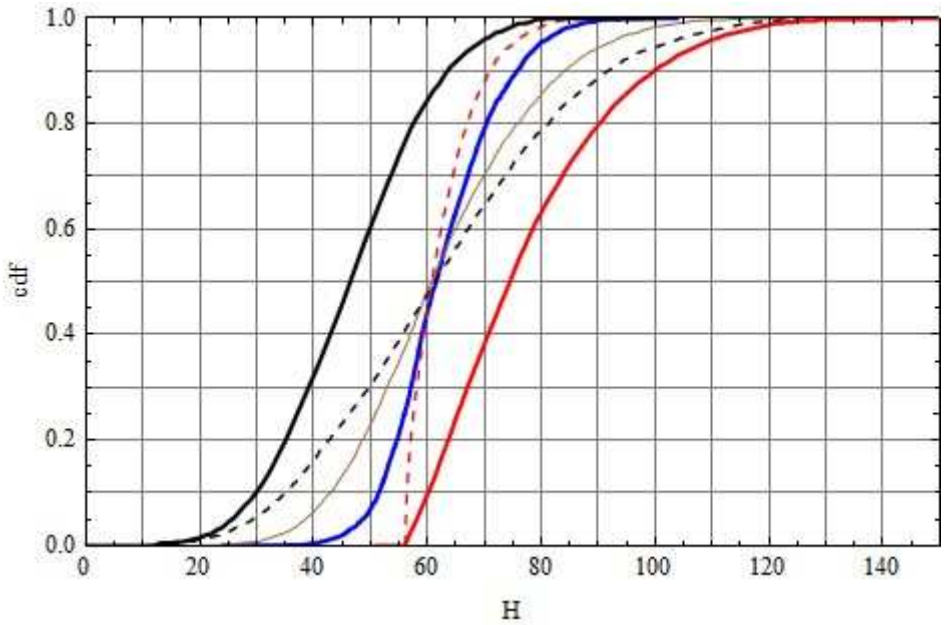


Abbildung 4-74: FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken $\underline{F}_H$ (rot) und $\overline{F}_H$ (schwarz) sowie aus der C_{12}-Copula (blau) und den Copulas Π (braun), W (rot gestrichelt) sowie M (schwarz gestrichelt) resultierende Verteilungsfunktionen für die Zielgröße H der Gl. (4-66).

Zu den in Abbildung 4-74 dargestellten FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken sei noch vermerkt, dass die drei oberen p-Quantile für $\underline{F}_H$ folgende Werte haben: $H_{0,9} = 100$, $H_{0,95} = 108$ und $H_{0,975} = 115$. Diese Werte liegen über den in Tabelle 4-24 für die deterministische Berechnung von H (auf Basis der entsprechenden p-Quantile der Randverteilungen von X und Y) angegebenen Werten. Sind keine Informationen zur Abhängigkeit zwischen den Zufallsgrößen X und Y verfügbar, dann sind auf Basis der empirischen Randverteilungen für X und Y streng genommen erst die o. g. aus $\underline{F}_H$ resultierenden p-Quantile wirklich konservativ (abdeckend).

4.3.4. Anforderungen an eine probabilistische Modellierung von Abhängigkeiten

Aus den Abschnitten 4.3.1 bis 4.3.3 resultieren Schlussfolgerungen zur Analyse, Modellierung und Simulation von statistischen Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren, die für probabilistische Untersuchungen von Strahlenexpositionen beachtet werden sollten. An dieser Stelle werden einige Schlussfolgerungen zusammengefasst. Außerdem wird auf Probleme hingewiesen, die noch nicht im erforderlichen Maße untersucht/diskutiert wurden.

Zunächst ist hervorzuheben, dass eine Vernachlässigung/Ignorierung vorhandener Abhängigkeiten i. d. R. zu falschen Bewertungen führt. Die oft anzutreffende Vorgehensweise, dass aus einer sehr kleinen Korrelation ($r_n \approx 0$) zwischen Werten bi-/multivariater Stichproben auf eine Unabhängigkeit der entsprechenden Zufallsgrößen geschlossen wird, ist i. A. nicht richtig. Ebenso wie für positive oder negative Werte der Korrelation bzw. Konkordanz eine Vielzahl von sehr unterschiedlichen Abhängigkeitsstrukturen möglich ist, können auch bei ($r_n \approx 0$, bzw. $\tau_n \approx 0$) starke Abhängigkeiten vorliegen, da mit diesen Koeffizienten nur "integrale" Aussagen getroffen werden. Die Analyse von Scatterplots für Datenpaare (X, Y) und die Abschätzung von Tail-Abhängigkeiten sind wichtige Mittel zur Vermeidung gravierender Fehler bei der Auswertung von Stichproben.

Die mit Hilfe von Copulas mögliche Separation der statistischen Inferenz zu Randverteilungen und Abhängigkeitsstrukturen gestattet eine wesentliche Vereinfachung der Analyse, Modellierung und Simulation voneinander abhängiger Zufallsgrößen. Zur Anpassung von Copulas an Stichproben sind jedoch große Datensätze erforderlich. Selbst wenn nur relativ einfache archimedische Copulas betrachtet werden, die sich bei gegebener Konkordanz τ_n der Zufallsgrößen deutlich voneinander unterscheiden, dürften mindestens Stichprobenumfänge von n = 50 bis 200 für eine belastbare (bzw. korrekte) Selektion einer dieser Copulas erforderlich sein. Zur Unterscheidung ähnlicher Copulas (z. B. der FRANK- und der GAUSS-Copula) sind noch größere Stichprobenumfänge erforderlich.

Auf der Basis von fachspezifischem Wissen können Abhängigkeitsmodelle entwickelt werden, die aber immer anhand empirischer Daten validiert werden sollten. Wenn Abhängigkeiten zwischen bestimmten Expositionsfaktoren nicht plausibel ausgeschlossen werden können, jedoch weder fachliche Ansätze noch ausreichendes Datenmaterial für eine Modellierung der Abhängigkeit zur Verfügung stehen, sind konservative Berechnungen mit FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken möglich.

Sind diskrete Zufallsvariable zur Untersuchung/Modellierung von Abhängigkeiten von Bedeutung, so ist bei einer dbzgl. Anwendung von Copulas Vorsicht geboten, weil dann im Satz von SKLAR nicht mehr die Aussage zur Eindeutigkeit der Abbildungen zutrifft [GEN 07]. Eine Anwendung von Copulas auf Datensätze, die aus stochastischen Prozessen stammen, ist ebenfalls zu hinterfragen, weil dann nicht mehr alle Annahmen der Copula-Theorie erfüllt sind [MIK 06], [JOE 06].

5. PROBABILISTISCHE UND STOCHASTISCHE SIMULATION VON PROZESSEN

In Abhängigkeit von den konkreten Gegebenheiten und Fragestellungen können die Ausbreitung von Radionukliden in den Umweltmedien und daraus resultierende bzw. potentielle Strahlenexpositionen von Personen mit Modellen beschrieben werden, deren mathematische Struktur von einfachen algebraischen Beziehungen bis zu komplexen Systemen gewöhnlicher bzw. partieller Differentialgleichungen reicht. Solche Systeme können für vielfältige radioökologische Situationen vereinfacht durch Kompartiment-Modelle beschrieben werden, wie z. B. in den Abbildungen 2-1 und 2-2 dargestellt. Während die Analyse und Modellierung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten in den Kapiteln 2 und 4 für einzelne Modellparameter bzw. einfache algebraische Strukturen betrachtet wurde, wie sie für "Expositionsmodelle im engeren Sinne" (siehe dbzgl. Erläuterungen in Abschnitt 2.2.1) direkt zur Anwendung kommen können, werden nachfolgend die Auswirkungen von Parameterunsicherheiten für komplexere Modellstrukturen betrachtet, die für eine realitätsnahe Beschreibung der Radionuklidausbreitung in den Umweltmedien, der Biosphäre bzw. in Expositionsmedien oft unumgänglich sind. Dabei handelt es sich i. d. R. um gewöhnliche bzw. partielle Differentialgleichungen oder um Systeme von Differentialgleichungen.

In Abschnitt 5.1 werden gewöhnliche Differentialgleichungen mit zeitdiskret zufällig variierenden Parametern sowie stochastische Differentialgleichungen betrachtet. Anhand von Beispielen soll hier insbesondere der Unterschied zwischen Modellen mit stochastisch zeitabhängigen Parametern und auf gewöhnlichen Differentialgleichungen basierenden Modellen mit probabilistisch unsicheren Parametern herausgearbeitet werden. In Abschnitt 5.2 werden Modellstrukturen behandelt, die durch Systeme linearer Differenzialgleichungen dargestellt werden (z. B. Kompartiment-Modelle). In Abschnitt 5.3 werden Modelle mit partiellen Differentialgleichungen diskutiert.

5.1. Modelle mit gewöhnlichen und stochastische Differentialgleichungen

Gewöhnliche Differentialgleichungen (ODE, ordinary differential equation) bzw. ODE-Systeme spielen für die Modellierung unterschiedlicher Parameter von radioökologischen Modellen eine wichtige Rolle, besonders zur Modellierung zeitlicher Veränderungen der Aktivität unter Beachtung des radioaktiven Zerfalls und weiterer Abbau- bzw. Akkumulationsprozesse. Hierzu können lineare Differentialgleichungen angesetzt werden. Lineare ODE höherer Ordnung werden als Systeme von linearen ODE 1. Ordnung dargestellt werden. Solche Systeme werden in Abschnitt 5.2 betrachtet. Die wesentlichen Auswirkungen von Parameterunsicherheiten bzw. der stochastischen Variabilität von Parameter können bereits anhand von Differentialgleichungen 1. Ordnung diskutiert werden. Wenn Parameter einer Differentialgleichung auch für infinitesimal kleine Zeitdifferenzen zufällig variieren können, so liegt eine stochastische Differentialgleichung vor (SDE, stochastic differential equation). Erläuterungen zu wichtigen stochastischen Prozessen und zur Lösung von SDE enthält der Abschnitt B.4 im Anhang B zum vorliegenden Bericht.

In Abschnitt 5.1.1 wird der Unterschied zwischen stochastischen und probabilistischen Modellen zunächst anhand von ODE mit zeitdiskret variierenden Modellparametern betrachtet. Abschnitt 5.1.2 behandelt diese Problematik für SDE-Modelle, die aus physikalischer Sicht realitätsnäher sind, deren mathematische Formulierung und Lösung jedoch etwas anspruchsvoller ist.

5.1.1. Stochastische und probabilistische Modelle mit gewöhnlichen Differentialgleichungen

Wichtige Aspekte der Analyse und Simulation von Prozessen, die durch Differentialgleichungen mit probabilistischen Parameterunsicherheiten bzw. mit stochastisch variierenden Parametern beschrieben werden, können bereits anhand der linearen ODE 1. Ordnung diskutiert werden. Für den Fall stochastisch variierender Parameter muss hierzu allerdings eine Einschränkung erfolgen. Die mathematische Modellierung von Prozessen mit zeitkontinuierlich variierenden Parametern verlangt die Anwendung von SDE. Im vorliegenden Abschnitt wird vereinfachend angenommen, dass die Modellparameter durch zeitdiskrete stochastische Prozesse dargestellt werden können, wie sie z. B. aus Messreihen resultieren. Im Rahmen dieses Ansatzes können zufällige Schwankungen der interessierenden Zielgröße mit Hilfe von ODE modelliert werden. Für die Diskussion derartiger Modelle sei zunächst die allgemeine Lösung der linearen ODE 1. Ordnung angegeben.

Für deren allgemeine Form,

$$\frac{dx}{dt} = a(t) \cdot x(t) + q(t) \quad \text{mit Anfangsbedingung } x(0) = x_0, \tag{5-1}$$

kann die Lösung mit Hilfe des Ansatzes

$$x(t) = y(t) \cdot e^{A(t)} \quad \text{mit} \quad A(t) = \int_0^t a(u)\, du \tag{5-2}$$

bestimmt werden. Aus Gl. (5-2) folgt die Übereinstimmung der Anfangswerte: $y(0) = x(0) = x_0$. Setzt man diesen Ansatz in Gl. (5-1) ein, so folgt für y(t) eine ODE, die sich direkt integrieren lässt:

$$\frac{dy}{dt} = q(t) \cdot e^{-A(t)}, \qquad y(t) = y(0) + \int_0^t q(s) \cdot e^{-A(s)}\, ds\,.$$

Mit Gl. (5-2) resultiert dann für x(t) die folgende allgemeine Darstellung der Lösung von Gl. (5-1):

$$x(t) = e^{\int_0^t a(u)\, du} \cdot \left(x_0 + \int_0^t q(s) \cdot e^{-\int_0^s a(u)\, du}\, ds \right). \tag{5-3}$$

Die drei Parameter a(t), q(t) und x_0 der Gl. (5-1) können verschiedenartige deterministische bzw. probabilistische/stochastische Eigenschaften aufweisen, wodurch für x(t) gemäß Gl. (5-3) Lösungen mit unterschiedlichen Eigenschaften resultieren. Nachfolgend werden zwei Fälle betrachtet: (1) die Inhomogenität q(t)[68] ist ein zeitdiskreter stochastischer Prozess oder eine Zufallsgröße; (2) die Koeffizientenfunktion a(t)[69] ist ein zeitdiskreter stochastischer Prozess oder eine Zufallsgröße.

---

[68] Die Funktion q(t) wird mathematisch auch als Störfunktion bezeichnet. Physikalisch beschreibt sie in Abhängigkeit vom Vorzeichen eine Quelle bzw. Senke.

[69] Physikalisch stellt die Funktion a(t) in Abhängigkeit vom Vorzeichen eine Aufbau- bzw. Abbaurate dar.

5.1.1.1. Lineare ODE mit stochastischer/probabilistischer Inhomogenität

Ist in Gl. (5-1) die Koeffizientenfunktion a(t) eine Konstante, so vereinfacht sich die Lösung dieser Differentialgleichung. Es sei

$a(t) = -\lambda$,

wobei λ eine konstante Abbaurate (z. B. die physikalische Zerfallskonstante) bezeichnet. Dann ist

$$x(t) = e^{-\lambda \cdot t} \cdot \left(x_0 + \int_0^t q(s) \cdot e^{\lambda \cdot s} ds \right). \tag{5-4}$$

Im nachfolgenden Beispiel 5.1-1 wird für den Quellterm q(t) eine stochastische Zeitreihe angesetzt. Anschließend wird in Beispiel 5.1-2 der Fall betrachtet, dass q ein konstanter, aber probabilistisch unsicherer Modellparameter ist, für den die gleiche statistische Verteilung angenommen wird wie für die stochastische Zeitreihe des Beispiele 5.1-1.

Beispiel 5.1-1

Der Quellterm q(s) sei eine stochastische Zeitreihe, die in Zeitintervallen mit gleicher Länge Δt durch voneinander unabhängige, identisch gammaverteilte Zufallsgrößen definiert sei (siehe Abschnitt C.3.4):

$$q(t) = q_i \text{ für } t_{i-1} < t \le t_i \text{ mit } q_i \sim Ga(\alpha, \beta) \text{ und } t_i - t_{i-1} = \Delta t \text{ sowie } Cov[q_i, \cdot q_j] = \alpha \beta^2 \cdot \delta_{ij}, \tag{5-5}$$

wobei δ_{ij} das KRONECKER-Symbol bezeichnet ($\delta_{ii} = 1$, $\delta_{ij} = 0$ für $i \neq j$). Der mit diesen Annahmen gemäß Gl. (5-4) resultierende Verlauf der Lösung x(t) wird für ein hinreichend langes Zeitintervall $0 \le t \le T$ mit $T = I \cdot \Delta t$ ebenfalls als Zeitreihe betrachtet. Für die Zeitpunkte $t = t_j = j \cdot \Delta t$ (mit j von 1 bis I) resultiert dann aus Gl. (5-4) die folgende Lösung:

$$\begin{aligned} x(t_j) &= e^{-\lambda \Delta t\, j} \cdot \left(x_0 + \sum_{i=1}^{j} \frac{q_i}{\lambda} \cdot \left(e^{\lambda \Delta t\, i} - e^{\lambda \Delta t\, (i-1)} \right) \right) \\ &= x_0\, e^{-\lambda \Delta t\, j} + \frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^{j} q_i \cdot \left(e^{-\lambda \Delta t\, (j-i)} - e^{-\lambda \Delta t\, (j-i+1)} \right) \end{aligned} . \tag{5-6}$$

Aus Gl. (5-6) lassen sich der Erwartungswert und die Varianz von $x(t_j)$ berechnen, wozu auf $E[q_i] = \alpha \cdot \beta$ und $Var[q_i] = E[q_i^2] - E[q_i]^2 = \alpha \cdot \beta^2$ (siehe Abschnitt C.3.4) zurückgegriffen wird. Die Berechnung des Erwartungswertes erfolgt direkt anhand von Gl. (5-6):

$$E[x(t_j)] = x_0\, e^{-\lambda \Delta t\, j} + \frac{\alpha \beta}{\lambda} \sum_{i=1}^{j} \left(e^{-\lambda \Delta t\, (j-i)} - e^{-\lambda \Delta t\, (j-i+1)} \right) = x_0\, e^{-\lambda t_j} + \frac{\alpha \beta}{\lambda} \left(1 - e^{-\lambda t_j} \right). \tag{5-7a}$$

Nach hinreichender Stabilisierung des Prozesses (Abklingen des Einflusses der Anfangsbedingung, für Zeiten von $t_j >> 1/\lambda$) nähert sich der Erwartungswert von x dem Gleichgewichtswert,

$$E[x(t)] \approx \frac{\alpha \beta}{\lambda} \quad (\text{für } e^{-\lambda t} << 1). \tag{5-7b}$$

Zur Berechnung der Varianz $Var[x(t_j)]$ ist Gl. (5-6) zu quadrieren. Unter Beachtung der Unabhängigkeit von q_i und q_j für $i \neq j$ kann der Erwartungswert $E[x^2(t_j)]$ berechnet werden, woraus sich mit Gl. (5-7) die Varianz $Var[x(t_j)] = E[x^2(t_j)] - E[x(t_j)]^2$ ergibt. Aus dieser etwas aufwändigeren Berechnung folgt:

$$Var[x(t_j)] = \frac{\alpha\beta^2}{\lambda^2}\left(1 - e^{-2\lambda t_j}\right)\frac{1 - e^{-\lambda\Delta t}}{1 + e^{-\lambda\Delta t}}\,. \tag{5-8a}$$

Bei ausreichend kleinem Zeitschritt, $\lambda\cdot\Delta t << 1$, sowie nach hinreichender Stabilisierung des Prozesses, nach einer Zeit von $t_j >> 1/\lambda$, nähert sich die Varianz von x dem folgenden Gleichgewichtswert:

$$Var[x(t)] \approx \frac{\alpha\beta^2}{\lambda}\cdot\frac{\Delta t}{2} \quad (\text{für } e^{-2\lambda t} << 1 \text{ und } \lambda\Delta t << 1)\,. \tag{5-8b}$$

Die Abhängigkeit der Varianz vom Zeitschritt Δt (im Unterschied zum Erwartungswert, der unabhängig von Δt ist), entspricht einem wichtigen Aspekt einer auf Messwerten basierenden Simulation stochastischer Modelle. Stellt z. B. die Zeitreihe der Quellstärken (q_1, q_2, q_3, …) Messwerte dar, die jeweils über Zeitintervalle Δt bestimmt wurden, so ist für eine darauf basierenden Simulationsrechnung entweder der gleiche Zeitschritt zu wählen oder es ist eine Anpassung der Verteilungsparameter für die Zufallsgrößen q_i vorzunehmen.

Wenn z. B. mit dem doppelten Zeitschritt $\Delta' t = 2\cdot\Delta t$ gerechnet werden soll, so wäre mit einer statistischen Verteilung der auf dieses Zeitintervall bezogenen Quellstärken q'_i zu rechnen, die dem Mittelwert von zwei unabhängigen Zufallsgrößen q_i und q_{i+1} entsprechen. Mit $q_i \sim Ga(\alpha,\beta)$ genügt $q'_i = (q_i + q_{i+1})/2$ einer Gammaverteilung mit den Parametern $\alpha' = 2\cdot\alpha$ sowie $\beta' = \beta/2$. Dies ergibt sich daraus, dass die Summe von zwei unabhängigen $Ga(\alpha,\beta)$-verteilten Zufallsgrößen die Verteilung $Ga(2\cdot\alpha,\beta)$ aufweist und nach einer Halbierung dieser Zufallsgröße eine Verteilung $Ga(2\cdot\alpha,\beta/2)$ resultiert.

Mit $\alpha' = 2\cdot\alpha$, $\beta' = \beta/2$ und $\Delta' t = 2\cdot\Delta t$ stimmen der Erwartungswert und die Varianz für die modifizierte Simulationsrechnung mit den entsprechenden Kenngrößen nach Gl. (5-7b) und Gl. (5-8b) überein:

$$\frac{\alpha'\beta'}{\lambda} = \frac{(2\alpha)\cdot(\beta/2)}{\lambda} = \frac{\alpha\beta}{\lambda},$$
$$\frac{\alpha'\beta'^2}{\lambda}\cdot\frac{\Delta' t}{2} = \frac{(2\alpha)\cdot(\beta/2)^2}{\lambda}\cdot\frac{(2\Delta t)}{2} = \frac{\alpha\beta^2}{\lambda}\cdot\frac{\Delta t}{2}\,.$$

Es sei angemerkt, dass diese "Teilbarkeit" wesentlich für die Definition von zeitkontinuierlichen stochastischen Prozessen ist (siehe Abschnitt B.4.1)

Die folgende Bespielrechnung dient der Veranschaulichung der obigen Darlegungen. Hierzu wurden für den Quellterm Gl. (5-5) die Parameterwerte $\alpha = 2$, $\beta = 1$ und $\Delta t = 1$ angesetzt. Außerdem wurden die Parameterwerte $\lambda = 0{,}02$ sowie $x_0 = 100$ angenommen (x_0 entspricht dem Erwartungswert von x).

Mit diesen Ansätzen wurden 1000 zufällige Realisierung des Quellterms sowie daraus resultierender Verläufe von x(t) für Zeitintervalle von $0 \leq t \leq T = 500$ berechnet. In Abbildung 5-1 ist exemplarisch ein Quellterm und der daraus resultierende Verlauf von x(t) dargestellt.

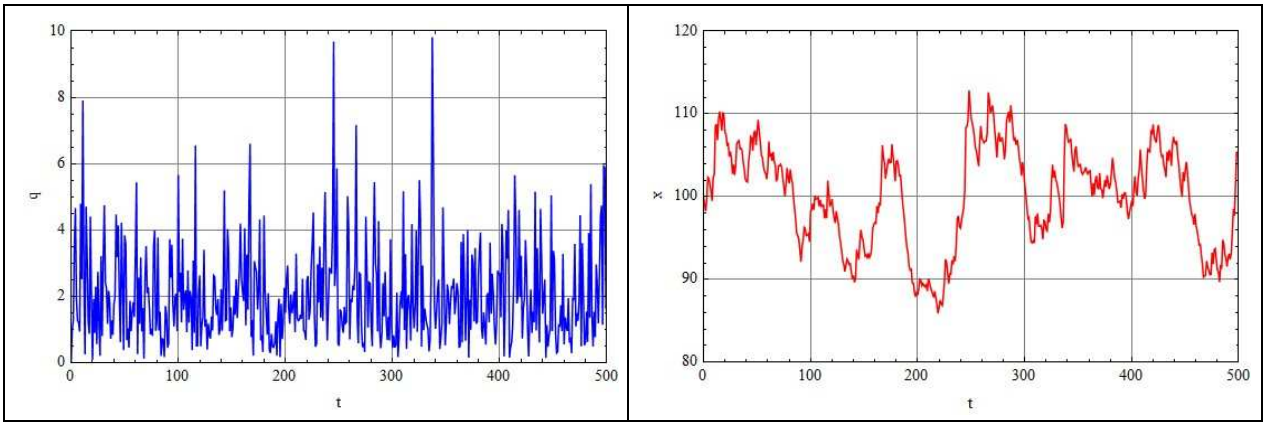


Abbildung 5-1: Beispiel der Realisierung eines Quellterms q(t) nach Gl. (5-5) (linkes Bild) sowie des daraus gemäß Gl. (5-6) resultierenden Verlaufs von x(t) (rechtes Bild).

In Abbildung 5-2 ist die empirische Verteilungsfunktion der Zufallsgröße x(T) dargestellt. Sie kann sehr gut durch eine Normalverteilung angepasst werden, x(T) ~ N(m, s), deren Parameterwerte mit einem empirischen Mittelwert von m = 100,3 sowie einer empirischen Standardabweichung von s = 6,98 gut mit den nach Gl. (5-7b) und (5-8b) erwarteten theoretischen Werten von 100 bzw. $\sqrt{50}$ übereinstimmen.

Die gute Übereinstimmung von x(T) mit einer Normalverteilung ist nach dem zentralen Grenzwertsatz der Statistik plausibel, da sich die Zufallsgröße x(T) gemäß Gl. (5-6) als Summe einer großen Anzahl von gegenseitig unabhängigen Zufallswerten ergibt.

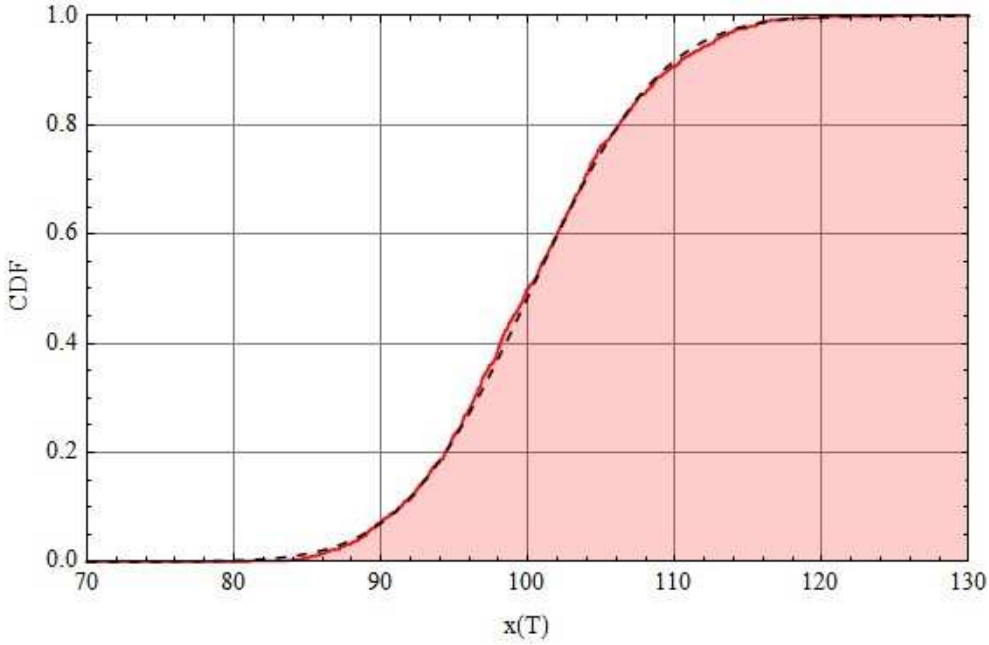


Abbildung 5-2: Empirische Verteilungsfunktion (rot) der Zufallsgröße x(T) für T = 500 von 1000 zufälligen Realisierungen des stochastischen Prozesses x(t) nach Gl. (5-4) mit Quellstärke q(t) nach Gl. (5-6) sowie angepasste Normalverteilung (schwarz gestichelt)

Beispiel 5.1-2

Ein völlig anderes Bild ergibt sich, wenn der Quellterm in Gl. (5-4) nicht als zeitabhängiger Prozess betrachtet wird, sondern als konstanter probabilistischer Parameter, der einer statistischen Verteilung unterliegt, wie sie z. B. für eine Messreihe mit den Werten q_1, q_2, … q_I bestimmt wurde. Dieser Ansatz wäre durchaus denkbar, wenn auf diese Weise die aleatorische Unsicherheit eines Modellparameters bestimmt wird. Für ein (Teil-)Modell, das durch eine Differentialgleichung dargestellt wird, könnte dies jedoch zu erheblichen Fehleinschätzungen führen.

Die zum vorigen Beispiel zur Gl. (5-4) analoge Lösung der ODE mit konstantem Quellterm q ist:

$$x(t) = x_0\, e^{-\lambda t} + \frac{q}{\lambda} \cdot \left(1 - e^{-\lambda t}\right). \tag{5-9}$$

Betrachtet man auch hierfür den sich nach hinreichend langer Zeit T einstellenden stationären Zustand,

$$x(T) \approx x_{stat} = \frac{q}{\lambda}, \tag{5-10}$$

so ist x_{stat} eine Zufallsgröße, deren Verteilung sich direkt aus der Verteilung von q ergibt. Wird für q, wie im Beispiel 5.1-1, in Auswertung von Messergebnissen eine Gammaverteilung angepasst, $q \sim Ga(\alpha,\beta)$, so resultiert gemäß Gl. (5-10) für x_{stat} ebenfalls eine Gammaverteilung, jedoch mit einem durch λ geteilten Skalenparameter, d. h. $x_{stat} \sim Ga(\alpha,\beta/\lambda)$. Für den Erwartungswert und die Varianz folgt dann:

$$E[x_{stat}] = \frac{\alpha\,\beta}{\lambda} \quad \text{und} \quad Var[x_{stat}] = \frac{\alpha\,\beta^2}{\lambda^2}\ . \tag{5-11}$$

Der Vergleich von Gl. (5-11) mit den in Beispiel 5.1-1 zu Erwartungswert und Varianz des Prozesses mit zeitabhängiger (stochastischer) Quellstärke berechneten Beziehungen Gl. (5-7b) und Gl. (5-8b) zeigt eine Übereinstimmung für den Erwartungswert, jedoch substantiell unterschiedliche Varianzen. Mit den Parameterwerten aus Beispiel 5.1-1 von $\alpha = 2$, $\beta = 1$ und $\lambda = 0{,}02$ resultiert nach Gl. (5-11) eine Varianz von $Var[x_{stat}] = 5000$, also ein um den Faktor 100 höherer Wert als für den stochastischen Prozess. Außerdem liegt für x_{stat} eine völlig andere Verteilungsform vor, wie aus Abbildung 5-3 ersichtlich.

Aus dem Vergleich der Beispiele 5.1-1 und 5.1-2 folgt, dass klar unterschieden werden muss, ob ein ODE-Modellparameter einem stochastischen Prozess entspricht oder (nur) eine probabilistische Größe darstellt. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu algebraischen Beziehungen/Modellen, in denen auch zeitlich variable Parameter/Prozesse mit probabilistischen Methoden allein durch ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung dargestellt werden können.

Für den oben betrachteten Fall, dass die Stochastik bzw. probabilistische Unsicherheit nur den Quellterm der linearen ODE betrifft, resultieren zwar gleiche Erwartungswerte; das stochastische Modell liefert jedoch eine wesentlich geringere Varianz als der probabilistische Ansatz. Hierzu ist anzumerken, dass probabilistische Modelle eine andere Fragestellung betreffen. Sie beschreiben die Unsicherheit (statistische Verteilung) eines Modellparameters in einer großen Grundgesamtheit ähnlicher Individuen. Zur Ermittlung probabilistischer ODE-Parameter wären deshalb Schätzungen anhand der Daten eines stochastischen Prozesses nicht sachgemäß.

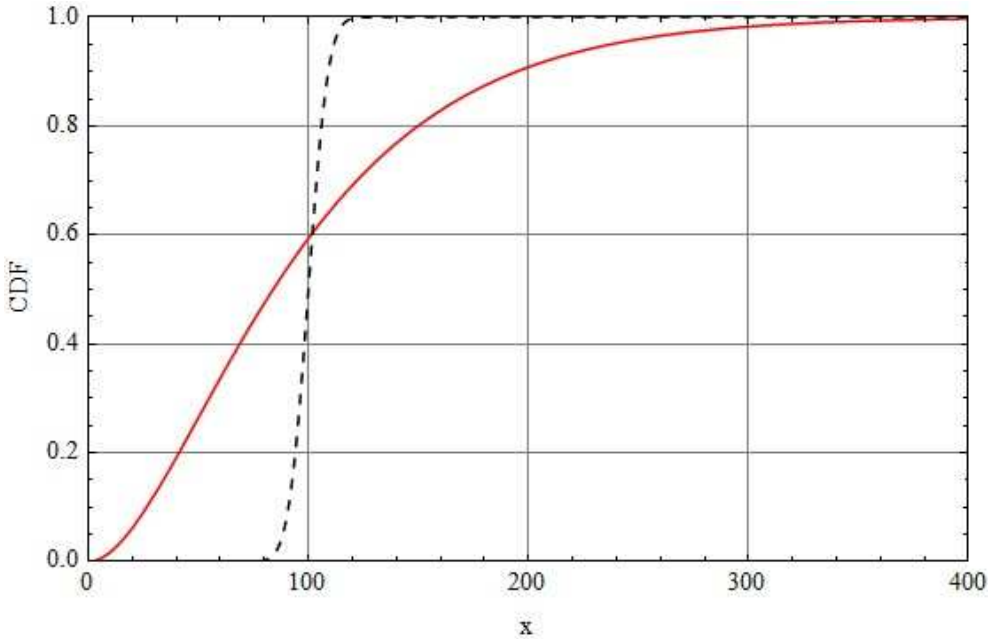


Abbildung 5-3: Verteilungsfunktion von x_{stat} ~ Ga(α,β/λ) (rot) des probabilistischen Modells im Vergleich zur angepassten Normalverteilung von x(T) des stochastischen Modells aus dem Beispiel 5.1-1 (schwarz, gestrichelt, vgl. Abbildung 5-2)

5.1.1.2. Lineare ODE mit stochastischer/probabilistischer Abbaurate

Die speziellen Eigenschaften von ODE-Modellen betreffen nicht nur fremderregte Prozesse, wie im Beispiel 5.1 betrachtet, sondern auch parametererregte Prozesse.

Im folgenden Beispiel wird hierzu der Einfluss von zufälligen Schwankungen der Lüftungsrate eines Raumes auf die Variabilität der Radonkonzentration bei konstanter Quellstärke betrachtet. Dieses Beispiel entspricht ebenfalls der linearen ODE 1. Ordnung Gl. (5-1), wobei nun jedoch der Parameter a(t) als zeitdiskreter Prozess mit zufälligen Werten modelliert wird. Anschließend erfolgt auch hierzu der Vergleich mit einem Modell, in dem die Lüftungsrate als eine zeitunabhängige probabilistische Größe betrachtet wird.

Beispiel 5.2-1

In einem Raum mit einem Volumen V und einer konstanten Radonquelle Q (freigesetzte Aktivität pro Zeiteinheit, z. B. verursacht durch die Radonemanation der verwendeten Baustoffe) genügt die Änderung der Rn-Konzentration $C_{Rn}(t)$ bei Annahme einer perfekten Durchmischung der Luft der linearen ODE

$$\frac{dC_{Rn}(t)}{dt} = -(\lambda_{Rn} + \lambda_v(t)) \cdot C_{Rn}(t) + q \ , \qquad (5\text{-}12)$$

wobei λ_{Rn} = 0,00756 h^{-1} die Rn-222-Zerfallskonstante ist, $\lambda_v(t)$ die Ventilationsrate (Luftwechselrate) darstellt und q = Q/V die auf das Raumvolumen bezogene Quellstärke bezeichnet. Vereinfachend wurde angenommen, dass die Radonkonzentration der Außenluft vernachlässigbar gering ist.

Die Ventilationsrate $\lambda_v(t)$ resultiert aus dem natürlichen Luftwechsel in Gebäuden, dessen Größe durch bautechnische Merkmale bestimmt wird und zeitliche Schwankungen in Abhängigkeit vom Winddruck an den Außenseiten des Gebäudes und einem durch Temperaturdifferenzen bedingten Auftrieb der Raumluft aufweist, sowie durch das Lüftungsverhalten der Bewohner (Häufigkeit und Dauer von Stoßlüftungen und Raumlüftung z. B. bei Kippstellung von Fenstern). In diesem Beispiel wird $\lambda_v(t)$ als stochastischer zeitdiskreter Prozess mit Gammaverteilung (siehe Abschnitt C.3.4) angesetzt:

$$\lambda_v(t) = \lambda_{v,i} \quad \text{für } t_i < t \leq t_i + \Delta t, \quad \lambda_{v,i} \sim Ga(\alpha,\beta), \quad E[\lambda_{v,i}] = \alpha\cdot\beta, \quad Cov[\lambda_{v,i},\cdot\lambda_{v,j}] = \alpha\cdot\beta^2\cdot\delta_{ij}, \tag{5-13}$$

wobei δ_{ij} wieder das KRONECKER-Symbol bezeichnet. Mit Werten der Verteilungsparameter von $\alpha = 2$ und $\beta = 0{,}25\ h^{-1}$ resultiert eine mittlere Ventilationsrate von $0{,}5\ h^{-1}$ mit Standardabweichung von $0{,}35\ h^{-1}$. Für das Beispiel sei $q = 100\ Bq/(m^3\cdot h)$, $C_{Rn}(0) = 200\ Bq/m^3$ und $\Delta t = t_i - t_{i-1} = 1\ h$.

Die Abbildung 5-4 zeigt einen simulierten Verlauf der Luftwechselrate $\lambda_v(t)$ für einen Zeitraum von zehn Tagen und die empirische Verteilungsfunktion der Einzelwerte im Vergleich zur theoretischen Verteilung der zugrunde gelegten Gammaverteilung.

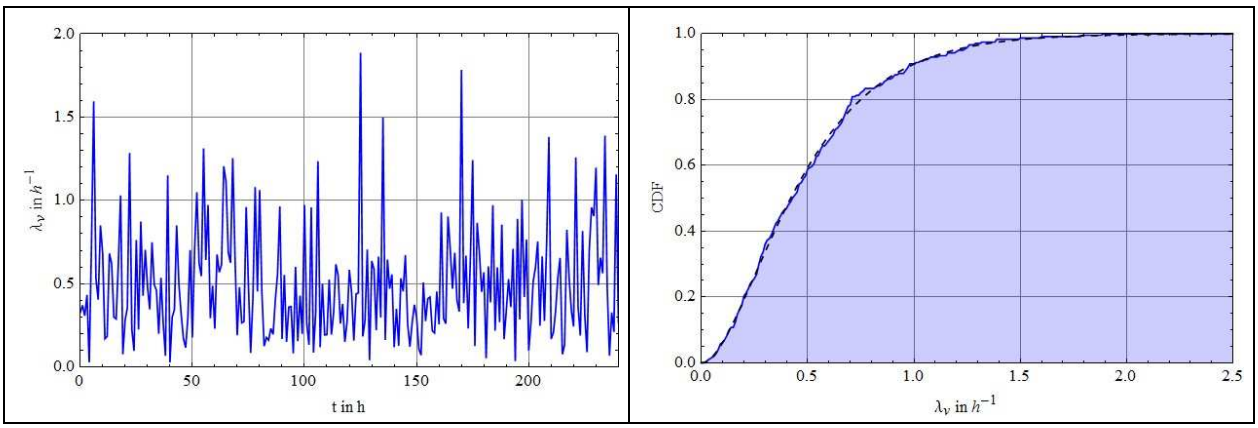


Abbildung 5-4: Simulierter Verlauf der Luftwechselrate $\lambda_v(t)$ gemäß Gl. (5-13) (linkes Bild) sowie empirische Verteilung der Einzelwerte λ_v (rechtes Bild) im Vergleich zur Verteilungsfunktion der Gammaverteilung $Ga(\alpha,\beta)$ mit $\alpha = 2$ und $\beta = 0{,}25$ (schwarz gestrichelt)

Der daraus gemäß Gl. (5-12) resultierende zeitliche Verlauf der Radonkonzentration kann nach Gl. (5-3) berechnet werden, wobei sich hierzu ein rekursives Verfahren anbietet, dessen Darstellung auch für die weitere Diskussion benötigt wird. Durch Anwendung von Gl. (5-3) auf Zeitintervalle der Länge Δt folgt:

$$C_{Rn}(t_i) = C_{Rn}(t_{i-1}) \cdot e^{-(\lambda_{v,i}+\lambda_{Rn})\,\Delta t} + \frac{q}{\lambda_{v,i}+\lambda_{Rn}} \cdot \left(1 - e^{-(\lambda_{v,i}+\lambda_{Rn})\,\Delta t}\right). \tag{5-14}$$

Die Abbildung 5-5 zeigt den nach Gl. (5-14) berechneten Verlauf der Radonkonzentration sowie die empirische Verteilungsfunktion der Werte $C_{Rn}(t_i)$ (i von 0 bis 240). Für die in Abbildung 5-5 dargestellte zufällige Realisierung resultiert ein Mittelwert der Radonkonzentration von 217 Bq/m^3.

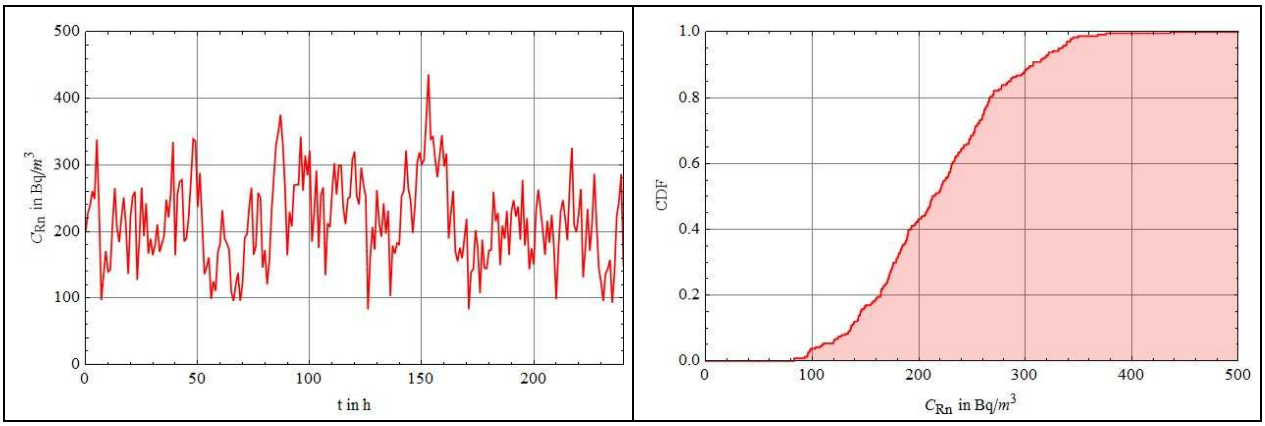


Abbildung 5-5: Nach Gl. (5-12) für den Verlauf der Luftwechselrate aus Abbildung 5-4 resultierender Verlauf der Rn-Konzentration (links) sowie empirische Verteilungsfunktion (rechts)

Für eine Berechnung der mittleren Radonkonzentration, die nicht durch die betrachtete Realisierung des stochastischen Prozesses bestimmt ist, kann von der analytischen Lösung der ODE für ein Zeitintervall der Länge Δt ausgegangen werden, die in Gl. (5-14) angegeben ist. Da die Zufallsgröße $\lambda_{v,i}$ unabhängig von der zuvor realisierten Radonkonzentration $C_{Rn}(t_{i-1})$ ist und die Lösung der Gl. (5-12) ein stationärer stochastischer Prozess ist, woraus $E[C_{Rn}(t_i)] = E[C_{Rn}(t_{i-1})] = E[C_{Rn})]$ folgt, kann der Erwartungswert der Radonkonzentration direkt aus Gl. (5-14) berechnet werden:

$$E[C_{Rn}] = q \cdot \frac{E\left[\dfrac{1-e^{-(\lambda_v+\lambda_{Rn})\,\Delta t}}{\lambda_v+\lambda_{Rn}}\right]}{1-e^{-\lambda_{Rn}\,\Delta t}\cdot E[e^{-\lambda_v\,\Delta t}]}\,. \tag{5-15}$$

Für $\lambda_v \sim Ga(\alpha,\beta)$ mit $\alpha > 1$ lassen sich die gemäß Gl. (B-8) für den Zähler und den Nenner auf der rechten Seite von Gl. (5-15) zu berechnenden Integrale analytisch bestimmen;

$$E[C_{Rn}] = \frac{q}{\lambda_{Rn}} \cdot \frac{e^{\lambda_{Rn}/\beta}\cdot(\lambda_{Rn}/\beta)^{\alpha}\cdot\left(\Gamma(1-\alpha,\lambda_{Rn}/\beta)-\Gamma(1-\alpha,\lambda_{Rn}/\beta+\lambda_{Rn}\cdot\Delta t)\right)}{1-e^{-\lambda_{Rn}\,\Delta t}\cdot(1+\beta\,\Delta t)^{-\alpha}}\,, \tag{5-16}$$

wobei $\Gamma(\alpha, z)$ die unvollständige Gammafunktion bezeichnet (siehe Gl. (C-28). Mit den oben genannten Parameterwerten resultiert aus Gl. (5-16) für $\Delta t = 1$ h eine mittlere Radonkonzentration von 218,5 Bq/m^3. Der für die zufällige Realisierung aus Abbildung 5-5 berechnete Mittelwert (217 Bq/m^3) weicht davon nur geringfügig ab, was der Stichprobenunsicherheit entspricht.

Der für dieses Beispiel gewählte Zeitschritt von $\Delta t = 1$ h dürfte eine sinnvolle Größenordnung für die Modellierung der Luftwechselrate sein. Konsequenzen dieser Annahme sind mit Gl. (5-16) abschätzbar. Dazu sind, wie bereits in Beispiel 5.1-1 angesprochen, bei Veränderungen von Δt auch die Parameter der für λ_v angesetzten Gammaverteilung anzupassen. Hierzu werden in Gl. (5-16) die beiden Substitutionen $\alpha \rightarrow \alpha' = \alpha\cdot\Delta t$ sowie $\beta \rightarrow \beta' = \beta/\Delta t$ durchgeführt. Mit den o. g. Werten für q, α und β ergibt sich die in Abbildung 5-6 dargestellte Abhängigkeit des Erwartungswertes $E[C_{Rn}]$ von Δt.

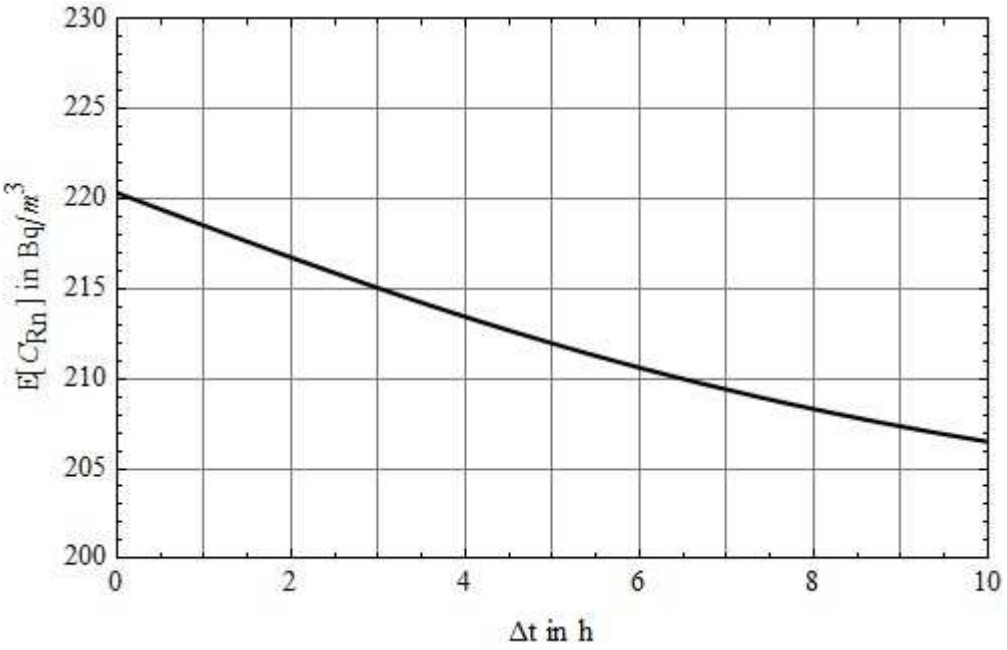


Abbildung 5-6: Abhängigkeit des Erwartungswertes $E[C_{Rn}]$ vom Zeitschritt Δt

Der gewählte Zeitschritt beeinflusst somit die berechnete mittlere Radonkonzentration, wenn auch relativ schwach. Der Grenzwert für $\Delta t \to 0$ ist hier formal zu sehen. Das Modell Gl. (5-12)/(5-13) ist keine SDE. Im Grenzfall $\Delta t \to \infty$ stimmt die mittlere Radonkonzentration mit der auf Basis des Mittelwertes der Luftwechselrate berechneten Radonkonzentration überein:

$$\lim_{\Delta t \to \infty} \{E[C_{Rn}]\} = \frac{q}{E[\lambda_v] + \lambda_{Rn}} \qquad \text{mit} \quad E[\lambda_v] = \alpha \cdot \beta. \tag{5-17}$$

Mit den o. g. Parameterwerten ergibt Gl. (5-17) eine mittlere Radonkonzentration von 197 Bq/m^3 (bei Vernachlässigung des Radonzerfalls: 200 Bq/m^3).

Beispiel 5.2-2

Ein völlig anderes Bild resultiert, wenn man die in Abbildung 5-4 dargestellten Daten zur Ventilationsrate nicht als stochastischen Prozess, sondern probabilistisch als zufällige Realisierungen des Parameters λ_v in einer Population von vielen Räumen betrachten würde. Methodisch könnte sich ein solcher Ansatz ergeben, wenn für eine große Anzahl (Stichprobe) von Räumen gleicher Bauart Messungen der Luftwechselrate (zu unterschiedlichen Zeitpunkten) durchgeführt und die Messergebnisse als Stichprobe zur Bestimmung der Variabilität der Luftwechselrate λ_v innerhalb der Grundgesamtheit interpretiert würden. In diesem Fall würde man nach Gl. (5-12) mit zeitunabhängiger Luftwechselrate λ_v die stationäre Lösung

$$C_{Rn} = q / (\lambda_v + \lambda_{Rn}), \tag{5-18}$$

mit Zufallswerten für λ_v gemäß Abbildung (5-4) betrachten. Die empirische Verteilung der resultierenden Zufallswerte zur Radonkonzentration ist in Abbildung 5-7 dargestellt. Ihr Mittelwert liegt bei 356 Bq/m^3.

Die theoretische Verteilung der durch Gl. (5-18) mit $\lambda_v \sim Ga(\alpha,\beta)$ bestimmten Radonkonzentration kann durch Substitution der Variablen für die in Abschnitt C.3.4 erläuterte Gammaverteilung bestimmt werden. Für die Wahrscheinlichkeitsdichte, die Verteilungsfunktion und den Erwartungswert von C_{Rn} resultieren bei probabilistischer Interpretation der Gl. (5-18) mit $\lambda_v \sim Ga(\alpha,\beta)$, $\alpha > 1$, die Beziehungen:

$$f(C_{Rn} \mid \alpha,\beta) = q \cdot \frac{\mathrm{Exp}\left(\frac{\lambda_{Rn}}{\beta} - \frac{q}{\beta\, C_{Rn}}\right) \cdot \left(\frac{q}{C_{Rn}} - \lambda_{Rn}\right)^{\alpha-1}}{C_{Rn}^{\;2}\, \Gamma(\alpha)\, \beta^{\alpha}}, \quad 0 < C_{Rn} < q/\lambda_{Rn} \tag{5-19}$$

$$F(C_{Rn} \mid \alpha,\beta) = \frac{\Gamma\left(\alpha, \frac{q - \lambda_{Rn}\, C_{Rn}}{\beta\, C_{Rn}}\right)}{\Gamma(\alpha)}, \tag{5-20}$$

$$E[C_{Rn}] = \frac{q}{\lambda_{Rn}} \cdot e^{\lambda_{Rn}/\beta} \cdot (\lambda_{Rn}/\beta)^{\alpha} \cdot \Gamma(1-\alpha, \lambda_{Rn}/\beta)\,. \tag{5-21}$$

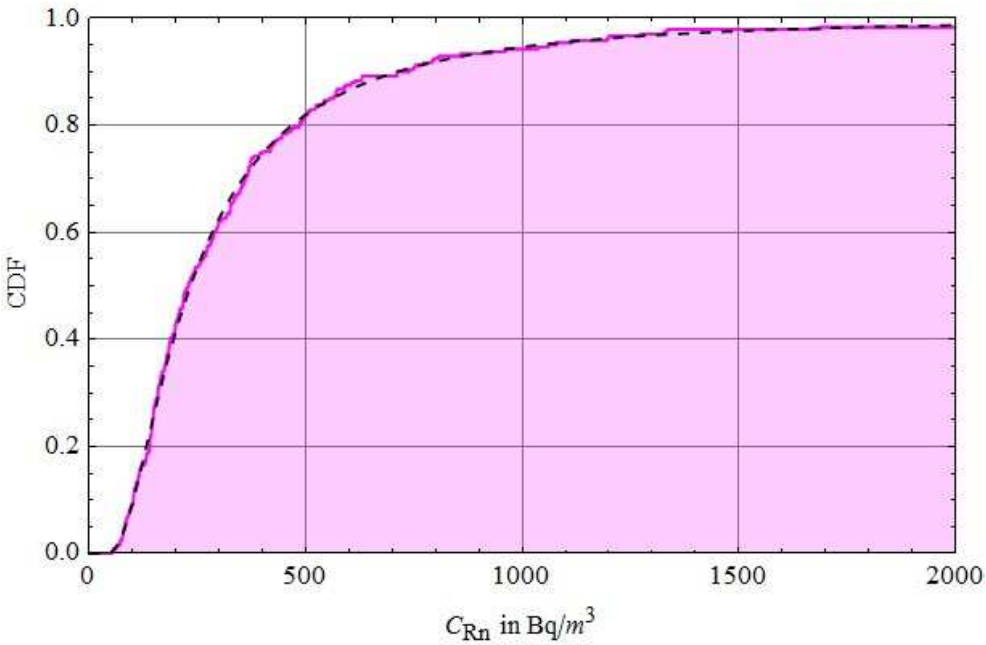


Abbildung 5-7: Empirische Verteilung der stationären Werte zur Rn-Konzentration nach Gl. (5-18) im Vergleich zur theoretischen Verteilungsfunktion (schwarz gestrichelt) nach Gl. (5-20)

Aus dem Vergleich der in den Abbildungen 5-5 und 5-7 dargestellten Verteilungsfunktionen folgt, dass im Rahmen des stochastischen Modells eine deutlich geringere Radonkonzentration resultiert als für das probabilistische Modell. Die Ursache dieses Unterschiedes lässt sich am einfachsten aus den jeweiligen Erwartungswerten erkennen. Während die mittlere Radonkonzentration im stochastischen Modell des Beispiels 5.2-1 wesentlich durch den Reziprokwert des Erwartungswert von λ_v bestimmt wird, ist für das probabilistische Modell der Erwartungswert des Reziprokwertes von λ_v maßgeblich:

$$E[C_{Rn}] = q \cdot E\left[\frac{1}{\lambda_v + \lambda_{Rn}}\right] \quad \text{mit} \quad \lambda_v \sim Ga(\alpha, \beta). \tag{5-22}$$

Anmerkung: Vernachlässigt man in Gl. (5-22) die Radon-Zerfallskonstante, so würde für $\lambda_v \sim Ga(\alpha,\beta)$ mit dem Erwartungswert

$$E[1/\lambda_v] = \frac{1}{(\alpha - 1) \cdot \beta} \quad (\alpha > 1) \tag{5-23}$$

eine mittlere Radonkonzentration von 400 Bq/m^3 resultieren, wogegen sich bei Vernachlässigung des Radonzerfalls in Gl. (5-17) ein Wert von 200 Bq/m^3 ergab (s. o.).

Im Unterschied zu den in Abschnitt 5.1.1.1 betrachteten Modellen mit einer stochastischen bzw. probabilistischen Quellstärke weichen bei stochastischer bzw. probabilistischer Modellierung der Abbaurate (Koeffizientenfunktion a(t) in der ODE Gl. (5-1)) bereits die jeweiligen Erwartungswerte erheblich voneinander ab. Dies folgt daraus, dass dieser Modellparameter nicht-linear in die Lösung der ODE eingeht. Deshalb kann eine probabilistische Auswertung und Nutzung von Messwerten, die eigentlich einem stochastischen Prozess zuzuordnen sind, zu erheblichen Fehleinschätzungen führen, wenn dies Modellparameter betrifft, die in die ODE mit der Zielgröße multipliziert werden. Für das stochastische Modell nach Gl. (5-12) und das probabilistische Modell nach Gl. (5-18) wurden für das Beispiel 5.2 zwar keine Varianzen berechnet; ein Vergleich der in Abbildungen 5-5 bzw. Abbildung 5-7 dargestellten Verteilungsfunktionen macht aber zumindest qualitativ deutlich, dass sich die aus dem stochastischen bzw. probabilistischen Modell resultierenden Varianzen und die höheren Quantile der Zielfunktion (hier: Rn-Konzentration) sehr stark unterscheiden.

Das stochastische Modell liefert auch im hier betrachteten Beispiel einen Erwartungswert, der sehr gut mit einem deterministischen Ansatz übereinstimmt, für den der Erwartungswert der Abbaurate angesetzt wird. Diese Übereinstimmung wird noch besser verständlich, wenn statt des zeitdiskreten Prozesses zeitkontinuierliche stochastische Prozesse mit SDE-Modellen betrachtet werden.

5.1.2. Modelle mit stochastischen Differentialgleichungen

Im vorigen Abschnitt wurden zur linearen ODE Gl. (5-1) mit der allgemeinen Lösung Gl. (5-3) in den Beispielen 5.1 und 5.2 zeitdiskrete stochastische Prozesse betrachtet. Die Lösung stochastischer Differentialgleichungen (SDE, siehe z. B. [KLOE 95], [ØKS 03], [ALL 07], [JAC 10]), mit denen zeitkontinuierliche stochastische Prozesse modelliert werden können, verlangt im Unterschied dazu spezielle Methoden der stochastischen Integration. Der Abschnitt B.4 von Anhang B enthält eine Zusammenstellung und Erläuterungen von wichtigen Definitionen und Eigenschaften stochastischer Prozesse und Differentialgleichungen, auf denen die nachfolgenden Darlegungen basieren.

5.1.2.1. SDE mit WIENER-Prozess

Der Standard-WIENER-Prozess (SWP) W(t) ist für $t \geq 0$ mit $W(0) = 0$ durch die Normalverteilung seines Inkrements

$$dW \sim N(0, \sqrt{dt}), \tag{5-24}$$

für infinitesimale Zeitintervalle dt definiert. Aus Gl. (5-24) folgt:

$$W(t) = \int_0^t dW \quad \text{mit} \quad E[W(t)] = 0, \quad Var[W(t)] = t, \quad W(t) \sim N(0, \sqrt{t}\,). \tag{5-25}$$

Die allgemeine Form einer SDE mit einem SWP ist

$$dX = a(X, t)\cdot dt + b(X, t)\cdot dW, \tag{5-26}$$

wobei a(X, t) und b(X, t) bestimmte Funktionen sind. Von besonderer Bedeutung für die Lösung von SDE mit einem SWP ist die ITO-Regel

$$(dW)^2 = dt. \tag{5-27}$$

(das Differentialprodukt dW·dt ist wie $(dt)^2$ gleich Null zu setzen). Daraus folgt die ITO-Formel

$$dY = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)\cdot dt + \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)\cdot dX + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{\partial^2 f}{\partial X^2}\right)\cdot (dX)^2 \tag{5-28}$$

zur Ableitung einer SDE für einen gemäß Y = f(X, t) transformierten Prozess mit Hilfe einer nach t sowie zweifach nach X stetig differenzierbaren Funktion.

In radiologischen und ökologischen Modellen stehen oft Parameter, deren aleatorische Unsicherheit (Variabilität) durch eine Lognormalverteilung approximiert werden kann. Das folgende Beispiel zeigt die Entstehung einer lognormal verteilten Zufallsgröße durch eine lineare SDE mit SWP.

Beispiel 5.3

Dieser spezielle Fall der allgemeinen SDE Gl. (5-26) ergibt sich mit a(X, t) = 0 und b(X, t) = c·X, wobei c eine Konstante bezeichnet. Zur Lösung der damit resultierenden SDE

$$dX(t) = c\,X(t)\,dW \quad \text{mit Anfangsbedingung } X(0) = X_0 \tag{5-29}$$

wird die Transformation

$$Y(t) = \ln(X(t)), \quad Y(0) = \ln(X_0), \tag{5-30}$$

vorgenommen. Gemäß Gl. (5-28) genügt dann Y(t) der SDE

$$dY = \frac{dX}{X} - \frac{(dX)^2}{2\,X^2} = c\,dW - \frac{c^2}{2}\cdot(dW)^2 = -\frac{c^2}{2}\,dt + c\,dW\,, \tag{5-31}$$

wobei zur Vereinfachung der Darstellung die Abhängigkeit von der Zeit t nicht explizit angegeben wurde. In Gl. (5-31) wurde $(dW)^2$ gemäß Gl. (5-27) durch dt ersetzt. Die Integration der Gl. (5-31) ist elementar ausführbar,

$$Y(t) = Y(0) - \frac{c^2\,t}{2} + c\,W(t)\,.$$

Die Rücktransformation nach Gl. (5-30) ergibt die folgende Lösung der SDE Gl. (5-29):

$$X(t) = X_0\cdot e^{-t\,c^2/2 - c\,W(t)}\,. \tag{5-32}$$

Der stochastische Prozess X(t) ist danach zu jedem Zeitpunkt eine lognormal verteilte Zufallsgröße, die auch als geometrische BROWN'sche Bewegung bezeichnet wird:

$$X(t) \sim \mathrm{Ln}(\mu(t), \sigma(t)) \quad \text{mit}$$
$$\mu(t) = \ln(X_0) - \frac{c^2}{2}\,t \quad \text{und} \quad \sigma(t) = c\sqrt{t}\,. \tag{5-33}$$

Zur Veranschaulichung der obigen Berechnungen sei X_0 = 100 und c = 0,1 gesetzt. In Abbildung 5-8 sind fünf zufällige Realisierungen w(t) des Standard-WIENER-Prozesses und die damit resultierenden Verläufe x(t) des durch die SDE Gl. (5-29) definierten stochastischen Prozesses X(t) dargestellt, wobei hierzu eine logarithmische Skala gewählt wurde. Durch die logarithmische Darstellung erscheinen die Trajektorien x(t) i. W. als Spiegelbilder der zugehörigen Trajektorien w(t). Zusätzlich ist eine Drift der Trajektorien x(t) in Richtung kleinerer Werte zu erkennen.

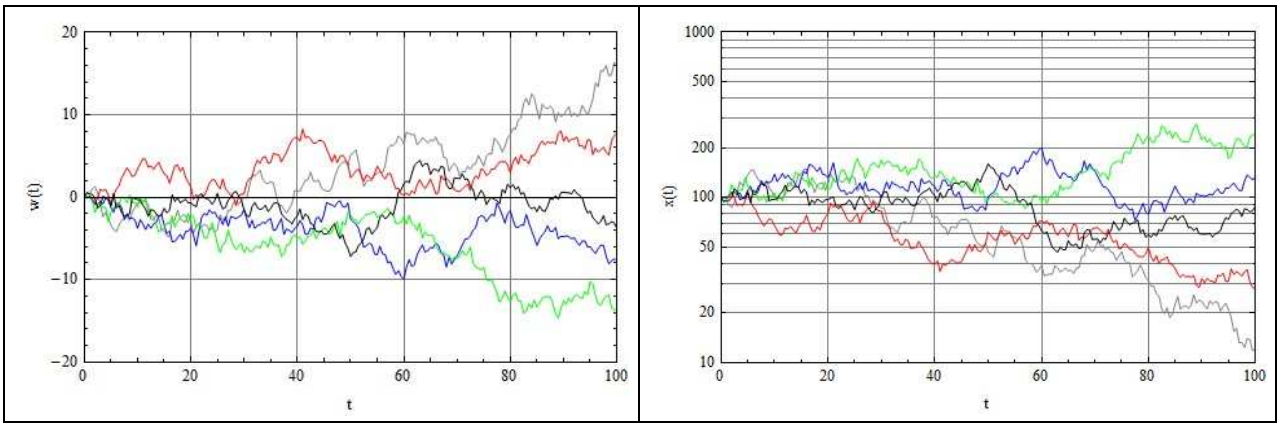


Abbildung 5-8: Fünf zufällige Realisierungen w(t) des Standard-WIENER-Prozesses (linkes Bild) und daraus nach Gl. (5-32) resultierende Realisierungen des stochastischen Prozesses X(t) (rechtes Bild); Parameterwerte: X_0 = 100 und c = 0,1 (für $0 \le t \le 100$).

Mit den in Abschnitt C.3.2 für den Erwartungswert und die Varianz lognormal verteilter Zufallsgrößen angegebenen Beziehungen Gl. (C-15) bzw. Gl. (C-16) erhält man aus Gl. (5-33) für den Erwartungswert und die Varianz von X(t) (für fixierte Zeitpunkte t ist X(t) eine lognormal verteilte Zufallsgröße):

$$E[X(t)] = e^{\mu(t)+\sigma^2(t)/2} = e^{\ln(C_0) - t\,c^2/2 + c^2\,t/2} = X_0\,, \tag{5-34}$$

$$\mathrm{Var}[X(t)] = E[X(t)]^2 \cdot \left(e^{\sigma^2(t)} - 1\right) = X_0{}^2 \cdot \left(e^{b^2 \cdot t} - 1\right).$$

Der Erwartungswert von X(t) stimmt folglich mit der Lösung der deterministischen ODE, dX(t)/dt = 0 überein. Der Variationskoeffizient von X(t), der als Verhältnis der Standardabweichung zum Erwartungswert definiert ist, wächst jedoch mit der Zeit t:

$$v_{X(t)} = \frac{\sqrt{\mathrm{Var}[X(t)]}}{E[X(t)]} = \sqrt{e^{\sigma^2(t)} - 1} = \sqrt{e^{c^2 \cdot t} - 1}\,.$$

Für $c^2 \cdot t << 1$ ergibt sich für den Variationskoeffizienten von X die Näherung $v_{X(t)} \approx c \cdot \sqrt{t}$, die der Standardabweichung des Rauschprozesses $c \cdot W(t)$ entspricht.

Abbildung 5-9 zeigt für vier ausgewählte Zeitpunkte, t_k = 1, 4, 16 und 64, für die Zufallsgröße $X(t_k)$ nach Gl. (5-33) berechnete Verteilungsfunktionen.

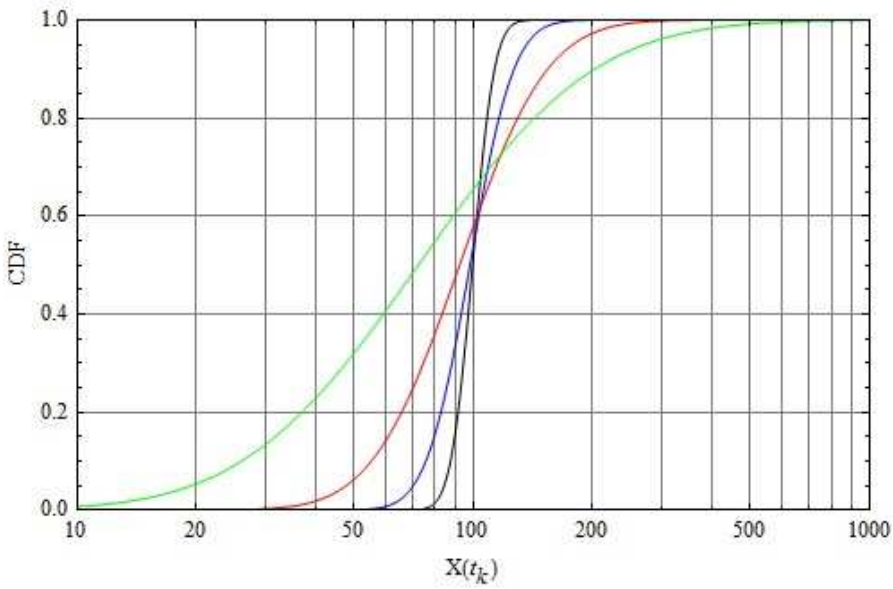


Abbildung 5-9: Verteilungsfunktionen der Zufallsgröße $X(t_k)$ für vier ausgewählten Zeitpunkte t_k = 1 (schwarz), t_k = 4 (blau), t_k = 16 (rot) sowie t_k = 64 (grün); nach Gl. (5-33); mit den Parameterwerten: X_0 = 100 und c = 0,1

Die Bedeutung des ITO-Kalküls für die Lösung von SDE mit Parametererregung durch WIENER-Prozesse lässt sich aus Gl. (5-34) gut erkennen. Würde man in der ersten Zeile von Gl. (5-31) den Term $(dW)^2$ vernachlässigen (statt $(dW)^2 = dt$ zu setzen), so würde statt Gl. (5-33) für $\mu(t)$ nur der Wert $\ln(X_0)$ resultieren. Damit würde jedoch im Erwartungswert von X(t) eine Zeitabhängigkeit der Form $\mathrm{Exp}(t \cdot c^2/2)$ verbleiben. Dies kann jedoch nicht sein, denn die Beziehung $E[X(t)] = X_0$ folgt bereits aus Gl. (5-29). Diese (ITO-)SDE ist als Grenzwert der Differenzen-Gleichung

$$X(t+\Delta t) - X(t) = c \cdot X(t) \cdot \big(W(t+\Delta t) - W(t)\big) \qquad (5\text{-}35)$$

für $\Delta t \to 0$ zu verstehen (siehe Definition des ITO-Integrals in Abschnitt B.4.2.1). Der Erwartungswert der rechten Seite von Gl. (5-35) ist gleich Null, weil die Änderung des WIENER-Prozesses im Zeitintervall t bis $t + \Delta t$ unabhängig von dem zum Zeitpunkt t vorliegenden Wert des Prozesses X(t) ist und deshalb unter Beachtung der Eigenschaften des WIENER-Prozesses (siehe Gl. (5-25) sowie Abschnitt B.4.1)

$$E[c \cdot X(t) \cdot \big(W(t+\Delta t) - W(t)\big)] = c \cdot E[X(t)] \cdot E[W(t+\Delta t) - W(t)] = c \cdot E[X(t)] \cdot E[W(\Delta t)] = 0$$

ist. Somit folgt aus Gl. (5-35) auch

$E[X(t+\Delta] = E[X(t)]$ und wegen $X(0) = X_0$ $E[X(t)] = X_0$.

Für SDE mit Fremderregung durch einen WIENER-Prozess spielt dagegen das ITO-Kalkül keine Rolle, da in diesem Fall kein zu $(dW)^2$ proportionaler Term erscheint. Im folgenden Beispiel wird dies für eine SDE gezeigt, die der in Abschnitt 2.6.5 angegebenen LANGEVIN-Gleichung Gl. (2-61a) sehr ähnlich ist.

Beispiel 5.4

Es seien λ die Zerfallskonstante für ein Radionuklid und q(t) ein Quellterm, der aus einem konstanten Anteil (Mittelwert) von $q_m = E[q(t)]$ sowie einem stochastisch variierenden Anteil besteht, der als Produkt eines konstanten Faktors b mit einem WIENER-Prozess dargestellt werden kann. Da die Quellstärke q(t) eine positiv definierte Größe ist, sei $q_m > 4 \cdot b$, so dass die Wahrscheinlichkeit des Auftretens negativer Werte von q(t) praktisch vernachlässigbar ist. Für die Aktivität bzw. Aktivitätskonzentration C(t) gilt dann die lineare SDE

$$dC(t) = -\lambda\, C(t)\, dt + q_m\, dt + b\, dW\,, \tag{5-36}$$

wobei W(t) wieder den Standard-WIENER-Prozess mit $dW \sim N(0, \sqrt{dt}\,)$ bezeichnet. Im Unterschied zur SDE Gl. (5-29) des Beispiels 5.3 beschreibt Gl. (5-36) einen fremderregten Prozess. Zur Vereinfachung der weiteren Darstellungen wird die Anfangsbedingung

$$C(0) = C_0 = q_m/\lambda \tag{5-37}$$

gewählt, die dem asymptotischen Wert der Lösung der deterministischen ODE $dC(t)/dt = -\lambda \cdot C(t) + q_m$ entspricht. Zur Lösung der SDE Gl. (5-35) wird die Transformation

$$Y(t) = C(t) \cdot e^{\lambda t} \tag{5-38}$$

vorgenommen. Gemäß Gl. (5-28) genügt der stochastische Prozess Y(t) der einfacheren SDE

$$\begin{aligned} dY &= \lambda\, C\, e^{\lambda t} dt + e^{\lambda t} dC = \lambda\, C\, e^{\lambda t} dt + e^{\lambda t}\,(-\lambda\, C\, dt + q_m\, dt + b\, dW) \\ &= e^{\lambda \cdot t}\,(q_m\, dt + b\, dW) \end{aligned}\,, \tag{5-39}$$

für deren Lösung gemäß Gl. (5-37)/(5-38) die Anfangsbedingung $Y(0) = C(0) = q_m/\lambda$ gilt. Gl. (5-39) kann auf elementare Weise integriert werden,

$$Y(t) = Y(0) + q_m \int_0^t e^{\lambda s} ds + b \int_0^t e^{\lambda s} dW(s)\,,$$

woraus nach Rücktransformation gemäß Gl. (5-38) unter Beachtung der o. g. Anfangsbedingung

$$C(t) = \frac{q_m}{\lambda} + b \int_0^t e^{-\lambda (t-s)} dW(s) \tag{5-40}$$

folgt. C(t) setzt sich also aus der Lösung der o. g. deterministischen ODE sowie einem von der Zeit t abhängigen stochastischen Integral zusammen. Zur Charakterisierung der zeitlichen Schwankungen von C(t) um dessen Erwartungswert sei auf die Eigenschaften stochastischer Integrale des SWP über eine glatte Funktion (hier: $e^{-\lambda \cdot (t\,-\,s)}$) Bezug genommen werden (siehe dbzgl. Anmerkungen in Abschnitt B.4.2.1). Danach erhält man folgende Beziehungen:

$$E[C(t)] = \frac{q_m}{\lambda}, \tag{5-41}$$

$$Var[C(t)] = b^2 \int_0^t e^{-2\lambda\cdot(t-s)} ds = \frac{b^2}{2\lambda} \cdot \left(1 - e^{-2\lambda t}\right). \tag{5-42}$$

In Abbildung 5-10 sind zur Veranschaulichung zehn zufällige Realisierungen w(t) des SWP sowie daraus nach Gl. (5-40) mit den Parameterwerten $q_m = 5$, $\lambda = 0{,}005$ und b = 1 resultierende Verläufe des Prozesses C(t) für einen Zeitraum von $0 \le t \le t500$ dargestellt. Der Mittelwert liegt bei $E[C(t)] = q_m/\lambda = 1000$. Das 95%-Konfidenzband für C(t), $E[C(t)] \pm 2\cdot Var[C(t)]^{1/2}$, liegt asymptotisch bei 1000 ± 20.

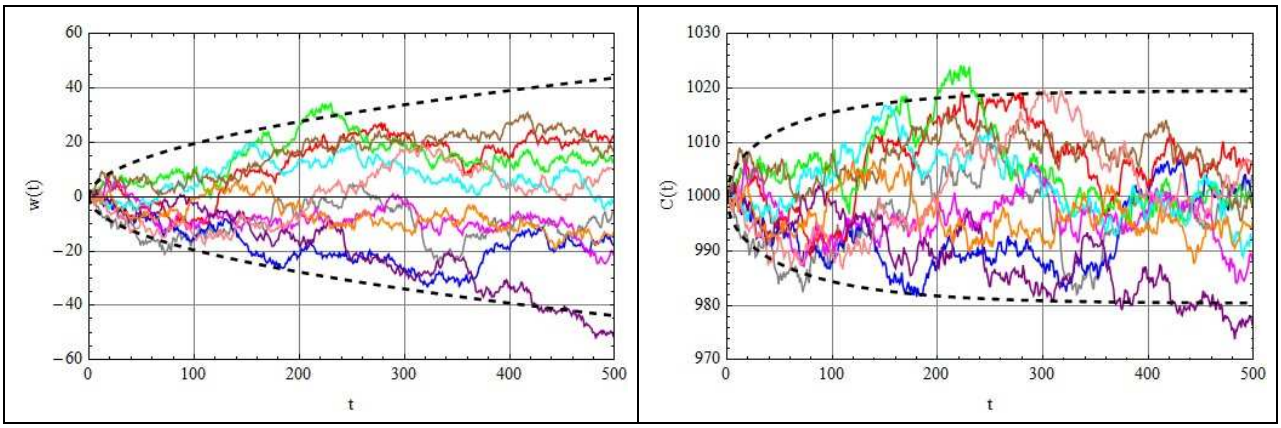


Abbildung 5-10: Zehn zufällige Realisierungen w(t) des Standard-WIENER-Prozesses w(t) mit 95%-Konfidenzband (linkes Bild) sowie daraus nach Gl. (5-40) mit $q_m = 5$, $\lambda = 0{,}005$ und b = 1 resultierende Verläufe von C(t) mit 95%-Konfidenzband (rechtes Bild);

Anhand der im Beispiel 5.4 für die einfache SDE mit Fremderregung durch einen WIENER-Prozess dargelegten Ergebnisse wird die Problematik der probabilistischen Modellierung von Parametern, deren Variabilität durch stochastische Prozesse bedingt ist, deutlich. Werden für die variierende Quellstärke q(t) (bzw. $q(t)\cdot dt = q_m\cdot dt + b\cdot dW$ entsprechend dem Quellterm von Gl. 5-33) Messungen über Zeitintervalle $[t_i, t_i + \Delta t]$ mit gleicher Länge Δt zur Bestimmung der Variabilität von q mit einem Stichprobenumfang von n ausgeführt, so resultieren zufällige Werte

$$q_i = \frac{1}{\Delta t} \cdot \left(\int_{t_i}^{t_i+\Delta t} q_m dt + b \cdot \int_{t_i}^{t_i+\Delta t} dw \right) = q_m + \frac{b \cdot \Delta w_i}{\Delta t}, \quad \text{für } i = 1 \text{ bis } n. \tag{5-43}$$

Mit $\Delta w_i \sim N(0, \sqrt{\Delta t})$ folgt dann aus Gl. (5-43), dass die Zufallsgröße q einer Normalverteilung mit Erwartungswert q_m und Varianz $b^2/\Delta t$ genügt, $q \sim N(q_m, b/\sqrt{\Delta t})$, wozu die Verteilungsparameter aus den n Stichprobenwerten q_i geschätzt werden können. Das wesentliche Problem ist in diesem Fall jedoch nicht die Schätzung der beiden Verteilungsparameter oder die Bewertung ihrer durch den endlichen Stichprobenumfang bedingten statistischen Unsicherheit (siehe Abschnitt 4.2), sondern die Abhängigkeit der Varianz der Stichprobenwerte von der Messzeit Δt. Im Unterschied

zu Expositionsfaktoren, deren probabilistische Verteilung anhand von Stichprobenwerten für eine Population aus klar definierten Individuen untersucht werden kann (wie z. B. die Verzehrsmengen von Personen einer bestimmten Altersgruppe), sind zeitlich oder räumlich variierende Parameter von Expositionsmodellen i. A. nicht eindeutig definiert, sondern hängen z. B. von der angewandten Messzeit, von der untersuchten Masse der Stoffstichproben oder der räumlichen Ausdehnung einer Quantifizierung von ortsabhängigen Parametern ab.

Für das obige Beispiel 5.4 (mit b = 1) würde z. B. für q bei einer Messzeit von $\Delta t = 1$ eine Standardabweichung σ von 1 resultieren, bei Messzeiten von $\Delta t = 0{,}25$ bzw. 4 aber von 2 bzw. 0,5. Betrachtet man die stationären Werte zur Aktivität $C = q/\lambda$ in einem probabilistischen Modell mit $q \sim N(q_m, b/\sqrt{\Delta t})$, so würden mit den oben verwendeten Werten von $q_m = 5$ und $\lambda = 0{,}005$ für C 95%-Konfidenzbänder von 1000 ± 200 (bei $\Delta t = 1$), von 1000 ± 400 (bei $\Delta t = 0{,}25$) bzw. auch von 1000 ± 100 (bei $\Delta t = 4$) resultieren. Zum Vergleich sei vermerkt, dass nach dem SDE-Modell ein 95%-Konfidenzband von 1000 ± 20 vorliegt (siehe Abbildung 5-10), was für das probabilistische Modell einer Messzeit von $\Delta t = 100$ entsprechen würde.

Versucht man, ein auf dem deterministischen Modell $C = q_m/\lambda$ basierten probabilistischen Ansatz $C = q/\lambda$ mit $q \sim N(q_m, \sigma)$ zu finden, der für C eine Varianz gemäß dem asymptotischen Wert von Gl. (5-42) liefert, d. h. $Var[C] = b^2/(2\cdot\lambda)$, so wäre dafür der Ansatz $\sigma = b\cdot(\lambda/2)^{1/2}$ erforderlich. Für die Zufallsgröße q/λ würde so die Varianz $Var[C] = Var[q/\lambda] = Var[q]/\lambda^2 = (b^2\cdot\lambda/2)/\lambda^2 = b^2/(2\cdot\lambda)$ resultieren. Dies bedeutet aber, dass die Anpassung des probabilistischen Modells zur Quellstärke q an Daten des stochastischen Prozesses C(t) immer von der Zerfallskonstante λ abhängt, was kaum als sinnvoll angesehen werden kann.

Damit resultieren folgende Schlussfolgerungen:

1. Wenn die zeitliche bzw. räumliche Variabilität von Parametern eines Expositionsmodells durch stochastische Prozesse verursacht ist, können probabilistische Ansätze in Abhängigkeit von der Messzeit, der Stichprobenmasse bzw. des Mittelungsraumes der Ermittlung von Stichprobenwerten gravierende Unterschiede der statistischen Beschreibung der Zielgröße bewirken.
2. Für stochastische Prozesse "adäquate" Mittelungszeiten (bzw. Massen/Volumina) der Messung von Stichprobenwerten, die für realistische probabilistische Modellrechnungen geeignet wären, können i. A. nur aus der Analyse/Lösung der jeweiligen SDE bestimmt werden.
3. Die Anpassung der Verteilungsfunktion für Parameter eines probabilistischen Modells (hier: für die Quellstärke q des Modells $C = q/\lambda$) anhand von Daten aus einem stochastischen Prozess (hier: C(t) gemäß Gl. (5-36)) hängt von anderen Parametern der SDE, die den stochastischen Prozess beeinflussen, ab (hier: λ) und kann deshalb irreführend sein.
4. Modellparameter, deren Variabilität durch stochastische Prozesse bedingt ist, sollten mit Hilfe von stochastischen Differentialgleichungen modelliert und simuliert werden.

5.1.2.2. SDE mit POISSON-Prozessen

Der elementare POISSON-Prozess (EPP) ist der grundlegende stochastische Prozess zur Beschreibung von selten auftretenden zufälligen Ereignissen und findet deshalb eine breite Anwendung in diversen Fachgebieten (siehe z. B. [KING 93]). Der EPP N(t) zählt die Anzahl solcher Ereignisse in einem Zeitintervall von 0 bis t. Er wird durch seine Intensität bestimmt, für die hier der Buchstabe

μ[70] verwendet sei. Er genügt dann einer POISSON-Verteilung mit dem Parameter $\mu \cdot t$. Sein Inkrement für ein infinitesimales Zeitintervall dt wird mit dN bezeichnet. Zu wichtigen Definitionen und Eigenschaften des EPP sei auf Abschnitt B.4.1.3 verwiesen. Zusammenfassend sei vermerkt, dass der elementare POISSON-Prozess N(t) für $t \geq 0$ mit N(0) = 0 durch die POISSON-Verteilung seines Inkrements

$$dN \sim Poi(dt \cdot \mu) \tag{5-44}$$

für infinitesimale Zeitintervalle dt definiert ist. Aus Gl. (5-44) folgt:

$$N(t) = \int_0^t dN \quad \text{mit} \quad E[N(t)] = \mu \cdot t, \quad Var[N(t)] = \mu \cdot t, \quad N(t) \sim Poi(t \cdot \mu). \tag{5-45}$$

Die allgemeine Form einer SDE mit einem EPP ist

$$dX = a(X, t) \cdot dt + b(X, t) \cdot dN, \tag{5-46}$$

wobei a(X, t) und b(X, t) bestimmte Funktionen sind. Von besonderer Bedeutung für die Lösung von SDE mit einem EPP ist die Beziehung

$$(dN)^2 = dN, \tag{5-47}$$

die daraus folgt, dass dN in einem infinitesimalen Zeitintervall dt nur die Werte 0 oder 1 annehmen kann. Damit gilt $(dN)^k = dN$ auch für $k > 2$. Außerdem gilt $dN \cdot dt = 0$.

Die zur ITO-Formel Gl. (5-28) analoge TAYLOR-Entwicklung der Transformation Y = f(X, t) eines Prozesses X(t), der durch eine SDE mit einem EPP gemäß Gl. (5-46) definiert ist, kann deshalb nicht nach dem quadratischen Term abgebrochen werden. Die SDE für den transformierten Prozess Y(t) ergibt sich aus der folgenden Formel

$$dY = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \cdot dt + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial X^k} \cdot (dX)^k = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \cdot dt + \frac{\partial f}{\partial X} \cdot dX + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(b(X,t))^k}{k!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial X^k} \cdot dN \tag{5-48}$$

Für praktische Anwendungen spielen neben dem EPP zusammengesetzte POISSON-Prozesse (ZPP, englisch: compound POISSON process) eine wichtige Rolle, weil sie flexibel an spezielle Prozesse angepasst werden können, bei denen die Auswirkungen bei Eintreten eines POISSON-Ereignisses probabilistisch zu beschreiben sind. Ein mit R(t) bezeichneter ZPP kann dann durch die Summe

$$R(t) = \sum_{k=1}^{N(t)} Z_k \tag{5-49}$$

dargestellt werden, in der Z_k iid Zufallsgrößen aus einer bestimmten univariaten Verteilung sind und auch nicht vom Zustand N(t) des elementaren POISSON-Prozesses abhängen. Zu wichtigen Eigenschaften des ZPP sei auf dbzgl. Erläuterungen in Abschnitt B.4.1.4 verwiesen.

---

[70] Die Intensität des POISSON-Prozesses wird hier mit μ symbolisiert, weil mit der üblichen Bezeichnung λ (siehe Abschnitte C.5.4 und B4.1.3) in den SDE Verwechslungen mit der Zerfallskonstante λ auftreten könnten.

Das folgende Beispiel veranschaulicht die Lösung von SDE mit POISSON-Prozessen (EPP und ZPP) zur Modellierung des Prozesses der stochastischen Reduzierung von Oberflächenkontaminationen, wie sie deterministisch z. B. in [BMU 05] durch die Verweilkonstante λ_V für das Verbleiben von Radionukliden auf Pflanzen modelliert wird oder in [EGO 09] hinsichtlich. des Wash-offs von Kontaminationen auf Dächern durch Niederschläge untersucht wurde.

Beispiel 5.5-1

Die Reduzierung einer zum Zeitpunkt t = 0 vorhandenen Oberflächenkontamination $C(0) = C_0$ durch zufällige Ereignisse (z. B. Niederschläge), deren stochastisches Eintreten durch einen EPP N(t) dargestellt und deren Wirkung mit Hilfe eines Wash-off-Anteils γ $(0 < \gamma < 1)$ beschrieben wird, kann durch folgende SDE modelliert werden:

$$dC = -\lambda\, C\, dt - \gamma\, C\, dN \qquad \text{mit Anfangsbedingung } C(0) = C_0, \tag{5-50}$$

wobei λ die physikalische Zerfallskonstante sei. Zur Vereinfachung der Darstellung ist in Gl. (5-49) die Zeitabhängigkeit (C = C(t)) nicht explizit angegeben. Bzgl. γ werden nachfolgend zwei Fälle betrachtet:

Fall 1: γ ist eine deterministische Konstante;

Fall 2: γ ist eine Zufallsgröße aus einer bestimmten univariaten Verteilung, wodurch die parametrische stochastische Erregung des Prozesses C(t) durch einen ZPP erfolgt.

Zur Lösung der SDE Gl. (5-50) wird zunächst die Transformation

$$Y = \ln(C), \tag{5-51}$$

durchgeführt. Mit

$$\frac{\partial^k \ln(C)}{\partial C^k} = \frac{(-1)^{k+1} \cdot (k-1)!}{C^k}$$

folgt dann nach Gl. (5-48) mit Gl. (5-50):

$$\begin{aligned} dY &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}\,(k-1)!}{C^k} \cdot \frac{(dC)^k}{k!} = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(\lambda\, dt + \gamma\, dN)^k}{k} \\ &= -\lambda\, dt - dN \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\gamma^k}{k} = -\lambda\, dt + \ln(1-\gamma) \cdot dN \end{aligned} \quad . \tag{5-52}$$

Zur Lösung der SDE für den transformierten Prozess Y(t) nach Gl. (5-52) ist nun zu unterscheiden, ob γ eine deterministische Größe ist oder für jedes POISSON-Ereignis einen zufälligen Wert annehmen kann.

Fall 1: γ ist eine konstante deterministische Größe

In diesem Fall ergibt die Integration von Gl. (5-52) die folgende Beziehung für Y(t):

$$Y(t) = Y(0) - \lambda\, t + \ln(1-\gamma)\, N(t)\,,$$

woraus durch Rücktransformation nach Gl (5-51) unter Beachtung der Anfangsbedingung für C(t) die folgende Lösung resultiert:

$$C(t) = C_0\ e^{-\lambda\, t + \ln(1-\gamma)\, N(t)} = C_0\ e^{-\lambda\, t} \cdot (1-\gamma)^{N(t)}\,. \tag{5-53}$$

Gl. (5-53) ist physikalisch plausibel; sie besagt dass mit jedem Ereignis, bei dem ein Anteil γ der zu dieser Zeit noch vorhandenen Kontamination entfernt wird, die Kontamination um den Faktor (1-γ) reduziert wird. Der radioaktive Zerfall erfolgt parallel dazu kontinuierlich. Aus Gl. (5-53) kann der Erwartungswert und die Varianz von C(t) durch entsprechende Mittelungen mit der Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion der POISSON-Verteilung des Prozesses N(t) (siehe Gl. (5-45)) berechnet werden:

$$E[C(t)] = C_0\ e^{-\lambda\, t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mu\, t)^n \cdot e^{-\mu\, t}}{n!} \cdot (1-\gamma)^n = C_0\ e^{-\lambda\, t - \gamma\, \mu\, t}\,. \tag{5-54}$$

$$\begin{aligned} Var[C(t)] &= E[C^2(t)] - E[C(t)]^2 = C_0^{\,2}\ e^{-2\lambda\, t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mu\, t)^n \cdot e^{-\mu \cdot t}}{n!} \cdot (1-\gamma)^{2\,n} - C_0^{\,2}\ e^{-2\lambda\, t - 2\,\gamma\, \mu\, t} \\ &= C_0^{\,2}\ e^{-2\lambda\, t} \cdot e^{-2\,\gamma\, \mu\, t + \gamma^2\, \mu\, t} - C_0^{\,2}\ e^{-2\lambda\, t - 2\,\gamma\, \mu\, t} = C_0^{\,2}\ e^{-2\lambda\, t - 2\,\gamma\, \mu\, t} \cdot \left(e^{\gamma^2\, \mu\, t} - 1\right) \\ &= E[C(t)]^2 \cdot \left(e^{\gamma^2\, \mu\, t} - 1\right) \end{aligned} \quad . \tag{5-55}$$

Somit entspricht das Produkt des Parameters μ des EPP mit dem Anteil γ der pro Ereignis entfernten Kontamination der üblichen Verweilkonstante λ_V des deterministischen Modells [BMU 05],

$$\lambda_V = \gamma \cdot \mu, \tag{5-56}$$

das nach Gl. (5-54) dem Erwartungswert des stochastischen Prozesses entspricht. Hierzu ist anzumerken, dass ein definierter Wert von λ_V, z. B. $\lambda_V = 0{,}05\ d^{-1}$ nach [BMU 05] (entspricht einer Halbwertszeit von 14 Tagen), durch sehr unterschiedliche Wertepaaren (γ, μ) bestimmt sein kann. Nach Gl. (5-55) wird die Varianz von C(t) nach dem stochastischen Model vom Quadrat des Erwartungswertes sowie durch einen Faktor bestimmt, in dem μ und γ in der Form $\gamma^2 \cdot \mu$ auftreten. Deshalb führen verschiedene Wertepaare der beiden Parameter (γ; μ) bei Gleichheit ihres Produkts zwar zum gleichen Erwartungswert von C(t), jedoch zu unterschiedlichen Varianzen des stochastischen Prozesses. In Abbildung 5-11 ist dies beispielhaft anhand des zeitlichen Verlaufs des Variationskoeffizienten von C(t) verdeutlicht,

$$v_{C(t)} = \frac{\sqrt{Var[C(t)]}}{E[C(t)]} = \sqrt{e^{\gamma^2\, \mu\, t} - 1}\,; \tag{5-57}$$

für einen Zeitraum von 60 Tagen mit den Wertepaare (γ; μ): (0,1; 0,5 d^{-1}), (0,25; 0,2 d^{-1}) und (0,5; 0,1 d^{-1}).

In Abbildung 5-12 sind für die beiden Fälle (γ; μ) = (0,1; 0,5 d^{-1}) und (γ; μ) = (0,25; 0,2 d^{-1}) je 5 zufällige Realisierungen n(t) des EPP sowie die damit nach Gl. (5-53) resultierenden Trajektorien von c(t) bei einer Anfangsaktivität von $C_0 = 100$ (ohne Einheit) im Betrachtungszeitraum von 60 Tagen dargestellt. Für die Zerfallskonstante wurde ein Wert von $\lambda = 0{,}005\ d^{-1}$ angesetzt, womit die Reduzierung der Kontamination durch radioaktiven Zerfall bei 10% des mittleren durch Wash-off bedingten Abbaus der Kontamination liegt. Der Vergleich der zufälligen Realisierungen n(t) und c(t) macht deutlich, wie sich die zufällige Anzahl von Ereignissen des POISSON-Prozesses und die zeitlichen Abstände ihres Eintretens im Betrachtungszeitraum auf die Reduzierung der Kontamination C(t) auswirken. Um einen Eindruck der in Abhängigkeit von der Zeit t resultierenden statistischen Verteilung der Zufallsgrößen N(t) und C(t) zu gewinnen, sind in Abbildung 5-13 je 100 zufällige Realisierungen dieser Prozesse dargestellt.

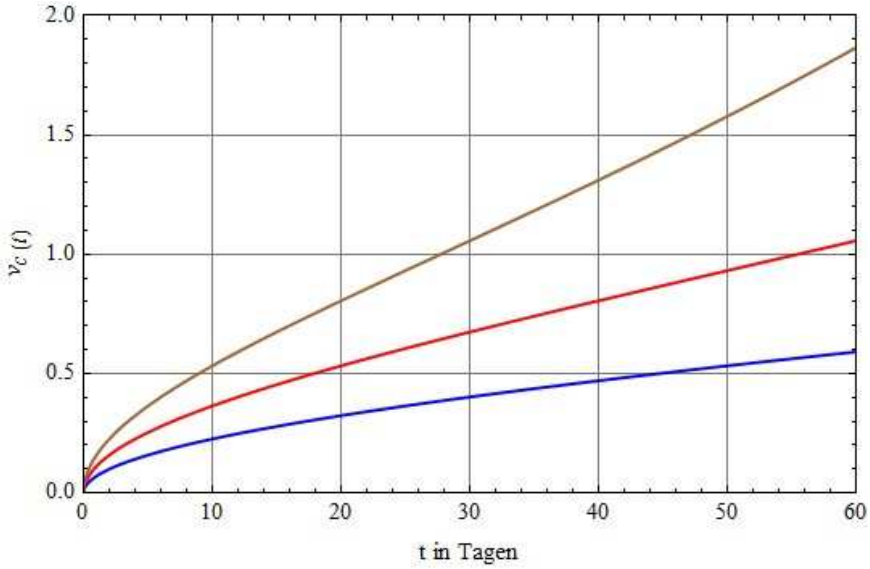


Abbildung 5-11: Zeitliche Entwicklung des Variationskoeffizienten von C(t) nach Gl. (5-57) für Wertepaare (γ; μ); blau: (0,1; 0,5 d^{-1}); rot: (0,25; 0,2 d^{-1}); braun (0,5; 0,1 d^{-1})

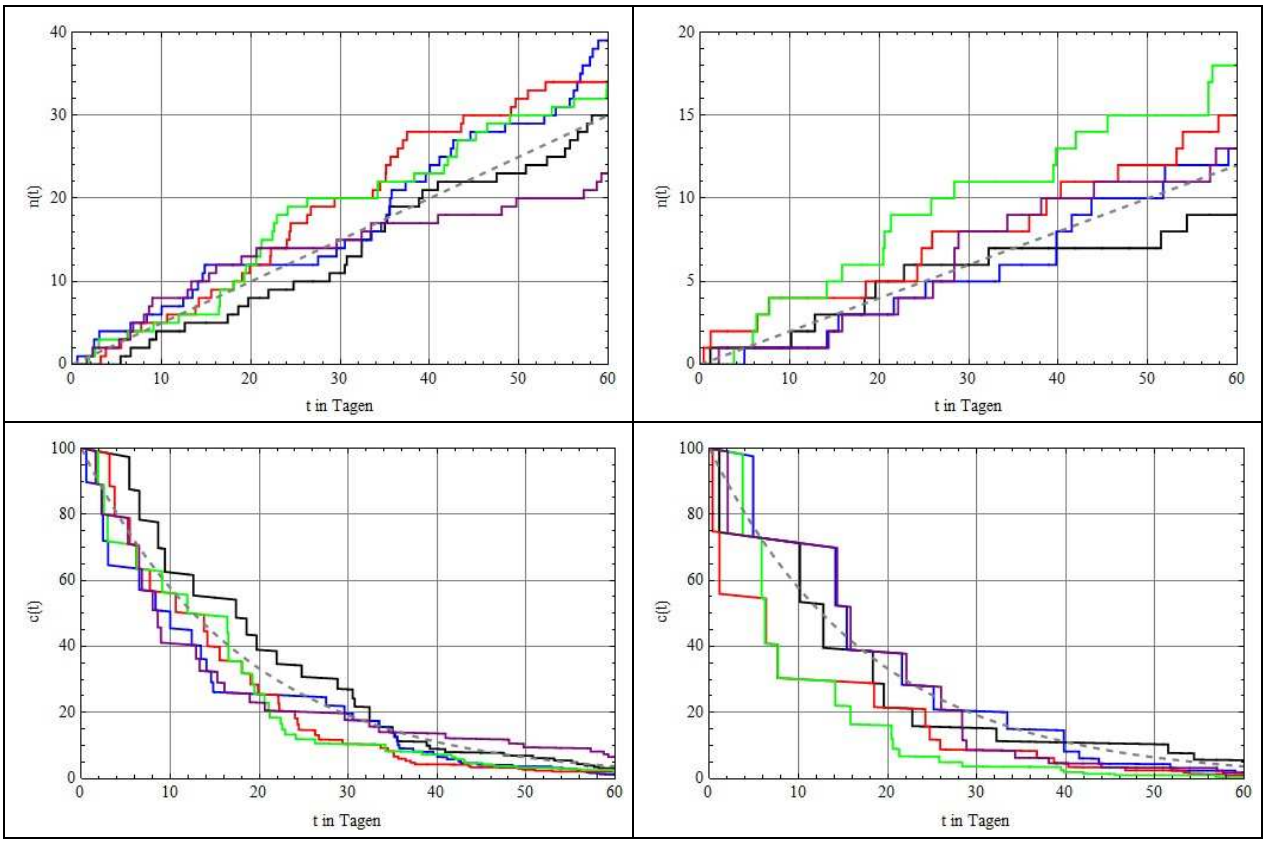


Abbildung 5-12: Je 5 Realisierungen n(t) (oben) und daraus gemäß Gl. (5-53) mit λ = 0,005 d^{-1} resultierende Trajektorien c(t) (unten); links: (γ; μ) = (0,1; 0,5 d^{-1}); rechts: (γ; μ) = (0,25; 0,2 d^{-1}); mit Erwartungswerten der stochastischen Prozesse (grau gestrichelt)

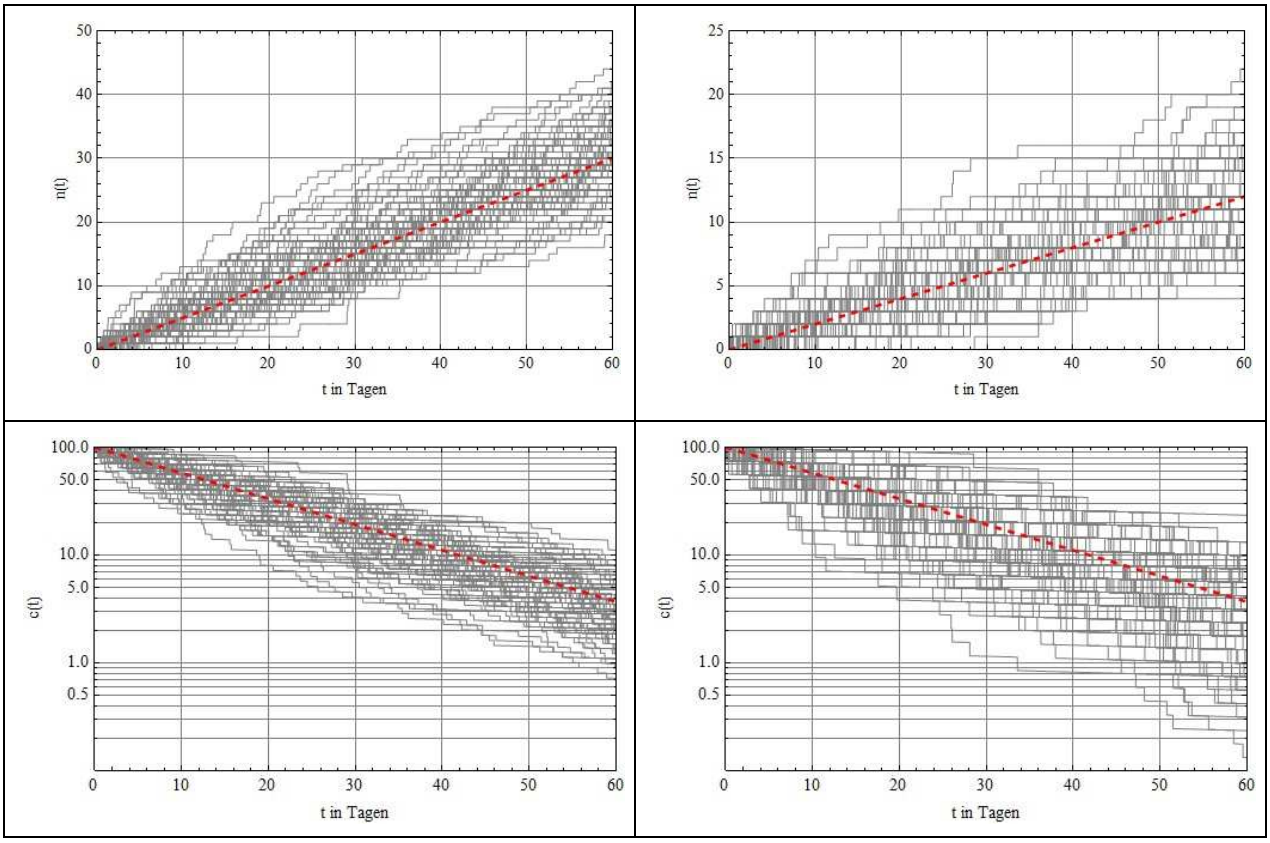


Abbildung 5-13: Je 100 Realisierungen n(t) (oben) und aus Gl. (5-53) mit λ = 0,005 d^{-1} resultierende Trajektorien c(t) (unten); links: (γ; μ) = (0,1; 0,5 d^{-1}); rechts: (γ; μ) = (0,25; 0,2 d^{-1}); mit Erwartungswerten der stochastischen Prozesse (rot gestrichelt)

Fall 2: γ ist eine Zufallsgröße

Mit dem Parameter γ wird der durch Eintreten eines POISSON-Ereignisses entfernte Anteil der zu diesem Zeitpunkt noch vorhandenen Kontamination C(t) (z.B. durch Wash-off[71]) beschrieben. Da γ nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann, sei hier für die weiteren Berechnungen angenommen, dass γ einer Betaverteilung genügt. Grundsätzlich könnte γ auch durch andere Verteilungsarten approximiert werden, z. B. durch eine KUMARASWAMY-, JOHNSON-SB- oder Log-PEARSON-3-Verteilung (siehe Abschnitte C.4 und 4.1.4.3). Der hier getroffene Ansatz einer Betaverteilung dient der Bestimmtheit des Beispiels. In diesem Fall ergibt die Integration von Gl. (5-52) die folgende Lösung:

$$Y(t) = Y(0) - \lambda\, t + \sum_{i=1}^{N(t)} \ln(1-\gamma_i), \qquad \gamma_i \sim Bt(\alpha,\beta). \tag{5-58}$$

[71] Wash-off wird hier beispielhaft für den zugrunde liegenden physikalischen Prozess betrachtet. Generell wären auch andere physikalische und/oder biologische Prozesse zu berücksichtigen, wie z. B. die Resuspension radioaktiver Partikel oder das Absterben und Abfallen einzelner kontaminierter Blätter. Die mathematische Form von Modellen, mit denen diese (ebenfalls) stochastischen Prozesse beschrieben werden können, entspricht der hier zum Wash-off betrachteten SDE-Struktur.

woraus durch Rücktransformation nach Gl (5-51) unter Beachtung der Anfangsbedingung für C(t) die folgende Lösung resultiert:

$$C(t) = C_0\ e^{-\lambda\, t + \sum_{i=1}^{N(t)} \ln(1-\gamma_i)} = C_0\ e^{-\lambda\, t} \cdot \prod_{i=1}^{N(t)} (1-\gamma_i)\,, \qquad \gamma_i \sim Bt(\alpha,\beta). \tag{5-59}$$

Gl. (5-59) besagt, dass zu jedem Ereignis (Sprung des EPP N(t)) die zu dieser Zeitpunkt noch vorhandene Kontamination um den Zufallsfaktor $(1-\gamma_i)$ reduziert wird, wobei der radioaktive Zerfall parallel dazu erfolgt. Dadurch bewirkt der ZPP auch für Realisierungen mit zufällig gleicher Anzahl N(t) zur Zeit t unterschiedliche Werte für C(t). (Anmerkung: Bei konstantem Wert von γ, wie im "Fall 1" betrachtet, stimmen dagegen die Werte von C(t) überein, sofern die Anzahl der elementaren POISSON-Ereignisse zu diesem Zeitpunkt gleich ist; siehe Gl. 5-53 und Abbildung 5-12.)

Mit $N(t) \sim Poi(\mu \cdot t)$ und $\gamma_i \sim Bt(\alpha,\beta)$ können aus Gl. (5-59) der Erwartungswert und die Varianz von C(t) unter Beachtung der in Abschnitt B.1.4 erläuterten Beziehung berechnet werden. Hierzu müssen nur der Erwartungswert und die Varianz des auf der rechten Seite von Gl. (5-59) stehenden Produkts

$$\pi(t) = \prod_{i=1}^{N(t)} (1-\gamma_i) \tag{5-60}$$

betrachtet werden, da $C_0\ e^{-\lambda\, t}$ ein deterministischer Faktor ist, der abschließend berücksichtigt wird.

$$E_\pi[\pi] = E_{Poi}[E_{\pi|N}[\pi]] = E_{Poi}[E_{Bt}[1-\gamma]^N] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\mu\, t)^n \cdot e^{-\mu\, t}}{n!} \cdot \left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^n = e^{-\mu\, t \cdot \frac{\alpha}{\alpha+\beta}};$$

$$E[C(t)] = C_0\ e^{-\lambda\, t - \gamma_e\, \mu\, t} \quad \text{mit} \quad \gamma_e = E[\gamma] = \alpha/(\alpha+\beta). \tag{5-61}$$

Der Erwartungswert nach Gl. (5-61) stimmt mit Gl (5-54) überein, wenn der zum "Fall 1" betrachtete konstante Wert γ gleich dem Erwartungswert γ_e der Verteilung $\gamma \sim Bt(\alpha,\beta)$ ist.

$$Var_\pi[\pi] = E_{Poi}[Var_{\pi|N}[\pi]] + Var_{Poi}[E_{\pi|N}[\pi]];$$

$$Var_{\pi|N}[\pi] = \left(Var_{Bt}[1-\gamma] + E_{Bt}[1-\gamma]^2\right)^N - \left(E_{Bt}[1-\gamma]\right)^{2N}$$

$$= \left(\frac{\alpha\,\beta}{(\alpha+\beta)^2 \cdot (1+\alpha+\beta)} + \frac{\beta^2}{(\alpha+\beta)^2}\right)^N - \left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^{2\,N};$$

$$Var_{Poi}[E_{\pi|N}[\pi]] = Var_{Poi}[E_{Bt}[1-\gamma]^N] = Var_{Poi}\left[\left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^N\right] = E_{Poi}\left[\left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^{2\,N}\right] - E_{Poi}\left[\left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^N\right]^2;$$

$$Var_\pi[\pi] = E_{Poi}\left[\left((1-\gamma_e)\cdot\sqrt{1+\frac{\alpha}{\beta\,(1+\alpha+\beta)}}\right)^{2\,N}\right] - E_{Poi}[(1-\gamma_e)^N]^2\,. \tag{5-62}$$

Die Ergebnisse für die beiden Erwartungswerte in Gl. (5-62) lassen sich gut zusammenfassen und führen nach Multiplikation mit $C_0^{\,2}\ e^{-2\,\lambda\, t}$ zu folgender Beziehung für die Varianz von C(t):

$$\mathrm{Var}[C(t)] = E[C(t)]^2 \cdot \left(e^{\mu\, t \left(\gamma_e{}^2 + \mathrm{Var}[\gamma]\right)} - 1 \right) \quad \text{mit} \quad \mathrm{Var}[\gamma] = \frac{\alpha\,\beta}{(\alpha+\beta)^2 \cdot (1+\alpha+\beta)} \,. \tag{5-63}$$

Ist der im "Fall 1" betrachtete konstante Wert γ gleich dem Erwartungswert γ_e der Verteilung $\gamma \sim \mathrm{Bt}(\alpha,\beta)$, so erhöht sich die Varianz des Prozesses C(t) durch die im Exponenten von Gl. (5-63) stehende Varianz Var[γ]. Hierzu sei angemerkt, dass $\gamma_e{}^2 + \mathrm{Var}[\gamma] = E[\gamma^2]$ ist, was die ähnliche Struktur von Gl. (5-63) und Gl. (5-55) unterstreicht. Für den Variationskoeffizienten ergibt sich analog zur Gl. (5-57) die Beziehung

$$v_{C(t)} = \frac{\sqrt{\mathrm{Var}[C(t)]}}{E[C(t)]} = \sqrt{e^{E[\gamma^2]\,\mu\, t} - 1} \,. \tag{5-64}$$

Zu den beiden für den "Fall 1" betrachteten Parameterkonstellationen werden nachfolgend je zwei Verteilungen für $\gamma \sim \mathrm{Bt}(\alpha,\beta)$ betrachtet, deren Erwartungswerte γ_e mit den für den "Fall 1" angesetzten konstanten Werten dieses Modellparameters übereinstimmen, deren Varianzen sich jedoch jeweils klar unterscheiden. Die Verteilungsparameter und statistischen Kennwerte dieser für die nachfolgenden MC-Simulationsrechnungen angesetzten Betaverteilungen sind in Tabelle 5-1aufgeführt. Ihre Wahrscheinlichkeitsdichten sind in Abbildung 5-14 dargestellt. Die Abbildung 5-15 zeigt die zugehörigen Verläufe des Variationskoeffizienten nach Gl. (5-64) im Vergleich mit den entsprechenden Verläufen aus dem "Fall 1".

Tabelle 5-1: Verteilungsparameter des EPP N(t) ~ Poi(μ·t) sowie des Wash-off-Anteils $\gamma \sim \mathrm{Bt}(\alpha,\beta)$ bei Eintreten eines POISSON-Ereignisses sowie statistische Kennwerte für die Zufallsgröße γ für MC-Simulationsrechnungen zum "Fall 2"

μ = 0,5 d^{-1}		**γ_e = E[γ] = 0,1**		**$\gamma_e{}^2$ = 0,01**	**μ = 0,2 d^{-1}**		**γ_e = E[γ] = 0,25**		**$\gamma_e{}^2$ = 0,0625**
α	**β**	**Var[γ]$^{1/2}$**	**Var[γ]**	**E[γ^2]**	**α**	**β**	**Var[γ]$^{1/2}$**	**Var[γ]**	**E[γ^2]**
4	36	0,0469	0,0022	0,0122	4	12	0,105	0,0110	0,0735
1	9	0,094	0,0082	0,0182	1	3	0,194	0,0375	0,1

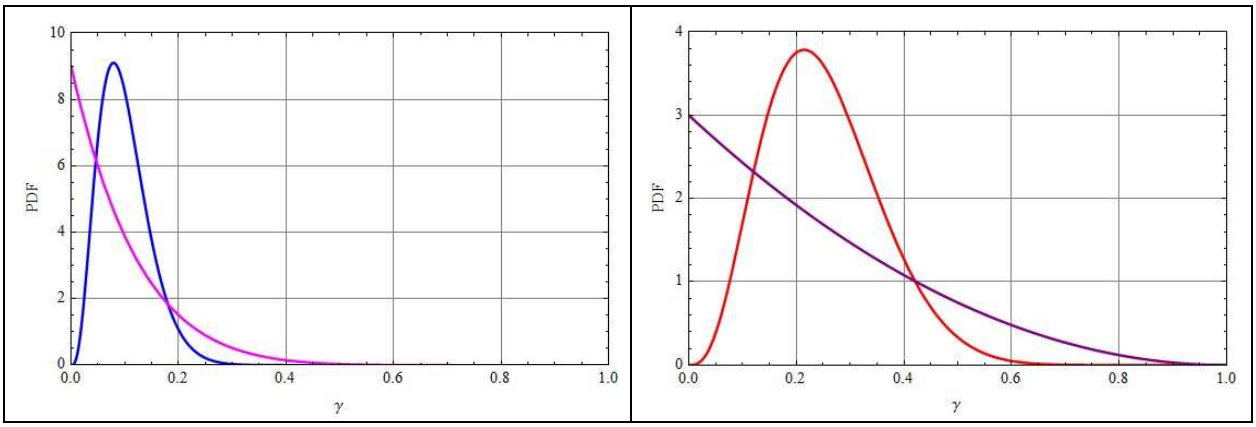


Abbildung 5-14: Wahrscheinlichkeitsdichten $f_{Bt}(\gamma|\alpha,\beta)$ für die in Tabelle 5-1 spezifizierten Werte der Verteilungsparameter; linkes Bild: γ_e = 0,1 mit (α, β) = (4, 36) (blau) bzw. (1, 9) (magenta); rechtes Bild: γ_e = 0,25 mit (α, β) = (4, 12) (rot) bzw. (1, 3) (violett);

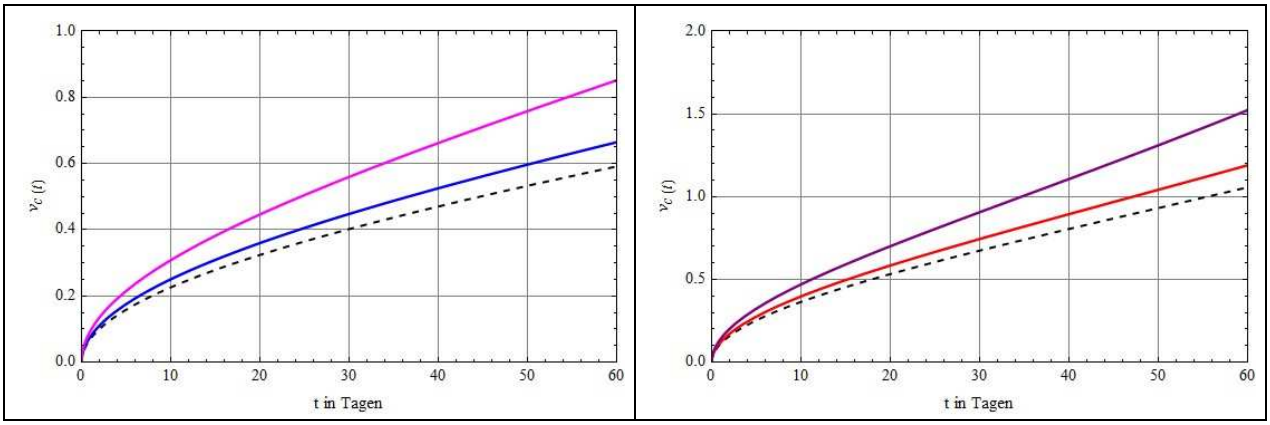


Abbildung 5-15: Zeitliche Entwicklung des Variationskoeffizienten von C(t) nach Gl. (5-64) für die in Tabelle 5-1 spezifizierten Werte der Verteilungsparameter; linkes Bild: $\mu = 0{,}5\ d^{-1}$ und $\gamma_e = 0{,}1$ mit $(\alpha, \beta) = (4, 36)$ (blau) bzw. (1, 9) (magenta) im Vergleich zu $v_C(t)$ nach Gl. (5-57) zum "Fall 1" mit konstantem Werte von $\gamma = 0{,}1$ (schwarz gestrichelt); rechtes Bild: $\mu = 0{,}2\ d^{-1}$ sowie $\gamma_e = 0{,}25$ mit $(\alpha, \beta) = (4, 12)$ (rot) bzw. (1, 3) (violett) im Vergleich zu $v_C(t)$ nach Gl. (5-57) zum "Fall 1" mit konstantem Werte von $\gamma = 0{,}25$ (schwarz gestrichelt)

In Abbildung 5-15 ist die unterschiedliche Skalierung der vertikalen Achse zu beachten. Danach ist festzustellen, dass der Variationskoeffizient v_C nicht nur bei gleichem Wert des Produkts $\lambda_V = \gamma_e \cdot \mu$ umso größer ist, je höher der Beitrag von γ_e zu diesem Produkt ist, sondern dass er auch bei gleichen Werten von γ_e umso größer ist, je breiter die zugrunde Verteilungen des Parameters $\gamma \sim Bt(\alpha,\beta)$ ist.

Abbildung 5-16 zeigt analog zur Abbildung 5-12 (aus "Fall 1") für die beiden Fälle $(\gamma_e; \mu) = (0{,}1; 0{,}5\ d^{-1})$ bzw. $(\gamma_e; \mu) = (0{,}25; 0{,}2\ d^{-1})$ je 5 zufällige Realisierungen n(t) des EPP sowie die damit nach Gl. (5-59) mit den jeweils 2 verschiedenen Ansätze für die Zufallsgröße $\gamma \sim Bt(\alpha, \beta)$ resultierenden Verläufe c(t) bei einer Anfangsaktivität von $C_0 = 100$ (ohne Einheit) im Betrachtungszeitraum von 60 Tagen. Für die Zerfallskonstante wurde wieder ein Wert von $\lambda = 0{,}005\ d^{-1}$ angesetzt. Für die Vergleichbarkeit mit den in Abbildung 5-12 zu "Fall 1" dargestellten Simulationsergebnissen wurden für die Rechnungen zu "Fall 2" jeweils die gleichen (zufälligen) fünf Realisierungen n(t) des EPP zugrunde gelegt. Sie sind in den beiden oberen Bildern von Abbildung 5-16 noch einmal dargestellt, um den Vergleich mit den resultierenden Trajektorien c(t) zu erleichtern.

Der Vergleich der einzelnen Realisierungen n(t) mit c(t) sowie der c(t)-Trajektorien für relativ schmale bzw. breite Verteilungen von γ (mittlere bzw. untere Bilder), wodurch die Verläufe der Realisierungen der ZPP maßgeblich mitbestimmt werden, verdeutlicht die wesentlichen Unterschiede zur SDE mit EPP aus dem "Fall 1".

Zur Illustration der in Abbildung 5-15 gezeigten Abhängigkeit der Streubereite des Prozesses C(t) von den Verteilungsparametern der stochastischen Störung zeigt Abbildung 5-17 analog zur Abbildung 5-13 (aus "Fall 1") je 100 zufällige Realisierungen der Prozesse für alle vier Rechenfälle. Für die Rechnungen zu "Fall 2" wurden wieder jeweils die gleichen (zufälligen) 100 Verläufe n(t) des EPP zugrunde gelegt, die in den beiden oberen Bildern von Abbildung 5-17 noch einmal gezeigt sind.

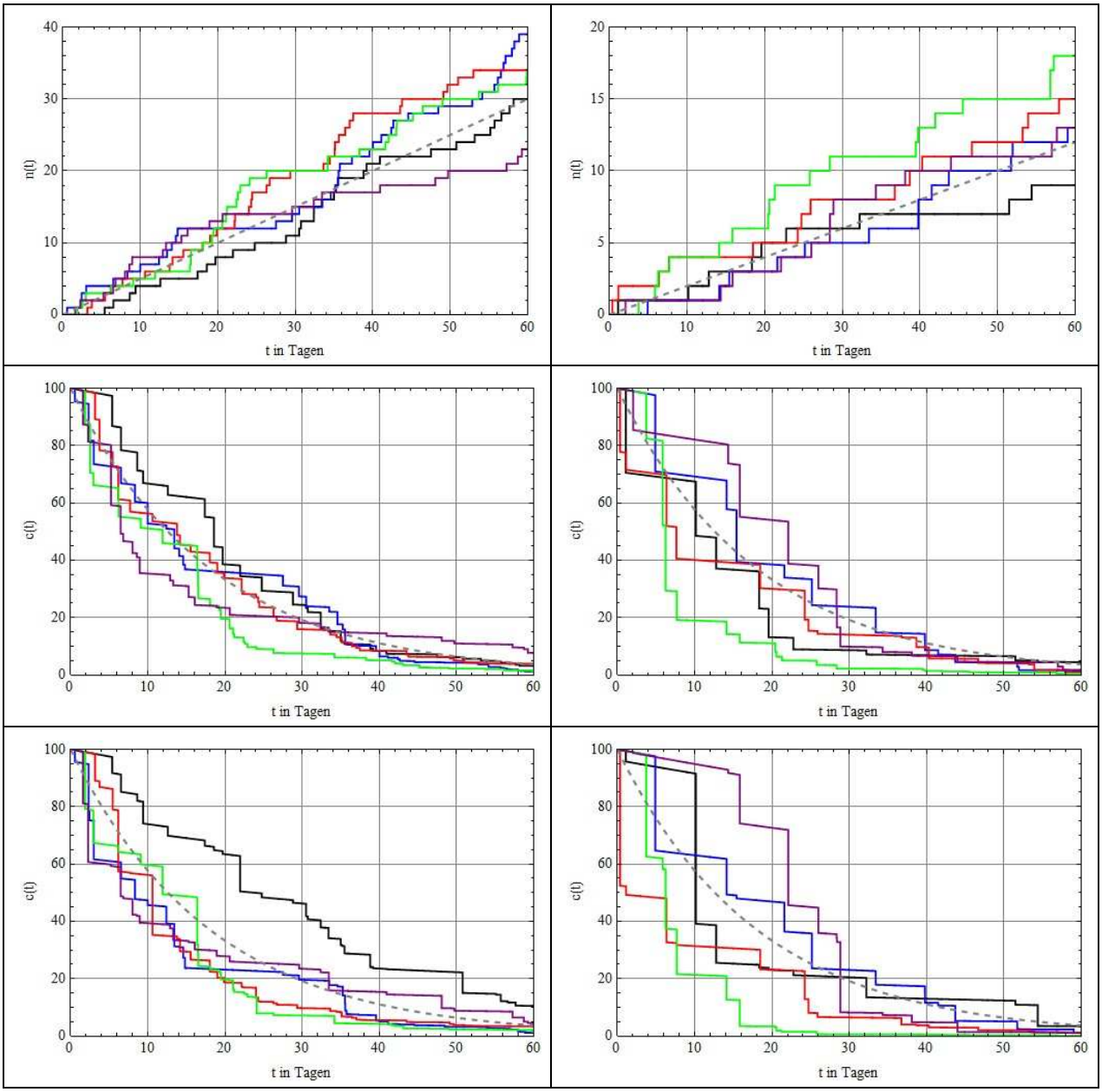


Abbildung 5-16: Je 5 Realisierungen n(t) (oben, wie in Abbildung 5-12) und nach Gl. (5-59) für den ZPP mit N(t) ~ Poi(μ·t) und γ ~Bt(α,β) resultierende Trajektorien c(t); $\lambda = 0{,}005\ d^{-1}$; links: (E[γ]; μ) = (0,1; 0,5 d^{-1}); (α, β) = (4, 36) (Mitte) bzw. (α, β) = (1, 9) (unten); rechts: (E[γ]; μ) = (0,25; 0,2 d^{-1}); (α, β) = (4, 12) (Mitte) bzw. (α, β) = (1, 3) (unten); mit Erwartungswerten (grau gestrichelt)

Wie aus Abbildung 5-16 ersichtlich, stimmen zwar die Zeitpunkte der Ereignisse, an denen c(t) sprungartig reduziert wird, mit den Sprüngen von n(t) des jeweiligen EPP überein, deren Auswirkungen werden aber von der Zufallsgröße γ bestimmt, die in den Fällen mit α = 1 (untere Bilder) eine größere Bandbreite aufweisen als für die Betaverteilungen mit α = 4 (mittlere Bilder); wobei die gleichen Erwartungswerte γ_e = E[γ] durch die entsprechende Spezifizierung des zweiten Verteilungsparameters β vorliegen.

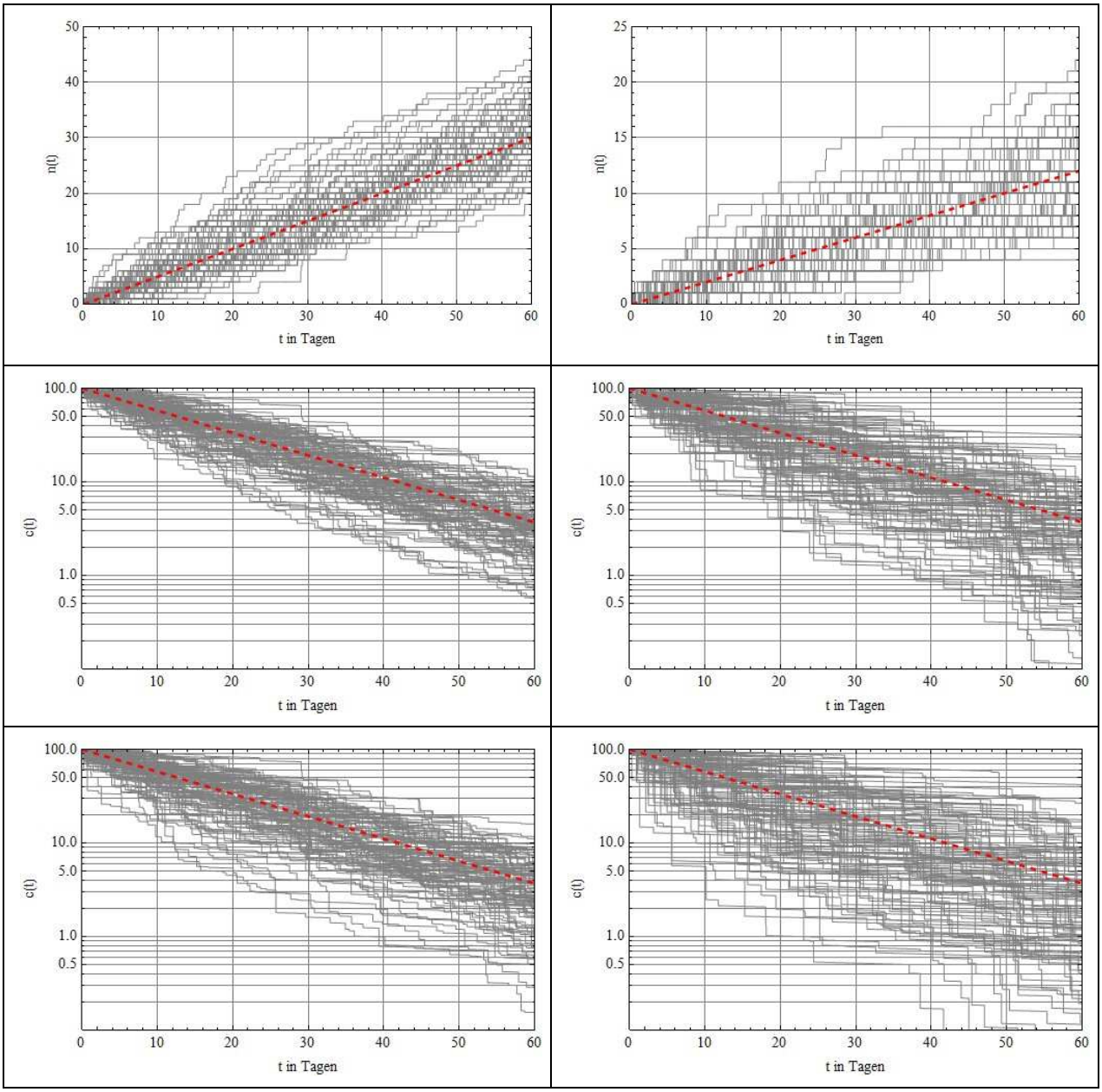


Abbildung 5-17: Je 100 Realisierungen n(t) (oben, wie in Abbildung 5-13) und nach Gl. (5-59) für den ZPP mit $N(t) \sim Poi(\mu \cdot t)$ und $\gamma \sim Bt(\alpha,\beta)$ resultierende Verläufe c(t); $\lambda = 0{,}005\ d^{-1}$; links: $(E[\gamma];\ \mu) = (0{,}1;\ 0{,}5\ d^{-1})$; $(\alpha,\ \beta) = (4,\ 36)$ (Mitte) bzw. $(\alpha,\ \beta) = (1,\ 9)$ (unten); rechts: $(E[\gamma];\ \mu) = (0{,}25;\ 0{,}2\ d^{-1})$; $(\alpha,\ \beta) = (4,\ 12)$ (Mitte) bzw. $(\alpha,\ \beta) = (1,\ 3)$ (unten); mit Erwartungswerten (rot gestrichelt)

Aus Abbildung 5-17 ist die stärkere Streuung der Prozessrealisierungen bei größerem Erwartungswert von γ (rechte Bilder; bei gleichem Wert des für den Erwartungswert E[C(t)] relevanten Produkts $\mu \cdot E[\gamma]$) sowie bei größerer Bandbreite der Zufallsgröße γ (untere Bilder) gut erkennbar.

Zur Bewertung der im Beispiel 5.5-1 für die sehr einfache SDE Gl. (5-50) mit Parametererregung durch einen EPP ("Fall 1", mit konstantem Wert des Parameters γ) bzw. durch einen ZPP ("Fall 2", mit probabilistischer Verteilung $\gamma \sim Bt(\alpha,\beta)$) ist zunächst anzumerken, dass der "Fall 2" im Hinblick auf einen Wash-off-Prozess von Oberflächenkontaminationen sicherlich ein realitätsnäheres Modell ist, da die Wirkung von Niederschlagsereignissen auf den Abtrag der Kontamination von diversen Faktoren abhängt, z. B. von der Regenstärke, der Oberflächenbeschaffenheit und der Bindungsart der Kontamination auf der Oberfläche. Dies bewirkt eine größere Streuung des ZPP im Vergleich zum EPP und des resultierenden Prozesses C(t). Diese ist in Kauf zu nehmen, sofern nicht nur der mittlere zeitliche Verlauf des Prozesses (Erwartungswert E[C(t)]) von Interesse ist, sondern auch Unsicherheiten auf dem SDE-Modell basierender Prognosen zu beurteilen sind. Verfeinerungen des in Beispiel 5.5-1 betrachteten Modells wären für realistischere Berechnungen möglich/nötig:

- Der Ansatz eines bestimmten Wertes zur Intensität μ des EPP $N(t) \sim Poi(\mu \cdot t)$ ist eine sehr starke Vereinfachung. Die Berechnungen für zwei unterschiedliche Kombinationen der Parameter μ und γ_e (unter Beibehaltung des gleichen Wertes von $\lambda_V = \mu \cdot \gamma_e = 0{,}05\ d^{-1}$) haben gezeigt, dass die Streuung des stochastischen Prozesses C(t) bzgl. dieser Annahme sensitiv ist. Da der Wert von μ im Beispiel 5.5-1 die Statistik der Niederschlagsereignisse repräsentiert, wären für eine realistischere Modellierung regionale sowie saisonale und langzeitliche Schwankungen dieses Parameters zu berücksichtigen. Für vereinfachte generische Betrachtungen wäre dann z. B. eine Modifikation des POISSON-Prozesses durch eine statistische Verteilung für dessen Parameter μ denkbar, wie z. B. in Abschnitt C.5.5 zur Genesis der Negativen Binomialverteilung gezeigt. Der Prozess N(t) könnte aber auch in ein übergeordnetes SDE-Modell eingeordnet werden.
- Mit dem Parameter γ, der die Wirksamkeit einzelner POISSON-Ereignisse quantifiziert, wären diverse Einflussfaktoren statistisch zu erfassen, wie die Statistik der Niederschlagsintensität, die Art der Kontamination und ihrer physikalisch-chemischen Bindung an Oberflächen oder auch unterschiedliche geometrische Strukturen von Pflanzenblättern. Es ist kaum vorstellbar, dass die Vielfalt relevanter Einflussfaktoren durch die zwei Parameter α und β der Betaverteilung erfasst werden kann. Die Berechnungen in Beispiel 5.5-1 für je zwei unterschiedliche Kombinationen der Parameter α und β (unter Beibehaltung des Erwartungswertes $\gamma_e = \alpha/(\alpha+\beta)$) haben gezeigt, dass die Form der Verteilung von γ für die Streuung des stochastischen Prozesses C(t) sensitiv ist. Deshalb könnte es erforderlich sein, die Parameter α und β selbst als Zufallsgrößen zu betrachten, um unterschiedliche Einflussfaktoren statistisch zu erfassen. Die Unsicherheit von Modellprognosen würde aber durch ein derartiges hierarchisches Modell weiter zunehmen.
- Im Beispiel 5.5-1 wurde angenommen, dass die Zufallswerte γ_i in Gl. (5-59) iid sind und auch nicht vom POISSON-Prozess N(t) abhängen. Dies entspricht zwar dem üblichen Ansatz für ZPP, ist jedoch bzgl. der Anwendung dieses Modells für reale Prozesse durchaus fragwürdig. Die Annahme, dass aufeinander folgende Werte von γ_i die gleiche statistische Verteilung aufweisen und voneinander unabhängig sind, kann z. B. unrealistisch sein, wenn bei den ersten Ereignissen (Regentagen) schwach gebundene Komponenten der Kontamination abgespült werden, danach aber noch Kontamination mit stärkerer Oberflächenbindung vorliegt, deren weiter Reduzierung nur noch bei Starkregen erfolgt. Bei Vorliegen unterschiedlich stark gebundener Komponenten der Kontamination wäre auch die Unabhängigkeit des Parameters γ vom POISSON-Prozess N(t) nicht mehr plausibel.

Zusammenfassend sei zum Beispiel 5.5-1 vermerkt, dass anhand dieser einfachen SDE zwar einige generelle Aspekte der Modellierung von stochastischen Prozessen und Eigenschaften der Lösung von SDE verdeutlicht wurden, wobei insbesondere gezeigt wurde, dass der Erwartungswert E[C(t)] dem deterministischen Ansatz zur Verweilkonstante λ_V nach Gl. (5-56) (bzw. $\lambda_V = \gamma_e \cdot \mu$ für den "Fall 2" des ZPP) entspricht und in welcher Größenordnung deterministische Berechnungen von der "stochastischen Realität" entfernt sein könnten, dass damit aber nicht der Eindruck erweckt werden sollte, bereits mit diesem Ansatz die realen Prozesse ausreichend genau modellieren zu können.

Im Abschnitt 5.1.1 wurde darauf hingewiesen, dass die Lösungen von Differentialgleichungen mit stochastischen Parametern i. A. nicht mit probabilistischen Modellen übereinstimmen, die auf analogen deterministischen Gleichungen basieren, deren Parameter (nachträglich) als Zufallsgrößen behandelt werden (siehe dbzgl. Beispiele 5.1-1 und 5.1-2 sowie 5.2-1 und 5.2-2). Für die SDE des Beispiels 5.5-1 wurde gezeigt, dass der Erwartungswert E[C(t)] dem deterministischen Modells einer linearen ODE 1. Ordnung mit effektiver Zerfallskonstante $\lambda + \lambda v$ mit $\lambda_V = \gamma_e \cdot \mu$ entspricht. Das folgende Beispiel 5.5-2 soll verdeutlicht, dass ein probabilistischer Ansatz zum Parameter λ_V des deterministischen Modells einer völlig anderen Fragestellung entspricht als das SDE-Modell. Das Beispiel 5.5-2 basiert nicht auf einer SDE; es ist an dieser Stelle jedoch für den Vergleich mit den Ergebnissen des Beispiels 5.5.-1 aufschlussreich.

Beispiel 5.5-2

Das deterministische Modell des Abbaus einer zum Zeitpunkt t = 0 vorliegenden Oberflächenkontamination C_0 durch Umweltprozesse (z. B. Regen) ist die folgende lineare ODE 1. Ordnung,

$$\frac{dC(t)}{dt} = -(\lambda + \lambda_V) \cdot C(t) \quad \text{mit der Anfangsbedingung } C(0) = C_0; \tag{5-65}$$

λ ist die physikalische Zerfallskonstante, λ_V die durch Umweltprozesse bestimmte Verweilkonstante. Die Lösung von Gl. (5-65) ist:

$$C(t) = C_0 \cdot e^{-(\lambda + \lambda_V)\,t}. \tag{5-66}$$

Zur Bestimmung von λ_V wird gemäß Gl. (5-61) von der Beziehung

$$\lambda_V = \mu \cdot \gamma_e \tag{5-67}$$

ausgegangen, die deterministisch als Produkt der Anzahl kontaminationsreduzierender Umwelteinflüsse pro Zeiteinheit (μ) mit einem Wirkungsfaktor γ_e der Umwelteinflüsse ($0 \le \gamma_e \le 1$) zu verstehen ist. Mit $\gamma_e = \alpha/(\alpha+\beta)$ entspricht Gl. (5-66) mit Gl. (5-67) dem Erwartungswert des stochastischen Modells mit ZPP (Beispiel 5.5-1; "Fall 2"; siehe Gl. (5-61)).

Für ein probabilistisches Modell kann man den Parameter γ_e als Zufallsgröße definieren. Dies entspräche der Fragestellung, wie sich unterschiedliche Beschaffenheiten der Oberflächenstruktur einer Population bestimmter Objekte (z. B. Dachtypen, Pflanzenarten) auf die <u>mittleren</u> Verläufe C(t) der Abnahme einer Anfangskontamination C_0 auswirken, wozu die für eine konkrete Population ermittelte γ_e-Statistik durch eine geeignete Verteilung anzupassen wäre.

Da mit $\gamma_e = \alpha/(\alpha+\beta)$ für jedes Individuum $0 < \gamma_e < 1$ gilt, könnte die Verteilung der Zufallsgröße γ_e wieder durch eine Betaverteilung approximiert werden, $\gamma_e \sim Bt(\alpha_e,\beta_e)$, wobei der Index e der Parameter α_e und β_e kenntlich macht, dass mit diesen Werten die statistische Verteilung der Zufallsgröße γ_e für die betrachtete

Population spezifiziert wird (im Gegensatz zu der für einzelne Individuen in Beispiel 5.5-1 betrachteten Verteilung $\gamma \sim Bt(\alpha,\beta)$ mit Erwartungswert $\gamma_e = \alpha/(\alpha+\beta)$, wobei die Parameter α und β z. B. das Zusammenwirken von Oberflächeneigenschaften mit der Statistik der Niederschlagsintensität bzgl. des Wash-offs statistisch erfassen). Der Erwartungswert von γ_e für die Population sei mit γ_m bezeichnet,

$$\gamma_m = E[\gamma_e] = \alpha_e/(\alpha_e+\beta_e). \tag{5-68}$$

Da die Zufallsgröße γ_e nichtlinear in die Funktion C(t) nach Gl. (5-66)/(5-67) eingeht, die den mittleren Verlauf der Abnahme der Anfangskontamination C_0 für einzelne Individuen der Population beschreibt, weist der Erwartungswert der Population E[C(t)] eine andere Form als Gl. (5-66) auf. Ein vereinfachter (deterministischer) Ansatz auf Basis der mittleren Verweilkonstante $\lambda_{V;m} = \mu\cdot\gamma_m$ wäre deshalb im Sinne eines Erwartungswertes inadäquat. Der Erwartungswert E[C(t)] kann analytisch berechnet werden;

$$E[C(t)] = C_0\ e^{-\lambda t} \cdot \int_0^1 e^{-\mu \gamma_e t} \cdot f_{Bt}(\gamma_e \mid \alpha_e, \beta_e)\, d\gamma_e = C_0\ e^{-\lambda t} \cdot {}_1F_1(\alpha_e, \alpha_e + \beta_e; -\mu t), \tag{5-69}$$

wobei $f_{Bt}(\gamma_e|\alpha_e,\beta_e)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Betaverteilung von γ_e ist und ${}_1F_1(a,b;z)$ die so genannte konfluente hypergeometrische Funktion (KUMMER-Funktion) bezeichnet:

$${}_1F_1(a,b;z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)\,\Gamma(b)}{\Gamma(a)\,\Gamma(b+k)} \cdot \frac{z^k}{k!}\,. \tag{5-70}$$

Die Berechnung der Varianz $Var[C(t)] = E[C^2(t)] - E[C(t)]^2$ erfolgt analog;

$$Var[C(t)] = C_0^{\ 2}\ e^{-2\lambda t} \cdot \left({}_1F_1(\alpha_e, \alpha_e + \beta_e; -2\mu t) - ({}_1F_1(\alpha_e, \alpha_e + \beta_e; -\mu t)^2\right), \tag{5-71}$$

womit für den Variationskoeffizienten $v_{C(t)}$ die folgende Beziehung resultiert:

$$v_{C(t)} = \frac{\sqrt{Var[C(t)]}}{E[C(t)]} = \sqrt{\frac{{}_1F_1(\alpha_e, \alpha_e + \beta_e; -2\mu t)}{{}_1F_1(\alpha_e, \alpha_e + \beta_e; -\mu t)} - 1}\,. \tag{5-72}$$

Zur Illustration dieser Beziehungen sind in Abbildung 5-18 die Verteilungsfunktion von γ_e mit $\alpha_e = 2$ und $\beta_e = 6$ (ergibt $\gamma_m = 0{,}25$) sowie der Verlauf des Variationskoeffizienten Gl. (5-72) unter Annahme von $\mu = 0{,}2\ d^{-1}$ (ergibt $\lambda_{V,m} = \mu\cdot\gamma_m = 0{,}05\ d^{-1}$) dargestellt.

Abbildung 5-19 zeigt den Verlauf des Erwartungswertes E[C(t)] nach Gl. (5-69) im Vergleich zu dem (im Sinne eines Erwartungswertes inadäquaten) Ansatz auf Basis der mittleren Verweilkonstante $\lambda_{V,m}$,

$$C_m(t) = C_0 \cdot e^{-(\lambda + \lambda_{V,m})\, t}, \tag{5-73}$$

sowie Quantilfunktionen

$$C_p(t) = C_0 \cdot e^{-(\lambda + \mu\, \gamma_{(1-p)})\, t}, \quad \text{mit } \gamma_p \text{ gemäß } F_{Bt}(\gamma_p|\alpha_e,\beta_e) = p \tag{5-74}$$

für die 19 Quantile mit p = 0,05(0,05)0,95. Für die physikalische Zerfallskonstante λ und für C_0 wurden wie in Beispiel 5.5-1 die Werte $\lambda = 0{,}005\ d^{-1}$ und $C_0 = 100$ (beliebige Einheit) angesetzt.

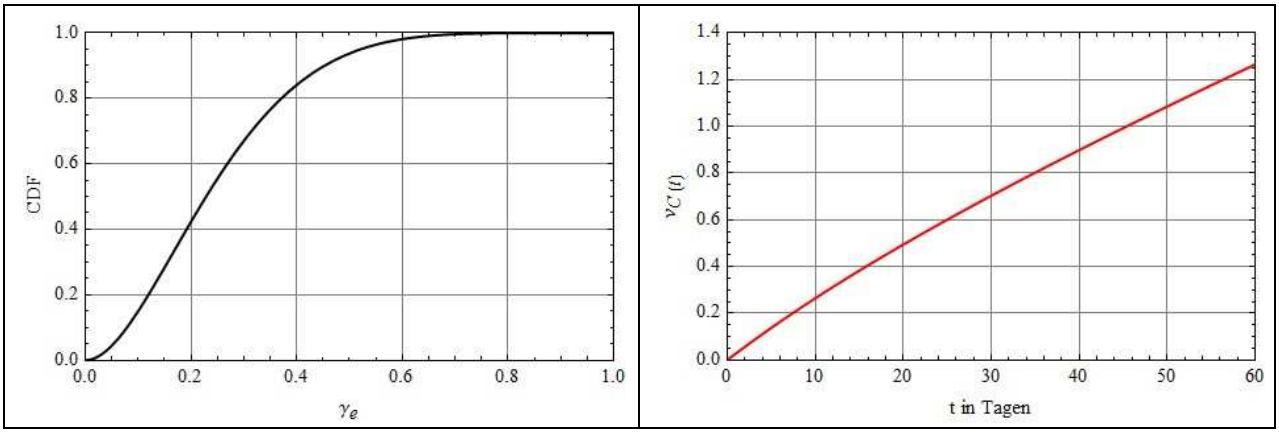


Abbildung 5-18: Verteilungsfunktion $F_{Bt}(\gamma_e|\alpha_e,\beta_e)$ (links) und Variationskoeffizient $v_{C(t)}$ (rechts)

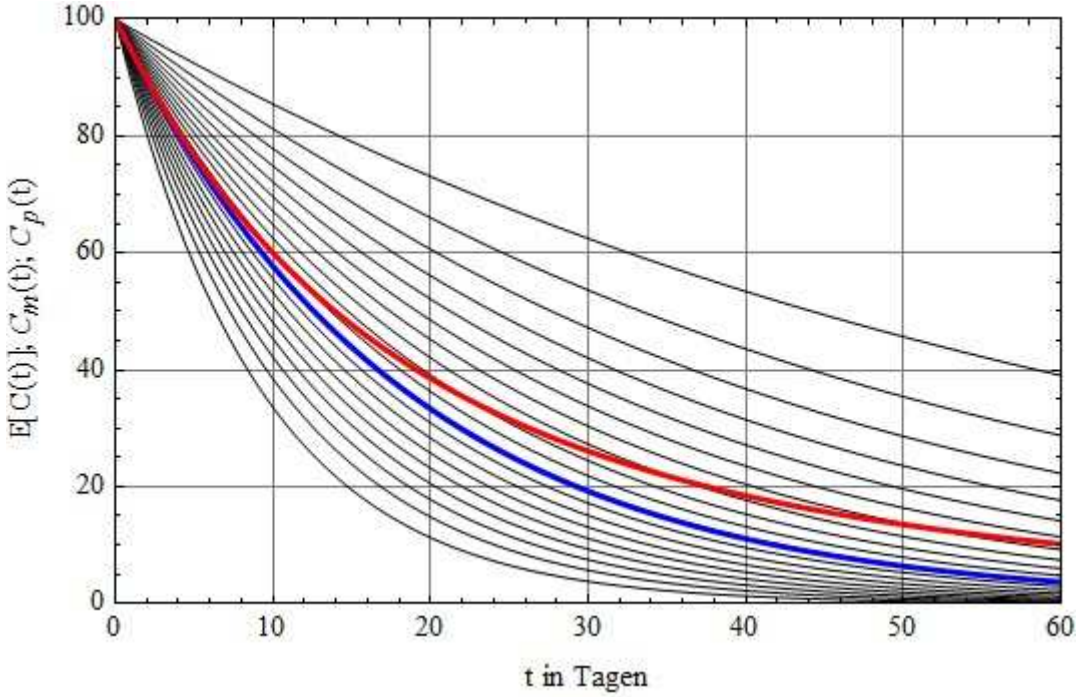


Abbildung 5-19: Erwartungswert E[C(t)] gemäß Gl. (5-69) (rot), $C_m(t)$ mit mittlerer Verweilkonstante gemäß Gl. (5-73) (blau) und Quantilfunktionen $C_p(t)$ gemäß Gl. (5-74) für Quantile von p = 0,05 bis 0,95 in Schritten von 0,05 (schwarz); Anmerkung: $C_m(t) = C_{p=0,445}(t)$

Die Verteilung von γ_e deckt auch die in Beispiel 5.5-1 betrachteten "individuellen" Prozesse (mit γ_e 0,1 bzw. 0,25; siehe Tabelle 5-1) mit ab, beschreibt aber eine Bandbreite dieses Parameters für die Population mit einem 95%-Konfidenzbereich von ca. 0,04 bis 0,58.

Der Variationskoeffizient $v_{C(t)}$ wächst annähernd linear mit der Zeit und liegt in der Größenordnung des Variationskoeffizienten $v_{C(t)}$ des stochastischen Prozesses C(t) für ein "typisches" Individuum, das den in Beispiel 5.5-1 mit γ_e = 0,25 betrachteten zwei Fällen entspricht. Die funktionale Form des zeitlichen

Anstiegs des Variationskoeffizienten der stochastischen Prozesse unterscheidet sich jedoch deutlich vom Verlauf des Variationskoeffizienten der Population des probabilistischen Modells (vgl. rechte Bilder der Abbildungen 5-15 und 5-18).

Aus Abbildung 5-19 ist ersichtlich, dass der Erwartungswert E[C(t)] anders verläuft als die mit Gl. (5-73) auf Basis der mittleren Verweilkonstante der Population, $\lambda_{V,m}$, berechnete Funktion $C_m(t)$. Letztere entspricht einer bestimmten Quantilfunktion (für die Werte der Verteilungsparameter $\alpha_e = 2$ und $\beta_e = 6$ gemäß $F_{Bt}(\alpha_e/(\alpha_e + \beta_e)|\alpha_e,\beta_e) = 0{,}555$ der Quantilfunktion $C_p(t)$ mit $p = 0{,}445$). Der Erwartungswert E[C(t)] fällt deutlich langsamer als $C_m(t)$ und entspricht mit zunehmender Zeit einem immer größeren Quantil der Populationsverteilung von C(t). Dies geht auch aus Gl. (5-74) hervor. Da $C_p(t)$ mit $p > p'$ (dies entspricht $\gamma_{(1-p)} < \gamma_{(1-p')}$) exponentiell langsamer fällt als $C_{p'}(t)$, dominieren die höheren Perzentile von C(t) den Erwartungswert zunehmend. Diese Eigenschaft der Lösung linearer ODE 1. Ordnung, die nur einen probabilistischen Parameter enthalten, ist u. a. bei der Festlegung von konservativen Ansätzen für deterministische Modelle zu beachten, stellt in diesem Fall jedoch durch Auswahl einer der jeweiligen Problemstellung angemessenen Quantilfunktion jedoch kein wirkliches Problem dar.

Anhand der in den Beispielen 5.5-1 bzw. 5.5-2 betrachteten stochastischen bzw. probabilistischen Modelle zur Reduzierung einer Oberflächenkontamination durch Umwelteinflüsse (z. B. Wash-off durch Niederschläge) wurden wesentliche Unterschiede dieser beiden Ansätze sowie ihr Bezug zum entsprechenden deterministischen Modell der üblichen Zerfallsgleichung, in der die physikalische Zerfallskonstante λ durch eine Verweilkonstante λ_V ergänzt wird, deutlich.

Hervorzuheben ist, dass der Erwartungswert des stochastischen Modells mit dem deterministischen Ansatz übereinstimmt, wenn dieser auf dem Erwartungswert des stochastischen Modellparameters basiert. Die für das stochastische Modell analysierte Variabilität zufälliger Realisierungen machte zugleich deutlich, dass die (ggf. expositionsrelevante) Zielgröße mit dem deterministischen Modell in erheblichem Maße unter- bzw. überschätzt werden kann.

Der auf dem deterministischen Modell basierende probabilistische Ansatz, mit dem der Modellparameter λ_V als Zufallsgröße betrachtet wird, entspricht einer anderen Fragestellung, nämlich der Bewertung der Unsicherheit deterministischer Berechnungen für eine Population ähnlicher Prozesse mit statistisch unsicherem Modellparameter. Da die Zielgröße C(t) nicht-linear vom Modellparameter abhängt, weicht der Erwartungswert des probabilistischen Modells auch in seiner Form vom deterministischen Modell ab. Ein weiterer Aspekt betrifft die probabilistische Analyse/Simulation von stochastischen Modellen, worauf nachfolgend in Abschnitt 5.1.3 eingegangen wird.

Anhand dieses Beispiels sei zusammenfassend vermerkt, dass die drei strukturell unterschiedlichen Modellansätze (stochastisch, deterministisch bzw. probabilistisch) in Abhängigkeit von jeweiligen Zielstellungen ihre spezielle Berechtigung haben können. Dabei ist es jedoch wichtig, die den drei Modellen zugrunde liegenden Annahmen und deren Relevanz für die Beurteilung einer konkreten Fragestellung sachgerecht zu beurteilen. Eine generelle Vereinfachung dieser Problematik durch ausschließlich probabilistische Behandlung aleatorischer und/oder epistemischer Unsicherheiten zu Parametern von (Teil-)Modellen, die durch Differentialgleichungen formuliert werden, würde dem offenbar nicht gerecht werden. Neben der Beurteilung von stochastischen Unsicherheiten mit Hilfe von SDE (im Vergleich zum Erwartungswert eines stochastischen Modells, der einem deterministischen Modell entspricht) dient die Entwicklung stochastischer Modelle nicht zuletzt dem Verständnis der realen Prozesse und damit auch der Begründung vereinfachter deterministischer Ansätze.

5.1.3. Probabilistische Unsicherheiten stochastischer Modelle

Die Messung eines stochastischen Prozesses X(t) erfolgt i. A. für äquidistante Zeitintervalle Δt über einen bestimmten Zeitraum T, wobei zu unterscheiden ist, ob die Messwerte X_i (i von 1 bis $T/\Delta t$) für den typischen Frequenzbereich des untersuchten Prozesses als Momentan- oder Mittelwerte zu interpretieren sind. Im zweiten Fall müssen die den Messwerten zugrunde liegenden Messzeiten bei der Schätzung von Verteilungsparametern des Prozesses X(t) durch entsprechende Korrekturen berücksichtigt werden (siehe dbzgl. Anmerkungen in Abschnitt 5.1.1). Hier sei angenommen, dass die Messwerte X_i mit hinreichender Genauigkeit als Momentanwerte des stochastischen Prozesses X(t) betrachtet werden können, d. h.

$$X_i = X(i \cdot \Delta t) \quad \text{mit } i \text{ von 1 bis I}, \; I = T/\Delta t. \tag{5-75}$$

Methodische Unterschiede resultieren in Abhängigkeit davon, ob X(t) ein originärer Rauschprozess oder die Zustandsgröße eines Modells ist, das durch eine SDE beschrieben wird. Im erstgenannten Fall ergeben sich Fragen zur Auswahl eines passenden Typs des Rauschprozesses und ggf. zu seiner Parametrisierung (z. B. zur Schätzung der Parameter μ und σ einer BROWN'schen Bewegung oder der Parameter α und β eines Gammaprozesses; siehe Abschnitt B.4), die i. W. analog zu den in Kapitel 4 diskutierten Problemen der Identifikation der Verteilungsart und der Parameterschätzung für übliche Zufallsgrößen behandelt werden können.

Praktische Anwendungen greifen zur Art der Rauschquelle und ggf. auch zu ihrer Parametrisierung auf Daten oder plausible Ansätze zurück. Es sind dann jedoch die Parameter eines SDE- Modells zu schätzen, mit dem eine interessierende Zustandsgröße beschrieben und ihr zukünftiger Verlauf prognostiziert werden kann. Die Schätzung der Modellparameter aus Messreihen (x_1, x_2, …, x_I) des untersuchten Prozesses X(t) ist i. A. etwas schwieriger als die Schätzung der Verteilungsparameter von Zufallsgrößen anhand von Stichproben. Die für stochastische Prozesse angewandten Methoden zur Schätzung der Parameter von SDE-Modellen sind den aus der klassischen bzw. BAYES-Statistik bekannten Verfahren z. T. ähnlich (wie Maximum-Likelihood-Schätzer und auf der Likelihood-Funktion basierende BAYES-Methoden; [PED 95], [POL 94]). Für viele SDE-Modelle können aber die Übergangswahrscheinlichkeiten für den Prozess X(t), die für die allgemeine SDE mit WIENER-Rauschquelle der FOKKER-PLANCK-Gleichung (siehe Gl. (2-66), Abschnitt 2.6.5) und für SDE mit anderen LÉVY-Prozessen der so genannten Master-Gleichung genügen, nicht analytisch bestimmt werden. Dann ist jedoch auch die Likelihood-Funktion nicht analytisch berechenbar, weshalb auf Näherungen der Likelihood-Funktion oder auf andere Schätzfunktionen zurückgegriffen werden muss, wie sie z. B. auf Basis der KOLMOGOROV-SMIRNOV-Statistik oder der FISHER-Information abgeleitet wurden [MCD 99], [KESS 00]. Eine Übersicht und kritische Diskussion unterschiedlicher Schätzverfahren zu SDE-Parametern gibt [HURN 07].

Für die folgende Diskussion sei vereinfachend angenommen, dass Übergangswahrscheinlichkeiten für den untersuchten Prozess X(t) anhand der SDE analytisch dargestellt werden können und damit auch die Abhängigkeit der Likelihood-Funktion von den zu schätzenden Modellparametern explizit bekannt ist. Der unter diesen Voraussetzungen hier interessierende Aspekt betrifft die Unsicherheit der Schätzung der Modellparameter und Auswirkungen dieser Unsicherheit auf Modellprognosen. Hierzu wird das klassische Beispiel des ORNSTEIN-UHLENBECK-Prozesses (siehe Abschnitt B.4.2.1) betrachtet.

5.1.3.1. Parameterschätzung für SDE-Modelle bei bekannter Übergangswahrscheinlichkeit

Sind für eine SDE zum Prozess X(t) die Übergangswahrscheinlichkeiten $f(x_i|x_{i-1},\boldsymbol{\theta},\Delta t)$ von einem Messwert x_{i-1} zu einem im Zeitabstand Δt später gemessenen Wert x_i bekannt, wobei $\boldsymbol{\theta}$ für die unbekannten Parameter der SDE steht, dann ist die Likelihood-Funktion für die im Messzeitraum T realisierte Trajektorie $\{\mathbf{x}, \mathbf{t}\} = \{(x_0, 0), (x_1, \Delta t), (x_2, 2\cdot\Delta t),\ldots, (x_i, i\cdot\Delta t), \ldots, (x_I, T)\}$ mit $I = T/\Delta t$ gleich dem Produkt der einzelnen Übergangswahrscheinlichkeiten. Zur Schätzung der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ ist das Maximum des Logarithmus der Likelihood-Funktion, $\mathcal{L}(\mathbf{x},\boldsymbol{\theta},\Delta t)$, zu bestimmen. Hierzu sind die Ableitungen von $\mathcal{L}$ nach den Komponenten von $\boldsymbol{\theta}$ zu berechnen und gleich Null zu setzen sind. Die Lösung des entstehenden Gleichungssystems ist der Maximum-Likelihood-Schätzer für $\boldsymbol{\theta}$.

Beispiel 5.6

X(t) sei ein ORNSTEIN-UHLENBECK-Prozess (siehe Abschnitt B.4.2.1), der folgender SDE genügt:

$$dX = -\lambda\, X\, dt + b\, dW\,, \quad X(0) = X_0 = 0, \tag{5-76}$$

wobei λ und b positive Konstanten und $dW \sim N(0, \sqrt{dt}\,)$ den SWP bezeichnen. Gl. (5-76) entspricht i. W. der im Beispiel 5.4 behandelten SDE Gl. (5-36), auch wenn dort noch ein konstanter Quellterm $q_m\cdot dt$ enthalten war. Subtrahiert man aber von Gl. (5-36) die ODE für den Erwartungswert, so ergibt sich eine SDE, die mit Gl. (5-76) übereinstimmt. Sie beschreibt also den stochastischen Anteil (die Schwankungen um dem Erwartungswert) von Gl. (5-36). Abweichend von Beispiel 5.4 sei λ hier jedoch keine bekannte (physikalische Zerfalls-) Konstante, sondern eine Abreicherungsrate (z. B. die Sedimentationsrate in einem Gewässer), die wie der Parameter b zwar konstant aber nicht bekannt ist.

Die Modellparameter λ und b sollen anhand einer Messreihe $x_i = x(t_i)$ für äquidistante Zeitabstände Δt bestimmt werden. Für feste Zeitpunkte t ist X(t) eine normalverteilte Zufallsgröße mit Erwartungswert und Varianz nach Gl. (B-139) und Gl. (B 142). Wendet man diese Gleichungen auf die Zeitintervalle von t_{i-1} bis t_i an ($t_i = t_{i-1} + \Delta t$; i von 1 bis I), so resultieren die Übergangswahrscheinlichkeiten $f(x_i|x_{i-1},\lambda,b,\Delta t)$. Sie sind normalverteilte Größen mit Erwartungswert $x_{i-1}\cdot e^{-\lambda\Delta t}$ und Varianz $b^2\cdot(1 - e^{-2\lambda\Delta t})/(2\lambda)$:

$$f(x_i \mid x_{i-1}, \lambda, b, \Delta t) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi\, b^2\, (1 - e^{-2\lambda\Delta t})}} \cdot \exp\left\{-\frac{\lambda\cdot\left(x_i - x_{i-1}\, e^{-\lambda\Delta t}\right)^2}{b^2\cdot\left(1 - e^{-2\lambda\Delta t}\right)}\right\}. \tag{5-77}$$

Das Produkt dieser Übergangswahrscheinlichkeiten über i von 1 bis I ist die Likelihood-Funktion. Für ihren Logarithmus, die Log-Likelihood-Funktion, ergibt sich mit Gl. (5-77) folgende Beziehung:

$$\mathcal{L}(\lambda,b|\mathbf{x},\Delta t) = -\frac{I}{2}\ln\left(\frac{\pi\, b^2\, (1 - e^{-2\lambda\Delta t})}{\lambda}\right) - \frac{\lambda}{b^2\left(1 - e^{-2\lambda\Delta t}\right)}\cdot\sum_{i=1}^{I}\left(x_i - x_{i-1}\, e^{-\lambda\Delta t}\right)^2. \tag{5-78}$$

Aus der Lösung der beiden Gleichungen

$\partial\mathcal{L}(\lambda,b|\mathbf{x},\Delta t)/\partial\lambda = 0$ und $\partial\mathcal{L}(\lambda,b|\mathbf{x},\Delta t)/\partial b = 0$

ergeben sich die folgenden ML-Schätzer für die beiden gesuchten Modellparameter λ und b:

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{\Delta t} \cdot \left(\ln\left(\sum_{i=1}^{I} x_i^{\,2} \right) - \ln\left(\sum_{i=1}^{I} x_i \; x_{i-1} \right) \right) \qquad \hat{b} = \frac{2\,\hat{\lambda}}{I\left(1 - e^{-2\,\lambda\,\Delta t}\right)} \cdot \sum_{i=1}^{I} \left(x_i - x_{i-1} \cdot e^{-\lambda\,\Delta t} \right)^2 . \tag{5-79}$$

Die Unsicherheit der nach Gl. (5-79) anhand einer zufällig realisierten (gemessenen) Trajektorie erfolgten Schätzungen der Parameter λ und b hängt sowohl vom Produkt $\lambda \cdot \Delta t$ als auch von der Anzahl I der Messwerte ab. Dies kann mit Hilfe von Simulationsrechnungen gezeigt werden, wie nachfolgend anhand dbzgl. Ergebnisse dargestellt. Die Analyse der Abhängigkeit zwischen den Schätzwerten für die beiden Modellparameter zeigt, dass sie einer GAUSS-Copula entspricht (siehe Abschnitt B.3.2.1).

Zur Darstellung der Unsicherheit der aus einer Messreihe (Trajektorie) des mit Gl. (5-76) definierten Prozesses ermittelten Schätzwerte für die Modellparameter λ und b wurden Simulationsrechnungen für verschiedene Parameterkonstellationen durchgeführt. Der Parameter b skaliert offenbar nur den Prozess X(t), weshalb sein wahrer Wert keine Auswirkung auf die Unsicherheit der nach Gl. (5-79) berechneten Schätzwerte hat. Für die Beispielrechnungen wurde deshalb b = 1 gesetzt. Der Parameter λ bestimmt dagegen die Dynamik (Autokorrelation) des Prozesses X(t), weshalb für ihn drei verschiedene Werte betrachtet wurden. Mit der Einheit $\Delta t = 1$ wurden für λ die Werte 0,1, 0,2 und 0,5 betrachtet. Zur Anzahl der Messwerte wurden zwei Varianten gewählt: I = 250 und I = 1000 (entspricht wegen $\Delta t = 1$ Messzeiten von T = 250 bzw. T = 1000).

Für die so definierten 6 Fälle wurden jeweils 2000 Simulationsläufe zum Prozess X(t) ausgeführt, wozu die exakte numerische Methode nach [GILL 96] angewandt wurde. Für jede der 2000 Trajektorien wurden die ML-Schätzer für λ und b berechnet. Die zu diesen Schätzungen resultierende Statistik beschreibt die Unsicherheit der Schätzung auf Basis von Messreihen für (zufällige) Realisierungen des Prozesses X(t).

In Tabelle B-2 sind für alle 6 Rechenfälle die empirischen Mittelwerte (m) und Standardabweichungen (s) der Verteilung der jeweils 2000 die ML-Schätzer von λ und b angegeben, für die Quantifizierung der Abhängigkeit zwischen den ML-Schätzungen $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ ebenso der PEARSON'sche Korrelationskoeffizient $r_{\hat{\lambda},\hat{b}}$ und der KENDALL'sche Konkordanzkoeffizient $\tau_{\hat{\lambda},\hat{b}}$ (siehe Abschnitt B.2.3). Die Abhängigkeit zwischen den ML-Schätzern $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ kann mit hoher Genauigkeit durch eine GAUSS-Copula (siehe Abschnitt B.3.2.1) erfasst werden.

In Tabelle B-3 sind für alle 6 Rechenfälle jeweils die exakten Werte $b/(2\lambda)^{1/2}$ zur asymptotischen Standardabweichung des Prozesses X(t) (diese Beziehung gilt für $e^{-\lambda \cdot T} << 1$) und das 0,95-Quantil $x_{0,95}(T)$ sowie die Mittelwerte und Standardabweichungen dieser statistischen Kenngrößen aufgeführt, mit denen die epistemische Unsicherheit einer auf den ML-Schätzern $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ basierenden Schätzung zur Bandbreite bzw. eines konservativen oberen Wertes des Prozesses X(t) eingeschätzt werden kann.

Die empirischen (Rand-)Verteilungen der jeweils 2000 auf zufälligen Realisierungen des Prozesses X(t) basierenden Schätzwerte $\hat{\lambda}$ können sehr genau durch Lognormalverteilungen approximiert werden; für $\hat{b}$ resultieren Normalverteilungen. Die daraus berechneten Schätzwerte zur Standardabweichung $\hat{b}/\sqrt{2\hat{\lambda}}$ und des 0,95-Quantils können sehr genau durch Lognormalverteilungen beschrieben werden. Die Abbildungen 5-20a bis 5-20c zeigen die Randverteilungen von $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ sowie Scatterplots zur Copula dieser ML-Schätzer für die 3 betrachteten λ-Werte. In Abbildung 5-21 sind die zugehörigen Verteilungen der 0,95-Quantile dargestellt.

Tabelle 5-2: Empirische Mittelwerte (m) und Standardabweichungen (s) der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ sowie Werte des PEARSON'schen Korrelationskoeffizienten (r) und des KENDALL'schen Konkordanzkoeffizienten (τ) für jeweils 2000 zufällige Realisierungen des Prozesses X(t) mit b = 1 bei unterschiedlichen Werten für λ und der Messzeit T bzw. Messwertzahl I.

	$m(\hat{\lambda})$	$s(\hat{\lambda})$	$m(\hat{b})$	$s(\hat{b})$	$r_{\hat{\lambda},\hat{b}}$	$\tau_{\hat{\lambda},\hat{b}}$
	T = I = 250					
λ = 0,1	0,1088	0,0322	1,0001	0,0485	0,315	0,213
λ = 0,2	0,2098	0,0472	1,0003	0,0500	0,411	0,283
λ = 0,5	0,5111	0,0854	1,0019	0,0577	0,592	0,417
	T = I = 1000					
λ = 0,1	0,1025	0,0155	1,0006	0,0237	0,314	0,213
λ = 0,2	0,2013	0,0257	0,9995	0,0245	0,405	0,277
λ = 0,5	0,5024	0,0412	0,9999	0,0277	0,605	0,427

Tabelle 5-3: Exakte Werte sowie empirische Mittelwerte (m) und Standardabweichungen (s) zur asymptotischen Standardabweichung des Prozesses X(t) und das 0,95-Quantil für jeweils 2000 zufällige Realisierungen des Prozesses X(t) mit b = 1 bei unterschiedlichen Werten für λ und der Messzeit T bzw. Messwertzahl I

	$b/\sqrt{2\lambda}$	$m\left(\hat{b}/\sqrt{2\hat{\lambda}}\right)$	$s\left(\hat{b}/\sqrt{2\hat{\lambda}}\right)$	$x_{0,95}$	$m(\hat{x}_{0,95})$	$s(\hat{x}_{0,95})$
	T = I = 250					
λ = 0,1	2,236	2,207	0,303	3,678	3,631	0,499
λ = 0,2	1,581	1,569	0,157	2,601	2,581	0,259
λ = 0,5	1,000	0,998	0,066	1,645	1,642	0,109
	T = I = 1000					
λ = 0,1	2,236	2,228	0,160	3,678	3,664	0,263
λ = 0,2	1,581	1,582	0,080	2,601	2,602	0,131
λ = 0,5	1,000	0,999	0,032	1,645	1,644	0,053

Entsprechend diesen Ergebnissen sind folgende generelle Schlussfolgerungen zu treffen:

- Alle Standardabweichungen verringern sich mit der Länge der Messreihe proportional zu $1/I^{1/2}$.
- Der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ hat eine Verzerrung (Bias), die mit der Länge der Messreihe wie 1/I fällt.
- Die Abhängigkeit zwischen den ML-Schätzern $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ nimmt mit λ zu.

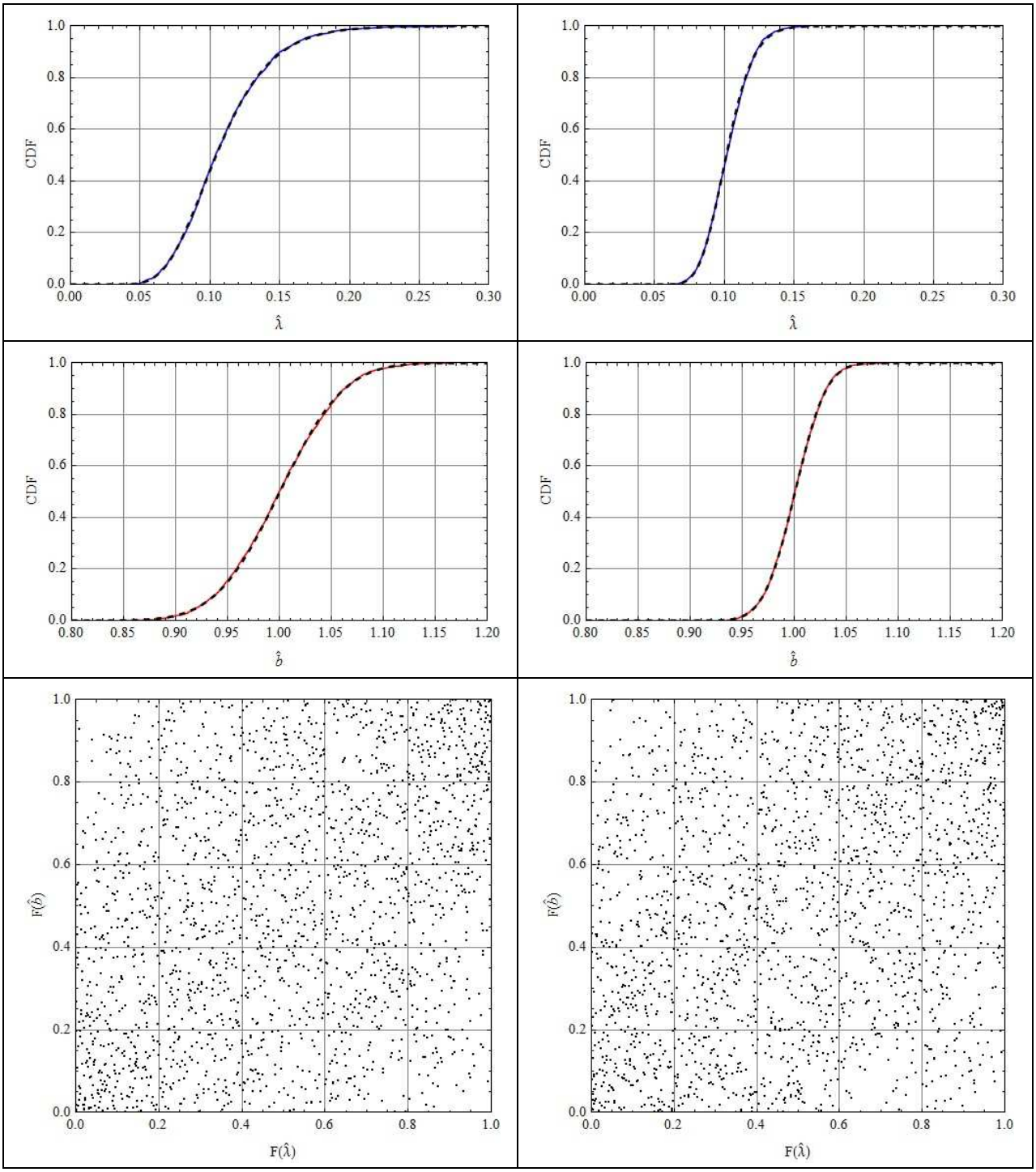


Abbildung 5-20a: Randverteilungen der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ (obere Bilder) und $\hat{b}$ (mittlere Bilder) sowie Scatterplots ihrer Copula-Verteilung (untere Bilder) für den Fall **λ = 0,1** mit **T = 250** (linke Bildreihe) bzw. **T = 1000** (rechte Bildreihe); mit Anpassung der empirischen Verteilung von $\hat{\lambda}$ an eine Lognormalverteilung bzw. von $\hat{b}$ an eine Normalverteilung (schwarz gestrichelt)

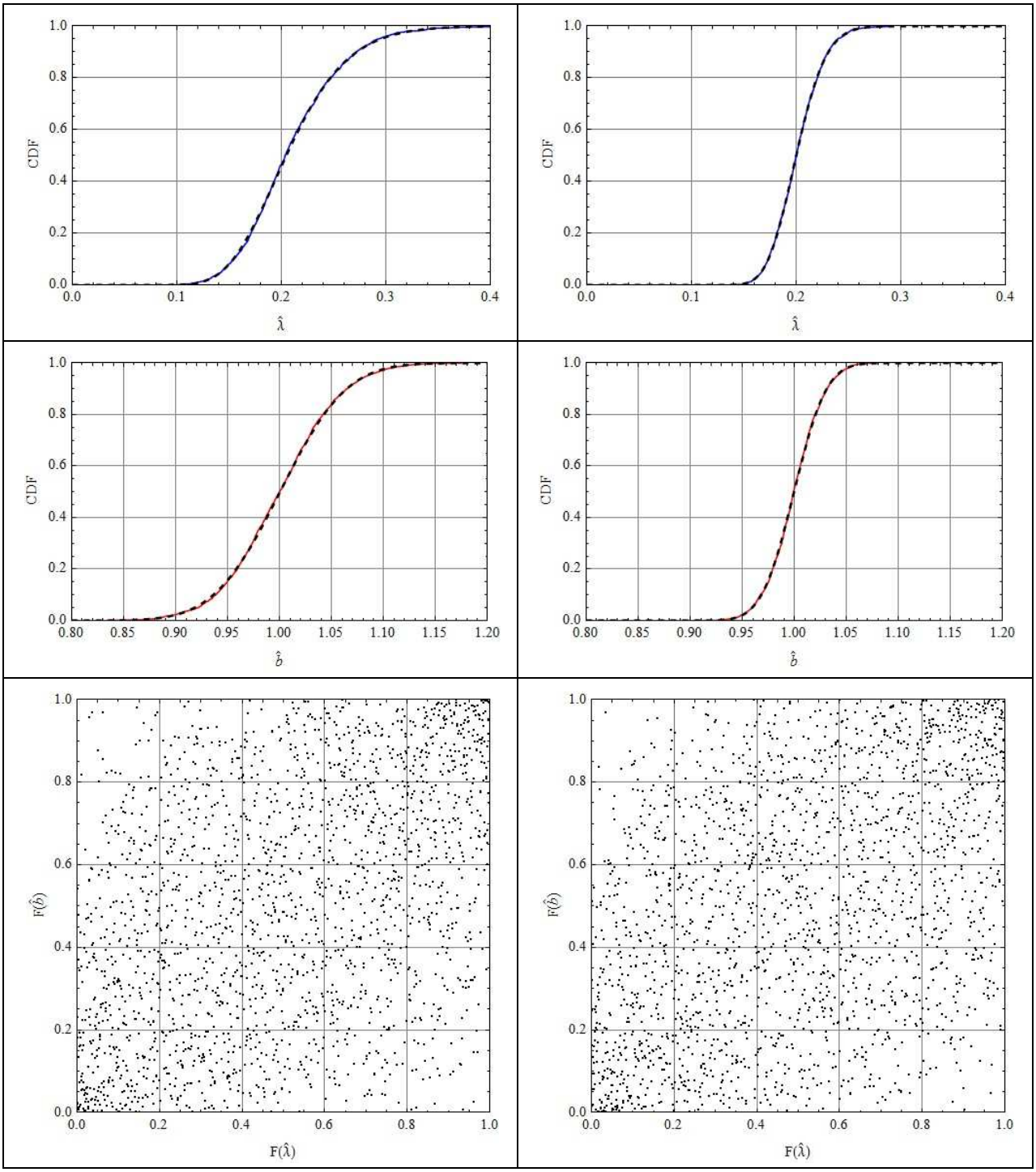


Abbildung 5-20b: Randverteilungen der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ (obere Bilder) und $\hat{b}$ (mittlere Bilder) sowie Scatterplots ihrer Copula-Verteilung (untere Bilder) für den Fall $\boldsymbol{\lambda}$ **= 0,2** mit **T = 250** (linke Bildreihe) bzw. **T = 1000** (rechte Bildreihe); mit Anpassung der empirischen Verteilung von $\hat{\lambda}$ an eine Lognormalverteilung bzw. von $\hat{b}$ an eine Normalverteilung (schwarz gestrichelt)

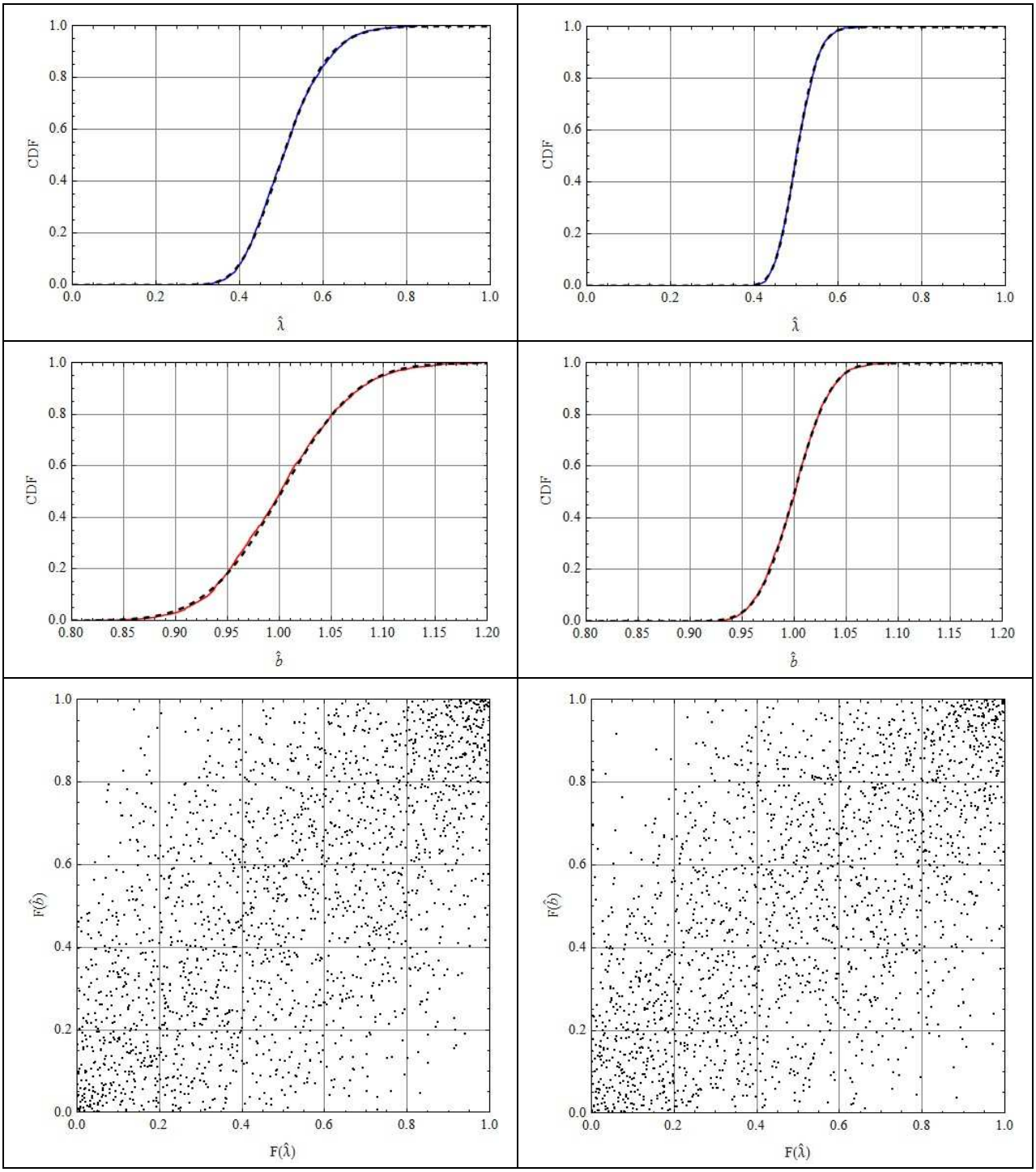


Abbildung 5-20c: Randverteilungen der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ (obere Bilder) und $\hat{b}$ (mittlere Bilder) sowie Scatterplots ihrer Copula-Verteilung (untere Bilder) für den Fall **λ = 0,5** mit **T = 250** (linke Bildreihe) bzw. **T = 1000** (rechte Bildreihe); mit Anpassung der empirischen Verteilung von $\hat{\lambda}$ an eine Lognormalverteilung bzw. von $\hat{b}$ an eine Normalverteilung (schwarz gestrichelt)

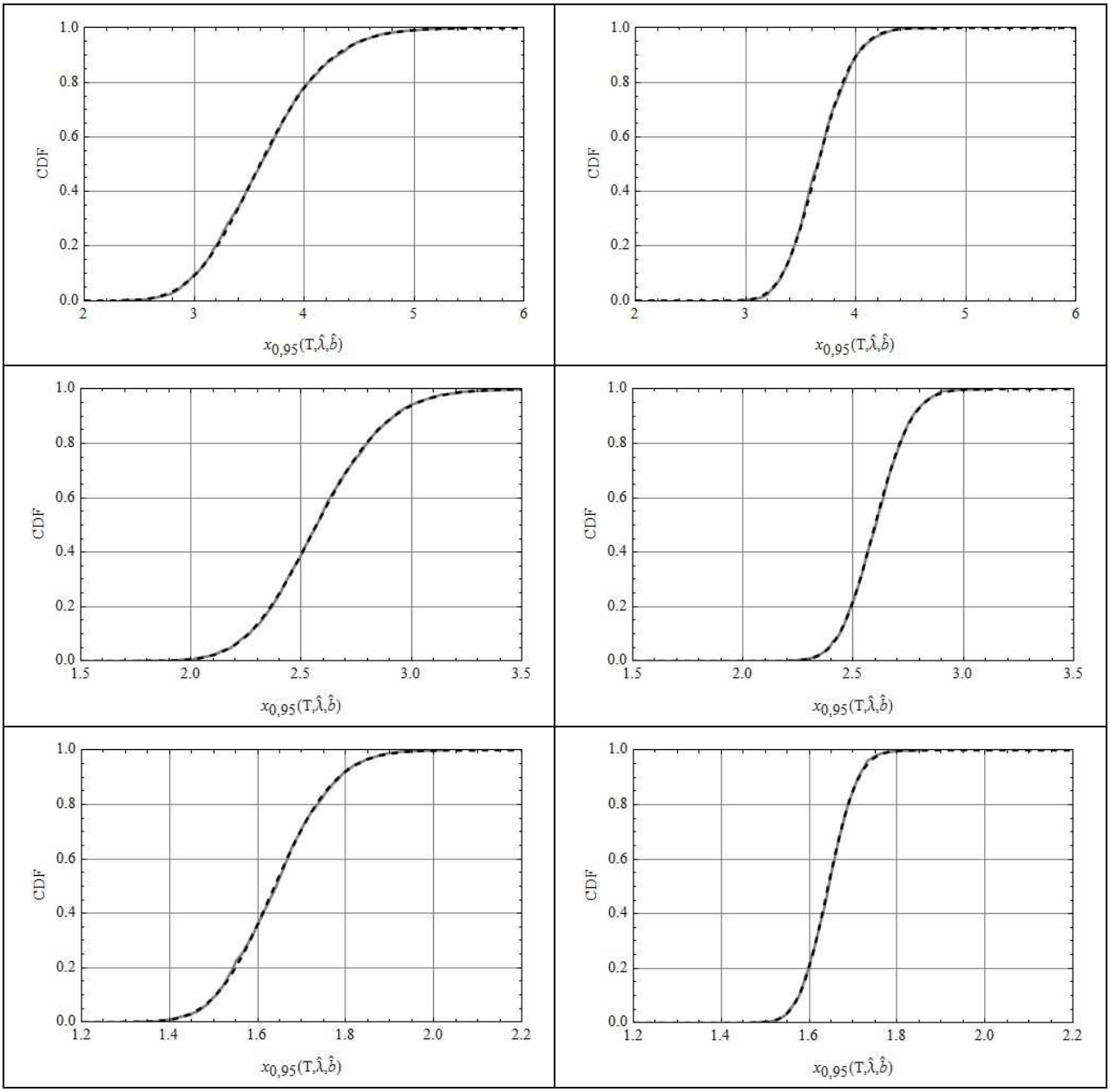


Abbildung 5-21: Empirische Verteilungen mit den ML-Schätzern $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ berechneter Schätzwerte $\hat{x}_{0,95}$ des asymptotischen 0,95-Quantils des Prozesses X(t) für die Fälle **λ = 0,1** (obere Bilder), **λ = 0,2** (mittlere Bilder) und **λ = 0,5** (untere Bilder) mit **T = 250** (linke Bildreihe) bzw. **T = 1000** (rechte Bildreihe); mit Anpassung an Lognormalverteilungen (schwarz gestrichelt)

Im Hinblick auf Anforderungen an die Datenbasis zur Schätzung der Parameter für SDE-Modelle könnte für das hier betrachtete Beispiel z. B. aus der vom Umfang I der Messreihe abhängigen epistemischen Unsicherheit des geschätzten 0,95-Quantils des Prozesses X(t) der für eine hinreichend konservative Prognose erforderliche Messumfang abgeleitet werden.

Zur MC-Simulation für Expositionsprognosen sollten sowohl die Variabilität des Prozesses X(t) als auch die bei Schätzung der Modellparameter λ und b anhand einer Messreihe resultierenden epistemischen Unsicherheiten berücksichtigt werden. Diese können mit den Schätzwerten $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$ durch Bootstrap-Simulationen oder mit BAYES-Methoden ermittelt werden (siehe Abschnitt 4.2.3). Für die hier betrachtete SDE liefert das Bootstrapping korrekte Angaben zur Unsicherheit der ML-Schätzer $\hat{\lambda}$ und $\hat{b}$, wobei die Abhängigkeit zwischen diesen Schätzern zu beachten ist.

5.1.3.2. Behandlung epistemischer Unsicherheiten zu Parametern von SDE-Modellen

Nach den für das Beispiel 5.6 dargelegten Ergebnissen dürfte es i. A. wichtig sein, epistemische Unsicherheiten zu Modellparametern für stochastische Prozesse, die durch eine SDE beschrieben werden, einzuschätzen und bei Simulationsrechnungen zu berücksichtigen. Wie für die statistischen Unsicherheiten der Schätzung von Modellparametern aus einer Messreihe gezeigt wurde, können diese bei relativ geringem Datenumfang durchaus in der Größenordnung der zeitlichen Variabilität des stochastischen Prozesses liegen. Der am Ende von Abschnitt 5.1.2.2 angesprochene Aspekt einer probabilistischen Analyse und Simulation von stochastischen Modellen kann somit für ausreichend konservative Expositionsabschätzungen wichtig sein.

Neben den epistemischen Unsicherheiten, die aus der Schätzung von Modellparametern aus einer Messreihe resultieren, können auch andere Gründe eine probabilistische Bewertung der Lösung von SDE-Modellen nahe legen. Dies kann z. B. für generische Expositionsprognosen erforderlich sein, weil für Parameter des SDE-Modells aus Messungen an mehreren Standorten unterschiedliche Schätzwerte oder weil für eine standortspezifische Expositionsbetrachtung dbzgl. keine Messwerte vorliegen, weshalb eine Quantifizierung von epistemischen Unsicherheiten des Modellparameters durch Expertenschätzung vorzunehmen ist. In solchen Fällen kann auf die Lösung der SDE bzw. eine daraus gewonnene, für die Expositionsprognose relevante statistische Kenngröße (z. B. das asymptotische 0,95-Quantil des Prozesses) Bezug genommen werden, die jedoch vom unsicheren Parameter abhängt, um anschließend die Verteilung dieser Kenngröße entsprechend der Verteilung des unsicheren Parameters zu bestimmen. Ist also für den durch eine SDE mit dem Parametervektor $\boldsymbol{\theta}$ definierten Prozess X(t) z. B. das asymptotische p-Quantil x_p die relevante Kenngröße, so ist dies ein determinierter, jedoch bezüglich $\boldsymbol{\theta}$ bedingter Wert $x_p(X(t)|\boldsymbol{\theta})$, für den (nachträglich) gemäß der epistemischen Unsicherheit von $\boldsymbol{\theta}$ eine Verteilung zu betrachten ist. Hierbei ist es wichtig zu unterscheiden, ob die Verteilung von $\boldsymbol{\theta}$ statistisch (probabilistisch) oder z. B. possibilistisch (siehe dbzgl. Abschnitt 2.8.3) zu interpretieren ist, da diese Ansätze zu unterschiedlichen Bewertungen der Unsicherheit von x_p führen. Dies wird im folgenden Beispiel verdeutlicht.

Beispiel 5.7

X(t) sei der in Beispiel 5.6 betrachtete, durch die SDE Gl. (5-76) definierte Prozess, wobei b ein fester Wert sei (bekannt bzw. als solcher definiert), wogegen λ als epistemisch unsicherer Parameter betrachtet wird. Die relevante Kenngröße sei das asymptotische p-Quantil x_p (z. B. für p = 0,95).

Mit der Bezeichnung κ_p für das p-Quantil der Standardnormalverteilung ($\kappa_{0,95}$ = 1,645) ergibt sich für x_p die folgende Beziehung (siehe Beispiel 5.6):

$$x_p = \frac{\kappa_p \, b}{\sqrt{2\,\lambda}} \,. \tag{5-80}$$

Nachfolgend wird mit b = 1 und p = 0,95 gerechnet. Für den Parameter λ wird eine Dreiecksverteilung (siehe Abschnitt C.4.6) mit einem Minimalwert von λ_{min} = 0,1, einem Maximalwert von λ_{max} = 0,5 sowie einem Modalwert von λ_{mod} = 0,2 gerechnet. Bezeichnet $f_\Lambda(\lambda)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Dreiecksverteilung, so ergibt sich daraus die entsprechende (possibilistische) Möglichkeitsverteilung $\pi_\Lambda(\lambda)$ durch Normierung des Modalwertes auf den Wert 1, d. h.

$$f_\Lambda(\lambda) = \begin{cases} \dfrac{2\,(\lambda - \lambda_{min})}{(\lambda_{max} - \lambda_{min}) \cdot (\lambda_{mod} - \lambda_{min})} & \text{für } \lambda_{min} \le \lambda \le \lambda_{mod} \\ \dfrac{2\,(\lambda_{max} - \lambda)}{(\lambda_{max} - \lambda_{min}) \cdot (\lambda_{max} - \lambda_{mod})} & \text{für } \lambda_{mod} \le \lambda \le \lambda_{max} \end{cases} \quad (= 0 \text{ sonst}). \tag{5-81}$$

$$\pi_\Lambda(\lambda) = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{mod}}{2} \cdot f_\Lambda(\lambda) \,. \tag{5-82}$$

Abbildung 5-22 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte für λ und die gemäß Gl. (5-80)/(5-81) resultierende Wahrscheinlichkeitsdichte für x_p sowie im Vergleich zur Möglichkeitsverteilung für λ und der daraus gemäß Gl. (5-80)/(5-82) resultierenden Möglichkeitsverteilung für x_p. Für das hier betrachtete Beispiel lassen sich zwar die entsprechend Gl. (5-80) zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. der Möglichkeitsverteilung von X_p durchzuführenden Transformationen analytisch ausführen,

$$f_{X_p}(x_p) = \frac{2\,\kappa_p^{\,2}}{x_p^{\,3}\,(\lambda_{max} - \lambda_{min})} \cdot \begin{cases} \dfrac{\lambda_{max} - \dfrac{\kappa_p^{\,2}}{2\,x_p^{\,2}}}{\lambda_{max} - \lambda_{mod}} & \text{für } \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{max}}} \le x_p \le \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{mod}}} \\ \dfrac{\dfrac{\kappa_p^{\,2}}{2\,x_p^{\,2}} - \lambda_{min}}{\lambda_{mod} - \lambda_{min}} & \text{für } \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{mod}}} \le x_p \le \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{min}}} \end{cases} \quad (= 0 \text{ sonst}), \tag{5-83}$$

$$\pi_{X_p}(x_p) = \begin{cases} \dfrac{\lambda_{max} - \dfrac{\kappa_p^{\,2}}{2\,x_p^{\,2}}}{\lambda_{max} - \lambda_{mod}} & \text{für } \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{max}}} \le x_p \le \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{mod}}} \\ \dfrac{\dfrac{\kappa_p^{\,2}}{2\,x_p^{\,2}} - \lambda_{min}}{\lambda_{mod} - \lambda_{min}} & \text{für } \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{mod}}} \le x_p \le \dfrac{\kappa_p}{\sqrt{2\,\lambda_{min}}} \end{cases} \quad (= 0 \text{ sonst}), \tag{5-84}$$

generell würde man jedoch die Wahrscheinlichkeitsdichte der Transformierten einer Zufallsgröße, die eine kompliziertere Wahrscheinlichkeitsdichte hat, durch MC-Simulation und die Möglichkeitsverteilung

der Transformierten einer possibilistischen Größe mit komplizierter Möglichkeitsverteilung mit Hilfe der Intervallarithmetik für diskrete Möglichkeitsniveaus von 0 bis 1 berechnen. Zur Verdeutlichung der unterschiedlichen Methodik sind in Abbildung 5-22 auch eine Häufigkeitsverteilung von λ (auf Basis von 2000 zufälligen Realisierungen der Dreiecksverteilung Gl. (5-81)) sowie die daraus gemäß Gl. (5-80) resultierende Häufigkeitsverteilung von x_p dargestellt, ebenso wie diskretisierte Möglichkeitsverteilungen für λ und x_p für π-Werte 0(0,05)1. Daraus wird deutlich, dass der numerische Aufwand possibilistischer Berechnungen im Fall monotoner Transformationen[72] wesentlich geringer ist als für probabilistische Simulationen (für das hier betrachtete Beispiel würden mit der o. g. Diskretisierung 41 "possibilistische" Transformationen gegenüber 2000 "probabilistischen" Transformationen resultieren, wenn nicht die hier möglichen analytischen Transformationen gemäß Gl. (5-83) und Gl. (5-84) genutzt würden).

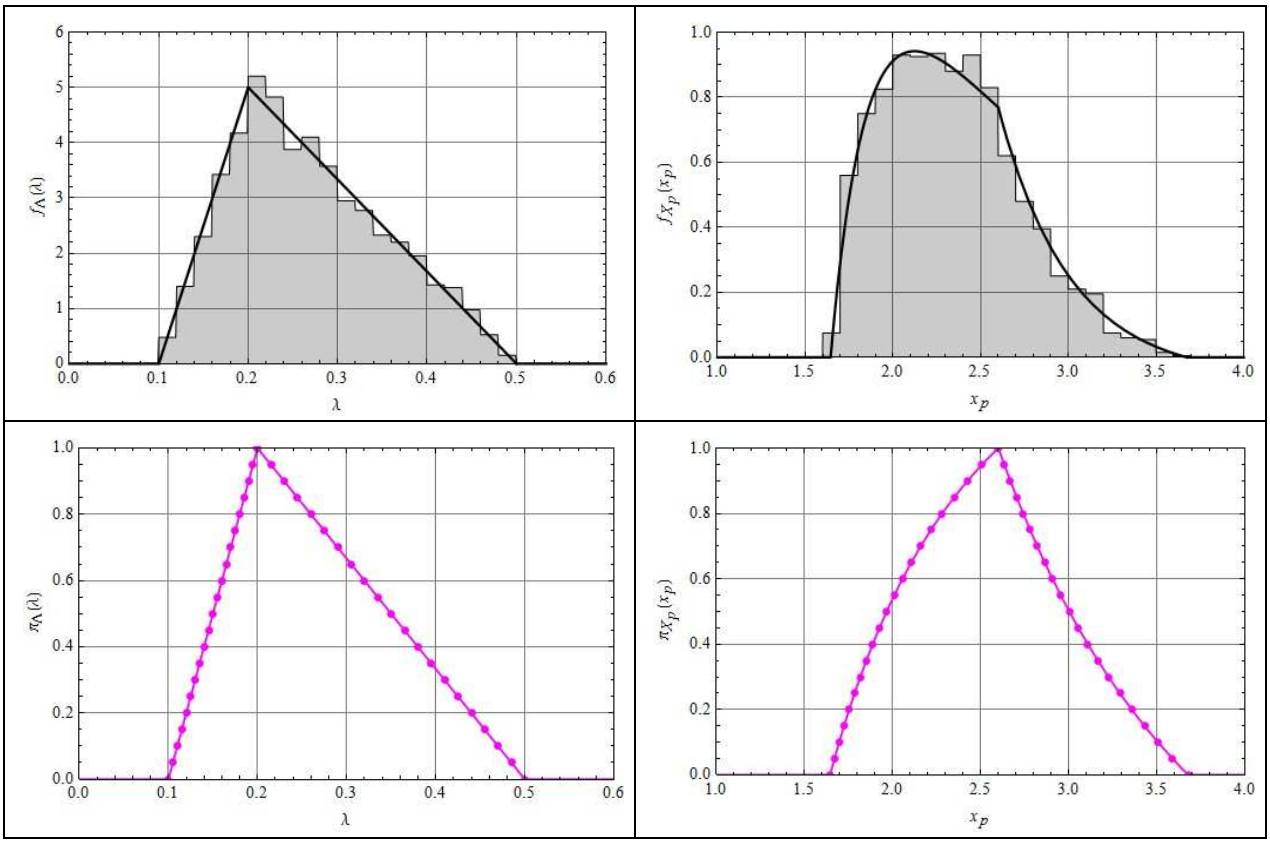


Abbildung 5-22: Wahrscheinlichkeitsdichten (oben) und Möglichkeitsverteilungen (unten) für die Parameter λ (links) und x_p (rechts) für p = 0,95.

Der wesentliche Unterschied zwischen einer probabilistischen und einer possibilistischen Behandlung von Parameterunsicherheiten besteht jedoch in den grundsätzlich verschiedenartigen Annahmen und der Interpretation der Ergebnisse. Der probabilistische Ansatz liefert im Sinne der klassischen Statistik eine Aussage zu relativen Häufigkeiten bzw. im Sinne der BAYES-Theorie zu begründeten Erwartungen. Mit

[72] Im Fall von nicht-monotonen Transformationen kann die possibilistische Verteilung der transformierten Größe nicht mehr auf die Transformation der Intervalle der Ausgangsgröße für bestimmte π-Werte reduziert werden. Auf dbzgl. methodische Aspekte wird in Abschnitt 5.2.2.3 eingegangen.

dem possibilistischen Ansatz wird die zwischen Möglichkeit und Notwendigkeit liegende Unsicherheit zur Prognose von Ereignissen im Sinne oberer (linker) und unterer (rechter) Grenzen probabilistischer Verteilungen quantifiziert. In Abbildung 5-23 sind entsprechend Gl. (5-81) und Gl. (5-83) berechnete Verteilungsfunktion der Zufallsgrößen Λ und X_p sowie die aus Gl. (5-82) und Gl.(5-84) resultierenden Möglichkeits- und Notwendigkeitsfunktion für die Ereignisse "$\Lambda \leq \lambda$" sowie "$X_p \leq x_p$" dargestellt (zur Berechnung der Funktionen Pos und Nec aus der Möglichkeitsverteilungen π siehe Gl. (2-93)/(2-94)).

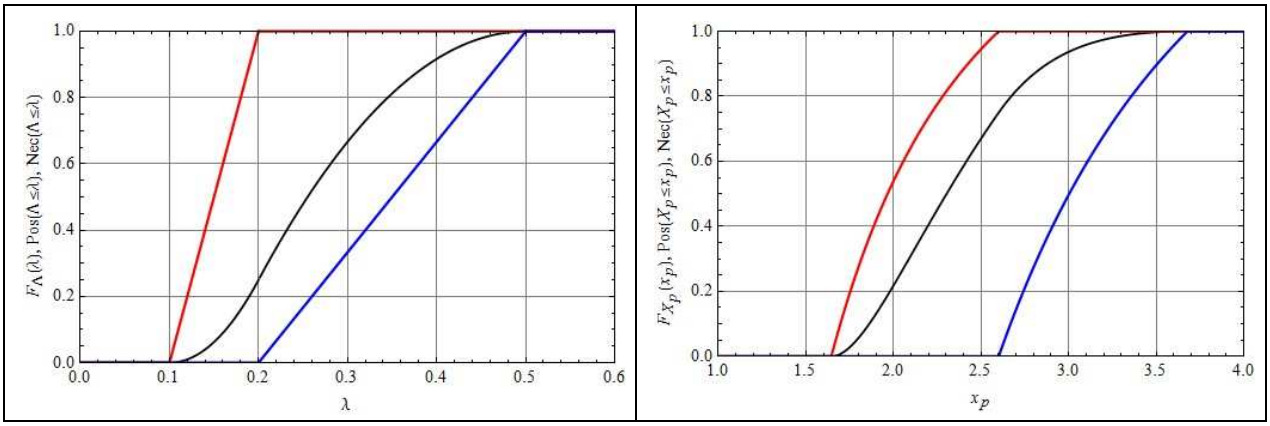


Abbildung 5-23: Verteilungsfunktion F (schwarz) sowie Möglichkeit Pos (rot) und Notwendigkeit Nec (blau) für die unsicheren Parameter Λ (links) und X_p (rechts)

Die Ergebnisse des Beispiels 5.7, insbesondere die in Abbildung 5-23 dargestellten Verläufe von probabilistischen Verteilungsfunktionen im Vergleich zu den possibilistischen Möglichkeits- und Notwendigkeitsfunktionen, zeigen, dass eine probabilistische Interpretation von Expertenaussagen zur Beurteilung der Auswirkungen von epistemischen Unsicherheiten auf eine Zielgröße immer zu einer klar definierten Aussage zur Wahrscheinlichkeit möglicher Ereignisse führt, wogegen bei possibilistischer Interpretation zum gleichen Vertrauensniveau eine Bandbreite resultiert, die auf Basis der zugrunde gelegten Informationen nicht weiter eingeengt werden kann.

5.2. Modelle mit Differentialgleichungssystemen

Systeme von Differentialgleichungen haben für radiologische und radioökologische Modelle große Bedeutung, insbesondere zur Berechnung von Zerfallsketten und für so genannte Kompartiment-Modelle. Da eine Differentialgleichung n-ter Ordnung durch n Differentialgleichungen 1. Ordnung dargestellt werden kann, werden nur Systeme von Differentialgleichungen 1. Ordnung diskutiert. In den Anwendungen dominieren Modelle mit linearen Differentialgleichungssystemen. Wenn jedoch Parameter eines solchen Systems zeitlichen Veränderungen unterliegen, die selbst wieder durch eine deterministische oder stochastische Differentialgleichung zu beschreiben sind, entsteht ein dadurch ergänztes System von nichtlinearen Differentialgleichungen, in denen auch Produkte von Zustandsgrößen auftreten. Deshalb können für die radioökologische Modellierung auch nichtlineare Differentialgleichungssysteme von Interesse sein.

In Abschnitt 5.1 wurde anhand einfacher linearer Differentialgleichungen verdeutlicht, dass für die jeweiligen Gegebenheiten und Zielstellungen der Modellierung eine korrekte Spezifikation der

Parameter als determinierte Konstanten, zeitabhängige stochastische Größen bzw. als stationäre Zufallsgrößen oder auch als epistemisch unsichere Konstanten nötig ist.

Für Differentialgleichungssysteme ist als weiterer Aspekt die Möglichkeit von Abhängigkeiten zwischen zeitlich variierenden bzw. epistemisch unsicheren Modellparametern zu betrachten. Die Behandlung stochastischer bzw. probabilistischer Modelle, die als Differentialgleichungssystem 1. Ordnung formuliert werden können, ist ansonsten jedoch sehr ähnlich zu der in Abschnitt 5.1 dargelegten Vorgehensweise. Auf die unterschiedlichen Fragestellungen, für die stochastische bzw. probabilistische Modelle erforderlich oder sinnvoll sind, wird deshalb nicht erneut eingegangen.

Nachfolgend werden Modelle unterschieden, mit denen punktuell (in einem als ideal durchmischt betrachteten Volumen) der Zerfall und Aufbau der Radionuklide von Zerfallsketten beschrieben wird, bzw. mit denen in vereinfachter Form auch die Ausbreitung von Radionukliden in der Geo- und Biosphäre beschrieben werden kann (Kompartiment-Modelle). Zerfallsketten sind i. A. auch für Kompartiment-Modelle relevant, wodurch hier die Dimension des Differentialgleichungssystems erhöht wird. Die mathematische Struktur von Punkt- und Kompartiment-Modellen ist sehr ähnlich. Betrachtet man die Radionuklide einer Zerfallskette als "Kompartimente", dann resultiert deren Kopplung durch den Aufbau der Tochternuklide. Für die Diskussion von speziellen Aspekten deterministischer, probabilistischer und stochastischer Modelle mit Differentialgleichungssystemen erscheint aus fachspezifischer Sicht eine Unterscheidung von Punkt- und Kompartiment-Modellen sinnvoll, wobei letztere für Zerfallsketten als Verknüpfung mehrerer Punktmodelle darstellbar sind.

Bezeichnet man mit $\mathbf{X}(t)$ den Vektor von d relevanten Zustandsgrößen (z. B. die Aktivitäten der Radionuklide einer Zerfallskette eines Punktmodells bzw. für mehrere Kompartimente), so wird ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung durch die Gleichung

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \mathbf{G}(\mathbf{X}(t), t) \quad \text{mit Anfangsbedingung } \mathbf{X}(0) = \mathbf{X_0} \tag{5-85}$$

dargestellt, wobei $\mathbf{G}(t)$ eine d-dimensionale Vektorfunktion bezeichnet. Sind einige Parameter dieser Funktion stochastische Prozesse, so ist Gl. (5-85) keine korrekte Darstellung, weil diese nicht differenzierbar sind und die Modellierung der zeitlichen Veränderungen von $\mathbf{X}(t)$ mit Hilfe einer stochastischen ITO-Differentialgleichung erfordern. Wie in Abschnitt 5.1 für einfache SDE ist deshalb auch hier eine Differential-Schreibweise angebracht, die Gl. (5-85) als Spezialfall enthält, die aber auch zur Beschreibung stochastisch parameter- oder fremderregter Systeme geeignet ist. Sind insgesamt s stochastische Prozesse zu berücksichtigen, die als s-dimensionaler Vektorprozess $d\mathbf{L}$ dargestellt werden können, so ergibt sich folgende allgemeine Struktur eines SDE-Systems:

$$d\mathbf{X} = \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t)\, dt + \mathbf{B}(\mathbf{X}(t), t)\, d\mathbf{L}, \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X_0}, \tag{5-86}$$

wobei $\mathbf{A}$ eine d-dimensionale Vektorfunktion und $\mathbf{B}$ eine $(d \times s)$-dimensionale Matrixfunktion sind. Ein ODL-System gemäß Gl. (5-85) würde aus Gl. (5-86) resultieren, wenn alle Komponenten von $d\mathbf{L}$ differenzierbar wären (mit $d\mathbf{L}(t) = \boldsymbol{\xi}(t)\, dt$).

In den nachfolgenden Abschnitten werden vereinfachend nur stationäre SDE-Systeme entsprechend Gl. (5-86) betrachtet, in denen also die Vektorfunktion $\mathbf{A}$ und die Matrixfunktion $\mathbf{B}$ keine explizite Zeitabhängigkeit aufweisen, wobei für $d\mathbf{L}(t)$ LÉVY-Prozesse angesetzt werden. Hierzu werden auch vergleichbare deterministische und probabilistische ODE-Systeme betrachtet.

5.2.1. Punktmodelle

5.2.1.1. Lineare Punktmodelle

Unter der Annahme, dass die Vektorfunktion **A** und die Matrixfunktion **B** keine explizite Zeitabhängigkeit aufweisen und beide Funktionen linear vom Zustandsvektor **X**(t) abhängen, kann Gl. (5-86) weiter spezifiziert/vereinfacht werden. Eine Darstellung der allgemeinen Form eines linearen SDE-Systems ist trotzdem relativ kompliziert, wenn man alle theoretisch möglichen Parameter- und Fremderregungen durch den stochastischen Vektorprozess d**L** aus Gl. (5-86) erfassen will.

Nachfolgend wird für ein einfaches Beispiel gezeigt, wie auf Basis eines linearen ODE-Systems ein lineares SDE-System zu formulieren ist, wenn ein Parameter des ODE-Systems als stochastischer Prozess modelliert werden soll. In Abschnitt 5.2.1.1 wird dieses Modell zu einem nichtlinearen SDE-System erweitert, indem ein weiterer, ursprünglich deterministische Parameter, durch eine Zustandsgröße ersetzt wird, die einer SDE genügt. Zu diesem Zweck wird das JACOBI-Modell zur Berechnung der Konzentration von Rn-222 und seinen kurzlebigen Folgenukliden in einem Raum mit idealer Durchmischung der Luft betrachtet (siehe [JAC 72], [KNU 88]).

Beispiel 5.8-1

Das JACOBI-Modell zur Berechnung der Aktivitätskonzentration von Rn-222 und seinen vier kurzlebigen Folgenukliden Po-218, Pb-214, Bi-214 und Po-214 sowie der resultierenden potentiellen α-Energiekonzentration (PAE) berücksichtigt folgende Prozesse:

- Freisetzung von Rn-222 in einen Raum mit Volumen V mit einer Quellstärke von Q_{Rn} (in Bq h^{-1});
- radioaktiver Zerfall (Zerfallskonstanten λ_r, r = Radionuklid): $\lambda_{Rn\text{-}222} = 7{,}56 \cdot 10^{-3}\ h^{-1}$; $\lambda_{Po\text{-}218} = 13{,}6\ h^{-1}$; $\lambda_{Pb\text{-}214} = 1{,}55\ h^{-1}$; $\lambda_{Bi\text{-}214} = 2{,}1\ h^{-1}$ (Po-214 zerfällt mit der Halbwertszeit von 164 µs "momentan"; seine Aktivitätskonzentration entspricht der von Bi-214);
- Verdünnung durch Luftaustausch mit nicht belasteter Luft (Luftwechselrate λ_v);
- Anlagerung von unangelagerten Radonfolgenukliden an Aerosole (Anlagerungsrate λ_a);
- Entstehen von unangelagertem Pb-214 beim α-Zerfall von angelagertem Po-218 infolge Rückstoß (mit der Wahrscheinlichkeit p, wobei für p mit einem Wert von 0,83 gerechnet wird);
- Deposition von unangelagerten (unattached) bzw. angelagerten (attached) Radonfolgenukliden an den Raumwänden bzw. weiteren Innenflächen (Depositionsraten $\lambda_{d\text{-}u}$ bzw. $\lambda_{d\text{-}a}$).

Die genannten Prozesse sind in Abbildung 5-24 schematisch dargestellt. Es wird angenommen, dass im betrachteten Raum (Volumen V) eine perfekte Durchmischung der Luft stattfindet.

Zur Anlagerungsrate λ_a werden in der Fachliteratur unterschiedliche Bandbreiten und/oder Schätzwerte für das geometrische Mittel angegeben, so z. B. in [KNU 88] eine Bandbreite von 5 bis 500 h^{-1} mit einem "best estimate" von 50 h^{-1} oder in [CAU 00] eine Bandbreite von 40 bis 100 h^{-1}. Für diesen Parameter wird zunächst ein konstanter Wert von 50 h^{-1} angesetzt. Da eine lineare Abhängigkeit dieses Parameters von der Aerosolkonzentration im Raum anzunehmen ist (Modellrechnungen zu diesem nahe liegenden Ansatz enthält [STEV 09]), wird er jedoch in Abschnitt 5.1.2.2 als stochastischer Prozess modelliert, der ebenso wie die Radonkonzentration durch eine parametererregte SDE beschrieben werden kann.

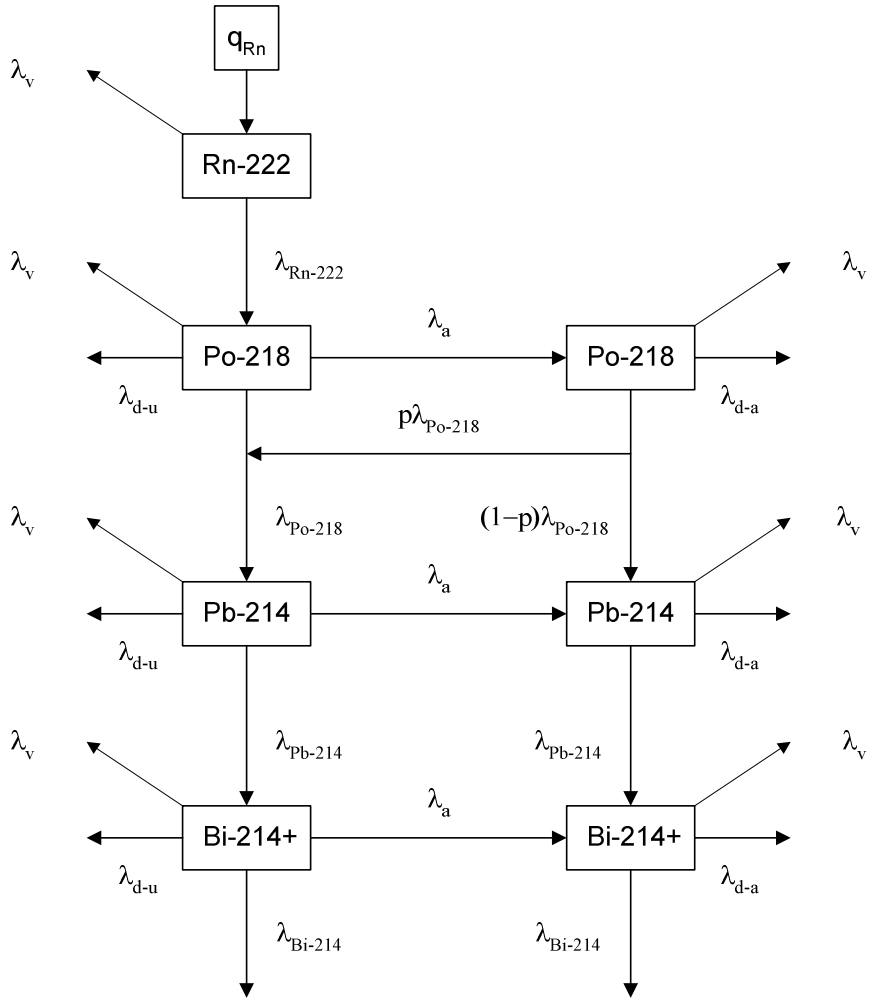


Abbildung 5-24: Schema des JACOBI-Modells; linke Spalte: unangelagerte Radontöchter; rechte Spalte: angelagerte Radontöchter, Bi-214+ steht für Bi-214 + Po-214;

Die Depositionsraten λ_{d-u} und λ_{d-a} sind das Produkt von Depositionsgeschwindigkeiten mit dem Verhältnis der Oberfläche S zum Volumen V des Raumes.

$$\lambda_{d-u} = u_{d-u} \cdot S/V \ , \qquad \lambda_{d-a} = u_{d-a} \cdot S/V \ .$$

Die Relation S/V wird von der Raumgröße bestimmt, hängt aber auch vom Umfang der Einrichtungen ab, welche die Fläche S vergrößern. Für Wohnungen wird der übliche Ansatz von $S/V \cong 2/m$ verwendet. Eine Diskussion des theoretischen Modells und von Messwerten zu den Depositionsgeschwindigkeiten u_{d-u} und u_{d-a} enthält [KNU 88], wonach für u_{d-u} mit einem Unsicherheitsbereich von 5 bis 10 m/h sowie mit der Relation $u_{d-a} \cong u_{d-u}/100$, die aus den unterschiedlichen Werten des Diffusionskoeffizienten für Aerosole bzw. unangelagerte Radonfolgenuklide resultiert, gerechnet werden kann. Für diese beiden Parameter werden für die nachfolgenden Berechnungen feste Werten von $\lambda_{d-u} = 14\ h^{-1}$ und $\lambda_{d-a} = 0{,}14\ h^{-1}$ angesetzt.

Das in Abbildung 5-24 skizzierte JACOBI-Modell entspricht folgenden linearen ODE-System für die Aktivitätskonzentrationen C_r (r = Rn-222, Po-218, Pb-214 und Bi-214), wobei die Massenzahlen zur Verkürzung der Darstellung nicht angegeben wurden. Die unangelagerten bzw. an Aerosole angelagerten Fraktionen der Rn-Folgenuklide sind durch Ergänzung des Index "r" zu "r-u" bzw. "r-a" gekennzeichnet.

$$\frac{dC_{Rn}}{dt} = -(\lambda_v + \lambda_{Rn})\, C_{Rn} + q_{Rn} \;; \tag{5-87a}$$

$$\frac{dC_{Po-u}}{dt} = \lambda_{Po}\, C_{Rn} - (\lambda_v + \lambda_{Po} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\, C_{Po-u} \;; \tag{5-87b}$$

$$\frac{dC_{Po-a}}{dt} = \lambda_a\, C_{Po-u} - (\lambda_v + \lambda_{Po} + \lambda_{d-a})\, C_{Po-a} \;; \tag{5-87c}$$

$$\frac{dC_{Pb-u}}{dt} = \lambda_{Pb}\, C_{Po-u} + p\, \lambda_{Pb}\, C_{Po-a} - (\lambda_v + \lambda_{Pb} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\, C_{Pb-u} \;; \tag{5-87d}$$

$$\frac{dC_{Pb-a}}{dt} = \lambda_a\, C_{Pb-u} + (1-p)\, \lambda_{Pb}\, C_{Po-a} - (\lambda_v + \lambda_{Pb} + \lambda_{d-a})\, C_{Pb-a} \;; \tag{5-87e}$$

$$\frac{dC_{Bi-u}}{dt} = \lambda_{Bi}\, C_{Pb-u} - (\lambda_v + \lambda_{Bi} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\, C_{Bi-u} \;; \tag{5-87f}$$

$$\frac{dC_{Bi-a}}{dt} = \lambda_a\, C_{Bi-u} + \lambda_{Bi}\, C_{Pb-a} - (\lambda_v + \lambda_{Bi} + \lambda_{d-a})\, C_{Bi-a} \;. \tag{5-87g}$$

In Gl. (5-87a) wurde die auf das Volumen V bezogene Quellstärke mit $q_{Rn} = Q_{Rn}/V$ bezeichnet (q_{Rn} hat also die Einheit Bq/(m^3 h)).

Zur Darstellung von Ergebnisse der Lösung dieses ODL-Systems bzw. eines entsprechenden SDE-Systems werden die Aktivitätskonzentrationen der kurzlebigen Radontochternuklide zur Zustandsgröße der gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration C_{eq} zusammengefasst. C_{eq} entspricht jener Radonkonzentration, bei der im Gleichgewicht mit den kurzlebigen Tochternukliden die gleiche PAE vorliegen würde, die im aktuellen Zustand eines Nicht-Gleichgewichtes zwischen Rn-222 und den Folgenukliden vorhanden ist. Die PAE der kurzlebigen Radonfolgeprodukte beträgt (siehe [ICRP 93]):

PAE_{Po-218} = 3615 MeV/Bq; PAE_{Pb-214} = 17840 MeV/Bq; PAE_{Bi-214} = 13250 MeV/Bq

(die PAE von Po-214 ist mit einem Wert von 2 keV/Bq vernachlässigbar). Aus der Relation der Anteile der einzelnen Radontöchter an der PAE im radioaktiven Gleichgewicht resultiert für C_{eq} die Formel

$$C_{eq} = 0{,}104 \cdot C_{Po-218} + 0{,}514 \cdot C_{Pb-214} + 0{,}382 \cdot C_{Bi-214} \;, \tag{5-88}$$

wobei die in Gl. (5-88) stehenden Aktivitätskonzentrationen der Radontöchter jeweils als Summe der Aktivitätskonzentrationen der unangelagerten und der angelagerten Fraktionen zu verstehen sind:

$$C_r = C_{r-u} + C_{r-a} \qquad (r = \text{Po-218; Pb-214; Bi-214}). \tag{5-89}$$

Zur Diskussion der Ergebnisse von Simulationsrechnungen ist der Gleichgewichtsfaktor hilfreich, der hier mit G_{Rn} bezeichnet sei:

$$G_{Rn} = C_{eq}/C_{Rn}. \tag{5-90}$$

Für deterministische Modellrechnungen werden die Quellstärke q_{Rn} und die physikalisch veränderbaren Parameter des ODL-Systems Gl. (5-87) als Konstanten bzw. als bekannte Funktionen der Zeit definiert, wonach unter Beachtung geeigneter Anfangsbedingen Zeitverläufe der interessierenden Zustandsgrößen berechnet werden können. Häufig ist auch nur der Gleichgewichtszustand für einen konstantem Quellterm und konstante Werte der Modellparameter von Interesse. Mit den o. g. Werten der Modellparameter λ_a, p, $\lambda_{d\text{-}u}$ und $\lambda_{d\text{-}a}$ sowie einem konstanten Wert der Luftwechselrate von λ_v (hier: $\lambda_v = 0{,}5\ h^{-1}$) sind bei konstanter Quellstärke q, für die ein Wert von 100 Bq/(m^3·h) angesetzt sei, alle Aktivitätskonzentrationen proportional zu q. Mit den o. g. Werten resultieren stationäre Lösung von Gl. (5-87) mit C_{Rn} = 197 Bq/m^3 und C_{eq} = 88 Bq/m^3, woraus ein Gleichgewichtsfaktor von G_{Rn} = 0,448 resultiert. Der zur Abschätzungen von Strahlenexpositionen durch Inhalation kurzlebiger Radonfolgeprodukte üblich angesetzte Wert eines Gleichgewichtsfaktors von 0,5 stimmt damit gut überein.

Wenn Parameter des ODL-Systems Gl. (5-87) als stochastische Prozesse zu betrachten sind, so ist ein entsprechendes SDE-System zu formulieren und mit Methoden der stochastischen Integration zu lösen. Hier sei zunächst der Fall betrachtet, dass nur die Lüftungsrate λ_v ein stochastischer Prozess ist. Dieser Parameter kann als zusammengesetzter POISSON-Prozess (ZPP, B.4.1.4) modelliert werden. Es sei

$$R(t) = \sum_{k\geq 1} Z_k \cdot 1_{t \geq T_k}(t) = \sum_{k=1}^{N(t)} Z_k\ , \quad R(0) = 0, \tag{5-91}$$

ein ZPP der auf dem elementaren POISSON-Prozess N(t) ~ Poi(μ·t) basiert, dessen Sprunghöhen jedoch durch iid Zufallsgrößen Z_k ~ Bt(α,β) definiert sind. Dann ist

$$\lambda_v(t)\,\Delta t = R(t+\Delta t) - R(t) = \Delta R(t)$$

der im Zeitintervall Δt erfolgte Luftaustausch zwischen dem betrachteten Raum und der Umgebung, zu der eine vernachlässigbar kleine Radonkonzentration angesetzt wird. Für ein infinitesimales Zeitintervall dt ergibt sich damit aus Gl. (5-87) das folgende SDE-System:

$$dC_{Rn} = -\lambda_{Rn}\ C_{Rn}\ dt + q_{Rn}\ dt - C_{Rn}\ dR\ ; \tag{5-92a}$$

$$dC_{Po-u} = \lambda_{Po}\ C_{Rn}\ dt - (\lambda_{Po} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\ C_{Po-u}\ dt - C_{Po-u}\ dR\ ; \tag{5-92b}$$

$$dC_{Po-a} = \lambda_a\ C_{Po-u}\ dt - (\lambda_{Po} + \lambda_{d-a})\ C_{Po-a}\ dt - C_{Po-a}\ dR\ ; \tag{5-92c}$$

$$dC_{Pb-u} = \lambda_{Pb}\ C_{Po-u}\ dt + p\,\lambda_{Pb}\ C_{Po-a}\ dt - (\lambda_{Pb} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\ C_{Pb-u}\ dt - C_{Pb-u}\ dR\ ; \tag{5-92d}$$

$$dC_{Pb-a} = \lambda_a\ C_{Pb-u}\ dt + (1-p)\,\lambda_{Pb}\ C_{Po-a}\ dt - (\lambda_{Pb} + \lambda_{d-a})\ C_{Pb-a}\ dt - C_{Pb-a}\ dR\ ; \tag{5-92e}$$

$$dC_{Bi-u} = \lambda_{Bi}\ C_{Pb-u} dt - (\lambda_{Bi} + \lambda_a + \lambda_{d-u})\ C_{Bi-u}\ dt - C_{Bi-u}\ dR\ ; \tag{5-92f}$$

$$dC_{Bi-a} = \lambda_a C_{Bi-u}\ dt + \lambda_{Bi}\ C_{Pb-a}\ dt - (\lambda_{Bi} + \lambda_{d-a})\ C_{Bi-a}\ dt - C_{Bi-a}\ dR\ . \tag{5-92g}$$

Für die nachfolgende Beispielrechnung wurde für den stochastischen der Luftwechsel-Prozess R(t) eine Intensität des EPP N(t) ~ Poi(μ·t) von $\mu = 6\ h^{-1}$ gewählt. Zur Vergleichbarkeit mit dem in Beispiel 5.2-1 betrachteten zeitdiskreten Prozess zur Radonkonzentration wurde hier für die Verteilung der Sprunghöhen Z ~ Bt(α,β) mit α = 0,4 und β = 4,4 gerechnet. Damit resultieren gemäß Gl. (B-111)/(B-112) für den ZPP ein Erwartungswert von E[dR] = dt·0,5 h^{-1} und eine Varianz von Var[dR] = dt·0,121 h^{-1}, die gut mit der in Beispiel 5.2-1 als zeitdiskreter Prozess mit Δt = 1 h angesetzten Lüftungsrate von λ_v ~ Ga(α, β) übereinstimmt, für die sich mit α = 2 und β = 0,25 ein Erwartungswert von 0,5 und eine Varianz von 0,125

ergaben. Die Modellierung des Luftwechsels durch einen ZPP wurde hier deshalb vorgenommen, weil sich damit (im Unterschied zum Ansatz eines zeitkontinuierlichen Gamma-Prozesses) auf relativ einfache Weise eine exakte Lösung des SDE-Systems Gl. (5-92) berechnen lässt. In Abbildung 5-25 sind eine mit der o.g. Parametrisierung des ZPP simulierte zufällige Realisierung r(t) dieses Prozesses sowie die darauf basierenden Lösungen von Gl. (5-92) für die Radonkonzentration $C_{Rn}(t)$, die gleichgewichtsäquivalente Radonkonzentration C_{eq} und den Gleichgewichtsfaktor G_{Rn} dargestellt, wobei als Anfangswerte die (stationären) Erwartungswerte der Gl. (5-92) gewählt wurden, die gemäß $E[dR]/dt = 0{,}5\ h^{-1}$ mit der stationären Lösung des ODE-Systems Gl. (5-87) für $\lambda_v = 0{,}5\ h^{-1}$ übereinstimmt, wozu auch hier mit einer Rn-Quellstärke von $q_{Rn} = 100\ Bq/(m^3 \cdot h)$ gerechnet wurde. Die für einen Zeitraum von 250 h dargestellten Trajektorien wurden mit einem Zeitschritt von 0,01 h berechnet.

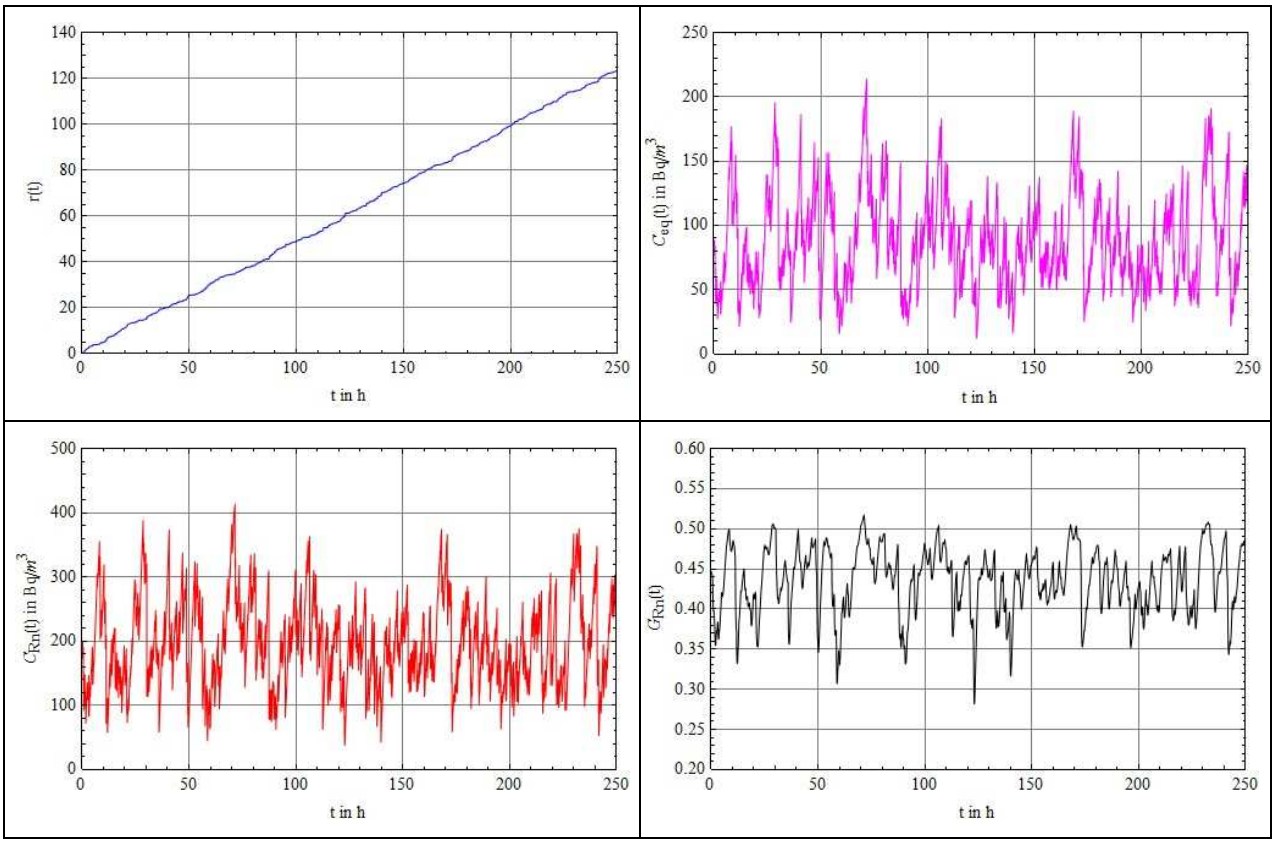


Abbildung 5-25: Zufällige Realisierung r(t) des stochastischen Luftwechselprozesses (links oben) sowie damit nach Gl. (5-92) berechnete Trajektorien zur Radonkonzentration $C_{Rn}(t)$ (links unten), gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration $C_{eq}(t)$ (rechts oben) und zum Gleichgewichtsfaktor $G_{Rn}(t)$ (rechts unten)

Für die in Abbildung 5-25 dargestellte zufällige Realisierung des SDE-Systems Gl. (5-92) stimmen die mittleren Aktivitätskonzentrationen gut mit den stationären Lösungen des deterministischen Modells überein ($E[C_{Rn}] = 196\ Bq/m^3$, $E[C_{eq}] = 88\ Bq/m^3$). Die Variationskoeffizienten liegen etwas über 0,4. Die Trajektorien $C_{Rn}(t)$ und $C_{eq}(t)$ ähneln sich zwar stark, weichen jedoch tatsächlich infolge der verzögerten Nachbildung der Radonfolgeprodukte nach den Luftwechselereignissen voneinander ab, wodurch sich die

Schwankungen des Gleichgewichtsfaktors ergeben. Für $G_{Rn}(t)$ resultieren ein Erwartungswert von 0,435 und eine Standardabweichung von 0,040, was einem Variationskoeffizienten von ca. 0,1 entspricht.

Die Dynamik der zeitlichen Variation des Gleichgewichtsfaktors ist aus Abbildung 5-26 ersichtlich. Durch ein Luftwechselereignis werden "momentan" $C_{Rn}(t)$ und $C_{eq}(t)$ um den gleichen zufälligen Faktor von $(1 - z_k)$ gemäß Z_k $Bt(\alpha,\beta)$ reduziert, wodurch sich zunächst der Gleichgewichtsfaktor nicht verändert. Danach steigt die Radonkonzentration zunächst schneller als die der Tochternuklide, wodurch $G_{Rn}(t)$ fällt. Durch den bei fehlendem Luftwechsel nachfolgenden Ausgleichsprozess steigt die Konzentration der Tochternuklide wieder schneller und nähert sich einem Verhältnis zur Radonkonzentration an, die dem stationären Wert des Gleichgewichtsfaktors der Lösung von Gl. (5-87) mit $\lambda_v = 0$ entspricht Dieser Wert liegt für die hier angesetzten Modellparameter bei $G_{Rn}(\lambda_v = 0) = 0{,}614$ (entspricht asymptotischen Werten für C_{Rn} und C_{eq} von 13228 bzw. 8128 Bq/m^3, die aber wegen nachfolgender Luftwechselereignisse nicht erreicht werden).

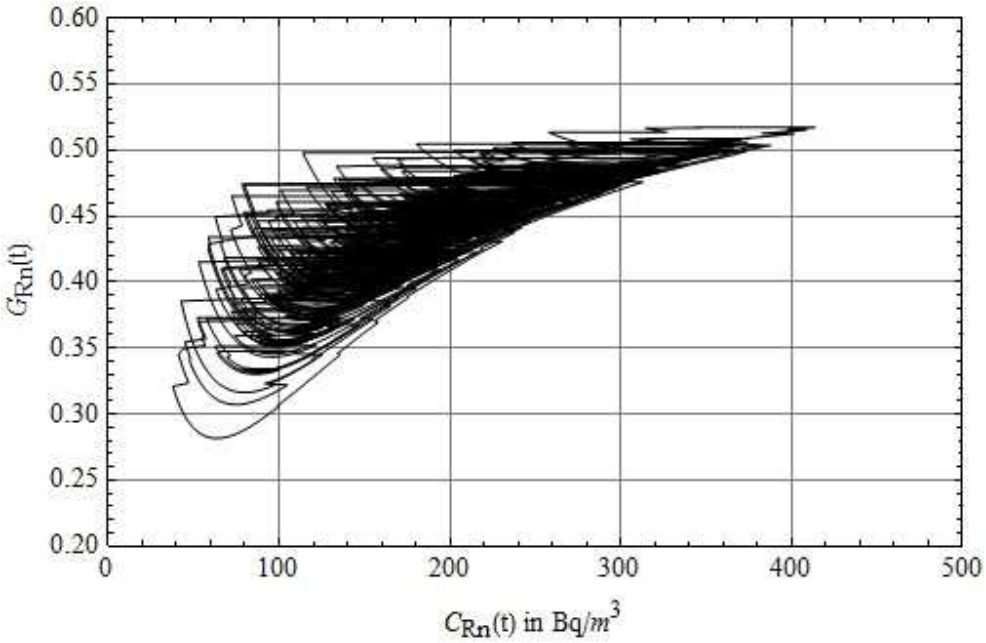


Abbildung 5-26: Dynamik durch den stochastischen Luftwechselprozess verursachter Schwankungen der Radonkonzentration und des Gleichgewichtsfaktors (zeitlicher Ablauf entgegen dem Uhrzeigersinn)

Zum Vergleich mit dem in Beispiel 5.2-1 zur Radonkonzentration betrachteten zeitdiskreten Prozess sind in Abbildung 5-27 noch die Stundenmittel der Luftwechselrate λ_v dargestellt, die der in Abbildung 5-25 gezeigten Realisierung des stochastischen Prozesses R(t) entsprechen. Außerdem ist die empirische Verteilungsfunktion dieser Stundenwerte dargestellt. Der Vergleich mit Abbildung 5-4 zeigt eine große Ähnlichkeit. Im Bereich sehr kleiner Luftwechselraten ist aber eine Abweichung von der angepassten Gammaverteilung klar ersichtlich ist. Sie resultiert daraus, dass ein Gammaprozess nur als Überlagerung einer Vielzahl zusammengesetzter POISSON-Prozesse dargestellt werden kann (siehe Abschnitt B.4.1.6). Das Beispiel zeigt andererseits, dass einfach handhabbare ZPP-Modelle hinreichend genau sein können.

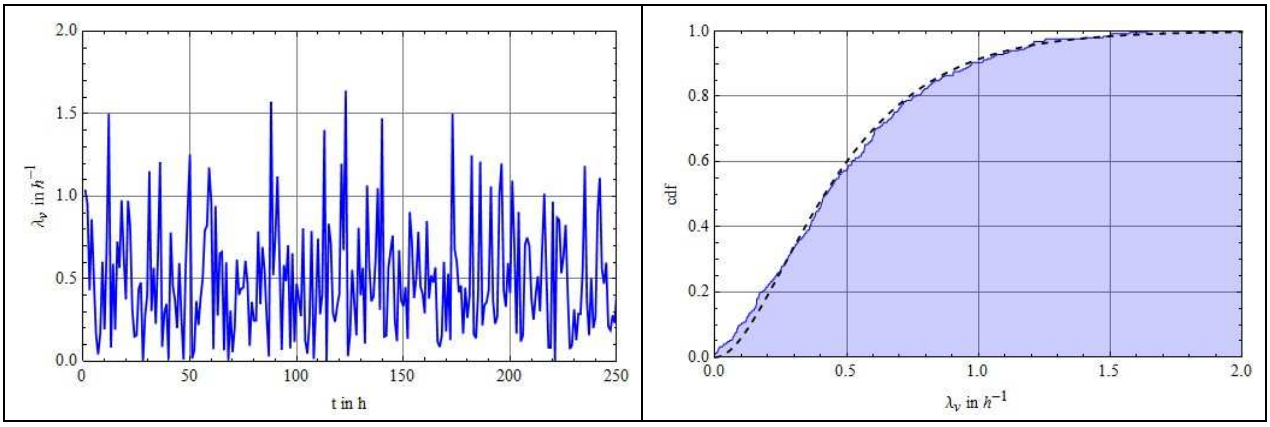


Abbildung 5-27: Zur Realisierung r(t) des stochastischen Luftwechselprozesses aus Abbildung 5-25 berechnete Stundenwerte der Luftwechselrate λ_v und Anpassung dieser Zufallswerte an eine Gammaverteilung ($\lambda_v \sim Ga(\alpha_r,\beta_r)$ mit $\alpha_s = 2{,}05$ und $\beta_r = 0{,}24$).

Ein wesentlicher methodischer Unterschied zwischen dem hier betrachteten System stochastischer Differentialgleichungen und dem in Abschnitt 5.1.1.2 anhand des Beispiels 5.2-1 bzgl. Radon analogen Modells einer linearen ODE mit einer zeitdiskreten stochastischen Koeffizientenfunktion besteht darin, dass eine SDE für beliebige Zeitintervalle Δt gelöst werden kann, ohne dass dadurch wesentliche statistische Kenngrößen verändert werden. Dies folgt aus der speziellen Definition der stochastischen Integration. Die in Abbildung 5-6 für das Beispiel 5.2-1 dargestellte Abhängigkeit des Erwartungswertes $E[C_{Rn}]$ vom Zeitschritt Δt resultiert aus der "gewöhnlichen" Integration.

Zur Einschätzung der wesentlichen Unterschiede zwischen stochastischen und probabilistischen Modellen mit Systemen von Differentialgleichungen sei auf dbzgl. Erläuterungen in Abschnitt 5.1 verwiesen, die völlig analog auch für Systeme von Differentialgleichungen gelten.

Zum Vergleich stochastischer und deterministischer Modelle sei anhand des Beispiels 5.8-1 darauf hingewiesen, dass der Erwartungswert eines linearen SDE-Systems zwar mit der Lösung des entsprechenden ODE-Systems übereinstimmt, dass die stochastische Variabilität der Zustandsgrößen jedoch erheblich sein kann. Bei dem in Beispiel 5.8-1 betrachteten Prozess liegt allerdings eine relativ kurze Korrelationszeit vor (siehe nachfolgende Anmerkung). Sie ist durch den Reziprokwert der mittleren Luftwechselrate bestimmt und liegt bei 3 Stunden. Für Expositionsabschätzungen, die auf eine Prognose der Jahresdosis ausgerichtet sind, wäre für dieses Beispiel eine deterministische Berechnung sicherlich angemessen. Generell können jedoch maßgebliche Zeitkonstanten von SDE-Systemen in der Größenordnung des Zeitraumes einer Expositionsabschätzung oder -prognose liegen, wobei diese ggf. auch auf einen kürzeren Zeitraum als den eines Jahres ausgerichtet sein kann. Folglich kann man nur für den konkreten Anwendungsfall die Frage beantworten, ob durch stochastische Prozesse verursachte zeitliche Schwankungen expositionsrelevanter Zustandsgrößen mit Hilfe von SDE-Systemen genauer untersucht werden sollten oder ob Berechnungen auf der Basis entsprechender deterministischer Modelle ausreichend sind.

Zum Begriff des "Gleichgewichtsfaktors" ist gemäß Abbildung 5-26 festzustellen, dass die beiden Zustandsgrößen C_{qe} und C_{Rn} praktisch zu keinem Zeitpunkt im Gleichgewicht vorliegen und somit $G_{Rn}(t)$ ein stochastische Prozess ist (siehe Abbildung 5-25). Der Erwartungswert $E[G_{Rn}(t)] = 0{,}435$

stimmt jedoch mit dem Gleichgewichtsfaktor des deterministischen Systems Gl. (5-87), für den mit den angesetzten Modellparametern ein Wert von 0,448 resultierte, relativ gut überein.

Anmerkung zur Korrelationszeit:

Die Korrelationszeit eines stationären[73] stochastischen Prozesses X(t) ist als jene Zeitspanne definiert, in der die Autokorrelationsfunktion $\Phi_X(\tau)$ zum ersten Mal und signifikant verschwindet. Sie ist definiert als die mit der Varianz von X normierte Kovarianz der Zufallsgrößen X(t) und X(t + τ) in Abhängigkeit vom Zeitabstand τ (siehe z. B. [LIND 04], [WEI 06]). Für eine über einen Zeitraum von T mit Intervallen von Δt vorliegende Zeitreihe aus I = T/Δt Werten x_i (i von 1 bis I) kann $\Phi_X(\tau)$ wie folgt berechnet werden:

$$\Phi_X(\tau) = \frac{\frac{1}{I-k}\sum_{i=k+1}^{I}(x_i - m_x)(x_{i-k} - m_x)}{\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}(x_i - m_x)^2}, \quad \tau = k\cdot\Delta t \quad \text{und} \quad m_x = \frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I} x_i \,. \tag{5-93}$$

Abbildung 5-28 zeigt die Autokorrelationsfunktionen für die in Abbildung 5-25 dargestellten Verläufe der Radonkonzentration C_{Rn} und gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration C_{eq} des Beispiels 5.8-1. Eine statistisch signifikante Korrelation liegt in diesem Beispiel vor, bis $\Phi_X(\tau)$ zum ersten Mal einen Wert von 0,089 unterschreitet, was einer Korrelationszeit von 3,15 h entspricht.

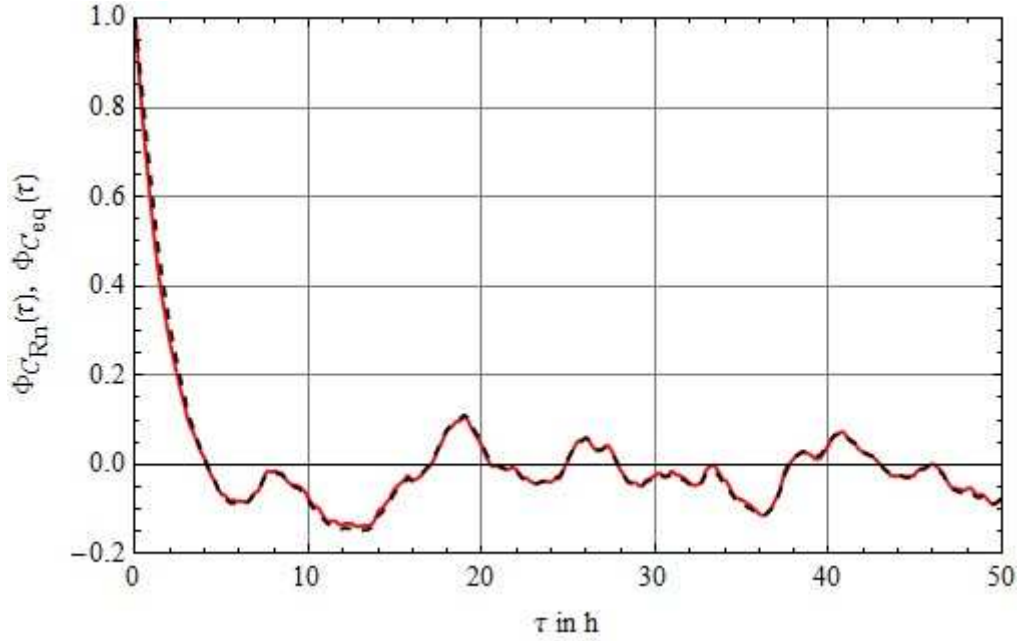


Abbildung 5-28: Autokorrelationsfunktionen zu den stochastischen Verläufen der Radonkonzentration $C_{Rn}(t)$ (rot) und der gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration $C_{eq}(t)$ (schwarz gestrichelt) aus Abbildung 5-25

[73] Ein stochastischer Prozess X(t) ist stationär, wenn die Kovarianz $Cov_X(t, t + \tau)$ nur von der Zeitdifferenz τ abhängt

5.2.1.2. Nichtlineare Punktmodelle

Ein SDE-System wird als nichtlinear bezeichnet, wenn in den Differentialgleichungen einzelne Zustandsgrößen nicht in erster Potenz auftreten und/oder Produkte von Zustandsgrößen vorliegen. Produkte von Zustandsgrößen treten insbesondere dann auf, wenn für einzelne Koeffizienten eines ursprünglichen Modells eine ergänzende Beschreibung durch eine SDE erfolgt. Nach den einführenden Erläuterungen zu dem in Beispiel 5.8-1 betrachteten JACOBI-Modell ist festzustellen, dass der Parameter $\lambda_{a,}$ mit dem die Anlagerung von Radonfolgenuklide an Aerosole/Staub beschrieben wird, relativ große Unsicherheiten aufweist. Wenn im betrachteten Raum eine Staubquelle vorhanden ist (nachfolgend wird vereinfachend die Bezeichnung "Staub" auch für Aerosole verwendet), so wäre es plausibel, dass die Staubkonzentration, die den Parameter λ_a direkt beeinflusst, ähnlich wie die Radonkonzentration, durch den stochastischen Luftwechsel variiert. Alternativ könnten auch Situationen betrachtet werden, bei denen sich durch den Luftwechsel mit der Umgebung die Staubkonzentration im Raum erhöht (z. B. durch den vom Straßenverkehr in einer Stadt erzeugten Feinstaub). Das folgende Beispiel behandelt einen einfachen Fall dbzgl. Ergänzungen/Präzisierungen des SDE-Systems Gl. (5-92).

Beispiel 5.8-2

Ergänzend zu Beispiel 5.8-1 wird angenommen, dass im betrachteten Raum eine konstante Staubquelle q_S vorhanden ist und die Staubkonzentration in der Umgebung gegenüber der Staubkonzentration S(t) im Raum vernachlässigbar klein ist (dies entspricht z. B. einer konstanten Freisetzung von Zigaretten- oder Kerzenqualm bzw. durch Kochen entstehender Aerosole im betrachteten Raum). Es wird angenommen, dass die Anlagerungsrate $\lambda_{a,}$ proportional zur Staubkonzentration ist,

$$\lambda_a(t) = \xi_S\, S(t)\,. \tag{5-94}$$

Außerdem wird die in Gl. (5-92) für die Deposition angelagerter Radonfolgenuklide verwendete Rate $\lambda_{d\text{-}a}$ auch für die Deposition von Staub an den Raumflächen angesetzt. Mit diesen Annahmen ist das SDE-System Gl. (5-92) wie folgt zu präzisieren bzw. zu ergänzen:

$$dC_{Rn} = -\lambda_{Rn}\, C_{Rn}\, dt + q_{Rn}\, dt - C_{Rn}\, dR\ ; \tag{5-95a}$$

$$dC_{Po-u} = \lambda_{Po}\, C_{Rn}\, dt - (\lambda_{Po} + \xi_S S + \lambda_{d-u})\, C_{Po-u}\, dt - C_{Po-u}\, dR\ ; \tag{5-95b}$$

$$dC_{Po-a} = \xi_S\, S\, C_{Po-u}\, dt - (\lambda_{Po} + \lambda_{d-a})\, C_{Po-a}\, dt - C_{Po-a}\, dR\ ; \tag{5-95c}$$

$$dC_{Pb-u} = \lambda_{Pb}\, C_{Po-u}\, dt + p\,\lambda_{Pb}\, C_{Po-a}\, dt - (\lambda_{Pb} + \xi_S\, S + \lambda_{d-u})\, C_{Pb-u}\, dt - C_{Pb-u}\, dR\ ; \tag{5-95d}$$

$$dC_{Pb-a} = \xi_S\, S\, C_{Pb-u}\, dt + (1-p)\,\lambda_{Pb}\, C_{Po-a}\, dt - (\lambda_{Pb} + \lambda_{d-a})\, C_{Pb-a}\, dt - C_{Pb-a}\, dR\ ; \tag{5-95e}$$

$$dC_{Bi-u} = \lambda_{Bi}\, C_{Pb-u} dt - (\lambda_{Bi} + \xi_S\, S + \lambda_{d-u})\, C_{Bi-u}\, dt - C_{Bi-u}\, dR\ ; \tag{5-95f}$$

$$dC_{Bi-a} = \xi_S\, S\, C_{Bi-u}\, dt + \lambda_{Bi}\, C_{Pb-a}\, dt - (\lambda_{Bi} + \lambda_{d-a})\, C_{Bi-a}\, dt - C_{Bi-a}\, dR\ . \tag{5-95g}$$

$$dS = -\lambda_{d-a}\, S\, dt + q_S\, dt - S\, dR\ . \tag{5-95h}$$

Neben der zusätzlichen linearen SDE Gl. (5-95h) enthalten nun die Gl. (5-95c) bis (5-95g) Produkte von Zustandsgrößen und sind damit nichtlinear. Da für die Staubkonzentration S(t) die gleiche Rauschquelle vorliegt wie für die anderen Zustandsgrößen, kann das SDE-System Gl. (5-95) relativ einfach integriert

werden, auch wenn das Auffinden einer analytischen Lösung schwer sein dürfte. Eine rein numerische Integration ist jedoch unproblematisch.

Für eine Vergleichbarkeit der Lösung von Gl. (5-95) mit den Ergebnissen des Beispiels 5.8-1 wird der Proportionalitätsfaktor ξ_S für eine Staubquellstärke q_S von 100 (willkürlicher Konzentrationseinheit $\times$ h^{-1}) so bestimmt, dass sich mit der stationären Lösung des Erwartungswertes von Gl. (5-95h),

$$S_e = \frac{q_S}{\lambda_{d-a} + \mu \cdot \dfrac{\alpha}{\alpha + \beta}}, \tag{5-96}$$

nach Gl. (5-94) die mittlere Anlagerungsrate $\lambda_a = 50\ h^{-1}$ ergibt, mit der in Beispiel 5.8-1 gerechnet wurde. In Gl. (5-96) ist $\mu = 6\ h^{-1}$ wieder die Intensität des EPP; $\alpha = 0{,}4$ und $\beta = 4{,}4$ bestimmen die Sprunghöhenverteilung $Z \sim Bt(\alpha,\beta)$ des ZPP (s. o.). Mit $\lambda_{d\text{-}a} = 0{,}14\ h^{-1}$ ergibt sich dann $\xi_S = 0{,}32\ h^{-1}$ (geteilt durch die willkürliche Einheit der Staubkonzentration). Für die Anfangsbedingungen zur Lösung von Gl. (5-95) wurden wieder die stationären Lösungen der Gleichung für die Erwartungswerte angesetzt (für $S(0) = S_e$ entspricht dies einem Wert von 100/0,64 = 156,25). Mit der zufälligen Realisierung r(t) des ZPP aus Abbildung 5-25 resultieren nun die in Abbildung 5-29 gezeigten Verläufe S(t), $C_{Rn}(t)$, $C_{eq}(t)$ und $G_{Rn}(t)$.

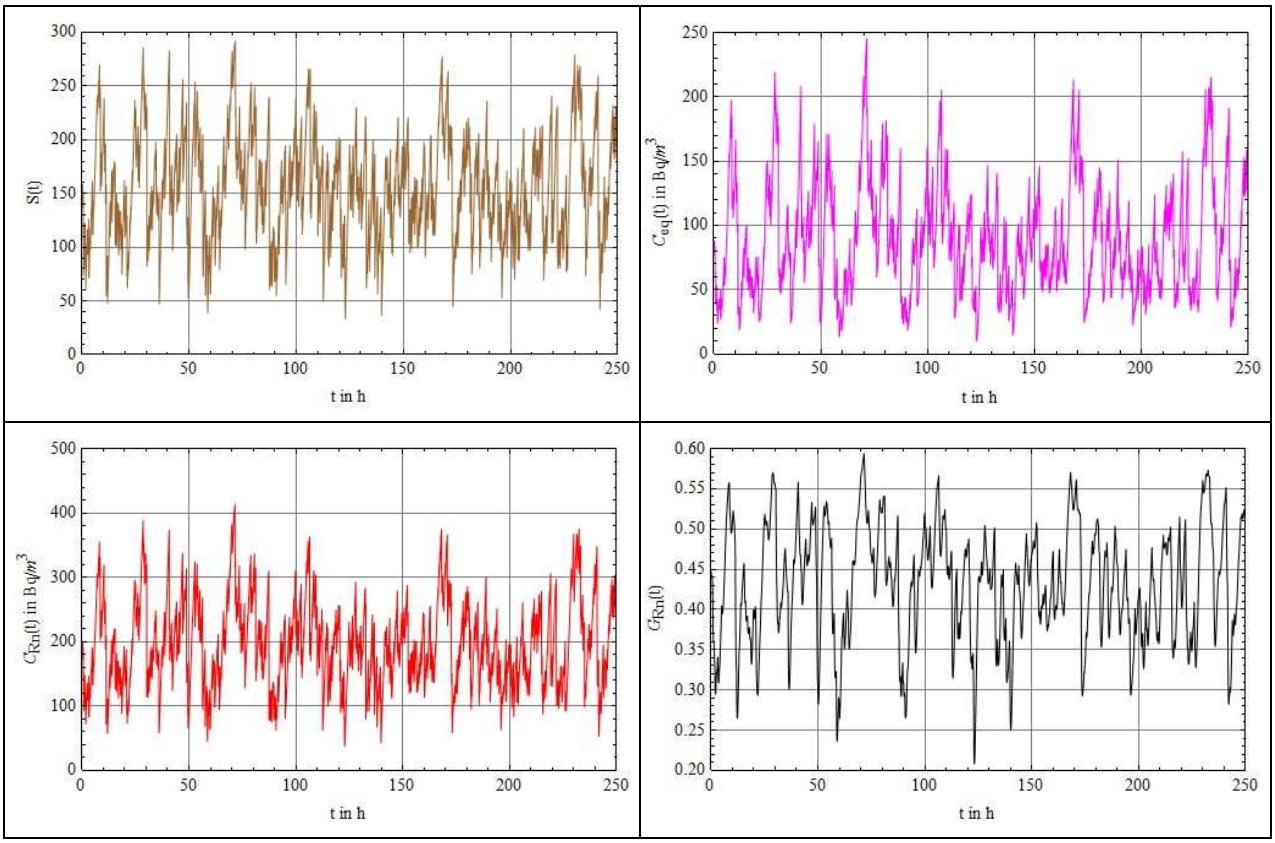


Abbildung 5-29: Verläufe der Staubkonzentration S(t) (links oben), Radonkonzentration $C_{Rn}(t)$ (links unten), gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration $C_{eq}(t)$ (rechts oben) und des Gleichgewichtsfaktors $G_{Rn}(t)$ (rechts unten) nach Gl. (5-95) mit der zufälligen Realisierung r(t) des stochastischen Luftwechselprozesses aus Abbildung 5-25.

Der in Abbildung 5-29 zur Radonkonzentration dargestellte Verlauf ist identisch mit der Rn-Trajektorie aus dem Beispiel 5.8-1 (vgl. mit Abbildung 5-25), da die gleiche SDE gilt und auch die in Beispiel 5.8-1 zugrunde gelegte zufällige Trajektorie des Rauschprozesses R(t) wieder verwendet wurde. Der Verlauf der Staubkonzentration S(t) ist fast proportional zu $C_{Rn}(t)$, weicht davon aber wegen der unterschiedlichen Werte der Zerfallskonstante von Rn-222 (λ_{Rn}) und der Staub-Depositionsrate ($\lambda_{d\text{-}a}$) etwas ab. Deutlich anders als in Beispiel 5.8-1 sind jedoch die Verläufe der gleichgewichtsäquivalenten Radonkonzentration und damit auch des Gleichgewichtsfaktors. Da die Depositionsrate $\lambda_{d\text{-}a}$ für angelagerte Radonfolgenuklide (Staub) bei 1 % der Depositionsrate $\lambda_{d\text{-}u}$ für die unangelagerten kurzlebigen Radontöchter liegt, bewirkt eine über dem Erwartungswert liegende Staubkonzentration einen im Vergleich zu Beispiel 5.8-1 höheren Wert des Gleichgewichtsfaktors, ebenso wie eine unterdurchschnittliche Staubkonzentration eine geringer Anlagerung der Radontöchter an Staub/Aerosole und damit wegen der schnellere Deposition von nicht angelagerten Radontöchter einen kleineren Wert des Gleichgewichtsfaktors bewirkt. Die zu C_{Rn} und C_{eq} stark korrelierten Fluktuationen der Staubkonzentration spreizen somit die Bandbreite der Fluktuationen von C_{eq} und G_{Rn}.[74] Für $G_{Rn}(t)$ resultieren nun ein Erwartungswert von 0,431 mit Standardabweichung von 0,071 (dbzgl. Kenngrößen des Beispiels 5.8-1: 0,435 und 0,040). Die durch korrelierte Schwankungen der Staubkonzentration veränderte Dynamik des Gleichgewichtsfaktors ist aus Abbildungen 5-30 ersichtlich (vgl. mit Abbildung 5-26). Der asymptotisch stationäre Wert des Gleichgewichtsfaktors zur Lösung von Gl. (5-95) bei völlig aussetzendem Luftwechsel (dR =0) liegt nun bei 0,81 (bei einer Staubkonzentration von 714, die nach Gl. (5-94) einer Anlagerungsrate von $\lambda_a = 228\ h^{-1}$ entsprechen würde).

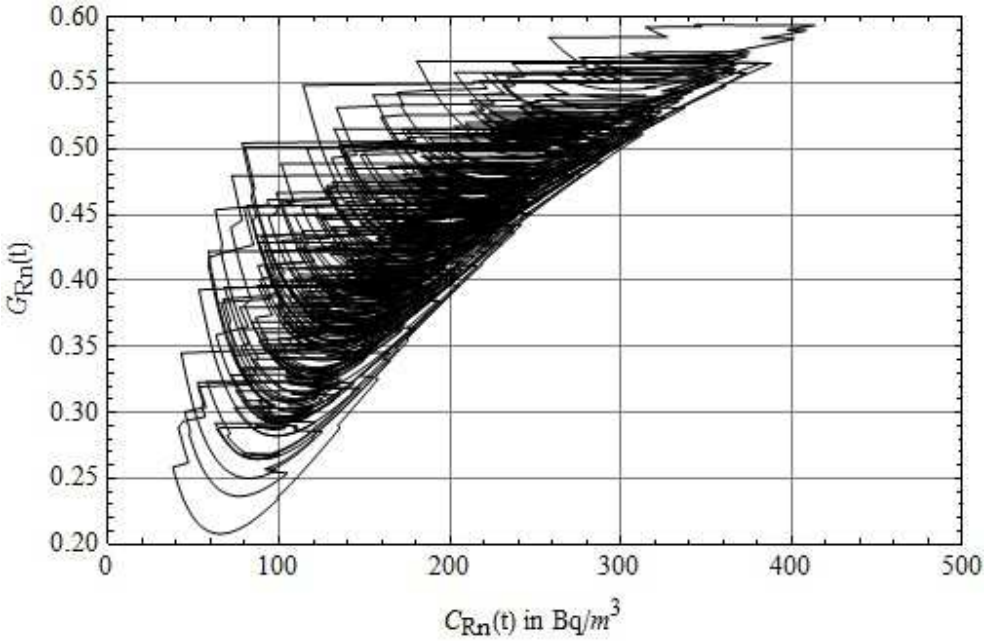


Abbildung 5-30: Dynamik durch den stochastischen Luftwechselprozess verursachter Schwankungen der Radonkonzentration und des Gleichgewichtsfaktors bei korrelierter Fluktuation der Staubkonzentration (zeitlicher Ablauf entgegen Uhrzeigersinn)

[74] Im oben angesprochenen Fall einer aus Umgebungsbelastungen der Außenluft resultierenden Staubquelle, würde dagegen eine starke Antikorrelation vorliegen (die Staubkonzentration erhöht sich dann bei Luftwechsel), wodurch wesentlich kleinere Fluktuation des Gleichgewichtsfaktors resultieren würden.

Wie bereits in Abschnitt 5.2.1.1 zu den Ergebnissen des Beispiels 5.8-1 vermerkt, ist der Begriff des Gleichgewichtsfaktors, der für ODL-Systeme mit konstanten Parametern einen definierten Wert hat (Verhältnis von C_{eq} zu C_{Rn} im Gleichgewichtszustand), für SDE-Systeme eine eher irreführende Bezeichnung. Für das Beispiel 5.8-2 ist aus Abbildung 5-30 ist zu entnehmen, dass G_{Rn} eine breite Verteilung (aleatorische Unsicherheit) mit einer Bandbreite von ca. 50 % des Erwartungswertes aufweist und ein Gleichgewicht zu keinem Zeitpunkt vorliegt. Wenn man Messergebnisse zu $C_{Rn}(t)$ und $C_{eq}(t)$ auf bestimmte Wertebereiche von C_{Rn} bezieht, würden sich zudem unterschiedliche statistische Verteilungen für G_{Rn} ergeben. Ähnliche Effekte spielen in Kompartiment-Modellen, die auf Transferfaktoren basieren (diese entsprechen dem Gleichgewichtsfaktor), eine große Rolle.

5.2.2. Deterministische Kompartiment-Modelle

Für eine vereinfachte Modellierung der Ausbreitung von Radionukliden in der Geo- bzw. Biosphäre können Kompartimente definiert werden, zwischen denen ein Transfer von Radionukliden durch Stoffübertragung bzw. Stoffwechselprozesse erfolgt. Dies sind i. A. dynamische Prozesse, die aus den zeitlichen Veränderungen der Quelle radioaktiver Belastungen durch Umweltmedien und der Kinetik von hydrogeologischen, chemischen, biologischen bzw. ökologischen Prozessen resultieren. Innerhalb der Kompartimente wird eine momentane und perfekte Durchmischung angesetzt.

Für generische Dosisabschätzungen wird der Radionuklidtransfer zwischen Kompartimenten (z. B. der Transfer "Boden → Pflanze → Tier") überwiegend durch Transferfaktoren beschrieben (siehe z. B. [IAEA 01], [BMU 05]). Deren Messung liegt aber die Annahme eines Gleichgewichtszustands zugrunde, in dem zwischen den Aktivitätskonzentrationen von verbundenen Kompartimenten feste Relationen vorliegen, die als Transferfaktoren bezeichnet werden.

Solche Faktoren werden auch für dynamische Situationen verwendet, wie z. B. im Programmsystem RESRAD [YU 01]. Unsicherheiten werden durch probabilistische Simulationsrechnungen auf Basis statistischer Verteilungen untersucht, die auf Messwerten zu den Transferfaktoren basieren. Dies sind oft Lognormalverteilungen (siehe z. B. [YU 00], [IAEA 09]). Epistemische Unsicherheiten werden häufig auch durch Log-Dreiecksverteilungen beschrieben. Auf dieser Basis prognostizierte Strahlenexpositionen, wie zu radiologischen Auswirkungen durch bzw. verbleibende Belastungen nach Sanierungsmaßnahmen, führen mittels MC-Simulation für die berechneten Zielgrößen zu entsprechend breiten Verteilungen (siehe z. B. [IAEA 04C]).

Für Ausbreitungsmodelle, mit denen Analysen oder Prognosen zu dynamischen Veränderungen von radiologischen Umweltbelastungen erstellt werden sollen (z. B. nach Störfällen, Programmsystem RODOS [EHR 97]), aber auch zur Modellierung des Radionuklidtransports in Ökosystemen, in denen durch die zeitliche Variabilität von Umweltbedingungen und die Eigendynamik biologischer Prozesse kaum ein Gleichgewichtszustand entsteht, ist der Ansatz von Transferfaktoren oft nicht gerechtfertigt. Deshalb wurden für diverse Ökosysteme dynamische Modelle auf Basis linearer ODE-Systeme entwickelt, die den Radionuklidtransfer zwischen den einzelnen Kompartimenten durch Transferraten erfassen. Solche Modelle wurden u. a. im Rahmen der IAEA-Programme VAMP (Validation of Model Predictions, 1988 bis 1996), BIOMASS (BIOsphere Modelling und ASSessment Methods, 1996 bis 2001) sowie EMRAS (Environmental Modelling for RAdiation Safety, 2003 bis 2007) entwickelt und verglichen. Dynamische Kompartiment-Modelle für Ökosysteme sind in diversen Veröffentlichungen erläutert, so z. B. für aquatische Systeme in [HELI 97], [IAEA 00], [MON 03], [MON 04], [MON 05], für Forstsysteme in [IAEA 02], [FIE 05],

[AVI 06] oder für Landwirtschaftssysteme in [ABS 01], [IAEA 03A] und [IAEA 03B]. Eine aktuelle Übersicht dynamischer radioökologischer Kompartiment-Modellen für terrestrische und aquatische Nahrungsketten findet man in [IAEA 12]. Zur Veranschaulichung ist in Abbildungen 5-31 das Blockschema des Modells RIFE1 (Forstsystem) für ein Radionuklid mit Zerfallskonstante λ (z. B. für Cs-137 mit $\lambda = 0{,}023\ a^{-1}$) dargestellt.[75] In Gl. (5-97) ist das zugehörige ODL-System angegeben.

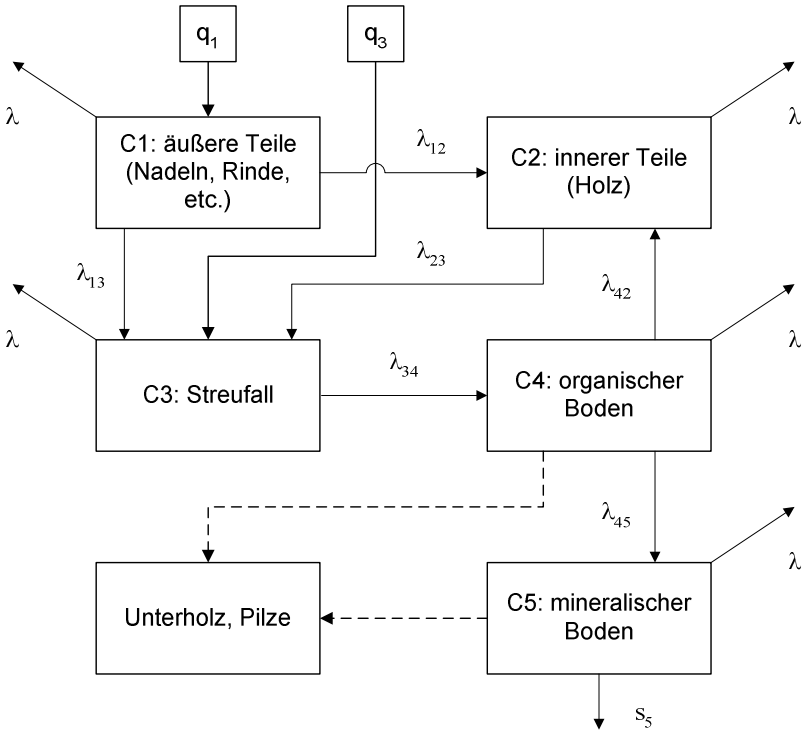


Abbildung 5-31: Schema des Kompartiment-Modells RIFE1 für Forstsysteme (nach [IAEA 02]

$$\frac{dC_1}{dt} = -(\lambda + \lambda_{12} + \lambda_{13})\, C_1 + q_1\,; \tag{5-97a}$$

$$\frac{dC_2}{dt} = \lambda_{12}\, C_1 - (\lambda + \lambda_{23})\, C_2 + \lambda_{42}\, C_4\ ; \tag{5-97b}$$

$$\frac{dC_3}{dt} = \lambda_{13}\, C_1 + \lambda_{23}\, C_2 - (\lambda + \lambda_{34})\, C_3 + q_3\ ; \tag{5-97c}$$

$$\frac{dC_4}{dt} = \lambda_{34}\, C_3 - (\lambda + \lambda_{42} + \lambda_{45})\, C_4\ ; \tag{5-97d}$$

$$\frac{dC_5}{dt} = \lambda_{45}\, C_4 - (\lambda + s_5)\, C_5\ . \tag{5-97e}$$

[75] In Abbildung 5-31 wurden für die weitere Diskussion eigene Bezeichnungen für die Modellparameter gewählt.

An dieser Stelle soll nicht die Vollständigkeit des mit Gl. (5-97) beschriebenen Modells diskutiert werden; es sei aber vermerkt, dass analoge Modelle zur vertikalen Verteilung der Radionuklide im Boden mehrere Bodenschichten für die Fixierung und Desorption ansetzen (siehe z. B. [FIE 05]) bzw. auch weitere Transferraten betrachten, wie z. B. vom Inneren der Bäume zu den Blättern bzw. Nadeln [AVI 06]. Die Aufteilung des Bodens in mehrere Schichten sowie die Modellierung des Radionuklidtransfers zwischen diesen Boden-Kompartimenten (siehe z. B. [COU 88], [MAM 95]) wirft verschiedene Fragen auf; wie zur Relevanz des advektiven bzw. diffusiven Transports der Radionuklide und der mit dem K_d-Ansatz verbundenen Modellunsicherheit [KIR 98]. Generell ist zur Struktur von Kompartiment-Modellen anzumerken, dass die Anzahl von Kompartimenten und ihre Verknüpfungen je nach Fragestellung und der zur Modellanpassung verfügbaren Datenbasis zu spezifizieren ist. Der Ansatz zeitunabhängiger Transferraten ist dabei eine Vereinfachung, die den realen Gegebenheiten häufig nicht entspricht. Für eine ausführliche Diskussion biologischer und konzeptioneller Aspekte der Modellierung von (Forst-) Ökosystemen sei in diesem Zusammenhang auf [STEI 02] verwiesen. Danach spielen Pilze eine wesentliche Rolle in der Dynamik des Radionuklidtransfers als Zwischenspeicher und für den Transport. Das in Abbildung 5-31 dargestellte Modell könnte deshalb zur Verbesserung der Realitätsnähe z. B. durch die Einbeziehung des Blocks "Unterholz und Pilze" als weiteres Kompartiment mit Transferrate zum Streufall-Kompartiment C3 ergänzt werden.

Die Diskussion von Modellunsicherheiten soll hier nicht vertieft werden (siehe Abschnitt 1.2); es ist aber offensichtlich, dass sie sich i. A. substantiell auf die Unsicherheit der Schätzung von Modellparametern aus Messungen und die Ergebnisse von Simulationsrechnungen auswirken können.

Aus dem Vergleich von Abbildung 5-31 und Gl. (5-97) ist die allgemeine mathematische Struktur von dynamischen Kompartiment-Modellen ersichtlich. Für ein Radionuklid mit Zerfallskonstante λ sei $C_j(t)$ die Aktivitätskonzentration im j-ten Kompartiment, $q_j(t)$ der Eintrag (Quellterm) und s_j die Eliminationsrate von Radionukliden aus dem System (Senke) über das j-te Kompartiment sowie λ_{jk} die Transferrate von Kompartiment j zu Kompartiment k. Dann genügt $C_j(t)$ der folgenden ODE:

$$\frac{dC_j(t)}{dt} = -\left(\lambda + s_j + \sum_{k\neq j}^{J} \lambda_{jk}\right) C_j(t) + \sum_{k\neq j}^{J} \lambda_{kj}\, C_k(t) + q_j(t)\,, \quad C_j(0) = C_{j,0} \text{ für } j = 1, \ldots, J. \qquad (5\text{-}98)$$

In Gl. (5-98) sind alle Modellparameter positiv definiert, wobei zur Vereinfachung der Darstellung die Zustandsgrößen C_j für alle Kompartimente in der gleichen physikalischen Einheit angegeben wurden. Für ein Modell mit J Kompartimenten ist dies ein lineares ODE-System, das sich mit gängigen Methoden numerisch und in einfachen Fällen auch analytische lösen lässt. Unter der i. A. zutreffenden Voraussetzung, dass die J×J-Matrix $\mathbf{\Lambda}$ mit den Elementen

$$\Lambda_{jj} = -\left(\lambda + s_j + \sum_{k\neq j}^{J} \lambda_{jk}\right) \quad \text{und} \quad \Lambda_{jk} = \lambda_{kj} \text{ für } k \neq j \qquad (5\text{-}99)$$

J unterschiedliche Eigenwerte aufweist, sind die Lösungen $C_j(t)$ des ODL-Systems (5-98) als lineare Überlagerungen von J Exponentialfunktionen mit unterschiedlichen Zeitkonstanten darstellbar.

Wegen seiner relativ einfachen Lösbarkeit ist dieser Modelltyp sehr attraktiv. Die Rechtfertigung dieses deterministischen Ansatzes und die Berücksichtigung von Unsicherheiten der Anpassung der Modellparameter an Messwerte für prognostische Berechnungen sind jedoch nicht unproblematisch.

Wesentliche Annahmen, die den deterministischen Kompartiment-Modellen zugrunde liegen, wie

- die momentane und perfekte Durchmischung der Radionuklide in den Kompartimenten,
- die Unabhängigkeit der Wahrscheinlichkeit einer Elimination von Radionukliden aus einem Kompartiment von ihrer Residenzzeit sowie
- der Ansatz kinetischer Beziehungen 1. Ordnung für eine Elimination

dürften den realen Mechanismen der Aufnahme, Speicherung, Fixierung, Remobilisierung und Elimination von Radionukliden in biologischen Systemen kaum gerecht werden [NEW 96].

Daraus resultierende Modellunsicherheiten können bei der Interpretation von Unsicherheiten der anhand von Messergebnissen angepassten Modellparameter und deren Nutzung für probabilistische Simulationsrechnungen zu Strahlenexpositionen nicht außer Acht gelassen werden. Sie tragen sicherlich in einem erheblichen Maße zu den teils über Größenordnungen variierenden Messwerten zu Transferfaktoren bei (siehe hierzu [IAEA 10]).

Nachfolgend wird in Abschnitt 5.2.2.1 der Zusammenhang zwischen dynamischen Kompartiment-Modellen nach Gl (5-98) und (statischen) Transferfaktoren erläutert. In Abschnitt 5.2.2.2 wird auf Parameterunsicherheiten deterministischer dynamischer Kompartiment-Modelle eingegangen. Zur Simulation dieser Unsicherheiten werden in Abschnitt 5.2.2.3 possibilistische und probabilistische Ansätze verglichen. Ein generell anderer Ansatz der Datenanalyse und für Simulationsrechnungen ergibt sich, wenn die Transferraten λ_{jk} bzw. Eliminationsraten s_j in Gl. (5-98) nicht als unsichere deterministische Parameter, sondern mit Hilfe von stochastischen Prozessen dargestellt werden. Daraus resultierende stochastische Kompartiment-Modelle könnten für den Radionuklidtransfer in Ökosystemen eine realistische Beschreibung der Variabilität und der aus Messungen resultierenden Unsicherheiten der Schätzung von Transfer- und Abbauraten deterministischer Modelle liefern. Diesbezüglich methodische Ansätze werden in Abschnitt 5.2.3 behandelt.

5.2.2.1. Bestimmung von Transferfaktoren aus dynamischen Kompartiment-Modellen

Unter der Annahme, dass ein dynamisches Kompartiment-Modell den Transfer von Radionukliden zwischen den Kompartimenten hinreichend genau beschreibt, lassen sich Transferfaktoren aus der stationären Lösung des entsprechenden ODL-Systems Gl. (5-98) bestimmen, wobei solche Faktoren i. A. nur für aufeinander folgende Kompartimente sinnvoll sind und zudem für das nachgeordnete Kompartiment kein eigener Quellterm vorliegt. Dies entspricht der in Abbildung 5-32 dargestellten Situation, wobei der Quellterm q_1 zum Kompartiment C_1 als konstante Größe anzusetzen ist, weil sonst kein Gleichgewichtszustand entsteht. Der Transferfaktor ist dann als Relation der Aktivitätskonzentrationen (bzw. anderer Aktivitätsmaße) im stationären Zustand definiert:

$$T_{2(1)} = \lim_{t\to\infty} \frac{C_2(t)}{C_1(t)} = \frac{C_{2,stat}}{C_{1,stat}}. \qquad (5\text{-}100)$$

Hierzu sind zwei Fälle zu unterscheiden, für die bei gleicher Systemmatrix $\mathbf{\Lambda}$ sehr unterschiedliche Werte des Transferfaktors $T_{2(1)}$ resultieren können: (1) $q_1 > 0$; (2) $q_1 = 0$ für $t > 0$. Der 1. Fall entspricht z. B. im Hinblick auf die Bestimmung von Transferfaktoren "Boden → Pflanze" oder "Wasser → Fisch" einer anhaltenden Beregnung von Feldern mit kontaminiertem Wasser bzw. kontinuierlichen Einleitung von kontaminiertem Wasser in ein Gewässer. Der 2. Fall entspricht dagegen einer einmaligen Ablagerung bzw. Einleitung von Radioaktivität zum Zeitpunkt t = 0 (der z. B. der Zeitpunkt eines Störfalls sein könnte), wodurch mit $C_1(0) > 0$ ein bestimmter Anfangswert der Aktivitätskonzentration im Kompartiment C1 resultiert. Die weitere Zustandsentwicklung wird ausschließlich durch den homogenen Teil von Gl. (5-98) bestimmt. Das folgende Beispiel weist auf Unterschiede der für diese beiden Fälle resultierenden Transferfaktoren hin.

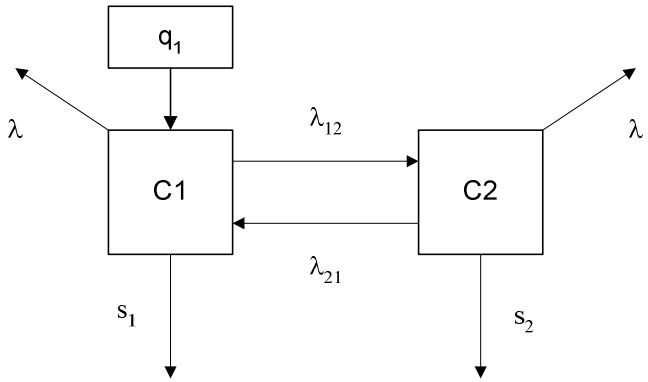


Abbildung 5-32: Modell mit zwei Kompartimenten und Quellterm nur im 1. Kompartiment

Beispiel 5.9-1

In diesem Beispiel wird die Bestimmung von Transferfaktoren für die beiden o. g. Fälle verdeutlicht. Zur Verkürzung der Darstellung werden die physikalische Zerfallskonstante λ und die beiden Abbauraten s_1 und s_2 zu effektiven Abbauraten λ_1 und λ_2 zusammengefasst:

$$\lambda_1 = \lambda + s_1 \quad \text{und} \quad \lambda_2 = \lambda + s_2 \,. \tag{5-101}$$

Für das in Abbildung 5-32 dargestellte Modell ergibt sich dann nach Gl. (5-99) die Systemmatrix

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} -(\lambda_1 + \lambda_{12}) & \lambda_{21} \\ \lambda_{12} & -(\lambda_2 + \lambda_{21}) \end{pmatrix}, \tag{5-102}$$

deren beiden Eigenwerte

$$\nu_{1,2} = -\frac{\lambda_1 + \lambda_{12} + \lambda_2 + \lambda_{21}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\lambda_1 + \lambda_{12} + \lambda_2 + \lambda_{21})^2 - 4\,(\lambda_1\,\lambda_2 + \lambda_{12}\,\lambda_2 + \lambda_{21}\,\lambda_1)} \tag{5-103}$$

die Verläufe der Zustandsgrößen $C_1(t)$ und $C_2(t)$ als Linearkombinationen der Exponentialfunktionen $\exp(\nu_1 \cdot t)$ und $\exp(\nu_2 \cdot t)$ bestimmen. Mit den für dieses Beispiel angesetzten Werten

$$\lambda_1 = 1;\ \lambda_{12} = 0{,}4;\ \lambda_2 = 0{,}39 \text{ und } \lambda_{21} = 0{,}01 \tag{5-104}$$

folgt: $\nu_{1,2} = -0{,}9 \pm 0{,}504$; d. h., $\nu_1 = -0{,}396$ und $\nu_2 = -1{,}404$.

Fall 1: $q_1 > 0$, $C_1(0) = 0$

Für den Fall eines zeitlich konstanten Quellterms wird mit

$q_1(t) = 139$ für $t > 0$

sowie den Anfangsbedingungen $C_1(0) = 0$ und $C_2(0) = 0$

gerechnet. Die stationären (asymptotischen) Werte der beiden Konzentrationen sowie ihrer Relation sind:

$$C_{1,stat} = \frac{q_1\,(\lambda_2 + \lambda_{21})}{\lambda_{12}\,\lambda_2 + \lambda_1\,(\lambda_2 + \lambda_{21})}, \quad C_{2,stat} = \frac{q_1\,\lambda_{12}}{\lambda_{12}\,\lambda_2 + \lambda_1\,(\lambda_2 + \lambda_{21})}, \quad T_{2(1)} = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_2 + \lambda_{21}}. \qquad (5\text{-}105)$$

Mit den o. g. Parameterwerten ergeben sich für beide Konzentrationen asymptotische Werte von 100 sowie ein Transferfaktor von $T_{2(1)} = 1$. Die mit den o. g. Anfangsbedingungen resultierenden Verläufe

$$C_1(t) = 100 - 1{,}39\,e^{-0{,}396\,t} - 98{,}61\,e^{-1{,}404\,t} \quad \text{und} \quad C_2(t) = 100 - 139{,}29\,e^{-0{,}396\,t} + 39{,}29\,e^{-1{,}404\,t}$$

sowie die Relation $C_2(t)/C_1(t)$ sind in Abbildung 5-33 dargestellt. Hätten die Transferraten die Einheit a^{-1}, so wäre nach ca. 10 Jahren eine sehr genaue Bestimmung des Transferfaktors möglich. Frühe Messungen würden den Transferfaktor unterschätzen.

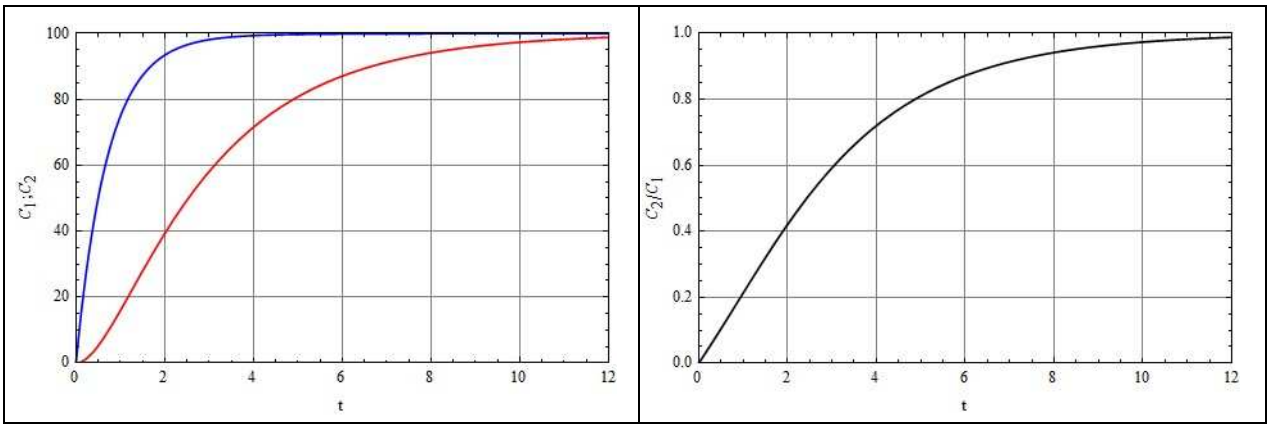


Abbildung 5-33: Zeitabhängigkeit der Konzentrationen (links) $C_1(t)$ (blau) und $C_2(t)$ (rot) sowie der Relation $C_2(t)/C_1(t)$ (rechts) für den Fall 1

Fall 2: $q_1 = 0$, $C_1(0) > 0$

Hierzu wird ein positiver Anfangswert der Konzentration im Kompartiment C_1 angesetzt, wogegen in C_2 die Anfangskonzentration gleich Null sei:

$C_1(0) = 100$ und $C_2(0) = 0$.

Die asymptotischen Werte der beiden Konzentrationen sowie ihrer Relation sind:

$$C_1(t \to \infty) = 0, \quad C_2(t \to \infty) = 0,$$

$$T_{2(1)} = \frac{2\,\lambda_{12}}{\lambda_2 + \lambda_{21} - \lambda_1 - \lambda_{12} + \sqrt{(\lambda_1 + \lambda_{12} - \lambda_2)^2 + 2\,\lambda_{21}\,(\lambda_2 + \lambda_{12} - \lambda_1) + \lambda_{21}^{\;2}}}.$$

Mit den o. g. Parameterwerten ergibt sich in diesem Fall ein Transferfaktor von $T_{2(1)} = 100$, der allerdings erst bei vergleichsweise geringen Konzentrationen erreicht wird. Die mit den o. g. Anfangsbedingungen resultierenden Verläufe

$$C_1(t) = 0{,}395\, e^{-0{,}396\, t} + 99{,}605\, e^{-1{,}404\, t} \quad \text{und} \quad C_2(t) = 39{,}684\left(e^{-0{,}396\, t} - e^{-1{,}404\, t}\right)$$

sowie die Relation $C_2(t)/C_1(t)$ sind in Abbildung 5-34 dargestellt. Auch hier würde bei zu früh erfolgten Messungen der Transferfaktor erheblich unterschätzt werden.

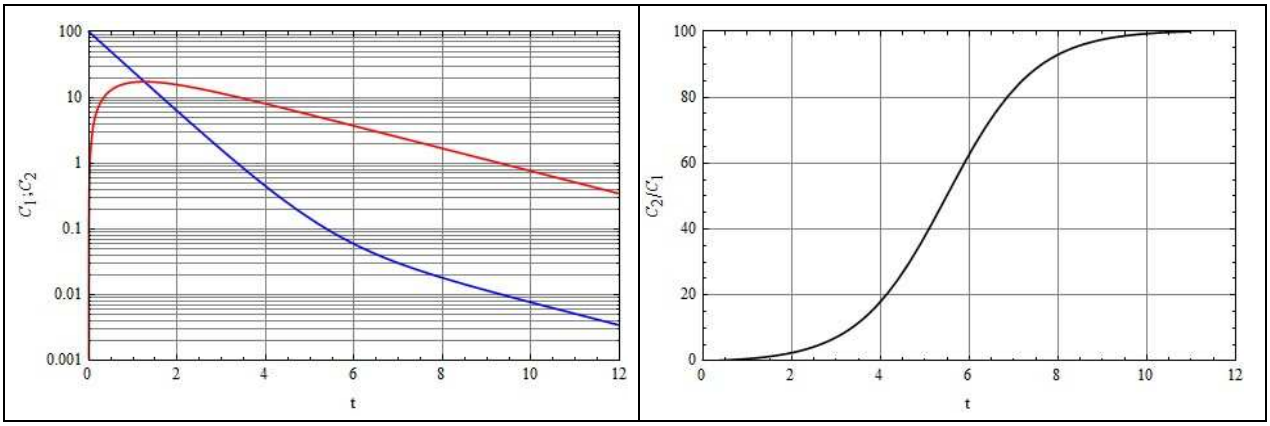


Abbildung 5-34: Zeitabhängigkeit der Konzentrationen (links) $C_1(t)$ (blau) und $C_2(t)$ (rot) sowie der Relation $C_2(t)/C_1(t)$ (rechts) für den Fall 2

Das Beispiel 5.9-1 verdeutlicht, dass Transferfaktoren ein sehr einfaches, in Abhängigkeit von den konkreten Gegebenheiten jedoch auch kritisch zu hinterfragendes Konzept der Quantifizierung des Transports von Radionukliden zwischen Kompartimenten darstellen. Die große Bandbreite von Messergebnissen zu diversen Transferfaktoren dürfte neben regionalen bzw. lokalen Unterschieden der Bodenparameter, Ökosysteme und weiterer spezifischer Gegebenheiten auch dadurch bedingt sein, dass die diesem Konzept zugrunde liegende Gleichgewichtsannahme schlicht nicht erfüllt ist.

Die in [SHEP 05] diskutierte Frage, ob die aus sehr vielen, weltweit bestimmten Transferfaktoren resultierenden Verteilungen mit Bandbreiten von mehreren Größenordnungen (charakterisiert durch Relationen des 0,95-Quantils zum 0,05-Quantil) für Dosisabschätzungen besser oder schlechter geeignet sind als lokal bestimmte Transferfaktoren, die zwar oft eine geringere Variabilität zeigen, bei viel geringerem Stichprobenumfang jedoch mit deutlich größeren epistemischen (Stichproben-) Unsicherheiten verbunden sind, ist interessant, könnte aber am eigentlichen Problem vorbei gehen. Das Beispiel 5.9 verdeutlicht in diesem Zusammenhang, dass selbst bei gleichen Transferraten zwischen und Abbauraten aus den relevanten Kompartimenten in Abhängigkeit von der Ursache der Kontamination (permanente Quelle bzw. Zustand des Abklingens nach einer impulsartig erfolgten Kontamination) sowie durch die Abweichungen vom Gleichgewichtszustand auch rein kinetisch bedingte Unsicherheiten der Messung von Transferfaktoren resultieren können, die über mehrere Größenordnungen reichen können. Insofern sollten auch das Konzept der Transferfaktoren selbst und die Übertragbarkeit entsprechender Messergebnisse (bzw. ihrer statistischen Verteilungen) auf andere Anwendungsfälle hinterfragt werden.

5.2.2.2. Identifikation und Parameterunsicherheit dynamischer Kompartiment-Modelle

Mit dynamischen Kompartiment-Modellen können Übergangsprozesse analysiert werden, wobei für eine radiologische Bewertung z. B. der Maximalwert der Aktivitätskonzentration in einem der Kompartimente nach einer Störung maßgeblich sein kann (siehe hierzu Konzentrationsverläufe in Abbilddung 5-34, wo z. B. der Maximalwert von $C_2(t)$ die relevante Größe darstellen könnte). Für solche Fragestellungen sind Transferfaktoren kaum geeignet. Dynamische Kompartiment-Modelle benötigen allerdings eine größere Anzahl von Parametern - die Transfer- und Abbauraten.

Die Bestimmung der Transferraten λ_{jk} und Abbauraten s_j dynamischer Kompartiment-Modelle, die durch ein ODE-System nach Gl. (5-98) beschrieben werden, verlangt selbst dann einen hohen Aufwand für Messungen und Parameterschätzungen, wenn die (i. A. nicht zutreffende[76]) Annahme, dass diese Modellparameter zeitunabhängige Konstanten sind, gerechtfertigt wäre. In der Regel können nicht alle J Zustandsgrößen $C_j(t)$ gemessen werden, sondern es gibt M Messgrößen $Y_m(t)$, die mit $M \leq J$ in vielen Anwendungsfällen als Linearkombinationen der J Zustandsgrößen $C_j(t)$ beschrieben werden können.[77] Die Quellstärken $q_j(t)$ sind i. A. nur für wenige Kompartimente eines Modells relevant und werden als Linearkombination voneinander unabhängiger Funktionen $u_l(t)$ (mit l von 1 bis L) dargestellt.[78] Für deterministische Kompartiment-Modelle wird angenommen, dass die Inputvariablen des Systems bekannte bzw. kontrollierbare Funktionen sind. Die Messergebnisse der Outputvariablen $Y_m(t)$ weisen zufällige Schwankungen auf, die durch M Funktionen $\eta_m(t)$ dargestellt werden. In der Realität enthalten sie zwar auch die Auswirkungen schwankender Umwelteinflüsse; in deterministischen Kompartiment-Modellen werden sie aber ausschließlich als Messunsicherheiten interpretiert und haben somit keine Rückwirkung auf das Systemverhalten. Für das mit Gl. (5-98) definierte Kompartiment-Modell ergeben sich dann die folgende Vektor-Differentialgleichung für die Zustandsgrößen und eine zugehörige Messgleichung:

$$\frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} = \mathbf{\Lambda}\,\mathbf{C}(t) + \mathbf{B}\,\mathbf{U}(t)\,, \quad \mathbf{C}(0) = \mathbf{C_0}, \tag{5-106}$$

$$\mathbf{Y}(t) = \mathbf{H}\,\mathbf{C}(t) + \boldsymbol{\eta}(t)\,. \tag{5-107}$$

$\mathbf{C}(t)$ und $\mathbf{C_0}$ sind J-dimensionale Vektoren, $\mathbf{U}(t)$ ist ein L-dimensionaler Vektor, $\mathbf{\Lambda}$ ist eine J×J- und $\mathbf{B}$ eine J×L-Matrix. $\mathbf{Y}(t)$ und $\boldsymbol{\eta}(t)$ sind M-dimensionale Vektoren, $\mathbf{H}$ ist eine M×J-Matrix.

---

[76] Für das in Abbildung 5-31 dargestellte Modell ist z. B. die Transferrate λ_{13} ein durch die Niederschlagsereignisse bestimmter stochastischer Prozess (siehe Beispiel 5.5-1), der zudem wegen saisonaler Schwankungen nicht stationär ist. Saisonale und langfristige Schwankungen bzgl. trockener/feuchter Jahre dürften aber auch für die Transferrate λ_{34} u. a. wegen des Einflusses des Wetterverlaufes (Temperatur, Niederschläge) auf die Ausbreitung und biologische Aktivität von Pilzen nicht vernachlässigbar sein.

[77] Zur Veranschaulichung dieses Umstandes sei auf das Beispiel 5.8-1 verwiesen, wo die Radonkonzentration C_{Rn} und die gleichgewichtsäquivalente Radonkonzentration C_{eq} Messgrößen wären, nicht aber die Aktivitätskonzentrationen der unangelagerten und angelagerten kurzlebigen Radontöchter, die aber Zustandsgrößen darstellen, aus denen entsprechend Gl. (5-88) und Gl. (5-9) die Messgröße C_{eq} als Linearkombination resultiert.

[78] So können z. B. die Quellstärken q_1 und q_3 des in Abbildung 5-31 skizzierten Modells als Linearkombinationen von trockener Ablagerung u_1 und durch Wash-Out bedingter feuchter Ablagerung u_2 dargestellt werden, wobei sich die auf die Kompartimente C1 und C3 anfallenden Anteile unterscheiden: $q_1 = a_1 \cdot u_1 + a_2 \cdot u_2$; $q_3 = (1-a_1) \cdot u_1 + (1-a_2) \cdot u_2$.

Die Matrix **H** der Messgleichung Gl. (5-107) ist bekannt. Wird vorausgesetzt, dass auch **B** und **U**(t) bekannt sind, so können die Parameter der System-Matrix **Λ**, in der meistens nur wenige der nicht-diagonalen Elemente besetzt sind, i. A. anhand von Messreihen $\mathbf{Y}(t_i)$ (i = 1 bis I) geschätzt werden, wozu unterschiedliche statistische Verfahren verfügbar sind. Erläuterungen solcher Schätzmethoden findet man u. a. in [GOOD 77], [LJU 99], [ISER 11], [KEES 11]. Die Modellparameter werden oft durch Anpassung nach dem Kriterium der kleinsten quadratischen Abweichung zwischen Modell-rechnungen und Messwerten geschätzt. Maximum-Likelihood-Schätzer und BAYES-Methoden sind aber ebenso gängige Verfahren, wobei mit letzteren die Unsicherheiten der Parameterschätzungen genauer quantifiziert werden können [CAR 92], [CART 94]. Maximum-Likelihood-Schätzungen ermöglichen dagegen nur die Bestimmung von Varianzen/Kovarianzen der Schätzunsicherheiten.

Die Voraussetzungen für eine (sinnvolle) Schätzung der Modellparameter sind jedoch nicht immer gegeben. In Abhängigkeit von **H** kann **Λ** "nicht-identifizierbar" sein. Bei Schätzungen mit den o. g. Methoden würden dann "zufällige" Werte resultieren (siehe dbzgl. Ausführungen in den vier obigen Referenzen sowie Kap. 3 in [WANG 12]). Eine Methode zur Prüfung der Identifizierbarkeit linearer Kompartiment-Modelle (mit Beispielrechnungen für ein System mit vier Kompartimenten und drei Messgrößen) ist in [AUD 98] dargelegt. Das folgende Beispiel illustriert diese Problematik für das in Abbildung 5-32 dargestellte Modell mit zwei Kompartimenten.

Beispiel 5.9-2

Für das in Abbildung 5-32 dargestellte Modell aus zwei Kompartimenten wird $Y(t) = C_1(t)$ gemessen, wobei der in Gl. (5-107) angegebene Rauschterm vernachlässigbar sei. Zur Prüfung der Identifizierbarkeit der Parameter $\lambda_1 = \lambda + s_1$, λ_{12}, $\lambda_2 = \lambda + s_2$ sowie λ_{21} (siehe Gl. (5-101) und (5-102) wird die Übertragungs-funktion G(s) betrachtet (sie ist das Verhältnis der LAPLACE-Transformierten der Messgröße Y(t) zur LAPLACE-Transformierten der Inputvariablen q(t), wobei die LAPLACE-Variable mit s bezeichnet sei):

$$G(s) = \frac{s + \lambda_2 + \lambda_{21}}{(s - \nu_1)\,(s - \nu_2)}; \qquad (5\text{-}108)$$

ν_1 und ν_2 sind die zwei in Gl. (5-103) angegebenen Eigenwerte der System-Matrix **Λ** gemäß Gl. (5-102). Aus Gl. (5-108) und Gl. (5-103) ist ersichtlich, dass das Übertragungsverhalten für die Messgröße $C_1(t)$ nur durch drei Kombinationen der vier Modellparameter λ_1, λ_{12}, λ_2 und λ_{21} bestimmt ist:

$$a = \lambda_1 + \lambda_{12}, \qquad (5\text{-}109a)$$

$$b = \lambda_2 + \lambda_{21}, \qquad (5\text{-}109b)$$

$$c = \lambda_1\,\lambda_2 + \lambda_{12}\,\lambda_2 + \lambda_{21}\,\lambda_1 = a\,b - \lambda_{12}\,\lambda_{21}. \qquad (5\text{-}109c)$$

Folglich können für beliebige Realisierungen der Inputvariablen q(t) durch Messungen von $C_1(t)$ die vier Modellparameter nicht bestimmt werden. Möglich ist nur die Bestimmung der drei in Gl. (5-109) angegebenen Kombinationen dieser Parameter. So würden z. B. neben den in Beispiel 5.9-1 angesetzten Parameterwerten

$\lambda_1 = 1{,}0$; $\lambda_{12} = 0{,}4$; $\lambda_2 = 0{,}39$ und $\lambda_{21} = 0{,}01$ (B-104)

auch mit

$\lambda_1 = 1{,}2$; $\lambda_{12} = 0{,}2$; $\lambda_2 = 0{,}38$ und $\lambda_{21} = 0{,}02$ oder (B-104')

$\lambda_1 = 0{,}6$; $\lambda_{12} = 0{,}8$; $\lambda_2 = 0{,}395$ und $\lambda_{21} = 0{,}005$ (B-104")

die gleichen Verläufe der Messgröße $C_1(t)$ resultieren, denn für alle drei Varianten gilt a = 1,4; b = 0,4 und c = 0,556. Allein mit einer Messung von $C_1(t)$ wäre also die System-Matrix $\mathbf{\Lambda}$ nicht identifizierbar.[79] Die Auswirkungen einer fehlerhaften Schätzung der vier Modellparameter durch eine Spezifizierung unter Einhaltung von Gl. (5-109) würden sich natürlich nicht in der Zustandsvariablen $C_1(t)$ zeigen, die in diesem Beispiel mit der Messgröße Y(t) übereinstimmt, sondern in der Zustandsvariablen $C_2(t)$, die nicht gemessen und somit nicht zur Parameterschätzung genutzt werden konnte, die jedoch für Prognosen zum Systemverhalten wichtig sein kann (z. B. bzgl. aus $C_2(t)$ resultierender Expositionen). In Abbildung 5-35 sind hierzu analog zur Abbildung 5-33 für den in Beispiel 5.9-1 betrachteten "Fall 1" (Parameterwerte nach Gl. (5-104)) die Verläufe der Konzentrationen $C_1(t)$ und $C_2(t)$ dargestellt, wenn die Parameterwerte nach Gl. (5-104') bzw. Gl. (B-104") angesetzt werden. Während für $C_1(t)$ in den drei Rechenfällen gleiche Verläufe resultieren, erhält man für $C_2(t)$:

Parameter nach Gl. (B-104'): $$C_2(t) = 50 - 69{,}64\,e^{-0{,}396\,t} + 19{,}64\,e^{-1{,}404\,t},$$

Parameter nach Gl. (B-104"): $$C_2(t) = 200 - 278{,}58\,e^{-0{,}396\,t} + 78{,}58\,e^{-1{,}404\,t}.$$

Im Vergleich zum Verlauf von $C_2(t)$ mit Parameterwerten nach Gl. (5-104) resultiert also mit Gl. (B-104') eine um den Faktor 0,5 kleinere und mit Gl. (B-104") eine um den Faktor 2 größere Konzentration.

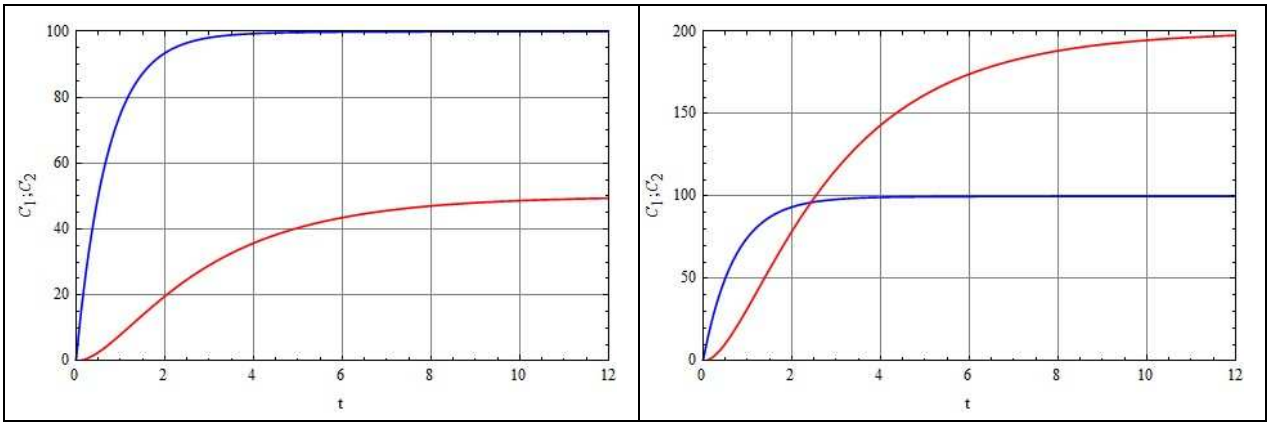


Abbildung 5-35: Zeitabhängigkeit der Konzentrationen $C_1(t)$ (blau) und $C_2(t)$ (rot) bei Ansatz der Parameterwerte nach Gl. (B-104') (links) bzw. Gl. (B-104") (rechts); Quellstärke und Anfangsbedingungen wie in Beispiel 5.9-1, Fall 1 (q = 139, $C_1(0) = C_2(0) = 0$)

Ein Nachweis der Identifizierbarkeit ist somit eine Voraussetzung für eine sinnvolle Schätzung der Parameter von Kompartiment-Modellen anhand von Messungen. Für das Beispiel 5.9-2 war diese Prüfung elementar. Generell sind zur Prüfung der Identifizierbarkeit von Kompartiment-Modellen spezielle mathematische Methoden anzuwenden (siehe z. B. [AUD 98], [CAT 98], [BENV 02]).

---

[79] Die "Nicht-Identifizierbarkeit" bedeutet (leider) nicht, dass die gängigen Schätzverfahren, wie Anpassung nach dem Kriterium der kleinsten quadratischen Abweichung, Maximum-Likelihood-Schätzung oder BAYES-Schätzungen, keine Ergebnisse liefern würden. Diese können allerdings völlig falsch sein und zufällig von der Messunsicherheit $\eta(t)$ aus Gl. (5-107) bestimmt sein.

Die Bestimmung der Parameter dynamischer radioökologischer Kompartiment-Modellen erfolgt häufig durch Anpassung nach dem Kriterium der kleinsten quadratischen Abweichung mittels nichtlinearer Regression, wozu implizit angenommen wird, dass alle Abweichungen gegenseitig unkorreliert und normalverteilt sind (siehe hierzu [BAT 88], [KUN 98], [SEB 03]). In vielen (radio-) ökologischen Kompartiment-Modellen sind aber äußere Einwirkungen/Quellstärken oft für mehrere Kompartimente relevant und dann als korrelierte bzw. gegenseitig abhängige Größen anzusehen, die in Schwankungen von Umweltparametern bzw. -ereignissen gemeinsame Ursachen haben. Eine ähnliche Situation kann für pharmakokinetische Modelle vorliegen. Dies begrenzt die Eignung von Regressionsmethoden und spricht für die Anwendung von BAYES-Methoden zur Schätzung der Parameter von Kompartiment-Modellen, mit denen auch Korrelationen/Abhängigkeiten zwischen den Zustandsvariablen berücksichtigt werden [WAKE 96], [CLAR 05], [HACK 06], [HOET 09].

Die oben angesprochene Problematik der Identifizierbarkeit der Parameter der System-Matrix $\mathbf{\Lambda}$ wird bei Schätzungen mit BAYES-Methoden, wozu überwiegend MCMC-Methoden mit GIBBS-Sampling (siehe Abschnitt 4.2.2.2) für hierarchisch strukturierte Modelle angewandt werden (siehe z. B. [WIK 03], [CLAR 05], [CRE 09]), weitgehend ausgeklammert. Da für BAYES-Schätzungen zu allen unsicheren Parameter eine Priorverteilung vorzugeben ist, wird dadurch auch die Posteriorverteilung für Parameter beeinflusst, die eigentlich nicht identifizierbar sind. Ausführlich wird die Bestimmung von Priorverteilungen für nicht-identifizierbare Parameter in [GEL 99] diskutiert. Enge Priorverteilungen, die auf Expertenschätzungen basieren (im Sinne "subjektiver" BAYES-Methoden), beeinflussen die Inferenz stark und bewirken eine schwache Wichtung der Information der Daten. Breite Priorverteilungen (nicht-informative Ansätze im Sinne "objektiver" BAYES-Methoden) führen für nicht identifizierbare Modelle zu zweifelhaften Posteriorverteilungen und Konvergenzproblemen der MCMC-Algorithmen. In [GEL 99] wird ein Mittelweg zwischen diesen beiden extremen Ansätzen zur Spezifizierungen von Priorverteilungen empfohlen.

5.2.2.3. Possibilistische und probabilistische Simulation von Unsicherheiten

Weitgehend analog zu den in Abschnitt 5.1.3.2 erläuterten Unterschieden von possibilistischen bzw. probabilistischen Methoden der Behandlung epistemischer Parameterunsicherheiten, führen diese beiden Ansätze auch für Kompartiment-Modelle zu unterschiedlichen Aussagen. Zur Berechnung von possibilistischen Verteilungen ist ein "rechentechnisches" Problem zu beachten, das sich daraus ergibt, dass die unsicheren Parameter in der Lösung des Gleichungssystems Gl. (5-98) mehrfach und in nicht-linearer Weise eingehen (siehe z. B. Gl. (5-103)). Bei Anwendung der elementaren Intervall-Arithmetik resultieren daraus für die Zielfunktion zu breite Möglichkeitsverteilungen, weil bei Computerberechnungen für in Formeln mehrfach auftretende Variable entsprechende Intervalle als voneinander unabhängige Größen behandelt werden.

Dieses als "Intervall-Abhängigkeit" bekannte Problem (siehe z. B. [MOO 09]) kann schon anhand elementarer Operationen veranschaulicht werden. Für die Funktion $y = f(x_1, x_2) = x_1 - x_2$ mit den Intervallgrößen $x_1 = [0, 1]$ und $x_2 = [0, 1]$ resultiert korrekt $y = [0 - 1, 1 - 0] = [-1, 1]$. Man erhält mit dieser Intervallarithmetik aber das gleiche Resultat für $f(x_1, x_1) = x_1 - x_1$, anstatt korrekt $[0, 0]$. Nun ist zwar $[0, 0] \in [-1, 1]$ und insofern das richtige Ergebnis im berechneten Intervall enthalten, solche Intervallverbreiterungen sind aber unerwünscht. Als weiteres Beispiel sei $y = f(x) = x\cdot(1 - x)$ mit $x = [0, 1]$ betrachtet. Zum zweiten Faktor liefert ein Computer: $1 - [0, 1] = 1 + [-1, 0] = [0, 1]$.

Damit folgt für y das Intervall y = [0, 1]·[0, 1] = [0, 1]. Das korrekte Ergebnis ist aber y = [0, 0,25]. Für die Funktionsdarstellung $y = x - x^2$ würde sogar y = [-1, 1] resultieren.

Ist eine Funktion $y = f(x_1, \ldots, x_n)$ in allen n possibilistischen Variablen x_i monoton, so resultiert ein exaktes y-Intervall, wenn y für die 2^n Kombinationen unterer und oberer Intervallgrenzen $x_{i,min}$ und $x_{i,max}$ berechnet und daraus die minimalen und maximalen Wert bestimmt werden, $y = [y_{min}, y_{max}]$. Diese "Vertex-Methode" [DONG 87] führt aber zu Fehlern, wenn die Funktion $y = f(x_1, \ldots, x_n)$ ihr Minimum bzw. Maximum nicht an einer der 2^n Ecken des aus den n Intervallen $[x_{i,min}, x_{i,max}]$ gebildeten Hyperwürfels annimmt, sondern auf einer Kante bzw. im Inneren des Würfels. Dies betrifft z. B. die oben betrachtete Funktion y = x·(1 - x), die ihr Maximum bei x = 0,5 erreicht. Die Vertex-Methode würde hier fälschlich zu y = [0, 0] (statt y = [0, 0,25]) führen. Eine Anwendung der Vertex-Methode verlangt somit immer die Prüfung der hierfür erforderlichen Voraussetzungen.

Beispiel 5.9-3

Es werden Auswirkungen epistemischer Unsicherheiten der Abbau- und Transferraten aus Beispiel 5.9-1 auf die Eigenwerte ν_1 und ν_2 nach (Gl. 5-103) sowie Konzentrationen $C_{1,stat}$ und $C_{2,stat}$ nach Gl. (5-105) betrachtet. Hierzu wurden für die Parameter λ_1, λ_{12}, λ_2 und λ_{21} Möglichkeitsverteilungen angenommen, die in Abbildung 5-36 dargestellt sind. Ihre Core-Werte entsprechen den Konstanten aus Gl. (5-104). Die Unsicherheiten liegen bei ±10 % für λ_1, λ_2 und λ_{21} bzw. bei ±5 % für λ_{12}.

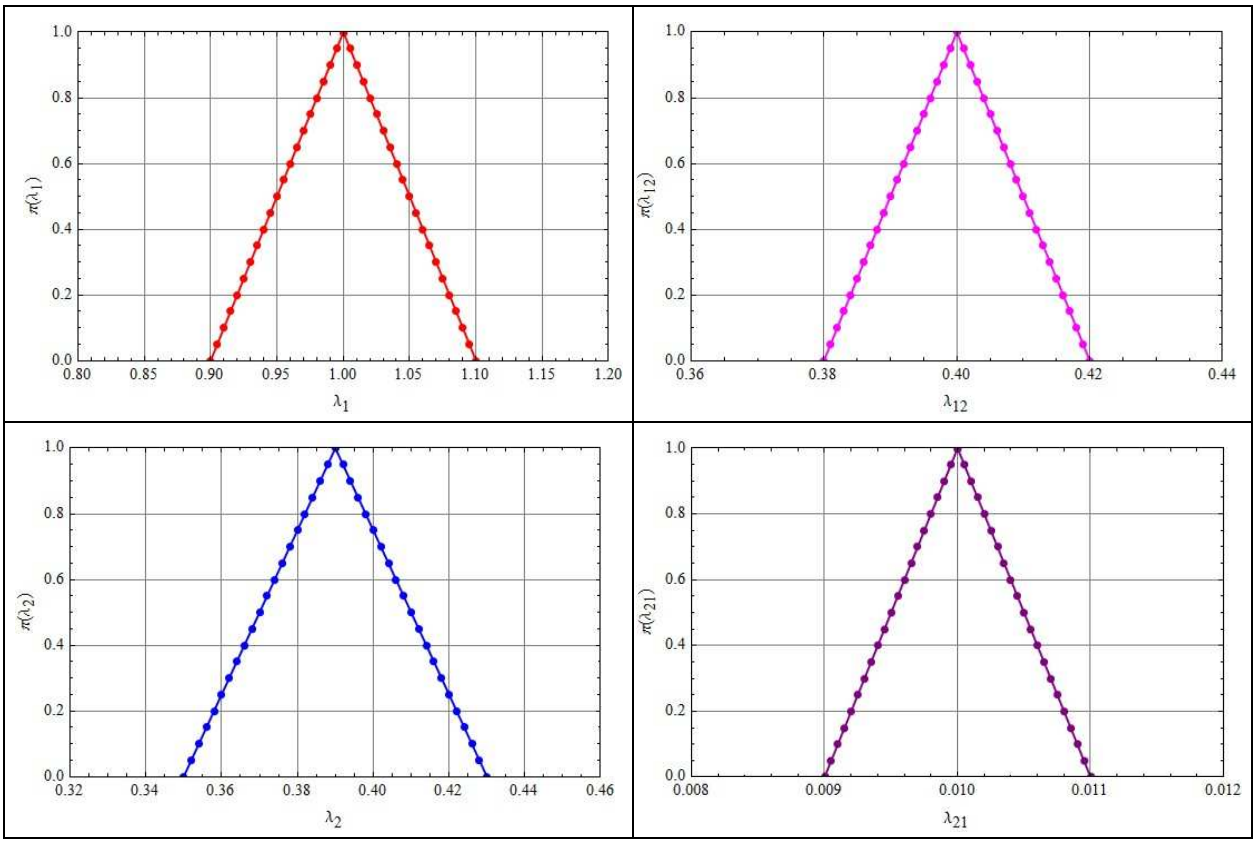


Abbildung 5-36: Möglichkeitsverteilungen für die Abbau- und Transferraten aus Beispiel 5.9-1

Aus den vier Möglichkeitsverteilungen für die Abbau- und Transferraten aus Abbildung 5-36 resultieren nach Gl. (5-103) für die Eigenwerte ν_1 und ν_1 sowie nach Gl. (5-105) für die asymptotischen Werte $C_{1,stat}$ und $C_{2,stat}$ der beiden Konzentrationen des Kompartiment-Modells aus Abbildung 5-32 (für den "Fall 1" aus Beispiel 5.9-1; konstanter Quellterm) Möglichkeitsverteilungen, die sich durch Intervallrechnung für die verschiedenen Vertrauensniveaus π ergeben. Dabei sind für alle Variable die zu einem bestimmten Vertrauensniveau vorliegenden Intervalle zu verknüpfen. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 5-36 sowie in den beiden folgenden Abbildungen für Vertrauensniveaus von 0(0,05)1 jeweils die unteren und oberen Intervallgrenzen durch Punkte hervorgehoben.

E sei angenommen, dass die Unsicherheiten der vier Variablen λ_1, λ_2, λ_{21} und λ_{12} nicht korreliert sind.[80] Abbildung 5-37 veranschaulicht hierzu die Unterschiede einer simplen Intervallarithmetik im Vergleich zur Vertex-Methode. Die exakten Intervalle der Möglichkeitsverteilungen liegen immer innerhalb der mit simpler Intervallarithmetik berechneten Intervalle, die z. T. erheblich "rechnerisch" erweitert sind. Die Bedingung der Monotonie für die Anwendung der Vertex-Methode ist erfüllt (siehe Abbildung 5-38).

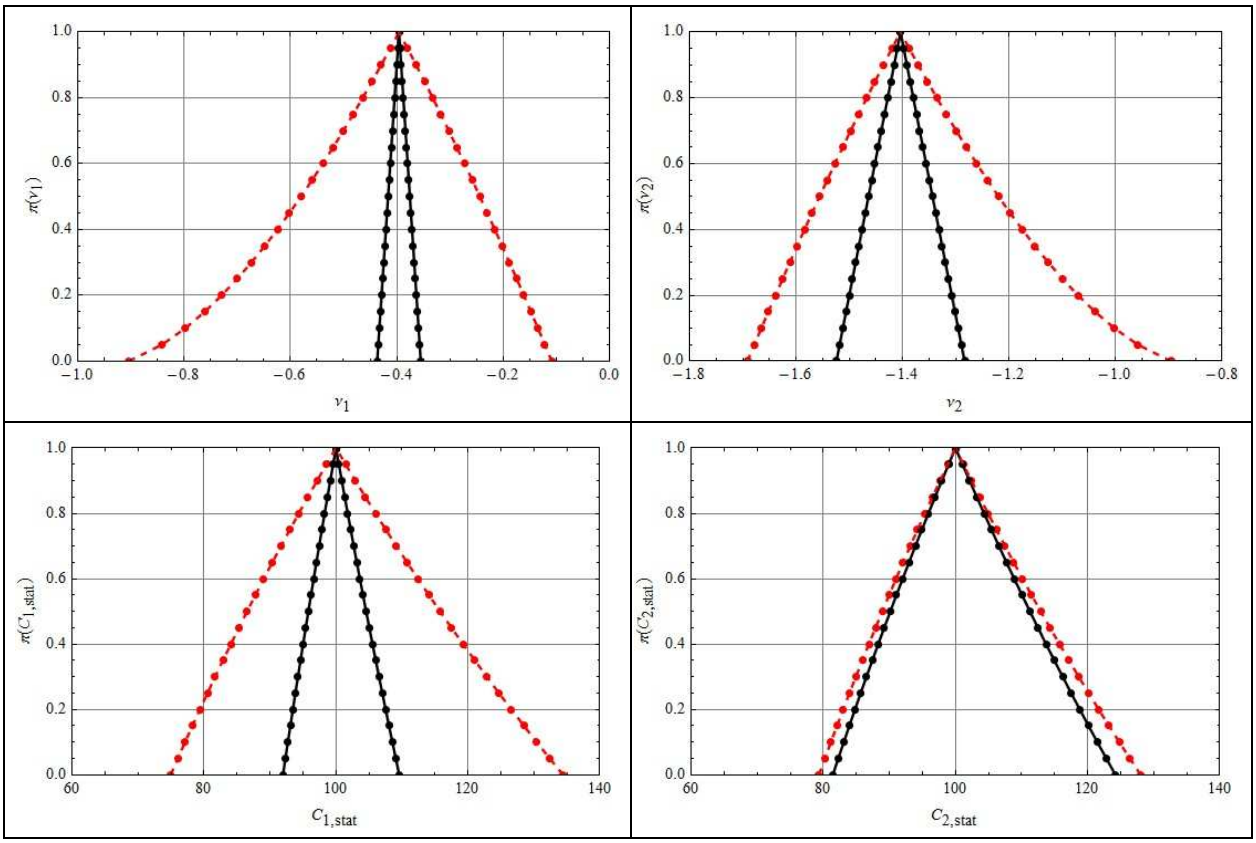


Abbildung 5-37: Possibilistische Verteilungen von ν_1, ν_2, $C_{1,stat}$ und $C_{2,stat}$ nach Berechnungen mit der Vertex-Methode (schwarz) bzw. simpler Intervall-Arithmetik (rot, gestrichelt)

[80] Diese Annahme vereinfacht die folgenden Berechnungen erheblich, dürfte aber in realen Anwendungsfällen meist nicht erfüllt sein. Ebenso wie epistemische Unsicherheiten der anhand von Daten geschätzten Parameter üblicher statistischer Verteilungen gegenseitig abhängig sind (siehe dbzgl. Beispiele in Abschnitt 4.2), sind auch Unsicherheiten der Schätzung der Parameter von Kompartiment-Modellen i. A. korreliert. Zu intervall-basierten Methoden der Behandlung von Korrelation solcher Unsicherheiten siehe z. B. [CHAU 01], [CARL 05], [CEB 07] und [NGU 12].

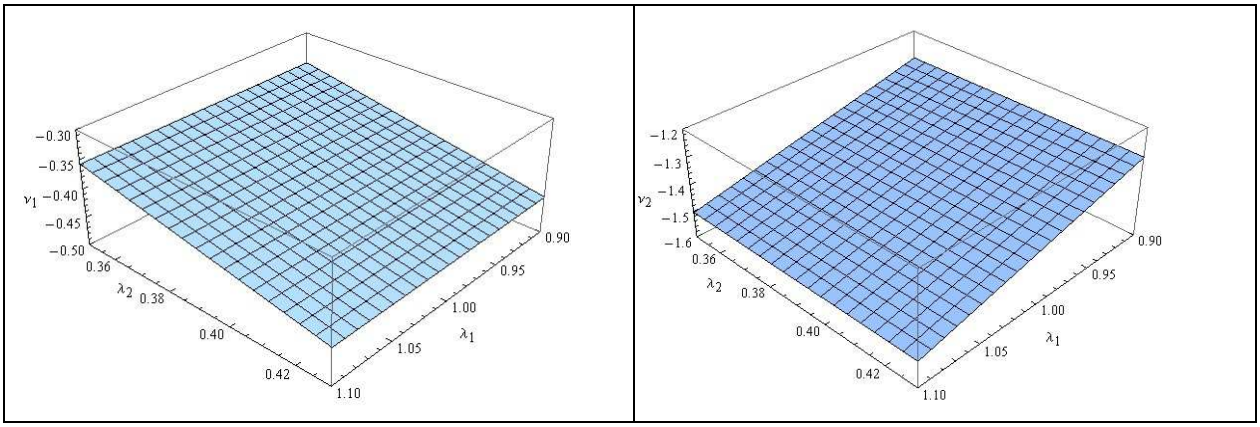


Abbildung 5-38: Beispiel zur Überprüfung der monotonen Abhängigkeit der Eigenwerte ν_1 und ν_2 von den Modellparametern λ_1 und λ_2 (Darstellung für λ_{12} = 0,40 und λ_{21} = 0,01)

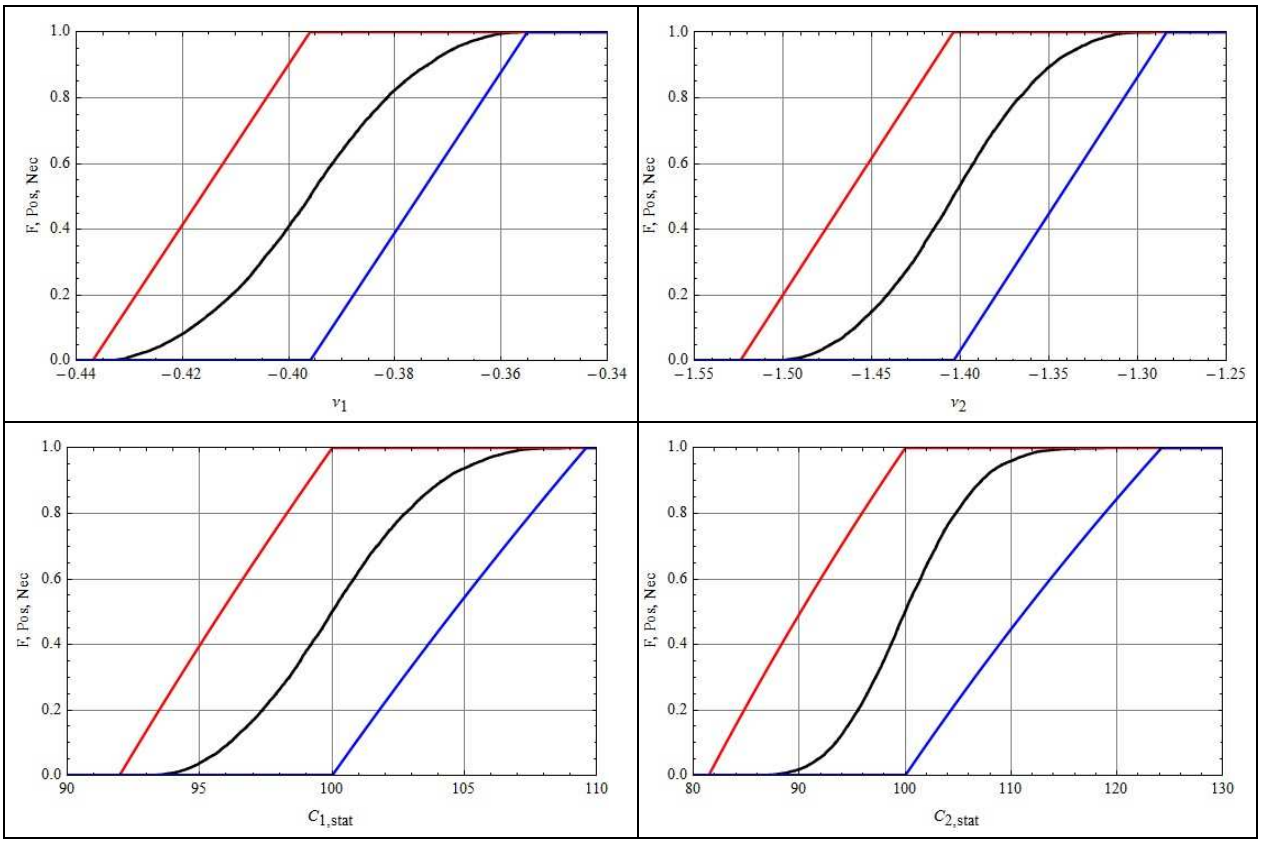


Abbildung 5-39: Verteilungsfunktion F (schwarz) sowie Möglichkeit Pos (rot) und Notwendigkeit Nec (blau) für Eigenwerte ν_1 und ν_2 (oben) sowie Konzentrationen $C_{1,stat}$ und $C_{2,stat}$ (unten)

Abbildung 5-39 zeigt nach Gl. (5-103) und Gl. (5-105) durch MC-Simulation berechnete probabilistische Verteilungsfunktionen für ν_1 und ν_2 sowie $C_{1,stat}$ und $C_{2,stat}$, wozu Dreiecksverteilungen angesetzt wurden, die bis auf die Normierung der Abbildung 5-36 entsprechen, sowie die aus Abbildung 5-37 resultierenden Möglichkeits- und Notwendigkeitsfunktionen (zur Berechnung von Pos und Nec siehe Gl. (2-93)/(2-94)). Der wesentliche Unterschied zwischen einer probabilistischen bzw. einer possibilistischen Behandlung von Parameterunsicherheiten besteht auch hier in den grundsätzlich verschiedenartigen Annahmen und der Interpretation der Ergebnisse. Der probabilistische Ansatz liefert im Sinne der klassischen Statistik eine Aussage zu relativen Häufigkeiten bzw. im Sinne der BAYES-Theorie zu begründeten Erwartungen. Mit dem possibilistischen Ansatz wird die zwischen Möglichkeit und Notwendigkeit liegende Unsicherheit zur Prognose von Ereignissen quantifiziert. Im possibilistischen Ansatz resultieren für ein bestimmtes Vertrauensniveau Bandbreiten für die Zielfunktionen, die auf Basis der zugrunde gelegten Informationen nicht weiter eingeengt werden können.

Die Berechnung possibilistischer Verteilungen für Funktionen $y = f(x_1, \ldots, x_n)$, die nicht-monoton von den (possibilistischen) Variablen x_i abhängen, erfordert Algorithmen, mit denen auch auf den Kanten bzw. im Inneren von n-dimensionalen Hyperwürfeln liegende Minima und Maxima erfasst werden. Hierzu finden sich in der Fachliteratur verschiedene Ansätze (siehe z. B. [HAN 05]), deren rechentechnische Umsetzung jedoch mit einem hohen Aufwand verbunden ist. Dies dürfte einer der Gründe sein, warum für praktische Anwendung oft MC-Simulationsrechnungen genutzt werden, auch wenn die zugrunde liegenden aleatorischen Unsicherheiten, wie z. B. auf Expertenschätzungen basierende Verteilungen, zumindest im Sinne der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie nicht probabilistisch interpretiert werden können. Mit der BAYES'schen Interpretation des Begriffs der Wahrscheinlichkeit (siehe Abschnitt 2.7.1) wird dieses Problem jedoch umgangen.

5.2.3. Stochastische Kompartiment-Modelle

Deterministische dynamische Kompartiment-Modelle basieren auf dem naturwissenschaftlichen bzw. technischen Verständnis des untersuchten Systems und beschreiben auf dieser Grundlage den Stofftransfer (Massen, Aktivitäten etc.) zwischen den Kompartimenten sowie mit der Umwelt. Sie werden auch als "White-Box"-Modelle bezeichnet. Eine Methode der empirischen Modellierung komplexer Systeme sind so genannte "Black-Box"-Modelle, die auf der Anpassung von Zeitreihen-Modellen basieren, wozu insbesondere autoregressive Modelle mit gleitendem Mittelwert angesetzt werden (so genannte ARMA-bzw. VARMA-Modelle[81], siehe z. B. [LÜT 05], [WEI 06], [KIRC 07], [BIS 11]). Ihre optimale Ordnung kann mit dem AKAIKE-Informations-Kriterium bestimmt werden (siehe Abschnitt 4.1.3.2). Aus einem Vergleich von "White-Box"- und "Black-Box"-Modellen kann ggf. abgeleitet werden, ob ein deterministisches Kompartiment-Modell für die Beschreibung des Systemverhaltens eine ausreichende Anzahl von Kompartimenten enthält, mit denen die Struktur eines dynamischen Systems gemäß dem Ziel der Modellierung (Verständnis von Phänomenen, Simulation von Handlungsoptionen, Erstellung von Prognosen) hinreichend genau zu erfassen ist. Die Möglichkeiten, durch Einbindung von weiteren Kompartimenten deutliche Verbesserungen der deterministischen Modellierung zu erreichen, stoßen jedoch oft an Grenzen der Realisierbarkeit (Messbarkeit, Messumfang etc.).

---

[81] ARMA ist das Akronym für Autoregressive Moving Average Modelle; VARMA bedeutet Vektor-ARMA.

Als Alternative zu einer Verkomplizierung von deterministischen Kompartiment-Modellen und zu empirischen Zeitreihen-Modellen (deren Nutzungsmöglichkeiten zwangsläufig beschränkt sind) bieten stochastische Kompartiment-Modelle die Möglichkeit, naturwissenschaftliches bzw. technisches Wissen zur Struktur von Systemen und die Ergebnisse der statistischen Datenanalyse auf effektive Weise zu verbinden. Hierzu ist ein deterministisches Modell, wie die Prozessgleichung Gl. (5-106), additiv durch stochastische Prozesse zu ergänzen bzw. es sind Modellparameter durch stochastische Prozesse so zu ersetzen, dass damit nicht kontrollierte/kontrollierbare Umwelteinwirkungen auf das System und aus Modellvereinfachungen resultierende Abweichungen von der Realität möglichst gut erfasst werden. Stochastische Kompartiment-Modelle werden auch "Grey-Box"-Modelle genannt. Sie haben ein breites Anwendungsspektrum (siehe [KRIS 04A], [TOR 04], [KRIS 05], [MØLL 11]).

Ähnlich zu den in Abschnitt 5.1 behandelten stochastischen Differentialgleichungen (SDE) für eine einzelne Zustandsgröße sind auch für stochastische Kompartiment-Modelle die Fälle einer additiven bzw. einer multiplikativen Ergänzung/Änderung des deterministischen Modells durch stochastische Prozesse zu unterscheiden. Man kann deshalb von Fremd- bzw. Parametererregung sprechen, auch wenn mit diesen Rauschprozesse keine definierte bestimmte sprechen, stochastische Prozesse zu unterscheiden.

5.2.3.1. Fremderregte Systeme

Stochastische Kompartiment-Modelle können für zeitdiskrete stochastische Differenzengleichungen bzw. für zeitstetige SDE-Systeme des Zustandsvektors $\mathbf{X}(t)$ formuliert werden. Für den Vektor $\mathbf{Y}$ der Messgrößen liegt dagegen immer eine Zeitreihe vor.

In der zeitdiskreten Form der Prozessgleichung Gl. (5-106) für einen Zustandsvektor $\mathbf{X}(t)$ wird k als Index für die zeitliche Reihenfolge genutzt: $\mathbf{X}(t_k) = \mathbf{X}_k$ und $\mathbf{X}(t_k - \Delta t) = \mathbf{X}_{k-1}$. Analog wird für die Messgleichung Gl. (5-107) die Bezeichnung $\mathbf{Y}(t_k) = \mathbf{Y}_k$ gewählt. Für das zeitdiskrete stochastische Kompartiment-Modell resultieren dann die Vektorgleichungen [JAZ 70]:

$$\mathbf{X}_k = \mathbf{A}\,\mathbf{X}_{k-1} + \mathbf{B}\,\mathbf{U}_{k-1} + \xi_{k-1}, \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0, \tag{5-110a}$$

$$\mathbf{Y}_k = \mathbf{H}\,\mathbf{X}_k + \boldsymbol{\eta}_k, \tag{5-111a}$$

Im Unterschied zum deterministischen Kompartiment-Modell nach Gl. (5-106) enthält Gl. (5-110a) den (hier zeitdiskreten) stochastischen Prozess $\xi(t_k) = \xi_k$, der als Prozessrauschen bezeichnet wird. Mit ihm werden unkontrollierte (stochastische) Umwelteinwirkungen auf das System beschrieben, die neben den kontrollierten Umweltparametern $\mathbf{U}_k$ existieren. In Gl. (5-110a)/(5-111a) sind $\mathbf{X}_k$ und $\mathbf{X}_0$ sowie ξ_k J-dimensionale Vektoren, $\mathbf{U}_k$ ist ein L-dimensionaler Vektor, $\mathbf{A}$ ist eine J×J- und $\mathbf{B}$ eine J×L-Matrix. $\mathbf{Y}_k$ und $\boldsymbol{\eta}_k$ sind M-dimensionale Vektoren, $\mathbf{H}$ ist eine M×J-Matrix.

Während für das Messrauschen i. A. davon ausgegangen werden kann, dass $\boldsymbol{\eta}_k$ einer multivariaten Normalverteilung mit dem Erwartungswert $\mu = 0$ und einer bekannten Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$ genügt, sind analoge Annahme für das Prozessrauschen ξ_k oft weniger begründet. Näherungsweise ist dieser Ansatz plausibel, wenn sich viele unkorrelierte Einwirkungen auf das System additiv überlagern. Er liegt dem KALMAN-Filter [KAL 60]/[KAL 61] zugrunde, der u. a. zur Überwachung dynamischer

Systemen genutzt wird, um eine kontinuierliche Anpassung von Schätzungen der Zustandsgrößen an neue Messwerte vorzunehmen (z. B. Überwachung von Umweltbelastungen nach Störfällen).

Der KALMAN-Filter verlangt die Kenntnis der Parameter des dynamischen Systems (Prozessmatrix **A** und Steuerungsmatrix **B** in Gl. (5-110a) sowie Messmatrix **H** in Gl. (5-111)). Er beinhaltet einen Prognoseschritt, in dem bei bekannten Messwerten bis $\mathbf{y}_{k-1}$ und geschätztem Zustandsvektor $\mathbf{x}_{k-1}$ auf den Zustand $\mathbf{x}_k$ geschlossen wird. Mit Eingang der nächsten Messung $\mathbf{y}_k$ erfolgt eine Korrektur (update) für $\mathbf{x}_k$ und der für die vorherige Prognose verwendeten Übergangswahrscheinlichkeiten. Zu den mathematischen Grundlagen und Algorithmen von KALMAN-Filtern sei auf die Fachliteratur verwiesen (siehe z. B. [JAZ 70], [VER 07], [CHUI 09], [GIBB 11]]). Zur Einführung in diese Thematik und zum Verständnis des Funktionsprinzips des KALMAN-Filters könnte die in [MEI 83] auf der BAYES-Theorie basierende Darstellung hilfreich sein.

Der KALMAN-Filter ist als Schätzer mit kleinster quadratischer Abweichung für lineare Prozesse mit additivem GAUSS'schen Rauschen optimal. Die Unsicherheit der Schätzungen wachsen, wenn sich die Modellparameter ändern. Eine Weiterentwicklung für nichtlineare Prozesse ist der erweiterte KALMAN-Filter (EFK, extended KALMAN-Filter; [JAZ 70]). Damit können auch Modellparameter approximativ wie Zustandsgrößen behandelt und im Rahmen einer adaptiven Systemidentifikation mitgeschätzt werden. Für nichtlineare Modelle resultieren aber, weil normalverteilte Zufallsgrößen nach einer nichtlinearen Transformation von der Normalverteilung abweichen, deutliche Störungen der Voraussetzungen des KALMAN-Filters.

Zur Schätzung der Systemparameter stochastischer Kompartiment-Modelle werden überwiegend Maximum-Likelihood-Schätzer bzw. BAYES-Methoden (MCMC-Verfahren) genutzt. Ausführliche Erläuterungen der Anwendung von EKF für die Schätzung des Zustandsvektors von nichtlinearen stochastischen Kompartiment-Modellen in Kombination mit der Maximum-Likelihood-Schätzung der Modellparameter enthält [KRIS 04B]. Hierzu wurde folgende allgemeine Form eines SDE-Systems mit additivem GAUSS'schen Rauschterm und zugehöriger Messgleichung zugrunde gelegt:

$$d\mathbf{X}_t = \mathbf{a}(\mathbf{X}_t, \mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta})\, dt + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta})\, d\mathbf{W}_t, \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0, \tag{5-110b}$$

$$\mathbf{Y}_k = \mathbf{h}(\mathbf{X}_k, \mathbf{U}_k, t_k, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\eta}_k, \tag{5-111b}$$

wobei $\mathbf{X}_t = \mathbf{X}(t)$ der zeitkontinuierliche Zustandsvektor ist, $\boldsymbol{\theta}$ den Vektor aller Modellparameter und $\mathbf{W}_t$ einen J-dimensionalen WIENER-Prozess bezeichnen, $\mathbf{U}_t$ steht wie in Gl. (5-110a) für kontrollierte Inputvariable, **a** ist eine J-dimensionale Vektorfunktion, $\boldsymbol{\sigma}$ ist eine J×J-dimensionale Matrixfunktion und **h** ist eine M-dimensionale Vektorfunktion. Für den (erweiterten) KALMAN-Filter werden die Funktionen **a** und **h** an den Stellen der Prognosewerte $\mathbf{x}_{k|k-1}$ (für den Zeitpunkt t_k) linearisiert, wobei über die partiellen Ableitung $\partial\mathbf{a}/\partial\mathbf{x}_t$ und $\partial\mathbf{h}/\partial\mathbf{x}_t$ Matrizen entstehen, die i. W. den Matrizen **A** bzw. **H** in Gl. (5-110a)/(5-111a) entsprechen.

Die zur Schätzung der Parameter $\boldsymbol{\theta}$ benötigte Likelihood-Funktion ist ein Produkt von (bedingten) Wahrscheinlichkeitsdichten der multivariaten Normalverteilungen der Zeitreihe der Messwerte $\mathbf{Y}_k$. Mit der Bezeichnung $\mathbf{Y}_k = \{\mathbf{y}_0, \mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_k\}$ kann die Likelihood-Funktion $L(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{Y}_N)$ für eine Zeitreihe der Länge N als Produkt solcher bedingten Wahrscheinlichkeiten dargestellt werden:

$$L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{Y}_N) = f(\mathbf{y}_0 \mid \boldsymbol{\theta}) \prod_{k=1}^{N} f(\mathbf{y}_k \mid \mathbf{Y}_{k-1}, \boldsymbol{\theta}). \tag{5-112}$$

Die Berechnung der Verteilungsparameter von $f(\mathbf{y}_k|\mathbf{Y}_{k-1},\boldsymbol{\theta})$ erfolgt mit dem EKF (siehe [KRIS 04B]).

Die Maximum-Likelihood-Schätzung der Modellparameter $\boldsymbol{\theta}$ gemäß

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta} \in \boldsymbol{\Theta}} \{\ln(L(\boldsymbol{\theta} \mid \mathbf{Y}_N))\} \tag{5-113}$$

verlangt die Lösung eines Problems der nichtlinearen Optimierung (i. A. hoher Dimension). Wenn Prior-Informationen zu den Parametern $\boldsymbol{\theta}$ vorliegen, können alternativ auch BAYES-Schätzungen der Modellparameter vorgenommen werden, entweder als Maximum-Posterior-Schätzer [KRIS 04B], wie auch im Programm CTSM 2.3[82] realisiert, oder durch Anwendung von MCMC-Methoden mit Berechnung von epistemischen Verteilungen (siehe z. B. [PEDE 11]).

Diese Anmerkungen sollen verdeutlichen, dass zur Schätzung der Parameter von stochastischen Kompartiment-Modellen die erforderlichen mathematischen Algorithmen vorliegen, deren rechentechnische Umsetzung bzw. praktische Anwendung verlangt aber einen hohen Aufwand.

5.2.3.2. Parametererregte Systeme

Berücksichtigt man, dass Transfer- und Abbauraten deterministischer Kompartiment-Modelle i. A. als Erwartungswerte stochastischer Prozesse dargestellt werden können (siehe z. B. [KOD 76], [BERG 95], [LIM 98], Beispiel 5.5-1 in Abschnitt 5.1.2.2), dann sind stochastische Kompartiment-Modelle mit ausschließlich additivem Rauschterm $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta}) \cdot d\mathbf{W}_t$, wie in Gl. (5-110b) dargestellt, sicherlich nicht adäquat. Für den Diffusionsterm muss i. A. eine Prozessabhängigkeit angenommen werden, wonach die Matrixfunktion $\boldsymbol{\sigma}$ von den Zustandsgrößen $\mathbf{X}_t$ abhängt; d. h. $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}_t, \mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta})$. Zudem kann nicht a priori davon ausgegangen werden, dass der zugrunde liegende Rauschprozess immer als WIENER-Prozess darstellbar ist. Zusammengesetzte POISSON-Prozesse (ZPP) und weitere LÉVY-Prozesse (siehe Abschnitt B.4.1) dürften zur stochastischen Modellierung von Transferraten ebenfalls und vmtl. sogar besser geeignet sein.

Zur Lösung von SDE mit multiplikativem Term der Diffusionsmatrix $\boldsymbol{\sigma}$ und des Rauschprozesses,

$$d\mathbf{X}_t = \mathbf{a}(\mathbf{X}_t, \mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta})\, dt + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}_t, \mathbf{U}_t, t, \boldsymbol{\theta})\, d\mathbf{L}_t, \quad \mathbf{X}(0) = \mathbf{X}_0, \tag{5-114}$$

wobei $\mathbf{L}_t$ einen multivariaten LÉVY-Prozess bezeichnet (u. a. WIENER-Prozess $\mathbf{W}_t$), werden nach Möglichkeit Transformationen der Zustandsgrößen so durchgeführt, dass der Diffusionsterm nicht mehr von den Zustandsvariablen abhängt (ähnlich zu den logarithmischen Transformationen in den Beispielen 5.3 und 5.5-1; siehe Gl. (5-30) bzw. Gl. (5-51)). Hierzu werden die für stochastische Prozesse geltenden Regeln, wie die ITO-Formel Gl. (5-28) für SDE mit WIENER-Prozess bzw. die Formel (5-48) für SDE mit POISSON-Prozess, für Vektor-SDE benötigt. Die zu Gl. (5-28) analoge ITO-Formel zur Transformation $\mathbf{Z}_t = \mathbf{f}(\mathbf{X}_t,t) = [f_1(\mathbf{X}_t,t), f_2(\mathbf{X}_t,t), \ldots, f_J(\mathbf{X}_t,t)]$ lautet (siehe [ØKS 03]):

---

[82] Das and der Technischen Universität von Dänemark entwickelte Programm CTSM 2.3 (Continuous Time Stochastic Modelling, siehe [KRIS 03A], [KRIS 03B]) ist frei verfügbar.

$$dZ_{j,t} = \frac{\partial f_j(\mathbf{X}_t, t)}{\partial t}\, dt + \sum_{i=1}^{J} \frac{\partial f_j(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{i,t}}\, dX_{i,t} + \sum_{i=1}^{J}\sum_{k=1}^{J} \frac{\partial^2 f_j(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{i,t}\partial X_{k,t}}\, dX_{i,t}\, dX_{k,t} \quad , \tag{5-115}$$

wobei die ITO-Regeln $dW_{i,t}\cdot dW_{k,t} = \delta_{i,k}\cdot dt$ und $dW_{i,t}\cdot dt = 0$ gelten (natürlich auch $dt^2 = 0$). Ist $\mathbf{L}_t$ ein POISSON-Prozess, so kann die TAYLOR-Entwicklung nicht abgebrochen werden (siehe Gl. (5-48)).

Die folgenden Erläuterungen beschränken sich auf den Fall des WIENER-Prozesses ($d\mathbf{L}_t = d\mathbf{W}_t$). Sollen auch nichtlineare SDE-Systeme in die Betrachtungen einbezogen werden, bei denen die Diffusionsmatrix $\boldsymbol{\sigma}$ z. B. Produkte von Zustandsgrößen enthält wie in Gl. (5-95) des Beispiels 5.8-2, so ist die Bestimmung einer Transformation $\mathbf{Z}_t = \mathbf{f}(\mathbf{X}_t,t)$ des Vektorprozesses $\mathbf{X}_t$ zu einem Prozess $\mathbf{Z}_t$, der einer SDE mit zustandsunabhängiger Diffusion genügt, weder trivial noch immer möglich. SDE-Systeme, für die solche Transformationen existieren, heißen nach [AIT 08] "reduzibel". In dieser Arbeit wird auch eine notwendige und hinreichende Bedingung dafür angegeben, dass $\mathbf{X}_t$ ein reduzibler Prozess ist. Dies ist nach [AIT 08] genau dann der Fall, wenn für die Diffusionsmatrix $\boldsymbol{\sigma}$ für alle $\mathbf{X}_t$ des Zustandsraums $S_{\mathbf{X}}$ die Gleichung

$$\sum_{l=1}^{J} \frac{\partial \sigma_{i\,k}(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{l,t}}\, \sigma_{l\,j}(\mathbf{X}_t, t) = \sum_{l=1}^{J} \frac{\partial \sigma_{i\,j}(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{l,t}}\, \sigma_{l\,k}(\mathbf{X}_t, t) \tag{5-116}$$

für alle Tripel (i,j,k) = 1, …, J mit k > j gilt. Ist die Matrix $\boldsymbol{\sigma}$ nicht-singulär, so kann Gl. (5-116) durch die folgende äquivalente Bedingung dargestellt werden:

$$\frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{i\,j}(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{k,t}} = \frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{i\,k}(\mathbf{X}_t, t)}{\partial X_{j,t}} \quad \text{für } k > j. \tag{5-117}$$

Für reduzible Prozesse können die Modellparameter nach geeigneter Transformation $\mathbf{Z}_t = \mathbf{f}(\mathbf{X}_t,t)$ mit den in Abschnitt 5.2.3.1 erläuterten Methoden aus dem zum Prozess $\mathbf{Z}_t$ resultierenden SDE-System (es entspricht einer Fremderregung) geschätzt werden. Ist dies nicht möglich, werden zur Schätzung der Modellparameter i. A. moderne MCMC-BAYES-Verfahren genutzt (siehe z. B [WALK 06]). Im folgenden Beispiel wird anhand einfacher Modelle mit zwei Kompartimenten die Anwendung von Gl. (5-117) zur Prüfung der Reduzierbarkeit von parametererregten SDE-Systemen illustriert.

<u>Beispiel 5.10</u>

Für bivariate Prozesse $\mathbf{X}_t = [X_{1,t}, X_{2,t}]$ reduziert sich Gl. (5-117) auf zwei Bedingungen:

$$\frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{11}(\mathbf{X})}{\partial X_2} = \frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{12}(\mathbf{X})}{\partial X_1} \quad \text{und} \quad \frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{21}(\mathbf{X})}{\partial X_2} = \frac{\partial [\boldsymbol{\sigma}^{-1}]_{22}(\mathbf{X})}{\partial X_1} \tag{5-118}$$

(zur Verkürzung der Darstellung wird in diesem Beispiel die Zeitabhängigkeit nicht explizit angegeben). Die folgenden beiden Demonstrationsbeispiele (1) und (2) sind [AIT 08] entnommen.

(1) Für die Diffusionsmatrix

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} a(X_2) & 0 \\ 0 & b(X_1) \end{pmatrix} \quad \text{folgt} \quad \boldsymbol{\sigma}^{-1}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} 1/a(X_2) & 0 \\ 0 & 1/b(X_1) \end{pmatrix},$$

wobei $a(X_2)$ und $b(X_1)$ zwei positiv definierte Funktionen seien. Beide Bedingungen aus Gl. (5-118) sind offenbar nicht erfüllt. Ein entsprechendes SDE-System nach Gl. (5-114) wäre nicht reduzibel. Wenn man eine analoge Diffusionsmatrix betrachtet, in der beide Funktionen von der gleichen Zustandsgröße abhängen (also $\sigma_{11}(\mathbf{X}) = a(X_1)$ und $\sigma_{22}(\mathbf{X}) = b(X_1)$ bzw. $\sigma_{11}(\mathbf{X}) = a(X_2)$ und $\sigma_{22}(\mathbf{X}) = b(X_2)$; mit $\sigma_{12} = \sigma_{21} = 0$), so wäre jeweils eine der beiden Bedingungen in Gl. (5-118) nicht erfüllt.

(2) Für die Diffusionsmatrix

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} a(X_1) & a(X_1)\cdot b(X_2) \\ 0 & c(X_2) \end{pmatrix} \quad \text{folgt} \quad \boldsymbol{\sigma}^{-1}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} 1/a(X_1) & -b(X_2)/c(X_2) \\ 0 & 1/c(X_2) \end{pmatrix},$$

wobei $a(X_1)$, $b(X_2)$ und $c(X_2)$ positiv definierte Funktionen seien. Es ist offensichtlich, dass die vier partiellen Ableitungen in Gl. (5-118) für diese Matrix gleich Null und beide Bedingungen somit erfüllt sind. Ein SDE-System mit dieser Diffusionsmatrix wäre deshalb reduzibel.

Das folgende Demonstrationsbeispiel ist [MØLL 10] entnommen.

(3) Die Prozesse $X_1(t)$ und $X_2(t)$ seinen positiv definiert. Für die Diffusionsmatrix

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} a\cdot X_1 & b\cdot X_1) \\ c\cdot X_2 & d\cdot X_2 \end{pmatrix} \quad \text{folgt} \quad \boldsymbol{\sigma}^{-1}(\mathbf{X}) = \frac{1}{(a\,d - b\,c)}\cdot\begin{pmatrix} d/X_1 & -b/X_2 \\ -c/X_1 & a/X_2 \end{pmatrix},$$

wobei a, b, c und d Konstanten mit $a\cdot d \neq b\cdot c$ seien. Die vier partiellen Ableitungen in Gl. (5-118) sind für diese Matrix offenbar gleich Null und beide Bedingungen somit erfüllt. Man kann zeigen, dass mit den Transformationen $Z_{1,t} = f_1(\mathbf{X}_t) = \ln(X_{1,t})$ und $Z_{2,t} = f_2(\mathbf{X}_t) = \ln(X_{2,t})$ der Prozess $\mathbf{Z}_t$ einer linearen SDE mit additivem Rauschterm genügt und somit ein bivariater GAUSS-Prozess ist. Die Rücktransformation ergibt für $\mathbf{X}_t$ einen bivariat-lognormal verteilten Prozess.

5.2.3.3. Aspekte weiterführender Untersuchungen

Analog zu den in Abschnitt 4.1 behandelten Fragen der Bestimmung des Typs von statistischen Verteilungen ergeben sich auch für stochastische Prozesse viele Möglichkeiten zur Modellierung, zwischen denen nach statistischen Kriterien eine Auswahl zu treffen ist. Goodness-of-Fit Tests, die insbesondere zur Spezifizierung von Diffusionsprozessen entwickelt wurden (siehe z. B. [CHEN 08], [NEG 09], [KUT 10]), bieten hierfür die Grundlagen. Im Rahmen weiterführender Untersuchungen zur Analyse und Simulation stochastischer Kompartiment-Modelle sollte der Spezifizierung bzw. Unterscheidung anderer LÉVY-Prozesse, z. B. zusammengesetzter POISSON- und Gammaprozesse, hinsichtlich der Modellierung stochastischer ökologischer Prozesse Gewicht beigemessen werden.

Für deterministische Kompartiment-Modelle resultieren exponentiell verteilte "Residenzzeiten" der Stoffe (Radionuklide) in den Kompartimenten. Dieses Verhalten muss jedoch für biologische bzw. ökologische Systeme nicht zutreffen, wenn in Abhängigkeit von der Konzentration oder von Umgebungsparametern eine länger anhaltende Speicherung bzw. ein beschleunigter Abbau möglich sind. Derartige Prozesse können durch stochastische Differentialgleichungen modelliert werden. Da diese Problematik für die pharmakologische Forschung große Bedeutung hat, wurden bzw. werden dort für die Analyse und Simulation solcher Prozesse stochastische Kompartiment-Modelle genutzt (siehe z. B. [FAD 90], [MAT 90], [YU 04]). Neben bekannten Prozessen mit MARKOV-Eigenschaft werden hierzu auch stochastische Prozesse modelliert, die diese Eigenschaft nicht aufweisen [MAT 98], für die also die weitere Entwicklung nicht nur vom aktuellen Zustand, sondern in

bestimmter Weise auch von der Vorgeschichte abhängt. Eine genauere Untersuchung solcher Prozesse dürfte auch für die Analyse und Simulation radioökologischer Systemen mit Hilfe von stochastischen Kompartiment-Modellen von Interesse sein.

5.3. Modelle mit partiellen Differentialgleichungen

Die Ausbreitung von Radionukliden in der Atmosphäre oder ihre Migration im ungesättigten Boden bzw. Grundwasser sind wichtige Fälle, in denen Änderungen von Aktivitätskonzentrationen in Raum und Zeit zu modellieren sind, um Prognosen zu potentiellen Strahlenexpositionen zu erstellen. Zur mathematischen Modellierung solcher Prozesse können auch Kompartiment-Modelle genutzt werden, indem Kompartimente für räumlich begrenzte Bereiche definiert werden, zwischen denen Massen- bzw. Aktivitätsströme stattfinden. Die Annahme, dass die Aktivitätskonzentration in den einzelnen Kompartimenten gleichmäßig ist, stellt aber i. A. nur dann eine hinreichend genaue Approximation dar, wenn die Ausdehnung der Kompartimente sehr klein ist (also eine sehr große Anzahl von Kompartimenten modelliert wird), was dann strukturell der Finite-Elemente-Methode (FEM) der numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen sehr nahe kommt. In diesem Sinne besteht eine Ähnlichkeit zwischen Modellen mit partiellen Differentialgleichungen und Modellen mit ausschließlich räumlich definierten Kompartimenten. Die beiden Modellstrukturen sind jedoch zu unterscheiden, wobei partielle Differentialgleichungen einer Modellierung von stetig in Raum und Zeit veränderlichen Zustandsgrößen entsprechen.

Für die Diskussion der Behandlung von aleatorischen und epistemischen Parameterunsicherheiten in Modellen mit partiellen Differentialgleichungen (PDE) wird die Migration von Radionukliden in einem porösen Medium als Anwendungsfall gewählt (dies kann z. B. ein Grundwasserleiter sein). Zu den wesentlichen Annahmen solcher Modelle und den gängigen Methoden ihrer numerischen Lösung sei auf die Fachliteratur verwiesen (siehe z. B. [ZHE 02], [BEAR 10]). Für realitätsnahe Modelle sind FEM-Berechnungen erforderlich, um komplizierte geometrische Strukturen und die räumliche Heterogenität der Modellparameter zu erfassen. Einige grundsätzliche Aspekte der Behandlung von Parameterunsicherheiten in PDE-Modellen können aber anhand einfacher Modelle, die bei Ansatz konstanter Parameter analytische Lösungen zulassen, diskutiert werden, was für die Zielstellungen des vorliegenden Berichts ausreichend ist.

5.3.1. Deterministische Advektions-Dispersions-Gleichung mit konstanten Parametern

Zur Modellierung der Schadstoffausbreitung mit dem Sicker- bzw. Grundwasser wird die Bilanz für eine Volumeneinheit V aufgestellt, wonach durch einen Grenzübergang ($V \to 0$) die Advektions-Dispersions-Gleichung resultiert. Zur Berücksichtigung der (zeitweiligen) Rückhaltung des Schadstoffs durch Sorption wird zwischen der im Wasser gelösten, mobilen Phase (Konzentration C), die mit dem Wasser transportiert wird, und der durch Sorption des Stoffes an Feststoffen resultierenden immobilen Phase (Massengehalt A) unterschieden. Es wird angenommen, dass der gesamte Porenraum durchströmt wird. Ist V eine Volumeneinheit des Bodens mit Porenraumanteil n, dann ist

$$V_P = V \cdot n$$

das Porenvolumen, das teilweise (Sickerwasser) oder vollständig (Grundwasser) mit Wasser gefüllt ist. Dies wird durch den Sättigungsgrad S ($0 \leq S \leq 1$) erfasst. Der volumetrische Wassergehalt des

Bodens ist $\theta = S \cdot n$. Für den (wasser-)gesättigten Zustand des Bodens gilt also $\theta = n$. Die festen Bodenbestandteile nehmen in V das Teilvolumen

$$V_F = V \cdot (1 - n)$$

ein. Es sei ρ_F die (mittlere) Korndichte der festen Bodenbestandteile. Die auf das Gesamtvolumen V bezogene Feststoffmasse wird als Trockenrohdichte ρ bezeichnet:

$$\rho = \frac{\rho_F \cdot V_F}{V} = \rho_F \cdot (1 - n)\,.$$

Der Schadstofftransport erfolgt primär mit der Strömung des Wassers. Neben diesem advektiven Transport ist die Dispersion zu berücksichtigen. Die Richtung der Strömung des Wassers sei x; die mittlere Fließgeschwindigkeit des Wassers sei v ($v = q/\theta$ bei Darcy-Geschwindigkeit q). Die zeitliche Änderung der Aktivitätskonzentration eines Radionuklids mit Zerfallskonstante λ genügt dann im Fall einer konstanten Fließgeschwindigkeit und Dispersion folgender Bilanzgleichung:

$$\theta \cdot \frac{\partial C}{\partial t} + \rho \cdot \frac{\partial A}{\partial t} = \theta \cdot \left(D_x \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - \theta \cdot v \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \cdot (\theta \cdot C + \rho \cdot A). \qquad (5\text{-}119)$$

Neben den bereits erklärten Symbolen sind in Gl. (5-119) mit D_x, D_y und D_z die Dispersionskoeffizienten bezeichnet, mit denen sowohl die molekulare Diffusion als auch die hydrodynamische Dispersion erfasst wird. Ursache der Dispersion ist die Variabilität der Strömungsgeschwindigkeit im Porenraum nach Betrag und Richtung die aus (1) dem Geschwindigkeitsprofil innerhalb einer Pore, (2) den Unterschieden der Strömungsgeschwindigkeit in verschiedenen Poren in Abhängigkeit vom Porenquerschnitt sowie (3) den durch das Korngerüst bedingten Abweichungen von der mittleren Hauptfließrichtung resultiert. In Gl. (5-119) sind die Parameter v und D als Mittelwerte zu verstehen. Mit dem letzten Term in Gl. (5-119) können neben dem radioaktiven Zerfall auch andere Reaktionen 1. Ordnung beschrieben werden. Wenn sich Radionuklide durch den Zerfall eines Mutternuklids nachbilden, so ist Gl. (5-119) durch einen dbzgl. Quellterm zu ergänzen (s. u.).

Gl. (5-119) ist durch eine Sorptions-Isotherme zu ergänzen, mit der eine Beziehung zwischen der Aktivitätskonzentration C der flüssigen Phase und der spezifischen Aktivität A der festen Phase hergestellt wird. In Abhängigkeit von den Mechanismen der Sorption/Desorption existieren hierzu verschiedene Modelle (siehe [BAR 06]), wobei am häufigsten der K_d-Ansatz angewendet wird,

$$A = K_d \cdot C, \qquad (5\text{-}120)$$

weil sich damit nach Gl. (5-119) für die Schadstoffkonzentration C(x, y, z, t) des gelösten Stoffes eine lineare Advektions-Dispersions-Gleichung (ADE, engl.: advection dispersion equation) ergibt:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda\, R\, C \qquad (5\text{-}121)$$

$$\text{mit} \quad R = 1 + \frac{\rho \cdot K_d}{\theta} \quad \text{bzw.} \quad R = 1 + \frac{\rho \cdot K_d}{n} \qquad (5\text{-}122)$$

bei partieller bzw. vollständiger Sättigung des Porenraumes. Der Parameter R wird als Retardationsfaktor bezeichnet. Für die Lösung der PDE Gl. (5-121) sind noch Anfangs- und Randbedingungen zu spezifizieren. Nachfolgend wird vereinfachend nur die 1-dimensionale Form von Gl. (5-121) für den Halbraum $x \geq 0$ betrachtet, wobei für $x = 0$ eine Randbedingung vorzugeben ist, welche die Art des Eintrags von Radionukliden in den "Strömungsfaden" beschreibt.

Für die vereinfachte ADE

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda R C \qquad (x \geq 0, t \geq 0) \tag{5-123}$$

werden neben der Anfangsbedingung, z. B.

$$C(x, 0) = 0, \tag{5-124}$$

und der Randbedingung (Typ 2) für $x \to \infty$,

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\Big|_{x\to\infty} = 0\,, \tag{5-125}$$

i. A. zwei verschiedene Randbedingungen für $x = 0$ betrachtet:

$$C(0,t) = \begin{cases} C_I(t) & \text{für } 0 < t \leq t_I \\ 0 & \text{für } t > t_I \end{cases} \quad \text{oder} \tag{5-126a}$$

$$-D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} + v\, C(0,t) = \begin{cases} v\, C_I(t) & \text{für } 0 < t \leq t_I \\ 0 & \text{für } t > t_I \end{cases}, \tag{5-126b}$$

wobei mit der Randbedingung Gl. (5-126a) (Typ 1) die Konzentration bei $x = 0$ für den Zeitraum t_I des Inputs und mit der Randbedingung Gl. (5-126b) (Typ 3) der Zustrom des Schadstoffinputs bei $x = 0$ spezifiziert werden.

Für die Modellierung des Schadstoffinputs sind in Abhängigkeit von den konkreten Gegebenheiten verschiedene Ansätze üblich. Dies sind insbesondere der Ansatz einer konstanten Konzentration $C_I(t) = C_0$ sowie der Exponentialansatz $C_I(t) = C_0 \cdot \exp(-(\lambda+\gamma)\cdot t)$, wobei λ die physikalische Zerfallskonstante und γ die Auslaugrate aus einem Aktivitätsinventar (z. B. Halde oder Endlager für radioaktive Abfälle) bezeichnen. Unter der Annahme, dass alle Modellparameter konstante Größen sind (mit ggf. epistemisch unsicheren Werten), kann die PDE Gl. (5-123) mit den Anfangs- und Randbedingungen Gl. (5-124) bis Gl. (5-126) analytisch gelöst werden (siehe z. B. [VANG 81], [LEIJ 91]). Das folgende Beispiel veranschaulicht den Einfluss des Dispersionskoeffizienten D und des Retardationsfaktors R auf die räumliche Verteilung der Aktivitätskonzentration C(x, t) in Abhängigkeit von der Zeit.

Beispiel 5.11

Die Lösung der (5-123) mit Anfangs- und Randbedingung nach Gl. (5-124), Gl. (5-125) und Gl. (5-126a) unter Annahme einer konstanten Konzentration $C_I(t) = C_0$ im Zeitraum $0 < t \leq t_I$ ist:

$$C(x,t) = C_0 \cdot \begin{cases} f(x,t) & \text{für } 0 < t \le t_I \\ f(x,t) - f(x,t-t_I) & \text{für } t > t_I \end{cases} \quad \text{mit} \tag{5-127}$$

$$f(x,t) = \frac{1}{2}\left[\exp\left(\frac{(v-u)\,x}{2\,D}\right)\cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x - u\,t/R}{2\sqrt{D\,t/R}}\right) + \exp\left(\frac{(v+u)\,x}{2\,D}\right)\cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + u\,t/R}{2\sqrt{D\,t/R}}\right)\right], \text{ mit} \tag{5-128}$$

$$u = \sqrt{v^2 + 4\,\lambda\,R\,D}\,, \tag{5-129}$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_x^{\infty} \exp(-z^2)\,dz\,. \tag{5-130}$$

In Abbildung 5-40 sind für die 4 Kombinationen der Parameterwerte D = 2 bzw. 10 m^2/d sowie R = 10 bzw. 50 die Konzentrationsverteilungen C(x,t) für die Zeitpunkte t = 1, 2, 5, 10 und 20 a dargestellt, wobei C_0 = 100 (beliebige Einheit) und t_I = 1 a gesetzt wurde. Für die mittlere Fließgeschwindigkeit wurde v = 1 m/d angenommen. Außerdem wurde radioaktiver Zerfall mit einer Halbwertszeit von 30 a angesetzt.

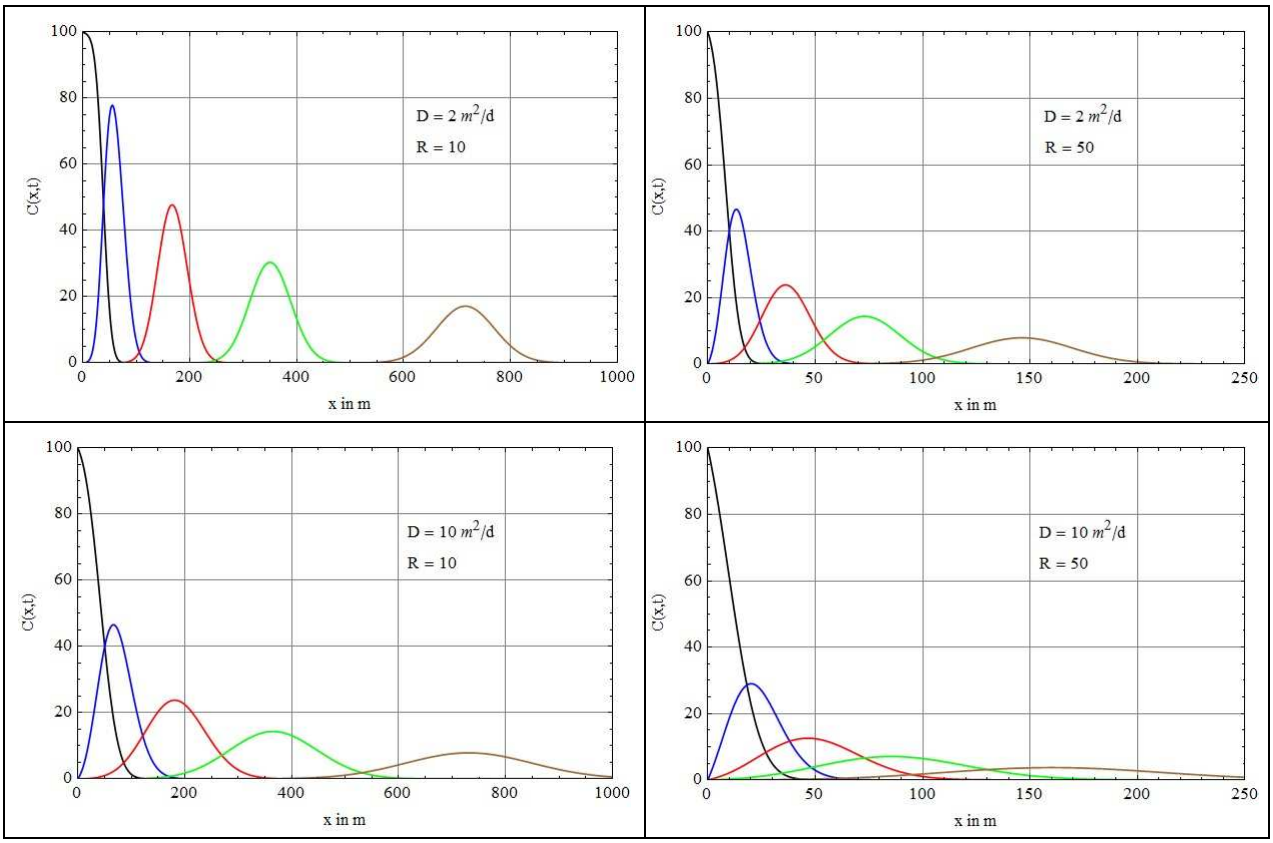


Abbildung 5-40: Verteilungen der Aktivitätskonzentration C(x,t) nach Gl. (5-127) zu den Zeitpunkten t von 1 a (schwarz), 2 a (blau), 5 a (rot), 10 a (grün) und 20 a (braun) Kombinationen der Parameterwerte D = 2 bzw. 10 m^2/d und R 10 bzw. 50; weitere Parameter sind: C_0 = 100; t_I = 1 a; v = 1 m/d sowie $\lambda = 6{,}3 \cdot 10^{-5}\ d^{-1}$.

Aus Abbildung 5-40 ist deutlich zu erkennen, dass für die Aktivitätskonzentration GAUSS-Verteilungen resultieren, deren Breite vom Dispersionskoeffizienten abhängt und mit der Zeit wie $t^{1/2}$ wächst, wobei sich der Parameter R i. W. als Skalierungsfaktor der Zeit auswirkt. Die Konzentrationsverteilung hängt somit sensitiv von den beiden Parametern D und R ab. Dies gilt auch für die Fleißgeschwindigkeit v, für die in diesem Beispiel jedoch nur ein fester Wert (v = 1 m/d) betrachtet wurde.

Zur Modellierung der Migration von Radionukliden, die aus radioaktiven Abfällen (Endlager) bzw. aus deponierten NORM-Rückständen freigesetzt werden, sind i. A. Zerfallsreihen zu betrachten. Hierfür werden analog zu Gl. (5-121) ADE-Systeme formuliert. Zur Verkürzung der Darstellung sei hier ein 1-dimensionales Modell betrachtet. Bezeichnet man für eine Zerfallskette aus J Nukliden mit $C_1(x,t)$ die Aktivitätskonzentration des Mutternuklids und mit $C_2(x,t)$ bis $C_J(x,t)$ die Aktivitätskonzentrationen der Tochternuklide, so resultiert folgendes System gekoppelter PDE[83]:

$$R_1 \frac{\partial C_1}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_1}{\partial x} - \lambda_1 R_1 C_1 \qquad (x \geq 0, t \geq 0) \tag{5-131a}$$

$$R_j \frac{\partial C_j}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_j}{\partial x} - \lambda_j R_j C_j + \lambda_{j-1} R_{j-1} C_{j-1} \qquad j = 2, \ldots, J, \tag{5-131b}$$

wozu neben den Anfangsbedingungen

$$C_j(x, 0) = 0, \quad j = 1 \text{ bis } J, \tag{5-132}$$

und den Randbedingungen (Typ 2) für $x \to \infty$,

$$\frac{\partial C_j(x,t)}{\partial x}\Big|_{x\to\infty} = 0, \quad j = 1 \text{ bis } J, \tag{5-133}$$

i. A. zwei verschiedene Randbedingungen für x = 0 und j von 1 bis J betrachtet werden:

$$C_j(0,t) = \begin{cases} C_{I,j}(t) & \text{für } 0 < t \leq t_{I,j} \\ 0 & \text{für } t > t_{I,j} \end{cases} \qquad \text{oder} \tag{5-134a}$$

$$-D \frac{\partial C_j(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} + v\, C_j(0,t) = \begin{cases} v\, C_{I,j}(t) & \text{für } 0 < t \leq t_{I,j} \\ 0 & \text{für } t > t_{I,j} \end{cases}. \tag{5-134b}$$

Die hydrologischen Modellparameter D und v können zwar für alle Radionuklide der Zerfallsreihe gleich angesetzt werden, da sich aber i. A. die Retardationsfaktoren R_j erheblich unterscheiden, ist eine Entkopplung des PDE-Systems Gl. (5-131) im Zeitbereich nicht möglich. Für spezielle Fälle sind analytische Lösungen bekannt, siehe z.B. [VANG 85] für J = 4. In der Fachliteratur findet man ausführliche Erläuterungen zu Methoden der Lösung von PDE-Systemen des Typs von Gl. (5-131) für verschiedene Anfangs- und Randbedingungen, so in [BAU 01], [QUEZ 04], [SRI 08], [PERE 10] und [CHEN 12]. Der gängige Lösungsweg besteht darin, zunächst bzgl. der Zeit eine LAPLACE-Transformation der Gl. (5-131) vorzunehmen. Für den transformierten J-dimensionalen Vektor

[83] Ähnliche PDE-Systeme ergeben sich für Zerfallsreihen mit Verzweigungen, auf die hier nicht eingegangen wird.

$\tilde{\mathbf{C}}(x,s)$, wobei mit s die LAPLACE-Variable bezeichnet sei, erhält man unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen Gl. (5-132) folgende Vektor-ADE:

$$D\frac{\partial^2\tilde{\mathbf{C}}(x,s)}{\partial x^2} - v\frac{\partial\tilde{\mathbf{C}}(x,s)}{\partial x} + \mathbf{A}\,\tilde{\mathbf{C}}(x,s) = 0\,, \qquad (5\text{-}135)$$

in der **A** eine J×J-Matrix mit folgenden Elementen ist:

$A_{i,i} = -(\lambda_i + s)\,R_i$ für i = 1 bis J; $A_{i+1,i} = \lambda_i\,R_i$ für i = 1 bis J-1; sonst $A_{i,k} = 0$.

Die Diagonalelemente dieser Matrix sind zugleich ihre Eigenwerte. Da **A** eine untere Dreiecksmatrix ist, kann Gl. (5-135) in ein System von J entkoppelten ADE transformiert werden (siehe z. B. [CLEM 01], [SRI 08]),

$$\tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{T}\,\tilde{\mathbf{B}}\,;$$

$$D\frac{\partial^2\tilde{\mathbf{B}}(x,s)}{\partial x^2} - v\frac{\partial\tilde{\mathbf{B}}(x,s)}{\partial x} + \mathbf{A}_T\,\tilde{\mathbf{B}}(x,s) = 0\,, \qquad (5\text{-}136)$$

mit $\mathbf{A}_T = \mathbf{T}^{-1}\,\mathbf{A}\,\mathbf{T}$,

wozu die Transformationsmatrix **T** aus den Eigenvektoren von **A** so definiert wird, dass $\mathbf{A}_T$ eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten von **A** ist. Die allgemeine Lösung $\tilde{\mathbf{B}}(x,s)$ ist durch inverse LAPLACE-Transformation in den Zeitbereich zu überführen (siehe hierzu [BAU 01]), woraus sich mit **C**(x,t) = **T B**(x(t) die Lösung von Gl. (5-131) ergibt, deren bislang noch unbestimmte Koeffizienten aus den Randbedingungen Gl. (5-133) und Gl. (5-134) berechnet werden können.

Aus analytischen Lösungen von ADE für einzelne Radionuklide bzw. für Zerfallsreihen können Erkenntnisse zur Sensitivität einzelner Modellparameter gewonnen werden. Außerdem werden analytische Lösungen für den Test von Verfahren der numerischen Integration von ADE-Systemen genutzt. Generell ist anzumerken, dass die vereinfachende Annahme der räumlichen und zeitlichen Konstanz der Modellparameter den realen Gegebenheiten des Transports von Radionukliden in der Hydrogeosphäre nicht gerecht wird. Die analytischen Lösungen von ADE sind aber zur Messung von bestimmten Modellparametern in Auswertung der Ergebnisse von Laborversuchen hilfreich.

5.3.2. Bestimmung und Behandlung von Parameterunsicherheiten

Für die Modellierung des Transports von Radionukliden mit dem Grundwasser bzw. auch in der ungesättigten oberflächennahen Zone sind die hydrogeologischen Parameter Fließgeschwindigkeit und Dispersion von den hydrogeochemischen Parametern (K_d-Wert bzw. Retardationsfaktor) zu unterscheiden. Zur Ermittlung der hydrogeologischen Parameter werden Labor- bzw. Feldversuche mit Tracern durchgeführt, die nicht adsorbiert werden und physikalisch sowie chemisch stabil sind.

Die messtechnische Bestimmung von K_d-Werten erfolgt hauptsächlich durch Schüttelversuche, Säulenversuche, die Analyse des Porenwassers und des Feststoffes von In-Situ-Proben sowie eine Kalibrierung von Ausbreitungsmodellen an In-Situ-Messungen zur Stoffausbreitung. Bei den zwei erstgenannten Methoden handelt es sich um Laborversuche. Die beiden anderen Methoden sind

Übertragungen der Labormethoden auf Feldbedingungen. Jede der vier Methoden weist spezifische Vor- und Nachteile auf und basiert auf speziellen Annahmen (siehe [BAR 06]).

5.3.2.1. Fließgeschwindigkeit und Dispersion

Die Dispersionskoeffizienten der ADE Gl. (5-121) genügen in Medien, die ab einer bestimmten Skala (repräsentatives Elementarvolumen) näherungsweise homogen sind, den Beziehungen

$$D_x \cong \tau \cdot D_{mol} + \alpha_L \cdot v \quad \text{und} \quad D_y \cong D_z \cong \tau \cdot D_{mol} + \alpha_T \cdot v. \tag{5-137}$$

Hier bezeichnet D_{mol} den molekularen Diffusionskoeffizient ($D_{mol} \approx 10^{-9}$ m^2/s); τ ist die Tortuosität, die das mittlere Verhältnis des direkten Abstandes zweier Punkte zur realen Strecke beschreibt, die ein Teilchen beim Transport in dem durch Bodenkörner gekrümmten Porenraum zurücklegen muss ($\tau \approx 0{,}3$ bis $0{,}7$). Die hydrodynamische Dispersion ist proportional zur Fließgeschwindigkeit v. Die Koeffizienten α_L und α_T werden als longitudinale bzw. transversale Dispersivität bezeichnet, wobei α_T wesentlich kleiner als α_L ist. Die Dispersivität hat die Einheit einer Länge und charakterisiert die Ausdehnung der für die Dispersion maßgeblichen Inhomogenität. In Grundwasserleitern liegen α_L-Werte überwiegend im Bereich von 0,1 bis 100 m (in [BAU 01] wird z. B. mit einem typischen Wert für die longitudinale Dispersivität von $\alpha_L = 10$ m gerechnet).

Für typische Abstandsgeschwindigkeiten des Grundwassers im Bereich von 10^{-7} bis 10^{-5} m/s folgt aus Gl. (5-127), dass die molekulare Diffusion im Vergleich zur hydrodynamischen Dispersion meist von untergeordneter Bedeutung ist. Für die ungesättigte Bodenzone ist jedoch zu beachten, dass unter realen Bedingungen durch den Jahresgang des Niederschlags und der Evapotranspiration zeitweise keine nennenswerte Strömung des Porenwassers stattfindet. In Trockenperioden kann die molekulare Diffusion zum maßgeblichen Mechanismus für die Migration von Schadstoffen im Boden werden (siehe z. B. [GRI 96]). Für genauere Berechnungen zur Schadstoffmigration in der ungesättigten Bodenzone sind deshalb jahreszeitliche Schwankungen der hydrologischen Parameter um ihre Jahresmittelwerte zu berücksichtigen.

In Abschnitt 5.3.1 wurde die Lösung von ADE mit konstanten Koeffizienten betrachtet. Gemäß Auswertung diverser Felduntersuchungen hängt α_L jedoch stark von der Längenskala (L) ab, für die der Schadstofftransport betrachtet wird. Insofern kann die ADE mit konstanten Koeffizienten zwar überwiegend gut zur Auswertung von Säulenversuchen unter Laborbedingungen genutzt werden, wo homogene Materialeigenschaften und konstante Strömungsbedingungen realisierbar sind und die Längenskala durch den Versuchsaufbau vorgegeben ist; in der Natur weisen Transportmedien aber diverse Heterogenitäten auf (Schichtungen mit unterschiedlicher hydraulischer Leitfähigkeit, verstreute Einschlüsse von Tonlinsen mit geringer sowie Klüfte mit hoher Durchlässigkeit, etc.). Da advektive und dispersive Komponenten der Wasserströmung zudem untrennbar zusammenwirken, sind Messungen der hydrodynamischen Modellparameter für Grundwasserleiter nicht nur schwierig und aufwendig, sondern auch mit erheblichen Unsicherheiten verbunden.

Zur Abhängigkeit der longitudinalen Dispersivität α_L von der Längenskala L zeigt Abbildung 5-40 fünf empirische Funktionen aus [ARYA 86], [XU 95] und [SCHU 05] für nicht-konsolidierte Sedimente. Aus den in [XU 95] und [SCHU 05] dargestellten Scatterplots der Datensätze, die den in Abbildung 5-40 angegebenen Regressionsfunktionen zugrunde liegen, geht zudem eine relativ hohe

statistische Unsicherheit der Schätzwerte für Regressionsparameter hervor (siehe auch [GEL 92]). Zweifelsfrei ist jedoch der Anstieg der longitudinalen Dispersivität mit der Skala der Schadstoffausbreitung, was im Gegensatz zu Annahmen steht, die der klassischen ADE zugrunde liegen.

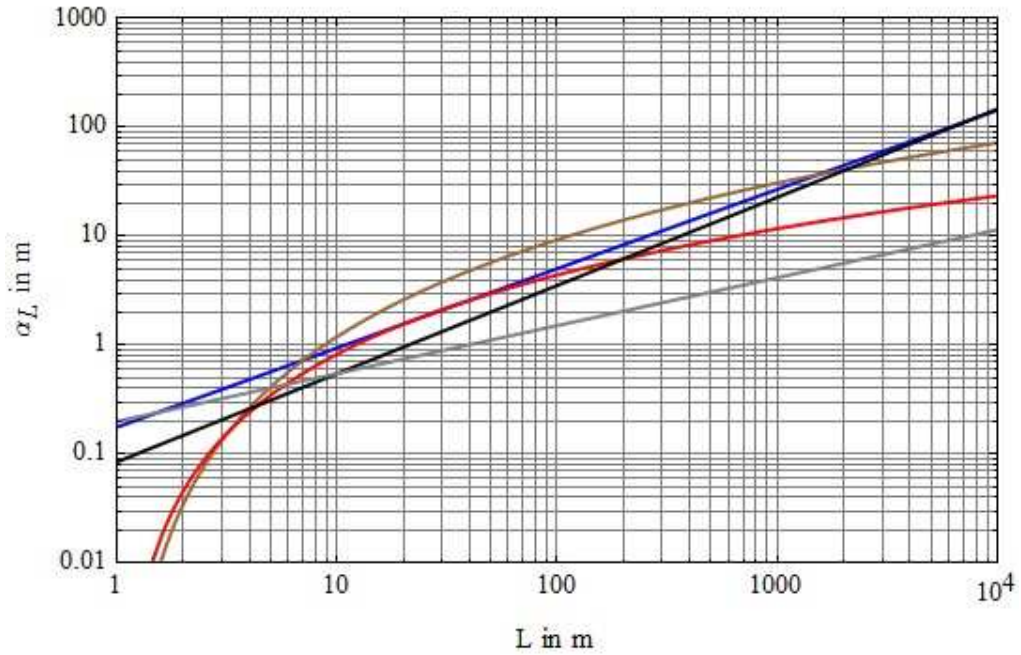


Abbildung 5-40: Regressionskurven zur longitudinale Dispersivität α_L in Abhängigkeit von der Längenskala L; blau: $\alpha_L = 0{,}177 \cdot L^{0{,}728}$ [ARYA 86]; braun: $\alpha_L = 1{,}2 \cdot (\log_{10}(L))^{2{,}.958}$ [XU 95] alle Daten gleich gewichtet; rot: $\alpha_L = 0{,}83 \cdot (\log_{10}(L))^{2{,}414}$ [XU 95] bei Wichtung der Daten mit geringer, mittlerer bzw. hoher Belastbarkeit im Verhältnis von 1:2:3; schwarz: $\alpha_L = 0{,}085 \cdot L^{0{,}81}$ [SCHU 05] nach einer Anpassung an 156 Datensätze; grau: $\alpha_L = 0{,}20 \cdot L^{0{,}44}$ [SCHU 05] nach Anpassung an 32 ausgewählte Datensätze mit höchster Belastbarkeit

Plausible Erklärungen für die von der Entfernung (Längenskala) abhängige Dispersivität basieren auf stochastischen Modellen, welche die für unterschiedliche räumliche Maßstäbe festgestellte stochastische Variabilität der hydraulischen Leitfähigkeit berücksichtigen (siehe Abschnitt 5.3.3). Diese Variabilität resultiert lokal aus der Korn-/Bodenstruktur und im regionalen Maßstab z. B. aus Schichtungen, Einschlüssen und Klüften. Probabilistische Ansätze zur Behandlung der räumlichen Variabilität der Leitfähigkeit bzw. des Feldes der Fließgeschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ (z. B. mit Hilfe von MC-Simulationsrechnungen für ADE auf Basis statistischer Verteilungen der Modellparameter) wären nicht sachgerecht, weil eine Spezifizierung solcher Verteilungsfunktionen sehr stark von der Ausdehnung (Skala) der untersuchten Bereiche bzw. der zu modellierenden Schadstoffausbreitung bestimmt wird. Im Prinzip ist diese Problematik vergleichbar mit den in Abschnitt 5.1 diskutierten Unterschieden zwischen Modellen mit stochastischen Differentialgleichung und solchen Modellen, die basierend auf gewöhnlichen Differentialgleichungen die aleatorischen Parameterunsicherheiten durch eine probabilistische Spezifizierung der Parameter deterministischer Modelle beschreiben.

5.3.2.2. K_d-Werte

Sieht man von den Unsicherheiten zu hydrologischen Parametern der ADE ab, so bestimmen die K_d-Werte bzw. daraus gemäß Gl. (5-122) berechnete Retardationsfaktoren die Unsicherheit von Modellrechnungen zum Transport von Radionukliden über den Wasserpfad. Das generelle Problem der Anwendung des K_d-Konzeptes für solche Modellrechnungen resultiert daraus, dass die Sorption durch sehr viele Faktoren beeinflusst wird, so dass K_d-Werte in Abhängigkeit von der jeweiligen Zusammensetzung des Bodens sowie der makrochemischen Beschaffenheit des Grund- bzw. Sickerwassers über mehrere Größenordnungen variieren können. In Tabelle 5-4 sind zur Illustration dieser Feststellung Angaben zu K_d-Werten für Radium und Blei aus [SHE 90], [IAEA 94] und [IAEA 10] zusammengestellt.

Tabelle 5-4: K_d-Werte (geometrische Mittel und Variationsbereiche; **in cm^3/g**) nach [SHE 90], [IAEA 94] und [IAEA 10] für Radium und Blei in verschiedenen Bodentypen

Element	Sand	Lehm	Ton	Quelle
Radium	500 (57 ... $2{,}1\cdot10^4$)	$3{,}6\cdot10^4$ (1.262 ...$5{,}3\cdot10^5$)	9.100 (696 ... $5{,}6\cdot10^4$)	[SHE 90]
	490 (0,82 ... $3{,}0\cdot10^4$)	$3{,}6\cdot10^4$ (74 ... $1{,}8\cdot10^7$)	9.000 (670 ... $1{,}2\cdot10^5$)	[IAEA 94]
	1.900 (12 … $1{,}2\cdot10^5$)		$3{,}8\cdot10^4$ (700 ...$9{,}5\cdot10^5$)	[IAEA 10]
Blei	270 (19 ... 1.405)	$1{,}6\cdot10^4$ (3.500 ... $5{,}9\cdot10^4$)	550 (keine Angaben)	[SHE 90]
	270 (2,7 ... $2{,}7\cdot10^4$)	$1{,}6\cdot10^4$ (990 ... $2{,}7\cdot10^5$)	540 (keine Angaben)	[IAEA 94]
	220 (25 … 1300)	$1{,}3\cdot10^4$ (3.600 ...$1{,}3\cdot10^5$)		[IAEA 10]

Wenn der Wasserpfad im Vergleich zu den anderen Expositionspfaden für den Nachweis der Einhaltung von Dosisbeschränkungen relevant ist, so kann die sehr große Bandbreite möglicher K_d-Werte dazu führen, dass mit den Beiträgen des Wasserpfads die potentielle Strahlenexposition von Referenzpersonen substantiell über- bzw. unterschätzt wird, wenn für die Modellrechnungen bestimmte generische K_d-Werte zugrunde gelegt werden. Viele Autoren weisen deshalb darauf hin, dass das K_d-Konzept nur für Standortgegebenheiten angewandt werden sollte, für die ausreichend repräsentative Messungen der K_d-Werte vorliegen. Bzgl. einer ausführlichen Diskussion des K_d-Konzeptes und der diversen Faktoren, welche die große Bandbreite von K_d-Werten verursachen, sei auf den Bericht [BAR 06] verwiesen.

Danach ist zur Berücksichtigung der Parameterunsicherheiten zu K_d-Werten zunächst festzustellen, dass diese primär epistemisch bedingt sind. Probabilistische Modellrechnungen können deshalb zwar im Sinne von Sensitivitätsanalysen nützlich sein, auf dieser Basis prognostizierte statistische Verteilungen zu Beiträgen des Wasserpfades zu potentiellen (zukünftigen) Strahlenexpositionen sollten jedoch allenfalls qualitativ interpretiert werden.

Für einzelne Radionuklide können Sensitivitätsanalysen zum Einfluss von Unsicherheiten zu K_d-Werten durch Variation dieses Parameters in der Lösung der ADE vorgenommen werden (siehe Beispiel 5.11), wobei jedoch zu beachten ist, dass eine Korrelationen des K_d-Werts (bzw. des Retardationsfaktors) mit den hydraulischen Parametern der ADE vorliegen kann (z. B. relativ hohe Fließgeschwindigkeit in sandigen/kieshaltigen Schichten, bei gegebenem hydraulischen Gradient,

wobei diese Bodentypen zugleich nur eine geringe Retardation des Radionuklidtransports durch Sorption bewirken).

Modellrechnungen für Zerfallsketten erfordern die Berücksichtigung von Korrelationen zwischen den K_d-Werten für unterschiedliche Radionuklide, wozu jedoch i. A. keine belastbaren Aussagen in veröffentlichten Daten vorliegen. Da solche Korrelationen nicht nur von der Zusammensetzung des jeweiligen Bodens, sondern auch vom geochemischen Milieu beeinflusst werden, dürften auf den jeweiligen Anwendungsfall bezogene standortspezifische hydrogeochemische Modellrechnungen i. A. unverzichtbar sein, um zumindest annähernd realistische Prognosen zu ermöglichen.

5.3.3. Stochastische Modellierungsansätze

Der Transport von Schadstoffen mit dem Grundwasser wird wesentlich von der Heterogenität der hydraulischen Leitfähigkeit bestimmt. Solche Heterogenitäten können jedoch sehr unterschiedliche Ursachen und über mehrere Größenordnungen variierende Korrelationslängen haben. Lokal hängt die Leitfähigkeit von der Struktur der Porenräume ab. Die Fließgeschwindigkeit und -richtung ähnelt hier einer BROWN'schen Bewegung. Für Distanzen, die viel größer als die Korrelationslänge dieses stochastischen Prozesses sind, wird die Änderung der Schadstoffkonzentration im Abstrom näherungsweise durch eine ADE beschrieben. Sie entspricht der FOKKER-PLANCK-Gleichung (siehe Gl. (2-66)), wobei die mittlere Geschwindigkeit, mit der die Schadstoffwolke im Grundwasserleiter wandert, den Drift-Term der FOKKER-PLANCK-Gleichung bestimmt. Der Dispersionskoeffizient D in Gl. (5-123) entspricht der Diffusion und beschreibt die Streuung der zufälligen Realisierungen von Partikeltrajektorien, die sich aus einer SDE mit Fremderregung durch WIENER-Prozess ergeben.

Abweichend vom "normalen" (GAUSS'schen) Transport, der durch die ADE modelliert wird und wobei der dispersive Partikelstrom analog zur molekularen Diffusion mit dem FICK'schen Gesetz ($\mathbf{J} = - D \cdot \nabla C$) beschrieben wird, wurden in diversen Feldversuchen (aber auch bei Laborversuchen mit i. W. homogen gepackten Durchflusssäulen) ein "anomaler" Tracer- bzw. Schadstofftransport festgestellt, der sich u. a. durch eine Skalenabhängigkeit der Dispersivität (siehe Abbildung 5-40), eine breitere Verteilung der Stoffkonzentration (früherer Durchbruch und längerer Bestand einer erhöhten Konzentration an einem Messpunkt) sowie durch eine ausgeprägte Schiefe der räumlichen Konzentrationsverteilung bemerkbar macht. In der englischsprachigen Fachliteratur wird dies auch als "heavy-tailed" bzw. "non-Gaussian" oder "non-Fickian" Transport bezeichnet. Eine Übersicht zu diversen Labor- und Feldversuchen, bei denen anomaler Transport festgestellt wurde, kann u. a. [BERK 00], [LEV 03] und [COR 04A] entnommen werden.

Zur mathematischen Modellierung stochastischer Grundwasserströmungen und darauf basierender Modellrechnungen zum Schadstofftransport gibt es verschiedenen Ansätze, die sich insbesondere dadurch unterscheiden, ob sie ausgehend von der deterministischen ADE deren Parameter bzw. Randbedingungen/Quellterme durch stochastische Prozesse ersetzen, womit sich eine stochastische Advektions-Dispersions-Gleichung (SADE) ergibt, oder ob von stochastischen Transportmodellen (Random Walk Modellen) ausgegangen wird, aus denen die ADE als spezieller Fall resultiert, wenn für die Übergangswahrscheinlichkeiten GAUSS-Verteilungen angesetzt werden. Nachfolgend wird auf diese beiden Modellierungsansätze kurz eingegangen.

5.3.3.1. Stochastische Advektions-Dispersions-Gleichung (SADE)

Ähnlich zu den in Abschnitt 5.1.2 betrachteten stochastischen Differentialgleichungen, die sich aus gewöhnlichen Differentialgleichungen ergeben, indem der Quellterm oder Modellparameter als stochastische Prozesse modelliert werden, wodurch die Zustandsgröße ein (fremd- bzw. parameter-erregter) stochastischer Prozess wird, kann man auf Basis der deterministischen ADE stochastische Advektions-Dispersions-Gleichungen (SADE) definieren, indem die Randbedingung (Quellterm) und/oder Modellparameter (Fließgeschwindigkeit, Dispersionstensor) durch stochastische Prozesse ersetzt werden. Während für den Quellterm durch einen zeitlich stochastischen Prozess z. B. die Auswirkungen der Variabilität von Umweltbedingungen (Zuflüssen) erfasst werden können, ist für die Modellparameter primär die räumliche Heterogenität der hydraulischen Leitfähigkeit relevant, die in Grundwasserleitern oft über mehrere Größenordnungen variiert. Die Fließgeschwindigkeit $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ wird dadurch ein stochastisches Feld. Die Modellierung von solchen Feldern erfolgt mit Hilfe von Korrelationsfunktionen bzw. Spektraldichten des Logarithmus der hydraulischen Leitfähigkeit (siehe [GELH 83], [DAG 84], [HSU 03]).

Zur Lösung von SADE können funktionalanalytische Methoden angewandt werden [SERR 88], mit denen Gleichungen für Momente und Likelihood-Funktionen berechnet werden, die zur Schätzung von Modellparametern geeignet sind [UNNY 89], [KUMA 91]. Überwiegend werden aber störungs-theoretische Näherungen der SADE genutzt [DAG 97], wozu die Parameter und Zustandsfunktionen in Erwartungswerte und stochastische Anteile aufgespaltet werden. Für letztere wird angenommen, dass sie relativ "klein" sind und deshalb Näherungen 1. Ordnung ausreichend sind (siehe [GELH 83], [DAG 84], [MIR 96]). Diese Annahme ist aber nicht immer gerechtfertigt und kann zu gravierenden Fehlern führen [CHRI 93], [PAI 99]. Legt man mit dieser Näherung berechnete Makrodispersivitäten den Modellrechnungen zum Schadstofftransport zugrunde, so können Peakwerte signifikant unter-schätzt werden, wenn eine stochastische Variabilität der Fließgeschwindigkeit mit unterschiedlichen Korrelationslängen vorliegt [McL 01]. Die berechnete Schadstoffverteilung (GAUSS'sche Fahne) weist dann eine zu gute Durchmischung auf. Ähnlich zu den Abwetterfahnen in der bodennahen Atmosphäre sind auch für die Modellierung der Schadstoffausbreitung in Grundwasserleitern unterschiedliche Skalen der stochastischen Variabilität der Fließgeschwindigkeit zu beachten. Die Aufweitung der Schadstoffverteilung erfolgt dabei durch Fluktuationen des Geschwindigkeitsfelds, deren Korrelationslänge kleiner als die Ausdehnung der Schadstoffverteilung ist, wogegen durch eine großräumige Heterogenität von hydrogeologischen Parametern mäanderförmige Bewegungen verursacht werden (zu dbzgl. Modellierungsansätzen und Modellrechnungen siehe [FIO 01]).

Diverse methodische Fragen der Anwendung von SADE-Modellen sind in [CUSH 87] aufgezeigt. Ein wichtiger Aspekt ist die Kompatibilität der Modellansätze mit der zeitlichen und räumlichen Auflösung von Konzentrationsmessungen, auf denen Schätzungen der Modellparameter basieren. Die Formulierung *"randomness is a function of the scale of observation"* verdeutlicht diese Problematik. Trotz der generellen methodischen Probleme von SADE-Modellen ist anzumerken, dass die Entwicklung von stochastischen Transportmodellen und die Analyse darauf basierender Simulationsrechnungen neue Erkenntnisse zu strukturellen Zusammenhängen vermittelt und dass durch Sensitivitätsanalyse jene Parameterunsicherheiten bzw. Abhängigkeiten zwischen Parametern ermittelt werden können, die die Unsicherheit der Zielgrößen von Modellrechnungen bestimmen. So sind für den Schadstofftransport in heterogenen Grundwasserleitern die Unsicherheiten bzgl. hydrologischer Modellparameter zwar wesentlich, seine Dynamik kann aber maßgeblich durch die

Korrelation der logarithmischen hydraulischen Leitfähigkeit mit dem Retardationsfaktor dominiert werden [MIR 96]. Zur Quantifizierung solcher Korrelationen sind spezielle dynamische Messungen erforderlich, die einen hohen Aufwand erfordern.

5.3.3.2. Random-Walk-Transportmodelle

Die übliche Modellierung des Schadstofftransports in Grundwasserleitern mit Hilfe von ADE (siehe Gl. (5-121)) basiert auf der Existenz eines repräsentativen Elementarvolumens, dessen räumliche Ausdehnung deutlich größer ist als die Korrelationslängen der stochastischen Schwankungen der Fließgeschwindigkeit, jedoch auch wesentlich kleiner als die modellierte Transportentfernung der Schadstoffausbreitung. Unter diesen Voraussetzungen beschreibt das FICK'sche Gesetz die mittlere Dispersion hinreichend genau. Die vielfach festgestellten Abweichung von diesem Modell, die als "anomaler" Transport mit zeit- bzw. entfernungsabhängigem Anstieg des Dispersionskoeffizienten beschrieben werden, belegen, dass unter realen Gegebenheiten die Voraussetzungen der klassischen ADE häufig nicht erfüllt sind. Für Modellrechnungen auf Basis der ADE werden deshalb von der Transportzeit abhängige Dispersionskoeffizienten angesetzt, um Effekte der anomalen Dispersion zu berücksichtigen. Wie in [BERK 95] gezeigt, ist dieser Ansatz aus physikalischen Gründen nicht haltbar und kann auch zu signifikanten Fehleinschätzungen führen. Wenn die Voraussetzungen des ADE-Modells nicht erfüllt sind, weil mit zunehmender Skalenlänge neue Heterogenitäten auftreten, sind zur Analyse von Feldversuchen und für Prognosen alternative Modellansätze erforderlich.

In den beiden letzten Jahrzehnten wurden stochastische Transportmodelle entwickelt, mit denen Zufallsbewegungen (Random Walk) von Partikeln in heterogenen Medien mit wenigen Parametern beschrieben werden (zu dbzgl. Übersichten siehe z. B. [METZ 00] und [METZ 04]). Die Entwicklung der resultierenden Wahrscheinlichkeitsverteilung in Raum und Zeit entspricht der Verteilung der Schadstoffkonzentration C(x, y, z, t). Die nachfolgenden Erläuterungen beschränken sich auf den 1-dimensionalen Fall mit C = C(x, t), sind aber auf 3-dimensionale Transportmodelle übertragbar.

Random Walk mit α-stabiler Verteilung der Schrittlänge

Ein zeitdiskreter Random Walk ist eine Abfolge von zufälligen Schritten, die als iid Zufallsgrößen einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ beschrieben werden. Bezeichnet man die zufälligen Schritte mit X_1 bis X_n, $X_i \sim V(\boldsymbol{\theta})$, dann wird durch den Random Walk nach n Schritten der Ort/Wert $Y_n = X_1 + X_2 + \ldots + X_n$ erreicht, wobei der Startwert mit $Y_0 = 0$ festgelegt sei.

Die Verteilung $V(\boldsymbol{\theta})$ der Zufallsgröße X heißt stabil, wenn für beliebige $n \geq 2$ positive Zahlen c_n und reelle Zahlen d_n existieren, mit denen $(Y_n - d_n)/c_n \sim V(\boldsymbol{\theta})$ gilt [GNE 68], [FEL 71], [SAMO 94], [UCH 99]. Dabei ist $c_n = n^{1/\alpha}$ mit $0 < \alpha \leq 2$ (einen dbzgl. Beweis enthält [FEL 71], Kapitel VI.1). Die Konstante α heißt Stabilitätsindex. Man spricht dann von "α-stabilen" Verteilungen. Der Fall $\alpha = 2$ entspricht der Normalverteilung; sie ist die einzige α-stabile Verteilung mit endlicher Varianz.

Für die stochastische Modellierung ist der zentrale Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie von besonderer Bedeutung. Danach gilt für beliebige Zufallsvariable $X \sim V(\boldsymbol{\theta})$ mit Erwartungswert $E_V[X] = \mu$ und einer endlichen Varianz $Var_V[X] = \sigma^2$:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + \ldots + X_n - n\,\mu}{\sigma\, n^{1/2}} = Z \sim N(0,1)\,. \qquad (5\text{-}138)$$

Beim Random Walk resultiert deshalb für beliebige Verteilungen mit endlicher Varianz in guter Näherung nach einer hinreichend großen Anzahl von Schritten die gleiche Verteilung wie bei der auf der BROWN'schen Bewegung (Normalverteilung) basierenden Diffusion/Dispersion. Man sagt, dass Zufallsvariable endlicher Varianz im "Anziehungsbereich" (engl. domain of attraction) der Normalverteilung liegen.

Durch LÉVY wurde der zentrale Grenzwertsatz auf beliebige Verteilungen verallgemeinert. Die normierten Summen nicht-entarteter iid Zufallsgrößen konvergieren zu α-stabilen Verteilungen:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + ... + X_n - n\,\mu}{\sigma\, n^{1/\alpha}} = Z \sim S(\alpha,\beta;\mu = 0,\sigma = 1)\,, \tag{5-139}$$

wobei die Parameter der α-stabilen Verteilungen $S(\alpha,\beta;\mu,\sigma)$ folgende Bedeutung haben: α mit $0 < \alpha \le 2$ ist der Stabilitätsindex; β mit $-1 \le \beta \le 1$ ist der Schiefekoeffizient; μ ist ein Lageparameter und $\sigma > 0$ ist ein Skalenparameter. Zur Wahrscheinlichkeitsdichte α-stabiler Verteilungen existieren geschlossene analytische Darstellungen nur für die Fälle $\alpha = 2$ (GAUSS-Verteilung, hier ist β ohne Bedeutung, s. u.), $\alpha = 1$ (CAUCHY-Verteilung) und $\alpha = 1/2$ (LÉVY-Verteilung). Die mathematische Beschreibung α-stabiler Verteilungen erfolgt deshalb i. A. über ihre charakteristische Funktion $\phi_Z(s)$ (FOURIER-Transformierte der Wahrscheinlichkeitsdichte der Zufallsgröße $Z \sim S(\alpha,\beta;\mu,\sigma)$, die dem Erwartungswert von e^{isZ} entspricht, wobei s die Variable im FOURIER-Raum bezeichnet):

$$\phi(s \mid \alpha,\beta;\mu,\sigma) = \begin{cases} \exp\left[i\,s\,\mu - \sigma^{\alpha}\,|\,s\,|^{\alpha}\cdot\left(1 - i\,\beta\,\mathrm{sign}(s)\,\tan(\pi\,\alpha/2)\right)\right] & \text{für } \alpha \ne 1 \\ \exp\left[i\,s\,\mu - \sigma\,|\,s\,|\cdot\left(1 + i\,\beta\,\mathrm{sign}(s)\,\ln(|\,s\,|)\,2/\pi\right)\right] & \text{für } \alpha = 1 \end{cases} \tag{5-140}$$

$$\text{mit} \quad \mathrm{sign}(s) = \begin{cases} 1 & \text{für } s > 0 \\ 0 & \text{für } s = 0\,. \\ -1 & \text{für } s < 0 \end{cases}$$

Zum Fall $\alpha = 2$ (Normalverteilung) sei angemerkt, dass der Schiefekoeffizient β wegen $\tan(\pi) = 0$ irrelevant ist und dass das Quadrat σ^2 des Skalenparameters in der üblichen Parametrisierung von α-stabilen Verteilungen dem Zweifachen der Varianz der für $\alpha = 2$ resultierenden Normalverteilung entspricht (vgl. Anhang B, Tabelle B-3).

Abgesehen vom Fall $\alpha = 2$ existiert für α-stabile Verteilungen keine Varianz und somit auch keine Skala für eine Anwendung der FICK'schen Näherung des diffusiven/dispersiven Stroms. Für $\alpha > 1$ haben α-stabile Verteilungen einen Erwartungswert, der mit dem Lageparameter μ übereinstimmt; für $\alpha \le 1$ existiert auch kein Erwartungswert.

In Abbildung 5-41 sind zur Veranschaulichung des unterschiedlichen asymptotischen Verhaltens von α-stabilen Verteilungen Wahrscheinlichkeitsdichten der symmetrischen Standardverteilungen ($\beta = 0$, $\mu = 0$, $\sigma = 1$) für α-Werte von 1 bis 2 in Schritten von 0,25 dargestellt. Daraus ist ersichtlich, dass die Wahrscheinlichkeitsdichten für $\alpha < 2$ asymptotisch wie $x^{-(1+\alpha)}$ fallen. Dies erklärt die Nicht-Existenz des 2. Moments (der Varianz) für $\alpha < 2$ sowie eines Erwartungswertes für $\alpha \le 1$.

Abbildung 5-42 veranschaulicht den Einfluss des Schiefekoeffizienten β, wozu für $\alpha = 1{,}25$ sowie $\alpha = 1{,}5$ jeweils die Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen für $\beta = 0$, $\beta = 0{,}5$ und

$\beta = 1$ dargestellt sind (mit $\mu = 0$ und $\sigma = 1$). Wie auch aus Gl. (5-140) ersichtlich, wird der Einfluss des Schiefekoeffizienten β umso schwächer, je näher α bei 2 liegt.

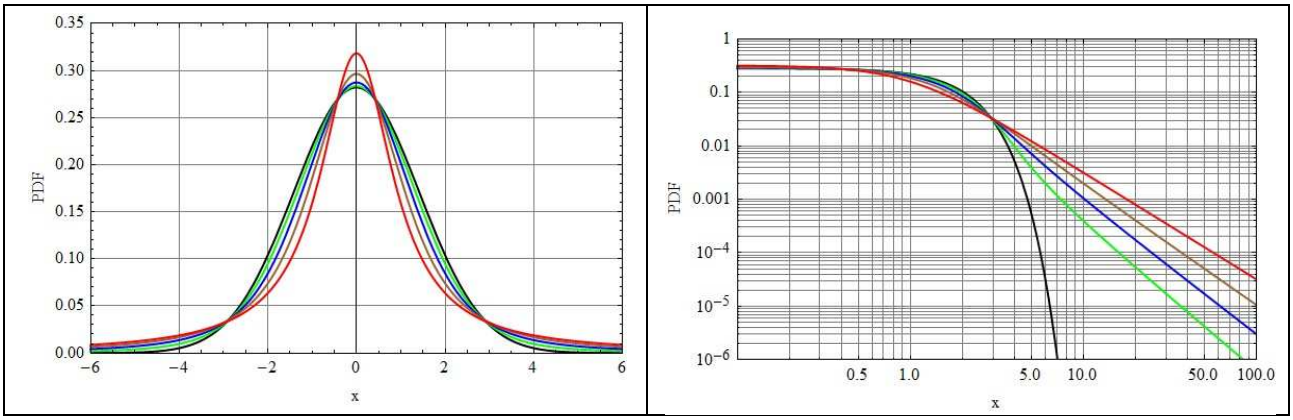


Abbildung 5-41: Wahrscheinlichkeitsdichten $f_S(x|\alpha,\beta;\mu,\sigma)$ standardisierter ($\mu = 0$; $\sigma = 1$), symmetrischer ($\beta = 0$) α-stabiler Verteilungen für $\alpha = 2$ (schwarz), $\alpha = 1{,}75$ (grün), $\alpha = 1{,}5$ (blau), $\alpha = 1{,}25$ (braun) und $\alpha = 1$ (rot)

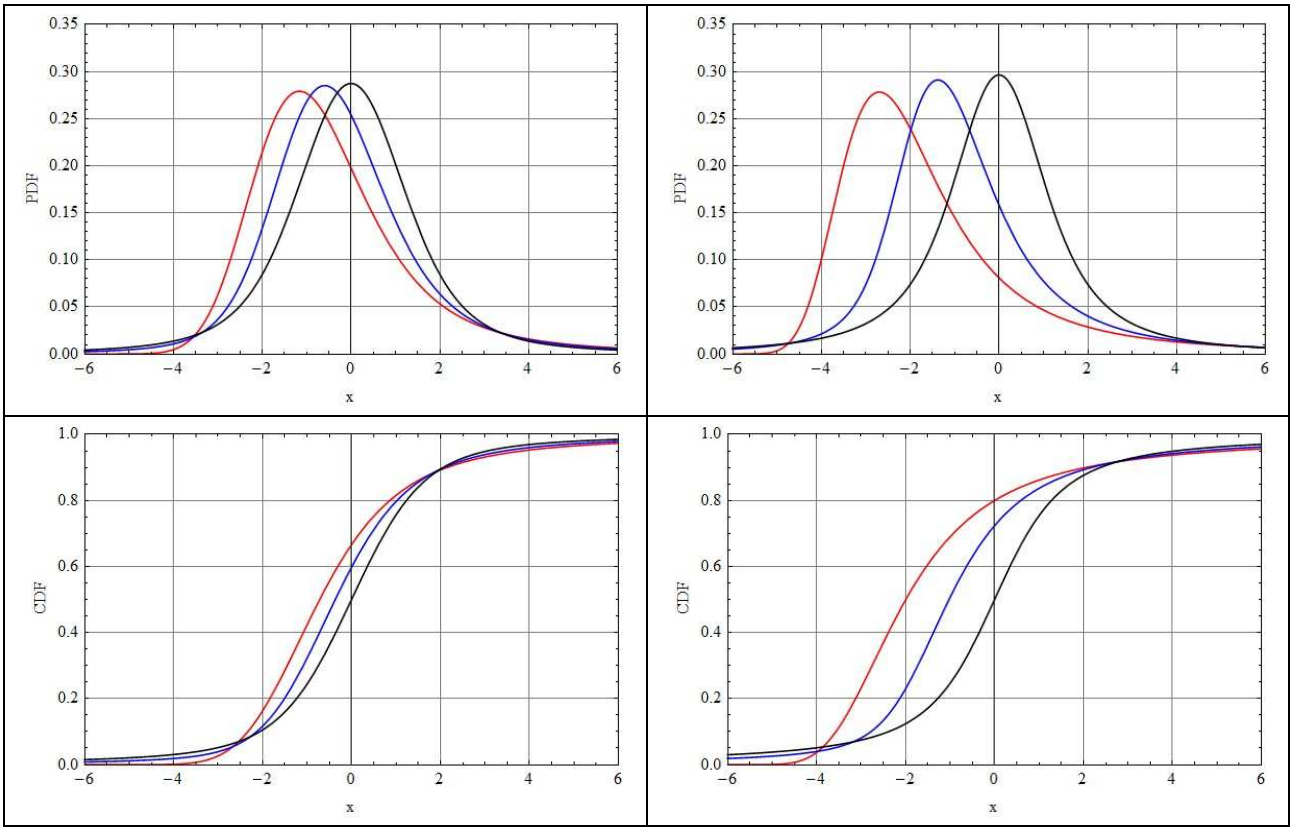


Abbildung 5-42: Wahrscheinlichkeitsdichten (oben) und Verteilungsfunktionen (unten) für standardisierte α-stabile Verteilungen ($\mu = 0$ und $\sigma = 1$) mit $\alpha = 1{,}5$ (links) bzw. $\alpha = 1{,}25$ (rechts) mit Schiefekoeffizienten von $\beta = 0$ (schwarz), $\beta = 0{,}5$ (blau) sowie $\beta = 1$ (rot)

Für negative β-Werte resultieren Wahrscheinlichkeitsdichten, die nach einer Spiegelung um den Punkt $x = \mu$ den in Abbildung 5-42 gezeigten Dichten (hier mit $\mu = 0$) entsprechen. Allgemein gilt:

$$f_S(x|\alpha,-\beta;\mu,\sigma) = f_S(2\mu - x|\alpha,\beta;\mu,\sigma). \qquad (5\text{-}141)$$

Aus den obigen Erläuterungen zu den Eigenschaften α-stabiler Verteilungen folgt, dass mit ihnen z. B. der Schadstofftransport in heterogenen Medien simuliert werden kann, wenn diese Klüfte mit hoher Leitfähigkeit aufweisen. Mit $\alpha < 2$ werden erhöhte Wahrscheinlichkeiten von sehr großen Schritten definiert, mit denen ein gewisser Anteil der Schadstoffwolke pro Zeiteinheit transportiert wird. Mit dem Parameter β kann die Schiefe einer Schadstoffwolke modelliert werden.

Im Unterschied zur BROWN'schen Bewegung (Random Walk mit Schritten, die Zufallsgrößen aus eine GAUSS-Verteilung entsprechen), die zu räumlich-zeitlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Partikel führt, die der üblichen ADE genügen, können durch den Random Walk mit α-stabilen Verteilungen Ausbreitungsbedingungen modelliert werden, die "schnelle Transportwege" enthalten, zu schiefen Verteilungen führen können und bei denen die Ausdehnung der Schadstofffahne mit der Zeit schnelle als $t^{1/2}$ wächst (anomal skaliert).

Beispiel 5.12

Zur Veranschaulichung der Unterschiede von Random Walks mit iid normalverteilten Schritten ($\alpha = 2$) bzw. mit Schritten aus einer α-stabilen Verteilung mit $\alpha < 2$ sind in Abbildung 5-43 zunächst zufällige Realisierungen eines Random Walks mit $\Delta X \sim S(\alpha,\beta;\mu=0,\sigma=1)$ für $\alpha = 2$ und $\alpha = 1{,}5$ (hierzu mit $\beta = 0$, $\beta = 0{,}75$ und $\beta = -0{,}75$) dargestellt, die alle auf der gleichen Folge u_i von gleichverteilten Zufallszahlen $U_{(0,1)}$ basieren, d. h. $\Delta x_i = F_S^{-1}(u_i|\alpha,\beta;\mu=0,\sigma=1)$, $x_i = \Delta x_1 + \Delta x_2 + \ldots + \Delta x_i$, i = 1 bis n (für n = 400; $x_0 = 0$). Daraus ist klar zu erkennen, dass beim Random Walk mit Schritten aus α-stabilen Verteilungen mit $\alpha < 2$ einige extrem große Schritte auftreten können, wodurch die Trajektorien erheblich von der BROWN'schen Bewegung abweichen.

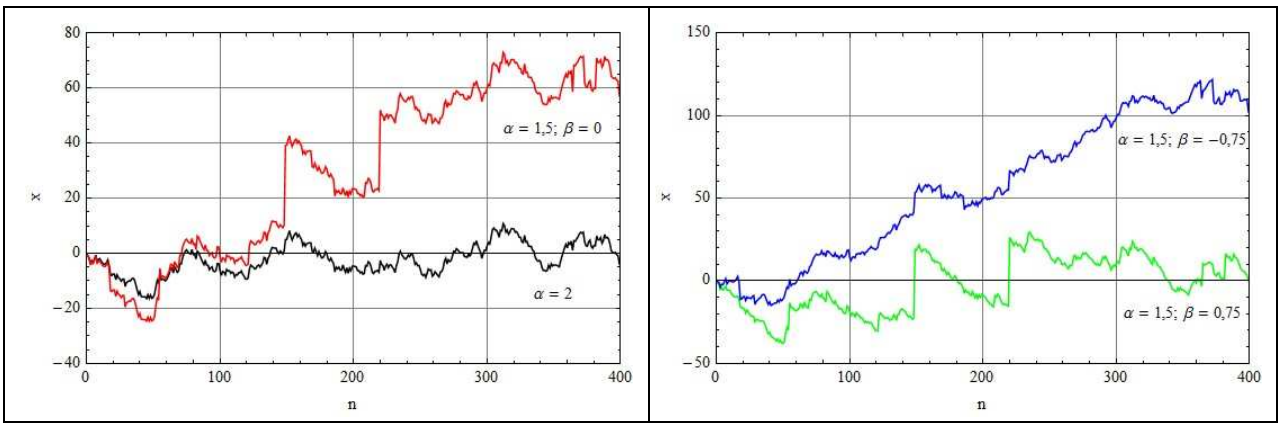


Abbildung 5-43: Random Walks mit $\Delta x_i = F_S^{-1}(u_i|\alpha,\beta;\mu=0,\sigma=1)$; linkes Bild: mit $\alpha = 2$ (schwarz) bzw. mit $\alpha = 1{,}5$ und $\beta = 0$ (rot); rechtes Bild: $\alpha = 1{,}5$ mit $\beta = 0{,}75$ (grün) bzw. $\beta = -0{,}75$ (blau); gleiche Folgen von $u_i \sim U_{(0,1)}$

Abbildung 5-44 zeigt die resultierenden Wahrscheinlichkeits- bzw. Konzentrationsverteilungen für die gleichen vier Fälle ($\alpha = 2$; $\alpha = 1{,}5$ mit $\beta = 0$; $\alpha = 1{,}5$ mit $\beta = 0.75$ sowie $\alpha = 1{,}5$ mit $\beta = -0.75$), wobei mit $t_i = i \cdot \Delta t$ und $\Delta t = 1$ jeweils die Verteilungen für t = 100 und t = 400 dargestellt sind. Hierbei wurde mit einer mittleren Fließgeschwindigkeit von $\mu = 1{,}5$ gerechnet, so dass die Mittelwerte der Verteilungen zu den beiden o. g. Zeitpunkten bei x = 150 bzw. x = 600 liegen. Aus Abbildung 5-44 ist gut zu erkennen, dass bei der BROWN'schen Bewegung ($\alpha = 2$) eine Aufweitung der (Schadstoff-)Verteilung proportional zu $t^{1/2}$ erfolgt, wogegen generell eine Skalierung mit $t^{1/\alpha}$ erfolgt. Mit $\alpha < 2$ resultiert also eine schnellere Aufweitung der Verteilung, wodurch zugleich der Maximalwert der Konzentration sinkt. Solche Prozesse werden auch als "Super-Dispersion" (bzw. "Super-Diffusion") bezeichnet [METZ 00].

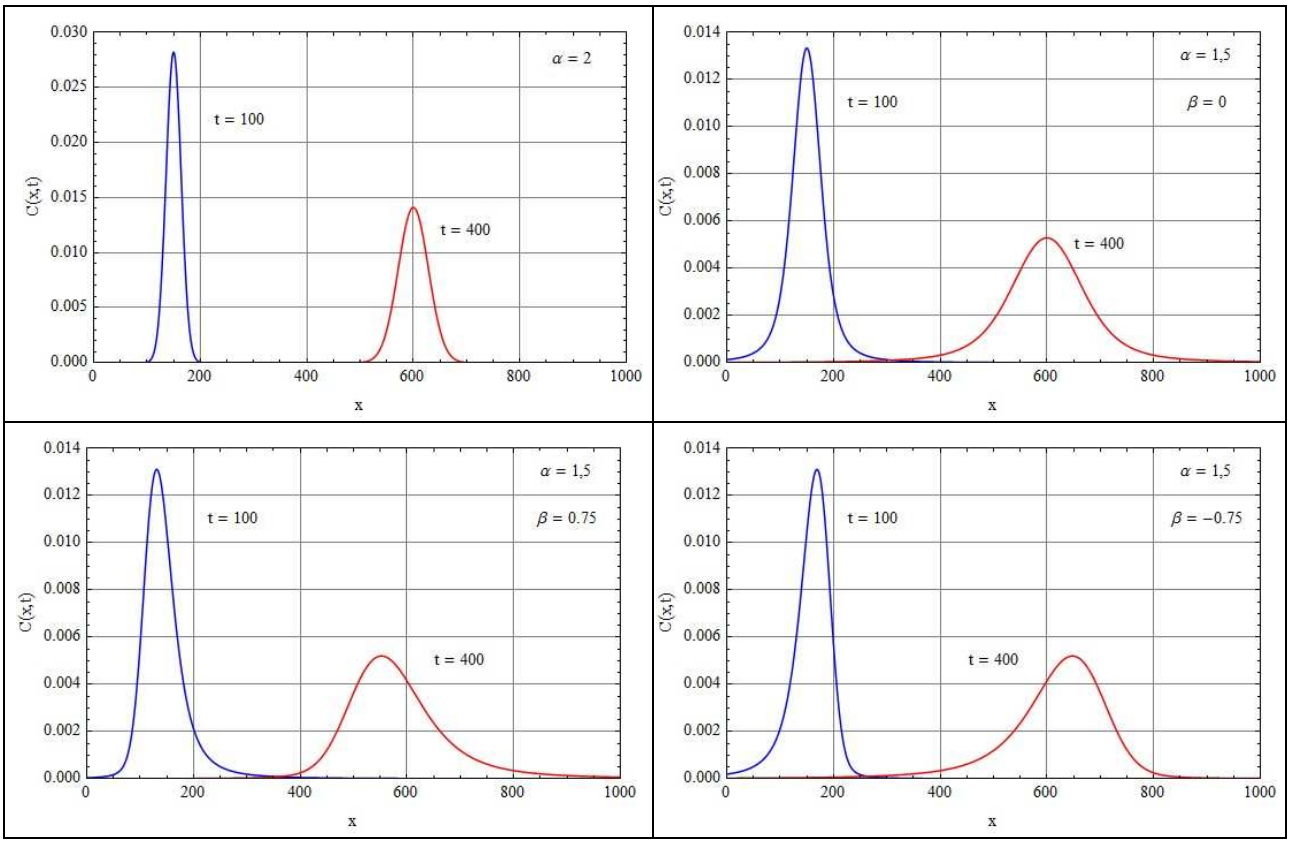


Abbildung 5-44: Wahrscheinlichkeits- (bzw. Schadstoff-)Verteilung C(x,t) zu Zeitpunkten von t = 100 (blau) und t = 400 (rot) bei Random Walks mit Schritten von $\Delta x_i \sim S(\alpha,\beta;\mu,\sigma)$; mit $\mu = 1{,}5$ und $\sigma = 1$; links oben: mit $\alpha = 2$; rechts oben: $\alpha = 1{,}5$ und $\beta = 0$; links unten: $\alpha = 1{,}5$ und $\beta = 0{,}75$; rechts unten: $\alpha = 1{,}5$ und $\beta = -0{,}75$

Zur Unterscheidung von der BROWN'schen Bewegung werden Random Walks mit Schritten aus α-stabilen Verteilungen mit $\alpha < 2$ als LÉVY-Bewegungen bezeichnet, wobei im hier betrachteten Fall eine LÉVY-Bewegung mit Markov-Eigenschaft vorliegt, die auch "LÉVY-Flug" genannt wird (siehe z. B. [KLA 96], [SHLE 99]). Bei der BROWN'schen Bewegung entspricht die resultierende FOKKER-PLANCK-Gleichung der üblichen ADE. Für Prozesse, die durch LÉVY-Flüge bestimmt sind, ergeben sich ähnliche partielle Differentialgleichungen zu Beschreibung der zeitlich-räumlichen Änderung

der Wahrscheinlichkeitsdichte (Schadstoffkonzentration). Es resultieren jedoch fraktionale ADE, bei denen im Diffusions-/Dispersionsterm die üblichen 2. Ableitungen nach den Ortskoordinaten durch fraktionale Ableitungen der Ordnung α zu ersetzen sind (siehe z. B. [BEN 98], [GOR 98], [MEER 99], [BEN 00B], [SCHU 01]). Derartige Modelle wurden durch Messergebnisse aus diversen Labor- und Feldversuchen bestätigt (siehe z. B. [BEN 00A], [BEN 01]). Zu mehrdimensionalen fraktionalen ADE-Modellen siehe z. B. [MEER 01], [SCHU 03], [MEER 06], [ZHA 06].

Beispiel 5.13

Eine ausführliche Darstellung der mathematischen Grundlagen und Methoden der fraktionalen Integration und Differentiation liegt nicht im Rahmen des vorliegenden Berichts. Neben den obigen Referenzen sei hierzu insbesondere auf [MIL 93], [SAM 93] sowie [HIL 00] verwiesen. Um zumindest einen Eindruck zu den (nicht-lokalen) Operatoren der fraktionalen Differentiation und Integration zu vermitteln, seien hier einige grundlegende Definitionen und beispielhaft auch ihre Anwendung erläutert.

Ist f(x) im Bereich (a, ∞) integrierbar, $-\infty \le a < x < \infty$, dann gilt für das gewöhnliche n-fache Integral:

$$ {}_a I_x^n \, f(x) = \int_a^x du_1 \int_a^{u_1} du_2 \ldots \int_a^{u_{n-1}} f(u_n)\, du_n = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-u)^{n-1} f(u)\, du \,. \tag{5-142a} $$

(Dies ist die Lösung der ODE $y^{(n)}(x) = f(x)$ mit den Anfangsbedingungen $y(a) = y'(a) = \ldots = y^{(n-1)}(a) = 0$.) Für Funktionen f(x), die für $-\infty < x < b \le \infty$ integrierbar sind, gilt analog:

$$ {}_x I_b^n \, f(x) = \int_x^b du_1 \int_{u_1}^b du_2 \ldots \int_{u_{n-1}}^b f(u_n)\, du_n = \frac{1}{(n-1)!} \int_x^b (u-x)^{n-1} f(u)\, du \,. \tag{5-142b} $$

Entsprechend der Beziehung $(n-1)! = \Gamma(n)$ wird Gl. (5-142) zur Definition von fraktionalen Integralen der Ordnung α ($\alpha > 0$) verallgemeinert:

$$ {}_a I_x^\alpha \, f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-u)^{\alpha-1} f(u)\, du \,, \tag{5-143a} $$

$$ {}_x I_b^\alpha \, f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b (u-x)^{\alpha-1} f(u)\, du \,. \tag{5-143b} $$

Gl. (5-143) heißt fraktionales RIEMANN-LIOUVILLE-Integral. Bei unendlichen Integrationsgrenzen $a = -\infty$ bzw. $b = \infty$ spricht man auch vom WEYL'schen fraktionalen Integral [HIL 00]. Für $\alpha > 0$ und $\beta > 0$ gelten die Beziehungen

$$ {}_a I_x^\alpha \; {}_a I_x^\beta \, f(x) = {}_a I_x^{\alpha+\beta} \, f(x) \quad \text{sowie} \quad {}_x I_b^\alpha \; {}_x I_b^\beta \, f(x) = {}_x I_b^{\alpha+\beta} \, f(x) \,. \tag{5-144} $$

Fraktionale Ableitungen der Ordnung α ($\alpha > 0$) können nun als (gewöhnliche) n-te Ableitung eines fraktionalen Integrals der Ordnung $n - \alpha$ definiert werden, wobei $n = [\alpha] + 1$ die kleinste natürliche Zahl größer als α ist. Auf der Basis von Gl. (5-143) werden rechts- und linksseitige Ableitungen definiert:

$$ {}_aD_x^{\alpha} f(x) = \frac{d^n}{dx^n}\, {}_aI_x^{n-\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_a^x (x-u)^{n-\alpha-1} f(u)\, du\,, \qquad (5\text{-}145a) $$

$$ {}_xD_b^{\alpha} f(x) = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n}\, {}_xI_b^{n-\alpha} f(x) = \frac{(-1)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_x^b (u-x)^{n-\alpha-1} f(u)\, du\,, \qquad (5\text{-}145b) $$

mit $\alpha > 0$ und $n\text{-}1 \le \alpha < n$. Für den RIEMANN-LIOUVILLE'schen fraktionalen Differentialoperator ${}_0D_x^{\alpha}$ wird auch die Notation d^{α}/dx^{α} verwendet. Damit ergibt sich z. B. für $x > 0$ die folgende fraktionale Ableitung der Potenzfunktion $f(x) = x^p$ mit $p > -1$:

$$ \frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}} x^p = \frac{\Gamma(1+p)}{\Gamma(1+p-\alpha)} x^{p-\alpha} \qquad (p > -1). $$

Hieraus folgt u. a. für die fraktionale Ableitung einer Konstante c ($f(x) = c$):

$$ \frac{d^{\alpha}}{dx^{\alpha}} c = \frac{c\, x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \ . $$

Ist α gleich einer natürlichen Zahl n, so ist die fraktionale Ableitung wegen $\Gamma(1\text{-}n) = \infty$ für $n = 1, 2, \ldots$ gleich Null. Zur Veranschaulichung dieser Beziehungen zeigt Abbildung 5-45 fraktionale Ableitungen der Funktionen $f(x) = 1$ und $f(x) = x^2$ im Bereich $0 < x \le 10$ für α von 0,1 bis 0,9 (in Schritten von 0,2).

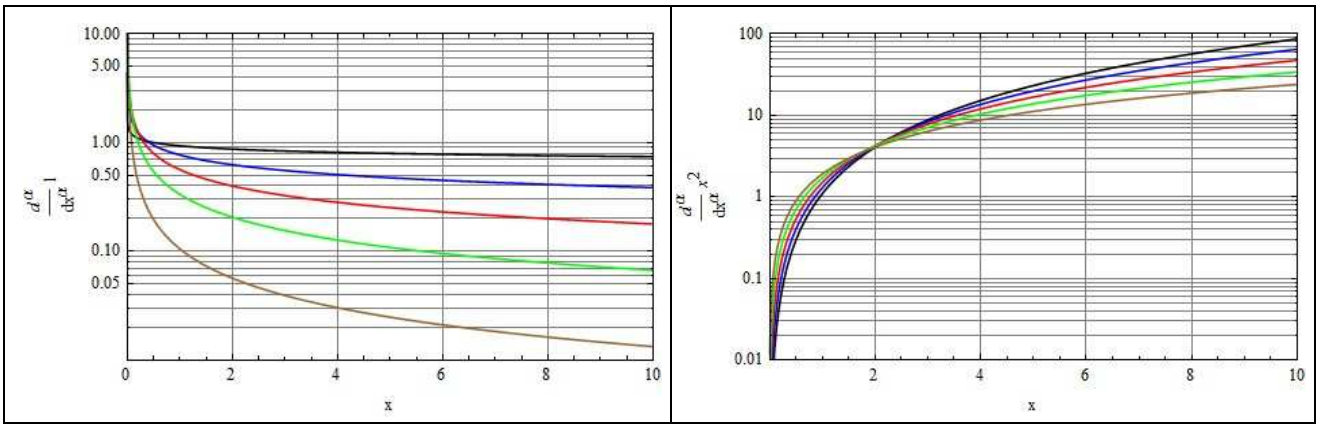


Abbildung 5-45: Fraktionale Ableitungen von $f(x) = 1$ (links) und $f(x) = x^2$ (recht) der Ordnung α für $\alpha = 0{,}1$ (schwarz), $\alpha = 0{,}3$ (blau), $\alpha = 0{,}5$ (rot), $\alpha = 0.7$ (grün) und $\alpha = 0{,}9$ (braun)

Zeitkontinuierlicher Random Walk

Im oben erläuterten Modell des Random Walks mit α-stabiler Schrittlängenverteilung wurde davon ausgegangen, dass alle Partikel pro Zeiteinheit Δt einen Schritt (mit zufälliger Richtung und Länge) ausführen. Beim Modell des zeitkontinuierlichen Random Walk (CTRW; continuous time random walk) wird zusätzlich die Zeit bis zur Ausführung des nächsten Schrittes als Zufallsgröße betrachtet, wobei dann Richtung und Länge der Schritte wie beim elementaren Random Walk wieder zufällige iid verteilte Größen sind. CTRW-Modelle werden in diversen Fachgebieten angewandt (siehe z. B,

[METZ 00], [METZ 04]). Zur Modellierung des anomalen Transports von Tracern im Grundwasser bzw. in der ungesättigten Bodenzone werden CTRW-Modelle seit ca. 15 Jahren sehr erfolgreich eingesetzt ([BERK 98], [BERK 00], [BERK 01A], [BERK 01B], [KOS 01], [BERK 02], [MARG 02], [COR 04A], [COR 04B], [BERK 06], [SRIN 10]). Durch Anpassung der Verteilung zur Wartezeit (bis zum nächsten Schritt) an Messergebnisse kann sowohl ein sub- als auch superdiffusiver Transport modelliert werden.

Beim CTRW-Modell wird für ein Partikel, das zum Zeitpunkt t' am Ort x' angekommen war, die Wahrscheinlichkeit eines nächsten Schritts zum Ort x zur Zeit t durch eine Übertragungsfunktion $\psi(x - x', t - t')$ beschrieben, wobei die beiden Randverteilungen

$$\rho(x) = \int_0^\infty \psi(x,t)\,dt \quad \text{und} \quad \omega(t) = \int_{-\infty}^\infty \psi(x,t)\,dx \tag{5-146}$$

die Wahrscheinlichkeitsdichten für die Schrittlänge (und -richtung) sowie für die Wartezeit sind. Die beiden Zufallsgrößen x und t werden meistens als voneinander unabhängig betrachtet, d. h., es wird von der Annahme $\psi(x,t) = \rho(x)\cdot\omega(t)$ ausgegangen, was jedoch nicht immer gerechtfertigt sein dürfte. Unter dieser Annahme ist die Wahrscheinlichkeit $\eta(x, t)$ dafür, dass ein Partikel zum Zeitpunkt t am Ort x ankommt, gleich

$$\eta(x,t) = \int_{-\infty}^\infty dx' \int_0^t dt'\, \eta(x',t')\, \omega(t-t')\, \rho(x-x') + \delta(x)\cdot\delta(t)\,,$$

wobei mit dem zweiten Summanden die Anfangsbedingung des CTRW beschrieben wird (Partikel startet zur Zeit t = 0 am Ort x = 0). Die Wahrscheinlichkeit C(x, t) dafür, dass sich ein Partikel zum Zeitpunkt t am Ort x befindet, ist dann gleich

$$C(x,t) = \int_0^t \eta(x,t')\, w(t-t')\, dt'\,,$$

wobei

$$w(t) = 1 - \int_0^t dt'\, \omega(t-t')$$

die Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass ein Partikel über einen Zeitraum t keinen Schritt ausführt.

Das zentrale Problem einer CTRW-Modellierung ist die Identifikation der Übertragungsfunktion $\psi(x, t)$ für die jeweiligen Gegebenheiten. Im Unterschied zur standortspezifischen deterministischen Modellierung des Transports von Schadstoffen/Radionukliden auf Basis einer ADE mit heterogenen Parametern, die einen hohen Aufwand zur Bestimmung der Eingabedaten erfordert, verlangt ein stochastisches Modell nur die Ermittlung von relativ wenigen Verteilungsparametern, die mit Hilfe von Feldversuchen gewonnen bzw. validiert werden können. Die Anwendung von stochastischen Modellen dürfte besonders für Anwendungsfälle von Interesse sein, für die detaillierte Daten zur räumlich heterogenen Verteilung der Modellparameter nicht verfügbar bzw. ermittelbar sind.

Unter der Annahme, dass die Schrittlängenverteilung $\rho(x)$ eine endliche Varianz hat, kann $\rho(x)$ in guter Näherung durch eine GAUSS-Verteilung ersetzt werden. Die Dynamik der Ausbreitung hängt jedoch auch von der Verteilung $\omega(t)$ der Wartezeit ab. Fällt die Wahrscheinlichkeitsdichte $\omega(t)$ für große t hinreichend schnell ab, z. B. exponentiell oder potenziell gemäß

$$\omega(t) \sim t^{-(1+\gamma)}$$

mit $\gamma > 2$, so ist das CTRW-Modell asymptotisch äquivalent zu einem normalverteilten Random Walk (siehe [METZ 00], [MARG 00], [MARG 02]). In diesem Fall bewegt sich die mittlere Position $l_C(t)$ der Schadstoffwolke proportional zur Zeit t, und die Standardabweichung $\sigma_C(t)$ der räumlichen Verteilung der Schadstoffe um $l_C(t)$ wächst, wie bei der BROWN'schen Bewegung, gemäß $\sigma_C(t) \sim t^{1/2}$ (siehe Abbildung 5-40). Für $0 < \gamma < 2$ liegt dagegen anomaler Transport vor. Das CTRW-Modell ist dann äquivalent zu einer fraktionalen ADE mit fraktionaler Ableitung nach der Zeit [METZ 00]. In Abhängigkeit vom jeweiligen γ-Wert, der das asymptotische Verhalten der Wartezeit-Verteilung des CTRW beschreibt, ist sowohl Super- als auch Sub-Diffusion möglich [BERK 01A], [BERK 02].

Zur Modellierung eines Übergangs von anomalem zu normalem (GAUSS'schen) Transport wurde in [DEN 04] eine Wahrscheinlichkeitsdichte für die Wartezeit mit zwei Zeitkonstanten untersucht, die einen allmählichen Übergang von potentiellem zu exponentiellem Verhalten der Dichtefunktion $\omega(t)$ beschreibt. Mit dieser Modifikation kann die Anpassung von CTRW-Modellen an Messwerte aus Feldversuchen weiter verbessert werden, wenn davon auszugehen ist, dass ab einer bestimmten Entfernung die heterogene Verteilung der Bodenparameter unkorreliert wird.

Die theoretischen Grundlagen sowie die Methoden zur Lösung der resultierenden fraktionalen ADE (siehe z. B. [BARK 00], [MEER 04]) sollen im vorliegenden Bericht nicht näher erläutert werden. Es ist aber hervorzuheben, dass aus CTRW-Modellen, die eine gute Übereinstimmung mit Messwerten von Labor- und Feldversuchen zur Ausbreitung von Tracern/Schadstoffen mit dem Grundwasser sowie in ungesättigten Böden zeigen, strukturelle Änderungen im Vergleich zum deterministischen Ansatz gewöhnlicher ADE resultieren. Sie entsprechen fraktionalen ADE. Im folgenden Beispiel werden in Abhängigkeit von der Wartezeitverteilung $\omega(t)$ resultierende Unterschiede im Verhalten von CTRW-Modellen veranschaulicht.

Beispiel 5.14

Es wird angenommen, dass die Schrittlänge x und die Wartezeit t voneinander unabhängig sind, so dass die Übergangswahrscheinlichkeit $\psi(x,t)$ des CTRW-Modells dem Produkt der Schrittlängenverteilung $\rho(x)$ und der Wartezeitverteilung $\omega(t)$ entspricht (siehe Gl. (5-146)). Für $\rho(x)$ wird eine Normalverteilung angesetzt, $x \sim N(\mu,\sigma)$, wozu mit $\mu = 1$ und $\sigma = 1$ gerechnet wird. Für die Wartezeitverteilung werden zwei Fälle betrachtet:

(a) $\omega(t)$ fällt exponentiell. Hierzu wird für die Zufallsgröße t eine Exponentialverteilung betrachtet (siehe Abschnitt C.3.3), d. h. $t \sim Ex(\lambda)$, wozu mit $\lambda = 1$ gerechnet wird. Die mittlere Wartezeit ist somit $E[t] = 1$.

(b) $\omega(t)$ fällt potentiell wie $t^{-(1+\gamma)}$ mit $0 < \gamma < 2$. Hierzu wird eine PARETO-Verteilung angesetzt:

$$\omega(t) = \frac{\gamma}{\kappa}\left(\frac{\kappa}{\kappa + t}\right)^{1+\gamma} \quad \text{für} \quad t \geq 0 \quad (\kappa > 0). \tag{5-147}$$

Mit der in Gl. (5-147) angegebenen Wahrscheinlichkeitsdichte existiert für $\gamma > 1$ ein Erwartungswert von $E_{\gamma>1}[t] = \kappa/(\gamma-1)$. Für eine gute Vergleichbarkeit der beiden CTRW-Modelle wird mit $\gamma = 1{,}5$ und $\kappa = 0{,}5$ gerechnet, so dass auch im Fall (b) eine mittlere Wartezeit von $E[t] = 1$ resultiert. Abbildung 5-46 zeigt die für die beiden Rechenfälle (a) und (b) angesetzten Wartezeitverteilungen.

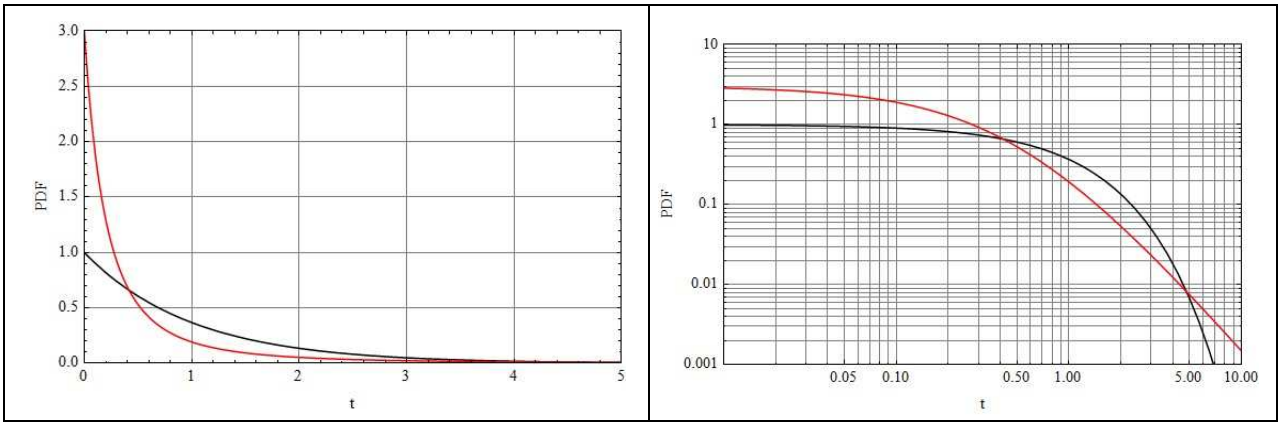


Abbildung 5-46: Wahrscheinlichkeitsdichten der betrachteten Wartezeitverteilungen; (a): Exponentialverteilung mit $\lambda = 1$ (schwarz); (b) PARETO-Verteilung gemäß Gl. (5-147) mit $\gamma = 1{,}5$ und $\kappa = 0{,}5$ (rot); Erwartungswerte stimmen in beiden Fällen mit $E[t] = 1$ überein

Für beide Fälle wurden jeweils 10000 zufällige Realisierungen des CTRW bis zu einer Zeit von $t = 1600$ berechnet. Die für bestimmte Zeitpunkte resultierenden Häufigkeitsverteilungen der erreichten Positionen (x) entsprechen der Konzentrationsverteilung C(x,t) nach einer zum Zeitpunkt $t = 0$ am Ort $x = 0$ erfolgten impulsartigen Injektion.

Im Fall (a) stimmt C(x,t) mit der fundamentalen Lösung einer ADE mit konstanten Parametern überein:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v\frac{\partial C}{\partial x},$$

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\exp\left(-\frac{(x - v t)^2}{4 D t}\right) \qquad (x \geq 0,\ t \geq 0) \quad \text{mit } v = \mu\ (=1) \text{ und } D = \sigma^2\cdot\lambda\ (=1). \qquad (5\text{-}148)$$

Das ist eine GAUSS-Verteilung mit Schwerpunkt $l_C(t) = \mu\cdot t$, deren Standardabweichung $\sigma_C(t) = \sigma\cdot(2\cdot\lambda\cdot t)^{1/2}$ sich proportional zu $t^{1/2}$ vergrößert.

Im Fall (b) liegt ein anomaler Transport vor, wobei C(x,t) als Lösung einer fraktionalen ADE dargestellt werden kann. Mit dem hier gewählten Wert von $\gamma = 1{,}5$ resultiert ein superdiffusiver Prozess, wobei nach [MARG 00], [BERK 01A] der Schwerpunkt der Schadstoffwolke (der Häufigkeitsverteilung der Partikel des CTRW) ähnlich zum Fall (a) etwa bei $l_C(t) = \mu\cdot t$ liegen, ihre Standardabweichung jedoch anomal schnell wie $\sigma_C(t) \sim t^{(3-\gamma)/2}$ zunehmen sollte (im hier betrachteten Fall also wie $t^{3/4}$). Außerdem ist für C(x,t) eine schiefe Verteilung mit steilerem Anstieg an der Frontseite zu erwarten.

Abbildung 5-47 zeigt für die beiden Fälle (a) und (b) berechnete (Häufigkeits-)Verteilungen C(x,t) zu den Zeitpunkten t = 100, 200, 400, 800 und 1600. Zum Vergleich ist auch die Lösung des BROWN'schen

CTRW nach Gl. (5-148) dargestellt. Die zum Fall (b) resultierenden Verteilungen entsprechen dem durch die Wartezeitverteilung nach Gl. (5-147) bedingten Effekt der Superdispersion.

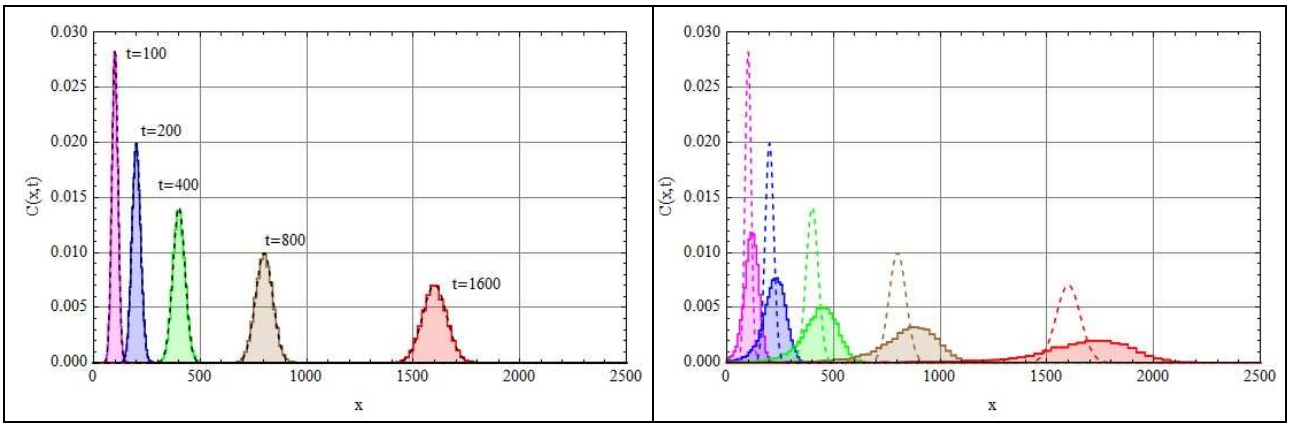


Abbildung 5-47: Verteilungen C(x,t) des CTRW-Modells für die Fälle (a) (linkes Bild) und (b) (rechtes Bild) zu den Zeitpunkten t = 100 (magenta), 200 (blau), 400 (grün), 800 (braun) und 1600 (rot); zum Vergleich die GAUSS-Verteilungen nach Gl. (5-148) (gestrichelt)

Zu den o. g. asymptotischen Abhängigkeiten des Schwerpunktes $l_C(t)$ und der Standardabweichung $\sigma_C(t)$ der Verteilungen C(x,t) enthält Tabelle 5-5 die aus der CTRW-Simulation resultierenden Schätzwerte. Die Zeitabhängigkeiten entsprechen sehr gut den oben angegebenen asymptotischen Beziehungen. Neben $l_C(t)$ und $\sigma_C(t)$ sind für den Fall (a) auch die Varianz $\sigma_C^2(t)$ und für den Fall (b) die Größe $\sigma_C^{4/3}(t)$ angegeben, die jeweils proportional mit der Zeit t anwachsen.

Tabelle 5-5: Statistische Kenngrößen der Verteilungen C(x,t) der CTRW-Simulation Abbildung 5-47

	t = 100	**t = 200**	**t = 400**	**t = 800**	**t = 1600**
	Fall (a)				
$\mathbf{l_C(t)}$	100,0	200,3	400,5	800,1	1599,9
$\boldsymbol{\sigma_C(t)}$	14,31	20,26	28,42	40,29	56,66
$\boldsymbol{\sigma_C^2(t)}$	204,8	410,5	807,6	1623,7	3209,9
	Fall (b)				
$\mathbf{l_C(t)}$	114,0	219,6	427,2	839,4	1654,8
$\boldsymbol{\sigma_C(t)}$	34,41	56,38	92,43	152,39	254,15
$\boldsymbol{\sigma_C^{4/3}(t)}$	111,9	204,4	417,9	814,0	1609,8

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass inzwischen auch CTRW-Modelle zur Simulation von Transportprozessen mit Sorption entwickelt wurden (siehe z. B. [MARG 03] und [BERK 08]). Dieser Ansatz sollte zur Modellierung der Ausbreitung von Radionukliden im Grundwasser im Hinblick auf die radiologische Analyse von Endlagermodellen weiter verfolgt werden.

Teil III

Entscheidungshilfen und Kriterien zur Anwendung deterministischer, probabilistischer bzw. stochastischer Expositionsmodelle

6. AUSWAHL DETERMINISTISCHER, PROBABILISTISCHER, POSSIBILISTISCHER UND STOCHASTISCHER EXPOSITIONSMODELLE

Die Kapitel 2 bis 5 des vorliegenden Berichts geben eine Übersicht zu den vielfältigen Ansätzen und Methoden der Anwendung von deterministischen, probabilistischen oder possibilistischen sowie stochastischen Modellen, die für Expositionsabschätzungen genutzt werden oder zukünftig angewandt werden könnten, um der Forderung nach weitgehend realistischen bzw. realitätsnahen Abschätzungen von Strahlenexpositionen nachzukommen. In den Abschnitten 6.1 und 6.2 werden generelle Schlussfolgerungen zur Nutzung deterministischer, probabilistischer bzw. stochastischer Modellierungsansätze gezogen und dbzgl. Entscheidungshilfen erläutert.

Vor diesem Hintergrund sind Kriterien abzuleiten, die zur Auswahl zwischen den unterschiedlichen Modellierungsansätzen herangezogen werden können. Hierzu sind Anforderungen an die jeweils erforderliche Datenbasis zu spezifizieren. Dies ist ein vielschichtiges Problem. In Abschnitt 6.3 werden zunächst jene Gesichtspunkte dargelegt, die im Rahmen der o. g. Zielstellung zu beachten sind. Davon ausgehend werden Kriterien zur Auswahl von Modellierungsansätzen für die verschiedenen Ziele und Randbedingungen abgeleitet.

6.1. Schlussfolgerungen zur Nutzung deterministischer und probabilistischer Modelle

Neben den üblichen deterministischen Expositionsabschätzungen dienen die in den Kapiteln 2 und 4 erläuterten Methoden der probabilistischen und possibilistischen Expositionsmodellierung dem Verständnis der Auswirkungen aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten auf Zielgrößen der Modellierung (Expositionsmaße bzw. Risiken).

- Deterministische Expositionsabschätzungen sind für Genehmigungsverfahren, zum Screening und für Fälle geeignet, in denen eine geringe Strahlenexposition zu erwarten ist. Dabei werden i. A. konservative Abschätzungen angestrebt. Unsicherheiten der Ansätze und Ergebnisse sowie deren Bezug auf die reale Variabilität von Inputparametern können jedoch bei diesem Ansatz prinzipiell nicht oder zumindest nicht offenbar nachvollzogen werden.
- Probabilistische Expositionsabschätzungen mit Hilfe von 1D-MC-Simulationen sind technisch mit kommerziell verfügbarer Software realisierbar. Sie erfordern eine gewissenhafte Prüfung der für Inputvariable angepassten Verteilungen und ggf. auch von statistischen Abhängigkeiten zwischen Modellparametern, wozu eine umfangreiche Datenbasis nötig ist. Ihre Anwendung zur Sensitivitätsanalyse deterministischer Abschätzungen ist ein gangbarer Weg, wenn i. W. nur die Analyse möglicher Auswirkungen der realen Variabilität von Inputvariablen auf radiologisch relevante Zielgrößen bezweckt ist. Die Anwendung von 1D-MC-Simulationen zur Bestimmung höherer Quantile einer Zielgröße ist aber kritisch zu hinterfragen,
  - wenn "Default"-Verteilungen für Inputvariable genutzt werden, die im konkreten Fall unzutreffend sein können,
  - wenn die Datenbasis keine sichere Unterscheidung zwischen ähnlichen Verteilungsfamilien zulässt, die sich in den Randbereichen erheblich unterscheiden, oder

- wenn sich epistemische Unsicherheiten zu statistischen Schätzungen bzw. von Vermutungen für einzelne Inputvariable und/oder deren gegenseitige Abhängigkeit substantiell auf die Verteilung der Zielgröße auswirken können.

- Mit Hilfe von 2D-MC-Simulationen können Auswirkungen aleatorischer bzw. epistemischer Unsicherheiten von Inputvariablen auf eine Zielgröße separiert und analysiert werden. Dies erweitert den Anwendungsbereich probabilistischer Simulationen für Sensitivitätsanalysen. Die oben zur Anwendung der 1D-MC-Simulation für andere Ziele genannten Anforderungen gelten auch hier. Methodisch zu hinterfragen ist die Anwendung des Bootstrappings zur Modellierung von Abhängigkeiten zwischen unsicheren Verteilungsparametern, da hiermit auch bei größeren Stichprobenumfängen erhebliche Verzerrungen auftreten können (siehe Abschnitt 4.2.3). Die 2D-MC-Simulation ist mit einem hohen rechentechnischen Aufwand verbunden und für große/komplexe Systeme eher weniger geeignet, obwohl auch hierzu einige Anwendungen vorliegen. Fragwürdig ist eine Übertragung von frequentistischen Methoden auf epistemische Unsicherheiten der Informationsassimilation und von Vermutungen, weil dbzgl. Annahmen zu Verteilungen der Inputvariablen nicht im Sinne der klassischen (frequentistischen) Statistik interpretiert und behandelt werden sollten.

- Die alternative Anwendung von BAYES-Methoden erleichtert insbesondere für hierarchisch strukturierte Systeme probabilistische Expositionsabschätzungen auch unter Berücksichtigung von epistemischen Unsicherheiten. Ein wesentlicher Vorteil dieses Zugangs ist die konsistente Behandlung von Unsicherheiten zu Verteilungsparametern der für Inputvariable angepassten statistischen Verteilungen sowie die Berücksichtigung ihrer gegenseitigen Abhängigkeit bei Simulationsrechnungen. Auswirkungen aleatorischer bzw. epistemischer Unsicherheiten von Inputvariablen auf eine Zielgröße können separiert und analysiert werden. Die Einbeziehung von epistemischen Unsicherheiten ist zwar mit Hilfe von BAYES-Methoden möglich, verlangt aber ein grundlegend anderes Verständnis der Wahrscheinlichkeit als "glaubhafte Erwartung", die vielen Praktikern wenig geläufig und wegen ihrer Subjektivität auch nicht unumstritten ist. Bei einem adäquaten Verständnis der mittels subjektiver BAYES-Ansätze für Zielgrößen von probabilistischen Expositionsmodellen resultierenden Verteilungen können diese für die Beurteilung von Unsicherheiten der Prognose von Expositionsgrößen aber hilfreich sein. Die mathematisch-technischen Anforderungen der Anwendung von BAYES-Methoden sind relativ hoch und verlangen i. d. R. für den jeweiligen Anwendungsfall spezifizierte Modelle und ggf. auch spezielle Lösungsalgorithmen (siehe Abschnitt 4.2.2).

- Eine Anwendung der Evidenztheorie (DEMPSTER-SHAFER-Theorie), einer Verallgemeinerung der Wahrscheinlichkeitstheorie zur Einbindung von Expertenwissen und zur Modellierung der Glaubwürdigkeit von Aussagen zu Wahrscheinlichkeiten bzw. ihren Verteilungen, mit der auch probabilistische und possibilistische Aussagen zu Inputvariablen verknüpft werden können (beides sind Spezialfälle von DEMPSTER-SHAFER-Strukturen), könnte aus unserer Sicht als aussichtsreicher Ansatz angesehen werden, um aleatorische und epistemische Unsicherheiten von Expositionsmodellen adäquat zu quantifizieren und darzustellen. Eine vereinfachte Form ist die für konservative Abschätzungen geeignete p-Box-Methode, der in zunehmendem Maße Aufmerksamkeit gewidmet wird. Sie könnte auch für strahlenschutzrechtliche Bewertungen an Bedeutung gewinnen. Ein einfaches Beispiel zur Berücksichtigung von Unwissen/Unsicherheit zur Abhängigkeit zwischen zwei Inputvariablen/Expositionsfaktoren bei der Modellierung der

aleatorischen und epistemischen Unsicherheit einer Zielgröße enthält der Abschnitt 4.3.3. Für eine Beurteilung der Anwendbarkeit von Methoden der Evidenztheorie auf komplexe Modelle mit unterschiedlichen Strukturen sind weiterführende Untersuchungen und Modellrechnungen erforderlich. Eine Kombination mit BAYES-Methoden erscheint möglich und zweckmäßig, wäre aber ebenfalls noch genauer zu untersuchen.

Das Handbuch [CUL 99] enthält auch zur Einordnung der Ergebnisse deterministischer bzw. probabilistischer Expositionsberechnungen vielfältige Aussagen, die auf Erfahrungen basieren, die bis Ende des letzten Jahrzehnts in den USA gesammelt wurden. Neben den obigen Darlegungen erscheint es angebracht, an dieser Stelle auch wesentliche Vor- und Nachteile von deterministischen bzw. probabilistischen Expositionsmodellen zu nennen, wie sie von anderen Autoren gesehen werden. Danach sind Anwendungen deterministischer bzw. probabilistischer Expositionsmodelle mit unterschiedlichen Vor- und Nachteilen verbunden:

- Vorteile deterministischer Expositionsmodelle sind insbesondere der wesentlich geringere Aufwand für und die einfache Darstellung der Verwendung von Punktschätzern sowie die leichte Nachvollziehbarkeit der Ergebnisse von Expositionsabschätzungen sowie ihre einfache Vergleichbarkeit, wenn standardisierte personenbezogene Expositionsfaktoren zugrunde liegen.
- Nachteile deterministischer Expositionsmodelle sind z. B., dass durch die Nutzung von Punktschätzern häufig die Relevanz vorhandener Unsicherheiten aus dem Auge verloren wird und unrealistische Ergebnisse resultieren, dass die Korrelation von Parametern nicht berücksichtigt wird und Sensitivitätsaussagen nur zur Dominanz einzelner Expositionspfade bzw. Schadstoffe getroffen werden, dass sie keine quantitative Aussage zur Wahrscheinlichkeit der Einhaltung bzw. Überschreitung des angestrebten Schutzniveaus gestatten und dass ihre Ergebnisse nur wenig zur Verbesserung der Datenbasis motivieren, da sie oft irrtümlich als bereits erreichte "einfache Antwort auf komplizierte Fragen" interpretiert werden.

Während für einzelne Variable mit Hilfe von Punktschätzern oft ausreichende Informationen für eine Bewertung in kompakter Form vermittelbar sind, erlaubt die Anwendung von Punktschätzern für die verschiedenen Variablen eines Expositionsmodells in der Regel keine unmittelbare Aussage zur (statistischen) Einordnung der berechneten Dosis. So entspricht z. B. das Produkt von mehreren 95%-Perzentilen nicht dem 95%-Perzentil des Produkts, sondern führt zu einem wesentlich höheren Perzentil des Produkts. Während für einzelne Faktoren das 95%-Perzentil angemessen konservativ sein mag, kann ihr Produkt zu einer extrem konservativen Schätzung der Dosis führen. Wenn die einzelnen Faktoren eines Expositionsmodells verschiedenartigen statistischen Verteilungen unterliegen, können anhand von Punktschätzern für die einzelnen Faktoren kaum noch belastbare Aussagen zur Bedeutung der berechneten Zielgröße (Dosis) getroffen werden. Dieses Problem kann durch die Anwendung probabilistischer Methoden behoben werden.

- Vorteile der probabilistischen Expositionsmodelle sind insbesondere die vollständige Nutzung der verfügbaren Datenbasis sowie weiterer verfügbarer Kenntnisse zu allen Eingangsgrößen inklusive der Beachtung real vorhandener Korrelationen zwischen Eingangsvariablen, die darauf basierende Erfassung der Variabilität der Eingangsgrößen sowie die Möglichkeiten zur Bewertung von Unsicherheit der Berechnungen entsprechend Datenlage, die Realitätsnähe der Ergebnisse von Expositionsabschätzungen mit der Quantifizierung ihrer Glaubwürdigkeit, die Identifizierung von sensitiven Modellvariablen, woraus oft wirksame Maßnahmen zur Optimierung des Strahlenschutzes bzw. Verbesserung der Datenbasis für entscheidungsrelevante Ein-

flussfaktoren abgeleitet werden können, und die quantitative Bewertung der Wahrscheinlichkeit denkbarer Überschreitungen des Schutzniveaus.

- Nachteile der probabilistischen Expositionsmodelle sind z. B. der deutlich höhere Aufwand, die komplexere und umfangreichere Darstellung der Datenbasis, Modelle und Ergebnisse bei einer für breite Leserkreise geringeren Nachvollziehbarkeit, der Zwang zur Interpretation von Unsicherheiten der Expositionsabschätzungen, die Gefahr, auch bei unzureichender Datenbasis den Eindruck exakter Kenntnis zu erwecken, wobei unzutreffende Annahmen oder Fehler verdunkelt sein können, und nicht zuletzt das Risiko der Erzeugung von Misstrauen in die Ergebnisse bei nicht erfolgreicher Kommunikation mit den Betroffenen.

Hierzu ist aber anzumerken, dass die Ergebnisse probabilistischer Expositionsberechnungen durch deterministische Modellrechnungen mit geeignet gewählten Punktschätzern untersetzt und verständlich dargestellt werden können. Deterministische und probabilistische Ansätze können sich folglich sinnvoll ergänzen.

Unter Beachtung der oben erwähnten Vor- und Nachteile deterministischer bzw. probabilistischer Expositionsabschätzungen hat sich zur Abschätzung von Expositionen durch chemotoxische Stoffe ein derartig abgestuftes Vorgehen der Nutzung konservativer deterministischer bis hin zu realitätsnahen probabilistischen Modellen, in denen für sensitive Variable statistische Verteilungen berücksichtigt werden, bewährt und etabliert (siehe Abschnitt 3.1). Dies betrifft u. a. die Risikobewertung von Altlasten [EPA 01B] sowie prognostische Risikoabschätzungen zu Chemikalien, besonders in Lebensmitteln [IEFS 03], [NCM 07], [UBA 07], [WHO 08].

Danach wird in einer ersten Stufe der Risikobewertung zunächst im Rahmen ungünstiger ("worst case") Szenarien mit deterministischen Modellen auf der Basis konservativer Annahmen geprüft, ob das erforderliche Schutzniveau mit hoher Sicherheit eingehalten wird. Wenn mit diesem Screening trotz der pessimistischen Annahmen zur Schadstoffexposition die Einhaltung des Schutzniveaus gezeigt werden kann, sind weitere Untersuchungen nicht erforderlich. Andernfalls werden in einem iterativen Prozess Expositionsszenarien und -modelle verfeinert und Auswirkungen der Variabilität von Modellparametern und der Unsicherheiten ihrer Ermittlung analysiert, um auf dieser Grundlage abschließende Aussagen zur Einhaltung des Schutzniveaus zu gewinnen. In der Abbildung 6-1 ist ein Beispiel für eine derartig gestufte Vorgehensweise nach [LUN 01] dargestellt, die entsprechend den Anforderungen des Strahlenschutzes modifiziert wurde.

Die Frage, für welche Zielstellungen und unter welchen Voraussetzung eine MC-Simulation zur Quantifizierung der Unsicherheiten von Expositionsabschätzungen sinnvoll ist und hierzu auch eine Analyse von sensitiven aleatorischen und/oder epistemischen Unsicherheiten der Inputvariablen des Modells erfolgen sollte, kann häufig nicht von vornherein entschieden werden. Eine vernünftige Antwort auf diese Frage resultiert jedoch im Rahmen einer gestuften Vorgehensweise, die von vielen kompetenten Institutionen empfohlen wird (siehe z. B. [EPA 97A], [IEFS 03], [NCM 07], [UBA 07], [WHO 08]).

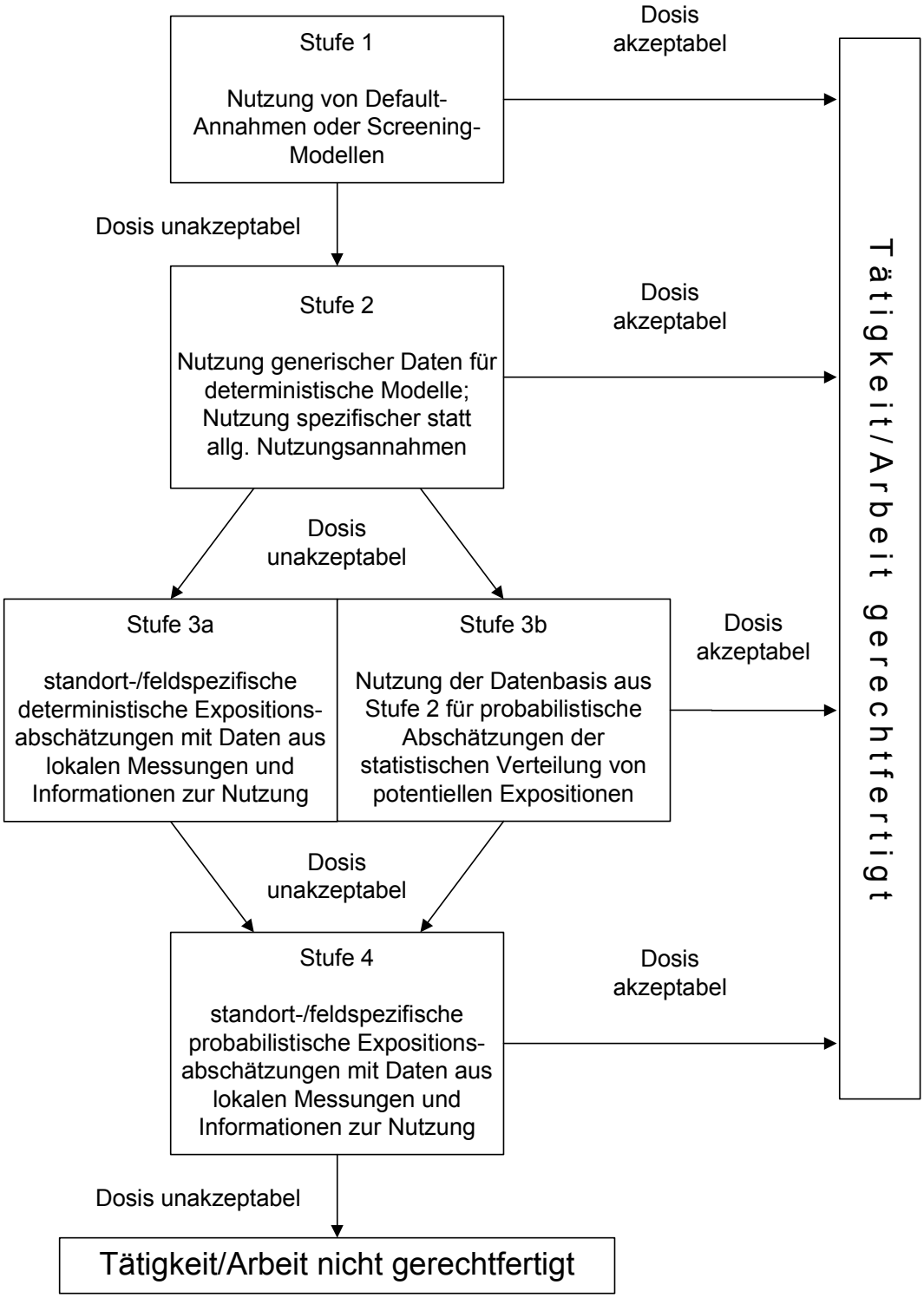


Abbildung 6-1: Schema einer gestuften Vorgehensweise zur Bewertung potentieller Expositionen der Bevölkerung und von Arbeitnehmern durch Tätigkeiten/Arbeiten; nach [LUN 01]

Wenn MC-Simulationen durchgeführt werden, so sollten dabei einige Prinzipien befolgt werden, wie sie auf der Basis vielfältiger Erfahrungen z. B. in [BUR 94] und [EPA 97A] formuliert wurden. Die folgende Zusammenfassung von Empfehlungen basiert auf [EPA 97A].

Auswahl von Daten und statistischen Verteilungen für die MC-Simulation

1. Mit Hilfe einer vorläufigen Sensitivitätsanalyse oder mit numerischen Experimenten sollten für das zugrunde liegende deterministische Modell Besonderheiten der Modellstruktur, wichtige Expositionspfade und Annahmen zu Inputparametern, die sich auf die Variabilität und/oder die Unsicherheit der Zielgröße stark auswirken könnten, untersucht werden.
2. Die MC-Simulation zur probabilistischen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse sollte auf signifikante Expositionspfade und Modellparameter fokussiert werden.
3. Die Auswahl von Verteilungsfunktionen sollte auf einer möglichst umfassenden Analyse der für die Inputvariablen zur Verfügung stehenden Daten und sonstigen Informationen basieren.
4. Für eine behelfsmäßige Verwendung von Daten/Verteilungen aus anderen Untersuchungen (wenn für den konkreten Fall keine oder zu wenig Daten verfügbar sind) sollte eine ausreichende Begründung vorgenommen werden.
5. Können für den zu untersuchenden Fall empirische Daten für die Schätzung der Parameter von statistischen Verteilungen erhoben werden, so sollten hierzu Methoden der Probenahme genutzt werden, die der Aufgabenstellung und dem Expositionsmodell möglichst gut entsprechen.
6. Expertenschätzungen zur Art von Verteilungen und/oder zu ihren Parametern können genutzt werden, deren epistemische Unsicherheit sollte aber bei der MC-Simulation besonders beachtet werden.[84]

Bewertung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten (von "Variabilität" und "Unsicherheit")

7. Da aleatorische und epistemische Unsicherheiten unterschiedlicher Natur sind, sollte anhand der Ziele und Anforderungen an die Expositionsabschätzung darüber entschieden werden, ob beide Arten von Parameterunsicherheiten gemeinsam behandelt werden können (1D-MC-Simulation) oder ob dbzgl. eine separierte Analyse und Bewertung erforderlich ist (2D-MC-Simulation).
8. In einer 2D-MC-Analyse sind methodische Unterschiede von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten zu beachten.[85]
9. Die numerische Stabilität von MC-Simulationsrechnungen sollte ausreichend geprüft werden, wozu insbesondere die höheren Momente der Stichprobenverteilungen und die Verteilung in den gering wahrscheinlichen Randbereichen kontrolliert werden sollten.
10. Die Möglichkeiten der Identifikation, Spezifikation und Berücksichtigung von epistemischen Unsicherheiten sind oft eingeschränkt. Es sollte jedoch versucht werden, die gesamte Breite solcher Unsicherheiten zu erfassen und ihre Relevanz mit Hilfe von Sensitivitätsanalysen auch quantitativ oder qualitativ zu charakterisieren.

---

[84] Zur erforderlichen Qualifikation von "Experten" wird auf [NCRP 96] verwiesen.

[85] Die tatsächliche Variabilität von Parametern wird häufig überschätzt, wogegen epistemische Unsicherheiten eher unterschätzt werden.

Präsentation der Ergebnisse von Monte-Carlo-Analysen

11. Das verwendete Expositionsmodell sollte vollständig beschrieben werden, wozu die zugrunde gelegten mathematischen Beziehungen, Annahmen und Beschränkungen so dargelegt werden sollten, dass Transparenz und Reproduzierbarkeit gewährleistet sind.
12. Die verwendeten Verteilungen für Inputvariable sollten detailliert dargestellt und bezüglich aleatorischer, epistemischer bzw. kombinierter Unsicherheiten der Inputvariablen des Modells erläutert werden. Die Ergebnisse von statistischen Anpassungstests sollten diskutiert werden.
13. Zu den Ergebnissen der MC-Simulation sollten die statistischen Verteilungen der Zielgrößen in anschaulicher Form grafisch dargestellt werden (z. B. mit übereinander angeordneten Darstellungen der Wahrscheinlichkeitsdichte und der Verteilungsfunktion) und durch Angaben zu wichtigen statistischen Kenngrößen (Mittelwert, Varianz, Schiefe und Wölbung, untere und höhere Perzentile etc.) ergänzt werden.
14. Die Berücksichtigung bzw. Vernachlässigung von Abhängigkeiten und Korrelationen zwischen den Inputvariablen sollte diskutiert und insbesondere bzgl. ihrer Auswirkungen auf die Randbereiche der Verteilung der Zielgröße(n) analysiert werden. Wenn Korrelationen zwischen Inputvariablen nicht oder nicht ausreichend sicher quantifiziert werden konnten, sollten die Ergebnisse einer entsprechenden Sensitivitätsanalyse erläutert werden.
15. Zur Bewertung der Ergebnisse der MC-Simulation sollten auch deterministische Berechnungen zur Exposition vorgenommen werden, wozu die verwendeten Punktschätzer (z. B. regulatorische Nominalwerte) für alle Modellparameter angegeben und in den statistischen Verteilungen der Inputvariablen zum Vergleich dargestellt werden sollten.
16. Eine nach Detaillierungsgrad abgestufte Präsentation, die auf die Informationsbedürfnisse der Leser zugeschnitten ist, wird als hilfreich angesehen und empfohlen.

6.2. Schlussfolgerungen zur Nutzung probabilistischer und stochastischer Modelle

Probabilistische Expositionsmodelle basieren auf deterministischen mathematischen Beziehungen und verallgemeinern diese, indem die Werte von Modellparametern durch statistische Verteilungen ersetzt werden, um dbzgl. aleatorische und/oder epistemische Unsicherheiten zu berücksichtigen.[86] Statistische Verteilungen beschreiben immer eine Grundgesamtheit (Population) von möglichen Realisierungen. Die Interpretation des Begriffs der Wahrscheinlichkeit von Realisierungen ist zwar nach dem Verständnis des klassischen (frequentistischen) bzw. des BAYES'schen Zugangs zur Wahrscheinlichkeitstheorie unterschiedlich (siehe Abschnitt 2.7), der grundsätzliche Ansatz einer Population von möglichen Realisierungen stimmt jedoch überein.

Davon ausgehend können deterministische Expositionsmodelle dann zu probabilistischen Modellen verallgemeinert werden, wenn für (probabilistisch) betrachtete Modellparameter eine Population existiert, deren Bestandteile (Elemente) zumindest theoretisch eindeutig definiert werden können. Typische Beispiele sind statistische Verteilungen zu jährlichen Verzehrsmengen einer bestimmten

[86] Dem Ansatz possibilistischer oder ähnlicher Verteilungen für epistemisch unsichere Parameter, z. B. auf der Basis von Expertenschätzungen, kommt eine ähnliche Funktion zu (siehe Abschnitt 2.8).

Bevölkerungsgruppe oder Expositionszeiten von Beschäftigten in Arbeitsbereichen mit erhöhter Gammastrahlung oder Aktivitätskonzentration der Luft. Probabilistische Ansätze sind demgemäß besonders zur Analyse oder Berücksichtigung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten zu den Parametern der "Expositionsmodelle im engeren Sinne" geeignet (vgl. Abschnitt 2.2).

Eine andere Situation liegt vor, wenn für Parameter von Verdünnungs- oder Ausbreitungsmodellen, die im Rahmen deterministischer Ansätze durch gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen beschrieben werden, eine stochastische zeitliche Variabilität und/oder räumliche Heterogenität vorliegt. Für diese Modellstrukturen resultieren stochastische Prozesse, die durch stochastische Differentialgleichungen oder Random-Walk-Modelle beschrieben werden können (siehe Kapitel 5).

Im Unterschied zu den o. g. Expositionsfaktoren, deren probabilistische Verteilung anhand von Stichprobenwerten für eine Population aus klar definierten Individuen untersucht werden kann, sind zeitlich und/oder räumlich variierende Parameter von Expositionsmodellen i. A. nicht eindeutig definiert, sondern hängen z. B. von der angewandten Messzeit, von der untersuchten Masse der Stoffstichproben oder von der räumlichen Ausdehnung einer Quantifizierung von ortsabhängigen Parametern ab. Modellparameter, deren Variabilität durch stochastische Prozesse bedingt ist, sollten auch deshalb mit Hilfe stochastischer Differentialgleichungen modelliert und simuliert werden, weil die Auswahl/Anpassung statistischer Verteilungen für Parameter eines probabilistischen Modells anhand von Daten aus einem stochastischen Prozess von weiteren Parametern dieses Prozesses abhängen und deshalb irreführend sein kann.

Verdünnungs- und Ausbreitungsprozesse sind i. d. R. stochastische Vorgänge, die für die Zielgröße zu Verteilungen führen, die in Abhängigkeit von Mittelungszeiten bzw. -räumen oft relativ genau durch deterministische Modelle approximiert werden können. Die Lösung von gewöhnlichen bzw. partiellen stochastischen Differentialgleichungen beinhaltet eine Mittelung über zeitlich/räumlich variierende Modellparameter, wie in Kapitel 5 anhand diverser Bespiele verdeutlicht wurde.

Die Lösungen stochastischer Differentialgleichungen stimmen nicht mit probabilistischen Modellen überein, die auf analogen deterministischen Gleichungen basieren, deren Parameter (nachträglich) als Zufallsgrößen behandelt werden. Solche probabilistischen Ansätze entsprechen einer anderen Fragestellung. Sie beschreiben z. B. eine Population unterschiedlicher (lokaler) Gegebenheiten der Verdünnung oder der Ausbreitung von Radionukliden. Solche probabilistischen Modelle können zwar für Sensitivitätsanalysen oder generische Modellrechnungen durchaus sinnvoll sein, betreffen aber nicht das eigentliche Problem der an einem bestimmten Standort zeitlich und/oder räumlich stochastisch variierenden Parameter dynamischer Modelle.

Deterministische, stochastische und probabilistische Modellansätze können in Abhängigkeit von der jeweiligen Zielstellung ihre spezielle Berechtigung haben. Dabei ist es jedoch wichtig, die den drei Modellen zugrunde liegenden Annahmen und deren Relevanz für die Beurteilung einer konkreten Fragestellung sachgerecht zu beurteilen. Eine rein probabilistische Behandlung von aleatorischen oder epistemischen Unsicherheiten zu Parametern von (Teil-)Modellen, die durch Differentialgleichungen formuliert werden, würde dem Charakter stochastischer Prozesse nicht gerecht werden. Neben der Beurteilung von stochastischen Unsicherheiten mit Hilfe von SDE (im Vergleich zum Erwartungswert stochastischer Modellen, die oft einem deterministischen Modell entsprechen) dient die Entwicklung stochastischer Modelle nicht zuletzt dem Verständnis der realen Prozesse und der Begründung vereinfachter deterministischer Ansätze (z. B. fraktionale ADE, siehe Abschnitt 5.3.3).

6.3. Auswahlkriterien für deterministische und probabilistische/possibilistische Modelle

6.3.1. Ziele und Randbedingungen von Expositionsabschätzungen

Für die Auswahl zwischen deterministischen, probabilistischen (bzw. auch possibilistischen) sowie stochastischen Ansätzen der Modellierung von Strahlenexpositionen können verschiedene Kriterien herangezogen werden. Neben den generellen Schlussfolgerungen, die hierzu in den Abschnitten 6.1 und 6.2 erläutert wurden, können weitere Kriterien abgeleitet werden, die sich auf spezielle Ziele und Randbedingungen von Expositionsabschätzungen beziehen. Sie betreffen die Definition der Person(en), für die Expositionsabschätzungen vorzunehmen sind, die konkrete Aufgabenstellung einer Expositionsabschätzung und die Art zu bewertender Expositionssituationen sowie Umfang bzw. Komplexität der Modellierung des Radionuklidtransports.

Bezugspersonen

Die Eignung deterministischer, probabilistischer, possibilistischer bzw. stochastischer Ansätzen für die Modellierung von Strahlenexpositionen wird nicht zuletzt durch Festlegungen zu den Personen, Personengruppen oder der Population bestimmt, für die Expositionsabschätzungen vorgenommen werden. Dies betrifft insbesondere Expositionsmodelle "im engeren Sinne", bei denen die äußere Strahlung und die radioaktive Kontamination von relevanten Umweltmedien (Luft, Wasser) und Lebensmitteln bekannt sind oder als zu messende bzw. abzuschätzende Größen betrachtet werden (siehe Abbildung 2-1). Für Expositionsabschätzungen sind die jeweiligen Bezugspersonen durch Personen- und Verhaltensparameter zu spezifizieren (wie Alter und Geschlecht, Expositionszeiten, Verzehrsmengen, Atemraten etc.). Es werden folgende Arten von Bezugspersonen unterschieden:

- hypothetische Einzelpersonen (Referenzpersonen) mit definierten Personen- und Verhaltensparametern (z. B. den in der StrlSchV festgelegten Parametern), die
  - (a) "unrealistisch konservativ" sein können,
  - (b) oberen Perzentilen (z. B. dem 95%-Perzentil) einer Population entsprechen oder
  - (c) die Erwartungswerte der für eine reale Population ermittelten Verteilungen abbilden;
- reale Personen bzw. Personengruppen, für die eine bestimmte Expositionssituation zu bewerten ist (z. B. Beschäftigte in Arbeitsumfeldern, für die mit erheblich erhöhten Strahlenexpositionen zu rechnen ist; Anwohner einer Halde des früheren Uranbergbaus; Personen mit besonderen Verhaltensmerkmalen wie Kleingärtner, Angler, Pilzesammler etc.).

Aufgabenstellungen für Expositionsabschätzungen

Die Aufgaben- bzw. Fragestellungen von Expositionsabschätzungen können unterschiedlich sein, woraus spezielle Anforderungen an die Berücksichtigung von aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten maßgeblicher Expositionsfaktoren resultieren können. Dies sind insbesondere:

- der Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten;
- die Ermittlung durchschnittlicher individueller Expositionen einer Bevölkerungsgruppe;
- die Ermittlung eines hohen Perzentils (z. B. des 95%-Perzentils) der individuellen Strahlenexpositionen in einer bestimmten Bevölkerungsgruppe;

- die Ermittlung der Unsicherheit bzw. Variabilität der individuellen Strahlenexpositionen in einer bestimmten Bevölkerungsgruppe infolge unsicherer bzw. variabler Eingangsdaten mit dem Zweck einer Vervollständigung der Datenbasis.

Arten von Expositionssituationen und Umfang der Modellierung

Im Hinblick auf die Expositionssituation, die einer radiologischen Bewertung unterzogen werden soll, sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- reale Situationen, wie beruflich bedingte Expositionen von Beschäftigten oder Expositionen der Bevölkerung infolge einer Verwertung bzw. Deponierung von NORM in der Nähe von Wohnbebauungen oder z. B. durch Ableitungen aus medizinischen Einrichtungen;
- hypothetische Situationen und Szenarien, wie sie der Ableitung von Überwachungsgrenzen und von Freigabewerten zugrunde gelegt werden bzw. für Planungszwecke (z. B. eines zukünftigen Endlagers für radioaktive Abfälle) angenommen werden.

Reale Expositionssituationen können sich auf vergangene, aktuelle bzw. zukünftige Gegebenheiten beziehen, was mit unterschiedlichen Möglichkeiten bzw. Beschränkungen der Ermittlung weiterer Daten zu expositionsrelevanten Parametern verbunden ist. Hypothetische Situationen betreffen potentielle zukünftige Strahlenexpositionen. Sie können standortbezogen oder generisch sein.

Der Umfang der für Expositionsabschätzungen erforderlichen Modellierungen zur Ausbreitung von Radionukliden in der Atmosphäre, Hydrogeosphäre und Biosphäre bestimmt maßgeblich die Unsicherheiten der Zielfunktion. Sofern Messungen der Radionuklidkonzentration in dem für eine Exposition relevanten Medium nicht verfügbar oder möglich sind, muss auf Ausbreitungsmodelle zurückgegriffen werden. Die hierbei zu berücksichtigenden Parameterunsicherheiten können, wie im Fall generischer Expositionsabschätzungen, grundsätzlicher Natur und deshalb nicht reduzierbar sein, oder, wie im Fall von standortbezogenen Ausbreitungsrechnungen, den aktuellen Kenntnisstand charakterisieren und durch weitere Untersuchungen ggf. substantiell reduziert werden. In diesem Zusammenhang sei noch einmal die Bedeutung von stochastischen Modellen für auf den Einzelfall (Standort) bezogene Ausbreitungsrechnungen hervorgehoben, die im Unterschied zu detaillierten deterministischen Modellierungen, die eine umfangreiche Datenbasis zu den Standortbedingungen erfordern, mit relativ wenigen Modellparametern eine adäquate Charakterisierung der Zielfunktion ermöglichen können (siehe Kapitel 5).

6.3.2. Auswahlkriterien gemäß Festlegung von Bezugspersonen

Für deterministische Expositionsmodelle ist die Definition von hypothetischen Einzelpersonen (Referenzpersonen) mit "unrealistisch konservativen" Verhaltensparametern eine gängige Methode, um einen sicheren Nachweis der Einhaltung von strahlenschutzrechtlich fixierten Grenzwerten zu erbringen (siehe [BMU 01], [BMU 05]). Die zu betrachtenden Szenarien, Modelle und Parameter sind hierbei gesamtheitlich darauf ausgerichtet, potentielle radiologische Folgen der Ableitung von Radionukliden mit Luft und Wasser sowie ihrer nachfolgenden Ausbreitung in den Umweltmedien und der Biosphäre für die Bevölkerung abdeckend zu bewerten. Eine Überschätzung von realistisch zu erwartenden Strahlenexpositionen wird hierbei angestrebt. Die deterministische Vorgehensweise vereinfacht strahlenschutzrechtliche Verwaltungsverfahren.

Die in der StrlSchV zu § 29 (Voraussetzungen für die Freigabe) sowie § 47 (Begrenzung der Ableitung radioaktiver Stoffe) für die Ermittlung von Strahlenexpositionen in Anlage VII Teil B festgelegten Parameterwerte zu "Lebensgewohnheiten" (mittlere Verzehrsraten gemäß Tabelle 1 Spalte 1 bis 7 mit "Konservativitätsfaktoren" gemäß Tabelle 1 Spalte 8; Atemraten gemäß Tabelle 2 sowie Aufenthaltszeiten gemäß Tabelle 3) sind z. T. unterschiedlich zu handhaben. Während für Einzelfallnachweise zur Freigabe bzgl. der Festlegung, *"dass für Einzelpersonen der Bevölkerung nur eine effektive Dosis im Bereich von 10 Mikrosievert im Kalenderjahr auftreten kann"*, gemäß Anlage IV Teil A Nr. 2 von den mittleren Verzehrsraten auszugehen ist, wurde für den Nachweis der Einhaltung der in § 47 bzgl. Planung, Errichtung, Betrieb, Stilllegung, Einschluss und Abbau von Anlagen oder Einrichtungen festgelegten Grenzwerte (u. a. für Wasser- und Luftpfad jeweils 0,3 mSv/a effektive Dosis für Einzelpersonen der Bevölkerung) die Berücksichtigung der Konservativitätsfaktoren für die Verzehrsraten festgelegt. Für Freigaben ist ein Richtwert (*"Bereich von 10 µSv/a"*) einzuhalten, der auf Referenzpersonen mit mittleren Verzehrsraten bezogen wird. Zur Begrenzung von Ableitungen sind dagegen klar definierte Grenzwerte zu potentiellen Strahlenexpositionen einzuhalten, wozu Referenzpersonen mit konservativ angesetzten Verzehrsraten zu betrachten sind. Für beide Fälle ist festzuhalten, dass gemäß StrlSchV für Abschätzungen von Strahlenexpositionen bzgl. der Freigabe und Ableitung radioaktiver Stoffe deterministische Werte für die wesentlichen Verhaltensparameter der Referenzpersonen zugrunde zu legen sind.

An dieser Stelle soll nicht die Konservativität der Gesamtheit aller Annahmen beurteilt werden. Es sei jedoch vermerkt, dass die in Anlage VII Teil C der StrlSchV spezifizierten "übrigen Annahmen" zum Teil nicht konservativ sind, weil z. B. bei Ableitungen mit Wasser *"der Berechnung langjährige Mittelwerte der Wasserführung des Vorfluters zugrunde zu legen"* sind (siehe Teil C Nr. 4), die in Jahren mit geringen Niederschlägen sicherlich unterschritten werden. Andererseits ist die Festlegung von Parameterwerten *"so zu treffen, dass bei dem Gesamtergebnis eine Unterschätzung der Strahlenexposition nicht zu erwarten ist"* (ebenda). Allerdings dürfen für expositionsrelevante Parameter, deren Zahlenwerte einer Schwankungsbreite unterliegen, *"nur in begründeten Ausnahmefällen Extremwerte der Einzelparameter gewählt werden"* (ebenda). Aus unserer Sicht weisen fast alle für Dosisabschätzungen relevanten Modellparameter mehr oder weniger große aleatorische und/oder epistemische Unsicherheiten auf. Wenn auf der Basis von Modellrechnungen eine Unterschätzung von Strahlenexpositionen vermieden werden soll, sind die höheren Quantile der insgesamt resultierenden Verteilung der Zielgröße zu bewerten. Wie bereits in Abschnitt 6.1 vermerkt, schließen die deterministischen Ansätze zu den Verhaltensparametern von Referenzpersonen die Möglichkeit einer sinnvollen Gesamtbeurteilung der Unsicherheit (bzw. der höheren Quantile) von realen Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Zielgröße (Dosis) aus.

Werden für Verhaltensparameter obere Quantile der für eine Population ermittelten Verteilungen angesetzt, wie zu Verzehrsraten von Referenzpersonen in der StrlSchV Anlage VII Teil B Tabelle 1 mit Spalte 8, so handelt es sich insbesondere deshalb um "hypothetische Einzelpersonen", weil es in diesem Fall kaum möglich sein dürfte, dass eine Person gleichzeitig für alle Lebensmittelklassen Verzehrsraten aufweist, die oberen Quantilen der einzelnen Populationsverteilungen entsprechen. Unter diesem Gesichtspunkt können Dosisberechnungen resultieren, die zwar konservativ sind, sich jedoch auf irreale Referenzpersonen beziehen. Probabilistische Modelle zu Verzehrsraten, die sowohl die (Rand-)Verteilungen für einzelne Lebensmittelklassen als auch die Abhängigkeiten zwischen den Verzehrsraten unterschiedlicher Lebensmittelklassen erfassen (siehe Abschnitt 4.3.3),

wären für eine belastbare Abschätzung der oberen Quantile von Strahlenexpositionen infolge des Verzehrs von kontaminierten Lebensmitteln sehr hilfreich, stehen bislang aber nicht zur Verfügung.

In diesem Zusammenhang sollten aus unserer Sicht auch die folgenden Fragen diskutiert werden, zu denen die strahlenschutzrechtlichen Regelungen keine Antwort geben:

1. Wie ist der oft verwendete Begriff der "konservativen Expositionsabschätzung" definiert? In welchen Fällen ist eine "abdeckende" Abschätzung von Strahlenexpositionen erforderlich bzw. kann dieser Begriff z. B. auf das 95%-Perzentil der Wahrscheinlichkeitsverteilung einer (sachgerechten) probabilistischen Expositionsabschätzung bezogen werden?[87]
2. Ist es richtig, eine bestimmte Konservativität von Dosisabschätzungen nur über den Ansatz von hohen Quantilen der Verteilung einer Inputgröße (z. B. Verzehrsraten) festzulegen, oder wäre es nicht sachgerechter, die Konservativität über die in einem Anwendungsfall für die betrachtete Bevölkerungsgruppe resultierende statistische Verteilung der Dosis zu definieren?[88]

Da der Nachweis der Einhaltung von Dosisgrenzwerten im Zentrum der strahlenschutzrechtlichen Regelungen steht, sollte bzgl. der zweiten Frage aus unserer Sicht die Verteilung der Dosis als maßgebliches Kriterium angesehen werden. Die Verteilungen von Verzehrsraten, um bei diesem Beispiel zu bleiben, hätten dann nur die Bedeutung von Inputgrößen für die Dosisberechnungen in einem Anwendungsfall.

Zu Referenzpersonen, die bezüglich der Verzehrsraten ein oberes Quantil für eine Population repräsentieren sollen, sind probabilistische Analysen und Simulationsrechnungen erforderlich. Eine Ergänzung der Datenbasis wäre hierzu insbesondere zur Beachtung von Abhängigkeiten zwischen Verzehrsraten nützlich, um realitätsnähere Abschätzungen zu den hohen Quantilen des Verzehrs kontaminierter Nahrungsmittel zu ermöglichen. Die epistemischen Unsicherheiten, die für höhere Quantile zunehmen, können auch mit Hilfe von possibilistischen Ansätzen beschrieben werden.

Im Unterschied zu Verteilungsquantilen stimmt der Erwartungswert einer Linearkombination von gegenseitig unabhängigen Zufallsgrößen mit der Summe der Erwartungswerte der Summanden überein. Für Referenzpersonen, die den Erwartungswert einer Population repräsentieren sollen, kann deshalb ein deterministischer Ansatz mit Erwartungswerten für einzelne Verhaltensparameter gut begründet werden. Dies gilt jedoch nur dann, wenn die entsprechenden Parameter gegenseitig unabhängig sind (eine Annahme, die nicht immer gerechtfertigt ist, z. B. für Verzehrsraten). Wenn zwischen den Verhaltensparametern und den weiteren Parametern von Expositionsmodellen (z. B. Aktivitätskonzentrationen) keine Abhängigkeit vorliegt, wovon ausgegangen wird, so stimmen Erwartungswerte der Produkte dieser Parameter mit dem Produkt ihrer Erwartungswerte überein. Somit können Dosisabschätzungen für Referenzpersonen, die den Erwartungswert der für eine Population resultierenden probabilistischen Verteilung der Strahlenexposition repräsentieren sollen, i. A. auf relativ einfach Weise ausgeführt werden. Für die Schätzung der Erwartungswerte der relevanten Parameter ist natürlich trotzdem eine ausreichende Datenbasis erforderlich, und ggf. sind

---

[87] Hier sei vereinfachend angenommen, dass die radiologischen Belastungswerte, z. B. die spezifischen Aktivitäten von unterschiedlichen Lebensmitteln, für alle relevanten Radionuklide bekannt sind, wonach Unsicherheiten bei der Berechnung von Strahlenexpositionen nur noch von den statistischen Verteilungen der Verzehrsraten abhängen.

[88] In Abhängigkeit von den konkreten Formen der Verteilungen und der Anzahl zu addierender Einzelbeiträge (für unterschiedliche Lebensmittelklassen) kann die Summe der einzelnen p%-Perzentile erheblich größer sein als das p%-Perzentil der Summe der einzelnen Dosisbeiträge.

auch die durch den beschränkten Umfang an Stichproben bedingten Unsicherheiten dieser Schätzungen zu berücksichtigen (siehe z. B. [BAR 01]).

In diversen Anwendungsfällen sind Dosisabschätzungen für reale Personen bzw. Personengruppen erforderlich, wozu regionale bzw. lokale oder tätigkeitsbedingte Besonderheiten von relevanten Verhaltensparametern zu berücksichtigen sind. Ähnliche Aspekte sind bei Dosisabschätzungen für Subpopulationen zu beachten, deren Verhaltensparameter statistische Verteilungen aufweisen, die signifikant von dbzgl. für eine Gesamtpopulation ermittelten Verteilungen abweichen (dies betrifft z. B. die höhere Bodeningestion durch Kinder mit Pica-Verhalten, den höheren Fischverzehr von Anglern oder unter Küstenbewohnern sowie die Subpopulationen von Vegetariern bzw. Veganern, die den Verzicht auf Ernährung mit tierischen Produkten durch einen erhöhten Verzehr pflanzlicher Produkte kompensieren). Dosisabschätzungen für solche Personengruppen verlangen eine spezielle Datenerhebung für sensitive Verhaltensparameter (z. B. Aufenthaltszeiten von Beschäftigten in Arbeitsbereichen mit hoher radiologischer Belastung, Verzehrsraten spezieller Lebensmittelarten). In Abhängigkeit von der jeweiligen Fragestellung können dann im Ergebnis von probabilistischen Expositionsberechnungen statistische Verteilungen der Dosis oder bestimmte Kenngrößen dieser Verteilungen bewertet werden.

Ein generelles Problem solcher auf spezielle Personengruppen ausgerichteten Untersuchungen ist die Repräsentativität der Daten bzw. der daran angepassten statistischen Verteilungen, weil hierzu oft nur relativ wenige Untersuchungsergebnisse vorliegen und diese auch für Einzelpersonen nicht ausreichend repräsentativ sind, weil sie auf einem begrenzten Zeitraum der Untersuchung basieren. Eine Bewertung der epistemischen Unsicherheiten zu geschätzten Verteilungsparametern sollte in solchen Fällen unbedingt vorgenommen werden. Neben probabilistischen Ansätzen im Sinne der BAYES-Theorie sind possibilistische oder p-Box-Modelle geeignet, mit denen die Unsicherheit von Wahrscheinlichkeitsverteilungen zum Ausdruck gebracht wird.

Für reale Einzelpersonen sind die auf einen bestimmten Zeitraum (für Dosisabschätzungen auf ein Jahr) bezogenen Verhaltensparameter keine Zufallsgrößen. Dbzgl. epistemische Unsicherheiten können jedoch eine erhebliche Bandbreite aufweisen. Diese können im Sinne der BAYES'schen Interpretation von Wahrscheinlichkeiten oder mittels possibilistischer Ansätze beschrieben werden.

In Tabelle 6-1 sind die obigen Aussagen zur Auswahl von Modellierungsansätzen für Verhaltensparameter unterschiedlich definierter Bezugspersonen zusammengefasst.

Tabelle 6-1: Auswahl von Modellierungsansätzen für Verhaltensparameter von Bezugspersonen[1)]

Bezugsperson(en)	deterministisch	probabilistisch	possibilistisch
hypothetische Einzelpersonen:			
- "unrealistisch konservativ"	x	(x)	x
- oberes Populationsperzentil	(x)	x	(x)
- Populationserwartungswert	x	x	(x)
reale Personengruppe		x	x
reale Einzelperson	x	x [2)]	x

1) siehe nachfolgende Erläuterungen zur Bedeutung der Einträge "x" bzw. "(x)"

2) nur im Sinne der BAYES'schen Interpretation von Wahrscheinlichkeiten als "Maß für eine begründete Erwartung"

In Tabelle 6-1 bedeuten die mit "x" dargestellten Einträge, dass die entsprechende Methode für die Modellierung von Verhaltensparametern der jeweiligen Art von Bezugspersonen aus unserer Sicht grundsätzlich geeignet ist (bei Vorliegen hierzu benötigter Daten). Einträge "(x)" bedeuten eine Anwendbarkeit der Methode mit bestimmten Einschränkungen. So ist für einen einzelnen Verhaltensparameter das 95%-Perzentil ein definierter Wert, der für deterministische Modellrechnungen angesetzt werden kann und zum 95%-Perzentil der Dosis führt, wenn die anderen Parameter feste Größen sind. Schon wenn mehrere Verhaltensparameter zu berücksichtigen sind, kann ein deterministischer Ansatz i. A. nicht mehr das 95%-Perzentil einer Dosisverteilung abbilden. Zu Bezugspersonen mit "unrealistisch konservativen" Verhaltensparametern wäre ein probabilistischer Ansatz zwar im Grunde möglich, entspricht jedoch nicht dem Sinn dieses Zugangs. Eine Beschreibung von Verhaltensparametern mit possibilistischen Ansätzen ist für Bezugspersonen, die obere Perzentile oder den Erwartungswert eine Populationsverteilung repräsentieren sollen, mit Einschränkung versehen, weil nur aus den epistemischen Unsicherheiten resultierende Bandbreiten angegeben werden können.

Zu den Datenanforderungen für deterministische, probabilistische bzw. possibilistische Ansätze der Modellierung von Verhaltensparametern für die Bezugspersonen von Dosisabschätzungen kann zunächst qualitativ festgestellt werden, dass i. A. für deterministische Ansätze die geringsten und für probabilistische Ansätze die höchsten Anforderungen an Umfang/Qualität der Daten bestehen:

- Konservative deterministische Ansätze können u. a. dem maximal möglichen Werten eines Parameters entsprechen (z. B. eine Aufenthaltszeit von einem Jahr in einer Abluftfahne zur Berechnung der Jahresdosis nach Anlage VII Teil B Tabelle 3 StrlSchV) oder aus empirischen Verteilungen von Daten durch Extrapolation auf eine extrem hohes Perzentil abgeleitet werden. Bei unzureichender Datenbasis für Parameter, die keine echte physikalische Grenze aufweisen, werden konservative Ansätze auch durch Expertenschätzungen bestimmt.
- Für probabilistische Ansätze können sowohl empirische als auch parametrische Verteilungen genutzt werden. Im vorliegenden Bericht wurden hauptsächlich parametrische Verteilungen betrachtet, weil damit fachspezifische Überlegungen (sowie stochastische Modelle) zur Genesis einer bestimmten Verteilungsart berücksichtigt, die verfügbaren Daten für die Auswahl der Verteilungsart und die Schätzung der Verteilungsparameter genutzt, Abhängigkeiten zwischen Parametern erfasst und effektive Darstellungen und Simulationen von Zufallsgrößen realisiert werden können. Allgemeingültige Angaben zum Umfang der hierfür erforderlichen Datenbasis können nicht getroffen werden, weil die durch den beschränkten Datenumfang bestimmten epistemischen (Stichproben-)Unsicherheiten in Abhängigkeit von den jeweiligen Gegebenheiten entscheidungsrelevant oder unbedeutend sein können. Das Kapitel 4 des vorliegenden Berichts enthält jedoch eine Vielzahl von Beispielen, aus denen klar hervorgeht, dass für die Auswahl zwischen ähnlichen Verteilungsarten, die Schätzung von hohen Quantilen und die Bestimmung von statistischen Abhängigkeiten zwischen Parametern sehr große Stichprobenumfänge in der Größenordnung einiger hundert Daten erforderlich sein können, wenn nur geringe epistemische Unsicherheiten verbleiben sollen.
- Possibilistische Ansätze nehmen eine Rolle zwischen deterministischen und probabilistischen Ansätzen der Modellierung ein. Sie basieren überwiegend auf Expertenschätzungen und binden natürlich auch physikalisch bedingte Grenzen für Parameterwerte ein. Die real berücksichtigte Datenbasis ist i. A. nicht spezifiziert, weil das zugrunde liegende Expertenwissen eine nicht klar

definierte/nachvollziehbare Verknüpfung von Daten und fachwissenschaftlichen Bewertungen ist. Insofern besteht eine gewisse Ähnlichkeit zu deterministischen Modellen. Andererseits liefern possibilistische Verteilungen Aussagen zur Plausibilität unterschiedlicher Werte von Parametern in einem als möglich erachteten Bereich, womit die Ähnlichkeit zu probabilistischen Ansätzen resultiert. Im Sinne einer "Faustregel" kann aus unserer Sicht festgestellt werden, dass possibilistische Ansätze dann angebracht sind, wenn die Datenbasis und das Fachwissen zu einem Modellparameter so groß sind, dass eine Beschränkung auf deterministische Werte nicht mehr angebracht ist, andererseits aber für einen probabilistischen Ansatz noch nicht ausreichen.

6.3.3. Auswahlkriterien gemäß Aufgabenstellung von Expositionsabschätzungen

Entsprechend den Vor- und Nachteilen von deterministischen bzw. probabilistischen Ansätzen zur Abschätzung von Strahlenexpositionen (siehe Abschnitt 6.1) können diese in unterschiedlichem Maße für spezielle Aufgabenstellungen von Expositionsabschätzungen geeignet sein. Nachfolgend werden hierzu die vier in Abschnitt 6.3.1 genannten Aufgabenstellungen betrachtet.

6.3.3.1. Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten

Der Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten betrifft eine zentrale Aufgabenstellung von Expositionsabschätzungen und ist in der Praxis sicher auch die am häufigsten gestellte Frage. Die Anwendung relativ einfach zu handhabender deterministischer Ansätze ist nicht zuletzt von besonderer Bedeutung, weil dadurch alle Dosisberechnungen leicht nachvollziehbar werden und die Eindeutigkeit der Ergebnisse ein wichtiger Aspekt für die Effizienz von Verwaltungsverfahren und die Kommunikation zwischen allen Beteiligten ist. Dieser Gesichtspunkt soll aber in der folgenden Diskussion im Hintergrund stehen. Im Fokus steht die Frage, mit welchem der zu vergleichenden Ansätze (deterministisch, probabilistisch bzw. possibilistisch) aus rein fachlicher Sicht am besten sichergestellt werden kann, dass die auf anwendungsspezifischen Daten und generellem Fachwissen basierenden Dosisabschätzungen belastbare Bewertungen zur Einhaltung von Grenz- oder Richtwerten ermöglichen, die eine geringe Fehlerquote (Irrtumswahrscheinlichkeit) haben.

Da für viele Parameter von Expositionsmodellen nur schwer generelle Intervallgrenzen angegeben werden können, z. B. zu Verzehrsraten, kommen deterministische Ansätze nicht ohne Bezugnahme auf bestimmte (hohe) Perzentile der statistischen Verteilungen solcher Parameter für zu bewertende Populationen aus. Hierzu ist die Wahl des 95%-Perzentils ein gängiger Ansatz, nach dem z. B. auch die Konservativitätsfaktoren der Spalte 8 in Tabelle 1 von Anlage VII Teil B der StrlSchV bestimmt wurden. Dies macht deutlich, dass solche deterministischen Ansätze zum Nachweis der Einhaltung von Grenzwerten zu Strahlenexpositionen ohne zusätzliche konservative Annahmen, deren Konsequenzen aber i. A. nicht quantifiziert werden können, keine " sicheren" Bewertungen liefern.

Beispiel 6.1-1

Zu den mittleren Verzehrsraten für Trinkwasser ist in Tabelle 1 von Anlage VII Teil B der StrlSchV ein Konservativitätsfaktor von 2 angegeben. Die zu diesem Parameter in [BAR 99A]/[BAR 99B] durchgeführte Auswertung international und national verfügbarer repräsentativer Datenerhebungen zur Aufnahme von Trinkwasser (aus Wasserleitungen), wozu insbesondere Daten aus [ERS 89], [UBA 97], [FKE 99A] und [FKE 99B] verwendet wurden, zeigte, dass die als "Konservativitätsfaktor" definierte Relation $K = T_{95}/T_M$

des 95%-Perzentils T_{95} zum Mittelwert T_M der Trinkwasseraufnahme unabhängig von der Altersgruppe näherungsweise bei einem Wert von 2 liegt, wobei die jeweiligen empirischen Verteilungen sehr genau durch Lognormalverteilungen approximiert werden können. Für die Altersgruppe der Erwachsenen ergab die Auswertung der für Deutschland vorliegenden Daten (Stichprobenumfang von 4018) z. B. einen Mittelwert von 336 l/a und ein 95%-Perzentil von 702 l/a. Die dbzgl. in der StrlSchV gerundeten Werte von $T_{M,Erw.}$ = 350 l/a und $T_{95,Erw.}$ = 700 l/a entsprechen einer Lognormalverteilung $T_{Erw.} \sim Ln(\mu_T,\sigma_T)$ mit den Parameterwerten $\mu_T = 5{,}735$ und $\sigma_T = 0{,}496$.

Für Expositionsfaktoren mit definierten Intervallbeschränkungen, wie z. B. für Expositionszeiten, basieren deterministische Ansätze auf diesen Schranken bzw. auf plausiblen oberen Grenzen. So ist z. B. in Anlage VII Teil B Tabelle 3 StrlSchV zur Aufenthaltszeit in einer Abluftfahne der maximal mögliche Wert von 1 Jahr und für den Aufenthalt auf Sedimenten ein konservativ angesetzter Wert von 1000 h für die Berechnung von Jahresdosen angesetzt.

Aus den obigen Darlegungen zu deterministischen Ansätzen für Dosisabschätzungen, die auf den Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten abzielen, ist zu entnehmen, dass hierfür kein einheitlicher/konsistenter Zugang existiert - und auch nicht möglich ist. In Abhängigkeit von den realen Charakteristika relevanter Expositionsfaktoren werden obere Perzentile, allgemeine Intervallgrenzen oder auch plausible konservative Schätzwerte angesetzt. Für einige sensitive Expositionsfaktoren sind Mittelwerte anzusetzen (vgl. Anlage VII Teil B StrlSchV; Beispiel 6.1-2 in Abschnitt 6.3.3.3). In der Gesamtheit aller Expositionspfade ist zwar eine "ausreichend sichere" Bewertung zu erwarten, eine Quantifizierung der Irrtumswahrscheinlichkeit ist aber nicht möglich.

Sowohl mit probabilistischen als auch mit possibilistischen Ansätzen für Expositionsmodelle kann (zumindest theoretisch) ein konsistenter Zugang für den Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten realisiert werden.

Für den probabilistischen Ansatz müsste hierzu eine zulässige Irrtumswahrscheinlichkeit (z. B. von $\alpha = 0{,}05$) festgelegt werde. Wenn dann das $(1-\alpha)$-Quantil der für die Zielgröße berechneten Verteilungsfunktion kleiner als der Grenz-/Richtwert ist, wäre dessen Einhaltung "mit akzeptierter Irrtumswahrscheinlichkeit" nachgewiesen. Die Festlegung eines bestimmten α-Wertes hat keinen Einfluss auf die Methodik, die für alle Anwendungsfälle einheitlich umgesetzt werden kann. Auf der Basis von übergeordneten Gründen könnten natürlich auch unterschiedliche α-Werte für spezielle Strahlenschutzziele festgelegt werden.

Für einen possibilistischen Ansatz wäre konservativ zu verlangen, dass die Notwendigkeitsfunktion (Nec) das $(1-\alpha)$-Niveau erst über dem relevanten Grenz-/Richtwert erreicht. Da dieses Niveau durch die Möglichkeitsfunktion (Pos) bereits bei kleineren Werten erreicht wird, wäre es möglich, dass real eine noch deutlich kleinere Dosis vorliegt. Diese "Unschärfe" ist für Entscheidungsfindungen nachteilig und hätte insgesamt zur Folge, dass ein possibilistischer Zugang zwar konsistent, bzgl. der tatsächlichen Möglichkeit von irrtümlichen Bewertungen jedoch nicht einheitlich wäre.

Zusammenfassend ist also festzuhalten, dass nur der probabilistische Ansatz einen konsistenten und einheitlichen Zugang für den Nachweis der Einhaltung von Grenz-/Richtwerten ermöglicht. Er stellt aber die höchsten Anforderungen an die Datenbasis zur Bestimmung der Verteilungsfunktionen für Expositionsfaktoren und möglicher Abhängigkeiten zwischen ihnen. Bei mangelhafter Ausführung besteht die Gefahr, dass nur der Anschein einer exakten Bewertung erweckt wird. Wenn wegen einer unzureichenden Datenbasis epistemische Unsicherheiten maßgeblich werden und eine 2D-

MC-Simulation erforderlich ist, verliert der probabilistische Zugang seine Einheitlichkeit (die dann zu bewertenden unteren und oberen Wahrscheinlichkeiten haben eine ähnliche Bedeutung wie die possibilistischen Funktonen Nec und Pos). Durch probabilistische Sensitivitätsanalysen lassen sich jedoch jene Parameter bestimmen, für die ggf. eine Ergänzung der Datenbasis wichtig wäre, um die epistemischen Unsicherheiten einer Bewertung substantiell zu reduzieren.

6.3.3.2. Ermittlung durchschnittlicher individueller Expositionen

Zur Ermittlung von durchschnittlichen (mittleren) individuellen Expositionen sind probabilistische Expositionsmodelle natürlich prädestiniert. Unsicherheiten bzgl. der Auswahl der Verteilungsart von Expositionsfaktoren sowie der Bestimmung von Verteilungsparametern wirken sich auf den Erwartungswert der Zielgröße i. A. nur geringfügig aus. Der probabilistische Zugang ermöglicht auch die Berücksichtigung von Abhängigkeiten zwischen Modellparametern.

Wenn für die einzelnen Expositionsfaktoren Mittelwerte vorliegen und diese Faktoren gegenseitig unabhängig sind sowie ausschließlich linear in die Zielfunktion eingehen, sind deterministische Berechnungen von mittleren individuellen Expositionen adäquat. Die o. g. Bedingungen sind jedoch in vielen Fällen nicht erfüllt, so z. B. für Expositionsfaktoren, die im Nenner einer Beziehung stehen.[89] Liegen statistische Abhängigkeiten zwischen Expositionsfaktoren vor, so können mit den aus den Randverteilungen berechneten Erwartungswerten der einzelnen Faktoren erhebliche Fehler bei einer deterministischen Berechnung des "durchschnittlichen Werts" der Zielgröße resultieren.

Beispiel 6.2

Für eine bivariate Normalverteilung der Zufallsgrößen X_1 und X_2, deren Korrelationskoeffizient gleich r sei, wobei die Randverteilungen dieser Zufallsgrößen durch $X_1 \sim N(\mu_1,\sigma_1)$ und $X_2 \sim N(\mu_2,\sigma_2)$ gegeben sind, resultieren z. B. für das Produkt der Erwartungswerte und den Erwartungswert des Produkts dieser beiden Zufallsgrößen die folgenden Beziehungen:

$E[X_1]\cdot E[X_2] = \mu_1\cdot\mu_2, \qquad E[X_1\cdot X_2] = \mu_1\cdot\mu_2 + r\cdot\sigma_1\cdot\sigma_2.$

Auf Basis possibilistischer Ansätze für einzelne Expositionsfaktoren können Erwartungswerte der Zielgröße zwar nicht im üblichen Sinn eines Wertes definiert werden; man kann jedoch auf analoge possibilistische Verallgemeinerungen für "unscharfe" Erwartungswerte zurückgreifen (siehe z. B. [DUB 87], [CARL 01], [LIU 02], [AYY 06]).

6.3.3.3. Ermittlung eines hohen Perzentils der individuellen Strahlenexposition

Die Berechnung von hohen Perzentilen der individuellen Strahlenexposition in einer bestimmten Bevölkerungsgruppe/Population ist im Rahmen probabilistischer Expositionsmodelle grundsätzlich möglich, wobei mit BAYES-Methoden oder 2D-MC-Simulation auch epistemische Unsicherheiten solcher Berechnungen quantifiziert werden können. Hierfür ist jedoch i. A. eine umfangreiche Datenbasis zur korrekten Bestimmung der Art und Parameterwerte der statistischen Verteilungen für die einzelnen Expositionsfaktoren erforderlich. In den Kapiteln 2 und 4 des vorliegenden

---

[89] Der Reziprokwert des Erwartungswertes einer Zufallsgröße (1/E[X]) stimmt i. A. nicht mit dem Erwartungswert der reziproken Zufallsgröße (E[1/X]) überein.

Berichts wurden zu den dbzgl. methodischen Untersuchungen diverse Beispiele behandelt, aus denen diese Problematik deutlich wurde. Die notwendigen Stichprobenumfänge nehmen mit der Höhe der zu bestimmenden Perzentile zu.

Possibilistische Methoden sind insbesondere dann für eine Eingrenzung der hohen Perzentile von Expositionsverteilungen geeignet, wenn die verfügbare Datenbasis für sinnvolle probabilistische Berechnungen unzureichend ist, jedoch Expertenschätzungen zu possibilistischen Verteilungen erlaubt. Die Interpretation daraus resultierender Intervallschätzungen erfolgt analog zu unteren und oberen Wahrscheinlichkeiten [WAL 91], [DUB 92], [BAUD 08].

Im Rahmen deterministischer Expositionsmodelle ist eine Bestimmung von (höheren) Perzentilen der aus mehreren Expositionsfaktoren resultierenden Zielgröße grundsätzlich nicht möglich. Dies entspricht der bereits in Abschnitt 6.3.3.1 angesprochenen Uneinheitlichkeit des deterministischen Ansatzes zum Nachweis der Einhaltung von Grenzwerten. Eine grobe Näherung kann bei einfachen Modellstrukturen mitunter dadurch erreicht werden, dass für einen der Expositionsfaktoren das entsprechende Perzentil (z. B. 95%-Perzentil) für den deterministischen Ansatz verwendet, für alle anderen Faktoren jedoch der Erwartungswert angesetzt wird (siehe Tabelle 2-1 in Beispiel 2.1-1).

Diese Vorgehensweise ist z. T. auch in der StrlSchV zu finden: Die Verzehrsraten mit Konservativitätsfaktoren aus Anlage VII Teil B Tabelle 1 sind 95%-Perzentile der Populationsverteilungen, und bei Ableitungen mit Wasser sind gemäß Anlage VII Teil C Nr. 3 *"der Berechnung langjährige Mittelwerte der Wasserführung des Vorfluters zugrunde zu legen."* Auf diese Weise wird zwar eine nicht angestrebte zu hohe Konservativität der Dosisabschätzungen vermieden, die sich bei Ansatz einer geringeren Abflussrate (eines niedrigen Perzentils der statistischen Verteilung der jährlichen mittleren Abflüsse) ergeben würde; die Irrtumswahrscheinlichkeit des Nachweises der Einhaltung des Dosisgrenzwertes kann dadurch aber deutlich über dem Wert von $\alpha = 0{,}05$ liegen. Dies sei durch ein einfaches Beispiel für den Trinkwasserpfad veranschaulicht.

Beispiel 6.1-2

Wird eine zeitlich konstante Ableitungsrate von Radionukliden in einen Vorfluter/Fluss angenommen, der zur Gewinnung von Trinkwasser genutzt wird, so ist die über den Trinkwasserpfad resultierende effektive Jahresdosis H_T einer Person proportional zur jährlichen Trinkwassermenge T und umgekehrt proportional zur mittleren Jahresabflussrate MQj, d. h.

$$H_T = c \cdot T/MQj, \qquad (6\text{-}1)$$

wobei c eine Konstante ist, in der die anderen Einflussfaktoren, Dosiskoeffizienten etc. zusammengefasst sind. Hier ist nur das Verhältnis T/MQj von Interesse. Für eine Population ist T eine Zufallsgröße, wozu die in Beispiele 6.1-1 für Erwachsene angegebene Lognormalverteilung betrachtet wird:

$$T \sim Ln(\mu_T,\sigma_T) \quad \text{mit} \quad \mu_T = 5{,}735 \text{ und } \sigma_T = 0{,}496. \qquad (6\text{-}2)$$

Der Abfluss eines Vorfluters ist ein stochastischer Prozess, der von den jeweiligen hydrogeologischen Gegebenheiten abhängt und dessen Variabilität durch die zeitlichen Schwankungen meteorologischer Parameter bedingt ist. Für dieses Beispiel wird eine langjährige Zeitreihe der mittleren täglichen Abflüsse der Elbe am Pegel Neu-Darchau genutzt ([HZG 12], Tagesmittelwerte vom 01.11.1874 bis 13.06.2012),

woraus mittlere jährliche Abflussraten MQj für den Zeitraum von 1875 bis 2011 berechnet wurden.[90] Im linken Bild von Abbildung 6-2 ist die Zeitreihe dieser 137 Jahreswerte dargestellt. Der langjährige Mittelwert des Abflusses der Elbe beträgt

$$MQ = 709{,}6\ m^3/s. \qquad (6\text{-}3)$$

Die mittleren Jahreswerte MQj können sehr gut als zufällige Realisierungen einer Lognormalverteilung dargestellt werden (siehe Abbildung 6-2),

$$MQj \sim Ln(\mu_{MQj},\sigma_{MQj}) \quad \text{mit} \quad \mu_{MQj} = 6{,}534 \text{ und } \sigma_{MQj} = 0{,}248. \qquad (6\text{-}4)$$

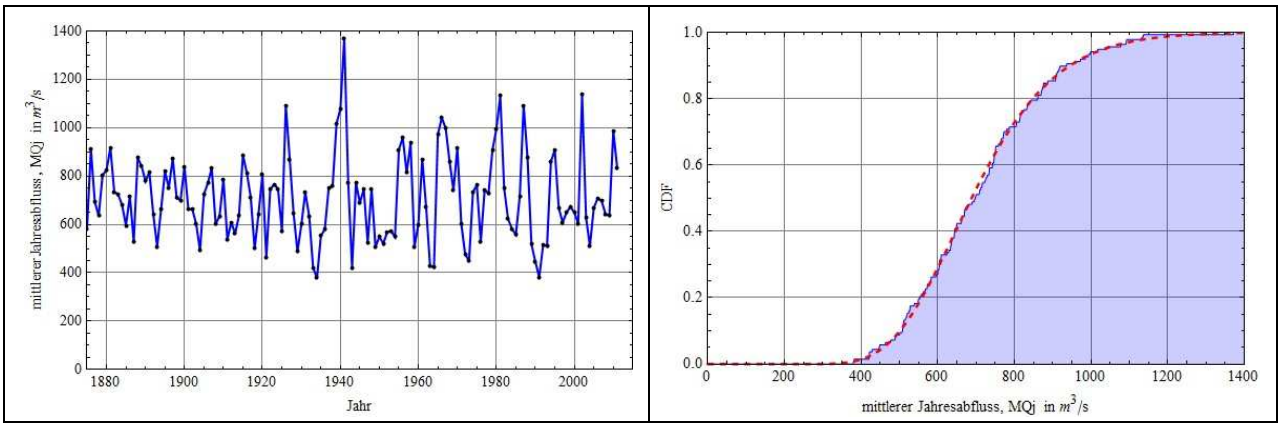


Abbildung 6-2: Verlauf der Jahresmittelwerte MQj der Elbe am Pegel Neu-Darchau von 1875 bis 2011 (linkes Bild) und Approximation der empirischen Verteilung dieser 137 Werte durch eine Lognormalverteilung gemäß Gl. (6-3) (rechtes Bild)

Nach den Vorgaben der StrlSchV (Anlage VII Teil B Tabelle 1 und Teil C Nr. 3) wäre für den Nachweis der Einhaltung von Dosisgrenzwertes gemäß Gl. (6-3) mit der Relation

$$T_{95}/MQ = 700/709{,}6\ (l/a)/(m^3/s) = 0{,}986\ (l/a)/(m^3/s) \qquad (6\text{-}5)$$

zu rechnen. Zur Berechnung des 95%-Perzentils $(T/MQj)_{95}$ der Zufallsgröße T/MQj sei vermerkt, dass die Relation von zwei lognormal verteilten Größen wieder lognormal verteilt ist. Im gegebenen Fall folgt:

$$T/MQj \sim Ln(\mu,\sigma) \quad \text{mit} \quad \mu = \mu_T - \mu_{MQj} = -0{,}799 \text{ und } \sigma = \sqrt{\sigma_T^2 + \sigma_{MQj}^2} = 0{,}555, \qquad (6\text{-}6)$$

woraus sich ein 95%-Perzentil von

$$(T/MQj)_{95} = 1{,}120\ (l/a)/(m^3/s) \qquad (6\text{-}7)$$

ergibt, das um ca. 14 % über dem in Gl. (6-5) angegebenen Wert liegt. Dieser entspricht etwa dem 92%-Perzentil der in Gl. (6-6) angegebenen Lognormalverteilung.

---

[90] Der Pegel Neu-Darchau ist der unterste stau- und tidenunabhängige Pegel der Elbe und gilt deshalb als Richtpegel für den Gesamtabfluss der Elbe.

Die in Beispiel 6.1-2 gezeigte Abweichung zwischen dem deterministischen Ansatz nach Gl. (6-5) und der probabilistischen Berechnung des 95%-Perzentils der Zielgröße T/MQj nach Gl. (6-7) ist wegen der relativ geringen Variabilität des mittleren Jahresabflusses nicht substantiell und untermauert somit den dbzgl. vereinfachten Ansatz der StrlSchV[91]. Sie macht aber auch den methodischen Unterschied zwischen deterministischen und probabilistischen Ansätzen deutlich.

Sind zur Abschätzung von Strahlenexpositionen die über mehrere Expositionspfade resultierenden Dosisbeiträge zu addieren, wobei für die einzelnen Pfade deterministische Ansätze angewandt werden, die jeweils einem hohen Perzentil entsprechen, so ergeben sich für die Gesamtdosis Werte, die i. A. einem wesentlich höheren Perzentil der tatsächlichen Dosisverteilung entsprechen. Dies wird durch das folgende methodische Beispiel veranschaulicht.

Beispiel 6.3

Gemäß Anlage VII Teil B Tabelle 1 StrlSchV sind zur Berechnung von Strahlenexpositionen bei Ableitungen für die einzelnen Lebensmittelklassen Konservativitätsfaktoren zu berücksichtigen, die nach Multiplikation mit den mittleren Verzehrsraten jeweils dem 95%-Perzentil der statistischen Verteilung der einzelnen Verzehrsraten entsprechen. Hier sei die Summe der Beiträge für fünf Lebensmittelklassen betrachtet, für die jeweils ein Konservativitätsfaktor von 3 gilt. Zur Vereinfachung der Beispielrechnung sei außerdem angenommen, dass die 5 Dosisbeiträge H_i (i = 1 bis 5) voneinander unabhängig sind und gleichen Lognormalverteilungen

$$H_i \sim Ln(\mu,\sigma) \quad \text{mit} \quad \mu = -4{,}346 \ \text{ und } \ \sigma = 0{,}9319 \tag{6-8}$$

genügen. Aus Gl. (6-8) folgt für die Erwartungswerte und 95%-Perzentile: $E[H_i] = 0{,}02$ und $H_{i,95} = 0{,}06$. Die Summe der fünf 95%-Perzentile der einzelnen Dosisbeiträge läge somit bei

$$\sum_{i=1}^{5} H_{i,95} = 5 \cdot 0{,}06 = 0{,}3\,. \tag{6-9}$$

In der Einheit mSv/a wäre der Dosisgrenzwert gerade erreicht. Für die Verteilung der Gesamtdosis

$$H_{ges} = \sum_{i=1}^{5} H_i \tag{6-10}$$

ergibt sich jedoch im Ergebnis einer einfachen MC-Simulation ein 95%-Perzentil von

$$H_{ges,95} = 0{,}195\,. \tag{6-11}$$

Der in Gl. (6-9) nach deterministischem Ansatz berechnete Dosiswert von 0,3 entspricht dem 99,35%-Perzentil der statistischen Verteilung der Zielgröße H_{ges}.

Die in Beispiel 6.3 getroffene Annahme, dass die fünf Dosisbeiträge gleiche Verteilung aufweisen, ist zwar nicht realistisch; das methodische Problem deterministischer Ansätze wird aber deutlich.

---

[91] Der für den Elbe-Pegel Neu-Darchau resultierende Variationskoeffizient der MQj-Werte von $v_{MQj} \cong 0{,}25$ dürfte für viele deutsche Flüsse einen typischen Wert darstellen (siehe z. B. [KLI 03]).

6.3.3.4. Ermittlung der Variabilität bzw. Unsicherheit von individuellen Strahlenexpositionen

Aus den obigen Darlegungen und der ausführlichen Untersuchung von methodischen Aspekten der probabilistischen Berechnung von Strahlenexpositionen in den Kapiteln 2, 4 und 5 ist aus unserer Sicht klar zu entnehmen, dass dies ein praktikabler Ansatz ist, mit dem sowohl die Variabilität von individuellen Strahlenexpositionen in einer bestimmten Bevölkerungsgruppe als auch epistemische Unsicherheiten der Quantifizierung dbzgl. Verteilungen ermittelt werden können, wobei sich aus letzteren wichtige Hinweise zur Vervollständigung der Datenbasis für sensitive Modellparameter ableiten lassen. Rein epistemische Unsicherheiten können auf der Basis von Expertenschätzungen mit Hilfe possibilistischer Verteilungen in solche Berechnungen eingebunden werden. Die separate Darstellung der Auswirkungen von aleatorischen Unsicherheiten (der Variabilität) und epistemisch bedingten Unschärfen von Wahrscheinlichkeitsaussagen, die mit BAYES'schen Methoden bzw. auch durch 2D-MC-Simulationen berechnet werden können, ist zwar ohne z. T. erheblichen Aufwand für die mathematische Modellierung und Simulationsrechnungen nicht realisierbar, ermöglicht jedoch Aussagen zur Variabilität bzw. Unsicherheit individueller Strahlenexpositionen, die dem jeweiligen Kenntnisstand entsprechen.

Wie bereits in Abschnitt 6.1 dargelegt, hängt die Relevanz genauerer Kenntnisse zur Variabilität und Unsicherheit der Abschätzung von Strahlenexpositionen von den jeweiligen Gegebenheiten und Zielstellungen ab. In den meisten praktischen Fällen wird man zunächst versuchen, mit einfachen Sensitivitätsanalysen auf Basis deterministischer Modelle die Notwendigkeit bzw. Überflüssigkeit der Anwendung von (genaueren) probabilistischen Expositionsmodellen zu beurteilen. Im Hinblick auf die Variabilität resultierender Strahlenexpositionen sollten hierfür auch einfach zu realisierende 1D-MC-Simulationen genutzt werden, deren Ergebnisse wesentlich aussagekräftiger sind als die Ergebnisse von deterministischen Sensitivitätsanalysen, die allerdings noch keine Einschätzung der Unsicherheit/Belastbarkeit von Wahrscheinlichkeitsaussagen ermöglichen.

6.3.3.5. Zusammenstellung der Bewertungen

In den Abschnitten 6.3.3.1 bis 6.3.3.4 wurde die Anwendbarkeit deterministischer, probabilistischer und possibilistischer Ansätze zur Abschätzung von Strahlenexpositionen bzgl. unterschiedlicher Aufgabenstellungen beurteilt. Die wesentlichen Ergebnisse sind in Tabelle 6-2 zusammengefasst.

Tabelle 6-2: Auswahl mathematischer Modellierungsansätze für unterschiedliche Aufgabenstellungen von Expositionsabschätzungen[1)]

Aufgabenstellung	deterministisch	probabilistisch	possibilistisch
Einhaltung von Grenz-/Richtwerten	x	x	x
Berechnung mittlerer Expositionen	(x)[2)]	x	(x)[4)]
Berechnung hoher Expositionsperzentile		x	(x)[4)]
Ermittlung der Variabilität/Unsicherheit	(x)[3)]	x	x

1) siehe Erläuterungen zur Bedeutung der Einträge "x" bzw. "(x)" nach Tabelle 6-1

2) nur im Fall linearer Expositionsmodelle mit voneinander unabhängigen Expositionsfaktoren

3) im Sinne deterministischer Sensitivitätsanalysen zur Variabilität

4) mit Modifikation der üblichen (probabilistischen) Definition dieser Kenngrößen

6.3.4. Auswahlkriterien gemäß Art der Expositionssituation und Umfang der Modellierung

6.3.4.1. Reale Expositionssituationen

Zur Abschätzung der Strahlenexposition von Beschäftigten oder Einzelpersonen der Bevölkerung, die sich auf reale Expositionssituationen beziehen, bestehen i. d. R. vielfältige Möglichkeiten, der jeweiligen Situation angepasste konservative Parameterwerte für sensitive Expositionsfaktoren (Aktivitätskonzentration, Expositionszeit, Verzehr von kontaminierten Nahrungsmitteln etc.) zu ermitteln und auf dieser Basis einzuschätzen, ob die real mögliche Strahlenexposition in der Nähe von Grenz- bzw. Richtwerten liegen oder so geringfügig ist, dass der Aufwand für eine genauere probabilistische Bewertung nicht gerechtfertigt wäre. In diesem Fall ist das Kriterium zur Nutzung von probabilistischen/possibilistischen Expositionsmodellen der Abstand der konservativ mit Hilfe deterministischer Ansätze berechneten Zielgröße von einem entscheidungsrelevanten (Grenz-)Wert.

Wenn nicht ausgeschlossen werden kann, dass Strahlenexpositionen in der Größenordnung von entscheidungsrelevanten Werten liegen, sollten zumindest für die sensitivsten Expositionsfaktoren Daten in einem Umfang ermittelt werden, der eine hinreichend zuverlässige Bestimmung der statistischen Verteilungen dieser Parameter und denkbarer Abhängigkeiten zwischen Parametern ermöglicht. Außerdem können für (sensitive) Parameter der Expositionsmodelle, für die mögliche Schwankungsbreiten bzw. Wahrscheinlichkeitsverteilungen nur durch Ausbreitungsrechnungen abgeschätzt werden können, stochastische (Teil-)Modelle an die realen Gegebenheiten angepasst oder entwickelt/validiert werden, um Ergebnisse dbzgl. Modellrechnungen in das Gesamtmodell der potentiellen Strahlenexposition einzubinden.

Falls sensitive Modellparameter substantiellen Veränderungen durch natürliche Prozesse unterliegen, wozu aber keine wissenschaftlich belastbaren Modelle existieren, sollte versucht werden, durch Expertenschätzungen zumindest die Bandbreite solcher Veränderungen abzuschätzen, um auf dieser Basis probabilistisch-possibilistische Abschätzungen zu potentiellen Strahlenexpositionen vornehmen zu können. Aus den Ergebnissen solcher Berechnungen können dann Anforderungen für ein zielgerichtetes Monitoring abgeleitet werden.

6.3.4.2. Hypothetische Expositionssituationen

Die Unsicherheiten von prognostischen Abschätzungen zu potentiellen Strahlenexpositionen für hypothetische Expositionssituationen resultieren i. A. nicht nur aus aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten zu den einzelnen Expositionsfaktoren, sondern können maßgeblich auch durch die Szenariounsicherheiten (siehe Abschnitt 1.1) bestimmt werden. Statistische Methoden, die zur Behandlung von Szenariounsicherheiten angewandt werden können, sind nicht Gegenstand der vorliegenden Untersuchung (siehe Abschnitt 1.2). Auf die Frage, wie Parameterunsicherheiten bei Expositionsabschätzungen, die hypothetische Situationen mit substantiellen Szenariounsicherheiten betreffen, berücksichtigt werden sollten, wird nachfolgend eingegangen.

Hierzu sind die Fälle von standortbezogenen Expositionsabschätzungen, wie sie im Rahmen der Planung kerntechnischer Anlagen (z. B. eines Endlagers) vorzunehmen sind, von den generischen Expositionsabschätzungen zu unterscheiden, da für letztere (wie z. B. zur Freigabe von Abfällen aus kerntechnischen Anlagen oder zur Entlassung von NORM-Rückständen aus der strahlenschutzrechtlichen Überwachung) neben den verschiedenen Szenarien auch eine Vielfalt denkbarer

Standorte mit unterschiedlichsten hydrogeologischen und sonstigen Randbedingungen "abdeckend" zu betrachten ist.

Analog zur radiologischen Bewertung von realen Expositionssituationen wird man sicherlich auch für beide Fälle hypothetischer Strahlenexpositionen zunächst mit konservativen deterministischen Ansätzen und einer Sensitivitätsanalyse überprüfen, welche Szenarien entscheidungsrelevant sein könnten und deshalb genauer zu analysieren sind. Ist dann beispielsweise davon auszugehen, dass Freisetzungen von Radionukliden in einen nutzbaren Grundwasserleiter oder Vorfluter für eine Entscheidungsfindung maßgebliche Szenarien darstellen, so resultieren für standortbezogene bzw. generische hypothetische Situationen unterschiedliche Möglichkeiten und Vorgehensweisen für genauere Untersuchungen und Modellrechnungen mit Hilfe probabilistischer bzw. possibilistischer Ansätze.

Sind diese Untersuchungen auf einen bestimmten Standort bezogen, so können wichtige Annahmen zu Expositionsszenarien (z. B. Nutzungsmöglichkeiten eines Grundwasserleiters bzw. Vorfluters) auf belastbare Weise getroffen werden. Auf der Basis von hydrogeologischen bzw. hydrologischen Daten können detaillierte deterministische oder stochastische Ausbreitungsmodelle (siehe Beispiel 5.14) bzw. deterministische oder probabilistische Verdünnungsmodelle (Beispiel 6.1-2) begründet werden. Auch wenn bestimmte Teile des Gesamtmodells, wie z. B. zum Umfang der an einem Standort zukünftig deponierten Aktivität und deren mögliche Freisetzung in die Hydrogeosphäre noch mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sind, können im Ergebnis einer standortbezogenen Expositionsmodellierung wichtige Schlussfolgerungen gezogen werden, z. B. bzgl. der zulässigen Gesamtaktivität in Abhängigkeit von Wirkungsgrad/-dauer natürlicher und technischer Barrieren.

Für die Berechnung von Überwachungsgrenzen für NORM-Rückstände sowie von Freigabewerten für Abfälle aus kerntechnischen Anlagen müssen generische hypothetische Expositionssituationen, die möglichst alle sinnvoll denkbaren Szenarien und Gegebenheiten abdecken, betrachtet werden. Für diese Aufgabenstellung wurden sowohl deterministische als auch probabilistische Ansätze genutzt, wobei letztere auf 1D-MC-Simulationen basierten (siehe z. B. [BS 99] und [BS 04]).

In beiden Ansätzen können unvermeidbare epistemische Unsicherheiten zu wichtigen Parametern der Expositionsmodelle bzw. Verteilungsfunktionen nur unzureichend bzw. nicht berücksichtigt werden. Für eine Vielzahl wichtiger Parameter von Ausbreitungs- und Verdünnungsmodellen (wie z. B. K_d-Werte, Dispersionskoeffizienten, Fließgeschwindigkeiten, Abflussraten) können generisch für bestimmte Nutzungsszenarien von Grundwasserleitern bzw. von Vorflutern zwar sinnvolle Bandbreiten oder possibilistische Verteilungen ermittelt werden, eine ausschließliche Verwendung von konservativen Schranken dieser Parameter würde jedoch im Rahmen einer deterministischen Modellierung übermäßig konservative Abschätzungen potentieller Strahlenexpositionen bewirken. Deshalb ist es eine gängige Vorgehensweise, für die verschiedenen Parameter eines komplexen Modells Werte mit unterschiedlichem Konservativitätsgrad anzunehmen. Für die Zielgröße lässt sich dann aber kein bestimmter Konservativitätsgrad angeben. Dies wäre auf Basis probabilistischer Ansätze zwar möglich, sie sind jedoch für epistemische Unsicherheiten, die nur durch Expertenschätzungen quantifiziert werden können, ebenfalls fragwürdig, worauf im vorliegenden Bericht schon mehrfach hingewiesen wurde. Daraus ergibt sich die Schlussfolgerung, dass für generische hypothetische Expositionssituationen verstärkt possibilistische Ansätze genutzt werden sollten.

6.3.5. Bewertung von probabilistischen bzw. possibilistischen Expositionsabschätzungen

Auf der Grundlage von Ergebnissen deterministischer Expositionsabschätzungen ist zumindest rechnerisch die Frage der Einhaltung bzw. Überschreitung von Grenzwerten definitiv beantwortbar. Ist H_G ein Dosisgrenzwert und gilt für den dbzgl. Wert H_d einer deterministischen Abschätzung die Aussage $H_d \leq H_G$, so ist der vorgegebene Grenzwert formal eingehalten, wogegen $H_d > H_G$ als Überschreitung zu werten ist, unabhängig davon, in welchem Maße der Grenzwert überschritten wird. Dabei werden Unsicherheiten der den Dosisabschätzungen zugrunde liegenden Annahmen und die Tatsache, dass für unterschiedliche Einzelpersonen realistisch eine statistische Verteilung der Zielgröße vorliegt, nicht berücksichtigt. In der Strahlenschutzpraxis dürfte eine derartig starre, formale Bewertung zwar eher selten auftreten, der Nachweis der Einhaltung bzw. Überschreitung von Grenzwerten ist aber an die obigen Ungleichungen gebunden.

In Abschnitt 6.3.2 wurde die Frage angesprochen, wie auf der Basis von probabilistischen oder auch possibilistischen Expositionsabschätzungen die Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten beurteilt werden kann. Ein gängiger Ansatz zur Bewertung probabilistischer Expositionsberechnungen wäre die Festlegung eines bestimmten hohen Perzentils der mit Hilfe einer 1D-MC-Simulation oder einer BAYES'schen Posterior-Prognoseverteilung für die Zielgröße berechneten Verteilungsfunktion. So könnte auf der Basis des 95%-Perzentils H_{95} der Dosisverteilung die Beziehung $H_{95} \leq H_G$ als Einhaltung und $H_{95} > H_G$ als Überschreitung eines Richtwertes angesehen werden. Berücksichtigt man jedoch die epistemischen Unsicherheiten solcher Verteilungen, die im Bereich hoher Perzentile in besonderem Maße ausgeprägt sein können, so erscheinen Bewertungen mit einer statistischen Kenngrößen wie H_{95} ebenfalls nicht unproblematisch.

Auf der Basis probabilistischer bzw. possibilistischer Expositionsabschätzungen oder von dbzgl. Hybridansätzen besteht jedoch die Möglichkeit, weitere Eigenschaften berechneter Verteilungen für den Nachweis der Einhaltung von Grenzwerten zu nutzen. Hierzu könnten z. B. der weitere Verlauf der Verteilungsfunktion oberhalb des Perzentils H_{95} und/oder die epistemische Unsicherheit der Schätzung dieser Kenngröße in eine Bewertung einbezogen werden. Ein denkbares Kriterium wäre z. B., dass nicht nur das 95%-Perzentil H_{95} der wahrscheinlichsten Verteilungsfunktion unter dem Grenzwert liegen muss, sondern dass ein klar definierter Unsicherheitsbereich dieser statistischen Kenngröße diese Bedingung erfüllt oder zumindest nicht gravierend verletzt. Hierzu könnten z. B. die 95%-Perzentil-Konfidenzverteilung einer 2D-MC-Simulation, BAYES'sche Grenzverteilungen oder die possibilistische Notwendigkeitsverteilung Nec genutzt werden (siehe dbzgl. Beispiele in den Abschnitten 2.4.2.3, 4.2.4.2 und 5.1.3.2). Damit könnten sowohl die aus der Variabilität von Expositionsfaktoren resultierenden Bandbreiten potentieller Strahlenexpositionen als auch die Stichprobenunsicherheiten und die weiteren epistemisch bedingten Unsicherheiten von Modellrechnungen angemessen berücksichtigt werden.

Mit diesen oder ähnlichen Bewertungsansätzen zum Nachweis der Einhaltung von Grenzwerten auf Basis probabilistischer oder possibilistischer Expositionsabschätzungen könnten aus unserer Sicht

- wichtige Impulse für realistischere bzw. realitätsnähere Dosisabschätzungen gesetzt,
- bessere Kenntnisse zur tatsächlichen Verteilung von Strahlenexpositionen gewonnen und
- einheitliche, konsistente Kriterien zur Berücksichtigung von Unsicherheiten etabliert werden.

7. SCHLUSSFOLGERUNGEN UND EMPFEHLUNGEN FÜR WEITERE ARBEITEN

"So far as the laws of mathematics refer to reality, they are uncertain, and so far as they are certain, they do not refer to reality." (ALBERT EINSTEIN)

Die nachfolgenden Schlussfolgerungen und Empfehlungen für weiterführende Arbeiten basieren auf den Einschätzungen, dass

- im Strahlenschutz überwiegend mittels konservativer deterministischer Expositionsmodelle mit relativ geringem Aufwand Dosisabschätzungen vorgenommen werden können, die für viele Aufgabenstellungen zielführend und ausreichend sind,
- für die Bewertung von Expositionssituationen mit deutlich erhöhten Strahlenexpositionen von Beschäftigten oder Einzelpersonen der allgemeinen Bevölkerung sowie für die Ableitung von sekundären Grenz- bzw. Richtwerten (z. B. von Freigabewerten und Überwachungsgrenzen) probabilistische Expositionsmodelle, insbesondere Expositionsmodelle im engeren Sinne, zur Ermittlung realistischer bzw. realitätsnaher statistischer Verteilungen von Strahlenexpositionen prädestiniert sind, deren sinnvolle Nutzung jedoch eine ausreichende Datenbasis zur Erfassung der Variabilität sensitiver Faktoren und zwischen den Inputgrößen ggf. bestehender statistischer Abhängigkeiten sowie eine sachgemäße Bewertung von Stichprobenunsicherheiten erfordert,
- durch die Beschreibung von Verdünnungs- und Ausbreitungsprozessen mit Hilfe von Systemen stochastischer Differentialgleichungen oder Random-Walk-Modellen ein besseres Verständnis und eine adäquate Darstellung dieser Prozesse möglich ist, um zeitlich-stochastische Einflüsse sowie räumlich-stochastische Verteilungen sensitiver Modellparameter zu erfassen,
- zu epistemisch unsicheren Modellparametern, für die durch Expertenschätzung nur Bandbreiten oder possibilistische Verteilungen angegeben werden können, spezielle Methoden für eine Einbindung in Ausbreitungs- bzw. Expositionsberechnungen erforderlich sind, wobei auch die Interpretation daraus resultierender Ergebnisse von probabilistischen Aussagen abweicht und sich tendenziell konservativere Abschätzungen ergeben, die dem geringeren Informationsgehalt solcher Ansätze entsprechen,
- im konventionellen Umweltschutz sowie auch im Strahlenschutz neben deterministischen Expositionsabschätzungen zunehmend probabilistische und auch probabilistisch-possibilistische Hybridansätze verfolgt werden, um reale aleatorische und epistemische Unsicherheiten von Modellparametern in angemessener Weise für Bewertungen zu berücksichtigen, und dass
- für eine konsistente Methodik des Nachweises der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten des Strahlenschutzes mit einheitlichen Anforderungen an die Zuverlässigkeit dbzgl. Bewertungen probabilistische Ansätze (oder auch Hybridansätze) besser geeignet sein dürften als gängige deterministische Kriterien, wogegen letztere das Verwaltungshandeln wesentlich vereinfachen.

In den Kapiteln 4 und 5 des vorliegenden Berichts wurde zu verschiedenen Modellstrukturen auf diverse Ansätze, Methoden und Probleme der probabilistischen bzw. stochastischen Modellierung eingegangen, die für einfache algebraische Expositionsmodelle bzw. für dynamische Modelle zum Transfer von Radionukliden zwischen ökologischen Kompartimenten sowie ihrer Ausbreitung und

Verdünnung in Umweltmedien von besonderem Interesse sind. Mit diesen Untersuchungen konnten nicht alle relevanten Aspekte und Fragen zur probabilistischen/stochastischen Modellierung von Expositionen umfassend behandelt bzw. abschließend beantwortet werden. Für weiterführende Untersuchungen kristallisierten sich folgende Probleme und Aufgaben heraus, denen aus unserer Sicht besondere Bedeutung im Hinblick auf praktische Anwendungen beigemessen werden sollte:

1. Gemäß Anlage VII Teil A StrlSchV sind für die Abschätzung von Strahlenexpositionen bei Ableitungen mit Luft und Wasser sowie für Freigaben mehrere potentielle Expositionspfade zu berücksichtigen, die zu einer Aufnahme von Radionukliden mit verschiedenen Lebensmitteln führen können. Dies gilt ebenso für die Berechnung von inneren Strahlenexpositionen durch diffuse Freisetzungen von Radionukliden aus bergbaulichen Hinterlassenschaften [BFS 10]. Die für deterministische Expositionsabschätzungen nach Anlage VII Teil B Tabelle 1 StrlSchV bzw. Anlage IV Tabelle IV.2 der "Berechnungsgrundlagen - Bergbau" anzusetzenden Mittelwerte von Verzehrsraten (bzw. ihrer durch einen Konservativitätsfaktor dargestellten 95%-Perzentile im Fall von Ableitungen nach § 47 StrlSchV) können für einzelne konkrete Anwendungsfälle zu einer Unterschätzung realer Strahlenexpositionen führen, verursachen i. d. R. jedoch eher eine signifikante Überschätzung der effektiven Dosis.

   Für probabilistische Dosisabschätzungen sollten in Deutschland verfügbare Verzehrsdaten einer genaueren statistischen Analyse unterzogen werden, um für gängige Lebensmittelklassen und alle Altersgruppen die Randverteilungen zu einzelnen Verzehrsraten sowie die Abhängigkeiten zwischen Verzehrsraten unterschiedlicher Lebensmittelklassen mit einem statistischen Modell darzustellen. Für die Modellierung der Randverteilungen sollten Unsicherheiten der Auswahl des Verteilungstyps und der Anpassung der jeweiligen Verteilungsparameter quantifiziert und insbesondere bzgl. ihrer Auswirkungen auf höhere Perzentile beurteilt werden. Zur Darstellung von gegenseitigen statistischen Abhängigkeiten zwischen den Verzehrsraten sollten geeignete Copula-Modelle geprüft werden.

2. Der Transfer von Radionukliden zwischen radioökologischen Kompartimenten wird üblich mit Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen (Kompartiment-Modellen) beschrieben, wobei für einen bestimmten Standort mit konstanten Koeffizienten (Transferraten) gerechnet wird. Für eine Gesamtheit von substantiell unterschiedlichen Standortgegebenheiten können hierfür auch probabilistische/possibilistische Ansätze genutzt werden. Die bei Feldmessungen festgestellte zeitliche und räumliche Variabilität von Transferraten an einem Standort resultiert aus unserer Sicht hauptsächlich daraus, dass der Radionuklidtransfer ein stochastischer Prozess ist, der sowohl durch zeitlich-stochastische Umwelteinflüsse und die eigene Systemdynamik als auch durch die räumlich-stochastische Heterogenität hydrogeologischer, hydrochemischer sowie biologischer Umgebungsparameter bestimmt wird.

   Für wichtige radioökologische Kompartiment-Modelle (wie Landwirtschafts- und Forstsysteme) sollten durch Darstellung und Anpassung von Systemen stochastischer Differentialgleichungen ein besseres Prozessverständnis und realitätsnahe stochastische Modelle entwickelt werden. Zu den sensitiven stochastischen Einflussfaktoren sollten die zur Modellvalidierung erforderlichen Messreihen so konzipiert werden, dass die zeitliche und räumliche Auslegung von Probenahmen den Korrelationszeiten bzw. -längen der stochastischen Einflüsse entspricht. Zu den Methoden der Parameteranpassung für stochastische Modelle sollten vertiefte Untersuchungen erfolgen.

3. Für deterministische Modellierungen des Transports von Radionukliden mit dem Grundwasser bzw. in der ungesättigten Bodenzone mit Hilfe von Advektions-Dispersions-Gleichungen ist für heterogene Gegebenheiten eine umfangreiche Datenbasis erforderlich. Mit Hilfe stochastischer Ausbreitungsmodelle und/oder entsprechender fraktionaler partieller Differentialgleichungen erscheint eine effektive Beschreibung stochastisch-heterogener Gegebenheiten möglich.

   Die zu dieser Thematik in der Fachliteratur veröffentlichten Arbeiten sollten intensiv verfolgt und durch eigene anwendungsorientierte Untersuchungen untersetzt werden, woraus langfristig u. a. im Hinblick auf die Modellierung von Endlagern Vorteile dieses Ansatzes nutzbar wären.

4. Für komplexe Expositionsmodelle dürfte i. A. davon auszugehen sein, dass für einen gewissen Teil sensitiver Modellparameter eine für probabilistische Modelle benötigte Datenbasis vorliegt, wogegen für andere Modellparameter mit Hilfe von Expertenschätzungen nur Bandbreiten oder possibilistische Verteilungen angegeben werden können (ggf. muss auch auf Plausibilitätsmaße der Evidenztheorie zurückgegriffen werden). Der vorliegende Bericht enthält zwar einige Beispiele und Hinweise zur Anwendung solcher Ansätze, zu den mathematischen Methoden der Verknüpfung von qualitativ unterschiedlichen Ansätzen für aleatorisch und/oder epistemisch unsichere Parameter besteht jedoch weiterer Untersuchungsbedarf, insbesondere für dynamische Modelle zum Radionuklidtransfer zwischen ökologischen Kompartimenten.

   Die mathematischen Methoden zur Verknüpfung von probabilistischen und possibilistischen Verteilungen (sowie evidenztheoretischer Plausibilitätsmaße) für Parameter komplexer Expositionsmodelle sollten vertiefend untersucht und für praktische Anwendungen aufbereitet werden.

5. Es wird empfohlen, einige praxisrelevante Anwendungen der probabilistischen/possibilistischen Modellierung von Expositionen sowohl für
   - reale Expositionssituationen (z. B. Strahlenexpositionen in der Umgebung von Hinterlassenschaften des früheren Uranbergbaus oder anderer radiologischer Altlasten) als auch für
   - hypothetische Expositionssituationen (z. B. zur Ableitung von Überwachungsgrenzen für NORM-Rückstände)

   im Sinne von Demonstrationsbeispielen zu realisieren. In diesem Rahmen sollten für einige ausgewählte Parameter von Expositionsmodellen, z. B. zum Anteil des Verzehrs lokal erzeugter Lebensmittel, die kontaminiert sein könnten (siehe [BFS 10]), auch Daten zur Anpassung von statistischen Verteilungen erhoben und zum Vergleich Expertenschätzungen eingeholt werden.

6. Zur Bewertung der Ergebnisse probabilistischer Expositionsabschätzungen für den Nachweis der Einhaltung von Grenz- bzw. Richtwerten des Strahlenschutzes sind verschiedene Kriterien möglich, wie die alleinige Bezugnahme auf eine hohes Perzentil der für die Zielgröße (z. B effektive Dosis) berechneten Verteilungsfunktion, die Einbeziehung des weiteren Verlaufs der Verteilungsfunktion oberhalb dieses Perzentils oder der Vertrauensbereich zu diesem Perzentil für ein vorgegebenes Niveau.

   Zur Anwendung von probabilistischen/possibilistischen Modellen der Expositionsabschätzung sollte die Praktikabilität und Zweckmäßigkeit unterschiedlicher Ansätze zur Bewertung von auf diesen Ansätzen basierenden Ergebnissen untersucht werden.

8. LITERATUR

[ABS 01] ABSALOM, J. P.; YOUNG, S. D.; CROUT, N. M. J.; SANCHEZ, A.; WRIGHT, S. M.; SMOLDERS, E.; NISBET, A. F.; GILLETT, A. G.
Predicting the transfer of radiocaesium from organic soils to plants using soil characteristics
Journal of Environmental Radioactivity **52**(1)31-43, 2001

[ADEN 03] ADEN, J.; SCOTT, B. R.
Modeling Variability and Uncertainty associated with inhaled weapons-grade PuO_2
Health Physics **84**(6)726-736, 2003

[ADES 03] ADES, A. E.; LU, G.
Correlations Between Parameters in Risl Models: Estimation and Propagation of Uncertainty by Markov Chain Monte Carlo
Risk Analysis **23**(6)1165-1172, 2003

[AIT 08] AIT-SAHALIA, Y.
Closed-Form Likelihood Expansions for Multivariate Diffusion
The Annals of Statistics **36**(2)906-937, 2008

[AKAI 74] AKAIKE, H.
A New Look at the Statistical Model Identification
IEEE Transactions on Automatic Control **AC-19**(6)716-723, 1974

[ALB 08] ALBERT, I.; GRENIER, E.; DENIS, J.-B.; ROUSSEAU, J.
Quantitative Risk Assessment from Farm to Fork and Beyond: A Global Bayesian Approach Concerning Food-Borne Diseases
Risk Analysis **28**(2)557-571, 2008

[ALBR 10] ALBRECHT, A.; MIQUEL, S.
Extension of sensitivity and uncertainty analysis for long term dose assessment of high level nuclear waste disposal sites to uncertainties in the human behaviour
Journal of Environmental Radioactivity **101**(1)55-67, 2010

[ALI 78] ALI, M. M.; MIKHAIL, N. N.; HAQ, M. S.
A Class of Bivariate Distributions Including the Bivariate Logistic
Journal of Multivariate Analysis **8**(3)405-412, 1978

[ALL 07] ALLEN, E.
Modeling with Ito Stochastic Differential Equations
Springer, 2007

[ALLE 07] ALLEN, B. C.; HACK, C. E.; CLEWELL, H. J.
Use of Markov Chain Monte Carlo Analysis with a Physiologically-Based Pharmacokinetic Model of Methylmercury to Estimate Exposures in U.S. Women of Childbearing Age
Risk Analysis **27**(4)947-959, 2007

[ALLI 08] ALLISY-ROBERTS, P.; DAY, P.
Uncertainty evaluation and expression in dose and risk assessment
Journal of Radiological Protection **28**(3)265-269, 2008

[ALS 06] ALSINA, C.; FRANK, M. J.; SCHWEIZER, B.
Associative Functions – Triangular Norms and Copulas
World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2006

[AND 52] ANDERSON, T. W.; DARLING, D. A.
Asymptotic Therory of Certain "Goodness of Fit" Criteria Based on Stochstic Processes
The Annals of Mathematical Statistics **23**(2)193-212, 1952

[AND 54] ANDERSON, T. W.; DARLING, D. A.
A Test of Goodness of Fit
Journal of the American Statistical Association **49**(268)765-769, 1954

[ANDE 10] ANDERSSON, K. G.; NIELSEN, S. P.; THØRRING, H.; HANSEN, H. S.; JOENSEN, H. P.; ISAKSSON, M.; KOSTIAINEN, E.; SUOLANEN, V.; PÁLSSON, S. E.
Improving Ingestion Dose Modelling for the ARGOS and RODOS Decision Support Systems: A Nordic Initiative
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[ANN 01] ANNAN, J. D.
Modelling under uncertainty: Monte Carlo methods for temporally varying parameters
Ecological Modelling **136**(2-3)297-302, 2001

[ANO 08] ANOOP, M. B.; RAO, K. B.
Determination of bounds on failure probability in the presence of hybrid uncertainties
Sadhana **33**(6)753-765, 2008

[APO 04] APOSTOAEI, A. I.; MILLER, L. F.
Uncertainties in Dose Coefficients from Ingestion of ^{131}I, ^{137}Cs, and ^{90}Sr
Health Physics **86**(5)460-482, 2004

[APO 05] APOSTOAEI, A. I.
Testing Prediction Capabilities of an ^{131}I Terrestrial Transport Model by Using Measurements Collected at the Hanford Nuclear Facility
Health Physics **88**(5)439-458, 2005

[APOL 09] APOLLONI, B.; BASSIS, S.
Algorithmic Inference of Two-Parameter Gamma Distribution for Small Samples
Communications in Statistics - Simulation and Computation **38**(9)1950-1968, 2009

[APP 09] APPLEBAUM, D.
Lévy Proceses and Stochastic Calculus (Second Edition)
Cambridge University Press, 2009

[ARCH 97] ARCHER, G. E. B.; SALTELLI, A.; SOBOL, I. M.
Sensitivity Measures, ANOVA-Like Techniques and the Use of Bootstrap
Journal of Statistical Computation and Simulation **58**(2)99-120, 1997

[ARN 95] ARNOLD, B. C.; GROENEVELD, R. A.
Measuring Skewness with Respect to the Mode
The American Statistician **49**(1)34-38, 1995

[ARYA 86] ARYA, A.
Dispersion and reservoir heterogeneity
Ph.D. Dissertation, University of Texas, Austin, 1986

[AUD 98] AUDOLY, S.; D'ANGIO, L.; SACCOMANI, M. P.; COBELLI, C.
Global Identifiability of Linear Compartmental Models – A Computer Algebra Algorithm
IEEE Transactions on Biomedical Enginering **45**(1)36-47, 1998

[AVEN 10] AVEN, T.
On the Need for Restricting the Probabilistic Analysis in Risk Assessments to Variability
Risk Analysis **30**(3)354-360, 2010

[AVI 06] AVILA, R.
Model of the long-term transfer of radionuclides in forests, (SKB TR 06-08)
Svensk Kärnbränslehantering AB, May 2006

[AYY 06] AYYUB, B. M.; KLIR, G. J.
Uncertainty Modelling and Analysis in Engineering and the Sciences
Chapman & Hall/CRC, 2006

[BAI 02] BAILEY, W. H.
Dealing With Uncertainty in Formulating Occupational and Public Exposure Limits
Health Physics **83**(3)402-408, 2002

[BAIN 80] BAIN, L. J.; ENGELHARDT, M.
Probability of Correct Selection of Weibull versus Gamma Based on Likelihood Ratio
Communications in Statistics – Theory and Methods **9**(4)375-381, 1980

[BAL 03] BALAKRISHNAN, N., NEVZOROV, V. B.
A Primer on Statistical Distributions
John Wiley & Sons, Inc., 2003

[BAL 09] BALAKRISHNAN, N.; LAI, C.-D.
Continuous Bivariate Distributions (Second Edition)
Springer, 2009

[BALI 11] BALISTROCCHI, M.; BACCHI, B.
Modelling the statistical dependence of rainfall event variables through copula functions
Hydrology and Earth System Sciences **15**(6)1959-1977, 2011

[BAR 99A] BARTHEL, R.
Ansätze zur Trinkwasseraufnahme von Referenzpersonen der Bevölkerung zur Abschätzung von Strahlenexpositionen, SSK-Unterlage 99(0001) SSK/A301-2/U1
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 13.09.1999

[BAR 99B] BARTHEL, R.
Auswertung von Daten zur Trinkwasseraufnahme in Deutschland,
SSK-Unterlage 99(0015) SSK/A301-4/U6
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 08.11.1999

[BAR 01] BARTHEL, R.
Statistische Auswertung von Stichproben lognormal verteilter Größen für realistisch-konservative radiologische Bewertungen
in: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (Hrsg.): Aktuelle und zukünftige Aufgaben in der Radioökologie (Klausurtagung des Ausschusses "Radioökologie" der Strahlenschutzkommission am 25./26. Juli 2001; Veröffentlichungen der Strahlenschutzkommission Band 49,
Urban & Fischer, München, 2003

[BAR 03] BARTHEL, R.; SCHMIDT, P.
Realistische Abschätzung von Strahlenexpositionen durch Hinterlassenschaften des Uranbergbaus
in [SSK 03], S. 293-313

[BAR 06] BARTHEL, R.
K_d-Konzept und seine Anwendung für natürliche Radionuklide (Bericht zum Vorhaben StSch 4396)
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 18. Juli 2006

[BARA 08] BARALDI, P.; ZIO, E.
A Combined Monte Carlo and Possibilistic Approach to Uncertainty Propagation in Event Tree Analysis
Risk Analysis **28**(5)1309-1325, 2008

[BARA 10] BARALDI, P.; ZIO, E.
A Comparison between Probabilistic and Dempster-Shafer Theory Approaches to Model Uncertainty Analysis in the Performance Assessment of Radioactive Waste Repositories
Risk Analysis **30**(7)1139-1156, 2010

[BARD 09] BARDOSSY, A.; PEGRAM, G. G. S.
Copula based multisite model for daily precipitation simulation
Hydrology and Earth System Sciences **13**(12)2299-2314, 2009

[BARK 00] BARKAI, E.; METZLER, R.; KLAFTER, J.
From continuous time random walks to the fractional Fokker-Planck equation
Physical Review **E 61**(1)132-138, 2000

[BART 82] BARTELS, R.
The Rank Version of von Neumann's Ratio Test for Randomness
Journal of the American Statistical Association **77**(377)40-46, 1982

[BARTL 63] BARTLETT, M. S.
The Spectral Analysis of Point Processes
Journal of the Royal Statistical Society **B 25**(2)264-296, 1963

[BAT 88] BATES, D. M.; WATTS, D. G.
Nonlinear Regession Analysis and its Applications
John Wiley & Sons, Inc., 1988

[BATE 03] BATES, S. C.; CULLEN, A.; RAFTERY, A. E.
Bayesian uncertainty assessment in multicompartment deterministic simulation models for environmental risk assessment
Environmetrics **14**(4)355-371, 2003

[BATE 03] BATES, S. C.; CULLEN, A.; RAFTERY, A. E.
Bayesian uncertainty assessment in multicompartment deterministic simulation models for environmental risk assessment
Environmetrics **14**(4)355-371, 2003

[BAU 01] BAUER, P.; ATTINGER, S.; KINZELBACH, W.
Transport of a decay chain in homogeneous porous media: analytical solutions
Journal of Contaminant Hydrology **14**(3-4)217-239, 2001

[BAUD 02] BAUDRIT, C.; DUBOIS, D.; GUYONNET, D.
Joint Propagation and Exploitation of Probabilistic and Possibilistic Information in Risk Assessment
Journal of LATEX Class Files **1**(11)1-13, 2002

[BAUD 06] BAUDRIT, C.; DUBOIS, D.
Practical Representations of Incomplete Probabilistic Knowledge
Computational Statistics and Data Analysis **51**(1)86-108, 2006

[BAUD 07] BAUDRIT, C.; COUSO, I.; DUBOIS, D.
Joint propagation of probability and possibility in risk analysis: Towards a formal framework
International Journal of Approximate Reasoning **45**(1)82-105, 2007

[BAUD 08] BAUDRIT, C.; DUBOIS, D.; PERROT, N.
Representing parametric probabilistic models tained with imprecision
Fuzzy Sets and Systems **159**(15)1913-1928, 2008

[BEA 96] BEALS, J. A. J.; FUNK, L. M.; FOUNTAIN, R.; SEDMAN, R.
Quantifying the Distribution of Inhalation Exposure in Human Populations: Distribution of Minute Volumes in Adults and Children
Environmental Health Perspectives **104**(9)974-979, 1996

[BEAR 10] BEAR, J.; CHENG, A. H.-D.
Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport
Springer, 2010

[BEAU 09] BEAUVAIS, Z. S.; THOMPSON, K. H.; KEARFOTT, K. J.
Evaluation of Total Effective Dose due to Certain Environmentally Placed Naturally Occurring Radioactive Materials Using a Procedural Adaptation of RESRAD Code
Health Physics **97**(1)50-67, 2009

[BEC 10] BECKER, F.; HARRENDORF, M. A.
Simulations of radiation fields of a photon and a fast neutron calibration facility
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[BEH 10] BEHRENS, R.
Uncertainties in External Dosimetry: analytical vs. Monte Carlo method
Radiation Protection Dosimetry **138**(4)346-352, 2010

[BEN 98] BENSON, D. A.
The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application
Ph.D. Dissertation, University of Nevada, Reno, 1998

[BEN 00A] BENSON, D. A.; WHEATCRAFT, S. W.; MEERSCHAERT, M. M.
Application of a fractional advection-dispersion equation
Water Resources Research **36**(6)1403-1412, 2000

[BEN 00B] BENSON, D. A.; WHEATCRAFT, S. W.; MEERSCHAERT, M. M.
The fractional-order governing eqution of Lévy motion
Water Resources Research **36**(6)1413-1423, 2000

[BEN 01] BENSON, D. A.; SCHUMER, R.; MEERSCHAERT, M. M.; WHEATCRAFT, S. W.
Fractional Dispersion, Lévy Motion, and the MADE Tracer Test
Transport in Porous Media **42**(1-2)211-240, 2001

[BENI 01] BENINSON, D.; LINDELL, B.
The evasive plausibility
Journal of Radiation Protection **21**(1)39-44, 2001

[BENV 02] BENVENUTI, L.; DE SANTIS, A.; FARINA, L.
On model consistency in compartmental systems identification
Automatica **38**(11)1969-1976, 2002

[BER 06] BERGER, J.
The Case for Objective Bayesian Analysis
Bayesian Analysis **1**(3)385-402, 2006

[BERG 95] BERG, M. T.; SHUMAN, L. J.
A three-dimensional stochastic model of the behaviour of radionuclides in forests, Part I: Model Structure, Part II: Cs-137 behaviour in forest soils, Part III: Cs-137 uptake and release by vegetation
Ecological Modelling **83**(3)359-404, 1995

[BERG 07] BERG, D.
Copula goodness-of-fit testing: an overview and power comparison
Statistical Research Report No. 5, Department of Mathematics, University of Oslo
October 2007

[BERK 95] BERKOWITZ, B.; SCHER, H.
On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media
Water Resources Research **31**(6)1461-1466, 1995

[BERK 98] BERKOWITZ, B.; SCHER, H.
Theory of anomalous chemical transport in random fracture networks
Physical Review **E 57**(5)5858-5869, 1998

[BERK 00] BERKOWITZ, B.; SCHER, H.; SILLIMAN, S. E.
Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media
Water Resources Research **36**(1)149-158, 2000

[BERK 01A] BERKOWITZ, B.; SCHER, H.
The Role of Probabilistic Approaches to Transport Theory in Heterogeneous Media
Transport in Porous Media **42**(1-2)241-263, 2001

[BERK 01B] BERKOWITZ, B.; KOSAKOWSKI, G.; MARGOLIN, G.; SCHER, H.
Application of Continuous Time Random Walk Theory to Tracer Test Measurements in Fractured and Heterogeneous Porous Media
Ground Water **39**(4)593-604, 2001

[BERK 02] BERKOWITZ, B.; KLAFTER, J.; METZLER, R.; G.; SCHER, H.
Physical Pictures of Transport in Heterogeneous Media: Advection-Dispersion, Random Walk and Fractional Derivative Formulations
Water Resources Research **38**(10)1191-1202, 2002

[BERK 06] BERKOWITZ, B.; CORTIS, A.; DENTZ, M.; SCHER, H.
Modeling Non-Fickian Transport in Geological Formations as a Cintinuous Time Random Walk
Reviews of Geophysics **44,** 2005RG000178-1/49**,** 2006

[BERK 08] BERKOWITZ, B.; EMMANUEL, S.; SCHER, H.
Non-Fickian transport and multiple-rate mass transfer in porous media
Water Resources Research **44,** W03402-1/16, 2008

[BERN 00] BERNARDO, J. M.; SMITH, A. F. M.
Bayesian Theory
John Wiley & Sons, 2000

[BES 93] BESAG, J.; GREEN, P. J.
Spatial Statistics and Bayesian Computation
Journal of the Royal Statistical Society **B 55**(1)25-37, 1993

[BESS 07] BESS, J. D.; KRAHENBUHL, M. P.; MILLER, S. C.; SLAUGHTER, D. M.; KHOKHRYAKOV, V. V.; KHOKHRYAKOV, V. F.; SUSLOVA, K. G.; VOSTROTIN, V. V.
Uncertainties Analysis for the Plutonium Dosimetry Model, Doses-2005, Using Mayak Bioassay Data
Health Physics **93**(3)207-219, 2007

[BFS 09] BUNDESAMT FÜR STRAHLENSCHUTZ
Die Empfehlungen der Internationalen Strahlenschutzkommission (ICRP) von 2007
ICRP-Veröffentlichung 103, März 2007, Deutsche Ausgabe, BfS-SCHR-47/09, Salzgitter, November 2009

[BfS 10] BUNDESAMT FÜR STRAHLENSCHUTZ
Berechnungsgrundlagen zur Ermittlung der Strahlenexposition infolge bergbau-bedingter Umweltradioaktivität (Berechnungsgrundlagen – Bergbau), (BfS-SW-07/10, urn:nbn:de:20100329966)
Salzgitter, März 2010

[BHAU 09] BHAUMIK, D. K.; KAPUR, K.; GIBBONS, R. D.
Testing Parameters of a Gamma Distribution for Small Samples
Technometrics **51**(3)326-334, 2009

[BIER 99] BIER, V. M.; HAIMES, Y. Y.; LAMBERT, J. H; MATALAS, N. C.; ZIMMERMAN, R.
A Survey of Approaches for Assessing and Managing the Risk of Extremes
Risk Analysis **19**(1)83-94, 1999

[BIJU 09] BIJU, K.; SELVAM, T. P.; LAVALE, D. S.
Monte Carlo Simulation of Various Source-Product Geometries for a Proposed Multi-Product Gamma Irradiator Facility
Health Physics **97**(3)187-197, 2009

[BIN 01] BINKOWITZ, B. S.; WARTENBERG, D.
Disparity in Quantitative Risk Assessment: A Review of Input Distributions
Risk Analysis **21**(1)75-90, 2001

[BIRN 52] BIRNBAUM, Z. W.
Numerical Tabulation of the Distribution of Kolmogorov's Statistic for Finite Sample Size
Journal of the American Statistical Association **47**(259)425-441, 1982

[BIS 11] BISGAARD, S.; KULAHCI, M.
Time Series Analysis and Forecasting by Example
John Wiley & Sons, Inc., 2011

[BMU 01] REGIERUNG DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND
Verordnung für die Umsetzung von EURATOM-Richtlinien zum Strahlenschutz vom 20. Juli 2001, Artikel 1: Verordnung über den Schutz vor Schäden durch ionisierende Strahlen (Strahlenschutzverordnung - StrlSchV), BGBl. I, Nr. 38, S. 1714; zuletzt geändert durch Art. 1 VO zur Änderung strahlenschutzrechtlicher VO vom 04.10.2011 (BGBl. I S. 2000)

[BMU 05] BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT
Entwurf der Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zu § 47 StrlSchV, Stand 13.05.2005
Bonn, 2005

[BMU 09] BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT
Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle, Berlin, Juli 2009

[BOG 87] BOGEN, K. T.; SPEAR, R. C.
Integrating Uncertainty and Interindividual Variability in Environmental Risk Assessment
Risk Analysis **7**(4)427-436, 1987

[BOG 94] BOGEN, K. T.
A Note on Compounded Conservatism
Risk Analysis **14**(4)379-381, 1994

[BOIS 00] BOIS, F. Y.
Statistical Analysis of Clewell et al. PBPK Model of Trichlorethylene Kinetics
Environmental Health Perspectives **108**(Supplement 2)307-316, 2000

[BOL 01] BOLCH, W. E.; FARFÁN, E. B.; HUH, C.; HUSTON, T. E.; BOLCH, W. E.
Influences of Parameter Uncertainties within the ICRP 66 Respiratory Tract Model: Particle Deposition
Health Physics **81**(4)378-394, 2001

[BOL 03] BOLCH, W. E.; HUSTON, T. E.; FARFÁN, E. B.; VERNETSON, W. G.; BOLCH, W. E.
Influences of Parameter Uncertainties within the ICRP-66 Respiratory Tract Model: Particle Clearance
Health Physics **84**(4)421-435, 2003

[BOR 06] BORGONOVO, E.
Measuring Uncertainty Importance: Investigation and Comparison of Alternative Approaches
Risk Analysis **26**(5)1349-1361, 2006

[BOR 07] BORGONOVO, E.
A new uncertainty importance measure
Reliability Engineering & System Safety **92**(6)771-784, 2007

[BOR 08] BORGONOVO, E.
Sensitivity Analysis of Model Output with Input Constraints: A Generalized Rationale for Local Methods
Risk Analysis **2**8(3)667-680, 2008

[BOX 92] BOX, G. E. P.; TIAO, G. C.
Bayesian Inferences in Statistical Analysis
John Wiley and Sons, Inc., 1992

[BOX 94] BOX, G. E. P.; JENKINS, G. M.; REINSEL, G. C.
Time Series Analysis, Forecasting and Control (Third Edition)
Prentice-Hall International, Inc., New Jersey, 1994

[BRA 95] BRAND, K. P.; SMALL, M. J.
Updating Uncertainty in an Integrated Risk Assessment: Conceptual Framework and Methods
Risk Analysis **15**(6)719-731, 1995

[BRAT 96] BRATTIN, W. J.; BARRY, T. M.; CHIU, N.
Monte Carlo Modelling with Uncertain Probability Density Functions
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)820-840, 1996

[BRO 98] BROWN, E. A.; SHELLEY, M. L.; FISHER, J. W.
A Pharmacokinetic Study of Occupational and Environmental Benzene Exposure with Regard to Gender
Risk Analysis **18**(2)205-213, 1998

[BS 99] BARTHEL, R.; GOLDAMMER, W.; KISTINGER, S.; KUGELER, E.; NÜSSER, A.; THIERFELDT, S.
Ableitung von Überwachungsgrenzen für Reststoffe mit erhöhten Konzentationen natürlicher Radioaktivität (Bericht BS 9410-2; im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit)
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 31.05.1999 (Anhänge A und B, 24.08.1999)

[BS 04] THIERFELDT, S.; WÖRLEN, S.
Spezifische Fragestellungen für die Fortentwicklung von Datensätzen für die Freigrenzen, Freigabe von Oberflächenkontaminationen (Endbericht zu AP2/AP3 des Vorhabens StSch 4279, BS 0107-01; im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit)
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 31. Juli 2004

[BS 09A] BARTHEL, R.; DEISSMANN, G.; STOLLENWERK, R. H.; THIERFELDT, S.; WÖRLEN, S.
Consultancy Support for the RSA 93 Application for the Proposed LLW Facility at Dounreay (Final. Report, prepared on behalf of the Scottish Environment Protection Agency)
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, June 26, 2009

[BS 09B] CRAMER, T.; DEISSMANN, G.; KISTINGER, S.; NITZSCHE, O.; STOLLENWERK, R. H.
Modellgestützte Berechnungen zum langfristigen Stoffaustrag aus den industriellen Absetzanlagen Culmitzsch und Trünzig sowie aus den Halden am Standort Seelingstädt (Bericht im Auftrag des
Thüringer Landesbergamtes)
Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 29. Juli 2009

[BUCK 97] BUCK, R. J.; HAMMERSTROM, K. A.; RYAN, P. B.
Bias in Population Estimates of Long-Term Exposure from Short-Term Measurements of Individual Exposure
Risk Analysis **17**(4)455-466, 1997

[BUK 95] BUKOWSKI, J.; KORN, L.; WARTENBERG, D.
Correlated Inputs in Quantitative Risk Assessment: The Effects of Distributional Shape
Risk Analysis **15**(2)215-219, 1995

[BUK 01] BUKOWSKI, J. A.; SCHNATTER, A. R.; KORN, L.
Using Epidemiological Studies to Check the Consistency of the Cancer Risks Predicted by High-Dose Animal Experiments: A Methodological Review
Risk Analysis **21**(4)601-611, 2001

[BUR 93] BURMASTER, D. E.; HARRIS, R. H.
The Magnitude of Compounding Conservatism in Superfund Risk Assessments
Risk Analysis **13**(2)131-134, 1993

[BUR 94] BURMASTER, D. E.; ANDERSON, P. D.
Principles of Good Practice for the Use of Monte Carlo Techniques in Human Health and Ecological Risk Assessments
Risk Analysis **14**(4)477-481, 1994

[BUR 96] BURMASTER, D. E.; WILSON, A. M.
An Introduction to Second-Order Random Variables in Human Health Risk Assessments
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)892-919, 1996

[BURG 99] BURGER, J.; STEPHENS JR., W. L.; BORING, C. S.; KUKLINSKI, M.; GIBBONS, J. W.; GOCHFELD, M.
Factors in Exposure Assessment: Ethnic and Socioeconomic Differences in Fishing and Consumption of Fish Caught along the Savannah River
Risk Analysis **19**(3)427-438, 1999

[BURN 02] BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R.
Model Selection and Multimodel Inference – A Practical Information-Theoretic Approach (Second Edition)
Springer, New York, 2002

[BURY 99] BURY, K.
Statistical Distributions in Engineering
Cambridge University Press, 1999

[CAR 92] CARLIN, B. P.; POLSON, N. G.; STOFFER, D. S.
A Monte Carlo Approach to Nonnormal and Nonlinear State-Space Modeling
Journal of the American Statistical Association **87**(418)493-500, 1992

[CARL 01] CARLSSON, C.; FULLÉR, R.
On possibilistic mean value and variance of fuzzy numbers
Fuzzy Sets and Systems **122**(2)315-326, 2001

[CARL 05] CARLSSON, C.; FULLÉR, R.; MAJLENDER, P.
On possibilistic correlation
Fuzzy Sets and Systems **155**(3)425-445, 2005

[CARM 97] CARMICHAEL, G. R.; SANDU, A.; POTRA, F. A.
Sensitivity Analysis for Atmospheric Chemistry Models via Automatic Differentiation
Atmospheric Environment **31**(3)475-489, 1997

[CART 94] CARTER, C. K.; KOHN, R.
On Gibbs sampling for state space models
Biometrika **81**(3)541-553, 1994

[CAS 92] CASELLA, G.; GEORGE, E. I.
Explaining the Gibbs Sampler
The American Statistician **46**(3)167-174, 1992

[CAS 02] CASELLA, G.; BERGER, R. L.
Statistical Inference
Duxbury, 2002

[CAT 98] CATCHPOLE, E. A.; MORGAN, B. J. T.; FREEMAN, S. N.
Estimation in parameter-redundant models
Biometrika **85**(2)462-468, 1998

[CAU 00] CAUWELS, P.; POFFIJN, A.; MONDELAERS, W.; LAHORTE, P.; MASSCHAELE, B.; MEESEN, G.; VAN DEYNSE, A.
Theoretical Study of the Relation between Radon and its Long-Lived Progeny in a Room
Health Physics **79**(4)389-395, 2000

[CEB 07] CEBERIO, M.; FERSON, S.; KREINOVICH, V.; CHOPRA, S.; XIANG, G.; MURGUIA, A.; SANTILLAN, J.
How to Take into Account Dependence between the Inputs:
From Interval Computations to Constraint-Related Set Computations,
with Potential Applications to Nuclear Safety, Bio- and Geoscience
Journal of Uncertain Systems **1**(1)14-37, 2007

[CHA 08] CHATTERJEE, A.; HORGAN, G.; THEOBALD, C.
Exposure Assessment for Pesticide Intake from Multiple Food Products: A Bayesian Latent-Variable Approach
Risk Analysis **28**(6)1727-1736, 2008

[CHAU 01] CHAUDHURI, B. B.; BHATTACHARYA, A.
On correlation between two fuzzy sets
Fuzzy Sets and Systems **118**(3)447-456, 2001

[CHEN 00] CHEN, M. H.; SHAO, Q. M.; IBRAHIM, J. G.
Monte Carlo Methods in Bayesian Computation
Springer, 2000

[CHEN 03] CHEN, Z.; HUANG, H.; CHAKMA, A.
Hybrid Fuzzy-Stochastik Modelling Approach for Assessing Environmental Risks at Contaminated Groundwater Systems
Journal of Environmental Engineering **129**(1)79-88, 2003

[CHEN 08] CHEN, S. X.; GAO, J; TANG, C. Y.
A Test for Model Specification of Diffusion Processes
The Annals of Statistics **36**(1)167-198, 2008

[CHEN 12] CHEN, J.-S.; LAI, K.-H.; LIU, C.-W.; NI, C.-F.
A novel method for analytically solving multi-species advective-dispersive transport equations sequentially coupled with first-order decay reactions
Journal of Hydrology **420-421**, 191-204, 2012

[CHER 08] CHERNICK, M. R.
Bootstrap Methods – A Guide for Practioneers and Researchers
John Wiley & Sons, Inc., 2008

[CHHI 74] CHHIKARA, R. S.; FOLKS, J. L.
Estimation of the Inverse Gaussian Distribution Function
Journal of the American Statistical Association **69**(345)250-254, 1974

[CHIB 95] CHIB, S,; GREENBERG, E.
Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm
The American Statistician **49**(4)327-335, 1995

[CHOW 04] CHOWDHURY, S.; HUSAIN, T.; VEITCH, B.; BOSE, N.; SADIQ, R.
Human health risk assessment of naturally occurring radioactive materials in produced water - a case study
Human and Ecological Risk Assessment **10**(6)1155-1171, 2004

[CHOW 06] CHOWDHURY, S.; HUSAIN, T.; BOSE, N.
Fuzzy rule-based modelling for human health risk from naturally occurring radioactive materials in produced water
Journal of Environmental Radioactivity **89**(1)1-17, 2006

[CHRI 93] CHRISTAKOS, G.; MILLER, C. T.; OLIVER, D.
Stochastic perturbation analysis of groundwater flow. Spatially variable soils, semi-infinite domains and large fluctuations
Stochastic Hydrology and Hydraulics **7**(3)213-239, 1993

[CHUI 09] CHUI, C. K.; CHEN, G.
Kalman Filtering with Real-Time Applications (Fourth Edition)
Springer, 2009

[CHUN 00] CHUN, M. H.; HAN, S. J.; TAK, N. I.
An uncertainty importance measure using a distance metric for the change in a cumulative distribution function
Reliability Engineering & System Safety **70**(3)313-321, 2000

[CIFF 05] CIFFROY, P.; SICLET, F.; DAMOIS, C.; LUCK, M.; DUBOUDIN, C.
A dynamic model for assessing radiological consequences of routine releases in the Loire river: Parameterisation and uncertainty/sensitivity analysis
Journal of Environmental Radioactivity **83**(1)9-48, 2005

[CIFF 06] CIFFROY, P.; SICLET, F.; DAMOIS, C.; LUCK, M.
A dynamic model for assessing radiological consequences of tritium routinely released in rivers. Application to the Loire River
Journal of Environmental Radioactivity **90**(2)110-139, 2006

[CIFF 09] CIFFROY, P.; DURRIEU, G.; GARNIER, J.-M.
Probabilistic distribution coefficients (K_ds) in freshwater for radioisotopes of Ag, Am, Ba, Be, Ce, Co, Cs, I, Mn, Pu, Ra, Ru, Sb, Sr and Th – implications for uncertainty analysis of models simulating the transport of radionuclides in rivers
Journal of Environmental Radioactivity **100**(9)785-794, 2009

[CLA 89] CLARK, S. J.; PERRY, J. N.
Estimation of the Negative Binomial Parameter κ byMaximum Quasi-Likelihood
Biometrics **45**(1)309-316, 1989

[CLAR 05] CLARK, J. S.
Why environmental scientists are becoming Bayesians
Ecology Letters **8**(1)2-14, 2005

[CLAY 78] CLAYTON, D. G.
A model for association in bivariate life tables and its application in epidemiological studies of familial tendency in chronic disease incidence
Biometrika **65(**1)141-151, 1978

[CLE 99] CLEWELL, H. J.; GEARHART, J. M.; GENTRY, P. R.; COVINGTON, T. R.; VANLANDINGHAM, C. B; CRUMP, K. S.; SHIPP, A. M.
Evaluation of the Uncertainty in an Oral Reference Dose for Methylmercury Due to Interindividual Variability in Pharmacokinetics
Risk Analysis **19**(4)547-558, 1999

[CLEM 01] CLEMENT, T. P.
Generalized solution to multispecies transport equations coupled with a first-order reaction network
Water Resources Research **37**(1)157-163, 2001

[CLO 10] CLOUGHERTY, J. E.
A Growing Role for Gender Analysis in Air Pollution Epidemiology
Environmental Health Perspectives **118**(2)167-176, 2010

[COH 96] COHEN, J. T.; LAMPSON, M. A.; BOWERS, T. S.
The Use of Two-Stage Monte Carlo Simulation Techniques to Characterize Variability and Uncertainty in Risk Analysis
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)939-971, 1996

[COL 08] COLYVAN, M.
Is Probability the Only Coherent Approach to Uncertainty?
Risk Analysis **28**(3)645-652, 2008

[CON 71] CONSUL, P. C.; JAIN, G. C.
On the Log-Gamma Distribution and its Properties
Statistische Hefte **12**(2)100-106, 1971

[CONG 01] CONGDON, P.
Bayesian Statistical Modelling
John Wiley & Sons, 2001

[CONT 04] CONT, R.; TANKOV, P.
Financial Modelling with Jump Proceses
Chapman & Hall/CRC, London, 2004

[COO 00] COOKE, R. M.; NOORTWIJK, J. M.
Graphical Methods
in [SAL 00A], pp. 245-264

[COOP 96] COOPER, J. A.; FERSON, S.; GINZBURG, L.
Hybrid Processing of Stochastic and Subjective Uncertainty
Risk Analysis **16**(6)785-791, 1996

[COR 04A] CORTIS, A.; H.; BERKOWITZ, B.
Anomalous Transport in "Classical" Soil and Sand Columns
Soil Science Society of America Journal **68**(5),1539-1548, 2004

[COR 04B] CORTIS, A.; GALLO, C.; SCHER, H.; BERKOWITZ, B.
Numerical simulation of non-Fickian transport in geological formations with multiple-scale heterogeneities
Water Resources Research **40**, W04209-1/16, 2004

[COU 88] COUGHTREY, P. J.
Models for radionuclide transport in soils
Soil Use and Management **4**(3)84-90, 1988

[COW 96] COWLES, M. K.; CARLIN, B. P.
Markov Chain Monte Carlo Convergence Diagnostica: A Comparative Review
Journal of the American Statistical Association **91**(434)883-904, 1996

[COW 04] COWLES, M. K.
Review of WinBUGS 1.4
The American Statistician **58**(4)330-336, 2004

[COX 46] COX, R. T.
Probability, Frequency and Reasonable Expectation
American Journal of Physics **14**(1)1-13, 1946

[COX 61] COX, D. R.
Tests of Separate Families of Hypotheses
in: Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium, Vol. 1, pp. 105-123,
University of California Press, Berkeley, 1961

[COX 62] COX, D. R.
Further Results on Tests of Separate Families of Hypotheses
Journal of the Royal Statistical Society **B 24**(2)406-424, 1962

[COX 06] COX, M.; HARRIS, P.; NAM, G.; THOMAS, D.
The use of a Monte Carlo method for uncertainty calculation, with an application to the measurement of neutron ambient dose equivalent rate
Radiation Protection Dosimetry **121**(1)12-23, 2006

[CRE 09] CRESSIE, N.; CALDER, C. A.; CLARK, J. S.; VER HOEF, J. M.; WIKLE, C. K.
Accounting for uncertainty in ecological analysis: the strengths and limitations of hierarchical statistical modeling
Ecolocical Applications **19**(3)553-570, 2009

[CUA 81] CUADRAS, C. M.; AUGE
A continuous general multivariate distribution and its properties
Communications in Statistics – Theory and Methods **10**(4)339-353, 1981

[CUK 73] CUKIER, R. I.; FORTUIN, C. M.; SHULER, K. E.
Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I. Theory
The Journal of Chemical Physics **59**(8), 3873-3878, 1973

[CUK 75] CUKIER, R. I.; SCHAIBLY, J. H.; SHULER, K. E.
Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. III. Analysis of approximations
The Journal of Chemical Physics **63**(3), 1140-1149, 1975

[CUK 78] CUKIER, R. I.; LEVINE, H. B.; SHULER, K. E.
Nonlinear Sensitivity Analysis of Multiparameter Model Systems
Journal of Computational Physics **26**(1), 1-42, 1978

[CUL 94] CULLEN, A. C.
Measures of Compounding Conservatism in Probabilistic Risk Assessment
Risk Analysis **14**(4)389-393, 1994

[CUL 99] CULLEN, A. C.: FREY, H. C.
Probabilistic Techniques in Exposure Assessment: A Handbook for Dealing with Variability and Uncertainty in Models and Inputs
Plenum Press, New York and London, 1999

[CUSH 87] CUSHMAN, J. H.
Development of stochastic partial differential equations for subsurface hydrology
Stochastic Hydrology and Hydraulics **1**(4)241-262, 1987

[DAG 84] DAGAN, G.
Solute transport in heterogeneous porous formations
Journal of Fluid Mechanics **145,** 151-177**,** 1984

[DAG 97] DAGAN, G.; NEUMAN, S. P. (EDS.)
Subsurface Flow and Transport: A Stochastic Approach
Cambridge University Press, 1997

[DAK 96] DAKINS, M. E.; TOLL, J. E.; SMALL, M. J.; BRAND, K. P.
Risk-Based Environmental Remediation: Bayesian Monte Carlo Analysis and the Expected Value of Sample Information
Risk Analysis **16**(1)67-79, 1996

[DAM 99] DAMIEN, P.; WAKEFIELD, J.; WALKER, S.
Gibbs sampling for Bayesian non-conjugate and hierarchical models by using auxiliary variables
Journal of the Royal Statistical Society **B 61**(2)331-344, 1999

[DAMS 75] DAMSLETH, E.
Conjugate Classes for Gamma Distributions
Scandinavian Journal of Statistics **2**(2)80-84, 1975

[DAVE 09] DAVESNE, E.; CHOJNACKI, E.; PAQUET, F.; BLANCHARDON, E.
Modeling the Imprecision in Prospective Dosimetry of Internal Exposure to Uranium
Health Physics **96**(2)144-154, 2009

[DAVI 07] DAVIS, K.; MARSH, J. W.; GERONDAL, M.; BAILEY, M. R.; LE GUEN, B.
Assessment of Intakes and Doses to Workers followed for 15 Years after Accidental Inhalation of ^{60}Co
Health Physics **92**(4)332-344, 2007

[DEC 98] DECKERT, A.; THIERFELDT, S. (BRENK SYSTEMPLANUNG)
Berechnung massenspezifischer Freigabewerte für schwach radioaktive Reststoffe
BMU-1998-520, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz des BMU, ISSN 0724-3316, Brenk Systemplanung, Aachen, 1998

[DEM 07] DEMCHUK, E.; YUCESOY, B.; JOHNSON, V. J.; ANDREW, M.; WESTON, A.; GERMOLEC, D. R.; DE ROSA, C. T.; LUSTER, M. I.
A Statistical Model for Assessing Genetic Susceptibility as a Risk Factor in Multifactorial Diseases: Lessons from Occupational Asthma
Environmental Health Perspectives **115**(2)231-234, 2007

[DEMA 05] DEMARTA, S.; MCNEILL, A. J.
The t Copula and Related Copulas
International Statistical Review **73**(1)111-129, 2005

[DEMP 67] DEMPSTER, A. P.
Upper and lower probabilities induced by a multivalued mapping
The Annals of Mathematical Statistics **38**(2)325-339, 1967

[DEMP 68] DEMPSTER, A. P.
A Generalization of Bayesian Inference
Journal of the Royal Statistical Society **B 30**(2)205-247, 1968

[DEN 04] DENTZ, M.; CORTIS, A.; SCHER, H.; BERKOWITZ, B.
Time behavior of solute transport in heterogeneous media: transition from anomalous to normal transport
Advances in Water Resources **27**(2)155-173, 2004

[DEV 86] DEVROYE, L.
Non-Unoform Random Variate Generation
Springer-Verlag New York Inc., 1986

[DIC 96] DICICCIO, T. J.; EFRON, B.
Bootstrap Confidence Intervals
Statistical Science **11**(3)189-228, 1996

[DIJK 06] VAN DIJK, J. W. E.
Uncertainties in personal dosimetry for external radiation: a Monte Carlo approach
Radiation Protection Dosimetry **121**(1)31-38, 2006

[DIN 25457] DIN DEUTSCHES INSTITUT FÜR NORMUNG
Aktivitätsmessverfahren für die Freigabe von radioaktiven Reststoffen und kerntechnischen Anlagenteilen; Teile 1, 4, 5, 6, 7
Beuth-Verlag, Berlin, verschiedene Veröffentlichungsdaten

[DON 09] DONALD, M.; COOK, A.; MENGERSEN, K.
Bayesian Network for Risk of Diarrhea Associated with the Use of Recycled Water
Risk Analysis **29**(12)1672-1685, 2009

[DONG 87] DONG, W.; SHAH, H. C.
Vertex Method for Computing Functions of Fuzzy Variables
Fuzzy Sets and Systems **24**(1)65-78, 1987

[DREW 00] DREW, J. H.; GLEN, A. G.; LEEMIS, L. M.
Computing the cumulative distribution function of the Kolmogorov-Smirnov statistics
Computational Statistics & Data Analysis **3**4(1)1-15, 2000

[DRO 08] DROGUETT, E. L.; MOSLEH, A.
Bayesian Methodology for Model Uncertainty Using Model Performance Data
Risk Analysis **28**(5)1457-1476, 2008

[DROU 01] DROUET MARI, D.; KOTZ, S.
Correlation and Dependence
Imperial College Press, 2001

[DROZ 10] DROZDOVITCH, V.; KHROUCH, V.; MACEIKA, E.; ZVONOVA, I.; VLASOV, O.; BRATILOVA, A,; GAVRILIN, Y.; GOULKO, G.; HOSHI, M.; KESMINIENE, A.; SHINKAREV, S.; TENET, V.; CARDIS, E.; BOUVILLE, E.
Reconstruction of Radiation Doses in a Case-Control Study of Thyroid Cancer Following the Chernobyl Accident
Health Physics **99**(1)1-16, 2010

[DUB 87] DUBOIS, D.; PRADE, H.
The mean value of a fuzzy number
Fuzzy Sets and Systems **24**(3)279-300, 1987

[DUB 88] DUBOIS, D.; PRADE, H.
Possibility Theory: An Approach to Computerized Processing of Uncertainty
Plenum Press, New York, 1988

[DUB 92] DUBOIS, D.; PRADE, H.
When upper probabilities are possibility meaures
Fuzzy Sets and Systems **49**(2)65-74, 1992

[DUB 06] DUBOIS, D.
Possibility Theory and Statistical Reasoning
Computational Statistics and Data Analysis **51**(1)47-69, 2006

[DUB 10] DUBOIS, D.
Representation, Propagation, and Decision Issues in Risk Analysis under Incomplete Probabilistic Information
Risk Analysis **30**(3)361-368, 2010

[DUP 07] DUPUIS, D. J.
Using Copulas in Hydrology: Benefits, Cautions, and Issues
Journal of Hydrologic Engineering **12**(4)381-393, 2007

[DYER 73] DYER, A. R.
Discrimination Procedures for Separate Families of Hypotheses
Journal of the American Statistical Association **68**(344)970-974, 1973

[EC 98] EUROPEAN COMMISSION
Recommended radiological protection criteria for the recycling of metals from the dismantling of nuclear installations
Radiation Protection No. 89, ISBN 92-828-3284-8, Luxemburg, 1998

[EC 00A] EUROPEAN COMMISSION
Recommended radiological protection criteria for the clearance of buildings and building rubble from the dismantling of nuclear installations
Radiation Protection No. 113, ISBN 92-828-9172-0, Luxemburg, 2000

[EC 00B] EUROPEAN COMMISSION
Practical use of the concepts of clearance and exemption – Part I: Guidance on General Clearance Levels for Practices; Recommendations of Group of Experts established under the terms of Article 31 of the Euratom Treaty; Radiation Protection No. 122, Luxemburg, 2000

[EC 01] EUROPEAN COMMISSION
Practical Use of the Concepts of Clearance and Exemption – Part II: Application of the Concepts of Exemption and Clearance to Natural Radiation Sources; Draft of Radiation Protection No. 122, Luxemburg, 2001

[EC 02] EUROPEAN COMMISSION, DIRECTORATE-GENERAL ENVIRONMENT
Guidance on the realistic assessment of radiation doses to members of the public due to the operation of nuclear installations under normal conditions (Recommendations of the group of experts set up under the terms of Article 31 of the Euratom Treaty), Radiation Protection 129
Luxembourg, 2002

[EFRO 79] EFRON, B.
Bootstrap Methods: Another Look at the Jackknife
The Annals of Statistics **7**(1)1-26, 1979

[EFRO 86] EFRON, B.; TIBSHIRANI, R.
Bootstrap Methods for Standard Errors, Confidence Intervals, and Other Measures of Statistical Accuracy
Statistical Science **1**(1)54-77, 1986

[EFRO 93] EFRON, B.; TIBSHIRANI, R.
An Introduction to the Bootstrap
Chapman & Hall, New York, 1993

[EGO 09] EGODAWATTA, P. K.; THOMAS, E. C.; GOONETILLEKE, A.
Understanding the physical processes of pollutant build-up and wash-off in roof surfaces
Science of the Total Environment **407**(6)1834-1841, 2009

[EHL 02] EHLKEN, S.; KIRCHNER, G.
Environmental processes affecting plant root uptake of radioactive trace elements and variability of transfer factor data: a review
Journal of Environmental Radioactivity **58**(2-3)79-112, 2002

[EHR 97] EHRHARDT, J.
The RODOS System: Decision Support for Off-Site Emergency Management in Europe
Radiation Protection Dosimetry **73**(1-4)35-40, 1997

[EIN 08] EINMAHL, J. H. J.; KRAJINA, A.; SEGERS, J.
A method of moments estimator of tail dependence
Bernoulli **14**(4)1003-1026, 2008

[ELE 99] ELERT, M.; BUTLER, A.; CHEN, J.; DOVLETE, C.; KONOPLEV, A.; GOLUBENKOV, A.; SHEPPARD, M.; TOGAWA, O.; ZEEVAERT, T.
Effect of model complexity on uncertainty estimates
Journal of Environmental Radioactivity **42**(2-3)255-270, 1999

[EMB 03] EMBRECHT, P.; LINDSKOG, F.; MCNEIL, A.
Modelling Dependence with Copulas and Applications to Risk Management
in: Rachev, S. (Ed.), Handbook of Heavy Tailed Distributions inFinance, pp. 329-384
Elsevier, 2003

[ENG 78] ENGELHARDT, M.; BAIN, L. J.
Construction of Optimal Unbiased Inference Procedures for the Parameters of the Gamma Distribution
Technometrics **20**(4)485-489, 1978

[EPA 89] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
Risk Assessment Guidance for Superfund, Volume I, Human Health Evaluation Manual (Part A); EPA/540/1-89/002
Washington, D.C., December 1989

[EPA 91] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
Risk Assessment Guidance for Superfund, Volume I, Human Health Evaluation Manual, Supplemental Guidance "Standard Default Exposure Factors",
OSWER Directive: 9285.6-03
Washington, D.C., March 25, 1991

[EPA 92] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
Guidance for Exposure Assessment (EPA/600/Z-92/001, May 1992)
Federal Register 57(104):22888-22938, May 29, 1992

[EPA 95] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, SCIENCE POLICY COUNCIL
Guidance for Risk Characterization
Washington, D. C., February 1995

[EPA 97A] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, RISK ASSESSMENT FORUM
Guiding Principles for Monte Carlo Analysis
Washington, D. C., March 1997

[EPA 97B] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
Policy for Use of Probabilistic Analysis in Risk Assessment
Washington, D. C., May 15, 1997

[EPA 97C] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, NATIONAL CENTER FOR ENVIRONMENTAL ASSESSMENT, OFFICE OF RESEARCH AND DEVELOPMENT
Exposure Factors Handbook (Final Report EPA/600/P-95/002F)
Washington, D. C., August 1997

[EPA 98] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF PESTICIDE PROGRAMS
Guidance for Submission of Probabilistic Human Health Exposure Assessments to the Office of Pesticide Programs (Draft, 11/4/98)
Washington, D. C., November 4, 1998

[EPA 99] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF AIR AND RADIATION
Understanding Variation in Partition Coefficient, K_d, Values
Volume I: The K_d Model, Methods of Measurement, and Application of Chemical Reaction Codes (EPA 402-R-99-004A),
Volume II: Review of Geochemistry and Available K_d Values for Cadmium, Cesium, Chromium, Lead, Plutonium, Radon, Strontium, Thorium, Tritium (^3H), and Uranium (EPA 402-R-99-004B)
Washington, D. C., August 1999

[EPA 00A] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF PESTICIDE PROGRAMS
Choosing a Percentile of Acute Dietary Exposure as a Threshold of Regulatory Concern
Washington, D. C., March 16, 2000

[EPA 00B] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF RESEARCH & DEVELOPMENT
Options for Development of Parametric Probability Distributions for Exposure Factors
Washington, D. C., July 2000

[EPA 01A] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF PESTICIDE PROGRAMS
General Principles for Performing Aggregate Exposure and Risk Assessments
Washington, D. C., November 28, 2001

[EPA 01B] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF EMERGENCY AND REMEDIAL RESPONSE
Risk Assessment Guidance for Superfund: Vol. III – Part A,
Process for Conducting Probabilistic Risk Assessment
Washington, D. C., December 2001

[EPA 02] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF PESTICIDE PROGRAMS
Guidance on Cumulative Risk Assessment of Pesticide Chemicals That Have a Common Mechanism of Toxicity
Washington, D. C., January 14, 2002

[EPA 04] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, OFFICE OF AIR AND RADIATION
Understanding Variation in Partition Coefficient, K_d, Values
Volume III: Review of Geochemistry and Available K_d Values for Americium, Arsenic, Curium, Iodine, Neptunium, Radium, and Technetium (EPA 402-R-04-002C)
Washington, D. C., July 2004

[EPA 08] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, NATIONAL CENTER FOR ENVIRONMENTAL ASSESSMENT, OFFICE OF RESEARCH AND DEVELOPMENT
Child-Specific Exposure Factors Handbook (Final Report EPA/600/R-06/096F)
Washington, D. C., September 2008

[EPA 09] U. S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
Guidance for Submission of Probabilistic Human Health Exposure Assessments
Science Policy; Notice of Withdrawal
Federal Register Vol. 74, No. 134, pp. 34341-34342;
Washington, D. C., July 15, 2009

[ERS 89] ERSHOW, A.G.; CANTOR, K.P.
Total water and tapwater intake in the United States: population-based estimates of quantities and sources
Life Science Research Office, Federation of American Societies for Experimental Biology, Washington, 1989

[EU 96] RAT DER EUROPÄISCHEN UNION
Richtlinie 96/29/EURATOM des Rates vom 13. Mai 1996 zur Festlegung der grundlegenden Sicherheitsnormen für den Schutz der Gesundheit der Arbeitskräfte und der Bevölkerung gegen die Gefahren durch ionisierende Strahlungen,
Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaft, L 159, 29. Juni 1996; Luxemburg, 29.06.1996

[EUR 10] EURSSEM
Environmental Radiation Survey and Site Execution Manual (EURSSEM)
http://www.eurssem.eu/wiki, 2010

[EVE 10] EVERITT, B. S.; SKRONDAL, A.
The Cambridge Dictionary of Statistics (Fourth Edition)
Cambridge University Press, 2010

[FAD 90] FADDY, M. J.
Compartmental Models with Phase-Type Recidence-Time Distributions
Applied Stochastic Models and Data Analysis **6**(2)121-127, 1990

[FAR 03] FARFÁN, E. B.; HUSTON, T. E.; BOLCH, W. E.; VERNETSON, W. G.; BOLCH, W. E.
Influences of Parameter Uncertainties within the ICRP-66 Respiratory Tract Model: Regional Tissue Doses for $^{239}PuO_2$ and $^{238}UO_2/^{238}U_3O_8$
Health Physics **84**(4)436-450, 2003

[FAR 05] FARFÁN, E. B.; BOLCH, W. E.; HUSTON, T. E.; RAJON, D. A.; HUH, C.; BOLCH, W. E.
Uncertainties in Electron-Absorbed Fractions and Lung Doses From Inhaled Beta-Emitters
Health Physics **88**(1)37-47, 2005

[FEA 91] FEARN, D. H.; NEBENZAHL, E.
On the Maximum Likelihood Ratio Method of Deciding Between the Weibull and Gamma Distributions
Communications in Statistics – Theory and Methods **20**(2)579-593, 1991

[FEL 68] FELLER, W.
An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Volume I (Third Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 1968

[FEL 71] FELLER, W.
An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Volume II (Second Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 1971

[FER 96] FERSON, S.
What Monte Carlo Methods Cannot Do
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)990-1007, 1996

[FER 03] FERSON, S.; KREINOVICH, V.; GINZBURG, L.; MYERS, D. S.; SENTZ, K.
Constructing Probability Boxes and Dempster-Shafer Structures
Report SAND2002-4015, Sandia National Laboratories, January 2003

[FER 04] FERSON, S.; NELSEN, R. B.; HAJAGOS, J.; BERLEANT, D. J.; ZHANG, J.; TUCKER, W. T.; GINZBURG, L. R.; OBERKAMPF, W. L.
Dependence in probabilistic modeling, Dempster-Shafer theory, and probability bounds analysis
Report SAND2004-3072, Sandia National Laboratories, October 2004

[FER 05] FERSON, S.
Bayesian methods in risk assessments (Technical Report)
Applied Biomathematics, Setauket, New York, 2005

[FER 06] FERSON, S.; TUCKER, W. T.
Sensitivity analysis using probability bounding
Reliability Engineering & System Safety **91**(10-11)1435-1442, 2006

[FERM 05] FERMANIAN, J.-D.
Goodness-of-fit tests for copulas
Journal of Multivariate Analysis **95**(1)119-152, 2005

[FIE 05] DR. FIELITZ UMWELTANALYSEN
Untersuchungen zum Verhalten von Radiocäsium in Wildschweinen und anderen Biomedien des Waldes
Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-2005-675

[FIL 10] FILIPSSON, M.; ÖBERG, T.; BERGBÄCK, B.
Variability and Uncertainty in Swedish Exposure Factors for Use in Quantitative Exposure Assessments
Risk Analysis (Online), August 17, 2010

[FIN 74] DE FINETTI, B.
Theory of Probability (Vol. 1)
Wiley, New York, 1974

[FIO 01] FIORI, A.
The Relative Dispersion and Mixing of Passive Solutes in Transport in Geologic Media
Transport in Porous Media **42**(1-2)69-83, 2001

[FISH 22] FISHER, R. A.
On the Mathematical Foundations of Theoretical Statistics
Philisophical Transactions of the Royal Society **A, 222**, 309-368, 1922

[FISH 54] FISHER, R. A.
Statistical Methods for Research Workers (Twelfth Edition – Revised)
Hafner Publishing Company Inc., New York, 1954

[FKE 99A] FORSCHUNGSINSTITUT FÜR KINDERERNÄHRUNG
Wasseraufnahme von Säuglingen und Kleinkindern der DONALD-Studie (unveröffentlichte Datenauswertung), Dortmund, 26.10.1999

[FKE 99B] FORSCHUNGSINSTITUT FÜR KINDERERNÄHRUNG
Wasseraufnahme von Kindern und Jugendlichen der DONALD-Studie (unveröffentlichte Datenauswertung), Dortmund, 03.11.1999

[FLY 04] FLYNN, M. R.
A Stochastic Differential Equation for Exposure Yields a Beta Distribution
Annals of Occupational Hygiene **48**(5)491-497, 2004

[FLY 06] FLYNN, M. R.
Fitting human exposure data with the Johnson S_B distribution
Journal of Exposure Science and Environmental Epidemiology **16**(1)56-62, 2006
(Corrigendum: **16**(4)385, 2006)

[FOL 78] FOLKS, J. L.; CHHIKARA, R. S.
The Inverse Gaussian Distribution and Its Statistical Application – A Review
Journal of the Royal Statistical Society, Series **B 40**(3)263-289, 1978

[FOR 11] FORBES, C.; EVANS, M.; HASTINGS, N.; PEACOCK, B.
Statistical Distributions (Fourth Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 2011

[FRA 79] FRANK, M. J.
On the simultaneous associativity of F(x ,y) and x + y - F(x y)
Aequationes Methematicae **19**(1)194-226, 1979

[FRAH 05] FRAHM, G.; JUNKER, M.; SCHMIDT, R.
Estimating the tail-dependence coefficient: Properties and pitfalls
Insurance: Mathematics and Economics **37**(1)80-100, 2005

[FRED 07] FREDRICKS, G. A.; NELSEN, R. B.
On the relationship between Spearman's rho and Kendall's tau for pairs of continuous random variables
Journal of Statistical Planning and Inference **137**(7)2143-2150, 2007

[FREY 92] FREY, H. C.
Quantitative Analysis of Uncertainty and Variability in Environmental Policy Making
American Association for the Advancement of Science, Directorate for Science and Policy Programs
Washington, D. C., 1992

[FREY 96] FREY, H. C.; RHODES, D. S.
Characterizing, Simulating, and Analyzing Variability and Uncertainty: An Illustration of Methods Using an Air Toxics Emissions Example
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)762-797, 1996

[FREY 98] FREY, H. C.; RHODES, D. S.
Characterization and Simulation of Uncertain Frequncy Distributions: Effects of Distribution Choice, Variability, Uncertainty, and Parameter Dependence
Human and Ecological Risk Assessment **4**(2)423-468, 1998

[FREY 99] FREY, H. C.; BURMASTER, D. E.
Methods for Characterizing Variability and Uncertainty: Comparison of Bootstrap Simulation and Likelihood-Based Approaches
Risk Analysis **19**(1)109-130, 1999

[FREY 02] FREY, H. C.; PATIL, S. R.
Identification and Review of Sensitivity Analysis Methods
Risk Analysis **22**(3)553-578, 2002

[FRI 06] FRITSCH, P.
Uncertainties in Aerosol Deposition Within the Respiratory Tract Using the Icrp 66 Model: A Study in Workers
Health Physics **90**(2)114-126, 2006

[FRO 00] FROHMBERG, E.; GOBLE, R.; SANCHEZ, V.; QUIGLEY, D.
The Assessment of Radiation Exposures in Native American Communities from Nuclear Weapons Testing in Nevada
Risk Analysis **20**(1)101-111, 2000

[FUSS 10] FUSS, M.; MUÑOZ, A.; OLLER, J. C.; BLANCO, F.; HUERGA, C.; TÉLLEZ, M.; GARCÍA, G.
Modelling electron and photon interactions for applications in brachytherapy
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[GAL 08] GALSON SCIENCES LTD
Dounreay New LLW Facilities – RSA93 Environmental Safety Case 2008
Report No. LLW (07) S2/197, Issue 1, Draft, March 2008

[GAR 10] GARRICK, B. J.; STETKAR, J. W.; BEMBIA, P. J.
Monte Carlo Estimation of Radiation Doses in Red Bone Marrow and Breast in Common Pediatric X-Ray Examinations
Risk Analysis **30**(8)1219-1230, 2010

[GEL 90] GELFAND, A. E.; SMITH, F. M.
Sampling-Based Approaches to Calculationg Marginal Densities
Journal of the American Statistical Association **85**(410)398-409, 1990

[GEL 99] GELFAND, A. E.; SAHU, S. K.
Identifiability, Improper Priors, and Gibbs Sampling for Generalized Linear Models
Journal of the American Statistical Association **94**(445)247-253, 1999

[GELH 83] GELHAR, L. W.; AXNESS, C. L.
Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers
Water Resources Research **19**(1)161-180, 1983

[GELH 92] GELHAR, L. W.; WELTY, C.; REHFELDT, K. R.
A Critical Review of Data on Field-Scale Dispersion in Aquifers
Water Resources Research **28**(7)1955-1974, 1992

[GELM 95] GELMAN, A. B.; CARLIN, J. S.; STERN, H. S.; RUBIN, D. B.
Bayesian Data Analysis
Chapman & Hall/CRC, 1995

[GEM 84] GEMAN, S.; GEMAN, D.
Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Image
IEEE Transactions of Pattern Analysis and Machine Intelligence **6**, 721-741, 1984

[GEN 86] GENEST, C.; MACKAY, R. J.
Copules archimédiennes et familles de lois bidimensionnelles dont les marges sont données
The Canadian Journal of Statistics **14**(2)145-159, 1986

[GEN 87] GENEST, C.
Frank's family of bivariate distributions
Biometrika **74**(3)549-555, 1987

[GEN 93] GENEST, C.; RIVEST, L.-P.
Statistical Inference Procedures for Bivariate Archimedian Copulas
Journal of the American Statistical Association **88**(423)1034-1043, 1993

[GEN 95] GENEST, C.; GHOUDI, K.; RIVEST, L.-P.
A semiparametric estimation procedure of dependence parameters in multivariate families of distributions
Biometrika **82**(3)543-552, 1995

[GEN 01] GENEST, C.; RIVEST, L.-P.
On the multivariate probability integral transformation
Statistics & Probability Letters **53**(4)391-399, 2001

[GEN 06] GENEST, C.; QUESSY, J.-F.; RÉMILLARD, B.
Goodness-of-fit Procedures for Copula Models Based on the Probability Integral Transformation
The Scandinavian Journal of Statistics **33**(2)337-366, 2006

[GEN 07A] GENEST, C.; NESLEHOVA, J.
A Primer on Copulas for Count Data
Astin Bulletin **37**(2)475-515, 2007

[GEN 07B] GENEST, C.; FAVRE, A.-C.
Everything You Always Wanted to Know about Copula Modelling but Were Afraid to Ask
Journal of Hydrologic Engineering **12**(4)347-368, 2007

[GEN 08] GENEST, C.; RÉMILLARD, B.
Validity of the parametric bootstrap for goodness-of-fit testing in semiparametric models
Annales de l'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques **44**(6)1096-1127, 2008

[GEN 09] GENEST, C.; RÉMILLARD, B.; BEAUDOIN, D.
Goodness-of-fit tests for copulas: A review and a power study
Insurance: Mathematics and Economics **44**(2)199-213, 2009

[GIA 08] GIALOUSIS, G. I.; YAKOUMAKIS, E. N.; DIMITRIADIS, A. I.; PAPOULI, Z. K.; YAKOUMAKIS, N. E.; TSALAFOUTAS, I. A.; PAPADOPOULOU, D. I.
Monte Carlo Estimation of Radiation Doses in Red Bone Marrow and Breast in Common Pediatric X-Ray Examinations
Health Physics **95**(3)331-336, 2008

[GIB 03] GIBBONS, J. D.; CHAKRABORTI, S.
Nonparametric Statistical Inference (Fourth Edition)
Marcel Dekker, Inc., New York, Basel, 2003

[GIBB 11] GIBBS, B. P.
Advanced Kalman Filtering, Least-Squares and Modeling: A Practical Handbook
John Wiley & Sons, Inc., 2011

[GIG 07] GIGASE, Y.
Uncertainty Analysis of the Radiological Characteristics of Radioactive Waste using a Method Based on Log-Normal Distributions
Proceedings of the ICEM Conference 2007

[GIL 87] GILBERT, R. O.
Statistical Methods for Environmental Pollution Monitoring
John Wiley & Sons, 1987

[GIL 96] GILBERT, R. O.; MART, E. I.; DENHAM, D. H.; STRENGE, D. L.; MILEY, T. B.
Uncertainty of Historical Measurements of ^{131}I in Hanford-Area Vegetation
Health Physics **70**(2)160-170, 1996

[GILB 96] GILBERT, E. S.; FIX, J. J.; BAUMGARTNER, W. V.
An Approach to Evaluating Bias and Uncertainty in Estimates of External Dose Obtained from Personal Dosimeters
Health Physics **70**(3)336-345, 1996

[GILK 92] GILKS, W. R.; WILD, P.
Adaptive Rejection Sampling for Gibbs Sampling
Journal of the Royal Statistical Society, Series **C 41**(2)337-348, 1992

[GILK 94] GILKS, W. R.; ROBERTS, G. O.; GEORGE, E. I.
Adaptive Direction Sampling
Journal of the Royal Statistical Society, Series **D 43**(1)179-189, 1994

[GILK 98] GILKS, W. R.; ROBERTS, G. O.; SAHU, S. K.
Adaptive Markov Chain Monte Carlo through Regeneration
Journal of the American Statistical Association **93**(443)1045-1054, 1998

[GILL 96] GILLESPIE, D. T.
Exact numerical simulation of the Ornstein-Uhlenbeck process and its integral
Physical Review E **54**(2)2084-2091, 1996

[GNE 86] GNEDENKO, B. V.; KOLMOGOROV, A. N.
Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables
Addison-Wesley Publishing Company, 1986

[GOLD 06] GOLDSTEIN, M.
Subjective Bayesian Analysis: Principles and Practice
Bayesian Analysis **1**(3)403-420, 2006

[GOOD 77] GOODWIN, G. C.; PAYNE, R. L.
Dynamic System Identification: Experiment Design and Data Analysis
Academic Press, Inc., New York, 1977

[GOR 98] GORENFLO, R.; MAINARDI, F.
Fractional calculus and stable probability distributions
Archives of Mechanics **50**(3)377-388, 1998

[GÖR 89] GÖRTZ, R.; GRAF, R.; KNAUP, A. G.
Strahlenexposition der Bevölkerung infolge der Freigabe von Eisenmetallschrott aus Kernkraftwerken zur schadlosen Verwertung. Brenk Systemplanung, Aachen, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz des BMU, BMU-1994-222

[GÖR 90] GÖRTZ, R.; GRAF, R.; KNAUP, A. G.
Untersuchung zur schadlosen Verwertung von Nichteisenmetallen. Brenk Systemplanung, Aachen, Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-1990-264

[GRE 20] GREENWOOD, M.; YULE, G. U.
An Inquiry into the Nature of Frequency Distributions Representative of Multiple Happenings with Particular Reference to the Occurrence of Multiple Attacks of Disease or of Repeated Accidents
Journal of the Royal Statistical Society **83**(2)255-279, 1920

[GREE 95] GREEN, P. J.
Reversible jump Markov chain Monte Carlo computation and Bayesian model determination
Biometrika **82**(4)711-732, 1995

[GREE 01] GREENLAND, S.
Sensitivity Analysis, Monte Carlo Risk Analysis, and Bayesian Uncertainty Assessment
Risk Analysis **21**(4)579-583, 2001

[GREG 05] GREGORY, P. C.
Bayesian Logical Data Analysis for the Physical Sciences
Cambridge University Press, 2005

[GRI 96] GRIFOLL, J.; COHEN, Y.
Contaminant migration in the unsaturated soil zone: the effect of rainfall and evapotranspiration
Journal of Contaminant Hydrology **23**(3)185-211, 1996

[GRS 04] BIESOLD, H.; ARTMANN, A.; BECKER, A.; BÜRGEL, A.
Abschätzung der Konservativität der Annahmen in der AVV zur Berechnung der Strahlenbelastung über den Ingestionspfad
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, 2004
Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-2004-646

[GRU 69] GRUBBS, F. E.
Prodedures for Detecting Outlying Observations in Samples
Technometrics **11**(1)1-21, 1969

[GRUB 10] GRUBER, V.; MARINGER, F. J.
Public exposure by natural radionuclides in drinking water – Models for effective dose assessment and implications to guidelines
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[GUP 99] GUPTA, R. D.; KUNDU, D.
Generalized exponential distributions
Australian & New Zealand Journal of Statistics **41**(2)173-188, 1999

[GUP 01] GUPTA, R. D.; KUNDU, D.
Generalized exponential distributions: Different methods of estimation
Journal of Statistical Computation and Simulation **69**(4)315-338, 2001

[GUP 07] GUPTA, R. D.; KUNDU, D.
Generalized exponential distribution: Existing results and some recent developments
Journal of Statistical Planning and Inference **137**(11)3537-3547, 2007

[GUY 03] GUYONNET, D.; BOURGINE, B.; DUBOIS, D.; FARGIER, H.; COME, B.; CHILES, J.-P.
Hybrid Approach for Addressing Uncertainty in Risk Assessments
Journal of Environmental Engineering **129**(1)68-78, 2003

[HAAS 97] HAAS, C. N.
Importance of Distributional Form in Characterizing Inputs to Monte Carlo Risk Assessments
Risk Analysis **17**(1)107-113, 1997

[HAAS 99] HAAS, C. N.
On Modeling Correlated Random Variables in Risk Assessment
Risk Analysis **19**(6)1205-1214, 1999

[HACK 06] HACK, C. E.
Bayesian analysis of physiologically based toxicokinetic and toxicodynamic models
Toxicology **221**(2-3)241-248, 2006

[HAE 05] HAENNI, R.
Shedding New Light on Zadeh's Criticism of Dempser's Rule of Combination
Proceedings of 8th International Conference on Information Fusion,
Philadelphia, USA, July 25 -29, 2005

[HAK 03] HAKAMI, A.; ODMAN, M. T.; RUSSEL, A. G.
High-Order, Direct Sensitivity Analysis of Multidimensional Air Quality Models
Environmental Science & Technology **37**(11)2442-2452, 2003

[HAM 02] HAMBY, D. M.
The Gaussian Atmospheric Transport Model and its Sensitivity to the Joint Frequency Distribution and Parametric Variability
Health Physics **82**(1)64-73, 2002

[HAM 93] HAMBY, D. M.
A Probabilistic Estimation of Atmospheric Tritium Dose
Health Physics **65**(1)33-40, 1993

[HAM 99] HAMBY, D. M.
Uncertainty of the Tritium Dose Conversion Factor
Health Physics **77**(3)291-297, 1999

[HAMM 99] HAMMIT, J. K; SHLYAKHTER, A. I.
The Expected Value of Information and the Probability of Surprise
Risk Analysis **19**(1)135-152, 1999

[HAN 05] HANNS, M.
Applied Fuzzy Arithmetic – An Introduction with Engineering Applications
Springer, 2005

[HAR 03] HARVEY, R. P.; HAMBY, D. M.; BENKE, R. R.
Age-Specific Uncertainty of the ^{131}I Ingestion Dose Conversion Factor
Health Physics **84**(3)334-343, 2003

[HAR 04] HARVEY, R. P.; HAMBY, D. M.; PALMER, T. S.
A Modified ICRP 66 Iodine Gas Uptake Model and its Parametric Uncertainty
Health Physics **87**(5)490-506, 2004

[HARR 09] HARRSION, J.
Biokinetic and dosimetric modelling in the estimation of radiation risks from internal emitters
Journal of Radiological Protection **29**(2A)A81-A105, 2009

[HAS 70] HASTINGS, W. K.
Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications
Biometrika **57**(1)97-109, 1970

[HAT 94A] HATTIS, D.; SILVER, K.
Human Interindividual Variability - A Major Source of Uncertainty in Assessing Risks for Noncancer Health Effects
Risk Analysis **14**(4)421-431, 1994

[HAT 94B] HATTIS, D.; BURMASTER, D. E.
Assessment of Variability and Uncertainty Distributions for Practical Risk Analyses
Risk Analysis **14**(5)713-730, 1994

[HAT 99] HATTIS, D.; BANATI, P.; GOBLE, R.; BURMASTER, D. E.
Human Interindividual Variability in Parameters Related to Health Risks
Risk Analysis **19**(4)711-726, 1999

[HAT 01] HATTIS, D.; RUSS, A.; GOBLE, R.; BANATI, P.; CHU, M.
Human Interindividual Variability in Susceptibility to Airborne Particles
Risk Analysis **21**(4)585-599, 2001

[HATO 10] HATO, S.; HOMMA, T.
Uncertainty Analysis of Internal Dosimetry using Expert Judgment and Probabilistic Inversion
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[HEL 94] HELTON, J. C.
Treatment of Uncertainty in Performance Assessments for Complex Systems
Risk Analysis **14**(4)483-511, 1994

[HEL 96] HELTON, J. C.; BURMASTER, D. E. (EDS.)
Special issue on treatment of aleatory and epistemic uncertainty
Reliable Engineering and System Safety **54**(2-3)91-262, 1996

[HEL 99A] HELTON, J. C.
Uncertainty and sensitivity analysis in performance assessment for the Waste Isolation Pilot Plant
Computer Physics Communications **117**(1-2)156-180, 1999

[HEL 99B] HELTON, J. C.; ANDERSON, D. R.; JOW, H.-N.; MARIETTA, M. G.; BASABILVAZO, G.
Performance Assessment in Support of the 1996 Compliance Certification Application for the Waste Isolation Pilot Plant
Risk Analysis **19**(5)959-986, 1999

[HEL 02A] HELTON, J. C.; DAVIS, F. J.
Illustration of Sampling-Based Methods for Uncertainty and Sensitivity Analysis
Risk Analysis **22**(3)591-622, 2002

[HEL 02B] HELTON, J. C.; DAVIS, F. J.
Latin Hypercube Sampling and the Propagation of Uncertainty in Analyses of Complex Systems
Report SAND2001-0417, Sandia National Laboratories, 2002
Reliable Engineering and System Safety **81**(1)23-69, 2003

[HEL 06] HELTON, J. C.; JOHNSON, J. D.; SALLABERRY, C. J.; STORLIE, C. B.
Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis
(Report SAND2006-2901, Sandia National Laboratories, 2006)
Reliable Engineering and System Safety **91**(10-11)1175-1209, 2006

[HEL 08] HELTON, J. C.; JOHNSON, J. D.; OBERKAMPF, W. L; SALLABERRY, C. J.
Representation of Analysis Results Involving Aleatory and Epistemic Uncertainty
Report SAND2008-4379, Sandia National Laboratories, 2008

[HELI 97] HELING, R.
LAKECO: Modelling the transfer of radionuclides in a lake ecosystem
Radiation Protection Dosimetry **73**(1-4)191-194, 1997

[HER 99] HERTWICH, E. G.; MCKONE, T. E.; PEASE, W. S.
Parameter Uncertainty and Variability in Evaluative Fate and Exposure Models
Risk Analysis **19**(6)1193-1204, 1999

[HIG 98] HIGDON, D. M.
Auxiliary Variable Methods for Markov Chain Monte Carlo with Applications
Journal of the American Statistical Association **93**(442)585-595, 1998

[HIL 00] HILFER, R. (ED.)
Applications of Fractional Calculus in Physics
World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000

[HIN 94] HINTON, T. G.
Sensitivity Analysis of Ecosys-87: An Emphasis on the Ingestion Pathway as a Function of Radionuclide and Type of Deposition
Health Physics **66**(5)513-531, 1994

[HOET 09] HOETING, J. A.
The importance of accounting for spatial and temporal correlation in analyses of ecological data
Ecolocical Applications **19**(3)574-577, 2009

[HOF 07] HOFER, E.
Hypothesis Testing, Statistical Power, and Confidence Limits in the Presence of Epistemic Uncertainty
Health Physics **92**(3)226-235, 2007

[HOF 08] HOFER, E.
How To Account for Uncertainty due to Measurement Errors in an Uncertainty Analysis Using Monte Carlo Simulation
Health Physics **95**(3)277-290, 2008

[HOFF 94] HOFFMAN, F. O.; HAMMONDS, J. S.
Propagation of Uncertainty in Risk Assessments: The Need to Distinguish Between Uncertainty Due to Lack of Knowledge and Uncertainty Due to Variability
Risk Analysis **14**(5)707-712, 1994

[HOFF 99] HOFFMAN, F. O.; KAPLAN, S.
Beyond the Domain of Direct Observation: How to Specify a Probability Distribution that Represents the “State of Knowledge” About Uncertain Inputs
Risk Analysis **19**(1)131-134, 1999

[HOL 09] HOLMES, K. J.; GRAHAM, J. A.; MCKONE, T.; WHIPPLE, C.
Regulatory Models and the Environment: Practice, Pitfalls, and Prospects
Risk Analysis **29**(2)159-170, 2009

[HOLL 99] HOLLANDER, M.; WOLFE, D. A.
Nonparametric Statistical Methods
John Wiley & Sons, 1999

[HOM 96] HOMMA, T.; SALTELLI, A.
Importance measures in global sensitivity analysis of nonlinear Models
Reliability Engineering & System Safety **52**(1)1-17, 1996

[HSU 03] HSU, K.-C.
The influence of log-conductivity autocovariance structure on macrodispersion coefficients
Journal of Contaminant Hydrology **65**(1-2)65-77, 2003

[HUA 06] HUARD, D.; ÉVIN, G.; FAVRE, A.-C.
Bayesian Copula Selection
Computational Statistics & Data Analysis **51**(2)809-822, 2006

[HUR 89] HURVICH, C. M.; TSAI, C-L.
Regression and time series model selection in small samples
Biometrika **76**(2)297-307, 1989

[HURN 07] HURN, A. S.; JEISMAN, J. I.; LINDSAY, K. A.
Seeing the Wood for the Trees: A Critical Evaluation of Methods to Estimate the Parameters of Stochastic Differential Equations
Journal of Financial Econometrics **5**(3)390-455, 2007

[HUS 03] HUSTON, T. E.; FARFÁN, E. B.; BOLCH, W. E.; BOLCH, W. E.
Influences of Parameter Uncertainties within the ICRP-66 Respiratory Tract Model: A Parameter Sensitivity Analysis
Health Physics **85**(5)553-566, 2003

[HWA 97] HWANG, D.; BYUN, D. W.; ODMAN, M. T.
An Automatic Differentiation Technique for Sensitivity Analysis of Numerical Advection Schemes in Air Quality Models
Atmospheric Environment **31**(6)879-888, 1997

[HZG 12] HELMHOLTZ-ZENTRUM GEESTHACHT, ISTITUT FÜR KÜSTENFORSCHUNG
Abflussdaten der Elbe bei Neu-Darchau (Tagesmittelwerte vom 01.11.1874 bis 13.06.2012, Quelle: BfG Koblenz, WSA Lauenburg)
coast.gkss.de/staff/kappenberg/elbe/abfluss/elbe.abfluss, 13.06.2012

[IAEA 89] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Evaluation the Reliability of Predictions Made Using Environmental Transfer Models
Safety Series No. 100; Vienna, 14 November 1989

[IAEA 94] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Handbook of Parameter Values for the Prediction of Radionuclide Transfer in Temperate Environments
Technical Report Series No. 364; Vienna, 1994

[IAEA 00] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Modelling of the transfer of radiocaesium from deposition to lake ecosystems
Report of the VAMP Aquatic Working Group; IAEA-TECDOC-1143
Vienna, March 2000

[IAEA 01] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Generic Models for Use in Assessing the Impact of Discharges of Radioactive Substances to the Environment
Safety Reports Series No. 19; Vienna, 2001

[IAEA 02] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Modelling the migration and accumulation of radionuclides in forest ecosystems
Report of the Forest Working Group of the Biosphere Modelling and Assessment (BIOMASS) Programme, Theme 3, IAEA-BIOMASS-1
Vienna, August 2002

[IAEA 03A] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Modelling the transfer of radionuclides to fruit, Report of the Fruits Working Group of BIOMASS Theme 3, IAEA-BIOMASS-5
Vienna, July 2003

[IAEA 03B] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
"Reference Biospheres" for solid radioactive waste disposal; Report of BIOMASS Theme 1 of the BIOsphere Modelling and ASSessment (BIOMASS) Programme, IAEA-BIOMASS-6
Vienna, July 2003

[IAEA 04A] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities
Vienna, 2004

[IAEA 04B] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Application of the Concepts of Exclusion, Exemption and Clearance
Safety Guide RS-G-1.7, Vienna, 2004

[IAEA 04C] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Testing of environmental transfer models using data from the remediation of a radium extraction site; Report of the Remediation Assessment Working Group of BIOMASS Theme 2; IAEA-BIOMASS-7
Vienna, March 2004

[IAEA 05] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Derivation of Activity Concentration Values for Exclusion, Exemption and Clearance
Safety Reports Series No. 44, Vienna, 2005

[IAEA 09] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Quantifucation of Radionuclide Transfer in Terrestrial and Freshwater Environments for Radiological Assessments, IAEA-TECDOC-1616
Vienna, May 2009

[IAEA 10] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Handbook of Parameter Values for the Prediction of Radionuclide Transfer in Terrestrial and Freshwater Environments
Technical Report Series No. 472, Vienna, 2010

[IAEA 12] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY
Modelling Radiation Exposure and Radionuclide Transfer for Non-human Species
Report of the Biota Working Group of EMRAS Theme 3 (to be published)
www-ns.iaea.org/projects/emras/draft-reports; last update: February 24, 2012

[ICRP 93] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION PROTECTION
Protection Against Radon-222 at Home and at Work,
Annals of the ICRP, Vol. 23 No 2, ICRP Publication 65, 1993

[ICRP 98] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION PROTECTION
Genetic Susceptibility to Cancer
Annals of the ICRP, Vol. 28, No. 1-2, ICRP Publication 79, 1998

[ICRP 02] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION PROTECTION
Basic anatomical and physiological data for use in radiological protection
Annals of the ICRP, Vol. 32, No. 3-4, ICRP Publication 89, 2002

[ICRP 05] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION PROTECTION
Low-dose Extrapolation of Radiation-related Cancer Risk
Annals of the ICRP, Vol. 35, No. 4, ICRP Publication 99, 2005

[ICRP 07] INTERNATIONAL COMMISSION ON RADIATION PROTECTION
The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection
Annals of the ICRP, Vol. 37, 2-4, ICRP Publication 103, 2007
(deutsche Ausgabe: [BFS 09])

[IEFS 03] INSTITUTE OF EUROPEAN FOOD STUDIES
Guidelines on the application of probabilistic modelling to the estimation of exposure to food chemicals (Prepared by the Monte Carlo project); 2003

[IMAN 82] IMAN, R. L.; CONOVER, W. J.
A Distribution-Free Approach to Inducing Rank Correlation among Input Variables
Communications in Statistics - Simulation and Computation **11**(3)311-334, 1982

[IMAN 87] IMAN, R. L.
A Matrix-Based Approach to Uncertainty and Sensitivity Analysis for Fault Trees
Risk Analysis **7**(1)21-33, 1987

[IMAN 88] IMAN, R. L.; HELTON, J. C.
An Investigation of Uncertainty and Sensitivity Analysis Techniques for Computer Models
Risk Analysis **8**(1)71-89, 1988

[IMAN 90] IMAN, R. L.; HORA, S. C.
A Robust Measure of Uncertainty Importance for Use in Fault Tree System Analysis
Risk Analysis **10**(3)401-406, 1990

[INS 00] INSUA, D. R.; RUGGERI, F.; MARTIN, J.
Bayesian Sensitivity Analysis, in [SAL 00A], pp. 225-244

[ISER 11] ISERMANN, R.; MÜNCHHOF, M.
Identification of Dynamic Systems – An Introduction with Applications
Springer, Berlin, Heidelberg, 2011

[ISO 08A] INTERNATIONAL STANDARDISATION ORGANIZATION
Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement
Uncertainty of measurement - Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement, ISO/IEC Guide 98-3:2008

[ISO 08B] ISO GUIDE TO THE EXPRESSION OF UNCERTAINTY IN MEASUREMENT
(Geneva: ISO) (1993), corrected reprint (1995) and ISO, Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM) - Supplement 1: Propagation of Distributions Using a Monte Carlo Method, JCGM 101:2008

[ISU 00] ISUKAPALLI, S. S.; ROY, A.; GEORGOPOULOS, P. G.
Efficient Sensitivity/Uncertainty Analysis Using the Combined Stochastic Response Surface Method and Automated Differentiation: Application to Environmental and Biological Systems
Risk Analysis **20**(5)591-602, 2000

[JAC 72] JACOBI, W.
Activity and Potential Alpha-Energy of Rn-222 and Rn-220 Daughters in Different Air Atmospheres
Health Physics **22**(5)441-450, 1972

[JAC 98] JACOBS, H. L.; KAHN, H. D.; STRALKA, K. A.; PHAN, D. B.
Estimates of per Capita Fish Consumption in the U.S. Based on the Continuing Survey of Food Intake by Individuals (CSFII)
Risk Analysis **18**(3)283-291, 1998

[JAC 10] JACOBS, K.
Stochastic Processes for Physicists – Understanding Noisy Systems
Cambridge University Press, 2010

[JACK 68] JACKSON, O. A. Y.
Some results in tests of separate families of hypotheses
Biometrika **55**(3)355-363, 1968

[JACO 09] JACOB, P.; RÜHM, W.; WALSH, L.; BLETTNER, M.; HAMMER, G.; ZEEB, H.
Is cancer risk of radiation workers larger than expected?
Occupational and Environmental Medicine **66**(12)789-796, 2009

[JANG 09] JANG, H.-K.; KIMA. J.-Y.; LEE, J.-K.
Radiological risk assessment for field radiography based on two dimensional Monte Carlo analysis
Applied Radiation and Isotopes **67**(7-8)1521-1525, 2009

[JAY 03] JAYNES, E. T.; EDITED BY BRETTHORST, G. L.
Probability Theory: The Logic of Science
Cambridge University Press, 2003

[JAZ 70] JAZWINSKI, A. H.
Stochastic Processes and Filtering Theory
Academic Press, Inc., New York, London, 1970

[JEFF 61] JEFFREYS, H.
Theory of Probability
Oxford University Press, 1961

[JEFF 61] JEFFREYS, H.
Theory of Probability
Oxford University Press, 1961

[JOE 93] JOE, H.
Parametric Families of Multivariate Distributions with Given Margins
Journal of Multivariate Analysis **46**(2)262-282, 1993

[JOE 97] JOE, H.
Multivariate Models and Dependence Concepts
Chapman&Hall/CRS, London, New York, 1997

[JOE 06] JOE, H.
Discussion of "Copulas: Tales and facts", by Thomas Mikosch
Extremes **9**(1)37-41, 2006

[JOH 94] JOHNSON, N. L.; KOTZ, S.; BALAKRISHNAN, N.
Continuous Univariate Distributions, Volume 1 (Second Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 1994

[JOH 95] JOHNSON, N. L.; KOTZ, S.; BALAKRISHNAN, N.
Continuous Univariate Distributions, Volume 2 (Second Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 1995

[JOH 97] JOHNSON, N. L.; KOTZ, S.; BALAKRISHNAN, N.
Discrete Multivariate Distributions
John Wiley & Sons, Inc., 1997

[JOH 05] JOHNSON, N. L.; KEMP, A. W.; KOTZ, S.
Univariate Discrete Distributions (Third Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 2005

[JOHN 97] JOHNSON, D.
The Triangular Distribution as a Proxy for the Beta Distribution in Risk Analysis
Journal of the Royal Statistical Society, Series **D 46**(3)387-398, 1997

[JON 09] JONES, M. C.
Kumaraswamy's distribution: A beta-type distribution with some tractability advantages
Statistical Methodology **6**(1)70-81, 2009

[JONG 06] DE JONG, P.; VAN DIJK, W.; VAN DER GRAAF, E. R.; DE GROOT, T. J. H.
National Survey on the Natural Radioactivity and ^{222}Rn Exhalation Rate of Building Materials in the Netherlands
Health Physics **91**(3)200-210, 2006

[KAI 08] KAISER, J. C.; GERING, F.; ANDERSSON, K.; CHARNOCK, T.; HOE, S.; JACOBSEN, L. H.
Correction of model predictions for the radioactive contamination of the environment with data assimilation; in: Strand, P.; Brown, J.; Joelle, T. (Eds.), International Conference on Radioecology and Environmental Radioactivity, pages 130-133
Bergen, Norway, 2008

[KAL 60] KALMAN, R. E.
A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems
Transactions of the ASME Journal of Basic Engineering Series D **82**(1)35-45, 1960

[KAL 61] KALMAN, R. E.; BUCY, R. S,
New Results in Linear Filtering and Prediction Theory
Transactions of the ASME Journal of Basic Engineering Series D **83**(1)95-108, 1961

[KALI 01] KALINICH, D. A.; WILSON, M. L.
Effects of Uncertainty and Spatial Variability on Seepage into Drifts in the Yucca Mountain Total System Performance Assessment Model
Proceedings of the ICEM Conference 2001

[KAM 02] KAMBOJ, S.; LEPOIRE, D.; YU, C.
External Exposure Model in the RESRAD Computer Code
Health Physics **82**(6)831-839, 2002

[KAPP 82] KAPPENMAN, R. F.
On a Method for Selecting a Distributional Model
Communications in Statistics – Theory and Methods **11**(6)663-672, 1982

[KAR 09] KARANKI, D. R.; KUSHWAHA, H. S.; VERMA, A. K.; AJIT, S.
Uncertainty Analysis Based on Probability Bounds (P-Box) Approach in Probabilistic Safety Assessment
Risk Analysis **29**(5)662-675, 2009

[KASS 96] KASS, R. E.; WASSERMAN, L.
The Selection of Prior Distributions by Formal Rules
Journal of the American Statistical Association **91**(435)1343-1370, 1996

[KATO 02] KATO, K.; AMANO, O.; UEDA, H.; IKEDA, T.; YOSHIDA, H.; TAKASE, H.
Hybrid Probabilistic and Possibilistic Safety Assessment: Methodology and Application
JSME International Journal, Series B **45**(3)626-630, 2002

[KATO 03] KATO, K.; MAEDA, T.; TAKASE, H.
Evaluation of Uncertainty associated with Spatially Variable Properties
Proceedings of the ICEM Conference 2003

[KEAT 90] KEATING, J. P.; GLASER, R. E.; KETCHUM, N. S.
Testing Hypotheses about the Shape Parameter of a Gamma Distribution
Technometrics **32**(1)67-82, 1990

[KEEP 95] KEEPING, E. S.
Introduction to Statistical Inference
Dover Publications, Inc., New York, 1995

[KEES 11] KEESMAN, K. J.
System Identification – An Introduction
Springer, London, 2011

[KEN 04] KENNEDY, C. A.
Interpretation of Monte Carlo Simulations Using Parameter Space Plots
Risk Analysis **24**(2)437-442, 2004

[KENN 09] KENNEDY, M.; HART, A.
Bayesian Modeling of Measurement Errors and Pesticide Concentration in Dietary Risk Assessments
Risk Analysis **29**(10)1427-1442, 2009

[KENT 04] KENTEL, E.; ARAL, M. M.
Probabilistic-fuzzy health risk modeling
Stochastic Environmental Research and Risk Assessment **18**(5)324-338, 2004

[KENT 05] KENTEL, E.; ARAL, M. M.
2D MonteCarlo versus 2D fuzzy Monte Carlo health risk assessment
Stochastic Environmental Research and Risk Assessment **19**(1)86-96, 2005

[KER 93] KERCHER, J. R.; ROBISON, W. L.
Uncertainties in Predicted Radionuclide Body Burdens and Doses from Discrete Stochastic Source Terms
Health Physics **65**(1)47-68, 1993

[KES 99] KESSLER, J. H.; MCGUIRE, R. K.
Total System Performance Assessment for Waste Disposal Using a Logic Tree Approach
Risk Analysis **19**(5)915-931, 1999

[KESS 00] KESSLER, M.
Simple and Explicit Estimating Functions for a Discretely Observed Diffusion Process
The Scandinavian Journal of Statistics **27**(1)65-82, 2000

[KING 93] KINGMAN, J. F. C.
Poisson Processes
Oxford University Press, 1993

[KIO 04] KIOUTSIOUKIS, I.; TARANTOLA, S.; SALTELLI, A.; GATELLI, D.
Uncertainty and global sensitivity analysis of road transport emission estimates
Atmospheric Environment **38**(38)6609-6620, 2004

[KIR 98] KIRCHNER, G.
Applicability of compartmental models for simulating the transport of radionuclides in soil
Journal of Environmental Radioactivity **38**(3)339-352, 1998

[KIR 99] KIRCHNER, G.; PETERSON, S. R.; BERGSTRÖM, U.; BUSHELL, S.; DAVIS, P.; VILISTOVIC, V.; HINTON, T. G.; KRAJEWSKI, P.; RIESEN, T.; DE HAAG, P. U.
Effect of user interpretation on uncertainty estimates: examples from the air-to-milk transfer of radiocesium
Journal of Environmental Radioactivity **42**(2-3)177-190, 1999

[KIR 08] KIRCHNER, G.; STEINER, M.
Uncertainties in radioecological assessment models – Their nature and approaches to reduce them
Applied Radiation and Isotopes **66**(11)1750-1753, 2008

[KIR 09] KIRCHNER, G.; STEINER, M.; ZÄHRINGER, M.
A new approach to estimate nuclide ratios from measurements with activities close to background
Journal of Environmental Radioactivity **100**(6)484-488, 2009

[KIRC 07] KIRCHGÄSSNER, G.; WOLTERS, J.
Introduction to Modern Time Series Analysis
Springer, 2007

[KIS 04] KIS, Z.; EGED, K.; VOIGT, G.; MECKBACH, R.; MÜLLER, H.
Modeling of an Industrial Environment: External Dose Calculations Based on Monte Carlo Simulations of Photon Transport
Health Physics **86**(2)161- 173, 2004

[KIST 03] KISTINGER, S.
Unsichere Größen bei der Abschätzung von Strahlenexpositionen durch Altablagerungen: Grundwasserpfad; siehe [SSK 03], S. 345-364

[KLA 96] KLAFTER, J.; SHLESINGER, M. F.; ZUMOFEN, G.
Beyond Brownian Motion
Physics Today **49**(2)33-39, 1996

[KLE 99A] KLEIJNEN, J. P. C.; HELTON; J. C.
Statistical analyses of scatterplots to identify important factors in large-scale simulations, 1: Review and comparison of techniques
Reliability Engineering & System Safety **65**(2)147-185, 1999

[KLE 99B] KLEIJNEN, J. P. C.; HELTON; J. C.
Statistical analyses of scatterplots to identify important factors in large-scale simulations, 2: Robustness of techniques
Reliability Engineering & System Safety **65**(2)187-197, 1999

[KLI 03] ARBEITSKREIS KLIWA (KLIMAVERÄNDERUNG UND WASSERWIRTSCHAFT); LANDESAMT FÜR UMWELTSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG; BAYRISCHES LANDESAMT FÜR WASSERWIRTSCHAFT; DEUTSCHER WETTERDIENST (HRSG.)
Langzeitverhalten der mittleren Abflüsse in Baden-Württemberg und Bayern – KLIWA-Projekt A 2.1.2 "Analyse zum Langzeitverhalten der mittleren jährlichen und monatlichen Abflüsse, KLIWA-Berichte Heft 3, 2003

[KLOE 95] KLOEDEN, P. E.; PLATEN, E.
Numerical Solution of Stochastic Differential Equations (Second Edition)
Springer, 1995

[KNU 88] KNUTSON, E. O.
Modeling Indoor Concentrations of Radon's Decay Products
in: Nazaroff, W.W.; Nero, A.V. (Eds.); Radon and its decay products in indoor air, S. 161-202
Wiley Interscience, New York, 1988

[KOD 76] KODELL, R. L.; MATIS, J. H.
Estimating the Rate Constants in a Two-compartment Stochastic Model
Biometrics **32**(2)377-390, 1976

[KOI 00] KOIZUMI, A.; KATAHIRA, M.; SEKIGUSHI, T.; SHIOTA, Y.
Log-Normality of Air Contaminants and Its Hidden Characteristics Useful for Industrial Hygiene Technology
Journal of Occupational Health **42**(6)281-283, 2000

[KOL 33] KOLMOGOROFF, A.
Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung
Julius Springer Verlag, Berlin. 1933

[KOL 41] KOLMOGOROFF, A.
Confidence Limits for an Unknown Distribution Function
The Annals of Mathematical Statistics **12**(4)461-463, 1941

[KOS 01] KOSAKOWSKI, G.; BERKOWITZ, B.; SCHER, H.
Analysis of field observations of tracer transport in a fractured till
Journal of Contaminant Hydrology **47**(1)29-51, 2001

[KOTZ 00A] KOTZ, S.; NADARAJAH, S.
Extreme Value Distributions – Theory and Applications
Imperial College Press, London, 2000

[KOTZ 00B] KOTZ, S.; BALAKRISHNAN, N.; JOHNSON, N. L.;
Continuous Multivariate Distributions, Volume 1 (Second Edition)
John Wiley & Sons, Inc., 2000

[KRA 05] KRAHENBUHL, M. P.; BESS, J. D.; WILDE, J. L.; VOSTROTIN, V. V.; SUSLOVA, K. G.; KHOKHRYAKOV, V. F.; SLAUGHTER, D. M.; MILLER, S. C.
Uncertainties Analysis of Doses Resulting from Chronic Inhalation of Plutonium at the Mayak Production Association
Health Physics **89**(1)33-45, 2005

[KRI 81] KRISHNAIAH, P. R.
Analysis of Variance
Elsevier, New York, 1981

[KRI 06] KRISHNAMOORTY, K.
Handbook of Statistical Distributions with Applications
Chapman & Hall/CRC, Taylor & Francis Group, LLC, 2006

[KRIS 03A] KRISTENSEN, N. R.; MADSEN, H.
Continuous Time Stochastic Modelling, CTMS 2.3 Mathematics Guide
Technical University of Denmark, Lyngby, December 10, 2003

[KRIS 03B] KRISTENSEN, N. R.; MADSEN, H.
Continuous Time Stochastic Modelling, CTMS 2.3 User's Guide
Technical University of Denmark, Lyngby, December 10, 2003

[KRIS 04A] KRISTENSEN, N. R.; MADSEN, H.; JØRGENSEN, S. B.
A method for systematic improvement of stochastic grey-box models
Computers and Chemical Engineering **28**(8)1431-1449, 2004

[KRIS 04B] KRISTENSEN, N. R.; MADSEN, H.; JØRGENSEN, S. B.
Parameter estimation in stochastic grey-box models
Automatica **40**(2)225-237, 2004

[KRIS 05] KRISTENSEN, N. R.; MADSEN, H.; INGWERSEN, S. H.
Using Stochastic Differential Equations for PK/PD Model Development
Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics **32**(1)109-141, 2005

[KRU 58] KRUSKAL, W. H.
Ordinal Measures of Association
Journal of the American Statistical Association **53**(284)814-861, 1958

[KULL 51] KULLBACK, S.; LEIBLER, R. A.
On Information and Sufficiency
The Annals of Mathematical Statistics **22**(1)79-86, 1951

[KUM 80] KUMARASWAMY, P.
A generalized probability density function for double-bounded random processes
Journal of Hydrology **46**(1-2)79-88, 1980

[KUMA 91] KUMAR, P.; UNNY, T. E.; PONNAMBALAM, K.
Stochastic partial differential equations in groundwater hydrology, Part 2: Application to Borden aquifer
Stochastic Hydrology and Hydraulics **5**(3)239-251, 1991

[KUN 98] KUNDU, D.; MITRA, A.
Estimationg the parameters of the linear compartment model
Journal of Statistical Planning and Inference **70**(2)317-334, 1998

[KUN 08] KUNDU, D.; GUPTA, R. D.
Generalized exponential distribution: Bayesian Estimations
Computational Statistics & Data Analysis **52**(4)1873-1883, 2008

[KUT 10] KUTOYANTS, Y. A.
On the Goodness-of-Fit Testing for Ergodic Diffusion Proceses
Journal of Nonparametric Statistics **22**(4)529-543, 2010

[KYP 06] KYPRIANOU, A. E.
Introductory Lectures on Fluctuations of Lévy Processes with Applications
Springer, 2006

[LAG 87] LAGOY, P. G.
Estimated Soil Ingestion Rates for Use in Risk Assessment
Risk Analysis **7**(3)355-359, 1987

[LAW 87] LAWLESS, J. F.
Negative binomial and mixed Poisson regression
The Canadian Journal of Statistics **15**(3)209-225, 1987

[LEE 95] LEE, R. C.; FRICKE, J. R.; WRIGHT, W. E.; HAERER, W.
Development of a probabilistic blood lead prediction model
Environmental Geochemistry and Health **17**(4)169-181, 1995

[LEEM 86] LEEMIS, L. M.
Relationships Among Common Univariate Distributions
The American Statistician **40**(2)143-146, 1986

[LEEM 08] LEEMIS, L. M.; MCQUESTON, J. T.
Univariate Distribution Relationships
The American Statistician **62**(1)45-53, 2008

[LEIJ 91] LEIJ, F. J.; SKAGGS, T. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH.
Analytical Solutions for Solute Transport in Three-Dimensional Semi-Infinite Porous Media
Water Resources Research **27**(10)2719-2733, 1991

[LEM 07A] DE LEMOS, F.; HELLMUTH, K.-H.; SULLIVAN, T.
Transparent Tools for Uncertainty Analysis in High Level Waste Disposal Facilities Safety Assessment
Proceedings of the ICEM Conference 2007

[LEM 07B] DE LEMOS, F; SULLIVAN, T.
Developing a Fuzzy Rule Based Cognitive Map for Total System Performance Assessment
Proceedings of the ICEM Conference 2007

[LEM 07C] DE LEMOS, F; ROSS, T.; SULLIVAN, T.
Application of Total Uncertainty Theory in Radioactive Waste Disposal Facilities Safety Assessment
Proceedings of the ICEM Conference 2007

[LES 07] LESTER, R. R.; GREEN, L. C.; LINKOV, I.
Site-Specific Applications of Probabilistic Health Risk Assessment: Review of the Literature Since 2000
Risk Analysis **27**(3)635-658, 2007

[LEVY 03] LEVY, M.; BERKOWITZ, B.
Measurement and analysis of non-Fickian dispersion in heterogeneous porous media
Journal of Contaminant Hydrology **64**(3-4)203-226, 2003

[LEW 61] LEWIS, P. A. W.
Distribution of the Anderson-Darling Statistic
The Annals of Mathematical Statistics **32**(4)1118-1124, 1961

[LI 09] LI, W. B.; KARPAS, Z.; SALONEN, L.; KURTTIO, P.; MUIKKU, M.; WAHL, W.; HÖLLRIEGL, V.; HOESCHEN, C.; OEH, U.
A Compartmental Model of uranium in human hair for protracted ingestion of natural uranium in drinking water
Health Physics **96**(6)636-645, 2009

[LI 10] LI, W. B.; HOESCHEN, C.
Uncertainty and sensitivity analysis of biokinetic models for radiopharmaceuticals used in nuclear medicine
Radiation Protection Dosimetry **139**(1-3)128-131, 2010

[LIA 10] LIANG, F.; LIU, C.; CARROLL, R.; J.
Advanced Markov Chain Monte Carlo Methods
John Wiley and Sons, Ltd., 2010

[LIM 89] LIMIC, N.
On stochastic compartmental models
Journal of Mathematical Biology **27**(1)105-113, 1989

[LIN 76] LINDLEY, D. V.; PHILLIPS, L. D.
Inference for a Bernoulli Process (a Bayesian View)
The American Statistician **30**(3)112-119, 1976

[LIN 81] LINDLEY, D. V.; NOVICK, M. R.
The Role of Exchangebility in Inference
The Annals of Statistics **9**(1)45-58, 1981

[LIN 90] LINDLEY, D. V.
The 1988 Wald Memorial Lectures: The Present Position in Bayesian Statistics (with Comments by Barnard, G. A.; Berger, J. O.; Bernardo, J. M.; Cox, D. R.; French, S.; Kadane, J. B.; Lehmann, E. L.; Mouchart, M.; and Rejoinder by Lindley, D. V.)
Statistical Science 5(1)44-89, 1990

[LIND 04] LINDSEY, J. K.
Statistical Analysis of Stochastic Processes in Time
Cambridge University Press, 2004

[LINK 03] LINKOV, I.; BURMISTROV, D.
Model Uncertainty and Choices Made by Modelers: Lessons Learned from the International Atomic Energy Agency Model Intercomparisons
Risk Analysis **23**(6)1297-1308, 2003

[LINK 05] LINKOV, I.; BURMISTROV, D.
Sources of Uncertainty in Model Predictions: Lessons Learned from the IAEA Forest and Fruit Working Group Model Intercomparisons
Journal of Environmental Radioactivity **84**(2)297-314, 2005

[LIT 79] LITTEL, R. C.; MCCLAVE, J. T.; OFFEN, W. W.
Goodness-of-fit tests for the two parameter Weibull distribution
Communications in Statistics – Simulation and Computation **8**(3)257-269, 1979

[LIU 02] LIU, B.; LIU, Y.-K.
Expected Value of Fuzzy Variable and Fuzzy Expected Value Models
IEEE Transactions on Fuzzy Systems **10**(4)445-450, 2002

[LIU 03] LIU, L.; HAO, R. X.; CHENG, S. Y.
A Possibilistic Analysis Approach for Assessing Environmental Risks from Drinking Groundwater at Petroleum-Contaminated Sites
Journal of Environmental Informatics **2**(1)31-37, 2003

[LIU 07A] LIU, Q.; HOMMA, T.
A Robust Importance Measure for Sensitivity Analysis
Abstracts of the 5th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Outputs (SAMO 2007), pp. 18-20, Budapest, Hungary, June 18-22, 2007

[LIU 07B] LIU, Q.; HOMMA, T.
The Indication of the Moment Independent Measure δ and its new calculation Method
Abstracts of the 5th International Conference on Sensitivity Analysis of Model Outputs (SAMO 2007), pp. 54-55, Budapest, Hungary, June 18-22, 2007

[LJU 99] LJUNG, L.
System Identification - Theory for the User (Second Edition)
PTR Prentice Hall, 1999

[LOM 54] LOMAX, K. S.
Business Failures: Another Example of the Analysis of Failure Data
Journal of the American Statistical Association **49**(268)847-852, 1954

[LOP 05] LOPEZ-FIDALGO, J.; SANCHEZ, G.
Statistical Criteria to Establish Bioassay Programs
Health Physics **89**(4)333-338, 2005

[LOR 05] LORENZANA, R. M.; TROAST, R.; KLOTZBACH, J. M.; FOLLANSBEE, M. H.; DIAMOND, G. L.
Issues Related to Time Averaging of Exposure in Modeling Risks Associated with Intermittent Exposures to Lead
Risk Analysis **25**(1)169-178, 2005

[LUN 01] LUNCHICK, C.
Probabilistic Exposure Assessment of Operator and Residential Non-Dietary Exposure
Annals of Occupational Hygiene **45**(1001)29-42, 2001

[LÜT 05] LÜTKEPOHL, H.
New Introduction to Multiple Time Series Analysis
Springer, 2005

[MADD 04] MADDALENA, R. L.; MCKONE, T. E.; SOHN, M. D.
Standardized Approach for Developing Probabilistic Exposure Factor Distributions
Risk Analysis **24**(5)1185-1199, 2004

[MAGE 80] MAGE, D. T.
An Explicit Solution for S_B Parameters Using Four Percentile Points
Technometrics **22**(2)247-251, 1980

[MAM 95] MAMIKHIN, S. V.
Marthematical Model of ^{137}Cs Vertical Migration in a Forest Soil
Journal of Environmental Radioactivity **28**(2)161-179, 1995

[MAR 67A] MASHALL, A. W.; OLKIN, I.
A Multivariate Exponential Distribution
Journal of the American Statistical Association **62**(317)30-44, 1967

[MAR 67B] MASHALL, A. W.; OLKIN, I.
A Generaized Bivariate Exponential Distribution
Journal of Applied Probability **4**(2)291-302, 1967

[MAR 97] MASHALL, A. W.; OLKIN, I.
A new method for adding a parameter to a family of distributions with application to the exponential and Weibull families
Biometrika **84**(3)641-652, 1997

[MAR 01] MASHALL, A. W.; MEZA, J. C.; OLKIN, I.
Can Data Recognize Its Parent Distribution?
Journal of Computation and Graphical Statistics **10**(3)555-580, 2001

[MARG 00] MARGOLIN, G.; BERKOWITZ, B.
Application of Continuous Time Random Walks to Transport in Porous Media
Journal of Physical Chemistry **B 104**(16)3942-3947, 2000
(Minor Correction: Journal of Physical Chemistry **B 104**(36)8762, 2000)

[MARG 02] MARGOLIN, G.; BERKOWITZ, B.
Spatial behaviour of anomalous transport
Physical Review **E 65**(3)031101-1/11, 2002

[MARG 03] MARGOLIN, G.; DENTZ, M.; BERKOWITZ, B.
Continuous time random walk and multirate mass transfer modelling of sorption
Chemical Physics **295**(1)71-80, 2003

[MARI 01] MARINELL, G.; STECKEL-BERGER, G.
Einführung in die Bayes-Statistik
R. Oldenbourg Verlag München Wien, 2001

[MAT 90] MATIS, J. H.; WEHRLY, T. E.
Generalized Stochastic Compartmental Models with Erlang Transit Times
Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics **18**(6)589-607, 1990

[MAT 98] MATIS, J. H.; WEHRLY, T. E.
A General Approach to Non-Markovian Compartmental Models
Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics **26**(4)437-456, 1998

[MAY 96] MAY, H.; BURGER, J.
Fishing in a Polluted Estuary: Fishing Behavior, Fish Consumption, and Potential Risk
Risk Analysis **16**(4)459-471, 1996

[McD 99] McDonald, A. D.; Sandal, L. K.
Estimating the parameters of stochastic differential equations using a criterion function based on the Kolmogorov-Smirnov Statistic
Journal of Statistical Computation and Simulation **64**(3)235-250, 1999

[McK 79] McKay, M. D.; Conover, W. J.; Beckman, R. J.
A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code
Technometrics **21**(2)239-245, 1979

[McK 99] McKay, M. D.; Morrison, J. D.; Upton, S. C.
Evaluating prediction uncertainty in simulation models
Computer Physics Communications, **117**(1999)44-51, 1999

[McL 01] McLaughlin, D.; Ruan, F.
Macrodispersivity and Large-scale Hydrogeologic Variability
Transport in Porous Media 42(1-2)133-154, 2001

[Meer 99] Meerscheart, M. M.; Benson, D. A.; Bäumer, B.
Multidimensional advection and fractional dispersion
Physical Review **E 59**(5)5026-5028, 1999

[Meer 01] Meerscheart, M. M.; Benson, D. A.; Baeumer, B.
Operator Lévy motion and multiscaling anomalous diffusion
Physical Review **E 63**(2)021112-1/6, 2001

[Meer 04] Meerscheart, M. M.; Tadjeran, C.
Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations
Journal of Computational and Applied Mathematics **172**(1)65-77, 2004

[Meer 06] Meerscheart, M. M.; Mortensen, J.; Wheatcraft, S. W.
Fractional vector calculus for fractional advection-dispersion
Physica A **367**, 181-190, 2006

[Mei 83] Meinhold, R. J.; Singpurwalla, N. D.
Understanding the Kalman Filter
The American Statistician **37**(2)123-127, 1983

[Mer 03] Mercat-Rommens, C.; Brenot, J.
Realistic dose and risk assessment for Cap de la Hague; siehe [SSK 03], S. 167-185

[Met 53] Metropolis, N.; Rosenbluth, A. W.; Rosenbluth, M. N; Telleer, A. H; Teller, E.
Equation of State Calculations by Fast Computing Machines
The Journal of Chemical Physics **21**(6)1087-1092, 1953

[Metz 00] Metzler, R.; Klafter, J.
The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach
Physics Reports **339**(1)1-77, 2000

[METZ 04] METZLER, R.; KLAFTER, J.
The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics
Journal of Physics A **37**, R161-R208, 2004

[MIK 06] MIKOSCH, T.
Copulas: Tales and facts
Extremes **9**(1)3-20, 2006

[MICH 99] MICHEL, R.; KIRCHHOFF, K.
Nachweis-, Erkennungs- und Vertrauensgrenzen bei Kernstrahlungsmessungen
Fachverband für Strahlenschutz e.V., TÜV-Verlag, 1999

[MIK 06] MIKOSCH, T.
Copulas: Tales and facts
Extremes **9**(1)3-20, 2006

[MIL 56] MILLER, L. H.
Table of Percentage Points of Kolmogorov Statistics
Journal of the American Statistical Association **51**(273)111-121, 1956

[MIL 80] MILLER, R. B.
Bayesian Analysis of the Two-Parameter Gamma Distribution
Technometrics **22**(1)65-69, 1980

[MIL 93] MILLER, K. S.; ROSS, B.
An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations
John Wiley & Sons, Inc., 1993

[MILL 07] MILLER, G.
Statistical modelling of Poisson/log-normal data
Radiation Protection Dosimetry **124**(2)155-163, 2007

[MILL 08A] MILLER, G.; MARTZ, H.; LITTLE, T.; BERTELLI, L.
Bayesian Hypothesis Testing-Use in Interpretation of Measurements
Health Physics **94**(3)248-254, 2008

[MILL 08B] MILLER, G.; BERTELLI, L.; GUILMETTE, R.; MCNAUGHTON, M. W.; EISELE, W. F.
A study of early Los Alamos internal exposures to plutonium
Radiation Protection Dosimetry **130**(4)503-509, 2008

[MILL 08C] MILLER, G.; MELO, D.; MARTZ, H.; BERTELLI, L.
An Empirical Multivariate Log-Normal Distribution representing Uncertainty of Biokinetic Parameters for ^{137}Cs
Radiation Protection Dosimetry **131**(2)198-211, 2008

[MILL 08D] MILLER, G.; GUILMETTE, R.; BERTELLI, L.; WATERS, T.; ROMANOV, S. A.; ZAYTSEVA, Y. V.
Uncertainties in Internal Doses calculated for Mayak Workers-A Study of 63 Cases
Radiation Protection Dosimetry **131**(3)316-330, 2008

[MILL 08E] MILLER, G.
Variability and Uncertainty of Biokinetic Model Parameters: the Discrete Empirical Bayes Approximation
Radiation Protection Dosimetry **131**(3)394-398, 2008

[MILL 09] MILLER, G.; CHENG, Y. S.; TRAUB, R. J.; LITTLE, T. T.; GUILMETTE, R. A.
Methods Used To Calculate Doses Resulting From Inhalation of Capstone Depleted Uranium Aerosols
Health Physics **96**(3)306-327, 2009

[MIR 96] MIRALLES-WILHELM, F.; GELHAR, L. W.
Stochastic analysis of sorption macrokinetics in heterogeneous aquifers
Water Resources Research **32**(6)1541-1549, 1996

[MOE 07] MOELLER, D. W.; RYAN, M. T.; SUN, L.-S. C.
Factors Affecting Dose Estimates for Long-Term Performance Assessments: Case Study-Armagosa Valley
Health Physics **92**(2) 127-133, 2007

[MOKH 05] MOKHTARI, A.; FREY, H. C.
Sensitivity Analysis of a Two-Dimensional Probabilistic Risk Assessment Model Using Analysis of Variance
Risk Analysis **25**(6)1511-1529, 2005

[MOL 07] MOLITOR, J.; JERRETT, M.; CHANG, C.-C.; MOLITOR, N.-T.; GAUDERMAN, J.; BERHANE, K.; MCCONNELL, R.; LURMANN, F.; WU, J.; WINER, A.; THOMAS, D.
Assessing Uncertainty in Spatial Exposure Models for Air Pollution Health Effects Assessment
Environmental Health Perspectives **115**(8)1147-1153, 2007

[MØLL 11] MØLLER, J. K.; MADSEN, H.; CARSTENSEN, J.
Parameter estimation in a simple stochastic differential equation for phytoplankton modelling
Ecological Modelling **222**(11)1793-1799, 2011

[MOLO 10] MOLOKANOV, A.; CHOJNACKI, E.; BLANCHARDON, E.
A Simple Algorithm for Solving the Inverse Problem of Interpretation of Uncertain Individual Measurements in Internal Dosimetry
Health Physics **98**(1)12-19, 2010

[MON 03] MONTE, L.; BRITTAIN, J. E.; HAKANSON, L.; HELING, R.; SMITH, J. T.; ZHELEZNYAK, M.
Review and assessment of models used to predict the fate of radionuclides in lakes
Journal of Environmental Radioactivity **69**(3)177-205, 2003

[MON 04] MONTE, L.; BRITTAIN, J. E.; HAKANSON, L.; SMITH, J. T.; VAN DER PERK, M.
Review and assessment of models for predicting the migration of radionuclides from catchments
Journal of Environmental Radioactivity **75**(1)83-103, 2004

[MON 05] MONTE, L.; BOYER, P.; BRITTAIN, J. E.; HAKANSON, L.; LEPICARD, S.; SMITH, J. T.
Review and assessment of models for predicting the migration of radionuclides through rivers
Journal of Environmental Radioactivity **79**(3)273-296, 2005

[MOO 09] MOORE, R. E.; KEARFOTT, R. B.; CLOUD, M. J.
Introduction to Intervall Analysis
Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2009

[MOR 91] MORRIS, M. D.
Factorial Sampling Plans for Preliminary Computational Experiments
Technometrics **33**(2)161-174, 1991

[MORR 10] MORRISSEY, C.
Study of Deterministic and Monte Carlo Simulation Methods for Neutron and Photon Dosimetry at the Royal Surrey Hospital Radiotherapy Facility
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[MUR 08] MURPHY, P.; ORGANO, C.
A comparative study of lognormal, gamma and beta modelling in radon mapping with recommendations regarding bias, sample sizes and the treatment of outliers
Journal of Radiological Protection **28**(3)293-301, 2008

[NAP 01] NAPIER, B. A.; SHAGINA, N. B.; DEGTEVA, M. O.; TOLSTYKH, E. I.; VOROBIOVA, M. I.; ANSPAUGH, L. R.
Preliminary Uncertainty Analysis for the Doses Estimated Using the Techa River Dosimetry System-2000
Health Physics **81**(4)395-405, 2001

[NAU 00] NAUTA, M. J.
Separation of uncertainty and variability in quantitative microbial risk assessment models
International Journal of Food Microbiology **57**(1-2)9-18, 2000

[NCM 07] NORDIC COUNCIL OF MINISTERS
Probabilistic Exposure Assessment Methods in Chemical Safety Asessments (REACH)
Copenhagen, 2007

[NCRP 96] NATIONAL COUNCIL ON RADIATION PROTECTION AND MEASUREMENTS
A Guide for Uncertainty Analysis in Dose and Risk Assessments Related to Environmental Contamination
NCRP Commentary No. 14, Bethesda, May 10, 1996

[NEAL 97] NEAL, R. N.
Markov Chain Monte Carlo Methods Based on 'Slicing' the Density Function
Technical Report No. 9722, Department of Statistics, University of Toronto, 1997

[NEAL 03] NEAL, R. N.
Slice Sampling *(with discussion)*
The Annals of Statistics **31**(3)705-767, 2003

[NEG 09] NEGRI, I.; NISHIYAMA, Y.
Goodness of fit test for ergodic diffusion proceses
Annals of the Institute of Statistical Mathematics **61**(4)919-928, 2009

[NEL 03] NELSEN, R. B.; QUESADA-MOLINA, J. J.; RODRIGUEZ-LALLENA, J. A.; UBEDA-FLORES, M.
Kendall distribution functions
Statistics & Probability Letters **65**(3)263-268, 2003

[NEL 07] NELSEN, R. B.
An Introduction to Copulas (Second Edition)
Springer, Berlin, 2007

[NEL 09] NELSEN, R. B.; QUESADA-MOLINA, J. J.; RODRIGUEZ-LALLENA, J. A.; UBEDA-FLORES, M.
Kendall distribution functions and associative copulas
Fuzzy Sets and Systems **160**(1)52-57, 2009

[NEW 96] NEWMAN, M. C.; JAGOE, R. H.
Bioaccumulation models with time lags: Dynamics and stability criteria
Ecological Modelling **84**(1-3)281-286, 1996

[NGU 12] NGUYEN, H. T.; KREINOVICH, V.; WU, B.; XIANG, G.
Computing Statistics under Interval and Fuzzy Uncertainty
Springer, Berlin, Heidelberg, 2012

[NIK 08] NIKOLOULOPOULOS, A. K.; KARLIS, D.
Copula model evaluation based on parametric bootstrap
Computational Statistic and Data Analysis **52**(7)3342-3353, 2008

[NOR 10] NORTH, D. W.
Probability Theory and Consistent Reasoning
Risk Analysis **30**(3)377-380, 2010

[NTZ 09] NTZOUFRAS, I.
Bayesian Modelling Using WinBUGS
John Wiley & Sons, Inc., 2009

[OAK 04] OAKLEY, J. E.; O'HAGAN, A.
Probabilistic sensitivity analysis of complex models: a Bayesian approach
Journal of the Royal Statistical Society, Series **B 66**(3)751-769, 2004

[O'BRI 98] O'BRIEN, R. S.; COOPER, M. B.
Technologically Enhanced Naturally Occurring Radioactive Material (NORM): Pathway Analysis and Radiological Impact
Applied Radiation and Isotopes **49**(3)227-239, 1998

[O'HAG 04] O'HAGAN, A.; OAKLEY, J. E.
Probability is perfect, but we can't elicit it perfectly
Reliability Engineering & System Safety **85**(1-3)239-248, 2004

[ØKS 03] ØKSENDAL, B.
Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications (Sixth Edition)
Springer, Berlin, 2003

[PAI 99] PAINTER, S.; MAHINTHAKUMAR, G.
Prediction uncertainty for tracer migration in random heterigeneities with multifractal character
Advances in Water Resources **23**(1),49-57, 1999

[PAT 99] PATÉ-CORNELL, M. E.
Conditional Uncertainty Analysis and Implications for Decision Making: The Case of WIPP
Risk Analysis **19**(5)995-1002, 1999

[PATI 04] PATIL, S. R.; FREY, H. C.
Comparison of Sensitivity Analysis Methods Based on Applications to a Food Safety Risk Assessment Model
Risk Analysis **24**(3)573-585, 2004

[PED 95] PEDERSEN, A. R.
A New Approach to Maximum Likelihood Estimation for Stochastic Differential Equations Based on Discrete Observations
The Scandinavian Journal of Statistics **22**(1)55-71, 1995

[PEDE 11] PEDERSEN, M. W.; BERG, C. W.; THYGESEN, U. H.; NIELSEN, A.; MADSEN, H.
Estimation methods for nonlinear state-space models in ecology
Ecological Modelling **222**(8)1394-1400, 2011

[PEN 07] PENSADO, O.; MANCILLAS, J.
Estimates of Mean Consequences and Confidence Bounds on the Mean associated with Low-Probability Seismic Events in Total System Performance Assessments
Proceedings of the ICEM Conference 2007

[PER 78] PEREIRA, B. DE B.
Empirical Comparisons of Some Tests of Separate Families of Hypotheses
Metrika **25**(1)219-234, 1978

[PERE 10] PEREZ GUERRERO, J. S.; SKAGGS, T. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH.
Analytical Solutions for Multi-Species Contaminant Transport in Finite Media with Time-Varying Boundary Conditions
Transport in Porous Media **85**(1)171-188, 2010

[PERI 04] PERIANEZ, R.
On the sensitivity of a marine dispersion model to parameters describing the transfers of radionuclides between the liquid and solid phases
Journal of Environmental Radioactivity **73**(1)101-115, 2004

[PIE 90] PIEGORSCH, W. W.
Maximum Likelihood Estimation for the Negative Binomial Dispersion Parameter
Biometrics **46**(3)863-867, 1990

[PLA 83] PLACKETT, R. L.
Karl Pearson and the Chi-squared Test
International Statistical Review **51**(1)59-72, 1983

[POL 94] POLSON, N. G.; ROBERTS, G. O.
Bayes factors for discrete observations from diffusion processes
Biometrika **81**(1)11-26, 1994

[POU 07] POULIN, A.; HUARD, D.; FAVRE, A.-C.; PUGIN, S.
Importance of Tail Dependence in Bivariate Frequency Analysis
Journal of Hydrologic Engineering **12**(4)394-403, 2007

[PRAD 11] PRADHAN, B.; KUNDU, D.
Bayesian estimation and prediction of the two-parameter gamma distribution
Journal of Statistical Computation and Simulation **81**(9)1187-1198, 2011

[PRI 96A] PRICE, P. S.; SU, S. H.; HARRINGTON, J. R.; KEENAN, R. E.
Monte Carlo Modeling of Time-Dependent Exposures Using a Microexposure Event Approach
Risk Analysis **16**(2)263-277, 1996

[PRI 96B] PRICE, P. S.; CURRY, C. L.; GOODRUM, P. E.; GRAY, M. N.; MCCRODDEN, J. I.; HARRINGTON, N. W.; CARLSON-LYNCH, H.; KEENAN, R. E.
Monte Carlo Modeling of Time-Dependent Exposures Using a Microexposure Event Approach
Risk Analysis **16**(3)339-348, 1996

[PRI 05] PRICE, P. S.; CHAISSON, C. F.
A conceptual framework for modeling aggregate and cumulative exposures to chemicals
Journal of Exposure Analysis and Environmental Epidemiology **15**(6)473-481, 2005

[PRIC 96] PRICE, P. N.; NERO, A. V.; GELMAN, A.
Bayesian Prediction of Mean Indoor Radon Concentrations for Minnesota Counties
Health Physics **71**(6)922-936, 1996

[PRÖ 96] PRÖHL, G.; MÜLLER, H.
Radiation exposure from radionuclides in ground water: an uncertainty analysis for selected exposure scenarios
Radiation and Environmental Biophysics **35**(3)205-218, 1996

[PRÖ 05] PRÖHL, G.; OLYSLAEGERS, G.; KANYAR, B.; PINEDO, P.; BERGSTRÖM, U.; MOBBS, S.; EGED, K.; KATONA, T.; SIMÓN, I.; HALLBERG, U. B.; CHEN, Q.; KOWE, R.; ZEEVAERT, T.
Development and comparison of five site-specific biosphere models for safety assessment of radioactive waste disposal
Journal of Radiation Protection **25**(4)343-374, 2005

[PRV 03] PRVÁKOVÁ, S.; ĎÚRAN, J.
Preliminary Calculations of Radionuclide Release from Nearfield to Biosphere using Computer Code GOLDSIM
Proceedings of the ICEM Conference 2003

[PUN 07] PUNCHER, M.; BIRCHALL, A.
Estimating uncertainty on internal dose assessments
Radiation Protection Dosimetry **127**(1-4)544-547, 2007

[PUN 08] PUNCHER, M.; BAILEY, M. R.; HARRISON, J. D.
Uncertainty Analysis of Doses from Inhalation of Depleted Uranium
Health Physics **95**(3)300-309, 2008

[QUE 05] QUÉLO, D.; SPORTISSE, B.; ISNARD, O.
Data assimilation for short range atmospheric dispersion of radionuclides: a case study of second-order sensitivity
Journal of Environmental Radioactivity **84**(3)393-408, 2004

[QUES 82] QUESENBERRY, C. P.; KENT, J.
Selecting among Probability Distributions Used in Reliability
Technometrics **24**(1)59-65, 1982

[QUEZ 04] QUEZADA, C. R.; CLEMENT, T. P.; LEE, K.-K.
Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors
Advances in Water Resources **27**(5)507-520, 2004

[RAI 96] RAI, S. N.; KREWSKI, D.; BARTLETT, S.
A General Framework for the Analysis of Uncertainty and Variability in Risk Assessment
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)972-989, 1996

[RAI 98] RAI, S. N.; KREWSKI, D.
Uncertainty and Variability Analysis in Multiplicative Risk Models
Risk Analysis **18**(1)37-45, 1998

[RAT 01] RATTO, M.; TARANTOLA, S.; SALTELLI, A.
Sensitivity analysis in model calibration: GSA-GLUE approach
Computer Physics Communications **136**(3)212-224, 2001

[RECH 99] RECHARD, R. P.
Historical Relationship between Performance Assessment for Radioactive Waste Disposal and Other Types of Risk Assessment
Risk Analysis **19**(5)763-807, 1999

[REG 04] REGAN, H. M.; FERSON, S.; BERLEANT, D.
Equivalence of methods for uncertainty propagation of real-valued random variables
International Journal of Approximate Reasoning **36**(1)1-30, 2004

[REGI 06] REGINATTO, M.
Bayesian approach for quantifying the uncertainty of neutron doses derived from spectrometric measurements
Radiation Protection Dosimetry **121**(1)64-69, 2006

[RIM 10] RIMBAUD, L.; HERAUD, F.; LA VIEILLE, S.; LEBLANC, J.-C.; CREPET, A.
Quantitative Risk Assessment Relating to Adventitious Presence of Allergens in Food: A Probabilistic Model Applied to Peanut in Chocolate
Risk Analysis **30**(1)7-19, 2010

[RIN 97] RINNE, H.
Taschenbuch der Statistik
Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 1997

[ROB 04] ROBERT, C. P.; CASELLA, G.
Monte Carlo Statistical Methods (Second Edition)
Springer, 2004

[ROB 07] ROBERT, C. P.
The Bayesian Choice: From Decision-Theoretic Foundations to Computational Implementation (Second Edition)
Springer, 2007

[ROC 98] ROCHEDO, E. R. R.; CONTI, L. F. C.; BARTELL, S. M.; PARETZKE, H. G.
PARATI – a dynamic model for radiological assessments in urban areas
Part III: Parameter uncertainty analysis
Radiation and Environmental Biophysics **36**(4)285-292, 1998

[RÜM 82] RÜMELIN, W.
Numerical Treatment of Stochastic Differential Equations
SIAM Journal on Numerical Analysis **19**(3)604-613, 1982

[SACH 99] SACHS, L.
Angewandte Statistik (9. überarbeitete Auflage)
Springer, Berlin, Heidelberg, 1999

[SAJO 03] SAJO, E.
An Estimate of Spatial Uncertainty of Mean Concentrations Predicted by Gaussian Dispersion Models
Health Physics **85**(2)174-183, 2003

[SAL 93] SALTELLI, A.; ANDRES, T.H.; HOMMA, T.
Sensitivity analysis of model output – An investigation of new techniques
Computational Statistics & Data Analysis **15**(2)211-238, 1993

[SAL 98] SALTELLI, A.; BOLADO, R.
An alternative way to compute Fourier amplitude sensitivity test (FAST)
Computational Statistics & Data Analysis **26**(4), 445-460, 1998

[SAL 99] SALTELLI, A.; TARANTOLA, S.; CHAN, K. P.-S.
A Quantitative Model-Independent Method for Global Sensitivity Analysis of Model Output
Technometrics **41**(1), 39-56, 1999

[SAL 00A] SALTELLI, A.; CHAN, K.; SCOTT, M. (EDS.)
Sensitivity Analysis
John Wiley & Sons, Ltd, 2000

[SAL 00B] SALTELLI, A.; TARANTOLA, S.; CAMPOLONGO, F.
Sensitivity Analysis as an Ingredient of Modeling
Statistical Science **15**(4), 377-395, 2000

[SAL 02A] SALTELLI, A.; TARANTOLA, S.
On the Relative Importance of Input Factors in Mathematical Models: Safety Assessment for Nuclear Waste Disposal
Journal of the American Statistical Association **97**(459)702-709, 2002

[SAL 02B] SALTELLI, A.
Sensitivity Analysis for Importance Assessment
Risk Analysis **22**(3)579-590, 2002

[SAL 08] SALTELLI, A.; RATTO, M.; ANDRES, T.; CAMPOLONGO, F.; CARIBONI, J.; GATELLI. D.; SAISANA, M.; TARANTOLA, S.
Global Sensitivity Analysis. The Primer
John Wiley & Sons, Ltd, 2008

[SALV 07] SALVADORI, G.; DE MICHELE, C.
On the Use of Copulas in Hydrology: Theory and Practice
Journal of Hydrologic Engineering **12**(4)369-380, 2007

[SAM 93] SAMKO, S. G.; KILBAS, A. A.; MARICHEV, O. I.
Fractional Integrals and Derivatives - Theory and Applications
Gordon and Breach Science Publishers, 1993

[SAMO 94] SAMORODNITSKY, G.; TAQQU, M. S.
Stable non-Gaussian Random Processes: Stochastic Models with Infinite Variance
Chapman & Hall, 1994

[SAN 06] SANDER, P.; BERGBÄCK, B.; ÖBERG, T.
Uncertain Numbers and Uncertainty in the Selection of Input Distributions
- Consequences for a Probabilistic Risk Assessment of Contaminated Land
Risk Analysis **26**(5)1363-1375, 2006

[SASS 08] SASSI, G.; RUGGERI, B.
Uncertainty Evaluation of Human Risk Analysis (HRA) of Chemicals by Multiple Exposure Routes
Risk Analysis **28**(5)1343-1356, 2008

[SATO 99] SATO, K.-I.
Lévy Proceses and Infinitely Divisible Distributions
Cambridge University Press, 1999

[SAV 72] SAVAGE, L. J.
The Foundations of Statistics
Dover Publications, Inc.; New York, 1972

[SCH 73] SCHAIBLY, J. H.; SHULER, K. E.
Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. II. Applications
The Journal of Chemical Physics **59**(8)3879-3888, 1973

[SCHE 85] SCHENKER, N.
Qualms about Bootstrap Confidence Intervals
Journal of the American Statistical Association **80**(390)360-361, 1985

[SCHM 06] SCHMIDT, R.; STADTMÜLLER, U.
Nonparametric estimation of tail dependence
The Scandinavian Journal of Statistics **33**(2)307-335, 2006

[SCHR 15] SCHRÖDINGER, E.
Zur Theorie der Fall- und Steigversuche anTeilchen mit Brownscher Bewegung
Physikalische Zeitschrift **16**, S. 289-295, 1915

[SCHU 99] SCHULZ, T. W.; GRIFFIN, S.
Estimating Risk Assessment Exposure Point Concentrations when the Data Are Not Normal or Lognormal
Risk Analysis **19**(4)577-584, 1999

[SCHU 01] SCHUMER, R.; BENSON, D. A.; MEERSCHAERT, M. M.; WHEATCRAFT, S. W.
Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation
Journal of Contaminant Hydrology **48**(1-2)69-88, 2001

[SCHU 03] SCHUMER, R.; BENSON, D. A.; MEERSCHAERT, M. M.; BAEUMER, B.
Multiscaling fractional advection-dispersion equations and their solutions
Water Resources Research **39**(1)SBH 12-1/11, 2003

[SCHU 05] SCHULZE-MAKUCH, D.
Longitudinal Dispersivity Data and Implications for Scaling Behavior
Ground Water **44**(3)443-456, 2005

[SCHW 78] SCHWARZ, G.
Estimating the Dimension of a Model
The Annals of Statistics **6**(2)461-464, 1978

[SCHW 81] SCHWEIZER, B.; WOLFF, E. F.
On Nonparametric Measures of Dependence for Random Variables
The Annals of Statistics **9**(4)879-885, 1981

[SEB 03] SEBER, G. A. F.; WILD, C. J.
Nonlinear Regression
John Wiley & Sons, Inc., 2003

[SEI 96] SEILER, F. A.; ALVAREZ, J. L.
On the Selection of Distributions for Stochastic Variables
Risk Analysis **16**(1)5-18, 1996

[SEN 02] SENTZ, K.; FERSON, S.
Combination of Evidence in Dempster-Shafer Theory
Report SAND2002-083, Sandia National Laboratories, April 2002

[SER 88] SERRANO, S. E.
General solution to random advective-dispersive equation in porous media;
Part 1: Stochasticity in the sources and in the boundaries,
Part 2: Stochasticity in the parameters
Stochastic Hydrology and Hydraulics **2**(2)79-112, 1988

[SHA 76] SHAFER, G.
A Mathematical Theory of Evidence
Princeton University Press, 1976

[SHA 81] SHAFER, G.
Constructive Probability
Synthese **48**(1)1-80, 1981

[SHE 90] SHEPPARD, M.I.; THIBAULT, D.H.
Default Soil Soil/Liquid Partition Coefficients, K_ds for Four Major Soil Types:
A Compendium
Health Physics **59**(4)471-482, 1990

[SHEL 09] SHELDON, L. S.; COHEN HUBAL, E. A.
Exposure as Part of a Systems Approach for Assessing Risk
Environmental Health Perspectives **117**(8)1181-1184, 2009

[SHEP 05] SHEPPARD, C. S.
Transfer Parameters – Are On-Site Data Really Better
Human and Ecological Risk Assessment **11**(5)939-949, 2005

[SHLE 99] SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J.; ZUMOFEN, G.
Above, below, and beyond Brownian motion
American Journal of Physics **67**(12)1253-1259, 1999

[SIL 08] SILVA, R. S.; LOPES, H. F.
Copula, marginal distributions and model selection: a Bayesian note
Statistics and Computing **18**(3)313-320, 2008

[SIM 03] SIMPKINS, A. A.; HAMBY, D. M.
Uncertainty in Transport Factors Used to Calculate Historical Dose from ^{131}I Releases at the Savannah River Site
Health Physics **85**(2)194-203, 2003

[SINC 88] SINCLAIR, C. D.; SPURR, B. D.
Approximations to the Distribution Function of the Anderson-Darling Test Statistic
Journal of the American Statistical Association **83**(404)1190-1191, 1988

[SKL 59] SKLAR, A.
Fonctions de répartition à n dimensions et leurs marges
Publications de l'Institut de Statistique de l'Université de Paris **8**, 229-231, 1959

[SKL 73] SKLAR, A.
Random Variables, Joint Distributions, and Copulas
Kybernetika **9**(6)449-460, 1973

[SLOB 93] SLOB, W.
Modeling Long-Term Exposure of the Whole Population to Chemicals in Food
Risk Analysis **13**(5)525-530, 1993

[SLOB 96] SLOB, W.
A Comparison of Two Statistical Approaches to Estimate Long-Term Exposure Distributions from Short-Term Measurements
Risk Analysis **16**(2)195-200, 1996

[SLOB 98] SLOB, W.; PIETERS, M. N.
A Probabilistic Approach for Deriving Acceptable Human Intake Limits and Human Health Risks from Toxicological Studies: General Framework
Risk Analysis **18**(6)787-798, 1998

[SME 94] SMETS, P.; KENNES, R.
The Transferable Belief Model
Artificial Intelligence **66**(2)191-243, 1994

[SMI 92] SMITH, A. E.; RYAN, P. B.; EVANS, J. S.
The Effect of Neglecting Correlations When Propagating Uncertainty and Estimating the Population Distribution of Risk
Risk Analysis **12**(4)467-474, 1992

[SMIR 48] SMIRNOV, N.
Table for Estimating the Goodness of Fit of Empirical Distributions
The Annals of Mathematical Statistics **19**(2)279-281, 1948

[SOB 93] SOBOL, I. M.
Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models
Mathematical Modeling and Computational Experiment **1**(4)407-414, 1993

[SOB 99] SOBOL, I. M.; LEVITAN, Y. L.
On the use of variance reducing multipliers in Monte Carlo computations of global sensitivity index
Computer Physics Communications **177**(1-2)52-61, 1999

[SOB 01] SOBOL, I. M.
Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates
Mathematics and Computers in Simulation **55**(1-3)271-280, 2001

[SON 06] SON, Y. S.; OH, M.
Bayesian Estimation of the Two-Parameter Gamma Distribution
Communications in Statistics – Simulation and Computation **35**(2)285-293, 2006

[SOU 04] SOUNDAPPAN, P.; NIKOLAIDIS, E.; HAFTKA, R. T.; GRANDHI, R.; CANFIELD, R.
Comparison of evidence theory and Bayesian theory for uncertainty modelling
Reliability Engineering & System Safety **85**(1-3)295-311, 2004

[SPE 01] SPENCER, M.; FISHER, N. S.; WANG, W.-X.; FERSON, S.
Temporal Variability and Ignorance in Monte Carlo Contaminant Bioaccumulation Models: A Case Study with Selenium in *Mytilus edulis*
Risk Analysis **21**(2)383-394, 2001

[SPIE 02] SPIEGELHALTER, D. J.; BEST, N. G.; CARLIN, B. P.; VAN DER LINDE, A.
Bayesian measures of model complexity and fit
Journal of the Royal Statistical Society **B 64**(4)583-639, 2002

[SPIE 03] SPIEGELHALTER, D.; THOMAS, A.; BEST, N.; LUNN, D.
WinBUGS User Manual, Version 1.4
http://www.mrc-bsu.cam.ac.uk/bugs, 2003

[SRI 08] SRINIVASAN, V.; CLEMENT, T. P.
Analytical solutions for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems; Part I: Mathematical derivations; Part II: Special cases, implementation and testing
Advances in Water Resources **31**(2)203-232, 2008

[SRIN 10] SRINIVASAN, G.; TARTAKOVSKY, D. M.; DENTZ, M.; VISWANATHAN, H.; BERKOWITZ, B.; ROBINSON, B. A.
Random walk particle tracking simulations of non-Fickian transport in heterogeneous media
Journal of Computational Physics **229**(11)4304-4314, 2010

[SSK 88] BUNDESMINISTER FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (HRSG.)
Strahlenschutzgrundsätze zur schadlosen Wiederverwertung und -verwendung von schwachradioaktivem Stahl und Eisen aus Kernkraftwerken
Empfehlung der Strahlenschutzkommission, verabschiedet am 1.10.1987, veröffentlicht im Bundesanzeiger Nr.9 vom 9.1.1988

[SSK 98] STRAHLENSCHUTZKOMMISSION
Freigabe von Materialien, Gebäuden und Bodenflächen mit geringfügiger Radioaktivität aus anzeige- und genehmigungspflichtigem Umgang
Empfehlung der Strahlenschutzkommission, verabschiedet auf der 151. Sitzung im Februar 1998

[SSK 03] BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (HRSG.)
Realistische Ermittlung der Strahlenexposition (Klausurtagung des Ausschusses "Radioökologie" der Strahlenschutzkommission am 25./26. November 2003)
Veröffentlichungen der Strahlenschutzkommission Band 55,
Elsevier Urban & Fischer München Jena, 2005

[SSK 04] STRAHLENSCHUTZKOMMISSION
Grundsätze und Methoden zur Berücksichtigung von statistischen Unsicherheiten für die Ermittlung repräsentativer Werte der spezifischen Aktivität von Rückständen
Empfehlung der Strahlenschutzkommission
verabschiedet in der 197. Sitzung der Strahlenschutzkommission am 16./17. Dezember 2004

[SSK 05A] BUNDESMINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ UND REAKTORSICHERHEIT (HRSG.)
Grundsätze und Methoden zur Berücksichtigung von statistischen Unsicherheiten für die Ermittlung repräsentativer Werte der spezifischen Aktivität von Rückständen (SSK-Empfehlung)
Berichte der Strahlenschutzkommission (SSK) des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit Heft 46 (2005), Elsevier Urban & Fischer München Jena, 2005

[SSK 05B] STRAHLENSCHUTZKOMMISSION
Kernkraftwerk Stade – Stilllegung und Rückbau
Stellungnahme der Strahlenschutzkommission
verabschiedet in der 200. Sitzung der Strahlenschutzkommission am 30. Juni 2005

[STA 02] VON STACKELBERG, K. E.; BURMISTROV, D.; VORHEES, D. J.; BRIDGES, T. S.; LINKOV, I.
Importance of Uncertainty and Variability to Predicted Risks from Trophic Transfer of PCBs in Dredged Sediments
Risk Analysis **22**(3)499-512, 2002

[STAN 96] STANEK III, E. J.
Estimating Exposure Distributions: A Caution for Monte Carlo Risk Assessment
Human and Ecological Risk Assessment **2**(4)874-891, 1996

[STAN 00] STANEK III, E. J.; CALABRESE, E. J.
Daily Soil Ingestion Estimates for Children at a Superfund Site
Risk Analysis **20**(5)627-635, 2000

[STE 74] STEPHENS, M. A.
EDF Stastistics for Goodness of Fit and Some Comparisons
Journal of the American Statistical Association **69**(347)730-737, 1974

[STE 79] STEPHENS, M. A.
Tests of fit for the logistic distribution based on the empirical distribution function
Biometrika **66**(3)591-595, 1979

[STEI 02] STEINER, M; LINKOV, I.; YOSHIDA, S.
The role of fungi in the transfer and cycling of radionuclides in forest ecosystems
Journal of Environmental Radioactivity **58**(2-3)217-241, 2002

[STEV 09] STEVANOVIC, N.; MARKOVIC, V.; UROSEVIC, V.; NIKEZIC, D.
Determination of parameters of the Jacobi room model using the Brownian motion model
Health Physics **96**(1)48-54, 2009

[STRA 66] STRATONOVICH, R. L.
A New Representation for Stochastic Integrals and Equations
SIAM Journal on Control and Optimization **4**(2)362-371, 1966

[STI 04] STIBER, N. A.; SMALL, M. J.; PANTAZIDOU, M.
Site-Specific Updating and Aggregation of Bayesian Belief Network Models for Multiple Experts
Risk Analysis **24**(6)1529-1538, 2004

[SUG 78] SUGIURA, N.
Further Analysis of Data by Akaike's Information Criterion and the Finite Corrections
Communications in Statistics – Theory and Methods **7**(1)13-26, 1978

[SUN 95] SUN, H.
Monte Carlo Simulation of Radon Emanation from Dry Building Materials
Health Physics **68**(4)553-560, 1995

[SUN 10] SUN, K.; FIELD, R. W.; STECK, D. J.
Room Model Based Monte Carlo Simulation Study of the Relationship between the Airborne Dose Rate and the Surface-Deposited Radon Progeny
Health Physics **98**(1)29-36, 2010

[SWA 98] SWARTOUT, J. C.; PRICE, P. S.; DOURSON, M. L.; CARLSON-LYNCH, H. L.; KEENAN, R. E.
A Probabilistic Framework for the Reference Dose (Probabilistic RfD)
Risk Analysis **18**(3)271-282, 1998

[TAK 01] TAKEDA, S.; MINASE, N.; KIMURA, H.
Safety and Uncertainty Analyses for the Shallow-Land Disposal of Radionuclide Waste with Uranium Decay Chain
Proceedings of the ICEM Conference 2001

[TAY 85] TAYLOR, J. A.; JAKEMAN, A. J.
Identification of a distributional model
Communications in Statistics – Simulation and Computation **14**(2)497-508, 1985

[THI 03] THIERFELDT, S.; WÖRLEN, S.; SCHARTMANN, F.
Abschätzung der Kollektivdosis durch Freigaben in Deutschland
Endbericht zum Vorhaben StSch 4279, Brenk Systemplanung GmbH, Aachen, 2003

[THO 91] THOMPSON, K. M.; BURMASTER, D. E..
Parametric Distributions for Soil Ingestion by Children
Risk Analysis **11**(2)339-342, 1991

[TIE 94] TIERNEY, L.
Markov Chains for Exploring Posterior Distributions *(with discussion)*
The Annals of Statistics **22**(4)1701-1762, 1994

[TIR 08]] TIRMARCHE, M.
Conclusions following draft report of C1-task group 64 and MC meeting in BA end of October 2008 (Presentation at IAEA RASSC)
International Commission on Radiological Protection, 2008

[TOR 04] TORNØE, C. W.; JACOBSEN, J. L.; PEDERSEN, O.; HANSEN, T.; MADSEN, H.
Grey-box Modelling of Pharmacokinetic/Pharmacodynamic Systems
Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics **31**(5)401-417, 2004

[TRAN 04] TRAN, N. L.; BARRAJ, L.; SMITH, K.; JAVIER, A.; BURKE, T. A.
Combining Food Frequency and Survey Data to Quantify Long-Term Dietary Exposure: A Methyl Mercury Case Study
Risk Analysis **24**(1)19-30, 2004

[TRI 05] TRIVEDI, P. K.; ZIMMER, D. M.
Copola Modeling: An Introduction for Practitioners
Foundations and Trends in Econometrics **1**(1)1-111, 2005

[TSI 01] TSIONAS, E. G.
Likelihood and Posterior Shapes in Johnson's S_B System
Sankhya B **63**(1)3-9, 2001

[TUCK 03] TUCKER, W. T.; FERSON, S.
Probability bounds analysis in environmetal risk assessments (Technical Report)
Applied Biomathematics, Setauket, New York, 2003

[TÜV 05A] TÜV SÜDDEUTSCHLAND BAU UND BETRIEB GMBH
Vergleich der Berechnungsmethoden der Strahlenexposition in Europa, München, 2005
Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-2005-674

[TÜV 05B] TÜV INDUSTRIE SERVICE GMBH TÜV SÜD GRUPPE, ENERGIE UND TECHNOLOGIE
Sensitivitätsanalyse der Allgemeinen Berechnungsgrundlagen zu § 47 StrlSchV
München, Mai 2005
Schriftenreihe Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, BMU-2007-693

[TUYL 08] TUYL, F.; GERLACH, R.; MENGERSEN, K.
A Comparison of Bayes-Laplace, Jeffreys, and Other Priors: The Case of Zero Events
The American Statistician **62**(1)40-44, 2008

[TWEE 57A] TWEEDIE, M. C. K.
Statistical Properties of the Inverse Gaussian Distributions. I
The Annals of Mathematical Statistics **28**(2)362-377, 1957

[TWEE 57B] TWEEDIE, M. C. K.
Statistical Properties of the Inverse Gaussian Distributions. II
The Annals of Mathematical Statistics **28**(3)696-705, 1957

[UBA 97] UMWELTBUNDESAMT
Umwelt-Survey 1990/92 Band V: Trinkwasser
WaBoLu-Hefte, 5/97

[UBA 07] UMWELTBUNDESAMT
Evaluation von Standards und Modellen zur probabilistischen Expositionsabschätzung (Abschlussbericht zum Projekt Xprob);
Teil 1: Grundlagen der bevölkerungsbezogenen Expositionsmodellierung; Teil 2: Empfehlungen für Expositionsfaktoren; Teil 3: Szenarien; Teil 4: Anhang
WaBoLu-Hefte, 02/07 bis 05/07

[UCH 99] UCHAIKIN, V. V.; ZOLOTAREV, V. M.
Chance and Stability – Stable Distributions and their Applications
VSP International Science Publishers, 1999

[UHL 30] UHLENBECK, G. E.; ORNSTEIN, L. S.
On the Theory of the Brownian Motion
Physical Review **36**(5)823-841, 1930

[UN 10] UNITED NATIONS SCIENTIFIC COMMITTEE ON THE EFFECTS OF ATOMIC RADIATION
Uncertainty in Radiation Risk Estimation
United Nations General Assambly, A/AC.82/R.675/Rev.1, 21 July 2010

[UNNY 89] UNNY, T. E.
Stochastic partial differential equations in groundwater hydrology; Part 1: Theory
Stochastic Hydrology and Hydraulics **3**(2)135-153, 1989

[VAHL 04] VAHLBRUCH, J.-W.
Über den Transfer von natürlichen Radionukliden in terrestrischen Ökosystemen und die realistsche Modellierung der natürlichen Strahlenexposition in Norddeutschland (Dissertation), Fachbereich Physik der Universität Hannover, 2004

[VAND 10] VANDENBERGHE, S.; VERHOEST, N. E. C.; BUYSE, E.; DE BAETS, B.
A stochastic design rainfall generator based on copulas and mass curves
Hydrology and Earth System Sciences **14**(12)2429-22442, 2010

[VANG 81] VAN GENUCHTEN, M.TH.
Analytical Solutions for Chemical Transport with Simultaneous Adsorption, Zero-Order Production and First-Order-Decay
Journal of Hydrology **49**(3-4)213-233, 1981

[VANG 85] VAN GENUCHTEN, M.TH.
Convective-Dispersive Transport of Solutes Involved in Sequential First-Order Decay Reactions
Computers & Geosciences **11**(2)129-147, 1985

[VANK 07] VAN KAMPEN, N. G.
Stochastic Processes in Physics and Chemistry
North Holland (Third Edition), 2007

[VER 07] VERHAEGEN, M.; VERDULT, V.
Filtering and System Identification - A Least Squares Approach
Cambridge University Press, 2007

[VRBA 10] VRBA, T.
Uncertainty of in vivo assessment of actinides activity in human skeleton
Proceedings of Third European IRPA Congress, Helsinki, Finland, June 14-18, 2010

[VUO 06] VUORI, V.; ZALESKI, R. T.; JANTUNEN, M. J.
ExpoFacts - An Overview of European Exposure Factors Data
Risk Analysis **26**(3)831-843, 2006

[WAKE 96] WAKEFIELD, J.
The Bayesian Analysis of Population Pharmacokinetic Models
Journal of the American Statistical Association **91**(433)62-75, 1996

[WAL 94] WALLACE, L. A.; DUAN, N.; ZIEGENFUS, R.
Can Long-Term Exposure Distributions Be Predicted from Short-Term Measurements?
Risk Analysis **14**(1)75-85, 1994

[WAL 05] WALLACE, L.; WILLIAMS, R.
Validation of a Method for Estimating Long-Term Exposures Based on Short-Term Measurements
Risk Analysis **25**(3)687-694, 2005

[WALD 43] WALD, A.; WOLFOWITZ, J.
An Exact Test for Randomness in the Non-Parametric Case Based on Serial Correlation
The Annals of Mathematical Statistics **14**(4)378-388, 1943

[WALD 44] WALD, A.
On cumulative sums of random variables
The Annals of Mathematical Statistics **15**(3)283-296, 1944

[WALD 47] WALD, A.
Sequential Analysis
Wiley, New York, 1947

[WALK 06] WALKER, D. M.; PEREZ-BARBERIA, F. J.; MARION, G.
Stochastic Modelling of ecological processes using hybrid Gibbs samplers
Ecological Modelling **198**(1-2)40-52, 2006

[WALL 91] WALLEY, P.
Statistical Reasoning with Imprecise Probabilities
Chapman and Hall, London, 1991

[WALL 96] WALLEY, P.
Measures of uncertainty in expert systems
Artificial Intelligence **83**(1)1-58, 1996

[WANG 00] WANG, W.; WELLS, M. T.
Model Selection and Semiparametric Inference for Bivariate Failure-Time Data
Journal of the American Statistical Association **95**(449)62-72, 2000

[WANG 10] WANG, A.
Goodness-of-fit tests for archimedean copula models
Statistica Sinica **20**(1)441-453, 2010

[WANG 12] WANG, L.; GARNIER, H. (EDS.]
System Identification, Environmental Modelling, and Control System Design
Springer, 2012

[WEI 06] WEI, W. W. S.
Time Series Analysis: Univariate and Multivariate Methods (Second Edition)
Pearson Education, Inc., Wiley-VCH, 1999

[WEIB 51] WEIBULL, W.
A Statistical Distribution Function of Wide Applicability
Journal of Applied Mechanics **18**(3)293-297, 1951

[WEIS 99] WEISE, K.; WÖGER, W.
Messunsicherheit und Messdatenauswertung
Wiley-VCH, 1999

[WEIS 06] WEISE, K.; HÜBEL, K.; ROSE, E.; SCHLÄGER, M.; SCHRAMMEL, D.; TÄSCHNER, M.; MICHEL, R.
Bayesian Decision Thresholds, Detection Limit and Confidence Limits in Ionising-Radiation Measurement
Radiation Protection Dosimetry **121**(1)52-63, 2006

[WEIS 09] WEISE, K.; KANISCH, G.; MICHEL, R.; SCHLÄGER, M.; SCHRAMMEL, D.; TÄSCHNER, M.
Monte Carlo determination of the characteristic limits in measurement of ionising radiation—fundamentals and numerics
Radiation Protection Dosimetry **135**(3)169-196, 2009

[WHI 09] WHITE, R. H.; COTE, I.; ZEISE, L.; FOX, M.; DOMINICI, F.; BURKE, T. A.; WHITE, P. D.; HATTIS, D. B.; SAMET, J. M.
State-of-the-Science Workshop Report: Issues and Approaches in Low-Dose-Response Extrapolation for Environmental Health Risk Assessment
Environmental Health Perspectives **117**(2)283-287, 2009

[WHO 04] WORLD HEALTH ORGANIZATION, INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS)
IPCS Risk Assessment Terminology (Part 1: IPCS/OECD Key Generic Terms used in Chemical Hazard/Risk Assessment; Part 2: IPCS Glossary of Key Exposure Assessment Terminology; IPCS Harmonization Project Document No. 1)
Geneva, 2004

[WHO 05] WORLD HEALTH ORGANIZATION, INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS)
Principles of Characterizing and Applying Human Exposure Models
(IPCS Harmonization Project Document No. 3), Geneva, 2005

[WHO 08] WORLD HEALTH ORGANIZATION, INTERNATIONAL PROGRAMME ON CHEMICAL SAFETY (IPCS)
Uncertainty and Data Quality in Exposure Assessment (Part 1: Guidance Document on Characterizing and Communicating Uncertainty in Exposure Assessment; Part 2: Hallmarks of Data Quality in Chemical Exposure Assessment; IPCS Harmonization Project Document No. 6)
Geneva, 2008

[WIK 03] WIKLE, C. K.
Hierarchical Models in Environmental Science
International Statistical Review **71**(2)181-199, 2003

[WIL 90] WILLIAMSON, R. C.; DOWNS, D.
Probabilistic Arithmetic. I. Numerical Methods for Calculating Convolutions and Dependency Bounds
International Journal of Approximate Reasoning **4**(2)89-158, 1990

[WILD 93] WILD, P.; GILKS, W. R.
Algorithm AS 287: Adaptive Rejection Sampling from Log-Concave Density Functions
Journal of the Royal Statistical Society, Series **C 42**(4)701-709, 1993

[WOL 06] WOLBARST, A. B.; CHIU, W. A.; YU, C.; AIELLO, K.; BACHMAIER, J. T.; BASTIAN, R. K.; CHENG, J.-J.; GOODMAN, J.; HOGAN, R.; JONES, A. R.; KAMBOJ, S.; LENHARTT, T.; OTT, W. R.; RUBIN, A.; SALOMON, S. N.; SCHMIDT, D. W.; SETLOW, L. W.
Radioactive Materials in Biosolids: Dose Modeling
Health Physics **90**(1)16-30, 2006

[WOLL 09] WOLLRATH, J.; PREUSS, J.; BECKER, D. A.; MOENIG, J.
Numerical Assessment of the Long-Term Safety of the Morsleben Repository for Low- and Intermediate-Level Radioactive Waste
Proceedings of the ICEM Conference 2009

[WU 04] WU, F.-C.; TSANG, Y.-P.
Second-order Monte Carlo uncertainty/variability analysis using correlated model parameters: application to salmonid embryo survival risk assessment
Ecological Modelling **177**(3-4)393-414, 2004

[XU 95] XU, M.; ECKSTEIN, Y
Use of Weighted Least-Squares Method in Evaluation of the Relationship between Dispersivity and Field Scale
Ground Water **33**(3)905-908, 1995

[YAN 10] YANKOVICH, T. L.; BATLLE, J. V.; VIVES-LYNCH, S.; BERESFORD, N. A.; BARNETT, C. L.; BEAUGELIN-SEILLER, K.; BROWN, J. E.; CHENG, J.-J.; COPPLESTONE, D.; HELING, R.; HOSSEINI, A.; HOWARD, B. J.; KAMBOJ, S.; KRYSHEV, A. I.; NEDVECKAITE, T.; SMITH, J. T.; WOOD, M. D.
An international model validation exercise on radionuclide transfer and doses to freshwater biota
Journal of Radiological Protection **30**(2)299-340, 2010

[YU 00] YU, C.; LEPOIRE, D.; GNANAPRAGASAM, E.; ARNISH, J.; KAMBOJ, S.; BIWER, B. M.; CHENG, J.-J.; ZIELEN, A.; CHEN, S. Y.
Development of Probabilistic REASRAD 6.0 and RESRAD-BUILD 3.0 Computer Codes (NUREG/CR-6697, ANL/EAD/TM-98)
Argonne National Laboratory, Argonne, November 2000

[YU 01] YU, C.; ZIELEN, A. J.; CHENG, J.-J.; LEPOIRE, D. J.; GNANAPRAGASAM, E.; KAMBOJ, J.; ARNISH, J.; WALLO III, A.; WILLIAMS, W. A.; PETERSON, H.
User's Manual for RESRAD Version 6 (ANL/EAD-4)
Argonne National Laboratory, Argonne, July 2001

[YU 04] YU, J.; WEHRLY, T. E.
An approach to the residence time distribution for stochastic multi-compartment models
Mathematical Biosciences **191**(2)185-205, 2004

[ZAD 65] ZADEH, L. A.
Fuzzy sets
Information and Control **8**(3)338-353, 1965

[ZAD 75] ZADEH, L. A.
The concept of a linguistic variable and its application to approximate reasoning, I, II, III
Information Science **8**(3)199-249, **8**(4)301-357, **9**(1)43-80, 1975,

[ZAD 78] ZADEH, L. A.
Fuzzy sets as a basic for a theory of possibility
Fuzzy Sets and Systems **1**(1)3-28, 1978

[ZHA 06] ZHANG, Y.; BENSON, D. A.; MEERSCHAERT, M. M.; LABOLLE, E. M.; SCHEFFLER, H.-P.
Random walk approximation of fractional-order multiscaling anomalous diffusion
Physical Review **E 74**(2)026706-1/10, 2006

[ZHAN 07] ZHANG, L.; SINGH, V. P.
Trivariate Flood Frequency Analysis Using the Gumbel-Hougaard Copula
Journal of Hydrologic Engineering **12**(4)431-439, 2007

[ZHAO 04] ZHAO, Y.; FREY, H. C.
Quantification of Variability and Uncertainty for Censored Data Sets and Application to Air Toxic Emission Factors
Risk Analysis **24**(4)1019-1034, 2004

[ZHE 02] ZHENG, C.; BENNET, G. D.
Applied Contaminant Transport Modelling (Second Edition)
John Wiley and Sons, Inc., New York, 2002

[ZHEN 04] ZHENG, J.; FREY, H. C.
Quantification of Variability and Uncertainty Using Mixture Distributions: Evaluation of Sample Size, Mixing Weights, and Separation between Components
Risk Analysis **24**(3)553-571, 2004

[ZHEN 05] ZHENG, J.; FREY, H. C.
Quantitative Analysis of Variability and Uncertainty with Known Measurement Error: Methodology and Case Study
Risk Analysis **25**(3)663-675, 2005

[ZIO 09] ZIO, E.; CADINI, F.; AVRAM, D.; GIROTTI; T.; LUCE; A.; TAGLIONI, A.;
Monte Carlo Simulation of a Compartment Model of Radionuclide Migration at a Radioactive Waste Repository
Proceedings of the ICEM Conference 2009

- Anhänge A, B, C -

INHALTSVERZEICHNIS ZU DEN ANHÄNGEN

Seite

ANHANG A: GLOSSAR 456

ANHANG B: GRUNDLAGEN DER STATISTIK 462

B.1 Grundlegende Begriffe und Definitionen 463

B.1.1 Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion 463

B.1.2 Erwartungswert und Varianz 464

B.1.3 Multivariate Zufallsgrößen, Kovarianz, Korrelationskoeffizient 465

B.1.4 Zerlegung der Varianz einer Funktion von zwei Variablen 467

B.2 Punktschätzer 468

B.2.1 Stichprobenmittelwert, Stichprobenvarianz, Stichprobenkorrelationskoeffizient 468

B.2.2 Schiefe und Wölbung 470

B.2.3 Abhängigkeitsmaße 471

B.3 Copulas 472

B.3.1 Grundlegende Begriffe und Aussagen der Copula-Theorie 473

B.3.2 Familien von Copulas 478

B.3.2.1 Copulas von elliptischen Verteilungen 479

B.3.2.2 Archimedische Copulas 481

B.3.2.3 MARSHALL-OLKIN-Copula 488

B.3.3 Berechnung der empirischen Copula und KENDALL-Verteilung 491

B.4 Stochastische Prozesse und Differentialgleichungen 492

B.4.1 Zeitkontinuierliche stochastische Prozesse 492

B.4.1.1 Definition von LÉVY-Prozessen 493

B.4.1.2 Standard-WIENER-Prozess (SWP) 493

B.4.1.3 Elementarer POISSON-Prozess (EPP) 495

B.4.1.4 Zusammengesetzte POISSON-Prozesse (ZPP) 499

B.4.1.5 Darstellung von LÉVY-Prozessen 501

B.4.1.6 Gammaprozess 503

B.4.2 Stochastische Differentialgleichungen (SDE) 506

B.4.2.1 SDE mit WIENER-Prozess als Rauschquelle 507

B.4.2.2 SDE mit POISSON-Prozess als Rauschquelle 510

ANHANG C: UNIVARIATE PARAMETRISCHE VERTEILUNGEN 512

C.1 Vorbemerkungen 513

C.2 Stetige Verteilungen mit unbegrenztem Definitionsbereich ($-\infty < X < \infty$) 513

C.2.1 Normalverteilung $X \sim N(\mu,\sigma)$ 513

C.2.2 STUDENT'sche t-Verteilung $X \sim t(\nu)$ 515

C.3 Stetige Verteilungen für positiv definierte Zufallsvariable ($x \geq 0$) 517
C.3.1 Chi-Quadrat-Verteilung $X \sim \chi^2(\nu)$ 517
C.3.2 Lognormalverteilung $X \sim Ln(\mu,\sigma)$ 518
C.3.3 Exponentialverteilung $X \sim Ex(\lambda)$ 519
C.3.4 Gammaverteilung $X \sim Gam(\alpha,\lambda)$ oder $X \sim Ga(\alpha,\beta)$ 520
C.3.5 WEIBULL-Verteilung $X \sim We(\alpha,\beta)$ 523
C.3.6 LOMAX-Verteilung $X \sim Lo(\alpha,\eta)$ 525
C.3.7 WALD-Verteilung $X \sim Wa(\mu,\lambda)$ 528
C.4 Stetige Verteilungen für beidseitig begrenzte Zufallsvariable ($0 \leq x \leq 1$) 530
C.4.1 Gleichverteilung $X \sim U$ 530
C.4.2 Betaverteilung $X \sim Bt(\alpha,\beta)$ 530
C.4.3 KUMARASWAMY-Verteilung $X \sim Ku(\alpha,\beta)$ 533
C.4.4 JOHNSON-S_B-Verteilung $X \sim JS_B(\gamma,\delta)$ 534
C.4.5 Log-PEARSON-3-Verteilung $X \sim LP3(\alpha,\lambda)$ 535
C.4.6 Dreiecksverteilung Tr(a,b,m) 536
C.5 Diskrete Verteilungen 538
C.5.1 BERNOULLI-Verteilung $X \sim Ber(p)$ 538
C.5.2 Geometrische Verteilung $X \sim Geo(p)$ 538
C.5.3 Binomialverteilung $X \sim Bin(n, p)$ 538
C.5.4 POISSON-Verteilung $X \sim Poi(\lambda)$ 539
C.5.5 Negative Binomialverteilung $X \sim NBin(r,p)$ oder $NegB(\alpha,\beta)$ oder $NB(\lambda,\delta)$ 541

ANHANG A: GLOSSAR

A-D-Test: (Abkürzung für Anderson-Darling-Test): Anpassungstest zur Prüfung der Hypothese, dass eine gegebene iid Zufallsstichprobe einer bestimmten parametrischen Verteilung zugeordnet werden kann, der auf einem funktionalen Maß für den Abstand zwischen der empirischen und der angenommenen Verteilungsfunktion basiert, wobei die Randbereiche der statistischen Verteilung verstärkt gewichtet werden.

aleatorische Unsicherheit: (siehe Variabilität)

Chi-Quadrat-Test: Anpassungstest (nach PEARSON) zur Prüfung der Hypothese, dass eine gegebene iid Zufallsstichprobe einer bestimmten Verteilung zugeordnet werden kann. Er basiert für festzulegende Intervalle des Definitionsbereichs der Zufallsgröße auf dem Vergleich erwarteter und beobachteter Häufigkeit von Realisierungen in diesen Intervallen. Die Entscheidung erfolgt mit der asymptotisch (für sehr große Stichprobenumfänge) geltenden χ^2-Verteilung.

Dosiskoeffizient: Der Dosiskoeffizient ist der Quotienten einer Dosis zur Aktivitätszufuhr eines radioaktiven Stoffes. Dieser Begriff (bzw. auch der Begriff Dosiskonversionsfaktor) dienen auch zur Bezeichnung anderer Koeffizienten, die Aktivitäten oder Aktivitätskonzentrationen mit Dosen oder Dosisleistungen verknüpfen (z. B. die externe Dosisleistung in einer bestimmten Entfernung oberhalb einer Fläche mit einer Deposition einer bestimmten Aktivität pro Flächeneinheit eines bestimmten Radionuklids auf dieser Fläche [BFS 09]). Zur Berechnung effektiver Folgedosen infolge Ingestion bzw. Inhalation von Radionukliden sind u. a. in [EU 96] entsprechende Dosiskoeffizienten für potentiell relevante Radionuklide für 6 Altersgruppen der allgemeinen Bevölkerung sowie für Beschäftigte zusammengestellt.

effektive Dosis: Die effektive Dosis E ist die Summe der gewichteten Organdosen H_T,

$$E = \sum_T w_T \cdot H_T ,$$

wobei mit w_T die Organ- bzw. Gewebewichtungsfaktoren bezeichnet sind (siehe Tabelle 3 und Anhang A in [ICRP 07]). Die Einheit von E ist $J \cdot kg^{-1}$ und trägt den speziellen Namen Sievert (Sv).

effektive Folgedosis: Die effektive Folgedosis $E(\tau)$ ist analog zur effektiven Dosis die gewichtete Summe der Organfolgedosen $H_T(\tau)$, wobei τ den Integrationszeitraum nach einer Aktivitätszufuhr bezeichnet.

epistemische Unsicherheit: (siehe Unsicherheit)

Exposition:	Konzentration oder Menge eines speziellen Stoffes, der ein Zielorganismus, ein System oder eine (Sub-)Population mit einer bestimmten Häufigkeit und Dauer erreicht, bzw. Einwirkung einer Strahlung
Expositionsroute:	Ingestion, Inhalation und dermale Aufnahme sowie äußere Exposition durch Strahlung, kennzeichnet den Mechanismus der Exposition
Expositionspfad:	Weg, den ein Schadstoff von einer Quelle (z. B. der Ableitung aus einer Anlage oder Einrichtung) über einen Ausbreitungs-/Transportvorgang in den Umweltmedien bis zur Exposition des Menschen nimmt.
Expositionsszenario:	Gesamtheit der Bedingungen und Annahmen zu Quellen, Expositionspfaden und Mengen bzw. Konzentrationen relevanter Schadstoffe, der Art, Anzahl bzw. Charakteristika belasteter Organe, Personen oder Personengruppen, die zur Modellierung und Abschätzung von Expositionen in einer gegebenen oder einer zukünftigen Situation herangezogen werden.
Häufigkeitsverteilung:	Tabellarische oder grafische Zusammenstellung/Darstellung zur Häufigkeit der Realisierungen einer Zufallsgröße.
iid	unabhängig und gleichartig verteilt (englisch: independent and identically distributed). Ist eine grundlegende Annahme zu Werten einer Stichprobe für die statistische Inferenz zu parametrischen Verteilungen.
K-S-Test:	(Abkürzung für Kolmogorov-Smirnov-Test): Anpassungstest zur Prüfung der Hypothese, dass eine gegebene iid Zufallsstichprobe einer bestimmten parametrischen Verteilung zugeordnet werden kann, der auf dem maximalen Abstand zwischen der empirischen und angenommenen Verteilungsfunktion basiert.
Likelihood-Funktion:	Produkt der Wahrscheinlichkeitsdichten einer parametrischen Verteilung mit Werten der Zufallsgröße X für die einzelnen Stichprobendaten, als Funktion der unbekannten Verteilungsparametern der Population betrachtet wird; stellt ein Maß für die Glaubwürdigkeit dafür dar, dass die Stichprobe aus der betrachteten Verteilungsfamilie stammt (in Abhängigkeit von den möglichen Werten der Verteilungsparameter).
LL-Test:	(Abkürzung für Log-Likelihood-Test): Test zum Vergleich der Plausibilität von unterschiedlichen Verteilungsfamilien, die als generierende Population einer gegebenen iid Zufallsstichprobe in Betracht gezogen werden, der auf der Relation der Maxima der jeweiligen Likelihood-Funktionen bzw. der Differenz ihrer Logarithmen basiert.
Medianwert:	50%-Perzentil (x_{50}) der statistischen Verteilung einer Zufallsgröße X.
Messunsicherheit:	Zu dem aus einer Messung resultierenden Schätzwert einer physikalischen Größe grenzt die Messunsicherheit einen Wertebereich ein, in welchem der wahre Wert der Messgröße mit einer vorgegeben Wahrscheinlichkeit liegt. Das Ergebnis einer Messung ist somit durch Schätzer und Messunsicherheit definiert; es wird in der Form (Schätzwert ± Messunsicherheit) angegeben.

Mittelwert: Der Mittelwert bzw. Erwartungswert E[X] einer Zufallsgröße X beschreibt den durchschnittlichen Wert der Realisierungen von X und stellt ein Maß für die Lage des Schwerpunktes der statistischen Verteilung dar, er kann als 1. zentrale Moment der Zufallsgröße berechnet werden.

mittlere Energiedosis: Die mittlere Energiedosis $D_{T,R}$ ist die durch eine (ionisierende) Strahlung R auf eine Gewebe bzw. Organ T übertragene mittlere Energie, bezogen auf die Masse dieses Gewebes oder Organs. Die Einheit von $D_{T,R}$ ist $J \cdot kg^{-1}$ und trägt den speziellen Namen Gray (Gy).

ML-Schätzer (Abkürzung für Maximum-Likelihood-Schätzer); schätzt die Parameter einer parametrischen Verteilungsfamilie durch Bestimmung des Maximums der Likelihood-Funktion unter der Annahme, dass die Stichprobenwerte als iid Zufallsgrößen einer bestimmten Population angesehen werden können.

Modalwert: Der Modalwert (auch Modus genannt) ist ein Wert aus der statistischen Verteilung einer Zufallsgröße, dem die größte Häufigkeit beizumessen ist bzw. bei dem die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Maximum erreicht. Es können auch mehrere Modalwerte in einer statistischen Verteilung auftreten (insbesondere in gemixten Verteilungen), die dann als multimodale Verteilungen bezeichnet werden.

Modellunsicherheit: Auswirkung von fehlendem Wissen, unvollständiger Information oder von vereinfachenden Annahmen bei der Modellierung eines Expositionspfades, einer Extrapolation von Modellen über den Rahmen hinaus, in dem diese anhand von empirischen Untersuchungen/Daten validiert wurden. Hierzu gehören aber auch die unzureichende bzw. nicht adäquate Berücksichtigung von Korrelationen zwischen Modellparametern sowie die Auswirkungen der Wahl idealisierter statistischer Verteilungen für einzelne Modellparameter.

Monte-Carlo-Simulation: Numerisches Verfahren, mit dem für alle Modellvariablen, die durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen spezifiziert sind, aus ihren Verteilungen zufällige Werte generiert werden, wonach zufällige Realisierungen der Zielgröße resultieren. Nach sehr vielen Wiederholungen dieser Prozedur erhält man für die Zielgröße eine statistische Verteilung der möglichen Werte, die mit zunehmender Anzahl ausgeführter Berechnungen die Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Verteilungsfunktion der Zielgröße verbessert approximiert.

Organdosis: Die Organdosis H_T (auch als Äquivalentdosis bezeichnet) ist die Summe der in einem Organ oder Gewebe T durch Strahlungen R verursachten mittleren Energiedosen $D_{T,R}$,

$$H_T = \sum_R w_R \cdot D_{T,R} \ ,$$

gewichtet mit Strahlungswichtungsfaktoren w_R nach Tabelle 2 in [ICRP 07]. Die Einheit von H_T ist $J \cdot kg^{-1}$ mit dem speziellen Namen Sievert (Sv).

Organfolgedosis: Die Organfolgedosis $H_T(\tau)$ ist das Zeitintegral der Organdosisleistung in einem bestimmten Gewebe oder Organ T, die eine Referenzperson nach der Zufuhr eines radioaktiven Stoffes in den Körper erhalten wird, wobei τ den Integrationszeitraum nach einer Aktivitätszufuhr bezeichnet. Er beträgt für Erwachsene 50 Jahre und erstreckt sich für Kinder bis zu einem Alter von 70 Jahren. $H_T(\tau)$ wird nur für interne Strahlenexpositionen berechnet und berücksichtigt die biologische und physikalische Halbwertszeit zugeführter Radionuklide sowie ggf. den Aufbau von radioaktiven Tochternukliden.

Parameterunsicherheit: Ungewissheit über den wahren Wert eines Modellparameters oder die realen Kenngrößen seiner statistischen Verteilung. Parameterunsicherheiten haben überwiegend ihre Ursache in der realen Variabilität der Parameter, mit denen z. B. primäre Strahlenquellen, die Ausbreitung von Radionukliden in den Umweltmedien und in der Biosphäre sowie schließlich die Exposition von Personen modelliert werden, da immer nur eine begrenzte Stichprobe zur Schätzung von Modell- bzw. Verteilungsparametern zur Verfügung steht. Parameterunsicherheiten werden aber auch durch Messunsicherheiten beeinflusst. Daneben können qualitative Aspekte, wie die Übertragung von Daten aus früheren Untersuchungen auf eine aktuelle Situation (ungewisse Repräsentativität) oder die Bezugnahme auf Expertenschätzungen (partielle Unkenntnis, Unschärfe der Information) zur Unsicherheit der Schätzung von Parameterwerten beitragen.

Perzentil: Das Perzentil der Ordnung P (P%-Perzentil) der statistischen Verteilung der Zufallsgröße X ist der kleinste Wert x_P, der von P % der Realisierungen von X nicht überschritten wird (wird P nicht in Prozent sondern einen Anteil p, $0 < p < 1$, angegeben, so spricht man auch vom p-Quantil).

Punktschätzer: Wert einer Stichprobenfunktion/Schätzfunktion für eine Kenngröße, die zur Charakterisierung der statistischen Verteilung einer Zufallsgröße verwendet wird (z. B. für den Mittelwert/Erwartungswert, die Varianz oder Perzentile).

Referenzmensch: Idealisierter Mann bzw. idealisierte Frau mit charakteristischen Merkmalen, die von der ICRP für Zwecke des Strahlenschutzes definiert wurden, d. h. mit anatomischen und physiologischen Eigenschaften, wie sie in [ICRP 02] definiert sind.

Referenzperson: Eine idealisierte Person, für die Organdosen errechnet werden, indem die entsprechenden Dosen des männlichen und weiblichen Referenzmenschen gemittelt werden. Die Organdosen der Referenzperson werden mit den Gewebewichtungsfaktoren multipliziert, um effektive Dosen zu berechnen. Für Referenzpersonen werden Verhaltensparameter definiert.

Schiefe: Kenngröße der statistischen Verteilung einer Zufallsgröße X, die als Maß der Asymmetrie der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Häufigkeitsverteilung durch das 3. zentrale Moment der Zufallsgröße bestimmt ist.

Stratifizierung: Unter Stratifizierung (bzw. Abschichtung) versteht man die Aufteilung einer Gesamtheit in verschiedene Kategorien, Gruppen, Teilpopulationen (Strata), wie z. B. die Einteilung von Personen der allgemeinen Bevölkerung in sechs Altersgruppen für Expositionsabschätzungen oder die Zuordnung meteorologischer Gegebenheiten zu sechs Stabilitätsklassen für die Modellierung von Schadstoffausbreitungen über den Luftpfad. Durch eine Stratifizierung wird die Variabilität relevanter Parameter für die einzelnen Strata gegenüber der ursprünglichen Gesamtheit reduziert.

Szenariounsicherheit: Auswirkung von fehlendem Wissen oder unvollständiger Information bzgl. einer adäquaten Beschreibung von Expositionsszenarien, wie sie z. B. aus dem Unwissen über zukünftige natürliche oder anthropogene Einwirkungen auf Schadstoffquellen und Migrationswege, über die Lebensbedingungen von aktuell oder potentiell exponierten Personen oder durch unvollständige Analyse möglicher Expositionspfade resultieren können.

Unsicherheit: (wird auch als **epistemische Unsicherheit** bezeichnet) Auswirkung von fehlendem Wissen oder unvollständiger Information bzgl. spezieller Aspekte, Faktoren oder Parameter der Beschreibung des aktuellen bzw. der Prognose eines zukünftigen Zustandes eines untersuchten Systems. Die Unsicherheit resultiert aus subjektiven Merkmalen der Systemanalyse und kann grundsätzlich durch zusätzliche Untersuchungen reduziert werden. Bei Expositionsabschätzungen kann zwischen Szenariounsicherheiten, Modellunsicherheiten und Parameterunsicherheiten unterschieden werden.

Wölbung: Kenngröße der statistischen Verteilung einer Zufallsgröße X, die als Maß der Krümmung der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Häufigkeitsverteilung durch das 4. zentrale Moment der Zufallsgröße bestimmt ist.

Variable: Beobachtbarer oder messbarer Modellparameter, der in Abhängigkeit von konkreten Rahmenbedingungen unterschiedliche Werte annehmen kann, die räumlich und/oder zeitlich bedingt sind bzw. einer statistischen Verteilung innerhalb einer Grundgesamtheit unterliegen (z. B. Verhaltensparameter in einer Personengruppe; Aktivitätskonzentration in einem Umweltmedium).

Variabilität: (wird auch als **aleatorische Unsicherheit** bezeichnet) Heterogenität, Zeitabhängigkeit oder auch Diversität der Werte eines Modellparameters, die auch durch zusätzliche Untersuchungen/Messungen nicht reduziert, aber mit höherer Konfidenz quantifiziert werden kann.

Varianz: Die Varianz (σ^2) ist ein Maß der Variabilität einer Zufallsgröße, das durch ihr 2. zentrales Moment (mittlere quadratische Streuung um den Mittelwert) bestimmt ist.

Verteilungsfunktion: Die Verteilungsfunktion $F_X(x)$ (genauer: kumulative Verteilungsfunktion) zeigt die Variabilität einer Zufallsgröße X in tabellarischer oder grafischer Form bzw. als mathematische Funktion bestimmter Verteilungsparameter auf. Sie ist eine monoton nicht fallende Funktion die jedem möglichen Wert

x des Definitionsbereiches von X eine bestimmte Wahrscheinlichkeit p ($0 \leq p \leq 1$) zuordnet, mit der dieser Wert durch die Realisierungen von X unterschritten wird. Man unterscheidet parametrische Verteilungsfunktionen (sie werden durch analytische Funktionen beschrieben, die von bestimmten Parametern abhängen) und empirische Verteilungsfunktionen (diese werden durch die einzelnen Werte einer Stichprobe bestimmt, denen allen gleiche Wahrscheinlichkeiten des Auftretens beigemessen werden).

Wahrscheinlichkeits-dichte: Mathematische Funktion $f_X(x)$, mit der Variabilität einer Zufallsgröße X sowie die Wahrscheinlichkeit/Häufigkeit des Auftretens von Realisierungen aus Intervallen des Definitionsbereiches von X charakterisiert wird. Sie stellt für stetige Verteilungen die 1. Ableitung der Verteilungsfunktion $F_X(x)$ dar. Somit entspricht die Wahrscheinlichkeit der Realisierungen von X im Intervall $[x_a, x_e]$ dem Integral der Funktion $f_X(x)$ über dieses Intervall.

Zufallsvariable: Als Zufallsvariable (auch Zufallsgröße) bezeichnet man eine Funktion, die den Ergebnissen eines Zufallsexperiments (d. h. einer zufälligen Stichprobe) so genannte Realisationen als Werte zuordnet. Es wird zwischen diskreten Zufallsvariablen (die Funktion kann nur abzählbar endlich oder unendlich viele Werte annehmen) und kontinuierlichen/stetigen Zufallsvariablen (die Funktion kann alle Werte aus einem Kontinuum annehmen und durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte charakterisiert werden) unterschieden.

ANHANG B

GRUNDLAGEN DER STATISTIK

B.1 Grundlegende Begriffe und Definitionen

B.1.1 Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion

Ist X eine kontinuierliche Zufallsvariable, deren Verteilung durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ spezifiziert ist (engl.: probability density function, pdf),

$$f_X(x|\boldsymbol{\theta}) \geq 0 \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f_X(x \mid \boldsymbol{\theta})dx = 1, \tag{B-1}$$

wobei $\boldsymbol{\theta} = \{\theta_1, \theta_2, \ldots)$ der Vektor der Verteilungsparameter ist, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass X nicht größer als ein bestimmter Wert x ist[1], durch ihre kumulative Verteilungsfunktion (engl.: cumulative distribution function, cdf) $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ gegeben:

$$F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) = \Pr(X \leq x \mid \boldsymbol{\theta}) = \int_{-\infty}^{x} f_X(t \mid \boldsymbol{\theta})dt. \tag{B-2}$$

$F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ ist eine positive, nicht fallende Funktion von x mit

$$0 \leq F_X(x|\boldsymbol{\theta}) \leq 1 \quad \text{und} \quad \lim_{x\to\infty}(F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) = 1. \tag{B-3}$$

Eine kurze Schreibweise zur Kennzeichnung der Art der Verteilung einer Zufallsgröße ist $X \sim \Phi(\boldsymbol{\theta})$, wobei Φ für den Typ der parametrischen Verteilung steht und $\boldsymbol{\theta}$ die Verteilungsparameter angibt (z. B. bezeichnet $X \sim N(\mu,\sigma)$ eine normal verteilte Zufallsgröße mit dem Erwartungswert $\mu = E[X]$ und der Standardabweichung $\sigma = \sqrt{\mathrm{Var}[X]}$; vgl. Anhang C).

Das p-Quantil x_p (zur Wahrscheinlichkeit p, $0 < p < 1$) bzw. das P%-Perzentil x_P (mit $P = p \cdot 100$) ist jener Wert der Zufallsvariablen X, der mit der Wahrscheinlichkeit p nicht überschritten wird:

$$F_X(x_p|\boldsymbol{\theta}) = p. \tag{B-4}$$

Eine Zufallsvariable X heißt diskret, wenn sie nur endlich oder abzählbar unendlich viele Werte x_i ($i = 1, 2, \ldots$) annehmen kann. Sie wird durch eine Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion (engl.: probability mass function, pmf) beschrieben,

$$f_X(x_i|\boldsymbol{\theta}) = \Pr(X = x_i|\boldsymbol{\theta}) = p_i \quad \text{mit } 0 \leq p_i \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_i p_i = 1, \tag{B-5}$$

wobei pi die Wahrscheinlichkeiten der möglichen Realisierungen x_i bei gegebenen Verteilungsparametern $\boldsymbol{\theta}$ sind. Die kumulative Verteilungsfunktion für diskrete Zufallsvariable ist:

$$F_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) = \Pr(X \leq x \mid \boldsymbol{\theta}) = \sum_{x_i \leq x} \Pr(X = x_i \mid \boldsymbol{\theta}) = \sum_{i:x_i \leq x} p_i. \tag{B-6}$$

---

[1] In der Wahrscheinlichkeitstheorie/Statistik ist es üblich, Zufallsgrößen mit Großbuchstaben und ihre Realisierungen mit kleinen Buchstaben zu bezeichnen. Im vorliegenden Bericht schließen wir und dieser Konvention möglichst an.

Eine Stichprobe vom Umfang n, $\{X\}_n$, besteht aus n Zufallsgrößen $X_1, X_2, \ldots, X_n$ (bzw. den nach der Größe aufsteigend geordneten Größen $X_{(1)}, X_{(2)}, \ldots, X_{(n)}$). Die empirische Verteilungsfunktion ist mit diesen Werten definiert durch:

$$F_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < X_{(1)} \\ i/n & \text{für } X_{(i)} \le x < X_{(i+1)} \quad i = 1, 2, \ldots, n-1. \\ 1 & \text{für } X_{(n)} \le x \end{cases} \tag{B-7}$$

Anmerkung: Für graphische Darstellungen und Regressionsberechnungen für Realisierungen $\{x\}_n$ ist es oft ausreichend bzw. auch angebracht, die empirische Verteilungsfunktion nur an den Stellen $x_{(i)}$ zu betrachten und hierfür mittlere Funktionswerte $F_n(x_{(i)}) = (i - 0{,}5)/n$ anzusetzen (i = 1, 2, …, n).

B.1.2 Erwartungswert und Varianz

Die beiden wichtigsten Kenngrößen statistischer Verteilungen sind ihr Erwartungswert und ihre Varianz, die für kontinuierliche Zufallsvariable durch folgende Integrale definiert sind:

$$E_X = E[X] = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) dx\,, \tag{B-8}$$

$$\mathrm{Var}[X] = E\left[(X - E_X)^2\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E_X)^2 \cdot f_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) dx\,. \tag{B-9}$$

Neben der Definition der Varianz nach Gl. (B-9) ist folgende alternative Formel nützlich, die sich unmittelbar nach Auflösung des Quadrats $(X - E_X)^2$ ergibt.

$$\mathrm{Var}[X] = E\left[(X - E_X)^2\right] = E\left[X^2\right] - E_X^2\,. \tag{B-10}$$

Der Erwartungswert einer durch X mittels einer Funktion g(X) transformierten Zufallsvariable ist:

$$E[g(X)] = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \cdot f_X(x \mid \boldsymbol{\theta}) dx\,. \tag{B-11}$$

Die mit Gl. (B-9) definierte Varianz ist ein spezieller Fall von Gl. (B-11), und zwar für die Funktion $g(X) = (X - E_X)^2$.

Anmerkung: Der Erwartungswert E_X ist der Wert der Zufallsgröße X, für den sich die kleinste mittlere quadratische Abweichung von X ergibt, die dann durch Var[X] bestimmt ist. Es sei c eine Konstante. Beachtet man, dass gemäß Gl. (B-11) der Erwartungswert einer Summe von X abhängiger Funktionen gleich der Summe der Erwartungswerte dieser Funktionen ist und dass nach Gl. (B-1) der Erwartungswert einer festen Größe/Konstante gleich dieser Größe ist, so folgt:

$E[(X - c)^2] = E[(X - E_X + E_X - c)^2] = E[(X - E_X)^2] + (E_X - c)^2 + 2 \cdot E[X - E_X] \cdot (E_X - c)$.

Der letzte Term der rechten Seite dieser Gleichung verschwindet wegen $E[X - E_X] = E_X - E_X = 0$. Der erste Term ist nicht beeinflussbar; er stellt gemäß Gl. (B-9) die Varianz der Zufallsgröße X dar. Der mittlere Term ist eine nichtnegative Konstante, die mit $c = E_X$ zu Null wird. Dies beweist die obige Feststellung.

Aus den obigen Definitionen des Erwartungswertes und der Varianz der Zufallsgröße X resultieren unmittelbar auch die beiden folgenden nützlichen Beziehungen für lineare Transformationen von X:

$$E[a \cdot X + b] = a \cdot E_X + b\,, \tag{B-12}$$

$$\mathrm{Var}[a \cdot X + b] = a^2 \cdot \mathrm{Var}[X]\,. \tag{B-13}$$

Für den Erwartungswert und die Varianz einer diskreten Zufallsgröße gelten analog zu den Gleichungen (B-8) und (B-9) die Beziehungen

$$E_X = E[X] = \sum_i x_i \cdot p_i\,, \tag{B-14}$$

$$\mathrm{Var}[X] = E\left[(X - E_X)^2\right] = \sum_i (x_i - E_X)^2 \cdot p_i\,. \tag{B-15}$$

B.1.3 Multivariate Zufallsgrößen, Kovarianz, Korrelationskoeffizient

Sind für probabilistische Expositionsabschätzungen mehrere Modellparameter als Zufallsvariable definiert, so sind diese mit multivariaten Wahrscheinlichkeitsdichten bzw. Verteilungsfunktionen zu beschreiben. Man spricht dann auch von multivariaten Zufallsgrößen. Im bivariaten Fall wird die zweidimensionale Zufallsgröße (X_1, X_2) durch die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_{1,2}(x_1,x_2) \geq 0 \quad \text{mit} \quad \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,2}(x_1, x_2)\,dx_1 dx_2 = 1, \tag{B-16}$$

charakterisiert (zur Verkürzung der folgenden Darstellungen wird hier auf die explizite Angabe der Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ verzichtet). Die gemeinsame kumulative Verteilungsfunktion ist:

$$F_{1,2}(x_1, x_2) = \Pr(X_1 \leq x_1;\, X_2 \leq x_2) = \int_{-\infty}^{x_1}\int_{-\infty}^{x_2} f_{1,2}(u, v)\,du\,dv\,. \tag{B-17}$$

$F_{1,2}(x_1,x_2)$ ist eine positive, nicht fallende Funktion von x_1 und x_2 mit

$$0 \leq F_{1,2}(x_1,x_2) \leq 1 \quad \text{und} \quad \lim_{x_1 \to \infty, x_2 \to \infty} F_{1,2}(x_1, x_2) = 1\,. \tag{B-18}$$

Aus der gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{1,2}(x_1,x_2)$ können durch Integration über x_1 bzw. x_2 die Randdichten der beiden Zufallsvariablen berechnet werden,

$$f_1(x_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,2}(x_1, x_2)\,dx_2 \quad \text{und} \quad f_2(x_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,2}(x_1, x_2)\,dx_1\,. \tag{B-19}$$

Aus diesen beiden (univariaten) Verteilungen lassen sich mit den Gleichungen (B-8) und (B-9) die Erwartungswerte und Varianzen der beiden Zufallsvariablen X_1 und X_2 berechnen.

Eine wichtige Kenngröße bivariater Verteilungen ist die Kovarianz der beiden Zufallsvariablen:

$$\begin{aligned} \mathrm{Cov}[X_1, X_2] &= E[(X_1 - E_{X_1})(X_2 - E_{X_2})] = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(x_1 - E_{X_1})(x_2 - E_{X_2}) f_{1,2}(x_1, x_2)\,dx_1 dx_2 \\ \mathrm{Cov}[X_1, X_2] &= E[X_1 \cdot X_2] - E_{X_1} \cdot E_{X_2} \end{aligned} \quad .\text{(B-20)}$$

Ein deskriptives Maß für den <u>linearen</u> Zusammenhang der beiden Zufallsvariablen X_1 und X_2 ist der Korrelationskoeffizient,

$$\rho_{1,2} = \frac{\mathrm{Cov}[X_1, X_2]}{\sqrt{\mathrm{Var}[X_1] \cdot \mathrm{Var}[X_2]}}, \qquad \text{(B-21)}$$

der nur Werte von -1 bis +1 annehmen kann. X_1 und X_2 heißen unkorreliert, wenn $\rho_{1,2} = 0$ ist. Dies gilt insbesondere dann, wenn die beiden Zufallsvariablen voneinander unabhängig sind.[2]

Die beiden Zufallsgrößen X_1 und X_2 sind voneinander unabhängig, wenn ihre gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte gleich dem Produkt der beiden Randdichten ist, d.h. wenn

$$f_{1,2}(x_1, x_2) = f_1(x_1) \cdot f_2(x_2) \qquad \text{(B-22)}$$

ist. Für unabhängige Zufallsgrößen vereinfacht sich die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichten transformierter Zufallsgrößen $Y = T(X_1,X_2)$ erheblich. Für die einfachen arithmetischen Funktionen gelten (für den allgemeinen Fall) die folgenden Berechnungsvorschriften:

$Y = X_1 + X_2$:
$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,2}(x_1, y - x_1)\,dx_1, \qquad \text{(B-23)}$$

$Y = X_1 - X_2$:
$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{1,2}(x_1, x_1 - y)\,dx_1, \qquad \text{(B-24)}$$

$Y = X_1 \cdot X_2$:
$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{|x_1|} \cdot f_{1,2}(x_1, y/x_1)\,dx_1, \qquad \text{(B-25)}$$

$Y = X_1/X_2;\ X_2 \neq 0$
$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} |x_1| \cdot f_{1,2}(x_1 \cdot y, x_1)\,dx_1. \qquad \text{(B-26)}$$

---

[2] Allerdings darf umgekehrt aus $\rho_{1,2} = 0$ nicht auf die Unabhängigkeit der beiden Zufallsgrößen geschlossen werden, was leider oft übersehen wird.

B.1.4 Zerlegung der Varianz einer Funktion von zwei Variablen

Es sei $Z = T(X_1,X_2)$ eine Funktion der beiden (Input-)Variablen X_1 und X_2, für die eine gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{1,2}(x_1,x_2)$ vorliegt. Fixiert man jeweils eine dieser Variablen, ergeben sich daraus die bedingten Wahrscheinlichkeiten: $f_{1|2}(x_1|x_2)$ ist die bedingte Wahrscheinlichkeit von x_1 (für den festen Wert x_2) und $f_{2|1}(x_2|x_1)$ ist die bedingte Wahrscheinlichkeit von x_2 (für den festen Wert x_1). Nach dem Satz über bedingte Wahrscheinlichkeiten (siehe z. B. [RIN 97]) kann die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte der beiden Variablen $f_{1,2}(x_1,x_2)$ als Produkt einer bedingten Verteilung mit der Marginalverteilung der jeweils anderen Variablen dargestellt werden:

$$f_{1,2}(x_1,x_2) = f_{1|2}(x_1|x_2)\cdot f_2(x_2) = f_{2|1}(x_2|x_1)\cdot f_2(x_2). \qquad \text{(B-27)}$$

Nachfolgend wird der linke Teil von Gl. (B-27) betrachtet (die beiden Indizes 1 und 2 können aber ohne Verlust der Gültigkeit der Ergebnisse vertauscht werden).

Der Erwartungswert von Z $E_Z = E[Z]$, $z = T(x_1,x_2)$, kann mit Gl. (B-27) wie folgt dargestellt werden:

$$E_Z = \iint z \cdot f_{1,2}(x_1,x_2)dx_1dx_2 = \int(\int z \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1)\cdot f_2(x_2)dx_2 \qquad \text{(B-28a)}$$

$$E_Z = E_{X_2}[E_{Z|X_2}] \text{ mit} \qquad \text{(B-28b)}$$

$$E_{Z|X_2} = \int z \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1 . \qquad \text{(B-29)}$$

$E_{Z|X_2}$ ist der bedingte Erwartungswert von Z bzgl. X_2. Die bedingte Varianz bzgl. X_2 ist

$$Var_{Z|X_2} = \int (z - E_{Z|X_2})^2 \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1 . \qquad \text{(B-30)}$$

Zur Berechnung/Zerlegung der Varianz von Z, Var_Z wird die "produktive Null" $\pm E_{Z|X_2}$ verwendet:

$$\begin{aligned} Var_Z &= \iint (z - E_Z)^2 \cdot f_{1,2}(x_1,x_2)dx_1dx_2 = \int(\int (z - E_Z)^2 \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1)\cdot f_2(x_2)dx_2 \\ Var_Z &= \int(\int (z - E_{Z|X_2})^2 \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1)\cdot f_2(x_2)dx_2 \\ &\quad + \int(\int (E_{Z|X_2} - E_Z)^2 \cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1)\cdot f_2(x_2)dx_2 + \\ &\quad - 2\cdot\int (E_{Z|X_2} - E_Z)\cdot(\int (z - E_{Z|X_2})\cdot f_{1|2}(x_1 \mid x_2)dx_1)\cdot f_2(x_2)dx_2 \end{aligned} \qquad \text{(B-31)}$$

In Gl. (B-31) ist der 1. Summand der Erwartungswert (äußeres Intergral über x_2) der bzgl. X_2 bedingten Varianz von Z, $Var_{Z|X_2}$ (siehe Gl. (B-30)). Im 2. Summanden hängt $(E_{Z|X_2} - E_Z)^2$ nicht von x_1 ab und kann vor das innere Integral gezogen werden, das dann den Wert 1 ergibt. Das noch verbleibende Integral über x_2 ergibt die Varianz des bedingten Erwartungswertes $E_{Z|X_2}$. Der letzte Term von Gl. (B-31) verschwindet, weil das innere Integral gemäß Gl. (B-29) eine Null ergibt. Damit resultiert für die Varianz von Z die folgende Zerlegung:

$$Var_Z = E_{X_2}[Var_{Z|X_2}] + Var_{X_2}[E_{Z|X_2}]. \qquad \text{(B-32a)}$$

Ist $\{X\}_m$ eine Auswahl von m aus n Inputvariablen eines Modells $Z = T(X_1, X_2, \ldots, X_n)$, dann kann analog zu Gl. (B-32a) die folgende Varianzzerlegung abgeleitet werden:

$$\mathrm{Var}_Z = E_{\{X\}_m}[\mathrm{Var}_{Z|\{X\}_m}] + \mathrm{Var}_{\{X\}_m}[E_{Z|\{X\}_m}]. \qquad \text{(B-32b)}$$

In der Gl. (B-32b) beschreibt der zweite Summand die durch $\{X\}_m$ erklärte Varianz von Z und der erste Summand die Restvarianz.

B.2 Punktschätzer

Es sei X eine kontinuierliche Zufallsgröße, die durch ihre Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ charakterisiert sei und für die eine Stichprobe $\{X\}_n = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$ vom Umfang n gewonnen werden kann, auf deren Basis bestimmte Kenngrößen von X (Mittelwert, Varianz, etc.) geschätzt werden sollen.

Die n Zufallsvariablen $X_1, X_2, \ldots, X_n$ bilden eine zufällige Stichprobe, wenn die X_i gegenseitig unabhängig sind und jeweils durch die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ charakterisiert sind. Sie sind dann unabhängig und gleichartig verteilt (kurz: iid = independent and identically distributed). Damit eine Stichprobe $\{X\}_n$ n iid Zufallsgrößen liefert, ist eine entsprechende Planung und Durchführung der Stichprobennahme erforderlich (vgl. [GIL 87]).

Analog zu dem in Gl. (B-22) betrachteten Fall von zwei unabhängigen Zufallsgrößen ist die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte der n iid Proben dann gegeben durch

$$f_{\{X\}_n} = f_X(x_1 \mid \boldsymbol{\theta}) \cdot f_X(x_2 \mid \boldsymbol{\theta}) \cdot \ldots \cdot f_X(x_n \mid \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} f_X(x_i \mid \boldsymbol{\theta}). \qquad \text{(B-33)}$$

Ein Punktschätzer ist, allgemein gesprochen, eine definierte Stichprobenfunktion/Schätzfunktion

$$W = \Psi(X_1, \ldots, X_n). \qquad \text{(B-34a)}$$

Der Wert w, den diese Funktion für eine Realisation $(x_1, \ldots, x_n)$ von n Stichprobenwerten der Zufallsvariablen X annimmt, wird als Punktschätzung oder Schätzwert bezeichnet,

$$w = \Psi(x_1, \ldots, x_n). \qquad \text{(B-34b)}$$

B.2.1 Stichprobenmittelwert, Stichprobenvarianz, Stichprobenkorrelationskoeffizient

Da eine zufällige Stichprobe $(X_1, X_2, \ldots, X_n)$ aus der Grundgesamtheit der Zufallsgröße X n iid Zufallsgrößen bildet, sind die Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Realisierungen x_i gleich, so dass in Analogie zu Gl. (B-14) mit $p_i = 1/n$ das arithmetische Mittel der Stichprobenwerte

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \text{(B-35b)}$$

einen Schätzwert des Erwartungswerts E[X] der Grundgesamtheit, aus der die Stichprobe gewonnen wurde, darstellt. Es sei vermerkt, dass die Schätzfunktion (kurz: der Schätzer)

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad \text{(B-35a)}$$

selbst wieder eine Zufallsgröße ist. Statistische Eigenschaften dieser Zufallsgröße $\overline{X}$ resultieren aus folgender Feststellung (siehe z. B. [CAS 02]): Ist $(X_1, X_2, \ldots, X_n)$ eine iid Stichprobe aus der

Grundgesamtheit der Zufallsgröße X und g(X) eine Funktion, für die der Erwartungswert E[g(X)] und die Varianz Var[g(X)] existieren, dann ist

$$E\left[\sum_{i=1}^{n} g(X_i)\right] = n \cdot E[g(X)], \tag{B-36}$$

$$Var\left[\sum_{i=1}^{n} g(X_i)\right] = n \cdot Var[g(X)]. \tag{B-37}$$

Aus Gl. (B-36) und Gl. (B-37) folgen für den Erwartungswert und die Varianz des Stichprobenmittelwertes $\overline{X}$ (für g(X) = X/n) unter Beachtung von Gl. (B-12) und Gl. (B-13) die Beziehungen

$$E[\overline{X}] = E[X], \tag{B-38}$$

$$Var[\overline{X}] = \frac{Var[X]}{n}. \tag{B-39}$$

Der arithmetische Mittelwert der Stichprobenwerte ist also ein erwartungstreuer Schätzer für den Erwartungswert der Grundgesamtheit, aus der die Stichprobe gewonnen wurde, wobei die Varianz des Stichprobenmittelwertes $\overline{X}$ proportional zur Varianz der Grundgesamtheit ist und umgekehrt proportional mit dem Stichprobenumfang fällt. Dies ist eine zentrale Aussage zu den Möglichkeiten einer Reduzierung von Stichprobenunsicherheiten durch Erhöhung des Stichprobenumfangs.

Die Stichprobenvarianz S^2 wird in Analogie zu Gl. (B-15) durch folgenden Schätzer definiert,

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2. \tag{B-40a}$$

Für eine konkrete Realisierung (x_1, x_2, …, x_n) ergibt sich damit zur Varianz der Grundgesamtheit der Zufallsgröße X der Schätzwert

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 \tag{B-40b}$$

mit $\overline{x}$ gemäß Gl. (B-35b).

<u>Anmerkung:</u> Abweichend vom arithmetischen Mittel der quadratischen Abweichungen $(X_i - \overline{X})^2$ wird üblich für die Stichprobenvarianz als Faktor vor der Summe nicht mit den Wahrscheinlichkeiten 1/n, sondern den etwas größeren Werten 1/(n-1) gerechnet. Dadurch wird erreicht, dass S^2 ein erwartungstreuer Schätzer der Varianz der Grundgesamtheit der Zufallsgröße X ist[3].

---

[3] Aus Gl. (B-40a) folgt unter Beachtung der Gleichungen (B-12), (B-36), (B-38) und (B-39):

$$E[S^2] = \frac{1}{n-1}E\left[\sum_{i=1}^{n}\left(X_i^2 - 2\cdot X_i\cdot\overline{X} + \overline{X}^2\right)\right] = \frac{1}{n-1}E\left[\sum_{i=1}^{n}X_i^2 - n\cdot\overline{X}^2\right] = \frac{1}{n-1}\left(n\cdot E\left[X^2\right] - n\cdot E\left[\overline{X}^2\right]\right) =$$

$$\frac{1}{n-1}\left(n\cdot\left(Var[X] + E_X^2\right) - n\cdot\left(Var[\overline{X}] + E[\overline{X}]^2\right)\right) = \frac{1}{n-1}\left(n\cdot\left(Var[X] + E_X^2\right) - Var[X] - n\cdot E_X^2\right) = Var[X]$$

B.2.2 Schiefe und Wölbung

Zwei wichtige Kenngrößen, mit denen die Form von statistischen Verteilungen charakterisiert wird, sind die Schiefe und die Wölbung. Stichprobenschätzer dieser beiden Kenngrößen können für die Auswahl von Familien parametrischer Verteilungen herangezogen werden, die zur Modellierung bzw. Approximation von empirischen Verteilungen in Betracht gezogen werden. Beide Kenngrößen werden durch Relationen des 3. bzw. 4. zentralen Momentes der Verteilung zu entsprechenden Potenzen der Standardabweichung σ normiert.

Das für die Schiefe der Verteilung einer Zufallsgröße X am häufigsten verwendete Funktional ist definiert durch:

$$\gamma_1 = E\left[\left(\frac{X-\mu}{\sigma}\right)^3\right], \tag{B-41}$$

wobei μ den Erwartungswert von X und σ dessen Standardabweichung bezeichnen. Verteilungen mit positiver Schiefe bezeichnet man als "linkssteil" bzw. als "rechtsschief". Bei ihnen treten Werte, die kleiner als der Erwartungswert sind, häufiger auf (der Modalwert liegt unter dem Median, und dieser ist kleiner als der Erwartungswert, wie z. B. bei der Lognormalverteilung). Verteilungen mit einer negativen Schiefe bezeichnet man entsprechend als "rechtssteil" oder "linksschief". Die Schiefe von symmetrischen Verteilungen ist gleich Null. Für eine Stichprobe (x_1, x_2, …, x_n) aus n Einzelwerten mit dem Mittelwert $\overline{x}$ gemäß Gl. (B-35b) ergibt sich für die mit Gl. (B-41) definierte (auf den Erwartungswert bezogene) Schiefe der folgende Schätzwert g_1:

$$g_1 = \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^3}{\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2\right)^{3/2}}, \tag{B-42a}$$

der jedoch nicht erwartungstreu ist. Ein erwartungstreuer Schätzer der Schiefe ist:

$$g'_1 = \frac{\sqrt{n\cdot(n-1)}}{n-2}\cdot g_1 = \frac{n}{(n-1)\cdot(n-2)}\cdot\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\overline{x}}{s}\right)^3, \tag{B-42b}$$

wobei s die Stichproben-Standardabweichung bezeichnet, also die Wurzel der Stichprobenvarianz nach Gl. (B-40b).

Es sei vermerkt, dass es weitere Schiefemaße gibt, die wesentliche Anforderungen an ein solches Maß erfüllen und z. T. einfacher zu berechnen sind, wie z. B. das in [ARN 95] definierte Maß γ_M, das auf den Modalwert Mod_X bezogene ist:

$$\gamma_M = 1 - 2\cdot F_X(Mod_X). \tag{B-43}$$

Die Kurtosis (Wölbung) der Verteilung einer Zufallsgröße X ist definiert durch:

$$\gamma_2 = E\left[\left(\frac{X-\mu}{\sigma}\right)^4\right]. \tag{B-44}$$

Zur quantitativen Einschätzung der Wölbung einer Wahrscheinlichkeitsdichte wird sie häufig mit der Wölbung der Normalverteilung verglichen, deren Wert 3 beträgt. Die Größe

$$\gamma_{2,\text{Exzess}} = \gamma_2 - 3 \tag{B-45}$$

wird als "Exzesskurtosis" bzw. auch als "zentriertes Wölbungsmaß" bezeichnet. Verteilungen mit einer Wölbung unter 3 heißen platykurtisch (flach gewölbt), Verteilungen mit einer Wölbung über 3 heißen leptokurtisch (stark gewölbt). Ein erwartungstreuer Schätzer der Exzesskurtosis ist:

$$g'_{2,\text{Exzess}} = \frac{n\cdot(n+1)}{(n-1)\cdot(n-2)\cdot(n-3)}\cdot\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{x_i-\overline{x}}{s}\right)^4 - \frac{3\cdot(n-1)^2}{(n-2)\cdot(n-3)}, \tag{B-46}$$

wobei s wieder die Stichproben-Standardabweichung bezeichnet.

B.2.3 Abhängigkeitsmaße

Der Schätzer für den Korrelationskoeffizienten $\rho_{X,Y}$ aus Gl. (B-21) bei einem Stichprobenumfang für X und Y von n ist der PEARSON'sche Korrelationskoeffizient:

$$r_{x,y} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})\cdot(y_i-\overline{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2\cdot\sum_{i=1}^{n}(y_i-\overline{y})^2}} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})\cdot(y_i-\overline{y})}{(n-1)\cdot s_x\cdot s_y}, \tag{B-47}$$

wobei s_x und s_y die nach Gl. (B-40b) geschätzten Standardabweichungen der beiden Variablen sind.

Zur Beschreibung der statistischen Abhängigkeit zwischen zwei Zufallsgrößen X und Y, die durch nichtlineare, jedoch monotonen Funktionen miteinander verknüpft sind, kann der SPEARMAN'sche Rang-Korrelationskoeffizient $\rho_{x,y}$ benutzt werden, der die Korrelation der Ränge $rg(x_i)$ und $rg(y_i)$ der Stichprobenwerte bestimmt ($rg(x_i) = k$, wenn x_i der k-größte Wert der Stichprobe ist; k von 1 bis n). Seine Berechnung erfolgt analog zu Gl. (B-47), nur dass statt der Werte x_i und y_i ihre Ränge $rg(x_i)$ und $rg(y_i)$ verwendet werden. Sind alle Stichprobenwerte ungleich (damit auch ihre Ränge), so vereinfacht sich die Berechnung des SPEARMAN'schen Rang-Korrelationskoeffizienten erheblich:

$$\rho_{x,y} = 1 - \frac{6\cdot\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n\cdot(n^2-1)} \quad \text{mit} \quad d_i = rg(x_i) - rg(y_i). \tag{B-48}$$

Anmerkung: Ist Y = g(X), wobei g eine nichtlineare, monotone Funktion ist, so liegt eine perfekte Abhängigkeit zwischen beiden Variablen vor, der PEARSON'sche Korrelationskoeffizient $r_{x,y}$ nimmt aber im Unterschied zum SPEARMAN'schen Korrelationskoeffizienten $\rho_{;x,y}$ nicht die Werte 1 (g monoton steigend) bzw. -1 (g monoton fallend) an.

Ein weiteres Maß zur Quantifizierung der Abhängigkeit zwischen zwei Zufallsgrößen X und Y ist der KENDALL'sche Konkordanzkoeffizient $\tau_{X,Y}$ (wird auch KENDALL-Rang-Korrelationskoeffizient genannt). Zwei Paare (x_i,y_i) und (x_j,y_j) zufälliger Realisierungen von (X,Y) heißen

konkordant, wenn $(x_i - x_j)\cdot(y_i - y_j) > 0$, (B-49)

diskordant, wenn $(x_i - x_j)\cdot(y_i - y_j) < 0$.

Das in Gleichung (B-49) stehende Produkt kann natürlich auch gleich Null sein, wenn $x_i = x_j$ oder $y_i = y_j$ oder beides zutrifft. In diesem Fall spricht man von Bindungen. Wir betrachten zunächst den einfachen Fall, dass in einer Stichprobe (x,y) mit dem Umfang n weder für X noch für Y Bindungen vorliegen. Insgesamt liegen $n\cdot(n-1)/2$ Paare (x_i,y_i) und (x_j,y_j) von Beobachtungen vor. Ist nun n_c die Anzahl der konkordanten Paare und n_d die Anzahl der diskordanten Paare, dann ist

$$\tau_{x,y} = \frac{2\cdot(n_c - n_d)}{n\cdot(n-1)} = \frac{n_c - n_d}{n_c + n_d} \qquad \text{(B-50a)}$$

ein Maß für die Abhängigkeit zwischen X und Y, das Werte zwischen -1 (perfekt gegenläufig) und +1 (perfekt gleichläufig) annimmt, wobei im Fall von unabhängigen Zufallsgrößen X und Y ein Wert von Null (bzw. ≈ 0) angenommen wird. Wie der Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizient ρ ist auch der KENDALL'sche Konkordanzkoeffizient τ unabhängig gegenüber monoton steigenden Transformationen bzgl. X und/oder Y.

Liegen in der Stichprobe für die Variable X n_x und für die Variable Y n_y Bindungen vor, so ist eine Modifizierung von Gl. (50-a) erforderlich, mit der diese Bindungen berücksichtigt werden. Hierzu gibt es verschiedene Möglichkeiten. Im Rahmen des vorliegenden Berichts wird die Beziehung

$$\tau_{x,y} = \frac{n_c - n_d}{\sqrt{(n_c + n_d + n_x)\cdot(n_c + n_d + n_y)}} \qquad \text{(B-50b)}$$

verwendet, die als Verallgemeinerung von Gl. (B-50a) sehr gebräuchlich ist.

Zwischen den drei betrachteten Abhängigkeitsmaßen gibt es verschiedene Zusammenhänge, wozu insbesondere auf [KRU 58] und [SCHW 81] verwiesen sei.

B.3 Copulas

Mit der auf dem Satz von SKLAR [SKL 59]/[SKL 73] basierenden Copula-Theorie kann zur Analyse und Simulation von multivariaten Verteilungen, die eine gemeinsame Dichte $f_{\mathbf{X}}(x_1, x_2, \ldots, x_d)$ bzw. Verteilungsfunktion $F_{\mathbf{X}}(x_1, x_2, \ldots, x_d)$ aufweisen, hinsichtlich der Struktur von Abhängigkeiten zwischen den d Zufallsgrößen X_i (i von 1 bis d) von ihren Randverteilungen abstrahiert werden. Zur Vereinfachung der Darstellungen beschränken sich die nachfolgenden Darstellungen überwiegend auf den Fall von zwei Zufallsgrößen (d = 2). Zunächst werden in Abschnitt B.3.1 grundlegende Begriffe und Aussagen der Copula-Theorie zusammengefasst. Der Abschnitt B.3.2 enthält Angaben zu ausgewählten Klassen bzw. Familien von Copulas. Auf Methoden zur Simulation voneinander abhängiger Zufallsgrößen mit Hilfe von Copulas wird an entsprechender Stelle eingegangen. Die Berechnung der empirischen Copula-Funktion wird in Abschnitt B.3.3 erläutert.

B.3.1 Grundlegende Begriffe und Aussagen der Copula-Theorie

Definition: Eine d-dimensionale Copula ist eine Funktion $C(\mathbf{u}) = C(u_1, u_2, \ldots, u_d)$, die den d-dimensionalen Einheitskubus $I^d = [0, 1]^d$ auf das Einheitsintervall $I = [0, 1]$ abbildet, d. h. $0 \le u_i \le 1$ für i von 1 bis d und $0 \le C(\mathbf{u}) \le 1$, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:

$C(\mathbf{u})$ ist gleich Null, wenn eine Variable den Wert Null hat:

$$C(u_1, u_2, \ldots, u_{i-1}, 0, u_{i+1}, \ldots, u_d) = 0 \text{ für beliebige } u_i = 0; \tag{B-51a}$$

- die Randverteilung jeder der d Variablen ist eine Gleichverteilung:

$$C(1, 1, \ldots, 1, u_i, 1, 1, \ldots, 1) = u_i \text{ für jede Variable } u_i; \tag{B-51b}$$

- $C(\mathbf{u})$ ist in allen d Variablen wachsend (d-wachsend), d. h. mit $a_i \le b_i$ für alle i von 1 bis d und den Bezeichnungen $u_{i,1} = a_i$ und $u_{i,2} = b_i$ gilt:

$$\sum_{j_1=1}^{2} \ldots \sum_{j_d=1}^{2} (-1)^{j_1+\ldots+j_d} C(u_{1,j_1}, \ldots, u_{d,j_d}) \ge 0 . \tag{B-51c}$$

Die Funktion $C(\mathbf{u})$ ist dann auch in jeder einzelnen Variable wachsend:

$$C(u_1, u_2, \ldots, u_{i-1}, a_i, u_{i+1}, \ldots, u_d) \le C(u_1, u_2, \ldots, u_{i-1}, b_i, u_{i+1}, \ldots, u_d) \text{ für } a_i \le b_i. \tag{B-51d}$$

Fall d = 2: Insbesondere Gl. (B-51c) ist für beliebige Dimensionen d nicht mehr sehr anschaulich. Deshalb werden auch die im Fall d = 2 resultierenden Gleichungen angegeben, wobei es üblich ist, für eine von nur 2 Variablen abhängige Copula die Variablen mit u (für u_1) und v (für u_2) zu bezeichnen. Die Definitionsgleichungen (B-51a) bis (B-51c) vereinfachen sich damit wie folgt:

$$C(u, 0) = 0 \text{ und } C(0, v) = 0 , \tag{B-52a}$$

$$C(u, 1) = u \text{ und } C(1, v) = v , \tag{B-52b}$$

$$C(u_2, v_2) - C(u_2, v_1) - C(u_1, v_2) + C(u_1, v_1) \ge 0 \quad \text{für } u_1 \le u_2 \text{ und } v_1 \le v_2. \tag{B-52c}$$

Mit einer Copula C(u, v) wird jedem Rechteck $[0, u]\cdot[0, v]$ aus I^2 ein nicht-negativer Wert aus dem Einheitsintervall I zugeordnet, der mit beiden Variablen wächst. Die Gl. (B-52c) sagt dann aus, dass auch jedem Rechteck $[u_1, u_2]\cdot[v_1, v_2]$ ($u_1 \le u_2$ und $v_1 \le v_2$) ein nicht-negativer Wert zugeordnet wird.

Satz von SKLAR: Sind $F(x_1, x_2, \ldots, x_d)$ die gemeinsame multivariate Verteilungsfunktion von d Zufallsgrößen X_1 bis X_d und $F_i(x_i)$ (i = 1, …, d) die jeweiligen Randverteilungen, dann existiert eine Copula C, für die

$$F(x_1, x_2, \ldots, x_d) = C(F_1(x_1), F_2(x_2), \ldots, F_d(x_d)) \tag{B-53}$$

gilt. Wenn alle d Randverteilungen $F_i(x_i)$ stetig sind, so ist die Copula C eindeutig. Umgekehrt wird durch eine Copula $C(u_1, u_2, \ldots, u_d)$ und d Randverteilungen $F_i(x_i)$ (i = 1, …, d) durch die Gleichung (B-53) eine gemeinsame Verteilungsfunktion für die d Zufallsgrößen definiert, welche diese Randverteilungen aufweist.

Per Definition stellt eine Copula $C(u_1, u_2, \ldots, u_d)$ die gemeinsame kumulative Verteilungsfunktion von d auf dem Einheitsintervall I = [0, 1] gleichverteilten Zufallsgrößen dar. Nach dem Satz von SKLAR wird die Struktur der Abhängigkeiten zwischen d stetigen Zufallsgrößen X_i, welche die multivariate Verteilungsfunktion $F(x_1, x_2, \ldots, x_d)$ haben, durch eine Copula dargestellt, in der die gleichverteilten Größen u_i den Randverteilungen $F_i(x_i)$ entsprechen.

Im Fall d = 2, auf den sich die weiteren Erläuterungen konzentrieren, werden für die Zufallsgrößen die Bezeichnungen X und Y, für ihre Randverteilungen die Bezeichnungen F(x) und G(y) sowie für ihre gemeinsame Verteilungsfunktion die Bezeichnung H(x, y) verwendet. Gl. (B-53) lautet damit:

$$H(x, y) = C(F(x), G(y)). \qquad \text{(B-54a)}$$

Umgekehrt gilt mit den Quantilen (Inversen) der beiden Randverteilungen $x = F^{-1}(u)$ und $y = G^{-1}(v)$:

$$C(u, v) = H(F^{-1}(u), G^{-1}(v)). \qquad \text{(B-54b)}$$

Die Gleichung (B-54b) beschreibt auch den Weg zur Berechnung von empirischen Copulas auf der Basis von Stichproben für Wertepaare (x_i, y_i) mit i von 1 bis n.

<u>Copulas für monoton transformierte Zufallsvariable:</u> Es sei $C_{X,Y}(u, v)$ gemäß Gl. (B-54) die Copula für die Zufallsvariablen X und Y. Für stetig transformierte Zufallsvariable $\alpha(X)$ und $\beta(X)$ lassen sich die Copulas $C_{\alpha(X),\beta(Y)}(u, v)$ auf die Copula $C_{X,Y}(u, v)$ zurückführen, wenn die Transformationen α und β strikt monoton (s. m.) steigende oder fallende Funktionen sind:

$$C_{\alpha(X),\beta(Y)}(u, v) = C_{X,Y}(u, v), \quad \text{wenn } \alpha(X) \text{ und } \beta(X) \text{ s. m. steigen;} \qquad \text{(B-55a)}$$

$$C_{\alpha(X),\beta(Y)}(u, v) = u - C_{X,Y}(u,1-v), \quad \text{wenn } \alpha(X) \text{ s. m. steigt und } \beta(X) \text{ s. m. fällt;} \qquad \text{(B-55b)}$$

$$C_{\alpha(X),\beta(Y)}(u, v) = v - C_{X,Y}(1-u, v), \quad \text{wenn } \alpha(X) \text{ s. m. fällt und } \beta(X) \text{ s. m. steigt;} \qquad \text{(B-55c)}$$

$$C_{\alpha(X),\beta(Y)}(u, v) = u + v - 1 + C_{X,Y}(1-u,1-v), \quad \text{wenn } \alpha(X) \text{ und } \beta(X) \text{ s. m. fallen.} \qquad \text{(B-55d)}$$

<u>Copula Π für unabhängige Zufallsgrößen:</u> Die Zufallsgrößen X und Y sind genau dann voneinander unabhängig, wenn $H(x, y) = F(x)\cdot G(y)$ gilt (entspricht Gl. (B-22)). Aus Gl. (B-54b) folgt damit die Copula für unabhängige Zufallsgrößen, die auch Produkt-Copula genannt und mit dem Buchstaben Π bezeichnet wird:

$$\Pi(u, v) = F(F^{-1}(u))\cdot G(G^{-1}(v)) = u\cdot v. \qquad \text{(B-56)}$$

<u>FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken:</u> Alle Copulas werden durch eine obere und eine untere Schranke begrenzt, die einer perfekten Co- bzw. Contra-Monotonie der Abhängigkeit von Zufallsvariablen entsprechen (vollständige Konkordanz bzw. Diskordanz, vgl. Abschnitt B.2.3). Ist $Y = \gamma(X)$ und γ s. m. steigend (X und Y sind perfekt konkordant), dann folgt mit Gl. (B-55a):

$$C_{X,Y}(u, v) = C_{X,\gamma(X)}(u, v) = C_{X,X}(u, v) = \Pr(F(X) \le u, F(X) \le v) = \min(u, v).$$

Diese obere Schranke für den Fall der perfekten Co-Monotonie wird üblich mit M(u, v) bezeichnet.

Ist die Transformation $Y = \gamma(X)$ dagegen s. m. fallend (X und Y sind perfekt diskordant), so folgt mit Gl. (B-55b) für diesen Fall der Contra-Monotonie:

$C_{X,Y}(u, v) = C_{X,\gamma(X)}(u\ v) = u - C_{X,X}(u,1\text{-}v) = u - Pr(F(X) \leq u, F(X) \leq 1 - v) = u - \min(u, 1\text{-}v) =.$
$= \max(u+v\text{-}1, 0).$

Diese untere Schranke wird üblich mit W(u, v) bezeichnet. Damit gelten für d = 2 die Schranken:

$$W(u, v) \leq C(u, v) \leq M(u, v) \quad \text{mit} \tag{B-57a}$$

$$W(u, v) = \max(u+v\text{-}1, 0), \tag{B-57b}$$

$$M(u, v) = \min(u, v). \tag{B-57c}$$

Man kann zeigen, dass die mit Gleichung (B-57b) und (B-57c) definierten unteren und oberen Schranken ebenfalls Copulas sind. Im allgemeinen Fall von d Zufallsvariablen, gelten für die FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken die folgenden Beziehungen:

$$W(u_1, u_2, ..., u_d) \leq C(u_1, u_2, ..., u_d) \leq M(u_1, u_2, ..., u_d) \quad \text{mit} \tag{B-58a}$$

$$W(u_1, u_2, ..., u_d) = \max\left\{\sum_{i=1}^{d} u_i + 1 - d, 0\right\}, \tag{B-58b}$$

$$M(u_1, u_2, ..., u_d) = \min\{u_1, u_2, ..., u_d\}. \tag{B-58c}$$

Während die obere Schranke M(**u**) für beliebige Dimensionen d eine Copula ist, trifft dies bzgl. der unteren Schranke W(**u**) nur im Fall d = 2 zu.

Die Copulas W(u, v), Π(u, v) und M(u, v) sind in Abbildung B-1 dargestellt. Sie sind Grenzfälle von diversen Copula-Familien.

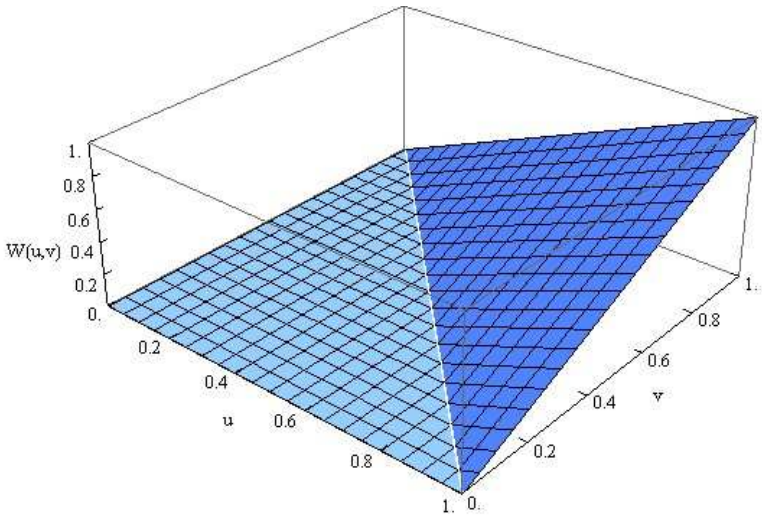
<u>Copula-Dichte:</u> Da Copulas Verteilungsfunktionen von gleichverteilten Zufallsgrößen sind, können auch ihre Dichten betrachtet werden, die (hier für den Fall d = 2 betrachtet) durch

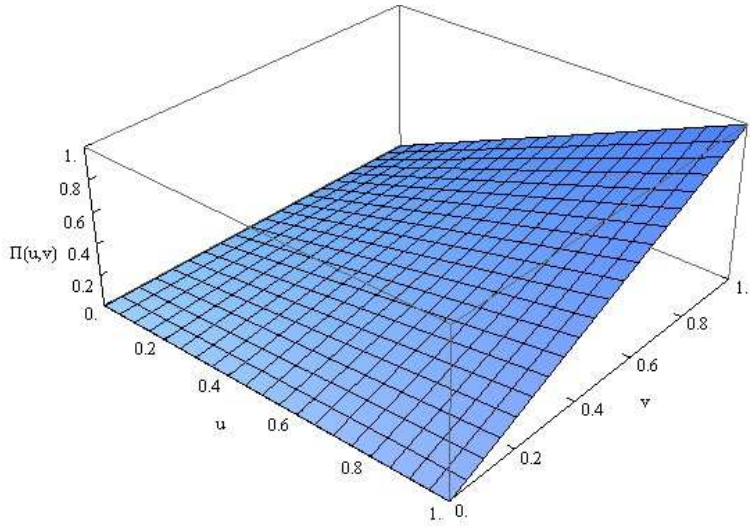
$$c(u, v) = \frac{\partial^2}{\partial u \partial v} C(u, v) \tag{B-59}$$

definiert sind. Copulas C(u, v,) können einen absolut stetigen Anteil $A_C(u, v)$ und einen singulären Anteil $S_C(u, v)$ enthalten,

$$C(u, v,) = A_C(u, v) + S_C(u, v) \quad \text{mit} \quad A_C(u, v) = \int_0^u \int_0^v c(s, t)\, ds\, dt\ , \tag{B-60}$$

wobei im Einzelfall auch nur einer dieser beiden Anteile vorhanden sein kann. Die Produkt-Copula Π(u, v) ist z. B. absolut stetig; ihre Dichte ist gleich 1. Die FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken W(u, v) und M(u, v) sind dagegen rein singuläre Copulas, wobei der Träger von W(u, v) die Diagonale v = 1 - u ist (entspricht perfekten Antikorrelation/Diskordanz), wogegen der Träger von M(u, v) die Diagonale v = u ist (entspricht perfekter Korrelation/Konkordanz). Zur anschaulichen Darstellung von Copula-Dichten sind Scatterplots für eine größere Anzahl von zufälligen Realisierungen der Wertepaare (u_i, v_i) (mit i von 1 bis n, n ist Stichprobenumfang) geeignet (siehe Abschnitt B.3.2).





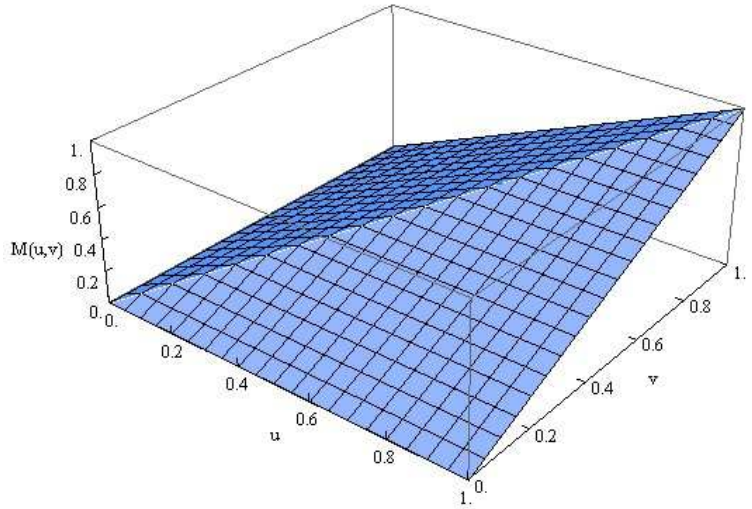


Abbildung B-1: Copulas W(u, v), Π(u, v) und M(u, v) gemäß Gl. (B-56) und (B-57b/c)

Simulation aus Copula-Verteilungen: Die Simulation voneinander abhängiger Zufallsgrößen kann mit generell anwendbaren sowie mit Hilfe von speziellen Algorithmen erfolgen (siehe [DEV 86], [NEL 07], [BAL 09]). Für Copulas basiert die allgemeine Methode auf der üblichen Darstellung von Verteilungen als Produkt einer bedingten Wahrscheinlichkeit und einer Randverteilung. Für eine Copula C(u, v) kann die bzgl. einer der beiden Variablen bedingte Wahrscheinlichkeit über eine partielle Ableitung dargestellt werden:

$$\Pr(V \le v \mid U = u) = \lim_{\Delta u \to 0} \frac{C(u + \Delta u, v) - C(u, v)}{\Delta u} = \frac{\partial C(u, v)}{\partial u}. \tag{B-61}$$

Die Variable $Z = C_u(v) = \partial C(u, v)/\partial u$ ist wieder eine Verteilungsfunktion und dementsprechend auf dem Intervall [0, 1] gleichverteilt. Damit resultiert zur Erzeugung zufälliger Realisierungen (u, v) aus der Copula C(u, v) ein genereller Algorithmus:

1. Es werden zwei voneinander unabhängige Realisierungen u und z von auf dem Einheitsintervall [0,1] gleichverteilten Zufallszahlen generiert.
2. Mit der inversen Verteilungsfunktion C_u^{-1} der Größe Z (s. o.) wird $v = C_u^{-1}(z)$ gesetzt.
3. Das Wertepaar (u, v) ist eine zufällige Realisierung der Copula C(u, v).

Diese Methode verlangt eine analytische Darstellung der inversen Verteilungsfunktion C_u^{-1}. Für Zufallsgrößen X und Y mit den Randverteilungen F(x) und G(y) können dann die abhängigen Wertepaare (x, y) gemäß Gl. (B-54) über $x = F^{-1}(u)$ und $y = G^{-1}(v)$ berechnet werden.

Abhängigkeitsmaße: Zur Quantifizierung des durch eine Copula C(u, v) bestimmten Maßes der Abhängigkeit zwischen den beiden Zufallsvariablen U und V werden als einfache globale Maße der SPEARMAN'sche Rang-Korrelationskoeffizient ρ und der KENDALL'sche Konkordanz-Koeffizient τ verwendet. Sie sind invariant gegenüber streng monoton wachsenden Transformationen und können Werte von -1 bis +1 annehmen. ρ und τ hängen zwar zusammen, die Beziehung zwischen diesen beiden Kennwerten ist jedoch spezifisch für Copula-Familien (siehe u. a. [SCHW 81], [FRED 07], [NEL 07]). Für gegebene Populationen mit stetig differenzierbaren Copulas C(u, v) können ρ und τ über folgende Integrale berechnet werden:

$$\rho = 12 \cdot \int_0^1 \int_0^1 C(u, v)\, du\, dv - 3 = 3 - 6 \cdot \int_0^1 \int_0^1 \left(u \cdot \frac{\partial C(u, v)}{\partial u} + v \cdot \frac{\partial C(u, v)}{\partial v} \right) du\, dv, \tag{B-62}$$

$$\tau = 4 \cdot \int_0^1 \int_0^1 C(u, v) \frac{\partial^2 C(u, v)}{\partial u \partial v} du\, dv - 1 = 1 - 4 \cdot \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial C(u, v)}{\partial u} \cdot \frac{\partial C(u, v)}{\partial v} du\, dv. \tag{B-63}$$

Der KENDALL'sche Konkordanz-Koeffizient τ spielt in der Copula-Theorie eine besondere Rolle. Er steht in einem engen Zusammenhang mit der Verteilungsfunktion $K_C(t)$,

$$K_C(t) = \Pr[H(X, Y) \le t] = \Pr[C(U, V) \le t], \tag{B-64}$$

die im "Copula-Raum" zwischen den beiden FRÉCHET-HOEFFDING-Schranken W(u, v) und M(u, v) eine Ordnungsstruktur definiert. Sie wird als KENDALL'sche Verteilungsfunktion bezeichnet und steht mit τ in folgendem Zusammenhang (siehe [GEN 93], [GEN 01], [NEL 03], [NEL 09]):

$$\tau = 3 - 4 \cdot \int_0^1 K_C(t)\, dt\,. \tag{B-65}$$

Für die untere Schranke W(u, v) folgt aus Gl. (B-57b) und Gl. (B-64): $K_W(t) = 1$. Aus Gl. (B-65) folgt $\tau = -1$ (Fall der perfekten Diskordanz). Für die obere Schranke M(u, v) folgt aus Gl. (B-57c) und Gl. (B-64) (siehe hierzu auch Abbildung B-1): $K_M(t) = t$. Aus Gl. (B-65) folgt damit $\tau = 1$ (Fall der perfekten Konkordanz). Für andere Copulas verläuft die KENDALL'sche Verteilungsfunktion $K_C(t)$ zwischen diesen beiden Extremen: $t \le K_C(t) \le 1$. Die Verteilungsfunktion $K_C(t)$ ist wesentlich informativer als der Koeffizient τ, der gemäß Gl. (B-65) ein integraler Parameter ist. Mit $K_C(t)$ können auch Besonderheiten zur Abhängigkeit zwischen Zufallsgrößen in den Randbereichen (den Tails) untersucht und dargestellt werden (siehe Abschnitt 4.3).

Für Risikoanalysen ist die mit einer Copula erfasste Tail-Abhängigkeit zwischen Zufallsgrößen von besonderem Interesse. Die Koeffizienten λ_U und λ_L für die obere (upper) bzw. untere (lower) Tail-Abhängigkeit sind durch folgende Grenzwerte für bedingte Wahrscheinlichkeiten definiert:

$$\lambda_U = \lim_{t \to 1^-} \Pr[Y > G^{-1}(t) \mid X > F^{-1}(t)]\,, \tag{B-66a}$$

$$\lambda_L = \lim_{t \to 0^+} \Pr[Y \le G^{-1}(t) \mid X \le F^{-1}(t)]\,. \tag{B-66b}$$

Die Koeffizienten λ_U und λ_L können Werte im Bereich von 0 bis 1 annehmen. Ist z. B. λ_U (oder λ_L) gleich Null, dann sind die Zufallsgrößen X und Y für sehr große (kleine) Quantile asymptotisch unabhängig. Je größer die Koeffizienten λ_U bzw. λ_L werden, umso stärker ist die Konkordanz der beiden Zufallsvariablen im jeweiligen Randbereich. Über die Copulas können diese Koeffizienten durch folgende Beziehungen bestimmt werden:

$$\lambda_U = 2 - \lim_{t \to 1^-} \frac{1 - C(t,t)}{1 - t}\,, \tag{B-67a}$$

$$\lambda_L = \lim_{t \to 0^+} \frac{C(t,t)}{t}\,. \tag{B-67b}$$

Eine Übersicht zu verschiedenen Methoden der nicht-parametrischen Schätzung der Koeffizienten λ_U und λ_L anhand von Stichproben und den dabei zu beachtenden Problemen geben [FRAH 05] und [POU 07]. Zu weiteren Konzepten für die Charakterisierung von Besonderheiten der Abhängigkeit zwischen zwei Zufallsgrößen sei auf [DROU 01], [NEL 07] und [BAL 09] verwiesen.

B.3.2 Familien von Copulas

Aus der großen Vielfalt von Copula-Klassen und ihren Familien werden einige Copula-Familien näher beschrieben. Mit der getroffenen Auswahl sollen wichtige Klassen, wie die der elliptischen und der archimedischen Copulas kurz dargestellt werden, wobei der Fokus auf den Copula-Familien

liegt, die im Rahmen des vorliegenden Berichtes für die Analyse bzw. Simulation von abhängigen Zufallsgrößen genutzt werden. Zudem werden Copulas angesprochen, wie die MARSHALL-OLKIN-Copula, deren Konstruktion auf Modellen zur Genesis von multivariaten Verteilungen basiert. Zur Vereinfachung werden die Darstellungen auf den Fall von zwei Variablen (d = 2) beschränkt.

B.3.2.1 Copulas von elliptischen Verteilungen

Wichtige Familien aus der Klasse der so genannten elliptischen Copulas sind die GAUSS-Copula, die auf der multivariaten Normalverteilung basiert, und die t-Copula, die aus der multivariaten STUDENT'schen t-Verteilung abgeleitet ist.

Für d = 2 ist die GAUSS-Copula nach Gl. (B-53) definiert durch:

$$C_G(u,v\,|\,r) = \frac{1}{2\cdot\pi\cdot\sqrt{1-r^2}}\cdot\int_{-\infty}^{\Phi^{-1}(u)}\int_{-\infty}^{\Phi^{-1}(v)}\exp\left(-\frac{s^2-2\cdot r\cdot s\cdot t+t^2}{2\cdot(1-r^2)}\right)ds\,dt\,, \qquad \text{(B-68)}$$

wobei Φ die Verteilungsfunktion der univariaten Standardnormalverteilung N(0, 1) ist und r den linearen Korrelationskoeffizienten bezeichnet. Der KENDALL'sche Konkordanzkoeffizient τ und der Spearman'sche Rangkorrelationskoeffizient ρ sind mit r über folgende Beziehungen verknüpft:

$$\tau = \frac{2}{\pi}\cdot\arcsin(r)\,, \qquad \rho = \frac{6}{\pi}\cdot\arcsin(r/2)\,. \qquad \text{(B-69)}$$

Die GAUSS-Copula hat keine Tail-Abhängigkeit, d. h. $\lambda_U = \lambda_L = 0$.

Für die STUDENT-Copula (t-Copula) gilt gemäß Gl. (B-53) im Fall d = 2 folgende Darstellung:

$$C_S(u,v\,|\,r) = \frac{1}{2\cdot\pi\cdot\sqrt{1-r^2}}\cdot\int_{-\infty}^{t_\nu^{-1}(u)}\int_{-\infty}^{t_\nu^{-1}(v)}\left(1+\frac{s^2-2\cdot r\cdot s\cdot t+t^2}{\nu\cdot(1-r^2)}\right)^{-(\nu+2)/2}ds\,dt\,, \qquad \text{(B-70)}$$

wobei t_ν die Verteilungsfunktion der STUDENT'schen t-Verteilung mit ν Freiheitsgraden und r den Korrelationskoeffizienten der bivariaten t-Verteilung bezeichnen. Zur Beziehung zwischen r und τ bzw. ρ gilt für die t-Copula nach [EMB 03] ebenfalls Gl. (B-69). Im Unterschied zur GAUSS-Copula weist die t-Copula eine Tail-Abhängigkeit auf [EMB 03]:

$$\lambda_L = \lambda_U = 2\cdot\left(1-t_{\nu+1}(\sqrt{\nu+1}\cdot\sqrt{1-r}/\sqrt{1+r}\,)\right). \qquad \text{(B-71)}$$

Zu weiteren Eigenschaften der t-Copula sei auf [DEMA 05] verwiesen.

Die Erzeugung zufälliger Realisierungen (u, v) aus der GAUSS- und der t-Copula kann entsprechend dem in Abschnitt beschriebenen generellen Algorithmus erfolgen.

Simulation der GAUSS-Copula:

1. Erzeugung von unabhängigen Realisierungen x und z aus der Standardnormalverteilung N(0, 1).
2. Es wird $y = x\cdot r + z\cdot\sqrt{1-r^2}$ berechnet.
3. Mit $u = \Phi(x)$ und $v = \Phi(y)$ ist (u, v) eine zufällige Realisierung aus der Copula $C_G(u, v)$.

Simulation der STUDENT-Copula:

1. Erzeugung von unabhängigen Realisierungen x und z aus der Standardnormalverteilung N(0, 1) sowie einer Zufallszahl w aus der χ^2-Verteilung mit ν Freiheitsgraden.
2. Es wird $y = x \cdot r + z \cdot \sqrt{1 - r^2}$ berechnet.
3. Mit $u = t_\nu(\sqrt{\nu / w} \cdot x)$ und $v = t_\nu(\sqrt{\nu / w} \cdot y)$, wobei t_ν die Verteilungsfunktion der STUDENT'schen t-Verteilung bezeichnet, ist (u, v) eine zufällige Realisierung aus der Copula $C_S(u, v)$.

Zur Veranschaulichung der Unterschiede zwischen der GAUSS- und der STUDENT-Copula sind in Abbildung B-2 Scatterplots zu den Dichten der beiden Copulas mit jeweils n = 2000 zufälligen Realisierungen zu den Parameterwerten r = 0.8 und ν = 3 dargestellt. Die Populationswerte zu den Koeffizienten τ und ρ gemäß Gl. (B-69) sind τ = 0,590 und ρ = 0,786. Mit den in Abschnitt B.2.3 genannten Beziehungen für die Punktschätzer dieser Koeffizienten resultieren für die Stichproben folgende Werte zur bivariaten GAUSS-Verteilung: $r_{x,y}$ = 0,802; $\tau_{x,y}$ = 0,599; $\rho_{x,y}$ = 0,797; bzw. zur bivariaten STUDENT-Verteilung: $r_{x,y}$ = 0,778; $\tau_{x,y}$ = 0,580; $\rho_{x,y}$ = 0,758.

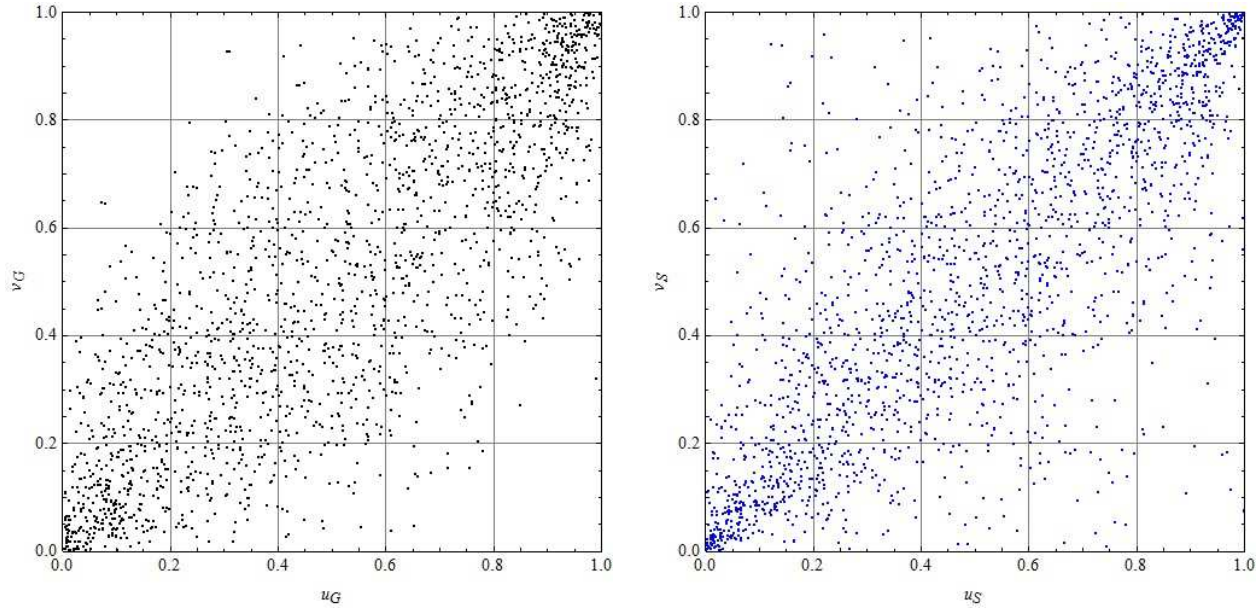


Abbildung B-2: Scatterplots zu den Copulas $C_G(u, v)$ (links) und $C_S(u, v)$ (rechts) zu den Parameterwerten r = 0,8 und ν = 3 mit 2000 zufälligen Realisierungen

Aus Abbildung B-2 ist insbesondere zu erkennen, dass die STUDENT-Copula im Bereich der Tails (für u < 0,2 und v < 0,2 bzw. für u > 0,8 und v > 0,8) eine größere Konkordanz aufweist als die GAUSS-Copula. Die Unterschiede zwischen beiden Copulas werden noch deutlicher, wenn man aus ihnen bivariate Verteilungen H(x, y) erzeugt und für die Randverteilungen G(x) und F(y) jeweils die Standardnormalverteilung angesetzt wird, wie in Abbildung B-3 dargestellt. Die Wertepaare $(x_{G(G)}, y_{G(G)})$ bzw. $(x_{G(S)}, y_{G(S)})$ basieren auf der GAUSS- bzw. der STUDENT-Copula.

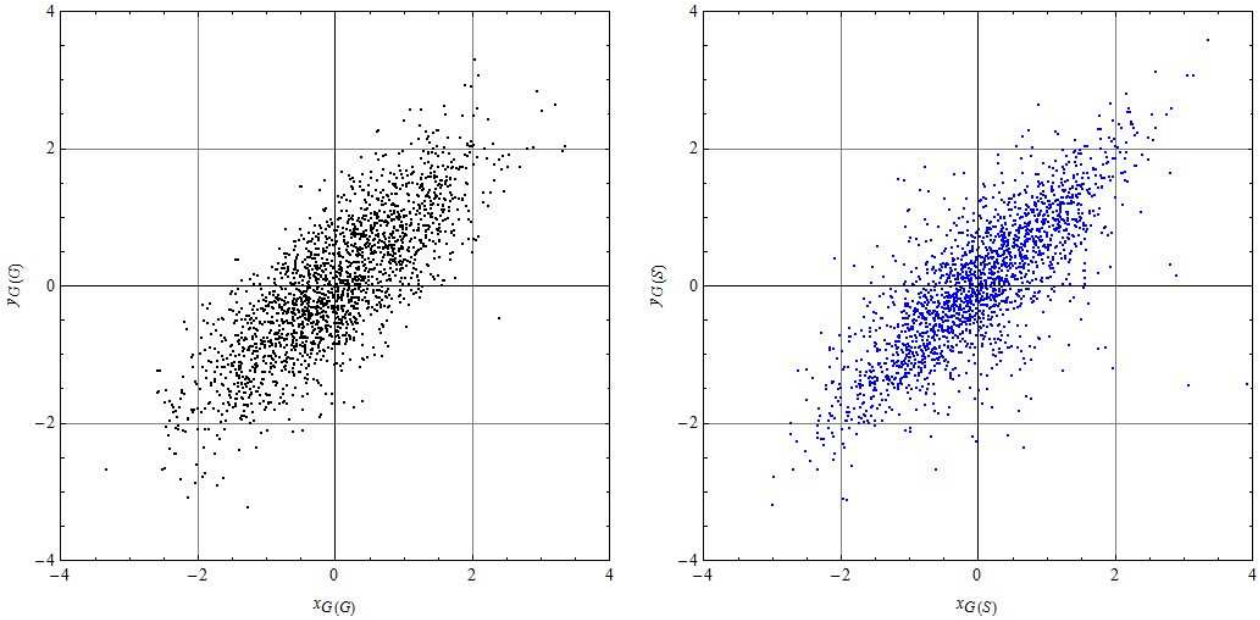


Abbildung B-3: Scatterplots zur gemeinsamen Verteilung H(x ,y) mit den gleichen Randverteilungen der Zufallsgrößen X ~ N(0, 1) und Y ~ N(0, 1), deren Abhängigkeit jedoch durch die GAUSS-Copula (links) bzw. die STUDENT-Copula (rechts) gemäß Abbildung B-2 definiert ist.

Aus Abbildung B-3 ist klar ersichtlich, dass bei gleichen Werten der Korrelationskoeffizienten r und ρ bzw. des Konkordanzkoeffizienten τ sehr unterschiedliche Abhängigkeiten zwischen zwei Zufallsgrößen X und Y vorliegen können. Die in kommerziellen Programmen zur MC-Simulation übliche Vereinfachung der Abhängigkeitsstruktur auf GAUSS-Copulas kann deshalb substantielle Einschränkung bzgl. der Erfassung realer Abhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen bewirken. Dies wird anhand der im folgenden Abschnitt betrachteten Copulas, die geringere Ähnlichkeiten als die GAUSS- und die STUDENT-Copula aufweisen, noch deutlicher.

B.3.2.2 Archimedische Copulas

Eine umfassende Darstellung der mathematischen Grundlagen und viele Beispiele zur Klasse der so genannten archimedischen Copulas findet man in [NEL 07]. In den folgenden Erläuterungen werden einige mathematische Aspekte vereinfacht behandelt, indem nur solche Beispiele betrachtet werden, für die bestimmte "technische Feinheiten" nicht von Belang sind.

Archimedische Copulas C(u, v) sind relativ einfache Konstrukte, welche die Definitionsgleichungen (B-52a) bis (B-52c) erfüllen. Sie basieren auf generierenden Funktionen φ(t), die stetig, strikt fallend und konvex sind (d. h. φ"(t) > 0) und das Einheitsintervall [0, 1] auf die Menge der positiven reellen Zahlen mit φ(1) = 0 abbilden. Die inverse Funktion $\varphi^{-1}(w)$ mit $0 \le w < \infty$ ist dann eindeutig bestimmt und nimmt Werte im Einheitsintervall [0, 1] an. Dann ist die Funktion

$$C(u,v) = \varphi^{-1}\big(\varphi(u) + \varphi(v)\big) \qquad \text{(B-72)}$$

eine archimedische Copula.

Archimedische Copulas sind gemäß Gl. (B-72) symmetrisch. Mit Hilfe der Transformationen nach Gl. (B-55b) bzw. (B-55c) können daraus jedoch auch Copulas gebildet werden, deren Dichten bzgl. der Gerade v = 1 - u symmetrisch sind. Mit der Transformation Gl. (B-55d) resultiert eine Copula, deren Dichte im Vergleich zu C(u, v) bzgl. der Gerade v = 1 - u gespiegelt ist. Es sei angemerkt, dass alle archimedischen Copulas auch assoziativ sind, d. h. C(C(u, v), w) = C(u, C(v, w)) und auch für mehrere Variable u_1 bis u_d mit d > 2 definiert werden können [NEL 07].

Die generierenden Funktionen φ(t) können durch einen oder auch mehrere Verteilungsparameter spezifiziert sein. Hier werden nur arithmetische Copula-Familien mit einem Verteilungsparameter θ betrachtet. In [NEL 07] ist eine Liste von 22 solcher Copula-Familien aufgeführt und charakterisiert, in der neben gebräuchlichen/bekannten Copulas, wie der CLAYTON-Copula [CLAY 78] und der ALI-MIKHAIL-HAQ-Copula [ALI 78], auch diverse namenlose Copulas enthalten sind, auf die in der Fachliteratur über die lfd. Nummer der Liste von [NEL 07] Bezug genommen wird. Für die im Rahmen des vorliegenden Berichts durchgeführten Berechnungen zur Anwendung von Copulas für die Analyse und Simulation von Abhängigkeiten zwischen Zufallsvariablen (siehe Abschnitt 4.3) wurden aus dieser Liste vier archimedische Copulas ausgewählt, die sich hinsichtlich der Tail-Abhängigkeit deutlich unterscheiden. Dies sind die in der Tabelle 4.1 von [NEL 07] unter der Nr. 5 aufgeführte FRANK-Copula [FRA 79], [GEN 87], die unter Nr. 6 aufgeführte JOE-Copula [JOE 93], [JOE 97] sowie zwei weiter unter Nr. 12 bzw. Nr. 19 aufgeführte Copulas. In Tabelle B-1 sind diese vier Copulas und ihre generierenden Funktionen zusammengestellt. Zusätzlich enthalten die beiden letzten Zeilen von Tabelle B-1 die entsprechenden Angaben für die Produkt-Copula Π (Gl. (B-56)) sowie für eine weitere spezielle archimedische Copula, die hier mit Σ bezeichnet wurde.

Tabelle B-1: Bestimmungsgleichungen zu ausgewählten archimedischen Copulas

Copula	**C(u, v|θ)**	**φ(t|θ)**	**zulässige θ**	**Grenzfälle**
C_F FRANK	$-\frac{1}{\theta}\cdot\ln\left(1+\frac{\left(e^{-\theta\cdot u}-1\right)\cdot\left(e^{-\theta\cdot v}-1\right)}{e^{-\theta}-1}\right)$	$-\ln\left(\frac{e^{-\theta\cdot t}-1}{e^{-\theta}-1}\right)$	$-\infty < \theta < \infty$ *)	W: $\theta \to -\infty$ Π: $\theta \to 0$ M: $\theta \to \infty$
C_J JOE	$1-\left((1-u)^\theta+(1-v)^\theta-(1-u)^\theta\cdot(1-v)^\theta\right)^{1/\theta}$	$-\ln\left(1-(1-t)^\theta\right)$	$1 \le \theta < \infty$	Π: $\theta \to 1$ M: $\theta \to \infty$
C_{12}	$1-\left((1-u)^\theta+(1-v)^\theta-(1-u)^\theta\cdot(1-v)^\theta\right)^{1/\theta}$	$\left(t^{-1}-1\right)^\theta$	$1 \le \theta < \infty$	Σ: $\theta \to 1$ M: $\theta \to \infty$
C_{19}	$\theta/\ln\left(e^{\theta/u}+e^{\theta/v}-e^\theta\right)$	$e^{\theta/t}-e^\theta$	$0 < \theta < \infty$	Σ: $\theta \to 0$ M: $\theta \to \infty$
Π	u·v	- ln(t)	entfällt	entfällt
Σ **)	$u\cdot v/\left(u+v-u\cdot v)\right)$	1/t – 1	entfällt	entfällt

*) Der Wert θ = 0 ist streng genommen aus dem Definitionsbereich der FRANK-Copula ausgenommen. Im Sinne des Grenzübergangs für θ → 0 existieren jedoch sowohl die generierende Funktion als auch die Copula und stimmen in diesem Grenzfall mit der Produkt-Copula (φ_Π bzw. Π) überein.

**) In [NEL 07] wird für diese spezielle archimedische Copula, die als Grenzfall von anderen archimedischen Copulas auftritt, die Bezeichnung Π/(Σ-Π) verwendet.

Archimedische Copulas haben nicht zuletzt wegen ihrer relativ einfachen Handhabung eine breite Anwendung gefunden. Für sie können die KENDALL-Verteilungsfunktion $K_C(t)$ nach Gl. (B-64), der Konkordanzkoeffizient τ nach Gl. (B-65) und die Koeffizienten λ_L und λ_U zur Tail-Abhängigkeit nach Gl. (B-67)direkt auf die generierenden Funktionen $\varphi(t|\theta)$ zurückgeführt werden, wodurch sich (z. T. einfache) analytische Funktionen des Verteilungsparameters θ ergeben. Zudem vereinfachen sich Algorithmen für die Simulation.

Für archimedische Copulas resultiert zur KENDALL'schen Verteilungsfunktion $K_C(t)$ die Darstellung

$$K_C(t) = t - \frac{\varphi(t)}{\varphi'(t)}, \tag{B-73}$$

wonach sich gemäß Gl. (B-65) auch für τ eine vereinfachte Berechnungsformel ergibt [GEN 93],

$$\tau = 1 + 4 \cdot \int_0^1 \frac{\varphi(t)}{\varphi'(t)}\, dt\,. \tag{B-74}$$

Aus den Gleichungen (B-67a/b) folgen mit Gl. (B-72) die Darstellungen

$$\lambda_U = 2 - \lim_{t \to 1^-} \frac{1 - \varphi^{-1}(2 \cdot \varphi(t))}{1 - t} = 2 - \lim_{z \to 0^+} \frac{1 - \varphi^{-1}(2 \cdot z)}{1 - \varphi^{-1}(z)}, \tag{B-75a}$$

$$\lambda_L = \lim_{t \to 0^+} \frac{\varphi^{-1}(2 \cdot \varphi(t))}{t} = \lim_{z \to \infty} \frac{\varphi^{-1}(2 \cdot z)}{\varphi^{-1}(z)}. \tag{B-75b}$$

In Tabelle B-2 sind für die 6 Copulas aus Tabelle B-1 die nach Gl. (B-73) bis (B-75) resultierenden Beziehungen zusammengestellt.

Tabelle B-2: KENDALL'sche Verteilungsfunktion $K_C(t|\theta)$, Konkordanzkoeffizient $\tau_C(\theta)$, und Tail-Abhängigkeitskoeffizienten $\lambda_{L;C}(\theta)$ und $\lambda_{U;C}(\theta)$ für einige archimedische Copulas

Copula	$\mathbf{K_C(t\|\theta)}$	$\boldsymbol{\tau_C(\theta)}$	$\boldsymbol{\lambda_{L;C}(\theta)}$	$\boldsymbol{\lambda_{U;C}(\theta)}$
C_F FRANK	$t - \frac{\left(e^{\theta \cdot t} - 1\right)}{\theta} \cdot \ln\left(\frac{e^{-\theta \cdot t} - 1}{e^{-\theta} - 1}\right)$	$1 - \frac{4}{\theta} \cdot \left(1 - D_1(\theta)\right)$	0	0
C_J JOE	$t + \frac{1}{\theta}\left((1-t)^{\theta} - 1\right) \cdot (1-t)^{1-\theta} \cdot \ln\left(1 - (1-t)^{\theta}\right)$	$\frac{\theta - 4 + 2 \cdot \left(\gamma + \psi(1 + 2/\theta)\right)}{\theta - 2}$	0	$2 - 2^{1/\theta}$
C_{12}	$\frac{t \cdot (1 - t + \theta)}{\theta}$	$1 - \frac{2}{3 \cdot \theta}$	$2^{-1/\theta}$	$2 - 2^{1/\theta}$
C_{19}	$\frac{t}{\theta} \cdot \left(t + \theta - t \cdot e^{\theta - \theta/t}\right)$	$\frac{1}{3}\left(1 + 2 \cdot \theta + 2 \cdot e^{\theta} \cdot \theta^2 \cdot \mathrm{Ei}(-\theta)\right)$	1	0
Π	$t \cdot \left(1 - \ln(t)\right)$	0	0	0
Σ	$t \cdot (2 - t)$	1/3	1/2	0

Einige in der 3. Spalte von Tabelle B-2 für $\tau_C(\theta)$ angegebenen Formeln enthalten spezielle Symbole bzw. Funktionen. In der Formel zur FRANK-Copula stellt $D_1(z)$ die DEBYE-Funktion erster Ordnung dar:

$$D_1(z) = \frac{1}{z}\int_0^z \frac{t}{e^t - 1}\,dt\,. \qquad \text{(B-76)}$$

In der Formel zur JOE-Copula ist γ = 0,577216 die EULER'sche Konstante. $\psi(z)$ bezeichnet die Digammafunktion,

$$\psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} \quad \text{mit der Gammafunktion} \quad \Gamma(z) = \int_o^\infty t^{z-1} \cdot e^{-t} dt \qquad \text{(B-77)}$$

In der Formel zur Copula C_{19} ist Ei(z) die Integralexponentialfunktion

$$Ei(z) = -\int_{-z}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t}\,dt\,. \qquad \text{(B-78)}$$

In Abbildung B-4 ist $\tau_C(\theta)$ in Abhängigkeit vom jeweiligen Verteilungsparameter θ für die Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} dargestellt (der Verlauf mit $\theta < 0$ für die FRANK-Copula ist nicht dargestellt). Die Abbildung B-5 zeigt mit jeweils 2000 zufälligen Realisierungen Scatterplots zu den Dichten der Copulas C_F, C_J, C_{12} und C_{19} bei Ansatz von τ = 0,59 (analog zur Abbildung B-2).

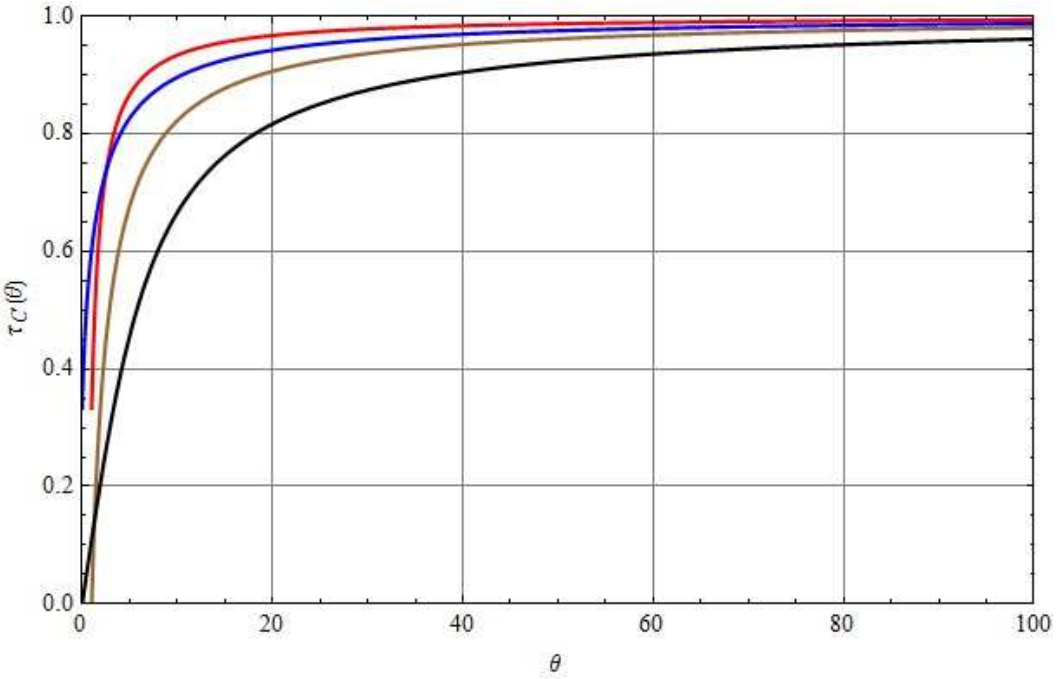


Abbildung B-4: Konkordanzkoeffizienten $\tau_C(\theta)$ für die FRANK-Copula (schwarz), die JOE-Copula (braun), sowie für die Copulas C_{12} (rot) und C19 (blau)

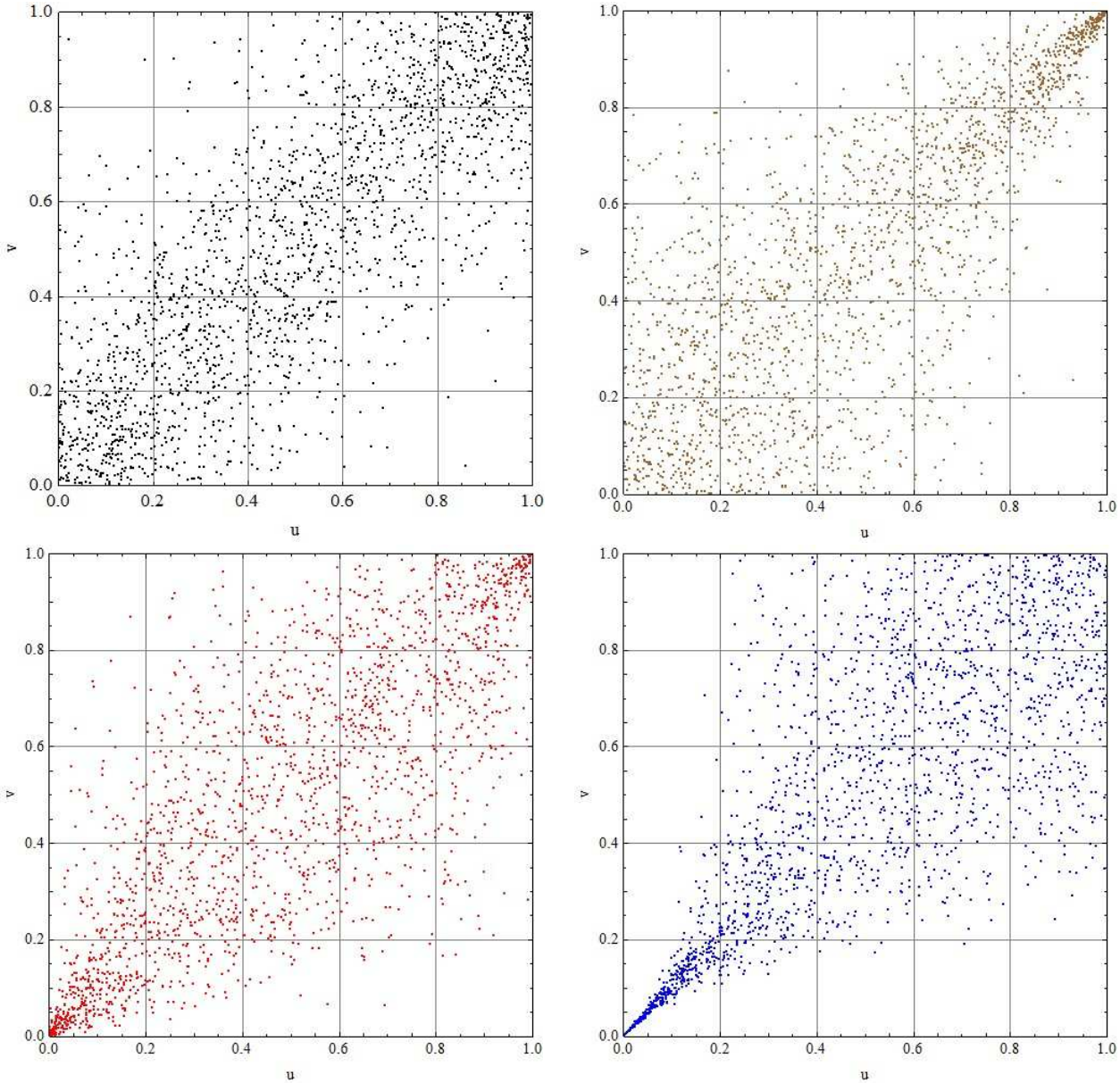


Abbildung B-5: Scatterplots zu den Copulas C_F (links oben, schwarz), C_J (rechts oben, braun), C_{12} (links unten, rot) und C_{19} (rechts unten, blau) für $\tau = 0{,}59$ mit 2000 zufälligen Realisierungen

Der Konkordanzkoeffizient $\tau = 0{,}59$ entspricht für diese vier Copulas den folgenden Werten des jeweiligen Verteilungsparameters θ: $\theta_F = 7{,}669$; $\theta_J = 3{,}708$; $\theta_{12} = 1{,}626$ und $\theta_{19} = 1{,}626$. Die von θ abhängigen Werte von Koeffizienten der Tail-Abhängigkeit (vgl. Tabelle B-2) sind: $\lambda_{U;J} = 0{,}794$; $\lambda_{L;12} = 0{,}653$ und $\lambda_{U;12} = 0{,}468$.

Für den Verglich mit Abbildung B-3 wurden für die in Abbildung B-5 dargestellten Copulas gemäß Gl. (B-54) die Verteilungen von Zufallsgrößen X und Y erzeugt, deren Randverteilungen F(x) und G(y) Standardnormalverteilungen sind. Die entsprechenden Scatterplots zeigt Abbildung B-6.

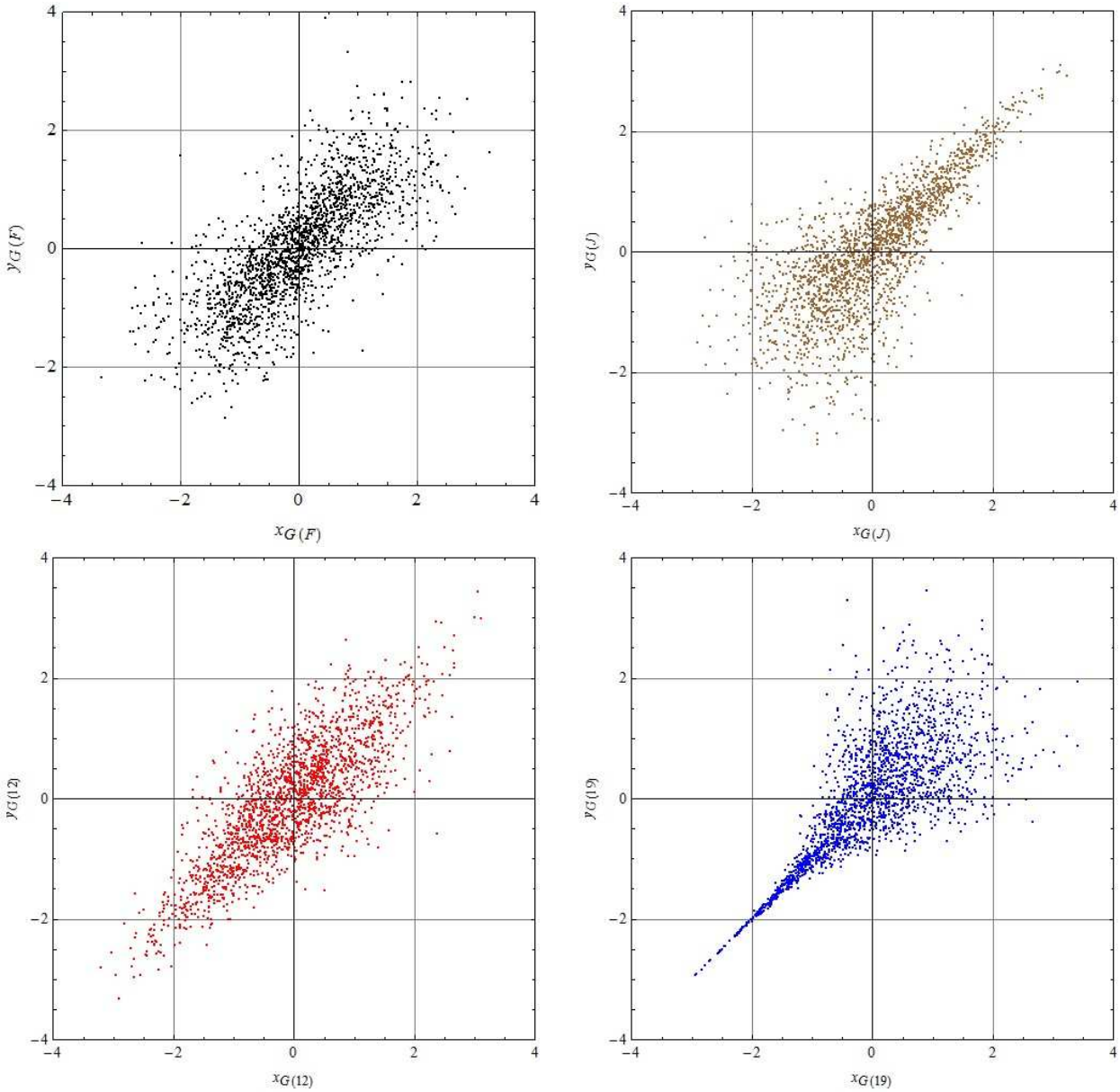


Abbildung B-6: Scatterplots zur gemeinsamen Verteilung H(x ,y) mit den gleichen Randverteilungen der Zufallsgrößen X ~ N(0,1) und Y ~ N(0,1), deren Abhängigkeit jedoch durch die Frank-Copula (links oben), die JOE-Copula (rechts oben) bzw. die Copulas C_{12} (links unten) und C_{19} (rechts unten,) gemäß Abbildung B-5 definiert ist

Die (linearen) Korrelationskoeffizienten $r_{x,y}$ der in Abbildung B-6 dargestellten Verteilungen liegen in der Nähe des für die bivariate GAUSS-Verteilung von Abbildung B-3 angesetzten Wertes von 0,8. Die Werte sind 0,752 (basierend auf C_F), 0,795 (basierend auf C_J), 0,807 (basierend auf C_{12}) und 0,759 (basierend auf C_{19}). Dieser Vergleich zeigt, dass die alleinige Angabe von Korrelationskoeffizienten bzgl. der Struktur/Form der Abhängigkeit zwischen Zufallsgrößen, insbesondere für die Randbereiche, nicht informativ ist.

Zum Vergleich sind in Abbildung B-7 für die beiden nicht-parametrischen Copulas Π und Σ aus den Tabellen B-1 und B-2 Scatterplots zur jeweiligen Copula sowie den daraus resultierenden bivariaten Verteilungen von Zufallsgrößen X und Y mit Randverteilungen N(0, 1) dargestellt. Die Produkt-Copula Π beschriebt voneinander unabhängige Zufallsgrößen; Σ beschreibt für diverse archimedische Copulas einen Grenzfall, für den $\tau = 1/3$ und $\lambda_L = 1/2$ gilt.

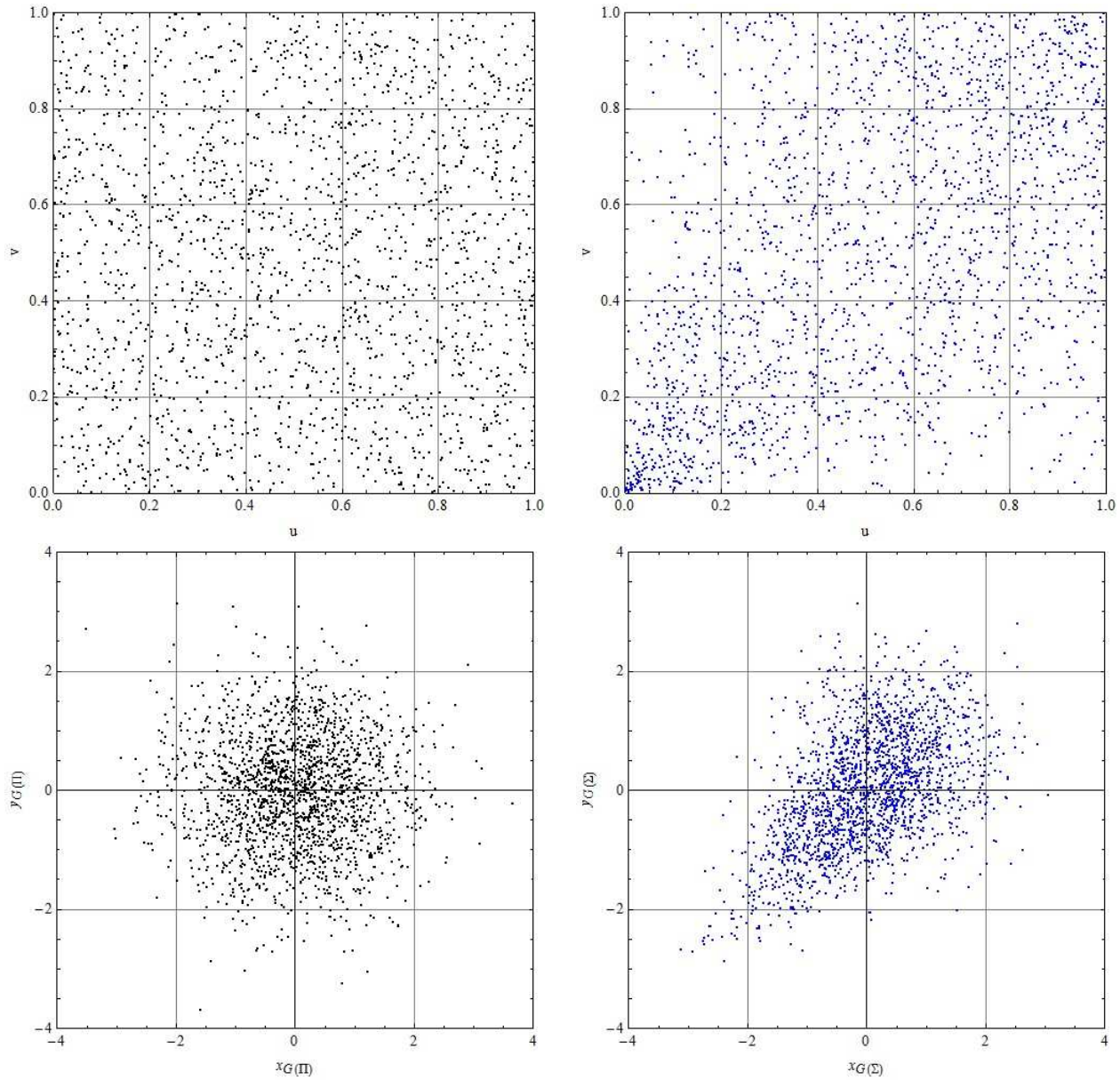


Abbildung B-7: Scatterplots zu den Copulas Π (links oben, schwarz) und Σ (rechts oben, blau) mit 2000 zufälligen Realisierungen sowie daraus resultierende gemeinsamen Verteilung H(x ,y) mit den gleichen Randverteilungen der Zufallsgrößen X ~ N(0, 1) und Y ~ N(0, 1), deren Unabhängigkeit durch die Produkt-Copula (links unten) bzw. Abhängigkeit durch die Copula Σ, (rechts unten) gemäß Gl. (B-54) definiert ist.

Simulation aus archimedischen Copula-Verteilungen: Die Simulation zufälliger Realisierungen aus archimedischen Copulas vereinfacht sich im Vergleich zu dem in Abschnitt B.3.1 beschriebenen allgemeinen Algorithmus, weil die KENDALL'sche Verteilungsfunktion $K_C(t)$ (siehe Gl. B-73) die Verteilung der Zufallsgröße C(U, V) ist [GEN 93]. Der generelle Algorithmus nimmt damit für archimedische Kopulas die folgende Form an [NEL 07]:

1. Es werden zwei voneinander unabhängige Realisierungen s und t von auf dem Einheitsintervall [0, 1] gleichverteilten Zufallszahlen generiert.
2. Mit der inversen K-Verteilungsfunktion K_C^{-1} wird $w = K_C^{-1}(t)$ berechnet.
3. Mit der generierenden Funktion φ der Copula C und ihrer Inversen φ^{-1} werden $u = \varphi^{-1}(s\cdot\varphi(w))$ sowie $v = \varphi^{-1}((1-s)\cdot\varphi(w))$ berechnet. Das Wertepaar (u, v) ist eine zufällige Realisierung der Copula C(u, v).

Diese Methode verlangt eine analytische Darstellung der Inversen der K-Verteilungsfunktion, K_C^{-1}.

Ein spezieller Algorithmus, der nur auf die generierende Funktion φ und ihrer Ableitung φ' sowie die Inversen dieser beiden Funktionen φ^{-1} und $\varphi'^{(-1)}$ zurückgreift, wurde in [GEN 86] begründet:

1. Es werden zwei voneinander unabhängige Realisierungen u und t von auf dem Einheitsintervall [0, 1] gleichverteilten Zufallszahlen generiert.
2. Es wird $w = \varphi'^{(-1)}(\varphi'(u)/t)$ berechnet.
3. Es wird $v = \varphi^{-1}(\varphi(w) - \varphi(u))$ berechnet. Das Wertepaar (u, v) ist eine zufällige Realisierung der Copula C(u, v).

Welcher dieser beiden Algorithmen für eine bestimmte Copula am zweckmäßigsten eingesetzt wird hängt davon ab, welche der beiden Inversen K_C^{-1} bzw. $\varphi'^{(-1)}$ sich einfacher berechnen lässt.

B.3.2.3 MARSHALL-OLKIN-Copula

Die in [MAR 67A]/[MAR 67B] entwickelte MARSHALL-OLKIN-Copula ist ein Beispiel zur Ableitung bi- bzw. multivariater Verteilungen auf der Basis eines fachbezogenen Modells zur Abhängigkeit zwischen Zufallsgrößen. Im einfachsten Fall beschreibt sie die Lebensdauer eines aus zwei parallelen (redundanten) Einheiten bestehenden Systems unter Einfluss von seltenen Ereignissen, die gleichzeitig auf beide Einheiten einwirken können. Beschreibt man das Auftreten von seltenen Ereignissen mit fataler Wirkung durch einen POISSON-Prozess, so ist die (Über-)Lebenszeit eine exponentiell verteilte Zufallsgröße (siehe Anhang C, Abschnitte C.3.3 und C.5.4). Für ein System aus zwei Einheiten wird angenommen, dass die Auswirkungen von Ereignissen (Schocks) durch drei unabhängige POISSON-Prozesse mit den Parametern λ_1, λ_2 und λ_{12} beschrieben werden können, wobei λ_1 die Ausfallrate der ersten Einheit, λ_2 die Ausfallrate der zweite Einheit, und λ_{12} die Rate des gleichzeitigen Ausfalls beider Einheiten beim Auftreten seltener Ereignisses beschreiben. Die Lebenszeiten X und Y der beiden Einheiten können dann durch drei unabhängige, exponentiell verteilte Zufallsgrößen Z_1, Z_2 und Z_{12} (mit den Parametern λ_1, λ_2 bzw. λ_{12}) beschrieben werden:

$$X = \min\{Z_1, Z_{12}\} \quad \text{und} \quad Y = \min\{Z_2, Z_{12}\}. \tag{B-79}$$

Bezeichnet man mit H(x, y) die gemeinsame Verteilungsfunktion von X und Y, welche die Randverteilungen F(x) und G(y) haben, so kann man die gemeinsame Überlebensfunktion

$$\begin{aligned}\overline{H}(x,y) &= \Pr[X > x, Y > y] = \Pr[Z_1 > X]\cdot\Pr[Z_2 > y]\cdot\Pr[Z_{12} > \max\{x,y\}] \\ &= e^{-\lambda_1\cdot x-\lambda_2\cdot y-\lambda_{12}\cdot\max\{x,y\}}\end{aligned} \tag{B-80}$$

durch eine so genannte Überlebens-Copula darstellen. Mit den Rand-Überlebensfunktionen

$$\overline{F}(x) = \Pr[X > x] = 1 - F(x) \quad \text{und} \quad \overline{G}(y) = \Pr[Y > y] = 1 - F(y) \tag{B-81}$$

folgt zunächst

$$\begin{aligned}\overline{H}(x,y) &= \Pr[X > x, Y > y] = 1 - F(x) - G(y) + H(x,y) \\ &= \overline{F}(x) + \overline{G}(y) - 1 + H(x,y) \\ &= \overline{F}(x) + \overline{G}(y) - 1 + C(F(x), G(y)) \\ &= \overline{F}(x) + \overline{G}(y) - 1 + C(1-\overline{F}(x), 1-\overline{G}(y))\end{aligned}, \tag{B-82}$$

wobei H(x, y) nach dem Satz von SKLAR gemäß Gl. (B-54a) durch eine Copula C(F(x), G(y)) dargestellt wurde. Für die auf dem Einheitsintervall [0, 1] gleichverteilten Variablen

$$u = \overline{F}(x) \quad \text{und} \quad v = \overline{G}(y) \tag{B-83}$$

gilt dann:

$$\overline{H}(x,y) = u + v - 1 + C(1-u, 1-v)\,. \tag{B-84}$$

Der Vergleich mit Gl. (B-55d) zeigt, dass die rechte Seite von Gl. (B-84) eine Copula ist. Wie die multivariate Verteilung H(x, y) kann also auch die Überlebensfunktion $\overline{H}(x,y)$ durch eine Copula dargestellt werden. Sie wird Überlebens-Copula genannt [NEL 07] und mit $\hat{C}(u,v)$ bezeichnet:

$$\overline{H}(x,y) = \hat{C}(\overline{F}(x), \overline{G}(x))\,. \tag{B-85}$$

Ersetzt man nun in Gl. (B-80) max{x, y} durch x + y – min{x, y}, so folgt mit

$\overline{F}(x) = e^{-(\lambda_1+\lambda_{12})\cdot x}$ und $\overline{G}(y) = e^{-(\lambda_2+\lambda_{12})\cdot y}$:

$$\overline{H}(x,y) = \overline{F}(x)\cdot\overline{G}(x)\cdot\min\{e^{\lambda_{12}\cdot x}, e^{\lambda_{12}\cdot y}\}\,.$$

Für u und v gemäß Gl. (B-83) und mit den Bezeichnungen

$$\alpha = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_1+\lambda_{12}} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{\lambda_{12}}{\lambda_2+\lambda_{12}}, \qquad 0 \le \alpha, \beta \le 1, \tag{B-86}$$

resultiert dann folgende Darstellung der Überlebens-Copula $\hat{C}(u,v)$ (MARSHALL-OLKIN-Copula):

$$\hat{C}(u,v) \equiv C_{\alpha,\beta}(u,v) = \min\left\{u^{1-\alpha}\cdot v,\ u\cdot v^{1-\beta}\right\} = \begin{cases} u^{1-\alpha}\cdot v & \text{für } u^{\alpha} \ge v^{\beta} \\ u\cdot v^{1-\beta} & \text{für } u^{\alpha} \le v^{\beta} \end{cases}. \tag{B-87}$$

Grenzfälle sind die Produkt-Copula, $C_{\alpha,0} = C_{0,\beta} = \Pi$, und die obere FRÉCHET-HOEFFDING-Schranke, $C_{1,1} = M$ (siehe Gl. (B-56) und (B-57c)). Für $\alpha = \beta$ resultiert die CUADRAS-AUGÉ-Copula [CUA 81].

Die MARSHALL-OLKIN-Copula besitzt einen stetigen und einen singulären Anteil (siehe Gl. (B-60)), wobei der singuläre Anteil

$$S_{\alpha,\beta}(u,v) = \frac{\alpha \cdot \beta}{\alpha + \beta - \alpha \cdot \beta} \cdot \left(\min\left\{u^{\alpha}, v^{\beta}\right\}\right)^{\frac{\alpha+\beta-\alpha\cdot\beta}{\alpha\cdot\beta}} \tag{B-88}$$

auf der Kurve $u^{\alpha} = v^{\beta}$ liegt. Die Größe $S_{\alpha,\beta}(1, 1) = \alpha\cdot\beta/(\alpha + \beta - \alpha\cdot\beta)$ ist das Wahrscheinlichkeitsmaß für die singuläre Komponente $Pr[U^{\alpha} = V^{\beta}]$. Für den Konkordanzkoeffizienten erhält man gemäß Gl. (B-63) den gleichen Wert: $\tau_{\alpha,\beta} = \alpha\cdot\beta/(\alpha + \beta - \alpha\cdot\beta)$. Die Koeffizienten zur Tail-Abhängigkeit gemäß Gl. (B-67) lassen sich direkt berechnen: $\lambda_L = 0$ und $\lambda_U = \min\{\alpha, \beta)$.

Die Simulation kann z. B. mit folgendem Algorithmus vorgenommen werden:

1. Es werden drei voneinander unabhängige Realisierungen r, s und t von auf dem Einheitsintervall [0, 1] gleichverteilten Zufallszahlen generiert.
2. Es werden $a = \min\{-\ln(r)/(1-\alpha); -\ln(t)/\alpha\}$ und $b = \min\{-\ln(s)/(1-\beta); -\ln(t)/\beta\}$ berechnet.
3. Dann ist mit $u = e^{-a}$ und $v = e^{-b}$ das Wertepaar (u, v) eine zufällige Realisierung der MARSHALL-OLKIN-Copula $C_{\alpha,\beta}(u, v)$.

Die Abbildung B-8 zeigt Scatterplots zur MARSHALL-OLKIN-Copula für zwei Parametersätze (mit $\tau_{\alpha,\beta} = 1/16$ bzw. 1/4), welche die obigen Erläuterung veranschaulichen. Abschließend sei vermerkt, dass die MARSHALL-OLKIN-Copula nicht nur in Modellen mit exponentiellen Randverteilungen genutzt wird. Eine Übersicht zu diversen Anwendungen enthält [BAL 09].

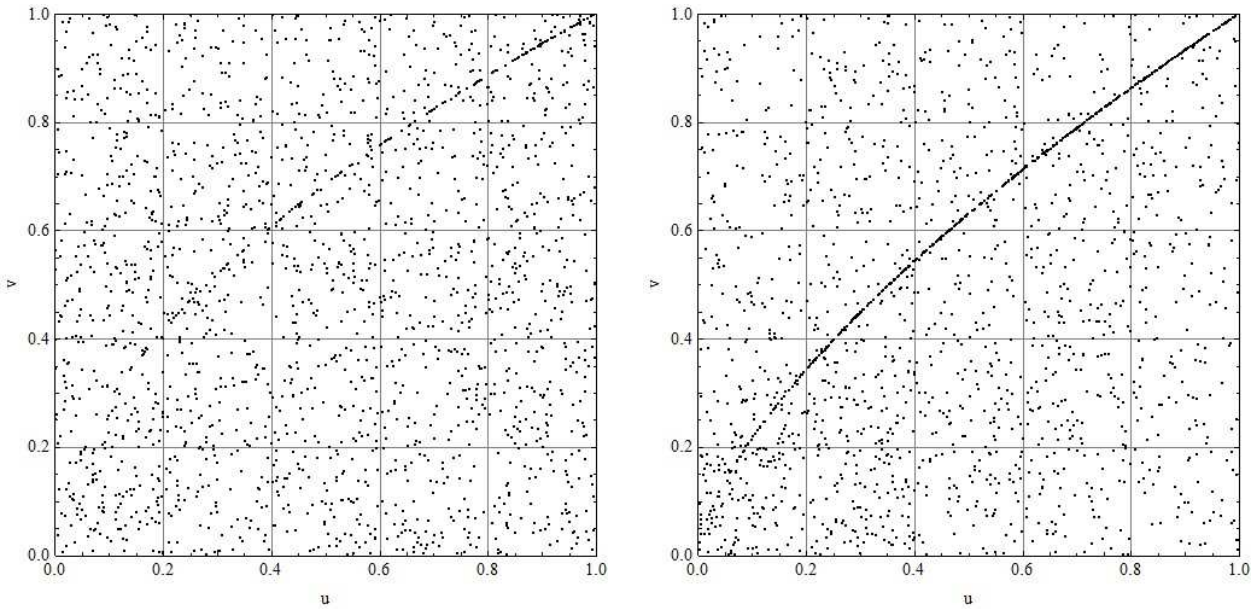


Abbildung B-8: Scatterplots zur MARSHALL-OLKIN-Copula mit 2000 zufälligen Realisierungen für zwei Parametersätze mit $\lambda_1 = 2$; $\lambda_2 = 1$;
linkes Bild: $\lambda_{12} = 1/5$; somit $\alpha = 1/11$; $\beta = 1/6$; $\tau_{\alpha,\beta} = 1/16$ (für Stichprobe $\tau_{u,v} = 0{,}0693$);
rechtes Bild: $\lambda_{12} = 1$; somit $\alpha = 1/3$; $\beta = 1/2$; $\tau_{\alpha,\beta} = 1/4$ (für Stichprobe $\tau_{u,v} = 0{,}248$)

B.3.3 Berechnung der empirischen Copula und KENDALL-Verteilung

Zur Anpassung von parametrischen Copulas an Stichproben, die mit Hilfe der empirischen Randverteilungsfunktionen der jeweiligen Zufallsgrößen auf das Einheitsintervall [0, 1] transformiert wurden, ist die empirische Copula von zentraler Bedeutung. Sie wird analog zur empirischen Verteilungsfunktion univariater Zufallsgrößen definiert (siehe z. B. [NEL 07]).

Es sei $\{(x_k, y_k)\}_n$ eine Stichprobe des Umfangs n von Wertepaaren (x_k, y_k) der Zufallsgrößen X und Y (k von 1 bis n). Mit $x_{(i)}$ und $y_{(j)}$ werden die in aufsteigender Ordnung nummerierten Werte von X bzw. Y. bezeichnet: $x_{(1)}$ ist der kleinste und $x_{(n)}$ der größte Wert der Zufallsgröße X in der Stichprobe, wie auch $y_{(1)}$ den kleinsten und $y_{(n)}$ den größten Stichprobenwert der Zufallsgröße Y bezeichnen. Dann ist die empirische Copula $C_n(i/n, j/n)$ wie folgt definiert:

$$C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)=\frac{\text{Anzahl der Paare } (x_k, y_k) \text{ der Stichprobe mit } x_k \le x_{(i)} \text{ und } y_k \le y_{(i)}}{n}. \qquad \text{(B-89)}$$

Die empirische Copula-Massendichte, $c_n(i/n, j/n)$ ist definiert durch:

$$c_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)=\begin{cases}1/n & \text{wenn } (x_{(i)}, y_{(j)}) \text{ ein Element der Stichprobe ist}\\ 0 & \text{sonst}\end{cases}. \qquad \text{(B-90)}$$

Zwischen der empirischen Copula(-verteilungsfunktion) C_n und ihrer Massendichte c_n bestehen folgende Beziehungen:

$$C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)=\sum_{k=1}^{i}\sum_{l=1}^{j}c_n\left(\frac{k}{n},\frac{l}{n}\right), \qquad \text{(B-91)}$$

$$c_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)=C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)-C_n\left(\frac{i-1}{n},\frac{j}{n}\right)-C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j-1}{n}\right)+C_n\left(\frac{i-1}{n},\frac{j-1}{n}\right). \qquad \text{(B-92)}$$

Für den empirischen Konkordanzkoeffizienten τ_n resultiert die Gleichung:

$$\tau_n=\frac{2\cdot n}{n-1}\sum_{i=2}^{n}\sum_{j=2}^{n}\left[C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j}{n}\right)\cdot C_n\left(\frac{i-1}{n},\frac{j-1}{n}\right)-C_n\left(\frac{i-1}{n},\frac{j}{n}\right)\cdot C_n\left(\frac{i}{n},\frac{j-1}{n}\right)\right]. \qquad \text{(B-93)}$$

Gemäß Gl. (B-64) ergibt sich die folgende empirische KENDALL-Verteilungsfunktion:

$$K_n(t)=\frac{\text{Anzahl der Paare } (x_k, y_k), \text{ für deren Ränge } (i, j)\ C_n(i/n, j/n) \le t \text{ gilt}}{n}, \qquad \text{(B-94)}$$

wobei $0 \le t \le 1$ ist. Offensichtlich gilt $K_n(0) = 0$, $K_n(1) = 1$, und für $t_1 \le t_2$ auch $K_n(t_1) \le K_n(t_2)$.

Zu alternativen Darstellungen der Berechnung von τ_n sei auf [NEL 03] verwiesen.

B.4 Stochastische Prozesse und Differentialgleichungen

In den Abschnitten B.1 bis B.3 wurden Zufallsgrößen betrachtet, die bei "Experimenten" zufällige Wert aus einer Menge Ω der möglichen Ergebnisse annehmen. Für univariate stetige Zufallsgrößen kann Ω z. B. die Menge $\mathbb{R}$ aller reellen Zahlen sein (oder der nicht-negativen reellen Zahlen $\mathbb{R}_+$ bzw. Zahlen $\mathbb{R}_{[a,b]}$ aus einem Intervall [a, b]). Für diskrete Zufallsgrößen kann Ω z. B. die Menge $\mathbb{N}$ aller natürlichen Zahlen sein. Ein Ereignis ist dann eine gewisse Untermenge aus Ω, für dessen Eintreten ein Wahrscheinlichkeitsmaß bestimmt werden kann, $\Pr(X \leq x) = F_X(x|\boldsymbol{\theta})$, wobei $F_X(x|\boldsymbol{\theta})$ eine Verteilungsfunktion mit dem Verteilungsparameter $\boldsymbol{\theta}$ ist (siehe Beispiele in Anhang C).

Stochastische Prozesse sind zufällige Funktionen X(t), wobei die Variable t als Zeit betrachtet werden kann, $t \in [0, T]$.[4] Eine Realisierung x(t) wird als Trajektorie oder Stichprobenfunktion bezeichnet (engl.: sample path). Für einen fixierten Zeitpunkt t ist $X_t = X(t)$ eine übliche Zufallsgröße, für die eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\Pr(X_t \leq x) = F_{Xt}(x|\boldsymbol{\theta}, t)$ existiert.

Die Zeit t wird oft nicht als kontinuierlicher Parameter, sondern als diskrete Reihe $t = t_0, t_1, \ldots, t_N$ mit (i. A. konstanten) Zeitschritten $\Delta t = t_i - t_{i-1} = T/N$, i von 1 bis N) betrachtet. In diesem Fall wird von zeitdiskreten stochastischen Prozessen bzw. von stochastischen Zeitreihen X_t gesprochen.

Von praktischer Bedeutung sind stochastische Prozessen insbesondere dann, wenn sie an die Stelle üblicher Parameter von deterministischen Modellen treten, die durch eine Differentialgleichung beschrieben werden. Dann wird auch die Lösung der Differentialgleichung, welche den zeitlichen Verlauf der Zielgröße beschreibt, zu einem stochastischen Prozess. Aus gewöhnlichen Differentialgleichungen werden stochastische Differentialgleichungen (bzw. Differenzengleichungen im Fall von zeitdiskreten Prozessen). Dbzgl. Beispiele mit Bezug zu radiologisch relevanten Fragen werden in Kapitel 5 betrachtet. Nachfolgend werden einige grundlegende mathematische Begriffe und Aussagen zu stochastischen Prozessen und Differentialgleichungen erläutert, um das Verständnis dieser Beispiele und der daraus abgeleiteten Schlussfolgerungen zu erleichtern.

Zunächst wird in Abschnitt B.4.1 auf die wichtigsten zeitkontinuierlichen stochastische Prozesse eingegangen. Spezielle Aspekte, die im Vergleich zu gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODE, ordinary differential equation) bei der Integration von stochastischen Differentialgleichungen (SDE, stochastic differential equation) zu beachten sind, werden in Abschnitt B.4.2 erläutert.

B.4.1 Zeitkontinuierliche stochastische Prozesse

Die zwei grundlegenden stochastischen Prozesse sind der Standard-WIENER-Prozess (SWP) und der elementare POISSON-Prozess (EPP). Ausführliche Definitionen und Beschreibungen dieser Prozesse findet man in den Fachbüchern zu stochastischen Differentialgleichungen (siehe z. B. [KLOE 95], [ØKS 03], [ALL 07], [JAC 10]). Der SWP und der EPP sind auch die Bausteine für die Klasse der LÉVY-Prozesse, die als Kombinationen von WIENER-Prozessen und zusammengesetzten POISSON-Prozessen dargestellt werden können. Die damit verbundene Flexibilität gibt LÉVY-Prozessen eine besondere Bedeutung für die Modellierung von stochastischen Prozessen. Bevor auf einige spezielle LÉVY-Prozesse näher eingegangen wird, sei deren allgemeine Definition erläutert.

---

[4] Analog werden räumliche stochastische Prozesse als zufällige Funktionen der kartesischen Koordinaten betrachtet.

B.4.1.1 Definition von LÉVY-Prozessen

Eine prägnante Darstellung der LÉVY-Prozesse enthält [JAC 10]. Ausführlich sind sie u. a. in [SATO 99], [CONT 04], [KYP 06] und [APP 09] beschrieben.

Ein zeitkontinuierlicher LÉVY-Prozess ist

(1) ein rechsstetiger stochastischer Prozess L(t) mit linken Grenzwerten[5] und L(0) = 0, bei dem

(2) für zwei beliebige Zeitpunkte $0 \le t_n \le t_{n+1}$ die Differenz $L(t_{n+1}) - L(t_n)$ die gleiche statistische Verteilung aufweist wie $L(t_{n+1} - t_n)$,

(3) die Differenz $L(t_{n+1}) - L(t_n)$ für drei beliebige Zeitpunkte $0 \le t_{n-1} \le t_n \le t_{n+1}$ unabhängig von $L(t_{n-1})$ ist, und

(4) für beliebig kleine Werte $\varepsilon > 0$ die Wahrscheinlichkeit $Pr(L(t + \Delta t) - L(t) > \varepsilon)$ für den Grenzwert $\Delta t \to 0$ gleich Null ist.

Die Bedingungen (2) und (3) besagen, dass die Inkremente $L(t + \Delta t) - L(t)$ von LÉVY-Prozessen iid Zufallsgrößen mit einer stationären Verteilung sind und dass sie stationäre MARKOV-Prozesse sind. Die als "stochastische Stetigkeit" bezeichnete Bedingung (4) besagt nicht, dass die Trajektorien stetige Funktionen sein müssen (so enthalten POISSON-Prozesse Sprünge an zufälligen Zeitpunkten), schließt aber Sprünge zu determinierten Zeitpunkten (z. B. "Kalendereffekte") aus. Die Definition der LÉVY-Prozesse als "càdlàg" besagt, dass für einen Zeitpunkt t, für den der Wert der realisierten Trajektorie l(t) bekannt ist, die weitere Entwicklung zufällig verläuft (auch für ein infinitesimales Zeitinkrement dt nicht determiniert ist).

Zur Modellierung von realen stochastischen Prozessen sei vermerkt, dass sich LÉVY-Prozesse durch ihre MARKOV-Eigenschaft ("Gedächtnislosigkeit") oft nicht direkt eignen. Sie finden jedoch breite Anwendung als "Rauschquelle" in stochastischen Differentialgleichungen (siehe Abschnitt B.4.2),

B.4.1.2 Standard-WIENER-Prozess (SWP)

Der (Standard-) WIENER-Prozess W(t) ist für $t \ge 0$ mit W(0) = 0 durch die Normalverteilung seines Inkrements

$$dW \sim N(0, \sqrt{dt}) \tag{B-95}$$

für infinitesimale Zeitintervalle dt definiert. Aus Gl. (B-95) folgt:

$$W(t) = \int_0^t dW \quad \text{mit} \quad E[W(t)] = 0, \quad Var[W(t)] = t, \quad W(t) \sim N(0, \sqrt{t}). \tag{B-96}$$

Im Unterschied zu anderen LÉVY-Prozessen ist der WIENER-Prozess stetig (links- und rechtseitige Grenzwerte stimmen für jeden Zeitpunkt t überein. Er ist jedoch nicht differenzierbar. Dies ist durch die folgende Grenzwertbetrachtung unter Beachtung von Gl. (B-96) einsichtig:

---

[5] Eine Funktion f(t), $[0,T] \to R$, ist rechtsstetig mit linken Grenzwerten, wenn für beliebige $t \in [0, T]$ linke und rechte Grenzwerte $f_l(t) = \lim f(t-\delta)$ und $f_r(t) = \lim f(t+\delta)$ für $\delta > 0$, $\delta \to 0$ existieren und $f(t) = f_r(t)$ gilt. In der Fachliteratur wird diese Eigenschaft von Funktionen als "càdlàg" bezeichnet. Dies ist ein französisches Akronym (continue à droite, limitée à gauche).

$$\frac{dW(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{W(t+\Delta t) - W(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{W(\Delta t)}{\Delta t} \sim \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\sqrt{\Delta t}}{\Delta t} \to \infty. \qquad \text{(B-97)}$$

In Gl. (B-97) steht das Zeichen "~" für "in der Größenordnung von", wobei die letzte Aussage aus $Var[W(\Delta t)] = E[W^2(\Delta t)] = \Delta t$ folgt. Die Eigenschaft des WIENER-Prozesses, nicht differenzierbar zu sein, verlangt spezielle Methoden für nichtlineare Transformationen und die Integration, worauf in Abschnitt B.4.2 eingegangen wird. In Abbildung B-9 sind zur Veranschaulichung fünf zufällige Realisierungen w(t) des SWP dargestellt. Die numerische Simulation von zufälligen Realisierungen des SWP kann sehr einfach mit folgendem Algorithmus vorgenommen werden:

1. Es wird w(0) = 0 gesetzt, und für den Simulationszeitraum T wird für eine (beliebige) große Anzahl I von Simulationsschritten der Zeitschritt $\Delta t = T/I$ festgelegt.
2. Es werden I normalverteilte Zufallszahlen $\Delta w_i \sim N(0, \sqrt{\Delta t})$ erzeugt.
3. Dann ergibt sich mit $w(i \cdot \Delta t) = w((i-1) \cdot \Delta t) + \Delta w_i$ für i von 1 bis I eine Trajektorie des SWP.

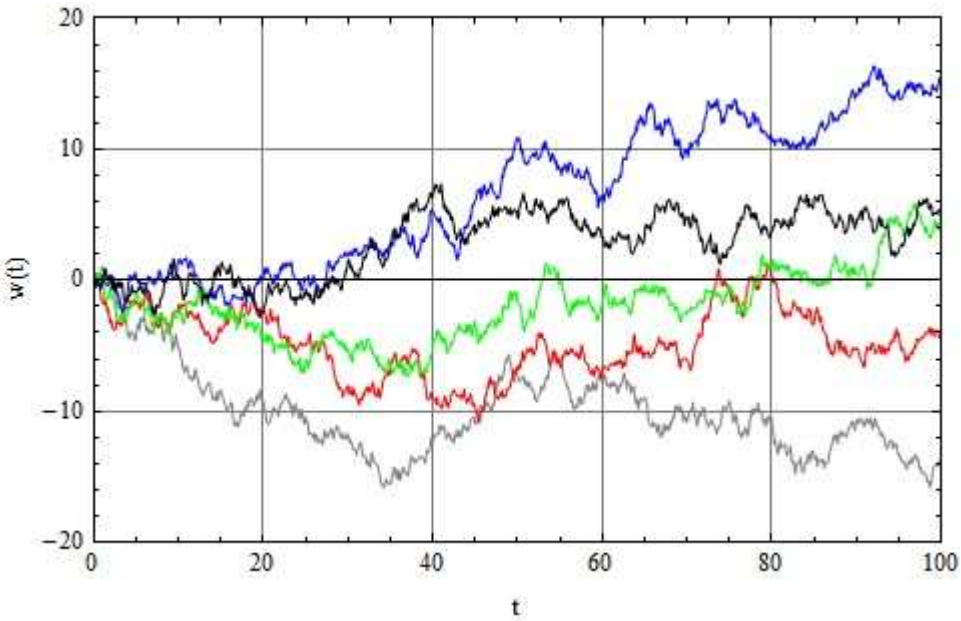


Abbildung B-9: Fünf zufällige Realisierungen des Standard-WIENER-Prozesses W(t); mit Zeitschritt der numerischen Simulation von $\Delta t = 0{,}1$ (T = 100; Anzahl der Zeitschritte: I = 1000).

Für einen linear transformierten WIENER-Prozess gilt:

$$B(t) = \mu\, t + \sigma\, W(t) \quad \Rightarrow \quad B(t) \sim N(\mu\, t, \sigma \sqrt{t})\,. \qquad \text{(B-98)}$$

Der so aus einem SWP definierte Prozess B(t) wird als verallgemeinerter WIENER-Prozess oder als BROWN'sche Bewegung mit Drift μ und Volatilität σ bezeichnet. B(t) hat den Erwartungswert $\mu \cdot t$ und die Varianz $\sigma^2 \cdot t$. Die Summe von zwei SWP ist eine BROWN'sche Bewegung mit $\mu = 0$ und $\sigma^2 = 2$. Diese Additivität ist ein generelles Merkmal aller LÉVY-Prozesse (siehe Abschnitt B.4.1.5).

Der SWP ist zudem ein Martingal. Mit diesem Begriff werden stochastische Prozesse bezeichnet, für die bei einem zum Zeitpunkt u bekannten Zufallswert X_u der dbzgl. bedingte Erwartungswert von X(t) für zukünftige Zeitpunkte t > u gleich X_u ist, d. h., $E_X[X_t|X_u] = X_u$ gilt. Für den SWP kann diese Eigenschaft unmittelbar gezeigt werden. Sie folgt aus $W_t - W_u \sim N(0, \sqrt{t-u})$:

$$E[W_t \mid W_u] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{W_t \exp\left(-\frac{(W_t - W_u)^2}{2\,(t-u)}\right)}{\sqrt{2\pi(t-u)}}\, dW_t = W_u. \qquad \text{(B-99)}$$

In Abbildung B-10 ist dies anhand von fünf für t > u möglichen weiteren Verläufen des SWP W(t) bei Kenntnis der Trajektorie bis zum Zeitpunkt u verdeutlicht, wobei der genaue Verlauf bis zum Zeitpunkt u wegen der MARKOV-Eigenschaft des SWP unerheblich ist. Wichtig ist nur der Wert W_u.

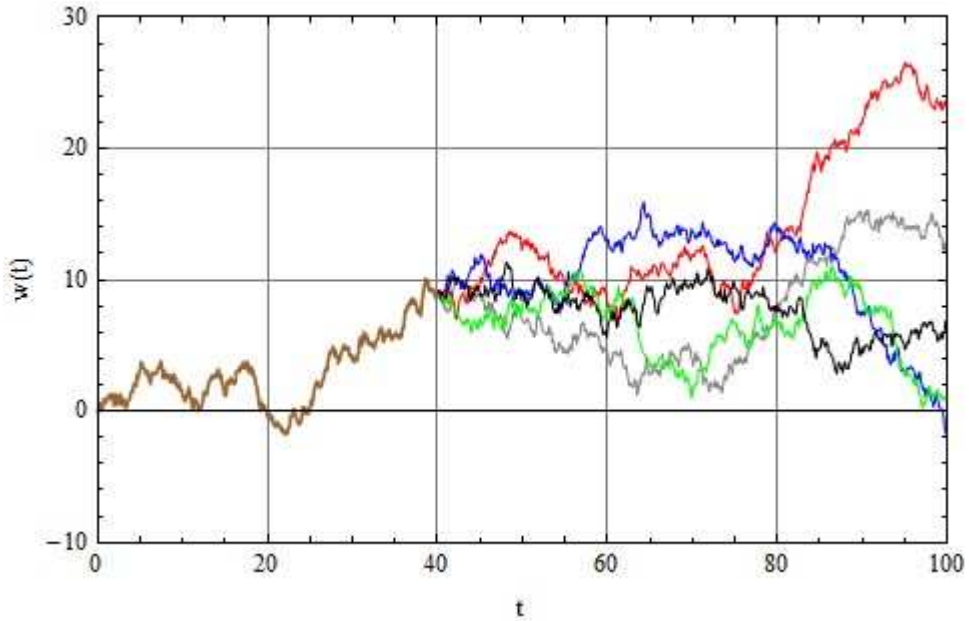


Abbildung B-10: Fünf zufällige Realisierungen des Standard-WIENER-Prozesses W(t) bei bekanntem Verlauf bis zum Zeitpunkt u = 40 (braun); mit Zeitschritt der numerischen Simulation von Δt = 0,1 (T = 100; Anzahl der Zeitschritte: I = 1000).

B.4.1.3 Elementarer POISSON-Prozess (EPP)

Der elementare POISSON-Prozess (EPP) ist ein Zählprozess mit mittlerer Rate (Intensität) λ, dessen Zustandsgröße zum Zeitpunkt t eine zufällige natürliche Zahl N(t) ist, mit der die Anzahl von Ereignissen im Zeitintervall von 0 bis t gezählt wird. Es gilt N(0) = 0. Für einen EPP mit Intensität λ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass in einem infinitesimalen Zeitintervall dt ein Sprung erfolgt und somit dN = N(t+dt) – N(t) = 1 ist, unabhängig von der Zeit t und gleich λ·dt. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass im Zeitintervall dt kein Sprung erfolgt ist dann gleich 1 - μ·dt, da eines der beiden sich gegenseitig ausschließenden Ereignisse (dN = 1 oder dN = 0) realisiert wird (das Auftreten von mehreren Sprüngen in einem infinitesimalen Zeitintervall ist ausgeschlossen).

Wird ein Zeitintervall [0, t] in I Intervalle gleicher Länge $\Delta t = t/I$ aufgeteilt, kann die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bis t kein Sprung erfolgt, durch folgenden Grenzübergang berechnet werden:

$$\Pr(N(t) = 0 \mid \lambda) = \lim_{I\to\infty} \prod_{i=1}^{I} (1 - \lambda\, \Delta t) = \lim_{I\to\infty} \left(1 - \lambda\, t / I\right)^{I} = e^{-\lambda\, t} .$$

Analog ergibt sich die Wahrscheinlichkeit dafür, dass n Ereignisse in der Zeit t erfolgen, wozu alle Kombinationen von Zeitintervallen mit bzw. ohne Sprung zu berücksichtigen sind:

$$\Pr(N(t) = n \mid \lambda) = \lim_{I\to\infty} \frac{I!}{n!(I-n)!} \cdot (\lambda\, t / I)^{n} \cdot (1 - \lambda\, t / I)^{I-n} = \frac{(\lambda\, t)^{n} \cdot e^{-\lambda\, t}}{n!} . \qquad \text{(B-100)}$$

Aus dem Vergleich von Gl. (B-100) mit Gl. (C-82) folgt: Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass durch einen EPP mit dem Parameter λ im Zeitintervall [0, t] genau n Sprünge erfolgen, ist durch die POISSON-Verteilung mit dem Parameter $\lambda \cdot t$ bestimmt:

$$\Pr(N(t) = n \mid \lambda) = f_{Poi}(n \mid \lambda\, t) . \qquad \text{(B-101)}$$

Ist N(t) ein EPP mit einer Intensität λ, so gilt dementsprechend (siehe Gl. (C-83)):

$$E[N(t)] = \lambda\, t, \quad Var[N(t)] = \lambda\, t . \qquad \text{(B-102)}$$

Für die Ableitung einer einfachen Darstellung des EPP

$$N(t) = \int_0^t dN \quad \text{mit} \quad \Pr(dN = 1|\lambda) = \lambda \cdot dt \quad \text{und} \quad \Pr(dN = 0|\lambda) = 1 - \lambda \cdot dt, \qquad \text{(B-103)}$$

aus der sich auch ein effektiver Algorithmus zur Simulation dieses stochastischen Prozesses ergibt, wird die Tatsache genutzt, dass die Zeit τ zwischen zwei Ereignissen eine Zufallsgröße ist, die einer Exponentialverteilung mit dem gleichen Parameter λ folgt: $\tau \sim Ex(\lambda)$.

<u>Anmerkung:</u> Mit diesem Ansatz kann auch Gl. (B-100) auf einfache Weise abgeleitet werden. Es seien τ_i $(1 \le i \le k)$ k iid Zufallsgrößen der Exponentialverteilung $Ex(\lambda)$. Ihre Summe

$$T_k = \sum_{i=1}^{k} \tau_i , \quad \tau_i \sim Ex(\lambda) \qquad \text{(B-104)}$$

ist dann ebenfalls eine Zufallsgröße, welche die Zeit bis zum Eintreten des k-ten POISSON-Ereignisses angibt. Sie genügt der Gammaverteilung[6] $T_k \sim Gam(k,\lambda)$ (siehe Abschnitte C.3.3, C.3.4). Damit kann die Wahrscheinlichkeit $\Pr(N(t) = n|\lambda)$ durch eine elementare partielle Integration bestimmt werden:

$$\Pr\left(N(t) = n \mid \lambda)\right) = \Pr(T_n < t < T_{n+1} \mid \lambda) = \int_0^t f_{Gam}(T \mid n, \lambda)\, dT - \int_0^t f_{Gam}(T \mid n+1, \lambda)\, dT , \qquad \text{(B-105)}$$

wobei $f_{Gam}(T|\alpha,\lambda)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte der Gammaverteilung $Gam(\alpha,\lambda)$ ist; siehe Gl. (C-26). Eine partielle Integration des zweiten Integrals auf der rechten Seite von Gl. (B-104) ergibt

---

[6] Da der Formparameter α der Gammaverteilung $Gam(\alpha,\lambda)$ in diesem Fall eine natürliche Zahl ist, spricht man auch von einer ERLANG-Verteilung.

$$\int_0^t f_{Gam}(T \mid n+1,\lambda)\,dT = \int_0^t \frac{\lambda^{n+1}\cdot T^n \cdot e^{-\lambda T}}{\Gamma(n+1)}\,dT = -\frac{\lambda^n \cdot t^n \cdot e^{-\lambda t}}{\Gamma(n+1)} + \int_0^t \frac{\lambda^n \cdot T^{n-1}\cdot e^{-\lambda T}}{\Gamma(n)}\,dT$$
$$= -\frac{(\lambda\, t)^n \cdot e^{-\lambda t}}{n!} + \int_0^t f_{Gam}(T \mid n,\lambda)\,dT \quad .$$

Setzt man diese Beziehung in Gl. (B-105) ein, so folgt:

$$\Pr\big(N(t) = n \mid \lambda)\big) = \frac{(\lambda\, t)^n \cdot e^{-\lambda t}}{n!} \,. \qquad \text{(B-100')}$$

Mit der in Gl. (B-104) definierten Zufallsgröße T_k (Zeitpunkt des Eintretens des k-ten POISSON-Ereignisses) lässt sich der Prozess N(t), der die Anzahl dieser Ereignisse zählt, wie folgt darstellen:

$$N(t) = \sum_{k\geq 1} 1_{t \geq T_k}(t)\,, \qquad \text{(B-106)}$$

wobei $1_B(t)$ die Indikatorfunktion bezeichnet, die auf dem im Index angegebene Bereich B den Wert 1 annimmt und außerhalb dieses Bereichs gleich 0 ist,

$$1_B(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t \in B \\ 0 & \text{für } t \notin B \end{cases} . \qquad \text{(B-107)}$$

Man kann zeigen, dass der mit Gl. (B-104)/(B-106) dargestellte POISSON-Prozess ein stationärer LÉVY-Prozess ist (siehe z. B. [CONT 04]).

Die Summe von zwei unabhängigen POISSON-Prozessen $N_1(t)$ und $N_2(t)$ mit Intensitäten von λ_1 und λ_2 ist ein POISSON-Prozess N(t) mit einer Intensität von $(\lambda_1 + \lambda_2)$. Dies kann durch Faltung der Wahrscheinlichkeitsmassenfunktionen (analog zu Gl. (B-23)) gezeigt werden:

$$f_{Poi}(N_1 \mid \lambda_1 t) * f_{Poi}(N_2 \mid \lambda_2 t) = \sum_{k=0}^{n} \frac{(\lambda_1 t)^k \cdot e^{-\lambda_1 t}}{k!} \cdot \frac{(\lambda_2 t)^{n-k} \cdot e^{-\lambda_2 t}}{(n-k)!}$$
$$= \frac{(\lambda_1+\lambda_2)^n\, t^n \cdot e^{-(\lambda_1+\lambda_2)t}}{n!} = f_{Poi}\big(N \mid (\lambda_1+\lambda_2)t\big) \quad , \qquad \text{(B-108)}$$

wobei "*" das übliche mathematische Symbol für die Operation der Faltung ist. Noch einfacher kann diese Eigenschaft der POISSON-Verteilung mit Hilfe ihrer charakteristischen Funktion gezeigt werden (siehe Abschnitt B.4.1.5).

Die numerische Simulation zufälliger Realisierungen n(t) des EPP kann nach Gl. (B-104)/(B-106) mit folgendem Algorithmus vorgenommen werden:

1. Es wird n(0) = 0 gesetzt und ein Simulationszeitraum T festgelegt.
2. Es werden nacheinander exponentiell verteilte Zufallszahlen τ_i erzeugt, deren Summe gemäß Gl. (B-104) die Zeitpunkte T_k bestimmt, zu denen (zufällig) POISSON-Ereignisse stattfinden. Entsprechend wird iterativ der der Zähler $n(T_k) = n(T_{k-1}) + 1$ erhöht.
3. Wenn $T_{k'} > T$ wird, endet die Simulation; es wird $n(T) = n(T_{k'-1})$ gesetzt.

Der EPP ist kein Martingal. Durch Subtraktion des Erwartungswertes $\lambda \cdot t$ kann jedoch ein Martingal erzeugt werden, das als kompensierter POISSON-Prozess bezeichnet wird,

$$\tilde{N}(t \mid \lambda) = N(t \mid \lambda) - \lambda\, t\,. \qquad \text{(B-109)}$$

Abbildung B-11 zeigt zur Veranschaulichung fünf zufällige Realisierungen n(t) des EPP mit einer Intensität $\lambda = 0{,}02$ für einem Zeitraum von T = 1000 und die zugehörigen kompensierten POISSON-Prozesse.

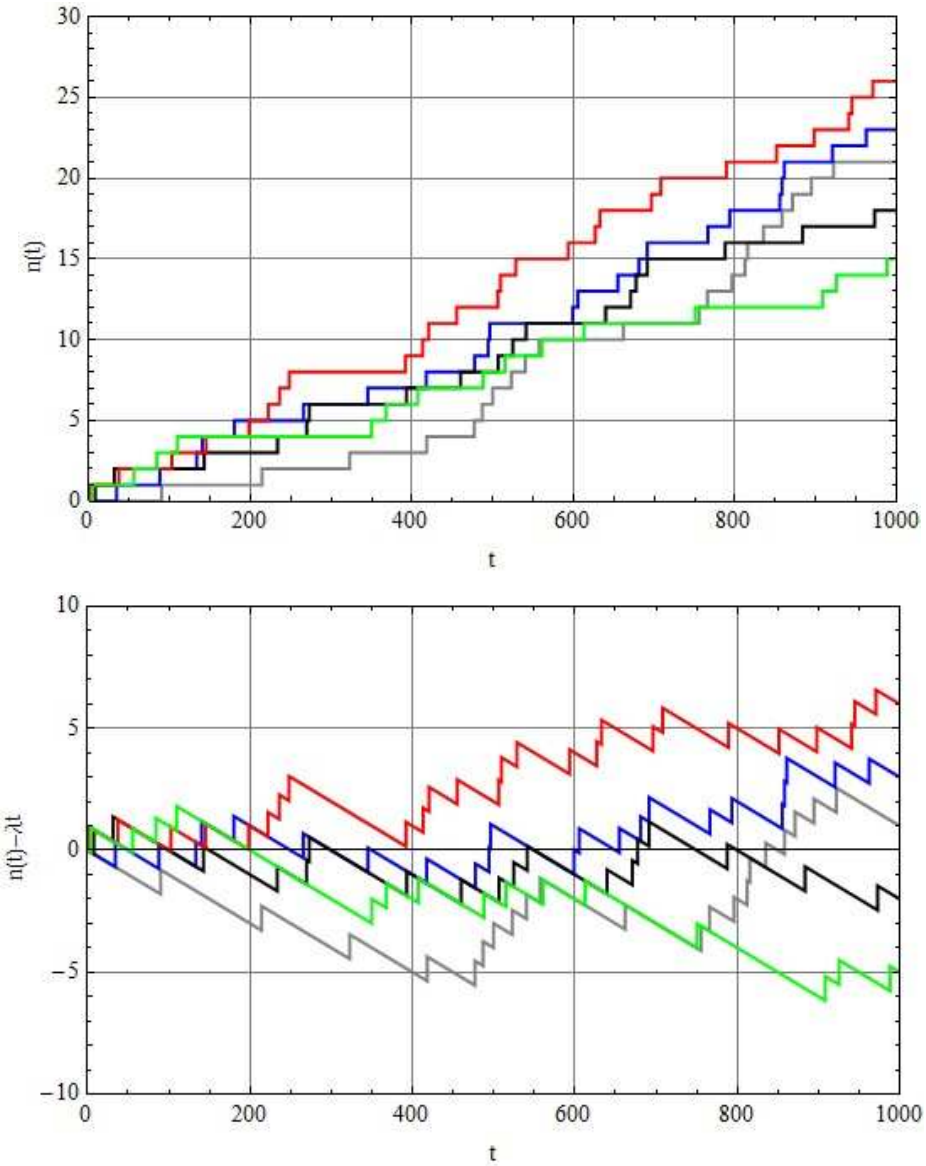


Abbildung B-11: Fünf zufällige Realisierungen des elementaren POISSON-Prozesses N(t) mit Intensität von $\lambda = 0{,}02$ für einen Zeitraum von T = 1000 (oberes Bild) und zugehörige nach Gl. (B-109) kompensierte POISSON-Prozesse (unteres Bild)

B.4.1.4 Zusammengesetzte POISSON-Prozesse (ZPP)

Für Anwendungen haben neben dem EPP so genannte zusammengesetzte POISSON-Prozesse (ZPP, englisch: compound POISSON process) eine große Bedeutung, weil mit ihnen die Modellierung von stochastisch eintretenden Prozessen, deren Auswirkungen durch Zufallsgröße darzustellen sind, flexibel an die jeweiligen Gegebenheiten angepasst werden können. Ein EPP N(t) ist durch zwei Eigenschaften geprägt:

(1) Die Wahrscheinlichkeit des Eintretens von Ereignissen ist durch die Intensität λ bestimmt.

(2) Bei Eintreten eines Ereignisses besteht dessen Auswirkung in einer Erhöhung des "Zählers" N(t) um den Wert 1; $dN(T_k) = 1$, wenn T_k der (zufällige) Zeitpunkt eines Ereignisses ist.

Mit Hilfe von ZPP können diese beiden Merkmale von EPP verallgemeinert werden, wobei statt der Sprunghöhe 1 des EPP nun Sprunghöhen definiert werden, die einer probabilistischen Verteilung folgen. Außerdem können Prozesse mit unterschiedlicher Intensität überlagert werden.

Zunächst sei ein ZPP R(t) betrachtet, der auf einem EPP N(t) mit festem λ basiert. Es sei Z eine Zufallsgröße mit Wahrscheinlichkeitsdichte $f_Z(z|\boldsymbol{\theta})$. Sind Z_k (k von 1 bis N(t)) iid Zufallswerte aus dieser Verteilung, dann wird auf Basis von Gl. (B-104)/(B-106) des EPP N(t) ~ Poi($\lambda \cdot$t) mit

$$R(t) = \sum_{k\geq 1} Z_k \cdot 1_{t \geq T_k}(t) = \sum_{k=1}^{N(t)} Z_k \ , \ \ R(0) = 0, \qquad \text{(B-110)}$$

ein ZPP definiert, für den die Zeitpunkte des Eintretens von Ereignissen durch den EPP N(t) bestimmt werden, die Wirkung eines Ereignisses jedoch zufällig ist und durch die Verteilung der Zufallsgröße Z bestimmt wird. Dabei sind die Höhen Z_k der einzelnen Sprünge unabhängig von N(t), d. h. unabhängig vom Verlauf des zugrunde liegenden EPP.

Für den Erwartungswert und die Varianz der Zufallsgröße R(t) folgt aus Gl. (B-110) mit den in Abschnitt B.1.4 für Funktionen von zwei Zufallsgrößen dargelegten Beziehungen Gl. (B-28b) bzw. Gl. (B-32a) und Beachtung der Gleichheit von Erwartungswert und Varianz des EPP, Gl. (B-102):

$$E_R[R(t)] = E_{Poi}[E_{R|N(t)}[R(t)]] = E_{Poi}[N(t) \cdot E_Z[Z]] = E_{Poi}[N(t)] \cdot E_Z[Z] = \lambda\ t\ E_Z[Z], \qquad \text{(B-111)}$$

$$\begin{aligned} Var_R[R(t)] &= E_{Poi}[Var_{R|N(t)}[R(t)]] + Var_{Poi}[E_{R|N(t)}[R(t)]] \\ &= E_{Poi}[N(t) \cdot Var_Z[Z]] + Var_{Poi}[N(t)] \cdot E_Z[Z]] \\ &= E_{Poi}[N(t)] \cdot Var_Z[Z] + (E_Z[Z])^2 \cdot Var_{Poi}[N(t)] \\ &= \lambda\ t \cdot \left(Var_Z[Z] + (E_Z[Z])^2\right) = \lambda\ t \cdot E_Z[Z^2] \end{aligned} . \qquad \text{(B-112)}$$

Für einen ZPP, bei dem die Wirkung bei Eintreten eines Ereignisses z. B. durch eine Gammaverteilung bestimmt ist, Z ~ Ga(α, β), resultieren aus Gl. (B-111) und (B-112) sowie den bekannten Beziehungen für den Erwartungswert und die Varianz von Zufallsgrößen mit Gammaverteilung (siehe Abschnitt C.3.4) die Beziehungen

$$E[R(t)] = \alpha\ \beta\ \lambda\ t \quad \text{und} \quad Var[R(t)] = \alpha\ (1+\alpha)\ \beta^2\ \lambda\ t\,.$$

Für eine Beispielrechnung zu diesem ZPP sei $\alpha = 2$ und $\beta = 0{,}5$. Für den Parameter des EPP wird mit $\lambda = 0{,}02$ gerechnet. Die Parameter der Gammaverteilung wurden für den Vergleich der Prozesse N(t) und R(t) so gewählt, dass deren Erwartungswerte wegen $\alpha \cdot \beta = 1$ übereinstimmen. Die Varianz von R(t) ist jedoch um den Faktor $\alpha \cdot (1+\alpha) \cdot \beta^2 = 1{,}5$ größer als die Varianz von N(t).

In Abbildung B-12 sind zweimal je 5 zufällige Realisierungen n(t) des EPP N(t) und darauf basierende zufällige Realisierungen r(t) des ZPP R(t) dargestellt. Die "Aufweitung" der Pfade des ZPP durch die Variabilität der einzelnen Sprunghöhen (gemäß Gammaverteilung von Z gegenüber den Sprunghöhen von dN = 1 des EPP) ist daraus deutlich erkennbar.

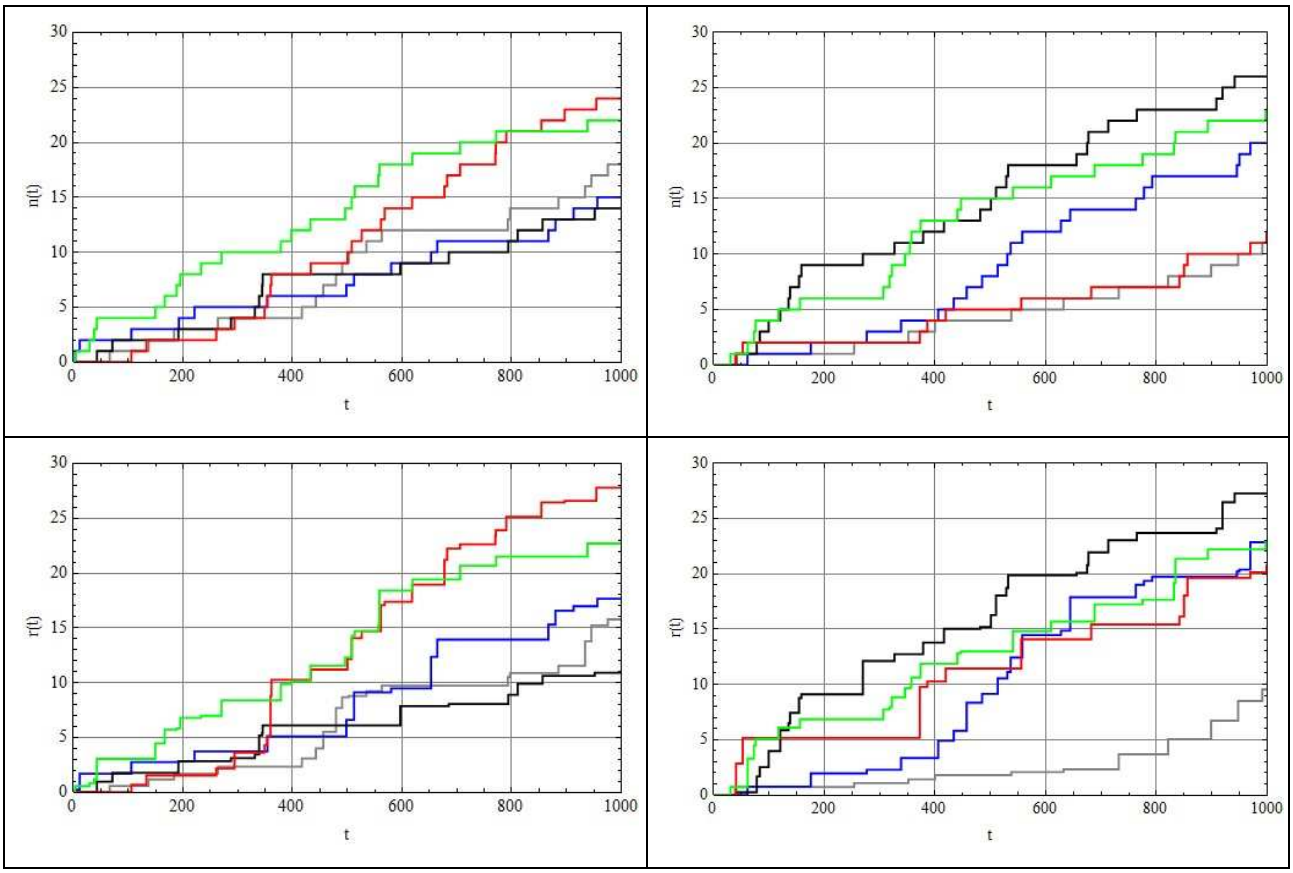


Abbildung B-12: Realisierungen des EPP N(t) mit $\lambda = 0{,}02$ (obere Bilder) und daraus gemäß Gl. (B-110) für den ZPP R(t) mit $Z \sim Ga(\alpha, \beta)$, $\alpha = 2$, $\beta = 0{,}5$ resultierende Verläufe (untere Bilder)

Zur weiteren Spezifizierung von zusammengesetzten POISSON-Prozessen wird die Darstellung von Zufallsgrößen bzw. von stochastischen Prozessen durch ihre charakteristischen Funktionen benötigt. Ist X eine Zufallsgröße mit Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$, so ist ihre charakteristische Funktion $\phi_X(s|\boldsymbol{\theta})$ als Erwartungswert von $e^{i \cdot s \cdot X}$ ($i = \sqrt{-1}$) definiert:

$$\phi_X(s\,|\,\boldsymbol{\theta}) = E_X[e^{i\,s\,X}] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\,s\,x} \cdot f_X(x\,|\,\boldsymbol{\theta})\,dx\,. \tag{B-113}$$

Ist X eine diskrete Zufallsgröße, so ist in Gl. (B-113) das Integral durch eine Summe zu ersetzen, wobei $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$ dann die Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion bezeichnet.

Für den elementaren POISSON-Prozess N(t) resultiert mit Gl. (B-100) die charakteristische Funktion

$$\begin{aligned}\phi_N(s\,|\,\lambda) &= E_{Poi}[e^{i\,s\,N(t)}] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\,s\,n} \cdot \frac{(\lambda\,t)^n\,e^{-\lambda\,t}}{n!} = e^{-\lambda\,t} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda\,t\,e^{i\,s})^n}{n!}\,. \\ &= e^{-\lambda\,t} \cdot \exp\left(\lambda\,t\,e^{i\,s}\right) = \exp\left(\lambda\,t \cdot \left(e^{i\,s} - 1\right)\right)\end{aligned} \tag{B-114}$$

Zur Berechnung der charakteristischen Funktion des mit Gl. (B-110) definierten ZPP wird von der Tatsache Gebrauch gemacht, dass das Faltungsintegral Gl. (B-23), mit dem die Wahrscheinlichkeitsdichte der Summe von zwei unabhängigen Zufallsgrößen bestimmt werden kann, dem Produkt ihrer charakteristischen Funktionen entspricht. Für die Summe aus n iid Zufallsgrößen Z_k

$$X = \sum_{k=1}^{n} Z_k\,, \quad Z_k \text{ sind iid mit der charakteristischen Funktion } \phi_Z(s|\boldsymbol{\theta}), \tag{B-115}$$

ergibt sich dann die charakteristische Funktion

$$\phi_X(s\,|\,\boldsymbol{\theta}) = \left(\phi_Z(s\,|\,\boldsymbol{\theta})\right)^n\,. \tag{B-116}$$

Zur charakteristischen Funktion des in Gl. (B-110) definierten ZPP R(t) resultiert nach Gl. (B-113) unter Beachtung der Beziehung (B-28b) folgende Darstellung:

$$\begin{aligned}\phi_{R(t)}(s\,|\,\boldsymbol{\theta},\lambda) &= E_R[e^{i\,s\,R(t)}] = E_{Poi}[E_{R(t)|N(t)}[e^{i\,s\,R(t)}]] = E_{Poi}[\left(\phi_Z(s\,|\,\boldsymbol{\theta})\right)^{N(t)}] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\phi_Z(s\,|\,\boldsymbol{\theta})\right)^n (\lambda\,t)^n\,e^{-\lambda\,t}}{n!} = \exp\{\lambda\,t\,\left(\phi_Z(s\,|\,\boldsymbol{\theta}) - 1\right)\} \\ &= \exp\left\{\lambda\,t \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{i\,s\,z} - 1\right) f_Z(z\,|\,\boldsymbol{\theta})\,dz\right\}\end{aligned} \tag{B-117}$$

Es sei angemerkt, dass für $f_Z(z|\boldsymbol{\theta}) = \delta(z - 1)$ aus Gl. (B-117) durch Integration über die DIRAC'sche δ-Funktion wieder die charakteristische Funktion des EPP Gl. (B-114) resultiert.

B.4.1.5 Darstellung von LÉVY-Prozessen

Überlagert man nun viele voneinander unabhängige zusammengesetzte POISSON-Prozesse, deren charakteristische Funktionen jeweils Darstellungen entsprechend Gl. (B-117) haben, die jedoch unterschiedliche Intensitäten λ_j mit Verteilungsfunktionen $f_j(z)$ für die Sprunghöhen aufweisen (mit j von 1 bis J), dann ergibt sich für diesen komplexen Prozess die charakteristische Funktion aus dem Produkt der nach Gl. (B-117) beschriebenen ZPP, wobei $\lambda \cdot f_Z(z)$ durch die Summe der Produkte $\lambda_j \cdot f_j(z)$ über j von 1 bis J zu ersetzen ist. Eine Verallgemeinerung dieser Konstruktion erfolgt durch

Einführung einer Funktion $\lambda(z)$, die ein Kontinuum der Überlagerung von ZPP beschreibt. Daraus resultiert folgende Darstellung für stochastische Sprungprozesse:

$$\phi_{J(t)}(s) = \exp\left\{ t \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{i\,s\,z} - 1\right) \lambda(z)\, dz \right\}, \qquad \text{(B-118)}$$

(der Index J steht für "Jump Process") Es sei vermerkt, dass $\lambda(z)$ keine Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Der EPP entspräche z. B. der Funktion $\lambda(z) = \lambda \cdot \delta(z-1)$, deren Integral gleich λ ist, das beliebige positive Werte haben kann.

Die Sprungratenfunktion $\lambda(z)$ muss bestimmten Anforderungen genügen, damit der Sprung-Prozess J(t) aus Gl. (B-118) einem stochastischen Prozess mit den Eigenschaften von LÉVY-Prozessen entspricht. Zunächst muss das Integral von $\lambda(z)$ über den Bereich großer Sprunghöhen z einen endlichen Wert haben, weil der Prozess J(t) sonst umgehend ins Unendliche divergieren würde. LÉVY-Prozesse können jedoch unbeschränkt große Sprungraten aufweisen, wenn die zugehörigen Sprunghöhen gegen Null gehen. Hierzu wird gefordert, dass das Integral von $z^2 \cdot \lambda(z)$ über kleine z-Werte (i. A. wird hierzu der Bereich $|z| < 1$ festgelegt) ebenfalls endlich ist. Die beiden Forderungen an $\lambda(z)$ sind dann (siehe z. B. [SATO 99], [CONT 04], [KYP 06], [APP 09], [JAC 10]):

$$\int_{|z|>1} \lambda(z)\, dz < \infty \quad \text{und} \quad \int_{|z|<1} z^2\, \lambda(z)\, dz < \infty. \qquad \text{(B-119)}$$

Zerlegt man den unter dem Integral in Gl. (B-118) stehenden Ausdruck $(e^{i \cdot s \cdot z} - 1)$ in eine TAYLOR-Reihe, $(e^{i \cdot s \cdot z} - 1) = i \cdot s \cdot z - s^2 \cdot z^2/2 - i \cdot s^3 \cdot z^3/3! + \ldots$, so muss der Term $i \cdot s \cdot z$ für den Fall $\lambda(z) \to \infty$ bei $z \to 0$ speziell betrachtet werden. Wenn

$$\int_{|z|<1} z\, \lambda(z)\, dz = a < \infty. \qquad \text{(B-120)}$$

gilt, so resultiert daraus nach Gl. (B-118) für die charakteristische Funktion $\phi_{J(t)}(s)$ ein Faktor $e^{i \cdot t \cdot s \cdot a}$, der dem Drift-Term der BROWN'schen Bewegung B(t) entspricht. Deren charakteristische Funktion $\phi_{B(t)}(s|\mu,\sigma)$ lässt sich mit Gl. (B-98) nach Gl. (B-113) leicht berechnen:

$$\phi_{B(t)}(s\,|\,\mu,\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\,s\,x} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\,\pi\,t}\,\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu\,t)^2}{2\,\sigma^2\,t} \right) dx = e^{t\,(i\,\mu\,s - \frac{\sigma^2 s^2}{2})}. \qquad \text{(B-121)}$$

Funktionen $\lambda(z)$, die Gl. (B-120) nicht erfüllen, müssen ausgeschlossen werden. Damit resultiert aus Gl. (B-118) und Gl. (B-121) folgende generelle Darstellung für LÉVY-Prozesse L(t), die immer als Superposition einer BROWN'schen Bewegung mit Sprungprozessen, die auf zusammengesetzten POISSON-Prozessen basieren, dargestellt werden können (LÉVY-KHINCHIN-Darstellung):

$$L(t) = B(t) + J(t),$$

$$\phi_{L(t)}(s) = \exp\left\{ t\left(i\,\mu\,s - \frac{\sigma^2\,s^2}{2} \right) + t\left(\int_{|z|\le 1} \left(e^{i\,s\,z} - 1 - i\,z\,s\right) \lambda(z)\, dz + \int_{|z|>1} \left(e^{i\,s\,z} - 1\right) \lambda(z)\, dz \right) \right\}. \qquad \text{(B-122)}$$

Die Eignung univariater Verteilungen zur Modellierung von stochastischen Prozessen, welche die Eigenschaften von LÉVY-Prozesse haben, hängt von ihrer unendlichen Teilbarkeit ab [SATO 99]. Diese Eigenschaft lässt sich gut anhand der charakteristischen Funktion $\phi_X(s|\boldsymbol{\theta})$ einer Zufallsgröße X erkennen. Gemäß Gl. (B-115) und (B-116) ist die charakteristische Funktion der Summe Z von n iid Zufallsgrößen X gleich der n-ten Potenz der charakteristischen Funktion von X. Die Verteilung einer Zufallsgröße X heißt unendlich teilbar, wenn für beliebige natürliche Zahlen n = 1, 2, … eine Folge von iid Zufallsgrößen $X_{n,1}$, $X_{n,2}$, …, $X_{n,k}$, …, $X_{n,n}$ existiert, deren Summe von k = 1 bis n wie X verteilt ist. Für die charakteristische Funktion ϕ_X bedeutet dies, dass für jedes n > 0 eine charakteristische Funktion ϕ_{Xn} existiert, für die $\phi_X = (\phi_{Xn})^n$ gilt. In Tabelle B-3 sind vier Beispiele unendlich teilbarer Verteilungen aufgeführt, die außerdem reproduktiv sind, was bedeutet, dass die charakteristischen Funktionen ϕ_{Xn} auch zur gleichen Verteilungsfamilie gehören wie ϕ_X.

Tabelle B-3: Vier Beispiele für unendlich teilbare Verteilungen univariater Zufallsgrößen

Verteilung	$\mathbf{f_X(x\|\theta)}$	$\boldsymbol{\phi_X(s\|\theta)}$	$\boldsymbol{\theta_n}$ **in** $\boldsymbol{\phi_{Xn}(s\|\theta_n)}$
Normalverteilung $X \sim N(\mu,\sigma)$	$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$	$\exp\left[i\,s\,\mu+\frac{s^2\,\sigma^2}{2}\right]$	$\mu_n=\mu/n$ $\sigma_n=\sigma/\sqrt{n}$
Gammaverteilung $X \sim Ga(\alpha,\beta)$	$\frac{x^{\alpha-1}}{\beta^\alpha\Gamma(\alpha)}\cdot\exp(-x/\beta)$	$\frac{1}{(1-i\,s\,\beta)^\alpha}$	$\alpha_n=\alpha/n$ $\beta_n=\beta$
WALD-Verteilung $X \sim Wa(\mu,\lambda)$	$\sqrt{\frac{\lambda}{2\pi\,x^3}}\cdot\exp\left[\frac{-\lambda\,(x-\mu)^2}{2\mu^2\,x}\right]$	$\exp\left[\frac{\lambda}{\mu}\cdot\left(1-\sqrt{1-\frac{2\,i\,s\,\mu^2}{\lambda}}\right)\right]$	$\mu_n=\mu/n$ $\lambda_n=\lambda/n^2$
POISSON-Verteilung $X \sim Poi(\lambda)$	$\frac{e^{-\lambda}\,\lambda^x}{x!}$	$\exp\left[\left(e^{i\,s}-1\right)\cdot\lambda\right]$	$\lambda_n=\lambda/n$

Neben den in Tabelle B-3 genannten Verteilungen gibt es weitere, die unendlich teilbar und zudem reproduktiv sind, z. B. die Negative Binomialverteilung. Unendlich teilbar aber nicht reproduktiv ist z. B. die Exponentialverteilung $X \sim Ex[\lambda]$, die sich aus der Gammaverteilung mit $\alpha = 1$ ergibt (siehe Abschnitt C.3.3). Ihre charakteristische Funktion ist $1/(1-i\cdot s/\lambda)$. Durch Potenzierung mit 1/n resultiert daraus für X_n eine charakteristische Funktion ϕ_{Xn}, die der Gammaverteilung mit $\beta_n = 1/\lambda$ und $\alpha_n = 1/n$ entspricht, also zu einer anderen Verteilungsfamilie gehört.

B.4.1.6 Gammaprozess

Ähnlich wie auf Basis der Normalverteilung und der POISSON-Verteilung kann auch ein auf der Gammaverteilung basierender stochastischer Prozess definiert werden. Aus der letzten Spalte von Tabelle B-3 ist ersichtlich, dass dieser Prozess, der hier mit G(t) bezeichnet sei, wie folgt definiert werden kann:

$$dG \sim Ga(dt\cdot\alpha,\beta),\quad G(t)=\int_0^t dG\,,\quad E[G(t)]=\alpha\cdot\beta\cdot t,\quad Var[G(t)]=\alpha\cdot\beta^2\cdot t. \qquad \text{(B-123)}$$

Der Gammaprozess kann entsprechend Gl. (B-118) als ein komplexer stochastischer Sprungprozess mit folgender Sprungratenfunktion dargestellt werden:

$$\lambda_{Ga}(z) = \frac{\alpha}{z} \cdot e^{-z/\beta} \cdot 1_{z \geq 0}, \quad \alpha > 0, \ \beta > 0. \tag{B-124}$$

Die beiden Bedingungen aus Gl. (B-119) werden durch die Funktion $\lambda_{Ga}(z)$ erfüllt:

$$\int_1^{\infty} \lambda_{Ga}(z)\, dz = \alpha \cdot \Gamma(0, 1/\beta) < \infty \quad \text{und} \quad \int_0^1 z^2\, \lambda_{Ga}(z)\, dz = \alpha\beta \cdot \left(\beta - (1+\beta)\, e^{-1/\beta}\right) < \infty .$$

Da auch die Bedingung Gl. (B-120) erfüllt ist,

$$\int_0^1 z\, \lambda_{Ga}(z)\, dz = \alpha\beta \cdot \left(1 - e^{-1/\beta}\right) < \infty, \tag{B-125}$$

ist die in der allgemeinen LÉVY-KHINCHIN-Darstellung Gl. (B-122) enthaltene spezielle Behandlung des Bereiches sehr kleiner Sprunghöhen ($|z| < 1$) mit unbegrenzt hohen Sprungraten ($\lambda(z) \to \infty$ für $z \to 0$) nicht erforderlich. Zur Berechnung der charakteristischen Funktion des Gammaprozesses kann die Darstellung nach Gl. (B-118) direkt angewendet werden[7]:

$$\phi_{Ga(t)}(s) = \exp\left\{ t \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{i s z} - 1\right) \lambda_{Ga}(z)\, dz \right\} = (1 - i\, s\, \beta)^{-\alpha t} . \tag{B-126}$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des Gammaprozesses G(t) ergibt sich dann durch Ausführung der inversen FOURIER-Transformation von Gl. (B-126):

$$f_{Ga}(g \mid t, \alpha, \beta) = \frac{g^{\alpha\ t - 1} \cdot e^{-g/\beta}}{\beta^{\alpha t} \cdot \Gamma(\alpha\, t)} . \tag{B-127}$$

Der mit Gl. (B-123) definierte Gammaprozess ist also eine Überlagerung von zusammengesetzten POISSON-Prozessen mit der in Gl. (B-124) angegebenen Sprungratenfunktion. In Abbildung B-13 sind die Verläufe der Funktion $\lambda_{Ga}(z)$ für zwei Konstellationen der Verteilungsparameter α und β dargestellt, die jeweils die gleiche Varianz von Var[G(t)] = t ergeben, d. h., für die $\alpha \cdot \beta^2 = 1$ ist. Die Erwartungswerte dieser beiden Prozesse, $E[G(t)] = \alpha \cdot \beta \cdot t$, müssen dementsprechend unterschiedlich sein. Ähnlich wie beim POISSON-Prozess N(t) können jedoch auch "kompensierte Gammaprozesse" definiert werden:

$$\tilde{G}(t \mid \alpha, \beta) = G(t \mid \alpha, \beta) - \alpha\, \beta\, t . \tag{B-128}$$

Der Erwartungswert eines kompensierten Gammaprozesses ist gleich Null, die Varianz entspricht für jeden fixierten Zeitpunkt der Varianz des zugrunde liegenden Gammaprozesses G(t). In Abbildung B-14 sind zum Vergleich jeweils fünf zufällige Realisierungen von kompensierten Gammaprozessen für die Verteilungsparameter $(\alpha, \beta) = (1, 1)$ bzw. $(\alpha, \beta) = (4, 0{,}5)$ dargestellt.

---

[7] Diese ist äquivalent zur LÉVY-KHINCHIN-Darstellung Gl. (B-122) mit einem Drift-Term μ nach Gl. (B-125).

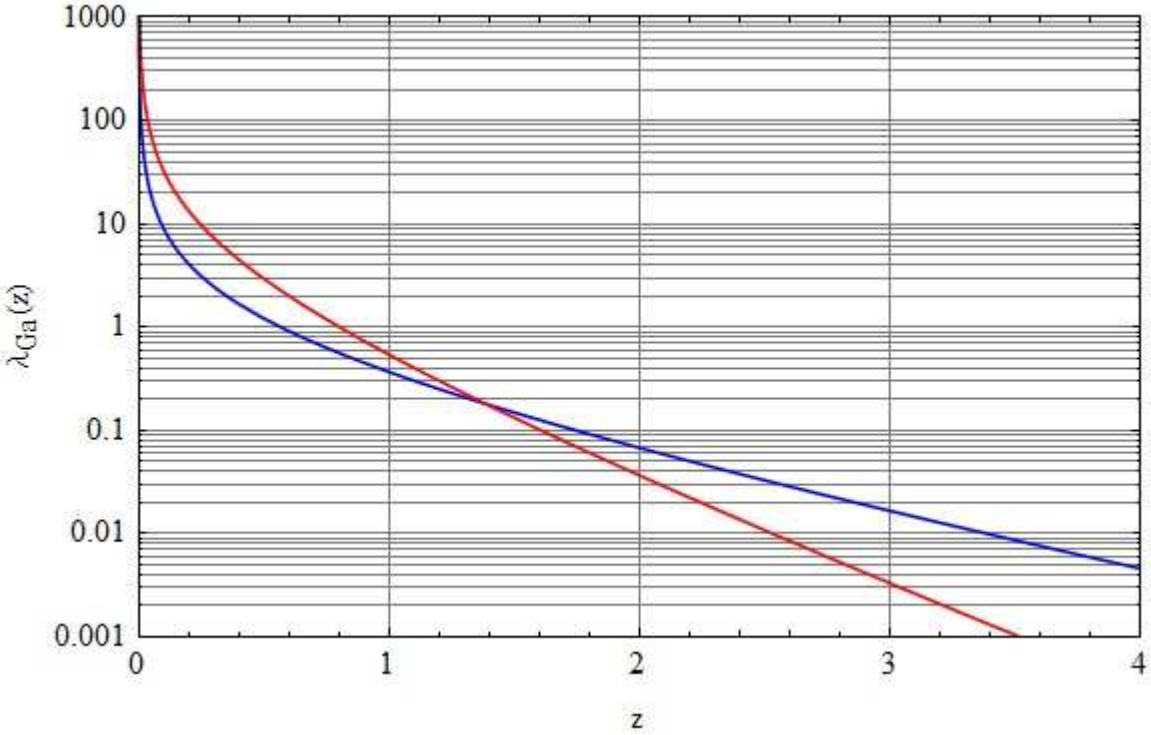


Abbildung B-13: Vergleich von zwei Sprungratenfunktionen $\lambda_{Ga}(z|\alpha,\beta)$, Gl. (B-124), für Gammaprozesse mit gleicher Varianz; blau: $(\alpha,\beta)= (1, 1)$; rot: $(\alpha,\beta)= (4, 0{,}5)$

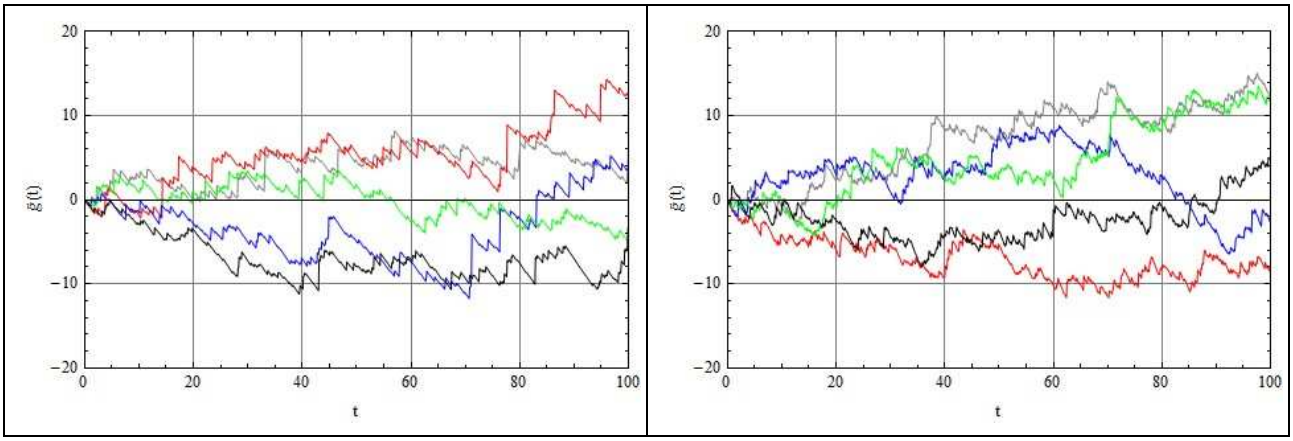


Abbildung B-14: Gegenüberstellung von je fünf zufälligen Realisierungen kompensierter Gammaprozesse mit gleicher Varianz (nach Gl. (B-128)); links: $(\alpha,\beta)= (1, 1)$; rechts: $(\alpha,\beta)= (4, 0{,}5)$; mit Zeitschritten der numerischen Simulation von $\Delta t = 0{,}1$ für Zeitraum von $T = 100$;

Aus Abbildung B-14 ist gut erkennbar, dass der kompensierte Gammaprozess mit den Parametern $(\alpha,\beta)= (1, 1)$ einen höheren Anteil größerer Sprünge aufweist als der zweite, mit $(\alpha,\beta)= (4, 0{,}5)$ definierte Prozess. Dieser hat schon relativ große Ähnlichkeit zum SWP (vgl. mit Abbildung B-9).

B.4.2 Stochastische Differentialgleichungen (SDE)

Genügt eine Variable x(t) einer gewöhnlichen Differentialgleichung (ODE, ordinary differential equation) mit Parametern, die als Konstanten oder als deterministische zeitabhängige Funktionen definiert sind, so kann bei gegebenen Anfangsbedingungen für jeden zukünftigen Zeitpunkt t der Wert der Funktion x(t) berechnet werden. Sind dagegen bestimmte Parameter der Differentialgleichung stochastische Prozesse, so wird die Variable x(t) eine Zufallsfunktion X(t), die für fixierte Zeitpunkte t eine Zufallsgröße ist[8]. Werden zufällige Schwankungen stochastischer Parameter auch für infinitesimale Zeitintervalle dt zugelassen, wie bei den in Abschnitt B.4.1 betrachteten LÉVY-Prozessen, dann genügt X(t) einer stochastischen Differentialgleichung (SDE, stochastic differential equation). Für deren Lösung sind im Vergleich zur Lösung von ODE bestimmte Besonderheiten zu beachten[9].

Zeitkontinuierliche stochastischen Prozesse sind nicht differenzierbar (siehe dbzgl. Anmerkung in Abschnitt B.4.1.2 zum SWP W(t), Gl. (B-97)). SDE werden deshalb nicht mit Ableitungen der Variablen X(t) nach der Zeit, sondern ausschließlich über Differentiale dX(t) formuliert. Hierbei werden nur Differentiale 1. Ordnung betrachtet. Ebenso wie ODE höherer Ordnung als Systeme von ODE 1. Ordnung dargestellt werden können, ist aber eine analoge Modellierung durch Systeme von SDE möglich. Die folgenden Erläuterungen beschränken sich auf einfache SDE.

Eine stochastische Differentialgleichung beschreibt die zeitliche Änderung des Prozesses X(t) für ein infinitesimales Zeitintervall dt,

$$dX(t) = X(t+dt) - X(t),$$

wobei üblich statt "dX(t)" verkürzt nur "dX" geschrieben wird. Für einen LÉVY-Prozess L(t) kann die Änderung im Zeitintervall dt,

$$dL = L(t+dt) - L(t) = L(dt),$$

direkt durch eine mit dt parametrisierte Zufallsgröße dargestellt werden (siehe Abschnitt 4.1.1).

Die allgemeine Form einer SDE mit einem LÉVY-Prozess ist

$$dX = a(X, t)\cdot dt + b(X, t)\cdot dL, \qquad \text{(B-129)}$$

wobei a(X, t) und b(X, t) bestimmte Funktionen sind. Mit b(X, t) = 0 geht Gl. (B-129) von einer stochastischen in eine gewöhnliche Differentialgleichung über. Der zweite Term in Gl. (B-129), mit dem stochastisch variierende Beiträge zum Inkrement dX erfasst werden, wird als "Rauschquelle" bezeichnet. Wenn b(X, t) eine Konstante oder eine nur von t abhängige Funktion ist, so spricht man von Fremderregung der Zustandsgröße X; andernfalls liegt eine Parametererregung vor.

---

[8] Zufallsfunktionen werden hier analog zu Zufallsgrößen mit Großbuchstaben symbolisiert, wogegen ihre (zufälligen) Realisierungen wieder mit kleinen Buchstaben bezeichnet werden.

[9] X(t) wird auch dann ein stochastischer Prozess, wenn ein stochastisch zeitlich variierender Parameter durch eine zeitdiskrete Folge von Zufallswerten aus einer bestimmten statistischen Verteilung approximiert wird, die z. B. aus Messungen des Parameters für aufeinander folgende feste Zeitintervalle Δt resultieren. In diesem Fall wird der Parameter als stückweise konstante Funktion mit zufälligen Werten dargestellt. Der (stochastische) Verlauf von X(t) kann dann mit der entsprechenden ODE berechnet werden. Diese Art der Modellierung zeitdiskreter stochastischer Prozesse wird in Abschnitt 5.1.1 behandelt.

Es sei vermerkt, dass SDE mehrere Rauschquellen enthalten können, die auf unterschiedliche Weise die Änderung des Prozesses X(t) beeinflussen. So wäre z. B.

$$dX = a(X, t)\cdot dt + b(X, t)\cdot dW + c(X, t)\cdot dN$$

die SDE für einen Prozess X(t), der sowohl durch einen WIENER-Prozess W(t) als auch durch einen POISSON-Prozess N(t) beeinflusst wird. Im Rahmen des vorliegenden Berichts werden jedoch nur SDE mit einem bestimmten stochastischen Prozess als Rauschquelle betrachtet. Nachfolgend wird auf Besonderheiten der Lösung solcher SDE eingegangen, deren Rauschquelle einem der beiden grundlegenden stochastischen Prozesse entspricht, dem Standard-WIENER-Prozess (SWP) bzw. einem elementaren POISSON-Prozess (EPP).

B.4.2.1 SDE mit WIENER-Prozess als Rauschquelle

Für eine analytische Lösung von SDE sind oft - analog zur Lösung von ODE – nichtlineare Transformationen der Variablen erforderlich. Zur Lösung von ODE können dabei höhere Potenzen von dt vernachlässigt werden. Ist x(t) eine stetige Funktion, so ist auch $(x(t)\cdot dt)^2$ vernachlässigbar. Zur Lösung von SDE mit einem Standard-WIENER-Prozess (SWP; $dW \sim N(0, \sqrt{dt})$; siehe Abschnitt B.4.1.2) können höheren Potenzen von dt sowie Produkte von dt mit dW ebenfalls vernachlässigt werden; für das Quadrat von dW gilt jedoch die so genannte ITO-Regel:

$$(dW)^2 = dt. \qquad \text{(B-130)}$$

Wäre der Prozess W(t) stetig differenzierbar, d. h. $dW/dt = \xi(t)$, so könnte auch $(dW)^2 = (\xi(t))^2\cdot(dt)^2$ vernachlässigt werden. Dies trifft jedoch auf den SWP nicht zu.

Zum Verständnis von Gl. (B-130) sei zunächst vermerkt, dass nach Definition von dW für den Erwartungswert von $(dW)^2$ die Beziehung

$$E[(dW)^2] = Var[dW] = dt$$

gilt. Die Varianz von $(dW)^2$ lässt sich elementar durch Integration des Produkts der 4. Potenz von dW mit der Wahrscheinlichkeitsdichte der Normalverteilung $N(0, \sqrt{dt})$ berechnen:

$$Var[(dW)^2] = E[(dW)^4] - (E[(dW)^2])^2 = 3\cdot(dt)^2 - (dt)^2 = 2\cdot(dt)^2.$$

Da höhere Potenzen von dt vernachlässigt werden, ist die Varianz von $(dW)^2$ gleich Null zu setzen, so dass $(dW)^2$ als deterministische Größe mit dem Erwartungswert dt zu behandeln ist (eine ausführlichere Diskussion dieser Problematik enthält z. B. [JAC 10]). Die oben angesprochenen Vernachlässigbarkeit des Produkts dt·dW kann auf ähnliche Weise begründet werden. Da dt eine deterministische Größe ist, gilt

$$E[dt\cdot dW] = dt\cdot E[dW] = 0 \quad \text{und} \quad Var[dt\cdot dW] = (dt)^2\cdot Var[dW] = (dt)^3,$$

wonach dt·dW wegen der Vernachlässigbarkeit höherer Potenzen von dt gleich Null zu setzen ist.

Gl. (B-130) kann bei allen nichtlinearen Transformationen stochastischer Prozesse, die durch einen WIENER-Prozess fremd- bzw. parametererregt sind, angewandt werden. Ist X(t) ein solcher stochastischer Prozess und Y = f(X, t) eine nach t sowie zweifach nach X stetig differenzierbare Funktion, dann ist zur Bestimmung der SDE für den Prozess Y(t) die ITO-Formel

$$dY = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)\cdot dt + \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)\cdot dX + \frac{1}{2}\cdot\left(\frac{\partial^2 f}{\partial X^2}\right)\cdot (dX)^2 \qquad \text{(B-131)}$$

anzuwenden. Sie folgt aus der TAYLOR-Entwicklung von f(X, t), wobei höhere Ableitungen als in Gl. (B-131) angegeben wegen $(dt)^2 = 0$ und $dt \cdot dW = 0$ entfallen. Der quadratische Term ist dagegen wegen $(dW)^2 = dt$ gemäß Gl. (B-130) zu berücksichtigen.

Genügt X(t) z. B. der SDE

$$dX = a \cdot dt + b \cdot dW,$$

wobei a und b Konstanten sind, dann gilt gemäß Gl. (B-131) für den Prozess $Y = X^2$ die SDE

$$dY = 2 \cdot X \cdot dX + (dX)^2,$$

in der wegen Gl. (B-130) der letzte Term im Unterschied zu einer ODE nicht mehr verschwindet, sondern den Beitrag $b^2 \cdot (dW)^2 = b^2 \cdot dt$ liefert. Y(t) genügt dementsprechend der SDE

$$dY = (2 \cdot a \cdot X + b^2) \cdot dt + 2 \cdot b \cdot X \cdot dW.$$

Während für einige einfache Fälle für SDE mit WIENER-Rauschterm,

$$dX = a(X, t) \cdot dt + b(X, t) \cdot dW, \qquad \text{(B-132)}$$

eine analytische Lösung existiert, muss i. A. eine numerische Integration dieser Gleichung erfolgen (siehe z. B. [RÜM 82], [KLOE 95], [ALL 07]). Diese basieren auf der Definition der stochastischen Integration mit dem so genannten ITO-Integral. Das formale Integral der Gl. (B-132),

$$X(t) = X(0) + \int_0^t a(X(u), u)\, du + \int_0^t b(X(u), u)\, dW(u), \qquad \text{(B-133)}$$

wird dazu als Grenzwert einer Summe über $I = t/\Delta$ Zeitintervalle der Länge Δ definiert, wobei für die Funktionen a(X(u),u) und b(X(u),u) jeweils die Werte am Anfang eines Intervalls der Länge Δ gesetzt werden, wogegen für dW(u) die Differenz des WIENER-Prozesses $W(u+\Delta) - W(u)$ zwischen dem Ende und dem Anfang eines Intervalls $[(i-1)\cdot\Delta, i\cdot\Delta]$ mit i von 1 bis I gesetzt wird, d. h.,

$$X(t) = X(0) + \lim_{I\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{I} a\big(X(u_{i-1}), u_{(i-1)}\big)\cdot\Delta + \sum_{i=1}^{I} b\big(X(u_{i-1}), u_{i-1}\big)\cdot\big(W(u_i) - W(u_{i-1})\big)\right) \qquad \text{(B-134)}$$

$$\text{mit} \quad \Delta = t/I \quad \text{und} \quad u_i = i \cdot \Delta.$$

Die Definition des ITO-Integrals entspricht der obigen Definition von SDE, die deshalb häufig auch als ITO-SDE bezeichnet wird.[10]

---

[10] Eine andere Definition der SDE und stochastischer Integrale stammt von STRATONOVICH [STRA 66]. Dabei wird in Gl. (B-134) das Mittel der Werte der Funktionen a und b an den beiden Enden der Intervalle angesetzt.

Zur Veranschaulichung der Anwendung des ITO-Kalküls zur Lösung von SDE sei die in Abschnitt 2.6.5 angegebene LANGEVIN-Gleichung betrachtet, die in der Fachliteratur zu SDE nach [UHL 30] auch als ORNSTEIN-UHLENBECK-Prozess bezeichnet wird (siehe z. B. [GILL 96], [JAC 10]):

$$dX = -\lambda\, X\, dt + b\, dW\,, \quad X(0) = X_0, \tag{B-135}$$

wobei λ und b positive Konstanten und $dW \sim N(0, \sqrt{dt})$ den SWP bezeichnen. Ohne den Rauschterm $b \cdot dW$ wäre $X(t) = X_0 \cdot e^{-\lambda t}$ die bekannte Lösung der Zerfallsgleichung. Zur Lösung von Gl. (B-135) wird demgemäß die Transformation

$$Y(t) = X(t) \cdot e^{\lambda \cdot t} \tag{B-136}$$

angewandt. Für Y(t) gilt die Anfangsbedingung $Y(0) = X(0) = X_0$. Gemäß Gl. (B-131) resultiert für die transformierte Zufallsgröße die SDE

$$dY = \lambda\, X\, e^{\lambda t} dt + e^{\lambda t} dX = \lambda\, X\, e^{\lambda t} dt + e^{\lambda t}\, (-\lambda\, X\, dt + b\, dW) = b\, e^{\lambda t}\, dW\,, \tag{B-137}$$

deren Lösung elementar ist:

$$Y(t) = Y(0) + b \int_0^t e^{\lambda s} dW(s).\,,$$

Nach Rücktransformation entsprechend Gl. (B-136) ergibt sich für X(t) die Lösung

$$X(t) = X_0\, e^{-\lambda t} + b \int_0^t e^{-\lambda (t-s)} dW(s)\,. \tag{B-138}$$

Dies ist eine Überlagerung der deterministischen Lösung der Gl. (B-135) ohne Rauschterm mit einem stochastischen Prozess. Da das stochastische Integral nach Gl. (B-134) als Grenzwert einer Summe von normalverteilten Zufallsgrößen zu verstehen ist, stellt X(t) für einen fixen Zeitpunkt t eine normalverteilte Zufallsgröße dar. Wegen E[dW(s)] = 0 resultiert für X(t) der Erwartungswert

$$E[X(t)] = X_0\, e^{-\lambda t}\,. \tag{B-139}$$

Zur Berechnung der Varianz von X(t) kann ausgenutzt werden, dass die Varianz des Produkts einer deterministischen Größe mit einer normalverteilten Zufallsgröße gleich dem Produkt des Quadrats der deterministischen Größe mit der Varianz der normalverteilten Zufallsgröße ist. Folglich gilt für beliebige deterministische Funktionen g(s, t), dass das stochastische Integral

$$S(t) = \int_0^t g(s,t)\, dW(s) \tag{B-140}$$

eine normalverteilte Zufallsgröße mit Erwartungswert E[S(t)] = 0 und Varianz

$$\mathrm{Var}[S(t)] = \int_0^t (f(s,t))^2 \, ds \tag{B-141}$$

ist. Die Anwendung von Gl. (B-141) auf Gl. (B-138) liefert zur Varianz von X(t) die Beziehung

$$\mathrm{Var}[X(t)] = b^2 \int_0^t e^{-2\lambda(t-s)} ds = \frac{b^2}{2\lambda}\left(1 - e^{-2\lambda t}\right). \tag{B-142}$$

Hinsichtlich der Lösung von SDE mit Parametererregung durch einen WIENER-Prozess sei auf das Beispiel 5.3 in Abschnitt 5.1.2.1 verwiesen.

B.4.2.2 SDE mit POISSON-Prozess als Rauschquelle

Ähnlich zu den im vorigen Abschnitt betrachteten SDE, die durch einen WIENER-Prozess fremd- oder parametererregt sind, lassen sich auch SDE, denen ein elementarer POISSON-Prozess (EPP) zugrunde liegt, relativ einfach behandeln und z. T. analytisch lösen. Die Form solcher SDE ist analog zu Gl. (B-132):

$$dX = a(X, t)\cdot dt + b(X, t)\cdot dN, \tag{B-145}$$

wobei dN das infinitesimale Inkrement des EPP mit $N(t) \sim \mathrm{Poi}(\lambda\cdot t)$ ist (siehe Abschnitt B.4.1.3). Da zur Lösung der SDE i. A. wieder nicht-lineare Transformationen erforderlich sind, wird eine zur ITO-Formel Gl. (B-131) analoge Beziehungen benötigt. Sie basiert auf der Besonderheit des EPP, wonach dN nur die Werte 1 und 0 annehmen kann ($\Pr(dN = 1) = \lambda\cdot dt$ und $\Pr(dN = 0) = 1 - \lambda\cdot d$). Folglich gilt unabhängig davon, ob in einem infinitesimalen Zeitintervall dt ein POISSON-Ereignis stattfindet oder nicht, immer die Beziehung

$$dN^2 = dN. \tag{B-146}$$

Sie spielt für den EPP eine ähnliche Rolle wie Gl. (B-130) für den SWP. Während für den WIENER-Prozess Potenzen $(dW)^k$ mit $k > 2$ zu vernachlässigen sind (wegen $(dW)^2 = dt$ und $dW\cdot dt = 0$), gilt für das Inkrement des EPP $(dN)^k = dN$ auch für alle Potenzen $k > 2$. Außerdem gilt $dN\cdot dt = 0$.

Ist X(t) ein durch POISSON-Prozesse bestimmter stochastischer Prozess und $Y = f(X, t)$ eine nach t sowie beliebig oft nach X stetig differenzierbare Funktion, dann ist zur Ableitung der SDE für den Prozess Y(t) die Formel

$$dY = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)\cdot dt + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}\cdot\frac{\partial^k f}{\partial X^k}\cdot (dX)^k = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)\cdot dt + \frac{\partial f}{\partial X}\cdot dX + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(b(X,t))^k}{k!}\cdot\frac{\partial^k f}{\partial X^k}\cdot dN \tag{B-147}$$

anzuwenden. Im Unterschied zur Gl. (B-131) kann die in Gl. (B-147) aus der TAYLOR-Entwicklung resultierende Reihe wegen $(dN)^k = dN$ (s. o.) also nicht abgebrochen werden.

Zur Veranschaulichung der Anwendung von Gl. (B-147) zur Lösung einer SDE mit EPP sei

$$dX = -a\cdot X\cdot dt - b\cdot X\cdot dN, \quad \text{mit } a > 0, \quad 0 < b < 1 \quad \text{und} \quad X(0) = X_0, \tag{B-148}$$

betrachtet, wobei $dN \sim \mathrm{Poi}(\lambda\cdot t)$ den EPP bezeichnet. In diesem Fall ist X(t) durch eine stochastische Parametererregung gestört.

Zur Lösung von Gl. (B-148) wird zunächst die Transformation

$$Y = \ln(X), \tag{B-149}$$

durchgeführt. Mit

$$\frac{\partial^k \ln(X)}{\partial X^k} = \frac{(-1)^{k+1} \cdot (k-1)!}{X^k}$$

folgt nach Gl. (B-147) mit Gl. (B-148):

$$dY = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} \cdot (k-1)!}{X^k} \cdot \frac{(dX)^k}{k!} = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(a\ dt + b\ dN)^k}{k}\ .$$

In der Summe auf der rechten Seite dieser Gleichung können höhere Potenzen von dt vernachlässigt werden, wogegen für Potenzen von dN nach Gl. (B-146) $(dN)^k = dN$ zu setzen ist. Damit folgt

$$dY = -a\ dt - dN \sum_{k=1}^{\infty} \frac{b^k}{k} = -a\ dt + \ln(1-b) \cdot dN\ .$$

Diese SDE kann direkt integriert werden,

$$Y(t) = Y(0) - a\ t + \ln(1-b) \cdot N(t)\ ,$$

woraus durch Rücktransformation nach Gl (B-149) unter Beachtung der Anfangsbedingung für X(t) die folgende Lösung resultiert:

$$X(t) = X_0 \cdot e^{-a\ t + \ln(1-b) \cdot N(t)} = X_0 \cdot e^{-a \cdot t} \cdot (1-b)^{N(t)}\ . \tag{B-150}$$

Einer radiologisch relevanten Anwendung der SDE Gl. (B-148) und physikalische Interpretation der Lösung Gl. (B-150) enthält das Beispiel 5.5-1 in Abschnitt 5.1.2.2. Der Erwartungswert und die Varianz von X(t) ergeben sich durch Mittelungen mit der Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion der POISSON-Verteilung N(t) ~ Poi(λ·t):

$$E[X(t)] = X_0 \cdot e^{-a \cdot t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-b)^n\ (\lambda\ t)^n \cdot e^{-\lambda\ t}}{n!} = X_0 \cdot e^{-a\ t - b \lambda\ t}\ . \tag{B-151}$$

$$\begin{aligned} Var[X(t)] &= E[X^2(t)] - \left(E[X(t)]\right)^2 \\ &= X_0^{\ 2}\ e^{-2\,a\,t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1-b)^{2\,n}\ (\lambda\ t)^n \cdot e^{-\lambda\ t}}{n!} - X_0^{\ 2}\ e^{-2\,a\,t - 2\,b\,\lambda\,t} \\ &= X_0^{\ 2}\ e^{-2\,a\,t}\ e^{-2\,b\,\lambda\,t + b^2\,\lambda\,t} - X_0^{\ 2}\ e^{-2\,a\,t - 2\,b\,\lambda\,t} = X_0^{\ 2}\ e^{-2\,a\,t - 2\,b\,\lambda\,t}\left(e^{b^2\,\lambda\,t} - 1\right) \\ &= \left(E[X(t)]\right)^2 \cdot \left(e^{b^2\,\lambda\,t} - 1\right) \end{aligned}\ . \tag{B-152}$$

ANHANG C

UNIVARIATE PARAMETRISCHE VERTEILUNGEN

C.1 VORBEMERKUNGEN

In den nachfolgenden Abschnitten dieses Anhangs werden einige wichtige univariate statistische Verteilungen beschrieben. Die Erläuterungen zu stetigen und diskreten Verteilungen beschränken sich auf Verteilungen, die im Hauptteil des vorliegenden Berichts für Beispiele herangezogen werden. Sie streben demgemäß keine vollständige Übersicht aller gängigen Verteilungen an, die auch für Expositionsabschätzungen relevant sind bzw. sein können. Aus der Vielfalt der stetigen Verteilungen wurden neben grundlegenden "Familien" auch einige weniger bekannte Verteilungen ausgesucht, die für spezielle Fragestellungen zunehmend Anwendung finden und/oder wegen ihrer relativ einfachen mathematischen Handhabbarkeit als sinnvolle Alternativen zu den bekannteren Verteilungsarten in Betracht gezogen werden können. Für weiterführende Beschreibungen der hier erläuterten sowie weiterer Verteilungen sei auf die Fachliteratur verwiesen, insbesondere auf die Standardwerke [JOH 94], [JOH 95], [JOH 05] sowie einige statistische Hand- und Fachbücher (siehe z. B. [RIN 97], [BURY 99], [CAS 02], [BAL 03], [KRIS 06], [EVE 10] und [FOR 11]).

Zwischen diversen univariaten Verteilungen bestehen funktionelle Zusammenhänge, die z. B. aus Transformationen, Grenzfallbetrachtungen bzw. für spezielle Parameterkonstellationen oder auch für bestimmte Stichprobenfunktionen resultieren. Auf solche Zusammenhänge wird nachfolgend zumindest teilweise hingewiesen. Eine dbzgl. sehr umfangreiche Darstellung enthält [LEEM 08].

C2 Stetige Verteilungen mit unbegrenztem Definitionsbereich ($-\infty < X < \infty$)

C.2.1 Normalverteilung $X \sim N(\mu,\sigma)$

Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion normal verteilter Variabler $X \sim N(\mu,\sigma)$ sind:

$$f_N(x \mid \mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad -\infty < x, \mu < \infty; \quad \sigma > 0; \tag{C-1}$$

$$F_N(x \mid \mu,\sigma) = \Phi\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right), \tag{C-2}$$

wobei $\Phi(x)$ die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung N(0,1) bezeichnet und erf(x) die so genannte Fehlerfunktion ist,

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp\left[-z^2\right] dz = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-x^2\right] \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n \cdot x^{2n+1}}{(2n+1)!!}. \tag{C-3}$$

Der Erwartungswert und die Varianz von X sind gegeben durch:

$$E[X] = \mu \quad \text{und} \quad Var[X] = \sigma^2. \tag{C-4}$$

Für Schiefe γ_1 und Kurtosis γ_2 der Normalverteilung folgt gemäß Gl. (B-41) bzw. (B-43):

$$\gamma_1 = 0 \quad \text{und} \quad \gamma_2 = 3. \tag{C-5}$$

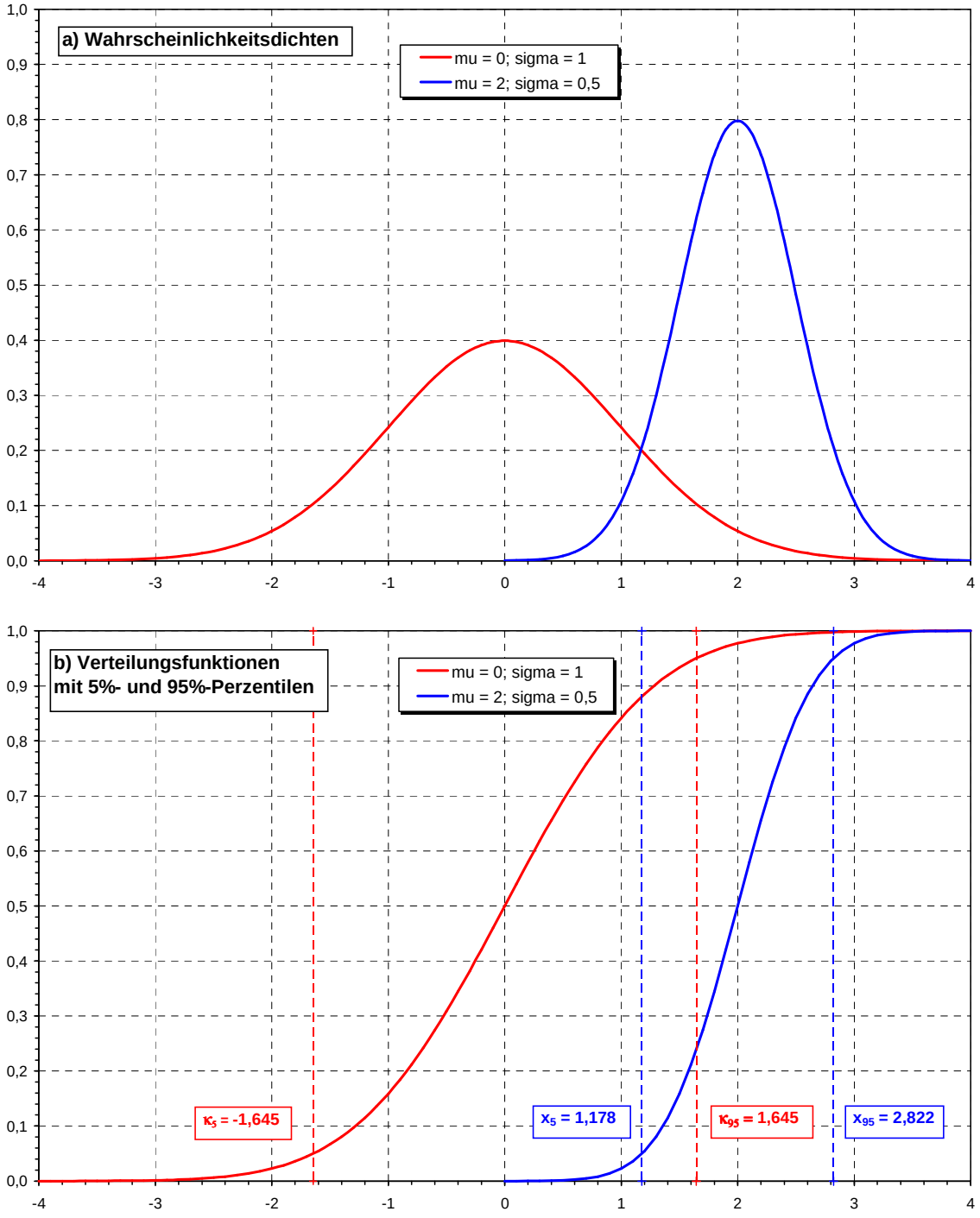


Abbildung C-1: Wahrscheinlichkeitsdichten, Verteilungsfunktionen sowie 5%- und 95%-Perzentile der Standardnormalverteilung N(0, 1) sowie der Normalverteilung mit $\mu = 2$; $\sigma = 0{,}5$

Die beiden Verteilungsparameter $\theta_1 = \mu$ und $\theta_2 = \sigma$ einer normal verteilten Zufallsgröße sind somit ihr Erwartungswert und die positive Wurzel ihrer Varianz, die Standardabweichung genannt wird.

In der Abbildung C-1 sind zur Illustration Wahrscheinlichkeitsdichten und Verteilungsfunktionen der Normalverteilung für die Parameter $\mu = 0$ und $\sigma = 1$ bzw. $\mu = 2$ und $\sigma = 0{,}5$ dargestellt. Im erstgenannten Fall spricht man von der Standardnormalverteilung N(0,1). Die Abbildung C-1b zeigt auch die 5%- und 95%-Perzentile der beiden Verteilungen. Für die p-Quantile der Standardnormalverteilung wird die spezielle Bezeichnung κ_P verwendet. Die Werte von κ_P lassen sich entsprechend Gl. (B-4) mit Gl. (C-2) und (C-3) relativ einfach berechnen; sie sind aber auch in gängigen Fachbüchern tabelliert (siehe z. B. [RIN 97]). Die p-Quantile der allgemeinen Normalverteilungen $N(\mu,\sigma)$ resultieren aus den p-Quantilen der Standardnormalverteilung über folgende Beziehung:

$$x_p = \mu + \sigma \cdot \kappa_p \qquad \text{(C-6).}$$

Wegen $\kappa_{0,5} = 0$ ist der Median Med_N (Definition: $F_X(Med_X) = 0{,}5$) für eine normal verteilte Größe gleich dem Erwartungswert. Der Modalwert Mod_X einer Zufallsgröße X durch das Maximum ihrer Wahrscheinlichkeitsdichte definiert (wahrscheinlichster Wert). Auch er stimmt für normal verteilte Größen mit dem Erwartungswert überein ($Med_N = Mod_N = E_N = \mu$).

Der Ansatz der Normalverteilung für eine Zufallsgröße X ist nach dem zentralen Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie nahe liegend, wenn ihre Variabilität aus einer additiven Überlagerung vieler zufälliger Einflüsse resultiert, von denen keines dominiert (Beispiele: Messunsicherheiten, atmosphärische Dispersion von Schadstoffwolken). Die Normalverteilung ist auf der gesamten reellen Achse definiert ($-\infty < x < \infty$), sie kann jedoch näherungsweise auch für Zufallsgrößen, die nur positive Werte annehmen können, verwendet werden, wenn die Standardabweichung wesentlich kleiner als der Mittelwert ist (z. B. für $\mu > 5 \cdot \sigma$). Die Summe $Y = X_1 + X_2$ von zwei unabhängigen, normalverteilten Zufallsgrößen $X_1 \sim N(\mu_1,\sigma_1)$ und $X_2 \sim N(\mu_2,\sigma_2)$ ist ebenfalls eine normalverteilte Größe; $Y \sim N(\mu_1+\mu_2, \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2})$.

C.2.2 STUDENT'sche t-Verteilung $X \sim t(\nu)$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der t-Verteilung mit ν Freiheitsgraden ist:

$$f_t(t \mid \nu) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right) \cdot \left(1 + \frac{t^2}{\nu}\right)^{-(\nu+1)/2}}{\sqrt{\nu \cdot \pi} \cdot \Gamma(\nu/2)}, \quad -\infty < t < \infty; \quad \nu \geq 1, \qquad \text{(C-7)}$$

wobei $\Gamma(\alpha)$ die Gammafunktion bezeichnet:

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty t^{\alpha-1} \cdot e^{-t} dt \quad \text{mit } \mathrm{Re}(\alpha) > 0\,. \qquad \text{(C-8)}$$

Anmerkung: $\Gamma(\alpha+1) = \alpha \cdot \Gamma(\alpha)$; $\Gamma(1) = 1$; $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Die t-Verteilung ist insbesondere für die Einschätzung von Unsicherheiten der Schätzung des Erwartungswertes von normalverteilten Größen anhand von Stichproben von Bedeutung.

Bezeichnen $\bar{x}$ den Mittelwert und s die Standardabweichung einer Stichprobe vom Umfang n einer normalverteilten Zufallsgröße, dann genügt die Zufallsvariable

$$t = \frac{\mu - \bar{x}}{s / \sqrt{n}} \qquad \text{(C-9)}$$

einer STUDENT'schen t-Verteilung mit $\nu = n - 1$ Freiheitsgraden, wobei μ den (unbekannten) Erwartungswert der beprobten Normalverteilung bezeichnet. Da $\bar{x}$ und s sowie n für die betrachtete Stichprobe feste Größen sind, stellt μ eine gemäß Gl. (C-9) transformierte Zufallsgröße im Sinne der BAYES-Theorie dar.

Die Verteilungsfunktion der t-Verteilung ist nicht elementar darstellbar. Die t-Verteilung ist symmetrisch; ihr Mittelwert und ihre Schiefe sind gleich Null. Die t-Verteilung ist leptokurtisch; für ihre Varianz und Kurtosis gelten die Beziehungen:

$$\mathrm{Var}[t] = \nu/(\nu - 2) \quad \text{für } \nu > 2; \qquad \gamma_2 = 3 + 6/(\nu - 4) \quad \text{für } \nu > 4. \qquad \text{(C-10)}$$

Für sehr große Werte des Freiheitsgrades ν (Grenzwert $\nu \to \infty$) nähert sich die t-Verteilung der Standardnormalverteilung N(0,1) an. Die Abbildung C-2 veranschaulicht diesen Übergang anhand der Wahrscheinlichkeitsdichten der t-Verteilung für die Freiheitsgrade $\nu = \{5, 10, 100\}$. Daraus ist ersichtlich, dass die t-Verteilung bei einem Freiheitsgrad von 100 nur noch sehr geringfügig von der Standardnormalverteilung abweicht. Für kleine Freiheitsgrade (Stichprobenumfänge) sind dagegen die deutlich höheren Wahrscheinlichkeiten in den Randbereichen der t-Verteilung zu beachten.

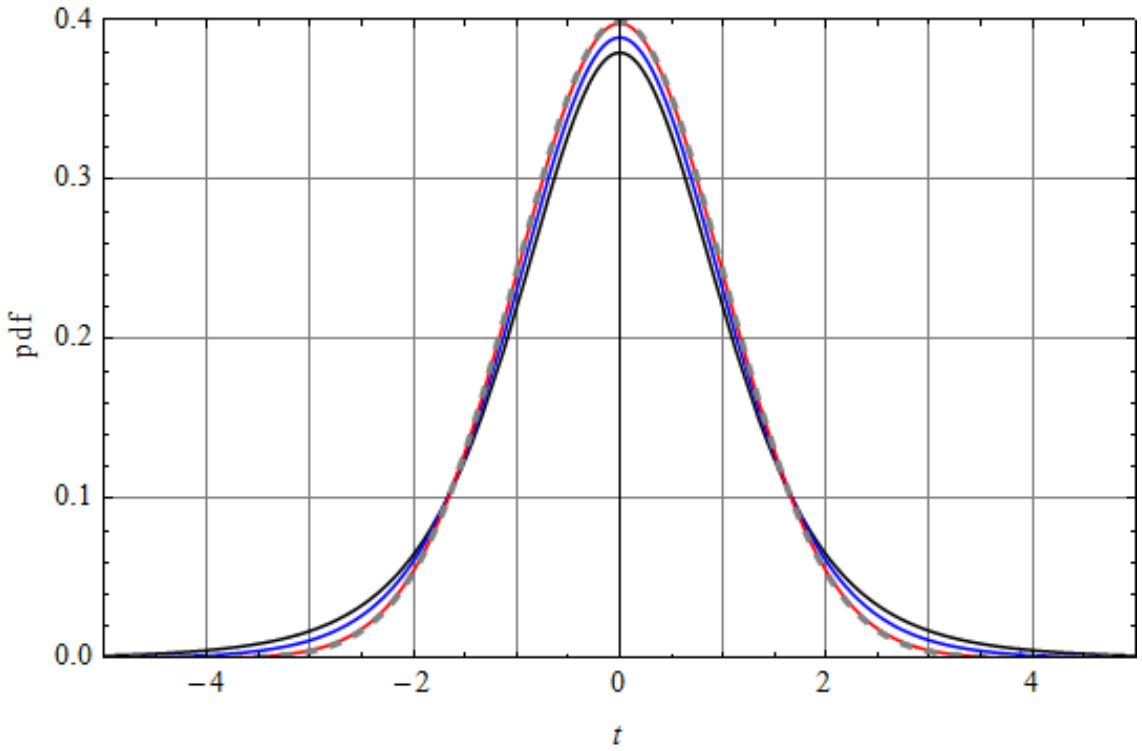


Abbildung C-2: Wahrscheinlichkeitsdichte der t-Verteilung für Freiheitsgrade ν von 5 (schwarz) 10 (blau) und 100 (rot) im Vergleich zur Standardnormalverteilung (grau, gestrichelt)

C.3 Stetige Verteilungen für positiv definierte Zufallsvariable ($x \geq 0$)

C.3.1 Chi-Quadrat-Verteilung $X \sim \chi^2(\nu)$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Chi-Quadrat-Verteilung mit ν Freiheitsgraden ist:

$$f_{\chi^2}(x \mid \nu) = \frac{x^{\nu/2-1} \cdot e^{-x/2}}{2^{\nu/2} \cdot \Gamma(\nu/2)}, \quad 0 \leq x < \infty, \nu \geq 1 \tag{C-11}$$

wobei $\Gamma(z)$ wieder die Gammafunktion bezeichnet (siehe Gl. (C-8). Eine wichtige Eigenschaft der Chi-Quadrat-Verteilung ist Ihre Additivität. Sind $X_1 \sim \chi^2(\nu_1)$ und $X_2 \sim \chi^2(\nu_2)$ unabhängig, so folgt ihre Summe einer Chi-Quadrat-Verteilung mit $(\nu_1 + \nu_2)$ Freiheitsgraden: $X_1 + X_1 \sim \chi^2(\nu_1 + \nu_2)$.

Die Chi-Quadrat-Verteilung ist insbesondere zur Einschätzung von Unsicherheiten der Schätzung der Varianz von normalverteilten Größen anhand von Stichproben von Bedeutung. Bezeichnet s die Standardabweichung einer Stichprobe vom Umfang n einer normalverteilten Zufallsgröße, dann genügt die Zufallsvariable

$$x = \frac{(n-1) \cdot s^2}{\sigma^2}$$

einer Chi-Quadrat-Verteilung mit $\nu = n - 1$ Freiheitsgraden, wobei σ^2 die (unbekannte) Varianz der beprobten Normalverteilung ist. Die Chi-Quadrat-Verteilung ist linkssteil und leptokurtisch. Für sehr große Werte von ν nähert sich die Chi-Quadrat-Verteilung einer Normalverteilung $N(\nu, \sqrt{2 \cdot \nu})$ an (siehe Abbildung C-3).

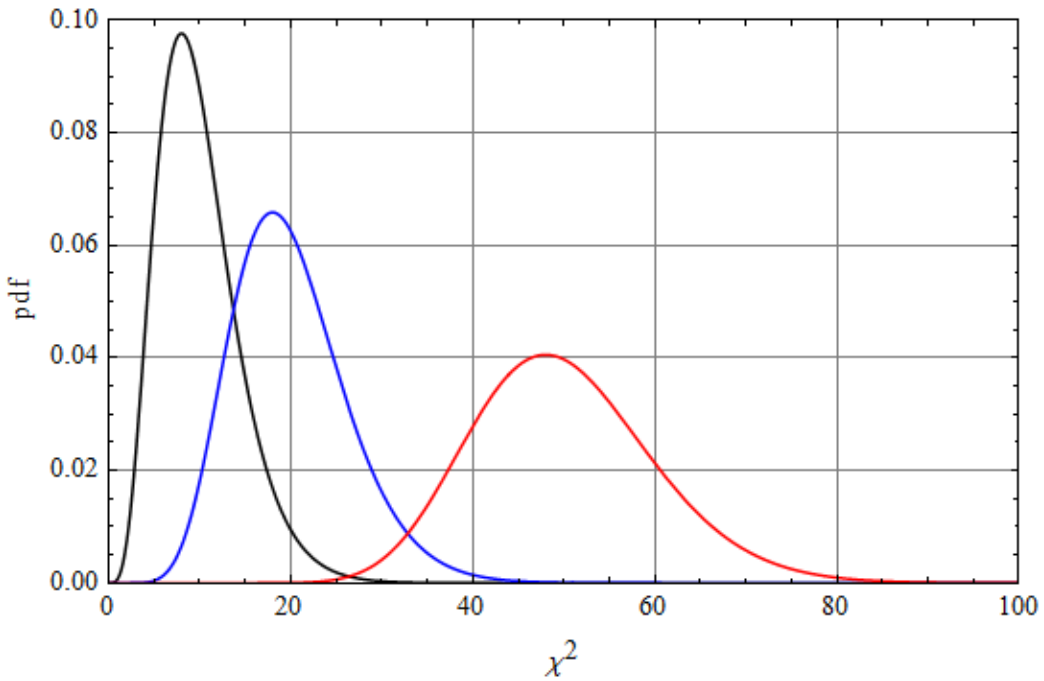


Abbildung C-3: Wahrscheinlichkeitsdichte der Chi-Quadrat-Verteilung für Freiheitsgrade ν von 10 (schwarz), 20 (blau) und 50 (rot)

Ihre wichtigsten statistischen Kenngrößen sind:

$$E_{\chi^2}[X] = \nu; \quad Var_{\chi^2}[X] = 2 \cdot \nu; \quad \gamma_1 = 2 \cdot \sqrt{2/\nu}; \quad \gamma_2 = 3 + 12/\nu\,. \tag{C-12}$$

C.3.2 Lognormalverteilung X ~ Ln(μ,σ)

Eine Zufallsgröße X ist lognormal verteilt, wenn ihre logarithmisch transformierte Größe Y = ln(X) normal verteilt ist. Als Verteilungsparameter werden üblich der Erwartungswert μ und die Standardabweichung σ der logarithmierten Größe Y ~ N(μ,σ) verwendet.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte von X ~ Ln(μ,σ) ist

$$f_{Ln}(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{x \cdot \sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln(x) - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad \text{mit} \quad x \geq 0;\ -\infty < \mu < \infty;\ \sigma > 0. \tag{C-13}$$

Für die Verteilungsfunktion der Lognormalverteilung ergibt sich die Beziehung

$$F_{Ln}(x \mid \mu, \sigma) = \int_0^x f_{Ln}(t \mid \mu, \sigma)dt = \frac{1}{2}\left(1 + \mathrm{erf}\left(\frac{\ln(x) - \mu}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right). \tag{C-14}$$

Nach Gl. (B-8) bis Gl. (B-10) lassen sich der Erwartungswert und die Varianz analytisch berechnen:

$$E_{Ln}[X] = \int_0^\infty x \cdot f_{Ln}(x \mid \mu, \sigma)dx = \exp\left[\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right], \tag{C-15}$$

$$Var_{Ln}[X] = \int_0^\infty x^2 \cdot f_{Ln}(x \mid \mu, \sigma)dx - E_{Ln}{}^2 = E_{Ln}^2 \cdot \left(\exp(\sigma^2) - 1\right) = \exp(2\mu + \sigma^2) \cdot \left(\exp(\sigma^2) - 1\right). \tag{C-16}$$

Die p-Quantile x_p für lognormal verteilte Zufallsgrößen lassen auf einfache Weise aus den p-Quantilen für Normalverteilungen Gl. (C-6) berechnen:

$$x_p = \exp(\mu + \sigma \cdot \kappa_p). \tag{C-17}$$

Wegen $\kappa_{0,5} = 0$ resultiert für den Median ($F_X(Med_X) = 0{,}5$) die Formel

$$Med_{LN} = \exp[\mu]. \tag{C-18}$$

Der Median einer lognormal verteilten Zufallsgröße ist auch ihr geometrischer Mittelwert und um einen Faktor von $\exp(\sigma^2/2)$ kleiner als der Erwartungswert. Der Modalwert ist noch kleiner:

$$Mod_{Ln} = \exp(\mu - \sigma^2). \tag{C-19}$$

Die Lognormalverteilung ist linkssteil und leptokurtisch; ihre Schiefe und Kurtosis sind:

$$\gamma_1 = \left(2 + e^{\sigma^2}\right) \cdot \sqrt{e^{\sigma^2} - 1} \quad \text{und} \quad \gamma_2 = e^{4 \cdot \sigma^2} + 2 \cdot e^{3 \cdot \sigma^2} + 3 \cdot e^{2 \cdot \sigma^2} - 3\,. \tag{C-20}$$

Der Ansatz der Lognormalverteilung für eine Zufallsgröße X ist nach dem zentralen Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie nahe liegend, wenn ihre Variabilität aus einer multiplikativen Überlagerung vieler zufälliger Einflüsse resultiert, von denen keines dominiert, wobei reziproke Einflussfaktoren, die nur positive Werte annehmen können, eingeschlossen sind (der Logarithmus der Zufallsgröße X ist dann die Summe/Differenz vieler kleiner Einflussfaktoren). Lognormal verteilte Größen stellen eine gute Approximation für viele Parameter der Natur und des Verhaltens von Personen dar (Beispiele: K_d-Werte, Bioakkumulationsfaktoren, natürliche Radonkonzentration in Gebäuden, Trinkwasserverbrauch).

C.3.3 Exponentialverteilung X ~ Ex(λ)

Die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Verteilungsfunktion der Exponentialverteilung sind:

$$f_{Ex}(x \mid \lambda) = \lambda \cdot \exp(-\lambda \cdot x), \quad 0 \le x < \infty, \quad \lambda > 0, \tag{C-21}$$

$$F_{Ex}(x \mid \lambda) = 1 - \exp(-\lambda \cdot x). \tag{C-22}$$

Sie findet in der Zuverlässigkeitsanalyse und anderen statistischen Modellen zur Beschreibung von selten auftretenden Ereignissen Anwendung und beschreibt hier die Dauer zwischen Ereignissen, die mit einer konstanten Rate (λ) auftreten, wie z. B. die Zeit bis zum Zerfall eines Radionuklids bzw. generell bis zum Ausfall ermüdungsfreier Systeme. Die Exponentialverteilung wird auch zur probabilistischen Modellierung von Expositionsfaktoren genutzt (z. B. für die probabilistische Modellierung der Schadstoffaufnahme durch Ingestion und Inhalation; siehe z. B. [LEE 95]).

Die Exponentialverteilung ist die einzige stetige statistische Verteilung, welche die Eigenschaft der "Gedächtnislosigkeit" aufweist. Diese besagt, dass die Überlebenswahrscheinlichkeit eines Systems in Bezug auf einen bestimmten Zeitpunkt nicht von seinem Alter abhängt:

$$\Pr(X \ge x_0 + x \mid X \ge x_0) = \frac{e^{-\lambda \cdot (x_0 + x)}}{e^{-\lambda \cdot x_0}} = e^{-\lambda \cdot x} = \Pr(X \ge x). \tag{C-23}$$

Die Ausfallrate h(x) (Hazardrate), die als Relation der Wahrscheinlichkeitsdichte zum Komplement der Verteilungsfunktion definiert ist, ist demgemäß für die Exponentialverteilung konstant,

$$h_{Ex}(x \mid \lambda) = \frac{f_{Ex}(x \mid \lambda)}{1 - F_{Ex}(x \mid \lambda)} = \lambda. \tag{C-24}$$

Die Exponentialverteilung ist rechtsschief und leptokurtisch. Die wichtigsten Kenngrößen (Erwartungswert, Varianz, Schiefe und Kurtosis) sind:

$$E_{Ex}[X] = 1/\lambda; \quad Var_{Ex}[X] = 1/\lambda^2; \quad \gamma_1 = 2; \quad \gamma_2 = 9. \tag{C-25}$$

Es sei darauf hingewiesen, dass zur Parametrisierung der Exponentialverteilung häufig statt der Rate λ der Skalenparameter $\beta = 1/\lambda$ verwendet wird ($f_{Ex}(x \mid \beta) = e^{-x/\beta} / \beta$).

Die Summe von n unabhängigen und gleichartig exponentialverteilten Zufallsgrößen ist wieder eine Zufallsgröße, die der so genannten ERLANG-Verteilung genügt. Diese stellt einen speziellen Fall der

im folgenden Abschnitt erläuterten Gammaverteilung Gam(α,λ) mit α = n dar, was sich mit Gl. (B-23) durch wiederholte Ausführung des Faltungsintegrals leicht zeigen lässt.

C.3.4 Gammaverteilung X ~ Gam(α,λ) oder X ~ Ga(α,β)

Die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Verteilungsfunktion der Gammaverteilung sind:

$$f_{Gam}(x \mid \alpha,\lambda) = \frac{\lambda^{\alpha} \cdot x^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)} \cdot \exp(-\lambda \cdot x), \quad 0 \le x < \infty, \quad \alpha > 0, \lambda > 0, \tag{C-26}$$

$$F_{Gam}(x \mid \alpha,\lambda) = 1 - \frac{\Gamma(\alpha,\lambda \cdot x)}{\Gamma(\alpha)}, \tag{C-27}$$

wobei in Gl. (C-27) mit Γ(α, z) die unvollständige Gammafunktion bezeichnet ist (vgl. Gl. (C-8)):

$$\Gamma(\alpha,z) = \int_z^{\infty} t^{\alpha-1} \cdot e^{-t} dt \quad \text{mit } \mathrm{Re}(\alpha) > 0 \quad \text{und} \quad z > 0. \tag{C-28}$$

Die Gammaverteilung beschreibt, wenn α eine natürliche Zahl ist, die Summe von unabhängigen, exponentiell verteilten Ereignissen, also z. B. die Zeit bis zum Eintreten einer bestimmten Anzahl von POISSON-verteilten Ereignissen. Für α > 1 ist der Verlauf ihrer Wahrscheinlichkeitsdichte ähnlich dem der Lognormalverteilung. Bei gleichem Erwartungswert und gleicher Varianz sind extrem hohe Perzentile der Gammaverteilung jedoch etwas kleiner als die der Lognormalverteilung, wie aus Abbildung C-4b ersichtlich.

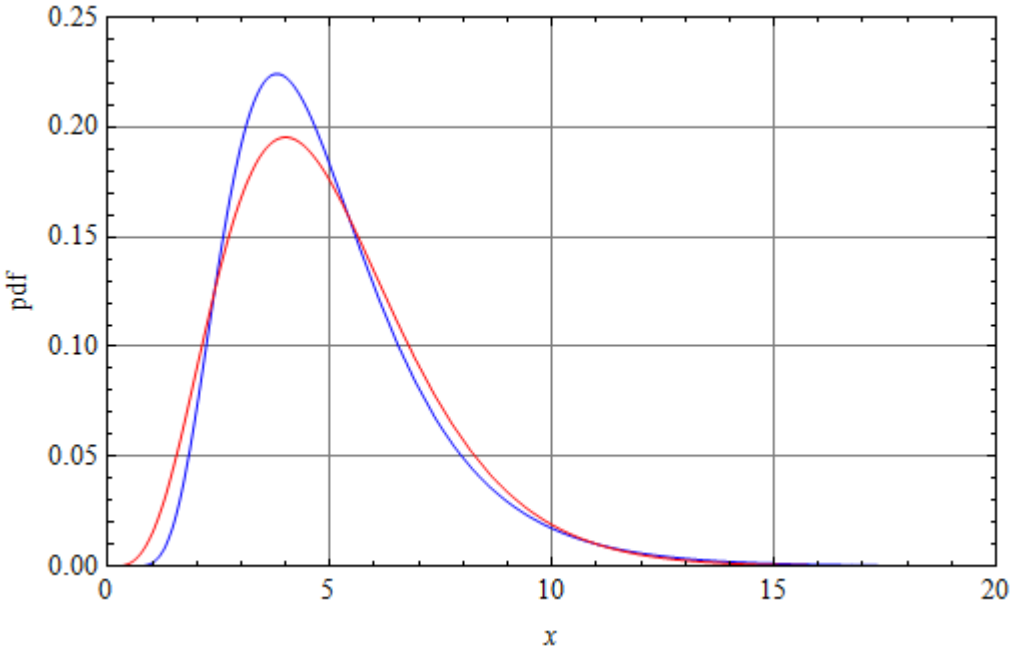


Abbildung C-4a: Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichte der Gammaverteilung X ~ Gam(α = 5, λ = 1) (rot) mit einer bzgl. Erwartungswert (= 5) und Varianz (= 5) angepassten Lognormalverteilung X ~ Ln(μ, σ); μ = ln(5) – 0,5·ln(6/5) ≈ 1,52 und σ = $\sqrt{\ln(6/5)} \approx 0{,}427$ (blau)

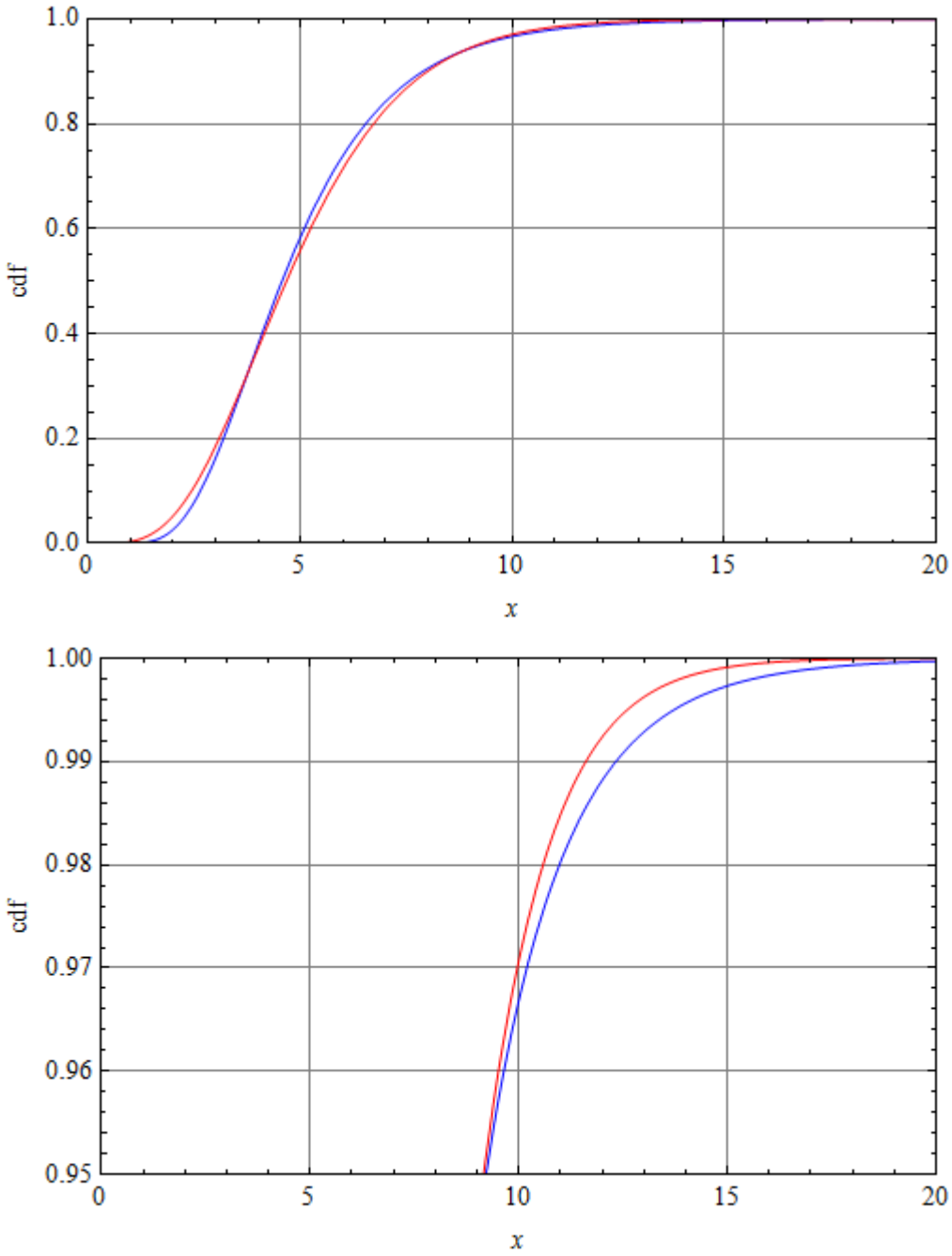


Abbildung C-4b: Vergleich der Verteilungsfunktion der Gammaverteilung X ~ Gam(α = 5, λ = 1) (rot) mit einer bzgl. Erwartungswert (= 5) und Varianz (= 5) angepassten Lognormalverteilung X ~ Ln(μ,σ); μ = ln(5) – 0,5·ln(6/5) ≈ 1,5 und σ = $\sqrt{\ln(6/5)} \approx 0{,}43$ (blau); das untere Bild zeigt zur Verdeutlichung des Unterschieds beider Verteilungen für extrem hohe Perzentile nur den Bereich 0,95 ≤ Pr(X ≤ x) ≤ 1.

Die Gammaverteilung ist rechtsschief und leptokurtisch. Für wichtige statistische Kenngrößen, wie Erwartungswert, Varianz, Schiefe und Kurtosis sowie Modalwert gelten folgende Beziehungen:

$$E_{Gam}[X] = \alpha/\lambda; \quad Var_{Gam}[X] = \alpha/\lambda^2; \quad \gamma_1 = 2/\sqrt{\alpha}\,; \quad \gamma_2 = 3 + 6/\alpha; \qquad \text{(C-29)}$$

$$Mod_{Gam} = (\alpha-1)/\lambda \quad \text{für } \alpha > 1.$$

Spezialfälle der Gammaverteilung sind die Exponentialverteilung ($\alpha = 1$), die ERLANG-Verteilung ($\alpha = n$, natürliche Zahl), sowie die Chi-Quadrat-Verteilung (für $\alpha = \nu/2$ folgt die transformierte Variable $Y = 2\cdot\lambda\cdot X$ einer χ^2–Verteilung mit dem Freiheitsgrad ν). Für sehr große Werte von α nähert sich die Gammaverteilung einer Normalverteilung. Die Gammaverteilung ist flexibler als die Lognormalverteilung, was u. a. darin zum Ausdruck kommt, dass mit α-Werten von $0 < \alpha \leq 1$ auch Wahrscheinlichkeitsdichten dargestellt werden können, deren Modalwert bei $x = 0$ liegt bzw. die für $x \to 0$ singulär werden. Die Abbildung C-5 verdeutlicht die Flexibilität der Gammaverteilung.

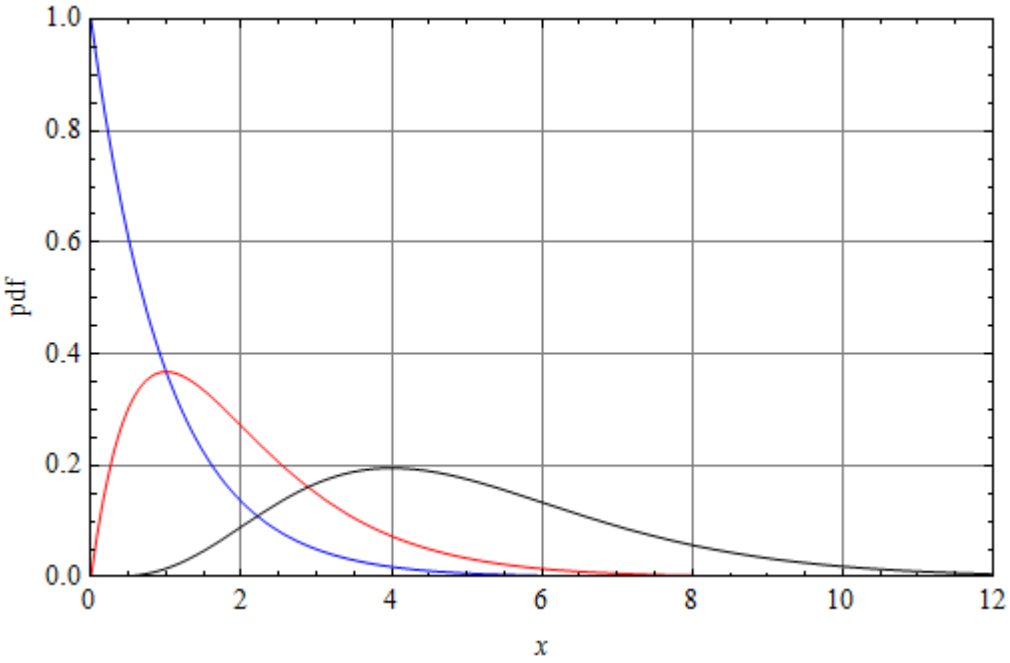


Abbildung C-5: Wahrscheinlichkeitsdichten der Gammaverteilung für $\lambda = 1$ und drei verschiedene Werte des Formparameters α: $\alpha = 1$ (blau), $\alpha = 2$ (rot) und $\alpha = 5$ (schwarz)

Es sei darauf hingewiesen, dass zur **Parametrisierung der Gammaverteilung** häufig statt der Rate λ der Skalenparameter $\beta = 1/\lambda$ verwendet wird (dann wird Bezeichnung $\mathbf{X \sim Ga(\alpha,\beta)}$ gewählt).

Die Gammaverteilung wird im Rahmen von probabilistischen Expositionsmodellen sowohl für die Modellierung von meteorologischen Ereignissen (z. B. Niederschläge, Stürme etc.) als auch für die Verteilung von Schadstoffkonzentrationen verwendet. Darüber hinaus ist hervorzuheben, dass sie für verschiedene statistische Modelle von zentraler Bedeutung ist, z. B. als konjugierter Prior für BAYES-Modelle oder als Hyperverteilung für einen Verteilungsparameter elementarer statistischer Verteilungen zur Ableitung von komplexeren Verteilungsfamilien (siehe z. B. Abschnitte C.3.6 und C.5.5). In diesem Zusammenhang sei vermerkt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $f_{Gam}(x|\alpha,\lambda)$

gegen eine DIRAC'sche δ-Funktion konvergiert, wenn ihre beiden Verteilungsparameter α und λ gleichzeitig gegen ∞ streben, ihre Relation jedoch konstant bleibt:

$$\lim_{\substack{\alpha,\lambda \to \infty \\ \alpha/\lambda=\mu=\text{const}}} f_{Gam}(x \mid \alpha,\lambda) = \delta(x-\mu). \qquad \text{(C-30)}$$

Dies ist intuitiv aus Gl. (C-29) einsichtig, da die Wahrscheinlichkeitsdichte der Normalverteilung, $f_N(x|\mu,\sigma)$, für $\sigma \to 0$ gegen $\delta(x - \mu)$ konvergiert. Abbildung C-6 veranschaulicht die asymptotische Beziehung Gl. (C-30).

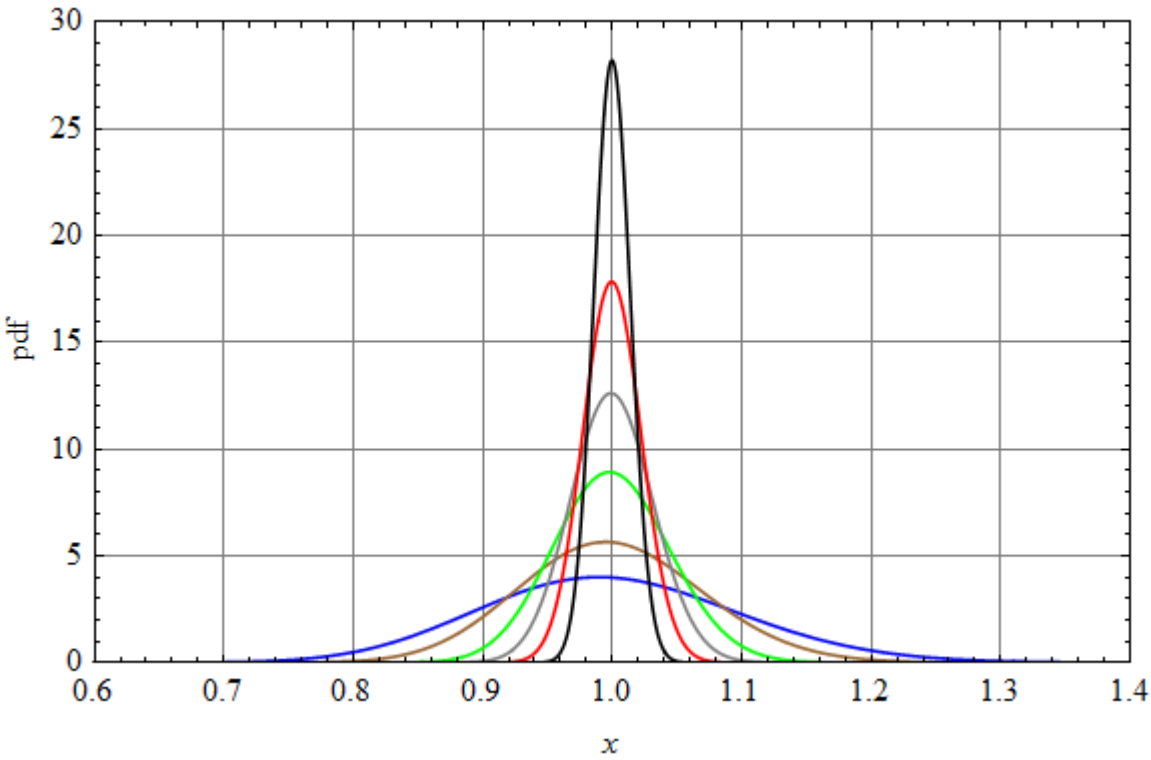


Abbildung C-6: Wahrscheinlichkeitsdichten der Gammaverteilung für Parameterwerte von α = λ von 100 (blau), 200 (braun), 500 (grün), 1000 (grau), 2000 (rot) und 5000 (schwarz) zur Illustration der Annäherung an die DIRAC'sche δ-Funktion δ(x-1) gemäß Gl. (C-30)

Eine wichtige Eigenschaft der Gammaverteilung ist ihre Additivität bei gleichem Ratenparameter. Für unabhängige $X_1 \sim Gam(\alpha_1,\lambda)$ und $X_2 \sim Gam(\alpha_2,\lambda)$ gilt: $X_1+X_2 \sim Gam(\alpha_1 + \alpha_2,\lambda)$.

C.3.5 WEIBULL-Verteilung $X \sim We(\alpha,\beta)$

Die WEIBULL-Verteilung stellt eine Verallgemeinerung der Exponentialverteilung dar, die aus einer Transformation einer exponentiell verteilten Zufallsgröße $Y \sim Ex(1/\beta)$ durch eine Potenzfunktion $Y = (X/\beta)^\alpha$ resultiert (für die WEIBULL-Verteilung ist es üblich, die Exponentialverteilung nicht mit Hilfe der Hazardrate λ, sondern mit dem Skalenparameter β zu parametrisieren). Abhängig davon,

ob β mitpotenziert wird oder ob nur die Zufallsgröße X potenziert wird, resultieren zur WEIBULL-Verteilung voneinander abweichende Darstellungen. Mit der obigen Transformation ist sie durch die folgenden Gleichungen für die Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Verteilungsfunktion definiert:

$$f_{We}(x \mid \alpha,\beta) = \frac{\alpha \cdot (x/\beta)^{\alpha-1}}{\beta} \cdot \exp\left(-(x/\beta)^{\alpha}\right), \quad 0 \le x < \infty, \quad \alpha, \beta > 0, \tag{C-31}$$

$$F_{We}(x \mid \alpha,\beta) = 1 - \exp\left(-(x/\beta)^{\alpha}\right). \tag{C-32}$$

Für den Erwartungswert und die Varianz der Weibull-Verteilung ergeben sich die Beziehungen

$$E_{We}[X] = \beta \cdot \Gamma(1+1/\alpha); \;\; Var_{We}[X] = \beta^2 \cdot \left(\Gamma(1+2/\alpha) - \Gamma^2(1+1/\alpha)\right). \tag{C-33}$$

Ihr Modalwert ist

$$Mod_{We} = \beta \cdot \left(\frac{\alpha-1}{\alpha}\right)^{1/\alpha} \quad \text{für } \alpha > 1. \tag{C-34}$$

Zur Schiefe und Kurtosis der WEIBULL-Verteilung lassen sich ebenfalls analytische Ausdrücke angeben. Sie ist für α < 3,60235 linkssteil und für α >3,60235 rechtsteil (wie z. B. in Abbildung C-6 dargestellt. Für 2,252 < α < 5,773 ist die WEILBULL-Verteilung platykurtisch, sonst leptokurtisch.

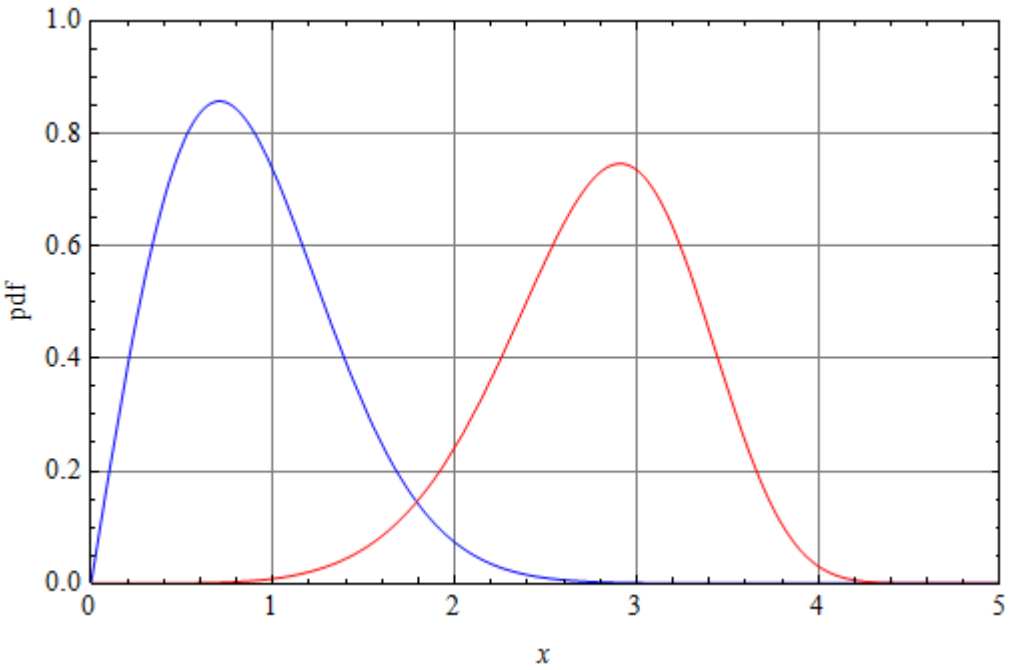


Abbildung C-6: Wahrscheinlichkeitsdichten einer linkssteilen (X ~ We(2,1), blau gezeichnet) sowie einer rechtssteilen (X ~ We(6,3), rot gezeichnet) WEIBULL-Verteilung

Die WEIBULL-Verteilung wird wegen ihrer ausgeprägten Flexibilität für unterschiedlichste Zwecke der probabilistischen Modellierung genutzt [WEIB 51], [JOH 94], u. a. für Korngrößenverteilungen, Festigkeitsanalysen, Lebensdauer- bzw. Zuverlässigkeitsanalysen und für diverse meteorologische Parameter. In Abhängigkeit vom Wert des Verteilungsparameters α können stochastische Prozesse mit fallender ($\alpha < 1$) bzw. mit steigender ($\alpha > 1$) Hazardrate

$$h_{We}(x) = \frac{\alpha}{\beta} \cdot (x/\beta)^{\alpha-1} \tag{C-35}$$

modelliert werden (für $\alpha = 1$ resultiert die Exponentialverteilung mit konstanter Hazardrate). Die Weibull-Verteilung ist zudem eine von drei Arten von Extremwert-Verteilungen [KOTZ 00A].

C.3.6 LOMAX-Verteilung $X \sim Lo(\alpha,\eta)$

Die LOMAX-Verteilung (auch als PARETO-Verteilung Typ II bekannt; siehe [JOH 94]), wurde in [LOM 54] empirisch aus der statistischen Analyse der Überlebenszeit von Firmen unterschiedlicher Branchen abgeleitet. Ihre Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion sind definiert durch:

$$f_{Lo}(x \mid \alpha,\eta) = \frac{\alpha/\eta}{(1+x/\eta)^{\alpha+1}}, \quad 0 \le x < \infty, \quad \alpha > 0,\ \eta > 0, \tag{C-36}$$

$$F_{Lo}(x \mid \alpha,\eta) = 1 - \frac{1}{(1+x/\eta)^{\alpha}}, \tag{C-37}$$

wobei α einen Form- und η einen Skalenparameter in der üblichen Parametrisierung darstellen. Für den Erwartungswert und die Varianz erhält man die Beziehungen

$$E_{Lo}[X] = \frac{\eta}{\alpha-1} \quad (\text{für } \alpha > 1); \qquad Var_{Lo}[X] = \frac{\eta^2}{(\alpha-1)^2} \cdot \frac{\alpha}{\alpha-2} \quad (\text{für } \alpha > 2). \tag{C-38}$$

Zur Schiefe und Kurtosis der LOMAX-Verteilung lassen sich ebenfalls analytische Ausdrücke angeben. Sie ist rechtsschief und leptokurtisch. Das 3. bzw. das 4. zentrale Moment existieren jedoch nur für $\alpha > 3$ bzw. $\alpha > 4$:

$$\gamma_1 = \frac{2\cdot(\alpha+1)}{\alpha-3} \cdot \sqrt{\frac{\alpha-2}{\alpha}} \quad (\text{für } \alpha > 3); \qquad \gamma_2 = 9 + \frac{81}{\alpha-4} - \frac{32}{\alpha-3} - \frac{1}{\alpha} \quad (\text{für } \alpha > 4) \tag{C-39}$$

Die LOMAX-Verteilung trägt der Tatsache Rechnung, dass für bestimmte Systeme die Hazardrate mit der Zeit fällt. Dies trifft für Firmen z. B. deshalb zu, weil ihre Überlebenschance am Markt durch im Laufe der Zeit gewonnene Erfahrungen und Verbindungen wächst, die Wahrscheinlichkeit ihres Versagens (die Hazardrate) somit sinkt. Aus Gl. (C-36) und (C-37) resultiert die Hazardrate

$$h_{Lo}(x \mid \alpha,\eta) = \frac{f_{Lo}(x \mid \alpha,\eta)}{1 - F_{Lo}(x \mid \alpha,\eta)} = \frac{\alpha/\eta}{1+x/\eta}. \tag{C-40}$$

Ein ähnliches Verhalten kann sicherlich auch für den Verbleib von Schadstoffkonzentrationen in einem Aquifer oder von Schadstoffablagerungen auf Pflanzen unterstellt werden. Zuerst werden mit

einer höheren Rate jene Spezies abgereichert, die relativ schnell an Bodenpartikel sorbieren bzw. relativ leicht durch Witterungseinflüsse von den Pflanzen entfernt werden. Im Laufe der Zeit verbleiben dann hauptsächlich nur noch solche Spezies im Grundwasser bzw. auf den Pflanzen, deren Reduzierung aufgrund von besonderen chemischen bzw. physikalischen Eigenschaften mit einer geringen Rate erfolgt, die letztlich gegen Null tendiert.

Nachfolgend wird auf Basis dieser Überlegungen eine einfache mathematische Begründung der LOMAX-Verteilung gegeben. Es wird angenommen, dass den einzelnen Individuen einer Population (der statistischen Grundgesamtheit) zwar jeweils eine bestimmte Versagensrate λ zugeschrieben und ihre Überlebenswahrscheinlichkeit mit Hilfe einer Exponentialverteilung dargestellt werden kann, dass diese jedoch innerhalb der Population variieren kann. Geht man davon aus, dass die statistische Verteilung des Parameters λ in der Population durch eine Gammaverteilung hinreichend gut approximiert werden kann, dann ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte für die auf diese Grundgesamtheit bezogene Zufallsgröße X durch die mit einer Gammaverteilung für den Parameter λ gewichtete Mittelung von (individuellen) Exponentialverteilungen:

$$f_{Lo}(x \mid \alpha,\eta) = \int_0^\infty f_{Ex}(x \mid \lambda) \cdot f_{Gam}(\lambda \mid \alpha,\eta) d\lambda = \int_0^\infty \lambda \cdot e^{-\lambda \cdot x} \cdot \frac{\lambda^{\alpha-1} \cdot \eta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} \cdot e^{-\eta \cdot \lambda} d\lambda = \frac{\alpha/\eta}{(1+x/\eta)^{\alpha+1}} . \quad \text{(C-41)}$$

Zu Gl. (C-41) sei angemerkt, dass der Parameter η in der Gammaverteilung zwar die Bedeutung einer Rate hat, durch die Integration in der resultierenden LOMAX-Verteilung jedoch die Funktion eines Skalenparameter erhalten hat.

Eine Anpassung der Parametrisierung der LOMAX-Verteilung an eine Exponentialverteilung kann für weitere Betrachtungen hilfreich sein. Da die Wahrscheinlichkeitsdichte der Gammaverteilung $f_{Gam}(\lambda|\alpha,\eta)$ für α/η = const. und $\alpha \to \infty$ gegen die Dirac'sche δ-Funktion $\delta(\lambda - \alpha/\eta)$ konvergiert (siehe Gl. (C-30), hätten in diesem Grenzfall alle Individuen der mit Gl. (C-41) beschriebenen Grundgesamtheit die gleiche Versagensrate $\lambda = \alpha/\eta$. Eine entsprechende Substitution $\eta = \alpha/\lambda$ ergibt eine Parametrisierung der LOMAX-Verteilung mit den Parametern (α,λ), wobei für sehr große Werte von α (näherungsweise, asymptotisch) eine Exponentialverteilung resultiert.

Für die Schätzung der Parameter der LOMAX-Verteilung mit der Maximum-Likelihood-Methode und Vergleiche mit der Exponentialverteilung ist zweckmäßig, die Parametrisierung der LOMAX-Verteilung durch Gleichsetzung der Erwartungswerte beider Verteilungen anzupassen. Hierfür ist gemäß Gl. (C-38) die Substitution $\eta = (\alpha-1)/\lambda$ vorzunehmen. Zur Unterscheidung der aus dieser Substitution resultierenden Parametrisierung der LOMAX-Verteilung von der üblichen Form wird der Index "Lox" verwendet. Damit ist:

$$f_{Lox}(x \mid \alpha,\lambda) = \frac{\alpha}{\alpha-1} \cdot \frac{\lambda}{(1+\lambda \cdot x/(\alpha-1))^{\alpha+1}}, \quad 0 \le x < \infty, \quad \alpha > 1, \lambda > 0, \quad \text{(C-36')}$$

$$F_{Lox}(x \mid \alpha,\lambda) = 1 - \frac{1}{(1+\lambda \cdot x/(\alpha-1))^{\alpha}}, \quad \text{(C-37')}$$

$$E_{Lox}[X] = \frac{1}{\lambda} \quad (\text{für } \alpha > 1); \qquad Var_{Lox}[X] = \frac{1}{\lambda^2} \cdot \frac{\alpha}{\alpha-2} \quad (\text{für } \alpha > 2). \quad \text{(C-38')}$$

Für große Werte von α nähert sich die LOMAX-Verteilung der Exponentialverteilung an:

$$\lim_{\alpha\to\infty} f_{Lox}(x \mid \alpha,\lambda) = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\alpha}{\alpha-1} \cdot \frac{\lambda}{\left(1+\lambda\cdot x/(\alpha-1)\right)^{\alpha+1}} = \lambda \cdot e^{-\lambda\cdot x} = f_{Ex}(x \mid \lambda) \qquad \text{(C-42)}$$

Die Abbildung C-7 verdeutlicht die Abweichungen der LOMAX- von der Exponentialverteilung.

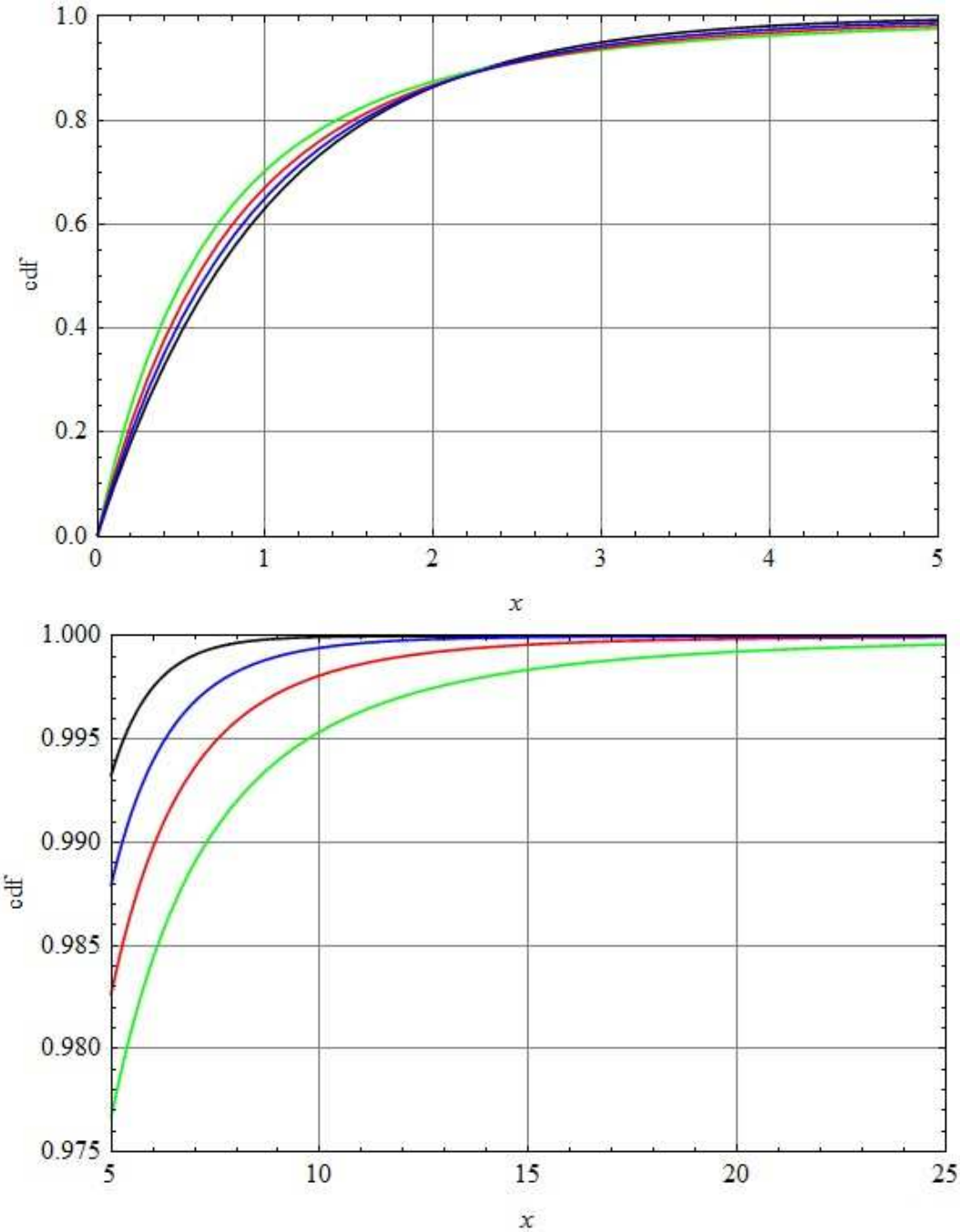


Abbildung C-7: Vergleich von Verteilungsfunktionen $F_{Lox}(x|\alpha,\lambda)$ der LOMAX-Verteilung für $\lambda = 1$ und α-Werten von 3 (grün), 5 (rot) und 10 (blau) mit der Exponentialverteilung $F_{Ex}(x|\lambda=1)$ (schwarz)

C.3.7 WALD-Verteilung X ~ Wa(μ,λ)

Die WALD-Verteilung (üblich auch inverse Normal- bzw. inverse GAUSS-Verteilung genannt) wurde in [SCHR 15] für die statistische Beschreibung der Zeit bis zum ersten Durchgang eines Teilchens bei BROWN'scher Bewegung mit Drift durch ein bestimmten Punkt abgeleitet (sie wurde deshalb auch als "first passage time distribution" bezeichnet). In [WALD 44] wurde diese Verteilung als asymptotische Verteilung des Stichprobenumfangs für den sequentiellen Test von statistischen Hypothesen abgeleitet (siehe auch [WALD 47]). Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion der WALD-Verteilung sind definiert durch:

$$f_{Wa}(x \mid \mu,\lambda) = \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi \cdot x^3}} \cdot \exp\left(\frac{-\lambda \cdot (x-\mu)^2}{2\mu^2 \cdot x}\right), \qquad 0 \le x < \infty, \quad \mu, \lambda > 0 \tag{C-43}$$

$$F_{Wa}(x \mid \mu,\lambda) = \Phi\left(\sqrt{\frac{\lambda}{x}} \cdot \left(\frac{x}{\mu} - 1\right)\right) + e^{2\cdot\lambda/\mu} \cdot \Phi\left(-\sqrt{\frac{\lambda}{x}} \cdot \left(\frac{x}{\mu} + 1\right)\right), \tag{C-44}$$

wobei $\Phi(x)$ die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung ist, siehe Gl. (C-2). Zum Beweis von Gl. (C-44) sei z. B. auf [CHHI 74] verwiesen.

Für den Erwartungswert und die Varianz sowie für Schiefe und Kurtosis der WALD-Verteilung gelten die folgenden Beziehungen:

$$E_{Wa}[X] = \mu\,; \qquad Var_{Wa}[X] = \frac{\mu^3}{\lambda}\,; \quad \gamma_1 = 3 \cdot \sqrt{\frac{\mu}{\lambda}}\,; \quad \gamma_2 = 3 + \frac{15 \cdot \mu}{\lambda}\ . \tag{C-45}$$

Die WALD-Verteilung ist somit linkssteil und leptokurtisch; sie ist damit ähnlich zu anderen für positive Zufallsgrößen bekannten Verteilungen, wie z. B. Lognormalverteilung, Gammaverteilung und WEIBULL-Verteilung. Ihr Modalwert ist:

$$Mod_{Wa} = \mu \cdot \left(\sqrt{1 + \frac{9 \cdot \mu^2}{4 \cdot \lambda^2}} - \frac{3 \cdot \mu}{2 \cdot \lambda}\right). \tag{C-46}$$

Aus Gl. (C-46 ist ersichtlich, dass sich der Modalwert bei fixiertem Erwartungswert (μ) für größere Werte von λ dem Erwartungswert annähert, wobei sich gemäß Gl. (C-45) die Schiefe dem Wert 0 und die Kurtosis dem Wert 3 nähern. Dies zeigt, dass die Wald-Verteilung mit zunehmendem λ gegen eine Normalverteilung mit Erwartungswert μ und Standardabweichung $\sqrt{\mu^3/\lambda}$ konvergiert. Die Abbildung C-8 veranschaulicht diesen Übergang und den Einfluss des Parameters λ auf die Form der WALD-Verteilung. Zu wichtigen statistischen Eigenschaften der WALD-Verteilung und zu Methoden der Schätzung ihrer Parameter anhand von Stichproben sei auf [TWEE 57A], [TWEE 57B] sowie [FOL 78] verwiesen. Die letztgenannte Arbeit enthält auch diverse Anwendungen der WALD-Verteilung, z. B. zur Lebensdaueranalyse und zur Analyse von Niederschlagsdaten (Rate, Abfluss). Neben der Lebensdaueranalyse [CHHI 77] und der der statistischen Modellierung des Zeitaufwands für Arbeiten [HAW 97] wird die WALD-Verteilung auf weiteren Gebieten für die Analyse und Modellierung von positiven Zufallsgrößen mit linkssteiler Verteilung genutzt.

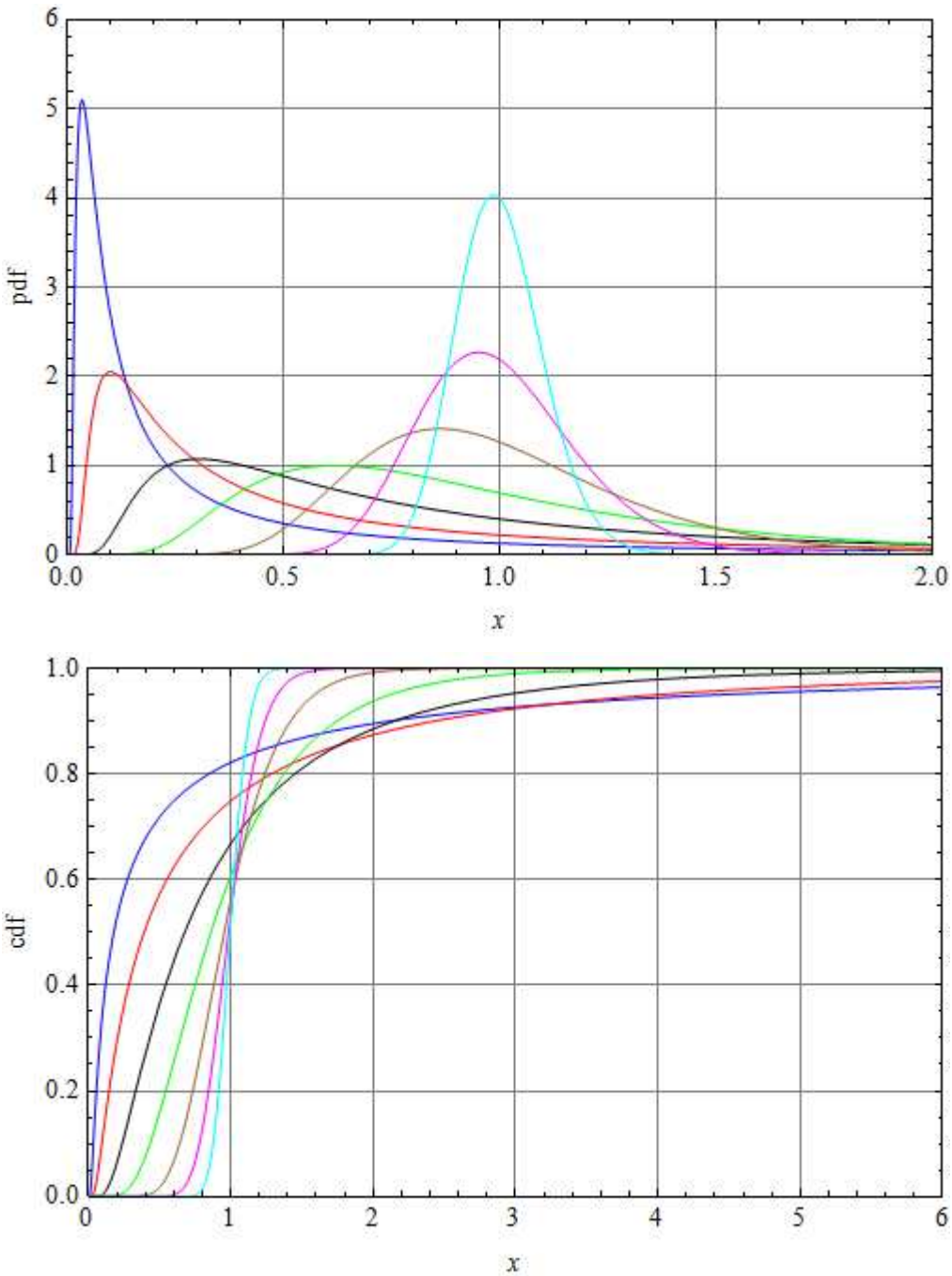


Abbildung C-8: Formen der WALD-Verteilung X ~ Wa(μ,λ) bei fixiertem Erwartungswert μ = 1 für verschiedene Werte des Verteilungsparameters λ: 0,1 (blau), 0,3 (rot), 1 (schwarz), 3 (grün), 10 (braun), 30 (magenta), 100 (cyan); oberes Bild: Wahrscheinlichkeitsdichte für 0 < x <2; unteres Bild: Verteilungsfunktion für 0 < x <6

C.4 Stetige Verteilungen für beidseitig begrenzte Zufallsvariable ($0 \le x \le 1$)

Eine stetige Zufallsvariable Y, die durch eine Bedingung $a \le Y \le b$ beidseitig begrenzt ist, wobei a und b konstante Werte bezeichnen, kann durch die einfache lineare Transformation

$$X = \frac{Y - a}{b - a} \tag{C-47}$$

in eine Zufallsgröße X überführt werden, die auf dem Intervall [0, 1] definiert ist. Deshalb ist es hier ausreichend, ausschließlich Verteilungen für Zufallsvariable X zu beschreiben, für die $0 \le X \le 1$ gilt (sie stellen standardisierte Verteilungen dar). Es sei aber darauf hingewiesen, dass im Allgemeinen die konkreten Werte a und b, welche die Zufallsgröße Y begrenzen, nicht bekannt sein müssen, sondern, wie andere Verteilungsparameter auch, aus den vorhandenen Stichprobendaten geschätzt werden müssen. In diesem Fall ist natürlich die Schätzung der Verteilungsparameter aufwendiger als für die nachfolgend betrachteten standardisierten Verteilungen, da zwei weitere Größen (a und b) mitbestimmt werden müssen. Diese Problematik entfällt natürlich, wenn von a priori bekannt ist, dass die zu analysierende Zufallsgröße auf das Intervall [0, 1] begrenzt ist, was z. B. für Variable zutrifft, die Anteile oder ähnliche Relationen darstellen.

C.4.1 Gleichverteilung X ~ U

Die Gleichverteilung (engl.: Uniform Distribution) ist die einfachste und in gewissem Sinne auch wichtigste statistische Verteilung, weil sie der Erzeugung anderer Zufallsgrößen zugrunde liegt. Für ihre Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion sowie für die Kenngrößen Erwartungswert, Varianz, Schiefe und Kurtosis gelten folgende Beziehungen:

$$f_U(x) = 1 \quad \text{und} \quad F_u(x) = x \quad (0 \le x \le 1);. \tag{C-48}$$

$$E_U[X] = 1/2, \quad Var_U[X] = 1/12, \quad \gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = 9/5. \tag{C-49}$$

Die Gleichverteilung bzw. eine durch die zu Gl. (C-47) inverse Transformation dargestellte Rechteckverteilung Re(a,b) wird auch für die Beschreibung von partieller Unkenntnis bzgl. einer Größe Y verwendet, für die nur der minimal und der maximal mögliche Wert spezifiziert werden können.

C.4.2 Betaverteilung X ~ Bt(α,β)

Die Betaverteilung wird häufig zur Modellierung der statistischen Verteilungen zufälliger Anteile bzw. Relationen genutzt, weil sie sehr flexibel verschiedene Formen der Wahrscheinlichkeitsdichte ermöglicht (links- oder rechtsteil, lepto- oder platykurtisch). Ihre Wahrscheinlichkeitsdichte ist

$$f_{Bt}(x \mid \alpha,\beta) = \frac{1}{B(\alpha,\beta)} \cdot x^{\alpha-1} \cdot (1-x)^{\beta-1}, \qquad 0 \le x \le 1, \quad \alpha,\beta > 0, \tag{C-50}$$

wobei B(α,β) die so genannte Betafunktion bezeichnet,

$$B(\alpha,\beta) = \int_0^1 x^{\alpha-1} \cdot (1-x)^{\beta-1} dx = \frac{\Gamma(\alpha)\cdot\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)}. \qquad \text{(C-51)}$$

Für die Verteilungsfunktion der Beta-Verteilung existiert keine einfache analytische Form; sie ist die regularisierte unvollständige Betafunktion:

$$F_{Bt}(x \mid \alpha,\beta) = \frac{B_x(\alpha,\beta)}{B(\alpha,\beta)} = \frac{1}{B(\alpha,\beta)} \cdot \int_0^x t^{\alpha-1} \cdot (1-t)^{\beta-1} dt\,. \qquad \text{(C-52)}$$

für den Erwartungswert sowie Varianz, Schiefe und Kurtosis gelten folgende Beziehungen:

$$E_{Bt}[X] = \frac{\alpha}{\alpha+\beta}, \quad Var_{Bt}[X] = \frac{\alpha\cdot\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}, \qquad \text{(C-53)}$$

$$\gamma_1 = 2\frac{(\beta-\alpha)\cdot\sqrt{\alpha+\beta+1}}{(\alpha+\beta+2)\cdot\sqrt{\alpha\cdot\beta}}, \quad \gamma_2 = 3\frac{(\alpha+\beta+1)\cdot\left(\alpha\cdot\beta\cdot(\alpha+\beta-6)+2\cdot(\alpha+\beta)^2\right)}{\alpha\cdot\beta\cdot(\alpha+\beta+2)\cdot(\alpha+\beta+3)}. \qquad \text{(C-54)}$$

Ihr Modalwert ist:

$$Mod_{Bt} = \frac{\alpha-1}{\alpha+\beta-2} \quad \text{für} \quad \alpha, \beta > 1; \quad \text{(Anti-Modalwert für } \alpha, \beta < 1). \qquad \text{(C-55)}$$

Die Abbildung C-9 verdeutlicht die Veränderung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Betaverteilung bei Variation eines der beiden Formparameter. Für $\alpha = \beta = 1$ entspricht die Betaverteilung der Gleichverteilung. Die für $\alpha = \beta = ½$ resultierende Verteilung ist als "ArcSin-Verteilung" bekannt.

Die verbreitete Anwendung der Betaverteilung für die Modellierung von zufälligen Anteilen ist jedoch nicht zwangsläufig, da einige andere Verteilungen ähnliche Eigenschaften aufweisen (siehe folgende Abschnitte C.4.3 bis C.4.5). Genügen zwei positive Zufallsgrößen X und Y allerdings Gammaverteilungen mit gleichem Ratenparameter (bzw. Skalenparameter), d. h. $X \sim Ga(\alpha,\lambda)$ und $Y \sim Ga(\beta,\lambda)$, dann folgt die Relation X/(X+Y) exakt einer Betaverteilung, $X/(X+Y) \sim Bt(\alpha,\beta)$.

Besondere Bedeutung hat die Betaverteilung in der BAYES-Theorie für die statistische Inferenz von Bernoulli-Versuchen als Prior- und Posteriorverteilung für die Erfolgswahrscheinlichkeit p, aber auch in der Ordnungsstatistik, wo sie die statistische Verteilung der nach der Größe geordneten Zufallswerte von Stichproben aus einer Gleichverteilung beschreibt (siehe z. B. [BAL 03]. Für eine Stichprobe $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ der Zufallsvariablen $X \sim U$ werden die nach aufsteigender Größe geordneten Werte mit $x_{(k)}$ bezeichnet (k von 1 bis n). Der k-größte Wert ist dann eine Zufallsgröße, die einer Betaverteilung folgt: $X_{(k)} \sim Bt(k, n+1)$.

Schließlich sei vermerkt, dass die Betaverteilung nach entsprechender Transformation auch zur Modellierung von andersartig verteilten Zufallsgrößen genutzt wird. Ist $X \sim Bt(\alpha,\beta)$, so resultieren z. B. durch die Transformationen $Y = -\ln(X)$ oder $Y = X/(1-X)$ Zufallsgrößen mit positiven Werten ($0 < y < \infty$). Die letztgenannte Transformation führt zur so genannten PEARSON VI Verteilung. Zu dbzgl. Erläuterungen und Beispielen zu Anwendungen sei auf [JOH 95] verwiesen.

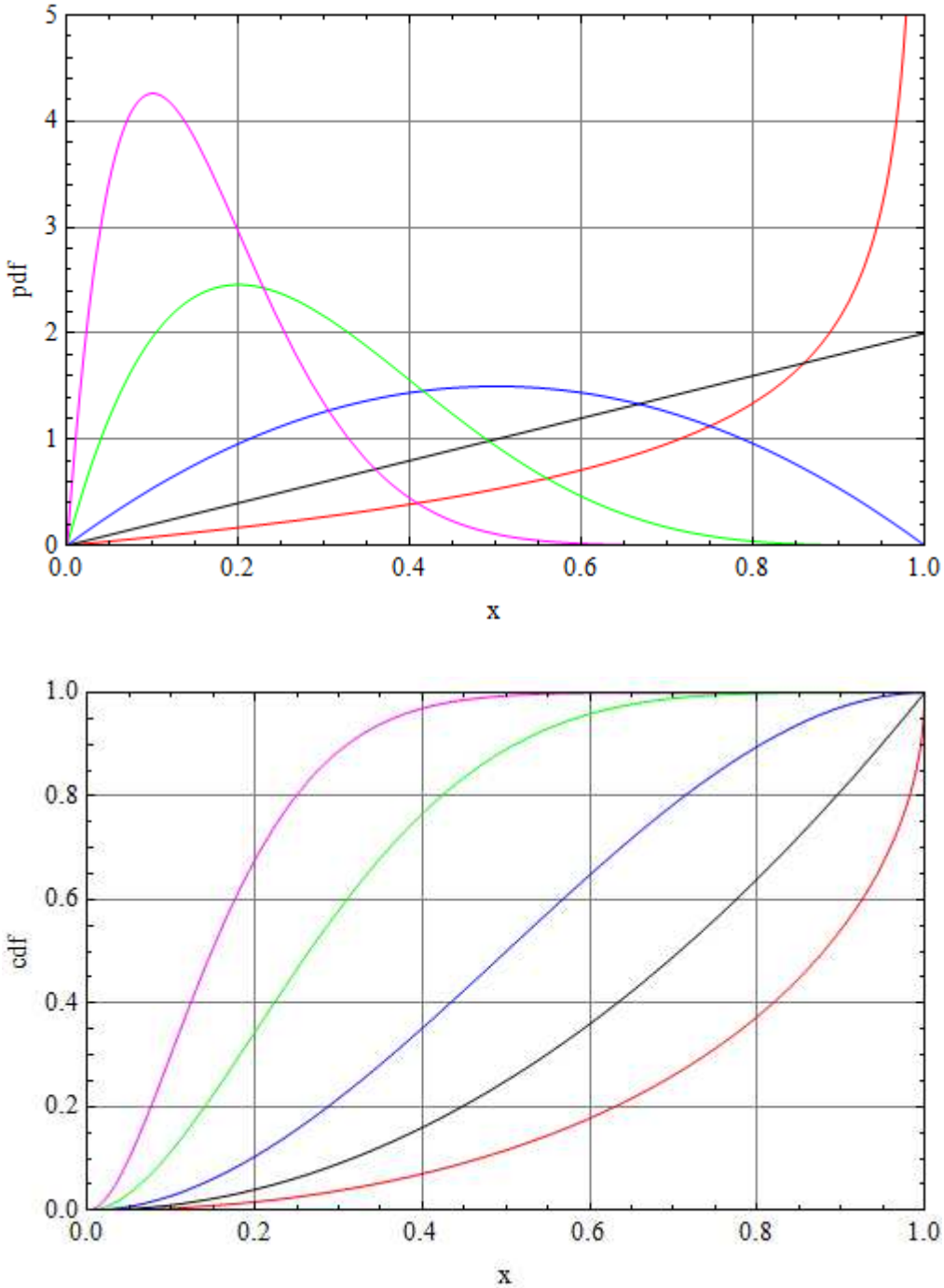


Abbildung C-9: Formen der Betaverteilung X ~ Bt(α, β) bei fixiertem Wert des 1. Formparameters von α = 2 für verschiedene Werte des 2. Formparameters β: 0,5 (rot), 1 (schwarz), 2 (blau), 5 (grün) und 10 (magenta); oberes Bild: Wahrscheinlichkeitsdichte; unteres Bild: Verteilungsfunktion

C.4.3 KUMARASWAMY-Verteilung X ~ Ku(α,β)

Die KUMARASWAMY-Verteilung wurde in [KUM 80] empirisch für die statistische Modellierung von täglichen Niederschlagsmengen entwickelt (in [LEEM 08] als Minimax-Verteilung bezeichnet). Ihre Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion sind definiert durch:

$$f_{Ku}(x \mid \alpha,\beta) = \alpha \cdot \beta \cdot x^{\alpha-1} \cdot (1-x^{\alpha})^{\beta-1}, \qquad 0 \le x \le 1, \quad \alpha,\beta > 0, \tag{C-56}$$

$$F_{Ku}(x \mid \alpha,\beta) = 1-(1-x^{\alpha})^{\beta}. \tag{C-57}$$

Für den Erwartungswert und die Varianz erhält man die Beziehungen

$$E_{Ku}[X] = \frac{1}{\alpha} B(1/\alpha, \beta+1); \qquad Var_{Ku}[X] = \frac{2}{\alpha} \cdot B(2/\alpha, \beta+1) - \frac{1}{\alpha^2} \cdot B^2(1/\alpha, \beta+1), \tag{C-58}$$

wobei B(*,*) die Betafunktion gemäß Gl. (C-51) bezeichnet. Zur Schiefe und Kurtosis lassen sich für die KUMARASWAMY-Verteilung analytische Ausdrücke berechnen, die aber kompliziert werden. Hier sei deshalb nur die Beziehung für die Schiefe angegeben:

$$\gamma_1 = \frac{2 \cdot B^3(1/\alpha, \beta+1) - 6 \cdot \alpha \cdot B(1/\alpha, \beta+1) \cdot B(2/\alpha, \beta+1) + 3 \cdot \alpha^2 \cdot B(3/\alpha, \beta+1)}{\left(2 \cdot \alpha \cdot B(2/\alpha, \beta+1) - B^2(1/\alpha, \beta+1)\right)^{3/2}}. \tag{C-59}$$

Für den Modalwert der KUMARASWAMY-Verteilung folgt aus Gl. (C-56):

$$Mod_{Ku} = \left(\frac{\alpha-1}{\alpha \cdot \beta - 1}\right)^{1/\alpha} \qquad \text{für} \quad \alpha, \beta > 1; \quad \text{(Anti-Modalwert für } \alpha, \beta < 1). \tag{C-60}$$

Die KUMARASWAMY-Verteilung weist einige Gemeinsamkeiten mit der Betaverteilung auf. Beide Verteilungen sind für {α > 1, β > 1} unimodal, für {α < 1, β < 1} uniantimodal und ergeben für α = β = 1 die Gleichverteilung. Beide Verteilungen sind für {α > 1, β ≤ 1} mit x wachsend und für {α ≤ 1, β > 1} fallend. Auch verhalten sich beide Wahrscheinlichkeitsdichten an den Grenzen gleichartig, wie $x^{\alpha-1}$ für x → 0 bzw. $(1 - x)^{\beta-1}$ für x → 1. Ein Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichten der beiden Verteilungen, Gl. (C-50) und Gl. (C-56), macht den direkten Zusammenhang deutlich: aus X ~ Ku(α,β) folgt X^{α} ~ Bt(1,β).

Ein Vergleich von Vor- und Nachteilen der KUMARASWAMY- und der Beta-Verteilung wurde in [JON 09] vorgenommen. Der wesentliche Vorteil der KUMARASWAMY-Verteilung ist die einfache Form ihrer Verteilungsfunktion, Gl. (C-57), für die auch die inverse Funktion (die Quantilfunktion) analytisch angegeben werden kann, was statistische Datenanalysen und Simulationsrechnungen stark vereinfacht. Da sie – wie die Betaverteilung – zur Modellierung sehr unterschiedliche Formen beidseitig begrenzter Zufallsgrößen geeignet ist (siehe Abschnitt 4.1.4.3) kann sie in vielen Fällen zweckmäßig angewandt werden. Ein Nachteil der KUMARASWAMY-Verteilung ist, dass sie nur im trivialen Fall α = β =1 symmetrisch ist.

Wie in Abschnitt C.4.2 für die Betaverteilung vermerkt, kann natürlich auch die KUMARASWAMY-Verteilung durch entsprechende Transformationen zur Modellierung von andersartig verteilten

Zufallsgrößen genutzt wird. Durch die Transformation Y = - ln(X) resultiert z.B. die in [GUP 99] als Alternative zu bekannten stetigen Verteilungen für positiv definierte Zufallsvariable (wie Gamma-Lognormal-, und WEIBULL-Verteilung) eingeführte "Verallgemeinerte Exponentialverteilung". Die Hierfür entwickelten Methoden der statistischen Inferenz (siehe [GUP 01], [GUP 07], [KUN 08]) können durch Transformation auf die KUMARASWAMY-Verteilung übertragen werden.

C.4.4 JOHNSON-S_B-Verteilung $X \sim JS_B(\gamma,\delta)$

Die statistischen Eigenschaften stetiger Zufallsvariablen sind durch ihre Wahrscheinlichkeitsdichte definiert. Bezeichnet X eine bestimmte Zufallsgröße mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $f_X(x|\boldsymbol{\theta})$, wobei $\boldsymbol{\theta}$ für den Vektor der Verteilungsparameter steht, so definiert eine Transformation Z = g(X) eine andere Zufallsgröße Z. In [JOH 49] wurden Transformationen untersucht, mit denen X auf eine Standard-Normalverteilung Z ~ N(0,1) zurückgeführt wird. Ähnlich zum PEARSON'schen System (siehe Kapitel 4 in [JOH 94]) wurde $\boldsymbol{\theta}$ mit vier skalare Verteilungsparametern definiert. Eine relativ allgemeine Form der Transformation mit klarer Bedeutung der Verteilungsparameter ergibt sich mit

$$Z = \gamma + \delta \cdot g\left(\frac{X-\xi}{\beta}\right), \quad \text{bzw.} \quad Y = \frac{Z-\gamma}{\delta} = g\left(\frac{X-\xi}{\beta}\right), \tag{C-61a}$$

wobei Y einer Normalverteilung genügt, $Y \sim N(\gamma,\delta)$. Für die Zufallsvariable X stellt ξ einen Lageparameter und β ein Skalenparameter dar; folglich ist ß > 0. Für Y ist γ ein Lage- und δ ein Skalenparameter; folglich ist $\delta > 0$. Betrachtet man die standardisierte Form für die Zufallsgröße X, so kann mit $\xi = 0$ und $\beta = 1$ von der folgenden, vereinfachten Transformation ausgegangen werden:

$$Z = \gamma + \delta \cdot g(X), \tag{C-61b}$$

die nur noch von den zwei Parametern γ und δ abhängen, die für X als Formparametern fungieren (mit g(X) = ln(X) stellt X z. B. eine Lognormalverteilung $X \sim Ln(\gamma,\delta)$ dar, die als JS_L-Verteilung bezeichnet wird; mit g(X) = arsinh(x) folgt die JS_U-Verteilung für reelle Zufallsgrößen, $-\infty < x < \infty$).

Eine beidseitig begrenzte Zufallsgröße (Verteilung vom Typ JS_B) entsteht mit g(X) = ln(X/(1-X). Mit Gl. (C-61b) resultieren für X die folgende Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion:

$$f_{JS_B}(x \mid \gamma,\delta) = \frac{\delta}{\sqrt{2\cdot\pi}\cdot x\cdot(1-x)} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\gamma + \delta\cdot\ln\left(\frac{x}{1-x}\right)\right)^2\right), \quad 0 \le x \le 1, \quad \delta > 0, \tag{C-62}$$

$$F_{JS_B}(x \mid \gamma,\delta) = \Phi\left(\gamma + \delta\cdot\ln\left(\frac{x}{1-x}\right)\right). \tag{C-63}$$

In Gl. (C-63) bezeichnet $\Phi(x)$ die Verteilungsfunktion der Standardnormalverteilung N(0,1). Für den Erwartungswert, die Varianz und die 3. bzw. 4 Momente, die zur Berechnung der Schiefe und der Kurtosis nötig sind, existieren für die JOHNSON-S_B-Verteilung keine analytischen Ausdrücke. Dies trifft auch für den Modalwert zu. Diese erheblichen Nachteile der Johnson-S_B-Verteilung beeinträchtigen jedoch nicht die Schätzung der Verteilungsparameter anhand einer Stichprobe $\{x_i\}_n$, da sich über die Transformation $y_i = \ln(y_i/(1-y_i))$ mit Gl. (C-61b) eine Stichprobe $\{y_i\}_n$ ergibt, die

normalverteilt ist. Anwendungen der JOHNSON-S_B-Verteilung für Expositionsparametern verlangen jedoch oft eine Schätzung aller vier Parameter gemäß Gl. (C-61a). Hierzu sind Quantilmethoden bzw. BAYES-Methoden geeignet (siehe z. B. [MAGE 80], [FLY 06], [TSI 01]).

Die JS_B-Verteilung ist – wie die Betaverteilung – zur Modellierung sehr unterschiedlicher Formen beidseitig begrenzter Zufallsgrößen geeignet (siehe Abschnitt 4.1.4.3). Sie kann deshalb in vielen Fällen als Alternative zur Betaverteilung angewandt werden. Wie die Betaverteilung ist sie auch zur Modellierung symmetrischer Verteilungen mit unterschiedlicher Varianz/Kurtosis geeignet.

C.4.5 Log-PEARSON-3-Verteilung X ~ LP3(α,λ)

Die in [CON 71] als Log-Gamma-Verteilung untersuchte Transformation der Gammaverteilung wird nachfolgend als Log-PEARSON-3-Verteilung bezeichnet, weil die Bezeichnung "Log-Gamma" inzwischen überwiegend für eine andere Transformation der Gamma-Verteilung genutzt wird (siehe z. B. [LEEM 08] und Programm EasyFit von MathWave Technologies). Die PEARSON-Verteilung Typ 3 ist eine Gammaverteilung (siehe [JOH 94]). Die hier verwendete Bezeichnung LP3 ist somit bzgl. [CON 71] als Synonym zur Vermeidung von Verwechslungen zu verstehen.

Ist Y eine der Gammaverteilung folgende positive Zufallsgröße, Y ~ Ga(α,λ), 0 < y < ∞ (α, λ > 0), so definiert die Transformation $X = e^{-Y}$ eine auf das Intervall [0, 1] begrenzte Zufallsgröße X. Die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Verteilungsfunktion der so definierten LP3-Verteilung sind:

$$f_{LP3}(x \mid \alpha,\lambda) = \frac{\lambda^{\alpha} \cdot x^{\lambda-1} \cdot (-\ln(x))^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}, \quad 0 \le x \le 1, \quad \alpha > 0, \lambda > 0, \tag{C-64}$$

$$F_{LP3}(x \mid \alpha,\lambda) = \frac{\Gamma(\alpha, -\lambda \cdot \ln(x))}{\Gamma(\alpha)}, \tag{C-65}$$

wobei Γ(α, z) die unvollständige Gammafunktion ist (siehe Gl. (C-28)). Für den Erwartungswert und die Varianz erhält man die Beziehungen

$$E_{LP3}[X] = \left(\frac{\lambda}{\lambda+1}\right)^{\alpha}; \qquad Var_{LP3}[X] = \left(\frac{\lambda}{\lambda+2}\right)^{\alpha} - \left(\frac{\lambda}{\lambda+1}\right)^{2\cdot\alpha}. \tag{C-66}$$

Zur Schiefe und Kurtosis lassen sich für die LP3-Verteilung analytische Ausdrücke berechnen, die aber kompliziert werden. Für den Modalwert ergibt sich jedoch eine einfache Beziehung:

$$Mod_{LP3} = Exp\left(-\frac{\alpha-1}{\lambda-1}\right) \quad \text{für} \quad \alpha, \lambda > 1; \quad \text{(Anti-Modalwert für } \alpha, \lambda < 1). \tag{C-67}$$

Die LP3-Verteilung ist – wie die Betaverteilung – zur Modellierung sehr unterschiedliche Formen beidseitig begrenzter Zufallsgrößen geeignet (siehe Abschnitt 4.1.4.3). Sie kann deshalb in vielen Fällen als Alternative zur Betaverteilung angewandt werden.

C.4.6 Dreiecksverteilung Tr(a,b,m)

Die Dreiecksverteilung wird oft zur Beschreibung von partieller Unkenntnis für Modellparameter verwendet, für die nur minimale (a), maximale (b) sowie wahrscheinlichste (m) Werte benannt werden können (z. B. durch Expertenschätzungen). Sie wird dementsprechend überwiegend zur Charakterisierung von epistemisch unsicheren Parametern genutzt, für die keine repräsentative Datenbasis zur Bestimmung "üblicher" statistischer Verteilungen (z. B. der Betaverteilung) vorliegt.

Eine auf dem Intervall [a, b] definierte Zufallsgröße X ist dreiecksverteilt, X ~ Tr(a,b,m), wenn ihre Wahrscheinlichkeitsdichte von a bis zum Modalwert Mod_{Tr} = m linear ansteigt und danach von m bis b linear abfällt (a ≤ m ≤ b). Ihre Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungsfunktion sind:

$$f_{Tr}(x \mid a,b,m) = \begin{cases} \dfrac{2\cdot(x-a)}{(b-a)\cdot(m-a)} & \text{für} \quad a \le x \le m \\ \dfrac{2\cdot(b-x)}{(b-a)\cdot(b-m)} & \text{für} \quad m \le x \le b \end{cases}, \tag{C-68}$$

$$F_{Tr}(x \mid a,b,m) = \begin{cases} \dfrac{(x-a)^2}{(b-a)\cdot(m-a)} & \text{für} \quad a \le x \le m \\ 1-\dfrac{(b-x)^2}{(b-a)\cdot(b-m)} & \text{für} \quad m \le x \le b \end{cases}. \tag{C-69}$$

Für den Erwartungswert sowie für Varianz, Schiefe und Kurtosis resultieren die Beziehungen

$$E_{Tr}[X] = (a+b+m)/3; \quad Var_{Tr}[X] = (a^2 - a\cdot b + b^2 - am - bm + m^2)/18; \tag{C-70}$$

$$\gamma_1 = \frac{\sqrt{2}\cdot(2a^3 - 3a^2b - 3ab^2 + 2b^3 - 3a^2m + 12abm - 3b^2m - 3am^2 - 3bm^2 + 2\cdot m^3)}{5\cdot(a^2 - a\cdot b + b^2 - am - bm + m^2)^{3/2}}; \tag{C-71}$$

$$\gamma_2 = 12/5. \tag{C-72}$$

Die Anwendbarkeit von Dreiecksverteilungen zur Approximation von Betaverteilungen für die probabilistische Modellierung von Parametern eines Expertsystems (PERT, Program Evaluation and Review Technique) wurde in [JOHN 97] untersucht. Es wurde gezeigt, dass für dbzgl. relevante Parameterbereiche der Betaverteilung eine relativ gute Approximation durch Dreiecksverteilungen vorgenommen werden kann. Dies kann z. B. durch Gleichsetzung des Modalwertes der Dreiecksverteilung mit dem Modalwert der Betaverteilung sowie Anpassung des 5%- und 95%-Perzentils der Dreiecksverteilung an die entsprechenden Perzentile der Betaverteilung erfolgen. Dies ist in der Abbildung C-10 anhand einer Anpassung der Dreiecksverteilung an X ~ Bt(10,3) veranschaulicht.

Umgekehrt können mit analogen Ansätzen natürlich auch Beta- oder ähnliche Verteilungen (s. o) so an Dreiecksverteilungen angepasst werden, dass wesentliche Kenngrößen der Dreiecksverteilung, die auf Expertenschätzungen basieren, auf stetig differenzierbare Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die "natürlicher" sind, übertragen werden. Hierzu sind dann allerdings i d. R. die 4-parametrigen Formen z. B. der Beta-, KUMARASWAMY-, JS_B oder LP3-Verteilung erforderlich.

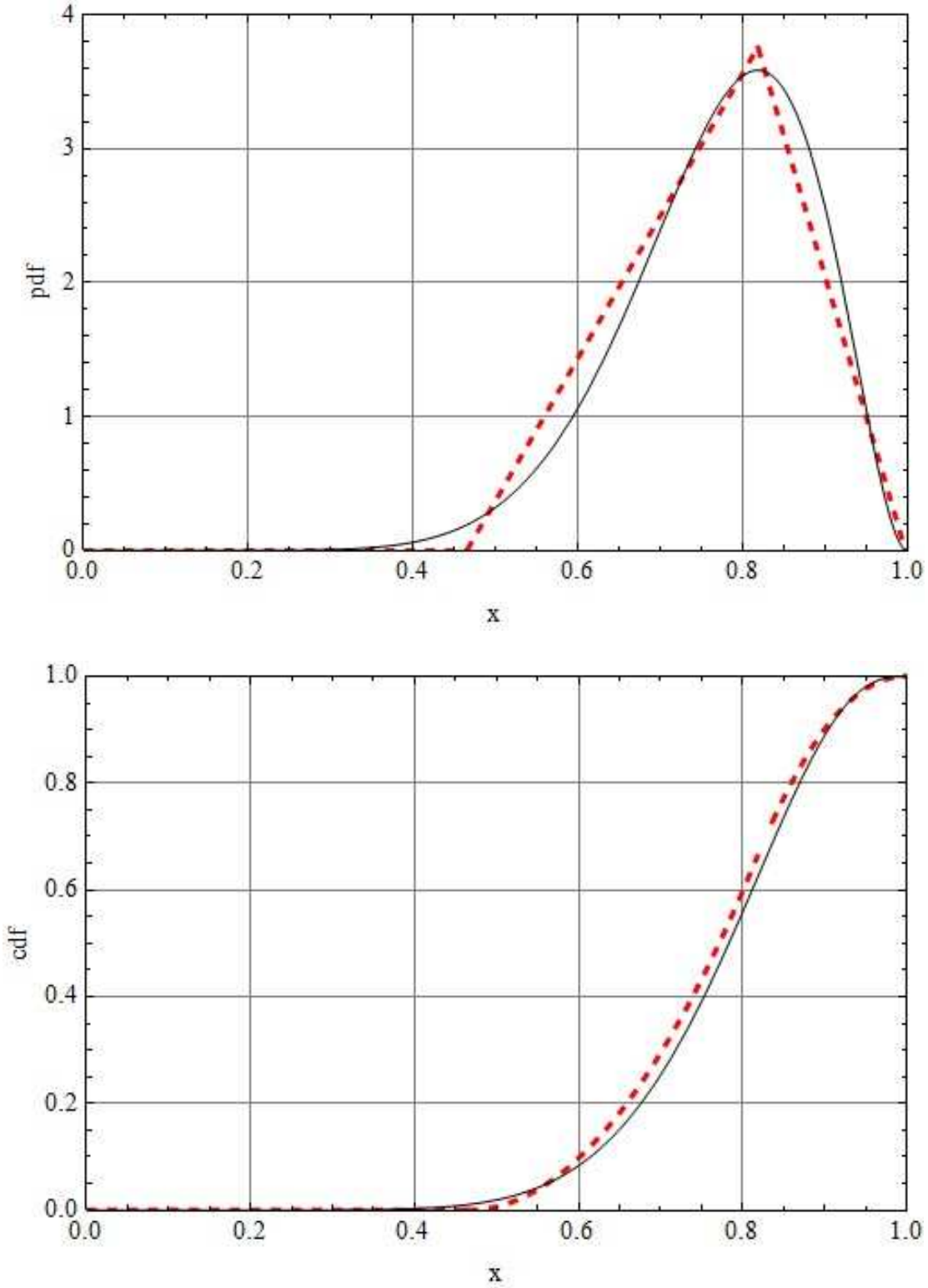


Abbildung C-10: Wahrscheinlichkeitsdichte (oben) und Verteilungsfunktion (unten) einer an die Betaverteilung X ~ Bt(10,3) (schwarz) angepassten Dreiecksverteilung (rot, gestrichelt) X ~ Tr(0.465, 0.997, 0.818).

C.5 Diskrete Verteilungen

C.5.1 BERNOULLI-Verteilung X ~ Ber(p)

Die Bernoulli-Verteilung wird zur Beschreibung von Versuchen genutzt, bei denen es nur zwei mögliche Ergebnisse gibt, die mit X = 1 (Erfolg) und X = 0 (Misserfolg) bezeichnet werden. Ist p die Erfolgswahrscheinlichkeit des Versuches, so ist

$$f_{Ber}(x|p) = Pr(X=x|p) = p^x \cdot (1-p)^{1-x}; \quad x = 0 \text{ oder } 1; \quad 0 < p < 1; \tag{C-73}$$

die Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion (pmf). Der Erwartungswert und die Varianz sind:

$$E_{Ber}[X|p] = p, \qquad Var_{Ber}[X|p] = p \cdot (1-p). \tag{C-74}$$

Die BERNOULLI-Verteilung stellt die Basis für diverse andere diskrete Verteilungen dar.

C.5.2 Geometrische Verteilung X ~ Geo(p)

Die geometrische Verteilung beschreibt die Anzahl X von erfolglosen Bernoulli-Versuchen, die eine Erfolgswahrscheinlichkeit p haben, bis zum Eintreten des ersten Erfolges im (X+1)-ten Versuch. Die pmf und die Verteilungsfunktion sind:

$$f_{Geo}(x \mid p) = (1-p)^x \cdot p, \quad x \geq 0 \ (0, 1, 2, \ldots), \quad 0 < p < 1, \tag{C-75}$$

$$F_{Geo}(x \mid p) = 1-(1-p)^{x+1}. \tag{C-76}$$

Erwartungswert und Varianz sind:

$$E_{Geo}[X|p] = (1-p)/p, \qquad Var_{Geo}[X|p] = (1-p)/p^2. \tag{C-77}$$

Für die Schiefe und die Kurtosis ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\gamma_1 = \frac{2-p}{\sqrt{1-p}}; \quad \gamma_2 = 8 - p + \frac{1}{1-p}. \tag{C-78}$$

C.5.3 Binomialverteilung X ~ Bin(n, p)

Die Binomialverteilung beschreibt die Anzahl X von erfolgreichen Versuchen bei n identischen und voneinander unabhängigen BERNOULLI-Versuchen, die eine Erfolgswahrscheinlichkeit von p haben. Die pmf der Binomialverteilung ist:

$$f_{Bin}(x \mid n, p) = \frac{n!}{x! \cdot (n-x)!} \cdot p^x \cdot (1-p)^{n-x}, \quad 0 \leq x \leq n, \quad 0 < p < 1. \tag{C-79}$$

Erwartungswert und Varianz sind:

$$E_{Bin}[X|n,p] = n \cdot p, \qquad Var_{Bin}[X|n,p] = n \cdot p \cdot (1-p). \tag{C-80}$$

Für die Schiefe und die Kurtosis ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\gamma_1 = \frac{1-2\cdot p}{\sqrt{n\cdot p\cdot(1-p)}}; \quad \gamma_2 = 3-\frac{6}{n}+\frac{1}{n\cdot p\cdot(1-p)}. \tag{C-81}$$

Für sehr große n nähert sich die Binomialverteilung einer POISSON-Verteilung Poi(λ) mit λ = n·p an. Dies ist in Abbildung C-11 für Parameterwerte (n, p) der Binomialverteilung von (10; 0,3) sowie (50; 0,06) illustriert.

C.5.4 POISSON-Verteilung X ~ Poi(λ)

Die POISSON-Verteilung dient der Beschreibung der Anzahl seltener Ereignisse, die mit konstanten Rate λ (z. B. mittlere Anzahl von Ereignissen pro Zeiteinheit) stattfinden. Sie wurde durch POISSON als Grenzverteilung der Binomialverteilung für n → ∞ und p → 0 mit n·p = const. =λ gefunden:

$$\lim_{n\to\infty}\frac{n!}{x!\cdot(n-x)!}\cdot\left(\frac{\lambda}{n}\right)^x\cdot\left(1-\frac{\lambda}{n}\right)^{n-x} = \frac{e^{-\lambda}\cdot\lambda^x}{x!} = f_{Poi}(x\,|\,\lambda), \quad x = 0, 1, 2, \ldots; \lambda > 0. \tag{C-82}$$

Erwartungswert und Varianz der POISSON-Verteilung sind:

$$E_{Poi}[X|\lambda] = \lambda, \qquad Var_{Poi}[X|\lambda] = \lambda. \tag{C-83}$$

Ihre Schiefe und Kurtosis sind:

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}; \quad \gamma_2 = 3+\frac{1}{\lambda}. \tag{C-84}$$

Generell wird ein POISSON-Prozess durch folgende Bedingungen definiert:

- Die Anzahl von Ereignissen in disjunkten Zeitintervallen ist voneinander unabhängig.
- Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von genau einem Ereignis in einem infinitesimal kleinen Zeitabschnitt dt ist λ·dt (mit λ > 0).
- Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von zwei oder mehreren Ereignissen in infinitesimal kleinen Zeitabschnitten ist vernachlässigbar gering.
- Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer bestimmten Anzahl X von Ereignissen in einem Zeitintervall der Länge Δt hängt nur von der Länge dieses Intervalls, jedoch nicht von ihrem Anfangszeitpunkt ab (ein POISSON-Prozess hat die Eigenschaft der "Gedächtnislosigkeit").

Für die Modellierung von diskreten Zufallsgrößen ist die Reproduktivität der POISSON-Verteilung von besonderer Bedeutung. Sind X_1 ~ Poi(λ_1) und X_2 ~ Poi(λ_2) zwei unabhängige Zufallsgrößen, so folgt ihre Summe ebenfalls einer POISSON-Verteilung: $X_1 + X_2 = Y$ ~ Poi($\lambda_1 + \lambda_2$).

Für große Werte des Parameters λ nähert sich die POISSON-Verteilung eine Normalverteilung mit dem Erwartungswert λ und der Standardabweichung $\sqrt{\lambda}$ an, wie in Abbildung C-12 dargestellt.

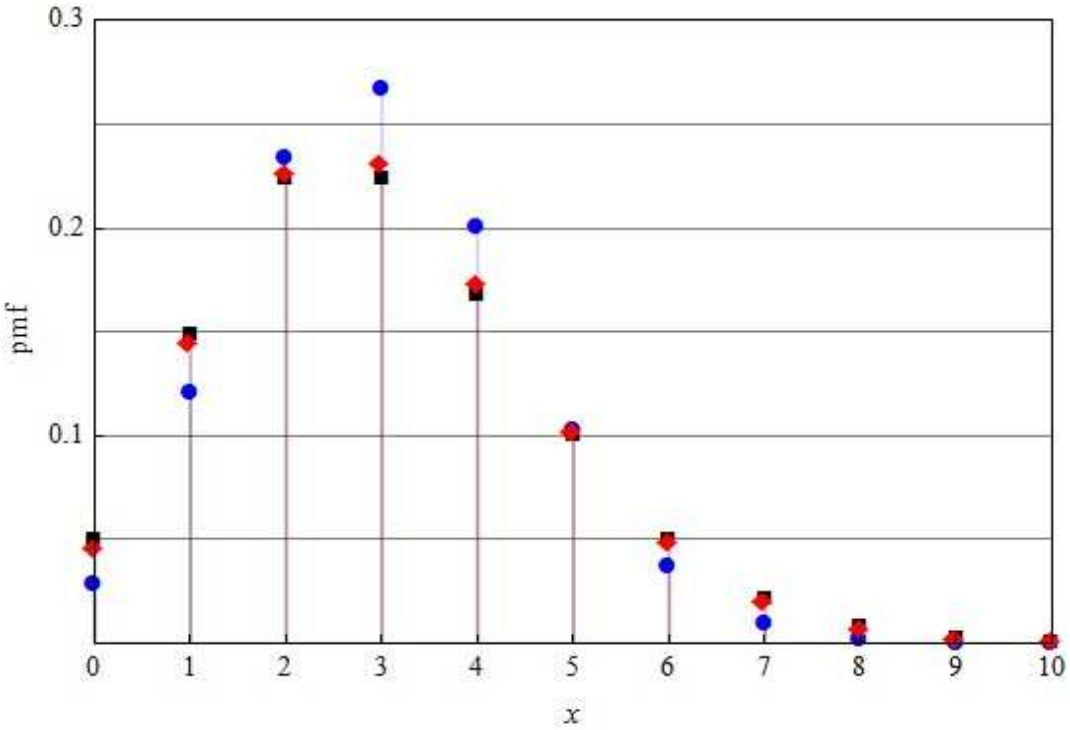


Abbildung C-11: Annäherung der Binomialverteilung an eine POISSON-Verteilung; schwarz: X ~ Poi(3); blau: X ~ Bin(10; 0,3); rot: X ~ Bin(50; 0,06)

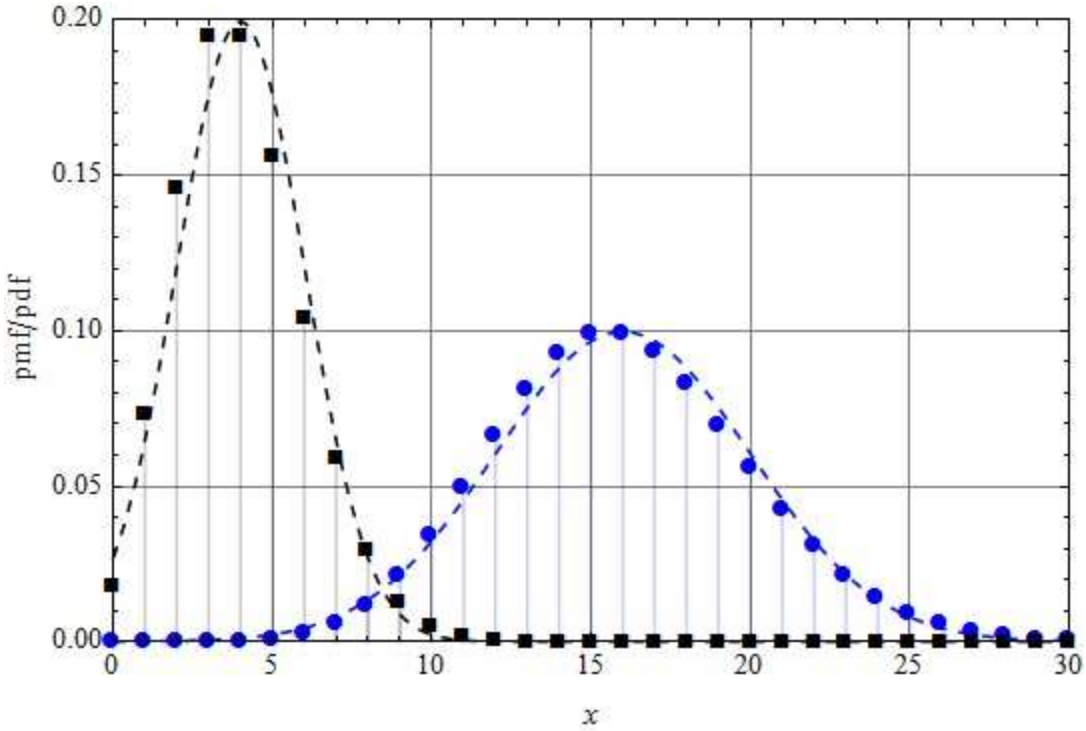


Abbildung C-12: Annäherung der POISSON-Verteilung an eine Normalverteilung; schwarz: X ~ Poi(4) und X ~ N(4,2) (gestrichelt); blau: X ~ Poi(16) und X ~ N(16,4) (gestrichelt)

C.5.5 Negative Binomialverteilung X ~ NBin(r,p) oder NegB(α,β) oder NB(λ,δ)

Nach der klassischen Definition der Negativen Binomialverteilung beschreibt diese die Anzahl X von erfolglosen iid Bernoulli-Versuchen, die eine Erfolgswahrscheinlichkeit p haben, bis zum Eintreten des r-ten Erfolges im (X+1)-ten Versuch. Sie ist damit gleich der Summe von r Zufallsgrößen, die einer geometrischen Verteilung Geo(p) folgen (siehe Abschnitt C.5.2). Die pmf der Negativen Binomialverteilung ist:

$$f_{NBin}(x \mid r,p) = \frac{(r+x-1)!}{x! \cdot (r-1)!} \cdot p^r \cdot (1-p)^x, \quad x = 0, 1, 2, \ldots; 0 < p < 1. \tag{C-85}$$

Erwartungswert und Varianz sind:

$$E_{NBin}(X \mid r,p) = \frac{r \cdot (1-p)}{p}; \quad Var_{NBin}(X \mid r,p) = \frac{r \cdot (1-p)}{p^2}. \tag{C-86}$$

Für die Schiefe und die Kurtosis ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\gamma_1 = \frac{2-p}{\sqrt{r \cdot (1-p)}}; \quad \gamma_2 = 3 + \frac{6}{r} + \frac{p^2}{r \cdot (1-p)}. \tag{C-87}$$

In den Gl. (C-85) bis (C-87) ist r eine natürliche Zahl. Die so definierte Negative Binomialverteilung wird auch als PASCAL-Verteilung bezeichnet (siehe z. B. [JOH 05], [LEEM 08]).

Für die probabilistische Modellierung der Anzahl selten auftretender Ereignisse ist eine zweite Bedeutung der Negativen Binomialverteilung von Interesse, die ihren engen Zusammenhang mit der POISSON-Verteilung verdeutlicht. In vielen Fällen kann man nicht davon ausgehen, dass in einer Population für alle Individuen die gleiche Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auftreten seltener Ereignisse vorliegt, wie sie durch eine POISSON-Verteilung mit festem Parameter λ (der mittleren Anzahl von Ereignissen pro Zeiteinheit) beschrieben wird. In [GRE 20] wurde angenommen, dass Risiken für Individuen zwar mit bestimmten λ-Werten beschrieben werden können, dass diese in einer Population jedoch selbst einer statistischen Verteilung unterliegen. Geht man hierzu von einer Gammaverteilung aus, d. h. λ ~ Ga(α,β), so resultiert für die gesamte Population zur Anzahl X selten auftretender Ereignisse die Wahrscheinlichkeitsmassenfunktion (pmf):

$$f_{NegB}(x \mid \alpha,\beta) = \int_0^\infty f_{Poi}(x \mid \lambda) \cdot f_{Ga}(\lambda \mid \alpha,\beta) d\lambda = \left(\frac{1}{1+\beta}\right)^\alpha \cdot \left(\frac{\beta}{1+\beta}\right)^x \cdot \frac{\Gamma(x+\alpha)}{x! \cdot \Gamma(\alpha)}, \quad \alpha, \beta > 0, \tag{C-88}$$

wobei Γ(α) die Gammafunktion gemäß Gl. (C-8) bezeichnet. Setzt man in Gl. (C-88) p = 1/(1+β), so entspricht diese Verteilung eine Negativen Binomialverteilung NBin(α,p), in der α nun jedoch eine beliebige positive reelle Zahl sein kann. Ist α eine natürliche Zahl, dann ist NegB(α,β) = NBin(α,1/(1+β). Für den Mittelwert und die Varianz der diskreten Zufallsgröße X ~ NegB(α,β) folgt:

$$E_{NegB}(X \mid \alpha,\beta) = \alpha \cdot \beta; \quad Var_{NegB}(X \mid \alpha,\beta) = \alpha \cdot \beta \cdot (1+\beta). \tag{C-89}$$

Ihre Schiefe und Kurtosis folgen aus Gl. (C-87) mit den Substitutionen $r \to \alpha$ und $p \to 1/(1+\beta)$.

Berücksichtigt man gemäß Gl. (C-30) die Konvergenz der Gammaverteilung $Ga(\alpha,\beta)$ zu einer DIRAC'schen δ-Funktion für $\alpha \to \infty$, $\beta \to 0$ mit $\alpha \cdot \beta = \lambda = \text{const.}$, so ist klar, dass die Negative Binomialverteilung $NegB(\alpha,\beta)$ in diesem Grenzfall zu einer POISSON-Verteilung $Poi(\lambda)$ wird:

$$\lim_{\substack{\alpha \to \infty,\, \beta \to 0 \\ \alpha \cdot \beta = \lambda = \text{const}}} f_{NegB}(x \mid \alpha, \beta) = f_{Poi}(x \mid \lambda). \qquad \text{(C-90)}$$

Dieser Übergang ist in Abbildung (C-13) veranschaulicht.

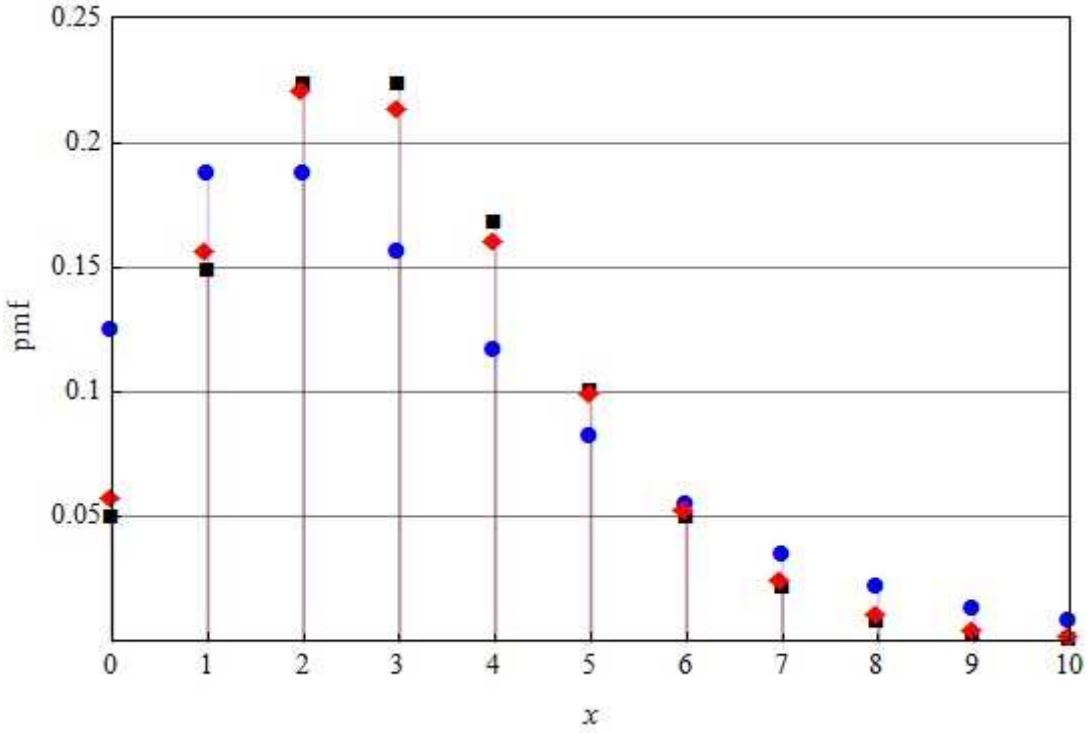


Abbildung C-13: Annäherung der Negativen Binomialverteilung an eine POISSON-Verteilung; schwarz: X ~ Poi(3); blau: X ~ NegB(3; 1); rot: X ~ NegB(30; 0,1)

Die Negative Binomialverteilung stellt somit eine Verallgemeinerung der POISSON-Verteilung für diskrete Zufallsgrößen dar, deren Varianz größer als ihr Erwartungswert ist. Die Interpretation als Mischung von POISSON-Verteilungen mit Gammaverteilung des POISSON-Parameters ist ähnlich zu der in Abschnitt C.3.6 angesprochenen Verallgemeinerung der Exponentialverteilung zur LOMAX-Verteilung. Zu weiteren Modellen der Genesis der Negativen Binomialverteilung siehe [JOH 05].

Ausgehend von Gl. (C-90) bietet sich eine Parametrisierung der Negativen Binomialverteilung an, die auf der Substitutionen $\alpha \cdot \beta = \lambda$ basiert, wobei außerdem der Parameter α durch $\delta = 1/\alpha$ ersetzt wird. Für die mit (λ,δ) parametrisierte Negative Binomialverteilung wird die Bezeichnung $X \sim NB(\lambda,\delta)$ verwendet. Aus Gl. (C-88) resultiert folgende pmf:

$$f_{NB}(x\,|\,\lambda,\delta) = \left(\frac{1}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{1/\delta} \cdot \left(\frac{\delta\cdot\lambda}{1+\delta\cdot\lambda}\right)^{x} \cdot \frac{\Gamma(x+1/\delta)}{x!\cdot\Gamma(1/\delta)}, \quad \lambda,\ \delta > 0, \tag{C-90}$$

Für den Erwartungswert und die Varianz von X resultieren aus Gl. (C-90) die Beziehungen

$$E_{NB}(X\,|\,\lambda,\delta) = \lambda\,; \qquad Var_{NB}(X\,|\,\lambda,\delta) = \lambda\cdot(1+\delta\cdot\lambda)\,. \tag{C-91}$$

Vergleicht man Gl. (C-91) mit den analogen Beziehungen für die POISSON-Verteilung in Gl. (C-83), so ist klar, dass der Parameter δ die Vergrößerung der Varianz der Negativen Binomialverteilung gegenüber der POISSON-Verteilung charakterisiert. Deshalb wird $\delta = 1/\alpha$ als Dispersionsparameter der Negativen Binomialverteilung bezeichnet [CLA 89], [PIE 90]. Er erfasst die erhöhte Dispersion für Realisierungen aus der NB-Verteilung im Vergleich zu Stichproben, die durch einen POISSON-Prozess erzeugt wurden. Analog zu Gl. (C-90) ergibt sich die POISSON-Verteilung als Grenzfall:

$$\lim_{\delta\to 0} f_{NB}(x\,|\,\lambda,\delta) = \frac{e^{-\lambda}\cdot\lambda^{x}}{x!} = f_{Poi}(x\,|\,\lambda)\,. \tag{C-90}$$

| Verantwortung für Mensch und Umwelt |

Kontakt:
Bundesamt für Strahlenschutz
Postfach 10 01 49
38201 Salzgitter
Telefon: + 49 30 18333 - 0
Telefax: + 49 30 18333 - 1885
Internet: www.bfs.de
E-Mail: ePost@bfs.de
Gedruckt auf Recyclingpapier aus 100 % Altpapier.

Bundesamt für Strahlenschutz