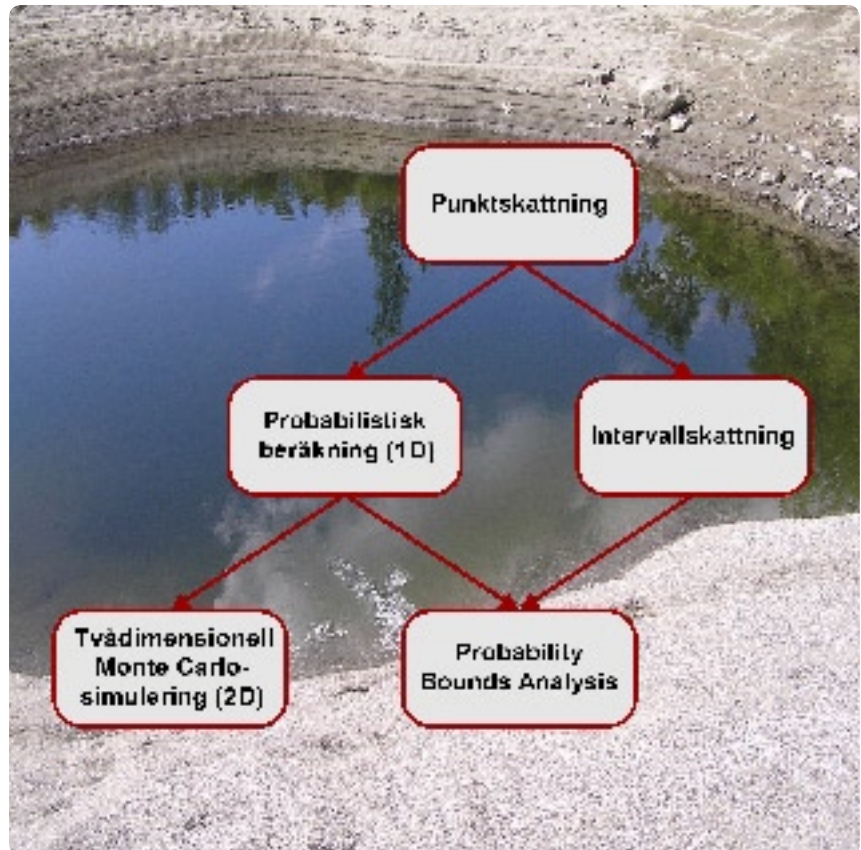


Probabilistisk riskbedömning fas 2

RAPPORT 5621 • NOVEMBER 2006



Kunskapsprogrammet



Probabilistisk riskbedömning - fas 2

Tomas Öberg, Högskolan i Kalmar
Per Sander, Högskolan i Kalmar
Bo Bergbäck, Högskolan i Kalmar

Beställningar

Ordertel: 08-505 933 40

Orderfax: 08-505 933 99

E-post: natur@cm.se

Postadress: CM-Gruppen, Box 110 93, 161 11 Bromma

Internet: www.naturvardsverket.se/bokhandeln

Naturvårdsverket

Tel 08-698 10 00, fax 08-20 29 25

E-post: natur@naturvardsverket.se

Postadress: Naturvårdsverket, SE-106 48 Stockholm

Internet: www.naturvardsverket.se

ISBN 91-620-5621-2.pdf

ISSN 0282-7298

© Naturvårdsverket 2006

Elektronisk publikation

Tryck: CM Digitaltryck AB

Omslagsbild: Tomas Öberg

Förord

Ett av riksdagens miljömål är Giftfri miljö, och i detta mål ingår att efterbehandla och sanera förorenade områden. Brist på kunskap om risker med förorenade områden och hur de bör hanteras har identifierats som hinder för ett effektivt saneringsarbete. Naturvårdsverket har därför initierat kunskapsprogrammet Hållbar Sanering.

Den här rapporten redovisar projektet ”Probabilistisk riskbedömning – fas 2” som har genomförts inom Hållbar Sanering. Detta är andra fasen av ett projekt som syftar till att undersöka hur kvantitativa riskbedömningar av förorenad mark kan genomföras med en sannolikhetsbaserad – probabilistisk metod. Fokus i denna rapport är hur probabilistiska riskbedömningar av förorenad mark kan genomföras och kvalitetssäkras.

Rapporten har författats av Tomas Öberg, Per Sander och Bo Bergbäck vid Högskolan i Kalmar. Kontaktperson för Hållbar Sanering har varit Tommy Hammar vid Länsstyrelsen i Kalmar län.

Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i rapporten. Författarna svarar själva för innehåll, slutsatser och eventuella rekommendationer.

Naturvårdsverket december 2006

Innehåll

SAMMANFATTNING	6
SUMMARY	8
1 INLEDNING	10
2 TILLÄMPBARHET INOM FÖRORENAD MARK	12
3 BESKRIVNING AV OSÄKERHET OCH VARIABILITET	16
3.1 Osäkerhet	17
3.2 Variabilitet	18
4 BERÄKNINGSMETODER OCH PROGRAMVAROR	19
4.1 Intervallskattning	19
4.2 Monte Carlo-simulering	21
4.3 Probability bounds analysis (PBA)	22
4.4 Utvärdering av tre programvaror	25
5 VAL AV SANNOLIKHETSFÖRDELNINGAR	29
6 OBEROENDE MELLAN VARIABLER OCH ANDRA ANTAGANDEN	32
6.1 Upprepade parametrar	32
6.2 Bakåträkning	32
6.3 Beroende mellan ingångsvariabler	33
7 KÄNSLIGHETSANALYSER	36
8 RESULTATREDOVISNING OCH KVALITETSSÄKRING	39
9 RISKKOMMUNIKATION	41
10 SLUTSATSER	42
11 REFERENSER	44

Sammanfattning

Probabilistiska metoder förutses få en betydligt ökad användning för riskbedömningar av förorenad mark. Metodiken kan enkelt integreras med nuvarande riskbedömningsmodeller, men behov finns att kvalitetssäkra arbetsgången och redovisningsrutinerna. Syftet med denna rapport är att ge vägledning och förslag som säkerställer jämförbarhet och möjliggör oberoende granskning.

En tidigare genomförd litteraturstudie visade på ett brett tillämpningsområde för probabilistisk riskbedömning. Ofta har denna typ av riskbedömningar kunnat ge distinkta svar på frågor om förekomst av hälso- och miljörisk, vilka saneringsmål som är rimliga och hur olika markområden bör klassificeras. Probabilistisk riskbedömning bör därför övervägas när en vanlig punktskattning inte kan friskriva från risker och kostnaderna för efterbehandling är betydande. Tillämpningarna avser då främst exponeringsanalys.

Syftet med en probabilistisk riskbedömning är att på ett rationellt och vetenskapligt försvarbart sätt hantera osäkerhet (bristande kunskap) och variabilitet (naturlig variation). En viktig källa till osäkerhet är bristande kunskap i skattningen av de olika variabler som ingår i riskbedömningsmodellen. Den viktigaste källan till variabilitet är den naturliga variationen mellan individer. Dessa båda källor till osäkerhet och variabilitet bör beskrivas kvantitativt.

Det finns ett antal metoder för att beskriva osäkerhet och/eller variabilitet för en ingångsvariabel och föra detta vidare (fortplanta) genom en riskbedömningsmodell. I rapporten behandlas tre metoder: Intervallskattning, Monte Carlo-simulering och ”Probability Bounds”-analys (PBA). PBA är en relativt ny metod som till viss del kan betraktas som en kombination av de båda förstnämnda. Metodvalet är till stor del beroende av tillgången på data, där Monte Carlo-metoder kräver mer underlag än de båda andra metoderna.

Tre programvaror har utvärderats inom ramen för det redovisade projektet. Crystal Ball® och Analytica® är lämpliga hjälpmedel för Monte Carlo-simuleringar och Risk Calc™ kan användas för intervallskattningar och ”probability bounds”-analys. Alla tre programvarorna är likvärdiga vid en probabilistisk beräkning där osäkerhet och variabilitet hanteras lika, eller där endast den ena ingår.

Valet och specifikationen av sannolikhetsfördelningar och beroenden mellan ingångsvariablerna är de enskilda moment som har störst inverkan på utfallet av en probabilistisk riskbedömning. Valet av ingångsfördelningar och hanteringen av beroenden bör därför motiveras och dokumenteras.

Känslighetsanalys används som beteckning på metoder för att kvantifiera hur ingångsvariablerna inverkar på utfallet av modellberäkningarna. En probabilistisk riskbedömning kan ses som en övergripande känslighetsanalys, men i allmänhet vill man särskilja och skatta inverkan av varje ingångsvariabel var för sig. Det finns ett stort antal metoder att välja emellan och därför bör valet av metod motiveras.

En viktig del i kvalitetssäkringen är att alla beräkningsresultat kan verifieras utifrån redovisade uppgifter. Vi rekommenderar även att riskbedömningar av större

marksaneringsprojekt blir föremål för en oberoende expertgranskning. För att uppnå acceptans bland beslutsfattare och allmänhet krävs även att rapporteringen av resultat disponeras så att den blir tillgänglig och motsvarar olika gruppers krav på redovisning. Probabilistiska riskbedömningar kan då bli ett hjälpmedel för effektiv riskkommunikation genom att analysprocessen tydliggör de osäkerheter som döljs i en traditionell deterministisk riskberäkning.

Summary

Probabilistic methods are anticipated to find an increased use in risk assessment of contaminated land. The methodology is easy to integrate with current risk assessment models, but a need exists for quality assurance of the work process and reporting routines. The purpose of this report is to provide guidance and recommendations to ensure comparability and facilitate independent review.

A previous review of the literature showed a wide area of application for probabilistic risk assessment. This type of risk assessments can often provide distinct answers to questions regarding the presence of health- and environmental risks, suitable cleanup targets, and the classification of different areas of land. Probabilistic risk assessments should therefore be considered when a traditional point estimate cannot ensure a lack of risk and when the costs for cleanup are substantial. The applications are then mainly within exposure assessments.

The purpose of a probabilistic risk assessment is to handle uncertainty (lack of knowledge) and variability (natural variation) with a rational and scientific defensible approach. An important source of uncertainty is lack of knowledge in the estimation of parameters in the risk assessment model. The largest contribution to variability is the natural variation between individuals. These sources of uncertainty and variability should be described quantitatively.

Different methods are available to describe uncertainty and/or variability in an input variable and to carry it through the risk assessment model. Three methods are treated here: Interval estimates, Monte Carlo simulations, and probability bounds analysis (PBA). PBA is a relatively new method that can be viewed as a combination of the first two. The choice of method is to a large extent dependent upon the availability of data, where Monte Carlo methods are more demanding than the other two.

Three software have been evaluated within the frame of this project. Crystal Ball® and Analytica® are suitable tools for Monte Carlo simulations and Risk Calc™ can be used for estimating intervals and probability bounds analysis. All three software are equivalent when the probabilistic calculation handle uncertainty and variability similarly, or when only one of these is estimated.

The choice and specification of probability distributions and dependence between input variables are the separate components that have most influence upon the outcome of a probabilistic risk assessment. The choice of input distributions and treatment of dependencies should therefore be motivated and documented.

Sensitivity analysis denotes methods to quantitate the influence by input variables on the outcome of model calculations. A probabilistic risk assessment can be viewed as a general sensitivity analysis, but usually beneficial to estimate the influence of each input variable separately. There are several methods to choose among and therefore this choice should also be motivated.

An important part for the quality assurance is that all calculation results should be possible to verify from the information provided. We recommend that risk assessments of larger cleanup projects are peer reviewed by independent experts. To gain acceptance among decision makers and the public it is necessary that the

results are reported in a manner that satisfies the need of different groups of stakeholders. Probabilistic risk assessments may then become an efficient tool to facilitate risk communication by disclosing uncertainties that are hidden by the traditional deterministic approach.

1 Inledning

Riskbedömningar syftar till att identifiera riskfaktorer, bestämma exponering och uppskatta sannolikheten för att skada uppstår. För att detta ska vara möjligt så måste även osäkerhet och variabilitet karakteriseras i alla led av riskbedömningsprocessen. Probabilistiska eller sannolikhetsbaserade metoder möjliggör detta och har fått en snabbt ökande användning, för att skatta både exponering och effektsamband.

Förorenad mark är vid sidan av kärnkraftsindustrin den viktigaste miljötillämpningen av probabilistisk riskbedömning och ett stort antal studier har publicerats för specifika objekt i Nord-Amerika, Europa och Asien. Probabilistisk riskbedömning har ofta använts för att etablera platsspecifika riktvärden och det är här som en framtida användning i Sverige främst kan förutses.

Probabilistisk metodik kan enkelt integreras med nuvarande svenska riskbedömningsmodeller. En övergång till probabilistisk riskbedömning ställer dock krav på kvalitetssäkring, både avseende arbetsgången och redovisningsrutinerna. Det amerikanska naturvårdsverket (U.S. EPA) har gett ut detaljerade anvisningar som i stort överensstämmer med vad som idag utgör vetenskapligt konsensus [1, 2]. I vissa stycken är dock de amerikanska anvisningarna onödigt detaljerade och låser tillämpningarna till specifika metoder och programvaror.

Europeiska riktlinjer finns inte ännu, men arbete pågår exempelvis avseende miljöriskbedömningar av bekämpningsmedel. Inom ramen för kunskapsprogrammet Hållbar Sanering har vi tidigare redovisat en litteraturstudie av probabilistiska metoder för riskbedömning av förorenad mark [3, 4]. Där pekade vi på behovet av ett vägledningsdokument som skulle kunna tjäna till att utbilda och upplysa utförare, beslutsfattare och allmänhet om probabilistisk riskbedömning, dess möjligheter och begränsningar.

Syftet med denna rapport är föreslå rutiner för kvalitetssäkring och ge viss praktisk vägledning för dem som vill börja tillämpa metodiken vid riskbedömning av förorenad mark. Särskild vikt har därför lagts vid de moment som påverkar riskbedömningens kvalitet och möjligheterna till en oberoende granskning.

Det sker en ständig utveckling inom området. Rekommendationer och råd har med avsikt formulerats så att de inte ska låsa valet av probabilistiska metoder och verktyg. Läsaren förutsätts ha erfarenhet av kvantitativ riskbedömning och kännedom om probabilistisk metodik. Vägledningen ersätter därför inte de böcker som beskriver metoderna eller manualerna för de olika programvarorna, utan ska istället mer ses som ett komplement och en checklista av vad som är viktigt att tänka på. De olika referenser som anges kan med fördel användas för vidare studier på egen hand. Några böcker som vi själva har funnit användbara är: "Uncertainty – A guide to dealing with uncertainty in quantitative risk and policy analysis" av M. Granger Morgan och Max Henrion, "Probabilistic techniques in exposure assessment" av Alison C. Cullen och H. Christopher Frey, "Risk analysis – A quantitative guide" av David Vose och "Risks and decisions for conservation and environmental management" av Mark Burgman [5-8].

Beräkningsarbetet i en probabilistisk riskbedömning kan idag utföras med en vanlig PC, men förutsätter givetvis tillgång till en lämplig beräkningsprogramvara. Några exempel redovisas i rapporten och tre verktyg har varit föremål för en mer ingående utvärdering. Programvaruleverantörerna ordnar återkommande korta utbildningar, men för att nå djupare förståelse så rekommenderas kurser som anordnas av akademiska lärosäten i Sverige eller utomlands.

2 Tillämpbarhet inom förorenad mark

Probabilistiska metoder har använts sedan början av 1990-talet för riskbedömning av förorenad mark, som vid sidan av kärnkraftssäkerhet är den viktigaste miljö-tillämpningen. Hittills har probabilistiska metoder fått störst användning för att förbättra exponeringsanalysen, men tillämpningar finns även inom dos-respons-analys av ekotoxikologiska effekter.

Ett stort antal studier har publicerats för specifika platser i Nordamerika, Europa och Asien. De har avsett exempelvis förorening av bly, arsenik, krom, uran, PCB, PAH, hexaklorbensen, pentaklorfenol, dioxiner och klorerade lösningsmedel. Dessa probabilistiska riskbedömningar täcker in olika exponeringssituationer inom vitt skilda verksamheter, däribland tidigare metallurgisk industri (smältverk och gruvor), tillverkningsindustri, gasverkstomter, träimpregnering, infrastruktur (fyllnadsmaterial och rangerbangård), skjutfält samt deponier [3].

Probabilistisk riskbedömning har alltså använts inom i stort sett hela skalan av de tillämpningar som förekommer när det gäller sanering av förorenad mark. Erfarenheterna har genomgående varit goda. Det har ansetts att den probabilistiska metodiken ökar kunskapen om osäkerhet och variabilitet och därmed förbättrar och fördjupar beslutsunderlaget. Det har visats att det förekommer överskattningar av risker med traditionell metodik, men även motsatsen kan förekomma och den probabilistiska riskbedömningen leder då till striktare saneringsmål. Ofta har den probabilistiska riskbedömningen kunnat ge distinkta svar på frågor om förekomst av en hälso- eller miljörisk (av betydelse), vilka saneringsmål som är rimliga och hur olika markområden bör klassificeras.

Probabilistisk riskbedömning ger alltså ett bättre (fylligare) beslutsunderlag, men kräver också en ökad arbetsinsats jämfört med en traditionell deterministisk punktskattning. Den probabilistiska ansatsen är därför mest motiverad där beslut-situationen är oklar, framför allt när en punktskattning inte kan friskriva från risker och kostnaderna för efterbehandling är betydande. Probabilistisk metodik öppnar även möjligheter att direkt använda sannolikhetsfördelningar för risker i den fortsatta beslutsanalysen, att utvärdera olika beslutsalternativ och inte minst att ta med de ekonomiska aspekterna.

Beslutsanalys grundad på en probabilistisk riskbedömning har tillämpats i USA för några Superfundprojekt. Beslutsproblem i ett tidigt skede står även i centrum för en nyligen utvecklade metodik för prioritering av förorenade områden (PRIOR) [9]. PRIOR syftar till att fördjupa nuvarande metodik för inventering av förorenade områden (MIFO) genom att även ta in kostnader för efterbehandling i priorite-ringen mellan olika objekt. Den kvalitativa riskklassificeringen i MIFO har ersatts med antagna sannolikhetsfördelningar som får representera olika risknivåer.

Den inledande fasen av en MIFO-undersökning har nyligen utvärderats och jämförts med den mer kvantitativt inriktade amerikanska metoden för preliminär bedömning ("Preliminary Assessment") [10]. En slutsats från den utvärderingen var att kvalitetssäkringen behöver förbättras för att undvika alltför stora variationer

mellan olika bedömare och för att uppnå transparens i rapporterade resultat. Sannolikt är dock probabilistiska metoder generellt sett alltför resurskrävande för att innebära ett realistiskt alternativ i denna tidiga sållningsfas.

När probabilistiska metoder, och då framför allt Monte Carlo-simulering, började få en allt större betydelse i slutet av 1990-talet så tog det amerikanska naturvårdsverket (U.S. EPA) initiativ till att ge ut anvisningar för hur dessa bör utföras och rapporteras [1]. Ett vägledningsdokument specifikt för förorenad mark gavs ut 2001 [2]. I dessa dokument redovisas åtta punkter som definierar god vetenskaplig sed avseende probabilistisk riskbedömning. I förkortad form kan dessa punkter återges enligt följande:

- Syftet och omfattningen av den probabilistiska riskbedömningen ska tydligt redovisas.
- Metoderna (inklusive modeller och antaganden) ska dokumenteras och vara lätt tillgängliga i utvärderingsrapporten.
- Resultat från känslighetsanalyser ska presenteras och diskuteras.
- Närvaro eller frånvaro av samband och beroenden mellan olika ingångsvariabler ska diskuteras och beaktas i riskbedömningen.
- Information ska ges i rapporten om varje ingångs- och utgångsfördelning (i tabellform och grafiskt). Valet av fördelningar ska förklaras och motiveras.
- Den numeriska stabiliteten, både för centralmått och övre percentiler, i utgångsfördelningarna ska redovisas och diskuteras.
- Beräkningar av exponering och risker med deterministiska metoder bör även redovisas.
- Hänsyn ska tas till de exponeringsantaganden som ligger till grund för toxikologiska jämförelsevärden.

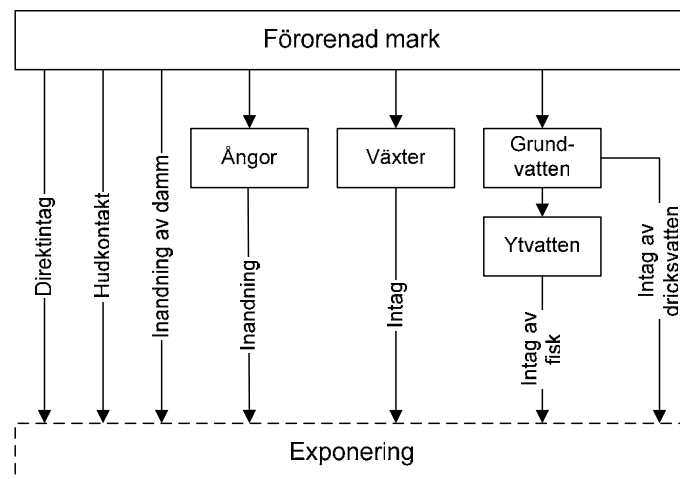
Innehållsmässigt så motsvarar EPA:s åtta punkter ovan de fjorton ”principles of good practice” som tidigare har föreslagits av Burmaster och Andersson [11]. Det finns en vetenskaplig konsensus i dessa frågor på det principiella planet, men däremot kan synpunkterna i det enskilda fallet variera om hur det bäst genomförs.

Den ökade arbetsinsatsen i att genomföra en probabilistisk riskbedömning är framför allt kopplad till att införskaffa och analysera nödvändig bakgrunds-information. Detta kan exemplifieras med den modell som används i Sverige för att utvärdera exponeringsrisker. Ett stort antal ingångsvariabler används då för att karakterisera olika markegenskaper, fysikalisk-kemiska egenskaper hos de aktuella föreningarna, fysiologiska egenskaper för den exponerade befolkningen och dessas levnadsmönster. Ska osäkerhet och variabilitet i exponerings-skattningen kunna karakteriseras så behöver den först undersökas för var och en av dessa ingångsvariabler. Vissa variabler kan dock uteslutas om inverkan från dessa är marginell. Likartat, så behöver även samband och beroenden mellan olika ingångsvariabler undersökas närmare. Dessa frågeställningar kommer att diskuteras ytterligare i denna rapport liksom kraven på redovisning och dokumentation.

I det praktiska genomförandet av en probabilistisk riskbedömning så har en stegvis ansats föreslagits. Det är givetvis lätt att acceptera och en vanlig

punktskattning brukar alltid få inleda varje kvantitativ riskbedömning, men ännu bättre är att utforma den som en intervallskattning (se vidare avsnitt 4.1, ”Intervallskattning”). Intervallskattningen ger då en känsla för hur osäkerheten i de enskilda ingångsvariablerna återverkar på slutresultatet. Detta inledande steg är tillfyllest som beslutsunderlag när exponeringsrisken är mycket låg jämfört med de toxikologiska/ekotoxikologiska referensvärdena eller när kostnaden för åtgärder är låg. Ibland ger dock denna inledande skattning av exponeringen inget tydligt svar och samtidigt är kostnaderna för åtgärder tillräckligt höga för att motivera en fördjupad bedömning. Den probabilistiska bedömningen kan också indelas i några olika steg. Exempelvis kan osäkerhet och variabilitet först behandlas samlat för att senare behandlas var för sig.

Den exponeringsmodell som ofta tillämpas i Sverige är en s.k. kompartimentmodell med antagande om jämvikt, figur 2.1. Modellen presenterades 1997 av Naturvårdsverket som en grund för att beräkna generella riktvärden för förorenad mark [12]. Liknande modeller används även i andra länder och den holländska CSOIL har varit en viktig förebild.



Figur 2.1 Den svenska exponeringsmodellen.

Varje ruta i figuren ovan representerar en depå eller media i transporten från förorenad jord till intaget hos människor (exempelvis mineraljord, organiskt material, vatten och luft). Fördelningen mellan olika media beräknas utifrån respektive ämnes *fugacitet* (ett mått på ämnets strävan att undfly den aktuella omgivningen) och anges med jämviktskonstanter [13]. Utöver jämviktskonstanterna innehåller de ekvationer som beskriver transporten av föroreningar från riskälla till skyddsobjekt en rad andra variabler, som ämneskoncentrationer, flöden, volymer och sammansättningar av olika media. I den kompletta modellen ingår ca 100 ingångsvariabler och alla dessa måste definieras innan den aktuella exponeringen kan beräknas.

I den svenska modellen anges alla ingångsvariablerna med punktskattningar och en sådan modell kan därför även kallas för ”deterministisk”. En del av dessa skattningar är konservativa (försiktiga) medan andra mer avspeglar en normal-situation. Målsättningen är att den sammanvägda bedömningen ska ge en god skyddsnivå för människa och miljö, men med rimliga avvägningar så att resultaten

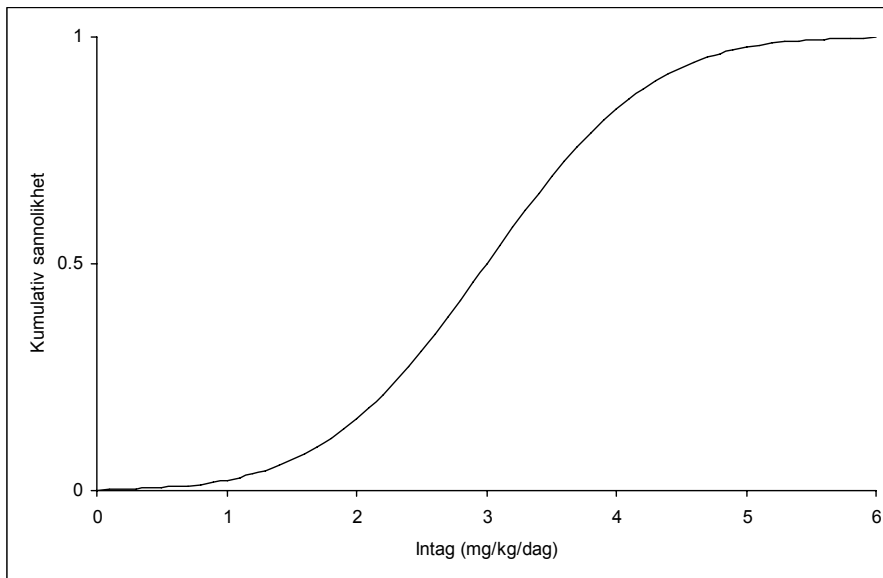
är praktiskt tillämpbara. När en lång rad ingångsvariabler skattas utifrån delvis olika kriterier och senare räknas samman i en komplex exponeringsmodell är det dock svårt, för att inte säga omöjligt, att uttala sig om vilken säkerhetsmarginal som finns i den slutliga bedömningen. Likaså är det svårt att bedöma hur stor exponeringen blir för olika delar av befolkningen och om ytterligare undersökningar behövs. Problemen med att ge svar på dessa frågor är förstås inte unika för den svenska modellen, utan samma insikt om en deterministisk modellens begränsningar har vuxit fram även i andra delar av världen.

I en statisk kompartmentmodell är det relativt enkelt att gå från en deterministisk till en probabilistisk ansats. Modellstrukturen och ekvationerna behöver inte ändras. Är modellen inlagd i ett eller flera Microsoft® Excel kalkylblad, som exempelvis remissversionen av Naturvårdsverkets beräknings-program, så finns det tilläggsprogram för Monte Carlo-simulering som är den populäraste probabilistiska metoden. Det är emellertid ingen svårighet att lägga in modellen även i andra mer specialiserade programvaror. Svårigheterna är istället till stor del kopplade till hur osäkerhet, variabilitet och beroende mellan variabler ska hanteras och hur resultaten ska rapporteras. Rapporten kommer därför till stor del att handla om just detta.

Rekommendation: Probabilistisk riskbedömning bör övervägas när en vanlig punktskattning inte kan friskriva från risker och kostnaderna för efterbehandling är betydande. Probabilistiska metoder kan användas i alla delar av riskbedömningsprocessen, men det är lämpligt att tills vidare fokusera på tillämpningar avseende exponeringsanalys och ekologiska effekter. Tillämpningar avseende dos-responssamband för människor bör avvakta att en vetenskaplig konsensus först uppnås.

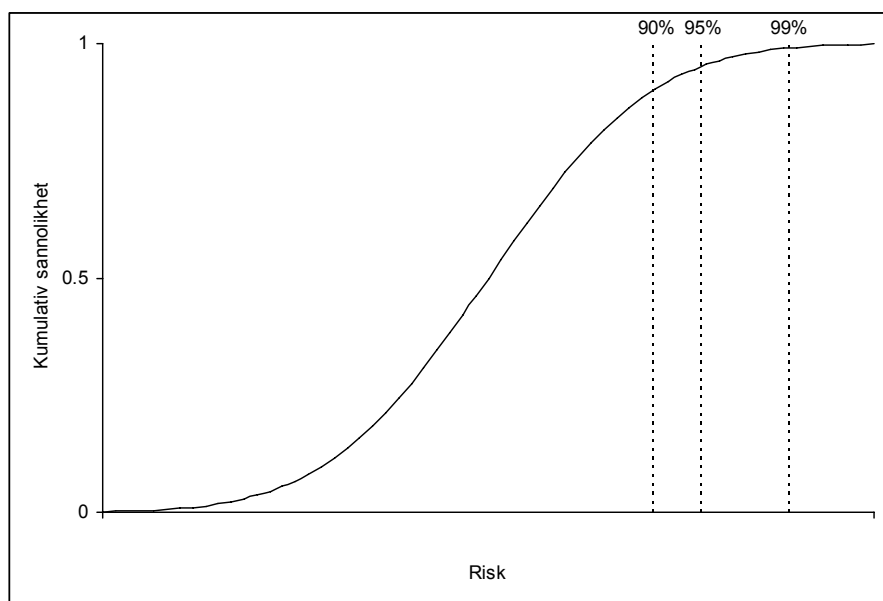
3 Beskrivning av osäkerhet och variabilitet

Syftet med en probabilistisk riskbedömning är att på ett rationellt och vetenskapligt försvarbart sätt hantera osäkerhet (bristande kunskap) och variabilitet (naturlig variation). Ofta används då sannolikhetsfördelningar för att beskriva osäkerhet och variabilitet i en eller flera av ingångsvariablerna och resultatet redovisas som en sannolikhetsfördelning för den risk som undersöks [6, 7]. I en exponeringsanalys går det naturligtvis lika bra att istället skatta sannolikheten för olika dosnivåer (intag) och hur troligt det är att ett riktvärde överskrids. I figur 3.1 visas ett exempel där intaget av en förorening beskrivs av en normalfördelning med medelvärdet 3 och standardavvikelsen 1. Det innebär att 95 % av de exponerade har ett intag mellan 0-4.65 mg/kg/dag.



Figur 3.1 Exempel på en kumulativ sannolikhetsfördelning.

Fortplantningen av osäkerheter i en modell går att beskriva analytiskt, men i allmänhet används en numerisk simuleringsmetodik och Monte Carlo-metoden är då vanligast. Vid en Monte Carlo-simulering ändras alla ingångsvariablerna i modellen slumpmässigt enligt de valda fördelningarna och dessa simuleringar görs om tusentals gånger. Utfallet kommer att variera mellan varje simuleringsrunda och tillsammans beskriver de den variabilitet och osäkerhet som riskbedömningsmodellen innefattar. Utifrån denna beskrivning kan sedan beslutsfattaren välja vilken percentil som ska användas för en riskjämförelse (vanligtvis i intervallet 90-99 %) [2], figur 3.2.



Figur 3.2 Exempel på kumulativ sannolikhetsfördelning med olika percentiler markerade.

Det kan i många sammanhang vara fördelaktigt att skilja variabilitet och osäkerhet åt i en Monte Carlo-simulering. Resultaten från Monte Carlo-simuleringen kan slutligen användas för att undersöka känsligheten och bidraget till variation i slutresultatet från de olika ingångsvariablerna. En sådan känslighetsanalys ger då en tydlig bild var ytterligare undersökningar eller riskreducerande åtgärder är mest motiverade.

3.1 Osäkerhet

När det gäller exponeringsrisker kopplade till förorenad mark så är valet av modell och dess struktur en grundläggande osäkerhetsfaktor som benämns modelsäkerhet [2]. Validering och verifiering av exponeringsmodellen liksom definition av tillämpningsdomänen är då av stor betydelse (se även avsnitt 8 ”Resultatredovisning och kvalitetssäkring”). Inte ens i en traditionell deterministisk riskbedömning går det att bortse från den osäkerhet som beror på avrundningsfel, d.v.s. anges jordens densitet till 1.5 kg/dm^3 så innebär det att den kan variera mellan $1.45\text{-}1.55 \text{ mg/dm}^3$ (yttre avrundning).

Parameterosäkerhet används som beteckning på osäkerheten i skattningen av de variabler som används i den slutliga exponeringsmodellen. Fördelningskoefficienter, biokoncentrations- och biomagnifikationsfaktorer är några exempel på modellparametrar som ofta ger ett stort bidrag till osäkerheten i hälso- och miljöriskbedömningar [14-16]. Parameterosäkerheter kan minimeras genom ytterligare informationsinsamling och genom kritisk utvärdering av redan tillgänglig information. Parameterosäkerhet finns även i de fördelningar som beskriver variabilitet i olika ingångsvariabler, t.ex. koncentrationen av en markförorening [17].

Probabilistisk riskbedömning kan användas för att beskriva de parameterosäkerheter som finns i en given exponeringsmodell och hur dessa inverkar på slutresultatet. Modellstrukturen i sig är svår att beskriva i probabilistiska termer. En

systematisk jämförelse av alternativa modellstrukturer och modellantaganden kan däremot ingå som en del av den probabilistiska riskbedömningen [2, 18].

Scenariosäkerhet, slutligen, betecknar osäkerheten i valet av exponeringsförutsättningar och avsaknad av väsentlig information. Osäkerheten kan bli påtaglig när en modell från ett tillämpningsområde används inom ett helt annat för vilken den inte är avsedd, men scenariosäkerheten kan även avse oklarheter i den framtida användningen av ett markområde och därav följande exponering [19]. Scenariosäkerhet hanteras ofta som modellosäkerhet, dvs. flera olika alternativ utvärderas och jämförs.

3.2 Variabilitet

Interindividuell variabilitet (naturlig variation mellan individer) är av stor betydelse i alla riskbedömningar. Skillnaden mellan barn och vuxna är den kanske mest uppenbara faktorn att ta hänsyn till. Olika livsstil, matvanor, kroppsbyggnad, kön, sjukdomar och yrke är bara några av de övriga faktorer som inverkar på de flesta miljö- och hälsorisker [7]. Vid en punktskattning behandlas alla lika genom att konstruera en slags "medelsvensson" eller en extremt exponerad och känslig individ. Beroende på hur olika faktorer väljs så kan det leda till både över- och underskattning av risker, för såväl enskilda individer som hela populationer. En probabilistisk ansats, gör det däremot möjligt att särskilja olika grupper (populationer) med särskilt hög exponering [20]. Genom att ta hänsyn till denna interindividuell variabilitet kan riskbedömningar av förorenad mark förbättras [21]. I USA har den här typen av faktauppgifter samlats i "Exposure Factors Handbook" och arbete pågår nu med en liknande sammanställning inom EU-projektet "European Exposure Assessment Toolbox" [22-24]. För befolkningar i europeiska länder finns data även rapporterade i "Exposure Factors Sourcebook for European populations" och "Exposure Factors Sourcebook for Europe" [25, 26].

Spatial variabilitet (variationer i rummet) är likaså av stor betydelse när det gäller riskbedömningar av förorenad mark. Utbredningen av en markförorening är en uppenbar faktor att beakta, men även markförhållandena kan variera [27]. Det är därför av värde att bibehålla den spatiala kopplingen i probabilistiska riskbedömningar [28]. Konsekvenser av olika behandlingsalternativ kan utvärderas både med geostatistiska metoder och genom att skatta den spatiala variabiliteten och osäkerheten med probabilistisk metodik [17, 29, 30].

Temporal variabilitet (variationer över tiden) tillmäts inte alltid lika stor vikt som den interindividuell och spatiala variabiliteten. Det kan delvis bero på avsaknad av data, men även på att dynamiska modeller ofta är mer komplexa och svårare att parametersätta.

Rekommendation: En probabilistisk riskbedömning bör behandla de olika typer av osäkerhet och variabilitet som har påverkan på bedömningsresultatet. Parameterosäkerhet och interindividuell variabilitet bör beskrivas kvantitativt. Modell- och scenariosäkerhet samt spatial och temporal variabilitet bör beskrivas åtminstone kvalitativt.

4 Beräkningsmetoder och programvaror

Det finns ett antal metoder för att beskriva osäkerhet och/eller variabilitet för en ingångsvariabel och föra detta vidare (fortplanta) genom en riskbedömningsmodell. Här kommer vi att koncentrera oss på följande tre metoder:

- Intervallskattning
- Monte Carlo-simulering
- Probability Bounds-analys

Intervallskattning och Monte Carlo-simulering används flitigt, medan ”probability bounds”-analys (PBA) är en relativt ny metod som till viss del kan betraktas som en kombination av de båda förstnämnda.

I anslutning till varje metod kommer vi att diskutera programvaror som underlättar beräkningsarbetet. Beskrivningen är inte fullständigt heltäckande, däremot är målsättningen att läsaren ska få en bild av vad som finns att tillgå. I december 2005 så presenterade vi resultat från denna utvärdering (inklusive beräkningsjämförelser) vid Society of Risk Analysis årliga konferens [31].

4.1 Intervallskattning

Intervallskattning är den kanske enklaste metoden för att beakta osäkerheter och variabilitet i en kvantitativ riskbedömning [5]. En skattning av sämsta tänkbara utfall (”worst case”) kan betraktas som ett specialfall av intervallskattning, där värdena för alla ingångsvariablerna i riskbedömningsmodellen väljs så att det mest ogynnsamma utfallet uppnås. Problemen är förstas att definiera vad sämsta tänkbara utfall är och att slutresultatet blir en realistisk skattning av risken. Fördelen är att beräkningen är enkel och övertygande om det visar sig att slutresultatet fortfarande ger en acceptabelt låg risk.

I allmänhet är det av större intresse att få kunskap om hela riskintervallet och då måste även den undre delen av intervallet definieras. Det viktigt att tydligt definiera vad intervallet innebär, t.ex. 95% konfidensgränser för ingångsvariabel ifråga.

Intervallskattning är ofta en bra metod när vi vet mycket lite om en variabel, alltså när osäkerheten är stor. Har vi några få mätningar eller litteraturuppgifter så är det kanske inte meningsfullt att försöka bilda ett medelvärde som bästa skattning, utan det är just variationsintervallet som beskriver vad vi vet. Har vi bättre kunskap så går det fortfarande att använda intervallskattning även om de metoder som beskrivs nedan bättre utnyttjar den tillgängliga informationen.

Efter det att alla ingångsvariabler har definierats så är räkneoperationerna i en intervallskattning enkla att genomföra. I formlerna nedan förutsätts att $0 < x_1 < x_2$ och $0 < y_1 < y_2$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} + \mathbf{y} &= [x_1 + y_1, x_2 + y_2] \\ \mathbf{x} - \mathbf{y} &= [x_1 - y_2, x_2 - y_1] \\ \mathbf{x} * \mathbf{y} &= [\min(x_1y_1, x_1y_2, x_2y_1, x_2y_2), \max(x_1y_1, x_1y_2, x_2y_1, x_2y_2)] \\ \mathbf{x} / \mathbf{y} &= [x_1/y_2, x_2/y_1] \end{aligned}$$

I algebraiska räkneoperationer med intervall är det även av betydelse hur ekvationerna ställs upp (se avsnitt 6). Enklare modeller kan handräknas, men ofta är kalkylblad typ Microsoft® Excel ett bra hjälpmedel för beräkningarna. Ett räkneexempel visar hur det går till:

Antag att arsenikhalten (C) i förorenad mark varierar i intervallet 10-100 mg/kg TS, intaget av jord (J) hos barn under 7 år varierar i intervallet 10-200 mg/dag och vikten (W) hos dessa barn varierar i intervallet 10-30 kg. Intaget av arsenik per kg kroppsvikt kan då beräknas som:

$$\begin{aligned} I_{As} &= C * J / W = ([10, 100] * [10, 200]) / [10, 30] * 10^{-6} \text{ mg/kg/dag} \\ &= ([10*10, 100*200] / [10, 30]) * 10^{-6} = ([100, 20000] / [10, 30]) * 10^{-6} \\ &= [100/30, 20000/10] * 10^{-6} = [3.3, 2000] * 10^{-6} \text{ mg/kg/dag} \end{aligned}$$

I den här enkla modellen är det lätt att se att det är osäkerheten/variabiliteten i jordintaget som inverkar mest på slutresultatet. I en mer komplicerad modell är detta ofta inte lika uppenbart vilka variabler som inverkar mest. Det är även tidsödande att räkna igenom en intervallskattning för en fullständig exponeringsmodell, typ den svenska riskbedömningsmodellen för förorenad mark. Det finns då specialiserade programvaror som avsevärt förenklar beräkningsarbetet. Programvaran RAMAS RiskCalc™ hanterar direkt intervall som oprecisa tal ("imprecise numbers") [32]. Varje variabel definieras som ett oprecist tal, ekvationen anges och resultatet beräknas enligt:

$$\begin{aligned} C &= [10, 100] \\ J &= [10, 200] \\ W &= [10, 30] \\ I &= C*J/W \\ I & \\ &= [3.333333, 2000] \end{aligned}$$

Större beräkningar skrivs med fördel som skriptfiler där alla beräkningar behandlas samlat. Därmed erhålls även en dokumentation av hela beräkningen. Programvaran beskrivs ytterligare i avsnitt 4.4 "Utvärdering av tre programvaror"

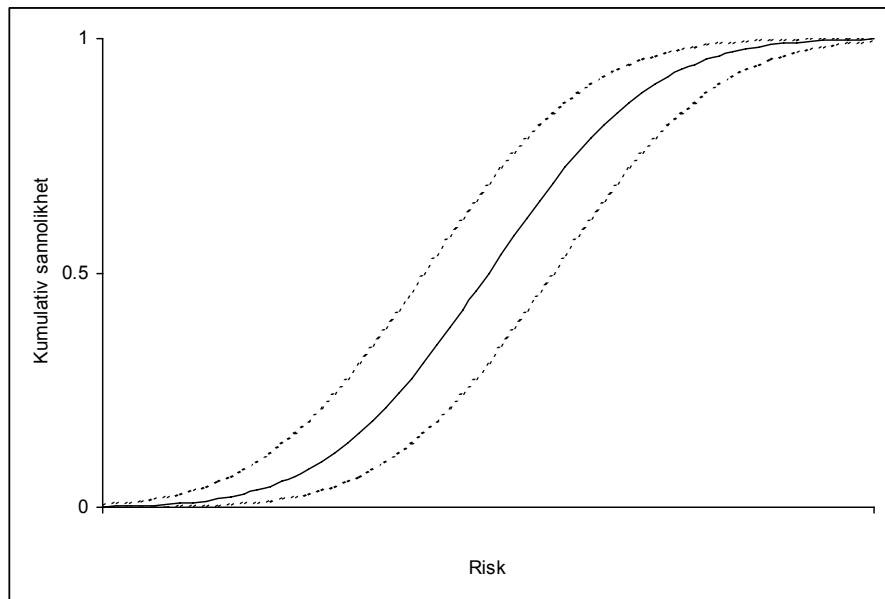
Rekommendation: Intervallskattning är en lämplig metod för att skatta osäkerhet och variabilitet när endast min och maxvärden är kända för ingångsvariablerna. Metoden kan i andra sammanhang användas för att ge en snabb överblick.

4.2 Monte Carlo-simulering

Probabilistiska riskbedömningar baseras ofta på simuleringar av utfall från ett stort antal möjliga val av värden för ingångsvariablerna och modellparametrarna [7, 8]. Beräkningsarbetet kan för det mesta utföras med en vanlig persondator. Den vanligaste simuleringstekniken – Monte Carlo-metoden – går ut på att slumpmässigt dra värden (sampla) från de valda sannolikhetsfördelningarna och sedan fortplanta dessa igenom den valda modellen. Upprepas proceduren tillräckligt många gånger så blir resultatfördelningen stabil och kan användas i riskbedömningen. För att uppnå stabilitet även i de högsta percentilerna för resultatfördelningen så krävs i allmänhet många tusen eller t.o.m. 10 000-tals iterationer (upprepningar).

En metod att snabbare uppnå konvergens över hela området är då att systematiskt sampla ingångsfördelningarna över hela deras variationsområde. Latin Hypercube Sampling (LHS) är en sådan stratifierad metod, där ingångsfördelningen först delas upp i områden med likformiga sannolikheter och därefter dras värden slumpmässigt inom dessa områden. LHS-metoden ger därmed en garanterad täckning av hela variationsintervallet.

Osäkerhet och variabilitet kan separeras genom en s.k. tvådimensionell (2D) simulering. I en 2D-simulering körs två beräkningsloopar, en inre och en yttre [2]. I den inre beräkningsloopen undersöks variabiliteten genom att dra värden från de valda sannolikhetsfördelningarna i ett lämpligt antal iterationer. I den yttre beräkningsloopen simuleras osäkerheten på ett likartat sätt och för varje nytt parameterval så återupprepas den inre beräkningsloopen. Det innebär alltså att lika många sannolikhetsfördelningar beräknas som antalet "varv" i den yttre loopen. Består den inre loopen av 5 000 iterationer och den yttre av 1 000 iterationer så blir alltså det totala antalet 5 000 000 iterationer. Beräkningsarbetet ökar alltså påtagligt vid en 2D-simulering. Resultatet från en 2D-simulering kan redovisas som en kumulativ fördelningsfunktion med konfidensgränser, figur 4.1.



Figur 4.1 Exempel på en kumulativ sannolikhetsfördelning med övre och undre konfidensgränser (ofta motsvarande 5 % respektive 95 %).

Valet av sannolikhetsfördelningar för ingångsvariablerna är den faktor som har enskilt störst betydelse för utfallet av beräkningarna och detta diskuteras vidare i avsnitt 5. I Monte Carlo-simuleringar är det likaså av betydelse hur ekvationerna ställs upp och vilka antaganden som görs om beroende mellan variablerna (se avsnitt 6).

Monte Carlo-simuleringar kan utföras med både generella matematik- och statistikprogramvaror, exempelvis Matlab®, Mathematica® och S-Plus®, liksom mer specialiserade. Crystal Ball® och @Risk® är två exempel på tilläggsprogram som gör det enkelt att genomföra simuleringar direkt i Microsoft® Excel. Analytica® är ett annat exempel på specialiserad programvara som kan hantera stora modeller med ett innovativt grafiskt användargränssnitt.

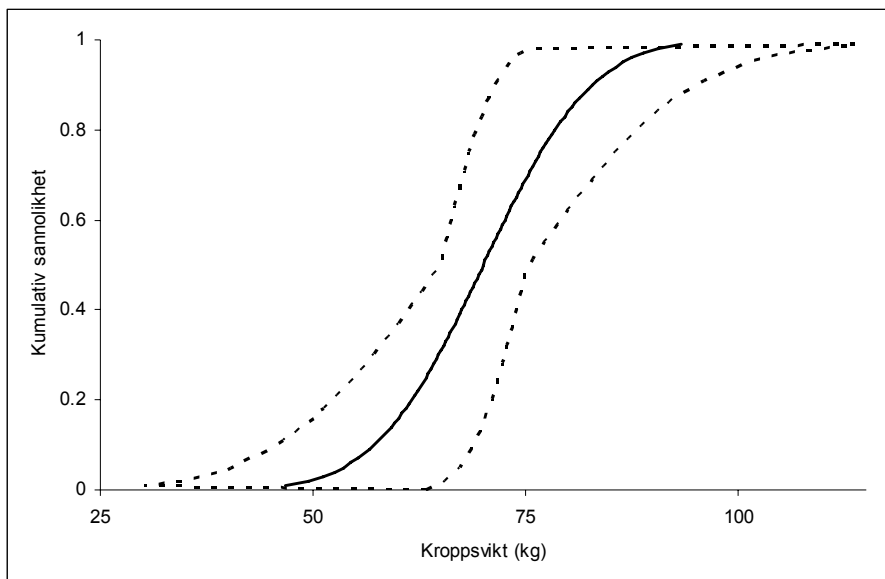
Probabilistiska beräkningar, där osäkerhet och variabilitet beskrivs med sannolikhetsfördelningar, behöver inte nödvändigtvis utföras som simuleringar. Beräkningarna kan även genomföras med analytiska metoder [6]. I programvaran RAMAS RiskCalc® sker det med en diskret analytisk metod.

Rekommendation: Monte Carlo-simulering är en lämplig metod för att skatta osäkerhet och variabilitet när sannolikhetsfördelningar som beskriver detta kan definieras för ingångsvariablerna. Dessutom bör information om det inbördes beroendet mellan ingångsvariablerna vara tillgänglig.

4.3 Probability bounds analysis (PBA)

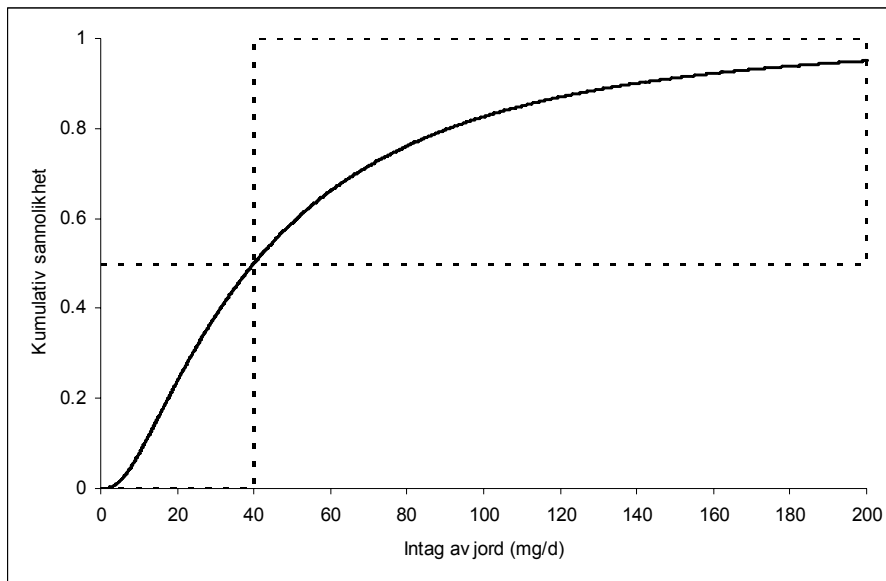
Valet av sannolikhetsfördelningar är ofta kritiskt i en probabilistisk riskbedömning (se även avsnitt 5, ”Val av sannolikhetsfördelningar”). När detaljerad kunskap saknas är det därför ofta fördelaktigt att inte binda sig för en specifik fördelning. ”Probability bounds”-analys (PBA) är en metod som utgör något av ett mellanting

mellan intervallskattningar och Monte Carlo-simuleringar. Metoden, som har utvecklats av Ferson et al., är mycket flexibel och möjliggör en kombination av information på olika nivåer [33-36]. Variabilitet beskrivs fort-farande med sannolikhetsfördelningar, medan osäkerheten beskrivs med intervall. En s.k. ”p-box” kan generaliseras och behandla båda begreppen samtidigt genom att lägga intervall till en kumulativ fördelningsfunktion. Ett exempel visas i figur 4.2, där en normalfördelning för kroppsvikt med medelvärdet 70 kg och standard-avvikelsen 10 kg jämförs med en p-box där dessa båda parametrar har avrundats till intervallen 65-75 kg respektive 5-15 kg.



Figur 4.2 Exempel på en normalfördelning för kroppsvikt (heldragen linje) jämförd med en p-box (streckad linje).

Är den exakta sannolikhetsfördelningen okänd så finns det kanske ändå information som kan ange begränsningar (”bounds”) för olika möjliga fördelningar. Barns intag av jord kan användas som exempel. Statistik från European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC) anger 50- och 95-percentilen till 40 respektive 200 mg/dag, med en maximal exponering 200 mg/dag [25]. Informationen kan användas för att definiera en lognormalfördelning trunkerad (”avhuggen”) vid 200 mg/dag. Likartat kan en p-box definieras med ett minvärde noll, ett maxvärde 200 mg/dag och en median vid 40 mg/dag. Den kumulativa sannolikhetsfördelningen, som visas i figur 4.3, överensstämmer med p-boxen för medianvärdet, men i resten av intervallet är det möjligt att formen avviker betydligt. Det framgår också av figur 4.3 att avvikelserna kan vara särskilt påtagliga vid de högsta och lägsta percentilerna.



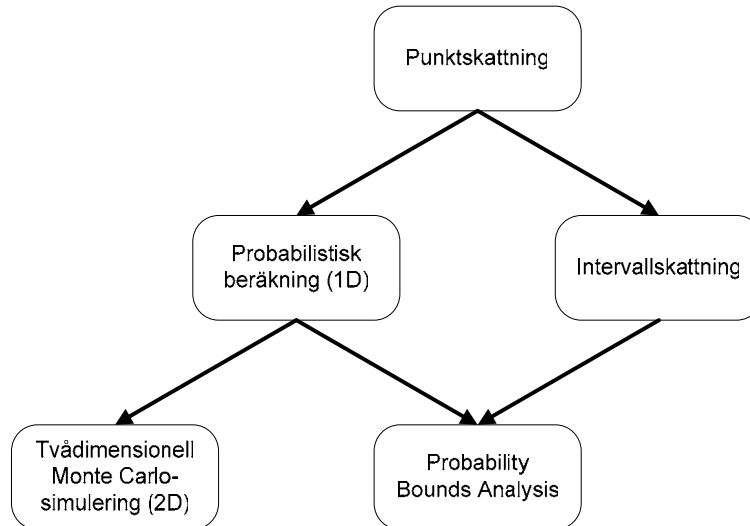
Figur 4.3 Exempel på en lognormalfördelning för intag av jord (heldragen linje) jämförd med en p-box (streckad linje).

Det går sedan att räkna ”som vanligt” med de olika ingångsvariabler som har definierats som p-boxar. Den speciella aritmetik och algoritmer som behövs för att räkna med detta utvecklades under 1990-talet och finns nu tillgängligt i några olika programvaror [37]. Dessa diskreta beräkningar går generellt sett mycket snabbare än motsvarande Monte Carlo-simuleringar och det är enkelt att kombinera p-boxar med sannolikhetsfördelningar och intervall. Metoden är därmed mycket flexibel och ett ytterligare bidrag till denna flexibilitet är hanteringen av samband mellan variabler. Oberoende är ett standardantagande vid Monte Carlo-simuleringar, men i en PBA är det lika lätt att även lämna dessa antaganden åt sidan.

Nackdelen med PBA är att bara de yttre begränsningarna anges och därför är det inte möjligt att ange det mest sannolika värdet. Samtidigt kan man fundera om det alls är möjligt att ange detta när det finns en genuin osäkerhet. Betraktar vi exemplet med normalfördelningen i figur 4.2 så går det inte att påstå att själva fördelningen är mer sannolik än ytterkanterna av p-boxen, om vi inte vet fördelningen av osäkerheterna. I allmänhet är denna okänd och då går det förstås inte att slentrianmässigt anta exempelvis normalfördelning.

När exakta sannolikhetsfördelningar kan anges för alla ingångsvariabler och om inbördes oberoende antas så konvergerar PBA-beräkningarna till samma resultat som en endimensionell (1D) Monte Carlo-simulering (se vidare avsnitt 4.4). Ett sätt att orientera sig är att se på skillnader och likheter mellan de olika metoderna. I figur 4.4 visas en bild som lånats från Ferson och som visar den inbördes relationen mellan de olika metoder som hittills har behandlats [37]. Variabilitet och osäkerheten i en deterministisk punktskattning kan beskrivas med antingen en intervallskattning eller en 1D probabilistisk beräkning (här skiljer inte Monte Carlo och PBA). Förfinas analysen ytterligare, så att osäkerhet och variabilitet skiljs åt, så är PBA en utökning av en 1D probabilistisk beräkning med en

intervallskattning. Tvådimensionell Monte Carlo-simulering är ett annat sätt att angripa detta.



Figur 4.4 Inbördes relation mellan en deterministisk punktskattning, en intervallskattning och de båda probabilistiska metoderna.

PBA-beräkningar skulle kunna utföras med generella matematikprogramvaror, som Mathematica® och Matlab®, men det finns även specialiserade programvaror. Här har vi använt RAMAS RiskCalc™, två andra exempel är StatTool och Constructor.

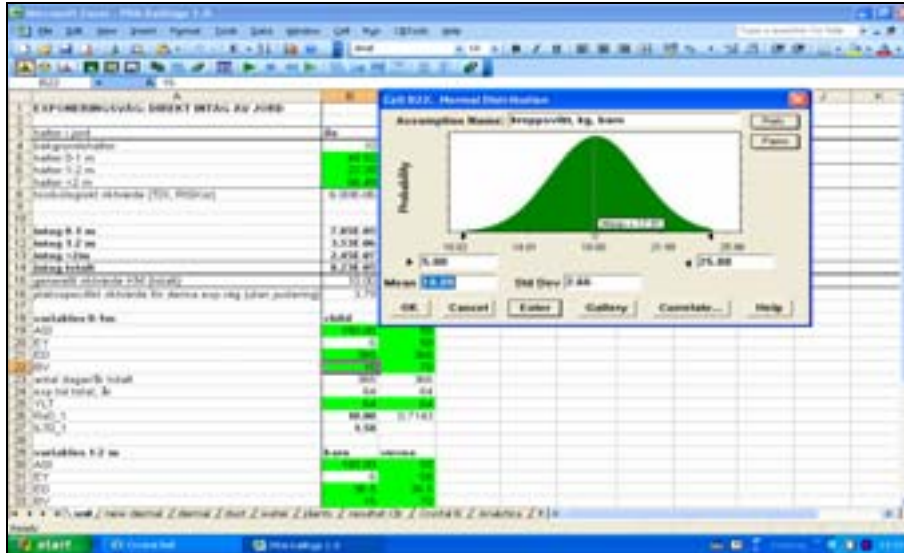
Rekommendation: Probability Bounds Analysis (PBA) är en lämplig metod för att skatta osäkerhet och variabilitet när det inte går att ange precisa sannolikhetsfördelningar för ingångsvariablerna, men när mer information finns än enbart min- och maxvärden. PBA är även användbart när det inbördes beroendet mellan ingångsvariablerna är okänt.

4.4 Utvärdering av tre programvaror

En fallstudie över ett förorenat område har använts för att utvärdera probabilistiska riskbedömningar med programvarorna Crystal Ball®, Analytica® och Risk Calc™. Utvärderingen, som redovisas mer detaljerat i bilaga 1, visar att alla tre programvarorna kan användas i en normal exponeringssituation avseende förorenad mark. Beräkningar av intag, där sannolikhetsfördelningar används för att karakterisera ingångsvariablerna, ger med samma antaganden helt likvärdiga resultat. Däremot har programvarorna delvis olika egenskaper som gör dem mer eller mindre väl lämpade i olika situationer.

Crystal Ball® har funnits på marknaden i 20 år och är ett s.k. tillägg för Microsoft Excel®. Beräkningsmodellerna sätts upp i vanliga Excel-kalkylblad och därefter anges sannolikhetsfördelningar för de ingångsvariabler som ska simuleras. Crystal Ball kan utföra både Monte Carlo simulering och Latin Hypercube Sampling (LHS). Det finns dessutom möjlighet att göra känslighetsanalyser och 2D-simuleringar för att särskilja variabilitet och osäkerhet. Det finns ett stort antal fördefinierade fördelningar att välja från och det går även att definiera en

fördelning själv. Valet av fördelning underlättas av olika statistiska test.
Användargränssnittet är grafiskt och programmet är lätt att lära sig, figur 4.5.

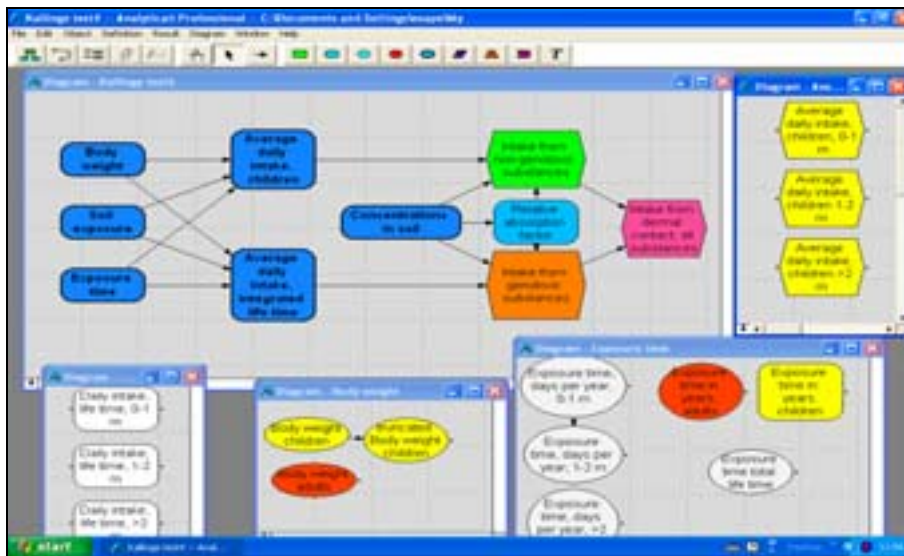


Figur 4.5 Användargränssnitt i Crystal Ball.

Resultaten kan presenteras med olika fördefinierade diagram eller Excels egna diagramfunktioner. Däremot är det svårare att följa beräkningarna eftersom matematiska formler och informationsflöden inte automatiskt visas i Excel. I detta och mycket annat så liknar Crystal Ball® simuleringsprogrammet @Risk, som även detta är ett tillägg till Microsoft Excel.

Analytica® är den andra programvaran som har utvärderats. Precis som Crystal Ball, så är det ett program för Monte Carlo och LHS-simulering. Modellerna byggs grafiskt som s.k. influensdiagram vilket bidrar till tydlighet och transparens. Analytica har också ett stort antal fördefinierade fördelningar och fler möjligheter till att utföra känslighetsanalyser. Det går även att skapa länkar till Excel för att hämta och exportera data. Däremot är det ganska besvärligt att genomföra 2D-simuleringar.

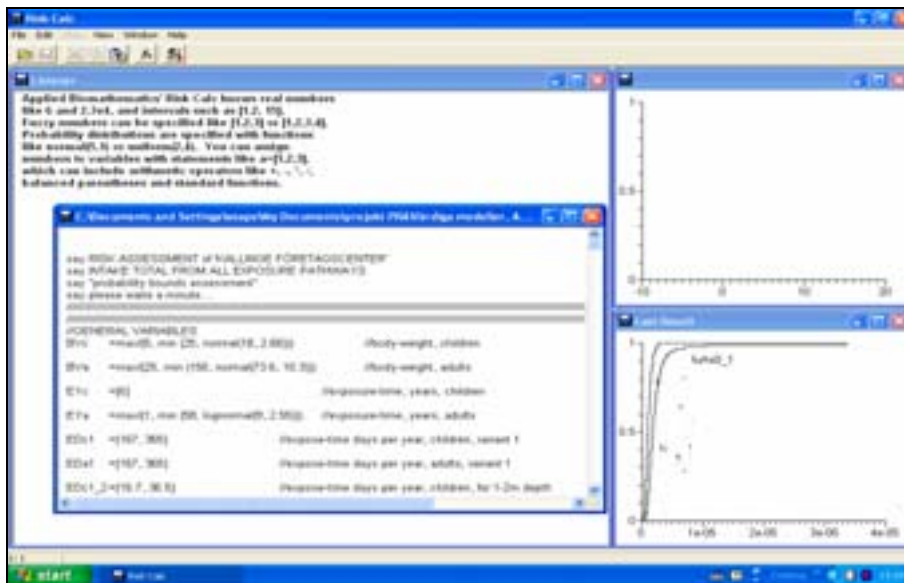
Det grafiska modellbygget i hierarkier underlättar hantering av stora och komplexa modeller, figur 4.6.



Figur 4.6 Användargränssnitt och modellbygge i Analytica.

RAMAS Risk Calc®, slutligen, erbjuder förutom beräkningar med sannolikhetsfördelningar även flera andra möjligheter för att hantera osäkerheter. Den viktigaste metoden är då ”probability bounds”-analys (PBA), som beskrevs tidigare. Alla beräkningar med Risk Calc utförs diskret, och programvaran blir därmed mycket snabb, men det går fortfarande att räkna med fördelningar precis som i Crystal Ball och Analytica. Skillnaden till de övriga programmen är inte bara hur ingångsvariablerna kan beskrivas, utan även utökade möjligheter att hantera beroende mellan variabler.

Beräkningarna i Risk Calc utförs vanligen genom att modellen skrivs in som ett skript, med förklarande text, alltså en enkel form av programmering. Alla beräkningar kan därmed överblickas och följas steg för steg, vilket underlättar granskning och felsökning. Resultaten kan presenteras grafiskt med diagram, men även exporteras till Excel. Användargränssnittet visas i figur 4.7.



Figur 4.7 Användargränssnitt och modellbygge i RAMAS Risk Calc.

Beräkningsjämförelsen som redovisas i bilaga 1 visar att alla tre programmen är likvärdiga vad avser att utföra endimensionella probabilistiska beräkningar. När det gäller separation av variabilitet och osäkerhet finns dock en metodskillnad mellan Risk Calc och de båda övriga. Risk Calc har fler möjligheter att hantera osäkerhet, men också en helt annan filosofi. PBA-metoden är tilltalande genom att den inte kräver så många antaganden och förhandsinformation som vid en Monte Carlo-simulering. PBA är också mer konservativ och fokuserar på de yttre begränsningarna i osäkerhet. Metoden är därför ett utmärkt kvalitetssäkringsverktyg som kompletterar Monte Carlo-simuleringar [35]. Crystal Ball och den besläktade programvaran @Risk är å den andra sidan lättare att använda och många riskbedömningsmodeller finns redan tillgängliga i form av kalkylblad.

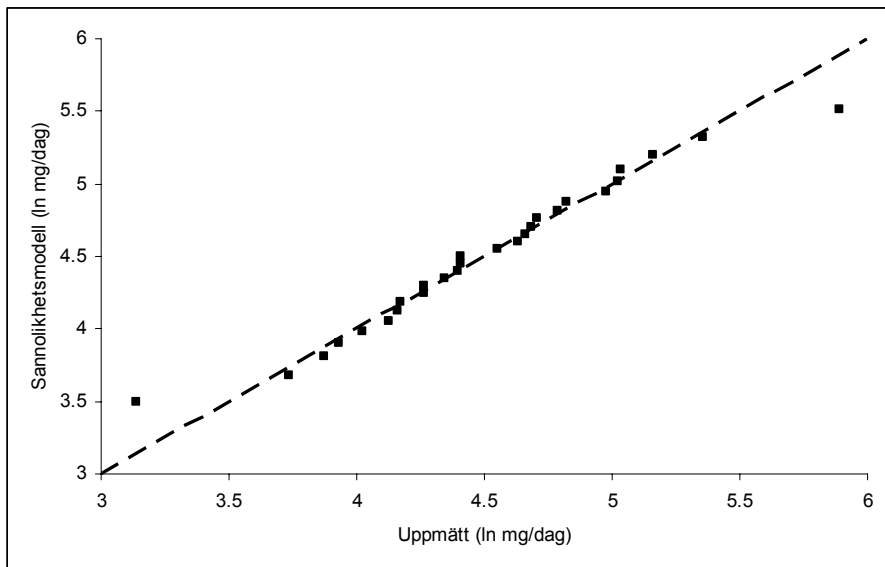
Rekommendation: Valet av programvara bör styras av syftet med undersökningen. Crystal Ball® och Analytica® är båda utmärkta hjälpmedel för Monte Carlo-simulering. RAMAS Risk Calc™ är ett lämpligt hjälpmedel för intervallskattningar och "probability bounds"-analys. Vid en endimensionell probabilistisk beräkning är de tre programvarorna likvärdiga.

5 Val av sannolikhetsfördelningar

Valet och specifikationen av sannolikhetsfördelningar för ingångsvariablerna är det enskilda moment som har störst inverkan på utfallet av en probabilistisk riskbedömning. En utvärdering av exponeringskattningar med den svenska modellen visade att valet av sannolikhetsfördelningar kan innebära en osäkerhet med i storleksordningen tre tiopotenser för det beräknade intaget av en markförening [38]. Det är därför viktigt att underlaget för valet av sannolikhetsfördelningar är väl dokumenterat och underbyggt. Längre fram i texten kommer vi även att diskutera hur man kan hantera situationer när underlag helt eller delvis saknas.

I idealfallet så finns en rent mekanistisk motivering till valet av en specifik fördelning, exempelvis Poissonfördelning för att beskriva radioaktivt sönderfall. Näst bäst är om det finns representativa och platsspecifika data i tillräcklig mängd för att både utvärdera valet av lämplig fördelning och osäkerheten i parameterkattningarna. Flera av programvarorna för Monte Carlo-simulering innehåller verktyg för att med olika statistiska test välja en lämplig fördelning. De statistiska testen bör dock alltid kompletteras med även en visuell granskning av modellanpassningen. Vi kan illustrera detta med ett exempel. En undersökning gav följande mätserie för intag av jord hos små barn: 103, 154, 23, 71, 82, 81, 42, 174, 62, 65, 108, 152, 362, 145, 120, 77, 82, 111, 124, 95, 106, 48, 71, 212, 51, 64 och 56 mg/dag.

Tre statistiska test (Chi-två, Kolmogorov-Smirnov och Anderson-Darling) användes för att utvärdera anpassningen till 11 olika kontinuerliga sannolikhetsfördelningar och lognormalfördelningen visade sig vara bäst för att beskriva mätdata. Överensstämmelsen mellan den teoretiska fördelningen och observationerna kan granskas med frekvenshistogram, men det blir tydligare om observationerna visas i ett s.k. fördelningsdiagram, figur 5.1. I diagrammet visas överensstämmelsen mellan sannolikhetsmodellen (lognormalfördelningen) och den antagna fördelningen och mätvärdena. Vid en god anpassning till den antagna sannolikhetsmodellen så bör observationerna ligga längs en rät linje.



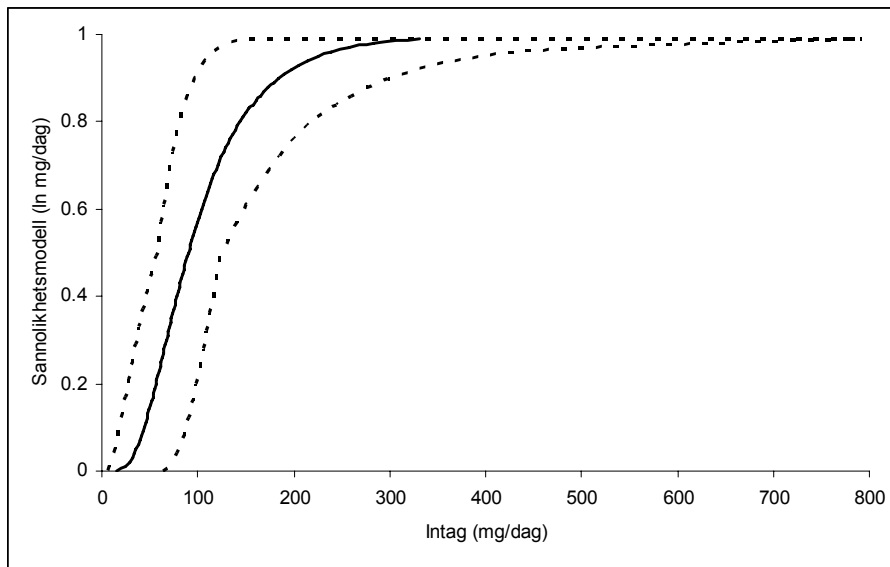
Figur 5.1 Anpassning av lognormalfördelning till uppmätt intag av jord hos barn.

När en fördelning skattas från ett empiriskt underlag bör även osäkerheten i fördelningens modellparametrar beskrivas. Denna osäkerhet bör sedan tas med i den probabilistiska riskbedömningsmodellen.

En alternativ metod till att anpassa en kontinuerlig fördelning är att direkt använda observationerna. Observationsdata kan användas för att genom åter-sampling ("bootstrapping") konstruera empiriska referensfördelningar [39, 40]. Praktiskt går bootstrapping till enligt följande:

- 1) Ett prov dras slumpmässigt från de aktuella mätdata och proceduren upprepas tills antalet prov är lika med det ursprungliga.
- 2) Det valda provet "läggs tillbaka" varje gång. Ett enskilt prov kommer därför att ibland representeras flera gånger i det nya provurvalet och ibland inte alls.
- 3) Medelvärdet (och vad man övrigt kan önska) beräknas för det nya provurvalet.
- 4) Steg 1-2 upprepas ett stort antal gånger (1000-10000). Dessa 1000-tals skattningar av medelvärdet ger den nya referensfördelningen och den 95%-iga konfidensgränsen är helt enkelt 95%-percentilen.

I exemplet med intag av jord så kan medelvärdet skattas till 105 och standardavvikelsen till 67 mg/dag. Osäkerheten (90% konfidensintervall) i medelvärdet och standardavvikelsen kan med bootstrapping skattas till 86-128 respektive 36-95 mg/dag. I figur 5.2 visas dels lognormalfördelningen med de angivna parameter-skattningarna, dels den p-box som kan definieras när medelvärde och standardavvikelse anges med osäkerhetsintervall.



Figur 5.2 Intag av jord (mg/kg) beskrivet med en lognormalfördelning (heldragen linje) och en p-box (streckad linje).

I många fall får sannolikhetsfördelningar även hämtas från litteraturen (exempelvis fysiologiska egenskaper). Då är det viktigt att kontrollera hur dessa fördelningar har tagits fram. I princip gäller samma krav för publicerade data som för de fördelningar man utvecklar själv. Ett exempel på en auktoritativ källa till information är den amerikanska "Exposure Factors Handbook" [23]. Ett problem som bör beaktas är dock att vissa ingångsvariabler kan skilja kraftigt mellan olika länder och då är det därför rekommendabelt att utgå från närliggande källor (exempelvis Statistiska centralbyrån och Livsmedelsverket).

I allmänhet krävs ett ganska omfattande dataunderlag för att säkert kunna välja en specifik teoretisk sannolikhetsfördelning. Ett alternativ är att, som angavs tidigare, direkt använda mätdata för att konstruera en empirisk fördelning. Med få mätdata kan det dock ifrågasättas om detta verkligen avspeglar den osäkerhet som finns. Den tidigare beskrivna metoden med "probability bounds" eller "p-boxes" erbjuder då ett mer flexibelt verktyg för att genomföra den probabilistiska riskbedömningen.

Rekommendation: Valet av sannolikhetsfördelningar för ingångsvariablerna i en probabilistisk riskbedömning bör motiveras och dokumenteras.

6 Oberoende mellan variabler och andra antaganden

Beroende mellan variabler har stor inverkan i probabilistiska riskbedömningar och påverkar direkt hur beräkningarna ställs upp och genomförs. Ibland används oberoende som ett slentrianmässigt grundantagande, men det är ofta felaktigt. Det inbördes beroendet kan dessutom följa direkt av hur modellen formuleras.

6.1 Upprepade parametrar

Upprepade parametrar kan betraktas som ett specialfall av beroende. Vid räkning med oprecisa tal (intervall och ”p-boxes”) så gäller inte alltid den distributiva lagen för addition och multiplikation:

$$a * (b + c) = a * b + a * c$$

Det beror i sin tur på att $\mathbf{x} - \mathbf{x} \neq [0, 0]$ vid intervallsubtraktion om inte $x_1 = x_2$. Inte heller annulleringslagen är alltid tillämplig, istället gäller en svagare variant där noll är ett element i intervallet ovan. Likartat så är $a*(b+c)$ en delmängd av $ab+ac$. Av detta kan man dra slutsatsen att upprepade parametrar i modell-ekvationerna kan ge alltför stora osäkerhetsintervall vid räkning med oprecisa tal [32]. Lösningen är givetvis att förenkla alla uttryck och ekvationer så att varje parameter förekommer endast en gång. När detta inte är möjligt kan osäkerhetsintervallet överskattas även om det alltid innefattar den korrekta lösningen. I Monte Carlo-simuleringar kan samma problem kringgås genom att alltid referera tillbaka till samma simulering av ursprungsparametern. Det är alltså viktigt att inte simulera samma parameter eller ingångsvariabel flera gånger, särskilt som effekten även kan bli den motsatta och det angivna osäkerhetsintervallet underskattas (när man antar oberoende mellan parametrarna).

Rekommendation: Upprepade parametrar och ingångsvariabler bör om möjligt elimineras i modeller som används för probabilistiska riskbedömningar. Monte Carlo-simuleringar bör alltid referera till samma simulering av ursprungsparametern.

6.2 Bakåträkning

Beroende mellan variabler omöjliggör även enkel bakåträkning av exempelvis platsspecifika riktvärden i probabilistisk riskbedömning. Det beror på inbördes parameterberoende i definitionen av våra modellekvationer [41]. Som ett exempel kan vi återigen ta det skattade intaget av arsenik i räkneexemplet från avsnitt 4.1.

Intaget beräknades enligt:

$$I = C * J / W$$

där C är halten i marken, J intaget är av jord hos barn under 7 år och W är kroppsvikten. Har vi nu fastställt det tolerabla dagliga intaget (TDI) till $6 * 10^{-6}$ mg/kg/dag, och bortser från andra exponeringsvägar, så skulle den tillåtna markkoncentrationen kunna beräknas enligt:

$$C = I * W / J$$

Vidare anger vi ingångsvariablerna som intervall, $I = [0, 6] * 10^{-6}$ mg/kg/dag, $W = [10, 30]$ kg och $J = [10, 200]$ mg/dag.

$$C = ([0, 6] * 10^{-6} * [10, 30] / [10, 200]) * 10^6 \text{ mg/kg} = [0, 18] \text{ mg/kg}$$

18 mg/kg skulle alltså vara den högsta halt som vi kan tolerera, men om vi sätter in det i ursprungsekvationen så blir resultatet

$$I = ([0, 18] * [10, 200] / [10, 30]) * 10^{-6} \text{ mg/kg/dag} = [0, 360] * 10^{-6} \text{ mg/kg/dag}$$

Det maximala intaget kan alltså överskrida det tolerabla intaget 60 ggr. Bakåträkning enligt den här metoden fungerar alltså inte som avsett. Beräkningar med genomgående konservativa antaganden kan likaså betraktas som en form av intervallskattning och medför liknande problem (över eller underskattningar). Samma problem med bakåträkning vidhäftar även Monte Carlo-simuleringar och det därför alltså inte tillrådligt.

Orsaken till att bakåträkning inte fungerar är att det innefattar ett indirekt antagande om oberoende mellan intag och föroreningshalt. Det är förstås fel då intaget i högsta grad är beroende av halten i marken.

Lösningen på problemet ser lite olika ut beroende på valet av metod för osäkerhetsanalysen. I skattningar med intervall och "probability bounds" så kan bakåträkningen lösas rent analytiskt. Det acceptabla intervallet i markkoncentrationer i exemplet ovan kan då direkt beräknas till 0-0.3 mg/kg. Tyvärr finns det inte någon lika enkel lösning för Monte Carlo-simuleringar. Platsspecifika riktvärden får istället beräknas iterativt genom att upprepade gånger justera halten i intagsberäkningen (värdet för markkoncentrationen) tills den valda percentilen, eller maxhalten, stämmer överens med TDI-värdet.

Rekommendation: Bakåträkning bör ej användas för att skatta platsspecifika riktvärden med Monte Carlo-simulering. Riktvärdet bör istället grundas på en iterativ intagsberäkning.

6.3 Beroende mellan ingångsvariabler

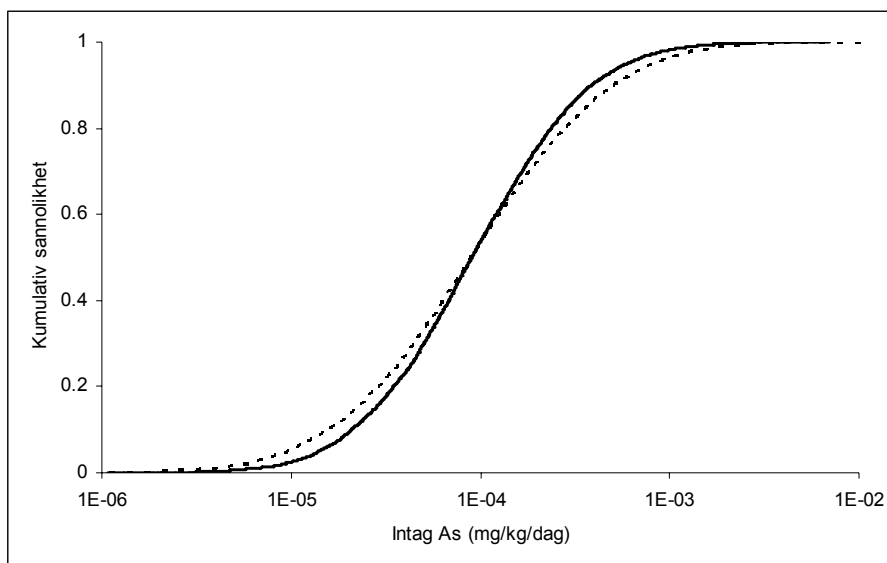
Olika ingångsvariabler kan ofta vara helt eller delvis inbördes beroende. Olika fysiologiska parametrar är ofta korrelerade, exempelvis vatten- och födointag, andningshastighet och kroppsvikt. Korrelation kan även finnas mellan andra exponeringsparametrar, exempelvis Henrys konstant och olika biokoncentrationsfaktorer. Det är heller inte osannolikt att det finns samband mellan olika typer

av ingångsvariabler som tidsanvändning (utomhusaktiviteter) och kroppsvikt. Samband som de exemplifierade, och hur de hanteras, kan ha stor betydelse för riskbedömningen.

I en intervallskattning görs inga antaganden om variablersamband och därför är den metoden okänslig för eventuella beroenden mellan variabler. I Monte Carlo-simulering är det däremot vanligt att ha oberoende som grundantagande. Detta kommer i många fall att leda till att osäkerhet och variabilitet skattas i alltför snäva intervall. Vi kan illustrera detta med det tidigare exemplet på direktintag av förorenad jord.

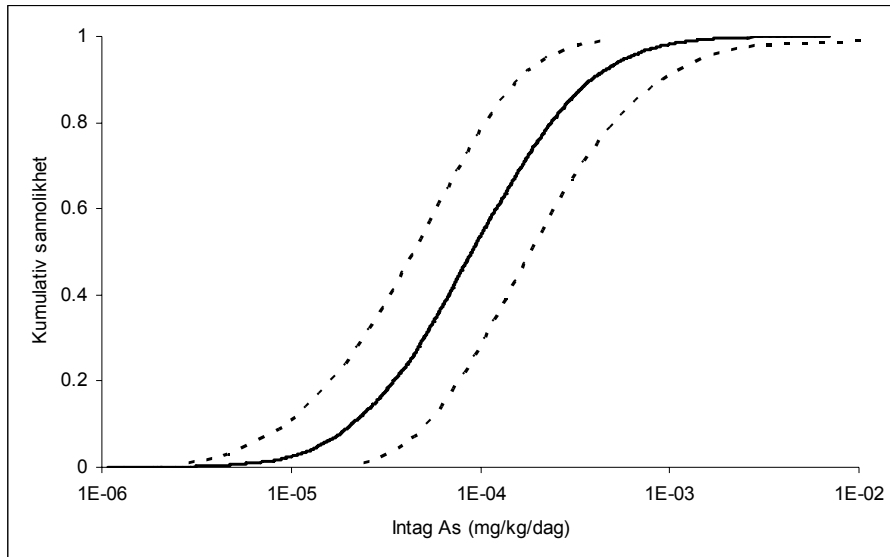
Antag att variationen av arsenikhalten (C) i förorenad mark kan beskrivas som lognormalfördelad, med medelvärdet 40 och standardavvikelsen 30 mg/kg TS. Vidare, att intaget av jord (J) hos barn under 7 år även det beskrivs med en lognormalfördelning, med medelvärdet 70 och standardavvikelsen 75 mg/dag. Slutligen antas att även vikten (W) är lognormalfördelad med medelvärdet 18 och standardavvikelsen 6 kg. Intaget av arsenik per kg kroppsvikt beräknas som tidigare enligt: $I_{As} = C * J / W$.

Antar vi nu oberoende mellan ingångsvariablerna och genomför en Monte Carlo-simulering (10 000 iterationer) så kan intaget beskrivas med en sannolikhetsfördelning som har 5- och 95-percentilerna $13 * 10^{-6}$ och $600 * 10^{-6}$ mg/kg/dag. Antar vi istället att det finns ett negativt samband mellan jordintag och kroppsvikt, alltså att små barn konsumerar mer jord, så blir resultatet något förändrat. I exemplet nedan har vi ansatt en rangkorrelationskoefficient på -0.8. Med en ny Monte Carlo-simulering (10 000 iterationer) så kan intaget nu beskrivas med en fördelning som har 5- och 95-percentilerna $10 * 10^{-6}$ och $830 * 10^{-6}$ mg/kg/dag, alltså 30-40% ändring. I figur 6.1 visas de kumulativa sannolikhetsfördelningarna för respektive antagande.



Figur 6.1 Intag av arsenik hos barn (mg/kg/dag), Monte Carlo-simuleringar med antagande om oberoende (heldragen linje) respektive partiellt beroende mellan jordintag och kroppsvikt ($r_{rang} = -0.85$, streckad linje).

Antar vi att alla typer av beroende kan finnas mellan jordintag och kroppsvikt så blir skillnaderna betydligt större. I figur 6.2 visas den p-box som omsluter alla dessa möjligheter till inbördes beroende mellan de båda variablerna. Osäkerheten i 95-percentilen är nästan en tiopotens, eller $2.2 \cdot 10^{-4}$ - $15 \cdot 10^{-4}$ mg/kg/dag.



Figur 6.2 Intag av arsenik hos barn (mg/kg/dag), Monte Carlo-simuleringar med antagande om oberoende (heldragen linje) respektive p-box som innesluter alla typer av beroende mellan jordintag och kroppsvikt (streckade linjer).

I en större modell kan beroenden mellan variabler ha stor inverkan, men dessa är sällan karakteriserade på ett sådant sätt att det kan användas i riskmodelleringen. Det är då rimligt att komplettera riskbedömningen med ett scenario där olika typer av beroende kan förekomma. ”Probability bounds”-analys är den metod som enklast kan hantera detta (förutom intervallskattningar).

Rekommendation: Beroenden mellan ingångsvariabler bör karakteriseras och tas med i riskbedömningsmodellen. Saknas information om oberoende så bör även konsekvenserna av olika typer av beroende utvärderas/beskrivas.

7 Känslighetsanalyser

Känslighetsanalys används som beteckning på metoder för att kvantifiera hur ingångsvariablerna inverkar på utfallet av modellberäkningarna. En probabilistisk riskbedömning kan ses som en övergripande känslighetsanalys, men i allmänhet vill man särskilja och skatta inverkan av varje ingångsvariablerna var för sig.

Ett syfte med känslighetsanalysen kan vara att förenkla arbetet genom att en del variabler med mindre inflytande ersätts av punktskattningar. Arbetet kan då fokuseras till att konstruera tillförlitliga sannolikhetsfördelningar för de väsentligaste ingångsvariablerna [42]. Känslighetsanalysen visar också var ytterligare undersökningar för att minska osäkerheter ger mest effekt på slutresultatet. Ytterligare ett viktigt syfte med känslighetsanalysen är att visa vilka exponeringsvägar som har störst betydelse.

Ett enkelt sätt att undersöka känsligheten för variationer i en enskild ingångsvariabel är att variera denna och studera utfallet för modellen [7]. Det är enkelt att förstå och genomföra, men om många variabler ska utvärderas så blir det ganska tidsödande (särskilt om samverkans effekter ska studeras). Beräkningsresultaten kan normaliseras genom att räkna alla förändringar på procentbasis [2].

Känslighetskvoten ("sensitivity ratio") definieras som:

$$SR = \frac{\left(\frac{y_2 - y_1}{y_1} \right) \times 100\%}{\left(\frac{x_2 - x_1}{x_1} \right) \times 100\%}, \text{ där } y_1 \text{ är referensvärdet för resultatvariabeln, } y_2 \text{ är resultatet när en av ingångsvariablerna ändras, } x_1 \text{ är referensvärdet och } x_2 \text{ är det nya värdet för ingångsvariabeln.}$$

En annan metod att undersöka känsligheten för ändringar i ingångsvariablerna är att beräkna de partiella derivatorna med avseende på resultatet. Det kan exemplifieras med uttrycket för intag av en markförorening:

$$I = C * J / W$$

Partialderivatorna av I med avseende på C , J och W är då:

$$\partial I / \partial C = J / W, \partial I / \partial J = C / W \text{ respektive } \partial I / \partial W = - C * J / W^2$$

Antar vi följande värden för ingångsvariablerna: $C = 6 \text{ mg/kg}$, $J = 50 \text{ mg/dag}$ och $W = 20 \text{ kg}$, så kan intaget beräknas till $15 * 10^{-6} \text{ mg/kg/dag}$. Partialderivatornas storlek är beroende av valet av enhet för storheten X_i , så därför kan det vara lämpligt att normera dessa genom att dela med kvoten för punktskattningen I / X_i . Känsligheten för respektive variabel kan då beräknas till:

$$\begin{aligned}\text{Norm}(\partial I / \partial C) &= (50 / 20) / (15 / 6) = 1 \\ \text{Norm}(\partial I / \partial J) &= (6 / 20) / (15 / 50) = 1 \\ \text{Norm}(\partial I / \partial W) &= -(6 * 50 / 20^2) / (15 / 20) = -1\end{aligned}$$

Exemplet är alltså ganska trivialt och det behövs ju inga räkneoperationer för att direkt från formeln se hur de tre ingångsvariablerna inverkar. Lite mer komplicerat blir det om vi istället utgår från följande matematiska beskrivning av koncentrationen i porvatten:

$$C_w = C_s \left[K_d + \frac{(\theta_w + \theta_a H)}{\rho_b} \right]^{-1}$$

De partiella derivatorna är:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C_w}{\partial C_s} &= \frac{\rho_b}{K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w} & \frac{\partial C_w}{\partial K_d} &= \frac{-C_s \rho_b^2}{(K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w)^2} \\ \frac{\partial C_w}{\partial \theta_w} &= \frac{-C_s \rho_b}{(K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w)^2} & \frac{\partial C_w}{\partial \theta_a} &= \frac{-H C_s \rho_b}{(K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w)^2} \\ \frac{\partial C_w}{\partial H} &= \frac{-C_s \rho_b \theta_a}{(K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w)^2} & \frac{\partial C_w}{\partial \rho_b} &= \frac{C_s (H \theta_a + \theta_w)}{(K_d \rho_b + H \theta_a + \theta_w)^2}\end{aligned}$$

Antar vi förorening med fenol och följande värden för ingångsvariablerna [12]: $C_s = 10$ mg/kg, $K_d = 0.6$ L/kg, $\theta_w = 0.3$, $\theta_a = 0.2$, $H = 1.6 * 10^{-5}$ och $\rho_b = 1.5$ kg/dm³. Då kan C_w beräknas till 12.5 mg/L och analogt med tidigare så blir de normerade partiella derivatorna:

$$\begin{aligned}\text{Norm}(\partial C_w / \partial C_s) &= 1.00 & \text{Norm}(\partial C_w / \partial K_d) &= -0.75 \\ \text{Norm}(\partial C_w / \partial \theta_w) &= -0.25 & \text{Norm}(\partial C_w / \partial \theta_a) &= -2.67 * 10^{-6} \\ \text{Norm}(\partial C_w / \partial H) &= -2.67 * 10^{-6} & \text{Norm}(\partial C_w / \partial \rho_b) &= 0.25\end{aligned}$$

Beräkningen visar att andelen porluft och Henrys konstant saknar betydelse i det aktuella fallet eftersom fenol huvudsakligen fördelar sig till vattenfasen.

Nu finns det en begränsning i att använda partialderivator och det är att dessa representerar lokala approximationer som egentligen bara är giltiga inom ett begränsat område, men det är inte ovanligt att utöka det undersökta området [6]. Partialderivatorna för en hel exponeringsmodell blir naturligtvis betydligt mer komplicerade än exemplen ovan, men då går det att ta hjälp av programvaror för symbolisk derivering.

Partialderivatorna är användbara för att med olika probabilistiska metoder dels beräkna känsligheten, dels skatta osäkerheten i dessa beräkningar [43]. Naturligtvis är det då inte lika enkelt att inbördes rangordna olika ingångsvariabler.

Vid utvärdering av känsligheten i Monte Carlo-simuleringar är det vanligt att direkt granska sambanden mellan simulerade värden för ingångsvariablerna och modellresultatet. Ofta brukar korrelationskoefficienten användas som ett mått på känsligheten. Den vanliga korrelationskoefficienten, Pearsons

korrelationskoefficient, förutsätter ett linjärt samband och normalfördelade data. Rangkorrelation, Spearmans eller Kendalls korrelationskoefficient, är därför ofta att föredra eftersom den enda förutsättningen är att sambandet kan beskrivas av en godtycklig funktion som är monotont ökande eller minskande.

Funktions sambandet mellan en ingångsvariabel och resultatet är inte alltid monotont (växande eller avtagande). En enkel grafisk analys (X-Y-plott) kan visa om så är fallet och ge vägledning för hur känsligheten bör utvärderas. Variansanalys (ANOVA) och regression är exempel på alternativ till korrelationskoefficienter för att utvärdera känsligheten [7, 44].

En ”probability bounds”-analys (PBA) kan dels utvärderas med partialderivatorna, dels genom att studera effekten av minskad osäkerhet i ingångsvariablerna. Praktisk går det till så att för en enskild ingångsvariabel så ersätts p-boxen med en hypotetisk sannolikhetsfördelning utan osäkerhet. Därefter utvärderas effekten på osäkerheten i modellresultatet, som ofta är tydligast i de höga percentilerna [35]. Därigenom kan värdet av ytterligare undersökningar och forskningsinsatser kvantifieras och en prioritering blir möjlig. Variabilitet kan undersökas likartat genom att ersätta p-boxen med en punktskattning.

En riskbedömningsmodell är givetvis även känslig för de modellantaganden som ligger bakom och valet av exponeringsscenario. Känsligheten för dessa kvalitativa skillnader undersöks vanligen genom att upprepa beräkningarna för några olika fall som bedöms relevanta. Ett exempel kan vara olika typer av markanvändning såsom det avspeglas i de generella riktvärdena för förorenad mark.

Rekommendation: En probabilistisk riskbedömning bör åtföljas av någon typ av känslighetsanalys. Valet av analysmetod bör motiveras.

8 Resultatredovisning och kvalitetssäkring

Redovisningen av resultat från en probabilistisk riskbedömning bör givetvis alltid inledas med en problemformulering och redogörelse för bakgrunden och motivet för arbetet.

En grundläggande princip för redovisningen av en kvantitativ riskbedömning är att en granskare ska kunna förstå och reproducera alla steg i bedömningen inklusive alla beräkningar. Det förutsätter att modellekvationer redovisas, liksom punktskattningar eller fördelningar för ingångsvariablerna. Likaså måste olika övervägande och beslut i metodfrågor redovisas, exempelvis valet emellan olika modeller. Eftersom den detaljeringsgraden sannolikt inte efterfrågas av alla läsare så kan rapporten med fördel delas upp i en huvudtext och bilagor.

Flera olika genomgångar av lämpligt innehåll finns publicerade [1, 2, 11, 45, 46]. Innehållet i den tekniska redovisningen har redan behandlats i de tidigare avsnitten i rapporten. Däremot finns det skäl att diskutera vilka kvalitets-säkringsåtgärder som i övrigt behövs. Vetenskaplig expertgranskning ("peer review") har införts av U.S. EPA och en oberoende granskning av denna typ har många fördelar. Granskning av ytterligare experter leder nästan alltid fram till en bättre bedömning därför att olika fel kan rättas och presentationen av utförande och resultat förtydligas. Därutöver ger granskningen, förutsatt att den utförs av oberoende experter, en ökad trovärdighet i resultatet. Det sistnämnda är viktigt för både beslutsfattare och allmänhet, som kanske inte alltid själva har möjlighet att sätta sig in i alla tekniska detaljer.

Validering av riskbedömningsmodellerna är en annan kvalitetshöjande åtgärd. Praktiskt kan detta ske på flera olika sätt. Nedan anges några olika punkter att beakta vid validering av en exponeringsmodell:

- 1) Arbetsprocessen för framtagning av modellen
- 2) Validering av modellekvationer
- 3) Validering av ingångsvariabler
- 4) Känslighetsanalyser
- 5) Prediktionsförmåga

Alltmer av kvalitetsarbetet inriktas på att säkerställa att produktionsprocessen ger en fullgod produkt istället för att enbart förlita sig på slutkontroll. Detta synsätt kan tillämpas på både varor och tjänster, liksom framtagningen av en exponeringsmodell. Sker modelleringsarbetet systematiskt och är väldokumenterat så ger det i sig en god validering av den slutliga modellen. Ofta är det dock så att frågan om kvalitetssäkring väcks först när det finns en färdig produkt, i detta fall en modell. Det är då lämpligt att börja valideringen med de olika delsystemen, i detta fall modellekvationerna.

För struktur-aktivitetssamband (SAR) finns ett antal kvalitetskrav fastställda som med fördel även kan tillämpas för andra delmodeller [47]:

- 1) Den modellerade egenskapen/storheten ska vara definierad/mätbar.
- 2) Beräkningsgången ska vara definierad och transparent.
- 3) Modellen ska ha en definierad tillämpningsdomän.
- 4) Modellens prediktionsförmåga ska redovisas.
- 5) Modellen ska vara (vetenskapligt) tolkningsbar.

Som synes så överlappar vissa av kvalitetskraven för delmodellerna och den fullständiga exponeringsmodellen. När delmodellerna är kvalitetssäkrade så bör även indata valideras. Olika ämnes- och scenariospecifika parametrar kontrolleras då mot tillgängliga undersökningsdata, exempelvis från den vetenskapliga i litteraturen. Tidigare redovisade känslighetsanalyser är också en del av valideringen.

Validering av den sammanfogade exponeringsmodellen är önskvärd, men ofta besvärlig att genomföra i praktiken. Det finns exempel när biomonitorering har använts för att verifiera att beräknat intag motsvarar det faktiskt uppmätta [48-50], men detta får ses som rena forskningsuppgifter.

Rekommendation: Probabilistiska riskbedömningar bör redovisas så att beräkningsresultaten kan verifieras utifrån rapporterade uppgifter. Riskbedömningar av större marksaneringsprojekt bör regelmässigt genomgå granskning av oberoende experter. Riskbedömningsmodellen och dess delkomponenter bör vara validerade.

9 Riskkommunikation

Det har ofta framförts att beslutsfattare och allmänhet inte kan förstå osäkerhet och att det leder till beslutsförlamning och otrygghet. Modernare forskning tyder på att så inte behöver vara fallet [51]. Tvärtom så underskattas ofta icke-experters förmåga att förstå och hantera osäkerheter [52]. Ett tydligt budskap som även innefattar information om de osäkerheter som råder leder till ökad trovärdighet och minskad oro. Acceptansen är större för osäkerheter som beror på bristande vetenskaplig förståelse, jämfört med brister i själva utförandet av riskbedömningen.

Hur ska då resultatet från en probabilistisk riskbedömning kommuniceras? Det första är att tydligt formulera problemet och förklara metodvalet. Då är det nödvändigt att förklara bristerna i att enbart utgå från punktskattningar. Enklarest är då att börja med variabilitet mellan individer, exempelvis i intag av olika livsmedel eller någon fysiologisk parameter. Det är förstås lämpligt att då utgå från den aktuella situationen eller projektet som ska riskbedömas. Det innebär även en redovisning av riskbedömningsmodellen inklusive den variabilitet och osäkerhet som karakteriserar viktiga ingångsvariabler.

Visuella hjälpmedel underlättar i allmänhet kommunikationsprocessen, men det är samtidigt nödvändigt att inte överbelasta budskapet med en uppsjö av diagram och figurer. Riskbedömningsmodellerna kan med fördel kommuniceras med bilder eller flödesdiagram. Variabilitet åskådliggörs bäst med kumulativa fördelningsfunktioner [53, 54]. Osäkerhet kan då enkelt adderas i figuren som konfidensband eller p-boxes. Diagram och figurer bör dock alltid åtföljas av förklarande text.

Sannolikheter i nivån 0.5 (50%) är ofta lätta att förstå och föreställa sig, eftersom det är något vi möter i det dagliga livet. Små sannolikheter är bättre att uttrycka som frekvenser, alltså 2 av 10000 istället för 0.0002 [53].

Rapporteringskraven för en probabilistisk riskbedömning är, som framgår av denna rapport, omfattande. Det är då svårt att göra rapporteringen både tillgänglig och fullständig i en löpande rapporttext. Den tekniska redovisningen kan därför med fördel ske i bilagor. Mer omfattande rapporter bör dessutom alltid förses med en relativt grundlig sammanfattning (några sidor), som tar upp syfte, omfattning, utförande och resultat.

En svårighet som inte kan undvikas är avsaknaden av beslutskriterier. Den information som kommer fram i en probabilistisk riskbedömning ger betydande tolkningsmöjligheter. Det kan naturligtvis upplevas som en brist, men det kan också ses som en värdefull tillgång i och med att det skapar ett förhandlingsutrymme. Olika parter och beslutsfattare kan därmed ges en reell möjlighet till medverkan och inflytande. Det anses ofta som en förutsättning för framgångsrik riskkommunikation som ju bygger på interaktion mellan likställda parter.

Rekommendation: Probabilistiska riskbedömningar bör kommuniceras så att motivet för att använda metoden tydliggörs. Variabilitet och osäkerhet bör visualiseras med kumulativa fördelningsfunktioner och sannolikheter bör uttryckas som frekvenser. Rapporteringen bör disponeras så att den motsvarar olika grupperns krav på redovisning (fyllig sammanfattning, rapporttext samt tekniska bilagor).

10 Slutsatser

Syftet med denna rapport är att ge vägledning i genomförandet av probabilistiska riskbedömningar dels för att uppnå god kvalitet, dels för att möjliggöra oberoende granskning av resultaten. Förslagen på rutiner för kvalitetssäkring är huvudsakligen av principiell karaktär. Vi har medvetet försökt att undvika detaljstyrning som kan hämma utveckling och användning av alternativa analysmetoder.

Probabilistiska riskbedömningsmetoder bör övervägas när en förenklad bedömning inte kan friskriva från risker och kostnaderna för efterbehandling är betydande. Probabilistisk metodik har ett brett tillämpningsområde, men för närvarande bör användningen fokuseras till exponeringsanalys och ekologiska effekter. Skälet för denna avgränsning är att en vetenskaplig konsensus ännu inte har uppnåtts om hur dos-responssamband för människor bäst ska hanteras.

Flera olika typer av osäkerhet och variabilitet kan ingå i en probabilistisk riskbedömning. Det är lämpligt att en kvantitativ beskrivning görs av både parameterosäkerhet och interindividuell variabilitet. Andra typer av osäkerheter och variabilitet kan hanteras kvalitativt eller genom att undersöka ett antal alternativa problemdefinitioner.

Valet av metod för den probabilistiska riskbedömningen bör styras av dels den aktuella frågeställningen, dels tillgången på data. När endast min och maxvärden är kända för ingångsvariablerna så är intervallskattning en lämplig metod. Monte Carlo-simulering kan användas när det finns underlag för att beskriva osäkerhet och variabilitet med sannolikhetsfördelningar. ”Probability bounds”-analys intar en mellanställning och är en användbar metod när precisa sannolikhetsfördelningar eller inbördes beroenden är svåra att definiera.

De programvaror som utvärderades i projektet var beräkningsmässigt helt likvärdiga när variabilitet eller osäkerhet beskrevs med precisa sannolikhetsfördelningar. I andra sammanhang skiljer sig programvarorna åt och valet av beräkningsverktyg bör då styras av både den lämpligaste beräkningsmetoden och kunskaperna i hanteringen.

I probabilistiska riskbedömningar är valet av sannolikhetsfördelningar den enskilt viktigaste faktorn som påverkar utfallet av beräkningarna. Det är därför av största vikt att valet av dessa fördelningar utförligt motiveras och dokumenteras. Likartat så bör inbördes beroende mellan ingångsvariablerna karakteriseras. Hänsyn till beroende bör också tas när riskbedömningsmodeller konstrueras.

Någon typ av känslighetsanalys bör alltid ingå i en probabilistisk riskbedömning, särskilt i de fall när det primära syftet är att identifiera de faktorer som har stor inverkan på utfallet och var ytterligare kunskapsinhämtning är mest välmotiverad. Valet av metod bör även här motiveras.

Validering av en probabilistisk riskbedömning uppnås dels genom att själva arbetsprocessen kvalitetssäkras, dels genom att beräkningsresultaten redovisas så att de kan verifieras utifrån rapporterade uppgifter. Vi rekommenderar att riskbedömningar för större marksaneringsprojekt genomgår en oberoende expertgranskning.

Probabilistiska riskbedömningar kan bli ett hjälpmedel för effektiv riskkommunikation genom att analysprocessen tydliggör de osäkerheter som döljs i en traditionell deterministisk riskberäkning. Dessa osäkerheter, som nu redovisas öppet, innebär att beslut inte kan överlämnas till experter för avgörande. Istället blir det naturligt med en beslutsprocess grundad i en dialog eller förhandling mellan de som berörs av beslutet. En meningsfull dialog förutsätter att man från början klargör motivet för valet av riskbedömningsmetod. Rapporteringen bör också disponeras så att den motsvarar olika gruppers krav på redovisningen.

11 Referenser

1. *Guiding principles for Monte Carlo analysis*. Rapport nr: EPA/630/R-97/01, 1997, U.S. Environmental Protection Agency: Washington, DC.
2. *Risk assessment guidance for Superfund: Volume III - Part A, Process for conducting probabilistic risk assessment*. Rapport nr: EPA 540-R-02-002, 2001, U.S. Environmental Protection Agency: Washington, DC.
3. Öberg, T., *Probabilistisk riskbedömning fas 1. Sannolikhetsbaserad uppskattning av miljö- och hälsorisker i förorenade markområden – en litteraturöversikt*. Rapport nr: 5532, 2006, Naturvårdsverket: Stockholm.
4. Öberg, T. och B. Bergbäck, *A review of probabilistic risk assessment of contaminated land*. Journal of Soils and Sediments, 2005. 5(4): sid. 213 - 224.
5. Burgman, M.A., *Risks and decisions for conservation and environmental management*. Ecology, biodiversity, and conservation. 2005, Cambridge University Press: New York.
6. Morgan, M.G., M. Henrion och M. Small, *Uncertainty: a guide to dealing with uncertainty in quantitative risk and policy analysis*. 1990, Cambridge University Press: New York.
7. Cullen, A.C. och H.C. Frey, *Probabilistic techniques in exposure assessment: a handbook for dealing with variability and uncertainty in models and inputs*. 1999, Plenum Press: New York.
8. Vose, D., *Risk analysis: a quantitative guide*. 2:a uppl. 2000, Wiley: New York.
9. Rosén, L., L. Larborn och H. Stridsman, *Kostnads-nytta-risk baserad prioritering av förorenade områden. Beskrivning av PRIOR-metoden*. Rapport, 2004, SWECO VIAK och Scandiaconsult Sverige AB: Göteborg.
10. Bergius, K., Öberg, T. *Initial screening of contaminated land: A comparison of U.S. and Swedish methods*. Environmental Management, accepterad för publicering.
11. Burmaster, D.E. och P.D. Anderson, *Principles of good practice for the use of Monte Carlo techniques in human health and ecological risk assessments*. Risk Analysis, 1994. 14: sid. 477-481.
12. Elert, M., C. Jones och F. Norman, *Development of generic guideline values - Model and data used for generic guideline values for contaminated soil in Sweden*. Rapport nr: 4639, 1997, Naturvårdsverket: Stockholm.

13. Schwarzenbach, R.P., P.M. Gschwend och D.M. Imboden, *Environmental organic chemistry*. 2:a uppl. 2002, Wiley: Hoboken, USA.
14. MacIntosh, D.L., G.W. Suter och F.O. Hoffman, *Uses of probabilistic exposure models in ecological risk assessment of contaminated sites*. Risk Analysis, 1994. **14**(4): sid. 405-419.
15. McKone, T.E., *Uncertainty and variability in human exposures to soil contaminants through home-grown food - a Monte-Carlo assessment*. Risk Analysis, 1994. **14**(4): sid. 449-463.
16. Kostka-Rick, R. och O. Meikel, *Selecting bioconcentration factors for minimizing uncertainty in probabilistic exposure assessment for cadmium*. Fresenius Environmental Bulletin, 2003. **12**(6): sid. 581-583.
17. McKenna, S.A., *Geostatistical approach for managing uncertainty in environmental remediation of contaminated soils: Case study*. Environmental & Engineering Geoscience, 1998. **4**(2): sid. 175-184.
18. Hertwich, E.G., T.E. McKone och W.S. Pease, *A systematic uncertainty analysis of an evaluative fate and exposure model*. Risk Analysis, 2000. **20**(4): sid. 439-454.
19. Katsumata, P.T. och W.E. Kastenbergh, *On the impact of future land use assumptions on risk analysis for Superfund sites*. Journal of the Air & Waste Management Association, 1997. **47**(8): sid. 881-889.
20. Moschandreas, D.J., H. Ari, S. Karuchit, Y. Kim, M.D. Lebowitz, M.K. O'Rourke, S. Gordon och G. Robertson, *Exposure to pesticides by medium and route: The 90th percentile and related uncertainties*. Journal of Environmental Engineering - ASCE, 2001. **127**(9): sid. 857-864.
21. Zhao, Q. och J.J. Kaluarachchi, *Risk assessment at hazardous waste-contaminated sites with variability of population characteristics*. Environment International, 2002. **28**(1-2): sid. 41-53.
22. Papameletiou, D. och P.J. Hakkinen. *The "European Exposure Assessment Toolbox"*, presentation vid *the Society for Risk Analysis Annual Meeting*. 5-8 december 2004, Palm Springs, Kalifornien, USA.
23. *Exposure factors handbook*. Rapport nr: PB98-124217, 1997, U.S. Environmental Protection Agency: Washington DC.
24. *Status report about the development of the "European exposure assessment toolbox" at EIS-ChemRisks*. Rapport, 2003, European Commission, Joint Research Centre: Ispra, Italien.
25. *Exposure factors sourcebook for European populations (with focus on UK data)*. Rapport nr: 79, 2001, European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals: Bryssel.

26. Jantunen, M., V. Vuori, H. Hendolin och A. Jetsu, *ExpoFacts - Exposure Factors Sourcebook for Europe*. 2004, Folkhälsoinstitutet: Helsingfors.
27. van Alphen, B.J. och J.J. Stoorvogel, *Effects of soil variability and weather conditions on pesticide leaching — A farm-level evaluation*. Journal of Environmental Quality, 2002. **31**(3): sid. 797-805.
28. Burmaster, D.E. och K.M. Thompson, *Estimating exposure point concentrations for surface soils for use in deterministic and probabilistic risk assessments*. Human and Ecological Risk Assessment, 1997. **3**(3): sid. 363-384.
29. Ryti, R.T., *Superfund soil cleanup - developing the Piazza Road remedial design*. Journal of the Air & Waste Management Association, 1993. **43**(2): sid. 197-202.
30. Starzec, P., T. Purucker och R. Stewart, *Kvantifiering och presentation av osäkerheter i riskbedömning och beslutsprocess: exemplifiering med fallstudier*. Rapportutkast, 2006.
31. Sander, P., B. Bergbäck och T. Öberg. *An evaluation of software for probabilistic risk assessment*. Posterpresentation vid *the Annual Meeting of the Society for Risk Analysis*. 4-7 december, 2005, Orlando, Florida.
32. Ferson, S., *RAMAS Risk Calc 4.0 software: Risk assessment with uncertain numbers*. 2002, Lewis Publishers: Boca Raton, FL, USA
33. Regan, H.M., B.E. Sample och S. Ferson, *Comparison of deterministic and probabilistic calculation of ecological soil screening levels*. Environmental Toxicology And Chemistry, 2002. **21**(4): sid. 882-890.
34. Ferson, S. och J.G. Hajagos, *Arithmetic with uncertain numbers: rigorous and (often) best possible answers*. Reliability Engineering and System Safety, 2004. **85**(1-3): sid. 135-152.
35. Regan, H.M., B.Y. Hope och S. Ferson, *Analysis and portrayal of uncertainty in a food-web exposure model*. Human and Ecological Risk Assessment, 2002. **8**(7): sid. 1757-1777.
36. Ferson, S. och L.R. Ginzburg, *Different methods are needed to propagate ignorance and variability*. Reliability Engineering and System Safety, 1996. **54**(2-3): sid. 133-144.
37. Ferson, S. och W.T. Tucker. *Beyond Monte Carlo: An introduction to imprecise probabilities*. Workshop vid *the Annual Meeting of the Society for Risk Analysis*. 4-7 december, 2005, Orlando, Florida.

38. Sander, P., B. Bergbäck och T. Öberg, *Uncertain numbers and uncertainty in the selection of input distributions – Consequences for a probabilistic risk assessment of contaminated land*. Risk Analysis, accepterad för publicering.
39. Efron, B. och R. Tibshirani, *An introduction to the bootstrap*. Monographs on statistics and applied probability; 57. 1993, Chapman & Hall/CRC: New York.
40. Singh, A.K., A. Singh och M. Engelhardt, *The lognormal distribution in environmental applications*. Rapport nr: EPA/600/R-97/006, 1997, U.S. Environmental Protection Agency: Washington, DC.
41. Ferson, S., *What Monte Carlo methods cannot do*. Human And Ecological Risk Assessment, 1996. **2**(4): sid. 990-1007.
42. Maddalena, R.L., T.E. McKone, D.P.H. Hsieh och S. Geng, *Influential input classification in probabilistic multimedia models*. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment, 2001. **15**(1): sid. 1-17.
43. Tucker, W.T. och S. Ferson, *Probability bounds analysis in environmental risk assessments*. Rapport nr, 2003, Applied Biomathematics: Setauket, NY, USA.
44. Frey, H.C., A. Mokhtari och J. Zheng, *Recommended practice regarding selection, application, and interpretation of sensitivity analysis methods applied to food safety process risk models*. Rapport, 2004, North Carolina State University, Raleigh, NC, USA.
45. Hope, B. och M. Stock, *Guidance for use of probabilistic analysis in human health risk assessments*. Rapport, 1998, Oregon Department of Environmental Quality: Portland, OR, USA.
46. Maund, S., P. Byrne, P. van den Brink, S. Beulke, H. Galicia, A. Hart, L. Posthuma och K. Solomon, *EUFRAM work package 6: Guidance for reporting probabilistic assessments*. Rapport, 2004, Central Science Laboratory: York, Storbritannien.
47. *Principles for the validation, for regulatory purposes, of (quantitative) structure-activity relationship models*. 2004, Organisation for Economic Co-operation and Development: Paris.
48. Dor, F., P. Empeur-Bissonnet, D. Zmirou, V. Nedellec, J.-M. Haguenoer, F. Jongeneelen, A. Person, W. Dab och C. Ferguson, *Validation of Multimedia Models Assessing Exposure to PAHs - The SOLEX Study*. Risk Analysis, 2003. **23**(5): sid. 1047-1057.
49. Cohen, J.T., B.D. Beck, T.S. Bowers, R.L. Bornschein och E.J. Calabrese, *An arsenic exposure model: Probabilistic validation using empirical data*. Human and Ecological Risk Assessment, 1998. **4**(2): sid. 341-377.

50. Tristán, E., A. Demetriades, M.H. Ramsey, M.S. Rosenbaum, P. Stavrakis, I. Thornton, E. Vassiliades och K. Vergou, *Spatially resolved hazard and exposure assessments: An example of lead in soil at Lavrion, Greece*. Environmental Research, 2000. **82**(1): sid. 33-45.
51. Kuhn, K.M., *Message format and audience values: Interactive effects of uncertainty information and environmental attitudes on perceived risk*. Journal of Environmental Psychology, 2000. **20**(1): sid. 41-51.
52. Frewer, L., *The public and effective risk communication*. Toxicology Letters, 2004. **149**: sid. 391-397.
53. Lipkus, I.M. och J.G. Hollands, *The visual communication of risk*. Journal of the National Cancer Institute Monographs, 1999. **25**: sid. 149-163.
54. Ibrekk, H. och M.G. Morgan, *Graphical communication of uncertainty quantities to nontechnical people*. Risk Analysis, 1987. **7**: sid. 519-529.

Probabilistisk riskbedömning fas 2

RAPPORT 5621

NATURVÅRDSVERKET
ISBN 91-620-5621-2
ISSN 0282-7298

Förorenade områden medför risker för hälsa och miljö som ibland kan vara svåra att kvantifiera. Här redovisas den andra fasen i ett projekt som beskriver hur kvantitativa riskbedömningar kan kompletteras med en sannolikhetsbaserad – probabilistisk – metod. Den probabilistiska metoden innebär att naturlig variation och osäkerhet kan karakteriseras för att få ett bättre beslutsunderlag och kunskap om hur bedömningen ytterligare kan förfinas. Probabilistiska riskbedömningar baseras i allmänhet på simuleringar av utfall från ett stort antal möjliga val av värden för ingångsvariabler och modellparametrar. Probabilistisk riskbedömning har ofta använts för att etablera platsspecifika riktvärden och det är här som en framtida användning främst kan förutses i Sverige. I rapporten från ”Probabilistisk riskbedömning - fas 1” gjordes en litteraturoversikt i ämnet. I denna andra fas beskrivs hur probabilistiska riskbedömningar av förorenad mark kan genomföras och kvalitetssäkras.

Naturvårdsverket har inte tagit ställning till innehållet i rapporten. Författarna svarar själva för innehåll, slutsatser och eventuella rekommendationer.

Kunskapsprogrammet Hållbar Sanering samlar in, bygger upp och sprider kunskap om förorenade mark- och vattenområden. Genom Hållbar Sanering kan myndigheter, forskare och företag söka bidrag för utredningar, seminarier och utvecklingsprojekt som täcker kunskapsluckor på kort och lång sikt. Hållbar Sanering styrs av en programkommitté som består av representanter från Banverket, Göteborgs stad, KTH, Linköpings Universitet, Länsstyrelsen i Kalmar, Naturvårdsverket, Norges Teknisk- Naturvetenskaplige Universitet; SGI, SLU, Sydkraft SAKAB och Umeå Universitet.