

SECTIUNEA 1

RAPORTUL STIINTIFIC SI TEHNIC (RST)

FAZA DE EXECUTIE NR. V

CU TITLUL

Elaborarea produsului "Procedura de evaluare economica a retentiei poluantilor stabili si a software-ului open access de transfer al poluantilor, modelare matematica a circuitelor si efectelor poluantilor toxici stabili la nivel local

RST - raport stiintific si tehnic in extenso

PVAI - proces verbal de avizare interna

Cuprins

1. Obiective generale
2. Obiectivele fazei
3. Rezumatul fazei
4. Descrierea stiintifica si tehnica
5. Biblografie
6. Concluzii
7. Comunicari si Publicatii

1. OBIECTIVE GENERALE

In aceasta etapa au fost investigate si analizate o serie de modele matematice utilizate in evaluarea riscului de contaminare cu metale. Aceasta cercetare a fost necesara pentru realizarea obiectivului general

Elaborarea softului necesar de calcul al transferului poluantilor in lanturi trofice

2. OBIECTIVELE FAZEI

Acumularea metalelor in receptorii ecologici este un proces complex care depinde de o multitudine de factori de mediu extern si factori specifici. La ora actuala exista doua clase largi de modele matematice ale acumularii metalelor in bioreceptori, modele statistice si modele dinamice. Gradul de utilizare a celor doua tipuri de metode depinde de natura, calitatea si cantitatea de informatii aflate la dispozitia modelatorului.

Modelele statistice sunt folosite acolo unde exista putine informatii despre procesele bio- fizico- chimice implicate in transferul poluantilor dar exista un numar mare de date masurate direct in teren. Limitarile modelelor statistice sunt date de imposibilitatea folosirii lor la alte situatii decat cele in care au fost facute masuratorile si aduc foarte putine informatii despre natura proceselor implicate.

Modele dinamice, ecuatii diferentiale, ecuatii cu derivate partiale sau automate celulare, sunt obtinute pe baza cuantificarii proceselor bio- fizico- chimice. Sunt flexibile si iau in considerare variatiile specifice bioreceptorilor, conditiilor de mediu sau tipul metalului contaminant.

Tinand cont de cele spuse mai sus in aceasta etapa am urmarit

Stabilirea modelelor optime pentru modelarea matematica a circulatiei poluantilor toxici stabili in sisteme tampon.

3. REZUMATUL FAZEI

Studiul contaminării cu metale al sistemelor ecologice trebuie să trateze sistemul ecologic ca întreg deoarece speciile componente sunt expuse contaminării atât în mod direct cât și indirect prin consumul de hrană contaminată. Schema generală a circulației contaminantului este: mediu extern, sursa de hrană, consumator.

Modelele biodinamice cuantifică evoluția în timp a contaminantului la nivelul sistemului ecologic. Pentru aceasta sunt necesare date din teren care să permită cuantificarea transferului contaminantului de la mediu extern la individ precum și transferul între specii. Având în vedere că aceste măsurători sunt costisitoare, timp și bani, ar fi de dorit elaborarea unor modele care să fie fidele realității și în același timp să necesite cât mai puține măsurători.

Modelul biodinamic analizat constă dintr-un sistem liniar de ecuații diferențiale ordinare cu parametri. Natura diversă a interacțiilor din diferite sisteme este luată în considerare de structura sistemului de ecuații iar varietatea răspunsului organismelor este cuantificată de parametri. Din punct de vedere matematic au fost formulate două probleme cu aplicații practice. Prima problemă presupune că parametrii modelului sunt cunoscuți și se cere determinarea stărilor sistemului la momente de timp ulterioare unei stări cunoscute, problema directă. A doua problemă constă în determinarea unui set de parametri cunoscând un set de date referitoare la starea sistemului la diverse momente de timp, problema inversă. Pentru ambele probleme au fost întreprinse studii teoretice și au fost elaborate scheme de calcul.

Având în vedere că activitatea de cercetare în domeniul științelor mediului include și achiziția și prelucrarea datelor, în perioada derulării contractului am dezvoltat un set de instrumente statistice și grafice de explorare a datelor. Analiza și interpretarea datelor este extrem de importantă în special în domeniile în care se știe foarte puțin despre natura adevărată a interacțiilor dintre specii sau despre procesele implicate, descoperirea de cunoștințe prin analiza datelor.

4. DESCRIERE ȘTIINȚIFICĂ ȘI TEHNICĂ

1. Modele de bioacumulare. O etapă esențială în evaluarea riscului de contaminare este determinarea nivelului contaminantului în organism ca funcție de concentrația acestuia în mediul extern. Din mediul extern metalul se acumulează în organism prin contact direct, prin consumul de hrană contaminată sau combinat. Bioconcentrarea desemnează creșterea substanței în organism relativ la mediul extern iar bioacumularea ia în considerare și consumul de hrană. Factorul de bioconcentrare, BAC, reprezintă raportul dintre concentrația în organism și concentrația în mediul extern, factorul de bioacumulare, BAF, se calculează ca raport al concentrației în organism și concentrația în mediul extern luând în calcul și consumul de hrană ca expunere.

Acesti doi factori pot fi determinati experimental sau utilizand diverse modele matematice. Atunci cand se doreste o evaluare rapida se recomanda folosire unor metode de tip regresie care dau BCF sau BAF ca functie de caracteristicile mediului. Daca se doreste o reprezentare cat mai fidela a realitati atunci sunt necesare modele mai elaborate.

Modele de bioacumulare tip retea de hrana. In interiorul sistemelor ecologice relatiile de tip prada- pradator domina procesul de raspandire a contaminantilor. Distributia spatiala a contaminatilor, distributia spatiala a bioreceptorilor precum si sitemul individualizat de cautare a hranei fac ca modul de distributie a contaminantului in sistem se fie extrem de heterogen. Pentru a reflecta in mod fidel aceasta realitate este nevoie de modele matematice complexe cu un numar mare de necunoscute, de ecuatii si de parametri. Din pacate de cele mai multe ori se vedeste ca gradul mare de complexitate face ca modelul sa fie intratabil din punc de vedere al determinarii solutiilor, fie nu poate fi rezolvat, fie parametrii nu pot fi determinati sau starea initiala a sistemului nu poate fi determinata. Pentru a obtine un model tratatibil din punct de vedere al calcului dar inca relevant fizic suntem nevoiti sa focalizam pe o zona restransa a realitatii si sa simplificam restul. Marea diversitate de modele intalnita in literatura confirma aceasta maniera de abordare a modelarii.

Tabelul reprezinta o sinteza a cinci modele diferite. Din pacate ele nu pot fi comparate intrucat se adreseaza unor realitati diferite. Numitorul lor comun este ca transferul prada- pradator este modelat de un sisteme de ecuatii ODE.

	Descriere	Tip ecosistem	Referinta
Eco- SpaCE	<ul style="list-style-type: none"> - <i>spatial variabil, discretizat in celule;</i> - <i>lant trofic cu trei nivele;</i> - <i>relatii in sistem: individual dependent, combinat stocastic-determinist;</i> - <i>transferul in sitem: combinat ODE, regresie;</i> - <i>mecanismul de preluare - eliminare: cinetic de ordinul intai;</i> - <i>modelul in asamblu: combinat, automat celular- ODE;</i> 	terestru	[6]
MICHTOX	<ul style="list-style-type: none"> - <i>spatial dependent, discretizat in compartimente cu functi de transfer intre compartimente;</i> - <i>lant trofic cu trei nivele ;</i> - <i>relatii in sistem: omogene, determinist;</i> - <i>transferul in sistem: ODE;</i> - <i>mecanismul de preluare - eliminare: cinetic de ordinul intai;</i> - <i>modelul in asamblu: ODE;</i> 	acvactic	[4]
BASS	<ul style="list-style-type: none"> - <i>spatial omogen;</i> - <i>lant trofic cu trei nivele ;</i> - <i>relatii in sistem: omogene, determinist;</i> - <i>transferul in sistem: ODE;</i> - <i>mecanismul de preluare - eliminare: compartimentat, difuzie in compartiment, functii de transfer intre compartimente;</i> - <i>modelul in asamblu: ODE, PDE;</i> 	acvactic	[2]
BERISP	<ul style="list-style-type: none"> - <i>spatial variabil, discretizat in celule;</i> - <i>lant trofic cu trei nivele;</i> - <i>relatiil in sistem: individual dependent, combinat stocastic-determinist;</i> - <i>transferul in sitem: ODE, regresie;</i> 	terestru	

	- mecanismul de preluare - eliminare: <i>cinetic de ordinul intai;</i> - modelul in asamblu: <i>combinat, automat celular, ODE, regresie;</i>		
OBM	- <i>spatial omogen;</i> - <i>lant trofic cu doua nivele;</i> - <i>relatii in sistem: omogene, determinist;</i> - <i>transferul in sistem: ODE;</i> - <i>meccanismul de preluare - eliminare: difuzie la nivelul bronhiilor ;</i> - <i>modelul in asamblu: ODE, PDE;</i>	acvactic	[1]

Diferentele majore intre ele sunt date de modul in care sunt cuantificate distributia contaminantului in mediul extern si maniera in care pradatorii isi procura hrana. In modelul MICHTOX parametrii in ODE sunt omogeni dar concentratia in mediul extern este spatial variabila.

In modelele Eco-SpaCE si BERISP mediul extern este impartit in celule iar speciile din sistem se deplaseaza in teren dupa o strategie proprie. Frecventa intalnirilor prada- pradator depinde de distributia spatiala astfel incat gradul de contaminare este influentat si de traectoria in teren.

Modelele BASS si OBM pun accentul pe mecanismul de preluare din mediul extern si repartitia contaminantului in organism (BASS). Este important de remarcat la aceste modele ca ele includ ecuatii cu derivate partiale ca modele de difuzii a contaminantului in anumite tesuturi sau organe.

Avand in vedere structura combinata a modelului matematic al acestor modele este aproape imposibil de facut un studiu matematic in ce priveste existenta si unicitatea solutiilor, sensibilitatea in raport cu parametrii si starea initiala, etc. Validarea lor se poate face numai prin compararea cu datele din teren.

Dupa cum am remarcat mai sus modelarea transferului hrana- consumator prin ecuatii diferentiale este o practica comuna in studiul bioacumularii. Lucrul acesta ne- a facut sa acordam o atentie deosebita acestui model. De remarcat ca modelul nu este orientat catre un sistem ecologic anume si nu se adreseaza unui structuri anume de populatii.

ODE ca Model al Bioacumularii. Modelul se obtine din bilantul masei cu ipoteza ca transferul donator- receptor este functie numai de concentratia contaminatului in donator. Fiecare receptor din sistem elimina o parte din cantitatea preluata intr- o masura proportionala cu cantitatea din receptor. In ipoteza ca fluxurile de eliminare si preluare sunt liniare in raport cu concentratiile se obtine un sistem de ecuatii liniare cu un numar de parametri care quantifica interactiile din sistem. Modelul este unul generic, se poate aplica la nivelul unui individ sau la nivelul populatiilor din sistem. Modelul

poate fi folosit fie pentru determinarea starii sistemului, problema directa, fie pentru determinarea unur parmetriei cinetici cum ar fi ratele de eliminarea sau preluare cand se cunoaste nivelul concetratiei la diverse momente de timp, problema inversa.

Problema directa, detrminarea solutiei cand se cunosc parametrii si starea initiala, nu necesita eforturii foarte mari de rezolvare intrucat solutia sistemului poate fi determinata analitic, in cazul de fata solutia este o suma de functii exponentiale. Deasemenea starea de echilbru a sistemului poate fi usor determinata. Starea de echilbru permite determinarea factorilor de bioacumulare a tuturor speciilor din sistem.

Problema inversa, include doua etape: a) studiul identificabilitatii sistemului si b) calculul parametrilor.

Identificabilitatea sistemului. General vorbind in problema indentificabilitatii avem deaface cu un sistem de ecuatii care depind de un set de parametri necunoscuti si un set de variabile, numite observabile, legate de variabilele de stare printr- un set de ecuatii, algebrice in cazul nostru. Problema identificabilitatii consta in a stabili daca la parametrii diferiti corespund observabile diferite. Pentru sistemele de tip lant trophic am reusit sa aratam ca parametrii cinetici atasati pradatorilor de varf sunt unic de determinati de observarea acestora.

Calculul parametrilor. Pentru calculul parametrilor in problema inversa am utilizat metoda minimizari unei functii cost. Functia cost utilizata se defineste ca suma patratelor diferentelor dintre observabilele calculate si observabilele masurate la diferite momente de timp. Ca metode de minimizare am utilizat patru metode,

1. metoda Levenberg- Marquardt, LM,
2. o metoda stocastica, PSO, un acronim de la "particles swarm optimization",
3. o metoda hibrida, PSO plus LM
4. metoda excluziunii celulare, MEC, de localizare a tuturor punctelor critice dintr- un domeniu limitat.

Toate metodele necesita integrarea sistemului de ecuatii, analitic sau numeric. Pe langa aceasta metoda LM si MEC presupun calculul derivatelor functiei cost in raport cu parametrii. Desi pentru modelul lantului trofic solutia analitica poate fi calculata relativ rapid, indiferent de dimensiunea sistemului, in metoda LM am preferat calculul derivatelor utilizand integrarea numerica a sistemului care guverneaza derivatele solutiei in raport cu parametrii. MEC foloseste solutia analitica pentru calculul acestora. Metoda PSO utilizeaza numai functia cost, nu necesita calculul derivatelor.

In raport cu caracterul local sau global al punctului de minim furnizat metoda LM este o metoda de tip local, metoda PSO este o metoda de tip global iar MEC are un caracter local, localizarea punctelor critice dar poate fi extinsa la o metoda de tip global. In cazul metodei hibride este greu de spus daca metoda este de tip local sau global.

Validarea acestor metode este in curs, oricum o validare interna a fost facuta. Prin validare interna se intelege un procedeu prin care observabilele masurate provin din observabile calculate folosind un set de parametri cunoscuti urmand ca acestia sa fie redescoperiti pe baza metodei de calcul.

Detalii asupra metodelor de minimizare pot fi gasite in cele doua rapoarte tehnice anexate la raportul stiintific, *Parameter evaluation for a bioconcentration model using cellular exclusion method* si *Parameter Estimation of the ODE Model of Distribution of Heavy Metal in a Food Web*. Pentru calculul efectiv a fost elaborat un program in C, *PETCh*, cu surse libere. Algoritmul de calcul include metodele LM, PSO si hibrida.

2. Explorarea datelor. Achizitia de date este un capitol important in efortul de modelare a proceselor naturale. Cel mai adesea acestea sunt interpretate pe baza unor modele existente. Dar exista si situatii in care nu avem un model, modelul urmeaza a fi elaborat. Explorarea datelor se adreseaza acestei situatii. Am avut in vedere trei instrumente de analiza, analiza clasterelor, multiregresia liniara si metode grafice. Pentru fiecare din aceste metode am pus la punct programe de calcul si am elaborat documentatia si suportul teoretic aferent, *Exploratory data analysis tools*. Softurile sunt scrise in C cu surse libere,

5. BIBLIOGRAFIE

1. Dennis A. Apeti, Elijah Johnson and Larry Robinson, *A Model for Bioaccumulation of Metals in Crassostrea virginica from Apalachicola Bay, Florida*, American Journal of Environmental Sciences, 1 (3): 239- 248, 2005
2. Craig Barber, *Bioaccumulation and Aquatic System Simulator (BASS)*, EPA Report No. 600/R- 01/035, April 2001
3. A. Cormont, J.M. Baveco, N.W. van den Brink, *Effects of spatial foraging behaviour on risks of contaminants for wildlife*, Alterra- rapport 1369, Alterra, Wageningen, 2005
4. Douglas D. Endicott, William L. Richardson, Dean J. Kandt, 1992 *MICHTOX: A Mass Balance and Bioaccumulation Model for Toxic Chemicals in Lake Michigan*, raport tehnic.
5. Stelian Ion, *Parameter Estimation of the ODE Model of Distribution of Heavy Metal in a Food Web*, Raport tehnic.
6. Mark Loos, Ad M.J. Ragas, Rinus Plasmeijer, Aafke M. Schipper, A. Jan Hendriks, *Eco-SpaCE: An object-oriented, spatially explicit model to assess*

- the risk of multiple environmental stressors on terrestrial vertebrate populations*, Science of the Total Environment, 408 (2010), 3908-3917
7. Dorin Marinescu, Stefan Cruceanu, *Parameter evaluation for a bioconcentration model using cellular exclusion method*, raport tehnic http://www.imaro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/

6. CONCLUZII

Obiectivele asumate pentru aceasta faza au indeplinite integral si la termen. Lucrarile corespund clauzelor contractuale. Rezultatele obtinute in aceasta faza a facut obiectul patru comunicari stiintifice, a doua lucrari publicate si a trei lucrari stiintifice.

Perspective de dezvoltare: a) Studii de caz in estimare parametrilor, b) dezvoltarea unor metode de tip interval pentru metoda inversa, c) Exidenderea modelului liniar la cazuri de interactie neliniare. In special elaborarea unui model care sa ia in considerare capacitatea organismelor de a-si modifica ratele de preluare si eliminarea ca instrumente de adaptare.

7. COMUNICARI, PUBLICATII, SOFTURI

1. **Stelian Ion**, *Parameter Estimation of the ODE Model of Distribution of Metals in a Food Web*, ICAM7 - 7th International Conference on Applied
2. **Stelian Ion**, *Exploratory data analysis tools*, 8th Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problem, Constanta, Romania, Octombrie 2010
3. **Stefan Cruceanu** and **Dorin Marinescu**, *Cellular exclusion algorithm for parameter estimation with applications in biology models*, 8th Workshop on Mathematical Modelling of Environmental and Life Sciences Problem, Constanta, Romania, Octombrie 2010
4. **Stefan Cruceanu** and **Dorin Marinescu**, *Applications of cellular exclusion methods to locate solutions of nonlinear systems of equations*, CAIM 2010, Iași, Romania, 15- 17 Octombrie 2010
5. Liliana Vasiliu- Oromulu, Daniela Barbuceanu, and **Stelian Ion**, *The Ecological Study of Thrips Populations in a Southern Romanian Vineyard (Insecta: Thysanoptera)*, Acta entomologica serbica, vol. 14,nr. 1, pp. 1- -11, 2009. indexata ISI
6. Onete M., Paucă- Comănescu M., Bianu E., **Ion S.**, 2009, *Heavy metals content in soil and plants from central parks (Bucharest, Romania)*, in: Silaghi- Dumitrescu I, Gârban Z., Drăgan P. (Ed.), Proceedings of the Conference “Metal elements in environment, medicine and biology”,

- Tome IX, ISSN 1583- 4204, Cluj University Press, 58- 64
7. **Stelian Ion**, *Parameter Estimation of the ODE Model of Distribution of Metals in a Food Web*,
http://www.ima.ro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/rth_31043_01.pdf
 8. **Stelian Ion**, *Exploratory data analysis tools*,
http://www.ima.ro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/rth_31043_02.pdf
 9. Dorin Marinescu, Stefan Cruceanu, *Parameter evaluation for a bioconcentration model using cellular exclusion method*,
http://www.ima.ro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/rth_31043_03.pdf
 10. **Stelian Ion**, *ExDaT*, Pachet programe explorarea datelor,
www.ima.ro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/
 11. **Stelian Ion**, *PETCh*, Program estimare parametrilor cinetici in modele de tip lant trofic, www.ima.ro/PNII_programme/PECOTOX/publicatii/