

ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ



ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΓΙΑ ΤΗ  
ΦΥΤΟΕΞΑΓΩΓΗ ΜΟΛΥΒΔΟΥ ΑΠΟ ΥΦΑΛΜΥΡΕΣ  
ΡΥΠΑΣΜΕΝΕΣ ΠΕΡΙΟΧΕΣ

ΑΝΤΡΕΑΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

Δρ. ΝΙΚΟΛΑΟΣ ΚΑΛΟΓΕΡΑΚΗΣ (επιβλέπων)

Δρ. ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΓΚΕΚΑΣ

Δρ. ΔΙΟΝΥΣΗΣ ΜΑΝΤΖΑΒΙΝΟΣ

Περιεχόμενα:

I. Περίληψη.....	1
II. Φυτοεξυγίανση.....	2
II.1: Εφαρμογές.....	3
II.2: Φυτοεξαγωγή.....	5
II.3: Φυτοεξαγωγή Μολύβδου.....	7
III: Πηγές του Μολύβδου.....	9
III.1: Επίδραση του Pb στα φυτά.....	9
III.2: Μορφές του Μολύβδου.....	10
III.3: Επιδράσεις στην υγεία.....	10
IV: Φυσιολογία των Φυτών.....	11
IV.1: Ρίζα.....	11
IV.2: Αγωγοί των Φυτών.....	13
IV.3: Μεταφορά του Νερού.....	13
IV.4: Ροή μάζας.....	13
IV.5: Διάχυση.....	14
IV.6: Διαπνοή.....	14
IV.7: Μεταφορά Θρεπτικών Στοιχείων Μέσω Μεμβρανών.....	14
IV.8: Μηχανισμοί Μεταφοράς Μετάλλων από το Εδαφικό Διάλυμα έως τους Ιστούς του Φυτού.....	15
IV.9: Καθοριστικοί Παράγοντες για τη Μεταφορά και Συσσώρευση των Μετάλλων.....	16
IV.9.i: Κινητοποίηση.....	16
IV.9.ii: Πρόσληψη.....	17
IV.10: Μεταφορά στο Ξύλο.....	17
IV.11: Εναπόθεση, Κυκλοφορία και Αποθήκευση.....	17
V: Αλατότητα.....	18
VI. Μοντελοποίηση Περιβαλλοντικών Συστημάτων.....	21

VI.1: Βασικές Έννοιες και Ορισμοί για την Ανάπτυξη Μαθηματικού Μοντέλου Πρόσληψης μη Οργανικών Ουσιών από τα Φυτά.....	23
VI.2: Ανάλυση Ανάπτυξης Μηχανιστικού Μοντέλου.....	24
VI.3: Μοντελοποίηση Βασικών Διεργασιών.....	27
VI.3.i: Διάχυση Μέσω Μεμβράνης.....	27
VI.3.ii: Συμμεταφορά με το Ρεύμα Διαπνοής.....	28
VI.3.iii: Ρόφηση στα Κυτταρικά Τοιχώματα.....	28
VI.3.iv: Η Ανάπτυξη των Φυτών.....	29
VII: Υποθέσεις, Παραδοχές Μοντέλου.....	31
VIII: Υπολογισμός, Προσδιορισμός Όγκων Ελέγχου και Διάγραμμα Ροής Μετάλλου στο Φυτό.....	33
VIII.1: Διάγραμμα Ροής Νερού και Θρεπτικών Στοιχείων στους Όγκους Ελέγχου.....	35
VIII.1.i: Ρίζα.....	35
VIII.1.ii: Βλαστός.....	36
VIII.1.iii: Φύλλο.....	36
IX: Μαθηματικές Εξισώσεις.....	37
IX.i: Ρίζα.....	37
IX.ii: Βλαστός.....	44
IX.iii: Φύλλο.....	50
X: Αποτελέσματα Μοντέλου.....	55
XI: Ανάλυση Ευαισθησίας.....	75
XI.i: Ρυθμός Ενεργούς Διάχυσης (DR).....	75
XI.ii: Συγκέντρωση Μολύβδου στο Εδαφικό Διάλυμα ( $C_{ss}$ ).....	75
XI.iii: Μέγιστος Ρυθμός Πρόσληψης Μετάλλου ( $UPT_{max}$ ).....	76
XI.iv: Ρυθμοί Κατακράτησης ( $PR_s$ , $PR_t$ , $PR_{phl}$ , $PR_{xyl}$ ).....	76
XI.v: Ανάπτυξη του Φυτού ( $k$ , $V_{0,root}$ ).....	77

XI.vi: Τμήμα της Ροής από το Ξύλο προς τον Ηθμό.....	80
XI.vii: Σταθερά ημικορεσμού ( $K_{hs}$ ).....	81
XI.viii: Συντελεστής Κατανομής Ισορροπίας Προσροφημένου – Εν Διαλύσει Μετάλλου ( $P_{r,surf}$ ).....	81
XI.iv: Κινητική Σταθερά Προσρόφησης (PR).....	81
XII: Συμπεράσματα.....	82
XIII: Παράρτημα.....	84
XIV: Βιβλιογραφία.....	108

## I. Περίληψη

Στη παρούσα διπλωματική εργασία μοντελοποιήθηκε η απορύπανση από το μόλυβδο, υφάλμυρων συστημάτων χρησιμοποιώντας τη τεχνολογία της φυτοεξαγωγής. Το φυτό που επιλέχθηκε είναι η πικροδάφνη (*Nerium oleander*). Διαχωρίστηκε το φυτό σε 10 υποτμήματα καλά ανεμειγμένα με τη δυνατότητα μεταφοράς μάζας μεταξύ τους, για κάθε διαμέρισμα αλλά και για τον συνολικό όγκο ελέγχου, ισχύει  $\sum Q_{in} = \sum Q_{out}$  (CSTR αντιδραστήρας). Υποτέθηκε ότι το μέταλλο ακολουθά τη ροή του νερού και των άλλων θρεπτικών στοιχείων που προσκομεί το φυτό. Το μέταλλο βρίσκεται σε δυο φάσεις στο φυτό. Στη στερεή φάση (κατακρατήσιμη και προσροφημένη ποσότητα) και στην υγρή φάση (διαλυμένη ποσότητα). Για κάθε υποτμήμα του φυτού σχεδιάστηκαν δυο διαφορετικές εξισώσεις, μια για κάθε φάση.

Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων έγινε με τη χρήση του λογισμικού πακέτου Matlab 7.1.

Τα αποτελέσματα του μοντέλου έδειξαν ότι η αλατότητα βοηθάει στη δέσμευση του Pb στο συγκεκριμένο φυτό. Η μεγαλύτερη ποσότητα κατακρατήσιμης μάζας μετάλλου βρίσκεται στη ρίζα. Ένα μικρό ποσοστό ανεβαίνει προς το βλαστό και τα φύλλα.

Η ανάλυση ευαισθησίας έδειξε ότι οι παράμετροι που επηρεάζουν τη δέσμευση του μετάλλου στο φυτό σε μεγάλο βαθμό, συσχετίζονται με τη διάχυση που λαμβάνει μέρος στην επιφάνεια της ρίζας. Για μελλοντική μελέτη είναι απαραίτητη η ταξινόμηση και η προσθήκη των μηχανισμών του συστήματος εδάφους – μετάλλου, ώστε το μοντέλο να γίνει ακόμη πιο ρεαλιστικό.

Η μέχρι τώρα μελέτη στη τεχνολογία της φυτοεξαγωγής φέρει θετικά αποτελέσματα συγκρινόμενη με άλλες τεχνολογίες απορρύπανσης δαπανηρές σε ενέργεια και χρήμα. Είναι σημαντικό να συνεχιστεί η μοντελοποίηση των συστημάτων ρυπων – φυτών. Με αυτή τη διαδικασία θα προσδιοριστούν οι σημαντικοί παράμετροι που επηρεάζουν το σύστημα. Τα αποτελέσματα θα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ώστε να γίνει γενετική μετατροπή σε διάφορα είδη φυτών. Η λύση της γενετικής μετατροπής είναι η πιο σοβαρή πρόταση και η πιο περιβαλλοντικά φιλική (δεν θα χρειάζεται προσθήκη χημικών ενώσεων για καλύτερη ανάληψη ρύπου, υπερβολική άρδευση, θα είναι δυνατό να γίνεται δέσμευση αχρείαστων στοιχείων από το έδαφος / υδροφορέα, όπως NaCl) για τη αύξηση της απόδοσης της τεχνολογίας.

## II. Φυτοεξυγίανση

Το σύνολο των διεργασιών στις οποίες χρησιμοποιούνται φυτά με σκοπό την απορύπανση εδαφών και υδάτων επιβεβαρυμένων με ανόργανους και οργανικούς ρυπαντές. Στον παρακάτω πίνακα παρατίθενται κάποιοι από τους ρυπαντές που έχουν μελετηθεί:

Ανόργανοι	Οργανικοί
Θρεπτικά στοιχεία (N & P)	Υδρογονάνθρακες πετρελαίου
Μεταλλοειδή (Se & As)	Χλωριωμένοι διαλύτες
Ραδιενεργά	Μικροβιοκτόνα
Βαρέα μέταλλα	PCB's
	PAH's
	Εκρηκτικά

Πίνακας II.1: Ρύποι που δύναται να δεσμευτούν με τη χρήση της φυτοεξυγίανσης  
Πηγή: US E.P.A 2004

Στη μελέτη των μηχανισμών και διεργασιών που παίρνουν μέρος στην τεχνολογία αυτή χρησιμοποιούνται γνώσεις από διάφορα επιστημονικά πεδία όπως η γεωπονία, μικροβιολογία, μηχανική και η υδρογεωλογία.

Η έρευνα της φυτοεξυγίανσης χωρίζεται σε δύο κατηγορίες: στη μελέτη των μηχανισμών/διεργασιών (αλληλεπίδραση φυτού και ρύπου) και στην εκτίμηση των απαιτήσεων για την εφαρμογή της (κόστος, αποτελεσματικότητα).

Η τεχνολογία της φυτοεξυγίανσης βρίσκεται ακόμη στο στάδιο των εργαστηριακών εφαρμογών, με ελάχιστες εφαρμογές σε πειράματα πεδίου. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να μην είναι πλήρως τεκμηριωμένη η εφαρμογή της φυτοεξυγίανσης σε πραγματικές συνθήκες. Τα ενθαρυντικά αποτελέσματα που προκύπτουν από τις εργαστηριακές έρευνες στη φυτοεξυγίανση την καθιστούν μια υποσχόμενη τεχνολογία και συνεχώς αναπτυσσόμενη που μπορεί να μειώσει το κόστος εξυγίανσης μιας περιοχής όπου η ρύπανση είναι χαμηλού ή μεσαίου επιπέδου και συνάμα να είναι αισθητικά ευχάριστη.

### 1. Εφαρμογές

Η ταξινόμηση των εφαρμογών της φυτοεξυγίανσης γίνεται με κριτήριο τον μηχανισμό που εμπλέκεται:

- Φυτοεξαγωγή είναι η πρόσληψη των ρυπαντικών ουσιών από τη ρίζα του φυτού και η μεταφορά τους στο υπέργειο τμήμα του φυτού. Ο ρύπος δεσμεύεται από το φυτό και ακινητοποιείται αφού ενσωματώνεται στον κυτταρικό ιστό. Τα φυτά μετά μαζεύονται και επεξεργάζονται για την αφαίρεση του ρύπου.
- Φυτοαποδόμηση είναι η διάσπαση οργανικών ρύπων στο σώμα του φυτού από τις μεταβολικές διεργασίες του. Οι κύριες διεργασίες που λαμβάνουν μέρος είναι η πρόσληψη του μετάλλου και ο μεταβολισμός. Ο μηχανισμός της φυτοαποικοδόμηση είναι ιδιαίτερα περίπλοκος λόγω των μετασχηματισμών των οργανικών ρύπων υπό την επίδραση των φυτικών ενζύμων, μηχανισμοί οι οποίοι δεν είναι απόλυτα κατανοητοί. Είναι επίσης δυνατή η διάσπαση των ρύπων έξω από το φυτό από ένζυμα που εκκρίνονται στη ριζόσφαιρα του φυτού.
- Φυτοεξάτμιση είναι η συμμεταφορά του ρύπου μέσω του ρεύματος διαπνοής στο υπέργειο τμήμα του φυτού και η έκλυση μιας μορφής του, στην ατμόσφαιρα. Γίνεται μετατροπή των ρύπων σε λιγότερο τοξικές μορφές μέσω του μεταβολισμού ή άλλων φυσικών διεργασιών όπως η φωτοδιάσπαση. Η μέθοδος αυτή μπορεί να εφαρμοστεί προκειμένου να απορυπανθούν υπόγεια ύδατα, εδάφη, ιζήματα, καθώς και η ιλύς επεξεργασμένων υγρών αποβλήτων (US EPA 2002).
- Ριζοδιήθηση είναι η προσρόφηση ή η κατακράτηση του ρύπου πάνω στις ρίζες του φυτού που βρίσκεται διαλελυμένος γύρω από τη ζώνη επίδρασης της ρίζας, εξαιτίας βιοτικών ή αβιοτικών διεργασιών. Αρχικά πραγματοποιείται ακινητοποίηση του ρύπου επάνω ή εντός της ρίζας του φυτού. Παρουσιάζει ικανοποιητικά αποτελέσματα μόνο σε περιπτώσεις επεξεργασίας υπόγειων και επιφανειακών υδάτων ή στην επεξεργασία υγρών αποβλήτων.
- Ριζοαποικοδόμηση είναι η διάσπαση μιας οργανικής ένωσης από εκκρίματα που απελευθερώνονται από τη ρίζα του φυτού, τα οποία αυξάνουν το μικροβιακό πληθυσμό, τη δραστηριότητα τους άρα και το ρυθμό βιοαποικοδόμησης του ρύπου.
- Υδραυλικός έλεγχος είναι η χρήση των φυτών για τη πρόσληψη και κατανάλωση του υπόγειου ύδατος με σκοπό τον περιορισμό και τον έλεγχο της μεταφοράς των ρύπων. Χρησιμοποιείται στην επεξεργασία του υπόγειου επιφανειακού ύδατος καθώς επίσης και του εδαφικού ύδατος.

Για να παρεμποδιστεί η μεταφορά του ρύπου στο έδαφος μέσω του αέρα, του νερού, της έκπλυσης και της διασποράς, ώστε να απορροφηθεί και να συσσωρευτεί στη ρίζα, χρησιμοποιείται ο μηχανισμός της **φυτοσταθεροποίησης**. Βασίζεται στις μικροβιολογικές και χημικές ιδιότητες της ριζόσφαιρας και στις μεταβολές των ιδιοτήτων του εδάφους και του ρύπου. Μεταβάλλει την διαλυτότητα και την κινητικότητα των μετάλλων ή μπορεί και να επιδράσει στον

διαχωρισμό οργανικών ενώσεων. Κύριες διεργασίες της φυτοσταθεροποίησης είναι:

- Λιγνιτοποίηση είναι η μεταφορά των ρύπων και η σταθεροποίηση τους με μη αντιστρεπτές χημικές αντιδράσεις στα τοιχώματα φυσικών κυττάρων.
- Χουμικοποίηση, κατά την οποία μικροβιακά και φυτικά ένζυμα ενώνουν τους ρύπους στις χουμικές ενώσεις του εδάφους.

Κάποιοι σημαντικοί παράμετροι που πρέπει να ληφθούν υπόψη κατά την εφαρμογή της φυτοεξυγίανσης παρουσιάζονται παρακάτω:

- Πρέπει να καθοριστεί αν ο ρυπαντής βρίσκεται εντός των ορίων της ριζόσφαιρας των φυτών. Τα όρια αυτά συνήθως κυμαίνονται μεταξύ 30 – 60 cm κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και 3 - 4 m για υπόγεια νερά. Στην περίπτωση των υπόγειων υδάτων υπάρχει και η επιλογή της άντλησης του υπόγειου νερού και της παροχής του στα φυτά.
- Αν υπάρχουν περιοχές οι οποίες είναι τοξικές για τα φυτά, πρέπει να μελετηθεί αν είναι οικονομικά αποδεκτή η απομάκρυνση τους
- Αν οι μικροοργανισμοί της ριζόσφαιρας και τα ένζυμα που παράγονται από τη ρίζα, διασπούν το ρυπαντή, είναι απαραίτητο να διευκρινιστεί αν τα προϊόντα είναι αποδεκτά. Ο ίδιος έλεγχος πρέπει να γίνει και όταν το φυτό διασπά το ρύπο μετά τη πρόσληψη με μεταβολικές δραστηριότητες
- Το φυτό συσσωρεύει το ρύπο στο σώμα του ή τον αποβάλλει μέσω εξατμισοδιαπνοής. Πρέπει να ελεγχθεί αν το επίπεδο συσσώρευσης είναι ικανοποιητικό ή αν ο ρυθμός και η ποσότητα της εξατμισοδιαπνοής είναι αποδεκτά. Και στις δυο περιπτώσεις πρέπει να ελεγχθεί αν πραγματοποιείται μεταφορά του ρυπαντή από τα φυτά στα ζώα και στον άνθρωπο μέσω της τροφικής αλυσίδας
- Έλεγχος κατά πόσο είναι αποδεκτή η τελική διάθεση του φυτικού υλικού και αν ο ρυπαντής μπορεί να αδρανοποιηθεί σε αποδεκτά επίπεδα
- Οικονομική μελέτη για να διασαφηνιστεί αν η φυτοεξυγίανση είναι η φτηνότερη τεχνολογία απορύπανσης για τη συγκεκριμένη περιοχή

Κάποια πιθανά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της φυτοεξυγίανσης (US EPA 2001) παρουσιάζονται παρακάτω:

Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
Χαμηλό κόστος συγκρινόμενη με άλλες τεχνολογίες	Χρειάζεται αρκετός χρόνος για την απορύπανση της περιοχής
Φίλικη στο περιβάλλον και αισθητικά	Είναι δυνατό να εξαρτάται από

ευχάριστη στο κόσμο	κλιματικές συνθήκες
Ελαχιστοποιείται η ποσότητα των αποβλήτων προς διάθεση	Μπορεί να επενεργήσει στην αλυσίδα τροφής
Τεχνολογία που υλοποιείται και συντηρείται εύκολα με τη δυνατότητα της πλήρους αποφυγής εργατικών ατυχημάτων	Δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε περιοχές όπου η ρύπανση είναι βαθιά στο έδαφος / υδροφορέα ή υψηλής συγκέντρωσης
Τεχνολογία που εφαρμόζεται in-situ, ex-situ και εφαρμόζεται σε μεγάλες εκτάσεις	Η βιομάζα μετά τη συγκομιδή μπορεί να χαρακτηριστεί ως τοξικό και επικίνδυνο απόβλητο
Αποικοδομεί μεγάλη ποικιλία οργανικών και ανόργανων ρύπων	Δυσχέρεια στη μεταφορά μάζας του ρύπου από το σημείο ρύπανσης στις ρίζες του φυτού (Καλογεράκης 2001, Uner 1999)

Πίνακας Π.2: Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα της φυτοεξυγίανσης

## 2. Φυτοεξαγωγή

Η μέθοδος αυτή χρησιμοποιείται κυρίως στην απορύπανση εδαφών, ιζημάτων ή ιλύος επεξεργασίας υγρών αποβλήτων από μέταλλα. Τα πειράματα που γίνονται σε υδροπονικές καλλιέργειες δεν ανταποκρίνονται στις πραγματικές συνθήκες ούτε και σε αποτελέσματα από τις εδαφικές καλλιέργειες για αυτό η τεχνολογία αυτή έχει ελάχιστη εφαρμογή σε επεξεργασία ρυπασμένου ύδατος. Αφαιρεί μόνιμα τον ρύπο από το έδαφος / υδροφορέα και σε μερικές περιπτώσεις είναι ακόμα δυνατή και η αφαίρεση του ρυπαντή από τη φυτική βιομάζα. Με τη χρήση της συγκεκριμένης μεθόδου συλλέγεται μικρότερη μάζα από ότι στην εκσκαφή ή έκπλυση εδάφους. Για να εφαρμοστεί η φυτοεξαγωγή πρέπει απαραίτητα να τηρούνται οι παρακάτω προϋποθέσεις από το φυτό:

- Δυνατότητα απόσπασης μεγάλων ποσοτήτων βαρέων μετάλλων από τη ρίζα.
- Δυνατότητα μεταφοράς του μετάλλου στο υπέργειο τμήμα του
- Παραγωγή μεγάλης ποσότητας φυτικής βιομάζας

Παράγοντες που επηρεάζουν τη φυτοεξαγωγή αναφέρονται παρακάτω:

- Βιοδιαθεσιμότητα του μετάλλου στη ριζόσφαιρα
- Ρυθμός πρόσληψης του μετάλλου από τη ρίζα

- Η κυτταρική ανοχή στα τοξικά μέταλλα
- Ο ρυθμός μεταφοράς του μετάλλου στο βλαστό
- Ο ρυθμός πλήρωσης του ξύλου

Δευτερεύων παράγοντες που πρέπει να ληφθούν υπόψη κατά την εφαρμογή της τεχνολογίας:

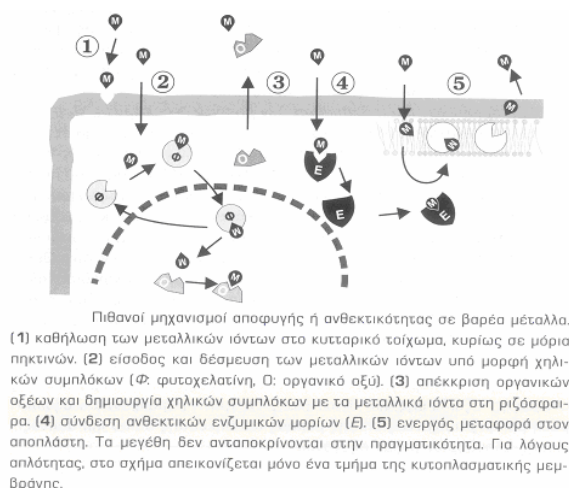
- Το φυτό πρέπει να είναι ντόπιας καταγωγής και να έχει χαμηλές γεωργικές απαιτήσεις.
- Να υφίσταται αποσύνθεση εύκολα μετά τη συγκομιδή ώστε να είναι εύκολο να ανακτηθούν οι ρύποι.

Αν και υπάρχουν πολλά φυτά που τηρούν 2 από τις παραπάνω προϋποθέσεις άριστα, για την περίπτωση του Pb, δεν έχει βρεθεί κάποιο που να τηρεί και τις τρεις.

Υπερσυσσωρευτές ονομάζονται τα φυτά που έχουν τη δυνατότητα να συσσωρεύουν στο σώμα τους 100 φορές περισσότερη ποσότητα μετάλλου από ότι ένα κοινό φυτό. Η ανάληψη μετάλλων από αυτά τα φυτά δεν είναι φαινόμενο παθητικό. Το περιεχόμενο του μετάλλου στους υπερσυσσωρευτές δεν αυξάνεται γραμμικά όπως αυξάνεται η συγκέντρωση του μετάλλου στο υπόστρωμα. Χαρακτηριστικό των υπερσυσσωρευτών είναι το γεγονός της συσσώρευσης μετάλλων στο σώμα τους ακόμη και σε χαμηλής περιεκτικότητας σε μέταλλα εδάφη. Μειονέκτηματα συνήθως των υπερσυσσωρευτών ότι αναπτύσσονται αργά με μικρή βιομάζα και αβαθή ριζικά συστήματα. Οι υπερσυσσωρευτές αντιμετωπίζουν με δυο στρατηγικές τη συσσώρευση μετάλλων στο σώμα τους:

- Αποφυγή: τα φυτά που έχουν επιλέξει τη στρατηγική αυτή διαθέτουν κατάλληλους αμυντικούς μηχανισμούς μέσω των οποίων αποκλείουν τα βαρέα μέταλλα στο εξωτερικό περιβάλλον. Τα τοξικά μεταλλικά ιόντα είτε δεσμεύονται και εξουδετερώνονται στο περιβάλλον της ριζόσφαιρας από χηλικές ενώσεις οι οποίες απεκκρίνονται από τα κύτταρα της ρίζας, είτε αποκλείονται στο εξωτερικό περιβάλλον λόγω της υψηλής εκλεκτικότητας που παρουσιάζουν οι μεμβράνες των κυττάρων της ρίζας.
- Ανθεκτικότητα: Σε αυτή τη κατηγορία φυτών ανήκει η πικροδάφνη. Γίνεται πρόσληψη των μετάλλων από το περιβάλλον από τα φυτικά είδη και έχουν την ικανότητα να τα συσσωρεύουν στους ιστούς τους σε υψηλές συγκεντρώσεις, που θα σκότωναν ευαίσθητα είδη. Η δέσμευση γίνεται με δύο διαφορετικούς τρόπους: Ορισμένα φυτά δεσμεύουν τα βαρέα μέταλλα με τη μορφή χηλικών συμπλόκων, με οργανικά μόρια χαμηλού μοριακού βάρους όπως οργανικά οξέα, αμινοξέα ή φαινολικές ενώσεις. Τα μόρια αυτά συνήθως εντοπίζονται στο χυμοτόπιο όπου και συσσωρεύονται. Σε άλλα φυτικά είδη η

δέσμευση των βαρέων μετάλλων γίνεται με τις φυτοχελατίνες. Η σύνθεση της φυτοχελατίνης δραστηριοποιείται από ορισμένα μέταλλα, κατά συνέπεια σημαντικές ποσότητες φυτοχελατίνων στους φυτικούς ιστούς ανιχνεύονται μόνο παρουσία τοξικών επιπέδων βαρέων μετάλλων. Η δράση των φυτοχελατίνων δεν είναι απόλυτα γνωστή αλλά μια απλοϊκή εξήγηση της φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Εικόνα Π.1: Δράση μιας φυτοχελατίνης, Πηγή: Γεώργιος Καραμπουνιώτης, φυσιολογία καταπονήσεων των φυτών, εκδόσεις Εμβryo 2003

Η φυτοεξαγωγή είναι οικονομικά συμφέρουσα αφού το κόστος που υπολογίστηκε για την εξυγίανση μιας περιοχής 12 στρεμμάτων από Pb σε χρονικό διάστημα 30 ετών είναι στα \$200000, σε σχέση με τη μέθοδο εκσκαφής και διάθεσης που υπολογίστηκε στα \$12000000, με έκπλυση του εδάφους \$6300000 ή με κάλυψη του εδάφους \$600000 (Cunningham 1996).

### 3. Φυτοεξαγωγή μολύβδου

Ένα μεγάλο ποσοστό από τον μόλυβδο που εξάγεται από τα φυτά, παραμένει στη ρίζα τους (Huang and Cunningham 1996). Το διατροφικό πρόβλημα που αντιμετωπίζουν τα φυτά σε εδάφη ρυπασμένα με μόλυβδο είναι η έλλειψη φωσφορικών αλάτων. Αυτό οφείλεται στη δημιουργία αδιάλυτων ενώσεων μεταξύ φωσφορικών αλάτων και μολύβδου (pyromorphite). Η έλλειψη σε φώσφορο μπορεί να αντιμετωπιστεί με την εφαρμογή φωσφόρου στα υπέργεια τμήματα του φυτού, αυξάνοντας τη βιομάζα και το ολικό ποσό του Pb στο βλαστό κατά 400% και 115% αντίστοιχα. Αντιθέτως η συγκέντρωση του μολύβδου στη βιομάζα θα μειωθεί.

Είναι πιθανό σε περίπτωση εμπορευματοποίησης ενός συστήματος φυτοεξαγωγής μολύβδου το σύστημα θα περιέχει τα εξής:

- Εφαρμογή χηλικών ενώσεων στο έδαφος

- Σύστημα το οποίο θα περιορίζει τη διαρροή νερού στο έδαφος, ώστε να αποφευχθεί ρύπανση των υπογείων νερών από τις χηλικές ενώσεις
- Παροχή φωσφορικών αλάτων στο φυτό
- Μείωση του φυτικού όγκου που θα διατεθεί προς επεξεργασία με φυσικές, χημικές ή βιολογικές μεθόδους
- Συγκομιδή των νεαρών ή “σκοτωμένων” παλιών φυτών με μεγάλη βιομάζα
- Μετατροπή της αύξησης του φυτού με κάποιο τρόπο (π.χ γενετική μετατροπή), για παράδειγμα αύξηση της μάζας της ρίζας ή / και του βάθους της ζώνης ρίζας.

### III. Πηγές του μολύβδου

Ο μολύβδος είναι ένα μέταλλο γκρι-μπλε χρώματος που συναντάται στο φλοιό της γης σε μικρές ποσότητες. Η συχνή του χρήση σε πολλές βιομηχανικές διεργασίες είναι ο κύριος λόγος της ρύπανσης που έχει προκληθεί στο περιβάλλον. Οι διεργασίες αυτές περιλαμβάνουν την εξόρυξη μεταλλευμάτων, την παρασκευή εντομοκτόνων και άλλων φυτοπροστατευτικών προϊόντων, λιπασμάτων, την διάθεση αστικών αποβλήτων και την καύση καυσίμων που περιέχουν πρόσθετα μολύβδου. Ο Pb χρησιμοποιείται και σε πολλά προϊόντα και υλικά του εμπορίου όπως χρώματα, κεραμικά, οθόνες τηλεοράσεων, μπαταρίες, ιατρικά όργανα και ηλεκτρικά εξαρτήματα.

Τα προϊόντα που παράγονται από την ανακύκλωση του μετάλλου ικανοποιούν το μισό των απαιτήσεων μολύβδου.

#### 1. Επίδραση του Pb στα φυτά

Το μέταλλο δεν συνεισφέρει σε καμιά βιολογική διεργασία. Η συσσώρευση του στον ιστό των φυτών είναι τοξική στα περισσότερα από αυτά σε πολύ μικρές ποσότητες, μειώνοντας έτσι τη παραγωγή σπόρων και προκαλώντας δυσλειτουργίες στην είσοδο και έξοδο των ιόντων ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{K}^+$ ) μέσω των μεμβρανών. Προκαλεί μη αντιστρεπτή παρεμπόδιση της δραστηριότητας ενζύμων και σημαντική πτώση στη παραγωγή ενέργειας οδηγώντας έτσι στη μειωμένη παραγωγή χλωροφύλλης και βιομάζας. Σε περιοχές επιβεβαρυμένες σε ποσότητες Pb και άλλων βαρέων μετάλλων η βιοποικιλότητα των φυτικών ειδών είναι μειωμένη, τα εδάφη άγονα, και υπάρχουν ελάχιστα έως και καθόλου δέντρα. Παρατηρείται σημαντική πτώση ενέργειας και παρεμπόδιση της λειτουργίας της αλυσίδας μεταφοράς ηλεκτρονίων τόσο στην αναπνοή, όσο και στη φωτοσύνθεση. Σε δρόμους υψηλής κυκλοφορίας έχουν μετρηθεί συγκεντρώσεις 7000 mg/kg και σε μεταλλευτικές περιοχές 13380 mg/kg.

#### 2. Μορφές του μολύβδου

Κυριότερες μορφές του μετάλλου που ελευθερώνονται στο έδαφος, υπόγεια και επιφανειακά ύδατα είναι ο δισθενής μολύβδος,  $\text{Pb}^{2+}$ , τα οξείδια και υδροξείδια του και τα σύμπλοκα του με ανιόντα ή ρίζες. Ο  $\text{Pb}^{2+}$  και τα υδροξυλιόντα του είναι οι πιο σταθερές και δραστικές μορφές του. Το  $\text{Pb}^{2+}$  σχηματίζει πολυπυρηνικά και μονοπυρηνικά οξείδια και υδροξείδια.

Αδιάλυτες ενώσεις που επικρατούν είναι ο φωσφορούχος και φωσφορικός Pb, ο ανθρακικός σε  $\text{pH} > 6$ , και το υδροξύλιο Pb. Η ένωση του με το θείο,  $\text{PbS}$ , είναι η πιο σταθερή στερεά μορφή του στο εδαφικό σύμπλεγμα και παράγεται με αυξημένη παρουσία θείου. Υπό αναερόβιες συνθήκες σχηματίζεται τετραμεθυλιούχος μολύβδος εξαιτίας της μικροβιακής αλκυλίωσης.

### 3. Επιδράσεις στην υγεία

Ο Pb κατατάσσεται στα καρκινογόνα στοιχεία σύμφωνα με την Υπηρεσία Προστασίας Περιβάλλοντος των Η.Π.Α. Η εισαγωγή του στον οργανισμό γίνεται μέσω της εισπνοής και της τροφής. Συσσωρεύεται στα όργανα του σώματος, στο κεντρικό νευρικό σύστημα και μπορεί να οδηγήσει σε δηλητηρίαση ή ακόμη και σε θάνατο. Ανθρώποι που βρίσκονται σε στάδιο ανάπτυξης και εκτίθενται στον Pb βρίσκονται σε κίνδυνο νοητικής καθυστέρησης. Σε ενήλικους συνήθως παρατηρούνται μειωμένα αντανακλαστικά, απώλεια μνήμης, αυπνία, ανορεξία και αδυναμία στους συνδέσμους του σώματος.

#### IV. Φυσιολογία των φυτών

##### 1. Ρίζα

Το ριζικό σύστημα του φυτού αποτελεί ένα ευρύτατα διακλαδισμένο υπόγειο όργανο, μέσω του οποίου πραγματοποιείται η απορρόφηση του νερού και των θρεπτικών στοιχείων. Η ρίζα στηρίζει το φυτό, προσλαμβάνει το νερό και ανόργανα άλατα, αποθηκεύει θρεπτικές ουσίες και αλληλεπιδρά με το έδαφος μέσω χημικών και φυσικών διεργασιών. Το μέγεθος του υπέργειου τμήματος καθορίζει και το μέγεθος του ριζικού συστήματος. Επίσης επηρεάζεται από το είδος του φυτού και από τις περιβαλλοντικές συνθήκες ανάπτυξης του φυτού (φυτά που αναπτύσσονται σε καλά αρδευόμενες περιοχές έχουν μικρότερης έκτασης ριζικό σύστημα σε σχέση με φυτά του ίδιου είδους που αναπτύσσονται υπό ξηρές συνθήκες).

Η καλύπτρα της ρίζας είναι η κατασκευή που προστατεύει τα ευαίσθητα κύτταρα και είναι υπεύθυνη για τη διείσδυση της ρίζας στο έδαφος, αφού τα περιφερειακά κύτταρα της έχουν άφθονα δικτυοσωμάτια και εκκρίνουν βλέννες οι οποίες διευκολύνουν τη διείσδυση της ρίζας. Περιβάλλει σαν δακτυλίθρα το ακραίο μερίστωμα της ρίζας και αποτελείται από ζωντανά παρεγχυματικά κύτταρα. Ο φλοιός της ρίζας αποτελείται από παρεγχυματικά κύτταρα που φέρουν ένα μεγάλο κεντρικό χυμοτόπιο. Εκεί σχηματίζονται με σχιζογενή τρόπο πολυάριθμοι μεσοκυτταρικοί τόποι. Τα ριζικά τριχίδια αποτελούν επέκταση των επιδερμικών κυττάρων της ρίζας αυξάνοντας έτσι την ολική ενεργό επιφάνεια της, αφού εισέρχονται στα φυτά περισσότερες ουσίες. Το μήκος των ριζικών τριχιδίων κυμαίνεται από ένα χιλιοστό μέχρι ένα εκατοστό και η διάμετρος του είναι περίπου 0,01 χιλιοστά. Η διάρκεια ζωής τους περιορίζεται σε λίγες μόνο μέρες.

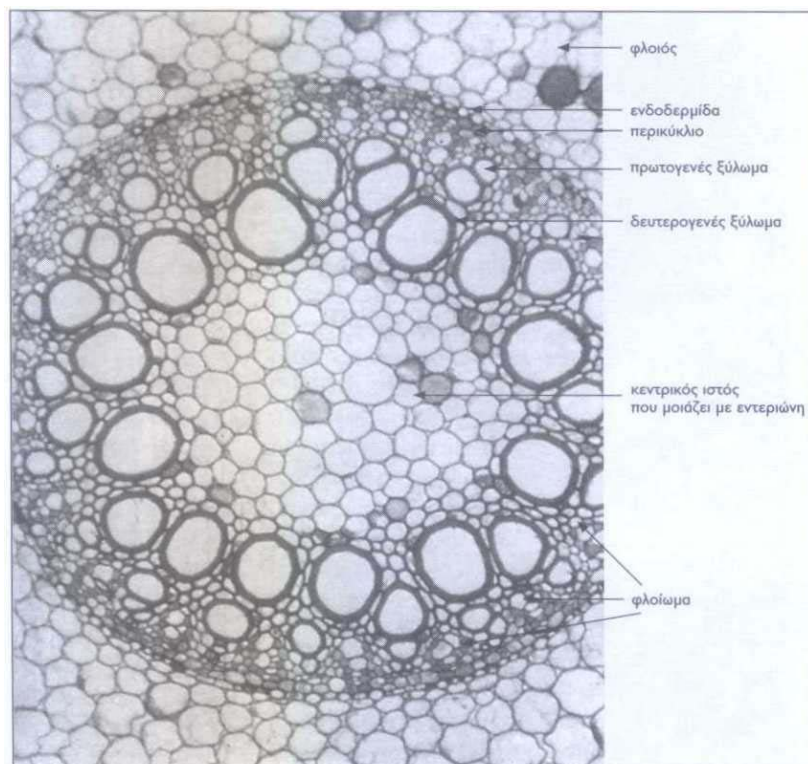
Η ριζόσφαιρα ορίζεται ως η περιοχή γύρω από το ριζικό σύστημα του φυτού όπου παρατηρείται έντονη μικροβιακή δραστηριότητα. Το ριζικό σύστημα των φυτών, συμβάλλει στη τροποποίηση του εδαφικού περιβάλλοντος κυρίως μέσω εκκρίσεων διαφόρων ουσιών. Στη περιοχή της ριζόσφαιρας αναπτύσσονται βακτήρια, μύκητες και πρωτόζωα. Οι οργανισμοί αυτοί λαμβάνουν ουσίες που εκκρίνονται από τις ρίζες οι οποίες είναι απαραίτητες για την ανάπτυξη τους. Μερικοί μικροοργανισμοί συμβάλλουν στην υγιή κατάσταση των φυτών, τροποποιώντας το εδαφικό pH, προσθέτοντας χηλικούς παράγοντες και επεκτείνοντας την ενεργό ζώνη απορρόφησης των θρεπτικών ουσιών από τις φυτικές ρίζες.

Η λειτουργία του μηχανισμού απορρόφησης του εδαφικού διαλύματος σχετίζεται άμεσα με τους ανατομικούς και μορφολογικούς χαρακτήρες της ρίζας. Το νερό και οι θρεπτικές ουσίες κινούνται ελεύθερα από το εδαφικό διάλυμα στο εσωτερικό των πόρων του φλοιού της ρίζας. Στη περιοχή της ενδοδερμίδας, η κίνηση αυτή παρεμποδίζεται από τη λωρίδα Caspary, η οποία αποτελείται κυρίως από λιπαρά οξέα. Η λωρίδα Caspary υποχρεώνει το νερό και τα ανόργανα άλατα να ακολουθήσουν την κυτοπλασματική οδό και όχι τη μεσοκυτταρική. Όταν ένα ιόν φτάσει στην επιφάνεια της ρίζας έχει τις εξής δυνατότητες κίνησης:

- Κίνηση στον ελεύθερο χώρο της ρίζας
- Δέσμευση στην εξωτερική ή εσωτερική επιφάνεια των κυτταρικών τοιχωμάτων των κυττάρων της ρίζας

Οι μεσοκύτταροι χώροι και τα κυτταρικά τοιχώματα των κυττάρων είναι ο ελεύθερος χώρος της ρίζας. Ο ελεύθερος χώρος είναι ο συνολικό χώρος μέσω του οποίου η κίνηση των διαλυμένων ουσιών στο νερό γίνεται με παθητική μεταφορά, δηλαδή η δρώσα δύναμη είναι η διαφορά συγκέντρωσης μεταξύ του εσωτερικού και εξωτερικού περιβάλλοντος. Η περιοχή αυτή προσδίδει εκτεταμένη επιφάνεια για τη πρόσληψη ουσιών. Η ενδοδερμίδα είναι το στρώμα των κυττάρων που περιβάλλει τη λωρίδα Caspary. Όλες οι ουσίες διαπερνούν τις κυτταρικές μεμβράνες ώστε να εισέλθουν στο εσωτερικό του κυττάρου. Η είσοδος μέσω των μεμβρανών είναι μια διαδικασία πολύπλοκη, η οποία πραγματοποιείται με την ενεργοποίηση ειδικών φορέων και είναι γνωστή ως ενεργός μεταφορά.

Η πρόσληψη των χημικών ενώσεων που περιέχουν βαρέα μέταλλα από τα φυτά είναι κυρίως μια παθητική διαδικασία η οποία ελέγχεται από τη διεργασία της διάχυσης και από τη διαλυτότητα της ουσίας στο νερό και τις κυτταρικές μεμβράνες.



Εικόνα III.1: Εγκάρσια τομή του κεντρικού τμήματος ρίζας, Πηγή: Καρατάγλης Στέλιος φυσιολογία φυτών εκδόσεις art of text 1995

## 2. Αγωγοί των φυτών

Υπάρχουν δύο είδη αγωγών: το ξύλωμα και το φλοίομα. Το ξύλο αποτελεί ένα σύνθετο ιστό ως προς τη δομή και τη λειτουργία του, στον οποίο πραγματοποιείται η ανοδική μεταφορά του νερού (τραχοειδή κύτταρα) από τη ρίζα στο βλαστό και στα φύλλα, η αποθήκευση θρεπτικών (παρέγχυμα) και η στήριξη του φυτού (μηχανικά κύτταρα).

Το φλοίομα αποτελείται από ένα σύμπλεγμα ζωντανών κυττάρων που χρησιμεύει τόσο λειτουργικά όσο και δομικά. Είναι υπεύθυνος για τη καθοδική μεταφορά από τα φύλλα στο βλαστό και στη ρίζα νερό και ανόργανα άλατα. Επίσης διανέμει τα οργανικά μόρια που έχουν παρασκευαστεί από τη φωτοσύνθεση στα φύλλα, στα υπόλοιπα μέρη του φυτού όπου χρησιμοποιούνται για την ανάπτυξη τους ή για αποθήκευση. Το ρεύμα του ηθμοσωλήνα κινείται με φορά από τις πηγές προς τους αποδέκτες με ταχύτητα  $10 - 100 \frac{cm}{hr}$ . Πηγές είναι τα φύλλα όπου λαμβάνει χώρα η

φωτοσύνθεση, αλλά και μερικοί ιστοί αποθήκευσης. Αποδέκτες είναι τα μέρη του φυτού που δεν μπορούν να ικανοποιήσουν τις θρεπτικές απαιτήσεις τους. Το φλοίομα και το ξύλο μαζί δημιουργούν ένα συνεχές αγγειακό σύστημα που διατρέχει το φυτό σε όλο το σώμα του.

### 3. Μεταφορά του νερού

Οι μηχανισμοί της μεταφοράς του νερού κατατάσσονται σε παθητικούς και ενεργητικούς ανάλογα με το γεγονός αν σπαταλείται ενέργεια μεταβολισμού. Είναι δύσκολο να διαχωριστεί η ενεργός από τη παθητική μεταφορά και σε ποια σημεία του φυτού εκτελούνται. Ο μηχανισμός της όσμωσης είναι ο κύριος υπεύθυνος για τη μεταφορά νερού. Η διεύθυνση και η ταχύτητα ροής του ύδατος διαμέσου μιας μεμβράνης καθορίζεται όχι μόνο από τη διαβάθμιση της συγκεντρώσεως του νερού ή από τη διαβάθμιση πίεσεως, αλλά από το άθροισμα αυτών των δυο ωθουσών δυνάμεων. Αυτή η παρατήρηση οδηγεί σε μια συνισταμένη ωθούσα δύναμη, η οποία αντιπροσωπεύει την διαβάθμιση της ελευθέρως ενέργειας του νερού. Η παθητική μεταφορά των ουσιών μέσα στο φυτό οφείλεται σε δυο μηχανισμούς, τη ροή μάζας και τη διάχυση.

### 4. Ροή μάζας

Η μεταφορά των συστατικών μέσα στο φυτό με τη ροή μάζας βασίζεται στο γεγονός ότι ασκείται μια πίεση ή μια εξωτερική δύναμη, όπως η βαρύτητα. Δρώσα δύναμη η διαφορά πίεσης. Όταν τα στομάτια είναι ανοικτά και οι περιβαλλοντικές συνθήκες ευνοούν τη διαπνοή, δημιουργείται μια διαφορά δυναμικού εντός του φυτού. Στον ιστό του ξύλου, η διαβάθμιση της ενέργειας μπορεί να εκφραστεί ως δυναμικό πίεσης, κατά το οποίο η κίνηση του νερού και των διαλυμένων ουσιών πραγματοποιείται με μεταφορά μάζας. Αυτό συμβαίνει σε όλα τα σημεία του φυτού

όπως στα κύτταρα μεταφοράς του ιστού του ξύλου και στη κίνηση του νερού μέσα στη ρίζα. Είναι ο κυριότερος μηχανισμός για τη μετακίνηση του νερού σε μεγάλες αποστάσεις των αγγείων του ξύλου.

## 5. Διάχυση

Διάχυση είναι ένα συνήθες φαινόμενο, που οφείλεται στην κινητική ενέργεια των μορίων ή των ιόντων. Είναι η κατευθυνόμενη κίνηση από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης σε μια περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης. Δρώσα δύναμη είναι η διαφορά συγκέντρωσης. Πρέπει να διευκρινισθεί ότι τους νόμους της διάχυσης δεν ακολουθούν μόνο τα μόρια της διαλυμένης ουσίας αλλά και του διαλύτη, γι' αυτό είναι ένας πολύ σημαντικός παράγοντας στη πρόσληψη και διανομή νερού, αερίων και των διαλελυμένων ουσιών για κάθε φυτό. Στη διάχυση οφείλεται κυρίως η παροχή του διοξειδίου του άνθρακα για τη φωτοσύνθεση, καθώς και η αποβολή υδρατμών από τα φύλλα του φυτού.

## 6. Διαπνοή

Είναι η διεργασία στα φυτά όπου απορροφούνται μεγάλες ποσότητες ύδατος από το έδαφος και μεταφέρονται σε όλη τη μάζα του φυτού ως τη τελική απώλεια τους στο περιβάλλον σε μορφή υδρατμών, κυρίως από τα φύλλα, με τη βοήθεια των τραχειακών κυττάρων. Αυτή η κατακόρυφη κίνηση του νερού εντός του φυτικού σώματος έχει σαν αποτέλεσμα τη μεταφορά διαλυμένων ουσιών και ρυπαντών. Μόνο το 5% του απορροφούμενου νερού χρειάζεται για την ανάπτυξη του φυτού. Ελάχιστη ποσότητα από αυτό το ποσοστό χρησιμοποιείται στις βιοχημικές διεργασίες. Με την ύγρανση της επιφάνειας των κυττάρων μέσω της διαπνοής στα φύλλα επιτυγχάνεται η είσοδος του διοξειδίου του άνθρακα, στοιχείου απαραίτητου για τη φωτοσύνθεση. Η διαπνοή συμβάλλει στην απορροφητική δύναμη των κυττάρων με θρεπτικές ουσίες και προστατεύει το φυτικό σώμα από υπερθέρμανση.

## 7. Μεταφορά θρεπτικών στοιχείων μέσω μεμβράνων

Υπάρχουν τρεις θεωρίες: η απλή διάχυση, η διευκολυνόμενη διάχυση και η ενεργή μεταφορά.

Η απλή διάχυση αναφέρεται στη προσανατολισμένη μεταφορά ποσότητας ουσίας από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης σε μια χαμηλής συγκέντρωσης. Επειδή η εξωτερική μεμβράνη είναι λιπιδικής φύσεως, τα μη πολικά μόρια έχουν τη τάση να τη διαπερνούν αρκετά γρήγορα. Ενώσεις που δεν παρουσιάζουν πολικότητα και είναι απαραίτητες στο φυτό από βιολογικής πλευράς είναι το  $\text{CO}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{NH}_3$ . Έτσι ο συντελεστής διαπερατότητας αντικατοπτρίζει τη λιποδιαλυτότητα των διαχεόμενων

μορίων. Το νερό αν και παρουσιάζει υψηλή πολικότητα διαχέεται μέσω των λιπιδικών μεμβράνων, εξαιτίας της ουδετερότητας του μορίου και του μικρού μοριακού βάρους του.

Για μερικές όμως ουσίες δεν αρκεί να υπάρχει διαφορά συγκέντρωσης μεταξύ των χώρων, που διαχωρίζονται από τη μεμβράνη. Στη διευκολυνόμενη διάχυση κάποιες πρωτεΐνες μεταφοράς που βρίσκονται στη λιπιδική μεμβράνη των κυττάρων, διευκολύνουν τη διάχυση των ιόντων ή των φορτισμένων μορίων μέσα από τις μεμβράνες. Η κατεύθυνση μεταφοράς καθορίζεται από την διαφορά συγκέντρωσης (για αφόρτιστη διαλυμένη ουσία) ή από το ηλεκτροχημικό δυναμικό (για ιόντα). Η μεταφορά με διάχυση είτε απλή είτε διευκολυνόμενη είναι παθητική διεργασία, άρα δεν απαιτεί άμεση εισροή ενέργειας μεταβολισμού. Συνεπώς ο μηχανισμός αυτός δεν οδηγεί σε συσσώρευση της διαλυμένης ουσίας.

Η ενέργεια για τη διεργασία της ενεργής μεταφοράς προκύπτει από την υδρόλυση του ATP. Αυτό οδηγεί σε συσσώρευση της ουσίας μέσα στο κύτταρο και κίνηση της αντίθετα με την βαθμίδα συγκέντρωσης ή του ηλεκτροχημικού δυναμικού. Η φύση του μηχανισμού αυτού είναι τέτοια που συχνά αναφέρεται και σαν αντλία, εξαιτίας της δυνατότητας μεταφοράς ουσιών αντίθετα με τη φυσική φορά, δηλαδή αντίθετα από τη διαβάθμιση της συγκέντρωσης.

#### 8. 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 τη τοξικότητα. Πολλά ιχνοστοιχεία θέτουν συγκεκριμένο δίλημμα στους οργανισμούς. Από τη μια 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 ατέλει των διαδικασιών ελέγχου συσσώρευσης των μετάλλων, πολλοί οργανισμοί απαιτείται να αντιμετωπίσουν επιτυχώς την έκθεση σε ανεπιθύμητα στοιχεία.

#### 9. Καθοριστικοί παράγοντες για τη μεταφορά και συσσώρευση των μετάλλων

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 στα 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:

- Κινητοποίηση και πρόσληψη από το εδαφικό διάλυμα
- Διαχωρισμός σε τμήματα και απομόνωση μέσα στη ρίζα
- Ικανότητα πλήρωσης του ξύλου και μεταφορά στο σώμα του
- Διανομή ανάμεσα στους αποδέκτες του μετάλλου στα υπέργεια τμήματα
- Απομόνωση και 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.

#### 9.i. Κινητοποίηση

Πολλά μέταλλα παρουσιάζουν περιορισμένη βιοδιαθεσιμότητα για πρόσληψη από τις ρίζες, λόγω της χαμηλής διαλυτότητας τους στο οξυγονωμένο νερό και της δημιουργίας ισχυρών δεσμών με τα σωματίδια του εδάφους. Ειδικότερα για το μολύβδο, η χαμηλή κινητικότητα του στο έδαφος οφείλεται κυρίως στη καθίζηση με τη μορφή αδιάλυτων αλάτων, όπως τα φωσφορικά, ανθρακικά και υδροξείδια του μολύβδου. Για τη λύση της βιοδιαθεσιμότητας του μολύβδου χρησιμοποιούνται χηλικές ενώσεις όπως το αιθυλενοδιαμινοτετραοξικό οξύ (EDTA), οι οποίες με την εφαρμογή τους στο εδαφικό διάλυμα αυξάνουν τη διαθεσιμότητα του μετάλλου για πρόσληψη. Οι ενώσεις αυτές αποτρέπουν τη 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 χηλικών ενώσεων είναι η πιθανότητα διαφυγής στα υπόγεια ύδατα και η επιβάρυνση του φυτού από τη τοξική δράση του Pb λόγω αυξημένης πρόσληψης.

#### 9.ii. Πρόσληψη

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

### 10. Μεταφορά στο ξύλο

Το συνεχές και ομογενές ρεύμα του αποπλάστη της επιδερμίδας και του φλοιού της ρίζας είναι διαπερατό για τη διαλυμένη ύλη. Τα κύτταρικά τοιχώματα του ενδοδερμικού κυτταρικού στρώματος δρουν σαν φράγμα για την αποπλαστική διάχυση στο αγγειακό σύστημα. Γενικά το διάλυμα πρέπει να απορροφήθει από τον συμπλάστη της ρίζας πριν μπορέσει να εισέλθει στο ξύλο. Μετά τη πρόσληψη του μετάλλου από τον συμπλάστη της ρίζας ακολουθούν τρεις διαδικασίες που ελέγχουν τη κίνηση του μετάλλου από τη ρίζα προς το ξύλο:

- Απομόνωση του μετάλλου μέσα στα κύτταρα της ρίζας
- Μεταφορά μέσω του συμπλάστη στη στήλη του αγγείου
- Αποδέσμευση μέσα στο ξύλο

Η μεταφορά των ιόντων μέσα στο ξύλο είναι γενικά μια αυστηρά ελεγχόμενη διαδικασία στην οποία διαμεσολαβούν πρωτεΐνες μεταφοράς. Μέσα στο ξύλο επικρατεί μια 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.

## 11. Εναπόθεση, κυκλοφορία και αποθήκευση

Το μέταλλο φτάνει στον αποπλάστη του φύλλου μέσω του χυμού του ξύλου από 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 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.

## V. Αλατότητα

Ο όρος αλατότητα αναφέρεται στην ύπαρξη υψηλών συγκεντρώσεων ιόντων (κατά κανόνα  $\text{Na}^+$  και  $\text{Cl}^-$ ). Υψηλή συγκέντρωση  $\text{Na}^+$  συνοδεύεται συχνά από υψηλή συγκέντρωση  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ . Το πρόβλημα της υψηλής συγκέντρωσης αλάτων δεν περιορίζεται μόνο στις παραθαλάσσιες περιοχές, αλλά επεκτείνεται και σε καλλιεργούμενες εκτάσεις. Η αλατότητα ως παράγοντας καταπόνησης παρουσιάζεται σε εκτεταμένες περιοχές του πλανήτη, η έκταση τους φθάνει το 20% του συνόλου των καλλιεργούμενων εδαφών. Οι διάφοροι λόγοι στους οποίους οφείλεται το γεγονός είναι:

- Περιοχές οι οποίες συνήθως διαβρέχονται από θαλασσινό νερό (αλίπεδα ή υφάλμυρα έλη). Τα εδάφη τους δεν παρουσιάζουν ομοιόμορφη σύσταση ή/και συγκέντρωση από πλευράς ιόντων.
- Ερημικές περιοχές στα εδάφη των οποίων συσσωρεύονται άλατα επειδή ο ρυθμός εξάτμισης του νερού είναι κατά πολύ υψηλότερος από το ρυθμό βροχόπτωσης.
- Υπερβολικά αρδευόμενες γεωργικές εκτάσεις, στις οποίες παρατηρείται συσσώρευση ιόντων στο έδαφος λόγω έντονης εξατμισοδιαπνοής.

Η καταπόνηση λόγω αλατότητας επιδρά δυσμενώς σε τρία διαφορετικά επίπεδα:

- Αλλοιώνονται τα χαρακτηριστικά του εδάφους. Επηρεάζεται δυσμενώς το πορώδες και κατά συνέπεια ο αερισμός και η ηλεκτρική αγωγιμότητα.
- Τα εξαιρετικώς χαμηλά ωσμωτικά δυναμικά που δημιουργούνται στο έδαφος παρακρατούν το διαθέσιμο νερό, οπότε τα φύλλα πρέπει να αποκτήσουν ακόμη αρνητικότερο ωσμωτικό δυναμικό για να διατηρήσουν τη διαβάθμιση υδατικού δυναμικού στο σύστημα έδαφος-ρίζα-φυτό.
- Τα ιόντα  $\text{Na}^+$  και  $\text{Cl}^-$ , παρουσιάζουν τοξικότητα λόγω κυρίως του ανταγωνισμού του ιόντος αυτού στην πρόσληψη  $\text{K}^+$  και  $\text{Ca}^{2+}$ . Παρουσία υπερβολικής συγκέντρωσης  $\text{Na}^+$  δημιουργούνται ανωμαλίες στη περατότητα των μεμβράνων και παρεμπόδιση στη δημιουργία αλλά και στη δράση των ενζύμων. Γενικώς κάνουν την εμφάνιση τους δυσλειτουργίες στην αφομοίωση του άνθρακα (λόγω παρεμπόδισης της φωτοσυνθετικής λειτουργίας, αλλά και επιτάχυνσης της αναπνευστικής δραστηριότητας ώστε να αντισταθμιστεί το ενεργειακό κόστος αποκλεισμού των ιόντων ή σύνθεσης των νέων μεταβολιτών). Επίσης εμφανίζεται δυσχέρεια στη πρόσληψη και μεταφορά θρεπτικών στοιχείων.

Οι αντίξοες συνθήκες τις οποίες δημιουργεί το περιβάλλον υψηλής αλατότητας αντιμετωπίζονται από τα φυτά, μέσω κυρίως δυο στρατηγικών:

- Αποφυγή: Τα φυτά (ρυθμιστές αλατότητας) τα οποία έχουν επιλέξει τη στρατηγική αυτή, δεν επιτρέπουν την είσοδο των ιόντων στο εσωτερικό των ευαίσθητων κυττάρων. Η στρατηγική αυτή παρουσιάζει δυο παραλλαγές: i. ορισμένα φυτικά είδη δεν απορροφούν το αλάτι αλλά το αποκλείουν ενεργητικά στο εξωτερικό περιβάλλον των ριζών, ii. άλλοι ρυθμιστές αλατότητας επιτρέπουν την είσοδο του αλατιού, το οποίο οδηγείται προς και εκκρίνεται από εξειδικευμένους αλατώδεις αδένες των φύλλων.
- Ανθεκτικότητα: Ο μεταβολισμός των φυτών αυτών (συσσωρευτές αλάτων) είναι κατάλληλα προσαρμοσμένος ώστε να μην παρουσιάζουν δυσλειτουργίες παρουσία υψηλών συγκεντρώσεων ιόντων. Η επιβίωση των φυτών αυτών στηρίζεται στη πρόσληψη υψηλών συγκεντρώσεων αλατιού εντός των κυττάρων τους, έτσι ώστε να αντισταθμιστεί το χαμηλό δυναμικό νερού του εδάφους και να επιτυγχάνονται ορθοτικές πιέσεις.

Η πικροδάφνη αν και δεν ανήκει στην ομάδα των αλόφυτων (φυτά που έχουν άριστη ανάπτυξη μόνο σε πολύ αλατούχα εδάφη), είναι ανθεκτικό φυτό ως προς την αλατότητα και υιοθετεί τη δεύτερη στρατηγική. Υπάρχει φυσικά ένα όριο αλατότητας που μπορεί να εφαρμόζει το φυτό τη συγκεκριμένη στρατηγική, πάνω από αυτό το φυτό καταστρέφεται

Το άριστο ιοντικό περιβάλλον στο κυτταρόπλασμα των φυτών, για μέγιστη ενζυμική δράση, περιέχει 100-200 mM  $K^+$  και 1-10 mM  $Na^+$ . Υψηλότερη αναλογία  $\frac{Na^+}{K^+}$  ή / και υψηλότερες συγκεντρώσεις ιόντων αδρανοποιούν ένζυμα και παρεμποδίζουν την πρωτεϊνική σύνθεση.

Η έκθεση της πικροδάφνης σε περιβάλλον αλατότητας αυξάνει τη πρόσληψη μετάλλου στη ρίζα, στο βλαστό και στα φύλλα.

Τα φυτά που είναι ανθεκτικά στην αλατότητα τείνουν να έχουν μεγαλύτερες συγκεντρώσεις  $Na^+$  στον βλαστό παρά στη ρίζα τους. Με μια ιδιόρρυθμη ωσμωτική προσαρμογή (διαμερισματοποίηση της περίσσειας  $Na^+$ , απομάκρυνση του από το κυτταρόπλασμα, ATP-εξαρτώμενη μεταφορά του στο χυμοτόπιο και εκτός κυττάρου), αναπτύσσονται άριστα, επιζητώντας κυτταρικές συγκεντρώσεις NaCl από 20 έως 500 mM. Η ικανότητα της απορρόφησης και του περιορισμού του  $Na^+$  στα χυμοτόπια, σε αλατούχα περιβάλλοντα, μειώνει ικανοποιητικά το ωσμωτικό δυναμικό των φύλλων, διευκολύνοντας έτσι την πρόσληψη νερού από το έδαφος και ελαττώνοντας το μεταβολικό κόστος σύνθεσης δαπανηρών ωσμωλυτών. Προκειμένου τα φυτά να συσσωρεύσουν  $Na^+$  στα χυμοτόπια τους, θα πρέπει να το αντισταθμίσουν με άντληση πρωτονίων και να έχουν πρόσθετους μηχανισμούς για την απόκτηση άλλων ιόντων, κυρίως  $K^+$ , που συνήθως είναι περιορισμένα σε αλατούχα εδάφη. Η αύξηση στη πρόσληψη του Pb από το φυτό επιτυγχάνεται με τη μεσολάβηση των μηχανισμών μεταφοράς  $K^+$ ,  $Ca^{2+}$ .



## VI. Μοντελοποίηση περιβαλλοντικών συστημάτων

Μέχρι σήμερα δεν έχει δημοσιευτεί κάποιο μαθηματικό μοντέλο που να περιλαμβάνει τις απαιτούμενες παραμέτρους εισόδου και εξόδου για τη πλήρη περιγραφή της φυτοεξυγίανσης (Cunningham et al. 1996).

Στη μοντελοποίηση των περιβαλλοντικών συστημάτων χρησιμοποιούνται κυρίως δυο μέθοδοι (Trapp & Matthies, 1998):

- Η μηχανιστική μέθοδος (mechanistic / deductive method), βασιζόμενη σε βιολογικές φυσικοχημικές θεωρίες και διαδικασίες. Σε αυτή τη μέθοδο ερμηνεύονται μαθηματικά τα φαινόμενα και οι μηχανισμοί που αποτελούν το υπό μελέτη περιβαλλοντικό σύστημα
- Η εμπειρική μέθοδος (empiric / data based method), βασιζόμενη σε δεδομένα εμπειρικών, εργαστηριακών μετρήσεων και μετρήσεων πεδίου. Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιείται συχνά σε περιπτώσεις όπου οι φυσικοχημικές διεργασίες είναι πολύπλοκες στη περιγραφή τους και γι' αυτό χρησιμοποιούνται εμπειρικές σχέσεις βασιζόμενες σε πειραματικές μετρήσεις

Η ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων περιβάλλοντος με τη μηχανιστική μέθοδο προσεγγίζεται με δύο διαφορετικούς τρόπους, αν και τις περισσότερες φορές εφαρμόζονται και οι δυο προσεγγίσεις ταυτόχρονα (Trapp & Matthies, 1998):

- Με την υδροδυναμική προσέγγιση (hydrodynamic / flow mechanistic approach) η οποία στηρίζεται στη περιγραφή των φαινομένων μεταφοράς σε μια ή περισσότερες διαστάσεις με διαφορικές εξισώσεις
- Με τη προσέγγιση της κινητικής των αντιδράσεων (reaction kinetics approach) που εστιάζεται στους βιοχημικούς μετασχηματισμούς που υφίσταται μια οργανική ουσία στο περιβάλλον

Η εφαρμογή μοντέλων περιβάλλοντος είναι απαραίτητη για τους εξής λόγους (Trapp & Matthies, 1996, Schnoor, 1996):

- Να προσδιοριστούν οι συγκεντρώσεις των ουσιών – στόχων, στα βιοτικά και αβιοτικά διαμερίσματα του συστήματος, ώστε να καθοριστούν οι συγκεντρώσεις έκθεσης των ανθρώπων και των άλλων οργανισμών στις χημικές ενώσεις, για πρόληψη μελλοντικών επικίνδυνων επιπτώσεων
- Να συμβάλει στην κατανόηση των διαδικασιών μεταφοράς, μετατροπής των ρυπαντών στο περιβάλλον και των παραμέτρων που τις ελέγχουν
- Πρόβλεψη της συμπεριφοράς των συστημάτων υπό μελέτη, σε διαφορετικές συνθήκες / σενάρια, ώστε να γίνεται καλύτερη μελλοντική διαχείριση

Για να επιτευχθούν οι παραπάνω στόχοι πρέπει να εφαρμοστούν οι εξής διαδικασίες (Trapp & Matthies, 1998, Wagner & Matthies, 1996):

- Προσδιορισμός του περιβαλλοντικού συστήματος, των συνθηκών και της χημικής ένωσης που θα μελετηθούν. Απόκτηση γνώσεων για τις βιολογικές και φυσικοχημικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στο σύστημα (στιγμιαίος ή συνεχής τρόπος απελευθέρωσης του ρυπαντή, μεταφορά μέσω διάχυσης, συμμεταφοράς ή διασποράς, διαδικασία ρόφησης του ρυπαντή). Μετά τον αποσαφηνισμό των διεργασιών επιλέγεται ο καταλληλότερος τρόπος περιγραφής τους
- Η διατύπωση των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στο σύστημα υπό μελέτη με μαθηματικές σχέσεις, συνήθως από ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων και η αναζήτηση παραμέτρων (π.χ. διαλυτότητα, ρυθμός κατακράτησης) από βιβλιογραφία ή από εργαστηριακές έρευνες
- Η στατιστική σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με τα πειραματικά αποτελέσματα (calibration). Σε περίπτωση που το στατιστικό σφάλμα είναι εκτός αποδεκτών ορίων, οι παράμετροι που αποτελούν το μοντέλο πρέπει να τροποποιηθούν έτσι ώστε η προσομοίωση να είναι αποδεκτή
- Η επαλήθευση του μοντέλου περιλαμβάνει τη στατιστική σύγκριση με ένα δεύτερο σύνολο πειραματικών αποτελεσμάτων. Οι τιμές των παραμέτρων παραμένουν οι ίδιες με το στάδιο της βαθμονόμησης
- Η ευαισθησία του μοντέλου σε μικρές διακυμάνσεις των παραμέτρων που το αποτελούν είναι ένας σημαντικός παράγοντας της μοντελοποίησης. Η ανάλυση ευαισθησίας προσδιορίζει την επίδραση των διακυμάνσεων των τιμών των ανεξάρτητων μεταβλητών στο τελικό αποτέλεσμα του μοντέλου. Στη περίπτωση που μικρής τάξης μεταβολή στη τιμή μιας ανεξάρτητης μεταβλητής τροποποιεί σημαντικά τα αποτελέσματα του μοντέλου, είναι απαραίτητο να υπάρχει υψηλή ακρίβεια στις γνώσεις που αφορούν τη συγκεκριμένη μεταβλητή.
- Η επικύρωση αξιοπιστίας του μοντέλου βασίζεται σε 3 επιστημονικές αποδοχές: Το μοντέλο πρέπει να περιλαμβάνει όλες τις βασικές διεργασίες του συστήματος, οι διεργασίες αυτές να έχουν περιγραφεί με σωστό τρόπο και το μοντέλο να είναι κατάλληλο για το σκοπό που δημιουργήθηκε. Η εφαρμοσιμότητα του μοντέλου θα πρέπει να εξεταστεί σε διαφορετικές συνθήκες και εφαρμογές ώστε να αποκτηθεί εμπιστοσύνη στην αποτελεσματικότητά του
- Ανάλυση αβεβαιότητας είναι η διαδικασία κατά την οποία με τον υπολογισμό της τυπικής απόκλισης διακρίνουμε τι τύπους σφαλμάτων περιέχει το μοντέλο μας και την ακρίβεια του αποτελέσματος που έχει υπολογιστεί. Το στοχαστικό σφάλμα προέρχεται από τη διακύμανση που παρουσιάζουν τα δεδομένα εισαγωγής (μεταβλητές του συστήματος εξαρτώμενες και αρχικές, παράμετροι), όσο και από τις υπεραπλουστεύσεις των περιγραφόμενων διαδικασιών (σφάλματα μοντέλου). Τα σφάλματα μοντέλου είναι δύσκολο να προσδιοριστούν επειδή η μόνη ένδειξη ότι υπάρχουν είναι οι αντίστοιχες

πειραματικές μετρήσεις. Τα στοχαστικά σφάλματα είναι πιο εύκολο να προσδιοριστούν μέσω της ανάλυσης ευαισθησίας

# 1. Βασικές έννοιες και ορισμοί για την ανάπτυξη μαθηματικού μοντέλου πρόσληψης μη οργανικών ουσιών από τα φυτά

Η θεωρία της ανάλυσης συστημάτων χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη συμπεριφορά πολύπλοκων συστημάτων. Το υπό μελέτη σύστημα διαιρείται σε ένα αριθμό υπο μέρους συστημάτων, τα οποία ονομάζονται διαμερίσματα. Τα διαμερίσματα αυτά θεωρούνται ότι είναι ομοιογενή, πλήρως αναμεμειγμένα και ότι ανταλλάσσουν χημικές ουσίες και ενέργεια μεταξύ τους. Οι παραπάνω διαδικασίες απλουστεύουν σημαντικά το μοντέλο, καθώς το σύστημα των μερικών διαφορικών εξισώσεων (ως προς το χώρο και το χρόνο), μετατρέπονται σε ένα σύστημα με συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (αποκλειστικά ως προς το χρόνο). Οι βασικές εξισώσεις μπορούν να αναπτυχθούν είτε με όρους συγκεντρώσεων των ουσιών είτε με όρους της ολικής μάζας σε κάθε διαμέρισμα. Στις βασικές εξισώσεις εμπλέκονται και οι παράμετροι του συστήματος.

Για κάθε διαμέρισμα του συστήματος ισχύει η αρχή διατήρησης της μάζας, δηλ. η μεταβολή της μάζας  $dM(t)$ , στο χρονικό διάστημα  $d(t)$  εντός του διαμερίσματος ισούται με τις εισροές μείον τις εκροές.

$$dM(t) = \left[ \text{εισροές} - \text{εκροές} - \text{μείωση λόγω ροφησης στα κυτταρικά τοιχώματα} \right] \cdot d(t)$$

Θεωρώντας ότι οι εισροές και οι εκροές μεταβάλλονται με το χρόνο, η μάζα τη χρονική στιγμή  $t = t_0 + dt$  με  $m_0 = m(t_0)$  θα είναι:

$$m(t) = m_0 + dm(t) = m_0 + \left[ \text{εισροές}(t) - \text{εκροές}(t) - \text{μείωση λόγω ροφησης στα κυτταρικά τοιχώματα}(t) \right] \cdot dt$$

Επομένως για συνεχείς διαδικασίες θα ισχύει:

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \left[ \frac{dM(t)}{dt} \right] = \frac{dM(t)}{dt} = \text{εισροές} - \text{εκροές} - \text{μείωση λόγω ροφησης στα κυτταρικά τοιχώματα}$$

Το ισοζύγιο μάζας για τη στερεή φάση είναι:

$$\frac{dM_{solid}}{dt} = d \frac{(C_{solid} \cdot V_{solid})}{dt} = \text{ρυθμός αύξησης λόγω ρόφησης στα κυτταρικά τοιχώματα}$$

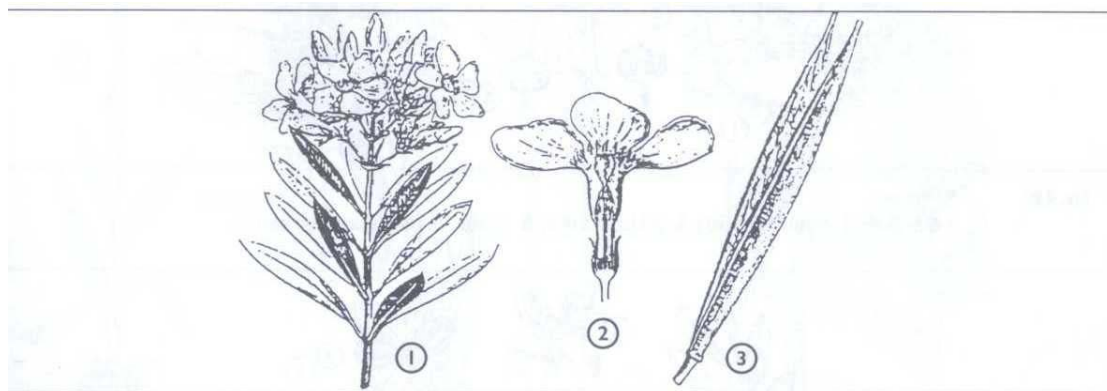
Λόγω της ανάπτυξης του φυτού ο όγκος του φυτού μεταβάλλεται με το χρόνο. Για την υγρή και τη στερεή φάση ισχύει:

$$V \frac{dC}{dt} = \frac{d(C \cdot V)}{dt} - C \frac{dV}{dt}$$

## 2. Ανάλυση ανάπτυξης μηχανιστικού μοντέλου

Τα υπάρχοντα μοντέλα προσομοίωσης αφορούν περισσότερο τη πρόσληψη των μετάλλων και όχι τη μεταφορά τους. Σημαντικό στόχο αποτελεί η δομή του μοντέλου με την όσο το δυνατό ακριβέστερη περιγραφή των μηχανισμών, παρά ο υπολογισμός των παραμέτρων, που τις περισσότερες φορές οι τιμές τους δεν εμφανίζονται στη βιβλιογραφία και δεν είναι επαρκώς αποδεδειγμένες.

Για να επιτευχθεί ο σκοπός αυτός χρησιμοποιείται μια μηχανιστική προσέγγιση μοντελοποίησης δυναμικού συστήματος και επιλέγεται η πικροδάφνη (*nerium oleander*), καθώς εξαιτίας της φυσιολογίας του, επιτρέπει μεγάλη συσσώρευση βιομάζας και ικανοποιητική μεταφορά. Επίσης η πικροδάφνη παρουσιάζει αντοχή στη παρουσία αλατότητας στο έδαφος ή στον υδροφορέα.



Εικόνα VI: 1: Πικροδάφνη (*Nerium Oleander*), 2: Λουλούδι, 3: Καρπός, Πηγή: Ιωάννη Β. Τσέκου Φυσιολογία Φυτών Τομος 1 εκδόσεις Αδελφών Κυριακίδη α.ε 2003



Εικόνα VI.2: Άγρια πικροδάφνη

Στο μοντέλο που παρουσιάζεται περιγράφονται με τον πιο απλό τρόπο όλες οι κύριες διεργασίες που ευθύνονται για τη συμπεριφορά του φυτού. Η μαθηματική προσέγγιση με δυναμικό τρόπο επιτυγχάνει συγκεκριμένη δομή και περιορισμούς στο μοντέλο, που επιτρέπουν την εξαγωγή ασφαλών αποτελεσμάτων ως προς την αναγνώριση και περιγραφή των διεργασιών που φαίνεται να επηρεάζουν τη συμπεριφορά του συστήματος. Είναι δυνατό με αυτή τη προσέγγιση να περιγραφούν οι δυναμικές τάσεις του συστήματος όπως η διαπνοή και η ανάπτυξη του φυτού

Γνωρίζοντας κάποιες βασικές παραμέτρους για το πεδίο εφαρμογής της μεθόδου, όπως η συγκέντρωση του μολύβδου στο έδαφος, την αλατότητα του εδάφους, μπορούμε με τη χρήση του μοντέλου να υπολογίσουμε τον αριθμό των φυτών που απαιτούνται για μείωση αυτής της συγκέντρωσης σε επιτρεπτά όρια, ακόμη και το χρονικό διάστημα της απορύπανσης. Επίσης από τα αποτελέσματα του μοντέλου μπορεί να υπολογιστεί η χρονική περίοδος όπου το σύστημα θα έχει τη μέγιστη απόδοση εκτιμώντας έτσι τη βέλτιστη περίοδο συγκομιδής του φυτού. Χρήσιμη πληροφορία που μας παρέχει το μοντέλο είναι και η χρονική περίοδος που θα είναι κατάλληλη η προσθήκη των χηλικών ενώσεων που θα βοηθήσουν στη πρόσληψη του μετάλλου.

Λόγω της δυναμικής προσέγγισης και το γεγονός ότι κάθε μαθηματική σχέση του μοντέλου έχει ένα αναγνωρισμένο ομοιότυπο, η μοντελοποίηση αυτή μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιοδήποτε σύστημα φυτού-μετάλλου. Οι παραμέτροι του μοντέλου

μπορούν να διαμορφωθούν ώστε να αναλογούν στο φυτό που επιλέγεται π.χ διαπνοή, ρυθμό ανακυκλοφορίας του διαλύματος μέσω των ηθμών, ανάπτυξη του φυτού. Αντίστοιχα με τις κατάλληλες τροποποιήσεις, π.χ διαλυτότητα του μετάλλου στους ιστούς, ρυθμός διάχυσης, ρυθμός ιονοανταλλαγής, το ίδιο μπορεί να γίνει με την επιλογή του ρυπαντή. Γενικότερα η φυσιολογία του φυτού και οι χημικές ιδιότητες του ρυπαντή είναι αυτά που θα καθορίσουν τις αλλαγές στο μοντέλο. Ένα άλλο σημαντικό πλεονέκτημα της δυναμικής προσέγγισης είναι ότι το μοντέλο μπορεί να εξελιχθεί ώστε να ληφθούν υπόψη εξωτερικές παράμετροι που επηρεάζουν το σύστημα φυτού-μετάλλου, όπως η αλατότητα. Με τις απαραίτητες εργαστηριακές μετρήσεις μπορούν να δημιουργηθούν μαθηματικές σχέσεις και να ενσωματωθούν στο μοντέλο.

Τα όρια του συστήματος που εξετάζουμε καθορίζονται από την εξωτερική επιφάνεια του φυτού. Οι συνθήκες υπόγειας ροής και το είδος του εδάφους δεν είναι υπό μελέτη. Η ρίζα είναι η πηγή εισόδου μολύβδου στο φυτό και θεωρείται ότι δεν υπάρχουν εισροές από ή εκροές προς την ατμόσφαιρα από άλλα μέρη του φυτού.

Τα βασικά μέρη του μολύβδου στο σύστημα είναι:

- ο μολύβδος στο εδαφικό διάλυμα ή διαλυμένος στον υδροφορέα
- ο μολύβδος στη ρίζα
- στο βλαστό
- και στα φύλλα

Ο μολύβδος βρίσκεται στην υγρή (διαλυτή μορφή) και στερεή (κατακρατήσιμη) φάση σε όλο το σώμα του φυτού. Οι ροές που επηρεάζουν τη κίνηση του μολύβδου παρατίθενται παρακάτω:

- Πρόσληψη Pb από το εδαφικό διάλυμα από το συμπλάστη της ρίζας
- Μεταφορά του Pb στο ξύλο μέσω του ρεύματος μεταφοράς από τη ρίζα στο βλαστό
- Μεταφορά του μετάλλου στον ηθμό
- Κατακράτηση Pb στο φυτό
- Η αύξηση του όγκου του φυτού φαίνεται να ακολουθεί μια συνάρτηση s-μορφής και επηρεάζεται αρνητικά από τη πρόσληψη Pb.
- Η διαπνοή του φυτού επηρεάζει τη κίνηση του Pb στην επιφάνεια της ρίζας μέσω της ροής μάζας και ελέγχει τη ροή του χυμού στο ξύλο

Το μέταλλο διαλελυμένο στην επιφάνεια της ρίζας προσροφάται στον ιστό της με ένα μέγιστο ρυθμό πρόσληψης ( $V_{\max}$ ) και μια σταθερά ημικορεσμού ( $K_m$ ). Το μέταλλο

που έχει προσροφηθεί από το κορεσμένο σε νερό τμήμα του εδάφους / υδροφορέα στην επιφάνεια της ρίζας, στη στερεή φάση, ελέγχεται από την εξίσωσης της προσρόφησης που περιγράφεται παρακάτω στη μοντελοποίηση βασικών διεργασιών. 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. Όταν βρεθεί στο ξύλο μπορεί να προσροφηθεί στα σημεία ιονοανταλλαγής που βρίσκονται στα τοιχώματα της σωληνοειδούς διατομής του ξύλου, καθώς ρέει προς τα άλλα μέρη του φυτού.

Ο ρυθμός διαπνοής ( $Q_{trans}$  και  $Q_{phl}$ ) μεταβάλλεται καθημερινά κατά τη διάρκεια της καλλιεργητικής περιόδου. Το ρεύμα διαπνοής μετά τη διέλευση του από τη ρίζα διαχωρίζεται σε δύο τμήματα, στο τμήμα του βλαστού και στο τμήμα φυλλώματος. Ο βλαστός είναι ο κύριος αγωγός μεταφοράς από τη ρίζα προς τα φύλλα. Στα φύλλα οδηγείται το μεγαλύτερο μέρος της ροής και το υπόλοιπο στο βλαστό. Στα επιμέρους τμήματα του φυτού η ροή διαχωρίζεται ανάλογα με τους όγκους του αντίστοιχου τμήματος. Στο μοντέλο αυτό υλοποιείται με τη χρήση συντελεστών πολλαπλασιαζόμενους με τη παροχή διαπνοής. Η διεργασία που λαμβάνει μέρος στη διαπνοή είναι η συμμεταφορά.

Η κίνηση του Pb στον ηθμό περιγράφεται από τη ροή της μάζας ( $Q_{phl}$ ) με τη κατεύθυνση από την πηγή προς τον αποδέκτη. Πηγή είναι τα φύλλα και αποδέκτης η ρίζα.

Η αντίδραση της κατακράτησης (precipitation) υποτίθεται ότι ελέγχεται από την αντίδραση ισορροπίας της διάλυσης του μετάλλου, τη συγκέντρωση του μετάλλου στο διάλυμα και τη ταχύτητα με την οποία η αντίδραση φτάνει σε ισορροπία (ρυθμός κατακράτησης). Επειδή η κύρια μορφή κατακράτησης είναι ο φωσφορούχος μόλυβδος, η αντίδραση διάλυσης του Pb εξαρτάται από τη συγκέντρωση της φωσφορώδους ρίζας και το pH. Το pH και οι ρυθμοί κατακράτησης είναι ξεχωριστοί για κάθε τμήμα του φυτού. Όταν το μεταφερόμενο διάλυμα είναι ακόρεστο σε μέταλλο συμβαίνει επαναδιάλυση του μετάλλου από τις θέσεις κατακράτησης στο διάλυμα μεταφοράς.

### 3. Μοντελοποίηση βασικών διεργασιών

#### 9.i. Διαχυση μέσω μεμβράνης:

Ισχύει ο 1<sup>ος</sup> νόμος του Fick:

$$J = -D \cdot A \cdot \frac{dC}{dx}$$

όπου

$J$  = η πυκνότητα ροής που εκφράζει τη ροή ή τη ποσότητα μάζας του συστατικού που διέρχεται από την επιφάνεια της μεμβράνης στη μονάδα χρόνου  $\frac{M}{T}$

$D$  = συντελεστής διάχυσης διαμέσου της μεμβράνης. Εξαρτάται από τη φύση του διαχεόμενου μορίου σε συνδυασμό με την εκλεκτικότητα της μεμβράνης  $\frac{L^2}{T}$

$A$  = το εμβαδό της επιφάνειας της μεμβράνης το οποίο διέρχεται η ουσία  $L^2$

$\frac{dC}{dx}$  = είναι η κλίση συγκέντρωσης μεταξύ των δύο περιοχών της διάχυσης. Στη

περίπτωση της απλής διάχυσης αποτελεί τη δρώσα δύναμη  $\frac{M}{L^4}$

(Καρατζάς Γ., 2002)

#### 9.ii. Συμμεταφορά με το ρεύμα διαπνοής:

Η ουσία μεταφέρεται μέσω της ροής του ίδιου του μέσου εντός του οποίου είναι διαλυμένη. Η μονοδιάστατη ροή μάζας  $F$  δίνεται από τη σχέση (Καρατζάς Γ., 2002):

$$F = u \cdot A \cdot C$$

όπου:

$$u = \text{ταχύτητα ροής} \frac{L}{T}$$

$A$  = κάθετη στη ροή επιφάνεια  $L^2$

$C$  = συγκέντρωση της ουσίας  $\frac{M}{L^3}$

Στη περίπτωση συμμεταφοράς της ουσίας εντός του φυτού με το ρεύμα διαπνοής χρησιμοποιείται η σχέση:

$$F = Q \cdot C$$

όπου:

$$Q = \text{ρυθμός ροής του ρεύματος διαπνοής} \frac{L^3}{T}$$

#### 9.iii. Ρόφηση στα κυτταρικά τοιχώματα:

Η ρόφηση του ρύπου στα κυτταρικά τοιχώματα περιγράφεται από τη σχέση:

$$\frac{dC}{dt} = -k_{sor} \cdot \left( C - \frac{S}{K_{eq}} \right)$$

όπου:

$$k_{sor} = \text{η κινητική σταθερά της ρόφησης} \frac{1}{T}$$

$S$  = συγκέντρωση της ουσίας που βρίσκεται σε προσροφημένη μορφή στα κυτταρικά τοιχώματα του φυτού  $\frac{M}{M}$

$K_{eq}$  = η σταθερά ισορροπίας μεταξύ της διαλυμένης φάσης και της προσροφημένης

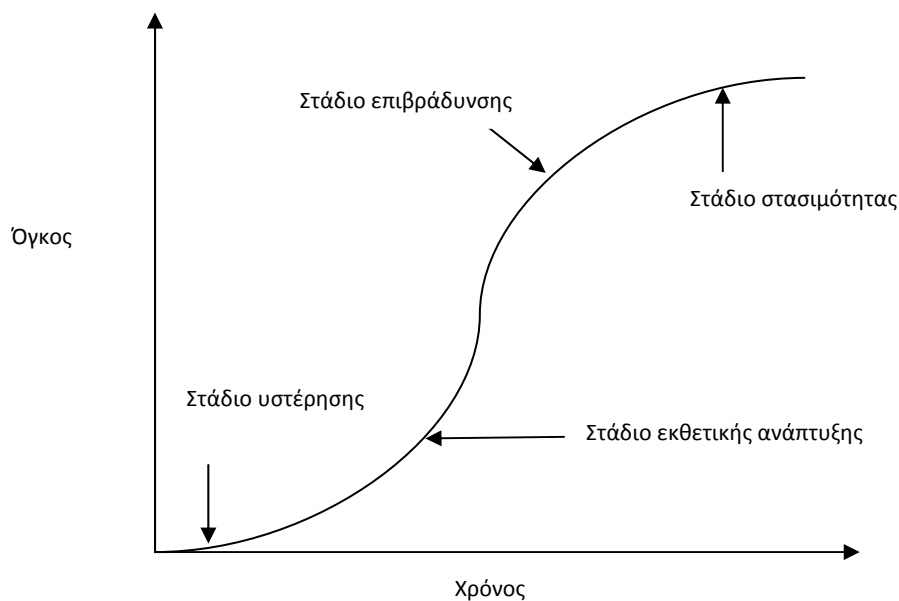
φάσης της ουσίας  $\frac{L^3}{M}$

$C =$  συγκέντρωση της ουσίας που βρίσκεται σε διαλυμένη μορφή  $\frac{M}{L^3}$

#### 9.iv. Η ανάπτυξη των φυτών

Η αύξηση του όγκου των φυτών ακολουθεί καμπύλη σιγμοειδούς μορφής (Ιωάννη Β. Τσέκου, 2003). Τα στάδια ανάπτυξης παρουσιάζονται παρακάτω:

1. Στάδιο υστέρησης: το φυτό συνθέτει τα απαραίτητα ένζυμα για να αναπτυχθεί
2. Στάδιο εκθετικής ανάπτυξης: ο όγκος του φυτού αυξάνεται με υψηλό ρυθμό
3. Στάδιο επιβράδυνσης: ο όγκος του φυτού συνεχίζει να αυξάνεται, αλλά με πιο αργό ρυθμό από ότι στο προηγούμενο στάδιο
4. Στάδιο στασιμότητας: ο όγκος του φυτού σταθεροποιείται



Δεδομένου ότι η καμπύλη ανάπτυξης του όγκου των φυτών είναι σιγμοειδούς μορφής, η λογιστική εξίσωση την περιγράφει ικανοποιητικά (Καλογεράκης, 2007). Σύμφωνα με την προαναφερθείσα εξίσωση η αύξηση του όγκου του φυτού ισούται με:

$$\frac{dV}{dt} = \mu \cdot V = k_{growth} \cdot \left(1 - \frac{V}{V_{max}}\right) \cdot V$$

όπου:

$\mu = k_{growth} \cdot \left(1 - \frac{V}{V_{max}}\right)$ , ο ειδικός ρυθμός ανάπτυξης του φυτού είναι ανάλογος της

υπολειπόμενης φέρουσας ικανότητας  $\left(1 - \frac{V}{V_{max}}\right)$  με σταθερά αναλογίας  $k_{growth} \cdot \frac{1}{T}$

$V$  = ο όγκος του φυτού  $L^3$  τη χρονική στιγμή  $t$   $T$

$V_{max}$  = ο μέγιστος όγκος του φυτού  $L^3$

Επίδραση φυτοτοξικότητας στην ανάπτυξη του φυτού

Η συσσώρευση του ρύπου εντός της ρίζας του φυτού αυξάνεται, παρεμποδίζοντας έτσι σταδιακά τις λειτουργίες του φυτού και την ανάπτυξη του. Η λογιστική εξίσωση μετατρέπεται ως εξής:

$$\frac{dV}{dt} = \mu \cdot k_{tox} \cdot V = k_{growth} \cdot \left(1 - \frac{V}{V_{max}}\right) \cdot k_{tox} \cdot V$$

όπου:

$k_{tox} = 1 - \frac{C_{root}^{Pb}}{C_{root,max}^{Pb}}$ , αδιάστατη σταθερά φυτοτοξικότητας που εκφράζει τη

παρεμπόδιση στην ανάπτυξη του φυτού και μεταβάλλεται με το χρόνο λόγω της συνεχούς συσσώρευσης του ρύπου στη ρίζα του φυτού. Παίρνει τιμές από 0 (παρουσία του ρύπου στη μέγιστη συγκέντρωση στη ρίζα, το φυτό δεν αναπτύσσεται καθόλου) μέχρι 1 (όπου ο ρύπος δεν επηρεάζει καθόλου την ανάπτυξη του φυτού). Οι υπολογισμοί για το συντελεστή  $k_{tox}$  έχουν γίνει για μηδενική αλατότητα αλλά και για αλατότητα 0,5%.

## VII. Υποθέσεις, παραδοχές μοντέλου

- Τα διαλύματα είναι καλά αναμειγμένα σε όλα τα μέρη του φυτού
- Η περίοδος που επιλέχθηκε να γίνει η προσομοίωση αντιστοιχεί σε 150 μέρες με αφετηρία τη πρωτοεμφάνιση βλαστού στις 15 μέρες
- Η ανάπτυξη του φυτού παρεμποδίζεται από τη συνεχή συσσώρευση Pb στη ρίζα. Η υψηλότερη συγκέντρωση που μπορεί να αντέξει το φυτό φτάνει στα 5600 mg Pb ανα kg ξηρής μάζας. Σε συνδυασμό με αλατότητα 0,5%, το φυτό αντέχει συσσώρευση Pb στα 4000 mg ανα kg ξηρής μάζας.
- Η ποσότητα του νερού στο βλαστό και στη ρίζα μειώνονται κατά τη διάρκεια της καλλιεργητικής περιόδου
- Ένα γραμμάριο φυτικής μάζας έχει όγκο 1 ml
- Οι όγκοι του ξύλου, του ηθμού και του ιστού βρέθηκαν από βιβλιογραφία
- Η αύξηση της ξηρής μάζας του φυτού ακολουθεί σιγμοειδή καμπύλη
- Η ροή μάζας είναι υπεύθυνη για τη μεταφορά στον ηθμό, από τον ιστό στον ηθμό και από τον ηθμό στον ιστό, σε όλα τα μέρη του φυτού
- Η ροή μάζας είναι υπεύθυνη για τη μεταφορά στο ξύλο, από τον ιστό στο ξύλο και αντίστροφα, σε όλα τα μέρη του φυτού
- Η καθημερινή διαπνοή περιλαμβάνει αυτήν που απαιτείται στην παραγωγή φυτικής μάζας και αυτή που απαιτείται για τη διατήρηση της υπάρχουσας
- Η μεταφορά του Pb στη ρίζα περιγράφεται από τη διαπνοή και τη συγκέντρωση του διαλύματος
- Η διάχυση και η επιλεκτική δέσμευση του  $Pb^{2+}$  στη ρίζα περιγράφεται από ένα συντελεστή συμμετοχής και ένα ρυθμό
- Η κίνηση του Pb από το εδαφικό διάλυμα προς την επιφάνεια της ρίζας γίνεται με μεταφορά μάζας και διάχυση
- Ο Pb κατακρατείται στην επιφάνεια της ρίζας, στον ιστό, στο ξύλο και στον ηθμό σε όλο το φυτό στη μορφή του φωσφορώδους Pb
- Η κατακράτηση του Pb ελέγχεται από το pH, το ρυθμό κατακράτησης, τα συνολικά φωσφοριόντα και τη συγκέντρωση του Pb στο διάλυμα
- Η αντίδραση της κατακράτησης συμβαίνει πολύ γρήγορα και φτάνει σε ισορροπία πολλές φορές την ημέρα
- Ο ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια και τον αποπλάστη της ρίζας μειώνεται καθώς ο φωσφορώδης μόλυβδος συσσωρεύεται στην επιφάνεια της ρίζας
- Το pH στο ξύλο είναι 5.5, στον ηθμό 8, στον ιστό 7 και στην επιφάνεια της ρίζας και αποπλάστη 6
- Η πρόσληψη από την επιφάνεια της ρίζας στον συμπλάστη της ρίζας συμβαίνει σε συμφωνία με τη κινητική κορεσμού Michaelis-Menden
- Η ροή στο ξύλο από τη ρίζα στο βλαστό είναι ίση με τον καθημερινό ρυθμό διαπνοής
- Η ροή από τη ρίζα προς τον ιστό του βλαστού και τα φύλλα κατανέμεται ανάλογα με τη ποσότητα διαπνοής που παρουσιάζεται σε κάθε τμήμα. Άρα η ροή στα φύλλα είναι η υψηλότερη και μετά ακολουθεί η ροή στο βλαστό
- Μικρή ποσότητα μολύβδου μεταφέρεται ενεργά από το ξύλο στον ηθμό της ρίζας και του βλαστού
- Η ροή του μολύβδου στο ξύλο παρεμποδίζεται από τη προσρόφηση του  $Pb^{2+}$  στο κυτταρικό τοίχωμα του ξύλου. Η παρεμπόδιση αυτή είναι αρχικά υψηλή

ενώ μειώνεται καθώς τα κατιόντα  $Pb^{2+}$  συσσωρεύονται στα κυτταρικά τοιχώματα. Τελικά μηδενίζεται

- Η παρεμπόδιση εξαιτίας της προσρόφησης, είναι πάντα μικρότερη από 100%, επειδή κάποια ποσότητα του Pb μεταφέρεται με τη μορφή ουδέτερων σύμπλοκων μορίων
- Η ροή στον ηθμό γίνεται από τη πηγή προς τον αποδέκτη. Πηγή είναι τα φύλλα και μόνος αποδέκτης η ρίζα. Ο καρπός του συγκεκριμένου φυτού λίγες φορές εμφανίζεται. Κατά τις πειραματικές μετρήσεις δεν εμφανίστηκε. Ο βλαστός συνεισφέρει στη ροή του ηθμού μόνο σαν αγωγός ροής
- Ο ρυθμός ροής στον ηθμό είναι ένα τμήμα του ρυθμού ροής στο ξύλο. Το τμήμα αυτό μεγαλώνει ελαφρώς καθώς τα φύλλα ωριμάζουν
- Πιθανό να υπάρχει κάποια μικρή διάχυση από τον ιστό του βλαστού πίσω στο ξύλο του βλαστού. Η ροή είναι ανάλογη με τη βαθμίδα της βαθμίδας συγκέντρωσης μεταξύ των δυο και ενός συντελεστή διάχυσης. Η διάχυση μεταξύ του ιστού και του ξύλου του φύλλου 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 στη ροή μέσα στο ξύλο από το βλαστό

VIII. Υπολογισμός, προσδιορισμός όγκων ελέγχου και διάγραμμα ροής μετάλλου στο φυτό

Πίνακας VIII.1: Επί τοις εκατό ποσοστό του όγκου των επιμέρους τμημάτων

	Εξωτερική επιφάνεια	Ηθμός	Ιστός	Ξύλο
Ρίζα	8	20	42	30
Βλαστός		20	50	30
Φύλλα		20	50	30

Παραδοχές:

- Η μάζα του φυτού φτάνει το 1 kg
- Το ποσοστό του υπέργειου τμήματος αντιστοιχεί με το 75% (0,75 kg) της συνολικής μάζας και αντίστοιχα η ρίζα αντιστοιχεί στο 25% (0,25 kg). Σε περίπτωση αλατότητας το ποσοστό της ρίζας αυξάνεται στο 30% (0,3 kg), άρα αντίστοιχα το ποσοστό του υπέργειου τμήματος μειώνεται στο 0,7%.
- Η υγρή φάση αποτελεί το 65% του όγκου του φυτού και αντιστοιχεί στο μόλυβδο που είναι διαθέσιμος για μεταφορά στο φυτό. Αντίστοιχα το 35% του όγκου του φυτού αντιστοιχεί στο μόλυβδο που βρίσκεται κατακρατημένος σε στερεή μορφή
- Η πυκνότητα του φυτού θεωρείται  $1 \frac{kg}{l}$
- Η μάζα του υπέργειου τμήματος αντιστοιχεί σε 75% βλαστό και 25% φύλλωμα

Μέγιστοι όγκοι των υποτμημάτων του φυτού:

Απουσία αλατότητας

Πίνακας VIII.2: Επί τοις εκατό ποσοστό του όγκου των επιμέρους τμημάτων

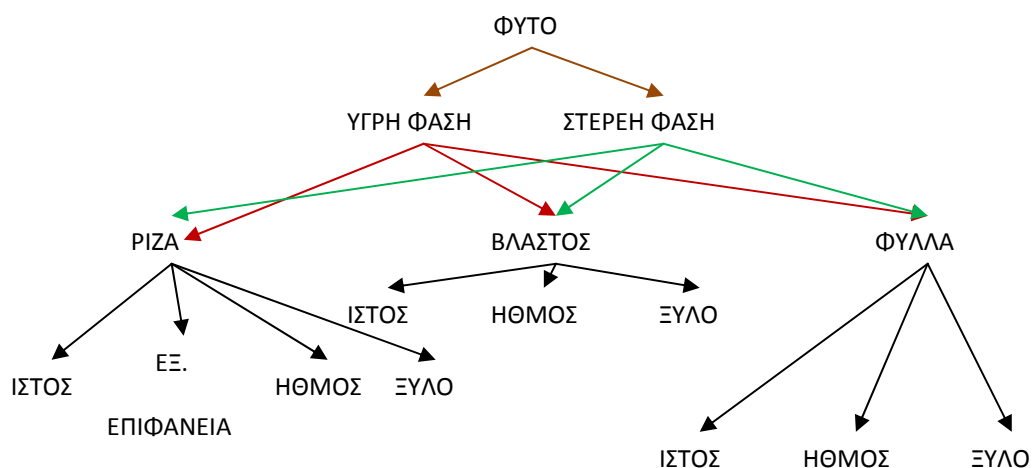
Vmax	Εξωτερική επιφάνεια	Ηθμός	Ιστός	Ξύλο
Ρίζα	0,02	0,05	0,105	0,075
Βλαστός		0,112	0,28	0,169

Φύλλα		0,038	0,094	0,056
-------	--	-------	-------	-------

αλατότητα:

Πίνακας VIII.3: Επί τοις εκατό ποσοστό του όγκου των επιμέρους τμημάτων

V <sub>max</sub>	Εξωτερική επιφάνεια	Ηθμός	Ιστός	Ξύλο
Ρίζα	0,024	0,06	0,126	0,09
Βλαστός		0,105	0,2625	0,1575
Φύλλα		0,035	0,0875	0,0525



Σχήμα VIII.1: Διαμερισματοποίηση του φυτού στους όγκους ελέγχου

# 1. Διάγραμμα ροής νερού και θρεπτικών στοιχείων στους ογκούς ελέγχου

## 1.i. Ρίζα:

Υπόμνημα:

υγρή φάση:



στερεή φάση:



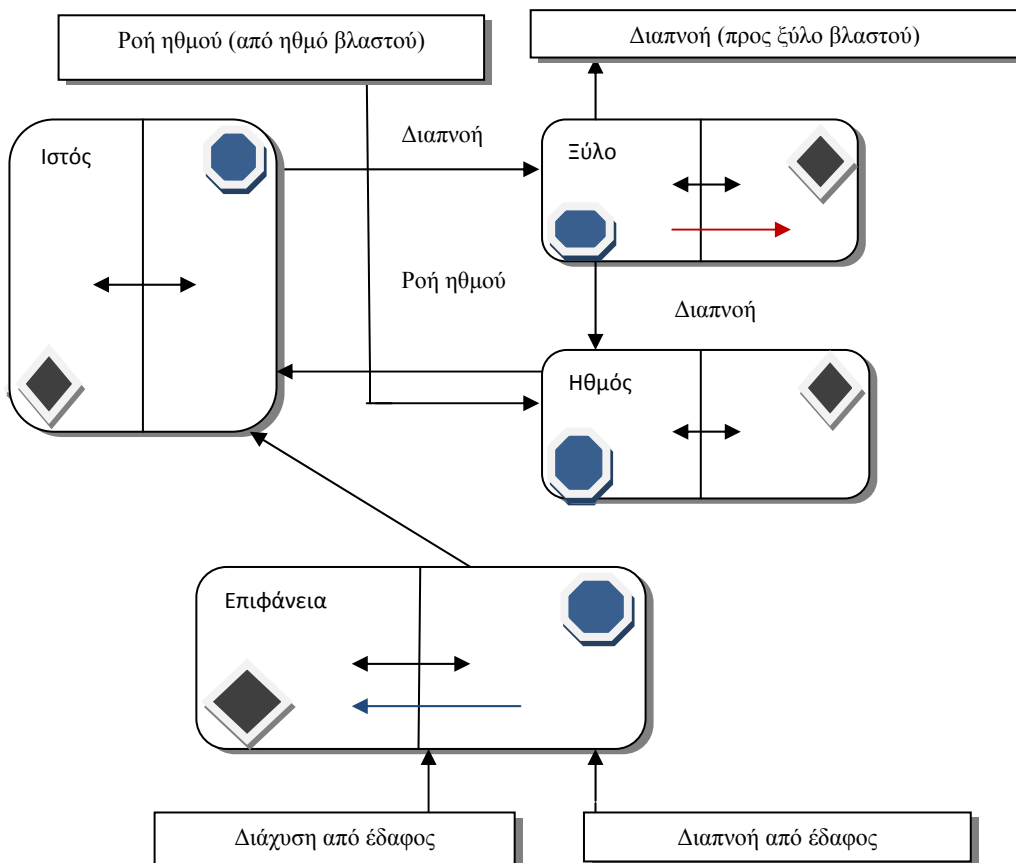
ιονανταλλαγή:



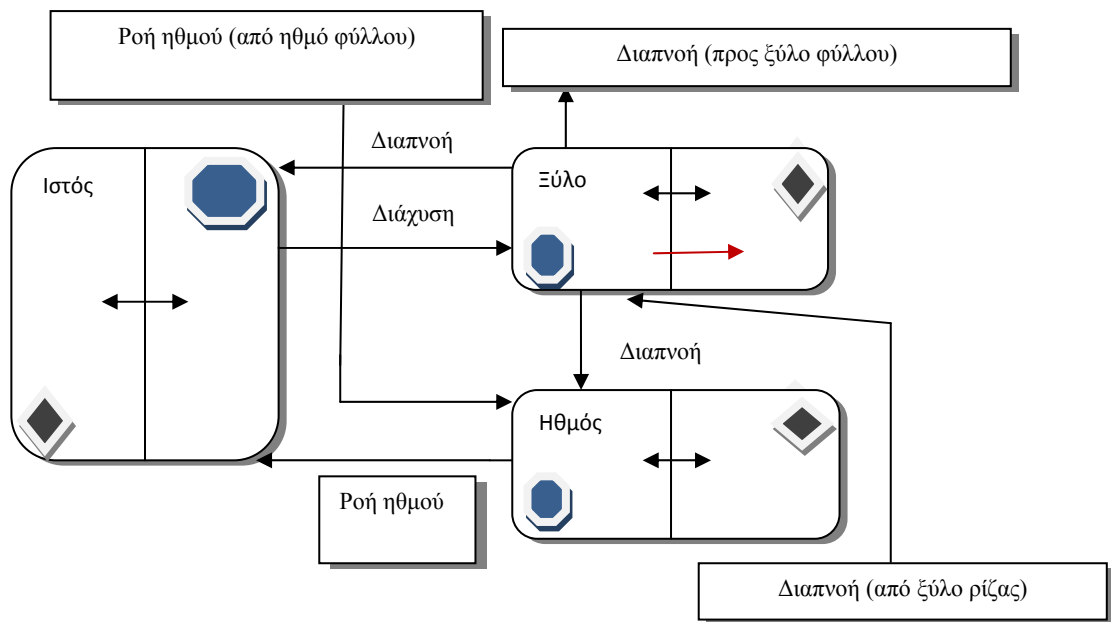
προσρόφηση:



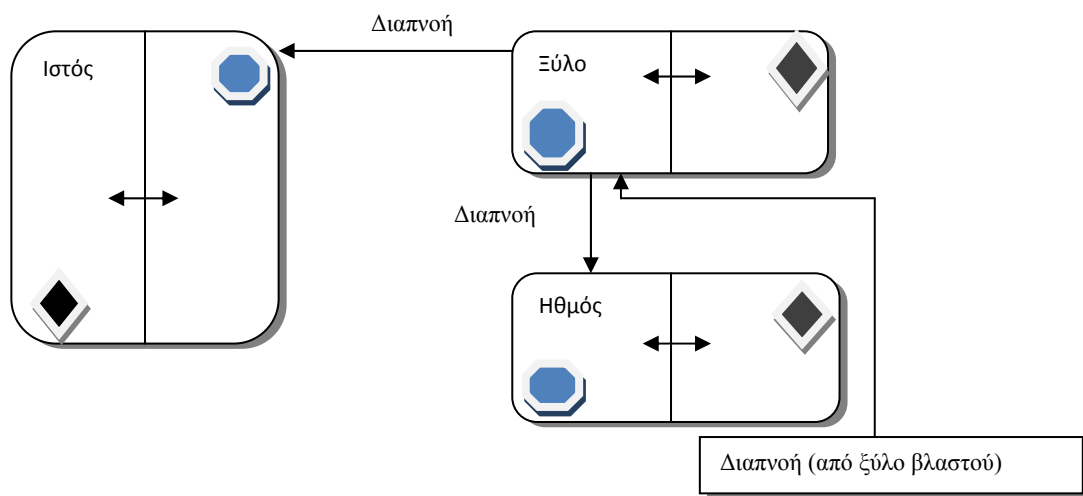
κατακράτηση, επαναδιάλυση:



### 1.ii. Βλαστός:



### 1.iii. Φύλλο:



## IX. Μαθηματικές εξισώσεις

Στους τελεστές των συγκεντρώσεων και όγκων στις εξισώσεις η πρώτη υπόστιξη ορίζει τη φάση (υγρή, στερεή), η δεύτερη το τμήμα του φυτού (ρίζα, βλαστός, φύλλα) και η τρίτη τους αγωγούς (ιστός, ηθμός, ξύλο, εξωτερική επιφάνεια ρίζας). Από το διάγραμμα ροής φαίνεται η κίνηση του μετάλλου που βρίσκεται στο φυτό.

### IX.i. Ρίζα

#### Ιστός ρίζας

##### Υγρή φάση:

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

##### Στερεή φάση:

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

$C_{l,r,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού της ρίζας  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$UPT_{\max}$  : μέγιστος ρυθμός πρόσληψης μετάλλου στη ρίζα από την επιφάνεια της  
 $= 400 \cdot 8 \frac{mg}{kg \cdot d}$  για τον Pb στη πικροδάφνη

$TOXF$  : παράγοντας τοξικότητας που επηρεάζει την ανάπτυξη του φυτού και την πρόσληψη (s-μορφής, φθίνουσα συνάρτηση της συγκέντρωσης μετάλλου στον ιστό της ρίζας και της συγκέντρωσης της αλατότητας στο έδαφος). Περιγράφεται από το function Fp, στα script files fytoode, fytosolver2.

$K_{hs}$  : σταθερά ημικορεσμού για πρόσληψη μετάλλου που δύναται να γίνει κάτω από συνθήκες κορεσμού στη ρίζα από την επιφάνεια της ( $10,7 \frac{mg}{l}$  από πειραματικά δεδομένα)

$M_r$  : ξηρή μάζα ρίζας

$ERM_{fr}$  : ενεργή μάζα ρίζας (s μορφή φθίνουσα συνάρτηση της ηλικίας του φυτού, 1.0 όταν  $t = 0$  days και 0 όταν  $t = 150$  days). Περιγράφεται από το function mass στα script files fytoode, fytosolver2.

$Q_{phl}$  : συνολική ροή στον ηθμό προερχόμενη από το φύλλο  $\left(\frac{l}{day}\right)$ , συναρτήση της ροής στο ξύλο, της μάζας και της ωριμότητας του φύλλου. Περιγράφεται από το function trans2 στα script files fytoode, fytosolver2.

$Q_{trans}$  : συνολική ροή διαπνοής  $\left(\frac{l}{d}\right)$ , μεταβάλλεται κατά την περίοδο ανάπτυξης. Περιγράφεται από το function trans1 στα script files fytoode, fytosolver2.

$C_{s,r,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερή φάση του ιστού της ρίζας  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

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

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

$PRECIP_{r,tiss} = \frac{C_{l,r,tiss} - SOL_{r,tiss}}{C_{l,r,tiss}} \cdot V_{l,r,tiss} \cdot C_{l,r,tiss} \cdot PR_r$  (αν το διάλυμα στον ιστό της ρίζας είναι υπέρκορο)

$PRECIP_{r,tiss} = \frac{C_{l,r,tiss} - SOL_{r,tiss}}{SOL_{r,tiss}} \cdot A_{r,precip} \cdot PR_r$  (αν το διάλυμα είναι ακόρεστο)

Οι δύο παραπάνω σχέσεις ορίζουν την κατακράτηση ή 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. Το κλάσμα στην εξίσωση αντιπροσωπεύει το επί τοις εκατό ποσοστό που κατακρατείται (θετική τιμή) ή επαναδιαλύεται (αρνητική τιμή).

$SOL_r$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό υποθέτοντας pH=7 και  $PO_3^{-2}=0.0001$

mol ( $= 0.02 \frac{mg}{l}$  για το 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 ( $=5d^{-1}$ )

Ερμηνεύοντας την εξίσωση διαπιστώνουμε ότι στον ιστό της ρίζας εισρέει ποσότητα μετάλλου τόσο από την εξωτερική επιφάνεια της ρίζας, με το μέγιστο ρυθμό πρόσληψης, όσο και από τα φύλλα μέσω του ρεύματος αφομοίωσης (ροή στον ηθμό). Οι εκροές περιλαμβάνουν το ρεύμα διαπνοής προς όλα τα τμήματα του φυτού, καθώς και την κατακράτηση (precipitation) στον ιστό της ρίζας.

### Επιφάνεια ρίζας

#### Υγρή φάση:

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

#### Στερεή φάση:

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

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

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

$C_{ss}$ : συγκέντρωση μετάλλου στο εδαφικό διάλυμα  $\left( \frac{mg}{l} \right)$

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

$C_{s,r,surf}$ : συγκέντρωση του μετάλλου στη στερή φάση της επιφάνειας της ρίζας  
 $\left( \frac{mg}{kg} \right)$

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

$C_{r,sorbed}$ : συγκέντρωση μετάλλου σε προσροφημένη μορφή στην επιφάνεια της ρίζας  
 $\left( \frac{mg}{V_{rfs}} \right)$

Ισχύει:

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

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

$P_{r,surf}$ : συντελεστής κατανομής της ισορροπίας προσροφημένου μετάλλου προς εν διαλύσει μέταλλο ( $=0.0048$ , αδιάστατος αριθμός)

$PRECIP_{r,surf}$ : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στην επιφάνεια της ρίζας  $\left( \frac{mg}{d} \right)$ , όπου

$PRECIP_{r,surf} = \frac{C_{l,r,surf} - SOL_{surf}}{C_{l,r,surf}} \cdot V_{l,r,surf} \cdot C_{l,r,surf} \cdot PR_{surf}$  (αν το διάλυμα στην επιφάνεια της ρίζας είναι υπέρκορο)

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

$SOL_{surf}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας για  $pH=6$  και  $PO_3^{-2}=0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.15 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

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

Με τις παραπάνω εξισώσεις περιγράφουμε την εισροή ποσότητας μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας από το εδαφικό διάλυμα με διάχυση αλλά και με διαπνοή. Εκροές είναι η ποσότητα μετάλλου που εισρέει στον ιστό της ρίζας μέσω της υγρής φάσης και το ποσοστό από τη προσροφημένη ποσότητα μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας που καταλήγει στη στερεή φάση.

### Ηθμός ρίζας

#### Υγρή φάση:

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

#### Στερεή φάση:

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

$C_{l,r,phl}$  : συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού της ρίζας  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$C_{l,s,phl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του βλαστού  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

$XPF_r$  : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (0,45 αδιάστατος αριθμός). Το μέταλλο μεταφέρεται με τρόπο παρόμοιο με αυτό των θρεπτικών στοιχείων

$C_{s,r,phl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ηθμού της ρίζας  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

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

$PRECIP_{r,phl}$  : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, ηθμό της ρίζας  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

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

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

$SOL_{r,phl}$  : διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό της ρίζας για pH=8 και  $PO_3^{-2} = 0.0001$  mol ( $= 0.01 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

$A_{r,surf,precip}$  : συνολική ποσότητα μετάλλου που έχει κατακρατηθεί στον ηθμό, όπου  $\frac{dA_{r,p,precip}}{dt} = PRECIP_{r,phl}$

$PR_{phl}$  : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας ( $= 2 \cdot PR_{xyl} = 3d^{-1}$ )

Υποτίθεται ότι 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. Η ταχύτητα κίνησης στο ξύλο είναι πιο γρήγορη από τον ηθμό.

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

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

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

Στις εισροές στον ηθμό της ρίζας έχουμε τη ροή του ηθμού από το βλαστό και τμήμα της ροής διαπνοής από το ξύλο της ρίζας. Στις εκροές συμπεριλαμβάνεται η κατακράτηση και η ροή του ηθμού προς τον ιστό της ρίζας.

Ξύλο ρίζας

Υγρή φάση:

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

Στερεή φάση:

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

$C_{l,r,xyl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου της ρίζας  $\left( \frac{mg}{l} \right)$

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

$C_{r,x,wall}$ : συγκέντρωση του προσροφημένου μετάλλου στα τοιχώματα του ξύλου  $\left( \frac{mgPb}{xylemwalldrymass} \right)$

$C_{r,x,wall} = \frac{A_{r,x,wall}}{M_{r,x,wall}}$ , όπου  $A_{r,x,wall}$ : συνολική ποσότητα προσροφημένου μετάλλου στο

ξύλο και  $M_{r,x,wall}$  : 0.5% της ξηρής μάζας

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

$CEF_r$  : παράγοντας ιοναναταλλαγής στο ξύλο της ρίζας. Τμήμα της ποσότητας του μετάλλου στο ξύλο που δεσμεύεται στα τοιχώματα του. Φθίνουσα συνάρτηση του βαθμού κορεσμού των θέσεων κατακράτησης,  $0 \leq \frac{CEC_r - C_{r,x,wall}}{CEC_r} \leq 0,8$ , ένα μέρος

του μετάλλου είναι σε μορφή που δεν δύναται να κατακρατηθεί. Περιγράφεται από το Function ionex στα script files fytoode, fytosolver2.

$CEF_r$  : δυνατότητα κατιονανταλλαγής των τοιχωμάτων του ξύλου της ρίζας  $\left( = 200 \frac{mgPb}{xylemwalldrymass} \right)$

$C_{s,r,xyl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ξύλου της ρίζας  $\left( \frac{mg}{kg} \right)$

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

$PRECIP_{r,xyl}$ : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στο ξύλο της ρίζας  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

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

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

$SOL_{r,xyl}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ξύλο της ρίζας για pH=5.5 και  $PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.38 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

Στο ξύλο της ρίζας εισροή είναι το ρεύμα διαπνοής από τον ιστό της ρίζας. Στις εκροές είναι η διαπνοή προς τον ηθμό της ρίζας και προς το ξύλο του βλαστού. Επίσης στις εκροές συμπεριλαμβάνεται και το τμήμα της ποσότητας του μετάλλου που με ιονοανταλλαγή δεσμεύεται στα τοιχώματα του.

## IX.ii. Βλαστός

### Ιστός βλαστού

#### Υγρή φάση:

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

#### Στερεή φάση:

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

$C_{l,s,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού του βλαστού  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

$V_{l,s,tiss}$  : όγκος του ιστού στην υγρή φάση του ιστού του βλαστού ( $L$ )

$Q_{phl}$  : συνολική ροή στον ηθμό προερχόμενη από το φύλλο  $\left(\frac{l}{day}\right)$

$Q_{trans}$  : συνολική ροή διαπνοής  $\left(\frac{l}{d}\right)$ , μεταβάλλεται κατά την περίοδο ανάπτυξης

$C_{s,s,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ιστού του βλαστού  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

$V_{s,s,tiss}$  : όγκος του ιστού στη στερεή φάση του βλαστού ( $L$ )

$\alpha$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ιστό του βλαστού από τη ρίζα,  $\alpha=0.2$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q1 στα script files fytode, fytosolver2.

$PRECIP_{s,tiss}$  : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στον ιστό του βλαστού  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

$PRECIP_{s,tiss} = \frac{C_{l,s,tiss} - SOL_{s,tiss}}{C_{l,s,tiss}} \cdot V_{l,s,tiss} \cdot C_{l,s,tiss} \cdot PR_s$  (αν το διάλυμα στον ιστό του βλαστού είναι υπέρκορο)

$PRECIP_{s,tiss} = \frac{C_{l,s,tiss} - SOL_s}{SOL_s} \cdot A_{s,precip} \cdot PR_s$  (αν το διάλυμα είναι ακόρεστο)

$SOL_s$  : διαλυτότητα του μετάλλου στον ιστό υποθέτοντας  $pH=7$  και  $PO_3^{-2}=0.0001$  mol ( $= 0.02 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

$PR_s$  : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό της ρίζας ( $=5d^{-1}$ )

Εισροή στον ιστό του βλαστού γίνεται από τη ροή του ηθμού του βλαστού και από το ρεύμα διαπνοής από το ξύλο του βλαστού. Εκροή, η κατακράτηση και η διαπνοή προς το ξύλο του βλαστού.

## Ηθμός βλαστού

### Υγρή φάση:

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

### Στερεή φάση:

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

$C_{l,s,phl}$  : συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του βλαστού  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$C_{l,l,phl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του φύλλου  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

$XPF_s$  : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (0,45 αδιάστατος αριθμός). Το μέταλλο μεταφέρεται με τρόπο παρόμοιο με αυτό των θρεπτικών στοιχείων

$C_{s,s,phl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ηθμού του βλαστού  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

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

$\beta$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ηθμό του βλαστού από τη ρίζα,  $\beta=0.08$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q2 στα script files fytoode, fytosolver2.

$PRECIP_{s,phl}$  : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, ηθμό του βλαστού  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

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

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

$SOL_{s,phl}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό του βλαστού για pH=8 και  $PO_3^{-2}=0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.01 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

$PR_{phl}$ : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας ( $= 2 \cdot PR_{xyl} = 3d^{-1}$ )

Υποτίθεται ότι 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. Η ταχύτητα κίνησης στο ξύλο είναι πιο γρήγορη από τον ηθμό.

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

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

Οι παραπάνω εξισώσεις περιγράφουν τις εισροές στον ηθμό του βλαστού από το φύλλο και τη διαπνοή από το ξύλο του βλαστού. Στις εκροές περιγράφεται η κατακράτηση και η ροή του ηθμού προς τον ιστό.

### Ξύλο βλαστού

#### Υγρή φάση:

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

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

#### Στερεή φάση:

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

$C_{l,s,xyl}$ : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του βλαστού  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$C_{s,x,wall}$ : συγκέντρωση του προσροφημένου μετάλλου στα τοιχώματα του ξύλου  $\left(\frac{mgPb}{xylemwalldrymass}\right)$

$C_{s,x,wall} = \frac{A_{s,x,wall}}{M_{s,x,wall}}$ , όπου  $A_{s,x,wall}$ : συνολική ποσότητα προσροφημένου μετάλλου στο

ξύλο και  $M_{s,x,wall}$ : 0.5% της ξηρής μάζας

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

$CEF_s$ : παράγοντας ιοναναταλλαγής στο ξύλο του βλαστού. Τμήμα της ποσότητας του μετάλλου στο ξύλο που δεσμεύεται στα τοιχώματα του. Φθίνουσα συνάρτηση του βαθμού κορεσμού των θέσεων κατακράτησης,  $0 \leq \frac{CEC_r - C_{r,x,wall}}{CEC_r} \leq 0,8$ , ένα μέρος του μετάλλου είναι σε μορφή που δεν δύναται να κατακρατηθεί.

$CEF_s$ : δυνατότητα κατιονανταλλαγής των τοιχωμάτων του ξύλου της ρίζας  $\left(= 200 \frac{mgPb}{xylemwalldrymass}\right)$

$C_{s,s,xyl}$ : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ξύλου του βλαστού  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

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

$\gamma$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στο ξύλο του βλαστού από τη ρίζα,  $\gamma = 0.12$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q2 στα script files fytoode, fytosolver2.

DTR: συντελεστής διάχυσης της μεταφοράς μετάλλου από τον ιστό του βλαστού προς το ξύλο του βλαστού  $\left(= 0,001 \frac{l}{day}\right)$

$PRECIP_{s,xyl}$ : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στο ξύλο του βλαστού  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

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

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

$SOL_{s,xyl}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ξύλο της ρίζας για pH=5.5 και  $PO_3^{-2} = 0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.38 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

Στο ξύλο του βλαστού εισροές είναι το ρεύμα διαπνοής από τον ιστό του βλαστού και μια ποσότητα μετάλλου που διαχέεται από τον ιστό προς το ξύλο. Στις εκροές περιλαμβάνεται το ρεύμα διαπνοής προς τον ηθμό του βλαστού και προς το ξύλο του φύλλου, η κατακράτηση και η ιονοανταλλαγή στο ξύλο του βλαστού.

### IX.iii. Φύλλο

#### Ιστός φύλλου

Υγρή φάση:

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

Στερεή φάση:

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

$C_{l,l,xyl}$  : συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του φύλλου  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

$C_{l,l,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ιστού του φύλλου  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$Q_{trans}$  : συνολική ροή διαπνοής  $\left(\frac{l}{d}\right)$ , μεταβάλλεται κατά την περίοδο ανάπτυξης

$C_{s,l,tiss}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ιστού του φύλλου  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

$V_{s,l,tiss}$  : όγκος του ιστού στη στερεή φάση του φύλλου ( $L$ )

$\delta$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ιστό του φύλλου από τη ρίζα,  $\delta=0.3$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q4 στα script files fytode, fytosolver2.

$PRECIP_{l,tiss}$  : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στον ιστό του φύλλου  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

$PRECIP_{l,tiss} = \frac{C_{l,l,tiss} - SOL_{l,tiss}}{C_{l,l,tiss}} \cdot V_{l,l,tiss} \cdot C_{l,l,tiss} \cdot PR_l$  (αν το διάλυμα στον ιστό του φύλλου είναι υπέρκορο)

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

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

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

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

$PR_l$  : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό της ρίζας ( $=5d^{-1}$ )

Στον ιστό του φύλλου εισροή είναι το ρεύμα διαπνοή από το ξύλο του φύλλου. Εκροές η κατακράτηση και διαπνοή προς το ξύλο του φύλλου.

## Ηθμός φύλλου

### Υγρή φάση:

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

### Στερεή φάση:

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

$C_{l,l,phl}$  : συγκέντρωση του μετάλλου στην υγρή φάση του ηθμού του φύλλου  $\left(\frac{mg}{l}\right)$

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

$XPF_l$  : τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό (0,45 αδιάστατος αριθμός). Το μέταλλο μεταφέρεται με τρόπο παρόμοιο με αυτό των θρεπτικών στοιχείων

$C_{s,l,phl}$  : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ηθμού του φύλλου  $\left(\frac{mg}{kg}\right)$

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

$\varepsilon$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ηθμό του φύλλου από τη ρίζα,  $\varepsilon=0.07$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q5 στα script files fytode, fytosolver2.

$PRECI P_{l,phl}$  : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, ηθμό του φύλλου  $\left(\frac{mg}{d}\right)$ , όπου

$$PRECI P_{l,phl} = \frac{C_{l,l,phl} - SOL_{l,phl}}{C_{l,l,phl}} \cdot V_{l,l,phl} \cdot C_{l,l,phl} \cdot PR_{phl} \text{ (αν το διάλυμα είναι υπέρκορο)}$$

$$PRECI P_{l,phl} = \frac{C_{l,l,phl} - SOL_{l,phl}}{SOL_{l,phl}} \cdot A_{l,phl,precip} \cdot PR_{phl} \text{ (αν το διάλυμα είναι ακόρεστο)}$$

$SOL_{l,phl}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ηθμό του βλαστού για pH=7 και  $PO_3^{-2}=0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.01 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

$PR_{phl}$ : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας ( $= 2 \cdot PR_{xyl} = 3d^{-1}$ )

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

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

Εισροή είναι το ρεύμα διαπνοής από το ξύλο του φύλλου και εκροή η κατακράτηση.

### Ξύλο φύλλου

#### Υγρή φάση:

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

#### Στερεή φάση:

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

$C_{l,l,xyl}$ : συγκέντρωση μετάλλου στην υγρή φάση του ξύλου του φύλλου  $\left( \frac{mg}{l} \right)$

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

$C_{s,x,wall}$ : συγκέντρωση του προσροφημένου μετάλλου στα τοιχώματα του ξύλου  

$$\left( \frac{mgPb}{xylemwalldrymass} \right)$$

$C_{s,x,wall} = \frac{A_{s,x,wall}}{M_{s,x,wall}}$ , όπου  $A_{s,x,wall}$ : συνολική ποσότητα προσροφημένου μετάλλου στο ξύλο και  $M_{s,x,wall}$ : 0.5% της ξηρής μάζας

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

$CEF_s$ : παράγοντας ιοναναταλλαγής στο ξύλο του βλαστού. Τμήμα της ποσότητας του μετάλλου στο ξύλο που δεσμεύεται στα τοιχώματα του. Φθίνουσα συνάρτηση του βαθμού κορεσμού των θέσεων κατακράτησης,  $0 \leq \frac{CEC_r - C_{r,x,wall}}{CEC_r} \leq 0,8$ , ένα μέρος του μετάλλου είναι σε μορφή που δεν δύναται να κατακρατηθεί.

$CEF_s$ : δυνατότητα κατιονανταλλαγής των τοιχωμάτων του ξύλου της ρίζας  
 $\left( = 200 \frac{mgPb}{xylemwalldrymass} \right)$

$C_{s,l,xyl}$ : συγκέντρωση μετάλλου στη στερεή φάση του ξύλου του φύλλου  $\left( \frac{mg}{kg} \right)$

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

$\kappa$ : συντελεστής που καθορίζει το τμήμα του ρεύματος διαπνοής που οδηγείται στον ξύλο του φύλλου από τη ρίζα,  $\kappa=0.18$ . Περιγράφεται από το συντελεστή q6 στα script files fytocode, fytosolver2.

$PRECIP_{l,xyl}$ : ρυθμός κατακράτησης μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος, στο ξύλο του φύλλου  $\left( \frac{mg}{d} \right)$ , όπου

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

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

$SOL_{l,xyl}$ : διαλυτότητα του μετάλλου στον ξύλο της ρίζας για pH=5.5 και  $PO_3^{-2}=0.0001 \text{ mol}$  ( $= 0.38 \frac{mg}{l}$  για το Pb)

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

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

Εισροές είναι το ρεύμα διαπνοής από τον ιστό του φύλλου και από το ξύλο του βλαστού. Στις εκροές παρατηρούμε το ρεύμα διαπνοής προς τον ηθμό του φύλλου και τη κατακράτηση.

X.

### Αποτελέσματα μοντέλου

Το μαθηματικό μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για να περιγράψει τη πρόσληψη μολύβδου από το φυτό *perium oleander*, σε σύστημα χωρίς αλατότητα και σε σύστημα με μικρό ποσοστό αλατότητας (τάξης 0,5%) με σταθερή συγκέντρωση  $Pb\ 200\frac{mg}{l}$ . Οι διαφορές στη μοντελοποίηση των δυο αυτών περιπτώσεων περιλαμβάνουν:

- Εξίσωση ανάπτυξης φυτού
- Υπολογισμό εξίσωσης τοξικότητας από τη συσσώρευση μολύβδου στη ρίζα του φυτού που επηρεάζει την πρόσληψη
- Εξίσωση ιονανταλλαγής στο ξύλο της ρίζας, του βλαστού και του φύλλου
- Όγκοι των επιμέρους τμημάτων του φυτού

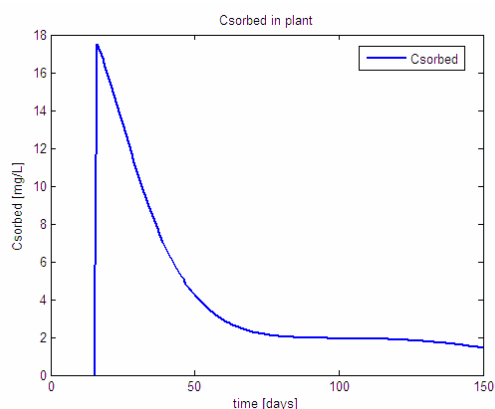
Αλλαγές σε παράμετρους δεν έχουν γίνει, αλλά η επίδραση των παραμέτρων στα αποτελέσματα του μοντέλου φαίνεται στην ανάλυση ευαισθησίας.

Η μελέτη και η κατασκευή μιας εξίσωσης που να περιλαμβάνει την επίδραση της αλατότητας συνολικά στο φυτό, ξεχωριστά από την επίδραση της τοξικότητας του μετάλλου δεν ήταν δυνατή λόγω της φύσεως των πειραματικών αποτελεσμάτων για αυτό και χρειάστηκε να δημιουργηθούν δυο μοντέλα.

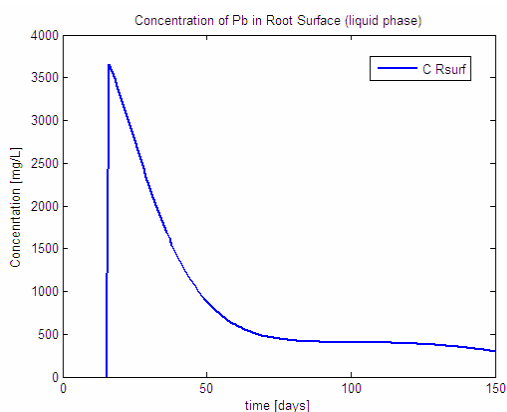
Από τα πειραματικά δεδομένα παρατηρήθηκε ότι σε περιβάλλον αλατότητας η πικροδαφνη δεσμεύει περισσότερο μόλυβδο απ' ότι σε απουσία αλατότητας. Σε χαμηλές συγκεντρώσεις μετάλλου και σε ανεκτή ποσότητα αλατότητας για το φυτό, μεταφέρει ένα μεγαλύτερο ποσοστό στο υπέργειο τμήμα σε σύγκριση με φυτά τα οποία είχαν καλλιεργηθεί σε απουσία αλατότητας. Υπάρχει μια ισορροπία μεταξύ του ποσοστού της αλατότητας στο έδαφος και της συγκέντρωσης του μετάλλου στο εδαφικό διάλυμα που δίνει τη μέγιστη ανάληψη και μεταφορά από το φυτό. Για παράδειγμα σε αλατότητα 0,5% και συγκέντρωση Pb στο έδαφος 1600 ppm παρατηρήθηκε η μεγαλύτερη ανάληψη και μεταφορά μετάλλου στο υπέργειο τμήμα του φυτού ενώ σε αλατότητα 3% το φυτό πέθαινε από τη τρίτη εβδομάδα ακόμη και χωρίς τη παρουσία μετάλλου.

Στα διαγράμματα που ακολουθούν στην αριστερή πλευρά της σελίδας φαίνονται τα αποτελέσματα του μοντέλου σε απουσία αλατότητας και στη δεξιά πλευρά, τα αποτελέσματα σε περιβάλλον αλατότητας 0,5%:

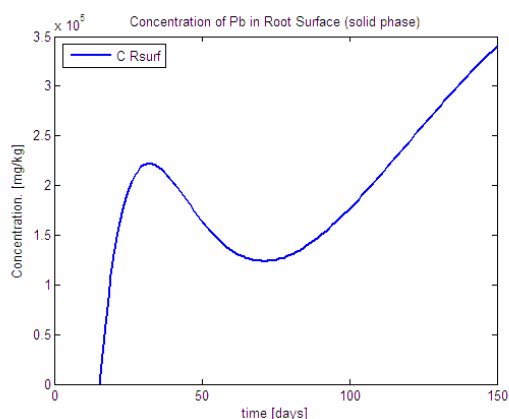
### Απουσία αλατότητας



Διάγραμμα X.1: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας

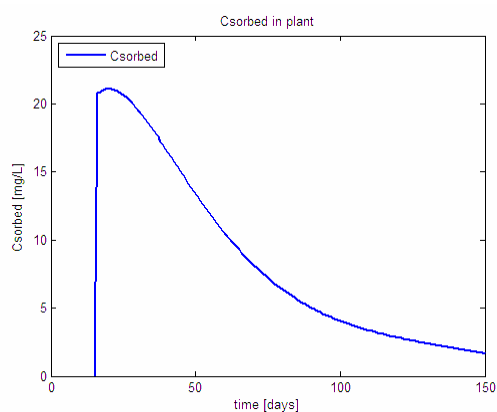


Διάγραμμα X.3: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας

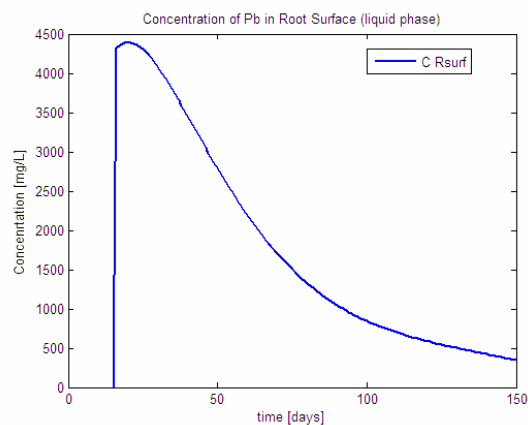


Διάγραμμα X.5: Συγκέντρωση Pb στη στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας

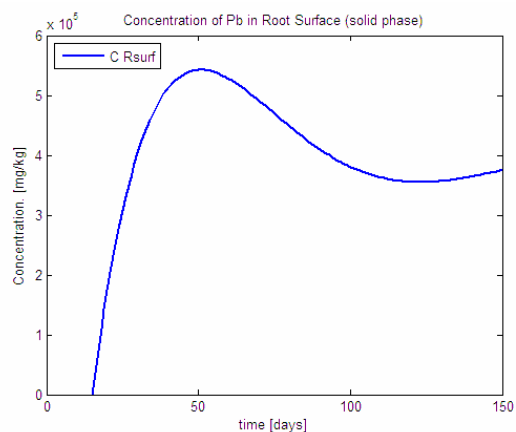
### Αλατότητα 0.5%



Διάγραμμα X.2: Συγκέντρωση Pb που απορροφάται στην επιφάνεια της ρίζας

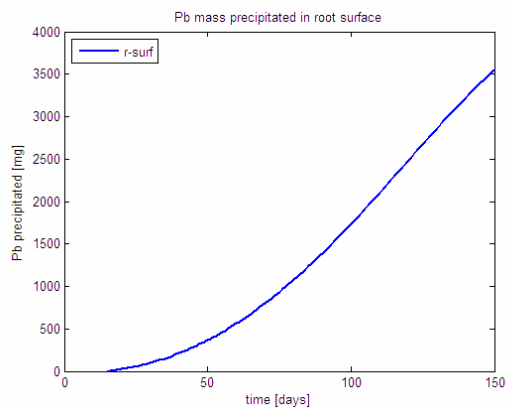


Διάγραμμα X.4: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας

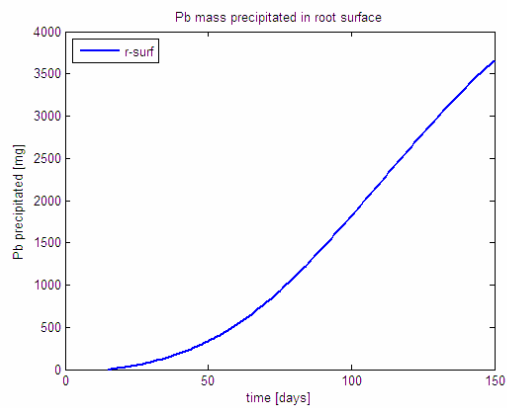


Διάγραμμα X.6: Συγκέντρωση Pb στη στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας

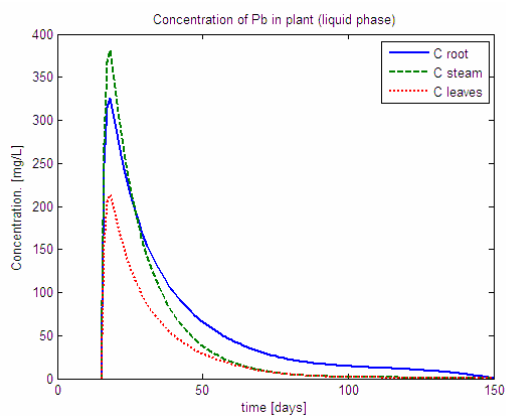
### Απουσία αλατότητας



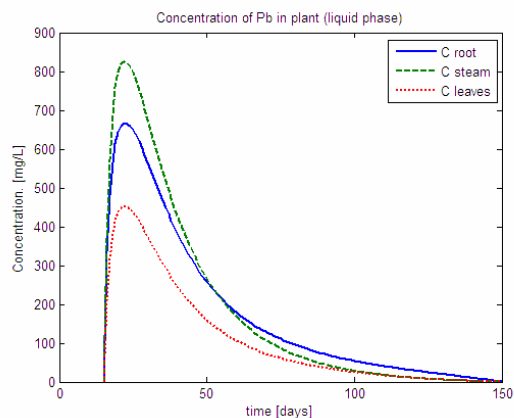
Διάγραμμα X.7: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας



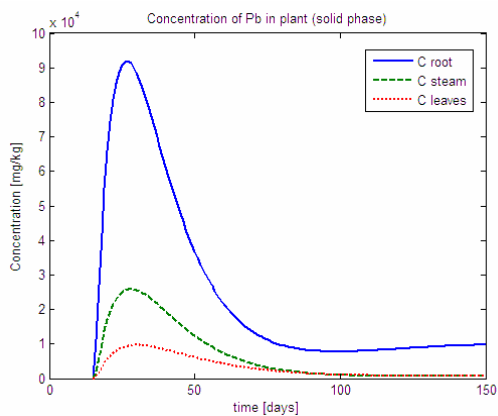
Διάγραμμα X.8: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας



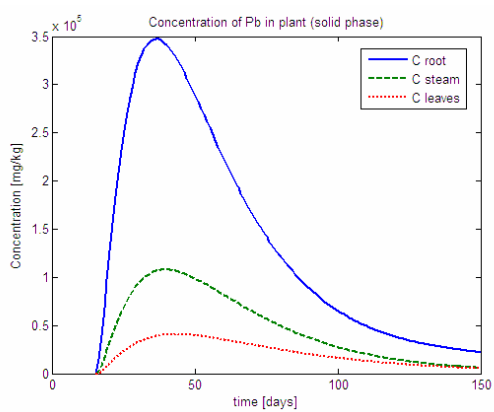
Διάγραμμα X.9: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση του φυτού



Διάγραμμα X.10: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση του φυτού



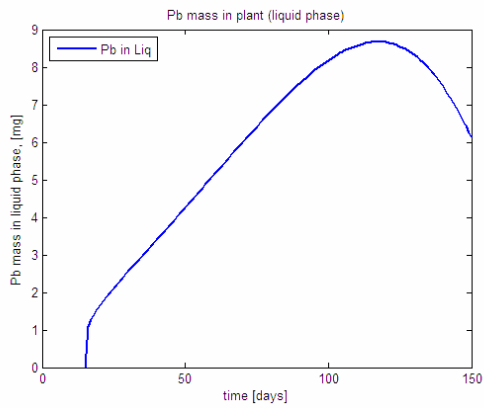
Διάγραμμα X.11: Συγκέντρωση Pb στη στερεή φάση του φυτού



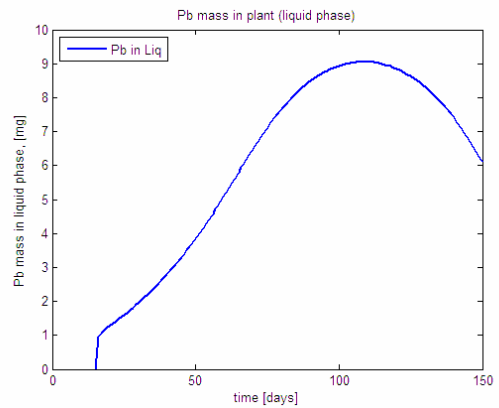
Διάγραμμα X.12: Συγκέντρωση Pb στη στερεή φάση του φυτού

Αλατότητα 0.5%

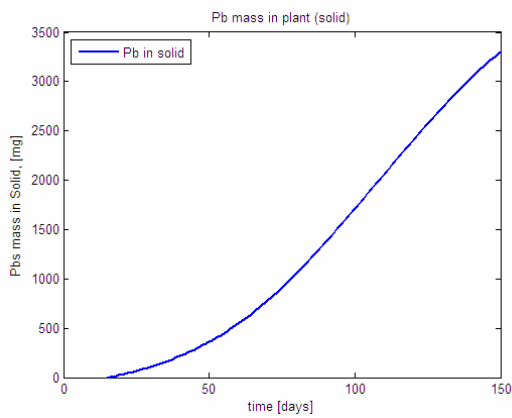
Απουσία αλατότητας



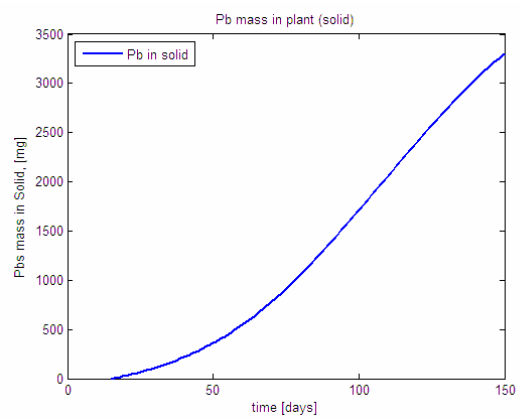
Διάγραμμα X.13: Μάζα Pb στην υγρή φάση του φυτού



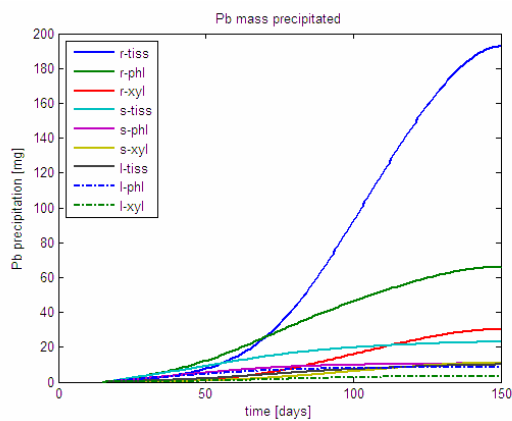
Διάγραμμα X.14: Μάζα Pb στην υγρή φάση του φυτού



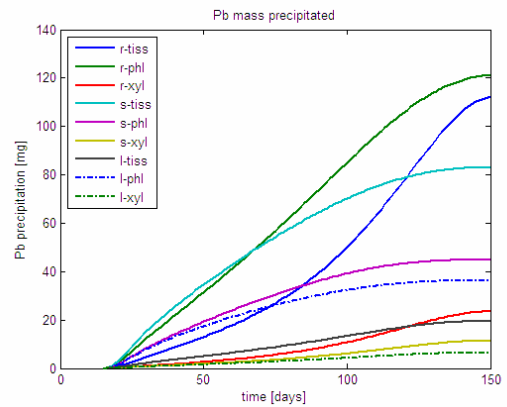
Διάγραμμα X.15: Μάζα Pb στη στερεή φάση του φυτού



Διάγραμμα X.16: Μάζα Pb στη στερεή φάση του φυτού



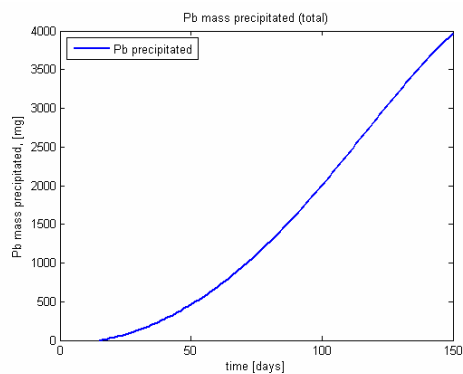
Διάγραμμα X.17: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στο κάθε τμήμα του φυτού



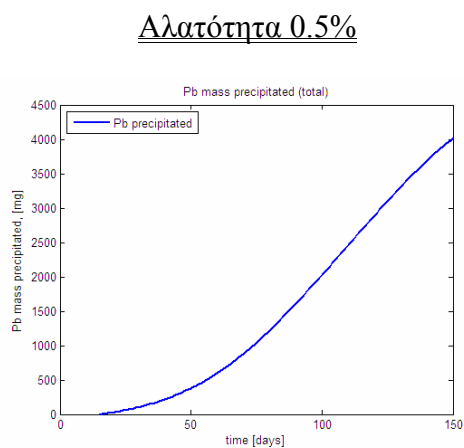
Διάγραμμα X.18: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στο κάθε τμήμα του φυτού

Αλατότητα 0.5%

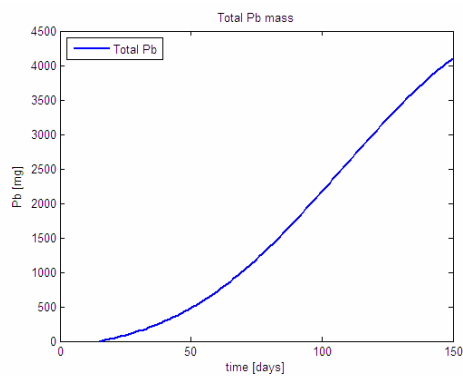
Απουσία αλατότητας



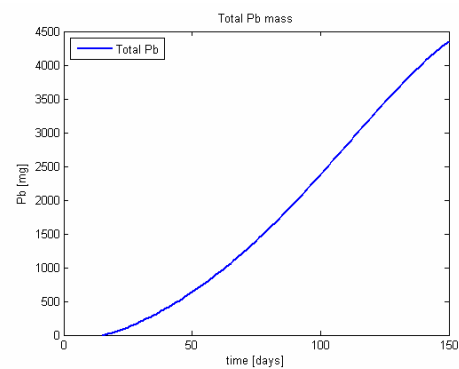
Διάγραμμα X.19: Συνολική μάζα Pb που κατακρατήθηκε στο φυτό



Διάγραμμα X.20: Συνολική μάζα Pb που κατακρατήθηκε στο φυτό



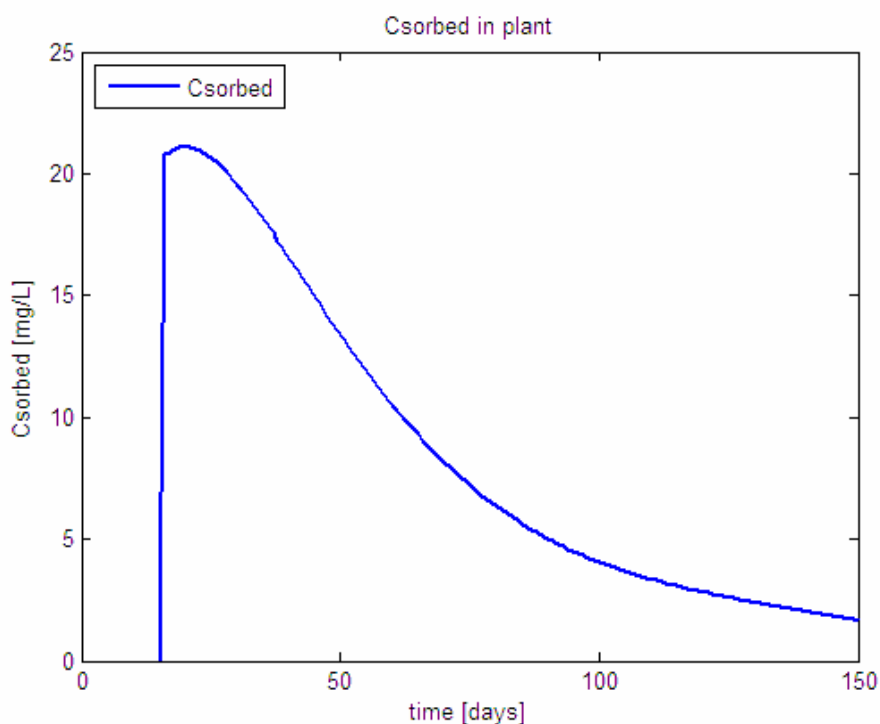
Διάγραμμα X.21: Συνολική συσσώρευση Pb στο φυτό



Διάγραμμα X.22: Συνολική συσσώρευση Pb στο φυτό

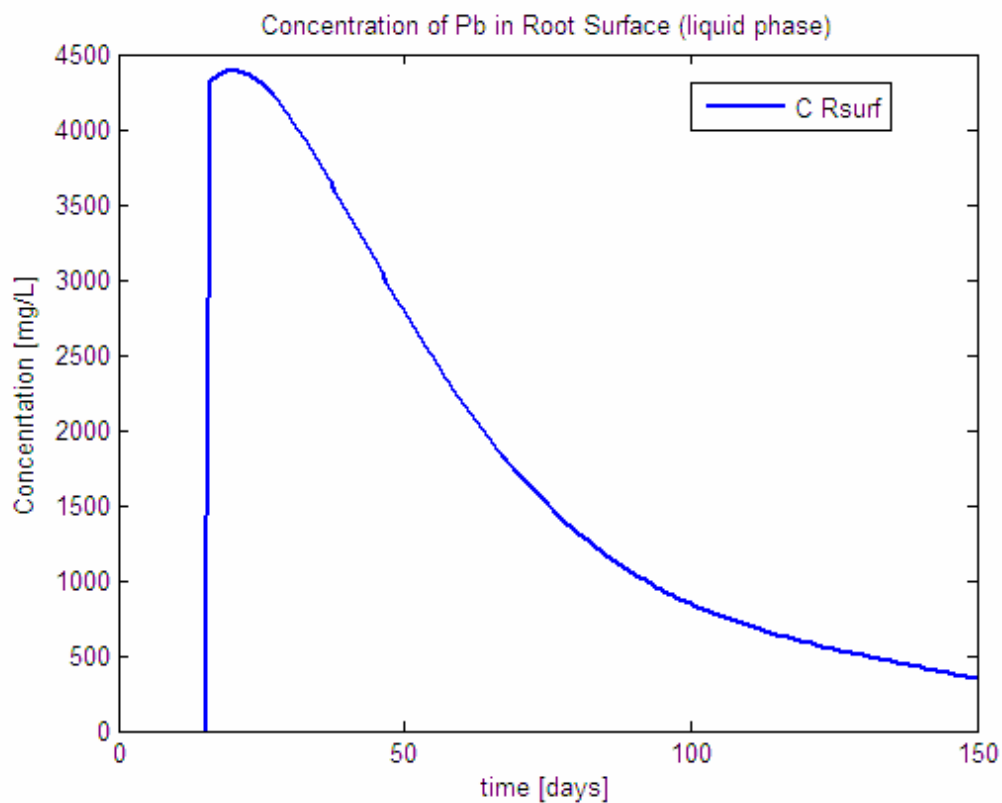
Από τη σύγκριση των παραπάνω γραφημάτων προκύπτει η συμπεριφορά που περιγράφηκε από τα εργαστηριακά πειράματα. Το φυτό σε περιβάλλον αλατότητας 0,5% απορροφά, κατακρατά, και μεταβιβάζει στο υπέργειο του τμήμα περισσότερο μέταλλο. Απόλυτη εξήγηση για το γεγονός αυτό δεν υπάρχει, αλλά μια επιστημονική περιγραφή δίνεται στο κεφάλαιο της αλατότητας.

Στα παρακάτω διαγράμματα παρατηρούμε τη συγκέντρωση αλλά και τη κατακρατήσιμη ποσότητα μετάλλου στα επιμέρους τμήματα του φυτού που αφορούν τη προσομοίωση με 0.5% αλατότητα στο σύστημα. Το διάγραμμα X.23 δείχνει τη συγκέντρωση μολύβδου που προσροφήθηκε από την υγρή στη στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας στα κυτταρικά τοιχώματα.

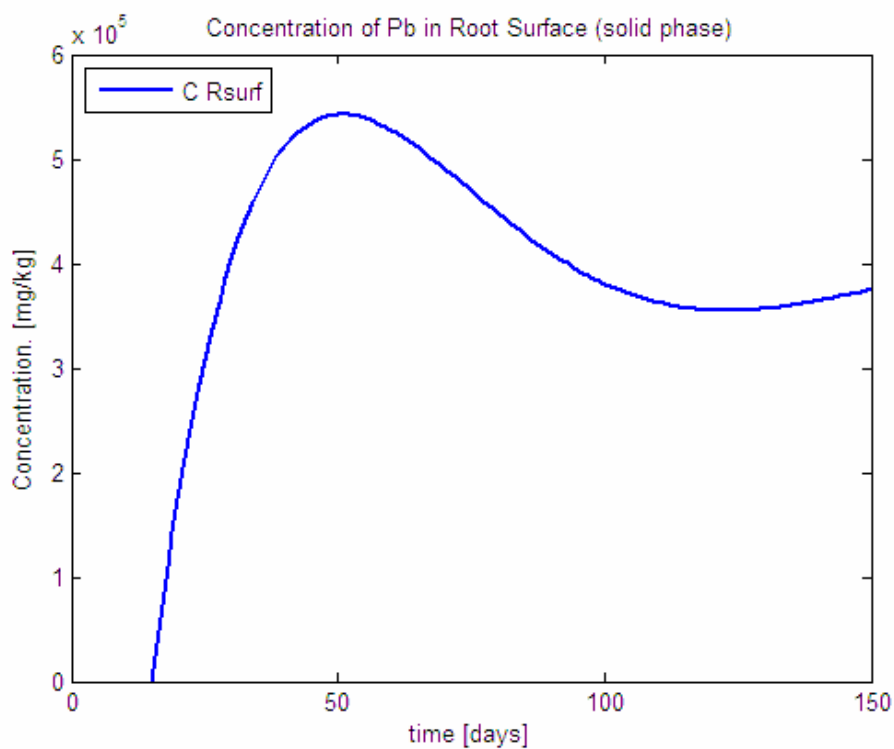


Διάγραμμα X.23: Συγκέντρωση προσροφημένου μολύβδου στην επιφάνεια της ρίζας

Στο διάγραμμα X.24 περιγράφεται η συγκέντρωση του Pb στην υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας. Στο διάγραμμα X.25 παρατηρούμε τη συγκέντρωση του Pb στη στερεή φάση της επιφάνειας της ρίζας, όπου περιλαμβάνεται η συγκέντρωση προσροφημένου μετάλλου και η συγκέντρωση του κατακρατημένου μετάλλου. Στο διάγραμμα X.26 παρουσιάζεται η μάζα που κατακρατήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας.

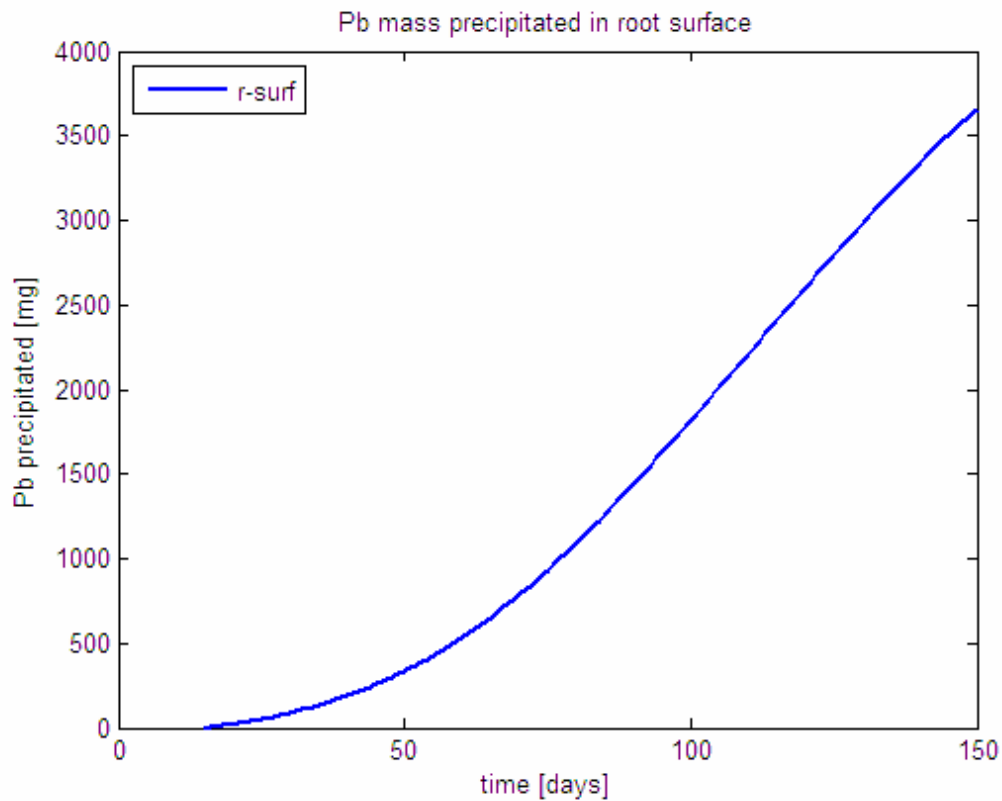


Διάγραμμα X.24: Συγκέντρωση Pb στην επιφάνεια της ρίζας στην υγρή φάση



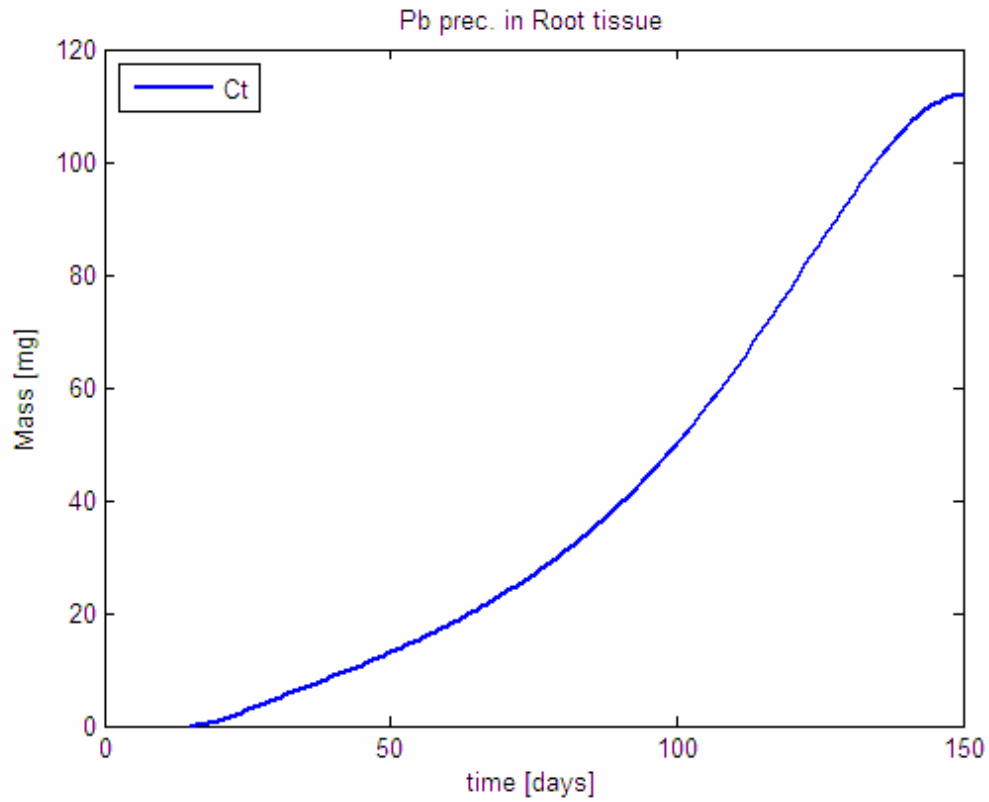
Διάγραμμα X.25: Συγκέντρωση μολύβδου στην επιφάνεια της ρίζας στη στερεή φάση

Στο διάγραμμα X.25 παρατηρούμε την αρχική συγκέντρωση μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας. Όσο περνά ο χρόνος η ροή αυξάνεται στα υπέργεια τμήματα του φυτού και για αυτό παρατηρείται η μείωση στη συγκέντρωση μετάλλου μετά τις 50 ημέρες. Αφού κορεστούν οι μεσοκυτταρικές θέσεις στο υπέργειο από τη μεταβίβαση του μετάλλου στο υπέργειο τμήμα ξαναρχίζει η συσσώρευση στην επιφάνεια της ρίζας.

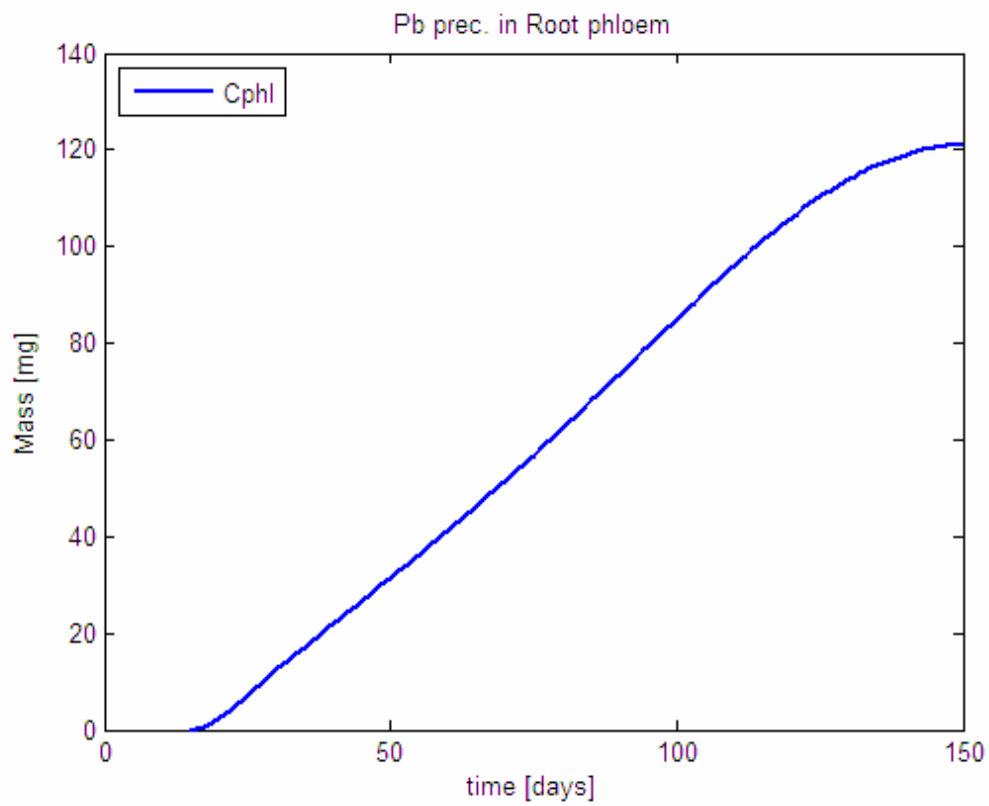


Διάγραμμα X.26: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας

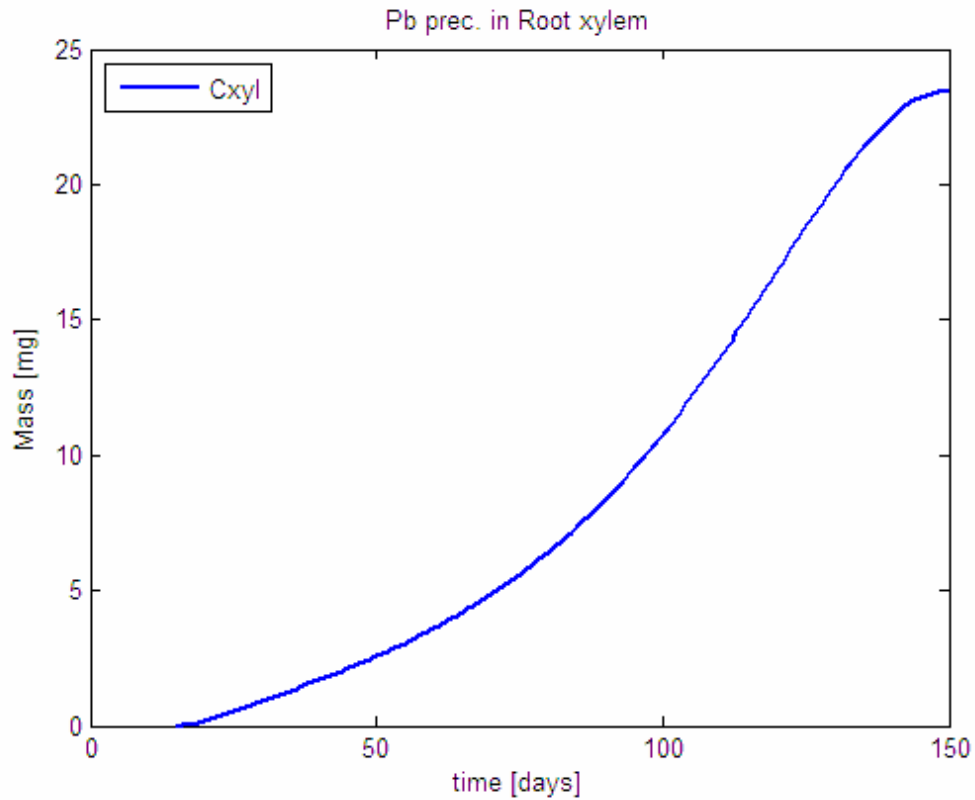
Στα διαγράμματα X.27, X.28 και X.29 υποδεικνύονται οι κατακρατήσιμες ποσότητες Pb στα επιμέρους τμήματα της ρίζας.



Διάγραμμα X.27: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στον ιστό της ρίζας

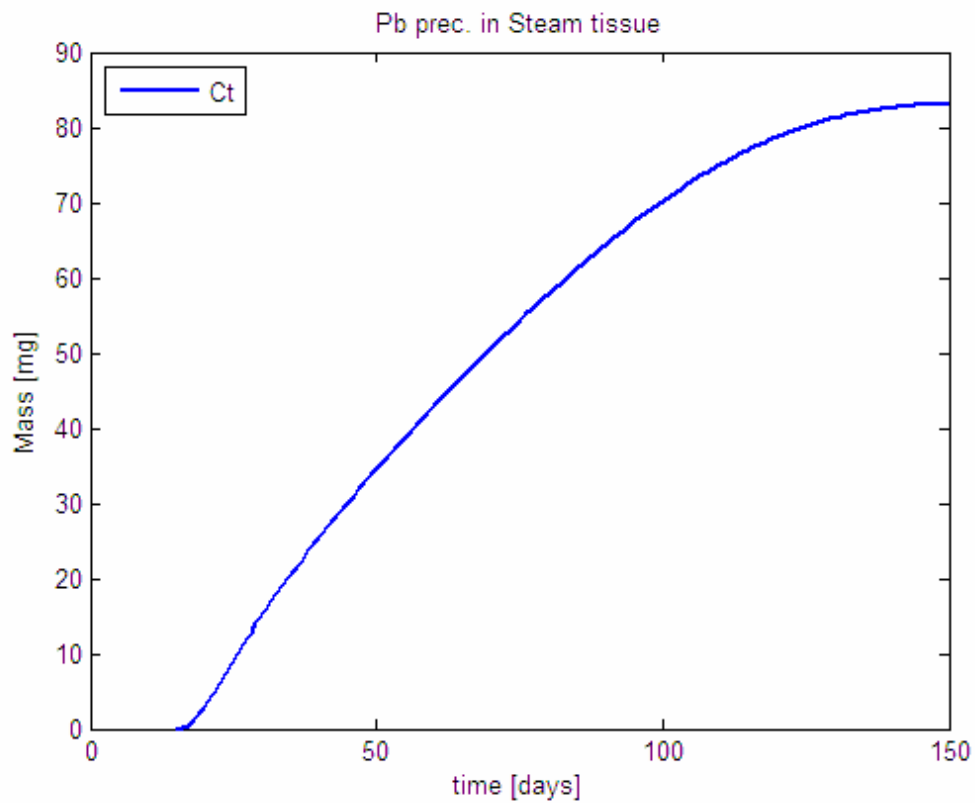


Διάγραμμα X.28: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στον ηθμό της ρίζας

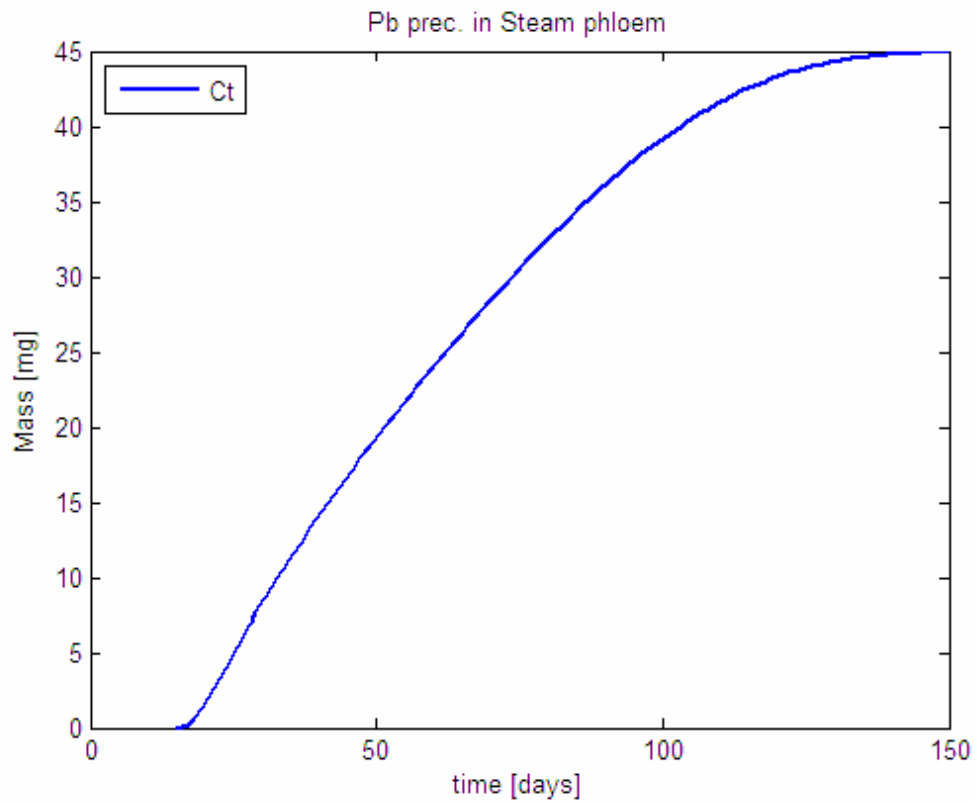


Διάγραμμα X.29: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στο ξύλο της ρίζας

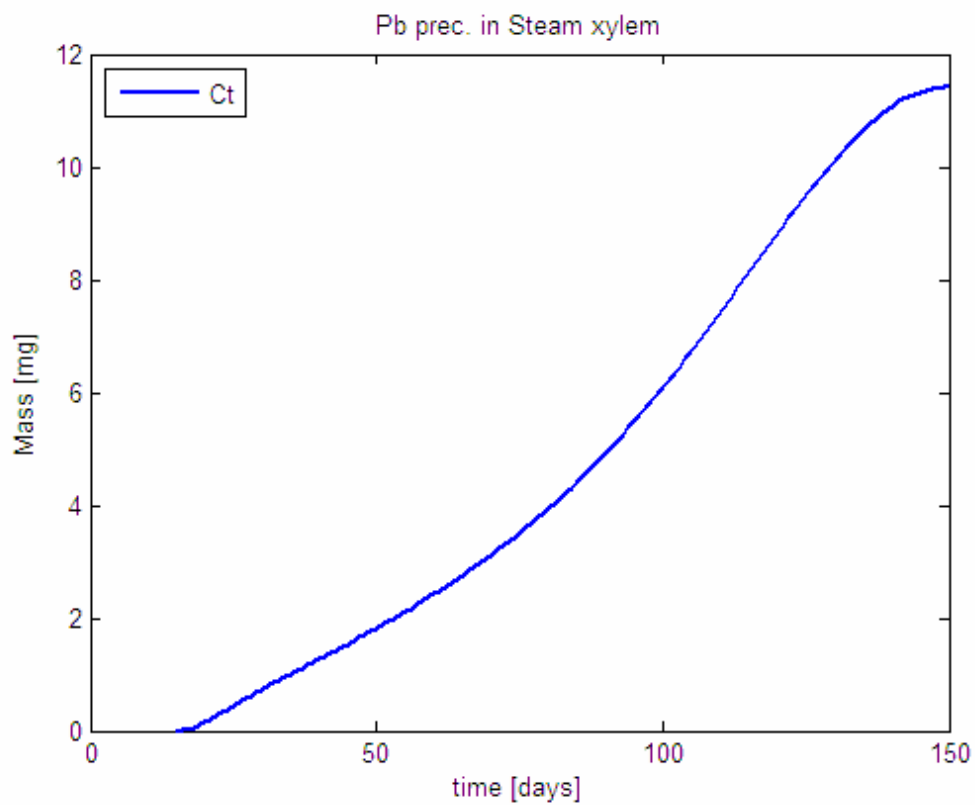
Στα διαγράμματα X30, X31 και X32 παρατηρείται η κατακρατήσιμη ποσότητα στα επιμέρους τμήματα του βλαστού.



Διάγραμμα X.30: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στον ιστό του βλαστού

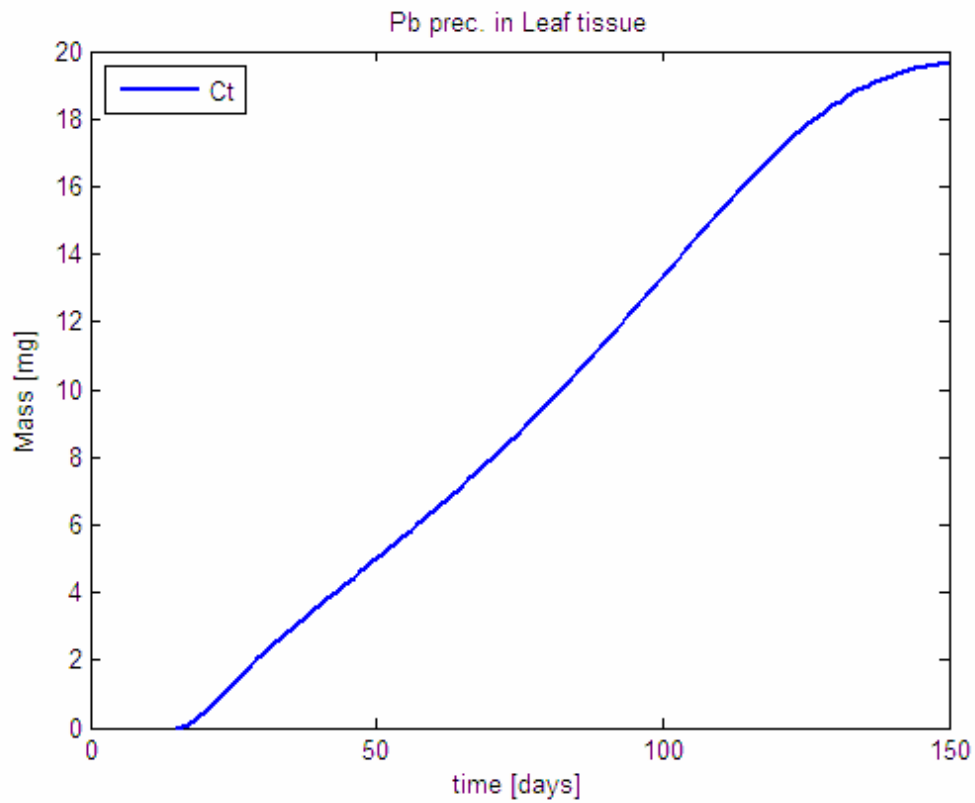


Διάγραμμα X.31: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στον ηθμό του βλαστού

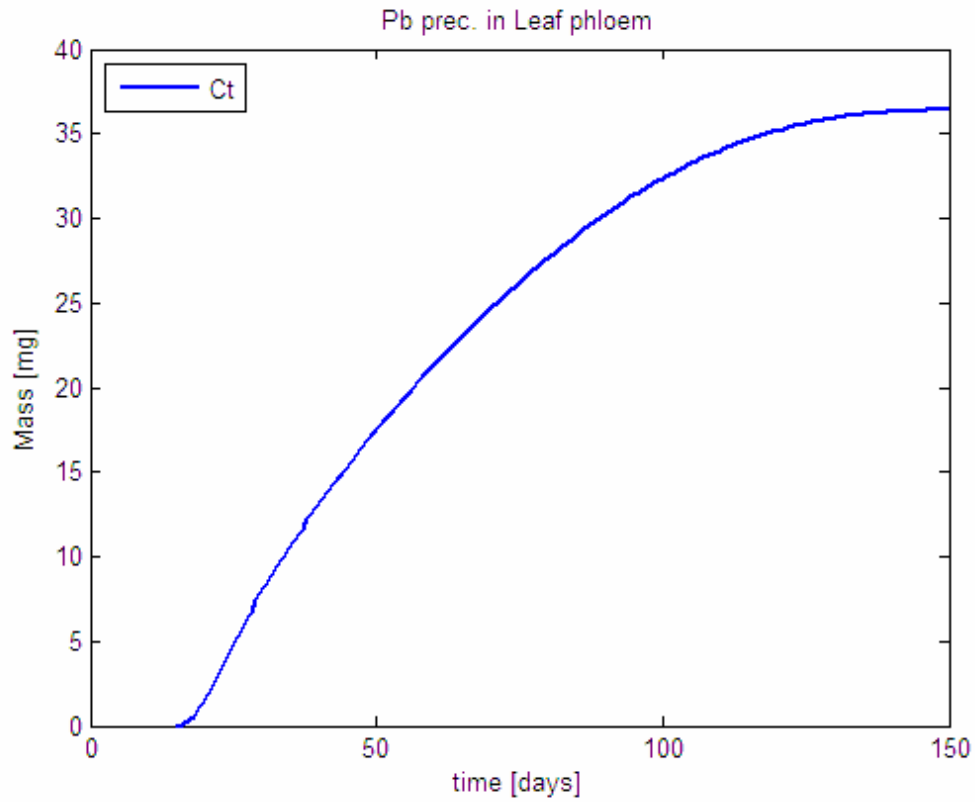


Διάγραμμα X.32: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στο ξύλο του βλαστού

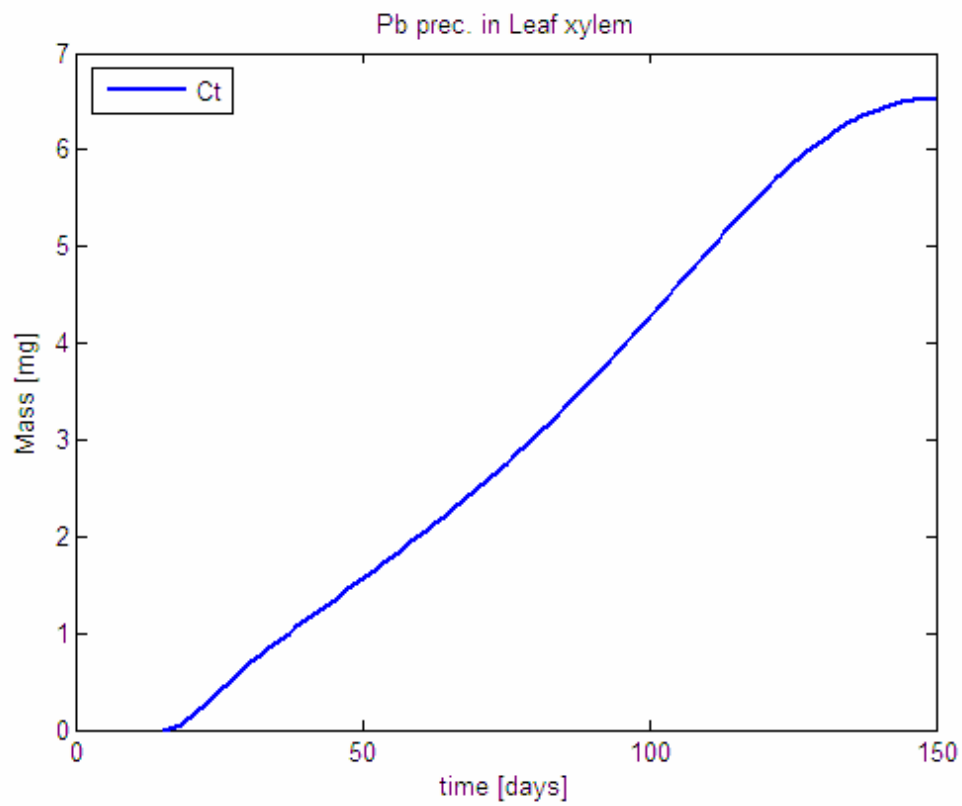
Στα διαγράμματα X.33, X.34 και X.35 παρατηρείται η κατακρατήσιμη ποσότητα μετάλλου στα επιμέρους τμήματα του φύλλου.



Διάγραμμα X.33: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στον ιστό του φύλλου



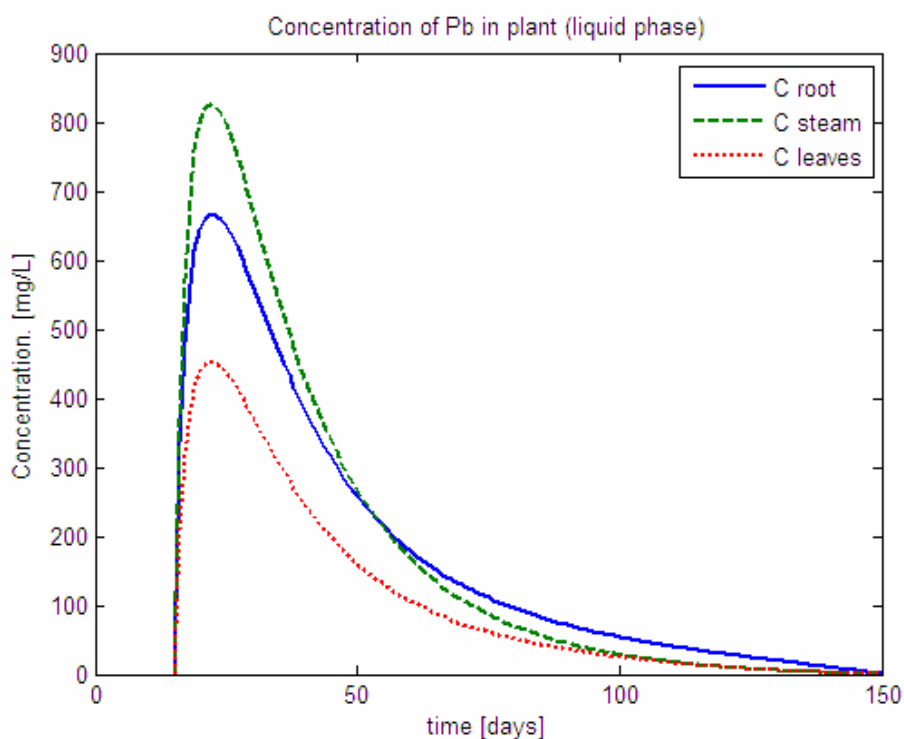
Διάγραμμα X.34: Μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε στον ηθμό του φύλλου



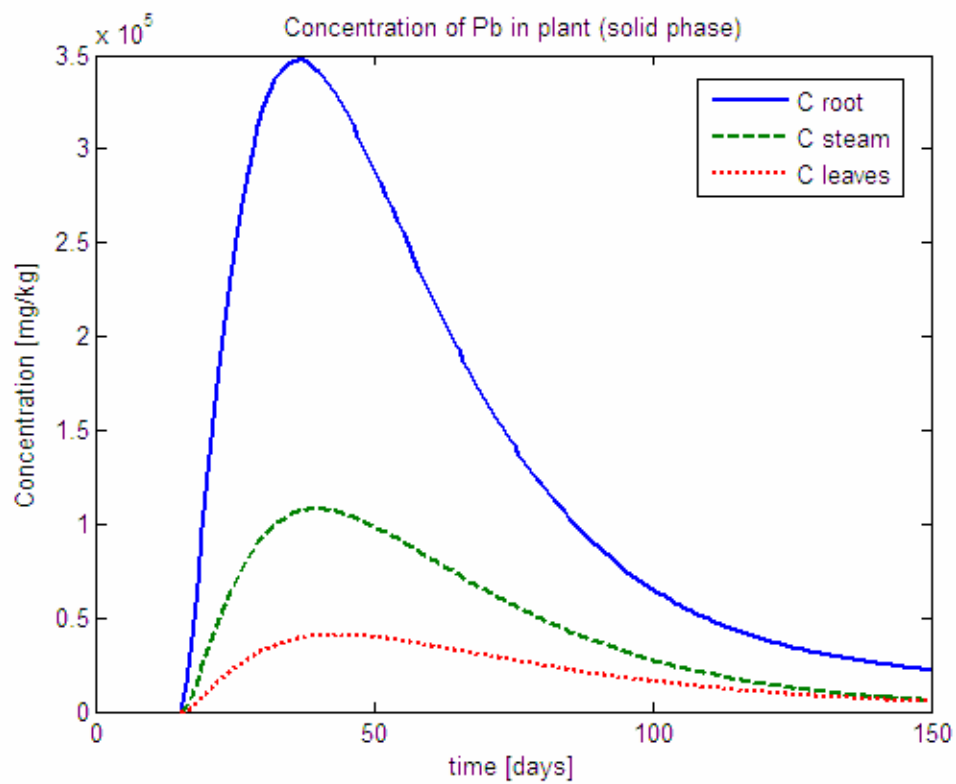
Διάγραμμα X.35: Μάζα Pb που κατακρατήθηκε στο ξύλο του φύλλου

Το ξύλο έχει τη λιγότερη κατακρατήσιμη ποσότητα μετάλλου, κυρίως λόγω του γεγονότος ότι τροφοδοτείται μόνο από την ρίζα και συνάμα τροφοδοτεί τα υπόλοιπα μέρη του φυτού κατά την ανοδική πορεία του νερού από τη ρίζα στο φύλλο. Επίσης έχει και το μικρότερο ρυθμό κατακράτησης. Σε σύγκριση της κατακρατήσιμης ποσότητας μετάλλου στον ιστό και τον ηθμό στα τρία μέρη του φυτού συμπεραίνουμε ότι είναι ανάλογη με τη αντίστοιχη τροφοδοσία και το ρυθμό κατακράτησης στο κάθε υποτιμήμα (όσο μεγαλύτερος ο ρυθμός κατακράτησης τόσο περισσότερη κατακρατήσιμη ποσότητα θα παρατηρούμε).

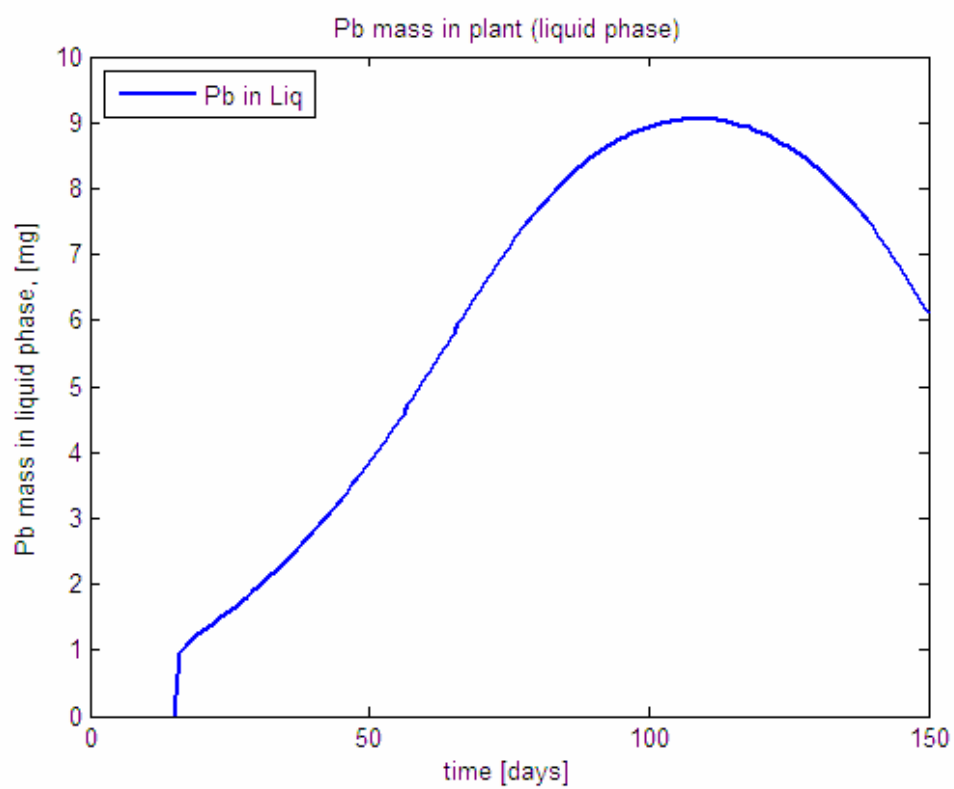
Στα διαγράμματα X.36 και X.37 παρατηρούμε τη συγκέντρωση του μολύβδου στα διάφορα μέρη του φυτού στην υγρή και στη στερεή φάση αντίστοιχα. Η αρχική απότομη αύξηση οφείλεται στο ότι το φυτό αρχικά δεσμεύει ουσίες από το έδαφος / υδροφορέα για την ανάπτυξη του αλλά από κάποιο σημείο και μετά ο ρυθμός κατακράτησης του μετάλλου είναι μικρότερος από το ρυθμό ανάπτυξης του φυτού για αυτό υπάρχει αραίωση.



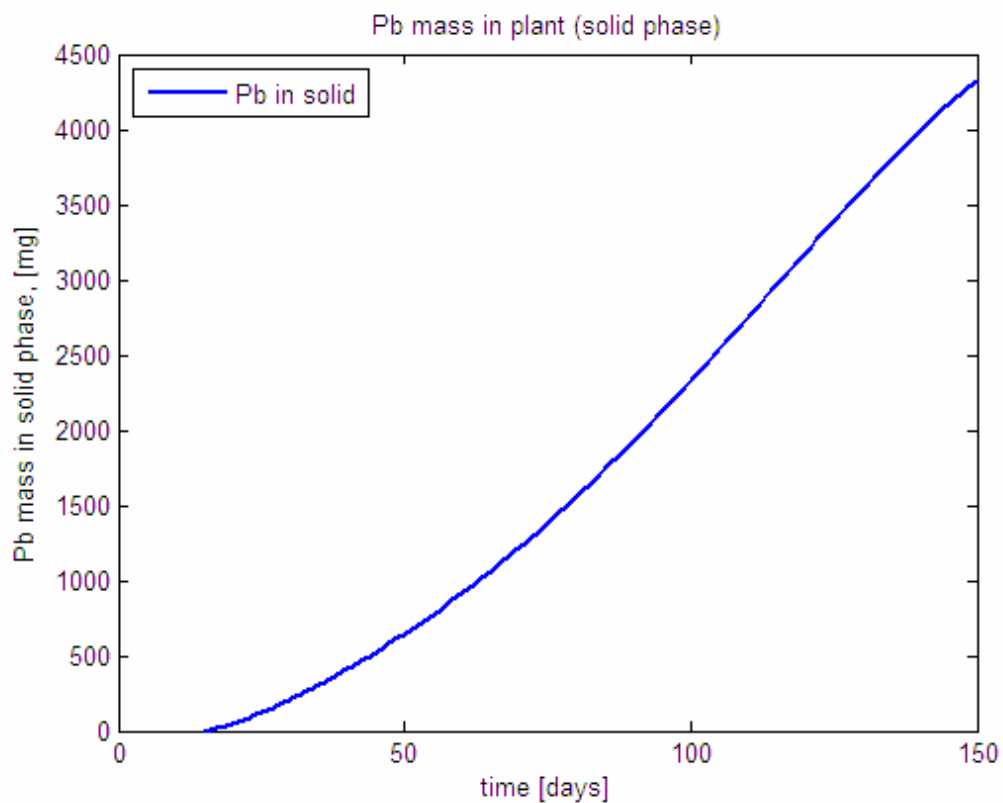
Διάγραμμα X.36: Συγκέντρωση Pb στην υγρή φάση στα διάφορα μέρη του φυτού



Διάγραμμα X.37: Συγκέντρωση Pb στη στερεή φάση στα διάφορα μέρη του φυτού

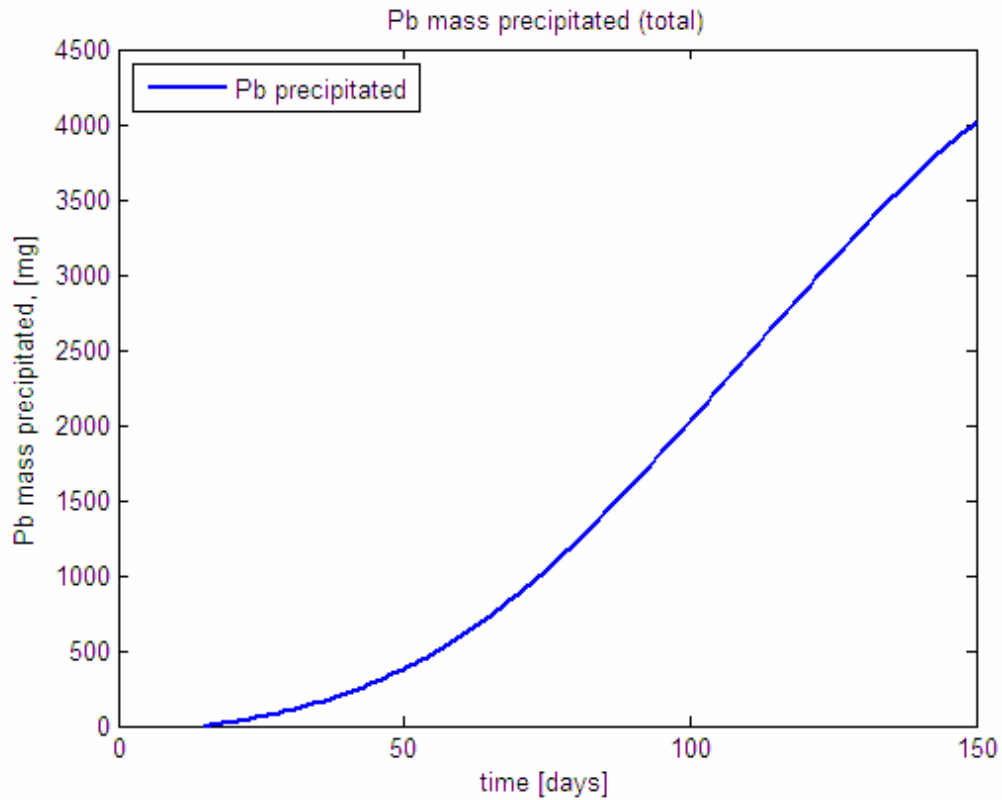


Διάγραμμα X.38: Μάζα μολύβδου στην υγρή φάση του φυτού



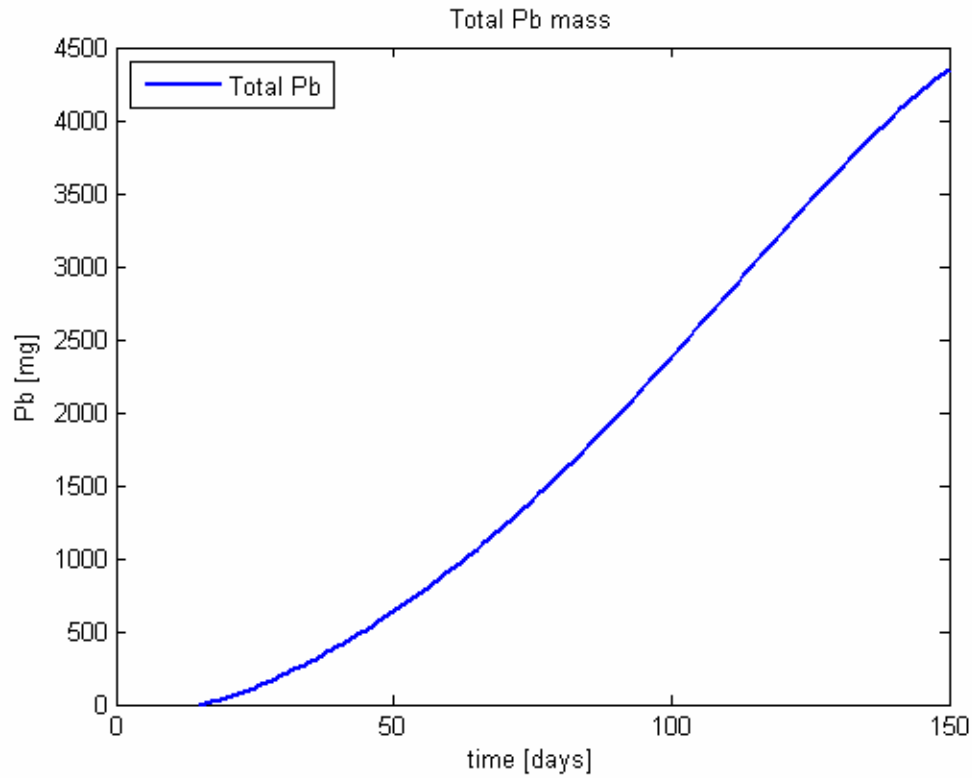
Διάγραμμα X.39: Μάζα μολύβδου στη στερεή φάση του φυτού

Από τα διαγράμματα X.38 και X.39 παρατηρούμε τη συνεχή δέσμευση Pb από την υγρή φάση στη στερεή.

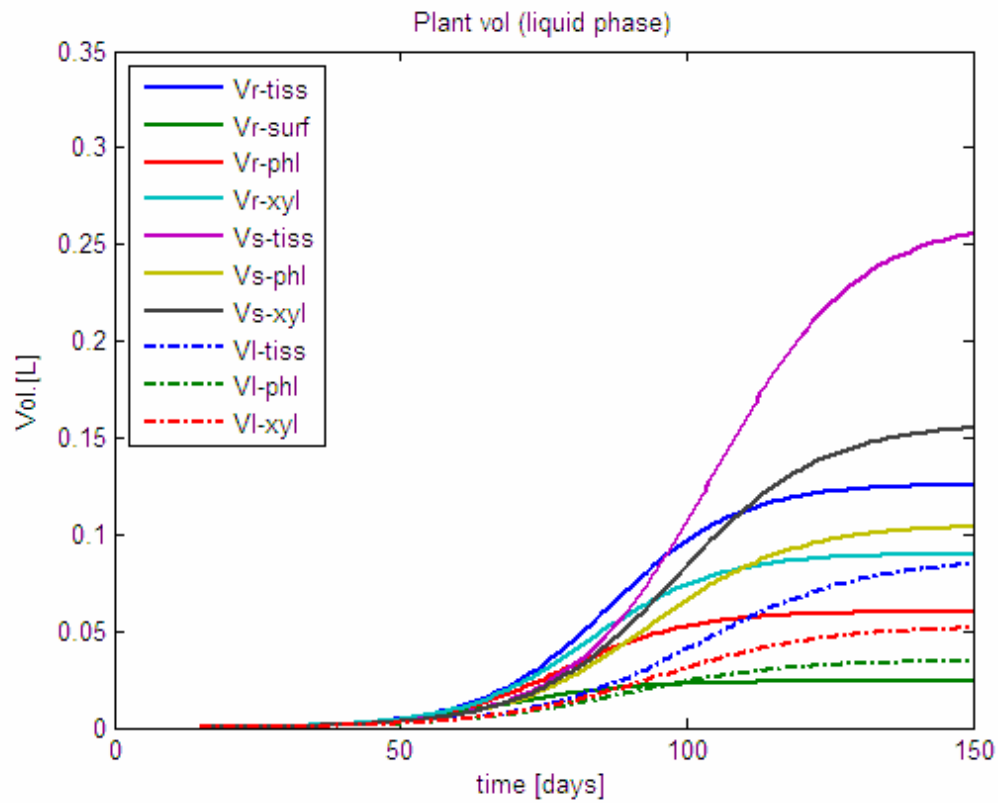


Διάγραμμα X.40: Συνολική μάζα μολύβδου που κατακρατήθηκε

Η μεγαλύτερη ποσότητα μετάλλου στη στερεή φάση είναι στη κατακρατήσιμη μορφή. Η υπόλοιπη οφείλεται στη προσρόφηση που γίνεται στην επιφάνεια της ρίζας και στην αντίδραση της ιονανταλλαγής που γίνεται στα τοιχώματα του ξύλου σε όλα τα μέρη του φυτού (υπολογίζονται ξεχωριστά από τη κατακράτηση).



Διάγραμμα X.41: Συνολική μάζα του Pb κατακρατημένη στο φυτό (υγρή και στερεή φάση)



Διάγραμμα X.42: Ανάπτυξη του φυτού

Η προσομοίωση θα γίνει σε απορρύπανση υδροφορέα καλά ανεμειγμένου με σταθερή συγκέντρωση μετάλλου στα  $200 \frac{mg}{l}$ . Αν υποθέσουμε ότι η έκταση προς απορρύπανση είναι  $500 m^2$  και η βέλτιστη απόσταση μεταξύ δύο φυτών είναι 1 m, με την εφαρμογή 530 φυτών στην επιφάνεια του υδροφορέα και το γεγονός ότι το κάθε φυτό συσσωρεύει συνολική ποσότητα Pb 4313.7 mg η συνολική ποσότητα μετάλλου που θα συσσωρευτεί θα ανέρχεται στα 2286261 mg.

Για να υπάρξει μια σωστή μοντελοποίηση στη τεχνολογία φυτοεξαγωγής σε έδαφος, θα πρέπει να μελετηθεί η σχέση του συστήματος μέταλλο – έδαφος. Είναι κατανοητό ότι σε πραγματικές συνθήκες η συγκέντρωση του μολύβδου στο έδαφος δεν παραμένει σταθερή κατά τη διάρκεια της απορρύπανσης αφού υπάρχουν δυνάμεις και άλλα φυσικά φαινόμενα (συνοχή εδάφους κ.α.), τα οποία πρέπει να ληφθούν υπόψη. Μπορούμε να εξετάσουμε το σενάριο όπου η ρίζα του φυτού θα δεσμεύει μέταλλο από το νερό που υπάρχει στο έδαφος. Ας υποθέσουμε ότι η επιφάνεια της έκτασης αντιστοιχεί σε  $500 m^2$ , το βάθος επίδρασης της ρίζας του φυτού ανέρχεται στα 0.5 m, η κυκλική επιφάνεια επίδρασης της ρίζας είναι 0.6 m και η βέλτιστη απόσταση μεταξύ δυο φυτών είναι το 1 m. Ο όγκος ελέγχου υπολογίζεται ίσος με  $V = \pi \cdot 0,6^2 \cdot 0,5 = 0,5652 m^3 = 565 L$ . Αν το πορώδες του εδάφους είναι 50% κορεσμένο συνεπάγεται ότι ο όγκος ελέγχου είναι ίσος με 282.5 L. Άρα η συνολική ποσότητα μετάλλου που είναι διαθέσιμη για πρόσληψη ανέρχεται στα  $M_{pb} = 200 \frac{mg}{l} \cdot 282,5 l = 565000 mg$ . Αφού κάθε φυτό μπορεί να προσλάβει ποσότητα Pb ίση με 4313.7 mg η απόδοση του συστήματος υπολογίζεται ίση με  $eff = \frac{4313,7 mg}{565000 mg} \cdot 100 = 7,63\%$ .

## XI. Ανάλυση ευαισθησίας

Αν και πολλές τιμές των παραμέτρων έχουν αντληθεί από τη βιβλιογραφία, ένα ποσοστό από αυτές είναι αποτέλεσμα της συμπεριφοράς του μοντέλου και της ανάλυσης ευαισθησίας κατά τη διάρκεια προσομοιώσεων. Οι παράμετροι αυτοί παρουσιάζουν αβεβαιότητα για αυτό η ανάλυση ευαισθησίας καθίσταται απαραίτητη για να επιβεβαιωθούν οι αποφάσεις που έχουν παρθεί σχετικά με τους μηχανισμούς πρόσληψης, μεταφοράς, συσσώρευσης του μολύβδου και την ανάπτυξη του φυτού.

### XI.i. Ρυθμός ενεργούς διάχυσης (DR):

Εκφράζει το κύριο ρυθμό εισροής μολύβδου στην επιφάνεια της ρίζας. Δρώσα δύναμη η διαφορά συγκέντρωσης μεταξύ της ρίζας και του εδαφικού διαλύματος.

Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημένος Pb
Μεταβολή επί %				
-20	7.7	5.27	7.69	8.33
+20	-7	-4.62	-7	-7.69
-50	21	15.14	20.74	22.21
+50	-16.42	-10.69	-16.43	-18.18

### XI.ii. Συγκέντρωση μολύβδου στο εδαφικό διάλυμα ( $C_{ss}$ ):

Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημένος Pb
Μεταβολή επί %				
-75	-73.4	-72.7	-72.9	-73.8
-50	-45.6	-46.9	-43.2	-49.4
+400	393	387	390	398
+900	876	865	885	889
+2000	1987	1992	1974	1981

### XI.iii. Μέγιστος ρυθμός πρόσληψης μετάλλου ( $UPT_{max}$ ):

Μεταβολή του μέγιστου ρυθμού πρόσληψης του μετάλλου προκαλεί και τις αντίστοιχες μεταβολές στα τελικά ολικά αποτελέσματα. Ο ρυθμός πρόσληψης αφορά

τη μεταφορά μετάλλου από την υγρή φάση της επιφάνειας της ρίζας στην υγρή φάση του ιστού.

Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημένος Pb
Μεταβολή επί %				
-20	-2.67	-0.49	-2.38	-1.02
+20	2.27	0.33	2.27	1
-50	-6.8	-1.3	-6.83	-2.86
+50	5.22	0.8	5.49	2.7

#### XI.iv. Ρυθμοί κατακράτησης ( $PR_s$ , $PR_t$ , $PR_{phl}$ , $PR_{xyl}$ ):

Ο ρυθμός κατακράτησης ελέγχει την ισορροπία της κατακράτησης του μετάλλου στο φυτό.

$PR_s$ : ρυθμός κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας  $\frac{1}{5days}$

$PR_t$ : ρυθμός κατακράτησης στον ιστό  $\frac{1}{5days}$

$PR_{phl}$ : ρυθμός κατακράτησης στον ηθμό  $\frac{1}{3days}$

$PR_{xyl}$ : ρυθμός κατακράτησης στο ξύλο  $\frac{1}{1,5days}$

Οι μεγαλύτερες μεταβολές αρνητικές ή θετικές στα τελικά ολικά αποτελέσματα, παρατηρούνται στο ρυθμό κατακράτησης της επιφάνειας της ρίζας. Με την αύξηση του ρυθμού κατακράτησης στην επιφάνεια της ρίζας μειώνεται ο μόλυβδος στην υγρή μορφή και αυξάνεται ο κατακρατήσιμος.

Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημένος Pb
Μεταβολή επί %				
Ιστού -50	-0.88	0.33	-0.58	-1.28

Ιστού +50	0.58	-0.16	0.63	1
Επιφάνειας ρίζας -50	-44.35	19.82	-44.54	-50.95
Επιφάνειας ρίζας +50	17.07	-19.8	17.11	18.14
Ηθμού -50	1.16	0.26	3.25	2.98
Ηθμού +50	-5.18	-0.82	-5.2	-3.12
Ξύλου -50	0.58	0.16	0.86	0.25
Ξύλου +50	-0.58	-0.15	-0.58	-0.76

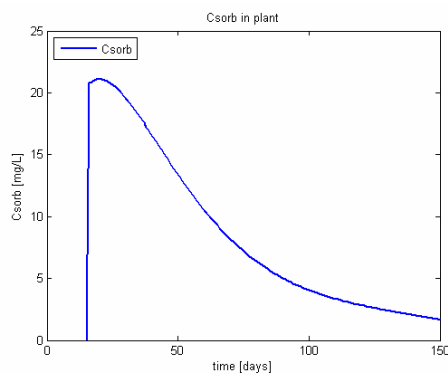
XI.v. Ανάπτυξη του φυτού ( $k$ ,  $V_{0,root}$ ):

Τα αποτελέσματα από την αυξομείωση των ρυθμών ανάπτυξης της ρίζας του βλαστού και των φύλλων παρουσιάζονται παρακάτω. Η μόνη αξιόλογη μεταβολή παρατηρείται από την αύξηση του αρχικού όγκου της ρίζας και του ρυθμού ανάπτυξης της.

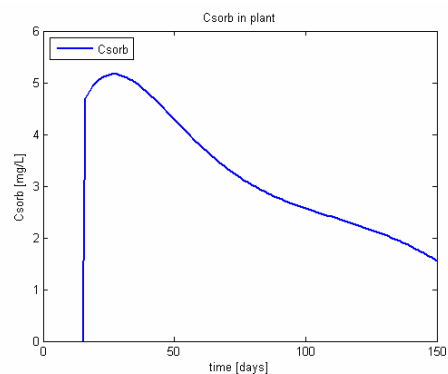
Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημέν ος Pb
Μεταβολή επί %				
Όγκος ρίζας - 50%	-0.67	-0.54	-0.31	-0.76
Όγκος ρίζας +100%	1.43	1.77	1.43	1.24
Όγκος ρίζας +500%	2.82	3.78	2.82	6.59
Ρυθμός ανάπτυξης ρίζας -50%	-11.65	-35.48	-11.69	-15.07
Ρυθμός ανάπτυξης ρίζας +50%	7.26	4.53	7.28	9.57
Ρυθμός ανάπτυξης	-0.29	-0.33	+0.029	-0.76

βλαστού -50%				
Ρυθμός ανάπτυξης βλαστού +50%	-0.87	0.49	-0.58	0.01
Ρυθμός ανάπτυξης φυλλων -50%	2.2	1.77	24.06	17.47
Ρυθμός ανάπτυξης φυλλων +50%	-5.5	-0.49	-5.52	-3.66

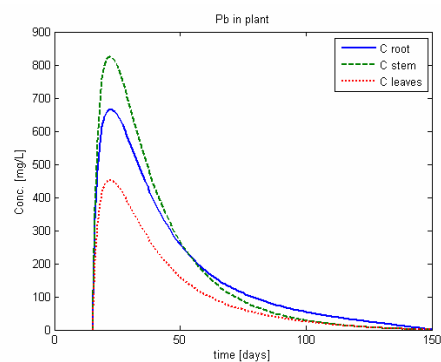
Από τα παρακάτω διαγράμματα παρατηρούμε ότι με την αύξηση του όγκου της ρίζας δεν έχουμε τις υψηλές αρχικές συγκεντρώσεις που μπορεί να σκοτώσουν το φυτό από τις πρώτες μέρες της εφαρμογής της τεχνολογίας.



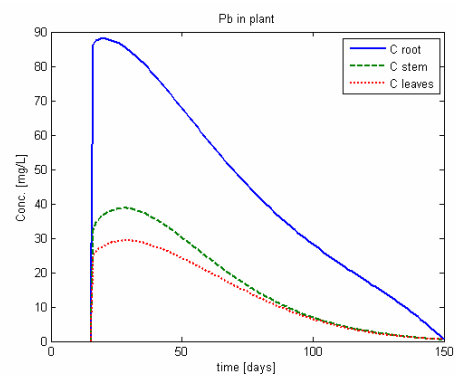
Διάγραμμα XI.1: Συγκέντρωση μολύβδου που απορροφήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας με  $V_{0,root} = 0.0002$  L



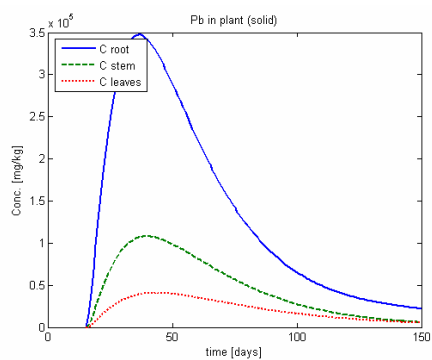
Διάγραμμα XI.2: Συγκέντρωση μολύβδου που απορροφήθηκε στην επιφάνεια της ρίζας με  $V_{0,root} = 0.001$  L



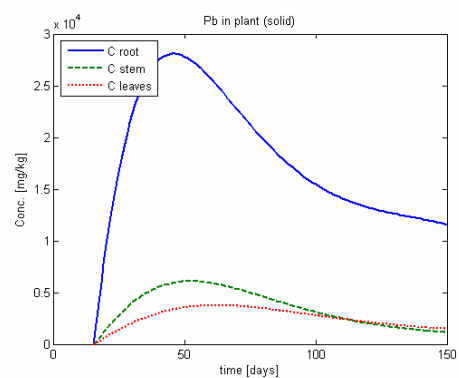
Διάγραμμα XI.3: Συγκέντρωση μολύβδου σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με  $V_{0,root} = 0.0002$  L



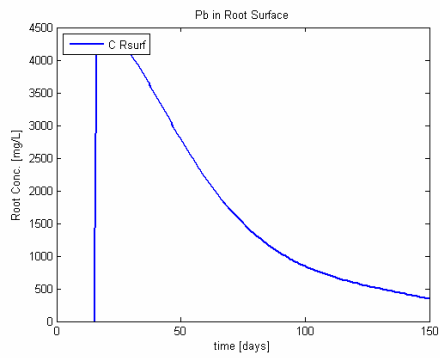
Διάγραμμα XI.4: Συγκέντρωση μολύβδου σε κάθε τμήμα του φυτού στην υγρή φάση με  $V_{0,root} = 0.001$  L



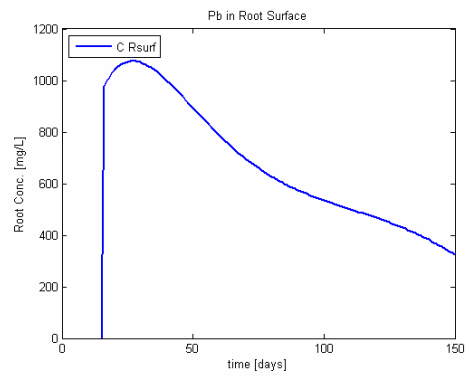
Διάγραμμα XI.5: Συγκέντρωση μολύβδου σε κάθε τμήμα του φυτού στη στερεή φάση με  $V_{0,root} = 0.0002$  L



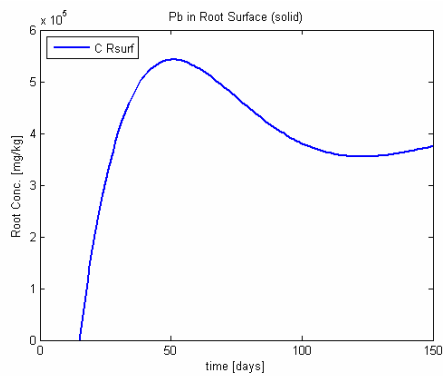
Διάγραμμα XI.6: Συγκέντρωση μολύβδου σε κάθε τμήμα του φυτού στη στερεή φάση με  $V_{0,root} = 0.001$  L



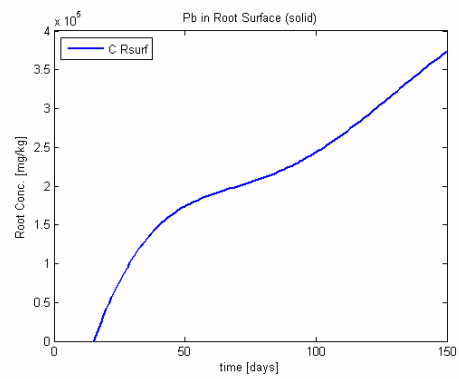
Διάγραμμα XI.7: Συγκέντρωση  
μολύβδου στην υγρή φάση της  
επιφάνειας της ρίζας με  $V_{0,\text{root}} =$   
0.0002 L



Διάγραμμα XI.8: Συγκέντρωση  
μολύβδου στην υγρή φάση της  
επιφάνειας της ρίζας με  $V_{0,\text{root}} = 0.001$   
L



Διάγραμμα XI.9: Συγκέντρωση  
μολύβδου στη στερεή φάση της  
επιφάνειας της ρίζας με  $V_{0,\text{root}} =$   
0.0002 L



Διάγραμμα XI.10: Συγκέντρωση  
μολύβδου στη στερεή φάση της  
επιφάνειας της ρίζας με  $V_{0,\text{root}} = 0.001$   
L

XI.vi. Τμήμα της ροής από το ξύλο προς τον ηθμό ( $XPF_r$ ,  $XPF_s$ ,  $XPF_l$ ):

Παράμετρος	Ολικός Pb	Ολικός σε υγρή μορφή Pb	Ολικός Pb σε στερεή μορφή	Ολικός κατακρατημένος Pb
Μεταβολή επί %				
Ρίζας -50%	-5.5	-0.82	-5.52	-3.6
Ρίζας +50%	7.26	0.97	7.53	4.56
Βλαστού -50%	-0.58	-0.16	-0.58	-0.5
Βλαστού +50%	0.57	0.02	0.16	0.25
Φύλλου -50%	-7.14	-0.99	-7.16	-4.75
Φύλλου +50%	16.06	1.29	16.1	9.15

XI.vii. Σταθερά ημικορεσμού ( $K_{hs}$ ):

Αλλάζοντας τη σταθερά ημικορεσμού για πρόσληψη μετάλλου που δύναται να γίνει κατω από συνθήκες κορεσμού στον ιστό και στην επιφάνεια της ρίζας προέκυψαν ελάχιστες διαφορές στα τελικά ολικά αποτελέσματα.

XI.viii. Συντελεστής κατανομής ισορροπίας προσροφημένου – εν διαλύσει μετάλλου ( $P_{r,surf}$ ):

Μεταβάλλοντας το συντελεστή της κατανομής ισορροπίας μεταξύ προσροφημένου μετάλλου – μετάλλου εν διαλύσει, ο οποίος εφαρμόζεται στη προσρόφηση μετάλλου που γίνεται στην επιφάνεια της ρίζας, παρατηρήθηκαν ελάχιστες μεταβολές στα τελικά ολικά αποτελέσματα.

XI.ix. Κινητική σταθερά προσρόφησης (PR):

Μεταβολή του ρυθμού μεταφοράς μεταξύ προσροφημένου και διαλυμένου μετάλλου στην επιφάνεια της ρίζας, όπου λαμβάνει μέρος η προσρόφηση. Η μεταβολή αυτή επέφερε ελάχιστες μεταβολές στα τελικά ολικά αποτελέσματα. Σε μεγάλες τάξεις μεταβολών (400%) παρουσιάστηκαν κάποιες μικρές αλλαγές.

## XII. Συμπεράσματα

Στη παρούσα διπλωματική εργασία σχεδιάστηκε ένα μαθηματικό μοντέλο το οποίο προσομοιάζει την απορρύπανση ρυπασμένων συστημάτων από μόλυβδο, με σταθερή συγκέντρωση, χρησιμοποιώντας τη τεχνολογία της φυτοεξαγωγής. Ένας επιπλέον παράγοντας που μελετήθηκε ήταν η επιρροή της αλατότητας του συστήματος στη συσσώρευση και την ανάληψη του μετάλλου από το φυτό. Το φυτό που χρησιμοποιήθηκε είναι η πικροδάφνη (*Nerium Oleander*) λόγω της αντοχής του φυτού στις τοξικές επιδράσεις των βαρέων μετάλλων αλλά και της ικανότητας του να συσσωρεύει το μέταλλο στη βιομάζα του και να το μεταφέρει στα υπέργεια τμήματα του. Επίσης η πικροδάφνη αν και δεν ανήκει στα αλόφυτα, έχει καλή αντοχή σε εδάφη με αλατότητα, σημαντικός παράγοντας στο σχεδιασμό συστημάτων φυτοεξαγωγής αν κανείς λάβει υπόψη ότι το  $\frac{1}{3}$  των καλλιεργήσιμων περιοχών παρουσιάζει υψηλές συγκεντρώσεις σε άλατα.

Από τα αποτελέσματα του μοντέλου παρατηρήθηκε ότι η πιο σημαντική μορφή συσσώρευσης μετάλλου στο φυτό είναι η κατακράτηση του μετάλλου στη μορφή του φωσφορώδους άλατος στα διάφορα μέρη του φυτού. Η μεγαλύτερη συγκέντρωση παρατηρείται στη ρίζα, μετά στο βλαστό και η μικρότερη συγκέντρωση παρατηρείται στα φύλλα. Στην εφαρμογή του μοντέλου θεωρήθηκε ότι δεν υπάρχει εισροή άλλης ποσότητας μετάλλου εκτός από την αρχική που ορίζουμε δηλ. σταθερή εισροή στα  $200 \frac{mg}{l}$ . Αυτή η υπόθεση ικανοποιεί τη προβλεψη σε εφαρμογή της τεχνολογίας σε απορρύπανση υδροφορέων.

Μια πιο σωστή μελλοντική προσέγγιση στο μοντέλο θα ήταν η μελέτη της συμπεριφοράς του μετάλλου στο εδαφικό διάλυμα. Μια αρχική προσέγγιση θα ήταν η μοντελοποίηση που να περιγράφει τη δυναμική ισορροπία που αναπτύσσεται μεταξύ του μετάλλου εν διαλύσει στο νερό του εδαφικού διαλύματος και του μετάλλου που βρίσκεται προσροφημένο στα στερεά σωματίδια του εδάφους.

Απαραίτητη προϋπόθεση φυσικά είναι η μελέτη και ο προσδιορισμός των παραμέτρων που παρουσιάζονται στην ανάλυση ευαισθησίας που επηρεάζουν τα τελικά αποτελέσματα του μοντέλου σε μεγάλο βαθμό. Παρατηρούμε για τη αύξηση της απόδοσης της τεχνολογίας συντελεί ένας συνδυασμός παραγόντων που πρέπει να μελετηθούν σε όλα τα μέρη του φυτού.

Όπως έχει προαναφερθεί το μοντέλο μπορεί να εφαρμοστεί και σε άλλα συστήματα φυτοεξαγωγής μετάλλου – φυτού. Αυτό οφείλεται στη μηχανιστική προσέγγιση σχεδιασμού του. Είναι φυσικό ότι για να γίνει αυτό θα πρέπει να υπολογιστούν ξανά διάφορες παράμετροι και εξισώσεις ανάλογα με τις αλλαγές που θα γίνονται. Στο παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται οι αλλαγές που είναι απαραίτητο να γίνουν για τη μετατροπή του μοντέλου:

Φυτό	Μέταλλο
Προσαρμογή των εξισώσεων του ρυθμού διαπνοής	Διαλυτότητα του μετάλλου στους ιστούς του φυτού (SOL)
Ρυθμός κατακράτησης του μετάλλου (PR)	Ρυθμός με τον οποίο προσλαμβάνεται από τη ρίζα (UPT)
Αλλαγή των στοιχείων μορφολογίας του φυτού (V, Mroot)	Εξισώσεις τοξικότητας στη ρίζα του φυτού (TOXIC, Fp)
Συντελεστές ρεύματος διαπνοής που οδηγείται σε κάθε τμήμα του φυτού (q,XPF)	Σταθερά ημικορεσμού ( $K_{hs}$ )
Μετατροπή των εξισώσεων της ενεργής επιφάνειας της ρίζας (mass), της ανάπτυξης της μάζας της ρίζας (Rmass)	Ρυθμός ιονανταλλαγής μετάλλου στο τοίχωμα του ξύλου (ionex)

Για να γίνει ένας αποδοτικός σχεδιασμός ενός μοντέλου φυτοεξαγωγής θα πρέπει να γίνει μια εκτεταμένη έρευνα στις βιολογικές ενέργειες που κάνει το φυτό ανάλογα με το ρύπο που αντιμετωπίζει. Ήδη έχει γίνει ένας διαχωρισμός μεταξύ φυτών που είναι κατάλληλα για απορύπανση οργανικών ρύπων και φυτών που είναι κατάλληλα για ανόργανους ρύπους. Αυτό απαιτεί ένα συντονισμό μιας ομάδας επιστημόνων από διάφορους τομείς, όπως επιστήμονες που ασχολούνται με τη μηχανική εδαφών, γεωπόνους, βιολόγους, χημικούς μηχανικούς, μηχανικούς περιβάλλοντος.

Αφού προσδιοριστεί η συμπεριφορά του ρύπου στο έδαφος και η συμπεριφορά του συστήματος ρύπου - φυτού θα πρέπει να προσδιοριστεί ποιοί ρύποι μπορούν να δεσμευτούν / αποσυντεθούν με την εφαρμογή της φυτοεξαγωγής και να συμφέρει οικονομικά.

Σαν τελευταίο βήμα είναι απαραίτητη η γενετική τροποποίηση σε φυτά τα οποία θα χρησιμοποιούνται αποκλειστικά για φυτοεξυγίανση. Αφού έχουν εξακριβωθεί οι μηχανισμοί που συντελούν στην αύξηση της απόδοσης της τεχνολογίας από τη μοντελοποίηση, η γενετική μετατροπή μπορεί να ενισχύσει τους μηχανισμούς του φυτού που είναι υπεύθυνοι για την ανάληψη, αποσύνθεση και αποβολή των ρύπων.

## Παράρτημα

Παρακάτω παρουσιάζεται ο κώδικας του μοντέλου:

### Απουσία Αλατότητας:

Main Script file (contains all the calculations of the concentrations, masses of Lead in the plant and the plotting of figures):

```
echo on
% echo displays every line of the script file as it is executed
clc

% The process and input data are set as GLOBAL VARIABLES. This is useful
% when you want one variable to be used by more than one function

global UPT Khs SOL1 PRt Css DR Prsurf PR SOL2 PRs XPFR SOL3 PRphl PRxyl...
      SOL4 DTR SOL5 XPFs SOL7 SOL8 XPFI SOL9 SOL10 SOL6 ...
      V11max V12max V13max V14max V15max V16max V17max V18max
      V19max V110max

UPT = 400.8; Khs = 10.7;
SOL1 = 0.02; PRt = 5; Css = 200; DR = 10; Prsurf = 0.0048; PR = 1.5;
SOL2 = 0.15; PRs = 5; XPFR = 0.45;
SOL3 = 0.01; PRphl = 3; PRxyl = 1.5;
SOL4 = 0.38; DTR = 0.001;
SOL5 = 0.02; XPFs = 0.45;
SOL6 = 0.01; SOL7 = 0.38;
SOL8 = 0.02; XPFI = 0.45;
SOL9 = 0.01; SOL10 = 0.38;

% maximum volume of the subdepartments of the plant

V11max = 0.105; V12max = 0.02;
V13max = 0.05; V14max = 0.075;
V15max = 0.28; V16max = 0.112;
V17max = 0.169; V18max = 0.094;
V19max = 0.038; V110max = 0.056;

% Setting the duration of the process

t0 = 15;
tfinal = 150;
tspan = [t0:1:tfinal];
```

```
% Defining initial conditions. The first line corresponds to the
% concentration of Pb in the solid phase of the plant. The second line
% corresponds to the concentration of Pb in the liquid phase of the plant
% and the third line to the initial volume of the 10 subdepartments of the plant.
% The fourth line corresponds to the precipitated quantity of metal. The fifth line is
the
% initial value of the concentration of the absorbed Pb.
```

```
C0 = [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
      0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 ...
      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...
      0]';
```

```
% To solve the ODE over the interval of  $15 < t < 150$  days, we invoke
% ODE15s: Due to the complexity of the differential equations and the stiff
% nature of the model BDF (Backward Differentiation Formulas) is
% used.
%Max step: Upper bound on solver step size
%InitialStep: sets an upper bound on the magnitude of the first step size the solver
tries
```

```
options = odeset('BDF','on','InitialStep',0.00001,'MaxStep',1)
[t,c]=ode15s('fytoode',tspan,C0,options);
```

```
% Computing the total mass of Pb
```

```
Cr_liq = c(:,[1 3 4]); %concentration of liquid phase in root
Total_Cr_liq = sum(Cr_liq');
Cs_liq = c(:,5:7); %concentration of liquid phase in steam
Total_Cs_liq = sum(Cs_liq');
Cl_liq = c(:,8:10); %concentration of liquid phase in leaves
Total_Cl_liq = sum(Cl_liq');
Cliq = c(:,1:10);
```

```
Cr_solid = c(:,[11 13 14]); %concentration of solid phase in root
Total_Cr_solid = sum(Cr_solid');
Cs_solid = c(:,15:17); %concentration of solid phase in steam
Total_Cs_solid = sum(Cs_solid');
Cl_solid = c(:,18:20); %concentration of solid phase in leaves
Total_Cl_solid = sum(Cl_solid');
Csolid = c(:,11:20);
```

```
Csorb_Temp = c(:,41); %concetration of metal absorbed
```

```
% Computing Pb precipitation
```

```
Pbr_prec = c(:,31:34);
Pbs_prec = c(:,35:37);
```

```
Pbl_prec = c(:,38:40);
Pb_prec = c(:,31:40);
Total_Pb_prec = sum(Pb_prec')
```

**% Computing root volume and total Pb mass**

```
VOLl = c(:,21:30);
VOLs = (0.35/0.65)*VOLl;
Pb_liq_Mass = Cliq.*VOLl;
Total_Pb_liq_Mass = sum(Pb_liq_Mass')
Pb_sol_Mass = Csolid.*VOLs;
Total_Pb_sol_Mass = sum(Pb_sol_Mass')
```

```
Total_Pb_Mass = Total_Pb_liq_Mass + Total_Pb_sol_Mass
```

```
Tot_Pb_r_surf=c(:,2)+c(:,12); % Computing the total Pb concentration in root surface
```

```
mkdir results
cd('results');
```

**% Graphs**

```
figure(figure);
plot(t,c(:,31),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root tissue','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,32),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root surface'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Csur',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root surface','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,33),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Cphl',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,34),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Cxyl',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,35),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
```

```
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam tissue','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,36),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,37),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,38),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf tissue','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,39),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,40),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,2),'LineWidth',2), title('Concentration of Pb in Root Surface (liquid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration [mg/L]'), legend('C Rsurf',2),
saveas(gcf,'Concentration of Pb in Root Surface (liquid phase)','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,Total_Cr_liq,t,Total_Cs_liq,'--',t,Total_Cl_liq,'.','LineWidth',2),
title('Concentration of Pb in plant (liquid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration. [mg/L]'), legend('C root','C steam','C leaves',1)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in plant (liquid phase)','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,12),'LineWidth',2), title('Concentration of Pb in Root Surface (solid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
```

```

    ylabel('Concentration. [mg/kg]'), legend('C Rsurf',2)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in Root Surface (solidphase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,Total_Cr_solid,t,Total_Cs_solid,'--',t,Total_Cl_solid,'-', 'LineWidth',2),
title('Concentration of Pb in plant (solid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration [mg/kg]'),
legend('C root','C steam','C leaves',2)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in plant (solid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,c(:,21),t,c(:,22),t,c(:,23),t,c(:,24),t,c(:,25),t,c(:,26),t,c(:,27),t,c(:,28),'- ',t,c(:,29),'- ',t,c(:,30),'-', 'LineWidth',2), title('Plant vol (liquid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Vol.[L]'),
legend('Vr-tiss','Vr-surf','Vr-phl','Vr-xyl','Vs-tiss','Vs-phl','Vs-xyl','Vl-tiss','Vl-phl','Vl-xyl',2)
saveas(gcf,'Plant vol (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,c(:,41), 'LineWidth',2), title('C sorbed in plant'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('C sorbed [mg/L]'),
legend('C sorbed',2)
saveas(gcf,'C sorbed in plant','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_liq_Mass, 'LineWidth',2), title('Pb mass in plant (liquid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb mass in liquid phase, [mg]'), legend('Pb in Liq',2)
saveas(gcf,'Pb mass in plant (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_sol_Mass, 'LineWidth',2), title('Pb mass in plant (solid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb mass in solid phase, [mg]'), legend('Pb in solid',2)
saveas(gcf,'Pb mass in plant (solid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_prec, 'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated (total)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb mass precipitated, [mg]'), legend('Pb precipitated',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated (total)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);

```

```

plot(t,c(:,32),'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated in root surface'),xlabel('time
[days]'),...
    ylabel('Pb_precipitated [mg]'),
legend('r-surf',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated in root surface','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,c(:,31),t,c(:,33),t,c(:,34),t,c(:,35),t,c(:,36),t,c(:,37),t,c(:,38),t,c(:,39),'-.',t,c(:,40),'-
.', 'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb_precip [mg]'),
legend('r-tiss','r-phl','r-xyl','s-tiss','s-phl','s-xyl','l-tiss','l-phl','l-xyl',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t>Total_Pb_Mass,'LineWidth',2), title('Total Pb mass'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb [mg]'),
legend('Total Pb',2)
saveas(gcf,'Total Pb mass','bmp')
pause

save workspace.mat
save('Total_Pb_Mass.txt','Total_Pb_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_liq_Mass.txt','Total_Pb_liq_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_sol_Mass.txt','Total_Pb_sol_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_prec.txt','Total_Pb_prec','-ASCII','-tabs');
save('Csorb_Temp.txt','Csorb_Temp','-ASCII','-tabs');

```

Function script file (contains all the differential equations):

```

function dCdt = fytoode(t,c);

global UPT Khs SOL1 PRt Css DR Prsurf PR SOL2 PRs XPFR SOL3 PRphl PRxyl...
    SOL4 DTR SOL5 XPFs SOL7 SOL8 XPF1 SOL9 SOL10...
    SOL6...
    V11max V12max V13max V14max V15max V16max V17max V18max
    V19max V110max

C11=c(1); C12=c(2); C13=c(3); C14=c(4); C15=c(5); C16=c(6); C17=c(7);
C18=c(8);
C19=c(9); C110=c(10);

C21=c(11); C22=c(12); C23=c(13); C24=c(14); C25=c(15); C26=c(16); C27=c(17);
C28=c(18);

```

C29=c(19); C210=c(20);

V11 = c(21); V12 = c(22); V13 = c(23); V14 = c(24); V15 = c(25); V16 = c(26); V17 = c(27);

V18 = c(28); V19 = c(29); V110 = c(30);

V21 = 0.35/0.65\*V11; V22 = 0.35/0.65\*V12; V23 = 0.35/0.65\*V13; V24 = 0.35/0.65\*V14; V25 = 0.35/0.65\*V15; V26 = 0.35/0.65\*V16; V27 = 0.35/0.65\*V17; V28 = 0.35/0.65\*V18; V29 = 0.35/0.65\*V19; V210 = 0.35/0.65\*V110;

A1 = c(31); A2 = c(32); A3 = c(33); A4 = c(34); A5 = c(35); A6 = c(36); A7 = c(37);

A8 = c(38); A9 = c(39);

A10 = c(40);

Csorb = c(41);

Toxic = kttox(C11);

RMass = Mr(t);

Fp = TOXFp(C11);

mass = ERM(t);

trans1 = Qtrans(t);

trans2 = Qphl(t);

ionex = CEF(t);

#### % VOLUME CALCULATIONS (LIQUIDS)

k1 = 0.09;

k2 = k1;

k3 = k1;

k4 = k1;

k5 = 0.08;

k6 = k5;

k7 = k5;

k8 = 0.07;

k9 = k8;

k10 = k8;

dV11dt = (1-V11/V11max)\*V11\*k1\*(1-kttox(C11));

dV12dt = (1-V12/V12max)\*V12\*k2\*(1-kttox(C11));

dV13dt = (1-V13/V13max)\*V13\*k3\*(1-kttox(C11));

dV14dt = (1-V14/V14max)\*V14\*k4\*(1-kttox(C11));

dV15dt = (1-V15/V15max)\*V15\*k5\*(1-kttox(C11));

dV16dt = (1-V16/V16max)\*V16\*k6\*(1-kttox(C11));

dV17dt = (1-V17/V17max)\*V17\*k7\*(1-kttox(C11));

dV18dt = (1-V18/V18max)\*V18\*k8\*(1-kttox(C11));

dV19dt = (1-V19/V19max)\*V19\*k9\*(1-kttox(C11));

dV110dt = (1-V110/V110max)\*V110\*k10\*(1-kttox(C11));

#### % VOLUME CALCULATIONS (SOLIDS)

```

dV21dt = 0.35/0.65*dV11dt; dV22dt = 0.35/0.65*dV12dt; dV23dt =
0.35/0.7*dV13dt; dV24dt = 0.35/0.65*dV14dt;
dV25dt = 0.35/0.65*dV15dt; dV26dt = 0.35/0.65*dV16dt; dV27dt =
0.35/0.7*dV17dt; dV28dt = 0.35/0.65*dV18dt;
dV29dt = 0.35/0.65*dV19dt; dV210dt = 0.35/0.65*dV110dt;

```

```

dCsorbd = (C12-(Csorb/Prsurf))*PR;

```

% q is a coefficient that defines what proportion of Qtrans ends up in the root

```

q1 = 0.2;
q2 = 0.08;
q3 = 0.12;
q4 = 0.3;
q5 = 0.12;
q6 = 0.18;

```

% root tissue

```

if C11 >= SOL1
    PRECIP1 = (C11-SOL1)*PRt*V11;
else
    PRECIP1 = ((C11-SOL1)/SOL1)*A1*PRt;
end
if A1 <= 0 & (C11-SOL1)< 0
    PRECIP1=0;
end
dC11dt = (UPT*TOXFp(C11)*C12*Mr(t)*ERM(t))/(V11*(Khs+C12)) +
C13*Qphl(t)/V11...
- C11*Qtrans(t)/V11 - PRECIP1/V11 - C11*dV11dt/V11;
dC21dt = PRECIP1/V21 - C21*dV21dt/V21;
dA1dt = PRECIP1;

```

% root surface

```

if C12 >= SOL2
    PRECIP2 = (C12-SOL2)*PRs*V12;
else
    PRECIP2 = ((C12-SOL2)/SOL2)*A2*PRs;
end
if A2 < 0 & (C12-SOL2)<0
    PRECIP2 = 0;
end
dC12dt = Css*Qtrans(t)/V12 + (Css-C12)*DR -
(UPT*TOXFp(C11)*C12*Mr(t)*ERM(t))/(V12*(Khs+C12))...
- (C12-(Csorb/Prsurf))*PR - PRECIP2/V12 - C12*dV12dt/V12;
dC22dt = (C12-(Csorb/Prsurf))*PR + PRECIP2/V22 - C22*dV22dt/V22;
dA2dt = PRECIP2;

```

%root phloem

```

if C13 >= SOL3
    PRECIP3 = (C13-SOL3)*PRphl*V13;
else
    PRECIP3 = ((C13-SOL3)/SOL3)*A3*PRphl;
end
if A3 < 0 & (C13-SOL3) < 0
    PRECIP3=0;
end
dC13dt = Qphl(t)*(C16-C13)/V13 + Qtrans(t)*XPFr*C14/V13 - PRECIP3/V13 -
C13*dV13dt/V13;
dC23dt = PRECIP3/V23 - C23*dV23dt/V23;
dA3dt = PRECIP3;

% root xylem

if C14 >= SOL4
    PRECIP4 = (C14-SOL4)*PRxyl*V14;
else
    PRECIP4 = ((C14-SOL4)/SOL4)*A4*PRxyl;
end
if A4 < 0 & (C14-SOL4)<0
    PRECIP4 = 0;
end
dC14dt = Qtrans(t)*(C11-C14)/V14 - Qtrans(t)*C14*CEF(t)/V14 - PRECIP4/V14 -
C14*dV14dt/V14;
dC24dt = Qtrans(t)*C14*CEF(t)/V24 + PRECIP4/V24 - C24*dV24dt/V24;
dA4dt = PRECIP4;

% steam tissue

if C15 >= SOL5
    PRECIP5 = (C15-SOL5)*PRt*V15;
else
    PRECIP5 = ((C15-SOL5)/SOL5)*A5*PRt;
end
if A5 < 0 & (C15-SOL5)<0
    PRECIP5 = 0;
end
dC15dt = C16*Qphl(t)/V15 + q1*Qtrans(t)*(C17-C15)/V15 - PRECIP5/V15 -
C15*dV15dt/V15;
dC25dt = PRECIP5/V25 - C25*dV25dt/V25;
dA5dt = PRECIP5;

% steam phloem

if C16 >= SOL6
    PRECIP6 = (C16-SOL6)*PRphl*V16;
else
    PRECIP6 = ((C16-SOL6)/SOL6)*A6*PRphl;

```

```

end
if A6 < 0 & (C16-SOL6)<0
    PRECIP6 = 0;
end
dC16dt = Qphl(t)*(C19-C16)/(V16) + q2*Qtrans(t)*XPFs*C17/(V16) -
PRECIP6/V16 - C16*dV16dt/V16;
dC26dt = PRECIP6/V26 - C26*dV26dt/V26;
dA6dt = PRECIP6;

% steam xylem

if C17 >= SOL7
    PRECIP7 = (C17-SOL7)*PRxyl*V17;
else
    PRECIP7 = ((C17-SOL7)/SOL7)*A7*PRxyl;
end
if A7 < 0 & (C17-SOL7)<0
    PRECIP7 = 0;
end

dC17dt = q3*Qtrans(t)*(C14-C17)/(V17) + (C15-C17)*DTR/(V17) -
q3*Qtrans(t)*C17*CEF(t)/(V17) - PRECIP7/V17 - C17*dV17dt/V17;
dC27dt = q3*Qtrans(t)*C17*CEF(t)/(V27) + PRECIP7/V27 - C27*dV27dt/V27;
dA7dt = PRECIP7;

% leaf tissue

if C18 >= SOL8
    PRECIP8 = (C18-SOL8)*PRt*V18;
else
    PRECIP8 = ((C18-SOL8)/SOL8)*A8*PRt;
end
if A8 < 0 & (C18-SOL8)<0
    PRECIP8 = 0;
end
dC18dt = q4*(C110-C18)*Qtrans(t)/V18 - PRECIP8/V18 - C18*dV18dt/V18;
dC28dt = PRECIP8/V28 - C28*dV28dt/V28;
dA8dt = PRECIP8;

% leaf phloem

if C19 >= SOL9
    PRECIP9 = (C19-SOL9)*PRphl*V19;
else
    PRECIP9 = ((C19-SOL9)/SOL9)*A9*PRphl;
end
if A9 < 0 & (C19-SOL9)<0
    PRECIP9 = 0;
end
dC19dt = q5*Qtrans(t)*XPFI*C110/V19 - PRECIP9/V19 - C19*dV19dt/V19;

```

```
dC29dt = PRECIP9/V29 - C29*dV29dt/V29;
dA9dt = PRECIP9;
```

```
% leaf xylem
```

```
if C110 >= SOL10
    PRECIP10 = (C110-SOL10)*PRxyl*V110;
else
    PRECIP10 = ((C110-SOL10)/SOL10)*A10*PRxyl;
end
if A10 < 0 & (C110-SOL10)<0
    PRECIP10 = 0;
end
dC110dt = q6*Qtrans(t)*(C17-C110)/(V110) - PRECIP10/V110 -
C110*dV110dt/V110;
dC210dt = PRECIP10/V210 - C210*dV210dt/V210;
dA10dt = PRECIP10;
```

```
%array where the results are stored
```

```
dCdt = [dC11dt, dC12dt, dC13dt, dC14dt, dC15dt, dC16dt, dC17dt, dC18dt, dC19dt,
dC110dt, ...
dC21dt, dC22dt, dC23dt, dC24dt, dC25dt, dC26dt, dC27dt, dC28dt, dC29dt,
dC210dt, ...
dV11dt, dV12dt, dV13dt, dV14dt, dV15dt, dV16dt, dV17dt, dV18dt, dV19dt,
dV110dt, ...
dA1dt, dA2dt, dA3dt, dA4dt, dA5dt, dA6dt, dA7dt, dA8dt, dA9dt, dA10dt, ...
dCsorbdt]';
```

```
function Toxic = kttox(C11);
x=min(5600, max(0, C11));
Toxic_cal = 7.031e-012*(x)^3 - 6.1873e-008*(x)^2 + 0.000394*(x) - 0.5008;
Toxic_min = 0;
Toxic_max = 1;
Toxic = min(Toxic_max, max(Toxic_min, Toxic_cal));
% The above function describes the toxicity effect of lead on the growth of
% the plant
```

```
function RMass = Mr(t);
RMass = 6.6667e-010*t^3 - 1e-007*t^2 + 0.00058333*t - 7.7093e-018;
% The above function describes dry root mass
```

```
function Fp = TOXFp(C11);
x=min(5600, max(0, C11));
Fp_cal = -7.0311e-012*(x)^3 + 8.9999e-008*(x)^2 - 0.0005965*(x) + 1.7528;
Fp_min = 0;
Fp_max = 1;
Fp = min(Fp_max, max(Fp_min, Fp_cal));
% Toxicity factor which affects intake capability of the plant
```

```
function mass = ERM(t);
mass = -3.3333e-007*t^3 + 5e-005*t^2 - 0.0066667*t + 1.0;
% This function describes the effective root mass fraction
```

```
function trans1 = Qtrans(t);
trans1 = -4e-07*t^3 + 5e-05*t^2 + 0.0031*t + 0.0049;
% Transpiration stream
```

```
function trans2 = Qphl(t);
trans2 = -1e-07*t^3 + 1e-05*t^2 + 0.0009*t + 0.0015;
% Transpiration stream of phloem
```

```
function ionex = CEF(t);
ionex = -2.6667e-007*t^3 + 8e-005*t^2 - 0.011333*t + 0.8;
% Ion exchange behaviour of the xylem
```

### **Με αλατότητα:**

Main Script file (contains all the calculations of the concentrations, masses of Lead in the plant and the plotting of figures):

```
echo on
% echo displays every line of the script file as it is executed
clc
```

```
% The process and input data are set as GLOBAL VARIABLES. This is useful
% when you want one variable to be used by more than one function
```

```
global UPT Khs SOL1 PRt Css DR Prsurf PR SOL2 PRs XPFR SOL3 PRphl PRxyl...
SOL4 DTR SOL5 XPFs SOL7 SOL8 XPF1 SOL9 SOL10 SOL6 ...
V11max V12max V13max V14max V15max V16max V17max V18max
V19max V110max
```

```
UPT = 400.8; Khs = 10.7;
SOL1 = 0.02; PRt = 5; Css = 200; DR = 10; Prsurf = 0.0048; PR = 1.5;
SOL2 = 0.15; PRs = 5; XPFR = 0.45;
SOL3 = 0.01; PRphl = 3; PRxyl = 1.5;
SOL4 = 0.38; DTR = 0.001;
SOL5 = 0.02; XPFs = 0.45;
SOL6 = 0.01; SOL7 = 0.38;
SOL8 = 0.02; XPF1 = 0.45;
SOL9 = 0.01; SOL10 = 0.38;
```

% maximum volume of the subdepartments of the plant

```
V11max = 0.126; V12max = 0.024;  
V13max = 0.06; V14max = 0.09;  
V15max = 0.2625; V16max = 0.105;  
V17max = 0.1575; V18max = 0.0875;  
V19max = 0.035; V110max = 0.0525;
```

% Setting the duration of the process

```
t0 = 15;  
tfinal = 150;  
tspan = [t0:1:tfinal];
```

% Defining initial conditions. The first line corresponds to the  
% concentration of Pb in the solid phase of the plant. The second line  
% corresponds to the concentration of Pb in the liquid phase of the plant  
% and the third line to the initial volume of the 10 subdepartments of the plant. The  
fourth line  
% corresponds to the precipitated quantity of metal. The fifth line is the  
% initial value of the concentration of the absorbed Pb.

```
C0 = [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...  
      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...  
      0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 0.0002 ...  
      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 ...  
      0]';
```

% To solve the ODE over the interval of  $15 < t < 150$  days, we invoke  
% ODE15s: Due to the complexity of the differential equations and the stiff  
% nature of the model BDF (Backward Differentiation Formulas) is  
% used.  
%Max step: Upper bound on solver step size  
%InitialStep: sets an upper bound on the magnitude of the first step size the solver  
tries

```
options = odeset('BDF','on','InitialStep',0.00001,'MaxStep',1)  
[t,c]=ode15s('fytosolver2',tspan,C0,options);
```

% Computing the total mass of Pb

```
Cr_liq = c(:,[1 3 4]); %concentration of liquid phase in root  
Total_Cr_liq = sum(Cr_liq');  
Cs_liq = c(:,5:7); %concentration of liquid phase in steam  
Total_Cs_liq = sum(Cs_liq');  
Cl_liq = c(:,8:10); %concentration of liquid phase in leaves  
Total_Cl_liq = sum(Cl_liq');
```

```

Cliqu = c(:,1:10);

Cr_solid = c(:,[11 13 14]); %concentration of solid phase in root
Total_Cr_solid = sum(Cr_solid');
Cs_solid = c(:,15:17); %concentration of solid phase in steam
Total_Cs_solid = sum(Cs_solid');
Cl_solid = c(:,18:20); %concentration of solid phase in leaves
Total_Cl_solid = sum(Cl_solid');
Csolid = c(:,11:20);

Csurb_Temp = c(:,41); %concetration of metal absorbed

% Computing Pb precipitation

Pbr_prec = c(:,31:34);
Pbs_prec = c(:,35:37);
Pbl_prec = c(:,38:40);
Pb_prec = c(:,31:40);
Total_Pb_prec = sum(Pb_prec')

% Computing root volume and total Pb mass

VOLl = c(:,21:30);
VOLs = (0.35/0.65)*VOLl;
Pb_liq_Mass = Cliqu.*VOLl;
Total_Pb_liq_Mass = sum(Pb_liq_Mass')
Pb_sol_Mass = Csolid.*VOLs;
Total_Pb_sol_Mass = sum(Pb_sol_Mass')

Total_Pb_Mass = Total_Pb_liq_Mass + Total_Pb_sol_Mass

Tot_Pb_r_surf=c(:,2)+c(:,12); % Computing the total Pb concentration in root surface

mkdir results
cd('results');

% Graphs

figure(figure);
plot(t,c(:,31),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root tissue','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,c(:,32),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root surface'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Csur',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root surface','bmp')
pause

```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,33),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Cphl',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,34),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Root xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Cxyl',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Root xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,35),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam tissue','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,36),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,37),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Steam xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Steam xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,38),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf tissue'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf tissue','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,39),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf phloem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf phloem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
plot(t,c(:,40),'LineWidth',2), title('Pb prec. in Leaf xylem'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Mass [mg]'), legend('Ct',2),
saveas(gcf,'Pb precipitation in Leaf xylem','bmp')
pause
```

```
figure(figure);
```

```

plot(t,c(:,2),'LineWidth',2), title('Concentration of Pb in Root Surface (liquid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration [mg/L]'), legend('C Rsurf',2),
saveas(gcf,'Concentration of Pb in Root Surface (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t>Total_Cr_liq,t>Total_Cs_liq,'--',t>Total_Cl_liq,'.','LineWidth',2),
title('Concentration of Pb in plant (liquid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration. [mg/L]'), legend('C root','C steam','C leaves',1)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in plant (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,c(:,12),'LineWidth',2), title('Concentration of Pb in Root Surface (solid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration. [mg/kg]'), legend('C Rsurf',2)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in Root Surface (solidphase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t>Total_Cr_solid,t>Total_Cs_solid,'--',t>Total_Cl_solid,'.','LineWidth',2),
title('Concentration of Pb in plant (solid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Concentration [mg/kg]'),
legend('C root','C steam','C leaves',2)
saveas(gcf,'Concentration of Pb in plant (solid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,c(:,21),t,c(:,22),t,c(:,23),t,c(:,24),t,c(:,25),t,c(:,26),t,c(:,27),t,c(:,28),'-.',t,c(:,29),'-
.',t,c(:,30),'-','LineWidth',2), title('Plant vol (liquid phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Vol.[L]'),
legend('Vr-tiss','Vr-surf','Vr-phl','Vr-xyl','Vs-tiss','Vs-phl','Vs-xyl','Vl-tiss','Vl-phl','Vl-
xyl',2)
saveas(gcf,'Plant vol (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,c(:,41),'LineWidth',2), title('Csorbed in plant'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Csorbed [mg/L]'),
legend('Csorbed',2)
saveas(gcf,'Csorbed in plant','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t>Total_Pb_liq_Mass,'LineWidth',2), title('Pb mass in plant (liquid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb mass in liquid phase, [mg]'), legend('Pb in Liq',2)
saveas(gcf,'Pb mass in plant (liquid phase)','bmp')
pause

```

```

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_sol_Mass,'LineWidth',2), title('Pb mass in plant (solid
phase)'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb mass in solid phase, [mg]'), legend('Pb in solid',2)
saveas(gcf,'Pb mass in plant (solid phase)','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_prec,'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated (total)'),xlabel('time
[days]'),...
    ylabel('Pb mass precipitated, [mg]'), legend('Pb precipitated',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated (total)','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,c(:,32),'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated in root surface'),xlabel('time
[days]'),...
    ylabel('Pb_precipitated [mg]'),
    legend('r-surf',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated in root surface','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,c(:,31),t,c(:,33),t,c(:,34),t,c(:,35),t,c(:,36),t,c(:,37),t,c(:,38),t,c(:,39),'-.',t,c(:,40),'-
.', 'LineWidth',2), title('Pb mass precipitated'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb_precip [mg]'),
    legend('r-tiss','r-phl','r-xyl','s-tiss','s-phl','s-xyl','l-tiss','l-phl','l-xyl',2)
saveas(gcf,'Pb mass precipitated','bmp')
pause

figure(figure);
plot(t,Total_Pb_Mass,'LineWidth',2), title('Total Pb mass'),xlabel('time [days]'),...
    ylabel('Pb [mg]'),
    legend('Total Pb',2)
saveas(gcf,'Total Pb mass','bmp')
pause

save workspace.mat
save('Total_Pb_Mass.txt','Total_Pb_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_liq_Mass.txt','Total_Pb_liq_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_sol_Mass.txt','Total_Pb_sol_Mass','-ASCII','-tabs');
save('Total_Pb_prec.txt','Total_Pb_prec','-ASCII','-tabs');
save('Csorb_Temp.txt','Csorb_Temp','-ASCII','-tabs');

```

Function script file (contains all the differential equations):

```
function dCdt = fytosolver2(t,c);
```

```
global UPT Khs SOL1 PRt Css DR Prsurf PR SOL2 PRs XPFR SOL3 PRphl PRxyl...  
      SOL4 DTR SOL5 XPFs SOL7 SOL8 XPF1 SOL9 SOL10...  
      SOL6...  
      V11max V12max V13max V14max V15max V16max V17max V18max  
      V19max V110max
```

```
C11=c(1); C12=c(2); C13=c(3); C14=c(4); C15=c(5); C16=c(6); C17=c(7);  
C18=c(8);  
C19=c(9); C110=c(10);
```

```
C21=c(11); C22=c(12); C23=c(13); C24=c(14); C25=c(15); C26=c(16); C27=c(17);  
C28=c(18);  
C29=c(19); C210=c(20);
```

```
V11 = c(21); V12 = c(22); V13 = c(23); V14 = c(24); V15 = c(25); V16 = c(26); V17  
= c(27);  
V18 = c(28); V19 = c(29); V110 = c(30);
```

```
V21 = 0.35/0.65*V11; V22 = 0.35/0.65*V12; V23 = 0.35/0.65*V13; V24 =  
0.35/0.65*V14; V25 = 0.35/0.65*V15; V26 = 0.35/0.65*V16; V27 = 0.35/0.65*V17;  
V28 = 0.35/0.65*V18; V29 = 0.35/0.65*V19; V210 = 0.35/0.65*V110;
```

```
A1 = c(31); A2 = c(32); A3 = c(33); A4 = c(34); A5 = c(35); A6 = c(36); A7 = c(37);  
A8 = c(38); A9 = c(39);  
A10 = c(40);
```

```
Csorb = c(41);
```

```
Toxic = kttox(C11);  
RMass = Mr(t);  
Fp = TOXFp(C11);  
mass = ERM(t);  
trans1 = Qtrans(t);  
trans2 = Qphl(t);  
ionex = CEF(t);
```

### % VOLUME CALCULATIONS (LIQUIDS)

```
k1 = 0.09;  
k2 = k1;  
k3 = k1;  
k4 = k1;  
k5 = 0.08;  
k6 = k5;  
k7 = k5;  
k8 = 0.07;
```

```
k9 = k8;
k10 = k8;
```

```
dV11dt = (1-V11/V11max)*V11*k1*(1-ktox(C11));
dV12dt = (1-V12/V12max)*V12*k2*(1-ktox(C11));
dV13dt = (1-V13/V13max)*V13*k3*(1-ktox(C11));
dV14dt = (1-V14/V14max)*V14*k4*(1-ktox(C11));
dV15dt = (1-V15/V15max)*V15*k5*(1-ktox(C11));
dV16dt = (1-V16/V16max)*V16*k6*(1-ktox(C11));
dV17dt = (1-V17/V17max)*V17*k7*(1-ktox(C11));
dV18dt = (1-V18/V18max)*V18*k8*(1-ktox(C11));
dV19dt = (1-V19/V19max)*V19*k9*(1-ktox(C11));
dV110dt = (1-V110/V110max)*V110*k10*(1-ktox(C11));
```

### % VOLUME CALCULATIONS (SOLIDS)

```
dV21dt = 0.35/0.65*dV11dt; dV22dt = 0.35/0.65*dV12dt; dV23dt =
0.35/0.7*dV13dt; dV24dt = 0.35/0.65*dV14dt;
dV25dt = 0.35/0.65*dV15dt; dV26dt = 0.35/0.65*dV16dt; dV27dt =
0.35/0.7*dV17dt; dV28dt = 0.35/0.65*dV18dt;
dV29dt = 0.35/0.65*dV19dt; dV210dt = 0.35/0.65*dV110dt;
```

```
dCsorbdt = (C12-(Csorb/Prsurf))*PR;
```

% q is a coefficient that defines what proportion of Qtrans ends up in the  
% root

```
q1 = 0.2;
q2 = 0.08;
q3 = 0.12;
q4 = 0.3;
q5 = 0.12;
q6 = 0.18;
```

### % root tissue

```
if C11 >= SOL1
    PRECIP1 = (C11-SOL1)*PRt*V11;
else
    PRECIP1 = ((C11-SOL1)/SOL1)*A1*PRt;
end
if A1 <= 0 & (C11-SOL1)< 0
    PRECIP1=0;
end
dC11dt = (UPT*TOXFp(C11)*C12*Mr(t)*ERM(t))/(V11*(Khs+C12)) +
C13*Qphl(t)/V11...
- C11*Qtrans(t)/V11 - PRECIP1/V11 - C11*dV11dt/V11;
dC21dt = PRECIP1/V21 - C21*dV21dt/V21;
dA1dt = PRECIP1;
```

% root surface

```
if C12 >= SOL2
    PRECIP2 = (C12-SOL2)*PRs*V12;
else
    PRECIP2 = ((C12-SOL2)/SOL2)*A2*PRs;
end
if A2 < 0 & (C12-SOL2)<0
    PRECIP2 = 0;
end
dC12dt = Css*Qtrans(t)/V12 + (Css-C12)*DR -
(UPT*TOXFp(C11)*C12*Mr(t)*ERM(t))/(V12*(Khs+C12))...
- (C12-(Csorb/Prsurf))*PR - PRECIP2/V12 - C12*dV12dt/V12;
dC22dt = (C12-(Csorb/Prsurf))*PR + PRECIP2/V22 - C22*dV22dt/V22;
dA2dt = PRECIP2;
```

%root phloem

```
if C13 >= SOL3
    PRECIP3 = (C13-SOL3)*PRphl*V13;
else
    PRECIP3 = ((C13-SOL3)/SOL3)*A3*PRphl;
end
if A3 < 0 & (C13-SOL3) < 0
    PRECIP3=0;
end
dC13dt = Qphl(t)*(C16-C13)/V13 + Qtrans(t)*XPFr*C14/V13 - PRECIP3/V13 -
C13*dV13dt/V13;
dC23dt = PRECIP3/V23 - C23*dV23dt/V23;
dA3dt = PRECIP3;
```

% root xylem

```
if C14 >= SOL4
    PRECIP4 = (C14-SOL4)*PRxyl*V14;
else
    PRECIP4 = ((C14-SOL4)/SOL4)*A4*PRxyl;
end
if A4 < 0 & (C14-SOL4)<0
    PRECIP4 = 0;
end
dC14dt = Qtrans(t)*(C11-C14)/V14 - Qtrans(t)*C14*CEF(t)/V14 - PRECIP4/V14 -
C14*dV14dt/V14;
dC24dt = Qtrans(t)*C14*CEF(t)/V24 + PRECIP4/V24 - C24*dV24dt/V24;
dA4dt = PRECIP4;
```

% steam tissue

```
if C15 >= SOL5
    PRECIP5 = (C15-SOL5)*PRt*V15;
```

```

else
    PRECIP5 = ((C15-SOL5)/SOL5)*A5*PRt;
end
if A5 < 0 & (C15-SOL5)<0
    PRECIP5 = 0;
end
dC15dt = C16*Qphl(t)/V15 + q1*Qtrans(t)*(C17-C15)/V15 - PRECIP5/V15 -
C15*dV15dt/V15;
dC25dt = PRECIP5/V25 - C25*dV25dt/V25;
dA5dt = PRECIP5;

% steam phloem

if C16 >= SOL6
    PRECIP6 = (C16-SOL6)*PRphl*V16;
else
    PRECIP6 = ((C16-SOL6)/SOL6)*A6*PRphl;
end
if A6 < 0 & (C16-SOL6)<0
    PRECIP6 = 0;
end
dC16dt = Qphl(t)*(C19-C16)/(V16) + q2*Qtrans(t)*XPFs*C17/(V16) -
PRECIP6/V16 - C16*dV16dt/V16;
dC26dt = PRECIP6/V26 - C26*dV26dt/V26;
dA6dt = PRECIP6;

% steam xylem

if C17 >= SOL7
    PRECIP7 = (C17-SOL7)*PRxyl*V17;
else
    PRECIP7 = ((C17-SOL7)/SOL7)*A7*PRxyl;
end
if A7 < 0 & (C17-SOL7)<0
    PRECIP7 = 0;
end
dC17dt = q3*Qtrans(t)*(C14-C17)/(V17) + (C15-C17)*DTR/(V17) -
q3*Qtrans(t)*C17*CEF(t)/(V17) - PRECIP7/V17 - C17*dV17dt/V17;
dC27dt = q3*Qtrans(t)*C17*CEF(t)/(V27) + PRECIP7/V27 - C27*dV27dt/V27;
dA7dt = PRECIP7;

% leaf tissue

if C18 >= SOL8
    PRECIP8 = (C18-SOL8)*PRt*V18;
else
    PRECIP8 = ((C18-SOL8)/SOL8)*A8*PRt;
end
if A8 < 0 & (C18-SOL8)<0

```

```

    PRECIP8 = 0;
end
dC18dt = q4*(C110-C18)*Qtrans(t)/V18 - PRECIP8/V18 - C18*dV18dt/V18;
dC28dt = PRECIP8/V28 - C28*dV28dt/V28;
dA8dt = PRECIP8;

% leaf phloem

    if C19 >= SOL9
        PRECIP9 = (C19-SOL9)*PRphl*V19;
    else
        PRECIP9 = ((C19-SOL9)/SOL9)*A9*PRphl;
    end
    if A9 < 0 & (C19-SOL9)<0
        PRECIP9 = 0;
    end
dC19dt = q5*Qtrans(t)*XPFl*C110/V19 - PRECIP9/V19 - C19*dV19dt/V19;
dC29dt = PRECIP9/V29 - C29*dV29dt/V29;
dA9dt = PRECIP9;

% leaf xylem

    if C110 >= SOL10
        PRECIP10 = (C110-SOL10)*PRxyl*V110;
    else
        PRECIP10 = ((C110-SOL10)/SOL10)*A10*PRxyl;
    end
    if A10 < 0 & (C110-SOL10)<0
        PRECIP10 = 0;
    end
dC110dt = q6*Qtrans(t)*(C17-C110)/(V110) - PRECIP10/V110 - C110*dV110dt/V110;
dC210dt = PRECIP10/V210 - C210*dV210dt/V210;
dA10dt = PRECIP10;

%array where the results are stored

dCdt = [dC11dt, dC12dt, dC13dt, dC14dt, dC15dt, dC16dt, dC17dt, dC18dt, dC19dt,
dC110dt, ...
dC21dt, dC22dt, dC23dt, dC24dt, dC25dt, dC26dt, dC27dt, dC28dt, dC29dt,
dC210dt, ...
dV11dt, dV12dt, dV13dt, dV14dt, dV15dt, dV16dt, dV17dt, dV18dt, dV19dt,
dV110dt, ...
dA1dt, dA2dt, dA3dt, dA4dt, dA5dt, dA6dt, dA7dt, dA8dt, dA9dt, dA10dt, ...
dCsorbdt]';

function Toxic = kttox(C11);
x=min(4000, max(0, C11));
Toxic_cal = -6.5104e-11*(x)^3 + 5.4687e-07*(x)^2 - 0.0010208*(x) + 0.5;

```

```
Toxic_min = 0;  
Toxic_max = 1;  
Toxic = min(Toxic_max, max(Toxic_min, Toxic_cal));  
% The above function describes the toxicity effect of lead on the growth of  
% the plant
```

```
function RMass = Mr(t);  
RMass = -7.1853e-024*t^3 + 3.8672e-021*t^2 + 0.0006*t + 7.3482e-018;  
% The above function describes dry root mass
```

```
function Fp = TOXFp(C11);  
x=min(4000, max(0, C11));  
Fp_cal = 6.5104e-011*(x)^3 - 5.4687e-007*(x)^2 + 0.0010208*(x) + 0.5;  
Fp_min = 0;  
Fp_max = 1;  
Fp = min(Fp_max, max(Fp_min, Fp_cal));  
% Toxicity factor which affects intake capability of the plant
```

```
function mass = ERM(t);  
mass = -3.3333e-007*t^3 + 5e-005*t^2 - 0.0066667*t + 1.0;  
% This function describes the effective root mass fraction
```

```
function trans1 = Qtrans(t);  
trans1 = -4e-07*t^3 + 5e-05*t^2 + 0.0031*t + 0.0049;  
% Transpiration stream
```

```
function trans2 = Qphl(t);  
trans2 = -1e-07*t^3 + 1e-05*t^2 + 0.0009*t + 0.0015;  
% Transpiration stream of phloem
```

```
function ionex = CEF(t);  
ionex = 6.6895e-007*t^3 - 0.0001358*t^2 + 0.0057038*t + 0.89;  
% Ion exchange behaviour of the xylem
```

#### XIV: Βιβλιογραφία

Βαρδαβάκης Μ., Ζουζούλας Δ. Μορφολογία και ανατομία των φυτών Εκδόσεις Ζήτη 2003

Γαλάτης Β. Φυσιολογία φυτών: από το μόριο στο περιβάλλον Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης 2003

Hopkins G.W., Hunner P.A. N., An introduction to plant physiology εκδόσεις John Wiley & sons 2004

Mohr H., Schopfer P., Plant physiology Springer 1995

Γεώργιος Καραμπουνιώτης φυσιολογία καταπονήσεων των φυτών εκδόσεις Εμβρυο 2003

Καρατάγλης Στέλιος φυσιολογία φυτών εκδόσεις art of text 1995

Ιωάννη Β. Τσέκου Φυσιολογία Φυτών Τομος 1 εκδόσεις Αδελφών Κυριακίδη α.ε 2003

Robert R. Brooks Plants that hyperaccumulate heavy metals Cab International 1998

Trapp S. and Matthies M., 1998 chemodynamics and environmental modeling, an introduction Springer

Cunningham S. D., Shann J. R., Crowley D. E. and Anderson T. A., 1996 phytoremediation of contaminated water and soil. In phytoremediation of soil and water contaminants E. L. Kruger, T. A. Anderson and J. R. Coats ACS symposium series

Schnoor, Jerrard L., 1996 Environmental modeling: Fate and transport of pollutants in water, air and soil a Wiley-Interscience publication

Καλογεράκης Νίκος, 2006 Σημειώσεις του μαθήματος 'Βιολογικές μεθόδοι εξυγίανσης περιβάλλοντος', Τμήμα μηχανικών περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης

Καλογεράκης Νίκος, 2003 Σημειώσεις του μαθήματος 'Τεχνικές βιοχημικών διεργασιών', Τμήμα μηχανικών περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης

Καρατζάς Γεώργιος, 2005 Σημειώσεις του μαθήματος 'Ροή υπογείων υδάτων και μεταφορά ρύπων', Τμήμα μηχανικών περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης

I. A. Πολυράκης , Συνήθειες διαφορικές εξισώσεις, Αθήνα, 1989

Gongbing Peng, Lance M. Leslie, Yaping Shao, Environmental modelling and prediction, Berlin, New York, Springer, 2002

Extensive research done online using [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com) and U.S E.P.A website, keywords: environmental modeling, Pb uptake, phytoextraction, phytoremediation, heavy metals, salinity, sodicity