



ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Μοντελοποίηση Φυτοεξυγίανσης Ρυπασμένων Εδαφών από Μόλυβδο με χρήση MATLAB

Ελένη Δ. Χρυσάφοπούλου

Επιβλέπων:

Καθηγητής Καλογεράκης Νικόλαος

Εξεταστική επιτροπή:

Αναπλ. Καθηγητής Καρατζάς Γεώργιος

Αναπλ. Καθηγητής Νικολαΐδης Νικόλαος

Διπλωματική Εργασία

Σεπτέμβριος 2003

Περίληψη

Η εξυγίανση ρυπασμένων εδαφών, ιζημάτων και υπόγειων υδροφορέων αποτελεί βασικό τομέα έρευνας τα τελευταία χρόνια. Στις νέες τεχνολογίες που αναπτύσσονται ανήκει η φυτοεξυγίανση και ειδικότερα η φυτοεξαγωγή. Κατά την εφαρμογή της χρησιμοποιούνται συγκεκριμένα είδη φυτών (υπερσυσσωρευτές) τα οποία προσλαμβάνουν και στη συνέχεια συσσωρεύουν στην φυτική τους βιομάζα τους ρυπαντές καθαρίζοντας με αυτό τον τρόπο επιβεβαρυμένα εδάφη, ιζήματα και υπόγεια ύδατα. Παρόλο που αποδεικνύεται οικονομικά συμφέρουσα συγκρινόμενη με άλλες μεθόδους εξυγίανσης λίγη προσοχή έχει δοθεί στην μαθηματική προσομοίωση των εμπλεκόμενων μηχανισμών.

Στόχος της εργασίας αυτής είναι η ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου για την εξαγωγή αποτελεσμάτων σχετικών με την ικανότητα φυτοεξυγίανσης εδαφών από μόλυβδο και τη μελέτη και απόκτηση μεγαλύτερης γνώσης όσον αφορά τους μηχανισμούς της πρόσληψης από το έδαφος, της μεταφοράς του μετάλλου μέσα στο φυτό και τελικά της συσσώρευσής του. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται μια μηχανιστική προσέγγιση μοντελοποίησης δυναμικού συστήματος και επιλέγεται ο αραβόσιτος (*Zea mays*), καθώς εξαιτίας της φυσιολογίας του επιτρέπεται μεγάλη συσσώρευση βιομάζας και ικανοποιητική μεταφορά.

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας διαμορφώσαμε ένα μοντέλο προσομοίωσης της φυτοεξαγωγής για το σύστημα αραβόσιτος – μόλυβδος το οποίο μπορεί εύκολα να προσαρμοσθεί και σε άλλα συστήματα φυτού – μετάλλου. Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε ανάλυση ευαισθησίας για τις παραμέτρους του μοντέλου με σκοπό την επιβεβαίωση των υποθέσεων που έγιναν σχετικά με τους εμπλεκόμενους μηχανισμούς. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδειξαν ότι η κατακράτηση (precipitation) του μολύβδου σε όλα τα τμήματα του φυτού αποτελεί τον κύριο μηχανισμό συσσώρευσης του μετάλλου. Τέλος η αποτελεσματικότητα της εξυγίανσης με την μέθοδο της φυτοεξαγωγής μελετήθηκε με την προσομοίωση δύο διαφορετικών σεναρίων. Το πρώτο προσεγγίζει την εξυγίανση υπόγειων υδροφορέων ενώ το δεύτερο την εξυγίανση εδαφών.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες στον καθηγητή μου κ. Νίκο Καλογεράκη για την πολύτιμη καθοδήγηση και βοήθεια του σε αυτή την διπλωματική εργασία. Η εμπιστοσύνη που μου έδειξε όλο αυτό το διάστημα αλλά και το κουράγιο που μου παρείχε ήταν ιδιαίτερα σημαντικά για την ολοκλήρωση της.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την οικογένειά μου, χωρίς την υλική και κυρίως ηθική υποστήριξη της οποίας, δε θα ήταν δυνατή η ολοκλήρωση των σπουδών μου.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή στην Φυτοεξυγίανση.....	1
1.1	Φυτοεξυγίανση.....	1
1.2	Εφαρμογές Φυτοεξυγίανσης.....	2
1.3	Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα Φυτοεξυγίανσης.....	3
1.4	Φυτοεξαγωγή (phytoextraction).....	4
1.5	Γενικές Πληροφορίες για τον Μόλυβδο.....	6
1.5.1	Πηγές του Μολύβδου.....	6
1.5.2	Μορφές του Μολύβδου.....	7
1.5.3	Επιδράσεις στην Υγεία.....	7
1.5.4	Επιδράσεις στα Φυτά.....	7
2	Φυσιολογία των Φυτών.....	9
2.1	Οι Αγωγοί των Φυτών.....	9
2.2	Μεταφορά του Νερού.....	10
2.2.1	Διαπνοή.....	10
2.2.2	Ροή Μάζας.....	11
2.2.3	Διάχυση.....	11
2.3	Μεταφορά των Θρεπτικών Στοιχείων μέσω Μεμβρανών.....	11
2.4	Μηχανισμοί Μεταφοράς Μετάλλων από το Εδαφικό Διάλυμα έως τους Ιστούς του Φυτού.....	12
2.4.1	Καθοριστικοί Παράγοντες για την Μεταφορά και Συσσώρευση των Μετάλλων.....	13
3	Ανάλυση Ανάπτυξης Μηχανιστικού Μοντέλου.....	17

3.1	<i>Προσέγγιση του Μοντέλου.....</i>	<i>17</i>
3.2	<i>Δυνατότητα Πρόβλεψης και Σχεδιασμού Συστήματος Αποκατάστασης Εδαφών... </i>	<i>18</i>
3.3	<i>Προσαρμογή του Μοντέλου σε Διαφορετικά Συστήματα Φυτού – Μετάλλου.....</i>	<i>19</i>
4	Μοντελοποίηση.....	21
4.1	<i>Ανάπτυξη του Μοντέλου.....</i>	<i>21</i>
4.2	<i>Υποθέσεις του Μοντέλου.....</i>	<i>24</i>
5	Διαμερισματοποίηση του Φυτού και Αντίστοιχες Μαθηματικές Εξισώσεις.....	27
5.1	<i>Διαμερισματοποίηση.....</i>	<i>27</i>
5.2	<i>Μαθηματικές Εξισώσεις.....</i>	<i>29</i>
5.3	<i>Διάγραμμα Ροής.....</i>	<i>49</i>
6	Εκτίμηση των Παραμέτρων του Μοντέλου.....	51
6.1	<i>Ρυθμοί Κατακράτησης.....</i>	<i>51</i>
6.2	<i>Ρυθμός Ενεργούς Διάχυσης.....</i>	<i>53</i>
6.3	<i>Ρυθμός Μεταφοράς μεταξύ Φάσεων</i>	<i>53</i>
6.4	<i>Μέγιστος Ρυθμός Πρόσληψης Μετάλλου.....</i>	<i>54</i>
6.5	<i>Συγκέντρωση Μολύβδου στο Εδαφικό Διάλυμα.....</i>	<i>54</i>
6.6	<i>Ανάπτυξη του Φυτού.....</i>	<i>55</i>
7	Αποτελέσματα Προσομοίωσης.....	59
7.1	<i>Ερμηνεία Γραφημάτων Προσομοίωσης.....</i>	<i>59</i>
7.2	<i>1^ο Σενάριο Προσομοίωσης.....</i>	<i>67</i>
7.3	<i>2^ο Σενάριο Προσομοίωσης.....</i>	<i>68</i>
8	Συμπεράσματα.....	69
	Βιβλιογραφία.....	71

Λίστα Γραφικών Παραστάσεων και Σχημάτων

Σχήμα 1-1. Διεργασίες Φυτοεξυγίανσης.....	3
Σχήμα 1-2. Φυτοεξαγωγή του Μολύβδου από Εδάφη.....	5
Σχήμα 1-3. Αραβόσιτος (<i>Zea mays</i>).....	6
Σχήμα 2-1. Κάθετη τομή του βλαστού του αραβόσιτου.....	10
Σχήμα 5-1. Διαμερισματοποίηση του φυτού.....	27
Σχήμα 5-2. Διάγραμμα ροής για την ρίζα του αραβόσιτου.....	49
Σχήμα 5-3. Διάγραμμα ροής για τον βλαστό του αραβόσιτου.....	49
Σχήμα 5-4. Διάγραμμα ροής για το φύλλο του αραβόσιτου.....	50
Σχήμα 5-5. Διάγραμμα ροής για τον καρπό του αραβόσιτου.....	50
Σχήμα 6-1: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας με $V_{0,root} = 0,0002$	56
Σχήμα 6-2 : Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας με $V_{0,root} = 0,001 (+400\%)$	56
Σχήμα 6-3 : Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με $V_{0,root} = 0,0002$	57
Σχήμα 6-4: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με $V_{0,root} = 0,001 (+400\%)$	57
Σχήμα 6-5: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση με $V_{0,root} = 0,0002$	57
Σχήμα 6-6: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση με $V_{0,root} = 0,001 (+400\%)$	57
Σχήμα 6-7: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,0002$	57
Σχήμα 6-8: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,001 (+400\%)$	57
Σχήμα 6-9: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,0002$	58
Σχήμα 6-10: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας με	

$V_{0,root} = 0,001 (+400\%)$	58
Σχήμα 7-1: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας.....	60
Σχήμα 7-2: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας.....	60
Σχήμα 7-3: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας.....	61
Σχήμα 7-4: Κατακράτηση του Pb στην επιφάνεια της ρίζας.....	61
Σχήμα 7-5: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση.....	62
Σχήμα 7-6: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση.....	63
Σχήμα 7-7: Κατακράτηση του Pb στα διάφορα τμήματα του φυτού.....	64
Σχήμα 7-8: Κατακράτηση του Pb σε ολόκληρο το φυτό.....	64
Σχήμα 7-9: Ποσότητα Pb στην υγρή φάση του φυτού.....	65
Σχήμα 7-10: Ποσότητα Pb στην στερεή φάση του φυτού.....	65
Σχήμα 7-11: Συνολική ποσότητα Pb κατακρατημένη στο φυτό.....	66
Σχήμα 7-12: Συγκέντρωση Pb στο έδαφος.....	66
Σχήμα 7-13: Αύξηση του όγκου στα διάφορα τμήματα του φυτού.....	67

Λίστα Πινάκων

Πίνακας 1-1. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα φυτοεξυγίανσης.....	4
Πίνακας 5-1. Ποσοστά για τους Όγκους κάθε υπομηήματος του Φυτού.....	28
Πίνακας 6-1. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τους Ρυθμούς Κατακράτησης του Μοντέλου.....	52
Πίνακας 6-2. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Ρυθμό Ενεργούς Διάχυσης...	53
Πίνακας 6-3. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Ρυθμό Μεταφοράς μεταξύ Φάσεων.....	54
Πίνακας 6-4. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Μέγιστο Ρυθμό Πρόσληψης του Pb.....	54
Πίνακας 6-5. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για την Συγκέντρωση του Pb στο εδαφικό διάλυμα.....	55
Πίνακας 6-6. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τους Αρχικούς Όγκους του Φυτού και τους Ρυθμούς Ανάπτυξης.....	56

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή στην Φυτοεξυγίανση

Τα τελευταία είκοσι χρόνια έχει γίνει μεγάλη πρόοδος στον τομέα της αποκατάστασης ρυπασμένων εδαφών, ιζημάτων και υπόγειων υδάτων. Παρόλα αυτά οι υπάρχουσες μέθοδοι έχουν αποδειχθεί ασύμφωρες οικονομικά ή /και περιορισμένης εφαρμογής για διάφορους λόγους. Είναι έτσι φυσικό το ενδιαφέρον των ερευνητών να έχει στραφεί σε νέες μεθόδους περισσότερο αποδοτικές και οικονομικά συμφέρουσες.

1.1 Φυτοεξυγίανση

Στις νέες τεχνολογίες εξυγίανσης ανήκει και η φυτοεξυγίανση. Στην φυτοεξυγίανση γίνεται χρήση συγκεκριμένων φυτών για τον καθαρισμό εδαφών, ιζημάτων και υπογείων υδάτων επιβεβαρυμένων με μέταλλα ή /και οργανικούς ρυπαντές όπως πετρελαιοειδή και πολυαρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs). Ο όρος αυτός αποτελεί την επέκταση γνωστών φυσικών διεργασιών που παρατηρούνται στα οικοσυστήματα όπως οι κύκλοι των οργανικών και ανόργανων συστατικών μέσω των φυτών [50]. Η ανάπτυξη της φυτοεξυγίανσης βασίζεται σε γεωβοτανολογικές παρατηρήσεις σχετικές με την συσσώρευση των μετάλλων σε διάφορα φυτά που αναπτύσσονται σε περιοχές ρυπασμένες από μέταλλα [48]. Αρκετά επιστημονικά

πεδία όπως η γεωπονία, η φυσιολογία των φυτών, η μικροβιολογία, η υδρογεωλογία και η μηχανική συνδυάζονται για την σωστή επιλογή του φυτού αλλά και των κατάλληλων συνθηκών για κάθε ρυπασμένη περιοχή[50].

Τα πιθανά οικονομικά οφέλη από τη χρήση των φυτών για τους σκοπούς της εξυγίανσης είναι εντυπωσιακά. Η φυτοεξυγίανση είναι ένας αισθητικά ευχάριστος μηχανισμός ο οποίος μπορεί να μειώσει το κόστος της εξυγίανσης, να αποκαταστήσει το φυσικό περιβάλλον και να αποδώσει στο πεδίο χωρίς απλά να « θάψει » το πρόβλημα ρύπανσης της περιοχής ή να το μεταφέρει σε κάποια άλλη.

1.2 Εφαρμογές Φυτοεξυγίανσης

Η φυτοεξυγίανση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για αποκατάσταση ρυπασμένων περιοχών με διάφορους τρόπους ανάλογα με την διεργασία που επιλέγεται:

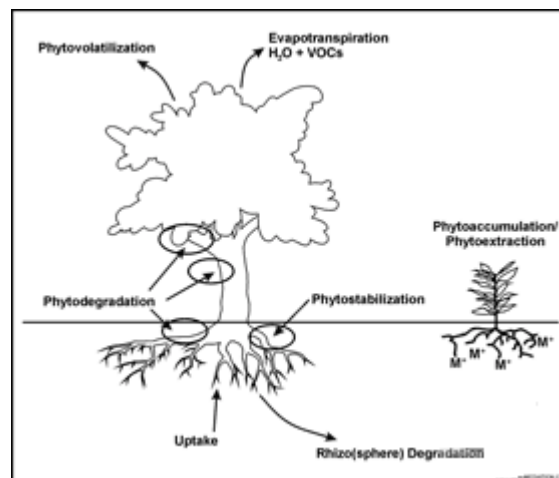
Διεργασίες φυτοαπορρύπανσης:

- Φυτοεξαγωγή ή φυτοεκχύλιση λέγεται η διαδικασία κατά την οποία γίνεται η πρόσληψη ενώσεων από την ρίζα και στη συνέχεια η μεταφορά τους στο υπέργειο τμήμα του φυτού. Η απομάκρυνση των ενώσεων γίνεται με την συγκομιδή των φυτών.
- Φυτοαποδόμηση ή φυτομετατροπή είναι η διάσπαση ρύπων που προσλαμβάνονται από τα φυτά, μέσω των διεργασιών μεταβολισμού του φυτού, ή η διάσπαση των ρύπων εκτός του φυτού με την επίδραση συστατικών όπως τα ένζυμα που εκκρίνονται από το φυτά.
- Φυτοεξάτμιση είναι η πρόσληψη και η μεταφορά ενός ρύπου με το ρεύμα διαπνοής και στην συνέχεια η έκλυση του ρύπου ή μιας μορφής του, στην ατμόσφαιρα από το φυτό εξαιτίας του μεταβολισμού του.
- Ριζοδιήθηση είναι η προσρόφηση ή η κατακράτηση πάνω στις ρίζες του φυτού των ενώσεων που βρίσκονται εν διαλύσει γύρω από την ζώνη επίδρασης της ρίζας, εξαιτίας βιοτικών ή αβιοτικών διεργασιών.

- Ριζοαποδόμηση είναι η ενζυματική διάσπαση των ρύπων εξαιτίας της ύπαρξης μικροβιακής δραστηριότητας, που ενισχύεται στην ζώνη επίδρασης της ρίζας.
- Ενισχυμένη βιοαποδόμηση καλείται η ενίσχυση του μικροβιακού πληθυσμού από το ριζικό σύστημα με αύξηση του ρυθμού βιοαποδόμησης ρύπων στην ριζόσφαιρα.

Διεργασίες φυτοσταθεροποίησης:

- Λιγνιτοποίηση είναι η μεταφορά των ρύπων και η σταθεροποίηση/ εγκλωβισμός τους (με μη αντιστρεπτές χημικές αντιδράσεις) στα τοιχώματα φυσικών κυττάρων.
- Χουμικοποίηση είναι η διεργασία κατά την οποία μικροβιακά και φυτικά ένζυμα ενώνουν τους ρύπους στις χουμικές ενώσεις του εδάφους.[23]



Σχήμα 1-1. Διεργασίες Φυτοεξυγίανσης
Πηγή: Phytoremediation Technology Web page

1.3 Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα Φυτοεξυγίανσης

Η φυτοεξυγίανση ως μέθοδος αποκατάστασης ρυπασμένων εδαφών, ιζημάτων ή υπόγειων υδροφορέων έχει πολλά πλεονεκτήματα αλλά και μειονεκτήματα τα οποία φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 1-1. Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα φυτοεξυγίανσης

Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
Εφαρμόζεται σε μια μεγάλη ποικιλία οργανικών και ανόργανων ενώσεων	Χρειάζεται μεγάλο χρονικό διάστημα για την αποκατάσταση
Μπορεί να εφαρμοσθεί στο πεδίο ή και εκτός πεδίου	Μπορεί να εξαρτάται από κλιματικές συνθήκες
Εύκολη στην υλοποίηση και την διατήρηση	Περιορίζεται σε περιοχές επιβεβαρυμένες μέσα στη ζώνη επίδρασης της ρίζας
Οικονομικά συμφέρουσα συγκριτικά με άλλες μεθόδους	Η βιομάζα μετά τη συγκομιδή μπορεί να χαρακτηριστεί ως RCRA επικίνδυνο απόβλητο
Περιβαλλοντικά φιλική και αισθητικά ευχάριστη στους πολίτες	Προκαλεί ανησυχία η πιθανότητα κατανάλωσης επιβεβαρυμένων φυτών
Μειώνει τις ποσότητες των αποβλήτων για υγειονομική ταφή	Πιθανή επίδραση στην τροφική αλυσίδα

Πηγή: EnviroTools, © 2002 Hazardous Substances Research Center, Michigan State University.

1.4 Φυτοεξαγωγή (phytoextraction)

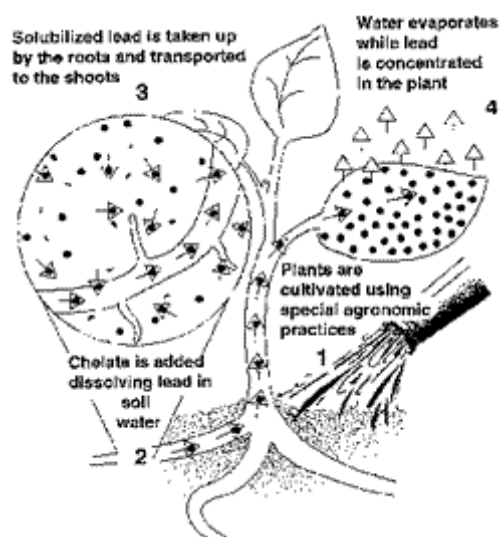
Η φυτοεξαγωγή χρησιμοποιείται κυρίως για την εξυγίανση ρυπασμένων εδαφών [51]. Για την απομάκρυνση των ρυπαντών χρησιμοποιούνται φυτά τα οποία απορροφούν, συγκεντρώνουν και κατακρατούν τα τοξικά μέταλλα από το ρυπασμένο έδαφος στην υπέργεια βιομάζα τους (βλαστός, φύλλα κτλ.) [7]. Όπως έχει ήδη αναφερθεί η ανάπτυξη της μεθόδου βασίζεται σε παρατηρήσεις σχετικές με την ικανότητα κάποιων φυτικών ειδών για υπερσυσσώρευση μετάλλων από ρυπασμένα εδάφη [20]. Ως υπερσυσσωρευτές χαρακτηρίζονται φυτά τα οποία έχουν ικανότητα συσσώρευσης μετάλλων 100 φορές μεγαλύτερη από ένα κοινό φυτό (μη-συσσωρευτής).

Συγκρινόμενη με άλλες συμβατικές μεθόδους η φυτοεξαγωγή αποδεικνύεται οικονομικά συμφέρουσα. Για παράδειγμα για την φυτοεξυγίανση μίας περιοχής ρυπασμένης από μόλυβδο έκτασης 12 acre υπολογίζεται ότι απαιτούνται 30 χρόνια και \$200,000 ενώ απαιτούνται \$12,000,000 για εκσκαφή και διάθεση, \$6,300,000 για εξυγίανση με πλύση χρησιμοποιώντας απορρυπαντικά και νερό και \$600,000 για στρώμα επικάλυψης από χώμα [51]. Ένα άλλο προνόμιο της μεθόδου είναι ότι αφαιρεί μόνιμα τον ρυπαντή από το έδαφος ή τον υδροφορέα [7]. Παράλληλα

μειώνεται σημαντικά η ποσότητα των προς διάθεση αποβλήτων και σε μερικές περιπτώσεις ο ρυπαντής ανακτάται από τη φυτική βιομάζα [7].

Η χρήση των υπερσυσσωρευτών περιορίζεται από παράγοντες όπως η αργή ανάπτυξη, το ρηχό ριζικό σύστημα και η μικρή παραγωγή βιομάζας. Επίσης μετά τη συγκομιδή επιβάλλεται η διάθεση της φυτικής βιομάζας ως επικίνδυνο απόβλητο [7]. Άλλοι παράγοντες που μπορούν να περιορίσουν την φυτοεξαγωγή των μετάλλων είναι οι παρακάτω:

- Η βιοδιαθεσιμότητα του μετάλλου στη ριζόσφαιρα
- Ο ρυθμός πρόσληψης του μετάλλου από τη ρίζα
- Αναλογία του κατακρατημένου μετάλλου μέσα στη ρίζα
- Ο ρυθμός πλήρωσης του ξύλου και μεταφοράς στο βλαστό
- Η κυτταρική ανοχή στα τοξικά μέταλλα



Σχήμα 1-2. Φυτοεξαγωγή του Μολύβδου από Εδάφη

Πηγή: ASPB – Plant Research Briefing Papers – Phytoremediation Using Plants to remove pollutants from the environment

Για να είναι εφικτή η εφαρμογή της φυτοεξαγωγής το φυτό που επιλέγεται θα πρέπει να έχει τα παρακάτω χαρακτηριστικά:

- Να αποσπούν μεγάλες ποσότητες βαρέων μετάλλων με τις ρίζες τους.
- Να επιτρέπουν την κυκλοφορία των μετάλλων στην υπέργεια βιομάζα τους.
- Να παράγουν μεγάλη ποσότητα φυτικής βιομάζας [3].

Αν και υπάρχουν πολλά φυτά που πληρούν δύο από τις τρεις προϋποθέσεις, δεν έχει βρεθεί ή αναπτυχθεί κάποιο φυτό που να πληροί και τις τρεις όσον αφορά τον

μόλυβδο. Έτσι ο αραβόσιτος (*Zea mays*) (Σχήμα 1-3), το φυτό με το οποίο ασχολούμαστε στη συνέχεια, αναπτύσσει μεγάλη βιομάζα, εμφανίζει μεγάλη ικανότητα μεταφοράς του Pb από τη ρίζα στους βλαστούς αλλά μικρή ικανότητα πρόσληψής του από τη ρίζα. Για να λυθούν αυτού του είδους τα προβλήματα, χρησιμοποιούνται χηλικές ενώσεις όπως το αιθυλενοδιαμινοτετραοξικό οξύ (EDTA), με σκοπό να αυξηθεί η βιοδιαθεσιμότητα του Pb στο έδαφος.



Σχήμα 1-3. Αραβόσιτος (*Zea mays*)

1.5 Γενικές Πληροφορίες για τον Μόλυβδο

1.5.1 Πηγές του Μολύβδου

Ο μόλυβδος (Pb) ανήκει στα βαρέα μέταλλα και συναντάται στη φύση σε μικρές ποσότητες κυρίως στα ορυκτά αποθέματα. Η συχνή του χρήση σε πολλές βιομηχανικές διεργασίες είναι ο κύριος λόγος της ρύπανσης που έχει προκληθεί στο περιβάλλον από τον Pb. Οι διεργασίες αυτές περιλαμβάνουν την εξόρυξη μεταλλευμάτων, την παρασκευή εντομοκτόνων και άλλων φυτοπροστατευτικών προϊόντων και λιπασμάτων, την διάθεση αστικών αποβλήτων και την καύση των καυσίμων που περιέχουν πρόσθετα μόλυβδου (π.χ. βενζίνης). Πολλά προϊόντα και υλικά του εμπορίου περιέχουν Pb όπως χρώματα, κεραμικά, οθόνες τηλεοράσεων, μπαταρίες, ιατρικά όργανα (ακτίνων-Χ) και άλλα ηλεκτρικά είδη. Σε μέρη που πραγματοποιείται ανακύκλωση και παραγωγή μπαταριών Pb, χρησιμοποιείται το 80%

του παραγόμενου Pb των Η.Π.Α. Κατά μέσο όρο τα προϊόντα ανακύκλωσης του μετάλλου ικανοποιούν μόνο το μισό των απαιτήσεων σε Pb.

1.5.2 Μορφές του Μολύβδου

Οι κυριότερες μορφές του Pb που ελευθερώνονται στο έδαφος, στα υπόγεια και επιφανειακά νερά είναι ο δισθενής μόλυβδος (Pb^{2+}), τα οξειδία και υδροξειδία του και τα σύμπλοκά του με ανιόντα ή ρίζες. Ο Pb^{2+} και τα υδροξυλιόντα του είναι οι πιο σταθερές μορφές του. Ο Pb^{2+} είναι η πιο κοινή και δραστική μορφή του, σχηματίζοντας μονοπυρηνικά και πολυπυρηνικά οξειδία και υδροξειδία.

Οι αδιάλυτες ενώσεις του Pb που επικρατούν είναι ο φωσφορούχος /φωσφορικός μόλυβδος, ο ανθρακικός μόλυβδος (σε $pH > 6$) και το υδροξυλίο του Pb. Η ένωσή του με το θείο (PbS) είναι η πιο σταθερή στερεά μορφή του στο εδαφικό σύμπλεγμα και παράγεται όταν η παρουσία του θείου είναι αυξημένη. Κάτω από αναερόβιες συνθήκες σχηματίζεται τετραμεθυλιούχος μόλυβδος εξαιτίας της μικροβιακής αλκυλίωσης.

1.5.3 Επιδράσεις στην Υγεία

Ο μόλυβδος κατατάσσεται στα καρκινογόνα στοιχεία σύμφωνα με το δελτίο καταγραφής της Υπηρεσίας Προστασίας Περιβάλλοντος των Η.Π.Α. Η εισαγωγή του στον οργανισμό γίνεται μέσω του αέρα, του νερού και της τροφής. Συσσωρεύεται στα όργανα του σώματος (π.χ. μυαλό) και μπορεί να οδηγήσει σε δηλητηρίαση ή ακόμα και στο θάνατο. Επηρεάζονται επίσης η γαστρεντερική χώρα, οι πνεύμονες και το κεντρικό νευρικό σύστημα. Τα παιδιά που εκτίθενται στον Pb βρίσκονται σε κίνδυνο νοητικής καθυστέρησης, χαμηλής νοημοσύνης, έλλειψη συγκέντρωσης, υπερδιέγερση, ιδιαίτερα δε εκείνα που βρίσκονται σε ηλικία κάτω των έξι ετών. Στους ενήλικους συνήθως παρατηρούνται μειωμένα αντανακλαστικά, απώλεια μνήμης, ναυτία, αϋπνία, ανορεξία και αδυναμία στους συνδέσμους του σώματος.

1.5.4 Επιδράσεις στα Φυτά

Ο μόλυβδος είναι μεταξύ εκείνων των μετάλλων που δεν συνεισφέρουν σε καμία βιολογική λειτουργία. Ως προς την επίδρασή του στα φυτά η υπερσυσσώρευση στον ιστό είναι τοξική στα περισσότερα από αυτά, μειώνοντας την παραγωγή σπόρων, τον ρυθμό αύξησης του μήκους και της βιομάζας καθώς και την παραγωγή

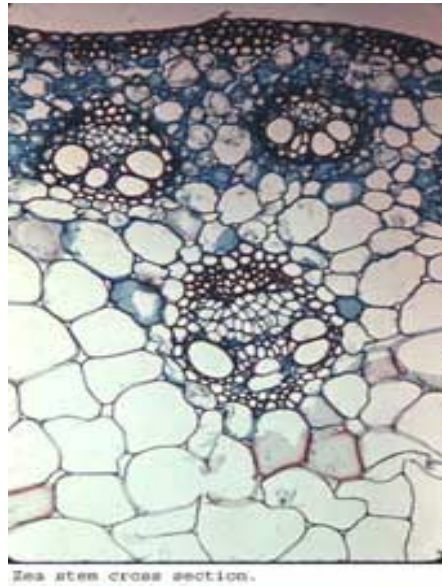
της χλωροφύλλης [1],[28],[9],[55]. Σε περιοχές επιβεβαρυμένες σε ποσότητες μολύβδου αλλά και άλλων βαρέων μετάλλων η βιοποικιλότητα των φυτικών ειδών είναι μειωμένη, τα εδάφη άγονα και υπάρχουν ελάχιστα έως καθόλου δέντρα [54].

Κεφάλαιο 2

Φυσιολογία των Φυτών

2.1 Οι Αγωγοί των Φυτών

Το ξύλο είναι ο κύριος ιστός για την μεταφορά του νερού που συναντάται στα τρχειόφυτα. Σχετίζεται ακόμη με την μεταφορά των ανόργανων συστατικών (τραχειοειδή κύτταρα), την αποθήκευση των θρεπτικών (παρέγχυμα) και την στήριξη του φυτού (μηχανικά κύτταρα). Ο ηθμός αποτελεί τον κύριο ιστό για την μεταφορά των θρεπτικών. Μέσω του ηθμού (ρεύμα αφομοίωσης) τα οργανικά μόρια που παρασκευάζονται με την φωτοσύνθεση στα φύλλα διανέμονται σε διάφορα τμήματα του φυτού όπου χρησιμοποιούνται για την ανάπτυξη τους όπως στο βλαστό και στις άκρες της ρίζας ή σε θέσεις όπου αποθηκεύονται όπως στον καρπό και στο παρέγχυμα του βλαστού ή της ρίζας. Το ρεύμα αφομοίωσης κινείται με φόρα από τις «πηγές» προς τους «αποδέκτες». Οι κύριες «πηγές» είναι τα φύλλα όπου λαμβάνει χώρα η φωτοσύνθεση όμως είναι δυνατό να λειτουργήσουν ως «πηγές» και κάποιοι ιστοί αποθήκευσης. Όλα τα μέρη του φυτού που δεν μπορούν να ικανοποιήσουν τις θρεπτικές απαιτήσεις τους δρουν ως «αποδέκτες». Μαζί με τον ηθμό το ξύλο διαμορφώνει ένα συνεχές σύστημα αγγειακού ιστού το οποίο εκτείνεται σε όλο το σώμα του φυτού[43].



Σχήμα 2-1. Κάθετη τομή του βλαστού του αραβόσιτου
Πηγή: Photographic Atlas of Plant Anatomy

2.2 Μεταφορά του Νερού

Οι μηχανισμοί της μεταφοράς του νερού από το έδαφος σε όλο το σώμα του φυτού και τελικά στην ατμόσφαιρα κατατάσσονται σε ενεργητικούς και παθητικούς, ανάλογα με την δαπάνη ή όχι ενέργειας μεταβολισμού. Πολλές φορές είναι δύσκολος ο διαχωρισμός της ενεργούς από την παθητική μεταφορά, όμως είναι αποδεδειγμένο ότι η μεταφορά του νερού στα διάφορα τμήματα του φυτού είναι παθητική. Δεν υπάρχει καμία ένδειξη ότι κατά την μεταφορά του νερού απαιτείται ενέργεια μεταβολισμού. Η παθητική μεταφορά σχεδόν όλων των ουσιών οφείλεται σε έναν από τους δύο εμπλεκόμενους μηχανισμούς, στην ροή μάζας (bulk flow ή mass flow) και στην διάχυση (diffusion). Στην περίπτωση του νερού, πρέπει να συμπεριληφθεί και μια ειδική περίπτωση διάχυσης, η όσμωση.

2.2.1 Διαπνοή

Διαπνοή ονομάζεται η διεργασία κατά την οποία το φυτό απορροφά μεγάλες ποσότητες ύδατος από το έδαφος, το μεταφέρει σε όλο τον όγκο του και τελικά το ελευθερώνει στην ατμόσφαιρα με τη μορφή υδρατμών κυρίως στα φύλλα.

Περισσότερο από το 90% του νερού που προσλαμβάνεται από τις ρίζες ενός φυτού ελευθερώνεται στην ατμόσφαιρα. Η διαπνοή είναι ιδιαίτερα σημαντική για τα φυτά, αφού με την ύγρανση της επιφάνειας των κυττάρων στα φύλλα επιτυγχάνεται η είσοδος του διοξειδίου του άνθρακα που είναι στοιχείο απαραίτητο για τη φωτοσύνθεση [43].

2.2.2 Ροή Μάζας

Η μεταφορά συστατικών με την ροή της μάζας βασίζεται στην πίεση. Συμβαίνει δηλαδή όταν ασκείται μια εξωτερική δύναμη όπως η βαρύτητα ή μια πίεση. Η κίνηση του νερού με αυτόν τον τρόπο είναι καθημερινή πραγματικότητα όπως το νερό σε ένα ποτάμι που ρέει εξαιτίας της υδροστατικής πίεσης που οφείλεται στην βαρύτητα. Όμοια συμβαίνει και στα φυτά, στα κύτταρα μεταφοράς του ιστού του ξύλου ή στην κίνηση του νερού μέσα στην ρίζα.

2.2.3 Διάχυση

Διάχυση είναι η κατευθυνόμενη κίνηση από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης σε μια περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης, που όμως πραγματοποιείται εξαιτίας της τυχαίας θερμικής κίνησης των μορίων. Επίσης, ενώ στην ροή μάζας η δρώσα δύναμη είναι η διαφορά πίεσης, στην περίπτωση της διάχυσης δρώσα δύναμη είναι η διαφορά συγκέντρωσης. Είναι ένας πολύ σημαντικός παράγοντας στην πρόσληψη και διανομή του νερού, των αερίων και των διαλυμένων ουσιών για κάθε φυτό. Η διάχυση έχει μεγάλη συμβολή στην παροχή διοξειδίου του άνθρακα για την φωτοσύνθεση, καθώς και στην αποβολή νερού (υδρατμών) από τα φύλλα του φυτού.

2.3 Μεταφορά των Θρεπτικών Στοιχείων μέσω Μεμβρανών

Το ζήτημα της μεταφοράς των θρεπτικών μέσα από τις μεμβράνες των κυττάρων έχει απασχολήσει τους επιστήμονες για πολλά χρόνια. Οι τρεις κύριες θεωρίες είναι : η απλή διάχυση, η διευκολυνόμενη διάχυση και η ενεργή μεταφορά. Οι θεωρίες αυτές αποδεικνύονται εξαιρετικά χρήσιμες στην κατηγοριοποίηση και ερμηνεία των εργαστηριακών παρατηρήσεων.

Η απλή διάχυση είναι ουσιαστικά ο μηχανισμός που αναφέρεται στην προσανατολισμένη μεταφορά ποσότητας ουσίας από μια περιοχή υψηλής

συγκέντρωσης σε περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης. Επειδή η εξωτερική μεμβράνη είναι λιπιδικής φύσεως, τα μη πολικά μόρια έχουν την τάση να την διαπερνούν αρκετά γρήγορα. Έτσι ο συντελεστής διαπερατότητας αντικατοπτρίζει την λιποδιαλυτότητα των διαχεόμενων μορίων. Λίγες ενώσεις δεν παρουσιάζουν πολικότητα και είναι απαραίτητες από βιολογικής πλευράς, όπως το O_2 , το CO_2 και η NH_3 . Το νερό επίσης παρά την υψηλή του πολικότητα διαχέεται μέσω των λιπιδικών μεμβρανών, εξαιτίας της ουδετερότητας του μορίου του και του πολύ μικρού του μοριακού βάρους.

Η διευκολυνόμενη διάχυση οφείλεται στην παρουσία ενός μεγάλου αριθμού πρωτεϊνών μεταφοράς που υπάρχουν στην λιπιδική μεμβράνη των κυττάρων. Οι πρωτεΐνες αυτές διευκολύνουν την διάχυση των ιόντων ή των φορτισμένων μορίων μέσα από τις μεμβράνες. Η κατεύθυνση της μεταφοράς καθορίζεται από την διαφορά της συγκέντρωσης (για αφόρτιστη διαλυμένη ουσία) ή από το ηλεκτροχημικό δυναμικό (για ιόντα). Η μεταφορά με διάχυση είτε απλή είτε διευκολυνόμενη είναι παθητική διεργασία, δηλαδή δεν απαιτείται άμεση εισροή ενέργειας μεταβολισμού. Συνεπώς ο μηχανισμός αυτός δεν οδηγεί σε συσσώρευση της διαλυμένης ουσίας.

Η ενεργή μεταφορά όμως οδηγεί σε συσσώρευση της ουσίας μέσα στο κύτταρο, κινούμενη αντίθετα με την βαθμίδα της συγκέντρωσης ή του ηλεκτροχημικού δυναμικού. Η ενέργεια για αυτήν την διεργασία προέρχεται από την υδρόλυση του ATP. Η φύση του μηχανισμού αυτού είναι τέτοια που συχνά αναφέρεται και σαν «αντλία», εξαιτίας της δυνατότητας μεταφοράς ουσιών αντίθετα με την φυσική φορά.

2.4 Μηχανισμοί Μεταφοράς Μετάλλων από το Εδαφικό Διάλυμα έως τους Ιστούς του Φυτού

Είναι κοινό χαρακτηριστικό όλων των μορφών ζωής ότι κάποια από τα στοιχεία που υπάρχουν στη φύση συσσωρεύονται και άλλα απορρίπτονται. Οι ρυθμοί συσσώρευσης ελέγχονται από φυσιολογικές απαιτήσεις και όχι από την τοξικότητα. Πολλά ιχνοστοιχεία θέτουν συγκεκριμένο δίλημμα στους οργανισμούς. Από τη μία πλευρά τα ιόντα τους είναι απαραίτητα σε ένα τεράστιο αριθμό από μεταβολικές διεργασίες και από την άλλη είναι πιθανό να καταστούν επικίνδυνα. Απαιτείται συντονισμένη λειτουργία των διεργασιών της πρόσληψης, της ουδετεροποίησης, της μεταφοράς και της αποθήκευσης για να διατηρηθούν οι απαιτούμενες συγκεντρώσεις των μετάλλων στους διάφορους ιστούς και τμήματα του φυτού. Κάποιες φορές λόγω

της ατέλειας των διαδικασιών ελέγχου της συσσώρευσης των μετάλλων, πολλοί οργανισμοί απαιτείται να αντιμετωπίσουν επιτυχώς την έκθεση σε ανεπιθύμητα στοιχεία.

2.4.1 Καθοριστικοί Παράγοντες για την Μεταφορά και Συσσώρευση των Μετάλλων [47]

Γενικά η συσσώρευση ενός μετάλλου είναι συνάρτηση της ικανότητας πρόσληψης και των θέσεων ενδοκυτταρικής δέσμευσης. Σε ένα πολυκύτταρο οργανισμό η κατάσταση περιπλέκεται ακόμη περισσότερο λόγω των ιδιαίτερων διαφορών ανάμεσα σε κύτταρα αλλά και σε ιστούς καθώς επίσης και λόγω της μεσοκυτταρικής μεταφοράς. Οι διεργασίες που θεωρείται ότι επηρεάζουν τους ρυθμούς συσσώρευσης των μετάλλων στα φυτά είναι οι εξής : η κινητοποίηση και η πρόσληψη από το εδαφικό διάλυμα, ο διαχωρισμός σε τμήματα και η απομόνωση μέσα στη ρίζα, η ικανότητα πλήρωσης του ξύλου και η μεταφορά, η διανομή ανάμεσα στους αποδέκτες του μετάλλου στα υπέργεια τμήματα, η απομόνωση και η αποθήκευση στα κύτταρα των φύλλων. Σε κάθε στάδιο η συγκέντρωση και η έλξη των ιονισμένων μορίων καθώς και η παρουσία και επιλεκτικότητα των δραστηριοτήτων μεταφοράς, επηρεάζουν τους ρυθμούς συσσώρευσης των μετάλλων.

Κινητοποίηση

Πολλά μέταλλα παρουσιάζουν περιορισμένη βιοδιαθεσιμότητα για πρόσληψη από τις ρίζες εξαιτίας της χαμηλής διαλυτότητάς τους στο οξυγονωμένο νερό και της δημιουργίας ισχυρών δεσμών με εδαφικά σωματίδια. Ειδικότερα για τον μόλυβδο, η χαμηλή κινητικότητα του στο έδαφος οφείλεται κυρίως στην καθίζηση με τη μορφή αδιάλυτων αλάτων όπως φωσφορικά, ανθρακικά και υδροξείδια του Pb.

Για την λύση του προβλήματος της βιοδιαθεσιμότητας του μολύβδου χρησιμοποιούνται χηλικές ενώσεις όπως το αιθυλενοδιαμινοτετραοξικό οξύ (EDTA), οι οποίες με την εφαρμογή τους στο εδαφικό διάλυμα αυξάνουν την διαθεσιμότητα του μετάλλου για πρόσληψη. Οι ενώσεις αυτές αποτρέπουν την καθίζηση του μετάλλου και το διατηρούν ως διαλυτό σύμπλοκο Pb διαθέσιμο για πρόσληψη από τις ρίζες του φυτού. Τα σημεία που χρειάζονται ιδιαίτερη προσοχή στην εφαρμογή των χηλικών ενώσεων είναι η πιθανότητα διαφυγής στα υπόγεια ύδατα και η επιβάρυνση του φυτού από την τοξική δράση του Pb λόγω αυξημένης πρόσληψης.

Πρόσληψη

Μετά την κινητοποίηση το μέταλλο προσλαμβάνεται από τα κύτταρα της ρίζας. Αρχικά δεσμεύεται από τα κυτταρικά τοιχώματα με ιον ανταλλαγή και έπειτα με την μεσολάβηση των συστημάτων μεταφοράς και των υψηλής συγγένειας ενδοκυτταρικών θέσεων δέσμευσης οδηγούνται στην άλλη πλευρά της μεμβράνης του κυτταρικού πρωτοπλάσματος.

Μεταφορά στο Ξύλο

Το συνεχές και ομογενές ρεύμα του αποπλάστη της επιδερμίδας και του φλοιού της ρίζας είναι διαπερατό για τη διαλυμένη ύλη. Τα κυτταρικά τοιχώματα του ενδοδερμικού κυτταρικού στρώματος δρουν σαν φράγμα για την αποπλαστική διάχυση στο αγγειακό σύστημα. Γενικά το διάλυμα πρέπει να απορροφηθεί από τον συμπλάστη της ρίζας πριν μπορέσει να εισέλθει στο ξύλο. Μετά την πρόσληψη του μετάλλου από τον συμπλάστη της ρίζας τρεις είναι οι διαδικασίες που ελέγχουν την κίνηση του μετάλλου από την ρίζα προς το ξύλο : η απομόνωση του μετάλλου μέσα στα κύτταρα της ρίζας, η μεταφορά μέσω του συμπλάστη στην στήλη του αγγείου, και η αποδέσμευση μέσα στο ξύλο. Η μεταφορά των ιόντων μέσα στο ξύλο είναι γενικά μία αυστηρά ελεγχόμενη διαδικασία στην οποία διαμεσολαβούν πρωτεΐνες μεταφοράς. Μέσα στο ξύλο επικρατεί μία εξαρτημένη από το pH ισορροπία ανάμεσα στα χαμηλού μοριακού βάρους ιόντα, στα ελεύθερα ένυδρα κατιόντα των μετάλλων και στα μεταλλικά ιόντα στο κινούμενο ρεύμα διαπνοής και στις σταθερές θέσεις δέσμευσης των μετάλλων στο κυτταρικό τοίχωμα του ξύλου. Η διαδικασία εκφόρτωσης στο ξύλο αποτελεί το πρώτο βήμα της ελεγχόμενης διανομής του μετάλλου και της αποτοξίνωσης στο βλαστό, καθώς επίσης και της πιθανής αναδιανομής του μετάλλου μέσω του ηθμού.

Εναπόθεση, Κυκλοφορία και Αποθήκευση

Το μέταλλο φτάνει στον αποπλάστη του φύλλου μέσω του χυμού του ξύλου απ' όπου προσλαμβάνεται από τα κύτταρα του πρώτου. Οι μεταφορείς μεσολαβούν για την πρόσληψη από τον συμπλάστη και η διανομή μέσα στο φύλλο συμβαίνει μέσω του αποπλάστη ή του συμπλάστη. Η κυκλοφορία του μετάλλου συμβαίνει μέσα σε όλα τα κύτταρα του φυτού, διατηρώντας τις συγκεντρώσεις μέσα σε ορισμένα φυσιολογικά όρια σε κάθε κυτταρικό όργανο και εξασφαλίζοντας τη διανομή του μετάλλου στις πρωτεΐνες που το χρειάζονται. Τα ιδιαίτερα απαραίτητα για το φυτό

μέταλλα αλλά και τα μη – απαραίτητα απομονώνονται στα κενοτόπια του φύλλου. Στο φύλλο, διαφορετικού τύπου κύτταρα συμβάλλουν στην συσσώρευση του μετάλλου.

Κεφάλαιο 3

Ανάλυση Ανάπτυξης Μηχανιστικού Μοντέλου

3.1 Προσέγγιση του Μοντέλου

Τα υπάρχοντα μοντέλα προσομοίωσης, τα οποία αφορούν κυρίως στην πρόσληψη των μετάλλων και όχι τη μεταφορά τους, κατατάσσονται σε εμπειρικά και μηχανιστικά. Στην πρώτη κατηγορία ανήκουν τα μοντέλα με τα οποία επιχειρείται η περιγραφή των φαινομένων που παρατηρούνται αλλά όχι και η ερμηνεία αυτών. Αντίθετα με την ανάπτυξη των μηχανιστικών μοντέλων, γίνεται προσπάθεια τόσο για την περιγραφή όσο και για την κατανόηση και ερμηνεία των φαινομένων αυτών.

Το μοντέλο που παρουσιάζεται σε αυτή την εργασία κατατάσσεται στην κατηγορία των μηχανιστικών μοντέλων και έχει σαν στόχο εκτός από την εξαγωγή αποτελεσμάτων σχετικών με την ικανότητα φυτοεξυγίανσης εδαφών από μόλυβδο και τη μελέτη και απόκτηση μεγαλύτερης γνώσης όσον αφορά τους μηχανισμούς που ελέγχουν την πρόσληψη του μετάλλου από το έδαφος καθώς και τη μεταφορά του από τη ρίζα στο βλαστό. Ακόμη βασικό στόχο του μοντέλου αποτελεί η μελέτη του τρόπου αλληλεπίδρασης των διαφόρων μηχανισμών για τον έλεγχο της συσσώρευσης του μετάλλου.

Χρησιμοποιείται μία μηχανιστική προσέγγιση μοντελοποίησης δυναμικού συστήματος για την περιγραφή του συστήματος του φυτού με έναν απλό τρόπο που

όμως περιλαμβάνει όλες τις κύριες διεργασίες που ευθύνονται για τη συνολική συμπεριφορά του. Το φυτό που επιλέχθηκε είναι ο αραβόσιτος (*Zea mays*), καθώς εξαιτίας της φυσιολογίας του επιτρέπεται μεγάλη συσσώρευση βιομάζας και ικανοποιητική μεταφορά. Με την δυναμική προσέγγιση που ακολουθείται επιτυγχάνεται συγκεκριμένη δομή και περιορισμοί του μοντέλου που οδηγούν σε ασφαλή αποτελέσματα σχετικά με τις διεργασίες που επηρεάζουν περισσότερο την συμπεριφορά του συστήματος.

Βασικό πλεονέκτημα της μεθόδου της δυναμικής προσέγγισης αποτελεί το γεγονός ότι κάθε στοιχείο και σχέση του μοντέλου έχουν ένα αναγνωρισμένο ομοιότυπο στην πραγματικότητα και έτσι οδηγούμαστε ευκολότερα στην κατανόηση του συστήματος. Επίσης μέσω αυτής της προσέγγισης είναι δυνατό να περιγραφούν οι δυναμικές τάσεις του συστήματος όπως η διαπνοή και η ανάπτυξη του φυτού. Σημαντικό στόχο αποτελεί η δομή του μοντέλου με την όσο το δυνατόν ακριβέστερη περιγραφή των μηχανισμών, παρά ο υπολογισμός των παραμέτρων, οι τιμές των οποίων πολλές φορές δεν είναι επαρκώς αποδεδειγμένες ή δεν εμφανίζονται στην βιβλιογραφία.

3.2 Δυνατότητα Πρόβλεψης και Σχεδιασμού Συστήματος Αποκατάστασης Εδαφών

Το μοντέλο, εκτός από εκπαιδευτικό εργαλείο για την μελέτη και κατανόηση των μηχανισμών που εμπλέκονται στην πρόσληψη, μεταφορά και συσσώρευση του μολύβδου στον αραβόσιτο, αποτελεί και χρήσιμο εργαλείο για την πρόβλεψη βασικών παραμέτρων κατά τον σχεδιασμό ενός συστήματος αποκατάστασης εδαφών.

Με τη χρήση του μοντέλου μπορεί να υπολογισθεί η βέλτιστη χρονική στιγμή για την συγκομιδή του αραβόσιτου. Μέσα από τα αποτελέσματα του μοντέλου μπορεί να εντοπισθεί χρονικά το σημείο όπου η απόδοση του συστήματος ελαττώνεται τόσο ώστε να αποτελεί το σημείο αυτό το βέλτιστο για συγκομιδή. Αυτό σημαίνει ότι μέχρι το σημείο αυτό θα έχει συσσωρευτεί στο φυτό ποσότητα μετάλλου πολύ ικανοποιητική σε σχέση με την συσσωρευτική ικανότητα του φυτού και δεν είναι συμφέρουσα η περαιτέρω αναμονή για την συγκομιδή αφού θα παρατηρούνταν πολύ μικρή αύξηση του συσσωρευμένου μολύβδου.

Γνωρίζοντας κάποιες βασικές παραμέτρους για το πεδίο εφαρμογής της μεθόδου, όπως τη συγκέντρωση του μολύβδου στο έδαφος μπορούμε με τη χρήση του μοντέλου να υπολογίσουμε τον αριθμό των φυτών που απαιτούνται για μείωση

αυτής της συγκέντρωσης στο βαθμό που επιθυμούμε, καθώς και το χρόνο που χρειάζεται για να επιτευχθεί η μείωση αυτή.

Ακόμη οι πληροφορίες που μας παρέχει το μοντέλο μπορούν να βοηθήσουν στην λήψη αποφάσεων σχετικά με την επιλογή του χρόνου προσθήκης των χηλικών ενώσεων στο εδαφικό διάλυμα. Η εφαρμογή των χηλικών ενώσεων έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση της συγκέντρωσης του μολύβδου στο εδαφικό διάλυμα. Αυτή η αύξηση προκαλεί με τη σειρά της και αύξηση της πρόσληψης του μολύβδου η οποία όμως οδηγεί σύντομα στο θάνατο του φυτού. Με τη χρήση του μοντέλου μπορεί να βρεθεί η βέλτιστη χρονική στιγμή για την εφαρμογή των χηλικών ενώσεων.

3.3 Προσαρμογή του Μοντέλου σε Διαφορετικά Συστήματα Φυτού - Μετάλλου

Λόγω της ικανότητας του μοντέλου να προσαρμόζεται σε προβλήματα παρόμοιας φύσης μπορεί να αποτελέσει την βάση για την μελέτη άλλων συστημάτων φυτού-μετάλλου. Έτσι για τους σκοπούς της φυτοεξυγίανσης θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την λήψη αποτελεσμάτων με χρήση άλλου φυτού. Για να γίνει βέβαια κάτι τέτοιο θα πρέπει να προσαρμοστούν ανάλογα με το φυτό που επιλέγεται παράμετροι που σχετίζονται με την αλληλεπίδραση μετάλλου-φυτού, οι συναρτήσεις που αφορούν την ανάπτυξη και την διαπνοή του φυτού καθώς και ο ρυθμός ανακυκλοφορίας του διαλύματος μέσω των ηθμών. Γενικότερα η φυσιολογία του φυτού θα καθορίσει τις αλλαγές που είναι απαραίτητο να γίνουν.

Κατά ανάλογο τρόπο και με τις κατάλληλες τροποποιήσεις σε διάφορες παραμέτρους, το μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσέγγιση της πρόσληψης και της μεταφοράς άλλων μετάλλων. Στο σύνολο των παραμέτρων που πρέπει να αλλάξουν σε αυτή την περίπτωση ανήκουν και η διαλυτότητα του μετάλλου στους ιστούς του φυτού, ο ρυθμός διάχυσης από ένα τμήμα σε κάποιο άλλο, ο ρυθμός ιονανταλλαγής στα τοιχώματα του ξύλου, ο ρυθμός πρόσληψης από τη ρίζα και η τοξικότητά του στον ιστό και την επιφάνεια της ρίζας.

Κεφάλαιο 4

Μοντελοποίηση

4.1 Ανάπτυξη του Μοντέλου

Για την σωστή ανάπτυξη του μοντέλου είναι απαραίτητο να εκφραστούν οι πιο σημαντικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα τόσο κατά την πρόσληψη όσο και κατά την μεταφορά του μολύβδου σε όλο το φυτό.

Τα όρια του όγκου ελέγχου για το σύστημα που εξετάζουμε καθορίζονται από την εξωτερική επιφάνεια του φυτού. Το εδαφικό διάλυμα βρίσκεται εκτός των ορίων του συστήματος, αφού δεν εξετάζεται ούτε η ποιότητα του εδάφους, ούτε οι συνθήκες της υπόγειας ροής. Η ρίζα είναι η μοναδική πηγή εισόδου μολύβδου στο φυτό και θεωρείται ότι δεν υπάρχουν εισροές ή εκροές αυτού στην ατμόσφαιρα από άλλα μέρη του φυτού.

Πέντε είναι τα βασικά μέρη του μολύβδου στο σύστημα : ο Pb που είναι διαθέσιμος για πρόσληψη, που είναι αυτός που βρίσκεται στο εδαφικό διάλυμα [4],[6],[22], και ο Pb στη ρίζα, στο βλαστό, στα φύλλα και στον καρπό [2],[33]. Φαίνεται ότι τα σύμπλοκα του αδιάλυτου μολύβδου παρουσιάζονται τόσο στην επιφάνεια της ρίζας όσο και σε όλο το φυτό [33],[49],[26],[29],[5]. Έτσι ο Pb στην ρίζα, στο βλαστό στο φύλλωμα και στον καρπό, εμφανίζεται τόσο στην διαλυτή όσο και στην κατακρατήσιμη μορφή. Για το λόγο αυτό θεωρείται απαραίτητη η διάκριση

του μολύβδου σε αυτόν που βρίσκεται στην υγρή φάση (διαλυτή μορφή) και σε αυτόν που βρίσκεται στην στερεή φάση (κατακρατημένος Pb).

Ο μολύβδος σε ολόκληρο το φυτό επηρεάζεται από τις ροές που ακολουθούν, με τις σχετικές υποθέσεις που πηγάζουν από τη βιβλιογραφία :

1. *Πρόσληψη Pb από το εδαφικό διάλυμα* : το πιο σημαντικό συστατικό εδώ είναι ο μολύβδος που προσλαμβάνεται στον συμπλάστη της ρίζας [18],[19].
2. *Μεταφορά του Pb στο ξύλο* : ο μολύβδος μπορεί να μεταφερθεί στο ξύλο μέσω του ρεύματος μεταφοράς από τη ρίζα στους βλαστούς [34],[45],[42],[46],[19].
3. *Μεταφορά του Pb στον ηθμό* : δεν έχει καθοριστεί πόσο μέταλλο μεταφέρεται στους ηθμούς, κατά πάσα πιθανότητα ελάχιστο [34].
4. *Κατακράτηση του Pb στο φυτό* [33],[49],[26],[29],[5].
5. *Ανάπτυξη του φυτού* : η αύξηση της μάζας του φυτού φαίνεται να ακολουθεί μια συνάρτηση S-μορφής [15],[12], και επηρεάζεται αρνητικά από την πρόσληψη του Pb [21],[17],[38],[18].
6. *Διαπνοή του φυτού* : επηρεάζει την κίνηση του Pb στην επιφάνεια της ρίζας μέσω της ροής μάζας [36],[14], και ελέγχει την ροή του χυμού στο ξύλο [37],[53],[27].

Ο μολύβδος ο διαλελυμένος στο υδατικό διάλυμα του εδάφους και πάνω στην επιφάνεια της ρίζας προσροφάται στον ιστό της με ένα μέγιστο ρυθμό πρόσληψης (V_{max}) και μια σταθερά ημικορεσμού (k_m). Το μέταλλο στη συνέχεια μπορεί να κατακρατηθεί σε κάποιο από τα μέρη του φυτού, να ρεύσει προς το ξύλο όπου είναι το κύριο ρεύμα διαπνοής του φυτού ή προς τους ηθμούς στους οποίους ρυθμίζονται οι συγκεντρώσεις των θρεπτικών συστατικών που εισέρχονται στο φυτό. Όταν βρεθεί στο ξύλο μπορεί να προσροφηθεί στα σημεία ιονανταλλαγής που βρίσκονται στα τοιχώματα της σωληνοειδούς διατομής του ξύλου [34],[36],[25],[42],[46] καθώς ρέει προς τα άλλα μέρη του φυτού όπως ο βλαστός, το φύλλο και ο καρπός του αραβόσιτου.

Ο ρυθμός διαπνοής μεταβάλλεται καθημερινά κατά τη διάρκεια της καλλιεργητικής περιόδου, παράλληλα με τον ρυθμό ανάπτυξης του φυτού, με ένα συντελεστή διαπνοής από βιβλιογραφικά δεδομένα [36],[10], και με τις λεπτομερείς μεθόδους που περιγράφονται από τον Breenan (1997). Το ρεύμα διαπνοής (Q_{trans}) μετά την διέλευσή του από τη ρίζα διαχωρίζεται αρχικά σε δύο τμήματα: στο τμήμα του βλαστού και στο τμήμα φυλλώματος. Ο βλαστός είναι ο κύριος αγωγός

μεταφοράς από την ρίζα προς τον καρπό και τα φύλλα. Επειδή ο ρυθμός διαπνοής είναι υψηλότερος στα φύλλα, στον βλαστό και στον καρπό αντίστοιχα [34],[27], το μεγαλύτερο μέρος της ροής του ξύλου οδηγείται κατά αντιστοιχία στο φύλλο, στον ιστό του βλαστού και στον καρπό, αφού εισέλθει στον βλαστό. Έτσι στο φύλλο οδηγείται το μεγαλύτερο μέρος με ποσοστό 60%, ενώ στον βλαστό το υπόλοιπο 40%. Μετά την 40^η ημέρα καλλιέργειας όταν και αρχίζει να αναπτύσσεται ο καρπός, το ποσοστό στο φύλλο γίνεται 45%, στον βλαστό 35% και στον καρπό το 20% του Q_{trans} . Στα επιμέρους τμήματα για κάθε βασικό μέρος του φυτού, δηλαδή στον ιστό, στους ηθμούς και στο ξύλο, η ροή διαχωρίζεται ανάλογα με το ποσοστό της μάζας ή του όγκου του τμήματος αυτού. Η παραδοχή αυτή είναι εμφανής στις μαθηματικές εξισώσεις του μοντέλου, όπου και χρησιμοποιούνται συντελεστές (α , β , γ , δ , ϵ , ζ , κ , λ , μ , ν) μπροστά από τους όρους που παρουσιάζουν την παροχή διαπνοής.

Η κίνηση του Pb στον ηθμό περιγράφεται από τη ροή της μάζας με κατεύθυνση από την πηγή προς τον αποδέκτη σε συμφωνία με την υπόθεση Munch. Σαν πηγή θεωρούνται τα φύλλα και σαν αποδέκτες η ρίζα και ο καρπός. Η ροή στον ηθμό (Q_{phi}) οδηγείται από τα φύλλα προς την ρίζα έως την στιγμή εκείνη που ο καρπός αρχίζει να αναπτύσσεται περίπου την 40^η ημέρα, μετά την οποία η ροή του ηθμού προς καρπό αυξάνεται ώσπου τελικά το μεγαλύτερο μέρος της καταλήγει στον καρπό, περίπου 30 ημέρες μετά. Η διάκριση της συνολικής ροής του ηθμού σε αυτά τα δύο ρεύματα γίνεται με τον συντελεστή $F_{s_{PbQ,ear}}$ ο οποίος εκφράζει το τμήμα της ροής που οδηγείται στον καρπό και όχι στον βλαστό.

Η αντίδραση της κατακράτησης (precipitation) υποτίθεται ότι ελέγχεται από την αντίδραση ισορροπίας της διάλυσης του Pb, την συγκέντρωση του Pb στο διάλυμα και την ταχύτητα με την οποία η αντίδραση φτάνει σε ισορροπία (ρυθμός κατακράτησης). Επίσης υποτίθεται ότι η κύρια μορφή κατακράτησης είναι ο φωσφορούχος μόλυβδος [52],[26], και για το λόγο αυτό η αντίδραση διάλυσης του Pb εξαρτάται από τη συγκέντρωση της φωσφορώδους ρίζας και το pH. Θεωρείται ότι υπάρχουν διαφορές στο pH και στους ρυθμούς κατακράτησης στον ιστό, στο ξύλο, στους ηθμούς και στην επιφάνεια της ρίζας όπως περιγράφεται από τον Brennan (1997). Είναι δυνατό να συμβαίνει και επαναδιάλυση του μετάλλου από τις θέσεις δέσμευσης προς το μεταφερόμενο διάλυμα, σε οποιοδήποτε τμήμα του φυτού, όταν το τελευταίο είναι ακόρεστο σε μέταλλο. Ο μηχανισμός της κατακράτησης του Pb περιγράφεται στο μοντέλο με 13 κανονικές διαφορικές εξισώσεις, μία για κάθε τμήμα του φυτού.

4.2 Υποθέσεις του Μοντέλου

1. Τα διαλύματα είναι καλά αναμεμειγμένα σε όλα τα τμήματα του φυτού [3].
2. Η περίοδος ανάπτυξης του αραβόσιπου είναι 125 μέρες, με αφετηρία την πρωτοεμφάνιση του βλαστού στο έδαφος [44].
3. Η ποσότητα του νερού στο βλαστό και τη ρίζα μειώνονται κατά τη διάρκεια της καλλιεργητικής περιόδου [13],[27].
4. Η ανάπτυξη του φυτού παρεμποδίζεται από τη συνεχή συσσώρευση Pb στη ρίζα. Η παρεμπόδιση ολοκληρώνεται στα 5000 mg Pb ανά kg ξηρής μάζας [18].
5. Ένα γραμμάριο φυτικής μάζας έχει όγκο 1 ml [31].
6. Η μάζα του βλαστού είναι 0.374 kg στην ωριμότητά του [16].
7. Η αύξηση της ξηρής μάζας του φυτού ακολουθεί σιγμοειδή καμπύλη [12].
8. Οι όγκοι του ξύλου, των ηθμών και του ιστού υπολογίστηκαν από φωτογραφίες και σχήματα της βιβλιογραφίας [8],[45],[41],[34].
9. Η μεταφορά στον ηθμό, από τον ιστό στον ηθμό και αντίστροφα γίνεται μέσω της ροής μάζας σε όλα τα τμήματα του φυτού [34],[40],[45].
10. Η ροή στο ξύλο, από τον ιστό της ρίζας στο ξύλο και το αντίστροφο γίνεται μέσω της μεταφοράς μάζας σε όλα τα τμήματα του φυτού [34].
11. Η καθημερινή διαπνοή περιλαμβάνει αυτήν που απαιτείται στην παραγωγή φυτικής μάζας και αυτήν που απαιτείται για τη διατήρηση της υπάρχουσας [3].
12. Ο Pb^{+2} είναι η μορφή που είναι πιο σημαντική στην περιγραφή της πρόσληψης Pb [30],[35],[56],[26].
13. Η κίνηση του Pb από το εδαφικό διάλυμα προς την επιφάνεια της ρίζας γίνεται με μεταφορά μάζας και διάχυση [14].
14. Η μεταφορά του Pb στη ρίζα περιγράφεται από το προϊόν της διαπνοής και της συγκέντρωσης του διαλύματος [14].
15. Η διάχυση και η επιλεκτική δέσμευση του Pb^{+2} στη ρίζα, περιγράφεται από έναν συντελεστή συμμετοχής και έναν ρυθμό [34].
16. Ο Pb κατακρατείται στην επιφάνεια της ρίζας, στον ιστό, στο ξύλο και στον ηθμό σε όλο το φυτό στη μορφή του φωσφορώδους Pb [33],[52].
17. Η κατακράτηση (precipitation) του Pb ελέγχεται από τα συνολικά φωσφοριόντα και τον Pb στο διάλυμα, το pH και τον ρυθμό κατακράτησης [33].

18. Η αντίδραση της κατακράτησης (precipitation) συμβαίνει πολύ γρήγορα και φτάνει σε ισορροπία πολλές φορές καθημερινά [33].
19. Ο ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια και τον αποπλάστη της ρίζας μειώνεται καθώς ο φωσφορώδης Pb συσσωρεύεται στην επιφάνεια της ρίζας [33].
20. Το pH είναι 5.5 στο ξύλο, 8.0 στον ηθμό, 7.0 στον ιστό και 6.0 στην επιφάνεια της ρίζας και στον αποπλάστη [34].
21. Η πρόσληψη από την επιφάνεια της ρίζας στον συμπλάστη της ρίζας συμβαίνει σε συμφωνία με την κινητική κορεσμού Michaelis-Menden [39].
22. Η ροή στο ξύλο από τη ρίζα στο βλαστό είναι ίση με τον καθημερινό ρυθμό διαπνοής [27],[37].
23. Η ροή από τη ρίζα προς τον ιστό του βλαστού, τα φύλλα ή τον καρπό κατανέμεται ανάλογα με την ποσότητα της διαπνοής που παρουσιάζεται σε κάθε τμήμα. Έτσι, η ροή στα φύλλα είναι η υψηλότερη, στον καρπό η χαμηλότερη και στον βλαστό ενδιάμεση [34],[27].
24. Η ροή του Pb στο ξύλο παρεμποδίζεται από την προσρόφηση του Pb^{+2} στο κυτταρικό τοίχωμα του ξύλου. Η παρεμπόδιση αυτή είναι αρχικά υψηλή, μειώνεται καθώς τα κατιόντα του Pb^{+2} συσσωρεύονται στα κυτταρικά τοιχώματα και τελικά μηδενίζεται [36],[34],[25].
25. Η παρεμπόδιση εξαιτίας της προσρόφησης, είναι πάντα μικρότερη από 100%, επειδή κάποια ποσότητα του Pb μεταφέρεται με την μορφή ουδέτερων σύμπλοκων μορίων [11].
26. Μικρή ποσότητα του Pb μεταφέρεται ενεργά από το ξύλο στον ηθμό της ρίζας και του βλαστού [34].
27. Η ροή στον ηθμό είναι από την πηγή προς τον αποδέκτη, με την πηγή να είναι τα ώριμα φύλλα και οι αποδέκτες να είναι η ρίζα και ο καρπός. Η ρίζα είναι ο μόνος αποδέκτης έως εκείνη την στιγμή που ο καρπός αρχίζει να αναπτύσσεται. Από εκείνο το σημείο και μετά ο κύριος αποδέκτης είναι ο καρπός. Ακόμα και όταν ο ρυθμός ροής στον καρπό είναι μέγιστος, ένα μικρό μέρος της ροής θα εξακολουθήσει να κατευθύνεται προς την ρίζα. Ο βλαστός υποτίθεται ότι δεν είναι ούτε πηγή ούτε και αποδέκτης όσον αφορά την ροή στον ηθμό και απλά συνεισφέρει σαν αγωγός ροής από τα φύλλα προς τον καρπό και τη ρίζα. Ο Pb κινείται με τους φωτοσυνθέτες από την πηγή προς τους αποδέκτες [34],[25].

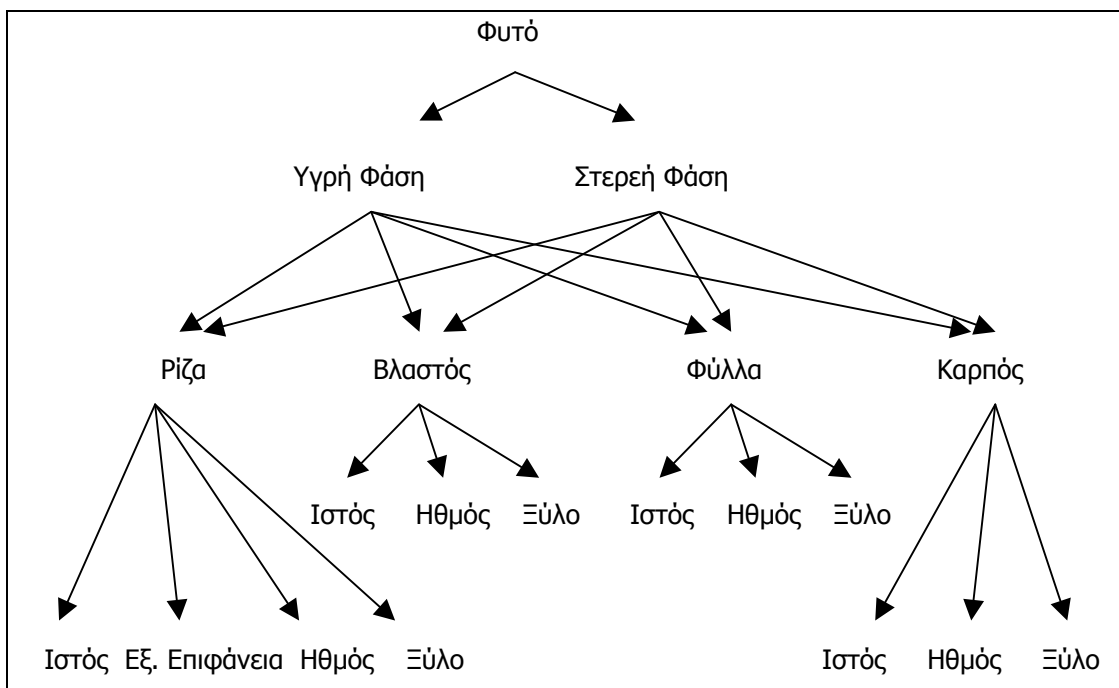
28. Ο ρυθμός ροής στον ηθμό είναι ένα τμήμα του ρυθμού ροής στο ξύλο. Το τμήμα αυτό μεγαλώνει ελαφρώς καθώς τα φύλλα ωριμάζουν [34],[25],[40].
29. Πιθανόν να υπάρχει κάποια μικρή διάχυση του Pb πίσω στο ξύλο του βλαστού από τον ιστό του βλαστού. Η ροή αυτή είναι ανάλογη με την βαθμίδα της συγκέντρωσης μεταξύ των δύο και ενός συντελεστή διάχυσης. Η διάχυση μεταξύ του ιστού και του ξύλου του φύλλου και του καρπού δεν σχετίζονται μεταξύ τους επειδή δεν υπάρχει ροή στο ξύλο έξω από αυτά τα τμήματα. Η διάχυση από τον ιστό της ρίζας στο ξύλο περιλαμβάνεται στην ροή μέσα στο ξύλο από τον βλαστό [34].
30. Ο καρπός του αραβόσιτου αρχίζει να σχηματίζεται από την 40^η μέρα και μετά [44].

Κεφάλαιο 5

Διαμερισματοποίηση του Φυτού και Αντίστοιχες Μαθηματικές Εξισώσεις

5.1 Διαμερισματοποίηση

Για τις ανάγκες διαμόρφωσης του μοντέλου το φυτό διαιρείται σε είκοσι έξι τμήματα όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα :



Σχήμα 5-1. Διαμερισματοποίηση του φυτού

Η υγρή φάση αποτελεί το 70% του συνολικού όγκου του φυτού και αναφέρεται στον μόλυβδο που είναι διαθέσιμος για μεταφορά μέσα στο φυτό. Η στερεή φάση αποτελεί το υπόλοιπο 30% του όγκου και αναφέρεται στον μόλυβδο που είναι κατακρατημένος ή απορροφημένος και δεν είναι διαθέσιμος για μεταφορά μέσα στο φυτό.

Η μάζα του φυτού σε πλήρη ωριμότητα φτάνει τα 0.5 kg. Από αυτά, τα 0.126 kg είναι η μάζα της ρίζας και τα υπόλοιπα 0.374 kg η μάζα του υπέργειου τμήματος του αραβόσιτου. Η μάζα του καρπού θεωρείται ότι φτάνει τα 0.150 kg.

Τα ποσοστά του όγκου που καταλαμβάνουν ο ιστός, ο ηθμός, το ξύλο και η εξωτερική επιφάνεια για κάθε ένα από τα τέσσερα βασικά τμήματα του φυτού φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

Πίνακας 5-1. Ποσοστά για τους Όγκους κάθε υποτμήματος του Φυτού

	Ιστός	Εξ. Επιφάνεια	Ηθμός	Ξύλο
Ρίζα	42%	8%	20%	30%
Βλαστός	50%	-	20%	30%
Φύλλα	50%	-	20%	30%
Καρπός	50%	-	20%	30%

Η μάζα του υπέργειου τμήματος του φυτού (εξαιρουμένου του καρπού) αποτελείται κατά 70% από τη μάζα του βλαστού και κατά 30% από αυτή των φύλλων. Η πυκνότητα του φυτού θεωρείται 1 kg/L.

Το χρονικό διάστημα για το οποίο επιλύονται οι διαφορικές εξισώσεις είναι από την 12^η ως την 125^η ημέρα καλλιέργειας. Θεωρούμε ότι 12 μέρες αρκούν για να αρχίσει να εμφανίζεται ο βλαστός πάνω από το έδαφος. Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων έγινε με χρήση του λογισμικού πακέτου MATLAB (έκδοση 6.1) και ο κώδικας δίνεται στο παράρτημα.

5.2 Μαθηματικές Εξισώσεις

Οι διαφορικές εξισώσεις που εκφράζουν τα ισοζυγία μάζας για τον μόλυβδο για κάθε διαμέρισμα του φυτού περιγράφονται παρακάτω.

Ρίζα

Ιστός Ρίζας (Root Tissue)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,r,tiss} \frac{dC_{l,r,tiss}}{dt} = \frac{UPT_{max} \cdot TOXF \cdot C_{l,r,surf}}{K_{hs} + C_{l,r,surf}} \cdot M_r \cdot ERM_{fr} + C_{l,r,phl} \cdot Q_{phl} (1 - Fr_{pQ,ear}) - C_{l,r,tiss} \cdot Q_{trans} - PRECIP_{r,tiss} - C_{l,r,tiss} \cdot \frac{dV_{l,r,tiss}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,r,tiss} \frac{dC_{s,r,tiss}}{dt} = PRECIP_{r,tiss} - C_{s,r,tiss} \cdot \frac{dV_{s,r,tiss}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,r,tiss}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού της ρίζας (mg/L)

$C_{s,r,tiss}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ιστού της ρίζας (mg/kg)

$V_{l,r,tiss}$: όγκος του ιστού στην υγρή φάση της ρίζας (L)

$V_{s,r,tiss}$: όγκος του ιστού στην στερεή φάση της ρίζας (L)

UPT_{max} : μέγιστος ρυθμός πρόσληψης μετάλλου στη ρίζα από την επιφάνειά της (= 184 mg/kg/d για τον Pb στον αραβόσιτο)

$TOXF$: παράγοντας τοξικότητας που επηρεάζει την ανάπτυξη του φυτού και την πρόσληψη (S-μορφής, φθίνουσα συνάρτηση της συγκέντρωσης μετάλλου στον ιστό της ρίζας (1.0 όταν $C_{r,tiss}=0$ και 0.0 όταν $C_{r,tiss}=5000$ mg/L)

K_{hs} : σταθερά ημικορεσμού για πρόσληψη μετάλλου που δύναται να γίνει κάτω από συνθήκες κορεσμού στη ρίζα, από την επιφάνειά της (= 8.3 mg/L από πειραματικά δεδομένα)

M_r : ξηρή μάζα ρίζας

ERM_{fr} : (effective root mass fraction), ενεργή μάζα ρίζας (S-μορφής, φθίνουσα συνάρτηση της ηλικίας του φυτού (1.0 όταν $t=0$ days και 0 όταν $t=125$ days))

Q_{phi} : συνολική ροή στον ηθμό προερχόμενη από το φύλλο (L/day), συνάρτηση της ροής στο ξύλο, της μάζας του φύλλου και της ωριμότητας του φύλλου

$Fr_{pQ,ear}$: τμήμα της συνολικής ροής του ηθμού, που οδηγείται στον καρπό και όχι στη ρίζα (S-μορφής, αύξουσα συνάρτηση του χρόνου (0-0.9))

Q_{trans} : συνολική ροή διαπνοής (L/d), μεταβάλλεται κατά την περίοδο της ανάπτυξης

$PRECIP_{r,tiss}$: ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στον ιστό της ρίζας (mg/d), όπου

$$PRECIP_{r,tiss} = \frac{C_{l,r,tiss} - SOL_r}{C_{l,r,tiss}} \cdot V_{l,r,tiss} \cdot C_{l,r,tiss} \cdot PR_r \quad \text{αν το διάλυμα στον ιστό της}$$

ρίζας είναι υπέρκορο και

$$PRECIP_{r,tiss} = \frac{C_{l,r,tiss} - SOL_r}{SOL_r} \cdot A_{r,precip} \cdot PR_r \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο.}$$

Αυτή είναι η κατακράτηση ή η επαναδιάλυση του μετάλλου στον συμπλάστη και τον αποπλάστη της ρίζας. Αν το διάλυμα στον ιστό είναι υπέρκορο, τότε κατακρατείται καθαρό μέταλλο ενώ αν το διάλυμα είναι ακόρεστο τότε επαναδιαλύεται καθαρό μέταλλο.

SOL_r : διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό υποθέτοντας $pH=7$ και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol (=0.02 mg/L για τον Pb)

$A_{r,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ιστό, όπου

$$\frac{dA_{r,precip}}{dt} = PRECIP_{r,tiss}$$

PR_r : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό της ρίζας (=5 d⁻¹).

Ερμηνεύοντας την εξίσωση διαπιστώνουμε ότι στον ιστό της ρίζας εισρέει ποσότητα μετάλλου τόσο από την εξωτερική επιφάνεια της ρίζας με τον μέγιστο ρυθμό

πρόσληψης όσο και από τα φύλλα μέσω του ρεύματος αφομοίωσης (ροή στον ηθμό). Η εκροές περιλαμβάνουν το ρεύμα διαπνοής προς όλα τα τμήματα του φυτού καθώς και την κατακράτηση (precipitation) στον ιστό της ρίζας. Αντίστοιχα ερμηνεύονται οι όροι και στις υπόλοιπες εξισώσεις.

Επιφάνεια Ρίζας (Root surface)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,rfs} \frac{dC_{l,r,surf}}{dt} = C_{ss} \cdot Q_{trans} + (C_{ss} - C_{l,r,surf}) \cdot DR \cdot V_{l,rfs} - \frac{UPT_{max} \cdot TOXF \cdot C_{l,r,surf}}{K_{hs} + C_{l,r,surf}} \cdot M_r \cdot ERM_{fr} - \left(C_{r,surf} - \frac{C_{r,sorbed}}{P_{r,surf}} \right) \cdot PR - PRECIP_{r,surf} - C_{l,r,surf} \cdot \frac{dV_{l,rfs}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,rfs} \frac{dC_{s,r,surf}}{dt} = \left(C_{r,surf} - \frac{C_{r,sorbed}}{P_{r,surf}} \right) \cdot PR + PRECIP_{r,surf} - C_{s,r,surf} \cdot \frac{dV_{s,rfs}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,r,surf}$: συγκέντρωση μετάλλου εν διαλύσει στην επιφάνεια της ρίζας και μέσα στον ελεύθερο χώρο του αποπλάστη του εξωτερικού φλοιού της ρίζας (mg/L)

$C_{s,r,surf}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας (mg/kg)

$V_{l,rfs}$: συνολικός όγκος διαλύματος που σχετίζεται με το οριακό στρώμα της επιφάνειας της ρίζας και τον ελεύθερο χώρο του εξωτερικού αποπλάστη (L)

$V_{s,rfs}$: συνολικός όγκος της στερεής φάσης της επιφάνειας της ρίζας (L)

C_{ss} : συγκέντρωση μετάλλου στο εδαφικό διάλυμα (mg/L)

DR : (diffusion rate-effective), ρυθμός ενεργούς διάχυσης μεταξύ του εδαφικού διαλύματος και της επιφάνειας της ρίζας ($=10 \text{ day}^{-1}$)

$C_{r,sorbed}$: συγκέντρωση μετάλλου σε προσροφημένη μορφή στην επιφάνεια της ρίζας, (mg per V_{rfs}).

Ισχύει :

$$\frac{dC_{r,sorbed}}{dt} = \left(C_{l,r,surf} - \frac{C_{r,sorbed}}{P_{r,surf}} \right) \cdot PR$$

$P_{r,surf}$: συντελεστής κατανομής της ισορροπίας προσροφ. μετάλλου – μετάλλου εν διαλύσει, (=0.0048 (αδιάστατος)),

PR : (partitioning transport rate), ρυθμός μεταφοράς μεταξύ του προσροφημένου και του διαλυμένου μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας (1.5 day^{-1})

$PRECIP_{r,surf}$: ρυθμός κατακράτησης στη μορφή του φωσφορώδους Pb, στην επιφάνεια της ρίζας (mg/d), όπου

$$PRECIP_{r,surf} = \frac{C_{l,r,surf} - SOL_{surf}}{C_{l,r,surf}} \cdot V_{l,r,tiss} \cdot C_{l,r,surf} \cdot PR_{surf} \quad \text{αν το διάλυμα είναι}$$

υπέρκορο και

$$PRECIP_{r,surf} = \frac{C_{l,r,surf} - SOL_{surf}}{SOL_{surf}} \cdot A_{surf,precip} \cdot PR_{surf} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο.}$$

SOL_{surf} : διαλυτότητα του μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας στο pH που επικρατεί (=0.15 mg/L για Pb,σε pH=6 και $PO_3^{-2} = 0.001 \text{ m}$),

$A_{surf,precip}$: ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στην επιφάνεια

$$\frac{dA_{surf,precip}}{dt} = PRECIP_{r,surf}$$

PR_{surf} : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας (=5 day^{-1}).

Ηθμός Ρίζας (Root phloem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,r,phl} \frac{dC_{l,r,phl}}{dt} = Q_{phl} \cdot (1 - Fr_{pQ,ear}) \cdot (C_{l,s,phl} - C_{l,r,phl}) + Q_{trans} \cdot XPF_r \cdot C_{l,r,xyl} - PRECIP_{r,phl} - C_{l,r,phl} \cdot \frac{dV_{l,r,phl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,r,phl} \frac{dC_{s,r,phl}}{dt} = PRECIP_{r,phl} - C_{s,r,phl} \cdot \frac{dV_{s,r,phl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,r,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού της ρίζας (mg/L)

$C_{s,r,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ηθμού της ρίζας (mg/kg)

$V_{l,r,phl}$: όγκος της υγρής φάσης του ηθμού της ρίζας (L)

$V_{s,r,phl}$: όγκος της στερεής φάσης του ηθμού της ρίζας (L)

$C_{l,s,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του βλαστού (mg/L)

XPF_r : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (=0.45, υποτίθεται πως το μέταλλο μεταφέρεται με τρόπο παρόμοιο με αυτό των θρεπτικών)

$PRECIP_{r,phl}$: ρυθμός κατακράτησης του φωσφορώδους Pb στον ηθμό (mg/d),

όπου:

$$PRECIP_{r,phl} = \frac{C_{l,r,phl} - SOL_{r,phl}}{C_{l,r,phl}} \cdot V_{l,r,phl} \cdot C_{l,r,phl} \cdot PR_{phl} \text{ αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{r,phl} = \frac{C_{l,r,phl} - SOL_{r,phl}}{SOL_{r,phl}} \cdot A_{rp,precip} \cdot PR_{phl} \text{ αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{r,phl}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό στο pH που επικρατεί (=0.01 mg/L για τον Pb σε pH=8 και $PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol}$),

$A_{rp,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ηθμό, όπου :

$$\frac{dA_{rp,precip}}{dt} = PRECIP_{r,phl}$$

PR_{phl} : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό του φυτού (=2PR_{xyt}=3 d⁻¹).

Υποτίθεται ότι : α) ο ρυθμός κατακράτησης είναι ο ίδιος σε όλο το φυτό, και

β) οι ρυθμοί κατακράτησης στον ηθμό είναι ανάλογοι με αυτούς στο υπόλοιπο φυτό, αλλά μικρότεροι εξαιτίας της ταχύτερης μεταφοράς του μετάλλου στον ηθμό σε

σύγκριση με άλλους ιστούς του φυτού. Όμως είναι υψηλότεροι απ' ότι στο ξύλο γιατί η κίνηση στον ηθμό είναι πιο αργή από ότι στο ξύλο.

PR_{xyl} : ρυθμός κατακράτησης στο ξύλο της ρίζας του φυτού ($= PR_{tiss} \cdot XPF = 1.5 \text{ d}^{-1}$),

PR_{tiss} : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό της ρίζας του φυτού ($= 5 \text{ d}^{-1}$),

XPF : παράγοντας που εκφράζει τη διαφορά στο ρυθμό κατακράτησης στο ξύλο από άλλους ιστούς του φυτού ($= 0.3$).

Ξύλο Ρίζας (Root xylem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,r,xyl} \frac{dC_{l,r,xyl}}{dt} = Q_{trans} \cdot (C_{l,r,tiss} - C_{l,r,xyl}) - Q_{trans} \cdot C_{l,r,xyl} \cdot CEF_r - PRECIP_{r,xyl} - C_{l,r,xyl} \cdot \frac{dV_{l,r,xyl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,r,xyl} \frac{dC_{s,r,xyl}}{dt} = Q_{trans} \cdot C_{l,r,xyl} \cdot CEF_r + PRECIP_{r,xyl} - C_{s,r,xyl} \cdot \frac{dV_{s,r,xyl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,r,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου της ρίζας (mg/L)

$C_{s,r,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ξύλου της ρίζας (mg/kg)

$V_{l,r,xyl}$: όγκος της υγρής φάσης του ξύλου της ρίζας (L)

$V_{s,r,xyl}$: όγκος της στερεής φάσης του ξύλου της ρίζας (L)

CEF_r : παράγοντας ιονανταλλαγής στο ξύλο της ρίζας. Τμήμα της ποσότητας του μετάλλου στο ξύλο που δεσμεύεται στα τοιχώματά του. Φθίνουσα συνάρτηση του

βαθμού κορεσμού των θέσεων κατακράτησης, $0 \leq \frac{CEC_r - C_{rx,wall}}{CEC_r} \leq 0.8$ (ένα μέρος

του μετάλλου είναι σε μορφή που δεν δύναται να κατακρατηθεί),

CEC_r : δυνατότητα κατιονανταλλαγής των τοιχωμάτων του ξύλου της ρίζας ($= 200 \text{ mg Pb}/(\text{xyl. wall dry mass})$),

$C_{rx,wall}$: συγκέντρωση του προσροφημένου μετάλλου στα τοιχώματα του ξύλου (mg/kg ξύλου ξηρής μάζας),

$$C_{rx,wall} = \frac{A_{rx,wall}}{M_{rx,wall}}, \text{ όπου}$$

$A_{rx,wall}$: συνολική ποσότητα του προσροφημένου μετάλλου στο ξύλο,

$$\frac{dA_{rx,wall}}{dt} = Q_{trans} \cdot C_{r,xyl} \cdot CEF_r$$

$M_{rx,wall}$: 0.5% της μάζας της ρίζας

$PRECIP_{r,xyl}$: ρυθμός κατακράτησης φωσφορούχου μετάλλου στο ξύλο (mg/d),

$$PRECIP_{r,xyl} = \frac{C_{l,r,xyl} - SOL_{r,xyl}}{C_{l,r,xyl}} \cdot V_{l,r,xyl} \cdot C_{l,r,xyl} \cdot PR_{xyl} \text{ αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{r,xyl} = \frac{C_{l,r,xyl} - SOL_{r,xyl}}{SOL_{r,xyl}} \cdot A_{rx,precip} \cdot PR_{xyl} \text{ αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{r,xyl}$: διαλυτότητα μετάλλου στο ξύλο (=0.38 mg/L για Pb σε pH=5.5 και $PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol}$),

$A_{rx,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου στο ξύλο της ρίζας που έχει κρατηθεί, όπου

$$\frac{dA_{rx,precip}}{dt} = PRECIP_{r,xyl}$$

Βλαστός

Ιστός Βλαστού (Stem tissue)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,s,tiss} \frac{dC_{l,s,tiss}}{dt} = C_{l,s,phl} \cdot Q_{phl} (1 - F_{S_{pQ,ear}}) + \alpha \cdot Q_{trans} \cdot (C_{l,s,xyl} - C_{l,s,tiss}) - PRECIP_{s,tiss} - C_{l,s,tiss} \cdot \frac{dV_{l,s,tiss}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,s,tiss} \frac{dC_{s,s,tiss}}{dt} = PRECIP_{s,tiss} - C_{s,s,tiss} \cdot \frac{dV_{s,s,tiss}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,s,tiss}$: : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού του βλαστού (mg/L)

$C_{s,s,tiss}$: : συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ιστού του βλαστού (mg/kg)

$V_{l,s,tiss}$: όγκος της υγρής φάσης του ιστού του βλαστού (L)

$V_{s,s,tiss}$: όγκος της στερεής φάσης του ιστού του βλαστού (L)

Q_{phl} : συνολική ροή στον ηθμό, προερχόμενη από το φύλλο (L/d)

$C_{l,s,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του βλαστού (mg/L)

$Fs_{pQ,ear}$: τμήμα της συνολικής ροής του ηθμού που οδηγείται στον καρπό και όχι στον βλαστό (S-μορφής, αύξουσα συνάρτηση του χρόνου (0-0.9))

$C_{l,s,xyf}$: συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του βλαστού (mg/L)

Q_{trans} : συνολική ροή διαπνοής (L/d), μεταβάλλεται κατά την περίοδο ανάπτυξης,

α : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ιστό του βλαστού από τη ρίζα (όταν $0 < t < 40$ d, $\alpha = 0.2$ ενώ όταν $40 < t < 125$ d, $\alpha = 0.175$)

$PRECIP_{s,tiss}$: ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος στον ιστό του βλαστού (mg/d),

$$PRECIP_{s,tiss} = \frac{C_{l,s,tiss} - SOL_{s,tiss}}{C_{l,s,tiss}} \cdot V_{l,s,tiss} \cdot C_{l,s,tiss} \cdot PR_s \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{s,tiss} = \frac{C_{l,s,tiss} - SOL_{s,tiss}}{SOL_{s,tiss}} \cdot A_{st,precip} \cdot PR_s \quad \text{αν είναι ακόρεστο}$$

SOL_s : διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό, υποθέτοντας pH=7 και

$PO_3^{-2} = 0.0001$ mol (=0.02 mg/L για τον Pb),

$A_{st,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ιστό,

$$\frac{dA_{st,precip}}{dt} = PRECIP_{s,tiss}$$

PR_s : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό του βλαστού ($=5 \text{ d}^{-1}$).

Ηθμός Βλαστού (Stem phloem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,s,phl} \frac{dC_{l,s,phl}}{dt} = Q_{phl} \cdot (1 - F_{s,pQ,ear}) \cdot (C_{l,l,phl} - C_{l,s,phl}) + \beta \cdot Q_{trans} \cdot XPF_s \cdot C_{l,s,xyl} - PRECIP_{s,phl} - C_{l,s,phl} \cdot \frac{dV_{l,s,phl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,s,phl} \frac{dC_{s,s,phl}}{dt} = PRECIP_{s,phl} - C_{s,s,phl} \cdot \frac{dV_{s,s,phl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,s,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του βλαστού (mg/L)

$C_{s,s,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ηθμού του βλαστού (mg/ kg)

$V_{l,s,phl}$: όγκος της υγρής φάσης του ηθμού του βλαστού (L)

$V_{s,s,phl}$: όγκος της στερεής φάσης του ηθμού του βλαστού (L)

$C_{l,l,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του φύλλου (mg/L)

XPF_s : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό ($=0.45$, υποτίθεται ότι το μέταλλο μεταφέρεται με τρόπο παρόμοιο με αυτόν των θρεπτικών)

β : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στους ηθμούς του βλαστού από τη ρίζα (όταν $0 < t < 40 \text{ d}$, $\beta = 0.08$ ενώ όταν $40 < t < 125 \text{ d}$, $\beta = 0.07$)

$PRECIP_{s,phl}$: ρυθμός κατακράτησης του φωσφόρου στον ηθμό (mg/d), όπου

$$PRECIP_{s,phl} = \frac{C_{l,s,phl} - SOL_{s,phl}}{C_{l,s,phl}} \cdot V_{l,s,phl} \cdot C_{l,s,phl} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{s,phl} = \frac{C_{l,s,phl} - SOL_{s,phl}}{SOL_{s,phl}} \cdot A_{sp,precip} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{s,phl}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό στο pH που επικρατεί (=0.01 mg/L για τον Pb σε pH=7 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol),

$A_{sp,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ηθμό, με

$$\frac{dA_{sp,precip}}{dt} = PRECIP_{s,phl}$$

PR_{phl} : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό του φυτού (=2 PR_{xyl} =3 d⁻¹). Ο ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό εξαιτίας της γρηγορότερης μεταφοράς του μετάλλου στον ηθμό σε σύγκριση με άλλους ιστούς του φυτού, είναι ανάλογος με αυτούς στο υπόλοιπο φυτό, αλλά μικρότερος. Όμως είναι υψηλότερος απ' ότι στο ξύλο γιατί η κίνηση στον ηθμό είναι πιο αργή από ότι στο ξύλο.

$$PR_{xyl} = PR_{tiss} * XPF = 5 * 0.3 = 1.5 \text{ d}^{-1}$$

XPF : παράγοντας που εκφράζει τη διαφορά στο ρυθμό κατακράτησης στο ξύλο από άλλους ιστούς του φυτού (0.3).

Ξύλο Βλαστού (Stem xylem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,s,xyl} \frac{dC_{l,s,xyl}}{dt} = \gamma \cdot Q_{trans} \cdot (C_{l,r,xyl} - C_{l,s,xyl}) + (C_{l,s,tiss} - C_{l,s,xyl}) \cdot DTR$$

$$- \gamma \cdot Q_{trans} \cdot C_{l,s,xyl} \cdot CEF_s - PRECIP_{s,xyl} - C_{l,s,xyl} \cdot \frac{dV_{l,s,xyl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,s,xyl} \frac{dC_{s,s,xyl}}{dt} = \gamma \cdot Q_{trans} \cdot C_{l,s,xyl} \cdot CEF_s + PRECIP_{s,xyl} - C_{s,s,xyl} \cdot \frac{dV_{s,s,xyl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,s,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του βλαστού (mg/L)

$C_{s,s,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ξύλου του βλαστού (mg/kg)

$V_{l,s,xyl}$: όγκος της υγρής φάσης του ξύλου του βλαστού (L)

$V_{s,s,xyl}$: όγκος της στερεής φάσης του ξύλου του βλαστού (L)

CEF_s : παράγοντας ιονανταλλαγής στο ξύλο του βλαστού. Τμήμα της ποσότητας του μετάλλου στο ξύλο που δεσμεύεται στα τοιχώματά του. Φθίνουσα συνάρτηση του

βαθμού κορεσμού των θέσεων κατακράτησης, $0 \leq \frac{CEC_s - C_{sx,wall}}{CEC_s} \leq 0.8$ (ένα μέρος

του μετάλλου είναι σε μορφή που δεν μπορεί να κατακρατηθεί)

CEC_s : δυνατότητα κατιονανταλλαγής των τοιχωμάτων του ξύλου του βλαστού (=200mg Pb/xyl wall dry mass)

$C_{sx,wall}$: συγκέντρωση του προσροφημένου μετάλλου στα τοιχώματα του ξύλου (mg/kg ξύλου ξηρής μάζας)

$$C_{sx,wall} = \frac{A_{sx,wall}}{M_{sx,wall}}, \text{ όπου :}$$

$A_{sx,wall}$: συνολική ποσότητα του προσροφημένου μετάλλου στο ξύλο

$$\frac{dA_{sx,wall}}{dt} = Q_{trans} \cdot C_{s,xyl} \cdot CEF_s$$

$M_{sx,wall}$: 0.5% της μάζας του βλαστού

DTR : (diffusion transfer rate coefficient), συντελεστής διάχυσης της μεταφοράς του μετάλλου από τον ιστό του βλαστού προς το ξύλο του βλαστού (=0.001 L/day),

γ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στο ξύλο του βλαστού από τη ρίζα (όταν $0 < t < 40$ d, $\gamma = 0.12$ ενώ όταν $40 < t < 125$ d, $\gamma = 0.105$)

$PRECIP_{s,xyl}$: ρυθμός κατακράτησης φωσφορούχου μετάλλου στο ξύλο (mg/d),
όπου :

$$PRECIP_{s,xyl} = \frac{C_{l,s,xyl} - SOL_{s,xyl}}{C_{l,s,xyl}} \cdot V_{l,s,xyl} \cdot C_{l,s,xyl} \cdot PR_{xyl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{s,xyl} = \frac{C_{l,s,xyl} - SOL_{s,xyl}}{SOL_{s,xyl}} \cdot A_{sx,precip} \cdot PR_{xyl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{s,xyl}$: διαλυτότητα μετάλλου στο ξύλο (=0.38 mg/L για Pb σε pH=5.5 και $PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol}$)

$A_{sx,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στο ξύλο του βλαστού,

$$\frac{dA_{sx,precip}}{dt} = PRECIP_{s,xyl} \cdot$$

Φύλλα

Ιστός Φύλλου (Leaf tissue)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,l,tiss} \frac{dC_{l,l,tiss}}{dt} = \delta \cdot (C_{l,l,xyl} - C_{l,l,tiss}) \cdot Q_{trans} - PRECIP_{l,tiss} - C_{l,l,tiss} \cdot \frac{dV_{l,l,tiss}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,l,tiss} \frac{dC_{s,l,tiss}}{dt} = PRECIP_{l,tiss} - C_{s,l,tiss} \cdot \frac{dV_{s,l,tiss}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,l,tiss}$: συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού του φύλλου (mg/L)

$C_{s,l,tiss}$: συγκέντρωση του μετάλλου στην στερεή φάση του ιστού του φύλλου (mg/kg)

$V_{l,l,tiss}$: όγκος της υγρής φάσης του ιστού του φύλλου (L)

$V_{s,l,tiss}$: όγκος της στερεής φάσης του ιστού του φύλλου (L)

$C_{l,l,xyl}$: συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του φύλλου (mg/L)

Q_{trans} : συνολική ροή διαπνοής (L/d)

δ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ιστό του φύλλου από τη ρίζα (όταν $0 < t < 40$ d, $\delta = 0.3$ ενώ όταν $40 < t < 125$ d, $\delta = 0.225$)

$PRECIP_{l,tiss}$: ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος στον ιστό του φύλλου (mg/d), με :

$$PRECIP_{l,tiss} = \frac{C_{l,l,tiss} - SOL_{l,tiss}}{C_{l,l,tiss}} \cdot V_{l,l,tiss} \cdot C_{l,l,tiss} \cdot PR_l \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{l,tiss} = \frac{C_{l,l,tiss} - SOL_{l,tiss}}{SOL_{l,tiss}} \cdot A_{lt,precip} \cdot PR_l \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{l,tiss}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό του φύλλου, υποθέτοντας pH=7 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol (=0.02 mg/L για τον Pb),

$A_{lt,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ιστό, όπου

$$\frac{dA_{lt,precip}}{dt} = PRECIP_{l,tiss}$$

PR_l : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό του φύλλου (5 d^{-1}).

Ηθμός Φύλλου (Leaf phloem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,l,phl} \frac{dC_{l,l,phl}}{dt} = \varepsilon \cdot Q_{trans} \cdot XPF_l \cdot C_{l,l,xyl} - PRECIP_{l,phl} - C_{l,l,phl} \cdot \frac{dV_{l,l,phl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,l,phl} \frac{dC_{s,l,phl}}{dt} = PRECIP_{l,phl} - C_{s,l,phl} \cdot \frac{dV_{s,l,phl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,l,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του φύλλου (mg/L)

$C_{s,l,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ηθμού του φύλλου (mg/kg)

$V_{l,l,phl}$: όγκος της υγρής φάσης του ηθμού του φύλλου (L)

$V_{s,l,phl}$: όγκος της στερεής φάσης του ηθμού του φύλλου (L)

XPF_l : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (=0.45)

ε : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στους ηθμούς του φύλλου από τη ρίζα (όταν $0 < t < 40$ d, $\varepsilon = 0.12$ ενώ όταν $40 < t < 125$ d, $\varepsilon = 0.07$)

$PRECIP_{l,phl}$: ρυθμός κατακράτησης του φωσφορώδους μετάλλου στον ηθμό (mg/d), με

$$PRECIP_{l,phl} = \frac{C_{l,l,phl} - SOL_{l,phl}}{C_{l,l,phl}} \cdot V_{l,l,phl} \cdot C_{l,l,phl} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{l,phl} = \frac{C_{l,l,phl} - SOL_{l,phl}}{SOL_{l,phl}} \cdot A_{lp,precip} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{l,phl}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό στο pH που επικρατεί (=0.01 mg/L για τον Pb σε pH=7 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol),

$A_{lp,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ηθμό,

$$\frac{dA_{lp,precip}}{dt} = PRECIP_{l,phl}$$

PR_{phl} : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό του φυτού ($= 2PR_{xyl} = 3 \text{ d}^{-1}$), όπου

$$PR_{xyl} = PR_{tiss} \cdot XPF, \text{ με}$$

XPF : παράγοντας που εκφράζει τη διαφορά στο ρυθμό κατακράτησης στο ξύλο από τους άλλους ιστούς του φυτού (=0.3).

Ξύλο Φύλλου (Leaf xylem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,l,xyl} \frac{dC_{l,l,xyl}}{dt} = \kappa \cdot Q_{trans} \cdot (C_{l,s,xyl} - C_{l,l,xyl}) - PRECIP_{l,xyl} - C_{l,l,xyl} \cdot \frac{dV_{l,l,xyl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,l,xyl} \frac{dC_{s,l,xyl}}{dt} = PRECIP_{l,xyl} - C_{s,l,xyl} \cdot \frac{dV_{s,l,xyl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,l,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του φύλλου (mg/L)

$C_{s,l,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ξύλου του φύλλου (mg/L)

$V_{l,l,xyl}$: όγκος της υγρής φάσης του ξύλου του φύλλου (L)

$V_{s,l,xyl}$: όγκος της στερεής φάσης του ξύλου του φύλλου (L)

κ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής από τη ρίζα προς στο ξύλο του φύλλου (όταν $0 < t < 40$ d, $\kappa = 0.18$ ενώ όταν $40 < t < 125$ d, $\kappa = 0.105$)

$PRECIP_{l,xyl}$: ρυθμός κατακράτησης φωσφορούχου Pb στο ξύλο (mg/d)

$$PRECIP_{l,xyl} = \frac{C_{l,l,xyl} - SOL_{l,xyl}}{C_{l,l,xyl}} \cdot V_{l,l,xyl} \cdot C_{l,l,xyl} \cdot PR_{xyl} \text{ αν το διάλυμα είναι υπέρκορο και}$$

$$PRECIP_{l,xyl} = \frac{C_{l,l,xyl} - SOL_{l,xyl}}{SOL_{l,xyl}} \cdot A_{lx,precip} \cdot PR_{xyl} \text{ αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{l,xyl}$: διαλυτότητα μετάλλου στο ξύλο (=0.38 mg/L για τον Pb σε pH=5.5 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol)

$A_{lx,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στο ξύλο του βλαστού,

$$\frac{dA_{lx,precip}}{dt} = PRECIP_{l,xyl} \cdot$$

Καρπός

Ιστός Καρπού (Fruit tissue)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,f,tiss} \frac{dC_{l,f,tiss}}{dt} = C_{l,f,tiss} \cdot Q_{phl} \cdot F_{f,pQ,f} + \lambda \cdot Q_{trans} \cdot (C_{l,f,xyl} - C_{l,f,tiss}) - PRECIP_{f,tiss} - C_{l,f,tiss} \cdot \frac{dV_{l,f,tiss}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,f,tiss} \frac{dC_{s,f,tiss}}{dt} = PRECIP_{f,tiss} - C_{s,f,tiss} \cdot \frac{dV_{s,f,tiss}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,f,tiss}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού του καρπού (mg/L)

$C_{s,f,tiss}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ιστού του καρπού (mg/kg)

$V_{l,f,tiss}$: όγκος της υγρής φάσης του ιστού του καρπού (L)

$V_{s,f,tiss}$: όγκος της στερεής φάσης του ιστού του καρπού (L)

$C_{l,f,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση το ξύλου του καρπού (mg/L)

$F_{f,pQear}$: τμήμα της ροής του ηθμού που οδηγείται στον καρπό (S-μορφής αύξουσα συνάρτηση του χρόνου (0-0.9))

λ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ιστό του καρπού από τη ρίζα (όταν $40 < t < 125$ d, $\lambda = 0.1$)

$PRECIP_{f,tiss}$: ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους Pb στον ιστό του καρπού (mg/d), με :

$$PRECIP_{f,tiss} = \frac{C_{l,f,tiss} - SOL_{f,tiss}}{C_{l,f,tiss}} \cdot V_{l,f,tiss} \cdot C_{l,f,tiss} \cdot PR_f \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{l,f,tiss} = \frac{C_{l,f,tiss} - SOL_{f,tiss}}{SOL_{f,tiss}} \cdot A_{f,precip} \cdot PR_f \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{f,tiss}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό του καρπού υποθέτοντας pH=7 και

$$PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol (=0.02 mg/L για τον Pb)}$$

$A_{f,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ιστό, με

$$\frac{dA_{ft,precip}}{dt} = PRECIP_{f,tiss} \quad \text{και}$$

PR_f : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό του καρπού (=5 d⁻¹).

Ηθμός Καρπού (Fruit phloem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,f,phl} \frac{dC_{l,f,phl}}{dt} = Q_{phl} \cdot F_{f,pQf} \cdot C_{l,l,phl} + \mu \cdot Q_{trans} \cdot XPF_f \cdot C_{l,f,xyl} - PRECIP_{f,phl} - C_{l,f,phl} \cdot \frac{dV_{l,f,phl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,f,phl} \frac{dC_{s,f,phl}}{dt} = PRECIP_{f,phl} - C_{s,f,phl} \cdot \frac{dV_{s,f,phl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,f,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του καρπού (mg/L)

$C_{s,f,phl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ηθμού του καρπού (mg/kg)

$V_{l,f,phl}$: όγκος της υγρής φάσης του ηθμού του καρπού (L)

$V_{s,f,phl}$: όγκος της στερεής φάσης του ηθμού του καρπού (L)

XPF_f : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (=0.45)

μ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στους ηθμούς του καρπού από τη ρίζα (όταν $40 < t < 125$ d, $\mu = 0.04$)

$PRECIP_{f,phl}$: ρυθμός κατακράτησης του φωσφορώδους μετάλλου στον ηθμό (mg/d), με :

$$PRECIP_{f,phl} = \frac{C_{l,f,phl} - SOL_{f,phl}}{C_{l,f,phl}} \cdot V_{l,f,phl} \cdot C_{l,f,phl} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι}$$

υπέρκορο και

$$PRECIP_{f,phl} = \frac{C_{l,f,phl} - SOL_{f,phl}}{SOL_{f,phl}} \cdot A_{fp,precip} \cdot PR_{phl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{f,phl}$: διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό στο pH που επικρατεί (=0.01 mg/L για τον Pb σε pH=7 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol),

$A_{fp,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ηθμό, με

$$\frac{dA_{fp,precip}}{dt} = PRECIP_{f,phl} \quad \text{και}$$

PR_{phl} : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό του φυτού (=2 PR_{xyl} =3 d⁻¹), με

$$PR_{xyl} = PR_{tiss} \cdot XPF = 1.5 \text{ d}^{-1}, \text{ με}$$

XPF : παράγοντας που εκφράζει τη διαφορά στο ρυθμό κατακράτησης στο ξύλο από τους άλλους ιστούς (=0.3).

Ξύλο Καρπού (Fruit xylem)

Υγρή Φάση :

$$V_{l,f,xyl} \frac{dC_{l,f,xyl}}{dt} = v \cdot Q_{trans} \cdot (C_{l,s,xyl} - C_{l,f,xyl}) - PRECIP_{f,xyl} - C_{l,f,xyl} \cdot \frac{dV_{l,f,xyl}}{dt}$$

Στερεή Φάση :

$$V_{s,f,xyl} \frac{dC_{s,f,xyl}}{dt} = PRECIP_{f,xyl} - C_{s,f,xyl} \cdot \frac{dV_{s,f,xyl}}{dt}$$

όπου :

$C_{l,f,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου (mg/L)

$C_{s,f,xyl}$: συγκέντρωση μετάλλου στην στερεή φάση του ξύλου (mg/L)

$V_{l,f,xyl}$: όγκος της υγρής φάσης του ξύλου του καρπού (L)

$V_{s,f,xyl}$: όγκος της στερεής φάσης του ξύλου του καρπού (L)

ν : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στο ξύλο του καρπού από τη ρίζα (όταν $40 < t < 125$ d, $\nu = 0.06$)

$PRECIP_{f,xyl}$: ρυθμός κατακράτησης φωσφορούχου μετάλλου στο ξύλο (mg/d), με

$$PRECIP_{f,xyl} = \frac{C_{l,f,xyl} - SOL_{f,xyl}}{C_{l,f,xyl}} \cdot V_{l,f,xyl} \cdot C_{l,f,xyl} \cdot PR_{xyl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι υπέρκορο}$$

και

$$PRECIP_{f,xyl} = \frac{C_{l,f,xyl} - SOL_{f,xyl}}{SOL_{f,xyl}} \cdot A_{fx,precip} \cdot PR_{xyl} \quad \text{αν το διάλυμα είναι ακόρεστο}$$

$SOL_{f,xyl}$: διαλυτότητα μετάλλου στο ξύλο (=0.38 mg/L για τον Pb σε pH=5.5 και $PO_3^{-2} = 0.0001$ mol)

$A_{fx,precip}$: συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στο ξύλο του καρπού με :

$$\frac{dA_{fx,precip}}{dt} = PRECIP_{f,xyl}$$

Ανάπτυξη του φυτού

Το μοντέλο λαμβάνει υπ' όψιν και την ανάπτυξη του φυτού, έτσι θεωρείται ότι ο όγκος για κάθε επιμέρους τμήμα ακολουθεί τη λογιστική καμπύλη η γενική εξίσωση της οποίας είναι :

$$\frac{dV_i}{dt} = k \cdot V_i$$

όπου:

k : ειδικός ρυθμός ανάπτυξης (d^{-1}) με

$$k = k_{max} \cdot \left(1 - \frac{V_i}{V_{i,max}}\right)$$

k_{max} : μέγιστος ρυθμός ανάπτυξης (d^{-1})

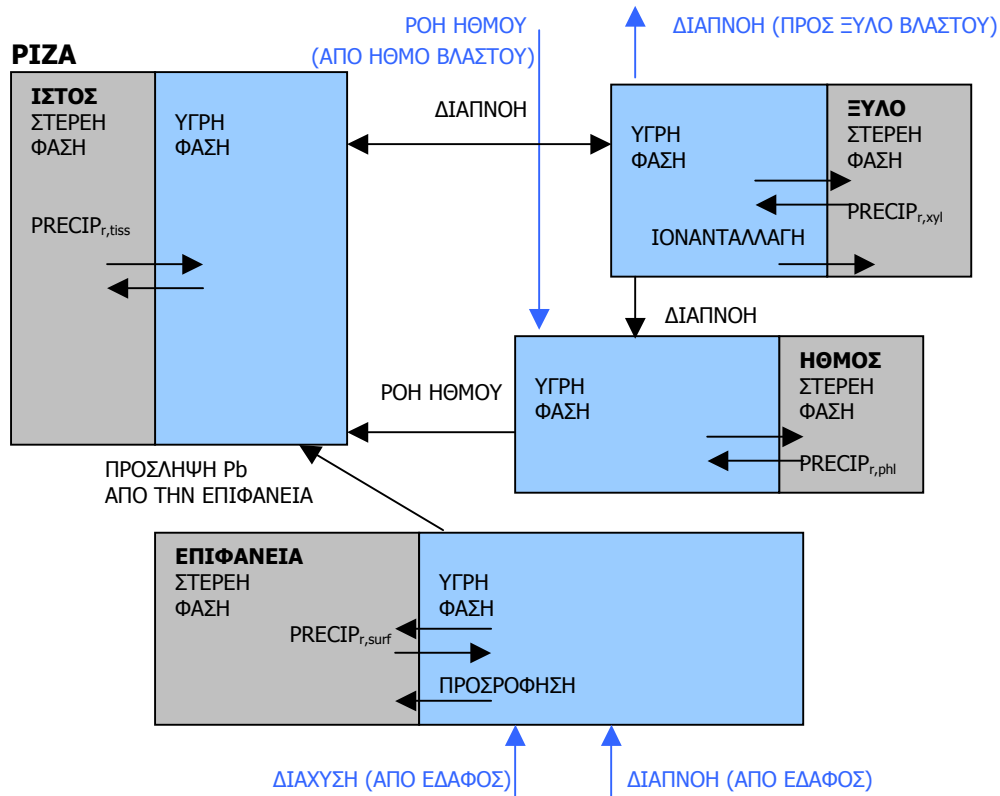
Η παραπάνω σχέση έχει προσαρμοσθεί έτσι ώστε να λαμβάνεται υπόψη και η τοξικότητα του μολύβδου που επηρεάζει την ανάπτυξη του φυτού. Έτσι ο ρυθμός ανάπτυξης να μειώνεται καθώς αυξάνει η ποσότητα του μολύβδου στη ρίζα και ισχύει:

$$k = k_{\max} \cdot (1 - k_{\text{Vtox}} (C_{r,\text{Pb}})) \cdot (1 - \frac{V_i}{V_{i\max}})$$

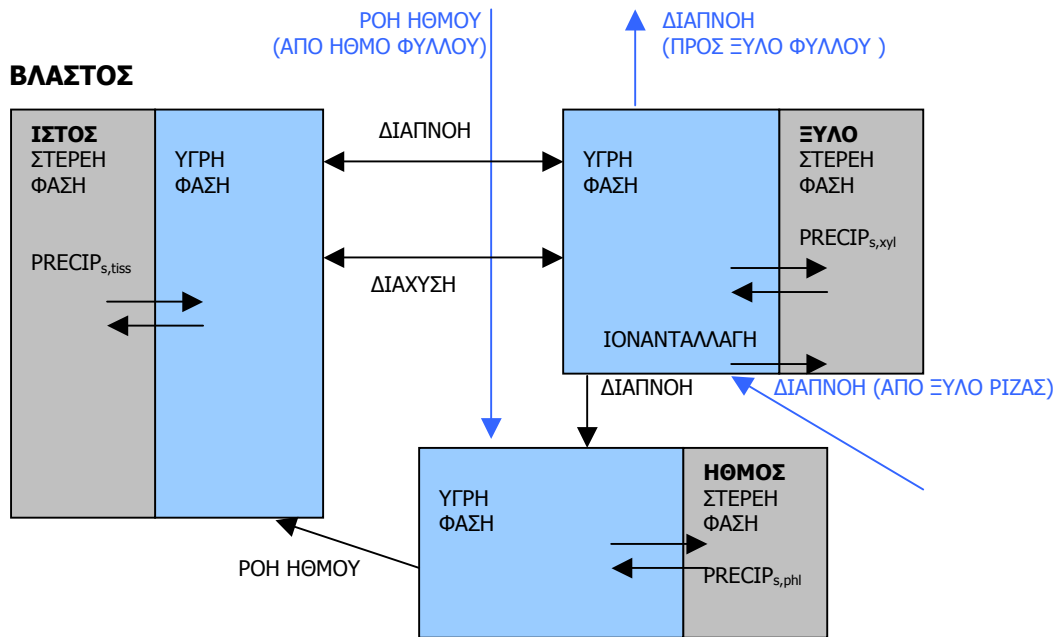
Η τελική μορφή της βασικής εξίσωσης ανάπτυξης του φυτού που προκύπτει από αυτή την προσέγγιση για κάθε όγκο ελέγχου 'i' είναι η παρακάτω :

$$\frac{dV_i}{dt} = k_{\max} \cdot (1 - k_{\text{Vtox}} (C_{r,\text{Pb}})) \cdot V_i \cdot (1 - \frac{V_i}{V_{i\max}})$$

5.3 Διάγραμμα Ροής

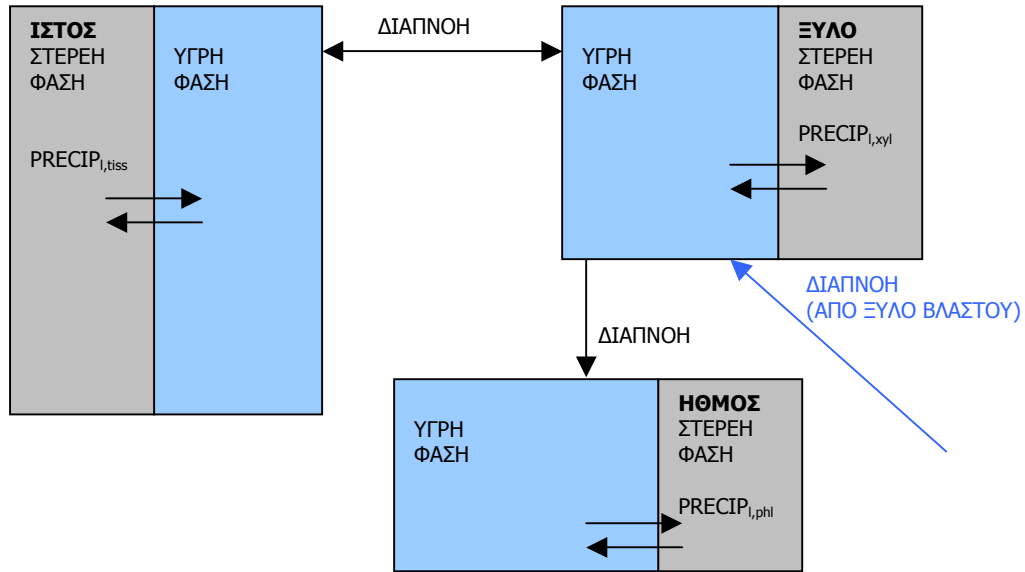


Σχήμα 5-2. Διάγραμμα ροής για την ρίζα του αραβόσιτου



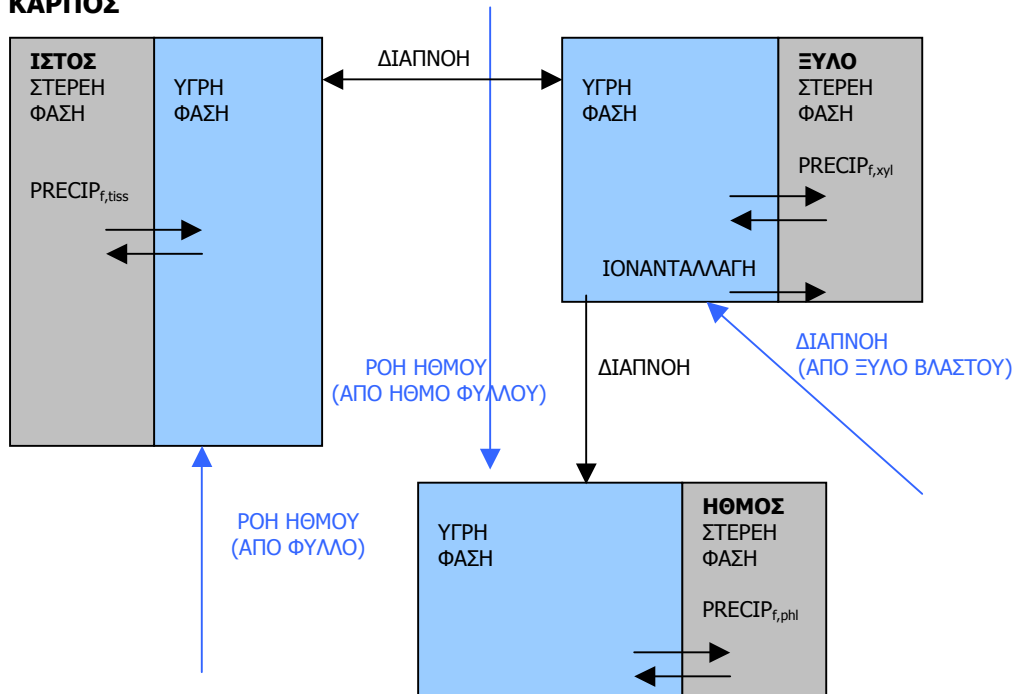
Σχήμα 5-3. Διάγραμμα ροής για τον βλαστό του αραβόσιτου

ΦΥΛΛΟ



Σχήμα 5-4. Διάγραμμα ροής για το φύλλο του αραβόσιτου

ΚΑΡΠΟΣ



Σχήμα 5-5. Διάγραμμα ροής για τον καρπό του αραβόσιτου

Κεφάλαιο 6

Εκτίμηση των Παραμέτρων του Μοντέλου

Η δομή του μοντέλου είναι βασισμένη στη φυσιολογία του αραβόσιτου. Έτσι οι περισσότερες παράμετροι έχουν αντληθεί από την βιβλιογραφία, αν και υπάρχουν αρκετές για τις οποίες δεν υπάρχουν βιβλιογραφικά δεδομένα. Οι τελευταίες είναι αποτέλεσμα της μελέτης της συμπεριφοράς του μοντέλου και της ανάλυσης ευαισθησίας κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων. Οι παράμετροι αυτοί παρουσιάζουν αβεβαιότητα γι' αυτό και η ανάλυση ευαισθησίας είναι ιδιαίτερα σημαντική για την επιβεβαίωση των υποθέσεων που έγιναν σχετικά με τους μηχανισμούς που σχετίζονται με την πρόσληψη, την μεταφορά και την συσσώρευση του Pb καθώς και την ανάπτυξη του φυτού.

6.1 Ρυθμοί Κατακράτησης

Όπως έχει ήδη αναφερθεί η κατακράτηση ή η επαναδιάλυση του μολύβδου στα διάφορα τμήματα του φυτού εξαρτάται από τους ρυθμούς κατακράτησης (precipitation rates). Στις εξισώσεις του μοντέλου που περιγράφουν τον μηχανισμό της κατακράτησης περιλαμβάνονται τέσσερις διαφορετικοί ρυθμοί κατακράτησης όσα και τα τμήματα κάθε μέρους του φυτού:

PR_t : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό του φυτού ($=5 d^{-1}$).

PR_s : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας ($=5 d^{-1}$).

PR_{phi} : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό του φυτού ($=3 d^{-1}$).

PR_{xyl} : ρυθμός κατακράτησης στο ξύλο του φυτού ($=1,5 d^{-1}$).

Στον Πίνακα 6-1 φαίνονται τα αποτελέσματα της ανάλυσης. Αύξηση του ρυθμού κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας του αραβόσιτου (PR_s) κατά 50% προκαλεί αρκετά σημαντική αύξηση της ολικής μάζας του Pb που συσσωρεύεται σε ολόκληρο το φυτό, της ποσότητας του Pb στην στερεή φάση του φυτού και του Pb που κατακρατείται στα διάφορα μέρη του αραβόσιτου. Ταυτόχρονα παρατηρούμε μείωση του διαθέσιμου για μεταφορά Pb στην υγρή φάση του φυτού. Μείωση του ρυθμού κατά 50% προκαλεί ακριβώς τα αντίθετα αποτελέσματα στις αντίστοιχες ποσότητες του Pb στο φυτό σε ποσοστά της ίδιας τάξης.

Πίνακας 6-1. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τους Ρυθμούς Κατακράτησης του Μοντέλου.

	$\Delta(\text{parameter})$ %	$\Delta(\text{tot. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. liq. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. sol. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. prec. Pb})$ %
PRt	+ 50	$+1,54 \times 10^{-1}$	$-7,50 \times 10^{-2}$	$+1,54 \times 10^{-1}$	$+2,78 \times 10^{-1}$
	- 50	$-2,46 \times 10^{-1}$	$+1,72 \times 10^{-1}$	$-2,47 \times 10^{-1}$	$-4,04 \times 10^{-1}$
PRs	+ 50	$+2,72 \times 10$	$-1,41 \times 10$	$+2,73 \times 10$	$+2,77 \times 10$
	- 50	$-3,80 \times 10$	$+1,97 \times 10$	$-3,82 \times 10$	$-3,88 \times 10$
PRphl	+ 50	$-3,65 \times 10^{-1}$	$-1,58 \times 10^{-1}$	$-3,66 \times 10^{-1}$	$-1,57 \times 10^{-1}$
	- 45	$+3,49 \times 10$	$+4,33 \times 10^{-1}$	$+3,50 \times 10$	$+1,27 \times 10$
PRxyl	+ 50	$-1,08 \times 10^{-1}$	$+7,98 \times 10^{-3}$	$-1,04 \times 10^{-1}$	$-5,49 \times 10^{-2}$
	- 50	$+1,61 \times 10^{-1}$	$-5,27 \times 10^{-2}$	$+1,66 \times 10^{-1}$	$+1,06 \times 10^{-1}$
PRtot	+ 50	$+2,69 \times 10$	$-1,43 \times 10$	$+2,70 \times 10$	$+2,78 \times 10$
	- 40	$-9,89$	$+1,56 \times 10$	$-9,95$	$-2,41 \times 10$

Αύξηση και μείωση του ρυθμού κατακράτησης στους ιστούς των επιμέρους τμημάτων του αραβόσιτου (PR_t) κατά 50% προκαλεί ποιοτικά τις ίδιες μεταβολές στα αποτελέσματα του μοντέλου με εκείνες του ρυθμού κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας. Ποσοτικά οι μεταβολές είναι πολύ μικρότερες, με ελάχιστη ίση με 0,075% στην ποσότητα του Pb στην υγρή φάση του φυτού και μέγιστη ίση με 0,404% στη μάζα του Pb που κατακρατείται στα διάφορα μέρη του αραβόσιτου.

Η μεταβολή του ρυθμού κατακράτησης στο ξύλο του φυτού (PR_{xyl}) προκαλεί ακριβώς τα αντίθετα αποτελέσματα. Έτσι με την αύξηση του ρυθμού παρατηρείται

μείωση της ολικής μάζας του Pb που συσσωρεύεται στο φυτό, της ποσότητας του Pb στην στερεή φάση και του Pb που κατακρατείται στα διάφορα μέρη του αραβόσιτου και παράλληλα αύξηση του Pb στην υγρή φάση του φυτού. Η μείωση του ρυθμού προκαλεί ακριβώς τα αντίθετα αποτελέσματα. Και σε αυτή την περίπτωση οι μεταβολές στα αποτελέσματα του μοντέλου είναι πολύ μικρές.

Η αλλαγή του ρυθμού κατακράτησης στον ηθμό του φυτού (PR_{phi}) προκαλεί διαφορετικές μεταβολές στα αποτελέσματα του μοντέλου. Έτσι η αύξηση του ρυθμού κατά 50% προκαλεί μείωση σε όλες τις ποσότητες του μολύβδου που υπολογίζονται ενώ η μείωση αυτού προκαλεί αρκετά σημαντική αύξηση.

Στον Πίνακα 6-1 οι μεταβολές του PR_{tot} αντιπροσωπεύουν την ταυτόχρονη μεταβολή όλων των παραπάνω ρυθμών κατακράτησης και προκαλούν ανάλογες μεταβολές με εκείνες που παρατηρούνται στην περίπτωση του PR_s και του PR_t .

6.2 Ρυθμός Ενεργούς Διάχυσης

Η κύρια εισροή του μολύβδου στην επιφάνεια της ρίζας από το εδαφικό διάλυμα γίνεται με διάχυση εξαιτίας της μεταξύ τους διαφοράς συγκέντρωσης και εξαρτάται από τον ρυθμό ενεργούς διάχυσης (DR). Στον Πίνακα 6-2 φαίνονται τα αποτελέσματα από την ανάλυση ευαισθησίας.

Πίνακας 6-2. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Ρυθμό Ενεργούς Διάχυσης.

	$\Delta(\text{parameter})$ %	$\Delta(\text{tot. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. liq. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. sol. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. prec. Pb})$ %
DR	+ 10	-4,72	-4,76	-4,72	-4,81
	- 10	+5,39	+5,44	+5,39	+5,49
	+ 50	-1,89 x10	-1,90 x10	-1,89 x10	-1,92 x10
	- 50	+3,77 x10	+3,81 x10	+3,77 x10	+3,84 x10

6.3 Ρυθμός Μεταφοράς Μεταξύ Φάσεων

Στην επιφάνεια της ρίζας παρατηρείται προσρόφηση του μολύβδου η οποία εξαρτάται από τον ρυθμό μεταφοράς (PR) μεταξύ του προσροφημένου και του διαλυμένου μετάλλου. Η ανάλυση ευαισθησίας έδειξε ότι η αύξηση ή η μείωση του

ρυθμού κατά 50% δεν προκαλεί μεταβολή στην ολική μάζα του Pb που συσσωρεύεται σε ολόκληρο το φυτό.

Πίνακας 6-3. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Ρυθμό Μεταφοράς μεταξύ Φάσεων.

	$\Delta(\text{parameter})$ %	$\Delta(\text{tot. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. liq. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. sol. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. prec. Pb})$ %
PR	+ 50	$-3,84 \times 10^{-3}$	0	0	0
	- 50	$-3,84 \times 10^{-3}$	0	0	0

6.4 Μέγιστος Ρυθμός Πρόσληψης Μετάλλου

Η πρόσληψη του μολύβδου στη ρίζα από την επιφάνειά της εξαρτάται από τον μέγιστο ρυθμό πρόσληψης (UPT_{\max}). Η παράμετρος αυτή δεν επηρεάζει σημαντικά το αποτέλεσμα του μοντέλου όπως φαίνεται και στον Πίνακα 6-4.

Πίνακας 6-4. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τον Μέγιστο Ρυθμό Πρόσληψης του Pb.

	$\Delta(\text{parameter})$ %	$\Delta(\text{tot. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. liq. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. sol. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. prec. Pb})$ %
UPT	+ 10	$+2,88 \times 10^{-1}$	$+1,60 \times 10^{-3}$	$+2,89 \times 10^{-1}$	$+1,18 \times 10^{-1}$
	- 10	$-2,92 \times 10^{-1}$	$-3,19 \times 10^{-3}$	$-2,89 \times 10^{-1}$	$-1,18 \times 10^{-1}$
	+ 50	+1,44	$+6,38 \times 10^{-3}$	+1,45	$+5,84 \times 10^{-1}$
	- 50	-1,44	$-1,10 \times 10^{-1}$	-1,45	$-5,88 \times 10^{-1}$

6.5 Συγκέντρωση Μολύβδου στο Εδαφικό Διάλυμα

Μεταβολή της συγκέντρωσης του μολύβδου στο εδαφικό διάλυμα (C_{ss}) προκαλεί ανάλογη μεταβολή και στα αποτελέσματα του μοντέλου όπως φαίνεται και στον Πίνακα 6-5.

Πίνακας 6-5. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για την Συγκέντρωση του Pb στο εδαφικό διάλυμα.

(mg/L)	$\Delta(\text{par.}) \%$	$\Delta(\text{tot. Pb}) \%$	$\Delta(\text{tot. liq. Pb}) \%$	$\Delta(\text{tot. sol. Pb}) \%$	$\Delta(\text{tot. prec. Pb}) \%$
C_{ss} = 50	- 75	-7,28 x10	-7,38 x10	-7,28 x10	-7,41 x10
C_{ss} = 100	- 50	-4,85 x10	-4,92 x10	-4,85 x10	-4,94 x10
C_{ss} = 1000	+ 400	+3,88 x10 ²	+3,94 x10 ²	+3,88 x10 ²	+3,95 x10 ²
C_{ss} = 2000	+ 900	+8,73 x10 ²	+8,86 x10 ²	+8,73 x10 ²	+8,89 x10 ²
C_{ss} = 10000	+ 4900	+4,75 x10 ³	+4,82 x10 ³	+4,75 x10 ³	+4,84 x10 ³
C_{ss} = 100000	+ 49900	+4,84 x10 ⁴	+4,91 x10 ⁴	+4,84 x10 ⁴	+4,93 x10 ⁴

6.6 Ανάπτυξη του Φυτού

Στις αρχικές προσομοιώσεις του μοντέλου θεωρήσαμε ότι όγκοι σε όλα τα τμήματα του φυτού έχουν αρχική τιμή ίση με 0,0002 L και ρυθμούς ανάπτυξης τους παρακάτω:

$k = 0.09 \text{ d}^{-1}$ για την ρίζα

$k = 0.08 \text{ d}^{-1}$ για τον βλαστό

$k = 0.07 \text{ d}^{-1}$ για τα φύλλα

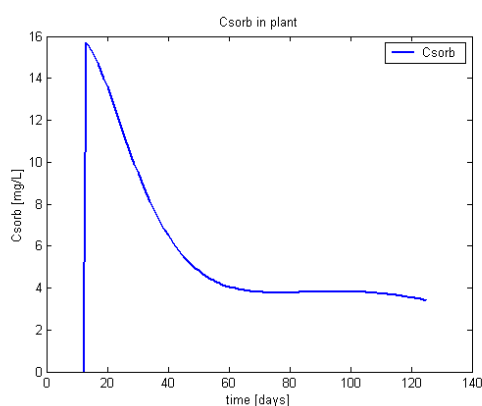
$k = 0.09 \text{ d}^{-1}$ για τον καρπό

Στον πίνακα που ακολουθεί φαίνεται η επίδραση της μεταβολής τόσο των αρχικών όγκων όσο και των ρυθμών ανάπτυξης στα αποτελέσματα του μοντέλου. Οι επιδράσεις των παραμέτρων αυτών δεν είναι σημαντική σε κανένα από τα αποτελέσματα του μοντέλου.

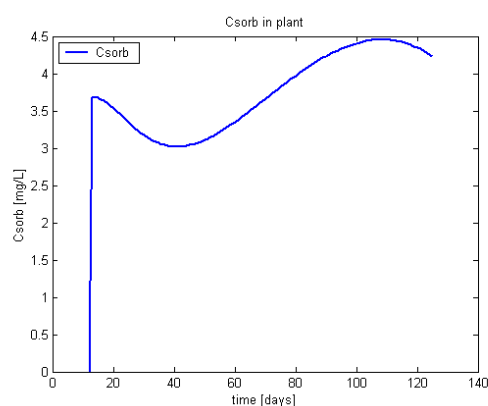
Πίνακας 6-6. Αποτελέσματα της Ανάλυσης Ευαισθησίας για τους Αρχικούς Όγκους του Φυτού και τους Ρυθμούς Ανάπτυξης.

	$\Delta(\text{parameter})$ %	$\Delta(\text{tot. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. liq. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. sol. Pb})$ %	$\Delta(\text{tot. prec. Pb})$ %
$V_{0,\text{root}}$	+100	+1,39	$+1,28 \times 10^{-2}$	+1,39	+1,64
$V_{0,\text{root}}$	+400	+3,20	$+2,23 \times 10^{-2}$	+3,21	+3,78
$V_{0,\text{root}}$	- 50	-1,41	$-2,55 \times 10^{-2}$	-1,42	-1,64
k_{root}	+ 50	+2,44	$+2,39 \times 10^{-2}$	+2,44	+2,85
k_{root}	- 50	-6,58	-2,71	-6,59	-7,18
k_{steam}	+ 50	$-1,08 \times 10^{-1}$	$+1,28 \times 10^{-2}$	$-1,08 \times 10^{-1}$	$-2,74 \times 10^{-2}$
k_{steam}	- 50	$+1,54 \times 10^{-2}$	$-2,92 \times 10^{-1}$	$+1,93 \times 10^{-2}$	$-5,10 \times 10^{-2}$
k_{leaf}	+ 50	$-4,27 \times 10^{-1}$	$+6,38 \times 10^{-3}$	$-4,28 \times 10^{-1}$	$-2,67 \times 10^{-1}$
k_{leaf}	- 50	+2,53	$-4,31 \times 10^{-2}$	+2,54	+1,80
k_{fruit}	+ 50	$+4,23 \times 10^{-2}$	$+1,60 \times 10^{-2}$	$+4,24 \times 10^{-2}$	$+4,31 \times 10^{-2}$
k_{fruit}	- 50	$-7,30 \times 10^{-2}$	$-1,92 \times 10^{-1}$	$-7,32 \times 10^{-2}$	$-7,45 \times 10^{-2}$

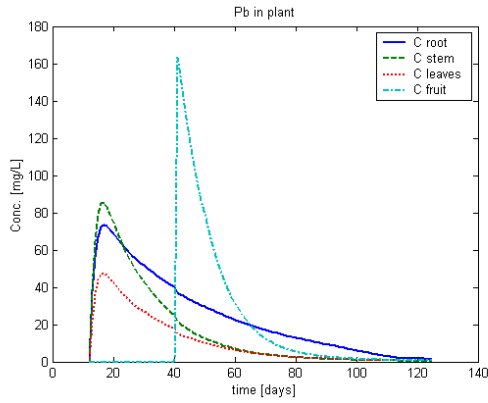
Αλλαγή στους αρχικούς όγκους των τμημάτων της ρίζας κατά 400% (αρχικοί όγκοι στη ρίζα ίσοι με 0,001 L) προκαλούν μεταβολές στην μορφή των παρακάτω καμπύλων που μας δίνει το μοντέλο. Παρατηρούμε ότι με την αύξηση των αρχικών όγκων για τη ρίζα δεν εμφανίζονται οι πολύ μεγάλες αρχικές συγκεντρώσεις Pb.



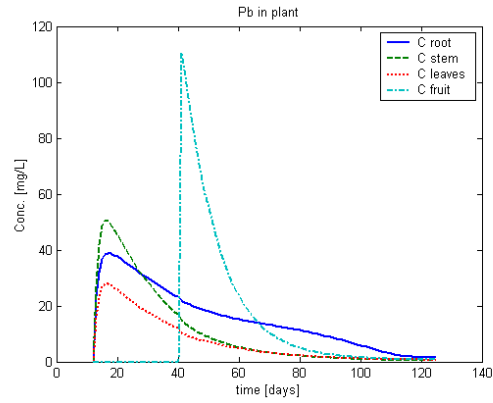
Σχήμα 6-1: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας με $V_{0,\text{root}}=0,0002$ L



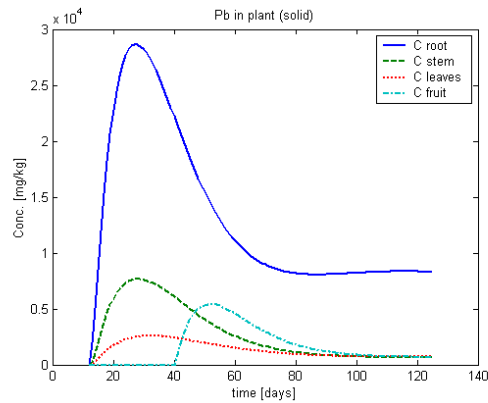
Σχήμα 6-2 : Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας με $V_{0,\text{root}}=0,001$ L (+400%)



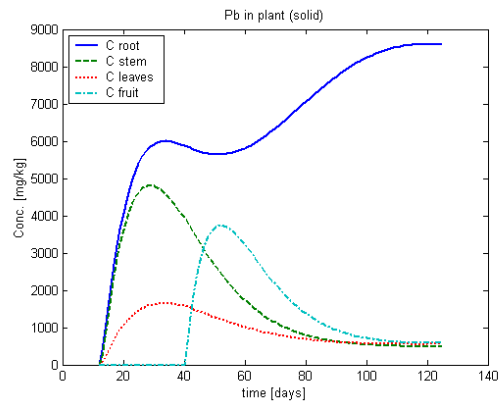
Σχήμα 6-3 : Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με $V_{0,root} = 0,0002 \text{ L}$



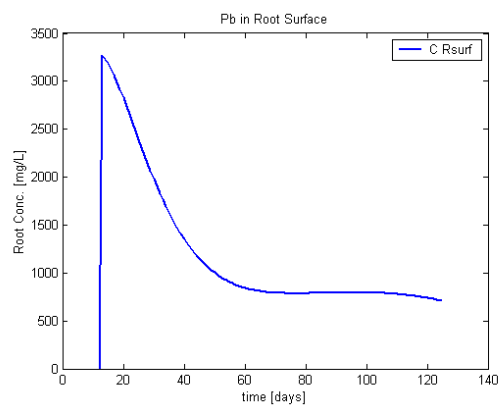
Σχήμα 6-4: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με $V_{0,root} = 0,001 \text{ L (+400\%)}$



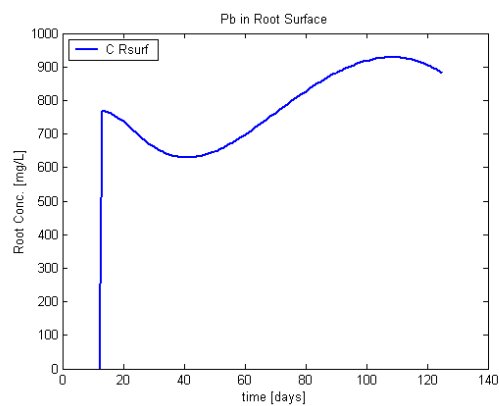
Σχήμα 6-5: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση με $V_{0,root} = 0,0002 \text{ L}$



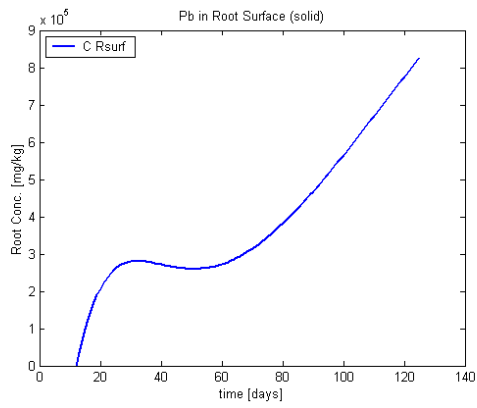
Σχήμα 6-6: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση με $V_{0,root} = 0,001 \text{ L (+400\%)}$



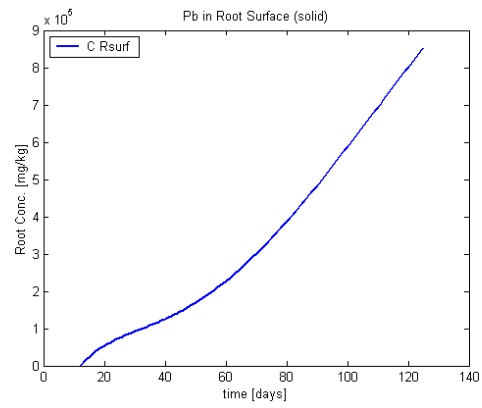
Σχήμα 6-7: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,0002 \text{ L}$



Σχήμα 6-8: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,001 \text{ L (+400\%)}$



Σχήμα 6-9: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,0002$ L



Σχήμα 6-10: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας με $V_{0,root} = 0,001$ L (+400%)

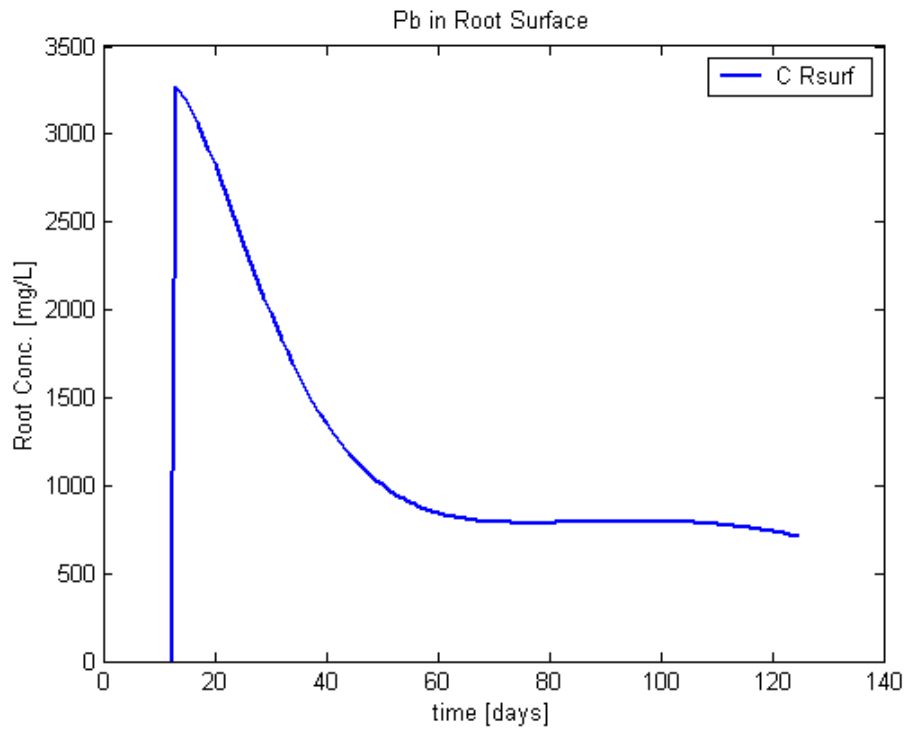
Κεφάλαιο 7

Αποτελέσματα Προσομοίωσης

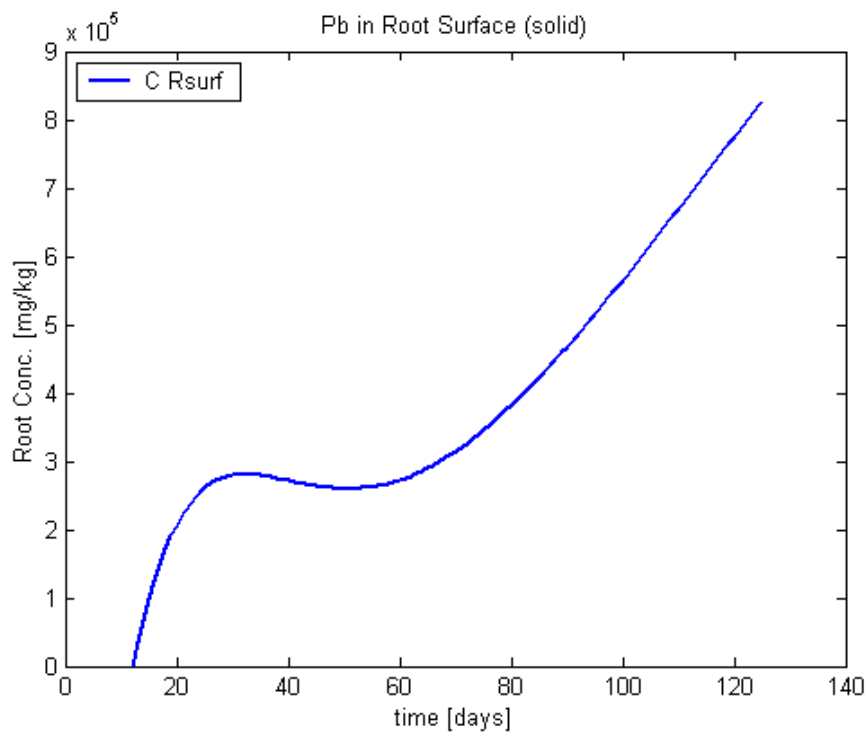
Οι προσομοιώσεις του μοντέλου έγιναν για δύο σενάρια διαφορετικών εδαφικών συνθηκών. Το πρώτο σενάριο προσεγγίζει την εξυγίανση υπόγειων υδροφορέων ενώ το δεύτερο την εξυγίανση εδαφών. Αναλυτικότερη περιγραφή των δύο σεναρίων γίνεται στις παραγράφους που ακολουθούν.

7.1 Ερμηνεία Γραφημάτων Προσομοίωσης

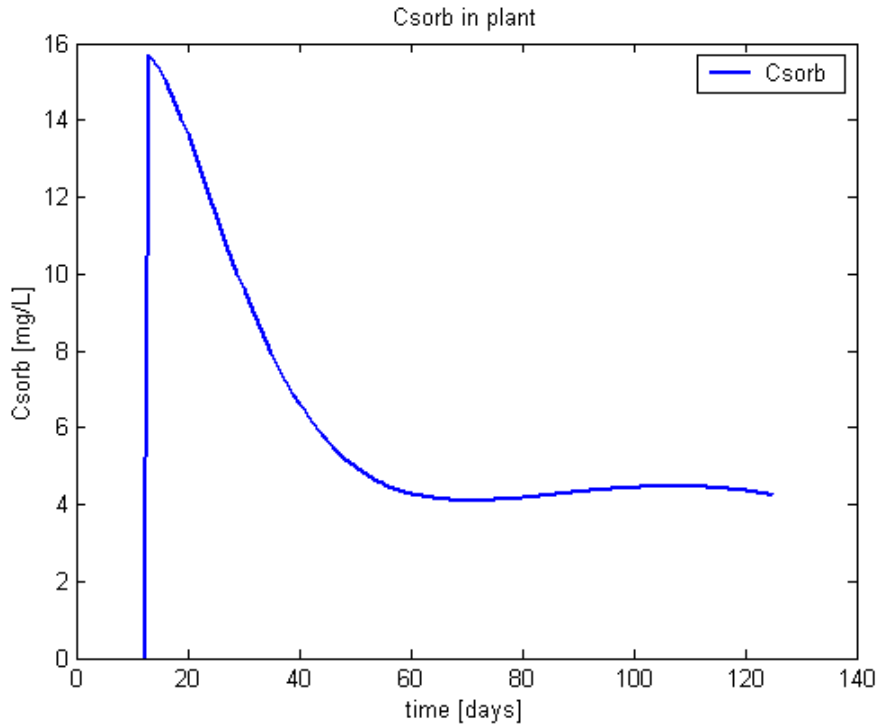
Μετά την προσομοίωση του μοντέλου μπορούμε να σχολιάσουμε τα αποτελέσματα μέσω των γραφικών παραστάσεων που προκύπτουν. Τα πρώτα τέσσερα διαγράμματα περιγράφουν την τύχη του μολύβδου στην επιφάνεια της ρίζας. Έτσι στο Σχήμα 7-1 φαίνεται η συγκέντρωση του Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας ενώ στο Σχήμα 7-2 η συγκέντρωση στην στερεή φάση όπου περιλαμβάνει την απορρόφηση (Σχήμα 7-3) αλλά και την κατακράτησή του (precipitation) (Σχήμα 7-4).



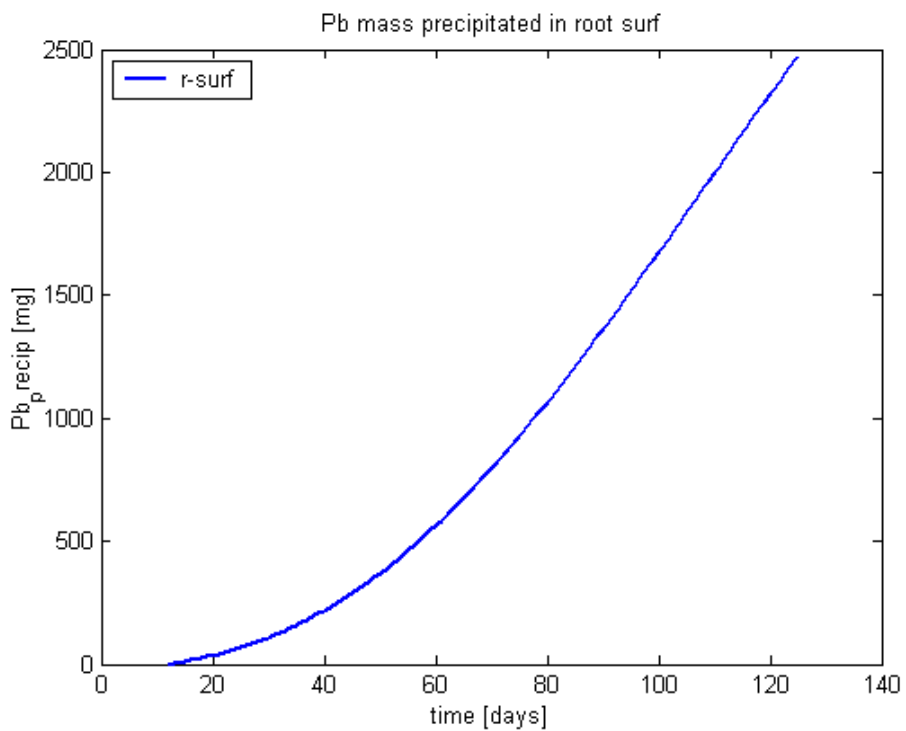
Σχήμα 7-1: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας



Σχήμα 7-2: Συγκέντρωση Pb στην στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας

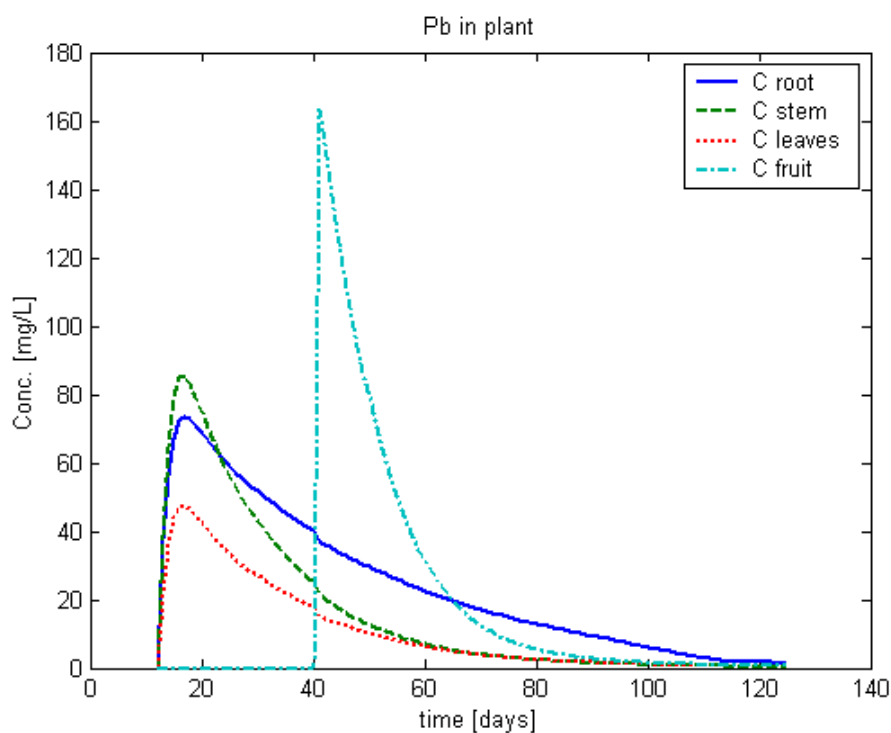


Σχήμα 7-3: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας

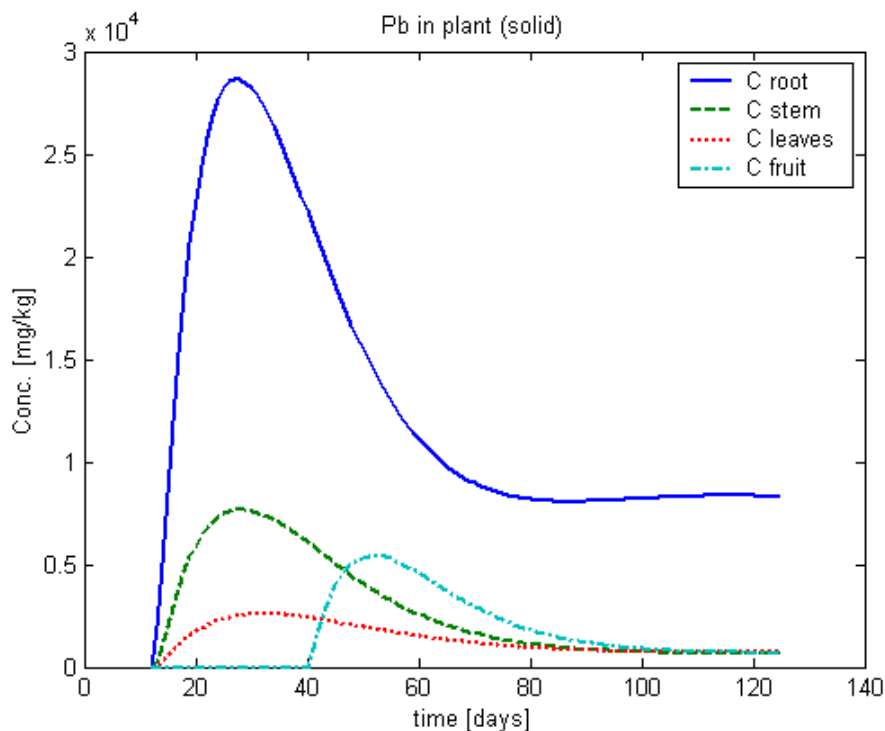


Σχήμα 7-4: Κατακράτηση (precipitation) του Pb στην επιφάνεια της ρίζας

Στα Σχήματα 7-5 και 7-6 φαίνεται η συγκέντρωση του μολύβδου στην υγρή (mg/L) και τη στερεή φάση (mg/kg) στα διάφορα τμήματα του φυτού. Παρατηρούμε στη ρίζα, τον βλαστό και τα φύλλα μία αρχική αύξηση μέχρι την 20^η ημέρα της καλλιέργειας για την υγρή φάση και την 30^η ημέρα για την στερεή φάση ενώ ακολουθεί μείωση για την υπόλοιπη περίοδο ανάπτυξης. Η συγκέντρωση του Pb στον καρπό μειώνεται με αντίστοιχο τρόπο. Αυτό συμβαίνει επειδή ο ρυθμός της ανάπτυξης του φυτού είναι μεγαλύτερος από τον ρυθμό κατακράτησης του μετάλλου κατά τη διάρκεια της ενεργής περιόδου ανάπτυξης η οποία φτάνει μέχρι την 90^η περίπου ημέρα της καλλιέργειας.

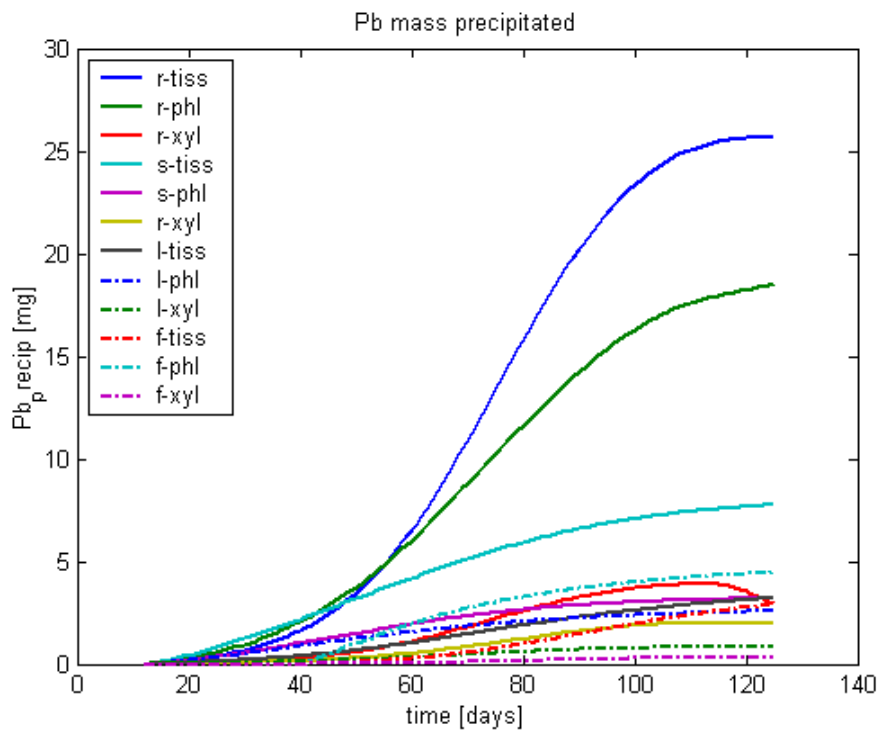


Σχήμα 7-5: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση

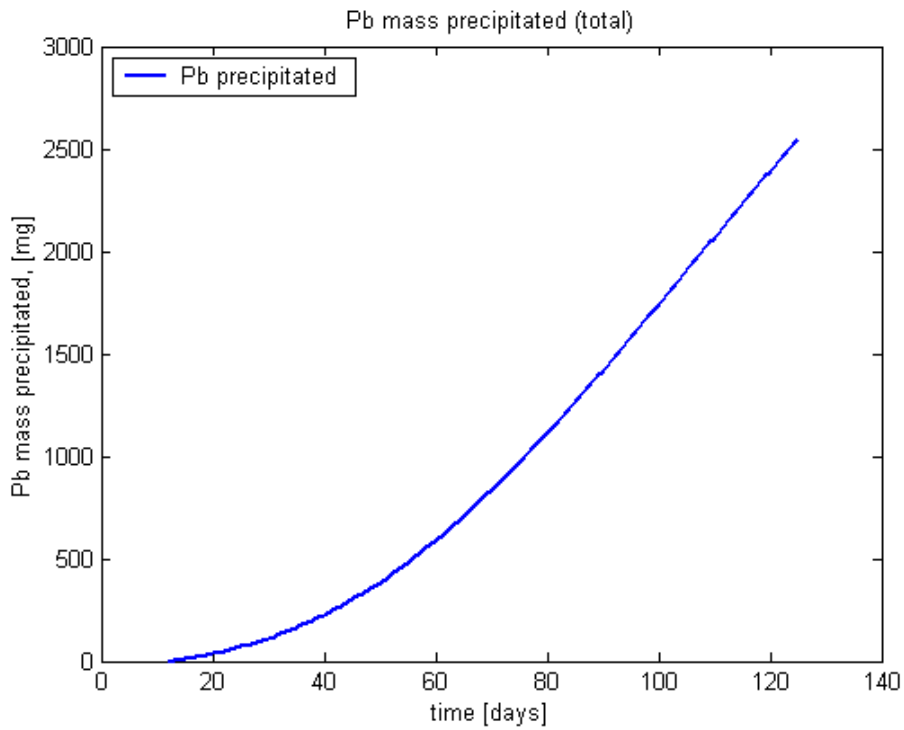


Σχήμα 7-6: Συγκέντρωση Pb σε κάθε τμήμα του φυτού στην στερεή φάση

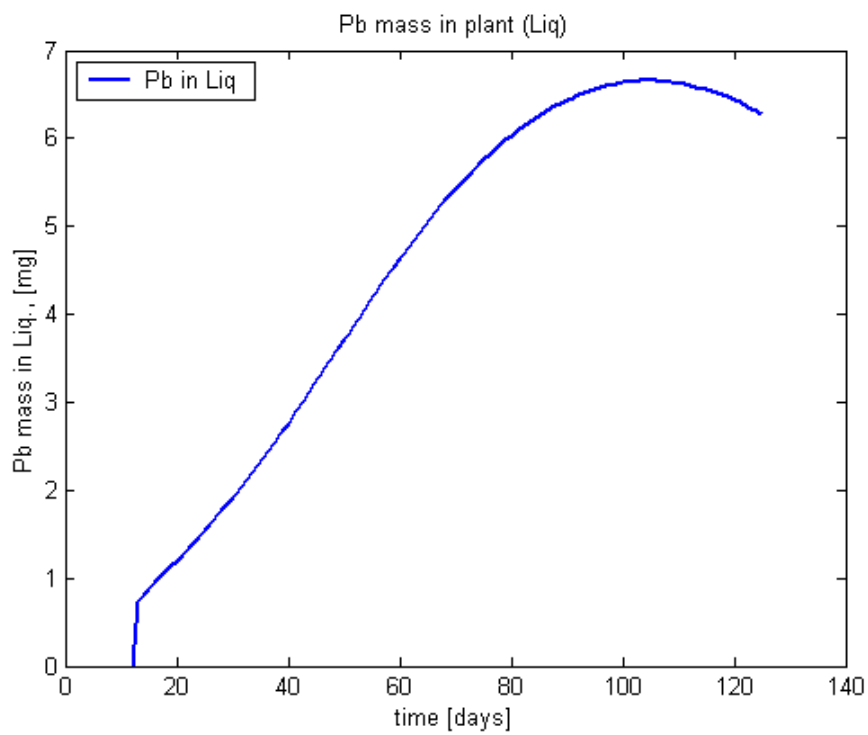
Στο Σχήμα 7-7 φαίνεται η κατακράτηση (precipitation) του μολύβδου στα επιμέρους τμήματα του αραβόσιτου ενώ στο Σχήμα 7-8 η συνολική κατακράτηση. Η ποσότητα του μετάλλου (mg) σε ολόκληρο το φυτό για την υγρή αλλά και τη στερεή φάση φαίνεται στα Σχήματα 7-9 και 7-10 αντίστοιχα. Ο πιο σημαντικός μηχανισμός που περιγράφεται στο μοντέλο είναι η κατακράτηση (precipitation) του Pb σε όλα τα τμήματα του φυτού. Η κατακράτηση (precipitation) αποτελεί επίσης τον σημαντικότερο μηχανισμό για την ολική κατακράτηση του Pb στην στερεή φάση. Μόνο ο μολύβδος που δεν έχει κατακρατηθεί είναι διαθέσιμος για μεταφορά μέσα στο φυτό και αυτό εξηγεί την μικρή ποσότητα του Pb στην υγρή φάση σε σχέση με την στερεή φάση. Στο Σχήμα 7-11 μπορούμε να δούμε την συσσώρευση του μολύβδου σε ολόκληρο το φυτό σε συνάρτηση με το χρόνο. Στο τέλος της περιόδου καλλιέργειας (125^η ημέρα) παρατηρείται η μέγιστη τιμή της συσσωρευμένης ποσότητας του μολύβδου σε ολόκληρο το φυτό που φτάνει τα 2602,4 mg.



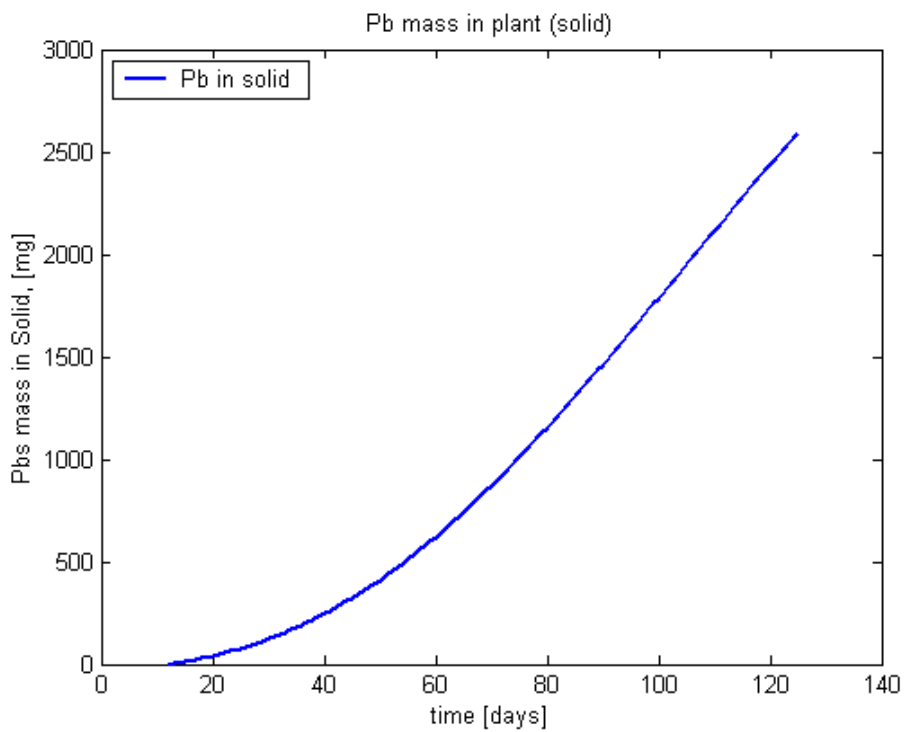
Σχήμα 7-7: Κατακράτηση (precipitation) του Pb στα διάφορα τμήματα του φυτού



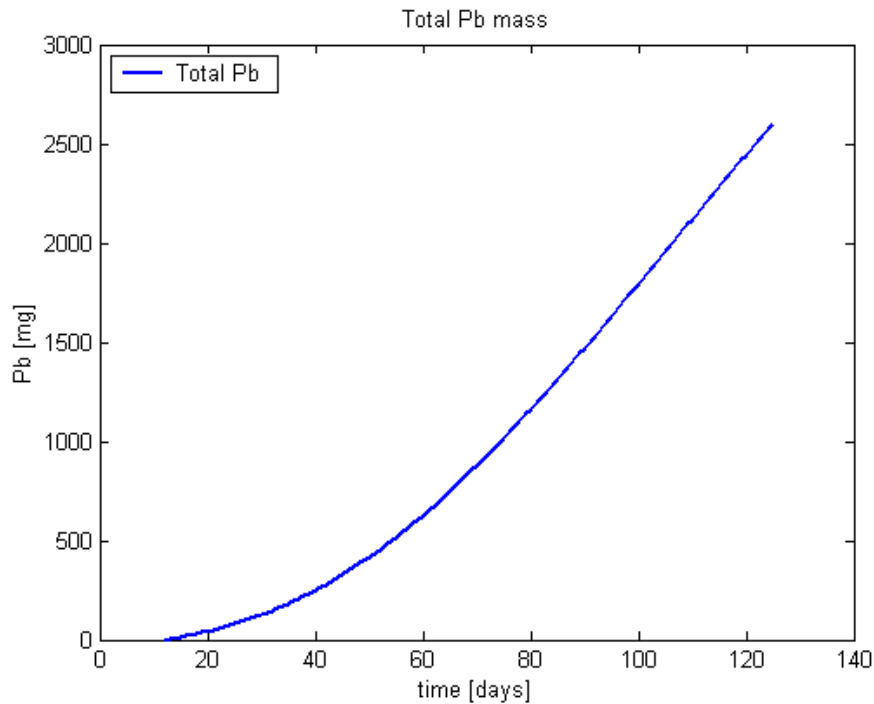
Σχήμα 7-8: Κατακράτηση (precipitation) του Pb σε ολόκληρο το φυτό



Σχήμα 7-9: Ποσότητα Pb στην υγρή φάση του φυτού

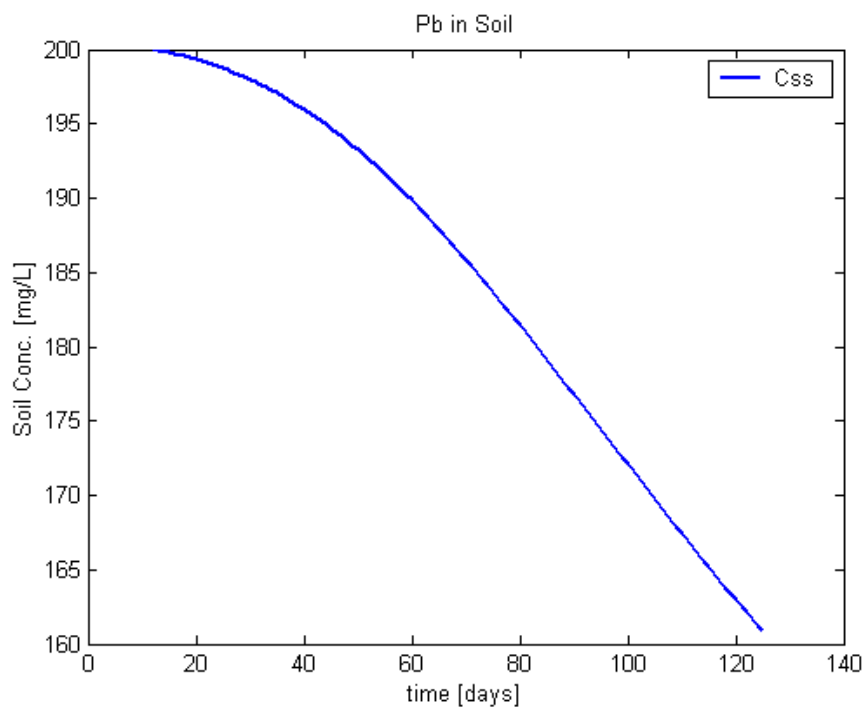


Σχήμα 7-10: Ποσότητα Pb στην στερεή φάση του φυτού

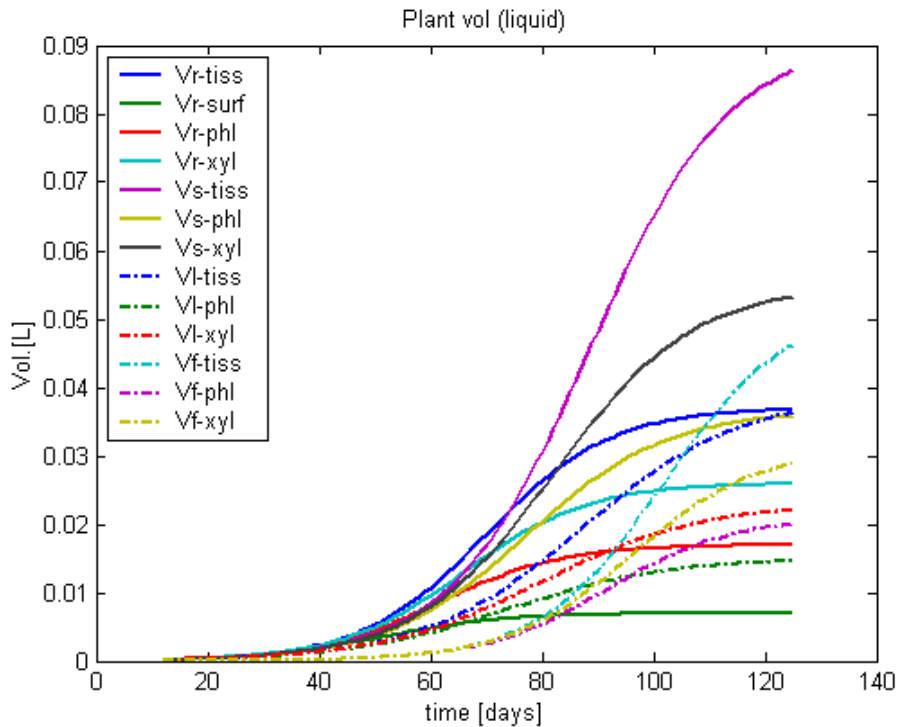


Σχήμα 7-11: Συνολική ποσότητα Pb κατακρατημένη στο φυτό

Για την περίπτωση της προσομοίωσης του δεύτερου σεναρίου έχουμε το Σχήμα 7-12 στο οποίο φαίνεται η μείωση της συγκέντρωσης του Pb στο έδαφος. Τέλος στο Σχήμα 7-13 μπορούμε να δούμε την ανάπτυξη κάθε επιμέρους τμήματος του αραβόσιτου. Όπως έχει αναφερθεί η μεταβολή των όγκων για όλα τα τμήματα ακολουθούν τη λογιστική καμπύλη.



Σχήμα 7-12: Συγκέντρωση Pb στο έδαφος



Σχήμα 7-13: Αύξηση του όγκου στα διάφορα τμήματα του φυτού

7.2 1^ο Σενάριο Προσομοίωσης

Αυτό το σενάριο προσομοίωσης προσεγγίζει την εξυγίανση υπόγειων υδροφορέων. Έτσι η τιμή της συγκέντρωσης του μολύβδου στο εδαφικό διάλυμα είναι σταθερή και ίση με 200 mg/L αντιπροσωπεύοντας την συγκέντρωση του μετάλλου στον υδροφόρα που βρίσκεται γύρω από το ριζικό σύστημα. Αν θεωρήσουμε έκταση 1000 m² και απόσταση ανάμεσα σε δύο φυτά ίση με 0.5 m , τότε θα έχουμε περίπου 4100 φυτά. Όπως αναφέρεται παραπάνω το κάθε φυτό μπορεί να συσσωρεύσει 2602.4 mg μολύβδου οπότε για τα 4100 φυτά η ποσότητα του μολύβδου που αφαιρείται από τον υδροφόρα σε μία περίοδο καλλιέργειας είναι 10669.840 gr.

7.3 2° Σενάριο Προσομοίωσης

Σε αυτό το σενάριο εξετάζουμε μία περίπτωση η οποία προσεγγίζει την εξυγίανση ρυπασμένων εδαφών. Όπως και στο 1° σενάριο θεωρούμε ότι απόσταση ανάμεσα στα φυτά είναι 0.5 m καθώς και ότι το βάθος του ριζικού συστήματος του αραβόσιτου φτάνει τα 0.3 m. Οπότε ο όγκος του εδάφους που αντιστοιχεί σε κάθε φυτό θα είναι $V = \pi \cdot 0.25^2 \cdot 0.3 \text{ m}^3 = 0.059 \text{ m}^3$ ή $V = 60 \text{ L}$, αφού μπορεί να θεωρηθεί ότι κάθε φυτό ασκεί επιρροή σε μια κυκλική επιφάνεια ακτίνας 0.25 m.

Το ισοζύγιο μάζας του μολύβδου για τον όγκο ελέγχου του εδάφους θα είναι:

$$V_{soil} \frac{dC_{ss}}{dt} = -r_{plant}$$

όπου:

r_{plant} : ρυθμός πρόσληψης μολύβδου από το φυτό με :

$$r_{plant} = -C_{ss} \cdot Q_{trans} - (C_{ss} - C_{l,r,surf}) \cdot DR \cdot V_{l,rfs}$$

Οπότε :

$$V_{soil} \frac{dC_{ss}}{dt} = -C_{ss} \cdot Q_{trans} - (C_{ss} - C_{l,r,surf}) \cdot DR \cdot V_{l,rfs}$$

με αρχική σταθερή τιμή για την συγκέντρωση C_{ss} ίση με 200 mg/L .

Σε αυτό το σενάριο φυτοεξαγωγής εκτός από τις εξισώσεις του μοντέλου που παρουσιάστηκαν αναλυτικά σε προηγούμενο κεφάλαιο προστίθεται και η τελευταία εξίσωση που περιγράφει την μεταβολή της συγκέντρωσης του μολύβδου στο έδαφος C_{ss} . Θεωρούμε ότι το ριζικό σύστημα του αραβόσιτου καλύπτει ολόκληρο τον όγκο ελέγχου για να μπορούμε να υποθέσουμε ομοιόμορφη συγκέντρωση C_{ss} .

Τα αποτελέσματα του μοντέλου έδειξαν μείωση της συγκέντρωσης του Pb στο έδαφος από 200 mg/L σε 160.86 mg/L, δηλαδή μείωση κατά 19.57% μέχρι το τέλος της περιόδου καλλιέργειας του αραβόσιτου (125^η ημέρα).

Μία επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων αυτών αποτελεί η σύγκριση της ποσότητας του Pb που αφαιρείται από το έδαφος και εκείνης που συσσωρεύεται σε κάθε φυτό οι οποίες είναι 2.345 gr περίπου.

Κεφάλαιο 8

Συμπεράσματα

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας αναπτύχθηκε ένα μαθηματικό μοντέλο προσομοίωσης της φυτοεξυγίανσης ρυπασμένων από μόλυβδο εδαφών, ιζημάτων και υπόγειων υδροφορέων. Παρά το γεγονός ότι η φυτοεξυγίανση αλλά και ειδικότερα η φυτοεξαγωγή αποτελεί μία πολλά υποσχόμενη μέθοδο εξυγίανσης με αρκετά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με άλλες συμβατικές τεχνολογίες, η εφαρμογή της βρίσκεται ακόμα σε πειραματικό στάδιο. Για την μοντελοποίηση επιλέχθηκε ο αραβόσιπος (*Zea mays*) επειδή λόγω της φυσιολογίας του έχει την ικανότητα να μεταφέρει τον μόλυβδο σε όλα τα τμήματά του αλλά και να τον συσσωρεύει στην βιομάζα του.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδειξαν ότι ο σημαντικότερος παράγοντας της συσσώρευσης του μολύβδου είναι η κατακράτηση (precipitation) σε όλα τα τμήματα του φυτού. Η μεγαλύτερη ποσότητα του μολύβδου στο φυτό βρίσκεται στην στερεή φάση, γεγονός φυσικό αφού μόνο ο μόλυβδος που δεν έχει κατακρατηθεί - κυρίως με κατακράτηση (precipitation) - είναι διαθέσιμος για μεταφορά στο φυτό (υγρή φάση). Ειδικότερα μεγαλύτερη συσσώρευση μετάλλου γίνεται στην ρίζα και ακολουθούν ο βλαστός, ο καρπός και τα φύλλα αντίστοιχα.

Με σκοπό την εξέταση της αποτελεσματικότητας της φυτοεξαγωγής ως μέθοδος εξυγίανσης μελετήσαμε τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για δύο διαφορετικά σενάρια. Το πρώτο σενάριο προσεγγίζει την εξυγίανση υπόγειων

υδροφορέων και τα αποτελέσματα έδειξαν ότι κάθε φυτό αραβόσιτου έχει την ικανότητα να συσσωρεύσει 2602.4 mg μολύβδου. Το δεύτερο σενάριο προσεγγίζει την εξυγίανση εδαφών και από τις προσομοιώσεις του μοντέλου προκύπτει ότι με την φυτοεξαγωγή επιτυγχάνεται μείωση του μολύβδου στο έδαφος κατά 19.57% στην διάρκεια μίας περιόδου καλλιέργειας (125 ημέρες). Τα παραπάνω αποτελέσματα μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η φυτοεξαγωγή μπορεί να αποτελέσει βιώσιμη μέθοδο εξυγίανσης.

Το μοντέλο εκτός από τις δυνατότητες πρόβλεψης και σχεδιασμού συστημάτων φυτοεξυγίανσης που μας παρέχει, αποτελεί και ένα χρήσιμο εκπαιδευτικό εργαλείο για την κατανόηση των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα στο δυναμικό σύστημα φυτού – μετάλλου που εξετάζεται. Η μηχανιστική προσέγγιση που ακολουθήθηκε μας δίνει την δυνατότητα να μελετήσουμε και να ερμηνεύσουμε μηχανισμούς όπως είναι η πρόσληψη του μολύβδου από το έδαφος μέσω του ριζικού συστήματος του αραβόσιτου, η μεταφορά του μετάλλου μέσα στο φυτό και τελικά η συσσώρευσή του. Ακόμη το μοντέλο αυτό με τις απαραίτητες τροποποιήσεις μπορεί να αποτελέσει τη βάση για την μελέτη και προσομοίωση άλλων συστημάτων φυτού – μετάλλου.

Η συνέχιση της έρευνας και της συγκέντρωσης περισσότερων πληροφοριών σχετικών με την φυτοεξυγίανση και την μοντελοποίηση της είναι απαραίτητη για την περαιτέρω ανάπτυξη της μεθόδου. Μόνο έτσι θα δοθούν απαντήσεις σε ερωτήσεις κλειδιά που αφορούν την αποδοτική εφαρμογή της τεχνολογίας και θα επαληθευτούν οι υποθέσεις που έγιναν τόσο για ορισμένες παραμέτρους του μοντέλου όσο και για τους εμπλεκόμενους μηχανισμούς.

Βιβλιογραφία

- [1] Balsberg, Pahlsson, A.M., (1989). Toxicity of heavy metals (Zn, Cu, Cd, Pb) to vascular plants. *Water Air Soil Pollut.* 66, 163-171.
- [2] Baumhardt, G.R., Welch, L.F., 1972. Lead uptake and corn growth with soil-applied lead. *J. Environ. Qual.* 1, 92-94.
- [3] Brennan, M.A., Shelley, M.L., 1999. A Model of the Uptake, Translocation, and Accumulation of Lead (Pb) by Maize for the Purpose of Phytoextraction. *Ecological Engineering* 12 (1999), 271-297.
- [4] Cory, R.B., Fuji, R., Hendrickson, L.L., 1981. Bioavailability of heavy metals in soil-sludge systems. In: *Fourth Annual Madison Conference of Applied Research and Practice on Municipal and Industrial Waste*. University of Wisconsin Extension, Madison, WI, pp. 449-466.
- [5] Cunningham, S.D., Shann, J.R., Crowley, D., Anderson, T.A., 1997. Phytoremediation of contaminated water and soil. In: *Crueger, E.L., Anderson, T.A., Coats, J.P. (Eds.), Phytoremediation of Soil and Water Contaminants*. American Chemical Society, Washington, DC.
- [6] Davies, B.E., 1990. Lead. In: *Alloway, B.J. (Ed.), Heavy Metals in Soils*. Blackie and Sons, New York, pp. 177-196. Ernst, W.H.O., 1996. Bioavailability of heavy metals and decontamination of soils by plants. *Appl. Geochem.* 11, 163-167.
- [7] *Emerging Technologies for the Phytoremediation of Metals in Soils (viii)*. 1997. Interstate Technology and Regulatory Cooperation Work Group (ITRC).
- [8] Fahn, A., 1990. *Plant Anatomy*, 4th ed. Pergamon Press, New York.
- [9] Fargasova, A., (1994). Effect of Pb, Cd, Hg, As and Cr on germination and root growth of *Sinapis alba* seeds. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 52, 452-456.
- [10] Forbes, J.C. Watson, R.D., 1992. *Plants in Agriculture*. Cambridge University Press, New York, 355 pp.

- [11] Foy, C.D., Chaney, R.L., White, M.C., 1978. The physiology of metal toxicity in plants. In: Briggs, W.R., Green, P.B., Jones, R.L. (Eds.), Annual Review of Plant Physiology. Annual Reviews, Palo Alto, CA.
- [12] Gardner, F.P., Pearce, R.B., Mitchell, R.L., 1985. Physiology of Crop Plants. The Iowa State University Press, Ames, IA, 327 pp.
- [13] Gavloski, J.E., Whifield, G.H., Ellis, C.R., 1992. Effect of restricted watering on sap flow and growth in corn (*Zea mays* L.). Can. J. Plant Sci. 72, 361–368.
- [14] Gregory, P.J., 1988. Growth and functioning of plant roots. In: Wild, A. (Ed.), Russell's Soil Conditions and Plant Growth, 11th ed. John Wiley, New York, pp. 113–167.
- [15] Hanway, J.J., 1966. How a Corn Plant Develops, Special Report Number 48, Iowa State University of Science and Technology Cooperative Extension Service. Iowa State University of Science and Technology, Ames, IA, 17 pp.
- [16] Hanway, J.J., Russell, W.A., 1969. Dry matter accumulation in corn (*Zea mays* L.), plant comparisons among single cross hybrids. Agronomy J. 61, 947–951.
- [17] Hassett, J.J., Miller, J.E., Koeppe, D.E., 1976. Interaction of lead and cadmium on maize root growth and uptake of lead and cadmium by roots. Environ. Pollut. 11, 297–302.
- [18] Huang, J.W., Cunningham, S.D., 1996. Lead phytoextraction: species variation in lead uptake and translocation. New Phytol. 134, 75–84.
- [19] Huang, J.W., Chen, J., Berti, W.R., Cunningham, S.D., 1997. Phytoremediation of lead-contaminated soils: role of synthetic chelates in lead phytoextraction. Environ. Sci. Technol. 31, 800–805.
- [20] Jeanna R. Henry, 2000. An overview of the phytoremediation of lead and mercury. National Network of Environmental Management Studies (NNEMS).
- [21] Jones, L.H.P., Jarvis, S.C., Cowling, D.W., 1973. Lead uptake from soils by perennial ryegrass and its relation to the supply of an essential element. Plant Soil 38, 605–619.
- [22] Kabata-Pendias, A., Pendias, H., 1992. Trace Elements in Soils and Plants. CRC Press, Boca Raton, FL, 365 pp.
- [23] Καλογεράκης Νίκος, 2002. Πανεπιστημιακές Σημειώσεις για το μάθημα 'Βιολογική Εξυγίανση Περιβάλλοντος'. Πολυτεχνείο Κρήτης.
- [24] Καλογεράκης Νίκος, 2001. Πανεπιστημιακές Σημειώσεις για το μάθημα 'Τεχνική Βιοχημικών Διεργασιών'. Πολυτεχνείο Κρήτης.
- [25] Kochian, L.V., 1991. Mechanisms of micronutrient uptake and translocation in plants. In: Mordtvedt, J.J., Cox, F.R., Shuman, L.M., Welch, R.M. (Eds.), Micronutrients in Agriculture, 2nd ed. Soil Science Society of America, Madison, WI, pp. 229–296.
- [26] Koeppe, D.E., 1977. The uptake, distribution, and effect of cadmium and lead in plants. Sci. Total Environ. 7, 197–206.

- [27] Kramer, P.J., Boyer, J.S., 1995. *Water Relations in Plants and Soils*. Academic Press, San Diego, CA, 495 pp.
- [28] Kumar, G., Singh, R.P., Sushila, (1991). Nitrate assimilation and biomass production in *Sesamum indicum* L seedlings in a lead enriched environment. *Water Air Soil Pollut.* 66, 163-171.
- [29] Kumar, P.B.A.N., Dushenkov, V., Motto, H., Raskin, I., 1995. Phytoextraction: the use of plants to remove heavy metals from soils. *Environ. Sci. Technol.* 29, 1232-1238.
- [30] Lindsay, W.L., 1979. *Chemical Equilibria in Soils*. John Wiley, New York.
- [31] Lindstrom, F.T., Boersma, L., MacFarlane, C., 1991. Mathematical model of plant translocation of organic chemicals; development of the model. *J. Environ. Quality* 20, 129-136.
- [32] Μακρυνόδης Γιώργος, 2002. ΔΙΠ. Ανάπτυξη μαθηματικού μοντέλου για την φυτοεξαγωγή μολύβδου (Pb) από ρυπασμένα εδάφη. Πολυτεχνείο Κρήτης.
- [33] Malone, C., Koeppe, D.E., Miller, R.J., 1974. Localization of lead accumulated in corn plants. *Plant Physiol.* 53, 388-394.
- [34] Marschner, H., 1986. *Mineral Nutrition of Higher Plants*. Academic Press, Orlando, FL, 674 pp.
- [35] McBride, M.B., 1994. *Environmental Chemistry of Soils*. Oxford University Press, New York.
- [36] Mengel, K., Kirkby, E.A., 1987. *Principles of Plant Nutrition*, 4th ed. International Potash Institute, 687 pp.
- [37] Milburn, J.A., 1979. *Water Flow in Plants*. Longman Group Limited, London, 225 pp.
- [38] Miller, J.E., Hassett, J.J., Koeppe, D.E., 1977. Interactions of lead and cadmium on metal uptake and growth of corn plants. *J. Environ. Qual.* 6, 18-20.
- [39] Nissen, P., 1996. Uptake mechanisms. In: Waisel, Y., Eshel, A., Kafkafi, U. (Eds.), *Plant Roots, the Hidden Half*, 2nd ed. Marcel Dekker, New York.
- [40] Nobel, P.S., 1991. *Physicochemical and Environmental Plant Physiology*. Academic Press, San Diego, CA, 635 pp.
- [41] Pitman, M.G., Cram, W.J., 1973. Regulation of inorganic ion transport in plants. In: Anderson, W.P. (Ed.), *Ion Transport in Plants*. Academic Press, New York.
- [42] Raskin, I., Kumar, N.P.B.A., Dushenkov, S., Salt, D.E., 1994. Bioconcentration of heavy metals by plants. *Curr. Opin. Biotech.* 5, 285-290.
- [43] Raven, P.H., Evert, R.F., Eichhorn, S.E., 1986. *Biology of plants (Fourth edition)*, Worth Publishers, Inc., New York.

- [44] Ritchie, S.W., Hanway, J.J., Benson, G.O., 1997. How a corn plant develops, Special Report Number 48. Iowa State University of Science and Technology. Cooperative Extension Service, Ames, IA.
- [45] Salisbury, F.B., Ross, C.W., 1992. Plant Physiology. Wadsworth Publishing Company, Belmont, CA, 682 pp.
- [46] Salt, D.E., Blaylock, M., Kumar, N.P.B.A., Dushenkov, V., Ensley, B.D., Chen, I., Raskin, I., 1995. Phytoremediation: a novel strategy for the removal of toxic metals from the environment using plants. *Biotechnology* 3 13, 468–474.
- [47] Stephan Clemens, Michael G. Palmgren and Ute Kramer, 2002. A long way ahead: Understanding and engineering plant metal accumulation.
- [48] The Workshop on Tools of Environmental Cleanup: Engineered Plants for Phytoremediation. January 26-28, 2003.
- [49] Tiffin, L.O., 1975. The form and distribution of metals in plants. In: Drucker, H., Wildung, R.E. (Chairmen), *Biological Implications of Metals in the Environment*. Proceedings of the Fifteenth Annual Hanford Life Sciences Symposium. Technical Information Center, Energy Research and Development Administration, Springfield, VA, pp. 315–334.
- [50] Todd Zynda, 2001. *Enviro Tools Fact Sheet*, Michigan State University TAB Program
- [51] United States Protection Agency (USEPA). 2000. *Introduction to Phytoremediation*. EPA 600/R-99/107. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Cincinnati, OH.
- [52] University of Illinois, 1972. *An Interdisciplinary Study of Environmental Pollution by Lead and Other Metals; Progress Report to the National Science Foundation*. University of Illinois, Urbana-Champaign, IL, 334 pp.
- [53] Westgate, M.E., Boyer, J.S., 1983. Transpiration and growth-induced water potentials in maize. *Plant Physiol.* 74, 882–889.
- [54] Wickland, D.E., (1990). Vegetation of heavy metal contaminated soils in North America. In: Shaw A.J. (ed.) *Heavy metal tolerance in plants : evolutionary aspects*. CRC Press, Florida, 39-51.
- [55] Xiong, Z.T., (1997 c). Bioaccumulation and physiological effects of excess lead in a roadside pioneer species *Sonchus oleraceus* L. *Environ. Pollut.* 97 (in press).
- [56] Zimdahl, R.L., Koeppe, D.E., 1977. Uptake by plants. In: Boggess, W.R., Wixson, B.G. (Eds.), *Lead in the Environment*. National Science Foundation, Washington, DC.