

**Προσομοίωση Μηχανισμών Ρύπανσης και Μεταφορά Επίμονων  
Οργανικών Ρυπαντών στο Υδάτινο Περιβάλλον**

**Βασίλης Αποστολόπουλος**

**Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Κρήτης  
Τμήμα Φυσικών Πόρων και Περιβάλλοντος**

**Χανιά**

**2005**

Επιβλέπων: Δρ. Ε. Τερζής

## Περιεχόμενα

### Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

1.1 Τοξικές οργανικές ενώσεις.....	4
1.2 Πολυχλωριωμένα διφαινύλια.....	6
1.3 Τοξική δράση των PCBs.....	8

### Κεφάλαιο 2: Περιβαλλοντικές προσομοιώσεις

2.1 Είδη μοντέλων προσομοίωσης.....	10
2.2 Ιστορική εξέλιξη.....	11
2.3 Οργάνωση ενός μοντέλου προσομοίωσης διακριτών γεγονότων.....	12
2.4 Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της προσομοίωσης.....	14
2.5 Αντικείμενο της περιβαλλοντικής μοντελοποίησης.....	15
2.6 Ισοζύγια μάζας.....	17
2.7 Βαθμονόμηση και επαλήθευση του μοντέλου.....	22

### Κεφάλαιο 3: Πρόγραμμα STELLA

3.1 Περιληπτική σύνοψη του περιβάλλοντος της STELLA.....	25
3.2 Βασικά εργαλεία του προγράμματος.....	26
3.3 Αποθέματα (stocks).....	26
3.4 Ροές (flows).....	27
3.5 Μετατροπείς (converters).....	28
3.6 Σύνδεσμοι (connectors).....	28
3.7 Γραφήματα.....	30
3.8 Πίνακες.....	32
3.9 Συσκευές εισαγωγής δεδομένων.....	33
3.10 Εκκίνηση της προσομοίωσης μοντέλου.....	34

### Κεφάλαιο 4: Προσομοιώνοντας την ροή των PCBs σύμφωνα με το μοντέλο Randers

4.1 Υπόβαθρο.....	37
4.2 Εισαγωγή στα μοντέλα συσσώρευσης PCBs (πρωτεύον).....	37
4.3 Δευτερεύον μοντέλο συσσώρευσης.....	40
4.4 Μοντέλο Randers.....	42
4.5 Διάγραμμα ισορροπίας.....	44
4.6 Επιπτώσεις από το βασικό μοντέλο σχεδίασης.....	46
4.7 Εναλλακτικό- αναθεωρημένο μοντέλο.....	47
4.8 Περίληψη.....	51

### Κεφάλαιο 5: Μοντέλο PCB

5.1 Εισαγωγή-σκοπός του μοντέλου.....	52
5.2 Υπόβαθρο και ανάπτυξη μοντέλου.....	52
5.3 Βασικές υποθέσεις.....	55
5.4 Εξισώσεις.....	56
5.5 Συζήτηση- Συμπεράσματα.....	62
5.6 Επιβεβαίωση και αξιοπιστία του μοντέλου.....	66
5.7 Ανάλυση “ευαισθησίας” του μοντέλου.....	66
5.8 Παρατηρήσεις.....	73

Κεφάλαιο 6: Βιβλιογραφία.....	74
-------------------------------	----



## **1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Η παρούσα πτυχιακή εργασία έχει ως αντικείμενο την προσομοίωση της πορείας και της κατάληξης μιας ποσότητας πολυχλωριωμένων διαφαινυλίων PCBs μέσα σε ένα περιβαλλοντικό σύστημα λίμνης. Ο σκοπός της έρευνας μας είναι να δούμε με πιο τρόπο αλληλεπιδρούν τα PCBs με τα διάφορα στοιχεία (έδαφος, αέρας, ποτάμια, ιζήματα) τι προκαλούν σε αυτά, πως μετακινούνται από το ένα μέσο στο άλλο και πως φθάνουν στον τελικό τους προορισμό που είναι τα ψάρια. Σκοπός επίσης της έρευνάς μας είναι η επιλογή των κατάλληλων μεταβλητών μέσα από το περιβαλλοντικό σύστημα της λίμνης ώστε να επιτευχθεί σταδιακά μείωση στα επίπεδα του PCB. Η μείωση στα επίπεδα του PCB κρίνεται επιβεβλημένη αφού πρόκειται για τοξική οργανική ένωση με βλαβερές συνέπειες τόσο για τον άνθρωπο όσο και για τα υπόλοιπα έμβια όντα.

### **1.1 Τοξικές οργανικές ενώσεις**

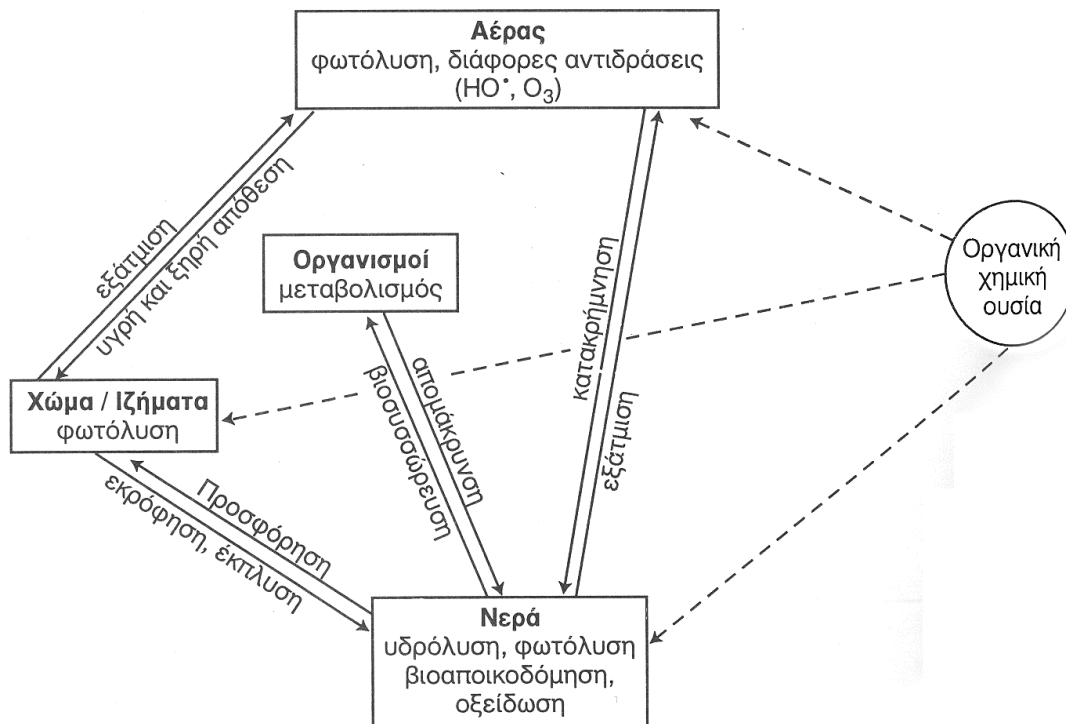
Ο όρος συνθετικά χημικά χρησιμοποιείται από τα μέσα για την περιγραφή ενώσεων που γενικά δεν εμφανίζονται στην φύση, αλλά έχουν συντεθεί από χημικούς από απλούστερες ενώσεις. Η μεγάλη πλειοψηφία των εμπορικών συνθετικών χημικών είναι οργανικές ενώσεις και οι περισσότερες χρησιμοποιούν το πετρέλαιο σαν την αρχική πηγή του άνθρακά τους.

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εξετασθούν οι περιβαλλοντικές συνέπειες από την εκτεταμένη χρήση των συνθετικών οργανικών χημικών, με έμφαση σε εκείνες τις ενώσεις, των οποίων η τοξικότητα δημιουργεί προβλήματα στην υγεία του ανθρώπου, -ειδικά όσο αφορά τον καρκίνο και τις γενετικές ανωμαλίες,- καθώς επίσης και τους κατώτερους οργανισμούς.

Γενικά, ο χρόνος παραμονής και η τύχη μιας τοξικής οργανικής ένωσης, που εισέρχεται στο περιβάλλον, εξαρτάται από τις φυσικοχημικές της ιδιότητες (διαλυτότητα, εξάτμιση, ρόφηση) και από τις διεργασίες που υφίστανται (οξειδωση, φωτόλυση, βιοαποδόμηση). Στο σχήμα 1.1 δίνονται παραστατικά οι δυνατοί τρόποι μεταφοράς και συσσώρευσης ή αποσύνθεσης των οργανικών ενώσεων στο περιβάλλον.

Οι οργανικές ενώσεις χαρακτηρίζονται από σημαντική βιολογική δράση. Πολλές από αυτές θεωρούνται καρκινογόνες, τερατογόνες ή μεταλλαξιογόνες, ενώ άλλες είναι ισχυρά τοξικές (Κουϊμτζής & Φυτιανός, 1998)

Η πρόσληψη των οργανικών ενώσεων από τον άνθρωπο γίνεται τόσο με την αναπνοή, όσο και με την διατροφή.



Σχήμα 1.1. Σχηματική αναπαράσταση της τύχης μιας οργανικής χημικής ουσίας στο περιβάλλον (Κουϊμιτζής & Φυτιανός, 1998)

Η τοξικότητα μιας ουσίας εκφράζεται σε τιμές **θανατηφόρας δόσης των 50%** (Lethal dose values- LD<sub>50</sub>). Ο όρος αυτός δίνει την ποσότητα της ουσίας, η οποία προκαλεί το θάνατο του 50% ενός πληθυσμού πειραματόζωων, αν χορηγηθεί σε μια δόση. Η τιμή LD<sub>50</sub> δίνεται συνήθως σε p.p.m. ή σε mg ουσίας ανά kg βάρους του πειραματόζωου. Ευνόητο είναι ότι, όσο μικρότερη είναι η LD<sub>50</sub>, τόσο πιο τοξική είναι η ένωση.

Εκτός από την τιμή LD<sub>50</sub> χρησιμοποιείται και ο όρος **ανώτατη μη δραστική συγκέντρωση** (no affect level) και είναι η συγκέντρωση εκείνη, με την οποία δεν εμφανίζεται καμία βλάβη στο πειραματόζωο.

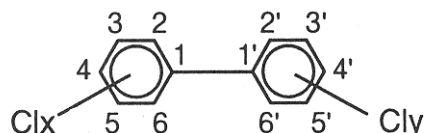
Με βάση την ανώτατη μη δραστική συγκέντρωση υπολογίζεται η **ανώτατη επιτρεπτή ημερήσια δόση** επίσης σε mg ουσίας ανά kg βάρους του πειραματόζωου. Στην συνέχεια υπολογίζεται η **ανώτατη επιτρεπτή ημερήσια πρόσληψη** (acceptable daily intake) για τον άνθρωπο. Για τον υπολογισμό αυτό θεωρείται ότι ο άνθρωπος είναι 10 φορές πιο ευαίσθητος από το πειραματόζωο και επιπλέον χρησιμοποιείται και ένας 10πλάσιος συντελεστής ασφάλειας.

Με βάση το μέσο βάρος του ανθρώπου, την ημερήσια κατανάλωση και την ανώτατη επιτρεπτή ημερήσια πρόσληψη υπολογίζεται η ανώτατη επιτρεπτή συγκέντρωση των οργανικών ουσιών στα τρόφιμα σε mg / kg (per-missible level).

Παρακάτω εξετάζονται τα PCBs, τα οποία είναι βιομηχανικά χημικά με εκτεταμένο περιβαλλοντικό ενδιαφέρον, εξαιτίας τόσο των ιδιοτήτων τους όσο και αυτής της ρύπανσης που προκαλούν.

## 1.2 Πολυχλωριωμένα διφαινύλια

Όταν το βενζόλιο θερμαίνεται στους 750°C παρουσία μολύβδου ως καταλύτη, τότε σχηματίζεται διφαινύλιο, ένα μόριο στο οποίο δύο βενζολικοί δακτύλιοι ενώνονται με ένα απλό δεσμό μεταξύ δύο ατόμων άνθρακα που το καθένα έχασε από ένα άτομο υδρογόνου. Όπως το βενζόλιο, έτσι και το διφαινύλιο αντιδρά με Cl<sub>2</sub> παρουσία χλωριούχου σιδήρου ως καταλύτη, και μερικά άτομα υδρογόνου αντικαθίστανται από άτομα χλωρίου. Τα προϊόντα που προκύπτουν είναι τα πολυχλωριωμένα διφαινύλια ή απλά PCB (Polychlorinated biphenyls), και έχουν τον γενικό τύπο:



Τα PCBs είναι ένα μίγμα από 209 ισομερή. Οι ακριβείς αναλογίες εξαρτώνται από την αναλογία χλωρίου προς το διφαινύλιο και από τον χρόνο αντίδρασης και την θερμοκρασία.

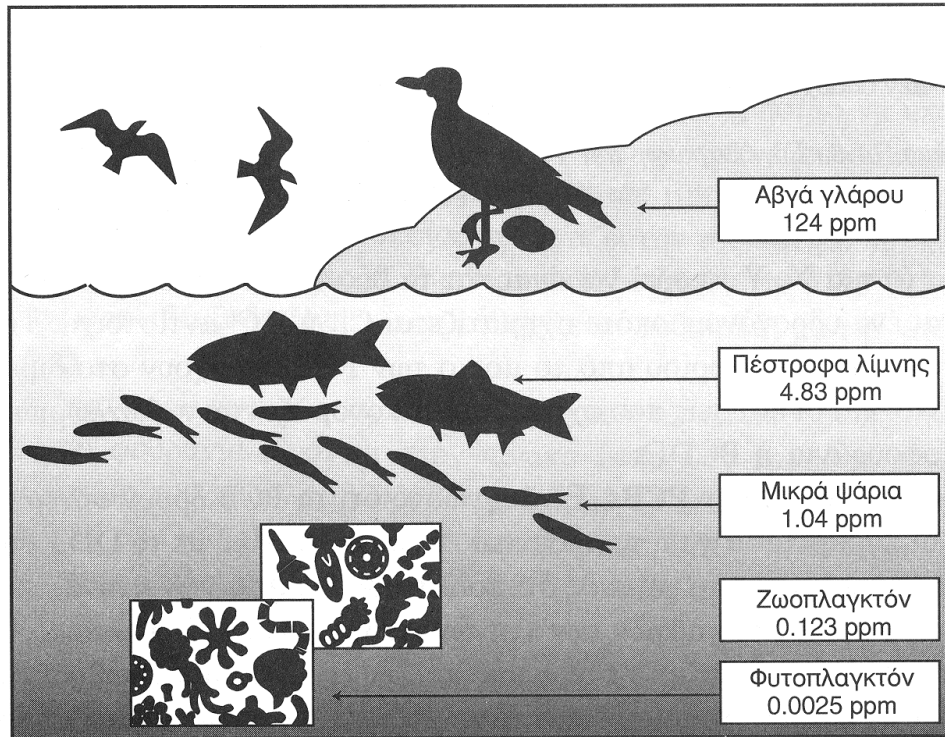
Οι ενώσεις αυτές χαρακτηρίζονται από εξαιρετικές ιδιότητες, όπως θερμική και χημική σταθερότητα και πολύ μικρή ηλεκτρική αγωγιμότητα. Για αυτό και χρησιμοποιήθηκαν, ήδη από το 1930, σε πολλές βιομηχανικές εφαρμογές (ψυκτικά, και μονωτικά μετασχηματιστών και πυκνωτών, πρόσθετα για την ευκαμψία μονωτικών υλικών, πλαστικοποιητές, βερνίκια, κ.α.). Η παραγωγή τους παρουσίασε μια ραγδαία αύξηση στην δεκαετία 1960-1970, ενώ από το 1971 μειώθηκε σημαντικά (Κουϊμτζής & Φυτιανός, 1998).

Οι κυριότερες πηγές ρύπανσης του περιβάλλοντος από PCB είναι τα απόβλητα ορισμένων χημικών βιομηχανιών, καθώς και οι πυκνωτές και μετασχηματιστές των ηλεκτρικών σταθμών.

Οι ενώσεις αυτές είναι ελάχιστα διαλυτές στο ύδωρ, ενώ προσροφούνται ισχυρά στα αιωρούμενα σωματίδια και τα ιζήματα. Τα προσροφημένα μόνο-, δι- και τρι-χλωροδιφαινύλια αποδομούνται σχετικά γρήγορα, αλλά τα PCBs με περισσότερα από 5 άτομα χλωρίου στο μόριό τους είναι πολύ σταθερά στην βιο-αποδόμηση, με αποτέλεσμα να συσσωρεύονται σε μεγάλες συγκεντρώσεις.

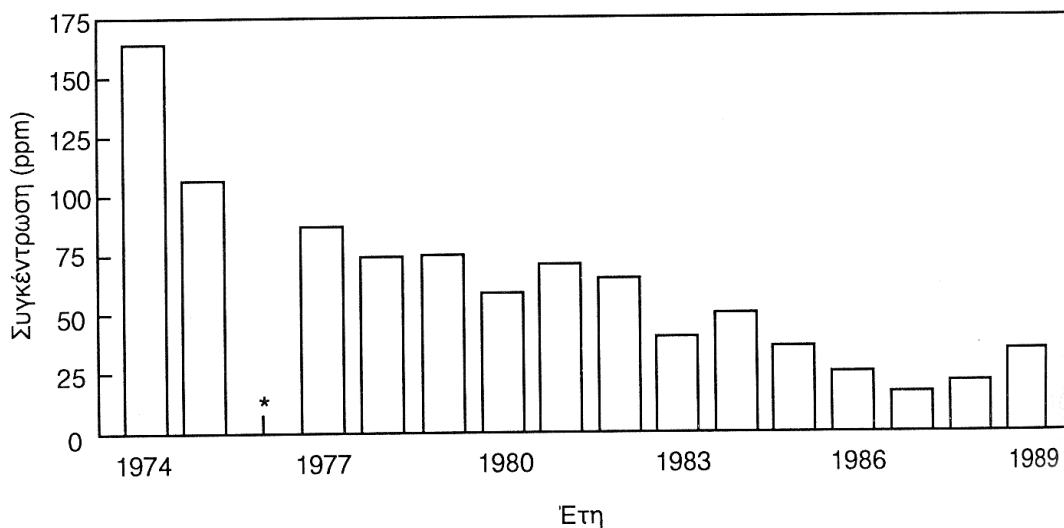
Η ρόφηση των PCBs στα υδροχαρή φυτά είναι ταχεία. Οι συντελεστές συσσώρευσης κυμαίνονται μεταξύ 40000 και 50000. Έτσι, ακόμη κι αν η περιεκτικότητα των PCBs στα φυσικά νερά είναι πολύ χαμηλή, σε διάφορα άλγη μπορεί να ξεπεράσει το 1 mg / kg ξηρού βάρους. Τα PCBs που προσλαμβάνονται από τα ψάρια συσσωρεύονται στους λιπώδεις ιστούς και το ήπαρ. Η ημιπερίοδος ζωής τους εκεί κυμαίνεται από 3 μέχρι και περισσότερο από 6 βδομάδες. Εξαιτίας της αργής αποικοδόμησής τους μπορούν να καταλήξουν, όπως και το DDT, μέσα από την τροφική αλυσίδα στα ζώα και τον άνθρωπο. Τα PCBs ανιχνεύονται σήμερα σε παγκόσμια κλίμακα στους πγκουίνους και τις φώκιες της Ανταρκτικής, στα ψάρια, μύδια, πτηνά, αβγά, μαργαρίνη, ακόμη και στο μητρικό γάλα.

Ένα παράδειγμα βιοσυσώρευσης των PCBs στην τροφική αλυσίδα δίνεται στο παρακάτω σχήμα. Η αναλογία των PCBs στα αυγά του γλάρου στις Μεγάλες Λίμνες είναι 50000 σε σχέση με την συγκέντρωση των PCBs στο φυτοπλαγκτόν στο νερό.



Σχήμα 1.2.1: Βιοσυσώρευση και βιομεγένθυση των PCBs στην υδάτινη τροφική αλυσίδα στις Μεγάλες Λίμνες της Βορείου Αμερικής (Κουϊμτζής & Φυτιανός, 1998)

Πάντως τα μέσα επίπεδα των PCBs στις περιοχές των Μεγάλων Λιμνών (Καναδάς) παρουσιάζουν μια συνεχή ελάττωση, όπως φαίνεται και στο σχήμα.

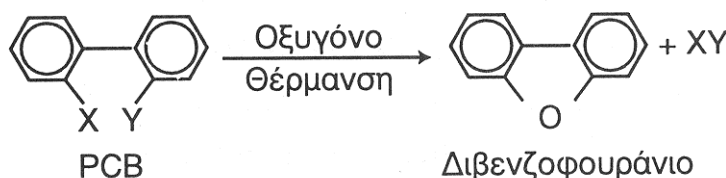


\* Δεν υπάρχουν δεδομένα για το 1976

Σχήμα 1.2.2: Συγκέντρωση των PCBs σε αυγά γλάρου στην λίμνη του Οντάριο, 1974-1989 (Κουϊμτζής & Φυτιανός, 1998)

Η τοξικότητα των PCBs για τους διάφορους οργανισμούς εξαρτάται από το είδος και το ισομέρες του PCB. Πιστεύεται, πάντως, ότι η κύρια ουσία δεν είναι τόσο τοξική, όσο μικρές ποσότητες ξένων προσμίξεων, όπως είναι τα χλωριωμένα διβενζοφουράνια.

Με ισχυρή θέρμανση των PCBs παρουσία μια πηγής οξυγόνου παράγονται μικρές ποσότητες διβενζοφουρανίων. Οι ενώσεις αυτές είναι από άποψη δομής παρόμοιες με τις διοξίνες.



Τα άτομα X, Y μπορεί να είναι και τα δύο χλώρια, ή ένα άτομο χλωρίου και ένα υδρογόνου, οπότε σχηματίζεται χλώριο ή υδροχλώριο αντίστοιχα. Τα περισσότερα άτομα χλωρίου από το μόριο των PCB υπάρχουν στο διβενζοφουράνιο, και οι ενώσεις αυτές που σχηματίζονται ονομάζονται πολυχλωριωμένα διβενζοφουράνια ή PCDFs.

### 1.3 Τοξική δράση των PCBs

Είναι γνωστό ότι τα PCB δρουν συνεργιστικά με τα παρασιτοκτόνα ή το αρσενικό. Σε συνεργιστική με το DDT δράση των PCB αποδόθηκε το γεγονός ότι πολλά είδη θαλασσινών πτηνών πέθαιναν, ενώ ο φλοιός των αβγών των πτηνών γινόταν ολοένα λεπτότερος, ώστε κατά την επώαση έσπαζε. Ύστερα από πολλές έρευνες διαπιστώθηκε ότι τα DDT και PCBs ενεργοποιούν στο ήπαρ ένζυμα, τα οποία μετατρέπουν τα οιστρογόνα σε υδατοδιαλυτή μορφή, με αποτέλεσμα να απομακρύνονται εύκολα από το σώμα. Η ελάττωση των οιστρογόνων οδηγεί σε ελάττωση των αποθεμάτων ασβεστίου, οπότε διατίθεται λιγότερο ασβέστιο για τον σχηματισμό του φλοιού των αβγών (Ford, 1999)

Το σημαντικότερο ατύχημα από PCB έγινε το 1968 σε εργοστάσιο επεξεργασίας τροφίμων στην Ιαπωνία, όπου, από βλάβη ψυκτικής εγκατάστασης, μια δεξαμενή που περιείχε ορυζέλαιο μολύνθηκε με PCB. Πολλοί άνθρωποι τότε προσβλήθηκαν από μια ασθένεια (γνωστή ως ασθένεια Yusho), της οποίας τα συμπτώματα ήταν δερματικές παθήσεις, μελανή χρώση του δέρματος, βλάβες στα νεφρά και το ήπαρ και σχηματισμός καρκίνων. Το 90% των παιδιών που γεννήθηκαν από μητέρες που δηλητηριάστηκαν από PCB παρουσίαζαν σοβαρές δερματικές αλλοιώσεις (black babies).

Αξίζει να σημειωθεί ότι η FDA (Food and Drug Administration) θεωρεί ότι δεν υπάρχει άμεση απειλή για την υγεία του ανθρώπου από τρόφιμα που περιέχουν PCB και τάχθηκε ενάντια στην απόλυτη απαγόρευσή τους. Αντίθετα ο Παγκόσμιος Οργανισμός Υγείας όρισε ως επιτρεπτή ημερήσια πρόσληψη (acceptable daily intake) τα 0,01 mg/ kg βάρους σώματος.

Μετά το 1970 η παραγωγή και χρήση των PCB έχει περιοριστεί σημαντικά σε πολλές χώρες. Ως αντικαταστατά τους χρησιμοποιούνται τα διμεθυλο-πολυσιλοξάνια, ενώσεις



που έχουν παρόμοιες ιδιότητες, αλλά μικρή τοξικότητα και, επιπλέον αποδομούνται γρήγορα.

Μια που οι περισσότεροι οργανισμοί, συμπεριλαμβανομένου και του ανθρώπου, περιέχουν ένα μίγμα από πολλές διοξίνες, φουράνια και PCBs που αποθηκεύονται στους λιπαρούς ιστούς, είναι χρήσιμο να υπάρχει ένα μέτρο για την τοξικότητα τους. Για τον σκοπό αυτό έχει καθορισθεί ένας **διεθνής συντελεστής ισοδύναμης τοξικότητας** (international toxicity equivalency factor), ή TEQ, ο οποίος συσχετίζει την τοξικότητα για κάθε διοξίνη, φουράνιο ή ισομερές PCB προς την τοξικότητα της 2,3,7,8-TCDD (тетраχλωροδιβενζοδιοξίνης), που καθορίζεται αυθαίρετα με την τιμή της μονάδας.

Μια περίληψη των τιμών TEQ για μερικές αντιπροσωπευτικές διοξίνες και φουράνια δίνονται στον παρακάτω πίνακα. Σαν παράδειγμα θεωρούμε ένα άτομο που προσλαμβάνει 30 pg 2,3,7,8- TCDD, 60 pg 1,2,3,7,8-PCDF και 200 pg O-CDD. Μια που οι συντελεστές TEQ για τις τρεις αυτές ουσίες είναι αντίστοιχα 1.0, 0.05, και 0.001, η πρόσληψη είναι ισοδύναμη με: 33.2 pg.

Διοξίνη ή φουράνιο	Συντελεστής ισοδύναμης τοξικότητας
2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin	1
1,2,3,7,8-pentachlorodibenzo-p-dioxin	0,5
1,2,3,4,7,8-hexachlorodibenzo-p-dioxin	0,1
1,2,3,7,8,9-hexachlorodibenzo-p-dioxin	0,1
1,2,3,6,7,8-hexachlorodibenzo-p-dioxin	0,1
1,2,3,4,6,7,8-heptachlorodibenzo-p-dioxin	0,01
octachlorodibenzo-p-dioxin	0,001
2,3,7,8-tetrachlorodibenzofuran	0,5
2,3,4,7,8-pentachlorodibenzofuran	0,05
1,2,3,7,8-pentachlorodibenzofuran	0,1
1,2,3,4,7,8-hexachlorodibenzofuran	0,1
1,2,3,7,8,9-hexachlorodibenzofuran	0,1
1,2,3,6,7,8-hexachlorodibenzofuran	0,1
2,3,4,6,7,8-hexachlorodibenzofuran	0,01
1,2,3,4,6,7,8-heptachlorodibenzofuran	0,01
1,2,3,4,7,8,9-heptachlorodibenzofuran	0,001
octachlorodibenzofuran	

Πίνακας 1.3.1: Τιμές συντελεστών ισοδύναμης τοξικότητας σε χαρακτηριστικές διοξίνες και φουράνια (Κουϊμτζής & Φυτιανός, 1998)

Δηλαδή, αν και έχουν προσληφθεί από το άτομο αυτό συνολικά 290 pg από διοξίνες και φουράνια, η ποσότητα αυτή είναι ισοδύναμη με την τοξικότητα που αντιστοιχεί για μια πρόσληψη 33.2 pg της ένωσης 2,3,7,8- TCDD.

## 2. ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ

### 2.1 Τα είδη μοντέλων προσομοίωσης

Έχοντας ένα μαθηματικό μοντέλο που πρέπει να μελετήσουμε με προσομοίωση (δηλαδή ένα *Μοντέλο Προσομοίωσης*), θα πρέπει να αναζητήσουμε κατάλληλα εργαλεία για το σκοπό αυτό. Στην προσπάθεια αυτή, είναι χρήσιμο να ταξινομήσουμε τα Μοντέλα Προσομοίωσης με βάση τέσσερις διαφορετικές έννοιες: (Deaton & Winebrake, 2000)

1. *Στατικά ή Δυναμικά Μοντέλα Προσομοίωσης*: Ένα στατικό μοντέλο προσομοίωσης, αναπαριστά ένα σύστημα σε μία συγκεκριμένη χρονική στιγμή, ή αναπαριστά ένα σύστημα στο οποίο ο χρόνος δεν έχει σημασία. Αντίθετα, ένα *δυναμικό* μοντέλο προσομοίωσης αναπαριστά ένα σύστημα, όπως αυτό εξελίσσεται με την πάροδο του χρόνου.
2. *Ντετερμινιστικά ή Στοχαστικά Μοντέλα Προσομοίωσης*: Αν ένα μοντέλο προσομοίωσης δεν περιλαμβάνει πιθανοτικά (δηλαδή "τυχαία") τμήματα, ονομάζεται *ντετερμινιστικό*. Για παράδειγμα, ένα πολύπλοκο σύστημα διαφορικών εξισώσεων που περιγράφει μία χημική αντίδραση, μπορεί να είναι ένα τέτοιο μοντέλο. Στα ντετερμινιστικά μοντέλα, η έξοδος είναι καθορισμένη, με δεδομένο το σύνολο των ποσοτήτων και σχέσεων εισόδου του μοντέλου. Όμως, πολλά συστήματα πρέπει να χρησιμοποιήσουν *στοχαστικά* μοντέλα προσομοίωσης, δηλαδή μοντέλα που θα έχουν τουλάχιστον ορισμένα τμήματα με "τυχαία" είσοδο. Τα περισσότερα υπολογιστικά συστήματα, που βασίζονται στα συστήματα αναμονής (queueing systems), χρησιμοποιούν στοχαστικά μοντέλα προσομοίωσης.
3. *Αυτο-οδηγούμενα ή Ιχνο-οδηγούμενα Μοντέλα Προσομοίωσης*: Σε ένα *αυτο-οδηγούμενο* (self-driven) μοντέλο, υπάρχει μία εσωτερική πηγή τυχαίων αριθμών. Οι τυχαίοι αριθμοί οδηγούν τα τμήματα του μοντέλου, δηλαδή χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των στιγμών εμφανίσεων των γεγονότων του συστήματος. Το βασικό χαρακτηριστικό του αυτο-οδηγούμενου μοντέλου είναι ότι αποτελεί ένα *αυτάρκες* μοντέλο το οποίο δεν χρειάζεται εξωτερικές εισόδους (inputs) για να λειτουργήσει. Αντίθετα, ένα *ιχνο-οδηγούμενο* (trace-driven) μοντέλο καθοδηγείται από ακολουθίες εισόδου που προέρχονται από δεδομένα (trace data) που έχουν δημιουργηθεί από τη λειτουργία ενός πραγματικού συστήματος. Τέτοια δεδομένα μπορούν να παραχθούν στα περισσότερα υπολογιστικά συστήματα που διαθέτουν ενσωματωμένα προγράμματα ιχνηλάτησης (tracing programs) που παρακολουθούν και καταγράφουν τις δραστηριότητες του συστήματος. Τα ιχνο-οδηγούμενα μοντέλα έχουν ορισμένα πλεονεκτήματα, όπως το γεγονός ότι αποφεύγονται οι δυσκολίες της πιθανοτικής ανάλυσης που χρειάζεται για τη χρήση κατανομών στην περιγραφή των εισόδων του μοντέλου και επίσης το γεγονός ότι τα μοντέλα αυτά είναι εύκολο να επιβεβαιωθούν. Το πρόβλημα με τα ιχνο-οδηγούμενα μοντέλα είναι το μικρό εύρος εφαρμογών που μπορούν να αντιμετωπίσουν. Οι εφαρμογές αυτές πρακτικά περιορίζονται σε υπολογιστικά συστήματα και μάλιστα μόνο για τη μελέτη μετατροπών σε ένα σύστημα που ήδη λειτουργεί.
4. *Συνεχή ή Διακριτά Μοντέλα Προσομοίωσης*: Οι ορισμοί των *συνεχών* και *διακριτών* μοντέλων προσομοίωσης, είναι ανάλογοι με τους ορισμούς των *συνεχών* και *διακριτών* συστημάτων. Πάντως, πρέπει να σημειωθεί ότι ένα διακριτό μοντέλο δεν χρησιμοποιείται μόνο για την αναπαράσταση ενός διακριτού συστήματος και ένα διακριτό σύστημα δεν αναπαριστάται μόνο από ένα διακριτό

μοντέλο προσομοίωσης. Η απόφαση για τη χρήση ενός διακριτού ή ενός συνεχούς μοντέλου για ένα συγκεκριμένο σύστημα, εξαρτάται από τους ιδιαίτερους στόχους της μελέτης. Για παράδειγμα, ένα μοντέλο της ροής πακέτων δεδομένων σε ένα WAN, θα είναι διακριτό εάν μας ενδιαφέρουν τα χαρακτηριστικά και η κίνηση των επιμέρους πακέτων και κατά συνέπεια των επιμέρους χρηστών. Αντίθετα, αν μας ενδιαφέρει μόνο η συνολική κίνηση, η ροή των πακέτων θα μπορούσε ίσως να περιγραφεί με διαφορικές εξισώσεις σε ένα συνεχές μοντέλο.

Τα μοντέλα προσομοίωσης που θα μας απασχολήσουν στη συνέχεια, θα είναι διακριτά, δυναμικά, στοχαστικά και αυτο-οδηγούμενα και θα ονομάζονται *Μοντέλα Προσομοίωσης Διακριτών Γεγονότων (discrete event simulation models)*. Μάλιστα, αφού τα ντετερμινιστικά μοντέλα μπορούν να θεωρηθούν ειδικές περιπτώσεις των στοχαστικών μοντέλων, δεν θα έχουμε απώλεια της γενικότητας στη μελέτη των μοντέλων προσομοίωσης.

## 2.2 Ιστορική εξέλιξη

Λόγω του δυναμικού χαρακτήρα των μοντέλων προσομοίωσης διακριτών γεγονότων, πρέπει να έχουμε τη δυνατότητα αποθήκευσης της τρέχουσας τιμής του προσομοιωμένου χρόνου, ενώ χρειαζόμαστε και ένα μηχανισμό αύξησής του από μία τιμή σε μία άλλη. Η μεταβλητή του μοντέλου προσομοίωσης που μας δίνει την τρέχουσα τιμή του χρόνου, ονομάζεται *ρολόι προσομοίωσης (simulation clock)*. Η μονάδα χρόνου που χρησιμοποιεί το ρολόι είναι συνήθως η ίδια με αυτή που χρησιμοποιούν οι παράμετροι εισόδου, ενώ γενικά δεν υπάρχει σχέση του χρόνου που καταγράφει το ρολόι, με το χρόνο που απαιτείται για την εκτέλεση του προσομοιωτή στον υπολογιστή.

Ιστορικά έχουν επικρατήσει δύο βασικές μέθοδοι για την εξέλιξη του ρολογιού προσομοίωσης: Η *Εξέλιξη με βάση το Χρόνο του Επομένου Γεγονότος (next-event time advance)* και η *Εξέλιξη Σταθερής Αύξησης του Χρόνου (fixed-increment time advance)*. Θα χρησιμοποιήσουμε την πρώτη μέθοδο διότι είναι πιο διαδεδομένη και διότι η δεύτερη μπορεί να θεωρηθεί ειδική περίπτωση της πρώτης.

Στη μέθοδο *εξέλιξης με βάση το χρόνο του επομένου γεγονότος*, το ρολόι προσομοίωσης αρχικοποιείται στο μηδέν και καθορίζονται οι στιγμές εμφάνισης των μελλοντικών γεγονότων. Το ρολόι τότε αυξάνει στο χρόνο εμφάνισης του πιο κοντινού στο μέλλον, από τα γεγονότα αυτά. Τη στιγμή αυτή η κατάσταση του συστήματος ενημερώνεται ώστε να πάρει υπ' όψη της το γεγονός που εμφανίστηκε, ενώ ενημερώνεται επίσης η γνώση μας για τις χρονικές στιγμές εμφάνισης των μελλοντικών γεγονότων. Στη συνέχεια, το ρολόι αυξάνει ώστε να δείχνει τη στιγμή εμφάνισης του νέου πιο κοντινού στο μέλλον γεγονότος, η κατάσταση του συστήματος ενημερώνεται, καθορίζονται οι χρονικές στιγμές εμφάνισης των μελλοντικών γεγονότων κ.ο.κ. Η διαδικασία αυτή εξέλιξης του ρολογιού προσομοίωσης από το ένα γεγονός στο άλλο, συνεχίζεται μέχρι να ικανοποιηθεί κάποια προκαθορισμένη συνθήκη τερματισμού της προσομοίωσης. Αφού όλες οι αλλαγές κατάστασης γίνονται μόνο στις χρονικές στιγμές εμφάνισης των γεγονότων, οι ενδιάμεσες ανενεργοί περίοδοι δεν λαμβάνονται υπ' όψη και το ρολόι μετακινείται αυτόματα στη στιγμή εμφάνισης του επομένου γεγονότος (Hannon & Ruth, 1994)

Όσον δε αφορά τη μέθοδο *εξέλιξης σταθερής αύξησης του χρόνου*, το ρολόι προσομοίωσης εξελίσσεται με σταθερές αυξήσεις ακριβώς μονάδων χρόνου κάθε φορά. Μετά από κάθε ενημέρωση του ρολογιού, γίνεται ένας έλεγχος για να εξακριβωθεί

εάν θα έπρεπε να έχουν εμφανισθεί κάποια γεγονότα κατά το προηγούμενο χρονικό διάστημα. Αν εμφανίσθηκαν γεγονότα στο διάστημα αυτό, θεωρούμε ότι αυτά εμφανίζονται στο τέλος του χρονικού διαστήματος και η κατάσταση του συστήματος ενημερώνεται κατάλληλα.

### **2.3 Οργάνωση ενός μοντέλου προσομοίωσης διακριτών γεγονότων**

Τα περισσότερα μοντέλα προσομοίωσης διακριτών γεγονότων που χρησιμοποιούν τη μέθοδο εξέλιξης με βάση το χρόνο του επομένου γεγονότος, περιλαμβάνουν τα παρακάτω τμήματα:

*Κατάσταση Συστήματος (system state):* Η συλλογή των μεταβλητών κατάστασης που είναι απαραίτητες για την περιγραφή του συστήματος σε μία χρονική στιγμή.

*Ρολόι Προσομοίωσης (simulation clock):* Μία μεταβλητή που περιέχει την τρέχουσα τιμή του προσομοιωμένου χρόνου.

*Λίστα Γεγονότων (event list):* Μία λίστα που περιέχει την επόμενη χρονική στιγμή εμφάνισης κάθε τύπου γεγονότος.

*Μετρητές Στατιστικών (statistical counters):* Μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για την αποθήκευση στατιστικών μετρήσεων της απόδοσης του συστήματος.

*Ρουτίνα Αρχικοποίησης (initialisation routine):* Ένα υποπρόγραμμα που αρχικοποιεί το μοντέλο προσομοίωσης τη χρονική στιγμή μηδέν.

*Ρουτίνα Χρονισμού (timing routine):* Ένα υποπρόγραμμα που αναγνωρίζει το επόμενο γεγονός από τη λίστα γεγονότων και ακολούθως αυξάνει το ρολόι προσομοίωσης στη χρονική στιγμή που το γεγονός αυτό θα εμφανισθεί.

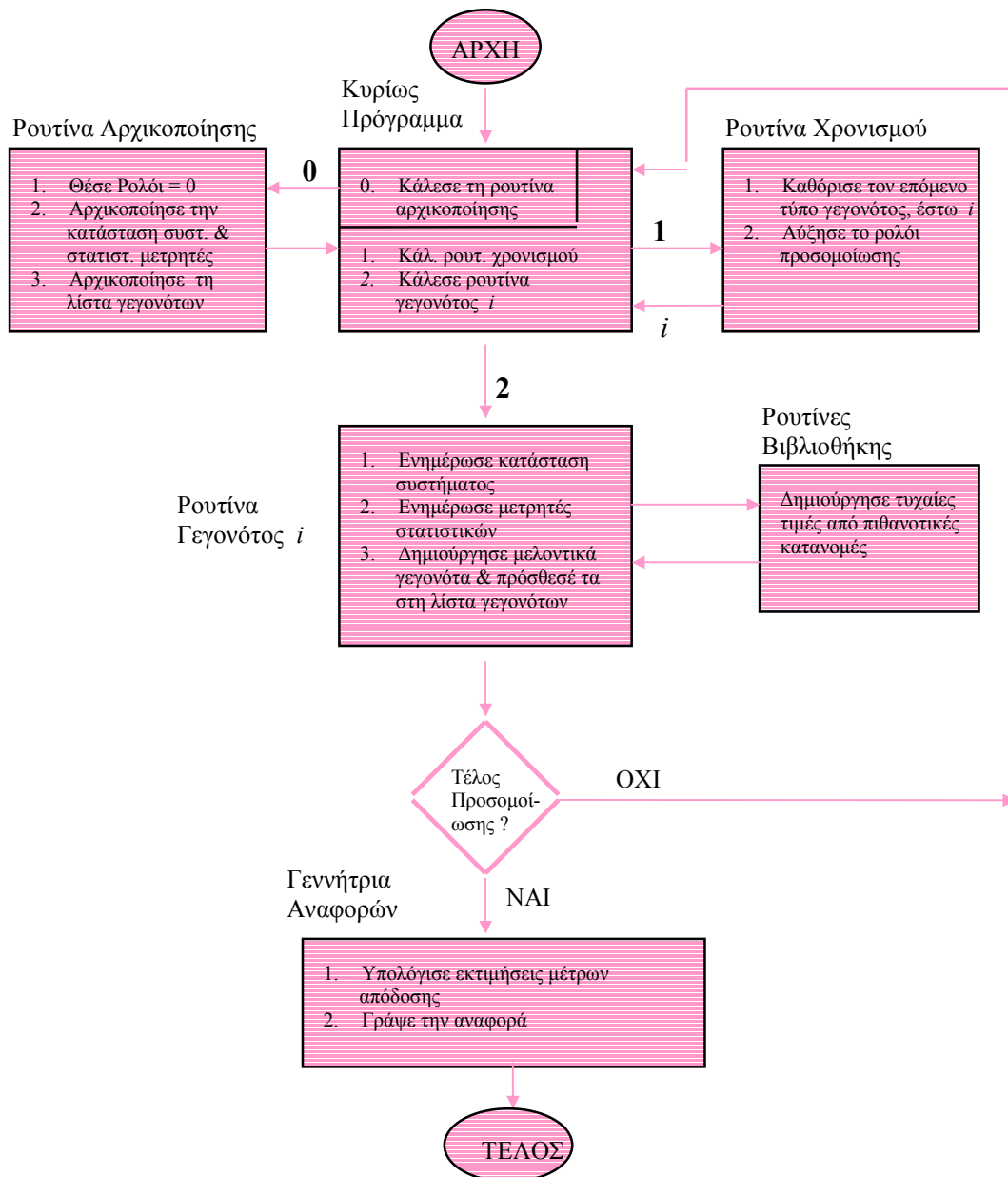
*Ρουτίνες Γεγονότων (event routines):* Υποπρογράμματα που ενημερώνουν την κατάσταση συστήματος όταν εμφανίζεται ένα συγκεκριμένο είδος γεγονότος (υπάρχει μία τέτοια ρουτίνα για κάθε είδος γεγονότος).

*Ρουτίνες Βιβλιοθήκης (library routines):* Σύνολο υποπρογραμμάτων που δημιουργούν τυχαίες εμφανίσεις τιμών από πιθανολογικές κατανομές, που έχουν ορισθεί ως μέρος του μοντέλου προσομοίωσης.

*Γεννήτρια Αναφορών (report generator):* Υποπρόγραμμα που υπολογίζει εκτιμήσεις των επιθυμητών μέτρων απόδοσης από τους μετρητές στατιστικών και παράγει αναφορές όταν τελειώσει η εκτέλεση του προσομοιωτή.

*Κυρίως Πρόγραμμα (main program):* Το πρόγραμμα που καλεί τη ρουτίνα χρονισμού για να καθοριστεί το επόμενο γεγονός και μετά μεταφέρει τον έλεγχο στην αντίστοιχη ρουτίνα γεγονότος για να ενημερωθεί κατάλληλα η κατάσταση του συστήματος. Ελέγχει επίσης αν πρέπει να τερματισθεί η προσομοίωση και καλεί τότε τη γεννήτρια αναφορών.

Οι λογικές σχέσεις ανάμεσα στα παραπάνω τμήματα φαίνονται στην παρακάτω εικόνα.



Εικόνα 2.3.1: Διάγραμμα Ροής για την Εξέλιξη με βάση το Χρόνο Επομένου Γεγονότος (Hannon & Ruth, 1994)

Όπως αναφέρθηκε στα προηγούμενα, ένα σύστημα είναι μια καλά ορισμένη συλλογή από οντότητες. Οι οντότητες χαρακτηρίζονται από τιμές δεδομένων που καλούνται *ιδιότητες (attributes)* και οι οποίες είναι μέρος της κατάστασης του συστήματος. Οι οντότητες που έχουν ορισμένα κοινά χαρακτηριστικά, συχνά ομαδοποιούνται σε λίστες (ή αρχεία ή σύνολα). Για κάθε οντότητα υπάρχει μια εγγραφή στη λίστα που αποτελείται από τις ιδιότητες της οντότητας, ενώ η σειρά με την οποία τοποθετούνται οι εγγραφές στη λίστα, εξαρτάται από κάποιο καθορισμένο κανόνα.

Η οργάνωση και η λειτουργία ενός προγράμματος προσομοίωσης διακριτών γεγονότων που χρησιμοποιεί το μηχανισμό εξέλιξης με βάση το χρόνο του επομένου γεγονότος, όπως περιγράφηκε παραπάνω, είναι τυπική για την ανάπτυξη προσομοιωτών με γλώσσες

προγραμματισμού γενικού σκοπού όπως η C, η Pascal και η FORTRAN. Ονομάζεται *Προσέγγιση Χρονοδρομολόγησης Γεγονότων (event-scheduling approach)* στη μοντελοποίηση της προσομοίωσης, διότι οι χρονικές στιγμές εμφάνισης των μελλοντικών γεγονότων κωδικοποιούνται στο μοντέλο και προγραμματίζονται να εμφανισθούν στο προσομοιωμένο μέλλον. Η εναλλακτική προσέγγιση στο θέμα, είναι η *Προσέγγιση Διαδικασίας (process approach)*, η οποία "βλέπει" την προσομοίωση σε σχέση με τις ξεχωριστές οντότητες που εμπλέκονται. Ο κώδικας που γράφεται εδώ, περιγράφει την "εμπειρία" μιας "τυπικής" οντότητας καθώς αυτή μετακινείται δια μέσου του συστήματος. Η κωδικοποίηση ενός προγράμματος προσομοίωσης με την προσέγγιση διαδικασίας, γίνεται συνήθως με χρήση ειδικών γλωσσών προγραμματισμού για προσομοίωση, όπως η SIMULA, η GPSS, η SIMSCRIPT, η SIMAN, η SLAM κ.α (Deaton & Winebrake, 2000).

#### **2.4 Πλεονεκτήματα, Μειονεκτήματα και Δυσκολίες της Προσομοίωσης**

Η προσομοίωση είναι μια ευρέως χρησιμοποιούμενη και συνεχώς πιο δημοφιλής μέθοδος για τη μελέτη πολύπλοκων συστημάτων. Έχει φυσικά τα πλεονεκτήματα, τα μειονεκτήματά της, αλλά και υπάρχουν πολλές αιτίες εξ αιτίας των οποίων ορισμένες προσομοιώσεις δεν καταλήγουν στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

Ορισμένα πιθανά *πλεονεκτήματα* της χρήσης της μεθόδου της προσομοίωσης είναι τα παρακάτω: (Soltzberg, 1996)

Τα περισσότερα σύνθετα συστήματα του πραγματικού κόσμου με "τυχαίες" παραμέτρους, δεν μπορούν να περιγραφούν ικανοποιητικά με κάποιο μαθηματικό μοντέλο που μπορεί να λυθεί αναλυτικά. Έτσι, η προσομοίωση είναι συχνά η μόνη διαθέσιμη μέθοδος μελέτης.

Η προσομοίωση επιτρέπει την εκτίμηση της απόδοσης ενός υπάρχοντος συστήματος, κάτω από κάποιο προβλεπόμενο σύνολο λειτουργικών συνθηκών.

Μπορούν να συγκριθούν μέσω της προσομοίωσης, εναλλακτικές προτεινόμενες σχεδιάσεις ή εναλλακτικές πολιτικές λειτουργίας του συστήματος, ώστε να προσδιορισθεί η βέλτιστη λύση που ικανοποιεί τις προδιαγραφές που έχουν ορισθεί.

Σε ένα μοντέλο προσομοίωσης μπορούμε να έχουμε καλύτερο έλεγχο στις συνθήκες των πειραμάτων, σε σχέση με πιθανό πειραματισμό με το πραγματικό σύστημα.

Η προσομοίωση επιτρέπει τη μελέτη ενός συστήματος που έχει μακρόχρονη εξέλιξη (π.χ. ένα οικονομικό σύστημα), σε πολύ μικρότερο χρόνο, ή τη μελέτη της λεπτομέρειάς του σε περισσότερο χρόνο.

Είναι μια μέθοδος οικονομική, αφού είναι δυνατό να υλοποιηθεί πλέον σε μικρούς υπολογιστές με τη χρήση γλωσσών προγραμματισμού γενικού σκοπού όπως η C, η Pascal και η BASIC.

Η προσομοίωση μπορεί να υλοποιηθεί από μηχανικούς που δεν είναι απαραίτητο να έχουν εκτεταμένες μαθηματικές γνώσεις, παρά μόνο τη δυνατότητα να κατανοούν βασικές έννοιες στατιστικής και να μπορούν να εφαρμόζουν ήδη έτοιμα μαθηματικά εργαλεία.

Ορισμένα *μειονεκτήματα* της προσομοίωσης είναι τα παρακάτω: ( Soltzberg, 1996)

Κάθε εκτέλεση ενός μοντέλου προσομοίωσης διακριτών γεγονότων παράγει μόνο εκτιμήσεις των πραγματικών χαρακτηριστικών του μοντέλου, για ένα συγκεκριμένο σύνολο παραμέτρων εισόδου. Έτσι, είναι πιθανό να χρειασθούν πολλές διαφορετικές ανεξάρτητες εκτελέσεις του μοντέλου για κάθε σύνολο παραμέτρων εισόδου που θα μελετηθεί. Για το λόγο αυτό, η προσομοίωση δεν είναι γενικά τόσο καλή μέθοδος για βελτιστοποίηση, όσο είναι για τη σύγκριση εναλλακτικών σχεδιαστικών λύσεων του συστήματος.

Τα μοντέλα προσομοίωσης συχνά απαιτούν πολύ χρόνο και πόρους για να αναπτυχθούν. Ο μεγάλος όγκος δεδομένων που παράγονται από μία μελέτη προσομοίωσης ή η εντύπωση που δημιουργούν οι τυχόν γραφικές αναπαραστάσεις των αποτελεσμάτων της, συχνά ενισχύουν μία τάση να δίνεται μεγαλύτερη εμπιστοσύνη στα αποτελέσματα αυτά από όσο πρέπει. Αν το μοντέλο δεν είναι μία αρκετά έγκυρη αναπαράσταση του συστήματος, τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, ανεξάρτητα του πόσο εντυπωσιακά είναι, θα προσθέσουν λίγη χρήσιμη πληροφορία για το πραγματικό σύστημα.

Από τη στιγμή που έχει ληφθεί η απόφαση να χρησιμοποιηθεί προσομοίωση για τη μελέτη ενός συστήματος, έχει παρατηρηθεί ότι μπορούν να εμφανισθούν αρκετά *προβλήματα* στην πορεία υλοποίησης ενός επιτυχημένου προσομοιωτή:

Όχι καλά ορισμένοι στόχοι κατά την έναρξη της μελέτης.

Ακατάλληλο επίπεδο λεπτομέρειας του μοντέλου.

Χειρισμός της μελέτης με προσομοίωση, σαν να ήταν βασικά μία δύσκολη άσκηση προγραμματισμού.

Έλλειψη στοιχειωδών γνώσεων Επιχειρησιακής Έρευνας και Στατιστικής.

Χρήση εμπορικών πακέτων προσομοιωτών που μπορεί να περιέχουν λάθη ή να μην υλοποιούν τη λογική του συστήματος.

Αποτυχία στη σωστή καταγραφή των πηγών τυχαιότητας του συστήματος.

Χρήση αυθαίρετων κατανομών (π.χ. κανονική ή ομοιόμορφη) για την περιγραφή των εισόδων του προσομοιωτή.

Ανάλυση των δεδομένων εξόδου από μία εκτέλεση του προσομοιωτή, με τη χρήση στατιστικών τύπων που προϋποθέτουν ανεξαρτησία.

Χρήση λανθασμένων μέτρων απόδοσης.

## **2.5 Αντικείμενο της περιβαλλοντικής μοντελοποίησης**

Οι λόγοι που πρέπει να αναπτύσσουμε μοντέλα για τους ρύπους του περιβάλλοντος είναι οι εξής:

Για να αποκτήσουμε μια καλύτερη κατανόηση του αποτελέσματος και της μεταφοράς των χημικών ενώσεων με την ποσοτικοποίηση των αντιδράσεών τους, των μορφών και της μεταφοράς τους.

Για να προσδιορίσουμε τις συγκεντρώσεις έκθεσης σε χημικές ενώσεις για υδρόβιους οργανισμούς ή και ανθρώπους στο παρελθόν, στο παρόν ή και στο μέλλον.

Για να προσδιορίσουμε τις μελλοντικές συνθήκες για διάφορα σενάρια επιβάρυνσης ή και εναλλακτικών ενεργειών διαχείρισης.

Στην πρώτη περίπτωση θέλουμε να ξέρουμε “που πάνε όλες αυτές οι χημικές ουσίες”. Παραμένουν μαζί μας για πάντα; Πόσο εύκολα αποδομούνται; Τέτοια θέματα έχουν σχέση με την τύχη, τη μεταφορά και τη σταθερότητα των χημικών ενώσεων στο περιβάλλον. Υπάρχουν κλασικά μοντέλα που αναφέρονται στους συμβατικούς ρύπους, στον ευτροφισμό, στους τοξικούς οργανισμούς και στα μέταλλα, επιφανειακά και υπόγεια νερά (Terzis, 1999)

Ο δεύτερος στόχος των μαθηματικών μοντέλων, ο προσδιορισμός των συγκεντρώσεων έκθεσης σε χημικές ουσίες, τυχαίνει να είναι αυξανόμενου ενδιαφέροντος. Έχει στενή σχέση με την εκτίμηση των επιπτώσεων των χημικών ρύπων. Νέα κριτήρια ποιότητας νερού εφαρμόζονται για τον καθορισμό επιπέδων για άμεσες και χρόνιες επιπτώσεις στην υγεία σε σχέση με τη συχνότητα και τη διάρκεια της έκθεσης. Τα κριτήρια αυτά συντείνουν στον καθορισμό σταθερών ποιότητας νερού τα οποία επιβάλλονται με το Νόμο και απαιτούν την εφαρμογή μαθηματικών μοντέλων για τον εντοπισμό φορτίων ρύπανσης, για ανάλυση επικινδυνότητας και ανάλυση περιβαλλοντικών επιπτώσεων. Τοξικού ρύπου- όπως αμμωνία, αρσενικό, κάδμιο, χλώριο, χρώμιο, χαλκός, κυανιούχα, μόλυβδος και υδράργυρος- έχουν ήδη ρυθμιστεί. Τα κριτήρια καθορίζουν μια οριακή συγκέντρωση για τη μη εμφάνιση χρόνιων επιπτώσεων, όπως επίσης επίπεδα ανθεκτικής έκθεσης ως προς τη διάρκεια και τη συχνότητα για κάθε τοξικό ρύπο.

Τα κριτήρια ποιότητας νερού καθορίζουν ότι οι υδρόβιοι οργανισμοί και οι χρήσεις τους δεν θα επηρεαστούν αρνητικά εάν ικανοποιούνται δυο συνθήκες:

- 1) η μέση συγκέντρωση επί τέσσερις συνεχείς μέρες του τοξικού ρύπου δεν υπερβαίνει το συνιστώμενο χρόνιο κριτήριο παρά μια μόνο φορά κάθε τρία έτη κατά μέσο όρο,
- 2) η μέση ωριαία συγκέντρωση δεν ξεπερνάει το κριτήριο άμεσης έκθεσης μια μόνο φορά κατά τρία έτη κατά μέσο όρο.

Τα νέα κριτήρια αναγνωρίζουν ότι οι τοξικές επιπτώσεις είναι συνάρτηση της συγκέντρωσης του ρύπου και της διάρκειας έκθεσης του οργανισμού σε αυτή τη συγκέντρωση. Μια πολύ σύντομη έκθεση σε σχετικός υψηλή συγκέντρωση μπορεί να αποβεί λιγότερο επιζήμια από ότι μια παρατεταμένη σε χαμηλότερη συγκέντρωση. Μόνο μέσα από τη χρήση μοντέλων υδατικής χημείας μπορούν να μελετηθούν τέτοιες σχέσεις διάρκειας- συχνότητας . μόνο μια λεπτομερειακή γνώση της υδατικής χημείας είναι δυνατόν να προταθούν τέτοια μοντέλα, να ελεγχθούν στην πράξη και να ερμηνευτούν σωστά.

Πρέπει να είμαστε σε θέση να ξεχωρίζουμε ανάμεσα σε οριακές συγκεντρώσεις άμεσης και χρόνιας τοξικότητας, όπως επίσης και τις ίδιες τοξικές χημικές μορφές.



Στο μέλλον θα είναι απαραίτητα κάποια κριτήρια πεδίου (site-specific criteria) ποιότητας νερού, τα οποία για τον καθορισμό των σταθερών (standards) ποιότητας των υδάτων θα απαιτούν τη βοήθεια μαθηματικής μοντελοποίησης. Για παράδειγμα, από έρευνες έχει προκύψει ότι ο χαλκός είναι σε μικρότερο βαθμό τοξικός και/ ή βιοδιαθέσιμος (bioavailable) σε επιτόπου δοκιμές σε σύγκριση με δοκιμές εργαστηρίου με βιοπειράματα ενός είδους single-species biomassay (Soltzberg, 1996). Είναι πιθανό ότι οι υδατικές μορφές του χαλκού σχηματίζουν ισχυρά σύμπλοκα στο πεδίο (in situ) (συγκεκριμένα με οργανικά σύμπλοκα), τα οποία δεν είναι τόσο τοξικά ή βιοδιαθέσιμα σε υδατικούς οργανισμούς. Οι συγκεντρώσεις διαλυμένου οργανικού άνθρακα ποικίλουν πολύ στα φυσικά ύδατα και γι' αυτό το λόγο θα πρέπει να αναπτυχθούν ειδικά κριτήρια πεδίου. Επειδή ο χαλκός σε μικρές τοποθεσίες υπερβαίνει με φυσικό τρόπο τα κριτήρια ποιότητας νερού για μερικά τοξικά μέταλλα, σε ακραίες συνθήκες χαμηλής ροής, η πιθανότητα είτε χρόνιας είτε άμεσης τοξικότητας στα συγκεκριμένα σημεία γίνεται το αντικείμενο του κύριου ενδιαφέροντος. Για να μπορέσουμε να δώσουμε μια σωστή προοπτική, χρειαζόμαστε έγκυρα δεδομένα έκθεσης σε τοξικές ουσίες, τα οποία απαιτούν τη χρήση μαθηματικών μοντέλων. Για παράδειγμα, έχει καθιερωθεί ένα κριτήριο πεδίου για την ποιότητα του νερού όσον αφορά την πενταχλωροφαινόλη.

Ο τρίτος κύριος στόχος των μαθηματικών μοντέλων είναι η πρόβλεψη μελλοντικών συγκεντρώσεων χημικών ουσιών, σε διαφορετικά σενάρια φόρτισης ή εναλλακτικές δράσεις διαχείρισης. Σε αυτή τη κατηγορία εμπίπτουν οι κατανομές των φορτίων αποβλήτων και τα μοντέλα έκθεσης για την εκτίμηση της επικινδυνότητας. Ανεξάρτητα από το πόσα δεδομένα έχουν καταγραφεί, θα είναι πάντα επιθυμητό να υπάρχουν κάποιες εκτιμήσεις των συγκεντρώσεων των χημικών ουσιών σε διαφορετικές συνθήκες, κάποια αποτελέσματα σεναρίου για μελλοντική φόρτιση αποβλήτων ή ακόμα εκτιμήσεις σε κάποια άλλη τοποθεσία, για την οποία δεν υπάρχουν μετρήσεις. Για όλους αυτούς τους λόγους, χρειαζόμαστε μοντέλα μεταφοράς και προσδιορισμού της ταχύτητας των χημικών ουσιών, τα οποία μάλιστα, είναι όλο και πιο σύνθετα, καθώς η οικοτοξικολογία λαμβάνει υπόψη όλο και περισσότερο στις στάθμες πεδίου για την ποιότητα του νερού και τη χημική μορφή. Για να μοντελοποιήσουμε υδατικά χημικά συστήματα, ξεκινάμε με ένα απλό ισοζύγιο μάζας, βασισμένο στην αρχή της συνέχειας: η ύλη ούτε παράγεται, ούτε καταστρέφεται σε μακροσκοπικές χημικές, φυσικές και βιολογικές αλληλεπιδράσεις (Deaton & Winebrake, 2000)

## 2.6 Ισοζύγιο μάζας

Η ποιότητα του νερού μπορεί να οριστεί ως "κάτι εγγενές ή κάτι διακριτικό σχετικά με το νερό". Αυτά τα διακριτικά χαρακτηριστικά μπορεί να είναι είτε χημικές, είτε φυσικές ή βιολογικές παράμετροι. Οι περισσότερες παράμετροι της ποιότητας του νερού μετρώνται σε ποσότητες μάζας ή μονάδες συγκέντρωσης ( $\text{mg l}^{-1}$ ,  $\text{moles liter}^{-1}$ ). Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούμε συχνά κάποιο ισοζύγιο μάζας για να καθορίσουμε την τύχη των παραμέτρων αυτών στα φυσικά υδατικά ύδατα και για να αποτιμήσουμε την έκταση της ρύπανσης που αναμένουμε σε ποικίλες συνθήκες.

Η τύχη των χημικών ουσιών στο υδατικό περιβάλλον καθορίζεται από δυο παράγοντες: την δραστηριότητά τους και την ταχύτητα της φυσικής τους μεταφοράς μέσω του περιβάλλοντος. Όλα τα μαθηματικά μοντέλα για την εκτίμηση της κατάληξης των χημικών ουσιών είναι απλά χρήσιμες λογιστικές ρουτίνες για τον υπολογισμό αυτών των διαδικασιών, καθώς αυτές γίνονται όλο και πιο αναλυτικές. Στο βαθμό που μπορούμε να προβλέψουμε με ακρίβεια τις χημικές, φυσικές και βιολογικές αντιδράσεις καθώς και τη μεταφορά των χημικών ουσιών, μπορούμε επίσης να "μοντελοποιήσουμε" την τύχη και

της σταθερότητά τους, καθώς και την αναπόφευκτη έκθεση σε υδατικούς οργανισμούς (Huggett, 1993)

Η *Εικόνα 2.6.1* είναι μια απεικόνιση της προσέγγισης του ισοζυγίου μάζας για τη λύση προβλημάτων μεταφοράς μάζας με χημική αντίδραση. Τα βασικά στοιχεία ενός ισοζυγίου μάζας ορίζονται παρακάτω:

Ένας σαφώς ορισμένος όγκος ελέγχου.

Γνώση των εισόδων και των εξόδων που διέρχονται από τα όρια του ελέγχου.

Γνώση των χαρακτηριστικών μεταφοράς μέσα στον όγκο ελέγχου και στα όριά του.

Γνώση της κινητικής της αντίδρασης μέσα στον όγκο ελέγχου.



Εικόνα 2.6.1: Γενική προσέγγιση για μοντέλα ισοζυγίου μάζας με χρήση της έννοιας του όγκου ελέγχου και της μεταφοράς στα οριακά στρώματα. (Huggett, 1993)

Ένας όγκος ελέγχου μπορεί να είναι τόσο μικρός όσο μια στοίβα νερού απειροελάχιστου πάχους νερού σε ένα ρεύμα που κυλάει, ή μεγάλος όσο το συνολικό υδατικό σώμα του πλανήτη. Το σημαντικό είναι ότι τα όρια ορίζονται ξεκάθαρα, όσον αφορά την τοποθεσία τους (στοιχείο α), ώστε ο όγκος να είναι γνωστός και να μπορούν να καθοριστούν οι ροές ανά μονάδα επιφάνειας των μαζών (στοιχείο β). Μέσα στον όγκο ελέγχου πρέπει να είναι γνωστά τα χαρακτηριστικά μεταφοράς (βαθμός ανάμιξης) είτε με μέτρηση, είτε με εκτίμηση βασισμένη στην υδροδυναμική του συστήματος. Παρομοίως, η μεταφορά σε γειτονικούς ή περιφερειακούς όγκους ελέγχου που μπορεί να προσφέρει μάζα στον υπό εξέταση όγκο ελέγχου (όπως ο καπνός μπορεί να ταξιδεύει από ένα δωμάτιο σε ένα άλλο

μέσα σε κάποιο σπίτι), συνεπώς θα πρέπει να είναι γνωστή ή να μπορεί να υπολογιστεί η μεταφορά στα όρια του όγκου ελέγχου (στοιχείο γ).

Είναι επίσης απαραίτητη η γνώση των χημικών, φυσικών, βιολογικών αντιδράσεων που μπορεί να πραγματοποιήσει η ουσία μέσα στον όγκο ελέγχου (στοιχείο δ). Εάν δεν υπήρχαν αντιδράσεις αποικοδόμησης στα υδάτινα οικοσυστήματα, κάθε ρυπαντικό στοιχείο που έχει απελευθερωθεί στο περιβάλλον θα μας στοίχειωνε ακόμα. Ευτυχώς υπάρχουν φυσικές διαδικασίες εξαγνισμού, οι οποίες συμβάλουν στη αφομοίωση μερικών αποβλήτων και στην άμβλυνση των υδατικών επιπτώσεων. Πρέπει να κατανοήσουμε τις αντιδράσεις αυτές ποσοτικά, προκειμένου να αποτιμήσουμε την ενδεχόμενη βλάβη που μπορεί να προκαλέσει η απόρριψη ρυπαντικών ουσιών στο περιβάλλον και να τοποθετήσουμε για κάθε περίπτωση τα επιτρεπτά όρια για την απόρριψη αυτή.

Ένα ισοζύγιο μάζας είναι απλά ένας λογιστικός υπολογισμός των εισροών και των εκροών μάζας, των αντιδράσεων και της συσσώρευσης, όπως περιγράφεται από την ακόλουθη εξίσωση:

$$\text{Συσσώρευση στον όγκο ελέγχου} = \text{Εισροή μάζας} - \text{Εκροή μάζας} \pm \text{Αντιδράσεις} \quad (1)$$

Μεταφορά

Εάν μια χημική ουσία σχηματίζεται μέσα στον όγκο ελέγχου (όπως είναι ο συνδυασμός δυο αντιδραστηρίων για το σχηματισμό ενός προϊόντος  $A + B \rightarrow P$ ), τότε το πρόσημο του όρου “Αντιδράσεις” είναι θετικό, όταν το ισοζύγιο μάζας αναφέρεται στο προϊόν. Εάν η χημική ουσία καταστρέφεται ή αποδομείται μέσα στον όγκο ελέγχου, τότε το πρόσημο του όρου “Αντιδράσεις” είναι αρνητικό. Εάν η χημική ουσία είναι συντηρητική (δηλαδή δεν αντιδράει ή είναι αδρανής), τότε ο όρος “Αντιδράσεις” είναι ίσος με μηδέν.

$$\text{Συσσώρευση} = \text{Εισροές} - \text{Εκροές} \pm \text{Αντιδράσεις} \quad (2)$$

Στον Πίνακα 2.6.2 δίνεται μία λίστα με δραστικές και μη δραστικές χημικές ουσίες.

<i>Αντίδραση Σχηματισμού (+)</i>	<i>Αντίδραση Αποδόμησης (-)</i>	<i>Απορρόφηση χημικών ουσιών</i>
<i>Προϊόντα σε χημικές αντιδράσεις Ανάπτυξη άλγης Βακτηριακή ανάπτυξη Απορρόφηση αερίου Χημική απορρόφηση</i>	<i>Αντιδρώντα σε χημικές αντιδράσεις Βιοχημικός απαιτούμενο οξυγόνο (BOD) Αποσύνθεση ραδιοϊσοτόπων Ιζηματοποίηση σωματιδίων Θάνατος βακτηρίων Αποδόμηση οργανικών</i>	<i>Χρώμα Rhodamin WT (R)<sup>®</sup> Χλώριο, βρώμιο Ολικά διαλυμένα στερεά (TDS) Μη βιοδιασπάσιμα οργανικά Ολικά μέταλλα Σταθερά ισότοπα (<sup>15</sup>N, <sup>13</sup>C)</i>

Πίνακας 2.6.2: Ταξινόμηση Ουσιών σε Σχέση με τη Δραστικότητά τους στο Νερό (Υγρή Φάση). (Soltzberg, 1996)

Εάν το σύστημα είναι σε σταθερή κατάσταση (δηλαδή δεν υπάρχει αλλαγή στη συγκέντρωση με το χρόνο,  $dC/dt=0$ ), τότε δεν υπάρχει συσσώρευση στο σύστημα και η εκροή ισούται με της εισροή συν ή πλην τις αντιδράσεις:

$$\text{Εισροή} = \text{Εισροή} \pm \text{Αντιδράσεις} \quad (3)$$

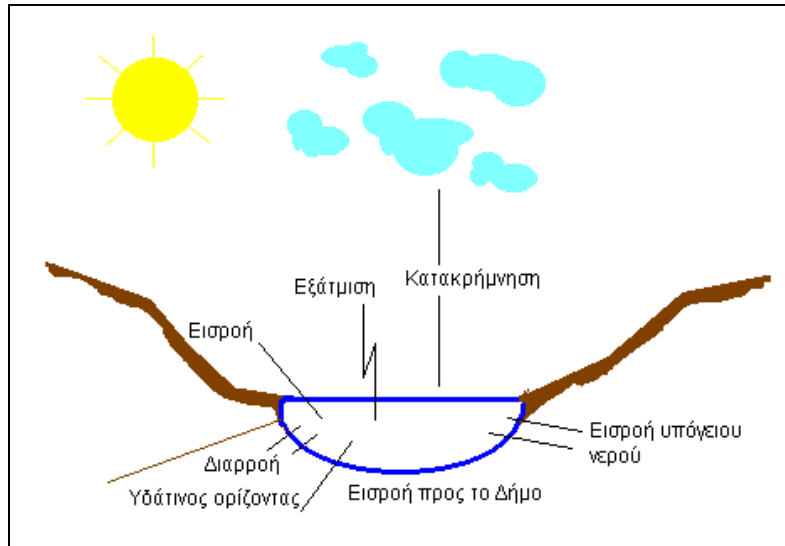
Η σημασία ενός ορθού ισοζυγίου μάζας του νερού δε μπορεί να τονιστεί υπέρ το δέον. Χωρίς ένα καλό ισοζύγιο μάζας νερού είναι αδύνατον να πάρουμε ένα ακριβές ισοζύγιο για την υδατική χημική ουσία που μας ενδιαφέρει. Μπορούμε να θεωρήσουμε το νερό ως μια συντηρητική ουσία με πολλαπλές εισροές και εκροές από το υδάτινο σώμα. Η συσσώρευση της μάζας νερού ονομάζεται “μεταβολή στο απόθεμα”. Εάν το σύστημα είναι κατά προσέγγιση ισοθερμικό, τότε η μάζα αποθέματος μπορεί να αντικατασταθεί από τις εισροές και τις εκροές:

$$\Delta_{\text{απόθεμα}} = \Sigma_{\text{εισροές}} - \Sigma_{\text{εκροές}} + \text{Άμεση κατακρίμνηση} - \text{Εξάτμιση} \quad (4)$$

Οι εισροές μπορούν να περιλαμβάνουν και τον όγκο που εισέρχεται από ρέματα και επιφανειακά ύδατα. Οι εκροές περιλαμβάνουν όλες τις εξόδους από το υδάτινο σώμα. Η άμεση κατακρίμνηση είναι το νερό που πέφτει κατευθείαν στην επιφάνεια, ενώ η εξάτμιση είναι ο όγκος του νερού που φεύγει από την επιφάνεια του υδάτινου σώματος προς την ατμόσφαιρα. Το  $\Delta_{\text{απόθεμα}}$  μπορεί να μετρηθεί σε λίμνες ή ποτάμια μέσω της μεταβολής του ύψους της στάθμης. Οι εισροές ή οι εκροές θα πρέπει να μετρώνται συνέχεια ή τουλάχιστον συχνά κατά τη διάρκεια της μελέτης. Για τη μέτρηση της άμεσης κατακρίμνησης και της εξάτμισης με επαρκή ακρίβεια μπορούν να χρησιμοποιηθούν βροχομετρικοί σταθμοί και δοχεία εξάτμισης. Εάν η λίμνη ή λεκάνη των ρευμάτων δεν είναι αρκετά ερμητική όσον αφορά τις εισροές και τις εκροές προς τον υπόγειο υδροφόρα, τότε θα πρέπει να μετρηθεί επίσης η πιεζομετρική επιφάνεια των υπόγειων υδάτων που είναι σε γειτνίαση με το υδάτινο σώμα, προκειμένου να καθοριστεί η έκταση της αλληλεπίδρασης.

$$\Delta_{\text{απόθεμα}} = \Sigma_{\text{εισροές}} + \text{Εισροές υπόγειων υδάτων} - \Sigma_{\text{εκροές}} - \text{Εκροή προς υπόγειο υδροφόρα} + \text{Άμεση κατακρίμνηση} - \text{Εξάτμιση} \quad (5)$$

Η εξίσωση (5) αναπαριστά σχηματικά την *Εικόνα 2.6.3*, όπου παρουσιάζονται διάφορες διαδρομές εισροής και εκροής σε μια υποθετική λίμνη.



Εικόνα 2.6.3: Σχηματική παράσταση μιας λίμνης με εισροές και εκροές για υπολογισμό ενός προϋπολογισμού του νερού [εξίσωση (5)].(Hannon & Ruth, 1997)

Η αλληλεπιδραστική σχέση των επιφανειακών και των υπόγειων υδάτων και τα σφάλματα στους όρους των υδατικών ισοζυγίων έχουν συζητηθεί σε αρκετές δημοσιεύσεις από τον Winter. Στην καλύτερη περίπτωση είναι δυνατόν να επιτευχθεί ένα ετήσιο ισοζύγιο νερού στα όρια του 5% (η συνολική εισροή βρίσκεται στα όρια του 5% της συνολικής εκροής συν το απόθεμα). Ένα κατανοητό υδατικό ισοζύγιο θα μπορούσε να εκφραστεί από την ακόλουθη αλγεβρική διαφορική εξίσωση:

$$\Delta V = (\Sigma q_{in} + \Sigma Q_{gw} - \Sigma q_{out} - Q_{seep} + IA - EA)\Delta t \quad (6)$$

όπου:

$Q =$  ροή,  $m^3 d^{-1}$

$I =$  κατακρήμνιση,  $md^{-1}$

$A =$  επιφάνεια του υδάτινου σώματος,  $m^2$

$E =$  εξάτμιση,  $md^{-1}$

$\Delta t =$  χρονικό βήμα, days

$\Delta V =$  αλλαγή στον όγκο αποθέματος,  $m^3$

Η εξίσωση μεταβολών μπορεί να μετατραπεί σε διαφορική εξίσωση, εάν διαιρέσουμε και τα δυο μέλη της εξίσωσης με  $\Delta t$  και πάρουμε το όριο καθώς  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$\Delta V/dt = \Sigma q_{in} + \Sigma Q_{gw} - \Sigma q_{out} - Q_{seep} + IA - EA \quad (7)$$

Η εξίσωση (7) μπορεί να ολοκληρωθεί και να λυθεί ως προς τον όγκο για όλο το χρονικό διάστημα.

Τα μοντέλα ισοζυγίου μάζας δίνουν την αναμενόμενη τιμή της συγκέντρωσης κάποιας χημικής ουσίας. Εάν το μοντέλο εφαρμόζεται για σταθερή κατάσταση, το αποτέλεσμα είναι αμετάβλητο με το χρόνο. Εάν το μοντέλο είναι μεταβλητό με το χρόνο, τότε η προβλεπόμενη μεταβλητή κατάσταση μεταβάλλεται με το χρόνο. Χωρικά, τα μαθηματικά μοντέλα των υδατικών χημικών ουσιών μπορούν να είναι μονό-, δι- ή τρισδιάστατα. Τα μοντέλα μπορούν να είναι ομογενή ή ετερογενή σε σχέση με το φυσικό περιβάλλον του πρωτότυπου (του φυσικού συστήματος που μοντελοποιείται). Για παράδειγμα, ένας υπόγειος υδροφορέας μπορεί να αποτελείται από αποθέματα άμμου, τα

οποία περικλείουν μια περιοχή πηλού διαφορετικής διαπερατότητας και πορώδους (Hannon & Ruth, 1997).

## 2.7 Βαθμονόμηση και επαλήθευση του μοντέλου

Για την μαθηματική μοντελοποίηση των υδατικών χημικών ουσιών είναι απαραίτητα τέσσερα στοιχεία:

- α) δεδομένα πεδίου για τις συγκεντρώσεις των χημικών ουσιών και τις εισροές μάζας
- β) μια διατύπωση ενός μαθηματικού μοντέλου
- γ) σταθερές ρυθμών και συντελεστές ισορροπίας για το μαθηματικό μοντέλο και τέλος
- δ) μερικά κριτήρια απόδοσης με τα οποία θα εκτιμηθεί το μοντέλο.

Χωρίς τα δεδομένα πεδίου, είναι αδύνατη η βαθμονόμηση και η επαλήθευση του μοντέλου. Ανάλογα με τη χρήση του μοντέλου ποικίλει ο βαθμός αναγνώρισης του πεδίου. Εάν το μοντέλο πρόκειται να χρησιμοποιηθεί για την έκδοση κανονισμών, θα πρέπει να υπάρχουν αρκετά δεδομένα πεδίου, ώστε να είμαστε βέβαιοι για τα αποτελέσματα του μοντέλου. Συνήθως, αυτό απαιτεί δυο σύνολα μετρήσεων πεδίου: ένα για την βαθμονόμηση του μοντέλου και ένα για την επαλήθευση σε ελαφρώς διαφορετικές συνθήκες (μετρήσεις από διαφορετική χρονιά ή σε άλλο μέρος).

Η βαθμονόμηση του μοντέλου περιλαμβάνει σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης και των μετρήσεων πεδίου. Οι συντελεστές του μοντέλου και οι σταθερές ρυθμών θα πρέπει αρχικά να επιλεγθούν με βάση τη βιβλιογραφία ή από εργαστηριακές μελέτες. Για τη λειτουργία του μοντέλου είναι επίσης απαραίτητοι οι ρυθμοί των εισροών. Αφού πραγματοποιηθεί το μοντέλο, γίνεται μια στατιστική σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων του μοντέλου για τις μεταβλητές κατάστασης (συγκεντρώσεις χημικών ουσιών) και των μετρήσεων πεδίου. Εάν τα σφάλματα κυμαίνονται μέσα σε ένα αποδεκτό επίπεδο ανοχής, το μοντέλο θεωρείται ως βαθμονομημένο. Εάν τα σφάλματα δεν είναι αποδεκτά, τότε οι σταθερές ρυθμού και οι συντελεστές θα πρέπει να μεταβληθούν συστηματικά (ρύθμιση του μοντέλου) μέχρι να επιτευχθεί μια αποδεκτή προσομοίωση. Οι παράμετροι δε θα πρέπει να καθοριστούν έξω από τα όρια των πειραματικά προσδιορισμένων τιμών που αναφέρονται στη βιβλιογραφία. Με τον τρόπο αυτό βαθμονομείται το μοντέλο (Harte, 2001).

Μπορεί να φανούν χρήσιμοι μερικοί ορισμοί που έχουν να κάνουν με την βαθμονόμηση και την επαλήθευση του μοντέλου:

*Μαθηματικό μοντέλο:* μια ποσοτική διατύπωση χημικών, φυσικών, βιολογικών διαδικασιών που προσομοιώνει το σύστημα.

*Μεταβλητή κατάστασης:* η εξαρτημένη μεταβλητή που μοντελοποιείται (με αυτή την έννοια είναι η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας).

*Παράμετροι μοντέλου:* συντελεστές του μοντέλου που χρησιμοποιούνται για τη διατύπωση της εξίσωσης ισοζυγίου μάζας (π.χ. σταθερές ρυθμών, σταθερές ισορροπίας, στοιχειομετρικές αναλογίες).

*Είσοδοι του μοντέλου:* δρώσες συναρτήσεις ή σταθερές που απαιτούνται για τη λειτουργία του μοντέλου (π.χ. ροή, συγκεντρώσεις χημικών ουσιών στην είσοδο, θερμοκρασία, ηλιοφάνεια).

*Βαθμονόμηση:* μια στατιστικά αποδεκτή σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων ενός μοντέλου και των μετρήσεων πεδίου. Η ρύθμιση ή προσαρμογή των παραμέτρων του μοντέλου επιτρέπει μέσα στα όρια των πειραματικών προσδιορισμένων τιμών που πάρθηκαν πειραματικά και στη βιβλιογραφία.

*Επαλήθευση:* μια στατιστικά αποδεκτή σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων του μοντέλου και ενός δεύτερου (ανεξάρτητου) συνόλου δεδομένων πεδίου, τα οποία αναφέρονται σε άλλη χρονιά ή σε διαφορετική τοποθεσία. Μετά από το στάδιο της βαθμονόμησης σταθεροποιούνται οι παράμετροι του μοντέλου και δεν επιτρέπεται περαιτέρω ρύθμιση.

*Προσομοίωση:* χρήση του μοντέλου με οποιοδήποτε σύνολο δεδομένων εισόδου (ακόμα και υποθετικής εισόδου) χωρίς απαίτηση για βαθμονόμηση ή επαλήθευση με δεδομένα πεδίου.

*Έλεγχος αξιοπιστίας:* επιστημονική αποδοχή ότι: (1) το μοντέλο περιλαμβάνει όλες τις βασικές και τις αξιοπρόσεκτες διαδικασίες, (2) οι διαδικασίες έχουν διατυπωθεί σωστά και (3) το μοντέλο περιγράφει με κατάλληλο τρόπο τα παρατηρούμενα φαινόμενα, σύμφωνα με τις ανάγκες χρήσης του.

*Ευρωστία:* χρησιμότητα του μοντέλου που έχει εδραιωθεί έπειτα από επανειλημμένες εφαρμογές υπό διαφορετικές συνθήκες και σε διαφορετικές τοποθεσίες.

*Λεπτομερής εξέταση περαιτέρω:* σύγκριση παλαιών προβλέψεων του μοντέλου με μετρήσεις πεδίου που γίνονται αυτή τη χρονική στιγμή.

*Ανάλυση ευαισθησίας:* προσδιορισμός της επίδρασης μιας μικρής μεταβολής των παραμέτρων του μοντέλου στα αποτελέσματα (μεταβλητή κατάστασης), είτε με αριθμητική προσομοίωση ή με μαθηματικές τεχνικές.

*Ανάλυση αβεβαιότητας:* προσδιορισμός της αβεβαιότητας (τυπική απόκλιση) της προβλεπόμενης τιμής της μεταβλητής κατάστασης (μέση) λόγω αβεβαιότητας στις παραμέτρους του μοντέλου, στις εισόδους ή στην αρχική κατάσταση, με χρήση τεχνικών στοχαστικής μεντολοποίησης.

Τα στατιστικά μοντέλα για την αποδοχή της βαθμονόμησης και της επαλήθευσης ενός μοντέλου θα πρέπει να ορίζονται εξαρχής, πριν ξεκινήσουν οι προσομοιώσεις. Το πόσο “καλά” είναι τα αποτελέσματα του μοντέλου εξαρτάται από την επιθυμητή χρήση του μοντέλου ή των προβλέψεων. Ομοίως, τα κριτήρια για την αποδοχή κάποιας βαθμονόμησης ή επαλήθευσης εξαρτώνται από την επιθυμητή χρήση του μοντέλου. Για παράδειγμα, ένα κριτήριο για την αποδοχή μιας βαθμονόμησης μοντέλου για διαλυμένο οξυγόνο μπορεί να είναι το εξής: “η πρόβλεψη της συγκέντρωσης του διαλυμένου οξυγόνου στο ρέμα θα πρέπει να βρίσκεται μέσα στα όρια του  $\pm 0.5$  mg/L, τουλάχιστον στο 90% των παρατηρήσεων”. Υπάρχουν αρκετοί τύποι στατιστικών κριτηρίων που μπορούν να δημιουργηθούν (Hannon & Ruth, 1994)

Στατιστικά κριτήρια “καταλληλότητας της προσομοίωσης”, τα οποία χρησιμοποιούν την κατανομή  $\chi^2$  ή τα τεστ Kolmogorov- Smirnov (τεστ της κατανομής δειγματοληψίας της διακύμανσης).

Ταυτόχρονες δοκιμές t ανά ζεύγη των παρατηρήσεων του μοντέλου και των παρατηρήσεων από πεδίο (δοκιμή του μέσου).

Γραμμική παρεμβολή δεδομένων ανά ζεύγη για προβλέψεις του μοντέλου και παρατηρήσεις πεδίου ταυτόχρονα.

Σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με τις μετρήσεις πεδίου και την κανονική τους απόκλιση (ή τη γεωμετρική απόκλιση, εάν είναι η κατάλληλη).

Τεχνικές εκτίμησης παραμέτρων, όπως οι μη γραμμικές παλινδρομήσεις για την προσέγγιση καμπύλης (σταθμισμένες ή μη) ή τα φίλτρα Kalman, για το βέλτιστο προσδιορισμό των παραμέτρων του μοντέλου (π.χ. ελαχιστοποίηση του αθροίσματος του τετραγώνου των υπολειμμάτων).

Για τον έλεγχο αξιοπιστίας του μοντέλου είναι απαραίτητη μια στατιστική σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης και ενός δεύτερου συνόλου δεδομένων πεδίου. Οι συντελεστές και οι σταθερές ρυθμού δεν επιτρέπεται να αλλάξουν από τη στιγμή που γίνει η βαθμονόμηση. Η διαδικασία αυτή παρέχει μια βεβαιότητα ότι το μοντέλο αποδίδει σε αποδεκτά επίπεδα. Τα κριτήρια απόδοσης μπορεί να είναι ελαστικά, όπως: “τα αποτελέσματα του μοντέλου θα πρέπει να βρίσκονται μέσα σε μια τάξη μεγέθους των συγκεντρώσεων πεδίου σε κάθε χρονική στιγμή”, ή πολύ αυστηρά, όπως: “το μέσο τετραγωνικό σφάλμα των υπολειμμάτων (διαφορά μεταξύ των μετρήσεων πεδίου και των αποτελεσμάτων του μοντέλου) θα πρέπει να είναι μια ελάχιστη προκαθορισμένη ή βέλτιστη τιμή”.

Η αποδοχή της βαθμονόμησης μοντέλου της επαλήθευσης δε σημαίνει απαραίτητα ότι επαληθεύεται το ίδιο το μοντέλο. Είναι πιθανό το μοντέλο να λειτουργεί σωστά υπό ορισμένες προϋποθέσεις, αλλά λανθασμένα υπό άλλες. Όσο το μοντέλο εφαρμόζεται σε διαφορετικές καταστάσεις σε διαφορετικές τοποθεσίες, αποκτάμε όλο και μεγαλύτερη εμπιστοσύνη σ’ αυτό και στην ευρωστία του. Η ακριβής στιγμή κατά την οποία το μοντέλο θεωρείται επαληθευμένο είναι τόσο δύσκολο να προσδιοριστεί, όσο και η στιγμή που ένας έφηβος γίνεται ενήλικος. Είναι μια σταδιακή διαδικασία. Όσο χρησιμοποιείται το μοντέλο, “κάμπτεται” όλο και περισσότερο και με διαφορετικούς τρόπους, θέτοντας σε δοκιμή την αξιοπιστία και την διατύπωσή του. Εκ των υστέρων η λεπτομερής εξέταση των αποτελεσμάτων του μοντέλου αποτελεί μια σημαντική δοκιμή της χρησιμότητάς του. Οι εξετάσεις αυτές γίνονται αφού έχουν πραγματοποιηθεί οι προβλέψεις από το μοντέλο και καθώς τα δεδομένα γίνονται διαθέσιμα με την πάροδο του χρόνου. Ελάχιστα παραδείγματα μετέπειτα λεπτομερούς εξέτασης έχουν αναφερθεί στη βιβλιογραφία, θεωρείται ότι χρειάζονται σίγουρα περισσότερα (Huggett, 1993).



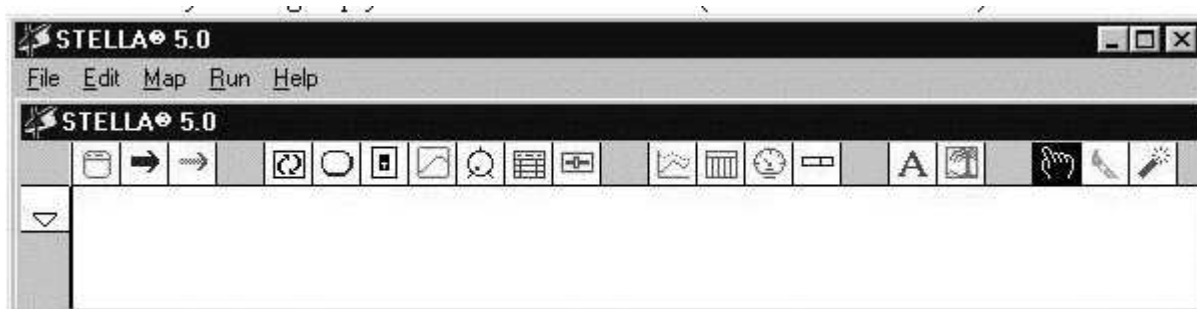
### 3. STELLA (Δομική σκέψη, Εργαστηριακή Εμπειρία με Προσομοίωση)

Η STELLA είναι ένα πρόγραμμα που συνδυάζει την περιβαλλοντική γνώση και τον συμβολισμό των δυναμικών συστημάτων με άμεση και εύκολη προσομοίωση παρέχοντας ένα φιλικό προς τον χρήστη περιβάλλον. Από εκπαιδευτικής άποψης η STELLA είναι ένα εξαιρετικά αποτελεσματικό εργαλείο που βοηθά τους σπουδαστές να αποκτήσουν τις κατάλληλες γνώσεις και εμπειρία που απαιτείται για την μαθηματική μοντελοποίηση (HPS, 2001)

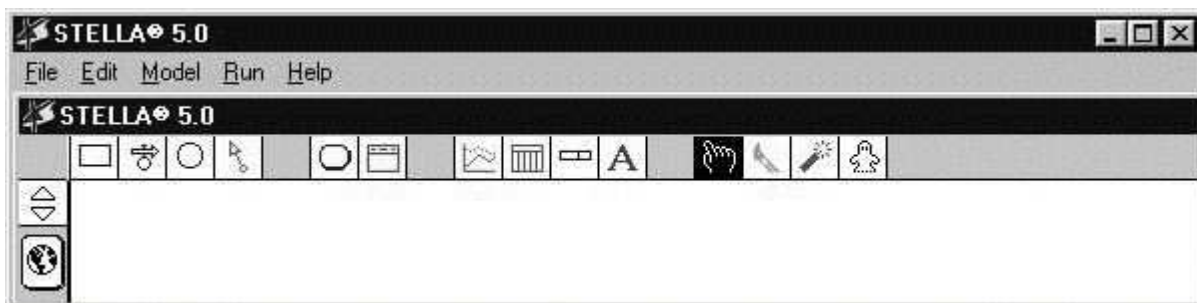
#### 3.1 Περιληπτική σύνοψη του περιβάλλοντος της STELLA

Αρχικά όταν θέσουμε σε εφαρμογή το πρόγραμμα ανακαλύπτουμε ότι υπάρχουν 3 βασικά επίπεδα μοντελοποίησης:

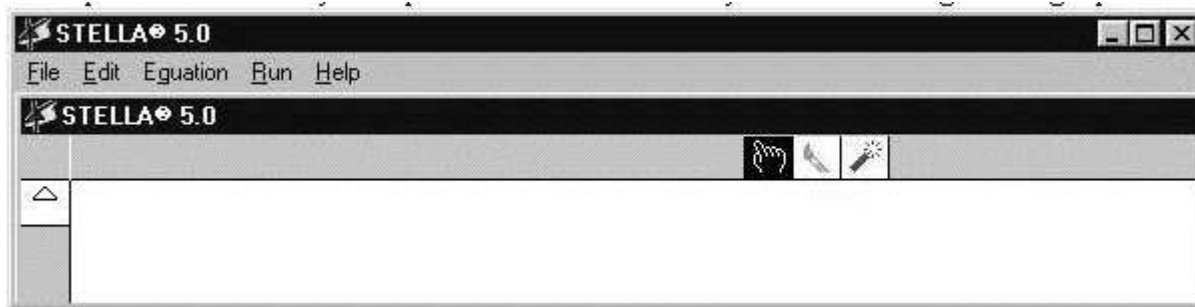
α) **“υψηλότερο επίπεδο” ή επίπεδο σχεδίασης:** αυτό το επίπεδο σχεδίασης παρέχει τα μέσα για τον λεπτομερή σχεδιασμό της συνολικής λογικής του μοντέλου όπως επίσης και συσκευές για να ελέγχουν και να παρακολουθούν την πρόοδο του μοντέλου.



β) **“μέσο επίπεδο” ή επίπεδο κατασκευής μοντέλου:** στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου απεικονίζεται στην οθόνη το ακριβές μοντέλο που κατασκευάζουμε



γ) **“κατώτερο επίπεδο” ή επίπεδο εξισώσεων:** το επίπεδο εξισώσεων αποτελεί την βάση του επιπέδου κατασκευής μοντέλου και περιέχει τις εξισώσεις και τις μαθηματικές έννοιες από τους βασικούς “οικοδομικούς λίθους” που χρησιμοποιούνται σε κάθε μοντέλο.

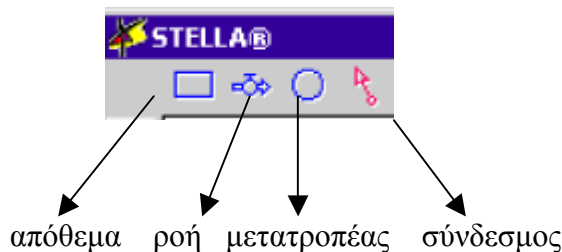


### 3.2 Βασικά εργαλεία ή “οικοδομικοί λίθοι” του προγράμματος:

Στα βασικά εργαλεία του προγράμματος περιλαμβάνονται τα αποθέματα (*stocks*), οι ροές (*flows*), οι μετατροπείς (*converters*) και οι σύνδεσμοι (*connectors*) (HPS, 2001).



Εικόνα 3.2.1: Βασικό μενού εργαλείων στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου, (HPS, 2001).



Εικόνα 3.2.2. Βασικά εργαλεία του προγράμματος, (HPS, 2001).

### 3.3 Αποθέματα (stocks):

Μιλώντας μεταφορικά, εάν η STELLA ήταν γλώσσα, τα αποθέματα (stocks) θα ήταν τα “ουσιαστικά”. Τα αποθέματα (stocks) είναι τα εργαλεία εκείνα που συσσωρεύουν ή συγκεντρώνουν “υλικά” (stuff). Με τον όρο “υλικά” εννοούμε ότι είναι χειροπιαστό και αντιληπτό και μπορεί να ποσοτικοποιηθεί και να προσδιοριστεί σε κάθε χρονική στιγμή. Τα “υλικά” μπορεί να είναι χαρακτηριστικοί οργανισμοί, άτομα άνθρακα, χρήματα, λίτρα νερού κτλ. Επιπρόσθετα τα “υλικά” είναι δυνατόν να είναι λιγότερο προσδιορισμένες έννοιες όπως για παράδειγμα η ευτυχία, η εμπιστοσύνη, η γνώση κτλ. Η δυναμική κίνηση και η αλλαγή των “υλικών” (stuff) βρίσκεται στο κέντρο κάθε συστήματος.



Εικόνα 3.3.1: Το απόθεμα (stock) στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA, (HPS, 2001).



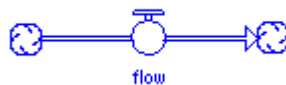
Εικόνα 3.3.2: Το απόθεμα (stock) όπως απεικονίζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου, (HPS, 2001).

### 3.4 Ροές (flows):

Εάν τα αποθέματα (stocks) είναι τα ‘ουσιαστικά’ της STELLA, τότε οι ροές (flows) είναι τα ‘ρήματα’. Μπορούμε να θεωρήσουμε τις ροές (flows) ως ‘σωλήνες’ που μεταφέρουν ‘υλικά’ και τον κύκλο που υπάρχει κάτω από τον σωλήνα ως την βαλβίδα που ρυθμίζει τον ρυθμό όπου τα ‘υλικά’ ρέουν.



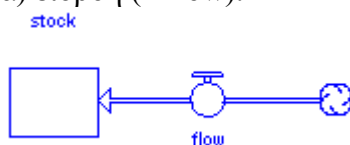
Εικόνα 3.4.1: Η ροή (flow) στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA, (HPS, 2001).



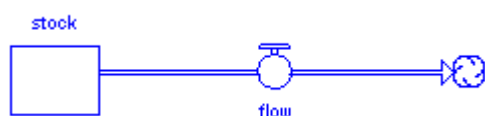
Εικόνα 3.4.2: Η ροή (flow) όπως απεικονίζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου, (HPS, 2001).

Παρακάτω μπορούμε να δούμε τους τρόπους σύνδεσης μεταξύ των ροών (flows) και των αποθεμάτων (stocks)

α) εισροή (inflow):



β) εκροή (outflow):



### 3.5 Μετατροπείς (converters):

Αξιοποιώντας την αναλογία της γλώσσας όπως και παραπάνω, θεωρούμε τους μετατροπείς ως τα “επίθετα” της STELLA. Οι μετατροπείς (converters) περιέχουν πληροφορίες που χρησιμοποιούνται για τον έλεγχο της ροής των “υλικών” στο μοντέλο. Προορίζονται για τον προσδιορισμό και την ερμηνεία των πληροφοριών. Ειδικότερα:

- α) προσδιορίζουν σταθερούς όρους
- β) ερμηνεύουν αλγεβρικές σχέσεις
- γ) ερμηνεύουν γραφικές σχέσεις



Εικόνα 3.5.1: Ο μετατροπέας (converter) στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA (HPS, 2001).



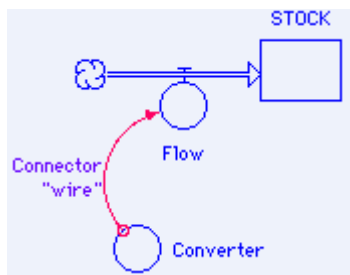
Εικόνα 3.5.2: Ο μετατροπέας (converter) όπως απεικονίζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου, (HPS, 2001).

### 3.6 Σύνδεσμοι (connectors):

Οι σύνδεσμοι (connectors) είναι τα εργαλεία εκείνα που λειτουργούν όπως τα ηλεκτρικά καλώδια. Μεταφέρουν πληροφορίες από το ένα σημείο στο άλλο, πληροφορίες που μπορεί να είναι μια σταθερή αλγεβρική σχέση, μια γραφική συνάρτηση ή και ο προσδιορισμός της ποσότητας των “υλικών” του μοντέλου.



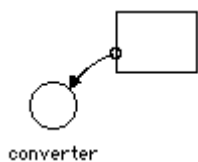
Εικόνα 3.6.1: Ο σύνδεσμος (connector) στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA, (HPS, 2001).



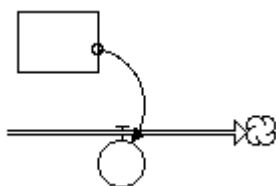
Εικόνα 3.6.2: Ο σύνδεσμος (connector) όπως απεικονίζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου συνδυαζόμενο με τα άλλα βασικά εργαλεία του συστήματος, (HPS, 2001).

Παρακάτω μπορούμε να δούμε τους τέσσερις διαφορετικούς τρόπους σύνδεσης που υπάρχουν.

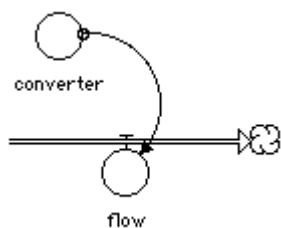
α) σύνδεση αποθεμάτων (stock) με μετατροπέα (converter)



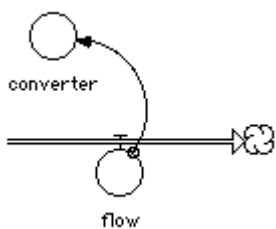
β) σύνδεση αποθεμάτων (stock) με ροή (flow)



γ) σύνδεση μετατροπέα (converter) με ροή (flow)



δ) σύνδεση ροής (flow) με μετατροπέα (converter)



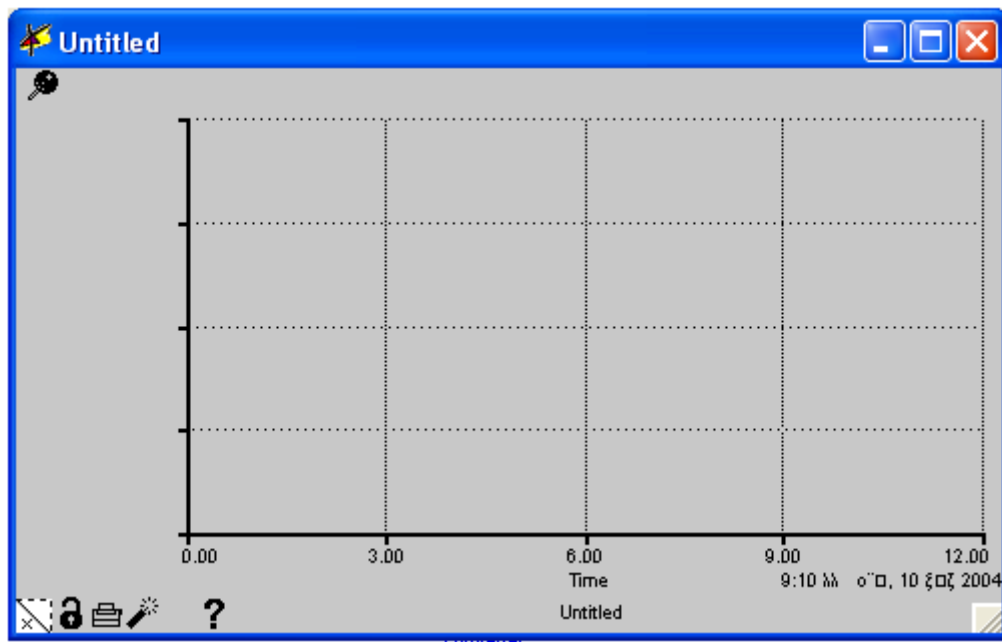
Πέρα από τα 4 βασικά εργαλεία της STELLA υπάρχουν και άλλα αντικείμενα που είναι χρήσιμα και πρακτικά όπως οι πίνακες και τα γραφήματα.

### 3.7 Γραφήματα :

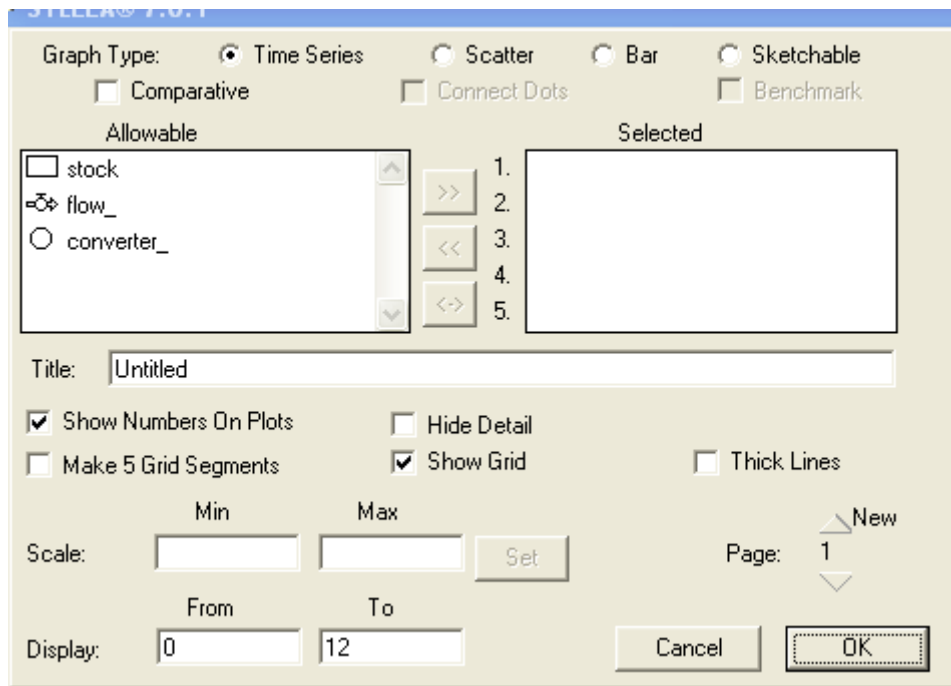


Εικόνα 3.7.1: Το γράφημα στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA, (Habekotte & Lutjeboer, 1995)

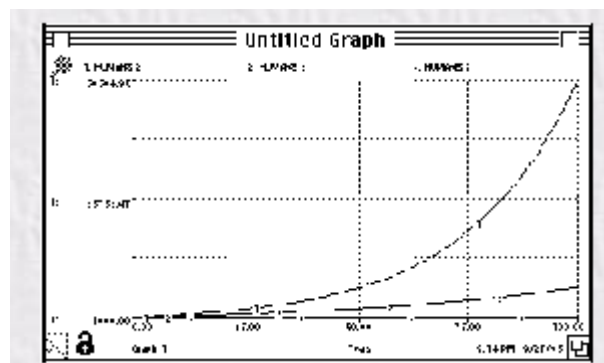
Για να δημιουργήσουμε ένα νέο γράφημα απλά επιλέγουμε την εικόνα του γραφήματος από το βασικό μενού εργαλείων της STELLA. Εάν το κάνουμε αυτό τότε θα δούμε ότι στο στρώμα κατασκευής του μοντέλου θα προκύψει το ακόλουθο κενό γράφημα



μπορούμε επίσης “κλικάρωντας” με το mouse του υπολογιστή μας στο κενό γράφημα να προκύψει ένα νέο παράθυρο



από την λίστα με τα επιτρεπόμενα είδη μπορούμε να επιλέξουμε αυτά τα οποία θέλουμε να φανερώσουμε. Μπορούμε να επιλέξουμε μεταξύ διαφόρων ειδών γραφημάτων. Σε ένα διαχωρισμένο γράφημα μια μεταβλητή σχεδιάζεται έναντι άλλης μεταβλητής. Σε γραφήματα χρόνου οι μεταβλητές σχεδιάζονται έναντι του χρόνου. Όπως συμβαίνει και με τους πίνακες μπορούμε να κάνουμε συγκρίσεις ώστε να δούμε τυχόν διαφορές μεταξύ διαφορετικών προσομοιώσεων. Ένα συγκριτικό γράφημα αποτυπώνει τα αποτελέσματα δύο ή και περισσότερων μοντέλων που “τρέχουν” κατά τους ίδιους άξονες. Πολλαπλές επιλογές της ίδιας “διαχωρισμένης” σχέσης μπορούν να αποτυπωθούν.



Εικόνα 3.7.2: Συγκριτικό γράφημα, (Habekotte& Lutjeboer, 1995)

### 3.8 Πίνακες:



Εικόνα 3.8.1: Ο πίνακας στο βασικό μενού εργαλείων της STELLA, (Habekotte & Lutjeboer, 1995)

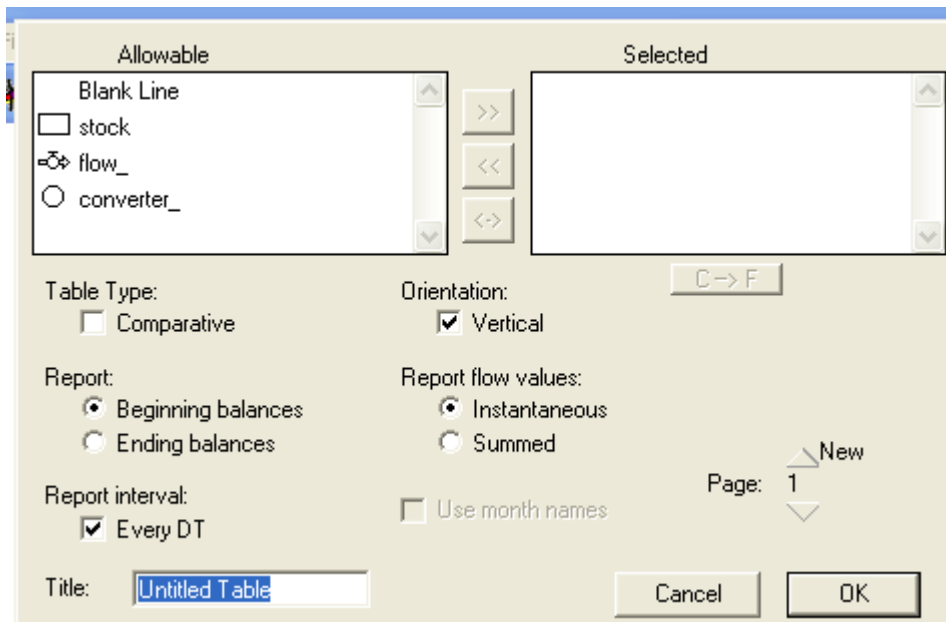
Οι πίνακες επιτρέπουν στον δημιουργό του μοντέλου να κατασκευάσει σύνθετα και πολυποίκιλα σετ μεταφράζοντας τα αριθμητικά αποτελέσματα που προκύπτουν από την προσομοίωση του μοντέλου

Για να επιλέξουμε έναν νέο πίνακα απλά επιλέγουμε την εικόνα του πίνακα από το βασικό μενού εργαλείων της STELLA. Εάν το κάνουμε αυτό θα δούμε ότι στο στρώμα κατασκευής θα προκύψει ο ακόλουθος κενός πίνακας

Time									

εάν “κλικάρουμε” με το mouse του υπολογιστή μας στο κενό πίνακα προκύπτει το ακόλουθο παράθυρο

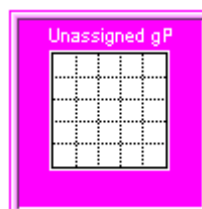




Ο προεπιλεγμένος πίνακας έχει κατακόρυφο σχήμα όπου απεικονίζεται κάθε τιμή από τις διαφορετικές επιτρεπόμενες μεταβλητές. Ένας συγκριτικός ωστόσο πίνακας φανερώνει μόνο μια επιτρεπόμενη μεταβλητή και χρησιμεύει για να συγκρίνει τα αποτελέσματα διαφορετικών προσομοιώσεων.

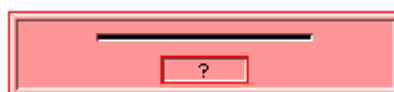
### 3.9 Συσκευές εισαγωγής δεδομένων

Στο επίπεδο σχεδίασης υπάρχει ένα πολύ σημαντικό εργαλείο που βοηθά στον αρχικό σχεδιασμό του μοντέλου. Λέγεται γραφική συσκευή εισαγωγής δεδομένων (graphical input device) και αποτυπώνει γραφικά, δεδομένα και πληροφορίες από διάφορες μεταβλητές του μοντέλου.



Εικόνα 3.9.1: Η γραφική συσκευή εισαγωγής δεδομένων όπως απεικονίζεται στο επίπεδο σχεδίασης του μοντέλου, (Habekotte& Lutjeboer, 1995)

Εκτός από την γραφική συσκευή εισαγωγής δεδομένων ένα άλλο πολύ χρήσιμο εργαλείο είναι η συσκευή εισαγωγής δεδομένων με την μορφή κλίμακας (slider input device). Η συσκευή αυτή αντιπροσωπεύει τις μεταβλητές που υπάρχουν στο μοντέλο με κλίμακα τέτοια ώστε να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τις τιμές που ορίζονται από την κλίμακα.



Εικόνα 3.9.2: Η συσκευή εισαγωγής δεδομένων με την μορφή κλίμακας (slider input device) όπως απεικονίζεται στο επίπεδο σχεδίασης μοντέλου του προγράμματος STELLA, (Habekotte& Lutjeboer, 1995)

### 3.10 Εκκίνηση προσομοίωσης μοντέλου

Όταν τελικά κατασκευάσουμε το μοντέλο θα πρέπει να δούμε πως αποτυπώνονται τα αποτελέσματά του, δηλαδή θα πρέπει να “τρέξουμε” το μοντέλο. Αυτό γίνεται με δύο τρόπους:

α) στο επίπεδο κατασκευής του μοντέλου χρησιμοποιώντας το ακόλουθο μενού



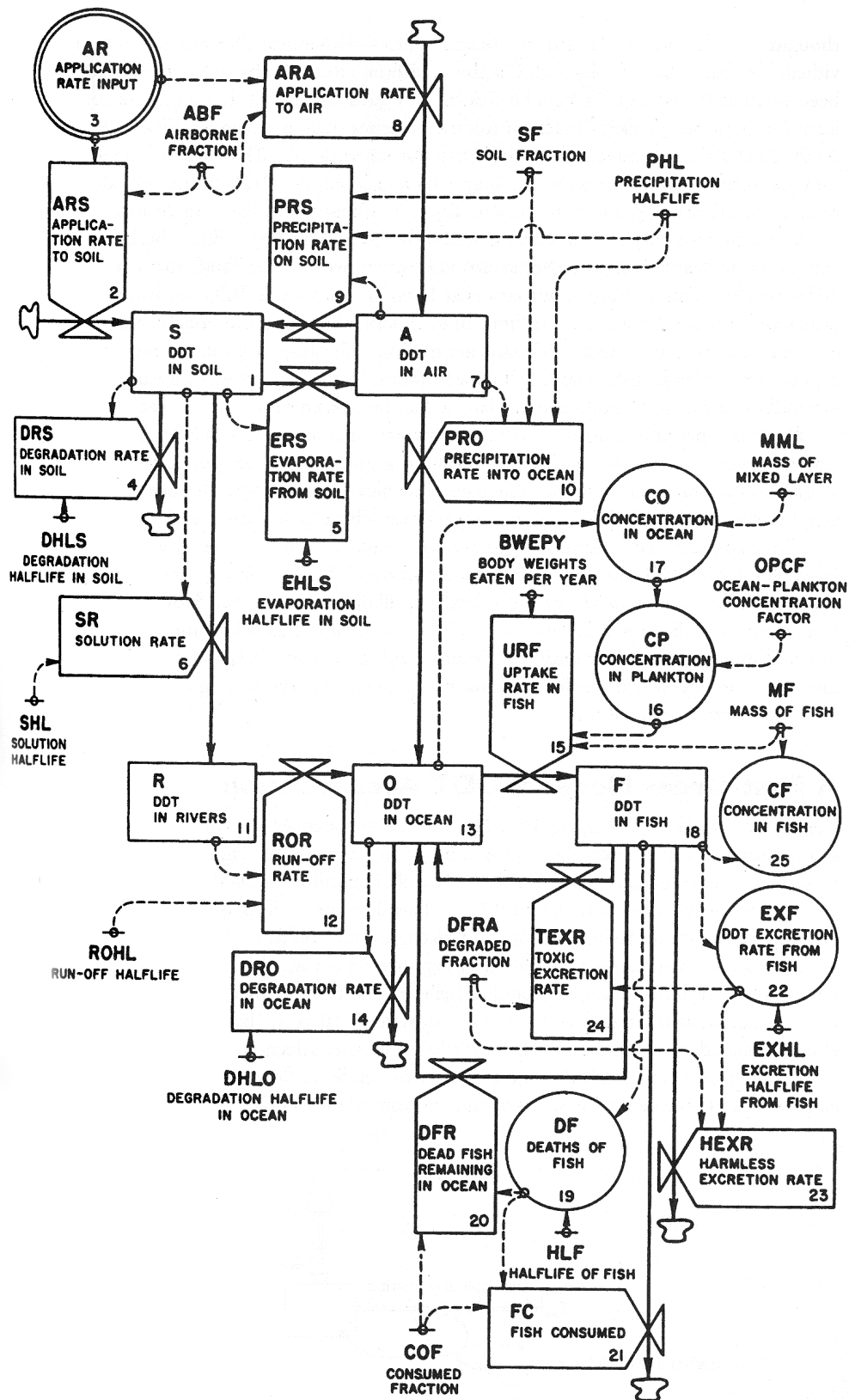
β) στο επίπεδο σχεδίασης του μοντέλου χρησιμοποιώντας το ακόλουθο μενού



#### 4. Προσομοιώνοντας την ροή του PCB σύμφωνα με το μοντέλο Randers

Η θεωρία της δυναμικής των συστημάτων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην προσομοίωση της ροής ενός υλικού, μέσα στο περιβάλλον. Οι ροές αυτές μπορεί να περιέχουν πολλαπλά μέσα, όπως νερό, έδαφος, αέρα καθώς και τα σώματα ανθρωπίνων όντων αλλά και άλλων ζώων. Τα μοντέλα μας βοηθούν να κατανοήσουμε την επιβράδυνση του χρόνου μεταξύ της εφαρμογής μιας ελεγχόμενης ροής και της έλευσής της σε *επιθυμητούς* και *μη επιθυμητούς* οργανισμούς. Τα μοντέλα συνήθως κατασκευάζονται με βήμα προς βήμα διαδικασία, βασισμένη στην γνώση που έχουμε, της ροής των υλικών σε κάθε μέσο. Ο στόχος είναι να βελτιώσουμε την διαχείριση των ελεγχόμενων ροών ώστε να επιτύχουμε την ζητούμενη επίδραση στους *επιθυμητούς οργανισμούς*, με ελάχιστα έμμεσα αποτελέσματα στους *μη επιθυμητούς οργανισμούς*. Το κεφάλαιο αυτό μας δείχνει εμφανώς μια γενική προσέγγιση στην προσομοίωση πολυμέσων ροών όπως για παράδειγμα το PCB. Το βιομηχανικό αυτό χημικό είναι ευρέως γνωστό σε σπουδαστές περιβαλλοντικών σχολών, και το παράδειγμά του θα αποκαλύψει την χρησιμότητα της θεωρίας δυναμικής των συστημάτων στο πεδίο της τοξικολογίας. Τα πρότυπα είναι χρήσιμα όποτε οι επιστήμονες επιθυμούν να προσομοιώσουν την ροή των υλικών διαμέσου πολλαπλών μέσων (π.χ. φαρμοκοκινητικό μοντέλο της ροής των φαρμάκων στο ανθρώπινο σώμα).

Η εικόνα παρουσιάζει ένα διάγραμμα ροής ενός μοντέλου δυναμικού συστήματος κατασκευασμένο από τον Jorgen Randers (1973) με σκοπό να μελετήσει την επιβράδυνση του χρόνου μεταξύ της εφαρμογής του DDT στην ζωική ανάπτυξη και την εμφάνιση χημικών στην αλιεία. Το διάγραμμα ροής ακολουθεί μια συγκεκριμένη δυναμική σύμβαση και έχει σχεδιαστεί βάσει της ροής του DDT που όμως αντιπροσωπεύει πλήρως και την ροή του PCB. Το μοντέλο DDT είναι εκτενώς τεκμηριωμένο στο βιβλίο του Randers (1973) με τίτλο: *Παγκόσμια Ισορροπία*. Μπορούμε να δουλέψουμε απευθείας στο δυναμικό ή να επιλέξουμε να μετατρέψουμε το μοντέλο σε πρόγραμμα ροής και αποθήκευσης. Το κεφάλαιο επεξηγεί το μοντέλο PCB με βήμα προς βήμα διαδικασία χρησιμοποιώντας προοδευτικά περισσότερα πολύπλοκα μοντέλα Stella. Μέχρι το τέλος του κεφαλαίου θα εκτιμήσουμε την εφαρμοσιμότητα των δυναμικών συστημάτων για την προσομοίωση ροής υλικών διάμεσου πολλαπλών μέσων. Επίσης θα εκτιμήσουμε κάποιες από τις <<προκλήσεις>> που μπορεί να προκύψουν κατά την προσομοίωση ροής υλικών με ευρεία ανομοιότητα σε χρονικές σταθερές.



Εικόνα 4.1: Διάγραμμα ροής του DDT κατασκευασμένο από τον Randers (1973)

#### 4.1 Υπόβαθρο

Η γέννηση της νέας περιβαλλοντικής κίνησης (modern environmental movement) συχνά σχετίζεται με την έκδοση της *Σιωπηλής Άνοιξης* (Silent Spring), της Carson το 1962. Η Carson (2002) περιέγραψε τον κίνδυνο των παρενεργειών από τα χημικά που εφευρέθηκαν τις δεκαετίες 1940 και 1950, συμπεριλαμβανομένων και των πολυχλωριωμένων διφαινυλίων ή PCBs. Τα PCBs χρησιμοποιήθηκαν πρώτη φορά την δεκαετία του 1940 με εντυπωσιακή επιτυχία σε διάφορες βιομηχανικές εφαρμογές. Το βιβλίο όμως της Carson (2002) μας προειδοποιούσε για τους κινδύνους από την συνεχιζόμενη χρήση των PCBs.

Τα PCBs παρουσιάζουν ιδιαίτερα προβλήματα εξαιτίας της μεγάλης διαλυτότητας τους στο λίπος. Αποθηκεύονται στο ζωικό λίπος και είναι αίτιο για την βιοσυγκέντρωσή του καθώς ανέρχεται τα στάδια της τροφικής αλυσίδας. Παρακάτω δίνεται ένα παράδειγμα στις εκβολές ενός ποταμού κοντά στο Long Island Sound (Ford, 1999). Οι τιμές των PCBs στο νερό ήταν γύρω στα 2,5 ppt (parts per trillion). Στο ζωοπλαγκτόν και στα πολύ μικρά ψάρια (που χρησιμεύουν και ως δόλωμα), η συγκέντρωση των PCBs μετρήθηκε στα 0,5 ppt. Τα μεγαλύτερα ψάρια τρώνε αυτά τα μικρότερα ψάρια ενώ οι αλαιοί τρώνε με την σειρά τους τα μεγαλύτερα ψάρια. Η συγκέντρωση των PCBs στους αλαιοτούς μετρήθηκε στα 25 ppt περίπου δέκα εκατομμύρια φορές μεγαλύτερη από την αρχική συγκέντρωση στο νερό του ποταμού.

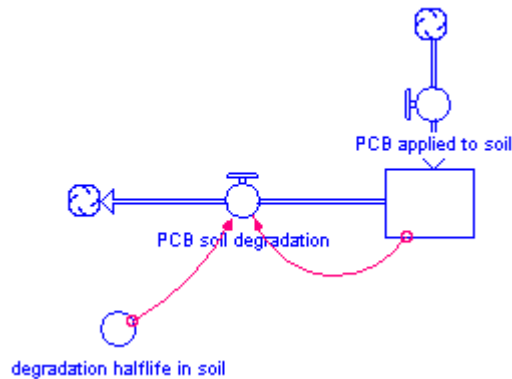
Τα PCBs είναι εξαιρετικά επικίνδυνα για σαρκοφάγα ζώα όπως αλαιοτούς, αετούς, γεράκια, πελεκάνους καθώς και το γεράκι peregrine. Διασπών τις συνήθεις ορμόνες στην περιοχή του ασβεστίου προκαλώντας έτσι αδυνατισμένα τσόφλια και ανεπάρκεια στην αναπαραγωγή. Για παράδειγμα το γεράκι peregrine είναι προστατευόμενο είδος λόγω της αναπαραγωγικής του ανεπάρκειας που συνδέεται κυρίως με τα PCBs.

Τα γεγονότα αυτά οδήγησαν τα περισσότερα από τα ανεπτυγμένα κράτη να απαγορεύσουν την χρήση των PCBs. Στις ΗΠΑ απαγορεύτηκε η χρήση τους το 1971, εννιά χρόνια μετά την έκδοση της *Σιωπηλής Άνοιξης* (Silent Spring). Μέχρι την χρονική στιγμή εκείνη υπήρξε μια δραματική προσπάθεια ανάκτησης κάποιων πληθυσμών πουλιών όπως για τον καφέ πελεκάνο στην ακτή της Καλιφόρνιας. Τα PCBs χρησιμοποιούνται ακόμα σε διάφορα μέρη του κόσμου παρά τον αρνητικό αντίκτυπό τους σε πληθυσμούς πουλιών. Ο Παγκόσμιος Οργανισμός Υγείας αναφέρει την παγκόσμια χρήση σε PCBs σε περισσότερο από 33 χιλιάδες μετρικούς τόνους ανά χρόνο.

#### 4.2 Εισαγωγή στα μοντέλα συσσώρευσης PCBs (πρωτεύον)

Ας εργαστούμε έναντι ενός συστήματος μοντέλου ροής PCBs με βήμα προς βήμα διαδικασία, ξεκινώντας με κάποια απλά παραδείγματα. Η εικόνα παρουσιάζει ένα μοντέλο προσομοίωσης της συσσώρευσης PCBs στο έδαφος. Η εισροή (inflow) είναι τα PCBs που *απαντώνται στο έδαφος*, η ξεχωριστή εκροή (outflow) είναι η υποβάθμιση του εδάφους σε ακίνδυνη μορφή. Αυτό συμβαίνει λόγω χημικής αποσύνθεσης, φωτοχημικής αποσύνθεσης και βιολογικού μεταβολισμού (Ford, 1999)

Αυτή η πολύπλοκη διαδικασία αντιπροσωπεύεται από εκθετική αποσύνθεση, με τον χρόνο ημιπεριόδου ζωής της υποβάθμισης του εδάφους να είναι η ελέγχων παράμετρος. Ο Randers (1973) πιστεύει ότι η παράμετρος αυτή μπορεί να κυμανθεί από 3 έως 30 χρόνια και συνιστά ένα <<βασικό παράδειγμα>>, υπολογισμένο σε 10 χρόνια και βασισμένο σε δοκιμές όπου η επίδραση της υποβάθμισης του εδάφους μετρήθηκε ξεχωριστά από άλλες επιδράσεις όπως για παράδειγμα την εξάτμιση.

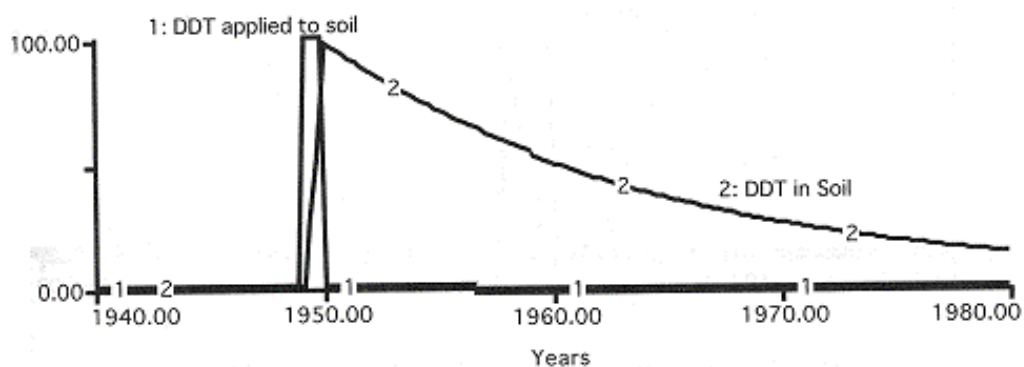


Εικόνα 4.2.1: Απλό μοντέλο προσομοίωσης PCB στο έδαφος

Η εξίσωση για ροές υλικών με παράμετρο ημιπεριόδου ζωής, απασχολεί ένα παράγοντα μετατροπής (1.44) ώστε να εξασφαλίσει την ισοδύναμη τιμή του χρονικού διαστήματος όταν το υλικό παραμένει στο *απόθεμα* (stock) του συστήματος. Από τότε που ο Randers (1973) δούλεψε με τόσο αβέβαιες μετρήσεις, είχε την ελευθερία να χρησιμοποιήσει το (1,5) ως παράγοντα μετατροπής. Ας ακολουθήσουμε το παράδειγμά του ώστε τα αποτελέσματά μας να μπορούν να συγκριθούν με τα πρωτότυπα. Ακολουθώντας την προσέγγιση του Randers (1973) η εξίσωση της εκροής (outflow) στην εικόνα θα γραφόταν

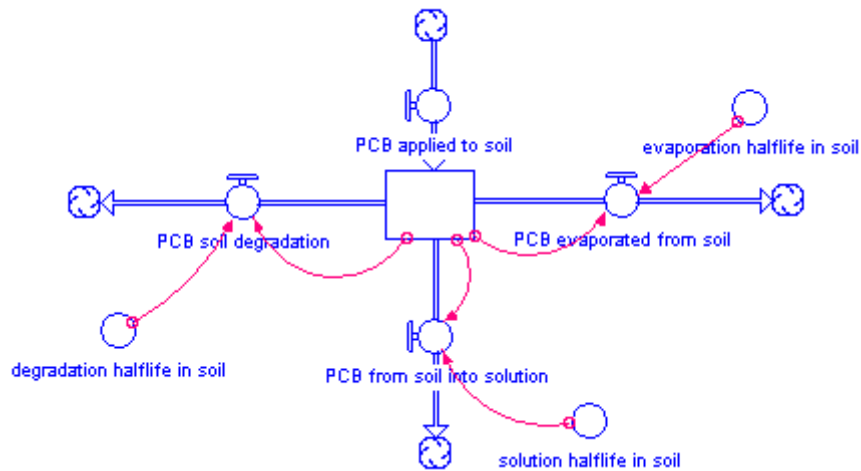
$$PCB\_υποβάθμιση\_του\_εδάφους = PCB\_εδάφους / (1.5 * ημιπερίοδος ζωής\_υποβάθμισης\_εδάφους)$$

Η εικόνα παρουσιάζει την προσομοιωμένη απόκριση των PCBs στο έδαφος, εάν 100 τόνοι PCBs συσσωρεύονταν στο έδαφος το 1950. Η συσσωρευμένη ποσότητα αυξάνεται απότομα σε 100 τόνους και ύστερα φθίνει με εκθετικό τρόπο. Δέκα χρόνια μετά την συσσώρευση, περίπου 50 τόνοι θα παρέμεναν στο έδαφος ενώ μετά από 20 χρόνια περίπου θα παρέμεναν 25 τόνοι. Παρατηρούμε ότι τα σχεδιαγράμματα έγιναν βάσει υπολογισμού DDT αλλά όπως γνωρίζουμε τα PCBs και το DDT συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο.



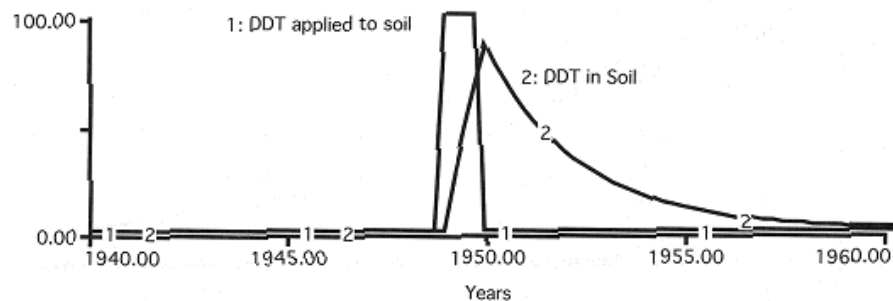
Εικόνα 4.2.2: Προσομοιωμένη απόκριση του πρωτεύοντος μοντέλου (Ford, 1999)

Στην εικόνα εκτείνεται το απλό μοντέλο που περιλαμβάνει δύο επιπρόσθετες εκροές (outflows). Η εξάτμιση των PCBs από το έδαφος, ελέγχεται από την εξάτμιση ημπεριόδου ζωής στο έδαφος που μπορεί να οριστεί στα 2 χρόνια. Η τρίτη εκροή (outflow) αντιπροσωπεύει την αφαίρεση των PCBs, όταν τα σωματίδια του εδάφους εξαλείφονται εντελώς από την διάβρωση. Το μόριο του PCB είναι ελάχιστα διαλυτό στο νερό, οπότε δεν είναι πιθανό να διαλυθεί. Όμως τα PCBs προσκολλούνται στα σωματίδια του εδάφους και τα σωματίδια αυτά μπορούν να καταστραφούν από την διάβρωση. Πολύ μικρή ποσότητα PCBs διαφεύγει από το έδαφος, μέσω της παραπάνω διαδικασίας για αυτό και ο Randers (1973) ορίζει τον χρόνο ημπεριόδου ζωής της διάλυσης των PCBs στο έδαφος στα 500 χρόνια.



Εικόνα 4.2.3: Επεκτείνοντας το απλό μοντέλο

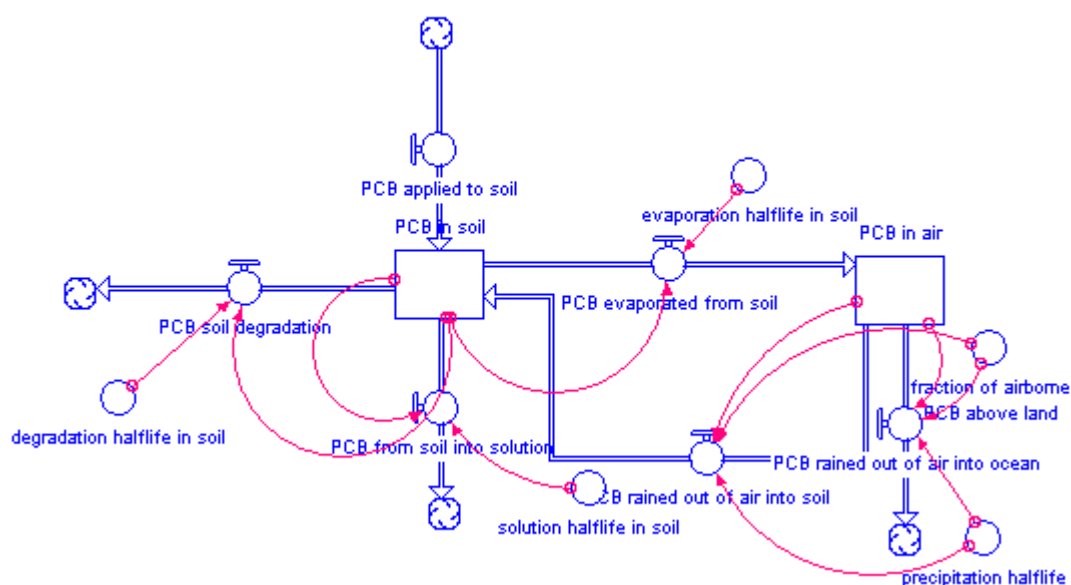
Η προσομοιωμένη απόκριση των PCBs στο έδαφος, εάν 100 τόνοι PCBs συσσωρεύονταν στο έδαφος το 1950, παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα. Η συσσωρευμένη ποσότητα αυξάνεται απότομα αλλά δεν φθάνει τους 100 τόνους εξαιτίας της ταχύτερης εξάτμισης η οποία αφαιρεί κάποια ποσότητα PCBs από το έδαφος. Το νέο αυτό μοντέλο παρουσιάζει ότι πολύ λίγη ποσότητα PCBs θα παρέμενε στο έδαφος 10 χρόνια μετά. Παρατηρούμε ότι τα σχεδιαγράμματα έγιναν βάσει υπολογισμού DDT αλλά όπως γνωρίζουμε τα PCBs και το DDT συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο.



Εικόνα 4.2.4: Προσομοιωμένη απόκριση στο απλό μοντέλο μετά την επέκτασή του (Ford, 1999)

### 4.3 Δευτερεύον μοντέλο συσσώρευσης

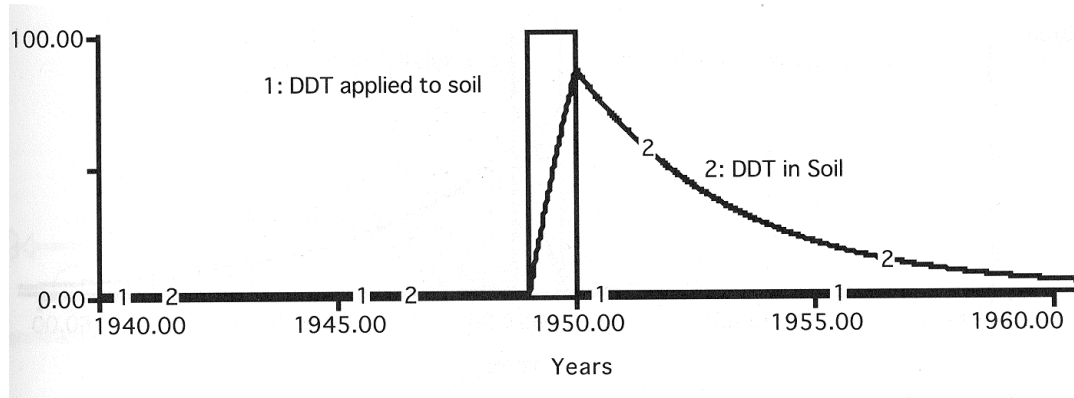
Στο σημείο αυτό πιθανόν να σκεφθούμε την κατάληξη των PCBs που απομακρύνονται από το έδαφος, μέσω της εξάτμισης. Μόλις τα μόρια των PCBs βρεθούν στον αέρα γίνονται πολύ ευκίνητα και μπορούν να διανύσουν μεγάλες αποστάσεις, μέχρι να πέσουν πάλι στο έδαφος, κυρίως λόγω καθίζησης. Εάν βρέχει κάθε 2-3 εβδομάδες μπορούμε να υποθέσουμε ότι τα PCBs σχεδόν ταχύτατα θα διαφύγουν από την ατμόσφαιρα. Κατά την διάρκεια όμως που βρίσκονται στον αέρα, μπορεί να διαχυθούν στον ωκεανό. Η εικόνα παρουσιάζει μια περαιτέρω επέκταση του μοντέλου ώστε να μπορεί να επεξεργάζεται τα αέρια PCBs καθώς και την ποσότητα των PCBs που επιστρέφει στο έδαφος εξαιτίας της καθίζησης. Αυτό είναι ένα δευτερεύον μοντέλο όπου χρησιμοποιεί δύο αποθέματα (stocks) για να μπορεί να επεξεργαστεί την συσσώρευση των PCBs στο σύστημα (Ford, 1999)



Εικόνα 4.3.1: Δευτερεύον μοντέλο συσσώρευσης

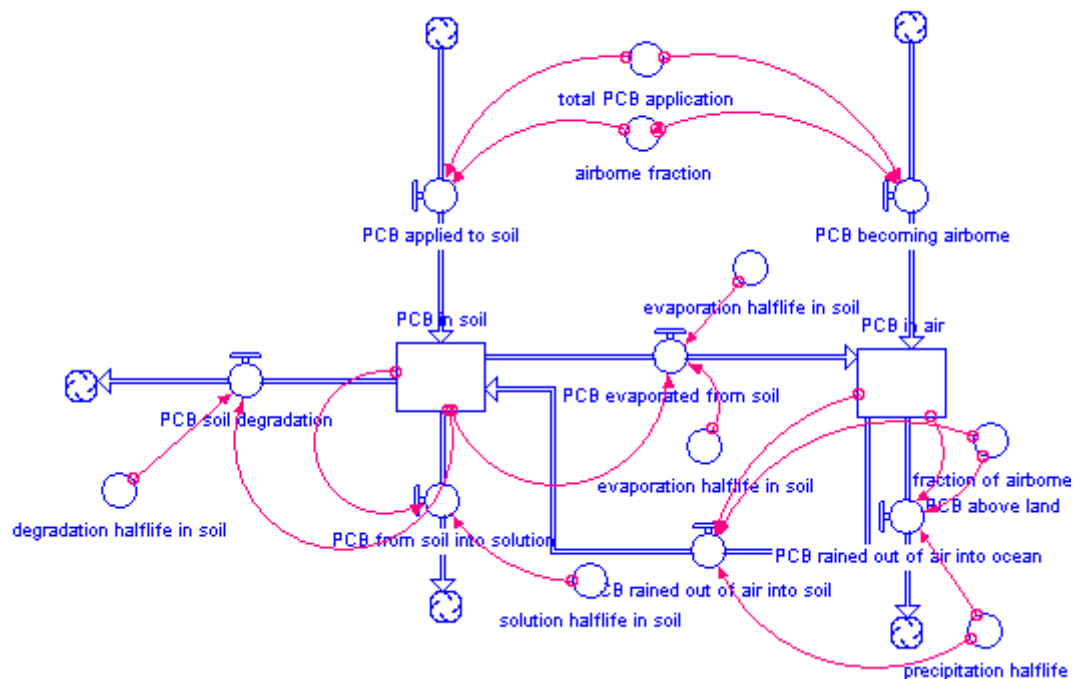
Ακολουθώντας τις υποδείξεις του Randers (1973) βλέπουμε ότι το κλάσμα των αερίων PCBs ορίζεται στο 30%. Ο χρόνος ημιπεριόδου ζωής της καθίζησης ορίζεται στα 0.05 χρόνια βασισμένο στην υπόθεση ότι μισή ποσότητα αερίων PCBs διαφεύγει βίαια της ατμόσφαιρας λόγω καθίζησης περίπου κάθε 2-3 εβδομάδες. Η προσομοιωμένη απόκριση του νέου μοντέλου απεικονίζεται παρακάτω. Όπως προηγουμένως 100 τόνοι PCBs συσσωρεύονται στο έδαφος την χρονιά 1950. Το νέο μοντέλο αποκρίνεται γενικά κατά τον ίδιο τρόπο όπως το προηγούμενο μοντέλο εξαιτίας της αστραπιαίας διαφυγής PCBs από το έδαφος λόγω εξάτμισης. Όμως η γρήγορη επιστροφή ποσότητας αερίων PCBs στο έδαφος προκαλεί μια πιο αργή φθίνουσα πορεία όπως δείχνει και η εικόνα. Παρατηρούμε ότι τα σχεδιαγράμματα έγιναν βάσει υπολογισμού DDT αλλά όπως γνωρίζουμε τα PCBs και το DDT συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο.





Εικόνα 4.3.2: Προσομοιωμένη απόκριση του δευτερεύοντος μοντέλου (Ford, 1999)

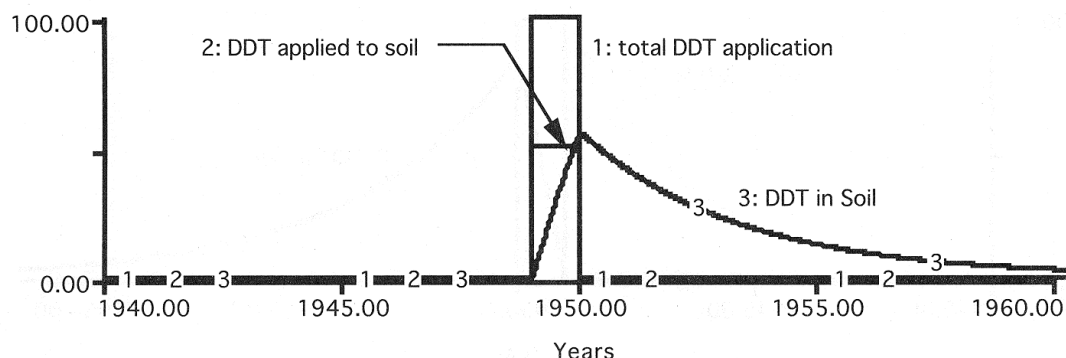
Τώρα ας επεκτείνουμε το δευτερεύον αυτό μοντέλο ώστε να υπολογίσουμε την πιθανότητα ότι ποσότητα PCB γίνεται αέρια αμέσως κατά την διάρκεια της συσσώρευσής της. Το *ολικό συσσωρευμένο PCB* είναι τώρα ένας μετατροπέας, και το κλάσμα του αερίου όζοντος χρησιμοποιείται για να διαχωρίσει το συσσωρευμένο PCB σε δύο ροές, όπως φαίνεται στην εικόνα. Το *κλάσμα του αερίου όζοντος* ορίζεται στο 50% αν λάβουμε υπ' όψη μας τις προτάσεις του Randers (1973).



Εικόνα 4.3.3: Επεκτείνοντας το δευτερεύον μοντέλο συσσώρευσης

Η προσομοιωμένη απόκριση του νέου μοντέλου φαίνεται στην εικόνα. Οι 100 τόνοι PCB (το έτος 1950) έχουν τώρα διαχωριστεί σε δύο ροές (flows). Η μισή ποσότητα φθάνει στο έδαφος, η άλλη μισή γίνεται αέριο PCB όπου ένα κλάσμα μπορεί να επιστρέψει στο έδαφος, μέσω καθίζησης. Η προσομοιωμένη αυτή απόκριση μας δείχνει ότι πολύ μικρή ποσότητα PCB θα παραμείνει στο έδαφος, 10 χρόνια μετά την συσσώρευσή της.

Παρατηρούμε ότι τα σχεδιαγράμματα έγιναν βάσει υπολογισμού DDT αλλά όπως γνωρίζουμε τα PCBs και το DDT συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο.



Εικόνα 4.3.4: Προσομοιωμένη απόκριση με διαχωρισμένες ροές μεταξύ εδάφους και ατμόσφαιρας (Ford, 1999)

#### 4.4 Μοντέλο Randers

Τα προηγούμενα τέσσερα μοντέλα περιγράφουν το πόσο μπορούμε να κατασκευάσουμε βαθμιαία και περιεκτικά την προσομοίωση της πορείας που είναι πιθανόν να ακολουθήσει το PCB στο περιβάλλον. Η προσέγγιση αυτή μπορεί να συνεχιστεί και για την συγκέντρωση του PCB στους ωκεανούς και στα ψάρια. Η συγκέντρωσή του στα ψάρια είναι ιδιαίτερα σημαντική επειδή τα ψάρια αποτελούν βασική πηγή τροφής για πολλά πτηνά, που μπορεί να αντιμετωπίζουν αναπαραγωγικές αδυναμίες.

Η εικόνα παρουσιάζει ένα διάγραμμα ροής PCB σύμφωνα με το αυθεντικό μοντέλο του Randers (1973) για το DDT. Πέντε αποθέματα (stocks) χρησιμοποιούνται για να παρακολουθήσουν την συγκέντρωση του PCB στο σύστημα. Κάθε απόθεμα (stock) μετριέται σε μετρικούς τόνους PCB, ενώ κάθε ροή (flow) σε μετρικούς τόνους/ χρόνο. Πολλές ροές χρησιμοποιούν τον όρο “ρυθμός” (πχ: ρυθμός υποβάθμισης του εδάφους). Ένας ρυθμός ευμετάβλητος στο << Dynamo >> αντιστοιχεί σε μια μεταβλητή ροή στην Stella ώστε να μην συγχέονται οι μονάδες τους. Κάθε ροή μετριέται σε μετρικούς τόνους / χρόνο.

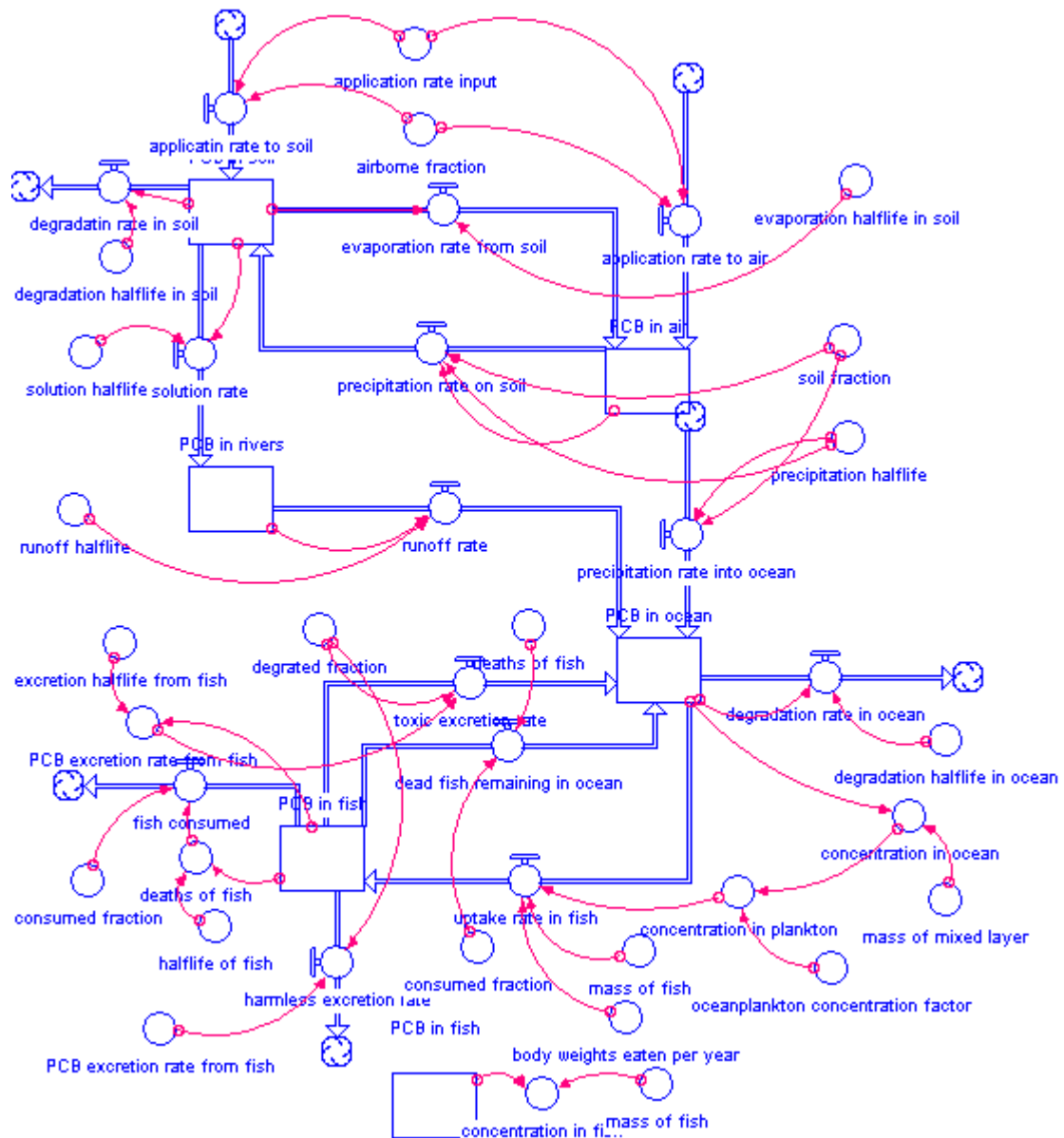
Το PCB εισάγεται στο σύστημα στην κορυφή και ακολουθεί πορεία μέσω δύο αποθεμάτων (stock). Η πορεία για τον ωκεανό γίνεται είτε μέσω των νερών που προέρχονται από το λιώσιμο των χιονιών είτε μέσω της καθίζησης του αερίου PCB που περιφέρεται πάνω στον ωκεανό. Στο κατώτερο τμήμα της εικόνας, έχουμε αναθέσει σε ένα απόθεμα (stock) να παρακολουθεί το PCB που βρίσκεται συσσωρευμένο στον ωκεανό και σε άλλο απόθεμα (stock) να παρακολουθεί και να ελέγχει το PCB που είναι συσσωρευμένο στα ψάρια. Η συγκέντρωση του PCB στον ωκεανό είναι βασισμένη στην μάζα νερού του ανάμεικτου στρώματος. Το μοντέλο χρησιμοποιεί έναν παράγοντα συγκέντρωσης ωκεάνιου πλαγκτού ώστε να εκτιμήσει την συγκέντρωση στο πλαγκτόν. Οι McKinney και Schoch (Ford, 1999) επεξηγούν την χρήση των παραγόντων βιοσυγκέντρωσης (BGF) για τους ρυπογόνους οργανισμούς που ανέρχονται στα στάδια της τροφικής αλυσίδας). Η συγκέντρωση του PCB στο πλαγκτόν χρησιμοποιείται έπειτα για να υπολογίσουμε την συγκέντρωση του PCB στα ψάρια. Ο Randers (1973) δίνει <<πολύ καλούς υπολογισμούς>> και μια κλίμακα αβεβαιότητας βασισμένη σε μια ευρεία ποικιλία από πηγές ενημέρωσης που ήταν διαθέσιμες στις αρχές τις δεκαετίας του

1970. Οι καλύτεροι και ακριβέστεροι υπολογισμοί του για διάφορους χρόνους ημίσειας ζωής φαίνονται στον παρακάτω πίνακα

Πίνακας 4.4.1: Υπολογισμοί ημιζών του PCB σε διάφορα μέσα (Randers, 1973)

Ημιπερίοδος ζωής	Χρόνια
Υποβάθμιση εδάφους	10
Εξάτμιση από το έδαφος	2
Διάλυση	500
Καθίζηση	0.05
Νερό λιωμένων χιονιών	0.1
Υποβάθμιση ωκεανού	15
Ψάρια	3
Απέκκριση ψαριών	0.3

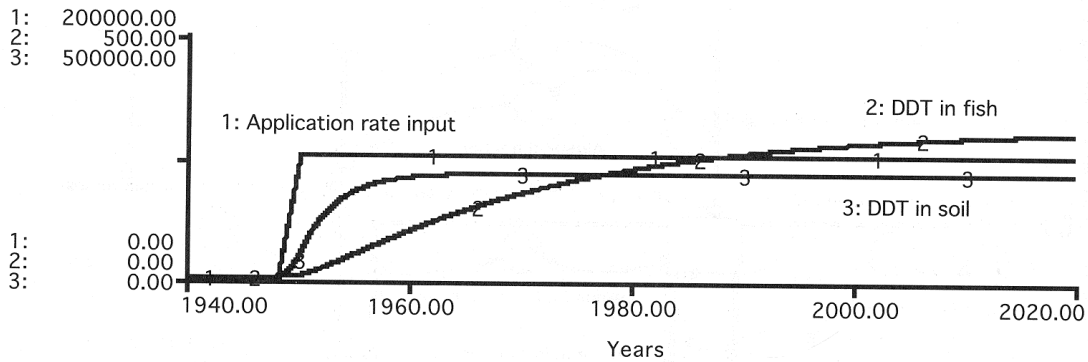
Ο σκοπός του μοντέλου αυτού είναι να μας βοηθήσει να κατανοήσουμε τον χρόνο που θα χρειαστεί για αλλαγές στην κορυφή της εικόνας ώστε να ακολουθεί και όλο το μοντέλο μέχρι το κατώτερο τμήμα. Ειδικότερα το μοντέλο να χρησιμοποιηθεί για να δοκιμάσει τον χρόνο που θα χρειαστεί για την μείωση του βαθμού συσσώρευσης του PCB στα ψάρια. Η εισαγωγή του βαθμού συσσώρευσης αντιπροσωπεύει παγκοσμίως την χρήση PCB. Αυτή περίπου ορίζεται σε 100.000 μετρικούς τόνους / χρόνο και η ανώτερη τιμή φθάνει τους 175.000 μετρικούς τόνους/ χρόνο( 1960)



Εικόνα 4.4.2: Διάγραμμα ροής του Μοντέλου PCB.

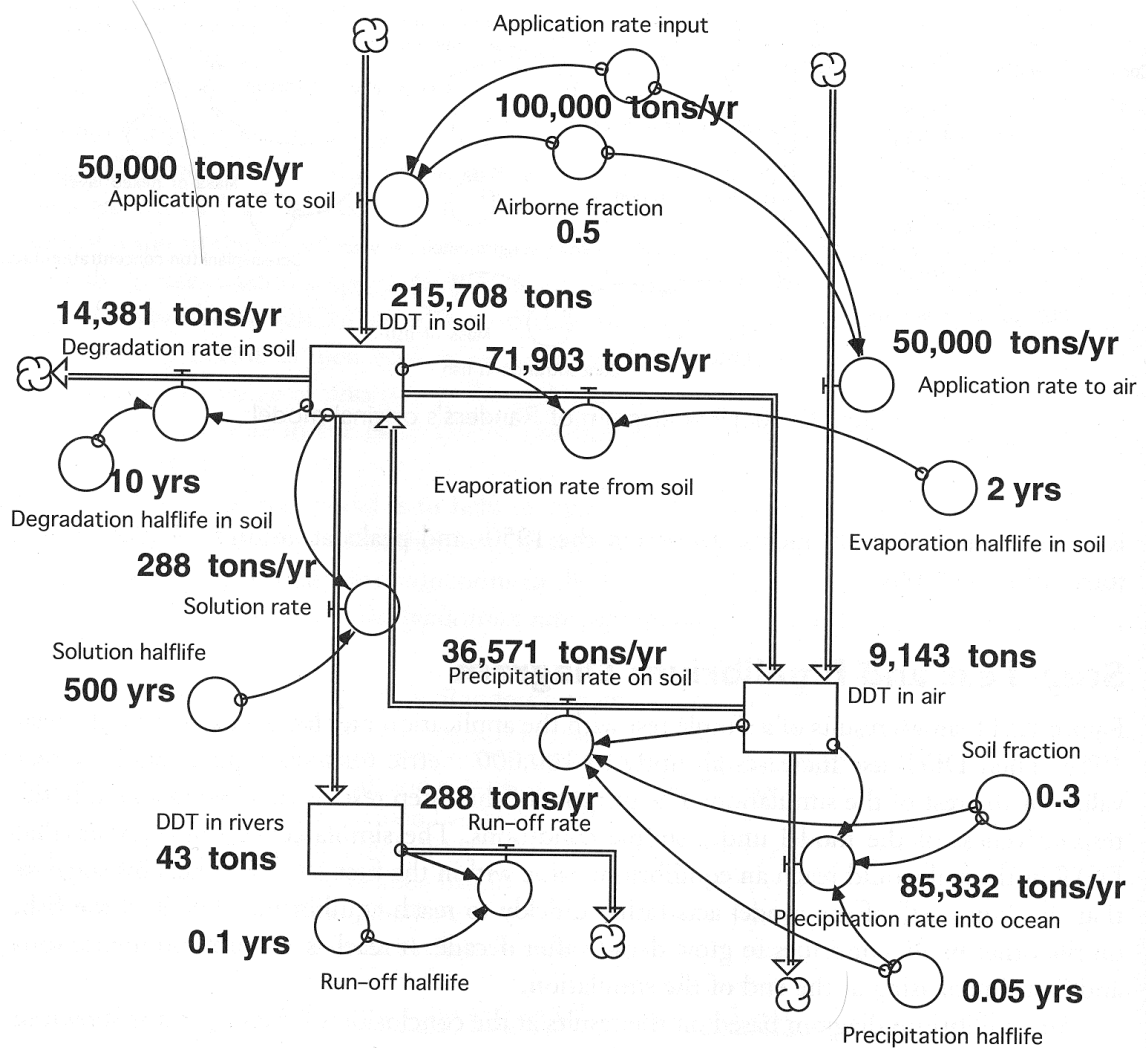
#### 4.5 Διάγραμμα ισορροπίας

Η εικόνα παρουσιάζει αποτελέσματα μιας απλής δοκιμής με τον βαθμό συσσώρευσης σταθεροποιημένο στο μηδέν έως την χρονιά 1950. Στην συνέχεια η χρήση του PCB αυξάνει απότομα σε 100.000 μετρικούς τόνους / χρόνο και παραμένει στην τιμή αυτή για το υπόλοιπο της προσομοίωσης. Ο σκοπός της δοκιμής αυτής είναι μας επιτρέψει να μελετήσουμε την απόκριση του μοντέλου υπό απλές συνθήκες. Η προσομοιωμένη απόκριση αποκαλύπτει ότι το PCB στο έδαφος θα έφτανε μια ισοδύναμη τιμή μέσα στα πρώτα 10-15 χρόνια. Αυτό υποδηλώνει ότι το “άνωτερο τμήμα” του μοντέλου δρα σχετικά γρήγορα ώστε να εξισορροπήσει. Από την άλλη μεριά ποσότητα PCB στα ψάρια συνεχίζει να αυξάνεται κάθε δεκαετία που περνά. Η τιμή φθάνει γύρω στους 300 μετρικούς τόνους και συνεχίζει να αυξάνεται στο τέλος της προσομοίωσης.



Εικόνα 4.5.1: Δοκιμές στο μοντέλο Randers (1973)

Ένα διάγραμμα ισορροπίας βασισμένο στα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα της προηγούμενης δοκιμής, παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα. Το διάγραμμα εστιάζει στο “κορυφαίο τμήμα” του μοντέλου, αφού αυτό είναι το τμήμα που ισορροπεί. Όπως φαίνεται 100.000 περίπου μετρικοί τόνοι / χρόνο, εισέρχονται στο σύστημα από την συσσωρευμένη ποσότητα PCB. Το “κατώτερο τμήμα” του διαγράμματος μας δείχνει τις δύο ροές που μεταφέρουν PCB στους ωκεανούς. Η μια ροή είναι το νερό στα ποτάμια που προέρχεται από το λιώσιμο των χιονιών. Υπολογίζεται γύρω στους 288 τόνους / χρόνο. Η δεύτερη ροή είναι η καθίζηση του αερίου PCB. Υπολογίζεται σε πάνω από 85.000 τόνους / χρόνο PCB που ρέει στον ωκεανό. Τα αριθμητικά αποτελέσματα στην εικόνα υποδηλώνουν ότι περίπου 85% της συσσωρευμένης ποσότητας PCB, θα εισέλθει στον ωκεανό λόγω κυρίως της καθίζησης που μετακινεί και παρασύρει το PCB στον ωκεανό. Αλλά τι γίνεται με το υπόλοιπο 15%; Φαίνεται να διαφεύγει από το σύστημα μέσω της υποβάθμισης του εδάφους.



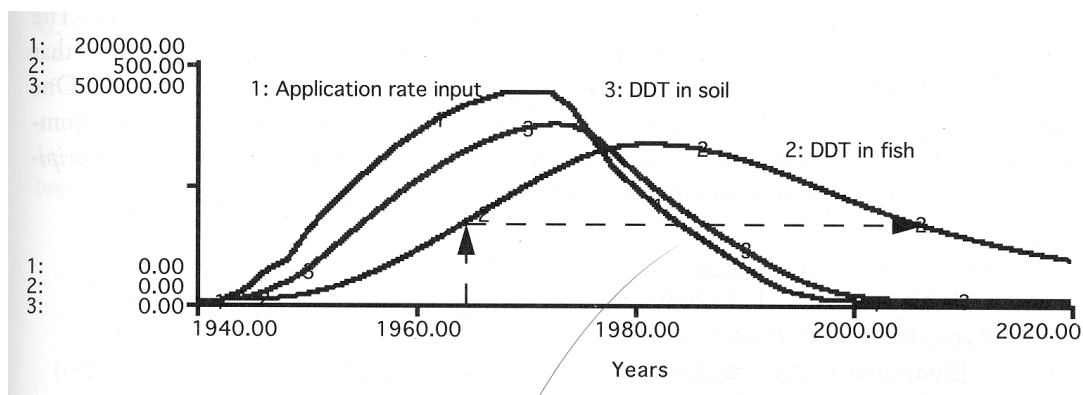
Εικόνα 4.5.2: Διάγραμμα ισορροπίας (Ford, 1999)

Ας υποθέσουμε ότι θα πρέπει να περιορίσουμε την χρήση του PCB στο “μηδέν” μέσα στην χρονιά 2021. Γνωρίζουμε ότι η ροή PCB στον ωκεανό δεν θα πέσει κατευθείαν στο “μηδέν”. Υπάρχει “απόθεμα” PCB τόσο στο έδαφος, όσο και στον αέρα και στα ποτάμια. Θα χρειαστεί χρόνος για το απόθεμα αυτό να βρει βαθμιαία τον “δρόμο” του προς τον ωκεανό. Το ολικό PCB που είναι αποθηκευμένο στο σύστημα την χρονιά 2020 είναι περίπου 255.000 τόνοι, και η μεγαλύτερη ποσότητά του είναι αποθηκευμένη στο έδαφος. Μπορούμε να περιμένουμε ότι περίπου 85% του αποθέματος PCB τελικά θα βρει τον “δρόμο” του προς τον ωκεανό κυρίως λόγω εξάτμισης και έπειτα λόγω καθίζησης στον ωκεανό.

#### 4.6 Επιπτώσεις από το βασικό μοντέλο σχεδίασης

Η εικόνα παρουσιάζει το σχεδιάγραμμα του Randers (1973) σε σχέση με την ποσότητα PCB στο έδαφος και τα ψάρια εάν η συσσώρευση του PCB ακολουθεί ένα πολύ καλά υπολογισμένο “σενάριο”. Επέτρεψε την αύξηση της χρήσης PCB κατά την διάρκεια της χρονιάς 1960 με μεγαλύτερη τιμή γύρω στους 175.000 τόνους /χρόνο την χρονιά 1970. Αιτιολόγησε την υπόθεση αυτή ενάντια στον αντίκτυπο που θα προκαλούσε μια σταδιακή μείωση της χρήσης του PCB έως την χρονιά 1998. Η εικόνα μας δείχνει ότι το PCB στο έδαφος θα αυξηθεί απότομα σε συνδυασμό της αύξησης της χρήσης του PCB

σε διάφορες βιομηχανικές εφαρμογές. Η ποσότητα του PCB στα ψάρια θα συνεχίσει να αυξάνει για κάποια χρόνια φθάνοντας μια μέγιστη τιμή το 1980. Οι διακεκομμένες γραμμές στην εικόνα έχουν ως σκοπό να εφιστήσουμε την προσοχή μας το 1962 χρονιά δηλαδή που εκδόθηκε η *Σιωπηλή Άνοιξη*. Το πρώτο βέλος μας δείχνει το επίπεδο του PCB στα ψάρια γύρω στο 1962, ένα επίπεδο αρκετά επικίνδυνο ώστε να οδηγήσει στην έκδοση της *Σιωπηλής Άνοιξης*. Τώρα ας ακολουθήσουμε την οριζόντια γραμμή για να διαπιστώσουμε τον χρόνο που θα χρειαστεί το προσομοιωμένο επίπεδο του PCB στα ψάρια να επιστρέψει στην τιμή του 1962. Η προσομοίωση αποκαλύπτει ότι πρέπει να είμαστε προετοιμασμένοι να περιμένουμε να επιστρέψει το PCB στο επίπεδο που προκάλεσε την έκδοση της *Σιωπηλής Άνοιξης*. Παρατηρούμε ότι τα σχεδιαγράμματα έγιναν βάσει υπολογισμού DDT αλλά όπως γνωρίζουμε τα PCBs και το DDT συμπεριφέρονται με παρόμοιο τρόπο.



Εικόνα 4.6.1: Σχεδιάγραμμα μοντέλου Randers (1973)

Το να μπορέσει να κατανοήσει την μεγάλη καθυστέρηση στην μεταφορά ενός επίμονου ρυπαντή ήταν για τον Randers (1973) ο κύριος σκοπός της έρευνάς του. Χρησιμοποίησε πολυάριθμους προσομοιωτές, με αποκλίσεις στις απροσδιόριστες παραμέτρους και με αλλαγές στο “σενάριο” χρήσης PCB στο μέλλον. Τα αποτελέσματά του μπορούν να συνοψισθούν αναφορικά στην επαναληψιμότητα της πενήνταχρονης παύσης. Για παράδειγμα, σύμφωνα με αισιόδοξες προβλέψεις όλων των απροσδιόριστων παραμέτρων η προσομοίωση απαιτούσε περίπου 40 χρόνια για να επιστρέψει στο επίπεδο του 1962. Σε ένα “σενάριο” με ολοκληρωτική απαγόρευση της χρήσης PCB την χρονιά 1971, θα χρειαζόντουσαν 35 περίπου χρόνια για την επιστροφή στο επίπεδο του 1962. Αυτός ο χρόνος παύσης προσδιορίζει την αξιολογική “ορμή” που σχετίζεται με την ροή του PCB διαμέσου πολλαπλών μέσων.

#### 4.7 Εναλλακτικό- αναθεωρημένο μοντέλο

Η αριθμητική βαθμίδα στο μέγεθος του μοντέλου Randers ορίζεται στα 0,02 χρόνια, οπότε 4.000 επαναλήψεις απαιτούνται για να προσομοιώσουν μια παύση 80 χρόνων. Το μοντέλο ξεκάθαρα “παραβιάζει” την <<1000 βημάτων>> κατευθυντήρια οδηγία. Η κατευθυντήρια αυτή οδηγία θα πρέπει να μας “προκαλέσει” να αναθεωρήσουμε τον μακροχρόνιο αυτόν ορίζοντα. Ο Randers (1973) χρειάστηκε έναν ορίζοντα 80 περίπου χρόνων ώστε να έχει επαρκή χρόνο για την σταδιακή προσομοίωση και ελάττωση της

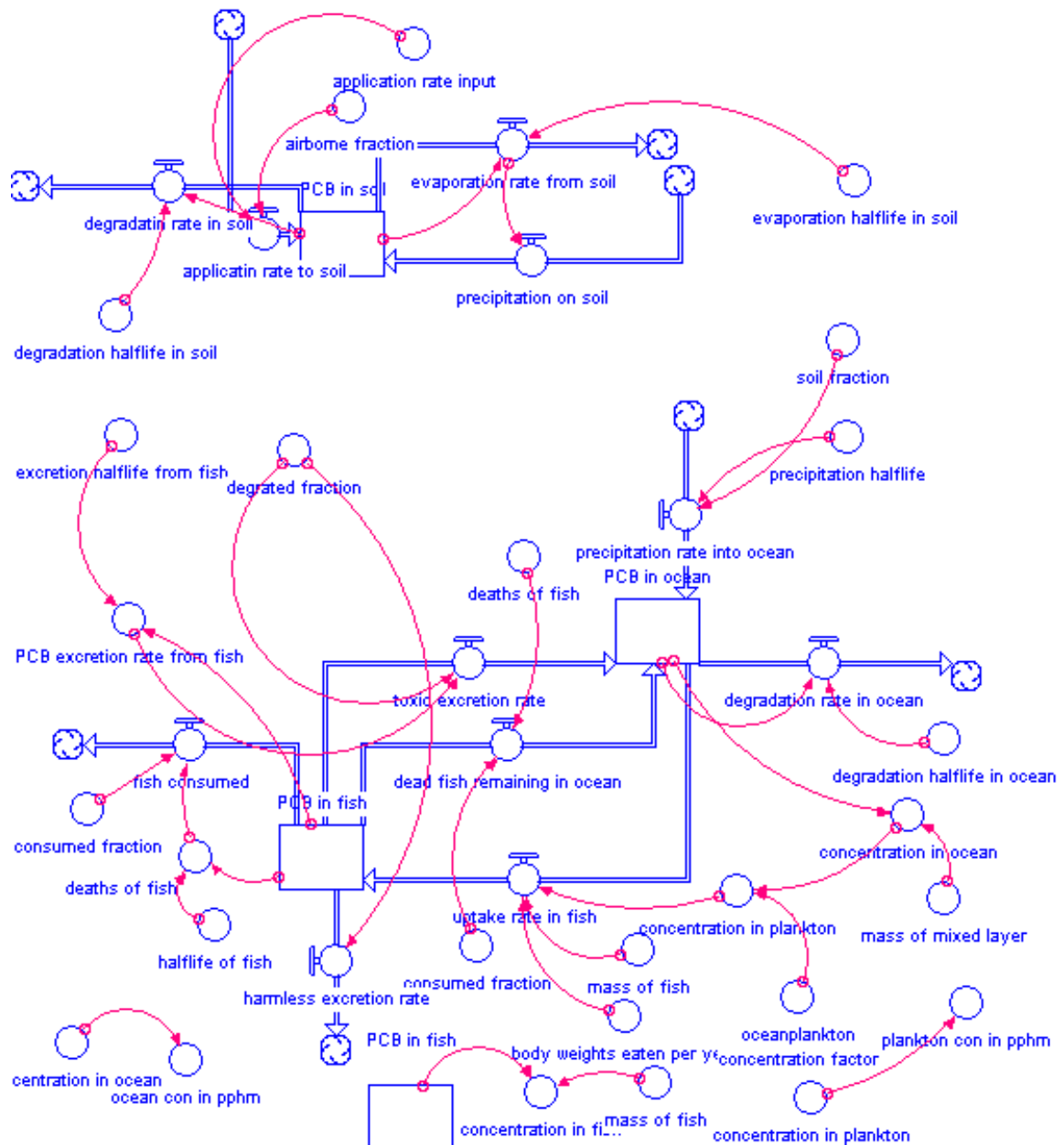
ποσότητας PCB. Εάν συντομεύσουμε τον χρονικό ορίζοντα θα χάσουμε το κύριο σημείο της άσκησης αυτής.

Ίσως πρέπει να επανεξετάσουμε το μοντέλο, αν θα έπρεπε να αφαιρέσουμε την σταθερά του ελάχιστου χρόνου. Όμως θα πρέπει να είμαστε προσεκτικοί γιατί όπως έχουμε δει από προηγούμενα, η καθίζηση του αερίου PCB στον ωκεανό είναι η κύρια διαδρομή ώστε το PCB να φτάσει στον ωκεανό. Το αναθεωρημένο μοντέλο πρέπει να διατηρήσει την πορεία του προς τον ωκεανό, αλλά ίσως μπορούμε να ελαχιστοποιήσουμε την χρήση του *αποθέματος* (stock) ώστε να παρακολουθούμε ολόκληρη την ποσότητα του αερίου PCB.

Η επόμενη σύντομη χρονική σταθερά είναι ο χρόνος ημιπεριόδου ζωής του νερού (προερχόμενο από το λιώσιμο των χιονιών) που ορίζεται στα 0,1 χρόνια. Για να ελαχιστοποιήσουμε την χρονική αυτή σταθερά θα χρειαστεί να αφαιρέσουμε το *απόθεμα* (stock) που αναφέρεται στο PCB των ποταμών. Επιπλέον μπορούμε να ελαχιστοποιήσουμε την διαδρομή επειδή μόνο ένα πολύ μικρό κλάσμα PCB συνεχίζει την διαδρομή του στον ωκεανό μέσω ποταμών.

Η εικόνα μας δείχνει ένα αναθεωρημένο μοντέλο PCB. Το νέο μοντέλο χρησιμοποιεί 3 *αποθέματα* (stocks) αντί για 5. Δεν λαμβάνεται υπ' όψη το απόθεμα του PCB στους ποταμούς όπως επίσης και η διαδρομή διαμέσου των ποταμών. Το νέο μοντέλο δεν αναθέτει σε ένα ξεχωριστό *απόθεμα* να παρακολουθεί το αέριο PCB. Όμως διατηρεί σε μαθηματική μορφή την κύρια διαδρομή που μεταφέρει το PCB στον αέρα και στον ωκεανό μέσω της καθίζησης. Η εικόνα παρουσιάζει τρία "νέφη" σε ομάδα στην επάνω δεξιά γωνία. Ένα από αυτά είναι πιο χαμηλά βυθισμένο από τα άλλα. Αντιπροσωπεύει το που το PCB πηγαίνει όταν εξατμίζεται από το έδαφος. Τα άλλα δύο "νέφη" είναι πηγές. Σχεδιάζονται σε διπλανή θέση με το βυθισμένο ώστε να επικοινωνούν με το σημείο όπου το μοντέλο δεν θα χάσει επαφή (μαθηματικά) από το PCB που εξατμίζεται από το έδαφος. Ένα τμήμα από αυτό επιστρέφει στο έδαφος και το υπόλοιπο κατευθύνεται στον ωκεανό.



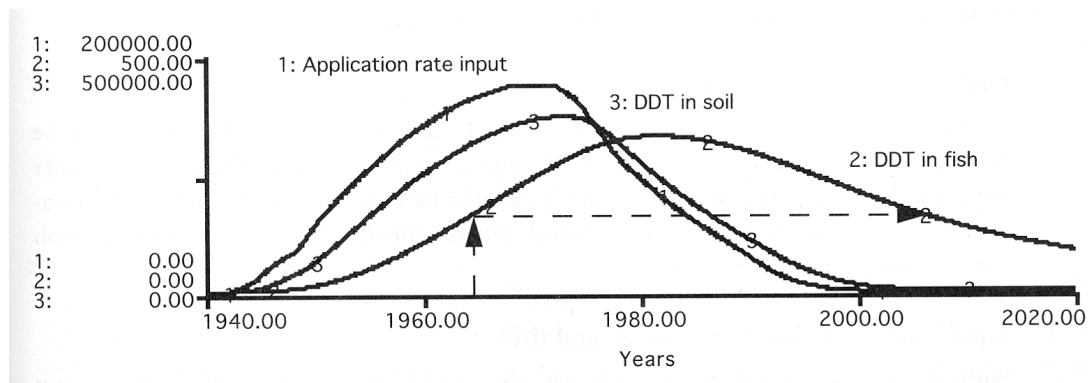


Εικόνα 4.7.1: Αναθεωρημένο μοντέλο PCB

Αυτό ολοκληρώνεται από τις εξισώσεις που συνδέουν τον βαθμό εξάτμισης από το έδαφος με την καθίζηση στο έδαφος και στους ωκεανούς. Οι εξισώσεις είναι οι ακόλουθες:

$$\begin{aligned} \text{Βαθμός\_εξάτμισης\_απο\_το\_έδαφος} &= \\ & (\text{PCB\_εδάφους} / (1.5 * \text{ημιπερίοδος\_ζωής\_εξάτμισης\_εδάφους})) \\ \text{Καθίζηση\_στους\_ωκεανούς} &= \\ & (\text{βαθμός\_εξάτμισης\_εδάφους} + \text{βαθμός\_εφαρμογής}) * (1 - \text{κλάσμα\_εδάφους}) \\ \text{Καθίζηση\_εδάφους} &= \\ & (\text{βαθμός\_εφαρμογής} + \text{βαθμός\_εξάτμισης\_εδάφους}) * \text{κλάσμα\_εδάφους} \end{aligned}$$

Η πρώτη εξίσωση είναι παρόμοια με του προηγούμενου μοντέλου. Όμως οι επόμενες δύο εξισώσεις πρέπει να αντιπροσωπεύουν την ροή του PCB μέσω της καθίζησης στους ωκεανούς ή στο έδαφος. Αυτό πραγματοποιείται με τις ροές που προηγούνται του αερίου PCB και του κλάσματος εδάφους. Η εικόνα επιβεβαιώνει ότι το αναθεωρημένο μοντέλο δίνει τα ίδια πρότυπα αποτελέσματα όπως το αυθεντικό μοντέλο. Ο σχετικός συγχρονισμός των άκρων και το μεγάλο χρονικό διάστημα παύσης που απαιτείται για να επιστρέψει το επίπεδο του PCB στα ψάρια όπως ήταν το 1962, είναι παρόμοιο με αυτό που παρουσιάστηκε προηγουμένως. Το νέο μοντέλο παραθέτει παρόμοιες γνώσεις όπως το αυθεντικό μοντέλο.



Εικόνα 4.7.2: Προσομοίωση του αναθεωρημένου μοντέλου (Ford, 1999)

Το αναθεωρημένο μοντέλο κάνει περισσότερα από το να αντιστοιχεί τις γενικές “τάσεις” στο αυθεντικό μοντέλο. Αντιστοιχίζει και τις αριθμητικές αξίες πολύ καλά επίσης. Ο πίνακας παρέχει μια περίληψη της χρονιάς 1980, χρονιά που είχαμε την μέγιστη τιμή PCB στα ψάρια. Παρουσιάζει ότι το αναθεωρημένο μοντέλο αντιστοιχεί στο αυθεντικό μοντέλο σε απόλυτη συμφωνία με τις τιμές του συσσωρευμένου PCB στα ψάρια, και πλησιάζει αρκετά τις τιμές στο έδαφος και στους ωκεανούς.

Πρότυπο μοντέλο (μετρικοί τόνοι)	Αναθεωρημένο μοντέλο ( μετρικοί τόνοι)
Έδαφος (268.362)	Έδαφος (269.301)
Αέρας (10.293)	-
Ποταμοί (54)	-
Ωκεανός (2.014.124)	Ωκεανός (2.016.528)
Ψάρια (329)	Ψάρια (329)

Πίνακας 4.7.3: Αριθμητικά αποτελέσματα χρονιάς 1980 (Ford, 1999)

Τα αποτελέσματα του αναθεωρημένου μοντέλου παράχθηκαν με ρυθμό 8-βημάτων ανά χρόνο. Με ανάλογο ρυθμό η 80-χρονη προσομοίωση απαιτεί 640 βήματα. Τώρα εργαζόμαστε μέσα στις προτεινόμενες κατευθυντήριες οδηγίες για αριθμητικές προσομοιώσεις.

#### 4.8 Περίληψη

Το κεφάλαιο αυτό περιγράφει μέσα από το παράδειγμα του PCB το πως δυναμικά συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να προσομοιώσουν την ροή υλικών διαμέσου του εδάφους, του ανέμου και του νερού. Η παρουσίαση χρησιμοποιεί βήμα προς βήμα διαδικασίες και διαγράμματα ισορροπίας για να μας βοηθήσει να εκτιμήσουμε ποιες από τις “διαδρομές” κυριαρχούν στο σύστημα. Η παρουσίαση επίσης περιέχεται σε δύο εκδοχές ενός μοντέλου πολυμέσων. Τα δύο μοντέλα παρουσιάζουν και ένα ενδιαφέρον ανάλογο με το ποιο είναι το καλύτερο. Το αναθεωρημένο μοντέλο φυσικά επεξεργάζεται γρηγορότερα στον υπολογιστή και αυτό το πετυχαίνει χωρίς να χάσει την ακρίβειά του. Εάν σκοπεύουμε να διεξαγάγουμε εκτεταμένες δοκιμές σχετικά με την “ευαισθησία” του συστήματος, μπορούμε να ελαττώσουμε τον χρόνο που χρειάζεται ο υπολογιστής χρησιμοποιώντας το αναθεωρημένο μοντέλο. Το αυθεντικό μοντέλο πιθανόν να φαίνεται πιο ευχάριστο επειδή είναι *ευκολότερο να διακριθούν οι “ροές”*, του PCB διαμέσου του περιβάλλοντος. Μπορούμε να αντιληφθούμε την λογική που διέπει το αναθεωρημένο μοντέλο και έτσι να κατανοήσουμε ότι τα δύο μοντέλα αποφέρουν τα ίδια αριθμητικά αποτελέσματα. Συνήθως όμως επικεντρωνόμαστε στο πρότυπο μοντέλο και είμαστε έτοιμοι να υποστούμε το “τίμημα” του να κάθεται μπροστά στην οθόνη του υπολογιστή περιμένοντας μια πιο αργή προσομοίωση να εμφανιστεί στην οθόνη. Η επιλογή μας είναι ωστόσο πολύ λογική καθώς η μοντελοποίηση είναι κάτι περισσότερο από μερικούς υπολογισμούς- είναι κατά κύριο λόγο μια διαδικασία βελτίωσης της αντίληψης και της επικοινωνίας.

Το παράδειγμα του PCB, περιλαμβάνει μια ροή υλικών διαμέσου πολλαπλών “μέσων” όπου οι ξεχωριστές ροές μπορούν να περιγραφούν ως διαχεόμενες ροές με χαρακτηριστικό χρόνο ημιπεριόδου ζωής. Όλες βέβαια οι φυσικές ροές δεν ακολουθούν αυτά τα πρότυπα. Κάποιες ελέγχονται πάρα πολύ στενά, όπως όταν ζώα αποδημούν στον ωκεανό ( Deaton & Winebrake, 2000).

## 5. Μοντέλο PCB

### 5.1 Εισαγωγή- σκοπός μοντέλου

Τα πολυχλωριωμένα διφαινύλια (PCB) είναι ένα μίγμα αποτελούμενο από 209 ισομερή, όπου από ένα μέχρι δέκα άτομα χλωρίου μπορεί να προσαρτηθούν στο μόριο του διφαινυλίου. Τα PCBs έχουν χρησιμοποιηθεί από την δεκαετία του 1930 σε πολλές βιομηχανικές εφαρμογές (ψυκτικά και μονωτικά μετασχηματιστών και πυκνωτών). Διάφορες εκθέσεις σχετικά με ασθένειες που προκαλούνται από την εκτεταμένη χρήση PCB, πραγματοποιήθηκαν στις ΗΠΑ το 1930 και μετά στην Ιαπωνία το 1953. Έχουν γίνει μελέτες σχετικά με τις περιβαλλοντικές επιπτώσεις των PCBs, οι οποίες αν και διαδόθηκαν γρήγορα ήταν σε πολύ μικρή ποσότητα. Οι επιπτώσεις στην υγεία από την ύπαρξη χλωρίου αφορούν σωματικές ασθένειες κατά κύριο λόγο αλλά και ορμονικές δυσλειτουργίες (Deaton & Winebrake, 2000).

Ο σκοπός του μοντέλου είναι να ‘‘ακολουθήσουμε’’ την πορεία μιας ποσότητας PCB μέσω ενός περιβαλλοντικού συστήματος, προς τον τελικό σκοπό που στην προκειμένη περίπτωση είναι τα ψάρια. Σκοπός μας είναι να δείξουμε πως μετακινούνται τα PCBs από το ένα μέσο στο άλλο, πως ανακυκλώνονται, και το πως τελικά φθάνουν στην τροφική αλυσίδα. Το μοντέλο είναι εξαιρετικά απλουστευμένο και αυτό έχει και θετικές συνέπειες καθώς:

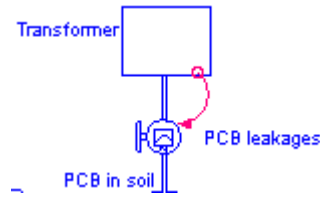
- α) μπορεί εύκολα να επιτευχθεί
- β) μπορεί εύκολα να προσαρμοστεί σε κλίμακες άλλων συνθετικών οργανικών χημικών
- γ) να αναγνωρίσει βασικές αρχές και πεδία εφαρμογών ειδικότερων και πολυπλοκότερων μοντέλων
- δ) να αποφύγει την λανθασμένη εκτίμηση τυχόν αποτελεσμάτων (κάτι που μπορεί να συμβεί σε ένα περισσότερο πολύπλοκο μοντέλο)
- ε) να χρησιμοποιηθεί για την μοντελοποίηση παρόμοιων οργανικών συνθετικών χημικών.

### 5.2 Υπόβαθρο και ανάπτυξη μοντέλου

Η γενική δομή του μοντέλου προέρχεται από δύο βασικές πηγές. Η πρώτη πηγή που έχει αναλυθεί εκτενώς παραπάνω, βασίζεται στο μοντέλο που ανέπτυξε ο Randers το 1973. Σε γενικές γραμμές το μοντέλο του Randers (1973) περιέγραφε ότι το PCB μετά την συσσώρευσή του στον αέρα ή στο έδαφος, μετακινούνταν διαμέσου των ποταμών ή μέσω της καθίζησης στον ωκεανό. Τα PCBs προσλαμβάνονταν από τα ψάρια τα οποία σκότωναν και επέστρεφαν μετά στον ωκεανό ή λόγω της αργής αποικοδόμησής τους περνούσαν στο επόμενο στάδιο της τροφικής αλυσίδας. Η δεύτερη πηγή στην οποία βασίστηκε το παρών μοντέλο είναι ένα γραφικό περίγραμμα που περιγράφεται εκτενώς στο βιβλίο με τίτλο *Our Stolen Future* (Colborn, 1996). Εκεί περιγράφονται λεπτομερώς τα ίδια γεγονότα, δίνεται όμως διαφορετική έμφαση στα μέσα, ενισχύοντας το γεγονός ότι τα PCBs είναι απίθανο να εκκριθούν, είτε σκοτώνοντας τα ψάρια είτε περνώντας στο επόμενο στάδιο της τροφικής αλυσίδας.

Επιλέχθηκε ένα περιβαλλοντικό σύστημα λίμνης αντί για το σύστημα ωκεανού στο μοντέλο του Randers (1973), ώστε τα νούμερα που θα προκύψουν να είναι ευκολότερα και να μην υπάρχει η ανάγκη να περιληφθεί κάποιο είδος παγκοσμίου μεταφορικού συστήματος ή ανάμειξη τεραστίων όγκων νερού. Η πηγή της μόλυνσης άλλαξε από την διεθνής εφαρμογή ενός μικροβιοκτόνου, σε μια αθέλητη διαρροή ενός ηλεκτρικού

μετασχηματιστή κάτι που δείχνει πιο ρεαλιστικό. Τα νούμερα έγιναν επίσης πιο ευκολονόητα.



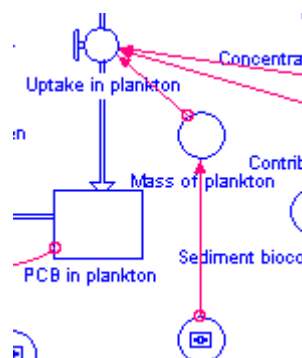
Εικόνα 5.2.1: Η “αθέλητη διαρροή ενός μετασχηματιστή όπως φαίνεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου

Διάφορα στοιχεία προστέθηκαν στο μοντέλο σε διαφορετικές χρονικές στιγμές και είναι πιο βολικό να περιγράψουμε τις μεταβολές που έγιναν. Προσθήκες στην ατμόσφαιρα θεωρήθηκαν αμελητέες. Αντίθετα προστέθηκε η υποβάθμιση της ατμόσφαιρας λόγω της υπεριώδους ακτινοβολίας. Προστέθηκε επίσης η ανακύκλωση λόγω εξάτμισης της υγρής προς την αέρια φάση. Ένα νέο απόθεμα (stock) έπρεπε να προβλεφθεί για τα ιζήματα. Αυτό ήταν απαραίτητο αφού η πλειοψηφία του PCB στο περιβαλλοντικό σύστημα της λίμνης εναποτέθηκε σε ιζήματα. Σαν συνέπεια τα ψάρια που αφανίστηκαν επέστρεψαν σε ιζήματα.



Εικόνα 5.2.2: Το απόθεμα ( stock) για τα ιζήματα όπως παρουσιάζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου

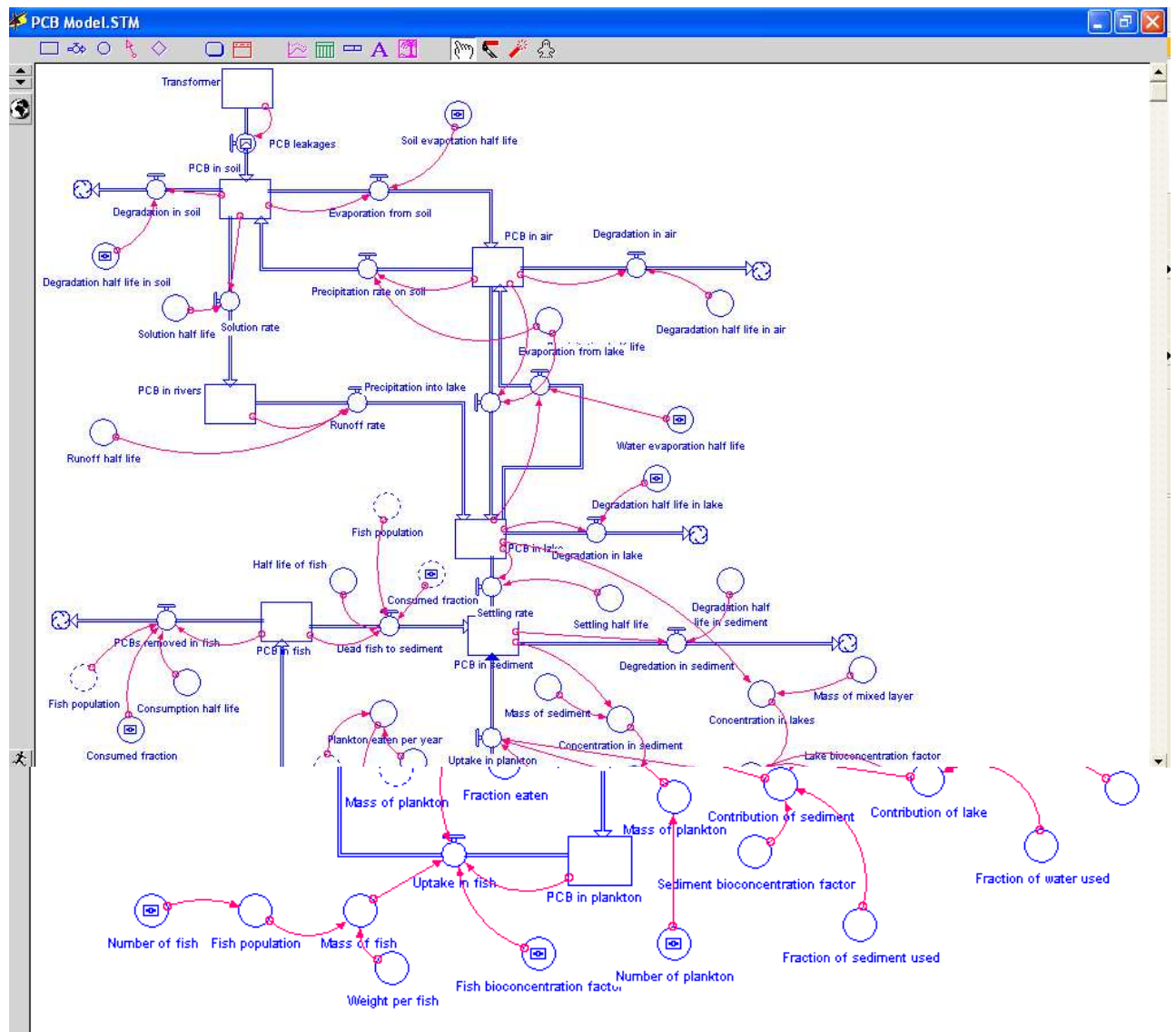
Εξαιτίας του χρόνου διατήρησης των ιζημάτων (λόγω και της αναερόβιας φύσης) απαιτήθηκαν μέθοδοι αφαίρεσης. Θεωρήθηκε ότι κάποιου είδους υποβάθμιση συνέβη και τα PCBs απορροφήθηκαν από το πλαγκτόν. Δημιουργήθηκε τότε ένα απόθεμα (stock) για το πλαγκτόν. Η συγκέντρωση στα ψάρια δημιουργήθηκε, χρησιμοποιώντας μόνο την συγκέντρωση στο πλαγκτόν. Η απέκκριση των χημικών αφαιρέθηκε, καθώς τα ψάρια δεν έχουν τα κατάλληλα ένζυμα για τον μεταβολισμό των PCBs, τουλάχιστον αυτά που έχουν τέσσερα και παραπάνω άτομα χλωρίου.



Εικόνα 5.2.3: Το απόθεμα ( stock) για το πλαγκτόν

Το PCB εισάγεται στο σύστημα στην κορυφή και ακολουθεί πορεία μέσω δύο αποθεμάτων (stock). Η πορεία για την λίμνη γίνεται είτε μέσω των νερών που λιώνουν από τα χιόνια είτε μέσω της καθίζησης του αερίου PCB που περιφέρεται πάνω στην λίμνη. Στο κατώτερο τμήμα της εικόνας, έχουμε αναθέσει σε ένα απόθεμα (stock) να παρακολουθεί το PCB που βρίσκεται συσσωρευμένο στην λίμνη και σε άλλο απόθεμα (stock) να παρακολουθεί και να ελέγχει το PCB που είναι συσσωρευμένο στα ψάρια.

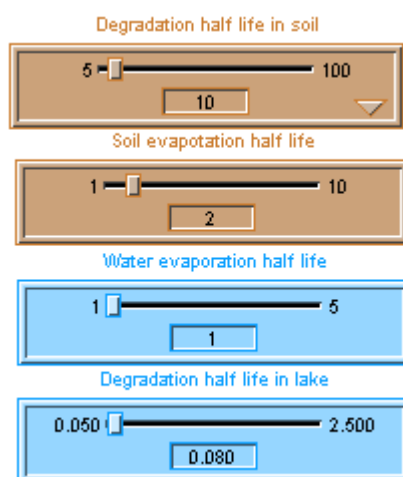
Έχοντας λοιπόν ως πρότυπο το μοντέλο του Randers (1973) και λαμβάνοντας υπ' όψη μας τα στοιχεία και τις αλλαγές που περιγράψαμε παραπάνω κατασκευάσαμε το μοντέλο με την βοήθεια του προγράμματος STELLA. Παρακάτω μπορούμε να δούμε πως απεικονίζεται το μοντέλο στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου της STELLA.



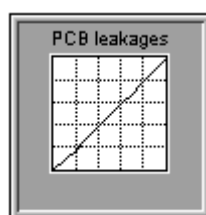
**Εικόνα 5.2.4: Μοντέλο PCB όπως παρουσιάζεται στο επίπεδο κατασκευής μοντέλου μέσα από το πρόγραμμα προσομοίωσης STELLA**

### 5.3 Υποθέσεις

Με ελάχιστες εξαιρέσεις η μεταφορά των PCBs μοντελοποιήθηκε χρησιμοποιώντας ημιπεριόδους ζών καθώς κάτι τέτοιο θεωρείται μια λογική διαδικασία προσέγγισης της συμπεριφοράς των χημικών. Οι εξαιρέσεις αφορούσαν τα αρχικά δεδομένα των PCBs στο σύστημα (διαρροές) για τις οποίες χρησιμοποιήθηκε μια “γραφική συσκευή εισαγωγής δεδομένων”, η οποία κατασκευάστηκε με τέτοιο τρόπο ώστε να επιτρέπει αρχικά μια εκθετική μείωση στην λαμβανόμενη ποσότητα της χλωρίδας και πανίδας του συστήματος που ήταν και το αίτιο για πολυπλοκότερες αλληλεπιδράσεις. Οι ημιπεριόδοι ζών είναι εκθετικές ελαττώσεις που χρησιμοποιούν ένα παράγοντα (1.44) για να τροποποιήσουν αυτό που διαφορετικά θα μπορούσε να είναι μια γραμμική σχέση. Ο Ford (1999) στο βιβλίο του αναφέρει ότι: εξαιτίας των αμφιβολιών που περιβάλλουν τις ημιπεριόδους ζών των οργανικών χημικών ένας παράγοντας (1.5) είναι λογικά αποδεκτός. Η ημιπερίοδος ζωής είναι αποτελεσματική όταν έχει καθοριστεί μια σταθερά σε ιδανικές συνθήκες και όταν δεν λαμβάνει υπ’ όψη εποχικές διαφοροποιήσεις και τοπικούς παράγοντες όπως την χημεία του εδάφους.



Εικόνα 5.3.1: Οι ημιπεριόδοι ζών που χρησιμοποιήθηκαν όπως απεικονίζονται στο επίπεδο σχεδίασης του μοντέλου



Εικόνα 5.3.2: Γραφική συσκευή εισαγωγής δεδομένων

Πριν από οποιαδήποτε δοκιμή, η κύρια αδυναμία του μοντέλου αυτού αφορά την επεξεργασία και διαχείριση των πλαγκτονικών πληθυσμών και των πληθυσμών των ψαριών. Για να δημιουργήσουμε δυναμικά μοντέλα πληθυσμών θα έπρεπε να αυξήσουμε την πολυπλοκότητα του μοντέλου πέρα από τον σκοπό του συγκεκριμένου προγράμματος. Αντίθετα, οι ετήσιες αλλαγές των πληθυσμών έχουν προσομοιωθεί χρησιμοποιώντας μια συνάρτηση που λαμβάνει υπόψη της το μέγεθος των πληθυσμών και τον ρυθμό των γεννήσεων ανά χρονιά.

Η έρευνα για τον βαθμό υποβάθμισης, εξάτμισης κτλ είναι εξαιρετικά λιγοστή, ειδικότερα όταν υπάρχουν 209 ισομερή που έχουν συνεργατικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ

τους αλλά και με άλλα συνθετικά. Πολλά από τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται για τα PCBs προέρχονται απευθείας από μελέτες που έχουν γίνει για το DDT.

#### **5.4 Εξισώσεις**

Όπου είναι δυνατό, δεδομένα από διάφορα εγχειρίδια έχουν χρησιμοποιηθεί. Ωστόσο πολλά από τα νούμερα έχουν παρθεί αυθαίρετα, έχουν επιλεγθεί όμως ώστε να είναι ευκολονόητα και βασισμένα στην κοινή λογική. Για παράδειγμα η μάζα του νερού υπολογίστηκε βάσει μιας λίμνης με έκταση 1 km<sup>2</sup>, με μέσο βάθος 40m ( Ford, 1999), ενώ τα νούμερα του πλαγκτόν υπολογίστηκαν βάσει τριών πληθυσμών ανά χρονιά, όπου κάθε πληθυσμός αριθμούσε 10000 ( οι διακυμάνσεις στον πληθυσμό αντιπροσωπεύονται ανεπεξέργαστα από μια ημιτονοειδές συνάρτηση).

#### **Καθίζηση:**

PCB στον αέρα / ( 1.5 x ημιπερίοδος ζωής καθίζησης )

Όπου ημιπερίοδος ζωής καθίζησης = 0.05 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

#### **Εξάτμιση εδάφους:**

PCB στο έδαφος / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής εξάτμισης εδάφους)

Όπου ημιπερίοδος ζωής εξάτμισης εδάφους = 2 χρόνια (Randers, 1973)

#### **Εξάτμιση νερού:**

PCB στην λίμνη / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής εξάτμισης νερού)

Όπου ημιπερίοδος ζωής εξάτμισης νερού = 0.1 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

#### **Διάλυση εδάφους:**

PCB στο έδαφος / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής διάλυσης)

Όπου ημιπερίοδος ζωής διάλυσης = 500 χρόνια (Randers, 1973)

#### **Υποβάθμιση εδάφους:**

PCB στο έδαφος / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης εδάφους)

Όπου ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης εδάφους = 10 χρόνια (Randers, 1973)

#### **Υποβάθμιση ατμόσφαιρας:**

PCB στην ατμόσφαιρα / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης ατμόσφαιρας)

Όπου ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης ατμόσφαιρας = 0.18 χρόνια ( Erickson), ( Ford, 1999)

#### **Υποβάθμιση λίμνης:**

PCB στην λίμνη / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης λίμνης)



Όπου ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης λίμνης = 0.08 χρόνια ( Erickson),  
( Ford,1999)

**Υποβάθμιση ιζημάτων:**

PCB ιζημάτων / ( 1.5 x ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης ιζημάτων)

Όπου ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης ιζημάτων = 40 χρόνια ( αυθαίρετη εκτίμηση)

**Νερό προερχόμενο από το λιώσιμο των χιονιών:**

PCB στα ποτάμια / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής νερού προερχόμενο από το λιώσιμο των χιονιών)

Όπου ημιπερίοδος ζωής νερού προερχόμενο από το λιώσιμο των χιονιών = 0.008 χρόνια (Erickson), (Ford, 1999)

**Βαθμός καθίζησης:**

PCB στην λίμνη / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής καθίζησης)

Όπου ημιπερίοδος ζωής καθίζησης = 0.2 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

**Προσθήκη νεκρών ψαριών στα ιζήματα:**

(( 1- κλάσμα κατανάλωσης) x πληθυσμός ψαριών) / (1.5 x ημιπερίοδος ζωής ψαριών)) x PCB στα ψάρια

Όπου κλάσμα κατανάλωσης = 0.9 (αυθαίρετη εκτίμηση)

Όπου ημιπερίοδος ζωής ψαριών = 3 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

Όπου αριθμός ψαριών = 500 (αυθαίρετη εκτίμηση)

Αναμενόμενη ζωή πληθυσμού ψαριών = 3 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

**Λαμβανόμενη ποσότητα στο πλαγκτόν:**

( συνεισφορά ιζημάτων + συνεισφορά λίμνης) x μάζα πλαγκτόν

**Συνεισφορά ιζημάτων:**

συνεισφορά ιζημάτων x κλάσμα ιζημάτων που χρησιμοποιήθηκαν x παράγοντας βιοσυγκέντρωσης ιζημάτων

όπου κλάσμα ιζημάτων που χρησιμοποιήθηκαν = 0.005 (αυθαίρετη εκτίμηση)

όπου παράγοντας βιοσυγκέντρωσης ιζημάτων = 150 (Erickson), (Ford,1999)

**Συγκέντρωση στα ιζήματα:**

PCB στα ιζήματα / μάζα ιζημάτων

Όπου μάζα ιζημάτων =  $1 \times 10^{10}$  kg (αυθαίρετη εκτίμηση)

**Συνεισφορά της λίμνης:**

συγκέντρωση στην λίμνη x κλάσμα της έκτασης λίμνης που χρησιμοποιείται x παράγοντας βιοσυγκέντρωσης λίμνης  
όπου κλάσμα της έκτασης λίμνης που χρησιμοποιείται = 0.001 (αυθαίρετη εκτίμηση)  
παράγοντας βιοσυγκέντρωσης λίμνης = 2000 (Erickson), (Ford, 1999)

**Συγκέντρωση στην λίμνη:**

PCB στην λίμνη / μάζα λίμνης  
Όπου μάζα λίμνης =  $4 \times 10^9$  kg (αυθαίρετη εκτίμηση)

**Λαμβανόμενη ποσότητα στα ψάρια:**

PCB στο πλαγκτόν x παράγοντας βιοσυγκέντρωσης ψαριών x μάζα ψαριών x πλαγκτόν που καταναλώνεται ανά χρονιά  
Όπου παράγοντας βιοσυγκέντρωσης ψαριών = 6

**Μάζα ψαριών:**

Πληθυσμός ψαριών x βάρος ψαριών  
Όπου βάρος ψαριών = 0.5 kg















**Πλαγκτόν που καταναλώνεται ανά χρονιά:**

Κλάσμα που καταναλώνεται x μάζα πλαγκτόν  
Όπου κλάσμα που καταναλώνεται = 0.5 (αυθαίρετη εκτίμηση)  
Μάζα πλαγκτόν = ( αριθμός πλαγκτόν, αναμενόμενη ζωή πλαγκτόν)  
Όπου αριθμός πλαγκτόν = 10000 (αυθαίρετη εκτίμηση)  
αναμενόμενη ζωή πλαγκτόν = 0.33 χρόνια (αυθαίρετη εκτίμηση)

Οι παραπάνω εξισώσεις αλλά και όλοι οι αριθμητικοί παράμετροι που έχουν χρησιμοποιηθεί και που αντιπροσωπεύουν κάθε απόθεμα, κάθε ροή και κάθε μετατροπέα απεικονίζονται στο στρώμα εξισώσεων

- $PCB\_in\_air(t) = PCB\_in\_air(t - dt) + (Evaporation\_from\_soil + Evaporation\_from\_lake - Precipitation\_rate\_on\_soil - Precipitation\_into\_lake - Degradation\_in\_air) * dt$   
 INIT PCB\_in\_air = 0  
 INFLOWS:  
 - Evaporation\_from\_soil =  $PCB\_in\_soil / (1.5 * Soil\_evaporation\_half\_life)$   
 - Evaporation\_from\_lake =  $PCB\_in\_lake / (1.5 * Water\_evaporation\_half\_life)$   
 OUTFLOWS:  
 - Precipitation\_rate\_on\_soil =  $PCB\_in\_air / (1.5 * Precipitation\_half\_life)$   
 - Precipitation\_into\_lake =  $PCB\_in\_air / (1.5 * Precipitation\_half\_life)$   
 - Degradation\_in\_air =  $PCB\_in\_air / (1.5 * Degradation\_half\_life\_in\_air)$
- $PCB\_in\_fish(t) = PCB\_in\_fish(t - dt) + (Uptake\_in\_fish - PCBs\_removed\_in\_fish - Dead\_fish\_to\_sediment) * dt$   
 INIT PCB\_in\_fish = 0  
 INFLOWS:  
 - Uptake\_in\_fish =  $PCB\_in\_plankton * Fish\_bioconcentration\_factor * Mass\_of\_fish * Plankton\_eaten\_per\_year$   
 OUTFLOWS:  
 - PCBs\_removed\_in\_fish =  $((Fish\_population * Consumed\_fraction) / (1.5 * Consumption\_half\_life)) * PCB\_in\_fish$   
 - Dead\_fish\_to\_sediment =  $((1 - Consumed\_fraction) * Fish\_population) / (1.5 * Half\_life\_of\_fish) * PCB\_in\_fish$
- $PCB\_in\_lake(t) = PCB\_in\_lake(t - dt) + (Precipitation\_into\_lake + Runoff\_rate - Degradation\_in\_lake - Settling\_rate - Evaporation\_from\_lake) * dt$   
 INIT PCB\_in\_lake = 0  
 INFLOWS:  
 - Precipitation\_into\_lake =  $PCB\_in\_air / (1.5 * Precipitation\_half\_life)$   
 - Runoff\_rate =  $PCB\_in\_rivers / (1.5 * Runoff\_half\_life)$   
 OUTFLOWS:  
 - Degradation\_in\_lake =  $PCB\_in\_lake / (1.5 * Degradation\_half\_life\_in\_lake)$   
 - Settling\_rate =  $PCB\_in\_lake / (1.5 * Settling\_half\_life)$   
 - Evaporation\_from\_lake =  $PCB\_in\_lake / (1.5 * Water\_evaporation\_half\_life)$
- $PCB\_in\_plankton(t) = PCB\_in\_plankton(t - dt) + (Uptake\_in\_plankton - Uptake\_in\_fish) * dt$   
 INIT PCB\_in\_plankton = 0  
 INFLOWS:  
 - Uptake\_in\_plankton =  $(Contribution\_of\_sediment + Contribution\_of\_lake) * Mass\_of\_plankton$   
 OUTFLOWS:  
 - Uptake\_in\_fish =  $PCB\_in\_plankton * Fish\_bioconcentration\_factor * Mass\_of\_fish * Plankton\_eaten\_per\_year$

Εικόνα 5.4.1: Επίπεδο Εξισώσεων ( πρόγραμμα STELLA)

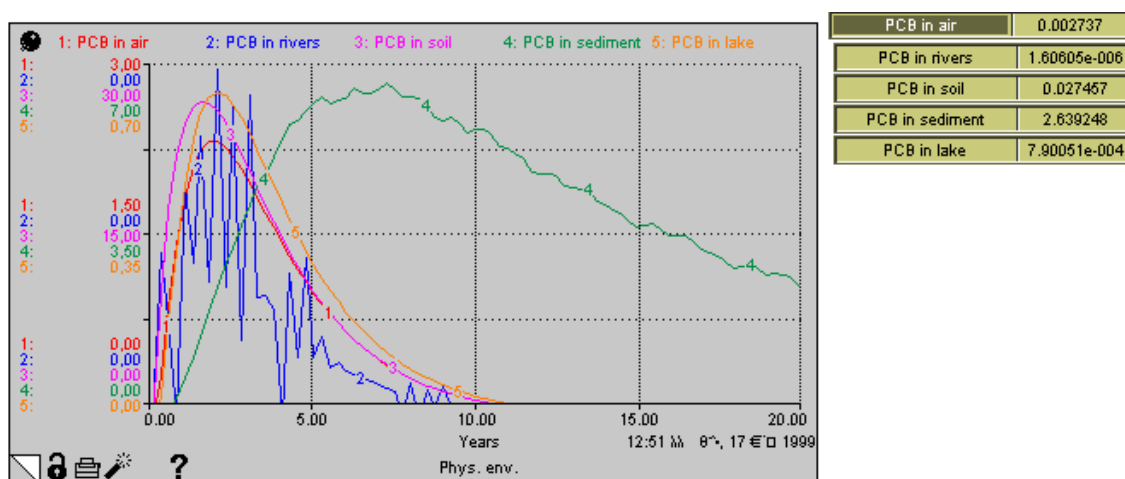
- 
- $PCB\_in\_rivers(t) = PCB\_in\_rivers(t - dt) + (Solution\_rate - Runoff\_rate) * dt$   
 INIT  $PCB\_in\_rivers = 0$   
 INFLOWS:  
    -   $Solution\_rate = PCB\_in\_soil / (1.5 * Solution\_half\_life)$
 OUTFLOWS:  
    -   $Runoff\_rate = PCB\_in\_rivers / (1.5 * Runoff\_half\_life)$
  
  - $PCB\_in\_sediment(t) = PCB\_in\_sediment(t - dt) + (Settling\_rate + Dead\_fish\_to\_sediment - Degradation\_in\_sediment - Uptake\_in\_plankton) * dt$   
 INIT  $PCB\_in\_sediment = 0$   
 INFLOWS:  
    -   $Settling\_rate = PCB\_in\_lake / (1.5 * Settling\_half\_life)$
    -   $Dead\_fish\_to\_sediment = (((1 - Consumed\_fraction) * Fish\_population) / (1.5 * Half\_life\_of\_fish)) * PCB\_in\_fish$
 OUTFLOWS:  
    -   $Degradation\_in\_sediment = PCB\_in\_sediment / (1.5 * Degradation\_half\_life\_in\_sediment)$
    -   $Uptake\_in\_plankton = (Contribution\_of\_sediment + Contribution\_of\_lake) * Mass\_of\_plankton$
  
  - $PCB\_in\_soil(t) = PCB\_in\_soil(t - dt) + (PCB\_leakages + Precipitation\_rate\_on\_soil - Degradation\_in\_soil - Solution\_rate - Evaporation\_from\_soil) * dt$   
 INIT  $PCB\_in\_soil = 0$   
 INFLOWS:  
    -   $PCB\_leakages = GRAPH(Transformer)$   
  $(0.00, 0.00), (10.0, 10.0), (20.0, 19.0), (30.0, 30.0), (40.0, 40.0), (50.0, 50.0), (60.0, 59.5), (70.0, 69.5), (80.0, 79.5), (90.0, 90.0), (100, 100)$
    -   $Precipitation\_rate\_on\_soil = PCB\_in\_air / (1.5 * Precipitation\_half\_life)$
 OUTFLOWS:  
    -   $Degradation\_in\_soil = PCB\_in\_soil / (1.5 * Degradation\_half\_life\_in\_soil)$
    -   $Solution\_rate = PCB\_in\_soil / (1.5 * Solution\_half\_life)$
    -   $Evaporation\_from\_soil = PCB\_in\_soil / (1.5 * Soil\_evapotation\_half\_life)$
  
  - $Transformer(t) = Transformer(t - dt) + (- PCB\_leakages) * dt$   
 INIT  $Transformer = 50$   
 OUTFLOWS:  
    -   $PCB\_leakages = GRAPH(Transformer)$   
  $(0.00, 0.00), (10.0, 10.0), (20.0, 19.0), (30.0, 30.0), (40.0, 40.0), (50.0, 50.0), (60.0, 59.5), (70.0, 69.5), (80.0, 79.5), (90.0, 90.0), (100, 100)$
  
  - $Concentration\_in\_lakes = PCB\_in\_lake / Mass\_of\_mixed\_layer$
  - $Concentration\_in\_sediment = PCB\_in\_sediment / Mass\_of\_sediment$
  - $Consumed\_fraction = 0.9$
  - $Consumption\_half\_life = 2$

- Contribution\_of\_lake =  
(Concentration\_in\_lakes/Fraction\_of\_water\_used)\*Lake\_bioconcentration\_factor
- Contribution\_of\_sediment =  
(Concentration\_in\_sediment/Fraction\_of\_sediment\_used)\*Sediment\_bioconcentration\_factor
- Degradation\_half\_life\_in\_air = 0.18
- Degradation\_half\_life\_in\_lake = .08
- Degradation\_half\_life\_in\_sediment = 40
- Degradation\_half\_life\_in\_soil = 10
- Fish\_bioconcentration\_factor = 6
- Fish\_population = SINWAVE(Number\_of\_fish,3)
- Fraction\_eaten = 0.5
- Fraction\_of\_sediment\_used = .005
- Fraction\_of\_water\_used = .001
- Half\_life\_of\_fish = 3
- Lake\_bioconcentration\_factor = 2000
- Mass\_of\_fish = Fish\_population\*Weight\_per\_fish
- Mass\_of\_mixed\_layer = 4\*10<sup>10</sup>
- Mass\_of\_plankton = sinwave(Number\_of\_plankton,0.33)
- Mass\_of\_sediment = 1\*10<sup>9</sup>
- Number\_of\_fish = 500
- Number\_of\_plankton = 10000
- Plankton\_eaten\_per\_year = Fraction\_eaten\*Mass\_of\_plankton
- Precipitation\_half\_life = 0.05
- Runoff\_half\_life = 0.008
- Sediment\_bioconcentration\_factor = 150
- Settling\_half\_life = 0.2
- Soil\_evaporation\_half\_life = 2
- Solution\_half\_life = 500
- Water\_evaporation\_half\_life = 0.1
- Weight\_per\_fish = 0.5

Εικόνα 5.4.2: Επίπεδο εξισώσεων μοντέλου (πρόγραμμα STELLA)

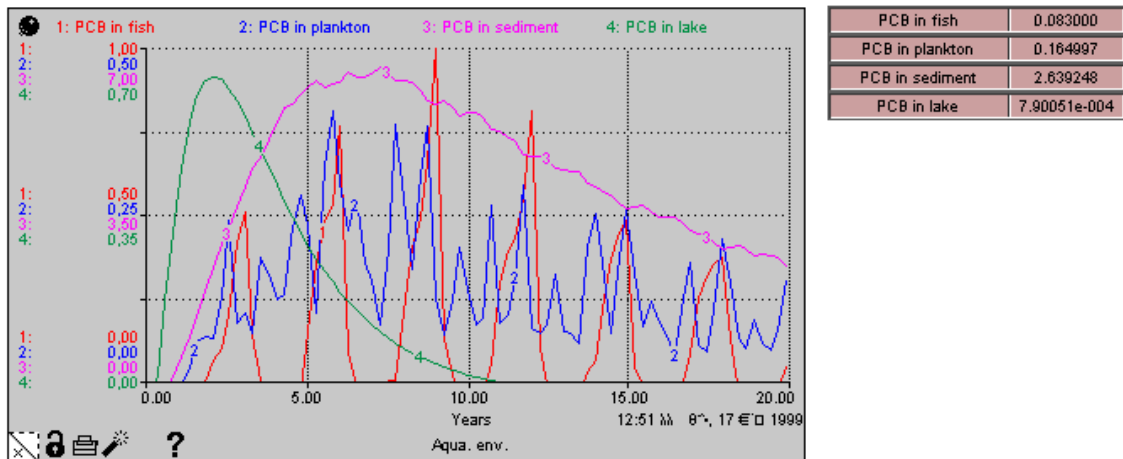
## 5.5 Συζήτηση- Συμπεράσματα

Το μοντέλο παρουσιάζει σε πρώτη ματιά, μια λογική διαδικασία προσέγγισης του περιβάλλοντος. Αντιδρά όπως αναμενόταν για τα φυσικά μέσα, με “δηλητηριώδες” συμπεριφορά για το έδαφος, τον αέρα, τις λίμνες και τα ιζήματα. Τα επίπεδα σε διάφορα στοιχεία των ποταμών φαίνεται να έχουν μεγάλη διακύμανση αλλά αυτό μπορεί και να οφείλεται στις λιγοστές ποσότητες και επομένως υπάρχει υψηλή ανάλυση των επιπέδων αυτών μέσα στο μοντέλο. Τα ιζήματα παρουσιάζουν μικρές διακυμάνσεις εξαιτίας ίσως της στενής τους σχέσης με το πλαγκτόν. Τα PCBs παραμένουν για περισσότερο χρονικό διάστημα στα ιζήματα από ότι σε άλλα φυσικά μέσα, πιθανά λόγω της στενής τους σχέσης με το πλαγκτόν και έχοντας ως επακόλουθο παρατεταμένη ανακύκλωση. Η παραπάνω περιγραφή αποτυπώνεται με τον καλύτερο τρόπο στο ακόλουθο γράφημα



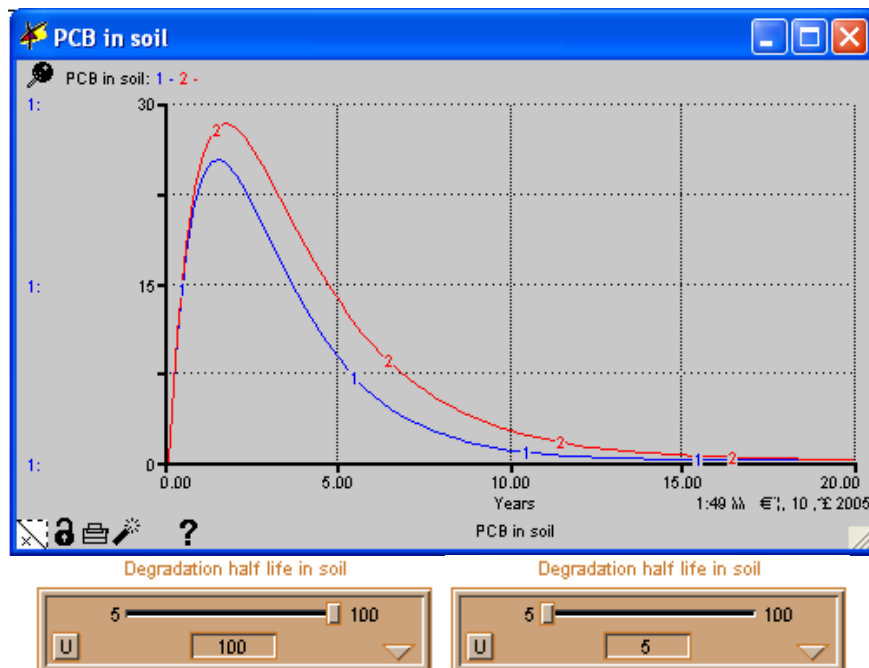
Εικόνα 5.5.1: Γράφημα μοντέλου PCB

Εάν μελετήσουμε το ακόλουθο γράφημα θα δούμε ότι τα ψάρια και το πλαγκτόν φαίνεται να έχουν μια “σχέση” μεγάλης διάρκειας, με τα επίπεδα του PCB να κυμαίνονται πάνω σε ένα συγκεκριμένο πρότυπο όπου θα έπρεπε να αντιπροσώπευε τις διακυμάνσεις των πληθυσμών αλλά και τους ρυθμούς του κυνηγιού. Τελικά το επίπεδο του PCB μειώνεται. Τα ψάρια περιέχουν τα υψηλότερα επίπεδα από κάθε μέσο (εκτός του εδάφους), κάτι που αναμενόταν, καθώς αποτελούν τον τελευταίο προορισμό των PCBs στο μοντέλο. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι κάτι τέτοιο δεν αντικατοπτρίζει πλήρως την πραγματικότητα καθώς υπάρχει συνεχής μόλυνση ενώ το μοντέλο μελετά μια σχετικά βραχυπρόθεσμη συμπεριφορά.



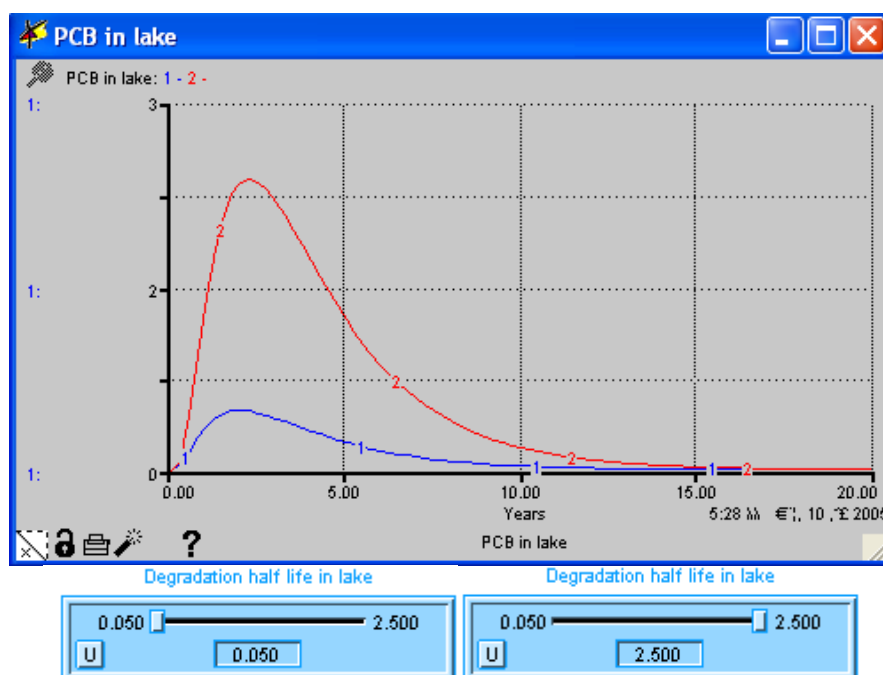
Εικόνα 5.5.2: Γράφημα μοντέλου PCB

Για να κατανοήσουμε τον τρόπο που κατασκευάσαμε τα παραπάνω γραφήματα που αφορούν το επίπεδο του PCB αλλά και για να δούμε το πως συγκεκριμένες μεταβλητές επηρεάζουν την συμπεριφορά του PCB, θα εξετάσουμε την επιρροή των ημιπεριόδων ζωών για την υποβάθμιση τόσο της λίμνης όσο και του εδάφους. Αρχικά θα δούμε πως επηρεάζεται το επίπεδο του PCB στο έδαφος εάν θέσουμε την κλίμακα που αντιπροσωπεύει την υποβάθμιση του εδάφους στην μέγιστη και ελάχιστη τιμή της. Εάν τρέξουμε το μοντέλο βλέπουμε το γράφημα που δημιουργείται. Η μπλέ καμπύλη αντιπροσωπεύει την ελάχιστη τιμή υποβάθμισης ενώ η κόκκινη καμπύλη την μέγιστη τιμή υποβάθμισης. Οι δύο καμπύλες είναι βασισμένες στο ίδιο πρότυπο αλλά όπως είναι φυσικό όταν έχουμε μέγιστη τιμή υποβάθμισης το επίπεδο του PCB είναι και μεγαλύτερο. Μετά από περίοδο πέντε περίπου ετών το επίπεδο του PCB μειώνεται ενώ μέσα σε διάστημα δεκαπέντε ετών παρατηρούμε ότι το PCB είναι σε μηδενικό επίπεδο.



Εικόνα 5.5.3: Γράφημα για το επίπεδο PCB στο έδαφος για κλίμακα υποβάθμισης του εδάφους στην μέγιστη και ελάχιστη τιμή

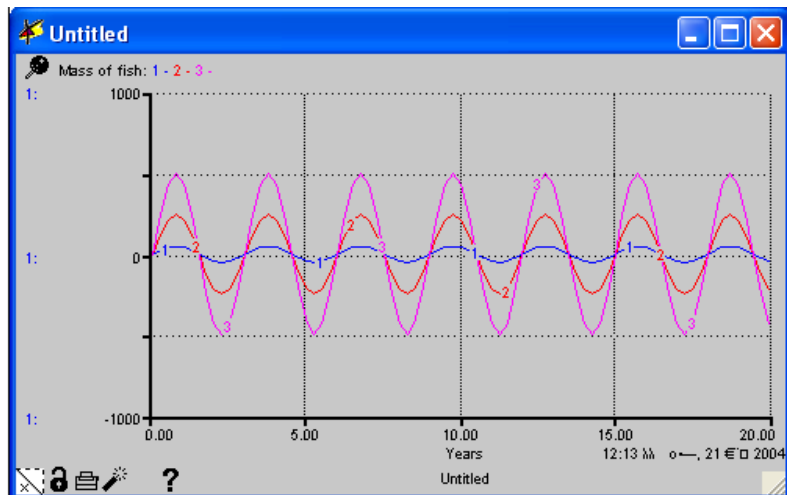
Αντίστοιχα με το προηγούμενο παράδειγμα για το επίπεδο του PCB στο έδαφος, μπορούμε να δούμε και το τι συμβαίνει με το επίπεδο του PCB στην λίμνη. Εάν θέσουμε την κλίμακα που αντιπροσωπεύει την υποβάθμιση της λίμνης, στην μέγιστη και ελάχιστη τιμή και τρέξουμε το μοντέλο παρατηρούμε το γράφημα που δημιουργείται. Η μπλέ καμπύλη αντιπροσωπεύει την ελάχιστη τιμή υποβάθμισης ενώ η κόκκινη καμπύλη την μέγιστη τιμή. Όπως είναι λογικό να συμβαίνει το επίπεδο του PCB είναι κατά πολύ μεγαλύτερο σε λίμνη με μεγαλύτερη υποβάθμιση. Αν και τα επίπεδα του PCB διαφέρουν κατά πολύ είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι και στις δύο περιπτώσεις χρειάζεται περίπου ο ίδιος χρόνος για να μειωθεί και να φτάσει σε μηδενικά επίπεδα το PCB



Εικόνα 5.5.4: Γράφημα για το επίπεδο PCB στη λίμνη, για κλίμακα υποβάθμισης της λίμνης στην μέγιστη και ελάχιστη τιμή

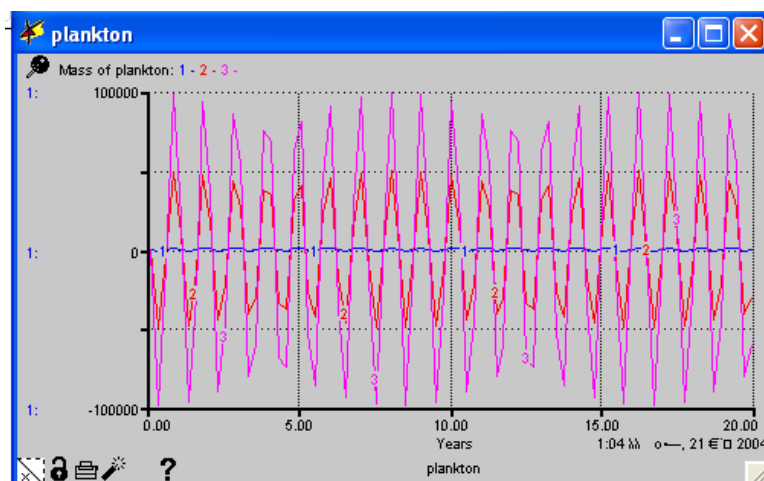
Εκτός από τα γραφήματα που αφορούν τα επίπεδα των PCBs στα διάφορα μέσα και τα οποία αναλύσαμε εκτενώς παραπάνω, είναι χρήσιμο να δούμε και ένα γράφημα που αφορά τον πληθυσμό των ψαριών μιας που τα ψάρια είναι και ο τελευταίος προορισμός των PCBs στο σύστημα. Στο γράφημα η καμπύλη 1 (μπλέ καμπύλη) έγινε με αριθμό ψαριών (number of fish) 100, η καμπύλη 2 (κόκκινη καμπύλη) με αριθμό ψαριών 500 και η καμπύλη 3 (ρόζ καμπύλη) με αριθμό ψαριών 1000. Μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι οι καμπύλες 2 και 3 ακολουθούν το ίδιο πρότυπο με την καμπύλη 3 να παρουσιάζει μεγαλύτερες διακυμάνσεις ενώ η καμπύλη 1 παρουσιάζει την μεγαλύτερη σταθερότητα.





Εικόνα 5.5.5: Γράφημα που αφορά τον πληθυσμό ψαριών

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει και το γράφημα που αναφέρεται στους πλανκτονικούς πληθυσμούς. Η μπλέ καμπύλη που παρουσιάζει και την μεγαλύτερη σταθερότητα έχει γίνει για αριθμό πλαγκτόν 1000, η κόκκινη καμπύλη για αριθμό πλαγκτόν 50000 και τέλος η ρόζ καμπύλη για αριθμό πλαγκτόν 100000. Οι δύο τελευταίες καμπύλες παρουσιάζουν πολύ μεγάλες διακυμάνσεις.



Εικόνα 5.5.6 : Γράφημα πλανκτονικών πληθυσμών

Το σύστημα δεν είναι χρονικά σταθερό καθώς έχει σχεδιαστεί για να δείξει πότε τα PCBs θα “αποβληθούν” από το σύστημα. Ωστόσο δείχνει ότι τα PCBs παραμένουν σε κάποιες περιοχές (ακόμα και μετά από εκατοντάδες χρόνια). Επίσης εάν το μοντέλο εκτελεστεί για ένα αρκετά μεγάλο χρονικό διάστημα θα δημιουργήσει αρνητικούς αριθμούς (μεταξύ 8000 και 9000 χρόνων). Αυτό αυξάνει την πιθανότητα, να είναι οι αριθμοί που δημιουργούνται από βραχυπρόθεσμα μοντέλα, ανακριβείς. Απαιτείται τότε πολύ προσεκτική επιβεβαίωση και έλεγχος όλων των στοιχείων. Δεν υπάρχει η δυνατότητα το μοντέλο να ακολουθήσει τους νόμους που διέπουν την αρχή διατήρησης της μάζας, αφού πρόκειται για ένα “ανοικτό” σύστημα (Deaton & Winebrake, 2000). Ακόμα και σε ένα “κλειστό” σύστημα τα υλικά ή στοιχεία που υποβαθμίζονται δεν μπορούν να

ερμηνευτούν αποτελεσματικά. Ακόμα δεν είναι απαραίτητη η παραγωγή του ισοζυγίου μάζας.

### 5.6 Επιβεβαίωση και αξιοπιστία του μοντέλου

Είναι δύσκολο να αποτιμήσουμε το μοντέλο έναντι ενός παγκοσμίου συστήματος για δύο κυρίως λόγους. Ο πρώτος λόγος είναι ότι τα συστήματα αυτά είναι εκτεθειμένα σε συνεχή μόλυνση από βραχυπρόθεσμες και μακροπρόθεσμες πηγές. Κάτι τέτοιο σημαίνει ότι δεν θα υπάρξει η κατάλληλη πτώση στα επίπεδα του PCB ούτε καμία δραματικά ακραία τιμή (εκτός αν υπάρχει κάποιο περιστατικό όπως η μόλυνση του όρμου Hudson στις ΗΠΑ). Ο δεύτερος λόγος είναι η ύπαρξη σφάλματος στο μοντέλο. Δεν υπάρχει συνάρτηση που να μετατρέπει τις αρχικές μονάδες (λίτρα) σε συγκεντρώσεις στα αντίστοιχα μέσα. Ωστόσο συνεπάγεται ότι οι αναλογίες μεταξύ των διαφορετικών μέσων θα είναι παρόμοιες. Χρησιμοποιήθηκαν τα ανώτατα επίπεδα από το μοντέλο

Πίνακας 5.6.1: Επίπεδα του PCB από το μοντέλο και το περιβάλλον (Erickson 1986), (Ford, 1999)

Μέσα	Επίπεδα στο περιβάλλον	Ανώτατα επίπεδα στο μοντέλο
Ατμόσφαιρα	0.06-36 $\mu\text{g}/\text{m}^3$	2.8
Ποταμοί	< 50 ng/l	$2.8 \cdot 10^3$
Έδαφος	15-1000 ng/m <sup>3</sup>	28
Λίμνες	< 5 ng/l	0.69
Ιζήματα	8-20 ng/m <sup>3</sup>	1.9
Ψάρια	0.03-190 $\mu\text{g}/\text{g}$	3.2
Πλαγκτόν	0.003-1.055 $\mu\text{g}/\text{g}$	1.9

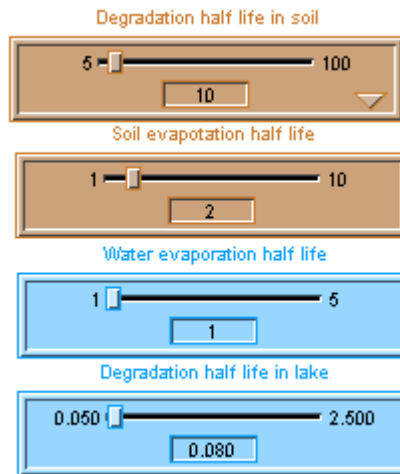
Η διανομή στα ψάρια και το πλαγκτόν φαίνεται να ακολουθεί το γενικό πρότυπο, όπως γίνεται και στο έδαφος. Επίσης ο διαχωρισμός μεταξύ των ιζημάτων και των λιμνών φαίνεται να αντιπροσωπεύεται καλά. Ωστόσο, το επίπεδο στα ποτάμια φαίνεται να είναι πολύ χαμηλό. Από εδώ μπορεί να εξαχθεί ένα βασικό συμπέρασμα: αν και η βασική λογική του μοντέλου φαίνεται πλήρης και σωστή απαιτείται επιπλέον εργασία ώστε

- α) να δημιουργήσουμε ορθά και ακριβή επίπεδα σε κάθε μέσο (πιθανότατα εστιάζοντας την προσοχή μας στην συμπεριφορά των PCBs στο έδαφος)
- β) να προσαρμόσουμε το μοντέλο ώστε να μπορούν να προκύψουν ωφέλιμες τιμές συγκέντρωσης.

Λαμβάνοντας τα παραπάνω υπ' όψη μας δεν θεωρήσαμε χρήσιμο να κάνουμε βαθμονόμηση του μοντέλου

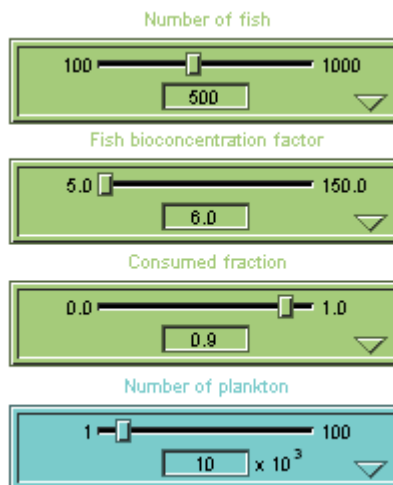
### 5.7 Ανάλυση “ευαισθησίας” του μοντέλου

Ένας αριθμός μεταβλητών επιλέχθηκε βάσει ότι θα μπορούσαν να είναι οι πιο σημαντικοί παράγοντες σε ότι αφορά την συμπεριφορά των PCBs στο φυσικό και βιολογικό περιβάλλον. Οι μεταβλητές λόγω μιας συνάρτησης που έθεσε κάθε μεταβλητή στην μέγιστη και ελάχιστη τιμή της, ενώ οι υπόλοιπες τιμές βρισκόντουσαν στα αρχικά τους επίπεδα. Οι μέγιστες και ελάχιστες τιμές θα δημιουργούσαν ενδεχομένως ευκολότερα αναγνωρίσιμες αποκρίσεις στο μοντέλο. Οι μεταβλητές που αφορούν τις ημιπεριόδους ζώων την υποβάθμιση εδαφών και λιμνών αλλά και την εξάτμιση από το νερό και το έδαφος φαίνονται στην παρακάτω εικόνα



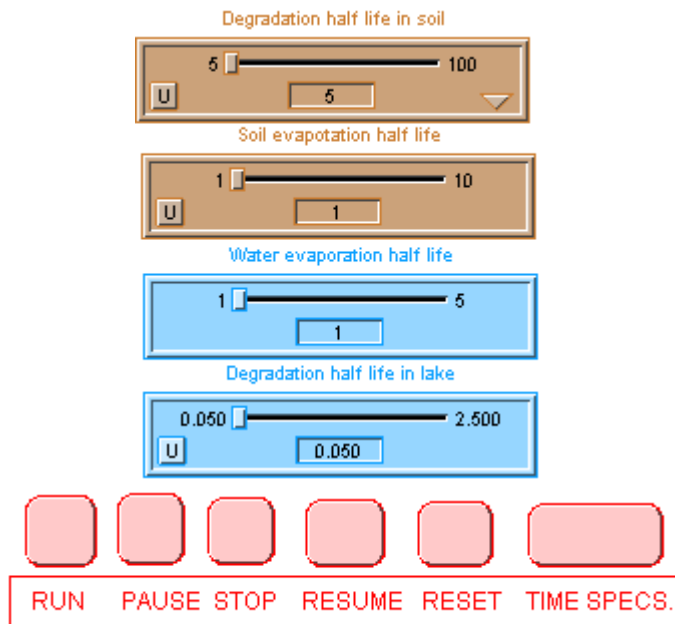
Εικόνα 5.7.1: Μεταβλητές ημιπεριόδων ζών όπως απεικονίζονται στο επίπεδο σχεδίασης μοντέλου.

Εκτός όμως από τις μεταβλητές που αφορούν τις ημιπεριόδους ζών στο στρώμα σχεδίασης του μοντέλου απεικονίζονται και οι υπόλοιπες σημαντικές μεταβλητές στις οποίες περιλαμβάνονται οι πληθυσμοί των ψαριών και του πλαγκτόν καθώς και οι παράγοντες κατανάλωσης και βιοσυγκέντρωσης των ψαριών.



Εικόνα 5.7.2: Οι μεταβλητές που χρησιμοποιήθηκαν στο μοντέλο όπως απεικονίζονται στο επίπεδο σχεδίασης του μοντέλου

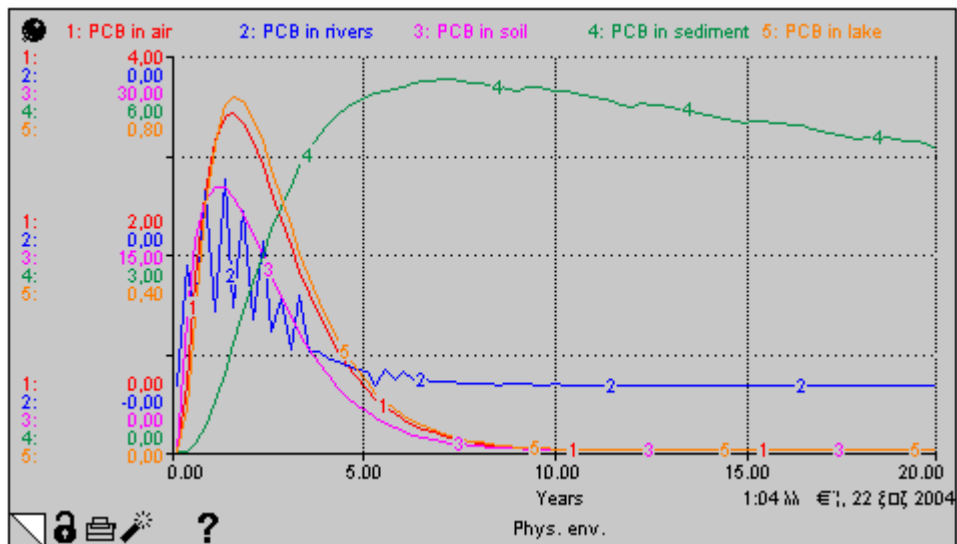
Μπορούμε να κάνουμε δοκιμές θέτοντας τις μεταβλητές στις μέγιστες και ελάχιστες τιμές και να δούμε πως ανταποκρίνεται το μοντέλο μας στις αλλαγές αυτές. Το πρόγραμμα της STELLA μας διευκολύνει καθώς όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε στις παραπάνω εικόνες οι μεταβλητές στο επίπεδο σχεδίασης του μοντέλου αντιπροσωπεύονται από συσκευές με κλίμακα όπου είναι δυνατόν να αλλάξουμε τις τιμές τους όποτε το επιθυμούμε. Για παράδειγμα ας θέσουμε τις μεταβλητές των ημιπεριόδων ζών στην ελάχιστη τιμή τους και ας τρέξουμε το μοντέλο



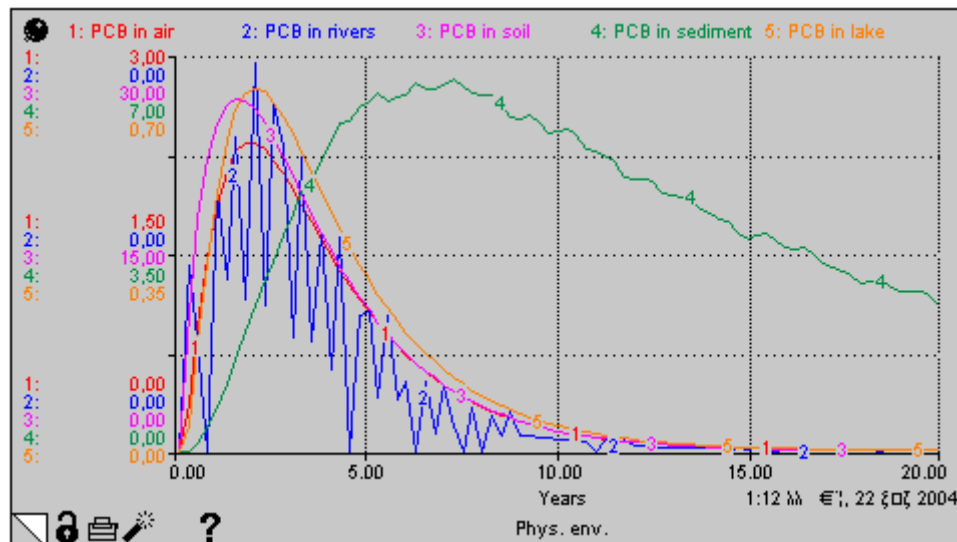
Εικόνα 5.7.3: Μεταβλητές ημιπεριόδων ζών με την κλίμακα τοποθετημένη στην ελάχιστη τιμή και τα ‘κουμπιά’ εκκίνησης του μοντέλου στο επίπεδο σχεδίασης του προγράμματος STELLA

Όταν θέσουμε τις μεταβλητές στις ελάχιστες τιμές τους “τρέχουμε” το μοντέλο και παρατηρούμε το γράφημα που προκύπτει στο στρώμα σχεδίασης του προγράμματος STELLA.

Εάν συγκρίνουμε τα δύο γραφήματα παρατηρούμε ότι στο αρχικό γράφημα του μοντέλου αποτυπώνεται μείωση στα επίπεδα του PCB ειδικότερα στα επίπεδα που αφορούν ποταμούς και ιζήματα. Στο γράφημα που προκύπτει αν θέσουμε τις μεταβλητές των ημιπεριόδων ζών στην ελάχιστη τιμή τους, τα επίπεδα του PCB δεν μειώνονται σε όλα τα μέσα και ειδικότερα στα επίπεδα που αφορούν τους ποταμούς και τα ιζήματα παρουσιάζουν σταθερότητα. Οπότε δεν είναι προς συμφέρον μας το να θέσουμε τις μεταβλητές των ημιπεριόδων ζών στην ελάχιστη τιμή τους.

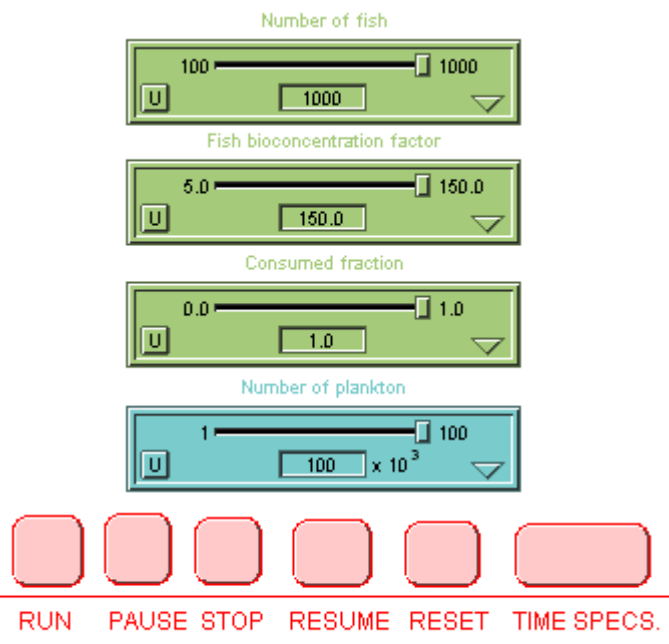


Εικόνα 5.7.4: Γράφημα σχεδιασμένο βάσει ελαχίστων τιμών μεταβλητών



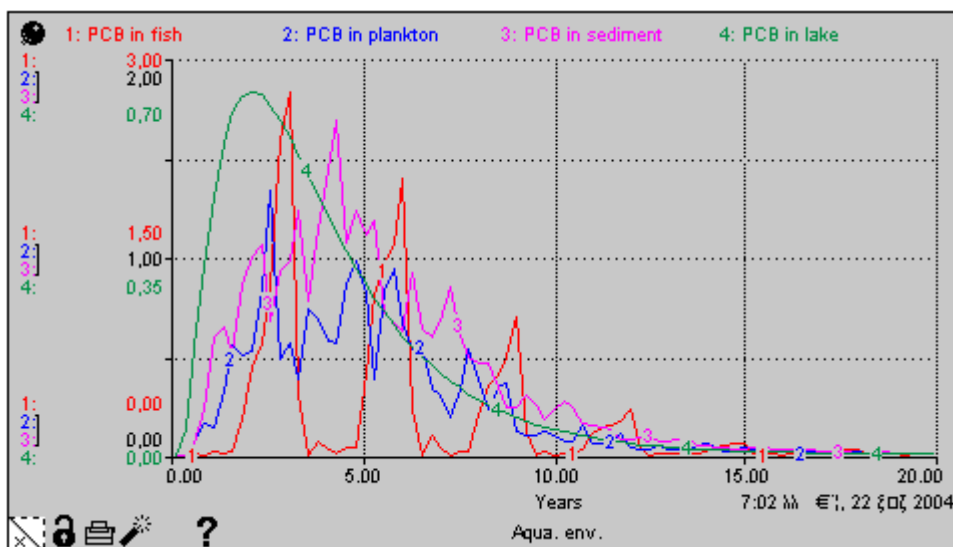
Εικόνα 5.7.5: Γράφημα μοντέλου PCB

Στο προηγούμενο παράδειγμα θέσαμε τις μεταβλητές των ημιπεριόδων ζών του μοντέλου στις ελάχιστες τιμές τους και συγκρίναμε το γράφημα που προέκυψε με το γράφημα του μοντέλου PCB. Στο παράδειγμα που θα κάνουμε τώρα θα χρησιμοποιήσουμε τις μέγιστες τιμές των μεταβλητών που αφορούν τους πλαγκτονικούς πληθυσμούς, τους πληθυσμούς των ψαριών, το κλάσμα κατανάλωσης και τον παράγοντα βιοσυγκέντρωσης στα ψάρια. Ας θέσουμε τις παραπάνω μεταβλητές στην μέγιστη τιμή τους και ας "τρέξουμε" το μοντέλο.

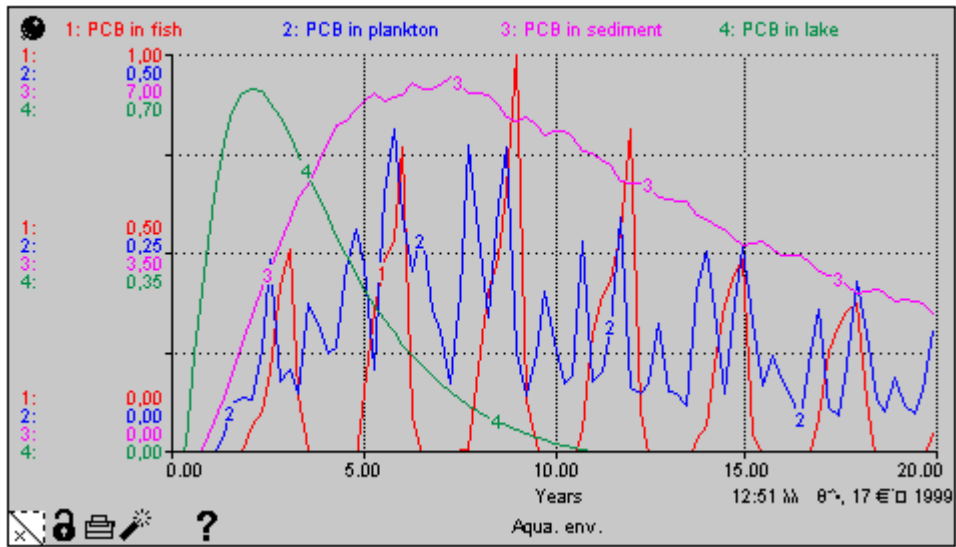


Εικόνα 5.7.6: Μεταβλητές με την κλίμακα τοποθετημένη στην μέγιστη τιμή και τα “κουμπιά” εκκίνησης του μοντέλου στο επίπεδο σχεδίασης του προγράμματος STELLA.

Όταν θέσουμε τις μεταβλητές στην μέγιστη τιμή τους “τρέχουμε” το μοντέλο και παρατηρούμε το γράφημα που προκύπτει στο επίπεδο σχεδίασης της STELLA. Στο γράφημα αυτό βλέπουμε ότι τα επίπεδα του PCB στην λίμνη είναι υψηλότερα κάτι όμως που δεν είναι σωστό αφού τα ψάρια είναι ο τελικός προορισμός της πορείας και επομένως εκεί θα έπρεπε να είχαμε τα υψηλότερα επίπεδα κάτι που συμβαίνει στο γράφημα του μοντέλου PCB. Επομένως δεν εξυπηρετεί τον σκοπό του μοντέλου το να θέσουμε τις μεταβλητές στις μέγιστες τιμές τους.



Εικόνα 5.7.7: Γράφημα σχεδιασμένο βάσει μέγιστων τιμών μεταβλητών



Εικόνα 5.7.8: Γράφημα μοντέλου PCB

Στον παρακάτω πίνακα μπορούμε να δούμε συγκεντρωτικά τις επιπτώσεις στα επίπεδα του PCB στο μοντέλο, εάν θέσουμε μέγιστες και ελάχιστες τιμές στις μεταβλητές.

Μεταβλητή	Ελάχιστη	Μέγιστη
Ημιπερίοδος ζωής υποβάθμισης εδάφους	Μέγιστα επίπεδα σε όλα τα μέσα, με κορυφή τα ψάρια όπως και αναμενόταν	Μέγιστα επίπεδα σε όλα τα μέσα, εκτός από τους ποταμούς όπου υφίστανται ταχύτερη μείωση
Εξάτμιση από το έδαφος	Καμία επίδραση στα επίπεδα των ιζημάτων, όλα τα υπόλοιπα συμπυκνώνονται στα πρώτα χρόνια	Χαμηλά επίπεδα για την χλωρίδα & πανίδα του συστήματος. Οι ποταμοί παρουσιάζουν ασυνήθιστη σταθερότητα στην μέση περίοδο.
Εξάτμιση από λίμνη	Ελάχιστη τιμή	Μικρές αλλαγές
Υποβάθμιση λίμνης	Μειωμένα επίπεδα στο πλαγκτόν. Η διανομή στην χλωρίδα & πανίδα του συστήματος περισσότερο κατανεμημένη.	Υψηλά επίπεδα στην χλωρίδα & πανίδα του συστήματος
Αριθμός ψαριών	Καμία αλλαγή	Σχετικά υψηλότερα επίπεδα πλαγκτόν
Παράγοντας βιοσυγκέντρωσης στα ψάρια	Ελάχιστο επίπεδο	Καμία επίδραση
Βαθμός κατανάλωσης	Πολύ στενή σχέση μεταξύ πλαγκτόν, ψαριών και ιζημάτων, χρειάζεται περισσότερος χρόνος για να φτάσει στο υψηλότερο επίπεδο και αμέσως μετά μειώνεται με αργό ρυθμό.	Καμία επίδραση
Αριθμός πλαγκτόν	Καμία επίδραση	Καμία επίδραση

Πίνακας 5.7.9: Επιπτώσεις στα επίπεδα του PCB στο μοντέλο αν θέσουμε μέγιστες και ελάχιστες τιμές στις μεταβλητές

Το μοντέλο παρουσιάζει ευαισθησία στις μεταβολές του εδάφους. Αυτό συμβαίνει επειδή το έδαφος ενεργεί ως την πρώτη δεξαμενή του συστήματος οπότε έχει και τις υψηλότερες συγκεντρώσεις PCB. Οι επιπτώσεις στο βαθμό όπου το PCB ‘‘πορεύεται’’ στο έδαφος θα επηρεάσουν τον τρόπο με τον οποίο διανέμεται το PCB στο υπόλοιπο μοντέλο. Η υποβάθμιση της λίμνης φαίνεται επίσης να έχει επιπτώσεις, υποδεικνύοντας ότι οι διαδικασίες αυτές είναι σημαντικές. Ίσως είναι απαραίτητο να εξετάσουμε τις διαδικασίες υποβάθμισης της ατμόσφαιρας για να διευκρινίσουμε αν κάτι τέτοιο ισχύει.



## 5.8 Παρατηρήσεις

Το μοντέλο έχει σχεδιαστεί και για χρήση με άλλα συνθετικά οργανικά, αλλά αν λάβουμε υπ' όψη τους περιορισμούς δεν προτείνεται η χρήση του για τον σκοπό αυτό πρέπει να ελεγχθεί.

Το μοντέλο αυτό είναι η αρχική προσπάθεια για την δημιουργία ακριβέστερων μοντέλων, όμως απαιτούνται περισσότερες πληροφορίες. Είναι απαραίτητο να δημιουργηθούν υπο-μοντέλα που θα περιγράφουν την συμπεριφορά του PCB σε όλα τα μέσα, ειδικότερα στο έδαφος, και θα ήταν ιδιαίτερα χρήσιμο να έχουμε ακριβή μοντέλα πληθυσμών για όλες τις βιολογικές συνιστώσες. Εάν αυτή η εργασία θα πρέπει να επαναληφθεί τότε θα πρέπει να βασιστεί σε πραγματικές συνθήκες περιβάλλοντος ώστε να ενσωματωθούν και οι πραγματικές τιμές καθώς και το πλήθος πληροφοριών που απαιτείται για την χημεία των PCBs.

## 6. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

### Ξενόγλωσση Βιβλιογραφία

1. Carson, R. (2002). *Silent Spring*. First Mariner Books, New York, USA.
2. Colborn, T., Dumanoski, D. and Myers, J. P. (1996). *Our Stolen Future*. Abacus. London, UK
3. Deaton, M. & Winebrake, J. J. (2000). *Dynamic Modelling of Environmental Systems*. Springer. New York, USA
4. Ford, A. (1999). *Modelling the environment*. Island Press. Washington, USA
5. Habekotte, B. & Lutjeboer, H. (1995). *Environmental Modelling with STELLA*. Van Hall Institute. Groningen, The Netherlands
6. Hannon, B. & Ruth, M. (1994). *Dynamic Modelling*. Springer-Verlag. New York, USA
7. Hannon, B. & Ruth, M. (1997). *Dynamic Modelling of Biological Systems*. Springer. New York, USA
8. Harte, J. (1988). *Consider a Spherical Cow – A course in Environmental Problem Solving*. University Science Books. Sausalito, California, USA.
9. Harte, J. (2001). *Consider a Cylindrical Cow – More adventures in Environmental Problem Solving*. University Science Books. Sausalito, California, USA.
10. HPS (High Performance Systems) (2001). *An Introduction to Systems Thinking*. Hanover, USA
11. HPS (High Performance Systems) (2001). *STELLA Manual*. Hanover, USA
12. Huggett, R. J. (1993). *Modelling the Human Impact on nature – Systems Analysis of Environmental Problems*. Oxford University Press. Oxford, UK.
13. Randers, J (1973). *Global Equilibrium*. Springer. New York, USA
14. Soltzberg, L. (1996). *The Dynamic Environment*. University Science Books. Sausalito, California, USA.
15. Terzis, E. (1999). *Environmental Modelling*. Postgraduate Course Notes. University of Bradford, Bradford, UK.

### Ελληνική Βιβλιογραφία

16. Κουϊμτζή, Θ. & Φυτιανού, Κ. & Σαμαρά- Κωνσταντίνου, Κ. (1998). *Χημεία Περιβάλλοντος*. University Studio Press. Θεσσαλονίκη, Ελλάδα