

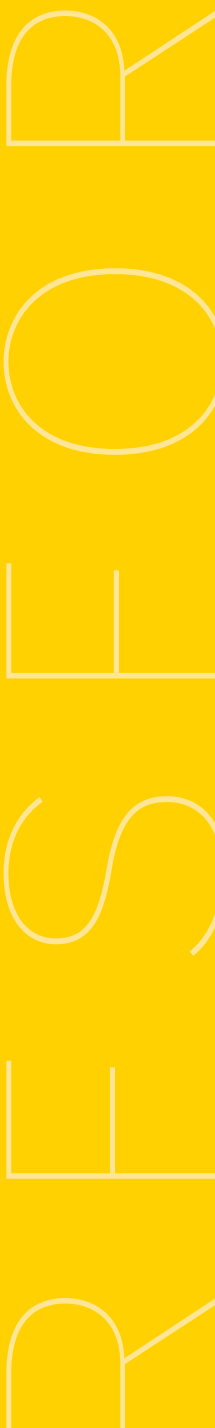


RESSORTFORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung (InvEnd II)

FKZ 4723E03310

AUFTRAGNEHMER:IN
CSD Ingenieure AG, Aarau, Schweiz



Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung (InvEnd II)

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

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

BASE-RESFOR-001/26

Bitte beziehen Sie sich beim Zitieren dieses Dokumentes immer auf folgende URN:
urn:nbn:de:0221-2026021759073

Berlin, September 2025

Impressum

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

RESSORTFORSCHUNGSBERICHTE ZUR
SICHERHEIT DER NUKLEAREN ENTSORGUNG

Auftragnehmer:in
CSD Ingenieure AG, Aarau, Schweiz

030 184321-0
www.base.bund.de

Stand: September 2025

GZ: A 1 – BASE – BASE23103/4723E03310 Invend II

CSD INGENIEURE AG

Schachenallee 29A

CH-5000 Aarau

+41 62 834 44 00

aarau@csd.ch

www.csd.ch

CSDINGENIEURE 
VON GRUND AUF DURCHDACHT



Forschungsvorhaben InvEnd II

Umgang mit der Datengrundlage des Inventars
radioaktiver Abfälle für die Endlagerung

Abschlussbericht 19. Februar 2026

FKZ 4723E03310 / DCH013822

Disclaimer

CSD bestätigt hiermit, dass bei der Abwicklung des Forschungsvorhabens die Sorgfaltspflicht angewendet wurde, die Ergebnisse und Schlussfolgerungen auf dem derzeitigen und im Bericht dargestellten Kenntnisstand beruhen und diese nach den anerkannten Regeln des Fachgebietes und nach bestem Wissen ermittelt wurden.

CSD geht davon aus, dass

- ihr seitens des Auftraggebers oder von ihm benannter Drittpersonen richtige und vollständige Informationen und Dokumente zur Auftragsabwicklung zur Verfügung gestellt wurden,
- von den Arbeitsergebnissen nicht auszugsweise Gebrauch gemacht wird, und
- die Arbeitsergebnisse nicht unüberprüft für einen nicht vereinbarten Zweck oder auf geänderte Verhältnisse übertragen werden.

Andernfalls lehnt CSD gegenüber dem Auftraggeber jegliche Haftung für dadurch entstandene Schäden ausdrücklich ab.

Macht ein Dritter von den Arbeitsergebnissen Gebrauch oder trifft er darauf basierende Entscheidungen, wird durch CSD jede Haftung für direkte und indirekte Schäden ausgeschlossen, die aus der Verwendung der Arbeitsergebnisse allenfalls entstehen.

Impressum

Projektbeteiligte

Rainer Schwarz (Projektleitung, Geophysiker, Dr. rer. nat.)

Marie Voss (Stellvertretende Projektleitung, Geophysikerin, M. Sc.)

Carme Chaparro (Projektmitarbeit, Hydrogeologin, PhD)

Sebastian Röthlin (Projektmitarbeit, Erdsystemwissenschaftler, M. Sc.)

Carl Philipp Krüger (Projektmitarbeit, Umweltschutztechniker, Dipl.-Ing.)

Liane Schlickerrieder (Lektorat, Hydrogeologin, M. Sc.)

Andreas Poller (Koreferat, Geoökologe, Dipl.)

CSD INGENIEURE AG

Dr. Rainer Schwarz

Senior Projektleiter Hydrogeologie,

Endlagerprojekte und Sicherheitsanalysen

Nicolas Hubschwerlen

Leiter Abteilung Grundwassermodellierung und

Sicherheitsanalysen

Das diesem Bericht zu Grunde liegende Forschungsvorhaben "Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung (InvEnd II)" (FKZ 4723E03310) wurde im Auftrag des Bundesamts für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung, durchgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Zusammenfassung

Im Forschungsvorhaben (FoV) „Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager – InvEnd“ (Rauscher et al., 2023) wurden umfassende Anforderungen an das Inventarmodell zur Durchführung von vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zusammengestellt und begründet. Zudem wurden erste qualitative Überlegungen in Bezug auf die Ungewissheit der Eingangsdaten und der Modellansätze des Inventarmodells angestellt.

Auf dieser Grundlage werden im vorliegenden FoV „Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung – InvEnd II“ die Anforderungen und Aussagen zum Inventarmodell im Hinblick auf Aspekte der Qualitätssicherung und -kontrolle (QA/QC) durch die Aufsichtsbehörde vertieft betrachtet. Dazu werden etablierte Methoden zum Umgang mit Ungewissheiten und zur Verifikation und Validierung des Inventarmodells durch Auswertung von endlagerspezifischer wie auch allgemeiner technisch-wissenschaftlicher Literatur zusammengestellt.

Zunächst wird ein genereller Überblick über derzeit verwendete Methoden zur Analyse der Fortpflanzung von Ungewissheiten und der Sensitivität von Eingangsdaten gegeben. Im Detail sind dies Methoden zur Gewichtung der Eingangsparameter („Ranking“), Methoden zur Identifizierung von Eingangsparametern, die einen dominanten Einfluss auf die Ausgangsdaten haben („Screening“), sowie Methoden zur Bestimmung des Bereiches von Eingangsdaten, der signifikante, z. B. extreme, Ausgangsdaten erzeugt („Mapping“).

Die wichtigsten der betrachteten Methoden werden an einem einfachen Beispiel illustriert und auf den Inventardatensatz zur vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben angewendet, um die Charakterisierung der Ausgangsparameter zu demonstrieren. Als Ausgangsparameter werden hier die Gesamtaktivität, Radiotoxizität, d. h. die Ingestionsdosis für eine erwachsene Person, und die Nachzerfallsleistung diskutiert.

Aus der Vielzahl der Methoden zur Sensitivitätsanalyse und der Analyse der Fortpflanzung der Ungewissheit werden derzeit in Bezug auf die Fragestellungen rund um ein Inventarmodell üblicherweise grafische, korrelations- und regressionsbasierte sowie varianzbasierte Methoden angewandt. Die gezeigten Methoden basieren meist auf einer Stichprobe, welche die zum Zeitpunkt der Erstellung der jeweiligen vSU bestehenden Ungewissheiten systematisch erfassen und es zudem erlauben soll, Verknüpfungen von Ungewissheiten untereinander zu identifizieren. Die Methoden, die in diesem FoV als geeignetste Methoden zur Darstellung der Beziehungen zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten eines Inventarmodells identifiziert wurden sind auch jene, die gemäß Literaturstudie am weitesten verbreitet sind.

Die Möglichkeiten zur Verifikation und Validierung von Aussagen bezüglich der Ausgangsdaten des Inventarmodells, sowie einzelner Eingangsdaten, werden anhand einer Literaturstudie aufgezeigt.

Summary

In the research project InvEnd (Importance of the inventory of radioactive waste in the selection of a repository site) (Rauscher et al., 2023), comprehensive requirements for the inventory model when conducting preliminary safety analyses were compiled and motivated according to the current state of the art in science and technology. In addition, initial qualitative considerations were made regarding the uncertainty of the input data and the modelling approaches of the inventory model.

On this basis, the present research project InvEnd II (Handling the data basis of the inventory of radioactive waste for final disposal) takes a closer look at the requirements and statements concerning the inventory model with regard to aspects of quality assurance and quality control (QA/QC) by the regulatory authority. To this end, established methods for dealing with uncertainties and for verifying and validating the inventory model are compiled by evaluating repository specific as well as general technical and scientific literature.

Firstly, a general overview is given of the methods in use today to analyse the propagation of uncertainties and the sensitivity of input data. More specifically, these are methods for weighting the input parameters („ranking”), methods for identifying input parameters that have a dominant influence on the output data („screening”), and methods for determining the range of input data that generates significant, e.g. extreme, output data („mapping”).

The most relevant of the methods considered are illustrated using a simple example and applied to the inventory data set for the preliminary safety analysis for the Gorleben site in order to demonstrate the characterisation of the output parameters. The output parameters discussed here are the total activity, radiotoxicity, i.e. the ingestion dose for an adult person, and the decay power. Of the numerous methods for sensitivity analysis and analysis of uncertainty propagation, currently graphical, correlation-based, regression-based and variance-based methods are commonly used in relation to the issues surrounding an inventory model. The methods shown are usually based on a sample that systematically captures the uncertainties existing at the time when the respective preliminary safety analysis is conducted and is also designed to identify relationships between uncertainties. The methods identified in this research project as most suitable for illustrating the relationships between the input and output data of an inventory model are also those that are most widely used according to the literature review.

The options for the verification and validation of statements regarding the output data of the inventory model, as well as individual input data, are shown on the basis of a literature review.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	v
Summary	vi
Inhaltsverzeichnis.....	vii
Abbildungsverzeichnis.....	x
Tabellenverzeichnis.....	xv
Abkürzungsverzeichnis.....	xvii
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Zielsetzung.....	2
1.3 Begriffsbestimmungen	2
1.4 Übergeordnetes Vorgehen und Aufbau des Berichts	3
2 Grundlagen	5
2.1 Vorgaben und Anforderungen	5
2.2 Umgang mit Ungewissheiten	5
2.2.1 Quellen von Ungewissheiten	5
2.2.2 Klassifizierung von Ungewissheiten	7
2.2.3 Darstellung von Ungewissheiten	7
2.2.4 Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse.....	9
2.2.5 Qualitätssicherung und -kontrolle	10
2.3 Definition und Abgrenzung Inventarmodell.....	11
3 Ungewissheit der Eingangsdaten und Modellansätze	13
3.1 Eingangsparameter.....	13
3.1.1 Zugängliche Informationen	13
3.1.2 Klassifizierung nach der Datenherkunft.....	16
3.2 Umgang mit Ungewissheiten in den Eingangsdaten	18
3.2.1 Zugängliche Informationen	18
3.2.2 Gruppierung	21
3.3 Modellansätze und deren Ungewissheiten	23
3.3.1 Zugängliche Informationen	24
3.4 Abgeleitetes Vorgehen in der Qualitätssicherung und -kontrolle	26
3.4.1 Eingangsparameter Typ A.....	26

3.4.2	Eingangsparameter Typ B	27
4	Sensitivität der Ausgangsdaten auf bestimmte Eingangsdaten und Modellansätze	29
4.1	Festlegung von Stichproben	29
4.1.1	Design	29
4.1.2	Umfang	34
4.2	Methoden	38
4.2.1	Übersicht	38
4.2.2	Grafische Methoden	45
4.2.3	Korrelations- und regressionsbasierte Methoden	55
4.2.4	Varianzbasierte Methoden	63
4.2.5	Weitere Methoden	66
4.3	Anwendung auf Ziel- und Ausgangsgrößen	68
4.3.1	Modellerkundung	69
4.3.2	Qualitatives Ranking der Einflussfaktoren	76
4.3.3	Quantitatives Ranking der Einflussfaktoren	81
5	Ungewissheit der Ausgangsdaten	87
5.1	Methoden	87
5.1.1	Übersicht	87
5.1.2	Grafische Methoden	87
5.1.3	Methoden mit Nutzung einer Verteilungsfunktion	88
5.1.4	Methoden ohne Nutzung einer Verteilungsfunktion	89
5.2	Anwendung auf Ziel- und Ausgangsgrößen	90
5.2.1	Qualitative und quantitative Aussagen	91
5.2.2	Aussagen zu unterschiedlichen Datenquellen	101
6	Verifikation und Validierung	115
6.1	Definitionen und Abgrenzungen	115
6.2	Verifikation	115
6.2.1	Methoden	115
6.2.2	Anwendung	116
6.3	Validierung	119
6.3.1	Methoden	119
6.3.2	Anwendung	120
7	Synthese und Schlussbemerkungen	125
8	Referenzen	127

9 Glossar 133

Anhang A Literaturrecherche zu den Eingangsparametern I

A.1 Allgemeine Charakterisierung.....	I
A.1.1 Anzahl Behälter / Gebinde.....	I
A.1.2 Brennstabanzahl (im Beladungszustand).....	I
A.1.3 Datum der Entnahme aus dem Reaktorkern (Entladung)	II
A.1.4 Brennelementtyp.....	III
A.1.5 Klassifizierung der abgebrannten BE	III
A.1.6 Abfallkategorie	III
A.2 Chemische Charakterisierung	IV
A.2.1 (Komponentenspezifische) chemische Zusammensetzung	IV
A.3 Geometrische Charakterisierung	IV
A.3.1 Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe	IV
A.3.2 Geometrie (innere und äußere) und Form.....	V
A.3.3 (Anfangs-) Volumen.....	V
A.3.4 Freies Volumen im Brennstabplenum	VI
A.4 Physikalische Charakterisierung.....	VI
A.4.1 Gesamtmasse.....	VI
A.4.2 Brennstoffdichte	VI
A.4.3 Abfalldichte	VII
A.4.4 Halbwertszeit der Nuklide	VII
A.4.5 Thermische Kennwerte (Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient)	VIII
A.4.6 Mechanische Kennwerte	VIII
A.5 Radiologische Charakterisierung	VIII
A.5.1 (Komponentenspezifisches) Radionuklidinventar.....	VIII
A.5.2 Gesamtaktivität	X
A.5.3 Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide	XII
A.5.4 (Ursprünglicher) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung	XII
A.5.5 Abbrand des Kernbrennstoffs	XIII
A.5.6 Strahlungsdosisleistung.....	XIV
A.6 Stoffliche Charakterisierung.....	XIV
A.6.1 Komponentenspezifische Zusammensetzung.....	XIV
A.6.2 Inertes Füllgas (Brennstab)	XV
A.6.3 Spaltstoffe und ihre isotoopenweise Zusammensetzung	XVI
A.6.4 Masse Schwermetall.....	XVI
A.7 Thermische Charakterisierung.....	XVI
A.7.1 Nachzerfallsleistung.....	XVI

A.7.2	Abklingzeit / Zwischenlagerungszeitraum	XVII
Anhang B	Historie der Entwicklung von Methoden und Modellansätzen.....	XIX
Anhang C	Codes und Beispiele.....	XXI
C.1	Codes.....	XXI
C.1.1	OpenTURNS.....	XXI
C.1.2	Radioactivedecay	XXI
C.1.3	UQpy	XXII
C.2	Konversionen	XXII
C.2.1	Aktivität – Radiotoxizität.....	XXII
C.2.2	Aktivität – Nachzerfallsleistung	XXII
C.3	Beispiele.....	XXII
C.3.1	Illustrationsbeispiel	XXII
C.3.2	Anwendungsbeispiel.....	XXIII
Anhang D	QA-/QC-Maßnahmen.....	XXV

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1	Klassifizierung der Eingangsparameter gemäß ihrer Datenherkunft.....	16
Abbildung 2	Aufteilung der Eingangsparameter gemäß ihrer Datenherkunft.....	18
Abbildung 3	Aufteilung der Eingangsparameter gemäß der Art und Weise der Bestimmung der Ungewissheiten.....	23
Abbildung 4	Verdeutlichung der Begriffe Auflösung, Präzision und Richtigkeit (Korrektheit) nach DIN 55350-13:1987-07 und DIN 1319-1:1995-01.....	27
Abbildung 5	Beispielhafte Darstellung eines vollständigen Versuchsplans (Full Factorial Design) mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern.....	30
Abbildung 6	Beispielhafte Darstellung einer Monte-Carlo-Stichprobe mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (links: Gleichverteilung der Parameter, rechts: Normalverteilung der Parameter).....	31
Abbildung 7	Beispielhafte Darstellung einer Latin-Hypercube-Stichprobe mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (links: zentriertes Vorgehen, rechts: zufallsverteiltes Vorgehen).....	32
Abbildung 8	Beispielhafte Darstellung eines raumfüllenden Stichprobendesigns mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (basierend auf einem LHS mit einem L^2 Abweichungskriterium)	33
Abbildung 9	CDF der initialen Aktivität der Uranisotope U-234, U-235 und U-236 als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem MCS	35
Abbildung 10	Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der initialen Aktivität für die Uranisotope U-234, U-235 und U-236 in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem MCS	35
Abbildung 11	CDF der initialen Aktivität der Uranisotope U-234, U-235 und U-236 als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem zentrierten LHS	36

Abbildung 12	Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der initialen Aktivität für die Uranisotope U-234, U-235 und U-236 in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem zentrierten LHS	36
Abbildung 13	CDF der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem MCS der initialen Aktivität	37
Abbildung 14	Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem MCS der initialen Aktivität.....	37
Abbildung 15	CDF der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem zentrierten LHS der initialen Aktivität.....	38
Abbildung 16	Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem zentrierten LHS der initialen Aktivität.....	38
Abbildung 17	Charakterisierung unterschiedlicher Formen der Abhängigkeiten zwischen zwei Datensätzen und der erforderlichen mathematischen Methode zur Identifizierung dieser Abhängigkeiten (Diem et al., 2024).....	40
Abbildung 18	Zeitliche Entwicklung der Masse (links) und Aktivität (rechts) der Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)	46
Abbildung 19	Respective-Contribution-Plot der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)	46
Abbildung 20	Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1).....	47
Abbildung 21	Box-Plot der statistischen Kennwerte der Eingangsdaten, hier initiales Masseninventar der Radionuklide	49
Abbildung 22	Streudiagramme der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) zu den Zeitpunkten 0,1 Jahre, 20 Jahre und 300 000 Jahre (von oben nach unten).....	50
Abbildung 23	Cobweb-Plot der initialen Inventare und der Gesamtaktivität des Beispiels (Anhang C.3.1) zu den Zeitpunkten 20 Jahre (links) und 300 000 Jahre (rechts)	51
Abbildung 24	CSM-Plots der Gesamtaktivität für Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1).....	52
Abbildung 25	CUSUNORO-Plots der Gesamtaktivität für die Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1).....	54
Abbildung 26	Tornado-Plots der Gesamtaktivität bei konsistenter Änderung des Anfangsinventars einzelner Radionuklide.....	55
Abbildung 27	Beispielhafte Zusammenhänge zwischen zwei Zufallsvariablen und daraus abgeleitete Funktionsgraphen: positiv linear (oben links), positiv nicht-linear (oben rechts), sinusförmig (unten links), und unabhängig (unten rechts)	56
Abbildung 28	Korrelationskoeffizienten nach Pearson (links), Spearman (mittlere Spalte) und Kendall (rechts) des anfänglichen Inventars der Nuklide des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität zu verschiedenen Zeitpunkten.....	58
Abbildung 29	Partialkorrelationskoeffizient (PCC, links) des anfänglichen Inventars der Nuklide des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität zu verschiedenen Zeitpunkten im Vergleich mit dem Korrelationskoeffizient nach Pearson (rechts)	60
Abbildung 30	Standardisierter Regressionskoeffizient (links) und standardisierter Rangregressionskoeffizient (mittlere Spalte) zwischen den anfänglichen Nuklidmassen des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität für verschiedene Zeitpunkte im Vergleich mit dem Korrelationskoeffizient nach Pearson (rechts)	62
Abbildung 31	Sobol' Index erster Ordnung der Anfangsinventare an U-238, Pb-210 und Po-210 aus dem Illustrationsbeispiel für die Gesamtaktivität des Inventars für den Zeitpunkt 20 Jahre	63

Abbildung 32	Streudiagramme zur Illustration der Unterschiede zwischen linearen Korrelationsmodellen und der varianzbasierten Methode EASI anhand des Illustrationsbeispiels.....	65
Abbildung 33	Darstellung der Zusammenhänge im Morris-Diagramm für den Mittelwert der absoluten Werte μ^* und die Standardabweichung σ der Elementareffekte.....	67
Abbildung 34	Mittelwert der absoluten Elementareffekte μ^* und Standardabweichung der Elementareffekte σ aus der Analyse des Illustrationsbeispiels mit der Morris-Methode für den Zeitpunkt 20 Jahre	68
Abbildung 35	Box-Plot der Eingangsdaten (RN-Inventar) für das Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)	69
Abbildung 36	Zeitliche Entwicklung der Gesamtaktivität und der nuklidspezifischen Aktivität pro Brennstoffmasse des Inventars der VSG (Anhang C.3.2).....	70
Abbildung 37	Zeitliche Entwicklung der gesamten und der nuklidspezifischen Radiotoxizität pro Brennstoffmasse des Inventars der VSG (Anhang C.3.2).....	70
Abbildung 38	Zeitliche Entwicklung der gesamten und der nuklidspezifischen Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse des Inventars der VSG (Anhang C.3.2).....	71
Abbildung 39	Cobweb-Plots für das Anfangsinventar einer Auswahl von Radionukliden und der Gesamtaktivität (oben links), der gesamten Radiotoxizität (oben rechts) und der gesamten Nachzerfallsleistung (unten) des Inventars der VSG (Anhang C.3.2) jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren	72
Abbildung 40	Cobweb-Plots für das Anfangsinventar einer Auswahl von Radionukliden und der Gesamtaktivität (oben links), der gesamten Radiotoxizität (oben rechts) und der gesamten Nachzerfallsleistung (unten) des Inventars der VSG (Anhang C.3.2) jeweils pro Brennstoffmasse nach 300 000 Jahren	73
Abbildung 41	Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)	74
Abbildung 42	Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Radiotoxizität pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)	75
Abbildung 43	Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)	76
Abbildung 44	Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse	77
Abbildung 45	Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)	77
Abbildung 46	Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der gesamten Radiotoxizität pro Brennstoffmasse	78
Abbildung 47	Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der gesamten Radiotoxizität pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2).....	78
Abbildung 48	Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der gesamten Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse	79
Abbildung 49	Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der gesamten Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2).....	79

Abbildung 50	CUSUNORO-Plots der Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeitpunkte von 20 Jahren (oben) und 300 000 Jahren (unten)	80
Abbildung 51	Morris-Kenngrößen μ^* und σ der Gesamtaktivität (oben links), der Radiotoxizität (oben rechts) und der Nachzerfallsleistung (unten) jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren für das anfängliche RN-Inventar	81
Abbildung 52	Übersicht über die Korrelationskoeffizienten (Pearson, Spearman, Kendall) der 19 variierten anfänglichen RN-Inventare bezogen auf die spezifische Gesamtaktivität für die Zeitpunkte 20 Jahre (oben) und 300 000 Jahre (unten)	82
Abbildung 53	Übersicht über die Korrelations- und Regressionskoeffizienten (Pearson, Standardregression und Partialkorrelation) der 19 variierten anfänglichen RN-Inventare bezogen auf die spezifische Gesamtaktivität für die Zeitpunkte 20 Jahre (oben) und 300 000 Jahre (unten)	83
Abbildung 54	DIM-Darstellung einer Auswahl von RN aus dem anfänglichen Inventar der VSG (Anhang C.3.2) zur Verdeutlichung der Ergebnisse der Korrelationskoeffizienten, speziell des PCC	84
Abbildung 55	EASI-Sensitivitätsindices der anfänglichen RN-Inventare mit bekannter Ungewissheit bezogen auf die Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Inventars jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren	84
Abbildung 56	Sobol' Index der anfänglichen RN-Inventare mit bekannter Ungewissheit bezogen auf die Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Inventars jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren	85
Abbildung 57	Tornado-Plots der anfänglichen RN-Inventare mit bekannter Ungewissheit bezogen auf die Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Inventars jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren (oben) und 300 000 Jahren (unten)	85
Abbildung 58	Horsetail-Diagramm der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)	88
Abbildung 59	Histogramm und CDF der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeiten 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts)	88
Abbildung 60	Histogramm der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeiten 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts) mit angepasster Normalverteilung (violett), dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)	89
Abbildung 61	Empirische CDF der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeitpunkte 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts) mit dem Medianwert (schwarz) und den vertikalen Linien des 1%-, 16%-, 84%- und 99%-Quantils (gestrichelt, grau), welche das 68%- und 98%-Vertrauensintervall angeben	90
Abbildung 62	Horsetail-Diagramme der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)	91
Abbildung 63	Histogramme der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit angepasster Normalverteilung (violett), dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)	93
Abbildung 64	CDF der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit der Annahme einer Normalverteilung für die Ungewissheit der Eingangsdaten und den 1%, 16%, 84% und 99% Quantilen der Ausgangsdaten als horizontale bzw. vertikale Linien (gestrichelt, grau)	95

Abbildung 65	Histogramm der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) Jahre angepasster Normalverteilung (violett) bei gleichverteilten Eingangsdaten, dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)	97
Abbildung 66	CDF der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit der Annahme einer Gleichverteilung für die Ungewissheit der Eingangsdaten und den 1%, 16%, 84% und 99% Quantilen der Ausgangsdaten als horizontale bzw. vertikale Linien (gestrichelt, grau)	99
Abbildung 67	Vergleich aller Bandbreiten für die spezifische Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 (unten) Jahre.....	100
Abbildung 68	Vergleich der VSG-Datensätze DWR-MOX/-UO2 sowie SWR-MOX/-UO2. Links: Zeitlicher Verlauf der spezifischen Gesamtaktivität (oben), Radiotoxizität (Mitte), Nachzerfallsleistung (unten). Rechts: Zeitlicher Verlauf der prozentualen Differenz zwischen den verschiedenen Datensätzen.	102
Abbildung 69	Respective-Contribution-Plot für die spezifische Gesamtaktivität der VSG-Datensätze DWR-MOX (oben links), DWR-UO2 (oben rechts), SWR-MOX (unten links) und SWR-UO2 (unten rechts)	103
Abbildung 70	Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Gesamtaktivität zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2.....	105
Abbildung 71	Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Radiotoxizität zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2.....	106
Abbildung 72	Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Nachzerfallsleistung zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2.....	107
Abbildung 73	Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Gesamtaktivität (oben), Radiotoxizität (mittig) und Nachzerfallsleistung (unten) zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2.....	108
Abbildung 74	Verlauf der spezifischen Nachzerfallsleistung des RN-Inventars des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) auf der Grundlage von ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) der IAEA Datenbank und JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) (links) sowie die prozentuale Abweichung der Ausgangsdaten (rechts)	109
Abbildung 75	Respective-Contribution-Plot der spezifischen Nachzerfallsleistung basierend auf den Zerfallsenergien der IAEA gemäss ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011)	110
Abbildung 76	Respective-Contribution-Plot der spezifischen Nachzerfallsleistung basierend auf den Zerfallsenergien gemäß JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020)	110
Abbildung 77	Modifiziertes DIM mit Differenzen der spezifischen Nachzerfallsleistung aufgrund von Ungewissheiten im Modellansatz.....	112
Abbildung 78	Vergleich der Referenzwerte und Standardabweichungen der Nachzerfallsleistung aus diversen Codes	117
Abbildung 79	Vergleich des relativen Gammaflusses in einem Brennelement aus einem vereinfachten MCNP Modell mit jenem aus dem Originalmodell	118
Abbildung 80	Vergleich von Ergebnissen zweier Codes (RAST-K und STREAM) für die Nachzerfallsleistung von schwedischen DWR.....	119

Abbildung 81	Bestimmung von RN-spezifischen Aktivitäten am Abfallgebinde	120
Abbildung 82	Vergleich der normierten Gammaflüsse von DWR BE aus experimentellen Daten und numerischen Modellen	121
Abbildung 83	Vergleich von Modellergebnissen mit Messdaten aus SFCOMPO 2.0	122
Abbildung 84	Vergleich der Ergebnisse diverser Codes und Samples für Radionuklidkonzentrationen in Histogrammen (oben) und Nachzerfallsleistung in Box-Plots (unten).....	123
Abbildung 85	Darstellung des Einflusses der Leistungshistorie auf Nuklidkonzentrationen	124
Abbildung 86	Zerfallskette des illustrativen Beispiels	XXIII

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1	Zugängliche Informationen zu den Parameterwerten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)	15
Tabelle 2	Klassifizierung der Parameter des Inventarmodells nach Datenherkunft.....	17
Tabelle 3	Zugängliche Informationen zu den Ungewissheiten in den Parameterwerten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)	20
Tabelle 4	Klassifizierung der Parameter des Inventarmodells nach GUM	22
Tabelle 5	Zugängliche Informationen zu den Modellansätzen für die Bestimmung von Eingangsdaten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)	24
Tabelle 6	Zugängliche Informationen zu den Codes zur Bestimmung von Eingangsdaten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)	25
Tabelle 7	Überblick über die Methoden der Sensitivitätsanalyse zum Inventarmodell aus der Literaturstudie	42
Tabelle 8	Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman sowie der EASI-Sensitivitätsindex für den Zusammenhang zwischen den Eingangsparametern des erweiterten Illustrationsbeispiels mit den Ausgangsdaten (Masse von Po-210 nach Ablauf einer Standzeit).....	66
Tabelle 9	Geschätzte Parameter der Normalverteilungsfunktion für die Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für verschiedene Zeitpunkte.....	89
Tabelle 10	Quantile der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für verschiedene Zeitpunkte	90
Tabelle 11	Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung einer Normalverteilung zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten.....	92
Tabelle 12	Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung der Quantile zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten.....	94
Tabelle 13	Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung, des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung einer Normalverteilung zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten für gleichverteilte Eingangsdaten	96
Tabelle 14	Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung der Quantile zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten für gleichverteilte Eingangsdaten	98
Tabelle 15	Auflistung der 20 Radionuklide mit dem größten Unterschied im maximalen relativen Beitrag zur gesamten spezifischen Nachzerfallsleistung	111

Tabelle 16	Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman und Sobol' Index der spezifischen Nachzerfallsleistung nach 1, 10, 300, 5 000 und 50 000 Jahren des anfänglichen RN-Inventars von Rh-106, Ca-137, Am-241, Pu-240 und Pu-239.....	113
Tabelle 17	Möglichkeiten der Kombination von Computercodes, Systembeschreibung und deren Anfangs- und Randbedingungen in der Sicherheitsanalyse (IAEA, 2008).....	XIX
Tabelle 18	Einsatz der Methoden zur Sensitivitätsanalyse in der Sicherheitsanalyse (Swiler et al., 2021)	XX
Tabelle 19	Abschätzung der Ungewissheiten in den Mengenangaben verschiedener Radionuklide aus dem Vergleich von numerischen Simulationen des Abbrandes mit unterschiedlichen Codes - Abbildung 13 aus (Mertyurek and Gauld, 2016)	XXIV
Tabelle 20	Übersicht über mögliche QA-/QC-Maßnahmen für die in Abschnitt 3.1 dargelegten Eingangsparameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023).....	XXV

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erklärung
1D/2D	Ein-/zweidimensional
AB	Abfallbehälter
AG	Abfallgebinde
AK	Abfallkategorie (z. B. bestrahlte Brennelemente)
AKW	Atomkraftwerk
ALZ	Auflockerungszone im Wirtsgestein
ASTM	American Society for Testing and Materials
AT	Abfalltyp einer Abfallkategorie (z. B. Brennelemente aus DWR mit UO ₂ -Brennstoff)
ATA	Alphatoxische Abfälle (Schweiz)
AtEV	Atomrechtliche Entsorgungsverordnung
Atomgesetz	Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren
BA	Betriebsabfälle des HAW-Endlagers
BASE	Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung
BE	Bestrahlte Brennelemente
BE-F	Ausgediente Brennelemente aus Versuchs- und Prototyp-KKWs sowie Forschungsreaktoren
Bel V	Belgian Technical Safety Organization (TSO)
BE-ST	Strukturteile der bestrahlten Brennelemente
BGE	Bundesgesellschaft für Endlagerung
BS	Brennstab eines Brennelementes
BSD	Gruppe von freizügigen Open-Source-Lizenzen, die ursprünglich von der University of California, Berkeley, stammt
BSK[-Cu]	(Brennstab-)Kokille [mit Kupferummantelung]
BSR/TSR	Biologische/Thermochemische Sulfatreduktion
C/M(A)SH-Phase	Kalzium/Magnesium-(Aluminium)-Silikat-Hydrat-Phase
CDF	Kumulative Verteilungsfunktion (cumulative distribution function)
CE	Sorptionsmechanismus (cation exchange)
DFN	Diskretes Kluftnetzwerk (discrete fracture network)
DIM	Differential Importance Measure
DSSC	Disposal System Safety Case (generischer Sicherheitsnachweis in Großbritannien)
DWR	Druckwasserreaktor

Abkürzung	Erklärung
EBS	Technisches Barrierensystem (engineered barrier system)
EBW	Endlagerbergwerk
EDTA	Ethylendiamintetraazetat (technischer Komplexbildner)
EG	Einschlusswirksamer Gebirgsbereich in der Schweiz (Wirtsgestein und ein Teil der angrenzenden Gebirgseinheiten)
EGTS	Technisches (engineered) Gastransportsystem
EL	Endlager
ELB	Endlagerbehälter
ELG	Endlagergebinde
ELK	Einlagerungskammer
EndISiAnfV	Endlagersicherheitsanforderungsverordnung
EndISiUntV	Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung
ERAM	Endlager für radioaktive Abfälle Morsleben
ESK	Entsorgungskommission
FANC	Belgian Federal Agency for Nuclear Control
FFD	Vollständiger Versuchsplan (Full Factorial Design)
FoV	Forschungsvorhaben
GUM	Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen (Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement)
HAW	Hochradioaktive Abfälle (high active waste)
IAEA	International Atomic Energy Agency
ICRP	International Commission on Radiological Protection
InvEnd	Forschungsvorhaben: „Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager“ (Rauscher et al., 2023)
IQR	interquartile range
ISRAM	Informationssystem für radioaktive Materialien der Schweiz
LAW/MAW	Schwach- und mittlradioaktive Abfälle (low / medium active waste)
LHS	Latin Hypercube Sampling
MCS	Monte Carlo Sampling
MIRAM	Modellhaftes Inventar radioaktiver Materialien der Schweiz
MIT	Massachusetts Institute of Technology; hier bezeichnet es die freizügige Open-Source-Lizenz, die ursprünglich vom MIT definiert wurde
MOX	Mischoxid-Brennstoff
NEA	OECD Nuclear Energy Agency
NIRAS	Nationale instelling voor radioactief afval en verrijkte Splijtstoffen (Belgien)
OAT	Der Ansatz, nur einen Eingangsparameter unabhängig von den anderen zu verändern (one-at-a-time)

Abkürzung	Erklärung
OECD	Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung (Organisation for Economic Co-operation and Development)
ONDRAF	Organisme national des déchets radioactifs et des matières fissiles enrichies (Belgien)
ORIGEN	Oak Ridge Isotope GENeration
PDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (probability density function)
PCC	Partialkorrelationskoeffizient (Partial Correlation Coefficient)
PRCC	Partieller Rangkorrelationskoeffizient (Partial Rank Correlation Coefficient)
QA	Qualitätssicherung (quality assurance)
QC	Qualitätskontrolle (quality control)
RN	Radionuklid
SBS	Sonderbrennstab
SCALE	Standardised Computer Analyses for Licensing Evaluation
SKB	Svensk Kärnbränslehantering AB (Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co)
SRC	Standardisierter Regressionskoeffizient (Standard Regression Coefficient)
SRRC	Standardisierter Rangregressionskoeffizient (Standard Rank Regression Coefficient)
StandAG	Standortauswahlgesetz
UO2	Urandioxid-Brennstoff
VSG	Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben
vSU	Vorläufige Sicherheitsuntersuchung
WA	Abfälle aus der Wiederaufbereitung bestrahlter Brennelemente

1 Einleitung

1.1 Hintergrund

Die Suche nach einem Standort für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (HAW-Endlager) ist im Standortauswahlgesetz (*StandAG*, 2023) geregelt. Die schrittweise Einengung von sogenannten Untersuchungsräumen für potenzielle Endlagersysteme im Rahmen des Auswahlverfahrens erfolgt dabei u. a. anhand von vorläufigen Sicherheitsuntersuchungen (vSU) gemäß den Vorgaben der Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (*EndlSiUntV*) (*EndlSiAnfV* & *EndlSiUntV*, 2020). Hierbei wird geprüft, inwiefern ein Untersuchungsraum den in der Endlagersicherheitsanforderungsverordnung (*EndlSiAnfV*) (*EndlSiAnfV* & *EndlSiUntV*, 2020) zusammengestellten Anforderungen an die Sicherheit des HAW-Endlagers genügt.

Gemäß dem Nationalen Entsorgungsprogramm (BMU, 2015) sind folgende Abfallkategorien für die Entsorgung im HAW-Endlager vorgesehen:

- Bestrahlte Brennelemente aus kommerziellen Leistungsreaktoren (BE)
- Abfälle aus der Wiederaufarbeitung bestrahlter Brennelemente (WA)
- Abfälle aus Nicht-Leistungsreaktoren (Versuchs-, Demonstrations- und Forschungsreaktoren)

Hinzu kommen ggf. geringe Mengen schwach- und mittelradioaktive Abfälle (LAW/MAW), welche unmittelbar aus der Entsorgung der oben genannten Kategorien entstehen (z. B. Betriebsabfälle des HAW-Endlagers, vgl. § 21 (3) *EndlSiAnfV*).

In § 27 (3) *StandAG* wird verlangt, dass die einzelnen vSU auf der Grundlage abdeckender Annahmen zu Menge, Art und Eigenschaften der radioaktiven Abfälle durchgeführt werden. In § 4 (2) *EndlSiUntV* heißt es hierzu: *Zu den endzulagernden radioaktiven Abfällen müssen alle Informationen herangezogen werden, die für die Durchführung der jeweiligen [vSU] erforderlich sind. Hierzu gehören insbesondere Informationen zu Menge, Art, Zusammensetzung und Aktivität der radioaktiven Abfälle.* Eine Konkretisierung des Begriffs „abdeckende Annahmen“ in § 27 (3) *StandAG* erfolgt in der *EndlSiUntV* nicht. In der Begründung zu § 4 (2) *EndlSiUntV* wird jedoch ergänzt, dass Informationen zu den radioaktiven Abfällen die einzigen Informationen sind, welche für alle Untersuchungsräume im jeweiligen Verfahrensschritt gleich sind, wobei der im Verfahren zunehmende Detaillierungsgrad derart sein muss, dass keine systematischen Bevorzugungen oder Benachteiligungen für einzelne Untersuchungsräume entstehen.

Viele für die Durchführung von vSU erforderlichen Informationen zu den radioaktiven Abfällen liegen aus verschiedenen Gründen nicht als direkte Messdaten vor. Stattdessen sind Modellansätze zu entwickeln, anhand welcher die benötigten Informationen aus den vorhandenen Informationen (Eingangsdaten) nachvollziehbar und belastbar abgeleitet und ggf. abdeckende Annahmen für verschiedene Fragestellungen einer vSU getroffen werden können. Die Eingangsdaten, die Modellansätze und die daraus abgeleiteten Informationen (Ausgangsdaten) werden üblicherweise als modellhaftes Inventar oder Inventarmodell bezeichnet. Sicherheitsrelevante Zielgrößen einer vSU, welche gemäß Standortauswahlgesetz (*StandAG*, 2023) und Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (*EndlSiAnfV* & *EndlSiUntV*, 2020) zu betrachten sind, sind entweder direkte Ausgangsdaten des Inventarmodells oder können aus diesen und anderen Daten abgeleitet werden.

Im Forschungsvorhaben (FoV) „Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager – InvEnd“ (Rauscher et al., 2023) wurden umfassende Anforderungen an das Inventarmodell zur Durchführung von vSU nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zusammengestellt und begründet. Zudem wurden erste qualitative Überlegungen in Bezug auf die Ungewissheit der Eingangsdaten und der Modellansätze des Inventarmodells angestellt sowie die Auswirkungen dieser Ungewissheit auf verschiedene abgeleitete Größen im Sinne einer Sensitivitätsanalyse qualitativ diskutiert.

1.2 Zielsetzung

Das vorliegende FoV „Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung“ (InvEnd II) verfolgt das übergeordnete Ziel, die im Vorgängerprojekt (InvEnd) entwickelten Anforderungen und Aussagen zum Inventarmodell im Hinblick auf Aspekte der Qualitätskontrolle (QC¹) durch die Aufsichtsbehörde zu vertiefen. Aspekte der Qualitätssicherung (QA¹), an welcher die Aufsichtsbehörde in Kooperation mit der Vorhabensträgerin teilnehmen kann, werden ebenfalls berücksichtigt.

Hierzu sollen etablierte Methoden zum Umgang mit Ungewissheiten und zur Verifikation und Validierung von (Inventar-)Modellen durch Auswertung von endlagerspezifischer wie auch allgemeiner technisch-wissenschaftlicher Literatur zusammengestellt werden.

Die dargestellten Methoden zum Umgang mit Ungewissheiten sollen sich mit der Bewertung der Eingangsdaten des Inventarmodells (z. B. im Hinblick auf Konsistenz von Daten aus verschiedenen Quellen), der resultierenden Ungewissheit der Ausgangsdaten sowie der Identifizierung besonders relevanter Eingangsdaten und Modellansätze im Inventarmodell befassen. Sie werden zudem auf ihre Konformität mit den Vorgaben der EndlSiUntV zum Umgang mit Ungewissheiten und zur Darstellung des Abfallinventars geprüft.

1.3 Begriffsbestimmungen

Der Begriff „Ungewissheit“ wird in diesem FoV sehr breit gefasst und reicht von fehlenden Messdaten über fehlende Angaben zu Messfehlern über inkongruente Experteneinschätzungen bis hin zu Prognoseungenauigkeiten in Bezug auf erst in Zukunft entstehende Abfälle.

Es wird im Folgenden davon ausgegangen, dass ein Inventarmodell einen definierten Satz an vorhandenen Eingangsdaten (Eingangsparameter und zugehörige Werte) $\vec{X}$ mit Hilfe von sachlich begründeten mathematischen Vorschriften (Modellansätze) $f()$ in einen für die Durchführung einer vSU erforderlichen Satz an Ausgangsdaten $\vec{Y}$ des Inventarmodells überführt: $\vec{Y} = f(\vec{X})$. Etwaige Ungewissheiten in den Eingangsdaten $\vec{X}$ und den Modellansätzen $f()$ verursachen dabei Unschärfen in den Ausgangsdaten $\vec{Y}$, wobei jedoch üblicherweise nur wenige Eingangsdaten und

¹ Qualitätssicherung (Quality Assurance – QA) umfasst alle Maßnahmen, die dazu beitragen, dass sämtliche Anforderungen an das jeweilige Produkt (hier das Inventarmodell) oder an die jeweilige Leistung (hier die Produktion eines modellhaften Inventars oder Inventarmodells) während der Erstellung des Produkts oder der Erbringung der Leistung erfüllt werden. Qualitätskontrolle (Quality Control – QC) umschreibt entsprechende Maßnahmen zur Überprüfung bevorzugt durch Dritte, welche an der Produktion / Erbringung der Leistung nicht beteiligt sind.

Modellansätze von solchem Einfluss sind, dass ihre Ungewissheit die Ungewissheit der Ausgangsdaten maßgeblich bestimmt.²

1.4 Übergeordnetes Vorgehen und Aufbau des Berichts

Das übergeordnete Vorgehen spiegelt sich im folgenden Berichtsaufbau wider:

- In Kap. 2 werden die Grundlagen des FoV dargestellt. Dazu wird der gesetzliche Rahmen beschrieben, der generelle Umgang mit Ungewissheiten erläutert, und letztlich das zu betrachtende Inventarmodell gegenüber den weiterführenden Betrachtungen in einer vSU abgegrenzt.
- In Kap. 3 werden die Eingangsparameter des Inventarmodells aufgezeigt, gruppiert und gemäß der zu betrachtenden Ungewissheiten kategorisiert. Es werden hierzu die Ergebnisse einer Literaturstudie (Anhang A) herangezogen, um den Stand der Wissenschaft zur Behandlung von Ungewissheiten in den Eingangsdaten aufzuzeigen. Abschließend werden Methoden zur qualitativen Bewertung der Eingangsdaten und zur qualitativen oder quantitativen Beschreibung der zugehörigen Ungewissheiten diskutiert.
- Kap. 4 zeigt die Methoden zur Ermittlung des Einflusses von Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten unter Berücksichtigung der Ungewissheiten in den Eingangsdaten und in den verwendeten mathematischen Ansätzen. Dabei wird die generelle Vergleichbarkeit der aus verschiedenen Methoden resultierenden Aussagen beleuchtet. Zudem wird auf bestimmte Aussagen und ihren Bezug zu einzelnen Zielgrößen einer vSU eingegangen.
- In Kap. 5 werden die Methoden zur Ermittlung der Ungewissheiten in den Ausgangsdaten, welche aus den Ungewissheiten in den Eingangsdaten und in den Modellansätzen des Inventarmodells resultieren, recherchiert und diskutiert.
- Kap. 6 fasst die Möglichkeiten zur Verifikation und Validierung des Inventarmodells sowie einzelner Eingangsdaten zusammen. Dabei werden die Ergebnisse einer Literaturstudie herangezogen, um die Verbreitung und den Nutzen dieser Möglichkeiten aufzuzeigen.

In den Kapiteln 4 und 5 werden außerdem einzelne Methoden illustrativ auf Beispieldaten angewendet, um den Stand von Wissenschaft und Technik in Bezug auf Inventarmodelle darzustellen. Eine Synthese der Ergebnisse zusammen mit übergeordneten Schlussbemerkungen in Kap. 7 runden den Bericht ab.

Auf die Aspekte der QA/QC von Eingangsdaten wird in den Kapiteln 3 und 6 eingegangen. Aspekte der QA/QC von Ausgangsdaten werden in den Kapiteln 4 und 5 diskutiert. Eine Zusammenfassung der möglichen QA/QC-Maßnahmen erfolgt im Anhang D.

² In der Literatur wird Ungewissheit in Bezug auf die Modellansätze oftmals als Modellungewissheit (engl.: model uncertainty) bezeichnet. Dieser Begriff wird hier vermieden, weil unter einem Modell die Gesamtheit von Modellansätzen und zugehörigen Daten verstanden werden soll.

2 Grundlagen

2.1 Vorgaben und Anforderungen

Im Forschungsvorhaben (FoV) „Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager – InvEnd“ (Rauscher et al., 2023) wurden durch die Auswertung deutscher Gesetze, untergesetzlicher Regelwerke sowie internationaler Richtlinien die Anforderungen an das HAW-Endlagersystem identifiziert, welche sich auf Behälter und Gebinde sowie auf die Erfassung der Inventardaten hochradioaktiver Abfallströme beziehen. Weitere Anforderungen an das Inventarmodell bestehen, da sicherheitsrelevante Zielgrößen einer vSU, welche sich aus dem Standortauswahlgesetz (*StandAG*, 2023) und der Endlagersicherheitsuntersuchungsverordnung (*EndlSiAnfV & EndlSiUntV*, 2020) ableiten lassen, in Abhängigkeit von den Inventardaten stehen. Diese Zielgrößen sind beispielsweise der Ausschluss einer selbsttragenden Kettenreaktion, der Radionuklidaustrag, die sich ergebende jährliche Dosis für Einzelpersonen, die Körperdosis, die Temperatur an der Gebindeoberfläche und die Beschaffenheit der Behälter.

Weitere verbindliche Anforderungen ergeben sich aus dem *Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren* (Atomgesetz) (AtG, 1985), der *Verordnung über Anforderungen und Verfahren zur Entsorgung radioaktiver Abfälle* (Atomrechtliche Entsorgungsverordnung) (AtEV, 2018), der *Richtlinie über einen Gemeinschaftsrahmen für die verantwortungsvolle und sichere Entsorgung abgebrannter Brennelemente und radioaktiver Abfälle* (2011/70/EURATOM, 2011), dem *Gemeinsamen Übereinkommen über die Sicherheit der Behandlung abgebrannter Brennelemente und über die Sicherheit der Behandlung radioaktiver Abfälle* (Joint Convention, 1997). Außerdem berücksichtigt werden müssen die Stellungnahmen und Empfehlungen der Entsorgungskommission (ESK) und Empfehlungen der International Atomic Energy Agency (IAEA).

Im Forschungsvorhaben (FoV) „Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager – InvEnd“ (Rauscher et al., 2023) wurden diese Vorgaben und die resultierenden Anforderungen an das Inventarmodell zur Durchführung von vSU nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zusammengestellt und begründet. An dieser Stelle wird auf diese daher nicht weiter eingegangen.

2.2 Umgang mit Ungewissheiten

2.2.1 Quellen von Ungewissheiten

Für die Erfüllung der Anforderungen an das Endlagersystem, speziell an das Inventarmodell, müssen verschiedenste Datensätze herangezogen werden. Diese umfassen radiologische, chemische und physikalische Eigenschaften aber auch Geometrien und andere Daten (siehe Abschnitt 3.1).

Es werden dabei Informationen einbezogen, die sich auf die vergangene, gegenwärtige oder zukünftige Realität beziehen. Diese Informationen werden entweder direkt oder indirekt gemessen, oder sie müssen abgeschätzt werden. Da Kenntnisse in jedem Fall nur begrenzt vorhanden sind, sind all diese Daten mit Ungewissheiten behaftet. Beispiele für verschiedene Arten von Informationen sind:

- Qualitative und quantitative Messdaten
- Qualitative und quantitative Spezifikationen, z. B. der Geometrie
- Qualitative und quantitative Test- oder Verifikationsdatensätze
- Qualitative und quantitative Modellergebnisse, inklusive Abschätzungen von Modellparametern
- Literaturdaten
- Subjektive Informationen und Experteneinschätzungen

Das Modell, im speziellen Fall das Inventarmodell, beschreibt hierbei ein reales System und ist eine näherungsweise Darstellung der Prozesse innerhalb dieses Systems (*IAEA safety glossary. Terminology used in nuclear safety and radiation protection.*, 2007). Das Modell wird aus vorhandenen Erkenntnissen und Wissen oder aus theoretischen Überlegungen abgeleitet und wird verwendet, um Daten „vorherzusagen“, die teilweise noch nicht beobachtet wurden. Modelle sind damit per se mit Ungewissheiten behaftet.³

Quellen der Ungewissheiten umfassen die Folgenden:

- Unvollständigkeiten und Ungenauigkeiten in Versuchsdaten, Beobachtungen, Planungsdaten, Informationen, Messdaten und Abfallspezifikationen (z. B. fehlende Daten, fehlende Werte, zufällige Messfehler)
- Fehlerhaftigkeit, Unzuverlässigkeit und Mehrdeutigkeit von Messdaten, Beobachtungen, Produktionsinformationen und Abfallspezifikationen (z. B. als Folge von schlecht definierten Bedingungen, Einzelmessungen, systematischen Messfehlern, Inkonsistenzen zwischen Daten)
- Zufälligkeit (Variabilität) von Messungen, Merkmalen, Ereignissen und Prozessen (z. B. Verteilung von Radionukliden in Abfallformen)
- Fehlen oder Vielzahl geeigneter und handhabbarer konzeptioneller, mechanistischer, stochastischer (empirischer) Modellansätze, die mit den verfügbaren Daten vereinbar sind
- zu stark vereinfachte oder zu stark parametrisierte Modelle, d. h. Modelle außerhalb ihrer nachgewiesenen oder angenommenen Gültigkeitsbereiche, Fehler (z. B. Diskretisierungs-, Matrixinversions-, Abrundungs- und Abbruchfehler)
- die Notwendigkeit der Hochskalierung oder Mittelwertbildung von Daten, der Extrapolation von Daten aufgrund räumlich und / oder zeitlich begrenzter Experimente und Messungen oder ganz allgemein aufgrund der Anwendung gemessener Daten, die unter einer Reihe von Bedingungen gemessen wurden und auf andere Bedingungen anzuwenden sind
- Ungenauigkeiten in den Erhebungsverfahren, falsche Darstellung der Erhebungsergebnisse, unterschiedliche Wahrnehmung von Nachweisen durch verschiedene Individuen, fehlender Konsens (Uneinigkeit, Kontroverse) unter Experten, Gruppendynamik und individuelle Verankerung (Fixierung auf inkorrekte oder irrelevante Sachverhalte) der Beteiligten
- die Möglichkeit eines unerkannten Versagens oder bei der Entwicklung und Anwendung von Berechnungsmodellen (Abweichung vom Modellansatz)

³ Dies ist eine pragmatische Definition von Ungewissheit. Eine ausführlichere Definition findet sich z. B. in (Ayyub, 2001).

Nicht alle genannten Quellen von Ungewissheiten müssen notwendigerweise auftreten. Ebenso kann es weitere Quellen geben, die in dieser Liste nicht erfasst sind.

2.2.2 Klassifizierung von Ungewissheiten

Die wichtigste Klassifizierung von Ungewissheiten erfolgt in Bezug auf deren Natur bzw. die Möglichkeit ihrer Reduzierbarkeit. Eine gängige Klassifizierung in Bezug auf die Natur der Ungewissheiten unterscheidet zwischen aleatorischen und epistemischen Ungewissheiten (Crawford and Galson, 2009).

Aleatorische Ungewissheiten sind auf Einflüsse zurückzuführen, die nach unserem heutigen Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse als zufällig anzusehen sind (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017). Sie können im Prinzip nicht reduziert werden und können auch als intrinsische Eigenschaft eines Datensatzes / Modells betrachtet werden. Eine aleatorische Ungewissheit in diesem strengen Sinne ist im Bereich der Entsorgung radioaktiver Abfälle selten. Allerdings ist es möglich einige Phänomene, die sich auf große Populationen beziehen, als Zufallsphänomene zu beschreiben und auf diesem Wege ihre Ungewissheit zu handhaben, z. B. radioaktiver Zerfall, Verteilung der Spaltprodukte bei der Kernspaltung und kleinräumige Heterogenität von radioaktiven Materialien.

Epistemische Ungewissheiten sind zurückführbar auf unser begrenztes Wissen über die natürlichen Gegebenheiten und Prozesse. Im Prinzip können sie durch angemessene Forschung verringert werden (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017). Allerdings können einige Arten von epistemischer Ungewissheit in der Praxis nicht reduziert werden (z. B. aufgrund des Aufwands und der Kosten, die damit verbunden wären).

Es existieren auch Mischformen, beispielsweise ist das Versagen der Hüllrohre ein mehr oder weniger zufälliger Prozess (aleatorisch). Allerdings sind die Parameter, die diesen Prozess beschreiben nur unzureichend bekannt und sind daher mit epistemischen Ungewissheiten behaftet.

Die Identifikation von Quellen der Ungewissheit, die sowohl für eine bestimmte Entscheidung relevant als auch reduzierbar sind, kann daher zu einer robusteren Entscheidungsfindung führen.

Eine Klassifizierung von Ungewissheiten gemäß ihrer Quelle wird beispielsweise von (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017) vorgenommen und resultiert in den Kategorien:

- Szenario-Ungewissheiten
- Modell-Ungewissheiten
- Parameter-Ungewissheiten

Wir beziehen uns im Folgenden nur auf Modell- und Parameter-Ungewissheiten, da die Festlegung und Betrachtung von Szenarien über den Rahmen dieses Forschungsvorhabens hinausgehen.

2.2.3 Darstellung von Ungewissheiten

Eine Art die Ungewissheit eines Parameters darzustellen ist die Angabe einer Bandbreite. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit, dass der tatsächliche Wert innerhalb der Bandbreite liegt, so hoch, dass es als gesichert angenommen werden kann, dass der Wert innerhalb der Bandbreite liegt. Dies trifft insbesondere auf Parameter zu, deren Werte aufgrund von allgemeinen Gesetzmäßigkeiten (z. B. physikalischer Natur) nur innerhalb eines definierten Bereiches (Bandbreite) vorliegen kann.

Durch weitere Kenntnisse kann innerhalb der Bandbreite ggf. eine Unterteilung in Bereiche mit erhöhter bzw. verringerter Wahrscheinlichkeit erfolgen. Diese Angabe der Wahrscheinlichkeit kann qualitativ und quantitativ erfolgen.

Im Falle der qualitativen Angabe der Wahrscheinlichkeit von Eingangsparametern eines Modells werden oftmals Wörter wie z. B. optimistisch, pessimistisch oder konservativ verwendet. Diese sind auch vorzufinden in Bezug auf qualitative Angaben zur Wahrscheinlichkeit von Ausgangsparameterwerten von Modellen, sofern diese als Risikobewertung auslegbar sind.

Die Beschreibung der Ungewissheit in Modellen resultiert, wie einleitend erwähnt, aus einer Kombination der Ungewissheiten in den Eingangsparametern $\vec{X}$ und den Ungewissheiten der Modellansätze $f()$, welche jeweils gewählt werden, um einen definierten Ausgangsparameter zu berechnen. Ein Modell, wie es im Abschnitt 1.3 bzw. 2.2.1 definiert wurde, wird qualitativ beschrieben als eine „zweckmäßige“ Darstellung eines realen Systems und der Art und Weise, wie Phänomene in diesem System auftreten bzw. auf dieses wirken. Im Falle einer Vorhersage durch das Modell bedeutet dies, dass das Modell die Realität ohne signifikante Verzerrungen widerspiegelt, d. h. dass die Ergebnisse $\vec{Y} = f(\vec{X})$ in für die Zielstellung ausreichender Genauigkeit die Realität abbilden.

Es kommt aber auch häufig vor, dass alternative Modellansätze $f()$ für eine „zweckmäßige“ Darstellung eines realen Systems geeignet sein können und ggf. eine Auswahl des Modells erfolgen muss. Im besten Fall basiert diese Auswahl auf objektiven Kriterien, sie kann aber auch auf Experteneinschätzung basieren. Für den Fall, dass das Ziel darin besteht, die Bandbreite möglicher Systementwicklungen zu erforschen, müssen die Ergebnisse möglichst aller verfügbaren Modellansätze, die mit dem vorhandenen Wissen übereinstimmen, bewertet werden, und mit ähnlichem Gewicht oder ähnlicher Wahrscheinlichkeit versehen werden. Besteht das Ziel darin vorsichtige Vorhersagen zu treffen, dann kann es ausreichend sein, einen einzigen Modellansatz anzuwenden, welcher eindeutig pessimistische Ergebnisse liefert.

Ein häufig verwendetes, gut definiertes und weithin akzeptiertes mathematisches Konzept zur quantitativen Darstellung von Ungewissheit ist die Wahrscheinlichkeitstheorie. Die Wahrscheinlichkeit für eine kontinuierliche Variable wird dabei mithilfe einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Probability Density Function – PDF) oder deren Integral - der kumulativen Verteilungsfunktion (Cumulative Distribution Function – CDF) - erfasst. Die Grenzwerte, die den plausiblen Wertebereich (Bandbreite) umspannen, werden häufig als symmetrische Perzentile der jeweiligen PDF/CDF (z. B. 2,5% und 97,5%) dargestellt. Der plausible Wertebereich umspannt somit ein sogenanntes Konfidenzintervall, in dem ein Referenzwert durch zusätzliche Kenntnisse oder Gesetzmäßigkeiten identifiziert wird.

Die Wahrscheinlichkeit kann dabei je nach Art der Ungewissheit, auf die sie angewendet wird, unterschiedlich interpretiert werden. Wird die Wahrscheinlichkeit zur Darstellung einer aleatorischen Ungewissheit verwendet, so beschreibt sie die relative Häufigkeit eines zufälligen Phänomens, basierend auf einer Vielzahl von Beobachtungen des Phänomens unter ähnlichen Bedingungen. Der Referenzwert ist dann üblicherweise der Erwartungswert, Median oder Modus (häufigster Wert). Wird die Wahrscheinlichkeit zur Quantifizierung einer epistemischen Ungewissheit verwendet, kann sie als der Grad der Überzeugung einer Person (oder einer Gruppe) in Bezug auf eine bestimmte Situation oder ein Ergebnis interpretiert werden. Solche subjektiven Wahrscheinlichkeiten beruhen vorzugsweise auf dem aktuellen Kenntnisstand. Der Referenzwert wird dann den wahrscheinlichsten Wert widerspiegeln, vorausgesetzt, dass es einen einzigen wahrscheinlichsten Wert gibt.

2.2.4 Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse

Modelle, hier speziell das Inventarmodell, werden in der Regel benutzt, um Daten (Ausgangsdaten $\vec{Y} = f(\vec{X})$) vorherzusagen, die (noch) nicht beobachtet wurden, und zwar unter Verwendung sowohl von Eingangsdaten $\vec{X}$ als auch der Modellansätze $f()$.

Das Ergebnis (die Ausgangsdaten) entsteht somit aus einer Kette von Arbeitsschritten mit sehr differenzierten Quellen von Ungewissheiten (siehe Abschnitt 2.2.1). Die Ungewissheit pflanzt sich ausgehend von den Ungewissheiten der Eingangsdaten mit jedem Arbeitsschritt bis zu den Ergebnissen fort, und aus der Analyse dieser Fortpflanzung der Ungewissheiten lassen sich Aussagen treffen, z. B. über die Bedeutung der Eingangsdaten für die Ungewissheit der Ausgangsdaten oder über die Aussagekraft eines Modells.

Werkzeuge für den Umgang mit Ungewissheiten in den Eingangs- und Ausgangsdaten sind die Sensitivitätsanalyse, welche hauptsächlich zur Analyse von Modell- und Parameterungewissheiten angewendet wird, und die Ungewissheitsanalyse, welche Szenarien-, Modell- und Parameterungewissheiten einschließt (Abschnitt 2.2.2).

Ergebnisse der Ungewissheitsanalyse werden in der Regel verwendet, um das wahrscheinlichste Ergebnis zu vermitteln und um den Grad des Vertrauens in die Ergebnisse insgesamt zu bewerten. Bei der Ungewissheitsanalyse für ein Inventarmodell kann das Vertrauen beispielsweise dadurch bemessen werden, ob ein bestimmter Schwellenwert (z. B. hinsichtlich des Gehalts an chemotoxisch relevanten Stoffen) überschritten wird. Dies kann dann als Entscheidungsgrundlage oder zur Quantifizierung eines Risikos verwendet werden.

Es werden zwei verschiedene Methoden der Ungewissheitsanalyse unterschieden. In deterministischen Ungewissheitsanalysen werden ausgehend von einem Referenzfall die Werte von einem oder mehreren Eingangsparametern so geändert, dass diese einen Extremfall oder eine veränderte Voraussetzung für das Modell darstellen. Mit diesem Vorgehen werden die Auswirkungen von Ungewissheiten in spezifischen Eingangsdaten einzeln oder in spezifischen Kombination der Eingangsdaten untersucht. Beispiele hierfür sind das Differential Importance Measure (DIM) oder die Darstellung der skalierten Sensitivität (Abschnitt 4.2.2).

Probabilistische Ungewissheitsanalysen sind ein Vorgehen, bei dem möglichst der gesamte plausible Wertebereich der Eingangsparameter untersucht wird. Die Auswahl des Bereiches der Eingangsdaten erfolgt dabei vorzugsweise auf der Grundlage der Eintretenswahrscheinlichkeiten, die für den jeweiligen Eingangsparameter angenommen werden. Das Ergebnis für die Ausgangsparameter des Modells wird mit Hilfe von speziellen grafischen und statistischen Methoden analysiert (vgl. Abschnitt 4.2.2).

Die Sensitivitätsanalyse ist ein Vorgehen, mit dem untersucht wird, wie die Variation (oder Ungewissheit) der Ergebnisse eines Modells (Ausgangsdaten $\vec{Y} = f(\vec{X})$) qualitativ oder quantitativ auf verschiedene Variationsquellen (Ungewissheiten in den Eingangsdaten $\vec{X}$) aufgeteilt ist, und wie ein bestimmtes Modellergebnis von seinen Eingangsdaten abhängt (vgl. (Saltelli et al., 2007)). Die Ergebnisse einer Sensitivitätsanalyse liefern somit Anhaltspunkte in der Analyse der Ungewissheiten eines Modells. Sie kann benutzt werden zur:

- Einordnung der Eingangsparameter eines Modells nach ihrem relativen Beitrag zur Ausgangsvariation (auch als „Ranking“ bezeichnet)

- Identifizierung von Eingangsparametern, die einen dominanten (bzw. vernachlässigbaren) Einfluss auf die Ausgangsdaten haben (auch als „Screening“ bezeichnet)
- Bestimmung des Bereiches eines Eingangsparameters, der signifikante, z. B. extreme, Ausgangswerte erzeugt (auch als „Mapping“ bezeichnet)

In Sensitivitätsanalysen und probabilistischen Ungewissheitsanalysen wird entsprechend der Bandbreite der Betrachtung bzw. der Einschränkung der Analyse zwischen zwei Ansätzen unterschieden.

Der lokale Ansatz untersucht die Auswirkung von Variationen einzelner Eingangsdaten in einem begrenzten Bereich auf die Ausgangsdaten. D. h. Methoden mit diesem Ansatz berechnen oder approximieren die partiellen Ableitungen der Modellergebnisse (Ausgangsdaten) nach den einzelnen Eingangsparametern unter bestimmten Bedingungen (Tong, 2007). Beispiele hierfür sind z. B. die grafischen Methoden des DIM oder die Darstellung der skalierten Sensitivität (Abschnitt 4.3.2) aber auch die lokale Anwendung einer globalen Methode, wie z. B. der Morris Sensitivitätsanalyse (Abschnitt 4.2.5).

Der globale Ansatz untersucht die Auswirkungen von Eingangsdaten des gesamten plausiblen Parameterraums und deren Kombinationen auf die Modellergebnisse. Globale Methoden sind durch zwei Eigenschaften definiert:

- der Einfluss von Skalen (z. B. log-transformiert) und Formen (z. B. normalverteilt) der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für alle Eingangsparameter wird einbezogen
- die Sensitivitätsschätzungen der einzelnen Eingangsparameter erfolgen unter der Variation aller anderen Eingangsparameter

Methoden des globalen Ansatzes lassen sich außerdem in quantitative und qualitative Methoden einteilen. Für Anwendungen mit einer großen Anzahl von Eingangsparametern führt der erforderliche Stichprobenumfang dazu, dass der Rechenaufwand für quantitative Analysen unüberwindbar wird (Abschnitt 4.1). Beispiele für globale Methoden sind die Morris Sensitivitätsanalyse (Abschnitt 4.2.5) und der Effective Algorithm for computing global Sensitivity Indices (EASI) (Abschnitt 4.2.4).

Die Methoden basieren auf der Erstellung von, in der Anzahl begrenzten, Stichproben zur Darstellung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eingangsdaten. (Helton et al., 2006) stellten verschiedene Methoden zur Erzeugung von Stichproben vor, welche eine einheitliche Verwendung in der Ungewissheitsanalyse und der Sensitivitätsanalyse ermöglichen.

Kapitel 4 und 5 stellen die gängigsten Methoden für Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen vor. Für weitere Informationen wird auf die Literatur verwiesen, z. B. (Saltelli et al., 2007; Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017; Veiga et al., 2021).

2.2.5 Qualitätssicherung und -kontrolle

Menschliche Fehler bei der Arbeit mit Modellen und Daten können nie ausgeschlossen werden. Sie bilden eine Quelle der Ungewissheit innerhalb jeder Messung, Modellierung und Analyse. Maßnahmen zur Verringerung der Ungewissheiten dieser Art werden zusammengefasst zu Maßnahmen der Qualitätssicherung (QA) und Qualitätskontrolle (QC).

Unter QA werden die Maßnahmen zusammengefasst, die mit dem Prozess der Erstellung eines Ergebnisses (z. B. eines Datensatzes) oder der Erbringung einer Dienstleistung verbunden sind. Zu den QA-Maßnahmen gehören z. B. Checklisten und interne Audits.

Unter QC werden die Maßnahmen zusammengefasst, mit denen ein Produkt überprüft wird. Typische QC-Maßnahmen sind Produkttests, Peer-Reviews und Inspektionen, die vorzugsweise von Personen durchgeführt werden, die nicht selbst in den Prozess der Erstellung des Produkts eingebunden sind.

Eine effiziente Verringerung der Ungewissheiten dieser Art wird durch eine Kombination von QA- und QC-Maßnahmen erreicht. In den Kapiteln 3, 5 und 6 sowie in Anhang D wird näher auf diese Maßnahmen eingegangen.

2.3 Definition und Abgrenzung Inventarmodell

Ein Inventarmodell für ein Endlager für radioaktive Abfälle ist im Allgemeinen ein detailliertes Modell, das die Art, Menge, Zusammensetzung und Aktivität der radioaktiven Abfälle beschreibt, die in einem Endlager eingelagert werden sollen. Im weiteren Sinne umfasst es nicht nur das radioaktive Inventar, sondern eine geometrische, stoffliche, radiologische, chemische und physikalische Charakterisierung der Abfälle, um die möglichen Prozesse innerhalb des Endlagers ausreichend beschreiben zu können. Es dient somit als Grundlage, um die langfristige Sicherheit und das Verhalten des Endlagers über geologische Zeiträume hinweg zu bewerten.

In diesem FoV werden Methoden zum Umgang mit Ungewissheiten aufgezeigt, die zur Bewertung der Eingangsdaten des Inventarmodells (z. B. im Hinblick auf Konsistenz zwischen verschiedenen Quellen), zur Bewertung der resultierenden Ungewissheit der Ausgangsdaten sowie zur Identifizierung besonders relevanter Eingangsparameter und Modellansätze im Inventarmodell benutzt werden können. Ziel ist es, dadurch dem Auftraggeber BASE Werkzeuge zur QA/QC eines Inventarmodells bereitzustellen.

Der Begriff des Inventarmodells wird in diesem FoV für ein Modell benutzt, das einen definierten Satz an vorhandenen Eingangsdaten (Eingangsparameter und zugehörige Werte) $\vec{X}$ mit Hilfe von sachlich begründeten mathematischen Vorschriften (Modellansätze) $f()$ in einen für die Durchführung einer vSU (und ggf. weiterer Zwecke) erforderlichen Satz an Ausgangsdaten (Ergebnisse) $\vec{Y}$ des Inventarmodells überführt: $\vec{Y} = f(\vec{X})$. Die Ausgangsdaten des Inventarmodells dienen innerhalb der Durchführung einer vSU als Datensatz zur Beschreibung des Endlagergebindes sowie dessen zeitlicher Entwicklung.

Die Ungewissheiten in den Ausgangsdaten des Inventarmodells pflanzen sich in Modellen zur Berechnung von Zielgrößen einer vSU ($\vec{Z} = g(\vec{Y})$) fort, und nur eine Teilmenge dieser Ausgangsdaten $\vec{Y}$ (wie auch der Eingangsdaten des Inventarmodells $\vec{X}$) hat einen nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die berechneten Zielgrößen $\vec{Z}$ einer vSU. In diesem FoV werden alle dem Inventarmodell nachgeschalteten Modelle und Berechnungen einer vSU a priori nicht weiter betrachtet.

Im Vorgängerprojekt (InvEnd) wurde festgehalten, dass sich die Anforderungen an das Inventarmodell (insbesondere an die Eingangsdaten des Inventarmodells $\vec{X}$) für die drei in Deutschland zu betrachtenden Wirtsgesteine kaum voneinander unterscheiden. Dies gilt nicht für alle Ausgangsdaten $\vec{Y}$ des Inventarmodells. Einzelne Ausgangsdaten und davon abhängige Zielgrößen einer vSU hängen von derzeit noch nicht definierten Sachverhalten ab, z. B. vom

chemischen Milieu im Wirtsgestein oder vom Endlagerbehälterkonzept (Rauscher et al., 2023), welches wiederum u. a. vom Wirtsgestein abhängt.

Von den innerhalb des Vorgängerprojektes (InvEnd) dargestellten Zielgrößen einer vSU werden daher nur Auswirkungen von Ungewissheiten im Inventarmodell auf die folgenden Zielgrößen einer vSU in Beispielen illustriert:

- Gesamtaktivität des Inventars
- Radiotoxizität (Dosisleistung) des Inventars
- Nachzerfallsleistung (Wärme) des Inventars

Dies erfolgt auf der Basis von Inventardaten aus der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) ohne Berücksichtigung des Endlagerbehälters. Dies ist begründet in der Tatsache, dass sich das Behälterkonzept für die drei potenziellen Wirtsgesteine voneinander unterscheiden kann und erst im Laufe des Standortauswahlverfahrens entwickelt wird (Rauscher et al., 2023) und somit die Inhalte des Inventarmodells sukzessive ergänzt.

3 Ungewissheit der Eingangsdaten und Modellansätze

Das Ziel dieses Kapitels ist die Diskussion von Methoden zur qualitativen Bewertung der Eingangsdaten und Modellansätze sowie zur qualitativen oder quantitativen Beschreibung der zugehörigen Ungewissheiten. Es werden dazu die Ergebnisse einer Literaturstudie (Anhang A) herangezogen, um den Stand der Wissenschaft zur Behandlung von Ungewissheiten in den Eingangsdaten und Modellansätzen aufzuzeigen.

3.1 Eingangsparameter

Eine Klassifizierung der Eingangsparameter des Inventarmodells erfolgte im vorhergehenden FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023). Es erfolgte eine Unterteilung in Parameter zur allgemeinen, chemischen, geometrischen, physikalischen, radiologischen, stofflichen und thermischen Charakterisierung des Inventars. Die vollständige Liste der Parameter ist in Tabelle 17 des Abschlussberichts zum FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023) zu finden.

3.1.1 Zugängliche Informationen

Innerhalb einer Literaturstudie öffentlich zugänglicher Quellen (Anhang A) wurden Informationen zu den Parametern des Inventarmodells aus Finnland, Schweden, Belgien, Schweiz, Großbritannien und Kanada evaluiert. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse ist in Tabelle 1 gezeigt. Über das französische Inventarmodell konnten keine öffentlich zugänglichen Informationen gefunden werden.

Informationen zu den Parametern der allgemeinen Charakterisierung konnten für Belgien und die Schweiz fast vollständig gefunden werden. Es waren jedoch keine Informationen für Schweden zugänglich, und für Finnland ausschließlich jene zum Brennelementtyp. Informationen zu den Parametern der chemischen Charakterisierung waren lediglich für Belgien und die Schweiz zugänglich. Ähnlich verhält es sich mit Angaben zu Parametern der geometrischen Charakterisierung (d. h. zum Gittertyp bzw. der Anordnung der Brennstäbe und der allgemeinen Geometrie (Längen, Breiten, Durchmesser, Querschnitte, Wandstärken, ...)). Nur das anfängliche Volumen der einzulagernden Abfälle konnte für alle Länder außer Finnland und Schweden evaluiert werden. Informationen zu den Parametern der physikalischen Charakterisierung – Gesamtmasse, Brennstoff- und Abfalldichte – sind, mit Ausnahme von Schweden und Kanada, öffentlich zugänglich. Parameter wie die Halbwertszeiten sowie Angaben zu den thermischen bzw. mechanischen Kennwerten werden aus internationalen Datenbanken entnommen, so dass keine landesspezifischen Angaben erfolgen. Datenquellen sind z. B. ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011), JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020), JENDL-5 (Iwamoto et al., 2023), CENDL-3.2 (Ge et al., 2020) oder ROSFOND (Zabrods kaya et al., 2007).

Angaben zu den Parameterwerten der radiologischen Charakterisierung sind, mit Ausnahme von Großbritannien, für alle Länder zu finden. Eine Unterteilung der Angaben in Aktivierungs- und Spaltprodukte ist teilweise zugänglich. Zu flüchtigen Radionukliden sind generell keine Informationen verfügbar. In der Schweiz werden lediglich Angaben zur radiolytischen Gasproduktion gemacht. Angaben zur Gesamtaktivität werden, mit Ausnahme von Finnland und Kanada, von allen Ländern gemacht, ohne eine Aufteilung in die Strahlungsart offenzulegen. Angaben zum Abbrand des Kernbrennstoffs sowie des ursprünglichen Anreicherungsgrads sind für alle Länder zugänglich. Letztere Angabe ist nur für Kanada nicht öffentlich zugänglich. Die Strahlendosisleistung der Abfälle wird nicht direkt benannt. In der Literatur für Schweden und die Schweiz wurden nur einzuhaltende Grenzwerte gefunden.

Angaben zur stofflichen Charakterisierung, d. h. zur komponentenspezifischen Zusammensetzung, sind teilweise vorhanden und Angaben zur thermischen Charakterisierung des Inventars, speziell der Nachzerfallsleistung, sind in allen Ländern mit Ausnahme von Großbritannien auffindbar. Die stoffliche Charakterisierung ist dabei seitens der Schweiz am umfangreichsten und umfasst Angaben zum Inventar der Metalle (ohne Schwermetalle), Organika, des Wasserinventars und des inerten Füllgases der Brennstäbe. Es muss jedoch angemerkt werden, dass es sich dabei um ein modellhaftes, repräsentatives Inventar auf der Grundlage des derzeitigen Inventars handelt, mit einer Extrapolation basierend auf Annahmen zur zukünftigen Energieproduktion aus Leistungsreaktoren.

Informationen aus den öffentlich zugänglichen Quellen jedes Landes konnten für etwa 25% der Parameter des Inventarmodells gefunden werden. Maximal waren etwas mehr als die Hälfte der Parameter (56%) zugänglich. Jedoch repräsentiert dieses Maximum den aktuellen Stand des nationalen Entsorgungsprogramms in der Schweiz, und bezieht sich auf ein modellhaftes, repräsentatives Inventar, welches aus Hochrechnungen des bekannten Inventars und der zu erwartenden Energieproduktion abgeschätzt wurde.

Tabelle 1 Zugängliche Informationen zu den Parameterwerten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)

Die Tabelle umfasst alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023).

1) FI: Finnland, SE: Schweden, BE: Belgien, CH: Schweiz, GB: Großbritannien, CA: Kanada

2) Komponentenspezifisch

3) Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient

Parameter	Land ¹⁾					
	FI	SE	BE	CH	GB	CA
Allgemeine Charakterisierung						
Anzahl Behälter / Gebinde			X	X		X
Brennstabanzahl (im Beladungszustand)			X	X	X	X
Datum der Entnahme aus dem Reaktorkern (Entladung)			X	X	X	X
Brennelementtyp	X		X	X		X
Klassifizierung der abgebrannten BE			X	X	X	
Abfallkategorie			X	X	X	X
Chemische Charakterisierung						
Chemische Zusammensetzung ²⁾			X	X		
Geometrische Charakterisierung						
Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe				X		
Geometrie (innere und äußere)			X	X		X
Form			X	X		X
(Anfangs-) Volumen			X	X	X	X
Freies Volumen im Brennstabplenum				X		
Physikalische Charakterisierung						
Gesamtmasse	X		X	X	X	
Brennstoffdichte	X		X	X		
Abfalldichte	X		X	X		
Halbwertszeit der Nuklide						
Thermische Kennwerte ³⁾						
Mechanische Kennwerte						
Radiologische Charakterisierung						
Radionuklidinventar ²⁾	X	X	X	X		X
Gesamtaktivität		X	X	X	X	
Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide						
(Ursprünglicher) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung	X	X	X	X	X	
Abbrand des Kernbrennstoffs	X	X	X	X	X	X
Strahlungsdosisleistung		X	X	X		
Stoffliche Charakterisierung						
Stoffliche Zusammensetzung ²⁾	X		X	X		X
Metalle (ohne Schwermetalle)				X	X	X
Organika				X	X	
Wasserinventar	X	X	X	X		
Inertes Füllgas (Brennstab)				X		
Spaltstoffe und ihre isotonenweise Zusammensetzung						
Masse Schwermetall			X	X		
Thermische Charakterisierung						
Nachzerfallsleistung	X	X	X	X		X

3.1.2 Klassifizierung nach der Datenherkunft

Innerhalb dieses FoV liegt der Fokus auf der Betrachtung von Methoden zur Charakterisierung der Ungewissheiten in den Parameterwerten, wobei die Herkunft der Daten eine entscheidende Rolle spielt. Es erfolgt daher eine Klassifizierung nach der Datenherkunft aus Sicht der Aufsichtsbehörde BASE.

Allgemein umfassen die Daten Messdaten und Spezifikationen aber auch Ergebnisse von Modellrechnungen / Simulationen (z. B. sind Angaben des radiologischen Inventars eines Brennstabes nach der Nutzung in einem Reaktor in der Regel Ergebnisse einer Simulation). Abbildung 1 zeigt die Klassifizierung gemäß der Datenherkunft. Spezifikationen erfolgen dabei seitens der Betreiber (in Deutschland seitens der Atomkraftwerke bzw. der BGE) und Produzenten oder entsprechen dem Stand von Wissenschaft und Technik, wobei sich gewisse Parameterwerte aus vorhergehenden Spezifikationen ergeben, z. B. durch statistische Analysen. Eingangsparameter, welche Ergebnisse von Modellrechnungen sind, werden von den Betreibern bereitgestellt und werden in diesem FoV getrennt betrachtet (s. Abschnitt 3.2).

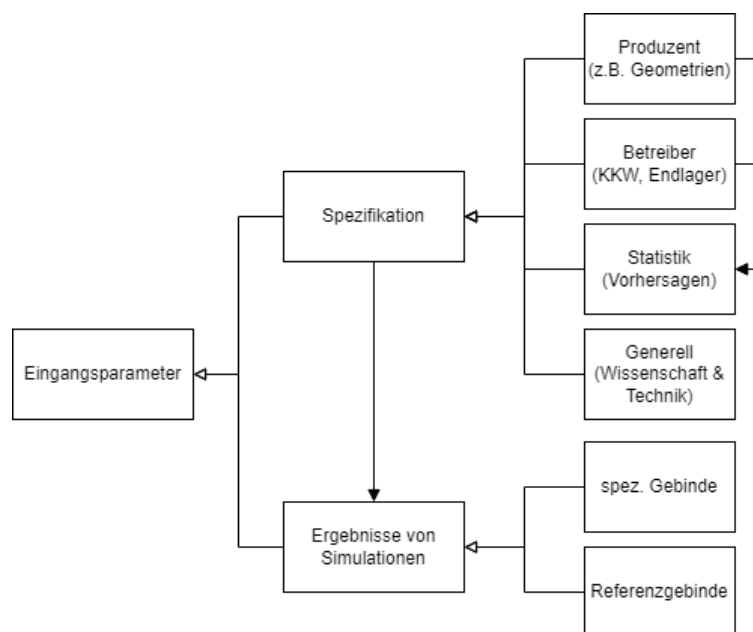


Abbildung 1 Klassifizierung der Eingangsparameter gemäß ihrer Datenherkunft

Die Klassifizierung der Parameter des Inventarmodells nach der Datenherkunft, die sich als Ergebnis der Literaturstudie ergibt, ist in Tabelle 2 dargestellt. Rund ein Drittel der Eingangsparameter (37%) stammen aus vorhergehenden Simulationen / Modellrechnungen. Die restlichen Eingangsparameter werden von Betreibern (34%) und Produzenten (14%) bereitgestellt oder basieren auf Statistiken gemäß deren Angaben (11%) bzw. auf dem Stand von Wissenschaft und Technik (5%). Abbildung 2 stellt diese Verhältnisse grafisch dar.

Tabelle 2 Klassifizierung der Parameter des Inventarmodells nach Datenherkunft

Die Tabelle umfasst alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023).

- 1) Wissenschaft und Technik
- 2) Komponentenspezifisch
- 3) Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient

Parameter	Herkunft				
	Produzent	Betreiber	Statistik	WT ¹⁾	Simulation
Allgemeine Charakterisierung					
Anzahl Behälter / Gebinde			X		
Brennstabanzahl (im Beladungszustand)		X	X		
Entnahmedatum aus Reaktorkern (Entladung)		X	X		
Brennelementtyp		X	X		
Klassifizierung der abgebrannten BE		X	X		
Abfallkategorie		X			
Chemische Charakterisierung					
Chemische Zusammensetzung ²⁾	X	X	X		X
Geometrische Charakterisierung					
Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe	X	X			
Geometrie (innere und äußere)	X	X			
Form	X	X			
(Anfangs-) Volumen		X	X		
Freies Volumen im Brennstabplenum		X			
Physikalische Charakterisierung					
Gesamtmasse	X	X	X		
Brennstoffdichte	X	X			
Abfalldichte	X	X			X
Halbwertszeit der Nuklide				X	
Thermische Kennwerte ³⁾				X	
Mechanische Kennwerte				X	
Radiologische Charakterisierung					
Radionuklidinventar ²⁾					X
Gesamtaktivität					X
Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide					X
(Urspr.) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung	X	X			
Abbrand des Kernbrennstoffs					X
Strahlungsdosisleistung					X
Stoffliche Charakterisierung					
Stoffliche Zusammensetzung ²⁾		X			
Metalle (ohne Schwermetalle)		X			
Organika		X			
Wasserinventar		X			
Inertes Füllgas (Brennstab)		X			
Spaltstoffe und ihre isotoopenweise Zusammensetzung					X
Masse Schwermetall					X
Thermische Charakterisierung					
Nachzerfallsleistung					X

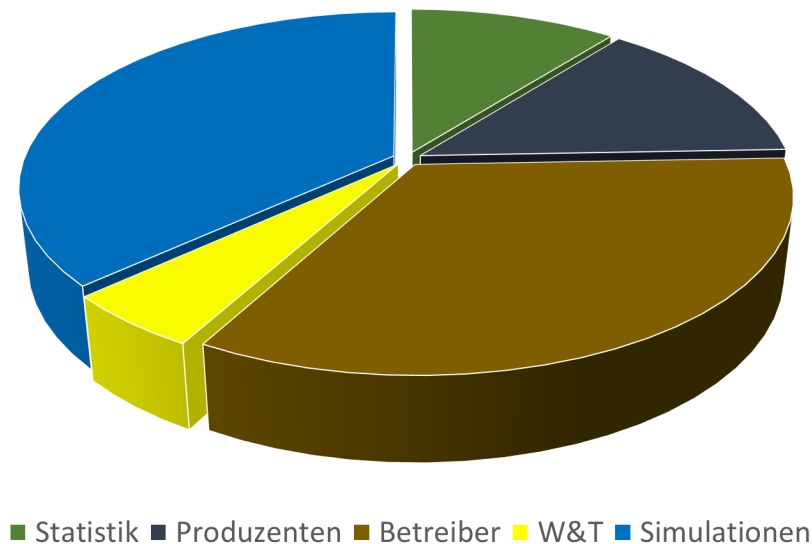


Abbildung 2 Aufteilung der Eingangsparameter gemäß ihrer Datenherkunft

3.2 Umgang mit Ungewissheiten in den Eingangsdaten

3.2.1 Zugängliche Informationen

Tabelle 3 gibt einen Überblick über die öffentlich zugänglichen Informationen zum Umgang mit Ungewissheiten in den Eingangsdaten des Inventarmodells. Es fällt auf, dass deutlich weniger Angaben zu den Ungewissheiten gemacht werden, als dies für Referenzangaben der Fall ist (siehe Abschnitt 3.1.1).

Die Schweiz macht Angaben zur Ungewissheit in der Brennstabanzahl. Zur Ungewissheit in der Anzahl der Behälter / Gebinde erfolgt von keinem Land eine Angabe. Angaben zu bestehenden Ungewissheiten im Zeitpunkt der Entnahme aus dem Reaktor und zum Brennelementtyp erfolgen nur seitens der Schweiz. Zur Handhabung dieser Ungewissheiten äußern sich die Schweiz sowie Kanada und Belgien (Zeitpunkt der Entnahme). Ungewissheiten in der Klassifizierung der BE werden von Belgien und der Schweiz benannt. Diese beiden Länder machen auch Aussagen zum Umgang mit der Ungewissheit in der komponentenspezifischen chemischen Zusammensetzung.

Aussagen zum Umgang mit Ungewissheiten in der geometrischen Charakterisierung werden lediglich von der Schweiz und Kanada getroffen, mit Ausnahme der Ungewissheiten im anfänglichen Volumen der Abfälle, für welches auch seitens Großbritanniens Aussagen öffentlich zugänglich sind. In Belgien erfolgt ein Ausschluss von Ungewissheiten durch Spezifikationen individueller Gebinde.

Der Umgang mit Ungewissheiten in den Parametern der physikalischen Charakterisierung, d. h. der Gesamtmasse, Brennstoff- bzw. Abfalldichte, wird wiederum nur seitens der Schweiz beschrieben. In Belgien erfolgt wiederum ein Ausschluss von Ungewissheiten durch die Bereitstellung von individuellen Spezifikationen.

Der Umgang mit Ungewissheiten in der radiologischen Charakterisierung, bezogen auf das komponentenspezifische Radionuklidinventar, wird seitens Finnlands, Schwedens, der Schweiz und Kanadas beschrieben. Der Umgang mit den Ungewissheiten in der Gesamtaktivität wird von

Schweden, der Schweiz und Großbritannien dargestellt. Großbritannien diskutiert diese auf der Grundlage von Szenarienanalysen des operativen Vorgehens, jedoch ohne eine Diskussion des Umgangs mit den Ungewissheiten im komponentenspezifischen Radionuklidinventar. In Belgien erfolgt wiederum ein Ausschluss von Ungewissheiten durch individuelle Spezifikationen.

Aussagen zum Umgang mit Ungewissheiten im ursprünglichen Anreicherungsgrad werden seitens Schwedens, Belgiens, Großbritanniens und der Schweiz gemacht, und der Umgang mit Ungewissheiten im Abbrand wird von Kanada und der Schweiz diskutiert.

Aussagen zum Umgang mit Ungewissheiten der komponentenspezifischen stofflichen Zusammensetzung erfolgen seitens Finnlands, der Schweiz, Großbritanniens und Kanadas.

Es ist anzumerken, dass es in vielen Ländern aufgrund des jeweiligen aktuellen Standes des nationalen Entsorgungsprogramms noch zu keinen Aussagen in Bezug auf den Umgang mit Ungewissheiten im Inventarmodell kommt. Getroffene Aussagen beziehen sich meist auf modellhafte, repräsentative Inventarungewissheiten auf der Grundlage einer Extrapolation des derzeitigen Inventars, welche auf Annahmen zu einer zukünftigen nuklearen Energieproduktion basiert.

Tabelle 3 Zugängliche Informationen zu den Ungewissheiten in den Parameterwerten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)

Die Tabelle umfasst alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023).

1) FI: Finnland, SE: Schweden, BE: Belgien, CH: Schweiz, GB: Großbritannien, CA: Kanada

2) Komponentenspezifisch

3) Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient

Parameter	Land ¹⁾					
	FI	SE	BE	CH	GB	CA
Allgemeine Charakterisierung						
Anzahl Behälter / Gebinde				x		
Brennstabanzahl (im Beladungszustand)				x		
Datum der Entnahme aus dem Reaktorkern (Entladung)			x	x		x
Brennelementtyp				x		
Klassifizierung der abgebrannten BE			x	x		
Abfallkategorie						
Chemische Charakterisierung						
Chemische Zusammensetzung ²⁾			x	x		
Geometrische Charakterisierung						
Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe				x		
Geometrie (innere und äußere)				x		x
Form				x		x
(Anfangs-) Volumen				x	x	
Freies Volumen im Brennstabplenum				x		
Physikalische Charakterisierung						
Gesamtmasse				x		
Brennstoffdichte				x		
Abfalldichte				x		
Halbwertszeit der Nuklide						
Thermische Kennwerte ³⁾						
Mechanische Kennwerte						
Radiologische Charakterisierung						
Radionuklidinventar ²⁾	x	x		x		x
Gesamtaktivität		x		x	x	
Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide						
(Ursprünglicher) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung		x	x	x	x	
Abbrand des Kernbrennstoffs				x		x
Strahlungsdosisleistung						
Stoffliche Charakterisierung						
Stoffliche Zusammensetzung ²⁾	x			x	x	x
Metalle (ohne Schwermetalle)				x		x
Organika				x		
Wasserinventar				x		
Inertes Füllgas (Brennstab)						
Spaltstoffe und ihre isotoopenweise Zusammensetzung						
Masse Schwermetall				x		
Thermische Charakterisierung						
Nachzerfallsleistung						

3.2.2 Gruppierung

Eine Gruppierung der Ungewissheiten in den Eingangsdaten erfolgt in Anlehnung an den Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen (Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM)), welcher als ISO bzw. DIN veröffentlicht ist (Schwarz, 2020a). Der GUM führt die zwei Kategorien A und B ein, um die Ungewissheiten in Messungen zu beschreiben.

GUM Typ A umfasst Berechnungen der Messungswissheit durch die statistische Analyse der Messungen. Er bezeichnet damit im klassischen Sinne Messungen, welche in der Regel einer Normalverteilung folgen. Es lassen sich Standardabweichungen berechnen, die nach GUM als Standardunsicherheiten bezeichnet werden (Schwarz, 2020b).

GUM Typ B umfasst Berechnungen der Messungswissheit mit anderen Mitteln als der statistischen Analyse. Dieser Typ B basiert im Allgemeinen auf einer endlichen Anzahl von Abschätzungen (Stichprobe), mit welcher versucht wird, die maximale Größe der durch die Ungewissheiten in den Eingangsdaten verursachten Abweichungen der Ausgangsdaten zu bestimmen. Anschließend wird diesen Ausgangsdaten eine Verteilung zugeordnet, sodass aus der resultierenden Verteilungsfunktion der zu bestimmende charakteristische Parameterwert mit seiner Standardunsicherheit abgeleitet werden kann (Schwarz, 2020b). Dies trifft hauptsächlich auf Parameter des Inventarmodells zu, welche statistisch aus Angaben der Betreiber bzw. Produzenten ermittelt werden.

Mit der DIN V ENV 13005 Beiblatt 1:2012-02 (Erweiterung des GUM) wurde die Fortpflanzung von Ungewissheiten unter Anwendung der Monte Carlo Methode auf die zu bestimmenden Größen (Werte von Parametern) eingeführt. Dieses Vorgehen innerhalb des Typ B trifft z. B. auf Eingangsparameter des Inventarmodells zu, welche aus vorhergehenden Modellrechnungen / Simulationen stammen. Dieses Vorgehen zum Umgang mit Ungewissheiten entspricht weitgehend dem in Kapitel 5 beschriebenen Vorgehen dieses FoV zur Bestimmung der Ungewissheiten in den Ausgangsdaten eines Modells ($\vec{Y} = f(\vec{X})$) (siehe dazu Kapitel 5).

In Tabelle 4 ist die Klassifizierung der Eingangsparameter des Inventarmodells nach den GUM-Typen dargestellt. Die Ungewissheit für nahezu die Hälfte der Eingangsparameter (46%) wird mit klassischen Methoden, d. h. der statistischen Analyse von Messungen (Typ A), bestimmt. Für etwas mehr Eingangsparameter (48%) erfolgt die Betrachtung der Ungewissheiten ausschließlich mittels anderer Methoden als der statistischen Analyse (Typ B). Abbildung 3 stellt diese Verhältnisse grafisch dar.

Für Eingangsparameter, die einer Wertauswahl / Kategorisierung entsprechen, erfolgt keine Zuordnung zu einem GUM-Typen (z. B. Abfallkategorie oder inertes Füllgas eines Brennstabs). Eine gemischte Klassifizierung nach GUM erfolgt für Eingangsparameter bei denen die Angaben des Betreibers / Produzenten dem Typ A entsprechen, diese jedoch nachfolgend als Bilanz über mehrere Angaben ins Inventarmodell einfließen (z. B. die Gesamtmasse oder das Gesamtvolumen der Abfälle).

Tabelle 4 Klassifizierung der Parameter des Inventarmodells nach GUM

Die Tabelle umfasst alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023).

¹⁾ Komponentenspezifisch

²⁾ Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient

Parameter	GUM - Typ		
	A	B	Ohne
Allgemeine Charakterisierung			
Anzahl Behälter / Gebinde		x	
Brennstabanzahl (im Beladungszustand)	x		x
Datum der Entnahme aus dem Reaktorkern (Entladung)	x		
Brennelementtyp		x	
Klassifizierung der abgebrannten BE		x	
Abfallkategorie			x
Chemische Charakterisierung			
Chemische Zusammensetzung ¹⁾		x	
Geometrische Charakterisierung			
Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe	x		
Geometrie (innere und äußere)	x		
Form	x		
(Anfangs-) Volumen		x	
Freies Volumen im Brennstabplenum	x		
Physikalische Charakterisierung			
Gesamtmasse		x	
Brennstoffdichte	x		
Abfalldichte	x	x	
Halbwertszeit der Nuklide	x		
Thermische Kennwerte ²⁾	x		
Mechanische Kennwerte	x		
Radiologische Charakterisierung			
Radionuklidinventar ¹⁾		x	
Gesamtaktivität		x	
Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide		x	
(Ursprünglicher) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung	x		
Abbrand des Kernbrennstoffs		x	
Strahlungsdosisleistung		x	
Stoffliche Charakterisierung			
Stoffliche Zusammensetzung ¹⁾	x	x	
Metalle (ohne Schwermetalle)	x		
Organika	x		
Wasserinventar	x		
Inertes Füllgas (Brennstab)	x		
Spaltstoffe und ihre isotonenweise Zusammensetzung		x	
Masse Schwermetall		x	
Thermische Charakterisierung			
Nachzerfallsleistung		x	

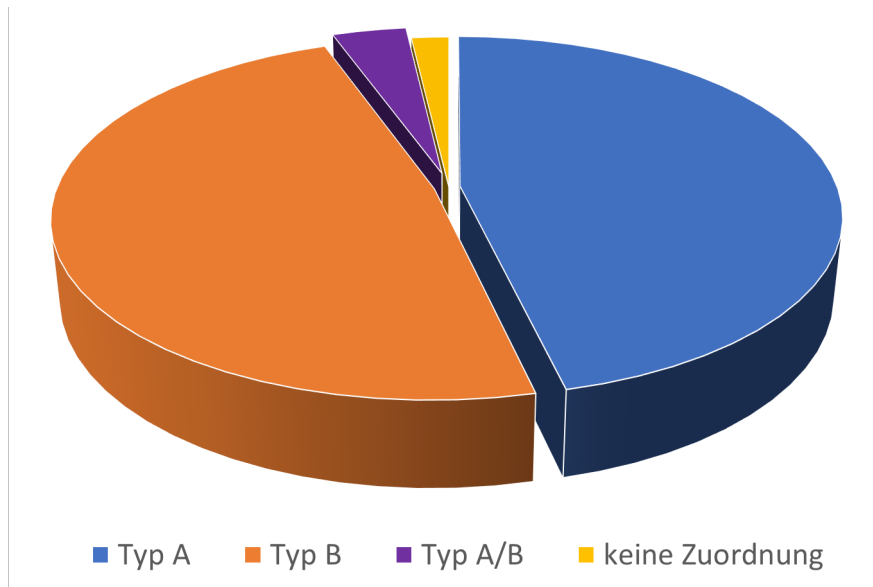


Abbildung 3 Aufteilung der Eingangsparameter gemäß der Art und Weise der Bestimmung der Ungewissheiten

3.3 Modellansätze und deren Ungewissheiten

Die Modellansätze, welche in ein Inventarmodell einfließen sind meist international abgestützte und entwickelte Computercodes und Programmpakete / -bibliotheken. Sie dienen hauptsächlich zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung des Radionuklidinventars bzw. der Aktivitäten (radiologische Charakterisierung und damit verbundene stoffliche und chemische Charakterisierung) sowie der Entwicklung der Nachzerfallsleistung (thermische Charakterisierung).

Die Simulationen erfolgen teilweise mit eigens zu diesem Zweck erstellten Computercodes oder mit Teilen jener Programmpakete, welche zur Simulation der Prozesse im Reaktor und damit zur Bestimmung gewisser Eingangsdaten des Inventarmodells (GUM Typ B) benutzt werden. Programme zur Simulation der Prozesse im Reaktor lösen die Boltzmann- und die Bateman-Gleichungen, während Programme zur Simulation der zeitlichen Entwicklung des Inventars unter Ausschluss einer sich selbst tragenden Kettenreaktion nur die Bateman-Gleichung lösen.

Der Ausschluss einer sich selbst tragenden Kettenreaktion im Rahmen einer vSU erfolgt, für die Betrachtungen der zeitlichen Entwicklung des Inventars, durch die Festlegung der Werte der Eingangsparameter des Inventarmodells. Diese Festlegung der Eingangsparameter erfolgt so, dass eine Kritikalität der Abfälle in den Endlagergebinden nach erfolgter Konditionierung ausgeschlossen werden kann. Der Ausschluss eines Neutronenmultiplikationsfaktors $> 0,95$ im Zeitraum der ersten 500 Jahre (bzw. $> 0,98$ für spätere Zeitpunkte) erfolgt demnach innerhalb der Zulassung der Abfallbehälter über die Eingangsparameter, spezifisch der geometrischen Charakterisierung (Geometrien, Gittertypen bzw. Anordnungen der BS) und der stofflichen Charakterisierung (Wasserinventar und inertes Füllgas).

Anhang B zeigt die historische Entwicklung der Behandlung von Ungewissheiten in den Eingangsdaten und Modellansätzen auf.

3.3.1 Zugängliche Informationen

Modellansätze

Nicht in allen Ländern sind Informationen zu den Modellansätzen und Daten zugänglich, welche zur Simulation der Reaktorprozesse und damit zur Bestimmung von Eingangsdaten des Inventarmodells benutzt werden. Tabelle 5 fasst die Länder und Eingangsparameter des Inventarmodells zusammen, für welche in der Literaturstudie (Anhang A) Informationen gefunden werden konnten.

Tabelle 5 Zugängliche Informationen zu den Modellansätzen für die Bestimmung von Eingangsdaten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)

Die Tabelle umfasst nicht alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023). Es werden nur diejenigen Parameter gelistet, für die wenigstens in einem Land Informationen zu Modellansätzen gefunden werden konnten.

¹⁾ FI: Finnland, SE: Schweden, BE: Belgien, CH: Schweiz, GB: Großbritannien, CA: Kanada

Parameter	Land ¹⁾					
	FI	SE	BE	CH	GB	CA
Chemische Charakterisierung						
(Komponentenspezifische) chemische Zusammensetzung	x		x	x		
Physikalische Charakterisierung						
Abfalldichte				x		
Radiologische Charakterisierung						
(Komponentenspezifisches) Radionuklidinventar	x	x	x	x		x
Gesamtaktivität	x	x	x	x	x	
Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide				x		
Abbrand des Kernbrennstoffs	x	x	x	x	x	x
Strahlungsdosisleistung		x	x	x		
Stoffliche Charakterisierung						
Masse Schwermetall			x	x		
Thermische Charakterisierung						
Nachzerfallsleistung	x	x	x	x		

Tabelle 6 listet Computercodes, welche in der Literatur (Anhang A) und weiterführender Literatur, z. B. (Ezure, 1998; NEA/CSNI, 2016; OECD, 2004), explizit genannt werden. Alle aufgelisteten Computercodes und Programmpakete / -bibliotheken werden derzeit eingesetzt, um Eingangsdaten des Inventarmodells sowie teilweise auch Ausgangsdaten zu bestimmen, z. B. das komponentenspezifische Radionuklidinventar.

Innerhalb des Inventarmodells werden gemäß der Literaturstudie (Anhang A) zur Bestimmung der zeitlichen Entwicklung des komponentenspezifischen Radionuklidinventars (Ausgangsparameter) in der Schweiz MCNP, MicroShield® und SCALE, in Schweden CrudAct, IndAct und ORIGEN und Letzteres auch in Finnland und Kanada eingesetzt.

Tabelle 6 Zugängliche Informationen zu den Codes zur Bestimmung von Eingangsdaten des Inventarmodells aus der Literaturstudie (Anhang A)

Die Tabelle umfasst nicht alle Parameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023). Es werden nur diejenigen Parameter gelistet, für die wenigstens in einem Land Informationen zu Modellansätzen gefunden werden konnten.

Code	Charakterisierung				
	Chemisch	Physikalisch	Radiologisch	Stofflich	Thermisch
AKTIV	x		x		
ANISN	x		x		
APROS					
ATHLET					
BOXER					
CATHARE					
CrudAct	x		x		
DCHAIN-MD	x		x		
DOT-3.5	x		x		
DORT	x		x		
ECOGE	x		x		
EVA	x		x		
FISPIN	x		x		
GoldSim					
IndAct	x		x		
MAC-RAD	x		x		
MCBEND	x		x		
MCNP	x		x		
MicroShield®	x		x		
MOD3.x					
MORSE	x		x		
NRN	x		x		
ORIGEN (-S -2.1 ...)	x		x		
QAD	x		x		
REAC	x		x		
RELAP5					
SCALE	x		x		
SCDAP					
SNAPSH	x		x		
TRACE					
TRIPOLI3.2	x		x		
XSDRN	x		x		

Ungewissheiten in den Modellansätzen

Der Nachweis, dass die Modelle das definierte Problem korrekt lösen können, erfolgt mittels Verifikation und Validierung (siehe Kapitel 6).

In der probabilistischen Analyse werden seit etwa 2010 die Methoden der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse (Kapitel 4 und 5) zum Umgang mit Ungewissheiten eingesetzt (vgl. Abschnitt 2.2.3). Die quantitative Darstellung der Ungewissheit erfolgt dabei mittels der Wahrscheinlichkeit, wobei diese für eine kontinuierliche Variable mittels einer PDF oder einer CDF erfasst wird.

Zur Charakterisierung der Wahrscheinlichkeitsverteilung eines Eingangsparameters werden dabei in Finnland, Schweden und Kanada hauptsächlich Normalverteilungen im kartesischen bzw. logarithmischen Parameterraum verwendet. In der Schweiz und auch in Finnland wird teilweise für die Parameter auch eine stetige Gleichverteilung zwischen zwei Eckwerten, auch Rechteckverteilung genannt, angenommen.

Für den Inventaranteil der Radionuklide, der beim Versagen der Brennstoffhüllrohre potenziell relativ rasch freigesetzt wird (instant release fraction) erfolgt gemäß der Literaturstudie (Anhang A) überwiegend eine Charakterisierung mittels logarithmischer Normalverteilung bzw. einer einfachen oder doppelten (asymmetrischen) Dreiecksverteilung (Finnland, Schweden, Kanada).

3.4 Abgeleitetes Vorgehen in der Qualitätssicherung und -kontrolle

3.4.1 Eingangsparameter Typ A

Die Werte der Eingangsparameter des Typs A, d. h. Ergebnisse von Messungen / Experimenten, können als Realisationen einer Zufallsvariable (-größe) aufgefasst werden. Eine hohe Auflösung und Präzision sind nach DIN 55350-13:1987-07 nicht gleichbedeutend mit der Richtigkeit des Wertes (Abbildung 4). Eine Angabe sollte mittels der statistischen Kennwerte (Erwartungswert und Varianz bzw. Standardabweichung) erfolgen. Es wird dabei implizit angenommen, dass die Eingangswerte normalverteilt sind, d. h. ihr Auftreten einer Normalverteilung (Gaußsche Verteilung) folgt. Nicht in Abbildung 4 dargestellt ist der Begriff der Genauigkeit. Die Genauigkeit ist ein Maß für die Übereinstimmung zwischen den einzelnen Ergebnissen (Positionen der Einschusslöcher) und dem wahren Wert (Zentrum der Zielscheibe) einer Messgröße.

Um die Ungewissheit in den Eingangsdaten, z. B. aus unterschiedlichen Datenquellen, zu berücksichtigen wird in vielen Ländern auf eine Standardisierung / Homogenisierung gesetzt. Dies erfolgt z. B. für BE-Typen, Abfallkategorien, Systemkomponenten, Materialien, Gittertypen, die Anzahl an BS und Eingangsparameter der geometrischen Charakterisierung (Größen, Formen). Für einen Standard / Typ erfolgt dann die Definition der Kennwerte / Referenzwerte inklusive der Definition von Grenzwerten und/oder Verteilungsfunktionen (siehe Anhang A).

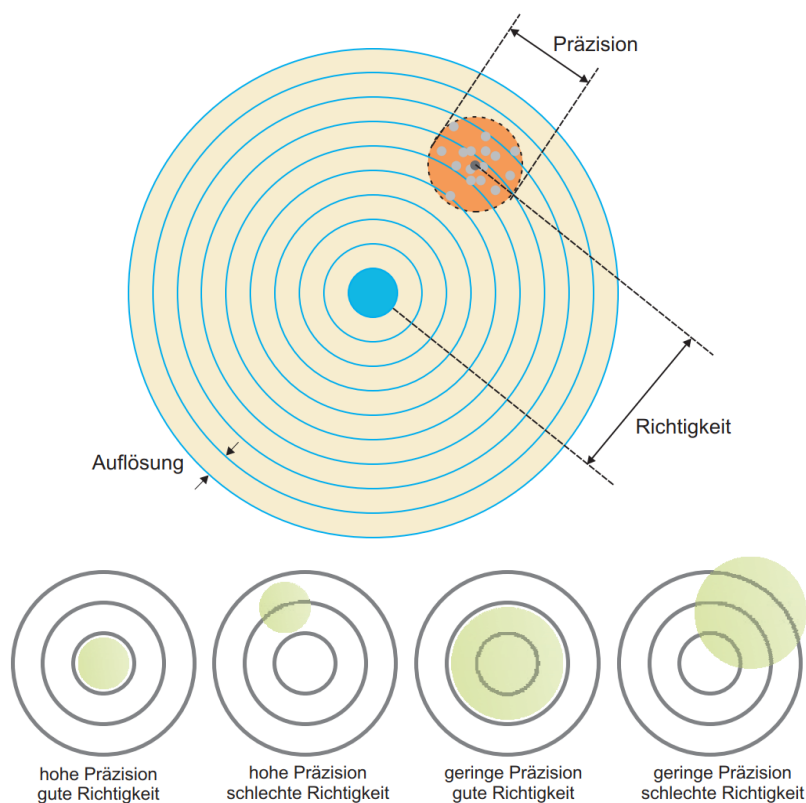


Abbildung 4 Verdeutlichung der Begriffe Auflösung, Präzision und Richtigkeit (Korrektheit) nach DIN 55350-13:1987-07 und DIN 1319-1:1995-01

Als QA-/QC-Maßnahmen erfolgen hauptsächlich Kontrollen und Audits der Betreiber und Produzenten durch die Aufsichtsbehörde, oder QA-Maßnahmen der Betreiber und Produzenten in Kooperation mit Aufsichtsbehörden, wie z. B. in Belgien (ONDRAF/NIRAS mit Bel V, FANC). QC-Maßnahmen beinhalten eigene Messungen durch die Aufsichtsbehörde und die Prüfung von Berichten der Betreiber / Produzenten durch Peer-Reviews.

3.4.2 Eingangsparemeter Typ B

Ein Vorgehen der QA/QC für Parameter des Typs B, deren Ungewissheiten nicht wie für Parameter des Typs A mittels einer statistischen Analyse im klassischen Sinne charakterisiert werden können, wird im Kapitel 5 für die Ausgangsparemeter dargestellt, nachdem auf die Methoden der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse (Kapitel 4 und 5) näher eingegangen wurde. Dieses Vorgehen in der QA/QC kann analog auf Eingangsparemeter des Typs B angewendet werden. Parameter des Typs B sind beispielsweise die Parameter, die aus vorhergehenden Modellrechnungen stammen, wie etwa die radiologische Charakterisierung des Inventars über die Zeit.

Innerhalb dieses Abschnitts wird das aus der Literaturstudie (Anhang A) abgeleitete Vorgehen in der QA/QC der Referenzwerte und Verteilungsfunktionen für die Eingangsparemeter des Typs B dargestellt. Sowohl der Referenzwert als auch die gewählte Verteilungsfunktion werden mittels Methoden der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse auf Plausibilität geprüft. Ist im Ergebnis der Ungewissheitsanalyse eine kleine Varianz des Parameterwertes zu erkennen, so wird bevorzugt eine kartesische Normalverteilung, in Anlehnung an die Parameter des Typs A, verwendet (Finnland, Schweden, Kanada) bzw. eine stetige Gleichverteilung im kartesischen Parameterraum (Schweiz).

Bei einer großen Varianz des Parameterwertes werden eine Normalverteilung (Finnland, Schweden, Kanada) bzw. eine stetige Gleichverteilung im logarithmischen Parameterraum (Logarithmus zur Basis 10) verwendet.

Aussagen zu QA- und QC-Maßnahmen der Eingangsparameter des Typs B in der Literatur beziehen sich hauptsächlich auf die Eingangsparameter des zugrundeliegenden Modells (Parameter des Typs A) und den verwendeten Modellansatz. Die Qualitätssicherung der zugrunde liegenden, verwendeten Computercodes und Programmpakete / -bibliotheken erfolgt dabei durch Verifikation und Validierung innerhalb internationaler Projekte, z. B. (NEA/CSNI, 2016). Kapitel 6 geht auf diesen Aspekt ein.

Speziell in Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2001) sind als QA-/QC-Maßnahmen ein nachvollziehbares System des Wissenstransfers, die Nutzung internationaler Standards und Gütesiegel, die internationale Zusammenarbeit, die Nutzung von Modellen und Computercodes, welche weitverbreitet, getestet und verifiziert sind, und ein periodischer, kritischer Review durch unabhängige Spezialisten vorgesehen.

4 Sensitivität der Ausgangsdaten auf bestimmte Eingangsdaten und Modellansätze

In diesem Kapitel werden die Methoden zur Ermittlung des Einflusses von Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten unter Berücksichtigung der Ungewissheiten in den Eingangsdaten und in den verwendeten Modellansätzen gezeigt. Es wird der Aufbau von Stichproben dargestellt und auf die Voraussetzungen eingegangen, die für eine generelle Vergleichbarkeit der Ergebnisse verschiedener Methoden notwendig sind. Nach einem Überblick über die Methoden erfolgt eine Demonstration, der am weitesten verbreiteten Methoden, und es wird darauf eingegangen, welche Aussagen sich aus der Anwendung der Methoden folgern lassen sowie auf den Bezug dieser Aussagen zu einzelnen Ausgangsdaten des Inventarmodells und Zielgrößen einer vSU.

4.1 Festlegung von Stichproben

Wie in Abschnitt 2.2.4 dargestellt, basieren die verschiedenen probabilistischen Methoden zur Analyse sowohl der Ungewissheiten als auch der Sensitivität auf der Erstellung von in der Anzahl begrenzten Stichproben zur Darstellung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eingangsparameter (Helton et al., 2006). Dabei ist es auch möglich, den mathematischen Rahmen der Stochastik weiter zu nutzen, der spezifische Instrumente wie die bedingte Wahrscheinlichkeitsverteilung und die Zerlegung der Varianz liefert, um globale Sensitivitätsmaße wie z. B. den Sobol' Index abzuleiten (Abschnitt 4.2.4).

Das grundlegende Instrument der Statistik bildet die Schätztheorie. Schätzwerte für die Parameter einer angenommen Verteilungsfunktionen für Eingangs- und Ausgangsparameter werden mathematisch als „asymptotisch erwartungstreue Schätzer“ verstanden, die für endliche Stichproben nicht erwartungstreu sind, also eine systematische Verzerrung aufweisen. Diese verschwindet aber bei immer größer werdenden Stichprobenumfängen.

Analysen der Sensitivität bzw. der Fortpflanzung der Ungewissheit basieren somit auf einem speziellen Verfahren zur Erzeugung von Stichproben, wie z. B. der Monte-Carlo-Methode, um den Eingangsparameterraum abzubilden⁴. Der erforderliche Stichprobenumfang (zum Erreichen der Erwartungstreue) kann jedoch bei größerer Anzahl an zu betrachtenden Eingangsparametern zu einem Problem werden. Die Verwendung effizienter Stichprobenverfahren (siehe Abschnitt 4.1.1), die eine Alternative zur Monte-Carlo-Methode darstellen, ist daher nicht nur für die Beschleunigung der Konvergenz der Schätzer von entscheidender Bedeutung (erwartungstreue Abbildung der geschätzten Ausgangsparameter), sondern auch um sicherzustellen, dass die Eingangsparameter ausreichend gut abgebildet werden (siehe Abschnitt 4.1.2).

4.1.1 Design

Die klassische Theorie der Versuchsplanung widmet sich der Aufgabe der Bestimmung eines geeigneten Stichprobendesigns und wurde für physikalische Experimente entwickelt (Montgomery, 2013). Sie umfasst mehrere Methoden, die den Anforderungen der Modellerkundung (Screening) entsprechen (z. B. der vollständige Versuchsplan - Full Factorial Design FFD, siehe weiter unten). Das Hauptziel der Modellerkundung besteht darin, mit einer minimalen Anzahl von Versuchen ein Maximum an qualitativen Informationen über die Auswirkungen der Eingangsparameter auf die Ausgangsparameter zu erhalten (Veiga et al., 2021).

⁴ Die erhaltene Stichprobe selbst wird auch als Design bezeichnet.

Ein weiterer Aspekt des Designs einer Stichprobe stammt aus dem Bereich der Computereperimente und ist die Betrachtung der so genannten Raumfüllungskriterien (Koehler and Owen, 1996), mit denen die Quantifizierung der Abdeckung eines Parameterraumes durch d Eingangsparameter mit Hilfe von N Berechnungen erfolgen kann.

Im Folgenden wird beispielhaft die Verteilung von 9 Berechnungspunkten in einem 2-dimensionalen Eingangsparameterraum für die am weitesten verbreiteten Verfahren zur Erzeugung einer Stichprobe gezeigt.

Vollständiger Versuchsplan (Full Factorial Design - FFD)

In der statistischen Versuchsplanung versteht man unter einem vollständigen Versuchsplan ein Stichprobendesign, welches alle möglichen Faktorkombinationen durchspielt. Für das gewählte Beispiel von gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern ergeben sich für jeden der Eingangsparameter je 3 Werte. Der Vorteil vollständiger Versuchspläne besteht in einem maximalen Informationsgewinn. Der Nachteil vollständiger Versuchspläne ist, dass mit steigender Anzahl der Eingangsparameter die Anzahl der Versuche exponentiell ansteigt.

Abbildung 5 zeigt die Lage der 9 Berechnungspunkte im Parameterraum der 2 Eingangsparameter X_1 und X_2 .

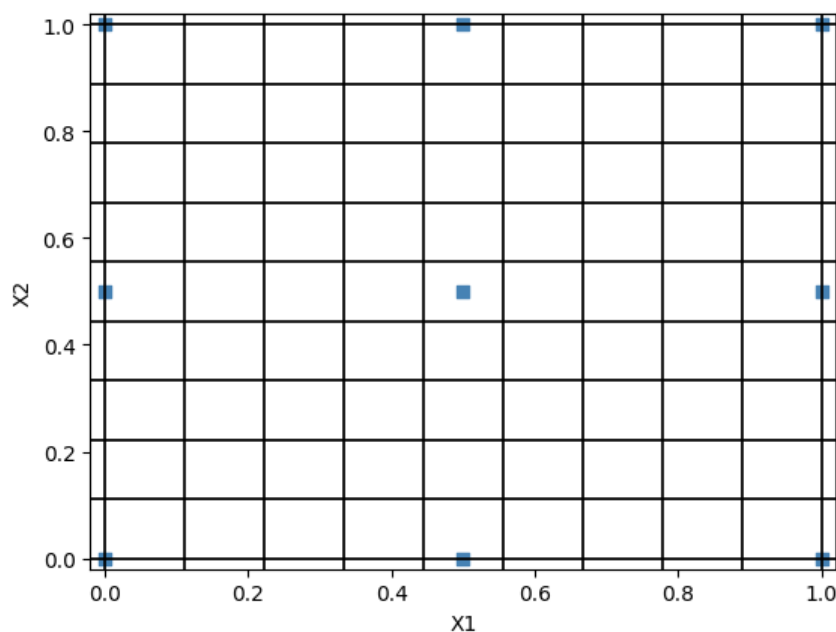


Abbildung 5 Beispielhafte Darstellung eines vollständigen Versuchsplans (Full Factorial Design) mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern
Eingangsparameterraum normiert auf $[0, 1]$

Monte-Carlo-Sampling

Das Monte-Carlo-Sampling (MCS) ist ein Verfahren aus der Stochastik bzw. Wahrscheinlichkeitstheorie, bei welchem wiederholt Zufallsstichproben einer Verteilung mithilfe von Zufallsexperimenten bestimmt werden.

In der Praxis können Computer jedoch nur deterministische Zahlenfolgen erzeugen, die bei Kenntnis des verwendeten Algorithmus und seiner Anfangswerte genau reproduziert werden können. Man spricht daher von Pseudozufallszahlengeneratoren⁵ (Knuth, 1998; Lemieux, 2009). Nach der Generierung der Werte der Pseudozufallsvariablen mit einer Gleichverteilung im Intervall $[0, 1]$ können diese mittels einer Quantil-Transformation⁶ in die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilung umgewandelt werden. Dieses Vorgehen kann auch Abhängigkeiten zwischen Eingangsparametern berücksichtigen, wobei die Stichproben selbst unabhängig voneinander bleiben (Veiga et al., 2021).

Die Vorteile von Monte-Carlo-Sampling bzw. -Stichproben bestehen darin, dass einerseits die notwendige Anzahl an Versuchen unabhängig von der Anzahl an Eingangsparametern ist, und andererseits ihre Anwendung unabhängig vom betrachteten Modell möglich ist. Der Nachteil des Monte-Carlo-Samplings ist die langsame Konvergenz der Schätzer, d. h. um die Genauigkeit eines Ergebnisses nach N Berechnungspunkten um einen Faktor 10 zu erhöhen sind $N*100$ weitere Berechnungspunkte notwendig (Veiga et al., 2021). Die Verwendung alternativer, effizienterer Stichprobenverfahren ist daher in vielen Situationen von entscheidender Bedeutung.

Abbildung 6 zeigt die Lage der 9 Berechnungspunkte im Parameterraum der 2 Eingangsparameter für eine gleichverteilte Monte-Carlo-Stichprobe bzw. unter der Annahme einer Normalverteilung für die Parameterwerte. In der linken Abbildung ist gut zu erkennen, dass mit MCS bei einem begrenzten Stichprobenumfang größere Bereiche des Parameterraums nicht erfasst werden.

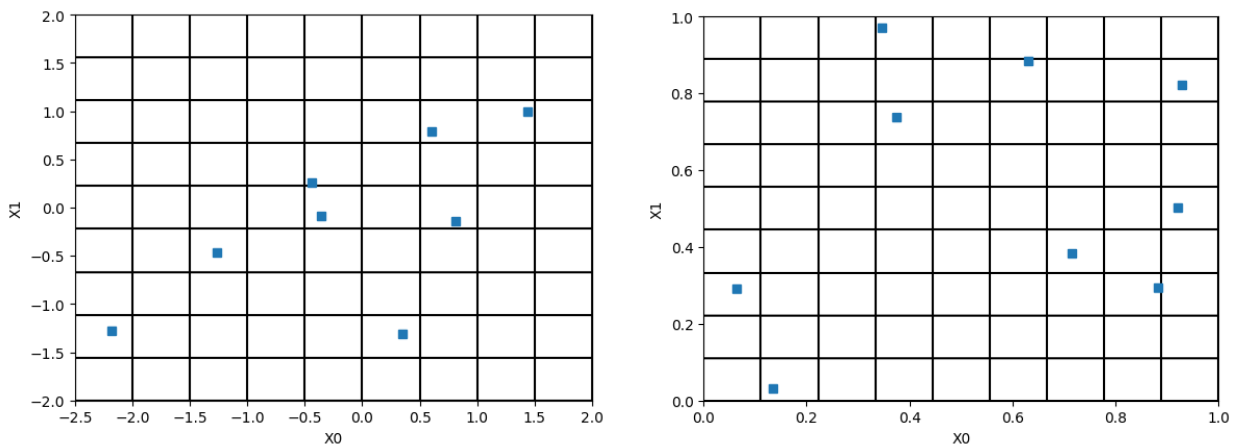


Abbildung 6 Beispielhafte Darstellung einer Monte-Carlo-Stichprobe mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (links: Gleichverteilung der Parameter, rechts: Normalverteilung der Parameter)

Eingangsparameterraum in der Gleichverteilung normiert auf $[0, 1]$

⁵ Echte Zufallszahlengeneratoren sind nichtdeterministische Zufallszahlengeneratoren, die echt zufällige Zahlenfolgen erzeugen. Ihre erzeugten Zahlenfolgen sind nicht reproduzierbar und aperiodisch. Diese echten Zufallszahlengeneratoren erzeugen Zufallszahlen mit Hilfe physikalischer Prozesse. Sie sind meistens erheblich langsamer als die in Computern genutzten Pseudozufallszahlengeneratoren, deren Zahlenfolgen zufällig erscheinen, obwohl sie durch einen deterministischen Algorithmus errechnet werden.

⁶ Umkehrfunktion der kumulativen Wahrscheinlichkeitsverteilung (CDF), die der geforderten Wahrscheinlichkeitsverteilung zugeordnet ist

Latin-Hypercube-Sampling

Das Latin-Hypercube-Sampling (LHS) ist ein Verfahren, bei dem die Berechnungspunkte deutlich einheitlicher im gesamten Parameterraum verteilt werden als im MCS. Das Grundprinzip sieht eine gleichmäßige Unterteilung des gesamten Wertebereiches für jeden Eingangsparameter vor. Die Zuordnung der Teilbereiche der verschiedenen Eingangsparameter zueinander erfolgt zufällig. Es wird entweder der mittlere Wert des jeweiligen Teilbereiches als Wert des Eingangsparameters benutzt (zentriertes Vorgehen) oder innerhalb des Teilbereiches ein zufälliger Wert als Wert für den Eingangsparameter ermittelt.

Die Methode setzt implizit die Unabhängigkeit zwischen den Eingangsparametern voraus, obwohl Erweiterungen für die Durchführung von LHS mit abhängigen Eingangsparametern entwickelt wurden (Petelet et al., 2010). Zur Erhöhung des Stichprobenumfangs sind, im Gegensatz zum MCS, spezielle Algorithmen entwickelt worden (Liu et al., 2015).

Abbildung 7 zeigt die Lage der 9 Berechnungspunkte im Parameterraum der 2 Eingangsparameter eines LHS mit einem zentrierten Vorgehen und einem zufallsverteilten Vorgehen.

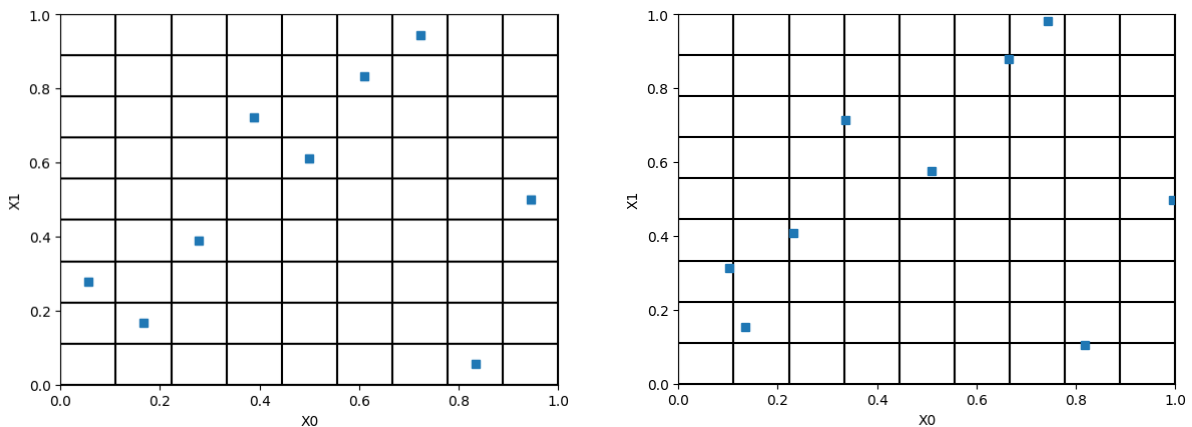


Abbildung 7 Beispielhafte Darstellung einer Latin-Hypercube-Stichprobe mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (links: zentriertes Vorgehen, rechts: zufallsverteiltes Vorgehen)

Eingangsparameterraum normiert auf [0, 1]

Raumfüllendes Design (space-filling design)

Unter dem Namen des raumfüllenden Stichprobendesigns (space-filling design) werden in der Literatur verschiedene Möglichkeiten zusammengefasst, welche versuchen den Parameterraum möglichst umfassend abzudecken. Die dabei benutzten Kriterien zur verbesserten Abdeckung des Parameterraumes sind:

- Abweichungskriterien, z. B. von der Gleichverteilung der Eingangsparameter⁷

⁷ Zu beachten ist, dass eine regelmäßige Diskretisierung nur in einem 1-dimensionalen Parameterraum zu einer gleichverteilten Stichprobe führt. Das Maß der Abweichung, das eingeführt wird, ist eine quantitative Information, die die Gleichförmigkeit quantifiziert (Veiga et al., 2021).

- Geometrische Kriterien, bezogen auf den „Abstand“ der Werte im Parameterraum, z. B. eine Maximierung des Abstandes
- Kriterien des Abstandes zwischen den Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Eingangsparameter

Abbildung 8 zeigt ein Beispiel für die Nutzung eines L^2 -Abweichungskriteriums⁸ auf der Basis eines LHS, welches oft zur Anwendung kommt (Lemieux, 2009).

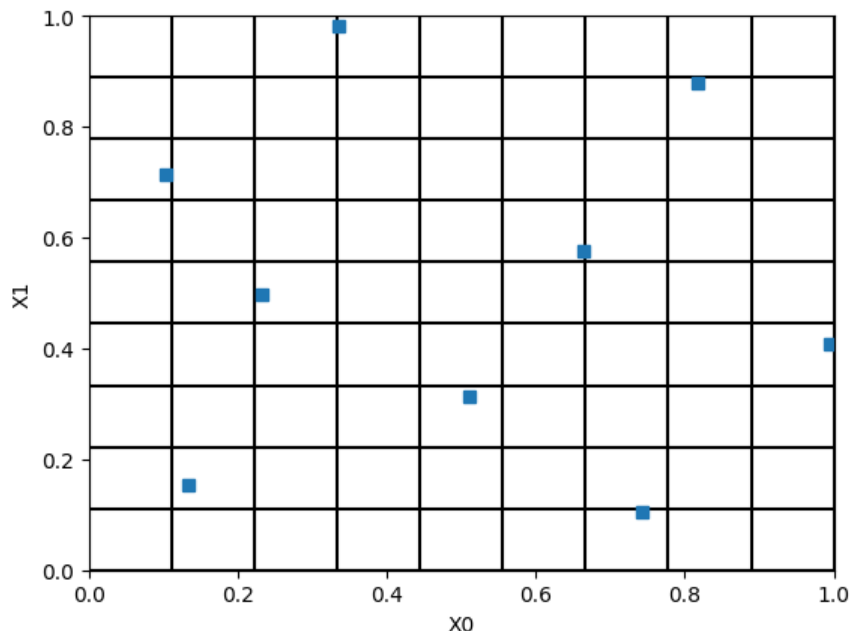


Abbildung 8 Beispielhafte Darstellung eines raumfüllenden Stichprobendesigns mit gesamthaft 9 Berechnungspunkten bei 2 Eingangsparametern (basierend auf einem LHS mit einem L^2 Abweichungskriterium)
Eingangsparameterraum normiert auf [0, 1]

Spezielle Sequenzen

Einzelne Methoden zur Ungewissheits- oder Sensitivitätsanalyse benötigen spezielle Verfahren zur Erzeugung der Stichproben. Ein innerhalb des lokalen Ansatzes oft verwendetes Vorgehen der Erzeugung von Stichproben ist der Ansatz jeweils nur einen Eingangsparameter unabhängig von den anderen zu verändern, englisch „one-at-a-time“ (OAT). Beispiele hierfür sind das DIM (Abschnitt 4.2.2) und die Darstellung der skalierten Sensitivität (Abschnitt 4.2.2). Die OAT-Sequenzierung wird aber auch innerhalb der Morris-Sensitivitätsanalyse (Abschnitt 4.2.5) benutzt.

Auf weitere Methoden wird bei der Beschreibung der Verfahren eingegangen, z. B. Sobol-Sequenz (Abschnitt 4.2.4).

⁸ Die Minimierung des L^2 -Abweichungskriteriums ist die Minimierung der quadratischen Integration der Abweichung des Istwertes vom Sollwert (im diskreten Fall: Minimierung der Summe der Fehlerquadrate).

4.1.2 Umfang

Der erforderliche Stichprobenumfang hängt vom gewählten Stichprobendesign ab, wenn der zu schätzende Parameter als „asymptotisch erwartungstreuer Schätzer“ verstanden werden soll. Dies bedeutet, dass „im Mittel“ der Schätzer immer den zu schätzenden Wert repräsentiert. Das Ergebnis gilt zudem als konsistent im mathematischen Sinn, wenn die Abweichung des geschätzten Wertes von dem zu schätzenden Wert sehr klein ist. Die Konsistenz ist dabei mathematisch ein asymptotisches Gütekriterium und formalisiert, dass für große Stichproben die Wahrscheinlichkeit sehr klein wird, dass der geschätzte Wert von dem zu schätzenden Wert abweicht.

Um den erforderlichen Stichprobenumfang zu bestimmen, müssen daher in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang die statistischen Größen des Mittelwerts und der Varianz eines geschätzten Parameters betrachtet werden. Stabilisieren sich der Mittelwert und die Varianz eines geschätzten Parameters, so ist dieser mathematisch korrekt beschrieben als „asymptotisch erwartungstreuer, konsistenter Schätzer“. In diesem Fall wird eine weitere Erhöhung des Stichprobenumfangs keine Änderung im Ergebnis bewirken. Stabilisiert sich nur der Mittelwert, so ist der Parameter nur als mathematisch „asymptotisch erwartungstreuer Schätzer“ zu betrachten, d. h. eine Erhöhung des Stichprobenumfangs wird zu einer weiteren Änderung der Varianz des Parameters führen.

Robustheit der Analyse

Probabilistische Analysen der Sensitivität bzw. der Fortpflanzung der Ungewissheit basieren auf einem Stichprobendesign und Stichprobenumfang. Um ein robustes Ergebnis zu erzielen, welches mit anderen Ergebnissen vergleichbar ist, muss beides so aufeinander abgestimmt sein, dass der Ausgangsparameter mathematisch mindestens als „asymptotisch erwartungstreuer Schätzer“ betrachtet werden kann. (Tong, 2007) zeigt ein entsprechendes Vorgehen und schlägt robuste varianzbasierte Methoden erster und zweiter Ordnung für globale Sensitivitätsanalysen vor. Insbesondere wird die Verwendung von Techniken der nachträglichen Verfeinerung in Stichprobenverfahren wie dem LHS diskutiert und aufgezeigt, wie die Bewertung der Genauigkeit erfolgt und die Verbesserung des Konvergenzverhaltens erreicht werden kann.

Die folgenden Abbildungen illustrieren den erforderlichen Stichprobenumfang für ein MCS und ein zentriertes LHS. Es wird das Inventar der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben als initiales Inventar herangezogen (siehe Anhang C.3.2). Die Berechnungen erfolgen mit den im Anhang C.1 aufgelisteten Codes.

Die Darstellung der angenommenen Eingangsparameterverteilung (CDF) unter Verwendung von MCS für die drei Uranisotope U-234, U-235 und U-236 ist in Abbildung 9 dargestellt. Abbildung 10 zeigt die Entwicklung des Mittelwertes und der Varianz der initialen Aktivität für die Isotope U-234, U-235 und U-236 in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang. Es ist klar zu erkennen, dass sich sowohl der Mittelwert der Aktivität als auch dessen Varianz nach einem Stichprobenumfang von ca. 1 000 Berechnungen stabilisieren und auch die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion bei diesem Stichprobenumfang gegeben ist.

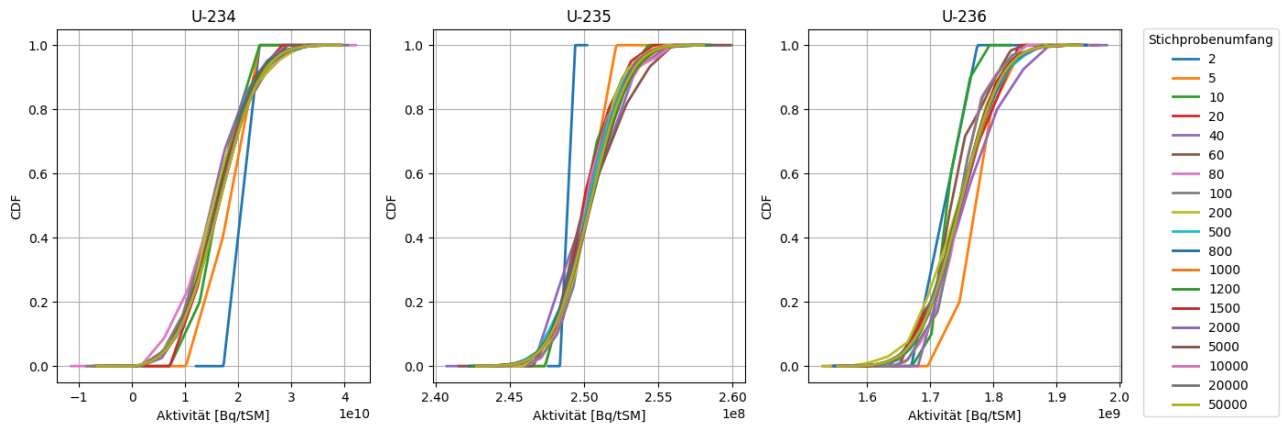


Abbildung 9 CDF der initialen Aktivität der Uranisotope U-234, U-235 und U-236 als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem MCS

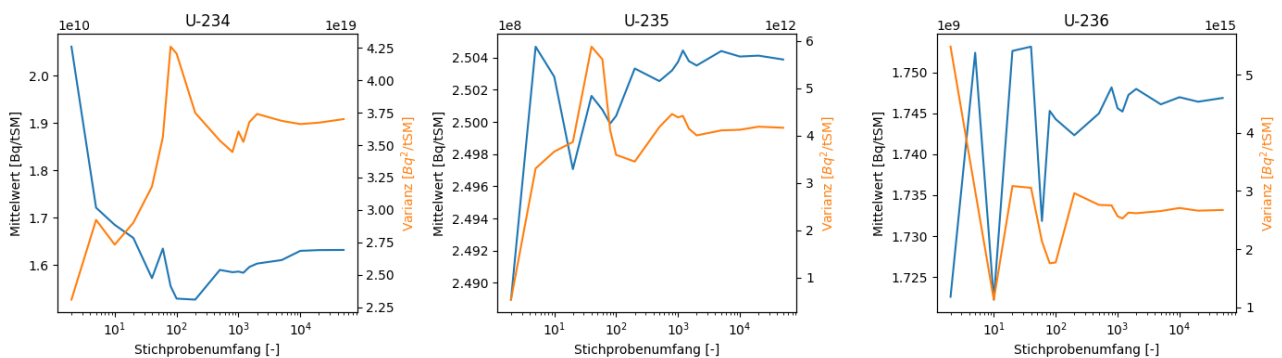


Abbildung 10 Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der initialen Aktivität für die Uranisotope U-234, U-235 und U-236 in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem MCS

Abbildung 11 zeigt die CDF der initialen Aktivität derselben Radionuklide für ein zentriertes LHS. Die CDF zeigt schon mit einem geringeren Stichprobenumfang die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion. Abbildung 12 verdeutlicht, dass aufgrund des zentrierten LHS-Designs der Mittelwert ab einem Stichprobenumfang von 2 Berechnungspunkten konsistent abgebildet wird, und es bereits bei deutlich weniger als 1 000 Berechnungen zu einer Stabilisierung der Varianz kommt.

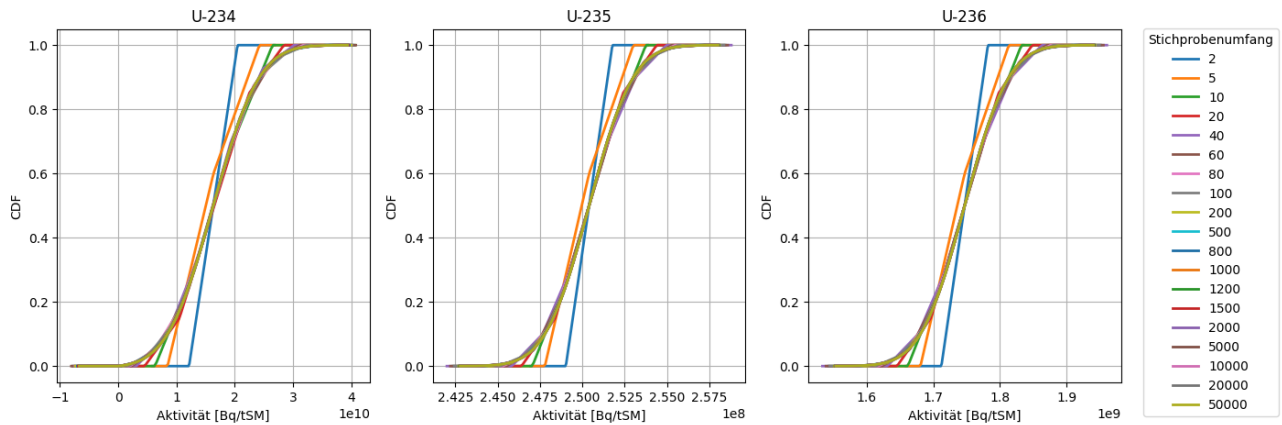


Abbildung 11 CDF der initialen Aktivität der Uranisotope U-234, U-235 und U-236 als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem zentrierten LHS

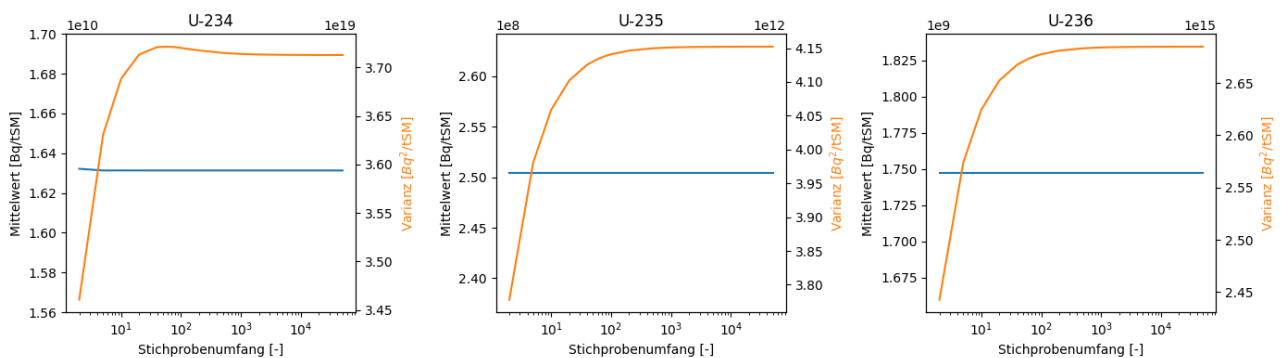


Abbildung 12 Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der initialen Aktivität für die Uranisotope U-234, U-235 und U-236 in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem zentrierten LHS

In beiden Designs wird damit das Ziel einer Abbildung der Eingangsparameter als mathematisch „asymptotisch erwartungstreuer, konsistenter Schätzer“ erreicht, jedoch mit einem unterschiedlichen Stichprobenumfang.

Um eine robuste Analyse zu erhalten, müssen auch die statistischen Kennwerte für die Ausgangsdaten mathematisch mindestens einem „asymptotisch erwartungstreuen Schätzer“ entsprechen. Hierzu werden als Beispiel die Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung als Zielgrößen einer vSU betrachtet (für Berechnungsgrundlagen siehe Anhang C). Abbildung 13 und Abbildung 14 zeigen die CDF und die Entwicklung des Mittelwertes und der Varianz der erwähnten Größen bei der Nutzung eines MCS in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang. Abbildung 15 und Abbildung 16 stellen analog die CDF und die Entwicklung des Mittelwertes und der Varianz bei der Nutzung eines zentrierten LHS in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang dar.

In beiden Designs wird wiederum das Ziel einer Abbildung der Ausgangsparameter als mathematisch „asymptotisch erwartungstreuer Schätzer“ erreicht, jedoch mit unterschiedlichem Stichprobenumfang je Design und betrachteter Größe.

Ein robustes und mit anderen Analysen vergleichbares Ergebnis setzt voraus, dass Stichprobendesign und -umfang aufeinander abgestimmt sind und sowohl die Eingangs- als auch die zu betrachtenden Ausgangsdaten (z. B. die Zielgrößen einer vSU) mathematisch als „asymptotisch erwartungstreue Schätzer“ beschrieben werden können.

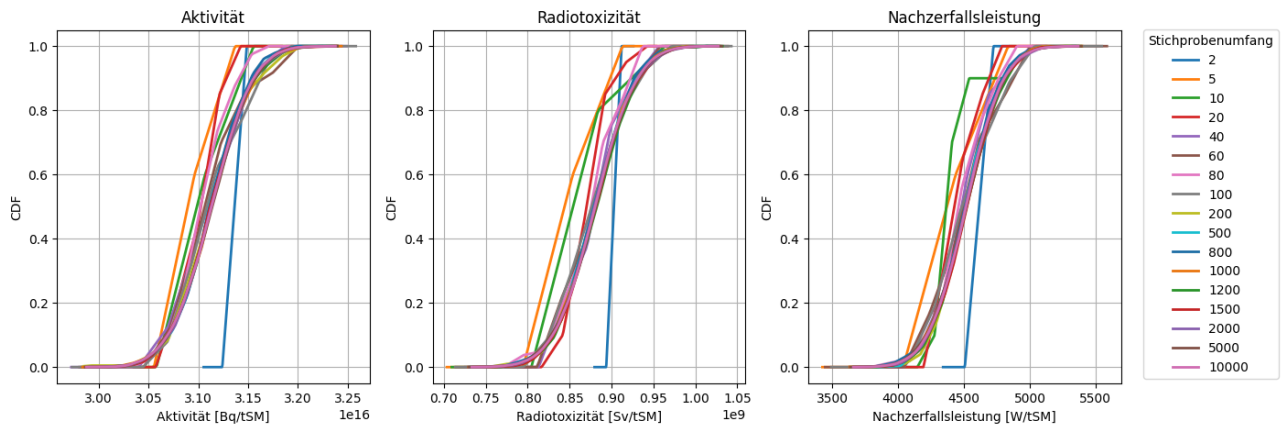


Abbildung 13 CDF der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem MCS der initialen Aktivität

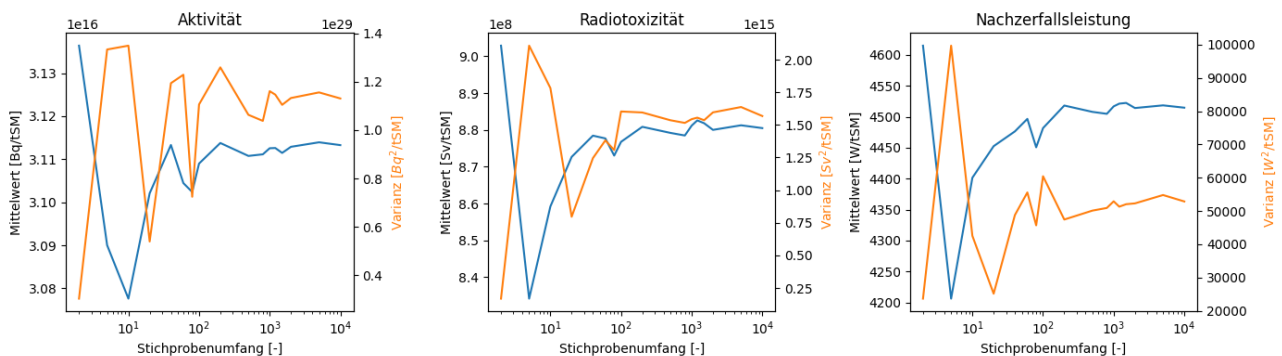


Abbildung 14 Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem MCS der initialen Aktivität

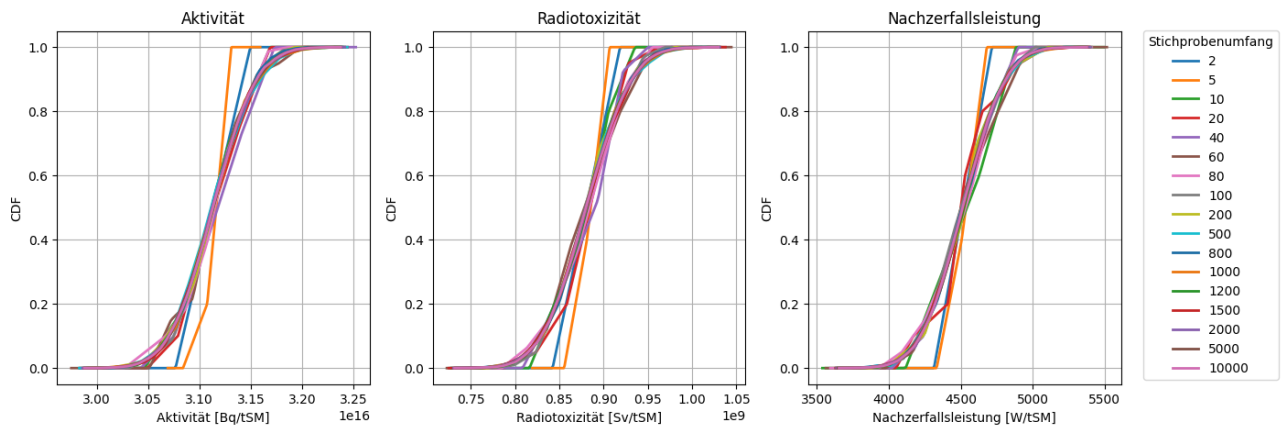


Abbildung 15 CDF der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) als Funktion des Stichprobenumfangs basierend auf einem zentrierten LHS der initialen Aktivität

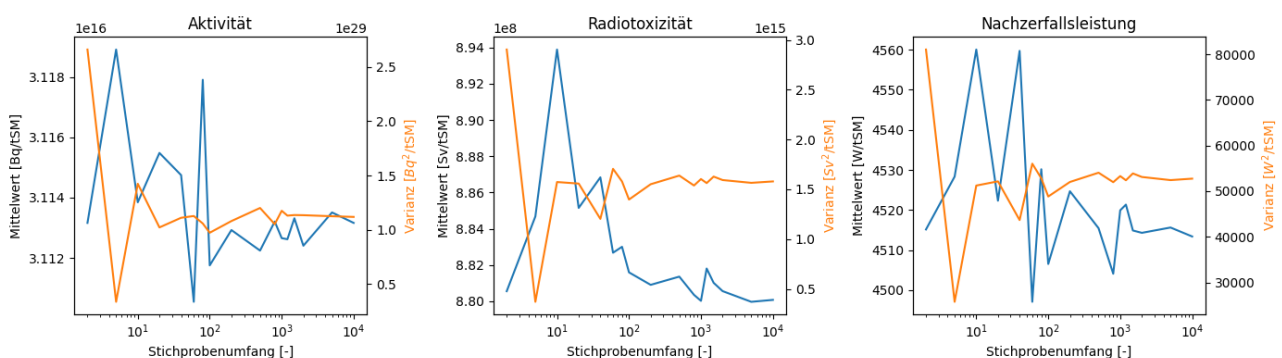


Abbildung 16 Entwicklung des Mittelwertes (blau) und der Varianz (orange) der Ausgangsdaten (Aktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) in Abhängigkeit vom Stichprobenumfang basierend auf einem zentrierten LHS der initialen Aktivität

4.2 Methoden

4.2.1 Übersicht

Die Methoden der Sensitivitätsanalyse lassen sich grob unterteilen in Methoden, welche rein grafisch (qualitativ) Abhängigkeiten zwischen Eingangs- und Ausgangsdaten herausarbeiten, und Methoden, die auf mathematischen Modellansätzen beruhende Sensitivitätskoeffizienten / -indizes berechnen, zum qualitativen Nachweis und zur Quantifizierung der Abhängigkeiten. (Veiga et al., 2021) unterscheiden zwischen folgenden, häufig genutzten mathematischen Modellansätzen der globalen und lokalen Sensitivitätsanalyse:

- Ableitungsbasierte Sensitivitätskoeffizienten, welche lokal auf der partiellen Ableitung basieren (Hamby, 1995) und wozu auch die grafischen Methoden des DIM und die skalierte Sensitivität gezählt werden können (Abschnitt 4.2.2), oder welche den eigentlich deterministischen lokalen Ansatz zu einem probabilistischen globalen Ansatz erweitern, wie z. B. (Sobol and Kucherenko, 2009).

- Lineare Korrelationskoeffizienten und Standardregressionskoeffizienten auf der Grundlage eines linearen Modellansatzes, der die Eingangs- mit den Ausgangsdaten verbindet. Diese Koeffizienten sind erweiterbar durch die Verwendung der Rangtransformation der Eingangs- und Ausgangsparameter, was zu Rangkorrelationskoeffizienten und Standardrangregressionskoeffizienten bzw. partialen Koeffizienten führt (Abschnitt 4.2.3).
- Allgemeine Varianz-basierte Koeffizienten (z. B. Sobol' Indizes), welche für jeden nicht-linearen Modellansatz mit einer endlichen Varianz, diejenigen Teile der Varianz der Ausgangsdaten angeben, welche auf jeden Eingangsparameter einzeln und alle Interaktionen zwischen den Eingangsdaten zurückzuführen sind (Abschnitt 4.2.4).
- Abhängigkeitskoeffizienten, die auf statistischen Momenten höherer Ordnung (mehr als dem Erwartungswert und der Varianz) beruhen, z. B. (Veiga, 2015).
- Dichtebasierte Koeffizienten, die die gesamte Verteilung der Ein- und Ausgangsdaten betrachten, unabhängig von den statischen Momenten, wie z. B. der Varianz.

Der Grund für die Existenz unterschiedlicher mathematischer Ansätze in den Methoden zur Sensitivitätsanalyse liegt in der Notwendigkeit / Möglichkeit der Charakterisierung unterschiedlicher Formen der Abhängigkeiten zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten. Abbildung 17 zeigt mögliche Parameterverteilungen und die erforderlichen mathematischen Ansätze zu deren Charakterisierung.

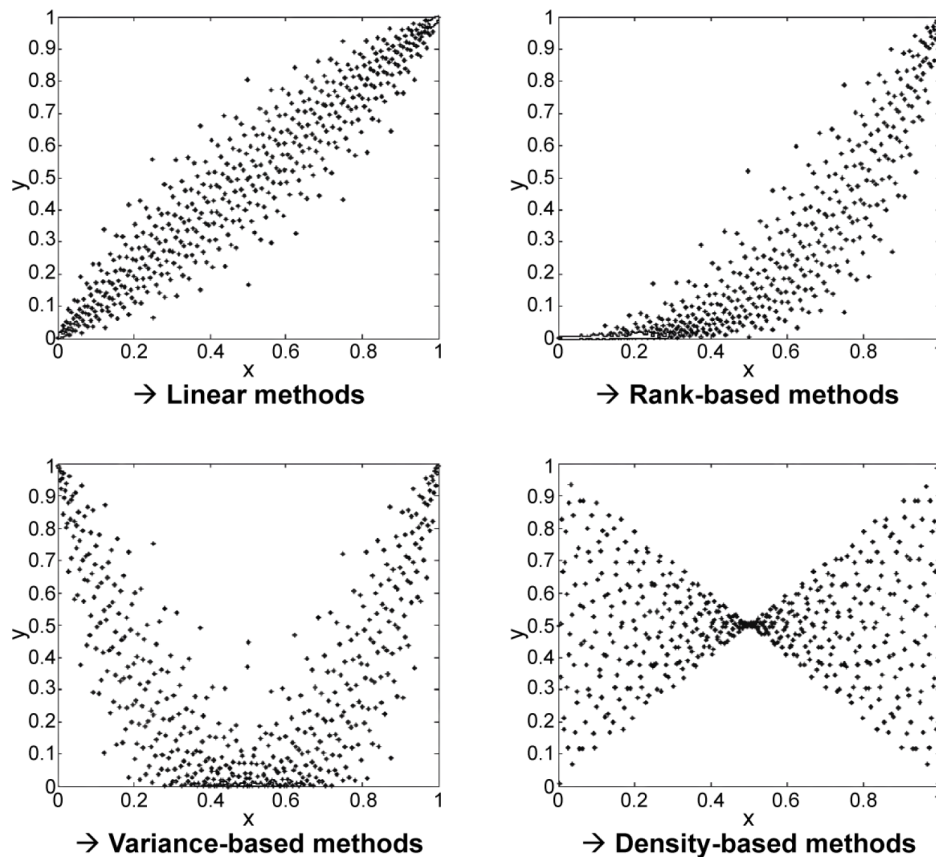


Abbildung 17 Charakterisierung unterschiedlicher Formen der Abhängigkeiten zwischen zwei Datensätzen und der erforderlichen mathematischen Methode zur Identifizierung dieser Abhängigkeiten (Diem et al., 2024)

Dargestellt für die Parameterdaten (x und y) im Bereich $[0, 1]$

Die beschriebenen Methoden zur Bestimmung von Sensitivitätskoeffizienten bauen dabei auf linearen Modellen oder den statistischen Momenten von Zufallsvariablen auf. Die Momente sind Kennwerte der deskriptiven Statistik und spielen eine Rolle in der Stochastik bzw. Wahrscheinlichkeitstheorie. Das erste Moment ist der Erwartungswert und wird üblicherweise mit dem Mittelwert einer Stichprobe geschätzt. Das zweite Moment ist die Varianz, welche oftmals in Form der Standardabweichung betrachtet wird, da sich diese bei einer angenommenen Normalverteilung aus der Wurzel der Varianz ergibt. Beide werden auch als statistische Momente der Verteilung einer Zufallsvariable bezeichnet⁹.

Im Allgemeinen besteht der einfachste Weg einen mathematischen Modellansatz $f()$ zu untersuchen darin, die Ausgangsdaten $\vec{y}$ des Modells zu untersuchen, wenn der Wert nur eines Eingangsparameters variiert wird. Diese Methode spiegelt ein differenzielles Vorgehen wider, entspricht also einer Methode zur Bestimmung einer partiellen Ableitung. Sie ist der Ursprung des so genannten OAT-Designs. Einige grafische Methoden und die lokalen ableitungsbasierten Methoden fußen auf diesem Design. Die Gruppe der ableitungsbasierten Methoden stellt eine bedeutende Gruppe der

⁹ Der Vollständigkeit halber werden das dritte Moment, die Schiefe, und das vierte Moment, die Wölbung, genannt.

Methoden der lokalen Sensitivitätsanalyse dar (Borgonovo and Plischke, 2016). Sie wird aber auch in globalen Methoden angewandt.

Nichtparametrische Methoden, die lineare Regressionstechniken verwenden, sind historisch gesehen die erste Gruppe von globalen Sensitivitätsmethoden (Borgonovo and Plischke, 2016). Einer der Gründe für die weite Verbreitung der nichtparametrischen Methoden ist die Tatsache, dass diese Sensitivitätsmaße aus einer gegebenen Monte-Carlo-Stichprobe (Helton and Davis, 2002) direkt geschätzt werden können.

Varianzbasierte Methoden bewerten die Sensitivität eines Eingangsparameters auf der Grundlage der erwarteten Veränderung der Varianz der Ausgangsdaten, die sich bei bekannten Eingangsdaten bzw. einer bekannten Wahrscheinlichkeit für die Eingangsdaten ergibt. Aus formaler Sicht basieren varianzbasierte Sensitivitätsmethoden auf der Zerlegung / Dekonvolution der Varianz. Die Varianz der Ausgangsdaten wird dabei aufgeteilt in die bekannte Varianz aufgrund der Abhängigkeit von den Eingangsdaten und eine Restvarianz. Historisch gesehen wurden varianzbasierte Sensitivitätsmaße sehr früh entwickelt. Varianzbasierte Sensitivitätsmaße der ersten Ordnung wurden von (Pearson, 1905) definiert und sind unter dem Namen Korrelationsverhältnis bekannt. Pearson führte sie ein, um die Grenzen der linearen Regression bei Vorliegen von Nichtlinearitäten zu überwinden. Allerdings ist die Schätzung des Pearson-Korrelationsverhältnisses ohne Computer sehr schwierig. So hat dieses Maß erst mit dem Aufkommen von Computern und mit der fortschreitenden Nutzung numerischer Simulationen in den angewandten Wissenschaften wieder an Interesse gewonnen. Die Idee, die Varianzreduktion zur Definition eines Sensitivitätsmaßes zu nutzen, entstand in den frühen 1990er Jahren (Borgonovo and Plischke, 2016).

Sensitivitätsmaße, die die gesamte Verteilung der Eingangsdaten $\vec{X}$ berücksichtigen, ohne ein statistisches Moment zu benutzen, werden als Momenten-unabhängig bezeichnet. Bei freier Variation aller Eingangsdaten gemäß der ihnen zugrundeliegenden Verteilungsfunktionen erhält man die unbedingte Wahrscheinlichkeitsdichte der Ausgangsdaten $\vec{Y}$. Diese Methoden werden daher auch als dichte-basierte Methoden bezeichnet. Historisch ist die erste Methode der dichte-basierten Sensitivitätsmaße das δ -Sensitivitätsmaß nach (Borgonovo, 2007).

Tabelle 7 fasst die Methoden der Sensitivitätsanalyse und deren hauptsächliches Anwendungsgebiet im Bereich des Inventarmodells zusammen. Die Tabelle ist nicht vollständig und schließt nicht alle Methoden ein, die innerhalb eines Sicherheitsnachweises für ein geologisches Endlager zur Anwendung kommen können. Diese wurden bereits an anderer Stelle zusammengefasst und publiziert, z. B. von (Becker, Dirk-Alexander et al., 2009; Brendler and Pospiech, 2022; *PREMIUM*, 2016). Die Zusammenstellung basiert hauptsächlich auf den Publikationen von (Bolado-Lavin and Badea, 2008; Borgonovo and Plischke, 2016; Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017).

Tabelle 7 Überblick über die Methoden der Sensitivitätsanalyse zum Inventarmodell aus der Literaturstudie

Mit Klammern sind Bereiche der Anwendung gekennzeichnet, in denen die Methode anwendbar ist, welche jedoch nicht explizit ihrer Hauptanwendung entsprechen.

Methoden		Erkundung	Qualitativ	Quantitativ
Grafisch	Zeitabhängige Summenkurve	x		
	Respective-Contribution-Plot	(x)	x	
	Streudiagramm (Scatter-Plot)	x	(x)	
	Cobweb-Plot	x	(x)	
	Contribution to the Sample Mean (CSM)		x	
	CUMulative SUMs of NOrmalized Reordered Output (CUSUNORO)		x	
	Tornado-Diagramm		x	(x)
	Box-Plot	x		
Ableitungs-basiert	Differential Importance Measure (DIM)		x	
	Darstellung der skalierten Sensitivität (Scaled-Sensitivity-Plot)		x	
	Relative deviation method		x	
	Relative deviation ratio method		x	
Korrelations- & regressions-basiert	Pearson Korrelationskoeffizient			x
	Spearman Korrelationskoeffizient & Kendall Tau			x
	Partial Correlation Coefficient (PCC)			x
	Partial Rank Correlation Coefficient (PRCC)			x
	Regression coefficients (linear, rank, stepwise)			x
Varianzbasiert	High Dimensional Model Representation (HDMR) deconvolution			x
	Variance deconvolution			x
	Taylor variance decomposition			x
	Sobol' indices			x
	Fourier Amplitude Sensitivity Test (FAST), extended FAST (eFAST)			x
	ANCOVA (ANalysis of COVariance)			x

Methoden		Erkundung	Qualitativ	Quantitativ
	Effective Algorithm for computing global Sensitivity Indices (EASI), COsine Sensitivity Index (COSI)			x
	Random Balance Designs (RBD)			x
Sonstige	Morris Sensitivitätsanalyse		x	(x)
	Meta modelling and State-Dependent Parameter method (SDP)			x
	Borgonovo's δ			x
	PiAnosi and WageNer (PAWN)			x
	Sensitivity analysis using Hilbert-Schmidt Independence Criterion (HSIC)			x

In den Abschnitten 4.2.2 – 4.2.5 wird eine Auswahl der Methoden mit Hilfe eines Illustrationsbeispiels erklärt. Nicht dargestellt werden die folgenden Methoden, da sie im Zusammenhang mit einem Inventarmodell eines Endlagers für radioaktive Abfällen nicht in der Literatur erwähnt werden (bzw. eher dem Status der Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Sensitivitätsanalyse zugeordnet werden können), aber als geeignet erscheinen und zukünftig durchaus zielführend zur Anwendung kommen könnten.

Die „Relative deviation method“ ist eine Methode, mit der die Variabilität der Ausgangsdaten ermittelt wird, indem jeder Eingangsparameter einzeln (OAT) entsprechend seiner Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion variiert wird. Als Maß der Sensitivität wird das Verhältnis der Standardabweichung der Ausgangsdaten zu ihrem Mittelwert benutzt, wodurch dieser ähnlich einem Variationskoeffizienten ist (Hamby, 1995).

Die „Relative deviation ratio method“ folgt dem Ansatz, dass für zwei Eingangsdaten mit einer „engen“ bzw. einer „weiten“ Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, welche eine identische Verteilung der Ausgangsdaten erzeugen, der Eingangsparameter mit der „engen“ Verteilungsfunktion sensibler ist. Das Maß der Sensitivität ist daher das Verhältnis der relativen Abweichung der Ausgangsdatenverteilung zur Eingangsdatenverteilung (Hamby, 1995).

In der Wahrscheinlichkeitstheorie ist es möglich, die Momente einer Zufallsvariable Y (Ergebnis eines Modells / Funktion $f(X)$) mit Hilfe einer Taylor-Entwicklung zu approximieren, vorausgesetzt $f(X)$ ist hinreichend differenzierbar und die Momente von X sind endlich. Diesem Ansatz folgend kann die Varianz der Ausgangsdaten durch eine Taylor-Entwicklung abgebildet werden, was zur Methode der „Taylor variance decomposition“ führt. Weitere Einzelheiten zu den Ausdrücken der Taylor-Entwicklung erster und zweiter Ordnung und zu den Näherungen der Taylorreihenmomente findet man z. B. bei (Veiga et al., 2021).

„Variance deconvolution“ ist eine Methode, die dem Ansatz folgt, dass die Varianz der Ausgangsdaten als Summe der Einflüsse aller Eingangsdaten beschrieben werden kann, wenn Ein- und Ausgangsdaten als Zufallsvariablen betrachtet werden. Es gibt dabei einen Anteil, der sich direkt aus dem Einfluss der einzelnen Eingangsdaten ergibt (Anteil erster Ordnung) und einen Anteil, der sich aus mehreren voneinander unabhängigen Eingangsdaten ergibt (zweiter und höherer Ordnung). Die Anzahl der Eingangsparameter wird dabei als Dimensionalität des Anteils bezeichnet.

Auf dieser Grundlage kann ein Sensitivitätsmaß definiert werden, welches die globale Empfindlichkeit unabhängig von der Linearität oder Nichtlinearität des Modells quantitativ widerspiegelt. Eine Varianz-Dekonvolution (Aufteilung auf Anteile der Varianz) erster Ordnung wird dabei als „Variance Deconvolution Method“ und eine Nutzung der Anteile höherer Ordnung als „High Dimensional Model Representation (HDMR) deconvolution“ bezeichnet (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017).

Der „Fourier Amplitude Sensitivity Test“ (FAST) ist eine Methode, die entwickelt wurde, um die Berechnung von varianzbasierten Sensitivitätsindizes erster Ordnung mit wesentlich geringerem Rechenaufwand zu ermöglichen. Die Methode basiert auf dem Ansatz, dass der Eingangsparameterraum statt des üblichen Stichprobendesigns (Abschnitt 4.1) mit periodischen Funktionen durchsucht werden kann. Die Periodizität kann in den Ausgangsdaten wiederentdeckt werden, und zwar umso deutlicher, je höher die Sensitivität ist. Wird jedem Eingangsparameter eine individuelle Frequenz zugewiesen, kann man die Einflüsse durch eine Fourier-Analyse der Ausgangsdaten unterscheiden. Es lässt sich zeigen, dass dieses Verfahren die varianzbasierten Sensitivitätsindizes liefert¹⁰. Eine Variante der FAST-Methode ist die „extended FAST“ Methode (eFAST). Diese Methode basiert auf der Nutzung von lediglich zwei verschiedenen Grundfrequenzen. Die höhere Frequenz ist dabei einem ausgewählten Eingangsparameter zugeordnet, die niedrigere Frequenz wird für alle anderen Parameter verwendet (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017).

Ein Nachteil von FAST/eFAST ist, dass das Sampling zu einer eher inhomogenen Abdeckung des Eingangsparameterraums führen kann. Um dieses Problem zu vermeiden und trotzdem eine Fourier-basierte Technik zu verwenden, wurde die „Random-Balance-Design-Method“ (RBD) entwickelt, die auf der Idee beruht, nur eine Frequenz zu verwenden (Tarantola et al., 2006). RBD berechnet alle Indizes erster Ordnung aus einer Stichprobe. Indizes höherer Ordnung können jedoch nicht berechnet werden.

Die „ANCOVA-Methode“ (ANalysis of COVariance) ist eine varianzbasierte Methode, die die ANOVA-Zerlegung (ANalysis Of VAriance) für Modelle mit korrelierten Eingangsparametern verallgemeinert (Caniou, 2012). Die Dekonvolution der Varianz ermöglicht es, die Sensitivitätsmaße als Summe eines physikalischen oder unkorrelierten Anteils und eines korrelierten Anteils der Eingangsdaten an den Ausgangsdaten zu definieren.

Die „Cosine Sensitivity“ (COSI) (Plischke, 2012a) ist eine Vereinfachung der EASI-Methode (siehe Kapitel 4.2.4), welche die schnelle Fouriertransformation durch eine diskrete Cosinus-Transformation ersetzt. Dies erlaubt eine vereinfachte Berechnung des Sensitivitätsindex erster Ordnung. Indices höherer Ordnung können durch ein spezielles Vorgehen ebenfalls abgeleitet werden.

Die „Meta modelling and State-Dependent Parameter method“ (SDP) beruht auf der Idee der Metamodellierung (Ratto et al., 2007). In dieser wird das ursprüngliche Modell durch ein vereinfachtes, rechenzeitparendes Meta-Modell ersetzt, welches das Verhalten des ursprünglichen Modells so gut wie möglich simuliert. Die Sensitivitäten erster Ordnung werden hierbei mit Hilfe des Metamodells berechnet (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017).

Varianzbasierte Ansätze werden häufig für die globale Sensitivitätsanalyse verwendet. Methoden, die nicht nur die Varianz, sondern die gesamte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) der

¹⁰ Bei nichtlinearen Modellen muss jede Frequenz zusammen mit einer ausreichenden Anzahl von Oberschwingungen analysiert werden. Die Frequenzen müssen daher entsprechend gewählt werden, um Überschneidungen zwischen den Eingangsparametern im Frequenzraum zu vermeiden.

Ausgangsdaten berücksichtigen, sind jedoch in Fällen vorzuziehen, in denen die Varianz kein angemessenes Maß für die Ungewissheit ist, z. B. wenn die Verteilung der Ausgangsdaten stark schief oder multimodal ist. Dennoch wurden dichte-basierte Methoden bisher nur in begrenztem Umfang eingesetzt, möglicherweise weil sie relativ schwierig zu implementieren sind (Pianosi and Wagener, 2015). Das „Borgonovo's δ “ ist, chronologisch gesehen, das erste dichte-basierte Sensitivitätsmaß (Borgonovo, 2007). (Pianosi and Wagener, 2015) stellten 2015 die PAWN - Methode vor, mit der sich dichte-basierte Sensitivitätsindizes effizient berechnen lassen. Die Schlüsselidee besteht darin, die Verteilungen der Ausgangsdaten durch ihre kumulativen Verteilungsfunktionen (CDF) zu charakterisieren, welche einfacher abzuleiten sind als die PDFs.

Die „Sensitivity analysis using Hilbert-Schmidt Independence Criterion“ (HSIC) bewertet die Abhängigkeit zwischen den Zufallsvariablen (Eingangs- und Ausgangsdaten) mittels eines Abhängigkeitsmaßes (HSIC), das sich auf die maximale mittlere Distanz zwischen den Verteilungsfunktionen der Zufallsvariablen stützt. Das Vorgehen wurde von (Gretton et al., 2005; Marrel and Chabridon, 2021; Veiga, 2015) dargestellt.

Darüber hinaus gibt es Methoden, die den Bereich der Eingangs- und Ausgangsdaten sequenzieren und innerhalb der Sequenzen die Sensitivität betrachten.

4.2.2 Grafische Methoden

In der Literatur finden sich zwei Arten von grafischen Darstellungen, zeitabhängige Darstellungen, d. h. Darstellungen der Ergebnisse als Funktion der Zeit, und Darstellungen, die auf einen Zeitpunkt fokussieren.

Zeitabhängige Darstellungen

Die einfachste Art der zeitabhängigen Darstellung ist die Darstellung der Entwicklung eines Parameterwertes in einer Zeitreihe, wobei bei mehreren Parametern ggf. zusätzlich eine Summenkurve dargestellt wird. Abbildung 18 zeigt die zeitliche Entwicklung der Massen der Nuklide (links) und der Aktivität (rechts) des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1). Die Gesamtaktivität als Ausgangsparameter ist dabei die Summe der Einzelaktivitäten der Nuklide (Total in Abbildung 18 rechts). Die anfängliche Masse aller Nuklide beträgt jeweils 1 kg. Aufgrund der relativ kurzen Halbwertszeit von Po-210 (138 Tage) geht anfänglich die Masse von Po-210 am stärksten zurück und die Gesamtaktivität ist durch den Zerfall von Po-210 dominiert (< 3 Jahre). Po-210 wird durch den Zerfall von Pb-210 (Halbwertszeit 22,2 Jahre) stetig gebildet. Dieser Prozess kann die Masse an Po-210 für einen kurzen Zeitraum stabilisieren, bevor diese weiter abnimmt. Die Gesamtaktivität setzt sich nach ca. 3 Jahren bis ca. 1 000 Jahre zu gleichen Teilen aus der Aktivität von Pb-210 und Po-210 zusammen. Nach ca. 1 000 Jahren beginnt der Zerfall von U-238 (Halbwertszeit 4,5 Milliarden Jahre) und dessen Tochternukliden die Masse von Pb-210 und Po-210 zu beeinflussen. Die Gesamtaktivität ist ab ca. 1 000 Jahren so weit abgesunken, dass die Aktivität von U-238 und dessen Tochternukliden die Gesamtaktivität dominiert. Daraus resultiert, dass Pb-210 und Po-210 wieder aufgebaut werden und der Zerfall von Pb-210 und Po-210 zu späten Zeiten wieder deutlicher zur Gesamtaktivität (> 100 000 Jahre) beiträgt.

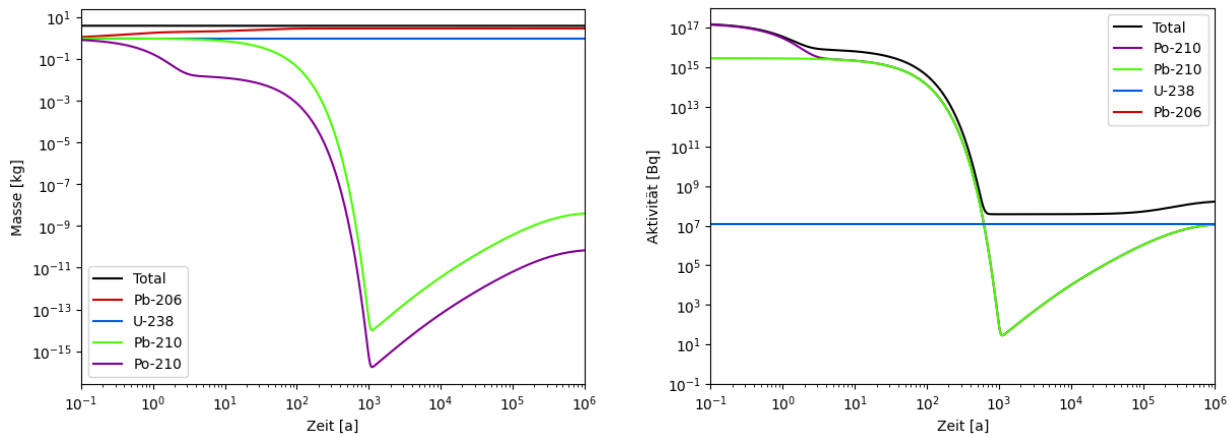


Abbildung 18 Zeitliche Entwicklung der Masse (links) und Aktivität (rechts) der Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Die Legenden sind nach den maximalen Werten der jeweiligen Parameter sortiert.

Diese Auswertung lässt sich auch mit Hilfe der Darstellung des Beitrags eines Eingangsparameters zum Wert des Ausgangsparameters Gesamtaktivität führen. Abbildung 19 (Respective-Contribution-Plot) zeigt eine Methode der grafischen Darstellung des prozentualen Anteils eines Nuklides (Eingangsparameter) am Ausgangsparameter (Gesamtaktivität). Auf der linken Seite wird der absolute Anteil unter der Gesamtaktivität, dem Wert des Ausgangsparameters des Modells, dargestellt. Auf der rechten Seite der Abbildung erfolgt die Darstellung der relativen / prozentualen Aufteilung.

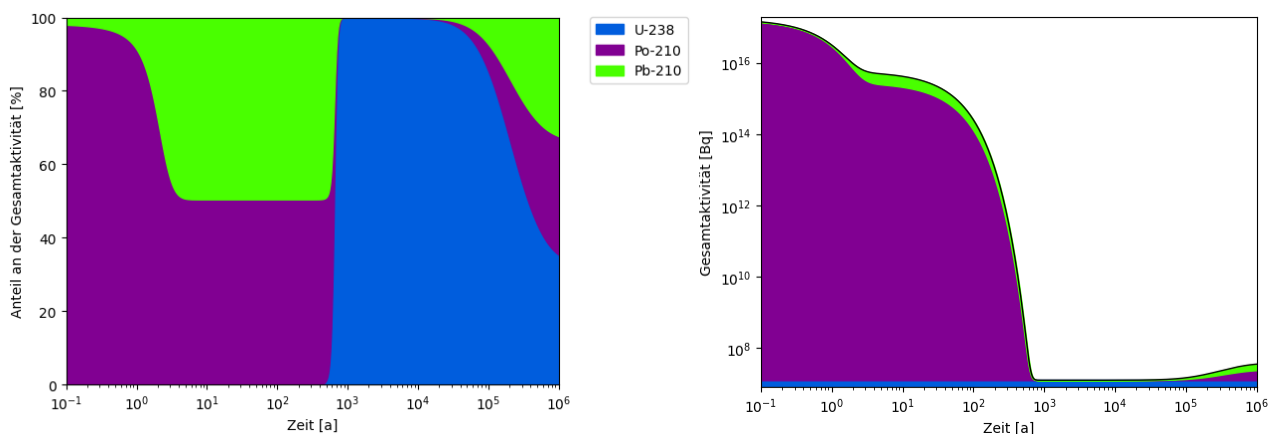


Abbildung 19 Respective-Contribution-Plot der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Darstellung unter dem Wert des Ausgangsparameters - Gesamtaktivität (links) bzw. des prozentualen Anteils am Wert des Ausgangsparameters - Gesamtaktivität (rechts)

Zur Darstellung der Sensitivitäten des Ausgangsdaten des Modells, der Gesamtaktivität, auf die anfängliche Masse der einzelnen Radionuklide (RN), als Eingangsdaten des Modells, gibt es grafische Methoden, die es erleichtern, die jeweils dominanten Eingangsdaten (hier anfängliche Massen der RN) zu charakterisieren. Das zu einem Zeitpunkt dominante RN (zeitabhängige Masse eines RN, siehe Abbildung 18 oder Anteil in Abbildung 19) muss nicht dem dominanten RN der Eingangsdaten, hier anfängliche Masse eines RN, entsprechen.

Differenzielle Methoden der Sensitivitätsanalyse werden auch als direkte Methoden bezeichnet (Hamby, 1995) und sind auf die Charakterisierung des Verhaltens eines Modells für ein Basis-szenario ausgerichtet. Sie zählen zu den Methoden des lokalen Ansatzes. Die differenzielle Sensitivitätsanalyse basiert auf der partiellen Differenzierung des aggregierten Modells. Wenn eine explizite algebraische Gleichung die modellierte Beziehung beschreibt, wird der Sensitivitätskoeffizient für einen bestimmten unabhängigen Eingangsparameter aus der partiellen Ableitung des abhängigen Ausgangsparameters in Bezug auf den unabhängigen Eingangsparameter berechnet.

Zwei grafische Methoden die den differenziellen Methoden zuzuordnen sind, sind das Differential Importance Measure (DIM) (Borgonovo and Apostolakis, 2001) und die Darstellung der skalierten Sensitivität (Scaled-Sensitivity-Plot). Sie erlauben die visuelle Identifikation des dominanten Eingangsparameters über den Zeitraum der Betrachtung hinweg. Beide Methoden folgen im Vorgehen dem lokalen Ansatz und im Design der Stichprobe der OAT-Methode (Abschnitt 4.1.1). Abbildung 20 zeigt beide Darstellungsmethoden. Der Unterschied in den Methoden besteht in der Normierung. Das DIM zeigt die Änderung der Ausgangsdaten (hier Gesamtaktivität) bezogen auf die anfängliche Änderung der Eingangsdaten (hier anfängliche Masse des RN) und normiert diese mit der Summe der Änderungen aus allen Berechnungen. In der Darstellung der skalierten Sensitivität erfolgt die Normierung mittels der zugrundeliegenden, lokalen Ausgangsdaten ohne Änderung in den Eingangsdaten. In diesem einfachen Beispiel (Anhang C.3.1) ergibt sich für beide Methoden der Normierung dasselbe Bild.

In Abbildung 20 ist ersichtlich, dass die anfängliche Masse von Po-210 in den ersten Jahren eine dominante Rolle spielt, die anfängliche Masse von Pb-210 im Zeitraum ab 2 Jahren bis ca. 1 000 Jahren den dominanten Beitrag zur Gesamtaktivität leistet und nachfolgend die anfängliche Masse von U-238 für die Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels verantwortlich ist, obwohl sich die Gesamtaktivität zu späteren Zeiten (> 30 000 Jahre) aus dem Zerfall aller 3 Nuklide ergibt (siehe Abbildung 19).

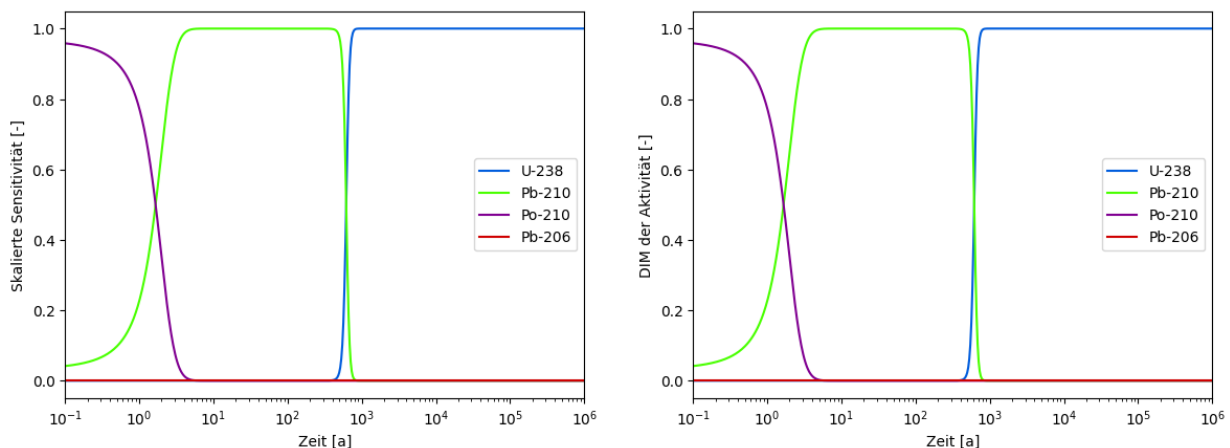


Abbildung 20 Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Darstellungen zu einem Zeitpunkt

Die zweite Art der Darstellung fokussiert auf einen Zeitpunkt, d. h. die Beziehungen der Eingangsparameter zu einem Ausgangsparameter eines Modells werden für einen konkreten Zeitpunkt betrachtet. Die Methoden erfordern die Annahme einer Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Eingangsparameter und die Abbildung dieser durch eine Stichprobe.

Hier wird für das Illustrationsbeispiel (Anhang C.3.1) eine Normalverteilung für die Werte der Eingangsparameter mit einer Standardabweichung von $\pm 10\%$ angenommen.

Ein Box-Plot stellt relevante statistische Kennwerte einer zufallsverteilten Variable dar. Für das in Anhang C.3.1 beschriebene Illustrationsbeispiel sind in Abbildung 21 die Eingangsdaten dargestellt, also die Masse der betrachteten Radionuklide nachdem auf den Referenzfall von je 1 kg U-238, Pb-210, Po-210 und Pb-206 die angenommene Normalverteilung angewendet wird. Der Box-Plot besteht aus den folgenden Elementen:

- der Median als orangefarbene Linie
- der Interquartilabstand (IQR, Interquartile Range) zwischen dem 25%-Perzentil und dem 75%-Perzentil (Quartile) als hell-orangefarbene Box mit schwarzer Umrandung
- der Bereich, der 95% der Werte (bzw. aller beobachteten Werte bei Darstellung von Messwerten) enthält, als Antennen / Whisker (vertikale schwarze Linien mit Querbalken)
- "Ausreißer" außerhalb des 95%-Bereichs als graue Kreise

Die Länge der Antennen ist in der Literatur nicht vereinheitlicht, sie können ebenso die gesamte Bandbreite der Daten beinhalten oder relativ zur IQR definiert werden (z. B. 1,5 mal Länge der IQR). In Abbildung 21 werden im Box-Plot die Eingangsdaten dargestellt, er kann jedoch auch zur Darstellung von Ausgangsdaten (Zufallsvariablen) zu einem Zeitpunkt verwendet werden.

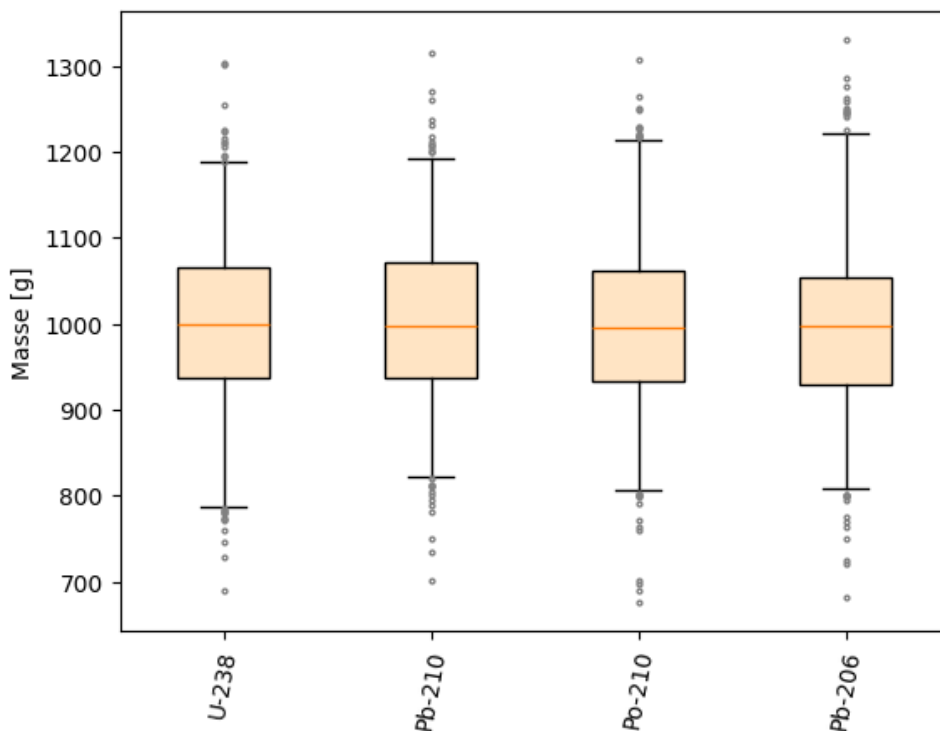


Abbildung 21 Box-Plot der statistischen Kennwerte der Eingangsdaten, hier initiales Masseninventar der Radionuklide

Orangefarbene Linie: Median, Box: Interquartile Range (IQR, 25%- bis 75%-Perzentil), Antennen: 95% der Daten (2,5%- und 97,5%-Perzentile), graue Kreise: „Ausreißer“

Abbildung 22 zeigt die Beziehung zwischen den Parametern in Form eines Streudiagramms (Scatter-Plot). Die Werte der Ausgangsparameter (Ordinate) werden als Funktion der Werte der Eingangsparameter (Abszisse) dargestellt. Von oben nach unten erfolgt die Darstellung für 0,1 Jahre, 20 Jahre und 300 000 Jahre. Zwei Parameter haben eine lineare Korrelation, wenn alle Punkte innerhalb einer Ellipse liegen, deren Haupt- und Nebenachsen unter der Annahme einer Normalverteilung für die Parameterwerte durch die Standardabweichung der Parameter beschrieben sind. Die Neigung der Ellipse repräsentiert den Korrelationskoeffizienten. Nach 0,1 Jahren besteht also eine positive Korrelation der Gesamtaktivität mit der anfänglichen Masse an Po-210, nach 20 Jahren mit der anfänglichen Masse an Pb-210 und nach 300 000 Jahren mit der anfänglichen Masse an U-238. Dies entspricht den Aussagen, die unter Kenntnis des zugrundeliegenden Modells (Zerfallsketten) aus Abbildung 18 und Abbildung 19 der zeitlichen Entwicklung gefunden wurden, bzw. ohne Kenntnisse des zugrundeliegenden Modells aus der Darstellung der DIM und skalierten Sensitivität abgeleitet werden können (Abbildung 20). Zwischen der anfänglichen Masse von Pb-206 und der Gesamtaktivität besteht zu keiner Zeit eine Korrelation, wie zu erwarten ist, da Pb-206 ein stabiles Nuklid ist.

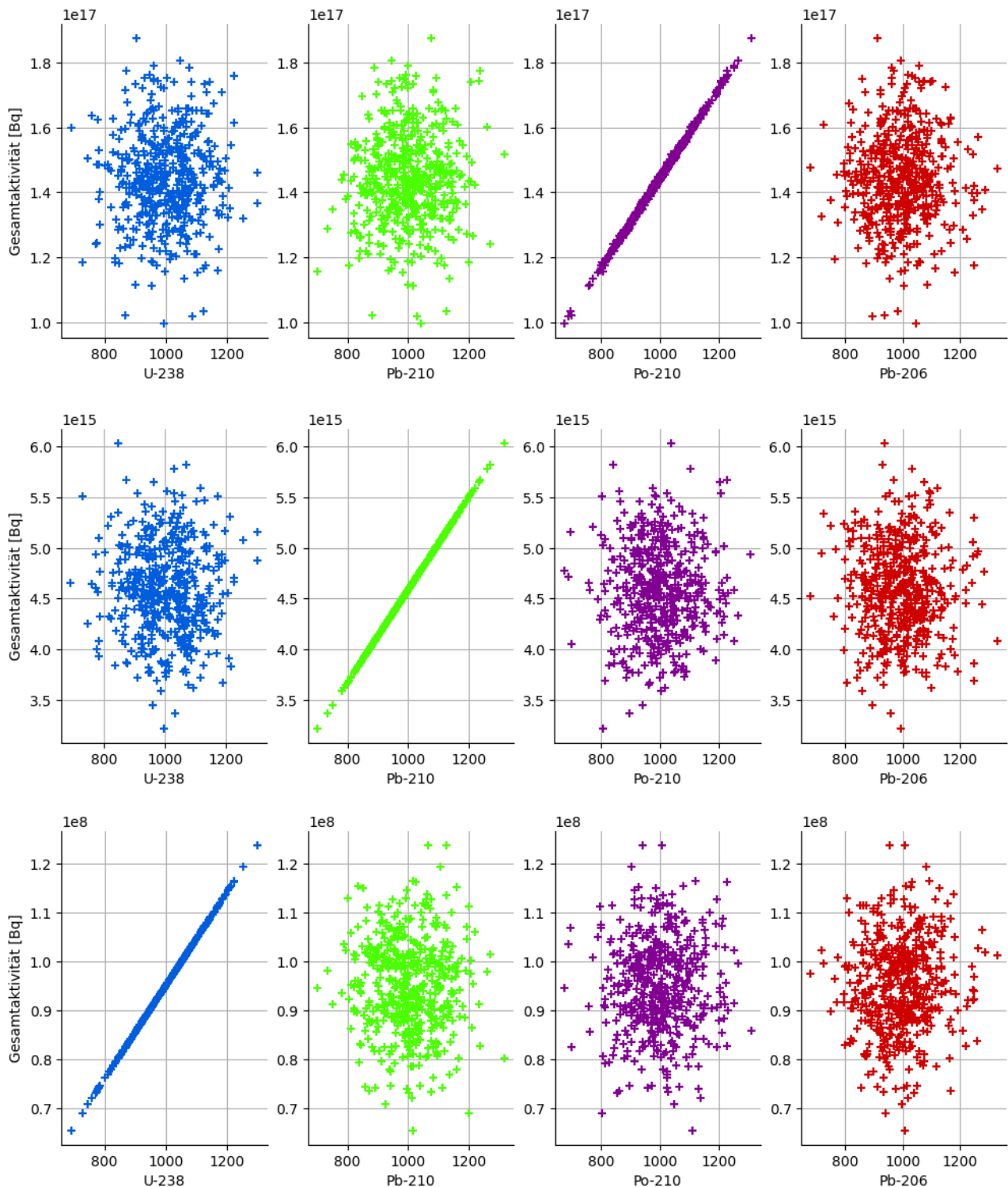


Abbildung 22 Streudiagramme der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) zu den Zeitpunkten 0,1 Jahre, 20 Jahre und 300 000 Jahre (von oben nach unten)

Abbildung 23 zeigt eine weitere Darstellungsmethode, den Cobweb-Plot. Im Cobweb-Plot erfolgt eine Darstellung der Werte jedes betrachteten Parameters (Eingangs- und Ausgangsparameter) auf je einer parallelen Achse (deshalb wird die Darstellung auch paralleler Koordinaten-Plot genannt). Die Achsen der Ausgangsparameter werden rechterhand der Eingangsparameter angeordnet. Alle

Kombinationen der Eingangsdaten des Stichprobenumfangs mit dessen Ausgangsdaten werden mit Linien verbunden (grau). Zur Darstellung von Beziehungen oder Abhängigkeiten werden Kombinationen aus der Stichprobe hervorgehoben (blau).

Im vorliegenden Beispiel werden die Ergebnisse oberhalb des 90%-Perzentils der Gesamtaktivität für den jeweils betrachteten Zeitpunkt hervorgehoben (rechte Achse). Dadurch ist ersichtlich, dass nach 20 Jahren eine hohe Gesamtaktivität nur bei einer hohen anfänglichen Masse an Pb-210 erzielt wird, da sich der Bereich der hervorgehobenen Eingangsdaten für Pb-210 bei dessen hohen Werten konzentriert, wobei die anderen Eingangsdaten über den gesamten Bereich des Eingangsparameters variieren (Abbildung 24 links). Nach 300 000 Jahren werden nur hohe anfängliche Massen an U-238 (Eingangsdaten) hohen Gesamtaktivitäten (Ausgangsdaten) zugeordnet (Abbildung 24 rechts). Diese Schlussfolgerung entspricht den Aussagen der vorhergehenden grafischen Darstellungen (Abbildung 20 und Abbildung 22).

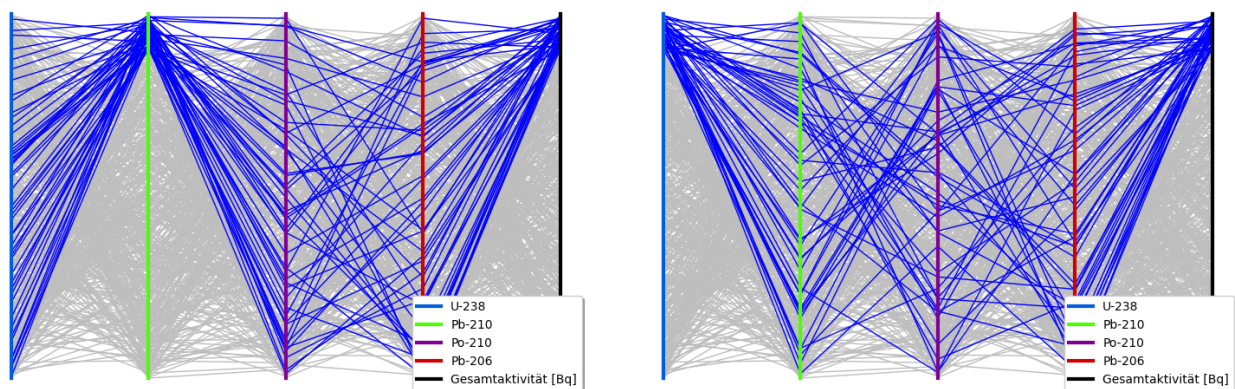


Abbildung 23 Cobweb-Plot der initialen Inventare und der Gesamtaktivität des Beispiels (Anhang C.3.1) zu den Zeitpunkten 20 Jahre (links) und 300 000 Jahre (rechts)

Eine weitere Methode zur grafischen Darstellung und Charakterisierung des Einflusses von Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten ist der „Contribution to the Sample Mean Plot“ (CSM-Plot). Der CSM-Plot stellt die kumulierte Summe der Ausgangsdaten, sortiert nach dem Rang des Eingangsparameters (d. h. nach aufsteigenden Werten des Eingangsparameters), normiert auf den Stichprobenumfang und den Mittelwert der Ausgangsdaten dar. Die Form der Kurve in Relation zur Diagonalen, insbesondere die vertikale Distanz zur Diagonalen, liefert Hinweise hinsichtlich des Einflusses der Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten des Modells. Verläuft die Kurve entlang der Diagonalen, so existiert kein signifikanter Einfluss der Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten. Verläuft die Kurve oberhalb der Diagonalen, so verringert sich der Wert des Ausgangsparameters bei einer Erhöhung des Wertes des Eingangsparameters, verläuft sie unterhalb, so erhöht sich der Wert des Ausgangsparameters bei einer Erhöhung des Wertes des Eingangsparameters. Ein starker Anstieg innerhalb eines Bereichs bedeutet, dass dieser Wertebereich des Eingangsparameters einen hohen Einfluss auf die Ausgangsdaten hat.

Angewandt auf das in Anhang C.3.1 beschriebene Inventar des Illustrationsbeispiels mit der sich ergebenden Gesamtaktivität resultieren für die Zeitpunkte 0,1 Jahre, 20 Jahre und 300 000 Jahre die in Abbildung 24 dargestellten Kurven. Das zugrundeliegende MCS hat einen Umfang von 1 000 Berechnungspunkten und wurde mit einer Standardabweichung von 10% unter der Annahme einer Normalverteilung der Eingangsparameter generiert. Zum Zeitpunkt 300 000 Jahre wurde eine zweite Stichprobe mit einer Standardabweichung von 100% generiert. Das Ergebnis zeigt eine Dominanz von Po-210 zu Beginn, gefolgt von Pb-210 nach 20 Jahren und zuletzt von U-238 und entspricht der

Aussage der vorhergehenden grafischen Darstellungen. Die normalverteilten Eingangsdaten und der lineare Zusammenhang mit den Ausgangsdaten erklären die symmetrische Form der Kurven des jeweils dominierenden Eingangsparameters (Nuklide). Die nur mäßige Abweichung von der Diagonalen verdeutlicht einen nur geringen Einfluss der Variation der Eingangsdaten (10% Standardabweichung) auf die Ausgangsdaten. Bei einer angenommenen Standardabweichung von 100% ist die Abweichung markanter (Abbildung 24 unten rechts).

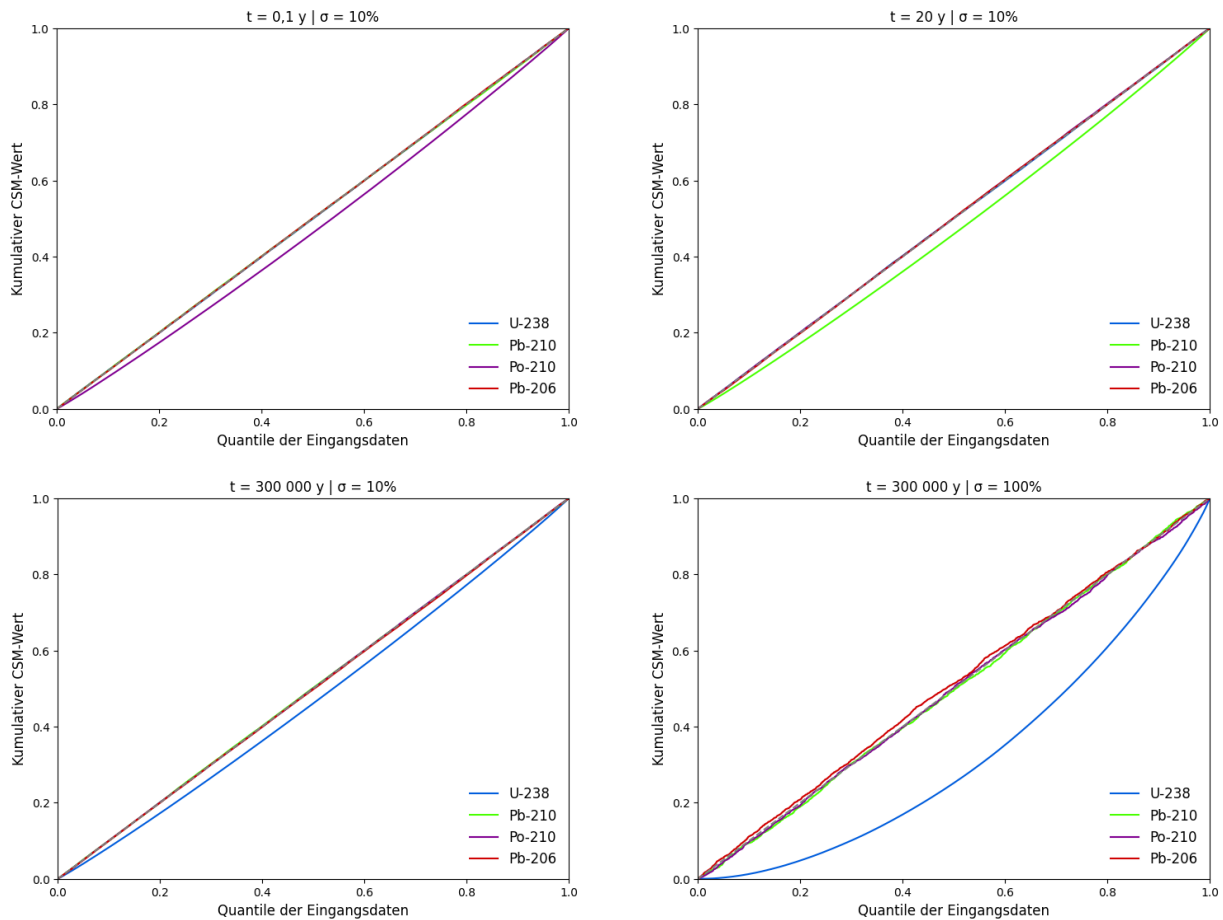


Abbildung 24 CSM-Plots der Gesamtaktivität für Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Abbildungen für die Zeitpunkte 0,1 Jahre (oben links), 20 Jahre (oben rechts) und 300 000 Jahre (unten). Normalverteilte Monte-Carlo-Stichprobe der Eingangsparameter mit einer Standardabweichung von 10% bzw. 100% (unten rechts)

Eine weitere Methode zur grafischen Darstellung und Charakterisierung der Eingangsdaten mit einem wesentlichen Einfluss auf die Ausgangsdaten ist der sogenannte „Cumulative Sums of Normalized Recorded Output“-Plot (CUSUNORO-Plot, (Plischke, 2011)). Dieser stellt, nach dem Rang der Eingangsdaten sortiert, die kumulierte Summe der Differenzen zwischen den Werten und dem Mittelwert der Ausgangsdaten dar, normiert auf den Stichprobenumfang und die Standardabweichung der Ausgangsdaten. Die Form der Kurve erlaubt Schlussfolgerungen hinsichtlich des Einflusses der Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten. Negative Werte bedeuten, dass sich der Wert des Ausgangsparameters bei einer Erhöhung des Wertes eines Eingangsparameters erhöht, positive Werte, dass sich der Wert des Ausgangsparameters bei einer Erhöhung des Wertes eines Eingangsparameters verringert – je höher der Absolutwert, desto höher der Einfluss der Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten. Eine zentrierte, parabolische Form deutet

auf symmetrisch verteilte Eingangsdaten und einen linearen Zusammenhang hin. Eine nicht symmetrische, schiefe Form signalisiert einen nicht-linearen Zusammenhang.

Angewandt auf die Gesamtaktivität des in Anhang C.3.1 beschriebenen Illustrationsbeispiels resultieren für die Zeitpunkte 0,1 Jahre, 20 Jahre und 300 000 Jahre die in Abbildung 24 dargestellten Kurven. Der zugrundeliegende Stichprobenumfang des MCS beträgt 1 000 Berechnungen, wobei eine Standardabweichung von 10% für eine auf positive Werte beschnittene Normalverteilung der Eingangsparameter angenommen wurde. Für den Zeitpunkt 300 000 Jahre wurde eine zweite Stichprobe mit einer Standardabweichung von 100% erstellt. Die Ergebnisse entsprechen den Aussagen der vorhergehenden grafischen Darstellungen und zeigen wiederum die Dominanz von Po-210 zu Beginn, abgelöst von Pb-210 zu mittleren bzw. U-238 zu späteren Zeitpunkten. Zum Zeitpunkt 300 000 Jahre sind die Kurven von U-238 zwischen den Varianten mit Standardabweichung 10% und 100% sehr ähnlich. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zum zuvor gezeigten CSM-Plot. Die leichte Schiefe im Falle von 100% Standardabweichung deutet darauf hin, dass der Zusammenhang weniger linear ist, was in diesem Fall der Beschränkung der Verteilungsfunktion auf positive Werte geschuldet ist¹¹.

¹¹ 100% Standardabweichung bedeuten im aktuellen Beispiel eine Standardabweichung von ± 1 kg, so dass bei einer symmetrischen Normalverteilung 98% der Werte einer Normalverteilung zwischen -1 kg und 3 kg liegen würden.

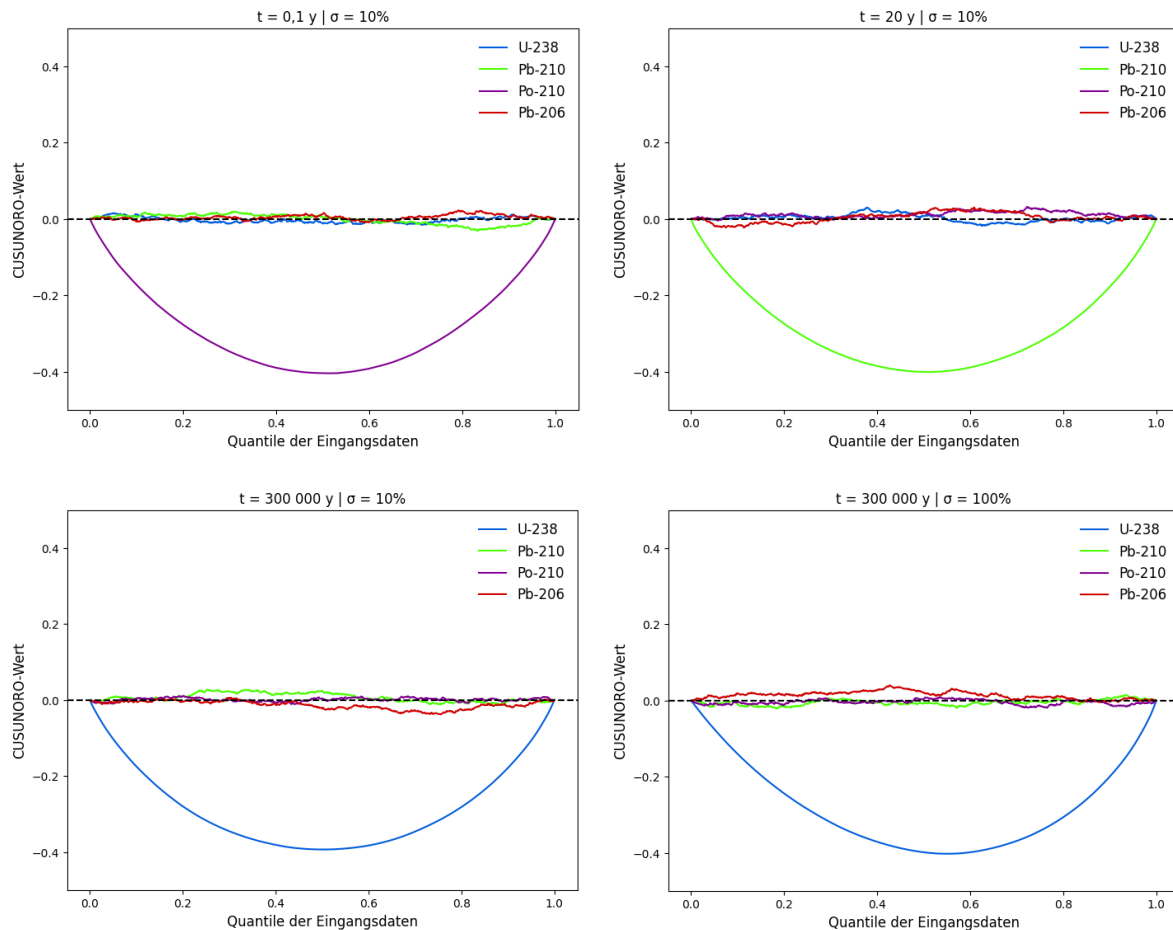


Abbildung 25 CUSUNORO-Plots der Gesamtaktivität für die Nuklide des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Abbildungen für die Zeitpunkte 0,1 Jahre (oben links), 20 Jahre (oben rechts) und 300 000 Jahre (unten). Normalverteilte Stichprobe der Eingangsparameter mit einer Standardabweichung von 10% bzw. 100% (unten rechts).

Der Einfluss einzelner Eingangsparameter auf die Ausgangsdaten kann auch mittels eines Tornado-Plots untersucht werden. In diesem wird die Abweichung der Ausgangsdaten von einem definierten Referenzfall dargestellt, welche daraus resultiert, dass einzelne Eingangsdaten variiert werden. Hierbei werden zwei Szenarien der Variation jedes Eingangsparameters verglichen, deren resultierende Abweichung pro variiertem Eingangsparameter in zwei farbigen Balken dargestellt wird. Die Eingangsparameter werden in der Darstellung dabei nach dem Ausmaß der resultierenden Abweichung sortiert. Die Interpretation eines Tornado-Plots kann also Aufschluss über den relativen Einfluss mehrerer Eingangsparameter sowie über Trends der Abhängigkeit der Ausgangsdaten von den Eingangsdaten liefern.

Für das in Anhang C.3.1 beschriebene Illustrationsbeispiel kann so beispielsweise der Einfluss gezeigt werden, den die Variation des anfänglichen Inventars einzelner Radionuklide auf die resultierende Gesamtaktivität hat. In Abbildung 26 sind Tornado-Plots der resultierenden Gesamtaktivität zu den Zeitpunkten 0,1 Jahre (Abbildung 26, links), 20 Jahre (Abbildung 26, Mitte) und 300 000 Jahre (Abbildung 26, rechts) dargestellt. Es wurde jeweils für ein Radionuklid das Anfangsinventar gemäß der angenommenen Normalverteilung mit einer Standardabweichung von $\pm 10\%$ variiert, während das Inventar der anderen RN konstant blieb. Die blauen Balken stellen

jeweils die Abweichung der resultierenden Gesamtaktivität vom Referenzfall für das Minimum des Inventars dar und die orangefarbenen Balken für das Maximum des Inventars. Die Ergebnisse entsprechen den Aussagen der vorhergehenden grafischen Darstellungen mit einer Dominanz von Po-210 zu Beginn, abgelöst von Pb-210 zu mittleren bzw. U-238 zu späteren Zeiten. Man sieht auch, dass zu frühen Zeiten Pb-210 bereits einen Einfluss auf die Gesamtaktivität hat, der jedoch klein ist. Zu den anderen Zeitpunkten hat nur das jeweils dominierende RN einen sichtbaren Einfluss.

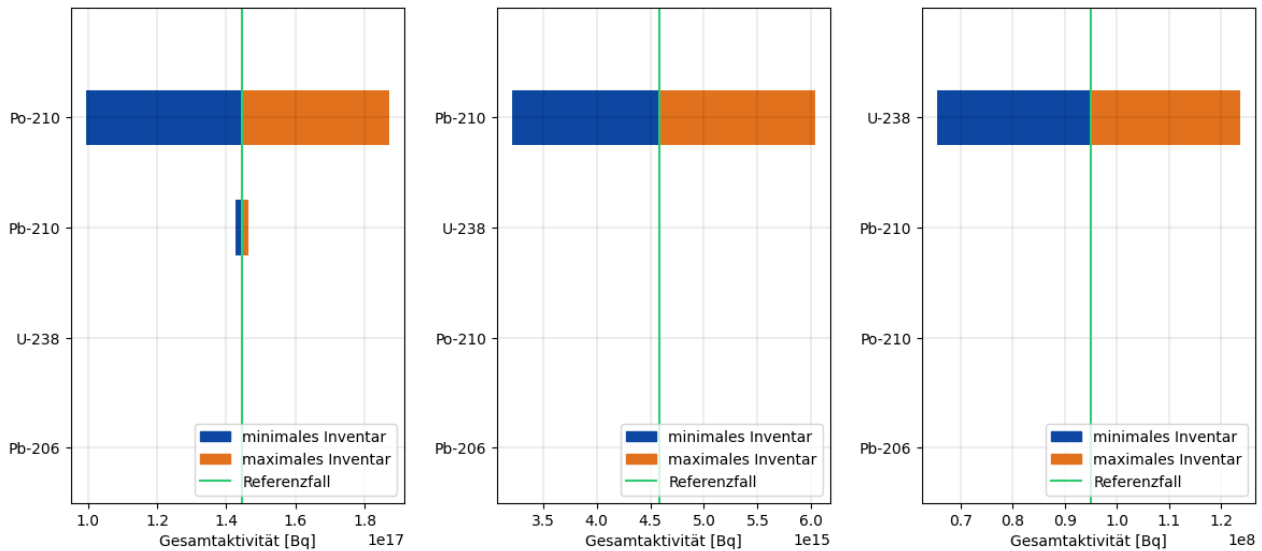


Abbildung 26 Tornado-Plots der Gesamtaktivität bei konsistenter Änderung des Anfangsinventars einzelner Radionuklide

Abbildungen für die Zeitpunkte 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts).

4.2.3 Korrelations- und regressionsbasierte Methoden

Korrelationsmaße beschreiben die Stärke des statistischen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen. Je nach Maß werden noch weitere Eigenschaften des Zusammenhangs beschrieben, z. B. die Richtung des Zusammenhangs (positiv / negativ)¹² oder die Art des Zusammenhangs (linear, nicht-linear, sinusförmig, unabhängig, etc.). Regressionsmaße beschreiben den funktionalen Zusammenhang zwischen zwei Variablen. Abbildung 27 illustriert beispielhaft verschiedene Zusammenhänge zwischen zwei Zufallsvariablen.

¹² Eine positive Korrelationsrichtung bedeutet, dass sich beide Variablen in die gleiche Richtung (zu höheren oder niedrigeren Werten) verändern. Eine negative Korrelationsrichtung bedeutet, dass sich die Variablen in entgegengesetzte Richtungen zueinander verändern.

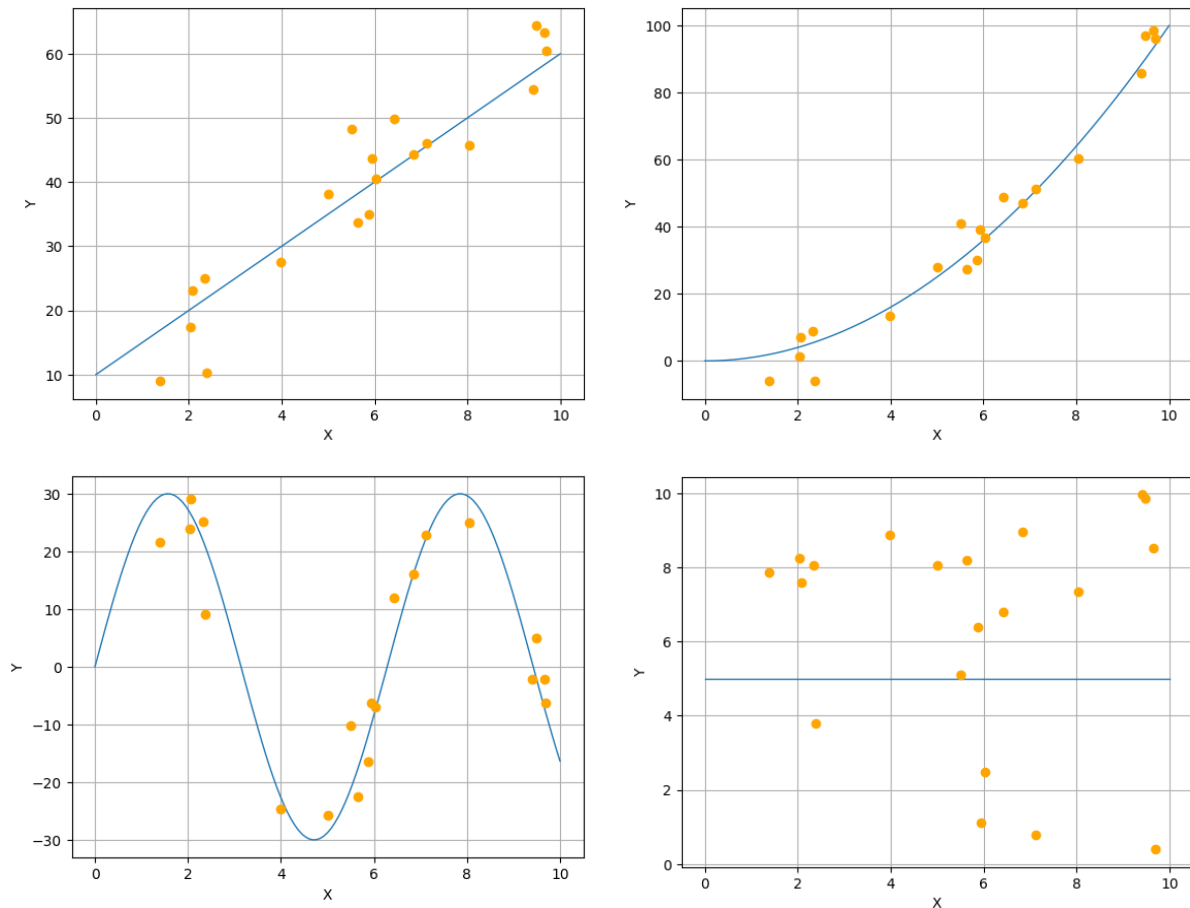


Abbildung 27 Beispielhafte Zusammenhänge zwischen zwei Zufallsvariablen und daraus abgeleitete Funktionsgraphen: positiv linear (oben links), positiv nicht-linear (oben rechts), sinusförmig (unten links), und unabhängig (unten rechts)

Nachfolgend werden in der Literatur gängige Korrelations- und Regressionskoeffizienten kurz erläutert und für verschiedene Zeitpunkte des in Anhang C.3.1 beschriebenen Illustrationsbeispiels berechnet. Als Eingangsdaten dient ein MCS mit einem Stichprobenumfang von 1 000 Berechnungen unter der Annahme normalverteilter Eingangsdaten mit einer relativen Standardabweichung von $\pm 10\%$. Als Ausgangsparameter dient die sich ergebende Gesamtaktivität.

Pearson

Der Korrelationskoeffizient nach Pearson, auch Produkt-Moment-Korrelation oder Bravais-Pearson-Korrelation genannt, drückt die Stärke des linearen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen aus. Er wird berechnet aus der Kovarianz der beiden Zufallsvariablen normiert auf das Produkt der Standardabweichungen und kann Werte zwischen -1 und +1 annehmen. Ein Wert von 0 bedeutet, dass kein linearer Zusammenhang vorliegt. Für die beispielhafte Zufallsvariablenverteilung in Abbildung 27 oben links ergibt sich ein Korrelationskoeffizient nach Pearson von nahezu +1. Für die weiteren Verteilungen in Abbildung 27 ergeben sich Werte nahe bei 0, da diese keinen linearen Zusammenhang aufweisen.

Spearman

Der Korrelationskoeffizient nach Spearman drückt die Stärke des monotonen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen aus. Die Berechnung entspricht jener nach Pearson, allerdings mit

den Werten der Ränge der Eingangs- bzw. Ausgangsparameter und nicht mit den tatsächlichen Werten. Dies führt zu einer Linearisierung des Zusammenhangs. Der Wertebereich des Spearman Korrelationskoeffizient liegt zwischen -1 und +1. Ein Wert von 0 bedeutet, dass kein monotoner Zusammenhang vorliegt. Für die beispielhafte Zufallsvariablenverteilung in Abbildung 27 ergibt sich für beide oberen Diagramme ein Korrelationskoeffizient nach Spearman nahe +1. Für die weiteren Verteilungen in Abbildung 27 (unten) ergeben sich Werte nahe 0, da diese keinen bzw. keinen monotonen Zusammenhang aufweisen.

Kendall

Der Korrelationskoeffizient nach Kendall (das Kendall Tau) drückt die Stärke des monotonen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen aus. Er basiert analog zum Spearman Korrelationskoeffizient auf den Werten der Ränge der Eingangs- bzw. Ausgangsparameter, allerdings werden bei der Berechnung die Unterschiede in der Reihenfolge der Werte gemäß der Ränge und nicht die Differenz der Ränge zwischen Eingangs- bzw. Ausgangsparameter betrachtet. Der Wertebereich des Kendall Korrelationskoeffizient liegt zwischen -1 und +1, wobei die Werte im Vergleich zu Spearman tendenziell etwas geringer ausfallen. Ein Wert von 0 bedeutet, dass kein bzw. kein monotoner Zusammenhang vorliegt.

Für das in Anhang C.3.1 beschriebene Inventar des Illustrationsbeispiels und dessen Gesamtaktivität zu bestimmten Zeiten ergeben sich die in Abbildung 28 dargestellten Korrelationskoeffizienten nach Pearson, Spearman und Kendall. Alle drei Methoden zeigen aufgrund der Linearität des zugrundeliegenden Modells (Modell des radioaktiven Zerfalls) und der angenommenen Normalverteilung der Eingangsdaten sehr ähnliche Ergebnisse. Des Weiteren fällt auf, dass der zum jeweiligen Zeitpunkt dominierende Eingangsparameter (anfängliches RN-Inventar) die höchste Korrelation zum Ausgangsparameter mit einem Wert nahe 1 zeigt, während die anderen Eingangsparameter Werte nahe 0 zeigen (vgl. DIM und skalierte Sensitivität in Abbildung 20). Nur während des Übergangs der Dominanz von einem zum nächsten Eingangsparameter zeigen sich Werte der Korrelationskoeffizienten zwischen 0 und 1 – zum Beispiel löst Pb-210 im Zeitraum zwischen 0,5 und 5 Jahre Po-210 als dominanten Eingangsparameter ab, was seinen „ansteigenden“ Korrelationskoeffizient mit ca. 0,25 erklärt (Abbildung 28, zweite Reihe). Das Ergebnis der Analyse der Korrelationen zwischen den Eingangsparametern, hier die anfängliche Masse der Nuklide, und dem Ausgangsparameter, hier die Gesamtaktivität, ist also nicht von der im Modell abgebildeten Zerfallskette beeinflusst. Das im Ergebnis der Analyse gefundene Nuklid mit der stärksten Korrelation zu einem Zeitpunkt muss nicht zwingend den zu diesem Zeitpunkt größten Anteil an der Gesamtaktivität (Ausgangsparameter) haben. Die Korrelation besteht nur zwischen der anfänglichen Masse (Eingangsparameter) und der Gesamtaktivität zum betrachteten Zeitpunkt (Ausgangsparameter).

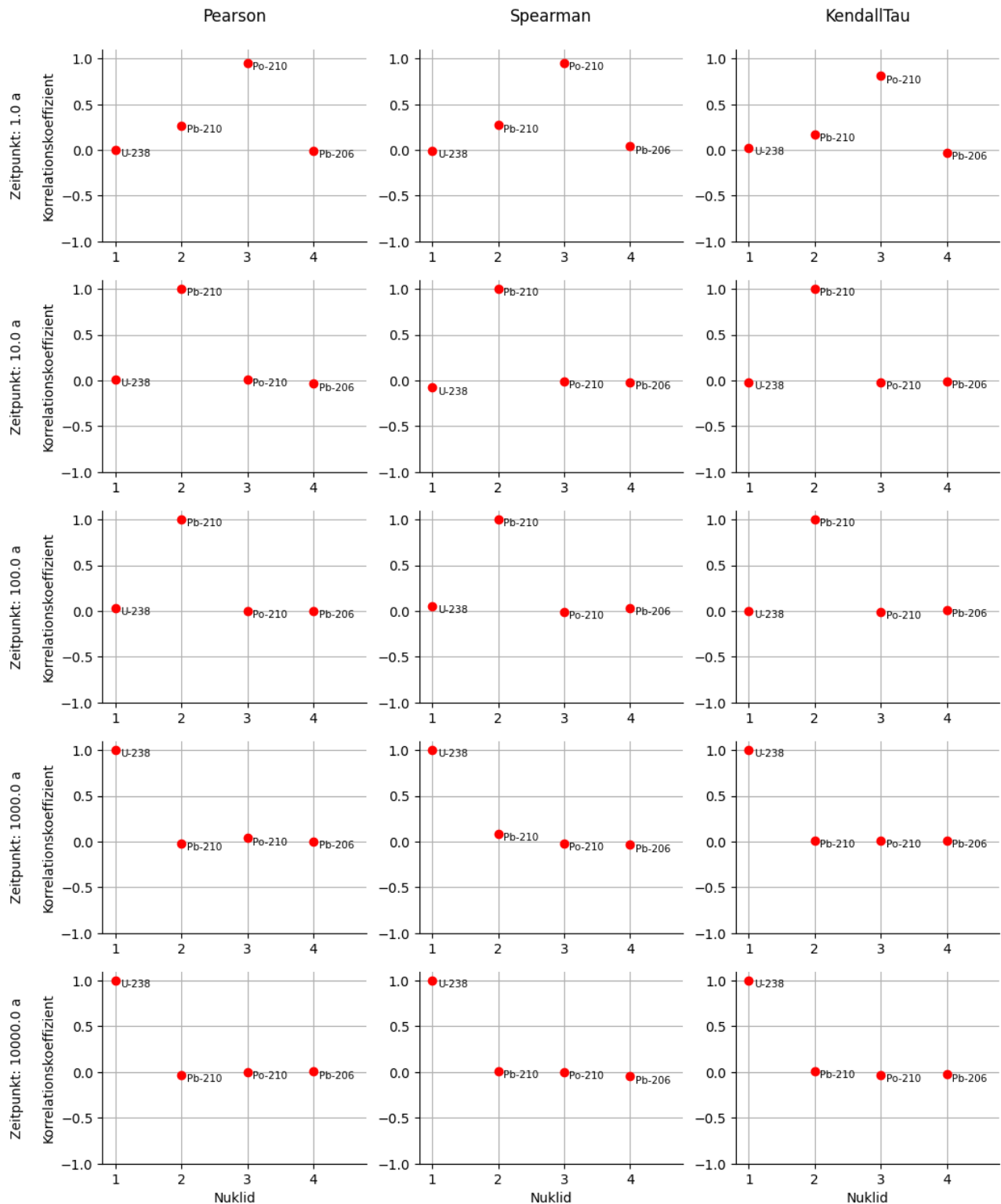


Abbildung 28 Korrelationskoeffizienten nach Pearson (links), Spearman (mittlere Spalte) und Kendall (rechts) des anfänglichen Inventars der Nuklide des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität zu verschiedenen Zeitpunkten

Partialkorrelationskoeffizient / Partial Correlation Coefficient (PCC)

Der partielle Korrelationskoeffizient, auch Partialkorrelationskoeffizient genannt, drückt die Stärke des linearen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen (Eingangs- und/oder Ausgangsparameter) unter Abzug des Einflusses weiterer Zufallsvariablen aus. Bezogen auf Inventarmodelle existieren solche Abhängigkeiten beispielsweise entlang von Zerfallsketten. Der partielle Korrelationskoeffizient ermöglicht in dieser Situation den verbleibenden Einfluss eines bestimmten anfänglichen Nuklidinventars (Eingangsparameter) auf den Ausgangsparameter (z. B. Gesamtaktivität) zu bestimmen, nachdem die Einflüsse von allen anderen Eingangsparametern (anfängliches Inventar der Eltern-Nuklide) eliminiert wurden. Der Wertebereich des partiellen Korrelationskoeffizient liegt zwischen -1 und +1.

Für das in Anhang C.3.1 beschriebene Inventar des Illustrationsbeispiels und dessen Gesamtaktivität zu bestimmten Zeitpunkten, ergeben sich die in Abbildung 29 dargestellten partiellen Korrelationskoeffizienten. Zum Vergleich sind zusätzlich die entsprechenden Korrelationskoeffizienten nach Pearson dargestellt. Es fällt auf, dass der partielle Korrelationskoeffizient für jeden Eingangsparameter (anfängliches Nuklidinventar) einen hohen Wert annimmt, solange dieser einen Einfluss auf den Ausgangsparameter hat, d. h. im vorliegenden Fall, wenn das anfängliche Nuklidinventar noch nicht vollständig zerfallen ist. Dies führt dazu, dass der partielle Korrelationskoeffizient für U-238, aufgrund seiner vergleichsweise großen Halbwertszeit, über den gesamten Betrachtungszeitraum einen hohen Wert (nahe 1) hat, jener für Pb-210 bis 1 000 Jahre ungleich Null bleibt und jener für Po-210 weniger als 100 Jahre ungleich Null bleibt.

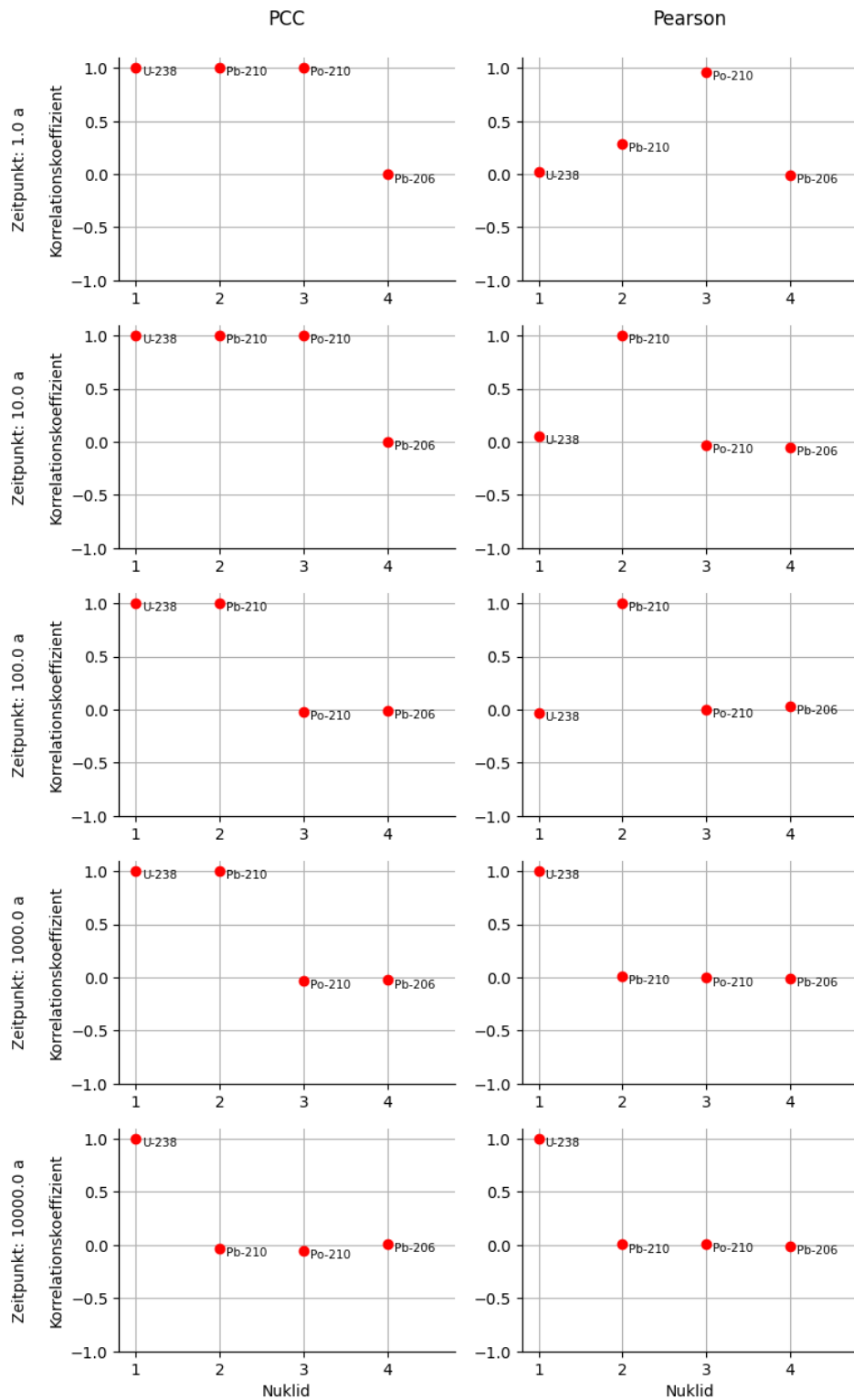


Abbildung 29 Partialkorrelationskoeffizient (PCC, links) des anfänglichen Inventars der Nuklide des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität zu verschiedenen Zeitpunkten im Vergleich mit dem Korrelationskoeffizient nach Pearson (rechts)

Partieller Rangkorrelationskoeffizient / Partial Rank Correlation Coefficient (PRCC)

Der partielle Rangkorrelationskoeffizient drückt die Stärke des monotonen Zusammenhangs zwischen zwei Zufallsvariablen (Eingangs- und Ausgangsparameter) unter Abzug des Einflusses weiterer Zufallsvariablen aus. Die Berechnung erfolgt analog zum partiellen Korrelationskoeffizienten allerdings basierend auf Rangwerten (=Linearisierung) und nicht auf den tatsächlichen Werten der Zufallsvariablen. Der Wertebereich des partiellen Rangkorrelationskoeffizienten liegt zwischen -1 und +1.

Standardisierter Regressionskoeffizient / Standard Regression Coefficient (SRC)

Beschäftigt sich die Korrelation mit der Frage nach dem funktionellen Zusammenhang zwischen zwei Zufallsvariablen, so nutzt die Regression einen angenommenen Zusammenhang, um Werte der einen Variable auf Basis der anderen Variable vorherzusagen. Das Ergebnis der Regression ist die Regressionsgleichung deren Steigung bei angenommenem linearen Zusammenhang dem Regressionskoeffizienten, auch Regressionsgewicht genannt, entspricht. In der standardisierten Form lassen sich Regressionskoeffizienten unterschiedlicher Skalierung besser miteinander vergleichen.

Der standardisierte Regressionskoeffizient unterstellt einen linearen Zusammenhang zwischen den Zufallsvariablen. Die Güte des linearen Zusammenhangs drückt sich im möglichen Wertebereich des standardisierten Regressionskoeffizienten zwischen -1 und +1 aus. Eine hohe Güte ergibt sich für Werte in Richtung der Extreme, eine niedrige Güte für Werte nahe 0.

Standardisierter Rangregressionskoeffizient / Standard Rank Regression Coefficient (SRRC)

Der standardisierte Rangregressionskoeffizient wird analog zum standardisierten Regressionskoeffizient berechnet, allerdings basierend auf Rangwerten (=Linearisierung) und nicht auf den tatsächlichen Werten der Zufallsvariablen. Der Wertebereich des standardisierten Rangregressionskoeffizient liegt zwischen -1 und +1. Für das in Anhang C.3.1 beschriebene anfängliche Inventar des Illustrationsbeispiels und dessen Gesamtaktivität zu bestimmten Zeiten ergeben sich die in Abbildung 30 dargestellten standardisierten Regressionskoeffizienten und standardisierten Rangregressionskoeffizienten. Zum Vergleich sind zusätzlich die entsprechenden Korrelationskoeffizienten nach Pearson dargestellt. Es fällt auf, dass sich die Regressionskoeffizienten je nach Methode (SRC, SRRC) nicht voneinander unterscheiden, was an der Linearität des Modells liegt. Tatsächliche und rangsortierte Werte führen daher zu quasi-identischen Regressionskoeffizienten.

Im Vergleich zum Korrelationskoeffizient nach Pearson sind die standardisierten Regressionskoeffizienten ebenfalls nahezu identisch. Dies liegt an der Standardisierung, welche den nicht-standardisierten Regressionskoeffizienten in den Korrelationskoeffizienten nach Pearson überführt. Gleiches gilt für die Standardisierung des Rangregressionskoeffizienten, welcher in den Korrelationskoeffizienten nach Spearman überführt wird. Standard(rang)regressionskoeffizienten erster Ordnung entsprechen also Korrelationskoeffizienten nach Pearson bzw. Spearman.

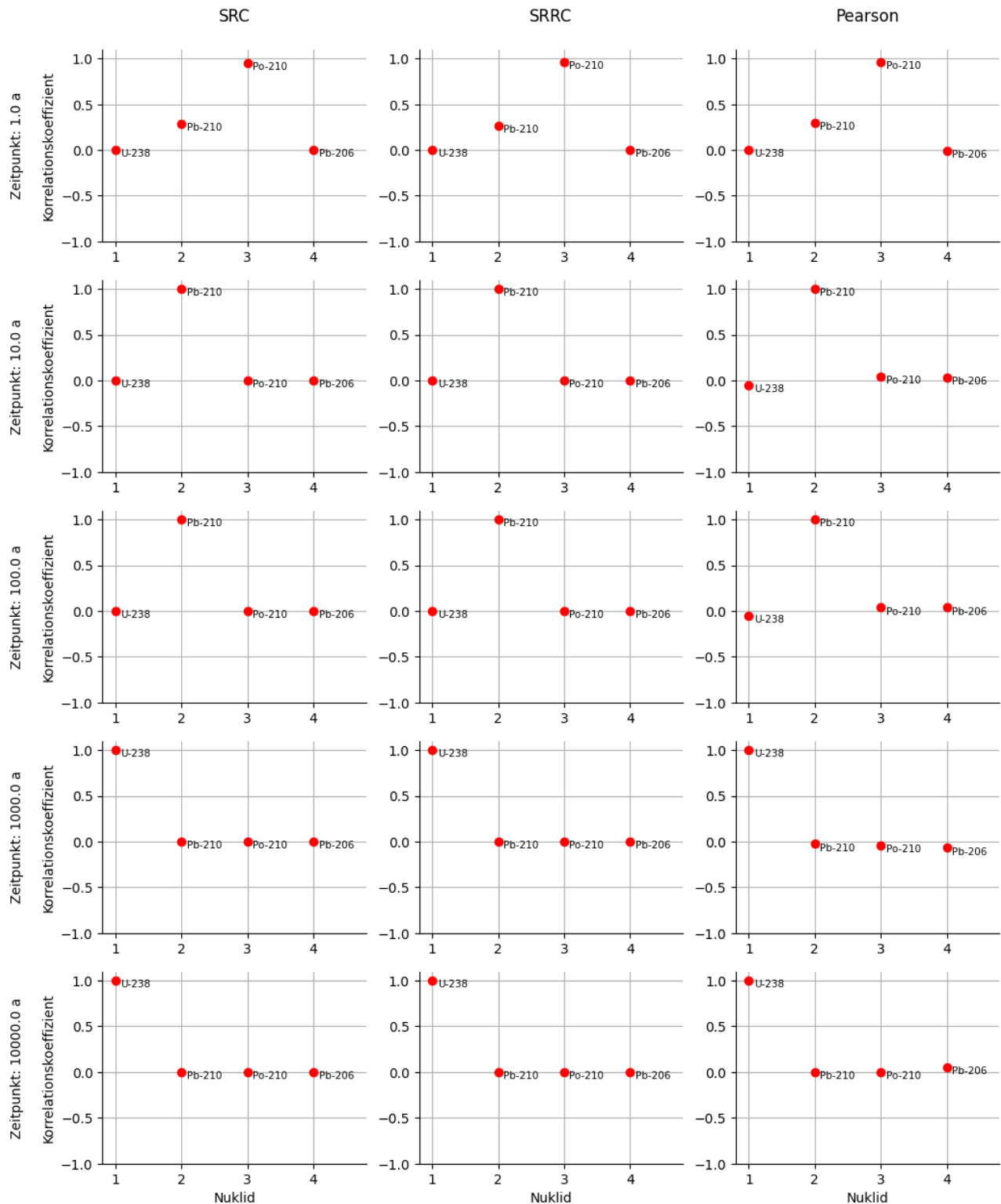


Abbildung 30 Standardisierter Regressionskoeffizient (links) und standardisierter Rangregressionskoeffizient (mittlere Spalte) zwischen den anfänglichen Nuklidmassen des Illustrationsbeispiels und der Gesamtaktivität für verschiedene Zeitpunkte im Vergleich mit dem Korrelationskoeffizient nach Pearson (rechts)

4.2.4 Varianzbasierte Methoden

Varianzbasierte Methoden bewerten die Sensitivität eines Ausgangsparameters auf einen oder mehrere Eingangsparameter auf der Grundlage der erwarteten Veränderung der Varianz der Ausgangsdaten, die sich bei einer bekannten Wahrscheinlichkeit für die Eingangsdaten ergibt. Formal basieren die varianzbasierten Sensitivitätsmethoden auf einer Zerlegung / Dekonvolution der Varianz der Ausgangsdaten in einen Anteil der Varianz aufgrund der Abhängigkeit von den Eingangsdaten und eine Restvarianz.

Sobol'

Der Sobol' Index der ersten Ordnung (Sobol, 1993) beschreibt den Anteil an der Varianz der Ausgangsdaten $\vec{Y}$, welcher den Eingangsdaten $\vec{X}$, speziell den Werten eines Eingangsparameters, zugeordnet werden kann. Um die durch die Werte eines einzelnen Eingangsparameters erzeugte Varianz der Ausgangsdaten bei der Nutzung des Modells $\vec{Y} = f(\vec{X})$ abzuschätzen, wird ein spezifisches Stichprobendesign verwendet. In diesem Design werden zwei unabhängige Stichproben im Umfang der Anzahl der Eingangsparameter verwendet und eine kombinierte Stichprobe konstruiert, indem jeweils eine einzelne Spalte der ersten Stichprobe durch die entsprechende Spalte der zweiten Stichprobe ersetzt wird. Es werden dadurch gezielt einzelne Eingangsparameter variiert, während die anderen unverändert gelassen werden. Für alle Kombinationen werden die Ausgangsdaten berechnet, wodurch mit steigender Anzahl an Eingangsparametern die Anzahl der erforderlichen Berechnungen steigt (Spießl, Sabine and Becker, Dirk-Alexander, 2017). Der Sobol' Index der ersten Ordnung ist der sich ergebende Anteil an der Varianz des Ausgangsparameters für einen Eingangsparameter normiert auf die gesamthafte Varianz des Ausgangsparameters. Die Werte des Index liegen somit im Bereich 0 – 1.

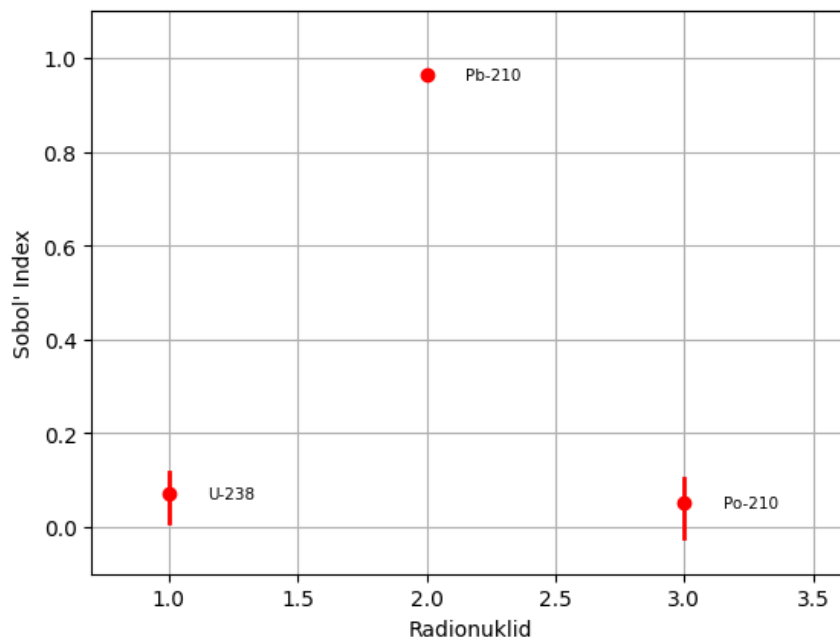


Abbildung 31 Sobol' Index erster Ordnung der Anfangsinventare an U-238, Pb-210 und Po-210 aus dem Illustrationsbeispiel für die Gesamtaktivität des Inventars für den Zeitpunkt 20 Jahre

Die vertikalen, roten Linien zeigen die Ungewissheit in der Abschätzung der Sobol' Indizes.

Der Sobol' Index der ersten Ordnung des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1), dargestellt in Abbildung 31, zeigt den Anteil der einzelnen anfänglichen Nuklidmassen (Eingangsparameter) an der Varianz der Gesamtaktivität des Inventars (Ausgangsdaten) nach 20 Jahren. Pb-210 weist klar den größten Beitrag zur Varianz der Gesamtaktivität auf, während die Werte von U-238 und Po-210 nahe bei Null sind. Die Ungewissheit im geschätzten Beitrag zur Varianz der Ausgangsdaten wächst je geringer der Beitrag zur Gesamtvarianz des jeweiligen Eingangsparameters ist.

Effective Algorithm for computing global Sensitivity Indices (EASI)

Viele varianzbasierte Methoden wie FAST (Cukier et al., 1973) oder der Sobol' Index (Sobol, 1993) haben eine klar definierte Vorgabe an das zu nutzende Stichprobendesign und dessen Umfang. Indem Eingangsdaten gezielt variiert oder konstant belassen werden, können Korrelationen der Eingangs- zu den Ausgangsdaten isoliert und zusammengefasst betrachtet werden. Bestehende probabilistische Modellrechnungen im Rahmen einer Analyse der Sensitivität bzw. der Ungewissheiten, welche beispielsweise auf einem MCS oder LHS basieren, können für diese Methoden nicht verwendet werden.

Der EASI-Algorithmus basiert auf einer Sortierung und Umstrukturierung bestehender Stichproben und erfordert kein spezifisches Stichprobendesign. EASI kann daher, im Gegensatz zu vielen anderen varianzbasierten Methoden, auf bestehende probabilistische Modellrechnungen im Rahmen einer Sensitivitäts- oder Ungewissheitsanalyse angewendet werden und diese Auswertungen mit einer varianzbasierten Methode ergänzen. Eine detaillierte Beschreibung des ursprünglichen EASI-Algorithmus ist in (Plischke, 2010) zu finden.

Hier wird ein modifizierter EASI-Ansatz (Plischke, 2012b) verwendet, bei welchem die Eingangsdaten nur zum Ranking der Ausgangsdaten (Sortierung nach Rang) benutzt werden. Diese Methode ist dadurch von der Skalierung unabhängig.

Da varianzbasierte Methoden geeignet sind nichtlineare Effekte zu charakterisieren, wird für das Illustrationsbeispiel (Anhang C.3.1) ein nichtlinearer Effekt illustriert. Dazu wird das Beispiel erweitert, indem die Massen an U-238, Pb-210 und Po-210 zu einem beliebigen Zeitpunkt (Ablauf einer Standzeit) betrachtet werden. Die Standzeit wird als zusätzlicher Eingangsparameter betrachtet dessen Verteilungsfunktion eine logarithmische Gleichverteilung zwischen 0,1 und 100 Jahren ist. Betrachtet man in den Streudiagrammen in Abbildung 32 die resultierende Masse von Po-210, welche nach Ablauf der Standzeit vorliegt, wird ein Maximum der Masse von Po-210 nach einer Standzeit von ca. zwei Jahren ersichtlich (Abbildung 34 rechts). Der Einfluss der anfänglichen Masse an U-238 auf die Ausgangsdaten (Masse von Po-210 nach einer Standzeit) ist schwach (Abbildung 34 links), während eine positive Korrelation der anfänglichen Masse von Pb-210 mit den Ausgangsdaten (Masse von Po-210 nach einer Standzeit) besteht (Abbildung 34 zweiter Graph von links).

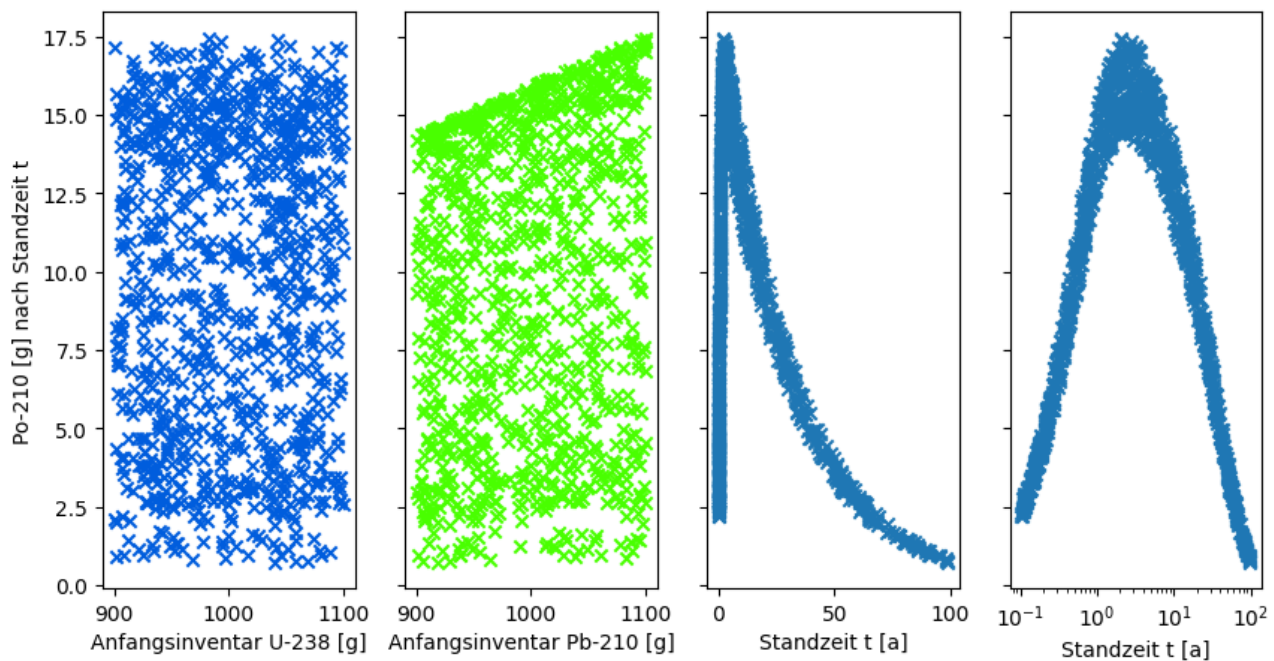


Abbildung 32 Streudiagramme zur Illustration der Unterschiede zwischen linearen Korrelationsmodellen und der varianzbasierten Methode EASI anhand des Illustrationsbeispiels

Die Eingangsdaten des Illustrationsbeispiels bilden die Werte auf der Abszisse während auf der Ordinate als Ausgangsdaten die Masse an Po-210 nach Ablauf einer Standzeit entlang aufgetragen ist. Die Eingangsdaten sind die anfänglichen Massen an U-238 und Pb-210 sowie die Standzeit in linearer und logarithmischer Darstellung.

Die Ergebnisse der Analysen der vorliegenden Stichproben mit den linearen Korrelationsmodellen nach Pearson und Spearman sowie der varianzbasierten EASI-Methode sind in Tabelle 8 aufgelistet. Wie zu erwarten, ist bei allen drei Methoden keine Korrelation der anfänglichen Masse von U-238 und der Masse an Po-210 nach Ablauf der Standzeit (Ausgangsdaten) ersichtlich (Indexwerte nahe Null). Die beiden linearen Korrelationsmodelle erkennen eine schwache positive Korrelation der anfänglichen Masse von Pb-210 und den Ausgangsdaten, können jedoch den nichtlinearen Zusammenhang zwischen Standzeit und Ausgangsdaten nicht abbilden. Der Korrelationskoeffizient nach Pearson deutet fälschlicherweise auf eine negative Korrelation zwischen (linearer) Standzeit und den Ausgangsdaten. Der Spearman Korrelationskoeffizient deutet für beide Betrachtungen der Standzeit auf eine Unabhängigkeit der Parameter hin. Da die Eingangsdaten lediglich für die Rangsortierung verwendet werden, kann kein Unterschied zwischen linearer und logarithmischer Skalierung der Standzeit entstehen. Die varianzbasierte EASI-Methode zeigt den nichtlinearen Zusammenhang zwischen Standzeit und Ausgangsdaten und wertet diesen stärker als den Zusammenhang zwischen der anfänglichen Masse an Pb-210 und den Ausgangsdaten. Analog zum Spearman Korrelationskoeffizienten gibt es in der EASI-Methode keinen Unterschied zwischen einer linearen und logarithmischen Betrachtung der Standzeit, da in der Berechnung der EASI-Methode die Ausgangsdaten nach aufsteigenden Eingangsdaten sortiert werden (Rangsortierung).

Tabelle 8 Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman sowie der EASI-Sensitivitätsindex für den Zusammenhang zwischen den Eingangsparametern des erweiterten Illustrationsbeispiels mit den Ausgangsdaten (Masse von Po-210 nach Ablauf einer Standzeit)

Methode	Korrelationskoeffizient bzw. Sensitivitätsindex zu Po-210			
	U-238	Pb-210	Standzeit	log(Standzeit)
Pearson	-0,005	0,08	-0,57	-0,07
Spearman	-0,007	0,11	-0,06	-0,06
EASI	0,005	0,008	0,98	0,98

4.2.5 Weitere Methoden

Morris Sensitivitätsanalyse

Die Morris-Methode folgt im übertragenen Sinne dem „One-at-a-time“ (OAT) Stichprobendesign, da für jede Berechnung des Modells $\vec{Y} = f(\vec{X})$ jeweils nur der Wert eines einzelnen Eingangsparameters verändert wird. Der aus zwei aufeinanderfolgenden Berechnungen resultierende Unterschied in den Ausgangsdaten, z. B. der Gesamtaktivität nach einer festgelegten Zeit, wird als Elementareffekt der Morris-Methode der veränderten Eingangsdaten bezeichnet. Jeder Eingangsparameter wird aufbauend auf der vorhergehenden Berechnung einzeln variiert.

Wenn für jeden Eingangsparameter eine Variation erfolgt und ein Elementareffekt berechnet wird, dann bilden diese Berechnungen eine Trajektorie durch den Parameterraum der Eingangsparameter. Die Anzahl an Datensätzen einer Trajektorie bzw. an Elementareffekten einer Trajektorie ist also gleich der Anzahl an Eingangsparametern. Dieses Vorgehen wird mehrere Male wiederholt, wobei jede Trajektorie an unterschiedlicher Stelle und möglichst gleichverteilt im Parameterraum der Eingangsparameter startet und einen eigenen Weg durch diesen nimmt. Für jeden Eingangsparameter entsteht so ein Datensatz von Elementareffekten der Morris-Methode, welche statistisch analysiert werden können.

Nach einer Normierung können die Aussagen zu den Eingangsparametern (die abgeleiteten statistischen Momente der Datensätze der Elementareffekte) verglichen werden. Der Mittelwert (erstes statistisches Moment) der absoluten Elementareffekte μ^* beschreibt die Stärke des Einflusses des jeweiligen Eingangsparameters. Die Standardabweichung σ (zweites statistisches Moment) beschreibt die Streuung der Elementareffekte. Eingangsparameter mit einem nichtlinearen Zusammenhang zu den Ausgangsdaten weisen hohe Werte für die Standardabweichung σ und geringe Werte für den Mittelwert μ^* auf. Eingangsparameter mit einem starken linearen Zusammenhang zu den Ausgangsdaten weisen hohe Werte für μ^* und geringe für σ auf. Sind sowohl μ^* als auch σ klein, haben die Eingangsdaten wenig Einfluss auf die Ausgangsdaten. Abbildung 33 verdeutlicht die im Morris-Diagramm ersichtlichen Einflüsse.

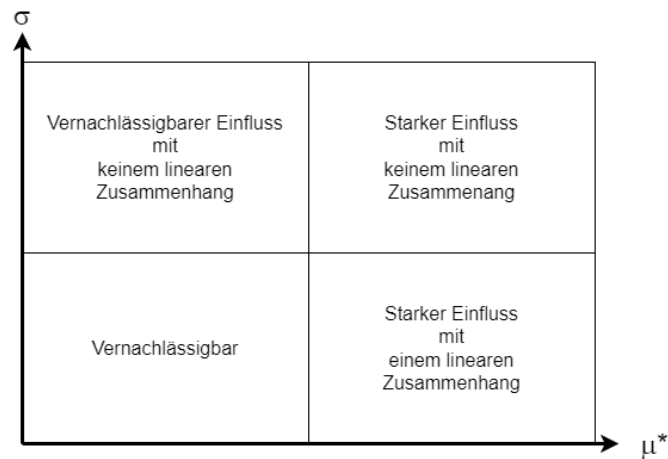


Abbildung 33 Darstellung der Zusammenhänge im Morris-Diagramm für den Mittelwert der absoluten Werte μ^* und die Standardabweichung σ der Elementareffekte

In Abbildung 34 sind die statistischen Momente der Elementareffekte (μ^* , σ) der anfänglichen Massen an U-238, Pb-210 und Po-210 auf die Gesamtaktivität nach 20 Jahren gezeigt (Illustrationsbeispiel aus Anhang C.3.1). Auf der Abszisse ist der gemittelte absolute Elementareffekt μ^* dargestellt, auf der Ordinate die Standardabweichung der Elementareffekte σ . Die anfängliche Masse von Po-210 hat somit auf das Gesamtinventar nach 20 Jahren den größten Einfluss, streut aber auch am meisten. Der Einfluss der anfänglichen Masse von U-238 liegt in Stärke, μ^* , und Streuung, σ , des Zusammenhangs zum Gesamtinventar nach 20 Jahren zwischen dem Einfluss der beiden anderen Eingangsparametern und die anfängliche Masse von Po-210 hat den geringsten Einfluss auf das Gesamtinventar nach 20 Jahren mit der kleinsten Streuung. Für sämtliche Eingangsparameter sind die Werte für μ^* deutlich grösser als jene für σ . Die Einflüsse der Eingangsparameter sind somit stark linear.

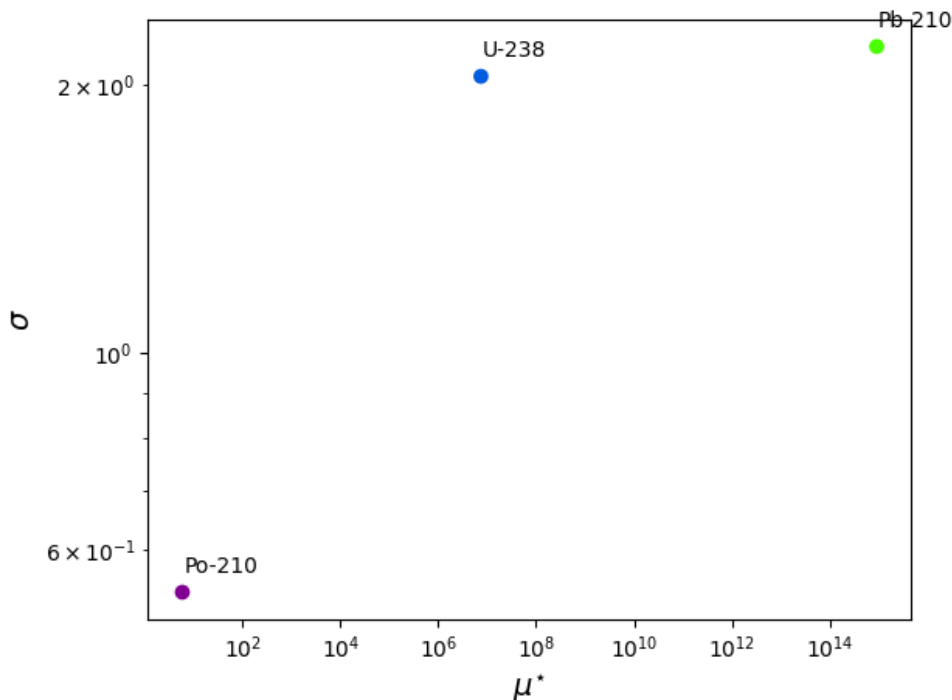


Abbildung 34 Mittelwert der absoluten Elementareffekte μ^* und Standardabweichung der Elementareffekte σ aus der Analyse des Illustrationsbeispiels mit der Morris-Methode für den Zeitpunkt 20 Jahre

Die Analyse beruht auf 50 Trajektorien der Morris-Methode.

4.3 Anwendung auf Ziel- und Ausgangsgrößen

In diesem Abschnitt soll die Anwendung der oben beschriebenen Methoden zur Sensitivitätsanalyse auf die radiologische Charakterisierung eines Inventarmodells gezeigt werden. Die Anwendung erfolgt beispielhaft auf das massenspezifische RN-Inventar der bestrahlten BE mit Mischoxid-Brennstoff (MOX) aus den Abfällen der Druckwasserleistungsreaktoren (DWR) des Anhangs zum Arbeitspaket 3 (Peiffer et al., 2011) der vorläufigen Sicherheitsuntersuchung Gorleben (VSG). Für die Werte des RN-Inventars werden illustrativ normalverteilte Abweichungen von den Angaben angenommen, deren Standardabweichung sich ableitet aus der Nutzung eines numerischen Codes zur Bestimmung des RN-Inventars nach der Nutzung in einem Reaktor. Ein MCS mit einem Stichprobenumfang von 1 000 Variationen der Eingangsparameter dient als Grundlage. Anhang C.3.2 gibt weitere Informationen zu den Eingangsdaten.

(Rauscher et al., 2023) stellen die sicherheitsrelevanten Ziel- und Ausgangsgrößen eines Inventarmodells zusammen. Gewisse dieser Größen können nicht ohne Kenntnis des Wirtsgesteins und des genauen Konzeptes der Endlagerung betrachtet werden. Dies betrifft Teile der chemischen, geometrischen, physikalischen und stofflichen Charakterisierung. Innerhalb dieses Abschnitts werden die massenspezifische Gesamtaktivität, als Ausgangsgröße des Inventarmodells, die massenspezifische Radiotoxizität, d. h. die Ingestionsdosis für einen Erwachsenen, repräsentativ für die Zielgröße der Körperdosis und durchschnittlichen Jahresdosis eines Erwachsenen, und die massenspezifische Nachzerfallsleistung, repräsentativ für die Zielgröße Temperatur an der Gebindeoberfläche, betrachtet.

Es werden Methoden zur Modellerkundung und zur Gewichtung der Eingangsdaten nach ihrem qualitativen und quantitativen Beitrag zu den Ausgangsdaten („Ranking“) dargestellt.

4.3.1 Modellerkundung

Abbildung 35 zeigt die Ungewissheit im anfänglichen Inventar. Für alle Radionuklide, denen eine Ungewissheit im Wert zugewiesen werden konnte, ist diese gering. Die relative Ungewissheit (Tabelle 19) für die Radionuklide Np-137 und U-234 ist am größten, jedoch ist das anfängliche Inventar beider RN gering. Für die Radionuklide Cm-242, Cm-244 und Pu-238 sind die Ungewissheiten „durchschnittlich“ im Vergleich der 19 Nuklide, für die eine Ungewissheit bestimmt werden konnte, das anfängliche Inventar ist jedoch vergleichsweise groß im Inventar der VSG (Anhang C.3.2).

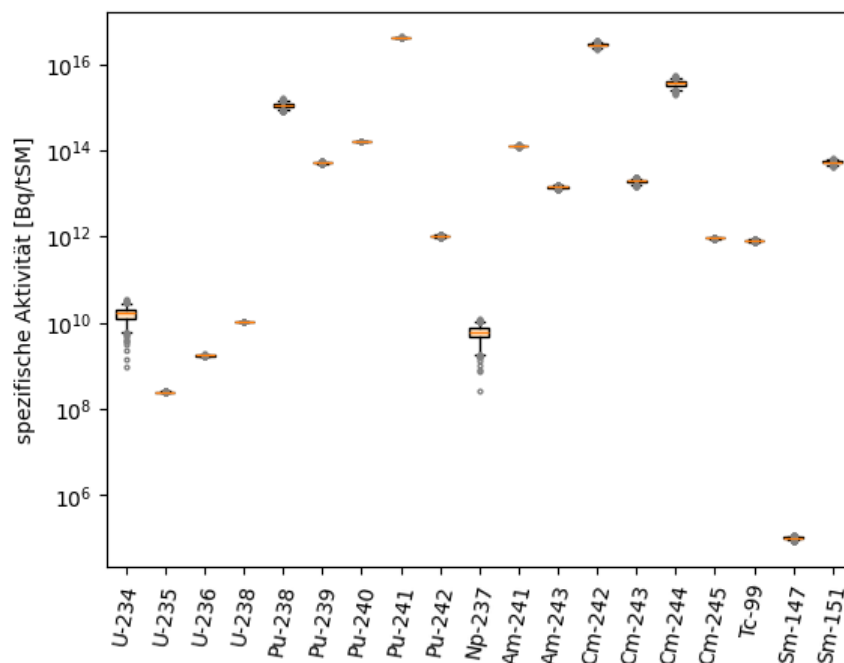


Abbildung 35 Box-Plot der Eingangsdaten (RN-Inventar) für das Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

Abbildung 36, Abbildung 37 und Abbildung 38 zeigen die zeitliche Entwicklung der spezifischen Aktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des RN-Inventars für das Anwendungsbeispiel ohne Berücksichtigung der normalverteilten Abweichungen des anfänglichen RN-Inventars.

Bei der spezifischen Aktivität in Abbildung 36 kommen die Hauptbeiträge zur spezifischen Gesamtaktivität bis ca. 100 Jahre aus dem Zerfall von Cs-137, nachfolgend ab 100 bis ca. 2 000 Jahre aus dem Zerfall von Am-241, von 2 000 bis 20 000 Jahre aus dem Zerfall von Pu-240, von 20 000 bis 300 000 Jahre aus dem Zerfall des metastabilen U-235m und dann aus dem Zerfall von Pu-242.

Den Hauptanteil an der spezifischen Radiotoxizität (Abbildung 37) liefert der Zerfall von Cm-244 bis ca. 20 Jahre, im Zeitraum von 20 bis 30 Jahren wird dieser vom Zerfall des Pu-238 übernommen. Von 30 – 3 000 Jahre kommt der Hauptanteil der Radiotoxizität aus dem Zerfall von Am-241, nachfolgend von 3 000 bis ca. 20 000 Jahre aus dem Zerfall von Pu-240. Zwischen 20 000 und

200 000 Jahren dominiert der Zerfall von Pu-239 und ab ca. 200 000 bis 800 000 Jahre der Zerfall von Po-210, der abgelöst wird vom Zerfall von Th-229.

Die spezifische Nachzerfallsleistung in Abbildung 38 wird die ersten 10 Jahre dominiert vom Zerfall von Rh-106. Zwischen 10 und ca. 40 Jahren trägt der Zerfall von Cm-244 am meisten zur Zerfallswärme bei, nachfolgend von 40 bis ca. 2 000 Jahre der Zerfall von Am-241, ab 2 000 bis ca. 20 000 Jahre ist es der Zerfall von Pu-240, dann der Zerfall von Pu-239 (20 000 – 200 000 Jahre) und Pu-242 (200 000 – 500 000 Jahre).

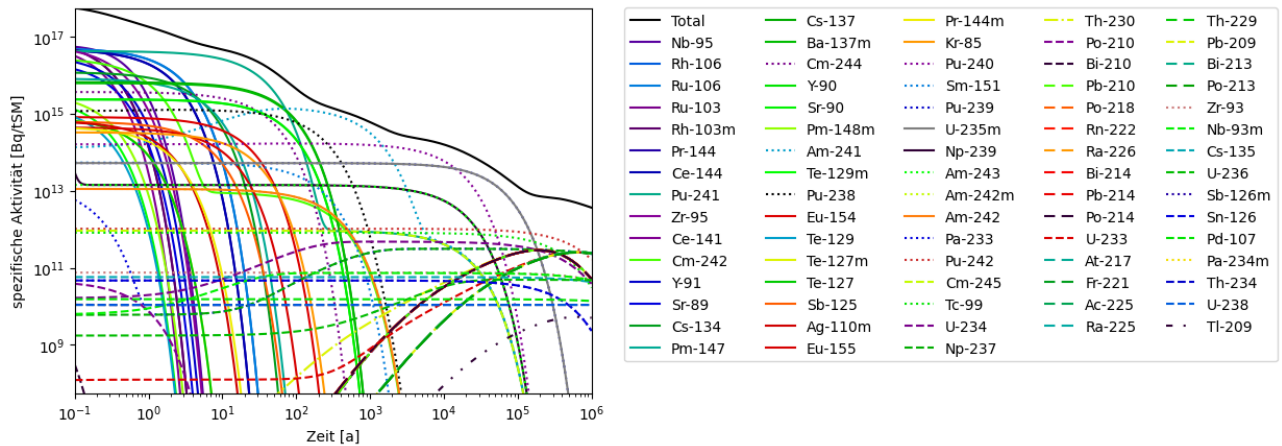


Abbildung 36 Zeitliche Entwicklung der Gesamtaktivität und der nuklidspezifischen Aktivität pro Brennstoffmasse des Inventars der VSG (Anhang C.3.2)

Gezeigt sind Nuklide, welche zu einem beliebigen Zeitpunkt mindestens 1‰ zur spezifischen Gesamtaktivität beitragen. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

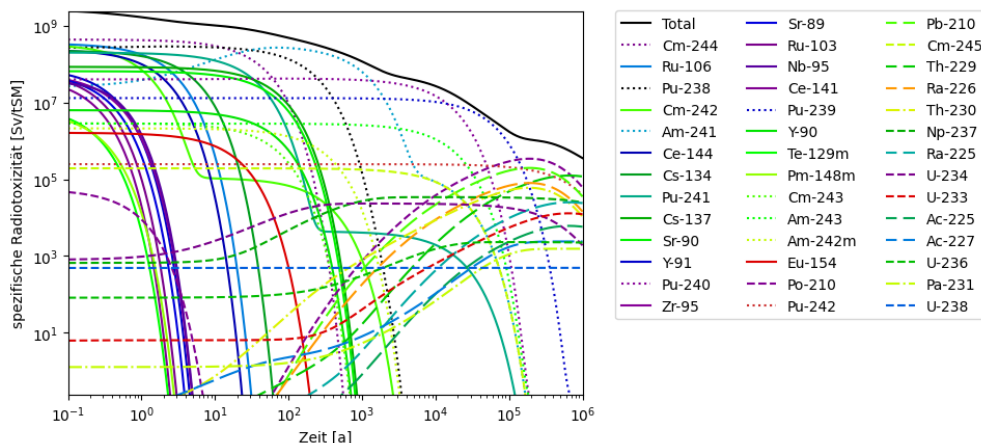


Abbildung 37 Zeitliche Entwicklung der gesamten und der nuklidspezifischen Radiotoxizität pro Brennstoffmasse des Inventars der VSG (Anhang C.3.2)

Gezeigt sind Nuklide, welche zu einem beliebigen Zeitpunkt mindestens 1‰ zur gesamten spezifischen Radiotoxizität beitragen. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Verhältnis der Quantile der Ausgangsdaten zu den Eingangsdaten. Die Radiotoxizität (Abbildung 40 oben rechts) und die Nachzerfallsleistung (Abbildung 40 unten) sind ebenfalls stark korreliert mit dem anfänglichen RN-Inventar an Pu-238. Das anfängliche Inventar an Pu-241, Cm-242 und Cm-244 kann jeden beliebigen Wert innerhalb des Wahrscheinlichkeitsbereiches dieser Eingangsdaten annehmen, und die Ausgangsdaten (Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) sind davon nahezu unbeeinflusst, d. h. die Werte verbleiben innerhalb der höchsten 10% des Wahrscheinlichkeitsbereiches der Ausgangsdaten.

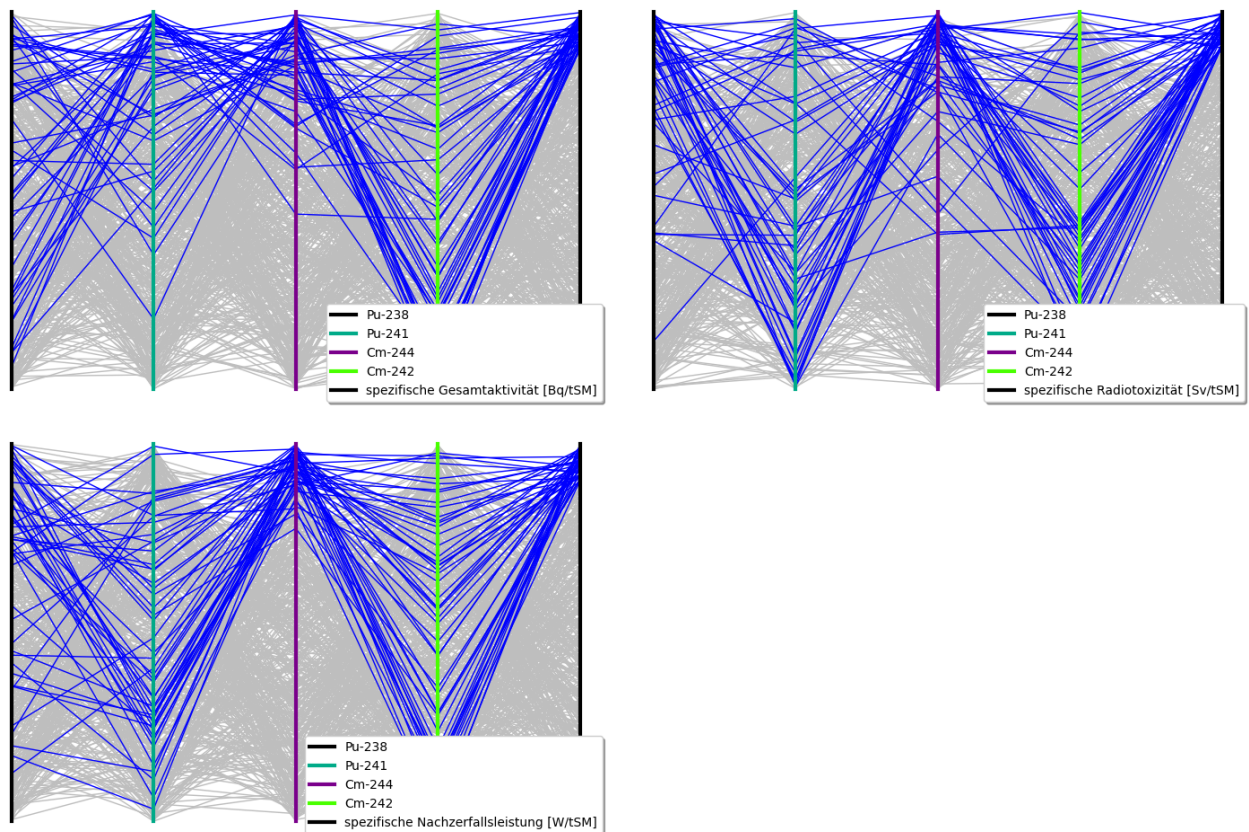


Abbildung 39 Cobweb-Plots für das Anfangsinventar einer Auswahl von Radionukliden und der Gesamtaktivität (oben links), der gesamten Radiotoxizität (oben rechts) und der gesamten Nachzerfallsleistung (unten) des Inventars der VSG (Anhang C.3.2) jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren

Hervorgehoben sind jene Rechenfälle, die zu den obersten 10% der Ausgangsdaten führen

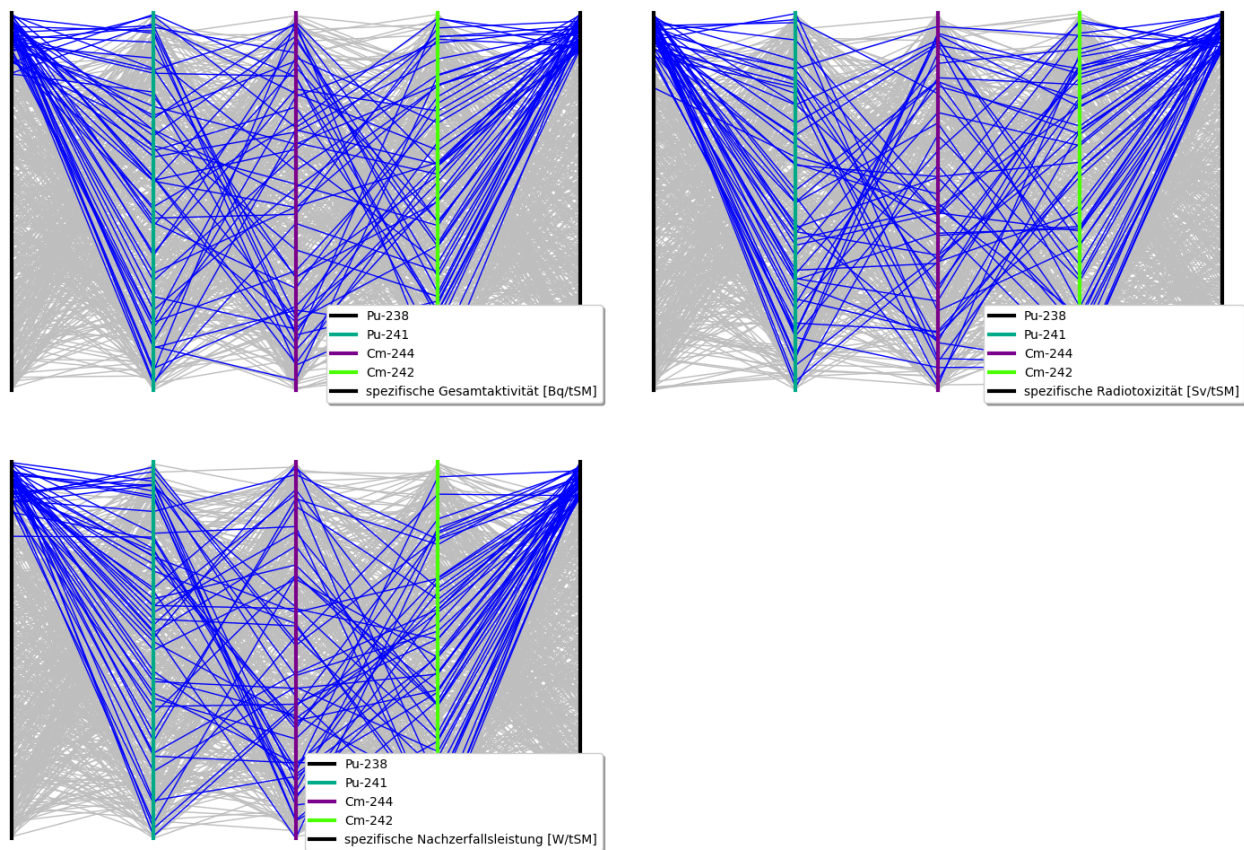


Abbildung 40 Cobweb-Plots für das Anfangsinventar einer Auswahl von Radionukliden und der Gesamtaktivität (oben links), der gesamten Radiotoxizität (oben rechts) und der gesamten Nachzerfallsleistung (unten) des Inventars der VSG (Anhang C.3.2) jeweils pro Brennstoffmasse nach 300 000 Jahren

Hervorgehoben sind jene Rechenfälle, die zu den obersten 10% der Ausgangsdaten führen

Die Streudiagramme (Abbildung 41, Abbildung 42, Abbildung 43) der Beziehungen des anfänglichen RN-Inventars zu den Ausgangsdaten bzw. den Zielgrößen (Gesamtaktivität, Radiotoxizität, Nachzerfallsleistung) eignen sich ebenso dazu, die bestehenden Zusammenhänge zu einzelnen Zeitpunkten (hier gezeigt: 20 Jahre) zu verdeutlichen. Auch hier sind Korrelationen der Gesamtaktivität mit dem anfänglichen RN-Inventar von Cm-244 und Pu-241 erkennbar, sowie Korrelationen der Radiotoxizität mit dem anfänglichen RN-Inventar von Cm-244 und Pu-238 und der Nachzerfallsleistung mit dem anfänglichen RN-Inventar von Cm-244.

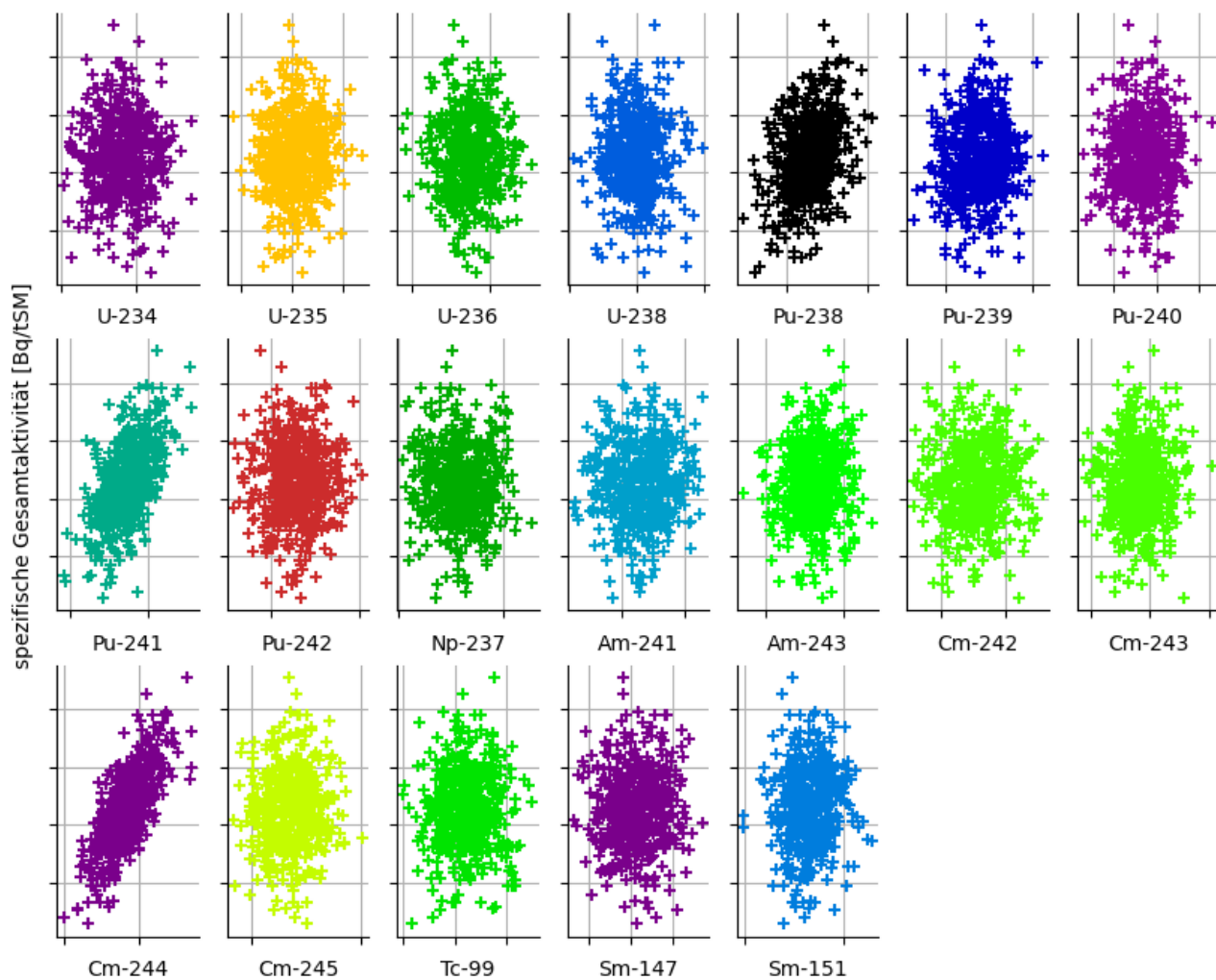


Abbildung 41 Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

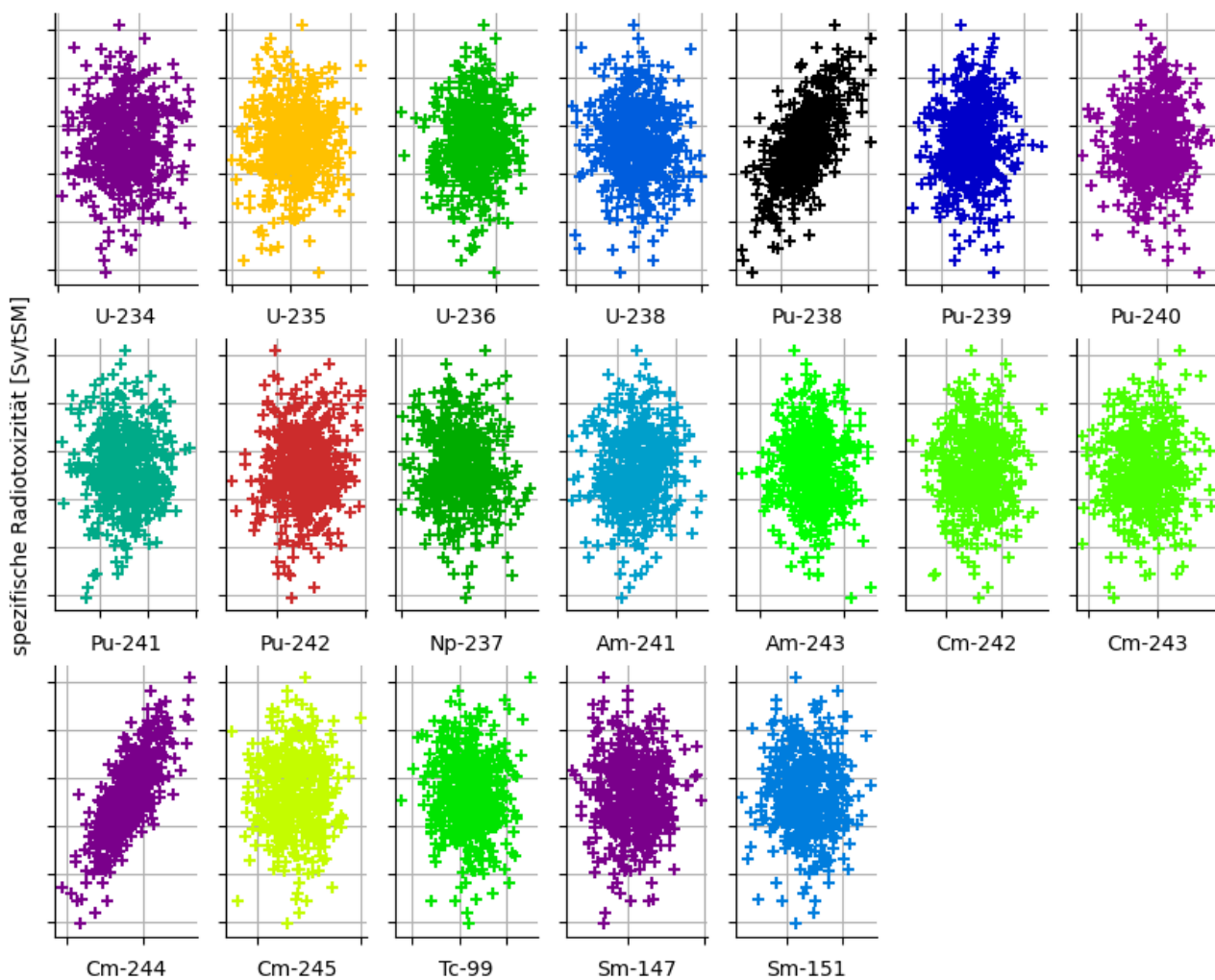


Abbildung 42 Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Radiotoxizität pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

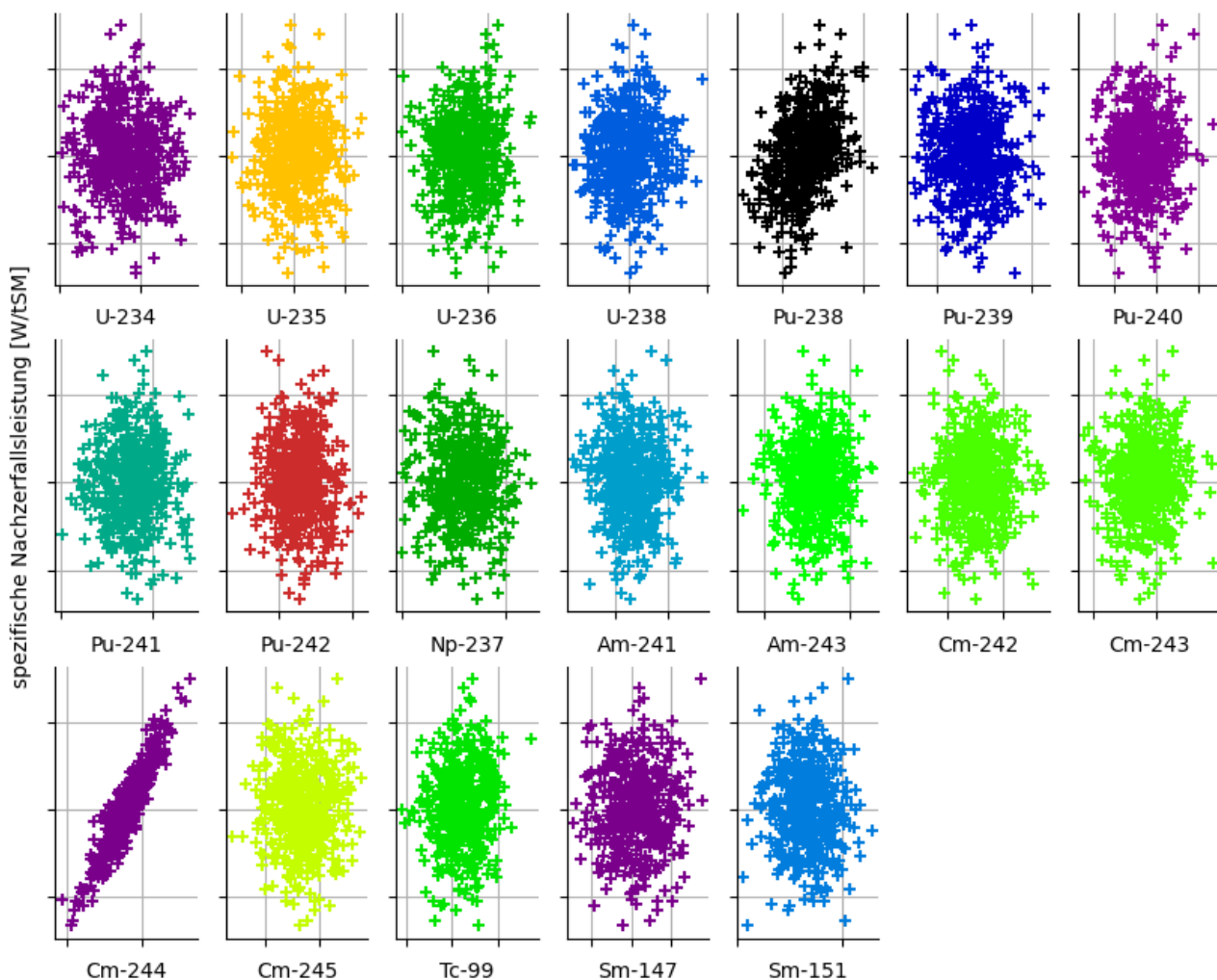


Abbildung 43 Streudiagramme des anfänglichen RN-Inventars im Bezug zur Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse zum Zeitpunkt von 20 Jahren im Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

4.3.2 Qualitatives Ranking der Einflussfaktoren

Nach der Erkundung des Einflusses der Eingangs- auf die Ausgangsdaten ist der folgende Schritt zum besseren Verständnis ein qualitatives Ranking der Eingangsparameter. Dabei geht es wie im vorhergehenden Schritt um die Erkundung des Modells, jedoch mehr im Detail, um eine qualitative Analyse mit dem Ziel einer Identifizierung (im Gegensatz zur Quantifizierung) der wichtigsten Eingangsdaten.

Abbildung 44 zeigt den prozentualen Anteil eines Eingangsparameters an der Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse über die Zeit. In den ersten 1 000 Jahren dominiert das Nuklid Pu-241, welches über 50% zur Gesamtaktivität nach ca. 10 Jahren beiträgt, gefolgt von Am-241, das nach ca. 300 Jahren etwa 70% zur Gesamtaktivität beiträgt. Abbildung 45 zeigt das DIM und die Darstellung der skalierten Sensitivität. Beide Methoden beleuchten den Zusammenhang der Ausgangsdaten zum anfänglichen RN-Inventar der VSG. Es wird klar ersichtlich, dass der gesamte vorher betrachtete Zeitraum (1 – 1 000 Jahre) nicht von den Nukliden Am-241 und Pu-241 dominiert wird, sondern nur vom anfänglichen RN-Inventar an Pu-241. Pu-241, mit einer Halbwertszeit von 14,4 Jahren, zerfällt

zu 99,9% in Am-241 (β -Zerfall), welches nachfolgend mit einer Halbwertszeit von 432 Jahren zerfällt. Die wichtigsten Eingangsdaten sind also das RN-Inventar von Pu-241 und nur untergeordnet das RN-Inventar von Am-241.

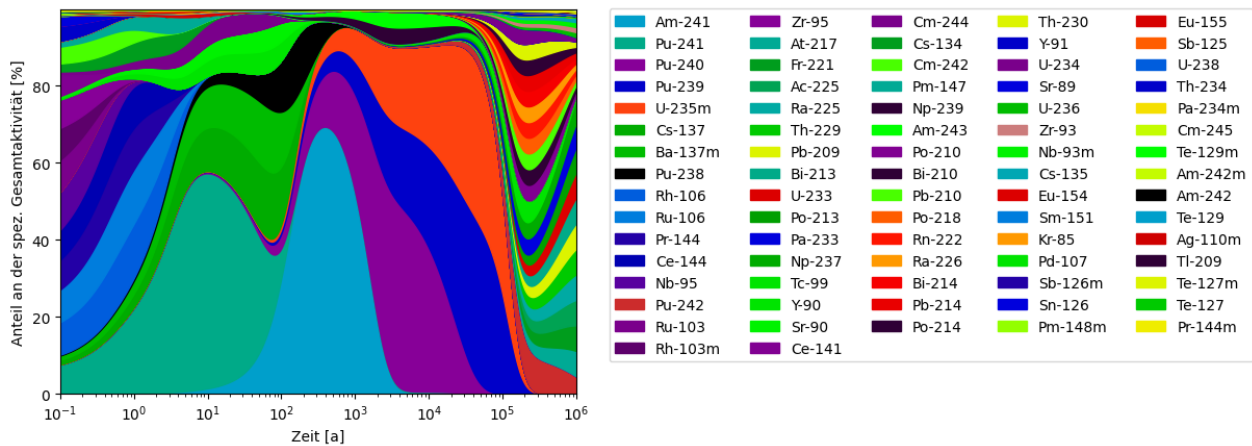


Abbildung 44 Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse

Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

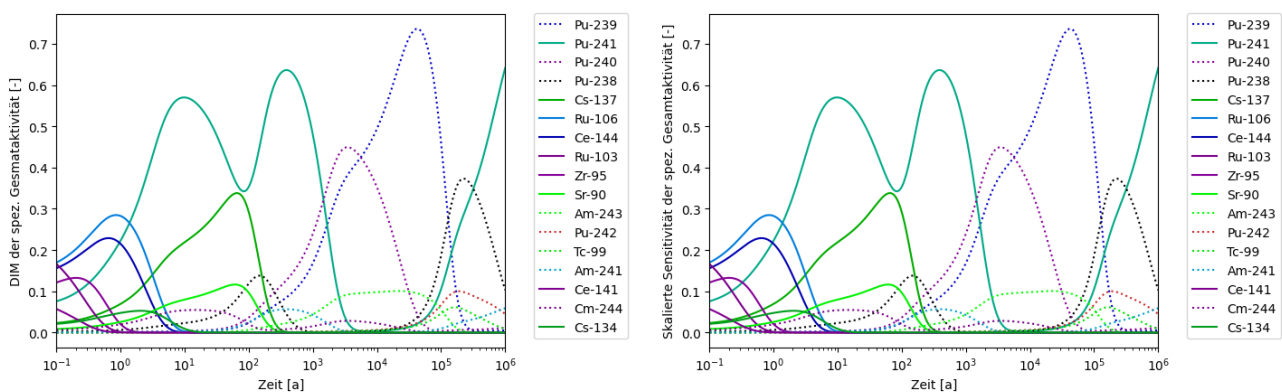


Abbildung 45 Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der Gesamtaktivität pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)

Es sind nur die 17 Radionuklide mit den größten Beiträgen dargestellt. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Betrachtet man Abbildung 46 so ist auch in Bezug auf die Radiotoxizität pro Brennstoffmasse ein dominanter Einfluss des Nuklids Am-241 nach ca. 300 Jahren sichtbar. Aus Abbildung 47 ist wiederum ersichtlich, dass dieser Einfluss tatsächlich auf dem anfänglichen RN-Inventar an Pu-241 beruht. Der Anteil des Radionuklids Pu-240 an der Radiotoxizität nach ca. 4 Jahren beruht auf dessen anfänglichem RN-Inventar (Abbildung 47). Ebenso ist der Anteil des Radionuklids Pu-239 an der Radiotoxizität nach 40 000 - 50 000 Jahren in dessen anfänglichem RN-Inventar begründet (Abbildung 47).

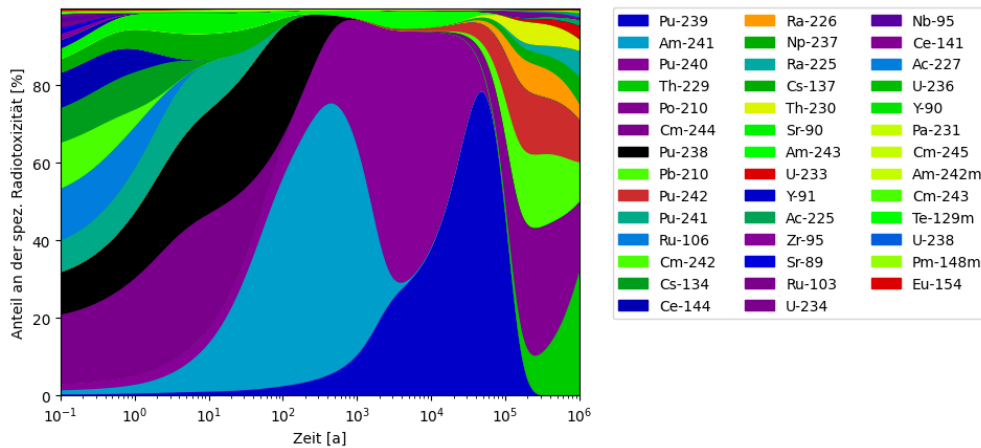


Abbildung 46 Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der gesamten Radiotoxizität pro Brennstoffmasse

Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

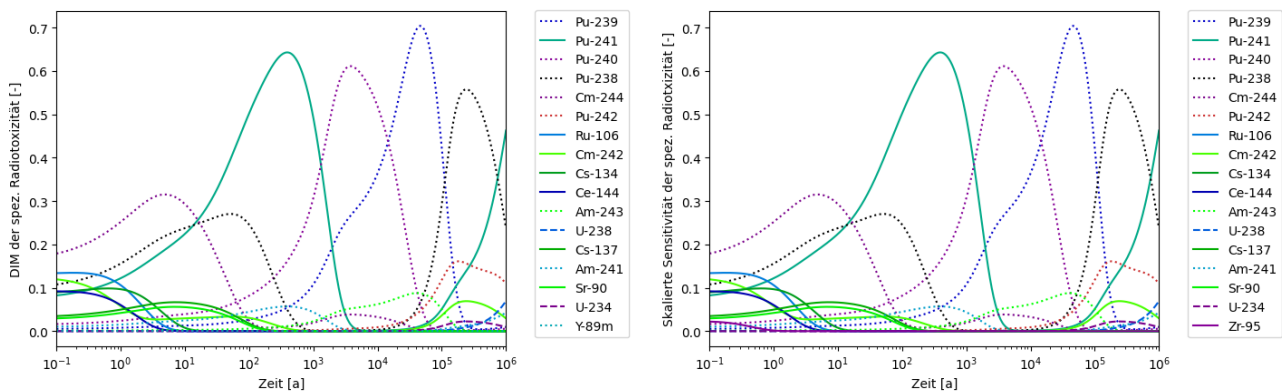


Abbildung 47 Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der gesamten Radiotoxizität pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)

Es sind nur die 17 Radionuklide mit den größten Beiträgen dargestellt. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Zusätzlich zu den bereits diskutierten RN beruht die Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse der ersten Jahre auf dem anfänglichen RN-Inventar an Rh-106 (Abbildung 48 und Abbildung 49).

Es ist ersichtlich, dass durch diese einfachen grafischen Methoden nicht nur ein Verständnis des zugrundeliegenden Modells (radioaktives Zerfallsmodell) gewonnen werden kann, sondern auch ohne genaue Kenntnis des Modells eine qualitative Gewichtung der Eingangsdaten (RN-Inventar) der VSG im Bezug auf die Ausgangsdaten erfolgen kann.

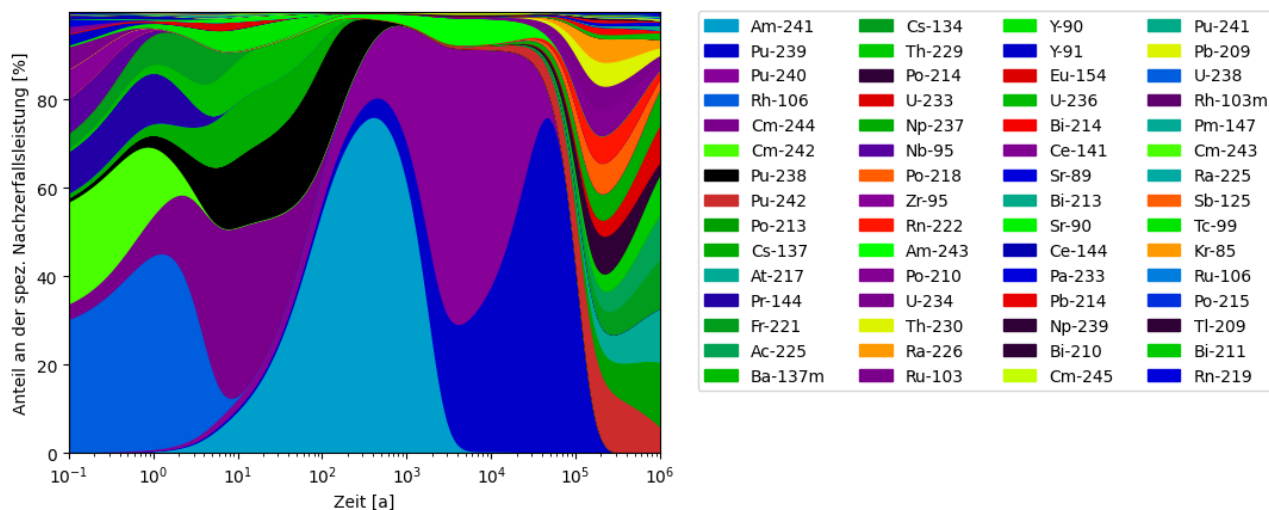


Abbildung 48 Respective-Contribution-Plot des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2): Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters an der gesamten Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse

Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

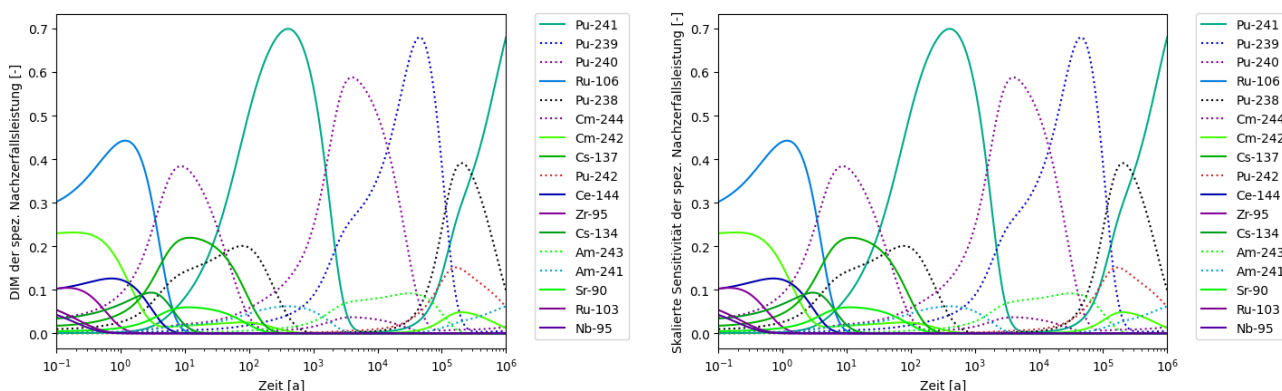


Abbildung 49 Differential Importance Measure (links) und Darstellung der skalierten Sensitivität (rechts) der gesamten Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)

Es sind nur die 17 Radionuklide mit den größten Beiträgen dargestellt. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Noch deutlicher ist eine qualitative Bewertung dieser Zusammenhänge zu einzelnen Zeitpunkten mit dem CUSUNORO-Plot möglich. Abbildung 50 zeigt die CUSUNORO-Plots für 20 und 300 000 Jahre. Sie zeigen bei 20 Jahren deutlich den großen Einfluss der Eingangsdaten des anfänglichen RN-Inventars an Cm-244, gefolgt vom Einfluss von Pu-241, Pu-238 und Cm-242 auf die spezifische Gesamtaktivität. Für die spezifische Radiotoxizität ergibt sich für die qualitative Wichtigkeit der Eingangsdaten die Reihenfolge der Nuklide Cm-244, Pu-238 und Pu-241. Für die spezifische Nachzerfallsleistung gilt für die Bedeutung des anfänglichen RN-Inventars die gleiche Reihenfolge wie für die spezifische Radiotoxizität. Nach 300 000 Jahren ist klar ersichtlich, dass nur die Ungewissheit im anfänglichen RN-Inventar an Pu-238 eine Rolle für die Gesamtaktivität bzw. die Radiotoxizität oder die Nachzerfallsleistung jeweils pro Brennstoffmasse spielt.

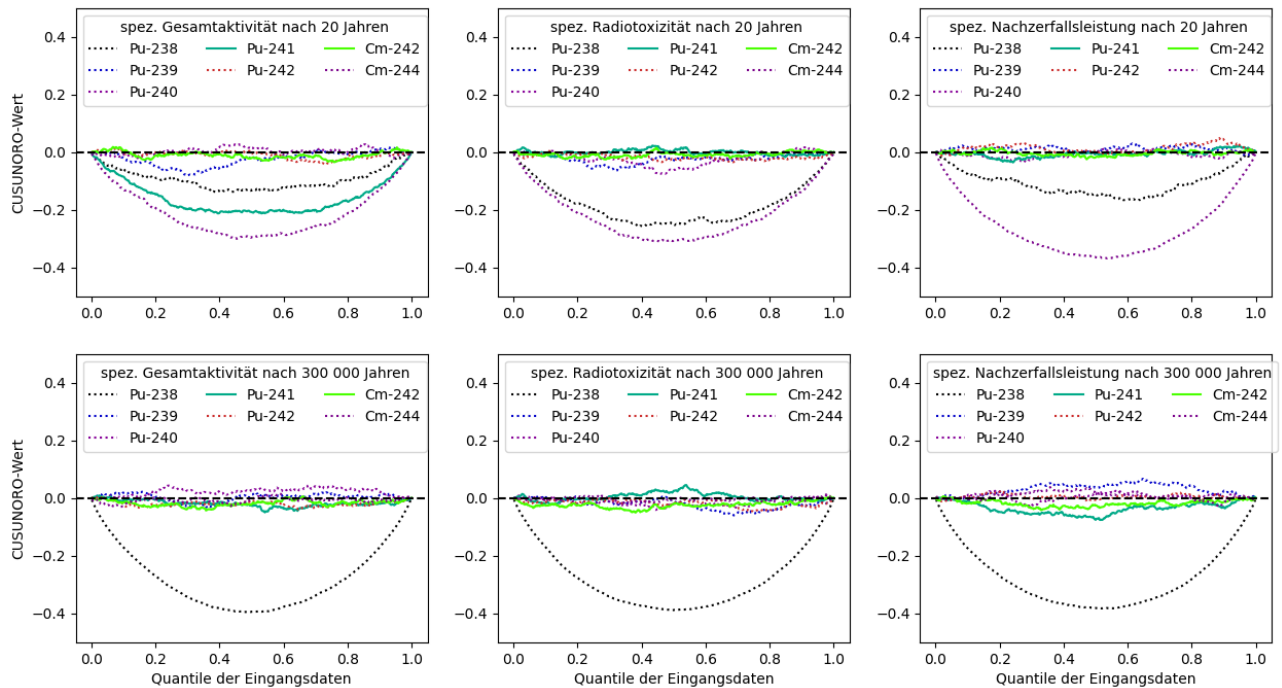


Abbildung 50 CUSUNORO-Plots der Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung pro Brennstoffmasse des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeitpunkte von 20 Jahren (oben) und 300 000 Jahren (unten)

Die Morris-Sensitivitätsanalyse eignet sich ebenso, die Zusammenhänge zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten zu verdeutlichen. Abbildung 51 zeigt das Ergebnis der Morris Sensitivitätsanalyse für die Zusammenhänge zwischen den anfänglichen RN-Inventaren (Eingangsdaten) und den Ziel- bzw. Ausgangsdaten, der Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung jeweils pro Brennstoffmasse nach einem Zeitraum von 20 Jahren. Für sämtliche Eingangsparameter sind die Werte für μ^* deutlich grösser als jene für σ . Die Einflüsse der Eingangsparameter sind somit stark linear.

Alle gezeigten Methoden sind geeignet, die Auswirkungen der Ungewissheiten in den Eingangsdaten zu beschreiben und ermöglichen ein qualitatives Ranking der Eingangsparameter im Hinblick auf die betrachteten Zielgrößen einer vSU des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2). Es muss jedoch darauf hingewiesen werden, dass dies darauf beruht, dass das zugrundeliegende Modell (Zerfallsmodell) durch lineare Zusammenhänge zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten geprägt ist. Die unterschiedlichen mathematischen Grundlagen der Methoden kommen dadurch nicht zu tragen. Sie haben jedoch beim Vorliegen anderer Zusammenhänge ihre Berechtigung (vgl. Abbildung 17).

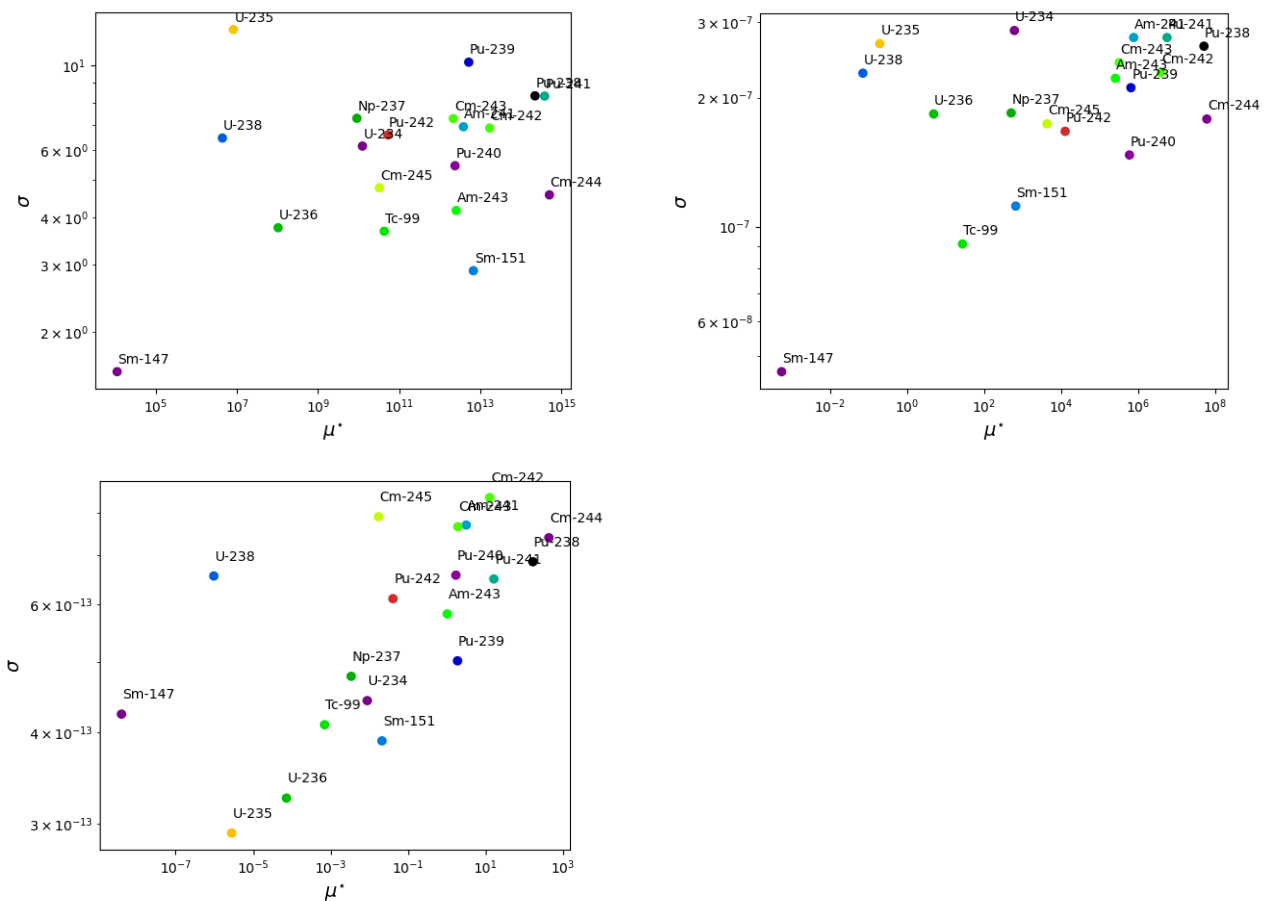


Abbildung 51 Morris-Kenngroßen μ^* und σ der Gesamtaktivität (oben links), der Radiotoxizität (oben rechts) und der Nachzerfallsleistung (unten) jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren für das anfängliche RN-Inventar
Basierend auf 50 Trajektorien für das Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

4.3.3 Quantitatives Ranking der Einflussfaktoren

Die letzte Stufe der Untersuchung des Einflusses von Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten ist eine Quantifizierung dieses Einflusses. Bei einer bestehenden oder angenommenen Linearität des Modells ist hierbei die Bestimmung eines Korrelations- bzw. Regressionskoeffizienten (Abschnitt 4.2.3) naheliegend.

Abbildung 52 zeigt die Korrelationskoeffizienten nach Pearson, Spearman und Kendall, welche durch Anwendung der Methoden (Abschnitt 4.2.3) auf das anfängliche RN-Inventar, für welches eine Ungewissheit verortet werden konnte, ermittelt wurden. Wie zu erwarten ist, zeigen sich keine Unterschiede zwischen dem Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman sowie leicht geringere Werte für das Kendall Tau. Die Ursache hierfür ist die starke Linearität innerhalb des zugrundeliegenden Modells. Nach 20 Jahren hat die Ungewissheit im anfänglichen RN-Inventar an Cm-244 den größten Einfluss auf die spezifische Gesamtaktivität gefolgt von der Ungewissheit im anfänglichen RN-Inventar an Pu-241 und Pu-238. Nach 300 000 Jahren hat nur noch die Ungewissheit im anfänglichen RN-Inventar von Pu-238 einen Einfluss auf die spezifische Gesamtaktivität des Inventars.

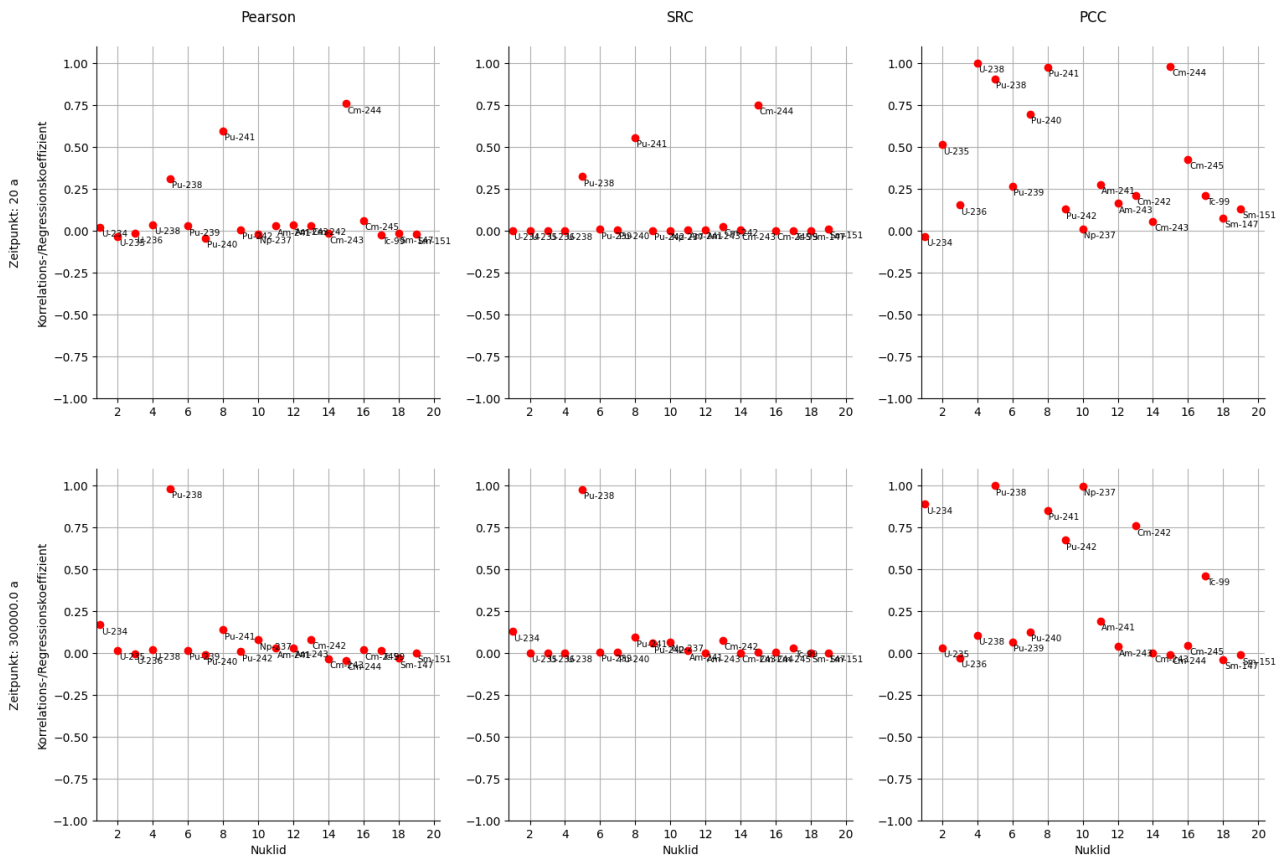


Abbildung 53 Übersicht über die Korrelations- und Regressionskoeffizienten (Pearson, Standardregression und Partialkorrelation) der 19 varierten anfänglichen RN-Inventare bezogen auf die spezifische Gesamtaktivität für die Zeitpunkte 20 Jahre (oben) und 300 000 Jahre (unten)

Berechnet für das Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

Um dies besser verständlich zu machen sind in Abbildung 54 die Bereiche des Einflusses einiger dieser RN besonders hervorgehoben. Es ist dabei zu beachten, dass der Einfluss des anfänglichen RN-Inventars hier nur für die gezeigten RN betrachtet wird, wodurch der Einfluss dieser gegenüber den anderen, nicht in der Abbildung enthaltenen RN, übergewichtet dargestellt wird (siehe Abschnitt 4.2.2).

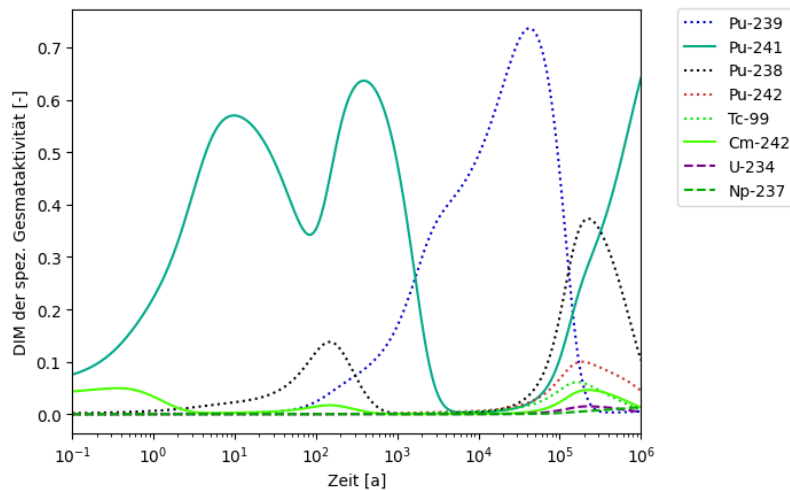


Abbildung 54 DIM-Darstellung einer Auswahl von RN aus dem anfänglichen Inventar der VSG (Anhang C.3.2) zur Verdeutlichung der Ergebnisse der Korrelationskoeffizienten, speziell des PCC

Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Abbildung 55 zeigt die EASI-Sensitivitätsindizes der anfänglichen RN-Inventare bezogen auf die Ausgangsparameter (Abschnitt 4.2.4). Diese zeigen im betrachteten Beispiel (Anhang C.3.2) wiederum keinen signifikanten Unterschied zu den linearen Korrelationskoeffizienten nach Pearson oder Spearman (Abschnitt 4.2.3).

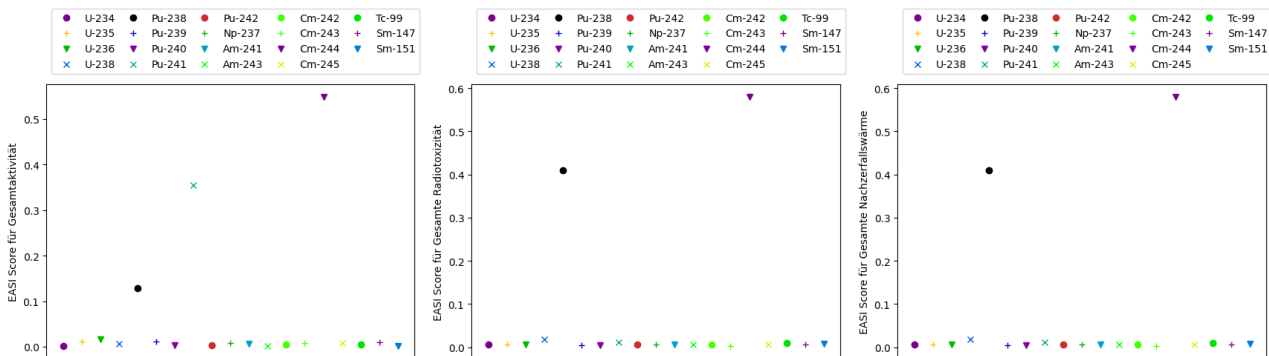


Abbildung 55 EASI-Sensitivitätsindizes der anfänglichen RN-Inventare mit bekannter Ungewissheit bezogen auf die Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Inventars jeweils pro Brennstoffmasse nach 20 Jahren

Berechnet für das Anwendungsbeispiel (Anhang C.3.2)

Gleiches gilt für den varianzbasierten Sobol' Index (Abbildung 56). Varianzbasierte Koeffizienten wie der Sobol' Index oder der EASI-Index sind vorrangig bei nicht-linearen Zusammenhängen zwischen Eingangs- und Ausgangsdaten von Bedeutung (Abschnitt 5.1.1).

5 Ungewissheit der Ausgangsdaten

In diesem Kapitel werden Methoden zur Ermittlung der Ungewissheiten in den Ausgangsdaten, welche aus den Ungewissheiten in den Eingangsdaten und in den Modellansätzen des Inventarmodells resultieren, dargestellt und diskutiert. Dazu werden zuerst die Methoden und das generelle Vorgehen kurz umrissen und dann wird auf bestimmte Aussagen, welche sich auf Basis der Methoden treffen lassen, und deren Bezug zu einzelnen Ausgangsdaten des Inventarmodells und Zielgrößen einer vSU eingegangen. Den Abschluss bilden zwei Beispiele zur Nutzung der Methoden zur Abschätzung des Einflusses unterschiedlicher Datenquellen.

Die qualitative und quantitative Analyse erfolgt hierbei mit nahezu denselben Methoden, welche in Abschnitt 4.2 dargestellt sind und auf der Bildung einer Stichprobe basieren (Abschnitt 4.1). Zur Ableitung von robusten Aussagen zu den Ausgangsdaten ist es wiederum erforderlich, dass sowohl die Eingangsdaten als auch die Ausgangsdaten mathematisch als „asymptotisch erwartungstreuer Schätzer“ betrachtet werden können (Abschnitt 4.1.2).

5.1 Methoden

5.1.1 Übersicht

Die Methoden lassen sich grob unterteilen in Methoden, welche rein grafisch und qualitativ einen Wertebereich für die Ausgangsparameter sichtbar machen, und zwei quantitative Vorgehensweisen zur Analyse der Ausgangsdaten. Letztere basieren auf der statistischen Analyse der Ausgangsdaten, welche auf einer Stichprobe für die Eingangsparameter und ggf. differenzierten Modellansätzen beruht. In der ersten Vorgehensweise wird auf dieser Grundlage eine theoretische Verteilungsfunktion für die Ausgangsdaten angenommen und die zugehörigen Parameter geschätzt. Die zweite Vorgehensweise besteht in der Angabe der empirischen Verteilung der Ausgangsdaten, welche mittels ihrer Perzentile charakterisiert wird.

5.1.2 Grafische Methoden

Als rein grafische Methode zur Darstellung der Ungewissheit von zeitabhängigen Ausgangsdaten kann eine gleichzeitige Darstellung der Stichprobe (und damit optisch der Bandbreite) über den gesamten Zeitraum erfolgen. Es wird dadurch rein optisch der Bereich sichtbar, innerhalb dessen die Ausgangsdaten zu jedem Zeitpunkt liegen. Diese Darstellungsmethode wird Horsetail-Diagramm, auch Horsetail-Plot, genannt (Abbildung 58).

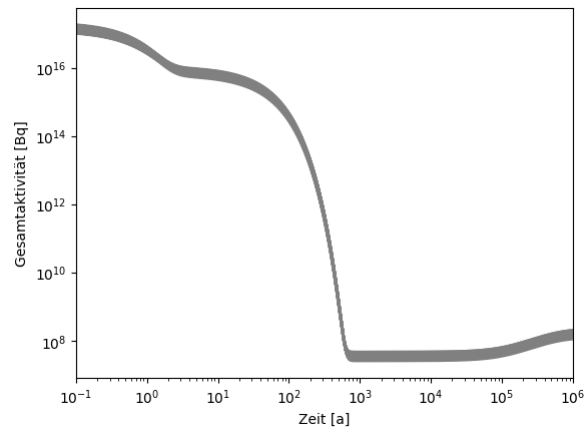


Abbildung 58 Horsetail-Diagramm der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1)

Eine zweite Methode zur Darstellung der Bandbreite und Wahrscheinlichkeitsverteilung von Ausgangsdaten ist die Darstellung als Histogramm bzw. als kumulative Verteilungsfunktion (CDF). Abbildung 59 zeigt die Histogramme und kumulierten Verteilungsfunktionen der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) zu verschiedenen Zeiten.

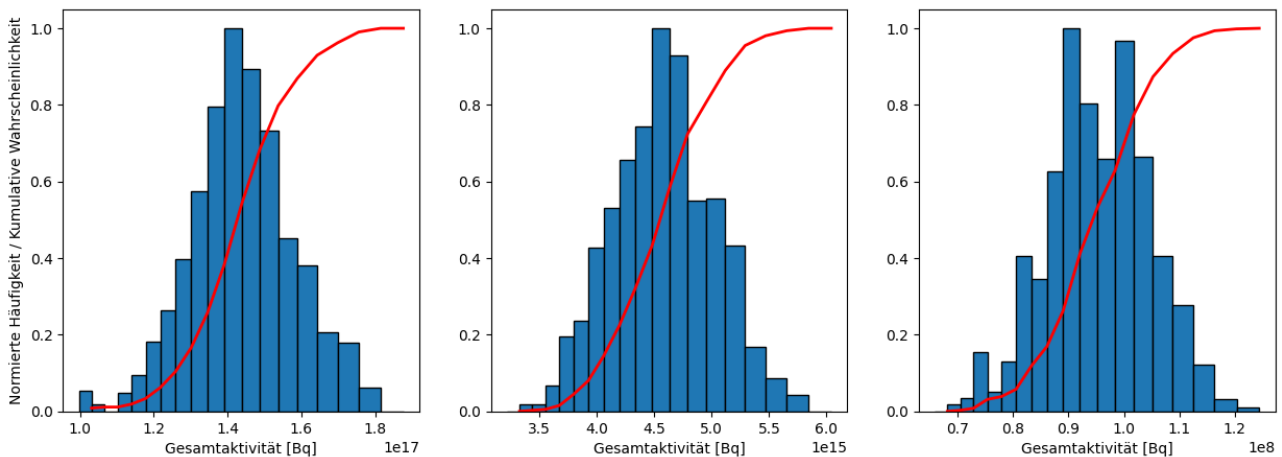


Abbildung 59 Histogramm und CDF der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeiten 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts)

5.1.3 Methoden mit Nutzung einer Verteilungsfunktion

Bei einer bekannten oder angenommenen Verteilung der Ausgangsdaten (z. B. Abbildung 59) kann diesen empirisch die bekannte oder angenommene Verteilungsfunktion durch Schätzung der Parameter aus der Stichprobe angepasst werden.

Die am häufigsten verwendete Verteilungsfunktion ist die Normalverteilung für einen Parameter in Anlehnung an die ISO bzw. DIN (Schwarz, 2020a). Dies bestätigte sich auch in der Literaturstudie (Anhang A): Die Normalverteilung bzw. die logarithmische Normalverteilung bei großer Streuung der Parameterwerte werden am häufigsten verwendet. In einzelnen Fällen erfolgt auch die Nutzung von Gleichverteilungen zwischen Extremwerten bzw. Eckwerten der Parameterwerte, z. B. (Nagra, 2023). Abbildung 60 zeigt das Histogramm der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang

C.3.1) mit der angepassten Normalverteilung (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion PDF) für verschiedene Zeitpunkte. Die zugehörigen Parameter der angepassten Normalverteilung, d. h. Mittelwert und Varianz, zeigt Tabelle 9. Das 68%-Vertrauensintervall ist in diesem Fall definiert durch den symmetrischen Bereich von plus / minus einer Standardabweichung zum Mittelwert, das 98%-Vertrauensintervall durch zwei Standardabweichungen.

Tabelle 9 Geschätzte Parameter der Normalverteilungsfunktion für die Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für verschiedene Zeitpunkte

Zeitpunkt [a]	Mittelwert [Bq]	Varianz [Bq ²]	68%-Vertrauensintervall [Bq]	98%-Vertrauensintervall [Bq]
0,1	1,44e+17	1,97e+32	1,30e+17 – 1,58e+17	1,16E-17 – 1,72e+17
20	4,59e+15	2,01e+29	4,14e+15 – 5,04e+15	3,69e+15 – 5,49e+15
300 000	9,56e+07	8,82e+13	8,62e+07 – 1,05e+08	7,68e+07 – 1,14e+08

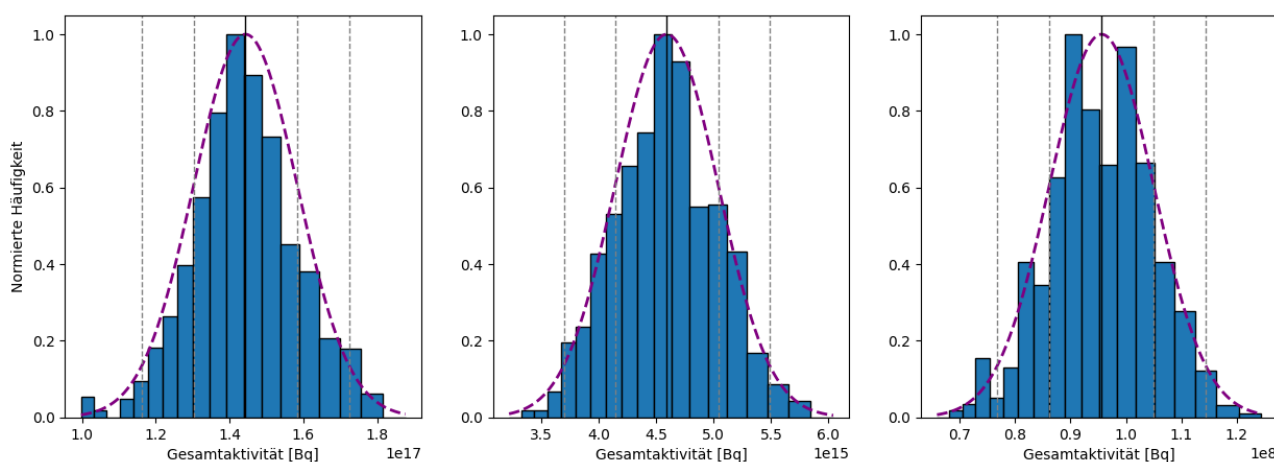


Abbildung 60 Histogramm der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeiten 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts) mit angepasster Normalverteilung (violett), dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)

Diese Methode kann unzureichende Ergebnisse liefern, falls die tatsächliche Verteilung der Ausgangsdaten durch die angenommene Verteilungsfunktion nicht angemessen abgebildet wird. Zur Bestimmung der Güte der Anpassung und zum Vergleich verschiedener möglicher Verteilungsfunktionen sind in der statistischen Literatur verschiedene Kriterien definiert.

5.1.4 Methoden ohne Nutzung einer Verteilungsfunktion

Ohne Kenntnis oder Annahme einer Verteilung der Ausgangsdaten kann die Darstellung der Ungewissheit mittels der Quantile der Ausgangsdaten erfolgen. Die Vertrauensintervalle sind hier symmetrisch um den Median der Ausgangsdaten (50%-Quantil) als Erwartungswert definiert. Das 68%-Vertrauensintervall liegt zwischen dem 16%-Quantil und dem 84%-Quantil, und das 98%-

Vertrauensintervall liegt zwischen dem 1%-Quantil und dem 99%-Quantil. Tabelle 10 zeigt die entsprechenden Quantile, Abbildung 61 verdeutlicht das Vorgehen dieser Methode grafisch.

Tabelle 10 Quantile der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für verschiedene Zeitpunkte

Zeitpunkt [a]	Median [Bq]	1%-Quantil [Bq]	16%-Quantil [Bq]	84%-Quantil [Bq]	99%-Quantil [Bq]
0,1	1,44e+17	1,12e+17	1,31e+17	1,58e+17	1,76e+17
20	4,58e+15	3,65e+15	4,13e+15	5,06e+15	5,59e+15
300 000	9,55e+07	7,39e+07	8,68e+07	1,05e+08	1,16e+08

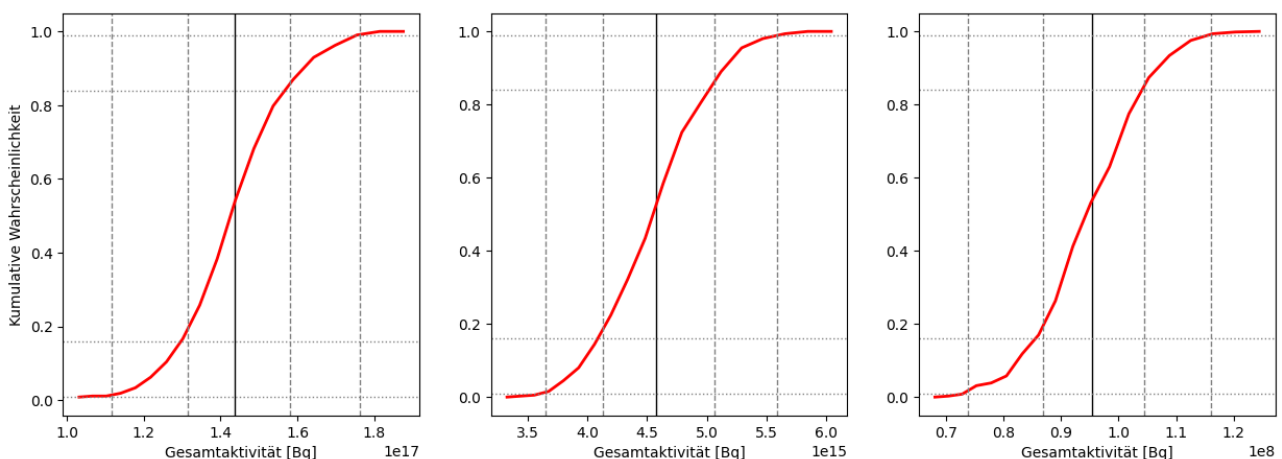


Abbildung 61 Empirische CDF der Gesamtaktivität des Illustrationsbeispiels (Anhang C.3.1) für die Zeitpunkte 0,1 Jahre (links), 20 Jahre (Mitte) und 300 000 Jahre (rechts) mit dem Medianwert (schwarz) und den vertikalen Linien des 1%-, 16%-, 84%- und 99%-Quantils (gestrichelt, grau), welche das 68%- und 98%-Vertrauensintervall angeben

Der Vergleich zwischen Tabelle 9 und Tabelle 10 zeigt eine gute Übereinstimmung (die Vertrauensintervalle sind nahezu identisch), d. h. die Annahme einer Normalverteilung scheint gerechtfertigt. Für das vorliegende Illustrationsbeispiel (Anhang C.3.1) ist dies zu erwarten, da sich die als normalverteilt beschriebene Ungewissheit der Eingangsdaten wegen der rein linearen Zerfallsgesetze als normalverteilte Ungewissheit der Ausgangsdaten niederschlägt.

5.2 Anwendung auf Ziel- und Ausgangsgrößen

In diesem Abschnitt soll die Anwendung der beschriebenen Methoden auf die radiologische Charakterisierung eines Inventarmodells gezeigt werden. Die Anwendung erfolgt beispielhaft auf das massenspezifische RN-Inventar der bestrahlten BE mit Mischoxid-Brennstoff (MOX) aus den Abfällen der Druckwasserleistungsreaktoren (DWR) des Anhangs zum Arbeitspaket 3 der vorläufigen Sicherheitsuntersuchung Gorleben (VSG). Für die Werte des RN-Inventars werden illustrativ normalverteilte Abweichungen von den Angaben angenommen, deren Standardabweichung sich aus der Nutzung eines numerischen Codes zur Bestimmung des RN-Inventars nach der Nutzung in einem Reaktor ableitet. Ein LHS mit einem Stichprobenumfang von 1 000

Variationen der Eingangsparameter dient als Grundlage. Anhang C.3.2 gibt weitere Informationen zu den Eingangsdaten.

Wie in Abschnitt 4.3 werden hier die massenspezifische Gesamtaktivität, als Ausgangsgröße des Inventarmodells, die massenspezifische Radiotoxizität, d. h. die Ingestionsdosis für einen Erwachsenen, repräsentativ für die Zielgröße der Körperdosis und durchschnittliche Jahresdosis eines Erwachsenen, und die massenspezifische Nachzerfallsleistung, repräsentativ für die Zielgröße Temperatur an der Gebindeoberfläche, betrachtet.

Zuerst werden die Horsetail-Diagramme der spezifischen Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung gezeigt. Nachfolgend erfolgt eine Bestimmung der Bandbreiten mit beiden in Abschnitt 5.1 vorgestellten Methoden.

5.2.1 Qualitative und quantitative Aussagen

Abbildung 62 zeigt die spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung aller Berechnungen basierend auf einer normalverteilten Variation der Eingangsdaten mit einem LHS als Horsetail-Diagramm.

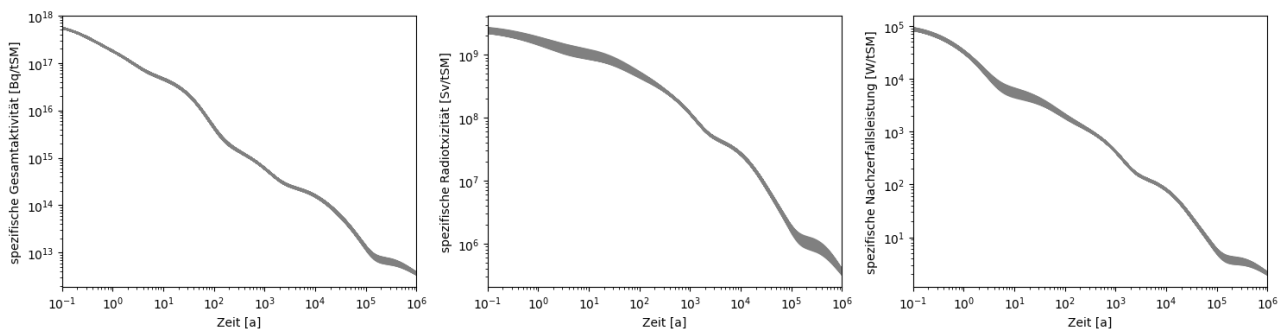


Abbildung 62 Horsetail-Diagramme der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (Mitte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2)

LHS mit einem Stichprobenumfang von 1 000 Variationen normalverteilter Eingangsdaten

Basierend auf diesen Zeitreihen werden den drei Ausgangs- bzw. Zielgrößen entsprechend den zwei quantitativen Methoden aus Abschnitt 5.1 Bandbreiten zugeordnet. D. h. den Ausgangsdaten wird zu einem Zeitpunkt eine Verteilungsfunktion, hier eine Normalverteilung, angepasst und aus dieser Mittelwert und Standardabweichung abgeleitet (gemäß Abschnitt 5.1.3), bzw. es erfolgt eine Berechnung der Quantile (gemäß Abschnitt 5.1.4).

Abbildung 63 zeigt das Ergebnis unter Annahme einer Normalverteilung (Abschnitt 5.1.3) für alle drei Ausgangs- bzw. Zielgrößen. Tabelle 11 zeigt die Mittelwerte und Vertrauensintervalle der Ausgangs- bzw. Zielgrößen.

Tabelle 11 Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung einer Normalverteilung zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten

Zeit [a]	Parameter	Einheit	Mittelwert	68%- Vertrauensintervall	98%- Vertrauensintervall
20	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,12e+16	3,08e+16 - 3,15e+16	3,05e+16 - 3,18e+16
	Radiotoxizität	Sv/tSM	8,81e+08	8,41e+08 - 9,21e+08	8,01e+08 - 9,61e+08
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	4,52e+03	4,29e+03 - 4,75e+03	4,06e+03 - 4,98e+03
300 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	6,51e+12	6,24e+12 - 6,78e+12	5,97e+12 - 7,05e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	9,45e+05	8,85e+05 - 1,00e+06	8,25e+05 - 1,06e+06
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	3,51E+00	3,37e+00 - 3,66e+00	3,22e+00 - 3,81e+00
1 000 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,63e+12	3,57e+12 - 3,68e+12	3,52e+12 - 3,74e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	3,55e+05	3,45e+05 - 3,66e+05	3,35e+05 - 3,76e+05
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	2,07e+00	2,04e+00 - 2,10e+00	2,00e+00 - 2,13e+00

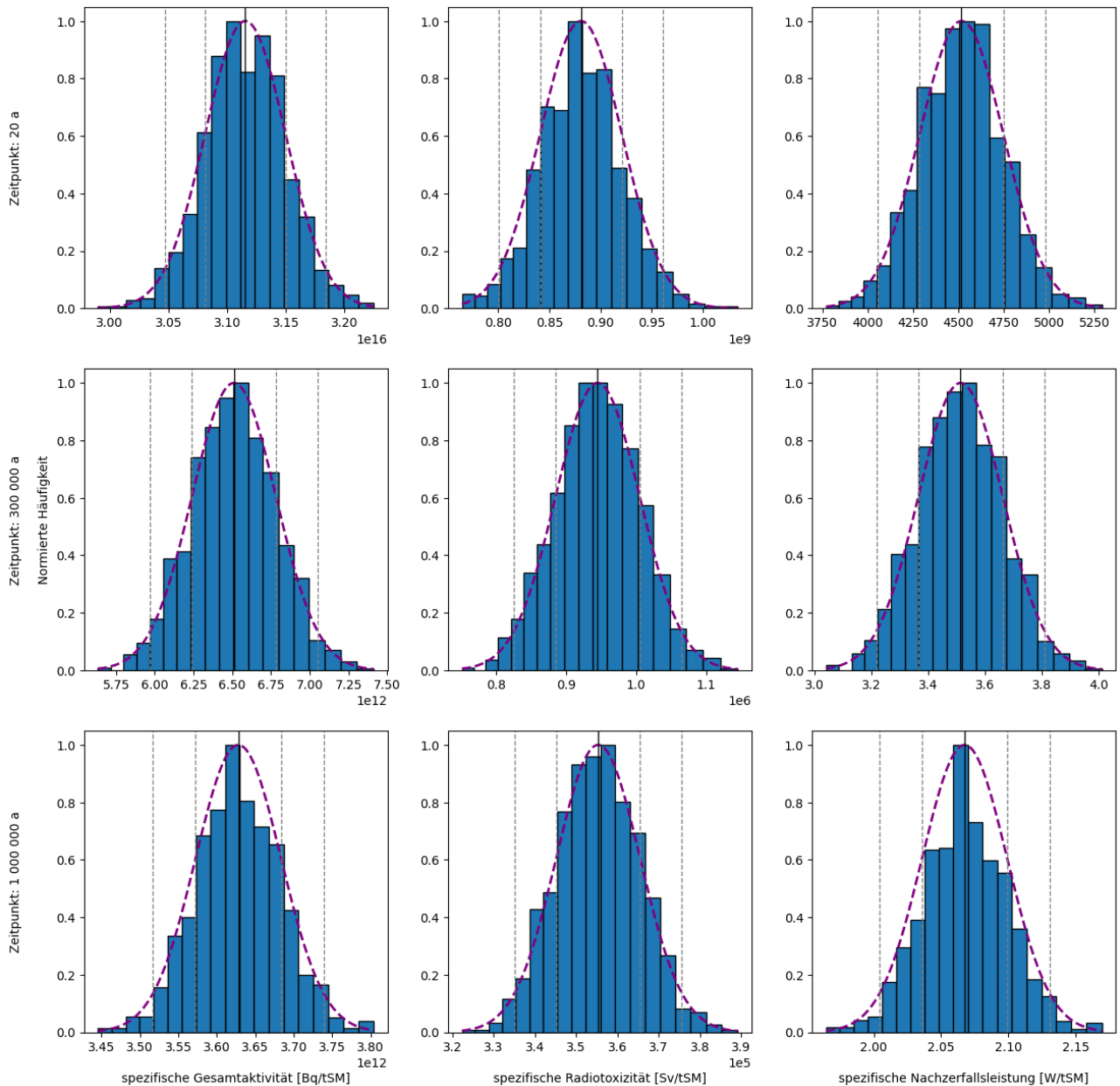


Abbildung 63 Histogramme der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit angepasster Normalverteilung (violett), dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)

Abbildung 64 zeigt das Ergebnis ohne Annahme einer Verteilung (Abschnitt 5.1.4) für alle drei Ausgangs- bzw. Zielgrößen. Tabelle 12 zeigt die Medianwerte und Vertrauensintervalle der Ausgangs- bzw. Zielgrößen.

Tabelle 12 Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung der Quantile zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten

Zeit [a]	Parameter	Einheit	Median	68%- Vertrauens- intervall	98%- Vertrauens- intervall
20	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,11e+16	3,08e+16 - 3,15e+16	3,04e+16 - 3,20e+16
	Radiotoxizität	Sv/tSM	8,80e+08	8,42e+08 - 9,20e+08	7,87e+08 - 9,78e+08
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	4,52e+03	4,29e+03 - 4,75e+03	4,00e+03 - 5,09e+03
300 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	6,51e+12	6,25e+12 - 6,78e+12	5,92e+12 - 7,12e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	9,44e+05	8,86e+05 - 1,00e+06	8,08e+05 - 1,08e+06
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	3,51E+00	3,37e+00 - 3,66e+00	3,19e+00 - 3,85e+00
1 000 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,63e+12	3,57e+12 - 3,68e+12	3,49e+12 - 3,76e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	3,55e+05	3,45e+05 - 3,65e+05	3,33e+05 - 3,80e+05
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	2,07e+00	2,04e+00 - 2,10e+00	1,99e+00 - 2,14e+00

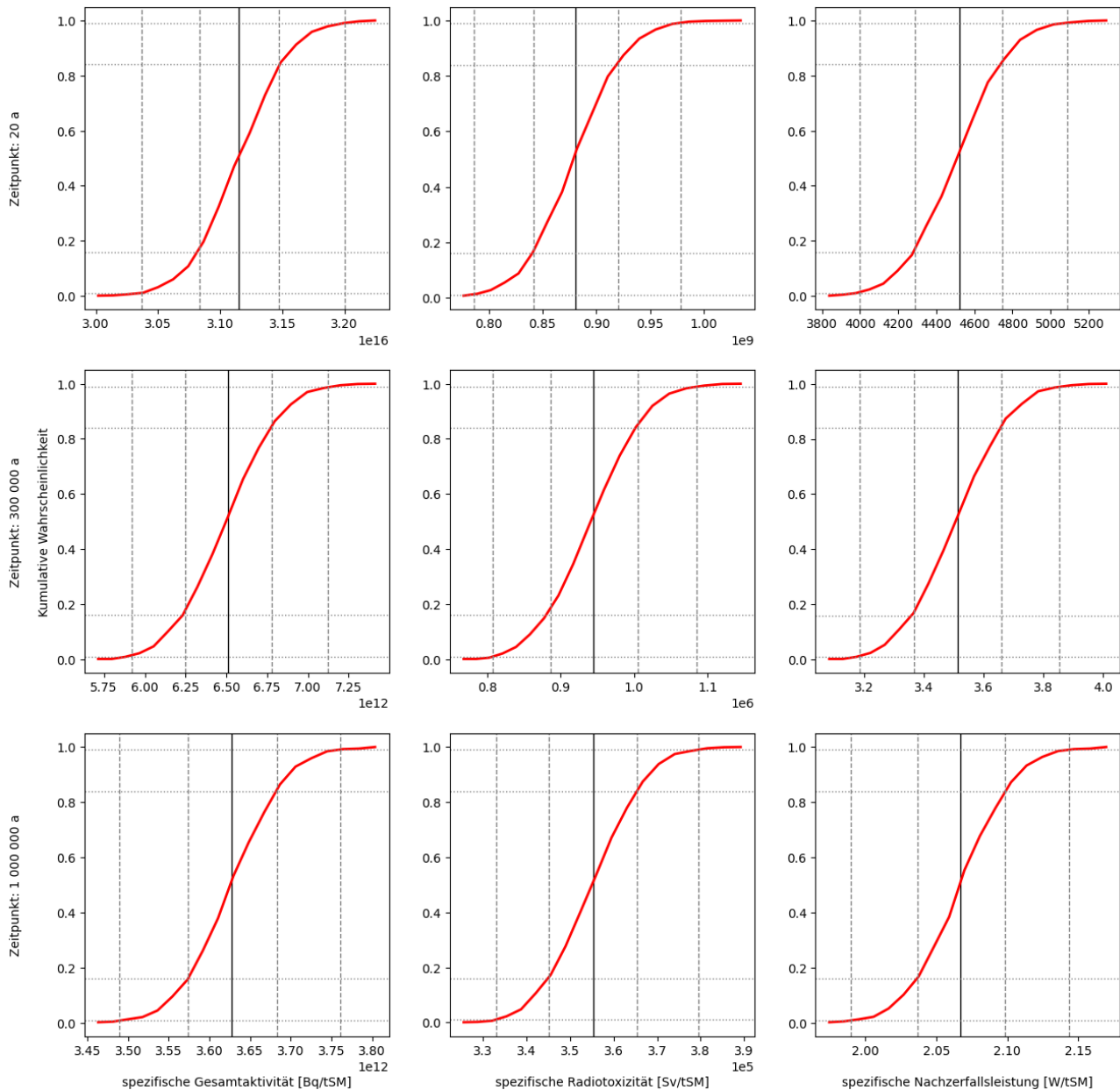


Abbildung 64 CDF der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit der Annahme einer Normalverteilung für die Ungewissheit der Eingangsdaten und den 1%, 16%, 84% und 99% Quantilen der Ausgangsdaten als horizontale bzw. vertikale Linien (gestrichelt, grau)

Beide Vorgehensweisen zur Bestimmung der Bandbreiten der Ausgangsdaten zeigen bei einem Vergleich von Tabelle 11 und Tabelle 12 kaum Unterschiede. Dies liegt, wie schon beim Illustrationsbeispiel, daran, dass die Verteilung der Ausgangsdaten einer Normalverteilung entspricht und alle Modellansätze im Inventarmodell linear sind.

In der Literatur wird oft auch eine Gleichverteilung zur Beschreibung der Verteilung der Eingangsdaten gefunden. Dies kann je nach Modellansatz zu Ausgangsdaten führen, deren Verteilung nicht einer Normalverteilung entspricht. Um dies zu verdeutlichen, wird nachfolgend der

Ungewissheit in den Eingangsdaten, anfängliches RN-Inventar, eine Gleichverteilung, über plus/minus zwei Standardabweichungen (98%-Vertrauensintervall) unterstellt.

Abbildung 65 zeigt das Ergebnis unter Annahme einer Normalverteilung gemäß Abschnitt 5.1.3 für alle drei Ausgangs- bzw. Zielgrößen. Es fällt deutlich auf, dass die Wahl einer Normalverteilung für die Ausgangsdaten nicht der tatsächlichen Verteilung der Parameter entspricht. Tabelle 13 zeigt die Mittelwerte und Vertrauensintervalle der Ausgangs- bzw. Zielgrößen.

Tabelle 13 Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung, des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung einer Normalverteilung zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten für gleichverteilte Eingangsdaten

Zeit [a]	Parameter	Einheit	Mittelwert	68%-Vertrauensintervall	98%-Vertrauensintervall
20	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,12e+16	3,08e+16 - 3,15e+16	3,04e+16 - 3,19e+16
	Radiotoxizität	Sv/tSM	8,81e+08	8,35e+08 - 9,27e+08	7,88e+08 - 9,73e+08
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	4,52e+03	4,25e+03 - 4,78e+03	3,98e+03 - 5,05e+03
300 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	6,51e+12	6,20e+12 - 6,82e+12	5,89e+12 - 7,13e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	9,45e+05	8,75e+05 - 1,01e+06	8,06e+05 - 1,08e+06
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	3,51E+00	3,34e+00 - 3,68e+00	3,17e+00 - 3,86e+00
1 000 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,63e+12	3,56e+12 - 3,69e+12	3,50e+12 - 3,75e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	3,55e+05	3,44e+05 - 3,67e+05	3,32e+05 - 3,79e+05
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	2,07e+00	2,03e+00 - 2,10e+00	1,99e+00 - 2,14e+00

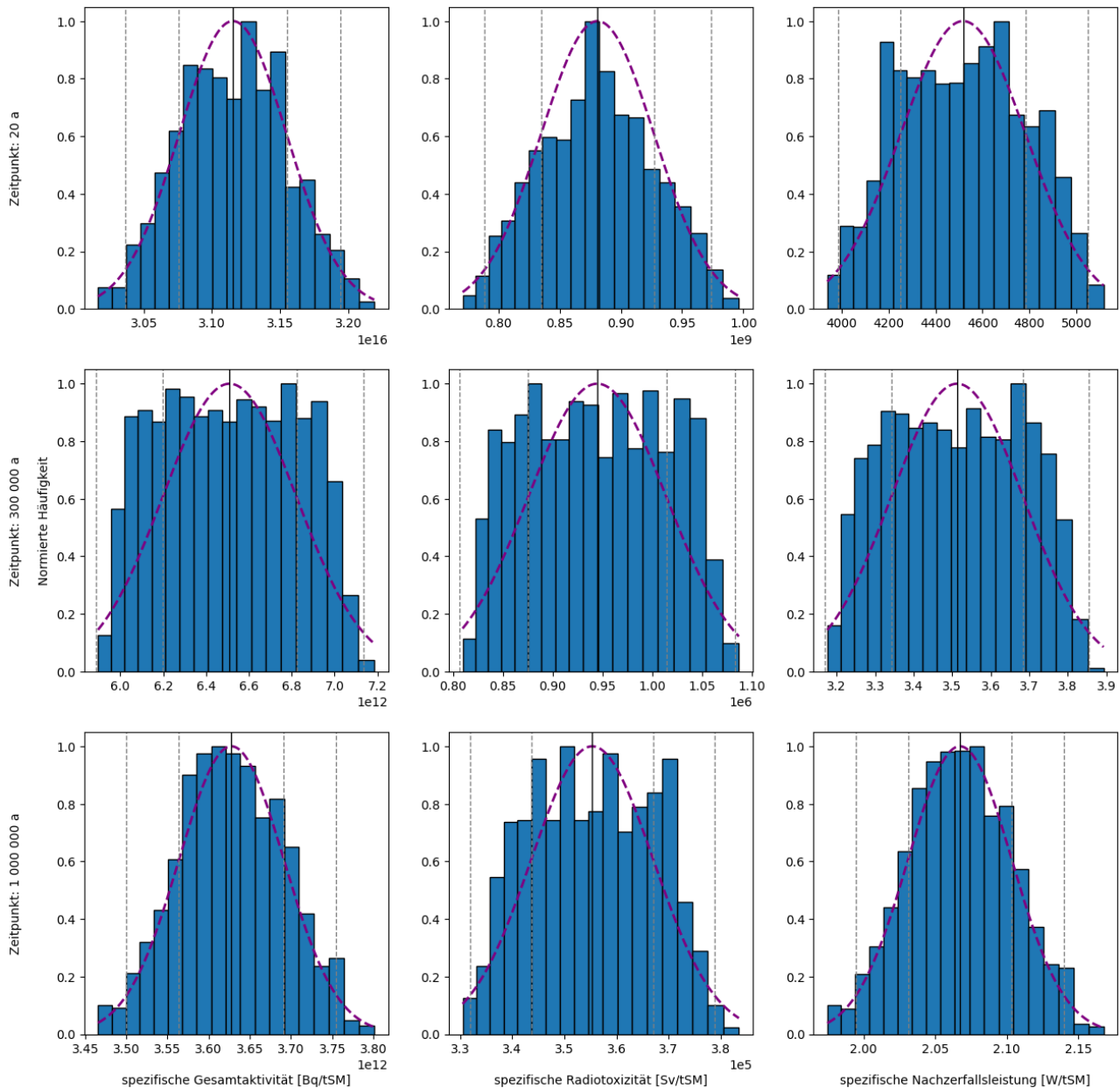


Abbildung 65 Histogramm der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) Jahre angepasster Normalverteilung (violett) bei gleichverteilten Eingangsdaten, dem zugehörigen Mittelwert (schwarz) und dem Vertrauensbereich einer bzw. der doppelten Standardabweichung als vertikale Linien (gestrichelt, grau)

Abbildung 66 zeigt das Ergebnis ohne Annahme einer Verteilung gemäß Abschnitt 5.1.4 für alle drei Ausgangs- bzw. Zielgrößen bei gleichverteilten Eingangsdaten.

Tabelle 14 zeigt die Medianwerte und Vertrauensintervalle der Ausgangs- bzw. Zielgrößen.

Tabelle 14 Bandbreiten für die Ausgangsdaten spezifische Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) bei Nutzung der Quantile zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit der Ausgangsdaten für gleichverteilte Eingangsdaten

Zeit [a]	Parameter	Einheit	Median	68%-Vertrauensintervall	98%-Vertrauensintervall
20	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,11e+16	3,08e+16 - 3,15e+16	3,03e+16 - 3,20e+16
	Radiotoxizität	Sv/tSM	8,80e+08	8,32e+08 - 9,31e+08	7,84e+08 - 9,78e+08
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	4,52e+03	4,22e+03 - 4,81e+03	4,00e+03 - 5,04e+03
300 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	6,51e+12	6,15e+12 - 6,87e+12	5,96e+12 - 7,08e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	9,43e+05	8,65e+05 - 1,03e+06	8,24e+05 - 1,07e+06
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	3,51E+00	3,32e+00 - 3,71e+00	3,21e+00 - 3,83e+00
1 000 000	Gesamtaktivität	Bq/tSM	3,63e+12	3,56e+12 - 3,69e+12	3,49e+12 - 3,76e+12
	Radiotoxizität	Sv/tSM	3,55e+05	3,42e+05 - 3,69e+05	3,33e+05 - 3,78e+05
	Nachzerfallsleistung	W/tSM	2,07e+00	2,03e+00 - 2,10e+00	1,99e+00 - 2,14e+00

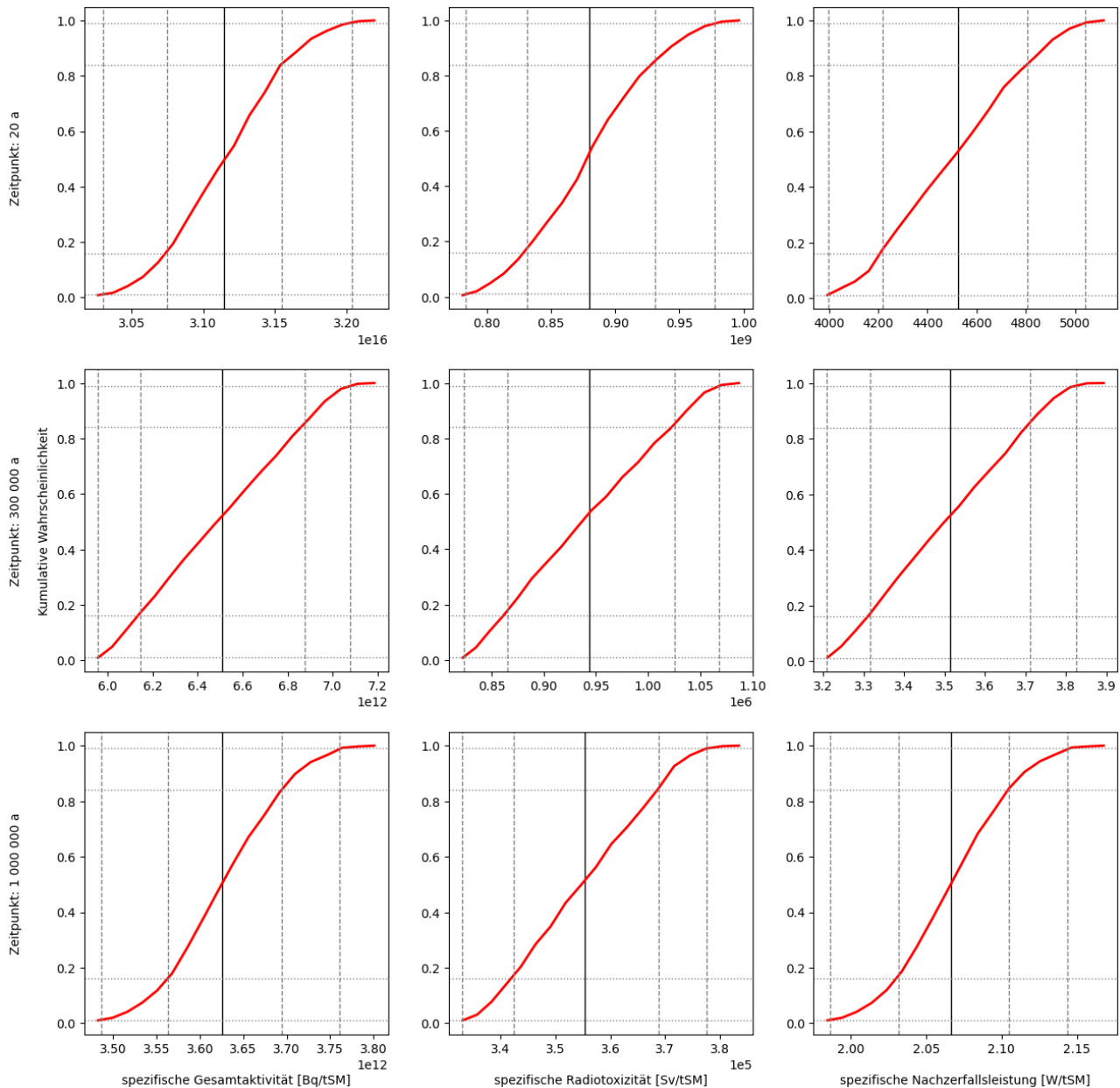


Abbildung 66 CDF der spezifischen Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 Jahre (unten) mit der Annahme einer Gleichverteilung für die Ungewissheit der Eingangsdaten und den 1%, 16%, 84% und 99% Quantilen der Ausgangsdaten als horizontale bzw. vertikale Linien (gestrichelt, grau)

Alle Ergebnisse für die Bandbreiten der Ausgangsdaten bzw. Zielgrößen sind in Abbildung 67 grafisch in leicht modifizierten Box-Plots zusammengefasst. Durch die geringen Ungewissheiten im anfänglichen RN-Inventar, welche nur 19 der 288 betrachteten Radionuklide zugeordnet werden können, sind nur geringe Abweichungen zwischen den verschiedenen Verteilungen der Eingangsdaten und den Methoden zur Bestimmung der Bandbreiten der Ausgangsdaten sichtbar. Die Referenzwerte sind in allen Beispielen unverändert. Bei einer angesetzten Normalverteilung der Eingangsdaten entstehen zwischen den Methoden der Bestimmung der Bandbreiten der Ausgangsdaten kaum Unterschiede (orangefarbene Balken). Das 98%-Vertrauensintervall wird für

normalverteilte Eingangsdaten bei der Nutzung der Quantile immer etwas grösser angegeben als bei der Bestimmung der Vertrauensbereiche unter Nutzung einer Verteilungsfunktion. Im Gegensatz dazu, werden bei Nutzung einer Normalverteilung zur Bestimmung der Bandbreiten, wenn diese nicht tatsächlich vorliegt, das 98%-Vertrauensintervall meist überschätzt und das 68%-Vertrauensintervall meist unterschätzt (linker blauer Balken verglichen mit rechtem orangefarbenem Balken).

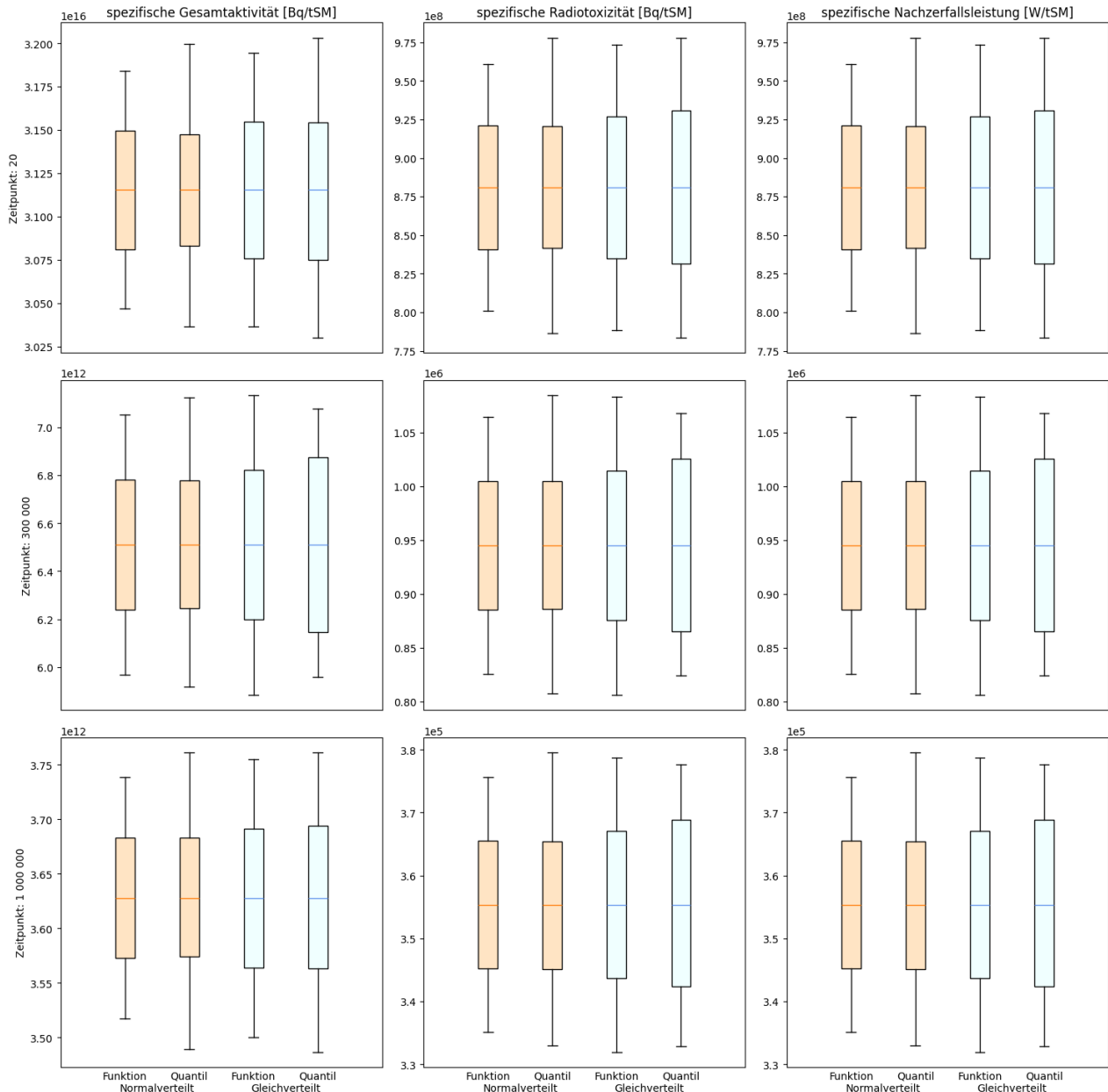


Abbildung 67 Vergleich aller Bandbreiten für die spezifische Gesamtaktivität (links), Radiotoxizität (mittlere Spalte) und Nachzerfallsleistung (rechts) des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) für die Zeiten 20 Jahre (oben), 300 000 Jahre (mittlere Reihe) und 1 000 000 (unten) Jahre

Gezeigt sind die Ergebnisse für die Referenzwerte (Linie), das 68%- (Box) und 98%- (Antennen) Vertrauensintervall bei einer Normalverteilung (orange) bzw. Gleichverteilung (blau) der Ungewissheit der Eingangsdaten unter Nutzung einer Normalverteilung („Funktion“) bzw. der Quantile („Quantil“) zur Bestimmung der Bandbreiten der Ausgangsdaten

Vergleich unterschiedlicher Datensätze eines RN-Inventars

In diesem Abschnitt soll die Anwendung der Methoden zum Vergleich unterschiedlicher Datensätze gezeigt werden. Eine relevante Fragestellung ist zum Beispiel, ob unterschiedliche Datensätze zu einem Referenzinventar zusammengefasst werden können.

Hierfür werden nachfolgend die Inventardatensätze der vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) verwendet. Neben den bisher in diesem Bericht betrachteten Abfällen aus der Nutzung von Mischoxid-Brennelementen in Druckwasserleistungsreaktoren (DWR-MOX) werden noch drei weitere Datensätze untersucht: Mischoxid-Brennelemente aus Siedewasserreaktoren (SWR-MOX) sowie Urandioxid-Brennelemente aus Druckwasserreaktoren (DWR-UO2) und aus Siedewasserreaktoren (SWR-UO2). Anhang C.3.2 gibt weitere Informationen zu diesen Eingangsdaten.

Zunächst werden die vier Inventardatensätze hinsichtlich ihres zeitlichen Verlaufs für die Ausgangs- bzw. Zielgrößen der spezifischen Gesamtaktivität, Radiotoxizität und Nachzerfallsleistung in Abbildung 68 (links) gegenübergestellt. Auf der rechten Seite der Abbildung sind die entsprechenden prozentualen Differenzen für sämtliche Konstellationen dargestellt.

Es kann gefolgert werden, dass über den gesamten Betrachtungszeitraum von 1 Million Jahre (mit Ausnahme des ersten Jahres) MOX-BE zu höheren Werten im Vergleich zu UO2-BE führen. Innerhalb einer dieser Kategorie (Mischoxid-Brennstoff MOX bzw. Urandioxid-Brennstoff UO2) ist der charakteristische Verlauf der zeitlichen Entwicklung der Ausgangs- bzw. Zielgrößen sehr ähnlich. Dies weist daraufhin, dass die Zerfallsketten innerhalb dieser Brennstoffkategorie und damit die Zusammensetzung des RN-Inventars sehr ähnlich sind, und zwar unabhängig vom Reaktortyp (DWR bzw. SWR). Der Respective-Contribution-Plot in Abbildung 69 bestätigt diese Annahme.

Die Abfälle aus Druckwasserreaktoren weisen (für beide Kategorien) eine um ca. 7% höhere anfängliche spezifische Gesamtaktivität auf (siehe Abbildung 68, oben rechts, blau-orangegestrichelte Kurve (DWR-MOX vs. SWR-MOX) bzw. grün-rot-gestrichelte Kurve (DWR-UO2 vs. SWR-UO2)). Aus den Differenz-Darstellungen wird ersichtlich, dass die größten Unterschiede bei ca. 300 Jahren auftreten und die geringsten Abweichungen zwischen den DWR-UO2 und SWR-UO2 Datensätzen vorliegen. Aus diesem Grund beschränkt sich die weitere Analyse hinsichtlich der Frage, ob verschiedene Inventare zu einem Referenzinventar zusammengefasst werden können auf die beiden Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2 zum Zeitpunkt von 300 Jahren, da, sollte sich deren Zusammenfassung als nicht zulässig erweisen, dies sehr wahrscheinlich auch für die anderen Datensätze gilt.

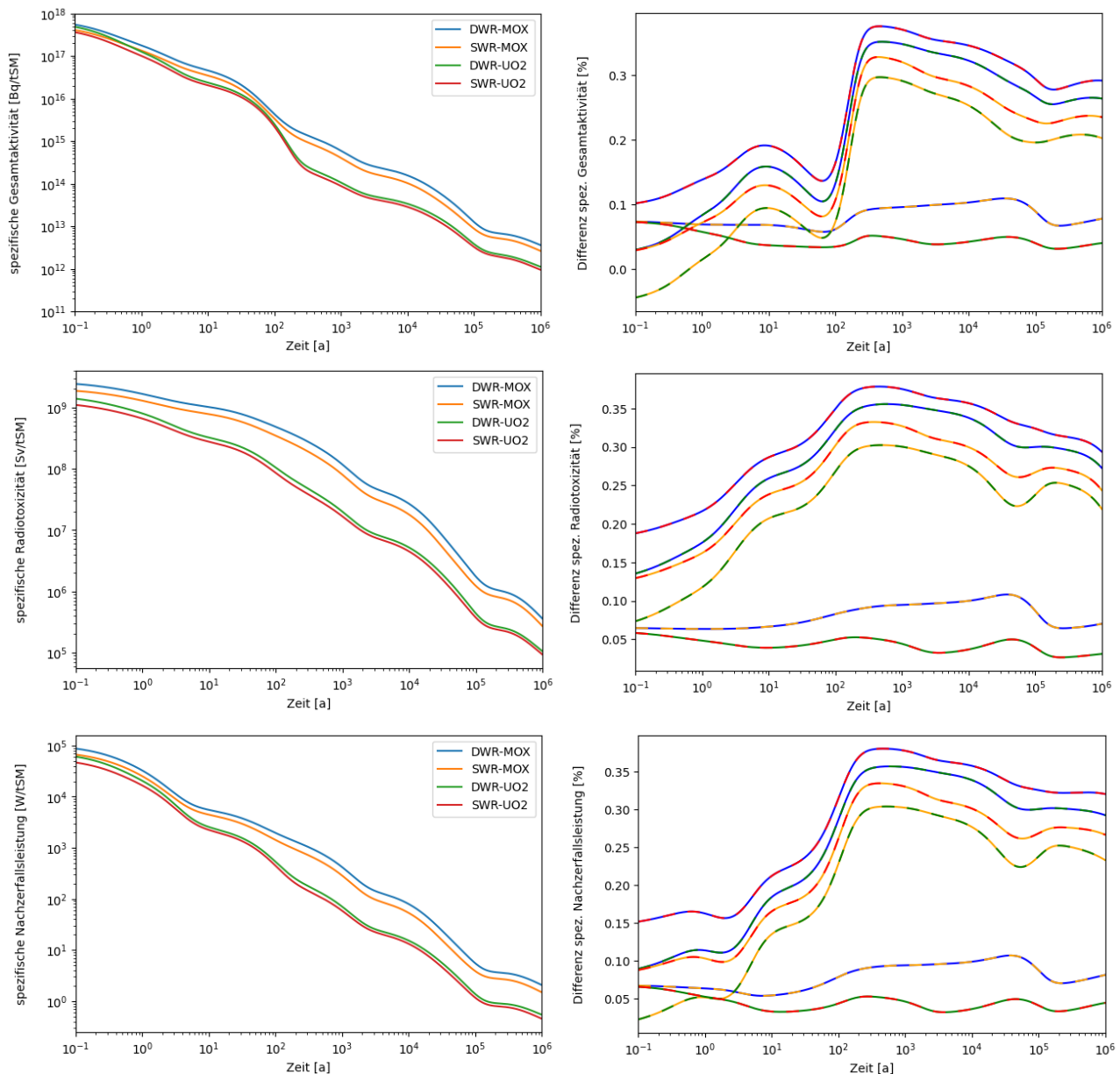


Abbildung 68 Vergleich der VSG-Datensätze DWR-MOX/-UO2 sowie SWR-MOX/-UO2. Links: Zeitlicher Verlauf der spezifischen Gesamtaktivität (oben), Radiotoxizität (Mitte), Nachzerfallsleistung (unten). Rechts: Zeitlicher Verlauf der prozentualen Differenz zwischen den verschiedenen Datensätzen.

Hinweis: Die gestrichelten Linien der prozentualen Differenzen (Diagramme rechts) setzen sich farblich aus den Linienfarben der einzelnen RN-Inventare (siehe Diagramme links) zusammen

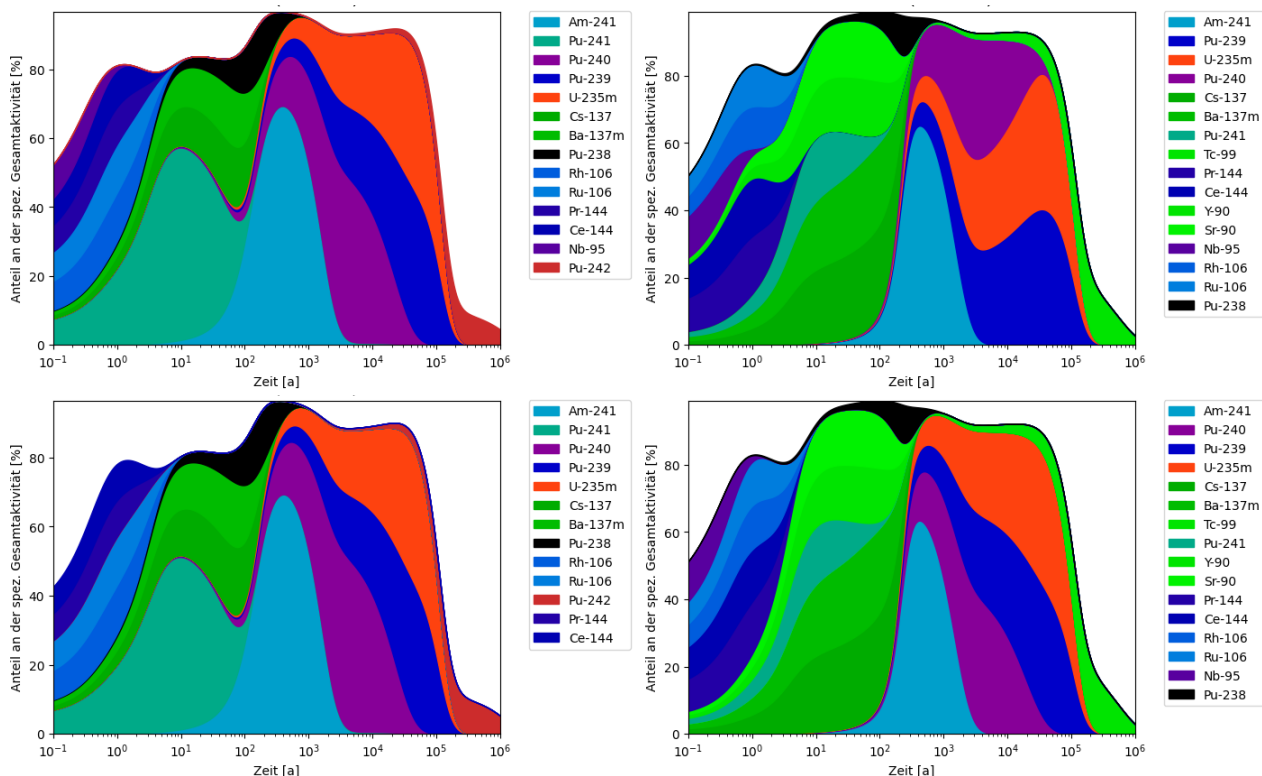


Abbildung 69 Respective-Contribution-Plot für die spezifische Gesamtaktivität der VSG-Datensätze DWR-MOX (oben links), DWR-UO2 (oben rechts), SWR-MOX (unten links) und SWR-UO2 (unten rechts)

Darstellung des prozentualen Anteils eines Eingangsparameters, RN-Inventar, an der spezifischen Gesamtaktivität (sofern dieser zu einem beliebigen Zeitpunkt größer als 10% ist). Innerhalb einer Kategorie (MOX: Diagramme links, UO2: Diagramme rechts) ist die Zusammensetzung und Rangfolge der wesentlichen RN sehr ähnlich. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Die Fragestellung hinsichtlich der Legitimität einer Zusammenfassung verschiedener Datensätze zu einem Referenzdatensatz – mit über die Datensätze vereinheitlichten Daten zu Referenzwert, Verteilungsfunktion und Vertrauensbereich für jedes RN – wird im Folgenden anhand der VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2 untersucht. Hierzu werden die beiden Datensätze des anfänglichen RN-Inventars mittels LHS (Stichprobenumfang 1 000) variiert und anhand der Histogramme, die sich ergebenden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF) für die drei betrachteten Ausgangs- / Zielgrößen und deren empirische kumulative Verteilungsfunktionen (CDF) miteinander verglichen, siehe Abbildung 70 (spezifische Gesamtaktivität), Abbildung 71 (spezifische Radiotoxizität) und Abbildung 72 (spezifische Nachzerfallsleistung). Die Variation der Eingangsparameter erfolgt dabei basierend auf der Annahme einer Normalverteilung, die sich ableitet aus der Nutzung eines numerischen Codes zur Bestimmung des RN-Inventars nach der Nutzung der BE in einem Reaktor (Gauld and Merturek, 2019), für 19 der 288 Nuklide mit Standardabweichungen zwischen 0,75% und 40%, sowie losgelöst von diesen Annahmen für alle 288 Nuklide des anfänglichen RN-Inventars mit der Annahme einer generellen Standardabweichung von 10%, 20% und 50%.

Es kann aus den Ergebnissen in Abbildung 70 bis Abbildung 72 gefolgert werden, dass die empirischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen als auch deren empirische kumulative Verteilungsfunktionen aller drei Ausgangs- / Zielgrößen für die Variation der Standardabweichung

nach (Gauld and Mertzyurek, 2019) sowie unter der Annahme einer generellen Standardabweichung von 10% und 20% für beide betrachteten Datensätze beträchtlich auseinander liegen und eine Zusammenfassung der beiden RN-Inventare zu einem Referenzdatensatz deswegen wenig angemessen erscheint.

Erst für größere generelle Standardabweichungen, hier 50%, vereinen sich die Histogramme bzw. deren empirische CDF so weit, dass eine Zusammenfassung des anfänglichen RN-Inventars in einem Referenzinventar bei Betrachtung der resultierenden Gesamtaktivität (Abbildung 73) zunehmend angemessen erscheint. Über eine mögliche Zusammenfassung von Datensätzen zu Referenzdatensätzen wird schlussendlich die tatsächliche Ungewissheit der Eingangsdaten und die Betrachtung aller relevanten Ausgangsparameter (Ausgangs- bzw. Zielgrößen) entscheiden.

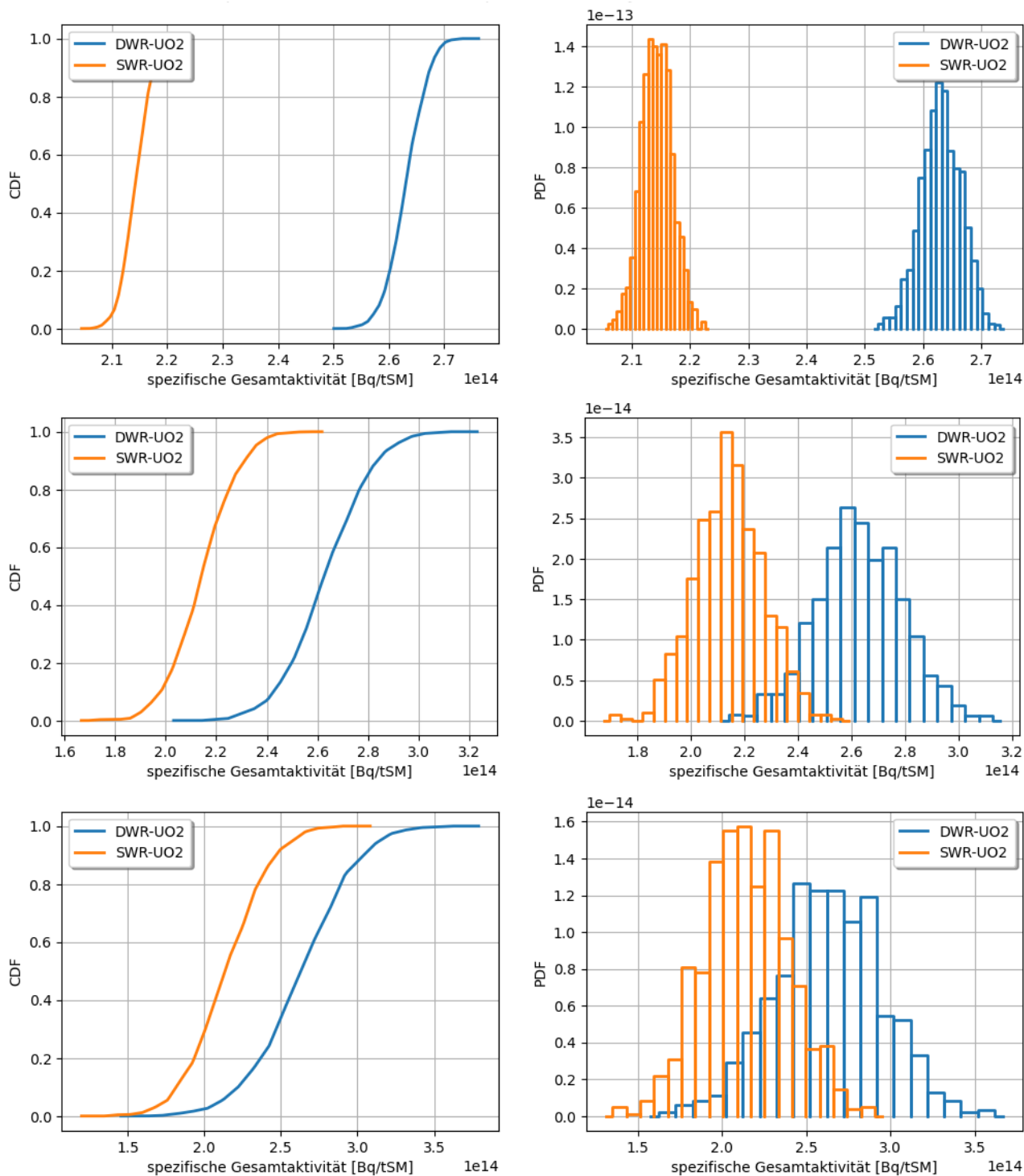


Abbildung 70 Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Gesamtaktivität zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2

Variation von 19 Eingangsparametern nach (Gauld and Mertzyurek, 2019) oben, generell für 288 Nuklide mit einer Standardabweichung von 10% (mittig) bzw. 20% (unten)

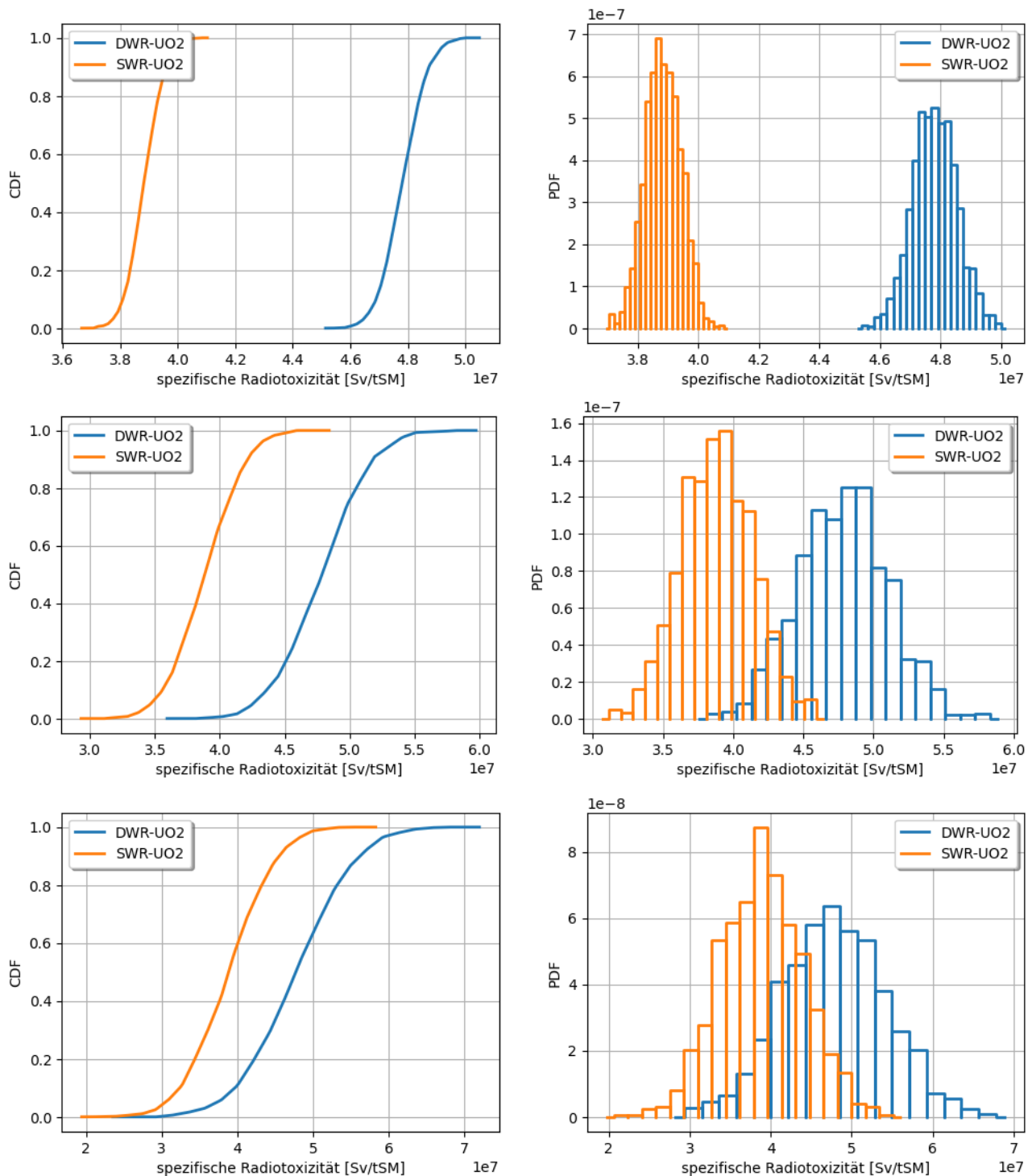


Abbildung 71 Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Radiotoxizität zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2

Variation von 19 Eingangsparametern nach (Gauld and Mertyurek, 2019) oben, generell für 288 Nuklide mit einer Standardabweichung von 10% (mittig) bzw. 20% (unten)

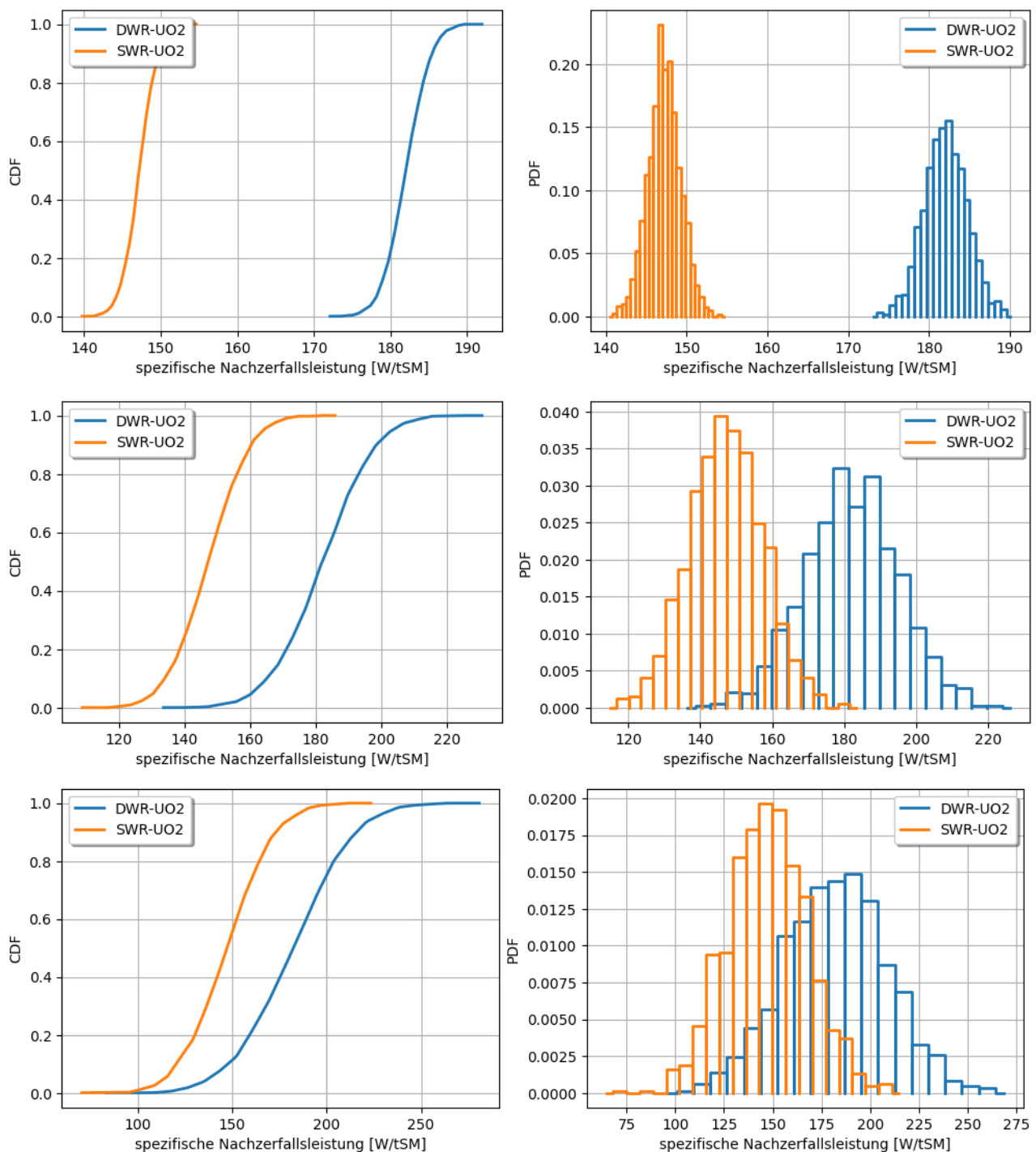


Abbildung 72 Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Nachzerfallsleistung zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2

Variation von 19 Eingangsparametern nach (Gauld und Mertzyurek, 2019) oben, generell für 288 Nuklide mit einer Standardabweichung von 10% (mittig) bzw. 20% (unten)

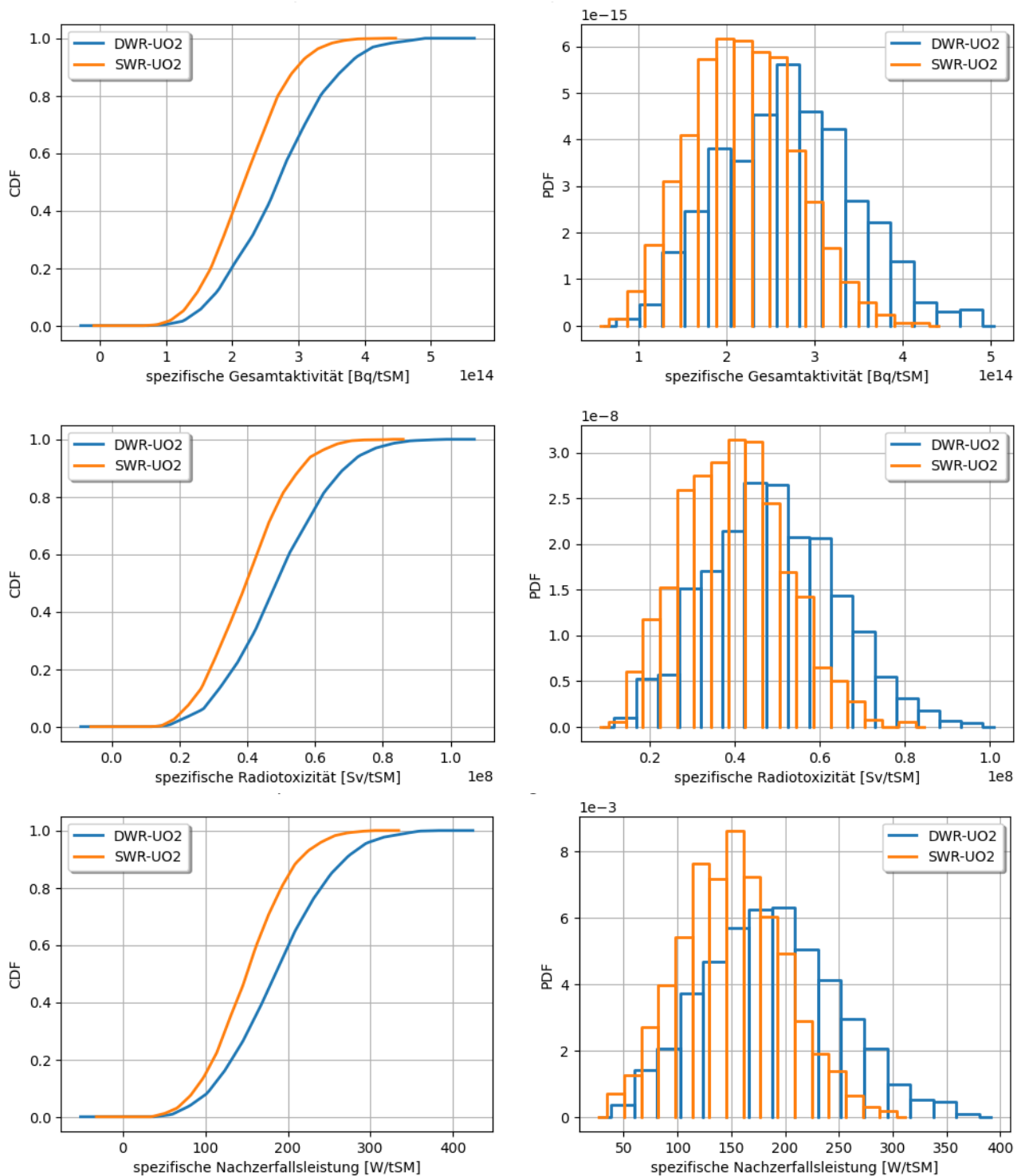


Abbildung 73 Empirische kumulative Verteilungsfunktion (links) und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (rechts) der spezifischen Gesamtaktivität (oben), Radiotoxizität (mittig) und Nachzerfallsleistung (unten) zum Zeitpunkt 300 Jahre für die VSG-Datensätze DWR-UO2 und SWR-UO2

Variation aller Eingangsparameter für 288 Nuklide mit einer Standardabweichung von 50%

Nutzung alternativer Datenquellen zur Bestimmung der Nachzerfallsleistung

Parameter wie die Halbwertszeiten sowie Angaben zu thermischen und mechanischen Eigenschaften werden üblicherweise aus internationalen Datenbanken entnommen. Einschlägige Datenquellen sind z. B. ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011), JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020), JENDL-5 (Iwamoto et al., 2023), CENDL-3.2 (Ge et al., 2020) oder ROSFOND (Zabrodskaya et al., 2007). In den bisher gezeigten Analysen wurde die ENDF-Datenbasis genutzt, da diese dem Nuclear Data Sheet der IAEA zugrunde liegt (Anhang C.2.2). Nachfolgend werden Konvertierungsfaktoren auf der Grundlage der Zerfallsenergien gemäß JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) verwendet. Dies erfolgt einerseits zur Illustration der Differenzen aber auch zur Bewertung der daraus resultierenden Unterschiede in der spezifischen Nachzerfallsleistung. Sämtliche betrachteten Nuklide sind in beiden Datenbanken vorhanden.

In Abbildung 74 ist der zeitliche Verlauf der spezifischen Nachzerfallsleistung für das anfängliche RN-Inventar des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) unter Verwendung beider Datenbanken dargestellt. Die Ergebnisse ähneln sich in ihrem Verlauf, es gibt jedoch kleine Unterschiede. Zu frühen Zeiten bis ca. 3 Jahre ergibt die Nutzung der Zerfallsenergien der IAEA gemäss ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) eine leicht höhere Zerfallswärme, während zu späteren Zeiten, insbesondere zwischen 1 000 bis 10 000 Jahren die Nachzerfallsleistung auf Basis der Zerfallsenergien gemäß JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) etwas höhere Werte aufweist.

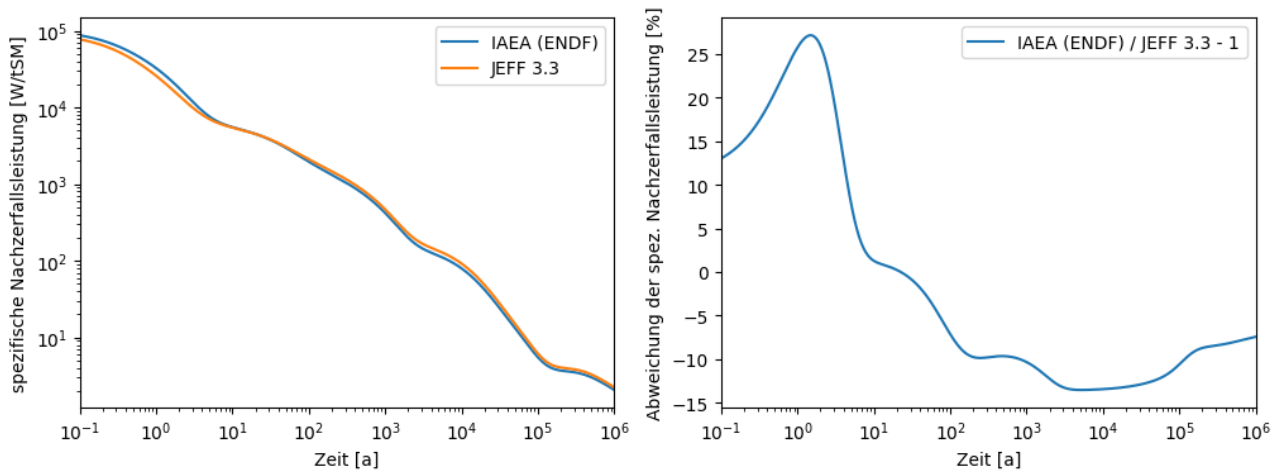


Abbildung 74 Verlauf der spezifischen Nachzerfallsleistung des RN-Inventars des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) auf der Grundlage von ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) der IAEA Datenbank und JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) (links) sowie die prozentuale Abweichung der Ausgangsdaten (rechts)

Die relativen Beiträge der einzelnen Nuklide zur gesamten spezifischen Nachzerfallsleistung im Verlauf der Zeit sind in Abbildung 75 für die Nutzung der Zerfallsenergien der IAEA gemäss ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) und in Abbildung 76 für die Nutzung der Zerfallsenergien gemäß JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) dargestellt. In beiden Abbildungen sind nur diejenigen Radionuklide gezeigt, welche zu einem beliebigen Zeitpunkt mindestens 1‰ zur spezifischen Nachzerfallsleistung des entsprechenden Zeitpunkts beitragen.

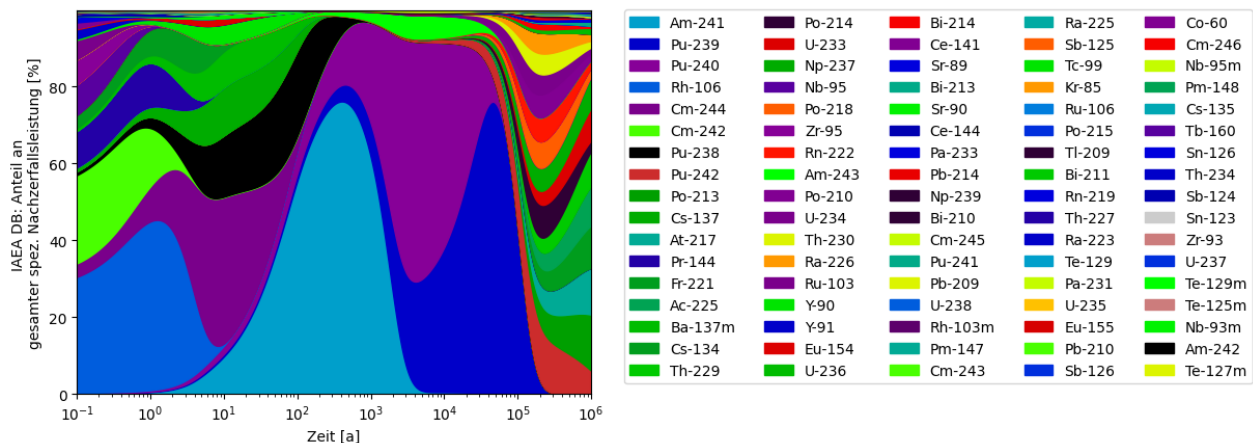


Abbildung 75 Respective-Contribution-Plot der spezifischen Nachzerfallsleistung basierend auf den Zerfallsenergien der IAEA gemäss ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011)

Dargestellt sind die prozentualen Anteile am Wert der spezifischen Nachzerfallsleistung für die Radionuklide mit einem Mindestbeitrag von 1‰. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

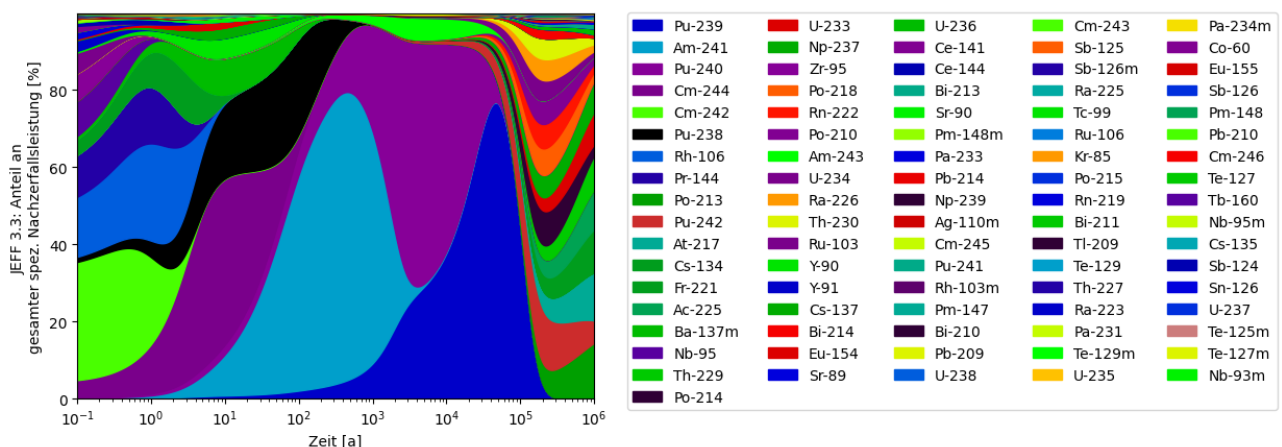


Abbildung 76 Respective-Contribution-Plot der spezifischen Nachzerfallsleistung basierend auf den Zerfallsenergien gemäß JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020)

Dargestellt sind die prozentualen Anteile am Wert der spezifischen Nachzerfallsleistung für die Radionuklide mit einem Mindestbeitrag von 1‰. Die Legende ist nach dem maximalen Beitrag des jeweiligen RN sortiert.

Um die Unterschiede zwischen den zwei Grafiken aufzuzeigen, sind in Tabelle 15 die 20 Radionuklide mit den größten Unterschieden in den maximalen Beiträgen zur spezifischen Nachzerfallsleistung gelistet. Gut erkennbar ist der Unterschied für Rh-106 in Blau, für welches zum Zeitpunkt von einem Jahr mit 18,6% der größte Unterschied im Beitrag an der spezifischen Nachzerfallsleistung zwischen den zwei Datensätzen besteht. Der Beitrag an der spezifischen Nachzerfallsleistung gemäß ENDF-Datensatz ist gut sichtbar größer, da die Zerfallsenergie für Rh-106 ungefähr doppelt so groß ist gegenüber dem JEFF-3.3-Datensatz. Im Gegensatz dazu führt der mehrere Größenordnungen umfassende Unterschied in der Zerfallsenergie von Ag-110m oder Pm-148m zu Differenzen kleiner 1% der spezifischen Nachzerfallsleistung aufgrund des geringen RN-

Inventars. Zeitlich treten die größten Unterschiede für das RN-Inventar des Anwendungsbeispiels (Anhang C.3.2) in den ersten 10 Jahren und im Zeitraum zwischen 2 000 und 100 000 Jahren auf (Abbildung 74).

Tabelle 15 Auflistung der 20 Radionuklide mit dem größten Unterschied im maximalen relativen Beitrag zur gesamten spezifischen Nachzerfallsleistung

Radio-nuklid	Unterschied im maximalen Beitrag zur spezifischen Nachzerfallsleistung	Zerfallsenergie [W/Bq]		Zeitpunkt des maximalen relativen Beitrags zur spezifischen Nachzerfallsleistung [a]	
		JEFF 3.3	IAEA	JEFF 3.3	IAEA
Cm-242	8,4%	9,96E-13	8,45E-13	0	0
Pr-144	3,0%	1,98E-13	1,96E-13	0	0
Nb-95	1,1%	1,30E-13	1,30E-13	0	0
Pm-148m	0,9%	3,43E-13	9,28E-16	0	0
Zr-95	0,7%	1,36E-13	1,39E-13	0	0
Ag-110m	0,4%	4,54E-13	2,51E-16	0	0
Ce-144	0,4%	1,71E-14	1,45E-14	0	0
Y-91	0,3%	9,76E-14	9,64E-14	0	0
Rh-106	18,6%	2,59E-13	5,68E-13	1	1
Cs-134	2,8%	2,75E-13	2,58E-13	2	2
Cm-244	5,1%	9,46E-13	8,52E-13	8	8
Cs-137	9,8%	2,88E-14	1,34E-13	11	11
Pu-238	3,1%	8,96E-13	7,47E-13	69	79
Am-241	1,3%	9,01E-13	8,28E-13	409	409
Pu-240	0,8%	8,42E-13	7,20E-13	3908	4036
Am-243	0,4%	8,72E-13	8,07E-13	4305	4446
Pu-239	0,8%	8,41E-13	7,28E-13	46773	45289
Pu-242	0,8%	7,99E-13	7,70E-13	169824	164437
Bi-214	0,8%	3,41E-13	2,04E-13	219785	212813
At-217	0,3%	1,15E-12	1,04E-12	1000000	1000000

Abbildung 77 zeigt den zeitlichen Verlauf der Anteile einzelner Radionuklide am Unterschied in der spezifischen Nachzerfallsleistung berechnet aus den zwei verglichenen Modellansätzen. Hierzu wird ein modifizierter Ansatz der DIM-Methode verwendet. Zur Beschreibung der Ungenauigkeiten im Datensatz, welcher dem Modellansatz $f()$ zugrundliegt (Anhang C.2.2), werden die Multiplikationsfaktoren (Zerfallsenergie pro Zerfall) variiert und nicht der Eingangsparameter (RN-Inventar). Die DIM-Methode verdeutlicht so nicht den Einfluss der Eingangsdaten auf die Ausgangsdaten, sondern den Einfluss der Ungewissheit im nuklidspezifischen Konversionsfaktor (ENDF (Brown et al., 2018;

Chadwick et al., 2011) bzw. JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020)) auf die Ausgangsdaten. Dargestellt werden nur jene Radionuklide, für welche die Ungewissheit im Modellansatz zu Änderungen der Ausgangsdaten von mindestens 10% führen. Diese Darstellung bestätigt den hohen Einfluss des Modellansatzes bzgl. des Radionuklids Rh-106 bis ca. 4 Jahre (max. bei ~1 Jahr), zeigt aber auch für spätere Zeiten hohe Beiträge von Pu-240 (~5 000 Jahre) und Pu-239 (50 000 Jahre).

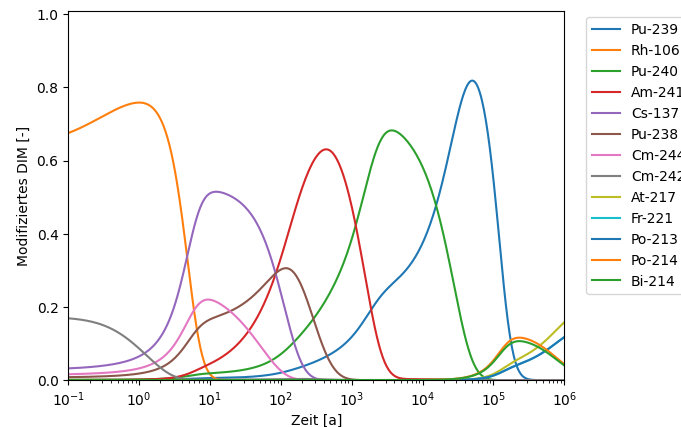


Abbildung 77 Modifiziertes DIM mit Differenzen der spezifischen Nachzerfallsleistung aufgrund von Ungewissheiten im Modellansatz

Datenquelle der Zerfallsenergie ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) bzw. JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) im Modellansatz gemäß Anhang C.2.2

Um zu prüfen, wie sich diese Unterschiede auf die Sensitivität der Ausgangsdaten (Nachzerfallsleistung) auf die Eingangsdaten (anfängliches RN-Inventar) auswirken, sind in Tabelle 16 die Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman, sowie der Sobol' Index für die spezifische Nachzerfallsleistung dargestellt. Berechnet wurden diese Koeffizienten bzw. Indizes mit beiden Datensätzen bei einer gleichverteilten Ungewissheit des anfänglichen RN-Inventars von $\pm 10\%$. Tabelle 16 zeigt diese nur für die 5 Radionuklide mit den größten Einflüssen, d. h. berechnet für die anfänglichen RN-Inventare von Rh-106, Cs-137, Am-241, Pu-240 und Pu-239 zum Zeitpunkt des maximalen Einflusses des Modellansatzes zu 1, 10, 300, 5 000 und 50 000 Jahren. Der Vergleich zeigt, dass der Einfluss selbst an jenen Stellen, an welchen dieser am deutlichsten ist, die Aussagen der Sensitivitätsanalysen nicht signifikant verändert.

Tabelle 16 Korrelationskoeffizienten nach Pearson und Spearman und Sobol' Index der spezifischen Nachzerfallsleistung nach 1, 10, 300, 5 000 und 50 000 Jahren des anfänglichen RN-Inventars von Rh-106, Cs-137, Am-241, Pu-240 und Pu-239

Berechnet auf Grundlage der Datensätze ENDF (Brown et al., 2018; Chadwick et al., 2011) bzw. JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020) für eine gleichverteilte Ungewissheit des anfänglichen Inventars von 10%. Für jeden Zeitpunkt sind die Korrelationskoeffizienten jenes Nuklides fett markiert, welches zu diesem Zeitpunkt die maximale Abweichung in der spezifischen Nachzerfallsleistung erzeugt

Zeitpunkt [a]	Koeffizient (Datenbank)	Rh-106	Cs-137	Am-241	Pu-240	Pu-239
1	Pearson (ENDF)	-0,019	0,994	-0,031	-0,044	0,141
	Pearson (JEFF)	-0,021	0,974	0,050	0,047	0,157
	Spearman (ENDF)	-0,018	0,993	-0,035	-0,045	0,149
	Spearman (JEFF)	-0,022	0,974	0,042	0,044	0,161
	Sobol' (ENDF)	0,034	0,924	-0,085	-0,254	0,033
	Sobol' (JEFF)	0,051	0,894	-0,067	-0,267	0,022
10	Pearson (ENDF)	-0,020	0,991	-0,014	-0,025	0,145
	Pearson (JEFF)	-0,021	0,961	0,084	0,086	0,164
	Spearman (ENDF)	-0,016	0,990	-0,016	-0,024	0,150
	Spearman (JEFF)	-0,017	0,963	0,070	0,079	0,165
	Sobol' (ENDF)	0,038	0,920	-0,082	-0,258	0,031
	Sobol' (JEFF)	0,057	0,875	-0,057	-0,266	0,016
100	Pearson (ENDF)	-0,024	0,659	0,430	0,489	0,207
	Pearson (JEFF)	-0,022	0,337	0,572	0,689	0,198
	Spearman (ENDF)	-0,020	0,657	0,422	0,478	0,209
	Spearman (JEFF)	-0,020	0,335	0,559	0,689	0,178
	Sobol' (ENDF)	0,056	0,470	0,149	0,010	-0,075
	Sobol' (JEFF)	-0,001	0,191	0,258	0,339	-0,127
5 000	Pearson (ENDF)	-0,0040	-0,0626	0,1313	0,8883	0,3128
	Pearson (JEFF)	-0,0048	-0,0635	0,1313	0,8910	0,3071
	Spearman (ENDF)	-0,0319	-0,0489	0,1291	0,8878	0,2987
	Spearman (JEFF)	-0,0330	-0,0499	0,1296	0,8909	0,2922
	Sobol' (ENDF)	0,0196	0,0318	-0,1193	0,7762	-0,1022
	Sobol' (JEFF)	0,0207	0,0317	-0,1197	0,7803	-0,1064
50 000	Pearson (ENDF)	0,1121	0,1162	0,0498	-0,0900	0,9976
	Pearson (JEFF)	0,1120	0,1162	0,0494	-0,0895	0,9976
	Spearman (ENDF)	0,1135	0,1185	0,0482	-0,0996	0,9979
	Spearman (JEFF)	0,1128	0,1190	0,0479	-0,0981	0,9978
	Sobol' (ENDF)	0,0828	0,0442	-0,2014	0,0188	0,9279
	Sobol' (JEFF)	0,0826	0,0443	-0,2014	0,0187	0,9278

6 Verifikation und Validierung

Das Ziel dieses Kapitels ist die Darstellung von Methoden zur Verifikation und Validierung eines Inventarmodells als Teil der QA-/QC-Maßnahmen. Es werden dazu die Ergebnisse einer Literaturstudie herangezogen, um übliche Methoden zu identifizieren und zu beschreiben.

6.1 Definitionen und Abgrenzungen

Wie in Kapitel 2.3 dargestellt, wird der Begriff des Inventarmodells in diesem FoV für ein Modell benutzt, das einen definierten Satz an vorhandenen Eingangsdaten mit Hilfe von sachlich begründeten mathematischen Vorschriften (Modellansätze) in einen erforderlichen Satz an Ausgangsdaten überführt. In der Praxis handelt es sich hierbei heutzutage um ein numerisches Werkzeug bestehend aus in Datenbanken abgelegten Datenstrukturen, spezifischen Berechnungsvorschriften und Eingabe-/Abfragemasken.

Als Verifikation wird allgemein die Prüfung der korrekten Funktionsweise numerischer Werkzeuge bezeichnet. Sie untersucht, ob das numerische Modell das definierte Problem korrekt löst (Bykov, 2019) und umfasst üblicherweise den Vergleich von numerischen Modellergebnissen mit analytischen Berechnungen oder anderen Codes, welche dieselbe Art von Problem lösen.

Validierung bezeichnet die Prüfung, ob ein mit einem numerischen Modell erzeugtes Ergebnis der Realität entspricht und die verwendeten Werkzeuge angemessen und geeignet sind, um das Versuchssystem und die Realität ausreichend genau darzustellen. Sie umfasst primär den Vergleich von numerischen Modellergebnissen mit experimentellen Messungen (Bykov, 2019).

Verifikation und Validierung sind wichtige Schritte im Rahmen der QA/QC von numerischen Modellen im Allgemeinen und von Inventarmodellen im vorliegenden Fall.

Die Verifikation und Validierung von Reaktormodellen, welche Eingangsdaten für das Inventarmodell produzieren, wird im Rahmen dieses FoV nicht direkt betrachtet. Die Codes für diese Modelle wie SCALE oder ORIGIN sind jedoch bereits validiert und verifiziert, sodass Literatur zu diesen Codes zur Herleitung von Methoden zur Verifikation und Validierung verwendet werden kann.

Inventarmodelle wie beispielsweise MIRAM in der Schweiz (Nagra, 2023) bauen üblicherweise auf den gleichen Modellen auf wie die Reaktormodelle jedoch unter Vernachlässigung der Boltzmann-Gleichung (s. Kapitel 3.3). Methoden der Verifikation und Validierung, welche für Reaktormodelle herangezogen werden, können also auch auf Inventarmodelle angewendet werden.

6.2 Verifikation

6.2.1 Methoden

Die Verifikation von Inventarmodellen erfolgt üblicherweise durch den Vergleich der Modellergebnisse mit den Ergebnissen anderer Modelle, welche das gleiche Ziel verfolgen bzw. Problem lösen aber andere Methoden oder Werkzeuge verwenden. Dieser Vorgang wird als Benchmarking bezeichnet und kann unterschiedliche Anwendungsfälle umfassen:

- Benchmarking unterschiedlicher Codes und darauf aufbauender Modelle mittels eines Vergleichs der Ergebnisse (inkl. Ungewissheit, d. h. Varianz oder Standardabweichung)

- Benchmarking vereinfachter Modelle mit komplexen Modellen, um Vereinfachungen oder Annahmen zu testen
- Vergleich neuer Implementationen mit bereits validierten Codes

Der Grundgedanke beim Benchmarking ist es, Ergebnisse oder Prozessbeschreibungen mit einem festgelegten Bezugsmaß zu vergleichen. Für die Verifikation von Inventarmodellen werden hierzu meist ein etabliertes, bereits verifiziertes und validiertes numerisches Modell und dessen Ergebnisse als Bezugsmaß festgelegt. Der Vergleich des neuen Inventarmodells mit dem etablierten Modell kann dann über die Standardabweichungen oder relative prozentuale Differenzen der Ergebnisse erfolgen oder auch durch einen visuellen grafischen oder tabellarischen Vergleich der Ergebnisse. Übliche grafische Methoden umfassen hierbei Liniendiagramme (z. B. Abbildung 82), Box-Plots (z. B. Abbildung 83), Tornado-Diagramme (z. B. Abbildung 85), Säulendiagramme (z. B. Abbildung 84) und Streudiagramme.

Für den Vergleich können verschiedene mathematische Größen verwendet werden, wobei C für die numerischen Ergebnisse (calculation) und E für die experimentellen Daten steht:

- Bias $B = C - E$ (z. B. Abbildung 78)
- C / E (z. B. Abbildung 84)
- Relative prozentuale Differenzen
 - $(C / E) - 1$ (z. B. Abbildung 80)
 - $(E - C) / E$ (Jansson et al., 2022)

6.2.2 Anwendung

Benchmarking unterschiedlicher Codes

Da die Verifikation im Gegensatz zur Validierung nicht die Übereinstimmung der Ergebnisse mit der Realität, sondern die korrekte Funktionsweise eines Modells prüft, zielen die Untersuchungen im Allgemeinen mehr auf die implementierten Prozesse und Modellansätze ab, als auf die Ergebnisse an sich. Die Verifikation mittels Benchmarking kann durch einen Vergleich von deterministischen wie auch probabilistischen Modellergebnissen erfolgen. Im zweiten Fall wird die Abweichung der Modellergebnisse in Form von Referenzwerten und Ungewissheiten, dargestellt mittels der Standardabweichung, betrachtet.

Ein Beispiel für ein solches Benchmarking ist in Abbildung 78 zu sehen (Shama et al., 2022). Dort vergleichen die Autoren Referenzwerte und Standardabweichungen ihrer eigenen Modellierung der Nachzerfallsleistung mit denen aus anderen Literaturquellen. Als Vergleichsgröße wird der Bias $B = C - E$ verwendet.

Die im gezeigten Beispiel (Shama et al., 2022) verwendeten Codes sind ORIGEN, Polaris und CASMO5. ORIGEN und Polaris sind Module des SCALE Software-Pakets, welches eine umfassende Modellierungs- und Simulationssuite zur Berechnung von Reaktorphysik, Kritikalitätssicherheit, Strahlenschutz und Charakterisierung abgebrannter Brennelemente für kerntechnische Anlagen und die Auslegung von Transport- und Lagerbehältern darstellt (Wieselquist and Lefebvre, 2024). ORIGEN berechnet zeitabhängige Konzentrationen, Aktivitäten und Strahlungsquellterme für eine große Anzahl von Isotopen, die gleichzeitig durch Neutronentransmutation, Spaltung und radioaktiven Zerfall erzeugt oder abgereichert werden. Polaris ist ein optimiertes Werkzeug, das für die Analyse von Leichtwasserreaktoren (LWR) mit

Kernsimulatoren gemittelte Wirkungsquerschnitte erzeugt. CASMO5 ist ein Gittermodell-Code für die Modellierung von DWR- und SWR-Brennstoff (Rhodes et al., 2006).

Für die nuklearen Daten wurden verschiedene Versionen der ENDF Bibliothek (Brown, 2023), JENDL 4.0 (Shibata et al., 2011) und die ORIGEN2 Bibliothek verwendet.

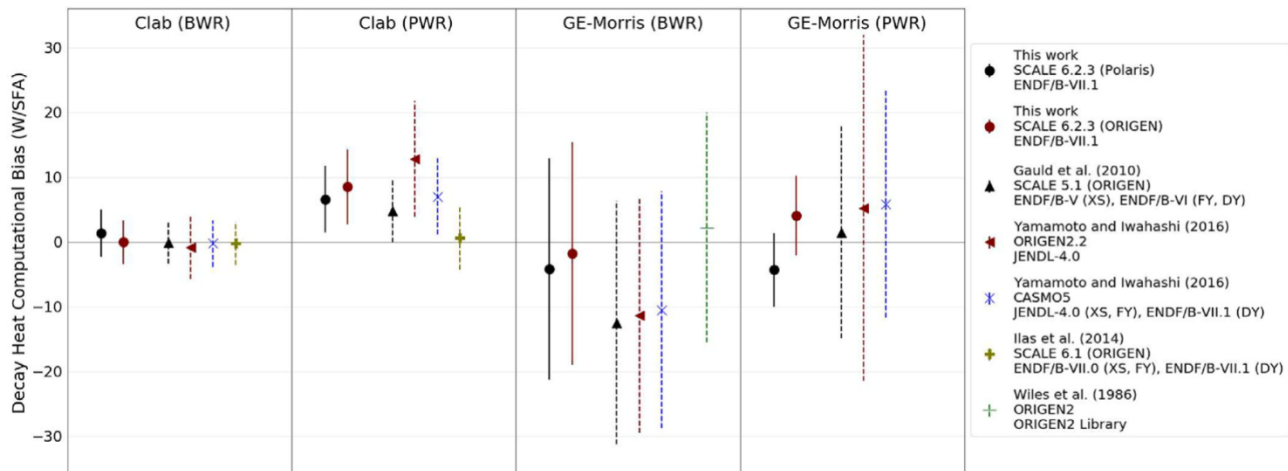


Abbildung 78 Vergleich der Referenzwerte und Standardabweichungen der Nachzerfallsleistung aus diversen Codes

In der Legende sind die verwendeten Codes und Datenbibliotheken aufgeführt, SFA – spent fuel assembly (bestrahltes Brennelement). Reproduziert nach (Shama et al., 2022, fig. 6) gemäß [CC BY 4.0 Lizenz](#).

Benchmarking vereinfachter Modelle mit komplexen Modellen

Um den Rechenaufwand zu verringern, werden in numerischen Modellen häufig Annahmen getroffen, um das Modell zu vereinfachen. Um solche vereinfachenden Annahmen zu testen und das vereinfachte Modell zu verifizieren, kann ein Benchmarking mit komplexen Modellen bzw. demselben Modell ohne Vereinfachung vorgenommen werden.

Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 79 zu sehen. Dort werden die Ergebnisse eines simplifizierten MCNP-Modells mit den Ergebnissen des Originalmodells verglichen. Dargestellt ist der relative Gammafluss (Stärke der Gammastrahlung) in den vier Ecken eines modellierten Brennelements. MCNP ist ein Monte-Carlo-Code zur Modellierung von Partikeltransport in 3D (Kulesza et al., 2024). Die im Beispiel betrachtete Vereinfachung des Modells besteht darin, dass zur Reduzierung der Rechenzeit die sehr detaillierten Daten zur Nuklidzusammensetzung der einzelnen Brennstäbe im ursprünglichen Modell durch die Definition von Brennstabtypen homogenisiert wurde (Cao et al., 2020).

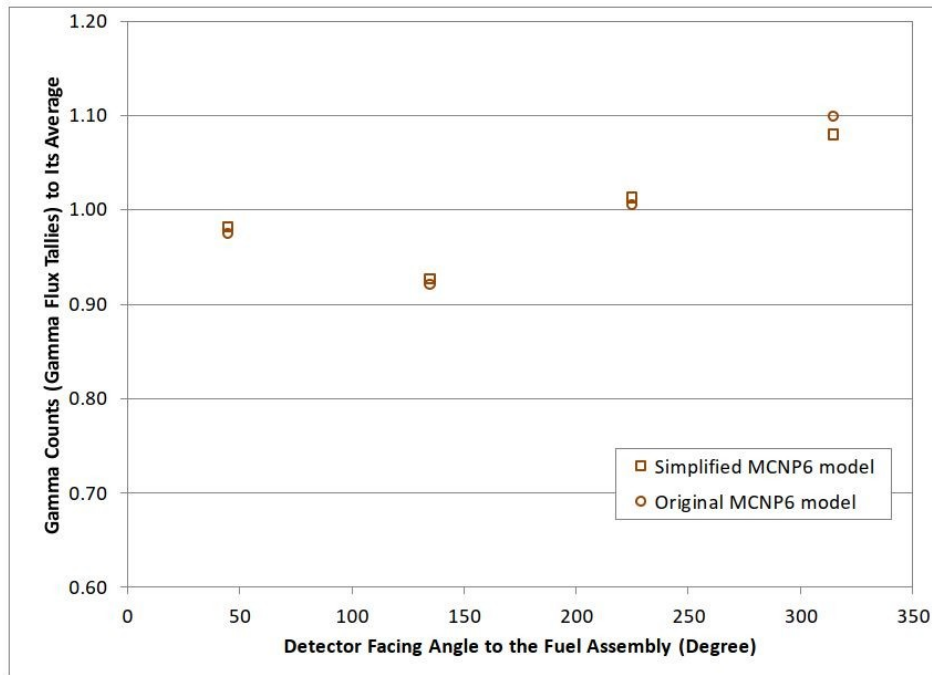


Abbildung 79 Vergleich des relativen Gammaflusses in einem Brennelement aus einem vereinfachten MCNP Modell mit jenem aus dem Originalmodell
Reproduziert nach (Cao et al., 2020, fig. 3).

Vergleich neuer Implementationen mit bereits verifizierten Codes

Eine weitere Möglichkeit neue Implementationen und Modelle zu verifizieren ist der Vergleich mit bereits verifizierten Codes und zugehörigen Modellen.

Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 80 dargestellt. Hier werden Ergebnisse aus dem verifizierten Code STREAM und Ergebnisse des RAST-K Codes verglichen. Als Vergleichsgröße wird die relative prozentuale Differenz $(C / E) - 1$ verwendet. RAST-K ist ein nodaler Diffusionscode in 3D (Park et al., 2020), während STREAM ein Code zur Analyse des Neutronentransports ist (Ebiwonjumi et al., 2021). Beide Codes verwenden jedoch dieselbe Methode zur Berechnung der Nachzerfallsleistung (Jang et al., 2021), daher kann STREAM als bereits verifizierter und validierter Code zur Verifizierung von Berechnungen der Nachzerfallsleistung mit RAST-K verwendet werden.

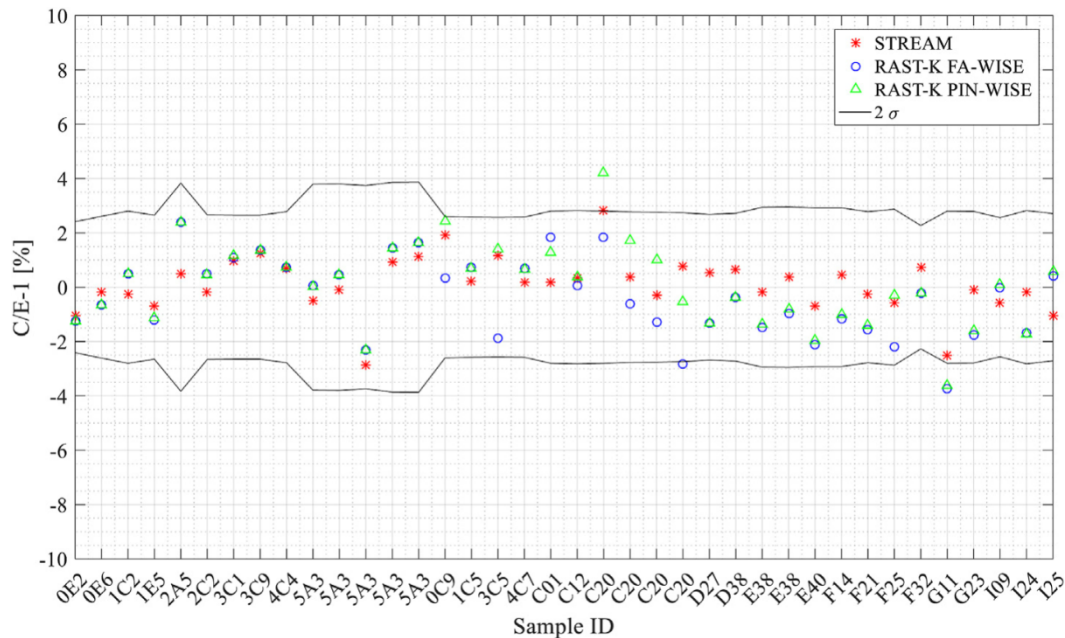


Abbildung 80 Vergleich von Ergebnissen zweier Codes (RAST-K und STREAM) für die Nachzerfallsleistung von schwedischen DWR

FA-WISE: pro Brennelement (FA – fuel assembly), PIN-WISE: pro Brennstab, 2σ : Standardabweichung aus Messungen; reproduziert nach (Jang et al., 2021, fig. 7) gemäß [CC BY-NC-ND Lizenz](#).

6.3 Validierung

6.3.1 Methoden

Die Validierung von Inventarmodellen erfolgt im Idealfall durch den Abgleich der numerischen Modellergebnisse mit Messungen und experimentellen Daten unter repräsentativen Bedingungen. Dieser Fall erfordert, dass Messdaten vorliegen. Dies ist im Kontext der Endlagerung radioaktiver Abfälle aber häufig nicht der Fall, da viele Parameter entweder nicht direkt gemessen werden können oder nur durch destruktive Messungen erfasst werden könnten, welche jedoch an einem verpackten und versiegelten Endlagergebäude nicht durchgeführt werden können.

In solchen Fällen kann auf alternative Methoden der Validierung zurückgegriffen werden:

- Vergleich mit Bibliotheken und Datenbanken von Messungen (z. B. SFCOMPO)
- Benchmarking von Modellergebnissen unterschiedlicher Codes
- Vergleich neuer Code-Entwicklungen mit bereits validierten Codes unter Nutzung der gleichen Bibliotheken
- Benchmarking um den Einfluss von Annahmen und fehlenden / ungewissen Daten zu untersuchen (z. B. durch Perturbation von Parametern)

Die zuletzt genannte Methode entspricht im Vorgehen einer Sensitivitätsanalyse.

Vergleich mit Messergebnissen und analytischen Berechnungen

Die Aktivität in einem Abfallgebinde kann nur für wenige Radionuklide direkt gemessen werden. Dies sind typischerweise energiereiche Gammastrahler, während niederenergetische Gammastrahlung sowie Beta- und Alphastrahlung bereits innerhalb des konditionierten Abfallgebundes absorbiert werden. Langzeitsicherheitsrelevante Radionuklide können somit nicht direkt radiologisch gemessen werden (Nagra, 2023).

Durch Entnahme repräsentativer Proben und radiochemische Laboranalysen können jedoch Korrelationsfaktoren hergeleitet werden, die schwer / nicht messbare und leicht messbare Radionuklide in Verhältnis zueinander setzen und somit die indirekte Bestimmung der Aktivitäten von langzeitsicherheitsrelevanten Nukliden ermöglichen. Als leicht messbare Nuklide (sogenannte Schlüsselnuklide) können beispielsweise Co-60 und Cs-137 gewählt werden (Abbildung 81).

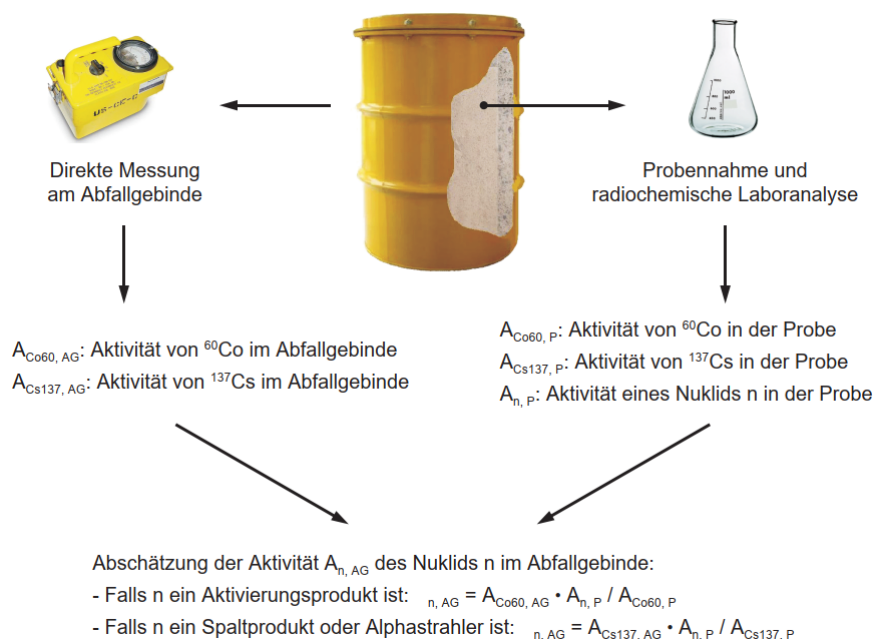


Abbildung 81 Bestimmung von RN-spezifischen Aktivitäten am Abfallgebinde

Reproduziert nach (Nagra, 2023, Fig. 4–1).

Sowohl die direkten radiologischen Messungen als auch die indirekten Berechnungen über Korrelationsfaktoren können zur Validierung von Ergebnissen aus Reaktormodellen verwendet werden, welche hier wiederum Eingangsparameter des Inventarmodells darstellen.

Diese Überlegungen zur Messbarkeit der Aktivität in einem Abfallgebinde gelten analog für die Parameter Strahlungsdosisleistung und Nachzerfallsleistung, welche ebenfalls durch zerstörungsfreie Messungen am Abfallgebinde bestimmt werden können. Wie für die Aktivitäten einzelner Nuklide bilden solche Messungen jedoch typischerweise nicht die langzeitsicherheitsrelevanten Radionuklide ab, sodass für diese indirekte Berechnungen hinzugezogen werden müssen.

Weitere Ausgangsparameter von Reaktormodellen / Eingangsparameter von Inventarmodellen wie die komponentenspezifische chemische Zusammensetzung, das Radionuklidinventar, der Abbrand und die Brennstoff- bzw. Abfalldichte können nur durch destruktive Messmethoden bestimmt

werden. Die Anwendung dieser Methoden ist jedoch nur zu bestimmten Zeiten im Prozess der Endlagerung, z. B. bei einer Umkonditionierung, möglich und kann nicht am fertigen Endlagergebäude erfolgen. Die Messdaten entsprechen daher nicht direkt den Ausgangsdaten des Inventarmodells, können aber dennoch zur Validierung von Reaktormodellen und deren Ergebnissen verwendet werden. Diese Ergebnisse wiederum können dann als validierte Eingangsdaten in das Inventarmodell eingehen.

Ein Beispiel für den Vergleich von Modellergebnissen mit experimentellen Daten ist in Abbildung 82 dargestellt. Es werden hier die normierten Gammaflüsse für Brennelemente aus Druckwasserreaktoren aus zwei verschiedenen Experimenten dargestellt und mit Ergebnissen eines MCNP-Modells (s. Abschnitt 6.2.2) für beide experimentellen Fälle verglichen (Cao et al., 2020).

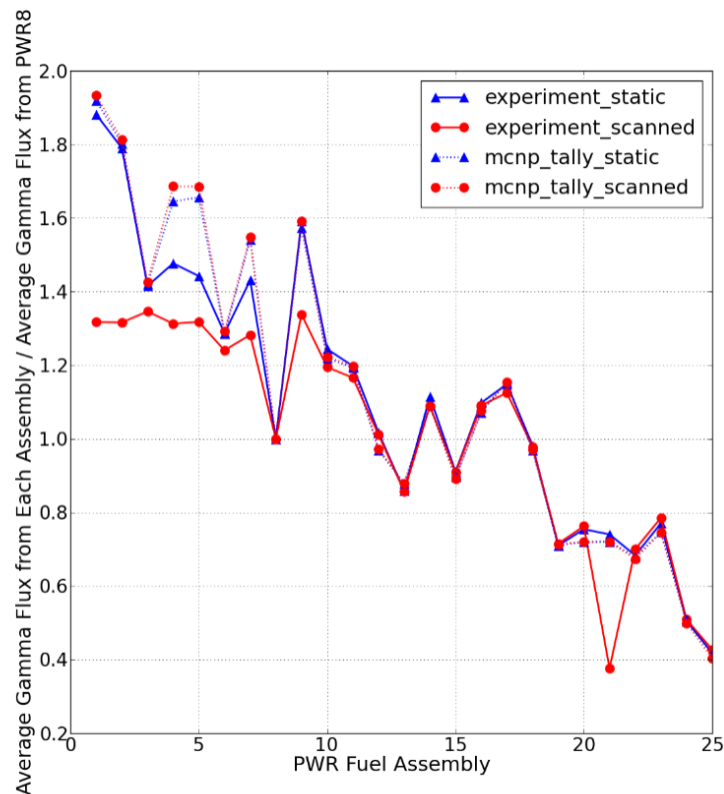


Abbildung 82 Vergleich der normierten Gammaflüsse von DWR BE aus experimentellen Daten und numerischen Modellen

Reproduziert nach (Cao et al., 2020, fig. 4).

Vergleich mit Bibliotheken und Datenbanken von Messungen

Für den Fall, dass eigene Messungen nicht möglich sind, gibt es Bibliotheken und Datenbanken, in denen Messdaten zur Verfügung stehen. Diese können ebenfalls zur Validierung von Modellergebnissen verwendet werden.

Im Beispiel in Abbildung 83 werden die relativen prozentualen Abweichungen $(C / E) - 1$ der Radionuklidkonzentrationen zwischen Modellergebnissen und experimentellen Daten aus der Datenbank SFCOMPO 2.0 gezeigt (Gauld and Mertzyurek, 2019). Die Literaturquelle verwendet hierbei die Bezeichnung M (Messung / measured) statt E (experimentell).

SFCOMPO 2.0 (Spent Fuel Isotopic COMPOsition) ist eine Datenbank der OECD NEA für experimentelle Messdaten der Isotopenkonzentrationen aus destruktiven radiochemischen Analysen von Proben abgebrannter Kernbrennstoffe. Die Messungen werden ergänzt durch Auslegungsinformationen für das Brennelement und den Brennstab, aus dem die jeweilige Probe entnommen wurde, sowie durch relevante Informationen über die Betriebsbedingungen und Merkmale der Reaktoren (Michel-Sendis et al., 2017). Die Datenbank ist frei zugänglich.

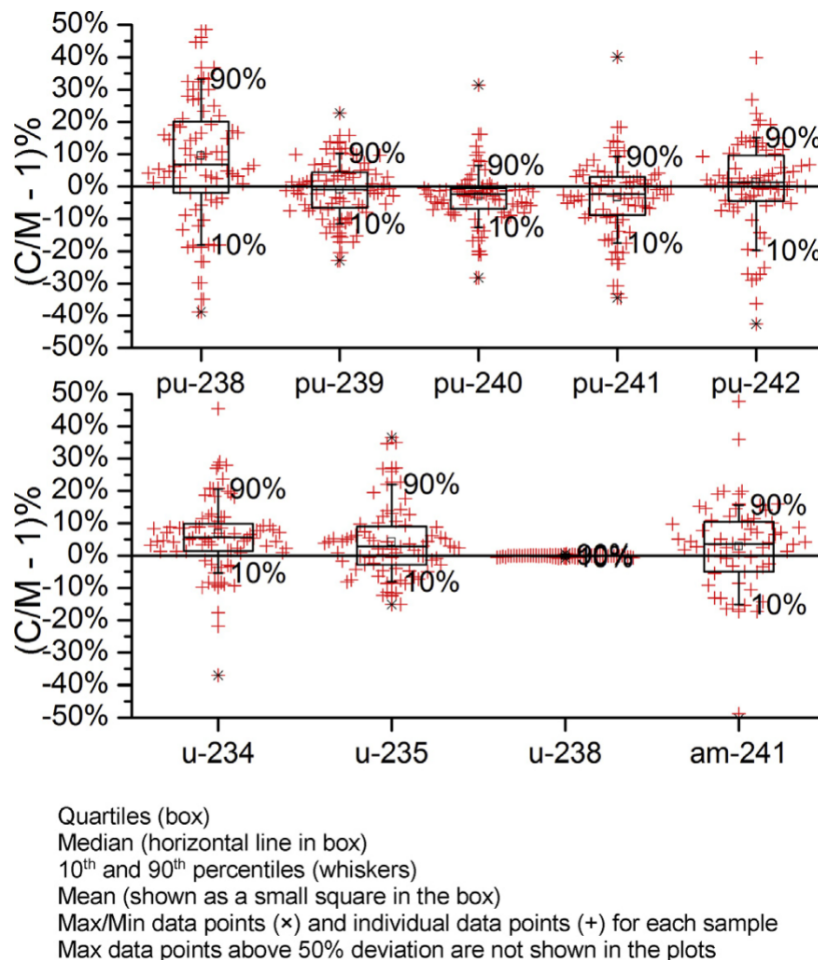


Abbildung 83 Vergleich von Modellergebnissen mit Messdaten aus SFCOMPO 2.0

M: gemessene Daten (measured); reproduziert nach (Gauld and Mertzyurek, 2019, fig. 10) gemäß CC BY 4.0 Lizenz.

Benchmarking von Modellergebnissen unterschiedlicher Codes

Analog zum Benchmarking als Methode der Verifikation (Abschnitt 6.2.2) kann Benchmarking mit den Modellergebnissen unterschiedlicher Codes auch als Methode der Validierung von numerischen Modellen und ihren Ergebnissen verwendet werden.

Ein Beispiel für den Vergleich der Ergebnisse verschiedener Codes ist in Abbildung 84 dargestellt. Insbesondere wenn die Ergebnisse vieler verschiedener Studien, Codes und Samples verglichen werden sollen, sind Histogramme und Box-Plots zur Darstellung der Ergebnisse geeignet (Rochman et al., 2023), um Aufschluss über die Verteilung der Ergebnisse sowie die Bandbreiten der einzelnen Untersuchungen im Vergleich zueinander zu geben.

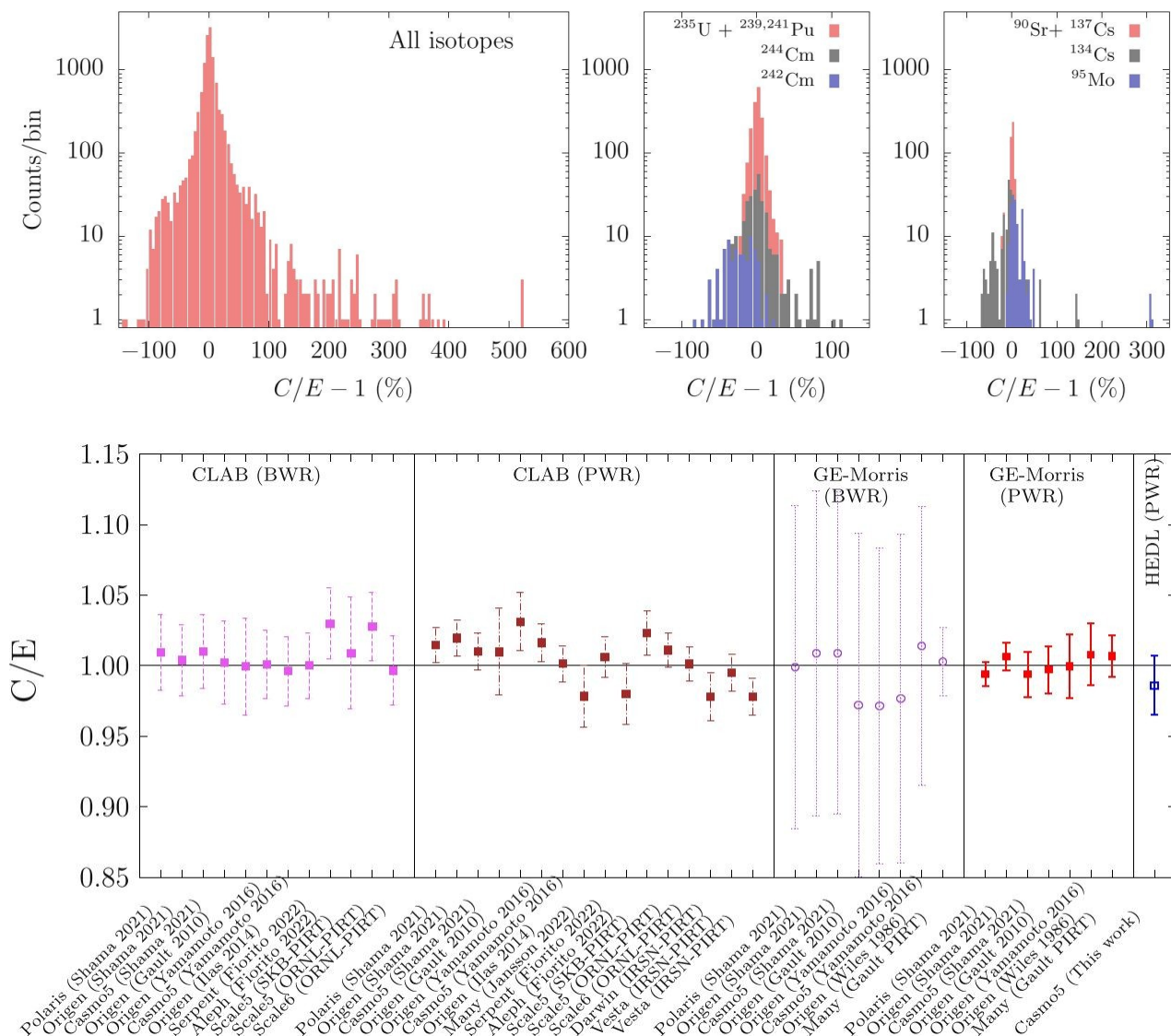


Abbildung 84 Vergleich der Ergebnisse diverser Codes und Samples für Radionuklidkonzentrationen in Histogrammen (oben) und Nachzerfallsleistung in Box-Plots (unten)

Reproduziert nach (Rochman et al., 2023, figs. 4, 7) gemäß [CC BY 4.0 Lizenz](#).

Vergleich neuer Code-Entwicklungen mit bereits validierten Codes

Eine der Optionen zur Validierung, wenn keine Messdaten zur Verfügung stehen, ist der Vergleich des eigenen Inventarmodells mit bereits validierten Codes und zugehörigen Modellen, welche im Idealfall die gleichen Bibliotheken und somit die gleiche Datenbasis verwenden. Dies entspricht von der Methodik her der analogen Methode zur Verifikation, die im Punkt „Vergleich neuer Implementationen mit bereits verifizierten Codes“ in Abschnitt 6.2.2 beschrieben ist.

Benchmarking um den Einfluss von Annahmen und fehlenden / ungewissen Daten zu untersuchen

Modelle stützen sich üblicherweise auf gewisse Annahmen bzw. basieren auf Daten, welche mit Ungewissheiten behaftet sind. Benchmarking kann verwendet werden, um den Einfluss dieser

Annahmen und Ungewissheiten auf die Modellergebnisse zu untersuchen und zu validieren, dass die Modellergebnisse trotz Annahmen und Ungewissheiten in ausreichendem Maß der Realität entsprechen.

Beispielhaft ist in Abbildung 85 der Einfluss unterschiedlicher Annahmen bezüglich der Leistungshistorie einer Brennstoffprobe auf die modellierte Konzentration diverser Radionuklide dargestellt (Mertyurek and Ilas, 2022). In einem Tornado-Diagramm kann die vertikale Linie in der Mitte die Messergebnisse, ein bereits validiertes Modellergebnis oder die Ergebnisse eines Referenzszenarios darstellen, von denen jeweils die Abweichungen bei unterschiedlichen Annahmen oder Eingabedaten gezeigt werden. In diesem Beispiel werden zwei Ansätze für die Leistungshistorie von drei Proben aus einem Brennelement verglichen, wobei die Ergebnisse eines Ansatzes als Referenzszenario verwendet werden. Die schwarze Linie stellt also die Ergebnisse des einen Ansatzes (Referenzszenario, Abweichung 0%) dar, während die farbigen Balken die prozentuale Abweichung der Ergebnisse des zweiten Ansatzes vom Referenzszenario für die drei Proben darstellen.

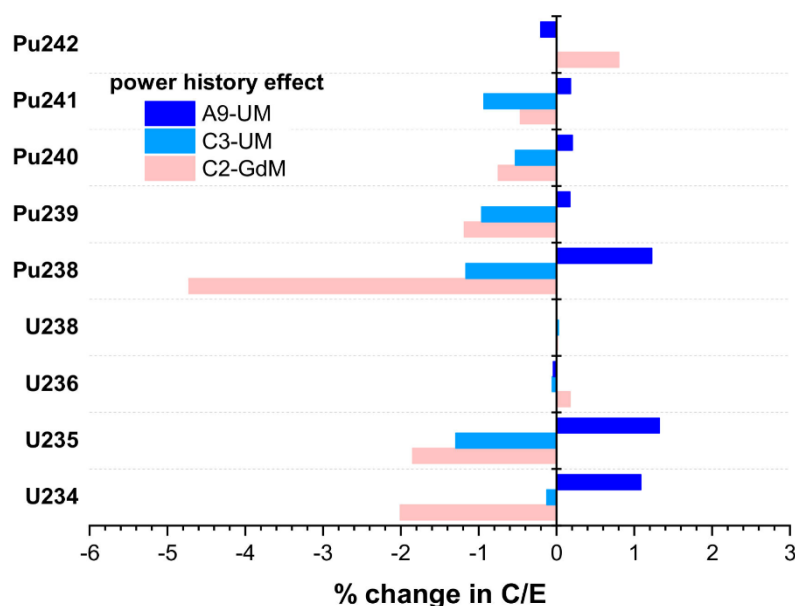


Abbildung 85 Darstellung des Einflusses der Leistungshistorie auf Nuklidkonzentrationen
Reproduziert nach (Mertyurek and Ilas, 2022, fig. 3).

7 Synthese und Schlussbemerkungen

Im vorliegenden FoV „Umgang mit der Datengrundlage des Inventars radioaktiver Abfälle für die Endlagerung – InvEnd II“ wurden etablierte Methoden zum Umgang mit Ungewissheiten und zur Verifikation und Validierung durch Auswertung von endlagerspezifischer wie auch allgemeiner technisch-wissenschaftlicher Literatur zusammengestellt und verglichen.

Zunächst wurden wichtige Grundlagen erarbeitet und dargestellt. Anschließend wurden Ungewissheiten in den Eingangsdaten und Modellansätzen eines Inventarmodells vertieft untersucht. Weiter wurde ein genereller Überblick über die derzeit verwendeten Methoden zur Analyse der Ungewissheit und der Sensitivität gegeben und die im Bezug auf ein Inventarmodell wichtigsten Methoden wurden an einem einfachen Beispiel illustriert und zusätzlich auf einen Inventardatensatz der vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben beispielhaft angewendet.

Als Ausgangsparameter des Inventarmodells / Zielgrößen einer vSU wurden in den letztgenannten Beispielen die spezifische Gesamtaktivität, spezifische Radiotoxizität, d. h. die Ingestionsdosis für einen Erwachsenen, repräsentativ für die Zielgröße der Körperdosis und durchschnittliche Jahresdosis eines Erwachsenen, und die spezifische Nachzerfallsleistung, repräsentativ für die Temperatur an der Gebindeoberfläche, betrachtet.

Die Möglichkeiten zur Verifikation und Validierung des Inventarmodells bezüglich der Ausgangsdaten, sowie einzelner Eingangsdaten, wurden anhand einer Literaturstudie aufgezeigt.

Auf Basis der in diesem FoV erfolgten Untersuchungen und Ausführungen können Methoden zur Qualitätssicherung und -kontrolle (QA/QC) durch die Aufsichtsbehörde BASE ausgewählt werden.

Innerhalb der Qualitätssicherung und -kontrolle können durch die Aufsichtsbehörde Kontrollen im Rahmen von Audits der Betreiber, teilweise auch in Kooperation mit dem Betreiber, ggf. eigene Messungen sowie eigene Berechnungen und Sensitivitätsanalysen bzw. Analysen der Ungewissheit mit dem Ziel einer Plausibilitäts- oder Konsistenzprüfung von direkten Modellergebnissen in Berichten der Betreiber erfolgen.

Generell werden die Methoden der quantitativen Sensitivitätsanalyse zunehmend zur Untermauerung, Qualitätssicherung und Verteidigung von modellbasierten Analysen herangezogen (Saltelli, 2002). Ein entscheidender Faktor bei der Auswahl der quantitativen Methoden ist dabei die Kenntnis der qualitativen Zusammenhänge zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten, welche ebenfalls durch Methoden der Sensitivitätsanalyse gewonnen werden können. Gemäß (Saltelli, 2002) ist es diesbezüglich entscheidend, im Voraus die Fragen zu identifizieren, welche durch eine Sensitivitätsanalyse beantwortet werden sollen. Diese Kenntnis der Zielsetzung ist vor allem notwendig, um die korrekten und zielführenden Methoden aus der Palette der Methoden heranzuziehen.

Aus der Vielzahl der Methoden zur Sensitivitätsanalyse und der Analyse der Fortpflanzung der Ungewissheit werden im Bezug auf die Fragestellungen rund um ein Inventarmodell bis heute grafische, korrelations- und regressionsbasierte sowie varianzbasierte Methoden angewandt. Die Einbeziehung momentenunabhängiger, dichtebasierter Methoden ist bis jetzt nicht verbreitet. Die Methoden zur Analyse der Sensitivität und der Fortpflanzung der Ungewissheit werden zunehmend auch zur Qualitätssicherung und -kontrolle, Diskussion des Einflusses einzelner Eingangsdaten auf Ausgangsdaten und die Verifikation von Ergebnissen für Ausgangsdaten eingesetzt.

Die gezeigten Methoden basieren meist auf einer Stichprobe, welche die zum Zeitpunkt der Erstellung der jeweiligen vSU bestehenden Ungewissheiten systematisch erfassen und es zudem erlauben soll, Verknüpfungen von Ungewissheiten untereinander zu identifizieren. Der Umgang mit den Ungewissheiten der Modellansätze und deren Auswirkungen auf die Aussagekraft des Ergebnisses einer vSU können ebenfalls durch die Methoden zur Ungewissheits- und Sensitivitätsanalyse deutlich gemacht und dokumentiert werden. Die gezeigten Methoden entsprechen außerdem den Vorgaben der EndSiUntV zum Umgang mit Ungewissheiten (§ 11 Abs. 2 EndSiUntV).

Die Methoden, die sich aus der Literaturstudie als die am weitesten Verbreiteten herausstellten, sind auch diejenigen, die für die beispielhafte Anwendung auf ein Inventarmodell am deutlichsten die Beziehungen zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten darstellen. Bei den grafischen Methoden stehen Cobweb-, CUSUNORO-, Box-Plots, Streudiagramme und die DIM-Methoden im Vordergrund. Die am weitesten verbreiteten Korrelationskoeffizienten sind jene nach Pearson und Spearman sowie die Partialkorrelationskoeffizienten. Stoßen diese an ihre Grenzen, so wird oft der varianzbasierte Sobol' Index oder der mit der EASI-Methode berechnete Index verwendet, da letztere keiner zusätzlichen oder speziellen Stichproben bedarf. Zur anfänglichen globalen Modellerkundung wird bevorzugt die Sensitivitätsanalyse nach Morris eingesetzt.

In den meisten Fällen kommt innerhalb einer quantitativen Betrachtung, z. B. innerhalb einer Qualitätssicherung oder -kontrolle, eine Kombination von Methoden, basierend auf einer anfänglichen qualitativen Evaluation der Beziehungen zwischen den Parametern, zur Anwendung. Für die Eignung der unterschiedlichen Methoden ist vor allem die Identifikation von Trends der Parameterzusammenhänge (linear, nicht-linear, monoton, etc.) sowie eine Vorstellung über die Verteilung der Daten (Normalverteilung, Gleichverteilung, logarithmische Normalverteilung, etc.) relevant. Eine Prüfung der Robustheit der Analyse im Hinblick auf einen genügend großen Stichprobenumfang sollte in jedem Fall erfolgen.

8 Referenzen

- Amaku, M., Pascholati, P.R., Vanin, V.R., 2010. Decay chain differential equations: Solution through matrix algebra. *Computer Physics Communications* 181, 21–23. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.08.011>
- Ayyub, B.M., 2001. *Elicitation of Expert Opinions for Uncertainty and Risks*, 1st ed. CRC Press, Boca Raton.
- Baudin, M., Dutfoy, A., Iooss, B., Popelin, A.-L., 2016. OpenTURNS: An Industrial Software for Uncertainty Quantification in Simulation, in: Ghanem, R., Higdon, D., Owhadi, H. (Eds.), *Handbook of Uncertainty Quantification*. Springer International Publishing, Cham, pp. 1–38. https://doi.org/10.1007/978-3-319-11259-6_64-1
- Becker, Dirk-Alexander, Destin, O., Nordman, H., Bolado, R., Duro, L., Cormenzana, J.L., Cuñado, M.A., Vetesnik, A., Avila, R., Stenberg, K., 2009. Performance Assessment Methodologies in Application to Guide the Development of the Safety Case, Treatment of parameter uncertainty in PA (No. D2.2.A.1). PAMINA.
- BMU, 2015. Programm für eine verantwortungsvolle und sichere Entsorgung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle (Nationales Entsorgungsprogramm). Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit.
- Bolado-Lavin, R., Badea, A.C., 2008. Review of Sensitivity Analysis Methods and Experience for Geological Disposal of Radioactive waste and Spent Nuclear Fuel, JRC Scientific and Technical Reports. European Commission Joint Research Centre Institute for Energy (IE), Petten.
- Bolado-Lavin, R., Castaings, W., Tarantola, S., 2009. Contribution to the sample mean plot for graphical and numerical sensitivity analysis. *Reliability Engineering and System Safety* 94, 1041–1049.
- Borgonovo, E., 2007. A new uncertainty importance measure. *Reliability Engineering & System Safety* 92, 771–784. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2006.04.015>
- Borgonovo, E., Apostolakis, G.E., 2001. A new importance measure for risk-informed decision-making. *Reliability Engineering & System Safety* 72, 193–212.
- Borgonovo, E., Plischke, E., 2016. Sensitivity analysis: A review of recent advances. *European Journal of Operational Research* 869–887.
- Brendler, V., Pospiech, S., 2022. Uncertainty identification, classification and quantification, Work Package 10 - UMAN (No. D10.3). European Joint Programme on Radioactive Waste Management (EURAD).
- Brown, D.A., 2023. ENDF-6 Formats Manual - Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI, ENDF/B-VII and ENDF/B-VIII. United States. <https://doi.org/10.2172/2007538>
- Brown, D.A., Chadwick, M.B., Capote, R., Kahler, A.C., Trkov, A., Herman, M.W., Sonzogni, A.A., Danon, Y., Carlson, A.D., Dunn, M., Smith, D.L., Hale, G.M., Arbanas, G., Arcilla, R., Bates, C.R., Beck, B., Becker, B., Brown, F., Casperson, R.J., Conlin, J., Cullen, D.E., Descalle, M.-A., Firestone, R., Gaines, T., Guber, K.H., Hawari, A.I., Holmes, J., Johnson, T.D., Kawano, T., Kiedrowski, B.C., Koning, A.J., Kopecky, S., Leal, L., Lestone, J.P., Lubitz, C., Damián, J.I.M., Mattoon, C.M., McCutchan, E.A., Mughabghab, S., Navrátil, P., Neudecker, D., Nobre, G.P.A., Noguere, G., Paris, M., Pigni, M.T., Plompen, A.J., Pritychenko, B., Pronyaev, V.G., Roubtsov, D., Rochman, D., Romano, P., Schillebeeckx, P., Simakov, S., Sin, M., Sirakov, I., Sleaford, B., Sobes, V., Soukhovitskii, E.S., Stetcu, I., Talou, P., Thompson, I., Marck, S. van der, Welser-Sherrill, L., Wiarda, D., White, M., Wormald, J.L., Wright, R.Q., Zerkle, M., Žerovnik, G., Zhu, Y., 2018. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data. *Nuclear Data Sheets* 148, 1–142. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001>
- Bykov, V., 2019. High-Fidelity Determination of Nuclide Inventories for Radioactive Waste Disposal. École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- Canio, Y., 2012. Global sensitivity analysis for nested and multiscale modelling (PhD-thesis). Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, 2.
- Cao, Y., Boyd, M., Feng, B., 2020. Validation of Spent Fuel Dose Rate Calculations Using NDA Measurement Campaign Data. United States. <https://doi.org/10.2172/1661877>
- Capouet, M., Griffault, L., Cormenzana, J.L., Becker, Dirk-Alexander, 2009. Task reports for the second group of topics: Safety strategy Analysis of the evolution of the repository system, Modelling strategy, Sensitivity analysis (No. D-N°:1.1.2). PAMINA.
- Chadwick, M.B., Herman, M., y, P.O., Dunn, M.E., Danon, Y., Kahler, A.C., Smith, D.L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D.A., Capote, R., Carlson, A.D., Cho, Y.S., Derrien, H., Guber, K., Hale, G.M., Hoblit, S., Holloway, S., Johnson, T.D., Kawano, T., Kiedrowski, B.C., Kim, H., Kunieda, S., Larson, N.M., Leal, L., Lestone, J.P., Little, R.C., McCutchan, E.A., MacFarlane, R.E., MacInnes, M., Mattoon, C.M., McKnight, R.D., Mughabghab, S.F., Nobre, G.P.A., Palmiotti, G.,

- Palumbo, A., Pigni, M.T., Pronyaev, V.G., Sayer, R.O., Sonzogni, A.A., Summers, N.C., Talou, P., Thompson, I.J., Trkov, A., Vogt, R.L., Marck, S.C. van der, Wallner, A., White, M.C., Wiarda, D., Young, P.G., 2011. ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. Nuclear Data Sheets 112, 2887–2996. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002>
- Crawford, M., Galson, D., 2009. The Treatment of Uncertainty in Performance Assessment and Safety Case Development: Synthesis of PAMINA RTDC-2 (No. D2.3.1). PAMINA.
- Cukier, R.I., Fortuin, C.M., Shuler, K.E., Petschek, A.G., Schaibly, J.H., 1973. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory. The Journal of Chemical Physics 59, 3873–3878. <https://doi.org/10.1063/1.1680571>
- Diem, S., Hubschwerlen, N., Li, X., Mayer, G., Röthlin, S., Brown, A., Guillemont, T., Javanmard, H., Leupin, O.X., Smith, P., 2024. Radiological Consequence Analysis for a Deep Geological Repository in Northern Switzerland (Technical Report No. NTB 14-18), NTB. Nagra, Wettingen.
- Ebiwonjumi, B., Kong, C., Zhang, P., Cherezov, A., Lee, D., 2021. Uncertainty quantification of PWR spent fuel due to nuclear data and modeling parameters. Nuclear Engineering and Technology 53, 715–731. <https://doi.org/10.1016/j.net.2020.07.012>
- Eckerman, K., Endo, A., 2008. ICRP Publication 107. Nuclear decay data for dosimetric calculations. Annals of the ICRP 38, 7–96. <https://doi.org/10.1016/j.icrp.2008.10.004>
- ENSI, 2017a. Überprüfung des modellhaften Inventars für radioaktive Materialien MIRAM 14.
- ENSI, 2017b. Sicherheitstechnisches Gutachten zum Vorschlag der in Etappe 3 SGT weiter zu untersuchenden geologischen Standortgebiete, Sachplan geologische Tiefenlager Etappe 2 (No. 33/540). Eidgenössisches Nuklearsicherheitsinspektorat ENSI, Brugg.
- ENSI, 2010. Sachplan geologische Tiefenlager, Etappe 1: Überprüfung des Abfallinventars.
- Ezure, H., 1998. Survey of Estimation Methods for Radioactive Inventory in Nuclear Reactors to be Decommissioned. Journal of Nuclear Science and Technology 35, 379–391.
- Gauld, I.C., Merturek, U., 2019. Validation of BWR spent nuclear fuel isotopic predictions with applications to burnup credit. Nuclear Engineering and Design 345, 110–124. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2019.01.026>
- Ge, Z., Xu, R., Wu, H., Zhang, Y., Chen, G., Jin, Y., Shu, N., Chen, Y., Tao, X., Tian, Y., Liu, P., Qian, J., Wang, J., Zhang, H., Liu, L., Huang, X., 2020. CENDL-3.2: The new version of Chinese general purpose evaluated nuclear data library. EPJ Web Conf. 239. <https://doi.org/10.1051/epjconf/202023909001>
- Gemeinsamen Übereinkommen über die Sicherheit der Behandlung abgebrannter Brennelemente und über die Sicherheit der Behandlung radioaktiver Abfälle, 1997.
- Gesetz über die friedliche Verwendung der Kernenergie und den Schutz gegen ihre Gefahren (Atomgesetz), 1985.
- Gesetz zur Suche und Auswahl eines Standortes für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle (Standortauswahlgesetz - StandAG) vom 05. Mai 2017 (BGBl. I S. 1074), zuletzt geändert durch Artikel 8 des Gesetzes vom 22. März 2023 (BGBl. 2023 I Nr. 88), 2023.
- Gobien, M., Garisto, F., Kremer, E., Medri, C., 2016. Sixth Case Study: Reference Data and Codes (TR No. 2016–10). NWMO.
- Gobien, M., Ion, M., 2021. Nuclear Fuel Waste Projections in Canada – 2021 Update (Technical Report No. 2021–17), NWMO-TR. NWMO.
- Gretton, A., Bousquet, O., Smola, A., Schölkopf, B., 2005. Measuring Statistical Dependence with Hilbert-Schmidt Norms, in: Jain, S., Simon, H.U., Tomita, E. (Eds.), Algorithmic Learning Theory. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 63–77.
- Håkansson, L., Lundgren, K., Wijkström, 2017. Source strengths for fuel elements during the operational phase for Clink, final repository construction and final disposal. (No. 06-0038R). SKB.
- Hamby, D.M., 1995. A Comparison of Sensitivity Analysis Techniques. Health Physics 68.
- Helton, J.C., Davis, F.J., 2002. Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. Reliability Engineering & System Safety 81, 23–69. [https://doi.org/10.1016/S0951-8320\(03\)00058-9](https://doi.org/10.1016/S0951-8320(03)00058-9)
- Helton, J.C., Johnson, J.D., Sallaberry, C.J., Storlie, C.B., 2006. Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis. Reliability Engineering and System Safety.
- Huang, W.J., Wang, M., Kondev, F.G., Audi, G., Naimi, S., 2021. The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures*. Chinese Physics C 45, 030002. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddb0>
- IAEA, 2008. Best Estimate Safety Analysis for Nuclear Power Plants: Uncertainty Evaluation (No. 52), Safety Reports Series. International Atomic Energy Agency (IAEA), Vienna.

- IAEA safety glossary. Terminology used in nuclear safety and radiation protection., 2007 ed. ed, 2007. . International Atomic Energy Agency (IAEA).
- INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2022. Benchmarks of Fuel Burnup and Material Activation Computational Tools Against Experimental Data for Research Reactors, Results of a Coordinated Research Project (IAEA-TECDOC No. 1992). IAEA, Vienna.
- Iwamoto, O., Iwamoto, N., Kunieda, S., Minato, F., Nakayama, S., Abe, Y., Tsubakihara, K., Okumura, S., Ishizuka, C., Yoshida, T., Chiba, S., Otuka, N., Sublet, J.-C., Iwamoto, H., Yamamoto, K., Nagaya, Y., Tada, K., Konno, C., Matsuda, N., Yokoyama, K., Taninaka, H., Oizumi, A., Fukushima, M., Okita, S., Chiba, G., Sato, S., Ohta, M., Kwon, S., 2023. Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5. *Journal of Nuclear Science and Technology* 60, 1–60.
<https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2141903>
- Jacobs UK Ltd, AFRY Solutions UK Ltd., 2022. 2022 UK Radioactive Waste Inventory. Nuclear Decommissioning Authority (NDA).
- Jang, J., Ebiwonjumi, B., Kim, W., Park, J., Choe, J., Lee, D., 2021. Validation of spent nuclear fuel decay heat calculation by a two-step method. *Nuclear Engineering and Technology* 53, 44–60.
<https://doi.org/10.1016/j.net.2020.06.028>
- Jansson, P., Bengtsson, M., Bäckström, U., Álvarez-Velarde, F., Čalič, D., Caruso, S., Dagan, R., Fiorito, L., Giot, L., Govers, K., Hernandez Solis, A., Hannstein, V., Ilas, G., Kromar, M., Leppänen, J., Mosconi, M., Ortego, P., Plukienė, R., Plukis, A., Ranta-Aho, A., Rochman, D., Ros, L., Sato, S., Schillebeeckx, P., Shama, A., Simeonov, T., Stankovskiy, A., Trelue, H., Vaccaro, S., Vallet, V., Verwerft, M., Žerovnik, G., Sjöland, A., 2022. Blind Benchmark Exercise for Spent Nuclear Fuel Decay Heat. *Nuclear Science and Engineering* 196, 1125–1145.
<https://doi.org/10.1080/00295639.2022.2053489>
- Kingdom of Belgium, 2021. National report on the implementation of Council Directive 2011/70/Euratom establishing a Community framework for the responsible and safe management of spent fuel and radioactive waste (National report of the Kingdom of Belgium).
- Kingdom of Belgium, 2020. Seventh meeting of the Contracting Parties to the Joint Convention on the Safety of Spent Fuel Management and on the Safety of Radioactive Waste Management (National Report).
- Kingdom of Belgium, 2015. National Programme for the Management of Spent Fuel and Radioactive Waste. ONDRAF/NIRAS.
- Knuth, D.E., 1998. *The Art of Computer Programming*, 3rd ed. Addison-Wesley, Boston.
- Koehler, J.R., Owen, A.B., 1996. Computer experiments. *Handbook of Statistics* 13.
- Kondeev, F.G., Wang, M., Huang, W.J., Naimi, S., Audi, G., 2021. The NUBASE2020 evaluation of nuclear physics properties *. *Chinese Physics C* 45, 030001. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddae>
- Kulesza, J.A., Adams, T.R., Armstrong, J.C., Bolding, S.R., Brown, F.B., Bull, J.S., Burke, T.P., Clark, A.R., Forster III, R.A., Giron, J.F., Grieve, T.S., Josey, C.J., Martz, R.L., McKinney, G.W., Pearson, E.J., Rising, M.E., Solomon Jr., C.J., Sriram, S., Trahan, T.J., Weaver, C.A., Wilson, S.C., Zukaitis, A.J., 2024. MCNP® Code Version 6.3.1 Theory & User Manual. United States.
<https://doi.org/10.2172/2372634>
- Lemieux, C., 2009. Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Sampling. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-78165-5>
- Liu, Z., Li, W., Yang, M., 2015. Two General Extension Algorithms of Latin Hypercube Sampling. *Mathematical Problems in Engineering* 2015, 450492. <https://doi.org/10.1155/2015/450492>
- Malins, A., Lemoine, T., 2022. radioactivedecay: A Python package for radioactive decay calculations. *Journal of Open Source Software* 7, 3318. <https://doi.org/10.21105/joss.03318>
- Marrel, A., Chabridon, V., 2021. Statistical developments for target and conditional sensitivity analysis: Application on safety studies for nuclear reactor. *Reliability Engineering & System Safety* 214, 107711. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2021.107711>
- Matplotlib, 2012.
- Mertyurek, U., Gauld, I.C., 2016. Development of ORIGEN libraries for mixed oxide (MOX) fuel assembly designs. *Nuclear Engineering and Design* 220–230.
- Mertyurek, U., Ilas, G., 2022. Nuclide Inventory Benchmark for BWR Spent Nuclear Fuel: Challenges in Evaluation of Modeling Data Assumptions and Uncertainties. *Journal of Nuclear Engineering* 3, 18–36. <https://doi.org/10.3390/jne3010003>
- Michel-Sendis, F., Gauld, I., Martinez, J.S., Alejano, C., Bossant, M., Boulanger, D., Cabellos, O., Chrapciak, V., Conde, J., Fast, I., Gren, M., Govers, K., Gysemans, M., Hannstein, V., Havljů, F., Hennebach, M., Hordosy, G., Ilas, G., Kilger, R., Mills, R., Mountford, D., Ortego, P., Radulescu, G., Rahimi, M., Ranta-Aho, A., Rantamäki, K., Ruprecht, B., Soppera, N., Stuke, M., Suyama, K., Tittelbach, S., Tore, C., Winckel, S.V., Vasiliev, A., Watanabe, T., Yamamoto, Toru, Yamamoto, Toshihisa, 2017.

SFCOMPO-2.0: An OECD NEA database of spent nuclear fuel isotopic assays, reactor design specifications, and operating data. *Annals of Nuclear Energy* 110, 779–788.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.07.022>

MicroShield, 2011.

Montgomery, D.C., 2013. *Design and Analysis of Experiments*, 8th ed. John Wiley & Sons, Inc.

Nagra, 2023. Modellhaftes Inventar radioaktiver Materialien MIRAM-RGB (Technischer Bericht No. 22– 05), NTB. Nagra, Wettingen.

Natural Resources Canada, 2021. Inventory of RADIOACTIVE WASTE in CANADA 2019. Natural Resources Canada.

NDA, 2022. Waste Stream Data Sheets.

NEA/CSNI, 2016. PREMIUM, a benchmark on the quantification of the uncertainty of the physical models in the system thermal-hydraulic codes: methodologies and data review (No. R(2016)9), Nuclear Safety. OECD.

NumPY, 2008.

OECD, 2004. Die Sicherheit der geologischen Tiefenlagerung von BE, HAA und LMA in der Schweiz, Eine internationale Expertenprüfung der radiologischen Langzeitsicherheitsanalyse der Tiefenlagerung im Opalinuston des Zürcher Weinlands (No. 5569), NEA. OECD.

Olivier, A., Giovanis, D.G., Aakash, B.S., Chauhan, M., Vandanapu, L., Shields, M.D., 2020. UQpy: A general purpose Python package and development environment for uncertainty quantification. *Journal of Computational Science* 47, 101204. <https://doi.org/10.1016/j.jocs.2020.101204>

ONDRAF/NIRAS, 2018. Quatrième rapport d'inventaire des passifs nucléaires de l'ONDRAF à sa tutelle (période 2013–2017) (No. 2017– 01), NIROND. ONDRAF/NIRAS.

ONDRAF/NIRAS, 2011. Waste Plan, for the long-term management of conditioned high-level and/or long-lived radioactive waste and overview of related issues (No. 2011– 02), NIROND. ONDRAF/NIRAS.

ONDRAF/NIRAS, 2001. Technical overview of the SAFIR 2 report, Safety Assessment and Feasibility Interim Report 2 (No. 2001– 05), NIROND. ONDRAF/NIRAS.

Park, J., Jang, J., Kim, H., Choe, J., Yun, D., Zhang, P., Cherezov, A., Lee, D., 2020. RAST-K v2—Three-Dimensional Nodal Diffusion Code for Pressurized Water Reactor Core Analysis. *Energies* 13. <https://doi.org/10.3390/en13236324>

Pearson, K., 1905. On the general theory of skew correlation and non-linear regression, *Mathematical contributions to the theory of evolution*, Drapers' Company Research Memoirs. Dulau & Co., London.

Peiffer, F., McStocker, B., Gründler, D., Ewig, F., Thomauske, B., Havenith, A., Kettler, J., 2011. Abfallspezifikation und Mengengerüst, Basis Ausstieg aus der Kernenergienutzung (Juli 2011), Bericht zum Arbeitspaket 3, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (No. 278). GRS.

Petelet, M., Iooss, B., Asserin, O., Lored, A., 2010. Latin hypercube sampling with inequality constraints. *ASTA Advances in Statistical Analysis* 94, 325–339. <https://doi.org/10.1007/s10182-010-0144-z>

Pianosi, F., Wagener, T., 2015. A simple and efficient method for global sensitivity analysis based on cumulative distribution functions. *Environmental Modelling & Software* 67, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2015.01.004>

Pirot, V., Geet, M.V., Lalieux, P., 2013. ONDRAF/NIRAS Research, Development and Demonstration (RD&D) Plan for the geological disposal of high-level and/or long-lived radioactive waste including irradiated fuel if considered as waste; State-of-the-art report as of December 2012 (NIROND-TR No. 2013–12). Belgian Agency for Radioactive Waste and Enriched Fissile Materials (ONDRAF/NIRAS).

Plischke, E., 2012a. How to compute variance-based sensitivity indicators with your spreadsheet software. *Environmental Modelling & Software* 35, 188–191. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2012.03.004>

Plischke, E., 2012b. An adaptive correlation ratio method using the cumulative sum of the reordered output. *Reliability Engineering & System Safety* 107, 149–156. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2011.12.007>

Plischke, E., 2011. An adaptive correlation ratio method using the cumulative sum of the reordered output. *Reliability Engineering & System Safety* 107. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2011.12.007>

Plischke, E., 2010. An effective algorithm for computing global sensitivity indices (EASI). *Reliability Engineering & System Safety* 95, 354–360. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2009.11.005>

Plompen, A.J.M., Cabellos, O., De Saint Jean, C., Fleming, M., Algora, A., Angelone, M., Archier, P., Bauge, E., Bersillon, O., Blokhin, A., Cantargi, F., Chebboubi, A., Diez, C., Duarte, H., Dupont, E., Dyrd, J., Erasmus, B., Fiorito, L., Fischer, U., Flammini, D., Foligno, D., Gilbert, M.R., Granada, J.R., Haack, W., Hamsch, F.-J., Helgesson, P., Hilaire, S., Hill, I., Hursin, M., Ichou, R., Jacqmin, R., Jansky, B., Jouanne, C., Kellett, M.A., Kim, D.H., Kim, H.I., Kodeli, I., Koning, A.J., Konobeyev, A.Yu., Kopecky, S., Kos, B., Krása, A., Leal, L.C., Leclaire, N., Leconte, P., Lee, Y.O., Leeb, H., Litaize, O., Majerle, M., Márquez Damián, J.I., Michel-Sendis, F., Mills, R.W., Morillon, B., Noguère, G., Pecchia, M., Pelloni, S., Pereslavyev, P., Perry, R.J., Rochman, D., Röhrmoser, A., Romain, P., Romojaro, P.,

- Roubtsov, D., Sauvan, P., Schillebeeckx, P., Schmidt, K.H., Serot, O., Simakov, S., Sirakov, I., Sjöstrand, H., Stankovskiy, A., Sublet, J.C., Tamagno, P., Trkov, A., van der Marck, S., Álvarez-Velarde, F., Villari, R., Ware, T.C., Yokoyama, K., Žerovnik, G., 2020. The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3. The European Physical Journal A 56, 181.
<https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9>
- Posiva, 2021. Safety Case for the Operating Licence Application - Design Basis (DB). (No. 2021– 08). Posiva Oy.
- PREMIUM: A Benchmark on the Quantification of the Uncertainty of the Physical Models in System Thermal-hydraulic Codes, Methodologies and Data Review (No. R(2016)9), 2016. . OECD.
- Radioactive Waste Management, 2021. Inventory for geological disposal; Main report (No. DSSC/403/03).
- Radioactive Waste Management, 2016. Geological Disposal Derived Inventory: Scenarios Report (NDA Report No. DSSC/404/01). Radioactive Waste Management (RWM).
- Ratto, M., Pagano, A., Young, P., 2007. State Dependent Parameter metamodelling and sensitivity analysis. Computer Physics Communications 177, 863–876. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2007.07.011>
- Rauscher, B., Vespa, M., Kisting, S., Haneke, K., 2023. Stellenwert des Inventars radioaktiver Abfälle bei der Standortauswahl für ein Endlager (InvEnd) (Schlussbericht No. BS-Projekt-Nr. 2112-04). Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung (BASE), Salzgitter.
- Rhodes, J., Smith, K., Lee, D., 2006. CASMO-5 development and applications. American Nuclear Society - ANS; La Grange Park (United States), Research Org.: American Nuclear Society, 555 North Kensington Avenue, La Grange Park, IL 60526 (United States).
- Richtlinie über einen Gemeinschaftsrahmen für die verantwortungsvolle und sichere Entsorgung abgebrannter Brennelemente und radioaktiver Abfälle, 2011.
- Rochman, D.A., Álvarez-Velarde, F., Dagan, R., Fiorito, L., Häkkinen, S., Kromar, M., Muñoz, A., Panizo-Prieto, S., Romojaro, P., Schillebeeckx, P., Seidl, M., Shama, A., Žerovnik, G., 2023. On the estimation of nuclide inventory and decay heat: a review from the EURAD European project. EPJ Nuclear Sci. Technol. 9. <https://doi.org/10.1051/epjn/2022055>
- Saltelli, A., 2002. Sensitivity analysis for importance assessment. Risk Analysis 22, 579–590.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., Tarantola, S., 2007. Global Sensitivity Analysis. The Primer. John Wiley & Sons, Ltd.
- Schwarz, W., 2020a. Methoden zur Bestimmung der Messunsicherheit nach GUM – Teil 1. avn-Heft 127, 69–86.
- Schwarz, W., 2020b. Methoden zur Bestimmung der Messunsicherheit nach GUM – Teil 2. avn-Heft 128, 211–219.
- SciPy, 2024.
- Shama, A., Rochman, D., Caruso, S., Pautz, A., 2022. Validation of spent nuclear fuel decay heat calculations using Polaris, ORIGEN and CASMO5. Annals of Nuclear Energy 165, 108758. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108758>
- Shibata, K., Iwamoto, O., Nakagawa, T., Iwamoto, N., Ichihara, A., KUNIEDA, S., CHIBA, S., FURUTAKA, K., OTUKA, N., OHSAWA, T., MURATA, T., MATSUNOBU, H., ZUKERAN, A., KAMADA, S., KATAKURA, J., 2011. JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. Journal of Nuclear Science and Technology 48, 1–30. <https://doi.org/10.1080/18811248.2011.9711675>
- SKB, 2010. Spent nuclear fuel for disposal in the KBS-3 repository (Technical Report No. TR-10-13). SKB.
- Sobol, I.M., 1993. Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models. MMCE 1.
- Sobol, I.M., Kucherenko, S., 2009. Derivative based global sensitivity measures and their link with global sensitivity indices. Mathematics and Computers in Simulation 79, 3009–3017. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2009.01.023>
- Spieß, Sabine, Becker, Dirk-Alexander, 2017. Investigation of Modern Methods of Probabilistic Sensitivity Analysis of Final Repository Performance Assessment Models (MOSEL) (No. GRS-412). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH.
- Swiler, L.P., Becker, Dirk-Alexander, Brooks, D., Govaerts, J., Koskinen, L., Kupiainen, P., Plischke, E., Röhlig, K.-J., Saveleva, E., Spiessl, S.M., Stein, E., Svitelman, V., 2021. Sensitivity Analysis Comparisons on Geologic Case Studies: An International Collaboration (No. SAND2021-11053), SANDIA REPORT. Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico.
- SymPy, 2024.
- Tarantola, S., Gatelli, D., Mara, T.A., 2006. Random balance designs for the estimation of first order global sensitivity indices. Reliability Engineering and System Safety 91, 717–727.
- Thiollière, N., Clavel, J.-B., Courtin, F., Doligez, X., Ernoult, M., Issoufou, Z., Krivtchik, H., Leniau, B., Mouginot, B., Bidaud, A., Sylvain, D., Lebin, V., Perigois, C., Richet, Y., Somaini, A., 2018. A methodology for performing sensitivity analysis in dynamic fuel cycle simulation studies applied to a PWR fleet simulated with the CLASS tool. EPJ Nuclear Sci. Technol. 4.

- Tong, C., 2007. Toward a more robust variance-based global sensitivity analysis of model outputs (No. UCRL-TR-235561). Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore.
- Veiga, S., 2015. Global sensitivity analysis with dependence measures. *Journal of Statistical Computation and Simulation* 1283–1305.
- Veiga, S., Gamboa, F., Iooss, B., Prieur, C., 2021. Basics and Trends in Sensitivity Analysis, Theory and Practice in R, Computational Science & Engineering. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Verordnung über Anforderungen und Verfahren zur Entsorgung radioaktiver Abfälle (Atomrechtliche Entsorgungsverordnung - AtEV), 2018.
- Verordnung über Sicherheitsanforderungen und vorläufige Sicherheitsuntersuchungen für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, 2020.
- Wang, M., Huang, W.J., Kondev, F.G., Audi, G., Naimi, S., 2021. The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references*. *Chinese Physics C* 45, 030003. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/abddaf>
- Wieselquist, W.A., Lefebvre, R.A., 2024. SCALE 6.3.2 User Manual. United States. <https://doi.org/10.2172/2361197>
- Zabrodskaia, S.V., Ignatyuk, A.V., Koshcheev, V.N., Manokhin, V.N., Nikolaev, M.N., Nikolaev, V.G., 2007. ROSFOND – Russian National Library of Evaluated Neutron Data. VANT. Ser. Nuclear and Reactor Constants 12: 3–21.

9 Glossar

Begriff	Erklärung
Ausgangsdaten	Ausgangsparameter und ihre Werte; Ergebnisse des Inventarmodells
Ausgangsparameter	Allgemeine, geometrische, physikalische und chemische Größen zum Inventar, deren Werte dem Inventarmodell entnommen werden sollen, z. B. für nachfolgende vorläufige Sicherheitsuntersuchungen
Betreiber	Betreiber eines Atomkraftwerks bzw. Endlagers radioaktiver Abfälle; in Deutschland die Bundesgesellschaft für Endlagerung (BGE), welche im Auftrag des Bundes für die dauerhafte Lagerung der radioaktiven Abfälle im tiefen Untergrund verantwortlich ist
Eingangsdaten	Eingangsparameter und ihre Werte; Eingangsdaten werden im Inventarmodell mit Hilfe von Modellansätzen in Ausgangsdaten umgewandelt
Eingangsparameter	Allgemeine, geometrische, physikalische und chemische Größen zum Inventar, deren Werte durch Messungen oder anderweitig bestimmt wurden
Inventarmodell	Gesamtheit aller Eingangsdaten, Modellansätze und Ausgangsdaten zur Abbildung des Inventars an radioaktiven Abfällen im Hinblick auf die Durchführung einer vorläufigen Sicherheitsuntersuchung
Modellansatz	Sachlich begründete mathematische Vorschrift zur Überführung von Eingangsdaten in Ausgangsdaten
statistische Momente / Kennwerte	Kennzahlen zur Beschreibung der Werte eines Parameters (Stichprobe), z. B. Mittelwert, Varianz, Schiefe, Wölbung. Sind die Kennzahlen unabhängig von einer Verteilungsfunktion, so werden sie als Momente / Kennwerte bezeichnet. Sie werden jedoch benutzt, um die Parameter einer Verteilungsfunktion zu schätzen, z. B. Standardabweichung einer Normalverteilung.
(kumulative) Verteilungsfunktion	Mathematische Funktion, welche die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein Parameter einen Wert annimmt, der kleiner oder gleich dem Argument der Verteilungsfunktion ist
Wahrscheinlichkeitsverteilung	Die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Zufallsvariable beschreibt mit welcher Wahrscheinlichkeit die Zufallsvariable verschiedene Werte annehmen kann. Für stetige / kontinuierliche Zufallsvariablen spricht man von einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF), deren Integral wird als kumulative Verteilungsfunktion (CDF) bezeichnet.

Begriff	Erklärung
(sicherheitsrelevante) Zielgrößen	Kriterien einer späteren Überprüfung der Sicherheitsanforderungen im Hinblick auf die Einhaltung der Schutzziele und allgemeinen Sicherheitsprinzipien durch das BASE. Im vorliegenden FoV werden als Zielgrößen beispielhaft 1) die Radiotoxizität, d. h. die Ingestionsdosis für einen Erwachsenen, repräsentativ für die Zielgröße Körperdosis und durchschnittliche Jahresdosis eines Erwachsenen, und 2) die Nachzerfallsleistung, repräsentativ für die Temperatur an der Gebindeoberfläche, betrachtet.
Zufallsvariable	Eine Zufallsvariable ist eine mathematische Funktion, die jedem möglichen Ergebniswert eines Zufallsexperiments einen numerischen Wert zuordnet. Sie wird verwendet, um Zufallsprozesse zu modellieren. Im vorliegenden FoV werden sowohl Eingangs- als auch Ausgangsdaten des Inventarmodells als Zufallsvariablen betrachtet.

Anhang A Literaturrecherche zu den Eingangsparametern

Ziel der Literaturrecherche ist es, den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik im Umgang mit Ungewissheiten in den Eingangsparametern des Inventarmodells auf der Basis öffentlich zugänglicher Informationsquellen darzustellen. Hierzu werden die Ergebnisse pro Eingangsparameter gemäß der Gruppierung im FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023) präsentiert.

A.1 Allgemeine Charakterisierung

A.1.1 Anzahl Behälter / Gebinde

Informationen zur Anzahl an Abfallbehältern konnten für Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2011, 2001), die Schweiz (Nagra, 2023) und Kanada (Natural Resources Canada, 2021) gefunden werden. Die Angaben beziehen sich auf Referenzgebinde und sind abgeleitet aus Produktionsprognosen oder basieren auf Produktionsstatistiken der Anlagenbetreiber. Es konnten jedoch keine direkten Informationen zur Ungewissheit in den Angaben gefunden werden, sie können jedoch aus den Angaben zur Ungewissheit in der Brennelementanzahl abgeleitet werden, welche für die Schweiz (OECD, 2004) und Kanada (Gobien and Ion, 2021) vorliegen. Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in Berichten aus Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und der Schweiz (ENSI, 2010) gefunden. Solche Maßnahmen beziehen sich in Belgien auf die Durchführung von Kontrollen und Audits der Betreiber und Produzenten durch die Aufsichtsbehörde (Bel V, FANC) oder auf QA-Maßnahmen der Betreiber und Produzenten in Kooperation mit der Aufsichtsbehörde (ONDRAF/NIRAS mit Bel V, FANC). In der Schweiz erfolgten Plausibilitätsprüfungen mit Angaben internationaler Partnerorganisationen (SKB), Überprüfungen der Angaben mittels Daten der ISRAM-Datenbank und Konsistenzprüfungen der verfügbaren Informationen.

Ungewissheiten werden durch die Definition von Endlagergebindetypen und die zugehörigen Bandbreiten charakterisiert (Schweiz) oder durch individuelle Spezifikation der Einzelgebinde (Belgien). Aufgrund der Natur der Daten, welche statistisch abgeleitet werden, gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ B entspricht. Diese wird mittels Extremwerten aus Szenarienanalysen abgeleitet, basierend auf unterschiedlichen Annahmen als Grundlage der Prognosen.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Plausibilitäts- oder Konsistenzprüfungen in Kooperation mit den Betreibern und internationalen Partnerorganisationen üblich.

A.1.2 Brennstabanzahl (im Beladungszustand)

Die Brennstabanzahl muss in Deutschland gemäß (AtEV, 2018) für jedes Brennelement (BE) sowie jeden Köcher von den Betreibern angegeben werden. Angaben zur Anzahl der BS konnten für Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2011, 2001), Schweiz (Nagra, 2023), Großbritannien (NDA, 2022) und Kanada (Natural Resources Canada, 2021) gefunden werden. Die Informationsquelle sind die Betreiber und die Angaben beziehen sich auf existente Bestände in Belgien, der Schweiz und Kanada bzw. sind abgeleitet aus Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion (Schweiz, Großbritannien). Angaben zur Ungewissheit in der Brennstabanzahl wurden für die Schweiz (OECD, 2004) und Kanada (Gobien and Ion, 2021) gefunden. Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in Berichten aus Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und der Schweiz (ENSI, 2010) gefunden. Solche Maßnahmen beziehen sich in Belgien auf die Durchführung von Kontrollen und Audits der Betreiber und Produzenten durch die Aufsichtsbehörde (Bel V, FANC) oder auf QA-Maßnahmen der Betreiber und Produzenten in

Kooperation mit der Aufsichtsbehörde (ONDRAF/NIRAS mit Bel V, FANC). In der Schweiz erfolgten Plausibilitätsprüfungen mit Angaben internationaler Partnerorganisationen (SKB), Überprüfungen der Angaben mittels Daten der ISRAM-Datenbank und Konsistenzprüfungen der verfügbaren Informationen.

Ungewissheiten in der Anzahl an BS werden durch die Definition von Referenzgebinden (Schweiz) erfasst oder durch individuelle Spezifikation der Gebinde ausgeschlossen (Belgien). Aufgrund der Natur der Daten, welche statistisch abgeleitet werden, gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ B entspricht.

Deutschland bildet hierbei eine Ausnahme, da alle AKW abgeschaltet wurden (mit Ausnahme der Forschungsreaktoren) und dadurch die Anzahl der BS nahezu bekannt ist, jedoch nicht die Anzahl der Endlagergebinde / -behälter, welche vom Standort (Wirtsgestein) und dem entsprechenden Verpackungskonzept abhängig ist. Für Deutschland entspricht daher die Ungewissheit in der Brennstabanzahl einem GUM Typ A.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Prüfungen des Bestandes und Audits möglich.

A.1.3 Datum der Entnahme aus dem Reaktorkern (Entladung)

Das Datum der Entnahme aus dem Reaktor muss für jedes Brennelement und jeden Brennstab im Köcher in Deutschland gemäß (*AtEV*, 2018) von den Betreibern angegeben werden. Der Entnahmezeitpunkt gilt als Ausgangspunkt für die Bestimmung der Abklingzeit (Entladung). Angaben zu diesem Zeitpunkt konnten für Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2018), Schweiz (Nagra, 2023), Großbritannien (NDA, 2022) und Kanada (Natural Resources Canada, 2021) auf der Grundlage periodischer Berichtslegungen gefunden werden. Exakte Angaben zu den Daten konnten nicht öffentlich gefunden werden. Diese sind aber in Datenbanken bzw. Datenblättern in jedem Land existent (z. B. in der ISRAM-Datenbank für die Schweiz (Nagra, 2023)). Die Informationsquelle sind die Betreiber und die Angaben beziehen sich auf existente Bestände in Belgien, der Schweiz und Kanada bzw. werden abgeleitet aus Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion (Schweiz, Großbritannien). Angaben zur Ungewissheit im Datum der Entnahme aus dem Reaktor wurden nur für die Schweiz (OECD, 2004) und Kanada (Gobien and Ion, 2021) gefunden. Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in Berichten aus Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und der Schweiz (ENSI, 2010) gefunden. Solche Maßnahmen beziehen sich in Belgien auf die Durchführung von Kontrollen und Audits der Betreiber und Produzenten durch die Aufsichtsbehörde (Bel V, FANC) oder auf QA-Maßnahmen der Betreiber und Produzenten in Kooperation mit der Aufsichtsbehörde (ONDRAF/NIRAS mit Bel V, FANC). In der Schweiz erfolgten Überprüfungen der Angaben mittels Daten der ISRAM-Datenbank und Konsistenzprüfungen der verfügbaren Informationen (ENSI, 2010).

Ungewissheiten in der Zeitangabe werden durch die Definition von Referenzgebinden (Schweiz) erfasst oder durch die Nutzung konservativer Angaben (Kanada) bzw. individuelle Spezifikation (Belgien) berücksichtigt. Die Ungewissheit des Parameters entspricht einem GUM Typ B.

Für Deutschland sollten nahezu alle Informationen existent sein, da alle AKW abgeschaltet wurden (mit Ausnahme der Forschungsreaktoren). Somit ergibt sich hier ein GUM Typ A.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Prüfungen des Bestandes und Konsistenzprüfungen zwischen verschiedenen Informationsquellen möglich.

A.1.4 Brennelementtyp

Der Brennelementtyp muss für jedes Brennelement in Deutschland gemäß (*AtEV*, 2018) von den Betreibern angegeben werden. Angaben zum Brennelementtyp konnten für Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2018), Schweiz (Nagra, 2023), Finnland (Posiva, 2021) und Kanada (Gobien et al., 2016) gefunden werden. Die Informationsquelle sind die Betreiber und die Angaben beziehen sich auf existente Bestände in Belgien, der Schweiz, Finnland und Kanada bzw. werden abgeleitet aus Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion (Schweiz). Angaben zur Ungewissheit und zum Umgang mit diesen wurden nur für die Schweiz gefunden (Nagra, 2023). Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in Berichten aus Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und Finnland (Posiva, 2021) gefunden. Die Maßnahmen umfassten die Durchführung von Kontrollen und Audits der Betreiber durch die Aufsichtsbehörde.

Ungewissheiten im Brennelementtyp werden durch die Definition von Referenzgebinden (Schweiz) je Abfallstrom berücksichtigt. Die Ungewissheit des Parameters entspricht einem GUM Typ B.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen des Bestandes und Konsistenzprüfungen zwischen verschiedenen Informationsquellen möglich.

A.1.5 Klassifizierung der abgebrannten BE

In Deutschland wird zwischen regulär abgebrannten BS und Sonderbrennstäben (SBS) unterschieden. SBS sind intakte oder defekte BS, die aus einem BE entfernt wurden. Für die Zwischenlagerung werden sie in Köcher für Sonderbrennstäbe eingesetzt (Rauscher et al., 2023). Eine Klassifizierung in regulär oder nicht regulär abgebrannte BS muss gemäß (*AtEV*, 2018) von den Betreibern angegeben werden. Angaben zu Spezifikationen zusätzlich zum Brennelementtyp konnten gefunden werden für Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2018), Schweiz (Nagra, 2023) und Großbritannien (NDA, 2022). Diese Informationen basieren auf Angaben der Betreiber. Sie umfassen Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion (Schweiz). Zur Nutzung dieser Angaben in Großbritannien fanden sich keine Informationen. In Belgien werden die Informationen zum Ausschluss von Ungewissheiten durch individuelle Spezifikation der Gebinde genutzt. In der Schweiz fließen sie in die Definition von Referenzgebinden je Abfallstrom und in die Festlegung der Bandbreite jedes Referenzgebindes zur Handhabung der Ungewissheit ein. Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in Berichten aus Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) gefunden. Die Maßnahmen umfassten die Durchführung von Kontrollen und Audits der Betreiber durch die Aufsichtsbehörde.

Aufgrund der individuellen Spezifikation entspricht die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ B. Ungewissheiten im Brennelementtyp werden durch die Definition von Referenzgebinden (Schweiz) je Abfallstrom berücksichtigt bzw. durch individuelle Spezifikation (Belgien).

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen des Bestandes und Konsistenzprüfungen zwischen verschiedenen Informationsquellen möglich.

A.1.6 Abfallkategorie

Der Begriff Abfallkategorie steht synonym für den Begriff Abfallstrom. Gemäß (*AtEV*, 2018) muss diese Kategorisierung nicht expliziert erfolgen. In der Literatur findet sich eine analoge Kategorisierung in Belgien (Kingdom of Belgium, 2015), der Schweiz (Nagra, 2023), Großbritannien (Jacobs UK Ltd and AFRY Solutions UK Ltd., 2022) und Kanada (Natural Resources Canada, 2021).

Die Angaben basieren auf Angaben der Betreiber (spez. Endlagerbetreiber). Es existieren keine Ungewissheiten in der Kategorisierung. Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen wurden keine gefunden.

A.2 Chemische Charakterisierung

A.2.1 (Komponentenspezifische) chemische Zusammensetzung

Angaben zu einer (komponentenspezifischen) chemischen Zusammensetzung wurden für Belgien (Pirrot et al., 2013) anhand von Forschungsvorhaben und für die Schweiz im Bericht zum Inventarmodell (Nagra, 2023) gefunden. Die Informationsquelle sind die Betreiber und Abfallproduzenten, und die Angaben beziehen sich auf existente Bestände bzw. sind abgeleitet aus Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion. Angaben zu den benutzten Modellansätzen in der Bestimmung der chemischen Zusammensetzung wurden in der Literatur gefunden für Finnland (Posiva, 2021), Belgien (Pirrot et al., 2013) und die Schweiz (Nagra, 2023).

Die Ungewissheit des Parameters entspricht einem GUM Typ B. Angaben zur Handhabung von Ungewissheiten in der (komponentenspezifischen) chemischen Zusammensetzung wurden in der Literatur aus Belgien (Pirrot et al., 2013) und der Schweiz (Nagra, 2023) gefunden. Zur Handhabung der Ungewissheit wird dabei eine Standardisierung bzw. Gruppierung in Referenztypen / -gebinde und die Nutzung harmonisierter Standardmaterialien angewandt. Jedem Typ / Standard wird dabei eine Referenzzusammensetzung mit einer Bandbreite zugeordnet. Die Definition generischer Typen erfolgt abhängig von der Möglichkeit der Nutzung bestehender Typen fortlaufend im Prozess der Zuordnung von Abfall- / Material- / Komponentenspezifikationen (vgl. Abschnitt A.5.4). Die Charakterisierung der Ungewissheit der chemischen Zusammensetzung von messbaren Komponenten erfolgt im klassischen Sinne mittels der Bestimmung von charakteristischen Werten. Für Komponenten, die einer direkten Messung nicht zugänglich sind, erfolgt die Bestimmung der charakteristischen Größen durch Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind, sofern dies möglich ist, die Analyse von Materialproben einzelner Komponenten und die Überprüfung der erfolgten Zuordnung zu den jeweiligen Typen / Standards in der Literatur genannt (Nagra, 2023). Allgemein und speziell in Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2001) werden als QA-/QC-Maßnahmen ein nachvollziehbares System des Wissenstransfers, die Nutzung internationaler Standards und Gütesiegel, die internationale Zusammenarbeit, die Nutzung von Modellen und Programmcodes, welche weitverbreitet, getestet und verifiziert sind, und ein periodischer, kritischer Review durch unabhängige Spezialisten vorgesehen.

A.3 Geometrische Charakterisierung

A.3.1 Gittertyp bzw. Anordnung der Brennstäbe

Der Gittertyp muss gemäß (AtEV, 2018) für jedes bestrahlte BE angegeben werden. Die Spezifikation ist unveränderlich und wird vom Betreiber bzw. Produzenten bereitgestellt. Spezifische Angaben sind für die Schweiz in der Literatur zu finden (Nagra, 2023). Die Angaben sind in der Schweiz Bestandteil der Definition der Abfallgebindetypen. Angaben zur Ungewissheit und zum Umgang mit diesen Ungewissheiten sind ebenfalls in der Literatur der Schweiz zu finden (Nagra, 2023).

Ungewissheiten werden durch die Definition von Endlagergebindetypen und die zugehörigen Bandbreiten charakterisiert (Nagra, 2023). Die Handhabung der Ungewissheiten erfolgt also durch die Nutzung zusammenfassender Endlagergebindetypen / Referenzgebinde je Abfallstrom aus der

Datenbank des Materialinventars (ISRAM in der Schweiz). Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ A entspricht. Die Ungewissheit wird im klassischen Sinne aus Messungen abgeleitet.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen innerhalb von Audits oder zwischen verfügbaren Dokumenten möglich.

A.3.2 Geometrie (innere und äußere) und Form

Angaben zur Geometrie umfassen die Länge von BS, BE, der aktiven Zone, den Abstand zwischen BS, die Breite (bei SWR mit Kasten) bzw. den Durchmesser von BE, die Querschnittsfläche, Innenabmessungen des BE-Kastens, Außen- und Innendurchmesser der Hüllrohre, Durchmesser der Pellets, Wandstärken der Strukturteile und deren Form. Die Parameter der Geometrie sind abhängig vom BE-Typ bzw. der Kokillenspezifikation verglaster Abfälle (CSD-V, CSD-C, CSD-B, UK-HAW, HAW-WAK). Unter Vernachlässigung von Geometrieänderungen durch die Bestrahlung basieren diese auf Angaben der Betreiber und Produzenten. Hinweise auf geometrische Größen sind in der Literatur für Belgien (Piro et al., 2013), Kanada (Gobien et al., 2016) und die Schweiz (Nagra, 2023) zu finden. Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023). In Belgien erfolgt ein Ausschluss von Ungewissheiten durch eine individuelle Spezifikation jedes Gebindes (Piro et al., 2013). In der Schweiz werden 395 reale und 257 modellhafte Typen benutzt, um gesamthaft 652 Abfallgebindetypen (6 Referenzgebände) und ihre möglichen Geometrien mit ihren Ungewissheiten zu beschreiben. In Kanada (Gobien et al., 2016) wird die Spezifikation von Referenzgebänden genutzt.

Der Form kommt bei korrosiven Materialien eine besondere Bedeutung zu, da Reaktionsgeschwindigkeiten, insbesondere der Korrosion, von ihr abhängig sind. Für die Form erfolgte ebenfalls eine Typisierung.

Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit der Parameter einem GUM Typ A entspricht. Die Ungewissheit wird im klassischen Sinne aus Messungen abgeleitet. Durch die Zuordnung in Geometrietypen mit einem Referenzwert und einer Standardabweichung ist die Berücksichtigung dieser möglich.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen innerhalb von Audits oder zwischen verfügbaren Dokumenten möglich.

A.3.3 (Anfangs-) Volumen

Angaben zum (Anfangs-)Volumen der Abfälle sind in der Literatur für Belgien (Kingdom of Belgium, 2021), Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021), Kanada (Natural Resources Canada, 2021) und die Schweiz (Nagra, 2023) gefunden worden. Die Angaben erfolgten dabei vom Betreiber pro Abfallgebände (Belgien), pro Abfallgebindetyp (Schweiz), pro Abfallkategorie (Großbritannien) bzw. gesamthaft (Kanada). Die Angaben beziehen sich auf existente Bestände bzw. sind abgeleitet aus Produktionsstatistiken und -prognosen auf der Grundlage von Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion (Belgien, Großbritannien, Schweiz). Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023) und Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021). Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen sind für Belgien in der Literatur zu finden (Kingdom of Belgium, 2020).

Ungewissheiten werden durch die Nutzung modellhafter Abfallgebände (Nagra, 2023) berücksichtigt, welche mit Mittelwerten und Bandbreiten (Eckwerten) definiert werden. In Großbritannien wird die

Ungewissheit in Szenarienanalysen berücksichtigt. Da es sich um statistisch abgeleitete Werte handelt, gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ B entspricht.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen innerhalb von Audits oder zwischen verfügbaren Dokumenten möglich.

A.3.4 Freies Volumen im Brennstabplenum

Angaben zum freien Volumen im Brennstabplenum wurden in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023) gefunden. Die Angaben erfolgten dabei vom Betreiber pro Abfallgebindetyp und beziehen sich auf Angaben zu Standardmaterialien, welche aus der ISRAM-Datenbank abgeleitet wurden. Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur ebenso (Nagra, 2023). Angaben zu QA-/QC-Maßnahmen erfolgten in der Literatur nicht.

Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ A entspricht. Die Ungewissheit wird im klassischen Sinne aus Messungen abgeleitet und durch eine Zuordnung in Geometrietypen mit einem Referenzwert und einer Standardabweichung ist die Berücksichtigung dieser möglich.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen zwischen verfügbaren Dokumenten möglich.

A.4 Physikalische Charakterisierung

A.4.1 Gesamtmasse

Die Masse muss gemäß (AtEV, 2018) für jedes bestrahlte BE und jeden Glaskörper angegeben werden. Die Spezifikation der Masse der Edelstahlkokille bzw. der Kokille/Gebinde muss nicht erfolgen. Für sonstige Abfälle aus der Wiederaufbereitung muss gemäß (AtEV, 2018) nur die Masse des Presslings und der leeren Kartusche angegeben werden. Die Angaben werden vom Betreiber bzw. Produzenten bereitgestellt bzw. resultieren aus staatlichen Planungen / Vorgaben / Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion. Spezifische Angaben konnten in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Kingdom of Belgium, 2021), Finnland (Posiva, 2021) und Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021) gefunden werden.

Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023). Sie basieren auf der Definition von Referenzgebinden mit je einem Referenzwert und einer Bandbreite. Aufgrund der Natur der Daten, welche statistisch abgeleitet werden, gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ B entspricht. Die Ungewissheit wird mit Hilfe von Extremwerten aus Szenarienanalysen abgebildet, basierend auf unterschiedlichen Annahmen als Grundlage der Prognosen.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen zwischen verfügbaren Dokumenten möglich.

A.4.2 Brennstoffdichte

Die nominale Brennstoffdichte muss gemäß (AtEV, 2018) für jedes bestrahlte BE angegeben werden. Die Angaben werden vom Betreiber bzw. Produzenten bereitgestellt. Spezifische Angaben konnten in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Kingdom of Belgium, 2021) und Finnland (Posiva, 2021) gefunden werden.

Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023). Sie basieren auf der Definition von Referenzgebinden mit je einem Referenzwert und einer Bandbreite auf der Grundlage von Angaben der Betreiber / Produzenten. In Belgien (Piro et al., 2013) werden Ungewissheiten durch eine individuelle Spezifikation der Gebinde ausgeschlossen. Aufgrund der Tatsache, dass die Dichte durch Messungen von Volumen und Masse bestimmt werden kann, weisen wir der Ungewissheit des Parameters einen GUM Typ A zu.

Hinweise auf QA-/QC-Maßnahmen fanden sich in der Literatur von Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und Finnland (Posiva, 2021). Als QA-/QC-Maßnahmen werden Kontrollen oder Konsistenzprüfungen innerhalb von Audits oder zwischen verfügbaren Dokumenten genannt.

A.4.3 Abfalldichte

Die Abfalldichte muss gemäß (AtEV, 2018) für jedes bestrahlte BE angegeben werden. Die Angaben werden vom Betreiber bzw. Produzenten bereitgestellt. Spezifische Angaben konnten in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Kingdom of Belgium, 2021) und Finnland (Posiva, 2021) gefunden werden.

Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben und der Handhabung dieser fanden sich in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023). Sie basieren auf der Definition von Referenzgebinden mit je einem Referenzwert und einer Bandbreite auf der Grundlage von Angaben der Betreiber / Produzenten. In Belgien (Piro et al., 2013) werden Ungewissheiten durch eine individuelle Spezifikation der Gebinde ausgeschlossen. Zu Methoden der Bestimmung der Ungewissheit in diesem Parameter wurden in der Literatur keine Angaben gemacht. Aufgrund der Natur der Daten, welche auf vorhergehenden Modellrechnungen oder Messungen basieren, lässt sich die Ungewissheit des Parameters nicht eindeutig einem GUM Typ A oder B zuweisen.

Hinweis auf QA-/QC-Maßnahmen fanden sich in der Literatur von Belgien (Kingdom of Belgium, 2020) und Finnland (Posiva, 2021). Als QA-/QC-Maßnahmen sind Kontrollen oder Konsistenzprüfungen innerhalb von Audits oder zwischen verfügbaren Dokumenten genannt.

A.4.4 Halbwertszeit der Nuklide

Die Halbwertszeiten der Nuklide werden in internationalen Datenbanken gesammelt. Die am weitesten verbreiteten Datenbanken sind ENDF/B-VIII.0 (Brown et al., 2018), ENDF/B-VII.1 (Chadwick et al., 2011), JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020), JENDL-5 (Iwamoto et al., 2023), CENDL-3.2 (Ge et al., 2020) und ROSFOND (Zabrodsкая et al., 2007). Sie können in einem einheitlichen Format (ENDF - Evaluated Nuclear Data File (Brown, 2023)) bezogen werden (aus Quellen im Internet). Jede dieser Quellen beinhaltet sowohl Angaben zu den Werten als auch zu den Ungewissheiten der Werte.

Angaben zur Berücksichtigung der Ungewissheit in den Angaben fanden wir in der Literatur keine. Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ A entspricht, da es sich um Messungen handelt.

QA-/QC-Maßnahmen sind seitens der Behörde keine erforderlich. Die Angaben werden innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinde geprüft und qualitätsgesichert. Es sollte auf eine eindeutige Quellenangabe bei der Nutzung geachtet werden.

A.4.5 Thermische Kennwerte (Leitfähigkeit, Wärmekapazität, Ausdehnungskoeffizient)

Die thermischen Kennwerte, welche innerhalb des Inventarmodells für die Materialien bereitgestellt werden, umfassen vor Allem die thermische Leitfähigkeit, die Wärmekapazität und den thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Diese Kennwerte werden in standardisierten Verfahren in Laboren bestimmt. Angaben zur Ungewissheit jeder dieser Angaben werden von den Produzenten der Komponenten bereitgestellt.

Angaben zur Berücksichtigung der Ungewissheit innerhalb des Inventarmodells in den Angaben fanden sich in der Literatur keine. Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ A entspricht, da es sich um Messungen handelt. Zur Handhabung unterschiedlicher Hersteller eines Materials werden Gruppen / Klassen / Typen gebildet und über diese ein Referenzwert und eine Bandbreite bestimmt (z. B. durch die Nagra aus der ISRAM-Datenbank (Nagra, 2023)).

Als QA-/QC-Maßnahmen sind nur eigene Messungen und Konsistenzprüfungen zwischen unterschiedlichen Literaturangaben möglich.

A.4.6 Mechanische Kennwerte

Die mechanischen Kennwerte, welche innerhalb des Inventarmodells für die Materialien bereitgestellt werden, umfassen das Elastizitätsmodul, Schubmodul, die Streckgrenze, Dehngrenze, Zugfestigkeit, Druckfestigkeit, Schwingfestigkeit, Wärmefestigkeit, kritische Schubspannung, Fließspannung, Bruch- und Risszähigkeit sowie die Schallgeschwindigkeit für jedes Material. Diese Kennwerte werden in standardisierten Verfahren in Laboren bestimmt. Angaben zur Ungewissheit jeder dieser Angaben werden von den Produzenten bereitgestellt.

Angaben zur Berücksichtigung der Ungewissheit innerhalb des Inventarmodells fanden wir in der Literatur keine. Aufgrund der Natur der Daten gehen wir davon aus, dass die Ungewissheit des Parameters einem GUM Typ A entspricht, da es sich um Messungen handelt. Zur Handhabung unterschiedlicher Hersteller eines Materials werden Gruppen / Klassen / Typen gebildet und über diese ein Referenzwert und eine Bandbreite bestimmt (z. B. durch die Nagra in MIRAM auf der Basis der ISRAM-Datenbank (Nagra, 2023)).

Als QA-/QC-Maßnahmen sind nur eigene Messungen und Konsistenzprüfungen zwischen unterschiedlichen Literaturangaben möglich.

A.5 Radiologische Charakterisierung

A.5.1 (Komponentenspezifisches) Radionuklidinventar

Das Inventar der relevanten Radionuklide muss gemäß (AtEV, 2018) sowohl für bestrahlte BE als auch für die radioaktiven Abfälle aus der Wiederaufbereitung angegeben werden (Rauscher et al., 2023). Vier Gruppen werden dabei gemäß (AtEV, 2018) unterschieden:

- Aktivierungsprodukte (Co-60, Cl-36 etc.)
- flüchtige Radionuklide (H-3, Kr-85, C-14, J-129, Rn-222 (als Ra-226) etc.)
- Spaltprodukte (Cs-137, Sr-90 etc.)
- Actinoide (Np-237, Am-241, Cm-244, U- und Pu-Isotope etc.)

Bei den bestrahlten BE sollte das Radionuklidinventar komponentenspezifisch ausgewiesen werden, da sich die Auflösungs- und Korrosionsraten für die unterschiedlichen Komponenten voneinander unterscheiden.

In der öffentlich zugänglichen Literatur fanden sich Angaben aus Finnland (Posiva, 2021), Schweden (Håkansson et al., 2017), der Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2011, 2001) und Kanada (Gobien et al., 2016). In allen Ländern erfolgt die Bestimmung des (komponentenspezifischen) Radionuklidinventars durch die Anwendung spezieller Programme (Computercodes) auf das ursprüngliche Radionuklidinventar vor dem Abbrand der BE im Reaktor. Die benutzten Computercodes sind in internationalen Forschungsprogrammen (z. B. (INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2022)) und Doktorarbeiten (z. B. bezgl. spezifischen Anpassungen (Bykov, 2019)) dokumentiert.

Alle Länder benutzen den Code ORIGIN (Oak Ridge Isotope GENERation), teilweise mit spezifischen Anpassungen (z. B. ORIGIN-S als Teil des Programmpaketes SCALE (Standardised Computer Analyses for Licensing Evaluation)), zur Berechnung der thermischen Leistung, Neutronenquellstärke und Aktivität des Kernbrennstoffs Uraniumdioxid auf der Grundlage der Berechnung der Inventarentwicklung (Håkansson et al., 2017). In Schweden (Håkansson et al., 2017) wird zusätzlich CrudAct (Berechnung der Aktivität in der abgeschiedenen Oxidschicht (crud) auf der Außenseite) und IndAct (Berechnung der induzierten Aktivität der leichten Elemente) benutzt und die Aktivität aus den Ergebnissen von ORIGIN-S, IndAct und CrudAct zur Charakterisierung eines BE bzw. einer Tonne Uran jeder Brennstoffart und jedes Abbrandes zusammengefasst. In der Schweiz (Nagra, 2023) werden zur Simulation die Programmbibliotheken SCALE (Wieselquist and Lefebvre, 2024), MCNP (Kulesza et al., 2024) sowie MicroShield® ("MicroShield," 2011) pro Referenzgebinde benutzt (6 Referenzgebinde gruppiert auf der Basis der Atomkraftwerke und Brennstoffe aus gesamthaft 652 Abfallgebindetypen (395 reale und 257 modellhafte)). Ein besonderes Augenmerk ist auf die exakte Kenntnis des zeitlichen Verlaufs des Abbrands zu legen, welcher vom Betreiber in allen Ländern der Literaturstudie bereitgestellt wird.

Die Inventare an Aktivitätsprodukten, flüchtigen Radionukliden, Spaltprodukten und Actinoiden sind somit Ergebnisse der Simulationen der Vorgänge im Reaktor. Die Ungewissheiten dieser Werte sind damit verbunden. So wird z. B. von (SKB, 2010) festgehalten, dass die Neutronen-induzierte Aktivität in Strukturmaterialien und Brennstoffbrüchen, z. B. für Co-60, von Faktoren wie dem Co-Gehalt in den Materialien und der Zufuhr von Korrosionsprodukten in den Primärkreislauf beeinflusst wird. Die Ungewissheit in diesen Angaben ist dadurch wesentlich größer und wird auf einen Faktor 2 geschätzt. Das Inventar reiner Spaltprodukte, wie z. B. Cs-137, ist in erster Linie durch den Abbrand kontrolliert, wodurch die Ungewissheit in den Berechnungen typischerweise bei $\pm 5\%$ liegt, was als gering angesehen wird. Das Inventar der Actinoide, z. B. Cm-244, ist empfindlich gegenüber Parametern wie z. B. dem Reaktionsquerschnitt und dem Anreicherungsgrad. Dies führt zu einer Ungewissheit in den Berechnungen von ca. $\pm 20\%$. Co-60 ist das Schlüsselnuklid für Nuklide, die durch Aktivierung von Materialien entstehen (Nagra, 2023). Cs-137 wird als Schlüsselnuklid für Spaltprodukte und α -Strahler benutzt wird (Nagra, 2023). Genauere Angaben zu den Ungewissheiten wurden in der Literatur nicht gefunden.

Ungewissheiten entstehen aus den verwendeten Modellen und durch erforderliche Eingangsdaten für diese. So gibt es Angaben und Parameter, welche den Prozess beeinflussen und die in der Regel nicht von den Betreibern bereitgestellt werden (Posiva, 2021), z. B. der ursprüngliche Stickstoff- und Chlorgehalt in den Brennstoffpellets, welcher abgeschätzt werden muss. In Finnland (Posiva, 2021) erfolgt dies mittels Expertenschätzungen und / oder durch die Nutzung von Spezifikationen in den Normen der American Society for Testing and Materials (ASTM). Diese und andere Zusatzinformationen fließen in Sensitivitätsanalysen zur Abschätzung einerseits des Einflusses

dieser Eingangsparameter und der Bandbreiten / Ungewissheit der Ausgangsdaten ein (Posiva, 2021).

Im Allgemeinen werden die Ungewissheiten in den Eingangsdaten der Modelle innerhalb der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen durch die Verwendung konservativer Werte des Abbrands in den Analysen abgedeckt (Posiva, 2021; SKB, 2010), aus Datenbanken (z. B. ISRAM (Nagra, 2023)) mit Referenzwert und Bandbreite abgeleitet oder ausgeschlossen durch eine individuelle Spezifikation (Belgien). Bandbreiten für die Ausgangsdaten dieser Berechnungen, z. B. das (komponentenspezifische) Inventar (Aktivierungsprodukte, flüchtige Radionuklide, Spaltprodukte und Actinoide), werden somit durch Analysen der Sensitivität und Ungewissheit bestimmt (SKB, 2010) und als Verteilungsfunktion eine Normalverteilung mit Angabe der Standardabweichung oder eine Gleichverteilung mit Eckwerten von ± 5 Standardabweichungen angegeben (Gobien et al., 2016). Die Ungewissheit des (komponentenspezifischen) Radionuklidinventars als Eingangsparameter des Inventarmodells entspricht daher einem GUM Typ B.

Die QA-/QC-Maßnahmen umfassen Audits (Kingdom of Belgium, 2020), die Kontrolle einer nachvollziehbaren Dokumentation der Entwicklung der Parameterwerte, Konsistenzprüfung mit eigenen Berechnungen bzw. Werten aus der Literatur und ggf. Verifikation/Validierung der Anfangswerte der Simulationen (Posiva, 2021), da zum Zeitpunkt der Entnahme aus dem Reaktor (Entladung) die Möglichkeit einer Validierung durch Labormessungen von Bestrahlungsproben, zur radiologischen oder radiochemischen Analyse und zur Messung von Dosisleistungsprofilen besteht (Nagra, 2023). Die Kontrolle umfasst eine Dokumentation der Anfangs- und Randbedingungen der Simulationen, der verwendeten Programme (ENSI, 2010), Dokumentation der vollständigen Simulationskette (inkl. der verwendeten Programme), ggf. Dokumentation der Verifikation/Validierung der Ergebnisse der Simulationen (ENSI, 2017a, 2017b) und Dokumentation der Analysen (Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen), welche zur Bandbreite / ggf. Wahl der Verteilungsfunktion der Parameterwerte geführt haben (Gobien et al., 2016). Es ist dabei darauf zu achten, dass sowohl die Programme als auch die benutzten Datenbanken nachvollziehbar dokumentiert wurden.

A.5.2 Gesamtaktivität

Die abdeckende Gesamt- α -Aktivität und die Gesamt- β -/ γ -Aktivität (inkl. Referenzdatum) müssen gemäß (AtEV, 2018) sowohl für bestrahlte BE und Brennelementkannen als auch für die radioaktiven Abfälle aus der Wiederaufbereitung angegeben werden (Rauscher et al., 2023). In der öffentlich zugänglichen Literatur fanden wir Angaben aus Schweden (Håkansson et al., 2017), der Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Kingdom of Belgium, 2021, 2020) und Großbritannien (Jacobs UK Ltd and AFRY Solutions UK Ltd., 2022). Sofern Angaben gemacht wurden, so basieren diese auf Daten der Betreiber und Modellrechnungen. In der Mehrzahl der Literaturquellen erfolgte eine Angabe der Gesamtaktivität und keine Unterteilung in α -Aktivität und β -/ γ -Aktivität, z. B. (Jacobs UK Ltd and AFRY Solutions UK Ltd., 2022). Alle Länder benutzen den Code ORIGEN, bzw. ORIGEN-S als Teil des Programmpakets SCALE, zur Berechnung der thermischen Leistung, Neutronenquellstärke und letztlich der Aktivität der Kernbrennstoffe (z. B. Inventarentwicklung des Uraniumdioxids (Håkansson et al., 2017)). In Bezug auf die Modelle und deren Eingangsparameter verweisen wir auf Abschnitt A.5.1.

Ungewissheiten in den Angaben werden im Allgemeinen durch die Verwendung konservativer Werte des Abbrands in den Analysen abgedeckt (SKB, 2010), aus Datenbanken (z. B. ISRAM (Nagra, 2023)) mit Referenzwert und Bandbreite abgeleitet oder ausgeschlossen durch eine individuelle Spezifikation (Belgien). Ein weiterer Teil der Ungewissheiten besteht aufgrund der Tatsache, dass die tatsächliche Gesamtmasse der Abfälle noch ungewiss ist, d. h. aus staatlichen

Planungen / Vorgaben / Annahmen zur zukünftigen nuklearen Energieproduktion abgeleitet wird. Teilweise besteht jedoch auch noch eine Ungewissheit im direkten operativen Vorgehen, welches als Quelle der Ungewissheit in Großbritannien diskutiert wird (Jacobs UK Ltd and AFRY Solutions UK Ltd., 2022).

α -Aktivität

Spezifische Angaben zur Gesamt- α -Aktivität sind in der Literatur selten zu finden. In Schweden (Håkansson et al., 2017) erfolgt eine Unterteilung der Aktivität in die Aktivität der Aktivierungsprodukte, Actinoide und Spaltprodukte mittels der Berechnungen von ORIGEN-S. In der Schweiz (Nagra, 2023) erfolgt eine beispielhafte Darstellung der Gesamt- α -Aktivität über den Betrachtungszeitraum der Endlagerung (3 – 1'000'000 Jahre). In Belgien (Kingdom of Belgium, 2021; ONDRAF/NIRAS, 2001) wird die Gesamt- α -Aktivität ebenfalls angegeben, unterteilt nach den Quellen der Brennstoffe bzw. deren Klassifizierung.

β/γ -Aktivität

Spezifische Angaben zur Gesamt- β/γ -Aktivität sind in der Literatur selten zu finden. In der Schweiz (Nagra, 2023) erfolgt eine beispielhafte Darstellung der Gesamt- β -Aktivität über den Betrachtungszeitraum der Endlagerung (3 – 1'000'000 Jahre). In Belgien (Kingdom of Belgium, 2021; ONDRAF/NIRAS, 2001) wird die Gesamt- β/γ -Aktivität ebenfalls angegeben, unterteilt nach den Quellen der Brennstoffe bzw. deren Klassifizierung.

Neutronenquellstärke

Spezifische Angaben zur Neutronenquellstärke sind in der Literatur selten zu finden. In Schweden (Håkansson et al., 2017) erfolgt die Berechnung der Neutronenquellstärke mittels ORIGEN-S einerseits nuklidspezifisch und andererseits bezogen auf die Spaltenergie. Ausgewiesen werden die Neutronenquellstärke der Schlüsselnuklide Am-241 (Actinoide) und Cm-244 (Spontanspaltung) für Siedewasser- und Druckwasserreaktoren. Die nichtlineare Auswirkung des Abbrandes auf die Neutronenquellstärke wird für Zerfallszeiten im Bereich von 0 – 50 Jahre aufgezeigt. Ebenso werden durch Sensitivitätsanalysen die Auswirkung des Abbrandes auf die Neutronenquellstärke für die Spontanspaltung sowie die Auswirkung der Benutzung unterschiedlicher Bibliotheken innerhalb von ORIGEN-S auf das Ergebnis gezeigt.

γ -Quellstärke

Spezifische Angaben zur γ -Quellstärke sind in der Literatur selten zu finden. In Schweden (Håkansson et al., 2017) erfolgt die Berechnung der γ -Quellstärke mittels ORIGEN-S einerseits nuklidspezifisch und andererseits bezogen auf die Spaltenergie.

Da in allen Ländern die Angaben auf numerischen Berechnungen basieren, werden zur Abschätzung der Bandbreiten / Ungewissheiten die Hilfsmittel der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse verwendet. Veröffentlichungen zu den anwendbaren Methoden und dem Vorgehen umfassen einerseits die Simulation des Brennstoffzyklus (z. B. (Thiollière et al., 2018)) und reichen andererseits bis zu Bewertungen des Sicherheitsnachweises (z. B. (Capouet et al., 2009; Crawford and Galson, 2009)). Die Ungewissheit aller Aktivitäten entspricht daher einem GUM Typ B.

Die QA-/QC-Maßnahmen umfassen Audits (Kingdom of Belgium, 2020), die Kontrolle einer nachvollziehbaren Dokumentation der Entwicklung der Parameter, Konsistenzprüfung mit eigenen Berechnungen und ggf. Verifikation / Validierung der Anfangswerte der Simulationen, da zum Zeitpunkt der Entnahme aus dem Reaktor (Entladung) die Möglichkeit einer Validierung durch

Labormessungen von Bestrahlungsproben, zur radiologischen oder radiochemischen Analyse und zur Messung von Dosisleistungsprofilen besteht (Nagra, 2023). Die Kontrolle umfasst eine Dokumentation der Anfangs- und Randbedingungen der Simulationen, der verwendeten Programme, Dokumentation der kompletten Simulationskette (inkl. der verwendeten Programme), ggf. Dokumentation der Verifikation / Validierung der Ergebnisse der Simulationen und Dokumentation der Analysen (Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen), welche zur Bandbreite und ggf. Wahl der Verteilungsfunktion der Parameterwerte geführt haben. Es ist dabei darauf zu achten, dass sowohl die Programme als auch die benutzten Datenbanken nachvollziehbar dokumentiert wurden.

A.5.3 Gasförmige (und flüchtige) Radionuklide

Gemäß (Rauscher et al., 2023) wird das Radionuklidinventar der hochradioaktiven Abfälle im Wesentlichen während der Bestrahlung von BE in Kernreaktoren gebildet. Die durch Neutroneneinfang gebildeten Actinoide gehen üblicherweise feste Verbindungen mit der UO_2 -Matrix ein, indem sie Uranatome im Kristallgitter substituieren. Sie zählen daher nicht zu den gasförmigen (und flüchtigen) Verbindungen / Nukliden. Spalt- und Aktivierungsprodukte können hingegen in vielen verschiedenen Formen (z. B. Gasbläschen, Metallausscheidungen, Oxidausscheidungen (auch Grauphase genannt) oder in die UO_2 -Matrix eingebunden) in der UO_2 -Matrix vorliegen. Die gasförmigen Spaltprodukte (Spaltgase z. B. Xe und Kr) haben eine sehr geringe Löslichkeit in UO_2 und können durch die Porenstruktur und Risse des Brennstoffpellets in das Brennstabplenum diffundieren (Rauscher et al., 2023). Flüchtige Radionuklide, wie z.B. C-14, H-3 oder Rn-222, können sich ebenfalls im Brennstabplenum aufkonzentrieren. Es gilt dabei aber zu beachten, dass diese RN je nach Verbindung nicht notwendigerweise gasförmig oder flüchtig vorliegen. Beispielsweise ist in Methan gebundenes C-14 flüchtig bzw. gasförmig, jedoch nicht in anderen organischen Verbindungen. Diese RN werden daher im übertragenen Sinne als flüchtig / gasförmig betrachtet, da sie je nach Bindung flüchtig bzw. gasförmig auftreten können.

In der öffentlich zugänglichen Literatur wurden keine Angaben zu flüchtigen Radionukliden (H-3, Kr-85, C-14, J-129, Rn-222 (als Ra-226) etc.) gefunden. Aufgrund der Tatsache, dass die gesamte komponentenspezifische Charakterisierung des Radionuklidinventars auf numerischen Modellen basiert, ist davon auszugehen, dass die Werte und Bandbreiten / Ungewissheit des Inventars an gasförmigen (und flüchtigen) Radionukliden ebenso mittels numerischer Simulationen bzw. Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen charakterisiert werden. Es wird daher auf Abschnitt A.5.1 verwiesen. Die Ungewissheit im Inventar gasförmiger (und flüchtiger) Radionuklide entspricht daher einem GUM Typ B.

A.5.4 (Ursprünglicher) Anreicherungsgrad bzw. Anreicherung

Gemäß (AtEV, 2018) ist für jedes bestrahlte BE der maximale U-235-Anreicherungsgrad anzugeben. Außerdem muss für jeden BS eines BE die Anreicherung angegeben werden (Rauscher et al., 2023). Die Angaben werden vom Betreiber bzw. Produzenten bereitgestellt. Spezifische Angaben konnten wir in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Pirrot et al., 2013), Schweden (Håkansson et al., 2017), Finnland (Posiva, 2021) und Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021) finden. Angaben zur Ungewissheit in diesen Angaben fanden wir in der Literatur der Schweiz (Nagra, 2023) und Finnland (Posiva, 2021). Die Handhabung der Ungewissheiten wurde in der Literatur fast aller Länder erläutert (Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Pirrot et al., 2013), Schweden (Håkansson et al., 2017) und Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021)). Hingegen fanden sich nur in der Literatur von Finnland (Posiva, 2021) Hinweise auf QA-/QC-Maßnahmen.

Die Ungewissheiten werden durch die Definition von Gruppen / Untergruppen in Belgien (6 Gruppen / 60 Untergruppen) bzw. Abfallgebindetypen in Großbritannien und der Schweiz (12 Typen in Großbritannien, 6 Referenzgebinde in der Schweiz) oder durch Ausschluss der Ungewissheiten durch die Nutzung einer max. Anreicherungsgrenze von 5% in Schweden gehandhabt. Gruppen bzw. Typen werden dabei jeweils durch Referenzwerte und eine zugehörige Bandbreite beschrieben (unter der Nutzung einer Normalverteilungsfunktion). Die ursprüngliche Anreicherung ist aufgrund der Natur der Daten als ein Parameter mit einer Ungewissheit des GUM Typ A zu klassifizieren.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind nur eigene Messungen, Prüfungen und Audits (Finnland) bekannt.

A.5.5 Abbrand des Kernbrennstoffs

Gemäß (AtEV, 2018) ist für jedes bestrahlte BE der mittlere Entladeabbrand und für jeden BS in einem Köcher der mittlere Abbrand anzugeben. Außerdem ist für Kugelbrennelemente

- der mittlere Abbrand der Kugelbrennelemente in einer Brennelementkanne,
- der höchste Abbrand einer Brennelementkugel in einer Kanne und
- die Abbrand-Verteilung der Kugeln in einer Brennelementkanne

anzugeben (Rauscher et al., 2023).

Angaben zum Abbrand sind in der Literatur diverser Länder zu finden. In Finnland (Posiva, 2021) wird diese Information von den Atomkraftwerksbetreibern geliefert und qualitätsgesichert. Der Abbrand zum Zeitpunkt der Entladung aus den Reaktoren wird dabei anhand von Berechnungen und Informationen über die Bestrahlungsgeschichte ermittelt. In Schweden (SKB, 2010) wurde der durchschnittliche Abbrand auf 60 MWd/kg U für den Uranoxidbrennstoff und 50 MWd/kg SM für den Mischoxidbrennstoff begrenzt. In der Schweiz (Nagra, 2023) erfolgt die Definition von Referenzgebinden einerseits auf Basis der Information zu den angefallenen Einzelgebinden aus der ISRAM-Datenbank und andererseits aus Produktionsprognosen auf der Grundlage der Produktionsstatistik eines jeden Kraftwerks. In Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2018) wird durch eine individuelle Spezifikation der Gebinde der Abbrand jedes einzelnen Gebindes bestimmt. In Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021) liegen die Werte in Abhängigkeit vom Brennstofftyp bei 50 – 65 MWd/kg U bzw. 4 – 189 MWd/kg SM. In Kanada (Gobien et al., 2016) beschränkt sich die Angabe auf einen Bereich von 9 – 12 MWd/kg U abhängig vom jeweiligen Szenario (Normalfall 280 MWh/kg U).

Die Genauigkeit des berechneten Abbrandes hängt von den verfügbaren Daten zur Bestrahlungsgeschichte und dem verwendeten Computercode zusammen mit den verwendeten nuklearen Datenbibliotheken ab (Posiva, 2021). Aussagen zur Handhabung der Ungewissheit in den Daten sind in der Literatur der Schweiz, Kanada und in gewisser Weise für Belgien zu finden. Ungewissheiten werden durch Bandbreiten der Referenzgebinde abgebildet (Nagra, 2023) bzw. durch die Individualisierung ausgeschlossen (ONDRAF/NIRAS, 2018) oder durch konservative Annahmen (Gobien et al., 2016) abgedeckt. Aufgrund der Tatsache, dass in allen Ländern numerische Simulationen zur Charakterisierung des Abbrandes erfolgen, ist davon auszugehen, dass deren Ungewissheiten durch Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen bestimmt werden. Der Parameter kann mit einer Ungewissheit des GUM Typ B klassifiziert werden.

QA-/QC-Maßnahmen sind die Kontrolle einer nachvollziehbaren Dokumentation der Entwicklung der Parameter, Konsistenzprüfung mit eigenen Berechnungen und ggf. Verifikation / Validierung der Entladung, da zum Zeitpunkt der Entnahme aus dem Reaktor (Entladung) die Möglichkeit einer

Validierung durch Labormessungen von Bestrahlungsproben, zur radiologischen oder radiochemischen Analyse und zur Messung von Dosisleistungsprofilen besteht (Nagra, 2023). Die Kontrolle sollte sich erstrecken über die Dokumentation der Anfangs- und Randbedingungen der Simulationen, der verwendeten Programme, Dokumentation der kompletten Simulationskette (inkl. der verwendeten Programme), ggf. Dokumentation der Verifikation / Validierung der Ergebnisse der Simulationen und Dokumentation der Analysen (Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen), welche zur Bandbreite und ggf. Wahl der Verteilungsfunktion der Parameterwerte geführt haben. Es ist dabei darauf zu achten, dass sowohl die Programme als auch die benutzten Datenbanken nachvollziehbar dokumentiert wurden.

A.5.6 Strahlungsdosisleistung

Die Mittelwerte der gemessenen Oberflächendosisleistung (γ -Strahler und Neutronen) an der Behältermantelfläche (inkl. Messdatum) muss gemäß (AtEV, 2018) sowohl für bestrahlte BE als auch für die radioaktiven Abfälle aus der Wiederaufbereitung angegeben werden. Des Weiteren sind für bestrahlte BE und Brennelementkannen die abdeckenden Neutronen- und Gammaquellstärken anzugeben (Rauscher et al., 2023).

Direkte Angaben zur Strahlendosisleistung konnten in der öffentlich zugänglichen Literatur nicht gefunden werden. In der Literatur zu Belgien (Pirrot et al., 2013) wird darauf verwiesen, dass durch Individualisierung der Gebinde Grenzwerte eingehalten werden. Grenzwerte werden in der Schweiz (Nagra, 2023) für die Dosisleistung an der Gebindeoberfläche durch γ -Strahlung und Neutronenstrahlung und in Schweden (SKB, 2010) für die Strahlungsdosisleistung an der Kanisteroberfläche benannt. Da sich die Strahlendosisleistung aus der Gesamtaktivität errechnet, handelt es sich um Angaben auf der Basis von Simulationen, welche zu einzelnen Zeitpunkten mit Messungen an der Behälteroberfläche validiert werden können, gemäß (AtEV, 2018). Die zeitliche Entwicklung (Prognose) der zukünftigen Strahlungsdosisleistung, welche ein Ausgangsparameter des Inventarmodells ist, wird ein Simulationsergebnis sein. Wir verweisen daher auf den Abschnitt A.5.2. Der Parameter kann mit einer Ungewissheit des GUM Typ B klassifiziert werden.

A.6 Stoffliche Charakterisierung

A.6.1 Komponentenspezifische Zusammensetzung

Gemäß (AtEV, 2018) muss für bestrahlte BE der Werkstoff des Hüllrohrmaterials und für Brennelementkannen (mit Kugelbrennelementen) das Material der Brennelementkanne erfasst werden (Rauscher et al., 2023). Da z. B. Korrosions- und Gasbildungsprozesse von den Materialeigenschaften der Komponenten abhängen, sollten diese Angaben so ergänzt werden, dass der (Werk-)Stoff jeder Komponente (z. B. Brennstoffmatrix, andere Strukturteile wie Kopf- und Fußstücke) aufgeführt wird (Rauscher et al., 2023). Ähnliches gilt für verglaste Abfälle, für welche gemäß (AtEV, 2018) das Kokillenmaterial, die Zusammensetzung der Glasmatrix und das Mengenverhältnis Abfall zu Fritte zu Zuschlagsstoffe angegeben werden muss, bzw. sonstige radioaktive Abfälle aus der Wiederaufbereitung, für welche das Kokillenmaterial und Kartuschenmaterial angegeben werden muss (Rauscher et al., 2023). Spezifische und allgemeine Angaben konnten wir in der Literatur für die Schweiz (Nagra, 2023), Belgien (Kingdom of Belgium, 2020), Finnland (Posiva, 2021) und Kanada (Gobien et al., 2016) finden. Die Angaben werden in der Schweiz vom Betreiber der Kraftwerke, in Finnland vom Hersteller bzw. in Belgien und Kanada vom Endlagerbetreiber bereitgestellt.

Angaben zur Ungewissheit in der komponentenspezifischen Zusammensetzung fanden sich in der Literatur von Finnland (Posiva, 2021), Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2016),

Kanada (Gobien et al., 2016) und der Schweiz (Nagra, 2023). Dabei wurden keine Werte angegeben. Es wurde jedoch der Umgang mit Ungewissheiten beschrieben. In Belgien (Piro et al., 2013) erfolgt die Definition von 6 Gruppen und 60 Untergruppen, in der Schweiz (Nagra, 2023) die Spezifikation von 652 Abfallgebindetypen, welche in 6 Referenzgebinden vereint werden. Finnland (Posiva, 2021) verweist auf die Nutzung konservativer Werte und Kanada (Gobien et al., 2016) auf die Nutzung von Referenzgebinden. In Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2016) werden die Ungewissheiten in Szenarien, basierend auf einer Analyse der Szenarien der anfallenden Abfälle, behandelt. Das Herangehen entspricht daher zum Teil einer Behandlung der Ungewissheiten einer Messung (GUM Typ A) und zum Großteil statistisch begründeten Werten aus vorhergehenden Annahmen und Modellen (GUM Typ B). Im Allgemeinen erfolgt eine Harmonisierung in Standardmaterialien mit einer Bandbreite.

Als QA-/QC-Maßnahmen sind nur Prüfungen und Audits möglich, welche jedoch in der Literatur nicht genannt werden.

Spezifische Angaben wurden für die folgenden Inventare gemacht.

Metalle (ohne Schwermetalle)

Kanada (Gobien et al., 2016) gibt die Masse an Zirkalloy an. Zirkalloy besteht jedoch zu 90% aus Zirkonium mit einer hohen Korrosionsbeständigkeit. Andere Angaben erfolgen nicht. Für Finnland und Belgien waren keine Angaben zugänglich. In Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021) wird angenommen, dass 19% der Gesamtmasse an Abfällen Metalle sind. In der Schweiz (Nagra, 2023) wird der Wert pro Abfallgebindetyp aus dem mittleren Materialinventar mit der zugehörigen Bandbreite aus der IRSAM-Datenbank abgeleitet. Der Umgang mit der Ungewissheit in diesen Angaben wird nur für die Schweiz (Nagra, 2023) (Harmonisierung in Standardmaterialien (Typen): 395 reale und 257 modellhafte Standardmaterialien) und für Kanada (Nutzung von Referenzgebinden) in der Literatur dargelegt.

Organika

Keines der Länder stellt direkte Werte des Inventars an Organika bereit. In Großbritannien (Radioactive Waste Management, 2021) wird angenommen, dass 2% der Gesamtmasse an Abfällen Organika sind. In der Schweiz (Nagra, 2023) wird darauf verwiesen, dass diese Werte pro Abfallgebindetyp aus dem mittleren Materialinventar mit der zugehörigen Bandbreite aus der IRSAM-Datenbank abgeleitet werden. Die Grundlage bilden dabei 395 reale und 257 modellhafte Standardmaterialien (Typen).

Wasserinventar

Das Inventar an Wasser im Endlagergebinde wird in Finnland (Posiva, 2021) und Schweden (SKB, 2010) als oberer Grenzwert von 600 g pro Abfallgebinde angegeben. In der Schweiz (Nagra, 2023) wird der Wert pro Abfallgebindetyp aus dem mittleren Inventar mit der zugehörigen Bandbreite aus der IRSAM-Datenbank abgeleitet. Die Grundlage bilden dabei 395 reale und 257 modellhafte Standardmaterialien (Typen). Zur Einhaltung des Parameterwertes bei angenommenen Ungewissheiten ist in Finnland (Posiva, 2021) eine spezielle Behandlung vorgesehen.

A.6.2 Inertes Füllgas (Brennstab)

Gemäß (AtEV, 2018) muss für bestrahlte BE der Innendruck des inerten Füllgases (He) angegeben werden. Aus der Angabe des Druckes lässt sich die Menge des Gases berechnen. In der Literatur fanden sich nur Angaben zum inerten Füllgas in der Schweiz (Nagra, 2023). Die Angaben erfolgen vom Anlagenbetreiber.

Angaben zu Ungewissheiten oder zur Handhabung dieser fanden sich nicht in der Literatur. Da sich die Massen aus Druckangaben in einem definierten Volumen ergeben, lässt sich die Ungewissheit des Parameters aus der Ungewissheit der Druckmessungen (GUM Typ A) und der Ungewissheit der Volumina (GUM Typ A) ableiten. Die Ungewissheit des Parameterwertes kann damit als GUM Typ A klassifiziert werden.

Informationen zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in der Literatur nicht gefunden.

A.6.3 Spaltstoffe und ihre isotonenweise Zusammensetzung

Gemäß (*AtEV*, 2018) müssen die Massen der Uranisotope U-233 und U-235 sowie der Plutoniumisotope Pu-239 und Pu-241 sowohl für bestrahlte BE als auch für die radioaktiven Abfälle aus der Wiederaufbereitung angegeben werden. Für bestrahlte BE ist gemäß (Rauscher et al., 2023) außerdem die Masse des Thorium-isotops Th-232 zu erfassen.

Spezifische Angaben zu Spaltstoffen konnten in der Literatur nicht gefunden werden. Sofern existent wurden Angaben zum (komponentenspezifischen) Radionuklidinventar gefunden. Wir verweisen daher auf Abschnitt A.5.1.

A.6.4 Masse Schwermetall

Gemäß (*AtEV*, 2018) muss für bestrahlte BE und Brennelementkannen sowie für jeden BS in einem Köcher die nominale Schwermetallmasse (U, Pu und Th) bzw. die abdeckende Schwermetallmasse (U und Pu) angegeben werden. Auch für die Köcher ist gemäß (Rauscher et al., 2023) die Schwermetallmasse (U und Pu) vor der Bestrahlung anzugeben.

Angaben zu den Schwermetallen erfolgen in der Literatur im Zusammenhang mit der Angabe des komponentenspezifischen Radionuklidinventars. In der Schweiz werden die Massen der Schwermetalle aus den jährlichen Statistiken der angefallenen Einzelgebände mit einem Endlagerfähigkeitsnachweis (Datenquelle ISRAM-Datenbank) und einer Produktionsprognose auf der Grundlage der Produktionsstatistik eines jeden Kraftwerks (Nagra, 2023) abgeleitet. In Belgien (ONDRAF/NIRAS, 2018) wird durch eine individuelle Spezifikation der Gebände die Masse an Schwermetallen bestimmt.

Ungewissheiten in den Angaben werden durch eine möglichst individuelle Spezifikation in Belgien vermieden und in der Schweiz (Nagra, 2023) aus den Leistungsprognosen der Kraftwerke abgeschätzt. Für die weitere Handhabung der Ungewissheiten als auch mögliche QA-/QC-Maßnahmen verweisen wir auf Abschnitt A.5.1.

A.7 Thermische Charakterisierung

A.7.1 Nachzerfallsleistung

Gemäß (*AtEV*, 2018) muss die Nachzerfallsleistung (inkl. Bezugsdatum) sowohl für bestrahlte BE als auch für verglaste radioaktive Abfälle aus der Wiederaufbereitung erfasst werden (Rauscher et al., 2023).

In der Literatur wird die Nachzerfallsleistung als Grenzwert innerhalb der Zuordnung von BE zu Endlagergebänden herangezogen. Die Nachzerfallsleistung in jedem Behälter kann anhand der gesamten Nachzerfallsleistung aller BE bestimmt werden. Für die Kriterien der Brennstoffauswahl bedeutet dies, dass die gesamte Nachzerfallsleistung der in einen Endlagerbehälter geladenen BE den für diesen Behältertyp spezifischen Grenzwert der Wärmeleistung nicht überschreiten darf. Als

Grenzwert wurde die gesamte Nachzerfallsleistung in jedem Kanister auf 1 700 W begrenzt (SKB, 2010). Der Grenzwert der Nachzerfallsleistung wurde in Schweden dafür auf 1 650 W festgelegt, um Abweichungen zwischen der berechneten und der tatsächlichen Nachzerfallsleistung auszugleichen, so dass die tatsächliche Nachzerfallsleistung immer unter 1 700 W liegt (SKB, 2010). In Kanada wurde der Grenzwert pro Gebinde bei 455 kW festgelegt (Gobien et al., 2016). In der Schweiz erfolgt ebenfalls eine Definition der maximalen Nachzerfallsleistung pro Abfallbehälter (Nagra, 2023). Finnland (Posiva, 2021) spezifiziert Grenzwerte für die Kanistertypen und Belgien verweist auf eine Einhaltung der Grenzwerte durch Individualisierung der Gebinde (Pirrot et al., 2013). Die Grenzwerte sind jedoch stark abhängig vom Endlagerkonzept (Architektur und Wirtsgestein).

Die Nachzerfallsleistung ergibt sich aus der freigesetzten Energie jedes einzelnen Zerfalls. Der Energiebetrag, welcher bei einem einzelnen Zerfall freigesetzt wird, ist ableitbar aus internationalen Datenbanken. Die am weitesten verbreiteten Datenbanken sind ENDF/B-VIII.0 (Brown et al., 2018), ENDF/B-VII.1 (Chadwick et al., 2011), JEFF-3.3 (Plompen et al., 2020), JENDL-5 (Iwamoto et al., 2023), CENDL-3.2 (Ge et al., 2020) und ROSFOND (Zabrodsкая et al., 2007). Sie können in einem einheitlichen Format (ENDF - Evaluated Nuclear Data File (Brown, 2023)) bezogen werden. Jede dieser Quellen beinhaltet sowohl Angaben zu den Werten als auch zu den Ungewissheiten der Werte. Als numerischer Computercode wird in vielen Ländern ORIGEN (Oak Ridge Isotope GENERation), teilweise mit spezifischen Anpassungen (z. B. ORIGEN-S als Teil des Programmpakets SCALE (Standardised Computer Analyses for Licensing Evaluation)), zur Berechnung der thermischen Leistung, Neutronenquellstärke und Aktivitäten auf Grundlage der Berechnung der Inventarentwicklung eingesetzt (Håkansson et al., 2017).

Angaben über die Behandlung der Ungewissheiten speziell zur Nachzerfallsleistung wurden in der Literatur nicht gefunden. Da diese aber maßgeblich auf die Ungewissheiten in der (komponentenspezifischen) Charakterisierung des Radionuklidinventars zurückgehen, verweisen wir auf den Abschnitt A.5.1 in Bezug auf die Handhabung der Ungewissheiten, die verwendeten Modellansätze und die QA-/QC-Maßnahmen.

A.7.2 Abklingzeit / Zwischenlagerungszeitraum

Einen entscheidenden Einfluss auf die zu erwartenden Temperaturen im Endlager hat nicht nur die Nachzerfallsleistung, sondern auch der Zeitraum, der zwischen der Entnahme aus dem Reaktor und der Einlagerung ins Endlager liegt. Aus diesem Grund werden in der Literatur Angaben zur Dauer dieses Zeitraums gefunden. Für Großbritannien beträgt dieser Zeitraum 1 bis 42 Jahre in Abhängigkeit vom Brennstofftyp (Radioactive Waste Management, 2021). Für Finnland beträgt der minimale Zeitraum 20 Jahre (Posiva, 2021).

Es erfolgt eine Berücksichtigung in dem Sinne, dass die Abklingzeit der BE zum Zeitpunkt des Einschlusses im Endlager auf Übereinstimmung mit dem für die Dimensionierung verwendeten Wert überprüft wird (Posiva, 2021). Ein analoges Vorgehen ist an anderen Literaturstellen zu finden, da die Nachzerfallsleistung während des Zeitraums der Lagerung mit hoher Genauigkeit durch Messungen am Gebinde bestimmt werden kann, wodurch ein geringes Maß an Ungewissheit besteht.

Informationen zu QA-/QC-Maßnahmen wurden in der Literatur nicht gefunden. Sie werden sich jedoch auf direkte Kontrollmessungen beschränken.

Anhang B Historie der Entwicklung von Methoden und Modellansätzen

Tabelle 17 fasst die verschiedenen Möglichkeiten der Kombination von in Computercodes implementierten Modellansätzen und Eingangsdaten für eine Sicherheitsanalyse zusammen. Ein vollständig konservativer Ansatz (Möglichkeit 1) wurde eingeführt, um die Behandlung der Ungewissheiten abzudecken, welche aufgrund der begrenzten Fähigkeit zur Modellierung physikalischer Phänomene in den 1970er Jahren entstanden. Es ist jedoch anzumerken, dass die mit diesem Ansatz erzielten Ergebnisse irreführend sein können und der Grad der Konservativität unbekannt ist (IAEA, 2008). Die Möglichkeiten 2 und 3 gelten als akzeptabel und werden in den IAEA-Sicherheitsnormen vorgeschlagen (IAEA, 2008). Gemäß der IAEA wurde 2008 in vielen Ländern für die Sicherheitsanalyse noch überwiegend die Möglichkeit 2 verwendet, d. h. eine möglichst genaue Modellierung der physikalischen Prozesse mit konservativen Annahmen für die Systembeschreibung und die Parameter der Anfangs- und Randbedingungen.

Tabelle 17 Möglichkeiten der Kombination von Computercodes, Systembeschreibung und deren Anfangs- und Randbedingungen in der Sicherheitsanalyse (IAEA, 2008)

¹⁾ Computerprogramm zur (konservativen oder bestmöglichen) Modellierung der physikalischen Prozesse

Möglichkeit	Code ¹⁾	Systembeschreibung	Anfangs- und Randbedingungen
1	Konservativ	Konservative Annahmen	Konservative Eingangsdaten
2	Bestmöglich	Konservative Annahmen	Konservative Eingangsdaten
3	Bestmöglich	Konservative Annahmen	Realistische Eingangsdaten mit Ungewissheiten
4	Bestmöglich	Probabilistische Analysen auf Grundlage von Annahmen	Realistische Eingangsdaten mit Ungewissheiten

Etwa 2010 erfolgte der Übergang zu realistischen Eingangsdaten und im Zuge der wachsenden Möglichkeiten der numerischen Simulation / Modellierung physikalischer Prozesse durch die Steigerung der Rechengeschwindigkeiten wurde zunehmend Möglichkeit 4, die probabilistische Analyse, angewendet.

In der probabilistischen Analyse werden die Methoden der Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse eingesetzt, deren Möglichkeiten mit steigenden Rechengeschwindigkeiten und der fortschreitenden Nutzung numerischer Simulation in den angewandten Wissenschaften wachsen. Tabelle 18 gibt einen Überblick über den Einsatzbereich der Methoden (Stand 2021) und die Anzahl der benötigten Modellberechnungen (Swiler et al., 2021). Kapitel 4 und 5 werden die Methoden aufzeigen und diskutieren.

Tabelle 18 Einsatz der Methoden zur Sensitivitätsanalyse in der Sicherheitsanalyse (Swiler et al., 2021)

¹⁾ FP: Factor prioritization, FF: Factor fixing, TI: Trend identification, SD: Structural discovery, RI: Regionalized information

²⁾ M ist die Anzahl der Eingangsparameter

Sensitivitätsanalysemethoden		Anwendungsbereich ¹⁾					Anzahl an Berechnungen ²⁾
		FP	FF	TI	SD	RI	
Graphical	Streudiagramme (Scatter-Plot)	x		x		x	> 100
	Cumulative Sums of Normalized Reordered Output (CUSUNORO)	x		x	x	x	> 100
Correlation & regression analysis	Pearson correlation & partial correlation Spearman rank correlation & partial rank correlation	x		x			> 100
	Regression coefficients (linear, rank, stepwise)	x		x			> 100
Variance based	Sobol' indices	x	x		x		> 500·M
	Fourier Amplitude Sensitivity Test (FAST), extended FAST (eFAST)	x	x		x		> 500·M
	Effective Algorithm for Sensitivity Indices (EASI), Cosine Sensitivity (COSI)	x			x		> 500
	Random balance designs	x			x		> 500
Moment independent	Borgonovo's δ	x	x		x	x	> 1 000
	Pianosi and Wagener (PAWN)	x	x		x	x	> 500·M

Anhang C Codes und Beispiele

C.1 Codes

Alle in diesem Bericht gezeigten Anwendungsbeispiele der Methoden zur Analyse der Sensitivität und der Ungewissheit wurden in Python implementiert und basieren auf der Nutzung der folgenden Python-Pakete.

C.1.1 OpenTURNS

OpenTURNS (Open source initiative for the Treatment of Uncertainties, Risks'N Statistics) wird von einem Kernteam und einer Benutzergemeinschaft getragen (Baudin et al., 2016). Das OpenTURNS-Python-Paket ist in der Praxis die meistgenutzte Schnittstelle der gleichnamigen, zugrundeliegenden C++-Bibliothek. Durch die Verknüpfung mit Matplotlib ("Matplotlib," 2012) sind zahlreiche grafische Darstellungen möglich.

Das Paket bietet die Möglichkeit zur multivariaten probabilistischen Modellierung einschließlich der Berücksichtigung von Abhängigkeit unter den Eingangsparametern. Es ist ein numerisches Werkzeug zur Behandlung von Ungewissheiten und ermöglicht eine generische Kopplung an jede Art von physikalischem Modell.

Die Arbeiten an OpenTURNS werden seit Beginn durch die Airbus Group, die Abteilung für Forschung und Entwicklung von EDF (Électricité de France), Phimeca Engineering, ONERA (Office national d'études et de recherches aérospatiales) seit 2019 und IMACS, seit 2014, finanziert.

C.1.2 Radioactivedecay

Radioactivedecay ist ein Python-Paket für die Berechnung des radioaktiven Zerfalls (Malins and Lemoine, 2022). Das Paket unterstützt die Berechnung von (verzweigten) Zerfallsketten von Radionukliden und metastabilen Zuständen. Standardmäßig verwendet das Paket die Zerfallsdaten aus der ICRP Publication 107 (Eckerman and Endo, 2008), die 1 252 Radionuklide von 97 Elementen enthält, und Atommassendaten aus dem Atomic Mass Data Center der IAEA (Huang et al., 2021; Kondev et al., 2021; Wang et al., 2021).

Der Code löst die Differentialgleichungen für den radioaktiven Zerfall analytisch unter Verwendung grundlegender Operationen der linearen Algebra (Amaku et al., 2010) mit Hilfe des NumPy-Pakets ("NumPY," 2008) und des SciPy-Pakets ("SciPy," 2024). Es gibt auch einen Berechnungsmodus mit hoher numerischer Präzision, der das SymPy-Paket ("SymPy," 2024) verwendet. Dieser liefert genauere Ergebnisse für die Berechnung der Zerfallsketten von Radionukliden, deren Halbwertszeiten um Größenordnungen voneinander abweichen.

Es handelt sich bei Radioactivedecay um eine frei verwendbare Open Source Software (MIT Lizenz). Sie wurde für Ingenieure, Techniker und Forscher entwickelt, die mit Radioaktivität arbeiten, sowie für den Einsatz in der Lehre. Die Entwicklung und Maintenance wird von der Japan Atomic Energy Agency gestützt.

Aus den verwendeten Datenquellen resultiert, dass für die Nuklide Ag-109m und Te-127 keine Zerfallsdaten bereitstehen.

C.1.3 UQpy

UQpy (Uncertainty Quantification with Python) ist ein universelles Python-Paket für die Modellierung von Ungewissheit in physikalischen und mathematischen Systemen (Olivier et al., 2020). Der Code ist als eine Reihe von Modulen organisiert, die sich auf die Kernfunktionen der Quantifizierung der Ungewissheit konzentrieren.

C.2 Konversionen

C.2.1 Aktivität – Radiotoxizität

Die Radiotoxizität wird in diesem Bericht vereinfacht aus der Aktivität eines jeden Nuklids ermittelt, d. h. unter dem Begriff der Radiotoxizität wird die Summe aller Ingestionsdosen eines jeden Nuklids für einen Erwachsenen verstanden. Die Ingestionsdosis eines Zerfalls wird pro Nuklid aus der ICRP Publication 107 (Eckerman and Endo, 2008) übernommen. Aus diesem Vorgehen resultiert, dass für die Nuklide Ge-76, Se-82, Zr-96, Mo-100, Tc-100, Nd-150, Am-242, Bk-248 und Es-252 keine Berechnung der Radiotoxizität erfolgen kann.

C.2.2 Aktivität – Nachzerfallsleistung

Die Nachzerfallsleistung wird auf der Basis der berechneten Aktivität jedes Nuklids unter der Berücksichtigung der Zerfallsart ermittelt. Dazu wird, wenn nicht anders beschrieben, auf das Nuclear Data Sheet der IAEA zugegriffen¹³, aus dem die Zerfallsart und die Zerfallsenergien ausgelesen werden. Die Nachzerfallsleistung ergibt sich aus der freigesetzten Zerfallsenergie abzüglich der kinetischen Energie der entstehenden Neutrinos. Aus diesem Vorgehen resultiert, dass für die Nuklide Ag-109m und Te-127 keine Werte für die Nachzerfallsleistung bereitstehen.

C.3 Beispiele

C.3.1 Illustrationsbeispiel

Zur Illustration der Methoden in Kapitel 4 und 5 wird das Beispiel einer kurzen Zerfallskette benutzt. Dieses Beispiel ist die Zerfallskette des Radionuklids Pb-210, wobei die kurzlebigen Nuklide (Bi-210, Hg-206, Tl-206) nicht dargestellt werden, d. h. das Beispiel reduziert sich auf Pb-210, mit einer Halbwertszeit von 22,2 Jahren, Po-210, mit einer Halbwertszeit von 138 Tagen, und Pb-206 (stabil). Abbildung 86 zeigt die Zerfallskette mit Angaben der Zerfallsart und des Verzweungsverhältnisses sowie der Angabe der Halbwertszeit eines jeden Nuklids.

In einzelnen Fällen wird das Beispiel erweitert um das Radionuklid U-238, in dessen Zerfallskette es zur Bildung von Pb-210 kommt. Die Darstellung des stabilen Nuklids Pb-206 erfolgt nicht immer, da es keine Sensitivität oder Auswirkung auf einen der Ausgangsparameter besitzt. Das anfängliche Inventar ist in allen Beispielen je ein Kilogramm jedes Nuklids (Pb-210, Po-210, Pb-206, ggf. U-238).

¹³ Verwendet wird der direkte Zugriff auf die „Livechart Data Download API“ der IAEA (<https://www-nds.iaea.org/relnsd/vcharthtml/VChartHTML.html>)

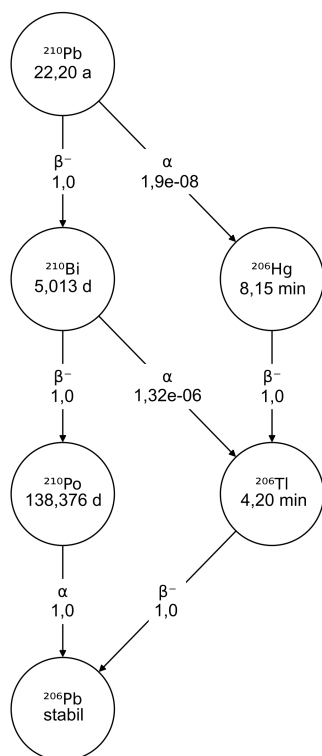


Abbildung 86 Zerfallskette des illustrativen Beispiels

C.3.2 Anwendungsbeispiel

Als Inventar für die beispielhafte Anwendung der Methoden in Kapitel 4 und 5, mit Ausnahme des Abschnitts „Nutzung alternativer Datenquellen zur Bestimmung der Nachzerfallsleistung“ in Abschnitt 5.2.2, wird ausschließlich das Inventar der Mischoxid-Brennstoffe bestrahlter BE aus den Abfällen der Nutzung von Druckwasserleistungsreaktoren (DWR-MOX) des Anhangs zum Arbeitspaket 3 (Peiffer et al., 2011) genutzt.

Aufgrund der Nutzung des Python-Pakets Radioactivedecay, kann in der Rechnung das metastabile Nuklid Ag-109m und das Nuklid Te-127 nicht berücksichtigt werden, da für dieses Nuklid Angaben zur Zerfallskette in der Datengrundlage des Python-Pakets (Anhang C.1.2) fehlen.

Die Ungewissheiten in den Mengenangaben verschiedener Radionuklide wurden abgeleitet aus den sich im Vergleich der Ergebnisse numerischer Simulationen des Abbrandes mit unterschiedlichen Codes ergebenden Ungewissheiten. Diese wurden dargestellt in der Abbildung 13 (Mertyurek and Gauld, 2016). Tabelle 19 fasst die verwendeten Werte zusammen. Für die beispielhafte Anwendung werden die Inventare um ihren Referenzwert mit der angegebenen Standardabweichung als normalverteilt betrachtet. Die Normalverteilung ist nach unten bei 0 begrenzt und nach oben offen.

Tabelle 19 Abschätzung der Ungewissheiten in den Mengenangaben verschiedener Radionuklide aus dem Vergleich von numerischen Simulationen des Abbrandes mit unterschiedlichen Codes - Abbildung 13 aus (Mertyurek and Gauld, 2016)

Radionuklid	Standardabweichung [%]	Radionuklid	Standardabweichung [%]
Mo-95	1,82	U-236	2,97
Tc-99	2,63	U-238	0,01
Ru-101	4,24	Pu-238	11,44
Rh-103	9,69	Pu-239	2,50
Ag-109	1,15	Pu-240	0,75
Nd-143	1,82	Pu-241	1,15
Nd-145	2,76	Pu-242	2,56
Sm-147	5,52	Np-237	38,21
Sm-149	4,65	Am-241	1,55
Sm-150	9,02	Am-242	15,54
Sm-151	7,34	Am-243	4,51
Sm-152	2,50	Cm-242	7,00
Eu-153	39,62	Cm-243	9,02
U-234	38,07	Cm-244	14,87
U-235	0,81	Cm-245	1,08

Anhang D QA-/QC-Maßnahmen

Tabelle 20 Übersicht über mögliche QA-/QC-Maßnahmen für die in Abschnitt 3.1 dargelegten Eingangsparameter gemäß FoV InvEnd (Rauscher et al., 2023)

¹⁾ KA: Kontrollen und Audits der Betreiber und Produzenten, PK: Plausibilitäts- oder Konsistenzprüfungen, AM: Analysen / Messungen, MV: Modellverifikationen, SU: Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalysen

Parameter	Maßnahmen ¹⁾				
	KA	PK	AM	MV	SU
Allgemeine Charakterisierung					
- Anzahl Behälter / Gebinde	x	x			
- Brennstabanzahl	x	(x)			
- Datum der Reaktorentnahme		x			
- Brennelementtyp	x	x			
- Klassifizierung von BE	x	x			
- Abfallkategorie		(x)			
Chemische Charakterisierung					
- komponentenspez. chemische Zusammensetzung	x	x	x	x	x
Geometrische Charakterisierung					
- Gittertyp bzw. Anordnung der BS	x	x			
- Geometrie und Form	x	x			
- (Anfangs-) Volumen	x	x			
- Freies Volumen im BS-Plenum	x	x			
Physikalische Charakterisierung					
- Gesamtmasse	x	x			
- Brennstoffdichte	x	x			
- Abfalldichte	x	x			
- Halbwertszeit der Nuklide	-	-	-	-	-
- Thermische Kennwerte		x	x		
- Mechanische Kennwerte		x	x		
Radiologische Charakterisierung					
- (Komponentenspezifisches) RN-Inventar	x	x	x	x	x
- Gesamtaktivität	x	x	x	x	x

Parameter	Maßnahmen ¹⁾				
	KA	PK	AM	MV	SU
- Gasförmige (und flüchtige) RN ¹⁴	-	-	-	-	-
- Ursprünglicher Anreicherungsgrad / Anreicherung	x		x		
- Abbrand des Kernbrennstoffs		x	x	x	x
- Strahlungsdosisleistung ¹⁵	-	-	-	-	-
Stoffliche Charakterisierung					
- Komponentenspez. stoffliche Zusammensetzung	x	x			
- Inertes Füllgas (BS)	-	-	-	-	-
- Spaltstoffe und isotonenweise Zusammensetzung ¹⁴	-	-	-	-	-
- Masse Schwermetalle ¹⁴	-	-	-	-	-
Thermische Charakterisierung					
- Nachzerfallsleistung ¹⁴	-	-	-	-	-
- Abklingzeit / Zwischenlagerungszeitraum	x				

¹⁴ Es konnten keine spezifischen Angaben zu diesem Parameter gefunden werden. Es wird auf die Angaben zum Parameter „(komponentenspezifisches) RN-Inventar“ verwiesen.

¹⁵ Es konnten keine spezifischen Angaben zu diesem Parameter gefunden werden. Es wird auf die Angaben zum Parameter „Gesamtaktivität“ verwiesen.

