

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΙΡΑΙΩΣ ΚΑΙ
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΤΜΗΜΑ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ &
ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

**ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ ΤΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ
& ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΤΟΥ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ**

με θέμα

**ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΕΠΙΠΤΩΣΕΩΝ ΣΤΗΝ ΑΝΘΡΩΠΙΝΗ
ΥΓΕΙΑ ΑΠΟ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΕΣ ΟΥΣΙΕΣ ΣΤΟ
ΕΛΑΦΟΣ ΚΑΙ ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΕΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΤΗΣ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ**

Υπό

ΜΑΚΡΗ Χ. ΓΕΩΡΓΙΟ

Επιβλέποντες

Καθηγητής **ΛΕΩΝΙΔΑΣ . ΚΑΜΑΡΙΝΟΠΟΥΛΟΣ**

Ερευνητής **ΙΩΑΝΝΗΣ Α. ΠΑΠΑΖΟΓΛΟΥ**

ΑΘΗΝΑ, ΝΟΕΜΒΡΙΟΣ 2004

*αφιερωμένη στην οικογένεια μου
για την ηθική υποστήριξή της*

ΔΗΛΩΣΗ

Η παρούσα διπλωματική εργασία είναι πρωτότυπη και εκπονήθηκε αποκλειστικά και μόνο για την απόκτηση του μεταπτυχιακού τίτλου «Οργάνωση και Διοίκηση Βιομηχανικών Συστημάτων» με ειδίκευση «Συστήματα Διαχείρισης της Ενέργειας και Προστασίας του Περιβάλλοντος».

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη της ανάλυσης επικινδυνότητας τοξικών ουσιών για τον άνθρωπο και η ανάπτυξη συστάσεων σχετικά με μια βέλτιστη προσέγγιση αξιολόγησης του κινδύνου που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να καθιερώσει ένα πρακτικό έγγραφο καθοδήγησης αξιολόγησης του κινδύνου.

Για τον σκοπό αυτό πραγματοποιήθηκε καταρχήν βιβλιογραφική ανασκόπηση, η οποία αφορά την εξέταση των γενικών πληροφοριών των διεθνών μοντέλων που σχετίζονται με την έκθεση της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος ερευνώντας τις διαφορές και τις ομοιότητες των αντίστοιχων αρχών που τα διέπουν. Κατόπιν, γίνεται αξιολόγηση των διαφορών μεταξύ των τεσσάρων πληρέστερων μοντέλων για κάθε οδό έκθεσης (τρεις σημαντικοί οδοί έκθεσης) με βάση τις διαφορές των εννοιών που διέπουν τα μοντέλα και των τιμών των παραμέτρων των δεδομένων εισόδου με σκοπό την εύρεση του πληρέστερου μοντέλου έκθεσης της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος.

Στη συνέχεια, με την βοήθεια του παραπάνω μοντέλου, πραγματοποιείται μια μελέτη περίπτωσης για το παλαιό αεροδρόμιο του Ελληνικού. Για δοθείσες τιμές συγκέντρωσης 44 πιθανά επικίνδυνων μολυσματικών ουσιών (ανόργανα στοιχεία, πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες, αρωματικές ενώσεις βενζόλιο-τολουόλιο-ξυλόλιο (BTX)) υπολογίζεται η ημερήσια δόση σε 88 σημεία δειγματοληψίας για δύο είδη αποδεκτών, το παιδί και τον ενήλικα. Κατόπιν υπολογίζεται το πηλίκο επικινδυνότητας κάθε μιας από τις προαναφερθείσες ουσίες σε κάθε σημείο και στη συνέχεια ο δείκτης επικινδυνότητας όλων των ουσιών για κάθε σημείο δειγματοληψίας και κατασκευάζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα.

Τέλος, πραγματοποιείται ανάλυση των αποτελεσμάτων και σύγκριση για τα διαφορετικά είδη μολυσματικών μέσων (χώμα, άσφαλτο), αποδεκτών (παιδί, ενήλικας) και βιβλιογραφικών πηγών (EPA, RIVM) και εξάγονται συμπεράσματα, ενώ παράλληλα υποβάλλονται προτάσεις για μελλοντική έρευνα με σκοπό τη βελτιστοποίηση της συγκεκριμένης ανάλυσης επικινδυνότητας.

Τα αποτελέσματα της εργασίας αυτής είναι πιθανό να είναι σημαντικά στην αξιολόγηση της λήψης αποφάσεων που χρησιμοποιεί πρότυπα εδαφολογικής

ποιότητας βασισμένα στους υπολογισμούς της ανθρώπινης έκθεσης και στον προσδιορισμό του τρόπου βελτίωσης των εννοιών και των παραμέτρων εισαγωγής για τα υπάρχοντα μοντέλα έκθεσης. Τα αποτελέσματά της θα μπορούσαν να έχουν βαθιά επιρροή στην μελλοντική έρευνα και στην ανάπτυξη σε αυτήν την περιοχή και η ίδια η εργασία μπορεί να είναι ένας πρόδρομος για μια μεγαλύτερη πρόταση έρευνας και ανάπτυξης.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

Δήλωση.....	ii
Περίληψη.....	iii
Πίνακας περιεχομένων.....	v
Κατάλογος γραφημάτων.....	xi
Κατάλογος πινάκων.....	xiii

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 Γενικά.....	1
1.2 Ιστορική αναδρομή.....	2
1.3 Αξιολόγηση της επικινδυνότητας.....	4
1.3.1 Στάδια της αξιολόγησης.....	5
1.3.1.1 Προσδιορισμός του κινδύνου.....	6
1.3.1.2 Αξιολόγηση της έκθεσης.....	7
1.3.1.3 Αξιολόγηση της τοξικότητας.....	8
1.3.1.4 Χαρακτηρισμός της επικινδυνότητας.....	8
1.3.2 Διαχείριση του κινδύνου.....	9
1.4 Οι τιμές επέμβασης.....	11
1.5 Μέγιστος επιτρεπόμενος κίνδυνος για τον άνθρωπο.....	11
1.6 Σκοπός της εργασίας.....	13
1.7 Δομή της εργασίας.....	13

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΔΙΕΘΝΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΣΧΕΤΙΚΑ ΜΕ ΤΗΝ ΕΚΘΕΣΗ ΤΟΥ ΑΝΘΡΩΠΟΥ ΣΕ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΕΣ ΟΥΣΙΕΣ ΑΠΟ ΤΟ ΕΔΑΦΟΣ

2.1 Εισαγωγή.....	15
2.2 Βασικές αρχές των διεθνών μοντέλων.....	15
2.2.1 Εξαρτήσεις μεταξύ των μοντέλων και των εφαρμογών τους.....	17
2.2.2 Σχεδιασμός των μοντέλων.....	17
2.2.3 Δυνατότητες των μοντέλων.....	22
2.2.4 Χρήση των μοντέλων.....	22
2.3 Επιλογή μοντέλων για λεπτομερέστερη σύγκριση.....	27

2.4	Σύντομη περιγραφή των υπό εξέταση μοντέλων.....	27
2.4.1	CLEA.....	27
2.4.2	UMS.....	29
2.4.3	CalTOX.....	32
2.4.4	CSOIL.....	37
2.5	Κατάποση μολυσμένων σωματιδίων από το έδαφος.....	39
2.6	Εισπνοή ατμών μολυσματικών παραγόντων σε εσωτερικό χώρο.....	47
2.7	Έκθεση σε μολυσματικούς παράγοντες μέσω κατανάλωσης καρπών.....	65
2.8	Συμπεράσματα.....	81

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ

3.1	Εισαγωγή.....	87
3.2	Επισκόπηση του μοντέλου CalTOX.....	88
3.2.1	Στόχοι, ικανότητες και περιορισμοί.....	89
3.2.1.1	Στόχοι του μοντέλου.....	90
3.2.1.2	Κατηγορίες χημικών ουσιών.....	91
3.2.1.3	Κρίσιμες ευαισθησίες και αβεβαιότητες.....	92
3.2.1.4	Περιπτώσεις μη-χρήσης του μοντέλου.....	93
3.2.2	Δομή του μοντέλου.....	93
3.2.3	Κέρδη και Απώλειες.....	95
3.2.4	Πηγή μολυσματικών ουσιών.....	98
3.2.5	Τα επτά τμήματα του μοντέλου.....	98
3.2.5.1	Το κατώτερο τμήμα της ατμόσφαιρας ή το τμήμα του αέρα (a).....	98
3.2.5.2	Το τμήμα των φυτών (p).....	100
3.2.5.3	Τα τρία τμήματα του εδάφους.....	102
	Το τμήμα του υπέργειου-επιφανειακού εδάφους (g).....	103
	Το τμήμα της ριζώδους-περιοχής του εδάφους (s).....	104
	Το τμήμα του υπεδάφους (v).....	104
3.2.5.4	Το τμήμα του επιφανειακού νερού (w).....	104
3.2.5.5	Το τμήμα του ιζήματος (d).....	106
3.2.6	Μόλυνση του υπόγειου νερού.....	108
3.3	Συντελεστές κατανομής και ικανότητες fugacity.....	109
3.3.1	Μοντέλα fugacity.....	109

3.3.2	Ικανότητες fugacity στο καθαρό αέρα, στο καθαρό νερό, στα σωματίδια και στα λιπίδια.....	111
3.3.2.1	Σωματίδια του εδάφους και του ιζήματος.....	112
3.3.2.2	Σωματίδια στον αέρα.....	113
3.3.2.3	Λιπίδια.....	116
3.3.3	Τροποποιήσεις στις ικανότητες fugacity για ανόργανες και ιοντικές-οργανικές χημικές ουσίες.....	117
3.3.4	Φυσική σύνθεση των μοντέλων των τμημάτων και των ικανοτήτων fugacity...	118
3.3.4.1	Το τμήμα του αέρα.....	118
3.3.4.2	Το τμήμα των φυτών.....	118
3.3.4.3	Τα τμήματα του εδάφους.....	121
3.3.4.4	Το τμήμα του επιφανειακού νερού.....	121
3.3.4.5	Το τμήμα του ιζήματος.....	122
3.4	Διαδικασίες μεταφοράς στο μοντέλο CalTOX.....	123
3.4.1	Συντελεστές μοριακής διάχυσης.....	123
3.4.1.1	Διάχυση στον αέρα.....	123
3.4.1.2	Διάχυση στο νερό.....	124
3.4.1.3	Διάχυση σε ελικοειδή, πολυφασικά συστήματα, όπως το έδαφος και τα ιζήματα.....	125
3.4.2	Διάχυση και μοντέλα οριακού στρώματος.....	126
3.4.2.1	Το μοντέλο διάχυσης διπλής-αντίστασης στα όρια του τμήματος.....	129
3.4.3	Συντελεστές διάχυσης μεταφοράς μάζας στις διεπιφάνειες των τμημάτων.....	132
3.4.3.1	Μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στην διεπιφάνεια του αέρα με το επιφανειακό νερό.....	132
3.4.3.2	Μεταφορά μάζας στον αέρα μέσω διάχυσης στην διεπιφάνεια του αέρα με το επιφανειακό έδαφος.....	134
3.4.3.3	Μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στα στρώματα του επιφανειακού εδάφους και της ριζώδους-ζώνης του εδάφους.....	135
3.4.3.4	Μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στην διεπιφάνεια του επιφανειακού νερού με το ίζημα.....	137
3.4.4	Μεταφορά μάζας μέσω μετακίνησης στο νερό και στα στερεά.....	139
3.5	Διαδικασίες μετασχηματισμού στο μοντέλο CalTOX.....	141
3.5.1	Φωτόλυση.....	142

3.5.2	Υδρόλυση.....	142
3.5.3	Οξειδωση και Αναγωγή.....	143
3.5.4	Μικροβιακός μετασχηματισμός.....	143
3.6	Δεδομένα εισαγωγής και απαραίτητα στοιχεία του μοντέλου.....	144
3.6.1	Χημικά και Φυσικά στοιχεία.....	145
3.6.1.1	Μοριακό βάρος.....	145
3.6.1.2	Συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού, K_{ow}	145
3.6.1.3	Σημείο τήξης.....	147
3.6.1.4	Πίεση ατμών.....	147
3.6.1.5	Διαλυτότητα στο νερό.....	147
3.6.1.6	Σταθερά Henry.....	148
3.6.1.7	Συντελεστές διάχυσης στον αέρα και στο νερό.....	148
3.6.1.8	Συντελεστής κατανομής οργανικού άνθρακα, K_{oc} , και συντελεστής απορρόφησης, K_D	149
3.6.1.9	Ρυθμοί μετασχηματισμού συγκεκριμένων μέσων.....	149
3.6.2	Στοιχεία περιοχής.....	150
3.7	Ρυθμός μεταφοράς, ρυθμός απωλειών και εξισώσεις κέρδους-απωλειών.....	152
3.7.1	Το τμήμα της χαμηλότερης ατμόσφαιρας ή του αέρα.....	154
3.7.2	Το τμήμα των φυτών.....	157
3.7.3	Το τμήμα του επιφανειακού εδάφους.....	158
3.7.4	Το τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους.....	159
3.7.5	Το τμήμα του υπεδάφους.....	160
3.7.6	Το τμήμα του επιφανειακού νερού.....	161
3.7.7	Το τμήμα του ιζήματος.....	162
3.7.8	Το τμήμα των υπόγειων υδάτων.....	163
3.7.9	Χρονικά εξαρτημένη λύση για το περιεχόμενο των τμημάτων.....	163

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΟΔΩΝ

4.1	Εισαγωγή.....	167
4.2	Το βασικό μοντέλο έκθεσης.....	168
4.2.1	Η εξίσωση της έκθεσης όπως περιγράφεται στο RAGS/HHEM.....	168
4.2.2	Το μοντέλο έκθεσης CalTOX.....	169
4.2.3	Οδοί έκθεσης.....	172

4.2.4 Προϋποθέσεις για το μοντέλο έκθεσης CalTOX.....	173
4.3 Πολλαπλοί οδοί έκθεσης και συνολική λήψη.....	175
4.3.1 Η οδός της κατάποσης.....	175
4.3.1.1 Κατάποση νερού ύδρευσης.....	176
4.3.1.2 Κατάποση εδάφους.....	177
4.3.1.3 Κατανάλωση μολυσμένων σπιτικών καλλιεργήσιμων φρούτων, λαχανικών ή δημητριακών.....	178
4.3.1.4 Κατανάλωση μολυσμένων ψαριών.....	187
4.3.1.5 Κατανάλωση μολυσμένου κρέατος, γάλακτος και αυγών.....	188
4.3.2 Η οδός της εισπνοής.....	202
4.3.2.1 Εισπνοή υπαίθριου αέρα.....	205
4.3.2.2 Εισπνοή εσωτερικού αέρα, αποκλείοντας τον αέρα των λουτρών.....	207
4.3.2.3 Εισπνοή του αέρα του μπάνιου.....	212
4.3.3 Επαφή μέσω του δέρματος.....	214
4.3.3.1 Λήψη μέσω του δέρματος χημικής ουσίας κατά την διάρκεια μπάνιου ή κολύμβησης με μολυσμένο νερό.....	215
4.3.3.2 Λήψη μέσω του δέρματος από μολυσμένο έδαφος.....	221
4.4 Συνολική λήψη από την έκθεση.....	224
4.5 Χαρακτηρισμός κινδύνου.....	226
4.5.1 Μετατροπή των λήψεων σε κίνδυνο και επικινδυνότητα.....	226
4.5.2 Αθροίζοντας τους κινδύνους και τις επικινδυνότητες.....	228
4.6 Επίπεδα επανόρθωσης του εδάφους.....	229
4.6.1 Υπολογισμός των προκαταρκτικών στόχων επανόρθωσης στην εκτίμηση του κινδύνου για το SUPERFUND/HUMAN HEALTH EVALUATION MANUAL (PART B).....	230
4.6.2 Υπολογισμός των επιπέδων επανόρθωσης του εδάφους στο μοντέλο έκθεσης CalTOX.....	231

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ ΡΥΠΩΝ ΕΔΑΦΟΥΣ

ΣΤΟ ΠΑΛΑΙΟ ΑΕΡΟΔΡΟΜΙΟ ΤΟΥ ΕΛΛΗΝΙΚΟΥ

5.1 Εισαγωγή.....	233
5.2 Μετρήσεις.....	234
5.2.1 Δειγματοληψία.....	235

5.3 Μεθοδολογία υπολογισμού ημερήσιας δόσης στον άνθρωπο.....	235
5.3.1 Υπολογιστικό μοντέλο CalTOX.....	236
5.3.1.1 Δομή του μοντέλου.....	237
5.3.1.2 Οδοί έκθεσης του ανθρώπου στους ρύπους του εδάφους.....	239
5.4 Όρια επικινδυνότητας για τους ανιχνευθέντες ρύπους.....	241
5.4.1 Όρια RIVM Ολλανδίας.....	241
5.4.1.1 Όρια για τοξικές επιδράσεις της Γαστρεντερικής και Δερματικής οδού	242
5.4.1.2 Όρια για τοξικές επιδράσεις δια της Αναπνευστικής οδού.....	242
5.4.2 Όρια της Environmental Protection Agency (EPA) Η.Π.Α.....	242
5.4.3 Εκτίμηση συνεπειών συγκεκριμένων δόσεων.....	242
5.4.3.1 Εκτίμηση συνεπειών κατά RIVM.....	243
5.4.3.2 Εκτίμηση συνεπειών κατά EPA.....	244
5.5 Σημειακή Ανάλυση Επικινδυνότητας.....	257
5.5.1 Υπολογισμοί στις χωμάτινες επιφάνειες.....	258
5.5.1.1 Ανόργανα στοιχεία.....	265
5.5.1.2 Πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAH).....	265
5.5.1.3 Αρωματικές ενώσεις ΒΤΧ.....	268
5.5.2 Υπολογισμοί στις επιφάνειες με άσφαλο ή σκυρόδεμα.....	268
5.5.2.1 Ανόργανα στοιχεία.....	275
5.5.2.2 Πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAH).....	275
5.5.2.3 Αρωματικές ενώσεις ΒΤΧ.....	275

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

6.1 Συμπεράσματα.....	276
6.2 Προτάσεις για μελλοντική εργασία.....	279
Βιβλιογραφία.....	280
Παράρτημα Α: Ερωτηματολόγια σχετικά με τις βασικές αρχές που διέπουν τα διεθνή μοντέλα έκθεσης της ανθρώπινης υγείας.....	293
Παράρτημα Β: Μετρήσεις.....	319
Παράρτημα Γ: Το φύλλο εργασίας του μοντέλου CalTOX.....	335

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΓΡΑΦΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1.1:	Διάγραμμα ροής των διαδικασιών αξιολόγησης της επικινδυνότητας	5
Σχήμα 1.2:	Στάδια αξιολόγησης της επικινδυνότητας.....	6
Σχήμα 1.3:	Διάγραμμα ροής των διαδικασιών διαχείρισης του κινδύνου.....	10
Σχήμα 2.1:	Γραφική απεικόνιση των οκτώ περιβαλλοντικών τμημάτων του CalTOX.....	34
Σχήμα 2.2:	Σχηματικό διάγραμμα του χωρισμένου σε τμήματα σπιτιού που χρησιμοποιείται στο CLEA.....	49
Σχήμα 2.3:	Ροές μεταφοράς των πτητικών ενώσεων από το έδαφος/υπόγεια νερά στον εσωτερικό και υπαίθριο χώρο.....	58
Σχήμα 3.1:	Απεικόνιση των διαδικασιών ανταλλαγής μάζας που μοντελοποιούνται στο περιβαλλοντικό μοντέλο μεταφορών και μετασχηματισμού των επτά-τμημάτων του CalTOX.....	94
Σχήμα 3.2:	Απεικόνιση της εξισορρόπησης των κερδών και των απωλειών στα περιβαλλοντικά μοντέλα μεταφορών και μετασχηματισμού, όπως το CalTOX.....	96
Σχήμα 3.3:	Η έννοια του στάσιμου οριακού στρώματος έναντι του πραγματικού πάχους του οριακού στρώματος στην μετάβαση μεταξύ της συγκέντρωσης του μολυσματικού παράγοντα στην επιφάνεια του εδάφους ή του νερού και της συγκέντρωσης του αέρα.....	127
Σχήμα 3.4:	Σχηματική παρουσίαση της μεταφοράς της μάζας μεταξύ δύο οριακών στρωμάτων στην διεπιφάνεια ανάμεσα στα τμήματα του αέρα και του νερού.....	151
Σχήμα 5.1:	Σχηματική δομή του φύλλου εργασίας του μοντέλου CalTOX.....	238
Διάγραμμα 5.1:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων - EPA.....	259
Διάγραμμα 5.2:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων - RIVM.....	260
Διάγραμμα 5.3:	Τοξικό φορτίο PAH - EPA.....	261
Διάγραμμα 5.4:	Τοξικό φορτίο PAH - RIVM.....	262
Διάγραμμα 5.5:	Τοξικό φορτίο BTX - EPA.....	263
Διάγραμμα 5.6:	Τοξικό φορτίο BTX - RIVM.....	264
Διάγραμμα 5.7:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων/τοξικό φορτίο σημείου ελέγχου - EPA.....	266

Διάγραμμα 5.8:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων/τοξικό φορτίο σημείου ελέγχου - RIVM.....	267
Διάγραμμα 5.9:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων - EPA.....	269
Διάγραμμα 5.10:	Τοξικό φορτίο Ανόργανων Στοιχείων - RIVM.....	270
Διάγραμμα 5.11:	Τοξικό φορτίο PAH - EPA.....	271
Διάγραμμα 5.12:	Τοξικό φορτίο PAH - RIVM.....	272
Διάγραμμα 5.13:	Τοξικό φορτίο BTX - EPA.....	273
Διάγραμμα 5.14:	Τοξικό φορτίο BTX - RIVM.....	274

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 2.1:	Σύνοψη των διαθέσιμων διεθνών μοντέλων έκθεσης.....	16
Πίνακας 2.2:	Εξάρτηση μεταξύ των μοντέλων και μεταξύ των προεπιλεγμένων παραμέτρων εισαγωγής δεδομένων.....	18
Πίνακας 2.3:	Πληροφορίες σχετικά με τον σχεδιασμό των μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας.....	19
Πίνακας 2.4:	Δυνατότητες των διεθνών μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας...	23
Πίνακας 2.5:	Χρήσεις των διεθνών μοντέλων έκθεσης του ανθρώπου σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος.....	25
Πίνακας 2.6:	Οι ομάδες έκθεσης και οι κατηγορίες της ηλικίας στο μοντέλο UMS...	31
Πίνακας 2.7:	Ρυθμός κατάποσης χόματος στο CLEA.....	40
Πίνακας 2.8:	Μέση ημερήσια κατάποση χόματος.....	42
Πίνακας 2.9:	Ο ημερήσιος ρυθμός κατάποσης χόματος που χρησιμοποιείται στο UMS.....	43
Πίνακας 2.10:	Σύνοψη των τιμών για κατάποση χόματος.....	44
Πίνακας 2.11:	Ρυθμός κατάποσης χόματος και σύγκριση της χρήσης εκούσιας κατάποσης χόματος από τα μοντέλα.....	46
Πίνακας 2.12:	Εισπνεόμενοι όγκοι αέρα που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CLEA...	51
Πίνακας 2.13:	Μέσοι ημερήσιοι ρυθμοί λήψης μέσω εισπνοής για οικιστικό σενάριο.	54
Πίνακας 2.14:	Σύνοψη προτεινόμενων τιμών για εισπνοή για μακροχρόνια έκθεση....	56
Πίνακας 2.15:	Βασικές αρχές που χρησιμοποιεί το κάθε μοντέλο.....	63
Πίνακας 2.16:	Ρυθμοί αναπνοής που χρησιμοποιούνται από τα υπό σύγκριση μοντέλα.....	64
Πίνακας 2.17:	Ετήσιος ρυθμός κατανάλωσης φαγητού (fresh weight) στο Ηνωμένο Βασίλειο.....	68
Πίνακας 2.18:	Ρυθμός λήψης (freshweight) για καρπούς και φρούτα για το σενάριο “οικιστικό με κήπο”.....	72
Πίνακας 2.19:	Ρυθμοί λήψης καρπών και φρούτων (freshweight) για σπιτικούς καλλιεργήσιμους καρπούς.....	75
Πίνακας 2.20:	Ρυθμοί λήψης φρέσκου και ξηρού βάρους για καρπούς από την ρίζα των φυτών και για καρπούς από τα φύλλα των φυτών που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CSOIL.....	77

Πίνακας 2.21:	Προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται από τα διαφορετικά μοντέλα για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στους καρπούς.....	79
Πίνακας 2.22:	Ρυθμοί λήψης φρέσκου βάρους καρπών από την ρίζα και τα φύλλα.....	80
Πίνακας 2.23:	Παράγοντας μεταξύ των ρυθμών λήψης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών και των συνολικών ρυθμών λήψης καρπών της ρίζας και των φύλλων.....	81
Πίνακας 2.24:	Οι διαθέσιμες οδοί για τα διαφορετικά μοντέλα έκθεσης.....	82
Πίνακας 3.1:	Περίληψη των διαδικασιών από τις οποίες οι μολυσματικοί παράγοντες ανταλλάσσονται και χάνονται μεταξύ των επτά τμημάτων του CALTOX.....	97
Πίνακας 3.2:	Οι ροές μετακίνησης ή μη-διάχυσης που χρησιμοποιούνται για μεταφορά μεταξύ των μέσων στο μοντέλο CALTOX.....	140
Πίνακας 3.3:	Ο κατάλογος των χημικών και φυσικών ιδιοτήτων που χρησιμοποιούνται για να πραγματοποιηθεί η περιβαλλοντική ανάλυση μεταφοράς και μετασχηματισμού στο CALTOX.....	146
Πίνακας 3.4:	Ο κατάλογος των ιδιοτήτων περιοχής που χρησιμοποιούνται για την πραγματοποίηση περιβαλλοντικών αναλύσεων μεταφοράς και μετασχηματισμού για τις περιοχές της Ελλάδας.....	151
Πίνακας 4.1:	Πίνακας των οδών έκθεσης που συνδέονται με τα περιβαλλοντικά μέσα, τα σενάρια έκθεσης και τις οδούς έκθεσης.....	174
Πίνακας 5.1:	Πίνακας δειγματοληψίας του παλαιού αεροδρομίου του Ελληνικού.....	236
Πίνακας 5.2:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Γαστρεντερικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.....	245
Πίνακας 5.3:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.....	246
Πίνακας 5.4:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Γαστρεντερικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.....	247
Πίνακας 5.5:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.....	249
Πίνακας 5.6:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Γαστρεντερικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.....	251

Πίνακας 5.7:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.....	252
Πίνακας 5.8:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Γαστρεντερικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.....	253
Πίνακας 5.9:	Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.....	255

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 ΓΕΝΙΚΑ

Οι κίνδυνοι για τους ανθρώπους ως συνέπεια των εκθέσεων σε χημικές ουσίες είναι ένα σύνθετο ζήτημα με παγκόσμιες επιπτώσεις, ειδικά στις σύγχρονες κοινωνίες μας. Η αποτελεσματική διαχείριση της ανθρώπινης έκθεσης σε ποικίλες χημικές ουσίες παρούσες στους διάφορους τομείς της κοινωνίας έχει γίνει πράγματι ένα πολύ σημαντικό ζήτημα της δημόσιας υγείας και η αξιολόγηση του κινδύνου υπόσχεται έναν συστηματικό τρόπο για την ανάπτυξη κατάλληλων στρατηγικών με σκοπό την παροχή βοήθειας στην λήψη αποφάσεων σχετικά με την διαχείριση των κινδύνων της δημόσιας υγείας. Η αξιολόγηση του κινδύνου χρησιμεύει γενικά ως ένα εργαλείο που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να οργανώσει, να συνθέσει και να συντάξει τις επιστημονικές πληροφορίες προκειμένου να βοηθήσει στον προσδιορισμό των υπαρχόντων επικίνδυνων καταστάσεων ή των προβλημάτων, στην πρόβλεψη των πιθανών προβλημάτων, στην καθιέρωση των προτεραιοτήτων και στην παροχή μιας βάσης για τους ρυθμιστικούς ελέγχους και/ή τις διορθωτικές ενέργειες.

Στην πραγματικότητα, με τον έλεγχο και τον περιορισμό των περισσότερων μολυσματικών συνθηκών και ασθενειών της προηγούμενης χιλιετίας να έχει επιτευχθεί στις περισσότερες αναπτυγμένες χώρες και με την επακόλουθη αύξηση στις προσδοκίες της ζωής, περισσότερη προσοχή φαίνεται να μετατοπίζεται στα εκφυλιστικά προβλήματα υγείας. Πολλές από τις εκφυλιστικές συνθήκες υγείας έχουν συνδεθεί με χιλιάδες χημικές ουσίες που αντιμετωπίζονται τακτικά στην ανθρώπινη διαβίωση και στο επαγγελματικό περιβάλλον. Είναι σημαντικό, επομένως, οι αξιολογήσεις του κινδύνου της ανθρώπινης υγείας να πραγματοποιούνται σε μια συνεχή βάση, προκειμένου να καθοριστούν οι πιθανές επιδράσεις των χημικών ουσιών στην δημόσια υγεία.

1.2 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ

Οι χημικές ουσίες είναι ενσωματωμένες σε όλα τα τμήματα της τεχνητής κοινωνίας μας. Αντιταγμένη στα πολλά (οικονομικά) οφέλη, υπάρχει η συνεχής ενημέρωση ότι οι χημικές ουσίες μπορούν να θέσουν κινδύνους για το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία. Η αξιολόγηση του κινδύνου και η διαχείριση του κινδύνου απαιτούνται για να ελέγξουν αυτούς τους πιθανούς κινδύνους των χημικών ουσιών για το άτομο και το περιβάλλον. Αυτό ισχύει ειδικά για τις αποκαλούμενες "υπάρχουσες" χημικές ουσίες, π.χ. εκείνες οι χημικές ουσίες που ήταν ήδη στην αγορά την περίοδο πριν από την νομική υποβολή ενός βασικού σχεδιαγράμματος των πιθανών κινδύνων κ.λ.π., από μια χημική ουσία (σύστημα ανακοίνωσης). Σε αντίθεση με τις "νέες" χημικές ουσίες, οι "υπάρχουσες" χημικές ουσίες δεν πέρασαν από έλεγχο για να φιλτραριστούν όσο το δυνατόν περισσότερο οι πιθανές επικίνδυνες ουσίες.

Ανησυχία σχετικά με τους πιθανούς κινδύνους των χημικών ουσιών και ειδικότερα των "υπαρχουσών" χημικών ουσιών ήταν ήδη πολιτική προτεραιότητα προς το τέλος της δεκαετίας του '80. Το Συμβούλιο των Ευρωπαϊκών Κοινοτήτων, στην έγκριση του τέταρτου προγράμματος κοινοτικής δράσης για το περιβάλλον (1987-1992), δήλωσε ότι ένας από τους τομείς προτεραιότητας ήταν η αξιολόγηση των κινδύνων για το περιβάλλον και την ανθρώπινη υγεία που τίθενται από τις χημικές ουσίες. Αυτό το πρόγραμμα δράσης υπογράμμισε την ανάγκη για ένα νομοθετικό όργανο, το οποίο θα παρείχε μια περιεκτική δομή για την αξιολόγηση των κινδύνων που τίθενται από τις υπάρχουσες χημικές ουσίες. Ειδικότερα, το πρόγραμμα δράσης δήλωσε ότι ένα τέτοιο νομοθετικό όργανο "θα καθιερώσει μια διαδικασία για την ανάπτυξη ενός καταλόγου προτεραιότητας των χημικών ουσιών άμεσης προσοχής, καθώς επίσης και τα μέσα για την συλλογή πληροφοριών, πραγματοποίησης των απαραίτητων δοκιμών και αξιολόγησης των κινδύνων για τους ανθρώπους και το περιβάλλον". Συνεπώς, η Ευρωπαϊκή Επιτροπή πρότεινε μια σειρά νομικών οργάνων, τα οποία στόχευαν στην επίτευξη των στόχων που τέθηκαν στο πρόγραμμα δράσης. Ένα από αυτά τα όργανα ήταν ο ισχύων κανονισμός ουσιών.

Το 1993 το Συμβούλιο εξέδωσε τον κανονισμό (EEC) 793/93 ή τον ισχύοντα κανονισμό ουσιών (EEC, 1993), εισάγοντας με αυτόν τον τρόπο ένα περιεκτικό πλαίσιο για την αξιολόγηση και τον έλεγχο των "υπαρχουσών" χημικών ουσιών. Ο κανονισμός

προορίστηκε να συμπληρώσει τους ήδη υπάρχοντες κανόνες που ρυθμίστηκαν από την οδηγία του Συμβουλίου 67/548/EEC για τις "νέες" χημικές ουσίες. Ο κανονισμός 793/93 προβλέπει ότι η αξιολόγηση και ο έλεγχος των κινδύνων που τίθενται από τις υπάρχουσες χημικές ουσίες θα πραγματοποιηθούν σε τέσσερα βήματα: 1. **Συλλογή δεδομένων**, 2. **Προτεραιότητα**, 3. **Αξιολόγηση του κινδύνου** και 4. **Μείωση του κινδύνου**.

Ο κανονισμός εφαρμόστηκε αρχικά για τις αποκαλούμενες υψηλές χημικές ουσίες όγκου παραγωγής (HPVCs). Οι HPVCs είναι εκείνες οι ουσίες, που έχουν εισαχθεί ή έχουν παραχθεί σε ποσότητες που υπερβαίνουν τους 1,000 τόνους ετησίως μεταξύ 23 Μαρτίου 1990 και 23 Μαρτίου του 1994. Το άρθρο 8 του κανονισμού δηλώνει ότι η Επιτροπή, κατόπιν διαβουλεύσεων με τα κράτη μέλη, θα συντάσσει τακτικά καταλόγους ουσιών προτεραιότητας που απαιτούν την άμεση προσοχή λόγω των πιθανών αποτελεσμάτων τους στο άτομο ή στο περιβάλλον. Από το 1994, τέσσερις τέτοιοι κατάλογοι προτεραιότητας έχουν δημοσιευθεί.

Οι ουσίες στους καταλόγους προτεραιότητας πρέπει να υποβληθούν σε εις βάθος αξιολόγηση του κινδύνου καλύπτοντας τους κινδύνους που τίθενται από την χημική ουσία προτεραιότητας στο άτομο (καλύπτοντας τους εργαζομένους, τους καταναλωτές και το άτομο που εκτίθενται μέσω του περιβάλλοντος) και στο περιβάλλον (καλύπτοντας τα επίγεια, υδρόβια και ατμοσφαιρικά οικοσυστήματα και την συσσώρευση μέσω της τροφικής αλυσίδας). Αυτή η αξιολόγηση του κινδύνου ακολουθεί το πλαίσιο που καθορίζεται στον κανονισμό (EC) 1488/94 της Επιτροπής και που εφαρμόζεται λεπτομερή στα τεχνικά έγγραφα καθοδήγησης (TGD) σχετικά με την αξιολόγηση του κινδύνου για τις νέες και τις υπάρχουσες ουσίες. Το πρώτο σχέδιο των εκθέσεων αξιολόγησης του κινδύνου γράφεται από τα κράτη μέλη που ενεργούν ως "εισηγητές".

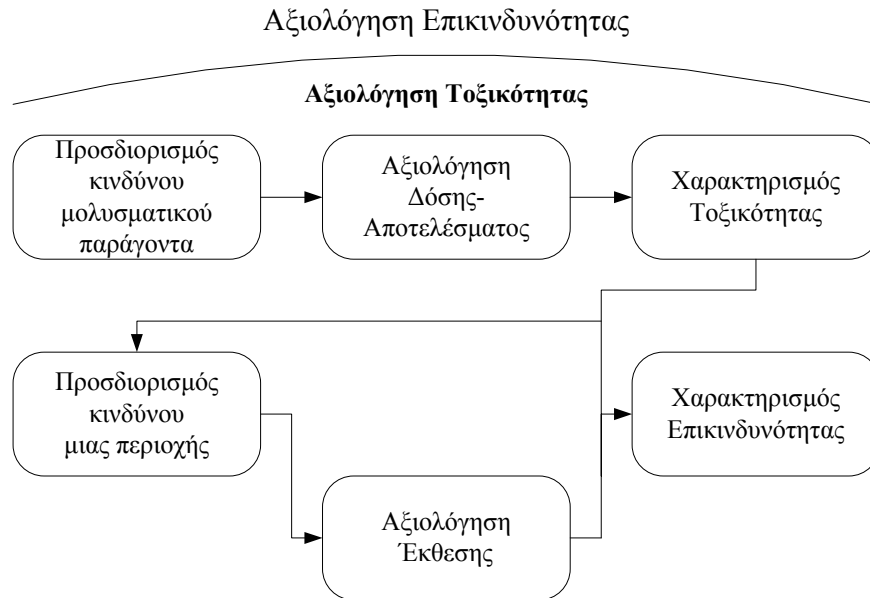
Το αντικείμενο της αξιολόγησης του κινδύνου καλύπτει τις εκπομπές, τις επακόλουθες περιβαλλοντικές επιδράσεις και την έκθεση του ανθρώπου σε κάθε στάδιο του κύκλου ζωής μιας χημικής ουσίας, από την παραγωγή, έως την επεξεργασία, την διατύπωση και την χρήση, την ανακύκλωση και την διάθεση. Οι στόχοι προστασίας για το περιβάλλον περιλαμβάνουν την ατμόσφαιρα, τους υδρόβιους οργανισμούς, τους οργανισμούς που βρίσκονται στα ιζήματα, τους οργανισμούς στο έδαφος, τους

μικροοργανισμούς στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας απόβλητων υδάτων και τα θηλαστικά και τα πουλιά που εκτίθενται μέσω της συσσώρευσης στην τροφική αλυσίδα.

Εξετάζεται η έκθεση των ανθρώπων από όλες τις σχετικές πηγές, συμπεριλαμβανομένων των εκθέσεων από τα καταναλωτικά προϊόντα, (π.χ. οι διαλύτες στα χρώματα κατά την διάρκεια της χρήσης τους, αλλά και μετά από την χρήση ως διηθούμενες πτητικές ουσίες στον αέρα, μετανάστευση από τα υλικά συσκευασίας που έρχονται σε επαφή με τα τρόφιμα, τα αποσμητικά χώρου εμποδίζουν την αργή ατμοποίηση σε ένα σπίτι), μέσω του περιβαλλοντικού αέρα, τα τρόφιμα και το πόσιμο νερό (άτομο που εκτίθεται μέσω του περιβάλλοντος) και την έκθεση στον εργασιακό χώρο. Κάθε σενάριο έκθεσης αξιολογείται χωριστά και όπου απαιτείται, υπολογίζεται επίσης και μια γενική συνδυασμένη έκθεση.

1.3 ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΤΗΣ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ

Επικινδυνότητα είναι η πιθανότητα ενός τραυματισμού, μιας ασθένειας ή ενός θανάτου που προκαλούνται από την έκθεση σε έναν κίνδυνο. Το EPA καθορίζει την επικινδυνότητα ως "Η πιθανότητα τραυματισμού, ασθένειας, ή θανάτου κάτω από συγκεκριμένες περιστάσεις". Η περιβαλλοντική αξιολόγηση της επικινδυνότητας είναι ένα εργαλείο που βοηθά τους ανθρώπους να λάβουν τεκμηριωμένες αποφάσεις στον καθορισμό της χρήσης μιας ενδεχομένως επικίνδυνης ουσίας, ή ενέργειες όταν η περιβαλλοντική μόλυνση έχει ήδη εμφανιστεί. Οι περιβαλλοντικοί μολυσματικοί παράγοντες μπορούν να προκαλέσουν τον τραυματισμό στους ανθρώπους, τα ζώα, το οικοσύστημα, την οικονομία και την αισθητική. Η αξιολόγηση της επικινδυνότητας παρέχει εκτίμηση της πιθανότητας και της δριμύτητας αυτών των τραυματισμών. Παρακάτω περιγράφονται το βασικό πλαίσιο για την αξιολόγηση της επικινδυνότητας για τον άνθρωπο και το περιβάλλον καθώς επίσης και η διαχείριση της επικινδυνότητας. Οι διαδικασίες της αξιολόγησης της επικινδυνότητας για την ανθρώπινη υγεία και το περιβάλλον είναι παρόμοιες. Το παρακάτω σχήμα (**Σχήμα 1.1**) παρουσιάζει το διάγραμμα ροής των διαδικασιών.

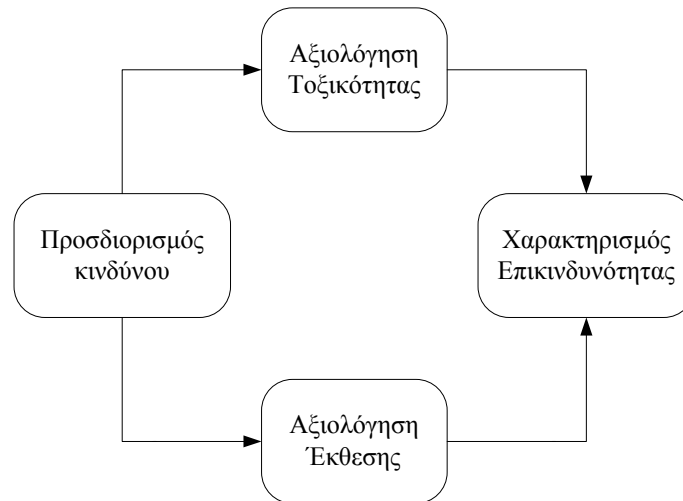


Σχήμα 1.1: Διάγραμμα ροής των διαδικασιών αξιολόγησης της επικινδυνότητας.

1.3.1 ΣΤΑΔΙΑ ΤΗΣ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗΣ

Υπάρχουν δύο σημαντικές συνιστώσες στην αξιολόγηση της επικινδυνότητας. Βασικά, η επικίνδυνη ουσία πρέπει να χαρακτηριστεί για να καθοριστεί η τοξικότητά της και το άτομο ή το οικοσύστημα πρέπει να αξιολογηθεί για να καθοριστεί ο βαθμός έκθεσης. Μια ουσία μπορεί να είναι ιδιαίτερα τοξική, αλλά εάν δεν υπάρχει καμία έκθεση στο οικοσύστημα (ζώα, φυτά και οι βιότοποί τους) ή στο άνθρωπο, τότε η επικινδυνότητα είναι πολύ χαμηλή. Αντιθέτως, μια ουσία μπορεί να είναι λιγότερο επικίνδυνη αλλά θα είναι τοξική εάν υπάρχει ένα μεγάλο ποσό έκθεσης κατά την διάρκεια μιας εκτεταμένης χρονικής περιόδου.

Υπάρχουν τέσσερα αρχικά στάδια που περιλαμβάνονται στην διεξαγωγή της αξιολόγησης της επικινδυνότητας (**Σχήμα 1.2**): **προσδιορισμός του κινδύνου, αξιολόγηση της έκθεσης, αξιολόγηση της τοξικότητας και χαρακτηρισμός της επικινδυνότητας.**



Σχήμα 1.2: Στάδια αξιολόγησης της επικινδυνότητας.

1.3.1.1 Προσδιορισμός του κινδύνου

Ο *προσδιορισμός του κινδύνου* είναι η διαδικασία που καθορίζει εάν μια ουσία προκαλεί ή όχι ζημιά. Περιλαμβάνει την συγκέντρωση και την ανάλυση των στοιχείων της περιοχής σχετικών με την αξιολόγηση της ανθρώπινης υγείας και τον προσδιορισμό των ουσιών που είναι παρούσες κατά τόπους, όπου εστιάζει η διαδικασία της αξιολόγησης της επικινδυνότητας. Υπάρχουν τέσσερις κύριες μέθοδοι προσδιορισμού του κινδύνου. Αυτές οι μέθοδοι είναι *ζωικές μελέτες*, *μελέτες σε σωλήνες δοκιμής*, *συγκριτικές μελέτες* ή *επιδημιολογικές μελέτες*. Οι ζωικές μελέτες είναι οι πιο κοινές. Οι (in vitro) μελέτες σε σωλήνες δοκιμής είναι πειράματα που πραγματοποιούνται σε ένα απομονωμένο, ιδιαίτερα ελεγχόμενο περιβάλλον. Οι συγκριτικές μελέτες κρίνουν μια χημική ουσία έναντι μιας παρόμοιας ουσίας που είναι γνωστή για την επιβλαβή της δράση. Οι επιδημιολογικές μελέτες προσδιορίζουν τις τάσεις της ασθένειας μέσα σε έναν πληθυσμό που μπορεί να συσχετιστεί με την έκθεση σε μια ουσία. Αυτές οι μελέτες είναι οι πιο αξιόπιστες, αλλά είναι δύσκολο να διεξαχθούν επειδή οι εκθέσεις μπορούν να ποικίλουν. Στην αξιολόγηση της επικινδυνότητας του οικοσυστήματος, προσδιορίζονται ο παράγοντας άγχους και τα πιθανά οικοσυστήματα σε κίνδυνο.

1.3.1.2 Αξιολόγηση της έκθεσης

Η αξιολόγηση της έκθεσης αποτιμά την διαδρομή των εκθέσεων (εισπνοή, κατάποση, απορρόφηση), την χρονική διάρκεια της έκθεσης, την συχνότητα της έκθεσης, εάν η έκθεση ήταν συνεχής ή διαλείπουσα και πόσο ευαίσθητο είναι το πρόσωπο που εκτέθηκε στην ουσία. Τα επίπεδα έκθεσης ποικίλλουν σε κάθε άτομο, περιπλέκοντας την δυνατότητα αξιολόγησης της επικινδυνότητας με ακρίβεια. Για να καθοριστεί εάν η ανθρώπινη υγεία διατρέχει κίνδυνο ασθένειας από τους μολυσματικούς παράγοντες, δύο πράγματα πρέπει να συμβούν: πρέπει να υπάρξει έκθεση σε έναν μολυσματικό παράγοντα και ο μολυσματικός παράγοντας πρέπει να είναι τοξικός και να είναι σε επαρκή ποσότητα για να προκαλέσει ζημιά. Για να παρουσιαστεί η ασθένεια πρέπει να είναι παρούσα μια πλήρης οδός έκθεσης. Τα στοιχεία μιας οδού έκθεσης είναι:

1. η πηγή - πώς ο μολυσματικός παράγοντας βρέθηκε στο περιβάλλον,
2. τα μέσα μεταφοράς - πώς ο μολυσματικός παράγοντας κινείται στο περιβάλλον,
3. το σημείο έκθεσης - πώς οι άνθρωποι ήρθαν σε επαφή με το μολυσματικό παράγοντα,
4. η διαδρομή έκθεσης - πώς ο μολυσματικός παράγοντας εισήρθε στο σώμα,
5. ο δέκτης πληθυσμός - πόσο ευαίσθητος είναι ο πληθυσμός στο μολυσματικό παράγοντα.

Στην αξιολόγηση της έκθεσης, αναπτύσσονται ρεαλιστικές μέγιστες εκτιμήσεις της έκθεσης τόσο για τις τρέχουσες όσο και για τις μελλοντικές υποθετικές χρήσεις του εδάφους. Οι τρέχουσες εκτιμήσεις της έκθεσης χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό μιας ενδεχόμενης απειλής βασισμένης στις υπάρχουσες συνθήκες έκθεσης κατά τόπους. Οι μελλοντικές εκτιμήσεις της έκθεσης χρησιμοποιούνται για να παρέχουν σε αυτούς που παίρνουν τις αποφάσεις κατανόηση των πιθανών μελλοντικών εκθέσεων και των απειλών, έτσι ώστε να διεξάγουν ποιοτική εκτίμηση της πιθανότητας εμφάνισης τέτοιων εκθέσεων. Η διεξαγωγή μιας αξιολόγησης της έκθεσης περιλαμβάνει την ανάλυση της εκπομπής των μολυσματικών παραγόντων, τον προσδιορισμό εκτεθειμένων πληθυσμών, τον προσδιορισμό όλων των πιθανών οδών της έκθεσης, τον υπολογισμό των συγκεντρώσεων στο σημείο έκθεσης για τις συγκεκριμένες οδούς, βασισμένη τόσο στα στοιχεία του περιβαλλοντικού ελέγχου όσο και στα προβλεπόμενα χημικά αποτελέσματα

και στον υπολογισμό των λήψεων των μολυσματικών παραγόντων για τις συγκεκριμένες οδούς. Τα αποτελέσματα αυτής της αξιολόγησης είναι ο υπολογισμός των λήψεων συγκεκριμένων οδών για τις τρέχουσες και μελλοντικές εκθέσεις στις μεμονωμένες ουσίες.

1.3.1.3 Αξιολόγηση της τοξικότητας

Η αξιολόγηση της τοξικότητας εξετάζει: (1) τους τύπους των δυσμενών επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία που συνδέονται με την έκθεση στις χημικές ουσίες, (2) την σχέση μεταξύ του μεγέθους της έκθεσης και των δυσμενών αποτελεσμάτων, και (3) σχετικές αβεβαιότητες, όπως το βάρος των στοιχείων καρκινογένεσης μιας συγκεκριμένης χημικής ουσίας στους ανθρώπους. Η αξιολόγηση της τοξικότητας των μολυσματικών παραγόντων ολοκληρώνεται γενικά σε δύο βήματα: **αξιολόγηση της έκθεσης** και **αξιολόγηση της δόσης-αποτελέσματος**. Το πρώτο βήμα, ο προσδιορισμός του κινδύνου, είναι η διαδικασία προσδιορισμού του κατά πόσο η έκθεση σε έναν παράγοντα μπορεί να προκαλέσει αύξηση στον ρυθμό ανάπτυξης δυσμενών επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία (π.χ., καρκίνος, ελάττωμα εκ γενετής). Ο προσδιορισμός του κινδύνου περιλαμβάνει επίσης τον χαρακτηρισμό της φύσης και της δύναμης των στοιχείων της αιτιολογίας. Το δεύτερο βήμα, η αξιολόγηση της δόσης-αποτελέσματος, είναι η διαδικασία της ποσοτικής αξιολόγησης των πληροφοριών τοξικότητας και του χαρακτηρισμού της σχέσης μεταξύ της δόσης του λαμβανόμενου μολυσματικού παράγοντα και των δυσμενών επιπτώσεων της ανθρώπινης υγείας στον πληθυσμό έκθεσης. Από αυτήν την ποσοτική σχέση δόσης-αποτελέσματος, εξάγονται οι τιμές τοξικότητας, οι οποίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό των δυσμενών αποτελεσμάτων που εμφανίζονται στους ανθρώπους σε διαφορετικά επίπεδα έκθεσης.

1.3.1.4 Χαρακτηρισμός της επικινδυνότητας

Ο χαρακτηρισμός της επικινδυνότητας είναι ο συνδυασμός των αξιολογήσεων της τοξικότητας και της έκθεσης με σκοπό να προσπαθήσει να προβλέψει τι θα συμβεί στους ανθρώπους που εκτίθενται σε μια επικίνδυνη ουσία. Ένας τέτοιος χαρακτηρισμός είναι μια εκτίμηση και όχι ένα γεγονός. Η αβεβαιότητα των αξιολογήσεων της τοξικότητας και

των αξιολογήσεων της έκθεσης το καθιστά δύσκολο να παρέχει έναν ακριβή χαρακτηρισμό της επικινδυνότητας. Η τελική περιγραφή της επικινδυνότητας παρέχει τις πληροφορίες για την εμπιστοσύνη που ο αξιολογητής κινδύνου έχει στα αποτελέσματα και προσδιορίζει το κατώφλι για τα δυσμενή αποτελέσματα. Κατά την διάρκεια του χαρακτηρισμού της επικινδυνότητας, οι πληροφορίες σχετικά με την τοξικότητα συγκεκριμένης χημικής ουσίας συγκρίνονται τόσο με τα μετρημένα επίπεδα έκθεσης του μολυσματικού παράγοντα όσο και με τα επίπεδα έκθεσης που εξάγονται από την μοντελοποίηση της μεταφοράς και της μετακίνησης του μολυσματικού παράγοντα προκειμένου να καθοριστεί εάν το τρέχον ή μελλοντικό επίπεδο έκθεσης στην περιοχή ή κοντά σε αυτήν είναι ανησυχητικό.

1.3.2 ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗ ΤΟΥ ΚΙΝΔΥΝΟΥ

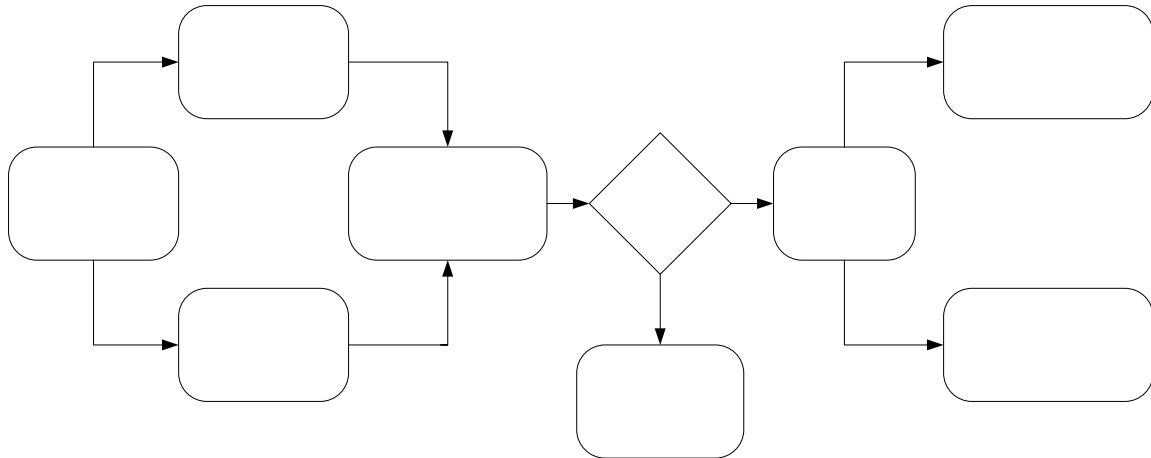
Η *διαχείριση του κινδύνου* είναι η διαδικασία που χρησιμοποιείται για την μείωση της έκθεσης μέσω πολιτικών αλλαγών. Η αξιολόγηση του κινδύνου είναι μια επιστημονική διαδικασία που ολοκληρώνεται με τον χαρακτηρισμό του κινδύνου ή μια περιγραφή της πιθανότητας της ζημιάς στην ανθρώπινη ή οικολογική υγεία. Μόλις χαρακτηριστεί ο κίνδυνος, το πως ο κίνδυνος προσεγγίζεται, ή ρυθμίζεται, γίνεται πολιτική επιλογή. Οι προσεγγίσεις μπορούν να περιλάβουν αλλαγές στην πρακτική της βιομηχανίας, αλλαγές στην ανθρώπινη συμπεριφορά, ή αλλαγές στις κυβερνητικές επεμβάσεις.

Όταν οι κατευθυντήριες δυνάμεις είναι πολιτικές, τα ζητήματα είναι συχνά ισορροπημένα στο συμβιβασμό. Αναπτύσσονται κανονισμοί επειδή οι προσπάθειες προστασίας του περιβάλλοντος είναι σπάνια εθελοντικές λόγω των βραχυπρόθεσμων δαπανών. Η νομοθεσία είναι το αποτέλεσμα από τον πολιτικό συμβιβασμό μεταξύ της δημόσιας κατακραυγής έναντι της απόκρισης των αρμόδιων συμβαλλόμενων μερών. Η διαδικασία υπόκειται σε όλες τις ιδιοσυγκρασίες της πολιτικής λήψης αποφάσεων και υπάρχει ένα εκτενές σύνολο ελέγχων και ισορροπιών.

Οι πολιτικές προσεγγίσεις στην διαχείριση του κινδύνου είναι βασισμένες στις κοινές περιβαλλοντικές αξίες, όπως:

- καμία δυσμενής επιρροή στην προσωπική υγεία μας
- ελάχιστη ή καμία επιρροή στην δημόσια υγεία

- προστασία των ειδών και των φυσικών οικοσυστημάτων
- ελαχιστοποίηση των περιορισμών που τοποθετούνται στις προσωπικές ελευθερίες
- εξέταση τόσο των δαπανών όσο και των κερδών των προσαθειών προστασίας του περιβάλλοντος



Σχήμα 1.3: Διάγραμμα ροής των διαδικασιών διαχείρισης του κινδύνου.

Ένας τρόπος με τον οποίο διαχειρίζεται ο κίνδυνος είναι μέσω του κανονισμού της βιομηχανίας. Προκειμένου να προστατευθεί η δημόσια υγεία, το EPA έχει κανόνες, που απαιτούν από τις επιχειρήσεις που χρησιμοποιούν εξαιρετικά επικίνδυνες ουσίες, να δημιουργήσουν σχέδια για να αποτρέψουν τα ατυχήματα και να αποκριθούν στις έκτακτες ανάγκες. Αυτές οι επιχειρήσεις είναι υποχρεωμένες να αξιολογούν την πιθανότητα ενός ατυχήματος, να αναπτύξουν ένα πρόγραμμα πρόληψης και να σχεδιάσουν ένα πρόγραμμα απόκρισης έκτακτης ανάγκης. Αυτά τα προγράμματα περιλαμβάνουν την κατάρτιση των υπαλλήλων, διαδικασίες υγείας και ασφάλειας και τον προσδιορισμό των δημόσιων συστημάτων πληροφοριών.

Τα προγράμματα διαχείρισης κινδύνου περιλαμβάνουν επίσης τοπικά σχέδια, τα οποία η πυροσβεστική, η αστυνομία και το προσωπικό έκτακτης ανάγκης τα χρησιμοποιούν για την προετοιμασία για χημικά ατυχήματα. Τα προγράμματα διαχείρισης κινδύνου είναι διαθέσιμα στο κοινό.

Προσδιορισμός
κινδύνου

Αξιολόγηση
Τοξικότητα

1.4 ΟΙ ΤΙΜΕΣ ΕΠΕΜΒΑΣΗΣ

Για εδαφολογική μόλυνση που έχει προκληθεί πριν από το 1987 ο βαθμός μόλυνσης κρίνεται σε αυτήν την περίπτωση από τις τιμές στόχου (Target Values) και επέμβασης (Intervention Values). Η τιμή του στόχου απεικονίζει την συγκέντρωση που υποδεικνύει μια καλή ποιότητα εδάφους. Σε περίπτωση που οι συγκεντρώσεις του εδάφους υπερβαίνουν την τιμή του στόχου τότε το πιθανότερο είναι ότι το έδαφος έχει μολυνθεί. Η τιμή επέμβασης υποδεικνύει το επίπεδο της συγκέντρωσης πάνω από το οποίο η εδαφολογική μόλυνση θεωρείται ως σοβαρή. Αυτό είναι το επίπεδο συγκέντρωσης με το οποίο εξάγονται οι τοξικολογικές τιμές κατώτατων ορίων για τους ανθρώπους ή για τα οικοσυστήματα. Όταν η εδαφολογική μόλυνση υπερβαίνει την τιμή επέμβασης, πρέπει να διενεργηθεί περαιτέρω έρευνα όσον αφορά τους πραγματικούς κινδύνους κατά τόπους, π.χ. έκθεση του ανθρώπου σε μια συγκεκριμένη περιοχή και οικολογικοί κίνδυνοι της συγκεκριμένης περιοχής. Με βάση αυτόν τον πραγματικό κίνδυνο λαμβάνεται μια απόφαση σχετικά με την επείγουσα ανάγκη εδαφολογικής επανόρθωσης ή ενεργειών καθαρισμού (Berg van den και Roels 1991, Swartjes et al. 1998, Ferguson et al. (eds.) 1998, Ferguson και Kasamas (eds.) 1999, Swartjes 1999).

Για τις τιμές επέμβασης η τοξικολογική τιμή των κατώτατων ορίων ενός μολυσματικού παράγοντα είναι εξίσου σημαντική με την συμπεριφορά ενός μολυσματικού παράγοντα στο έδαφος καθορίζοντας την έκθεση των ανθρώπων και των οικοσυστημάτων. Ακολούθως, η τοξικολογική τιμή εδαφολογικής επέμβασης για τον άνθρωπο έχει οριστεί ως η συγκέντρωση ενός μολυσματικού παράγοντα στο έδαφος, η οποία θα οδηγούσε σε μια πιθανή έκθεση ισοδύναμης με το MPR_{human} κάτω από τυποποιημένες συνθήκες.

1.5 ΜΕΓΙΣΤΟΣ ΕΠΙΤΡΕΠΟΜΕΝΟΣ ΚΙΝΔΥΝΟΣ ΓΙΑ ΤΟΝ ΑΝΘΡΩΠΟ

Μία από τις δομικές μονάδες των τιμών επέμβασης είναι η μέγιστη τοξικολογική επιτρεπόμενη τιμή του κινδύνου για τον άνθρωπο (MPR_{human}). Ο μέγιστος επιτρεπόμενος κίνδυνος για τον άνθρωπο (MPR_{human}) ορίζεται ως το ποσό μιας ουσίας (συνήθως χημική ουσία) στην οποία οποιοσδήποτε ανθρώπινος οργανισμός μπορεί να εκτεθεί καθημερινά κατά την διάρκεια της ζωής του χωρίς σημαντικό κίνδυνο υγείας. Περιλαμβάνει τόσο την

στοματική έκθεση όσο και την έκθεση μέσω της εισπνοής (εάν είναι απαραίτητο και την έκθεση μέσω του δέρματος), κλασσικούς τοξικούς κινδύνους καθώς επίσης και καρκινογόνους κινδύνους. Το MPR_{human} εκφράζεται γενικά είτε ως ανεκτή ημερήσια λήψη (TDI) είτε ως υπέρβαση του καρκινογόνου κινδύνου μέσω της λήψης (CR_{oral}), καλύπτοντας και τα δύο την στοματική έκθεση, ή μια ανεκτή συγκέντρωση στον αέρα (TCA), ή την υπέρβαση του καρκινογόνου κινδύνου μέσω του αέρα (CR_{inhal}), καλύπτοντας και τα δύο την έκθεση μέσω της εισπνοής.

Για τις γενotoξικές καρκινογόνες ουσίες η εκτίμηση του κινδύνου εμφάνισης καρκίνου γίνεται βάση των γνωστών συμβάντων όγκων για την εν λόγω ουσία. Αυτή η διαδικασία οδηγεί σε μια *υπέρβαση του κινδύνου εμφάνισης καρκίνου στην διάρκεια της ζωής*. Αυτή η προσέγγιση υποθέτει μια γραμμική σχέση (επίσης και στις πολύ χαμηλές δόσεις) μεταξύ της δόσης και της εμφάνισης καρκίνου, η οποία υποδηλώνει ότι η εμφάνιση καρκίνου λόγω έκθεσης σε μια συγκεκριμένη γενotoξική χημική ουσία είναι μηδενική μόνο εάν η δόση είναι μηδέν. Στα πλαίσια των τιμών επέμβασης ο μέγιστος επιτρεπόμενος κίνδυνος είναι το κριτήριο που χρησιμοποιείται για τις αξιολογήσεις του κινδύνου βασισμένες στην υγεία. Για τις γενotoξικές καρκινογόνες ουσίες ο MPR έχει οριστεί ως η υπέρβαση του κινδύνου εμφάνισης καρκίνου σε όλη την διάρκεια της ζωής 1 φορά στις 10,000 ($1:10^4$).

Στην διαδικασία εξαγωγής των MPR_{human} διακρίνονται τα ακόλουθα βήματα:

1. Προσδιορισμός της βάσης δεδομένων,
2. Γενική αξιολόγηση της βάσης δεδομένων,
3. Επιλογή της προσέγγισης: κατώτατο όριο ή μη-κατώτατο όριο,
4. Επιλογή της κρίσιμης μελέτης ή μελετών και εξαγωγή της οριακής τιμής,
 - 4.1 Αξιολόγηση των μη-κατώτατων ορίων (**Quantitative Cancer Risk Assessment**),
 - 4.2 Αξιολογήσεις των κατώτατων ορίων (εφαρμογή **Uncertainty Factor** σε **No Observed Adverse Effect Level**),
5. Τελικός έλεγχος και επιλογή της τιμής MPR,
6. Έκθεση των αποτελεσμάτων ως προφίλ τοξικότητας.

Η διαδικασία για την εξαγωγή των MPR_{human} περιγράφεται λεπτομερώς από τους Janssen και Speijers (1997).

1.6 ΣΚΟΠΟΣ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Η παρούσα εργασία έχει τους ακόλουθους στόχους:

- Εξέταση των γενικών πληροφοριών των διεθνών μοντέλων που σχετίζονται με την έκθεση της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος ερευνώντας τις διαφορές και τις ομοιότητες των αντίστοιχων αρχών που τα διέπουν,
- Αξιολόγηση των διαφορών μεταξύ των μοντέλων για κάθε οδό έκθεσης (τρεις σημαντικοί οδοί έκθεσης) με βάση τις διαφορές των εννοιών που διέπουν τα μοντέλα και των τιμών των παραμέτρων των δεδομένων εισόδου,
- Ταξινόμηση και ανασκόπηση των πληροφοριών για τις υπάρχουσες προσεγγίσεις αξιολόγησης του κινδύνου μολυσμένων περιοχών σε παγκόσμιο επίπεδο,
- Εύρεση του πληρέστερου μοντέλου έκθεσης της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος,
- Ανάπτυξη συστάσεων σχετικά με μια βέλτιστη προσέγγιση αξιολόγησης του κινδύνου που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να καθιερώσει ένα πρακτικό έγγραφο καθοδήγησης αξιολόγησης του κινδύνου στον Ευρωπαϊκό χώρο.

Τα αποτελέσματα της εργασίας αυτής είναι πιθανό να είναι σημαντικά στην αξιολόγηση της λήψης αποφάσεων που χρησιμοποιεί πρότυπα εδαφολογικής ποιότητας βασισμένα στους υπολογισμούς της ανθρώπινης έκθεσης και στον προσδιορισμό του τρόπου βελτίωσης των εννοιών και των παραμέτρων εισαγωγής για τα υπάρχοντα μοντέλα έκθεσης. Τα αποτελέσματά της θα μπορούσαν να έχουν βαθιά επιρροή στην μελλοντική έρευνα και στην ανάπτυξη σε αυτήν την περιοχή και η ίδια η εργασία μπορεί να είναι ένας πρόδρομος για μια μεγαλύτερη πρόταση έρευνας και ανάπτυξης.

1.7 ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Η εργασία αυτή σχετικά με την εκτίμηση των επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία από επικίνδυνες ουσίες στο έδαφος διαιρείται σε 6 κεφάλαια.

Το πρώτο κεφάλαιο περιγράφει την ιστορική διαδρομή των χημικών ουσιών στο έδαφος και τα μέτρα που λήφθηκαν για την διαχείρισή τους, την αξιολόγηση της επικινδυνότητας, τα διάφορα όρια λήψης των χημικών ουσιών και τέλος τον σκοπό της εργασίας αυτής.

Στο κεφάλαιο 2 συγκρίνουμε τα διεθνή μοντέλα που σχετίζονται με την έκθεση της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος ερευνώντας τις διαφορές και τις ομοιότητες των αντίστοιχων αρχών που τα διέπουν.

Στα επόμενα δύο κεφάλαια περιγράφεται η ανάπτυξη ενός δυναμικού μοντέλου, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των χρονικά μεταβαλλόμενων συγκεντρώσεων των μολυσματικών παραγόντων που εισάγονται αρχικά στα στρώματα του εδάφους κάτω από την επιφάνεια ή για τους μολυσματικούς παράγοντες που απελευθερώνονται συνεχώς στον αέρα, στο επιφανειακό έδαφος, ή στο επιφανειακό νερό. Το κεφάλαιο 3 περιγράφει την δυναμική μεταφορά μεταξύ των πολυμέσων και το μοντέλο μετασχηματισμού. Αυτό το μοντέλο καθορίζει πώς η χημική ουσία κινείται από το έδαφος σε άλλα περιβαλλοντικά τμήματα και παρέχει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σχετικά τμήματα. Στο κεφάλαιο 4, περιγράφεται η θεωρητική βάση του μοντέλου έκθεσης πολλαπλών οδών. Το μοντέλο έκθεσης αποτελείται από τις εξισώσεις που περιγράφουν την λήψη της χημικής ουσίας μέσω της κατάποσης, της εισπνοής και της επαφής με το δέρμα με το ενδεχομένως μολυσμένο νερό, αέρα, έδαφος και τρόφιμα. Στο κεφάλαιο 5 πραγματοποιείται ανάλυση των αποτελεσμάτων και σύγκριση για τα διαφορετικά είδη μολυσματικών μέσων (χώμα, άσφαλτο), αποδεκτών (παιδί, ενήλικας) και βιβλιογραφικών πηγών (EPA, RIVM). Τέλος, στο κεφάλαιο 6 εξάγονται συμπεράσματα, ενώ παράλληλα υποβάλλονται προτάσεις για μελλοντική έρευνα με σκοπό τη βελτιστοποίηση της συγκεκριμένης ανάλυσης επικινδυνότητας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΔΙΕΘΝΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΣΧΕΤΙΚΑ ΜΕ ΤΗΝ ΕΚΘΕΣΗ ΤΟΥ ΑΝΘΡΩΠΟΥ ΣΕ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΕΣ ΟΥΣΙΕΣ ΑΠΟ ΤΟ ΕΔΑΦΟΣ

2.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σε αυτό το κεφάλαιο θα συγκρίνουμε τα διεθνή μοντέλα που σχετίζονται με την έκθεση της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος ερευνώντας τις διαφορές και τις ομοιότητες των αντίστοιχων αρχών που τα διέπουν. Για τα διεθνή μοντέλα, απαραίτητη προϋπόθεση είναι ότι τα κριτήρια ποιότητας (τυποποιημένα) για το έδαφος και το υπόγειο νερό βασίζονται ή θα βασιστούν στα αποτελέσματα των μοντέλων αυτών. Τα μοντέλα του Βελγίου, της Γερμανίας, της Νορβηγίας, της Σουηδίας, του Ηνωμένου Βασιλείου και των Ηνωμένων Πολιτειών συμμορφώνονται με αυτόν τον όρο. Μια πλήρης επισκόπηση των διαθέσιμων διεθνών μοντέλων παρουσιάζεται στον **πίνακα 2.1**.

2.2 ΒΑΣΙΚΕΣ ΑΡΧΕΣ ΤΩΝ ΔΙΕΘΝΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Έχοντας ως βάση ένα ερωτηματολόγιο (**Παράρτημα Α**) συλλέχθηκαν πληροφορίες σχετικά με τις βασικές αρχές που διέπουν οκτώ από τα δέκα διεθνή μοντέλα που συγκρίνονται στην ενότητα αυτή. Πληροφορίες σχετικά με τα υπόλοιπα δύο μοντέλα συλλέχθηκαν από την σχετική διεθνή βιβλιογραφία. Αυτές οι πληροφορίες έχουν σχέση με τα εξής:

- Χαρακτηριστικά του μοντέλου (π.χ. επαφή με τον άνθρωπο),
- Εξαρτήσεις μεταξύ των μοντέλων και εφαρμογές των μοντέλων,
- Λεπτομερής σχεδιασμός του μοντέλου (π.χ. τμήματα και οδοί έκθεσης),
- Δυνατότητες του μοντέλου (π.χ. πιθανολογική εφαρμογή, οξεία έκθεση),
- Χρήση του μοντέλου (π.χ. εφαρμογές, τυποποιημένα σενάρια που έχουν συμπεριληφθεί).

Αυτές οι πληροφορίες συνοψίζονται στις ακόλουθες παραγράφους. Λεπτομερείς πληροφορίες και για τα οκτώ μοντέλα έκθεσης της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος, όπως προήλθαν από τα ερωτηματολόγια, συμπεριλαμβάνονται στο **παράρτημα Α**.

Πίνακας 2.1: Σύνοψη των διαθέσιμων διεθνών μοντέλων έκθεσης.

Χώρα	Αναπτυσσόμενο Μοντέλο	Μοντέλο που χρησιμοποιείται για στάνταρ ποιότητας για το έδαφος και το υπόγειο νερό	Μοντέλο που χρησιμοποιείται για άλλους σκοπούς
Αυστρία	Κανένα	Κανένα	Κανένα
Βέλγιο	Κανένα	Vlier-human (κλώνος του HESP)	Ναι
Δανία	CETOX-human	Κανένα	Κανένα
Φιλανδία	Κανένα	Κανένα	CalTOX RISC-Human
Γαλλία	Χωρίς όνομα	Χωρίς όνομα	
Γερμανία	UMS	Κανένα	
Ελλάδα	Κανένα	Κανένα	Κανένα
Ιρλανδία	Κανένα	Κανένα	EUSES POEM
Ιταλία	ROME (σε αναλογία με CONCAWE)	ROME	ASTM RBCA
Ολλανδία	CSOIL, SEDISOIL, VOLASOIL	CSOIL (έδαφος) SEDISOIL (ίζημα)	USES, HESP, RISK-Human
Νορβηγία	GRUF-model (βασισμένο στο Naturvardverket, CSOIL)	GRUF-model	
Πορτογαλία	Κανένα	Κανένα	
Ισπανία	Χωρίς όνομα	Χωρίς όνομα	
Σουηδία	Χωρίς όνομα	Χωρίς όνομα	Ναι
Ελβετία	Κανένα	Κανένα*	Κανένα
Ηνωμένο Βασίλειο	CLEA	CLEA	
Ηνωμένες Πολιτείες	CalTOX	CalTOX	
Καναδάς	Χωρίς όνομα	Χωρίς όνομα	
Αυστραλία	Κανένα	Κανένα	Κανένα

*Δεν χρησιμοποιείται μοντέλο, αλλά οι κατευθυντήριες οδηγίες για τα μέταλλα βασίζονται στην περίπτωση της χειρότερης έκθεσης.

2.2.1 ΕΞΑΡΤΗΣΕΙΣ ΜΕΤΑΞΥ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΚΑΙ ΤΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΤΟΥΣ

Στον **πίνακα 2.2** επισημαίνονται οι εξαρτήσεις μεταξύ των διεθνών μοντέλων και των προεπιλεγμένων παραμέτρων εισαγωγής δεδομένων (**Παράρτημα Α** για περισσότερες πληροφορίες).

Διαπιστώνουμε ότι οι βασικές αρχές και οι παράμετροι εισαγωγής δεδομένων των μοντέλων CETOX-human, NoNameFrance 2000, Vlier-Humaan και CSOIL 8.0 συσχετίζονται μεταξύ τους. Εκτός αυτού, οι αρχές του μοντέλου NoNameSweden σχετίζονται με τα τέσσερα προαναφερθέντα μοντέλα και αντιστρόφως.

2.2.2 ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Ο λεπτομερής σχεδιασμός των διεθνών μοντέλων συνοψίζεται στον **πίνακα 2.3** (**Παράρτημα Α** για περισσότερες πληροφορίες).

Τα σημαντικότερα συμπεράσματα σχετικά με τον σχεδιασμό των διεθνών μοντέλων έκθεσης του ανθρώπου είναι:

- Το τμήμα του εδάφους και της ακόρεστης ζώνης των υπογείων νερών συμπεριλαμβάνονται στα περισσότερα από τα μοντέλα. Επίσης, τα περισσότερα μοντέλα περιλαμβάνουν και αρκετά άλλα τμήματα (αέρας, επιφανειακό νερό, κορεσμένη ζώνη υπόγειων νερών κ.λ.π.).
- Οι παρακάτω οδοί έκθεσης ενσωματώνονται σε όλα τα μοντέλα: κατάποση χόματος, κατανάλωση καρπών (εκτός από το ROME 01), εισπνοή εσωτερικού αέρα (εισπνοή των ατμών μόνο, αποκλείοντας τα αιωρούμενα σωματίδια στον αέρα), επαφή μέσω του δέρματος, εισπνοή σκόνης/σωματίδια χόματος. Επίσης, τα περισσότερα μοντέλα περιλαμβάνουν και διάφορες άλλες οδούς έκθεσης.
- Όλες οι βασικές αρχές και οι προεπιλεγμένοι παράμετροι εισαγωγής δεδομένων είναι βασισμένες στην μέγιστη έκθεση ή (την ρεαλιστική) χειρότερη περίπτωση.
- Όλα τα μοντέλα χρησιμοποιούν ως σημείο αναφοράς το συνολικό περιεχόμενο του εδάφους.
- Η κατανομή των μολυσματικών παραγόντων στα τμήματα του εδάφους υπολογίζεται κυρίως βάσει των συντελεστών κατανομής και σε μερικές περιπτώσεις σύμφωνα με την θεωρία fugacity.

Πίνακας 2.2: Εξάρτηση μεταξύ των μοντέλων (πριν την κάθετο) και μεταξύ των προεπιλεγμένων παραμέτρων εισαγωγής δεδομένων (μετά την κάθετο).
+ = οι βασικές αρχές των μοντέλων ή οι παράμετροι εισαγωγής των δεδομένων σχετίζονται.

Μοντέλο	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000*	No Name Sweden*	ROME 01	Vlier-humaan
CETOX-human					+/+					
CLEA D.D.										
UMS										
CalTOX										
CSOIL 8.0	+/+						+/+	+/		+/+
LUR										
No Name France 2000					+/+					
No Name Sweden					+/					
ROME 01										
Vlier-humaan					+/+					

* Καμία επίσημη ονομασία δεν είναι διαθέσιμη για το μοντέλο αυτό.

Πίνακας 2.3: Πληροφορίες σχετικά με τον σχεδιασμό των μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας. (x = ενσωματώνεται στο μοντέλο)

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Τμήματα										
έδαφος	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
υπόγεια ύδατα στην ακόρεστη ζώνη		x		x	x		x	x	x	
υπόγεια ύδατα στην κορεσμένη ζώνη								x	x	x
επιφανειακό νερό			x	x				x		
αέρας			x	x			x		x	x
φυτά			x	x						
ίζημα				x						
Οδοί έκθεσης										
κατάποση χόματος	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
κατανάλωση καρπών	x	x	x	x	x	x	x	x		x
κατάποση σωματιδίων προσκολλημένων στους καρπούς		x					x			
κατανάλωση προϊόντων κρέατος και γαλακτοκομικά				x						x
κατανάλωση ψαριών			x	x				x		
κατάποση μητρικού γάλατος				x						

Πίνακας 2.3 (συνέχεια): Πληροφορίες σχετικά με τον σχεδιασμό των μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας. (x = ενσωματώνεται στο μοντέλο)

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
κατάποση νερού κεντρικού δικτύου κατά την διάρκεια του μπάνιου			x	x						
άμεση κατανάλωση υπογείων υδάτων					(x)			x	x	x
πόσιμο νερό (μολυσμένο)			x	x	x		x			x
εισπνοή εσωτερικού αέρα	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
εισπνοή εξωτερικού αέρα	x	x			x	x	x		x	x
εισπνοή σκόνης/σωματιδίων χόματος, σε εσωτερικό χώρο	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
εισπνοή σκόνης/σωματιδίων χόματος, σε εξωτερικό χώρο	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
εισπνοή του αέρα του μπάνιου		x		x	x		x			x
εισπνοή ατμών προερχόμενων από υπόγεια ύδατα									x	
απορρόφηση μέσω του δέρματος, εσωτερικός χώρος	x	x		x	x	x	x	x		x
απορρόφηση μέσω του δέρματος, εξωτερικός χώρος	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
απορρόφηση μέσω του δέρματος, κατά την διάρκεια του μπάνιου		x	x	x	x		x			x

Πίνακας 2.3 (συνέχεια): Πληροφορίες σχετικά με τον σχεδιασμό των μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας. (x = ενσωματώνεται στο μοντέλο)

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Βασικές αρχές του μοντέλου (πριν την κάθετο) / παράμετροι εισαγωγής δεδομένων (μετά την κάθετο)										
χειρίστη υπόθεση						x				x
ρεαλιστική χειρίστη υπόθεση	x								/x	
λογική μέγιστη έκθεση*		x/x	/x	/x	/x	/x	x/x	x/x	x	/x
υπόθεση μέσης κατάστασης			x	x	x					
βέλτιστη υπόθεση										
ελάχιστο, μέγιστο, μέση τιμή	/x									
Σημείο αναφοράς										
συνολική περιεχόμενο εδάφους	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
συγκέντρωση υπογείων υδάτων									x	
συγκέντρωση μέσου επαφής							x			(x)
Υπολογισμός της κατανομής του μολυσματικού παράγοντα στα τμήματα του εδάφους										
χρησιμοποίηση της θεωρίας fugacity του Mackay		x	x	x	x					x
χρησιμοποίηση των συντελεστών κατανομής	x	x	x	x		x	x	x	x	x

* καλύτερη εκτίμηση σε περίπτωση αρκετής γνώσης, σε περίπτωση αμφιβολιών υπολογισμός του ανώτερου ορίου.

2.2.3 ΔΥΝΑΤΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Στον **πίνακα 2.4** συνοψίζονται οι δυνατότητες των διεθνών μοντέλων (**Παράρτημα Α** για περισσότερες πληροφορίες).

Τα σημαντικότερα συμπεράσματα σχετικά με τις δυνατότητες των διεθνών προτύπων έκθεσης του ανθρώπου σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος είναι:

- Μόνο ένα μέρος των μοντέλων περιλαμβάνει την δυνατότητα πιθανολογικής εφαρμογής, έκθεσης στον περιβάλλοντα χώρο, κινητικών διαδικασιών, ή κριτηρίων που περιορίζουν την συγκέντρωση στο μέσω επαφής.
- Τα περισσότερα μοντέλα δεν προσφέρουν την δυνατότητα οξείας έκθεσης, αποσύνθεσης και έκθεσης σε μίγμα μολυσματικών παραγόντων.

2.2.4 ΧΡΗΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Στον **πίνακα 2.5** συνοψίζονται οι πληροφορίες σχετικά με την χρήση των διεθνών μοντέλων (**Παράρτημα Α** για περισσότερες πληροφορίες).

Τα σημαντικότερα συμπεράσματα σχετικά με την χρήση των διεθνών μοντέλων αναφέρονται παρακάτω:

- Όλα τα μοντέλα χρησιμοποιούνται για την εξαγωγή κριτηρίων ποιότητας του εδάφους. Επίσης, όλα τα μοντέλα χρησιμοποιούνται για τουλάχιστον έναν επιπρόσθετο σκοπό.
- Η χρήση του εδάφους ως “κατοικημένη περιοχή” και “βιομηχανική περιοχή” ενσωματώνεται σε όλα τα μοντέλα. Επίσης, όλα τα μοντέλα περιλαμβάνουν πολλές άλλες χρήσεις του εδάφους.
- Κανένα μοντέλο δεν περιλαμβάνει την φυτοτοξικότητα (μέγιστη συγκέντρωση στους καρπούς, επάνω από την οποία ο καρπός θα παρουσιάσει δυσμενή αποτελέσματα).
- Τα περισσότερα μοντέλα περιλαμβάνουν κατευθυντήριες οδηγίες για την επιλογή των παραμέτρων εισαγωγής των δεδομένων. Επίσης, τα περισσότερα μοντέλα δεν περιλαμβάνουν υποδείξεις ή κατευθυντήριες οδηγίες για τις μετρήσεις στο μέσω επαφής.
- Όλα τα μοντέλα προσφέρουν την δυνατότητα υπολογισμού της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα για συγκεκριμένη περιοχή. Εντούτοις, μόνο δύο μοντέλα προσφέρουν την δυνατότητα υπολογισμού της συγκέντρωσης των καρπών για συγκεκριμένη περιοχή.

Πίνακας 2.4: Δυνατότητες των διεθνών μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας.

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Δυνατότητα για πιθανολογικές εφαρμογές	Όχι	Ναι	Ναι	Ναι	Όχι	Όχι	Ναι	Όχι	Όχι	Ναι
Δυνατότητα υπολογισμού προϋπάρχουσας έκθεσης	Ναι	Προαιρετικά	Ναι	Ναι	Όχι	Ναι	Όχι	Ναι	Όχι	Ναι
Τυποποιημένα όρια ηλικίας (έτη)	1-3 20-60	0-6 16-59 59-70	< 1 1-3 4-8 9-16 > 16	1-15 16-70	0-6 6-70	0-6 6-70	0-6 6-70	0-6 6-64	0-6 6-70	0-6 6-70
Έκθεση σε παιδιά και ανήλικους										
υπολογίζεται ξεχωριστά	x					x	x (μη-καρκινογενής)	x (μη-καρκινογενής)	x (μη-καρκινογενής)	x (μη-καρκινογενής)
συνυπολογίζεται							x (καρκινογενής)	x (καρκινογενής)	x (καρκινογενής)	x (καρκινογενής)
υπολογίζεται ξεχωριστά ή συνυπολογίζεται		x	x	x	x			x		x

Πίνακας 2.4 (συνέχεια): Δυνατότητες των διεθνών μοντέλων έκθεσης της ανθρώπινης υγείας.

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Πιθανότητα για υπολογισμό άμεσης έκθεσης	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Όχι	Όχι
Κινητικές (εξαρτώμενες από τον χρόνο) διαδικασίες στο μοντέλο	Όχι	Ναι	Όχι (μόνο για το υπόγειο νερό)	Ναι	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Όχι	Όχι
Περιλαμβάνεται η αποσύνθεση στο μοντέλο;	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι
Ενσωματώνεται κάποιο κριτήριο που περιορίζει τις συγκεντρώσεις στο μέσω επαφής;	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Ναι
Περιλαμβάνεται η έκθεση σε μίγματα στο μοντέλο;	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Όχι

Πίνακας 2.5: Χρήσεις των διεθνών μοντέλων έκθεσης του ανθρώπου σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος.

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Χρήσεις των μοντέλων										
εξαγωγή κριτηρίων ποιότητας για το έδαφος	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	(Ναι)	Ναι
ανάλυση επικινδυνότητας	Ναι			Ναι	Ναι		Ναι			
θεραπευτικοί σκοποί		(Ναι)	Ναι	Ναι	Ναι		Ναι		Ναι	Ναι
ανάλυση έκθεσης συγκεκριμένης περιοχής		(Ναι)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	
Είναι το μοντέλο διαθέσιμο για τρίτα άτομα;	Όχι	Ναι	Όχι	Ναι	(Ναι)	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Όχι
Είναι το μοντέλο σε γενική χρήση;	Όχι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Όχι	Ναι	Ναι	Ναι
Υπάρχουν κατευθυντήριες οδηγίες για την επιλογή δεδομένων εισόδου;	Όχι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Όχι	Ναι	(Ναι)
Υπάρχουν υποδείξεις ή κατευθυντήριες οδηγίες για μετρήσεις στο μέσο επαφής;	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Όχι
Περιλαμβάνεται η φυτοτοξικότητα;	Όχι	(Όχι)	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι
Είναι δυνατός ο υπολογισμός της συγκέντρωσης των καρπών σε συγκεκριμένη περιοχή;	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι
Είναι δυνατός ο υπολογισμός της συγκέντρωσης εσωτερικού χώρου σε συγκεκριμένη περιοχή;	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	(Ναι)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	(Ναι)

Πίνακας 2.5 (συνέχεια): Χρήσεις των διεθνών μοντέλων έκθεσης του ανθρώπου σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος.

	CETOX-human	CLEA D.D.	UMS	CalTOX	CSOIL 8.0	LUR	No Name France 2000	No Name Sweden	ROME 01	Vlier-humaan
Σενάρια έκθεσης										
οικιστικό με κήπο	(Ναι)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
οικιστικό χωρίς κήπο		Ναι	Ναι	Ναι	Ναι		Ναι	Ναι	Ναι	
βιομηχανικό	(Ναι)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
κήπος οπωροκηπευτικών	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι			(Ναι)	Όχι	
νηπιαγωγείο	Ναι							(Ναι)	(Ναι)	
παιδικός σταθμός			Ναι			Ναι		(Ναι)	(Ναι)	
χώροι άθλησης	Ναι		Ναι						(Ναι)	
πάρκα	Ναι			Ναι	Ναι	Ναι		(Ναι)	Ναι	Ναι
κήπος	Ναι	Ναι							Ναι	
χώροι αναψυχής				Ναι	Ναι		Ναι	(Ναι)	Ναι	Ναι
πάρκα, παιδότοποι και ανοικτοί χώροι		Όχι	Ναι	Ναι	Ναι				Ναι	
φυσική προστατευόμενη περιοχή								(Ναι)	Όχι	
γεωργικοί χώροι			Ναι					(Ναι)	Όχι	Ναι
λιγότερο ευαίσθητη χρήση γης								(Ναι)		
υποδομή					Ναι			(Ναι)		
απομονωμένες περιοχές	Ναι									
εμπορικά κτίρια			Ναι							

2.3 ΕΠΙΛΟΓΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΓΙΑ ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΣΤΕΡΗ ΣΥΓΚΡΙΣΗ

Τα μοντέλα τα οποία επιλέχθηκαν για μια πιο λεπτομερέστερη σύγκριση είναι του Ηνωμένου Βασιλείου, της Γερμανίας, των Ηνωμένων Πολιτειών και της Ολλανδίας, επειδή πολλά άρθρα έχουν γραφτεί για τις αρχές και τις εφαρμογές των μοντέλων αυτών. Είναι επίσης καλά τεκμηριωμένα και είναι αναπτυγμένα χωριστά και ανεξάρτητα το ένα από το άλλο.

Τα επιλεγμένα διεθνή μοντέλα είναι:

1. the Contaminated Land Exposure Assessment model (CLEA) from the UK,
2. the Umweltmedizinische Beurteilung der Exposition des Menschen durch altlastbedingte Schadstoffe (UMS) from Germany,
3. the California Environmental Protection Agency, Department of Toxic Substances Control (CalTOX) from the US-EPA,
4. the National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Contaminated Soil (CSOIL) from the Netherlands.

Στην συνέχεια δίνεται μια σύντομη περιγραφή των τεσσάρων επιλεγμένων διεθνών μοντέλων έκθεσης. Αμέσως μετά περιγράφονται χωριστά οι έννοιες των τριών σχετικών οδών έκθεσης των διεθνών μοντέλων και στην τελευταία ενότητα γίνεται η σύγκριση τους.

2.4 ΣΥΝΤΟΜΗ ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΥΠΟ ΕΞΕΤΑΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

2.4.1 THE CONTAMINATED LAND EXPOSURE ASSESSMENT MODEL (CLEA)

Στο Ηνωμένο Βασίλειο έχει αναπτυχθεί το μοντέλο CLEA, το οποίο χρησιμοποιείται για την εξαγωγή κατευθυντήριων οδηγιών και για την αξιολόγηση κινδύνου μιας συγκεκριμένης περιοχής. Η σχετική συνεισφορά των οδών έκθεσης ποικίλλει ανάλογα με την χρήση της κάθε περιοχής. Όταν οι κατευθυντήριες τιμές των οδηγιών ξεπερνιούνται, τότε η πρόθεση είναι είτε να προστεθεί μια επιπλέον φάση αξιολόγησης του κινδύνου, είτε να ληφθούν διορθωτικά μέτρα. Οι κατευθυντήριες οδηγίες σχετικά με τις μεθοδολογίες αναπτύσσονται για τον υπολογισμό του βαθμού καθαρισμού του εδάφους που απαιτείται για την προστασία

των υπογείων νερών. Το μοντέλο CLEA σχεδιάστηκε για να αποτιμά τη μέση ημερήσια λήψη ενός μολυσματικού παράγοντα για μια δεδομένη (αρχική) συγκέντρωση μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος, για συγκεκριμένες χρήσεις των περιοχών. Το μοντέλο δεν μπορεί να υπολογίσει την συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα από την σχετιζόμενη μέση ημερήσια λήψη. Αυτό συμβαίνει επειδή στο CLEA η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος δεν είναι μια σταθερή τιμή αλλά μεταβάλλεται με τον χρόνο, λόγω του γεγονότος ότι οι διαδικασίες μετασχηματισμού συμπεριλαμβάνονται στο μοντέλο. Περιλαμβάνεται μια προσέγγιση για τον υπολογισμό αυτόν, αλλά καθίσταται ανενεργή στο αντίστροφο πρόβλημα του CLEA. Το μοντέλο σχετικά με την κατανάλωση φυτών είναι σε θέση να χειριστεί τους οργανικούς και τους μεταλλικούς μολυσματικούς παράγοντες.

Η έκθεση υπολογίζεται ως συνάρτηση του χρόνου, συμπεριλαμβανομένων των φυσικών διαδικασιών της αποικοδόμησης και της διασποράς. Οι διαδικασίες μετασχηματισμού περιλαμβάνουν την φωτόλυση, την χημική αντίδραση, την εξάτμιση, την βιο-αποικοδόμηση, την απορροή, την διάβρωση, την διήθηση και την συγκομιδή των καρπών. Για τους οργανικούς μολυσματικούς παράγοντες χρησιμοποιείται η πρώτη προσέγγιση του Jury (1983) για τον προσδιορισμό της φυσικής αποικοδόμησης.

Το μοντέλο CLEA χρησιμοποιεί 18 διαστήματα ηλικίας. Τα πρώτα 16 διαστήματα αντιστοιχούν στα πρώτα 16 έτη ζωής. Τα τελευταία δύο διαστήματα είναι η οικονομικά ενεργή ζωή, από 16 έως 59 έτη και το διάστημα από 60 έως 70 έτη.

Τα πιθανά σενάρια έκθεσης και οι οδοί έκθεσης του μοντέλου CLEA παρουσιάζονται παρακάτω. Για την σύγκριση του μοντέλου με τα υπόλοιπα λαμβάνονται υπόψη τα σενάρια και οι οδοί έκθεσης τα οποία επισημαίνονται με πλάγια γραφή.

Σενάρια έκθεσης:

1. *οικιστικό με κήπο,*
2. *οικιστικό χωρίς κήπο,*
3. *κήπος με οπωροκηπευτικά,*
4. *πάρκα, παιδότοποι και ανοικτοί χώροι,*
5. *εμπορικό / βιομηχανικό.*

Οδοί έκθεσης:

1. κατάποση χόματος (υπαίθριος χώρος),
2. κατάποση σκόνης (εσωτερικός χώρος),
3. κατάποση μολυσματικών παραγόντων μέσω καρπών που καλλιεργούνται στο κτήμα του σπιτιού,
4. κατάποση χόματος προσκολλημένου στους καρπούς,
5. επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες του εδάφους σε υπαίθριο χώρο,
6. επαφή μέσω του δέρματος με σκόνη σε εσωτερικό χώρο,
7. εισπνοή αιωρούμενης σκόνης σε υπαίθριο χώρο,
8. εισπνοή αιωρούμενης σκόνης σε εσωτερικό χώρο,
9. εισπνοή ατμών προερχόμενων από το έδαφος σε υπαίθριο χώρο,
10. εισπνοή ατμών προερχόμενων από το έδαφος σε εξωτερικό χώρο,
11. κατάποση πόσιμου νερού από το κεντρικό δίκτυο*,
12. επαφή μέσω του δέρματος με το νερό του κεντρικού δικτύου κατά τη διάρκεια του πλυσίματος, μπάνιου κ.λ.π.*,
13. εισπνοή ατμών κατά τη διάρκεια του πλυσίματος, μπάνιου και των ατμών που προέρχονται από το κεντρικό δίκτυο νερού*.

* Δεν υπολογίζεται όταν είναι διαθέσιμη η εκτίμηση της μέσης ημερήσιας λήψης από τις πηγές του περιβάλλοντος χώρου (όχι-έδαφος).

Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το μοντέλο του Ηνωμένου Βασιλείου, CLEA, σας παραπέμπω στην παρακάτω βιβλιογραφία: CLR-7, CLR-8, CLR-9, CLR-10 και CLR-11.

2.4.2 THE UMWELTMEDIZINISCHE BEURTEILUNG DER EXPOSITION DES MENSCHEN DURCH ALTLASTBEDINGTE SCHADSTOFFE (UMS)

Στην Γερμανία για μια λεπτομερή αξιολόγηση εγκαταλειμμένων μολυσμένων περιοχών έχει αναπτυχθεί το μοντέλο UMS, το οποίο υπολογίζει το είδος και την έκταση της έκθεσης για την ανθρώπινη υγεία και το υπόγειο νερό. Με βάση φυσικοχημικά και τοξικολογικά στοιχεία, χαρακτηριστικά της υπό εξέταση συγκεκριμένης περιοχής και την συμπεριφορά του πληθυσμού, το μοντέλο

ποσοτικοποιεί την πραγματική ή την πιθανή έκθεση σχετική με την ανθρώπινη υγεία. Για αυτό το λόγο το UMS περιγράφει την εκπομπή και τη κατανομή των οργανικών και μεταλλικών μολυσματικών παραγόντων στο περιβάλλον καθώς επίσης και την συχνότητα έκθεσης, τον ρυθμό λήψης, την απορρόφηση και την βιολογική διαθεσιμότητα των μολυσματικών παραγόντων για τις διάφορες ομάδες έκθεσης. Μόνο η μεταφορά των μολυσματικών παραγόντων στα υπόγεια νερά υπολογίζεται ως συνάρτηση με τον χρόνο, συμπεριλαμβανομένων των διαδικασιών διασποράς (μοντέλο SISIM). Οι διαδικασίες μετασχηματισμού, όπως η φωτόλυση, η χημική αντίδραση, η εξάτμιση ή η βιο-αποικοδόμηση, δεν χρησιμοποιούνται στο μοντέλο UMS.

Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί μια σταδιακή διαδικασία που αποτελείται από τις ακόλουθες πέντε ενότητες:

1. *Μοντέλο περιοχής*: ανακαλύπτει τις σχετικές οδούς κάθε ομάδας έκθεσης (Πίνακας 2.6).
2. *Μοντέλο μεταφοράς*: προσομοιώνει την μεταφορά των ρύπων από:
 - α) τον αέρα κοντά στο έδαφος στον εσωτερικό και υπαίθριο αέρα,
 - β) το έδαφος στη σκόνη,
 - γ) το έδαφος στα φυτά,
 - δ) το έδαφος στο νερό μέσω διήθηση από τους πόρους και στα υπόγεια νερά,
 - ε) τα υπόγεια νερά στα πηγάδια.

Οι τρεις τύποι εδάφους που χρησιμοποιεί είναι: αμμώδες έδαφος, πηλώδες έδαφος και λασπώδες έδαφος.

3. Το *SISIM* υπολογίζει την μεταφορά των μολυσματικών παραγόντων στην ακόρεστη ζώνη με βάση τις συνθήκες ισορροπίας (συντελεστές κατανομής). Περιγράφει την μετακίνηση των μολυσματικών παραγόντων μέσα και ανάμεσα στις τρεις διαφορετικές φάσεις στο χώμα:
 - α) ως διαλυτή ουσία διαλυμένη στο νερό,
 - β) ως αέριο στην αέρια φάση,
 - γ) ως προσροφημένη ουσία στη στερεά φάση.
4. *Μοντέλο έκθεσης*: υπολογίζει τους πραγματικούς, λανθάνοντες και πιθανούς κινδύνους των ομάδων έκθεσης που ζουν ή που εργάζονται στις μολυσμένες περιοχές. Τα εννέα πιθανά σενάρια έκθεσης είναι:

- i) παιδότοποι,
 - ii) αγρανάπαυση,
 - iii) δημόσια πάρκα,
 - iv) κήπος με οπωροκηπευτικά,
 - v) οικιστικό,
 - vi) εμπορικά κτίρια,
 - vii) αθλητικές περιοχές,
 - viii) βιομηχανικές περιοχές,
 - ix) πηγάδια.
5. *Μοντέλο έκβασης*: δίνει μια γενική άποψη του υπολογισμένου συνολικού κινδύνου (πίνακες/γραφική απεικόνιση) σε σύγκριση με τον κίνδυνο του περιβάλλοντος χώρου (background) καθώς ο περιβάλλον χώρος υπερβαίνει το ποσοστό.

Πίνακας 2.6: Οι ομάδες έκθεσης και οι κατηγορίες της ηλικίας στο μοντέλο UMS.

Ομάδες έκθεσης	Ηλικία (έτη)
Βρέφος	< 1
Μικρό παιδί	1-3
Παιδί	4-8
Νέος	9-16
Ενήλικος	> 16
Ολική περίοδο ζωής	0-46

Τα πιθανά σενάρια έκθεσης και οι οδοί έκθεσης του μοντέλου UMS παρουσιάζονται παρακάτω. Για την σύγκριση του μοντέλου με τα υπόλοιπα λαμβάνονται υπόψη τα σενάρια και οι οδοί έκθεσης τα οποία επισημαίνονται με πλάγια γραφή.

Τα πιθανά σενάρια έκθεσης του μοντέλου UMS είναι:

1. παιδότοποι,
2. δημόσια πάρκα,
3. κήπος με οπωροκηπευτικά,
4. οικιστικό,
5. αγρανάπαυση,
6. βιομηχανική περιοχή.

Οι οδοί έκθεσης του μοντέλου UMS είναι:

Στοματική οδός:

1. κατάποση σωματιδίων χόματος σε υπαίθριο χώρο,
2. κατάποση σκόνης σε εσωτερικό χώρο,
3. κατάποση πόσιμου νερού,
4. κατάποση νερού κατά την διάρκεια μπάνιου,
5. κατανάλωση καρπών,
6. κατάποση ψαριών.

Αναπνευστική οδός:

7. εισπνοή ατμών (αέρια) σε εσωτερικό χώρο,
8. εισπνοή σκόνης σε εσωτερικό και υπαίθριο χώρο.

Επαφή μέσω του δέρματος:

9. επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες σε υπαίθριο χώρο,
10. επαφή μέσω του δέρματος κατά την διάρκεια του μπάνιου.

2.4.3 THE CALIFORNIA ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, DEPARTMENT OF TOXIC SUBSTANCES CONTROL (CalTOX)

Το μοντέλο CalTOX αποτελείται από ένα σύνολο υπολογιστικών μοντέλων και στοιχείων που σχετίζουν την συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στο έδαφος με τον κίνδυνο δυσμενούς επίπτωσης στην υγεία για ένα πρόσωπο που ζει ή εργάζεται στο χώρο αυτόν ή κοντά στο μολυσμένο έδαφος (CalTOX, 1993).

Υπολογίζει τις συγκεντρώσεις καθαρισμού του εδάφους σε συγκεκριμένη περιοχή βασισμένες στην υγεία του ανθρώπινου οργανισμού δεδομένων των επιπέδων κινδύνου, ή την επικινδυνότητα της ανθρώπινης υγείας δεδομένων των εδαφολογικών συγκεντρώσεων της συγκεκριμένης περιοχής. Ο κίνδυνος, βασισμένος στα επίπεδα ελέγχου για τους μολυσματικούς παράγοντες στο έδαφος για την άμεση κατάποση, βασίζεται σε μια μεθοδολογία που υπολογίζει αντίστροφα το επίπεδο της συγκέντρωσης του εδάφους από έναν δεδομένο κίνδυνο (για τις καρκινογόνες ουσίες) ή από το πηλίκο ενός κινδύνου (για τις μη-καρκινογόνες ουσίες).

Το μοντέλο CalTOX, κατά φθίνουσα σειρά αξιοπιστίας, είναι σε θέση να χειριστεί μη-ιονικές οργανικές χημικές ουσίες, ραδιονουκλεΐδια, πλήρως

διαχωρίσιμες οργανικές και ανόργανες χημικές ουσίες και είδη μετάλλων σε στερεή φάση. Με ιδιαίτερη προσοχή στα δεδομένα εισόδου, το μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τα μερικώς διαχωρίσιμα οργανικά και ανόργανα είδη. Για την κατανομή εδάφους/ύδατος χρησιμοποιείται στο CalTOX ένας προσαρμοσμένος συντελεστής διανομής, K_d , για τα διαχωρίσιμα είδη. Αυτό το ζήτημα εισάγει ένα σημαντικό ποσοστό αβεβαιότητας στις εκτιμήσεις έκθεσης για τα είδη που διαχωρίζουν. Εντούτοις, επειδή το CalTOX μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να φέρει εις πέρας τυπικές αναλύσεις αβεβαιότητας χρησιμοποιώντας τις μεθόδους Monte Carlo, αυτοί οι τύποι αβεβαιοτήτων μπορούν σαφώς να αντισταθμιστούν. Το CalTOX δεν έχει σχεδιαστεί να αντιμετωπίζει απορρυπαντικά, ανόργανα χημικά είδη με υψηλή πίεση ατμού σε αναλογίες διαλυτότητας και πτητικά μέταλλα όπως είναι ο υδράργυρος.

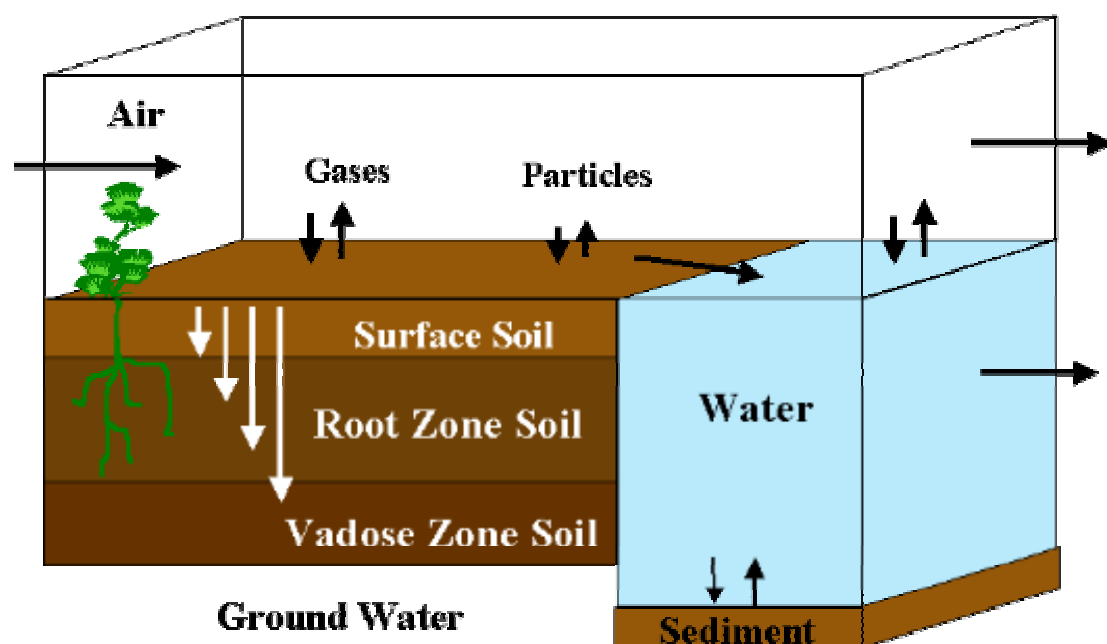
Το CalTOX αποτελείται από ένα μοντέλο το οποίο περιγράφει την μεταφορά του μολυσματικού παράγοντα και ένα άλλο το οποίο περιγράφει τον μετασχηματισμό του και τα οποία χρησιμοποιούν εξισώσεις βασισμένες στη διατήρηση της μάζας και της χημικής ισορροπίας. Οι πηγές των μολυσματικών παραγόντων μπορεί να είναι στον αέρα, στην επιφάνεια του εδάφους, στις ρίζες των φυτών, στο έδαφος κάτω από τις ρίζες των φυτών, στο επιφανειακό και στο υπόγειο νερό. Το μοντέλο υποθέτει ότι το έδαφος είναι το πρωταρχικό περιβαλλοντικό μέσο το οποίο μολύνεται από ένα επικίνδυνο απόβλητο. Το CalTOX προβλέπει τις χρονικά εξαρτημένες συγκεντρώσεις μιας χημικής ουσίας στα οκτώ περιβαλλοντικά τμήματα σε μια περιοχή (Σχήμα 2.1):

1. αέρας (air),
2. τρία στρώματα εδάφους (επιφανειακό έδαφος/ground-surface soil, ριζώδης-ζώνη του εδάφους/ rooting-zone soil, υπέδαφος/vadose-zone soil),
3. υπόγειο νερό (groundwater),
4. φυτά (plants),
5. επιφανειακό νερό (surface water),
6. ίζημα (sediment).

Οι ποσότητες ή οι συγκεντρώσεις μέσα στα τμήματα περιγράφονται από ένα σύνολο γραμμικών, εξαρτημένων, πρώτης τάξης διαφορικών εξισώσεων. Οι μολυσματικοί παράγοντες κινούνται και διαφεύγουν από κάθε τμήμα μέσω μιας σειράς διαδικασιών μεταφοράς και μετασχηματισμού που μπορεί να αντιπροσωπευθεί

από μαθηματικής απόψεως ως πρώτης τάξης απώλειες. Η κίνηση μιας τοξικής ουσίας περιγράφεται με την κατανομή των χημικών ειδών μεταξύ των προαναφερθέντων περιβαλλοντικών τμημάτων. Το CalTOX προσομοιώνει τις διαδικασίες αποσύνθεσης και μετασχηματισμού ως πρώτης τάξης αμετάκλητες κινήσεις. Η αποσύνθεση και ο μετασχηματισμός προσαρμόζονται στο CalTOX ως πρώτης τάξης ή ψευδο-πρώτες αμετάκλητες απώλειες.

Σε κάθε περιβαλλοντικό μέσο ορίζεται ένας ρυθμός μετασχηματισμού, το οποίο προσαρμόζεται στον απογραφικό κατάλογο σε εκείνο το τμήμα.



Σχήμα 2.1: Γραφική απεικόνιση των οκτώ περιβαλλοντικών τμημάτων του CalTOX.

Το CalTOX χρησιμοποιείται:

1. για να υπολογίζει την μακροπρόθεσμη συγκέντρωση της χημικής ουσίας που συσσωρεύεται με τον καιρό και η οποία χημική ουσία τοποθετείται αρχικά σε ένα από τα στρώματα του εδάφους,
2. για να υπολογίζει την σταθερή κατάσταση της σχέσης πηγή-δόση για μια συνεχή εκπομπή μιας χημικής ουσίας στον αέρα, στο επιφανειακό έδαφος, στις ρίζες των φυτών, σε έδαφος μεγάλου βάθους, στο επιφανειακό νερό και στα ιζήματα.

Για κάθε μια από αυτές τις επιλογές υπολογισμού, ο χρησιμοποιούμενος ρυθμός μετασχηματισμού έχει άμεσες επιπτώσεις στην κατ' εκτίμηση αναλογία πηγής-δόση που χρησιμοποιείται στην αξιολόγηση του κινδύνου. Οι διαδικασίες μετασχηματισμού είναι η φωτόλυση, η υδρόλυση, η οξείδωση, η αποικοδόμηση και ο μικροβιακός μετασχηματισμός.

Στο CalTOX χρησιμοποιούνται τα ακόλουθα σενάρια έκθεσης. Για την σύγκριση του μοντέλου με τα υπόλοιπα λαμβάνονται υπόψη τα σενάρια και οι οδοί έκθεσης τα οποία επισημαίνονται με πλάγια γραφή.

Κατάποση:

1. *κατάποση χώματος,*
2. *κατάποση νερού κεντρικού δικτύου,*
3. *κατάποση νερού κεντρικού δικτύου κατά την διάρκεια πλυσίματος, μπάνιου, κ.λ.π.,*
4. *κατανάλωση φρούτων, καρπών και δημητριακών (εναπόθεση στα φυτά, στο έδαφος και στο νερό άρδευσης από τον αέρα),*
5. *κατανάλωση κρέατος, γάλατος και αυγών (αέρας και έδαφος στα φυτά και στα ζώα, αέρας, έδαφος και νερό στα ζώα),*
6. *κατανάλωση ψαριών και θαλασσινών,*
7. *κατάποση μητρικού γάλατος (μέσω του αέρα, του εδάφους και του νερού),*
8. *κατάποση επιφανειακού νερού κατά την διάρκεια πλυσίματος, μπάνιου. κ.λ.π..*

Εισπνοή:

9. *εισπνοή αερίων και σωματιδίων σε υπαίθριο χώρο,*
10. *εισπνοή αερίων και σωματιδίων που μεταφέρονται από τον υπαίθριο χώρο στον εσωτερικό χώρο,*
11. *εισπνοή ατμών και σωματιδίων του εδάφους που μετανάστευσαν ή μεταφέρθηκαν στον εσωτερικό χώρο,*
12. *εισπνοή σε εσωτερικό χώρο μολυσματικών παραγόντων που μεταφέρονται από το νερό του κεντρικού δικτύου.*

Επαφή μέσω του δέρματος:

13. *επαφή μέσω του δέρματος με το χώμα,*
14. *επαφή μέσω του δέρματος στα λουτρά και τα ντους,*
15. *επαφή μέσω του δέρματος κατά την διάρκεια του πλυσίματος, μπάνιου, κ.λ.π..*

Το μοντέλο έκθεσης πολλαπλών οδών απαιτεί είτε μετρημένες συγκεντρώσεις είτε υπολογισμένες τιμές από το μοντέλο μεταφοράς και μετασχηματισμού. Το CalTOX καθορίζει τη χημική συγκέντρωση στα ακόλουθα μέσα έκθεσης:

1. αέρα που αναπνέουμε,
2. πόσιμο νερό,
3. τρόφιμα,
4. χώμα που οι άνθρωποι εισπνέουν,
5. χώμα που οι άνθρωποι καταναλώνουν,
6. επαφή μέσω του δέρματος.

Η κατανομή των δεδομένων εισόδου στο CalTOX αναπτύσσεται για τρεις κατηγορίες ηλικιών, παιδιά (από 1 έως 15 έτη), ενήλικοι (από 16 έως 70 έτη) και ένα ισοδύναμο διάρκειας ζωής (από 1 έως 70 έτη).

Το CalTOX χρησιμοποιεί τις εξισώσεις που βρίσκονται στο U.S. Environmental Protection Agency Risk Assessment Guidance for Superfund (US-EPA RAGS) για να εκτιμήσει την έκθεση και τον κίνδυνο. Πολλά από τα ζητήματα που περιγράφονται στο RAGS και σχετίζονται με το χαρακτηρισμό έκθεσης από επιλεγμένες οδούς έκθεσης συμπεριλαμβάνονται στο Exposure Factors Handbook (EFH).

Το CalTOX έχει την ικανότητα της διενέργειας προσομοιώσεων Monte Carlo. Επομένως κάθε παράγοντας έκθεσης αντιπροσωπεύεται από μια κατανομή πιθανότητας, με έναν μέσο όρο, έναν συντελεστή απόκλισης και έναν τύπο κατανομής. Χρησιμοποιούμενο κατ' αυτό τον τρόπο, το CalTOX θα παρουσιάσει ένα πεδίο τιμών για τον κίνδυνο ή για το επίπεδο καθαρισμού του εδάφους βασισμένο στην υγεία, γεγονός που απεικονίζει την αβεβαιότητα και τη μεταβλητότητα των εκτιμήσεων.

Για περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το μοντέλο των Ηνωμένων Πολιτειών, CalTOX, σας παραπέμπω στην παρακάτω βιβλιογραφία: CalTOX Part I, Part II, Part III, Part IV και CalTOX Version 2.3.

2.4.4 CONTAMINATED SOIL (CSOIL)

Το μοντέλο CSOIL έχει αναπτυχθεί για να υπολογίζει (αντίστροφος-υπολογισμός) την συγκέντρωση του μολυσμένου εδάφους (SCC), στην οποία ξεπερνιέται το τοξικό μέγιστο επιτρεπόμενο όριο (MPR) για τον άνθρωπο. Το μοντέλο χρησιμοποιείται για την ποσοτικοποίηση της ανθρώπινης έκθεσης σε ρύπους από το έδαφος για μια κατοικημένη περιοχή σε τοπική κλίμακα.

Στο CSOIL δεν εισάγονται δεδομένα εκπομπής, αλλά χρησιμοποιείται μόνο η έννοια της κατανομής για τα τρία τμήματα του εδάφους, στερεό έδαφος, νερό πόρων και αέρας εδάφους. Η συγκέντρωση του εδάφους υπολογίζεται στο επίπεδο όπου η έκθεση είναι ίση με το MPR. Χωρίς το τοξικό μέγιστο επιτρεπόμενο όριο για τον άνθρωπο το CSOIL δεν μπορεί να υπολογίσει την συγκέντρωση του μολυσμένου εδάφους (SCC).

Το μοντέλο έκθεσης CSOIL έχει αναπτυχθεί για την εξαγωγή τιμών παρέμβασης (Intervention Values) για τον καθαρισμό του εδάφους και των υπόγειων νερών. Αυτές οι τιμές παρέμβασης είναι, παραδείγματος χάριν, υπολογισμένες με βάση την πιθανή αξιολόγηση του κινδύνου για τους ανθρώπους που εκτίθενται στους μολυσματικούς παράγοντες του εδάφους (Van den Berg, 1995). Οι φυσικοχημικές ιδιότητες του μολυσματικού παράγοντα, μαζί με τις ιδιότητες του εδάφους, χαρακτηριστικά λήψης των φυτών, ανθρώπινα φυσικά χαρακτηριστικά, ανθρώπινη συμπεριφορά, κλιματολογικά/μετεωρολογικά κριτήρια και άλλες υποθέσεις οδηγούν στην ποσοτικοποίηση της πιθανής έκθεσης. Η έκθεση συγκρίνεται με το τοξικό μέγιστο επιτρεπόμενο όριο για τον άνθρωπο (MPR).

Ο συνδυασμός του MPR με την συγκέντρωση του εδάφους δίνει τις τιμές παρέμβασης (Intervention Values) βασισμένες στην ανθρώπινη τοξικολογία (former C-value) για το έδαφος και τα υπόγεια νερά για μια τυποποιημένη κατάσταση (DGM, 1994a, b). Υπέρβαση των τιμών παρέμβασης συνεπάγεται "σοβαρή μόλυνση του εδάφους", ένας απαράδεκτα αυξανόμενος κίνδυνος για τους ανθρώπους ή το περιβάλλον, λαμβάνοντας υπόψη όλες τις πιθανές οδούς έκθεσης (Van den Berg et al., 1993).

Στο CSOIL για τον προσδιορισμό της ανθρώπινης έκθεσης λαμβάνονται υπόψη οι ακόλουθοι άμεσοι και έμμεσοι οδοί έκθεσης:

1. κατάποση μολυσμένων σωματιδίων από το έδαφος,
2. επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες (εσωτερικός χώρος),
3. επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες (εξωτερικός χώρος),
4. εισπνοή μολυσμένων σωματιδίων από το έδαφος,
5. εισπνοή ατμών των μολυσματικών παραγόντων από το διάστημα κάτω από το σπίτι (εσωτερικός χώρος),
6. εισπνοή ατμών των μολυσματικών παραγόντων (υπαίθριος χώρος),
7. κατάποση μολυσματικών παραγόντων μέσω της κατανάλωσης τοπικών καλλιεργήσιμων καρπών,
8. κατάποση μολυσματικών παραγόντων από το έδαφος μέσω του πόσιμου νερού,
9. εισπνοή ατμών των μολυσματικών παραγόντων στο πόσιμο νερό κατά τη διάρκεια μπάνιου,
10. επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες στο πόσιμο νερό κατά τη διάρκεια μπάνιου.

Για τον προσδιορισμό των σοβαρών τοξικών συγκεντρώσεων του μολυσμένου εδάφους για τον άνθρωπο (HUMTOX SCC) με το μοντέλο CSOIL μερικοί άμεσοι (ιδιαίτερα μέσω του επιφανειακού νερού) και έμμεσοι (μέσω των ψαριών, του κρέατος και άλλων ζωικών παραγόμενων προϊόντων) οδοί δεν λαμβάνονται υπόψη. Για μια "πραγματική" ανάλυση έκθεσης αυτοί οι οδοί μπορούν ενδεχομένως να είναι σχετικές. Επομένως στο CSOIL οι έμμεσοι οδοί μέσω της κατανάλωσης προϊόντων κρέατος και γάλακτος ποσοτικοποιούνται, αλλά δεν λαμβάνονται υπόψη για τον προσδιορισμό του HUMTOX SCC.

Το μοντέλο CSOIL είναι βασισμένο στην ισορροπία μεταξύ των τμημάτων και στις στατικές εξισώσεις μεταφοράς. Για το CSOIL μπορούν να αναφερθούν οι ακόλουθοι περιορισμοί:

- δεν συμπεριλαμβάνεται καμία βιολογική αποσύνθεση,
- η πηγή των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος είναι ανεξάντλητη,
- το έδαφος είναι ομοιογενές,
- στο έδαφος υπάρχει ισορροπία σε όλο το βάθος της μόλυνσης, αλλά επάνω από αυτό δεν θεωρείται ύπαρξη κατάστασης ισορροπίας,
- καμία παράλληλη μεταφορά ή διήθηση.

Λόγω αυτών των περιορισμών και του γεγονότος ότι το CSOIL δεν είναι κατάλληλο για τον υπολογισμό της ανθρώπινης έκθεσης σε συγκεκριμένη περιοχή, αναπτύχθηκε το μοντέλο VOLASOIL (Waitz et al., 1996). Αυτό το μοντέλο χρησιμοποιείται για τον καθορισμό του πραγματικού κινδύνου από την μόλυνση του εδάφους.

2.5 ΚΑΤΑΠΟΣΗ ΜΟΛΥΣΜΕΝΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΑΠΟ ΤΟ ΕΔΑΦΟΣ

2.5.1 CLEA

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Ο ρυθμός κατάποσης χώματος και η διάρκεια έκθεσης εξαρτώνται από το επιλεγμένο σενάριο έκθεσης. Για κάθε σενάριο οι διαφορετικοί (μέση τιμή) ρυθμοί κατάποσης χώματος παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.7**. Από την τεκμηρίωση του CLEA (1998) δεν είναι σαφές ποιες εκτιμήσεις και ποια ακριβή στοιχεία είναι η βάση για τους ρυθμούς κατάποσης χώματος που παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.7**. Εντούτοις, στο CLEA (1998) υπάρχουν σύντομες περιλήψεις που παρουσιάζουν γνωστές μελέτες και άρθρα σχετικά με την κατάποση σωματιδίων χώματος, όπως Binder et al. (1986), Van Wijnen et al. (1990), Calabrese et al. (1989) και Davis et al. (1990).

Για τα σενάρια "οικιστικό με κήπο" και "χώροι αναψυχής" του CLEA, δεν εξετάζεται μόνο η ακούσια κατάποση χώματος, αλλά και η περιστασιακά εκούσια κατάποση. Για την κατηγορία ηλικίας από 1 έως 6 έτη η εκούσια κατάποση χώματος προσμετράτε μόνο για το δεύτερο έτος ζωής κάποιου.

Ο περιστασιακά σκόπιμος (εξερευνητικός) ρυθμός κατάποσης χώματος είναι βασισμένος σε μια λογική εκτίμηση για τα παιδιά τα οποία τρώνε χώμα (η κατάποση χώματος είναι μια εκούσια επίμονη και σκόπιμη συνήθεια) και είναι 10 g/d. Εντούτοις φαίνεται πολύ απίθανο το γεγονός ότι ο μεγαλύτερος αριθμός παιδιών που περνούν από μια φάση εξερεύνησης τρώγοντας χώμα θα καταναλώσει χώμα σε αυτό το ποσοστό. Για αυτά τα παιδιά έχει επιλεγεί 5 g/d ως προσωρινός σκόπιμος ρυθμός κατάποσης χώματος, και αυτό εξαιτίας της ακούσιας επαφής του χεριού με το στόμα. Σύμφωνα με το CLEA (1998) ακόμη και μια βραχυπρόθεσμη εξερευνητική κατανάλωση χώματος 5 g/d μπορεί να ασκήσει σημαντική επίδραση στην λήψη μολυσματικών παραγόντων στην παιδική ηλικία από το χώμα. Για το σενάριο

"οικιστικό με κήπο" μια εκούσια κατάποση χώματος 5 g/d κατά τη διάρκεια 15 ημερών για την περίοδο από 1 έως 6 έτη έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση της μέσης ετήσιας δόσης περισσότερο από 40%.

Πίνακας 2.7: Ρυθμός κατάποσης χώματος στο CLEA (CLEA, 1998).

Σενάρια έκθεσης	Κατηγορία ηλικίας (year)	Κατάποση χώματος (μέση τιμή) (mg/d)	Διάρκεια έκθεσης (day/year)	Εκούσια κατάποση χώματος (mg/d)	Μέση ετήσια έκθεση (mg/d)	Κατανομή
Οικιστικό με κήπο	1-6	80	365	5000 ¹	114 ²	Λογαριθμική
	7-16	60	365	0	60	Λογαριθμική
	> 16	60	365	0	60	Κανονική
Οικιστικό χωρίς κήπο	1-6	80	365	0	80	Λογαριθμική
	7-16	60	365	0	60	Λογαριθμική
	> 16	5	365	0	50	Κανονική
Χώροι αναψυχής	1-6	80	54	5000 ¹	46 ²	Λογαριθμική
	7-16	60	54	0	9	Λογαριθμική
	> 16	70	365	0	70	Κανονική

- 1) Η εκούσια συνιστώσα κατανάλωσης υποτίθεται ότι ισχύει μόνο στο δεύτερο έτος ζωής. Το ποσοστό λαμβάνεται ως 5 g/d για n ημέρες, όπου το n είναι μια μεταβλητή Monte Carlo που προέρχεται από μια ομοιόμορφη κατανομή (η κατανομή χαρακτηρίζεται από ένα ανώτερο και ένα κατώτερο όριο και όλες οι τιμές των παραμέτρων έχουν την ίδια πιθανότητα) μεταξύ n = 0 και n = 30.
- 2) Η μέση ετήσια έκθεση υπολογίζεται για μια εκούσια κατάποση χώματος 5 g/d για 15 ημέρες κατά τη διάρκεια της περιόδου 1-6 έτη.

Στο CLEA η μέση ημερήσια δόση (EDI) μέσω της υπαίθριας κατάποσης χώματος υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$EDI = \frac{1}{\sum (\Delta T)_i} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{C_i \cdot (IR)_i \cdot (ED)_i}{W_i}$$

$\Sigma(\Delta T)_i$:	συνολικός αριθμός ημερών έκθεσης	[day]
n:	αριθμός ετών	[-]
C_i :	μέση συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα στο έδαφος	[mg/g]
$(IR)_i$:	ρυθμός κατάποσης χώματος	[g/day]
$(ED)_i$:	αριθμός ημερών έκθεσης στο υπαίθριο έδαφος	[day]
W_i :	σωματικό βάρος	[Kg]

2.5.2 UMS

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Η κατάποση χόματος και η διάρκεια έκθεσης εξαρτώνται από το σενάριο έκθεσης. Για το μοντέλο UMS λαμβάνεται υπόψη όχι μόνο η άμεση λήψη χόματος, αλλά και η έμμεση λήψη μέσω της εισπνοής και στη συνέχεια κατάποση των σωματιδίων σκόνης. Στο UMS υποτίθεται ότι 60% της εισπνεόμενης σκόνης μεταφέρεται πίσω στη στοματική κοιλότητα και μετά λαμβάνεται στοματικά. Για την άμεση και έμμεση διαδρομή λήψης ένας διαφορετικός ρυθμός ημερήσιας δόσης (DIR) χρησιμοποιείται. Το DIR για την έμμεση κατάποση χόματος είναι αμελητέο σε σύγκριση με την άμεση διαδρομή. Οι πιο πρόσφατοι άμεσοι ρυθμοί κατάποσης χόματος παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.9** (UMS, 1997). Οι τιμές της μέσης ημερήσιας δόσης (DIR) για την έμμεση διαδρομή είναι τουλάχιστον 100 φορές μικρότερες από εκείνες της άμεσης διαδρομής και θεωρούνται αμελητέες.

Στην τεκμηρίωση του UMS ένα μεγάλο φάσμα από 50 mg/d έως 1 g/d περιγράφεται για τις ημερήσιες τιμές κατάποσης χόματος για τα παιδιά. Οι τιμές του UMS για τη μέση κατάποση χόματος για τα διαφορετικά σενάρια για τα μικρά παιδιά είναι 250 mg/d και για τα παιδιά είναι 150 mg/d, οι οποίες είναι κυρίως υπολογισμένες με βάση τις τιμές που παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.8** (AGLMB, 1995). Στο μοντέλο UMS η εκούσια κατάποση χόματος από τα παιδιά, συμπεριλαμβανομένου των geophagic ή pica, δεν λαμβάνεται υπόψη. Για το οικιστικό σενάριο μόνο για τα παιδιά η κατάποση σωματιδίων χόματος και σκόνης χρησιμοποιείται από το μοντέλο UMS. Εξαρτώμενοι από τον χρόνο που παίζουν τα παιδιά σε υπαίθριο χώρο οι διαφορετικοί συντάκτες υπολογίζουν την κατάποση του χόματος και της σκόνης για τα παιδιά σε περίπου 100 mg/d (Hawley 1985, Davis et al. 1990, Paustenbach et al. 1996). Οι προεπιλεγμένες τιμές κατάποσης χόματος που παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.9** είναι ρεαλιστικές εκτιμήσεις για την χειρότερη περίπτωση για σπίτια στο κέντρο της πόλης.

Οι τιμές κατάποσης χόματος για τους νεαρούς και τους ενηλίκους (π.χ. το σενάριο με κήπο) είναι βασισμένο σε αναφερθείσες τιμές που κυμαίνονται από 50 mg/d έως 500 mg/d (π.χ. US-EPA 1989, Ruck 1990, Calabrese et al. 1989). Για αυτήν την κατηγορία ηλικιών χρησιμοποιείται ένας ρυθμός στοματικής κατανάλωσης των 100 mg ανά παραμονή για την εντατική χρήση του κήπου. Δεν εξηγείται όμως πώς η

πραγματική τιμή κατάποσης χόματος των 30 mg/d υπολογίζεται για τους νεαρούς και τους ενηλίκους.

Για κάθε σενάριο οι ρυθμοί των συχνοτήτων έκθεσης για τα παιδιά είναι κυρίως βασισμένα στη μελέτη Stubenrauch et al. (1994). Οι ρυθμοί των συχνοτήτων έκθεσης για τις άλλες κατηγορίες ηλικιών προέρχονται από αυτήν την τιμή για τα παιδιά.

Πίνακας 2.8: Μέση ημερήσια κατάποση χόματος (AGLMB, 1995).

Ηλικία	< 1	1-3	4-6	7-9	10-14	15-19	20-75
Κατάποση χόματος (mg/d) Πιθανό σενάριο	20-100	20-100	20-100	5-25	5-25	2-10	2-10
Κατάποση χόματος (mg/d) Χειρότερο σενάριο	100-500	100-500	100-500	25-125	25-125	10-50	10-50

Στο μοντέλο UMS η πιθανή μέση ημερήσια δόση (PDI) μέσω κατάποσης χόματος υπολογίζεται σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο:

$$PDI = DIR \cdot EAF \cdot CCM \cdot AV \cdot R \cdot U \quad [mg / Kg \cdot d]$$

όπου

$$DIR = \frac{IR \cdot EFR \cdot ED}{BW \cdot AT}$$

DIR:	ρυθμός ημερήσιας δόσης, μέση ετήσια	[mg/Kg _{bw} ·day]
EAF:	προσαρμοστικός συντελεστής έκθεσης, προεπιλεγμένη τιμή = 1	[-]
CCM:	συγκέντρωση στο μέσο επαφής (χόμα)	[mg/Kg]
AV:	διαθεσιμότητα από το πλέγμα του χόματος, προεπιλεγμένη τιμή = 1	[-]
R:	ρυθμός αναρρόφησης, προεπιλεγμένη τιμή = 1	[-]
U:	συντελεστής μετατροπής = 10 ⁻⁶	[Kg/mg]
IR:	ρυθμός κατάποσης χόματος	[mg/day]
ED:	διάρκεια έκθεσης (εξαρτάται από το σενάριο)	[year]
EFR:	συχνότητα έκθεσης	[day/year]
BW:	σωματικό βάρος	[Kg]
AT:	Καρκινογενής ουσίες: AT = 70·365 Μη-καρκινογενής ουσίες: AT = ED·365	[day/year]

Ο υπολογισμένος ημερήσιος ρυθμός κατάποσης χόματος παρουσιάζεται στον **πίνακα 2.9**.

Πίνακας 2.9: Ο ημερήσιος ρυθμός κατάποσης χώματος που χρησιμοποιείται στο UMS (UMS, 1997).

Σενάριο έκθεσης	Ηλικία (years)	Σωματικό Βάρος (BW) (Kg)	Κατάποση χώματος (IR) (mg/d)	Διάρκεια έκθεσης (EFR) (d/y)	Μέση ετήσια έκθεση (mg/d)	Ρυθμός ετήσιας μέσης ημερήσιας δόσης (DIR) (mg/Kg·BW·d)
<i>Κήπος με οπωροκηπευτικά</i>	1-3	10	250	180	123	12.33
	4-8	20	150	180	74	3.70
	9-16	40	30	190	16	0.40
	> 16	70	30	190	16	0.22
<i>Οικιστικό</i>	1-3	1	250	150	103	10.3
	4-8	20	150	150	62	3.1

2.5.3 CalTOX

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Στην τεκμηρίωση του CalTOX αναφέρεται ότι η ημερήσια κατάποση χώματος ισχύει μόνο για τις οικιακές χρήσεις του εδάφους. Ο ρυθμός κατάποσης χώματος προσαρμόζεται μόνο για δύο κατηγορίες ηλικίας, επειδή διάφορες μελέτες έχουν δείξει ότι η ακούσια κατάποση χώματος είναι κοινή μεταξύ των παιδιών (Calabrese et al. 1989, Davis et al. 1990, Van Wijnen et al. 1990). Το CalTOX χρησιμοποιεί έναν συντελεστή κατάποσης χώματος, ο οποίος είναι βασισμένος στην ημερήσια κατάποση χώματος, στο σωματικό βάρος και την διάρκεια της έκθεσης για τα παιδιά από 0 έως 15 ετών και τους ενήλικους από 16 έως 70 ετών. Βάσει των συγκεκριμένων πληροφοριών σχετικά με την τοποθεσία ο ρυθμός κατάποσης μπορεί να προσαρμοστεί.

Στο μοντέλο CalTOX ως ισοδύναμη κατάποση για όλη την διάρκεια ζωής του ανθρώπου χρησιμοποιείται η τιμή 22 mg/d. Αυτή η τιμή λήφθηκε από το US-EPA Exposure Factors Handbook (EFH) το 1989 και από την πρώιμη εργασία των Calabrese et al.. Συνδυάζοντας την πληροφορία του 1989 EFH με τις συστάσεις από τους Calabrese et al. (1989) και LaGoy (1987), εξήχθηκαν οι ακόλουθες εκτιμήσεις για την κατάποση χώματος:

- 60 mg/d ($2.2 \cdot 10^{-6}$ kg (soil)/kg-d) για τα παιδιά από 0 έως 15 ετών,
- 10 mg/d ($1.4 \cdot 10^{-7}$ kg (soil)/kg-d) για τους ενήλικες από 16 έως 70 ετών,
- 20 mg/d ($3.5 \cdot 10^{-7}$ kg (soil)/kg-d) για ισοδύναμη διάρκεια ζωής από 0 έως 70 ετών.

Μαζί με την EPA τα πιο πρόσφατα στοιχεία κατάποσης χώματος αναθεωρούνται για να αναπτύξουν την κατανομή κατάποσης σύμφωνα με την ηλικία για την χρήση στο CalTOX. Οι πιο πρόσφατες συστάσεις για την κατάποση χώματος που περιγράφεται από το US-EPA στο EFH παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.10** (US-EPA, 1997). Μέχρι τώρα, αυτές οι τιμές δεν χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CalTOX.

Πίνακας 2.10: Σύνοψη των τιμών για κατάποση χώματος (US-EPA, 1997).

Πληθυσμός	Μέση τιμή	Μέγιστη τιμή
Παιδιά	100 mg/day ^α	400 mg/day ^β
Ενήλικοι	50 mg/day	-
Rica-παιδιά	10 g/day ^γ	-

- α) 200 mg/day μπορούν να θεωρηθούν ως συντηρητική εκτίμηση της μέσης τιμής (US-EPA 1997).
 β) Η περίοδος μελέτης ήταν σύντομη, οπότε, αυτές οι τιμές δεν αποτιμούν την συνήθη κατάποση.
 γ) Να χρησιμοποιείται σε αποτίμηση κινδύνου άμεσης έκθεσης. Βασίζεται σε ένα μόνο rica παιδί (Calabrese et al., 1989).

Στο μοντέλο CalTOX (CalTOX, 1993) η εξίσωση για ακούσια κατάποση χώματος δίνεται παρακάτω:

$$Intake_{soil} = C_g \cdot \frac{IR_{soil}}{BW} \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \cdot CF$$

Intake _{soil} :	δόση από έκθεση του ανθρώπου μέσω κατάποσης χώματος	[mg/Kg _{bw} ·d]
IR _{soil} :	ρυθμός κατάποσης χώματος	[mg/d]
C _g :	συγκέντρωση στην επιφάνεια του εδάφους	[mg/Kg]
BW:	σωματικό βάρος	[Kg]
FI:	κλάσμα κατάποσης χώματος από μολυσματική πηγή	[1]
EF:	συχνότητα έκθεσης	[d/y]
ED:	διάρκεια έκθεσης	[y]
AT:	μέσος χρόνος	[d]
CF:	συντελεστής μετατροπής	[10 ⁻⁶ Kg/mg]

2.5.4 CSOIL

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Οι παρούσες τιμές στο CSOIL για την κατάποση χώματος από παιδιά (1-6 έτος) και από ενήλικες (7-70 έτος) είναι 150 mg/d και 50 mg/d, αντίστοιχα (Van den Berg, 1995). Αυτές οι τιμές είναι κυρίως υπολογισμένες με βάση τις μελέτες των

Hawley (1985), Linders (1990) και Van Wijnen (1990). Στον Hawley (1985) η έκθεση για τα μικρά παιδιά εκτιμάται ότι είναι 150 mg/d, το οποίο υπολογίζεται με βάση την κατάποση χώματος σε υπαίθριο χώρο 250 mg κατά τη διάρκεια 130 ημερών, και την κατάποση σε εσωτερικό χώρο 100 mg/d (182 ημέρες) τον χειμώνα και 50 mg/d (182 ημέρες) το καλοκαίρι. Η κατάποση από τους ενήλικες είναι επίσης βασισμένη στον Hawley (1985), υπολογίζοντας κατάποση 480 mg/d κατά τη διάρκεια 2 ημερών εβδομαδιαίως και 5 μηνών ετησίως (= 57 mg/d). Ο Linders (1990) χρησιμοποιεί έναν ρυθμό 200 mg/d κατάποσης χώματος κατά την διάρκεια 3 ημερών την εβδομάδα (περίπου 86 mg/d μέση ετήσια).

Στο CSOIL η έκθεση ή ο ημερήσιος ρυθμός λήψης (DI) μέσω της κατάποσης χώματος υπολογίζεται με την ακόλουθη εξίσωση:

$$DI = \frac{AID \cdot Cs \cdot fa}{W}$$

AID:	ημερήσια δόση από κατάποση χώματος για ενήλικες/παιδιά	[50/150 mg/d]
Cs:	αναλογία στο χώμα	[mg/Kg]
fa:	συντελεστής απορρόφησης (προεπιλεγμένη τιμή = 1)	[-]
W:	σωματικό βάρος για ενήλικες/παιδιά	[70/15 Kg]

2.5.5 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Ρυθμός κατάποσης χώματος

Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί όχι μόνο την άμεση λήψη χώματος αλλά και μια έμμεση λήψη μέσω της εισπνοής και στη συνέχεια την κατάποση των σωματιδίων σκόνης. Η ημερήσια δόση χώματος μέσω της έμμεσης διαδρομής εμφανίστηκε να είναι αμελητέα έναντι αυτής της άμεσης διαδρομής. Τα μοντέλα CLEA, CalTOX και CSOIL χρησιμοποιούν μόνο την άμεση λήψη χώματος.

Στο CLEA ο περιστασιακός εκούσιος (εξερευνητικός) ρυθμός κατάποσης χώματος είναι βασισμένος σε μια λογική εκτίμηση για τα geophagic-pica παιδιά των 10 g/d. Ακόμη και μια βραχυπρόθεσμη (εξερευνητική) κατάποση χώματος των 5 g/d μπορεί να ασκήσει σημαντική επίδραση στην παιδική ηλικία από την λήψη μολυσματικών παραγόντων από το χώμα. Για το σενάριο του CLEA "οικιστικό με κήπο" η εκούσια κατάποση χώματος 5 g/d κατά τη διάρκεια 15 ημερών κατά την περίοδο 1-6 έτη αυξάνει την μέση ετήσια λήψη περισσότερο από 40%. Καμία

πληροφορία δεν είναι διαθέσιμη για μια σύγκριση της βραχυπρόθεσμης έκθεσης της εκούσιας κατάποσης χώματος ενάντια στα οξέα τοξικολογικά στοιχεία.

Όλα τα μοντέλα χρησιμοποιούν έναν προσαρμοσμένο συντελεστή ηλικίας για την κατάποση χώματος, επειδή η εκούσια κατάποση είναι διαφορετική για τα παιδιά και για τους ενήλικους. Οι χρησιμοποιημένες κατηγορίες ηλικίας και οι αντίστοιχοι ρυθμοί κατάποσης χώματος δεν είναι οι ίδιοι για όλα τα πρότυπα. Βάσει των μέσων ετήσιων ρυθμών κατάποσης χώματος μπορεί να συναχθεί το συμπέρασμα ότι η παρούσα τιμή για τα παιδιά στο CSOIL των 150 mg/d είναι υψηλότερη από τους ρυθμούς κατάποσης των άλλων προτύπων (Πίνακας 2.11). Για τα σχετικά σενάρια των άλλων μοντέλων οι μέσοι ετήσιοι ρυθμοί κατάποσης χώματος για τα παιδιά είναι 123 mg/d και 74 mg/d για το UMS, 114 mg/d για το CLEA και 60 mg/d για CalTOX. Για τους ενήλικες ο ρυθμός κατάποσης του CLEA είναι συγκρίσιμος με την τιμή του CSOIL των 50 mg/d. Ο ρυθμός κατάποσης του προτύπου UMS και CalTOX είναι χαμηλότερος με τιμή 16 mg/d και 10 mg/d, αντίστοιχα. Επιπλέον, πρέπει να σημειωθεί ότι μόνο το μοντέλο του CLEA υπολογίζει έναν επιπρόσθετο εκούσιο ρυθμό κατάποσης χώματος στο δεύτερο έτος ζωής.

Πίνακας 2.11: Ρυθμός κατάποσης χώματος και σύγκριση της χρήσης εκούσιας κατάποσης χώματος από τα μοντέλα.

Μοντέλο	Μέσος ετήσιος ρυθμός κατάποσης χώματος για ενήλικες (mg/d)	Μέσος ετήσιος ρυθμός κατάποσης χώματος για παιδιά (mg/d)	Χρήση εκούσιας κατάποσης για παιδιά	Ρυθμός απορρόφησης ή αναρρόφησης ³
CLEA	60	80/114 ¹	Ναι ²	Όχι
CalTOX	10	60	Όχι	Όχι
UMS	16 ⁴	123 (1-3 έτη) 74 (4-8 έτη)	Όχι	Ναι (προεπιλεγμένη τιμή = 1)
CSOIL	50	150	Όχι	Ναι (προεπιλεγμένη τιμή = 1)

- 1) Χωρίς εκούσια κατάποση χώματος: 80 mg/kg.
Με εκούσια κατάποση χώματος: 114 mg/kg.
- 2) 5000 mg/d για μέγιστη διάρκεια 30 ημερών στο δεύτερο χρόνο της ζωής.
- 3) Λήψη στο ανθρώπινο σώμα.
- 4) Βασισμένο σε κατάποση χώματος 30 mg/d και σε διάρκεια έκθεσης 190 d/y.
- 5) Βασισμένο σε κατάποση χώματος 250 mg/d (1-3) και 150 mg/d (4-8) και σε διάρκεια έκθεσης 180 d/y.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Η βασική ιδέα για τον υπολογισμό της ημερήσιας κατάποσης ή της έκθεσης είναι βασικά η ίδια για όλα τα πρότυπα. Τα CLEA, UMS και CalTOX μπορούν να υπολογίσουν μια ξεχωριστή συχνότητα έκθεσης η οποία συνδυάζεται με ένα ημερήσιο ρυθμό κατάποσης. Για εκείνα τα πρότυπα είναι δυνατό να χρησιμοποιηθεί ένα σενάριο διάρκειας έκθεσης λιγότερο από 365 ημερών ετησίως, το οποίο οδηγεί σε ένα χαμηλότερο μέσο ετήσιο ρυθμό κατάποσης. Μόνο το CSOIL χρησιμοποιεί ένα σταθερό μέσο ετήσιο ρυθμό κατάποσης χώματος και δεν είναι δυνατό να αλλάξει το σενάριο του CSOIL για διάρκεια έκθεσης λιγότερο από 365 ημέρες ετησίως. Για τα οικιστικά σενάρια του CLEA μια διάρκεια έκθεσης των 365 d/y χρησιμοποιείται και δεν είναι επομένως διαφορετική από το CSOIL. Το πρότυπο UMS χρησιμοποιεί μια αρκετά χαμηλότερη διάρκεια έκθεσης από 150 έως 190 d/y, η οποία εξαρτάται από το χρησιμοποιούμενο σενάριο. Για το μοντέλο του UMS οι μέσοι ετήσιοι ρυθμοί κατάποσης είναι επομένως χαμηλότεροι από τους ημερήσιους ρυθμούς. Μια ξεχωριστή συχνότητα έκθεσης συνδυασμένη με ένα ημερήσιο ρυθμό κατάποσης εφαρμόζεται επίσης και στο CalTOX. Για την σύγκριση υποτίθεται ότι το CalTOX χρησιμοποιεί συχνότητα έκθεσης 365 ημερών.

2.6 ΕΙΣΠΝΟΗ ΑΤΜΩΝ ΜΟΛΥΣΜΑΤΙΚΩΝ ΠΑΡΑΓΟΝΤΩΝ ΣΕ ΕΣΩΤΕΡΙΚΟ ΧΩΡΟ

2.6.1 CLEA

Εισπνοή ατμών σε εσωτερικό χώρο

Η εισπνοή ατμών σε εσωτερικό χώρο από το CLEA καθορίζεται από τις ακόλουθες τέσσερις διαδρομές:

1. Εισπνοή σκόνης σε υπαίθριο χώρο,
2. Εισπνοή ατμών από το έδαφος σε υπαίθριο χώρο,
3. Εισπνοή ατμών από το έδαφος σε εσωτερικό χώρο,
4. Εισπνοή ατμού που προέρχεται από τον κεντρικό αγωγό ύδατος σε εσωτερικό χώρο.

Για τον υπολογισμό των πιθανών κινδύνων υποτίθεται ότι ο περιβαλλοντικός αέρας είναι μη μολυσμένος και ότι δεν υπάρχει καμία εσωτερική πηγή μολύνσεων του αέρα. Οι βασικοί μηχανισμοί της μεταφοράς και της διασποράς είναι:

1. Κατανομή του μολυσματικού παράγοντα στη φάση έδαφος-ατμό,
2. Μοριακή διάχυση,
3. Εξαερισμός,
4. Ροή αναρρόφησης (οδηγούσα δύναμη ροής η πίεση).

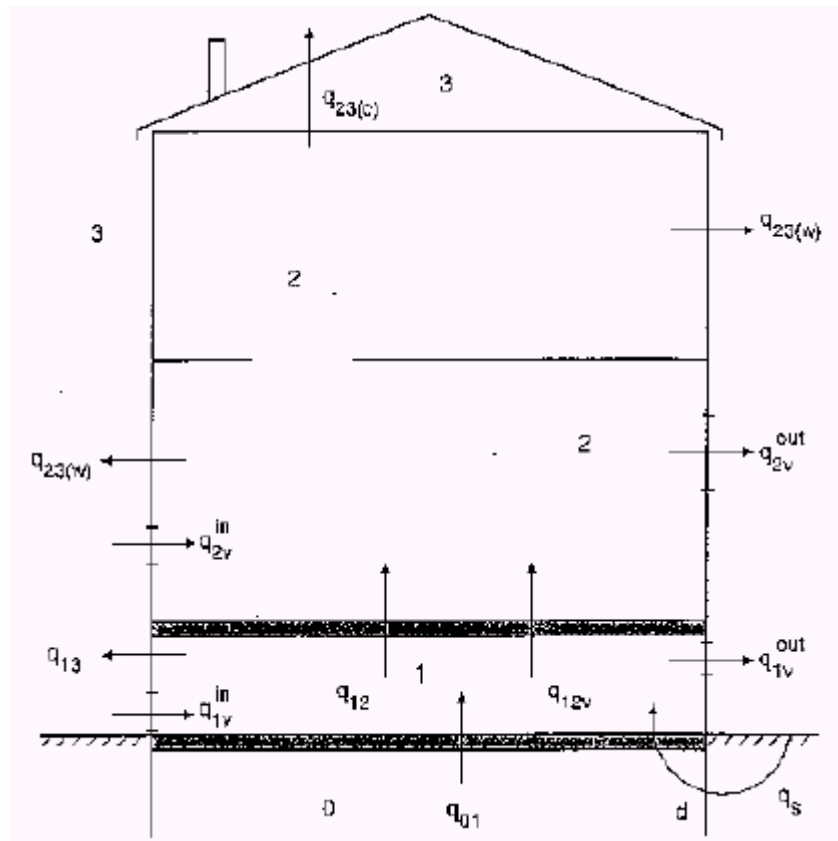
Για τον υπολογισμό της εισπνοής ατμών από το έδαφος σε εσωτερικό χώρο στο μοντέλο CLEA χρησιμοποιούνται μια προσέγγιση τριών και τεσσάρων τμημάτων. Με την προσέγγιση των τριών τμημάτων τα σπίτια διαμορφώνονται χωρίς κενό διάστημα κάτω από την κατοικία, ενώ στην προσέγγιση των τεσσάρων τμημάτων ο κενός χώρος αυτός προστίθεται. Και οι δύο προσεγγίσεις χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των τιμών των κατευθυντήριων οδηγιών.

Στο μοντέλο CLEA οι ροές αέρα στο σπίτι περιγράφονται χρησιμοποιώντας εξισώσεις ισορροπίας, επειδή κάτω από συνθήκες ισορροπίας το συνολικό ποσό του αέρα που εισέρχεται σε κάθε ξεχωριστό όγκο του σπιτιού είναι ίσο με το ποσό του αέρα που εξέρχεται από τον ίδιο όγκο.

Στην προσέγγιση τεσσάρων τμημάτων καθορίζονται τα ακόλουθα τμήματα (**Σχήμα 2.2**):

0. Έδαφος,
1. Κενό διάστημα κάτω από το οίκημα,
2. Ζωτικός χώρος,
3. Υπαίθριος χώρος.

Στο CLEA οι διαφορετικές ροές όπως, η μοριακή διάχυση, ο εξαερισμός και η αναρρόφησης, χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της προκύπτουσας συγκέντρωσης ισορροπίας στον εσωτερικό χώρο. Στο **σχήμα 2.2** παρουσιάζονται όλες οι ροές. Αυτές οι ροές χρησιμοποιούν απλές γραμμικές σχέσεις (Ferguson et al. 1995, Krylov and Ferguson 1998). Όλες οι ροές περιγράφονται αναλυτικά στις ακόλουθες παραγράφους.



Σχήμα 2.2: Σχηματικό διάγραμμα του χωρισμένου σε τμήματα σπιτιού που χρησιμοποιείται στο CLEA. Τα βέλη δείχνουν πιθανές ροές των χημικών ουσιών.

Μοριακή διάχυση

Στο CLEA περιγράφονται τρεις ροές διάχυσης:

- Διάχυση μέσω του εδάφους στην επιφάνεια του εδάφους,
- Διάχυση από το διάστημα κάτω από το σπίτι στον ζωτικό χώρο αυτού,
- Διάχυση μέσω των τοίχων και του ταβανιού.

Εξαερισμός

Ο φυσικός εξαερισμός προκαλείται κυρίως λόγω της διαφοράς πίεσης μεταξύ του εσωτερικού και εξωτερικού αέρα που προκαλείται από τον άνεμο. Υπάρχουν δύο όγκοι εξαερισμού: ο ζωτικός χώρος και ο χώρος κάτω από το σπίτι. Για τον υπολογισμό όλων των ροών εξαερισμού είναι απαραίτητο να υπολογιστούν οι διαφορές πιέσεων μεταξύ του εξωτερικού και εσωτερικού αέρα χωριστά για το ζωτικό χώρο και το κενό, οπότε η διαφορά πίεσης μεταξύ του κενού και ζωτικού χώρου μπορεί να καθοριστεί. Τα αποτελέσματα είναι σε καλή συμφωνία, πράγμα που

επικυρώνεται με το BREVENT, ένα αριθμητικό μοντέλο που αναπτύχθηκε από το Building Research Establishment.

Ροή αναρρόφησης (οδηγούσα δύναμη της ροής η πίεση)

Η ροή αναρρόφησης συντελείται όταν η πίεση των ατμών του εδάφους υπερβαίνει την πίεση του αέρα μέσα στον κενό χώρο και προκαλείται χημική ροή από τον αέρα του εδάφους στον αέρα του κενού χώρου. Η βαθμωτή μεταβολή της πίεσης στο έδαφος προκαλεί ροές από το έδαφος στον κενό αέρα μέσω των συνδεδεμένων πόρων, των διάκενων και των ρωγμών. Η ροή αναρρόφησης μπορεί να είναι μια αντίδραση στις προκαλούμενες διαφορές πίεσης από τον αέρα, ή στις διαφορές πίεσης που δημιουργούνται από τα συστήματα θέρμανσης και κλιματισμού. Η κύρια διαφορά μεταξύ της ροής αναρρόφησης και του προαναφερθέντος εξαερισμού είναι ότι ο εξαερισμός περιγράφει τις ροές μέσα σε ένα κτίριο και η ροή αναρρόφησης περιγράφει μόνο τη ροή από τον αέρα του εδάφους στον αέρα του κενού χώρου. Σε αντίθεση με την stack effect αναρρόφηση η ροή δεν προκαλείται θερμικά. Η αεροδυναμική προκαλούμενη ροή αναρρόφησης σε ένα σπίτι με κενό χώρο εμφανίζεται καθ' όλη τη διάρκεια του έτους.

Συγκεντρώσεις ισορροπίας τοξικού ατμού

Ένα σπίτι υποτίθεται ότι είναι ένας ζωτικός χώρος με έναν ενιαίο ομοιογενή όγκο, επειδή υποτίθεται ότι οι εσωτερικές πόρτες είναι ανοιγμένες αρκετά συχνά για να επιτρέψουν την ελεύθερη ανταλλαγή του αέρα μεταξύ των δωματίων. Στην ισορροπία η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στον αέρα σε κάθε χωριστό όγκο ενός σπιτιού θα είναι σταθερή. Τα παράθυρα και οι πόρτες θεωρούνται ως αδιαπέραστα από τους μολυσματικούς παράγοντες. Επιπλέον, υποτίθεται ότι ο υπαίθριος αέρας είναι αμόλυντος και ότι δεν υπάρχουν πηγές μολυσματικών παραγόντων μέσα στο σπίτι.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Οι όγκοι αέρα που εισπνέονται από τα παιδιά και τους ενήλικους στο μοντέλο CLEA παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.12**. Για τον υπολογισμό της έκθεσης από την εισπνοή ατμών των μολυσματικών παραγόντων σε εσωτερικό χώρο χρησιμοποιούνται μόνο οι παθητικοί όγκοι εισπνοής.

Πίνακας 2.12: Εισπνεόμενοι όγκοι αέρα που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CLEA.

		Εισπνεόμενος Όγκος (m ³ /h)	Βάρος Αντρα 50 th % (Kg)	Βάρος Γυναίκας 50 th % (Kg)	Υπολογισμένος ρυθμός εισπνοής ¹	
					(m ³ /h)	(m ³ /d)
Παιδιά	Ενεργητικός	0.03·Βάρος	6.12-56.5 (3 μήνες-15.5 έτη)	5.70-52.5 (3 μήνες-15.5 έτη)	0.45	10.8
	Παθητικός	0.011·Βάρος			0.17	4
Ενήλικες	Ενεργητικός	0.018·Βάρος	65-75.5 (16-75 έτη)	55.5-63.5 (16-75 έτη)	1.3	30.2
	Παθητικός	0.006·Βάρος			0.42	10.1

1) Οι ρυθμοί αναπνοής υπολογίζονται με τις προκαθορισμένες τιμές του CSOIL για το βάρος, οι οποίες είναι 15 Kg για τα παιδιά και 70 Kg για τους ενήλικες.

Στο CLEA η αναμενόμενη ημερήσια δόση (EDI) μέσω της εισπνοής ατμών σε εσωτερικό χώρο υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$EDI = \frac{1}{\sum (\Delta T)_i} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{(AC)_i \cdot (RV)_i \cdot (ED)_i}{W_i}$$

(AC) _i :	μέση συγκέντρωση εσωτερικού αέρα σε χρονικό διάστημα (ΔT) _i	[mg/m ³]
(RV) _i :	ημερήσιος όγκος αναπνοής για δραστηριότητες σε εσωτερικό χώρο σε χρονικό διάστημα (ΔT) _i	[m ³ /day]
(ED) _i :	αριθμός ημερών έκθεσης στον εσωτερικό αέρα σε χρονικό διάστημα (ΔT) _i	[day]
W _i :	σωματικό βάρος για χρονικό διάστημα (ΔT) _i	[Kg]

2.6.2 UMS

Εισπνοή ατμών σε εσωτερικό χώρο

Το σημείο αναφοράς για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα είναι η συγκέντρωση της ουσίας στον αέρα του εδάφους. Η συγκέντρωση του αέρα του εδάφους υπολογίζεται από την συγκέντρωση του εδάφους χρησιμοποιώντας έναν συντελεστή κατανομής εδάφους-αέρα (Nazaroff et al., 1992). Υποτίθεται ότι η συγκέντρωση μιας ουσίας στο εσωτερικό του σπιτιού είναι μόνο το αποτέλεσμα της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους κάτω από το σπίτι. Η άμεση μεταφορά των ουσιών από τον υπαίθριο αέρα στο σπίτι δεν λαμβάνεται υπόψη στο μοντέλο UMS. Για την αποτίμηση των ουσιών στον εσωτερικό αέρα η μεταφορά των ουσιών διαιρείται σε ένα πρώτο βήμα για να υπερνικήσει την απόσταση από τη θέση της μόλυνσης μέχρι το σπίτι, και ακολουθείται από ένα δεύτερο βήμα αυτό της άμεσης

μεταφοράς μέσω των ρωγμών και των πόρων στο σπίτι. Επιπλέον υποτίθεται ότι οι ουσίες δεν προσροφώνται στα οικοδομικά υλικά ή τα θεμέλια.

Τα λεπτομερή μοντέλα των Jury (1990), Mendoza και Frind (1990), Garbesi et al. (1993) και Nazaroff et al. (1992) θεωρούνται μη χρήσιμα για τον σκοπό του μοντέλου UMS (UMS, 1993). Για μια ρεαλιστική εκτίμηση της μεταφοράς των ουσιών στον αέρα του εδάφους αυτά τα πρότυπα θεωρούνται πάρα πολύ σύνθετα. Η αξιολόγηση των διαφορετικών διαθέσιμων προτύπων έχει δείξει ότι τα αποτελέσματα είναι μερικές φορές ρεαλιστικά, αλλά συνήθως πλασματικά. Οι απλουστευμένες υποθέσεις αυτών των προτύπων χρησιμοποιούνται στο πρότυπο UMS για τον υπολογισμό της μεταφοράς των ουσιών από τον αέρα του εδάφους στον εσωτερικό αέρα. Με βάση τις μελέτες των Nazaroff και Garbesi, περιγράφοντας την μεταφορά ραδονίου στα κτίρια ή χρησιμοποιώντας ροή με κατευθυντήρια δύναμη την πίεση, υπολογίζεται ο συντελεστής μεταφοράς από τον αέρα του εδάφους στον εσωτερικό αέρα. Για την μεταφορά του ραδονίου χρησιμοποιείται ένας συντελεστής άλφα για την περιγραφή της συγκέντρωσης στον εσωτερικό αέρα από την συγκέντρωση στον αέρα του εδάφους. Η ροή με κατευθυντήρια δύναμη την πίεση είναι βασισμένη στη σχετικά χαμηλότερη πίεση του σπιτιού έναντι στη σχετικά υψηλότερη πίεση στο έδαφος. Σύμφωνα με το UMS οι θερμικές διαφορές, η πίεση του αέρα και η δομή του σπιτιού συντελούν σε αυτήν την διαφορά πίεσης. Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί έναν αμετάβλητο παράγοντα 0.01 μεταξύ της συγκέντρωσης στον αέρα του εδάφους και της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα. Αυτός ο παράγοντας επιλέγεται κυρίως από την αξιολόγηση των στοιχείων από τις μολυσμένες περιοχές. Πρέπει να σημειωθεί ότι χρησιμοποιώντας αυτόν τον παράγοντα για τις περισσότερες από τις ουσίες πιθανώς η εσωτερική συγκέντρωση θα είναι κατ' εκτίμηση υψηλότερη από την πραγματική τιμή. Αυτός ο παράγοντας πρέπει να χρησιμοποιείται για μια επισκόπηση ή μια συζήτηση εάν υπάρχει ένας κίνδυνος στα κελάρια ή τα διαμερίσματα των ισογείων. Δεν πρέπει να χρησιμοποιείται ως ρεαλιστική τιμή η οποία γίνεται αφορμή για επανορθωτικές ενέργειες.

Στις εξισώσεις η συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα υπολογίζεται ως εξής:

$$C_{IA} = C_{SA} \cdot 1,000,000 \cdot TF_{SA-IA}$$

$$C_{SA} = \frac{C_S \cdot K_H}{(K_d + SWC)}$$

C_{IA} :	συγκέντρωση στον εσωτερικό αέρα	[$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
C_{SA} :	συγκέντρωση στον αέρα του εδάφους	[mg/l]
C_S :	συγκέντρωση του εδάφους	[mg/Kg]
TF_{SA-IA} :	συντελεστής μεταφοράς μεταξύ αέρα εδάφους και εσωτερικό αέρα	[0.01]
K_H :	σταθερά Henry	[-]
K_d :	συντελεστής κατανομής εδάφους-πορώδες νερό	[-]
SWC :	υγρασία εδάφους	[0.2 l/Kg]

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Ο ρυθμός εισπνοής του μοντέλου UMS που χρησιμοποιείται για το οικιστικό σενάριο παρουσιάζεται στον **πίνακα 2.13**.

Στο μοντέλο UMS η πιθανή ημερήσια δόση (PDI) μέσω της εισπνοής υπολογίζεται με την ακόλουθη εξίσωση:

$$PDI = DIR_{IA} \cdot C_{IA} \cdot R_{inhal}$$

$$DIR_{IA} = \frac{IR_{Atem} \cdot EFR_d \cdot EFR \cdot RF_{EFRg}}{365 \text{ days / year} \cdot BW}$$

C_{IA} :	συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα	[$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
R_{inhal} :	ρυθμός αναρρόφησης ουσίας	[-]
DIR_{IA} :	ρυθμός ημερήσιας εισπνοής, μέσος ετήσιος	[$\text{m}^3/\text{Kg} \cdot \text{day}$]
IR_{Atem} :	ρυθμός εισπνοής	[m^3/h]
EFR_d :	διάρκεια έκθεσης	[h/day]
EFR :	ρυθμός διάρκειας έκθεσης (365 ημέρες/έτος)	[day/year]
RF_{EFRg} :	συντελεστής μείωσης διάρκειας έκθεσης βασισμένος στην χρήση του κτιρίου. Ένα κτίριο χωρίς μπαλκόνι ή κήπο έχει $RF = 1$, όταν το κτίριο έχει μπαλκόνι ή κήπο τότε ο RF μειώνεται	[-]
BW :	σωματικό βάρος	[Kg]

Οι υπολογισμένοι ημερήσιοι ρυθμοί λήψης μέσω της εισπνοής παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.13**.

Πίνακας 2.13: Μέσοι ημερήσιοι ρυθμοί λήψης μέσω εισπνοής για οικιστικό σενάριο (UMS, 1997).

Πληθυσμός	Ηλικία years	Συχνότητα Έκθεσης (EFR _d) h/d	Ρυθμός εισπνοής (IR _{Atem}) m ³ /h	Σωματικό βάρος (BW) Kg	Μέση ημερήσια εισπνοή (DIR _{IA}) m ³ /Kg·d
Βρέφη	< 1	21	0.1	5	0.42
Μικρά παιδιά	1-3	21	0.25	10	0.53
Παιδιά	3-8	18	0.5	20	0.45
Ανήλικοι	8-16	15	0.7	40	0.26
Ενήλικοι	16-46	21	0.8	70	0.24

2.6.3 CalTOX

Εισπνοή ατμών εσωτερικού χώρου

Στο CalTOX η συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα δεν είναι βασισμένη στα fugacity μοντέλα, αλλά είναι βασισμένη στην διατήρηση της μάζας σε έναν όγκο ελέγχου. Σε αυτήν την προσέγγιση η περιοχή που μελετάται διαιρείται σε μικρότερους όγκους. Η συγκέντρωση σε κάθε όγκο υποτίθεται ότι είναι ομοιόμορφη και είναι συνάρτηση του όγκου αυτού, των ρυθμών εκπομπής μέσα στον όγκο και των ρυθμών στους οποίους το υλικό εισάγεται και εξάγεται από τον όγκο. Η διασπορά στα τμήματα του μοντέλου CalTOX είναι βασισμένη σε αυτήν την προσέγγιση του όγκου ελέγχου. Στο μοντέλο CalTOX έξι περιβαλλοντικά τμήματα ή όγκοι ελέγχου μπορούν να ωθήσουν τις χημικές ουσίες στον αέρα η οποίες εισπνέονται από τους ανθρώπους:

1. Μοριακή φάση του αέρα σε υπαίθριο χώρο,
2. Αέρια φάση του αέρα σε υπαίθριο χώρο
3. Επιφανειακό έδαφος
4. Περιοχή ριζών από τα φυτά
5. Πτητικές ενώσεις διαλυμένες στα υπόγεια νερά,
6. Πτητικές ενώσεις διαλυμένες στο επιφανειακό νερό.

Οι αναλυτικές μέθοδοι για τον υπολογισμό των συντελεστών διάχυσης στον αέρα είναι βασισμένες στους Reid et al. (1987) και Lyman et al. (1982). Στο CalTOX υποτίθεται ότι η τυρβώδης διάχυση μέσα στον αέρα είναι τόσο αποδοτική που η

συγκέντρωση της μάζας είναι ίση σε ολόκληρο το τμήμα του αέρα. Στο όριο μεταξύ του αέρα και του επιφανειακού εδάφους η μεταφορά μάζας είναι πιο σύνθετη και διαμορφώνεται χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο οριακού στρώματος. Η αρχή αυτού του μοντέλου είναι ότι μια καλά αναμεμιγμένη τυρβώδη μάζα αέρα είναι πάνω από ένα καλά αναμεμιγμένο στάσιμο στρώμα αέρα που είναι σε επαφή με το έδαφος.

Το μοντέλο διατήρησης της μάζας για το εσωτερικό περιβάλλον εξετάζει τέσσερις πηγές:

1. Μεταφορά των αέριων μολυσματικών παραγόντων (σωματίδια αέρα και σκόνης) από τον υπαίθριο σε εσωτερικό χώρο,
2. Μεταφορά των πτητικών χημικών ουσιών από το έδαφος κάτω από το σπίτι στον εσωτερικό αέρα,
3. Μεταφορά μολυσμένου χώματος από το εξωτερικό στο εσωτερικό περιβάλλον,
4. Μεταφορά των πτητικών χημικών ουσιών από το νερό του κεντρικού δικτύου στον εσωτερικό αέρα.

Συγκεκριμένοι ρυθμοί για τις συγκεντρώσεις των χημικών ουσιών χρησιμοποιούνται για τις πρώτες τρεις διαδρομές μεταφοράς. Για την μεταφορά των πτητικών χημικών ουσιών από το έδαφος κάτω από το σπίτι στον εσωτερικό αέρα, ο ρυθμός εσωτερικού αέρα/αέρα εδάφους είναι βασισμένος στο ραδόνιο (ο αποκαλούμενος "παράγοντας άλφα"). Ένα μοντέλο δύο τμημάτων για τον εσωτερικό αέρα χρησιμοποιείται για τη μεταφορά των πτητικών χημικών ουσιών από το νερό του κεντρικού δικτύου στον εσωτερικό αέρα. Η ροή με κατευθυντήρια δύναμη την πίεση ή η ροή αναρρόφησης χρησιμοποιείται μόνο στον βαθμό που συμπεριλαμβάνεται στον παράγοντα άλφα που αναπτύχθηκε για το ραδόνιο. Οι εξισώσεις εισπνοής του CalTOX για τον εσωτερικό αέρα ενός κτιρίου διαιρούνται σε δύο μέρη, το ένα είναι ο εσωτερικός αέρας, αποκλείοντας το λουτρό, και το άλλο είναι ο αέρας του λουτρού. Για τον αέρα του λουτρού συμπεριλαμβάνεται και η μεταφορά των πτητικών χημικών ουσιών από το νερό του κεντρικού δικτύου.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Ο προεπιλεγμένος ρυθμός εισπνοής στο CalTOX για τους ενηλίκους είναι 20 m³/day (CalTOX, 1993). Αυτή η τιμή υπερβαίνει τις συνιστώμενες τιμές (**Πίνακας 2.14**) του Exposure Factors Handbook (US-EPA, 1997). Οι τιμές του EFH είναι υπολογισμένες με βάση μελέτες που έχουν χαρακτηριστεί μελέτες-κλειδιά ή σχετικές.

Οι μελέτες-κλειδιά χρησιμοποιούνται ως βάση για την εξαγωγή συστάσεων και οι σχετικές μελέτες συμπεριλαμβάνονται για να παρέχουν το υπόβαθρο και την προοπτική προσθηκών. Μέχρι τώρα, οι τιμές του **πίνακα 2.14** δεν χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CalTOX.

Πίνακας 2.14: Σύνοψη προτεινόμενων τιμών για εισπνοή για μακροχρόνια έκθεση (US-EPA, 1997).

Πληθυσμός	Ηλικία (years)	Αντρας/Γυναίκα	Μέση τιμή (m ³ /day)
Βρέφη	< 1		4.5
Παιδιά	1-2		6.8
	3-5		8.3
	6-8		10
	9-11	Αντρες	14
		Γυναίκες	13
	12-14	Αντρες	15
Γυναίκες		12	
15-18	Αντρες	17	
	Γυναίκες	12	
Ενήλικοι	19-65+	Αντρες	15.2
		Γυναίκες	11.3

Η έκθεση ή η λήψη μέσω της εισπνοής των αέριων χημικών ουσιών υπολογίζεται σύμφωνα με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$Intake_{air} = C_{air} \cdot \left(\frac{IR_{air}}{BW} \right) \cdot \left(\frac{EF \cdot ED}{AT} \right)$$

Intake _{air} :	ημερήσιος ρυθμός εισπνοής	[m ³ /Kg·day]
C _{air} :	συγκέντρωση χημικών ουσιών στον αέρα	[mg/m ³]
IR _{air} :	ρυθμός εισπνοής	[m ³ /day]
BW:	σωματικό βάρος	[Kg]
EF:	συχνότητα έκθεσης	[350 days/year]
ED:	διάρκεια έκθεσης	[years]
AT:	μέση τιμή (μη-καρκινογόνα: AT=ED, καρκινογόνα ή χρόνια συμπτώματα: AT=70 years=25,550 days (US-EPA, 1997))	

Η χρονική εκτίμηση είναι ανεξάρτητη από την οδό εισπνοής και αφορά το εάν ή όχι η χημική ουσία είναι μια καρκινογόνος ουσία: $\left(\frac{EF \cdot ED}{AT}\right)$. Ο μέσος ημερήσιος ρυθμός λήψης: $\left(\frac{IR_{air}}{BW}\right)$ και η συγκέντρωση στον αέρα (C_{air}) εξαρτώνται και οι δύο από τη θέση και μπορεί να διαιρεθεί στην υπαίθρια έκθεση, την εσωτερική έκθεση και την έκθεση στο λουτρό.

Η εισπνοή του εσωτερικού αέρα (αποκλείοντας τον αέρα του λουτρού) περιγράφεται ως εξής:

$$\frac{IR_{air}}{BW} = ((ET_{ind} - ET_{sb}) \cdot f_{ind,l} \cdot BR_l) + ((ET_{ind} - ET_{sb}) \cdot (1 - f_{ind,l}) \cdot BR_s)$$

ET_{ind} :	συνολικές ώρες στο εσωτερικό συμπεριλαμβανομένου του λουτρού στις ρυπασμένες περιοχές	[hours/day]
ET_{sb} :	συνολικές ώρες στο λουτρό στις ρυπασμένες περιοχές	[hours/day]
$f_{ind,l}$:	κλάσμα των συνολικών ωρών στο εσωτερικό με ρυθμό αναπνοής όσον αφορά ελαφριά δραστηριότητα	[-]
BR_l :	ρυθμός αναπνοής ελαφριάς δραστηριότητας ανά κιλό σωματικού βάρους	[m ³ /Kg·hour]
BR_s :	ρυθμός αναπνοής κατά την διάρκεια του ύπνου ανά κιλό σωματικού βάρους	[m ³ /Kg·hour]

2.6.4 CSOIL

Ροές

Στο CSOIL διακρίνονται οι διαφορετικές ροές των πτητικών ενώσεων. Το **σχήμα 2.3** δίνει μια επισκόπηση αυτών των ροών, στο εσωτερικό καθώς επίσης και στον υπαίθριο χώρο.

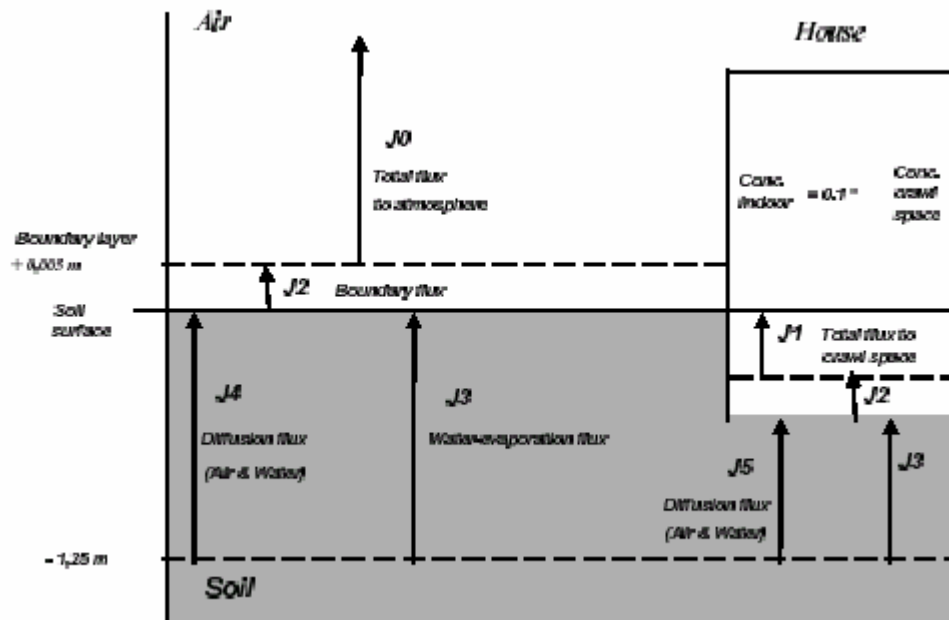
Επειδή η συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα είναι η σημαντικότερη οδός έκθεσης, επικεντρωνόμαστε στον υπολογισμό της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα. Για τον εσωτερικό αέρα υπολογίζονται οι ακόλουθες ροές μολυσματικών παραγόντων (**Σχήμα 2.3**):

J1 = συνολική ροή στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι,

J2 = ροή μέσω του ορίου του στρώματος (περιορίζει τις ροές από το έδαφος στον αέρα)

J3 = ροή εξάτμισης ύδατος από το έδαφος στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι,

$J5$ = ροή διάχυσης από το έδαφος (αέρας του εδάφους και νερό πόρων) στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι.



Σχήμα 2.3: Ροές μεταφοράς των πτητικών ενώσεων από το έδαφος/υπόγεια νερά στον εσωτερικό και υπαίθριο χώρο.

Ροές διάχυσης ($J5$)

Οι ροές διάχυσης μέσω του αέρα του εδάφους και του νερού των πόρων υπολογίζονται στο CSOIL σύμφωνα με τη θεωρία του Jury (1984c). Η υπόθεση είναι μια γραμμική μεταβολή της συγκέντρωσης στο έδαφος με τη μέγιστη συγκέντρωση σε βάθος 1.25 m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους.

Από αυτές τις δύο ροές, η διάχυση των πτητικών ενώσεων μέσω του αέρα του εδάφους είναι κατά πολύ σημαντικότερη στην ζώνη των τριχοειδών αγγείων του εδάφους. Για αυτόν τον λόγο δεν θα δοθεί προσοχή στην διάχυση μέσω του νερού των πόρων. Η ροή διάχυσης μέσω του αέρα του εδάφους ($J5$) περιγράφεται παρακάτω:

$$J5 = \frac{Du \cdot Cs \cdot SD}{dp - Bh}$$

με

$$Du = (Pa \cdot Dsa / Va) + (Pw \cdot Dsw / Vw)$$

$$Dsa = Va^{10/3} \cdot Da / (1 - Vs)^2$$

$$Da = 0.036 \cdot (76 / M)^{1/2}$$

$$Dsw = Vw^{10/3} \cdot Dw / (1 - Vs)^2$$

$$Dw = 3.6 \cdot 10^{-6} \cdot (76 / M)^{1/2}$$

Du:	συντελεστής διάχυσης στο έδαφος	[m ² /h]
Cs:	αρχική σύσταση του εδάφους (αέρια, υγρή, στερεή φάση)	[mol/kg dry soil or mg/kg]
SD:	μάζα του ξηρού εδάφους	[kg dry soil/dm ³ humid soil]
dp:	μέσο βάθος της μόλυνσης	[1.25 m]
Bh:	ύψος του κενού χώρου κάτω από το σπίτι	[0.5 m]
Pa:	κλάσμα μάζας στον αέρα του εδάφους	[-]
Pw:	κλάσμα μάζας στο νερό των πόρων	[-]
Dsa:	συντελεστής διάχυσης στην αέρια φάση του εδάφους	[m ² /h]
Dsw:	συντελεστής διάχυσης στην υγρή φάση του εδάφους	[m ² /h]
Va:	κλάσμα όγκου της αέριας φάσης	[-, 0.2]
Vw:	κλάσμα όγκου της υγρής φάσης	[-, 0.2]
Vs:	κλάσμα όγκου της στερεής φάσης	[-, 0.6]
Da:	συντελεστής διάχυσης στον ελεύθερο αέρα	[m ² /h]
M:	μοριακή μάζα	[g/mol]

Ροή εξάτμισης ύδατος (J3)

Η δεύτερη διαδικασία που καθορίζει την συνολική ροή στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι είναι η ροή εξάτμισης του νερού. Η ροή εξάτμισης του νερού υπολογίζεται βασισμένη στα στοιχεία από τους Fast et al. (1987). Για την Ολλανδική κατάσταση υπολογίζεται σε 0.1 dm³/m²·d. Η διαδικασία περιλαμβάνει την μεταφορά του ύδατος, αλλαγή φάσης από υγρό σε ατμούς νερού και την μεταφορά από την επιφάνεια του εδάφους στον αέρα. Υπάρχουν δύο λόγοι για τους οποίους αυτή η έννοια δεν είναι εξ ολοκλήρου επιστημονικά σωστή:

1. Επειδή ο κενός χώρος κάτω από το σπίτι είναι κοντά στον κορεσμό, δεν υπάρχει καμία μεταβολή της συγκέντρωσης στον αέρα που να οδηγεί την μεταφορά του ύδατος από το έδαφος στον αέρα.
2. Η σταθερή ροή εξάτμισης υπονοεί ότι υπάρχει μια σταθερή άνοδος μέσω τριχοειδών αγγείων από το επίπεδο των υπόγειων νερών. Στο πραγματικό έδαφος αυτό είναι μόνο δυνατό μέχρι την ζώνη μετάβασης των τριχοειδών αγγείων, η οποία σε πολλές περιπτώσεις δεν θα έφθανε στην επιφάνεια του εδάφους. Πάνω από αυτήν την ζώνη η διάχυση είναι η κυρίαρχη διαδικασία.

Στις εξισώσεις αυτή η ροή μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

$$J3 = Crw \cdot \frac{Ev}{24}$$

Ev: ροή από εξατμιζόμενο νερό (0.0001 m³/m²·d, Fast et al., 1987) [m³/m²·d]
 Crw: συγκέντρωση υγρασίας εδάφους (=Cs·SD·Pw/Vw) [mol/dm³ or g/m³]

Ροή οριακού στρώματος (J2)

Η μεταφορά στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι μπορεί να περιοριστεί από το οριακό στρώμα, ένα στάσιμο στρώμα αέρα πάνω από την επιφάνεια του εδάφους στην οποία μόνο η διάχυση εμφανίζεται. Η ροή οριακού στρώματος (J2) μπορεί να υπολογιστεί ως εξής:

$$J2 = Da \cdot \frac{Csa}{d}$$

Da: συντελεστής διάχυσης στον ελεύθερο αέρα [m²/h]
 Csa: συγκέντρωση του αέρα του εδάφους (=Cs·SD·Pa/Va) [mol/dm³ or g/m³]
 d: πάχος οριακού στρώματος (Jury et al. 1984c: 0.005 m) [m]

Η συνολική ροή στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι (J1)

Το άθροισμα της ροής εξάτμισης ύδατος (J3) και της ροής διάχυσης (J5) δεν μπορούν να υπερβούν την υπολογισμένη ροή του οριακού στρώματος (J2). Η συνολική ροή μολυσματικών παραγόντων στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι (J1, σε g/m²·h) είναι ίση με J3 + J5, αλλά στην περίπτωση που J2 < (J3+J5), τότε η J1 είναι ίση με την J2. Η συνολική ροή στον κενό χώρο χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα.

Βάθος του επιπέδου των υπόγειων νερών (βάθος του μολυσματικού παράγοντα)

Το βάθος του επιπέδου των υπόγειων νερών δεν ενσωματώνεται στο CSOIL. Υποτίθεται ότι η μέγιστη συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα είναι σε βάθος 1.25 m. Όταν το επίπεδο των υπόγειων νερών είναι πιο κοντά στην επιφάνεια του εδάφους η διάχυση θα είναι μικρότερη, επειδή η ροή διάχυσης μέσω του ύδατος είναι πολύ μικρότερη απ' ό,τι μέσω του αέρα.

Η συγκέντρωση στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι

Η συγκέντρωση στον κενό χώρο εξαρτάται από την συνολική ροή από το έδαφος (J_1), την επιφάνεια και τον όγκο του κενού χώρου και τον ρυθμό ανταλλαγής του αέρα στον χώρο αυτό (V_n), το οποίο εμπειρικά υπολογίζεται μεταξύ 0.04 και 74 h^{-1} , με έναν μέσο όρο 1.25 h^{-1} (Fast et al., 1987, 1988).

Στις εξισώσεις:

$$C_{ba} = \frac{J_1 \cdot B_o}{B_n \cdot V_n}$$

C_{ba} :	συγκέντρωση στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι	[g/m ³]
B_o :	επιφάνεια του κενού χώρου	[50 m ²]
B_n :	όγκος του κενού χώρου	[25 m ³]
V_n :	ρυθμός ανταλλαγής αέρα	[1.25 h ⁻¹]

Δεύτερον, η συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα μπορεί να υπολογιστεί ως ένα μέσο μέρος της συγκέντρωσης του κενού χώρου κάτω από το σπίτι. Η συμβολή του κενού χώρου (f_{bi}) στον εσωτερικό αέρα ποικίλλει μεταξύ 0 και 0.68, με έναν μέσο όρο 0.11, παρουσιάζοντας μεγάλη διαφορά μεταξύ των σπιτιών με ξύλινα (μέσος όρος 0.19) και τσιμεντένια πατώματα (μέσος όρος 0.096) (Fast et al., 1987, 1988). Η παράμετρος στο μοντέλο είναι 0.1.

Στις εξισώσεις:

$$C_{ia} = f_{bi} \cdot C_{ba}$$

C_{ia} :	συγκέντρωση στον εσωτερικό αέρα	[g/m ³]
f_{bi} :	κατανομή του κενού χώρου στον εσωτερικό αέρα ως κλάσμα	[0.1, -]

Αν και η εμπειρική εκτίμηση του ρυθμού ανταλλαγής του αέρα στον κενό χώρο (V_n) και η συμβολή του κενού χώρου στον εσωτερικό αέρα (f_{bi}) παρουσιάζουν μεγάλες διακυμάνσεις, η αρχή του υπολογισμού του εσωτερικού αέρα γίνεται αποδεκτή.

Εισπνοή εσωτερικού αέρα

Η λήψη πτητικών ενώσεων εξαρτάται από:

- την συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα (C_{ia}) (και υπαίθριος αέρας: C_{oa}),

- τον χρόνο που ξοδεύει στον εσωτερικό χώρο (και υπαίθριο) για τους ενήλικους και τα παιδιά: t_{ia} και t_{ic} (t_{oa} και t_{oc}),
- την μέση ετήσια παραμονή σε εσωτερικό χώρο (και υπαίθριο): t_{fia} και t_{fic} (t_{foa} , t_{foc}),
- τον όγκο που αναπνέουν οι ενήλικοι και τα παιδιά (AV_a και AV_c),
- την απορρόφηση των μολυσματικών παραγόντων από τους πνεύμονες (fa),
- το σωματικό βάρος (ενήλικοι και παιδιά, W_a και W_c).

Αυτές οι παράμετροι υπολογίζονται από τους Linders et al., (1990). Το κλάσμα της απορρόφησης των μολυσματικών παραγόντων (fa) ορίστηκε πρόσφατα στην τιμή 1.

Για τους ενήλικους και τα παιδιά η έκθεση υπολογίζεται από:

$$IV = [AV \cdot C_{ia} \cdot t_{fi} \cdot t_i + AV \cdot C_{oa} \cdot t_{fo} \cdot t_o] \cdot fa \cdot 10^3 / W$$

Η ημερήσια έκθεση, για την ολική περίοδο ζωής, των πτητικών ενώσεων ($DOSE_{IV}$) είναι ο σταθμισμένος μέσος όρος της δόσης για τα παιδιά και της δόσης για τους ενήλικους:

$$DOSE_{IV} = \frac{6 \cdot IV_{child} + 64 \cdot IV_{adult}}{70}$$

2.6.5 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Αρχές

Οι αρχές τις οποίες χρησιμοποιεί το κάθε μοντέλο παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.15**.

Μόνο στα μοντέλα CLEA και CSOIL είναι δυνατόν να υπολογιστεί η συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα για τα σπίτια με κενό διάστημα από κάτω τους.

Τα μοντέλα CLEA και CalTOX χρησιμοποιούν τη μοριακή διάχυση για την περιγραφή των ροών από το έδαφος στην επιφάνεια του εδάφους και μέσω των πατωμάτων, των τοίχων και της οροφής. Τα CLEA και CalTOX είναι τα μόνα πρότυπα που χρησιμοποιούν ροές από τον εξωτερικό αέρα στο εσωτερικό περιβάλλον. Τα πρότυπα UMS και CSOIL είναι κυρίως βασισμένα στη μοριακή

διάχυση. Σε εκείνα τα πρότυπα υποτίθεται ότι η συγκέντρωση μιας ουσίας στον εσωτερικό αέρα είναι αποτέλεσμα μόνο της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους κάτω από το κτίριο. Διαφορετικά από τα άλλα μοντέλα το CSOIL περιγράφει την εξάτμιση της υγρασίας του εδάφους, ενώ το CLEA χρησιμοποιεί τις πρόσθετες ροές εξαερισμού. Οι αρχές των αναφερθέντων ροών διάχυσης είναι όλες συγκρίσιμες, αλλά η σπουδαιότητα των ροών παραμένει άγνωστη.

Από όλα τα μοντέλα μόνο το CLEA χρησιμοποιεί την ροή με κατευθυντήρια δύναμη την πίεση για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα. Το μοντέλο CalTOX και UMS χρησιμοποιεί την ροή αυτή μόνο εν δυνάμει.

Πίνακας 2.15: Βασικές αρχές που χρησιμοποιεί το κάθε μοντέλο.

Μοντέλο	Μοριακή διάχυση	Ροή λόγω διαφοράς πίεσης	Κενό διάστημα κάτω από το σπίτι	Άλλες αρχές	Ροή από τον εξωτερικό προς τον εσωτερικό αέρα	Μεταμόρφωση ή αποικοδόμηση	Ρυθμός Απορρόφησης/ Αναρρόφησης ³
CLEA	Ναι	Ναι	Ναι	Εξαερισμός	Ναι	Ναι	Όχι
CalTOX	Ναι	Ναι ⁴	Όχι	Όχι	Ναι	Ναι	Όχι
UMS	Ναι ¹	Ναι ¹	Όχι	Όχι	Όχι	Όχι	Ναι (προεπιλεγμένη τιμή = 1)
CSOIL	Ναι	Όχι	Ναι		Όχι	Όχι	Ναι (προεπιλεγμένη τιμή = 1)

- 1) Ένας σταθερός παράγοντας μεταξύ της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους και της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα που προκύπτει από μελέτες οι οποίες περιγράφουν την μεταφορά του ραδονίου μέσα στο οίκημα και ο οποίος περιλαμβάνει την μοριακή διάχυση και την ροή λόγω διαφοράς πίεσης.
- 2) Φυσικός εξαερισμός μέσα στο σπίτι ως αποτέλεσμα της ροής του αέρα, λόγω της διαφοράς πίεσεως του αέρα μέσα και έξω από το σπίτι.
- 3) Όρος για την περιγραφή της συγκεκριμένης λήψης ουσιών στο ανθρώπινο σώμα μέσω των πνευμόνων.
- 4) Η ροή λόγω διαφοράς πίεσεως ή αναρρόφησης χρησιμοποιείται μόνο μέχρι το σημείο που συμπεριλαμβάνεται στον "παράγοντα άλφα" που αναπτύχθηκε για το ραδόνιο.

Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί έναν αμετάβλητο παράγοντα 0.01 μεταξύ της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους και της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα. Το CSOIL χρησιμοποιεί έναν σταθερό παράγοντα 0.1 μεταξύ της συγκέντρωσης του αέρα κάτω από το σπίτι και της συγκέντρωσης του εσωτερικού αέρα.

Τα μοντέλα CLEA και CalTOX περιλαμβάνουν τις διαδικασίες μετασχηματισμού/αποικοδόμησης, όπως η φωτόλυση, η υδρόλυση ή ο μικροβιακός μετασχηματισμός.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Βάσει των παρουσιασμένων ρυθμών αναπνοής για τα συγκρινόμενα διεθνή μοντέλα, μπορεί να συναχθεί το συμπέρασμα ότι η παρούσα τιμή του CSOIL 20 m³/d είναι μάλλον μεγάλη για τους ενήλικους. Η παρούσα τιμή του CalTOX είναι επίσης 20 m³/d, αλλά αυτή η τιμή θα αναθεωρηθεί σύμφωνα με το EFH. Για τους ενήλικους οι πιο πρόσφατοι ρυθμοί αναπνοής για τα μοντέλα του Ηνωμένου Βασιλείου, της Γερμανίας και των ΗΠΑ (τιμή EFH, για τους άντρες και τις γυναίκες) είναι 10, 17 και 15/11 m³/d, αντίστοιχα. Για τα παιδιά (1-6 έτη) οι τιμές των μοντέλων των ΗΠΑ (τιμή EFH) και της Γερμανίας είναι συγκρίσιμες με την τιμή του CSOIL 7.6 m³/d. Μόνο ο ρυθμός αναπνοής του βρετανικού μοντέλου είναι χαμηλότερος, με τιμή 4 m³/d.

Πίνακας 2.16: Ρυθμοί αναπνοής που χρησιμοποιούνται από τα υπό σύγκριση μοντέλα.

Μοντέλο	Ρυθμός αναπνοής για παιδιά (m ³ /d)	Ρυθμός αναπνοής για ενήλικους (m ³ /d)
CLEA	4	10
CalTOX	Παρούσα τιμή άγνωστη 6.8 (1-2 έτη), 8.3 (3-5 έτη) (EFH)	20 (προεπιλεγμένη τιμή) 15 άντρες / 11 γυναίκες (EFH)
UMS	5.3 (1-3 έτη), 9 (3-8 έτη)	17
CSOIL	7.6	20

Για όλα τα μοντέλα η έκθεση μέσω της εισπνοής των ατμών των μολυσματικών παραγόντων είναι πλήρως βασισμένη στη συγκέντρωση του αέρα πολλαπλασιασμένη με τον ημερήσιο ρυθμό εισπνοής διαιρούμενα και τα δύο με το σωματικό βάρος. Οι διαφορές μεταξύ των συγκρινόμενων μοντέλων είναι οι ρυθμοί απορρόφησης που χρησιμοποιούνται και η διάρκεια έκθεσης για συγκεκριμένα σενάρια.

2.7 ΈΚΘΕΣΗ ΣΕ ΜΟΛΥΣΜΑΤΙΚΟΥΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΕΣ ΜΕΣΩ ΚΑΤΑΝΑΛΩΣΗΣ ΚΑΡΠΙΩΝ

2.7.1 CLEA

Συγκέντρωση στους καρπούς

Στο μοντέλο CLEA η έκθεση από την κατάποση των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών υπολογίζεται για την χρήση του εδάφους ως "οικιακό με κήπο" και "κήπος οπωροκηπευτικών". Η λήψη των μολυσματικών παραγόντων από το έδαφος σχεδιάζεται μόνο μέσω της οδού της κατανάλωσης της ρίζας των φυτών και ακολούθως μέσω της διακίνησης με το ρεύμα διαπίδυσης μέσω των πόρων. Το CLEA δεν υπολογίζει την λήψη μορίων σκόνης που εναποθέτονται στις επιφάνειες των φυτών ή από άλλες οδούς, κυρίως επειδή οι περισσότερες μελέτες λήψης δεν κάνουν καμία προσπάθεια διάκρισης μεταξύ αυτών των οδών. Για τους ανόργανους μολυσματικούς παράγοντες οι αλγόριθμοι λήψης (BCF τιμές) είναι μια συγκεκριμένη ουσία. Μια γενικότερη προσέγγιση χρησιμοποιείται για πολλούς οργανικούς μολυσματικούς παράγοντες.

Η λήψη των μολυσματικών παραγόντων μπορεί επίσης να υπολογιστεί από την κατάποση του χώματος που προσκολλάται στους καρπούς, το οποίο χώμα δεν έχει αφαιρεθεί με τις κανονικές διαδικασίες της προετοιμασίας και του μαγειρέματος των τροφίμων. Στο CLEA χρησιμοποιείται η τιμή των 30 g χώματος/Kg ξηρού φύλλου (= 3%), το οποίο αντιστοιχεί περίπου σε 0.3% του βάρους (fresh weight) για μια χαρακτηριστική περιεκτικότητα των φυτών σε υγρασία 90%. Αυτή η τιμή βασίζεται στο προτεινόμενο κατ' εκτίμηση φορτίο εδάφους από τους Sheppard και Evenden (1992). Οι διαδικασίες διάβρωσης από τον αέρα αποκλείστηκαν από αυτήν την μελέτη για να υπολογιστεί το ποσό του χώματος στα φύλλα που προέρχονται μόνο από το υποκείμενο έδαφος. Στη μελέτη των Sheppard και Evenden το υλικό των φυτών ύστερα από αυστηρό πλύσιμο με αποσταγμένο νερό, αποξηράνθηκε, αποτεφρώθηκε, ζυγίστηκε και αναλύθηκε για ραδιονουκλεΐδια. Υπέθεσαν ότι όλη η όξινη αδιάλυτη τέφρα στα πλυμένα δείγματα φύλλων ήταν χώμα και ότι όλη η περιεκτικότητα σε μολυσματικούς παράγοντες ήταν το αποτέλεσμα της προσκόλλησης χώματος. Τα αποτελέσματα της μελέτης των Sheppard και Evenden έδειξαν ότι η προσκόλληση στα φύλλα είναι μια σημαντική συνιστώσα της συσσώρευσης μολυσματικών παραγόντων στα φυτά και ότι αυτός ο μολυσματικός παράγοντας δεν μπορεί να αφαιρεθεί με αυστηρό καθαρισμό. Πρέπει να σημειωθεί

ότι στο μοντέλο CLEA το προσκολλημένο χρώμα υπολογίζεται χρησιμοποιώντας μια τυχαία μεταβλητή από μια κατανομή βήτα και μια σταθερή απόκλιση. Για καρπούς που αναπτύσσονται κάτω από την επιφάνεια του εδάφους (πατάτες, καρότα, κρεμμύδια, πράσα) τα στοιχεία των Sheppard και Evenden δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν. Σε αυτές τις περιπτώσεις το προσκολλημένο μέρος του εδάφους, το οποίο επιλέγεται σύμφωνα με την κρίση ενός ειδικού, είναι 0.1% του φρέσκου βάρους (fresh weight) για τις πατάτες και τα καρότα και 0.5% του βάρους (fresh weight) για τα κρεμμύδια και τα πράσα.

Λήψη μεταλλικών στοιχείων του εδάφους από τα φυτά

Σύμφωνα με το CLEA (1998) είναι απίθανο το ενδεχόμενο ότι οποιαδήποτε προσέγγιση με εμπειρική σχέση μεταξύ των μεταβλητών να είναι αξιόπιστη για τον σχεδιασμό της λήψης μετάλλων από τα φυτά, λαμβάνοντας υπόψη τις περιπλοκές των συστημάτων φυτά-έδαφος και τις εκτεταμένες διαφορετικές αντιδράσεις των διαφορετικών ειδών φυτών. Η διαδικασία που υιοθετείται στο CLEA συνδυάζει τις γενικές εμπειρικές σχέσεις των μεταβλητών με τα διαθέσιμα στοιχεία της περιοχής για τον τύπο των μετάλλων και των καρπών. Το CLEA χρησιμοποιεί το έδαφος για τον προσδιορισμό της συγκέντρωσης των φυτών ως την αναλογία της συγκέντρωσης μολυσματικών παραγόντων στα φυτά προς τη συνολική συγκέντρωση μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος. Οι εμπειρικές σχέσεις των μεταβλητών, οι οποίες καθορίζουν το ανώτερο και κατώτερο όριο για τους καρπούς των φύλλων και των ριζών των Baes et al. (1984), χρησιμοποιούνται για την εύρεση μιας σχέσης μεταξύ του εδάφους στον παράγοντα της συγκέντρωσης των φυτών και του συντελεστή κατανομής για το έδαφος. Άλλες μελέτες (π.χ. Anderson και Christensen, 1988) χρησιμοποιούνται για τον συνδυασμό της εξάρτησης του συντελεστή κατανομής του εδάφους με το pH του εδάφους. Οι παραγόμενες σχέσεις, συμπεριλαμβανομένου αυτής για το pH του εδάφους, χρησιμοποιούνται για να παρέχουν τα ανώτερα και κατώτερα όρια. Αυτά τα όρια συγκρίνονται με τα στοιχεία λήψης της περιοχής για συγκεκριμένους καρπούς, με σκοπό τον έλεγχο του κατά πόσον το μοντέλο είναι αξιόπιστο για εκείνο τον συνδυασμό μεταλλικό στοιχείο-καρπός. Επιπλέον, η λήψη μεταλλικών στοιχείων από το έδαφος σχεδιάζεται χρησιμοποιώντας την προσομοίωση Monte Carlo από μια ομοιόμορφη κατανομή μεταξύ των ανώτερων και κατώτερων ορίων. Στο μοντέλο CLEA στοιχεία της περιοχής συλλέγονται για το

λάχανο, το μαρούλι, την πατάτα, το καρότο και το κρεμμύδι, αλλά δεν δημοσιεύονται στη διαθέσιμη βιβλιογραφία.

Λήψη οργανικών μειγμάτων από τα φυτά

Λόγω της καλής εμπειρικής υποστήριξης, στο CLEA ο αλγόριθμος λήψης των φυτών είναι βασισμένος στο μοντέλο των Briggs-Ryan. Το μοντέλο των Paterson-Mackay εντάσσεται στο μοντέλο CLEA, το οποίο είναι μια κομψή εναλλακτική λύση, αλλά δεν πρέπει να χρησιμοποιείται έως ότου η εμπειρική υποστήριξη καταστεί διαθέσιμη. Με βάση την τιμή $\log K_{ow}$ υπολογίζεται για τις οργανικές ουσίες ο παράγοντας της συγκέντρωσης του ρεύματος διαπίδυσης μέσω των πόρων (TSCF) και ο παράγοντας της συγκέντρωσης στην ρίζα των φυτών (RCF). Με την τιμή του TSCF μπορεί να υπολογιστεί ο παράγοντας της συγκέντρωσης των μίσχων των φυτών (SCF). Σύμφωνα με τους Briggs et al. (1982), έχοντας τις τιμές RCF και SCF μπορούμε να υπολογίσουμε για τους οργανικούς μολυσματικούς παράγοντες την συγκέντρωση στα διαφορετικά μέρη των φυτών. Ο Ryan (1988) επέκτεινε την προσέγγιση του Briggs, με σκοπό να συμπεριλάβει την επίδραση της προσρόφησης του εδάφους στις συγκεντρώσεις των διαλυμάτων του εδάφους. Το μοντέλο των Briggs-Ryan είναι ουσιαστικά ένα εμπειρικό μοντέλο βασισμένο στη λήψη υδρόφιλων χημικών ουσιών ($\log K_{ow}$ κυμαίνεται από -0.57 έως 3.7) από τα σπορόφυτα κριθαριού. Επομένως, δεν πρέπει να το εμπιστευόμαστε για άλλα είδη φυτών ή για περισσότερες υδροφοβικές χημικές ουσίες.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Επειδή οι συνήθειες κατανάλωσης φαγητού διαφέρουν αρκετά από μια χώρα σε μια άλλη, μόνο πηγές πληροφοριών σχετικές με το Ηνωμένο Βασίλειο χρησιμοποιούνται στο CLEA. Μια από τις κύριες πηγές είναι η National Food Survey, η οποία περιλαμβάνει οικιακές εκτιμήσεις κατανάλωσης τροφίμων καθ' όλη τη διάρκεια του έτους (Πίνακας 2.17). Οι καρποί που αναφέρονται στον πίνακα 2.17 επιλέχτηκαν επειδή ένα μεγάλο μέρος του πληθυσμού τα έφαγε και συμβάλλουν πιθανώς στον όγκο των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών στο Ηνωμένο Βασίλειο. Η μέση τιμή του ρυθμού κατανάλωσης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών είναι βασισμένη στη διαφορά μεταξύ της μέσης κατανάλωσης και των μέσων αγορών. Το κλάσμα των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών του ρυθμού κατανάλωσης καρπών

σχεδιάζεται ξεχωριστά στο CLEA. Στο μοντέλο CLEA ορίζεται ένας παράγοντας προετοιμασίας με τιμή 0.25 για το λάχανο και τους βλαστούς.

Πίνακας 2.17: Ετήσιος ρυθμός κατανάλωσης φαγητού (fresh weight) στο Ηνωμένο Βασίλειο (MAFF, 1990).

Καρποί	Ετήσιος ρυθμός κατανάλωσης (g/d)	Ετήσιος ρυθμός κατανάλωσης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών (g/d)	Ανώτερο όριο του ρυθμού κατανάλωσης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών (g/d)
<i>Καρποί από την ρίζα των φυτών:</i>			
Πατάτες	142	6.6 (4.6%)	112 (78.9%)
Καρότα	16	1.3 (8.1%)	12 (75%)
Κρεμμύδια, φρέσκα κρεμμύδια, πράσα	13	1.3 (10%)	13 (100%)
<i>Καρποί από τα φύλλα των φυτών:</i>			
Λάχανο	12	1.5 (12.5%)	12 (100%)
Λαχανάκια Βρυξελλών	4	0.4 (10%)	3.8 (95%)
Σαλάτα από φύλλα	7.2	0.5 (6.9%)	4.8 (66.7%)

Στο CLEA η ημερήσια λήψη (EDI) των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$EDI = \frac{1}{\sum (\Delta T)_i} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{C_i (ED)_i}{W_i} \cdot \sum_{k=1}^m (CR)_i (HF)_k U_k$$

m:	αριθμός ειδών καρπών	[m=6]
C _i :	συγκέντρωση των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών	[mg/Kg]
(CR) _{ik} :	ρυθμός κατανάλωσης του καρπού τύπου k σε χρόνο (ΔT) _i	[g/day]
(HF) _k :	κλάσμα του σπιτικού καλλιεργήσιμου καρπού τύπου k	[-]
U _k :	συντελεστής λήψης για τον καρπό τύπου k	[-]
(ED) _i :	αριθμός ημερών έκθεσης στον σπιτικό καλλιεργήσιμο καρπό σε χρόνο (ΔT) _i	[365 days]

Ο πρόσφατος αριθμός των ημερών έκθεσης (ED)_i ορίζεται στις 365 ημέρες ετησίως και η διάρκεια της εποχής ανάπτυξης (και των σχετικών παραγόντων) ρυθμίζεται με βάση την μεταβλητή (HF)_k. Ο χρήστης έχει την επιλογή της ρύθμισης της τιμής και των δύο μεταβλητών για να προσαρμόσει τα διαθέσιμα στοιχεία.

2.7.2 UMS

Συγκέντρωση στους καρπούς

Η στοματική λήψη φυτών είναι μόνο μία οδός έκθεσης για το σενάριο "οικιστικό με κήπο". Αυτό το σενάριο περιλαμβάνει όλες τις δραστηριότητες που χρησιμοποιούνται στο οικιστικό με κήπο και στον κήπο οπωροκηπευτικών. Από τις πιθανές οδούς λήψης για τα φυτά μόνο η λήψη από το τμήμα του εδάφους μέσω των ριζών υπολογίζεται στο UMS. Η διαδρομή από το έδαφος στα φυτά θεωρείται η πιο σημαντική για την αξιολόγηση της μόλυνσης, η οποία μόλυνση χρονολογείται πολλά έτη πριν (ο κύριος στόχος του UMS). Δεν λαμβάνονται υπόψη οι διαδρομές λήψης για τα φυτά μέσω της εναπόθεσης των μολυσματικών παραγόντων από τον αέρα στην επιφάνεια των φύλλων ή την λήψη αερίων από τον αέρα μέσω των στομάτων των φύλλων. Οι παράγοντες μεταφοράς (παράγοντες βιοσυγκέντρωσης) χρησιμοποιούνται για να διευκρινίσουν την αναλογία μεταξύ της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος (νερό πόρων) και της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων στα φυτά. Με αυτούς τους παράγοντες η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στα φυτά μπορεί να υπολογιστεί για ένα βάθος εδάφους λιγότερο από ένα μέτρο. Για βάθη εδάφους μεγαλύτερα του ενός μέτρου ένας πρόσθετος παράγοντας 0.2 χρησιμοποιείται.

Λήψη μεταλλικών στοιχείων του εδάφους από τα φυτά

Για μολυσματικούς παράγοντες τα μεταλλικά στοιχεία καθορίζεται ο παράγοντας μεταφοράς για τους καρπούς (75%) και για τα φρούτα (25%). Οι καρποί διανέμονται περαιτέρω μεταξύ των πατατών σε ποσοστό 57% (4/7) και άλλων καρπών σε ποσοστό 43% (3/7). Οπότε, η συνολική διανομή είναι 32% καρποί, 43% πατάτες και 25% φρούτα. Για την χρήση στο UMS πρώτα υπολογίζεται ένας παράγοντας μεταφοράς (TF) για τους καρπούς, επειδή η βάση δεδομένων για τους καρπούς είναι καλύτερη απ' ό,τι για τα φρούτα. Έναντι της μεταφοράς στους καρπούς η μεταφορά στα φρούτα είναι πιο σύνθετη και περίπλοκη για να περιγραφεί. Για μερικά βαριά μέταλλα είναι γνωστό από την βιβλιογραφία ότι η μεταφορά στα φρούτα είναι ένα επί τοις εκατό μέρος από την μεταφορά στους καρπούς. Ο παράγοντας μεταφοράς για τα μεταλλικά στοιχεία υπολογίζεται σύμφωνα με:

$$TF_V = \frac{3 \cdot (a + b + c + d) + 4 \cdot TF_P}{n \cdot 7}$$

$$TF = X\% \text{ of } TF_V$$

$$TF_{SM} = \frac{75 \cdot TF_V + 25 \cdot TF_F}{100}$$

TF _V :	παράγοντας μεταφοράς για τους καρπούς	[-]
TF _F :	παράγοντας μεταφοράς για τα φρούτα	[-]
TF _P :	παράγοντας μεταφοράς για τις πατάτες	[-]
a-d:	εμπειρικές σταθμικές TF τιμές για διαφορετικούς καρπούς	[-]
n:	αριθμός χρησιμοποιημένων καρπών	[-]
X%:	επί τις εκατό ποσοστό του παράγοντα μεταφοράς για καρπούς για την εξαγωγή του παράγοντα μεταφοράς για τα φρούτα	[-]

Για τον προσδιορισμό των παραγόντων μεταφοράς a-d και TF_P χρησιμοποιούνται όσο το δυνατόν περισσότερα μετρήσιμα στοιχεία (π.χ. Sauerbeck 1989, Sauerbeck και Lubben 1991).

Λήψη οργανικών μειγμάτων από τα φυτά

Για τις οργανικές ουσίες υποτίθεται ότι μεταφέρονται και αποθηκεύονται στα φυτά χωρίς δομικές αλλαγές και ότι οι πιθανοί μεταβολισμοί δεν αξιολογούνται. Για τις οργανικές ουσίες με διαθέσιμο συντελεστή κατανομής (K_d σε l/kg) πρώτα υπολογίζεται η συγκέντρωση στο νερό των πόρων (C_{sw} σε mg/l) από την συγκέντρωση στο έδαφος (C_s σε mg/Kg):

$$C_{sw} = \frac{C_s}{K_d}$$

Η συγκέντρωση στα φυτά υπολογίζεται αρχικά από την συγκέντρωση του νερού των πόρων. Με έναν παράγοντα συγκέντρωσης στη ρίζα (RCF) ή έναν παράγοντα συγκέντρωσης στους βλαστούς (μίσχρος, φύλλο, φρούτο) (SCF) υπολογίζεται η συγκέντρωση στα διάφορα μέρη των φυτών για τους οργανικούς

μολυσματικούς παράγοντες. Η συγκέντρωση στις ρίζες και στους βλαστούς υπολογίζεται σύμφωνα με τους Briggs et al. (1982, 1983):

$$RCF = 10^{(0.77 \cdot \log K_{ow} - 1.52)} + 0.82$$

$$TSCF = 0.784 \cdot 10^{\left(\frac{-0.434 \cdot (\log K_{ow} - 1.78)^2}{2.44} \right)}$$

$$SCF = RCF \cdot TSCF$$

Σύμφωνα με το μοντέλο UMS ο $\log K_{ow}$ περιορίζεται στο πεδίο από -0.7 έως 4.3. Στο μοντέλο UMS χρησιμοποιείται μια διόρθωση για τις ουσίες με υψηλή τιμή $\log K_{ow}$ (άγνωστη μέθοδος). Επιπλέον, η εργασία των Trapp και Matthies (1994) χρησιμοποιείται στο UMS για τον υπολογισμό της λήψης των φυτών οργανικών χημικών ουσιών μέσω του νερού των πόρων και της ανταλλαγής μέσω του αέρα.

Για τις οργανικές ουσίες οι καρποί διαιρούνται στις πατάτες σε ποσοστό 47%, στα φρούτα με 24% και το υπόλοιπο 29% διαιρείται εξίσου στις ρίζες και στα βλαστάρια, σύμφωνα με το εγχειρίδιο του UMS (DGE, 1994). Από αυτό υποτίθεται ότι για τουλάχιστον 85% ο παράγοντας μεταφοράς πρέπει να χρησιμοποιείται για τους βλαστούς και ότι το υπόλοιπο 15% πρέπει να χρησιμοποιείται για τις ρίζες. Επομένως στο UMS οι πατάτες δεν θεωρούνται ότι είναι καρποί ρίζας. Για τους οργανικούς μολυσματικούς παράγοντες ο παράγοντας μεταφοράς από το νερό των πόρων στα φυτά υπολογίζεται σύμφωνα με:

$$TF_{org} = RCF \cdot 0.15 + SCF \cdot 0.85$$

Για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στα εύπεπτα μέρη των φυτών, οι προαναφερθέντες υπολογισμοί είναι σε τροποποιημένη μορφή οι οποίοι συνοψίζονται στο μοντέλο UMS. Δεν υπολογίζει μόνο τα ποσοστά χρήσης των βλαστών και των ριζών, αλλά και την προετοιμασία των τροφίμων (ζύσιμο, ξεφλούδισμα, μαγείρεμα κ.λ.π.). Για τις οργανικές ουσίες η νέα εξίσωση στο μοντέλο UMS για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στα φυτά είναι:

$$C_{P-org} = \frac{0.15}{\log K_{ow}^{0.95}} \cdot (10^{0.77 \cdot (\log K_{ow})^{0.82} - 1.52} + 5) \cdot C_{sw}$$

C_{P-org} :	συγκέντρωση στα φυτά για τις οργανικές ουσίες	[mg/kg frw]
K_{ow} :	συντελεστής κατανομής octanol-water	[-]
C_{sw} :	συγκέντρωση στο νερό των πόρων	[mg/l]

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Οι συνολικοί ημερήσιοι μέσοι ρυθμοί λήψης των φυτών είναι βασισμένοι σε ένα ποσοστό χρήσης των σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων του 41% για τους καρπούς και 45% για τα φρούτα (Πίνακας 2.18). Θεωρώντας την γερμανική μέση τιμή ως τον συνολικό ρυθμό λήψης για τους καρπούς και τα φρούτα (Πίνακας 2.18) πρέπει να διορθωθεί με έναν παράγοντα 1.9 και 1.7, αντίστοιχα. Αυτή η διόρθωση χρησιμοποιείται επειδή εκτιμήθηκε ότι οι άνθρωποι καταναλώνουν περισσότερους καρπούς και φρούτα όταν έχουν ένα δικό τους κήπο με οπωροκηπευτικά ή έναν κήπο. Εάν τα ποσοστά χρήσης των σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων χρησιμοποιηθούν στην μη διορθωμένη Γερμανική μέση τιμή λήψης, τότε οι ρυθμοί λήψης των σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων θα είναι πολύ χαμηλοί. Οι ξεχωριστοί ρυθμοί λήψης καρπών και φρούτων δεν διορθώνονται μόνο ως προς το ποσοστό χρήσης, αλλά και ως προς την προετοιμασία των τροφίμων (ζύσιμο, ξεφλούδισμα, μαγείρεμα κ.λ.π.) με τον πολλαπλασιασμό τους με έναν παράγοντα 0.5 (UMS, 1997).

Πίνακας 2.18: Ρυθμός λήψης (freshweight) για καρπούς και φρούτα για το σενάριο “οικιστικό με κήπο” (UMS, 1997).

Πληθυσμός	Ηλικία (έτη)	Σωματικό Βάρος (Kg)	Συνολικός ρυθμός λήψης καρπών ¹ (g/d)	Συνολικός ρυθμός λήψης φρούτων ² (g/d)	Λήψη σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών ³ (g/d)	Λήψη σπιτικών καλλιεργήσιμων φρούτων ⁴ (g/d)	Συνολική μέση ημερήσια λήψη (mg/kg·d)
Βρέφη	< 1	5	-	-	-	-	-
Μικρά παιδιά	1-3	10	115	50	47	23	7000 ⁵
Παιδιά	3-8	20	230	95	94	43	6850 ⁵
Ανήλικοι	8-16	40	380	110	156	50	5125 ⁵
Ενήλικοι	16-46	70	475	120	195	54	3560 ⁵

- 1) 1.9 φορές η γερμανική μέση τιμή καθορίζεται από Deutschen Gesellschaft Ernahrungen (DGE), (Mekel, 1996).
- 2) 1.7 φορές η γερμανική μέση τιμή καθορίζεται από Deutschen Gesellschaft Ernahrungen (DGE) (Mekel, 1996).

- 3) Η λήψη βασίζεται σε ποσοστό χρήσης 41% των σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων για τους καρπούς (Mekel, 1996).
- 4) Η λήψη βασίζεται σε ποσοστό χρήσης 45% των σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων για τα φρούτα (Mekel, 1996).
- 5) Αυτός ο συνολικός μέσος ημερήσιος ρυθμός λήψης για το σενάριο με κήπο πρέπει περαιτέρω να πολλαπλασιαστεί με έναν παράγοντα 0.5 για την διόρθωση ως προς την προετοιμασία των τροφίμων (ξύσιμο, ξεφλούδισμα, μαγείρεμα κ.λ.π.).

Οι ημερήσιες τιμές λήψης για τα φυτά (καρποί και φρούτα) είναι οι ίδιες και για τα βαριά μέταλλα και για τις οργανικές ουσίες. Διαφορετικός είναι ο τρόπος με το οποίο εξάγεται η συγκέντρωση στα φυτά για τα βαριά μέταλλα και για τις οργανικές ουσίες. Στο μοντέλο UMS η συγκέντρωση για τους καρπούς εκφράζεται σε μια βάση φρέσκου βάρους. Οι συγκεντρώσεις ξηρού βάρους για τους καρπούς υποτίθεται ότι είναι 15% της συγκέντρωσης του φρέσκου βάρους. Στο μοντέλο UMS η πιθανή ημερήσια δόση (PDI) στους σπιτικούς καλλιεργήσιμους καρπούς υπολογίζεται με τις ακόλουθες εξισώσεις (UMS, 1993):

$$PDI_{P-S-ol} = DIR_P \cdot C_{P-SM} \cdot R_{ol} \cdot Av$$

$$PDI_{P-org-oral} = DIR_P \cdot C_{P-org} \cdot R_{oral} \cdot Av$$

με

$$C_{P-SM} = C_s \cdot TF_{SM} \cdot F \cdot 0.5 \cdot 0.15$$

$$C_{P-org} = \frac{0.15}{\log Kow^{0.95}} \cdot (10^{0.77 \cdot (\log Kow)^{0.82} - 1.52} + 5) \cdot C_{SW}$$

$$DIR_P = \frac{(IR_V \cdot EA_V) + (IR_F \cdot EA_F)}{BW}$$

C_{P-SM} :	συγκέντρωση στους καρπούς για βαριά μέταλλα (freshweight)	[mg/kg]
C_{P-org} :	συγκέντρωση στους καρπούς για οργανικές ουσίες (freshweight)	[mg/kg]
R_{oral} :	στοματική αναρρόφηση συγκεκριμένης ουσίας	[-]
Av :	διαθεσιμότητα αναρρόφησης συγκεκριμένου πλέγματος (προεπιλεγμένη τιμή = 1)	[-]
C_s :	συγκέντρωση στο έδαφος	[mg/kg]
C_{SW} :	συγκέντρωση στο νερό των πόρων	[mg/l]
F_d :	βάθος του εδάφους (0-1 m : $F_d=1$, >1 m : $F_d=0.2$)	[-]
DIR_P :	ρυθμός ημερήσιας λήψης καρπών/φρούτων, μέσος ετήσιος	[g frw/kg·day]
IR_V :	ρυθμός λήψης καρπών	[g frw/day]
EA_V :	ποσοστό χρήσης των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών	[41%]
IR_F :	ρυθμός λήψης φρούτων	[g frw/day]
EA_F :	ποσοστό χρήσης των σπιτικών καλλιεργήσιμων φρούτων	[45%]
BW :	σωματικό βάρος	[kg]
0.5:	διορθωτικός παράγοντας για την προετοιμασία του φαγητού	[-]
0.15:	παράγοντας υπολογισμού από φρέσκο σε ξηρό βάρος	[-]

2.7.3 CalTOX

Συγκέντρωση στους καρπούς

Στο μοντέλο CalTOX, η βλάστηση σχεδιάζεται ως ένα ενιαίο τμήμα που αποτελείται από αέρα, νερό, λιπίδια φυτών και άλλα υλικά (μεταλλικά στοιχεία κ.λ.π.). Στο μοντέλο αυτό ο διαχωρισμός καθορίζεται μεταξύ της αέριας, της υγρής και της στερεάς φάσης των τμημάτων της βλάστησης. Το τμήμα της βλάστησης αλληλεπιδρά με το τμήμα του αέρα και το τμήμα των ριζών στο έδαφος. Οι οδοί καθορίζονται για:

1. διάχυση με την αέρια φάση του τμήματος του αέρα,
2. εναπόθεση μορίων με την στερεά φάση του τμήματος του αέρα,
3. κίνηση με την υγρή φάση του τμήματος των ριζών στο έδαφος.

Η ικανότητα fugacity του τμήματος βλάστησης είναι βασισμένη σε μια απλουστευμένη έκδοση του μοντέλου που προτάθηκε από τους Paterson και Mackay (1989). Οι Paterson και Mackay προτείνανε ένα μοντέλο με επτά τμήματα για τα φυτά το οποίο, εκτός από τα φύλλα, τους μίσχους και τις ρίζες, περιλαμβάνει τα τμήματα του ξύλου, του φλοιού και της επιδερμίδας. Οι εκφράσεις σχετικά με τις ανταλλαγές μεταξύ της βλάστησης και του αέρα και μεταξύ της βλάστησης και του εδάφους λαμβάνονται υπόψη για τις μη ιονικές οργανικές χημικές ουσίες με την απαίτηση ότι η fugacity των φυτών είναι ο μέσος όρος των fugacities στον αέρα και στο έδαφος. Επίσης καθορίζεται ότι για τις ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες και τα ανόργανα είδη, η fugacity στους ιστούς των φυτών θα πλησιάσει την fugacity του εδάφους όταν επιτυγχάνεται ισορροπία.

Μια διαφορετική προσέγγιση χρησιμοποιείται για τα μέταλλα, η οποία είναι βασισμένη στην ισορροπία μεταξύ της απόθεσης ιζήματος, του πιτσιλίσματος της βροχής, του πλυσίματος και της αποσύνθεσης των φυτών που αναπτύχθηκε για τα ραδιενεργά στοιχεία. Σύμφωνα με το CalTOX, τα μοντέλα συσχετισμού BCF αποτυγχάνουν να προβλέψουν με αξιοπιστία την λήψη των φυτών. Ένα χειρόγραφο έχει δημοσιευθεί (τέλη 2000) περιγράφοντας την προσέγγιση των Paterson και Mackay που χρησιμοποιείται στο μοντέλο CalTOX.

Το μοντέλο των οδών έκθεσης του CalTOX υπολογίζει την μόλυνση των μέσων έκθεσης των φρούτων, των καρπών και των δημητριακών. Τα φρούτα και οι καρποί διαιρούνται σε μια ομάδα εκτεθειμένων προϊόντων, που αντιπροσωπεύουν τα υπέργεια φαγώσιμα μέρη των φυτών και σε μια ομάδα προστατευμένων προϊόντων

(καρποί ρίζας) και προϊόντων που προστατεύονται από το περιβαλλοντικό τμήμα του αέρα, όπως τα εσπεριδοειδή. Τα δημητριακά είναι εκτεθειμένα προϊόντα.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Στον **πίνακα 2.19** παρουσιάζονται οι ρυθμοί λήψης φρέσκου βάρους για τους καρπούς και τα φρούτα, συμπεριλαμβανομένων των κατ' οίκον παραγόμενων. Αυτές οι τιμές συστήνονται στο Exposure Factors Handbook (US-EPA, 1997). Στο μοντέλο CalTOX δεν χρησιμοποιούνται οι τιμές EFH, αλλά η συνολική κατανάλωση κάθε τύπου τροφίμων θεωρείται όπως παρουσιάζεται στο US Department of Agriculture Continuing Survey of Food Intakes by Individuals (CSFII). Αυτές οι τιμές ρυθμίζονται με τον παράγοντα ότι είναι κατ' οίκον καλλιεργήσιμα βασισμένο στο EFH. Οι ρυθμοί λήψης που χρησιμοποιούνται πραγματικά στο CalTOX δεν βρέθηκαν στη διαθέσιμη βιβλιογραφία. Στο μοντέλο CalTOX κανένας διορθωτικός παράγοντας δεν χρησιμοποιείται για την προετοιμασία των τροφίμων.

Πίνακας 2.19: Ρυθμοί λήψης καρπών και φρούτων (freshweight) για σπιτικούς καλλιεργήσιμους καρπούς (US-EPA, 1997).

	Λήψη καρπών	Λήψη καρπών (σπιτικά καλλιεργήσιμοι) ³	Λήψη καρπών από την ρίζα	Λήψη καρπών από την ρίζα (σπιτικά καλλιεργήσιμοι) ³	Λήψη φρούτων	Λήψη φρούτων (σπιτικά καλλιεργήσιμα) ³
Μέση τιμή (g/kg·d)	4.3	2.1 (49%)	1.2	1.2 (100%)	3.4	2.7 (79%)
95% (g/kg·d)	10	7.54 (75%)	4	3.7 (93%)	12	11.1 (93%)
Μέση τιμή (g/d)	301 ¹	126 ² (42%)	84 ¹	72 ² (86%)	238 ¹	162 ² (68%)
95% (g/d)	700 ¹	452 ² (65%)	280 ¹	222 ² (79%)	840 ¹	666 ² (79%)

- 1) Χρήση σωματικού βάρους 70 kg.
- 2) Χρήση σωματικού βάρους 60 kg, με βάση τον αριθμό των συμμετεχόντων σε κάθε κατηγορία ηλικίας και την μέση τιμή του σωματικού βάρους για αυτές τις ομάδες ηλικίας.
- 3) Το ποσοστό μέσα στις παρενθέσεις είναι το μέρος της συνολικής λήψης, το οποίο παράγεται κατ' οίκον.

Το μοντέλο CalTOX υπολογίζει την μόλυνση των μέσων έκθεσης των φρούτων, των καρπών και των δημητριακών μέσω των παραγόντων μεταφοράς (~BCF) για τις χημικές ουσίες παρούσες στον περιβαλλοντικό αέρα, στο επιφανειακό

νερό και στην ζώνη του εδάφους με τις ρίζες των φυτών. Το CalTOX χρησιμοποιεί την ακόλουθη εξίσωση για τον υπολογισμό της κατάποσης των μολυσμένων φρούτων, των καρπών και των δημητριακών ($Intake_{fvg}$):

$$Intake_{fvg} = C_{fvg} \cdot \left[\frac{IR_{fvg}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT}$$

C_{fvg} :	συγκέντρωση χημικών ουσιών στους καρπούς, φρούτα ή δημητριακά	[mg/kg]
IR_{fvg} :	ρυθμός κατάποσης	[kg/day]
BW:	σωματικό βάρος	[kg]
FI:	κλάσμα κατάποσης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών από μολυσμένη πηγή βάση του EFH (Πίνακας 2.19)	[-]
EF:	συχνότητα έκθεσης	[day/year]
ED:	διάρκεια έκθεσης	[years]
AT:	μέσος χρόνος	[day]

2.7.4 CSOIL

Συγκέντρωση στους καρπούς

Για τα μέταλλα, τις ανόργανες και οργανικές ουσίες είναι διαθέσιμες διαφορετικές εξισώσεις για τον υπολογισμό της περιεκτικότητάς τους στους καρπούς που προέρχονται από τις ρίζες των φυτών και στους καρπούς που προέρχονται από τα φύλλα των φυτών. Όλες οι εξισώσεις είναι βασισμένες στις τιμές BCF. Για τα μέταλλα η συγκέντρωση ξηρού βάρους για το έδαφος χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στα φυτά, χρησιμοποιώντας τις τιμές BCF του Sauerbeck (1989), η οποία ολοκληρώνεται με τις τιμές που λαμβάνονται από τη εξίσωση του Baes (1984). Επιπλέον, για άλλες ανόργανες και οργανικές ουσίες η συγκέντρωση του νερού των πόρων χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στα φυτά. Για την λήψη οργανικών ουσιών του εδάφους από τα φυτά χρησιμοποιούνται οι σχέσεις του Briggs (1982, 1983). Για τα μέταλλα η ημερήσια κατανάλωση καρπών εκφράζεται σε μια βάση ξηρού βάρους, ενώ για άλλες οργανικές και ανόργανες ενώσεις σε μια βάση φρέσκου βάρους. Οι ρυθμοί λήψης φρέσκου και ξηρού βάρους παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.20**.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Οι ρυθμοί λήψης του μοντέλου CSOIL καρπών από την ρίζα των φυτών και καρπών από τα φύλλα των φυτών παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.20**.

Πίνακας 2.20: Ρυθμοί λήψης φρέσκου και ξηρού βάρους για καρπούς από την ρίζα των φυτών και για καρπούς από τα φύλλα των φυτών που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CSOIL.

Καρποί	Λήψη καρπών από την ρίζα $G_{dryweight}/d$	Λήψη καρπών από την ρίζα $G_{freshweight}/d$	Λήψη καρπών από τα φύλλα $G_{dryweight}/d$	Λήψη καρπών από τα φύλλα $G_{freshweight}/d$
Παιδιά (1-6)	15.1	74.8	8.9	76.1
Ενήλικοι (7-70)	27.6	136.7	18.4	157.8

Το μοντέλο CSOIL διορθώνεται για τη σχετική συμβολή της ημερήσιας κατανάλωσης καρπών από τα φύλλα και από την ρίζα. Ένας διορθωτικός παράγοντας 0.1 θεωρείται για την χρήση των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών (f_v). Κανένας διορθωτικός παράγοντας δεν χρησιμοποιείται για την προετοιμασία των τροφίμων (ξύσιμο, ξεφλούδισμα, μαγείρεμα κ.λ.π.) ή για το βάθος του εδάφους. Το CSOIL υπολογίζει μια δόση για την ημερήσια κατανάλωση καρπών από τα φύλλα και την ρίζα των φυτών. Η λήψη των μολυσματικών παραγόντων μέσω των καρπών (VI), για τους ενήλικους και τα παιδιά ξεχωριστά, είναι βασισμένη σε:

$$VI = \frac{(Q_{fv}k' \cdot C_{pr}' + Q_{fvb}' \cdot C_{ps}') \cdot fa \cdot f_v}{W}$$

C_{pr}'/C_{ps}' :	συγκέντρωση στους καρπούς από την ρίζα ή τα φύλλα	[mg/kg _{wwt}]
$Q_{fv}k'$:	ημερήσια λήψη καρπών από την ρίζα (ενήλικες)	[0.1367 kg _{wwt} /d]
Q_{fvb}' :	ημερήσια λήψη καρπών από τα φύλλα (ενήλικες)	[0.1578 kg _{wwt} /d]
fa :	σχετικός παράγοντας απορρόφησης	[1.0]
f_v :	κλάσμα μολυσμένων τροφών (ιδιοκτησία κήπου)	[0.1]

2.7.5 ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ

Οργανικές ουσίες

Για τα μοντέλα CLEA, UMS και CSOIL οι υπολογισμοί για τις οργανικές ουσίες στους καρπούς (ρίζες και φύλλα) είναι βασισμένες στον Briggs (1982, 1983). Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιεί έναν παράγοντα συγκέντρωσης στο ρεύμα διαπίδυσης μέσω των πόρων (TSCF), έναν παράγοντα συγκέντρωσης στα κλαδιά (SCF) και έναν παράγοντα συγκέντρωσης στην ρίζα (RCF) για να υπολογίσει τη συγκέντρωση στα διαφορετικά μέρη των φυτών. Η προσέγγιση του Briggs είναι βασισμένη στη λήψη υδρόφιλων χημικών ουσιών και χρησιμοποιείται μόνο για τα σπορόφυτα κριθαριού. Δεν είναι σαφές πώς περισσότερες υδροφοβικές χημικές

ουσίες και άλλα φυτά ή καρποί χρησιμοποιούνται σε αυτά τα μοντέλα. Εκτός από την προσέγγιση του Briggs, το CLEA χρησιμοποιεί αυτή του Ryan (1988) για να συμπεριλάβει την επίδραση της προσρόφησης του εδάφους στις συγκεντρώσεις διαλυμάτων του εδάφους. Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί όχι μόνο αυτή του Briggs αλλά και την προσέγγιση των Trapp και Matthies (1994) επί πρόσθετα. Σε μια απλοποιημένη μορφή το μοντέλο CalTOX χρησιμοποιεί το προηγμένο fugacity μοντέλο των επτά-τμημάτων των Paterson και Mackay. Αυτό το μοντέλο είναι κατάλληλο για όλες τις ουσίες εκτός από τα μέταλλα. Στο μοντέλο CLEA η προσέγγιση των Paterson και Mackay είναι διαθέσιμη αλλά δεν χρησιμοποιείται επειδή στερείται εμπειρικής υποστήριξης.

Μέταλλα

Όπως το CSOIL, έτσι και τα CLEA, UMS χρησιμοποιούν των συσχετισμό BCF για να προβλέψουν την συγκέντρωση των μετάλλων στις ρίζες και στα φύλλα. Στο CLEA, οι μελέτες των Baes et al. (1984) και άλλες μελέτες (π.χ. Anderson και Christensen, 1988) χρησιμοποιούνται για να εξάγουν μια σχέση μεταξύ του εδάφους στον παράγοντα της συγκέντρωσης των φυτών, του συντελεστή κατανομής για το έδαφος και το pH του εδάφους. Επιπλέον, τα στοιχεία λήψης των περιοχών για συγκεκριμένους καρπούς χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν εάν το μοντέλο είναι αξιόπιστο για εκείνον τον συνδυασμό μεταλλικού στοιχείου-καρπός. Η προσέγγιση του CSOIL είναι βασισμένη στους Sauerbeck (1989) και Baes (1984). Σύμφωνα με το CalTOX, τα μοντέλα συσχετισμού BCF αποτυγχάνουν να προβλέψουν αξιόπιστα την λήψη των φυτών. Επομένως μια διαφορετική προσέγγιση χρησιμοποιείται για τα μέταλλα, η οποία είναι βασισμένη στην ισορροπία μεταξύ της εναπόθεσης, του πιτσιλίσματος της βροχής, του πλυσίματος και της αποσύνθεσης των φυτών, η οποία αναπτύχθηκε για τα ραδιενεργά στοιχεία.

Τα συγκρινόμενα μοντέλα υπολογίζουν την εναπόθεση του χώματος στους καρπούς των φυτών με διαφορετικό τρόπο. Η εκτίμηση του CLEA για το χώμα που εναποτέθηκε στους καρπούς των φυτών, το οποίο δεν μπορεί να αφαιρεθεί από την κανονική προετοιμασία των τροφίμων είναι 30 g ξηρού χώματος/kg ξηρού φύλλου ή 3%. Το CalTOX χρησιμοποιεί έναν συντελεστή κατανομής για το πιτσιλίσημα της βροχής και χρησιμοποιεί επίσης την αρχή της περιγραφής της εναπόθεσης στα μέρη των φυτών (καμία διαθέσιμη συμπληρωματική πληροφορία). Στο CSOIL η εναπόθεση στα μέρη των φυτών σχεδιάζεται σύμφωνα με τους Hetrick και

McDonnal-Boyer (1984), αλλά δεν χρησιμοποιείται για την εξαγωγή κατευθυντήριων τιμών. Η προσκόλληση στα φύλλα είναι μια σημαντική συνιστώσα για την συσσώρευση στα φυτά των δυσδιάλυτων μολυσματικών παραγόντων και αυτός ο μολυσματικός παράγοντας δεν μπορεί να αφαιρεθεί με τον αυστηρό καθαρισμό (Sheppard και Evenden, 1992).

Στον **πίνακα 2.21** παρουσιάζεται μια επισκόπηση σχετικά με τις προσεγγίσεις που χρησιμοποιούν όλα τα μοντέλα.

Πίνακας 2.21: Προσεγγίσεις που χρησιμοποιούνται από τα διαφορετικά μοντέλα για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης στους καρπούς.

Μοντέλο	Όλες οι ουσίες	Μέταλλα	Οργανικές ουσίες	Εκτιμήσεις για το προσκολλημένο χόμα (πιτσίλισμα)	Διορθωτικός παράγοντας για την προετοιμασία του φαγητού
CLEA	Paterson and Mackay (διαθέσιμο, μη-χρησιμοποιούμενο)	Baes (1984) και άλλες μελέτες. Έλεγχος με στοιχεία περιοχής	RCF: Briggs (1982) SCF: Briggs (1983) and Ryan (1988)	Ναι, Sheppard and Evenden (1992)	Ναι ¹
CalTOX	Απλοποιημένη μορφή Paterson and Mackay	Διαφορετική προσέγγιση, βασισμένη στην εναπόθεση, πιτσίλισμα της βροχής και στην αποσύνθεση των φυτών	-	Ναι	Όχι
UMS	-	Πειραματικοί BCFs (Sauerbeck and Lubben) ή παράγοντες μεταφοράς	RCF: Briggs (1982) SCF: Briggs (1983) & Trapp and Matthies	Όχι	Ναι, 0.5
CSOIL	-	Πειραματικοί BCFs (Sauerbeck)	RCF: Briggs (1982) SCF: Briggs (1983)	Ναι, εναπόθεση: Hetrick, McDonnal-Boyer (1984)	Όχι

1) Ένας παράγοντας προετοιμασίας 0.25 ορίζεται για το λάχανο και τους βλαστούς.

Έκθεση της ανθρώπινης υγείας

Η σύγκριση των μοντέλων μπορεί να γίνει μόνο για την λήψη καρπών από τους ενήλικους, επειδή για τα παιδιά οι τιμές λήψης δεν είναι διαθέσιμες για το μοντέλο CLEA και CalTOX. Πρέπει να σημειωθεί ότι οι πατάτες δεν θεωρούνται καρποί ρίζας στο μοντέλο UMS. Για όλα τα μοντέλα τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον **πίνακα 2.22**. Οι διαφορές είναι μάλλον μεγάλες μεταξύ των διαφορετικών μοντέλων, ειδικά για τους ρυθμούς λήψης των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών. Η διαφορά μεταξύ του κατώτερου και ανώτερου ρυθμού λήψης είναι ένας παράγοντας 13 και 30 για τους σπιτικούς καλλιεργήσιμους καρπούς από την ρίζα και τα φύλλα, αντίστοιχα.

Πίνακας 2.22: Ρυθμοί λήψης φρέσκου βάρους καρπών από την ρίζα και τα φύλλα.

Μοντέλο	Λήψη σπιτικών καρπών από την ρίζα (g/d)	Λήψη σπιτικών καρπών από τα φύλλα (g/d)	Συνολική λήψη καρπών από την ρίζα (g/d)	Συνολική λήψη καρπών από τα φύλλα (g/d)
CLEA ¹	9.2	2.4	171	23.2
CalTOX ²	126	72	301	84
UMS ³	195		475	
CSOIL ⁴	13.7	15.8	136.7	157.8

- 1) Οι ξεχωριστές λήψεις των διαφορετικών καρπών προστίθενται για να εξαχθούν οι συνολικές τιμές (**Πίνακας 2.17**). Ο ρυθμός κατανάλωσης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών είναι βασισμένος στη διαφορά μεταξύ της μέσης κατανάλωσης και της μέσης αγοράς προϊόντων.
- 2) Χρησιμοποιούνται οι τιμές EFH (US-EPA, 1997). Οι πραγματικοί ρυθμοί που χρησιμοποιούνται από το CalTOX είναι άγνωστοι.
- 3) Παρουσιάζονται μόνο οι τιμές των καρπών, επειδή οι καρποί από την ρίζα και από τα φύλλα δεν καθορίζονται στο UMS. Οι τιμές είναι χωρίς τον παράγοντα 0.5 για τη διόρθωση σχετικά με την προετοιμασία των τροφίμων.
- 4) Η λήψη σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών θεωρείται ότι είναι 10% της συνολικής λήψης καρπών.

Από τον **πίνακα 2.22** οι παράγοντες υπολογίζονται μεταξύ των ρυθμών λήψης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών και των συνολικών ρυθμών λήψης καρπών από την ρίζα και τα φύλλα. Η λήψη των σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών συγκρινόμενη με την συνολική λήψη καρπών ποικίλλει από 5.4% έως 42% για τους καρπούς της ρίζας και 10% έως 86% για τους καρπούς των φύλλων (**Πίνακας 2.23**).

Πίνακας 2.23: Παράγοντας μεταξύ των ρυθμών λήψης σπιτικών καλλιεργήσιμων καρπών και των συνολικών ρυθμών λήψης καρπών της ρίζας και των φύλλων.

Μοντέλο	Παράγοντας για τους καρπούς της ρίζας	Παράγοντας για τους καρπούς των φύλλων
CLEA	18.6 (5.4%)	9.7 (10.3%)
CalTOX	2.4 (42%)	1.2 (86%)
UMS	2.4 (41%)	
CSOIL	10 (10%)	10 (10%)

Για όλα τα μοντέλα η έκθεση στους μολυσματικούς παράγοντες μέσω των καρπών είναι βασισμένη στην εκτιμώμενη συγκέντρωση στα φύλλα και στις ρίζες πολλαπλασιασμένη με την ημερήσια κατανάλωση και διαιρεμένα με το σωματικό βάρος. Οι διαφορές είναι κυρίως οι ρυθμοί απορρόφησης ή αναρρόφησης και τα χρονικά διαστήματα που χρησιμοποιούνται.

Τα μοντέλα UMS και CSOIL χρησιμοποιούν έναν ειδικό χημικό παράγοντα αναρρόφησης ή απορρόφησης για την λήψη στο ανθρώπινο σώμα. Τα CLEA και UMS χρησιμοποιούν έναν διορθωτικό παράγοντα για την προετοιμασία των τροφίμων.

2.8 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Οδοί έκθεσης

Αυτό το κεφάλαιο εστιάζει στην αξιολόγηση των σχετικών εννοιών των μοντέλων που χρησιμοποιούνται για τον καθορισμό της πιθανής ανθρώπινης έκθεσης. Οι έννοιες των μοντέλων δεν εξετάζονται στην πραγματική περιοχή-συγκεκριμένη ανθρώπινη έκθεση. Ο **πίνακας 2.24** παρουσιάζει ποιες διαδρομές περιγράφονται σε όλα τα υπό εξέταση μοντέλα και καθιστά σαφείς τις ελάχιστονες διαφορές μεταξύ των διαδρομών που λαμβάνονται υπόψη.

Αυτή η παράγραφο περιγράφει τα συμπεράσματα της αξιολόγησης των τριών σχετικών οδών έκθεσης. Η ανθρώπινη έκθεση περιγράφεται χωριστά για κάθε μια από τις ακόλουθες οδούς:

1. κατάποση μολυσμένων σωματιδίων εδάφους,
2. εισπνοή πτητικών ενώσεων σε εσωτερικό χώρο,
3. κατανάλωση μολυσμένων καρπών.

Πίνακας 2.24: Οι διαθέσιμες οδοί για τα διαφορετικά μοντέλα έκθεσης.

Οδοί έκθεσης	CSOIL	CLEA	UMS	CalTOX
Κατάποση μολυσμένων σωματιδίων του εδάφους (υπαίθριος χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Κατάποση μολυσμένων σωματιδίων του εδάφους/σκόνη (εσωτερικός χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	-
Επαφή μέσω του δέρματος με μολυσματικές ουσίες του εδάφους (υπαίθριος χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Επαφή μέσω του δέρματος με μολυσματικές ουσίες/σκόνη του εδάφους (εσωτερικός χώρος)	Ναι	Ναι	-	-
Εισπνοή μολυσμένων σωματιδίων/σκόνης του εδάφους (υπαίθριος χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Εισπνοή μολυσμένων σωματιδίων/σκόνης του εδάφους (εσωτερικός χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Εισπνοή ατμών μολυσματικών ουσιών (υπαίθριος χώρος)	Ναι	Ναι	-	Ναι
Εισπνοή ατμών μολυσματικών ουσιών (εσωτερικός χώρος)	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Κατανάλωση (σπιτικών καλλιεργήσιμων) καρπών	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Κατανάλωση χόματος προσκολλημένο στους καρπούς	-	Ναι	-	-
Κατανάλωση μολυσματικών ουσιών μέσω του πόσιμου νερού	Ναι	Ναι	Ναι	Ναι
Κατάποση μολυσματικών ουσιών μέσω του νερού του μπάνιου	-	-	Ναι	Ναι
Εισπνοή ατμών από το νερό ύδρευσης κατά την διάρκεια μπάνιου ή ντους	Ναι	Ναι	-	Ναι
Επαφή μέσω του δέρματος με πόσιμο νερό κατά την διάρκεια μπάνιου ή ντους	Ναι	Ναι	-	Ναι
Επαφή μέσω του δέρματος με μολυσματικές ουσίες κατά την διάρκεια μπάνιου ή ντους	-	-	-	Ναι
Κατανάλωση μολυσματικών ουσιών μέσω κατανάλωσης ψαριού	-	-	Ναι	Ναι
Κατανάλωση μολυσματικών ουσιών μέσω κατανάλωσης γάλατος	-	-	-	Ναι
Κατανάλωση μολυσματικών ουσιών μέσω κατανάλωσης κρέατος	-	-	-	Ναι
Κατανάλωση μολυσματικών ουσιών μέσω κατανάλωσης μητρικού γάλατος	-	-	-	Ναι

Η επαφή μέσω του δέρματος με τους μολυσματικούς παράγοντες και η κατάποση μολυσματικών παραγόντων μέσω του πόσιμου νερού έχουν μια μικρή συμβολή στη συνολική έκθεση, με αποτέλεσμα να μην ληφθούν υπόψη στην σύγκριση των μοντέλων. Μολονότι η επαφή μέσω του δέρματος με τους

μολυσματικούς παράγοντες και η κατάποση μολυσματικών παραγόντων μέσω του πόσιμου νερού δεν εξετάζονται σε αυτήν την σύγκριση, συστήνεται να ληφθούν υπόψη σε μια πιθανή συνέχιση της αξιολόγησης. Επίσης, δεν συμπεριλαμβάνεται ούτε η *κατανάλωση μολυσματικών παραγόντων μέσω του μητρικού γάλατος*. Ίσως αυτή η οδός χρειάζεται περισσότερη προσοχή σχετικά με την εξαγωγή του ανθρώπινου τοξικολογικά παραγόμενου μέγιστου επιτρεπόμενου κινδύνου (MPR).

Κατάποση εδάφους

Δεν υπάρχει αμφιβολία ότι μια σχετική βραχυπρόθεσμη σκόπιμη κατανάλωση εδάφους είναι διαδεδομένη μεταξύ των παιδιών και μπορεί να ασκήσει σημαντική επίδραση στην έκθεση μολυσματικών παραγόντων στην παιδική ηλικία. Μια σκόπιμη κατάποση εδάφους 5 g/d κατά τη διάρκεια μόνο 15 ημερών την περίοδο από 1 έως 6 ετών αυξάνει την μέση ετήσια λήψη περισσότερο από 40%. Οι εκτιμήσεις για μια πιθανή προσέγγιση του συνδυασμού της ακούσιας και σκόπιμης κατάποσης εδάφους παρουσιάζονται στο CLEA (1998). Η έρευνα είναι απαραίτητη για να καθορίσει την εμμονή (διάρκεια) της σκόπιμης κατανάλωσης εδάφους των παιδιών. Σύμφωνα με το CLEA (1998) αυτή η συμπεριφορά μπορεί να εμμείνει από μερικές ημέρες μέχρι μερικούς μήνες. Το CSOIL υπολογίζει μόνο για ολική περίοδο ζωής μέσες ημερήσιες εκθέσεις και επομένως η επίδραση της βραχυπρόθεσμης σκόπιμης κατάποσης εδάφους είναι πιθανώς αμελητέα. Επίσης, συστήνεται η περαιτέρω έρευνα για τη σύγκριση της βραχυπρόθεσμης έκθεσης της σκόπιμης κατανάλωσης εδάφους με στοιχεία οξείας τοξικότητας (Calabrese et al., 1997). Η σκόπιμη κατάποση εδάφους είναι ιδιαίτερα σημαντική όταν η έκθεση για τα παιδιά (1-6 έτη) χωρίζεται από την έκθεση για τους ενηλίκους (7-64 έτη).

Το μοντέλο UMS χρησιμοποιεί μια *άμεση* και μια *έμμεση στοματική λήψη* του εδάφους ή των σωματιδίων σκόνης. Η έμμεση στοματική λήψη περιγράφει πρώτα την εισπνοή των σωματιδίων σκόνης και στην συνέχεια την κατάποσή τους. Η ημερήσια λήψη εδάφους μέσω της έμμεσης διαδρομής εμφανίζεται να είναι αμελητέα έναντι της άμεσης διαδρομής. Για τον υπολογισμό της κατάποσης εδάφους, όλα τα υπό εξέταση μοντέλα χρησιμοποιούν την ίδια έννοια, μόνο οι τιμές για τις παραμέτρους εισαγωγής είναι διαφορετικές. Η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος πολλαπλασιάζεται με έναν ρυθμό κατάποσης εδάφους, το οποίο ομαλοποιείται με βάση το σωματικό βάρος για τους ενηλίκους ή τα παιδιά. Η μόνη διαφορά είναι ότι όλα τα διεθνή μοντέλα χρησιμοποιούν έναν ξεχωριστό ημερήσιο

ρυθμό κατάποσης εδάφους, ο οποίος συνδυάζεται με την διάρκεια έκθεσης. Στο CSOIL μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο ένας μέσος ετήσιος ρυθμός κατάποσης εδάφους (Otte et al., 2001). Λόγω της εξάρτησης από την διάρκεια έκθεσης του χρησιμοποιημένου σεναρίου τα διεθνή μοντέλα είναι εύκαμπτα σχετικά με την ρύθμιση του μέσου ετήσιου ρυθμού κατάποσης.

Εισπνοή ατμών των μολυσματικών παραγόντων

Ο υπολογισμός της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους (από την συνολική συγκέντρωση του εδάφους) είναι ο ίδιος για όλα τα μοντέλα. Εντούτοις, είναι σαφές ότι αυτό είναι μόνο μια εκτίμηση και ότι οι μετρήσεις σε μια περιοχή μπορούν να οδηγήσουν σε άλλες συγκεντρώσεις.

Οι ροές διάχυσης στην *ροή από τον αέρα του εδάφους στον κενό χώρο κάτω από το σπίτι* είναι ίδιες στο CSOIL και στο CLEA. Η προσέγγιση του CLEA για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης του κενού χώρου είναι πιο λεπτομερής από το CSOIL. Στο CLEA εκτός από την ροή διάχυσης από το έδαφος και τις εισερχόμενες και εξερχόμενες οριζόντιες ροές εξαερισμού χρησιμοποιούνται, αλλά διαφορετικές από το CSOIL, επίσης μια ροή διάχυσης από τον κενό χώρο κάτω από το σπίτι στον εσωτερικό αέρα, εισερχόμενες και εξερχόμενες ροές εξαερισμού από τον κενό χώρο και τέλος μια εξερχόμενη ροή διάχυσης μέσω των τοίχων. Η ροή διάχυσης μέσω των τοίχων φαίνεται δευτερεύουσας σημασίας, έναντι της ροής εξαερισμού. Στα CalTOX και UMS δεν είναι δυνατό να υπολογιστούν οι συγκεντρώσεις εσωτερικού αέρα για τα σπίτια με κενό χώρο κάτω από αυτά. Στα μοντέλα αυτά οι συγκεντρώσεις του εσωτερικού αέρα βασίζονται στην ροή διάχυσης από τον αέρα του εδάφους στον εσωτερικό αέρα.

Το CLEA χρησιμοποιεί και μια ροή μεταφοράς (πίεση-οδηγούσα δύναμη ροής αέρα), εκτός από τις προαναφερθείσες ροές διάχυσης. Όλα τα συγκρινόμενα μοντέλα σαφώς ή εν δυνάμει χρησιμοποιούν την ροή με οδηγούσα δύναμη την πίεση, εκτός από το CSOIL.

Σε αντίθεση με τα άλλα μοντέλα, το CLEA χρησιμοποιεί πρόσθετες ροές εξαερισμού περιγράφοντας την προκαλούμενη από τον αέρα πίεση και την επίδραση της συσσώρευσης. Για την έννοια των πολυμέσων, το μοντέλο CalTOX χρησιμοποιεί την ανταλλαγή των ροών μεταξύ του εξωτερικού και του εσωτερικού αέρα.

Για όλα τα μοντέλα, η έκθεση μέσω της εισπνοής των ατμών των μολυσματικών παραγόντων είναι πλήρως βασισμένη στην ίδια έννοια, κατά την

οποία η συγκέντρωση στον αέρα πολλαπλασιάζεται με τον ημερήσιο ρυθμό εισπνοής και διαιρείται με το σωματικό βάρος. Οι κύριες διαφορές μεταξύ των συγκρινόμενων μοντέλων είναι η χρήση των ρυθμών εισπνοής και των ρυθμών απορρόφησης.

Κατανάλωση μολυσμένων καρπών

Στο CSOIL η λήψη των μετάλλων στις ρίζες και τα υπέργεια μέρη των φυτών είναι βασισμένη σε μια μέση τιμή του BCF, το οποίο εξάγεται ανά μεμονωμένο μέταλλο βασισμένο στα στοιχεία της βιβλιογραφίας. Ακριβώς όπως το CSOIL, τα CLEA και UMS χρησιμοποιούν τα μοντέλα συσχετισμού BCF για να προβλέψουν την συγκέντρωση των μετάλλων στις ρίζες και τα φύλλα. Μια σημαντική διαφορά είναι ότι το CLEA ενσωματώνει την επιρροή του pH του εδάφους. Μόνο το CalTOX χρησιμοποιεί μια διαφορετική προσέγγιση για τη λήψη των μετάλλων στους καρπούς, η οποία είναι βασισμένη σε μια ισορροπία μεταξύ της απόθεσης ιζήματος, του πιτσιλίσματος της βροχής, του ξεπλύματος και της αποσύνθεσης των φυτών, η οποία αναπτύχθηκε για τα ραδιενεργά στοιχεία.

Όλα τα συγκρινόμενα μοντέλα χρησιμοποιούν την προσέγγιση του Briggs για να προβλέψουν την λήψη οργανικών μολυσματικών παραγόντων από τα φυτά, εκτός από το CalTOX, το οποίο χρησιμοποιεί μια διαφορετική προσέγγιση και η οποία είναι μια απλουστευμένη μορφή των επτά-τμημάτων του μοντέλου fugacity των Paterson και Mackay. Η μόνη διαφορά είναι ότι το UMS χρησιμοποιεί την προσέγγιση των Trapp και Matthies. Δεν αναμενόταν η προσέγγιση του Ryan να είναι διαφορετική από την προσέγγιση του Briggs όπως χρησιμοποιείται στο CSOIL, εκτός από το ότι ο Ryan έχει επεκτείνει την προσέγγιση του Briggs για να συμπεριλάβει την επίδραση της προσρόφησης του εδάφους στις συγκεντρώσεις των διαλυμάτων εδάφους. Για κανένα από τα διεθνή μοντέλα που χρησιμοποιούν την προσέγγιση του Briggs δεν περιγράφονται οι συνέπειες για ουσίες με τιμές $\log K_{ow}$ μεγαλύτερες από περίπου 5 (βλ. Λήψη οργανικών ενώσεων από τα φυτά, 2.7.1 και 2.7.2). Η προσέγγιση των Trapp και Matthies (1994) χρησιμοποιείται στο UMS για να υπολογίσει την λήψη των οργανικών χημικών ουσιών από τα φυτά μέσω του νερού των πόρων και της ανταλλαγής μέσω του αέρα.

Τα σωματίδια του εδάφους και της σκόνης μπορούν να εναποτεθούν σε διαφορετικά μέρη των φυτών από το πιτσίλισμα της βροχής. Μόνο τα μοντέλα CLEA και CalTOX χρησιμοποιούν το πιτσίλισμα της βροχής.

Για το χώμα που είναι προσκολλημένο στους καρπούς και που δεν μπορεί να αφαιρεθεί με την κανονική προετοιμασία των τροφίμων, το CLEA χρησιμοποιεί την τιμή των 30 gr χώματος/kg ξηρό φύλλο (= 3%). Η τιμή αυτή βασίζεται στο προτεινόμενο κατ' εκτίμηση φορτίο του εδάφους που εισάγεται από τους Sheppard και Evenden (1992). Τα αποτελέσματα της μελέτης των Sheppard και Evenden έδειξαν ξεκάθαρα ότι η προσκόλληση στα φύλλα είναι μια σημαντική συνιστώσα στην συσσώρευση στα φυτά. Για τους καρπούς που αναπτύσσονται κάτω από το έδαφος χρησιμοποιούνται διαφορετικά ποσοστά (0.1%-0.5% σε βάση φρέσκου βάρους). Με τις υποθέσεις του CLEA είναι δυνατό να καθοριστεί η σημασία αυτής της διαδρομής για την έκθεση στους μολυσματικούς παράγοντες μέσω της κατανάλωσης καρπών. Οι έννοιες του CLEA και του CalTOX είναι διαφορετικές από αυτές που χρησιμοποιούνται στο CSOIL σχετικά με την εναπόθεση στα φυτά. Οι Trapp & Matthies προτείνουν μια λιγότερο συντηρητική τιμή του 1% ξηρού χώματος ανά ξηρά φυτά.

Για όλα τα μοντέλα η έκθεση στους μολυσματικούς παράγοντες μέσω των καρπών είναι βασισμένη στη συγκέντρωση των φύλλων και των ριζών πολλαπλασιασμένη με την ημερήσια κατανάλωση και διαιρεμένη με το σωματικό βάρος. Η κύρια διαφορά είναι η χρήση των ρυθμών απορρόφησης. Τα μοντέλα UMS και CSOIL χρησιμοποιούν έναν ενιαίο ειδικό παράγοντα απορρόφησης για την λήψη από το ανθρώπινο σώμα. Τα CLEA και UMS χρησιμοποιούν έναν διορθωτικό παράγοντα για την προετοιμασία των τροφίμων, π.χ. ξύσιμο, αποφλοιώση ή μαγείρεμα. Το CLEA χρησιμοποιεί έναν παράγοντα προετοιμασίας 0.25 για το λάχανο και τους νεαρούς βλαστούς, ενώ το UMS πολλαπλασιάζει τη συνολική μέση ημερήσια λήψη με έναν παράγοντα 0.5. Γενικά, δεν είναι σαφές ποια είναι τα αποτελέσματα αυτών των συνηθειών στην συνολική λήψη.

Εν κατακλείδι, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι το μοντέλο CalTOX είναι το πληρέστερο όσον αφορά την εκτίμηση των επιπτώσεων στην ανθρώπινη υγεία από επικίνδυνες ουσίες στο έδαφος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΔΥΝΑΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ

3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στο παρόν κεφάλαιο περιγράφεται η ανάπτυξη ενός δυναμικού μοντέλου, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των χρονικά μεταβαλλόμενων συγκεντρώσεων των μολυσματικών παραγόντων που εισάγονται αρχικά στα στρώματα του εδάφους κάτω από την επιφάνεια ή για τους μολυσματικούς παράγοντες που απελευθερώνονται συνεχώς στον αέρα, στο επιφανειακό έδαφος, ή στο επιφανειακό νερό. Εξετάζεται ο τρόπος με τον οποίο οι χημικές ιδιότητες έχουν επιπτώσεις τόσο στην βασική διαδρομή και στην ποσότητα του ανθρώπου όσο και στην επαφή προερχόμενη από έμβιο όν. Εστιάζει σε εκείνα τα συστατικά του περιβάλλοντος με τα οποία οι άνθρωποι είναι πολύ πιθανόν να έρθουν σε επαφή. Προκειμένου να αντεπεξέλθει σε αυτόν τον χαρακτηρισμό, αντιμετωπίζει το περιβάλλον ως μια σειρά από αλληλεπιδρώντα τμήματα. Σε αυτό το πλαίσιο, πρέπει να καθοριστεί εάν μια ουσία (α) θα παραμείνει ή θα συσσωρεύσει μέσα στο τμήμα προέλευσής της, (β) μετασχηματίζεται φυσικά, χημικά, ή βιολογικά μέσα στο τμήμα προέλευσής της, ή (γ) μεταφέρεται σε άλλο τμήμα μέσω της μεταφοράς μεταξύ των μέσων, η οποία περιλαμβάνει την διάχυση ή την κίνηση της αέριας μάζας (π.χ. πτητικότητα, ιζηματοποίηση).

Ο σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι να παρέχει μια επισκόπηση των μεθόδων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να καθοριστεί το πώς ο ανταγωνισμός μεταξύ αυτών των διαδικασιών οδηγεί στις χρονικές και χωρικές μεταβολές των συγκεντρώσεων των μολυσματικών παραγόντων στο περιβάλλον. Αρχίζουμε με μια επισκόπηση του μοντέλου μεταφορών και μετασχηματισμού CalTOX, συμπεριλαμβανομένου του προσδιορισμού των επτά τμημάτων του και της φύσης των μαθηματικών μοντέλων περιγράφοντας την μεταφορά των χημικών ουσιών και το αναμενόμενο αποτέλεσμα σε αυτό το σύστημα των επτά τμημάτων. Επίσης σε αυτό το κεφάλαιο, θεωρούμε για κάθε

τμήμα τις διαδικασίες μεταφοράς που οδηγούν στην διασπορά των ουσιών μέσα σε ένα περιβαλλοντικό μέσο. Στην επόμενο παράγραφο, καθορίζουμε την φυσική σύνθεση και την ικανότητα fugacity για κάθε τμήμα. Ακολουθεί παράγραφος η οποία εξετάζει τις διαδικασίες μεταφοράς στο CalTOX με έμφαση στις μεταφορές μεταξύ των μέσων από τις οποίες οι μολυσματικοί παράγοντες κινούνται μεταξύ δύο ή περισσότερων τμημάτων. Η επόμενη παράγραφος εξετάζει τις διαδικασίες μετασχηματισμού. Στην συνέχεια περιγράφονται τα στοιχεία της περιοχής και των χημικών ιδιοτήτων που απαιτούνται για να πραγματοποιηθεί η ανάλυση. Στην συνέχεια, ακολουθεί μια παράγραφο στην οποία αναπτύσσονται ρητά οι μαθηματικές περιγραφές για τις διαδικασίες μετασχηματισμού, τις σταθερές του ρυθμού απωλειών και όλες τις σταθερές των ρυθμών μεταξύ των τμημάτων στο μοντέλο CalTOX. Τέλος, παρουσιάζεται πώς αυτές οι σταθερές των ρυθμών χρησιμοποιούνται για να αναπτύξουν τις εξισώσεις εισόδου-εξόδου για μια μολυσμένη περιοχή και να αναπτύξουν μια δυναμική λύση σε αυτό το σύνολο των εξισώσεων.

3.2 ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ CalTOX

Το CalTOX είναι ένα επτά-τμημάτων τοπικό και δυναμικό fugacity μοντέλο που αναπτύχθηκε για τον υπολογισμό της διάδοσης της μόλυνσης μεταξύ των περιβαλλοντικών μέσων σε μια μονάδα περιοχής που αντιπροσωπεύει την περιοχή που έχει απελευθερωθεί η τοξική ουσία. Είναι σχεδιασμένο να μοντελοποιεί μια περιοχή με έκταση από 1,000 έως 10^7 m². Οι μικρότερες περιοχές μπορούν να αντιμετωπιστούν με το μοντέλο, αλλά σε τέτοιες περιπτώσεις το μοντέλο έχει μεγαλύτερη αβεβαιότητα, η οποία συνδέεται με τις προβλέψεις του μοντέλου και την εμμονή της μόλυνσης.

Σε αυτήν την παράγραφο, περιγράφονται οι στόχους του μοντέλου, οι κρίσιμες ευαισθησίες και αβεβαιότητες, οι χημικές κατηγορίες για τις οποίες μπορεί να χρησιμοποιηθεί, αλλά και οι περιπτώσεις στις οποίες δεν πρέπει να χρησιμοποιηθεί το μοντέλο. Επίσης, περιγράφεται η γενική δομή του μοντέλου CalTOX και των τμημάτων του, η μορφή των διαφορικών εξισώσεων οι οποίες περιγράφουν την είσοδο και την έξοδο των μολυσματικών παραγόντων σε κάθε τμήμα, η δομή, η μάζα, ο όγκος και η σύνθεση των φάσεων των τμημάτων και οι ικανότητες fugacity των οργανικών και ανόργανων χημικών ουσιών σε κάθε τμήμα του CalTOX.

3.2.1 ΣΤΟΧΟΙ, ΙΚΑΝΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΟΡΙΣΜΟΙ

Η ακρίβεια των περιβαλλοντικών μοντέλων συχνά περιορίζεται από την ακρίβεια των δεδομένων εισαγωγής. Υπό αυτούς τους όρους η αύξηση της πολυπλοκότητας των μοντέλων δεν αυξάνει απαραίτητα την ακρίβεια των μοντέλων προβλέψεων και μάλιστα συχνά την μειώνει. Η απλούστερη άποψη του περιβάλλοντος που θα μπορούσε να τεθεί σε ένα περιβαλλοντικό μοντέλο είναι αυτή ενός κόσμου που αποτελείται από διάφορες φάσεις, κάθε μία ομοιογενής, καλά αναμειγμένου και στατικού. Ο στόχος στην ανάπτυξη του μοντέλου CalTOX ήταν η αρχή με αυτήν την άποψη και στην συνέχεια να προστεθούν τα τμήματα, η ετερογένεια και η χρονική εξάρτηση διστακτικά αλλά ανάλογα με τις ανάγκες. Υπάρχουν δύο συστατικά στο μοντέλο CalTOX, το μοντέλο μεταφορών και μετασχηματισμού (**κεφάλαιο 3**) και το μοντέλο των οδών έκθεσης (**κεφάλαιο 4**). Οι στόχοι, οι ικανότητες και οι περιορισμοί του μοντέλου μεταφορών και μετασχηματισμού αναφέρονται παρακάτω.

Το μοντέλο CalTOX στηρίζεται στην fugacity ως μέσο περιγραφής των δυνατοτήτων της μάζας των οργανικών και ανόργανων χημικών ειδών μεταξύ ενός συνόλου συνδεδεμένων περιβαλλοντικών τμημάτων. Η fugacity προσέγγιση είναι καταλληλότερη στις μη ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες για τις οποίες η κατανομή συσχετίζεται έντονα με τις χημικές ιδιότητες, όπως η πίεση των ατμών, η διαλυτότητα και ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού. Το CalTOX έχει επίσης σχεδιαστεί να χειρίζεται τους ιοντικούς οργανικούς και ανόργανους μολυσματικούς παράγοντες, όπως τα ραδιονουκλεΐδια και τα μέταλλα, βασισμένο σε μια τροποποιημένη μορφή της fugacity προσέγγισης. Για όλα τα είδη, η fugacity και οι ικανότητες fugacity χρησιμοποιούνται για να εκφράσουν τις δυνατότητες της μάζας και την αποθήκευσή της μέσα στα τμήματα. Από μαθηματικής απόψεως, το CalTOX καταγράφει την χημική ουσία σε κάθε τμήμα και την πιθανότητα ότι, κατά την διάρκεια μιας δεδομένης χρονικής περιόδου, εκείνη η χημική ουσία θα παραμείνει στο τμήμα, θα μεταφερθεί σε κάποιο άλλο τμήμα, ή θα μετασχηματιστεί σε κάποια άλλα χημικά είδη.

Το CalTOX είναι ένα μοντέλο με συσσωρευμένα συστήματα, μηδενικών - (χωρικές)- διαστάσεων. Αυτό σημαίνει ότι περιλαμβάνει τμήματα για να αντιπροσωπεύσει τα διάφορα συστατικά του περιβάλλοντος, αλλά ότι δεν υπάρχει καμία ρητή κάθετη ή οριζόντια διάσταση σε αυτά τα τμήματα. Εντούτοις, λόγω της φύσης

αυτών των τμημάτων και του τρόπου με τον οποίο η ανταλλαγή της μάζας μοντελοποιείται μεταξύ αυτών των τμημάτων, υπάρχουν διανύσματα μεταφορών μέσα στο μοντέλο. Η μεταφορά στην στήλη του εδάφους είναι κατακόρυφη μέσα στο CalTOX, οι χημικές ουσίες κινούνται προς τα πάνω προς την ατμόσφαιρα και/ή προς τα κάτω στο υπόγειο νερό. Άπαξ και υπάρχει μολυσματική ουσία στην ατμόσφαιρα θα κινηθεί είτε κατακόρυφα πίσω στο υπέργειο-επιφανειακό έδαφος, ή προς το επιφανειακό νερό, ή μεταφέρεται από τον αέρα οριζόντια από την περιοχή. Η μεταφορά από το έδαφος στο επιφανειακό νερό είναι οριζόντια και στην επιφάνεια. Το μοντέλο CalTOX θεωρεί ότι, στα ακόρεστα στρώματα του εδάφους, η κατακόρυφη μεταφορά είναι πολύ μεγαλύτερη από την οριζόντια. Σε επίπεδο ανάγλυφο, υπολογίζεται ότι αυτή η υπόθεση ισχύει για τις περιοχές της τάξης των 1,000 m² ή μεγαλύτερης. Το CalTOX έχει περισσότερη ανάλυση της χημικής μεταφοράς στο έδαφος απ' ό,τι στα επιφανειακά ύδατα και προορίζεται για περιοχές στις οποίες υπάρχει μεγάλη αναλογία της περιοχής του εδάφους εν αντιθέσει με την περιοχή του επιφανειακού νερού. Το CalTOX έχει σχεδιαστεί να εφαρμόζεται κατά την διάρκεια μακρών χρονικών διαστημάτων, από μήνες έως έτη, όταν εφαρμόζονται οι εποχιακοί και ετήσιοι, υπολογισμένοι κατά μέσο όρο, παράγοντες κατανομής.

3.2.1.1 Στόχοι του μοντέλου

Ο σημαντικότερος στόχος του CalTOX είναι να εφοδιάσει τους υπεύθυνους για την λήψη αποφάσεων με μια απεικόνιση τόσο της πιθανής ανθρώπινης έκθεσης όσο και της ακριβής ποσοτικοποίησης των μολυσματικών παραγόντων του εδάφους. Προκειμένου να έρθει εις πέρας ο στόχος αυτός, οι στόχοι των τμημάτων μεταφορών και μετασχηματισμού του CalTOX είναι να (1) παρέχουν ρεαλιστικές (αν και) αβέβαιες διακυμάνσεις των συγκεντρώσεων των μολυσματικών παραγόντων στα περιβαλλοντικά μέσα κατά τόπους, (2) παρέχουν ένα σχετικά απλό και προσιτό μοντέλο, (3) διατηρούν την μάζα των μολυσματικών παραγόντων και να συμμορφώνονται με τους νόμους της χημικής ισορροπίας, (4) διευθύνει τις διαδικασίες μεταφοράς και μετασχηματισμού, (5) επιτρέπει την διάκριση μεταξύ των περιβαλλοντικών συγκεντρώσεων και των συγκεντρώσεων έκθεσης, (6) είναι συμβατό με την αβεβαιότητα και τις αναλύσεις ευαισθησίας, (7) παρέχει τους μεταβλητούς χρόνους των χημικών ουσιών και (8) είναι σε

θέση να διαχειρίζεται τόσο τις συνεχείς εισαγωγές δεδομένων όσο και τις αρχικές συγκεντρώσεις.

3.2.1.2 Κατηγορίες χημικών ουσιών

Υπάρχουν πολλές κατηγορίες χημικών ουσιών που πρέπει να εξεταστούν στα περιβαλλοντικά μοντέλα μεταφοράς/μετασχηματισμού, συμπεριλαμβανομένων των οργανικών χημικών ουσιών, των μετάλλων, των ανόργανων χημικών ουσιών και των ραδιονουκλεϊδίων. Αυτά τα είδη των χημικών ουσιών μπορούν επίσης να ταξινομηθούν σύμφωνα με την φυσική κατάσταση στην οποία εισάγονται στο περιβάλλον (αέρια, υγρή, ή στερεή), σύμφωνα με το εάν διαλύονται ή όχι σε διαλύματα (ιοντικές ή μη-ιοντικές χημικές ουσίες) και σύμφωνα με το φορτίο κατανομής στο μόριο (πολικές ή μη-πολικές). Η παραδοσιακή fugacity προσέγγιση είναι η πιο κατάλληλη για τις μη-ιοντικές, οργανικές χημικές ουσίες σε υγρή ή αέρια κατάσταση. Εντούτοις, με τροποποιήσεις για την συμπύκνωση των στερεών στα σωματίδια του αέρα, αυτή η προσέγγιση μπορεί να γίνει κατάλληλη για τις οργανικές χημικές ουσίες στερεής φάσης. Πρόσθετες ρυθμίσεις καθιστούν πιθανή την επεξεργασία των ανόργανων ειδών, των μετάλλων και των πλήρως ιονισμένων οργανικών ειδών. Τα μέταλλα (όπως ο υδράργυρος) και οι ανόργανες χημικές ουσίες με μια σχετικά μεγάλη πίεση ατμών δημιουργούν ειδικά προβλήματα, τα οποία δεν εξετάζονται εδώ. Ειδικά προβλήματα μοντελοποίησης εμφανίζονται επίσης με την μικτή πολικότητα, η οποία χωρίζει τα οργανικά είδη, όπως τα απορρυπαντικά. Το μοντέλο CalTOX, με φθίνουσα σειρά αξιοπιστίας, είναι σε θέση να χειριστεί τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες, τα ραδιονουκλεΐδια, τις πλήρως διαχωρισμένες οργανικές και ανόργανες χημικές ουσίες και είδη μετάλλων σε στερεή φάση. Με ιδιαίτερη προσοχή στις εισαγωγές των δεδομένων, το μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τα μερικώς χωρισμένα οργανικά και ανόργανα είδη. Το μοντέλο δεν έχει σχεδιαστεί να λειτουργεί με απορρυπαντικά, ανόργανα είδη χημικών ουσιών με υψηλές αναλογίες πίεσης ατμών-διαλυτότητα και με πτητικά μέταλλα όπως είναι ο υδράργυρος.

3.2.1.3 Κρίσιμες Ευαισθησίες και Αβεβαιότητες

Η ανάλυση ευαισθησίας όπως εφαρμόζεται στα μαθηματικά μοντέλα περιλαμβάνει τον προσδιορισμό των αλλαγών στην απόκριση του μοντέλου ως αποτέλεσμα των αλλαγών στις μεμονωμένες παραμέτρους του μοντέλου, ενώ η ανάλυση αβεβαιότητας περιλαμβάνει τον προσδιορισμό της απόκλισης ή της ανακρίβειας στην λειτουργία των δεδομένων εισαγωγής βασισμένη στην αθροιστική απόκλιση των δεδομένων εισαγωγής του μοντέλου. Υπάρχουν πέντε παράγοντες που καθορίζουν την ακρίβεια ή την αξιοπιστία ενός περιβαλλοντικού μοντέλου μεταφοράς. Αυτοί είναι (1) λεπτομερής περιγραφή του προβλήματος (ανάπτυξη σεναρίου), (2) διατύπωση του θεμελιώδους μοντέλου (διάγραμμα ροής), (3) διατύπωση του υπολογιστικού μοντέλου, (4) εκτίμηση των τιμών των παραμέτρων και (5) υπολογισμός και τεκμηρίωση των αποτελεσμάτων συμπεριλαμβανομένων και των αβεβαιοτήτων (IAEA, 1989).

Πολλές από τις ευαισθησίες του μοντέλου εξαρτώνται ιδιαίτερα από τις χημικές ιδιότητες των χημικών ειδών που μοντελοποιούνται. Εν τούτοις, σε όλες τις περιπτώσεις το μοντέλο είναι πολύ ευαίσθητο στις συνθήκες της πηγής. Όλα τα μοντέλα πρόβλεψης είναι άμεσα ανάλογα προς την αρχική απογραφή ή των χρησιμοποιούμενων ρυθμών εισαγωγής δεδομένων. Για πολλές εφαρμογές ενός μοντέλου όπως είναι το CalTOX τα στοιχεία της πηγής έχουν μεγάλη απόκλιση και/ή αβεβαιότητα. Αυτή είναι η περίπτωση όπου είναι απαραίτητες οι μετρήσεις των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος. Για τις περισσότερες χημικές ουσίες, μια άλλη σημαντική ευαισθησία του μοντέλου είναι η σημασία των ρυθμών μετασχηματισμού στο έδαφος, τον αέρα, το επιφανειακό νερό και/ή τα ιζήματα. Αυτοί οι σταθεροί ρυθμοί μπορούν να ασκήσουν μεγάλη επίδραση στην προβλεπόμενη εμμονή οποιονδήποτε χημικών ειδών και συχνά είναι οι πιο αβέβαιες εισαγωγές δεδομένων στο μοντέλο. Για τις πτητικές χημικές ουσίες, το μοντέλο είναι ευαίσθητο στο μέγεθος του συντελεστή κατανομής αέρα-νερού. Για τις ημι-πτητικές χημικές ουσίες και τα ανόργανα είδη το μοντέλο είναι πιο ευαίσθητο στους συντελεστές κατανομής εδάφους-νερού. Υποτίθεται ότι αυτοί οι συντελεστές κατανομής είναι γραμμικοί και αντιστρέψιμοι. Όταν δεν συμβαίνει αυτό, τότε μειώνεται η αξιοπιστία του μοντέλου λόγω των αβεβαιοτήτων για το πόσο απέχουν οι διαδικασίες κατανομής του εδάφους από αυτήν την ιδανική συμπεριφορά.

3.2.1.4 Περιπτώσεις μη-χρήσης του μοντέλου

Όπως συμβαίνει με οποιοδήποτε μοντέλο, το CalTOX σχεδιάστηκε για χρήση σε ένα περιορισμένο πεδίο της χωρικής κλίμακας, της χρονικής κλίμακας, των γεωγραφικών συνθηκών και των χημικών κατηγοριών. Όπως έχει σημειωθεί παραπάνω δεν χρησιμοποιείται για απορρυπαντικά ή πτητικά μέταλλα. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τις μερικώς ιονισμένες οργανικές χημικές ουσίες μόνο όταν επιδεικνύεται μεγάλη προσοχή σχετικά με την ρύθμιση των συντελεστών κατανομής, έτσι ώστε να είναι κατάλληλοι για το κατά τόπους pH. Το CalTOX προορίζεται για εφαρμογή για μακροχρόνια χρονικά διαστήματα, από αρκετούς μήνες έως δεκαετίες. Πρέπει να χρησιμοποιείται με προσοχή για τα χρονικά διαστήματα μικρότερα του ενός έτους και μόνο όταν χρησιμοποιούνται οι κατάλληλα χρονικές-υπολογισμένες κατά μέσο όρο ιδιότητες της περιοχής. Δεν πρέπει να χρησιμοποιείται για τις περιοχές εκείνες στις οποίες το νερό καταλαμβάνει περισσότερο από το 10% της επιφάνειας του εδάφους. Το CalTOX σχεδιάστηκε για την μοντελοποίηση των πολύ χαμηλών συγκεντρώσεων μόλυνσης. Όταν η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων υπερβαίνει το όριο διαλυτότητας σε οποιαδήποτε φάση, τα αποτελέσματα του μοντέλου δεν ισχύουν πλέον.

Το CalTOX δεν πρέπει να χρησιμοποιηθεί ως υποκατάστατο των μετρούμενων στοιχείων, όπου είναι διαθέσιμα.

3.2.2 ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

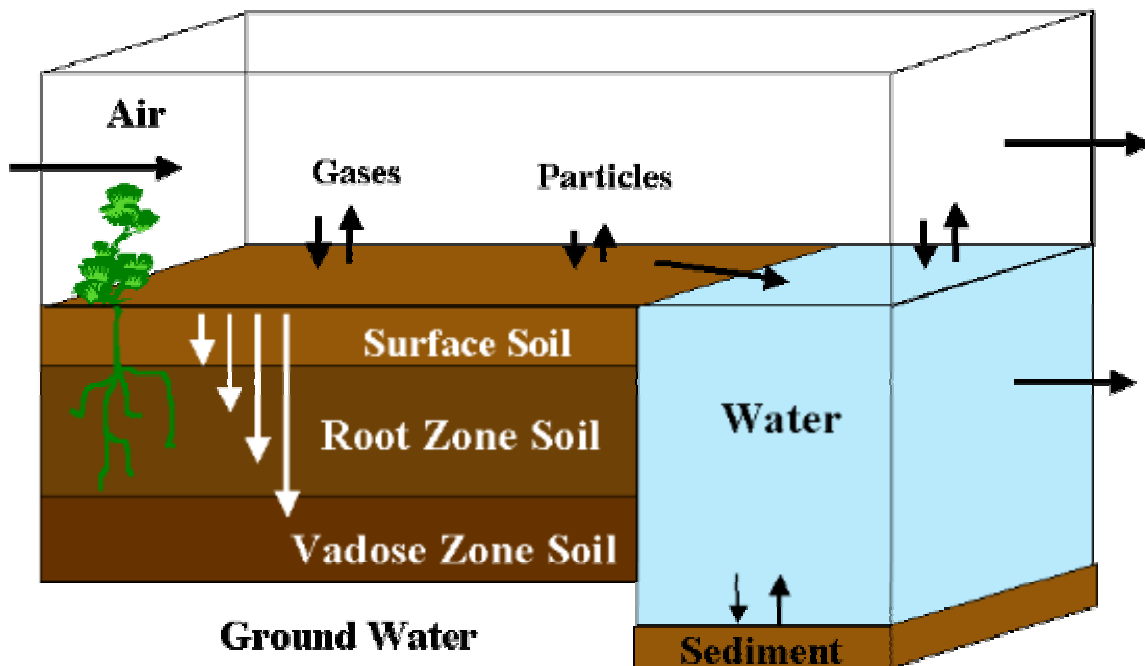
Στο μοντέλο CalTOX, σημαντικά τμήματα του περιβάλλοντος συσσωματώνονται σε ομοιογενή υποσυστήματα ή τμήματα τα οποία μπορούν να ανταλλάξουν μάζα με άλλα παρακείμενα τμήματα. Η δομή των επτά-τμημάτων που χρησιμοποιείται στο CalTOX παρουσιάζεται στο **σχήμα 3.1**. Οι ποσότητες ή οι συγκεντρώσεις μέσα στα τμήματα περιγράφονται από ένα σύνολο γραμμικών, συνδεδεμένων, πρώτης τάξης διαφορικών εξισώσεων. Ένα τμήμα περιγράφεται από την συνολική μάζα του, τον συνολικό όγκο του και την στερεή, υγρή και αέρια φάση της μάζας του. Οι μολυσματικοί παράγοντες κινούνται μεταξύ και εξαφανίζονται από κάθε τμήμα μέσω μιας σειράς διαδικασιών μεταφορών και μετασχηματισμού που μπορεί να αναπαρασταθεί, από μαθηματικής

απόψεως, ως πρώτης τάξης απώλειες. Κατά συνέπεια, οι εξισώσεις μεταφοράς και μετασχηματισμού που λύνονται στο CalTOX έχουν την μορφή:

$$\frac{d}{dt} N_i(t) = -R_i \cdot N_i(t) - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m T_{ij} \cdot N_i(t) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m T_{ji} \cdot N_j(t) + S_i(t) - T_{io} \cdot N_i(t) \quad (3.1)$$

όπου

- $N_i(t)$: είναι ο μεταβαλλόμενος με τον χρόνο κατάλογος των χημικών ειδών στο τμήμα i
 R_i : είναι ο σταθερός ρυθμός πρώτης τάξης για την απομάκρυνση των ειδών από το τμήμα i λόγω του μετασχηματισμού, 1/d
 T_{ij} : είναι ο σταθερός ρυθμός για την μεταφορά των ειδών από το τμήμα i στο τμήμα j , 1/d
 T_{ji} : είναι ο σταθερός ρυθμός για την μεταφορά των ειδών από το τμήμα j στο τμήμα i , 1/d
 T_{io} : είναι ο σταθερός ρυθμός για την μεταφορά των ειδών από το τμήμα i σε ένα σημείο έξω από το καθορισμένο σύστημα της περιοχής, 1/d
 S_i : είναι η πηγή για τα είδη στο τμήμα i , mole/d
 m : είναι ο συνολικός αριθμός τμημάτων στην εξεταζόμενη περιοχή



Σχήμα 3.1: Απεικόνιση των διαδικασιών ανταλλαγής μάζας που μοντελοποιούνται στο περιβαλλοντικό μοντέλο μεταφοράς και μετασχηματισμού των επτά-τμημάτων του CalTOX. (Το υπόγειο νερό δεν μοντελοποιείται ρητά στο σύστημα των εξισώσεων αλλά χρησιμοποιείται στους υπολογισμούς έκθεσης.)

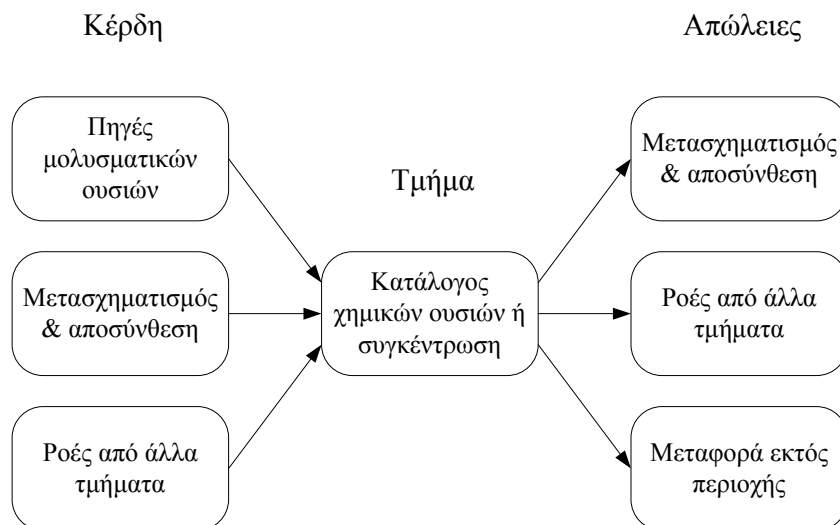
Η **εξίσωση 3.1** λύνεται και για τα επτά τμήματα που παρουσιάζονται στο **σχήμα 3.1**. Τα τμήματα του αέρα, επιφανειακού νερού, υπέργειου-επιφανειακού εδάφους, των φυτών και των ιζημάτων θεωρούνται ότι είναι σε ημι-μόνιμη κατάσταση με τα τμήματα της ριζώδης-περιοχής του εδάφους και του υπεδάφους. Οι μολυσματικοί παράγοντες στα δύο παραπάνω τμήματα αντιμετωπίζονται ως μεταβλητές που μεταβάλλονται με τον χρόνο. Οι συγκεντρώσεις των μολυσματικών παραγόντων στο υπόγειο νερό είναι βασισμένες στην διήθηση από το υπέδαφος.

3.2.3 ΚΕΡΔΗ ΚΑΙ ΑΠΩΛΕΙΕΣ

Η πρόβλεψη της κίνησης μιας τοξικής ουσίας στο περιβάλλον περιλαμβάνει την χρήση των μοντέλων που περιγράφουν την κατανομή των χημικών ειδών μεταξύ των διάφορων περιβαλλοντικών μέσων, συμπεριλαμβανομένου του αέρα, του νερού, του εδάφους και των ιζημάτων. Μια προσέγγιση σε αυτό το πρόβλημα είναι η χρήση των μοντέλων των τμημάτων. Όπως σημειώνεται παραπάνω, τα μοντέλα αυτού του τύπου έχουν αναπτυχθεί κατά την διάρκεια της τελευταίας δεκαετίας για την μελέτη των παγκόσμιων αποτελεσμάτων των τοξικών στοιχείων και των ραδιονουκλεϊδίων καθώς επίσης και για την μελέτη της μεταφοράς και του μετασχηματισμού των οργανικών χημικών ουσιών. Υπάρχουν δύο βασικά χαρακτηριστικά γνωρίσματα που καθιστούν τα μοντέλα των τμημάτων κατάλληλα για την μεταφορά και τον μετασχηματισμό στον αέρα, το νερό, ή το έδαφος. Κατ' αρχάς, κάθε τμήμα διαμορφώνει μια μονάδα στην οποία μπορούν να ισορροπήσουν τα κέρδη και οι απώλειες οι οποίες αποδίδονται στις πηγές, οι μεταφορές από άλλα τμήματα, οι μεταφορές σε άλλα τμήματα και οι φυσικοί/χημικοί μετασχηματισμοί. Δεύτερον, κάθε τμήμα διαμορφώνει μια μονάδα στην οποία μπορεί να γίνει αξιολόγηση της κατανομής της χημικής ουσίας σύμφωνα με τις θερμοδυναμικές αρχές. Επίσης, σε συνδυασμό, αυτά τα δύο χαρακτηριστικά γνωρίσματα μας επιτρέπουν να μοντελοποιήσουμε όχι μόνο την κατανομή μέσα σε ένα τμήμα αλλά το πώς αυτή η κατανομή μέσα στα τμήματα επηρεάζει την μεταφορά μεταξύ των τμημάτων.

Στο **σχήμα 3.2** παρουσιάζονται τα κέρδη και οι απώλειες που εξετάζονται στον καθορισμό του κάθε τμήματος στο μοντέλο CalTOX. Στον **πίνακα 3.1** απαριθμούνται συγκεκριμένα τα κέρδη και οι απώλειες που αντιπροσωπεύονται σε κάθε ένα από τα επτά τμήματα του CalTOX. Το CalTOX εξομοιώνει όλες τις διαδικασίες αποσύνθεσης και

μετασχηματισμού (όπως η ραδιενεργή αποσύνθεση, η φωτόλυση, η βιοδιάσπαση, κ.λ.π.) ως πρώτης τάξης, αμετάκλητες απομακρύνσεις.



Σχήμα 3.2: Απεικόνιση της εξισορρόπησης των κερδών και των απωλειών στα περιβαλλοντικά μοντέλα μεταφορών και μετασχηματισμού, όπως το CalTOX.

Η ροή της μάζας μεταξύ των τμημάτων περιλαμβάνει τις ροές στερεής φάσης, όπως η αιώρηση σκόνης ή η εναπόθεση και τις ροές της υγρής φάσης, όπως η απορροή της επιφάνειας και η αναπλήρωση των υπόγειων νερών. Η μεταφορά των μεμονωμένων χημικών ειδών μεταξύ των τμημάτων πραγματοποιείται με την διάχυση και την μετακίνηση αέριας μάζας στα όρια των τμημάτων. Κάθε χημικό είδος θεωρείται ότι βρίσκεται σε χημική ισορροπία μεταξύ των φάσεων μέσα σε ένα ενιαίο τμήμα. Εντούτοις, δεν υπάρχει καμία απαίτηση για ισορροπία μεταξύ των παρακείμενων τμημάτων. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε το υπέδαφος, το οποίο περιέχει στερεά, υγρά και αέρια. Μια οργανική χημική ουσία που προστίθεται στο έδαφος κατανέμεται μεταξύ αυτών των τριών φάσεων έτσι ώστε να επιτευχθεί χημική και φυσική ισορροπία. Μεταξύ των πιθανών οδών μεταφοράς από το τμήμα του υπεδάφους είναι η μετακίνηση υγρού (απορροή νερού του εδάφους), η μετακίνηση στερεής φάσης (διάβρωση στο επιφανειακό νερό ή ανακατεμένη σκόνη η οποία μεταφέρεται προς τα κάτω) και η διάχυση τόσο από την αέρια φάση του εδάφους όσο και από νερό του εδάφους στην χαμηλότερη ατμόσφαιρα.

Πίνακας 3.1: Περίληψη των διαδικασιών από τις οποίες οι μολυσματικοί παράγοντες ανταλλάσσονται και χάνονται μεταξύ των επτά τμημάτων του CaTOX.

Τμήμα	Κέρδη	Απώλειες
1. Αέρας (αέρια φάση και σωματίδια της τροπόσφαιρας)	διάχυση από το έδαφος διάχυση από τα φυτά διάχυση από το επιφανειακό νερό αιώρηση των συσσωρευμένων σωματιδίων του εδάφους πηγές μολυσματικών ουσιών	διάχυση στο επιφανειακό έδαφος διάχυση στο επιφανειακό νερό διάχυση στα φυτά εδαφική διάβρωση από την βροχή απώλειες μετάδοσης θερμότητας εναπόθεση στο έδαφος εναπόθεση στα φυτά εναπόθεση στο επιφανειακό νερό χημικός/φυσικός μετασχηματισμός
2. Φυτά (βλάστηση εδάφους)	εναπόθεση σωματιδίων από τον αέρα λήψη από τα φύλλα λήψη από τις ρίζες της ριζώδης-ζώνης	διάχυση από τα φύλλα των επιφανειών ξέπλυμα από τα φύλλα των επιφανειών χημικός/φυσικός μετασχηματισμός
3. Υπέργειο-επιφανειακό έδαφος	διάχυση από τον αέρα διάχυση από την ριζώδη-ζώνη ξέπλυμα του αέρα από βροχή ξερή εναπόθεση σωματιδίων του αέρα πηγές μολυσματικών ουσιών	διάχυση στον αέρα διάχυση στην ριζώδη-ζώνη μετακίνηση αέριας μάζας στην ριζώδη-ζώνη απορροή διαλυμάτων εδάφους διάβρωση (απορροή μεταλλικών στοιχείων) στο επιφανειακό νερό αιώρηση σωματιδίων του εδάφους χημικός/φυσικός μετασχηματισμός
4. Ριζώδης-ζώνη του εδάφους	διάχυση από το επιφανειακό έδαφος μετακίνηση αέριας μάζας από το επιφανειακό έδαφος πηγές μολυσματικών ουσιών	διάχυση στο επιφανειακό έδαφος διήθηση στο υπέδαφος χημικός/φυσικός μετασχηματισμός
5. Υπέδαφος	διήθηση από την ριζώδη-ζώνη πηγές μολυσματικών ουσιών	διήθηση στο υπόγειο νερό
6. Επιφανειακό νερό	διάχυση από τον αέρα εδαφική διάβρωση από την βροχή εναπόθεση σωματιδίων της ατμόσφαιρας απορροή διαλυμάτων εδάφους διάβρωση (απορροή μεταλλικών στοιχείων) διάχυση από το ίζημα αιώρηση του ιζήματος πηγές μολυσματικών ουσιών	εναπόθεση ιζήματος διάχυση ατμών στον αέρα διάχυση στο ίζημα εκροή επιφανειακού νερού χημικός/φυσικός μετασχηματισμός
7. Στρώμα ιζήματος	διάχυση από το επιφανειακό νερό εναπόθεση ιζήματος (από το επιφανειακό νερό)	διάχυση στο επιφανειακό νερό αιώρηση ιζήματος χημικός/φυσικός μετασχηματισμός

3.2.4 ΠΗΓΗ ΜΟΛΥΣΜΑΤΙΚΩΝ ΟΥΣΙΩΝ

Όπως σημειώνεται στον **πίνακα 3.1**, οι πηγές των μολυσματικών παραγόντων μπορούν να εισαχθούν στα πέντε από τα επτά τμήματα του CalTOX, αέρας, υπέργειο-επιφανειακό έδαφος, ριζώδη-ζώνη του εδάφους, υπέδαφος και επιφανειακό νερό. Στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους και στο υπέδαφος η πηγή πρέπει να διευκρινιστεί ως αρχική συγκέντρωση. Αυτός ο τύπος πηγής χρησιμοποιείται για να αντιπροσωπεύσει την ταφή των τοξικών χημικών ουσιών στο έδαφος. Σε αυτές τις περιπτώσεις, το μοντέλο CalTOX χρησιμοποιείται για να εκτιμήσει το πώς η αργή αποσύνθεση και η μετανάστευση των αποθέσεων στο στρώμα του εδάφους καθορίζουν τόσο τις συγκεντρώσεις στα στρώματα του εδάφους όσο και τις συγκεντρώσεις στα παρακείμενα περιβαλλοντικά μέσα. Στον αέρα, στο υπέργειο-επιφανειακό έδαφος και στο επιφανειακό νερό, η πηγή πρέπει να καθοριστεί ως συνεχής εισαγωγή. Αυτός ο τύπος πηγής χρησιμοποιείται για να αντιπροσωπεύσει τις ατμοσφαιρικές εκπομπές, τις εφαρμογές των φυτοφαρμάκων, τις εκκενώσεις του επιφανειακού νερού και άλλους τύπους τοπικών και συνεχών μη σημειακών ρυπάνσεων.

3.2.5 ΤΑ ΕΠΤΑ ΤΜΗΜΑΤΑ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

Σε αυτήν την παράγραφο, περιγράφουμε τα επτά τμήματα του CalTOX από την άποψη της μάζας, του όγκου και των χαρακτηριστικών τους που επηρεάζουν την κίνηση της αέριας μάζας και την διάχυση στα όρια του κάθε τμήματος. Δίνουμε ιδιαίτερη έμφαση σε εκείνους τους παράγοντες που καθορίζουν εάν μια ουσία (α) θα παραμείνει ή θα συσσωρευτεί μέσα στο τμήμα, (β) μετασχηματίζεται φυσικά, χημικά, ή βιολογικά μέσα στο τμήμα, ή (γ) μεταφέρεται σε άλλο τμήμα μέσω της μεταφοράς μεταξύ των μέσων, η οποία περιλαμβάνει την διάχυση ή την κίνηση της αέριας μάζας. Τα επτά τμήματα του CalTOX είναι (1) αέρας, (2) υπέργειο επιφανειακό έδαφος, (3) φυτά, (4) ριζώδη-περιοχή του εδάφους, (5) το υπέδαφος, (6) επιφανειακό νερό και (7) ίζημα.

3.2.5.1 Το κατώτερο τμήμα της ατμόσφαιρας ή το τμήμα του αέρα (α)

Οι ουσίες στον υπαίθριο (ή περιβαλλοντικό) αέρα διασκορπίζονται από την ατμοσφαιρική μετακίνηση της αέριας μάζας και την διάχυση. Ο όγκος και η μάζα του

τμήματος του αέρα καθορίζονται από την περιοχή του μολυσμένου τόπου και το ύψος μίξης της κατώτερης ατμόσφαιρας. Οι μετεωρολογικές παράμετροι έχουν συντριπτική επιρροή στην συμπεριφορά των μολυσματικών παραγόντων στη κατώτερη ατμόσφαιρα. Μεταξύ τους, σημαντικότερες είναι οι παράμετροι του αέρα (κατεύθυνση, ταχύτητα και στροβιλισμός) και οι θερμικές ιδιότητες (σταθερότητα). Τα τυποποιημένα μοντέλα για τον υπολογισμό της χρονικής και της χωρικής κατανομής των σημειακών πηγών μόλυνσης στην ατμόσφαιρα είναι οι στατιστικές λύσεις της κατανομής Gauss της εξίσωσης της ατμοσφαιρικής διάχυσης. Αυτά τα μοντέλα εξήχθησαν από την λύση της κλασσικής διαφορικής εξίσωσης για την χρονικά εξαρτημένη διάχυση σε τρεις διαστάσεις. Ο Pasquill (1961) αναφέρεται στην φυσική βάση, στις αναλυτικές λύσεις και στην χρήση αυτών των εξισώσεων. Ο Turner (1970) και οι Hanna et al. (1982) έχουν συντάξει εγχειρίδια για εφαρμογές αυτών των λύσεων σε προβλήματα ατμοσφαιρικής ρύπανσης, συμπεριλαμβανομένης της εφαρμογής των μοντέλων Gauss σε περιοχές και πηγές.

Μια άλλη προσέγγιση σχετικά με την διασπορά των ουσιών στην ατμόσφαιρα είναι βασισμένη στην εφαρμογή της διατήρησης της μάζας σε ένα στοιχειώδη όγκο ή ένα “box” του αέρα. Σε αυτήν την προσέγγιση, η περιοχή που μελετάται διαιρείται σε τμήματα ή διαμερίσματα. Η συγκέντρωση σε κάθε τμήμα υποτίθεται ότι είναι ομοιόμορφη και είναι μια λειτουργία του όγκου του τμήματος, του ρυθμού στον οποίο εισάγεται το υλικό, των ρυθμών εκπομπής μέσα στο τμήμα και του ρυθμού στον οποίο το υλικό εξάγεται από το τμήμα. Οι Gifford και Hanna (1973) αναφέρουν ότι σε ένα απλό στοιχειακό όγκο, η μέση ετήσια συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα μέσα στο “box” είναι ανάλογη με την ροή μάζας της πηγής ανά μονάδα περιοχής διαιρεμένη με την ταχύτητα του αέρα. Με βάση στοιχεία από πόλεις των Ηνωμένων Πολιτειών, έχουν αναπτυχθεί τόσο για τα αέρια όσο και για τα σωματίδια συντελεστές αναλογικότητας που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να υπολογίσουν τις μακροπρόθεσμες συγκεντρώσεις μολυσματικών παραγόντων. Η διασπορά στο τμήμα του αέρα του CalTOX είναι βασισμένη στην προσέγγιση του box-model. Με βάση την εργασία των Hanna et al. (1982), μπορεί να αποδειχθεί ότι η αναλογία της συγκέντρωσης στην πηγή που προβλέπεται από το μοντέλο Gauss είναι παρόμοια σε μορφή με αυτήν που προβλέπεται

από το box-model όταν η αναλογία αυτή εκφράζεται ως μέσος όρος για μεγάλης διάρκειας περιόδων (ενός έτους) και σε μια έκταση 10 km² ή μεγαλύτερη.

3.2.5.2 Το τμήμα των φυτών (p)

Το κυρίαρχο συστατικό του επίγειου τμήματος του εδάφους είναι τα φυτά. Τα φυτά έχουν γενικά επαφή με δύο περιβαλλοντικά μέσα - αέρας και έδαφος. Οι αλληλεπιδράσεις των φυτών με αυτά τα μέσα δεν γίνονται κατανοητές αρκετά καλά για να καθορίσουν μια ακριβή μέθοδο για την λήψη μιας χημικής ουσίας. Η μετακίνηση χημικών ουσιών από το έδαφος εμφανίζεται να είναι μια σχετικά δευτερεύουσας σημασίας οδός για την συσσώρευση αυτών των ουσιών στα φυτά (Fiedler et al., 1991). Ελλείπει πειραματικών μελετών, υπάρχει εμπιστοσύνη στους απλούς παράγοντες βιοσυγκέντρωσης (BCFs), οι οποίοι συσχετίζουν είτε την συγκέντρωση του εδάφους είτε του αέρα με την συγκέντρωση των φυτών. Η πρώτη χρήση των BCFs βλάστησης ήταν για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της παγκόσμιας ατμοσφαιρικής κατακρήμνισης με τον συσχετισμό της συγκέντρωσης των ραδιονουκλεϊδίων στα φυτά με τις συγκεντρώσεις στο έδαφος (Ng, 1982). Πιο πρόσφατα, οι BCFs βλάστησης έχουν προταθεί για τις οργανικές χημικές ουσίες (Travis και Arms, 1988).

Αυτό που εννοείται από την "συγκέντρωση στα φυτά" είναι δύσκολο να καθοριστεί στα μεγάλα φυτά όπου οι ρίζες, οι μίσχοι και τα φύλλα μπορούν να έχουν διαφορετικές συγκεντρώσεις μιας χημικής ουσίας. Οι πρόσφατες μελέτες για την βιοσυγκέντρωση των μη ιοντικών οργανικών χημικών ουσιών έχουν εστιάσει στους συσχετισμούς μεταξύ των BCFs και γνωστών χημικών ιδιοτήτων όπως η σταθερά του Henry και οι συντελεστές κατανομής οκτανόλης-νερού (Bacci et al. 1990, Briggs et al. 1982, Briggs et al. 1983, Travis & Hattemer-Frey 1988, Travis & Arms 1988). Εντούτοις, οι McFarlane et al. (1987) αποδείξαν πειραματικά ότι οι χημικές ουσίες με παρόμοιες τιμές του K_{ow} μπορούν να έχουν δραστικά διαφορετική μακροπρόθεσμη κατανομή, επισημαίνοντας την έλλειψη κατανόησης για τους μηχανισμούς που καθορίζουν την λήψη των φυτών και την κατανομή. Η αποτυχία των απλών μοντέλων συσχετισμού BCF να προβλέπουν αξιόπιστα την λήψη των φυτών οδήγησε στην δημοσίευση διάφορων μεγαλύτερης-ακρίβειας μοντέλων για την λήψη μιας χημικής ουσίας από το έδαφος ή τον αέρα από τα φυτά. Για τις ραδιενεργές ατμοσφαιρικές κατακρήμνισεις, οι Whicker και

Kirchner (1987) ανέπτυξαν ένα μοντέλο με την ονομασία PATHWAY, το οποίο είναι ένα δυναμικό μοντέλο που περιλαμβάνει την λήψη των φυτών από τον αέρα και το έδαφος καθώς επίσης και την επεξεργασία της ανάπτυξης και της γήρανσης των φυτών. Οι Calamari et al. (1987) πρότειναν δύο μοντέλα ισορροπίας βασισμένα στην θεωρία fugacity για την λήψη των φυτών. Ο Riederer (1990) πρότεινε ένα μοντέλο ισορροπίας βασισμένο στην θεωρία fugacity, το οποίο χειρίζεται μόνο την διεπαφή φύλλο-αέρα, αλλά περιλαμβάνει πολλή λεπτομέρεια στην σύνθεση των φύλλων. Με βάση τα πειράματα φύλλων αζαλέας με πέντε χημικές ουσίες, οι Bacci et al. (1990) ανέπτυξαν έναν συσχετισμό των παραγόντων βιοσυγκέντρωσης μεταξύ φύλλου-αέρα με τους συντελεστές κατανομής μεταξύ αέρα-νερού και οκτανόλης-νερού. Οι Trapp et al. (1990) χρησιμοποίησαν φυτά κριθαριού σε θερμοκήπια για να αναπτύξουν ένα τεσσάρων τμημάτων - αέρας, έδαφος, ρίζες και βλαστός - μόνιμης κατάστασης μοντέλο fugacity και διαπίστωσαν ότι, στις περισσότερες περιπτώσεις, οι χημικές ουσίες στις ρίζες των φυτών κριθαριού φθάνουν σε ισορροπία με το έδαφος, ενώ οι χημικές ουσίες στους βλαστούς είναι σε ισορροπία με τον αέρα. Οι Paterson και Mackay (1989) πρότειναν ένα fugacity μοντέλο επτά τμημάτων για τα φυτά, που εκτός από τα φύλλα, τον μίσχος και τις ρίζες τα οποία περιλαμβάνονται στα μοντέλα που περιγράφονται παραπάνω, περιλαμβάνουν τα τμήματα για το ξύλημα, το φλοιώμα και την επιδερμίδα. Αυτό το μοντέλο επικυρώθηκε ενάντια στα πειραματικά αποτελέσματα που επιτεύχθηκαν από τους Bacci και Gaggi (1986), οι οποίοι διαπίστωσαν ότι οι συγκεντρώσεις του φυλλώματος δεν εξαρτώνται άμεσα από την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος, αλλά από την συγκέντρωση στον αέρα.

Στο μοντέλο CalTOX, τα φυτά διαμορφώνονται ως ενιαίο τμήμα που αποτελείται από τον αέρα, το νερό, τα λιπίδια των φυτών και άλλα υλικά. Η ικανότητα fugacity αυτού του τμήματος είναι βασισμένη σε μια απλουστευμένη έκδοση του μοντέλου που προτείνεται από τους Paterson και Mackay (1989). Από την βιβλιογραφία που αναφέρεται παραπάνω, μπορεί να συναχθεί το συμπέρασμα ότι, για τις μη ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες, η fugacity στην συνολική μάζα των φυτών (δηλαδή, από τις ρίζες και την υπέργεια βιομάζα) είναι κάπου μεταξύ της ριζώδης-ζώνης του εδάφους και του αέρα. Κατά συνέπεια, υποθέτουμε ότι η fugacity στα φυτά είναι ο μέσος όρος των fugacities της ριζώδης-ζώνης του εδάφους και του αέρα. Μπορεί επίσης να καθοριστεί

ότι, για τις ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες και τα ανόργανα είδη, η fugacity στους ιστούς των φυτών θα πλησιάζει αυτή του εδάφους όταν επιτυγχάνεται η ισορροπία.

3.2.5.3 Τα τρία τμήματα του εδάφους

Το έδαφος, η λεπτή εξωτερική ζώνη της γήινης κρούστας που υποστηρίζει τα φυτά με ρίζες, είναι το προϊόν του κλίματος και των ζωντανών οργανισμών που ενεργούν στο πέτρωμα. Ένα πραγματικό έδαφος είναι ένα μίγμα αέρα, νερού, μεταλλεύματος και οργανικών συστατικών (Home, 1978). Το σχετικό μίγμα αυτών των συστατικών καθορίζει σε μεγάλο βαθμό πώς μια χημική ουσία θα μεταφερθεί και/ή θα μετασχηματιστεί μέσα στο έδαφος. Η μετακίνηση του νερού και των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος είναι κατακόρυφη σε σύγκριση με την οριζόντια μεταφορά στην ζώνη των υπογείων νερών (π.χ., κορεσμένη). Μια χημική ουσία στο έδαφος κατανέμεται μεταξύ του νερού του εδάφους, της στερεάς φάσης του εδάφους (ορυκτές και οργανικές φάσεις) και του αέρα του εδάφους. Παραδείγματος χάριν, ο ρυθμός αεριοποίησης μιας οργανικής ένωσης από το έδαφος εξαρτάται από την κατανομή της ένωσης στον αέρα του εδάφους και από το πορώδες και την διαπερατότητα του εδάφους.

Τα εδάφη είναι ετερογενή. Μια τάφος στην ζώνη του εδάφους αποκαλύπτει διάφορα οριζόντια στρώματα που έχουν διαφορετικά χρώματα και συστάσεις. Αυτά τα πολλαπλά στρώματα συχνά διαιρούνται σε τρεις σημαντικούς ορίζοντες: ο ορίζοντας *A*, ο οποίος καλύπτει την ριζώδη-ζώνη και περιέχει μια υψηλή συγκέντρωση οργανικής ουσίας, ο ορίζοντας *B*, ο οποίος είναι ακόρεστος, είναι κάτω από τις ρίζες των περισσότερων φυτών και περιέχει πολύ χαμηλότερη οργανική περιεκτικότητα σε άνθρακα και ο ορίζοντας *C*, ο οποίος είναι η ακόρεστη ζώνη του βραχώδους στρώματος, προσχωματικής απόθεσης υλικού, προϊόν παγετώνα και/ή το έδαφος μιας προηγούμενης γεωλογικής περιόδου (Bowen, 1979).

Τα μοντέλα που αναπτύσσονται για την αξιολόγηση της συμπεριφοράς των μολυσματικών παραγόντων στο έδαφος μπορούν να ταξινομηθούν ανάλογα με τις διαδικασίες των μεταφορών και του μετασχηματισμού που περιλαμβάνουν. Τα μοντέλα κατανομής όπως τα fugacity μοντέλα του Mackay (1979, 1991) και των Mackay & Paterson (1981, 1982) περιγράφουν την κατανομή ενός μολυσματικού παράγοντα μεταξύ της υγρής, της στερεής και των οργανικών φάσεων του εδάφους. Οι Jury et al. (1983)

ανέπτυξαν ένα αναλυτικό μοντέλο, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να υπολογίζει τον βαθμό στον οποίο οι μολυσματικοί παράγοντες που θάβονται στο έδαφος εξατμίζονται στην ατμόσφαιρα ή διεισδύουν κάτω στα χαμηλότερα στρώματα του εδάφους. Το μοντέλο πολυμέσων GEOTOX (McKone και Layton, 1986) έχει χρησιμοποιηθεί για τον καθορισμό των χημικών στοιχείων και των οργανικών ενώσεων στα στρώματα του εδάφους μετά από τα διάφορα γεγονότα μόλυνσης. Αυτό το μοντέλο απευθύνει την αεριοποίηση στην ατμόσφαιρα, την απορροή στο επιφανειακό νερό, την διήθηση στο υπόγειο νερό και στις χημικές διαδικασίες μετασχηματισμού. Για την εναπόθεση ραδιενεργούς-ατμοσφαιρικού κατακρημνίσματος στα γεωργικά εδάφη, οι Whicker και Kirchner (1987) ανέπτυξαν ένα μοντέλο που περιλαμβάνει τρία στρώματα του εδάφους, το επιφανειακό έδαφος (από 0 έως 0.1 cm), το ενδιάμεσο έδαφος (από 0.1 έως 25 cm) και το βαθύ έδαφος (> 25 cm).

Το τμήμα του υπέργειου-επιφανειακού εδάφους (g)

Οι μελέτες ραδιενεργούς-ατμοσφαιρικού κατακρημνίσματος στα γεωργικά εδάφη-διοικητικές μονάδες αποκαλύπτουν ότι, ελλείψει του οργώματος, τα σωματίδια που κατατίθενται από την ατμόσφαιρα συσσωρεύονται μέσα και αιωρούνται σε ένα λεπτό υπέργειο ή επιφανειακό στρώμα εδάφους με πάχος από 0 έως 1 cm (Whicker & Kirchner, 1987). Το υπέργειο-επιφανειακό στρώμα του εδάφους είναι στην κορυφή του ορίζοντα *A* του εδάφους. Το υπέργειο-επιφανειακό στρώμα του εδάφους έχει χαμηλότερη περιεκτικότητα σε νερό και υψηλότερη περιεκτικότητα σε αέρια από τα στρώματα που βρίσκονται από κάτω. Οι μολυσματικοί παράγοντες σε αυτό το υπέργειο-επιφανειακό στρώμα του εδάφους μεταφέρονται οριζόντια από την μηχανική απορροή και την απορροή διαλύματος εδάφους στα κοντινά επιφανειακά ύδατα. Οι μολυσματικοί παράγοντες στο επιφανειακό έδαφος είναι επιρρεπείς στη διάβρωση, στην αεριοποίηση, στη φωτόλυση, στη βιοδιάσπαση και στην μεταφορά στην επιφάνεια των φυτών από το πιτσίλισμα της βροχής. Αυτοί οι μολυσματικοί παράγοντες μεταφέρονται προς και από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους με την διάχυση και την διήθηση.

Το τμήμα της ριζώδη-ζώνης του εδάφους (s)

Οι μολυσματικοί παράγοντες στον ορίζοντα *A* κάτω από το επιφανειακό στρώμα, δηλαδή, στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, μεταφέρονται προς τα πάνω με την διάχυση, την αεριοποίηση, την λήψη των ριζών και την τριχοειδή κίνηση του νερού, ενώ μεταφέρονται προς τα κάτω με την διάχυση και την διήθηση και μετασχηματίζονται χημικά κυρίως με την βιοδιάσπαση ή την υδρόλυση. Η περιεκτικότητα του νερού του εδάφους στην ριζώδη-ζώνη είναι κάπως υψηλότερη από αυτή στα επιφανειακά εδάφη. Η παρουσία αργίλου σε αυτό το στρώμα χρησιμεύει στην διατήρηση του νερού. Οι ρίζες των περισσότερων φυτών περιορίζονται στο βάθος του ενός μέτρου. Στα γεωργικά εδάφη, το βάθος του οργώματος είναι από 15 έως 25 cm. Επιπλέον, το βάθος διάχυσης, που είναι το βάθος κάτω από το οποίο ένας μολυσματικός παράγοντας είναι απίθανο να ξεφύγει με την διάχυση, είναι το ένα μέτρο ή λιγότερο για όλους εκτός από τους πιο πτητικούς μολυσματικούς παράγοντες (Jury et al., 1990).

Το τμήμα του υπεδάφους (v)

Αυτό το τμήμα χρησιμοποιείται για να αντιπροσωπεύει τα στρώματα του εδάφους κάτω από την ριζώδη-ζώνη και το βάθος διάχυσης και πάνω από το κορεσμένο στρώμα. Αυτό το τμήμα μπορεί να καλύψει και τον *B* και τον *Γ* ορίζοντα του εδάφους. Το έδαφος σε αυτό το στρώμα έχει χαμηλότερη περιεκτικότητα σε οργανικό άνθρακα και χαμηλότερο πορώδες από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους. Οι μολυσματικοί παράγοντες σε αυτό το στρώμα θεωρούνται ότι κινούνται κυρίως προς τα κάτω προς την ζώνη των υπογείων νερών με την τριχοειδή κίνηση του νερού και την διήθηση. Ο χημικός μετασχηματισμός σε αυτό το στρώμα είναι κυρίως μέσω της βιοδιάσπασης.

3.2.5.4 Το τμήμα του επιφανειακού νερού (w)

Η συμπεριφορά των χημικών ουσιών στα επιφανειακά ύδατα καθορίζεται από δύο παράγοντες - τον ρυθμό φυσικής μεταφοράς στο υδάτινο σύστημα και τις χημικές αντιδράσεις. Οι χημικές αντιδράσεις στα επιφανειακά ύδατα συζητούνται παρακάτω στο τμήμα του μετασχηματισμού. Η φυσική διαδικασία της μεταφοράς εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την θεώρηση του τύπου του υδάτινου σώματος - ωκεανοί, θάλασσες, εκβολές

ποταμών, λίμνες, ποτάμια ή υδροβιότοποι. Ο Schnoor (1981) και οι Schnoor & MacAvoy (1981) συνοψίσανε τα σημαντικά ζητήματα σχετικά με την μεταφορά του επιφανειακού νερού. Τα fugacity μοντέλα αναπτύχθηκαν από τους Mackay et al. (1983a) για τις λίμνες και από τους Mackay et al. (1983b) για τους ποταμούς.

Σε χαμηλή συγκέντρωση, οι μολυσματικοί παράγοντες στα φυσικά ύδατα υπάρχουν τόσο σε διαλυμένη όσο και σε απορροφημένη φάση. Στα επιφανειακά ύδατα αργής κίνησης είναι σημαντική τόσο η μετακίνηση της αέριας μάζας όσο και η διασπορά. Στα υδάτινα συστήματα γρήγορης κίνησης, η μετακίνηση της αέριας μάζας ελέγχει την μεταφορά της μάζας και οι διαλυμένες ουσίες κινούνται ουσιαστικά με την ίδια ταχύτητα με το υδάτινο σύστημα. Οι μολυσματικοί παράγοντες που απορροφούνται σε κolloειδές υλικό και λεπτά αιωρούμενα στερεά μπορούν επίσης να παρασυρθούν από τα ρεύματα του νερού, αλλά μπορούν να υποβληθούν στις πρόσθετες διαδικασίες μεταφοράς, οι οποίες αλλάζουν τον αποτελεσματικό χρόνο παραμονής τους στα επιφανειακά ύδατα. Τέτοιες διαδικασίες περιλαμβάνουν την ιζηματοποίησή τους, την εναπόθεσή τους, τον καθαρισμό τους και την αιώρησή τους. Κατά συνέπεια, ο καθορισμός της μεταφοράς των μολυσματικών παραγόντων στα επιφανειακά ύδατα απαιτεί την παρακολούθηση της μετακίνησης του νερού, την εναπόθεση και την αιώρηση από το ίζημα.

Η ισορροπία του νερού είναι το πρώτο βήμα στην αξιολόγηση της μεταφοράς του επιφανειακού νερού. Η ισορροπία του νερού καθιερώνεται με την εξίσωση των εισαγωγών και των απωλειών σε ένα υδάτινο σύστημα με αποθήκευση. Το νερό μπορεί να αποθηκευτεί μέσα στις εκβολές των ποταμών, στις λίμνες, στους ποταμούς και στους υδροβιότοπους από μια αλλαγή στην υψομετρική διαφορά ή στο επίπεδο. Οι εισαγωγές του νερού περιλαμβάνουν τις εισροές (απορροή και ρεύμα εισόδου) και την άμεση ιζηματοποίηση. Οι απώλειες του νερού περιλαμβάνουν τις εκροές και την εξάτμιση.

Στο CalTOX το τμήμα του επιφανειακού νερού χρησιμοποιείται για να αντιπροσωπεύει το επιφανειακό υδάτινο σώμα που είναι πλησιέστερο σε μια περιοχή μόλυνσης και αυτό που λαμβάνει την απορροή και/ή την αερομεταφερόμενη εναπόθεση από εκείνη την περιοχή. Το τμήμα του επιφανειακού νερού αποτελείται από δύο φάσεις, το καθαρό νερό και το αιωρούμενο υλικό των ιζημάτων που περιέχει τους απορροφημένους μολυσματικούς παράγοντες. Θεωρούμε ότι τα επιφανειακά ύδατα είναι καλά αναμεμειγμένα (ομοιογενής) συστήματα. Η ταχύτητα του επιφανειακού νερού

συσχετίζεται με την περιοχή και το βάθος, ενώ ο όγκος καθορίζει τον χρόνο παραμονής της καθαρής φάσης του νερού. Ο αποτελεσματικός χρόνος παραμονής των αιωρούμενων ιζημάτων καθορίζεται τόσο από τον χρόνο παραμονής της υδάτινης φάσης και την εναπόθεση όσο και από τους ρυθμούς αιώρησης των ιζημάτων. Οι μολυσματικοί παράγοντες μεταφέρονται στο επιφανειακό νερό από την εναπόθεση από τον αέρα, την απορροή από το έδαφος, την διάχυση και την αιώρηση από τα ιζήματα. Οι μολυσματικοί παράγοντες στο επιφανειακό νερό μεταφέρονται έξω από αυτό το τμήμα με την μετακίνηση της αέριας μάζας τόσο στην υγρή όσο και στην φάση των ιζημάτων, την διάχυση στον αέρα στην ανώτερη επιφάνεια του υδάτινου σώματος και με την διάχυση και την εναπόθεση στα ιζήματα.

Οι μολυσματικοί παράγοντες στο επιφανειακό νερό λαμβάνονται από τους υδρόβιους οργανισμούς και αυτό μπορεί να έχει επιπτώσεις στην κατανομή αυτών των μολυσματικών παραγόντων. Στο CalTOX, η μοντελοποίηση της μεταφοράς των μολυσματικών παραγόντων στο επιφανειακό νερό είναι βασισμένη στην θεώρηση ότι ουσιαστικά όλη η μάζα των μολυσματικών παραγόντων είναι είτε στις υγρές είτε στις αιωρούμενες στερεές φάσεις. Αυτή η υπόθεση υπονοεί ότι ένα πολύ μικρό μέρος της συνολικής απογραφής του τμήματος κατανέμεται μεταξύ των υδρόβιων ειδών. Εντούτοις, αυτό δεν υπονοεί ότι υπάρχουν χαμηλές συγκεντρώσεις σε αυτούς τους οργανισμούς. Αρκετά συχνά συμβαίνει η αντίθετη περίπτωση.

3.2.5.5 Το τμήμα του ιζήματος (d)

Αυτό το τμήμα αντιπροσωπεύει το πορώδες, ενεργό στρώμα του νερού και το στερεό υλικό, το οποίο σχηματίζεται στο κατώτατο σημείο του τμήματος του επιφανειακού νερού κυρίως ως αποτέλεσμα του ιζήματος και της εναπόθεσης οργανικής ύλης από το επιφανειακό νερό από πάνω. Οι Reuber et al. (1987) σημείωσαν ότι τα ιζήματα του πυθμένα των σωμάτων του επιφανειακού νερού έχουν τουλάχιστον δύο ευδιάκριτα στρώματα - ένα ενεργό στρώμα που χαρακτηρίζεται από έναν υψηλό βαθμό χημικής και βιολογικής δραστηριότητας και ένα βαθύτερο ανενεργό στρώμα στο οποίο οι χημικές ουσίες είναι ουσιαστικά απομονωμένες από την υδάτινη στήλη. Στις λίμνες, το ενεργό στρώμα μπορεί να διαιρεθεί περαιτέρω σε αραιό ή "νεφελώδες" στρώμα στην διεπαφή νερού-ιζήματος και σε ένα περισσότερο συγκεντρωμένο χαμηλότερο στρώμα

κατωτέρω. Το νεφελώδες στρώμα αποτελείται περίπου από 95% νερό και 5% στερεά και είναι ιδιαίτερα οργανικό στην φύση, αποτελείται από τα εναποθετημένα σωματίδια και το κοπρώδες υλικό από την υδάτινη στήλη και ανακατώνεται από τα ρεύματα και με τα ασπόνδυλα ζώα, τα οποία φτιάχνουν τρύπες με τούνελ (Mackay, 1991). Το συγκεντρωμένο στρώμα έχει πάχος αρκετών εκατοστών και έχει την χαμηλότερη περιεκτικότητα σε νερό, 50%, αλλά μπορεί να έχει αφθονία οργανικού υλικού και μίξεων λόγω των δραστηριοτήτων των υδρόβιων οργανισμών. Τα ιζήματα στον πυθμένα των ποταμών μπορούν να είναι πιο στροβιλώδη από εκείνα των λιμνών και τείνουν να έχουν την λιγότερη οργανική ουσία και μια πιο γρήγορη μίξη λόγω της αιώρησης και της εναπόθεσης.

Η εναπόθεση, η αιώρηση, ο ενταφιασμός, η διάχυση, η οξείδωση και ο βιολογικός μετασχηματισμός είναι συνεχείς διαδικασίες, οι οποίες έχουν αντίκτυπο στον κατάλογο των μολυσματικών παραγόντων στα ιζήματα του πυθμένα. Η εναπόθεση ορυκτής ύλης και οργανικής ουσίας από το επιφανειακό νερό στα ιζήματα είναι μια συνεχής διαδικασία σε οποιοδήποτε υδάτινο σώμα και ένας σημαντικός μηχανισμός για την μεταφορά μολυσματικών παραγόντων προσκολλημένων στα σωματίδια στο στρώμα του ιζήματος. Σε οποιοδήποτε υδάτινο σύστημα, μέρος του αποθηκευμένου υλικού αιωρείται από τα ρεύματα του ύδατος, τα οποία εξαρτώνται από την υδρολογία του συστήματος. Στις λίμνες, η εναπόθεση είναι χαρακτηριστικά μεγαλύτερη από την αιώρηση και στους ποταμούς η αιώρηση μπορεί να είναι ίση ή να υπερβαίνει την εναπόθεση. Ο ενταφιασμός αναφέρεται στον ρυθμό στον οποίον οι μολυσματικοί παράγοντες κινούνται από το ενεργό προς το ανενεργό στρώμα. Το νερό των πόρων του στρώματος του ιζήματος μαζί με την κολλοειδή οργανική ουσία στο νερό των πόρων παρέχει το μέσο για την διάχυση. Οι μολυσματικοί παράγοντες που διαλύονται στο νερό των πόρων ή απορροφούνται στα κολλοειδή μπορούν να διασκορπίσουν ή να μεταναστεύσουν από τα ιζήματα προς τα πάνω μέχρι την υδάτινη στήλη ή προς τα κάτω στα βαθύτερα στρώματα των ιζημάτων. Η οξείδωση μπορεί να διαδραματίσει έναν σημαντικό ρόλο στο χημικό μετασχηματισμό των ανόργανων και (σε μικρότερη έκταση) οργανικών χημικών ουσιών στο στρώμα του ιζήματος. Η βιολογική μεταφορά είναι επίσης μια σημαντική διαδικασία μετασχηματισμού στο στρώμα του ιζήματος. Εντούτοις, ο ρυθμός με τον οποίο αυτές οι διαδικασίες μπορούν να αφαιρέσουν τους

μολυσματικούς παράγοντες από τα ιζήματα εξαρτάται από την διαθεσιμότητα του οξυγόνου στην υδάτινη στήλη (Mackay, 1991).

3.2.6 ΜΟΛΥΝΣΗ ΤΟΥ ΥΠΟΓΕΙΟΥ ΝΕΡΟΥ

Το μοντέλο CalTOX, δεν μοντελοποιεί ρητώς την ροή και την διάλυση των μολυσματικών παραγόντων στο υπόγειο νερό. Αντ' αυτού, θεωρεί την συγκέντρωση ενός μολυσματικού παράγοντα στο νερό, ο οποίος διηθείται από την ζώνη του εδάφους κάτω από τις ρίζες, ως εισαγωγή στην ζώνη του υπόγειου νερού. Αυτή η συγκέντρωση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των πιθανών δόσεων στους μολυσματικούς παράγοντες στο υπόγειο νερό. Υπάρχει επίσης επιλογή για τον χρήστη να εισάγει μια συγκέντρωση μολυσματικού παράγοντα στο υπόγειο νερό και αυτή η συγκέντρωση χρησιμοποιείται στους πιθανούς υπολογισμούς δόσεων που περιγράφονται στο **κεφάλαιο 4**.

Στο υπόγειο νερό, η διάλυση των μολυσματικών παραγόντων εμφανίζεται με πολύ πιο αργό ρυθμό από ότι στον αέρα και στο επιφανειακό νερό. Αφού το νερό του ιζήματος εισχωρήσει στο υπόγειο νερό, μετακινείται κατακόρυφα προς τα κάτω μέσω της ακόρεστης ζώνης όπου έρχεται σε επαφή με την υπόγεια στάθμη του νερού και έπειτα ρέει περίπου οριζόντια. Αυτή η οριζόντια μετακίνηση οδηγείται από την υδραυλική κλίση, η οποία είναι η διαφορά στο υδραυλικό προφίλ σε δύο σημεία διαιρεμένο με την απόσταση (κατά μήκος της πορείας ροής) μεταξύ των σημείων. Οι Bear & Verruijt (1987) και οι Freeze & Cherry (1979) έχουν συντάξει εκτενείς αναθεωρήσεις σχετικά με την θεωρία και την μοντελοποίηση της ροής των υπογείων νερών καθώς επίσης και για την μεταφορά των μολυσματικών παραγόντων στο υπόγειο νερό. Η μετακίνηση των μολυσματικών παραγόντων στο υπόγειο νερό περιγράφεται από δύο κύριους μηχανισμούς: (1) την ακαθόριστη μετακίνηση του ρευστού (ροή μετακίνησης αέριας μάζας) και (2) την διασπορά. Η διασπορά εξαρτάται τόσο από την μίξη των ρευστών όσο και από την μοριακή διάχυση. Η μεταφορά πολλών χημικών ειδών στο υπόγειο νερό συχνά επιβραδύνεται ή "καθυστερείται" ανάλογα με την ροή του ρευστού από την προσρόφηση του υλικού των μολυσματικών παραγόντων στο οργανικό υλικό, στα σωματίδια του εδάφους και στο πέτρωμα. Οποιαδήποτε μεταφορά του υπόγειου νερού

μακριά από την μολυσμένη μονάδα θα οδηγήσει στην μείωση της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων.

3.3 ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΕΣ ΚΑΤΑΝΟΜΗΣ ΚΑΙ ΙΚΑΝΟΤΗΤΕΣ FUGACITY

3.3.1 MONTEΛΑ FUGACITY

Τα μοντέλα fugacity έχουν χρησιμοποιηθεί εκτενώς για την μοντελοποίηση της μεταφοράς και του μετασχηματισμού των μη-ιοντικών οργανικών χημικών ουσιών στα σύνθετα περιβαλλοντικά συστήματα. Τα τροποποιημένα μοντέλα fugacity έχουν χρησιμοποιηθεί επίσης για τα ιοντικά-οργανικά και ανόργανα είδη, συμπεριλαμβανομένων των μετάλλων. Η fugacity είναι ένας τρόπος αναπαράστασης της χημικής δραστηριότητας στις χαμηλές συγκεντρώσεις. Η fugacity έχει τις μονάδες της πίεσης (Pascal [Pa]) και μπορεί να θεωρηθεί ως η μερική πίεση ή η δυνατότητα διαφυγής που ασκείται από μια χημική ουσία σε μια φυσική φάση ή τμήμα σε μια άλλη (Mackay 1979, 1991, Mackay & Paterson 1981, 1982). Όταν δύο ή περισσότερα μέσα είναι σε ισορροπία, η τάση διαφυγής (fugacity) μιας χημικής ουσίας είναι η ίδια σε όλες τις φάσεις. Αυτό το χαρακτηριστικό του μοντέλου που βασίζεται στην fugacity συχνά απλοποιεί τα μαθηματικά που περιλαμβάνονται στον υπολογισμό της κατανομής. Τα μοντέλα fugacity μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν για να αναπαραστήσουν ένα δυναμικό σύστημα στο οποίο οι fugacities σε δύο παρακείμενα μέσα αλλάζουν εγκαίρως λόγω έλλειψης ισορροπίας μεταξύ των πηγών και των απωλειών ή ενός δυναμικού συστήματος που έχει επιτύχει σταθερή κατάσταση με την εξισορρόπηση των κερδών και των απωλειών, ακόμα κι αν οι fugacities δεν είναι ίσες.

Στις χαμηλές συγκεντρώσεις, όπως εκείνες των περιβαλλοντικών τμημάτων, η fugacity, f (Pa), σχετίζεται γραμμικά με την συγκέντρωση C (mol/m^3) μέσω της ικανότητας fugacity, Z ($\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{Pa}$):

$$C = f \cdot Z \quad (3.2)$$

Η Z εξαρτάται από τις φυσικές και χημικές ιδιότητες της χημικής ουσίας και από τα διάφορα χαρακτηριστικά της φάσης, όπως η θερμοκρασία και η πυκνότητα. Η

ιδιότητα ότι οι fugacities είναι ίσες στην ισορροπία επιτρέπει τον απλό προσδιορισμό των τιμών Z από τους συντελεστές κατανομής. Παραδείγματος χάριν, για δύο φάσεις στην ισορροπία (φάση 1 και 2):

$$C_1 / C_2 = f \cdot Z_1 / f \cdot Z_2 = Z_1 / Z_2 = K_{12} \quad (3.3)$$

όπου C_1 και C_2 είναι οι συγκεντρώσεις σε κάθε φάση, Z_1 και Z_2 είναι οι ικανότητες fugacity κάθε φάσης και K_{12} είναι ένας αδιάστατος συντελεστής κατανομής, όπως ο K_{ow} , ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού.

Ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα των μοντέλων fugacity είναι η δυνατότητά τους να αντιπροσωπεύσουν τις διαδικασίες μεταφοράς της διάχυσης και της μετακίνησης μεταξύ των μέσων. Σε ένα μοντέλο fugacity, η καθαρή ροή διάχυσης, σε $\text{mol/m}^2 \cdot \text{d}$, κατά μήκος της διεπιφάνειας δίνεται από:

$$\rho o \eta = Y_{12} \cdot (f_1 - f_2) \quad (3.4)$$

όπου Y_{12} είναι ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας κατά μήκος του ορίου μεταξύ του μέσου 1 και 2 με μονάδες $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{Pa} \cdot \text{d})$ και f_1 και f_2 είναι οι fugacities του μέσου 1 και 2. Η **εξίσωση 3.4** είναι ανάλογη με την ροή των ηλεκτρονίων σε ένα κύκλωμα, στο οποίο η $(f_1 - f_2)$ δρα ως η διαφορά τάσης, ο Y_{12} ενεργεί ως η αγωγιμότητα και η ροή της μάζας χρησιμεύει ως το ισοδύναμο του ηλεκτρικού ρεύματος. Ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας εξαρτάται μόνο από τον συντελεστή μεταφοράς μάζας σε κάθε πλευρά της διεπιφάνειας.

$$Y_{12} = \left(\frac{1}{Z_1 \cdot U_1} + \frac{1}{Z_2 \cdot U_2} \right)^{-1} \quad (3.5)$$

όπου U_1 και U_2 είναι οι συντελεστές μεταφοράς μάζας (m/d) στα οριακά στρώματα στο μέσο 1 και 2 και Z_1 και Z_2 είναι οι ικανότητες fugacity του μέσου 1 και 2. Η καθαρή ροή μετακίνησης μεταξύ του μέσου 1 και 2 δίνεται από:

$$\rho\sigma\eta = Z_{water} \cdot (F_{12}^w \cdot f_1 - F_{21}^w \cdot f_2) + Z_{1p} \cdot F_{12}^p \cdot f_1 - Z_{2p} \cdot F_{21}^p \cdot f_2 \quad (3.6)$$

όπου

- Z_{water} : η ικανότητα fugacity του νερού, mol/m³·Pa
 F_{12}^w : η ροή του νερού από το μέσο 1 στο 2, m³/m²·d
 F_{21}^w : η ροή του νερού από το μέσο 2 στο 1, m³/m²·d
 Z_{1p} : η ικανότητα fugacity της στερεής φάσης του μέσου 1, mol/m³·Pa
 Z_{2p} : η ικανότητα fugacity της στερεής φάσης του μέσου 2, mol/m³·Pa
 F_{12}^p : η ροή των στερεών από το μέσο 1 στο 2, m³/m²·d
 F_{21}^p : η ροή των στερεών από το μέσο 2 στο 1, m³/m²·d

Για κάθε τμήμα του μοντέλου, καθορίζεται η ικανότητα fugacity του συνολικού τμήματος από το άθροισμα των σταθμισμένων κλασμάτων όγκου των ικανοτήτων fugacity των συνιστωσών φάσεων - αέρας, νερό, σωματίδια και λιπίδια.

3.3.2 ΙΚΑΝΟΤΗΤΕΣ FUGACITY ΣΤΟΝ ΚΑΘΑΡΟ ΑΕΡΑ, ΣΤΟ ΚΑΘΑΡΟ ΝΕΡΟ, ΣΤΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΚΑΙ ΣΤΑ ΛΙΠΙΔΙΑ

Η ικανότητα fugacity σε μονάδες mol/m³·Pa για μια μη-ιοντική οργανική χημική ουσία στον καθαρό αέρα, Z_{air} , δίνεται από:

$$Z_{air} = \frac{1}{RT} \quad (3.7)$$

όπου

- R: η παγκόσμια σταθερά των αερίων, 8.314 Pa·m³/mol·°K
T: η θερμοκρασία σε Kelvin's (°K)

Η ικανότητα fugacity σε μονάδες mol/m³·Pa για μια μη-ιοντική οργανική χημική ουσία στο καθαρό νερό, Z_{water} , δίνεται από:

$$Z_{water} = \frac{1}{H} \quad (3.8)$$

όπου H η σταθερά Henry, $\text{Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$, η οποία εκφράζει την αναλογία των δραστηριοτήτων ισορροπίας μιας χημικής ουσίας στον αέρα (εκφράζεται ως πίεση ατμών, Pa) και στο νερό (mol/m^3) όταν οι δύο φάσεις είναι καλά αναμεμειγμένες. Αντί της άμεσης μέτρησης, η σταθερά Henry μπορεί να υπολογιστεί ως η αναλογία της μετρημένης πίεσης ατμών, VP , σε Pa στην διαλυτότητα του νερού, S , σε mol/m^3 (Mackay, 1991),

$$H = \frac{VP}{S} \quad (3.9)$$

Εντούτοις, όταν η τιμή της σταθεράς Henry υπολογίζεται κατ' αυτό τον τρόπο, τόσο η διαλυτότητα όσο και η πίεση των ατμών πρέπει να καθοριστούν για την ίδια κατάσταση – είτε υγρή είτε στερεή.

3.3.2.1 Σωματίδια του Εδάφους και του Ιζήματος

Μια χημική ουσία σε στερεή φάση ή σε σωματίδια στο έδαφος, στο ίζημα και στο επιφανειακό νερό έχει μια ικανότητα fugacity η οποία δίνεται από:

$$Z_{ip} = K_{Di} \cdot \rho_{Si} \cdot Z_{water} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ water}}{1000 \text{ L water}} \quad (3.10)$$

όπου

- Z_{ip} : η ικανότητα fugacity της καθαρής στερεάς φάσης, $\text{mol}/\text{m}^3\cdot\text{Pa}$
 i : αναφέρεται στο όνομα του τμήματος (π.χ., a, g, b, s, κ.λ.π.) αντιπροσωπεύει, για το τμήμα i , τον συντελεστή προσρόφησης, ο οποίος είναι η αναλογία της ισορροπίας της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας που είναι προσκολλημένη στα σωματίδια (mol/kg) στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο διάλυμα, mol/L
 ρ_{Si} : η πυκνότητα των πραγματικών σωματιδίων σε kg/m^3 (όχι η φαινόμενη πυκνότητα των σωματιδίων όταν αναμιγνύονται στο διάλυμα)

Για τις ανόργανες χημικές ουσίες, οι τιμές του K_{Di} πρέπει να εξάγονται είτε από πειράματα στοιχεία είτε να συνεπάγονται από γεωχημικά στοιχεία. Για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες, ο Karickhoff (1981) έδειξε ότι ο συντελεστής προσρόφησης,

K_{Di} , μπορεί να συσχετίζεται με το προϊόν του συντελεστή κατανομής οργανικού-άνθρακα, K_{oc} , και με το κλάσμα του οργανικού άνθρακα, f_{oci} , σε ένα συγκεκριμένο τμήμα i ,

$$K_{Di} = K_{oc} \cdot f_{oci} \quad (3.11)$$

Για παράδειγμα, για το τμήμα της ριζώδης-ζώνης του εδάφους (s), ο K_{Ds} (με μονάδες L/kg) είναι το προϊόν του f_{ocs} , το κλάσμα του οργανικού άνθρακα σε αυτό το τμήμα του εδάφους, και ο K_{oc} , ο συντελεστής κατανομής του οργανικού άνθρακα. Ο συντελεστής κατανομής του οργανικού άνθρακα παρέχει ένα κριτήριο της κατανομής της χημικής ουσίας μεταξύ του οργανικού άνθρακα (στο έδαφος και στο ίζημα) και του νερού. Όσο υψηλότερος ο K_{oc} , τόσο πιθανότερο μια χημική ουσία να δεσμευτεί στην στερεά φάση του εδάφους ή του ιζήματος απ' ό,τι στην υγρή φάση. Ο Karickhoff (1985) περιέγραψε διάφορες εμπειρικές μεθόδους εκτίμησης για τον K_{oc} από τον K_{ow} .

$$\log K_{oc} = 0.72 \cdot \log K_{ow} + 0.49 \quad (\text{methylated and halogenated benzenes}) \quad (3.12)$$

$$\log K_{oc} = 1.029 \cdot \log K_{ow} - 0.18 \quad (13 \text{ pesticides}) \quad (3.13)$$

$$\log K_{oc} = 0.989 \cdot \log K_{ow} - 0.346 \quad (5 \text{ poly-nuclear aromatics [PNAs]}) \quad (3.14)$$

$$\log K_{oc} = \log K_{ow} - 0.317 \quad (22 \text{ PNAs and substituted PNAs}) \quad (3.15)$$

Ο πιο γενικός από τους παραπάνω, **εξίσωση 3.15**, εκφράζει τον K_{oc} ίσο με 0.48 φορές τον K_{ow} , και είναι ο συσχετισμός που ενσωματώνεται στο μοντέλο CalTOX ως προεπιλεγμένη τιμή. Εντούτοις, ο χρήστης έχει την επιλογή της εισαγωγής του K_{oc} ως δεδομένο εισαγωγής. Όταν εισάγεται τιμή του K_{oc} , δεν χρησιμοποιείται ο προεπιλεγμένος συσχετισμός.

3.3.2.2 Σωματίδια στον Αέρα

Στο τμήμα του αέρα οι μολυσματικοί παράγοντες που δεσμεύονται στα σωματίδια του αερολύματος επιτυγχάνουν ισορροπία με την αέρια φάση των μολυσματικών ουσιών. Η εξαγωγή της ικανότητα fugacity των σωματιδίων του αέρα

είναι βασισμένη σε ένα μοντέλο που αναπτύχθηκε αρχικά από τον Junge (1977) αλλά που χρησιμοποιήθηκε συχνά από άλλους (παραδείγματος χάριν, Cohen & Ryan 1985, Mackay et al. 1986, Pankow 1987, Ryan & Cohen 1986, Taylor 1992). Σε αυτό το μοντέλο το κλάσμα του μολυσματικού παράγοντα που δεσμεύεται στα σωματίδια του αερολύματος, φ , δίνεται από:

$$\varphi = \frac{c \cdot \theta}{(VP + c \cdot \theta)} \quad (3.16)$$

όπου,

- θ : η συνολική αιωρούμενη επιφάνεια των σωματιδίων ανά συγκέντρωση σε m^2/m^3
 VP : είναι η πίεση των ατμών του καθαρού μολυσματικού παράγοντα σε Pa
 c : είναι μια κατά προσέγγιση σταθερά που ο Junge έθεσε ίση με $0.173 \text{ m} \cdot \text{Pa}$

Αν και το μοντέλο χρησιμοποιείται ευρέως με αυτήν την μορφή, παραμένει η αβεβαιότητα για το πώς αξιολογούνται οι διάφορες παράμετροι (Bidleman & Pankow 1987, Ligocki & Pankow 1989, Mackay et al. 1986, Pankow 1987, Taylor 1992). Ο Whitby (1978) αναφέρει τιμές για το θ , οι οποίες κυμαίνονται από $4.2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{m}^3$ για μια καθαρή ηπειρωτική περιοχή μέχρι $1.1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{m}^3$ για τις αστικές περιοχές. Περισσότερα για την διακύμανση αυτής της παραμέτρου μπορούν να ερμηνευτούν από την διακύμανση της συγκέντρωσης των σωματιδίων στις καθαρές, αγροτικές έναντι στις αστικές περιοχές, $10 \text{ } \mu\text{g}/\text{m}^3$ έναντι $100 \text{ } \mu\text{g}/\text{m}^3$, αντίστοιχα (Hinds, 1982). Μια πιο δύσκολη ερώτηση περιλαμβάνει την πίεση ατμών που θα χρησιμοποιηθεί στο μοντέλο. Για τους μολυσματικούς παράγοντες που υπάρχουν ως στερεά στις περιβαλλοντικές θερμοκρασίες, δεν είναι σαφές εάν πρέπει να χρησιμοποιηθεί η πίεση ατμών του υγρού, VP_l^o ή η πίεση ατμών του στερεού, VP_s , (Mackay et al. 1986, Mackay 1991, Taylor 1992). Η σχέση μεταξύ αυτών των δύο πιέσεων ατμού δίνεται από τον Prausnitz (1969) ως:

$$\ln \left(\frac{VP_l^o}{VP_s} \right) = \Delta S_f \cdot \frac{(T_m - T)}{RT} \quad (3.17)$$

όπου

ΔS_f : η εντροπία τήξης στο σημείο τήξης, J/mole/°K

T_m : το σημείο τήξης της ένωσης

T : η θερμοκρασία του περιβάλλοντος

Όπως παρουσιάζεται από τους Mackay και Shiu (1981), η **εξίσωση 3.17** μπορεί να γραφτεί με τις αντικαταστάσεις ως εξής:

$$\frac{VP_l^o}{VP_s} = \exp \left[6.79 \cdot \left(\frac{T_m}{T} - 1 \right) \right] \quad (3.18)$$

Για ενώσεις όπως οι διοξίνες και οι πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες, η αναλογία αυτή μπορεί να είναι τόσο μεγάλη όσο 1,000, έτσι ώστε η επιλογή του υγρού έναντι της πίεσης ατμών του στερεού να μπορεί να οδηγήσει στην αβεβαιότητα. Μετά από την υπόδειξη των Mackay et al. (1986), χρησιμοποιείται η υγρή πίεση ατμών για να υπολογιστεί η ικανότητα fugacity των σωματιδίων του αέρα. Η ικανότητα fugacity για τα σωματίδια του αέρα, Z_{ap} σε mol/m³·Pa, εξάγεται από την **εξίσωση 3.16** με την σημείωση ότι:

$$f_{vap} \cdot Z_{ap} / Z_{air} = \frac{c \cdot \theta}{VP} \quad (3.19)$$

όπου

f_{vap} : Είναι το κλάσμα όγκου του αέρα που καταλαμβάνεται από τα σωματίδια του αέρα

Στις περιπτώσεις όπου το φορτίο των σωματιδίων στον αέρα είναι 100 μg/m³ και ότι η πυκνότητα των σωματιδίων είναι 1,500 kg/m³, αυτό το κλάσμα είναι 6.7·10⁻¹¹. Η αντικατάσταση του θ με 1.1·10⁻³ m²/m³, του c με 0.173 m·Pa, και του Z_{air} με το 1/RT στην **εξίσωση 3.19** δίνει:

$$Z_{ap} = \frac{3 \cdot 10^6}{VP_1^o \cdot RT} \quad (3.20)$$

Αυτή η έκφραση είναι παρόμοια με αυτή που εξήγαγε οι Mackay et al. (1986) χρησιμοποιώντας μια κάπως διαφορετική προσέγγιση.

3.3.2.3 Λιπίδια

Λιπίδιο είναι οποιαδήποτε ουσία που είναι διαλυτή στους μη-πολικούς οργανικούς διαλύτες και μαζί με τις πρωτεΐνες και τους υδατάνθρακες αποτελεί τα κύρια δομικά συστατικά των ζωντανών κυττάρων. Τα λιπίδια περιλαμβάνουν λίπη, waxes, phosphatides, cerebrosides και τις σχετικές παραγόμενες ενώσεις. Η ικανότητα Fugacity των λιπιδίων αποτελούν την βάση για την εκτίμηση της κατανομής των οργανικών μολυσματικών παραγόντων από τον αέρα και το νερό στον επίγειο και υδρόβιο βίοκοσμο. Ο Mackay (1991) παρουσίασε την γενική μορφή της ικανότητας fugacity, Z_{lipid} σε $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$, για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες στα βιολογικά είδη, η οποία έχει τη μορφή:

$$Z_{lipid} = a \cdot K_{ow}^b \cdot Z_{water} \quad (3.21)$$

όπου το a και b είναι εμπειρικές σταθερές που ποικίλλουν τόσο με τον εμπλεκόμενο οργανισμό όσο και με τον τύπο του λιπιδίου του ιστού. Η σταθερά a αντιπροσωπεύει το κλάσμα του λιπιδίου του ιστού που συμπεριφέρεται ως οργανικός διαλύτης. Τα λιπίδια των ιστών που φθάνουν σε χημική ισορροπία με το περιβάλλον τους, αναμένεται η b να είναι κοντά στο 1. Για τους ιστούς που δεν επιτυγχάνουν ισορροπία ή για τους ιστούς που επιτυγχάνουν αυτήν την μόνιμη κατάσταση και που δεν είναι σε χημική ισορροπία (λόγω στις διαδικασίες όπως ο μεταβολισμός), αναμένεται η b να είναι διαφορετική και πιθανότατα, μικρότερη από το 1. Για είδη, όπως τα ψάρια, ο παράγοντας βιοσυγκέντρωσης (BCF) είναι η αναλογία της συγκέντρωσης του ιστού στην συγκέντρωση του νερού, mol/kg (ψάρια) ανά mol/L (νερό). Για αυτά τα είδη, ο BCF εξηγείται κυρίως με την κατανομή στα λιπίδια των ιστών και αναμένεται ο BCF να είναι ανάλογος με το Z_{lipid}/Z_{water} , και η σταθερά αναλογίας απεικονίζει το κλάσμα των λιπιδίων του ψαριού, το οποίο σημαίνει:

$$Z_{fish} \propto Z_{lipid} = BCF \cdot Z_{water} \quad (3.22)$$

3.3.3 ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΣΤΙΣ ΙΚΑΝΟΤΗΤΕΣ FUGACITY ΓΙΑ ΑΝΟΡΓΑΝΕΣ ΚΑΙ ΙΟΝΤΙΚΕΣ-ΟΡΓΑΝΙΚΕΣ ΧΗΜΙΚΕΣ ΟΥΣΙΕΣ

Η παραδοσιακή fugacity προσέγγιση αναπτύχθηκε για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες. Οι τροποποιήσεις που περιγράφονται εδώ καθιστούν πιθανή την επεξεργασία των ανόργανων ειδών (συμπεριλαμβανομένων των ραδιονουκλεϊδίων), των μετάλλων και των πλήρως ιονισμένων οργανικών ειδών. Προκειμένου να διενεργηθούν αυτές οι προσαρμογές, πρέπει να επισημανθεί ότι η βασική προϋπόθεση της fugacity προσέγγισης είναι, η δυνατότητα της μάζας οποιουδήποτε τμήματος να κατανεμηθεί σε μια ενιαία φάση μέσω μιας σειράς συντελεστών κατανομής. Στην παραδοσιακή fugacity προσέγγιση αυτή η κατανομή είναι το $1/RT$. Εντούτοις, οι χημικές ουσίες, οι οποίες έχουν εξαιρετικά χαμηλή πίεση ατμών και σχετικά υψηλή διαλυτότητα στο νερό παρουσιάζουν πρόβλημα με τις εξαιρετικά μεγάλες ικανότητες fugacity τους στο νερό. Για την αποφυγή του προβλήματος αυτού για τις χημικές ουσίες με την πολύ χαμηλή πίεση ατμών, όπως οι ανόργανες χημικές ουσίες ή ιονισμένες οργανικές χημικές ουσίες, θεωρείται ότι αυτές οι χημικές ουσίες μπορούν να περιγραφούν από μηδενική fugacity στον αέρα, δηλαδή $Z_{air} = 0$. Στην συνέχεια, θέτουμε την ικανότητα fugacity του νερού, Z_{water} , ίση με $1 \text{ mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$. Αυτή η προσέγγιση έχει χρησιμοποιηθεί από τους Mackay & Diamond (1989) και τους Diamond et al. (1992) για τα ανόργανα είδη στις λίμνες. Αναφέρονται σε αυτήν την τροποποίηση ως "equivalence". Αυτό οδηγεί σε κατανομή των άλλων φάσεων και των ικανοτήτων fugacity των τμημάτων βασισμένων στη ικανότητα fugacity της υδάτινης φάσης. Κατά συνέπεια, όπως παραπάνω, η ικανότητα fugacity των σωματιδίων των τμημάτων ($i=g, s, b, w, d$) είναι της μορφής:

$$Z_{ip} = K_{Di} \cdot \rho s_i \cdot Z_{water} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ water}}{1000 \text{ L water}} \quad (3.23)$$

και δεδομένου ότι η Z_{air} θεωρείται ίση με το μηδέν, η ικανότητα fugacity των σωματιδίων του αέρα γίνεται η ίδια με αυτήν των σωματιδίων του επιφανειακού εδάφους:

$$Z_{ap} = Z_{gp} = K_{Dg} \cdot \rho s_g \cdot Z_{water} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ water}}{1000 \text{ L water}} \quad (3.24)$$

3.3.4 ΦΥΣΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΤΩΝ ΤΜΗΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΤΩΝ ΙΚΑΝΟΤΗΤΩΝ FUGACITY

Η ικανότητα fugacity του συνολικού τμήματος υπολογίζεται από το άθροισμα των σταθμισμένων κλασμάτων όγκου των ικανοτήτων fugacity των συνιστωσών φάσεων.

3.3.4.1 Το τμήμα του Αέρα

Στο τμήμα του αέρα, η συνολική ικανότητα fugacity, Z_a σε mol/m³-Pa, αποτελείται από τον μέσο σταθμισμένο όγκο των ικανοτήτων fugacity των δύο συνιστωσών φάσεών του, αέρας και σωματίδια του αέρα:

$$Z_a = Z_{air} + f_{vap} \cdot Z_{ap} \quad (3.25)$$

όπου f_{vap} είναι το κλάσμα του όγκου των σωματιδίων στον αέρα. Το κλάσμα του όγκου της αέριας φάσης είναι ουσιαστικά μονάδα.

3.3.4.2 Το τμήμα των Φυτών

Λόγω της δυσκολίας μοντελοποίησης της επίγειας βλάστησης χρησιμοποιώντας τα μοντέλα τύπου fugacity, έχει αγνοηθεί κατά ένα μεγάλο μέρος στα μοντέλα (Mackay, 1991). Ο Riederer (1990) αναφέρει ότι μια πλήρης περιγραφή της μόνιμης κατάστασης κατανομής μέσα στο φύλλωμα των φυτών απαιτεί ένα μοντέλο το οποίο να περιλαμβάνει τους ρυθμούς λήψης και τις απώλειες στις υδάτινες και στερεές φάσεις στην επιφάνεια της επιδερμίδας και τους ρυθμούς μετακίνησης, μεταβολισμού και διάλυσης λόγω της ανάπτυξης. Ο Riederer (1990) έδειξε ότι, για την φυλλώδη λήψη των οργανικών μολυσματικών παραγόντων στην αέρια φάση, η γενικότερη μορφή ενός μοντέλου μόνιμης κατάστασης κατανομής φυτών-αέρα είναι:

$$K_{pa} = f_{pa} + (f_{pw} + f_{pl} \cdot K_{ow}) \cdot \frac{RT}{H} \quad (3.26)$$

όπου

- K_{pa} : η αναλογία της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων στον ιστό των φυτών σε αυτήν του αέρα, mol/m^3 ανά mol/m^3
 f_{pa} : το κλάσμα όγκου του ιστού των φυτών που είναι αέρας
 f_{pw} : το κλάσμα όγκου του ιστού των φυτών που είναι νερό
 f_{pl} : το κλάσμα όγκου του ιστού των φυτών που είναι λιπίδια
 R : η παγκόσμια σταθερά των αερίων, $\text{Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}\cdot^\circ\text{K}$
 T : η θερμοκρασία σε Kelvin's (293 K)
 H : η σταθερά Henry του μολυσματικού παράγοντα σε $\text{Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$

Με βάση τα πειράματα σε φύλλα-αζαλέα με πέντε χημικές ουσίες, οι Bacci et al. (1990) ανέπτυξαν έναν συσχετισμό μεταξύ των παραγόντων βιοσυγκέντρωσης του αέρα των φύλλων με τον συντελεστή κατανομής αέρα-νερού και οκτανόλης-νερού και έδειξαν ότι το f_{pl} έχει την τιμή 0.01. Οι Paterson και Mackay (1989) υπολόγισαν την τιμή του f_{pa} ίση με 0.5. Αυτό υπονοεί ότι το υπόλοιπο κλάσμα όγκου των φυτών, 0.49, είναι είτε νερό είτε στερεά χωρίς λιπίδια. Με βάση την υπόθεση ότι το 80% της συνολικής μάζας των φυτών είναι νερό, θέτουμε το f_{pw} ίσο με 0.4. Αυτές οι θεωρήσεις μαζί με την αναγνώριση ότι η K_{pa} είναι η αναλογία της ικανότητας fugacity των φυτών στην ικανότητα fugacity του αέρα – η οποία είναι, Z_p/Z_{air} ή $Z_p\cdot RT$ – οδηγούν στην ακόλουθη έκφραση για τον υπολογισμό της ικανότητας fugacity των φυτών Z_p για τις οργανικές χημικές ουσίες στον ιστό των φυτών σχετικά με τον αέρα:

$$Z_p = \frac{0.5}{RT} + (0.4 + 0.01 \cdot K_{ow}) \cdot Z_{water} \quad (3.27)$$

Η ικανότητα fugacity των ιστών των φυτών σχετικά με το έδαφος μπορεί να συσχετίζεται με τον συντελεστή κατανομής φυτών-εδάφους, K_{ps} , ο οποίος εκφράζει την αναλογία της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων, mol/kg , στην φρέσκια μάζα των φυτών στην συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στην ριζώδη-περιοχή του εδάφους, mol/kg . Αυτό σημαίνει ότι ο K_{ps} είναι ίσος με $(Z_p \cdot \rho b_s)/(Z_s \cdot \rho_p)$, όπου ρb_s είναι η πυκνότητα του εδάφους σε kg/m^3 και ρ_p είναι η πυκνότητα των φυτών, θεωρείται ότι είναι 1000 kg/m^3 . Για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες, υπάρχουν μέθοδοι για τον υπολογισμό του K_{ps} ή Z_p από την διαλυτότητα της χημικής ουσίας ελλείψει μετρημένων στοιχείων. Οι Briggs et al. (1982, 1983) ανέπτυξαν μια εξίσωση για

τον υπολογισμό της λήψη των μολυσματικών παραγόντων μέσω των ριζών από τα διαλύματα του εδάφους. Αναφέρονται σε αυτόν τον συντελεστή κατανομής ως παράγοντα συγκέντρωσης της ρίζας, RCF. Αντιπροσωπεύει την αναλογία της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων στον ιστό της ρίζας, mol/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στο διάλυμα του εδάφους, mol/kg, και έχει την μορφή:

$$RCF = 0.82 + 0.03 \cdot K_{ow}^{0.77} \quad (3.28)$$

Σημειώνεται ότι ο RCF είναι η αναλογία της ικανότητας fugacity των φυτών στην ικανότητα fugacity του διαλύματος του εδάφους, δηλαδή, Z_p/Z_{water} (ή $Z_p \cdot H$). Αυτό σημαίνει ότι η **εξίσωση 3.28** οδηγεί στην ακόλουθη έκφραση για τον υπολογισμό της ικανότητας fugacity των φυτών Z_p :

$$Z_p = (0.82 + 0.03 \cdot K_{ow}^{0.77}) \cdot Z_{water} \quad (3.29)$$

Είναι ενδιαφέρον ότι, βάση των πειραμάτων που μέτρησαν την λήψη χημικής ουσίας από τον αέρα στα φύλλα και των πειραμάτων που μέτρησαν την λήψη χημικής ουσίας από το διάλυμα του εδάφους στις ρίζες, η ικανότητα fugacity των φυτών και στις δύο περιπτώσεις, όπως εκφράζονται από τις **εξισώσεις 3.27** και **3.29** αντίστοιχα, είναι αρκετά παρόμοιες. Η **εξίσωση 3.27**, επειδή περιλαμβάνει και τις τρεις φάσεις του τμήματος των φυτών, χρησιμοποιείται για να αντιπροσωπεύσει την ικανότητα fugacity στα φυτά στο μοντέλο CalTOX για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες.

Για τα ανόργανα είδη και τις ιοντικές οργανικές ενώσεις, υπολογίζεται η Z_p ως εξής:

$$Z_p = K_{ps} \cdot \frac{Z_{soil}}{\rho b_s} \quad (3.30)$$

Γενικά, για τα ανόργανα είδη και τις ιοντισμένες οργανικές ενώσεις, ο K_{ps} πρέπει να εξάγεται από τα μετρημένα στοιχεία. Ελλείπει των στοιχείων αυτών, ο K_{ps}

λαμβάνεται θεωρώντας ότι η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων είναι νερό των φυτών είναι ίση με αυτήν στο νερό του εδάφους, έτσι ώστε ο K_{ps} να είναι ίσος με $(1 - bio_{dm})/K_{Ds}$, όπου bio_{dm} είναι το ξηρό κλάσμα της μάζας των φυτών και $(1 - bio_{dm})$ είναι το κλάσμα του νερού-μάζας των φυτών.

3.3.4.3 Τα τμήματα του Εδάφους

Για τα τμήματα του εδάφους, τα οποία έχουν αέρα, νερό και στερεά συστατικά όλα με την ίδια fugacity, οι συνολικές ικανότητες fugacity των τμημάτων είναι ο μέσος σταθμισμένος όγκος των ικανοτήτων fugacity των τριών συνιστωσών φάσεων. Για το επιφανειακό έδαφος, την ριζώδη-ζώνη του εδάφους και το υπέδαφος οι ικανότητες fugacities των τμημάτων αυτών είναι, αντίστοιχα, Z_g , Z_s και Z_v σε $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$. Για παράδειγμα, για το τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (s), η εξίσωση που περιγράφει την γενική ικανότητα fugacity αυτού του τμήματος είναι:

$$Z_s = \alpha_s \cdot Z_{air} + \beta_s \cdot Z_{water} + (1 - \phi_s) \cdot Z_{sp} \quad (3.31)$$

όπου

α_s :	το κλάσμα του όγκου του αέρα στο τμήμα του εδάφους
β_s :	το κλάσμα του όγκου του νερού στο τμήμα του εδάφους
$(1 - \phi_s)$:	το κλάσμα του όγκου του στερεού στο τμήμα του εδάφους
$\phi_s (= \alpha_s + \beta_s)$:	το συνολικό κλάσμα του κενού στο τμήμα του εδάφους
Z_{sp} :	η ικανότητα fugacity των σωματιδίων του εδάφους, $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$

3.3.4.4 Το τμήμα του Επιφανειακού Νερού

Στο επιφανειακό νερό η συνολική ικανότητα fugacity, Z_w σε $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$, αποτελείται από τον μέσο σταθμισμένο όγκο των ικανοτήτων fugacity των δύο συνιστωσών φάσεων, του νερού και των αιωρούμενων σωματιδίων:

$$Z_w = Z_{water} + (\rho b_w / \rho s_w) \cdot Z_{wp} \quad (3.32)$$

όπου

ρb_w :	το αιωρούμενο φορτίο των σωματιδίων στο επιφανειακό νερό, kg/m^3
ρs_w :	η πυκνότητα των αιωρούμενων σωματιδίων kg/m^3
Z_{wp} :	η ικανότητα fugacity των σωματιδίων

Η ικανότητα fugacity των σωματιδίων, Z_{wp} , δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$Z_{wp} = K_{Dw} \cdot \rho s_w \cdot Z_{water} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ water}}{1000 \text{ L water}} \quad (3.33)$$

όπου

K_{Dw} : ο συντελεστής προσρόφησης των αιωρούμενων σωματιδίων, L/kg

Το κλάσμα όγκου των αιωρούμενων σωματιδίων στο νερό υποτίθεται ότι είναι τόσο μικρό που το κλάσμα όγκου της υδάτινης φάσης είναι ουσιαστικά μηδέν.

3.3.4.5 Το τμήμα του Ιζήματος

Στο τμήμα του ιζήματος η συνολική ικανότητα fugacity, Z_d σε $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$, αποτελείται από τον μέσο σταθμισμένο όγκο των ικανοτήτων fugacity των δύο συνιστωσών φάσεων, σωματίδια του ιζήματος και νερό:

$$Z_d = \beta_d \cdot Z_{water} + (1 - \beta_d) \cdot Z_{dp} \quad (3.34)$$

όπου

β_d : το κλάσμα του κενού στο τμήμα του ιζήματος

$1 - \beta_d$: το κλάσμα όγκου των σωματιδίων του ιζήματος στο τμήμα του ιζήματος

Z_{dp} : η ικανότητα fugacity των σωματιδίων του ιζήματος

Η ικανότητα fugacity των σωματιδίων του ιζήματος, Z_{dp} , δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$Z_{dp} = K_{Dd} \cdot \rho s_d \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ water}}{1000 \text{ L water}} \quad (3.35)$$

όπου

K_{Dd} : ο συντελεστής προσρόφησης των σωματιδίων του ιζήματος, L/kg

3.4 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ CalTOX

Στο μοντέλο μεταφοράς, οι σημαντικές συνιστώσες του περιβάλλοντος συσσωρεύονται σε ομοιογενή υποσυστήματα ή τμήματα, τα οποία μπορούν να ανταλλάξουν μάζα με άλλα παρακείμενα τμήματα. Η ροή της μάζας μεταξύ των τμημάτων περιλαμβάνει την ροή στερεής φάσης, όπως η αιώρηση της σκόνης ή η εναπόθεση και η ροή υγρής φάσης, όπως η απορροή επιφάνειας και η αναπλήρωση του υπόγειου νερού. Στην προηγούμενη παράγραφο, θεωρήθηκε η χρήση της fugacity για την περιγραφή της κατανομής κάθε χημικού είδους μεταξύ των φάσεων μέσα σε ένα ενιαίο τμήμα. Η φύση αυτής της κατανομής σε συνδυασμό με την ροή της μάζας στα όρια των τμημάτων καθορίζει τον γενικό ρυθμό μεταφοράς των μολυσματικών παραγόντων μεταξύ οποιονδήποτε δύο παρακείμενων τμημάτων. Η μεταφορά των μεμονωμένων χημικών ειδών μεταξύ των τμημάτων πραγματοποιείται από την διάχυση και την μετακίνηση αέριας μάζας στα όρια των τμημάτων. Η μοντελοποίηση αυτών των δύο διαδικασιών περιγράφεται στην παράγραφο αυτή.

3.4.1 ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΕΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Η μοριακή διάχυση είναι η καθαρή μεταφορά ενός μορίου σε υγρή ή αέρια φάση και είναι το αποτέλεσμα των διαμοριακών συγκρούσεων παρά της αναταραχής ή της μεταφοράς υλικού. Η μεταφορά μάζας μέσω της μοριακής διάχυσης κατευθύνεται από την μεταβολή της συγκέντρωσης (ή fugacity). Ένας συντελεστής διάχυσης εξαρτάται από τις ιδιότητες τόσο των χημικών ειδών που μεταφέρονται όσο και από την φάση ή τις φάσεις μέσω των οποίων μεταφέρεται.

3.4.1.1 Διάχυση στον Αέρα

Αναλυτικές μέθοδοι για τον υπολογισμό του συντελεστή διάχυσης ενός δυαδικού αερίου συστήματος έχουν αναθεωρηθεί από τους Reid et al. (1987) και Lyman et al. (1982). Αυτές οι μέθοδοι έχουν τα θεμέλιά τους σε μια θεωρητική σχέση που αναφέρεται ως μοντέλο Charman-Enskog για διαλυτά αέρια σε χαμηλές πιέσεις (Charman και Cowling 1939, Reid et al. 1987). Με βάση την ακρίβεια και την ευκολία της χρήσης, οι Lyman et al. (1982) συστήνουν δύο μεθόδους για την χρήση υπό περιβαλλοντικές

συνθήκες. Όταν εφαρμόζεται στην ατμοσφαιρική πίεση, ο απλούστερος αυτών των δύο μεθόδων, που χρησιμοποιείται στο CalTOX, συσχετίζει την διάχυση στον αέρα με το μοριακό βάρος της ένωσης ως εξής:

$$D_{air} = 8.6 \cdot 10^{-3} \cdot T^{1.75} \cdot \frac{\sqrt{(29 + M_x) \cdot 29 \cdot M_x}}{(2.7 + V_x^{1/3})^2} \quad (3.36)$$

όπου

- D_{air} : ο συντελεστής διάχυσης στον αέρα για την ένωση x σε m^2/d
 T : η θερμοκρασία του αέρα σε $^{\circ}K$
 M_x : το μοριακό βάρος της ένωσης x σε g/mol
 V_x : ο μοριακός όγκος της ένωσης x σε cm^3/mol

Οι τιμές **29** και **2.7** αντιπροσωπεύουν το μοριακό βάρος και την κυβική ρίζα του μοριακού όγκου, αντίστοιχα, για τον αέρα. Οι μέθοδοι για τον υπολογισμό του μοριακού όγκου παρουσιάζονται από τους Lyman et al. (1982). Για πολλές οργανικές ενώσεις, ο D_{air} παίρνει τιμές από 0 έως $1 m^2/d$.

3.4.1.2 Διάχυση στο Νερό

Οι Reid et al. (1987) και Lyman et al. (1982) παρουσιάζουν επίσης διάφορες μεθόδους για τον υπολογισμό των συντελεστών διάχυσης υγρών, οι οποίες είναι όλες βασισμένες στην εξίσωση Stokes-Einstein συσχετίζοντας την διαχυτότητα με την θερμοκρασία και το ιξώδες του διαλύτη και την μοριακή ακτίνα της διαλυμένης ουσίας. Όπως σημειώνεται από τους Reid et al. (1987), μια από τις παλαιότερες αλλά ακόμα ευρέως χρησιμοποιούμενες εμπειρικές μεθόδους εκτίμησης για την δυαδική διάχυση στα υγρά είναι αυτή των Wilke και Chang (1955). Αυτή η μέθοδος υπολογισμού των συντελεστών διάχυσης του νερού χρησιμοποιείται στο CalTOX και έχει την εξής μορφή:

$$D_{xy} = \frac{6.5 \cdot 10^{-7} \cdot (\phi \cdot M_y)^{1/2} \cdot T}{\eta_y \cdot V_x^{0.6}} \quad (3.37)$$

όπου

- D_{xy} : ο συντελεστής διάχυσης της διαλυτής ουσίας x στο διαλυτικό y , m^2/d
 ϕ : ο παράγοντας συσχέτισης του διαλυτικού y , αδιάστατο
 M_y : το μοριακό βάρος του διαλύτη, g/mol
 T : η θερμοκρασία του συστήματος ουσία-διαλυτικού, $^{\circ}K$
 η_y : το ιξώδες του διαλυτικού y , cP
 V_x : ο μοριακός όγκος της διαλυτής ουσίας στην θερμοκρασία βρασμού, cm^3/mol

Οι Wilke και Chang (1955) αναφέρουν μια μέση εκτίμηση λάθους του 10 τοις εκατό στην πρόβλεψη των συντελεστών διάχυσης για 251 συστήματα ουσίας-διαλυτικό. Συστήνουν έναν παράγοντα συσχέτισης 2.6 όταν ο διαλύτης είναι νερό. Το ιξώδες του νερού είναι 0.79 cP στους 30°C. Ο μοριακός όγκος μπορεί να υπολογιστεί με την επαυξητική μέθοδο LeBas όπως περιγράφεται από τους Lyman et al. (1982). Για πολλές οργανικές ενώσεις, ο D_{water} κυμαίνεται από 10^{-5} έως $10^{-4} m^2/d$.

3.4.1.3 Διάχυση σε Ελικοειδή, Πολυφασικά Συστήματα, όπως το Έδαφος και τα Ιζήματα

Τμήματα όπως το έδαφος και το ίζημα δεν είναι ούτε ομοιογενής ούτε έχουν ενιαία φάση. Όταν ο αέρας και το νερό καταλαμβάνουν τις ελικοειδής οδούς μεταξύ των στάσιμων σωματιδίων σε ένα πορώδες μέσο όπως το έδαφος ή το ίζημα, οι Millington και Quirk (1961) έδειξαν ότι η αποτελεσματική διάχυση, D_{eff} , μιας χημικής ουσίας σε κάθε ρευστό του μίγματος δίνεται από:

$$D_{eff} = \left(\frac{\omega^{10/3}}{\phi^2} \right) \cdot D_{pure} \quad (3.38)$$

όπου

- ω : το κλάσμα όγκου που καταλαμβάνεται από αυτό το ρευστό
 ϕ : το συνολικό κλάσμα του κενού στο μέσο (ο όγκος που καταλαμβάνεται από όλα τα ρευστά)
 D_{pure} : ο συντελεστής διάχυσης της χημικής ουσίας στο καθαρό ρευστό

Οι Jury et al. (1983) έδειξαν ότι η αποτελεσματική ελικοειδής διαχυτότητα στο νερό και στον αέρα σε τμήμα του εδάφους, όπως η ριζώδη-ζώνη του εδάφους (s), δίνεται ως εξής:

$$D_s = \frac{Z_{air}}{Z_s} \cdot \left(\frac{a_s^{10/3}}{\phi_{soil}^2} \right) \cdot D_{air} + \frac{Z_{water}}{Z_s} \cdot \left(\frac{\beta_s^{10/3}}{\phi_{soil}^2} \right) \cdot D_{water} \quad (3.39)$$

όπου

D_s : ο αποτελεσματικός ελικοειδής, μικτής φάσης συντελεστής διάχυσης στο τμήμα της ριζώδης-ζώνης του εδάφους

Z 's: οι ικανότητες fugacity, οι οποίες εξήχθησαν σε προηγούμενες παραγράφους

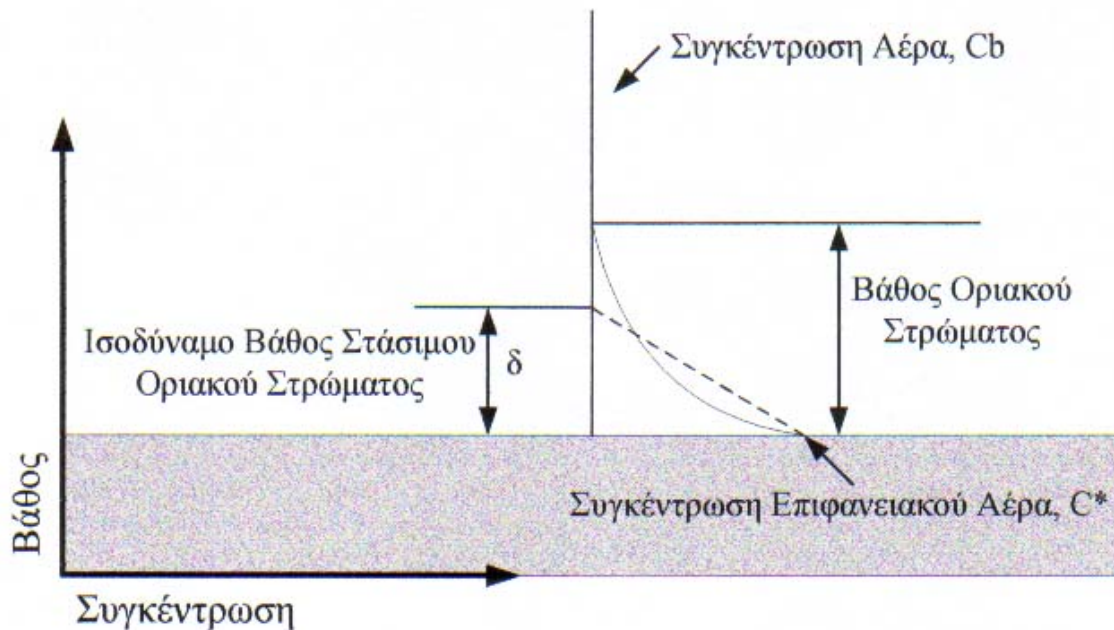
Η εξίσωση αυτή της μορφής χρησιμοποιείται για την περιγραφή του αποτελεσματικού συντελεστή διάχυσης στο επιφανειακό έδαφος (g), στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (v) και στα ιζήματα (d).

3.4.2 ΔΙΑΧΥΣΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΑ ΟΡΙΑΚΟΥ ΣΤΡΩΜΑΤΟΣ

Η ανταλλαγή μολυσματικών παραγόντων στο οριακό στρώμα μεταξύ δύο περιβαλλοντικών τμημάτων, τα οποία αποτελούνται εν μέρει από ρευστά σε κίνηση (π.χ., αέρας ή νερό), περιλαμβάνει δύο τρόπους διάχυσης – η μοριακή διάχυση μέσω ενός λεπτού οριακού στρώματος και η τυρβώδη διάχυση μέσω του σώματος του τμήματος. Σε ένα τμήμα, όπως η ατμόσφαιρα, στην οποία η τυρβώδης μίξη είναι γρήγορη και συνεχής, η μοριακή διάχυση θα είναι σημαντική μόνο στα όρια με άλλα λιγότερο τυρβώδη τμήματα, όπως το έδαφος και το επιφανειακό νερό. Σε αυτά τα όρια, ο αέρας μεταβαίνει από ένα καλά-αναμεμιγμένο τυρβώδης ρευστό σε ένα οριακό στρώμα μηδενικής ουσιαστικά ταχύτητας. Η φύση αυτής της ζώνης μετάβασης καθορίζει τον ρυθμό διάχυσης στην μεταφορά μάζας από ένα τμήμα σε ένα άλλο. Στο μοντέλο CalTOX, υποτίθεται ότι η τυρβώδης διάχυση μέσα σε ένα τμήμα, όπως η χαμηλότερη ατμόσφαιρα, είναι τόσο αποδοτική που η συγκέντρωση του σώματος, C^b σε mol/m^3 , είναι απλά το περιεχόμενο του τμήματος διαιρεμένο με την μάζα του τμήματος. Εντούτοις, στο όριο μεταξύ δύο τμημάτων, η μοντελοποίηση της διάχυσης μεταφοράς μάζας πρέπει να περιλάβει τόσο τις τυρβώδεις όσο και τις μοριακές διαδικασίες σε αυτές τις ζώνες μετάβασης, οι οποίες δεν μπορούν να συσσωματωθούν ή να παραληφθούν.

Η μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στα όρια των τμημάτων μοντελοποιείται χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο οριακού-στρώματος. Προκειμένου να εξαχθεί αυτό το μοντέλο, θεωρούμε ως παράδειγμα την τυρβώδη αέρια μάζα σε ένα καλά-αναμεμιγμένο

αλλά στάσιμο στρώμα του αέρα που είναι σε επαφή με μια επιφάνεια, όπως το έδαφος ή το νερό. Η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στο σώμα του αέρα πάνω από το στάσιμο στρώμα είναι C^b mol/m³. Η συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων στο όριο με την επιφάνεια είναι C^* mol/m³. Αυτό παρουσιάζεται στο **σχήμα 3.3**. Η συγκέντρωση του αέρα πάνω από το στάσιμο στρώμα μεταβαίνει από την συγκέντρωση της επιφάνειας στην συγκέντρωση του σώματος σε μια απόσταση που αναφέρεται ως οριακό στρώμα μεταφοράς-μάζας.



Σχήμα 3.3: Η έννοια του στάσιμου οριακού στρώματος έναντι του πραγματικού πάχους του οριακού στρώματος στην μετάβαση μεταξύ της συγκέντρωσης του μολυσματικού παράγοντα στην επιφάνεια του εδάφους ή του νερού και της συγκέντρωσης του αέρα.

Η ροή σε mol/m²·d του μολυσματικού παράγοντα από την επιφάνεια στο ρευστό του σώματος είναι ανάλογη προς την διαφορά της συγκέντρωσης μεταξύ της επιφάνειας και της αέριας μάζας του σώματος και δίνεται από την εξίσωση:

$$Flux = U_a \cdot (C^b - C^*) \quad (3.40)$$

όπου

U_a : ο συντελεστής μεταφοράς μάζας για την συνδυασμένη τυρβώδη και μοριακή διάχυση με μονάδες m/d

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, U_a , μπορεί να υπολογιστεί με την αντικατάστασή του με τον συντελεστή μεταφοράς μάζας που αντιστοιχεί στην μοριακή διάχυση ενός μολυσματικού παράγοντα με συντελεστή διάχυσης, D_{air} (m²/d), μέσω ενός ακίνητου στρώματος αέρα που έχει βάθος δ , έτσι ώστε να λαμβάνεται η ίδια ροή για αυτήν την μεταβολή της συγκέντρωσης:

$$Flux = \frac{D_{air}}{\delta} \cdot (C^b - C^*) \quad (3.41)$$

Το βάθος, δ , είναι το ισοδύναμο βάθος του στάσιμου οριακού στρώματος και δίνεται από:

$$\delta = \frac{D_{air}}{U_a} \quad (3.42)$$

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, U_a , εξαρτάται από τον συντελεστή διάχυσης, D_{air} , τον αριθμό Nusselt, Nu , και ένα χαρακτηριστικό μήκος, L_a , το οποίο μετριέται κατά μήκος της επιφάνειας:

$$U_a = \frac{D_{air} \cdot Nu}{L_a} \quad (3.43)$$

Ο αριθμός Nusselt είναι ένας αδιάστατος συντελεστής μεταφοράς μάζας, ο οποίος εξαρτάται από τον συντελεστή διάχυσης, το ιξώδες του ρευστού του μέσου μεταφοράς (αέρα), και άλλες ιδιότητες του ρευστού, οι οποίες είναι ίδιες για όλους τους μολυσματικούς παράγοντες. Το χαρακτηριστικό μήκος είναι μια ιδιότητα που εξαρτάται από την φύση της επιφάνειας μεταφοράς μάζας και την ταχύτητα του ρευστού στην επιφάνεια αυτή και επίσης είναι σχεδόν ανεξάρτητο από τον υπό εξέταση μολυσματικό παράγοντα. Ο συνδυασμός των **εξισώσεων 3.42** και **3.43** δίνει:

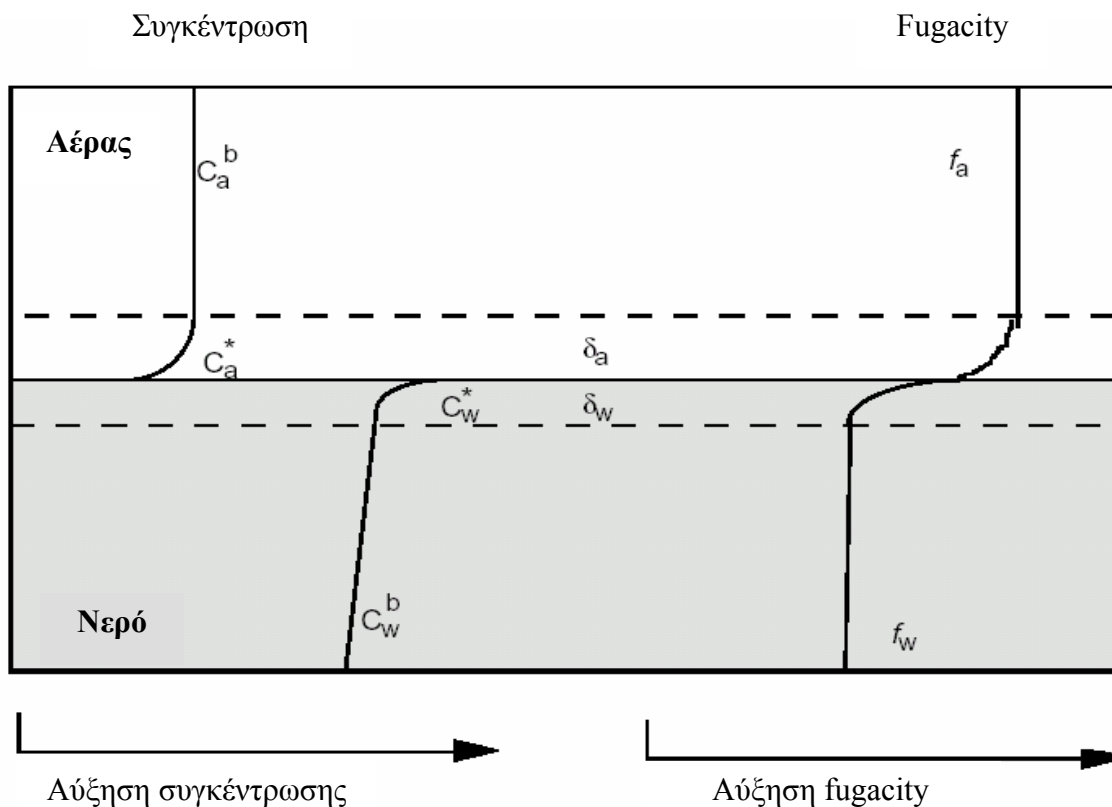
$$\delta = \frac{L_a}{Nu} \quad (3.44)$$

Ο Nu έχει ασθενής αδύνατη εξάρτηση από τον συντελεστή διάχυσης στο μέσο. Επειδή αυτή η εξάρτηση είναι ασθενής, είναι συχνά δυνατό να προσεγγίσει το δ για ένα μεγάλο σύνολο χημικών ουσιών με παρόμοιους συντελεστές διάχυσης.

Οι εξισώσεις 3.40 και 3.44 παρουσιάζουν τον υπολογισμό της μεταφοράς μεταξύ των μέσων στην μεριά του αέρα από τον αέρα του εδάφους και τον αέρα του νερού. Αυτή η προσέγγιση ισχύει επίσης και για την μεταφορά μεταξύ των μέσων στο τμήμα του νερού στην διεπιφάνεια αέρα-νερού και νερού-ιζήματος.

3.4.2.1 Το μοντέλο διάχυσης διπλής-αντίστασης στα όρια του τμήματος

Όταν δύο τμήματα, όπως το επιφανειακό νερό και ο αέρας, είναι σε επαφή, η μεταφορά μάζας από τον αέρα στο νερό (ή από το νερό στον αέρα) εξαρτάται από την μεταφορά μάζας μέσω των οριακών στρωμάτων τόσο της μεριάς του αέρα όσο και της μεριάς του νερού. Αυτό παρουσιάζεται στο **σχήμα 3.4**.



Σχήμα 3.4: Σχηματική παρουσίαση της μεταφοράς της μάζας μεταξύ δύο οριακών στρωμάτων στην διεπιφάνεια ανάμεσα στα τμήματα του αέρα και του νερού. Υπάρχει μια ασυνέχεια στην συγκέντρωση σ' αυτό το όριο γιατί η συγκέντρωση στην διεπιφάνεια εκφράζει την κατανομή του μολυσματικού παράγοντα σε ισορροπία σε διάφορες φάσεις. Σε αντίθεση, η fugacity είναι συνεχής στην διεπιφάνεια.

Η συνολική αντίσταση στην μεταφορά μάζας μέσω των δύο οριακών στρωμάτων είναι το άθροισμα των δύο αντιστάσεων μέσω των οριακών στρωμάτων του αέρα και του νερού. Η αντίσταση της μεταφοράς μάζας είναι ανάλογη προς το αντίστροφο του συντελεστή μεταφοράς μάζας. Προκειμένου να εξαχθεί ο συνδυασμένος συντελεστής μεταφοράς μάζας μέσω του νερού και του αέρα, σημειώνεται ότι η ροή στην επιφάνεια αέρα/νερού από την μεριά του αέρα πρέπει να είναι ίση με την ροή εκτός αυτής της επιφάνειας από την μεριά του νερού:

$$\text{flux at the surface} = U_a \cdot (C_a^b - C_a^*) \quad (3.45)$$

$$\text{flux at the surface} = U_w \cdot (C_w^* - C_w^b) \quad (3.46)$$

Σημειώνεται ότι, στην επιφάνεια $C_a^* / C_w^* = Z_a / Z_w$. Γι' αυτό τον λόγο, εάν πολλαπλασιάσουμε την **εξίσωση 3.45** με τον Z_w και την **εξίσωση 3.46** με τον Z_a και συνδυάσουμε τις δύο εκφράσεις, έχουμε το εξής:

$$\text{flux at the surface} = \left(C_a^b - \frac{Z_a}{Z_w} \cdot C_w^b \right) \cdot \left(\frac{1}{U_a} + \frac{Z_a}{U_w \cdot Z_w} \right)^{-1} \quad (3.47)$$

Ο δεύτερος όρος στην **εξίσωση 3.47** είναι ο συνολικός συντελεστής μεταφοράς μάζας μέσω του συνδυασμένου οριακού συστήματος αέρα-νερού.

Όπως σημειώθηκε νωρίτερα, ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα των μοντέλων fugacity είναι η δυνατότητά τους να εκφράσουν ευκολότερα την μεταφορά μέσω διάχυσης. Σε ένα μοντέλο fugacity, η ροή διάχυσης, σε mol/m²·d, δια μέσου της διεπιφάνειας που περιγράφεται παραπάνω, είναι:

$$\text{flux at the surface} = Y_{aw} \cdot (f_a - f_w) \quad (3.48)$$

όπου

Y_{aw} : ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας δια μέσου του ορίου μεταξύ του αέρα και του νερού με μονάδες mol/(m²·Pa·d)

f_a και f_w : οι fugacities του αέρα και του νερού

Ο Y_{aw} ενεργεί ως αγωγιμότητα και η διαφορά των fugacities είναι η πιθανή μεταφορά μάζας δια μέσου αυτού του ορίου. Ο συνολικός συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας εξαρτάται μόνο από τον συντελεστή μεταφοράς μάζας σε κάθε πλευρά της διεπιφάνειας.

$$Y_{aw} = \left[\frac{1}{Z_a \cdot U_a} + \frac{1}{Z_w \cdot U_w} \right]^{-1} \quad (3.49)$$

Εάν αντικαταστήσουμε στην **εξίσωση 3.49** την $f_a = C_a / Z_a$ και την $f_w = C_w / Z_w$ στην **εξίσωση 3.48**, λαμβάνουμε την **εξίσωση 3.47**. Πρέπει να σημειωθεί ότι ο συνολικός συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας, Y_{aw} , συσχετίζεται με τον συντελεστή fugacity μεταφοράς μάζας της μεριάς του αέρα για αυτήν την διεπιφάνεια, Y_{aw}^a , και με τον συντελεστή fugacity μεταφοράς μάζας της μεριάς του νερού για αυτήν την διεπιφάνεια, Y_{aw}^w . Αυτοί οι συντελεστές μεταφοράς μάζας έχουν μονάδες mol/(m²·Pa·d) και δίνονται από:

$$Y_{aw}^a = Z_a \cdot U_a = Z_a \cdot \frac{D_{air}}{\delta_{aw}} \quad (3.50)$$

$$Y_{aw}^w = Z_w \cdot U_w = Z_w \cdot \frac{D_w}{\delta_{wa}} \quad (3.51)$$

όπου

D_{air} : η διάχυση στο τμήμα του αέρα, m²/d

δ_{aw} : το πάχος του οριακού στρώματος στον αέρα πάνω από το νερό, m

D_w : η αποτελεσματική διάχυση στο τμήμα του νερού, m²/d

δ_{wa} : το πάχος του οριακού στρώματος στο νερό κάτω από τον αέρα, m

Οι σχέσεις που εξάγονται σε αυτήν την παράγραφο για την μεταφορά μάζας στην διεπιφάνεια αέρα-νερού μπορούν να γενικευτούν για την μεταφορά μάζας στις διεπιφάνειες αέρα-εδάφους, εδάφους-εδάφους και νερού-ιζήματος.

3.4.3 ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΕΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΜΑΖΑΣ ΣΤΙΣ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΤΩΝ ΤΜΗΜΑΤΩΝ

Στις παρακάτω παραγράφους, αναπτύσσονται οι εκφράσεις για τους συντελεστές fugacity μεταφοράς μάζας σε κάθε πλευρά της διεπιφάνειας των τμημάτων που συνδέονται με τις μεταφορές αέρα-νερού, αέρα-εδάφους και ιζήματος-νερού. Η έμφαση δίνεται στην ανάπτυξη του αποτελεσματικού πάχους του οριακού στρώματος, το οποίο, όταν συνδυάζεται με τον συντελεστή διάχυσης των τμημάτων, δίνει τον συντελεστή μεταφοράς μάζας.

3.4.3.1 Μεταφορά Μάζας μέσω Διάχυσης στην Διεπιφάνεια του Αέρα με το Επιφανειακό Νερό

Η ανταλλαγή μέσω διάχυσης οργανικών χημικών ουσιών μεταξύ των σωμάτων της χαμηλότερης ατμόσφαιρας και του επιφανειακού νερού είναι μια σημαντική συνιστώσα του συνολικού σταθερού ρυθμού που καθορίζει την μεταφορά μεταξύ του αέρα και του νερού. Η ανταλλαγή των χημικών ουσιών μεταξύ των σωμάτων του αέρα και του νερού εξαρτάται τόσο από τις φυσικοχημικές ιδιότητες του μολυσματικού παράγοντα όσο και από τις φυσικές ιδιότητες των σχετικών τμημάτων του αέρα και του νερού. Οι σημαντικές φυσικοχημικές ιδιότητες περιλαμβάνουν την διαλυτότητα, το μοριακό βάρος, την πίεση ατμών και τους συντελεστές διάχυσης στον αέρα και στο νερό. Οι σημαντικές φυσικές ιδιότητες περιλαμβάνουν τις θερμοκρασίες του αέρα και του νερού, την ταχύτητα του αέρα, την ταχύτητα ροής του νερού, το βάθος του νερού και την τύρβη του νερού.

Ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας στην πλευρά του αέρα, Y_{aw}^a , και ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας στην πλευρά του νερού, Y_{aw}^w , για την διεπιφάνεια αέρα-νερού δίνονται από τις **εξισώσεις 3.49** και **3.50**. Αυτοί οι συντελεστές μεταφοράς μάζας έχουν μονάδες $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{Pa} \cdot \text{d})$. Οι Lyman et al. (1982) αναφέρουν διάφορες μεθόδους για τον υπολογισμό των συντελεστών μεταφοράς μάζας στην πλευρά του αέρα και του νερού για την ανταλλαγή οργανικών χημικών ουσιών μεταξύ του αέρα και του επιφανειακού νερού. Στο CalTOX, ο υπολογισμός του συντελεστή μεταφοράς μάζας στην πλευρά του νερού, D_{water}/δ_{wa} , είναι βασισμένος στις μεθόδους που αναπτύχθηκαν

από τον Southworth (1979) από τα εργαστηριακά στοιχεία για χημικές ουσίες με H από 1 έως $100 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$. Όταν το ρεύμα του επιφανειακού νερού, $current_w$ σε m/s , είναι μικρότερο από 0.04 φορές την ταχύτητα του αέρα, v_w σε m/s , υψωμένη στην δύναμη 0.67, τότε ο D_{water}/δ_{wa} είναι 0.24 m/d . Για μεγαλύτερα ρεύματα επιφανειακού νερού και για μονάδες εδάφους στις οποίες η μέση ετήσια ταχύτητα του αέρα, v_w , είναι μικρότερη από 1.9 m/s , έχουμε:

$$D_{water} / \delta_{wa} = 5.64 \cdot \left(\frac{current_w^{0.969}}{d_w^{0.673}} \right) \cdot \sqrt{\frac{32}{MW_x}}, \text{ m/d} \quad (3.52)$$

όπου

d_w : το μέσο βάθος του σώματος του επιφανειακού νερού, σε m

Για μονάδες εδάφους στις οποίες η μέση ετήσια ταχύτητα του αέρα, v_w , είναι μεγαλύτερη από 1.9 m/s , έχουμε:

$$D_{water} / \delta_{wa} = 5.64 \cdot \left(\frac{current_w^{0.969}}{d_w^{0.673}} \right) \cdot \sqrt{\frac{32}{MW_x}} \cdot e^{0.526(v_w-1.9)}, \text{ m/d} \quad (3.53)$$

Για τον υπολογισμό του συντελεστή μεταφοράς μάζας στην πλευρά του αέρα, D_{air}/δ_{aw} , χρησιμοποιούνται επίσης οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν από τον Southworth (1979), βασισμένες σε εργαστηριακά στοιχεία για χημικές ουσίες με H από 1 έως $100 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$. Σε αυτήν την περίπτωση ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, D_a/δ_{aw} , σε m/d , δίνεται από την εξίσωση:

$$D_{air} / \delta_{aw} = 273 \cdot (v_w + current_w) \cdot \sqrt{\frac{18}{MW_x}}, \text{ m/d} \quad (3.54)$$

όταν το άθροισμα, $v_{wind} + current_w$, είναι μεγαλύτερο από 0.5 m/s ,

και από:

$$D_{air} / \delta_{aw} = 140 \cdot \sqrt{\frac{18}{MW_x}}, m/d \quad (3.55)$$

όταν το άθροισμα, $v_{wind} + current_w$, είναι μικρότερο από 0.5 m/s.

3.4.3.2 Μεταφορά Μάζας στον Αέρα μέσω Διάχυσης στην Διεπιφάνεια του Αέρα με το Επιφανειακό Έδαφος

Η μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στην διεπιφάνεια του εδάφους με τον αέρα υπολογίζεται τόσο για την αεριοποίηση των μολυσματικών παραγόντων από το έδαφος όσο και από την εναπόθεση των μολυσματικών παραγόντων σε αέρια φάση στο επιφανειακό στρώμα του εδάφους. Όπως και πριν, η μεταφορά μάζας εξαρτάται από την μεταφορά μάζας τόσο μέσω του οριακού στρώματος της πλευράς του αέρα όσο και μέσω του οριακού στρώματος της πλευράς του επιφανειακού εδάφους. Ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας στην πλευρά του αέρα της διεπιφάνειας αέρα-επιφανειακού εδάφους δίνεται από την εξίσωση:

$$Y_{ag}^a = Z_a \cdot \frac{D_{air}}{\delta_{ag}} \quad (3.56)$$

όπου

δ_{ag} : το πάχος του οριακού στρώματος στον αέρα επάνω από το στρώμα του επιφανειακού εδάφους

Αυτό το πάχος υποτίθεται ότι είναι 0.005 m. Στις ομαλές επιφάνειες το πάχος του οριακού στρώματος ποικίλλει από περίπου 1 cm σε ακίνητο αέρα έως 1 mm όταν ο αέρας κινείται πάνω στην επιφάνεια με 1 m/s (Hanna et al., 1982).

3.4.3.3 Μεταφορά Μάζας μέσω Διάχυσης στα Στρώματα του Επιφανειακού Εδάφους και της Ριζώδους-ζώνης του Εδάφους

Επειδή το έδαφος δεν είναι ένα καλά-αναμεμειγμένο τμήμα όπως ο αέρας ή το επιφανειακό νερό, η προσέγγιση του οριακού στρώματος που περιγράφεται παραπάνω δεν είναι εύκολα εφαρμόσιμο στο έδαφος. Η μεταβολή της συγκέντρωσης των μολυσματικών παραγόντων μπορεί να μην σταθεροποιείται για αρκετά μέτρα. Στα καλά-αναμεμειγμένα τμήματα του αέρα και του νερού, το πάχος του οριακού στρώματος είναι της τάξης με μερικών εκατοστών. Οι Cohen et al. (1990) σημειώνουν ότι το τμήμα του εδάφους σε ένα μοντέλο πρέπει να χρησιμοποιεί ένα χωρικό μοντέλο διάχυσης. Οι Jury et al. (1990) έδειξαν ότι το "περιοριστικό βάθος της επιφάνειας του εδάφους" κυμαίνεται από 0.001 m (για το chrysene) έως 160 m (για το dichlorodifluoromethane) σε αμμώδες έδαφος και από < 0.001 έως 61 m για τις ίδιες ενώσεις σε λασπώδες έδαφος. Το περιοριστικό βάθος του εδάφους είναι το πάχος του εδάφους που απαιτείται για να περιοριστούν οι απώλειες αεριοποίησης κατά την διάρκεια ενός αόριστου χρόνου σε λιγότερο από 1% της αρχικής συγκέντρωσης. Αυτό είναι το βάθος στο οποίο η αεριοποίηση στην επιφάνεια δεν ασκεί ουσιαστικά καμία επιρροή στην συγκέντρωση. Πάνω από αυτό το βάθος, υπάρχει μια μεταβολή της συγκέντρωσης που θα ελεγχθεί από τον ρυθμό εξάτμισης στην επιφάνεια του εδάφους.

Υπάρχουν διάφορες προσεγγίσεις στο πρόβλημα του σχεδιασμού ενός απλού αλλά με ακρίβεια μοντέλο για την μεταφορά στο έδαφος. Σε μια από τις απλούστερες προσεγγίσεις, οι Mackay και Paterson (1991) χρησιμοποιούν ένα μήκος διάχυσης, το οποίο είναι το μισό του βάθους του εδάφους, ως το πάχος του οριακού στρώματος στο τοπικό μοντέλο fugacity τους. Αυτή η τιμή είναι ανεξάρτητη από τα χημικά είδη. Εντούτοις, αυτό το μοντέλο έχει ένα σχετικά λεπτό στρώμα εδάφους (0.1 m) και δεν έχει σχεδιαστεί να αντιμετωπίζει μολυσματικούς παράγοντες που έχουν ενσωματωθεί στο έδαφος σε βάθος μερικών μέτρων όπως συμβαίνει στην περίπτωση των επικίνδυνων αποβλήτων. Ο Mackay (1991) σημειώνει ότι η χρήση ενός ενιαίου στρώματος εδάφους και ενός οριακού στρώματος μισού-βάθους μπορεί να υποτιμήσει σημαντικά την αεριοποίηση στην επιφάνεια του εδάφους. Προτείνει δύο πιθανές λύσεις για αυτήν την κατάσταση, (1) χρήση περισσότερων του ενός τμημάτων εδαφικού στρώματος στο

μοντέλο και (2) χρήση της γεωμετρικής-μέσης τιμής του βάθους του εδαφικού στρώματος ως προσέγγιση για το οριακό στρώμα.

Οι Jury et al. (1983) ανέπτυξαν μια περιεκτική “κλειστής-μορφής” αναλυτική έκφραση για τον υπολογισμό της ροής και της συγκέντρωσης ενός μολυσματικού παράγοντα σε οποιοδήποτε σημείο του αρχικού βάθους της ενσωμάτωσης των μολυσματικών παραγόντων ή πάνω από αυτό. Οι Jury et al. (1990) ανέπτυξαν επίσης μια έκδοση αυτού του μοντέλου που μπορεί να εφαρμοστεί στους μολυσματικούς παράγοντες που είναι θαμμένοι σε κάποιο βάθος κάτω από την επιφάνεια. Αυτά τα μοντέλα έχουν το πλεονέκτημα ότι έχουν αναλυτικές λύσεις και ότι είναι επιβεβαιωμένα με υπαίθρια πειράματα με φυτοφάρμακα. Το κύριο μειονέκτημα αυτών των αναλυτικών λύσεων είναι ότι είναι σύνθετες. Οι λύσεις περιλαμβάνουν εκφράσεις, οι οποίες περιέχουν πολυάριθμους όρους καθώς επίσης και διαδικασίες δοκιμής και λάθους, οι οποίες πρέπει να αναζητηθούν ή να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας μια σειρά από προσεγγίσεις. Επίσης οι λύσεις περιλαμβάνουν τα προϊόντα λάθους της λειτουργίας και των εκθετών που πρέπει να συνδυαστούν και να αναλυθούν χρησιμοποιώντας περιορισμένες προσεγγίσεις για να αποφευχθούν αποτελέσματα που τείνουν στο άπειρο. Είναι δύσκολο να ενσωματωθούν τέτοια αναλυτικά μοντέλα σε ένα απλό και εύκαμπτο μοντέλο. Οι Cohen et al. (1990) εξέτασε το πρόβλημα της ανομοιόμορφης συγκέντρωσης στα έδαφος λύνοντας αριθμητικά μια μονοδιάστατη εξίσωση διάχυσης στο στρώμα του εδάφους. Αυτή η προσέγγιση τείνει επίσης να αυξήσει αισθητά την πολυπλοκότητα του προκύπτοντος μοντέλου και με την προσθήκη των αριθμητικών αλγορίθμων, το καθιστά δύσκολο να καθορίζει τους υπολογισμούς μέσω του μοντέλου.

Στο CalTOX εξετάζεται το πρόβλημα της ανομοιόμορφης συγκέντρωσης στο έδαφος (1) χρησιμοποιώντας τρία στρώματα εδάφους για να αναπαραστήσουν την περιοχή μεταξύ της επιφάνειας του εδάφους και του ανώτατου σημείου της κορεσμένης ζώνης, (2) εφαρμόζοντας το μοντέλο των Jury et al. (1983) σε αυτό το σύστημα του μοντέλου με τις πολλαπλές προσομοιώσεις που επιτρέπουν διακυμάνσεις των χημικών ιδιοτήτων (K_D και H) και αποτελεσματικές διαχυτότητες του εδάφους και (3) αναπτύσσοντας ένα μοντέλο με εμπειρικές σχέσεις μεταξύ των μεταβλητών, το οποίο χρησιμοποιεί τους αποτελεσματικούς συντελεστές διάχυσης στο έδαφος για να υπολογίσει το πάχος του οριακού στρώματος σε κάθε ένα από αυτά τα τρία στρώματα

του εδάφους με βελτιστοποίηση των προσομοιώσεων αυτών. Ο στόχος ήταν να ελαχιστοποιηθεί το λάθος εκτίμησης στις επιφανειακές ροές και στο προβλεπόμενο περιεχόμενο των χημικών ουσιών στα τμήματα για τα στρώματα της επιφάνειας και της ριζώδους-ζώνης του εδάφους σχετικά με τις τιμές των αναλυτικών λύσεων που λήφθηκαν από τους Jury et al. (1983). Στην πραγματικότητα, η διαδικασία αυτή επιτρέπει στο μοντέλο CalTOX να μιμηθεί το μοντέλο των Jury et al. (1983) με ένα απλούστερο μοντέλο εμπειρικής σχέσης των μεταβλητών βασισμένο στην αποτελεσματική διάχυση. Το αντίτιμο γι' αυτήν την αυξανόμενη απλότητα είναι η μικρότερη ακρίβεια. Εντούτοις, μπορεί να υπολογιστεί αυτή η απώλεια ακρίβειας και να σημειωθεί ότι εφ' όσον είναι συγκρίσιμη με την μεταβλητότητα ή την αβεβαιότητα στον χαρακτηρισμό των αρχικών συγκεντρώσεων του εδάφους, δεν οδηγεί σε σημαντική υποβάθμιση της αξιοπιστίας του μοντέλου σχετικά με το μοντέλο των Jury et al. (1983) από το οποίο προέρχεται. Οι ακόλουθες εκφράσεις χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του πάχους του οριακού στρώματος ή του μήκους διάχυσης στο CalTOX:

$$\delta_g = 0.108 \cdot D_g^{0.229} \quad (3.57)$$

$$\delta_s = 318 \cdot D_s^{0.683} \quad (3.58)$$

όπου

δ_g : το μήκος διάχυσης στο τμήμα του επιφανειακού εδάφους (m)

δ_s : το μήκος διάχυσης στο τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (m)

D_g : η αποτελεσματική διάχυση στο τμήμα του επιφανειακού εδάφους (m^2/d), όπως λαμβάνεται από την **εξίσωση 3.38**

D_s : η αποτελεσματική διάχυση στο τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (m^2/d), όπως λαμβάνεται από την **εξίσωση 3.39**

3.4.3.4 Μεταφορά Μάζας μέσω Διάχυσης στην Διεπιφάνεια του Επιφανειακού Νερού με το Ίζημα

Η μεταφορά μάζας μέσω διάχυση στην διεπιφάνεια του ιζήματος με το νερό υπολογίζεται για την καθαρή αεριοποίηση των μολυσματικών παραγόντων από το ίζημα και την απόθεση των διαλυμένων μολυσματικών παραγόντων στο στρώμα του ιζήματος. Σε κάθε περίπτωση, η συνολική μεταφορά μάζας εξαρτάται από τα οριακά στρώματα

τόσο στην πλευρά του νερού όσο και στην πλευρά του ιζήματος. Ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας στην πλευρά του νερού δίνεται από:

$$Y_{wd}^w = Z_w \cdot \frac{D_{water}}{\delta_{wd}} \quad (3.59)$$

όπου

- Z_w : η ικανότητα fugacity στο τμήμα του επιφανειακού νερού
 D_{water} : η αποτελεσματική διαχυτότητα στο τμήμα του επιφανειακού νερού
 δ_{wd} : το πάχος του οριακού στρώματος στο νερό πάνω από το στρώμα του ιζήματος

Ο συντελεστής fugacity μεταφοράς μάζας στην πλευρά του ιζήματος δίνεται από:

$$Y_{wd}^d = Z_d \cdot \frac{D_d}{\delta_{dw}} \quad (3.60)$$

όπου

- Z_d : η ικανότητα fugacity στο τμήμα του ιζήματος
 D_d : η αποτελεσματική διαχυτότητα στο τμήμα του ιζήματος
 δ_{dw} : το πάχος του οριακού στρώματος του ιζήματος κάτω από το νερό

Οι Formica et al. (1988) έχουν περιγράψει μια μέθοδο για τον υπολογισμό της αποτελεσματικής διαχυτότητας στο στρώμα του ιζήματος βασισμένη στις διορθώσεις για την περιεκτικότητα του ιζήματος σε στερεά. Αυτή η προσέγγιση είναι παρόμοια με αυτήν που χρησιμοποιείται από τους Jury et al. (1983), όπως περιγράφεται στις **εξισώσεις 3.38** και **3.39** με το κλάσμα του όγκου της αέριας φάσης να τίθεται ίσο με μηδέν.

Για τον υπολογισμό του πάχους του οριακού στρώματος στην πλευρά του νερού, στο μοντέλο CalTOX, χρησιμοποιούνται οι ροές του ραδονίου από την εκβολή του ποταμού Hudson που μετρήθηκαν από τους Hammond et al. (1975). Η ροή που μετρήθηκε είναι $200 \text{ atoms/m}^2 \cdot \text{s}$ πάνω από τα ιζήματα με μια συγκέντρωση του ραδονίου στο νερό $2.6 \cdot 10^9 \text{ atoms/m}^3$ με έναν συντελεστή διάχυσης $1.4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Αυτό υπονοεί ένα οριακό στρώμα πάχους 0.02 m , το οποίο είναι αυτό που χρησιμοποιείται στο CalTOX για το πάχος του οριακού στρώματος στην πλευρά του νερού πάνω από τα ιζήματα. Για το πάχος του οριακού στρώματος στα ιζήματα κάτω από την υδάτινη στήλη, χρησιμοποιείται η εξίσωση 3.58 με την D_d αντί της D_s .

3.4.4 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΜΑΖΑΣ ΜΕΣΩ ΜΕΤΑΚΙΝΗΣΗΣ ΣΤΟ ΝΕΡΟ ΚΑΙ ΣΤΑ ΣΤΕΡΕΑ

Στο CalTOX, η μεταφορά των μολυσματικών παραγόντων από την μετακίνηση μεταξύ των μέσων αντιμετωπίζεται ως ροή μετακίνησης. Η ροή αυτή σχεδιάζεται ως το γινόμενο της ταχύτητας της κινούμενης φάσης με την συγκέντρωση των μολυσματικών παραγόντων σε εκείνη την φάση. Η ροή έχει μονάδες $\text{mol/m}^2 \cdot \text{d}$, η ταχύτητα της κινούμενης φάσης m/d και η συγκέντρωση στην κινούμενη φάση είναι το γινόμενο της fugacity των μολυσματικών παραγόντων σε εκείνη την φάση, Pa, με την ικανότητα fugacity εκείνης της φάσης σε $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$:

$$\text{ροή μετακίνησης} = \text{ταχύτητα} \cdot Z_{ik} \cdot f_i \quad (3.61)$$

όπου

Z_{ik} : η ικανότητα fugacity της κινούμενης φάσης στο τμήμα i
 f_i : η fugacity στο τμήμα i

Για παράδειγμα, η ροή του μολυσματικού παράγοντα από τον αέρα στο επιφανειακό έδαφος μέσω της εναπόθεσης σωματιδίων είναι το γινόμενο της ταχύτητας εναπόθεσης, v_d , της ικανότητας fugacity των σωματιδίων του αέρα, Z_{ap} και της συνολικής fugacity του τμήματος του αέρα, f_a :

$$\text{ροή (air to ground – surface soil)} = v_d \cdot Z_{ap} \cdot f_a \quad (3.62)$$

Οι διαδικασίες μετακίνησης που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CalTOX περιλαμβάνουν την εναπόθεση των σωματιδίων αερολύματος, αιώρηση σωματιδίων από το έδαφος, διάβρωση του εδάφους από το νερό, βροχοπτώσεις, εξάτμιση, απορροή του ιζήματος, διήθηση του νερού μέσω του εδάφους, εναπόθεση σωματιδίων των ιζημάτων στο επιφανειακό νερό, αιώρηση σωματιδίων του ιζήματος από το στρώμα του ιζήματος και ροές του επιφανειακού νερού. Οι ροές μετακίνησης ή μη-διάχυσης που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CalTOX συνοψίζονται στον **πίνακα 3.2**.

Πίνακας 3.2: Οι ροές μετακίνησης ή μη-διάχυσης που χρησιμοποιούνται για μεταφορά μεταξύ των μέσων στο μοντέλο CalTOX.

Μεταφορά μεταξύ των Μέσων	Περιγραφή της διαδικασίας μη-διάχυσης	Σχέση
Αέρας στο επιφανειακό έδαφος	Καθαρισμός από την βροχή των αέριων μολυσματικών ουσιών από τον αέρα στο έδαφος	$\rho_{\eta} = rain \cdot Z_{water} \cdot f_a$
Αέρας στο επιφανειακό έδαφος	Στεγνή και ξηρή εναπόθεση μολυσματικών ουσιών προσκολλημένων στα σωματίδια	$\rho_{\eta} = v_d \cdot Z_{ap} \cdot f_a$
Αέρας στο επιφανειακό νερό	Καθαρισμός από την βροχή των αέριων μολυσματικών ουσιών από τον αέρα στο έδαφος	$\rho_{\eta} = rain \cdot Z_{water} \cdot f_a$
Αέρας στο επιφανειακό νερό	Στεγνή και ξηρή εναπόθεση μολυσματικών ουσιών προσκολλημένων στα σωματίδια	$\rho_{\eta} = v_d \cdot Z_{ap} \cdot f_a$
Από το τμήμα του αέρα έξω από το σύστημα	Μετακίνηση αέριας μάζας από τον αέρα έξω από τα όρια της περιοχής	$\rho_{\eta} = Z_a \cdot \frac{0.23 \cdot v_w \cdot d_a}{\sqrt{Area}}$
Επιφανειακό έδαφος στον αέρα	Αιώρηση σωματιδίων του εδάφους	$\rho_{\eta} = v_d \cdot Z_{gp} \cdot f_g$
Επιφανειακό έδαφος στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους	Διήθηση λόγω της φόρτισης του υπογείου νερού	$\rho_{\eta} = recharge \cdot Z_{water} \cdot f_g$
Επιφανειακό έδαφος στο επιφανειακό νερό	Απορροή διαλύματος εδάφους	$\rho_{\eta} = runoff \cdot Z_{water} \cdot f_g$
Επιφανειακό έδαφος στο επιφανειακό νερό	Διάβρωση (απορροή μεταλλικών στοιχείων) στο επιφανειακό νερό	$\rho_{\eta} = erosion \cdot Z_{gp} \cdot f_g$
Ριζώδη-ζώνη του εδάφους στο υπέδαφος	Διήθηση λόγω της φόρτισης του υπογείου νερού	$\rho_{\eta} = recharge \cdot Z_{water} \cdot f_s$
Υπέδαφος στο υπόγειο νερό	Διήθηση λόγω της φόρτισης του υπογείου νερού	$\rho_{\eta} = recharge \cdot Z_{water} \cdot f_v$
Επιφανειακό νερό στο ίζημα	Εναπόθεση ιζήματος	$\rho_{\eta} = deposit \cdot Z_{wp} \cdot f_w$
Από το επιφανειακό νερό έξω από την περιοχή	Εκροή επιφανειακού νερού	$\rho_{\eta} = outflow \cdot Z_w \cdot f_w$
Ίζημα στο επιφανειακό νερό	Αιώρηση ιζήματος	$\rho_{\eta} = resuspend \cdot Z_{dp} \cdot f_d$

3.5 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΕΣ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ CalTOX

Ο μετασχηματισμός των μολυσματικών παραγόντων στο περιβάλλον μπορεί να έχει μια δυσκολονόητη επίδραση στη δυνατότητά τους για εμμονή. Οι χημικοί μετασχηματισμοί, οι οποίοι μπορούν να εμφανιστούν ως αποτέλεσμα των βιοτικών ή αβιοτικών διαδικασιών, μπορούν να μειώσουν σημαντικά την συγκέντρωση μιας ουσίας. Για τις οργανικές χημικές ουσίες, η γνώση της ημίσειας ζωής μιας ένωσης για οποιαδήποτε δεδομένη διαδικασία μετασχηματισμού παρέχει έναν πολύ χρήσιμο δείκτη της εμμονής στα περιβαλλοντικά μέσα. Επειδή αυτές οι διαδικασίες καθορίζουν την εμμονή και την μορφή μιας χημικής ουσίας στο περιβάλλον, καθορίζουν επίσης το ποσό και τον τύπο της ουσίας που είναι διαθέσιμη για την έκθεση των εξεταζόμενων ειδών. Πειραματικές μέθοδοι (Howard et al., 1975) και μέθοδοι εκτίμησης (Lyman et al., 1982) είναι διαθέσιμοι για τον καθορισμό αυτών των διαδικασιών σε ποικίλα μέσα. Πρέπει να ληφθούν συγκεκριμένες πληροφορίες για τους ρυθμούς και τις οδούς του μετασχηματισμού για τις μεμονωμένες χημικές ουσίες είτε άμεσα από τους πειραματικούς προσδιορισμούς είτε να προέλθουν έμμεσα από τις πληροφορίες για τις χημικές ουσίες που είναι δομικά παρόμοιες. Συνεπώς, οι ποσοτικές εκτιμήσεις είναι δύσκολο να εξαχθούν για τις κατηγορίες εκείνες των ενώσεων για τις οποίες λείπουν τα εμπειρικά στοιχεία. Στις παρακάτω παραγράφους παρουσιάζονται οι διαδικασίες μετασχηματισμού της φωτόλυσης, της υδρόλυσης, της οξειδωσης/αναγωγής και της μικροβιακής αποικοδόμησης.

3.5.1 ΦΩΤΟΛΥΣΗ

Οι περισσότεροι οργανικοί μολυσματικοί παράγοντες είναι σε θέση να υποστούν φωτολυτική αποσύνθεση. Τέτοιες αποσυνθέσεις μπορούν να είναι μερικές, με συνέπεια τον σχηματισμό σταθερών υποπροϊόντων, ή ολοκληρωτικές, με συνέπεια τον σχηματισμό CO₂ και H₂O. Η δυνατότητα για τέτοιους φωτοχημικούς μετασχηματισμούς μπορεί γενικά να προβλεφθεί βασισμένη στην δυνατότητα του μορίου να απορροφά ακτινοβολούμενη ενέργεια κοντά στην υπεριώδη περιοχή και στο ορατό φως (μήκος κύματος 240-700 nm). Αν και η ηλιακή ακτινοβολία στην γήινη επιφάνεια μειώνεται από την ατμόσφαιρα, είναι γενικά αρκετά υψηλού μήκους κύματος (π.χ., > 290 nm) για να

σπάσουν οι δεσμοί σε πολλές ενώσεις. Όλες οι ενώσεις που περιέχουν αρωματικούς δακτυλίους απορροφούν ενέργεια στα περιβαλλοντικά μήκη κύματος όπως οι ενώσεις που περιέχουν άτομα αλογόνου (π.χ., Cl, Br) και ακόρεστες αλυσίδες άνθρακα (π.χ., αλκένια και αλκύνια). Η φωτόλυση μιας χημικής ουσίας μπορεί να οδηγήσει σε δύο αποτελέσματα που είναι σχετικά με τον περιβαλλοντικό της προορισμό: (1) τεμαχισμός, στον οποίο σπάει ο μοριακός δεσμός διαμορφώνοντας δύο ελεύθερες ρίζες, ή (2) αναδιοργάνωση, όπως η μετατροπή από τα ισομερή *cis* στα *trans*. Από αυτές τις δύο πιθανές αντιδράσεις, ο τεμαχισμός είναι πιθανό να διαδραματίσει τον μέγιστο ρόλο στον προορισμό των μολυσματικών παραγόντων λόγω της δυνατότητάς του για αποικοδόμηση. Τέτοιοι μετασχηματισμοί μπορούν να οδηγήσουν σε σχετικά μικρούς χρόνους ημίσειας ζωής (π.χ., από ώρες έως ημέρες) για τους μολυσματικούς παράγοντες, όπως τα φυτοφάρμακα που ενσωματώνονται πάνω στο υπέργειο επιφανειακό έδαφος.

3.5.2 ΥΔΡΟΛΥΣΗ

Ο υδρολυτικός μετασχηματισμός των οργανικών χημικών ουσιών μπορεί να είναι μια σημαντική διαδικασία προορισμού για τις ενώσεις που είναι παρούσες στα υδάτινα περιβάλλοντα. Η υδρόλυση είναι σημαντικότερη για τις χημικές ουσίες που έχουν λειτουργικές ομάδες (π.χ., αμίδια, εστέρες, carbamates, οργανοφωσφορικά). Αυτές οι ενώσεις μπορούν να αλλάξουν γρήγορα (π.χ., από λεπτά έως ημέρες) παρουσία νερού. Αντίθετα, η υδρολυτική αποικοδόμηση των ενώσεων που περιέχουν σταθερά υποκατάστατα (π.χ., αλογονούχες ενώσεις, όπως το τετραχλωρίδιο του άνθρακα) μπορούν να έχουν χρόνο ημίσειας ζωής αρκετές χιλιάδες έτη. Επειδή οι υδρολυτικές αντιδράσεις οδηγούνται από την διαθεσιμότητα των ιόντων υδρογόνου και υδροξειδίου, το pH του περιβάλλοντος μπορεί να έχει μια δραματική επιρροή στον ρυθμό υδρόλυσης για οποιαδήποτε ένωση. Οι υδρολυτικοί μετασχηματισμοί που είναι σχετικά αργοί στο ουδέτερο pH μπορούν να εμφανιστούν με ρυθμούς που είναι αρκετά μεγαλύτεροι σε όξινες ή βασικές συνθήκες (Tinsley, 1979). Επομένως, η σχετική σημασία της υδρόλυσης στον περιβαλλοντικό προορισμό ενός μολυσματικού παράγοντα θα εξαρτηθεί από την χημική δομή της ένωσης καθώς επίσης και το pH των περιβαλλοντικών μέσων.

3.5.3 ΟΞΕΙΔΩΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΓΩΓΗ

Πολλές ανόργανες και οργανικές χημικές ουσίες μπορούν να υποβληθούν σε αντιδράσεις οξειδωσης ή αναγωγής στο περιβάλλον. Αυτές οι αντιδράσεις είναι σημαντικές επειδή μπορούν να επηρεάσουν τον περιβαλλοντικό προορισμό και τις τοξικολογικές ιδιότητες της ένωσης, οι οποίες είναι οι σημαντικότερες στα υδάτινα περιβάλλοντα (Stumm και Morgan, 1981). Ένας δείκτης της δυνατότητας μιας ένωσης να οξειδώνεται ή να ανάγεται παρέχεται από την γνώση της δυνατότητας αναγωγής του (E^0), η οποία είναι η τάση στην οποία μετασχηματίζεται στην ανηγμένη κατάστασή της. Ένα παρόμοιο μέτρο της δυνατότητας του περιβάλλοντος να ανάγει μια ένωση παρέχεται από την οξειδοαναγωγική δυνατότητα (pE), η οποία είναι ένα μέτρο της δραστηριότητας των ηλεκτρονίων. Οι οξειδοαναγωγικές δυνατότητες είναι σχετικά υψηλές και θετικές σε οξειδωμένα περιβάλλοντα (π.χ., επιφανειακά ύδατα), και χαμηλές και αρνητικές σε αναγόμενα περιβάλλοντα (π.χ., υδάτινα ιζήματα και χερσαία υπόγεια επιφάνεια). Αυτές οι περιβαλλοντικές συνθήκες είναι ιδιαίτερα σημαντικές για τις ανόργανες χημικές ουσίες που είναι σπάνια παρούσες με την στοιχειώδη μορφή τους στο περιβάλλον. Το αρσενικό, παραδείγματος χάριν, υπάρχει κυρίως με την οξειδωμένη μορφή του (εστέρας αρσενικού οξέως) στην ατμόσφαιρα και στα επιφανειακά ύδατα και με την ανηγμένη μορφή του (arsenite) στα ιζήματα.

3.5.4 ΜΙΚΡΟΒΙΑΚΟΣ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ

Ο μετασχηματισμός των οργανικών και ανόργανων ενώσεων από τους μικροοργανισμούς που είναι παρόντες στα περιβαλλοντικά μέσα μπορεί να έχει μια βαθιά επίδραση στην εμμόνη τους. Λόγω της ευρείας διακύμανσης των ενζυματικών ικανοτήτων τους, οι μικροοργανισμοί είναι σε θέση να μετασχηματίζουν πολλές ανόργανες και οργανικές ενώσεις. Τέτοιοι μετασχηματισμοί μπορούν να οδηγήσουν στην μερική αποικοδόμηση μιας ένωσης (π.χ., μετατροπή του DDT σε DDE), μεταλλοποίηση (π.χ., πλήρης μετασχηματισμός σε διοξείδιο του άνθρακα και νερό), ή σύνθεση ενός σταθερού προϊόντος (π.χ., σχηματισμός methyl arsenicals από τον εστέρα του αρσενικού οξέως). Η ευαισθησία πολλών οργανικών ενώσεων στον μικροβιακό μετασχηματισμό

μπορεί να προβλεφθεί με βάση γνώσεων της χημικής δομής (Boethling και Sabljic, 1989).

3.6 ΔΕΔΟΜΕΝΑ ΕΙΣΑΓΩΓΗΣ ΚΑΙ ΑΠΑΡΑΙΤΗΤΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Το μοντέλο μεταφοράς και μετασχηματισμού του CalTOX χρησιμοποιεί δύο σύνολα δεδομένων εισόδου, ένα που περιγράφει τις ιδιότητες των μολυσματικών παραγόντων και το άλλο που παρέχει τις ιδιότητες του περιβάλλοντος ή της περιοχής που δέχεται τους μολυσματικούς παράγοντες. Κάθε μια από τις εισαγωγές περιγράφεται από την άποψη της φυσικής διαδικασίας που συνδέεται με την εισαγωγή και με έναν κατ' εκτίμηση συντελεστή διακύμανσης, ο οποίος περιγράφει την αβεβαιότητα ή την μεταβλητότητα που συνδέεται με εκείνη την παράμετρο. Ο συντελεστής διακύμανσης ή CV είναι ο ρυθμός της αριθμητικής σταθερής απόκλισης στον αριθμητικό μέσο όρο για μια παράμετρο που μπορεί να έχει ένα διάστημα τιμών. Επειδή η διαδικασία της εκτίμησης των CVs είναι από μόνη της μια αβέβαιη διαδικασία, χρησιμοποιούνται μόνο πέντε τιμές συντελεστών διακύμανσης που αντιστοιχούν σε πέντε κατηγορίες αβεβαιότητας για να χαρακτηρίσουμε αυτές τις παραμέτρους. Ο όρος "*CVa*" αντιπροσωπεύει μια παράμετρο που έχει συντελεστή διακύμανσης 0.1 ή λιγότερο και θεωρείται ιδιαίτερα αξιόπιστη παράμετρος, η οποία θα συμβάλει λίγο στην γενική αβεβαιότητα ή μεταβλητότητα του τελικού αποτελέσματος, έτσι ώστε να μην χρειαστεί να εκφραστεί η αβεβαιότητα της παραμέτρου αυτής. Ο "*CVb*" αντιπροσωπεύει έναν συντελεστή διακύμανσης μεταξύ 0.1 και 0.3 και υποδηλώνει μια παράμετρο που έχει μετρηθεί ή έχει εξαχθεί από μια ιδιαίτερα αξιόπιστη μέθοδο εκτίμησης. Ο συντελεστής διακύμανσης σε αυτό το διάστημα τιμών απεικονίζει τόσο την χαρακτηριστική μεταβλητότητα στην μέτρηση όσο και την αβεβαιότητα στην παρέκταση της τιμής αυτής από ένα πειραματικό σε ένα περιβαλλοντικό σκηνικό. Ο "*CVc*" αντιπροσωπεύει έναν συντελεστή διακύμανσης μεταξύ 0.3 και 3 (λογάριθμος του μέσου συντελεστή διακύμανσης του 1) και υποδηλώνει μια παράμετρο για την οποία υπάρχει μια κάπως αξιόπιστη μέθοδος εκτίμησης. Ο "*CVd*" αντιπροσωπεύει έναν συντελεστή διακύμανσης μεταξύ 3 και 10 (λογάριθμος του μέσου συντελεστή διακύμανσης ισούται με το 5) και χρησιμοποιείται για τις παραμέτρους για τις οποίες η μέθοδος εκτίμησης είναι πολύ λιγότερο αξιόπιστη. Ο "*CVe*" αντιπροσωπεύει έναν συντελεστή διακύμανσης μεταξύ 10

και 15 (λογάριθμος του μέσου συντελεστή διακύμανσης ισούται με το 12) και χρησιμοποιείται για τις παραμέτρους για τις οποίες η κατ' εκτίμηση τιμή είναι ιδιαίτερα αβέβαιη.

3.6.1 ΧΗΜΙΚΑ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

Το μοντέλο CalTOX απαιτεί επίσης ένα σύνολο εισαγωγών δεδομένων φυσικοχημικών ιδιοτήτων. Αυτές οι εισαγωγές και η κατά προσέγγιση συντελεστές διακύμανσής τους περιγράφονται παρακάτω. Ο **πίνακας 3.3** παρέχει έναν κατάλογο των χημικών ιδιοτήτων που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο CalTOX και την αντίστοιχη κατηγορία του συντελεστή διακύμανσής τους.

3.6.1.1 Μοριακό Βάρος

Για τις περισσότερες οργανικές και ανόργανες ενώσεις, το μοριακό βάρος μπορεί να ληφθεί αξιόπιστα από διάφορες κοινές αναφορές. Η ακρίβεια με την οποία μπορούν να μετρηθούν τα μοριακά βάρη είναι τόσο υψηλή όσο οποιαδήποτε άλλη ιδιότητα που χρησιμοποιείται στην ανάλυση της μεταφοράς. Αυτή η παράμετρος κατατάσσεται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVa.

3.6.1.2 Συντελεστής Κατανομής Οκτανόλης-Νερό, K_{ow}

Ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού παρέχει ένα μέτρο της έκτασης της κατανομής της χημικής ουσίας μεταξύ του νερού και της οκτανόλης σε ισορροπία. Όσο μεγαλύτερος ο K_{ow} , τόσο πιθανότερο είναι μια χημική ουσία να κατανεμηθεί στην οκτανόλη απ' ό,τι στο νερό. Ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερό χρησιμοποιείται ως βάση για τον υπολογισμό της κατανομής του οργανικού άνθρακα στο έδαφος και στα ιζήματα, των παραγόντων βιοσυγκέντρωσης στους υδρόβιους οργανισμούς, των συντελεστών κατανομής της ριζώδης-ζώνης του εδάφους, των συντελεστών κατανομής του φύλλου-αέρα στη χερσαία βλάστηση και τους συντελεστές κατανομής των λιπιδίων στα χερσαία ζώα. Οι μετρημένες τιμές του K_{ow} είναι διαθέσιμες σε αναφορές, όπως του Howard (1989, 1990, 1991) και του Verschuere (1983). Οι μέθοδοι εκτίμησης παρουσιάζονται από τους Lyman et al. (1982). Για τις μετρημένες τιμές, η παράμετρος

αυτή κατατάσσεται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVb. Πρέπει να σημειωθεί ότι οι διαδικασίες εκτίμησης του K_{ow} οδηγούν σε λανθασμένες εκτιμήσεις παραγόντων που κυμαίνεται από 1.2 (βενζόλιο) έως τουλάχιστον 30 (διοξίνες), ανάλογα με την χημική ένωση. Εντούτοις, οι τωρινοί μέθοδοι εκτίμησης του K_{ow} τείνουν να είναι κάπως αξιόπιστες και το παραπάνω παράδειγμα των διοξινών είναι μια πιθανή εξαίρεση. Κατά συνέπεια, όταν υπολογίζεται ο K_{ow} παρά όταν μετριέται, πρέπει να κατατάσσεται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVc.

Πίνακας 3.3: Ο κατάλογος των χημικών και φυσικών ιδιοτήτων που χρησιμοποιούνται για να πραγματοποιηθεί η περιβαλλοντική ανάλυση μεταφοράς και μετασχηματισμού στο CalTOX.

Φυσικοχημικές Ιδιότητες	Σύμβολο	CV ^a
Μοριακό βάρος (g/mol)	MW	a
Συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού (L[water]/L[octanol])	K_{ow}	b ή c
Σημείο τήξης (K)	T_m	a
Πίεση ατμών (Pa)	VP	b ή c
Διαλυτότητα (mol/m ³)	S	b ή c
Σταθερά του Henry (Pa·m ³ /mol)	H	b ή c
Συντελεστής διάχυσης στον καθαρό αέρα (m ² /d)	D_{air}	b
Συντελεστής διάχυσης στο καθαρό νερό (m ² /d)	D_{water}	b
Συντελεστής κατανομής οργανικού-άνθρακα (L[water]/L[carbon])	K_{oc}	c
Συντελεστής απορρόφησης (L[water]/kg[solid])	K_D	c
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στον αέρα (day ⁻¹)	R_a	e
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στα φυτά (day ⁻¹)	R_p	e
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (day ⁻¹)	R_s	e
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στο υπέδαφος (day ⁻¹)	R_v	e
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στο επιφανειακό νερό (day ⁻¹)	R_w	e
Σταθερά ρυθμού αντίδρασης στο ίζημα (day ⁻¹)	R_d	e

^a: οι κατηγορίες του συντελεστή διακύμανσης είναι οι ακόλουθες, (a) CV 0.1 ή λιγότερο, (b) CV μεταξύ 0.1 και 0.3, (c) CV μεταξύ 0.3 και 3, (d) CV μεταξύ 3 και 10 και (e) CV μεταξύ 10 και 15.

3.6.1.3 Σημείο Τήξης

Το σημείο τήξης είναι μια μετρούμενη παράμετρος και διαθέσιμη για τις περισσότερες ενώσεις στην βιβλιογραφία. Κατατάσσεται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVa.

3.6.1.4 Πίεση Ατμών

Η πίεση των ατμών είναι η πίεση που ασκείται από τους ατμούς μιας χημικής ουσίας σε ισορροπία με την στερεά ή την υγρή φάση της. Χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του ρυθμού πτητικότητας του μολυσματικού παράγοντα από το έδαφος ή το νερό και για τον υπολογισμό της σταθεράς του Henry για τις χημικές ουσίες χαμηλής διαλυτότητας. Όσο υψηλότερη είναι η πίεση των ατμών, τόσο πιθανότερη είναι η ύπαρξη μιας χημική ουσία στην αέρια φάση. Η μετρημένη πίεση ατμών είναι συχνά διαθέσιμη σε αναφορές, όπως του Howard (1989, 1990, 1991) και του Verschueren (1983). Οι μέθοδοι εκτίμησης παρουσιάζονται από τους Lyman et al. (1982). Για τις μετρημένες τιμές, η ιδιότητα αυτή ορίζεται στην κατηγορία CVb και για τις κατ' εκτίμηση τιμές στην κατηγορία CVc.

3.6.1.5 Διαλυτότητα στο Νερό

Είναι το ανώτερο όριο της διαλυμένης συγκέντρωσης μιας χημικής ουσίας στο καθαρό νερό σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία. Εντούτοις, ο παρατηρούμενος ρυθμός του περιεχομένου στον όγκο των επιφανειακών υδάτων μπορεί να υπερβεί αυτό το όριο διαλυτότητας όταν υπάρχει προσρόφηση του μολυσματικού παράγοντα πάνω στα αιωρούμενα ιζήματα μέσα στο νερό, ή όταν υπάρχουν παράγοντες παρόντες, όπως οι διαλύτες, οι οποίοι αυξάνουν την φαινομενική διαλυτότητα στο νερό. Το μετρημένο όριο διαλυτότητας είναι συχνά διαθέσιμο σε αναφορές, όπως του Howard (1989, 1990, 1991) και του Verschueren (1983). Οι μέθοδοι εκτίμησης παρουσιάζονται από τους Lyman et al. (1982). Για τις μετρημένες τιμές, η ιδιότητα αυτή έχει CVb και για τις κατ' εκτίμηση τιμές CVc.

3.6.1.6 Σταθερά Henry

Αυτός ο παράγοντας είναι ένα μέτρο της ισορροπίας του ρυθμού της χημικής δραστηριότητας στο αέριο επάνω από ένα υγρό στην χημική δραστηριότητα στο υγρό. Είναι η βάση για τον υπολογισμό των συντελεστών κατανομής αέρα-νερού και συχνά εκφράζεται ως η μερική πίεση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση διαιρεμένη με την συγκέντρωση στην φάση του νερού. Για τις χημικές ουσίες με χαμηλό όριο διαλυτότητας στο νερό, η σταθερά Henry μπορεί να υπολογιστεί ως η πίεση των ατμών της καθαρής χημικής ουσίας που διαιρεμένης με το όριο διαλυτότητας στο νερό. Όσο υψηλότερη είναι η σταθερά Henry, τόσο πιθανότερο είναι μια χημική ουσία να υπάρξει σε αέρια κατάσταση από το να παραμείνει διαλυμένη στο νερό. Οι μετρημένες διαλυτότητες είναι συχνά διαθέσιμες σε αναφορές όπως του Howard (1989, 1990, 1991) και του Verschueren (1983). Οι μέθοδοι εκτίμησης παρουσιάζονται από τους Lyman et al. (1982). Για τις μετρημένες τιμές, η ιδιότητα αυτή ορίζεται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVb και για τις κατ' εκτίμηση τιμές στην κατηγορία αβεβαιότητας CVc.

3.6.1.7 Συντελεστές Διάχυσης στον Αέρα και στο Νερό

Οι συντελεστές διάχυσης περιγράφουν την μετακίνηση ενός μορίου σε ένα υγρού ή αερίου μέσο ως αποτέλεσμα των διαφορών στην συγκέντρωση μέσα στο μέσο. Χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της διασποράς του συστατικού της χημικής μεταφοράς. Όσο υψηλότερος είναι ο συντελεστής διάχυσης, τόσο πιθανότερο είναι μια χημική ουσία να κινηθεί ως απόκριση της μεταβολής της συγκέντρωσης. Η μεταφορά μάζας μέσω διάχυσης στα όρια των τμημάτων μοντελοποιείται συχνά χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο οριακού-στρώματος. Η ροή του μολυσματικού παράγοντα από την επιφάνεια στο σώμα του ρευστού είναι ανάλογη προς την διαφορά της συγκέντρωσης μεταξύ της επιφάνειας και του ρευστού. Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιείται για την μεταφορά μάζας μεταξύ του αέρα και του εδάφους, του αέρα και του επιφανειακού νερού και του επιφανειακού νερού και των ιζημάτων. Προκειμένου να πραγματοποιηθεί αυτή η προσέγγιση, χρειάζονται εκτιμήσεις των συντελεστών διάχυσης μιας χημικής ουσίας τόσο στον καθαρό αέρα όσο και στο καθαρό νερό. Οι μέθοδοι εκτίμησης για τους συντελεστές διάχυσης τείνουν να είναι αρκετά αξιόπιστες, κατά συνέπεια τόσο για τις

μετρημένες όσο και για τις κατ' εκτίμηση τιμές των συντελεστών διάχυσης να κατατάσσονται στην κατηγορία αβεβαιότητας CVb (παραδείγματος χάριν **εξιιώσεις 3.36 και 3.39** και η σχετική ανάλυση).

3.6.1.8 Συντελεστής Κατανομής Οργανικού-Άνθρακας, K_{oc} , και Συντελεστής Απορρόφησης, K_D

Όπως σημειώνεται παραπάνω, ο Karickhoff (1981) έχει προτείνει εμπειρικές μεθόδους εκτίμησης του K_{oc} από τον K_{ow} . Ο γενικότερος από αυτούς είναι ότι ο K_{oc} είναι ίσος με 0.48 φορές τον K_{ow} με συντελεστή διακύμανσης σε αυτήν την εκτίμηση περίπου 1. Αυτές οι μέθοδοι εκτίμησης προορίζονται για τις μη-ιοντικές οργανικές ενώσεις. Αναμένεται μεγαλύτερος συντελεστής διασποράς όταν η εκτίμηση εφαρμόζεται στα ιοντικά είδη, για τα οποία πρέπει να γίνει μια διόρθωση για τον όξινο διαχωρισμό. Όταν ο K_{oc} πολλαπλασιάζεται με το κλάσμα του οργανικού άνθρακα στο έδαφος ή στο ίζημα, τότε εξάγεται ο συντελεστής κατανομής του εδάφους-νερού ή του ιζήματος-νερού, K_D (Karickhoff, 1981). Ο συντελεστής διασποράς σε αυτήν την εκτίμηση επηρεάζεται από την λάθος εκτίμηση του K_{oc} , η οποία είναι κατά προσέγγιση ίσος με 1. Για τις ανόργανες χημικές ουσίες, οι τιμές K_D μπορούν να βασιστούν στις μετρημένες τιμές, στις τιμές που προσδιορίζονται από τα γεωχημικά στοιχεία, όπως αυτά που δημοσιεύονται στο Wedepohl (1969-1978), ή με βάση τις μεθόδους εκτίμησης που περιγράφονται από τους Bodek et al. (1988). Με βάση αυτές τις πληροφορίες, οι K_{oc} και K_D κατατάσσονται και οι δύο στην κατηγορία αβεβαιότητας CVc.

3.6.1.9 Ρυθμοί Μετασχηματισμού Συγκεκριμένων Μέσων

Οι σταθεροί ρυθμοί που εκφράζουν τον ρυθμό των χημικών μετασχηματισμών σε κάθε τμήμα απαιτούνται ως δεδομένα εισαγωγής. Οι πειραματικές μέθοδοι (Howard et al., 1978) και οι μέθοδοι υπολογισμού (Lyman et al., το 1982) είναι διαθέσιμοι για τον καθορισμό αυτών των σταθερών ρυθμών σε ποικίλα μέσα. Οι συγκεκριμένες πληροφορίες για τους ρυθμούς και τις οδούς του μετασχηματισμού για τις μεμονωμένες χημικές ουσίες πρέπει να ληφθούν άμεσα από τους πειραματικούς προσδιορισμούς ή να προέλθουν έμμεσα από τις πληροφορίες για τις χημικές ουσίες που είναι δομικά

παρόμοιες. Όπως σημειώνεται παραπάνω, οι ποσοτικές εκτιμήσεις είναι δύσκολο να εξαχθούν για τις κατηγορίες ενώσεων για τις οποίες λείπουν τα εμπειρικά στοιχεία. Οι σταθεροί ρυθμοί μετασχηματισμού είναι ίσως οι πιο αβέβαιες παράμετροι στο μοντέλο CalTOX και κατατάσσονται στην κατηγορία αβεβαιότητας C_{Ve} εκτός και αν είναι διαθέσιμα συγκεκριμένα στοιχεία για την περιοχή και τις χημικές ουσίες.

3.6.2 ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΠΕΡΙΟΧΗΣ

Επειδή είναι συχνά μη πρακτικό να αναπτυχθούν λεπτομερή σύνολα παραμέτρων για περιοχές που περιβάλλουν έναν μεγάλο αριθμό εγκαταστάσεων, έχουν αναπτυχθεί σύνολα στοιχείων περιοχών που είναι αντιπροσωπευτικά μιας περιοχής. Οι τύποι των στοιχείων που απαιτούνται για να κατασκευαστεί ένα σύνολο στοιχείων μιας περιοχής περιλαμβάνουν **i)** μετεωρολογικά στοιχεία, όπως η μέση ετήσια ταχύτητα του αέρα, οι ταχύτητες εναπόθεσης, η θερμοκρασία του αέρα και το βάθος του στρώματος μίξης, **ii)** υδρολογικά στοιχεία, όπως οι ετήσιες βροχοπτώσεις, η απορροή, η διήθηση του εδάφους, η φόρτιση των υπόγειων νερών, το βάθος του επιφανειακού νερού και τα φορτία των ιζημάτων και **iii)** ιδιότητες του εδάφους, όπως το ειδικό βάρος, το πορώδες, η περιεκτικότητα σε νερό, ρυθμοί διάβρωσης και το βάθος της ριζώδης-ζώνης. Στον **πίνακα 3.4** συνοψίζονται τα στοιχεία της περιοχής που απαιτούνται στις αναλύσεις του CalTOX. Επίσης, σε αυτόν τον πίνακα απαριθμούνται οι κατηγορίες του συντελεστή διασποράς που συνδέονται με την μεταβλητότητα και την αβεβαιότητα αυτών των στοιχείων.

Πίνακας 3.4: Ο κατάλογος των ιδιοτήτων περιοχής που χρησιμοποιούνται για την πραγματοποίηση περιβαλλοντικών αναλύσεων μεταφοράς και μετασχηματισμού.

Ιδιότητες Περιοχής	Σύμβολο	CV ^a
Μολυσμένη περιοχή (m ²)	Area	n/a
Μέση ετήσια ιζηματοποίηση (m/d)	rain	c
Ροή επιφανειακού νερού στην περιοχή (m/d)	inflow	n/a
Απορροή επιφάνειας εδάφους (m/d)	runoff	c
Φορτίο ατμοσφαιρικής σκόνης (kg/m ³)	ρb_a	b
Ταχύτητα εναπόθεσης των σωματιδίων του αέρα (m/d)	v_d	b
Μάζα ξηρών φυτών (kg[DM]/m ²)	bio _{inv}	b
Παραγωγή ξηρής μάζας φυτών (kg[DM]/m ² ·d)	bio _{prd}	b
Κλάσμα ξηρής μάζας φυτών	bio _{dm}	b
Πυκνότητα φυτών (kg/m ³)	ρ_p	b
Φορτίο υπόγειου νερού (m/d)	recharge	c
Εξάτμιση από το επιφανειακό νερό (m/d)	evaporate	c
Πάχος του υπέργειου στρώματος του εδάφους (m)	d_g	c
Πυκνότητα σωματιδίων του εδάφους, επιφανειακό στρώμα εδάφους (kg/m ³)	ρs_g	a
Περιεκτικότητα νερού στο επιφανειακό έδαφος (κλάσμα όγκου)	β_g	b
Περιεκτικότητα αέρα στο επιφανειακό έδαφος (κλάσμα όγκου)	α_g	b
Διάβρωση του επιφανειακού εδάφους (kg/m ² ·d)	erosion _g	b
Πάχος του στρώματος της ριζώδης-ζώνης του εδάφους (m)	d_s	b
Πυκνότητα σωματιδίων του εδάφους, στρώμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (kg/m ³)	ρs_s	a
Περιεκτικότητα σε νερό του στρώματος της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (κλάσμα όγκου)	β_s	b
Περιεκτικότητα σε αέρα του στρώματος της ριζώδους-ζώνης του εδάφους (κλάσμα όγκου)	α_s	b
Πάχος του υπεδάφους (m)	d_v	d
Περιεκτικότητα σε νερό του υπεδάφους (κλάσμα όγκου)	β_v	b
Πυκνότητα σωματιδίων του εδάφους, υπεδάφος (kg/m ³)	ρs_v	a
Περιεκτικότητα σε αέρα του υπεδάφους (κλάσμα όγκου)	α_v	b
Κλάσμα της έκτασης της περιοχής στο επιφανειακό έδαφος	f_{arw}	b

Πίνακας 3.4 (συνέχεια): Ο κατάλογος των ιδιοτήτων περιοχής που χρησιμοποιούνται για την πραγματοποίηση περιβαλλοντικών αναλύσεων μεταφοράς και μετασχηματισμού.

Ιδιότητες Περιοχής	Σύμβολο	CV ^a
Μέσο βάθος των επιφανειακών υδάτων (m)	d_w	c
Αιωρούμενο ιζημα στο επιφανειακό νερό (kg/m^3)	ρ_{b_w}	c
Εναπόθεση αιωρούμενου ιζήματος ($\text{kg/m}^2/\text{d}$)	Deposit	b
Πάχος του στρώματος του ιζήματος (m)	d_d	c
Πυκνότητα των στερεών υλικών στο ιζημα (kg/m^3)	ρ_{s_d}	a
Πορώδες του ιζήματος	β_d	b
Ρυθμός αιώρησης του ιζήματος ($\text{kg/m}^2/\text{d}$)	resuspend	d
Θερμοκρασίας περιβαλλοντικού αέρα (K)	T	a
Ρεύμα επιφανειακού νερού (m/d)	current _w	c
Κλάσμα οργανικού άνθρακα στο επιφανειακό έδαφος	f_{ocg}	c
Κλάσμα οργανικού άνθρακα στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους	f_{ocs}	c
Κλάσμα οργανικού άνθρακα στο υπέδαφος	f_{ocv}	c
Κλάσμα οργανικού άνθρακα στο ιζημα	f_{ocd}	c
Πάχος οριακού στρώματος στον αέρα πάνω από την επιφάνεια (m)	δ_{ag}	b
Μέση ετήσια ταχύτητα του ανέμου (m/d)	v_w	b

^a: οι κατηγορίες του συντελεστή διακύμανσης είναι οι ακόλουθες, (a) CV 0.1 ή λιγότερο, (b) CV μεταξύ 0.1 και 0.3, (c) CV μεταξύ 0.3 και 3, (d) CV μεταξύ 3 και 10 και (e) CV μεταξύ 10 και 15.

3.7 ΡΥΘΜΟΣ-ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ, ΡΥΘΜΟΣ-ΑΠΩΛΕΙΩΝ ΚΑΙ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΚΕΡΔΟΥΣ-ΑΠΩΛΕΙΑΣ

Οι δυναμικές και μόνιμης κατάστασης εξισώσεις που περιγράφουν τα κέρδη και τις απώλειες σε κάθε ένα από τα επτά τμήματα εκφράζονται στην γενική μορφή, η οποία καθορίζεται από την **εξίσωση 3.6**, στις **εξισώσεις 3.63** έως **3.69** παρακάτω. Ο **πίνακας 3.1** απαριθμεί τα κέρδη και τις απώλειες που εξετάζονται για κάθε τμήμα. Επιλύονται οι εξισώσεις για το περιεχόμενο (και την συγκέντρωση) σε κάθε τμήμα με την εξισορρόπηση των απωλειών και των κερδών που καθορίζουν το μοριακό περιεχόμενο σε κάθε τμήμα της μολυσμένης περιοχής.

$$L_a \cdot N_a = S_a + T_{pa} \cdot N_p + T_{ga} \cdot N_g + T_{wa} \cdot N_w \quad (\text{αερας}) \quad (3.63)$$

$$L_p \cdot N_p = T_{ap} \cdot N_a + T_{sp} \cdot N_s \quad (\text{φυτα}) \quad (3.64)$$

$$L_g \cdot N_g = S_g + T_{ag} \cdot N_a + T_{sg} \cdot N_s \quad (\text{επιφανειακο εδαφος}) \quad (3.65)$$

$$\frac{dN_s}{dt} = -L_s \cdot N_s + T_{gs} \cdot N_g \quad (\text{ριζωδης - ζωνη}) \quad (3.66)$$

$$\frac{dN_v}{dt} = -L_v \cdot N_v + T_{sv} \cdot N_s \quad (\text{υπεδαφος}) \quad (3.67)$$

$$L_w \cdot N_w = S_w + T_{aw} \cdot N_a + T_{gw} \cdot N_g + T_{dw} \cdot N_d \quad (\text{επιφανειακο νερο}) \quad (3.68)$$

$$L_d \cdot N_d = T_{wd} \cdot N_w \quad (\text{ιζημα}) \quad (3.69)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις τα N 's αντιπροσωπεύουν το περιεχόμενο των τμημάτων και οι T_{ij} ($i, j = a, p, g, s, v, w, \text{ ή } d$) είναι σταθερές ρυθμού μεταφοράς, με μονάδες day^{-1} , οι οποίες εκφράζουν το κλάσμα ανά μονάδα χρόνου του περιεχομένου του τμήματος i που μεταφέρεται στο τμήμα j . Οι συντμήσεις των τμημάτων είναι a για τον αέρα, p για τα φυτά, g για το επιφανειακό έδαφος, s για την ριζώδη-ζώνη του εδάφους, v για το υπέδαφος, w για το επιφανειακό νερό και d για τα ιζήματα. Το γινόμενο του όρου N και του όρου T είναι ο ρυθμός αλλαγής του περιεχομένου σε mol/d . Το γινόμενο $L_i \cdot N_i$ αντιπροσωπεύει όλες τις απώλειες από το τμήμα i , σε mol/d . Οι όροι S_a, S_g, S_w , στις εξισώσεις 3.63, 3.65 και 3.68 είναι οι ρυθμοί εισαγωγής του μολυσματικού παράγοντα στα τμήματα του αέρα, της επιφάνειας του εδάφους και του επιφανειακού νερό, σε mol/d .

Στα παρακάτω τμήματα, καθορίζονται οι σταθερές των ρυθμών μεταφοράς με βάση τις ιδιότητες της περιοχής, χημικές ιδιότητες, ικανότητες fugacity και άλλες παράμετροι που χρησιμοποιούνται για να τις κατασκευάσουν καθώς και οι σταθερές των ρυθμών απωλειών με βάση τις σταθερές του ρυθμού μεταφοράς και μετασχηματισμού.

Όσον αφορά την fugacity, η ισορροπία σε mol/d εκφράζεται ως απώλεια από ένα τμήμα i και μεταφορά σε ένα τμήμα j με την μορφή:

$$loss = Area \cdot v_{ij} \cdot Z_{ik} \cdot f_i \quad (3.70)$$

όπου

Area: η περιοχή στην οποία εμφανίζεται η ανταλλαγή μάζας, σε m²
 v_{ij} : η ταχύτητα μετακίνησης ή διάχυσης από το i στο j τμήμα στο οριακό στρώμα ανταλλαγής
 Z_{ik} : η ικανότητα fugacity της κινούμενης φάσης k από το i προς το j τμήμα
 f_i : αντιπροσωπεύει την fugacity του τμήματος i

Η εξίσωση 3.70 μπορεί επίσης να γραφτεί ως εξής:

$$loss = T_{ij} \cdot N_i \quad (3.71)$$

όπου

$$N_i = Z_i \cdot f_i \cdot V_i \quad (3.72)$$

$$T_{ij} = \frac{area \cdot v_{ij}}{V_i} \cdot \frac{Z_{ik}}{Z_i} = \frac{v_{ij}}{d_i} \cdot \frac{Z_{ik}}{Z_i} \quad (3.73)$$

όπου

V_i : ο όγκος των τμημάτων
 d_i : το βάθος ή το πάχος των τμημάτων
 Z_i : η συνολική ικανότητα fugacity του τμήματος i

Αυτή είναι η γενική προσέγγιση που χρησιμοποιείται στις παρακάτω παραγράφους για να εξαχθούν οι σταθερές του ρυθμού μεταφοράς.

3.7.1 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΗΣ ΧΑΜΗΛΟΤΕΡΗΣ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΑΣ Ή ΤΟΥ ΑΕΡΑ

Στο CalTOX, το τμήμα του αέρα αντιπροσωπεύεται από ένα απλό “box”, στο οποίο οι απώλειες περιλαμβάνουν την εναπόθεση στο έδαφος, στα φυτά και στο επιφανειακό νερό, απώλειες λόγω μεταφοράς και απώλειες μετασχηματισμού. Η συγκέντρωση σε αυτό το τμήμα υποτίθεται ότι είναι σε σταθερή κατάσταση σχετικά με τα βαθύτερα τμήματα του εδάφους, των οποίων το περιεχόμενο αλλάζει με το χρόνο, αλλά οι σταθερές του ρυθμού για την αλλαγή του περιεχομένου στα τμήματα του εδάφους είναι αρκετά μικρές έτσι ώστε τα άλλα τμήματα να συμπεριφέρονται σαν να

είναι σε σταθερή κατάσταση σε σχέση με αυτά τα τμήματα του εδάφους. Στο “box” μοντέλο που χρησιμοποιείται για τον αέρα, το περιεχόμενο, N_a , σε mol, του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα του αέρα περιγράφεται από την **εξίσωση 3.63**. Το L_a είναι το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα του αέρα:

$$L_a = T_{ap} + T_{ag} + T_{aw} + T_{ao} + R_a \quad (3.74)$$

όπου

$T_{pa} \cdot N_p$:	τα κέρδη από τα φυτά, mol/d
$T_{ga} \cdot N_g$:	τα κέρδη από το επιφανειακό έδαφος, mol/d
$T_{wa} \cdot N_w$:	τα κέρδη από το νερό, mol/d
T_{ga} :	η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια εναπόθεσης στο επιφανειακό έδαφος, day ⁻¹
T_{ap} :	η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια εναπόθεσης στα φυτά, day ⁻¹
T_{aw} :	η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια εναπόθεσης στο νερό, day ⁻¹
T_{ao} :	η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μεταφοράς, day ⁻¹
R_a :	η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day ⁻¹

Σε σταθερή κατάσταση και ελλείψει της καθαρής εναπόθεσης και των απωλειών χημικής αντίδρασης, ο όγκος V_a της **εξίσωσης 3.68** και η πηγή ρύπανσης, S_a σε mol/d, δίνονται από:

$$C_{air} = N_a / V_a = \frac{c \cdot S_a}{Area \cdot v_w} \quad (3.75)$$

όπου

c :	μια αδιάστατη σταθερά αναλογίας
$Area$:	η έκταση της περιοχής που μοντελοποιείται
v_w :	η μακροπρόθεσμη μέση ταχύτητα του αέρα σε m/d

Αυτό υπονοεί ότι το αντίστροφο της σταθεράς του ρυθμού, T_{ao} , είναι χρόνος παραμονής λόγω της μετακίνησης και δίνεται από την έκφραση, $c \cdot d_a / v_w$, όπου d_a είναι το ατμοσφαιρικό ύψος μίξης. Με βάση ένα μοντέλο για τις πηγές της περιοχής, που αναπτύχθηκε από τον Turner (1970), η σταθερά c μπορεί να υπολογιστεί ως: $4.3 \cdot \sqrt{Area} / d_a$, όπου \sqrt{Area} είναι το διατμηματικό μήκος μιας υποτιθέμενης τετραγωνικής περιοχής που περιέχει την πηγή S_a . Ύστερα από τις κατάλληλες

αντικαταστάσεις εξάγεται η ακόλουθη έκφραση για την σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετακίνησης στο τμήμα του αέρα:

$$T_{ao} = \frac{0.23 \cdot v_w}{\sqrt{Area}} \quad (3.76)$$

Η σταθερά του ρυθμού, T_{ag} , υπολογίζει την ολική διάχυση, την διάβρωση του εδάφους από το νερό της βροχής και τις απώλειες από την εναπόθεση των σωματιδίων από τον αέρα στο επιφανειακό έδαφος.

$$T_{ag} = (1 - f_{arw}) \cdot \frac{\left(Y_{ag} + rain \cdot Z_{water} + v_d \cdot Z_{ap} \cdot \frac{\rho b_a}{\rho s_g} \right)}{(Z_a \cdot d_a)} \quad (3.77)$$

Εάν η μοναδιαία έκταση της περιοχής είναι μεγαλύτερη ή ίση από $6 \cdot 10^8 \text{ m}^2$, τότε το βάθος μίξης του τμήματος του αέρα, d_a , είναι 700 m, ενώ εάν η περιοχή είναι λιγότερη από $6 \cdot 10^8 \text{ m}^2$, τότε η d_a είναι $0.22 \cdot \left(\sqrt{Area} \right)^{0.8}$ (Hanna et al., 1982). Η καθαρή διάχυση από τον αέρα του επιφανειακού εδάφους δίνεται από: $Y_{ag}(f_a - f_g)$. Κατά συνέπεια, το γινόμενο $Y_{ag}f_a$ είναι η ολική διάχυση από τον αέρα στο επιφανειακό έδαφος $Y_{ag}f_g$ είναι η ολική διάχυση από το επιφανειακό έδαφος στον αέρα. Οι άλλες παράμετροι σε αυτήν την έκφραση παρατίθενται στον **πίνακα 3.4** ή έχουν καθοριστεί προηγουμένως.

Η σταθερά του ρυθμού, T_{aw} , υπολογίζει την ολική διάχυση, την διάβρωση του εδάφους από το νερό της βροχής και τις απώλειες από την εναπόθεση των σωματιδίων από τον αέρα στο επιφανειακό νερό και έχει την μορφή:

$$T_{aw} = f_{arw} \cdot \frac{\left(Y_{aw} + rain \cdot Z_{water} + v_d \cdot Z_{ap} \cdot \frac{\rho b_a}{\rho s_g} \right)}{(Z_a \cdot d_a)} \quad (3.78)$$

Η σταθερά του ρυθμού, T_{ap} , εξάγεται στην επόμενη παράγραφο.

3.7.2 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΩΝ ΦΥΤΩΝ

Το τμήμα των φυτών αντιπροσωπεύει την βλάστηση, η οποία είναι το σημαντικότερο κλάσμα μάζας της χερσαίας βιόσφαιρας. Το τμήμα των φυτών αλληλεπιδρά με τα τμήματα του αέρα και της ριζώδους-ζώνης του εδάφους. Το περιεχόμενο είναι σε σταθερή κατάσταση σχετικά με τα βαθύτερα τμήματα του εδάφους και το περιεχόμενό του, N_p , σε mol, περιγράφεται από την **εξίσωση 3.64**. Το L_p είναι το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα των φυτών:

$$L_p = T_{pa} + T_{ps} + R_p \quad (3.79)$$

όπου

T_{pa} : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω της ανταλλαγής με τον αέρα, day^{-1}

T_{ps} : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω της ανταλλαγής με την ριζώδη-ζώνη του εδάφους, day^{-1}

R_p : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες μετασχηματισμού στα φυτά, day^{-1}

Τα γινόμενα $T_{ap} \cdot N_a$ και $T_{sp} \cdot N_s$ είναι τα κέρδη από τα τμήματα του αέρα και της ριζώδους-ζώνης του εδάφους, mol/d.

Οι εκφράσεις σχετικά με τις ανταλλαγές μεταξύ των φυτών και του αέρα και μεταξύ των φυτών και του εδάφους εξάγονται για τις μη-ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες με την απαίτηση ότι η fugacity των φυτών είναι ο μέσος όρος των fugacities στον αέρα και το έδαφος. Η βάση για αυτήν την υπόθεση περιγράφεται προηγουμένως. Αυτή η απαίτηση οδηγεί στις ακόλουθες εκφράσεις για τις μεταφορές μεταξύ του αέρα και των φυτών και μεταξύ του εδάφους και των φυτών:

$$T_{pa} = 0.5 \quad (3.80)$$

$$T_{ps} = 0.01 \quad (3.81)$$

$$T_{sp} = \frac{(T_{pa} + T_{ps}) \cdot Z_p \cdot V_p}{2 \cdot Z_s \cdot V_s} \quad (3.82)$$

$$T_{ap} = \frac{(T_{pa} + T_{ps}) \cdot Z_a \cdot V_a}{2 \cdot Z_p \cdot V_p} \quad (3.83)$$

Εκφράσεις σχετικά με τις ανταλλαγές μεταξύ των φυτών και του αέρα και μεταξύ των φυτών και του εδάφους εξάγονται για τις ιοντικές οργανικές χημικές ουσίες και τις ανόργανες χημικές ουσίες με την απαίτηση ότι η fugacity των φυτών είναι ίση με την fugacity του εδάφους και τα αποτελέσματα για τις μεταφορές μεταξύ του αέρα και των φυτών και μεταξύ του εδάφους και των φυτών παρουσιάζονται στις ακόλουθες εκφράσεις:

$$T_{ap} = 0 \quad (3.84)$$

$$T_{pa} = 0 \quad (3.85)$$

$$T_{sp} = \frac{evapotrans \cdot Z_{water}}{2 \cdot Z_s \cdot d_s} \quad (3.86)$$

$$T_{ps} = T_{sp} \cdot \frac{Z_s \cdot V_s}{Z_{water} \cdot V_p} \quad (3.87)$$

$$evapotrans = rain \cdot (1 - f_{arw}) - recharge - runoff \quad (3.88)$$

3.7.3 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΟΥ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΚΟΥ ΕΔΑΦΟΥΣ

Το τμήμα του επιφανειακού εδάφους είναι ένα άλλο τμήμα που θεωρείται ότι είναι σε σταθερή κατάσταση σχετικά με τα βαθύτερα τμήματα του εδάφους. Αντιπροσωπεύει το λεπτό στρώμα της επιφάνειας του εδάφους στο οποίο οι απώλειες περιλαμβάνουν την διάχυση στον αέρα, την διάχυση στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, την διήθηση στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, την απορροή στο επιφανειακό νερό και τις διαδικασίες μετασχηματισμού. Το περιεχόμενο, N_g , σε mol, του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα του επιφανειακού εδάφους περιγράφεται από την **εξίσωση 3.65**. Το L_g είναι το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα του επιφανειακού εδάφους:

$$L_g = T_{ga} + T_{gs} + T_{gw} + R_g \quad (3.89)$$

Τα γινόμενα $T_{ag} \cdot N_a$ και $T_{sg} \cdot N_s$ είναι τα κέρδη από τα τμήματα του αέρα και της ριζώδης-ζώνης του εδάφους, mol/d. Οι T_{ga} , T_{gs} , και T_{gw} είναι οι σταθερές του ρυθμού για τις απώλειες αιώρησης στον αέρα, για τις συνολικές απώλειες διάχυσης στον αέρα και στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, για τις απώλειες μετακίνησης λόγω της διήθηση υδάτων από την βροχή και για τις απώλειες απορροής στο επιφανειακό νερό, day^{-1} και R_g είναι η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day^{-1} . Αυτές οι σταθερές του ρυθμού απώλειας δίνονται από τις εξισώσεις:

$$T_{ga} = \frac{Y_{ag} + v_d \cdot \rho b_a \cdot \frac{Z_{gp}}{\rho s_g}}{Z_g \cdot d_g} \quad (3.90)$$

$$T_{gs} = \frac{\text{recharge} \cdot Z_{\text{water}} + Y_{sg}}{Z_g \cdot d_g} \quad (3.91)$$

$$T_{gw} = \frac{\text{runoff} \cdot Z_{\text{water}} + \text{erosion} \cdot \frac{Z_{gp}}{\rho s_g}}{Z_g \cdot d_g} \quad (3.92)$$

Η **εξίσωση 3.90** απεικονίζει την υπόθεση ότι η αιώρηση των σωματιδίων του εδάφους είναι, κατά μέσον όρο, ίση με την εναπόθεση. Οι άλλες παράμετροι σε αυτές τις εκφράσεις παρατίθενται στον **πίνακα 3.4** ή έχουν καθοριστεί προηγουμένως.

3.7.4 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΗΣ ΡΙΖΩΔΟΥΣ-ΖΩΝΗΣ ΤΟΥ ΕΔΑΦΟΥΣ

Το τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους δεν απαιτείται να είναι σε σταθερή κατάσταση και μοντελοποιείται ως τμήμα με ένα δυναμικό περιεχόμενο. Αντιπροσωπεύει το στρώμα του εδάφους στο οποίο οι απώλειες περιλαμβάνουν την συνολική διάχυση στο επιφανειακό έδαφος, την λήψη μέσω των φυτών, την διήθηση στο υπέδαφος και τις διαδικασίες μετασχηματισμού. Οι πηγές μόλυνσης στο τμήμα αυτό ορίζονται ως αρχικές. Το περιεχόμενο, N_s σε mol, του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους περιγράφεται από την **εξίσωση 3.66**. Το L_s είναι

το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας στο τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους:

$$L_s = T_{sp} + T_{sg} + T_{sv} + R_s \quad (3.93)$$

όπου

- T_{sp} : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λήψεις στα φυτά, day^{-1}
 T_{sg} : η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια ολικής διάχυσης στο επιφανειακό έδαφος, day^{-1}
 T_{sv} : η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια μετακίνησης στο υπέδαφος λόγω της διήθησης των υδάτων της βροχής, day^{-1}
 R_s : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day^{-1}

Το γινόμενο $T_{gs} \cdot N_g$ είναι το κέρδος από την διάχυση και την διήθηση από το τμήμα του επιφανειακού εδάφους, mol/d . Αυτές οι σταθερές του ρυθμού απώλειας δίνονται από τις εξισώσεις 3.82 ή 3.86 παραπάνω και από:

$$T_{sg} = \frac{Y_{sg}}{Z_s \cdot d_s} \quad (3.94)$$

$$T_{sv} = \frac{\text{recharge} \cdot Z_{\text{water}}}{Z_s \cdot d_s} \quad (3.95)$$

Οι άλλες παράμετροι σε αυτές τις εκφράσεις παρατίθενται στον πίνακα 3.4 ή έχουν καθοριστεί προηγουμένως.

3.7.5 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΟΥ ΥΠΕΔΑΦΟΥΣ

Το τμήμα του υπεδάφους είναι επίσης ένα δυναμικό τμήμα. Αντιπροσωπεύει το στρώμα του εδάφους κάτω από την ριζώδη-ζώνη και πάνω από το υπόγειο νερό και στο οποίο η ροή του νερού είναι κυρίως κάθετη. Στο υπέδαφος, οι απώλειες περιλαμβάνουν τις διαδικασίες της διήθησης στο υπόγειο νερό και του μετασχηματισμού. Οι πηγές μόλυνσης στο τμήμα αυτό ορίζονται ως αρχικές. Το περιεχόμενο, N_v σε mol , του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα του υπεδάφους περιγράφεται από την εξίσωση 3.67. Η L_v είναι το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα του υπεδάφους:

$$L_v = T_{vq} + R_v \quad (3.96)$$

όπου

- T_{vq} : η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια μετακίνησης στην ζώνη του υπόγειου νερού λόγω της διήθησης των υδάτων της βροχής, day^{-1}
 R_v : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day^{-1}

Το γινόμενο $T_{sv} \cdot N_s$ είναι το κέρδος από την διήθηση από το τμήμα της ριζώδους-ζώνης του εδάφους, mol/d . Αυτή η σταθερά του ρυθμού απώλειας δίνεται από:

$$T_{sv} = \frac{\text{recharge} \cdot Z_{\text{water}}}{Z_v \cdot d_v} \quad (3.97)$$

Οι παράμετροι σε αυτήν την έκφραση παρατίθεται στον **πίνακα 3.4** ή έχει καθοριστεί προηγουμένως.

3.7.6 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΟΥ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΚΟΥ ΝΕΡΟΥ

Το τμήμα του επιφανειακού νερού είναι ένα τμήμα σταθερής κατάστασης. Αντιπροσωπεύει σώματα ύδατος στα οποία οι απώλειες περιλαμβάνουν την διάχυση στον αέρα, την διάχυση στο ίζημα, την εναπόθεση στο ίζημα, την εκροή σε άλλα υδάτινα σώματα και τις διαδικασίες μετασχηματισμού. Το περιεχόμενο, N_w , σε mol , του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα του επιφανειακού νερού περιγράφεται από την **εξίσωση 3.68**. Η L_w είναι το άθροισμα όλων των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα του επιφανειακού εδάφους:

$$L_w = T_{wa} + T_{wd} + T_{wo} + R_w \quad (3.98)$$

όπου

- T_{wa} : η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια της συνολικής διάχυσης στον αέρα, day^{-1}
 T_{wd} : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες της εναπόθεσης και της συνολικής διάχυσης στο ίζημα, day^{-1}
 T_{wo} : η σταθερά του ρυθμού για την απώλεια λόγω εκροής, day^{-1}
 R_w : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day^{-1}

Το γινόμενο $T_{aw} \cdot N_a$ είναι το κέρδος από την διάχυση και την εναπόθεση από το τμήμα του αέρα, mol/d. Το γινόμενο $T_{gw} \cdot N_g$ είναι το κέρδος από την απορροή από το τμήμα του επιφανειακού εδάφους, mol/d και το γινόμενο $T_{dw} \cdot N_d$ είναι το κέρδος από την διάχυση και την εναπόθεση από το τμήμα του ιζήματος, mol/d. Οι σταθερές του ρυθμού απώλειας δίνονται από:

$$T_{wa} = \frac{Y_{aw}}{Z_w \cdot d_w} \quad (3.99)$$

$$T_{wd} = \frac{Y_{wd} + deposit \cdot \frac{Z_{dp}}{\rho S_d}}{Z_w \cdot d_w} \quad (3.100)$$

$$T_{wo} = outflow \cdot \frac{\left[Z_{water} + \frac{Z_{wp} \cdot \rho b_w}{\rho S_d} \right]}{Z_w \cdot d_w \cdot f_{arw}} \quad (3.101)$$

$$outflow = inflow + runoff + rain \cdot (f_{arw}) - evaporate \quad (3.102)$$

Οι παράμετροι στις παραπάνω εκφράσεις παρατίθεται στον **πίνακα 3.4** ή έχουν καθοριστεί προηγουμένως.

3.7.7 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΟΥ ΙΖΗΜΑΤΟΣ

Το τμήμα του ιζήματος είναι ένα τμήμα σταθερής κατάστασης. Αντιπροσωπεύει το στρώμα του ιζήματος στο κατώτατο σημείο μιας στήλης επιφανειακού νερού. Σε αυτό το τμήμα, οι απώλειες περιλαμβάνουν την διάχυση στο νερό, την αιώρηση των σωματιδίων του ιζήματος, τον ενταφιασμό του ιζήματος και τις διαδικασίες μετασχηματισμού. Το περιεχόμενο, N_d , σε mol, του μολυσματικού παράγοντα στο τμήμα του ιζήματος περιγράφεται από την **εξίσωση 3.69**. Η L_d είναι το άθροισμα των σταθερών του ρυθμού απώλειας από το τμήμα του επιφανειακού εδάφους:

$$L_d = T_{dw} + R_d \quad (3.103)$$

όπου

- T_{dw} : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες της συνολικής διάχυσης και της αιώρησης των σωματιδίων στο νερό, day^{-1}
 R_d : η σταθερά του ρυθμού για τις απώλειες λόγω μετασχηματισμού, day^{-1}

Το γινόμενο $T_{wd} \cdot N_w$ είναι το κέρδος από την διάχυση και την εναπόθεση από το τμήμα του νερού, mol/d. Οι σταθερές του ρυθμού απώλειας στο νερό δίνονται από:

$$T_{dw} = \frac{Y_{wd} + resuspend \cdot \frac{Z_{dp}}{\rho S_d}}{Z_d \cdot d_d} \quad (3.104)$$

Οι παράμετροι στις παραπάνω εκφράσεις παρατίθεται στον **πίνακα 3.4** ή έχουν καθοριστεί προηγουμένως.

3.7.8 ΤΟ ΤΜΗΜΑ ΤΩΝ ΥΠΟΓΕΙΩΝ ΥΔΑΤΩΝ

Το νερό στο τμήμα των υπόγειων υδάτων υποτίθεται ότι έχει την ίδια συγκέντρωση μολυσματικού παράγοντα με το προϊόν διήθησης από το κατώτατο σημείο του υπεδάφους. Αυτό σημαίνει ότι η συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα στα υπόγεια ύδατα δίνεται από:

$$C_q = Z_{water} \cdot f_v \quad (3.105)$$

όπου

- C_q : η συγκέντρωση του μολυσματικού παράγοντα από την διήθηση στην ζώνη του υπόγειου ύδατος, mol/m^3
 Z_{water} : η ικανότητα fugacity του καθαρού νερού, $\text{mol/m}^3 \cdot \text{Pa}$
 f_v : η fugacity του υπεδάφους, από το οποίο προέρχεται η διήθηση, Pa

3.7.9 ΧΡΟΝΙΚΑ ΕΞΑΡΤΗΜΕΝΗ ΛΥΣΗ ΓΙΑ ΤΟ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΤΩΝ ΤΜΗΜΑΤΩΝ

Προκειμένου να αναπτυχθεί μια λύση “κλειστής-μορφής” για το χρονικά εξαρτημένο περιεχόμενο του μολυσματικού παράγοντα στα επτά τμήματα που

περιλαμβάνονται στο μοντέλο χρησιμοποιήθηκαν οι εξισώσεις 3.63 έως 3.69 και οι εκθετικές μέθοδοι. Αυτή η λύση δίνεται από:

$$N_v(t) = a_7 \cdot \exp(-L_v \cdot t) + a_8 \cdot \exp(-\lambda_1 \cdot t) + b_5 \quad (3.106)$$

$$N_s(t) = a_6 \cdot \exp(-\lambda_1 \cdot t) + b_4 \quad (3.107)$$

$$N_g(t) = a_5 \cdot N_s(t) + b_3 \quad (3.108)$$

$$N_a(t) = a_3 \cdot N_g(t) + a_4 \cdot N_s(t) + b_2 \quad (3.109)$$

$$N_w(t) = a_1 \cdot N_a(t) + a_2 \cdot N_g(t) + b_1 \quad (3.110)$$

$$N_d(t) = \frac{T_{wd}}{L_d} \cdot N_w(t) \quad (3.111)$$

$$N_p(t) = \frac{T_{ap}}{L_p} \cdot N_a(t) + \frac{T_{gp}}{L_p} \cdot N_g(t) + \frac{T_{sp}}{L_p} \cdot N_s(t) \quad (3.112)$$

όπου

$$\lambda_1 = L_s - T_{gs} \cdot a_5 \quad (3.113)$$

$$a_8 = \frac{T_{sv} \cdot a_6}{(L_v - \lambda_1)} \quad (3.114)$$

$$a_7 = N_v(0) - \frac{T_{sv} \cdot a_6}{(L_v - \lambda_1)} - \frac{T_{sv} \cdot b_4}{L_v} \quad (3.115)$$

$$a_6 = N_s(0) - \frac{T_{gs} \cdot b_3}{\lambda_1} \quad (3.116)$$

$$a_5 = \frac{\left[T_{ag} \cdot a_4 + \frac{T_{ag} \cdot T_{ga}}{L_p} \cdot a_4 + \frac{T_{pg} \cdot T_{sp}}{L_p} + T_{sg} \right]}{\left[L_g - T_{ag} \cdot a_3 - \frac{T_{pg} \cdot T_{ap}}{L_p} \cdot a_3 - \frac{T_{pg} \cdot T_{gp}}{L_p} \right]} \quad (3.117)$$

$$a_4 = \frac{\left[\frac{T_{pa} \cdot T_{sp}}{L_p} \right]}{\left[L_a - \frac{T_{pa} \cdot T_{ap}}{L_p} \cdot a_3 - T_{wa} \cdot a_1 \right]} \quad (3.118)$$

$$a_3 = \frac{\left[\frac{T_{pa} \cdot T_{gp}}{L_p} + T_{wa} \cdot a_2 + T_{ga} \right]}{\left[L_a - \frac{T_{pa} \cdot T_{ap}}{L_p} - T_{wa} \cdot a_1 \right]} \quad (3.119)$$

$$a_2 = \frac{T_{gw}}{\left[L_w - \frac{T_{wd} \cdot T_{dw}}{L_d} \right]} \quad (3.120)$$

$$a_1 = \frac{T_{aw}}{\left[L_w - \frac{T_{wd} \cdot T_{dw}}{L_d} \right]} \quad (3.121)$$

$$b_5 = \frac{T_{sv} \cdot b_4}{L_v} \quad (3.122)$$

$$b_4 = \frac{T_{gs} \cdot b_3}{\lambda_1} \quad (3.123)$$

$$b_3 = \frac{\left[S_g + T_{ag} \cdot b_2 + \frac{T_{pg} \cdot T_{ap}}{L_p} \cdot b_2 \right]}{\left[L_g - T_{ag} \cdot a_3 - \frac{T_{pg} \cdot T_{ap}}{L_p} \cdot a_3 - \frac{T_{pg} \cdot T_{gp}}{L_p} \right]} \quad (3.124)$$

$$b_2 = \frac{\left[S_a + T_{wa} \cdot b_1 \right]}{\left[L_a - \frac{T_{pa} \cdot T_{ap}}{L_p} \cdot a_3 - T_{wa} \cdot a_1 \right]} \quad (3.125)$$

$$b_1 = \frac{S_w}{\left[L_w - \frac{T_{wd} \cdot T_{dw}}{L_d} \right]} \quad (3.126)$$

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΟΔΩΝ

4.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ο στόχος του μοντέλου CalTOX είναι η ποσοτικοποίηση της συγκέντρωσης μιας χημικής ουσίας στο έδαφος η οποία μπορεί να προκαλέσει δυσμενές επιπτώσεις στην ανθρώπινη υγεία. Αυτή η σχέση επιτρέπει τον υπολογισμό του θεωρητικού κινδύνου για μια δεδομένη συγκέντρωση του εδάφους ή τον υπολογισμό του επιπέδου απολύμανσης του εδάφους βασισμένο στην ανθρώπινη υγεία δεδομένου ενός αποδεκτού επιπέδου κινδύνου.

Το μοντέλο CalTOX αποτελείται από δύο σημαντικά μοντέλα, μέσα στα οποία υπάρχουν διάφορα άλλα μοντέλα. Το **κεφάλαιο 3** περιγράφει το πρώτο μοντέλο, την δυναμική μεταφορά μεταξύ των πολυμέσων και το μοντέλο μετασηματισμού. Αυτό το μοντέλο καθορίζει πώς η χημική ουσία κινείται από το έδαφος σε άλλα περιβαλλοντικά τμήματα και παρέχει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σχετικά τμήματα. Στο παρόν κεφάλαιο, περιγράφεται η θεωρητική βάση του μοντέλου έκθεσης πολλαπλών οδών. Το μοντέλο έκθεσης αποτελείται από τις εξισώσεις που περιγράφουν την λήψη της χημικής ουσίας μέσω της κατάποσης, της εισπνοής και της επαφής με το δέρμα με το ενδεχομένως μολυσμένο νερό, αέρα, έδαφος και τρόφιμα.

Η έκθεση έχει καθοριστεί προηγουμένως από το U.S. Environmental Protection Agency (EPA) (1988) από την άποψη της επαφής με τα "όρια ανταλλαγής" όπου πραγματοποιείται η απορρόφηση των μολυσματικών παραγόντων (δέρμα, πνεύμονας, γαστροεντερικό σύστημα). Εντούτοις, η πιο πρόσφατη συναίνεση της επιστημονικής κοινότητας (National Research Council, 1991a, 1991b U.S. EPA 1992b) είναι ότι η έκθεση πρέπει να καθορίζεται από την άποψη της επαφής με το ορατό εξωτερικό τμήμα του ανθρώπου. Κάτω από αυτόν τον ορισμό, θεωρούμε ότι το ανθρώπινο σώμα έχει ένα υποθετικό εξωτερικό όριο που χωρίζει τους εσωτερικούς ιστούς διαβίωσης από τις εξωτερικές επιφάνειες. Αυτό το εξωτερικό όριο είναι το δέρμα και οι εισαγωγές στο

σώμα (το στόμα, η μύτη, τραύμα και οπές του δέρματος). Το μοντέλο έκθεσης πολλαπλών οδών που περιγράφεται είναι βασισμένο σε αυτόν τον τελευταίο ορισμό.

Οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο έκθεσης πολλαπλών οδών CalTOX τροποποιούνται ή είναι επεκτάσεις των εξισώσεων που περιγράφονται από το U.S. EPA στο κεφάλαιο 6 του Risk Assessment Guidance for Superfund, τόμος 1. Human Health Evaluation Manual, Part A (RAGS/HHEM, U.S. EPA 1989b).

4.2 ΤΟ ΒΑΣΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ

Οι εξισώσεις για τον υπολογισμό της έκθεσης του ανθρώπινου οργανισμού στις χημικές ουσίες στο περιβάλλον περιγράφονται και συζητούνται παρακάτω.

4.2.1 Η ΕΞΙΣΩΣΗ ΤΗΣ ΕΚΘΕΣΗΣ ΟΠΩΣ ΠΕΡΙΓΡΑΦΕΤΑΙ ΣΤΟ RAGS/HHEM

Στο Εγχειρίδιο Αξιολόγησης Κινδύνου του SUPERFUND/Οδηγός Αποτίμησης Ανθρώπινης Υγείας (RAGS/HHEM) (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-21), παρουσιάζεται η ακόλουθη γενική εξίσωση:

$$I = C \cdot \frac{CR \cdot EFD}{BW} \cdot \frac{1}{AT} \quad (4.1)$$

όπου:

- I: η λήψη χημικής ουσίας μέσω μιας οδού έκθεσης (εισπνοή, κατάποση, επαφή με το δέρμα) σε mg ανά σωματικό βάρος kg ανά ημέρα, δηλαδή mg/kg/d
- C: η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης (όπως, προσωπικός αέρας, νερό κεντρικού δικτύου, γάλα, τρόφιμα, έδαφος), ίσο με το C_{exposure} στις εξισώσεις 4.3 και 4.4
- CR: ο ρυθμός επαφών, το ποσό του μολυσμένου μέσου που έρχεται σε επαφή ανά μονάδα χρόνου ή γεγονός (όπως, λίτρα ανά ημέρα (L/day))
- EFD: η συχνότητα και διάρκεια έκθεσης, περιγράφει πόσο καιρό και πόσο συχνά εμφανίζεται η έκθεση. Μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας δύο όρους ως εξής:
 - EF: η συχνότητα έκθεσης (days/year)
 - ED: η διάρκεια έκθεσης (years)
- BW: το σωματικό βάρος, το μέσο σωματικό βάρος κατά τη διάρκεια της περιόδου έκθεσης(kg)
- AT: ο μέσος όρος χρόνου, περίοδος κατά τη διάρκεια της οποίας η έκθεση υπολογίζεται κατά μέσο όρο (days)

Οι εξισώσεις των οδών λήψης μιας χημικής ουσίας περιγράφονται στο κεφάλαιο 6 του RAGS/HHEM (κατάποση πόσιμου νερού, εισπνοή μολυσμένου αέρα, κ.λ.π.) και βασίζονται σε αυτήν την γενική εξίσωση λήψης.

4.2.2 ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ CalTOX

Η εξίσωση του RAGS/HHEM διαφοροποιείται ελαφρώς για να εξαχθεί μια εναλλακτική γενική εξίσωση έκθεσης που χρησιμοποιείται στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX:

$$I = C \cdot \left[\frac{CR}{BW} \right] \cdot FI \cdot EFD \cdot \frac{1}{AT} \quad (4.2)$$

όπου:

FI: η κλασματική λήψη από τη μολυσμένη πηγή

Οι άλλες μεταβλητές έχουν την ίδια έννοια όπως στην **εξίσωση 4.1**.

Η **εξίσωση 4.2** διαφέρει από την **εξίσωση 4.1** σε τρία σημεία. Κατ' αρχάς, η κλασματική λήψη (FI) εξετάζεται μόνο στις οδούς της κατάποσης εδάφους και τροφίμων στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b), ενώ η κλασματική λήψη εξετάζεται σε όλες τις εξισώσεις έκθεσης του CalTOX. Η κλασματική λήψη διορθώνει την λήψη για το μέρος του μέσου επαφών που είναι μολυσμένο. Παραδείγματος χάριν, εάν μόνο πενήντα τοις εκατό της ημερήσιας λήψης υγρών είναι πιθανό να προέλθουν από το μολυσμένο νερό ύδρευσης, ένα FI 0.5 θα χρησιμοποιούνταν για την ρύθμιση σε εκείνη την περίπτωση. Δεύτερον, το RAGS/HHEM υποθέτει ότι όλες οι παράμετροι στην εξίσωση είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους, ενώ το μοντέλο έκθεσης CalTOX υποθέτει έναν συσχετισμό του ρυθμού επαφών με το σωματικό βάρος και απαιτεί την χρήση μιας αναλογίας μεταξύ του ρυθμού επαφών και του σωματικού βάρους (CR/BW). Παραδείγματος χάριν, οι άνθρωποι βαρέων βαρών καταναλώνουν περισσότερα τρόφιμα από τους ανθρώπους με μικρό βάρος. Η αναλογία CR/BW έχει υπολογιστεί για διάφορους ρυθμούς επαφών και ομάδες ηλικίας. Η τρίτη και σημαντικότερη διαφορά μεταξύ των **εξισώσεων 4.1** και **4.2** είναι ο τρόπος που η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης (C) εξετάζεται

στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) και στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX. Το RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) στην παράγραφο 6.5 παρέχει γενικές οδηγίες για την εκτίμηση των συγκεντρώσεων στα μέσα έκθεσης (αποκαλούμενα ως "συγκεντρώσεις έκθεσης" στο RAGS/HHEM), ενώ το μοντέλο έκθεσης του CalTOX περιγράφει μια ρητή μέθοδο για τον υπολογισμό των συγκεντρώσεων στον εισπνεόμενο αέρα, στο νερό που καταναλώνουμε, στα τρόφιμα, στο έδαφος και στο νερό και στο έδαφος που έρχονται σε επαφή με το δέρμα. Αυτά τα μέσα ορίζονται ως μέσα έκθεσης, επειδή είναι τα μέσα με τα οποία οι άνθρωποι έχουν την επαφή. Τα μέσα έκθεσης είναι ευδιάκριτα από τα μέσα των περιβαλλοντικών τμημάτων. Τα μέσα των περιβαλλοντικών τμημάτων είναι ο υπαίθριος περιβαλλοντικός αέρας επάνω από την περιοχή, το επιφανειακό έδαφος στην περιοχή, η ριζώδης περιοχή του εδάφους, το επιφανειακό νερό και το υπόγειο νερό κάτω από την περιοχή.

Το πλεονέκτημα του υπολογισμού της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας σε ένα μέσο έκθεσης και η χρήση αυτής της συγκέντρωσης, αντί της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό μέσο, είναι ότι η συγκέντρωση στο μέσο έκθεσης παρέχει πιο την λογική και ρεαλιστική βάση για την έκθεση. Στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX, εάν η συγκέντρωση της χημικής ουσίας σε ένα μέσο έκθεσης δεν μετρείται, υπολογίζεται από την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα. Αυτή η προσέγγιση είναι σύμφωνη με το RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b). Παραδείγματος χάριν, το RAGS/HHEM στην παράγραφο 6.5.7, αναφέρεται στις μεθόδους για τον υπολογισμό του ποσού της χημικής ουσίας στον ιστό των ψαριών, το μέσο έκθεσης, από την συγκέντρωση αυτή της χημικής ουσίας στα περιβαλλοντικά μέσα του ιζήματος και νερού και τον υπολογισμό του ποσού της χημικής ουσίας στα φυτά από τον αέρα και το έδαφος χρησιμοποιώντας υπολογιστικές προσεγγίσεις ή διάφορους συντελεστές κατανομής. Στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX, αρχικά, το δυναμικό μοντέλο μεταφοράς και μετασχηματισμού (που περιγράφεται στο **Κεφάλαιο 3**) παρέχει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας όσο αφορά τα περιβαλλοντικά τμήματα: αέρας, επιφανειακό έδαφος, ριζώδης περιοχή του εδάφους, επιφανειακό νερό και υπόγειο νερό. (Στο μοντέλο μεταφορών και μετασχηματισμού, η διήθηση της περιοχής κάτω από τις ρίζες των φυτών είναι η αναπλήρωση για το υπόγειο νερό.) Δεύτερον, ένας παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF), ο οποίος ορίζεται ως η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας

στο μέσο έκθεσης προς την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα, χρησιμοποιείται για να υπολογίσει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας της έκθεσης ή του μέσου επαφής όσον αφορά την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα ή μέσο. Οι εξισώσεις εκφράζονται ως εξής:

$$TF = \frac{C_{\text{exposure}}}{C_{\text{environm}}} \quad (4.3)$$

όπου:

- TF: ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων από ένα περιβαλλοντικό τμήμα σε ένα μέσο έκθεσης
 C_{exposure} : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης, ίσο με το C στις εξισώσεις 4.1 και 4.2
 C_{environm} : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα

$$C_{\text{exposure}} = TF \cdot C_{\text{environm}} \quad (4.4)$$

Όπως παρουσιάζει η **εξίσωση 4.4**, η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης υπολογίζεται εύκολα όταν είναι γνωστές η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα και ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων TF. Η συγκέντρωση της χημικής ουσίας σε διάφορα περιβαλλοντικά τμήματα μπορεί να συμβάλει στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας σε ένα μέσο έκθεσης. Παραδείγματος χάριν, μια χημική ουσία στον αέρα, στο νερό άρδευσης και στο έδαφος μπορεί να μολύνει τα σπιτικά καλλιεργήσιμα λαχανικά. Σε αυτήν την περίπτωση, τα προϊόντα των κατάλληλων παραγόντων μεταφοράς μεταξύ των μέσων TFs και οι συγκεντρώσεις της χημικής ουσίας σε εκείνα τα περιβαλλοντικά τμήματα αθροίζονται για να υπολογίσουν την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα λαχανικά (το μέσο έκθεσης).

Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων TF συνήθως αντιπροσωπεύεται από έναν κατάλληλο συγκεκριμένο χημικό συντελεστή κατανομής, ο οποίος περιγράφει τη σχετική φυσικοχημική έλξη της χημικής ουσίας για τα περιβαλλοντικά μέσα έκθεσης ή υπολογίζεται από τα μοντέλα των τμημάτων που περιγράφονται στις παρακάτω παραγράφους.

4.2.3 ΟΔΟΙ ΕΚΘΕΣΗΣ

Στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX οι συγκεντρώσεις της χημικής ουσίας στα πολλαπλά μέσα έκθεσης που μολύνονται από την χημική ουσία στα πολλαπλά περιβαλλοντικά μέσα χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της λήψης της χημικής ουσίας με την κατάποση, την εισπνοή και την επαφή μέσω του δέρματος. Το πλέγμα των οδών έκθεσης που συνδέουν τα περιβαλλοντικά μέσα, τα σενάρια έκθεσης και τις οδούς έκθεσης παρουσιάζεται στον **πίνακα 4.1**. Το μοντέλο CalTOX σχεδιάστηκε για να εξετάζει τις ακόλουθες οδούς έκθεσης που συνδέουν τις συγκεντρώσεις στα περιβαλλοντικά τμήματα με την ολική λήψη από τις διαφορετικές οδούς.

Λήψη μέσω της κατάποσης:

1. κατάποση υπόγειου ή επιφανειακού νερού ως πόσιμο νερό
2. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από τον αέρα (είτε ως ατμοί είτε ως σωματίδια)
3. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από το επιφανειακό έδαφος ή την ριζώδη-ζώνη του εδάφους
4. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από το νερό άρδευσης
5. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από την εισπνοή χημικών ουσιών στον αέρα (είτε ως ατμοί είτε ως σωματίδια) από τα προϊόντα των ζώων ή κατανάλωση από τα ζώα αυτά τροφής μολυσμένης από χημικές ουσίες που μεταφέρονται από τον αέρα
6. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο επιφανειακό έδαφος ή στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους από άμεση κατάποση εδάφους από τα ζώα αυτά και από κατανάλωση τροφής μολυσμένης από χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το έδαφος
7. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο υπόγειο ή επιφανειακό νερό από τα προϊόντα των ζώων
8. κατανάλωση ψαριού και θαλασσινών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο επιφανειακό νερό

9. κατανάλωση επιφανειακού νερού κατά την διάρκεια κολύμβησης και άλλων υδάτινων δραστηριοτήτων
10. ακούσια κατάποση επιφανειακού εδάφους

Λήψη μέσω της εισπνοής:

1. εισπνοή αερίων και σωματιδίων στον υπαίθριο και εσωτερικό αέρα
2. εισπνοή επιφανειακού εδάφους αιωρούμενο στον αέρα ως σκόνη
3. εισπνοή ατμών από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους
4. εισπνοή πτητικών χημικών ουσιών από το υπόγειο νερό ή από το επιφανειακό νερό που χρησιμοποιείται για μάνιο, ντους, πλύσιμο πιάτων, κ.λ.π.

Λήψη μέσω επαφής με το δέρμα:

1. επαφή μέσω του δέρματος με επιφανειακό έδαφος
2. επαφή μέσω του δέρματος με υπόγειο ή επιφανειακό νερό κατά την διάρκεια μάνιου, ντους ή κολύμβησης

4.2.4 ΠΡΟΫΠΟΘΕΣΕΙΣ ΓΙΑ ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ CalTOX

Η εκτίμηση της έκθεσης που παρέχεται από το πολλαπλών οδών έκθεσης μοντέλο CalTOX έχει διάφορες σημαντικές προϋποθέσεις. Κατ' αρχάς, το μοντέλο CalTOX εξετάζει το αποτέλεσμα και τις διαδικασίες μεταφοράς για μήνες και έτη παρά για ημέρες και εβδομάδες αφότου έχει εμφανιστεί η μόλυνση και έτσι υποθέτει ότι η αρχική μόλυνση του εδάφους έχει συμβεί περισσότερο του ενός έτος προτού να μετρηθεί η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος. Αυτή η υπόθεση είναι σύμφωνη με το ιστορικό αρχείο της μόλυνσης των περισσότερων επικίνδυνων αποβλήτων. Δεύτερον, το μοντέλο CalTOX υποθέτει ότι η ενδεχόμενη έκθεση του ανθρώπου γίνεται στην μολυσμένη περιοχή, αφού δεν χρησιμοποιείται κανένα μοντέλο διασποράς μέσα στο γενικό μοντέλο του CalTOX. Τέλος, δεδομένου ότι το μοντέλο αυτό είναι βασισμένο στις εξισώσεις λήψης του RAGS/HHEM και στον χαρακτηρισμό του κινδύνου (U.S. EPA 1989b), το CalTOX υπόκειται στους ίδιους περιορισμούς που περιγράφονται για εκείνες τις εξισώσεις.

Πίνακας 4.1: Πίνακας των οδών έκθεσης που συνδέονται με τα περιβαλλοντικά μέσα, τα σενάρια έκθεσης και τις οδούς έκθεσης.

Οδοί Έκθεσης	Μέσο		
	Αέρας (αέρια και σωματίδια)	Έδαφος (επίγειο επιφανειακό, ριζώδης-ζώνη)	Νερό (επιφανειακό και υπόγειο νερό)
Εισπνοή	<ul style="list-style-type: none"> • Εισπνοή αερίων και σωματιδίων στον υπαίθριο αέρα • Εισπνοή αερίων και σωματιδίων που μεταφέρονται από τον υπαίθριο στον εσωτερικό αέρα 	<ul style="list-style-type: none"> • Εισπνοή ατμών του εδάφους που μεταναστεύουν στον εσωτερικό αέρα • Εισπνοή σωματιδίων του εδάφους που μεταφέρονται στον εσωτερικό αέρα 	<ul style="list-style-type: none"> • Εισπνοή μολυσματικών παραγόντων που μεταφέρονται από το νερό ύδρευσης σε εσωτερικό χώρο
Κατάποση	<ul style="list-style-type: none"> • Κατανάλωση φρούτων, λαχανικών και δημητριακών μολυσμένων από την αερομεταφορά χημικών ουσιών στους ιστούς των φυτών • Κατανάλωση κρέατος, γάλακτος και αυγών μολυσμένων από την αερομεταφορά χημικών ουσιών στα φυτά και ζώα • Κατανάλωση κρέατος, γάλακτος και αυγών μολυσμένων μέσω της εισπνοής από τα ζώα • Κατανάλωση μητρικού γάλατος 	<ul style="list-style-type: none"> • Κατάποση εδάφους από τους ανθρώπους • Κατανάλωση φρούτων, λαχανικών και δημητριακών μολυσμένων από την μεταφορά από το έδαφος • Κατανάλωση κρέατος, γάλακτος και αυγών μολυσμένων από την μεταφορά από το έδαφος στα φυτά και τα ζώα • Κατανάλωση κρέατος, γάλακτος και αυγών μολυσμένων μέσω της κατάποσης εδάφους από τα ζώα • Κατανάλωση μητρικού γάλατος 	<ul style="list-style-type: none"> • Κατάποση νερού ύδρευσης • Κατανάλωση αρδεύσιμων φρούτων, λαχανικών και δημητριακών • Κατανάλωση κρέατος, γάλακτος και αυγών από ζώα που καταναλώνουν μολυσμένο νερό • Κατανάλωση ψαριών και θαλασσινά • Κατάποση επιφανειακού νερού κατά την διάρκεια κολύμβησης ή άλλων υδάτινων δραστηριοτήτων • Κατανάλωση μητρικού γάλατος
Επαφή με το δέρμα	<ul style="list-style-type: none"> • (Δεν περιλαμβάνεται) 	<ul style="list-style-type: none"> • Επαφή του δέρματος με το έδαφος 	<ul style="list-style-type: none"> • Επαφή με το δέρμα στο μάνιο και στο ντους • Επαφή με το δέρμα κατά την διάρκεια κολύμβησης

4.3 ΠΟΛΛΑΠΛΟΙ ΟΔΟΙ ΕΚΘΕΣΕΙΣ ΚΑΙ ΣΥΝΟΛΙΚΗ ΛΗΨΗ

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζονται οι εξισώσεις για τον υπολογισμό των λήψεων που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο έκθεσης του CalTOX. Οι συγκεντρώσεις των χημικών ουσιών σε κάθε περιβαλλοντικό τμήμα ($C_{\text{environment}}$), οι οποίες απαριθμούνται παρακάτω, χρησιμοποιούνται από κοινού με τους παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων για να υπολογίσουν την συγκέντρωση των χημικών ουσιών σε κάθε μέσο έκθεσης:

C_a σε mg/m^3 -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στα αέρια του περιβάλλοντος αέρα,
C_{ap} σε mg/m^3 -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας δεσμευμένη στα μόρια του αέρα (σκόνη),
C_g σε mg/kg -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (σε βάθος 1 cm ή 0.4 inches),
C_s σε mg/kg -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, κάτω από το επιφανειακό στρώμα (σε βάθος από 1 cm μέχρι 1 m ή από 0.4 μέχρι 39 inches),
C_q σε mg/L -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό,
C_w σε mg/L -	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό.

4.3.1 Η ΟΔΟΣ ΤΗΣ ΚΑΤΑΠΟΣΗΣ

Στην προσέγγιση των πολλαπλών οδών του μοντέλου έκθεσης CalTOX, ο μολυσμένος αέρας, το νερό και το έδαφος μπορούν να συμβάλουν στην έκθεση μέσω της κατάποσης. Η συνολική λήψη μέσω της κατάποσης περιλαμβάνει τις πιθανές δόσεις από τα μολυσμένα μέσα έκθεσης, όπως το νερό ύδρευσης, έδαφος, τοπικά ή σπιτικά καλλιεργήσιμα φρούτα, λαχανικά, σιτάρι, γάλα, κρέας, αυγά, τοπική αλιεία και επιφανειακό νερό κατά την διάρκεια της κολύμβησης. Για κάθε οδό έκθεσης ένας παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TF, εξάγεται για να εκφράσει την αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας σε ένα περιβαλλοντικό τμήμα. Στην συνέχεια, ο TF χρησιμοποιείται για να υπολογίσει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας (C_{exposure}) στο μέσο έκθεσης για την

εισαγωγή δεδομένων στην εξίσωση λήψης. Για τον ρυθμό επαφών του μέσου έκθεσης ανά μονάδα σωματικού βάρους, (CR/BW), χρησιμοποιούμε τους μέσους ημερήσιους ρυθμούς κατάποσης ανά μονάδα σωματικού βάρους. Η συχνότητα έκθεσης εξαρτάται από το σενάριο που εξετάζεται για την συγκεκριμένη περιοχή. Παραδείγματος χάριν, στο κατοικημένο σενάριο η συχνότητα έκθεσης θα μπορούσε να θεωρηθεί ότι είναι 350 ημέρες ετησίως. Οι τιμές για την διάρκεια και τον μέσο όρο έκθεσης εξαρτώνται από το εάν η υπολογισμένη τιμή της λήψης θα χρησιμοποιηθεί για να καθορίσει τον κίνδυνο καρκινογένεσης ή τον κίνδυνο της σωματικής υγείας από την χημική ουσία.

4.3.1.1 Κατάποση νερού ύδρευσης

Η τροποποιημένη στο μοντέλο CalTOX, εξίσωση του RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-35) για την κατάποση χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό είναι:

$$Intake_{dwi} = C_{drink} \cdot \left[\frac{IR_{drink}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.5)$$

όπου:

$Intake_{dwi}$:	η λήψη χημικής ουσίας από το εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατάποσης μολυσμένου πόσιμου νερού (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{drink} :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό (mg/L)
IR_{drink} :	ο ρυθμός κατάποσης υγρών (L/day)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FI:	το κλάσμα πόσιμου νερού που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, θεωρούμαι τιμή 1 (αδιάστατο)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (days/year)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (year)
AT:	ο μέσος όρος χρόνου (days)

Η εξίσωση του RAGS/HHEM τροποποιείται με τον συνυπολογισμό του FI, το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, και τον διακανονισμό των όρων.

Η C_{drink} μπορεί να είναι ένα μίγμα από την C_w , συγκέντρωση χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα του επιφανειακού νερού, και την C_q , συγκέντρωση χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα του υπόγειου νερού. Με το μοντέλο έκθεσης CalTOX, όταν χρησιμοποιείται ένα μίγμα υπογείου και επιφανειακού νερού, οι παράγοντες

μεταφοράς μεταξύ των μέσων για το επιφανειακό νερό στο πόσιμο νερό και για το υπόγειο νερό στο πόσιμο νερό μπορούν να εξεταστούν από μαθηματική άποψη ως εξής:

$$TF(w \rightarrow drink) = (1 - f_q^w)$$

$$TF(q \rightarrow drink) = f_q^w$$

όπου:

f_q^w : το κλάσμα του αναγκαίου νερού που παρέχεται από το υπόγειο νερό

Η ακόλουθη εξίσωση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της C_{drink} :

$$C_{drink} = f_q^w \cdot C_q + (1 - f_q^w) \cdot C_w \quad (4.6)$$

όπου:

C_{drink} : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό

f_q^w : το κλάσμα του αναγκαίου νερού που παρέχεται από το υπόγειο νερό

C_q : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό

C_w : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό

Στην συνέχεια η C_{drink} είναι δεδομένου εισόδου στην εξίσωση λήψης πόσιμου νερού (εξίσωση 4.5).

4.3.1.2 Κατάποση εδάφους

Η εξίσωση του RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-40) για την ακούσια κατάποση εδάφους μολυσμένο με μια χημική ουσία μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Intake_{soil} = C_g \cdot \left[\frac{IR_{soil}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.7)$$

όπου:

$Intake_{soil}$:	η λήψη χημικής ουσίας από το εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατάποσης μολυσμένου εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_g :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
IR_{soil} :	ο ρυθμός κατάποσης (mg εδάφους/day)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FI:	το κλάσμα εδάφους που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, θεωρούμε τιμή 1 (αδιάστατο)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (days/year)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (year)
AT:	ο μέσος όρος χρόνου (days)
CF:	ο παράγοντας μετατροπής (10^{-6} kg/mg)

Για αυτήν την λήψη, δεν είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθεί ο παράγοντας TF για να υπολογιστεί η συγκέντρωση στο μέσο έκθεσης, δεδομένου ότι το περιβαλλοντικό τμήμα του επιφανειακού εδάφους είναι το μέσο έκθεσης. Στο μοντέλο έκθεσης CalTOX, η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος του σπιτιού είναι ίση με την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα του επιφανειακού εδάφους, θεωρώντας ότι η σκόνη του σπιτιού προκύπτει από τον αέρα του εδάφους ή από την μεταφορά στο σπίτι από τον εξωτερικό χώρο. Επειδή το μοντέλο CalTOX θεωρεί την έκθεση ως επαφή της χημικής ουσίας με το εξωτερικό στρώμα του ανθρώπου, όπως το στόμα (σύμφωνα με τον καθορισμό που δίνεται από το U.S. EPA (U.S. EPA 1992b)), το μοντέλο CalTOX, στην εξίσωση λήψης, δεν εξετάζει τη βιολογική διαθεσιμότητα της χημικής ουσίας από το πλέγμα του λαμβανόμενου εδάφους.

4.3.1.3 Κατανάλωση μολυσμένων σπιτικών καλλιεργήσιμων φρούτων, λαχανικών ή δημητριακών

Υπάρχουν περιοχές και εγκαταστάσεις όπου η κατάποση μολυσμένων σπιτικών καλλιεργήσιμων τροφίμων είναι μια οδός έκθεσης που πρέπει να εξεταστεί. Η εξίσωση του RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-46) για τον υπολογισμό της κατάποσης των μολυσμένων φρούτων και λαχανικών μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Intake_{fvg} = C_{fvg} \cdot \left[\frac{IR_{fvg}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.8)$$

όπου:

Intake _{fvg} :	η λήψη χημικής ουσίας από το εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατάποσης μολυσμένων φρούτων, λαχανικών, δημητριακών (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C _{fvg} :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στα φρούτα, λαχανικά, δημητριακά (mg/kg προϊόντος)
IR _{fvg} :	ο ρυθμός κατάποσης (kg προϊόντος/day)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FI:	το κλάσμα κατάποσης από την μολυσμένη πηγή (αδιάστατο)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (days/year)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (year)
AT:	ο μέσος όρος χρόνου (days)

Στην παράγραφο 6.5.7 του RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b), υπάρχει μια γενική εκτίμηση των προσεγγίσεων που μπορούν να εξεταστούν στον υπολογισμό των συγκεντρώσεων των χημικών ουσιών στα τρόφιμα, αλλά παρέχονται λίγες συγκεκριμένες οδηγίες. Το μοντέλο έκθεσης CalTOX καλύπτει αυτό το κενό υπολογίζοντας την μόλυνση των μέσων έκθεσης των φρούτων, λαχανικών και δημητριακών από την παρουσία της χημικής ουσίας στα περιβαλλοντικά τμήματα του μολυσμένου αέρα (αέρια φάση και σωματίδια), του νερού, του επιφανειακού εδάφους και της ριζώδης-περιοχής του εδάφους. Τα φρούτα και τα λαχανικά διαιρούνται σε δύο ομάδες: εκτεθειμένα προϊόντα που αντιπροσωπεύουν τα υπέργεια εδάδιμα μέρη των φυτών και προστατευμένα προϊόντα που αντιπροσωπεύουν τους καρπούς ρίζας και προϊόντα που προστατεύονται από το περιβαλλοντικό τμήμα του περιβαλλοντικού αέρα, όπως τα εσπεριδοειδή. Τα δημητριακά θεωρούνται εκτεθειμένα προϊόντα. Προκειμένου να καθοριστεί η C_{fvg}, η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης, πρέπει πρώτα να υπολογιστούν οι TFs για την μόλυνση των δύο μέσων έκθεσης των εκτεθειμένων προϊόντων, C^{abg}_{fvg}, και των προστατευμένων προϊόντων, C^{protp}_{fvg}, από κάθε σχετικό περιβαλλοντικό τμήμα. Χρησιμοποιώντας αυτούς τους TFs, οι συγκεντρώσεις των χημικών ουσιών υπολογίζονται για κάθε μια από τις ακόλουθες δευτερεύουσες οδούς:

- 1) από τους ατμούς της χημικής ουσίας στον περιβαλλοντικό αέρα στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 2) από την χημική ουσία στην φάση σκόνης στον περιβαλλοντικού αέρα στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,

- 3) από το επιφανειακό νερό στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 4) από το υπόγειο νερό στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 5) από το επιφανειακό νερό στα προστατευμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 6) από το υπόγειο νερό στα προστατευμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 7) από το επιφανειακό έδαφος στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 8) από την ριζώδη-περιοχή του εδάφους στα εκτεθειμένα προϊόντα στην κατάποση,
- 9) από την ριζώδη-περιοχή του εδάφους στα προστατευμένα προϊόντα στην κατάποση.

Στην συνέχεια, αυτές οι συγκεντρώσεις αθροίζονται για να εξαχθεί η παράμετρος C_{fvg} στην **εξίσωση 4.8**. Οι υπολογισμοί παρουσιάζονται παρακάτω.

α. Μόλυνση από αερομεταφερόμενες χημικές ουσίες

Η κατανάλωση φρούτων, λαχανικών και δημητριακών μολυσμένων από τις χημικές ουσίες από τον αέρα περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από τον αέρα μέσω της εναπόθεσης/αιώρησης των σωματιδίων έχοντας προσκολλημένες τις χημικές ουσίες ή μέσω της λήψης των φύλλων των χημικών ουσιών στην αέρια φάση. Η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στα φρούτα, τα λαχανικά και τα δημητριακά από την μεταφορά της χημικής ουσίας στον περιβαλλοντικό υπαίθριο αέρα στα εδώδιμα μέρη των φυτών δίνεται από την εξίσωση:

$$C_{fvg}^{abga} = K_{pa}^{gs} \cdot C_a + K_{pa}^{pt} \cdot C_{ap} \quad (4.9)$$

όπου:

- C_{fvg}^{abga} : η συγκέντρωση χημικής ουσίας στα φρούτα, λαχανικά και δημητριακά εκτεθειμένα στην χημική ουσία στον περιβαλλοντικό αέρα (mg χημικής ουσίας/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
- K_{pa}^{gs} : ο TF(a→φυτό), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα φρέσκα προϊόντα, mg/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στη αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m³)
- C_a : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m³)
- K_{pa}^{pt} : ο TF(ap→φυτό), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα φρέσκα προϊόντα, mg/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια (ή σκόνη) του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m³)
- C_{ap} : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην σκόνη του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m³)

β. Μόλυνση από το νερό άρδευσης

Η κατανάλωση φρούτων, λαχανικών και δημητριακών μολυσμένων από τις χημικές ουσίες από το νερό άρδευσης περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από: 1) το επιφανειακό νερό στα εκτεθειμένα προϊόντα, 2) το υπόγειο νερό στα εκτεθειμένα προϊόντα, 3) το επιφανειακό νερό στα προστατευμένα προϊόντα και 4) το υπόγειο νερό στα προστατευμένα προϊόντα.

Για τα εκτεθειμένα προϊόντα (μέρη των φυτών πάνω από το έδαφος), οι TFs είναι βασισμένοι στο πιτσίλισμα της βροχής και στην μεταφορά από το έδαφος στα υπέργεια μέρη των φυτών. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων για τα εκτεθειμένα προϊόντα στο υπόγειο νερό ($TF(q \rightarrow exp)$) υπολογίζεται ως εξής:

$$TF(q \rightarrow exp) = f_q^w \cdot (K_{ps}^{rain} + K_{ps}) \cdot K_D \cdot f_{ir} \quad (4.10)$$

όπου:

$TF(q \rightarrow exp)$:	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό
f_q^w :	το κλάσμα των αναγκών νερού άρδευσης που παρέχεται από το υπόγειο νερό (αδιάστατο)
K_{ps}^{rain} :	ο συντελεστής κατανομής εδάφους-φυτών για το επιφανειακό έδαφος λόγω του πιτσίλισματος της βροχής (kg εδάφους/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
K_{ps} :	ο συντελεστής κατανομής εδάφους-φυτών από την ριζώδη-περιοχή του εδάφους στα υπέργεια μέρη του φυτού λόγω της λήψης μέσω των ριζών (kg εδάφους/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
K_D :	ο συντελεστής κατανομής εδάφους/νερού στο έδαφος (kg νερού/kg στερεού εδάφους)
f_{ir} :	το κλάσμα της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο νερό άρδευσης που συγκρατείται στο νερό του εδάφους (αδιάστατο)

Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων TF για τα εκτεθειμένα προϊόντα στο επιφανειακό νερό ($TF(w \rightarrow exp)$) υπολογίζεται ως εξής:

$$TF(w \rightarrow exp) = (1 - f_q^w) \cdot (K_{ps}^{rain} + K_{ps}) \cdot K_D \cdot f_{ir} \quad (4.11)$$

όπου:

$TF(w \rightarrow exp)$:	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
$1 - f_q^w$:	το κλάσμα των αναγκών νερού άρδευσης που παρέχεται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)

Στην συνέχεια, η εξίσωση για την συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα φρούτα, λαχανικά και δημητριακά από την μεταφορά της χημικής ουσίας στο επιφανειακό και υπόγειο νερό είναι:

$$C_{fvg}^{abgw} = TF(w \rightarrow exp) \cdot C_w + TF(q \rightarrow exp) \cdot C_q \quad (4.12)$$

όπου:

C_{fvg}^{abgw} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα υπέργεια φρούτα, λαχανικά και δημητριακά που εκτίθενται στην χημική ουσία μέσω του νερού άρδευσης (mg χημικής ουσίας/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
$TF(w \rightarrow exp)$:	βλέπε εξίσωση 4.11
$TF(q \rightarrow exp)$:	βλέπε εξίσωση 4.10

Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων για τα προστατευόμενα προϊόντα και τους καρπούς των ριζών στο υπόγειο νερό ($TF(q \rightarrow protp)$) υπολογίζεται ως εξής:

$$TF(q \rightarrow protp) = f_q^w \cdot K_{ps}(roots) \cdot K_D \cdot f_{ir} \quad (4.13)$$

όπου:

$TF(q \rightarrow protp)$:	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των προστατευμένων προϊόντων ή των καρπών των ριζών στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό
f_q^w :	το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχεται από το υπόγειο νερό (αδιάστατο)
$K_{ps}(roots)$:	ο συντελεστής κατανομής εδάφους-φυτών από την ριζώδη-περιοχή του εδάφους στις ρίζες (kg εδάφους/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
K_D :	ο συντελεστής κατανομής εδάφους/νερού στο έδαφος (kg νερού/kg στερεού εδάφους)
f_{ir} :	το κλάσμα της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο νερό άρδευσης που συγκρατείται στο νερό του εδάφους (αδιάστατο)

Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων για τα προστατευόμενα προϊόντα και τους καρπούς των ριζών στο επιφανειακό νερό ($TF(w \rightarrow protp)$) υπολογίζεται ως εξής:

$$TF(w \rightarrow protp) = (1 - f_q^w) \cdot K_{ps}(roots) \cdot K_D \cdot f_{ir} \quad (4.14)$$

όπου:

$TF(w \rightarrow protp)$:	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των προστατευμένων προϊόντων ή των καρπών των ριζών στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
$1 - f_q^w$:	το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχεται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)

γ. Μόλυνση από το επιφανειακό έδαφος

Η κατάποση των χημικών ουσιών στα φρούτα, λαχανικά και δημητριακά που μολύνονται από το επιφανειακό έδαφος περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από το έδαφος στα φυτά. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων, $TF(g \rightarrow expp)$, είναι η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα (mg/kg φρέσκιας μάζας) στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg/kg εδάφους). Ο $TF(g \rightarrow expp)$ είναι ίσος με τον συντελεστή κατανομής του πιτσιλίσματος της βροχής, K_{ps}^{rain} . Τα δημητριακά που μολύνονται από την χημική ουσία στην επιφάνεια του εδάφους υπολογίζονται με τον πολλαπλασιασμό K_{ps}^{rain} φορές την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (C_s).

δ. Μόλυνση από την ριζώδη-περιοχή του εδάφους

Η ριζώδη-περιοχή του εδάφους στο μοντέλο CalTOX ορίζεται ως το έδαφος κάτω από το στρώμα της επιφάνειας, από 1 cm μέχρι περίπου 1 m σε βάθος (ή 0.4 έως 39 inches). Η μόλυνση από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από εκείνο το στρώμα του εδάφους στα εκτεθειμένα και προστατευμένα προϊόντα.

Για τα εκτεθειμένα προϊόντα, ο $TF(s \rightarrow expp)$ είναι ίσος με τον K_{ps} . Κατά συνέπεια, η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα από την μολυσμένη ριζώδη-ζώνη του εδάφους δίνεται με τον πολλαπλασιασμό του K_{ps} με την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (C_s).

Για τα προστατευμένα προϊόντα, ο $TF(s \rightarrow protp)$ είναι ίσος με τον $K_{ps}(roots)$ και η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα προστατευμένα προϊόντα από την μολυσμένη ριζώδη-ζώνη του εδάφους δίνεται με τον πολλαπλασιασμό του $K_{ps}(roots)$ με την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (C_s).

ε. Υπολογισμός της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα και προστατευμένα προϊόντα

Η εξίσωση για την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα ως αποτέλεσμα της μόλυνσης μέσω του αέρα, του νερού άρδευσης και του εδάφους μπορεί να απεικονιστεί ως εξής:

$$C_{fvg}^{abg} = K_{pa}^{gs} \cdot C_a + K_{pa}^{pt} \cdot C_{ap} + TF(w \rightarrow exp) \cdot C_w + TF(q \rightarrow exp) \cdot C_q + K_{ps}^{rain} \cdot C_g + K_{ps} \cdot C_s \quad (4.15)$$

όπου:

C_{fvg}^{abg} :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στα φρούτα, λαχανικά και δημητριακά που εκτίθενται στην χημική ουσία στον περιβαλλοντικό αέρα, στο νερό άρδευσης και στο έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
K_{pa}^{gs} :	ο TF(a→φυτό), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα φρέσκα προϊόντα, mg/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³) (εξίσωση 4.9)
C_a :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
K_{pa}^{pt} :	ο TF(ap→φυτό), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα φρέσκα προϊόντα, mg/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια (ή σκόνη) του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³) (εξίσωση 4.9)
C_{ap} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
TF(w→exp):	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.11)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
TF(w→exp):	η αναλογία συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (εξίσωση 4.10)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
K_{ps}^{rain} :	ο TF(g→exp), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
K_{ps} :	ο TF(s→exp), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στη ριζώδη-ζώνη του εδάφους
C_s :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

Η συγκρίσιμη εξίσωση για την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα προστατευμένα προϊόντα (εξίσωση 4.16) έχει όρους για το υπόγειο νερό, το επιφανειακό

νερό και την ριζώδη-ζώνη του εδάφους. Αντίθετα, η εξίσωση για την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα εκτεθειμένα προϊόντα (**εξίσωση 4.15**), δεν έχει κανέναν όρο για τον αέρα ή το επιφανειακό έδαφος.

$$C_{fv}^{protp} = TF(q \rightarrow protp) \cdot C_q + TF(w \rightarrow protp) \cdot C_w + K_{ps}(roots) \cdot C_s \quad (4.16)$$

όπου:

C_{fv}^{protp} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας των προστατευμένων προϊόντων που μολύνονται από το νερό και την ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
$TF(q \rightarrow protp)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των προστατευμένων ή των καρπών της ρίζας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (εξίσωση 4.13)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
$TF(w \rightarrow protp)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των προστατευμένων ή των καρπών της ρίζας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.14)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
$K_{ps}(roots)$:	ο $TF(s \rightarrow protp)$, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των προστατευμένων προϊόντων ή των καρπών της ρίζας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στη ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
C_s :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

στ. Υπολογισμός της λήψης χημικής ουσίας από την κατανάλωση μολυσμένων φρούτων, λαχανικών, δημητριακών

Η λήψη των εκτεθειμένων προϊόντων υπολογίζεται με την χρησιμοποίηση συγκεκριμένων παραμέτρων στην **εξίσωση 4.8**:

$$I_{fvg}^{abg} = C_{fvg}^{abg} \cdot \left[\left(\frac{IR_{fv}}{BW} \cdot f_{fv}^{abg} \cdot f_{local}^v \right) + \left(\frac{IR_g}{BW} \cdot f_{local}^g \right) \right] \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.17)$$

όπου:

I_{fvg}^{abg} :	η λήψη μιας χημικής ουσίας από το υπέργειο έδαφος ή τα εκτεθειμένα φρούτα, λαχανικά και δημητριακά που μολύνονται από την παρουσία αυτής της χημικής ουσίας στα περιβαλλοντικά μέσα του αέρα, νερού και εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους/ημέρα)
IR_{fv} :	ο ρυθμός κατανάλωσης φρούτων και λαχανικών (kg τρόφιμα/ημέρα)
IR_g :	ο ρυθμός κατανάλωσης δημητριακών (kg δημητριακών/ημέρα)

Για την παραπάνω λήψη, ο FI, ή το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, ορίζεται ως:

f_{fv}^{abg} : το κλάσμα των φρούτων και των λαχανικών που καταναλώνονται και που είναι εκτεθειμένα προϊόντα (αδιάστατο)

f_{local}^v : το κλάσμα των φρούτων και των λαχανικών που καταναλώνονται και που είναι τοπικά καλλιεργημένα (αδιάστατο)

f_{local}^g : το κλάσμα των δημητριακών που καταναλώνονται και που είναι τοπικά καλλιεργημένα (αδιάστατο)

Η λήψη μιας χημικής ουσίας από τα προστατευμένα προϊόντα υπολογίζεται ομοίως, χρησιμοποιώντας την **εξίσωση 4.8**:

$$I_{fv}^{protip} = C_{fv}^{protip} \cdot \left[\frac{IR_{fv}}{BW} \cdot f_{local}^v \cdot (1 - f_{fv}^{abg}) \right] \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.18)$$

όπου:

I_{fv}^{protip} : η λήψη μιας χημικής ουσίας από την κατάποση προστατευμένων προϊόντων που μολύνονται με αυτήν την χημική ουσία μέσω του νερού ή της ριζώδης-ζώνης του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους/ημέρα)

Για την παραπάνω λήψη, ο FI, ή το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, ορίζεται ως:

f_{local}^v : το κλάσμα των φρούτων και των λαχανικών που είναι τοπικά καλλιεργημένα (αδιάστατο)

$1 - f_{fv}^{abg}$: το κλάσμα των φρούτων και των λαχανικών που καταναλώνονται και που είναι προστατευμένα προϊόντα (αδιάστατο)

Με το άθροισμα αυτών των δύο υπολογισμένων λήψεων (**εξισώσεις 4.17 και 4.18**), εξάγεται η δόση για την κατανάλωση όλων των μολυσμένων φρούτων, λαχανικών και δημητριακών ($Intake_{fvg}$):

$$Intake_{fvg} = I_{fvg}^{abg} + I_{fv}^{protip} \quad (4.19)$$

4.3.1.4 Κατανάλωση μολυσμένων ψαριών

Η εξίσωση για την κατανάλωση ψαριών και οστρακόδερμων (μαλακίων) που μολύνονται με μια χημική ουσία περιγράφεται από το RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) στις σελίδες: 6-45 και μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Intake_{fish} = C_{fish} \cdot \left[\frac{IR_{fish}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.20)$$

όπου:

$Intake_{fish}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένων ψαριών ή οστρακόδερμων (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{fish} :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στα ψάρια ή στα οστρακόδερμα (mg/kg ψαριών)
IR_{fish} :	ο ρυθμός κατανάλωσης (kg ψάρια/ημέρα)
BW :	το σωματικό βάρος (kg)
FI :	το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή (αδιάστατο)
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Στον υπολογισμό της καταναλωμένης δόσης της τοπικής αλιείας, το μοντέλο έκθεσης CalTOX θεωρεί ότι η μόλυνση των ψαριών από μια χημική ουσία οφείλεται στην μεταφορά αυτής από το περιβαλλοντικό τμήμα του επιφανειακού νερού στα ψάρια. Ο παράγοντας μεταφοράς TF μεταξύ των ψαριών και του επιφανειακού νερού είναι ο παράγοντας βιοσυγκέντρωσης (BCF), ορισμένος ως ο συντελεστής κατανομής οργανισμών/νερού από το RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, παράγραφος 6.5.7). Στο μοντέλο έκθεσης CalTOX, ο BCF πολλαπλασιάζεται με την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (C_w) προκειμένου να εξαχθεί η συγκέντρωση στον ιστό των ψαριών (C_{fish} , το μέσο επαφής, βλ. **εξίσωση 4.4**). Αυτή η μέθοδος είναι η ίδια με αυτήν που περιγράφεται στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, παράγραφος 6.5.7) για τις περιπτώσεις όπου δεν έχει γίνει καμία μέτρηση ιστού ψαριών. Το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή, FI, δίνεται από το f_{local}^{fish} , το κλάσμα λήψης ενός ατόμου αλιείας που προέρχεται από το τοπικό επιφανειακό νερό, το οποίο είναι μολυσμένο με την εν λόγω χημική ουσία.

4.3.1.5 Κατανάλωση μολυσμένων κρέατος, γάλακτος και αυγών

Η εξίσωση του RAGS/HHEM για την κατανάλωση μολυσμένων κρέατος, γάλακτος και αυγών (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-48) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Intake_{mke} = C_{mke} \cdot \left[\frac{IR_{mke}}{BW} \right] \cdot FI \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.21)$$

όπου:

$Intake_{mke}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένου κρέατος, γάλακτος και αυγών (mg χημικής ουσίας/kg BW ανά ημέρα)
C_{mke} :	η συγκέντρωση χημικής ουσίας στο κρέας, στα γαλακτοκομικά προϊόντα, ή στα αυγά (mg/kg τροφίμων)
IR_{mke} :	ο ρυθμός κατανάλωσης (kg κρέατος, γάλακτος, αυγών/ημέρα)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FI:	το κλάσμα που λαμβάνεται από την μολυσμένη πηγή
EF:	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT:	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Η παράγραφος 6.5.7 του RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) συστήνει την χρήση συντελεστών μεταφοράς και παρέχει αναφορές στην βιβλιογραφία για τον υπολογισμό της έκτασης της ανθρώπινης έκθεσης στις χημικές ουσίες στην επίγεια τροφική αλυσίδα όταν δεν υπάρχει κανένα στοιχείο καταγραφής του ιστού. Το μοντέλο έκθεσης CalTOX χρησιμοποιεί μια μέθοδο προεπιλογής που ενσωματώνει τους συντελεστές μεταφοράς για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας, το γάλα και τα γαλακτοκομικά προϊόντα και τα αυγά (C_{mke}) από την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα περιβαλλοντικά τμήματα του μολυσμένου αέρα (αέρια φάση και σωματίδια), του νερού (έδαφος και επιφάνεια) και του εδάφους (επιφάνεια και ριζώδη-ζώνη). Κατ' αρχάς, εξάγονται οι TFs για την μόλυνση των μέσων έκθεσης από κάθε σχετικό περιβαλλοντικό τμήμα. Κατόπιν, υπολογίζονται οι συγκεντρώσεις της χημικής ουσίας για τα μέσα έκθεσης για κάθε μια από τις ακόλουθες δευτερεύουσες οδούς χρησιμοποιώντας τους TFs:

- 1) εισπνοή ατμών της χημικής ουσίας στον αέρα και κατανάλωση τροφής μολυσμένης με τέτοιους ατμούς από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των

- ζώων και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση του κρέατος, των γαλακτοκομικών προϊόντων και των αυγών,
- 2) εισπνοή της χημικής ουσίας με την σκόνη του αέρα και κατανάλωση της τροφής που μολύνεται με τέτοια σωματίδια από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων, και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση του κρέατος, των γαλακτοκομικών προϊόντων και των αυγών,
 - 3) κατάποση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό και στην τροφή που μολύνεται από το νερό άρδευσης που περιέχει την χημική ουσία από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων, και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση αυτών των τροφών,
 - 4) κατάποση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό και στην τροφή που μολύνεται από το νερό άρδευσης που περιέχει την χημική ουσία από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων, και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση αυτών των τροφών,
 - 5) κατάποση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος και στην τροφή που μολύνεται από το επιφανειακό έδαφος από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση αυτών των τροφίμων,
 - 6) κατάποση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους και στην τροφή που μολύνεται με την χημική ουσία από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων και τα αυγά των πουλερικών με επακόλουθο την μόλυνση αυτών των τροφίμων.

Αυτές οι συγκεντρώσεις στην συνέχεια αθροίζονται για να εξαχθεί η παράμετρος C_{mke} στην **εξίσωση 4.21**. Οι υπολογισμοί παρουσιάζονται παρακάτω.

α. Παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων - Περιβαλλοντικός αέρας στα ζωικά προϊόντα

Η λήψη κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από τις χημικές ουσίες από τον αέρα περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών μέσω της εισπνοής από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων και τα αυγά των πουλερικών και μέσω της κατάποσης τροφής που έχει λάβει αυτές τις χημικές ουσίες από

τον αέρα. Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για την αέρια φάση του περιβαλλοντικού αέρα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(a \rightarrow meat) = [Inh_c + K_{pa}^{gs} \cdot I_{vbc}] \cdot B_t \quad (4.22)$$

Για τα γαλακτοκομικά προϊόντα:

$$TF(a \rightarrow milk) = [Inh_c + K_{pa}^{gs} \cdot I_{vdc}] \cdot B_k \quad (4.23)$$

Για τα αυγά:

$$TF(a \rightarrow eggs) = [Inh_h + K_{pa}^{gs} \cdot I_{vh}] \cdot B_e \quad (4.24)$$

όπου:

TF(a→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
Inh _c :	ο ημερήσιος ρυθμός εισπνοής των βοοειδών (m ³ /day)
K _{pa} ^{gs} :	ο TF(a→plant), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα φρέσκα προϊόντα, mg/kg (φρέσκια μάζα), στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
I _{vbc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (λιβάδι) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B _t :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
TF(a→milk):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
I _{vdc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B _k :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
TF(a→eggs):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
Inh _h :	ο ημερήσιος ρυθμός εισπνοής της κότα (m ³ /day)
I _{vh} :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
B _e :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)

Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για την σκόνη ή τα σωματίδια του περιβαλλοντικού αέρα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(ap \rightarrow meat) = [Inh_c + K_{pa}^{pt} \cdot I_{vbc}] \cdot B_t \quad (4.25)$$

Για το γάλα:

$$TF(ap \rightarrow milk) = [Inh_c + K_{pa}^{pt} \cdot I_{vdc}] \cdot B_k \quad (4.26)$$

Για τα αυγά:

$$TF(ap \rightarrow eggs) = [Inh_h + K_{pa}^{pt} \cdot I_{vh}] \cdot B_e \quad (4.27)$$

όπου:

TF(ap→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
Inh _c :	ο ημερήσιος ρυθμός εισπνοής των βοοειδών (m ³ /day)
K _{pa} ^{pt} :	ο TF(ap→plant), η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στην φρέσκια βοσκή, mg/kg φρέσκιας μάζας, στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
I _{vbc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B _t :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
TF(ap→milk):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
I _{vdc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B _k :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
TF(ap→eggs):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα
Inh _h :	ο ημερήσιος ρυθμός εισπνοής της κότα (m ³ /day)
I _{vh} :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
B _e :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)

β. Παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων - Νερό στα ζωικά προϊόντα

Η λήψη κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από τις χημικές ουσίες από το επιφανειακό και υπόγειο νερό περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από το νερό μέσω της κατάποσης νερού από το κρέας, την

γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων και τα αυγά των πουλερικών και μέσω της κατανάλωσης τροφής που έχει λάβει αυτές τις χημικές ουσίες από το νερό. Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για το επιφανειακό νερό στα ζωικά προϊόντα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(w \rightarrow meat) = \left[(1 - f_q^w) \cdot I_{wbc} + I_{vbc} \cdot TF(w \rightarrow exp) \right] \cdot B_t \quad (4.28)$$

Για το γάλα:

$$TF(w \rightarrow milk) = \left[(1 - f_q^w) \cdot I_{wdc} + I_{vdc} \cdot TF(w \rightarrow exp) \right] \cdot B_k \quad (4.29)$$

Για τα αυγά:

$$TF(w \rightarrow eggs) = \left[(1 - f_q^w) \cdot I_{wh} + I_{vh} \cdot TF(w \rightarrow exp) \right] \cdot B_e \quad (4.30)$$

όπου:

TF(w→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
$1-f_q^w$:	το κλάσμα των αναγκών σε νερό που παρέχονται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)
I_{wbc} :	η κατάποση νερού από τα βοοειδή (L/day)
I_{vbc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
TF(w→exp):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.11)
B_t :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
TF(w→milk):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
I_{wdc} :	η κατάποση νερού από γαλακτοκόμο βοοειδή (L/day)
I_{vdc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B_k :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
TF(w→eggs):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
I_{wh} :	η κατάποση νερού από την κότα (L/day)
I_{vh} :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
B_e :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)

Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για το υπόγειο νερό στα ζωικά προϊόντα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(q \rightarrow meat) = \left[f_{gw}^w \cdot I_{wbc} + I_{vbc} \cdot TF(q \rightarrow exp) \right] \cdot B_i \quad (4.31)$$

Για το γάλα:

$$TF(q \rightarrow milk) = \left[f_{gw}^w \cdot I_{wdc} + I_{vdc} \cdot TF(q \rightarrow exp) \right] \cdot B_k \quad (4.32)$$

Για τα αυγά:

$$TF(q \rightarrow eggs) = \left[f_{gw}^w \cdot I_{wh} + I_{vh} \cdot TF(q \rightarrow exp) \right] \cdot B_e \quad (4.33)$$

όπου:

TF(q→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
f_{q}^w :	το κλάσμα των αναγκών σε νερό που παρέχονται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)
I_{wbc} :	η κατάποση νερού από τα βοοειδή (L/day)
I_{vbc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
TF(q→exp):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας των εκτεθειμένων προϊόντων στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.10)
B_i :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
TF(q→milk):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
I_{wdc} :	η κατάποση νερού από γαλακτοκόμο βοοειδή (L/day)
I_{vdc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B_k :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
TF(q→eggs):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
I_{wh} :	η κατάποση νερού από την κότα (L/day)
I_{vh} :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
B_e :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)

γ. Παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων – Έδαφος στα ζωικά προϊόντα

Η λήψη κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από τις χημικές ουσίες από το επιφανειακό και την ριζώδη-ζώνη του εδάφους περιλαμβάνει την μεταφορά των χημικών ουσιών από το έδαφος μέσω της κατάποσης εδάφους από το κρέας, την γαλακτοκομική-παραγωγή των ζώων και τα αυγά των πουλερικών και μέσω της κατανάλωσης τροφής που έχει λάβει αυτές τις χημικές ουσίες από το έδαφος. Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για το επιφανειακό έδαφος στα ζωικά προϊόντα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(g \rightarrow meat) = [I_{sc} + I_{vbc} \cdot K_{ps}^{rain}] \cdot B_t \quad (4.34)$$

Για το γάλα:

$$TF(g \rightarrow milk) = [I_{sc} + I_{vdc} \cdot K_{ps}^{rain}] \cdot B_k \quad (4.35)$$

Για τα αυγά:

$$TF(g \rightarrow eggs) = [I_{sh} + I_{vh} \cdot K_{ps}^{rain}] \cdot B_e \quad (4.36)$$

όπου:

TF(g→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος
I_{sc} :	η κατάποση εδάφους από τα βοοειδή (kg/day)
I_{vbc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
K_{ps}^{rain} :	ο συντελεστής κατανομής φυτών-εδάφους για το επιφανειακό έδαφος λόγω του πιτσιλίσματος της βροχής, ισοδύναμο με την αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στην βλάστηση της βοσκής (εκτεθειμένα προϊόντα) στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (kg εδάφους/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
B_t :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
TF(g→milk):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος
I_{vdc} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
B_k :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
TF(g→eggs):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος
I_{sh} :	η κατάποση εδάφους από την κότα (kg/day)
I_{vh} :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
B_e :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)

Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TFs, για την ριζώδη-ζώνη του εδάφους στα ζωικά προϊόντα υπολογίζονται ως εξής:

Για το κρέας:

$$TF(s \rightarrow meat) = (I_{vbc} \cdot K_{ps}) \cdot B_t \quad (4.37)$$

Για το γάλα:

$$TF(s \rightarrow milk) = (I_{vdc} \cdot K_{ps}) \cdot B_k \quad (4.38)$$

Για τα αυγά:

$$TF(s \rightarrow eggs) = (I_{vh} \cdot K_{ps}) \cdot B_e \quad (4.39)$$

όπου:

TF(s→meat):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους ο συντελεστής κατανομής φυτών-εδάφους από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους στα υπέργεια μέρη του φυτού, ισοδύναμο με την αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στην τροφή στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (kg εδάφους/kg φρέσκιας μάζας φυτών)
K_{ps} :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από τα βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
I_{vbc} :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην λήψη αυτού του χημικού από τα βοοειδή (ημέρα/kg κρέας)
B_t :	η ημερήσια λήψη τροφής (βοσκή) από γαλακτοκόμο βοοειδή (kg φρέσκια μάζα/ημέρα)
I_{vdc} :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από γαλακτοκόμο βοοειδή (ημέρα/kg γάλα)
B_k :	η ημερήσια λήψη τροφής από την κότα (kg φρέσκιας μάζας/ημέρα)
I_{vh} :	ο παράγοντας βιομεταφοράς, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο αυγό στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την κότα (ημέρα/kg αυγού)
B_e :	

δ. Υπολογισμός της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας, τα αυγά και τα γαλακτοκομικά προϊόντα

Η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στο κρέας λόγω της μεταφοράς αυτής της χημικής ουσίας από τα περιβαλλοντικά τμήματα του περιβαλλοντικού αέρα, του επιφανειακού και υπόγειου νερού, του επιφανειακού εδάφους και της ριζώδης-ζώνης του εδάφους υπολογίζεται από την εξίσωση:

$$C_{meat} = TF(a \rightarrow meat) \cdot C_a + TF(ap \rightarrow meat) \cdot C_{ap} + TF(w \rightarrow meat) \cdot C_w \\ + TF(q \rightarrow meat) \cdot C_q + TF(g \rightarrow meat) \cdot C_g + TF(s \rightarrow meat) \cdot C_s \quad (4.40)$$

όπου:

C_{meat} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο κρέας (mg/kg κρέας)
$TF(a \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού αέρα (εξίσωση 4.22)
C_a :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό υπαίθριο αέρα (mg/m ³)
$TF(ap \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας (mg/kg κρέας) στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια (ή σκόνη) του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (εξίσωση 4.25)
C_{ap} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην σκόνη του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
$TF(w \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας (mg/kg κρέας) στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.28)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
$TF(q \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (εξίσωση 4.31)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
$TF(g \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (εξίσωση 4.34)
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
$TF(s \rightarrow meat)$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο κρέας στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (εξίσωση 4.37)
C_s :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

Η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στο γάλα και στα γαλακτοκομικά προϊόντα από την μεταφορά αυτής της χημικής ουσίας από τον περιβαλλοντικό αέρα, το επιφανειακό και υπόγειο νερό, το επιφανειακό έδαφος και την ριζώδη-ζώνη του εδάφους δίνεται από την εξίσωση:

$$C_{milk} = TF(a \rightarrow milk) \cdot C_a + TF(ap \rightarrow milk) \cdot C_{ap} + TF(w \rightarrow milk) \cdot C_w \\ + TF(q \rightarrow milk) \cdot C_q + TF(g \rightarrow milk) \cdot C_g + TF(s \rightarrow milk) \cdot C_s \quad (4.41)$$

όπου:

C_{milk} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο γάλα και στα γαλακτοκομικά προϊόντα (mg/kg γάλατος)
$TF(a \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού αέρα (εξίσωση 4.23)
C_a :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό υπαίθριο αέρα (mg/m ³)
$TF(ap \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια (ή σκόνη) του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (εξίσωση 4.26)
C_{ap} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην σκόνη του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
$TF(w \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.29)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
$TF(q \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (εξίσωση 4.32)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
$TF(g \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (εξίσωση 4.35)
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
$TF(s \rightarrow \text{milk})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (εξίσωση 4.38)
C_s :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

Η συγκέντρωση μιας χημικής ουσίας στα αυγά από την μεταφορά αυτής της χημικής ουσίας από τον περιβαλλοντικό αέρα, το επιφανειακό και υπόγειο νερό, το επιφανειακό έδαφος και την ριζώδη-ζώνη του εδάφους δίνεται από την εξίσωση:

$$C_{\text{eggs}} = TF(a \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_a + TF(ap \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_{ap} + TF(w \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_w + TF(q \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_q + TF(g \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_g + TF(s \rightarrow \text{eggs}) \cdot C_s \quad (4.42)$$

όπου:

C_{eggs} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα αυγά (mg/kg αυγά)
$TF(a \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην αέρια φάση του περιβαλλοντικού αέρα (εξίσωση 4.24)
C_a :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό υπαίθριο αέρα (mg/m ³)
$TF(ap \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα σωματίδια (ή σκόνη) του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (εξίσωση 4.27)
C_{ap} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην σκόνη του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (mg/m ³)
$TF(w \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (εξίσωση 4.30)

C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
$TF(q \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (εξίσωση 4.33)
C_q :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό (mg/L)
$TF(g \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (εξίσωση 4.36)
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)
$TF(s \rightarrow \text{eggs})$:	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα αυγά στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (εξίσωση 4.39)
C_s :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

ε. Υπολογισμός της λήψης της χημικής ουσίας μέσω της κατανάλωσης μολυσμένου κρέατος, αυγών και γαλακτοκομικών προϊόντων

Η λήψη μολυσμένου κρέατος υπολογίζεται με την χρησιμοποίηση συγκεκριμένων παραμέτρων για το κρέας στην **εξίσωση 4.21**:

$$Intake_{meat} = C_{meat} \cdot \left[\frac{IR_{meat}}{BW} \right] \cdot f_{local}^{mt} \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.43)$$

όπου:

$Intake_{meat}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένου κρέατος (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{meat} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο κρέας, η οποία υπολογίζεται από την εξίσωση 4.40 (mg/kg κρέατος)
IR_{meat} :	ο ρυθμός κατανάλωσης κρέατος (kg κρέας/ημέρα)
BW :	σωματικό βάρος (kg)
f_{local}^{mt} :	ή FI, το κλάσμα του κρέατος που λαμβάνεται από σπιτική παραγωγή ή τοπική πηγή
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Η παράγραφος 6.6.4 του RAGS/HHEM δίνει μια τιμή για το κλάσμα της σπιτικής παραγωγής βοδινού κρέατος που λαμβάνεται από τους τοπικούς κάτοικους (FI).

Η λήψη μολυσμένου γάλακτος και γαλακτοκομικών προϊόντων υπολογίζεται με την χρησιμοποίηση συγκεκριμένων παραμέτρων για τα γαλακτοκομικά προϊόντα στην **εξίσωση 4.21**:

$$Intake_{milk} = C_{milk} \cdot \left[\frac{IR_{milk}}{BW} \right] \cdot f_{local}^{mk} \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.44)$$

όπου:

$Intake_{milk}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένου γάλακτος (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{milk} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο γάλα, η οποία υπολογίζεται από την εξίσωση 4.41 (mg/kg γάλακτος)
IR_{milk} :	ο ρυθμός κατανάλωσης γάλακτος/γαλακτοκομικών προϊόντων (kg γάλα/ημέρα)
BW :	σωματικό βάρος (kg)
f_{local}^{mk} :	ή FI, το κλάσμα του γάλακτος που λαμβάνεται από σπιτική παραγωγή ή τοπική πηγή
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Η λήψη μολυσμένων αυγών υπολογίζεται με την χρησιμοποίηση συγκεκριμένων παραμέτρων για τα αυγά στην **εξίσωση 4.21**:

$$Intake_{eggs} = C_{eggs} \cdot \left[\frac{IR_{eggs}}{BW} \right] \cdot f_{local}^{egg} \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.45)$$

όπου:

$Intake_{eggs}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένων αυγών (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{eggs} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα αυγά, η οποία υπολογίζεται από την εξίσωση 4.42 (mg/kg αυγών)
IR_{eggs} :	ο ρυθμός κατανάλωσης αυγών (kg αυγά/ημέρα)
BW :	το σωματικό βάρος (kg)
f_{local}^{egg} :	ή FI, το κλάσμα των αυγών που λαμβάνεται από σπιτική παραγωγή ή τοπική πηγή
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Αθροίζοντας τις λήψεις του κρέατος, του γάλακτος/γαλακτοκομικών προϊόντων και των αυγών που υπολογίστηκαν παραπάνω, εξάγεται η λήψη για το μολυσμένο κρέας, το γάλα και τα αυγά (οριζόμενη ως $Intake_{mke}$ στην **εξίσωση 4.21**):

$$Intake_{mke} = Intake_{meat} + Intake_{milk} + Intake_{eggs} \quad (4.46)$$

στ. Κατάποση νερού κατά την διάρκεια κολύμβησης

Η εξίσωση του RAGS/HHEM για την ακούσια κατάποση μιας χημικής ουσίας κατά την διάρκεια κολύμβησης σε μια μολυσμένη επιφάνεια νερού (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-36) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Intake_{swim} = C_w \cdot \left[\frac{IR_{swim}}{BW} \right] \cdot ET_{sw} \cdot \frac{EF_{sw} \cdot ED}{AT} \quad (4.47)$$

όπου:

$Intake_{swim}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της κατάποσης επιφανειακού νερού κατά την διάρκεια κολύμβησης (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
IR_{swim} :	ο ρυθμός κατάποσης (L/ώρα)
BW :	το σωματικό βάρος (kg)
ET_{sw} :	ο χρόνος έκθεσης (ώρες στο μολυσμένο νερό/ημέρα)
EF_{sw} :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Κανένας παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TF, δεν είναι απαραίτητος για την εκτίμηση της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης, δεδομένου ότι, για αυτήν την λήψη, το περιβαλλοντικό τμήμα του επιφανειακού νερού είναι το μέσο έκθεσης. Η εξίσωση αυτή του CalTOX είναι ουσιαστικά ίδια με την εξίσωση του RAGS/HHEM και περιλαμβάνει ειδικούς παράγοντες οδών, ET_{sw} , που εκφράζεται ως ώρες κολύμβησης/ημέρα και EF_{sw} , που εκφράζεται ως ημέρες κολύμβησης/έτος.

ζ. Κατανάλωση μητρικού γάλακτος

Δεν υπάρχει καμία εξίσωση στο RAGS/HHEM για την κατανάλωση μητρικού γάλακτος από τα νήπια. Εντούτοις, οι θηλάζουσες γυναίκες μπορούν να μεταφέρουν στο γάλα του στήθους τους χημικές ουσίες από την λήψη τους από όλες τις οδούς (κατάποση, εισπνοή, και επαφή μέσω του δέρματος). Πρέπει να εξεταστούν όλες οι οδοί στον καθορισμό της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα του στήθους. Η λήψη των

νηπίων είναι κατά εκατό τοις εκατό κατάποση μητρικού γάλακτος. Η εξίσωση λήψης είναι:

$$Intake_{milk} = C_{bmilk} \cdot \left[\frac{IR_{bm}}{BW} \right] \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.48)$$

όπου:

$Intake_{milk}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα νήπιο μέσω της κατανάλωσης μολυσμένου μητρικού γάλακτος (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{bmilk} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο μητρικό γάλα (mg/L)
IR_{bm} :	ο ρυθμός κατανάλωσης μητρικού γάλακτος (L/ημέρα)
BW :	το σωματικό βάρος (kg)
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Για την λήψη αυτήν ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων, TF, είναι η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο μέσο έκθεσης του γάλακτος του στήθους στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο "περιβαλλοντικό τμήμα" της μητέρας λόγω της έκθεσής της στην χημική ουσία σε κάθε ένα από τα περιβαλλοντικά τμήματα, του περιβαλλοντικού αέρα, του νερού και του εδάφους. Ο TF σε αυτήν την περίπτωση είναι ο παράγοντας κατανομής, B_{bmk} , η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα της μητέρας στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την μητέρα. Η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο γάλα του στήθους μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$C_{bmilk} = I_{mo} \cdot BW_{mo} \cdot B_{bmk} \quad (4.49)$$

όπου:

C_{bmilk} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο γάλα του στήθους λόγω της λήψης της χημικής ουσίας από τη μητέρα από ένα συγκεκριμένο περιβαλλοντικό τμήμα (mg/kg γάλακτος)
I_{mo} :	το άθροισμα όλων των λήψεων της χημικής ουσίας από ένα συγκεκριμένο περιβαλλοντικό τμήμα από την μητέρα (mg/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
BW_{mo} :	το σωματικό βάρος της μητέρας (kg)
B_{bmk} :	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα της μητέρας στην λήψη αυτής της χημικής ουσίας από την μητέρα (ημέρες/kg γάλακτος)

Μετά από τον υπολογισμό της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο γάλα του στήθους ως αποτέλεσμα κάθε οδού στην οποία η μητέρα έχει ενδεχομένως εκτεθεί, η συνολική συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο γάλα του στήθους δίνεται με το άθροισμα των αποτελεσμάτων από κάθε οδό. Αυτό το άθροισμα εισάγεται ως δεδομένο για το $C_{\text{b milk}}$ στην **εξίσωση 4.48**. Όλες οι οδοί έκθεσης που εξετάζονται στο κεφάλαιο αυτό (κατάποση, εισπνοή, επαφή μέσω του δέρματος) υποτίθεται ότι συνέβαλαν στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην μητέρα.

4.3.2 Η ΟΔΟΣ ΤΗΣ ΕΙΣΠΝΟΗΣ

Οι μέθοδοι που παρέχονται σε αυτό το υποκεφάλαιο καλύπτουν το κενό που υπάρχει στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) σχετικά με την λήψη χημικών ουσιών μέσω της εισπνοής. Η παράγραφος 6.5.4 του RAGS/HHEM αναφέρεται στις προσεγγίσεις του ελέγχου και της μοντελοποίησης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό των συγκεντρώσεων έκθεσης στον αέρα. Εντούτοις, αυτή η παράγραφος του RAGS, κατά ένα μεγάλο μέρος, αναφέρει άλλες κατευθυντήριες οδηγίες, η οποίες είναι συλλογή μεθόδων, και δεν δίνεται καμία συγκεκριμένη κατευθυντήρια οδηγία. Το RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, παράγραφος 6.6.3) δίνει επίσης μια συνοπτική γενική αναφορά σχετικά με τον υπολογισμό της αέριας λήψης αλλά δεν προβαίνει σε συστάσεις για τα συγκεκριμένα σενάρια έκθεσης. Το μοντέλο CalTOX παρέχει λεπτομερείς μεθόδους για τον υπολογισμό των αέριων λήψεων για διάφορες πιθανές οδούς έκθεσης.

Κατ' αρχάς, η δομή των εξισώσεων εισπνοής του CalTOX καθορίζει ρητά τρεις θέσεις, στις οποίες οι ενδεχομένως εκτεθειμένοι άνθρωποι θα μπορούσαν να εισπνεύσουν τον αέρα που μολύνθηκε από τις χημικές ουσίες που προέρχονται από το έδαφος σε μια περιοχή. Αυτές οι τρεις θέσεις είναι ο υπαίθριος χώρος, ο εσωτερικός χώρος και το λουτρό. Ο υπαίθριος αέρας είναι ο αέρας ακριβώς πάνω από την περιοχή. Ο εσωτερικός αέρας είναι ο αέρας σε ένα κτίριο αποκλείοντας το λουτρό. Ο αέρας του λουτρού είναι ο αέρας στο λουτρό σε ένα κτίριο της περιοχής. Το λουτρό είναι διαχωρισμένο, επειδή η χρήση του νερού κατά την διάρκεια ενός μπάνιου μπορεί να αυξήσει σε μεγάλο βαθμό την συγκέντρωση των πτητικών χημικών ουσιών στο λουτρό. Με τον καθορισμό του εσωτερικού αέρα και του αέρα των λουτρών το μοντέλο CalTOX επεκτείνει την καθοδήγηση του RAGS.

Μια δεύτερη επέκταση των κατευθυντήριων οδηγιών του RAGS προκύπτει από τις πολλαπλές οδούς από τις οποίες ο αέρας σε αυτές τις τρεις θέσεις μπορεί να μολυνθεί. Το CalTOX παρέχει ρητές οδηγίες για τον συσχετισμό της συγκέντρωσης του αέρα στις τρεις θέσεις έκθεσης με τις μετρημένες ή μοντελοποιημένες συγκεντρώσεις στα διάφορα περιβαλλοντικά τμήματα. Υπάρχουν έξι περιβαλλοντικά τμήματα που μπορούν να παρέχουν τις χημικές ουσίες στον αέρα που εισπνέονται από τους ανθρώπους. Τα επίπεδα των συγκεντρώσεων σε αυτά τα τμήματα παριστάνονται με κεφαλαίο *C* που ακολουθείται από ένα γράμμα, το οποίο καθορίζει το τμήμα. Τα περιβαλλοντικά τμήματα είναι η μοριακή φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (*ap*), η αέρια φάση του περιβαλλοντικού υπαίθριου αέρα (*a*), το επιφανειακό έδαφος (*g*), η ριζώδη-ζώνη του εδάφους (*s*), οι πτητικές χημικές ουσίες που διαλύονται στα υπόγεια νερά (*q*) και οι πτητικές χημικές ουσίες που διαλύονται στο επιφανειακό νερό (*w*).

Ο υπαίθριος αέρας έχει χημικές ουσίες που βρίσκονται στη μοριακή φάση (*Cap*) και στην αέρια φάση (*Ca*) όπως περιγράφεται στο HHEM. Οι χημικοί μολυσματικοί παράγοντες στον εσωτερικό αέρα μπορούν να προέλθουν από τις ακόλουθες πηγές:

- 1) υπαίθριοι ατμοί του αέρα (*Ca*)
- 2) υπαίθρια αερομεταφερόμενα σωματίδια (*Cap*)
- 3) εσωτερικά αερομεταφερόμενα σωματίδια που προέρχονται από το χώμα του επιφανειακού εδάφους (*Cg*)
- 4) ατμοί εσωτερικού αέρα που μεταναστεύουν από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους μέσω των υπογείων, των τσιμεντένιων επιστρώσεων και του χώρου κάτω από το σπίτι (*Cs*)
- 5) ατμοί εσωτερικού αέρα που εξατμίζονται από το υπόγειο νερό που χρησιμοποιείται ως νερό στις βρύσες της κουζίνας και του πλυσταριού (*Cq*)
- 6) ατμοί εσωτερικού αέρα που εξατμίζονται από το επιφανειακό νερό που χρησιμοποιείται ως νερό στις βρύσες της κουζίνας και του πλυσταριού (*Cw*).

Ο αέρας του λουτρού μπορεί να περιέχει συγκεντρώσεις πτητικών πλωτών χημικών ουσιών σε μεγαλύτερη ποσότητα από οποιοδήποτε άλλο μέρος του σπιτιού, λόγω του μπάνιου ή/και του ντους. Επομένως, η έκθεση μέσω της εισπνοής στο λουτρό αντιμετωπίζεται ανεξάρτητα από την έκθεση στο υπόλοιπο μέρος του σπιτιού. Αυτές οι

πτητικές ουσίες μπορούν να προέλθουν είτε από το υπόγειο νερό (C_g) είτε από το επιφανειακό νερό (C_w) ανάλογα με την προέλευση του νερού ύδρευσης.

Το RAGS/HHEM συστήνει την χρήση της εξίσωσης για την εισπνοή των αέριων χημικών ουσιών (U.S. EPA 1989b, σελίδα 6-44) που τροποποιείται κατάλληλα για τον υπολογισμό της λήψης μέσω της εισπνοής της σκόνης. Αυτή η εξίσωση είναι:

$$Intake_{air} = C_{air} \cdot \left[\frac{IR_{air}}{BW} \right] \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \quad (4.50)$$

όπου:

$Intake_{air}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της εισπνοής μολυσμένου αέρα (mg/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_{air} :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στον αέρα (mg/m ³ αέρα)
IR_{air} :	ο ρυθμός εισπνοής (m ³ αέρα/ημέρα)
BW :	το σωματικό βάρος (kg)
EF :	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)

Για τους σκοπούς αυτού του κεφαλαίου θα θεωρήσουμε την παραπάνω εξίσωση ότι αποτελείται από τρία μέρη. Το τρίτο μέρος, $(EF \cdot ED)/AT$, είναι η χρονική εκτίμηση που είναι ανεξάρτητη από την οδό της εισπνοής και αφορά το εάν η χημική ουσία είναι καρκινογόνος ουσία. Επομένως, η ακόλουθη ανάλυση σχετικά με τις οδούς εισπνοής θα αγνοήσει αυτούς τους χρονικούς παράγοντες και θα επικεντρωθεί στα άλλα δύο μέρη: τον μέσο ημερήσιο ρυθμό εισπνοής, IR_{air}/BW , και την συγκέντρωση στον εισπνεόμενο αέρα, C_{air} .

Ο μέσος ημερήσιος ρυθμός εισπνοής και η συγκέντρωση στον εισπνεόμενο αέρα εξαρτώνται και τα δύο από την τοποθεσία στην οποία ο αέρας εισπνέετε. Το υπόλοιπο μέρος της εισπνοής θα διαιρεθεί σε τρία τμήμα: υπαίθρια έκθεση, εσωτερική έκθεση και έκθεση στο λουτρό. Ο μέσος ημερήσιος ρυθμός εισπνοής (m³ αέρα/ημέρα) διαφέρει για κάθε μια από τις τρεις εκθέσεις. Η εξίσωση που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του μέσου ημερήσιου ρυθμού εισπνοής παρουσιάζεται στην αρχή κάθε τμήματος. Κατόπιν κάθε τμήμα διαιρείται σε διαφορετικό αριθμό υποενοτήτων για την περιγραφή των παραγόντων μεταφοράς μεταξύ των μέσων. Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων

(TF) συσχετίζουν την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στα έξι περιβαλλοντικά τμήματα με την συγκέντρωση του υπαίθριου αέρα, του εσωτερικού αέρα και του αέρα των λουτρών. Οι TFs είναι αναλογίες των συγκεντρώσεων του εισπνεόμενου αέρα στις συγκεντρώσεις των περιβαλλοντικών τμημάτων. Ο αριθμός των υποενοτήτων εξαρτάται από τον αριθμό των οδών από τις οποίες οι χημικές ουσίες μπορούν να φθάσουν στον αέρα στην τοποθεσία έκθεσης από τα περιβαλλοντικά μέσα.

4.3.2.1 Εισπνοή υπαίθριου αέρα

Η εξίσωση για την λήψη μέσω της εισπνοής, **εξίσωση 4.50**, απαιτεί μια εκτίμηση του μέσου ημερήσιου ρυθμού εισπνοής (IR/BW) για τον υπολογισμό της λήψης λόγω της εισπνοής αέρα. Η εξίσωση για τον υπολογισμό του υπαίθριου ημερήσιου ρυθμού λήψης IR_{outair}/BW είναι η ακόλουθη:

$$\frac{IR_{outair}}{BW} = (ET_{out} \cdot f_{out,l} \cdot BR_l) + [ET_{out} \cdot (1 - f_{out,l}) \cdot BR_h] \quad (4.51)$$

όπου:

- IR_{outair}/BW : ο υπαίθριος ρυθμός εισπνοής ανά kg σωματικού βάρους (m^3 αέρας/kg ανά ημέρα)
 ET_{out} : οι συνολικές ώρες ανά ημέρα στον υπαίθριο χώρο στον μολυσμένο τόπο (ώρες/ημέρα)
 $f_{out,l}$: το κλάσμα των συνολικών ωρών στον υπαίθριο χώρο με έναν ρυθμό αναπνοής που συνδέεται με ελαφριά δραστηριότητα. Ο υπόλοιπος χρόνος θεωρείται με έναν ρυθμό αναπνοής που συνδέεται με υψηλή δραστηριότητα (αδιάστατο)
 BR_l : ο ρυθμός αναπνοής ελαφριάς δραστηριότητας ανά kg σωματικού βάρους (m^3/kg ανά ώρα)
 BR_h : ο ρυθμός αναπνοής υψηλής δραστηριότητας ανά kg σωματικού βάρους (m^3/kg ανά ώρα)

Αυτή η εξίσωση παρέχει την μέθοδο με την οποία υπολογίζεται ο μέσος ημερήσιος υπαίθριος ρυθμός εισπνοής. Επιτρέπει δύο διαφορετικούς ρυθμούς αναπνοής ανάλογα με το επίπεδο της φυσικής άσκησης. Αυτό είναι το δεύτερο μέρος της **εξίσωσης 4.50**.

Το πρώτο μέρος της **εξίσωσης 4.50** είναι η συγκέντρωση στον εισπνεόμενο υπαίθριο αέρα, C_{air} . Οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) χρησιμοποιούνται για να συσχετίσουν την συγκέντρωση στο μέσο έκθεσης, εισπνεόμενος αέρας, με τα

περιβαλλοντικά μέσα των τμημάτων. Η ακόλουθη υποενότητα παρουσιάζει τις εξισώσεις που χρησιμοποιούνται για να εξαχθούν οι TFs για τον υπαίθριο αέρα και τα σωματίδια των τμημάτων.

α. Οι σκόνης/σωματίδια του υπαίθριου αέρα

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX θεωρεί ότι η σχέση μεταξύ της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στην εισπνεόμενη υπαίθρια σκόνη/σωματίδια είναι ισότιμη με το προϊόν του περιβαλλοντικού τμήματος των αερομεταφερόμενων σωματιδίων (C_{ap}) και ενός παράγοντα μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF). Αυτός ο TF καθορίζεται στην ακόλουθη εξίσωση:

$$TF(ap \rightarrow outair) = 1 \quad (4.52)$$

Ο TF είναι ίσος με το 1 επειδή η εισπνεόμενη υπαίθρια σκόνη είναι ίση με τη μοριακή φάση που μετριέται ή μοντελοποιείται στον υπαίθριο αέρα. Αυτός ο TF μπορεί να φανεί περιττός, αλλά η υπόθεση ότι ο αέρας έκθεσης είναι ίσος με τον περιβαλλοντικό αέρα πρέπει να δηλωθεί ρητά.

β. Αέρια υπαίθρια φάση μιας χημικής ουσίας

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX θεωρεί ότι η συγκέντρωση της χημικής ουσίας του εισπνεόμενου υπαίθριου ατμού είναι ίση με το προϊόν του περιβαλλοντικού τμήματος της αέριας φάσης (C_a) και ενός παράγοντα μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF). Αυτός ο TF καθορίζεται στην ακόλουθη εξίσωση:

$$TF(a \rightarrow outair) = 1 \quad (4.52)$$

Ο TF είναι ίσος με το 1, επειδή ο εισπνεόμενος υπαίθριος ατμός είναι ίσος με την συγκέντρωση του ατμού που μετριέται ή μοντελοποιείται στον υπαίθριο αέρα.

4.3.2.2 Εισπνοή εσωτερικού αέρα, αποκλείοντας τον αέρα των λουτρών

Αυτό το τμήμα περιγράφει τις εξισώσεις που υπολογίζουν εκείνο το κλάσμα της μέσης ημερήσιας λήψης μέσω της εισπνοής που πραγματοποιείται στον εσωτερικό χώρο, αποκλείοντας τις ενδεχομένως υψηλότερες εκθέσεις που μπορούν να εμφανιστούν στο λουτρό. Η εξίσωση για την λήψη μέσω της εισπνοής, **εξίσωση 4.50**, απαιτεί μια εκτίμηση του μέσου ημερήσιου ρυθμού εισπνοής (IR/BW) για τον υπολογισμό της λήψης λόγω της εισπνοής του αέρα. Η εξίσωση για τον υπολογισμό του εσωτερικού ημερήσιου ρυθμού λήψης IR_{inair}/BW είναι η ακόλουθη:

$$\frac{IR_{inair}}{BW} = \left[(ET_{ind} - ET_{sb}) \cdot f_{ind,l} \cdot BR_l \right] + \left[(ET_{ind} - ET_{sb}) \cdot (1 - f_{ind,l}) \cdot BR_s \right] \quad (4.53)$$

όπου:

- IR_{outair}/BW : ο εσωτερικός ρυθμός εισπνοής ανά kg σωματικού βάρους (m^3 αέρας/kg ανά ημέρα)
 ET_{ind} : οι συνολικές ώρες ανά ημέρα στον εσωτερικό χώρο συμπεριλαμβανομένου και του λουτρού στον μολυσμένο τόπο (ώρες/ημέρα)
 ET_{sb} : οι συνολικές ώρες ανά ημέρα στο λουτρό στον μολυσμένο τόπο (ώρες/ημέρα)
 $f_{ind,l}$: το κλάσμα των συνολικών ωρών στον εσωτερικό χώρο με έναν ρυθμό αναπνοής που συνδέεται με ελαφριά δραστηριότητα. Ο υπόλοιπος χρόνος θεωρείται με έναν ρυθμό αναπνοής που συνδέεται με τον ύπνο (αδιάστατο)
 BR_l : ο ρυθμός αναπνοής ελαφριάς δραστηριότητας ανά kg σωματικού βάρους (m^3/kg ανά ώρα)
 BR_s : ο ρυθμός αναπνοής στον ύπνο ανά kg σωματικού βάρους (m^3/kg ανά ώρα)

Και τα έξι περιβαλλοντικά τμήματα μπορούν θεωρητικά να συμβάλουν στον εσωτερικό αέρα. Επομένως, παρακάτω παρουσιάζονται έξι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων για τον εσωτερικό αέρα.

α. Εσωτερική μοριακή φάση από τα υπαίθρια αερομεταφερόμενα σωματίδια

Αυτός ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) συσχετίζει τον εσωτερικό αέρα και τις υπαίθριες μοριακές συγκεντρώσεις. Αυτός ο TF ορίζεται στην ακόλουθη εξίσωση:

$$TF(ap \rightarrow inair) = 1 \quad (4.55)$$

Αυτός ο TF είναι ίσος με το 1, επειδή όλη η μοριακή φάση που δέσμευσε την μετρημένη ή μοντελοποιημένη χημική ουσία στον υπαίθριο αέρα υποτίθεται ότι μεταφέρθηκε στον εσωτερικό χώρο.

β. Εσωτερική αέρια φάση από τους υπαίθριους ατμούς του αέρα

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX θεωρεί ότι η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στον εισπνεόμενο εσωτερικό ατμό είναι ίση με το προϊόν του περιβαλλοντικού τμήματος του αέρα (Ca) και ενός παράγοντα μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF). Αυτός ο TF ορίζεται στην ακόλουθη εξίσωση:

$$TF(a \rightarrow inair) = 1 \quad (4.56)$$

Ο TF είναι ίσος με το 1, επειδή όλη η μοριακή φάση που δέσμευσε την μετρημένη ή μοντελοποιημένη χημική ουσία στον υπαίθριο αέρα υποτίθεται ότι μεταφέρθηκε στον εσωτερικό χώρο.

γ. Εισπνοή σκόνης/σωματιδίων στον εσωτερικό χώρο που εισάγονται από το υπαίθριο επιφανειακό έδαφος

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX θεωρεί ότι το μολυσμένο επιφανειακό έδαφος εισέρχεται στον εσωτερικό χώρο, γίνεται μέρος του εσωτερικού φορτίου σκόνης και εισπνέετε. Το μοντέλο έκθεσης CalTOX διαμορφώνει την σχέση μεταξύ της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στην εισπνεόμενη εσωτερική σκόνη ίση με το προϊόν της επιφανειακής συγκέντρωσης του εδάφους (C_g) και ενός παράγοντα μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF). Αυτός ο TF ορίζεται από την ακόλουθη εξίσωση:

$$TF(g \rightarrow inair) = \frac{Dust_{ind} \cdot C_q}{C_g} \quad (4.57)$$

όπου:

$Dust_{ind}$: το εσωτερικό φορτίο σκόνης (kg εδάφους/ m^3)

C_q : η συγκέντρωση στο επιφανειακό έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg εδάφους)

Η συγκέντρωση των αερομεταφερόμενων μορίων στο εσωτερικό περιλαμβάνει τα αερομεταφερόμενα μόρια από τον υπαίθριο αέρα και την αιωρούμενη σκόνη από το έδαφος.

δ. *Εσωτερικοί ατμοί χημικής ουσίας μεταφερόμενης από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους*

Θεωρείται ότι το κτίριο είναι στο μολυσμένο έδαφος, έχοντας θεμέλια ένα μέτρο μέσα στην μολυσμένη ριζώδη-ζώνη του εδάφους, οπότε μπορεί να εμφανιστεί η μετανάστευση ατμού των πτητικών χημικών ουσιών στην κατασκευή. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων TF είναι η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στη αέρια φάση του προσωπικού αέρα, αποδοτέα στη μετανάστευση αερίων του εδάφους, στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους, C_s . Ο TF καθορίζεται ως εξής.

$$TF(s \rightarrow inair) = \frac{K_d \cdot H}{RT} \cdot a_{inair} \quad (4.58)$$

όπου:

TF(s→inair):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στον εσωτερικό αέρα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους (mg/m ³ αέρα)/(mg/kg εδάφους)
K_d :	ο συντελεστής κατανομής μεταξύ ριζώδης-ζώνης του εδάφους/νερού (m ³ εδάφους/m ³ νερού)
H:	σταθερά του Henry (Pa·m ³ /mole)
R:	η παγκόσμια σταθερά των αερίων (Pa·L/mol·K)
T:	η θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin
a_{inair} :	η αναλογία της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους (mg/m ³) στην συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα (mg/m ³)

Η αναλογία της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους στην συγκέντρωση του εσωτερικού αέρα είναι βασισμένη άμεσα στην εργασία των Johnson και Ettinger (1991). Αυτή η αναλογία περιλαμβάνει την διαπερατότητα του εδάφους, την διάχυση και το μέγεθος των ρωγμών στα θεμέλια. Έχει μειωθεί σε μια ενιαία παράμετρο εισαγωγής δεδομένων, a_{inair} . Αυτό είναι μια αναλογία της συγκέντρωσης του αέρα του εδάφους, όχι συγκέντρωση σωματιδίων του εδάφους, στον αέρα του σπιτιού. Επομένως, η συγκέντρωση του αέρα του εδάφους πρέπει να υπολογιστεί από την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους. Αυτό ολοκληρώνεται θεωρώντας ότι ο

αέρας του εδάφους είναι σε χημική ισορροπία με την συγκέντρωση των σωματιδίων του εδάφους.

ε. *Χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το υπόγειο νερό στον εσωτερικό αέρα εκτός από το μπάνιο*

Οι χημικές ουσίες μπορούν να εξατμίζονται από το υπόγειο νερό στον εσωτερικό αέρα στα κατοικημένα σπίτια είτε από το πλυσταριό είτε από την κουζίνα. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) για την μεταφορά των χημικών ουσιών μέσω αυτής της οδού δίνεται από την εξίσωση που παρουσιάζεται παρακάτω:

$$TF(q \rightarrow \text{inair}) = f_q^w \cdot \frac{W_{\text{house}} \cdot \Phi_x(\text{house})}{VR_{\text{house}}} \quad (4.59)$$

όπου:

TF(q→inair):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στον εσωτερικό αέρα έξω από το μπάνιο από την χρήση οικιακού νερού στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό
f_q :	το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχονται από το υπόγειο νερό (αδιάστατο)
W_{house} :	ο ρυθμός χρήσης νερού για όλες τις οικιακές δραστηριότητες (L/hour)
VR_{house} :	ο μέσος ρυθμός εξαερισμού των σπιτιών (m^3/hour)
$\Phi_x(\text{house})$:	η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας μιας χημικής ουσίας από το νερό στον αέρα στο σπίτι (αδιάστατο)

Αυτή η εξίσωση λαμβάνεται από τους McKone και Bogen (1992). Τα W_{house} και VR_{house} είναι και οι δύο συγκεκριμένες παράμετροι σπιτιών. Το W_{house} , η ροή του νερού στο σπίτι, είναι ο ρυθμός στον οποίον το νερό μπαίνει στο σπίτι. Το VR_{house} , ο ρυθμός εξαερισμού, είναι ο ρυθμός στον οποίο ο αέρας εξέρχεται από το σπίτι. Η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας, $\Phi_x(\text{house})$, υποδεικνύει πόσο εύκολα η χημική ουσία γίνεται αερομεταφερόμενη από το τρεχούμενο νερό. Αυτή η χημική σχετική παράμετρος μπορεί να υπολογιστεί ως εξής:

$$\Phi_x(\text{house}) = 0.7 \cdot \frac{3 \cdot 10^6 (m^2/s)^{-2/3}}{\left[\frac{2.5}{D_l^{2/3}} + \frac{RT}{H \cdot D_a^{2/3}} \right]} \quad (4.60)$$

όπου:

- D_l : ο συντελεστής διάχυσης των μολυσματικών παραγόντων στο νερό (m^2/s)
 D_a : ο συντελεστής διάχυσης των μολυσματικών παραγόντων στον αέρα (m^2/s)
 R : η παγκόσμια σταθερά των αερίων (Pa-L/mol-k)
 T : η θερμοκρασία (βαθμοί Kelvin's)
 H : η σταθερά του Henry (Pa-L/mol)

Ο παράγοντας $\Phi_x(\text{house})$ υπολογίζεται σύμφωνα με τον McKone (1987).

στ. Χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το επιφανειακό νερό στον εσωτερικό αέρα εκτός από το μπάνιο

Οι χημικές ουσίες μπορούν να εξατμίζονται από το επιφανειακό νερό στον εσωτερικό αέρα στα κατοικημένα σπίτια είτε από το πλυσταριό είτε από την κουζίνα. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) για την μεταφορά των χημικών ουσιών μέσω αυτής της οδού δίνεται από την εξίσωση που παρουσιάζεται παρακάτω:

$$TF(w \rightarrow \text{inair}) = (1 - f_q^w) \cdot \frac{W_{\text{house}} \cdot \Phi_x(\text{house})}{VR_{\text{house}}} \quad (4.61)$$

όπου:

- $TF(w \rightarrow \text{inair})$: η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στον εσωτερικό αέρα έξω από το μπάνιο από την χρήση οικιακού νερού στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
 $1 - f_q^w$: το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχονται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)
 W_{house} : ο ρυθμός χρήσης νερού για όλες τις οικιακές δραστηριότητες (L/hour)
 VR_{house} : ο μέσος ρυθμός εξαερισμού των σπιτιών (m^3/hour)
 $\Phi_x(\text{house})$: η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας μιας χημικής ουσίας από το νερό στον αέρα στο σπίτι (αδιάστατο)

Οι παράμετροι W_{house} , VR_{house} και $\Phi_x(\text{house})$ συζητήθηκαν παραπάνω.

4.3.2.3 Εισπνοή του αέρα του μπάνιου

Αυτή η παράγραφος περιγράφει την εξίσωση, η οποία υπολογίζει εκείνο το κλάσμα της συνολικής λήψης μέσω της εισπνοής από τον αέρα του μπάνιου. Η εξίσωση για τη μέση λήψη μέσω της εισπνοής, **εξίσωση 4.50**, απαιτεί μια εκτίμηση του ημερήσιου ρυθμού εισπνοής (IR/BW). Η εξίσωση για τον υπολογισμό του μέσου ημερήσιου ρυθμού εισπνοής στο λουτρό ($IR_{bathair}/BW$) είναι η ακόλουθη:

$$\frac{IR_{bathair}}{BW} = ET_{sb} \cdot BR_l \quad (4.61)$$

όπου:

$IR_{bathair}/BW$: ο ρυθμός εισπνοής ανά kg σωματικού βάρους (m^3 αέρα/kg ανά ημέρα)
 ET_{sb} : οι συνολικές ώρες ανά ημέρα στο μπάνιο στην μολυσμένη περιοχή (ώρες/ημέρα)
 BR_l : ο ρυθμός αναπνοής ελαφριάς δραστηριότητας ανά kg σωματικού βάρους (m^3/kg ανά ώρα)

Αυτός ο ημερήσιος ρυθμός εισπνοής θα χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό των εκθέσεων κατά την διάρκεια ντους ή μπάνιου στο μολυσμένο νερό ύδρευσης. Το νερό ύδρευσης μπορεί να προέλθει είτε από το υπόγειο νερό είτε από το επιφανειακό νερό.

Οι εξισώσεις που περιγράφουν την μεταφορά των χημικών ουσιών μεταξύ των μέσων από το υπόγειο νερό και το επιφανειακό νερό στον αέρα του μπάνιου παρουσιάζονται στις δύο επόμενες υποενότητες.

α. Χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το υπόγειο νερό στον αέρα του μπάνιου

Οι χημικές ουσίες μπορούν να εξατμίζονται από το υπόγειο νερό στον αέρα του μπάνιου κατά την διάρκεια του ντους ή μπάνιου. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) για την μεταφορά των χημικών ουσιών δίνεται από την εξίσωση που παρουσιάζεται παρακάτω:

$$TF(q \rightarrow bathair) = f_q \cdot \frac{W_{bath} \cdot \Phi_x(bath)}{VR_{bath}} \quad (4.63)$$

όπου:

TF(q→bathair):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στον εσωτερικό αέρα του μπάνιου από την χρήση του νερού στο μπάνιο στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό
f_q :	το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχονται από το υπόγειο νερό (αδιάστατο)
W_{bath} :	ο ρυθμός χρήσης νερού για ντους/μπάνιο (L/hour)
VR_{bath} :	ο μέσος ρυθμός εξαερισμού των σπιτιών (m^3 /hour)
$\Phi_x(bath)$:	η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας μιας χημικής ουσίας από το νερό στον αέρα του μπάνιου (αδιάστατο)

Η **εξίσωση 4.63** λαμβάνεται από τους McKone και Bogen (1992). Τα W_{bath} και VR_{bath} είναι και οι δύο συγκεκριμένες παράμετροι για το μπάνιο. Το W_{bath} , η ροή του νερού στο ντους, είναι ο ρυθμός στον οποίον το νερό μπαίνει στο ντους. Το VR_{bath} , ο ρυθμός εξαερισμού, είναι ο ρυθμός στον οποίο ο αέρας εξέρχεται από το μπάνιο. Η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας, $\Phi_x(bath)$, υποδεικνύει πόσο εύκολα η χημική ουσία γίνεται αερομεταφερόμενη από το τρεχούμενο νερό. Αυτή η χημική σχετική παράμετρος μπορεί να υπολογιστεί ως εξής:

$$\Phi_x(bath) = 0.6 \cdot \frac{3 \cdot 10^6 (m^2/s)^{-2/3}}{\left[\frac{2.5}{D_l^{2/3}} + \frac{RT}{H \cdot D_a^{2/3}} \right]} \quad (4.64)$$

όπου:

D_l :	ο συντελεστής διάχυσης των μολυσματικών παραγόντων στο νερό (m^2/s)
D_a :	ο συντελεστής διάχυσης των μολυσματικών παραγόντων στον αέρα (m^2/s)
R:	η παγκόσμια σταθερά των αερίων (Pa-L/mol-k)
T:	η θερμοκρασία (βαθμοί Kelvin's)
H:	η σταθερά του Henry (Pa-L/mol)

Ο παράγοντας $\Phi_x(bath)$ υπολογίζεται σύμφωνα με τον McKone (1987).

β. Χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το επιφανειακό νερό στον αέρα του μπάνιου

Οι χημικές ουσίες μπορούν να εξατμίζονται από το επιφανειακό νερό στον αέρα του μπάνιου κατά την διάρκεια του ντους ή του μπάνιου. Ο παράγοντας μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TF) για την μεταφορά των χημικών ουσιών δίνεται από την εξίσωση που παρουσιάζεται παρακάτω:

$$TF(w \rightarrow bathair) = (1 - f_q^w) \cdot \frac{W_{bath} \cdot \Phi_x(bath)}{VR_{bath}} \quad (4.65)$$

όπου:

TF(w→bathair):	η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στον εσωτερικό αέρα από την χρήση του νερού του μπάνιου στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό
$1-f_q^w$:	το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχονται από το επιφανειακό νερό (αδιάστατο)
W_{bath} :	ο ρυθμός χρήσης νερού για όλες τις δραστηριότητες του μπάνιου (L/hour)
VR_{bath} :	ο μέσος ρυθμός εξαερισμού των σπιτιών (m ³ /hour)
$\Phi_x(bath)$:	η αποδοτικότητα της μεταφοράς μάζας μιας χημικής ουσίας από το νερό στον αέρα του μπάνιου (αδιάστατο)

Οι παράμετροι W_{bath} , VR_{bath} και $\Phi_x(bath)$ συζητήθηκαν παραπάνω.

4.3.3 ΕΠΑΦΗ ΜΕΣΩ ΤΟΥ ΔΕΡΜΑΤΟΣ

Στην πολλαπλή προσέγγιση των οδών του μοντέλου έκθεσης CalTOX, μια χημική ουσία στο μολυσμένο επιφανειακό έδαφος, το υπόγειο νερό και το επιφανειακό νερό μπορεί να μεταφερθεί στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος μέσω των μέσων έκθεσης του οικιακού εδάφους, του νερού ύδρευσης, ή του νερού κολύμβησης. Αυτή η μεταφορά δεν μπορεί να αντιμετωπιστεί απλά ως επαφή με το δέρμα, ούτε υπάρχει ικανοποιητική επιστημονική γνώση για τις περισσότερες χημικές ουσίες για να μοντελοποιηθεί η μεταφορά μέσω του δέρματος και μέσα στο αίμα. Άντ' αυτού, το μοντέλο έκθεσης CalTOX εξετάζει την λήψη της χημικής ουσίας από ένα μέσο έκθεσης στο δέρμα ως βάση για τον υπολογισμό της πιθανής δόσης. Κατά συνέπεια, η επαφή μέσω του δέρματος αντιμετωπίζεται διαφορετικά από ότι οι εκθέσεις μέσω της κατάποσης και της εισπνοής και στο RAGS/HHEM και στο μοντέλο CalTOX. Οι εξισώσεις του RAGS/HHEM για επαφή μέσω του δέρματος καλούνται υπολογισμοί της "απορροφημένης δόσης" (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-37, 6-41) ενώ, οι εξισώσεις του CalTOX είναι υπολογισμοί "της λήψης".

Για τις ακόλουθες εξισώσεις σχετικά με την έκθεση του δέρματος, οι παράγοντες μεταφοράς μεταξύ των μέσων (TFs) δεν απαιτούνται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στα μέσα έκθεσης, αφού οι συγκεντρώσεις της

χημικής ουσίας στα μέσα έκθεσης του οικιακού εδάφους, του νερού ύδρευσης, ή το νερό κολύμβησης μπορούν να θεωρηθούν ισοδύναμες με τις συγκεντρώσεις στα περιβαλλοντικά τμήματα του επιφανειακού εδάφους, του υπόγειου νερού και του επιφανειακού νερού.

Οι τιμές για την διάρκεια έκθεσης και τον μέσο χρόνο που χρησιμοποιούνται στις ακόλουθες εξισώσεις εξαρτώνται από το εάν η υπολογισμένη τιμή της λήψης θα χρησιμοποιηθεί για τον καθορισμό του κινδύνου καρκινογένεσης ή του κινδύνου για το χρόνιο σωματικό σύστημα υγείας.

4.3.3.1 Λήψη μέσω του δέρματος χημικής ουσίας κατά την διάρκεια μπάνιου ή κολύμβησης με μολυσμένο νερό

Η εξίσωση του RAGS/HHEM για την λήψη μέσω του δέρματος χημικών ουσιών κατά την διάρκεια μπάνιου ή κολύμβησης με μολυσμένο νερό (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-37) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Uptake_{bathsw} = C_w \cdot \frac{PC \cdot SA}{BW} \cdot ET \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.67)$$

όπου:

$Uptake_{bathsw}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της επαφής του δέρματος με το μολυσμένο νερό κατά την διάρκεια μπάνιου ή κολύμβησης (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό. Μπορεί επίσης να είναι και C_{drink} , συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό (mg/L)
PC:	η σταθερά δερματικής διαπερατότητας (cm/hour)
SA:	η περιοχή επιφάνειας του δέρματος διαθέσιμη για την επαφή (m ²)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
ET:	ο χρόνος έκθεσης (ώρα/ημέρα)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT:	ο μέσος χρόνος (ημέρες)
CF:	ο παράγοντας μετατροπής (10 L/(cm times m ²))

Σε αυτήν την εξίσωση, ο ρυθμός επαφής ανά σωματικό βάρος (CR/BW) έχει αντικατασταθεί από τις παραμέτρους της διαπερατότητα του δέρματος της χημικής

ουσίας και της διαθέσιμης περιοχής της επιφάνειας του δέρματος για την επαφή. Επίσης, έχει προστεθεί ένας παράγοντας μετατροπής (CF).

Το RAGS/HHEM συστήνει την χρήση χημικών ουσιών με συγκεκριμένες σταθερές διαπερατότητας. Εντούτοις, αυτές οι τιμές δεν είναι συχνά διαθέσιμες στην επιστημονική βιβλιογραφία. Το μοντέλο έκθεσης CalTOX παρέχει μια σειρά εξισώσεων που υπολογίζουν:

- 1) K_p^w , ο συντελεστής διαπερατότητας μόνιμης κατάστασης για την χημική ουσία από το νερό στο εξωτερικό στρώμα δέρματος, ο οποίος υπολογίζεται από τον συντελεστή κατανομής μοριακού βάρους και οκτανόλης-νερού, K_{ow} , της χημικής ουσίας,
- 2) AR_{water} , η αναλογία της λήψης χημικής ουσίας από το δέρμα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό, βασισμένη στο συντελεστή κατανομής δέρματος-νερού, K_m , στο πάχος του δέρματος και στον χρόνο έκθεσης ανά γεγονός έκθεσης.

Αυτοί οι υπολογισμοί χρησιμοποιούνται για να διευκρινίσουν την παράμετρο της σταθεράς δερματικής διαπερατότητας για τον χρόνο έκθεσης και συζητούνται σε βάθος στους McKone και Howd (1992).

α. Υπολογισμός του συντελεστή διαπερατότητας συγκεκριμένης χημικής ουσίας

Η εξίσωση για τον υπολογισμό του συντελεστή διαπερατότητας μόνιμης κατάστασης για μια χημική ουσία από το νερό στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος όταν το μοριακό βάρος της χημικής ουσίας είναι λιγότερο ή ίσο του 280 gr/mole είναι:

$$K_p^w = MW^{-0.6} \cdot \left[\frac{2.4 \cdot 10^{-6} + 3 \cdot 10^{-5} (K_{ow})^{0.8}}{\delta_{skin}} \right] \quad (4.68)$$

όπου:

- K_p^w : ο συντελεστής διαπερατότητας μόνιμης κατάστασης για μια χημική ουσία από το νερό στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος (cm/hour)
- MW: το μοριακό βάρος της χημικής ουσίας (gr/mole)
- K_{ow} : ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού της χημικής ουσίας (kg νερού/kg οκτανόλης)
- δ_{skin} : το πάχος του δέρματος (cm)

Για τις χημικές ουσίες με μοριακό βάρος μεγαλύτερο από 280, η εξίσωση είναι (U.S. EPA 1992a, εξίσωση 5.8):

$$K_p^w = 0.0019 \cdot (K_{ow})^{0.71} \cdot 10^{(-0.0061 \cdot MW)} \quad (4.69)$$

Εάν η εξίσωση 4.68 ή 4.69 προβλέπει μια τιμή υψηλότερη από ένα cm/hour, χρησιμοποιείται η προεπιλεγμένη τιμή του 1 cm/hour, δεδομένου ότι καμία τιμή υψηλότερη από αυτή δεν έχει μετρηθεί πειραματικά. Η υπολογισμένη τιμή του K_p^w χρησιμοποιείται στις ακόλουθες εξισώσεις για τον καθορισμό της τιμής του AR_{water} .

β. Υπολογισμός της αναλογία της λήψης χημικής ουσίας από το δέρμα στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό

Η αναλογία της λήψης χημικής ουσίας από το δέρμα μέσω επαφής με αυτό με το μολυσμένο νερό στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό εξαρτάται από τον χρόνο υστέρησης και τον χρόνο έκθεσης. Ο χρόνος υστέρησης ορίζεται ως ο χρόνος που χρειάζεται το εξωτερικό στρώμα του δέρματος (stratum corneum) για να φθάσει στην χημική ισορροπία με το μέσο που εφαρμόζεται σε αυτό (όπως, νερό) και δίνεται ως εξής:

$$LT = \frac{0.0017 + 0.00067 \cdot (K_{ow})^{0.8}}{6 \cdot K_p^w} \quad (4.70)$$

όπου:

LT: ο χρόνος υστέρησης (hour)

K_{ow} : ο συντελεστής κατανομής οκτανόλης-νερού της χημικής ουσίας (kg νερού/kg οκτανόλης)

K_p^w : ο συντελεστής διαπερατότητας μόνιμης κατάστασης συγκεκριμένης χημικής ουσίας από το νερό στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος (cm/hour) από την εξίσωση 4.68 ή 4.69

Ο χρόνος έκθεσης για την κολύμβηση δίνεται σε ώρες/ημέρα (ET_{sw}). Ο χρόνος έκθεσης στο ντους ή στο μπάνιο είναι οι ώρες/ημέρα στο λουτρό διαιρεμένες με το 2 ($ET_{sb}/2$), επειδή θεωρούμε ότι ο μισός χρόνος στο λουτρό ξοδεύεται στο ντους ή στο

μπάνιο. Όταν ο χρόνος έκθεσης είναι μικρότερος και μεταξύ του πέντε φορές του χρόνου υστέρησης, η αναλογία απορρόφησης είναι:

$$AR_{water} = \frac{\delta_{skin} \cdot K_m}{2} \quad (4.71)$$

όπου:

AR_{water} : η αναλογία απορρόφησης της λήψης μιας χημικής ουσίας μέσω του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό (mg/cm^2 δέρματος ανά mg/cm^3 νερού)

δ_{skin} : το πάχος του δέρματος (cm)

K_m : ο συντελεστής κατανομής δέρματος-νερού (cm^3 νερού ανά cm^3 δέρματος)

Όταν ο χρόνος έκθεσης είναι πολύ μικρότερος από τον χρόνο υστέρησης (μεγαλύτερο από έναν παράγοντα του πέντε), η αναλογία AR_{water} ρυθμίζεται για να αποφευχθεί η υπερεκτίμηση:

$$AR_{water} = \frac{\delta_{skin} \cdot K_m}{2} \cdot \frac{5 \cdot ET}{LT} \quad (4.72)$$

όπου:

ET: ο χρόνος έκθεσης (ώρες/ημέρα): είτε ο χρόνος έκθεσης στο ντους ή στο μπάνιο (ET_{sb} διαιρεμένο με το 2) είτε ο χρόνος κολύμβησης (ET_{sw})

LT: ο χρόνος υστέρησης (ώρες)

Όταν ο χρόνος έκθεσης είναι μεγαλύτερος από τον χρόνο υστέρησης, η εξίσωση για την αναλογία είναι:

$$AR_{water} = \frac{\delta_{skin} \cdot K_m}{2} + (ET - LT) \cdot K_p^w \quad (4.73)$$

όπου:

K_p^w : ο συντελεστής διαπερατότητας μόνιμης κατάστασης συγκεκριμένης χημικής ουσίας από το νερό στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος (cm/hour) από την εξίσωση 4.68 ή 4.69

γ. Υπολογισμός της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από την κολύμβηση σε μολυσμένο επιφανειακό νερό

Η λήψη χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από την κολύμβηση σε μολυσμένο επιφανειακό νερό υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την συγκεκριμένη τιμή της παραμέτρου AR_{water} , που υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις 4.71, 4.72, ή 4.73, για το προϊόν της χρονικής σταθεράς διαπερατότητας της χρονικής έκθεσης, PC φορές το ET. Άλλες συγκεκριμένες τιμές παραμέτρων είναι η επιφάνεια του σώματος διορθωμένη για το κλάσμα της επαφή με το νερό και η κατάλληλη τιμή συχνότητας έκθεσης για την κολύμβηση (EF_{sw}). Με αυτές τις συγκεκριμένες παραμέτρους η εξίσωση λήψης είναι:

$$Uptake_{swim} = C_w \cdot AR_{water} \cdot \left(f_{dc} \cdot \frac{SA}{BW} \right) \cdot \frac{EF_{sw} \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.74)$$

όπου:

$Uptake_{swim}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της επαφής του δέρματος με το επιφανειακό νερό κατά την διάρκεια κολύμβησης (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_w :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό (mg/L)
AR_{water} :	η αναλογία απορρόφησης της λήψης μιας χημικής ουσίας μέσω του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό (mg/cm ² δέρματος ανά mg/cm ³ νερού) (από τις εξισώσεις 4.71, 4.72 ή 4.73)
f_{dc} :	το κλάσμα της επιφάνειας του σώματος που υποτίθεται ότι είναι σε επαφή με το νερό κατά την διάρκεια της κολύμβησης, ισοδύναμο με το ένα (αδιάστατο)
SA/BW :	επιφάνεια σώματος ανά kg σωματικού βάρους (m ² /kg σωματικού βάρους)
EF_{sw} :	η συχνότητα έκθεσης για την κολύμβηση (επεισόδιο/έτος)
ED :	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT :	ο μέσος χρόνος (ημέρες)
CF :	ο παράγοντας μετατροπής (10 L/(cm times m ²))

Σε αυτήν την εξίσωση, υποτίθεται ότι η EF_{sw} , η συχνότητα έκθεσης για την κολύμβηση, σε ημέρες/έτος, είναι ίση με τα επεισόδια/έτος.

δ. Υπολογισμός της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από το μπάνιο ή το ντους με μολυσμένο νερό από την βρύση

Στον υπολογισμό της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από το μπάνιο ή το ντους με μολυσμένο νερό από την βρύση, η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό της βρύσης (C_{drink}) πρέπει να διορθωθεί κατάλληλα εάν το νερό της βρύσης είναι

ένα μίγμα επιφανειακού και υπογείου νερού (παράγραφος 4.3.1.1 Κατάποση νερού βρύσης). Η ακόλουθη εξίσωση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο νερό της βρύσης:

$$C_{drink} = f_q^w \cdot C_q + (1 - f_q^w) \cdot C_w \quad (4.75)$$

όπου:

- C_{drink} : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό
 f_q^w : το κλάσμα των αναγκών νερού που παρέχονται από το υπόγειο νερό
 C_q : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο υπόγειο νερό
 C_w : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό νερό

Με τις συγκεκριμένες παραμέτρους για το μπάνιο ή το ντους στο μολυσμένο νερό της βρύσης, η εξίσωση λήψης είναι:

$$Uptake_{bath} = C_{drink} \cdot AR_{water} \cdot \frac{SA}{BW} \cdot \frac{EF_{sb} \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.76)$$

όπου:

- $Uptake_{bath}$: η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της επαφής του δέρματος με το πόσιμο νερό κατά την διάρκεια ντους ή μπάνιου (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
 C_{drink} : η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο πόσιμο νερό (mg/L)
 AR_{water} : η αναλογία απορρόφησης της λήψης μιας χημικής ουσίας μέσω του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό (mg/cm² δέρματος ανά mg/cm³ νερού)
 SA/BW : η επιφάνεια σώματος ανά kg σωματικού βάρους (m²/kg σωματικού βάρους)
 EF_{sb} : η συχνότητα έκθεσης για το ντους ή το μπάνιο (επεισόδιο/έτος)
 ED : η διάρκεια έκθεσης (έτη)
 AT : ο μέσος χρόνος (ημέρες)
 CF : ο παράγοντας μετατροπής (10 L/(cm times m²))

Η συνδυασμένη λήψη της χημικής ουσίας από την επαφή μέσω του δέρματος με το μολυσμένο νερό κατά την διάρκεια μπάνιου ή κολύμβησης δίνεται από:

$$Uptake_{bathsw} = Uptake_{swim} + Uptake_{bath} \quad (4.77)$$

4.3.3.2 Λήψη μέσω του δέρματος από μολυσμένο έδαφος

Η εξίσωση του RAGS/HHEM για την επαφή μέσω του δέρματος με τις χημικές ουσίες στο έδαφος (U.S. EPA 1989b, σελίδες: 6-41) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$Uptake_{soil} = C_g \cdot \frac{AF \cdot ABS \cdot SA}{BW} \cdot FC \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.78)$$

όπου:

$Uptake_{soil}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της επαφής του δέρματος με το μολυσμένο έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg/kg)
AF:	ο συντελεστής προσκόλλησης εδάφους στο δέρμα (mg/cm ²)
ABS:	ο συντελεστής απορρόφησης του δέρματος (αδιάστατο)
SA:	η διαθέσιμη επιφάνεια δέρματος για επαφή (m ²)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FC:	το κλάσμα του εδάφους στο δέρμα, το οποίο είναι μολυσμένο (αδιάστατο)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (γεγονός/έτος)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT:	ο μέσος χρόνος (ημέρες)
CF:	ο παράγοντας μετατροπής (10 ⁻⁶ kg/mg)

Στην παραπάνω εξίσωση, ο ρυθμός επαφής ανά σωματικό βάρος (CR/BW) έχει αντικατασταθεί από παραμέτρους για την προσκόλληση του εδάφους, την απορρόφηση της χημικής ουσίας από το δέρμα και την διαθέσιμη επιφάνεια δέρματος για επαφή. Η εξίσωση του CalTOX περιλαμβάνει την παράμετρο του κλάσματος επαφής (FC) ως τροποποίηση στην εξίσωση του RAGS/HHEM.

Το RAGS/HHEM συστήνει την χρησιμοποίηση τιμών συγκεκριμένων χημικών ουσιών για την απορρόφηση της χημικής ουσίας από το έδαφος στο δέρμα και συγκεκριμένους συντελεστές προσκόλλησης ανάλογα με τον τύπο του εδάφους. Αυτές οι τιμές δεν είναι συχνά διαθέσιμες στην επιστημονική βιβλιογραφία. Επομένως, το μοντέλο έκθεσης CalTOX για την επαφή μέσω του δέρματος παρέχει μια σειρά εξισώσεων που υπολογίζουν:

- 1) K_p^s , η διαπερατότητα (ή απορρόφηση) της χημικής ουσίας από το έδαφος στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος από τον συντελεστή κατανομής οκτανόλης-νερού, K_{ow} , της χημικής ουσίας, και
- 2) AR_{soil} , η αναλογία της λήψης της χημικής ουσίας από το δέρμα στην συγκέντρωση του εδάφους, βασισμένη στην προσκόλληση του εδάφους, τον χρόνο έκθεσης ανά γεγονός έκθεσης και στην K_p^s (διαπερατότητα εδάφους στο δέρμα).

Αυτοί οι υπολογισμοί χρησιμοποιούνται για να καθοριστούν οι παράμετροι ABS και AF της εξίσωσης 4.78 και αναλύονται σε βάθος στους McKone και Howd (1992).

α. Υπολογισμός της διαπερατότητας του εδάφους στο δέρμα

Η εξίσωση για την διαπερατότητα του εδάφους στο δέρμα είναι:

$$K_p^s = \frac{K_m^{soil}}{K_m} \cdot K_p^w \cdot 1.7 \quad (4.79)$$

όπου:

- K_p^s : ο συντελεστής διαπερατότητας συγκεκριμένης χημικής ουσίας του εδάφους στο δέρμα (cm/hour)
- K_m^{soil} : ο συντελεστής κατανομής δέρματος-εδάφους, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος (cm^3 εδάφους/ cm^3 δέρματος)
- K_m : ο συντελεστής κατανομής δέρματος-νερού, η αναλογία της συγκέντρωσης της χημικής ουσίας στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο νερό (cm^3 νερού/ cm^3 δέρματος)
- K_p^w : ο συντελεστής διαπερατότητας συγκεκριμένης χημικής ουσίας σε μόνιμη κατάσταση από το νερό στο εξωτερικό στρώμα του δέρματος (cm/hour) (εξίσωση 4.68 ή 4.69)
- 1.7: ο παράγοντας μετατροπής για την προσαρμογή του πάχους του δέρματος στα διάφορα μέσα (πλήρως ενυδατωμένο δέρμα σε νερό εναντίον του λιγότερου ενυδατωμένου δέρματος σε επαφή με το έδαφος) (cm^3 νερού/ cm^3 εδάφους)

Αυτή η υπολογισμένη τιμή του K_p^s είναι δεδομένο εισόδου στην εξίσωση της AR_{soil} παρακάτω.

β. Υπολογισμός της αναλογίας της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος

Η αναλογία της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από την επαφή με το μολυσμένο έδαφος στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος εξαρτάται από το

πάχος του στρώματος στο δέρμα, την διαπερατότητα εδάφους-δέρματος και τον χρόνο έκθεσης. Η εξίσωση είναι:

$$AR_{soil} = \delta_{soil} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{K_p^s \cdot ET_{sl}}{\delta_{soil}}\right) \right] \quad (4.80)$$

όπου:

- AR_{soil} : η αναλογία της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος κατά την διάρκεια του χρόνου έκθεσης, ET_{sl} , στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος (mg/cm^2 δέρματος ανά mg/cm^3 εδάφους)
- δ_{soil} : το πάχος του εδαφικού στρώματος στο δέρμα (cm)
- K_p^s : η διαπερατότητα του εδάφους στο δέρμα (cm/hour)
- ET_{sl} : ο χρόνος έκθεσης ανά γεγονός έκθεσης (ώρα/ημέρα)

Η εξίσωση για την AR_{soil} διαφέρει που αυτή των McKone και Howd (1992). Ο παράγοντας διόρθωσης για την αεριοποίηση στον αέρα έχει εξαλειφτεί. Το διαθέσιμο έδαφος για την επαφή με το δέρμα θα ήταν το επίγειο επιφανειακό έδαφος. Επομένως, όλη η χημική ουσία που θα εξατμιζότανε θα είχε ήδη εξατμίσει. Επομένως, η μετρημένη ή μοντελοποιημένη συγκέντρωση σε εκείνο το έδαφος θα είχε ήδη εκτιμηθεί για αυτή την διαδικασία.

γ. Υπολογισμός της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από την επαφή με μολυσμένο έδαφος

Η λήψη χημικής ουσίας μέσω του δέρματος από την επαφή με μολυσμένο έδαφος υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την συγκεκριμένη τιμή της παραμέτρου AR_{soil} , που εξάγεται από την **εξίσωση 4.80**, του συντελεστή προσκόλλησης του εδάφους στο δέρμα (AF) και του παράγοντα απορρόφησης του δέρματος (ABS). Άλλες συγκεκριμένες τιμές παραμέτρων είναι η περιοχή της επιφάνειας του σώματος διορθωμένη για το κλάσμα της επαφής με το έδαφος και η κατάλληλη τιμή της συχνότητας έκθεσης για την επαφή με το έδαφος (EF_{sl}). Με αυτές τις παραμέτρους η εξίσωση λήψης είναι:

$$Uptake_{soil} = C_g \cdot AR_{soil} \cdot \left(f_{soil} \cdot \frac{SA}{BW} \right) \cdot \frac{EF \cdot ED}{AT} \cdot CF \quad (4.81)$$

όπου:

$U_{\text{take}_{\text{soil}}}$:	η λήψη χημικής ουσίας από ένα εκτεθειμένο άτομο μέσω της επαφής του δέρματος με το μολυσμένο έδαφος (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
C_g :	η συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο επιφανειακό έδαφος (mg/kg) η αναλογία της λήψης χημικής ουσίας μέσω του δέρματος κατά την διάρκεια του χρόνου έκθεσης, ET_{sl} , στην συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος (mg/cm ² δέρματος ανά mg/cm ³ εδάφους) (εξίσωση 4.80)
AR_{soil} :	το κλάσμα της επιφάνειας του δέρματος σε επαφή με το μολυσμένο έδαφος (αδιάστατο)
f_{soil} :	το κλάσμα της επιφάνειας του δέρματος σε επαφή με το μολυσμένο έδαφος (αδιάστατο)
SA:	η διαθέσιμη επιφάνεια του δέρματος για την επαφή (m ²)
BW:	το σωματικό βάρος (kg)
FC:	το κλάσμα του εδάφους στο δέρμα, το οποίο είναι μολυσμένο (αδιάστατο)
EF:	η συχνότητα έκθεσης (ημέρες/έτος)
ED:	η διάρκεια έκθεσης (έτη)
AT:	ο μέσος χρόνος (ημέρες)
CF:	ο παράγοντας μετατροπής (15 kg/cm ανά m ²), βασισμένος στην πυκνότητα του εδάφους των 1500 kg/m ³

4.4 ΣΥΝΟΛΙΚΗ ΛΗΨΗ ΑΠΟ ΤΗΝ ΕΚΘΕΣΗ

Στο μοντέλο έκθεσης CalTOX, οι υπολογισμένες λήψεις για κάθε οδό έκθεσης αθροίζονται ανά διαδρομή (λήψη κατάποσης, λήψη εισπνοής, λήψη επαφής με το δέρμα) για να εξαχθούν συγκεκριμένες τιμές των διαδρομών (παράγραφος 4.2.3).

Οι οδοί έκθεσης από τις οποίες η χημική ουσία σε κάθε περιβαλλοντικό τμήμα μπορεί να συμβάλει στην λήψη μέσω της κατάποσης, της εισπνοής και της επαφής με το δέρμα είναι ταξινομημένες παρακάτω:

Αέρας (αέρια και σωματίδια):

1. εισπνοή αερίων και σωματιδίων στον υπαίθριο και εσωτερικό αέρα
2. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από τον αέρα (είτε ως ατμοί είτε ως σωματίδια)
3. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από την εισπνοή χημικών ουσιών στον αέρα (είτε ως ατμοί είτε ως σωματίδια) από τα προϊόντα των ζώων ή κατανάλωση από τα ζώα αυτά τροφής μολυσμένης από χημικές ουσίες που μεταφέρονται από τον αέρα

Επιφανειακό έδαφος και ριζώδη-ζώνη εδάφους:

1. εισπνοή επιφανειακού εδάφους αιωρούμενο στον αέρα ως σκόνη

2. εισπνοή ατμών από την ριζώδη-ζώνη του εδάφους
3. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από το επιφανειακό έδαφος ή την ριζώδη-ζώνη του εδάφους
4. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο επιφανειακό έδαφος ή στην ριζώδη-ζώνη του εδάφους από άμεση κατάποση εδάφους από τα ζώα αυτά και από κατανάλωση τροφής μολυσμένης από χημικές ουσίες που μεταφέρονται από το έδαφος
5. ακούσια κατάποση επιφανειακού εδάφους
6. επαφή μέσω του δέρματος με επιφανειακό έδαφος

Υπόγειο και επιφανειακό νερό:

1. εισπνοή πτητικών χημικών ουσιών από το υπόγειο νερό ή από το επιφανειακό νερό που χρησιμοποιείται για μπάνιο, ντους, πλύσιμο πιάτων, κ.λ.π.
2. κατάποση υπογείου ή επιφανειακού νερού ως πόσιμο νερό
3. κατανάλωση προϊόντων μολυσμένων από χημικές ουσίες μεταφερόμενες από το νερό άρδευσης
4. κατανάλωση κρέατος, γαλακτοκομικών προϊόντων και αυγών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο υπόγειο ή επιφανειακό νερό από τα προϊόντα των ζώων
5. κατανάλωση ψαριού και θαλασσινών μολυσμένων από χημικές ουσίες στο επιφανειακό νερό
6. κατανάλωση επιφανειακού νερού κατά την διάρκεια κολύμβησης και άλλων υδάτινων δραστηριοτήτων
7. επαφή μέσω του δέρματος με υπόγειο ή επιφανειακό νερό κατά την διάρκεια μπάνιου, ντους ή κολύμβησης

Στο μοντέλο έκθεσης CalTOX, οι υπολογισμένες λήψεις για την εισπνοή, την κατάποση και την επαφή με το δέρμα αθροίζονται σε κάθε περιβαλλοντικό τμήμα για να εξαχθεί η πιθανή λήψη για κάθε τμήμα (αέρας, επιφανειακό έδαφος, ριζώδη-ζώνη του εδάφους, υπόγειο νερό, επιφανειακό νερό).

4.5 ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΣ ΚΙΝΔΥΝΟΥ

4.5.1 ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΤΩΝ ΛΗΨΕΩΝ ΣΕ ΚΙΝΔΥΝΟ ΚΑΙ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑ

Στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, παράγραφος 8.2.1) παρέχονται οι εξισώσεις για την ποσοτικοποίηση των καρκινογόνων και μη-καρκινογόνων αποτελεσμάτων. Τα καρκινογόνα αποτελέσματα εκφράζονται ως προσαυξητική πιθανότητα (ή κίνδυνος) ενός ατόμου να αναπτύξει καρκίνο σε όλη την διάρκεια της ζωής του ως αποτέλεσμα της έκθεσης σε μια πιθανή καρκινογόνο ουσία. Η εξίσωση είναι:

$$\text{Κίνδυνος} = \text{Χρόνια ημερήσια λήψη} \cdot \text{Παράγοντα προσαύξησης} \quad (4.82)$$

όπου:

Κίνδυνος:	η πιθανότητα ενός ατόμου να αναπτύξει καρκίνο (αδιάστατο)
Χρόνια ημερήσια λήψη:	ο μέσος όρος λήψης, ο οποίος υπολογίζεται με μέσο όρο (ΑΤ) 70 έτη (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
Παράγοντας προσαύξησης:	η σταθερά που μετατρέπει την λήψη που υπολογίζεται με μέσο όρο όλη την διάρκεια ζωής σε έναν προσαυξητικό κίνδυνο ανάπτυξης καρκίνου ((mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα) ⁻¹)

Η χρόνια ημερήσια λήψη υπολογίζεται από τις εξισώσεις λήψης που παρέχονται στην παράγραφο 4.3 όταν τα 70 έτη (ή εφ' όρου ζωής) είναι η τιμή της παραμέτρου που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του μέσο όρου του χρόνου (ΑΤ). Μια καρκινογόνος χημική ουσία (καρκινογόνος ουσία) μπορεί να έχει έναν διαφορετικό παράγοντα προσαύξησης για τις διαφορετικές οδούς έκθεσης, δηλαδή ο παράγοντας προσαύξησης για την εισπνοή μιας χημικής ουσίας μπορεί να είναι διαφορετικός από τον παράγοντα προσαύξησης της κατάποσης της ίδιας χημικής ουσίας. Επομένως, το μοντέλο έκθεσης CalTOX υπολογίζει αρχικά την χρόνια ημερήσια λήψη για κάθε διαδρομή έκθεσης με το άθροισμα των λήψεων για όλες τις οδούς που περιλαμβάνουν εκείνη την διαδρομή. Δεύτερον, οι παράγοντες προσαύξησης για την εισπνοή, την κατάποση και την επαφή με το δέρμα επιλέγονται και εισάγονται στο μοντέλο CalTOX ως τρεις ξεχωριστοί παράγοντες προσαύξησης. Κατόπιν, ο συγκεκριμένος παράγοντας προσαύξησης, ανάλογα με την διαδρομή, πολλαπλασιάζεται με την αντίστοιχη υπολογισμένη λήψη της διαδρομής για να εξαχθεί ο κίνδυνος για εκείνη την διαδρομή (εισπνοή, κατάποση, επαφή με το δέρμα). Οι παράγοντες προσαύξησης καρκίνου για συγκεκριμένες χημικές

ουσίες έχουν υπολογιστεί και έχουν καταγραφεί από California Environmental Protection Agency (Cal/EPA 1992), the Integrated Risk Information System (IRIS) of the U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA 1992c) και the Health Effects Assessment Summary Tables (HEAST) of the U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA 1992d). Οι περισσότεροι από αυτούς τους παράγοντες προσαύξησης έχουν υπολογιστεί από τις διεξαχθείσες ή εφαρμοσμένες δόσεις και επομένως είναι βασισμένοι στις λήψεις που είναι ισοδύναμες με τις λήψεις που υπολογίζονται από τις εξισώσεις που δίνονται στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b) και σε αυτό το μοντέλο.

Τα μη-καρκινογόνα αποτελέσματα δεν εκφράζονται ως πιθανότητα κινδύνου αλλά εκφράζονται ως άμεση σύγκριση της τιμής της λήψης με μια δόση αναφοράς συγκεκριμένης χημικής ουσίας. Όταν η χρησιμοποιούμενη τιμή της λήψης είναι για μια συγκεκριμένη χημική ουσία σε μια συγκεκριμένη οδό έκθεσης, η αναλογία καλείται πηλίκo κινδύνου και εκφράζεται ως εξής:

$$\text{Πηλίκo μη-καρκινογονου κινδυνου} = \frac{\text{Λήψη}}{\text{Δόση Αναφοράς}} \quad (4.83)$$

όπου:

Πηλίκo μη-καρκινογόνου κινδύνου:	η αναλογία της τιμής της λήψης σε μια δόση αναφοράς ή συγκέντρωση (αδιάστατο)
Λήψη:	η λήψη σε μια συγκεκριμένη διάρκειας έκθεσης (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)
Δόση Αναφοράς:	το επίπεδο έκθεσης στο οποίο ή κάτω από το οποίο οι δυσμενείς επιπτώσεις στην υγεία είναι απίθανο να εμφανιστούν (mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα)

Σε αυτήν την αναλογία, οι τιμές της λήψης και της δόσης αναφοράς πρέπει να είναι στις ίδιες μονάδες, πρέπει να απεικονίσουν την ίδια διαδρομή της έκθεσης (εισπνοή, κατάποση, ή επαφή με το δέρμα) και πρέπει να αντιπροσωπεύσουν την ίδια διάρκεια έκθεσης (χρόνια, υπο-χρόνια, βραχυπρόθεσμα). Στο μοντέλο έκθεσης CalTOX η εξίσωση αυτή χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό μόνο των χρόνιων μη-καρκινογόνων κινδύνων (διάρκεια έκθεσης περίπου επτά ετών). Οι δόσεις αναφοράς για τις χρόνιες εκθέσεις μέσω της διαδρομής της εισπνοής ή της στοματικής είναι διαθέσιμες από the Integrated Risk Information System (IRIS) of the U.S. Environmental Protection

Agency (U.S. EPA 1992c) και the Health Effects Assessment Summary Tables (HEAST) of the U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA 1992d). Η παράμετρος για την δόση αναφοράς στο μοντέλο CalTOX είναι σε mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα. Επομένως, εάν η επιθυμητή δόση αναφοράς δίνεται σε μονάδες συγκέντρωσης, όπως, mg χημικής ουσίας ανά όγκο αέρα, τότε η συγκέντρωση αναφοράς πρέπει να μετατραπεί σε mg χημικής ουσίας/kg σωματικού βάρους ανά ημέρα για την είσοδο στο μοντέλο CalTOX. Το μοντέλο έκθεσης CalTOX δεν διαχωρίζει τα πηλικά κινδύνου από τον μηχανισμό της δράσης ή το τοξικό αποτέλεσμα.

Το μοντέλο έκθεσης πολλαπλών οδών CalTOX χρησιμοποιεί αυτές τις εξισώσεις για τον υπολογισμό του καρκινογόνου κινδύνου και των μη-καρκινογόνων κινδύνων που συνδέονται με την έκθεση σε μια χημική ουσία και στις συγκεντρώσεις που προβλέπονται για τα διάφορα περιβαλλοντικά μέσα σε μια περιοχή. Οι χρησιμοποιούμενες τιμές λήψεων υπολογίζονται από τις εξισώσεις λήψεων που περιγράφονται στην παράγραφο 4.3 και οι τιμές τοξικότητας συγκεκριμένων χημικών ουσιών (παράγοντες προσαύξησης καρκίνου, δόσεις αναφοράς, ή συγκεντρώσεις αναφοράς) λαμβάνονται από το U.S. EPA.

Το μοντέλο CalTOX δεν εξετάζει την απορρόφηση στον υπολογισμό είτε της λήψης μέσω της κατάποσης είτε της εισπνοής. Επομένως, για εκείνες τις περιπτώσεις όπου ο παράγοντα προσαύξησης ή η δόση αναφοράς είναι βασισμένο/η σε μια απορροφημένη δόση, οι λήψεις που υπολογίζονται από το μοντέλο πρέπει να διορθωθούν για απορρόφηση έξω από το μοντέλο. Οι διορθωμένες λήψεις συγκρίνονται με τις τιμές των κριτηρίων οι οποίες βασίζονται στις απορροφημένες δόσεις έξω από το μοντέλο.

4.5.2 ΑΘΡΟΙΖΟΝΤΑΣ ΤΟΥΣ ΚΙΝΔΥΝΟΥΣ ΚΑΙ ΤΙΣ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΕΣ

Στο RAGS/HHEM (U.S. EPA 1989b, παράγραφοι 8.2.2 και 8.3) παρέχονται οι οδηγίες για την αξιολόγηση των πολλαπλών χημικών ουσιών σε μια περιοχή και για τον συνδυασμό των κινδύνων και των επικινδυνοτήτων στις οδούς έκθεσης. Στο RAGS/HHEM, οι κίνδυνοι και οι επικινδυνότητες υπολογίζονται για κάθε χημική ουσία για κάθε οδό έκθεσης. Στην συνέχεια, αυτοί αθροίζονται για να εξαχθεί ο κίνδυνος ή η επικινδυνότητα για κάθε συγκεκριμένη οδό και αυτοί με την σειρά τους αθροίζονται πάλι

για την εξαγωγή του συνολικού κινδύνου εμφάνισης καρκίνου ή της μη-καρκινογόνου επικινδυνότητας από την έκθεση στις πολλαπλές χημικές ουσίες.

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX παρέχει αξιολόγηση της έκθεσης σε μια συγκεκριμένη χημική ουσία, εξετάζοντας όλες τις οδούς από τις οποίες εμφανίζεται η έκθεση. Για κάθε χημική ουσία, οι συγκεκριμένες οδοί λήψης αθροίζονται αρχικά ανά διαδρομή (εισπνοή, κατάποση, ή επαφή με το δέρμα). Για τις καρκινογόνες ουσίες, ο κίνδυνος της συγκεκριμένης διαδρομής έπειτα υπολογίζεται με τον πολλαπλασιασμό της λήψης με το παράγοντα προσαύξησης της συγκεκριμένης χημικής ουσίας και διαδρομής (**εξίσωση 4.82**). Για τις μη-καρκινογόνες, το πηλίκιο κινδύνου συγκεκριμένης διαδρομής υπολογίζεται με την διαίρεση της λήψης από την δόση αναφοράς της συγκεκριμένης χημικής ουσίας και διαδρομής (**εξίσωση 4.83**). Τέλος, ο κίνδυνος ή η επικινδυνότητα για κάθε διαδρομή αθροίζεται για να εξαχθεί ο συνολικός κίνδυνος εμφάνισης καρκίνου ή ο συνολικός χρόνιος προτεινόμενος δείκτης επικινδυνότητας από την έκθεση στην παρούσα χημική ουσία στην περιοχή. Για τον καθορισμό του συνολικού κινδύνου ή της επικινδυνότητας έκθεσης σε πολλαπλές χημικές ουσίες, αθροίζονται οι κίνδυνοι των συγκεκριμένων χημικών ουσιών ή οι επικινδυνότητες έξω από το μοντέλο.

4.6 ΕΠΙΠΕΔΑ ΕΠΑΝΟΡΘΩΣΗΣ ΤΟΥ ΕΔΑΦΟΥΣ

Το επίπεδο επανόρθωσης του εδάφους αναφέρεται σε ένα επίπεδο στόχων μιας χημικής ουσίας στο έδαφος που θεωρείται προστατευτικό για την ανθρώπινη υγεία και που προκύπτει από την εκτίμηση του κινδύνου ή του κινδύνου βασισμένου στους υπολογισμούς. Αυτός ο όρος είναι συνώνυμος με την έννοια των προκαταρκτικών στόχων επανόρθωσης που περιγράφονται στο U.S. EPA Risk Assessment Guidelines for Superfund, Human Health Evaluation Manual (RAGS/HHEM), Part B (U.S. EPA 1991), εκτός από τον ακόλουθο. Ένα διαφορετικό μαθηματικό μοντέλο χρησιμοποιείται για να συσχετίσει την συγκέντρωση του εδάφους με την ημερήσια δόση μιας χημικής ουσίας, όπως περιγράφεται παρακάτω. Οι πολλαπλοί οδοί έκθεσης εξετάζονται στον υπολογισμό των προκαταρκτικών επιπέδων επανόρθωσης του εδάφους στο μοντέλο CalTOX ενώ, οι στόχοι που περιγράφονται στο μέρος B του RAGS/HHEM είναι βασισμένοι σε έναν περιορισμένο αριθμό οδών.

4.6.1 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΠΡΟΚΑΤΑΡΚΤΙΚΩΝ ΣΤΟΧΩΝ ΕΠΑΝΟΡΘΩΣΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΟΥ ΚΙΝΔΥΝΟΥ ΓΙΑ ΤΟ SUPERFUND/HUMAN HEALTH EVALUATION MANUAL (PART B)

Στις οδηγίες για την εκτίμηση του κινδύνου για το SUPERFUND: τόμος I – Human Health Evaluation Manual (RAGS/HHEM), μέρος B, Development of Risk-Based Preliminary Remediation Goals, παρέχονται οδηγίες για τον υπολογισμό των κινδύνων-βασισμένων στους προκαταρκτικούς στόχους της επανόρθωσης (**κεφάλαιο 3**).

Για τα καρκινογόνα αποτελέσματα, ο συνολικός κίνδυνος για μια συγκεκριμένη χημική ουσία σε ένα συγκεκριμένο περιβαλλοντικό τμήμα υπολογίζεται με το άθροισμα των κινδύνων από όλες τις οδούς που περιλαμβάνουν εκείνο το περιβαλλοντικό τμήμα (όπως, η κατάποση υπόγειου νερού και η εισπνοή των ατμών από το υπόγειο νερό). Όπως φαίνεται στην **εξίσωση 4.82**, ο κίνδυνος είναι ίσος με τον παράγοντα προσαύξεσης του καρκίνου πολλαπλασιασμένο με την χρόνια ημερήσια λήψη. Η εξίσωση του κινδύνου επεκτείνεται για να περιλάβει την εξίσωση της λήψης, η οποία, στη συνέχεια, περιλαμβάνει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας και των παραμέτρων έκθεσης. Επομένως, η συνολική εξίσωση κινδύνου μπορεί να ρυθμιστεί εκ νέου για να λύσει για την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα η οποία θα αντιστοιχούσε σε έναν στόχο κινδύνου.

Για τα μη-καρκινογόνα αποτελέσματα, υπολογίζεται ένας δείκτης κινδύνου για μια χημική ουσία σε ένα συγκεκριμένο περιβαλλοντικό τμήμα με το άθροισμα των πηλίκων κινδύνου αυτής της χημικής ουσίας για όλες τις οδούς έκθεσης που περιλαμβάνουν το περιβαλλοντικό τμήμα (**εξίσωση 4.83**). Δεδομένου ότι το πηλίκιο κινδύνου περιλαμβάνει την λήψη, η εξίσωση των δεικτών κινδύνου επεκτείνεται για να περιλάβει την συγκέντρωση της χημικής ουσίας και τις παραμέτρους έκθεσης. Κατόπιν, η εξίσωση των δεικτών κινδύνου ρυθμίζεται εκ νέου για να λύσει για την συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο περιβαλλοντικό τμήμα η οποία θα αντιστοιχούσε σε ένα επίπεδο στόχων δεικτών κινδύνου. Με την χρησιμοποίηση των κατάλληλων τιμών παραμέτρου έκθεσης, αυτός ο συνολικός κίνδυνος και οι εξισώσεις δεικτών κινδύνου υπολογίζουν τους κίνδυνος-βασισμένους στους στόχους επανόρθωσης για το έδαφος (το περιβαλλοντικό τμήμα των περισσότερων επιβλαβών αποβλήτων στην περιοχή) για τα σενάρια χρήσης του εδάφους (κατοικημένο, βιομηχανικό, εμπορικό, κ.λ.π.).

4.6.2 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΕΠΙΠΕΔΩΝ ΕΠΑΝΟΡΘΩΣΗΣ ΤΟΥ ΕΔΑΦΟΥΣ ΣΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΕΚΘΕΣΗΣ CalTOX

Το μοντέλο έκθεσης CalTOX απλοποιεί τους υπολογισμούς που συνοψίζονται παραπάνω και παρέχονται στο μέρος Β του RAGS/HHEM. Μια σημαντική υπόθεση του μοντέλου CalTOX στο κεφάλαιο 3, μεταφορά και μετασχηματισμός, είναι ότι το περιβαλλοντικό τμήμα του εδάφους χρησιμεύει ως η αρχική δεξαμενή της μόλυνσης των περισσοτέρων επιβλαβών αποβλήτων σε μια περιοχή. Από το έδαφος, οι χημικές ουσίες μπορούν να κινηθούν προς άλλα περιβαλλοντικά τμήματα (αέρας, υπόγειο και επιφανειακό νερό) και προς άλλα μέσα έκθεσης (προσωπικός αέρας, πόσιμο νερό). Δεδομένου ότι όλες οι λήψεις που υπολογίζονται στο μοντέλο έκθεσης CalTOX συνδέονται τελικά με ή βασίζονται στην παρούσα συγκέντρωση του εδάφους, η εξίσωση για τον καθορισμό των στόχων του επιπέδου επανόρθωσης του εδάφους για μια χημική ουσία σε μια περιοχή μπορεί να εξαχθεί από την ακόλουθη αναλογία:

$$\frac{\text{Στοχος Συγκέντρωσης Εδαφους}}{\text{Στοχος Κινδυνου}} = \frac{\text{Παρουσα Συγκέντρωση Εδαφους}}{\text{Υπολογισμενος Κινδυνος}} \quad (4.84)$$

Επομένως:

$$\text{Στοχος Συγκέντρωσης Εδαφους} = \frac{\text{Παρουσα Συγκέντρωση Εδαφους}}{\text{Υπολογισμενος Κινδυνος}} \cdot \text{Στοχος Κινδυνου} \quad (4.85)$$

όπου:

Στόχος Συγκέντρωσης Εδάφους:	το επίπεδο επανόρθωσης του εδάφους από την χημική ουσία (mg/kg εδάφους)
Στόχος Κινδύνου:	ο κίνδυνος που θεωρείται ότι είναι προστατευτικός για την υγεία του πληθυσμού στην περιοχή (αδιάστατο) η μετρημένη ή η υπολογισμένη συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος στην περιοχή (mg/kg εδάφους)
Παρούσα Συγκέντρωση Εδάφους:	ο κίνδυνος που συνδέεται με την παρούσα συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος (αδιάστατο)

Για τα μη-καρκινογόνα αποτελέσματα, οι εξισώσεις είναι:

$$\frac{\text{Στοχος Συγκεντρωσης Εδαφους}}{\text{Στοχος HI}} = \frac{\text{Παρουσα Συγκεντρωση Εδαφους}}{\text{Υπολογισμενος HI}} \quad (4.86)$$

επομένως:

$$\text{Στοχος Συγκεντρωσης Εδαφους} = \frac{\text{Παρουσα Συγκεντρωση Εδαφους}}{\text{Υπολογισμενος HI}} \cdot \text{Στοχος HI} \quad (4.87)$$

όπου:

Στόχος Συγκέντρωσης Εδάφους:	το επίπεδο επανόρθωσης του εδάφους από την χημική ουσία (mg/kg εδάφους)
Στόχος HI:	ο δείκτης επικινδυνότητας που θεωρείται ότι είναι προστατευτικός για την υγεία του πληθυσμού στην περιοχή (αδιάστατο)
Παρούσα Συγκέντρωση Εδάφους:	η μετρημένη ή η υπολογισμένη συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος στην περιοχή (mg/kg εδάφους)
Υπολογισμένος HI:	ο δείκτης επικινδυνότητας που συνδέεται με την παρούσα συγκέντρωση της χημικής ουσίας στο έδαφος (αδιάστατο)

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ ΡΥΠΩΝ ΕΔΑΦΟΥΣ ΣΤΟ ΠΑΛΑΙΟ ΑΕΡΟΔΡΟΜΙΟ ΤΟΥ ΕΛΛΗΝΙΚΟΥ

5.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στο παρόν κεφάλαιο πραγματοποιείται εκτίμηση της επικινδυνότητας για την ανθρώπινη υγεία από την ύπαρξη διαφόρων επικίνδυνων στοιχείων και ενώσεων στην περιοχή του πρώην αεροδρομίου του Ελληνικού. Η μόλυνση οφείλεται στην προηγούμενη χρήση της περιοχής σαν αεροδρόμιο και στην αντίστοιχη χρήση ουσιών οι οποίες, αν προσληφθούν σε ικανές δόσεις, έχουν την δυνατότητα τοξικής ή καρκινογόνου δράσης στον ανθρώπινο οργανισμό.

Η επικινδυνότητα για την ανθρώπινη υγεία προσδιορίστηκε μέσω του καθορισμού και της ποσοτικοποίησης των δυνατών οδών πρόσβασης των ρυπαντών στον ανθρώπινο οργανισμό καθώς και της μέσης ημερήσιας δόσης που λαμβάνει ένα άτομο. Σύγκριση των δόσεων αυτών με διεθνώς καθορισμένα όρια δόσεων προσδιορίζει τον βαθμό επικινδυνότητας της περιοχής.

Στην διεθνή βιβλιογραφία υπάρχουν διάφορα προτεινόμενα όρια συγκεντρώσεων στοιχείων και ουσιών τα οποία δεν πρέπει να υπερβαίνουν οι συγκεντρώσεις του εδάφους μιας περιοχής ώστε να μην απειλείται η ανθρώπινη υγεία. Τα όρια αυτά ποικίλλουν από χώρα σε χώρα και από οργανισμό σε οργανισμό και εξαρτώνται από τις υπάρχουσες ή προτεινόμενες χρήσεις γης.

Τα όρια της διεθνούς βιβλιογραφίας για τις επιδράσεις στην ανθρώπινη υγεία εξαρτώνται κατά πολύ από τα συγκεκριμένα μοντέλα και τις τιμές των παραμέτρων τους καθώς και από τα όρια επικινδυνότητας τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό τους. Οι αντίστοιχες αναλύσεις είναι επιπλέον πολύ γενικές ώστε να έχουν όσο το δυνατό μεγαλύτερο πεδίο εφαρμογής.

Μια απλή εκτίμηση της επικινδυνότητας ή καλύτερα της καταλληλότητας μιας περιοχής για ορισμένες χρήσεις γης συνίσταται στην μέτρηση των συγκεντρώσεων και σύγκρισή τους με τα προτεινόμενα όρια. Η προσέγγιση αυτή συνεπάγεται την αποδοχή των συγκεκριμένων παραδοχών για μοντέλα μετάδοσης,

τιμές παραμέτρων, χρήσεις γης και όρια επικινδυνότητας ως εφαρμόσιμα και ισχύοντα για την συγκεκριμένη περιοχή και χρήσεις γης.

Στην συγκεκριμένη εκτίμηση της επικινδυνότητας της περιοχής του παλαιού αεροδρομίου του Ελληνικού ακολουθήθηκε μεθοδολογία ειδικής εκτίμησης επικινδυνότητας προσαρμοσμένης στις συνθήκες και τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της περιοχής ενδιαφέροντος. Η βασική φιλοσοφία της προσέγγισης αυτής είναι η εκτίμηση των δόσεων των διαφόρων στοιχείων και ενώσεων που θα δεχθούν τα άτομα που συμμετέχουν στις δραστηριότητες που συνεπάγονται οι προβλεπόμενες χρήσεις γης στην περιοχή ενδιαφέροντος. Οι χρήσεις της περιοχής του πρώην αεροδρομίου του Ελληνικού συνεπάγονται την ανέγερση αθλητικών εγκαταστάσεων και χώρων αναψυχής και την χρήση τους από αθλητές και το κοινό. Κατά συνέπεια οι οδοί μετάβασης των διαφόρων ουσιών στον ανθρώπινο οργανισμό είναι αυτοί που αντιστοιχούν σε οικιστικές χρήσεις γης με κατάλληλες προσαρμογές των χρόνων έκθεσης και αφαίρεση ορισμένων οδών μετάδοσης που δεν έχουν εφαρμογή.

Με βάση τις διαθέσιμες οδούς μετάβασης των στοιχείων ή ενώσεων στον άνθρωπο ποσοτικοποιήθηκαν σχετικά μοντέλα και υπολογίστηκε η ημερήσια ποσότητα πρόσληψης κάθε στοιχείου ή ουσίας από τους χρήστες της περιοχής. Στην συνέχεια οι ημερήσιες ποσότητες αυτές συγκρίθηκαν με προτεινόμενα ανώτατα ανεκτά όρια για να προσδιορισθεί το τοξικό φορτίο.

5.2 ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ

Μετρήθηκαν 88 δείγματα από διαφορετικά σημεία του παλαιού αεροδρομίου. Σε κάθε ένα σημείο μετρήθηκε η συγκέντρωση όποιων ανόργανων στοιχείων και οργανικών ενώσεων ήταν ανιχνεύσιμες. Η επιφάνεια στην περιοχή ενδιαφέροντος διακρίθηκε σε δύο είδη: **χωμάτινη επιφάνεια** και **επιφάνεια καλυμμένη με σκυρόδεμα ή άσφαλτο**. Στη χωμάτινη επιφάνεια αντιστοιχούν 37 μετρήσεις και στην επιφάνεια σκυροδέματος/άσφαλτου 51. Τα δύο αυτά είδη επιφανειών θεωρήθηκαν ξεχωριστά γιατί ορισμένες από τις οδούς μεταφοράς που ισχύουν στις χωμάτινες επιφάνειες δεν ισχύουν για τις επιφάνειες ασφάλτου ή σκυροδέματος.

Επιπρόσθετα μετρήθηκαν δείγματα από διαφορετικά σημεία εκτός περιοχής έργων που αποτέλεσαν την βάση προσδιορισμού των συγκεντρώσεων *υποβάθρου*, των συγκεντρώσεων δηλαδή που οφείλονται στην φυσική σύσταση του εδάφους της

περιοχής και δεν μπορούν να αποδοθούν στην προηγούμενη χρήση της σαν αεροδρόμιο.

5.2.1 ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑ

Ανιχνεύτηκε η ύπαρξη και μετρήθηκε η συγκέντρωση είκοσι έξι (26) ανόργανων στοιχείων, δεκαοκτώ (18) οργανικών ενώσεων καθώς και η ποσότητα των λεγομένων Ολικών Πετρελαϊκών Υδρογονανθράκων (TPH) (**Παράρτημα Β**).

Οι μετρήσεις των TPH δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν απευθείας στην ανάλυση της επικινδυνότητας μιας και δεν χαρακτηρίζονται από μοναδικές φυσικοχημικές ιδιότητες που θα επέτρεπαν την ποσοτικοποίηση των μοντέλων μετάδοσης στον άνθρωπο. Για τον προσδιορισμό των δόσεων απαιτείται γνώση της κατά βάρος σύστασης των TPH από τις διάφορες συστατικές ενώσεις (αλιφατικοί και αρωματικοί υδρογονάνθρακες). Σύμφωνα με την ανάλυση της αέριας χρωματογραφίας ανιχνεύθηκαν μόνο υδρογονάνθρακες με ισοδύναμο αριθμό ατόμων άνθρακα εννέα, δέκα και μεγαλύτερο, πράγμα αναμενόμενο μια και οι ενώσεις με ισοδύναμο αριθμό ανθράκων από πέντε έως οκτώ είναι πολύ πτητικές και άρα εξαφανίζονται με τον καιρό. Έγινε λοιπόν η συντηρητική παραδοχή ότι όλοι οι μετρηθέντες TPH ανήκουν στους αλιφατικούς υδρογονάνθρακες των ομάδων [EC8-EC10], έως [EC16-EC21] με αναλογία ίση ενός τυπικού καυσίμου αεροπλάνων τύπου JP-4.

Οι κωδικοί, το είδος και ο αριθμός των δειγμάτων ανά περιοχή παρουσιάζονται αναλυτικά στον **πίνακα 5.1**.

5.3 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΗΜΕΡΗΣΙΑΣ ΔΟΣΗΣ ΣΤΟΝ ΑΝΘΡΩΠΟ

Η ημερήσια δόση ρύπων που ευρίσκονται στην επιφανειακή στιβάδα του εδάφους υπολογίστηκε με βάση το μοντέλο CalTOX, το οποίο παρουσιάστηκε λεπτομερώς στα **κεφάλαια 3 και 4**.

Πίνακας 5.1: Πίνακας δειγματοληψίας του παλαιού αεροδρομίου του Ελληνικού.

ΠΕΡΙΟΧΗ	Συνολικός αριθμός δειγμάτων ανά περιοχή	Κωδικοί δειγμάτων	Κύρια σύσταση περιοχής	Παρατηρήσεις
A	19	A1-A19	Χώμα	Έδαφος
B	17	B1-B17	Χώμα	Έδαφος
Γ	4	Γ1-Γ4	Άσφαλτος	Άσφαλτος
Δ	3	Δ1-Δ3	Άσφαλτος	Χώρος γύρω από υπόστεγα "Υπ" και "Υκ"
E	3	E1-E3	Άσφαλτος	
Bκ	3	Bκ1-Bκ3	Χώμα - Άσφαλτος	
Υπ	15	Υπ1-Υπ15	Βιομηχανικό σκυρόδεμα	Υπόστεγο "Υπ"
Υκ	15	Υκ1-Υκ15	Βιομηχανικό σκυρόδεμα	Υπόστεγο "Υκ"
ΣΓ	4	ΣΓΑ-ΣΓΔ	Σκυρόδεμα	Χώρος γύρω από υπόστεγο "Υπ"
ΣΤ	4	ΣΤ1-ΣΤ4	Σκυρόδεμα-Άσφαλτος	Χώρος γύρω από υπόστεγα "Υπ" και "Υκ"
ΔΑ	1	ΔΑ	Χώμα	Εκτός αεροδρομίου, από την περιοχή του Αγ. Κοσμά
ΣΥΝΟΛΟ	88			

5.3.1 ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ CalTOX

Το μοντέλο CalTOX έχει αναπτυχθεί ως ένα σύνολο μοντέλων προγράμματος λογιστικού φύλλου (spreadsheet) και στοιχείων (spreadsheet data) προκειμένου να βοηθήσει στην αξιολόγηση των εκθέσεων της ανθρώπινης υγείας από τις συνεχείς απελευθερώσεις στα πολλαπλά περιβαλλοντικά μέσα, π.χ. αέρας, έδαφος και νερό. Χρησιμοποιείται επίσης για την ταξινόμηση των αποβλήτων και για τον καθορισμό των επιπέδων καθαρισμού του εδάφους επί των ανεξέλεγκτων επιβλαβών αποβλήτων κατά τόπους. Τα τμήματα διαμόρφωσης του CalTOX περιλαμβάνουν μοντέλο μεταφοράς και μετασχηματισμού των πολυμέσων, μοντέλα σεναρίου έκθεσης πολλαπλών οδών και επιπρόσθετο μοντέλο για την ποσοτικοποίηση και αξιολόγηση της αβεβαιότητας και της μεταβλητότητας. Όλες οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται ως δεδομένα εισαγωγής στο CalTOX είναι κατανομές, οι οποίες περιγράφονται από την μέση τιμή και τον συντελεστή διασποράς και όχι εκτιμήσεις

σημείου ή ανώτατες τιμές όπως χρησιμοποιούν τα περισσότερα άλλα μοντέλα. Αυτή η πιθανολογική προσέγγιση επιτρέπει τόσο στις αναλύσεις ευαισθησίας όσο και στις αναλύσεις αβεβαιότητας να ενσωματώνονται άμεσα στην λειτουργία του μοντέλου.

5.3.1.1 Δομή του μοντέλου

Το φύλλο εργασίας του μοντέλου CalTOX αποτελείται από 18 σελίδες (**Παράρτημα Γ**) διευθετημένες σε έξι σειρές και τρεις στήλες. Η πρώτη σελίδα είναι η "αρχική σελίδα" και περιέχει τα συνοπτικά αποτελέσματα και μερικά από τα δεδομένα εισαγωγής σχετικά με τον στόχο της επικινδυνότητας, τον χρόνο έναρξης του υπολογισμού και τις αρχικές συγκεντρώσεις. Οι σελίδες 2 μέχρι 6 αποτελούν το υπόλοιπο της πρώτης στήλης και χρησιμεύουν ως οι τομείς εισαγωγής για τις χημικές ιδιότητες, τις ιδιότητες της περιοχής και τους ανθρώπινους παράγοντες έκθεσης που χρησιμοποιούνται στο μοντέλο.

Η δεύτερη στήλη αφιερώνεται στην παρουσίαση των αποτελεσμάτων από την αξιολόγηση της έκθεσης της ανθρώπινης υγείας. Στην κορυφή αυτής της στήλης είναι το ιστόγραμμα έκθεσης που αφορά τις πιθανές δόσεις από την διαδρομή του περιβαλλοντικού μέσου που συμβάλλει σε εκείνη την πιθανή δόση. Το υπόλοιπο αυτής της στήλης περιλαμβάνει τον πίνακα των οδών έκθεσης, ο οποίος χρησιμοποιείται για να ενεργοποιηθούν ή να απενεργοποιηθούν οι οδοί έκθεσης, τον πίνακα των πιθανών δόσεων, τον πίνακα των συγκεντρώσεων των μέσων έκθεσης, τον συνολικό πίνακα των δόσεων και τις πληροφορίες για τις μεταφορές εκτός της περιοχής.

Η τρίτη στήλη περιλαμβάνει κυρίως τις πληροφορίες που απαιτούνται και τα ενδιάμεσα αποτελέσματα για το fugacity μοντέλο ισορροπίας της μάζας μεταξύ των πολυμέσων. Εντούτοις, η πρώτη σελίδα σε αυτήν την στήλη περιλαμβάνει έναν κατάλογο όλων των δευτεροβάθμιων παραμέτρων εισαγωγής. Αυτές είναι τιμές των παραμέτρων του μοντέλου που υπολογίζονται από τα δεδομένα εισαγωγής που απαριθμούνται στις σελίδες 2 μέχρι 6. Αυτή ακολουθείται από έναν κατάλογο οποιονδήποτε προειδοποιήσεων και μηνυμάτων λάθους που έχουν προκληθεί από τον υπολογισμό. Το υπόλοιπο της στήλης αφιερώνεται στο fugacity μοντέλο και περιλαμβάνει τους πίνακες fugacities και ικανοτήτων fugacity, των σταθερών ρυθμών διάχυσης και μετακίνησης, των πινάκων κερδών-απωλειών για κάθε τμήμα, των σταθερών ρυθμών των συγκεκριμένων τμημάτων και ενός πίνακα και μιας γραφικής

παράστασης της συγκέντρωσης έναντι του χρόνου στα τμήματα της ριζώδους-ζώνης και του υπεδάφους. Το **σχήμα 5.1** παρουσιάζει την σχηματική δομή του φύλλου εργασίας του μοντέλου CalTOX.

Αρχική σελίδα Σελίδα 1	Ιστόγραμμα έκθεσης Σελίδα 7	Υπολογιζόμενες ιδιότητες Σελίδα 13
Χημικές ιδιότητες Σελίδα 2	Οδοί έκθεσης Σελίδα 8	Υπολογιζόμενες ιδιότητες, προειδοποιήσεις και μηνύματα λάθους Σελίδα 14
Χημικές ιδιότητες (συνέχεια) και ιδιότητες περιοχής Σελίδα 3	Πίνακας πιθανών δόσεων Σελίδα 9	Fugacity, όγκος τμημάτων και ικανότητες fugacity Σελίδα 15
Ιδιότητες περιοχής (συνέχεια) Σελίδα 4	Πίνακας συγκέντρωσης των μέσων έκθεσης Σελίδα 10	Σταθεροί ρυθμοί διάχυσης και μετακίνησης Σελίδα 16
Ιδιότητες περιοχής (συνέχεια) και παράγοντες έκθεσης Σελίδα 5	Πίνακας των χρονικά εξαρτημένων συσσωρευμένων δόσεων στον πλυθισμό Σελίδα 11	Κέρδη και απώλειες των τμημάτων, χρόνος παραμονής, απογραφή και συγκεντρώσεις Σελίδα 17
Παράγοντες έκθεσης (συνέχεια) Σελίδα 6	Πληροφορίες για μεταφορές εκτός περιοχής Σελίδα 12	Απογραφή των χρονικά εξαρτημένων τμημάτων στα στρώματα του εδάφους Σελίδα 18

Σχήμα 5.1: Σχηματική δομή του φύλλου εργασίας του μοντέλου CalTOX.

5.3.1.2 Οδοί έκθεσης του Ανθρώπου στους Ρύπους του Εδάφους

Οι οδοί μέσω των οποίων ρύποι που ευρίσκονται στο έδαφος μπορούν να φτάσουν στον ανθρώπινο οργανισμό είναι οι εξής:

Γαστρεντερική Οδός:

1. *Άμεση πρόσληψη μέσω της Γαστρεντερικής Οδού:* Λόγω των διαφόρων δραστηριοτήτων ενήλικες και κυρίως παιδιά καταπίνουν μια μικρή ποσότητα χώματος κάθε μέρα.
2. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους και κατάποσης πόσιμου νερού από διαπίδυση:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος και διαπιδύουν τους σωλήνες πόσιμου νερού το οποίο στη συνέχεια καταναλώνεται.
3. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους και κατάποσης πόσιμου νερού από διαπίδυση κατά την διάρκεια πλυσίματος, μπάνιου κ.λ.π.:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος και διαπιδύουν τους σωλήνες πόσιμου νερού το οποίο στη συνέχεια καταναλώνεται κατά την διάρκεια πλυσίματος, μπάνιου, κ.λ.π..
4. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της φυτικής τροφικής αλυσίδας:* Οι ρύποι του εδάφους μεταφέρονται στα φυτά είτε μέσω πρόσληψης δια των ριζών είτε με απλή επικάλυψη και από εκεί στον ανθρώπινο οργανισμό μέσω της κατανάλωσής τους.
5. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της κατανάλωσης κρέατος, γάλατος και αυγών:* Οι ρύποι του εδάφους εναποτίθενται μέσω του αέρα, του εδάφους και του νερού στα ζώα.
6. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της κατανάλωσης ψαριών και θαλασσινών:* Οι ρύποι του εδάφους μεταφέρονται στα ψάρια μέσω του αέρα και του νερού και από εκεί στον ανθρώπινο οργανισμό μέσω της κατανάλωσής τους.
7. *Έμμεση πρόσληψη μέσω κατάποση μητρικού γάλατος:* Οι ρύποι του εδάφους μεταφέρονται μέσω του αέρα, του εδάφους και του νερού στο μητρικό γάλα, το οποίο καταναλώνεται από τα βρέφη.
8. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της κατάποσης πόσιμου νερού:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος, μεταφέρονται στον υδροφόρο ορίζοντα και από εκεί στο πόσιμο ύδωρ το οποίο καταναλώνεται.

Αναπνευστική Οδός:

9. *Άμεση πρόσληψη μέσω της Αναπνευστικής Οδού:* Σωματίδια εδάφους παρασέρνονται από τον αέρα ένα μέρος παραμένει αιωρούμενο και αναμειγνύεται με άλλα αιωρούμενα σωματίδια και εισπνέονται είτε εκτός είτε εντός των σπιτιών.
10. *Έμμεση πρόσληψη μέσω του αέρα και της Αναπνευστικής Οδού:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στον αέρα που περιέχεται στο έδαφος, μεταφέρονται στην επιφανειακή στιβάδα του εδάφους και από εκεί διασπείρονται στην ατμόσφαιρα από όπου και εισπνέονται από τον άνθρωπο είτε στο ύπαιθρο είτε στο εσωτερικό των σπιτιών.
11. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους του νερού του λουτρού και της Αναπνευστικής Οδού:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος, μεταφέρονται στον υδροφόρο ορίζοντα και από εκεί στο πόσιμο ύδωρ το οποίο χρησιμοποιείται στο λουτρό (Shower) οι ατμοί του οποίου αναπνέονται.
12. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους του νερού του λουτρού, από διαπίδυση, και της Αναπνευστικής Οδού:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος και διαπιδύουν τους σωλήνες πόσιμου νερού το οποίο χρησιμοποιείται στο λουτρό οι ατμοί του οποίου αναπνέονται (Shower).

Δερματική Επαφή:

13. *Άμεση πρόσληψη μέσω Δερματικής Επαφής:* Σωματίδια του εδάφους είτε μέσω του αέρα είτε με απ' ευθείας επαφή επικάθονται στο δέρμα από όπου και απορροφούνται στον οργανισμό.
14. *Έμμεση πρόσληψη μέσω του αέρα και Δερματικής Επαφής:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στον αέρα που περιέχεται στο έδαφος, μεταφέρονται στην επιφανειακή στιβάδα του εδάφους και από εκεί διασπείρονται στην ατμόσφαιρα από όπου και επικάθονται στην ανθρώπινη επιδερμίδα και στην συνέχεια μέρος απορροφάται.
15. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους και Δερματικής Επαφής με το νερό του λουτρού:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό (Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος, μεταφέρονται στον υδροφόρο ορίζοντα και από εκεί στο πόσιμο ύδωρ το οποίο χρησιμοποιείται στο λουτρό (Shower).
16. *Έμμεση πρόσληψη μέσω της υγρασίας εδάφους και Δερματικής Επαφής με το νερό του λουτρού, νερού από διαπίδυση:* Οι ρύποι του εδάφους διαχέονται στο νερό

(Υγρασία) που περιέχεται στο έδαφος και διαπιδύουν τους σωλήνες πόσιμου νερού το οποίο χρησιμοποιείται στο λουτρό (Shower).

5.4 ΟΡΙΑ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ ΓΙΑ ΤΟΥΣ ΑΝΙΧΝΕΥΘΕΝΤΕΣ ΡΥΠΟΥΣ

5.4.1 ΟΡΙΑ RIVM ΟΛΛΑΝΔΙΑΣ

Το Ερευνητικό Κέντρο RIVM της Ολλανδίας ολοκλήρωσε πρόσφατα για λογαριασμό του Υπουργείου Περιβάλλοντος της Ολλανδίας, μια ανάλυση καθορισμού ορίων παρέμβασης για τον καθαρισμό εδαφών λόγω ύπαρξης διαφόρων ρυπαντών στο έδαφος, την ύλη λιμών και ποταμών καθώς και στο πόσιμο νερό (Lijzen J.P.A.). Τα όρια αυτά για τους διάφορους ρυπαντές δίνονται στους **πίνακες 5.2-5.5**, για την **χωμάτινη επιφάνεια** και στους **πίνακες 5.6-5.9** για την **επιφάνεια καλυμμένη με σκυρόδεμα ή άσφαλτο**.

Δίνονται δύο ήδη ορίων:

- α) Tolerable Daily Intake (TDI), για δόσεις μέσω της γαστρεντερικής και δερματικής οδού σε mg/kg·bw·day,
- β) Tolerable Concentration in Air (TCA), για δόσεις μέσω της αναπνευστικής οδού. Αυτή είναι η μέγιστη ανεκτή συγκέντρωση στον αέρα σε mg/m³.

Υπάρχουν επίσης δύο ειδών βλάβες στην υγεία:

- ι) Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες,
- ιι) Καρκινογενέσεις.

Για μεν τις τοξικές επιπτώσεις, αρκεί η δόση να είναι κάτω της μέγιστης ανεκτής για να είναι αποδεκτή η συγκέντρωση του ρυπαντή. Για τις καρκινογόνες επιπτώσεις, υπολογίζεται η πιθανότητα να δημιουργηθεί καρκίνος χρησιμοποιώντας την γραμμική υπόθεση. Υποτίθεται δηλαδή, ότι η σχέση πιθανότητας-δόσης καρκίνου είναι γραμμική με γνωστή κλίση και άρα η πιθανότητα καρκίνου δίνεται από το γινόμενο της κλίσης επί την δόση (για μικρές σχετικά δόσεις ώστε το γινόμενο να είναι μικρότερο της μονάδας).

5.4.1.1 Όρια για Τοξικές Επιδράσεις της Γαστρεντερικής και Δερματικής Οδού

Τα όρια που δίνει η αναφορά RIVM για την περίπτωση αυτή σε mg/(kg·bw·day) είναι άμεσα εφαρμόσιμα και συγκρίνονται με την αντίστοιχη υπολογισμένη δόση.

5.4.1.2 Όρια για Τοξικές Επιδράσεις δια της Αναπνευστικής Οδού

Η σύγκριση των υπολογισμένων δόσεων σε mg/(kg·bw·day) με τις οριακές συγκεντρώσεις στον αέρα είναι περισσότερο πολύπλοκη. Ένας τρόπος είναι να επαναληφθούν οι υπολογισμοί για τον υπολογισμό της δόσης από εισπνοή με υποθετική συγκέντρωση ρύπου στον αέρα το παρεχόμενο όριο TCA και να ευρεθεί η αντίστοιχη μέγιστη επιτρεπτή δόση. Αυτή συγκρίνεται με την υπολογισμένη όπως στην § 5.4.1.1.

5.4.2 ΟΡΙΑ ΤΗΣ ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (EPA) Η.Π.Α.

Η Environmental Protection Agency (EPA) των Η.Π.Α. προτείνει μια σειρά από όρια τα οποία μάλιστα δίνονται σε μορφή άμεσης εφαρμογής. Συγκεκριμένα για μια σειρά από εν δυνάμει επικίνδυνες ουσίες δίνονται:

- 1) *Ημερήσια Δόση Αναφοράς για την Γαστρεντερική και Δερματική Οδό*
(Oral Reference Dose - RfD_o σε mg/(kg·bw/d). Η δόση αυτή αποτελεί το πάνω όριο για τοξικές επιδράσεις ουσιών που δρουν δια μέσου της γαστρεντερικής οδού.
- 2) *Ημερήσια Δόση Αναφοράς για την Αναπνευστική Οδό*
(Inhaled Reference Dose - RfD_i σε mg/kg·bw/d). Η δόση αυτή αποτελεί το προτεινόμενο άνω όριο για ουσίες με τοξικές επιδράσεις που δρουν μέσω της αναπνευστικής οδού.

5.4.3 ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΣΥΝΕΠΕΙΩΝ ΣΥΓΚΕΚΡΙΜΕΝΩΝ ΔΟΣΕΩΝ

Οι δόσεις που εκτιμώνται σύμφωνα με τη μεθοδολογία που περιγράφουμε στην § 5.3 συγκρίνονται με τα όρια που προτείνονται από τις σχετικές αρχές της § 5.4.1 και § 5.4.2 στις παρακάτω παραγράφους.

5.4.3.1 Εκτίμηση συνεπειών κατά RIVM

Η μεθοδολογία που προτείνει το RIVM διαφέρει για τις διάφορες κατηγορίες συνεπειών.

i. *Ουσίες που προκαλούν τοξικές επιδράσεις δια της γαστρεντερικής οδού*

Η ημερήσια ολική δόση που υπολογίζεται για την γαστρεντερική οδό δεν πρέπει να υπερβαίνει το όριο TDI (§ 5.4.1). Μπορεί να ορισθεί το μέγεθος Hazard Quotient ή Toxic Unit, ως ο λόγος:

$$HQ = \frac{TI_o}{TDI}$$

Ο λόγος αυτός δεν πρέπει να υπερβαίνει τη μονάδα για κάθε ουσία που δύναται να έχει τέτοια δράση.

ii. *Ουσίες που προκαλούν τοξικές επιδράσεις δια της αναπνευστικής οδού*

Υπολογίζεται εάν άνω όριο ημερήσιας δόσης βασισμένο στην μέγιστη επιτρεπόμενη συγκέντρωση της ουσίας στον αέρα (TCA, § 5.4.1). Αυτή η δόση (TDI_i) υπολογίζεται θεωρώντας τις ίδιες συνθήκες και οδούς μετάδοσης στο αναπνευστικό σύστημα όπως και για τον υπολογισμό των δόσεων TI_a, όπου όμως σαν είσοδος υποτίθεται ατμόσφαιρα με συγκέντρωση TCA. Και στην περίπτωση αυτή δύναται να ορισθεί ένας λόγος:

$$HQ = \frac{TI_a}{TDI_i}$$

ο οποίος δεν πρέπει να υπερβαίνει τη μονάδα, για κάθε ουσία με δυνατότητα τοξικών επιπτώσεων δια της αναπνευστικής οδού.

5.4.3.2 Εκτίμηση συνεπειών κατά EPA

Όπως αναφέρθηκε στην § 5.4.2 η EPA των Η.Π.Α. έχει δημοσιευμένες συγκεκριμένες δόσεις και συντελεστές κλίσης των σχέσεων δόσης-απόκρισης για τις τοξικές και καρκινογόνους επιπτώσεις και για την γαστρεντερική και για την αναπνευστική οδό. Η πρόταση-σύσταση της EPA είναι να υπολογίζεται ξεχωριστά οι τοξικές επιπτώσεις από την πιθανότητα καρκίνου. Ανεκτή τιμή για την τελευταία δεν προσδιορίζεται. Κατά συνέπεια η EPA συνιστά τον υπολογισμό ενός δείκτη κινδύνου για τις τοξικές επιπτώσεις σύμφωνα με τη σχέση:

$$HQ = \frac{TI_o}{RfDo} + \frac{TI_a}{RfDi}$$

Η EPA επιπρόσθετα συνιστά την άθροιση των επικινδυνοτήτων για ενήλικα και για παιδί, ενώ συνιστά τη διατήρηση σε ξεχωριστούς δείκτες τα HQ για τον ενήλικα και το παιδί.

Τέλος, προτείνει την άθροιση των δεικτών κινδύνου HQ μόνο για ουσίες με πανομοιότυπο μηχανισμό δράσεως. Βέβαια για την επικινδυνότητα λόγω της φύσης της (πιθανότητα) και λόγω των πολύ μικρών τιμών, είναι δυνατή η άθροισή της σε ένα συνολικό μέτρο επικινδυνότητας.

Στην παρούσα ανάλυση ακολουθήθηκαν και οι δύο μέθοδοι και παρουσιάζονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα ώστε να είναι δυνατή η σύγκριση.

Πίνακας 5.2: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Γαστρεντερικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.

		<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
		Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
		RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΑΝΟΡΓΑΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΑ	As	1.00E-03	3.00E-04	1.00E-03	3.00E-04	1.00E-03	3.00E-04
	Ba	2.00E-02	7.00E-02	2.00E-02	7.00E-02	2.00E-02	7.00E-02
	Br						
	Cd	5.00E-04	1.00E-03	5.00E-04	1.00E-03	5.00E-04	1.00E-03
	Ce						
	Cr	5.00E-03	3.00E-03	5.00E-03	3.00E-03	5.00E-03	3.00E-03
	Cu	1.40E-01	4.00E-02	1.40E-01	4.00E-02	1.40E-01	4.00E-02
	Ga						
	Hg	2.00E-03		2.00E-03		2.00E-03	
	La						
	Mn		2.00E-02		2.00E-02		2.00E-02
	Nd						
	Ni	5.00E-02	2.00E-02	5.00E-02	2.00E-02	5.00E-02	2.00E-02
	Pb	3.60E-03		3.60E-03		3.60E-03	
	Pr						
	Rb						
	Sb		4.00E-04		4.00E-04		4.00E-04
	Se		5.00E-03		5.00E-03		5.00E-03
	Sr		6.00E-01		6.00E-01		6.00E-01
	Th						
	Tl		7.00E-05		7.00E-05		7.00E-05
	U		3.00E-03		3.00E-03		3.00E-03
	V		7.00E-03		7.00E-03		7.00E-03
	Y						
	Zn	5.00E-01	3.00E-01	5.00E-01	3.00E-01	5.00E-01	3.00E-01

Πίνακας 5.3: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.

		<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
		Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
		RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΑΝΟΡΓΑΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΑ	As	1.89E-04		1.89E-04		1.89E-04	
	Ba	1.89E-04	1.40E-04	1.89E-04	1.40E-04	1.89E-04	1.40E-04
	Br						
	Cd		5.70E-05		5.70E-05		5.70E-05
	Ce						
	Cr	1.13E-02	3.00E-05	1.13E-02	3.00E-05	1.13E-02	3.00E-05
	Cu	1.89E-04		1.89E-04		1.89E-04	
	Ga						
	Hg	3.78E-05	8.60E-05	3.78E-05	8.60E-05	3.78E-05	8.60E-05
	La		0.00E+00		0.00E+00		0.00E+00
	Mn		1.43E-05		1.43E-05		1.43E-05
	Nd						
	Ni	9.45E-06		9.45E-06		9.45E-06	
	Pb						
	Pr						
	Rb						
	Sb						
	Se						
	Sr						
	Th						
	Tl						
	U						
	V						
	Y						
Zn							

Πίνακας 5.4: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Γαστρεντερικής Οδού** (*Οργανικές Ενώσεις*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για **χωμάτινες επιφάνειες**.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΠΟΛΥΚΥΚΛΙΚΟΙ ΑΡΩΜΑΤΙΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ- ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
Phenanthrene	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02
Anthracene	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01
Fluoranthene		4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02
Pyrene		3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02
Benzo(a)anthracene						
Chrysene						
Benzo(j)fluoranthene						
Benzo(k)fluoranthene						
Benzo(a)pyrene						
Benzo(e)pyrene						
Dibenz(a,h)anthracene						
Benzo(ghy)perylene	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
Naphthalene	4.00E-02	2.00E-02	4.00E-02	2.00E-02	4.00E-02	2.00E-02
Indeno,1,2,3-cd pyrene						
Phenol	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01

Πίνακας 5.4 (Συνέχεια): Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Γαστρεντερικής Οδού** (*Οργανικές Ενώσεις*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για *χωμάτινες επιφάνειες*.

	Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΟΛΙΚΟΙ ΠΕΤΡΕΛΑΪΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ-ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
EC5-EC6	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
EC6-EC8	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
EC8-EC10	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC10-EC12	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC12-EC16	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC16-EC21	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
aromatic EC5-EC7	2.00E-01		2.00E-01		2.00E-01	
AR-EC7-EC8	2.00E-01		2.00E-01		2.00E-01	
AR-EC8-EC10	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC10-EC12	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC12-EC16	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC16-EC21	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
AR -EC21-EC35	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
ΑΡΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
Benzene	3.30E-03	3.00E-03	3.30E-03	3.00E-03	3.30E-03	3.00E-03
Toluene	2.23E-01	2.00E-01	2.23E-01	2.00E-01	2.23E-01	2.00E-01
o-Xylene	1.50E-01	2.00E+00	1.50E-01	2.00E+00	1.50E-01	2.00E+00

Πίνακας 5.5: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΠΟΛΥΚΥΚΛΙΚΟΙ ΑΡΩΜΑΤΙΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑ ΚΕΣ						
Phenanthrene						
Anthracene						
Fluoranthene						
Pyrene						
Benzo(a)anthracene						
Chrysene						
Benzo(j)fluoranthene						
Benzo(k)fluoranthene						
Benzo(a)pyrene						
Benzo(e)pyrene						
Dibenz(a,h)anthracene						
Benzo(ghy)perylene						
Naphthalene		9.00E-04		9.00E-04		9.00E-04
Indeno,1,2,3-cd pyrene						
Phenol	3.78E-03		3.78E-03		3.78E-03	

Πίνακας 5.5 (Συνέχεια): Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για χωμάτινες επιφάνειες.

	Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
ΟΛΙΚΟΙ ΠΕΤΡΕΛΑΪΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ-ΑΝΘΡΑΚΕΣ	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
EC5-EC6	3.48E+00	0.00E+00	3.48E+00	0.00E+00	3.48E+00	0.00E+00
EC6-EC8	3.48E+00		3.48E+00		3.48E+00	
EC8-EC10	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC10-EC12	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC12-EC16	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC16-EC21						
aromatic EC5-EC7	7.56E-02		7.56E-02		7.56E-02	
AR-EC7-EC8	7.56E-02		7.56E-02		7.56E-02	
AR-EC8-EC10	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC10-EC12	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC12-EC16	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC16-EC21						
AR -EC21-EC35						
ΑΡΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
Benzene	3.78E-03	1.70E-03	3.78E-03	1.70E-03	3.78E-03	1.70E-03
Toluene	7.56E-02	1.14E-01	7.56E-02	1.14E-01	7.56E-02	1.14E-01
o-Xylene	1.64E-01		1.64E-01		1.64E-01	

Πίνακας 5.6: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Γαστρεντερικής Οδού** (*Ανόργανα Στοιχεία*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για **ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα**.

		<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
		Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
		RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΑΝΟΡΓΑΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΑ	As	1.00E-03	3.00E-04	1.00E-03	3.00E-04	1.00E-03	3.00E-04
	Ba	2.00E-02	7.00E-02	2.00E-02	7.00E-02	2.00E-02	7.00E-02
	Br						
	Cd	5.00E-04	1.00E-03	5.00E-04	1.00E-03	5.00E-04	1.00E-03
	Ce						
	Cr	5.00E-03	3.00E-03	5.00E-03	3.00E-03	5.00E-03	3.00E-03
	Cu	1.40E-01	4.00E-02	1.40E-01	4.00E-02	1.40E-01	4.00E-02
	Ga						
	Hg	2.00E-03		2.00E-03		2.00E-03	
	La						
	Mn		2.00E-02		2.00E-02		2.00E-02
	Nd						
	Ni	5.00E-02	2.00E-02	5.00E-02	2.00E-02	5.00E-02	2.00E-02
	Pb	3.60E-03		3.60E-03		3.60E-03	
	Pr						
	Rb						
	Sb		4.00E-04		4.00E-04		4.00E-04
	Se		5.00E-03		5.00E-03		5.00E-03
	Sr		6.00E-01		6.00E-01		6.00E-01
	Th						
	Tl		7.00E-05		7.00E-05		7.00E-05
	U		3.00E-03		3.00E-03		3.00E-03
	V		7.00E-03		7.00E-03		7.00E-03
	Y						
	Zn	5.00E-01	3.00E-01	5.00E-01	3.00E-01	5.00E-01	3.00E-01

Πίνακας 5.7: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Ανόργανα Στοιχεία) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.

		<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
		Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
		RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΑΝΟΡΓΑΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΑ	As	1.89E-04		1.89E-04		1.89E-04	
	Ba	1.89E-04	1.40E-04	1.89E-04	1.40E-04	1.89E-04	1.40E-04
	Br						
	Cd		5.70E-05		5.70E-05		5.70E-05
	Ce						
	Cr	1.13E-02	3.00E-05	1.13E-02	3.00E-05	1.13E-02	3.00E-05
	Cu	1.89E-04		1.89E-04		1.89E-04	
	Ga						
	Hg	3.78E-05	8.60E-05	3.78E-05	8.60E-05	3.78E-05	8.60E-05
	La		0.00E+00		0.00E+00		0.00E+00
	Mn		1.43E-05		1.43E-05		1.43E-05
	Nd						
	Ni	9.45E-06		9.45E-06		9.45E-06	
	Pb						
	Pr						
	Rb						
	Sb						
	Se						
	Sr						
	Th						
	Tl						
U							
V							
Y							
Zn							

Πίνακας 5.8: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Γαστρεντερικής Οδού** (*Οργανικές Ενώσεις*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για **ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα**.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΠΟΛΥΚΥΚΛΙΚΟΙ ΑΡΩΜΑΤΙΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ- ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
Phenanthrene	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02	4.00E-02
Anthracene	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01
Fluoranthene		4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02
Pyrene		3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02
Benzo(a)anthracene						
Chrysene						
Benzo(j)fluoranthene						
Benzo(k)fluoranthene						
Benzo(a)pyrene						
Benzo(e)pyrene						
Dibenz(a,h)anthracene						
Benzo(ghy)perylene	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
Naphthalene	4.00E-02	2.00E-02	4.00E-02	2.00E-02	4.00E-02	2.00E-02
Indeno,1,2,3-cd pyrene						
Phenol	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01	4.00E-02	3.00E-01

Πίνακας 5.8 (Συνέχεια): Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Γαστρεντερικής Οδού** (*Οργανικές Ενώσεις*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για **ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα**.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΟΛΙΚΟΙ ΠΕΤΡΕΛΑΪΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ-ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
EC5-EC6	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
EC6-EC8	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
EC8-EC10	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC10-EC12	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC12-EC16	1.00E-01		1.00E-01		1.00E-01	
EC16-EC21	2.00E+00		2.00E+00		2.00E+00	
aromatic EC5-EC7	2.00E-01		2.00E-01		2.00E-01	
AR-EC7-EC8	2.00E-01		2.00E-01		2.00E-01	
AR-EC8-EC10	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC10-EC12	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC12-EC16	4.00E-02		4.00E-02		4.00E-02	
AR-EC16-EC21	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
AR -EC21-EC35	3.00E-02		3.00E-02		3.00E-02	
ΑΡΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
Benzene	3.30E-03	3.00E-03	3.30E-03	3.00E-03	3.30E-03	3.00E-03
Toluene	2.23E-01	2.00E-01	2.23E-01	2.00E-01	2.23E-01	2.00E-01
o-Xylene	1.50E-01	2.00E+00	1.50E-01	2.00E+00	1.50E-01	2.00E+00

Πίνακας 5.9: Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της Αναπνευστικής Οδού (Οργανικές Ενώσεις) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΠΟΛΥΚΥΚΛΙΚΟΙ ΑΡΩΜΑΤΙΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ- ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
Phenanthrene						
Anthracene						
Fluoranthene						
Pyrene						
Benzo(a)anthracene						
Chrysene						
Benzo(j)fluoranthene						
Benzo(k)fluoranthene						
Benzo(a)pyrene						
Benzo(e)pyrene						
Dibenz(a,h)anthracene						
Benzo(ghy)perylene						
Naphthalene		9.00E-04		9.00E-04		9.00E-04
Indeno,1,2,3-cd pyrene						
Phenol	3.78E-03		3.78E-03		3.78E-03	

Πίνακας 5.9 (Συνέχεια): Ημερήσια Δόση Ρύπων δια της **Αναπνευστικής Οδού** (*Οργανικές Ενώσεις*) στον Ανθρώπινο Οργανισμό για **ασφάλτινες επιφάνειες ή σκυρόδεμα**.

	<i>Τοξικές επιπτώσεις και βλάβες</i>					
	Ολική Περίοδο Ζωής		Ενήλικα		Παιδί	
	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
ΟΛΙΚΟΙ ΠΕΤΡΕΛΑΪΚΟΙ ΥΔΡΟΓΟΝ-ΑΝΘΡΑΚΕΣ						
EC5-EC6	3.48E+00	0.00E+00	3.48E+00	0.00E+00	3.48E+00	0.00E+00
EC6-EC8	3.48E+00		3.48E+00		3.48E+00	
EC8-EC10	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC10-EC12	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC12-EC16	1.89E-01		1.89E-01		1.89E-01	
EC16-EC21						
aromatic EC5-EC7	7.56E-02		7.56E-02		7.56E-02	
AR-EC7-EC8	7.56E-02		7.56E-02		7.56E-02	
AR-EC8-EC10	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC10-EC12	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC12-EC16	3.78E-02		3.78E-02		3.78E-02	
AR-EC16-EC21						
AR -EC21-EC35						
ΑΡΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ	RIVM	EPA	RIVM	EPA	RIVM	EPA
Benzene	3.78E-03	1.70E-03	3.78E-03	1.70E-03	3.78E-03	1.70E-03
Toluene	7.56E-02	1.14E-01	7.56E-02	1.14E-01	7.56E-02	1.14E-01
o-Xylene	1.64E-01		1.64E-01		1.64E-01	

5.5 ΣΗΜΕΙΑΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΠΙΚΙΝΔΥΝΟΤΗΤΑΣ

Η σημειακή ανάλυση περιλαμβάνει την επανάληψη των υπολογισμών 88 φορές σαν κάθε φορά η περιοχή να παρουσιάζει την συγκέντρωση των στοιχείων και ουσιών που μετρήθηκαν σε κάθε σημείο της δειγματοληψίας. Σε ορισμένα από αυτά έγιναν και μετρήσεις κατά τη διάσταση του βάθους. Επειδή όμως οι οδοί μεταφοράς που είναι δυνατοί δεδομένης της συγκεκριμένης χρήσης γης δεν περιλαμβάνουν τη μεταφορά των ρύπων μέσω του υδροφόρου ορίζοντα, αλλά μόνο μέσω του "επιφανειακού στρώματος" του εδάφους οι μετρήσεις αυτές δεν συμπεριλήφθηκαν στην σημειακή ανάλυση. Στην συνέχεια υπολογίζεται η ημερήσια δόση που λαμβάνει τόσο το παιδί, όσο και ο ενήλικας, καθώς επίσης και η συνολική δόση που λαμβάνει ο ανθρώπινος οργανισμός καθ' όλη την διάρκεια της ζωής του.

Η επιφάνεια στην περιοχή ενδιαφέροντος διακρίθηκε σε δύο είδη: **χωμάτινη επιφάνεια** και **επιφάνεια καλυμμένη με σκυροδέμα ή άσφαλτο**. Στη χωμάτινη επιφάνεια αντιστοιχούν 37 μετρήσεις και στην επιφάνεια σκυροδέματος/ασφάλτου 51. Τα δύο αυτά είδη επιφανειών θεωρήθηκαν ξεχωριστά γιατί ορισμένες από τις οδούς μεταφοράς που ισχύουν στις χωμάτινες επιφάνειες δεν ισχύουν για τις επιφάνειες ασφάλτου ή σκυροδέματος.

Τα βασικά συμπεράσματα μπορούν να περιγραφούν με την βοήθεια τεσσάρων δεικτών τοξικού φορτίου για αντίστοιχες ομάδες στοιχείων ή ουσιών: α) **Ανόργανα Στοιχεία** β) **Πολυκυκλικοί Αρωματικοί Υδρογονάνθρακες (PAH)** γ) **Ολικοί Πετρελαϊκοί Υδρογονάνθρακες (TPH)** και δ) **Αρωματικές Ενώσεις BXT** (Βενζόλιο, Ξυλόλιο, Τολουόλιο). Ο δείκτης υπολογίζεται σαν το άθροισμα των αντίστοιχων δεικτών κάθε στοιχείου ή ουσίας που ανήκει στην ομάδα. Ο δείκτης τοξικού φορτίου ενός στοιχείου ή ουσίας ορίζεται σαν ο λόγος της συνολικής ημερησίας δόσης στο άτομο προς την μέγιστη ανεκτή δόση του στοιχείου για τον ανθρώπινο οργανισμό. Ο δείκτης αυτός πρέπει να είναι μικρότερος της μονάδος για να είναι παραδεκτή η συγκέντρωση του συγκεκριμένου ρυπαντή. Για ρυπαντές που είναι χημικά συγγενείς και που επιδρούν στον ανθρώπινο οργανισμό μέσω του ίδιου βιολογικού μηχανισμού οι δείκτες τοξικού φόρτου προστίθενται και το άθροισμα αποτελεί τον συνολικό δείκτη της ομάδας. Ο δείκτης αυτός πρέπει να είναι μικρότερος της μονάδος.

Τα αποτελέσματα της σημειακής ανάλυσης αποδίδονται σχηματικά στα **διαγράμματα 5.1** έως **5.14**, για κάθε μία από τις τρεις ομάδες ρυπαντών (εφόσον δεν

είναι δυνατόν ο υπολογισμός της ημερήσιας δόσης στον άνθρωπο για τους Ολικούς Πετρελαϊκούς Υδρογονάνθρακες (TPH) με το υπολογιστικό μοντέλο CalTOX), τα 88 σημεία δειγματοληψίας και τις δύο σειρές ορίων (RIVM & EPA). Τα διαγράμματα απεικονίζουν την ημερήσια δόση, σε ισοδύναμες τοξικές μονάδες, που λαμβάνει τόσο το παιδί όσο και ο ενήλικας, καθώς επίσης και την συνολική δόση που λαμβάνει ο ανθρώπινος οργανισμός εφ'όρου ζωής, στα 88 σημεία της δειγματοληψίας.

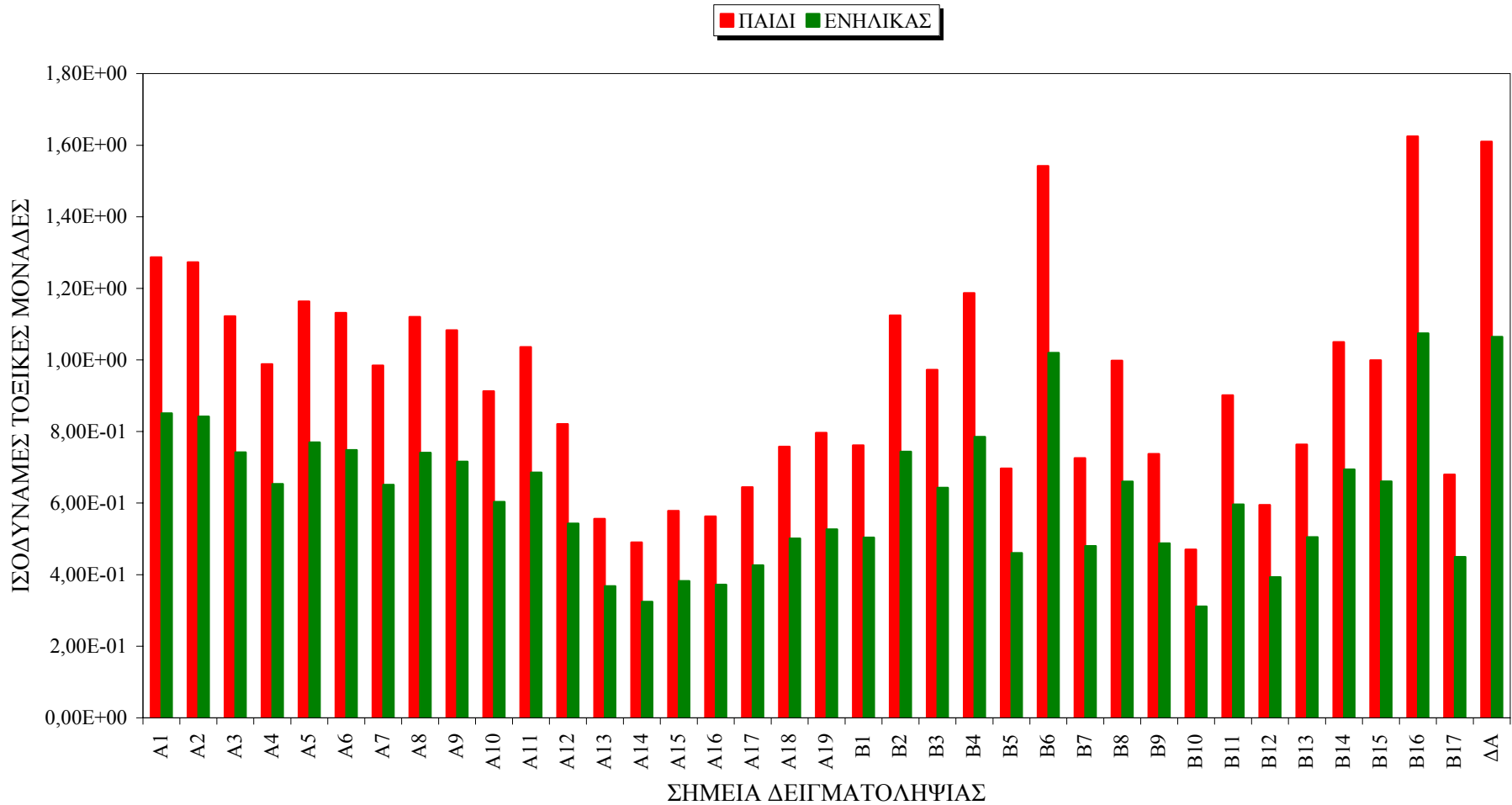
5.5.1 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΤΙΣ ΧΩΜΑΤΙΝΕΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ

Για τους υπολογισμούς αυτούς κρατήθηκαν οι μετρήσεις που αντιστοιχούν μόνο σε χωμάτινες επιφάνειες (37 μετρήσεις στις σειρές σημείων **A**, **B** και **ΔΑ** στην παράγραφο 5.2.1).

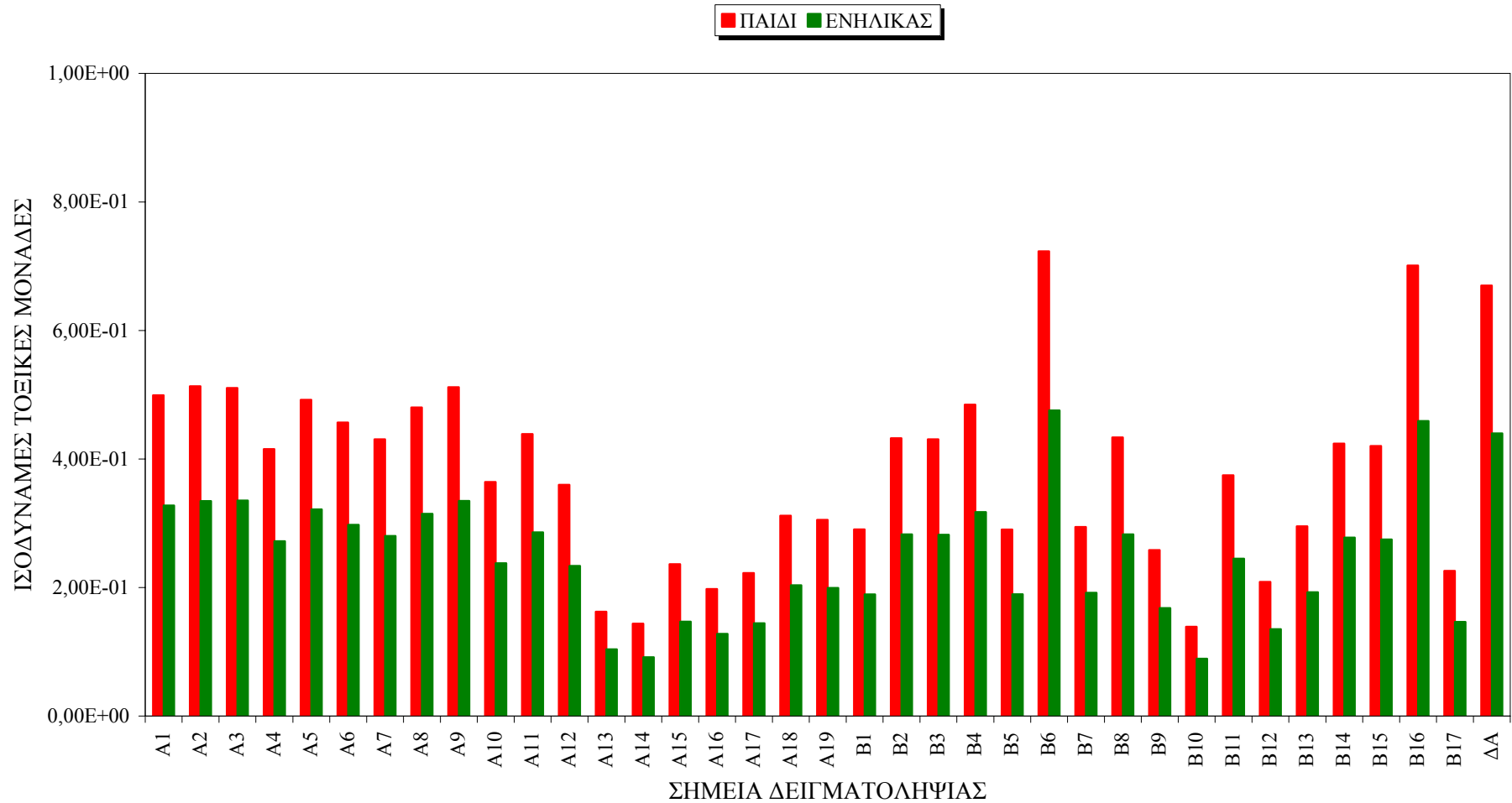
Λόγω της προτιθέμενης χρήσης γης στην περιοχή ενδιαφέροντος δεν είναι δυνατή η πραγματοποίηση της μεταφοράς σύμφωνα με τις οδούς *No. 4, 5, 6, 8, 11* και *15* της παραγράφου 5.3.1.2. Αυτό γιατί το πόσιμο νερό της περιοχής δεν προέρχεται από τοπικά πηγάδια και δεν καλλιεργούνται τοπικά βρώσιμα λαχανικά. Υπάρχει η δυνατότητα χρήσης τοπικού ύδατος (πηγάδια) για πότισμα αλλά πάλι όχι για την καλλιέργεια βρώσιμων λαχανικών. Έγινε η παραδοχή ότι είναι δυνατή η πρόσληψη ρυπαντών μέσω του πόσιμου νερού και των λουτρών στις αθλητικές εγκαταστάσεις με κατάλληλη προσαρμογή των χρόνων έκθεσης. Η προσέγγιση αυτή είναι ρεαλιστική μια και επιβαρύνει τις χρήσεις που υπέρκεινται χωμάτινων επιφανειών με τις συγκεντρώσεις και τις οδούς μεταφοράς που τους αντιστοιχούν.

Τα αποτελέσματα της σημειακής ανάλυσης στις χωμάτινες επιφάνειες αποδίδονται σχηματικά στα **διαγράμματα 5.1** έως **5.6** και για τις δύο σειρές ορίων (EPA & RIVM).

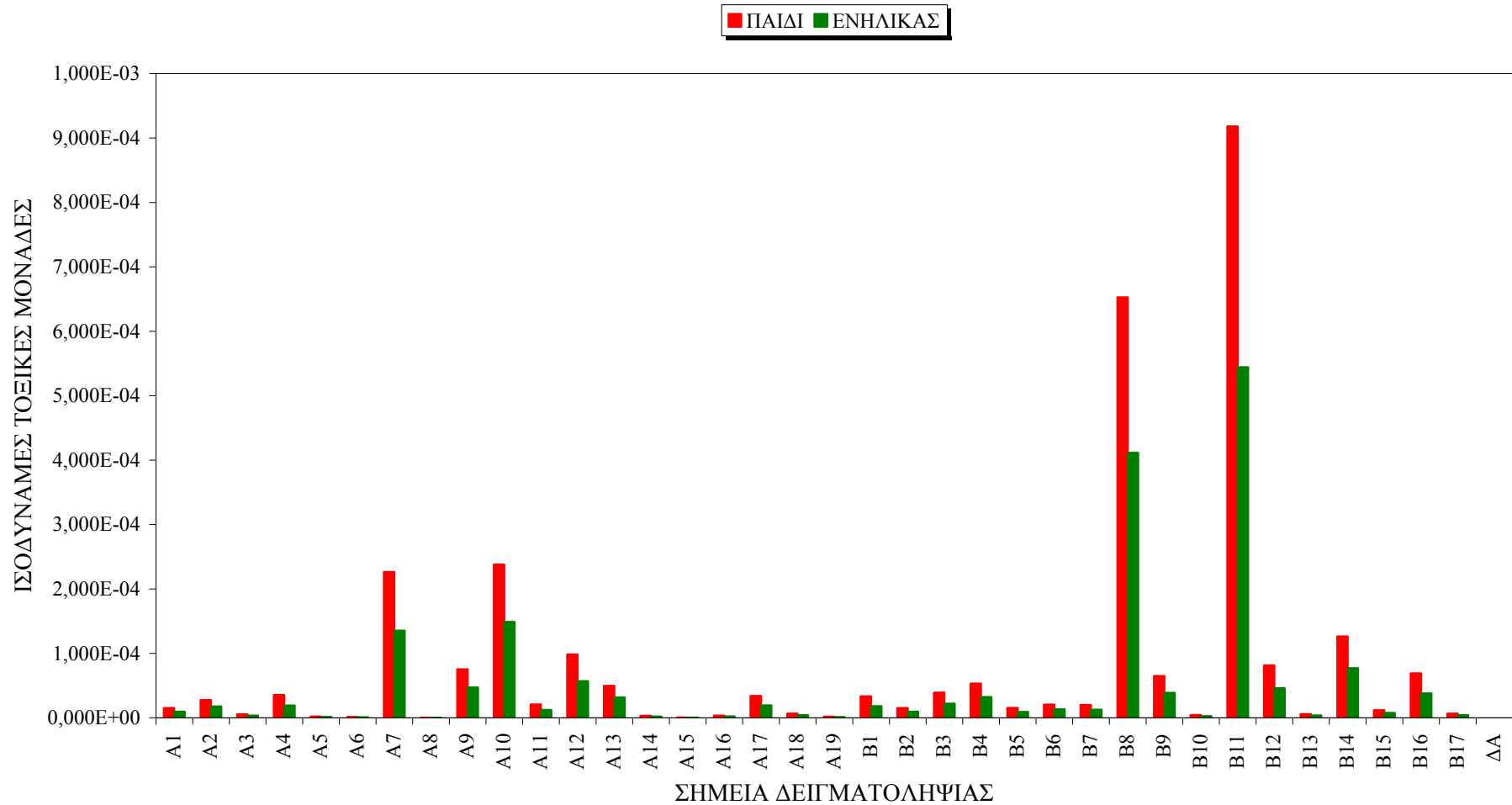
Διάγραμμα 5.1: Τοξικό φορτίο ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ - ΕΡΑ



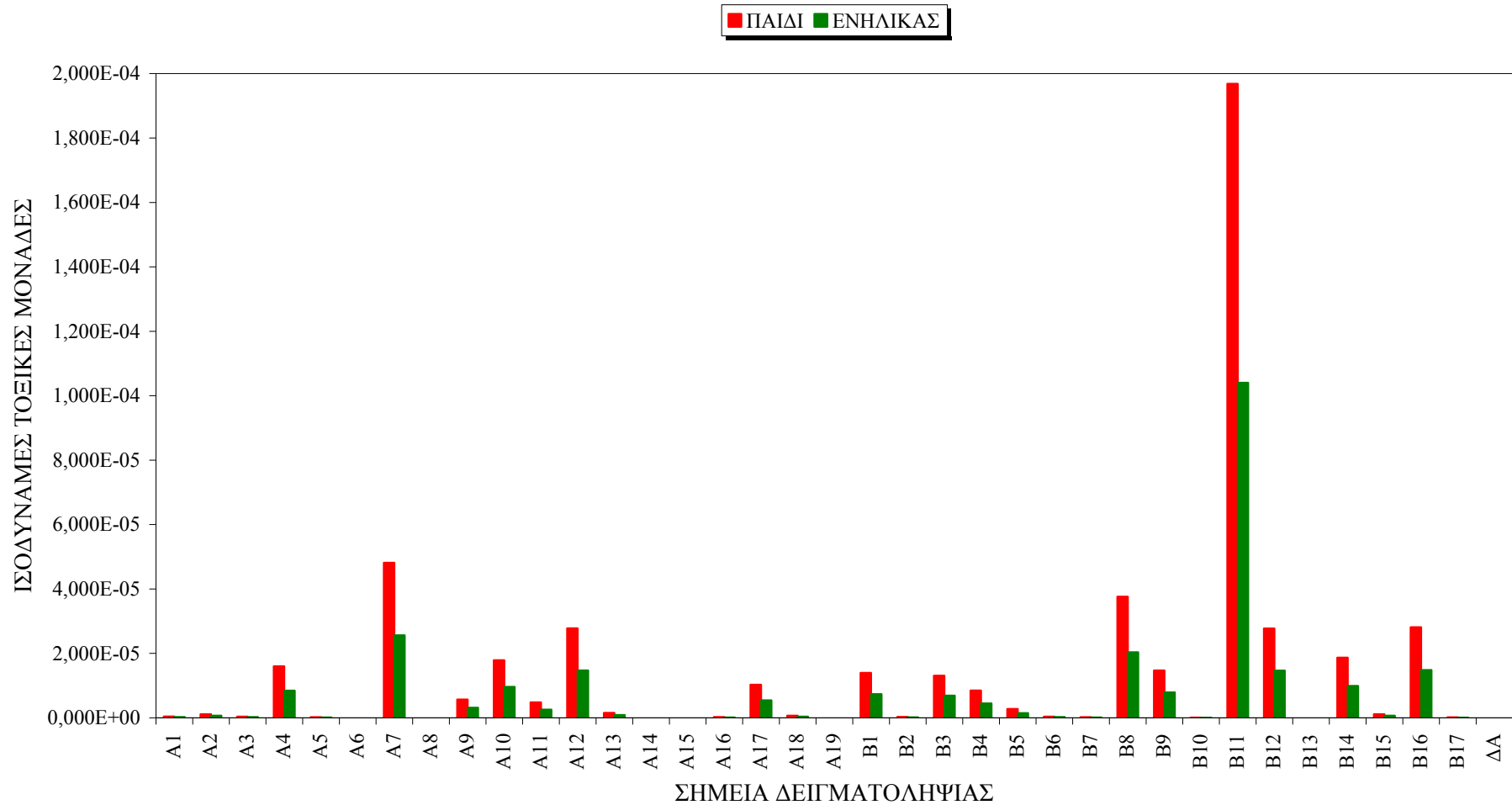
Διάγραμμα 5.2: Τοξικό φορτίο ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ - RIVM



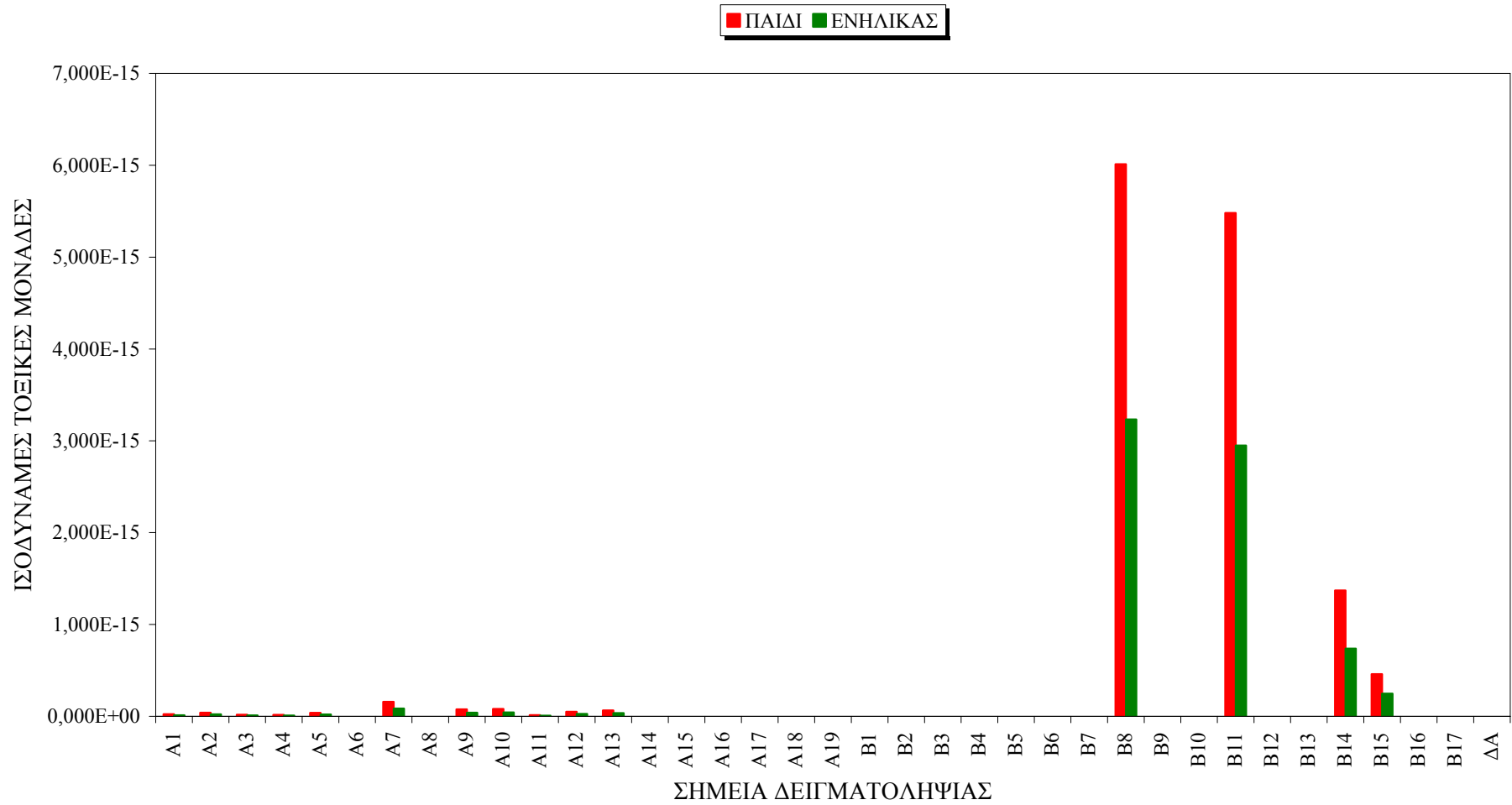
Διάγραμμα 5.3: Τοξικό φορτίο ΡΑΗ - ΕΡΑ



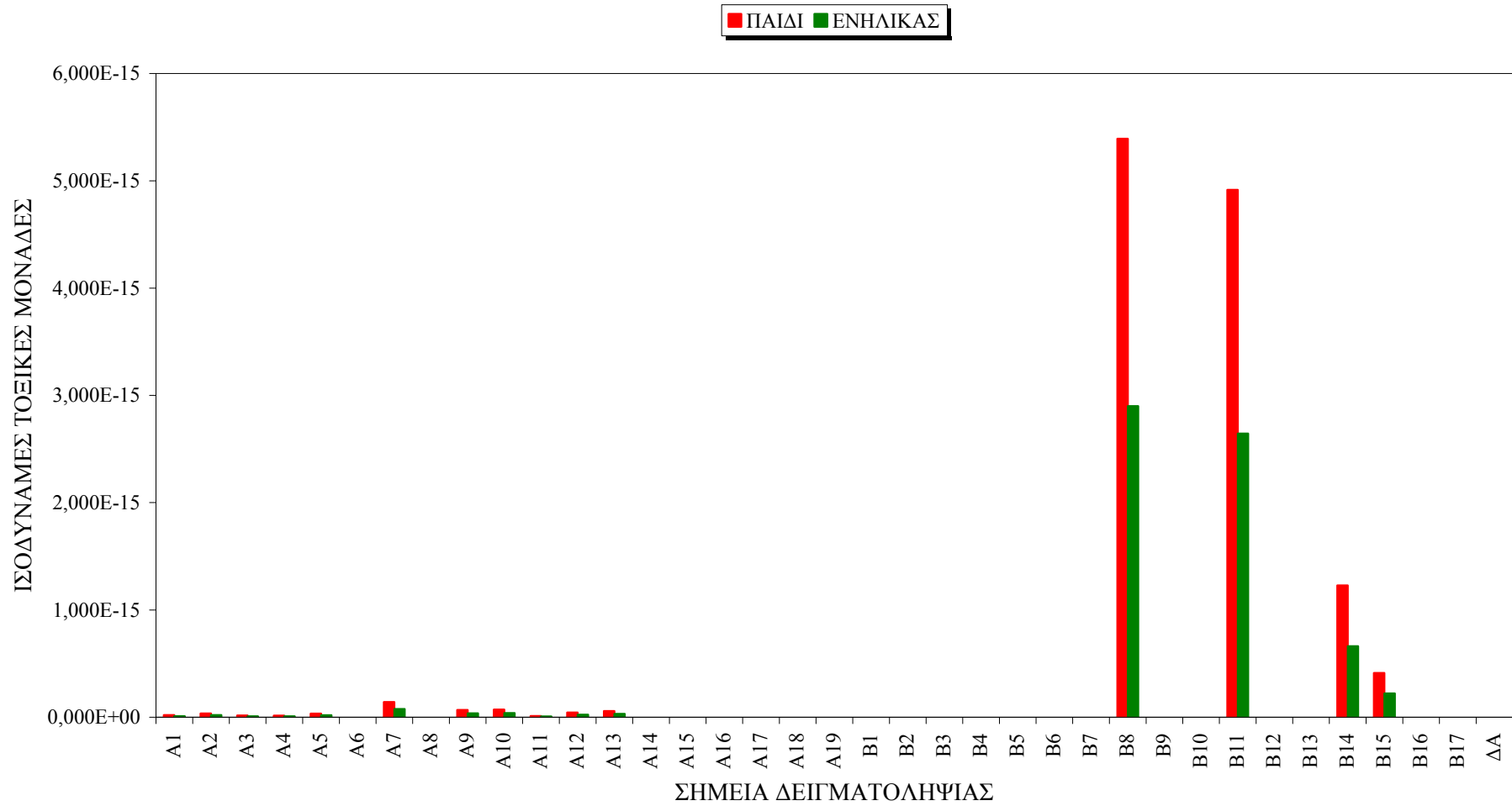
Διάγραμμα 5.4: Τοξικό φορτίο ΡΑΗ - RIVM



Διάγραμμα 5.5: Τοξικό φορτίο ΒΤΧ - ΕΡΑ



Διάγραμμα 5.6: Τοξικό φορτίο **BTX** - RIVM



5.5.1.1 Ανόργανα Στοιχεία

Όπως φαίνεται στα **διαγράμματα 5.1** (όρια EPA) και **5.2** (όρια RIVM), τα ανόργανα στοιχεία μπορούν να προκαλέσουν σημαντικό τοξικό φορτίο, στις χωμάτινες επιφάνειες, μόνο όσον αφορά τα όρια της EPA και αυτό για έκθεση παιδιών. Συγκεκριμένα, στα μισά σχεδόν σημεία δειγματοληψίας η έκθεση των παιδιών σε τοξικό φορτίο ξεπερνάει το ανώτατο όριο της μονάδος και σε ορισμένα εξ αυτών κατά μεγάλο βαθμό. Επίσης, σε 3 σημεία, ένα εκ των οποίων μάλιστα είναι εκτός ορίων Ελληνικού, το τοξικό φορτίο είναι μεγαλύτερο της μονάδος και για τον ενήλικα. Αντιθέτως, σύμφωνα με τα όρια RIVM το τοξικό φορτίο είναι σε όλα τα σημεία μικρότερο της μονάδος.

Είναι όμως σημαντικό ότι μεγαλύτερο φορτίο δημιουργείται σε χωμάτινη επιφάνεια εκτός της περιοχής των έργων (σημείο ΔΑ) πράγμα που σημαίνει ότι το τοξικό φορτίο της περιοχής των έργων μπορεί σε ορισμένα σημεία να υπερβαίνει την μονάδα αλλά παραμένει εντός των ορίων του υποβάθρου της περιοχής.

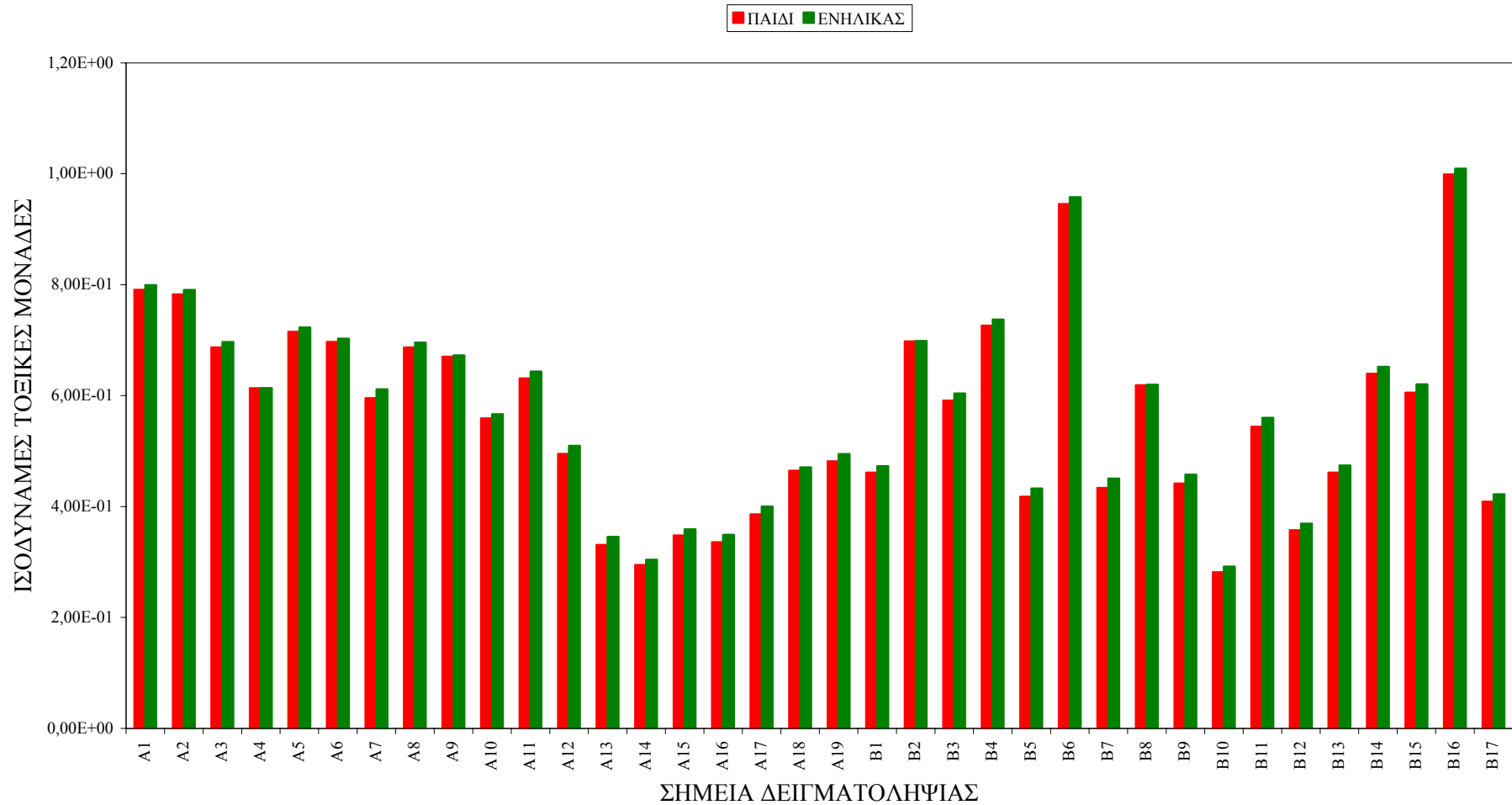
Για να γίνει περισσότερο προφανές το προηγούμενο συμπέρασμα υπολογίστηκε ο λόγος του συνολικού τοξικού φορτίου των Ανόργανων Στοιχείων για κάθε σημείο της χωμάτινης επιφάνειας της περιοχής των έργων προς το αντίστοιχο συνολικό τοξικό φορτίο του σημείου εκτός της περιοχής των έργων. Οι λόγοι αυτοί απεικονίζονται στα **διαγράμματα 5.7 και 5.8**, αντίστοιχα για τα όρια έκθεσης EPA και RIVM. Όπως φαίνεται και από τα διαγράμματα αυτά μόνο ένα σημείο της δειγματοληψίας εμφανίζει συνολικό τοξικό φορτίο ελάχιστα μεγαλύτερο από το φορτίο υποβάθρου (το B16 για τα όρια EPA και τα B6, B16 για τα όρια RIVM).

Συνεπώς το συνολικό τοξικό φορτίο της ομάδος στοιχείων "*Ανόργανα Στοιχεία*" στα σημεία της χωμάτινης επιφάνειας της περιοχής των έργων δεν παρουσιάζεται μεγαλύτερο από αυτό της περιοχής ελέγχου δηλαδή του υποβάθρου της γενικότερης περιοχής.

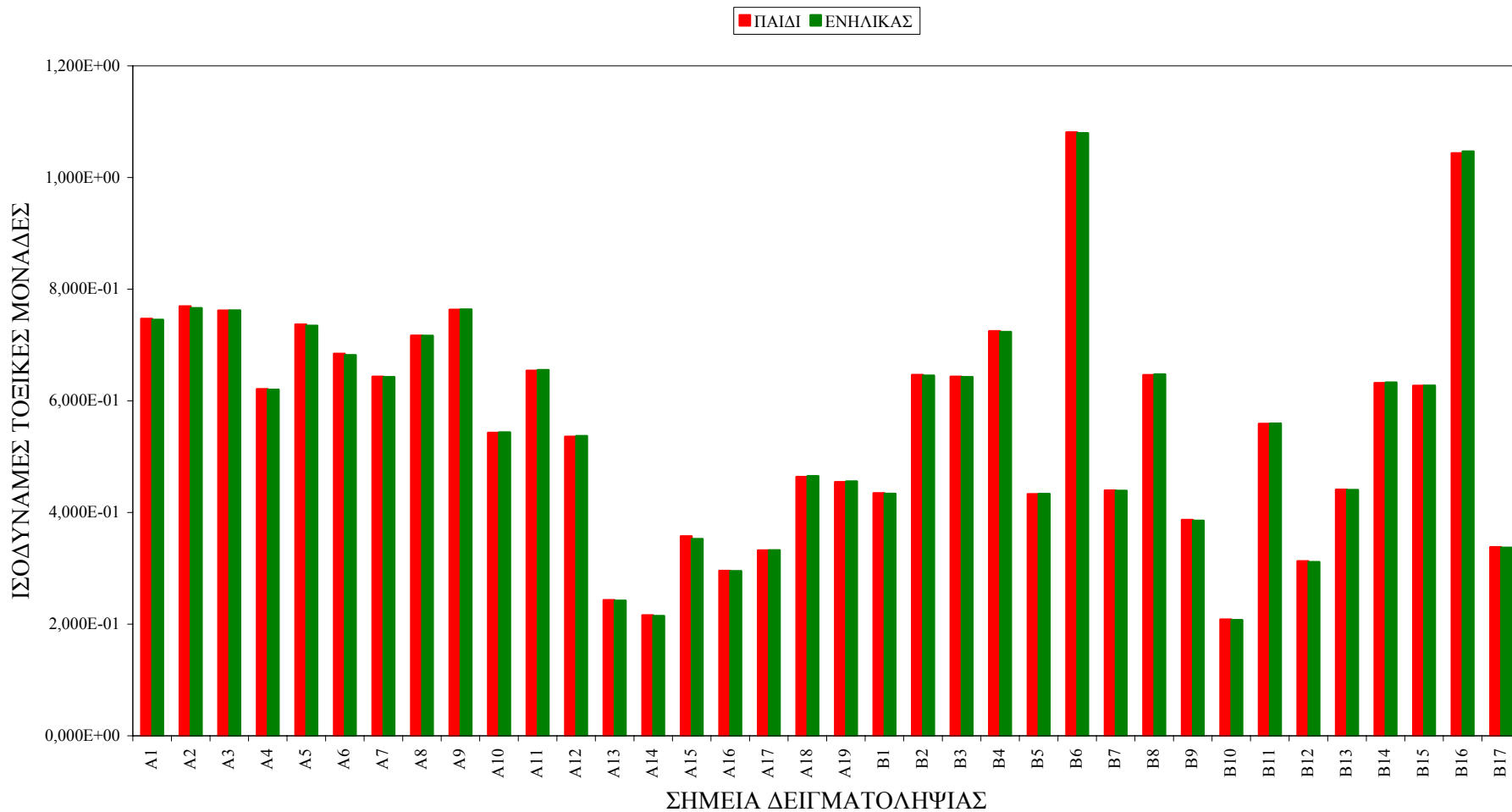
5.5.1.2 Πολυκυκλικοί Αρωματικοί Υδρογονάνθρακες (PAH)

Οι ενώσεις που ανήκουν στην ομάδα των Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων (PAH) παρουσιάζουν ένα συνολικό τοξικό φορτίο που είναι κατά πολύ μικρότερο της μονάδας, τόσο για τα όρια της EPA, όσο και για τα όρια της RIVM. Παρόλα αυτά, τα τοξικά φορτία προκύπτουν μεγαλύτερα για τα όρια που προτείνει η EPA.

Διάγραμμα 5.7: Τοξικό φορτίο Ανόργανων στοιχείων/τοξικό φορτίο σημείου ελέγχου - ΕΡΑ



Διάγραμμα 5.8: Τοξικό φορτίο Ανόργανων στοιχείων/τοξικό φορτίο σημείου ελέγχου - RIVM



5.5.1.3 Αρωματικές ενώσεις BXT

Η Ομάδα BXT αποτελείται από τις ενώσεις Βενζόλιο, Ξυλόλιο και Τολουόλιο. Βενζόλιο δεν ανιχνεύθηκε σε κανένα σημείο της δειγματοληψίας. Το συνολικό τοξικό φορτίο της ομάδας BXT δίνεται στα **διαγράμματα 5.5** και **5.6**, αντίστοιχα για τα όρια κατά EPA και RIVM. Τα φορτία είναι σε όλα τα σημεία κατά πολύ μικρότερα της μονάδας.

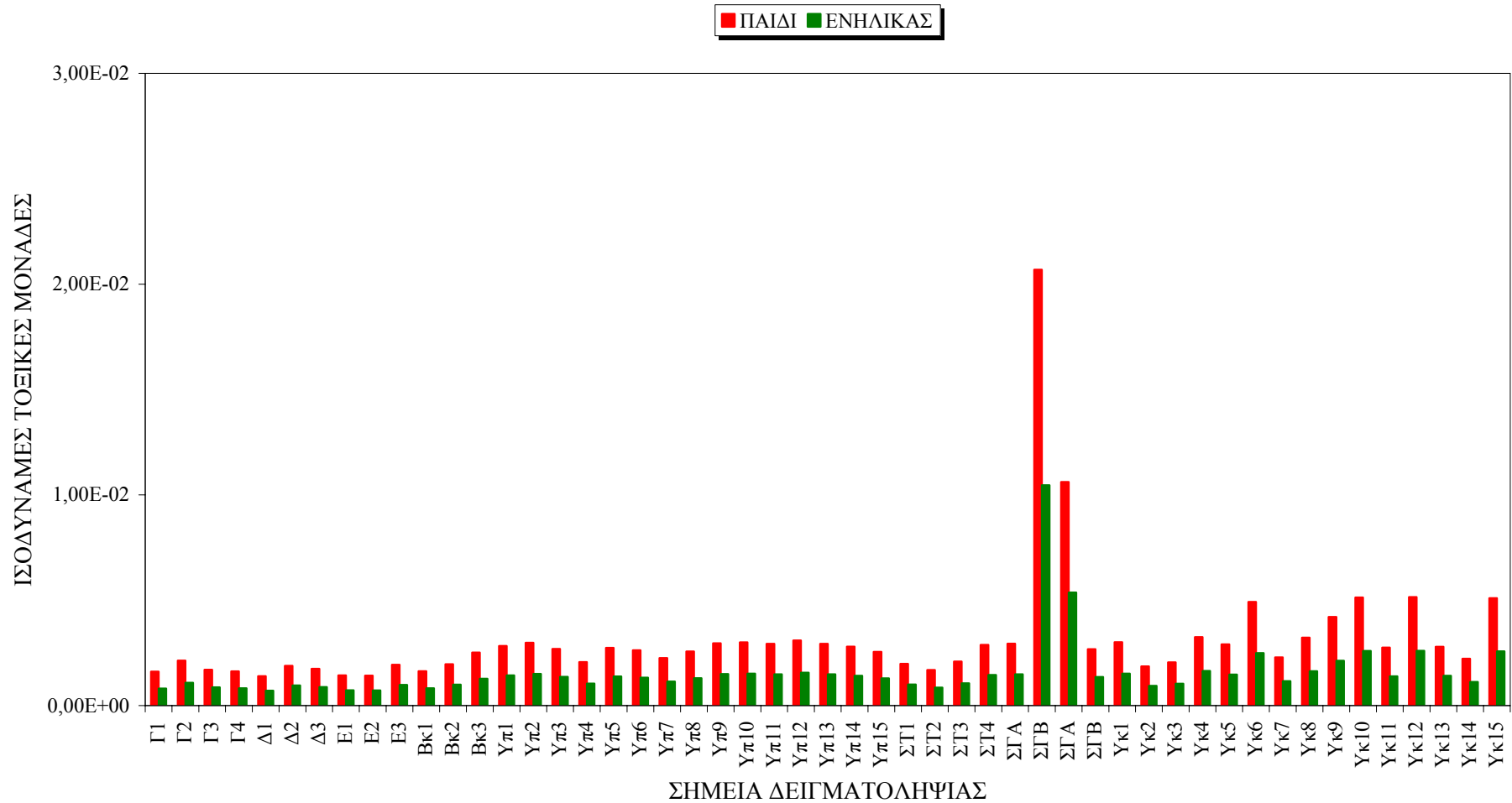
5.5.2 ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ ΣΤΙΣ ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΜΕ ΑΣΦΑΛΤΟ Η ΄ ΣΚΥΡΟΔΕΜΑ

Για τους υπολογισμούς αυτούς κρατήθηκαν οι μετρήσεις που αντιστοιχούν μόνο σε επιφάνειες που καλύπτονται από άσφαλτο ή σκυρόδεμα (51 μετρήσεις στις σειρές σημείων Γ, Δ, Ε, Στ, Υπ και Υκ στην **παράγραφο 5.2.1**).

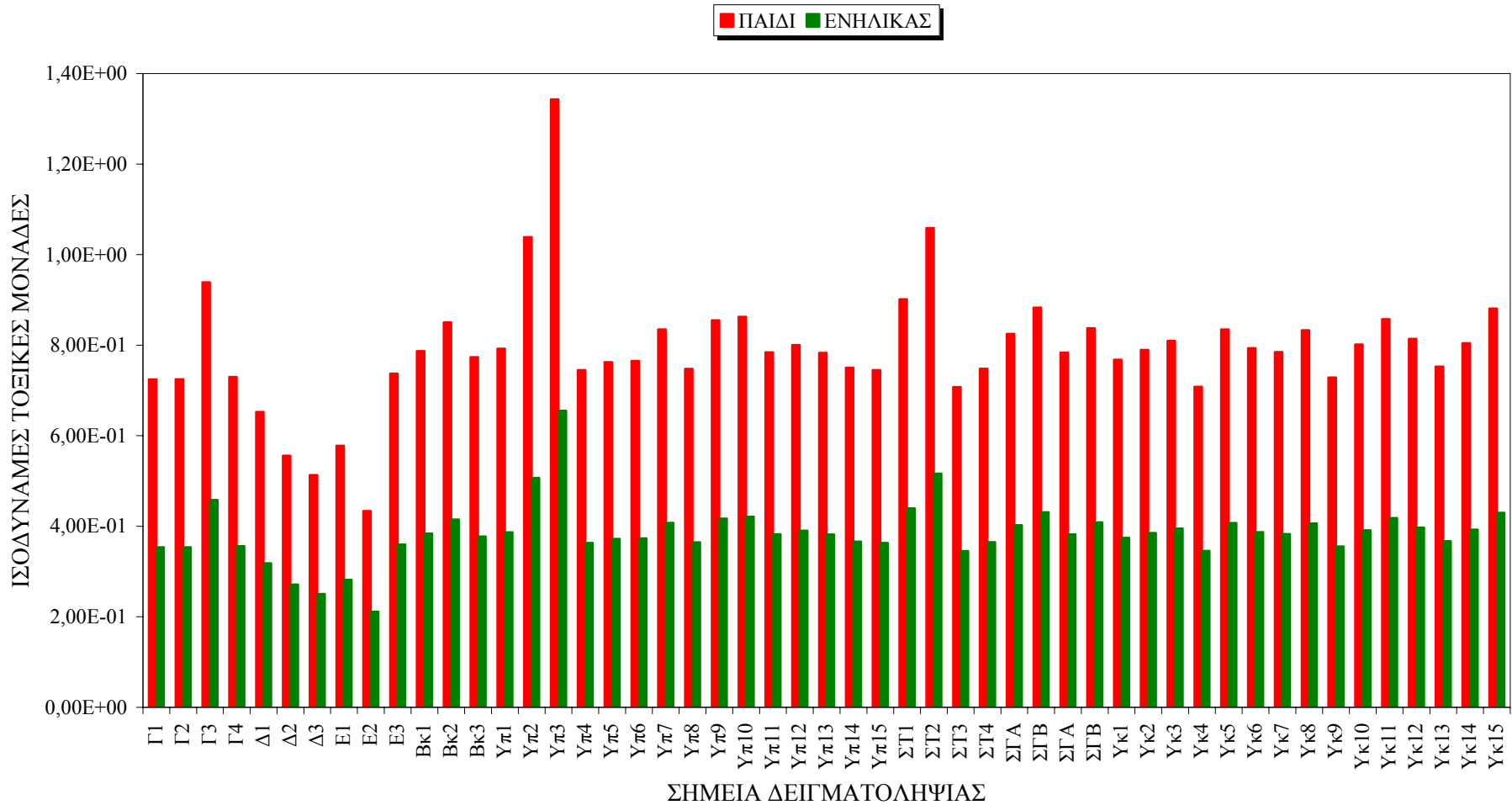
Στην περίπτωση αυτή δεν ισχύουν όλες οι οδοί μεταφοράς. Συγκεκριμένα οι πιο σημαντικές οδοί που αφορούν την μεταφορά και κατάποση ή αναπνοή σκόνης καθώς και διαδερματική μεταφορά από επικάθιση σκόνης δεν ισχύουν. Παραμένουν μόνο οι οδοί μεταφοράς μέσω του πόσιμου νερού αν γίνει αποδεκτό ότι οι σωλήνες νερού ευρίσκονται σε επαφή με τις επιφάνειες ασφάλτου και τσιμέντου και κυρίως αυτή της μεταφοράς στον αέρα και αναπνοής. Επίσης έγινε η παραδοχή ότι παιδιά κάτω των έξι χρόνων δεν θα χρησιμοποιούν λουτρά με καταιονισμό (Showering). Η προσέγγιση αυτή είναι πιο ρεαλιστική μια και επιβαρύνει τις χρήσεις που υπέρκεινται ασφάλτινων ή τσιμεντένιων επιφανειών με τις συγκεντρώσεις και τις οδούς μεταφοράς που τους αντιστοιχούν.

Τα αποτελέσματα της σημειακής ανάλυσης στις επιφάνειες με άσφαλτο ή σκυρόδεμα αποδίδονται σχηματικά στα **διαγράμματα 5.9** έως **5.14** και για τις δύο σειρές ορίων (EPA & RIVM).

Διάγραμμα 5.9: Τοξικό φορτίο ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ - ΕΡΑ



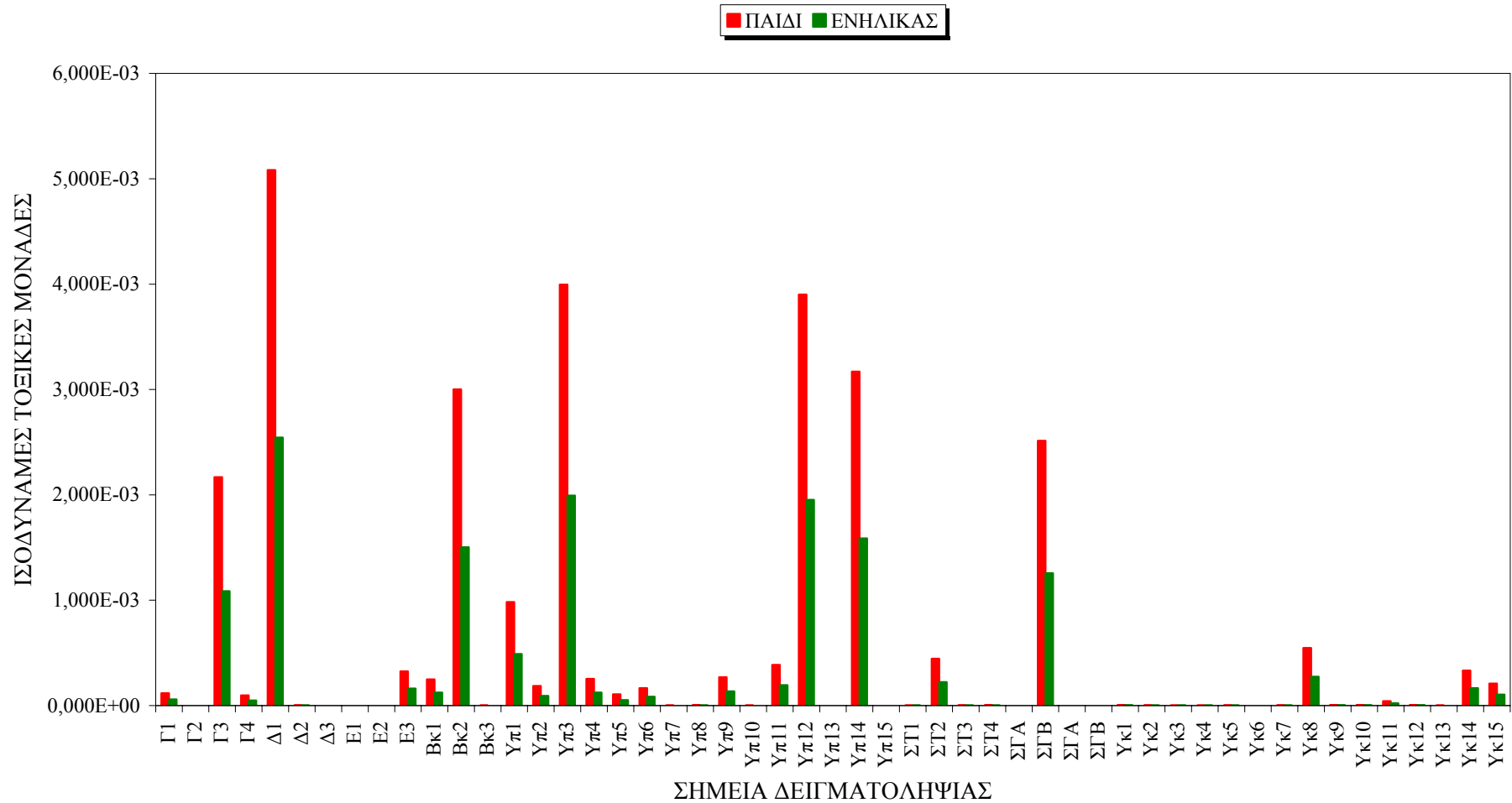
Διάγραμμα 5.10: Τοξικό φορτίο ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ - RIVM



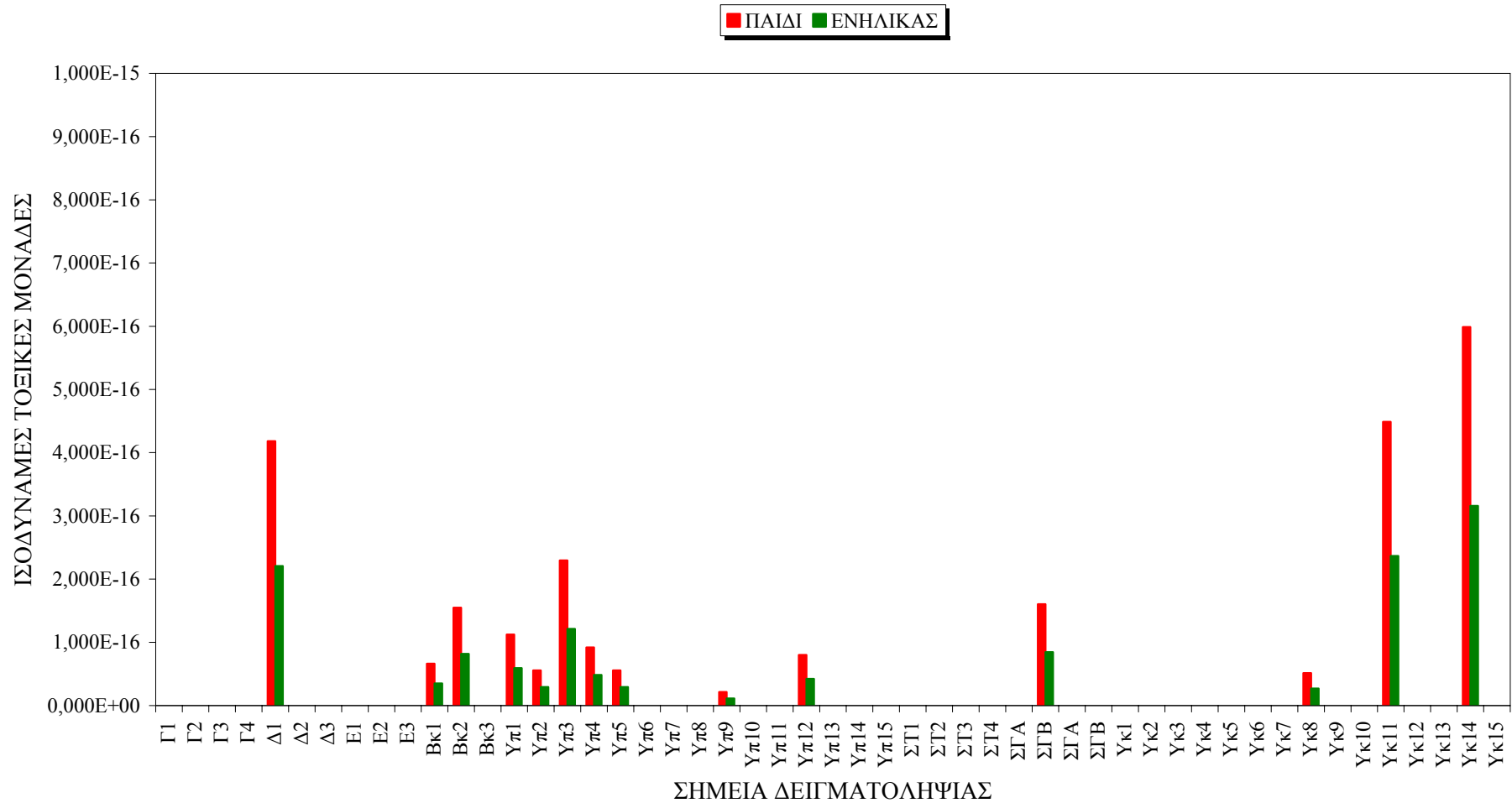
Διάγραμμα 5.11: Τοξικό φορτίο ΡΑΗ - ΕΡΑ



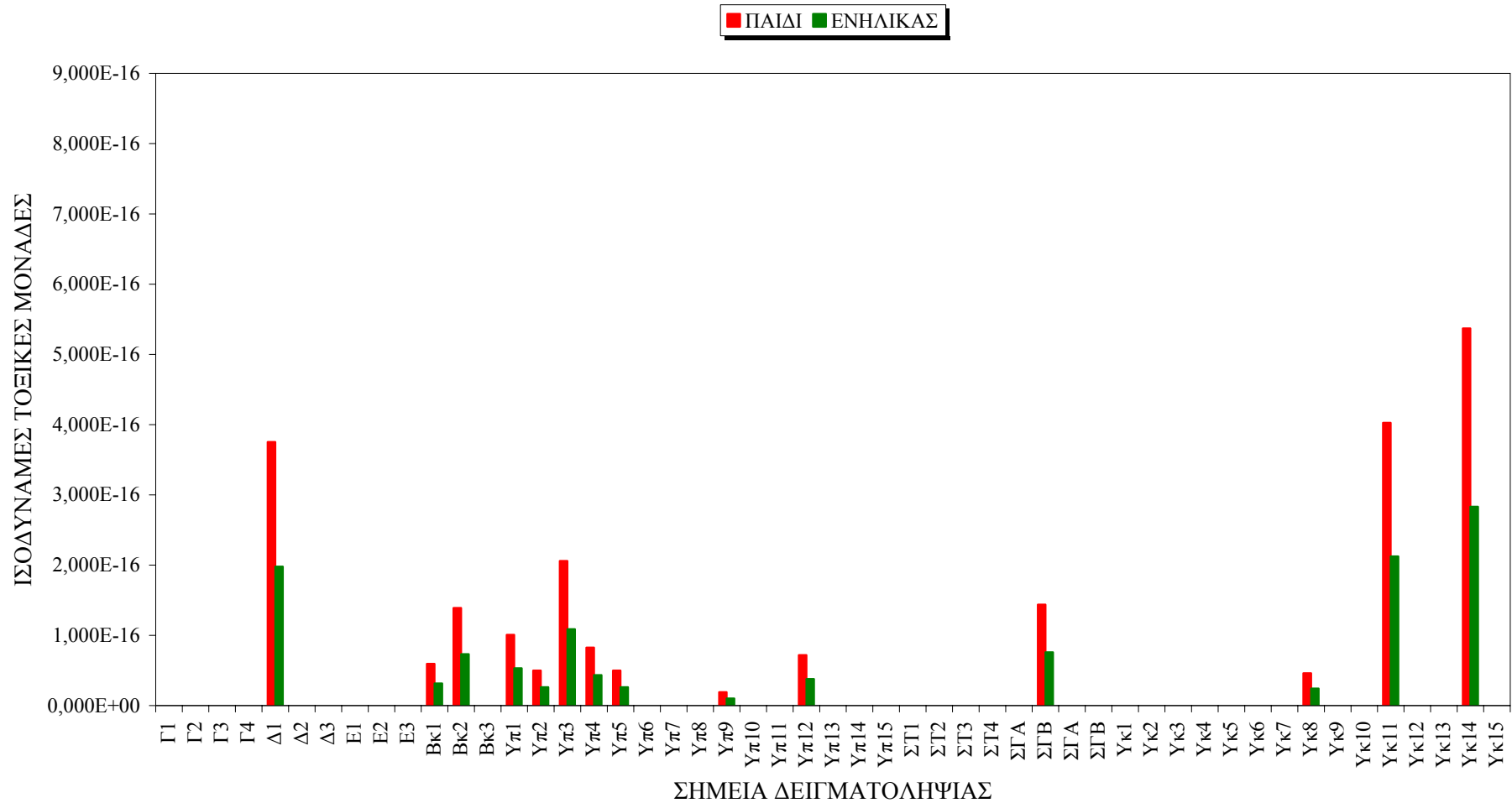
Διάγραμμα 5.12: Τοξικό φορτίο ΡΑΗ - RIVM



Διάγραμμα 5.13: Τοξικό φορτίο ΒΤΧ - ΕΡΑ



Διάγραμμα 5.14: Τοξικό φορτίο ΒΤΧ - RIVM



5.5.2.1 Ανόργανα Στοιχεία

Όπως φαίνεται στα **διαγράμματα 5.9** (όρια EPA) και **5.10** (όρια RIVM), τα ανόργανα στοιχεία μπορούν να προκαλέσουν σημαντικό τοξικό φορτίο, στις επιφάνειες με ασφαλτο/σκυρόδεμα, μόνο όσον αφορά τα όρια της RIVM και αυτό για έκθεση παιδιών. Συγκεκριμένα, σε 3 σημεία δειγματοληψίας η έκθεση των παιδιών σε τοξικό φορτίο ξεπερνάει το ανώτατο όριο της μονάδος. Αντιθέτως, σύμφωνα με τα όρια EPA το τοξικό φορτίο είναι σε όλα τα σημεία μικρότερο της μονάδος.

5.5.2.2 Πολυκυκλικοί Αρωματικοί Υδρογονάνθρακες (PAH)

Οι ενώσεις που ανήκουν στην ομάδα των Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων (PAH) παρουσιάζουν ένα συνολικό τοξικό φορτίο που είναι πολύ μικρότερο της μονάδας, τόσο για τα όρια της EPA, όσο και για τα όρια της RIVM. Παρόλα αυτά, τα τοξικά φορτία προκύπτουν μεγαλύτερα για τα όρια που προτείνει η EPA.

5.5.2.3 Ομάδα BXT

Η Ομάδα BXT αποτελείται από τις ενώσεις Βενζόλιο, Ξυλόλιο και Τολουόλιο. Βενζόλιο δεν ανιχνεύθηκε σε κανένα σημείο της δειγματοληψίας. Τα φορτία είναι σε όλα τα σημεία κατά πολύ μικρότερα της μονάδας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ & ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ

6.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη της ανάλυσης επικινδυνότητας τοξικών ουσιών για τον άνθρωπο.

Για τον σκοπό αυτό πραγματοποιήθηκε καταρχήν βιβλιογραφική ανασκόπηση, η οποία αφορά την εξέταση των γενικών πληροφοριών των διεθνών μοντέλων που σχετίζονται με την έκθεση της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος ερευνώντας τις διαφορές και τις ομοιότητες των αντίστοιχων αρχών που τα διέπουν. Κατόπιν, γίνεται αξιολόγηση των διαφορών μεταξύ των τεσσάρων πληρέστερων μοντέλων για κάθε οδό έκθεσης (τρεις σημαντικοί οδοί έκθεσης) με βάση τις διαφορές των εννοιών που διέπουν τα μοντέλα και των τιμών των παραμέτρων των δεδομένων εισόδου με σκοπό την εύρεση του πληρέστερου μοντέλου έκθεσης της ανθρώπινης υγείας σε επικίνδυνες ουσίες από το έδαφος.

Στη συνέχεια, με την βοήθεια του παραπάνω μοντέλου, πραγματοποιείται μια μελέτη περίπτωσης για το παλαιό αεροδρόμιο του Ελληνικού. Για δοθείσες τιμές συγκέντρωσης 44 πιθανά επικίνδυνων μολυσματικών ουσιών (ανόργανα στοιχεία, πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες, αρωματικές ενώσεις βενζόλιο-τολουόλιο-ξυλόλιο (BTX)) υπολογίζεται η ημερήσια δόση σε 88 σημεία δειγματοληψίας για δύο είδη αποδεκτών, το παιδί και τον ενήλικα. Κατόπιν υπολογίζεται το πηλίκο επικινδυνότητας κάθε μιας από τις προαναφερθείσες ουσίες σε κάθε σημείο και στη συνέχεια ο δείκτης επικινδυνότητας όλων των ουσιών για κάθε σημείο δειγματοληψίας και κατασκευάζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα.

Τέλος, πραγματοποιείται ανάλυση των αποτελεσμάτων και σύγκριση για τα διαφορετικά είδη μολυσματικών μέσων (χώμα, άσφαλτο), αποδεκτών (παιδί, ενήλικας) και βιβλιογραφικών πηγών (EPA, RIVM).

Σύμφωνα με την ανάλυση αποτελεσμάτων λοιπόν, μπορούμε να εξάγουμε τα εξής συμπεράσματα:

- Παρατηρούμε ότι χρησιμοποιώντας τις οριακές τιμές της EPA, θεωρώντας το χώμα ως μολυσματικό μέσο και το παιδί ως αποδέκτη, στα μισά σχεδόν σημεία δειγματοληψίας ο δείκτης επικινδυνότητας υπερβαίνει τη μονάδα. Θεωρώντας ως αποδέκτη τον ενήλικα στα αντίστοιχα σημεία δειγματοληψίας ο δείκτης επικινδυνότητας υπερβαίνει τη μονάδα μόνο σε τρία σημεία ένα εκ των οποίων μάλιστα είναι εκτός ορίων Ελληνικού. Το γεγονός αυτό οφείλεται κυρίως στον διαφορετικό τρόπο ζωής των παιδιών σε σύγκριση με τους ενήλικες. Για παράδειγμα, όταν τα παιδιά παίζουν στο χώμα έρχονται σε πολύ μεγαλύτερη επαφή με αυτό από ότι οι ενήλικες με αποτέλεσμα να εισέρχεται μεγαλύτερη ποσότητα μολυσματικής ουσίας στον οργανισμό τους.

Είναι όμως σημαντικό ότι μεγαλύτερο φορτίο δημιουργείται σε χωμάτινη επιφάνεια εκτός της περιοχής των έργων, πράγμα που σημαίνει ότι το τοξικό φορτίο της περιοχής των έργων μπορεί σε ορισμένα σημεία να υπερβαίνει την μονάδα αλλά παραμένει εντός των ορίων του υποβάθρου της περιοχής. Για να γίνει περισσότερο προφανές το προηγούμενο συμπέρασμα υπολογίστηκε ο λόγος του συνολικού τοξικού φορτίου των Ανόργανων Στοιχείων για κάθε σημείο της χωμάτινης επιφάνειας της περιοχής των έργων προς το αντίστοιχο συνολικό τοξικό φορτίο του σημείου εκτός της περιοχής των έργων.

- Σύμφωνα με τις οριακές τιμές του RIVM για το χώμα παρατηρούμε ότι ο δείκτης επικινδυνότητας δεν υπερβαίνει μεν τη μονάδα ούτε για το παιδί ούτε για τον ενήλικα, είναι όμως και σε αυτή την περίπτωση μεγαλύτερος για το παιδί γεγονός που οφείλεται ομοίως στον διαφορετικό τρόπο ζωής.
- Εξετάζοντας αντίστοιχα τα ίδια αποτελέσματα θεωρώντας την άσφαλτο ως μολυσματικό μέσο παρατηρούμε ότι σύμφωνα με την EPA ο δείκτης επικινδυνότητας δεν υπερβαίνει το όριο της μονάδας για κανένα από τα δυο είδη αποδεκτών. Βέβαια και σε αυτή την περίπτωση ο δείκτης

επικινδυνότητας του παιδιού είναι μεγαλύτερος από εκείνον του ενήλικα όμως και στις δύο περιπτώσεις είναι πολύ μικρότερος της μονάδας.

- Εξετάζοντας την ίδια περίπτωση σύμφωνα με το RIVM παρατηρούμε ότι για το παιδί υπάρχουν τρία επικίνδυνα σημεία, ενώ για τον ενήλικα κανένα. Όμοια με προηγούμενα, ο δείκτης επικινδυνότητας του παιδιού είναι μεγαλύτερος σε όλα τα σημεία από τον αντίστοιχο του ενήλικα.
- Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα EPA και RIVM για το χώμα παρατηρούμε ότι σύμφωνα με την EPA στο χώμα υπάρχουν πολλά επικίνδυνα σημεία δειγματοληψίας ενώ σύμφωνα με την RIVM δεν υπάρχουν. Η αντίστοιχη σύγκριση για την άσφαλτο μας δείχνει ότι σύμφωνα με το μοντέλο της RIVM υπάρχουν επικίνδυνα σημεία δειγματοληψίας ενώ σύμφωνα με την EPA δεν υπάρχουν. Λαμβάνοντας υπ' όψιν το γεγονός ότι η EPA έχει βιβλιογραφικά στοιχεία για οριακές τιμές περισσότερων χημικών ενώσεων από ότι το RIVM καθίσταται το EPA πιο αξιόπιστο.
- Θεωρώντας την EPA λοιπόν ως πιο αξιόπιστη αφού με βάση αυτές τις οριακές τιμές υπάρχουν περισσότερα στοιχεία, παρατηρούμε ότι ο δείκτης επικινδυνότητας για το χώμα ως μολυσματικό μέσο είναι μεγαλύτερος και για τα δυο είδη αποδεκτών από τον αντίστοιχο για την άσφαλτο για τα ανόργανα στοιχεία και τα ΒΤΧ, ενώ το αντίθετο ισχύει για τις πολυκυκλικές αρωματικές ενώσεις. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι οι συγκεντρώσεις των ανόργανων στοιχείων και των ΒΤΧ είναι μεγαλύτερες στο χώμα με αποτέλεσμα να είναι μεγαλύτερη και η ληφθείσα δόση από τον ανθρώπινο οργανισμό. Αντίστοιχα, οι συγκεντρώσεις των πολυκυκλικών αρωματικών ενώσεων είναι μεγαλύτερες στην άσφαλτο και για τα δυο είδη αποδεκτών.
- Το πιο επικίνδυνο σημείο δειγματοληψίας είναι το σημείο **B16** όπου ο δείκτης επικινδυνότητας είναι: **1,625** Η μεγάλη επικινδυνότητα του συγκεκριμένου σημείου οφείλεται κυρίως στην ένωση **Cr** (Chromium III) όπου το αντίστοιχο ηλικίο επικινδυνότητας είναι: **0,431**.

6.2 ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ

Με βάση τα συμπεράσματα που απορρέουν από την ανάλυση των έως τώρα αποτελεσμάτων προτείνουμε μια σειρά από μελλοντικές δραστηριότητες. Οι δραστηριότητες αυτές εκτιμούμε πως θα επιφέρουν βελτιώσεις στα μελλοντικά αποτελέσματα.

1. Κατά την διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής εργασίας παρατηρήσαμε ότι δεν υπάρχουν βιβλιογραφικά στοιχεία για οριακές τιμές πολλών χημικών ενώσεων. Το φαινόμενο αυτό είναι πολύ πιο έντονο στη RIVM από ότι στην EPA. Όμως και στις δύο περιπτώσεις υπάρχουν ελλείψεις βιβλιογραφικών ορίων. Θα μπορούσε λοιπόν να δημιουργηθεί μια βάση δεδομένων η οποία να περιέχει οριακές τιμές για όλες εκείνες τις χημικές ενώσεις που μας ενδιαφέρουν στον Ελλαδικό χώρο αλλά και γενικότερα.
2. Το μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε δεν έχει την δυνατότητα να υπολογίσει την ημερήσια δόση για όλες τις χημικές ενώσεις που ανιχνεύθηκαν στα σημεία δειγματοληψίας. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι στην βάση δεδομένων του μοντέλου δεν υπάρχουν οι τιμές κάποιων παραμέτρων για ορισμένες χημικές ενώσεις με αποτέλεσμα να καθίσταται αδύνατος ο υπολογισμός της ημερήσιας δόσης για τις συγκεκριμένες ενώσεις. Προτείνουμε λοιπόν να εισαχθούν στο μοντέλο και οι υπόλοιπες παράμετροι που απαιτούνται για τον υπολογισμό της ημερήσιας δόσης όλων των χημικών ενώσεων που μας ενδιαφέρουν.
3. Για την εφαρμογή του μοντέλου θεωρήσαμε ότι η Αθήνα έχει παρόμοια μετεωρολογικά και εδαφολογικά στοιχεία με την Καλιφόρνια. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι δεν υπάρχει η επιλογή της Αθήνας στο μοντέλο. Προτείνουμε λοιπόν να δημιουργηθεί μια βάση δεδομένων η οποία να περιλαμβάνει και περιοχές όχι μόνο της Ελλάδας αλλά και της υπόλοιπης Ευρώπης.
4. Επιλέγοντας την Καλιφόρνια έχουμε αναγκαστικά επιλέξει και τις συνήθειες των ανθρώπων που ζουν εκεί. Προτείνουμε λοιπόν την δημιουργία μιας βάσης δεδομένων η οποία να περιλαμβάνει τις διατροφικές συνήθειες και τις συνθήκες ζωής των Ελλήνων και κατ' επέκταση και των κατοίκων άλλων χωρών.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] AGLMB, 1995 Arbeitsgemeinschaft der leitenden Medizinalbeamten der Länder: Standards zur Expositionsabschätzung für ausgewählte Aufnahmepfade. Berichte des Ausschusses für Umwelthygiene.
- [2] Anderson, P.R. and T.H. Christensen 1988 Distribution coefficients of Cd, Co, Ni and Zn in soils. *J. Soil Sci.* 39, 15-22.
- [3] Bacci, E., and C. Gaggi (1986) "Chlorinated Pesticides and Plant Foliage Translation Experiments", *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 37, 850–857.
- [4] Bacci, E., D. Calamari, C. Gaggi, and M. Vighi (1990) "Bioconcentration of Organic Chemical Vapors in Plant Leaves: Experimental Measurements and Correlation", *Environ. Sci. Technol.* 24, 885-889.
- [5] Baes C.F. et al. 1984 A review and analysis of parameters for assessing transport of environmentally released radionuclides through agriculture. Oak Ridge National Laboratory Report No ORNL-5786, Oak Ridge, Tennessee.
- [6] Bear, J. and A. Verruijt (1987) *Modeling Groundwater Flow and Pollution* (D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland).
- [7] Berg R. van den, Roels J.M. 1991. Risk assessment to man and the environment in case of exposure to soil contamination. Integration of different aspects. pp. 98. Report no. 725201013. RIVM. Bilthoven. The Netherlands.
- [8] Berg, R. van den 1991/1995 Blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging. Een kwalitatieve en kwantitatieve analyse leidend tot voorstellen voor humaan toxicologische C-toetsingswaarden (rapportnr 725201006). RIVM, April 1991, herziene versie maart 1995.
- [9] Bidleman, T.F. and W.T. Foreman (1987) "Vapor-Particle Partitioning of Semivolatile Organic Compounds", in *The Chemistry of Aquatic Pollutants*, R.A. Hites and S.J. Eisenreich (Eds.) American Chemical Society (ACS) *Advances in Chemistry series*, (ACS, New York).
- [10] Binder S. et al., 1986 Estimating soil ingestion: the use of tracer elements in estimating the amount of soil ingested by young children. *Archives of Environmental Health* 41, 341-345.

- [11] Bodek, I, W.J. Lyman, W.F. Reehl, and D.H. Rosenblatt (1988) Environmental Inorganic Chemistry Properties, Processes and Estimation Methods (Pergamon Press, New York).
- [12] Boethling, R.S. and A. Sabijic (1989) “Screening-Level Model for Aerobic Biodegradability Based on a Survey of Expert Knowledge”, Environ. Sci. Technol. 23, 672-679.
- [13] Bowen, H.J.M. (1979) Environmental Chemistry of the Elements (Academic Press, London).
- [14] Briggs G.G., R.H. Bromilow and A.A. Evans, 1982 Relationships between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barley. Pestic. Sci. 13, 495-504.
- [15] Briggs, G. G., R. H. Bromilow, A. A. Evans, and M. Williams (1983) “Relationships Between Lipophilicity and the Distribution of Non-Ionized Chemicals in Barley Shoots Following Uptake by the Roots”, Pestic. Sci. 14, 492–500.
- [16] Briggs, G. G., R. H. Bromilow, and A. A. Evans (1982) “Relationship Between Lipophilicity and Root Uptake and Translocation of Non-Ionized Chemicals by Barley”, Pestic. Sci. 13, 495–504.
- [17] Briggs, G.G., R.H. Bromilow, A.A. Evans and M. Williams, 1983 Relationships between lipophilicity and the distribution of non-ionised chemicals in barley shoots following uptake by the roots. Pesticide Science 14, 492-500.
- [18] Calabrese E.J. et al. 1989 How much do young children ingest: An epidemiologic study. Regulatory Toxicology and Pharmacology 10, 113-123.
- [19] Calabrese, J., E.J. Slanek, R.C. James and S.M. Roberts, 1997 Soil ingestion: a concern for acute toxicity in Children. Environmental Health Perspectives 105, no 12, 1997.
- [20] Calamari, D., M. Vighi, and E. Bacci (1987) “The Use of Terrestrial Plant Biomass as a Parameter in the Fugacity Model”, Chemosphere 16, 2359–2364.
- [21] California Environmental Protection Agency (Cal/EPA), 1992, memo from the Standards and Criteria Work Group, Office of Environmental Health Hazard Assessment, June 18, 1992. California Cancer Potency Factors.
- [22] CalTOX Version 2.3, Description of Modifications and Revisions, Thomas E. McKone, University of California, Berkeley and University of California,

- Ernest Orlando Lawrence, Berkeley National Laboratory and by Deborah Hall and William E. Kastenberg, University of California, Berkeley. The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California. March 1997.
- [23] CalTOX, 1993 Draft Final Reports. A multimedia total exposure model for hazardous-waste sites. Technical reports. California Environmental Protection Agency, Sacramento, California.
- [24] CalTOX, A Multimedia Total Exposure Model For Hazardous-Waste Sites, Part I: Executive Summary, The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California. December 1993.
- [25] CalTOX, A Multimedia Total Exposure Model For Hazardous-Waste Sites, Part II: The Dynamic Multimedia Transport and Transformation Model, The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California. December 1993.
- [26] CalTOX, A Multimedia Total Exposure Model For Hazardous-Waste Sites, Part III: The Multiple Pathway Exposure Model, The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California. December 1993.
- [27] CalTOX, A Multimedia Total Exposure Model For Hazardous-Waste Sites, Part IV: Comments and Responses, The Office of Scientific Affairs, Department of Toxic Substances Control, California Environmental Protection Agency, Sacramento, California. December 1993.
- [28] Chapman, S., and T.G. Cowling (1939) The Mathematical Theory of Nonuniform Gases (Cambridge University Press, New York, NY).
- [29] CLEA, 1998 The Contaminated Land Exposure Assessment Model (CLEA); Technical Basis and Algorithms. Report prepared for the Department of Environment, Transport, and the Regions and the Environment Agency. Draft in confidence.
- [30] CLR-7 Assessment of Risks to Human Health from Land Contamination: An Overview of the Development of Soil Guideline Values and Related Research, Department for Environment, Food and Rural Affairs and The Environment Agency, March 2002.

- [31] CLR-8 Priority Contaminants for the Assessment of Land, Department for Environment, Food and Rural Affairs and The Environment Agency, March 2002.
- [32] CLR-9 Contaminants in Soil: Collation of Toxicological Data and Intake Values for Humans, Department for Environment, Food and Rural Affairs and The Environment Agency, March 2002.
- [33] CLR-10 The Contaminated Land Exposure Assessment Model (CLEA): Technical Basis and Algorithms, Department for Environment, Food and Rural Affairs and The Environment Agency, March 2002.
- [34] CLR-11 Model Procedures for the Management of Contaminated Land, Department for Environment, Food and Rural Affairs and The Environment Agency, March 2002.
- [35] Cohen, Y., and P.A. Ryan (1985) "Multimedia Modeling of Environmental Transport: Trichloroethylene Test Case", *Environ. Sci. Technol.* 9, 412-417.
- [36] Cohen, Y., W. Tsai, S.L. Chetty, and G.J. Mayer (1990) "Dynamic Partitioning of Organic Chemicals in Regional Environments: A Multimedia Screening-Level Approach", *Environ. Sci. Technol.* 24, 1549-1558.
- [37] Davis S. et al. 1990 Quantitative estimates of soil ingestion on normal children between the ages of 2 and 7 years: Population-based estimates using aluminium, silicon and titanium as soil traces elements. *Archives of Environmental Health* 45, 112-122.
- [38] DGE 1994 Deutsche Gesellschaft für Ernährung e.V. (Hrsg.) Ernährungsbericht 1994, Frankfurt am Main.
- [39] Diamond, M.L., D. Mackay, P.M. Welbourn (1992) "Models of Multi-Media Partitioning of Multi-Species Chemicals: The Fugacity/Aquivalence Approach", *Chemosphere*, 25, 1907-1921.
- [40] Fast T., J. Kliet, and H. van de Wiel, 1987 De bijdrage aan de verontreiniging van de luvcht in woningen. Rapportnummer 6 Publicatierreeks Milieubeheer. VROM, Leidschendam.
- [41] Fast T., Kliet J, Boleij J.S.M. and Slingerland P., 1988 The influence of soil pollution on the indoor air quality. In: Wolf e.a. (eds). *Contaminated soil '88*, 441-449 Kluwer.

- [42] Ferguson C., Darmandrail D., Freier K., Jensen B.K., Jensen J., Kasamas H., Urzelai A., Vegter J. (eds.), 1998. Risk assessment for contaminated sites in Europe. Volume 1; Scientific Basis. LQM Press. Nottingham. UK.
- [43] Ferguson C., Kasamas H. (eds.), 1999. Risk assessment for contaminated sites in Europe. Volume 2; Policy Frameworks. LQM Press. Nottingham. UK.
- [44] Ferguson CC, Krylov VV, McGrath PT, 1995 Contamination of indoor air by toxic soil vapours: a screening risk assessment model, *Building and Environment* 30 (3): 375-383.
- [45] Fiedler, D. A., K. W. Brown, J. C. Thomas, and K. C. Donnelly (1991) "Mutagenic Potential of Plants Grown on Municipal Sewage Sludge-Amended Soil", *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 20, 385–390.
- [46] Formica, S.J., J.A. Baron, L.J. Thibodeaux, and K.T. Valsaraj (1988) "PCB Transport into Lake Sediments. Conceptual Model and Laboratory Simulation", *Environ. Sci. Technol.* 22, 1435-1440.
- [47] Freeze, R.A. and J.A. Cherry, (1979) *Groundwater* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ).
- [48] Garbesi K, Sextro RG, Fisk W.J., Modera M.P. and Revzan K.L., 1993 Soil-Gas entry into an experimental Basement: Model Measurement comparisons and seasonaleffects. *Environ. Sci. Technol.* 27 (no.3): 466-473.
- [49] Gifford, F. A., and S. R. Hanna (1973) "Modeling Urban Air Pollution", *Atmos. Environ.* 7, 131–136.
- [50] Hammond, D., H.J. Simpson, and G. Mathieu (1975) "Methane and Radon-222 as Tracers for Mechanisms of Exchange across the Sediment-Water Interface in the Hudson River Estuary", in *Marine Chemistry in the Coastal Environment*, American Chemical Society Symposium Series 18, T.M. Church, Ed. (American Chemical Society, Washington D.C.)
- [51] Hanna, S.R., G.A. Briggs, and R.P. Hosker, Jr., (1982), *Handbook on Atmospheric Diffusion*, U.S. Department of Energy report DOE/TIC-11223.
- [52] Hawley J.K., 1985 Assessment of health risk from exposure to contaminated soil. *Risk analysis* 5, 289-302.
- [53] Hetrick, D.M. and L.M. McDowell-Boyer, 1984 Users manual for TOXSCREEN. EPA Report 560/5-83-024.
- [54] Hinds, W.C. (1982) *Aerosol Technology, Properties and Behavior and Measurement of Airborne Particles*, (Wiley and Sons, New York).

- [55] Horne, R.A. (1978) *The Chemistry of Our Environment* (Wiley-Interscience, New York).
- [56] Howard, P.H. (1989) *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals*, Volume I (Lewis Publishers, Chelsea, MI).
- [57] Howard, P.H. (1990) *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals*, Volume II (Lewis Publishers, Chelsea, MI).
- [58] Howard, P.H. (1991) *Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals*, Volume III (Lewis Publishers, Chelsea, MI).
- [59] Howard, P.H., J. Saxena, and H. Sikka (1978), "Determining the Fate of Chemicals", *Environ. Sci. Technol.* 12, 398-407.
- [60] International Atomic Energy Agency (IAEA) (1989) *Evaluating the Reliability of Predictions Made Using Environmental Transport Models*, Safety Series 100, (International Atomic Energy Agency, Vienna).
- [61] Janssen PJCM and Speijers GJA (1997) *Guidance on the derivation of Maximum Permissible Risk levels for human intake of soil contaminants*. National Institute of Public Health and the Environment, RIVM report no. 711701006, January 1997; Bilthoven, The Netherlands.
- [62] Junge, C.E. (1977) "Basic Considerations about Trace Constituents in the Atmosphere as Related to the Fate of Global Pollutants", in *Fate of Pollutants in the Air and Water Environments*, I.H. Suffet, Ed. (Wiley and Sons, New York) pp. 7-26.
- [63] Jury W .A., 1983 Behaviour assessment model for trace organics in soil: I, model description. *Journal Environmental Quality* 12, 558-564.
- [64] Jury W.A., 1990 Evaluation of volatilization by organic chemicals residing below the soil surface. *Water Resources research* 26, 13-20.
- [65] Jury, W., W. Spencer, and W. Farmer (1983) "Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model Description", *J. Environ. Qual.* 12, 558-564.
- [66] Jury, W.A., D. Russo, G. Streile, and H. El Abd (1990) "Evaluation of Volatilization by Organic Chemicals Residing Below the Soil Surface", *Water Resources Res.* 26, 13–20.
- [67] Jury, W.A., W.F. Spencer and W.J. Farmer, 1984c Behaviour assessment model for trace organics in soil: IV. Review of experimental evidence. *J. Environm. Quality.* 13: 580-586.

- [68] Karickhoff, S. W. (1985) "Pollutant Sorption in Environmental Systems", Environmental Exposure from Chemicals, Vol. 1, W.B. Neely and G.E. Blau, Eds. (CRC Press, Boca Raton).
- [69] Karickhoff, S.W. (1981) "Semi-Empirical Estimation of Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments and Soils", Chemosphere 10: 833-846.
- [70] Krylov V.V and Ferguson C.C., 1998 Contamination of indoor air by toxic soil vapours: the effects of subfloor ventilation and other protective measures, Building and Environment 33 (6): 331-347.
- [71] Ligocki, M.P. and J.F. Pankow (1989) "Measurements of the Gas/Particle Distributions of Atmospheric Organic Compounds", Environ. Sci. Technol. 23, 75-83.
- [72] Lijzen, J.P.A., Baars A.J., Otte, P.F., Rikken M.G.J., Swartjes F.A., Verbaruggen E.M.J. and van Wezel A.P. (2001) "Technical evaluation of the Intervention Values for Soil/sediment and Groundwater" National Institute of Public Health and the Environment, Bilthoven, The Netherlands. RIVM report. 711701 023.
- [73] Linders, J.B.H.L., 1990 Risicobeoordeling voor de mens bij blootstelling aan stoffen. Uitgangspunten en veronderstellingen (report no. 72520I003). RIVM, Bilthoven.
- [74] Lyman, W.J. et al. 1982 Handbook of Chemical Property Estimation Methods. McGraw-Hill, New York.
- [75] Lyman, W.J., W.F. Reehl, and D.H. Rosenblatt (1982) Handbook of Chemical Property Estimation Methods (McGraw-Hill, New York).
- [76] Mackay, D. (1979) "Finding Fugacity Feasible", Environ. Sci. Technol. 13, 1218-1223.
- [77] Mackay, D. (1991) Multimedia Environmental Models, the Fugacity Approach (Lewis Publishers, Chelsea, MI).
- [78] Mackay, D. and M. Diamond (1989) "Application of the QWASI (Quantitative Water Air Sediment Interaction) Model to the Dynamics of Inorganic Chemicals in Lakes", Chemosphere 18, 1343-1365.
- [79] Mackay, D., and S. Paterson (1981) "Calculating Fugacity", Environ. Sci. Technol. 15, 1006-1014.

- [80] Mackay, D., and S. Paterson (1982) "Fugacity Revisited", Environ. Sci. Technol. 16, 654-660.
- [81] Mackay, D., and S. Paterson (1991) "Evaluating the Multimedia Fate of Organic Chemicals: A Level III Fugacity Model", Environ. Sci. Technol. , 25, 427-436.
- [82] Mackay, D., and W.Y. Shiu (1981) "A Critical Review of Henry's Law Constants for Chemicals of Environmental Interest", J. Phys. Chem. Ref. Data 10, 1175-1199.
- [83] Mackay, D., M. Joy, and S. Paterson (1983a) "A Quantitative Water, Air, Sediment Interaction (QWASI) Fugacity Model for Describing the Fate of Chemicals in Lakes", Chemosphere 12, 981-997.
- [84] Mackay, D., S. Paterson, and M. Joy (1983b) "A Quantitative Water, Air, Sediment Interaction (QWASI) Fugacity Model for Describing the Fate of Chemicals in Rivers", Chemosphere 12, 1193-1208.
- [85] Mackay, D., S. Paterson, and W.H. Schroeder (1986) "Model Describing the Rates of Transfer Processes of Organic Chemicals between Atmosphere and Water", Environ. Sci. Technol., 20, 810-816.
- [86] MAFF, 1990 Household Food Consumption and Expenditure, Annual Report of the National Food Survey Committee HMSO London.
- [87] McFarlane, J. C., T. Pfleger, and J. Fletcher (1987) "Transpiration Effect on the Uptake and Distribution of Bromacil, Nitrobenzene, and Phenol in Soybean Plants", J. Environ. Qual. 16, 372-376.
- [88] McKone, T.E. 1987, Human Exposure to Volatile Organic Compounds in Household Tap Water: The Indoor Inhalation Pathway, Environ. Sci. Technol. 21: 1194-1201.
- [89] McKone, T.E. and Bogen, K.T. 1992, Uncertainties in Health-Risk Assessment: An Integrated Case Study Based on Tetrachloroethylene in California Groundwater, Regul. Toxicol. Pharmacol. 15: 86-103.
- [90] McKone, T.E., and D.W. Layton (1986) "Screening the Potential Risk of Toxic Substances Using a Multimedia Compartment Model: Estimation of Human Exposure", Regul. Toxicol. Pharmacol. 6, 359-380.
- [91] McKone, T.E., and D.W. Layton 1986, "Screening the Potential Risks of Toxic Substances Using a Multimedia Compartment Model: Estimation of Human Exposure", Regul. Toxicol. Pharmacol. 6: 359-380.

- [92] McKone, T.E., and Howd, R.A. 1992, Estimating Dermal Uptake of Nonionic Organic Chemicals from Water and Soil: Part 1, Unified Fugacity-Based Models for Risk Assessments, *Risk Analysis* 12: 543-557.
- [93] Mendoza C.A. and D.O. Frind, 1990 Advective dispersive transport of dense organic vapors in the unsaturated zone. 1. Model development. 2. Sensitivity analysis. *Water Resources Research* 26, 379-398.
- [94] Millington, R.J. and J.M. Quirk (1961) "Permeability of Porous Solids", *Trans. Faraday Soc.* 57, 1200-1207.
- [95] Nazaroff W.W. et al. 1992 Transport of subsurface contaminants into buildings. *Environ. Sci. Technol.* 26, 2058-2066.
- [96] Ng, Y. C. (1982) "A Review of Transfer Factors for Assessing the Dose from Radionuclides in Agricultural Products", *Nucl. Safety* 23, 57-71.
- [97] Otte, P.F, J.P.A.Lijzen, J.G. Otte, F.A. Swartjes and C.W Versluijs, 2001 Evaluation and revision of the CSOIL parameter set, proposed parameter set for human exposure modelling and deriving Intervention Values for the first series of compounds, RIVM report 711701021. RIVM, Bilthoven, The Netherlands.
- [98] Pankow, J.F. (1987) "Review and Comparison Analysis of the Theories on Partitioning Between the Gas and Aerosol Phases in the Atmosphere", *Atmos. Environ.* 21, 2275-2283.
- [99] Pasquill, F. (1961) "The Estimation of the Dispersion of Windborne Material", *Meteorol. Mag.* 90, 33-49.
- [100] Paterson S. and D. Mackay, 1989 Modeling the uptake and distribution of organic chemicals in plants. In: *Intermedia Pollutant Transport: Modeling and field measurements*, Allen, D.T. et al. (eds.) Plenum Press New York, pp. 283-292.
- [101] Paterson, S., and D. Mackay (1989) "Modeling the Uptake and Distribution of Organic Chemicals in Plants", in *Intermedia Pollutant Transport: Modeling and Field Measurements*, Allen, D. T., Y. Cohen, and I. R. Kaplan, Eds. (Plenum Press, New York, NY), pp. 283-292.
- [102] Paustenbach et al. 1996 Beitrag in rahmen des International Symposium "Exposure and Risk assessment with Respect to Contaminated Soil", 28 Februar bis 1 März 1996, GSF - Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit.

- [103] Prausnitz, J.M. (1969) *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*, (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ).
- [104] Reid R.C. et al. 1987 *The properties of gases and liquids*, 4th edition. McGraw-Hill, New York
- [105] Reid, R.C., J.M. Prausnitz, and B.E. Poling (1987) *The Properties of Gases and Liquids*, 4th Ed. (McGraw-Hill, New York).
- [106] Reuber, B., D. Mackay, S. Paterson, and P. Stokes (1987) "A Discussion of Chemical Equilibria and Transport at the Sediment-Water Interface", *Environ. Toxicol. Chem.* 6, 731-739.
- [107] Riederer, M. (1990) "Estimating Partitioning and Transport of Organic Chemicals in the Foliage/Atmosphere System: Discussion of a Fugacity-Based Model", *Environ. Sci. Technol.* 24, 829–837.
- [108] Ruck, A. 1990 *Regelungen zur Stofflichen Belastung von Boden: Erfahrungen in anderen Ländern und Umgang mit "Normalgehalten" VDI-Bericht 837.*
- [109] Ryan J.A. et al. 1988 *Plant uptake of non-ionic organic chemicals from soils.* *Chemosphere* 17, 195-207.
- [110] Ryan, P., and Y. Cohen (1986) "Multimedia Transport of Particle Bound Organics, Benzo(a)Pyrene Test Case", *Chemosphere* 15, 21-47.
- [111] Sauerbeck, D. 1989 *Der Transfer von Schwermetallen in die Pflanze.* In: *Beurteilung von Schwermetallkontaminationen im Boden. Vorträge der DECHEMA-Arbeitsgruppe "Bewertung von Gefährdungspotentialen im Bodenschutz"*, 281-316, DECHEMA, Frankfurt/M.
- [112] Sauerbeck, D., S. Lubben, 1991 *Auswirkungen von Siedlungsabfällen auf Boden, Bodenorganismen und Pflanzen.* *Berichte aus der Ökologischen Forschung.* Forschungszentrum Julich GmbH, Band 6.
- [113] Schnoor, J.L. (1981) "Fate and Transport of Dieldrin in Coraville Reservoir: Residues in Fish and Water Following a Pesticide Ban", *Science* 211, 840-842.
- [114] Schnoor, J.L. and D.C. MacAvoy (1981) "A Pesticide Transport and Bioconcentration Model", *J. Environ. Eng. Div, American Society of Civil Engineers* 107, 1229-1245.
- [115] Sheppard, S.C., W.G. Evenden 1992 *Contaminant enrichment of sparingly soluble contaminants (U, Th and Pb) by erosion and by soil adhesion to plants and skin.* *Environmental Geochemistry and Health* 14, 121-131.

- [116] Southworth, G.R. (1979) "The Role of Volatilization in Removing Polycyclic Aromatics from Aquatic Environments", *Bull. Environ. Contamin. Toxicol.* 21, 507-514.
- [117] Stubenrauch S., et al. 1994 Abschätzung der Schadstoffexposition in Abhängigkeit von Expositionsszenarien und Nutzergruppen. Teil 3: Vorschläge für orale Aufnahmeraten von Boden, Badeseewasser und Nahrungsmitteln des Eigenanbaus. *Umweltwissenschaften und Schadstoffforschung* 5/94.
- [118] Stumm, W. and J.J. Morgan (1981) *Aquatic Chemistry, An Introduction Emphasizing Chemical Equilibria in Natural Waters*, 2nd Ed. (John Wiley and Sons, New York, NY).
- [119] Swartjes F.A. 1999. Risk-based assessment of soil and groundwater quality in the Netherlands: standards and remediation urgency. *Risk Analysis* 19 (6): 1235-1249.
- [120] Swartjes F.A., Denneman C.A.J., Berg van den R. 1998. (In Dutch). The evaluation of soil quality within the framework of the 'Law on soil protection'. Chapter L0950, pp. 1-72. In: *Handbook for Environmental Management. Part IV, Soil protection; Section L, Soil remediation.* Kluwer. Deventer. The Netherlands.
- [121] Taylor, A.C. (1992) *Addressing Uncertainty in the Estimation of Environmental Exposure and Cancer Potency*, Doctoral Thesis, The Harvard School of Public Health, Boston, MA.
- [122] Tinsley, I. J. (1979) *Chemical Concepts in Pollutant Behavior* (John Wiley & Sons, New York, NY).
- [123] Trapp S., M. Matthies, 1994 Transfer von PCDD/F und anderen organischen Umweltchemicalien im System Boden-Pflanze-Luft, Teil 1: Modellierung des Transferverhaltens, Teil 2: Ausgasung aus dem Boden und Planzenaufnahme. *Umweltwissenschaften und Schadstoffforschung (UWSF)* 1/94 and 3/94 *Umweltchem. Okotox.* 6(3).
- [124] Trapp, S., M. Matthies, I. Scheunert, and E. M. Topp (1990) "Modeling the Bioconcentration of Organic Chemicals in Plants", *Environ. Sci. Technol.* 24, 1246-1252.
- [125] Travis, C. C., and A. D. Arms (1988) "Bioconcentration of Organics in Beef, Milk, and Vegetation", *Environ. Sci. Technol.* 22, 271-274.

- [126] Travis, C. C., and H. A. Hattemer-Frey (1988), "Uptake of Organics by Aerial Plant Parts: A Call for Research", *Chemosphere* 17, 277–284.
- [127] Turner, D. B. (1970) *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*, Office of Air Programs, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC.
- [128] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1988, Proposed Guidelines for Exposure-Related Measurements, *Federal Register* 53, 48830, December 2, 1988.
- [129] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1989b, Risk Assessment Guidance for Superfund Volume I Human Health Evaluation Manual (Part A), Office of Emergency and Remedial Response, EPA/540/1-89/002.
- [130] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1991. Risk Assessment Guidance for Superfund Volume I Human Health Evaluation Manual (Part B), Office of Emergency and Remedial Response, EPA 9285.7-01B.
- [131] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1992a, A Dermal Exposure Assessment: Principles and Applications Report No. EPA/600/8-91/011B. Office of Health and Environmental Assessment, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [132] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1992b, Guidelines for Exposure Assessment; Notice, Environmental Protection Agency, *Federal Register* 57(104), 22888-22938, May 29, 1992.
- [133] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1992c, U.S. EPA's Integrated Risk Information System (IRIS)-An Electronic Data Base Containing Health Risk and U.S. EPA Regulatory Information on Specific Chemicals (May 1, 1992 Update), U.S. Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Environmental Criteria and Assessment Office, Cincinnati, OH (updated monthly and available online by computer).
- [134] U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA) 1992d, Health Effects Assessment Summary Tables, Office of Research and Development, Office of Emergency and Remedial Response, Washington, DC.
- [135] UMS, 1993 *Umweltmedizinische Beurteilung der Exposition des Menschen durch alltagsbedingte Schadstoffe (UMS) Anschlussbericht "Weiterentwicklung und Erprobung des Bewertungsmodells zur Gefahrenbeurteilung bei Altlasten"*

- von der Arbeitsgemeinschaft Fresenius Consult GmbH und focon-Ingenieurgesellschaft mbH F and E-Vorhaben 10340107.
- [136] UMS, 1997 Umweltmedizinische Beurteilung der Exposition des Menschen durch altlastbedingte Schadstoffe (UMS) Anschlussbericht "Wissenschaftliche Begleitung und Forentwicklung eines Gefährdungsabschätzungsmodells für Altlasten" von der Arbeitsgemeinschaft Fresenius Consult GmbH und focon-Ingenieurgesellschaft mbH F and E-Vorhaben 10901215.
- [137] US-EPA, 1989 Risk Assessment Guidance for Superfund. Volume I Human Health Evaluation Manual (Part A). Interim Final. EPA/540/1-89/002 December 1989.
- [138] US-EPA, 1997 Exposure Factors Handbook, August 1997.
- [139] Verschueren, K. (1983) Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, (Van Nostrand Reinhold, New York, NY).
- [140] Waitz, M.F W., J.I. Freijer, P. Kreule and F.A. Swartjes, 1996. The VOLASOIL risk assessment model based on CSOIL for soils contaminated with volatile compounds. RIVM, Bilthoven, May 1996.
- [141] Wedepohl, K.H. (1969-1978) Handbook of Geochemistry (Springer-Verlag, Berlin).
- [142] Whicker, F.W. and T.B. Kirchner (1987) "PATHWAY: A Dynamic Food-Chain Model to Predict Radionuclide Ingestion After Fallout Deposition", Health Phys. 52, 717-737.
- [143] Whitby, K.T. (1978) "The Physical Characteristics of Sulfur Aerosols", Atmos. Environ. 12, 135-159.
- [144] Wijnen van J.H. et al. 1990 Estimated soil ingestion by children. Environmental Research 51, 147-162.
- [145] Wilke, C.R. and P. Chang (1955) "Correlation of Diffusion Coefficients in Dilute Solutions", AIChE J. 1, 264-270.

CETOX-human (Denmark)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Dorte Rasmussen, DHI Water and Environment, Agern Allé 11, DK-2970 Horsholm, DOR@dhi.dk

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Name: CETOX-human

Report in Danish: Humantoksikologiske vurderinger i forbindelse med depotindsatsen. Arbejdsrapport nr. 16 1996.

Report in Danish: Forholdsregler mod forurennet jord. Arbejdsrapport nr. 15 1996.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

Yes. Several of the sub-models are based on existing exposure models, e.g. the volatilisation is based on the model of Jury et al. (Thomas, 1982), the dilution in the air is taken from Veerkamp & ten Berge, 1992).

2.2b In regard to input parameters

Yes. Some of the input parameters have been defined specifically for the CETOX-human model, others are literature values; e.g. N&R Consult (1990), Dansk Standard (1995), van den Berg & J.M. Roels (1991), IPCS (1994), Veerkamp & ten Berge (1992), AIHC (1994), de Silva 1994). The compound data are derived on the basis of a review and evaluation of literature data.

2.3 What compartments are considered in the model

soil

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

soil ingestion

crop consumption

inhalation of indoor air.

inhalation of outdoor air

inhalation of dust/ soil particles

dermal uptake through soil, inside

dermal uptake through soil, outside

Remarks: The first model did not consider inhalation of indoor air. An extension, where this exposure pathway has been

included, has been added.

2.5 CETOX-human can be used for:

calculation of site-specific human exposure

characterisation of the polluted site with respect to "free use", "advisory action" (the users will be advised about the appropriate use of the soil), and "exposure cut-off" (denotes the uses of the soil, which cannot be recommended)

ad hoc risk assessment

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

no, not at present.

2.7 Is the model available for third parties?

no, not at present

2.8 Is the model in "general" use?

no

2.9 Is background exposure taken into account?

yes

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

residential: included in these calculations, were not included originally

industrial: included in these calculations, were not included originally.

vegetable garden

kindergarten

parks

ornamental gardens (crops like flowers, no consumption), incl. common grounds around apartment housing

sports grounds

consolidated grounds (partly un-permeable coating, e.g. asphalt, concrete, flagstones)

3.2 The following standard age ranges are defined:

children is around 1-3 years

adults is around 20 – 60 years

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration?

no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

calculated separately

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

no

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

no

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

no

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

realistic worst case

3.10b For input parameters:

different, namely a min, max and average

Remarks: The CETOX-human model operates with a minimum, average and maximum exposure via the different exposure pathways. This means that three estimated total exposures could be obtained from the model: a minimum, an average and a maximum exposure.

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

no

Remarks: The references to the model describe how parameters for 5 compounds have been derived. It also can be used as a guideline on how to derive parameters for other compounds.

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

no

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop consumption" is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

yes

3.15b What crops do you consider?

consumption crops only. A dietary model composed of different vegetables and fruits is included.

Remark: An adult and a child is assumed to eat a certain amount of potatoes, tomatoes, fruits etc per day. A BCF for each crop and chemical is determined. Average BCFs are then determined where the BCF of each crop is weighed with respect to the relative amount of the crop eaten per day.

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes, but a number of parameters have to be determined.

4. REFERENCES

AIHS (1994).

Exposure Factors Source Book. American Industrial Health Council.

Dansk Standard (1995).

Anvisning for undersøgelse af forurenede grunde. DS-Information, 1. udgave, febr. 1995

Christensen T.H. (1989).

Cadmium soil sorption at low concentrations. VIII. Correlation with soil parameters. Water, Air, and Soil Pollution, 44, 71-82

De Silva P.E. (1994).

How Much Soil Do Children Ingest – A New Approach. Appl. Occup. Environm. Hyg. 9(1), 40-43

IPCS (1994).

Assessing Human Health Risks of Chemicals: Derivation of Guidance Values for Health-based Exposure Limits. Environmental Health Criteria 170.

N & R Consult (1990).

Risikovurdering af forurenede grund. Miljøstyrelsen, Miljøprojekt nr. 123

Van den Berg R. & J.M. Roels (1991).

Beurteilung der Gefährdung des Menschen und der Umwelt durch Exposition gegenüber Bodenverureinigungen – Integration der Teilaspekte. RIVM report no. 725201007

Veerkamp W. & W.. ten Berge (1992).

Hazard assessment of chemical contaminants in soil. Revised appendix 3. HESP: Human exposure to soil pollutants, version 2.00. ECETOC Technical Report no. 40.

CLEA D.D. (United Kingdom)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Paul Nathanail, Land Quality Management Ltd, School of Chemical Environmental and Mining Engineering, University of Nottingham, University Park, Nottingham NG7 2RD, naomi.earl@nottingham.ac.uk

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Name: Contaminated Land Exposure Assessment Model, CLEA97, references

Remarks: Developed by Professor Colin Ferguson for Department of the Environment, now Department of the Environment,

Food and Rural Affairs (DEFRA), in Visual Basic. The non-compiled version has been held by Land Quality Management

Ltd until recently and all variables can be changed and manipulated. Since this model comparison was performed, CLEA

2002 has been published.

A compiled version of CLEA in C++ has been commissioned by DEFRA, the Environment Agency of England and Wales

and the Scottish Environment Protection Authority. Some input parameters can be changed but others (e.g. soil properties,

depth of contamination) and the source code cannot be manipulated without access to the software company.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

no (in the main)

Remarks: The model was designed for UK conditions, soil types, land-use scenarios and applicable pathways. However some of the algorithms are based on the algorithms in other models.

2.2b In regard to input parameters

no

Remarks: The input parameters have been chosen on a case-by-case basis from extensive literature review. Receptor characteristics and behaviour and time spent in various activities are based on UK data.

2.3 What compartments are considered in the model

soil

groundwater- only in unsaturated zone, when in equilibrium with soil

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

soil ingestion

crop intake-garden vegetables only

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation dust/ soil particles-separated into inside and outside

inhalation of bathroom air-not usually considered but present in one of background routines

dermal uptake through soil, inside

dermal uptake through soil, outside

dermal uptake during bathing/showering- not usually considered but present in one of background routines

soil attached to garden vegetables

2.5 CLEA can be used for

calculation of site-specific assessment criteria.

deriving soil quality standards (UK Soil Guideline Values for contaminants in soils) in the framework of UK regulation, (planning regime and Part IIA of 1990 Environmental Protection Act).

ad hoc risk assessment (only with manipulation of source code at present. This will change if an external version of the model is released).

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

yes

Remarks: CLEA has been developed solely as a probabilistic model (with manipulation of the source code this can be used for sensitivity and uncertainty analysis but neither is the primary purpose.) Many of the input parameters for calculating exposure have an input range of values with a probability density function appropriate for each variable. In order to input the standard defaults required for this exercise the source code within the model must be overwritten, in order to eliminate the probabilistic nature of the model and input single values.

2.7 Is the model available for third parties?

yes

Remarks: the model is available from available from www.environment-agency.gov.uk or www.defra.gov.uk.

2.8 Is the model in "general" use?

yes

Remarks: CLEA2002 has been in general use since March 2002.

2.9 Is background exposure taken into account?

optional

Remarks: UK policy is that background exposure to air, water and food and also exposure to contaminated soil on other sites

should be taken into account for threshold substances. They are not, however, included for non-threshold substances.

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

residential-with-plant uptake

residential-without-plant uptake

industrial

vegetable garden (called allotments)

Remarks: Exposure to parks, playing fields and open spaces was included in CLEA97, were it was treated as the same as the

residential-without-gardens scenario, with the exception that the vapour intrusion pathway is not included. This conservative

assumption is to take account of the fact that some inner city parks will be used by children as if they were back gardens. If

site-specific information was available, this assumption would not need to be made. In CLEA2002 it is not included.

3.2 The following standard age ranges are defined:

The first 16 years of life are treated as individual age classes. The working life (between 16 and 59, i.e. 43 years of exposure) is treated as another age class. Retirement (between 59 and 70, i.e. 11 years of exposure) is treated as another standard age class.

Remarks: For the purpose of deriving Soil Guideline Values, different combinations of age classes are used by CLEA2002

for exposure and averaging periods, depending on the land use and whether the contaminant considered is a non-threshold or

a threshold substance. These are shown in the table below.

For threshold substances

Land use Exposure Period Averaging Period

Residential-with-plant uptake 0-6 years 6 years

Residential-without-plant uptake 0-6 years 6 years

Allotments 0-70 years 70 years

Commercial/industrial 16-59 years 43 years

For threshold substances

Land use Exposure Period Averaging Period

Residential-with-plant uptake 0-30 years 70 years

Residential-without-plant uptake 0-30 years 70 years

Allotments 0-70 years 70 years

Commercial/industrial 16-59 years 70 years

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration?

yes

Remarks:

Men and women are assumed to have different physiological characteristics (e.g. body weights and inhalation rates) and also

slightly different activity patterns in some instances. The female receptor is used as the default for the derivation of Soil Guideline Values.

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

Calculated separately or summed up

Remarks: This depends on the land use and nature of contaminant as shown in the table above. An important feature is that

childhood is assumed to last until the 16th birthday, not just the sixth birthday. Each year of the 16 years is modelled differently in terms of bodyweights, inhalation rates and exposure patterns.

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

Remarks: Short-term risk is not taken into account in the model. However the as yet unpublished Soil Guideline Value for

cyanide is based on acute exposure- this is calculated separately, not using the CLEA model itself.

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

yes, namely “degradation” in terms of half life, and penetration through the skin in one of the dermal algorithms.

Remarks: The term “degradation” includes all the processes in soil which may contribute to the half-life e.g.

biodegradation,

leaching and volatilisation. Although the model is able to take degradation into account, it is not included when deriving

Soil Guideline Values in order to be protective of human health. A fixed contact period is used to calculate penetration into

the skin.

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

yes, namely use of half life-see above.

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

no

Remarks: CLEA97 is able to incorporate limits to vegetable concentration due to phytotoxicity. However insufficient data

was found in the literature about a) what constituted phytotoxicity (varies between minor decrease in plant yield and death of

plant) and b) phytotoxic limits for different contaminants and plants for this facility to be used when generating Guideline

Values.

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

probabilistic modelling is used in many cases (e.g. amount of contaminant taken up by plants, in other cases reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

Remarks: Each model concept was examined on an individual basis, in order to make these decisions.

3.10b For input parameters:

many of the variables e.g. body weight, vegetable consumption rate, proportion of vegetables that are site-grown, childhood soil ingestion rate are calculated probabilistically from Probability Density Functions using Monte Carlo simulation. In other cases e.g. time on site CLEA 97 uses a best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

yes

Remarks: Guidance is provided in the CLR9 and CLR10 and individual substance reports.

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

no

3.13 What is the “starting point” of the human exposure calculation?

total soil content

Remarks: The hard code of the model may be fixed to start with e.g. a groundwater concentration but this is not usually done.

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

different, namely mainly using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{henry}) but some of the algorithms (e.g. dermal, plant uptake) may use fugacity theory.

In case that the exposure pathway “exposure via crop intake” is included:

3.15 Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

yes

Remarks: As a function of pH (cadmium) and % soil organic matter (mercury, organic contaminants).

3.15b What crops do you consider?

different crops, namely potatoes; carrots; onions and leeks (treated as one category); brussels sprouts, cabbage, lettuce.

Remarks: These vegetables have been selected because they are the most commonly home-grown vegetables in the UK.

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

Remarks: CLEA97 is able to incorporate limits to vegetable concentration due to phytotoxicity. However insufficient data

was found in the literature about a) what constituted phytotoxicity (varies between minor decrease in plant yield and death of

plant) and b) phytotoxic limits for different contaminants and plants for this facility to be used when generating Guideline

Values.

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes

Remarks: The indoor air concentration depends on %Soil Organic Matter and soil type (sand, loam or clay) and building

type (ground-bearing slab or suspended floor) which can all be altered easily on the screen. Separate Soil Guideline Values

may be published for 1, 2.5, 5, and 10% SOM and also for building type. All published Guidelines will be for sandy soil

because this is a worst case scenario. The building characteristics (ventilation rate, volumes, thickness of layers etc) are in

data files and the pathlength is in the hard code. It is anticipated that all of these variables will be easily changeable when the

model is available commercially. At the time of writing no CLR10 report for volatile substances has been published.

4. REFERENCES

List: References that were given in the questionnaire.

CSOIL 8.0 (The Netherlands)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Piet Otte, National Institute of Public Health and the Environment (*RIVM*), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, The Netherlands, pf.otte@rivm.nl

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 name: CSOIL 8.0

Remarks: CSOIL calculates exposure to contaminated terrestrial soils. Other relevant models are VOLASOIL for the sitespecific

calculation of the indoor air and SEDISOIL for the calculation of exposure to contaminated sediments. The information in this questionnaire refers to CSOIL, unless it is said otherwise.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

no

Remarks: CSOIL was partly developed in co-operation with the developers of HESP (ECOTOC/Veerkamp, 1990).

2.2b In regard to input parameters

no

2.3 What compartments are considered in the model

soil

groundwater (unsaturated zone)

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

soil ingestion

crop consumption

intake of municipal drinking water, which is contaminated due to permeation of contaminants through groundwater tubes.

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation of dust/ soil particles

inhalation of bathroom air

dermal uptake through soil, inside

dermal uptake through soil, outside

- dermal uptake during bathing/showering

Remarks: as part of the procedure of the calculation of the Intervention Values exposure via direct intake of groundwater as drinking water is considered.

2.5 CSOIL can be used for

- derivation of soil quality standards (Intervention Values) in the framework of the Dutch Soil Protection Act
- derivation of remediation objectives
- determination of the urgency of remediation
- calculation of site-specific exposure

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

- no

2.7 Is the model available for third parties?

- no

Remarks: The CSOIL formulae have been incorporated in the model Risk human (Van Hall Institute) and in the (human exposure part of the) SUS model (also Van Hall Institute) which is formally used for the determination of the urgency of remediation in the case of serious soil contamination in the framework of the Dutch Soil Protection Act. These models are available.

In 2003 it is planned to give a overview of the model on the RIVM website (www.RIVM.nl).

2.8 Is the model in "general" use?

- yes

Remarks: Although CSOIL was never made available many consultants perform site-specific risk assessment on the basis of the CSOIL formulae. Besides, CSOIL is incorporated in the SUS computer package, which is formally used to assess the determination of the urgency of remediation in the case of serious soil contamination in the framework of the Dutch Soil Protection Act.

2.9 Is background exposure taken into account?

- no

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

- residential with vegetable garden
- residential with normal garden (standard scenario)
- residential without garden
- industrial
- infrastructure
- recreational areas
- parks
- social-cultural areas

Remark: The Intervention Values for soil were derived on the basis of the scenario residential with normal garden (the so called standard scenario).

3.2 The following standard age ranges are defined:

- 0 – 6 years (children) and 6 - 70 years (adults)

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration

- yes

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

- calculated separately or summed up

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

- no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

- no

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

- no

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

- yes, namely solubility should not exceed the maximal solubility.

Remarks: for the derivation of soil quality standards (Intervention Values) also the Tolerable Concentration in Air (TCA)

limits the calculated indoor air concentration and drinking water quality standards limit the calculated concentration in groundwater.

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

3.10b For input parameters:

best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

not officially

Remarks: However, for the derivation of the Intervention values the major input parameters have been identified on the basis

of a sensitivity analysis. Besides the input parameters of the VOLASOIL model has been categorised as sensitive/ average

sensitive and not sensitive.

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

it is recommended in the Manual on the determination of urgency of remediation, besides the assessment of the calculation of exposure to the indoor air, to measure the concentration in indoor air and compare this to the TCA. Besides it is recommended to measure the concentration in crops.

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using the fugacity theory

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{Henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop consumption" is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no, only generic

3.15b What crops do you consider?

consumption crops only

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

Remarks: a model for site-specific calculation of the uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics) is in progress.

In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

no, only generic

Remarks: for calculation of the site-specific indoor air concentration the VOLASOIL model is available.

4. REFERENCES

Berg, R. Van den (1991/1994/1995)

Human exposure to contaminated soils. A quantitative and qualitative analysis resulting in revised proposals for soil quality standards. Modified version of the original report Van den Berg, 1991/ Van den Berg 1994. In Dutch: RIVMreport

no. 725201006; in English: RIVM-report no. 725201011.

BEVER, Working group. 1999.

From funnel to sieve (in Dutch). National press, Den Haag.

Bockting, G.J.M., F.A. Swartjes, J.G.M. Koolenbrander, R. van den Berg. 1994.

Procedure for assessing soil quality in relation to building permits applications. Part I. Soil-use specific methodology on the assessment of human exposure (in Dutch). RIVM report 715810001. 123 pages.

Bockting, G.J.M., J.G.M. Koolenbrander, F.A. Swartjes. 1996.

SEDISOIL: Model for the calculation of human exposure to contaminated sediments (in Dutch). RIVM report 715810011. 50 pages

Koolenbrander, 1994.

Urgency of remediation, the manual (in Dutch). National press, Den Haag.

Lijzen, J.P.A., F.A. Swartjes, P. Otte en W.J. Willems. 1999.

Soil-use specific remediation objectives; Methodology and computations (in Dutch). RIVM report 711701016, December 1999. RIVM Bilthoven. 41 pages.

Lijzen, Johannes P.A. and Frank A. Swartjes. 2000. Soil-use specific remediation objectives. In: Contaminated Soil 2000: 503-507, Proceedings of the Seventh International FZK/TNO Conference on Contaminated Soil (ConSoil), 18-22 September 2000, Leipzig, Germany.

Swartjes, Frank A. 1998. Human exposure models used in the Netherlands (CSOIL, SEDISOIL, VOLASOIL and CROPSOIL). In: Federal Ministry for the Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety and Federal Environmental Agency. CARACAS International Workshop Risk Assessment Models and Risk Management for Contaminated Sites: 189-199.

Swartjes, Frank A. 1999. Risk-Based Assessment of Soil and Groundwater Quality in the Netherlands: Standards and Remediation Urgency. Risk Analysis, Vol. 19, No. 6, 1999.

Vissenberg, H.A., F.A. Swartjes. 1996. Evaluation of the calculated human exposure using CSOIL, by a Monte Carlo-based sensitivity and uncertainty analyses (in Dutch). RIVM report 715810018. 130 + 90 pages.

Waitz, M.F.W., J.I. Freijer, P. Kreule, F.A. Swartjes. 1996. The VOLASOIL risk assessment model based on CSOIL for soils contaminated with volatile compounds. RIVM report 715810004. 189 pages.

LUR (Basque Country, Spain)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Dr. Arantzazu Urzelai, LABEIN, Cuesta de Olabeaga 16, 48013 Bilbao (Spain), arantzazu@labein.es

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Full-name: LUR

References:

T. Martínez, K. Cambra, Y. Cuetos, A. Urzelai. 1998. Valores máximos admisibles en suelo (VIE-B) para la protección de la salud. En: *Calidad del Suelo. Valores Indicativos de Evaluación*. Gobierno Vasco - Departamento de Ordenación del Territorio, Vivienda y Medio Ambiente. IHOBE S.A., Bilbao.

T. Martínez, K. Cambra, A. Urzelai, L. González de Galdeano. 2000. Establecimiento de valores máximos admisibles en suelo para la protección de la salud con el modelo LUR. *Gaceta sanitaria*, 14(6): 449-457.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

yes

Remarks: It is based in a review of bibliography and models existing at that time

2.2b In regard to input parameters

Remarks: It is based in a review of bibliography and models existing at that time

2.3 What compartments are considered in the model

soil

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure from

soil ingestion

crop intake

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation dust/ soil particles

dermal uptake through soil, outside

2.5 LUR can be used for

deriving soil quality standards in the framework of Contaminated Soil Policy in the Basque Country

Remarks: In parallel to the development of LUR, a methodological guide for site-specific risk assessment was published,

which incorporates the criteria, assumptions, guidelines, default values, etc. adopted by LUR.

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

no

2.7 Is the model available for third parties?

no

Remarks: No, in the form of software, but it is published (see references).

2.8 Is the model in "general" use?

yes

Remarks: The soil values derived using the model are of general use in the Basque Country, but only in few cases it is used

for site-specific assessment (only by Government and very specialised consultancies)

2.9 Is background exposure taken into account?

yes

Remarks: If data are available.

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

residential

industrial

children play ground

parks

others, namely: residential with vegetable garden.....

3.2 The following standard age ranges are defined: Child (0-6 years); Adult (7-70 years).

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration?

no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

calculated separately

Remarks: For carcinogenic substances the long-life exposure is calculated.

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

no

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

no

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

no

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

worst case

reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

Remarks: Somewhere between these two options.

3.10b For input parameters:

best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

yes

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

recommendations yes, guidelines no

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{Henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop intake" is included:

3.15 Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no, only generic

3.15b What crops do you consider?

consumption crops only

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

In case that the exposure pathway "exposure via crop intake" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

no, only generic

NoNameGiven (France)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Roseline Bonnard, National Institute for Industrial Environment and Risks (*INERIS*), Parc technologique Alata, BP n°2, 60550 Verneuil-en-Halatte, roseline.bonnard@ineris.fr

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Model name: there is no official name. This model has been constructed by INERIS and it is used to make sitespecific

risk assessment and the appraisal of the third party's studies. Some parts are used to define generic warning values (VCI : valeurs de constat d'impact). It is a tool with a modular structure to adapt it to the specific pathways and pathways of exposure of a specific site.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

yes, HESP 2.1, Johnson and Ettingher's model, Thibodeaux's model, USEPA's models for dermal exposure (92), Volasoil

2.2b In regard to input parameters

yes, HESP 2.1 but also other sources from France, USEPA and more generally from the international scientific literature

2.3 What compartments are considered in the model

soil

water

air

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

soil ingestion

crop consumption

intake of water, which is contaminated due to permeation of contaminants through tubes.

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation of dust/ soil particles

inhalation of bathroom air

dermal uptake through soil, inside

dermal uptake through soil, outside

dermal uptake during bathing/showering

Remarks: For site-specific modelling, we try to incorporate all the pathways which are relevant: exposure via meat and milk

consumption could be calculated if these pathways were relevant for the use of the site.

2.5

The INERIS model can be used for and has been used for:

assessing the level of risk linked to specific sites for human health

support to identifying remediation solutions

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

yes, to the following purpose:

sensitivity analysis (evaluating the contribution of input-parameters)

uncertainty analysis (evaluating the uncertainty in the calculated exposure) owing to an add-in software

Remarks: But for uncertainty analysis, we do not have an identified method to define distributions for input parameters

2.7 Is the model available for third parties?

no

Remarks: But, we always present the origin of all the equations and values of the input parameters

2.8 Is the model in "general" use?

no

Remarks: Consultants are free to use the model they want, but INERIS can be asked by the French administration to check

the risk assessment studies for health, including the exposure modelling

2.9 Is background exposure taken into account?

no

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

The most common scenarios are

residential with or without a vegetable garden

industrial

recreational

Remarks: For specific risk assessment, we try to define all the pathways and pathways which are relevant according to the

specific use of the site. So there is no real predefined scenario.

3.2 The following standard age ranges are defined:

child (0-6 year), adult (6-70 years)

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration?

no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

calculated separately for non-carcinogens

summed up for carcinogens

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

Yes, the gas emission is time dependent

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

no

Remarks: It is used at the moment but a first order degradation function could be easily included

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

no

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

Remarks: We can manage several substances at the same time. But we cannot take into account the chemistry and the interactions of the mixtures of contaminants. Petroleum products can be treated by fractions like in the TPH approach. What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

3.10b For input parameters:

best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

yes

Remarks: There are some rules to choose values of input parameters. Values are chosen with regard to representatively and

experimental conditions. Values from experiments are preferred compared to calculated values. In a specific site assessment

the references must be given and the assessor has to motivate parameter identification. For substances, there are some reports

with the chemical parameters.

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

no

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content but the results of measures made in the different compartments can be used as inputs

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop consumption" is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no, only generic

Remarks: We try to choose parameters, including BCFs, for which the experimental conditions are representative for the

relevant site. But for BCF, it is often difficult to find well-adapted values

3.15b What crops do you consider?

all crops for which relevant data (i.e. BCFs) are available

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes

4. REFERENCES

Johnson P.C., and Ettingher R.A. (1991)

Heuristic model for predicting the intrusion rate of contaminant vapors into buildings. Environ. Sci; Technol. (25) : 1445-1452

Joint Research Center (1993)

ECDIN: Environmental Chemicals Data and Information Network [computer program]. J.R.C. (Joint Research

Center) & Commission of the European Community. Genève: Chemical Exchange Directory. Joint Research Center (1996).
 IUCLID : International Uniform Chemical Information Database. [computer program]. J.R.C (Joint Research Center) & European Chemical Bureau. 1996
 National Library of Medicine HSDB (1998)
 Hazardous substances databank [CD rom]. USA: Silverplatter International.
 OMS, International program on chemical safety, environmental health criteria, CD-ROM
 Thibodeaux L. J. (1982)
 Landfarming of petroleum wastes - Modelling the air emission problem. Environmental Progress US EPA (1988)
 Superfund exposure assessment manual. Washington, DC. US EPA. 1988; EPA/540/1-88/001 US EPA (1989).
 Risk Assessment Guidance for Superfund. Volume 1. Human Health Evaluation Manual. Part A. 1989; EPA/540/1-89/002. US EPA (1992).
 Dermal exposure assessment: principles and applications. Interim report. 1992; EPA/600/8-91/011B. US EPA (1995).
 Health Effects Assessment summary tables. 1995, PB95-921199. US EPA (1998)
 Integrated Risk Information System (IRIS) on line. <http://www.epa.gov/ngispgm3/iris/irisdat>.
 Veerkamp W., ten Berge W., (1994).
 The concepts of HESP, Reference manual, Shell International Petroleum Maatschappij B.V. The Hague.
 Van den Berg, R. (1991/1994)
 Human exposure to soil contamination: a qualitative and quantitative analysis towards proposals for human toxicological intervention values, Netherlands: National Institute of Public Health and Environmental Protection Bilthoven, 1991/1994, 725201011

NoNameGiven (Sweden)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Lennart Dock, PhD, National Institute of Environmental Medicine, Karolinska Institutet, Box 210, S-171 77 Sweden, lennart.dock@imm.ki.se; and
 Mark Elert, B Sc, Kemakta Konsult AB, Box 12655, S-112 93 Stockholm, mark@kemakta.se

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Name:

No name given, published in Swedish EPA Reports 4639 and 4889. Report 4639 reports the version of the model used for development of generic guidelines for contaminated soils. This model has later been extended for the development of guidelines at petrol stations (report 4889). The extensions comprise the use of different soil types, different depths of the pollutant, new models for indoor air concentration and dilution in groundwater wells.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

yes: CSOIL, HESP, Massachusetts Department of Environmental Protection, US EPA Soil Screening Levels, Ontario MOEE

2.2b In regard to input parameters

yes, same as above for exposure data. Chemical-physical data primarily from US EPA SSL and toxicological data from WHO, except for petroleum hydrocarbons where data are taken from Total Petroleum Hydrocarbon Working Group.

2.3 What compartments are considered in the model

- soil
- groundwater
- surface water

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

- soil ingestion
- crop consumption
- direct groundwater intake
- inhalation of indoor air
- inhalation of outdoor air (see remarks)
- inhalation of dust/ soil particles
- dermal uptake through soil, inside (not distinguished from outside)
- dermal uptake through soil, outside (not distinguished from inside)
- fish intake

Remarks: Inhalation of outdoor air included for land-uses: Park and Land with limited use (see 3.1).

2.5 The model can be used for

- calculation of site-specific human exposure
- deriving soil quality standards
- ad hoc risk assessment

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis?

- no

Remarks: Simple sensitivity analyses can be performed.

2.7 Is the model available for third parties?

- no

Remarks: Software form is Excel spreadsheets.

2.8 Is the model in "general" use?

- no

Remarks: The calculation methodology and formulas are in general use by consultants and public servants.

2.9 Is background exposure taken into account?

- yes

For some metals where background exposure through diet is high in relation to TDI

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

- residential
- industrial
- vegetable garden
- children play ground
- kindergarten
- infrastructure
- agriculture
- nature reserves
- recreational areas
- parks
- less sensitive land use but with groundwater extraction

Remarks:

Three categories of land use are defined in Report 4639:

- Sensitive land use (basically multifunctionality) i.e. residential areas, kindergartens, play grounds, vegetable garden, agricultural use
- Less sensitive use *without* groundwater extraction (i.e. commercial use, offices, industry, roads etc)
- Less sensitive land use *with* groundwater extraction within 500 m of the site (exposure through drinking water included)

In report 4889 two additional categories are included:

- Park, i.e. land without buildings but occasionally frequented by humans. High environmental value. Groundwater protection. (parks, recreational areas, nature reserves.)
- Land with limited use, land without buildings but occasionally frequented by humans. Moderate environmental value. Groundwater protection.

3.2 The following standard age ranges are defined:

- 0 – 6 years and 6 - 64 years

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration?

- no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

- calculated separately or summed up

Remarks: Exposure for both children and adults are evaluated. For non-genotoxic contaminants group with highest longterm

exposure considered (i.e. children). For genotoxic contaminants lifetime average exposure used.

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

- yes

Remarks: For some chemicals with high acute toxicity, such as cyanide and As (pica-children at high risk)

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

- yes, evaporation of volatile organic compounds.

Remarks: Release rate from soil will decrease with time due to depletion of soil layers near surface. An average rate over a

period of 5 years used.

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

- no

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

yes: groundwater concentrations should be below drinking water standards and indoor air concentrations should be below reference concentrations for air

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

yes, for petroleum hydrocarbons

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

3.10b For input parameters:

best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

no

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

recommendations and guidelines

Remarks: As detailed in Swedish EPA Reports 4310-0, 4310-2

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content

Remarks: Total (integrated) exposure should be below TDI

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{Henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop consumption" is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no, only generic

3.15b What crops do you consider?

no specific crops

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

Remark: Only for ecotoxicology

3.16 In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes

In Swedish EPA Report 4889

4. REFERENCES

ECETOC (1990).

Hazard Assessments of chemical contaminants in soil, 40, European Chemical Industry Ecology and Toxicology Centre

ECETOC (1992).

Hazard Assessments of chemical contaminants in soil, 40, Revised appendix 3, European Chemical Industry Ecology and Toxicology Centre

Ontario MOEE (1994).

Guidelines for the decommissioning and clean up of sites in Ontario. PIBS 141E, Ontario Ministry of Environment and Energy, Ontario, Canada

Ontario MOEE (1996).

Guidelines for use at contaminated sites in Ontario. PIBS 3161E01, Ontario Ministry of Environment and Energy, Ontario, Canada

MDEP (1994).

Background documentation for the development of MCP numerical standards, Massachusetts Department of Environmental Protection, USA

Shell (1994).

The concepts of HESP, Reference Manual, Human Exposure to soil pollutants, Version 2.10a, Shell International Petroleum, The Hague

SwEPA (1997).

Development of generic guideline values, Report no 4639, Swedish Environmental Protection Agency, Stockholm, Sweden.

SwEPA (1998).

Riktvärden för förorenade bensinstationer, Report no 4889, Swedish Environmental Protection Agency, Stockholm, Sweden

TPHCWG (1997a).

A risk-based approach for the management of Total Petroleum Hydrocarbons in soil. A technical overview of the petroleum hydrocarbon risk assessment approach of the TPH working group, TPH Criteria Working Group
TPHCWG (1997b).

Development of representative TPH fractions based on fate and transport considerations, Volume III, TPH Criteria Working Group, Fate and Transport Technical Action Group.

TPHCWG (1997c).

Development of fraction specific Reference Doses (RfDs) and Reference Concentrations (RfCs) for Total Petroleum Hydrocarbons (TPH), Volume IV, TPH Criteria Working Group, Toxicological Technical Working Group.

US EPA (1996).

Soil Screening Guidance: Technical Background document, EPA/540/R-95/128. PB96-963502, US EPA, Washington, DC, USA

Van de Berg (1991)

Blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging . Een kwalitatieve en kwantitatieve analyse, leidend tot voorstellen voor humaan toxicologische C-toetsingswaarden. Report no 725201006, RIVM, Netherlands; with modification (1995)

ROME 01 (Italy)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Francesca Quercia, National Environmental Protection Agency (ANPA), Via V. Brancati 48 – 00144, Roma – Italy, quercia@anpa.it

Remarks: additional contact person: Ivano Aglietto, Politecnico di Torino (DIGET), C.so Duca degli Abruzzi 24 – 10129

Torino – Italy, aglietto@polito.it

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Name: ReasOnable Maximum Exposure, ROME 01,

Remarks: ROME 01 is an "experimental" or "provisional model", i.e. it is being tested and improved, but at the same time

Version 01 is widely used in the country.

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

yes, namely ASTM RBCA and CONCAWE

2.2b In regard to input parameters

yes, namely U.S. EPA Databases *mostly*

2.3 What compartments are considered in the model

soil

groundwater

air

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure from

soil ingestion

direct groundwater intake

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation of dust/ soil particles

dermal uptake of soil

inhalation of vapours from groundwater and from free product

Remarks: crop consumption might be added in the future.

2.5 ROME 01 has been used for

Calculation of site-specific human exposure

Determination of site-specific clean up objectives

Real cases of risk assessment (by consultants and local authorities)

Proposal for National Generic Limit Values (not implemented so far)

Elaboration for Screening Values (Region Lombardia) for chemicals not included in the present national norm

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

no

2.7 Is the model available for third parties?

yes (user friendly and windows compatible, free of charge)

2.8 Is the model in "general" use?

yes

2.9 Is background exposure taken into account?

no

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

residential

industrial

Remarks: recreational areas are assimilated to residential, children playground is assimilated to residential for limited age

range. Vegetable gardens might be added by including crop consumption in the residential scenario, but this should fit with

criteria for agricultural soils, that are presently missing.

3.2 The following standard age ranges are defined:

0 – 6 years and 6 - 70 years

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration

no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

calculated separately

Remarks: for carcinogenic substances children and adult exposure are summed up and averaged over lifetime.

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

no

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

yes, namely first order

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

yes, namely maximum concentration for groundwater.

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

yes

Remarks: TPH diesel and gasoline ranges

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

reasonable maximal exposure (best estimates in case there is enough knowledge; upper bound estimate in case of doubt)

3.10b For input parameters:

reasonable worst case

reasonable case

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

yes

Remark: defaults mostly from U.S. EPA, ASTM Guidelines, ranges given in ROME 01 manual.

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

recommendations and guidelines

Remarks: National Technical Regulation and International recommendations and guidelines for soil, water, vapours, sludge,

wastes and crops

3.13 What is the “starting point” of the human exposure calculation?

total soil content AND / OR groundwater concentration

leachate concentration from tests

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using partition coefficients (K_d, K_{oc}, K_{henry})

In case that the exposure pathway “exposure via crop consumption” is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no, only generic

Remark: The Model, for the time being, does not include crop intake (generic and site-specific) since the national law for

site remediation does not include agricultural use of land. In the residential land-use, home-grown crops consumption is not

considered relevant so far, but could be considered in the future.

3.15b What crops do you consider?

no specific crops (see 15a)

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes

4. REFERENCES

Metodologia per la definizione dei LAG di suoli, acque sotterranee ed acque superficiali. Rapporto DAMES & Moore per ANPA, October 1997

ANPA, October 1997

Criteri per la definizione dei Limiti di Accettabilità generici (LAG) della contaminazione dei suoli, delle acque sotterranee e

superficiali, ANPA, RTI1/98

ASTM E1739-95 (Risk Based Corrective Action at Petroleum Release Sites)

U.S. EPA Exposure Factors Handbook (1996)

U.S. EPA Soil Screening Guidelines (1996)

Quercia F., C. Mariotti (1998).

Risk Assessment and Risk management of contaminated Sites in Europe -Proceedings, October 20, 1998, ANPA Rome.

Quercia, F., C. Mariotti, G. Rosti (2000).

Modelli per l'Analisi di Rischio, Atti del Seminario 'La bonifica dei siti inquinati', SEP Pollution2000, Padova Fiere.

ANPA (1999)

ROME, Manuale del software per l'Analisi di Rischio, Roma, 1999.

Vlier-humaan (Flanders, Belgium)

1. AFFILIATION CONTACT PERSON

1.1 Christa Cornelis, Flemish Institute of Technology and Development (VITO), Boeretang 200, B-2400 MOL, Belgium, cornelic@vito.be

2. MODEL CHARACTERISTICS

2.1 Name: Vlaams Instrument voor de evaluatie van risico's - humaan, Vlier-humaan version 1.0, Van Hall Institute

Is the model based on existing exposure models?

2.2a In regard to model concept

yes, namely HESP. Formulas are based on HESP and are almost not modified. Scenarios were modified.

2.2b In regard to input parameters

yes, namely input parameters are chosen from the HESP model and from other available models (as CSOIL)

2.3 What compartments are considered in the model

soil

groundwater

air

2.4 What exposure pathways are incorporated? Exposure via

soil ingestion

crop consumption

direct groundwater intake

intake of groundwater as drinking water, which is contaminated due to permeation of contaminants through drinking water tubes.

meat/milk consumption

inhalation of indoor air

inhalation of outdoor air

inhalation of dust/ soil particles

inhalation of bathroom air

dermal uptake through soil, inside

dermal uptake through soil, outside

dermal uptake during bathing/showering

2.5 Vlier-humaan can be used for

derivation of clean-up values within the Flemish legislation on soil remediation. These clean-up values are meant to decide whether a site has to be remediated in the case of recent soil pollution (originated after 28 October 1995). The clean-up values are also used to give a first indication of the presence of a "serious threat" in the case of historical soil pollution.

to calculate the minimal required clean-up goals. However, this must fit in the whole legal framework (reaching background values in principle, but BATNEEC can lead to higher values not giving rise to unacceptable risks).

2.6 Does the model offer possibilities for probabilistic analysis:

yes, to the following purpose: sensitivity analysis (evaluating the contribution of input-parameters)

Remarks: No, in the sense that there is no module provided to do this. Manual performance of sensitivity analysis is possible

2.7 Is the model available for third parties?

yes (diskette, Van Hall Institute, circa 900 Euro)

2.8 Is the model in "general" use?

The OVAM (in Flanders responsible for soil pollution problems) has formalised this model for use in risk assessments. It is for the moment the only model that is formally recognised. In principle, consultants need to use this model, so it is in general use. However, other models are also used.

2.9 Is background exposure taken into account?

yes

3. DEFAULT SCENARIOS AND INPUT PARAMETERS

3.1 What standard exposure scenario's do you use:

residential

industrial

agriculture

recreational areas

parks (same as recreational)

Remarks: Recreational and industrial land use each have two different exposure scenarios

3.2 The following standard age ranges are defined:

0 – 6 years and 6 - 70 years

3.3 Are differences in exposure for men and women taken into consideration

no

3.4 How is dealt with exposure to children and adults?

calculated separately or summed up

Remarks: Both options are possible, depending on the type of contaminant, i.e. carcinogen (lifetime average) or noncarcinogen

(separately). In each case results can be seen separately.

3.5 Do you (also) consider acute (short-term) exposure (i.e. exposure that takes place during several hours)?

no

3.6 Are any kinetic (time dependent) processes included in the model?

no

3.7 Is the possibility for degradation included in the model?

no

3.8 Are any standards incorporated in the model that limit the maximal concentration in contactmedia (e.g. crop concentration does not exceed x mg/kg, or indoor air concentration does not exceed y mg/m³)?

yes, namely drinking water concentration, crop concentration, air concentration (indoor and outdoor), meat concentration

3.9 Is exposure to mixtures of contaminants included in the model?

no

What principal basis do you use in the range of worst case - best case?

3.10a For model concepts:

probably worst case.

3.10b For input parameters:

best reasonable guess (realistic in case there is enough knowledge; worst case in case of doubt)

3.11 Are there any guidelines for selection of input parameters?

we make a difference between type of parameters. Fixed parameters can not be modified. Values are reasonable worst case. Secondly, there are default parameters. Values are reasonable worst case. The default parameters can be modified in case of clear site-specific deviations from the default scenario. Thirdly there are variable parameters. These should be identified depending on the local situation. No specific guidelines exist, although the impression is that OVAM prefers worst case, while consultants not always use it (which is of course sometimes reasonable).

3.12 Are there any recommendations and/or guidelines for measuring concentrations in contactmedia (crops, indoor air)?

no

3.13 What is the "starting point" of the human exposure calculation?

total soil content

Remarks: It is to a certain extent possible to use measured data in the model.

3.14 How is the distribution of contaminants into the soil phases incorporated in the model?

using the fugacity theory

using partition coefficients (K_d , K_{oc} , K_{Henry})

In case that the exposure pathway "exposure via crop consumption" is included:

3.15a Is it possible to calculate the *site-specific* uptake/accumulation in crops (as function of soil characteristics)?

no; however, it is possible to use measured crop concentrations or measured BCF-factors. But there are no BCF-factors

available that are dependent on soil characteristics.

3.15b What crops do you consider?

as default we use consumption crops. It is however possible to change values in order to calculate uptake in other crops.

3.15c Is phytotoxicity included (a maximal permissible concentration in the crop)?

no

In case that the exposure pathway "exposure via inhalation of indoor air" is included:

3.16 Is it possible to calculate the *site-specific* indoor air concentration (as function of soil characteristics, groundwater table, building characteristics, etc.)?

yes (partly)

Remarks: but not as a function of groundwater table.

4. REFERENCES

List: References that were given in the questionnaire.

ΔΕΙΓΜΑ	Be	K ₂ O	CaO	TiO ₂	Fe ₂ O ₃	As	Ba	Br	Cd	Ce	Cr	Cu	Ga	Hg	La	Mn	Nd	Ni
A1	70,0	0,91	26,67	0,24	2,17	21,64	97	17,41	1,28	16,8	146	854,23	1,06	2,17	5,9	338,70	10,4	69,00
A2	70,0	0,92	27,86	0,21	2,20	19,45	99	21,59	1,49	17,9	182	423,32	0,40	4,36	6,6	347,99	9,1	79,56
A3	70,0	0,94	16,77	0,26	2,52	10,15	107	11,24	1,25	16,0	218	640,30	5,15	2,02	7,9	351,63	9,5	71,25
A4	70,0	1,02	16,77	0,21	2,05	10,87	111	23,74	1,79	16,5	161	267,58	1,44	2,24	6,9	491,27	8,1	54,68
A5	70,0	1,00	16,77	0,21	2,47	11,89	93	25,28	1,78	17,5	202	299,00	2,13	3,32	7,3	375,69	9,4	112,47
A6	70,0	0,90	16,77	0,18	2,34	14,10	81	9,46	2,19	15,8	186	143,91	4,89	4,07	7,9	384,97	8,3	74,02
A7	70,0	0,94	16,77	0,25	2,23	9,49	114	19,02	1,83	18,1	167	234,97	2,45	3,94	8,5	271,53	7,6	63,99
A8	70,0	1,22	16,77	0,34	2,97	11,50	128	27,62	2,18	22,7	200	139,31	4,90	2,46	9,1	370,99	9,0	100,14
A9	70,0	1,20	16,77	0,32	2,93	10,19	148	94,66	1,47	28,6	211	325,65	4,58	3,20	13,2	459,38	15,7	63,10
A10	70,0	1,19	16,77	0,25	2,39	9,59	127	14,58	1,49	20,1	117	264,93	1,53	2,73	8,2	387,96	10,1	51,11
A11	70,0	1,32	16,77	0,37	3,06	11,33	161	5,57	1,40	23,9	175	163,13	3,01	4,01	10,4	318,38	11,3	70,79
A12	70,0	0,96	16,77	0,26	2,33	8,34	137	19,54	0,88	19,9	111	292,10	2,05	3,86	9,5	341,52	9,3	61,08
A13	70,0	0,70	16,77	0,13	0,95	4,47	57	8,80	0,70	8,6	35	224,89	0,05	2,99	4,1	187,40	5,5	18,20
A14	70,0	0,64	16,77	0,08	0,76	4,62	52	7,63	0,34	7,6	35	125,80	0,07	3,16	2,7	130,02	5,7	12,84
A15	70,0	0,72	16,77	0,10	1,20	3,19	55	20,89	1,83	8,0	53	305,08	0,00	8,27	2,2	158,15	5,3	21,48
A16	70,0	0,79	16,77	0,14	1,25	4,19	71	33,70	1,87	11,7	54	192,43	1,00	2,47	4,7	192,55	4,9	29,34
A17	70,0	0,86	16,77	0,15	1,33	4,26	83	9,01	0,60	14,5	78	221,55	1,55	2,49	5,6	205,92	6,9	29,69
A18	70,0	1,24	16,77	0,31	2,62	7,28	161	19,94	1,72	26,5	83	257,76	4,05	2,48	10,9	413,83	13,7	44,14
A19	70,0	1,10	16,77	0,26	2,14	8,85	118	85,16	2,08	18,6	79	337,49	2,40	2,38	9,3	331,53	8,0	31,86
B1	70,0	0,67	16,77	0,10	1,03	5,13	48	11,22	2,08	7,4	100	459,87	0,00	2,58	4,1	164,50	4,7	33,37
B2	70,0	1,06	16,77	0,24	2,49	15,16	104	20,92	0,89	20,5	157	249,59	2,50	2,83	10,6	459,56	11,9	81,70
B3	70,0	0,97	16,77	0,21	1,96	6,78	94	15,00	2,03	17,5	152	254,09	4,07	2,42	8,8	344,54	7,1	57,24
B4	70,0	0,99	16,77	0,21	2,52	13,89	95	18,37	1,87	18,8	195	283,65	2,35	2,61	9,2	360,07	7,2	74,00
B5	70,0	0,67	16,77	0,12	1,14	4,59	65	7,44	1,65	10,6	85	570,33	1,72	2,12	3,7	194,04	4,6	34,97
B6	70,0	1,19	16,77	0,31	2,82	11,89	129	15,92	1,84	25,2	371	249,82	4,66	2,32	10,0	425,31	12,8	83,15
B7	70,0	0,79	16,77	0,13	1,35	5,69	79	11,47	1,88	10,4	103	174,19	1,51	2,22	3,7	231,74	5,8	38,32
B8	70,0	1,13	16,77	0,29	2,53	10,25	140	10,07	0,63	22,9	163	343,65	3,90	3,50	10,0	515,47	13,7	69,76
B9	70,0	0,78	16,77	0,14	1,27	7,50	70	7,35	1,82	10,2	78	240,83	0,11	2,40	4,0	211,08	5,1	34,43
B10	70,0	0,57	16,77	0,09	0,66	2,84	36	13,79	0,75	7,3	35	178,34	0,48	2,28	2,7	136,08	5,9	15,02
B11	70,0	1,03	16,77	0,22	1,94	9,84	103	8,58	2,44	17,2	111	300,74	3,99	2,52	6,4	304,08	9,1	60,79
B12	70,0	0,68	16,77	0,09	0,86	3,22	49	9,69	1,94	8,9	69	197,89	0,00	2,46	3,4	168,58	4,5	23,32
B13	70,0	1,00	16,77	0,22	1,78	7,35	99	15,43	1,76	15,8	95	213,18	0,28	2,36	6,0	321,05	10,3	37,26
B14	70,0	1,34	16,77	0,35	2,77	13,30	148	10,53	2,24	22,5	147	204,26	3,46	2,43	11,0	359,56	9,8	62,88
B15	70,0	1,18	16,77	0,25	2,10	7,39	126	15,05	2,98	21,5	152	323,46	2,09	2,81	15,9	359,67	15,0	49,27
B16	70,0	1,01	16,77	0,46	4,11	18,27	309	16,36	4,48	64,6	199	525,66	7,00	4,20	30,9	758,89	34,6	82,59

ΔΕΙΓΜΑ	Be	K ₂ O	CaO	TiO ₂	Fe ₂ O ₃	As	Ba	Br	Cd	Ce	Cr	Cu	Ga	Hg	La	Mn	Nd	Ni
B17	70,0	0,77	16,77	0,10	0,96	5,97	68	6,23	2,12	10,6	65	215,74	0,91	2,61	6,0	169,82	7,1	20,15
Γ1	70,0	0,56	16,77	0,02	0,18	0,00	10	8,69	1,12	1,9	44	279,79	0,99	2,91	1,8	35,80	2,7	25,45
Γ2	70,0	0,53	16,77	0,05	0,23	0,00	11	7,13	3,46	3,3	53	209,03	1,47	2,91	3,1	40,96	7,1	29,84
Γ3	70,0	0,53	16,77	0,09	0,18	0,00	9	5,34	3,70	2,5	48	203,41	0,69	3,77	3,4	29,44	4,4	29,55
Γ4	70,0	0,54	16,77	0,05	0,18	0,00	8	5,36	1,10	2,5	51	199,29	0,18	2,93	2,5	44,43	2,2	33,24
Δ1	70,0	0,47	16,77	0,02	0,14	0,00	11	3,30	2,20	3,8	35	199,49	0,00	2,62	1,7	29,72	3,9	17,28
Δ2	70,0	0,50	16,77	0,06	0,77	1,97	43	7,70	3,10	5,2	92	175,74	0,47	2,23	1,8	142,00	4,6	37,26
Δ3	70,0	0,47	16,77	0,04	0,44	4,29	19	3,78	2,50	4,6	53	106,61	0,64	2,06	1,7	126,06	2,2	14,67
E1	70,0	0,49	16,77	0,04	0,34	1,86	29	3,86	3,10	10,0	35	106,81	0,88	2,32	5,7	58,07	2,2	14,95
E2	70,0	0,47	16,77	0,04	0,41	4,24	19	1,66	1,10	6,8	45	97,24	0,27	1,74	1,7	89,58	2,2	13,93
E3	70,0	0,52	16,77	0,02	0,13	3,40	9	2,17	2,50	2,9	38	286,66	0,00	2,96	2,2	35,72	2,9	16,28
BK1	70,0	0,55	16,77	0,02	0,17	1,85	8	3,29	2,76	2,5	36	72,63	0,63	3,16	3,1	39,91	5,4	21,42
BK2	70,0	0,57	16,77	0,03	0,23	1,95	26	3,36	4,40	4,6	56	122,51	0,89	3,41	3,5	57,86	5,3	23,34
BK3	70,0	0,89	16,77	0,08	0,86	3,95	49	3,30	5,37	7,5	95	287,07	0,28	3,10	4,0	178,53	4,5	24,38
ΥΠ1	70,0	0,72	16,77	0,07	0,93	10,14	81	11,32	4,98	9,1	64	197,79	1,33	3,18	6,5	217,65	8,5	32,03
ΥΠ2	70,0	0,92	16,77	0,07	0,99	13,89	109	8,71	1,56	7,2	64	135,51	1,55	4,17	4,3	168,82	3,3	33,62
ΥΠ3	70,0	1,00	16,77	0,09	0,90	11,96	466	7,68	2,37	6,8	40	117,23	0,58	5,39	3,6	176,61	6,8	23,60
ΥΠ4	70,0	0,96	16,77	0,08	0,75	5,41	85	6,65	0,89	4,7	53	115,08	0,99	2,99	3,5	165,92	2,2	34,17
ΥΠ5	70,0	0,83	16,77	0,08	0,87	9,37	249	6,56	4,74	6,8	60	299,76	0,17	3,06	5,9	198,32	7,9	25,24
ΥΠ6	70,0	0,89	16,77	0,08	0,96	8,12	165	10,11	4,60	7,0	67	154,26	0,00	3,07	3,8	201,43	4,6	25,94
ΥΠ7	70,0	0,89	16,77	0,09	0,84	6,30	435	10,39	2,87	5,8	35	95,61	0,00	3,35	4,3	177,72	6,4	17,34
ΥΠ8	70,0	0,79	16,77	0,06	0,92	10,10	68	12,13	4,92	6,5	53	149,86	0,00	3,00	4,4	223,25	2,5	22,90
ΥΠ9	70,0	0,76	16,77	0,08	0,94	6,80	146	4,83	13,17	6,3	47	443,13	0,78	3,43	4,3	196,89	7,7	30,94
ΥΠ10	70,0	0,92	16,77	0,11	1,06	9,13	473	8,74	13,57	8,7	53	212,55	1,95	3,46	3,5	192,34	9,5	26,91
ΥΠ11	70,0	0,76	16,77	0,08	0,69	0,00	85	10,99	4,61	7,2	135	214,28	9,38	3,14	7,0	270,15	3,8	24,07
ΥΠ12	70,0	0,88	16,77	0,09	0,94	10,40	342	7,03	2,83	5,8	103	189,79	1,08	3,21	4,6	208,13	6,7	25,73
ΥΠ13	70,0	0,85	16,77	0,10	0,83	9,93	449	5,71	5,07	7,1	85	159,16	0,89	3,14	5,7	170,07	8,4	26,48
ΥΠ14	70,0	0,90	16,77	0,09	0,94	8,02	194	20,35	3,28	6,4	56	559,96	0,78	3,01	5,7	188,50	8,3	30,53
ΥΠ15	70,0	0,76	16,77	0,07	0,83	9,16	39	12,73	3,49	8,1	47	164,14	0,04	2,99	4,6	155,34	7,0	26,45
ΣΤ1	70,0	0,56	16,77	0,01	0,10	2,86	8	1,99	3,10	3,8	35	247,29	0,00	3,62	3,9	10,64	10,4	18,66
ΣΤ2	70,0	0,52	16,77	0,01	0,08	0,00	9	2,86	6,25	4,6	35	114,80	0,77	4,25	3,9	32,51	4,5	19,37
ΣΤ3	70,0	0,53	16,77	0,05	0,55	4,81	40	5,86	4,47	3,4	46	273,08	0,27	2,84	2,6	157,69	2,4	22,72
ΣΤ4	70,0	0,57	16,77	0,07	0,79	6,06	39	3,98	6,62	6,6	124	185,41	0,00	3,00	6,0	173,38	8,1	28,28
ΣΓΑ	70,0	0,93	16,77	0,11	1,19	12,88	120	18,14	4,89	8,5	66	134,71	0,78	3,31	6,4	213,37	6,5	30,41
ΣΓΒ	70,0	1,51	16,77	3,79	1,65	3,66	540	23,62	278,86	33,4	1388	710,58	31,37	3,46	18,5	375,54	19,2	66,25

ΔΕΙΓΜΑ	Be	K ₂ O	CaO	TiO ₂	Fe ₂ O ₃	As	Ba	Br	Cd	Ce	Cr	Cu	Ga	Hg	La	Mn	Nd	Ni
ΣΓΓ	70,0	0,67	16,77	0,10	1,23	82,98	63	5,31	19,86	7,5	325	296,29	1,22	3,13	5,5	257,05	4,7	38,84
ΣΓΔ	70,0	1,17	16,77	0,14	1,55	4,03	256	3,46	7,53	10,3	58	310,27	0,19	3,36	4,9	519,83	7,3	39,34
ΥΚ1	70,0	0,62	16,77	0,05	0,78	10,03	40	4,79	2,71	5,1	113	191,20	0,49	3,08	5,3	168,17	6,4	35,64
ΥΚ2	70,0	0,63	16,77	0,03	0,47	1,78	32	9,21	2,73	4,4	46	238,38	0,19	3,17	7,1	114,13	7,9	25,53
ΥΚ3	70,0	0,67	16,77	0,03	0,50	4,29	34	5,00	3,34	4,8	39	162,75	0,00	3,25	4,9	118,93	5,8	21,09
ΥΚ4	70,0	0,56	16,77	0,03	0,79	2,86	30	3,55	4,09	5,1	220	141,13	0,00	2,84	5,4	292,09	5,4	16,76
ΥΚ5	70,0	0,77	16,77	0,06	0,70	15,34	32	3,73	1,85	5,6	54	78,84	1,26	3,35	4,1	126,91	2,6	30,83
ΥΚ6	70,0	0,72	16,77	0,06	1,09	15,07	47	2,04	5,79	7,0	302	113,37	1,15	3,18	4,9	301,75	6,9	38,73
ΥΚ7	70,0	0,63	16,77	0,07	0,53	6,37	85	5,88	4,49	5,5	49	130,60	0,40	3,15	2,5	114,71	4,8	28,44
ΥΚ8	70,0	0,71	16,77	0,09	0,83	10,84	70	3,38	16,16	8,8	89	240,20	1,52	3,34	6,3	154,71	3,9	27,22
ΥΚ9	70,0	0,60	16,77	0,04	0,87	6,35	40	3,49	6,39	7,3	321	65,15	0,98	2,92	7,2	425,36	6,0	25,60
ΥΚ10	70,0	0,65	16,77	0,05	1,23	2,27	60	6,52	7,58	5,5	466	63,80	1,13	3,21	4,1	381,86	4,9	40,86
ΥΚ11	70,0	0,70	16,77	0,06	0,68	10,46	68	4,06	8,43	7,3	50	71,01	0,32	3,44	5,6	151,94	6,2	20,50
ΥΚ12	70,0	0,70	16,77	0,05	1,11	7,12	61	5,35	8,63	7,3	411	60,63	0,00	3,26	5,4	379,42	6,7	39,32
ΥΚ13	70,0	0,62	16,77	0,07	0,60	11,28	76	6,02	5,16	10,3	70	66,95	1,21	3,02	7,4	168,25	5,3	26,99
ΥΚ14	70,0	0,75	16,77	0,06	0,56	6,06	31	5,30	5,05	4,5	38	122,22	0,40	3,23	6,0	98,78	5,2	16,15
ΥΚ15	70,0	0,68	16,77	0,07	1,21	5,49	50	3,19	2,30	5,6	441	95,63	1,07	3,53	4,3	382,76	2,2	39,23
ΔΑ	70,0	1,67	16,77	0,44	3,97	22,74	183	10,41	2,40	38,1	268	201,08	6,87	2,74	20,0	559,57	20,5	93,41
ΠΡΟ	70,0	0,99	16,77	0,19	1,65	6,28	93	17,10	0,60	19,1	82	137,73	1,02	2,94	8,4	299,57	11,7	36,83

ΔΕΙΓΜΑ	Pb	Pr	Rb	Sb	Se	Sr	Th	Tl	U	V	Y	Zn	Φαινανθρένιο	Ανθρακένιο	Φλωρανθένιο	Πυρένιο	Β(α)Ανθρακένιο	Χρυσένιο
A1	27,9	2,00	21,6	1,5	0,3	107,1	3,0	2,00	1,23	42,00	5,9	452,31	0,34	0,04	0,42	0,26	0,02	0,05
A2	17,9	4,27	20,6	1,82	0,5	124,1	1,7	2,20	1,36	44,00	6,5	227,31	0,72	0,10	0,81	0,45	0,02	0,07
A3	28,6	2,00	26,4	1,50	0,4	89,1	2,7	1,70	0,95	32,00	7,2	350,78	0,30	0,03	0,14	0,11	0,00	0,00
A4	21,2	2,00	24,1	1,60	0,3	105,0	2,6	2,01	1,19	43,38	6,1	164,65	0,20	0,02	0,09	0,07	0,02	0,06
A5	24,0	2,00	22,6	1,78	0,6	115,6	4,0	2,39	1,38	48,29	7,9	178,65	0,21	0,02	0,06	0,03	0,01	0,01
A6	10,5	2,00	19,7	1,50	0,3	115,8	1,3	2,36	1,19	45,53	8,6	98,77	0,04	0,00	0,04	0,02	0,00	0,00
A7	21,8	2,00	23,3	1,50	0,5	145,2	2,8	2,19	1,28	43,90	8,0	138,03	4,49	0,57	3,84	2,49	0,29	0,49
A8	20,4	2,00	33,8	2,07	0,9	141,9	3,8	2,31	1,38	45,56	11,2	106,36	0,00	0,00	0,02	0,00	0,00	0,00
A9	29,9	2,67	32,4	1,50	0,4	96,7	3,7	1,91	1,19	39,65	8,7	190,15	2,03	0,19	1,67	1,29	0,27	0,42
A10	26,3	2,00	32,5	1,50	0,3	139,5	2,8	2,47	1,49	50,82	11,3	154,77	2,20	0,37	5,11	4,00	1,13	1,65
A11	10,4	2,00	36,9	1,50	0,6	93,2	2,9	2,22	1,20	42,07	9,5	122,26	0,16	0,02	0,29	0,21	0,04	0,09
A12	28,9	2,00	28,8	2,53	0,5	84,2	4,3	1,86	1,11	35,73	7,6	140,91	1,25	0,11	1,25	0,77	0,09	0,25
A13	12,5	2,00	10,6	2,05	0,4	95,2	2,9	2,24	1,35	48,22	3,1	102,95	0,99	0,14	1,27	0,91	0,27	0,69
A14	7,6	2,00	8,5	1,50	0,9	83,5	1,3	2,00	1,31	43,48	2,0	73,52	0,04	0,00	0,10	0,05	0,01	0,03
A15	11,2	2,00	9,6	1,50	1,1	90,0	1,4	2,30	1,40	45,92	2,6	151,87	0,02	0,00	0,02	0,01	0,00	0,00
A16	10,9	2,00	13,7	1,50	0,3	123,3	1,3	1,98	1,29	42,39	3,6	127,22	0,09	0,02	0,09	0,07	0,01	0,03
A17	13,4	2,00	17,0	1,50	0,0	109,8	3,0	2,23	1,36	46,99	5,6	124,81	0,26	0,04	0,46	0,21	0,01	0,08
A18	24,8	2,00	34,3	1,50	0,3	129,8	4,7	2,21	1,31	43,81	9,8	168,27	0,25	0,06	0,17	0,12	0,03	0,10
A19	21,8	2,00	26,2	1,50	0,7	120,5	3,9	2,15	1,30	53,23	7,1	179,24	0,06	0,00	0,04	0,04	0,01	0,00
B1	19,3	2,00	9,8	1,50	0,2	110,1	1,6	2,32	1,39	49,79	2,5	244,60	0,12	0,03	0,15	0,11	0,03	0,06
B2	21,6	2,67	25,4	1,50	0,1	158,6	2,4	2,54	1,36	49,24	9,5	157,77	0,35	0,03	0,40	0,28	0,01	0,05
B3	50,7	2,00	23,3	2,33	1,1	115,0	4,9	2,86	1,34	45,35	6,6	152,16	0,33	0,03	0,37	0,24	0,02	0,09
B4	22,6	2,00	22,3	2,73	0,2	132,4	1,7	2,34	1,40	47,56	8,3	166,03	0,46	0,03	0,90	0,71	0,19	0,00
B5	30,6	3,29	12,8	1,57	0,4	87,8	3,2	1,89	1,22	40,73	2,5	327,74	0,17	0,01	0,26	0,18	0,02	0,08
B6	31,2	2,00	32,6	5,83	0,3	138,2	5,2	2,10	1,34	43,30	10,2	126,76	0,34	0,04	0,55	0,37	0,03	0,08
B7	22,9	2,00	16,1	2,12	0,4	105,1	3,3	2,01	1,23	44,54	5,1	116,89	0,18	0,02	0,49	0,38	0,08	0,15
B8	26,2	3,32	29,2	1,68	0,3	120,3	4,0	2,04	1,28	44,40	9,7	198,53	10,29	1,08	14,68	11,39	3,02	6,26
B9	14,2	2,00	16,2	2,66	0,3	103,3	2,0	2,15	1,32	47,14	4,5	166,00	1,46	0,29	1,08	0,75	0,32	0,47
B10	13,3	2,90	8,5	1,50	0,2	92,6	1,3	2,06	1,30	44,81	1,6	114,17	0,11	0,01	0,13	0,07	0,01	0,03
B11	31,8	2,00	25,5	1,95	0,7	115,6	2,7	2,26	1,24	46,04	5,9	178,00	8,55	0,75	13,51	10,09	1,84	4,25
B12	13,2	3,23	11,3	1,50	0,5	103,0	2,3	2,22	1,35	49,40	2,7	117,09	0,45	0,07	0,55	0,59	0,00	0,00
B13	19,3	3,21	24,0	1,50	0,2	125,8	2,6	2,12	1,30	45,33	7,2	138,22	0,06	0,00	0,16	0,10	0,00	0,00
B14	17,9	2,00	36,4	3,20	0,0	121,9	4,3	2,18	1,38	46,26	9,7	123,71	1,79	0,12	0,38	2,80	0,67	0,00
B15	27,4	5,77	27,9	3,75	0,3	156,6	4,6	2,52	1,57	53,74	6,0	204,30	0,68	0,10	0,30	0,22	0,02	0,10
B16	53,3	8,48	54,5	7,35	0,1	246,7	8,4	3,77	2,42	109,01	13,5	304,14	0,25	0,04	0,32	0,27	0,07	0,20

ΔΕΙΓΜΑ	Pb	Pr	Rb	Sb	Se	Sr	Th	Tl	U	V	Y	Zn	Φαινανθρένιο	Ανθρακένιο	Φλωρανθένιο	Πυρένιο	Β(α)Ανθρακένιο	Χρυσένιο
B17	10,2	2,83	12,7	2,34	0,9	121,8	1,8	2,39	1,40	49,88	3,3	127,99	0,17	0,02	0,15	0,13	0,03	0,09
Γ1	11,3	2,00	1,6	2,01	2,1	181,9	1,7	2,68	1,62	61,94	0,0	148,52	3,59	0,27	0,00	0,18	0,06	0,06
Γ2	10,4	5,92	1,2	3,77	3,5	188,4	1,6	3,96	1,58	58,77	0,0	114,59	3,37	0,00	0,00	0,45	0,00	0,00
Γ3	13,5	4,01	1,3	4,65	0,5	189,9	1,7	2,54	1,66	62,36	0,0	104,91	6,93	1,55	0,73	0,16	0,00	0,00
Γ4	10,2	2,00	2,4	1,90	1,3	192,2	1,7	2,68	1,67	64,15	0,0	105,46	1,82	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Δ1	12,2	4,11	1,7	2,16	1,0	101,7	3,2	2,35	1,42	56,29	0,0	108,55	12,51	18,75	37,37	25,62	3,41	6,96
Δ2	29,9	4,92	4,6	1,69	0,8	129,6	1,4	2,02	1,24	44,11	1,2	110,67	3,57	0,54	83,66	47,31	0,00	11,25
Δ3	9,3	5,62	4,0	1,50	0,6	105,9	1,2	2,23	1,16	42,60	1,6	84,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Ε1	7,7	8,17	3,8	2,76	0,2	91,2	1,1	2,12	1,08	43,84	1,6	69,56	2,39	0,00	0,17	0,06	0,00	0,00
Ε2	5,1	3,79	4,9	1,62	0,9	94,4	0,9	1,56	0,91	38,46	1,0	72,34	1,35	0,00	0,42	0,00	0,00	0,00
Ε3	9,9	2,21	1,5	4,95	1,3	108,7	1,6	2,68	1,55	62,88	0,0	140,80	1,27	0,08	1,44	0,17	0,00	0,27
BK1	7,7	3,04	1,9	3,33	1,6	112,3	2,3	2,62	1,64	61,31	0,1	43,84	2,76	0,19	3,08	1,12	0,00	0,00
BK2	17,3	3,41	2,0	4,39	1,4	112,7	3,4	2,80	1,69	65,73	0,0	93,69	4,67	0,36	0,62	0,17	0,02	0,10
BK3	26,0	2,03	9,8	3,18	0,9	535,4	1,7	2,85	1,75	58,99	1,2	162,11	1,43	0,23	0,53	0,47	0,03	0,00
ΥΠ1	17,0	5,38	5,7	5,12	0,9	727,9	1,9	2,90	1,89	65,09	2,5	145,74	157,45	39,32	54,29	34,55	2,45	3,13
ΥΠ2	11,3	2,00	9,3	2,22	0,5	808,6	1,8	3,31	1,81	64,65	1,5	143,39	71,61	16,89	23,21	14,25	1,61	2,31
ΥΠ3	23,5	3,08	10,3	3,75	0,7	1308,2	1,9	2,82	1,96	64,51	0,2	118,77	339,03	71,14	66,69	40,98	2,56	3,34
ΥΠ4	12,8	2,00	9,7	1,86	1,2	1188,7	1,8	2,70	3,22	59,81	1,2	94,41	141,44	41,72	61,85	43,05	5,99	8,27
ΥΠ5	22,7	2,20	6,9	4,44	0,6	785,3	1,8	2,72	1,85	61,41	0,7	196,40	104,33	27,04	51,08	28,74	2,99	4,42
ΥΠ6	17,0	3,15	7,8	3,77	0,8	845,0	1,8	2,89	1,93	63,07	0,7	112,87	7,75	1,23	1,57	0,92	0,05	0,28
ΥΠ7	25,5	4,11	7,2	2,54	0,9	1126,3	1,9	3,00	2,11	67,91	0,8	95,95	2,29	0,27	1,02	0,49	0,00	0,00
ΥΠ8	18,4	2,00	6,8	1,94	1,1	465,8	1,8	2,83	1,83	61,37	1,7	131,53	5,65	1,05	1,60	1,23	0,00	0,00
ΥΠ9	30,0	6,40	6,1	8,50	0,3	690,2	1,7	3,10	1,75	59,67	0,6	259,09	33,84	7,09	14,14	8,41	0,84	0,93
ΥΠ10	24,8	4,52	7,4	3,56	1,1	1668,3	2,0	3,18	2,15	69,05	0,6	175,66	3,65	0,28	3,17	1,67	0,14	0,89
ΥΠ11	276,6	2,42	5,6	10,56	0,2	583,4	15,0	3,20	1,93	63,43	0,0	175,84	29,08	5,64	9,84	5,18	0,23	1,28
ΥΠ12	21,1	2,81	8,7	3,98	0,9	834,8	1,9	2,91	1,92	64,99	0,8	153,11	116,03	23,34	16,49	8,50	1,35	1,25
ΥΠ13	23,1	7,39	8,5	3,34	0,7	675,0	1,9	2,84	1,96	65,76	2,5	125,13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
ΥΠ14	38,9	5,30	9,4	4,44	0,6	773,1	1,9	3,03	1,91	60,88	0,1	327,27	7,54	1,17	1,14	0,48	0,00	0,00
ΥΠ15	10,0	3,02	8,2	4,32	1,0	488,4	1,5	3,16	1,48	52,41	1,5	121,71						
ΣΤ1	7,6	4,65	1,0	3,24	1,3	96,4	1,7	3,27	1,55	65,15	0,0	132,69	0,21	0,39	3,74	2,04	0,34	0,87
ΣΤ2	9,9	5,43	1,1	5,20	1,8	91,5	2,3	2,72	1,51	60,71	0,0	69,89	6,99	0,82	4,00	2,68	1,17	0,75
ΣΤ3	24,1	2,00	2,6	2,67	1,1	128,9	1,8	2,57	1,56	56,38	1,5	231,61	3,60	0,55	6,44	4,12	0,51	1,47
ΣΤ4	22,8	2,06	3,9	5,00	0,0	163,4	1,8	2,72	1,65	60,20	1,8	192,34	6,00	1,06	18,53	16,00	3,92	7,71
ΣΓΑ	24,6	3,97	8,9	4,34	0,7	963,0	1,9	2,78	1,93	61,78	1,0	158,63	0,75	0,00	0,37	0,14	0,00	0,00
ΣΓΒ	522,7	5,09	50,8	68,08	0,0	2105,3	25,0	3,40	2,18	131,59	1,4	593,42	3,09	1,01	0,67	0,18	0,00	0,00

ΔΕΙΓΜΑ	Pb	Pr	Rb	Sb	Se	Sr	Th	Tl	U	V	Y	Zn	Φαινανθρένιο	Ανθρακένιο	Φλωρανθένιο	Πυρένιο	Β(α)Ανθρακένιο	Χρυσένιο
ΣΓΓ	67,2	2,99	4,1	9,15	0,3	172,0	4,3	3,81	1,67	63,28	1,5	153,28	0,23	0,00	0,13	0,09	0,00	0,00
ΣΓΔ	32,1	2,61	13,1	5,59	0,2	1632,0	2,0	3,03	3,42	65,28	0,6	295,33	0,20	0,00	0,26	0,00	0,00	0,00
ΥΚ1	24,4	3,35	4,0	3,60	0,9	133,5	1,8	2,86	1,68	63,78	1,5	121,57	12,97	1,42	19,64	11,55	1,88	4,88
ΥΚ2	16,3	2,71	4,1	3,53	1,2	112,7	2,9	2,65	1,69	62,19	4,3	137,28	6,39	0,68	12,10	7,26	1,13	2,40
ΥΚ3	10,6	6,04	5,3	3,31	0,4	139,7	1,8	2,94	1,73	67,77	2,7	93,44	4,99	0,44	2,07	1,08	0,22	0,47
ΥΚ4	11,3	2,00	3,4	4,75	1,0	122,8	1,6	2,57	1,54	60,63	2,9	88,12	2,08	0,39	3,74	2,04	0,34	0,87
ΥΚ5	14,5	2,00	7,9	2,21	2,1	138,5	1,8	3,18	1,82	67,72	2,0	76,52	5,80	0,57	17,11	15,04	1,56	4,17
ΥΚ6	14,9	3,36	7,2	6,67	0,7	150,0	1,8	2,90	1,79	64,74	1,9	92,47	0,79	0,00	2,18	0,22	0,00	0,32
ΥΚ7	8,4	3,23	3,2	3,94	1,0	145,7	1,8	2,85	1,75	65,41	1,0	94,22	9,82	0,66	6,46	3,56	0,75	0,00
ΥΚ8	18,4	2,00	10,8	3,81	0,2	173,8	1,5	3,00	1,42	56,26	1,8	157,32	24,94	2,09	22,92	24,05	3,88	10,89
ΥΚ9	8,5	5,45	3,3	3,12	2,1	127,0	1,6	2,62	1,52	56,62	2,3	60,48	13,79	1,55	17,34	9,63	1,27	2,80
ΥΚ10	26,4	2,07	3,8	4,08	1,4	139,5	1,9	2,91	1,75	64,17	2,3	62,29	14,40	1,30	11,01	7,30	0,90	3,01
ΥΚ11	27,3	2,08	5,4	4,12	1,0	139,0	2,7	3,11	1,91	71,35	2,0	127,88	122,30	12,67	41,18	26,20	3,43	5,37
ΥΚ12	10,3	4,86	4,4	4,75	0,5	150,9	1,9	2,95	1,83	68,64	1,9	51,37	19,55	1,25	14,77	17,78	3,00	7,05
ΥΚ13	17,6	5,69	3,8	4,91	1,4	139,8	2,1	2,74	1,73	63,84	2,8	60,42	4,10	0,33	4,20	2,28	0,38	1,12
ΥΚ14	11,8	3,23	7,0	4,62	1,1	117,2	1,9	2,95	1,82	69,12	1,9	87,50	146,51	15,33	47,78	27,59	5,73	9,99
ΥΚ15	12,5	2,00	4,2	1,50	0,9	144,0	1,7	3,34	1,64	62,11	3,1	69,56	12,17	1,38	16,45	8,61	1,75	3,76
ΔΑ	21,9	4,85	49,0	3,84	0,3	117,7	6,2	2,86	1,48	53,17	13,6	150,86						
ΠΡΟ	21,1	4,73	20,5	1,56	0,4	122,0	1,7	2,66	1,61	57,23	5,8	89,22						

ΔΕΙΓΜΑ	Βενζο(b) Φλωρανθένιο	Βενζο(k) Φλωρανθένιο	Βενζο(a) Πυρένιο	Βενζο(e) Πυρένιο	Διβενζο(a,h) Ανθρακένιο	Βενζο(g,h,l) Περυλένιο	Ναφθαλίνο	Ιντένο(1,2,3,0) 0cd) Πυρένιο	Φαινόλη	Σύνολο Πετρελαϊκών Υδρογονανθράκων	benzene	toluene	xylene
A1	0,01	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,03	0,98
A2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,05	1,25
A3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,02	0,95
A4	0,00	0,03	0,01	0,01	0,00	0,00	0,76	0,00	0,00	0,00		0,02	0,70
A5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,04	0,80
A6	0,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
A7	0,07	0,24	0,11	0,03	0,00	0,00	2,02	0,00	0,00	0,00		0,18	2,00
A8	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	14,00		0,00	0,00
A9	0,04	0,19	0,07	0,02	0,00	0,02	0,18	0,02	0,00	11,00		0,09	0,99
A10	0,17	0,71	0,33	0,10	0,00	0,10	0,67	0,11	0,00	0,00		0,09	1,05
A11	0,01	0,03	0,01	0,00	0,00	0,00	0,22	0,00	0,00	0,00		0,02	0,78
A12	0,03	0,11	0,03	0,01	0,00	0,01	1,28	0,01	0,00	0,00		0,06	0,50
A13	0,28	0,02	0,07	0,06	0,00	0,01	0,00	0,02	0,00	0,00		0,07	0,40
A14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
A15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
A16	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
A17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,47	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
A18	0,01	0,04	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,35
A19	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,00
B1	0,00	0,02	0,01	0,00	0,00	0,00	0,66	0,00	0,00	0,00		0,00	1,72
B2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	460,00		0,00	0,53
B3	0,02	0,07	0,02	0,00	0,00	0,00	0,61	0,00	0,00	0,00		0,00	0,52
B4	0,09	0,13	0,01	0,05	0,00	0,00	0,39	0,00	0,00	0,00		0,00	0,68
B5	0,04	0,08	0,05	0,00	0,00	0,00	0,13	0,00	0,00	0,00		0,00	0,16
B6	0,03	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,21
B7	0,03	0,09	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,16
B8	1,12	0,78	0,17	0,55	0,00	0,07	1,25	0,09	0,00	98,00		6,80	10,23
B9	0,03	0,23	0,06	0,09	0,00	0,00	0,56	0,00	0,00	31,00		0,00	1,23
B10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	27,00		0,00	0,12
B11	1,07	0,24	0,29	0,00	0,02	0,05	9,08	0,05	0,00	15,00		6,20	8,53
B12	0,04	0,10	0,08	0,04	0,00	0,03	1,30	0,03	0,00	17,00		0,00	0,48
B13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	42,00		0,00	0,00
B14	0,32	0,25	0,20	0,00	0,00	0,02	0,84	0,04	0,00	25,00		1,55	1,89
B15	0,02	0,14	0,05	0,12	0,00	0,07	0,00	0,05	0,00	64,00		0,52	1,11
B16	0,02	0,10	0,01	0,02	0,00	0,01	1,33	0,00	0,00	44,00		0,00	0,18

ΔΕΙΓΜΑ	Βενζο(b) Φλωρανθένιο	Βενζο(k) Φλωρανθένιο	Βενζο(a) Πυρένιο	Βενζο(e) Πυρένιο	Διβενζο(a,h) Ανθρακένιο	Βενζο(g,h,l) Περυλένιο	Ναφθαλίνο	Ιντένο(1,2,3,0) 0cd) Πυρένιο	Φαινόλη	Σύνολο Πετρελαϊκών Υδρογονανθράκων	benzene	toluene	xylene
B17	0,01	0,05	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		0,00	0,12
Γ1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,90	0,00	0,00	394,00		0,00	0,00
Γ2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	412,00		0,00	0,00
Γ3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	35,48	0,00	0,00	390,00		0,00	0,00
Γ4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,58	0,00	0,00	432,00		0,00	0,00
Δ1	0,85	0,09	0,18	0,15	0,00	0,00	82,34	0,00	0,00	174,00		0,39	3,45
Δ2	2,79	0,26	0,67	0,62	0,00	0,12	0,00	0,07	0,00	313,00		0,00	0,00
Δ3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,10	447,00		0,00	0,00
Ε1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	54,00		0,00	0,00
Ε2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,19	576,00		0,00	0,00
Ε3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5,31	0,00	0,23	908,00		0,00	0,00
BK1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	4,05	0,00	0,00	451,00		0,06	1,72
BK2	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	49,21	0,00	0,00	298,00		0,15	3,25
BK3	0,00	0,04	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02	0,00	0,00		0,00	0,21
ΥΠ1	0,21	1,29	0,39	0,17	0,00	0,34	12,37	0,17	1,00	185,00		0,11	1,95
ΥΠ2	0,10	0,79	0,17	0,08	0,00	0,14	2,12	0,12	0,20	762,00		0,05	0,10
ΥΠ3	0,12	0,64	0,22	0,07	0,00	0,06	54,71	0,05	0,00	963,00		0,21	3,94
ΥΠ4	0,18	1,40	0,38	0,28	0,00	0,00	0,00	0,05	0,08	216,00		0,09	1,34
ΥΠ5	0,44	1,79	0,79	0,29	0,00	0,35	0,00	0,43	0,06	1440,00		0,05	1,13
ΥΠ6	0,06	0,05	0,00	0,00	0,00	0,00	2,65	0,00	1,06	818,00		0,00	0,00
ΥΠ7	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,45	1762,00		0,00	0,00
ΥΠ8	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	679,00		0,00	0,00
ΥΠ9	0,22	0,04	0,03	0,07	0,00	0,00	4,03	0,00	2,85	489,00		0,02	0,03
ΥΠ10	0,12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,02	0,00	0,06	3,36	165,00		0,00	0,00
ΥΠ11	0,00	0,19	0,00	0,00	0,00	0,00	6,02	0,00	0,00	1352,00		0,00	0,00
ΥΠ12	0,00	0,24	0,11	0,00	0,00	0,00	62,62	0,00	0,00	3081,00		0,08	1,23
ΥΠ13	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	768,00		0,00	0,00
ΥΠ14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	51,93	0,00	11,01	1404,00		0,00	0,00
ΥΠ15												0,00	0,00
ΣΤ1	0,00	0,42	0,00	0,00	0,00	0,12	0,00	0,16	0,02	3722,00		0,00	0,00
ΣΤ2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	7,24	0,00	1,14	779,00		0,00	0,00
ΣΤ3	0,19	0,60	0,25	0,10	0,12	0,19	0,00	0,26	1,88	995,00		0,00	0,00
ΣΤ4	6,81	0,45	2,25	2,48	1,30	1,23	0,00	2,31	0,42	533,00		0,00	0,00
ΣΓΑ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,32	489,00		0,00	0,00
ΣΓΒ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	41,15	0,00	2,00	620,00		0,15	0,42

CalTOX™ 4.0 beta: Eight-Compartment Multimedia Exposure Model - Contaminated Soil
 Copyright (c) 2002 Regents of the University of California

Chemical ==>	Arsenic		Summary of Results:
Landscape ==>	CA Res (clay soil)		
Exposure Factors Set=>	Male 19+		
Toxicity Data ==>	potencies 1/(mg/kg-d)	ADIs (mg/kg-d)	Un-mitigated risk and/or hazard ratio
Inhalation	1,2 E+01	0,00000857	Risk 2,8 E-5
Ingestion	1,5 E+00	0,0003	Hazard ratio 3,1 E-1
Dermal	1,5 E+00	0,0003	
Total dose	0		
Target Risk/Hazard =	Risk 1,0 E-06	Hazard quotient 1,00	Target Soil Concentrations (in ppm)
Root-soil thickness ==>	current value 2	should be > OK	Based on cancer risk:
Alter root soil thickness to?	2,0 E+00		Root soil 7,7 E-1
Distance off-site for air exposure=	0,0 E+00	meters	Vadose soil 0,0 E+0 not avlbl.
Time after initial concentrations when exposure begins =	1,1 E+03	days	Root Soil 7,7 E-1
Measured Concentrations (at time = 0)			Vadose soil 0,0 E+0 not avlbl.
Root-zone soil	21,64	ppm (mg/kg)	Based on hazard:
Vadose-zone soil	0	ppm (mg/kg)	Root soil 7,0 E+1
Ground water	0	ppm (mg/L)	Vadose soil 0,0 E+0 not avlbl.
Continuous inputs	Methane flux m/d	0	Concentration limits without NAPL
Source term to air (mol/d)	0,0 E+00	Sa	Root soil 7,6 E+03 mg/kg solid
Source term to ground-surface soil (mol/d)	0,0 E+00	Sg	Vadose soil 7,6 E+03 mg/kg solid
Source term to root-zone soil (mol/d)	0,0 E+00	Ss	Ground water 7,5 E+00 mg/L water
Source term to surface water(mol/d)	0,0 E+00	Sw	
Aquifer characteristics			Time avrg. Conc. in on-site environmental media
Distance to first well (m)	0,0 E+00	d_well	Air 1,7 E-07 mg/m3
Darcy veleocity (m/d)	1,0 E-01	v_darc	Total Leaf 2,4 E+00 mg/kg(total)
Water dispersion coeff. (m2/d)	5,0 E-02	D_T	Grnd-surface soil 2,2 E+01 mg/kg(total)
			Root-zone soil 2,2 E+01 mg/kg(total)
			Vadose-zone soil 1,1 E-03 mg/kg(total)
			Ground water 4,4 E-04 mg/L(water)
			Surface water 4,8 E-02 mg/L
			Sediment 2,8 E+01 mg/kg

Chemical Properties

0,00297

0,003

1

-2,7 E+03

Compound	Arsenic		Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes
	Molecular weight (g/mol)	MW	7,49 E+01	7,49E+01	0,01	1	
	Octanol-water partition coefficient	Kow	0,00 E+00	0,00E+00	0,37	1	
	Melting point (K)	Tm	0,00 E+00	0,00E+00	0,03	1	
	Vapor Pressure in (Pa)	VP	0,00 E+00	0,00E+00	0,38	1	
	Solubility in mol/m ³	S	1,00 E-01	1,00E-01	0,37	1	Kaw
	Henry's law constant (Pa·m ³ /mol)	H -	n/a	-9,90E+01	0,45	1	#VALUE!
	Diffusion coefficient in pure air (m ² /d)	Dair	6,40 E-01	6,40E-01	0,08	1	7,41 E-06
	Diffusion coefficient; pure water (m ² /d)	Dwater	6,60 E-05	6,60E-05	0,24	1	7,64 E-10
	Organic carbon partition coefficient Koc	Koc -	n/a	-9,90E+01	0,66	1	m ² /s
	Octanol/air partition coefficient	Koa -	n/a	-9,90E+01	0,10	1	
	Partition coefficient in ground/root soil layer	Kd_s -	1,30 E+03	1,30E+03	0,10	1	
	Partition coefficient in vadose-zone soil layer	Kd_v -	1,30 E+03	1,30E+03	0,10	1	
	Partition coefficient in aquifer layer	Kd_q -	1,30 E+03	1,30E+03	0,10	1	
	Partition coeff. in surface wtr sediments	Kd_d -	1,30 E+03	1,30E+03	0,10	1	
	NOT USED	Kps -	3,85 E-04	-9,90E+01	3,70	1	
	Leaves/plm wtr prtn cff.(wet kg/m ³ per wet kg/m ³)	Kl_phl -	5,00 E-01	-9,90E+01	0,10	1	
	Stem/xylem-fluid prtn cff (m ³ [xylem]/m ³ [stem])	Ks_x -	4,00 E-01	-9,90E+01	0,10	1	
	Transpiration stream cncntrtn fctr (m ³ [wtr]/m ³ [ts])	TSCF -	1,00 E+00	-9,90E+01	0,10	1	
	Biotransfr fctr, plant/air (m ³ [a]/kg[pFM])	Kpa -	1,37 E+04	-9,90E+01	13,00	1	
	Biotransfer factor; cattle-diet/milk (d/kg[milk])	Bk -	6,20 E-05	6,20E-05	10,00	1	
	Biotransfer factor; cattle-diet/meat (d/L)	Bt -	6,20 E-05	6,20E-05	12,00	1	
	Biotransfer fctr; hen-diet/eggs (d/kg[egg contents])	Be -	6,20 E-05	6,20E-05	14,00	1	
	Biotransfr fctr; brst mlk/mthr intake (d/kg)	Bbmk -	3,00 E-02	3,00E-02	10,00	1	
	Bioconcentration factor; fish/water	BCF -	7,50 E+01	7,50E+01	0,62	1	
	Particle scavenging ratio of rain drops	Psr_rain -	5,00 E+04	5,00E+04	2,40	1	
	Skin permeability coefficient; cm/h	Kp_w -	1,00 E-03	1,00E-03	2,30	1	
	Skin-water/soil partition coefficient (L/kg)	Km -	6,50 E-01	6,50E-01	1,10	1	
	Fraction dermal uptake from soil	dfct_sl-	2,01 E-01	2,01E-01	1,00	1	

A parameter with a "-" symbol after it, indicates a parameter that can be calculated by a default algorithm when the value of mean for this parameter is <0. Otherwise the listed value is used.

Chemical Properties (continued)

Reaction half-life in air (d)	Thalf_a	n/a	n/a	1,00	1	
Reaction half-life in surface soil (d)	Thalf_g	n/a	n/a	1,20	1	
Reaction half-life in root-zone soil (d)	Thalf_s	n/a	n/a	1,20	1	
Reaction half-life in vadose-zone soil (d)	Thalf_v	n/a	n/a	1,00	1	
Reaction half-life in ground water (d)	Thalf_q	n/a	n/a	1,30	1	
Reaction half-life in surface water (d)	Thalf_w	n/a	n/a	1,20	1	
Reaction half-life in sediments (d)	Thalf_d	n/a	n/a	1,40	1	
Reaction half-life in the leaf surface (d)	Thalf_ls	n/a	n/a	1,00	1	

Landscape properties

site name	CA Res (clay soil)		Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes
	Contaminated area in m2	Area	1,00 E+06	1,00E+06	0,10	1	(m/y)
	Annual average precipitation (m/d)	rain	1,10 E-03	1,10E-03	1,00	1	4,02 E-01
	Not currently used	rain_days	2,00 E+01	2,00E+01	0,20	1	
	Flux; surface water into landscape (m/d)	inflow	0,00 E+00	0,00E+00	0,10	1	0,00 E+00
	Land surface runoff (m/d)	runoff	2,75 E-04	2,75E-04	1,00	1	1,00 E-01
	Atmospheric dust load (kg/m3)	rhob_a	6,15 E-08	6,15E-08	0,20	1	
	Dry deposition velocity, air particles (m/d)	v_d	5,00 E+02	5,00E+02	0,30	1	
	Aerosol organic fraction	foc_ap	2,00 E-01	2,00E-01	1,00	1	
	Volume fraction of water in leaf	beta_leaf	5,00 E-01	5,00E-01	0,05	1	
	Volume fraction of air in leaf	alpha_leaf	1,80 E-01	1,80E-01	0,20	1	
	Volume fraction of lipid in leaf	lipid_leaf	2,00 E-03	2,00E-03	0,20	1	
	Volume fraction of water in stem	beta_stem	4,00 E-01	4,00E-01	0,15	1	
	Volume fraction of water in root	beta_root	6,00 E-01	6,00E-01	0,15	1	
	Primary produciton dry vegetation(kg/m2/y)	veg_prod	9,00 E-01	9,00E-01	1,00	1	
	One-sided Leaf Area Index	LAI -	3,63 E+00	-9,90E+01	0,40	1	
	Wet interception fraction	IF_w	1,00 E-01	1,00E-01	0,10	1	
	Avg thickness of leaf surface(cuticle)(m)	d_cuticle	2,00 E-06	2,00E-06	0,20	1	
	Stem wet density (kg/m3)	rho_stm	8,30 E+02	8,30E+02	0,20	1	
	Leaf wet density (kg/m3)	rho_leaf	8,20 E+02	8,20E+02	0,30	1	
	Root wet density (kg/m3)	rho_root	8,00 E+02	8,00E+02	0,05	1	
	Veg attenuation fctr, dry interception(m2/kg)	atf_leaf	2,90 E+00	2,90E+00	0,01	1	

Landscape properties (continued)

site name	CA Res (clay soil)	Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes	
	Stomata area frctn(area stomata/area leaf)	na_st	7,00 E-03	7,00E-03	0,20	1	
	Effective pore depth	del_st	2,50 E-05	2,50E-05	0,20	1	
	Boundary layer thickness over leafs	del_a	2,00 E-03	2,00E-03	1,00	1	
	Leaf surface erosion half-life (d)	Thalf_le	1,40 E+01	1,40E+01	1,00	1	
	Ground-water recharge (m/d)	recharge	1,20 E-04	1,20E-04	1,00	1	4,38 E-02
	Evaporation of water from surface wtr (m/d)	evaporate	4,38 E-06	4,38E-06	1,00	1	
	Thickness of the ground soil layer (m)	d_g	1,00 E-02	1,00E-02	1,00	1	
	Soil particle density (kg/m3)	rhos_s	2,60 E+03	2,60E+03	0,05	1	
	Water content in surface soil (vol fraction)	beta_g	3,75 E-01	3,75E-01	0,20	1	
	Air content in the surface soil (vol frctn)	alpha_g	1,25 E-01	1,25E-01	0,20	1	cm/y
	Erosion of surface soil (kg/m2-d)	erosion_g	3,00 E-04	3,00E-04	0,20	1	0,006591
	Bioturbation (m^2/d)	D_bio	1,20 E-04	1,20E-04	1,00	1	
	Thickness of the root-zone soil (m)	d_s	2,00 E+00	2,00E+00	0,20	1	
	Water content of root-zone soil (vol. frctn.)	beta_s	3,75 E-01	3,75E-01	0,20	1	
	Air content of root-zone soil (vol. frctn.)	alpha_s	1,25 E-01	1,25E-01	0,20	1	
	Thickness of the vadose-zone soil (m)	d_v	5,00 E+00	5,00E+00	0,10	1	
	Water content; vadose-zone soil (vol. frctn.)	beta_v	3,75 E-01	3,75E-01	0,20	1	
	Air content of vadose-zone soil (vol. frctn.)	alpha_v	1,25 E-01	1,25E-01	0,20	1	
	Thickness of the aquifer layer (m)	d_q	3,00 E+00	3,00E+00	0,30	1	
	Solid material density in aquifer (kg/m3)	rhos_q	2,60 E+03	2,60E+03	0,05	1	
	Porosity of the aquifer zone	beta_q	2,00 E-01	2,00E-01	0,20	1	
	Fraction of land area in surface water	f_arw	8,15 E-03	8,15E-03	0,20	1	
	Average depth of surface waters (m)	d_w	5,00 E+00	5,00E+00	1,00	1	
	Suspended sedmnt in surface wtr (kg/m3)	rhob_w	8,00 E-01	8,00E-01	1,00	1	
	Suspended sdmnt deposition (kg/m2/d)	deposit	1,05 E+01	1,05E+01	0,30	1	(m/s)
	Thickness of the sediment layer (m)	d_d	5,00 E-02	5,00E-02	1,00	1	
	Solid material density in sediment (kg/m3)	rhos_d	2,60 E+03	2,60E+03	0,05	1	
	Porosity of the sediment zone	beta_d	2,00 E-01	2,00E-01	0,20	1	m/y
	Sediment burial rate (m/d)	bury_d	1,00 E-06	1,00E-06	5,00	1	3,65 E-04
	Ambient environmental temperature (K)	Temp	2,88 E+02	2,88E+02	0,02	1	(m/s)
	Surface water current in m/d	current_w	0,00 E+00	0,00E+00	1,00	1	0,00 E+00

Landscape properties (continued)

site name	CA Res (clay soil)		Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes
	Organic carbon fraction in upper soil zone	foc_s	2,78 E-02	2,50E-02	1,00	1	
	Organic carbon fraction in vadose zone	foc_v	2,50 E-02	2,50E-02	1,00	1	
	Organic carbon fraction in aquifer zone	foc_q	1,00 E-02	1,00E-02	1,00	1	
	Organic carbon fraction in sediments	foc_d	2,00 E-02	2,00E-02	1,00	1	
	Bndry lyr thickness in air above soil (m)	del_ag	5,00 E-03	5,00E-03	0,20	1	(m/s)
	Yearly average wind speed (m/d)	v_w	3,40 E+05	3,40E+05	0,24	1	3,94 E+00

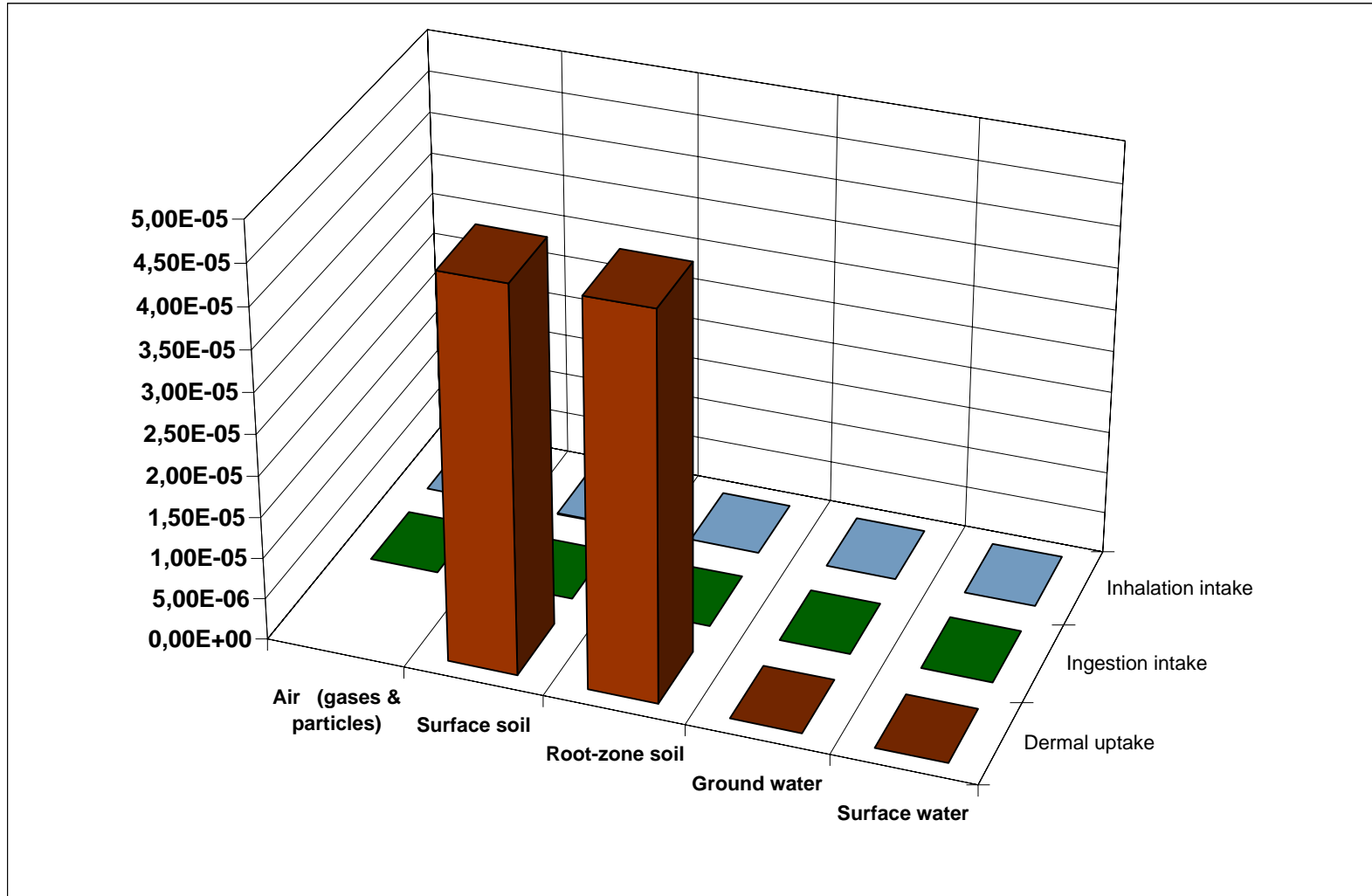
Human Exposure Factors

scenario	Male 19+		Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes
	Body weight (kg)	BW	7,87 E+01	7,87E+01	0,17	1	
	Surface area (m2/kg)	SAb	2,84 E-02	2,84E-02	0,10	1	
	Active breathing rate (m3/kg-h)	BRa	9,24 E-03	9,24E-03	0,54	1	
	Resting breathing rate (m3/kg-h)	BRr	5,35 E-03	5,35E-03	0,48	1	
	Fluid Intake (L/kg-d)	lfl	1,88 E-02	1,88E-02	0,37	1	
	Fruit and vegetable intake (kg/kg-d)	lfv	4,16 E-03	4,16E-03	0,20	1	
	Grain intake (kg/kg-d)	lg	2,74 E-03	2,74E-03	0,20	1	
	Milk intake (kg/kg-d)	lmk	3,61 E-03	3,61E-03	0,18	1	
	Meat intake (kg/kg-d)	lmt	2,90 E-03	2,90E-03	0,17	1	
	Egg intake (kg/kg-d)	legg	4,67 E-04	4,67E-04	0,18	1	
	Fish intake (kg/kg-d)	lfsh	2,75 E-04	2,75E-04	0,19	1	
	Soil ingestion (kg/d)	lsl	1,40 E-07	1,40E-07	2,00	1	
	Breast milk ingestion by infants (kg/kg-d)	lbn	0,00 E+00	0,00E+00	0,00	1	
	Inhalation by cattle (m3/d)	lnc	1,22 E+02	1,22E+02	0,30	1	
	Inhalation by hens (m3/d)	lnh	2,20 E+00	2,20E+00	0,30	1	
	Ingestion of pasture, dairy cattle (kg[FM]/d)	lvdc	8,50 E+01	8,50E+01	0,20	1	
	Ingestion of pasture, beef cattle (kg[FM]/d)	lvbc	6,00 E+01	6,00E+01	0,40	1	
	Ingestion of pasture by hens (kg[FM]/d)	lvh	1,20 E-01	1,20E-01	0,04	1	
	Ingestion of water by dairy cattle (L/d)	lwdc	3,50 E+01	3,50E+01	0,20	1	
	Ingestion of water by beef cattle (L/d)	lwbc	3,50 E+01	3,50E+01	0,20	1	
	Ingestion of water by hens (L/d)	lwh	8,40 E-02	8,40E-02	0,10	1	
	Ingestion of soil by cattle (kg/d)	lsc	4,00 E-01	4,00E-01	0,70	1	
	Ingestion of soil by hens (kg/d)	lsh	1,30 E-05	1,30E-05	1,00	1	

Human Exposure Factors (continued)

scenario	Male 19+		Value used	Mean value	Coeff. Var.	Adjustment	Notes
	Fraction of water needs from ground water	fw_gw	8,00 E-01	8,00E-01	0,10	1	
	Fraction of water needs from surface water	fw_sw	2,00 E-01	2,00E-01	0,10	1	
	Water irrigation rate applied to agr.soil (l/m ² -d)	R_irr	2,59 E+00	2,59E+00	1,00	1	
	Frctn frts & vgtbls that are exposed produce	fabv_grd_v	4,70 E-01	4,70E-01	0,10	1	
	Fraction of fruits and vegetables local	flocal_v	2,40 E-01	2,40E-01	0,70	1	
	Fraction of grains local	flocal_g	1,20 E-01	1,20E-01	0,70	1	
	Fraction of milk local	flocal_mk	4,00 E-01	4,00E-01	0,70	1	
	Fraction of meat local	flocal_mt	4,40 E-01	4,40E-01	0,50	1	
	Fraction of eggs local	flocal_egg	4,00 E-01	4,00E-01	0,70	1	
	Fraction of fish local	flocal_fsh	7,00 E-01	7,00E-01	0,30	1	
	Plant-air prttm fctr, particles, m ³ /kg[FM]	Kpa_part	3,30 E+03	3,30E+03	1,80	1	
	Rainsplash (mg/kg[plnt FM])/(mg/kg[dry soil])	rainsplash	3,40 E-03	3,40E-03	1,00	1	
	Water use in the shower (L/min)	Wshower	8,00 E+00	8,00E+00	0,40	1	
	Water use in the House (L/h)	Whouse	4,00 E+01	4,00E+01	0,40	1	
	Room ventilation rate, bathroom (m ³ /min)	VRbath	1,00 E+00	1,00E+00	0,40	1	
	Room ventilation rate, house (m ³ /h)	VRhouse	7,50 E+02	7,50E+02	0,30	1	
	Exposure time, in shower or bath (h/day)	ETsb	2,70 E-01	2,70E-01	0,60	1	
	Exposure time, active indoors (h/day)	ETai	8,00 E+00	8,00E+00	0,14	1	
	Exposure time, outdoors at home (h/day)	ETao	3,00 E-01	3,00E-01	0,14	1	
	Exposure time, indoors resting (h/day)	ETri	8,00 E+00	8,00E+00	0,14	1	
	Indoor dust load (kg/m ³)	dust_in	3,00 E-08	3,00E-08	0,40	1	
	Exposure frequency to soil on skin, (d/y)	EFsl	1,37 E+02	1,37E+02	0,60	1	
	Soil adherence to skin (mg/cm ²)	Slsk	5,20 E-01	5,20E-01	1,90	1	
	Ratio of indoor gas conc. to soil gas conc.	alpha_inair	1,00 E-04	1,00E-04	2,00	1	
	Exposure time swimming (h/d)	ETsw	5,00 E-01	5,00E-01	0,50	1	
	Exposure frequency, swimming (d/y)	EFsw	1,50 E+01	1,50E+01	4,00	1	
	Water ingestion while swimming (L/kg-h)	lsww	7,00 E-04	7,00E-04	1,00	1	
	Exposure duration (years)	ED	1,40 E+01	1,40E+01	1,15	1	
	Averaging time (days)	AT	2,56 E+04	2,56E+04	0,10	1	
Constants							
	Gas Constant (Pa-m ³ /mol-K)		8,31E+00	Rgas			

thisisacaltoxsheet



Exposure Pathway-Include-and-Exclude Toggles

All inhalation exposures indoors active	1	Contaminant transfer, air to plants surfaces	1
All inhalation exposures indoors resting	1	Cntmnnt. transfer, grnd. soil to plant surfaces	1
Inhalation exposure in shower/bath	1	Contamnnt. transfer, root soil to plant tissues	1
Inhalation exposures outdoors active	1	On-site grazing of animals	0
Inhalation of air particles indoors	1	Ingestion of home-grown exposed produce	0
Transfer of soil dust to indoor air	1	Ingestion of home-grown unexposed produce	0
Transfer of soil vapors to indoor air	1	Ingestion of home-grown meat	0
On-site inhalation by animals	0	Ingestion of home-grown milk	0
Use of ground water as tap water	0	Ingestion of home-grown eggs	0
Use of surface water as tap water	0	Ingestion of locally caught fish	0
Ingestion of tap water	1	Direct soil ingestion	1
Use of ground water for irrigation	0	Soil contact exposure at home or at work	1
Use of surface water for irrigation	0	Dermal exposure during shower/bath	1
Use of ground water for feeding animals	0	Dermal & ingstn exposures while swimming	0
Use of surface water for feeding animals	0	Breast-milk ingestion by infants	1

MEDIA AND CORRESPONDING POTENTIAL DOSES IN mg/kg-d (averaged over the exposure duration)

PATHWAYS	Air (gases & particles)	Surface soil	Root-zone soil	Ground water	Surface water	Totals	%
INHALATION	2,08E-08	9,73E-08	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	1,18E-07	0,13
INGESTION:							
Water				0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Exposed produce	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Unexposed produce			0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Meat	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Milk	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Eggs	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00
Fish					0,00E+00	0,00E+00	0,00
Soil		2,47E-08	2,48E-08			4,95E-08	0,05
Total ingestion	0,00 E+00	2,47 E-08	2,48 E-08	0,00 E+00	0,00 E+00	4,95 E-08	0,05
DERMAL UPTAKE		4,65E-05	4,65E-05	0,00E+00	0,00E+00	9,30E-05	99,82
Dose SUM	2,08E-08	4,66E-05	4,66E-05	0,00E+00	0,00E+00	9,32E-05	100,0

Breast milk concentration	Air (gases & particles)	Surface soil	Root-zone soil	Ground water	Surface water	total
	4,09 E-08	9,14 E-05	9,13 E-05	0,00 E+00	0,00 E+00	1,83 E-04
Infant dose	0,00 E+00	0,00 E+00	0,00 E+00	0,00 E+00	0,00 E+00	dose_bm 0,00 E+00

Ingestion dose used =>	4,95 E-08
Total dose used =>	9,32 E-05

ENVIRONMENTAL Media CONCENTRATIONS	Air (gases) mg/m³ (air)	Air (dust) mg/m³ (air)	Ground soil mg/kg(soil solids)	Root soil mg/kg(soil solids)	Ground water mg/L (pure)	Surface water mg/L (pure)
	0,00 E+00	1,74 E-07	2,78E+01	2,78 E+01	4,45 E-04	2,36 E-02

EXPOSURE MEDIA CONCENTRATIONS (averaged over the exposure duration)

EXPOSURE	Air (gases)	Air (dust)	Ground soil	Root soil	Ground water	Surface water
Indoor air (mg/m ³)	0,00 E+00	1,74 E-07	8,34 E-07	0,00 E+00	0,00 E+00	0,00 E+00
Bathroom air (mg/m ³)					0,00 E+00	0,00 E+00
Outdoor air (mg/m ³)	0,00 E+00	1,74 E-07				
Tap water (mg/L)					0,00 E+00	0,00 E+00
Exposed produce (mg/kg)	0,00 E+00	1,06 E-02	9,45 E-02	2,43 E+00	0,00 E+00	0,00 E+00
Unexposed produce (mg/kg)				1,03 E-02	0,00 E+00	0,00 E+00
Meat (mg/kg)	0,00 E+00	3,95 E-05	3,52 E-04	9,06 E-03	0,00 E+00	0,00 E+00
Milk (mg/kg)	0,00 E+00	5,60 E-05	4,98 E-04	1,28 E-02	0,00 E+00	0,00 E+00
Eggs (mg/kg)	0,00 E+00	7,90 E-08	7,03 E-07	1,81 E-05	0,00 E+00	0,00 E+00
Fish and seafood (mg/kg)						1,77 E+00
Household soil (mg/kg)			1,39 E+01	1,39 E+01		
Swimming water (mg/L)						4,81 E-02

PATHWAY CONTACT FACTORS (CR/BW*FI)

EXPOSURE Media	Units	Inhalation	Ingestion	Dermal
Indoor air (active)		7,39 E-02		
Indoor air (resting)		4,28 E-02		
Indoor air (shower/bath)		2,49 E-03		
Outdoor air (active)		2,77 E-03		
Tap water			1,88 E-02	1,85 E-04
Exposed produce			0,00 E+00	
Unexposed produce			0,00 E+00	
Meat			0,00 E+00	
Milk			0,00 E+00	
Eggs			0,00 E+00	
Fish and seafood			0,00 E+00	
Household soil			1,78 E-09	3,34 E-06
Swimming wtr			0,00 E+00	0,00 E+00

Dose ratios	inh-dose/Ns	ing-dose/Ns	drml-dose/Ns	inh-dose/Nq	ing-dose/Nq	drml-dose/Nq
	1,2 E-13	5,2 E-14	9,7 E-11	0,0 E+00	0,0 E+00	0,0 E+00

Time (y)	Total inhalation dose	Total ingestion dose	Total dermal dose	Total dose	Total dose from root soil	Total dose from ground water
3,01369863	1,2 E-07	5,0 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
4,41369863	1,2 E-07	5,0 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
5,81369863	1,2 E-07	5,0 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
7,21369863	1,2 E-07	5,0 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
8,61369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
10,01369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
11,41369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
12,81369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
14,21369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
15,61369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
17,01369863	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
Cumulative doses				0,476019585		
over ED by route, mg/kg	6,0 E-04	2,5 E-04	4,8 E-01	4,8 E-01	4,8 E-01	0,0 E+00
fraction	0,0013	0,0005	0,9982	1,0000	1,000	0,000
Average doses						
over ED by route, mg/kg-d	1,2 E-07	4,9 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
Maximum doses						
over ED by route, mg/kg-d	1,2 E-07	5,0 E-08	9,3 E-05	9,3 E-05	9,3 E-05	0,0 E+00
fraction	0,0013	0,0005	0,9982	1,0000	1,000	0,000

Max breast-milk dose 0,0 E+00 mg/kg-d

Max_ing	5,0 E-08
---------	----------

Off-site 1-h max X/Q (mol/m³-s)	5,8 E-04
Off-site Long-term X/Q	4,7 E-05
On-site Long-term X/Q	2,0 E-05
Off-site air dilution factor	1,0 E+00

Off-site pseudo Sa = 1,1 E-02 mol/day
 bbb2 = 1,3 E-04 bbb4 = 3,6 E+03
 bbb3 = 7,1 E-02 bbb5 = 9,1 E+03
fugacity off-site fugacity on-site

Off-site air concentration (gases)	0,0 E+00	mg/m³	2,9 E-05	2,9 E-05	air
Off-site concentration (particles)	1,7 E-07	mg/m³			
Off-site surface-water concentrtn.	9,1 E-05	mg/L	1,2 E-06	3,1 E-04	water
Off-site surface soil concentration	1,1 E-01	mg/kg	1,1 E-06	2,9 E-04	ground soil
Off-site root-soil concentration	1,1 E-01	mg/kg	1,1 E-06	2,9 E-04	root soil

Off-site ground-water dilution	0
--------------------------------	---

w	erf(w)
0,0 E+00	0,0 E+00
Dispsn redctn	1,0 E+00
decay reductn.	1,0 E+00

Darcy velocity of water	v_darc	1,0 E-01 m/d
Contaminant velocity	Vc	1,0 E-04 m/d
Trnsvrs. disprsn. coeff. (water)	D_T	5,0 E-02 m ² /d
Trnsvrs. disprsn. coeff. (chem)	D_Tc	1,8 E-05 m ² /d
Dispersion depth	dzz	3,0 m
Thickness of aquifer	d_q	3 m
Transverse dispersivity (chem)	alpha_t	1,8 E-01 m
Width of the contaminated area	Y	1000 m
Distrance to off-site location	X	0 m
Mass tranfer rate, aquifer - out	T_qo	1,0 E-07 1/d

Calculated Properties

fugacity capacity of pure air	0,00E+00	Zair		
fugacity capacity of pure water	1,00E+00	Zwater		
height of the air compartment (m)	5,53E+01	d_a		
evapotranspiration of water from soil (m/d)	6,96E-04	evapotrans	2,54 E-01	m/y
transpiration of water from plants (m/d)	6,96E-04	transpire	2,54 E-01	m/y
Total surface water runoff (m/d)	2,80E-04	outflow	1,02 E-01	m/y
bndry lyr thickness in air above wtr (m)	1,22E-03	del_aw		
bndry lyr thickness in wtr below air (m)	2,75E-04	del_wa		
diffusion length in surface soil (m)	1,37E-02	del_g		
diffusion length in upper soil (m)	6,68E-01	del_s		
Thickness of the root-zone soil layer	2,00E+00	d_s		
wtr-side bndry lyr thickness with sed (m)	2,00E-02	del_wd		
sed-side bndry lyr thickness with wtr (m)	4,65E-04	del_dw		
Initial concentration in soil (mol/m ³)	4,84E-01	Cs0		
Initial conc. in the vadose zone (mol/m ³)	0,00E+00	Cv0		
Sediment resuspension rate (kg/m ² -d)	1,05E+01	resuspend		
soil particle density; surface layer(kg/m ³)	2,60E+03	rhos_g		
soil particle density; vadose layer(kg/m ³)	2,60E+03	rhos_v		
Initial inventory in groundwater zone	0,00E+00	Nq0		
diffusion lag time in skin (h)	2,71E-01	tlag		
Skin/water partition coefficient	6,50E-01	Km		
Reaction rate constant in air (1/d)	0,00E+00	Ra		
Reaction rate constant, ground soil (1/d)	0,00E+00	Rg		
Reaction rate constant, root-zone soil (1/d)	0,00E+00	Rs		
Reaction rate constant, vadose-zone soil (1/d)	0,00E+00	Rv		
Reaction rate constant, ground water (1/d)	0,00E+00	Rq		
Reaction rate constant, surface water (1/d)	0,00E+00	Rw		
Reaction rate constant, sediment (1/d)	0,00E+00	Rd		
Reaction rate constant in leaf surface (1/d)	0,00E+00	Rls		
Continuous source term to air (mol/d)	0,00E+00	Sa		
Root lipid in root-zone soil(m ³ (organic)/m ³ (soil))	2,79E-03	RootLipid		

Leaf wet mass per area of soil (kg/m ²)	1,15E+00	bm_leaf		
Wood and stem wet mass per area of soil(kg/m ²)	2,69E+01	bm_stem		
Root wet mass per area of root-zone soil(kg/m ²)	1,11E+01	bm_root		
Interception fraction for dry deposition on leaf	7,29E-01	IF_d		
Volume of the stem (m ³)	3,21E+04	Vstm		
stomatal conductance (m/d)	n/a	mtc_s		
cuticular conductance (m/d)	n/a	mtc_c		
air side conductance over leaf (m/d)	n/a	mtc_a		
cuticle water permeance (m/d)	n/a	mtc_l		
conductance air/cuticle (m/d)	n/a	mtc_ct		
conductance air/stomata (m/d)	n/a	mtc_st		
root-soil / stem transfer factor	2,06E-07	x_rs		
stem / leaf transfer factor	5,37E-02	x_sl		
leaf / stem transfer factor	5,06E-02	p_ls		
stem / root-soil transfer factor	2,69E-03	p_sr		

Warnings

- 0 Ground soil depth greater than 2 cm
- 0 Root-zone soil too shallow for accuracy of diffusion model (must be at least 1.4*del_s)
- 0 Starting time cannot be 0 and should be greater than 365 day
- 0 Recharge velocity is negative
- 0 Recharge velocity is too large accuracy of model
- 0 Concentration in root-zone soil-water <0 or exceeds solubility when there are non-zero sources
- 0 Concentration in vadose-zone soil-water <0 or exceeds solubility when there are non-zero sources
- 0 Concentration in groundwater exceeds solubility or < 0
- 0 Concentration in surface water exceeds solubility
- 0 Concentration in sediment-zone water exceeds solubility
- 0 Exposure time indoors and outdoors at home or at work exceeds 24 h
- 0 Risk from breast milk exposure is large compared to other ingestion pathways
- 0 Hazard from breast milk exposure is large compared to other ingestion pathways
- 0 Fraction of water from groundwater plus fraction from surface >1
- 0 total

Fugacity (Pa)

Air	fa	2,91E-05
Cuticle	fc	2,94E-05
Leaf	fl	5,41E-02
Ground	fg	2,85E-04
Root	fs	2,86E-04
Vadose	fv	1,48E-08
Water	fw	3,15E-04
Sediment	fd	3,15E-04
Groundwater	fq	5,94E-06

Compartment Volumes (m³)

Va	5,5 E+07	Air compartment
Vc	1,46E+01	Cuticle compartment
Vl	1,38E+03	Leaf compartment
Vg	9,9 E+03	Ground-soil compartment
Vs	2,0 E+06	Root-zone compartment
Vv	5,0 E+06	Vadose compartment volume
Vw	4,1 E+04	Water compartment
Vd	4,1 E+02	Sediment compartment
Vq	3,0 E+06	aquifer compartment

rhob_c 0,01140873 Volume fraction of atmospheric particles on cuticle (m³/m³)**Fugacity Capacities (mol/m³ per Pa)**

phi

#VALUE!

Zap	3,38E+03	fugacity capacity of air particles in mol/m ³ [s]-Pa
Zgp	3,38E+03	fugacity capacity of ground soil compartment particles in mol/m ³ [s]-Pa
Zsp	3,38E+03	fugacity capacity of root zone compartment particles in mol/m ³ [s]-Pa
Zvp	3,38E+03	fugacity capacity of vadose zone compartment particles in mol/m ³ [s]-Pa
Zwp	3,38E+03	fugacity capacity of suspended sediment in surface water in mol/m ³ [s]-Pa
Zdp	3,38E+03	fugacity capacity of bottom sediment particles in mol/m ³ [s]-Pa
Zqp	3,38E+03	fugacity capacity of aquifer solids in mol/m ³ -Pa
Zleaftotal	8,97E-01	fugacity capacity of the total leaf compartment in mol/Pa/m ³
Za	8,00E-08	fugacity capacity of air compartment in mol/m ³ -Pa
Zc	3,86E+01	fugacity capacity of leaf surface compartment in mol/Pa/m ³
Zl	5,00E-01	fugacity capacity of internal leaf compartment in mol/Pa/m ³
Zg	1,69E+03	fugacity capacity of ground soil compartment in mol/m ³ -Pa
Zs	1,69E+03	fugacity capacity of root-soil compartment in mol/m ³ -Pa
Zv	1,69E+03	fugacity capacity of vadose-zone compartment in mol/m ³ -Pa
Zw	2,04E+00	fugacity capacity of water compartment in mol/m ³ -Pa
Zd	2,70E+03	fugacity capacity of sediment compartment in mol/m ³ -Pa
Zq	2,70E+03	fugacity capacity of aquifer compartment in mol/m ³ -Pa

Diffusion coefficients in m ² /d		Boundary-layer thickness (del)	Fugacity mass-transfer coefficients mol/Pa-m ² -d		Overall intercompartment mass transfer rate constants (1/day)			Compartment Interface		
Compartment Phase	Compartment		Y	one-sided	both-sides	Diffusion	Advection		T	
Dair	6,40E-01	Da	0,00E+00	1,22E-03	0,00E+00	0,00E+00	8,19E-02	8,19E-02	air-water, T_aw	
Dwater	6,60E-05	Dw	3,24E-05	2,75E-04	2,40E-01	0,00 E+00		0,00E+00	water-air, T_wa	
Dair_g	2,50E-03	Dg	1,20E-04	5,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,32E+00	3,32E+00	air-ground, T_ag	
Dwater_g	1,00E-05			1,37E-02	1,48E+01		2,36E-06	2,36E-06	ground-air, T_ga	
Dair_s	2,50E-03	Ds	1,20E-04	1,37E-02	1,48E+01	2,97E-01	7,10E-06	1,76E-02	ground-soil, T_gs	
Dwater_s	1,00E-05			6,68E-01	3,03E-01		0,00E+00	8,80E-05	soil-ground, T_sg	
Dair_v	2,50E-03	Dv	1,20E-04	6,68E-01	3,03E-01	1,52E-01	3,55E-08	3,55E-08	soil-vadose, T_sv	
Dwater_v	1,00E-05			6,68E-01	3,03E-01				vadose-soil, T_vs	
Dwater_d	7,72E-06	Dd	2,85E-09	2,00E-02	6,73E-03	4,79E-03	1,34E+00	1,34E+00	water-sediment, T_wd	
				4,65E-04	1,66E-02		1,01E-01	1,01E-01	sediment-water, T_dw	
							6,69E+00	6,69E+00	air-cuticle, T_ac	
							2,48E-03	2,48E-03	cuticle-air, T_ca	
								0,00E+00	air - leaf T_al	
								0,00E+00	leaf-air, T_la	
								0,00E+00	cuticle-leaf, T_cl	
								0,00E+00	leaf-cuticle, T_lc	
aaa1	1,14E+01		C0_1	9,60E+05			4,98E-02	4,98E-02	cuticle-ground T_cg	
aaa2	5,47E-03		C0_2	0,00E+00		aaa6	2,74E-03	2,74E-03	leaf-ground T_lg	
aaa3	2,69E-08		S_1	0,00E+00		aaa7	2,55E-03	2,55E-03	leaf-soil, T_ls	
aaa4	0,00E+00		S_2	0,00E+00		aaa8	2,06E-07	2,06E-07	soil-leaf, T_sl	
aaa5	4,99E-03		AA	1,76E-04		bbb4	0,00E+00	0,00E+00	ground-cuticle, T_gc	
bbb1	0,00E+00		BB	0,00E+00		bbb5	0	1,42E-08	1,42E-08	vadose-aquifer, T_vq
bbb2	0,00E+00		CC	3,55E-08		Lam1	3,42E-07	2,50E-05	2,50E-05	sediment-out, T_do
bbb3	0,00E+00		DDD	1,42E-08				7,82E+01	7,82E+01	air-out, T_ao
ccc1	5,29E-03		Gam1	-1,42E-08				3,93E-05	3,93E-05	ground-water, T_gw
ccc2	0,00E+00		Gam2	-1,76E-04				6,86E-03	6,86E-03	water-out, T_wo
ccc3	8,80E+01		Gm1mGm2	1,76E-04						
ccc4	0,00E+00		Gam1p	1,76E-04						
ccc5	9,70E+00		Gam2p	1,42E-08						
ccc6	2,74E-03		Gm1mGm2p	1,76E-04						

Source terms (g/d)

air	0,0 E+00	ground	0,0 E+00	water	0,0 E+00
-----	----------	--------	----------	-------	----------

Compartment		Loss-rate constant	Total Inventory	Concentration	Mass distribution	Gains	Losses	Residence Time
Name		(1/day)	(moles)	(mol/m3)	%	g/d	g/d	(days)
		L	N	C				
air	a	8,83E+01	1,29E-04	2,33E-12	0,00%	8,51E-01	8,51E-01	1,13E-02
leaf	l	5,29E-03	3,73E+01	2,70E-02	0,00%	1,48E+01	1,48E+01	1,89E+02
cuticle	c	5,22E-02	1,65E-02	1,13E-03	0,00%	6,45E-02	6,45 E-02	1,91E+01
ground-soil	g	1,76E-02	4,79E+03	4,83E-01	0,47%	6,32E+03	6,32E+03	5,67E+01
root-soil	s	8,82E-05	9,59E+05	4,83E-01	94,72%	6,32E+03	6,33E+03	1,13E+04
vadose-zone	v	1,42E-08	1,24E+02	2,51E-05	0,01%	2,55E+00	1,32E-04	7,04E+07
surface water	w	1,35E+00	2,62E+01	6,42E-04	0,00%	2,64E+03	2,64E+03	7,43E-01
sediment	d	1,01E-01	3,47E+02	8,52E-01	0,03%	2,63E+03	2,63E+03	9,91E+00
aquifer	q	1,00E-05	4,82E+04	1,61E-02	4,76%	1,32E-04	3,61E+01	1,00E+05

Mass Flows (g/d)

air-ground	3,20E-02	Tag*Na*MW	ground-water	1,41E+01	Tgw*Ng*MW
air-water	7,89E-04	Taw*Na*MW	ground-trnsfrm	0,00E+00	Rg*Ng*MW
air-out	7,54E-01	Tao*Na*MW	soil-ground	6,32E+03	Tsg*Ns*MW
air-leaves	0,00E+00	Tal*Na*MW	soil-leaves	1,48E+01	Tsl*Ns*MW
air-leaf surfaces	6,45E-02	Tac*Na*MW	soil-vadose	2,55E+00	Tsv*Ns*MW
air-transform	0,00E+00	Ra*Na*MW	soil-trnsfrm	0,00E+00	Rs*Ns*MW
leaves-air	0,00E+00	Tla*NI*MW	vadose-aquifer	1,32E-04	Tvq*Nv*MW
leaves-leaf surfaces	0,00E+00	Tlc*NI*MW	vadose-trnsfrm	0,00E+00	Rv*Nv*MW
leaves-ground	7,66E+00	Tlg*NI*MW	aquifer-removal	3,61E+01	Lq*Nq*MW
leaves-soil	7,13E+00	Tls*NI*MW	water-air	0,00E+00	Twa*Nw*MW
leaf-surface - air	3,06E-03	Tca*Nc*MW	water-sediment	2,63E+03	Twd*Nw*MW
leaf-surfaces - leaves	0,00E+00	Tcl*Nc*MW	water-out	1,35E+01	Two*Nw*MW
leaf-surfaces - ground	6,15E-02	Tcg*Nc*MW	water-trnsfrm	0,00E+00	Rw*Nw*MW
leaf surfaces-trnsfrm	0,00E+00	Rls*Nc*MW	sediment-water	2,62E+03	Tdw*Nd*MW
ground-air	8,48E-01	Tga*Ng*MW	sedmnt-trnsfrm	0,00E+00	Rd*Nd*MW
ground-leaf surface	0,00E+00	T_gc*Ng*MW	sediment-out	6,50E-01	Tdo*Nd*MW
ground-soil	6,31E+03	Tgs*Ng*MW			

Time-dependent Compartment Inventories

		Plot	
Time (y)	Time (d)	Ns(observed)	Nq
3,0136986	1100	9,6 E+05	1,5 E+04
4,4136986	1611	9,6 E+05	2,1 E+04
5,8136986	2122	9,6 E+05	2,8 E+04
7,2136986	2633	9,6 E+05	3,5 E+04
8,6136986	3144	9,6 E+05	4,1 E+04
10,013699	3655	9,6 E+05	4,8 E+04
11,413699	4166	9,6 E+05	5,5 E+04
12,813699	4677	9,6 E+05	6,2 E+04
14,213699	5188	9,6 E+05	6,8 E+04
15,613699	5699	9,6 E+05	7,5 E+04
17,013699	6210	9,6 E+05	8,2 E+04
		Ns(0)[total]	
		9,6 E+05	
		const_sat	
		-114,5614254	
		Ns(sat)	
		3,4E+08	
		Ns(total)	Nv(@Ns=sat)
t*	Ns(@Ns>=Nsat)		
0	8,34 E+05	9,6E+05	1,3E+04
0	9,01 E+05	9,6E+05	6,1E+03
0	9,01 E+05	9,6E+05	6,1E+03
0	9,01 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,01 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,2E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,3E+03
0	9,00 E+05	9,6E+05	6,3E+03

