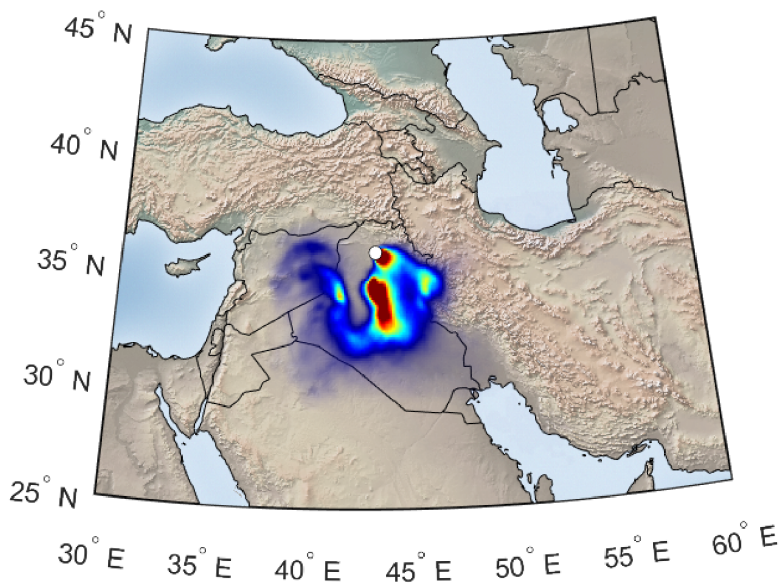
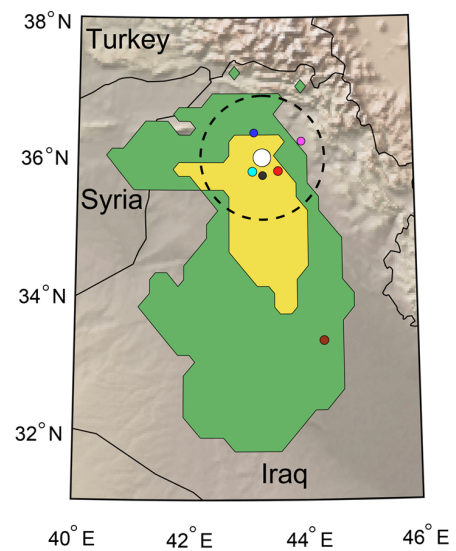


OSCAR BJÖRNHAM, PETTER LINDGREN, HÅKAN GRAHN,
SOFIA JONASSON, ULRIKA BERGSTRÖM, ÅSA GUSTAFSSON,
CHRISTIAN LEJON, JALIL BAHAR GOGANI, NIKLAS BRÄNNSTRÖM,
JONAS NÄSLUND, LAILA NOPPA, GÖRAN BUCHT OCH JAN BURMAN

Koncentrationsfält



Riskområde



Oscar Björnham, Petter Lindgren, Håkan Grahm, Sofia Jonasson,
Ulrika Bergström, Åsa Gustafsson, Christian Lejon, Jalil Bahar
Gogani, Niklas Brännström, Jonas Näslund, Laila Noppa,
Göran Bucht och Jan Burman

Effektmodeller

Slutrapport 2016-2018

Titel	Effektmodeller
Title	Effect Models
Rapportnr/Report no	FOI-R--4731--SE
Månad/Month	Januari
Utgivningsår/Year	2019
Antal sidor/Pages	29 p
ISSN	1650-1942
Kund/Customer	Försvarsdepartementet
Forskningsområde	2. CBRN-frågor och icke-spridning
FoT-område	
Projektnr/Project no	A406418
Godkänd av/Approved by	Åsa Scott
Ansvarig avdelning	CBRN-skydd och säkerhet

Bild/Cover: FOI/Oscar Björnham

Detta verk är skyddat enligt lagen (1960:729) om upphovsrätt till litterära och konstnärliga verk, vilket bl.a. innebär att citering är tillåten i enlighet med vad som anges i 22 § i nämnd lag. För att använda verket på ett sätt som inte medges direkt av svensk lag krävs särskild överenskommelse.

This work is protected by the Swedish Act on Copyright in Literary and Artistic Works (1960:729). Citation is permitted in accordance with article 22 in said act. Any form of use that goes beyond what is permitted by Swedish copyright law, requires the written permission of FOI.

Sammanfattning

Denna rapport beskriver översiktligt resultaten från projektet Effektm modeller under projektperioden 2016-2018. Effektm modeller innefattar flertalet delområden som till stor del arbetar separat och oberoende av varandra. De tre ämnesområdena biologiska, kemiska och radioaktiva ämnen har fortskridit genom att bygga på och förbättra tidigare resultat. Inom biologiska ämnen har sekundärsmitta och epidemiologi stått i fokus. En total översyn har skett vad gäller tidigare probitparametrar inom kemiska ämnen med jämförelser mot tidigare resultat samt två externa toxikologiska dataset. Nya fantom och miljöer har tagits fram och kvantitativt utforskats för stråldosberäkningar för gammastrålning från partiklar på olika avstånd med olika strålningsenergier. Utöver de tre ämnesområdena har en ny depositionsmodell färdigutvecklats och implementerats med syftet att ge förbättrad ingångsdata till effektm modellerna. Effektm modulen har fått en rad nya funktionaliteter där olika former av befolkningsrepresentationer samt agenthantering bör nämnas. Nya komponenter under denna period har varit studier angående lungdepositionsmodeller för aerosoler samt numerisk optimering av stråldosberäkningar. Slutligen har två fallstudier kopplade till kriget i Irak/Syrien genomförts vilket har visat på bra resultat och belyst områden i behov av utveckling.

Abstract

This report describes briefly the results from the project Effect models during the period 2016-2018. Effect models contains several fields that mainly operate separately and independently of each other. The fields for biological, chemical and radioactive substances have all made progress by building on and improving earlier results. Secondary infections and epidemiology have been in focus in the area of biological substance. A thorough review and update have been conducted regarding probit parameters for chemical substances. This included a comparison with earlier results and with two external toxicological data sets. New and improved phantoms have been constructed to which gamma radiation dosages have been quantitatively determined for different environmental conditions. The sources are located at different distances and with a variety of radiation energies which allows for utilization in generic situations. In addition to the three substance fields, progress have been made regarding a new deposition model which is now finalized and implemented. This development promises improved input data to the effect models. The Effect module has been improved with a number of new functionalities where different forms of population representations and support for agents may be mentioned. Two new fields have been studied during this period: a review of models for lung deposition of aerosols and numerical optimization for radiation dosage calculations. Finally, two case studies have been conducted coupled to the war in Iraq/Syria. The results were encouraging and also indicated fields in need of improvement for Effect models.

Innehåll

Sammanfattning	4
Abstract	4
1. Bakgrund och syfte	6
2. Biologiska ämnen	7
3. Kemiska ämnen	9
Regressionskoefficienter till probit-funktion.....	9
Förstudie av ny modell för dos-respons	10
4. Radiologiska ämnen	11
5. Deposition	13
6. Lungdeposition	14
7. System	14
8. Fallstudier	15
9. Diskussion	16
10. Referenser	18
Appendix – Effektiv stråldosberäkning	20
Grid binning	20
Statistiskt urval	21
Testupplägg och prestandamått.....	21
Resultat och diskussion.....	23

1. Bakgrund och syfte

I vårt industrialiserade samhälle finns det ett brett spektrum av farliga ämnen med väsensskilda karaktärer. Det är inte entydigt vad som menas med ett farligt ämne men en allmän beskrivning är att en relativt låg exponering kan ge upphov till en hälsofara. Risken för skada och dess karaktär beror på flertalet parametrar såsom ämnet, den utsattes hälsotillstånd, exponeringens storlek och förlopp.

En första klassificering av olika ämnen sker genom uppdelningen i kemiska, biologiska, radioaktiva ämnen. Som underklasser till dessa finns t.ex. kemiska stridsmedel, toxiska industrikemikalier, virus, bakterier, alfa-, beta och gamma-strålning. Samtliga av dessa underklasser innehåller ytterligare uppdelningar ner till den mest grundläggande agensnivån. Även typ av exponering är avgörande och där finns det aspekter som exponering på hud, genom andning eller födointag, extern strålning, ämnets aggregationstillstånd, aerosolstorlekar, koncentrationer och tidsförlopp. För att kunna hantera alla dessa förutsättningar införs ett rationellt tillvägagångssätt där frågeställningarna renodlas för olika grupperingar med liknande egenskaper.

Den grövsta indelningen sker genom indelningen i C-, B- och R-ämnen. Strukturen på problematiken mellan dessa områden skiljer sig åt så mycket att det inte är meningsfullt att försöka formulera problem eller lösningar på en övergripande nivå. Även inom varje område spänner parametrarna som listades ovan totalt upp en enorm domän vilken är omöjlig att undersöka induktivt. Dessutom innebär själva problemområdet att direkta försök ofta är etiskt omöjliga att genomföra. Experiment, mätningar och analyser av opplanerade händelser ger viktig information. Men informationen blir sporadisk och gäller då endast vissa starkt begränsade kombinationer av ämnen och exponeringar. Dessutom tenderar experimentellt framtagen data att vara fokuserad på relativt kraftig exponering av praktiska skäl. En låg exponering ger ett lågt skadeutfall och då krävs mer omfattande statistiskt underlag för att erhålla signifikanta resultat. Då detta blir dyrare och mer omständligt används istället oftast högre exponeringar. Ironiskt nog är det dock ofta skaderisker vid låg exponering som är av intresse i verkliga fall.

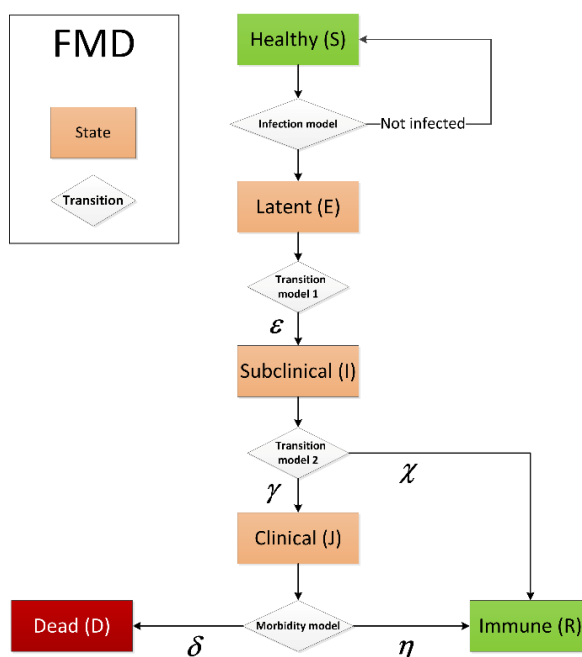
För att uppskatta och förstå effekter och risker vid exponering för farliga ämnen vid generiska förutsättningar krävs modeller. Genom att konstruera relevanta modeller med parametrar som anpassas efter kända datapunkter kan förlopp och risker för händelser med förutsättningar som aldrig har testats förutsägas. Detta är den största styrkan med att modellera effekterna av exponering för farliga ämnen och det huvudsakliga motivet till att projektet Effektm modeller är viktigt. Denna rapport ger en sammanfattande beskrivning av det arbetet som pågått under projektperioden 2016-2018. För mer detaljerad information inom olika specifika delområden hänvisas läsaren till övriga rapporter som levererats under denna period.

2. Biologiska ämnen

Under denna projektperiod har Effektm modeller medfinansierat MSB 2:4-projektet *Planeringsverktyg för hantering av smittspridning från djur via luft i besättning och under transport*. Det projektet hanterar sjukdomsmodeller och epidemiologisk modellering bland djurbesättningar. Fokus har legat på framförallt mul- och klövsjukan och Q-feber som orsakas av ett picornavirus respektive bakterien *Coxiella burnetii*. Principiellt fungerar sjukdomsmodeller likadant för djur som för människor, varför modeller och metoder som utvecklas för smittspridning inom boskap även är tillämpningsbara för smittspridning bland människor.

En generisk mall för sjukdomsmodeller har utvecklats vilken beskriver olika diskreta tillstånd samt det dynamiska flödet mellan tillstånden (Björnham et al. 2017b, Brännström and Johansson 2013). Ett exempel på en specifik sjukdomsmodell framtagen utifrån denna mall ges i figur 1 för mul- och klövsjukan (FMD). Modellen visar på utvecklingen hos en enskild individ som alltid befinner sig i ett av sex möjliga tillstånd vilka representeras av rektanglarna. Beroende på sjukdom kan det finnas olika former av information kopplat till de olika tillstånden som inte syns i flödesschemat i figur 1. Ett exempel på sådan information är hur smittsam en individ är beroende på tillstånd. Transitionsmodeller, romber i figuren, hanterar flödet mellan tillstånden vilket oftast sker med en viss sannolikhet per tidsenhet. I **Figur 1** är parametrar för överföringshastigheten mellan tillstånden utritade men ingår egentligen i respektive transitionsmodell.

Infektionsmodellen är en transitionsmodell men fungerar annorlunda än övriga transitionsmodeller genom att den använder sig av en dos-respons-modell för att uppskatta risken att en frisk individ, i tillståndet *Healthy*, som har exponerats för ett smittsamt ämne blir sjuk och hamnar i tillståndet *Latent*. Det finns alltså ingen överföringshastighet i infektionsmodellen. I sjukdomsmodellen för FMD kommer en individ som blivit sjuk att ta sig igenom olika tillstånd på väg till antingen tillståndet *Dead* eller tillståndet *Immune*.



Figur 1. Sjukdomsmodellen som används för mul- och klövsjukan.

Sjukdomsmodeller är konstruerad för enskilda individer men kan även användas direkt på en hel befolkning om befolkningen är ”well-mixed” vilket innebär att det är en homogen befolkning där alla har samma kontaktyta mot alla andra inom befolkningen. I en stor befolkning kan då enskilda individer ersättas med andel av befolkningen i de olika tillstånden och ett kontinuerligt flöde ersätter diskreta slumpmässiga förflyttningar. Detta är en vanlig modelltyp som används för att uppskatta t.ex. hur stor andel av en befolkning som behöver vaccineras för att uppnå flockimmunitet.

Smittspridning av mul- och klövsjuka utgör första detaljerade studien på FOI som inkluderar sjukdomsmodellen. Resultatet för Effektmodeller är inte färdigställt vid avslutningen av denna projektperiod men planen är att det ska presenteras 2019. En sjukdomsmodell för smittkoppor är också framtagen under denna period vilken är mer komplicerad och visas i rapporten *Effektmodeller 2017* (Björnham et al. 2017b).

Effektmodeller var representerat i det internationella symposiet *6th Annual Disease Modeling Symposium*¹ i Seattle, US, 2018. Detta är ett årligen återkommande symposium som arrangeras av *The Institute for Disease Modeling* som är en stark aktör vad gäller modellering och simulering av smittsamma sjukdomar. Deltagandet gav ny insikt i området, bra kontakter men också en bekräftelse på att Effektmodeller är på rätt spår och att den beskrivna sjukdomsmodellen är rätt väg framåt.

¹ <http://www.idmod.org/symposium2018>

3. Kemiska ämnen

FOI har under många år använt en probit-modell för att uppskattning av de toxiska effekter som orsakas av inhalation. Ett omfattande arbete har genomförts för att förbättra ämnesparametrarna genom en översyn av vilket data som har använts som grund till toxikologiska bedömningar. Detta arbete redovisas nedan tillsammans med en beskrivning av en förstudie om behov och möjlighet att utveckla modellen för att omfatta ett större spann av scenarion.

Regressionskoefficienter till probit-funktion

Läckage av flyktiga och högtoxiska kemikalier kan bilda gasmoln, som ibland kan transporteras långa avstånd med vinden innan turbulensen späder ut gasmolnen till ofarliga koncentrationer. Spridningsmodeller som tas fram vid FOI beskriver fördelningen av kemikalier i omgivningen efter händelser med kemikalieutsläpp till luft som till exempel en olycka, brand eller attentat. Med dessa beräkningar som grund kan man därefter uppskatta skaderisken för allmänheten vid olika exempel på händelser med kemikalieutsläpp till luft.

För att kunna göra skadeutfallsberäkningar behövs exponeringsdata av god kvalitet för olika exponeringstider och med tydliga mätbara effekter. I detta arbete har vi använt riktvärden från AEGL² eftersom de är vetenskapligt baserade, finns öppet tillgängliga, beskriver effekter och skadeutfall vid flera tidpunkter och är utformade och beräknade utifrån en genomsnittlig population, d.v.s. både för friska och känsliga individer. Vi har tagit fram ett förbättrat underlag så att skadeutfallsberäkningar kan göras vid spridningsscenarier vid valfria tider upp till åtta timmars exponering. Detta har vi gjort genom att ta fram regressionskoefficienter för probitfunktionen från värden för AEGL-3.

En översyn av tidigare års arbeten genomfördes 2018 och presenteras i rapporten *Probit functions for selected chemicals based on AEGL-3 values* (Bergström et al. 2018). Denna rapport är helt omarbetad mot tidigare rapporter. Tidigare har vi inkluderat flera vanliga och/eller giftiga kemikalier samt några kemiska stridsmedel som klassificeras som massförstörelsevapen i FN:s resolution 687 (United Nations Security Council 1991). Vi har inkluderat ytterligare ämnen och dessa valdes då de kan återfinnas i brandrök. I denna rapport används beräkningar för probit enligt en internationellt använd modell där metoden tillämpas på data för AEGL-3. Detta innebär att vi i denna rapport endast behandlar risk för dödliga skador efter akut exponering via inhalation. Detta möjliggör även en internationell jämförelse och här har vi jämfört data framtagna från AEGL-3 med värden framtagna av RIVM³ (Nederländerna). RIVMs värden baseras på dödliga skador efter en akut inhalationsexponering från en kemikale och tas, liksom AEGL, fram av en expertpanel. Det som också är nytt i rapporten är att det visas flera tabeller och figurer på hur regressionsfaktorerna påverkar vilka koncentrationer i luft som skulle kunna leda till ett visst skadeutfall efter olika tider av exponering.

Med resultaten från rapporten kommer skadeutfallsberäkningar kunna göras i spridningsberäkningar av fler kemikalier än tidigare. Rapporten förtydligar hur beräkningarna är gjorda och på vilka grunder. Vi pekar även på att en uppskattning av skadeutfallet vid en

² Acute Exposure Guideline Levels, framtaget av en kommitté vid U.S. National Research Council

³ Holländska institutet för folkhälsa och miljö

viss koncentration och exponeringstid kan skilja sig beroende på att de baseras på olika studier, olika tolkning av toxicitetsdata samt användning av faktorer för att översätta resultat från djur till människa och för att inkludera känsliga individer. En stor del av skillnaderna beror på faktorer för översättning av resultat och innan det är klarlagt vad skillnaderna främst beror på, t.ex. tolkning av osäkerhet eller inkludering av känsliga individer, så föreslår vi att två riskområden tas fram vid beräkning av kemikaliers spridning efter exempelvis ett utsläpp.

Förstudie av ny modell för dos-respons

När man gör skadeutfallsberäkningar baseras detta på underlag från studier där man har analyserat effekterna efter inhalation av kemikalier från en enstaka exponering med en fast koncentration i luften. Hur kan man göra en modellering av skadeutfall när koncentrationen i luften varierar över tid, exempelvis en kortvarig exponering för hög koncentration följt av en låg koncentration och sedan en hög koncentration igen? Denna typ av situation är inte ovanlig i verkligheten t.ex. när brandrök från större bränder byter riktning på grund av väderomslag.

Under 2018 har vi sökt i litteraturen efter beräkningsmodeller som kan ta hänsyn till hur en återhämtning under en period med lägre koncentration i luften påverkar skadeutfallet. Vi har under året konstaterat att det finns ett fåtal djurstudier där inhalationsexponering ges med ett exponeringsuppehåll, något som skulle behövas för att kunna göra mer verklighetsnära beräkningar. Vi har dock hittat några vetenskapliga rapporter som skulle kunna utgöra en grund för att ta hänsyn till återhämtning. Under kommande period avser vi att med befintliga vetenskapliga rapporter som grund utforska detta område djupare med målsättningen att förbättra den toxikologiska modelleringen.

4. Radioaktiva ämnen

Extern bestrålning, där strålkällan befinner sig utanför kroppen men utsänder joniserande strålning som når den, är en viktig exponeringsväg vid olika händelser med radioaktiva ämnen. Detta kan vara aktuellt vid en kärnkraftsolycka eller efter en nukleär detonation. Stråldosen genom extern bestrålning kan komma direkt från luftburna radioaktiva partiklar eller från aktivitet deponerad i/på mark och andra ytor.

Förutom den specifika frågeställningen i projektet Effektmodeller, föreligger en mer generell frågeställning beträffande extern dosimetri som behandlas parallellt i FOI-projektet *Dosimetri*. I Dosimetri strävas det efter att skapa generiska verktyg för beräkning av stråldos från olika typer av joniserande partiklar i omgivningen med hjälp av MCNP-simuleringar (Team 2003). För att de generiska verktyg som skapas ska kunna tillämpas i Effektmodeller behöver stråldosen till människan beräknas från enstaka modellpartiklar som följs från utspridningspunkten till deponeringspunkten i spridningsmodeller. Det koncept som utvecklas ska kunna svara på dosimetriska frågeställningar i idealiserade strålningsgeometrier samt lösa den mer specifika frågeställningen inom Effektmodeller. Med idealiserade strålningsgeometrier menas oändligt eller semi-oändligt utsträckta strålkällor som är homogent fördelade. Vidare ska dosberäkningsmetoden vara utformad så att den ska gå att tillämpa i komplexa strålningsgeometrier såsom i urbana miljöer. Detta utgör en stor utmaning och idag finns det inte tillförlitliga data tillgängliga för den typen av komplex geometri.

Arbetet under den aktuella projektperioden kan indelas i fyra huvudgrupper: (1) modifiering av modeller och modellverktyg, (2) generering av stråldosdata baserade på inom projektet framtagna modeller, (3) framtagning av konceptuella lösningar för nya strålningsgeometrier samt (4) validering av stråldosdata.

En basal komponent för extern dosimetri och den modell som kan tillämpas för frågeställningarna i Effektmodeller, är matematiskt beskrivna människofantom. Till en början använde FOI matematiska fantom som genererades med en kommersiell mjukvara, *BodyBuilder* (Van Riper 2003). Genomförda tester visade att dessa fantom hade flera stora brister i form av avsaknad eller felaktiga organdata eller instabilitet vid simuleringar. Dessa korrigerades till en början individuellt för varje enstaka fantom som genererades med ovannämnd mjukvara för att skapa FOI:s första två referensfantom, MCAP1 och FCAP1 (vuxet manligt och kvinnligt fantom). Stråldosdata för dessa två fantom finns att tillgå men har inte publicerats. För att åstadkomma en systematisk lösning på problemen utvecklades en egen mjukvara vid FOI, *Fantomen*, där ovannämnda initiala fel åtgärdades (Backman 2016). Mjukvaran Fantomen kan generera manliga och kvinnliga människofantom i olika åldrar från nyfödd till vuxen. Ett vuxet manligt (MCAP2) och ett vuxet kvinnligt fantom (FCAP2) som genererats med FOI:s mjukvara valdes för efterföljande valideringsarbete. Stråldosen till kroppens olika organ samt den effektiva dosen per fluens på grund av extern fotonstrålning simulerades i MCNP för dessa två fantom. Valideringen prövar därmed simuleringarna utifrån två aspekter: att de genererade fantomen är tillförlitliga som dosimetriska verktyg samt att algoritmerna för stråltransport producerar acceptabla resultat. Valideringsarbetet har i detalj dokumenterats i en FOI-rapport (Bahar Gogani et al. 2016) där god överensstämmelse med referensdata (Publ 1996, Zank et al.) påvisas i referensgeometri i vakuum. Förutom en systematisk lösning på

fantomgenereringen genomfördes en del förbättringar i fantomen- såsom indelningen av magsäcken i magsäcksvägg samt innehåll- och i dosberäkningsalgoritmen för benmärg.

I det efterföljande arbetet (Bahar Gogani et al. 2018) genomfördes ytterligare modifieringar, bl.a. inkorporerades en ny algoritm för beräkning av stråldos till ytliga organ och vävnader som tillämpades i simuleringarna i enlighet med ICRP 103 (ICRP 2007), en ny metod för bestämning av dos till benytor implementerades och en alternativ metod för simulering av dos till benmärg togs fram samt den senaste elektronalgoritmen (*eng.* bin-centered (Team 2003)) infördes i koden. Stråldosdata för olika organ samt effektivdos bestämdes både enligt den förra formalismen i ICRP 60 (ICRP 1991) och enligt den senaste i ICRP 103 (ICRP 2007). I den senaste versionen av mjukvaran Fantomen och i FOI:s referens-fantomserie (FCAP3, MCAP3) har magtarmkanalen modifierats så att väggar och innehåll för alla sektioner i kolon differentierats och ett kvinnligt fantom baserat på modellen Eva, utvecklat vid *Institut für Strahlenschutz*, har inkluderats (Zank et al.). Avgränsade tester visade att stråldosen till magtarmkanalen vid fotonbestrålning inte förändrades signifikant relativt tidigare resultat (Bahar Gogani et al. 2018) och därför gjordes inga nya dostabeller för de senaste fantomen.

Tidigare fantom hade använts vid simuleringar i luft med och utan mark i form av standarddjord med strålkälla i luft och på mark. De omfattande modifieringarna, särskilt vad gäller ytliga organ och vävnader, som ledde till utvecklingen av FCAP3 och MCAP3, gjorde det nödvändigt att uppdatera dessa stråldosdata. Simuleringarna är klara för dessa geometrier men har inte dokumenterats ännu. En anledning till avvaktan är avsaknaden av jämförelsedata för validering. Den speciella strålningsgeometrin som tillämpas för Effektm modeller är unik och det saknas publicerat data för direkta jämförelser. Indirekta jämförelser är dock möjliga i idealiserade geometrier där radioaktiviteten antas vara homogent och semi-öändligt spridd i luft eller i/på mark (Agency 1993). Detta föranleder å sin sida att algoritmen i simuleringarna ändras så att nya serier av stråldosdata kan genereras med FOI:s fantom i de idealiserade geometrierna och med de i referensen (Agency 1993) aktuella luft och markförhållandena. Detta arbete har påbörjats för ett antal utvalda nuklider deponerad i mark på 1 cm djup och de preliminära resultaten är i god överensstämmelse med referensdata. Valideringsarbetet fortsätter med radioaktivitet i luft och på mark samt i andra djup i mark i idealiserade geometrier.

Det är brukligt att stråldosdata simuleras vid en viss uppsättning av luftparametrarna tryck, temperatur och luftfuktighet för en viss kemisk komposition i luften. De vanligaste parametervärdena är 101,325 kPa, 20 °C och torr luft. Den kemiska kompositionen varierar mellan olika studier men variationerna är normalt sett små. De faktiska luftparametrarna vid en verklig händelse avviker oundvikligen från standardvärdena som har använts vid simuleringar vilket är en faktor som kan ha inverkan på stråldosen till målpunkten (människan) från ett t.ex. radioaktivt moln. Vid korta avstånd mellan strålkällan och målpunkten är effekten på stråldosdata orsakat av de avvikande luftvärden försumbar. Vid långa avstånd (över tiotals meter) kan dock korrekationer vara nödvändiga på grund av förändringar i luftens absorptions- och spridningsförmåga. För att kvantifiera effekten av variationer i luftparametrar på stråldosdata har simuleringar genomförts med det kvinnliga fantomet vid andra förhållanden än de standardiserade parametervärdena för tryck, temperatur och luftkomposition. Resultaten indikerar att så kallade *buildup*-faktorer som beror på tryck och temperatur kan tillämpas för att korrigera datat. *Buildup*-faktorerna för en viss uppsättning av luftförhållanden kan bestämmas med *Geometric Progression* teknik (Yoshida 2006) som sedan tillämpas på stråldosdata som har tagits fram vid standardförhållanden.. Korrektionsfaktorerna kan tillhandahållas antingen i form av tabellverk eller analytiska

uttryck. I fallet med varierande luftfuktighet är situationen mer komplex då det inbördes förhållandet mellan ingående grundämnena i luften förändras. Detta medför att attenueringsförmågan i luft förändras vilket inte medger en enkel korrektion på stråldosdata. Simuleringar har hittills gjorts vid 3 olika fotonenergier för varierande tryck, temperatur och luftfuktighet. Dessa behöver kompletteras med nya simuleringar för att ta fram en övergripande metod för korrektioner i dessa avseenden. Data från detta moment är planerat att presenteras i kommande rapporter.

För att studera effekten av variation av material i mark på stråldosdata, har det kvinnliga fantomet använts i simuleringar stående på ytor bestående av asfalt och jord. Radioaktiviteten placerades på mark och i luft på olika avstånd vid 3 olika fotonenergier (50, 662 och 2000 keV). Simuleringsresultaten jämfördes med motsvarande stråldoser från simuleringar med jord som markmaterial. Data från detta moment är också planerat att presenteras i kommande rapporter. Det manliga fantomet har använts vid simuleringar med fantomet stående i högt gräs (1 m höjd) där radioaktiviteten lagts i omgivande luft, på gräset, eller både i luft och i grässkiktet. Den konceptuella lösningen för denna strålningsgeometri har därmed tagits fram men simuleringar har endast gjorts vid en fotonenergi (50 keV) och vid bara ett avstånd mellan strålkälla och människa (2 m). Den kemiska kompositionen i standardgräs (Lagerkvist et al. 2018) har inte angetts i litteraturen och därför användes vatten för den konceptuella lösningen ovan. För att förbereda för kompletterande simuleringar har en kemisk komposition som kan representera den för standardgräs tagits fram (Lagerkvist et al. 2018).

FOI:s fantompark har dessutom kompletterats med de senaste av ICRP rekommenderade människomodellerna för vuxen man och kvinna i voxelformat (ICRP 2009). Dessa fantom är framtagna genom datortomografi och bildgivande magnetresonansteknik på två avlidna individer och utgör de mest realistiska människomodellerna som finns att tillgå. Hur dessa fantom genereras utifrån ICRP-data och presenteras är dokumenterat (Bahar Gogani and Ågren 2016). Dessa fantom kan tillämpas när mer detaljerade organdosdata med bäring på akuta strålskador behöver tas fram. Nackdelen med dessa fantom är att simuleringarna tar mycket längre tid än med geometriska fantom (ex. MCAP3 och FCAP3) samt att dessa är till dags dato definierade enbart för vuxna.

5. Deposition

En viktig komponent i atmosfärisk spridningsmodellering är deposition. Genom deposition tas modellpartiklar ut ur luftflödet och skapar ett relativt statiskt fält på ytan. Denna process sänker den luftburna koncentrationen samtidigt som det uppkomna depositionsfältet kan ge upphov till risker, framförallt när det gäller radioaktivt material. Ett behov av att förbättra depositionsmodellen som länge har använts i FOI:s spridningsmodeller har tidigare identifierats. Som ett första steg i att bemöta detta behov beskrevs en mer sofistikerad modell med bättre fysikalisk beskrivning i rapporten *Development of a model for deposition and resuspension using Lagrangian particles with intermittent flow* som publicerades 2016 (Burman 2017). Därefter har arbete för att implementera den modellen fortskridit.

Spridning, deposition och resuspension kan modelleras med Lagranska modellpartiklar där varje modellpartikel representerar en del av den substans som studeras. Egenskaperna hos de modellerade partiklarna motsvarar de egenskaper som det fysikaliska ämnet har. För transport i luft kan relativt enkla modeller vara tillräckliga för att simulera spridning. Men för deposition och resuspension måste egenskaper nära ytan simuleras. Turbulens på de skalor som driver deposition och resuspension är oftast inte upplösta för spridningsmodeller, men statistik för de turbulenta egenskaperna kan användas. Genom att modellera gränsskiktet närmast en yta i två steg kan mer av fysiken bakom processerna för deposition och resuspension fångas upp

(Henry et al. 2012). I den så kallade buffertzonen införs intermittenta luftströmlar mot och från ytan i enlighet med mätningar och närmast ytan som består av en viskös zon, appliceras en numerisk metod som tillåter att undvika alltför små tidssteg vilket skulle bli begränsande beräkningsmässigt (Minier et al. 2003). De första stegen i denna utveckling har tagits, och modeller för sannolikheten för att en partikel ska fastna på en yta eller ryckas loss från en yta har integrerats. Modellen har implementerats i Dispersion Engine och ska i nästa steg genomgå verifiering och validering.

6. Lungdeposition

En vanlig exponeringsväg för farliga ämnen är inhalation. Luften som andas in innehåller en koncentration som tas upp av respirationssystemet. Om ämnet i fråga inte är i gasform utan består av aerosoler eller är bundet till aerosoler uppstår ett beroende för kroppens upptagningshastighet på aerosolernas storlekar. Respirationssystemet är komplext och består av delar som har olika funktionaliteter. Detta resulterar också i olika upptagningsförmågor samt en variation i kroppens känslighet för det farliga ämnet beroende på var det tas upp. För att kunna hantera dessa frågor har modeller för upptagning av inhaled aerosoler studerats. En sådan modell kan ses som en intermediär del i en exponeringskedja; den beskriver vilka mängder en kropp tar upp omgivande aerosoler och genom vilka delar av inhalationssystemet det sker. Modellerna kan delas in i olika kategorier beroende på deras uppbyggnad och funktionaliteter. En jämförelse mellan de olika kategoriernas egenskaper, fördelar och nackdelar resulterade i en rekommendation för vilken modelltyp som lämpar sig bäst för Effektm modeller. Under denna projektperiod har ingen implementation ägt rum. En sådan utveckling av modellsystemet kräver även att efterföljande dos-respons-modeller är anpassade för att omhänderta den utökade detaljgraden i dosen vilket inte är genomfört ännu. Denna studie utgör dock ett förberedande steg mot en mer komplett modellkedja.

Studien i sin helhet finns återgiven i rapporten *Lung Deposition Models for Exposure and Risk Assessment* (Lejon 2018).

7. System

Grunden inom Effektm modeller består av representativa modeller med tillhörande parameterdata av hög kvalitet. För att dessa komponenter ska vara användbara är den generella målsättningen att alla funktionaliteter som förknippas med spridning av farliga ämnen i luft ska implementeras i Effektmmodulen, EM, och därmed bli tillgängligt för användare av FOI Dispersion Engine, DE. Mer detaljerad beskrivning av strukturen för EM ges i projektets årsrapport för 2016 (Björnham et al. 2016).

Det finns behov inom projektet att kunna representera en befolkning både som en kontinuerlig enhet och på detaljerad individnivå. Dessa två kategorier fyller olika syften och beroende på frågeställningar används den ena eller den andra. Traditionellt sett har befolkningar representerats som en statisk kontinuerlig enhet som exponeras för farliga ämnen. Detta är den mest primitiva formen av exponeringsmodellering vilken är snabb, enkel och tillräckligt bra för många studier. I andra fall önskas eller krävs en mer detaljerad beskrivning av befolkningen. Orsaken kan vara att uppnå bättre precision i riskuppskattningar men även vara en presentationsfråga där individer önskas för att öka den perceptuella realismen. Under denna projektperiod har agentmodellering byggts in i EM. Uttrycket *agent* syftar till en virtuell representation av en individ. Agenterna är designade för att kunna användas vid samtliga typer av farliga ämnen. En befolkningsuppdelning ner på individnivå tillåter personliga egenskaper som position, rörelse, ålder, kön, hälsotillstånd, skyddsutrustning etc. Mer ämnesspecifikt så kan agenterna ha olika känslighetsnivåer inom probitanalyser, immunitet mot sjukdomar eller fysiskt skydd mot externa stråldoser. Ytterligare ett användningsområde för agentbaserad modellering är att hantera kontaktytor inom befolkningen när det gäller sekundärsmitta.

För biologiska ämnen har generisk hantering av sjukdomsmodeller införts. Varje enskild sjukdomsmodell definieras i en separat xml-fil som EM importerar. En fungerande grundstruktur är implementerad för att hantera sjukdomsmodellerna och för att de ska kunna appliceras på agenter. Funktionalitet för sekundärsmitta, som en del av sjukdomsmodellen, har implementerats under denna projektperiod. Den största utvecklingen inom biologiska ämnen har under denna period skett inom epidemiologi med huvudfokus på spridning av djursmita i samarbete med projektet *Planeringsverktyg för hantering av smittspridning från djur via luft i besättning och under transport*. Systemet för smittspridningssimulering inom detta projekt är utvecklad i MATLAB och inte tillgängligt från EM. Men eftersom sjukdomsmodellen följdes till fullo är även sjukdomar som mul- och klövsjuka kompatibla med EM om stöd för olika arter byggs in.

Inom området kemiska ämnen används probitmodellen vilken är fullt användbar sedan tidigare i EM. För en skadeuppskattning efter exponering beräknas de slutgiltiga *toxic load* för varje position eller individ. Toxic load är ett mått på hur tung den toxiska belastningen från exponeringen är. Med den informationen kan sannolikhetsfördelningen för att erhålla en viss skada beräknas. Med denna metodik är det möjligt att följa skadeutvecklingen under ett dynamiskt förlopp och man kan använda ett motsvarande system som sjukdomsmodellen. Probitmodellen representerar då de olika skadenivåerna som tillstånd och transitioner sker genom ytterligare exponering. För att skadorna sett över befolkningen ska vara korrekt fördelade sätts individuella tröskelvärden, dragna ur en fördelning som är kompatibel med probit, för varje agent och för varje skadenivå. Dock måste tröskelvärdena dras ur fördelningen med hänsyn taget till att det finns en korrelation mellan skadenivåerna. Om inte, så kan skadenivåer uppnås i en felaktig ordning, d.v.s. att en agent kan bli svårt skadad innan den blir lätt skadad. En matematisk analys på hur detta kan lösas är genomförd och kommer skickas in för publikation i en peer review-tidskrift inom kort. Utvecklingen inom det kemiska området har under projektperioden främst rört parameterdata vilket utgör ett ämnesbibliotek i EM. Uppdateringen av denna kräver inga systemändringar.

Som en följd av arbetet med fallstudien Khan Shaykhun (beskriven nedan) belystes vikten av att kunna hantera spatial heterogenitet hos en befolkning även utan agentmodellering. En lyckad lösning på detta blev implementationen av befolkningen uttryckt som en densitet per ytenhet på ett 2D-grid i EM. Denna utveckling är direkt applicerbar även på övriga ämnesområden, framförallt vad gäller stråldosberäkningar. Khan Shaykhun-studien medförde även ytterligare förbättring av systemen då inomhusmodellering infördes i DE. Kopplingen mellan inomhus- och utomhuskoncentrationer gör nu att hälsorisker kan uppskattas i EM även för en befolkning inomhus då farliga ämnen sprids i atmosfären utanför.

8. Fallstudier

Under denna projektperiod har två fallstudier genomförts som ett samarbete mellan Effektmodeller och projektet *Spridning i Mark, Luft och Vatten*. Båda fallen är kopplade till kriget i Syrien/Irak men av olika karaktär i övrigt. Den första studien fokuserade på en enorm brand av elementärt svavel vid fabriken Al-Mishraq i norra Irak. När IS tappade mark under hösten 2016 antändes flera oljekällor samt Al-Mishraq för att sakta ner de allierade trupperna. Bränderna skapade en toxisk miljö över stora landområden. När elementärt svavel brinner bildas giftig svaveldioxid som sedan långsamt övergår till bl.a. svavelsyra när det reagerar med vattenånga i luften. Al-Mishraq brann en vecka och studien visade på att cirka 161 000 ton av svaveldioxid bildades. Då *in situ* mätningar inte var tillgängliga användes data från fyra satelliter för att uppskatta koncentrationsfält. Satellitdata anger värden som relaterar till kolumnvis integrerade värden genom atmosfären. Detta innebar att värdena var i behov av skalning efter hur svaveldioxiden var vertikalt fördelad. Dessutom tillhandahöll inte datasetet *per se* någon information om markkoncentrationen. Ett koncept utvecklades där spridningsmodellering integrerat med satellitdata via en optimeringsprocess uppskattade

källtermen och därigenom även utvecklingen av svaveldioxidplymen på alla höjder. Metoden publicerades i *Pure and Applied Chemistry* under titeln *Reconstructing chemical plumes from stand-off detection data of airborne chemicals using atmospheric dispersion models and data fusion* (Björnham et al. 2018). Denna publikation ingick i en specialutgåva för inbjudna bidrag till OPCW:s workshop *Innovative Technologies for Chemical Security* som hölls i Rio de Janeiro 2017. Detta koncept applicerades i studien av svavelbranden i Al-Mishraq vilket gav en uppskattning av markkoncentrationen och genom en toxikologisk analys med probitmodellen kunde riskområden erhållas. Dessa områden sammanföll väl med rapporter om var befolkningen uppsökte medicinsk hjälp. Hela studien om Al-Mishraq publicerades i *Atmospheric Environment* med titeln *The 2016 Al-Mishraq sulphur plant fire: Source and health risk area estimation* (Björnham et al. 2017a).

Den andra studien handlade om sarinattacken på invånarna i den syrisk staden Khan Shaykhun i gryningen den 4 april 2017. En granat slog ner i de norra delarna av staden vilket skapade ett dödligt moln av nervgas. OPCW undersökte attacken inom ramen för deras *Fact-Finding Mission* (Sellers and Parker 1969). Det finns osäkerheter om det exakta dödstalet men cirka hundra invånare dog som en direkt följd av exponering för sarinet. Hela förloppet rekonstruerades genom att samla in meteorologisk data och återskapa källan efter bästa möjliga information. En heterogen befolkningsdensitet ansattes i EM för att representera befolkningen så realistiskt som möjligt. DE användes för att simulera koncentrationsfält för både inomhus- och utomhusmiljöerna, vilket tillät EM att uppskatta skadeutfallet. Rekonstruktionen av hela scenariot visade på god överensstämmelse med det faktiska utfallet, både vad gäller omfattning och spatial utsträckning.

Båda dessa fallstudier finns beskrivna mer utförligt i årsrapporten för Effektm modeller 2017 (Björnham et al. 2017b).

9. Diskussion

Inom CBRN-området råder ständigt brist på empirisk data för skadeutfall vid olika exponeringar på grund av i huvudsak två olika anledningar. Den första anledningen är att antalet parametrar är många och därmed är det omöjligt att empiriskt testa alla kombinationer av parametervärden på ett tillfredsställande sätt givet den täthet mellan mätpunkter som man behöver. Den andra anledningen är att det är praktiskt och etiskt omöjligt att genomföra många experiment för att erhålla kunskap om hur farliga ämnen påverkar människor. Effektm modeller syftar till att överbrygga båda dessa problem. För att åstadkomma detta krävs välbeskrivna modeller som ger en god representation av skadeutfall för alla relevanta situationer. Hur sådana modeller ska utformas är en utmaning och inte alltid entydigt. Modellerna måste vara tillräckligt detaljerade för att ge utslag på viktiga faktorer samtidigt som de inte ska innehålla redundanta egenskaper, dvs. egenskaper som inte har signifikant inverkan på resultaten. En parameter som man inte känner till värdet på kommer inte fylla någon funktion i modellen och det kan även vara fördelaktigt att exkludera den parametern för att minska osäkerheterna i resultaten. Den konstruerade modellen innehåller ofta många olika parametrar som måste sättas. Parametervärden erhålls ofta genom någon form av regression av experimentell data och är ofta beroende av aktuellt ämne samt andra scenariospecifika egenskaper. Om det experimentella datat är av hög kvalitet, dvs. litet fel och liten osäkerhet, kan en välformulerad modell prognosticera skadeutfall givet andra omständigheter som aldrig blivit testade.

Arbetet med att konstruera modeller och ta fram parametervärden ter sig på många sätt olika inom de tre ämnesområdena. Frågeställningarna skiljer sig åt och problemen som dominerar de olika områdena varierar.

Inom biologiska ämnen är det en utmaning att konstruera kvantitativa sjukdomsmodeller eftersom det ofta krävs relativt många parametrar för att beskriva förloppet, och befintlig data ofta saknar tydliga fördelningar och konfidensintervaller. Dessutom är befintlig data ofta baserad på svaga statistiska underlag med många okända faktorer. Sjukdomsmodellen

innehåller därför ofta fler parametrar än det finns bra data till. Vissa av dessa parametrar kan vara omöjliga att exkludera och då måste parametrarna sättas utifrån experters bedömningar.

Probitmodellen för kemiska ämnen är matematiskt väldefinierad och enkel att använda. Men till skillnad från sjukdomsmodellen kan man argumentera för att probitmodellen i sin enkelhet, dvs. uppbyggd med få parametrar, misslyckas med att beskriva somliga väsentliga scenarier. Trots det enkla formatet på modellen kan det för vissa ämnen ändå vara en utmaning att lyckas hitta bra underlag för att parametersätta modellen. Detta är ett ständigt närvarande problem som skapar osäkerheter.

Inom radioaktiva ämnen utvecklas ständigt fantomen för stråldosberäkning. Detta gäller vilka organ som inkluderas, hur fantomet matematiskt är beskrivet samt viktning av hur känsliga organen är. Fantomen samt den fysikaliska beskrivningen av strålningens färd från källa till fantomet kan ses som en metod att uppskatta mätpunkter. De styrande mekanismerna bakom exponering för radioaktiva ämnen kan formuleras fysikaliskt på en detaljerad nivå. Därför skiljer sig detta område från de övriga då det är möjligt att med god precision beräkna data istället för att genomföra experimentella studier.

Under denna projektperiod har utveckling inom biologiska och radioaktiva ämnen skett både vad gäller modellutveckling och identifikation av parametrar. Utveckling inom biologiska ämnen har till största del skett inom projektet *Planeringsverktyg för hantering av smittspridning från djur via luft i besättning och under transport*, som medfinansierades av Effektm modeller. Då epidemiologisk modellering till stor del är nytt inom FOI, var detta i huvudsak en kunskapsuppbyggande process. Genom konstruktion av numeriska modeller, för både individer samt populationer, finns nu ett både kunskap och verktyg för att hantera dessa komplicerade problem. Flera viktiga steg har tagits och FOI har nu en god grund att arbeta vidare på.

För kemiska ämnen har ett rejält omtag tagits vad gäller probitparametrar under denna projektperiod. Detta var en nödvändig genomlysning för att modernisera FOI:s modell och den blir nu validerad mot externa data på ett sätt som aldrig skett förut. Detta kommer ge en betydligt större pålitlighet vad gäller toxikologiska bedömningar. Probitparametrar för dödliga skador är nu publicerade (Bergström et al. 2018) och arbetet med parametrar för icke dödliga skador genomförs under kommande projektperiod. Inom kemiska ämnen har ingen direkt modellutveckling skett under denna projektperiod. Däremot har frågeställningen adresserats och en förstudie har påbörjats vad gäller möjligheten till modellutveckling för att modellen ska kunna hantera även återhämtning vid dynamisk exponering. Ett annat komplicerat men viktigt område inom toxikologi är skadeuppskattning givet exponering för blandgaser. En ansats att kvantifiera probitparametrar för representativa brandgaser är planerat att genomföras under kommande projektperiod.

För radioaktiva ämnen prioriterades utvecklingen av nya fantom och ny valideringsdata användes för att testa modellerna. Resultaten visar på god överensstämmelse mot valideringsdata och FOI:s modell för stråldosberäkning anses därmed vara stabil och pålitlig. Tabulerad data för stråldos orsakad av extern gammastrålning finns färdigställd för nästan samtliga planerade omständigheter, både för kvinnligt och manligt fantom. Det återstår ett fåtal oavslutade moment för gammastrålning varefter motsvarande data för betastrålning ska produceras.

Ett område som inte har inkluderats i Effektm modeller än så länge är effekter av kärnvapen. Till stor del sammanfaller detta område med radioaktiva ämnen men de initiala effekterna av en detonation är av intresse och kommer att behandlas under kommande projektperiod.

Två fallstudier har genomförts vilket visade sig vara mycket intressant, lärorikt och givande. I slutändan är det till viss del just i verkliga situationer under kritiska förhållanden som resultaten från Effektm modeller ska kunna komma till nytta. Genom att studera sådana fall

belyses vilka frågeställningar som är viktiga, vilka osäkerheter som uppstår och vilka resultat som är viktigast att kunna leverera. I båda genomförda fallstudier överensstämde riskområden och skadeutfall till hög grad med de rapporterade skadeutfallen. Osäkerheterna är för stora för att stämpla detta som pålitlig validering, men det ger ökat förtroende för Effektm modeller och dess ingående modeller.

10. Referenser

- Agency USEP. 1993. *External exposure to radionuclides in air, water and soil*. Oak Ridge National Laboratory. Report no.
- Backman SBG, J. 2016. *Generating stylized anthropomorphic mathematical phantoms for radiation dosimetry*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI-D--0731--SE
- Bahar Gogani J, Ågren G. 2016. *Voxelfantom i FOI:s virtuella laboratorium*. FOI. Report no. FOI-D--0751--SE.
- Bahar Gogani J, Ågren G, Backman S. 2016. *Validation of FOI reference dosimetry phantoms MCAP2 and FCAP2*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI-R--4319--SE.
- Bahar Gogani J, Ågren G, Backman S. 2018. *Absorbed dose to supraficially situated organs due to external photon exposure*. Report no. FOI-D--0837--SE.
- Bergström U, Jonasson S, Gustafsson Å. 2018. *Probit functions for selected chemicals based on AEGL-3 values*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI-R--4720--SE.
- Björnham O, Grahn H, Brännström N. 2018. *Reconstructing chemical plumes from stand-off detection data of airborne chemicals using atmospheric dispersion models and data fusion*. Pure and Applied Chemistry 90: 1577-1592.
- Björnham O, Grahn H, von Schoenberg P, Liljedahl B, Waleij A, Brännström N. 2017a. *The 2016 Al-Mishraq sulphur plant fire: Source and health risk area estimation*. Atmospheric Environment 169: 287-296.
- Björnham O, et al. 2016. *Effektm modeller 2016*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI Memo 5910.
- Björnham O, et al. 2017b. *Effektm modeller 2017*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI-R--4545--SE.
- Brännström N, Johansson K. 2013. *Tillståndsmo del för sjukdomsförlopp - parameteriserad för mjältbrand och smittkoppor*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI MEMO 4633.
- Burman J. 2017. *Development of a model for deposition and resuspension using Lagrangian particles with intermittent flow*. Swedish Defence Research Agency. Report no. FOI-D--0771--SE.
- Henry C, Minier J-P, Lefèvre G. 2012. *Towards a description of particulate fouling: From single particle deposition to clogging*. Advances in colloid and interface science 185: 34-76.
- ICRP. 1991. *1990 Recommendation International Commision on Radiological Protection. Annals of the ICRP, 21 (1-3)*. Elmsford, NY: Pergamon Press.
- ICRP. 2007. *The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection. Annals of the ICRP 37 (2-4)*.
- ICRP. 2008. *Environmental Protection - the Concept and Use of Reference Animals and Plants. Annals of the ICRP 38 (4-6)*.
- ICRP. 2009. *Adult Reference Computational Phantoms. Annals of the ICRP 39 (2)*.

- Lagerkvist P, Bahar Gogani J, Nylén T. 2018. *Calculation of the elemental composition in grass*. FOI. Report no. Manuscript.
- Lejon C. 2018. *Lung Deposition Models for Exposure and Risk Assessment*. Swedish Defence Research Agency. Report no.
- Minier J-P, Peirano E, Chibbaro S. 2003. *Weak first-and second-order numerical schemes for stochastic differential equations appearing in Lagrangian two-phase flow modeling*. Monte Carlo Methods and Applications mcma 9: 93-133.
- Publ I. 1996. *Conversion coefficients for use in radiological protection against external radiation*. Ann. ICRP 26: 3-4.
- Sellers RF, Parker J. 1969. *Airborne excretion of foot-and-mouth disease virus*. The Journal of Hygiene 67: 671-677.
- Team X-MC. 2003. *MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*: Los Alamos National Laboratory Los Alamos, NM.
- United Nations Security Council. 1991. *Resolution 687, Iraq-Kuwait (3 Apr)*. United Nations. Report no.
- Van Riper KA. 2003. *BodyBuilder for Widows Version 1.22*. Los Alamos. Report no.
- Yoshida Y. 2006. *Development of fitting methods using geometric progression formulae of gamma-ray buildup factors*. Journal of nuclear science and technology 43: 1446-1457.
- Zankl M, PETOUSSI-HENSS N, Drexler G, SAITO K. *The Calculation of Dose from External Photon Exposures Using Reference Human Phantoms and Monte Carlo Methods, Part VII: Organ Doses due to Parallel and Environmental Exposure Geometries*. GSF-Bericht 8: 97

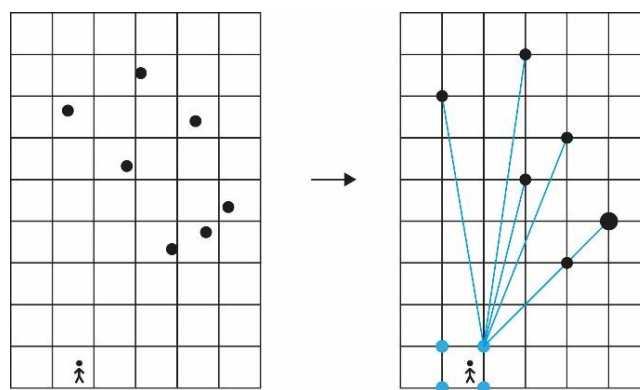
Appendix – Effektiv stråldosberäkning

Simulering av luftburna radioaktiva partiklar sker med en Lagransk partikelmodell. Ett stort antal modellpartiklar genereras och följs under transport och deposition. Stråldosberäkningen är konstruerad för att hantera bidrag från enskilda modellpartiklar vilket ger en detaljerad uppskattning av exponeringen. Antalet beräkningar för stråldos i ett scenario beror på antalet modellpartiklar, antalet människor och antalet tidssteg. Detta kan innebära ett enormt stort antal kombinationer, bli väldigt beräkningstungt och därmed tidskrävande. En statistisk studie av problematiken med beräkningsoptimering har genomförts för att belysa de viktigaste aspekterna. Studien är baserad på numeriska simuleringar där exekveringstid, fel och osäkerheter vid olika typer av förenklingar analyseras kvantitativt.

Utifrån en förutbestämd formel för stråldos till människa med avseende på avstånd och energi är det möjligt att beräkna den totala stråldosen till en punkt (människa) eller till flera punkter (människor) för ett helt moln av modellpartiklar genom att summera stråldosen från alla modellpartiklar. Detta är i många fall en datorintensiv process. Hur intensiv den är beror på partikelmolnet storlek, hur många punkter vi ska beräkna till och hur många tidssteg som inkluderas. Det finns metoder för att optimera denna beräkning. Vi har undersökt metoderna *Grid binning* och *Statistiskt urval*. Grid binning är en metod som reducerar antalet beräkningar genom att gruppera modellpartiklar i celler i ett förutbestämt rutnät. Med Statistiskt urval menas här att istället för att beräkna alla modellpartiklar, s.k. *Brute force*, så väljs (slumpmässigt eller stratifierat) en delmängd partiklar ut för beräkningen. Metoderna jämförs mot Brute force med avseende på exekveringstid, bias och precision.

Grid binning

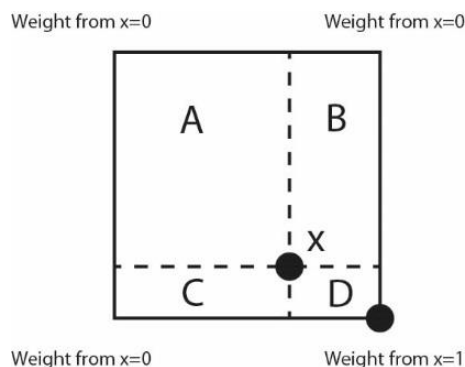
Metoden Grid binning lägger ett rutnät över berört område och flyttar modellpartiklar till närliggande punkter i rutnätet genom s.k. binning. Genom att utföra binning på aktuellt data har partikelpunkternas positioner diskretiserats och stråldosen för varje givet avstånd kan beräknas på förhand, se figur 2. Detta effektiviserar beräkningsprocessen.



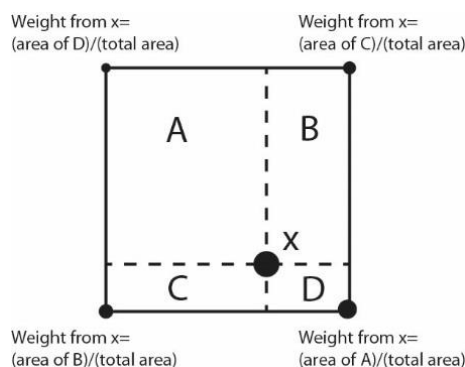
Figur 2. Figuren visar hur ett rutnät är lagt över berört område och där partiklarna förflyttas till rutnätspunkter (här med hjälp av enkel binning). Stråldosen till objektets fyra närliggande rutnätspunkter (endast en av dessa visas i figuren) beräknas genom att summera stråldoserna från respektive rutnätspunkt.

Genom att modellpartiklarna förflyttas tillsätts dock ett fel i beräkningarna. Hur stort detta fel är beror på rutnätets täthet och på hur nära varandra partikeln och objektet är. För att minska felet kan modellpartiklarna, istället för att förflytta hela sin massa till

närmsta rutnätspunkt, s.k. enkel binning (se figur 3), dela upp sin massa till de fyra närmaste rutnätspunkterna enligt en linjär formel, s.k. linjär binning (se figur 4). Denna metod kräver dock mer datorkraft och bör i första hand användas för partiklar som ligger nära sitt objekt.



Figur 3. Grafisk representation av enkel binning där hela partikelmassan förflyttas till närmsta rutnätspunkt.



Figur 4. Grafisk representation av linjär binning där partikelmassan fördelas linjärt till de närmsta rutnätspunkterna.

I detta arbete användes enkel binning och gridstorlekar på 8 000 celler (20x20x20) och 64 000 (40x40x40) celler.

Statistiskt urval

Statistiskt urval betyder att man gör ett slumpmässigt eller stratifierat urval av hela partikelmolnet och beräknar stråldos enbart för dessa partiklar. Den totala stråldosen för hela partikelmolnet erhålls sedan genom normalisering av stråldosen från den valda andelen av partiklarna. I detta arbete testades fraktionerna 0.1, 0.01 och 0.001.

Testupplägg och prestandamått

De parametrar vi valde att variera var antal partiklar, gridstorlek (för Grid binning), position för människa och fraktion partiklar (i metoden Statistiskt urval). Varje kombination av parameter testades (fullfaktoriell design) med 50 repetitioner. I Tabell 1 visas parametervärden som testades. De mått vi använde för validering av metoderna var exekveringstid för beräkning av stråldos, bias (systematiskt fel) och precision. För metoden Grid binning beräknas exekveringstiden som den totala tiden att beräkna stråldos från varje cell i rutnätet till människans position, att gruppera modellpartiklar till celler och slutligen beräkna total stråldos med hjälp av summering av alla

partiklars stråldoser. Tiden för att konstruera rutnätet är försumbar och inkluderas inte. För att effektivisera simuleringarna beräknades stråldos från varje cell i rutnätet i praktiken bara en gång för varje rutnät (denna är samma vid varje repetition). Den tiden inkluderades dock vid beräkning av exekveringstid för varje repetition.

Tabell 1. Redogörelse för vilka parametervärden som användes i testet

Parameter	Värde
Antal partiklar	10 000, 100 000, 1 000 000
Gridstorlek (antal celler per koordinat)	20x20x20, 40x40x40
Antal tidssteg	1
Antalet människor	1
Startposition för människa (x,y,z)	(150,0,0), (250,0,0), (350,0,0)
Andel partiklar	0.1, 0.01, 0.001
Antal repetitioner	50

Som förutbestämda stråldoser användes tabellen ”Luft Male med jord” från excel-filen ”AllaE_D Källa i Vakuum_Luft utan-med jord ICRP116_RBM.xlsx” med 400keV och distanserna 0.2, 0.5, 1, 2, 5, 10, 20, 50, 100, 200 och 300 meter. För avstånd mellan 0.2 och 300 meter användes linjär interpolation och för avstånd utanför det definierade området sattes dosen till noll. Partikelmolnet simulerades från en trunkerad multivariat normalfördelning i tre dimensioner ($X \in N(0,50)$, $Y \in N(0,50)$, $Z \in N(0,50)$) med begränsningarna att inga koordinater i någon dimension skulle överstiga 150. Dessutom tilläts bara positiva z-koordinater.

För mått på bias användes *Mean Percentage Error (MPE)*. MPE är ett bra mått på det totala systematiska felet då den använder faktiska värden (och inte absoluta värden) som tillåter att negativa och positiva fel tar ut varandra.

$$MPE = \frac{100}{n} \sum_n \left| \frac{\text{skattad dos} - \text{faktiskt dos}}{\text{faktiskt dos}} \right|$$

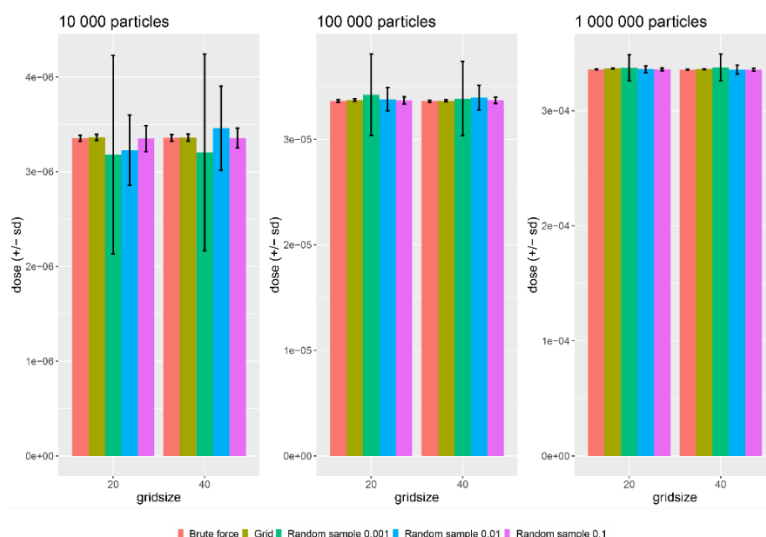
Faktisk dos är i detta fall dosskattningen med metoden Brute force och n är antalet repetitioner. För precision användes måttet relative *Coefficient of Variation (CV)* som är ett standardiserat mått på spridning och bra att använda då mätstorheterna varierar.

$$CV = \frac{\sigma}{\mu}$$

där μ är medelvärdet på skattningen av stråldos och σ är standardavvikelsen. Simuleringarna är gjorda i MATLAB R2016b, beräkningarna för prestandamått i SAS version 9.4 och figurerna i R version 3.5.1.

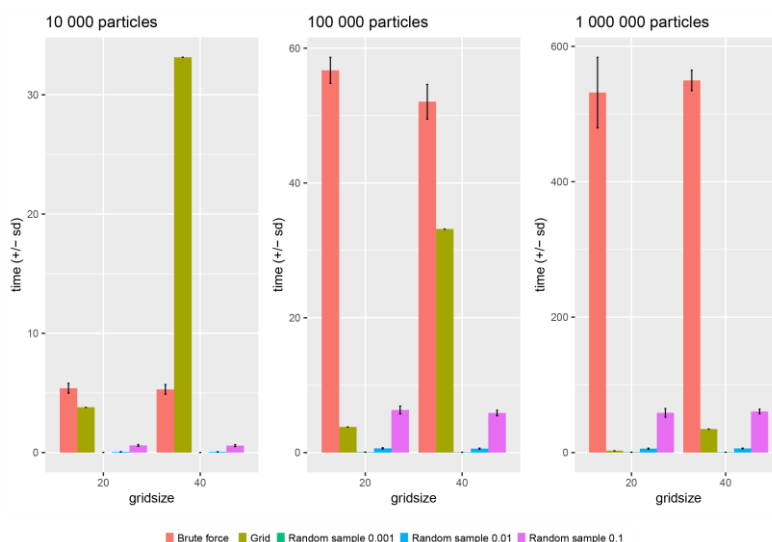
Resultat och diskussion

Alla metoder var relativt bra på att skatta medeldos, se figur 5. Bäst var Grid Binning (för båda rutnätstorlekarna) med minst variation och dosskattning närmast Brute force. Generellt blir det bättre skattningar och lägre variationer ju större moln av modellpartiklar. För alla kombinationer av position på människa och antal partiklar se tabell 2.



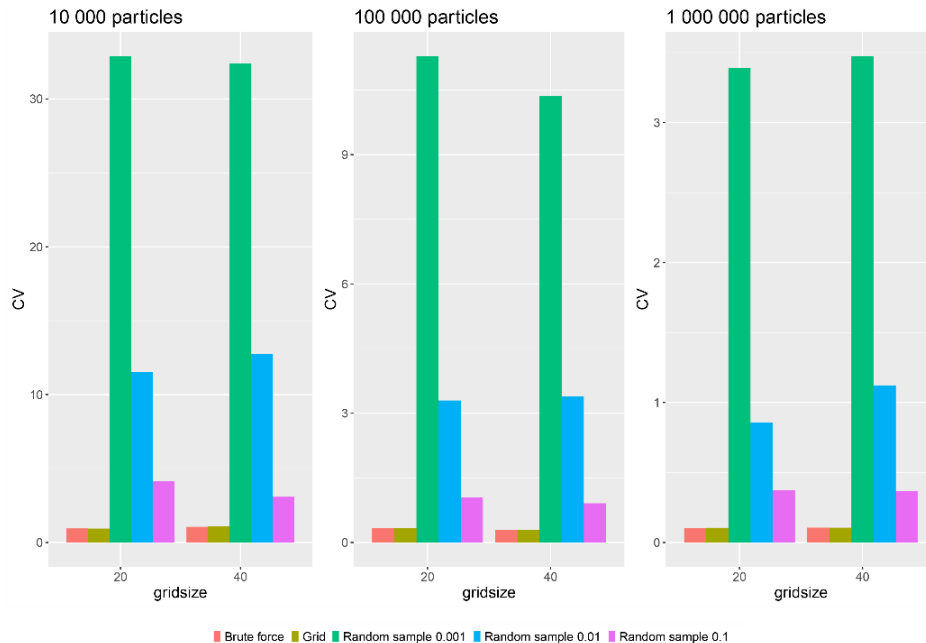
Figur 5. Figuren visar den skattade medelstråldosen (50 repetitioner) till människa på position (250,0,0) för de olika metoderna vid 10 000, 100 000 respektive 1 000 000 modellpartiklar. Observera att det är olika skalor på y-axlarna.

När det gäller exekveringstid var Statistiskt urval snabbast med 0.1 procent av modellpartiklarna, figur 6. Med fler modellpartiklar blir skillnaden mellan Grid binning och Statistiskt urval mindre och mindre. Exekveringstiden för metoden Grid binning ökar avsevärt med storleken på rutnätet. För alla kombinationer av position på människa och antalet partiklar se tabell 2.



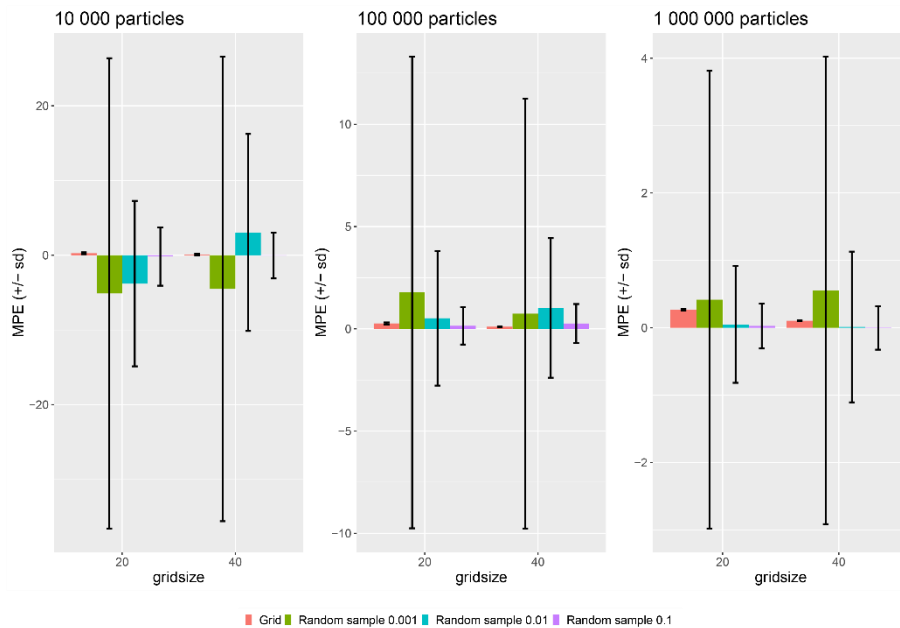
Figur 6. Figuren visar medel-exekveringstid för beräkning av stråldos till människa på position (250,0,0) för de olika metoderna vid 10 000, 100 000 respektive 1 000 000 modellpartiklar. Observera att det är olika skalor på y-axlarna.

Precisionen i form av CV är bäst för metoderna Brute force och Grid binning och sämre för Statistiskt urval, se figur 7. Precisionen för Statistiskt urval blir som väntat sämre med lägre proportion partiklar. För alla kombinationer av position på människa och antalet partiklar se tabell 3 i Appendix.



Figur 7. Figuren visar precision i form av relativ standardavvikelse för skattning av stråldos till människa på position (250,0,0) för de olika metoderna vid 10 000, 100 000 respektive 1 000 000 modellpartiklar. Observera att det är olika skalor på y-axlarna.

Det systematiska felet är i regel minst för Statistiskt urval med andelen 0.1 men också rätt litet för Grid binning, se figur 8. För Statistiskt urval är variationen på skattningen av det systematiska felet betydligt större än för Grid binning vilket egentligen visar på dålig precision snarare än systematiskt fel. För Grid binning är det systematiska felet signifikant positivt (konfidsintervall på 95%-nivån täcker inte nollan) i fem av sex fall (konfidsintervall inte visat), vilket inte är fallet för Statistiskt urval. Den höga andel signifikanta fel för Grid binning visar sig också för övriga simuleringar med andra positioner för människa, dock verkar riktningen på felet variera, se tabell 3.



Figur 8. Figuren visar bias (systematiskt fel) i form av Mean Percentage Error (MPE) för skattning av stråldos till människa på position (250,0,0) för de olika metoderna vid 10 000, 100 000 respektive 1 000 000 modellpartiklar. Observera att det är olika skalor på y-axlarna.

Sammanfattningsvis verkar Grid binning, trots ett litet systematiskt fel, generellt vara den bästa metoden för beräkning av stråldos från ett partikelmoln till människa. Statistiskt urval verkar vara en bra metod för relativt få partiklar (< 100 000) och då med minst en procent proportion partiklar. Men med fler partiklar blir Grid binning snabbt fördelaktigt, både i form av precision och exekveringstid. Vi bör också tillägga att exekveringstiden för Grid binning i denna analys inkluderade beräkningen för stråldos från rutnät till människa vid varje repetition. Beräkningen skulle vara betydligt snabbare vid nästa tidssteg (där partiklar har rört sig) utifall rutnätet och människa är konstant, då dos från rutnät till människa redan är beräknat. Grid binning verkar ha ett systematiskt fel, om än litet. Detta kan ha att göra med att modellpartiklarnas positioner simuleras från en normalfördelning. Det faktum att strålningsdosen inte är linjär i förhållande till avstånd kan också spela in. Det systematiska felet för Grid binning behöver undersökas noggrannare. Ytterligare aspekter att utreda i framtida projekt är att testa fler tidssteg, fler människor och införandet av ett gränsvärde på avståndet bortom vilket bidragen från partiklar är försumbart.

Tabell 2. Skattad strålningsdos och beräkningstid för olika metoder.

			Medeldos (sd)			Medeleksveringstid (sd)				
Grid- storlek	# modell- partiklar	x-koordinat människa	Brute force	Grid binning	Statistiskt unval	Brute force	Grid binning	Statistiskt unval		
20	1000	150	0.00022 (6.4E-7)	0.00022 (7E-7)	0.00023 (0.000021)	0.00021 (4.7E-6)	0.00022 (1.8E-6)	0.00022 (0.00057) (0.02)	0.01 (0.02)	0.1 (0.12)
		250	3.4E-6 (3.2E-8)	3.4E-6 (3.2E-8)	3.2E-6 (1E-6)	3.2E-6 (3.7E-7)	3.3E-6 (1.4E-7)	5.39 (0.42)	0.0053 (0.00043)	0.6 (0.076)
		350	2.5E-7 (7.3E-9)	2.5E-7 (7.2E-9)	2.3E-7 (2.5E-7)	2.4E-7 (6.5E-8)	2.5E-7 (2.2E-8)	5.4 (0.48)	0.0052 (0.00049)	0.06 (0.017) (0.089)
	10000	150	0.00022 (5.7E-6)	0.00022 (2.1E-6)	0.0002 (0.000033)	0.00021 (0.000014)	0.00022 (8.2E-6)	47.08 (3.04)	0.046 (0.0034)	0.5 (0.069) (0.45)
		250	0.00034 (1.1E-7)	0.00034 (1.1E-7)	0.00034 (3.9E-6)	0.00034 (1.1E-6)	0.00034 (3.5E-7)	56.71 (1.94)	0.059 (0.0036)	0.62 (0.093) (0.58)
		350	2.5E-6 (2.2E-8)	2.5E-6 (2.2E-8)	2.5E-6 (7.9E-7)	2.5E-6 (2.3E-7)	2.5E-6 (7E-8)	50.77 (3.63)	0.05 (0.0037)	0.56 (0.11) (0.54)
	100000	150	0.0022 (0.000017)	0.0022 (7.2E-6)	0.0022 (0.00015)	0.0022 (0.0001)	0.0022 (0.000039)	530.69 (46.37)	0.53 (0.079)	5.87 (0.6) (5.19)
		250	0.00034 (3.5E-7)	0.00034 (3.5E-7)	0.00034 (0.000011)	0.00034 (2.9E-6)	0.00034 (1.3E-6)	531.6 (52.19)	0.54 (0.094)	5.76 (0.74) (6.38)
		350	0.00025 (9.2E-8)	0.00025 (9.3E-8)	0.00026 (2.8E-6)	0.00025 (7E-7)	0.00025 (2.4E-7)	550.74 (17.85)	0.54 (0.078)	6.09 (0.45) (3.48)
40	1000	150	0.00022 (8E-7)	0.00022 (1.1E-6)	0.00021 (9.6E-6)	0.00022 (7E-6)	0.00022 (2.3E-6)	5.16 (0.52)	0.0051 (0.0003)	0.054 (0.017) (0.084)

			Medeldos (sd)				Medelexekveringstid (sd)					
Grid- storlek	# modell- partiklar	x-koordinat människa	Brute	Grid	Statistiskt unval	Brute	Grid	Statistiskt unval				
			force	binning		force	binning					
			0.001	0.01	0.1	0.001	0.01	0.1	0.1			
100000	250		3.4E-6 (3.6E-8)	3.4E-6 (3.6E-8)	3.2E-6 (1E-6)	3.5E-6 (4.4E-7)	3.4E-6 (1E-7)	5.29 (0.41)	33.14 (0.00068)	0.0055 (0.0023)	0.057 (0.014)	0.58 (0.081)
	350		2.5E-7 (8.6E-9)	2.5E-7 (8.7E-9)	2.7E-7 (2.7E-7)	2.5E-7 (6.9E-8)	2.5E-7 (2.5E-8)	5.2 (0.36)	30.87 (0.00037)	0.0053 (0.0021)	0.057 (0.017)	0.58 (0.088)
	150		0.00022 (3.2E-6)	0.00022 (3E-6)	0.00021 (0.000044)	0.00021 (0.000016)	0.00022 (6.3E-6)	52.36 (7.35)	27.94 (0.004)	0.051 (0.015)	0.58 (0.12)	5.83 (0.88)
1000000	250		0.000034 (9.7E-8)	0.000034 (9.7E-8)	0.000034 (3.5E-6)	0.000034 (1.1E-6)	0.000034 (3.1E-7)	52.05 (2.57)	33.15 (0.004)	0.049 (0.013)	0.58 (0.075)	5.87 (0.41)
	350		2.5E-6 (2.8E-8)	2.5E-6 (2.7E-8)	2.3E-6 (5.8E-7)	2.5E-6 (2.6E-7)	2.5E-6 (7E-8)	50.93 (3.53)	30.88 (0.0043)	0.051 (0.018)	0.55 (0.1)	5.58 (0.59)
	150		0.0022 (0.000015)	0.0022 (8.5E-6)	0.0021 (0.00013)	0.0022 (0.000076)	0.0022 (0.000067)	523.22 (66.84)	32.22 (0.028)	0.52 (0.1)	5.74 (0.82)	57.91 (7.86)
	250		0.00034 (3.5E-7)	0.00034 (3.5E-7)	0.00034 (0.000012)	0.00034 (3.8E-6)	0.00034 (1.2E-6)	549.58 (15.19)	34.72 (0.029)	0.55 (0.072)	6.06 (0.47)	60.71 (3.47)
	350		0.000025 (6.3E-8)	0.000025 (6.2E-8)	0.000025 (2.1E-6)	0.000025 (7.4E-7)	0.000025 (2.5E-7)	551.59 (15.06)	32.57 (0.026)	0.56 (0.076)	6.01 (0.51)	60.93 (3.43)

Tabell 3. Bias och precision.

			CV			MPE (sd)				
Grid- storlek	# modell- partiklar	x-koordinat människa	Grid binning	Statistiskt urval	Grid binning	Statistiskt urval	Statistiskt urval			
				0.001	0.01	0.1	0.001	0.01	0.1	
20	10000	150	3.21	91.87	22.14	8.52	0.86 (1.91)	5.30 (93.96)	-1.56 (20.81)	-0.15 (7.94)
			0.94	32.89	11.53	4.15	0.27 (0.12)	-5.11 (31.47)	-3.80 (11.07)	-0.16 (3.91)
		250								
			2.91	110.69	26.68	8.73	-0.60 (0.62)	-9.81 (100.74)	-2.16 (26.03)	0.76 (8.49)
	100000	150	0.95	16.05	6.41	3.77	-0.02 (2.07)	-6.45 (15.61)	-1.37 (6.73)	-0.42 (3.41)
			0.33	11.29	3.29	1.04	0.26 (0.05)	1.78 (11.53)	0.52 (3.29)	0.14 (0.91)
		250								
			0.90	31.14	9.37	2.78	-0.83 (0.17)	1.17 (31.81)	-1.48 (9.19)	-0.06 (2.56)
	1000000	150	0.33	6.93	4.63	1.78	0.27 (0.71)	-0.04 (6.64)	0.25 (4.51)	-0.06 (1.88)
			0.10	3.39	0.86	0.37	0.27 (0.01)	0.42 (3.40)	0.05 (0.87)	0.03 (0.33)
		250								
			0.37	11.08	2.74	0.96	-0.79 (0.06)	1.61 (11.24)	0.81 (2.68)	-0.01 (0.76)
40	10000	150	4.84	45.46	31.86	10.65	0.40 (2.04)	-1.89 (46.21)	0.62 (30.87)	-0.06 (10.48)
		250	1.08	32.38	12.77	3.09	0.09 (0.09)	-4.51 (31.08)	3.04 (13.18)	-0.05 (3.05)

		CV			MPE (sd)					
Grid- storlek	# modell- partiklar	x-koordinat människa	Grid	Statistiskt urval		Grid	Statistiskt urval			
			binning	0.001	0.01	0.1	binning	0.001	0.01	0.1
		350	3.43	101.88	28.11	9.98	0.90 (0.47)	6.35 (108.43)	-1.69 (28.12)	0.02 (9.67)
	100000	150	1.39	20.71	7.26	2.91	0.05 (0.69)	-2.25 (20.01)	-0.78 (7.40)	0.27 (2.92)
		250	0.29	10.36	3.39	0.91	0.10 (0.02)	0.74 (10.51)	1.02 (3.41)	0.26 (0.95)
		350	1.08	24.75	10.22	2.78	0.90 (0.16)	-6.79 (23.14)	0.93 (10.22)	0.44 (2.78)
	1000000	150	0.39	5.92	3.50	3.06	0.10 (0.66)	-2.38 (5.69)	-0.06 (3.65)	0.28 (2.95)
		250	0.11	3.47	1.12	0.37	0.10 (0.01)	0.55 (3.47)	0.01 (1.12)	-0.00 (0.32)
		350	0.24	8.30	2.91	1.00	0.93 (0.04)	1.26 (8.41)	0.56 (2.88)	-0.25 (1.02)

FOI är en huvudsakligen uppdragsfinansierad myndighet under Försvarsdepartementet. Kärnverksamheten är forskning, metod- och teknikutveckling till nytta för försvar och säkerhet. Organisationen har cirka 1000 anställda varav ungefär 800 är forskare. Detta gör organisationen till Sveriges största forskningsinstitut. FOI ger kunderna tillgång till ledande expertis inom ett stort antal tillämpningsområden såsom säkerhetspolitiska studier och analyser inom försvar och säkerhet, bedömning av olika typer av hot, system för ledning och hantering av kriser, skydd mot och hantering av farliga ämnen, IT-säkerhet och nya sensorers möjligheter.



FOI
Totalförsvarets forskningsinstitut
164 90 Stockholm

Tel: 08-55 50 30 00
Fax: 08-55 50 31 00

www.foi.se