

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS



ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΥΔΑΤΙΝΩΝ ΠΟΡΩΝ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΕΥΑΙΣΘΗΣΙΑΣ
ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΕΥΤΡΟΦΙΣΜΟΥ

Νικόλαος Παπαγεωργίου

Επιβλέπων:

Κωνσταντίνος Νουτσόπουλος, Αναπληρωτής Καθηγητής

Αθήνα, Μάρτιος 2021

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας, θέλω να ευχαριστήσω θερμά τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Κωνσταντίνο Νουτσόπουλο, για την ανάθεσή της και την συνεχή καθοδήγησή του καθόλη τη διάρκεια εκπόνησής της.

Επίσης, ευχαριστώ τον Χρήστο Ιωαννίδη για την πολύτιμη υλική και πνευματική βοήθεια, που μου έδωσε καθόλη την διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας.

Ευχαριστώ όλους τους συμφοιτητές και φίλους μου για όλα τα χρόνια που περάσαμε μαζί, τα μαθήματα και τις εργασίες, για να καταλήξουμε τώρα εδώ στο τελευταίο βήμα.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου και τα αδέρφια μου τόσο για την συμπαράστασή τους, όσο και για την ουσιαστική βοήθεια και συμβολή τους κατά την διάρκεια όλων των χρόνων μου στο Πολυτεχνείο.

Αθήνα, Μάρτιος 2021

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή.....	1
2	Βιβλιογραφική ανασκόπηση	4
2.1	Μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού.....	4
2.1.1	Γενική ταξινόμηση μαθηματικών μοντέλων ποιότητας νερού	4
2.1.2	Ταξινόμηση μοντέλων με βάση το υδάτινο σώμα	7
2.1.3	Εμπορικά λογισμικά και μοντέλα ποιότητας νερού	9
2.2	Ανάλυση ευαισθησίας	13
2.2.1	Εισαγωγή.....	13
2.2.2	Ταξινόμηση μεθόδων ανάλυσης ευαισθησίας.....	14
2.2.3	Στόχος της ανάλυσης ευαισθησίας.....	15
2.2.4	Ανάλυση ευαισθησίας και ανάλυση αβεβαιότητας.....	15
2.2.5	Ανάλυση ευαισθησίας και βαθμονόμηση μοντέλων	16
2.2.6	Μέθοδοι ανάλυσης σταθερών διαταραχών.....	16
2.2.7	Μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλής αρχής διαταραχών	18
2.2.8	Μέθοδοι αναλύσης με συσχέτιση ή παλινδρόμηση	20
2.2.9	Μέθοδοι ανάλυσης τοπικής ευαισθησίας (RSA).....	21
2.2.10	Μέθοδοι ανάλυσης διασπορών	22
3	Περιγραφή μοντέλου	26
3.1	Περιοχή μελέτης	26
3.2	Δομή μοντέλου ευτροφισμού.....	28
3.3	Φορτία	32
3.4	Αρχικές και οριακές συνθήκες.....	33
3.5	Διεργασίες - Τιμές παραμέτρων	35
3.5.1	Θερμοκρασία	35
3.5.2	Ηλιοφάνεια - Φωτοπερίοδος.....	36
3.5.3	Φυτοπλαγκτόν	38
3.5.4	Φώσφορος	44
3.5.5	Άζωτο	48
3.5.6	Οργανικός άνθρακας	52
3.5.7	Διαλυμένο οξυγόνο.....	53
4	Εφαρμογές μοντέλου προσομοίωσης	56
4.1	Συνολική περιγραφή μαθηματικού μοντέλου ποιότητας νερού	56
4.2	Μέθοδοι ανάλυσης ευαισθησίας.....	59

4.2.1 Εισαγωγή.....	59
4.2.2 Μέθοδος «one-at-a-time».....	60
4.2.3 Μέθοδος FAST	74
4.2.4 Μέθοδος Morris.....	88
4.2.5 Μέθοδος διασπορών (κλασικοί δείκτες Sobol).....	93
4.3 Αξιολόγηση μεθόδων.....	94
4.3.1 Σύγκλιση μεθόδων	94
4.3.2 Σύγκριση μεθόδων.....	102
5 Συμπεράσματα.....	109
Αναφορές.....	116

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 3-1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά της λίμνης.....	28
Πίνακας 3-2: Όγκος στοιχείων πλήρους μίξης της λίμνης.....	30
Πίνακας 3-3: Υδροδυναμικά μεγέθη για την προσομοίωση του μοντέλου	31
Πίνακας 3-4: Φορτία ρύπων από επιφανειακές απορροές	32
Πίνακας 3-5: Ποσοστά φόρτισης για κάθε στοιχείο πλήρους μίξης	33
Πίνακας 3-6: Συνολικά φορτία προσομοίωσης	33
Πίνακας 3-7: Αρχικές συνθήκες προσομοίωσης.....	34
Πίνακας 3-8: Οριακές συνθήκες προσομοίωσης.....	34
Πίνακας 4-1: Αρχικές τιμές και διαστήματα τιμών των παραμέτρων.....	57
Πίνακας 4-2: Συνολικά φορτία προσομοίωσης	58
Πίνακας 4-3: Αρχικές συνθήκες προσομοίωσης.....	58
Πίνακας 4-4: Οριακές συνθήκες προσομοίωσης.....	59
Πίνακας 4-5: Δείκτης σχετικότητας Rel, σημαντικών και μη – σημαντικών παραμέτρων για κάθε μέθοδο	106
Πίνακας 4-6: Συντελεστής θέσης PF, μεταξύ δύο μεθόδων	108
Πίνακας 4-7: Αριθμός επαναλήψεων μοντέλου, για κάθε μέθοδο	108

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 3-1: Διάταξη και διαχωρισμός της λίμνης που δημιουργήθηκε για το μοντέλο.....	27
Σχήμα 3-2: Εποχική διακύμανση της θερμοκρασίας T.....	36
Σχήμα 3-3: Εποχική διακύμανση της ακτινοβολίας I ₀	37
Σχήμα 3-4: Εποχική διακύμανση της φωτοπεριόδου F.....	38
Σχήμα 4-1: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος «one-at-a-time»	64
Σχήμα 4-2: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος «one-at-a-time»	64
Σχήμα 4-3: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος «one-at-a-time»	65
Σχήμα 4-4: Ιεράρχηση παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος «one-at-a-time»	66
Σχήμα 4-5: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος «one-at-a-time»	67
Σχήμα 4-6: Ιεράρχηση παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος «one-at-a-time».....	67
Σχήμα 4-7: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»	68
Σχήμα 4-8: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»	69
Σχήμα 4-9 Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»	69
Σχήμα 4-10: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»	70
Σχήμα 4-11: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος «one-at-a-time»	71
Σχήμα 4-12: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος «one-at-a-time»	71
Σχήμα 4-13: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος «one-at-a-time»	72
Σχήμα 4-14: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος «one-at-a-time»..	73
Σχήμα 4-15: Ιεράρχηση παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος «one-at-a-time»	73
Σχήμα 4-16: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST.....	76
Σχήμα 4-17: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST	77
Σχήμα 4-18: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος FAST	78
Σχήμα 4-19: Ιεράρχηση παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος FAST	78
Σχήμα 4-20: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος FAST.....	79

Σχήμα 4-21: Ιεράρχηση παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος FAST	79
Σχήμα 4-23: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος FAST	81
Σχήμα 4-24: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος FAST	82
Σχήμα 4-25: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος FAST	83
Σχήμα 4-26: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος FAST	84
Σχήμα 4-28: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος FAST.....	85
Σχήμα 4-29: Ιεράρχηση παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος FAST	86
Σχήμα 4-31: Ιεράρχηση παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος FAST	87
Σχήμα 4-30: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος FAST	87
Σχήμα 4-32: Διάγραμμα διασποράς (μ, σ), μέθοδος Morris για 20 παραμέτρους	90
Σχήμα 4-33: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris	91
Σχήμα 4-34: Διάγραμμα διασποράς (μ, σ), μέθοδος Morris για 13 παραμέτρους	92
Σχήμα 4-35: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris	93
Σχήμα 4-36: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST	99
Σχήμα 4-37: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris	100
Σχήμα 4-38: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris	101
Σχήμα 4-39: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST και «one-at-a-time»	103
Σχήμα 4-40: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους Morris και «one-at-a-time»	103
Σχήμα 4-41: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST και Morris.....	104
Σχήμα 4-42: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST, Morris και «one-at-a-time»	105

Περίληψη

Στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη της σημαντικότητας των διεργασιών, οι οποίες περιλαμβάνονται στο φαινόμενο του ευτροφισμού για τους υδάτινους αποδέκτες. Η μελέτη αποσκοπεί στην εύρεση των δεικτών σημαντικότητας κάθε διεργασίας, στην ιεράρχησή τους με σειρά σημαντικότητας, αλλά και στην διαλογή τους για τον αποκλεισμό των μη – σημαντικών. Πραγματοποιείται με την ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου ποιότητας νερού, το οποίο περιλαμβάνει όλες τις φυσικές, βιολογικές και χημικές διεργασίες που επιτελούνται σε ένα υδάτινο σώμα. Προσομοιώνει, μεταξύ άλλων, την ανάπτυξη και την φθορά των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών, την νιτροποίηση, τον επαναερισμό, την μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο, την οξείδωση του οργανικού άνθρακα, την μείωση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας λόγω αιωρούμενων στερεών και φυσικής θολότητας κ.ά. Στις μεταβλητές εξόδου, περιλαμβάνονται ρύποι και ποιοτικά χαρακτηριστικά όπως: το φυτοπλαγκτόν (σε όρους χλωροφύλλης), το αμμωνιακό και οξειδωμένο άζωτο ή νιτρικά (NH και NO αντίστοιχα), τον φώσφορο (P, οργανικό και ανόργανο), τον οργανικό άνθρακα (C), το διαλυμένο οξυγόνο (DO) και την διαφάνεια του νερού (σε όρους μέτρων Secchi Disk, SD). Ο πραγματικός χρόνος προσομοίωσης του μοντέλου είναι τρία χρόνια, για να έχει επέλθει η κατάλληλη σταθερότητα των τιμών, ενώ παράλληλα λαμβάνει υπόψη και τα υδροδυναμικά χαρακτηριστικά της λίμνης για την οποία διεκπεραιώθηκε η προσομοίωση. Το μοντέλο, όπως αναφέρθηκε, περιγράφει όλες τις διεργασίες που περιλαμβάνει το φαινόμενο του ευτροφισμού. Οι διεργασίες αυτές, χαρακτηρίζονται από παραμέτρους με κατάλληλες τιμές και με τα αντίστοιχα εύρη τιμών τους, για τις οποίες πραγματοποιείται η μελέτη σημαντικότητας μέσω μεθόδων ανάλυσης ευαισθησίας.

Η ανάλυση ευαισθησίας διεκπεραιώνεται μέσω τεσσάρων μεθόδων: της μεθόδου «one-at-a-time», της μεθόδου FAST, της μεθόδου Morris και της μεθόδου Sobol. Κατά την εφαρμογή των μεθόδων στο μοντέλο, μεταβάλλονται οι παράμετροι που αναφέρθηκαν, με στόχο την αναγνώριση τυχόν μεταβολών στα μεγέθη εξόδου του μοντέλου. Τελικά για κάθε μεταβλητή υπολογίζονται: οι δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων, η ιεράρχησή τους με σειρά σημαντικότητας, καθώς και η διαλογή τους, με στόχο να αποκλειστούν οι διεργασίες που δεν έχουν επιρροή στο φαινόμενο. Επιπλέον διερευνάται η σύγκλιση όλων των μεθόδων με αντίστοιχους δείκτες, ενώ πραγματοποιείται και σύγκριση, η οποία βασίζεται σε κατάλληλα

κριτήρια τα οποία είναι εφαρμόσιμα για όλες τις μεθόδους. Τα κυριότερα συμπεράσματα που προέκυψαν από την ανάλυση ευαισθησίας για τις διεργασίες του μοντέλου, μέσω και των τεσσάρων μεθόδων, είναι τα εξής:

- Σημαντικότερες διεργασίες για το μοντέλο ευτροφισμού, με την συμφωνία όλων των μεθόδων, αναδεικνύονται: η φθορά και η ανάπτυξη των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών, η μείωση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας λόγω αιωρούμενων στερεών στο εσωτερικό της υδάτινης στήλης και ο ρυθμός με τον οποίο καταναλώνεται το άζωτο για την ανάπτυξη των μικροοργανισμών. Επιπλέον υπάρχουν και άλλες σημαντικές διεργασίες, με την συμφωνία δύο μεθόδων, όπως η νιτροποίηση, η μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο, η οξείδωση του οργανικού άνθρακα και η μείωση της ακτινοβολίας λόγω φυσικής θολότητας. Η ολοκλήρωση της μεθόδου Morris και για τις υπόλοιπες μεταβλητές εξόδου κρίνεται απαραίτητη, για την επαλήθευση ή για τον αποκλεισμό των διεργασιών αυτών.
- Το μοντέλο ευτροφισμού της διπλωματικής εργασίας, χαρακτηρίζεται κυρίως από μη – γραμμική συμπεριφορά, καθώς εμφανίζονται αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων του για όλες τις μεταβλητές εξόδου.
- Η σύγκριση μεταξύ των μεθόδων παρουσιάζει την καλή συμφωνία μεταξύ των μεθόδων FAST και Morris, ενώ αναδεικνύει και την ανάγκη για ολοκλήρωση της ανάλυσης της τελευταίας για όλες τις υπόλοιπες μεταβλητές του μοντέλου. Με αυτόν τον τρόπο όπως αναφέρθηκε, μπορεί να εμφανιστούν και άλλες σημαντικές διεργασίες για το μοντέλο. Παράλληλα, η εφαρμογή εναλλακτικών μεθόδων για το ίδιο μοντέλο, επιτρέπει την αξιολόγηση και την σύγκρισή τους με καλύτερο τρόπο, διότι αναγνωρίζονται πεδία συμφωνίας αυτών, ενώ αποκλείονται τα μεμονωμένα περιστατικά που προκύπτουν από κάθε μέθοδο.
- Η σύγκλιση για τις μεθόδους είναι σε σχετικά καλό επίπεδο, δεδομένου και των χρονικών απαιτήσεων για την διεκπεραίωσή τους, το οποίο μας επιτρέπει την χρήση των αποτελεσμάτων τους με μεγάλο βαθμό εμπιστοσύνης. Εξάιρεση αποτελεί η μέθοδος Sobol, για την οποία δεν επιτεύχθηκε η σύγκλισή της. Θα πρέπει να αναφερθεί, ότι για όλες τις μεθόδους απαιτήθηκαν μεγαλύτερα δείγματα από τα προτεινόμενα της βιβλιογραφίας. Επομένως, η επιλογή των μεθόδων θα πρέπει να γίνεται από τον μελετητή εφόσον έχουν αναγνωριστεί: ο στόχος της μελέτης, οι

χρονικοί περιορισμοί της, καθώς και τα διαθέσιμα δεδομένα για τις παραμέτρους, που θα χρησιμοποιηθούν από το μοντέλο.

Λέξεις κλειδιά

Μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού, μοντέλο προσομοίωσης ευτροφισμού, χλωροφύλλη, διαλυμένο οξυγόνο, ανάλυση ευαισθησίας, εργαλειοθήκη SAFE, μέθοδος FAST, μέθοδος Morris, δείκτες σημαντικότητας, σύγκλιση

Abstract

The goal of this dissertation is the study of the significance of the eutrophication processes in the various types of water bodies, such as lakes and reservoirs. This study aims to identify the importance of each process present, rank the processes based on their significance and exclude the less or non-influential ones based on their screening. A water quality model which includes all the physical, chemical and biological processes that take place in any water body is deployed. This model, among other things, simulates the growth and decay of photosynthetic microorganisms; the nitrification; the reaeration; the conversion of organic phosphorus to inorganic; the oxidation of organic carbon; the reduction of the direct sunlight due to suspended solids and natural turbidity etc. The model outputs include pollutants and quality characteristics such as: phytoplankton (in the form of chlorophyll, A); ammoniacal and oxidized nitrogen or nitrates (NH and NO respectively); the phosphorus (P) (organic and inorganic); organic carbon (C); Dissolved oxygen (DO) and the transparency of water (Secchi Disk, SD meters). The simulation covers 3 years of real time in order for the values to reach an equilibrium while taking into account the hydrodynamic characteristics of the lake used in the simulation. As mentioned above, the model describes all the processes that are part of eutrophication and sensitivity analysis methodology is deployed to investigate the significance of the processes that are part of the eutrophication.

Sensitivity analysis is performed via four different methods: the “one-at-a-time” method, the FAST method, the Morris method and the Sobol method. The parameters are adjusted upon application of the aforementioned methods to detect any changes in the model outputs. Lastly, for every parameter used the following are calculated: their sensitivity indices, their ranking based on their significance, as well as their screening so that the processes with no effect on the phenomenon are excluded. In addition, the convergence of all methods with the corresponding indices is investigated, while they are being compared based on appropriate criteria applicable on all the methods used. The most important conclusions of the sensitivity analysis are the following:

- The most important processes of the model, based on all the methods used, are: the growth and decay of the photosynthetic microorganisms, the reduction of the direct sunlight due to the suspended solids in the water column as well as the rate of

nitrogen consumed for the growth of the microorganisms. In addition, there are more important processes, based on two methods, such as nitrification, the conversion of organic phosphorus to inorganic, the oxidation of organic carbon and the reduction of the direct sunlight due to natural turbidity. The application of the Morris method is crucial for the rest of the outputs, for verification or exclusion of these processes.

- The eutrophication model is mostly non-linear, as there is significant interaction between the parameters used for all outputs.
- There is a good agreement between the FAST and Morris methods, while the need of executing the latter for all the parameters used in the model is highlighted. The use of different methods on the same model allows for a proper review and comparison among them while it reveals common ground or by chance isolated extremes.
- The convergence of the methods is relatively good, despite the time requirements, providing us with results of high level of confidence. The only exception would be the Sobol method for which convergence wasn't accomplished. It should be noted that all methods used, required larger sample sizes than the ones suggested in the literature. Therefore, selection of the appropriate method is to be done only after the scope of the study, the time constraints, as well as the available data for the model's parameters have been identified.

Keywords

Water quality models; Eutrophication simulation model; SAFE toolbox; chlorophyll; Dissolved oxygen; Sensitivity analysis; FAST method; Morris method; Sensitivity indices; Convergence

1 Εισαγωγή

Ένα βασικό θέμα στην επιστήμη των υδατικών πόρων αποτελεί η ποιότητα του νερού στα υδάτινα σώματα και η κατάλληλη διαχείρισή τους. Η αυξημένη ανθρώπινη δραστηριότητα αναγνωρίζεται ως η βασικότερη συνιστώσα, η οποία κυρίως εκφράζεται μέσα από τις αγροτικές απορροές αλλά και από την λειτουργία εγκαταστάσεων επεξεργασίας λυμάτων. Ένα από τα βασικά προβλήματα που προκαλούνται στους αποδέκτες, αποτελεί ο ευτροφισμός. Συγκεκριμένα, παρατηρούνται αυξημένες συγκεντρώσεις μικροοργανισμών (φυτοπλαγκτού), το οποίο φαινόμενο ονομάζεται και «πρασίνισμα» της υδάτινης στήλης, από το χαρακτηριστικό χρώμα του φυτοπλαγκτού. Άμεση συνέπεια του ευτροφισμού αποτελεί η μείωση του διαλυμένου οξυγόνου στο νερό, προκαλώντας ανοξικές συνθήκες με καταστροφικές επιπτώσεις για τους υπόλοιπους οργανισμούς (Nakhaei et al., 2019). Επομένως, κρίνεται απαραίτητη η παρακολούθηση αυτών των φαινομένων και η σωστή διαχείριση των υδάτινων συστημάτων, με τελικό στόχο την αποφυγή επιβάρυνσής τους, αλλά και την βελτίωση υπάρχοντων ανεπιθύμητων καταστάσεων.

Συνήθως η διαχείριση ενός υδάτινου συστήματος, εμπεριέχει κάποιας μορφής προσομοίωση, είτε υδραυλικής είτε για την ποιότητα του νερού σύμφωνα και με περιβαλλοντικούς δείκτες. Επίσης, γνωρίζουμε ότι τα προβλήματα αυτά χαρακτηρίζονται από εξαιρετικά σύνθετες συνθήκες και κυβερνώνται από πολύπλοκες μαθηματικές σχέσεις. Ο συνδυασμός όλων των παραπάνω έχει οδηγήσει στην δημιουργία κατάλληλων αριθμητικών μοντέλων για την προσομοίωση του ευτροφισμού σε όλους τους υδάτινους αποδέκτες. Αναπτύχθηκαν ήδη από την δεκαετία του 1970 (Li et al., 2019) και στην βάση τους χρησιμοποιούν τρεις βασικές συνιστώσες: συγκεντρώσεις άνθρακα (C), αζώτου (N) και φωσφόρου (P). Μέσα από αυτές τις μεταβλητές, ταυτόχρονα με την κατάλληλη περιγραφή και προσομοίωση του υδάτινου συστήματος, παρέχεται ένα ικανοποιητικό πλήθος πληροφοριών για την κατάσταση στην οποία βρίσκεται ο αποδέκτης, ο οποίος εξετάζεται.

Η ανάλυση ευαισθησίας αποτελεί ένα ισχυρό εργαλείο στον τομέα των μαθηματικών μοντέλων και έχει ευρεία χρήση σε πολλά επιστημονικά πεδία. Μέσα από τις αναλύσεις αυτές, δύναται να εκτιμηθεί αλλά και να ποσοτικοποιηθεί η επίδραση μιας διαταραχής των παραμέτρων εισόδου ενός μοντέλου στα αντίστοιχα αποτελέσματα τα οποία παράγει αυτό (Camporlongo et al., 2000). Ο τελικός στόχος είναι η αναγνώριση των σημαντικότερων παραμέτρων του μοντέλου, καθώς και η αξιολόγηση της βαρύτητας που θα δοθεί σε αυτές

για την καλύτερη προσομοίωση των φυσικών διαδικασιών. Οι μέθοδοι ανάλυσης ευαισθησίας διαχωρίζονται σε δύο βασικές κατηγορίες, τις τοπικές μεθόδους (LSA) και τις καθολικές (GSA). Η προσέγγιση του προβλήματος είναι αρκετά διαφορετική σύμφωνα και με την μέθοδο που θα χρησιμοποιηθεί, με τις κυριότερες διαφοροποιήσεις να προκύπτουν στους υπολογιστικούς χρόνους, αλλά και στην ποσότητα των πληροφοριών που λαμβάνουμε για τις μεταβλητές των μοντέλων (Khare et al., 2019). Οι τοπικές μέθοδοι, χαρακτηρίζονται ως αποτελεσματικές, διότι μπορούν να παράξουν αποτελέσματα ενός σχετικά ικανοποιητικού βαθμού σε συντομότερο χρόνο και με μικρότερο υπολογιστικό κόστος. Ωστόσο, τα δεδομένα τα οποία παράγουν, έχουν κυρίως ποιοτικό χαρακτήρα και δεν περιγράφουν με μεγάλη ακρίβεια το σύνολο των διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα σε ένα υδάτινο σύστημα. Αντιθέτως, οι καθολικές μέθοδοι έχουν την δυνατότητα να παράξουν αποτελέσματα, μέσα από τα οποία είναι δυνατή η εις βάθος περιγραφή των συστημάτων και των διαδικασιών του, αλλά και των επιδράσεων των παραμέτρων στις μεταβλητές τις οποίες παράγει το μοντέλο μας. Επιπλέον, έχουν την ικανότητα να υπολογίζουν την σημαντικότητα των παραμέτρων, αλλά και να αναγνωρίζουν με μεγαλύτερη σιγουριά τις παραμέτρους που δεν είναι σημαντικές για το μοντέλο μας. Ωστόσο, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, οι καθολικές μέθοδοι απαιτούν σημαντικές υπολογιστικές δυνατότητες και αντίστοιχα περισσότερο χρόνο (Cosenza et al., 2013).

Σκοπός της παρούσας εργασίας, υπήρξε η δημιουργία ενός μοντέλου ποιότητας νερού στο προγραμματιστικό περιβάλλον του Matlab, το οποίο προσομοιώνει τον υδάτινο αποδέκτη, μέσα από φυσικές, χημικές και βιολογικές διεργασίες οι οποίες περιγράφουν το πρόβλημα του ευτροφισμού. Παράλληλα, εφαρμόστηκαν εναλλακτικές μεθόδους ανάλυσης ευαισθησίας στο μοντέλο, με στόχο την εύρεση των δεικτών σημαντικότητας των παραμέτρων εισόδου, την εκτίμηση των σχέσεων αλληλεπίδρασης μεταξύ τους, αλλά και την διαλογή μεταξύ σημαντικών και μη – σημαντικών. Επίσης πραγματοποιήθηκε ταξινόμηση των παραμέτρων αυτών, ώστε να υπολογιστεί η βαρύτητα που θα πρέπει να δοθεί στην φυσική μέτρηση, επομένως και στην αριθμητική τιμή, που θα χρησιμοποιηθεί για κάθε μία από αυτή.

Η διάρθρωση της διπλωματικής εργασίας είναι η εξής:

- Στο δεύτερο κεφάλαιο εμπεριέχεται μια εκτενής βιβλιογραφική ανασκόπηση για τα μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού, ενώ παρουσιάζονται λογισμικά και εμπορικά

πακέτα μοντέλων με τα οποία πραγματοποιούνται προσομοιώσεις και αναλύσεις των υδάτινων οικοσυστημάτων. Στην συνέχεια, γίνεται αναφορά στις μεθόδους ανάλυσης ευαισθησίας και δίνεται επιπλέον βαρύτητα σε εκείνες που χρησιμοποιούνται στην επιστήμη των υδατικών πόρων.

- Στο τρίτο κεφάλαιο περιγράφεται η δομή και η λειτουργία του βασικού μοντέλου ευτροφισμού, το οποίο και δημιουργήθηκε στο προγραμματιστικό περιβάλλον του Matlab. Παρουσιάζονται όλες οι φυσικές, χημικές και βιολογικές διεργασίες που περιλήφθηκαν σε αυτό, οι μαθηματικές σχέσεις από τις οποίες περιγράφονται, καθώς και οι τύποι και οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται. Επίσης, γίνεται λόγος για την περιοχή μελέτης, για τις αρχικές και τις οριακές συνθήκες του μοντέλου, καθώς και για τις μεταβλητές που εξετάζονται και παράγονται από το μοντέλο.
- Στο τέταρτο κεφάλαιο, αρχικά παρουσιάζεται συνοπτικά το μαθηματικό μοντέλο ευτροφισμού που δημιουργήσαμε και στην συνέχεια οι μέθοδοι που εφαρμόστηκαν για την ανάλυση ευαισθησίας. Στην συνέχεια, παρουσιάζονται όλα τα αποτελέσματα για όλες τις μεθόδους που εφαρμόστηκαν. Πραγματοποιείται αξιολόγηση όλων των μεθόδων αλλά και σχετική σύγκριση μεταξύ τους.
- Στο πέμπτο κεφάλαιο διατυπώνονται τα κυριότερα συμπεράσματα από όλες τις ανωτέρω εφαρμογές, ενώ προτείνονται και πιθανές μελλοντικές ενέργειες επί της ανάλυσης ευαισθησίας σε μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού.

2 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

2.1 Μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού

2.1.1 Γενική ταξινόμηση μαθηματικών μοντέλων ποιότητας νερού

Τα μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού συμβάλλουν στην προσομοίωση όλων των βιολογικών, χημικών και φυσικών διεργασιών, οι οποίες λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό του νερού. Με αυτόν τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα αξιολόγησης φαινομένων ρύπανσης στον υδάτινο αποδέκτη, χωρίς την διεξαγωγή πειραμάτων και δειγματοληψίας στο πεδίο. Παρακάμπτονται εμπόδια που συναντώνται στο πεδίο, αλλά και μειώνονται τα κόστη για τα φυσικά πειράματα που θα έπρεπε να πραγματοποιηθούν. Ένα τυπικό μαθηματικό μοντέλο ποιότητας νερού, αποτελείται από μαθηματικές εξισώσεις οι οποίες συνδέουν τις παραμέτρους εισόδου με τις μεταβλητές εξόδου. Συνήθως έχει απλοποιήσεις και υποθέσεις σε σχέση με το πραγματικό σύστημα που αναπαριστά, με στόχο την απλούστευσή του και την πιο εύκολη και γρήγορη επίλυσή του. Τα παραπάνω, έχουν οδηγήσει στην χρήση των μοντέλων για την αναγνώριση της ρύπανσης του νερού αλλά και για την συμπεριφορά των ρύπων στο υδάτινο περιβάλλον. Επιπλέον, συμβάλλουν στην αξιολόγηση και την λήψη αποφάσεων, π.χ. για την κατασκευή έργων υποδομής, διότι αυτά έχουν και σοβαρές επιπτώσεις στο υδάτινο σώμα. Με την προσομοίωση ποικίλων σεναρίων ρύπανσης δημιουργείται ένα πλαίσιο, από το οποίο λαμβάνονται αποφάσεις σχετικά με την διαχείριση του υδατικού συστήματος (Wang et al., 2013). Επιπρόσθετα, τα μοντέλα ποιότητας νερού έχουν την δυνατότητα να περιγράψουν τις σύνθετες διαδικασίες που πραγματοποιούνται μεταξύ των βιοτικών και των αβιοτικών συνιστωσών που περιέχονται στο υδάτινο σώμα (Chapra and Reckhow, 1983). Τα μοντέλα ποιότητας νερού αποτελούνται από τρία βασικά μέρη: 1) τις σημειακές απορροές και τα ρυπαντικά φορτία, 2) τις υδραυλικές διεργασίες στο εσωτερικό του αποδέκτη και 3) τις χημικές και βιολογικές διεργασίες στο εσωτερικό του αποδέκτη. Επομένως, θα πρέπει να προσομοιωθούν με κατάλληλο τρόπο και τα τρία αυτά κομμάτια, με την μεγαλύτερη βαρύτητα ωστόσο να αποδίδεται στο πρώτο και στο τρίτο (Walker et al., 2009).

Τα μαθηματικά μοντέλα μπορούν να περιγραφτούν και να διαχωριστούν με διαφορετικά κριτήρια, τα οποία και θα παρουσιαστούν στην συνέχεια, σύμφωνα και με τους Chapra and Reckhow, (1983).

- Εμπειρικά ή μηχανιστικά:** Τα εμπειρικά μοντέλα αναπτύσσονται πρωτίστως από ανάλυση δεδομένων και βασίζονται κυρίως στην προσαρμογή του σε αυτά τα δεδομένα, παρά σε θεωρητικές αρχές. Ονομάζονται και μοντέλα «μαύρου κουτιού», διότι δεν λαμβάνουν υπόψη τις διαφορετικές σχέσεις της διαδικασίας που προσομοιώνει, παρά μόνο χρησιμοποιεί στατιστικές μεθόδους για την ολοκλήρωση της προσομοίωσης (Vicaire, 2006). Αντίθετα, τα μηχανιστικά μοντέλα χρησιμοποιούν κυρίως μαθηματικές σχέσεις και θεωρίες, οι οποίες βασίζονται σε θεωρήματα. Έχουν την δυνατότητα και εκφράζουν τις σχέσεις των φυσικών διαδικασιών που περιγράφουν, απεικονίζουν δηλαδή την σχέση «αιτίου – αποτελέσματος». Με βάση τα παραπάνω, αυτά τα μοντέλα παρουσιάζουν κάποια πλεονεκτήματα: κατανοείται καλύτερα και πιο ολοκληρωμένα η ποιότητα του νερού, συλλέγονται πληροφορίες για τις σχέσεις «αιτίου – αποτελέσματος», αναγνωρίζονται τα κενά στην κατανόηση των διαδικασιών και δίνονται καλύτερες τελικές προβλέψεις (Vicaire, 2006). Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ένα ικανό μοντέλο, εμπεριέχει τόσο εμπειρικά όσο και μηχανιστικά χαρακτηριστικά.
- Προσομοίωσης ή βελτιστοποίησης:** Τα μοντέλα προσομοίωσης είναι σχεδιασμένα για να περιγράφουν την πλήρη λειτουργικότητα του συστήματος. Τα μοντέλα βελτιστοποίησης υπολογίζουν την βέλτιστη λύση (μέγιστο ή ελάχιστο), σε σχέση με κάποιους περιορισμούς όπως το κόστος ή η ποιότητα του περιβάλλοντος.
- Στατικό ή δυναμικό:** Το κριτήριο αυτό αναφέρεται, στο εάν υπάρχει ή όχι χρονική διάσταση στο μοντέλο. Τα στατικά μοντέλα περιγράφουν μια διαδικασία, η οποία είναι σταθερή στην μεταβολή του χρόνου και άρα ανεξάρτητη αυτού. Αντίθετα τα δυναμικά μοντέλα περιγράφουν διαδικασίες εξαρτημένες από την χρονική κλίμακα, μεταβάλλονται δηλαδή με τον χρόνο.
- Ενιαίας ή κατανεμημένης παραμέτρου:** Το κριτήριο αυτό αναφέρεται στην ύπαρξη ή την απουσία συσχέτισης με τον χώρο για τις μαθηματικές σχέσεις του μοντέλου. Πιο συγκεκριμένα, τα μοντέλα ενιαίας παραμέτρου χαρακτηρίζονται ως μηδενικής διάστασης στον χώρο. Πρακτικά βασίζονται στην υπόθεση της ύπαρξης σταθερών και ομοιόμορφων συνθηκών σε όλο το σύστημα που μοντελοποιείται. Αντίθετα, τα μοντέλα κατανεμημένης παραμέτρου προσομοιώνουν συστήματα που εμπεριέχουν συνθήκες οι οποίες μεταβάλλονται χωρικά σε μία ή περισσότερες διαστάσεις. Αυτά

κατηγοριοποιούνται περαιτέρω, αναλόγως και σύμφωνα με το τρόπο που προσομοιώνουν χωρικά τον πραγματικό κόσμο. Χωρίζονται σε μονοδιάστατα, δισδιάστατα και τρισδιάστατα μοντέλα, τα οποία αναλύονται παρακάτω. Τα μονοδιάστατα μοντέλα θεωρούνται τα πιο απλά, καθώς προσομοιώνουν είτε την κατακόρυφη, είτε την διαμήκη συμπεριφορά του υδάτινου σώματος. Τα δισδιάστατα μοντέλα προσομοιώνουν την διαμήκη συμπεριφορά και ταυτόχρονα είτε την εγκάρσια είτε την διάσταση του βάθους του υδάτινου σώματος. Τα τρισδιάστατα μοντέλα είναι και τα πιο σύνθετα, καθώς λαμβάνουν υπόψη τους όλες τις πιθανές κινήσεις του νερού στο εσωτερικό του υδάτινου σώματος. Η επιλογή του τύπου του μοντέλου βασίζεται στο πλήθος των διαθέσιμων δεδομένων αλλά και στον στόχο της μελέτης.

- **Ντετερμινιστικά ή στοχαστικά:** Τα ντετερμινιστικά μοντέλα χρησιμοποιούν αναμενόμενες τιμές για τις παραμέτρους, δηλαδή δεν αποτελούν πραγματικές τιμές από παρατηρήσεις και επομένως υπολογίζουν αναμενόμενες τιμές των μεταβλητών. Συγκεκριμένα η σχέση των μεγεθών εισόδου και εξόδου είναι σταθερή και μπορεί να είναι είτε εμπειρική, είτε μηχανιστική. Αντίθετα, τα στοχαστικά μοντέλα περιλαμβάνουν μεταβλητότητα και πιθανότητα εμφάνισης τιμών για τα μεγέθη εξόδου, σύμφωνα και με τις κατάλληλες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας για τα μεγέθη εισόδου. Πρακτικά εμπεριέχουν στοιχεία τα οποία παράγονται με τυχαίο τρόπο, π.χ. στατικές προσομοιώσεις Monte – Carlo, που χρησιμοποιούν μοντέλα ισορροπίας της μάζας, οι οποίες παράγουν αποτελέσματα για την συγκέντρωση ενός ρύπου με την μορφή των συναρτήσεων συχνότητας για μεταβλητά μεγέθη εισόδου (Vicaire, 2006).
- **Cross – sectional ή longitudinal:** Τα cross – sectional μοντέλα περιγράφουν μαθηματικές σχέσεις και συμπεριφορές αξιοποιώντας ένα δείγμα από μεμονωμένες περιπτώσεις. Αντίθετα, τα longitudinal μοντέλα εξετάζουν μια συγκεκριμένη συμπεριφορά και το πώς αυτή μεταβάλλεται στην κλίμακα του χρόνου. Συνήθως τα πρώτα είναι εμπειρικά μοντέλα, ενώ τα δεύτερα δύναται να είναι είτε εμπειρικά είτε μηχανιστικά.

Εδώ καλό θα ήταν να αναφέρουμε, ότι κανένα μοντέλο δεν μπορεί να παράξει ακριβή και πραγματική λύση, διότι χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη ρίσκου με την μορφή της

αβεβαιότητας, η οποία είναι αναμενόμενο και αναπόφευκτο κομμάτι όλων των μεθόδων πρόβλεψης. Το ιδανικό μοντέλο θα πρέπει να θεμελιώνεται σε μια σταθερή βάση από θεωρητικές ιδέες και σχέσεις, αλλά και να έχει αξιολογηθεί και εκτιμηθεί με βάση παρατηρήσεις και αποτελέσματα από το φυσικό περιβάλλον. Όσον αφορά την τελική επιλογή του μοντέλου, πραγματοποιείται λαμβάνοντας υπόψη διάφορους παράγοντες σύμφωνα και με τον στόχο της μελέτης για την οποία θα χρησιμοποιηθεί. Τελικά ένα μοντέλο πρέπει να έχει ως περιορισμούς και προδιαγραφές το κόστος, τους περιορισμούς στα δεδομένα, την καλή αξιοπιστία και την ικανότητα πρόβλεψης (Chapra and Reckhow, 1983).

Με βάση τα μέρη από τα οποία αποτελείται ένα τυπικό μοντέλο, διαχωρίζεται και ο τύπος των μαθηματικών σχέσεων που χρησιμοποιούνται. Προσομοιώνονται με στιγμιαίες εξισώσεις τόσο για την ροή του νερού, όσο και για την μετακίνηση των ρύπων. Αυτές οι εξισώσεις είναι η εξίσωση συνέχειας του νερού και εξισώσεις που περιγράφουν διατήρησης της μάζας του νερού, της ταχύτητάς του, της ενέργειάς του και όλων των επιμέρους συστατικών του. Η επίλυση αυτών είναι μια σύνθετη διαδικασία, αν αναλογιστεί κανείς και το μέγεθος, αλλά και το πλήθος των μεταβλητών που επηρεάζουν το πρόβλημα αυτό. Δύο βασικοί τρόποι χρησιμοποιούνται: 1) οι αναλυτικές λύσεις, οι οποίες προκύπτουν με απλουστεύσεις των αρχικών σχέσεων μέχρις ότου να μπορούν να επιλυθούν αυτές με αναλυτικό τρόπο και 2) αριθμητικές λύσεις, οι οποίες μετατρέπουν τις διαφορικές εξισώσεις σε αλγεβρικές με κάποια εκτίμηση, όπως πεπερασμένες διαφορές, πεπερασμένοι όγκοι κ.ά. (Vicaire, 2006).

Περαιτέρω ταξινόμηση πραγματοποιείται με βάση τον τρόπο προσομοίωσης των ρύπων στο σύστημα. Υπάρχουν δύο διαφορετικοί τρόποι, σημειακή και μη – σημειακή φόρτιση του ρύπου. Τα περισσότερα μοντέλα, χρησιμοποιούν και τους δύο τρόπους ταυτόχρονα πλησιάζοντας έτσι στις πραγματικές συνθήκες που επικρατούν.

2.1.2 Ταξινόμηση μοντέλων με βάση το υδάτινο σώμα

Τα μαθηματικά μοντέλα ποιότητας νερού ταξινομούνται περαιτέρω ανάλογα με το υδάτινο σώμα, το οποίο περιγράφουν στις παρακάτω κατηγορίες (Vicaire, 2006).

- **Μοντέλα ποιότητας νερού σε ποταμούς:** Η κατασκευή κατάλληλου μοντέλου για μελέτη ποταμών αποτελείται από δύο βασικά μέρη: 1) προσομοίωση ολόκληρου του

καθεστώς της ροής του νερού για την ανάπτυξη πλήρους εικόνας της κίνησης του νερού. Πραγματοποιείται υδρολογική προσομοίωση της απορροής, της υπόγειας ροής και την ροής του ποταμού, υδραυλική προσομοίωση της επιφάνειας του νερού με τον υπολογισμό των μέσων ταχυτήτων, βαθών κ.ά. για κάθε σημείο του ποταμού.

2) προσομοίωση της ποιότητας του νερού σε κάθε σημείο του ποταμού με την κατάλληλη προσομοίωση των σημαντικότερων ρύπων, η είσοδος, η έξοδος, η αλληλεπίδραση με την ατμόσφαιρα, οι χημικές αντιδράσεις και όλες οι διεργασίες και η ανταλλαγή μάζας μεταξύ του νερού και της ατμόσφαιρας. Για όλες τις διαδικασίες που έχουν περιγραφεί απαιτείται κατάλληλη βαθμονόμηση και επιβεβαίωση με φυσικές παρατηρήσεις.

- **Μοντέλα ποιότητας νερού σε εκβολές ποταμών:** Τα δέλτα των ποταμών στις εκβολές τους, αποτελούν ένα ξεχωριστό και πολύ σημαντικό κομμάτι του συνολικού συστήματος ενός ποταμού. Αποτελεί την ζώνη μετάβασης από αυτό στα θαλάσσια οικοσυστήματα. Επομένως τα μοντέλα αυτά εμπεριέχουν: 1) προσομοίωση της υδραυλικής των θαλάσσιων συστημάτων (βάθη, στάθμες, ταχύτητες, κατευθύνσεις κ.λπ.) και 2) προσομοίωση της ποιότητας του νερού σε αυτά τα συστήματα. Γίνεται χρήση μοντέλων με πεπερασμένες διαφορές ή πεπερασμένα στοιχεία για την προσομοίωση μεταβλητών, όπως το διαλυμένο οξυγόνο, ο σωματιδιακός άνθρακας, ή άλλοι ρύποι που εισέρχονται στο σύστημα. Επίσης, χρησιμοποιούνται συντελεστές και παράμετροι για την προσομοίωση φυσικών διαδικασιών, όπως ο επαναερισμός, η διασπορά κ.ά.
- **Μοντέλα ποιότητας νερού σε λίμνες και ταμιευτήρες:** Τα συγκεκριμένα μοντέλα χωρίζονται σε τέσσερα διαφορετικά, τα φυσικά, τα χημικά, τα βιολογικά και τα μοντέλα λιμνών. Τα φυσικά μοντέλα βασίζονται στην προσομοίωση της συνολικής μεταβολής της θερμοκρασίας, της θερμοκρασιακής στρωμάτωσης ή είναι υδροδυναμικά μοντέλα. Τα χημικά μοντέλα προσομοιώνουν τις μεταβολές στην συγκέντρωση ουσιών, όπως τα θρεπτικά ή άλλες τοξικές ουσίες που συμβάλλουν στην ανάπτυξη του φαινομένου του ευτροφισμού. Τα βιολογικά μοντέλα προσομοιώνουν την ανάπτυξη των αλγών, την νιτροποίηση και την απονιτροποίηση, την καθίζηση και το ισοζύγιο του συνολικού οξυγόνου μέσα στην λίμνη.
- **Μοντέλα ποιότητας νερού σε υπόγεια νερά:** Τα μοντέλα αυτά προσομοιώνουν την ροή του υπόγειου υδροφόρου ορίζοντα. Είναι στατικά μοντέλα ροής και υπολογίζουν

την μέση ταχύτητα. Επίσης, προσομοιώνουν την μετακίνηση του ρύπου, μέσω των φαινομένων της διασποράς, της μεταφοράς, της προσρόφησης, της παραγωγής και της αποσύνθεσης των ειδών.

- **Μοντέλα ποιότητας νερού σε απορροή:** Τα μοντέλα προσομοιώνουν την επιφανειακή απορροή, καθώς και την ποιότητα του νερού στις επιφανειακές απορροές αυτές. Το τελευταίο πραγματοποιείται μέσω μοντέλων διάβρωσης και μεταφοράς φερτών υλικών, αλλά και από μοντέλα παραγωγής θρεπτικών.

2.1.3 Εμπορικά λογισμικά και μοντέλα ποιότητας νερού

Τις τελευταίες δεκαετίες με την ανάπτυξη των υπολογιστών έχουν δημιουργηθεί πληθώρα λογισμικών και εμπορικών μοντέλων ποιότητας νερού. Έχουν ευρεία χρήση για ποικίλες μελέτες και εφαρμογές και πραγματοποιούν ικανοποιητικές προσομοιώσεις ενός συστήματος από το πιο απλό, μέχρι και το πιο σύνθετο. Όπως αναφέρθηκε, ένα ισχυρό και ακριβές μοντέλο θα πρέπει να περιλαμβάνει τις κατάλληλες μαθηματικές σχέσεις και εξισώσεις, με τις οποίες περιγράφονται αναλυτικά όλες αυτές οι διαδικασίες που περιέχονται στο σύστημά μας. Με αυτόν τον τρόπο θα έχει την δυνατότητα πλήρους απεικόνισης και προσομοίωσης όλων των φαινομένων, που λαμβάνουν χώρα σε ένα πραγματικό σύστημα. Όλα τα παραπάνω βασίζονται στην διαθεσιμότητα κατάλληλων στοιχείων για όλα τα δεδομένα εισόδου είτε από την βιβλιογραφία, είτε από φυσικές παρατηρήσεις. Επομένως, ένα μοντέλο ποιότητας νερού το οποίο επιτυγχάνει και στους δύο στόχους αυτούς, κρίνεται ως λειτουργικό και αποδεκτό για γενική χρήση. Διάφορα εμπορικά πακέτα και λογισμικά έχουν δημιουργηθεί προς εμπορική χρήση, τα οποία αποτελούνται από πληθώρα μοντέλων που εμπεριέχουν από απλές διαδικασίες, μέχρι τρισδιάστατες αναλύσεις με πολλές παραμέτρους και δυνατότητα στοχαστικής προσομοίωσης για αυτές.

Το πρώτο, χρονικά, μοντέλο ευτροφισμού ήταν το μοντέλο Vollenweider. Στην σημερινή εποχή, χρησιμοποιείται το εμπειρικό μοντέλο OECD – Vollenweider, το οποίο βασίζεται στο πρώτο και έχει υποστεί μερικές τροποποιήσεις από την αρχική έκδοση. Η βασική μεταβλητή του είναι το ετήσιο φορτίο φωσφόρου, ενώ δημιουργεί ποιοτικά διαγράμματα για την απεικόνιση της τροφικής κατάστασης. Αυτό το περιορίζει σε μια αρχική ποιοτική ένδειξη για την τροφική κατάσταση για αυτό και χρησιμοποιείται προτού πραγματοποιήσουμε μια αναλυτικότερη μελέτη. Επίσης, θα πρέπει να αναφέρουμε ότι τα μοντέλα αυτά εισάγουν

μεγάλη αβεβαιότητα στις προβλέψεις για το τελικό αποτέλεσμα, πράγμα το οποίο οφείλεται σύμφωνα με τον Håkanson, (1999) στην έλλειψη προσομοίωσης φαινομένων όπως οι εποχιακές αλλαγές στην εισροή των φορτίων φωσφόρου, η εσωτερική τροφοδότηση της λίμνης σε φώσφορο, οι μεταβολές στο φώσφορο μέσα στη λίμνη λόγω μίξης και στρωμάτωσης κλπ.

Η εταιρεία DHI έχει αναπτύξει το πακέτο MIKE, το οποίο περιλαμβάνει υπομοντέλα διαφορετικής πολυπλοκότητας και χρηστικότητας. Το βασικότερο και πιο απλό από τα μοντέλα, προσομοιώνει τρεις παραμέτρους: την θερμοκρασία T, το διαλυμένο οξυγόνο DO και το BOD το οποίο ορίζεται ως η ποσότητα του διαλυμένου οξυγόνου που χρησιμοποιούν οι μικροοργανισμοί για την πλήρη βιοχημική οξείδωση των περιεχόμενων οργανικών υλών. Επιπρόσθετα, περιλαμβάνει φυσικές, χημικές και βιολογικές διεργασίες όπως: η εισαγωγή οξυγόνου λόγω επαναερισμού της λίμνης από την ατμόσφαιρα και η κατανάλωσή του από τους οργανισμούς για την ανάπτυξή τους, η νιτροποίηση και η απονιτροποίηση μέσω εισαγωγής αμμωνιακού αζώτου και νιτρικού αζώτου, καθώς και η καθίζηση και η επαναιώρηση ρύπων και μικροοργανισμών στον πυθμένα. Επίσης, μπορεί να εισαχθούν ρύποι όπως ο ολικός φώσφορος, τα περιττωματικά και ολικά κολοβακτηρίδια, το COD, δηλαδή η ποσότητα του οξυγόνου η οποία απαιτείται για την ολική χημική οξείδωση των οργανικών συστατικών μιας ουσίας, pH και αλατότητα (Ρώμας κ.ά., 2006). Άλλα υπομοντέλα του MIKE, MIKE 11, MIKE 21 και MIKE 3, περιγράφονται παρακάτω:

- **MIKE 11:** Χρησιμοποιείται για δυναμική και μονοδιάστατη προσομοίωση ποτάμιων συστημάτων, λιμνών και ταμιευτήρων. Έχει την δυνατότητα να συμπεριλάβει υδραυλικές κατασκευές, όπως φράγματα ενώ μπορεί να προσομοιώσει την σχέση βροχόπτωσης – απορροής, τις πλημμύρες, την ποιότητα του νερού, την μεταφορά ιζήματος και την μορφολογία ποταμών.
- **MIKE 21:** Χρησιμοποιείται κυρίως για τη δισδιάστατη προσομοίωση όλων των φυσικών, χημικών και βιολογικών διεργασιών σε παράκτιες και θαλάσσιες περιοχές.
- **MIKE 3:** Χρησιμοποιείται για την τρισδιάστατη προσομοίωση ροών, ιζημάτων και ποιότητας νερού και έχει εφαρμογή σε όλους τους υδάτινους αποδέκτες. Επίσης μπορεί να συμβάλλει στην εκπόνηση μελετών περιβαλλοντικών επιπτώσεων, να προβλέψει την ποιότητα του νερού, αλλά και να αξιολογήσει υδρογραφικές

συνθήκες, οι οποίες χρησιμοποιούνται για την κατασκευή έργων εντός των υδάτων (<http://www.mikepoweredbydhi.com/>).

Η ίδια εταιρεία αναπτύσσει και ένα άλλο εμπορικό πακέτο, το ECO Lab. Στην βάση του υπάρχει ένα δυναμικό μοντέλο το οποίο πραγματοποιεί την προσομοίωση του συνόλου του οικοσυστήματος και έχει ως στόχο την διαχείριση του περιβάλλοντος και την αξιολόγηση του. Μέσα από αυτό επιτυγχάνουμε ικανοποιητική περιγραφή της ποιότητας του νερού τόσο βραχυπρόθεσμα όσο και μακροπρόθεσμα. Πιο συγκεκριμένα, υπολογίζει τις συγκεντρώσεις των θρεπτικών, του φυτοπλαγκτού, του ζωοπλαγκτού, των μακροαλγών αλλά και ρύπων όπως το οργανικό άζωτο, ο φώσφορος και τα νιτρικά. Επίσης, υποστηρίζει την εκτίμηση της επιρροής που έχουν στην ποιότητα του νερού: τα θρεπτικά, οι στρατηγικές της επεξεργασίας των λυμάτων, οι περιβαλλοντικές επιπτώσεις λόγω κατασκευών (φράγματα, λιμάνια) και λόγω ρίψεων αποβλήτων, η μείωση του οξυγόνου στα ύδατα κ.ά.

Ένα άλλο σημαντικό πακέτο είναι το DELWAQ, από την εταιρεία Delft, το οποίο δίνει την δυνατότητα τρισδιάστατης προσομοίωσης για διάφορες χρονικές περιόδους. Το μοντέλο περιλαμβάνει τις εξής διεργασίες: νιτροποίηση και απονιτροποίηση, η εισαγωγή οξυγόνου από την ατμόσφαιρα, η αποδόμηση του BOD, ο θάνατος του φυτοπλαγκτού, η επαναιώρηση BOD από τον πυθμένα, καθώς και η προσρόφηση και αποβολή βαρέων μετάλλων. Τα μεγέθη εξόδου που υπολογίζει είναι: ο οργανικός άνθρακας, ο ανόργανος φώσφορος, το διαλυμένο οξυγόνο, αιωρούμενα ανόργανα στερεά, βαρέα μέταλλα (κάδμιο, χαλκός, ψευδάργυρος, υδράργυρος, νικέλιο, μόλυβδος), βακτήρια, άλγη, μακρόφυτα και κολοβακτηρίδια (Ρώμας, 2006).

Η EPA (Environmental Protection Agency) των Η.Π.Α. ανέπτυξε το μοντέλο AQUATOX, το οποίο αποτελεί ένα μηχανιστικό μοντέλο προσομοίωσης για μεγάλη ποικιλία από υδάτινους αποδέκτες, όπως λίμνες (στρωματωμένες και μη) και ταμιευτήρες, ποτάμια, υδάτινα ρεύματα και εκβολές ποταμών. Οι σημαντικότερες διεργασίες που περιλαμβάνονται είναι: η φωτοσύνθεση, η ανάπτυξη η κατανάλωση η αναπνοή και ο θάνατος των μικροοργανισμών, οι τροφικές αλληλεπιδράσεις, ο κύκλος του αζώτου (νιτροποίηση και απονιτροποίηση) και του διαλυμένου οξυγόνου, η απελευθέρωση αζώτου από αναερόβια ιζήματα, βιοσυσσώρευση κ.ά. Στην βάση του, το μοντέλο προβλέπει τις συγκεντρώσεις διάφορων ρύπων και ουσιών όπως τα θρεπτικά (άζωτο, φώσφορος), τα οργανικά χημικά και την επίδραση που έχουν αυτά στην πανίδα και την χλωρίδα του οικοσυστήματος (ψάρια,

ασπόνδυλα και υδρόβια φυτά) (<http://www2.epa.gov/exposure-assessment-models/aquatox>).

Οι Reckhow et al. ανέπτυξαν το μοντέλο EUTROMOD, το οποίο δίνει έμφαση στην ανάλυση αβεβαιότητας και προσομοιώνει το φαινόμενο του ευτροφισμού. Έχει ως μεγέθη εισόδου τα υδρολογικά και μορφολογικά χαρακτηριστικά της λίμνης, τις συγκεντρώσεις των ρύπων στο εσωτερικό της, καθώς και τις χρήσεις γης της ευρύτερης περιοχής μελέτης. Η πρόβλεψη βασίζεται στον υπολογισμό του φορτίου των θρεπτικών, των συγκεντρώσεων τριαλογομεθανίων (THMs, περιβαλλοντικοί ρύποι μερικοί καρκινογόνοι) και της τροφικής κατάστασης στην λίμνη. Όπως αναφέρει και ο Riecken, (1995) το μοντέλο απαιτεί την συλλογή αρκετών δεδομένων εισόδου για την ικανοποιητική απόδοσή του και υπόκειται σε αβεβαιότητα, ο βαθμός της οποίας ποσοτικοποιείται μέσω της ανάλυσης αβεβαιότητας που περιλαμβάνεται σε αυτό.

Οι Greenwood et al. ανέπτυξαν το PHOSMOD το οποίο βασίζεται σε μοντέλο που περιέγραψαν οι Chapra and Canale, (1991). Η κύρια χρήση του απαντάται στην πρόβλεψη του ολικού φωσφόρου και του διαλυμένου οξυγόνου σε στρωματωμένες λίμνες, λαμβάνοντας υπόψη και την εποχικότητα. Πιο αναλυτικά, για την υδάτινη στήλη το μοντέλο θεωρεί ως είσοδο για τον φώσφορο τα εξωτερικά φορτία και την επαναιώρηση του από τον πυθμένα. Αντίθετα οι απώλειες προέρχονται κυρίως από την καθίζηση και την διαφυγή του. Αντίστοιχα για την ζώνη των ιζημάτων, θεωρεί ότι ο φώσφορος εισέρχεται λόγω καθίζησης και χάνεται λόγω επαναιώρησης και θανάτου των μικροοργανισμών (Gibson et., 2000). Ο χρήστης έχει την δυνατότητα εισαγωγής και εξέτασης διαφορετικών σεναρίων, ενώ παρέχονται και γραφικές παραστάσεις για τα αποτελέσματα. Τέλος, ο Riecken, (1995) προειδοποιεί για την χρήση του, διότι μπορεί να παράξει αποτελέσματα για σενάρια τα οποία δεν απαντώνται στην φύση, μπερδεύοντας έτσι έναν άπειρο, ως προς την θεωρία και την φύση των φαινομένων, χρήστη.

Ένα επιπλέον μοντέλο ευτροφισμού που έχει εφαρμογή σε λίμνες και ταμειυτήρες αποτελεί το μοντέλο BATHTUB (Walker, 1986). Αξιολογεί την κίνηση των ρύπων στο εσωτερικό του υδάτινου αποδέκτη λόγω των φαινομένων της μεταφοράς, διασποράς και καθίζησης. Έχει την δυνατότητα να εκφράσει τα μεγέθη εισόδου με στοχαστικό τρόπο, ο οποίος επιτρέπει να ληφθούν υπόψη τυχόν περιθώρια σφαλμάτων. Οι σχέσεις τις οποίες χρησιμοποιεί το μοντέλο BATHTUB είναι εμπειρικές και έχουν ήδη ορισμένες παραμέτρους και συμβάλλουν

στην μελέτη των συνθηκών του ευτροφισμού στον υδάτινο αποδέκτη. Επιπλέον το μοντέλο BATHTUB συνδυάζεται με άλλα προγράμματα πιο συγκεκριμένα τα FLUX και PROFILE. Το πρώτο (FLUX) υπολογίζει τις τιμές των αρχικών συγκεντρώσεων των θρεπτικών, το οποίο επιτρέπει την μείωση των απαιτούμενων δεδομένων εισόδου για το BATHTUB, ενώ συμβάλλει και στον εκτίμηση του σφάλματός του. Το δεύτερο (PROFILE) δίνει την δυνατότητα της αξιολόγησης και της ανάλυσης των πληροφοριών της δειγματοληψίας, π.χ. η συγκέντρωση του διαλυμένου οξυγόνου.

2.2 Ανάλυση ευαισθησίας

2.2.1 Εισαγωγή

Η ανάλυση ευαισθησίας αποτελεί ένα ισχυρό εργαλείο στον τομέα των μαθηματικών μοντέλων και έχει ευρεία χρήση σε πολλά επιστημονικά πεδία. Κύριο αντικείμενό της, αποτελεί η συσχέτιση των διαφοροποιήσεων στα μεγέθη εξόδου ενός αριθμητικού μοντέλου με των αντίστοιχων στα μεγέθη εισόδου (Pianosi et al., 2016). Μέσα από τις αναλύσεις δύναται να εκτιμηθεί, αλλά και να ποσοτικοποιηθεί, η επίδραση μιας διαταραχής των παραμέτρων εισόδου ενός μοντέλου στα αποτελέσματα αυτού (Saltelli, 2000). Ο τελικός στόχος είναι η αναγνώριση των σημαντικότερων παραμέτρων του μοντέλου, καθώς και η αξιολόγηση της βαρύτητας που θα δοθεί σε αυτές για την καλύτερη προσομοίωση των φυσικών διαδικασιών. Ο γενικότερος αυτός ορισμός, περιλαμβάνει ευρύ φάσμα εφαρμογών, το οποίο πρακτικά σημαίνει ότι υπάρχουν και διάφορες μέθοδοι σύμφωνα και με την πολυπλοκότητα των διαδικασιών αλλά και τον στόχο κάθε εφαρμογής και μελέτης. Η ταξινόμηση των μεθόδων πραγματοποιείται αναλόγως με τα όσα παραπάνω αναφέρθηκαν και παρουσιάζεται στην συνέχεια. Επιπλέον, παρατηρείται χρήση της ανάλυσης ευαισθησίας και σε άλλες εφαρμογές, όπως τον υπολογισμό ρίσκου, την βαθμονόμηση μοντέλων, την αξιολόγηση της ικανότητας και της εγκυρότητας αυτών αλλά και για αναλύσεις αβεβαιότητας στα πιο σύνθετα και απαιτητικά προβλήματα (Devenish et al., 2012, Paton et al., 2013).

2.2.2 Ταξινόμηση μεθόδων ανάλυσης ευαισθησίας

Ένας πρώτος βασικός διαχωρισμός για τις μεθόδους είναι σε τοπικές (local) και καθολικές (global). Η διαφορά τους εντοπίζεται στην οριοθέτηση των διαστημάτων και των τιμών για τα μεγέθη εισόδου (παράμετροι), σύμφωνα με τα οποία προκύπτουν οι διαφοροποιήσεις στα μεγέθη εξόδου (μεταβλητές). Έτσι στις τοπικές μεθόδους, οι παράμετροι επιλέγονται γύρω από μία συγκεκριμένη τιμή, συνήθως από την βιβλιογραφία. Αντίθετα, στις καθολικές μεθόδους, οι παράμετροι επιλέγονται, με κάποιον συνήθως τυχαίο τρόπο, σε όλο το πιθανό εύρος τους. Τα παραπάνω οδηγούν στην διαφοροποίηση και των κατάλληλων εφαρμογών για τις οποίες χρησιμοποιούνται οι εκάστοτε μέθοδοι. Πιο συγκεκριμένα, οι τοπικές είναι αποτελεσματικές για την αξιολόγηση της εγκυρότητας ενός μοντέλου όταν οι παράμετροι λάβουν τιμές μακριά από την προτεινόμενη τιμή τους. Αυτή η αξιολόγηση πραγματοποιείται μέσω δεικτών με μερικές παραγώγους ή πεπερασμένες διαφορές (Hill and Tiedeman, 2007). Όσον αφορά τις καθολικές μεθόδους, κρίνονται αποτελεσματικές σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών όπως: βαθμονόμηση μοντέλων (Sieber and Uhlenbrook, 2005; Harper et al., 2011; Nossent et al., 2011; Kelleher et al., 2013; Shin et al., 2013; Butler et al., 2014), μείωση αβεβαιότητας (Hamm et al., 2006), ανάλυση των σημαντικότερων συστημάτων ελέγχου (Pastres et al., 1999), υποστήριξη για επαρκή λήψη αποφάσεων (Nguyen and de Kok, 2007; Singh et al., 2014; Anderson et al., 2014).

Επιπρόσθετα, οι μέθοδοι χωρίζονται σε ποιοτικές και ποσοτικές, σύμφωνα με τον τρόπο υπολογισμού και παρουσίασης της ευαισθησίας για την εκάστοτε παράμετρο. Στις ποσοτικές μεθόδους ορίζεται για κάθε παράμετρο έναν δείκτη, ο οποίος έχει προκύψει από εκτιμήσεις της σχετικής της σημαντικότητας με το αποτέλεσμα του μοντέλου. Αντίθετα οι ποιοτικές μέθοδοι παρουσιάζουν την σημαντικότητα αυτή μέσω διαγραμμάτων και οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων και των προβλέψεων του μοντέλου. Μερικά από τα διαγράμματα αυτά αποτελούν τα tornado plot (Howard, 1998 και Powell and Baker, 1992), διασπορών (Beven, 1993 και Kleijnen and Helton, 1999a). Συνήθως προτείνεται η χρησιμοποίηση των ποιοτικών μεθόδων ως συμπληρωματικές στις ποσοτικές.

Ένας επιπλέον διαχωρισμός στις μεθόδους, αποτελεί ο τρόπος κατασκευής του δείγματος των τιμών για τις παραμέτρους, το οποίο χρειάζεται για τον υπολογισμό των δεικτών ευαισθησίας. Δύο τρόποι ξεχωρίζουν: 1) ο «μια-την-φορά» (one-at-a-time, OAT), κατά τον οποίο μεταβάλλεται μόνο μία από τις παραμέτρους, ενώ όλες οι υπόλοιπες διατηρούνται

σταθερές, και 2) ο «όλες-την-φορά» (all-at-a-time, AAT), όπου όλες οι παράμετροι μεταβάλλονται ταυτόχρονα. Ο δεύτερος τρόπος, όπως είναι αναμενόμενο, πέρα από την άμεση επίδραση της κάθε παραμέτρου στο αποτέλεσμα, επιτρέπει τον υπολογισμό της αλληλεπίδρασης μεταξύ τους. Στις τοπικές μεθόδους συνήθως επιλέγεται OAT για την δημιουργία του δείγματος των παραμέτρων, ενώ στις καθολικές επιλέγεται οποιαδήποτε από τις δύο. Πρακτικώς με τον AAT, ποσοτικοποιούνται οι αλληλεπιδράσεις, κάτι το οποίο δεν επιτρέπει ο OAT, ωστόσο είναι υπολογιστικά και συνεπώς χρονικά πιο απαιτητικός.

2.2.3 Στόχος της ανάλυσης ευαισθησίας

Στο σημείο αυτό, θα ήταν χρήσιμο να παρουσιάσουμε τους βασικούς στόχους για τους οποίους πραγματοποιείται η ανάλυση ευαισθησίας σε ένα αριθμητικό μοντέλο. Σύμφωνα με τον Saltelli et al (2008), αυτοί αποτελούνται από τρεις: 1) την ιεράρχηση των παραμέτρων, 2) την διαλογή τους σε μη σημαντικούς και σημαντικούς και 3) την χαρτογράφηση των διαστημάτων τους. Πιο αναλυτικά, η ιεράρχηση πραγματοποιείται με την ταξινόμηση της σημαντικότητας της εκάστοτε παραμέτρου, με το τελικό αποτέλεσμα και τις διαφοροποιήσεις του. Η διαλογή αναγνωρίζει τις παραμέτρους που έχουν μηδαμινή συνεισφορά στην μεταβλητότητα των μεγεθών εξόδου. Τέλος η χαρτογράφηση, πρακτικά υπολογίζει τον χώρο από τον οποίο λαμβάνουμε τιμές των παραμέτρων που παράγουν ακραία αποτελέσματα για τις μεταβλητές του μοντέλου μας. Συνεπώς αναλόγως τους σκοπούς για τους οποίους πραγματοποιούνται οι αναλύσεις ευαισθησίας, χρειάζεται και να επιλεγεί η κατάλληλη μέθοδος μιας και η κάθε μια έχει και διαφορετικές δυνατότητες.

2.2.4 Ανάλυση ευαισθησίας και ανάλυση αβεβαιότητας

Όπως ήδη αναφέρθηκε, η ανάλυση ευαισθησίας χρησιμοποιείται και συνδυαστικά με άλλους τύπου αναλύσεων, με τις πιο σημαντικές από αυτές να αποτελούν την ανάλυση αβεβαιότητας και την βαθμονόμηση των μοντέλων. Έχει προταθεί (Saltelli et al., 2008) ότι η ανάλυση ευαισθησίας και ειδικότερα οι καθολικές μέθοδοι (GSA) έχουν σημαντική συσχέτιση με την ανάλυση αβεβαιότητας. Η δεύτερη ποσοτικοποιεί την συνολική αβεβαιότητα του μοντέλου, η οποία και τελικά καταμερίζεται από την πρώτη στα διαφορετικά μεγέθη εισόδου με την αντίστοιχη αβεβαιότητά που εμπεριέχουν και εισάγουν

στο μοντέλο. Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω η Pianosi et al., 2016, υποστηρίζει ότι οι δύο αναλύσεις είναι συνετό να χρησιμοποιούνται συμπληρωματικά η μία με την άλλη. Όταν πραγματοποιείται GSA, η ανάλυση αβεβαιότητας παρέχει επιβεβαίωση ότι τα αποτελέσματά της GSA, βρίσκονται σε αποδεκτά όρια όσον αφορά την συμπεριφορά του μοντέλου μας. Αντιστοίχως, αφού πραγματοποιηθεί ανάλυση αβεβαιότητας, οι δείκτες ευαισθησίας προσφέρουν αξιόλογες επιπλέον λεπτομέρειες, χωρίς κάποιο σημαντικό επιπρόσθετο κόστος ή χρόνο.

2.2.5 Ανάλυση ευαισθησίας και βαθμονόμηση μοντέλων

Η διαδικασία της βαθμονόμησης ενός μοντέλου περιγράφεται ως η διαδικασία εκτίμησης των παραμέτρων με τέτοιο τρόπο, ώστε τα αποτελέσματα του μοντέλου να είναι, σε όσο το δυνατόν καλύτερη συμφωνία με αντίστοιχες φυσικές παρατηρήσεις (Pianosi et al., 2016). Η ανάλυση ευαισθησίας συμβάλλει στην αναγνώριση της συσχέτισης μεταξύ της μεταβλητότητας των παραμέτρων εισόδου και των αποτελεσμάτων του μοντέλου. Μέσα από αυτά, ποσοτικοποιείται και η συμφωνία αυτή με τις φυσικές παρατηρήσεις. Τοπικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται εφόσον έχει βρεθεί η αποδεκτή τιμή των παραμέτρων και μέσα από την ανάλυση ερευνάται η αβεβαιότητα τους (Freer et al., 1996). Καθολικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται μετά την βαθμονόμηση, με στόχο να μειωθεί το διάστημα των τιμών για τις παραμέτρους σε εκείνο που παρατηρείται ορθότερη συμπεριφορά του μοντέλου. Αντίθετα για ένα πιο σύνθετο μοντέλο η GSA συμβάλλει στον αποκλεισμό των μη σημαντικών παραμέτρων ως προς την βαθμονόμηση (van Werkhoven et al., 2009), στην επιλογή καλύτερων διαστημάτων τιμών για την περαιτέρω έρευνα περί αυτά με τοπικές μεθόδους (Spearg et al., 1994), ενώ εξετάζει και άλλες παραμέτρους του συνολικού προβλήματος όπως ο τρόπος και η ακρίβεια των φυσικών μετρήσεων (Baroni and Tarantola, 2014).

2.2.6 Μέθοδοι ανάλυσης σταθερών διαταραχών

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω, υπάρχουν πολλές και διαφορετικές μέθοδοι με τις οποίες πραγματοποιείται η ανάλυση ευαισθησίας. Η κάθε μια έχει το κατάλληλο πεδίο εφαρμογής και η επιλογή τους θα πρέπει να γίνεται, αφού έχει καθοριστεί πλήρως ο σκοπός τους αλλά

και να έχει ληφθεί υπόψη το υπολογιστικό τους κόστος. Στην συνέχεια θα παρουσιαστούν μερικές από τις πιο διάσημες και ευρέως χρησιμοποιούμενες, σύμφωνα και με την βιβλιογραφία στην ευρύτερη επιστήμη της ποιότητας του νερού.

Αρχικά, έχουμε μεθόδους με εισαγωγή σταθερών διαταραχών σε όλες τις παραμέτρους, ενώ η ευαισθησία ποσοτικοποιείται με αριθμητικούς δείκτες που χρησιμοποιούν μερικές παραγώγους. Η διαταραχή των παραμέτρων πραγματοποιείται συνήθως με τον τρόπο «μια-την-φορά»(OAT) και αποτελεί την απλούστερη μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας. Οι αριθμητικοί δείκτες υπολογίζονται με την μερική παράγωγο της μεταβολής των μεγεθών εξόδου του μοντέλου y , σε σχέση με την μεταβολή του εκάστοτε μεγέθους εισόδου x (Pianosi et al., 2016). Η βάση των παραγώγων αυτών, είναι οι σειρές Taylor και έχουν αναλυθεί και εξηγηθεί από τους Helton (1993) και Borgonono (2008). Ο γενικός τύπος για τους αριθμητικούς δείκτες παρουσιάζεται παρακάτω:

$$S_{py_{ji}} = \frac{\frac{\Delta y_i}{y_{i,0}}}{\frac{\Delta p_j}{p_{j,0}}}$$

όπου: Δy_i = η διαφορά μεταξύ της τιμής της μεταβλητή εξόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης λόγω της διαταραχή της παραμέτρου εισόδου p_j ,

Δp_j : η διαφορά μεταξύ της τιμής της παραμέτρου εισόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης μετά την διαταραχή της,

$y_{i,0}$: η τιμή της μεταβλητής εξόδου στην κατάσταση αναφοράς,

$p_{j,0}$: η τιμή της παραμέτρου εισόδου στην κατάσταση αναφοράς.

Γενικότερα, οι μέθοδοι αυτοί είναι οι πιο απλοί και οι λιγότεροι κοστοβόροι από την μεριά του υπολογιστικού κόστους. Ωστόσο, πρέπει να επισημανθεί πως παρουσιάζουν μόνο την ευαισθησία τοπικά, ενώ δεν απεικονίζουν και τυχόν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Κρίνονται ιδανικοί για μια αρχική εκτίμηση της σημαντικότητας των μεγεθών εισόδου σε ένα μοντέλο, ώστε να γίνει και μια διαλογή για περαιτέρω πιο απαιτητικές αναλύσεις, δίχως να ξεχνάμε και τους περιορισμούς περί αλληλεπιδράσεων.

2.2.7 Μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλής αρχής διαταραχών

Στην συνέχεια έχουμε τις μεθόδους πολλαπλής αρχής των διαταραχών των παραμέτρων, οι οποίες αποτελούν υβρίδιο ανάμεσα στις τοπικές και τις καθολικές μεθόδους. Πιο αναλυτικά, υπολογίζονται οι διαταραχές των μεταβλητών από πολλά διαφορετικά σημεία – τιμές των παραμέτρων και η καθολική ευαισθησία αποτελεί το άθροισμα των διαταραχών αυτών σε όλα τα σημεία που επιλέχθηκαν. Οι συγκεκριμένες μέθοδοι διαφέρουν σε σχέση με το αν χρησιμοποιούν πεπερασμένες διαφορές ή κάποια άλλο μέγεθος (απόλυτες τιμές τους, τετράγωνα) για τους δείκτες, στον τρόπο με τον οποίο επιλέγουν τα αρχικά σημεία – τιμές και το μέγεθος των διαταραχών Δ_i και στο πώς εκτιμούν τον τελικό δείκτη για την ευαισθησία κάθε παραμέτρου (Pianosi et al., 2016). Η πιο γνωστή μέθοδος είναι η Morris (Morris, 1991), η οποία είναι και γνωστή από τον Saltelli et al., 2008 ως τεστ στοιχειώδους επίδρασης (elementary effect test, EET). Λαμβάνεται ως μέγεθος r το μέσο των πεπερασμένων διαφορών EEs, μέσα από το οποίο μετριέται και η ευαισθησία με τον παρακάτω δείκτη:

$$S_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r EE^j$$

Η μέθοδος αποτελεί υβρίδιο μεταξύ τοπικών και καθολικών, διότι το μέγεθος της τυπικής απόκλιση των EEs απεικονίζει την αλληλεπίδραση της παραμέτρου i με τις υπόλοιπες. Συγκεκριμένα, όσο μεγαλύτερη τυπική απόκλιση τόσο μεγαλύτερη και η ανάδραση που υπάρχει μεταξύ τους. Επομένως, χωρίς επιπλέον προσομοιώσεις δίνονται πληροφορίες και για την αλληλεπίδραση των παραμέτρων κάτι που δεν το επέτρεπαν οι προηγούμενες μέθοδοι. Οι Campolongo and Saltelli (1997), πρότειναν την χρήση απόλυτων τιμών για να αποφευχθούν προβλήματα με τυχόν αρνητικές τιμές να ακυρώνουν η μια την άλλη.

Όσον αφορά την επιλογή των αρχικών σημείων – τιμών για το δείγμα, αλλά και για το μέγεθος των διαταραχών Δ_i , ο Morris (1991) πρότεινε την κατασκευή r τροχιών με $M+1$ στοιχεία, όπου M το πλήθος των παραμέτρων εισόδου του μοντέλου μας. Το αρχικό σημείο κάθε τροχιάς επιλέγεται τυχαία και τα σημεία επιλέγονται με την διαταραχή μιας παραμέτρου την φορά για το διάστημα Δ . Ο χρήστης καθορίζει το μέγεθος L , από το οποίο

προκύπτουν το μέγεθος του χώρου από το οποίο επιλέγονται οι τιμές (ισούται με $1/(L-1)$ από το πιθανό διάστημα τιμών της κάθε παραμέτρου) και το μέγεθος της διαταραχής $\Delta = L/(2*L-1)$. Τυπικές τιμές για το L είναι 4 έως 8, επομένως για το Δ είναι 0,76 έως 0,57. Σύμφωνα με αυτήν την μέθοδο δειγματοληψίας, αποφεύγεται η περιγραφή μόνο τοπικών συμπεριφορών του μοντέλου, ωστόσο τα αποτελέσματα γίνονται μη αποδεκτά εάν το μοντέλο χαρακτηρίζεται από μεγάλη μη – ομαλότητα. Για αυτούς τους λόγους έχουν προταθεί και άλλοι τρόποι κατασκευής των δειγμάτων με τους βασικότερους του van Griensven et al., (2006), ο οποίος χρησιμοποιεί Latin – Hypercube δειγματοληψία για την αρχική τιμή των τροχιών r και της Campolongo et al., (2007) όπου δημιουργείται ένα μεγάλο πλήθος τροχιών από τις οποίες επιλέγεται ένα υπόδειγμα πλήθους r , με στόχο την μεγιστοποίηση της επιλογής των τιμών σε όλο το πιθανό διάστημα των παραμέτρων.

Για όλες τις παραπάνω μεθοδολογίες το υπολογιστικό κόστος σε αριθμό επαναλήψεων ισούται με $r(M+1)$, το οποίο και είναι σημαντικά μικρότερο από τις αντίστοιχες καθολικές μεθόδους με AAT κατασκευή δειγμάτων. Επομένως η μέθοδος Morris είναι ιδανική είτε για μοντέλα με σημαντικό χρόνο προσομοίωσης, είτε με σημαντικό πλήθος παραμέτρων εισόδου. Όπως έδειξαν και οι Nguyen and Kok, 2007, η συγκεκριμένη μέθοδος είναι ιδανική για αρχική διαλογή των παραμέτρων, έτσι ώστε να απορριφθούν οι μη σημαντικές για τις μετέπειτα πιο χρονικά απαιτητικές καθολικές μεθόδους, αλλά και για ιεράρχηση των παραμέτρων. Μέθοδοι παρόμοιας λογικής, χρησιμοποιούν τετραγωνισμένες πεπερασμένες διαφορές, το οποίο επιτρέπει την σύνδεσή τους και με τις μεθόδους διασπορών που θα αναφερθούν στην συνέχεια. Οι Sobol' and Kucherenko (2009) προτείνουν την χρήση της μέσης τιμής των τετραγωνισμένων διαφορών και υποδεικνύουν την ικανότητά του να παρέχει ένα άνω όριο για τις τιμές των δεικτών συνολικών επιδράσεων. Αυτό το χαρακτηριστικό καθιστά την προσέγγιση αυτή ιδανική για την διαδικασία της διαλογής των παραμέτρων, μιας και μικρές τιμές των άνω ορίων σημαίνουν ότι και η παράμετρος είναι μη – σημαντική για το μοντέλο. Αντίθετα οι ίδιοι υποστηρίζουν, ότι η ιεράρχηση δεν πραγματοποιείται με ικανοποιητικό τρόπο μέσα από την προσέγγιση αυτή. Ο Rakovec et al., (2014) προτείνει μια διαφορετική αλλά κοντινή προσέγγιση με την χρήση τετραγωνισμένων πεπερασμένων διαφορών ως δείκτες σημαντικότητας, την DELSA (Distributed Evaluation of Local Sensitivity Analysis). Οι τιμές της σημαντικότητας δεν συναθροίζονται, αλλά ερευνάται

όλη η συνάρτηση πυκνότητάς τους και το τελικό συνάθροισμα πραγματοποιείται με την χρήση της διάμεσης τιμής και όχι της μέσης.

2.2.8 Μέθοδοι ανάλυσης με συσχέτιση ή παλινδρόμηση

Οι επόμενες μέθοδοι για την εκτίμηση της ευαισθησίας του μοντέλου, βασίζονται στην στατιστική ανάλυση των δεδομένων εισόδου και εξόδου του μοντέλου τα οποία παράγονται με τυχαίες προσομοιώσεις τύπου Monte Carlo. Οι στατιστικές αναλύσεις αυτές πραγματοποιούνται είτε μέσω μεθόδων συσχέτισης με εισηγητές τους Saltelli and Marivoet (1990), είτε μέσω αναλύσεων παλινδρόμησης από τους Iman and Helton (1988). Οι μέθοδοι συσχέτισης χρησιμοποιούν τον δείκτη συσχέτισης μεταξύ των μεγεθών εισόδου και εξόδου ως δείκτη ευαισθησίας. Δείκτες συσχέτισης που χρησιμοποιούνται είναι οι: συντελεστής Pearson (CC) και ο μερικός Pearson (PCC), οι οποίοι χρησιμοποιούνται όταν το μοντέλο είναι γραμμικό και ο συντελεστής Spearman (SRCC) ή μερικός συντελεστής ιεράρχης (PRCC) για μοντέλα μη γραμμικά αλλά σχετικά μονότονα (Pastres et al., 1999). Η Pianosi et al., (2016), υποστηρίζει ότι η επιλογή ανάμεσα στους παραπάνω συντελεστές εξαρτάται από τον βαθμό γραμμικότητας και μονοτονίας του μοντέλου, ο οποίος μπορεί να αξιολογηθεί από διαγράμματα διασποράς των παραμέτρων και των μεταβλητών του μοντέλου. Για πιο σύνθετες μελέτες, όπου θα πρέπει να αξιολογηθούν ταυτόχρονα πολλαπλές μεταβλητές ο Minnuno et al., (2013) χρησιμοποιεί την ανάλυση κανονικής συσχέτισης (CCA).

Για τις μεθόδους παλινδρόμησης, οι δείκτες ευαισθησίας εκτιμώνται από την εφαρμογή παλινδρόμησης στο δείγμα των μεγεθών εισόδου – εξόδου. Η απλούστερη και πιο συχνή μέθοδος είναι η γραμμική παλινδρόμηση με σχέση του τύπου, $y = \alpha_i + b_i \cdot x_i$. Η εκτίμηση των ελάχιστων τετραγώνων του συντελεστή παλινδρόμησης b_i αποτελεί το μέτρο της ευαισθησίας. Πολλά από τα μεγέθη για τα οποία μετριέται η ευαισθησία τους έχουν διαφορετικές μονάδες μέτρησης, επομένως χρησιμοποιείται ένας κανονικοποιημένος δείκτης (SRC) (Pianosi et al., 2016):

$$S_i = b_i \frac{SD(x_i)}{SD(y)}$$

όπου SD ορίζεται η τυπική απόκλιση του μεγέθους.

Η γραμμική παλινδρόμηση είναι απλή στην χρήση ενώ μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλαπλής μορφής και να υπολογιστούν οι ευαισθησίες για όλες τις παραμέτρους ταυτόχρονα. Ωστόσο, όπως παρουσίασε ο Hall et al., (2009), κρίνεται ανεπαρκής για μοντέλα που έχουν μη – μονότονες σχέσεις ή σχέσεις σημαντικά μη – γραμμικές. Για μοντέλα με αυτές τις συνθήκες, οι Harper et al., (2011) και Singh et al., (2014) πρότειναν μια μέθοδο την Classification and Regression Trees (CART), η οποία χρησιμοποιείται τόσο για ιεράρχηση των παραμέτρων αλλά και για χαρτογράφηση των διαστημάτων τους. Επίσης, παρουσιάζει ευκολία στην διαχείριση και την επεξεργασία μη - αριθμητικών μεγεθών εισόδου και εξόδου.

2.2.9 Μέθοδοι ανάλυσης τοπικής ευαισθησίας (RSA)

Η ανάλυση τοπικής ευαισθησίας (RSA), γνωστή και ως φιλτράρισμα Monte Carlo, αποτελείται από διάφορες μεθόδους που ερευνούν περιοχές τις τιμές αυτές των παραμέτρων, οι οποίες παράγουν συγκεκριμένες τιμές για τις μεταβλητές του μοντέλου. Χρησιμοποιούνται κυρίως για χαρτογράφηση των διαστημάτων των τιμών για τα μεγέθη εισόδου, αλλά και για ανάλυση του ελέγχου των συστημάτων (Pianosi et al., 2016). Εισάχθηκε για πρώτη φορά από τον Young et al., (1978) και στην συνέχεια αναλύθηκε από τους Spear and Hornberger (1980). Για την εφαρμογή της RSA, υπάρχουν διάφορες μεθοδολογίες οι οποίες παρουσιάζονται παρακάτω. Αρχικά, μπορούμε να χωρίσουμε τις παραμέτρους σε δύο υποσύνολα (συμπεριφορικές και μη – συμπεριφορικές), με γνώμονα την συμπεριφορά του μοντέλου και των αποτελεσμάτων των μεταβλητών του. Μια διαφορετική μεθοδολογία περιλαμβάνει τον διαχωρισμό των δειγμάτων των παραμέτρων, σύμφωνα με ένα προκαθορισμένο όριο των τιμών των μεταβλητών, οι οποίες προκύπτουν από αυτά. Στην συνέχεια, τα δύο υποσύνολα των μεγεθών εισόδου συγκρίνονται με στόχο την κατανόηση της πλήρους συμπεριφοράς του μοντέλου. Η επόμενη μεθοδολογία περιλαμβάνει την κατασκευή της γραφικής παράστασης των συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας για τις παραμέτρους (συμπεριφορικές και μη). Από αυτές τις απεικονίσεις λαμβάνονται ποιοτικά πληροφορίες για τα διαστήματα των παραμέτρων, δηλαδή την διαδικασία της χαρτογράφησης. Επιπλέον, η απόκλιση μεταξύ των δύο δειγμάτων μπορεί να υπολογιστεί με τον δείκτη Kolmogorov – Smirnov:

$$S_i = \max_{X_i} |F_{X_i|y_b} \cdot (x_i|y \in Y_b) - F_{X_i|y_{nb}} \cdot (x_i|y \in Y_{nb})|$$

όπου $F_{X_i|y_b}$ και $F_{X_i|y_{nb}}$ οι εμπειρικές αθροιστικές συναρτήσεις κατανομής των x_i του δείγματος με τις συμπεριφορικές παραμέτρους και αντίστοιχα με τις μη – συμπεριφορικές. Η χρησιμοποίηση εμπειρικών συναρτήσεων κατανομής έχει ως αποτέλεσμα την καλή απόδοση της μεθόδου ακόμα και σε μοντέλα με μικρά δείγματα, όπως ανέλυσε και ο Norton (2015). Ωστόσο, πρέπει να αναφερθεί ότι ο προηγούμενος δείκτης δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για διαλογή των παραμέτρων. Όπως υποστηρίζει ο Saltelli et al., (2008) εάν ο δείκτης Kolmogorov – Smirnov έχει μηδενική τιμή, αυτό αποτελεί αναγκαία αλλά όχι ικανή συνθήκη για να θεωρήσουμε ότι και η ευαισθησία είναι μηδενική. Το παραπάνω οφείλεται στο γεγονός ότι οι παράμετροι που συμβάλλουν στην μεταβλητότητα των μεγεθών εξόδου μόνο λόγω αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους, δύναται να έχουν τις ίδιες συμπεριφορικές και μη – συμπεριφορικές συναρτήσεις κατανομής. Το βασικό πλεονέκτημα της RSA εντοπίζεται στην ευκολία εφαρμογής της μεθόδου σε οποιοδήποτε μοντέλο, ακόμα και με μη – αριθμητικά μεγέθη εξόδου, με την προϋπόθεση ότι το κριτήριο διαχωρισμού των παραμέτρων είναι ορθά δομημένο και εξακριβωμένο και από κάποια ποιοτική ανάλυση του μοντέλου. Αντίθετα, όταν δεν υπάρχει ξεκάθαρος ορισμός του κριτηρίου διαχωρισμού η μέθοδος παρουσιάζει προβλήματα και . Οι Freer et al., (1996), Wagener et al., (2001) και Tang et al., (2007b) μελέτησαν τρόπους παράκαμψης του κριτηρίου διαχωρισμού ώστε η RSA να εφαρμοστεί χωρίς συγκεκριμένα όρια. Συγκεκριμένα, εξέτασαν την ομαδοποίηση των μεγεθών εξόδου σε σύνολα προκαθορισμένου μεγέθους και ίσου χωρικού διαστήματος και την σύγκριση των συναρτήσεων κατανομής των μεγεθών εξόδου με αυτές των μεγεθών εισόδου.

2.2.10 Μέθοδοι ανάλυσης διασπορών

Οι αναλύσεις ευαισθησίας οι οποίες βασίζονται σε διασπορές έχουν τρεις βασικές αρχές: 1) οι παράμετροι θεωρούνται ως στοχαστικού τύπου μεγέθη και εισάγουν μια συνάρτηση κατανομής στα μεγέθη εξόδου, 2) η μεταβλητότητα της συνάρτησης κατανομής των μεγεθών εξόδου αποτελεί ικανοποιητική απεικόνιση της αβεβαιότητας τους και 3) η συνεισφορά στην

μεταβλητότητα των μεγεθών εξόδου της εκάστοτε παραμέτρου, έχει ικανοποιητική συσχέτιση με την ευαισθησία των τελευταίων (Pianosi et al., 2016). Υπάρχουν αρκετοί δείκτες ευαισθησίας που βασίζονται στις διασπορές όπως ο δείκτης επιδράσεων πρώτης τάξεως (κύριων επιδράσεων) S_i . Μέσω αυτού μετριέται η άμεση συνεισφορά των εκάστοτε παραμέτρων στις μεταβλητές του μοντέλου ή πιο συγκεκριμένα την αναμενόμενη μείωση στην μεταβλητότητα των μεγεθών εξόδου, εάν καθοριστεί ένα από τα μεγέθη εισόδου. Ο τύπος όπως αναγράφεται στον Saltelli et al., (2010) έχει την εξής μορφή:

$$S_i^F = \frac{V_{X_i} \cdot (E_{X_{\sim i}} \cdot (Y|X_i))}{V(y)}$$

όπου E η αναμενόμενη τιμή, V η διασπορά και $X_{\sim i}$ αναφέρεται σε πίνακα με όλες τις παραμέτρους εκτός από την i -οστή. Αντίστοιχα στο ίδιο άρθρο προτείνεται ο δείκτης συνολικών επιδράσεων, ο οποίος υπολογίζει την συνολική συνεισφορά της εκάστοτε παραμέτρου λαμβάνοντας υπόψη και τις αλληλεπιδράσεις της με τις υπόλοιπες.

$$S_i^T = \frac{E_{X_{\sim i}} \cdot (V_{X_i} \cdot (Y|X_{\sim i}))}{V(y)} = 1 - \frac{V_{X_{\sim i}} \cdot (E_{X_i} \cdot (Y|X_{\sim i}))}{V(y)}$$

Οι δείκτες συνολικών επιδράσεων χρησιμοποιούνται στην διαλογή των παραμέτρων, αφού η μηδενική τιμή του είναι ικανή και αναγκαία συνθήκη για να αποδειχτεί ότι δεν επηρεάζουν το μοντέλο. Οι δείκτες κύριων επιδράσεων χρησιμοποιούνται για ιεράρχηση, ειδικότερα όταν δεν παρατηρούνται σημαντικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Επιπλέον μπορούν να οριστούν δείκτες δευτέρας τάξης, τρίτης κοκ. οι οποίοι μετρούν την συνεισφορά των παραμέτρων σε ζευγάρια, τριάδες αντίστοιχα. Έτσι δίνεται η δυνατότητα ανάλυσης των παραμέτρων και των αλληλεπιδράσεων τους σε μικρότερα υποσύνολα. Περαιτέρω ανάλυση για τον τρόπο υπολογισμού αλλά και για την αριθμητική προσέγγιση των δεικτών δίνεται στους Homma and Saltelli (1996), Sobol' (1993), Iman and Horra (1990) και Borgonovo (2007). Ο Sobol' (1993) έδειξε, ότι οι δείκτες πρώτης τάξεως αλλά και υψηλότερων τάξεων σχετίζονται με τους όρους της διασποράς των παραπάνω τύπων. Επίσης, διατηρούν αυτή την

συσχέτιση για διαφορετικού τύπου μοντέλων, αφού βασίζονται σε θεωρήσεις όπως ότι οι παράμετροι είναι ανεξάρτητες. Ωστόσο, εάν οι παράμετροι συσχετίζονται παρατηρούνται παράλογα αποτελέσματα π.χ. οι δείκτες συνολικών επιδράσεων να είναι μικρότεροι από τους δείκτες κύριων επιδράσεων ή να τείνουν στο μηδέν (Kucherenko et al., 2012). Σημαντική έρευνα για μοντέλα με εξαρτώμενες παραμέτρους και για το πώς μεταβάλλονται οι κλασικοί τύποι του Sobol' πραγματοποιήθηκε από τους Jacques et al., (2006). Παράλληλα, οι δείκτες αυτοί διαθέτουν αλγεβρικούς τύπους, εύκολους στην κατασκευή και χρήση, για την εκτίμηση τους. Οι τύποι αυτοί αναλύονται διεξοδικά από τον Saltelli et al., (2010). Ωστόσο, πρέπει να αναφερθεί ότι για να επιτευχθεί καλή εκτίμηση των δεικτών απαιτείται αρκετά μεγάλο αρχικό δείγμα, πράγμα που καθιστά την μέθοδο υπολογιστικά και χρονικά απαιτητική. Μερικές παραλλαγές που έχουν προταθεί για την μείωση του χρόνου είναι: 1) η χρήση σειρών Fourier για τον υπολογισμό των δεικτών κύριων επιδράσεων, Fourier Amplitude Sensitivity Test (FAST, Cukier et al., 1973) και η επέκταση αυτής, extended FAST για τους δείκτες συνολικών επιδράσεων (Saltelli et al., 1999) και 2) η χρήση εξομοιωτών όπως στους Oakley and O'Hagan (2004).

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν τα αναπτύγματα των σειρών Fourier (FAST και extended FAST) αποτελούν πολύ καλές εναλλακτικές στις κλασικές μεθόδους διασπορών. Συγκεκριμένα, υπολογίζουν με σημαντικά μικρότερο δείγμα τιμών τους δείκτες σημαντικότητας για τις παραμέτρους του μοντέλου. Αυτό επιτυγχάνεται, διότι σε αντίθεση με την κλασική Sobol, η τεχνική FAST μεταβάλλει όλες τις παραμέτρους, στο αντίστοιχο διάστημα τους, ταυτόχρονα χρησιμοποιώντας μια κοινή μεταβλητή s για όλες, εξοικονομώντας έτσι πολύ περισσότερο χρόνο (Norton, 2015). Πιο συγκεκριμένα, οι παράμετροι μεταβάλλονται ταυτόχρονα, με βάση μια κοινή μεταβλητή s , και οι τυχαίες τιμές τους επιλέγονται από μια συνάρτηση $G(\sin\omega_j s)$ με το s να κυμαίνεται στο διάστημα $-\pi$ και π . Η ποσότητα ω_j είναι ακέραιος αριθμός και αντικατοπτρίζει μια συχνότητα για κάθε παράμετρο, αφού αυτή παίρνει τιμές όσο το s κυμαίνεται από $-\pi$ έως π (Norton, 2015). Οι δείκτες ευαισθησίας υπολογίζονται με βάση τους τύπους που έχει προτείνει ο Saltelli, (1999), οι οποίοι χρησιμοποιούν τα ω_j , καθώς και τους συντελεστές Fourier (A_j , B_j) για να υπολογίσουν τις διασπορές των μεταβλητών εξόδου για το μοντέλο, από τις οποίες τελικά προκύπτουν οι δείκτες για τις παραμέτρους. Παρακάτω παρουσιάζονται όλοι οι τύποι που χρησιμοποιήθηκαν για την μέθοδο FAST:

$$A_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \cos(js) ds$$

$$B_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \sin(js) ds$$

$$\bar{Var}_i(Y) = 2 \sum_{j=1}^{\infty} (A_{jw_i}^2 + B_{jw_i}^2)$$

$$\bar{Var}(Y) = 2 \sum_{j=1}^{\infty} (A_j^2 + B_j^2)$$

$$S_i = \bar{Var}_i(Y) / \bar{Var}(Y)$$

Ο περιορισμός αυτής της τεχνικής εναπόκειται, στο ότι δεν μπορεί να υπολογίσει τους δείκτες συνολικών επιδράσεων και επομένως δεν παρέχει πληροφορίες για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Οι Saltelli et al., (1999) και Wang et al., (2013), ανέπτυξαν την τεχνική της extended FAST, με την οποία δίνεται η δυνατότητα υπολογισμού των δεικτών συνολικών επιδράσεων δίχως σημαντικές επιπλέον επαναλήψεις σε σχέση με την απλή FAST. Μια άλλη διαφοροποίηση της FAST, εισάγεται από τον Tarantola et al., (2006), στην οποία προτείνεται η χρήση κοινής συχνότητας για όλες τις παραμέτρους. Αυτό οδηγεί στον τελικό υπολογισμό των δεικτών κύριων επιδράσεων σε πολύ μικρότερο χρόνο από αυτόν της κλασικής FAST.

3 Περιγραφή μοντέλου

3.1 Περιοχή μελέτης

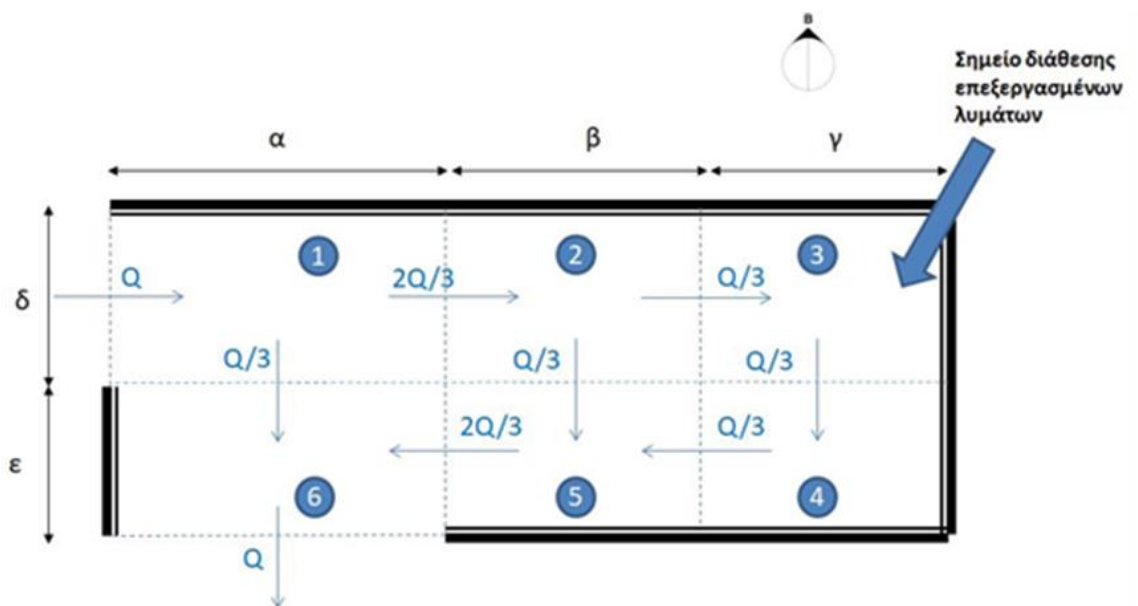
Το πρόβλημα του ευτροφισμού παρατηρείται κυρίως σε υδάτινους αποδέκτες όπως οι λίμνες αλλά και σε θαλάσσιες ακτές, οι οποίες βρίσκονται σε περιοχές με αυξημένη ανθρώπινη δραστηριότητα. Ο βασικότερος παράγοντας που επιταχύνει το πρόβλημα αυτό, είναι το μέγεθος του υδάτινου σώματος αλλά και τα χαρακτηριστικά της ροής του (Nakhaei et al., 2019). Μια μικρότερη λίμνη είναι πιο επιρρεπής στο φαινόμενο του ευτροφισμού λόγω του μεγέθους της αλλά και λόγω της περιορισμένης ροής στο εσωτερικό της, σε σχέση με έναν ποταμό ή πιο ανοιχτές ακτές.

Για το μοντέλο που εφαρμόστηκε στο πλαίσιο της εργασίας, δημιουργήθηκε μια πλασματική λίμνη, σχετικά μικρού μεγέθους. Η περιοχή στην οποία τοποθετήθηκε χαρακτηρίζεται κυρίως από γεωργικές και κτηνοτροφικές χρήσεις με τα αντίστοιχα φορτία και απορροές που συνεπάγονται από αυτές. Οι απορροές του δυτικού τμήματος της λεκάνης οδηγούνται στη λίμνη αποκλειστικά μέσω ποταμού, ενώ οι απορροές των υπολοίπων τμημάτων της λεκάνης οδηγούνται διάχυτα στη λίμνη. Η λίμνη, η οποία στο νότιο τμήμα της εκβάλλει σε παρακείμενο υγροβιότοπο, αποτελεί και αποδέκτη των επεξεργασμένων λυμάτων της παρακείμενης σε αυτήν πόλης.

Τα μαθηματικά μοντέλα χαρακτηρίζονται από χωρικές διακριτοποιήσεις, με τις οποίες διαχωρίζεται ο υδάτινος αποδέκτης σε κελιά-στοιχεία, μέσα στα οποία πραγματοποιούνται οι διεργασίες και οι υπολογισμοί. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να απλοποιούνται οι υπολογισμοί και να επιλύονται οι πολύπλοκες και πεπλεγμένες εξισώσεις που κυβερνούν αυτά τα φαινόμενα. Η επιλογή του πλήθους των στοιχείων πλήρους μίξης εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, όπως τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του υδάτινου αποδέκτη, την πυκνότητα και την διάταξη των δειγματοληπτικών σταθμών καθώς και την φύση των ποιοτικών παραμέτρων, τις οποίες θέλουμε να προσομοιώσουμε. Το μοντέλο ευτροφισμού που αναπτύχθηκε χαρακτηρίζεται ως ποιοτικό, επομένως αρκεί η εκτίμηση χωρικά μέσων δεικτών για τις παραμέτρους για μεγάλα τμήματα του αποδέκτη. Οι παροχές μεταξύ των επικοινωνούντων στοιχείων εκτιμώνται από τα πεδία ταχυτήτων που προκύπτουν από ρευματομετρήσεις και υδροδυναμικές προσομοιώσεις της περιοχής μελέτης. Τελικά το μοντέλο έχει ικανοποιητική ακρίβεια στον υπολογισμό των μέσων τιμών για μεγάλα χρονικά

διαστήματα προσομοίωσης αλλά και ελάχιστων και μέγιστων τιμών. Πέρα από την διαδικασία της μεταγωγής, η οποία περιγράφεται επαρκώς από την παραπάνω ανάλυση, πρέπει να προσομοιωθεί με κατάλληλο τρόπο και η διαδικασία της διασποράς. Κάτι τέτοιο επιτυγχάνεται με τον προσδιορισμό της τιμής των συντελεστών διασποράς για όλο το πεδίο προσομοίωσης. Στο μοντέλο αυτό, θεωρήθηκε σταθερός συντελεστής σε όλο το γεωμετρικό πεδίο και τιμή $E = 2,5 \text{ m}^2/\text{s}$.

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω, στην παρούσα εργασία επιλέχθηκε η λίμνη να διαχωριστεί σε έξι στοιχεία πλήρους μίξης, ενώ λήφθηκε η θεώρηση του συνεχούς υδάτινου μέσου για το σύνολο της λίμνης.



Σχήμα 3-1: Διάταξη και διαχωρισμός της λίμνης που δημιουργήθηκε για το μοντέλο

Όπως αναφέρθηκε, η λίμνη διαχωρίστηκε σε έξι στοιχεία πλήρους μίξης, τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των οποίων φαίνονται στην Εικόνα 3-1. Μεταξύ των στοιχείων υπάρχει ροή με τις αναλογίες που απεικονίζονται και είναι σταθερή για όλο τον χρόνο. Επίσης φαίνονται τα όρια από τα οποία ξεκινά και ολοκληρώνεται η ροή μέσω της λίμνης, καθώς και το στοιχείο στο οποίο εισάγονται τα επεξεργασμένα λύματα. Οι αριθμητικές τιμές όλων των γεωμετρικών χαρακτηριστικών δίνονται στον Πίνακα 3-1.

Πίνακας 3-1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά της λίμνης

Πλευρά	Μήκος (m)
α	900
β	900
γ	900
δ	350
ε	350
h	10

3.2 Δομή μοντέλου ευτροφισμού

Το μαθηματικό μοντέλο που δημιουργήθηκε, βασίζεται στις διάφορες φυσικές, χημικές και βιολογικές διεργασίες που επιτελούνται και που περιγράφονται σε όρους συνέχειας για κάθε χημική ή βιολογική μεταβλητή που προκύπτει. Το μοντέλο διαμορφώθηκε βάσει των αρχών διατήρησης και συνέχειας της μάζας. Επίσης, διακρίνει τις διαδικασίες που σχετίζονται σε μεταβολές συγκεντρώσεων σε ένα οριοθετημένο κλειστό σύστημα λόγω διαταραχής της κατάστασης ισορροπίας και περιγράφει την ταχύτητα των μεταβολών με τη βοήθεια κινητικών εξισώσεων που επηρεάζονται από τις συγκεντρώσεις, τη θερμοκρασία, την ηλιακή ακτινοβολία και άλλους παράγοντες. Ακόμα, διακρίνει τις διαδικασίες όπως η μεταγωγή, η διασπορά και η καθίζηση που προκαλούν μεταβολές στις συγκεντρώσεις λόγω φαινομένων μεταφοράς ύλης.

Όπως αναφέρθηκε το μοντέλο βασίζεται στην αρχή της συνέχειας της μάζας, η οποία μπορεί να εκφραστεί με τον ακόλουθο τρόπο. Η συνολική συσσώρευση της μάζας αποτελείται από τρία διαφορετικά μέρη, τα οποία και αθροίζονται μεταξύ τους. Αυτά είναι τα εξής: 1) η ποσότητα της μάζας που εισάγεται στο σύστημα λόγω μεταγωγής, 2) η αντίστοιχη ποσότητα λόγω διασποράς καθώς και 3) η μεταβολή της μάζας στο εσωτερικό του συστήματός μας λόγω αντιδράσεων και καθίζησης. Η μαθηματική της μορφή παρουσιάζεται στην παρακάτω εξίσωση.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla E \nabla C - \nabla V C + r$$

Όπου C = συγκέντρωση (g/m^3)

t = χρόνος (d)

E = συντελεστής διασποράς (m^2/d)

V = ταχύτητα (m/d)

r = μεταβολή λόγω αντιδράσεων ή καθίζησης ($g/m^3/d$)

Η εξίσωση, δεν επιλύεται με άμεσο τρόπο λόγω της πολυπλοκότητάς της στα άμεσα υδάτινα συστήματα τα οποία και μελετώνται. Λόγω αυτού, η τελική επίλυση του μαθηματικού μοντέλου πραγματοποιήθηκε με τη θεώρηση του συνεχούς υδάτινου μέσου ως δίκτυο έξι στοιχείων πλήρους μίξης. Με αυτόν τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα μετατροπής των μερικών διαφορικών εξισώσεων σε αλγεβρικές για κάθε στοιχείο και επιτυγχάνεται η τελική επίλυσή τους. Η παρακάτω εξίσωση περιγράφει όλες αυτές τις διαδικασίες και υπολογίζει την συγκέντρωση στο εκάστοτε στοιχείο πλήρους μίξης για κάθε μεταβλητή που υπολογίζει το μοντέλο, π.χ. οργανικός άνθρακας (C), αμμωνιακό άζωτο (NH), νιτρικά (NO), ανόργανος (IP) και οργανικός (OP) φώσφορος και το διαλυμένο οξυγόνο (DO).

$$V_k \cdot \frac{dC_k}{dt} = \sum_{k,j} \{Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}C_k - a_{j,k}C_j) + E'_{k,j} \cdot (C_j - C_k)\} \pm r_k V_k + w_k$$

Όπου:

C_k = συγκέντρωση στο στοιχείο k (g/m^3)

C_j = συγκέντρωση στο στοιχείο j σε επαφή με το στοιχείο k (g/m^3)

V_k = όγκος στοιχείου k (m^3)

Q_{kj} = καθαρή είσοδος λόγω μεταγωγής από στοιχείο k στο j (m^3/d)

$a_{k,j}$ = συντελεστής (αδιάστατος)

$a_{j,k} = 1 - a_{k,j}$

[$a_{k,j}=1$ όταν $Q_{k,j}<0$ – $a_{k,j}=0$ όταν $Q_{k,j}>0$]

$E_{k,j}$ = συντελεστής διασποράς (m^2/d)

$A_{k,j}$ = επιφάνεια διατομής μεταξύ k και j (m^2)

$$E'_{k,j} = E_{kj} A_{kj} / L_{kj} \text{ (m}^3/\text{d)}$$

L_k = μήκος στοιχείου k (m)

L_j = μήκος στοιχείου j (m)

r_k = ταχύτητα μεταβολής (g/m³/d)

W_k = φόρτιση στοιχείου k (g/d)

$$L_{k,j} = (L_k + L_j) / 2 \text{ (m)}$$

Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά V_k , L_k , L_j , $A_{k,j}$ υπολογίζονται σύμφωνα και με τις τιμές από το μοντέλο της λίμνης. Για τον όγκο του κάθε στοιχείου V_k , πολλαπλασιάζονται οι δύο πλευρές του κάθε στοιχείου με το αντίστοιχο βάθος. Το βάθος της λίμνης έχει ήδη οριστεί ως σταθερό και ίσο με $h = 10$ m, σε όλη την επιφάνειά της. Οι τιμές των όγκων για όλα τα στοιχεία παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-2.

Τα μήκη L_k , L_j ανταποκρίνονται στα πραγματικά μήκη των στοιχείων και από αυτά υπολογίζονται οι όροι $L_{k,j}$, ως ο μέσος όρος τους. Επιπλέον, ορίστηκε ως παροχή του ποταμού την $Q=500000 \text{ m}^3/\text{d}$ και σύμφωνα με αυτήν την τιμή υπολογίζονται όλες οι παροχές μεταξύ των στοιχείων. Ο συντελεστής διασποράς στην λίμνη θεωρείται σταθερός καθόλη την επιφάνεια αυτής και ελήφθη ίσος με $E = 2,5 \text{ m}^2/\text{s}$. Τέλος, η διεπιφάνεια ισούται με το εμβαδό της επιφάνειας, η οποία βρίσκεται στο σημείο που επικοινωνούν τα δύο στοιχεία πλήρους μίξης. Στον Πίνακα 3-3 παρουσιάζονται συγκεντρωτικά για όλους τους πιθανούς συνδυασμούς των στοιχείων που επικοινωνούν, τα μεγέθη $L_{k,j}$, διεπιφάνειας και παροχής.

Πίνακας 3-2: Όγκος στοιχείων πλήρους μίξης της λίμνης

Στοιχείο	$V \text{ (m}^3\text{)}$
1	3150000
2	3150000
3	3150000
4	3150000
5	3150000
6	3150000

Πίνακας 3-3: Υδροδυναμικά μεγέθη για την προσομοίωση του μοντέλου

Στοιχείο	L_{jk} (m)	Διεπιφάνεια (m ²)	Παροχή (m ³ /s)
1,1	0	0	0
1,2	900	3500	-333333
1,3	0	0	0
1,4	0	0	0
1,5	0	0	0
1,6	350	9000	-166667
1,7	900	3500	500000
1,8	0	0	0
2,1	900	3500	333333
2,2	0	0	0
2,3	900	3500	-166667
2,4	0	0	0
2,5	350	9000	-166667
2,6	0	0	0
2,7	0	0	0
2,8	0	0	0
3,1	0	0	0
3,2	900	3500	166667
3,3	0	0	0
3,4	350	9000	-166667
3,5	0	0	0
3,6	0	0	0
3,7	0	0	0
3,8	0	0	0
4,1	0	0	0
4,2	0	0	0
4,3	350	9000	166667
4,4	0	0	0
4,5	900	3500	-166667
4,6	0	0	0
4,7	0	0	0
4,8	0	0	0
5,1	0	0	0
5,2	350	9000	166667
5,3	0	0	0
5,4	900	3500	166667
5,5	0	0	0
5,6	900	3500	-333333
5,7	0	0	0
5,8	0	0	0
6,1	350	9000	166667
6,2	0	0	0
6,3	0	0	0

6,4	0	0	0
6,5	900	3500	333333
6,6	0	0	0
6,7	0	0	0
6,8	350	9000	-500000

3.3 Φορτία

Για τα εξωτερικά φορτία, υπάρχουν δύο είδη: 1) επιφανειακές απορροές από τα εξωτερικά όρια της λίμνης και 2) η σημειακή επιφόρτιση λόγω της παροχής των επεξεργασμένων λυμάτων μέσω της εγκατάστασης της πόλης. Οι επιφανειακές απορροές θεωρήθηκαν ομοιόμορφες καθόλη την διάρκεια του έτους με τα ακόλουθα φορτία. Στον Πίνακα 3-4 παρουσιάζονται τα φορτία των ρύπων από τις επιφανειακές απορροές σε kg/d.

Πίνακας 3-4: Φορτία ρύπων από επιφανειακές απορροές

Είδος	Φορτία (kg/d)
Οργανικός Άνθρακας (C)	100
Αμμωνιακό Άζωτο (NH)	30
Νιτρικά (NO)	15
Ανόργανος Φώσφορος (IP)	5

Για τον τελικό υπολογισμό των εξωτερικών φορτίων λόγω επιφανειακών απορροών, εφόσον θεωρήθηκαν ομοιόμορφα κατανεμημένες, εξάχθηκε το ποσοστό της φόρτισης που αναλογεί σε κάθε στοιχείο σύμφωνα με το μήκος των ορίων του, οι τιμές των οποίων φαίνονται στον Πίνακα 3-5.

Πίνακας 3-5: Ποσοστά φόρτισης για κάθε στοιχείο πλήρους μίξης

Στοιχείο	Μήκος Ορίων (m)	Ποσοστό
1	900	0,17
2	900	0,17
3	1250	0,24
4	1250	0,24
5	900	0,17
6	0	0
Σ	5200	

Η εγκατάσταση επεξεργασίας των λυμάτων της παρακείμενης πόλης λειτουργεί καθόλη την διάρκεια της ημέρας και του έτους. Θεωρήθηκε ότι εξυπηρετεί ισοδύναμο πληθυσμό 7 500 κατοίκων, με τα αντίστοιχα φορτία οργανικού άνθρακα, αζώτου και φωσφόρου που τους αναλογούν. Επίσης θεωρήθηκε ότι η είσοδος των λυμάτων πραγματοποιείται σημειακά μόνο στο στοιχείο 3. Τα συνολικά φορτία της λίμνης με τα οποία διεκπεραιώθηκε η προσομοίωση μας, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-6.

Πίνακας 3-6: Συνολικά φορτία προσομοίωσης

Συνολικά φορτία	W_C (kg/d)	W_{IP} (kg/d)	W_{NH} (kg/d)	W_{NO} (kg/d)
1	25,96	1,30	7,79	3,89
2	25,96	1,30	7,79	3,89
3	103,56	33,53	145,37	5,41
4	36,06	1,80	10,82	5,41
5	25,96	1,30	7,79	3,89
6	0,00	0,00	0,00	0,00

3.4 Αρχικές και οριακές συνθήκες

Οι αρχικές συνθήκες είναι ίδιες σε όλα τα στοιχεία πλήρους μίξης και οι τιμές τους για όλες τις μεταβλητές παρουσιάζονται στον Πίνακα 3-7.

Πίνακας 3-7: Αρχικές συνθήκες προσομοίωσης

Μεταβλητή	Τιμή
Χλωροφύλλη (A) (μg/L)	1
Αμμωνιακό άζωτο (NH) (μg/L)	8
Νιτρικά (NO) (μg/L)	7
Ανόργανος φώσφορος (IP) (μg/L)	3
Οργανικός φώσφορος (OP) (μg/L)	1
Οργανικός άνθρακας (C) (μg/L)	50
Διαλυμένο οξυγόνο (DO) (mg/L)	5

Όσον αφορά τις οριακές συνθήκες του μοντέλου θεωρήθηκε ότι στην είσοδο της λίμνης, στο ανατολικό κομμάτι της, ρέει ποταμός με συγκεκριμένες συγκεντρώσεις για τις ποιοτικές μεταβλητές που υπολογίζει το μοντέλο. Αντιστοίχως στο όριο εξόδου, το οποίο βρίσκεται στο νότιο κομμάτι της λίμνης, υπάρχει υγροβιότοπος με ανάλογες συγκεντρώσεις. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν εμφανίζονται στον Πίνακα 3-8.

Πίνακας 3-8: Οριακές συνθήκες προσομοίωσης

Μεταβλητή	Όριο εισόδου (ποταμός)	Όριο εξόδου (προς υγροβιότοπο)
Χλωροφύλλη (A) (μg/L)	0,5	2
Αμμωνιακό άζωτο (NH) (μg/L)	6	11
Νιτρικά (NO) (μg/L)	5	10,5
Ανόργανος φώσφορος (IP) (μg/L)	2	3,8
Οργανικός άνθρακας (C) (μg/L)	35	68
Διαλυμένο οξυγόνο (DO) (mg/L)	Εκάστοτε συγκέντρωση κορεσμού	Εκάστοτε συγκέντρωση κορεσμού

3.5 Διεργασίες - Τιμές παραμέτρων

Η γενική εξίσωση επίλυσης στην οποία και βασίζεται το μοντέλο, περιλαμβάνει όρους μεταγωγής – μεταφοράς, διασποράς, καθώς και έναν όρο ο οποίος περιγράφει τις διεργασίες που επιτελούνται στο εσωτερικό του. Σε αυτόν, εμπεριέχονται όλες οι φυσικές, βιολογικές και χημικές διαδικασίες, οι οποίες έχουν ως αποτέλεσμα την μεταβολή των τιμών των μεταβλητών μας. Οι μεταβλητές που εξετάστηκαν είναι το φυτοπλαγκτόν (σε όρους χλωροφύλλης A), το αμμωνιακό άζωτο (NH), τα νιτρικά ή το οξειδωμένο άζωτο (NO), ο φώσφορος (ανόργανος IP και οργανικός OP , αντίστοιχα), ο οργανικός άνθρακας (C), το διαλυμένο οξυγόνο (DO) και η διαφάνεια (σε όρους μέτρων (m) Secchi Disk, SD). Για κάθε μια από αυτές αναζητήθηκαν τα σημαντικότερα φαινόμενα που επηρεάζουν την συγκέντρωση των παραπάνω μεταβλητών, καθώς και οι αντίστοιχες παράμετροι οι οποίες κυβερνούν τα φαινόμενα αυτά.

Στην συνέχεια θα παρουσιαστεί η γενική εξίσωση, για κάθε μεταβλητή, συμπεριλαμβανομένου όλων των εσωτερικών χημικών και βιολογικών διεργασιών.

3.5.1 Θερμοκρασία

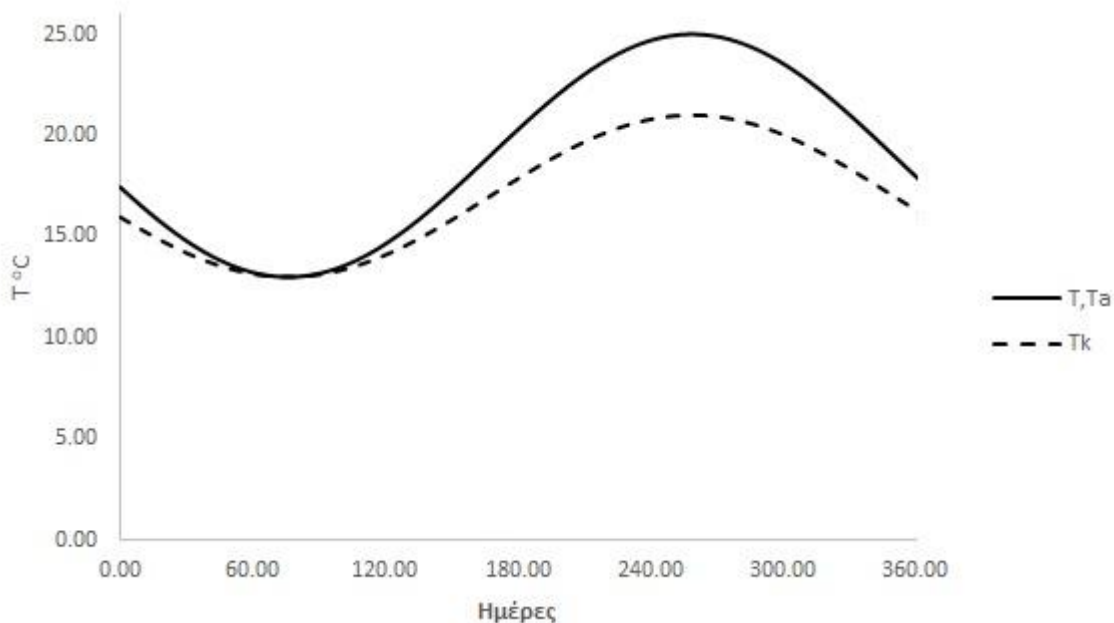
Το φαινόμενο του ευτροφισμού επηρεάζεται από τις κλιματικές συνθήκες και συνδέεται με την εποχικότητα. Οι κύριες διαδικασίες από τις οποίες αποτελείται, όπως η φωτοσύνθεση, έχουν στενή αλληλεπίδραση με την ηλιοφάνεια αλλά και με την θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Για την ακριβέστερη προσομοίωση του φαινομένου σε πραγματική χρονική κλίμακα, θα πρέπει να εισαχθούν παράμετροι ώστε να περιγράφεται με ικανοποιητικό τρόπο η εποχικότητα αυτών των περιβαλλοντικών μεταβλητών, όπως η θερμοκρασία, η ηλιοφάνεια αλλά και η φωτοπερίοδος)

Όσον αφορά την εποχική διακύμανση της θερμοκρασίας για μία θαλάσσια περιοχή, μπορεί να συσχετιστεί η θερμοκρασία σε όλο το βάθος του αποδέκτη, για το υπερκείμενο στρώμα και για το υποκείμενο στρώμα (T, T_A, T_K αντίστοιχα), με τις μέγιστες (T_{max}) και ελάχιστες (T_{min}) παρατηρούμενες τιμές. Σύμφωνα με τα παραπάνω, προκύπτουν εξισώσεις:

$$T = T_A = T_{min} + (T_{max} - T_{min})/2 \cdot (1 - \cos \left[\frac{(t - 76) \cdot 360}{365} \cdot 3,14/180 \right])$$

$$T_K = T_{Kmin} + (T_{Kmax} - T_{Kmin})/2 \cdot (1 - \cos \left[\frac{(t - 76) \cdot 360}{365} \cdot 3,14/180 \right])$$

όπου T, T_A και T_K οι θερμοκρασίες του συνολικού κόλπου, του άνω στρώματος και του κάτω στρώματος αντίστοιχα και t ο χρόνος σε ημέρες με αρχή την 1^η Δεκεμβρίου. Η γραφική παράσταση των δύο παραπάνω εξισώσεων για την ετήσια εποχική διακύμανση της θερμοκρασίας με $T_{max} = 25$ °C, $T_{Kmax} = 21$ °C και $T_{min} = T_{Kmin} = 13$ °C παρουσιάζεται στο Σχήμα 3-2.



Σχήμα 3-2: Εποχική διακύμανση της θερμοκρασίας T

3.5.2 Ηλιοφάνεια - Φωτοπερίοδος

Η ταχύτητα ανάπτυξης του φυτοπλαγκτού εξαρτάται από την ένταση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας I_0 , όσο και από την διάρκεια της μέσα στην ημέρα. Η διάρκεια αυτή εκφράζεται μέσω του μεγέθους της φωτοπεριόδου F , ως κλάσμα της κάθε ημέρας. Βασιζόμενοι σε τιμές από την Εθνική Μετεωρολογική Υπηρεσία αλλά και προηγούμενες μελέτες για την Νότια Ελλάδα, οι διακυμάνσεις της έντασης της ηλιακής ακτινοβολίας και του συντελεστή φωτοπεριόδου εκφράζονται με τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$I_0 = 120 + 192 \cdot (1 - \cos \left[\frac{(t - 15) \cdot 360}{365} \cdot 3,14/180 \right])$$

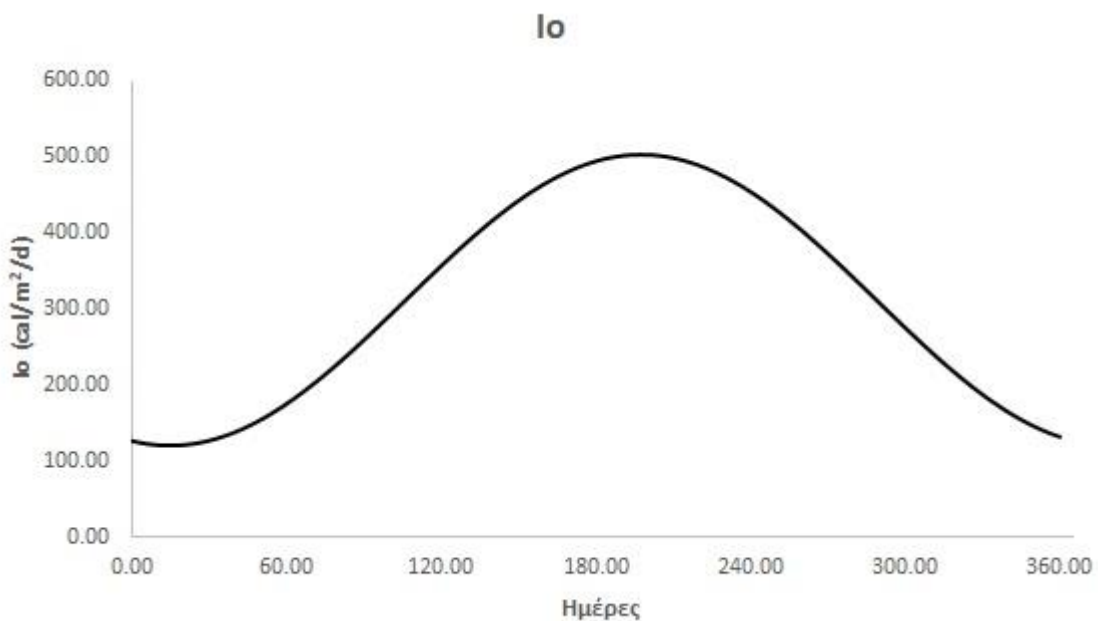
όπου: I_0 η μέση ημερήσια τιμή της ηλιακής ακτινοβολίας ($\text{cal}/\text{cm}^2/\text{d}$),

t = ο χρόνος σε ημέρες με αρχή την 1^η Δεκεμβρίου.

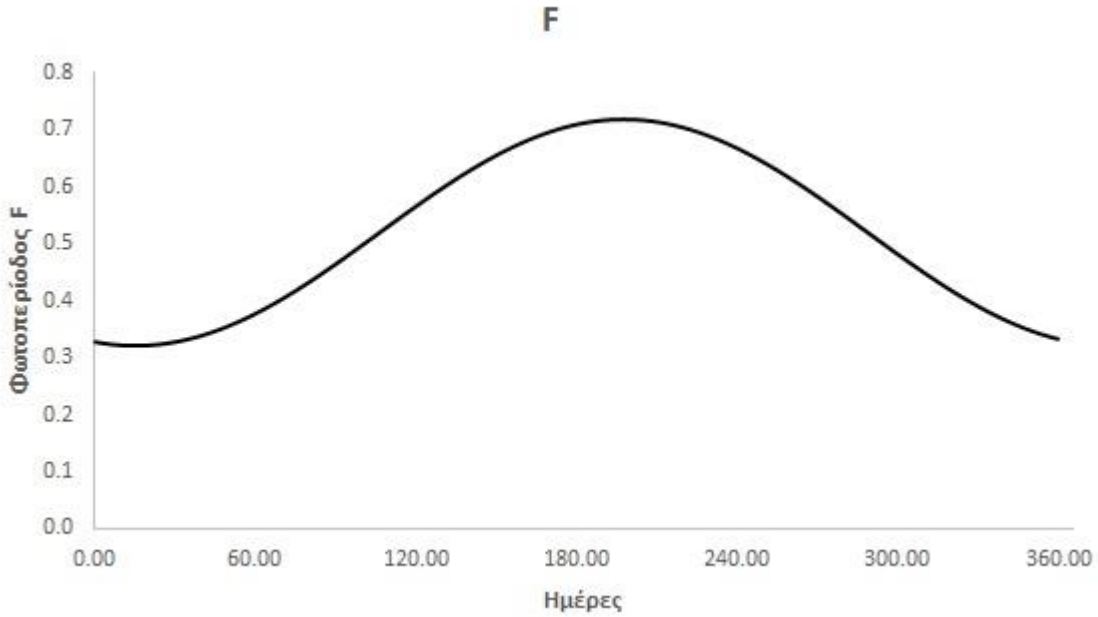
$$F = 0,320 + 0,200 \cdot (1 - \cos \left[\frac{(t - 15) \cdot 360}{365} \cdot 3,14/180 \right])$$

όπου: F η φωτοπερίοδος ως κλάσμα της ημέρας.

Τα Σχήματα 3-3 και 3-4 απεικονίζουν την ετήσια εποχική διακύμανση των δύο άνωθεν παραμέτρων, σύμφωνα και με τις εξισώσεις που τις περιγράφουν.



Σχήμα 3-3: Εποχική διακύμανση της ακτινοβολίας I_0



Σχήμα 3-4: Εποχική διακύμανση της φωτοπεριόδου F

3.5.3 Φυτοπλαγκτόν

Το φυτοπλαγκτόν χαρακτηρίζει το σύνολο των αλγών, περιλαμβάνει δηλαδή όλους τους μικροοργανισμούς και μετρείται σε όρους χλωροφύλλης. Η μεταβολή της συγκέντρωσής της επηρεάζεται από τους μηχανισμούς της ανάπτυξης των μικροοργανισμών, της ενδογενούς αναπνοής, του θανάτου και της καθίζησης. Η γενική εξίσωση για την χλωροφύλλη έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\frac{dA_k}{dt} = \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}A_k - a_{j,k}A_j) + E'_{k,j} \cdot (A_j - A_k)\} + \mu_k A_k - K_{dA} \cdot A_k - R_A \cdot A_k - K_{SA} \cdot A_k + W_{Ak}$$

όπου: A_k, A_j = οι συγκεντρώσεις χλωροφύλλης στα στοιχεία k, j (g/m^3),

Q_{kj} = η παροχή από το στοιχείο k στο j (m^3/d),

V_k = όγκος στοιχείου k (m^3),

E'_{kj} = όπως ορίζεται στην αρχική εξίσωση,

μ = ταχύτητα ανάπτυξης φυτοπλαγκτόν (d^{-1}),

K_{dA} = συντελεστής ταχύτητας θανάτου (d^{-1}),

R_A = συντελεστής ταχύτητας ενδογενούς αναπνοής (d^{-1}),

K_{SA} = συντελεστής ταχύτητας καθίζησης (d^{-1}),

W_{Ak} = εξωτερική είσοδος χλωροφύλλης στο στοιχείο k (kg/d).

Η ταχύτητα ανάπτυξης μ του φυτοπλαγκτού εξαρτάται από τη θερμοκρασία, την ηλιακή ακτινοβολία και τα θρεπτικά συστατικά άζωτο N και φώσφορος P . Επομένως προκύπτει ότι το μ αποτελεί συνάρτηση f όλων των παραπάνω.

$$\mu = \mu_{max} \cdot f(T)f'(I)f\{N, P\}$$

Η επίδραση της θερμοκρασίας περιγράφεται μέσω του μ_{max} από την ακόλουθη εξίσωση:

$$\mu_{max}(T) = \mu_{max}(20) \cdot A_1^{(T-20)}$$

όπου $\mu_{max}(T)$ = μέγιστη ταχύτητα ανάπτυξης σε $T^\circ C$ (d^{-1}),

$\mu_{max}(20)$ = μέγιστη ταχύτητα ανάπτυξης σε $20^\circ C$ (d^{-1}),

A_1 = θερμοκρασιακός συντελεστής (αδιάστατος),

T = θερμοκρασία ($^\circ C$).

Η ηλιακή ακτινοβολία επιδρά άμεσα στον ρυθμό της φωτοσύνθεσης άρα και στον ρυθμό ανάπτυξης των κυττάρων. Με αύξηση της έντασης της ακτινοβολίας προκαλούνται εντονότερα φαινόμενα φωτοσύνθεσης, ενώ αντίστροφα με ελάττωση προκαλείται αναστολή της διαδικασίας αυτής.

Σύμφωνα με παρατηρήσεις που έχουν πραγματοποιηθεί σε κύτταρα για διακυμάνσεις της ακτινοβολίας έχει βρεθεί μια τιμή I_s , πάνω από την οποία οι ρυθμοί της φωτοσύνθεσης μειώνονται λόγω αναχαίτισης. Η αναχαίτιση αυτή προκαλείται από την καταστροφή στις δομές της χλωροφύλλης, λόγω της υπεραυξημένης ακτινοβολίας και εκφράζεται από την εξίσωση:

$$\mu = \mu_{max} \cdot (I/I_s) \cdot e^{-(I/I_s)+1}$$

Επίσης, σημαντικό ρόλο παίζει η επιφάνεια του νερού καθώς η ακτινοβολία I , την οποία δέχονται τα άλγη, διαφέρει και είναι μικρότερη από την προσπίπτουσα ακτινοβολία I_0 , λόγω της μείωσης κατά την δίοδο στην υδάτινη μάζα. Συγκεκριμένα ο υπολογισμός της ακτινοβολίας σε βάθος H , I_H γίνεται με την εξίσωση:

$$I_H = I_0 \cdot e^{-KH}$$

όπου: H το βάθος (m) και K είναι συντελεστής απορρόφησης ακτινοβολίας (m^{-1}).

Το K αποτελείται από δύο επί μέρους συνιστώσες και ισούται με:

$$K = K_W + K_A \cdot A$$

όπου: K_W = σταθερά απόσβεσης λόγω του νερού και των αιωρούμενων στερεών (m^{-1}),

K_A = σταθερά απόσβεσης που οφείλεται στη συγκέντρωση της χλωροφύλλης (A) (m^2/g).

Η εξίσωση είναι απαραίτητο να ολοκληρωθεί ως προς το βάθος για να περιγραφτεί η ταχύτητα ανάπτυξης του φυτοπλαγκτού, το οποίο βρίσκεται σε ένα στρώμα νερού βάθους H . Κατά την ολοκλήρωση το I είναι μεταβαλλόμενο μέγεθος. Η ολοκλήρωση δίνει την εξίσωση:

$$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{e}{HK} \cdot (e^{a_1} - e^{a_0})$$

όπου:

$$a_1 = -\frac{I_0}{I_s} e^{-KH}$$

$$a_0 = -\frac{I_0}{IS}$$

Κατά την διάρκεια της ημέρας υπάρχει διακύμανση της έντασης της ακτινοβολίας, το οποίο μας ωθεί στην χρησιμοποίηση της μέσης ημερήσιας τιμής αυτής \bar{I}_0 , καθώς και στη χρήση του μεγέθους της φωτοπεριόδου F (κλάσμα ημέρας). Οι παραπάνω εξισώσεις τροποποιούνται ως εξής:

$$\mu = \mu_{max} \cdot \frac{Fe}{HK} \cdot (e^{a_1} - e^{a_0})$$

$$a_1 = -\frac{\bar{I}_0}{IS} \cdot e^{-KH}$$

$$a_0 = -\frac{\bar{I}_0}{IS}$$

Επιπλέον, η ταχύτητα ανάπτυξης των αλγών εξαρτάται και από τις συγκεντρώσεις των θρεπτικών στον αποδέκτη αζώτου N και φωσφόρου P . Η προσομοίωση της επίδρασής τους προσομοιώνεται με βάση τον νόμο του περιοριστικού παράγοντα του van Liebig με παράλληλη υιοθέτηση κινητικής Monod για κάθε θρεπτικό.

$$f(N, P) = \min \left\{ \frac{N}{K_N + N}, \frac{P}{K_P + P} \right\}$$

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω η γενική εξίσωση για τον συντελεστή ανάπτυξης μ του φυτοπλαγκτού γράφεται:

$$\mu = \mu_{max(20)} \cdot A_1^{(T-20)} \cdot \frac{Fe}{HK} \cdot (e^{a_1} - e^{a_0}) \cdot \min \left\{ \frac{N}{K_N + N}, \frac{P}{K_P + P} \right\}$$

Όσον αφορά την μείωση της συγκέντρωσης της χλωροφύλλης, αυτή επέρχεται με τρεις μηχανισμούς: την ενδογενή αναπνοή, τον θάνατο και την καθίζηση στον πυθμένα. Η ταχύτητα ενδογενούς αναπνοής αυξάνεται με την αντίστοιχη αύξηση της θερμοκρασίας. Οι σχέσεις για την περιγραφή της εξάρτησης αυτής, είναι συνήθως εκθετικές ή γραμμικές και στο μοντέλο εφαρμόστηκε η ακόλουθη:

$$R_A = R_{A0} + A_2 \cdot T$$

Από την θερμοκρασία εξαρτάται και η ταχύτητα θανάτου K_{dA} , η οποία εκφράζεται με την παρακάτω εκθετική εξίσωση:

$$K_{dA} = K_{dA(20)} \cdot A_3^{(T-20)}$$

Επισημαίνεται ότι δεν λήφθηκε υπόψη η κατανάλωση του φυτοπλαγκτού από το ζωοπλαγκτόν, ωστόσο η παράλειψη αυτού του φαινομένου, μπορεί να αντιμετωπιστεί με θεώρηση αυξημένης τιμής τόσο του $K_{dA(20)}$, όσο και του συντελεστή A_3 .

Η διαδικασία της καθίζησης και οι αντίστοιχες απώλειες του φυτοπλαγκτού περιγράφονται με τον συντελεστή K_{SA} , ο οποίος σχετίζεται με την ταχύτητα καθίζησης των αλγών σύμφωνα και με την εξίσωση:

$$K_{SA} = V_A / H$$

όπου: V_A = ταχύτητα καθίζησης φυτοπλαγκτού (m/d),

H = βάθος (m).

Ένα επιπρόσθετο φαινόμενο που επιδρά στην ποσότητα της καθιζάνουσας ιλύος αποτελεί η επαναιώρηση των στερεών, το οποίο παρατηρείται εντονότερα στα μικρότερα βάρη. Επομένως με στόχο να συμπεριληφθεί και αυτό στο μοντέλο μας, χρησιμοποιήθηκε η ακόλουθη συσχέτιση μεταξύ της ταχύτητας καθίζησης και του βάθους:

$$V_A = V_{Amax} \cdot H / (H + B)$$

όπου B είναι το βάθος (m) για το οποίο η ταχύτητα καθίζησης V_A γίνεται ίση με το μισό της μέγιστης τιμής της.

Οι τιμές όλων των παραμέτρων, σύμφωνα και με τα πιο συχνά διαστήματα που έχουν χρησιμοποιηθεί σε άλλες αντίστοιχες εφαρμογές, λήφθηκαν σύμφωνα με την διεθνή βιβλιογραφία. Για το μ_{max} οι τιμές δεν παρουσιάζουν μεγάλες διακυμάνσεις, καθώς ο Gargas (1976) προτείνει τιμή $2,5 \text{ d}^{-1}$, ο Orlob (1975) ένα διάστημα μεταξύ $1-2 \text{ d}^{-1}$, ο O' Connor (1976) διάστημα $1,3-2,5 \text{ d}^{-1}$ και ο Larsen (1974) την τιμή $2,4 \text{ d}^{-1}$. Επομένως στο μοντέλο λήφθηκε τυπική τιμή $\mu_{max(20)} = 2,5 \text{ d}^{-1}$ και συντελεστή $A_1 = 1,06$. Επίσης για την ένταση της ακτινοβολίας I_0 επιλέχθηκε η τιμή $300 \text{ cal/cm}^2 \text{ d}$, καθώς υπάρχει γενική συμφωνία από την βιβλιογραφία (Thomann 1975, O' Connor 1976 και 1973, Chen και Orlob 1972).

Οι παράμετροι K_W και K_A , εξαρτώνται από δεδομένα διαφάνειας και συγκεντρώσεις χλωροφύλλης. Οι Poole και Atkins (1929) εισήγαγαν σχέση, η οποία και χρησιμοποιήθηκε με ικανοποιητικά αποτελέσματα από διάφορους ερευνητές (Saunders 1962, Dugdale 1985, Canale 1974). Η εξίσωση συσχετίζει τον συνολικό συντελεστή K με την διαφάνεια SD (Secchi Disk, m).

$$K = D / SD$$

Η τιμή του D ποικίλλει από $1,5$ (Freedman και Canale 1977) έως $1,7$ (Canale 1974).

Σύμφωνα και με δεδομένα του ΕΚΘΕ για περιοχές του Ευβοϊκού και του Σαρωνικού κόλπου προκύπτουν τιμές $K_W = 0,0712$ και $K_A = 0,0603$. Πάντως, πρέπει να επισημανθεί ότι οι τιμές των παραμέτρων αυτών παρουσιάζουν διακυμάνσεις (ιδίως το K_W), λόγω των φυσικών χαρακτηριστικών του υδάτινου σώματος (φυσική θολότητα κλπ.). Επομένως για την εκάστοτε περίπτωση απαιτείται ειδική μεταχείριση και αξιολόγηση των συνθηκών για την βέλτιστη επιλογή των τιμών αυτών.

Για τον συντελεστή K_p προτείνεται οι τιμές να βρίσκονται στο διάστημα από 0,001-0,005 mg/L (Orlob 1973). Επιλέχθηκε τιμή ίση με $K_p = 0,003$ mg/L. Η τιμή K_N εξαρτάται από την θερμοκρασία και αυτή η εξάρτηση περιγράφεται από την εξίσωση:

$$K_N = K_{N0} \cdot A_4^T$$

Η βιβλιογραφία για θαλάσσια υδάτινα συστήματα δίνει τιμές $K_N = 5-10$ $\mu\text{g}/\text{L}$ (Valiela, 1984) και με τελική επιλογή των τιμών $K_{N0} = 0,05$ και $A_4 = 1,0415$ επιτυγχάνεται ικανοποιητική ακρίβεια.

Ο Gargas (1976) έχει δώσει τον συντελεστή ενδογενούς αναπνοής R_A ίσο με $0,6$ d^{-1} , ενώ ο Jorgensen (n.d.) χρησιμοποίησε μέγιστες τιμές στο διάστημα $0,08-0,13$ d^{-1} . Από την εξίσωση, εάν οριστεί $R_{A0} = 0$ και $A_2 = 0,0042$ και για διακύμανση θερμοκρασίας από $13^\circ\text{C} - 25^\circ\text{C}$ προκύπτει $R_A = 0,055-0,105$ d^{-1} .

Ο συντελεστής θανάτου του φυτοπλαγκτού κυμαίνεται σημαντικά από $0,003-0,17$ d^{-1} (Freedman και Canale 1977). Στο μοντέλο εισάχθηκε συντελεστής K_{dA} ο οποίος μεταβάλλεται με την θερμοκρασία σύμφωνα με την εξίσωση. Επίσης, όπως αναφέρθηκε με αυτήν την παράμετρο θα πρέπει να εκτιμηθεί και η κατανάλωση του φυτοπλαγκτού από το ζωοπλαγκτόν. Επομένως, λήφθηκαν τιμές $K_{dA(20)} = 0,10$ d^{-1} και $A_3 = 1,120$ και με αυτό τον τρόπο καλύπτεται και αυτό το φαινόμενο. Άλλωστε, η αυξημένη τιμή του A_3 είναι αναμενόμενη, εάν δεχτούμε ότι η αύξηση της θερμοκρασίας αναλογεί και σε αύξηση του ρυθμού κατανάλωσης του φυτοπλαγκτού καθώς και του ρυθμού του θανάτου του.

Η τιμή της ταχύτητας καθίζησης $V_{A\text{max}}$ δίνεται από την βιβλιογραφία μεταξύ ενός ευρέος διαστήματος $0,05-1,94$ m/d (Di Toro, 1971, Canale, 1974, Thoman, 1975 και Bierman και Richardson, 1976), ενώ για την τιμή B προτείνονται τιμές μεταξύ των $10-15$ m. Στο παρών μοντέλο επιλέχθηκε $V_{A\text{max}} = 0,3$ m/d και $B = 12,5$ m.

3.5.4 Φώσφορος

Ο φώσφορος στο υδάτινο περιβάλλον εμφανίζεται με δύο μορφές τον οργανικό ή τον ανόργανο φώσφορος και με σωματιδιακή μορφή, ενώ η ποσοτική κατανομή μεταξύ των

μορφών αυτών εξαρτάται από τις διεργασίες (χημικές, βιολογικές, φυσικές) που επιτελούνται στο περιβάλλον του αποδέκτη. Ο σωματιδιακός οργανικός φώσφορος έχει ως εσωτερικές πηγές α) τα υπολείμματα της χρήσης του φυτοπλαγκτού, β) τον θάνατο του ζωοπλαγκτόν και γ) την χρήση του τελευταίου από ανώτερους οργανισμούς. Οι δε απώλειες, οφείλονται στην καθίζηση αλλά και στην μετατροπή του σε διαλυμένο οργανικό φώσφορο. Οι πηγές του διαλυμένου οργανικού φωσφόρου περιλαμβάνουν τον θάνατο και την αναπνοή του φυτοπλαγκτού, καθώς και την μετατροπή που αναφέρθηκε παραπάνω. Αντιθέτως, οι απώλειες αυτού, έγκειται στην μετατροπή του σε ανόργανο διαλυμένο φώσφορο. Με την σειρά του, ο ανόργανος διαλυμένος φώσφορος αποτελεί την μορφή που μπορεί να προσληφθεί από το φυτοπλαγκτόν και η κύρια πηγή του είναι η μετατροπή του από τον οργανικό διαλυμένο. Επίσης άλλη σημαντική πηγή τροφοδοσίας διαλυμένου ανόργανου φωσφόρου συμβαίνει από την τροφοδότηση μέσω των πυθμενικών αποθέσεων, είτε με επαναιώρηση σωματιδιακού φωσφόρου είτε κυρίως με απελευθέρωση διαλυμένου φωσφόρου με χημικές διαδικασίες. Συνήθως στα μοντέλα ποιότητας και ευτροφισμού, όπως και σε αυτό που αναπτύχθηκε, η συνεισφορά περιγράφεται με απλούστερες σχέσεις από την λεπτομερή προσομοίωση των επί μέρους διαδικασιών που κανονικά απαιτούνται. Τελικά έχει παρατηρηθεί ότι η μετατροπή του σωματιδιακού οργανικού φωσφόρου σε διαλυμένο οργανικό φώσφορο γίνεται ταχύτατα μέσω μηχανισμών ενζυμικής υδρόλυσης. Το γεγονός αυτό καθιστά την υδρόλυση μη κρίσιμη διαδικασία που μπορεί να παραλειφθεί κατά τη μαθηματική προσομοίωση. Θεωρούνται κατά συνέπεια δύο μορφές φωσφόρου, οργανικός και ανόργανος φώσφορος.

Η τροφοδότηση με οργανικό φώσφορο λόγω θανάτου και ενδογενούς αναπνοής του φυτοπλαγκτού περιγράφεται από την εξίσωση:

$$\frac{dOP}{dt} = (K_{dA} + R_A) \cdot A \cdot Y_1$$

όπου: OP = συγκέντρωση οργανικού φωσφόρου (mg/L),

K_{dA} , R_A = συντελεστές ταχυτήτων θανάτου και ενδογενούς αναπνοής φυτοπλαγκτού (d^{-1}),

A = συγκέντρωση χλωροφύλλης (mg/L),

Y_1 = περιεκτικότητα φυτοπλαγκτόν σε φώσφορο (mg P/mg χλωροφύλλης).

Επισημαίνεται ότι η αυξημένη τιμή K_{dA} , επιτρέπει την προσμέτρηση του φωσφόρου που παράγεται από το ζωοπλαγκτόν σύμφωνα και με τα προηγούμενα για το φυτοπλαγκτόν.

Οι απώλειες του οργανικού φωσφόρου οφείλονται στην μετατροπή του σε ανόργανο και στην καθίζηση και περιγράφονται από την εξίσωση:

$$\frac{dOP}{dt} = (R_P + K_{SP}) \cdot OP$$

όπου: R_P = συντελεστής ταχύτητας μετατροπής οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο (d^{-1}),

K_S = συντελεστής καθίζησης οργανικού φωσφόρου (d^{-1}).

Θεωρείται ότι ο συντελεστής R_P εξαρτάται από την θερμοκρασία ως εξής:

$$R_P = R_{P0} + A_5 \cdot T$$

όπου: R_{P0} = τιμή του συντελεστή για $T = 0^\circ C$ (d^{-1}),

T = θερμοκρασία ($^\circ C$),

A_5 = θερμοκρασιακός συντελεστής.

Ο συντελεστής καθίζησης K_{SP} εκφράζεται με αντίστοιχο τρόπο του συντελεστή καθίζησης φυτοπλαγκτόν K_{SA} :

$$K_{SP} = V_{Pmax} \cdot \frac{1}{H + B}$$

Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω και με όσα αναφέρθηκαν για τις διαδικασίες του οργανικού φωσφόρου, η συνολική δίαιτα αυτού προκύπτει με την εφαρμογή της γενικής εξίσωσης:

$$\frac{dOP_k}{dt} = \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{-Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}OP_k + a_{j,k}OP_j) + E'_{k,j} \cdot (OP_j - OP_k)\} \\ + (K_{dA} + R_A) \cdot A_k Y_1 - (R_P + K_{SP}) \cdot OP_k + W_{OPk}$$

Όσον αφορά την διαδικασία των πυθμενικών αποθέσεων, κανονικά απαιτείται σύνθεση κατάλληλου υπομοντέλου, ωστόσο περιγράφηκε με την ακόλουθη εξίσωση:

$$\frac{dIP}{dt} = K_{RP} \cdot E/V$$

όπου: IP = συγκέντρωση ανόργανου φωσφόρου (mg/L),

K_{RP} = συντελεστής τροφοδότησης (mg/d/m²),

E = επιφάνεια πυθμένα (m²),

V = όγκος υδάτινου σώματος (m³).

Οι απώλειες του ανόργανου φωσφόρου οφείλονται στην πρόσληψή του από το φυτοπλαγκτόν, κατά την εξίσωση:

$$\frac{dIP}{dt} = -\mu \cdot Y_1 \cdot A$$

Τελικά, η συνολική δίαιτα του ανόργανου φωσφόρου περιγράφεται ως εξής:

$$\frac{dIP_k}{dt} = \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{-Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}IP_k + a_{j,k}OP_j) + E'_{k,j} \cdot (IP_j - IP_k)\} \\ + R_P \cdot OP_k + K_{RP} \cdot E/V - \mu \cdot Y_1 \cdot A_k + W_{IPk}$$

Όσον αφορά τις τιμές των παραμέτρων, για τον συντελεστή μετατροπής του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο R_P , ο Di Toro (1975) προτείνει τιμές 0,20-50 για διακύμανση

θερμοκρασιών 13-25°C. Ο O' Connor (1976) προτείνει τιμές στο διάστημα 0,14-0,40, ενώ τη μικρότερη τιμή, 0,1, προτείνει ο Nyholm (1978). Στη μελέτη της Limnotech για τον όρμο του SAGINAW (1977) (Eshenroder, R. L., 1977) και με βάση τις τιμές των Thoman (1975) και Canale (1976), προτείνονται τιμές για το R_{PO} στο διάστημα 0-0,70 και για το θερμοκρασιακό συντελεστή A_5 στο διάστημα 0-0,01. Τελικά επιλέχθηκαν οι τιμές $R_{PO} = 0,400$ και $A_5 = 0,005$. Οι τιμές της ταχύτητας καθίζησης V_{Pmax} έχουν βρεθεί να κυμαίνονται σε όρια αντίστοιχα με αυτά για την V_{Amax} , με κάπως μικρότερες τιμές (0,05-1,15 m/d). Επιλέχθηκε ίδια τιμή με την V_{Amax} , δηλαδή $V_{Pmax} = 0,03$ m/d. Η αναλογία φωσφόρου προς χλωροφύλλη στο φυτοπλαγκτόν έχει βρεθεί να κυμαίνεται από 0,63-1. Οι Di Toro (1975), O' Connor (1976 και 1973) και ο Thomann (1975) προτείνουν την τιμή 1. Ο Larsen (1974) χρησιμοποίησε την τιμή 0,63 και η Limnotech (1977) την τιμή 0,8. Στο μοντέλο ορίστηκε $Y_1 = 0,8$ mg P/mg χλωροφύλλης.

3.5.5 Άζωτο

Στα υδάτινα συστήματα το άζωτο παρουσιάζεται συνήθως σε τρεις μορφές, οργανικό, αμμωνιακό και οξειδωμένο (νιτρικά και νιτρώδη). Η ποσοτική κατανομή μεταξύ των τριών αυτών μορφών εξαρτάται από τις διεργασίες και τους περιβαλλοντικούς παράγοντες. Η θεώρηση δύο μορφών αζώτου, αμμωνιακού (NH_4) και νιτρικών (NO_3) κρίνεται γενικά ως αποδεκτή, με βάση και δύο σημαντικά γεγονότα στα χαρακτηριστικά των διεργασιών που επιτελούνται. Αρχικά, είναι γνωστό ότι η διαδικασία της αμμωνιοποίησης, η μετατροπή δηλαδή του οργανικού αζώτου σε αμμωνιακό, πραγματοποιείται με ταχύτατο ρυθμό. Επίσης τα επεξεργασμένα λύματα δεν εμπεριέχουν οργανικό άζωτο, διότι έχει προηγηθεί καθίζηση αλλά και βιολογική επεξεργασία, με αποτέλεσμα την κατανάλωσή του και την μετατροπή του σε ανόργανο (NH_4 , NO_3).

Εσωτερικές πηγές αμμωνιακού αζώτου κανονικά δεν υπάρχουν, δεδομένου ότι τα περιττώματα του ζωοπλαγκτού καθώς και ο θάνατος τόσο του ζωοπλαγκτού όσο και του φυτοπλαγκτού δημιουργούν οργανικό άζωτο. Επειδή όμως για τους λόγους που προαναφέρθηκαν δεν χρησιμοποιείται εξίσωση ισορροπίας για το οργανικό άζωτο, θεωρείται ότι οι παραπάνω διεργασίες συνεισφέρουν στην δημιουργία αμμωνιακού αζώτου, που στην πραγματικότητα γίνεται έμμεσα με την αμμωνιοποίηση του οργανικού αζώτου. Η συνεισφορά του ζωοπλαγκτού, όπως και στην περίπτωση του φωσφόρου,

εμπεριέχεται στην αυξημένη ταχύτητα θανάτου του φυτοπλαγκτού. Συνεπώς η παραγωγή αμμωνιακού αζώτου περιγράφεται ως εξής:

$$\frac{dNH}{dt} = -Y_2 \cdot K_{dA} \cdot A$$

όπου: Y_2 = περιεκτικότητα φυτοπλαγκτού σε άζωτο (mg NH/mg χλωροφύλλης),

NH = συγκέντρωση αμμωνιακού αζώτου (mg/L),

A = συγκέντρωση χλωροφύλλης (mg/L).

Οι απώλειες του αμμωνιακού αζώτου οφείλονται στις διαδικασίες πρόσληψης κατά τη σύνθεση του φυτοπλαγκτόν και στη νιτροποίηση, δηλαδή τη βιοχημική οξείδωση του αμμωνιακού αζώτου πρώτα σε νιτρώδη (NO_2) και στη συνέχεια σε νιτρικά (NO_3). Η χρησιμοποίηση του αμμωνιακού αζώτου από το φυτοπλαγκτόν εξαρτάται από την ποσοστιαία κατανομή των μορφών του ανόργανου αζώτου και συγκεκριμένα από τον λόγο αμμωνιακού αζώτου προς τα νιτρικά. Έχει προταθεί η χρήση ενός συντελεστή P_{NH} , ο οποίος εξαρτάται από τον παραπάνω λόγο και ο οποίος εκφράζει την προτίμηση των αλγών προς την αμμωνία σε σχέση με την προτίμηση τους προς τα νιτρικά. Η σχέση που δίνει τον συντελεστή P_{NH} είναι η ακόλουθη:

$$P_{NH} = \frac{0,96(NH)}{0,96(NH) + 0,04(NO)}$$

όπου: P_{NH} = συντελεστής (αδιάστατος),

NH = συγκέντρωση αμμωνιακού αζώτου (mg/L),

NO = συγκέντρωση νιτρικών (mg/L).

Επομένως η χρησιμοποίηση του αμμωνιακού αζώτου από το φυτοπλαγκτόν εκφράζεται ως εξής:

$$\frac{dNH}{dt} = -\mu \cdot Y_2 \cdot P_{NH} \cdot A$$

Η δεύτερη διαδικασία από την οποία μειώνεται το αμμωνιακό άζωτο είναι η νιτροποίηση, η μετατροπή δηλαδή σε νιτρικά και για μικρές συγκεντρώσεις των υδάτινων συστημάτων μπορεί να περιγραφεί με κινητική πρώτης τάξης:

$$\frac{dNH}{dt} = -R_N \cdot NH$$

όπου: R_N = συντελεστής νιτροποίησης.

Η νιτροποίηση έχει σημαντική συσχέτιση με την θερμοκρασία και επομένως θα πρέπει να συνδεθεί ο συντελεστής R_N με την θερμοκρασία με την βοήθεια ενός συντελεστή και μιας κατάλληλης εξίσωσης εκθετικής μορφής:

$$R_N = R_{N(20)} \cdot A_6^{(T-20)}$$

Τελικά, η συνολική δίαιτα του αμμωνιακού αζώτου, σύμφωνα με την γενική εξίσωση αλλά και όλα τα παραπάνω προκύπτει ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{dNH_k}{dt} = & \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{-Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}NH_k + a_{j,k}NH_j) + E'_{k,j} \cdot (NH_j - NH_k)\} \\ & - \mu \cdot Y_2 \cdot P_{NH} \cdot A_k - R_N \cdot NH_k + Y_2 \cdot K_{dA} \cdot A_k + W_{NHk} \end{aligned}$$

Όσον αφορά τα νιτρικά, η εσωτερική δημιουργία τους οφείλεται στην διαδικασία της νιτροποίησης, όπως είδαμε προηγουμένως, καθώς και στην τροφοδοσία από τις πυθμενικές αποθέσεις με σχέση ανάλογη του φωσφόρου. Οι απώλειες οφείλονται στην χρησιμοποίηση των νιτρικών από το φυτοπλαγκτόν και την απονιτροποίηση. Η πρώτη μορφής απώλειας μπορεί να περιγραφεί από την ακόλουθη εξίσωση:

$$\frac{dNO}{dt} = -Y_2 \cdot \mu \cdot (1 - P_{NH}) \cdot A$$

όπου: NO = συγκέντρωση νιτρικών αζώτου (mg/L).

Η απονιτροποίηση είναι ένα σύνθετο φαινόμενο που εξαρτάται από τη συγκέντρωση του διαλυμένου οξυγόνου (ανοξικές συνθήκες) και την επάρκεια οργανικού άνθρακα και έχει ως αποτέλεσμα την αναγωγή των νιτρικών σε μοριακό άζωτο και τη διαφυγή του τελευταίου στην ατμόσφαιρα. Συχνά σε μοντέλα ποιότητας υδάτινων αποδεκτών χρησιμοποιείται η απλή εξίσωση:

$$\frac{dNO}{dt} = -K_{DN} \cdot E/V$$

όπου: K_{DN} = συντελεστής απονιτροποίησης (mg N/d/m²).

Ωστόσο, για τυπικές εφαρμογές σε υδάτινους αποδέκτες είναι απίθανο να δημιουργούνται ανοξικές συνθήκες εντός της υδάτινης στήλης, οπότε και η διαδικασία δεν λαμβάνεται υπόψη ($K_{DN} = 0$).

Με βάση όλα τα παραπάνω η συνολική δίαιτα του ανόργανου αζώτου γράφεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{dNO_k}{dt} = & \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{ -Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}NO_k + a_{j,k}NO_j) + E'_{k,j} \cdot (NO_j - NO_k) \} \\ & - Y_2 \cdot \mu \cdot (1 - P_{NH}) \cdot A_k - K_{DN} \cdot E_k/V_k + R_N \cdot NH_k + K_{RN} \cdot E_k/V_k + W_{NOk} \end{aligned}$$

Όσον αφορά τις τιμές, τις οποίες επιλέξαμε για όλες τις παραμέτρους, η αναλογία αζώτου προς χλωροφύλλη στο φυτοπλαγκτόν έχει βρεθεί ότι κυμαίνεται από 7-15 mg N/mg χλωροφύλλης. Τιμές κοντά στο 7 έχουν προταθεί από τους Di Toro (1975) και Larsen (1974), ενώ τιμές κοντά στο 10 από τους O' Connor (1973, 1976) και Thomann (1975). Ο Canale (1974, 1975) έχει προτείνει την τιμή 15 και η Limnotech στη μελέτη του όρμου SAGINAW (1977) (Eshenroder, R. L., 1977) την τιμή 9. Για τον συντελεστή νιτροποίησης $R_{N(20)}$, οι Chen και Orlob (1976) και ο Canale (1975) προτείνουν την τιμή 0,030, ο Thoman (1975) και η Limnotech (1977) την τιμή 0,040 και ο Di Toro (1973) την τιμή 0,052. Για το θερμοκρασιακό συντελεστή A_6 έχει προταθεί η τιμή 1,088 από τη Limnotech (1977). Τελικά στο μοντέλο

χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές $Y_2 = 11 \text{ mg NH/mg χλωροφύλλης}$, $A_6 = 1,088$, $R_{N(20)} = 0,02$ και $R_N = 1,5$.

3.5.6 Οργανικός άνθρακας

Ο οργανικός άνθρακας βρίσκεται σε σωματιδιακή ή διαλυμένη μορφή και προέρχεται (εκτός από τις εξωτερικές συνεισφορές) από τον θάνατο του φυτοπλαγκτού και το θάνατο και τα περιττώματα του ζωοπλαγκτού. Η μετατροπή του σωματιδιακού άνθρακα σε διαλυμένο γίνεται με σχετικά μεγάλη ταχύτητα με τη βοήθεια εξωκυτταρικών υδρολυτικών ενζύμων. Για το λόγο αυτό συχνά δεν γίνεται διάκριση μεταξύ σωματιδιακού και διαλυμένου άνθρακα, θεωρείται δε ότι η διεργασία του θανάτου του φυτοπλαγκτού με την αυξημένη ταχύτητα με την οποία περιγράφεται περιλαμβάνει όλες τις εσωτερικές διαδικασίες παραγωγής άνθρακα που αναφέρθηκαν πιο πάνω. Επίσης οργανικός άνθρακας (C) παράγεται λόγω τροφοδότησης από πυθμενικές αποθέσεις. Αντίθετα η απομάκρυνση του οργανικού άνθρακα, θεωρείται ότι γίνεται με τις διαδικασίες της οξείδωσης και της καθίζησης. Για την τελευταία έχει χρησιμοποιηθεί ο συντελεστής καθίζησης K_{SA} που χρησιμοποιήθηκε για την καθίζηση του φυτοπλαγκτού. Τελικά, η συνολική δίαιτα του οργανικού άνθρακα προκύπτει ως η εξής:

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{-Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}C_k + a_{j,k}C_j) + E'_{k,j} \cdot (C_j - C_k)\} \\ + Y_3 \cdot K_{dA} \cdot A_k - (R_L + K_{SA}) \cdot C_k + W_{Ck}$$

όπου: C = συγκέντρωση οργανικού άνθρακα (mg/L),

Y_3 = περιεκτικότητα φυτοπλαγκτού σε άνθρακα (mg BOD/ mg χλωροφύλλης),

R_L = συντελεστής ταχύτητας οξείδωσης του C.

Η ταχύτητα διάσπασης του C για μικρές συγκεντρώσεις του περιγράφεται ικανοποιητικά με τη βοήθεια κινητικής πρώτης τάξης και με εξάρτηση του συντελεστή διάσπασης από τη θερμοκρασία.

$$R_L = R_{L(20)} \cdot A_7^{(T-20)}$$

Όσον αφορά τις τιμές των παραμέτρων, ο συντελεστής Y_3 εμφανίζεται σταθερός στη βιβλιογραφία με τιμή $Y_3 = 50 \text{ mg BOD/ mg χλωροφύλλης}$ (Di Toro 1973, O'Connor 1976, Thoman 1975), επομένως αυτός επιλέχθηκε. Ο συντελεστής R_L εξαρτάται τόσο από τη φύση του οργανικού άνθρακα που διασπάται όσο και από τους περιβαλλοντικούς παράγοντες που επηρεάζουν τη δράση των μικροοργανισμών. Αυτό προφανώς έχει ως αποτέλεσμα να μην είναι εύκολο να προταθούν τιμές με γενική εφαρμογή για κάθε υδάτινο αποδέκτη. Ωστόσο επιλέχθηκαν οι τυπικές τιμές τόσο για τον συντελεστή ταχύτητας οξείδωσης για $T = 20^\circ\text{C}$, όσο και για τον θερμοκρασιακό συντελεστή, $R_{L(20)} = 0,20 \text{ d}^{-1}$ και $A_7 = 1,040$ αντιστοίχως.

3.5.7 Διαλυμένο οξυγόνο

Η συγκέντρωση του διαλυμένου οξυγόνου στον υδάτινο αποδέκτη έχει ως πηγές την φωτοσύνθεση, καθώς και την επανεισαγωγή μέσω της ατμόσφαιρας. Αντιθέτως, το οξυγόνο καταναλώνεται για τις διαδικασίες της οξείδωσης του οργανικού άνθρακα, της νιτροποίησης, της ενδογενούς αναπνοής του φυτοπλαγκτού αλλά και της ζήτησης οξυγόνου των πυθμενικών αποθέσεων. Επομένως, η συνολική δίαιτα του διαλυμένου οξυγόνου εμπεριέχει όλες αυτές τις διαδικασίες, τις οποίες θα αναλύσουμε παρακάτω.

Η φωτοσύνθεση αποτελεί μια διαδικασία η οποία εξαρτάται από την συγκέντρωση του φυτοπλαγκτού και την ποσότητα της ηλιακής ακτινοβολίας. Οι συγκεντρώσεις των θρεπτικών αζώτου και φωσφόρου δεν την επηρεάζουν άμεσα, αλλά έμμεσα μέσω της ταχύτητας ανάπτυξης και σύνθεσης νέου πρωτοπλάσματος του φυτοπλαγκτού. Επομένως, η παραγωγή οξυγόνου περιγράφεται ως εξής:

$$\frac{dDO}{dt} = Y_4 \cdot A_k \cdot \mu_{max} \cdot \frac{Fe}{HK} \cdot (e^{a_1} - e^{a_0})$$

όπου: DO = συγκέντρωση διαλυμένου οξυγόνου (mg/L),

$Y_4 = O_2$ ανά μονάδα βάρους χλωροφύλλης (mg O_2 /mg χλωροφύλλης).

Όσον αφορά την τροφοδότηση του αποδέκτη με οξυγόνο από την ατμόσφαιρα, σύμφωνα και με την θεωρία των δύο στιβάδων, εκφράζεται από την εξής εξίσωση:

$$\frac{dDO}{dt} = K_{\alpha\tau}/H \cdot (DO_s - DO)$$

όπου: $K_{\alpha\tau}$ = σταθερά επαναερισμού (m/d),

DO_s = συγκέντρωση κορεσμού (mg/L).

Γνωρίζουμε ότι η συγκέντρωση κορεσμού του διαλυμένου οξυγόνου εξαρτάται από την θερμοκρασία της υδάτινης στήλης και περιγράφεται ως εξής:

$$DO_s = 14,659 - 0,41T + 0,00799T^2 - 0,0000775T^3$$

όπου T η θερμοκρασία σε °C.

Θα πρέπει να αναφερθεί ότι η παραπάνω σχέση αφορά σε γλυκά νερά (ποτάμια, λίμνες, ταμιευτήρες), ενώ για θαλάσσιους αποδέκτες η συγκέντρωση κορεσμού του διαλυμένου οξυγόνου υπολογίζεται από την ίδια σχέση πολλαπλασιάζοντας το αποτέλεσμα με 0,80.

Οι απώλειες οφείλονται στην ενδογενή αναπνοή, την νιτροποίηση και την οξείδωση του οργανικού άνθρακα με την εξίσωση που τα περιγράφει να είναι η:

$$\frac{dDO}{dt} = -R_L \cdot C - 4,5 \cdot R_N \cdot NH - Y_3 \cdot R_A \cdot A$$

Αντίστοιχα, η ζήτηση του οξυγόνου από τις πυθμενικές αποθέσεις προσομοιώνεται μέσω της σταθεράς SOD:

$$\frac{dDO}{dt} = -\frac{SOD}{H}$$

όπου SOD = ζήτηση οξυγόνου από τον πυθμένα (gr/m²/d).

Τελικά η συνολική δίαιτα του διαλυμένου οξυγόνου στο μοντέλο προκύπτει ως εξής:

$$\begin{aligned} \frac{dDO_k}{dt} = & \frac{1}{V_k} \cdot \sum_{k,j} \{-Q_{k,j} \cdot (a_{k,j}DO_k + a_{j,k}DO_j) + E'_{k,j} \cdot (C_j - C_k)\} \\ & + Y_4 \cdot A_k \cdot \mu_{max} \cdot \frac{Fe}{H_k K} \cdot (e^{a_1} - e^{a_0}) - \frac{SOD_k}{H_k} - R_L \cdot C_K - 4,5 \cdot R_N \cdot NH_k - Y_3 \cdot R_A \cdot A_k \\ & + W_{DOk} \end{aligned}$$

Ο προσδιορισμός του συντελεστή Y_4 γίνεται με τη βοήθεια στοιχείων που παρουσίασαν οι Dugkale και Wilkerson (1985). Δεχόμενοι την ισοδυναμία 1 mg άνθρακα = 4,1 mg άνθρακα/mg χλωροφύλλης/h, υπολόγισαν ότι η ημερήσια παραγωγή οξυγόνου ανά mg χλωροφύλλης είναι 130 mg O_2 /mg χλωροφύλλης/d. Η τιμή αυτή ισχύει για την επιφάνεια του υδάτινου σώματος και για τις θερινές θερμοκρασίες (μέγιστη ταχύτητα φωτοσύνθεσης). Επομένως θα πρέπει:

$$Y_4 \cdot \mu_{max} \cdot F = 130$$

Δεδομένου ότι η μ_{max} για $T = 25^\circ C$ ισούται με $3,34 d^{-1}$ και η μέγιστη φωτοπερίοδος είναι $F = 0,72$, προκύπτει $Y_4 = 54$ mg O_2 /mg χλωροφύλλης. Οι τιμές του συντελεστή επαναερισμού Κατ κυμαίνονται σημαντικά (0,3-9 m/d, Αφραταίος 1986) και εξαρτώνται από την ισχύ των ανέμων. Η τιμή Κατ=1,0 θεωρείται μία λογική πρώτη προσέγγιση. Η τιμή του SOD εξαρτάται από το πάχος των πυθμενικών αποθέσεων και μπορεί να είναι πολύ υψηλή κοντά στην εκβολή ανεπεξέργαστων ιδίως λυμάτων. Για θαλάσσιες περιοχές με λίγες πυθμενικές αποθέσεις οι τιμές που προτείνονται στη βιβλιογραφία (Limnotech 1977) βρίσκονται στο διάστημα 0,1-0,2 mg O_2 /m² d., ενώ σε περιοχές με αυξημένες αποθέσεις η τιμή μπορεί να φθάσει το 1 mg O_2 /m² d. Τελικά, στο μοντέλο επιλέχθηκε τιμή SOD = 0,1 gr/m²/d.

4 Εφαρμογές μοντέλου προσομοίωσης

4.1 Συνολική περιγραφή μαθηματικού μοντέλου ποιότητας νερού

Το μαθηματικό μοντέλο το οποίο δημιουργήθηκε, προσομοιώνει το φαινόμενο του ευτροφισμού για την πλασματική λίμνη που ορίσαμε. Έχει ως βάση όλες τις φυσικές, βιολογικές και χημικές διεργασίες οι οποίες αναφέρθηκαν και περιγράφηκαν αναλυτικά στο προηγούμενο κεφάλαιο. Επιπλέον, περιλαμβάνει τις αντίστοιχες παραμέτρους, σύμφωνα με τις οποίες επιτυγχάνεται η κατάλληλη προσομοίωση του φαινομένου. Για την δημιουργία μιας αρχικής κατάστασης αναφοράς, λήφθηκαν οι τιμές που φαίνονται στον Πίνακα 4-1 για τις παραμέτρους, ενώ η επιλογή των τιμών καθώς και των διαστημάτων τους πραγματοποιήθηκε από την κατάλληλη βιβλιογραφία. Τα κύρια μεγέθη εξόδου του μοντέλου περιλαμβάνουν τις συγκεντρώσεις των θρεπτικών (άζωτο N, φώσφορος P), την συγκέντρωση της χλωροφύλλης A, του διαλυμένου οξυγόνου DO, του οργανικού άνθρακα C και της διαφάνειας του νερού SD. Σύμφωνα με αυτά, επιτυγχάνεται και η περιβαλλοντική αξιολόγηση του υδατικού συστήματος για τα προβλήματα που προκαλεί το φαινόμενο του ευτροφισμού.

Παράλληλα, χρησιμοποιήθηκαν ρυπαντικά φορτία, σημειακά από την εγκατάσταση επεξεργασίας των λυμάτων και επιφανειακές απορροές από όλα τα όρια της λίμνης. Τα συνολικά φορτία παρουσιάζονται στον Πίνακα 4-2.

Πίνακας 4-1: Αρχικές τιμές και διαστήματα τιμών των παραμέτρων

Παράμετροι	Τιμές αναφοράς	Μονάδες	Εύρος τιμών
$\mu_{\max(20)}$	2.50	d^{-1}	1.0 – 5.0
A_1	1.06	αδιάστατο	-
I_s	300.00	$cal/cm^2/d$	210.0-390.0
K_W	0.0712	m^{-1}	0.1 – 1.5
K_A	0.0603	m^2/g	0.01 – 0.15
K_P	0.003	mg/L	0.001 – 0.03
K_{N0}	0.05	mg/L	0.01-0.3
A_4	1.0415	αδιάστατο	-
R_{A0}	0.00	d^{-1}	-
A_2	0.0042	αδιάστατο	-
$K_{dA(20)}$	0.10	d^{-1}	0.01 – 1
A_3	1.12	αδιάστατο	-
$V_{A\max}$	0.30	m/d	0.01-1
R_{P0}	0.40	d^{-1}	0.1-0.52
A_5	0.005	αδιάστατο	-
$V_{P\max}$	0.30	m/d	0.01-1
Y_1	0.80	$mg P/mg A$	0.56 – 1.04
K_{RP}	1.00	$mg/d/m^2$	0.5 – 1.5
Y_2	11.00	$mg NH/mg A$	7.7 – 15.0
$R_{N(20)}$	0.020	d^{-1}	0.001-0.1
A_6	1.088	αδιάστατο	-
K_{RN}	1.50	$mg/d/m^2$	1.0 – 2.0
Y_3	50.00	$mg BOD/mg A$	35-65
$R_{L(20)}$	0.20	d^{-1}	0.1-0.3
A_7	1.04	αδιάστατο	-
Y_4	54.00	$mg O_2/mg A$	37.8 – 70.2
$K_{\alpha t}$	1.00	m/d	0.2-2
SOD	0.10	$gr/m^2/d$	0.07-1
E	2.50	m^2/s	5.0-20.0
Q	500 000	m^3/d	-

Πίνακας 4-2: Συνολικά φορτία προσομοίωσης

Συνολικά φορτία	W_C (kg/d)	W_{IP} (kg/d)	W_{NH} (kg/d)	W_{NO} (kg/d)
1	25.96	1.30	7.79	3.89
2	25.96	1.30	7.79	3.89
3	103.56	33.53	145.37	5.41
4	36.06	1.80	10.82	5.41
5	25.96	1.30	7.79	3.89
6	0.00	0.00	0.00	0.00

Τέλος ορίσαμε κατάλληλες αρχικές και οριακές συνθήκες για την προσομοίωση του μοντέλου μας, οι οποίες φαίνονται στους Πίνακες 4-3 και 4-4.

Πίνακας 4-3: Αρχικές συνθήκες προσομοίωσης

Μεταβλητή	Τιμή
Χλωροφύλλη (A) ($\mu\text{g/L}$)	1
Αμμωνιακό άζωτο (NH) ($\mu\text{g/L}$)	8
Νιτρικά (NO) ($\mu\text{g/L}$)	7
Ανόργανος φώσφορος (IP) ($\mu\text{g/L}$)	3
Οργανικός φώσφορος (OP) ($\mu\text{g/L}$)	1
Οργανικός άνθρακας (C) ($\mu\text{g/L}$)	50
Διαλυμένο οξυγόνο (DO) (mg/L)	5

Πίνακας 4-4: Οριακές συνθήκες προσομοίωσης

Μεταβλητή	Όριο εισόδου (ποταμός)	Όριο εξόδου (προς υγροβιότοπο)
Χλωροφύλλη (A) (μg/L)	0,5	2
Αμμωνιακό άζωτο (NH) (μg/L)	6	11
Νιτρικά (NO) (μg/L)	5	10,5
Ανόργανος φώσφορος (IP) (μg/L)	2	3,8
Οργανικός άνθρακας (C) (μg/L)	35	68
Διαλυμένο οξυγόνο (DO) (mg/L)	Εκάστοτε συγκέντρωση κορεσμού	Εκάστοτε συγκέντρωση κορεσμού

4.2 Μέθοδοι ανάλυσης ευαισθησίας

4.2.1 Εισαγωγή

Όπως αναφέρθηκε, η ανάλυση ευαισθησίας αποτελεί ένα ισχυρό εργαλείο στον τομέα των μαθηματικών μοντέλων και μας δίνει την δυνατότητα να εκτιμήσουμε την επίδραση μιας διαταραχής των παραμέτρων εισόδου ενός μοντέλου στα αντίστοιχα αποτελέσματα τα οποία παράγει αυτό (Campolongo, 2000). Μέχρι στιγμής στον τομέα του περιβάλλοντος, τα μοντέλα χρησιμοποιούν κυρίως τοπικές μεθόδους με την βασικότερη αυτήν, της «μια την φορά» (one-at-a-time), η οποία δεν επιτρέπει την ποσοτικοποίηση και την αναγνώριση τυχόν αλληλεπιδράσεων μεταξύ των παραμέτρων του μοντέλου. Όσον αφορά τις καθολικές μεθόδους, έχουν χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Morris (Morris, 1991; Campolongo et al., 2007) όπως και μέθοδοι οι οποίες ποσοτικοποιούν την ευαισθησία με υπολογισμό διασπορών (π.χ. Extended FAST) και πιο συγκεκριμένα μέσω των δεικτών Sobol (Cukier et al., 1973, Schaibly and Shuler, 1973; Saltelli et al. 1999; Sobol, 2001). Στο κεφάλαιο 2 αναλύθηκαν εκτενώς ο τρόπος αλλά και οι κατηγορίες στις οποίες χωρίζονται οι διάφορες μέθοδοι, καθώς και τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα της κάθε μιας.

Τελικά, όσον αφορά την επιλογή μεθόδου ανάλυσης ευαισθησίας, αυτή θα πρέπει να πραγματοποιηθεί σύμφωνα με κριτήρια, μερικά από τα οποία είναι εφαρμόσιμα σε όλες τις μελέτες (π.χ. υπολογιστικό κόστος). Παράλληλα, ο μελετητής θα πρέπει να αναγνωρίσει τον στόχο για τον οποίο θα πραγματοποιήσει την ανάλυση ευαισθησίας, από τον οποίο προκύπτουν αντίστοιχα κριτήρια (π.χ. διαλογή παραμέτρων, ιεράρχηση κ.ά.). Τελικά, με τον συνδυασμό όλων των κριτηρίων επιτυγχάνεται και η επιλογή της καταλληλότερης μεθόδου ανάλυσης ευαισθησίας.

Στην διπλωματική εργασία, επιλέχθηκαν τέσσερις μέθοδοι ανάλυσης ευαισθησίας με στόχο την εκτίμηση των σημαντικότερων παραμέτρων εισόδου, οι οποίες παρουσιάζονται στην συνέχεια. Λαμβάνοντας υπόψη όσα αναφέρθηκαν για τις μεθόδους στο κεφάλαιο 2 αποφασίστηκε η εφαρμογή των εξής τεσσάρων: 1) μια τοπική μέθοδο, την «one-at-a-time», 2) μια καθολική μέθοδος διασπορών, την FAST, 3) μια μέθοδο υβρίδιο μεταξύ τοπικών και καθολικών, την μέθοδο Morris και 4) μια καθολική μέθοδο διασπορών με τους κλασικούς δείκτες Sobol.

Η ανάλυση ευαισθησίας και για την εφαρμογή όλων των μεθόδων που επιλέχθηκαν στην διπλωματική εργασία, χρησιμοποιήθηκε η εργαλειοθήκη SAFE (Pianosi et al., 2015). Η δομή της επιτρέπει την εφαρμογή των μεθόδων με τις λιγότερες δυνατές αλλαγές για τον κώδικα του μοντέλου, ενώ διαθέτει μια μεγάλη γκάμα από μεθόδους που καλύπτουν όλους τους στόχους της ανάλυσης ευαισθησίας.

4.2.2 Μέθοδος «one-at-a-time»

Οι LSA μέθοδοι είναι πολύ πιο οικονομικές ως προς το υπολογιστικό κόστος και χρόνο, αλλά τα αποτελέσματά τους έχουν ποιοτικό χαρακτήρα. Ο βασικός τους περιορισμός είναι ότι δεν μπορούν να εκτιμήσουν την οποιαδήποτε αλληλεπίδραση μεταξύ των παραμέτρων. Οι παράμετροι με τις οποίες ασχοληθήκαμε στην ανάλυση ευαισθησίας, βρίσκονται στον Πίνακα 4-1. Σύμφωνα με τα παραπάνω, επιλέγεται η πρώτη μορφή ανάλυσής να γίνει με την τοπική μέθοδο «one-at-a-time». Η μέθοδος αυτή έχει σχετικά απλή και γρήγορη εφαρμογή και δείχνει ποιοτικά την βαρύτητα της κάθε παραμέτρου, μέσω αριθμητικών δεικτών. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε προσομοίωση μεταβάλλεται μια από τις παραμέτρους, με μια διαταραχή (π.χ. +30%, -30%), ενώ ταυτοχρόνως όλες οι υπόλοιπες παράμετροι διατηρούν

ίδια τιμή με την κατάσταση αναφοράς, που είχε υπολογιστεί αρχικώς. Τελικά, προκύπτει ένας δείκτης ο οποίος ουσιαστικά ποσοτικοποιεί την μεταβολή της τιμής της κάθε μεταβλητής εξόδου, σε σχέση με την αντίστοιχη μεταβολή της κάθε παραμέτρου, η οποία και αλλάχθηκε για την συγκεκριμένη προσομοίωση. Ο τρόπος υπολογισμού του δείκτη παρουσιάζεται στην επόμενη εξίσωση:

$$S_{py_{ji}} = \frac{\frac{\Delta y_i}{y_{i,0}}}{\frac{\Delta p_j}{p_{j,0}}}$$

όπου: Δy_i = η διαφορά μεταξύ της τιμής της μεταβλητή εξόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης λόγω της διαταραχή της παραμέτρου εισόδου p_j ,

Δp_j : η διαφορά μεταξύ της τιμής της παραμέτρου εισόδου στην κατάσταση αναφοράς και της αντίστοιχης μετά την διαταραχή της,

$y_{i,0}$: η τιμή της μεταβλητής εξόδου στην κατάσταση αναφοράς,

$p_{j,0}$: η τιμή της παραμέτρου εισόδου στην κατάσταση αναφοράς.

Με αυτόν τον τρόπο υπολογίστηκε ένας δείκτης ευαισθησίας-βαρύτητας για κάθε μεταβλητή εξόδου y , για κάθε μια από τις δύο διαταραχές (+30%, -30%) κάθε παραμέτρου εισόδου p . Στην συνέχεια λήφθηκε η μέγιστη απόλυτη τιμή του δείκτη μεταξύ των τιμών λόγω των δύο διαφορετικών διαταραχών. Συνεπώς, αυτή η τιμή περιέγραψε τελικά την ευαισθησία της κάθε μεταβλητής στην εκάστοτε παράμετρο εισόδου. Σύμφωνα με τα παραπάνω, μπορούμε να έχουμε μια πρώτη άποψη για την σημαντικότητα των παραμέτρων, το πόσο δηλαδή επηρεάζουν τις μεταβλητές εξόδου, αλλά και το πώς τις επηρεάζουν (θετική ή αρνητική μεταβολή). Υπενθυμίζεται, ότι η μέθοδος εφαρμόστηκε με την διαταραχή μόνο μιας παραμέτρου την φορά και όλες τις υπόλοιπες να διατηρούνται σταθερές. Όπως είναι λογικό δεν παρέχεται καμία πληροφορία ως προς τις τυχόν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων εισόδου.

Η μέθοδος αυτή εφαρμόστηκε για όλες τις μεταβλητές εξόδου, στο σύνολο τους είναι 8, και επιλέχθηκε ο υπολογισμός τριών διαφορετικών αριθμητικών τιμών, σε δύο διαφορετικά

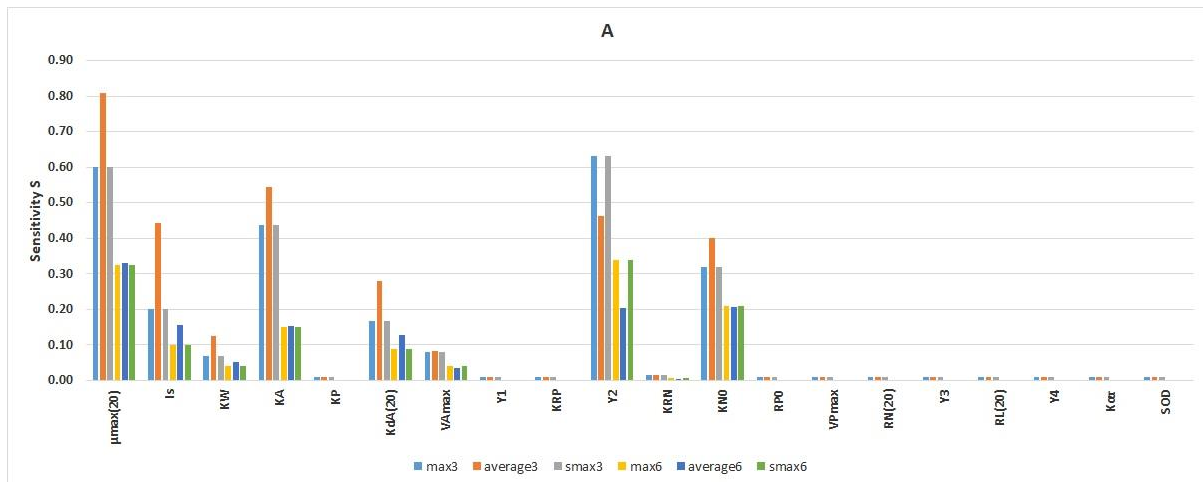
χωρικά σημεία της λίμνης. Υπολογίζονται τρεις αριθμητικές τιμές (μέγιστη ετήσια, μέση ετήσια, μέγιστη θερινή) για το στοιχείο πλήρους μίξης τρία, στο οποίο πραγματοποιείται η είσοδος των λυμάτων από την εγκατάσταση επεξεργασίας, και τρεις αντίστοιχες για το στοιχείο πλήρους μίξης έξι. Με την επιλογή αυτή λαμβάνονται στοιχεία για την κύρια πηγή φόρτισης των ρύπων, αλλά και για την μεταφορά και την διασπορά τους στο σύνολο του υδάτινου σώματος. Ως όριο για την αξιολόγηση της σημαντικότητας μιας παραμέτρου επιλέγεται, σύμφωνα και με την βιβλιογραφία (Cosenza et al., 2013) η τιμή 0.1. Με αυτόν τον τρόπο πραγματοποιείται, για κάθε μεταβλητή εξόδου, διαλογή μεταξύ των σημαντικών και μη παραμέτρων.

Παρακάτω, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των τελικών δεικτών ευαισθησίας με την μορφή κατακόρυφων ραβδογραφημάτων. Το κάθε γράφημα αφορά μια μεταβλητή εξόδου και περιέχει πληροφορίες για όλες τις αριθμητικές τιμές που υπολογίστηκαν, καθώς και για όλες τις παραμέτρους που εξετάστηκαν.

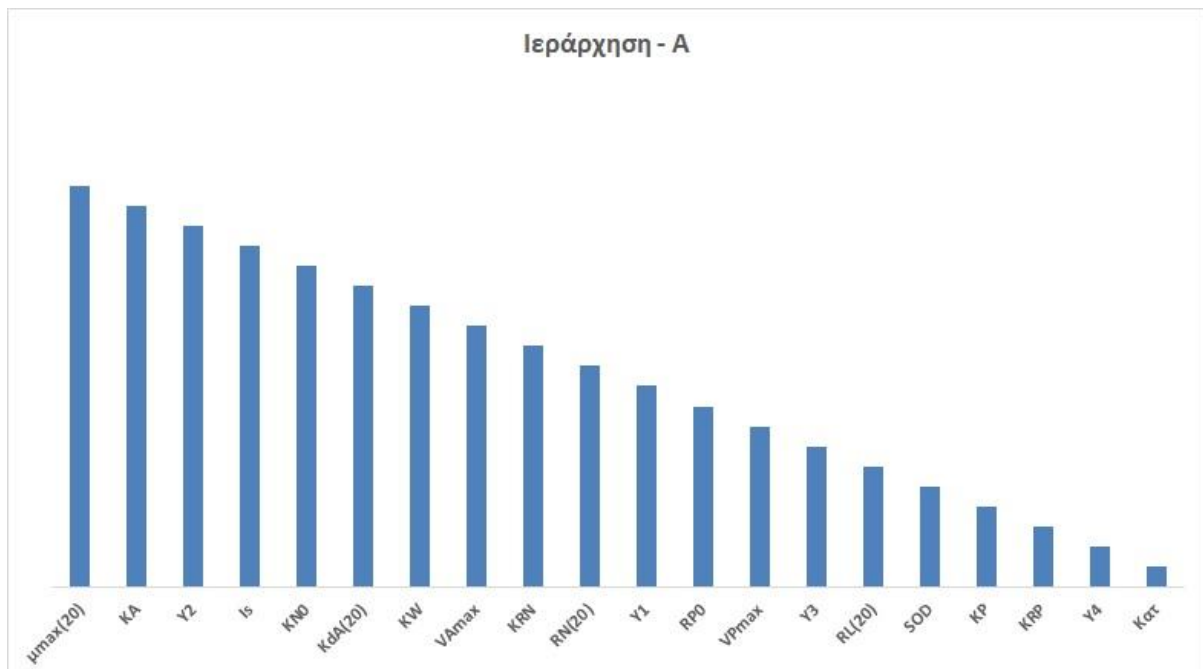
Αρχικά μέσω των ραβδογραφημάτων παρατηρείται ότι για τις περισσότερες παραμέτρους, οι δείκτες τους λαμβάνουν τις μεγαλύτερες τιμές για τις μέσες ετήσιες τιμές των συγκεντρώσεων των μεταβλητών. Το γεγονός αυτό συμβαίνει διότι, σε ετήσια κλίμακα έχει επέλθει και μια σταθερότητα στις συγκεντρώσεις και επομένως καθιστά αυτές τις τιμές περισσότερο αντιπροσωπευτικές της μεταβολής των μεγεθών εξόδου. Παράλληλα, οι τιμές για το στοιχείο πλήρους μίξης τρία είναι αρκετά μεγαλύτερες, γεγονός που εξηγείται από την παρουσία της σημειακής πηγής φόρτισης λόγω και της εγκατάστασης επεξεργασίας λυμάτων. Αντίθετα, παρατηρείται ότι οι αντίστοιχες τιμές για το στοιχείο πλήρους μίξης έξι είναι αρκετά χαμηλότερες, ενώ μερικές φορές είναι μικρότερες και από το όριο σημαντικότητας. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να παρουσιάζονται παράμετροι ως μη – σημαντικές ενώ είναι σημαντικές, σύμφωνα με τις τιμές του στοιχείου τρία. Ο συνδυασμός όλων των παραπάνω, οδηγεί στην επιλογή της μέσης ετήσιας συγκέντρωσης, και ειδικότερα αυτή του στοιχείου τρία, ως αντιπροσωπευτική τιμή τόσο για την μέθοδο «one at a time», όσο και για τις υπόλοιπες μεθόδους που επιστρατεύθηκαν στην συνέχεια. Η μέθοδος προσφέρει και δυνατότητα ακριβής ταξινόμησης των παραμέτρων, σύμφωνα με τις τιμές των δεικτών τους. Η ιεράρχηση των παραμέτρων για κάθε μεταβλητή, παρουσιάζεται παρακάτω με την μορφή κατακόρυφων ραβδογραφημάτων.

Όσον αφορά την διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, αυτή πραγματοποιήθηκε σύμφωνα με το όριο που θέσαμε (0.1), λαμβάνοντας υπόψη μόνο την μέση ετήσια τιμή στο στοιχείο πλήρους μίξης τρία. Παρατηρείται ότι υπάρχουν παράμετροι, οι οποίες είναι σημαντικές σχεδόν για όλες τις μεταβλητές. Πιο συγκεκριμένα σε αυτές περιλαμβάνονται οι $\mu_{\max(20)}$, K_A , I_S , $K_{da(20)}$, K_{NO} , οι οποίες έχουν μεγάλη τιμή στον δείκτη τους για όλες τις μεταβλητές, με εξαίρεση τον ανόργανο φώσφορο και το διαλυμένο οξυγόνο. Στην συνέχεια παρατηρούνται άλλες παράμετροι οι οποίες είναι σημαντικές για λιγότερες μεταβλητές (K_W , Y_2 , $R_{N(20)}$, Y_1) ή μόνο και για μια (οργανικός φώσφορος – R_{PO} , διαφάνεια - K_{RN} , οργανικός άνθρακας – Y_3 , $R_{L(20)}$). Επομένως, από την συγκεκριμένη μέθοδο και σύμφωνα με όλες τις μεταβλητές, υπάρχουν στο σύνολο 13 σημαντικές παραμέτρους, ενώ οι υπόλοιπες επτά από τις αρχικές θεωρούνται ως μη – σημαντικές.

Η μεταβλητή της χλωροφύλλης έχει επτά σημαντικές παραμέτρους, σύμφωνα και με το όριο σημαντικότητας, οι οποίες παρουσιάζονται σε φθίνουσα σειρά σημαντικότητας: $\mu_{\max(20)}$, K_A , Y_2 , I_S , K_{NO} , $K_{da(20)}$ και K_W . Επομένως στις διεργασίες που συμβάλλουν στην μεταβλητότητα της χλωροφύλλης περιλαμβάνονται: η ανάπτυξη του φυτοπλαγκτόν ($\mu_{\max(20)}$), η προσπίπτουσα ακτινοβολία (I_S) και η μείωσή της λόγω φυσικής θολότητας (K_A) αλλά και λόγω αιωρούμενων στερεών στο νερό (K_W). Επιπλέον, τα θρεπτικά και κυρίως το άζωτο, συμβάλλει μέσω της περιεκτικότητας των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε αυτό (Y_2), αλλά και μέσω του ρυθμού κατανάλωσής του για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{NO}). Τέλος, ο ρυθμός θανάτου του φυτοπλαγκτού και του ζωοπλαγκτού ($K_{da(20)}$) παίζει ρόλο για την χλωροφύλλη. Όλα τα παραπάνω παρουσιάζονται στα Σχήματα 4-1 και 4-2.



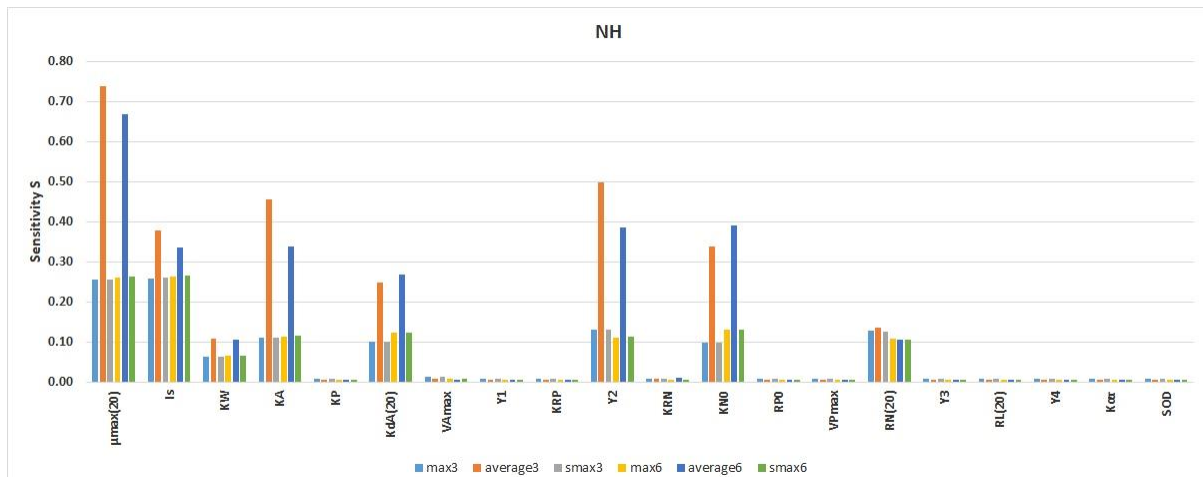
Σχήμα 4-1: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος «one-at-a-time»



Σχήμα 4-2: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος «one-at-a-time»

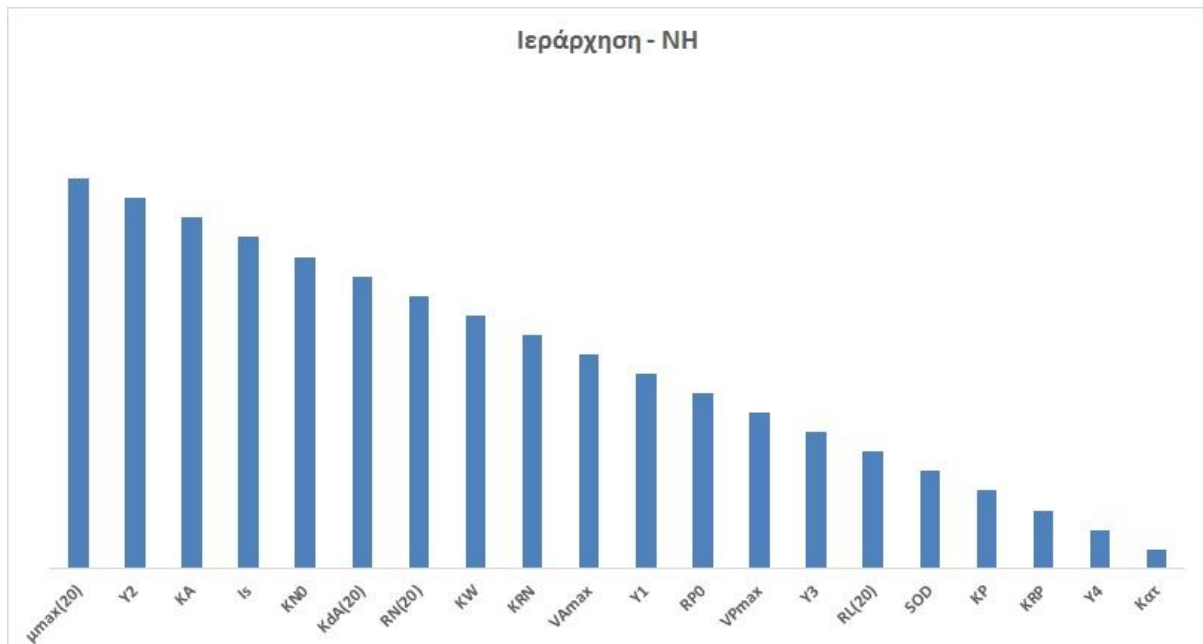
Το αμμωνιακό άζωτο έχει οκτώ σημαντικές παραμέτρους, οι οποίες με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας είναι οι εξής: $\mu_{\max(20)}$, Y_2 , K_A , I_s , K_{NO} , $K_{da(20)}$, $R_{N(20)}$ και K_W . Επομένως οι διεργασίες που συμβάλλουν στην μεταβλητότητα του αμμωνιακού αζώτου είναι οι εξής: η ανάπτυξη του φυτοπλαγκτόν ($\mu_{\max(20)}$), η προσπίπτουσα ακτινοβολία (I_s) και η μείωσή της λόγω φυσικής θολότητας (K_A) αλλά και λόγω αιωρούμενων στερεών στο νερό (K_W). Επιπλέον, τα θρεπτικά και κυρίως το άζωτο, συμβάλλει μέσω της περιεκτικότητας των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε αυτό (Y_2), μέσω του ρυθμού κατανάλωσής του για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{NO}), αλλά και μέσω του ρυθμού της διαδικασίας της

νιτροποίησης ($R_{N(20)}$). Τέλος, ο ρυθμός θανάτου του φυτοπλαγκτού και του ζωοπλαγκτού ($K_{da(20)}$) παίζει ρόλο για την χλωροφύλλη. Οι δείκτες ευαισθησίας παρουσιάζονται στο Σχήμα 4-3, ενώ η ιεράρχηση στο Σχήμα 4-4.



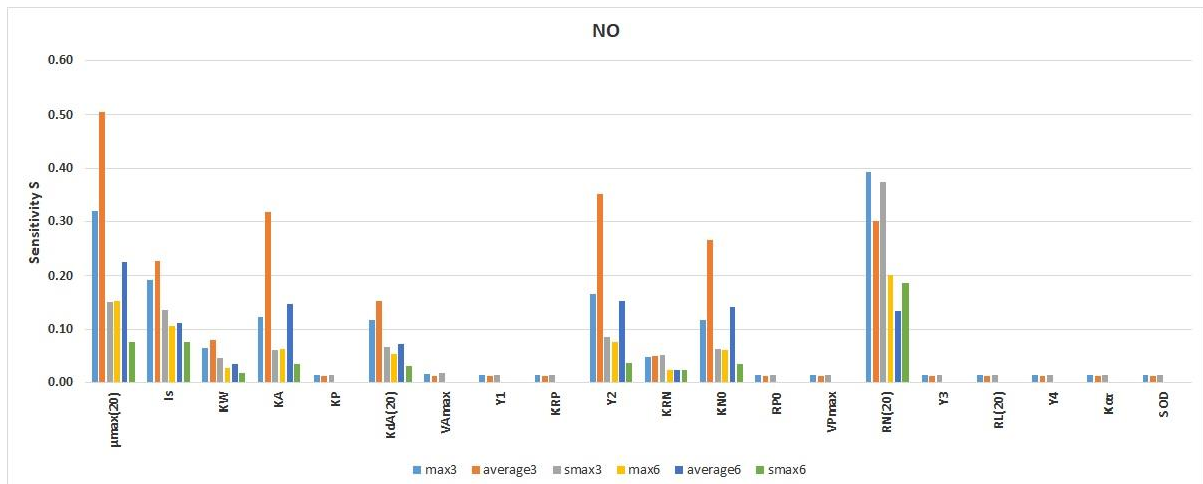
Σχήμα 4-3: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος «one-at-a-time»

Η συμπεριφορά των νιτρικών είναι πολύ κοντινή με αυτήν του αμμωνιακού αζώτου, με επτά σημαντικές παραμέτρους ακριβώς όπως οι παραπάνω, με την διαφορά ότι η K_w δεν αναδεικνύεται πλέον σημαντική. Στο Σχήμα 4-5 παρουσιάζονται οι δείκτες ευαισθησίας για την μεταβλητή των νιτρικών, ενώ το Σχήμα 4-6 περιέχει την ιεράρχηση των παραμέτρων.

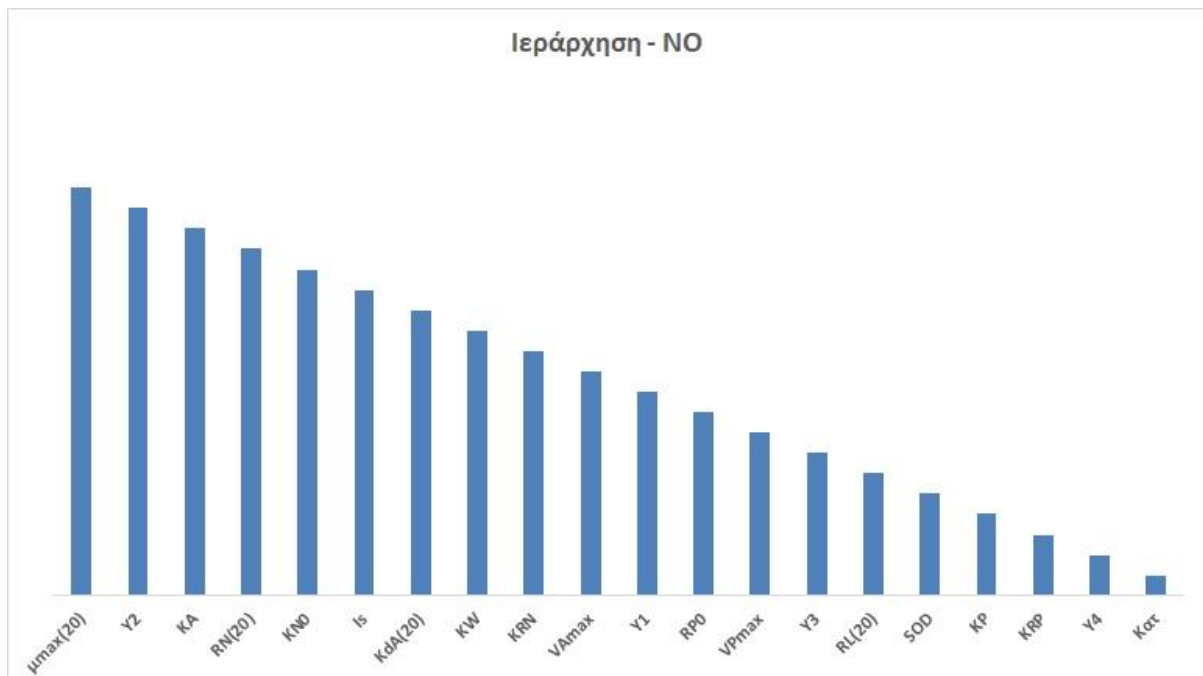


Σχήμα 4-4: Ιεράρχηση παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος «one-at-a-time»

Η σειρά σημαντικότητάς των παραμέτρων μεταβάλλεται ελαφρώς ($\mu_{\max(20)}$, Y_2 , K_A , $R_N(20)$, K_{NO} , I_s και $K_{da(20)}$), το οποίο δείχνει ότι η διαδικασία της νιτροποίησης αποκτά μεγαλύτερη βαρύτητα για την μεταβλητή αυτή. Αυτό είναι αναμενόμενο, μιας και η κύρια πηγή των νιτρικών στο εσωτερικό της λίμνης είναι μέσω της νιτροποίησης του αμμωνιακού αζώτου.



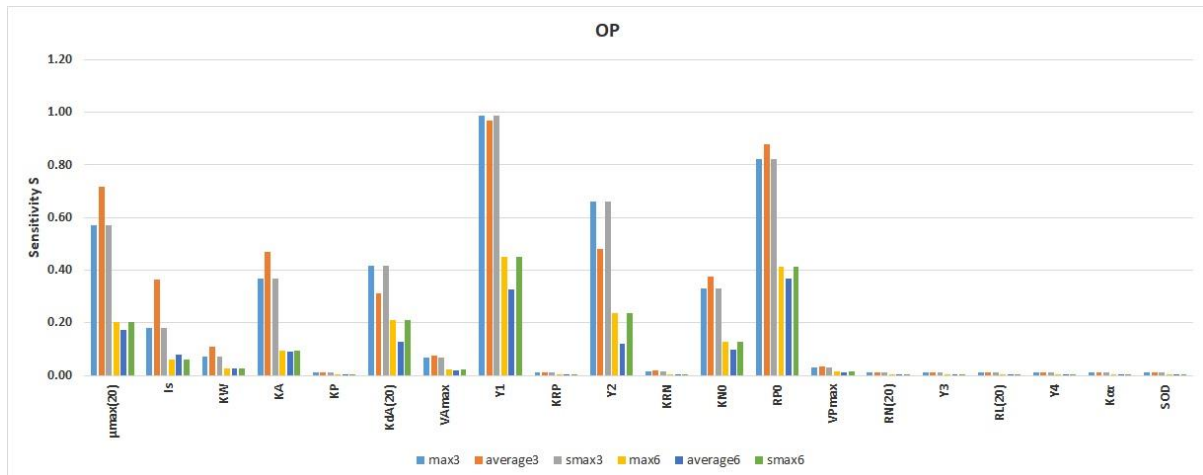
Σχήμα 4-5: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος «one-at-a-time»



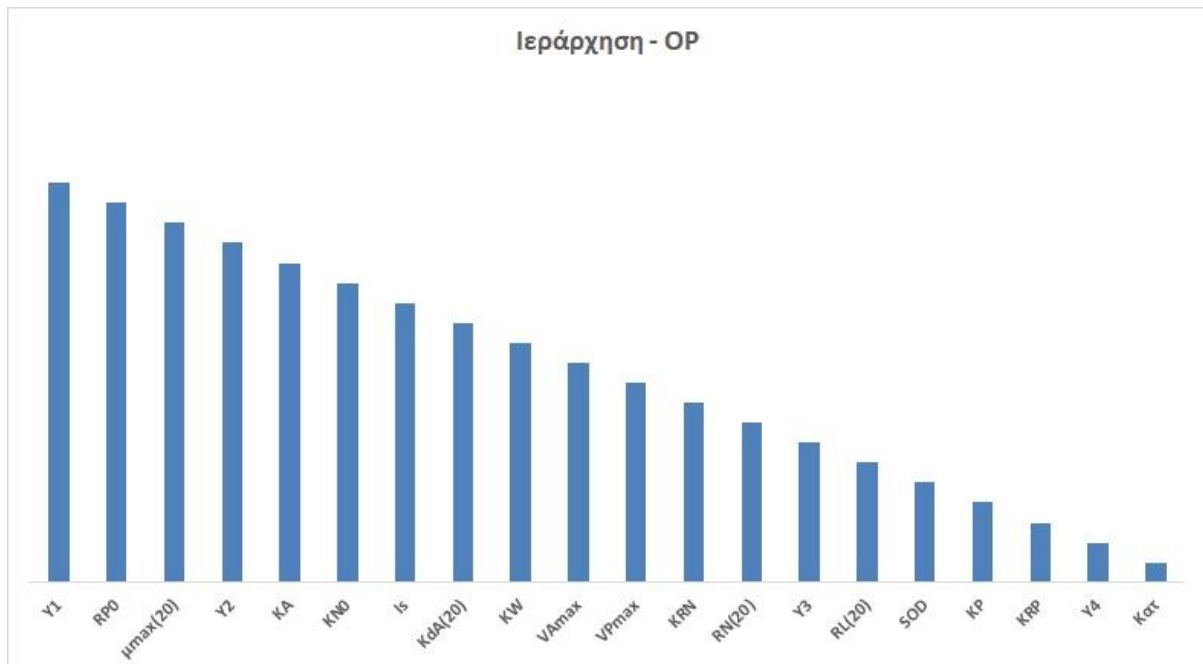
Σχήμα 4-6: Ιεράρχηση παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος «one-at-a-time»

Ο οργανικός φώσφορος έχει εννέα σημαντικές παραμέτρους, οι οποίες με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας είναι οι εξής: Y_1 , R_{PO} , $\mu_{\max(20)}$, Y_2 , K_A , K_{NO} , I_s , $K_{da(20)}$ και K_W . Παρατηρείται ότι οι σημαντικότερες διεργασίες σχετίζονται με τον φώσφορο, όπως η μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο (R_{PO}), ενώ σημαντική είναι και η περιεκτικότητα των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε αυτόν (Y_1). Παράλληλα, σημαντικές είναι: η ανάπτυξη του φυτοπλαγκτόν ($\mu_{\max(20)}$), η προσπίπτουσα ακτινοβολία (I_s) και η μείωσή της λόγω φυσικής θολότητας (K_A) αλλά και λόγω αιωρούμενων στερεών στο νερό (K_W). Επιπλέον και το άζωτο συμβάλλει, μέσω της περιεκτικότητας των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών

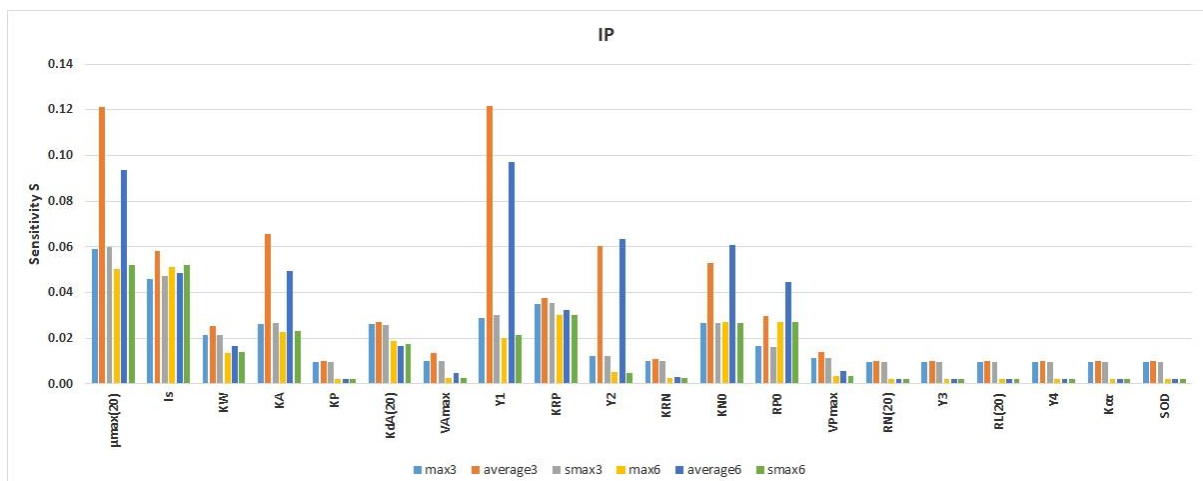
σε αυτό (Y_2), αλλά και μέσω του ρυθμού κατανάλωσής του για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{NO}). Τέλος, ο ρυθμός θανάτου του φυτοπλαγκτού και του ζωπλαγκτού ($K_{da(20)}$) παίζει ρόλο για την χλωροφύλλη. Τα Σχήματα 4-7 και 4-8 παρουσιάζουν τους δείκτες ευαισθησίας και την ιεράρχηση των παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο.



Σχήμα 4-7: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»

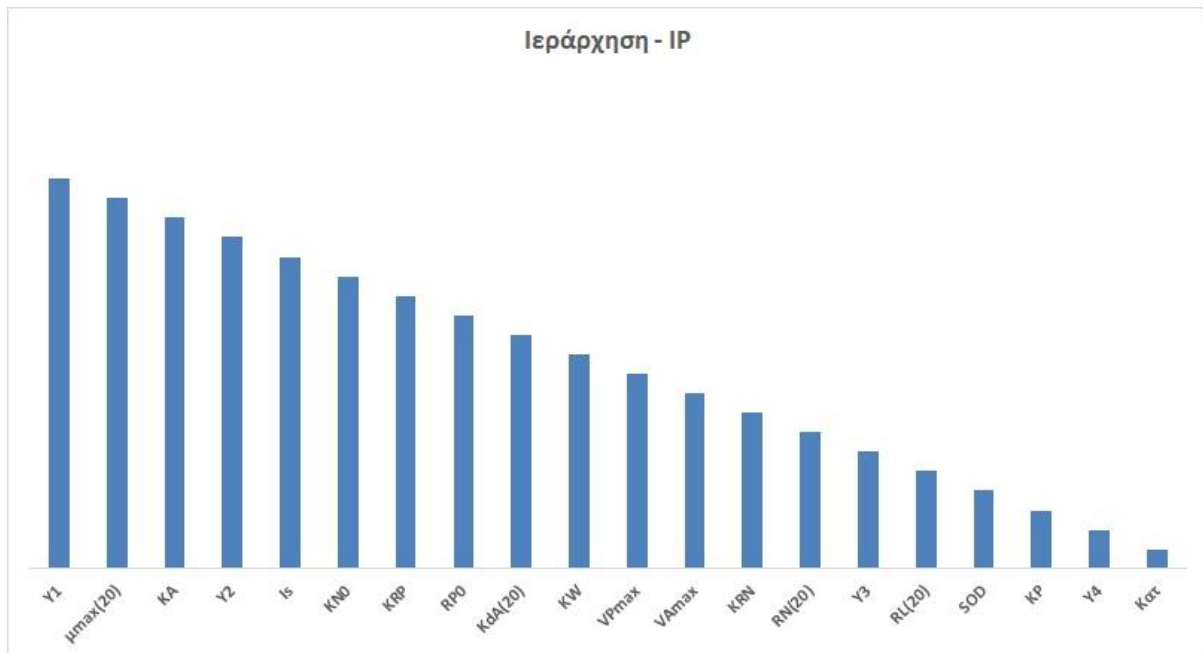


Σχήμα 4-8: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»



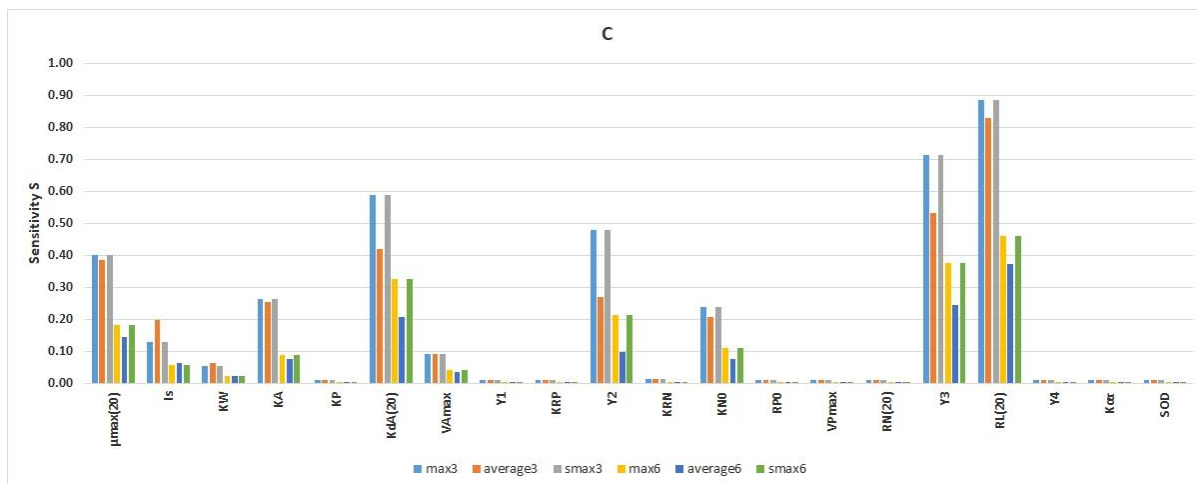
Σχήμα 4-9 Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»

Ο ανόργανος φώσφορος έχει μόνο δύο σημαντικές παραμέτρους, σύμφωνα με το όριο σημαντικότητας, την περιεκτικότητα των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε φώσφορο (Y_1) και την ανάπτυξη του φυτοπλαγκτόν ($\mu_{\max(20)}$), οι τιμές των οποίων φαίνονται στο Σχήμα 4-9. Διεργασίες όπως η μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο ή η τροφοδότηση ανόργανου φωσφόρου από τις πυθμενικές αποθέσεις δεν αναδεικνύονται σημαντικές, το οποίο μοιάζει μη αναμενόμενο. Ωστόσο λόγω των χαρακτηριστικών της μεθόδου, μπορεί να μην έχει την δυνατότητα να τις αναδείξει ως σημαντικές. Η ιεράρχηση για τον ανόργανο φώσφορο φαίνεται στο Σχήμα 4-10.

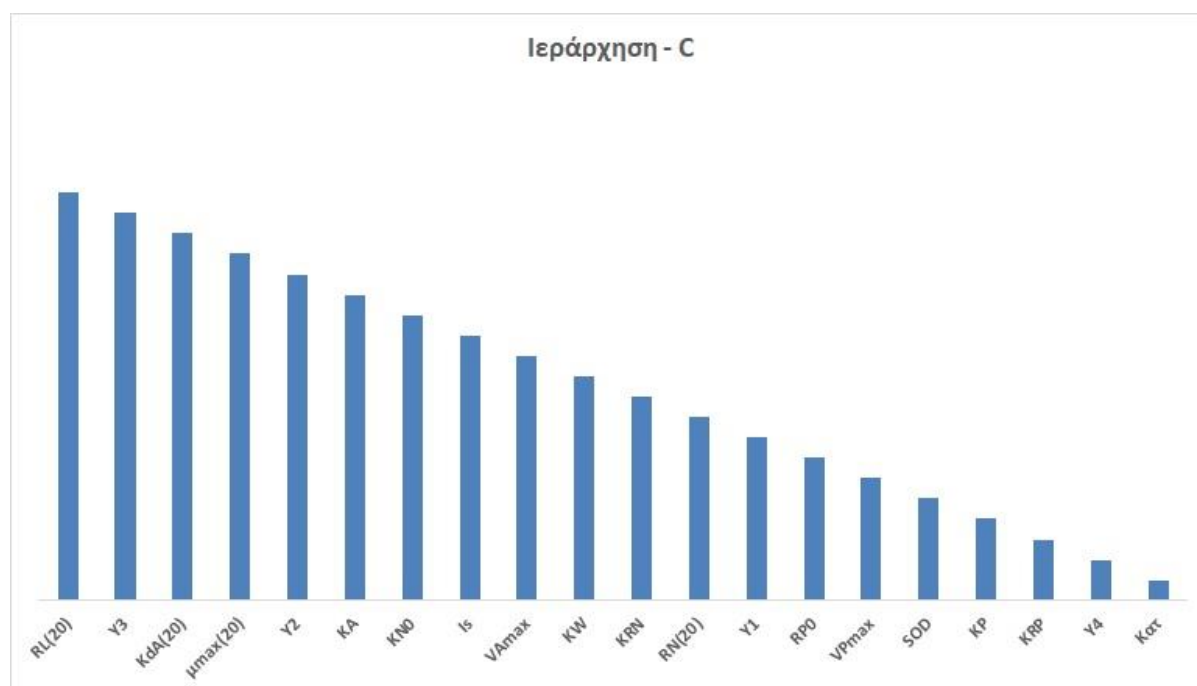


Σχήμα 4-10: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος «one-at-a-time»

Ο οργανικός άνθρακας έχει οκτώ σημαντικές παραμέτρους, οι οποίες με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας είναι οι εξής: $R_L(20)$, Y_3 , $K_{da(20)}$, $\mu_{\max(20)}$, Y_2 , K_A , K_{N0} και I_s . Παρατηρείται ότι σημαντικότερο ρόλο έχουν οι διεργασίες που συμβάλλουν άμεσα στην παραγωγή και την κατανάλωση του οργανικού άνθρακα, όπως η ταχύτητα οξείδωσης του οργανικού άνθρακα ($R_L(20)$) και η περιεκτικότητα των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε άνθρακα (Y_3). Λόγω του τελευταίου αναμενόμενα σημαντικές είναι, ο θάνατος ($K_{da(20)}$) και η ανάπτυξη ($\mu_{\max(20)}$) των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών από τις οποίες αυξάνεται ή μειώνεται η συγκέντρωση του οργανικού άνθρακα αντίστοιχα. Επίσης το άζωτο συμβάλλει μέσω της περιεκτικότητας των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών σε αυτό (Y_2), αλλά και μέσω του ρυθμού κατανάλωσής του για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{N0}). Τέλος, η προσπίπτουσα ακτινοβολία (I_s) και η μείωσή της, λόγω φυσικής θολότητας της λίμνης (K_A) παίζει ρόλο για τον οργανικό άνθρακα. Οι τιμές των δεικτών ευαισθησίας καθώς και η σειρά ταξινόμησης των παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα παρουσιάζονται στα Σχήματα 4-11 και 4-12.



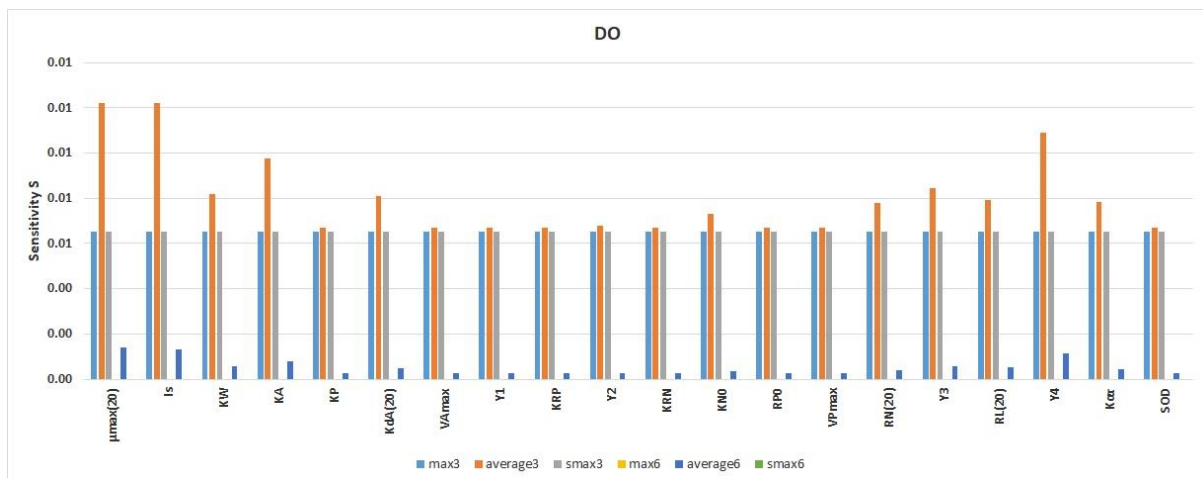
Σχήμα 4-11: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος «one-at-a-time»



Σχήμα 4-12: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος «one-at-a-time»

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφερθεί η ειδική περίπτωση του διαλυμένου οξυγόνου, καθώς οι δείκτες για όλες τις παραμέτρους που υπολογίστηκαν είναι πολύ μικρότεροι από το όριο σημαντικότητας. Αυτό σημαίνει, ότι οι συγκεντρώσεις του διαλυμένου οξυγόνου έχουν πρακτικά μηδενικές μεταβολές από τις αντίστοιχες που θέτουμε στις παραμέτρους εισόδου. Για το παραπάνω γεγονός υπάρχουν τρεις εξηγήσεις: 1) ο συνδυασμός της φυσικής διεργασίας του ρυθμού του επαναερισμού και των μικρών ρυπαντικών φορτίων που έχει η λίμνη, δημιουργούν συνθήκες στις οποίες η συγκέντρωση του οξυγόνου πλησιάζει σε αυτή

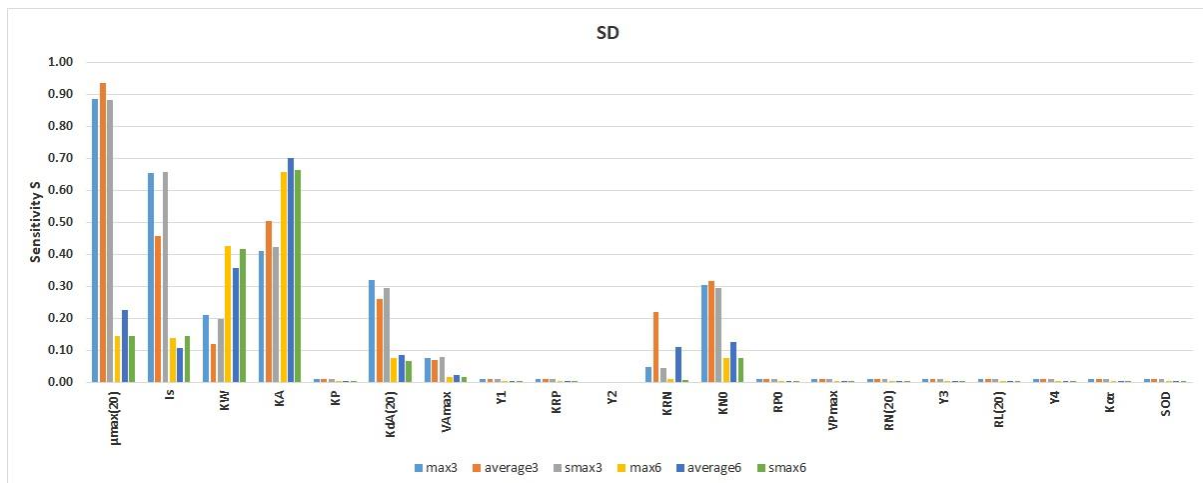
του κορεσμού και τελικά οι διαταραχές των παραμέτρων δεν την επηρεάζουν. 2) η μέθοδος δεν λαμβάνει υπόψη τις αλληλεπιδράσεις, μιας και οι παράμετροι δεν λαμβάνουν ταυτόχρονα τυχαίες τιμές. 3) η διαταραχή των παραμέτρων κατά +30% και -30% δεν είναι αρκετή για να ξεπεραστούν οι συνθήκες που περιγράφηκαν παραπάνω και να παρατηρηθεί μεταβολή στην συγκέντρωση του διαλυμένου οξυγόνου. Το τελευταίο είναι μάλλον η επικρατέστερη επεξήγηση, διότι το πιθανό εύρος των τιμών των παραμέτρων είναι αρκετά μεγαλύτερα από [-30% , +30%]. Παράλληλα, σε μια καθολική μέθοδο από την παραγωγή τυχαίων τιμών σε όλο το εύρος των παραμέτρων, αυξάνεται η πιθανότητα ανατροπής των συνθηκών που αναφέρθηκαν και επομένως υπάρχει περίπτωση να παρατηρηθούν μεταβολές στις συγκεντρώσεις του διαλυμένου οξυγόνου. Η συμπεριφορά των αποτελεσμάτων για την μεταβλητή του διαλυμένου οξυγόνου, δεν επιτρέπει στην μέθοδο να παράξει και λογική σειρά ταξινόμησης. Στο Σχήμα 4-13 φαίνονται και οι εξαιρετικά χαμηλές τιμές όλων των δεικτών ευαισθησίας για το διαλυμένο οξυγόνο.



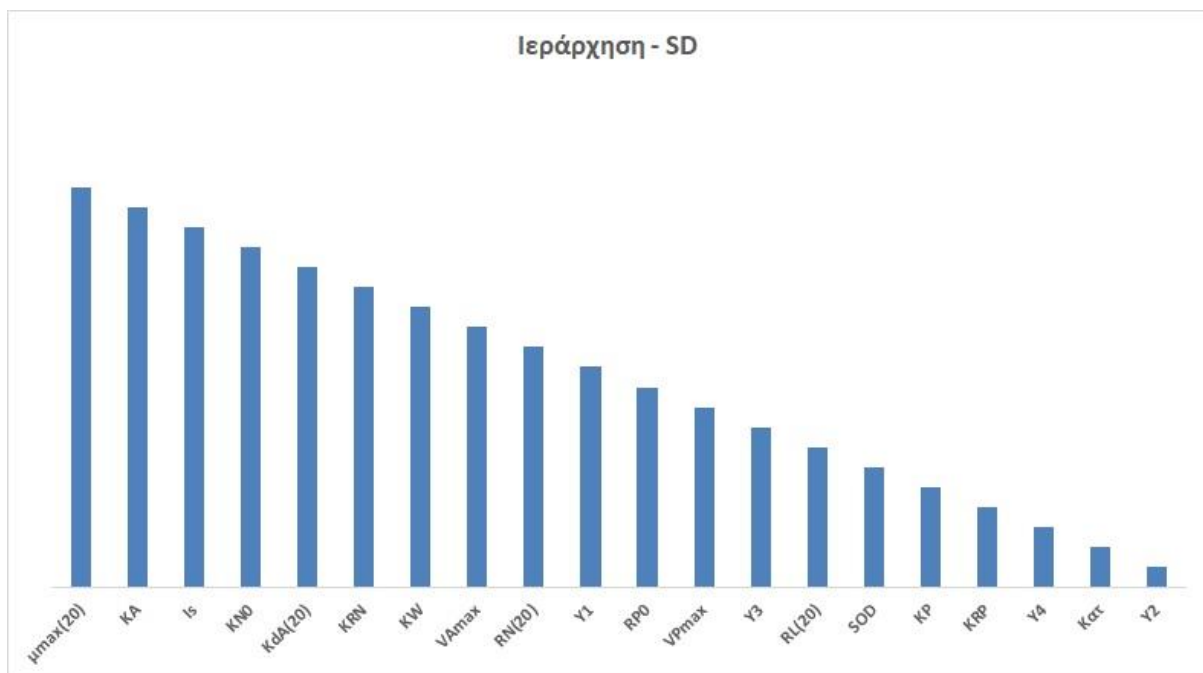
Σχήμα 4-13: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος «one-at-a-time»

Η διαφάνεια έχει επτά σημαντικές παραμέτρους, οι οποίες με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας είναι οι εξής: $\mu_{\max(20)}$, K_A , I_s , K_{NO} , $K_{da(20)}$, K_{RN} και K_W . Οι διεργασίες που συμβάλλουν είναι: η ανάπτυξη ($\mu_{\max(20)}$) των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών, η οποία επηρεάζεται από τον ρυθμό κατανάλωσης του αζώτου για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{NO}) αλλά και από την προσπίπτουσα ακτινοβολία (I_s), η οποία με την σειρά της επηρεάζεται τόσο από την φυσική θολότητα της λίμνης (K_A), όσο και από τα αιωρούμενα στερεά (K_W). Παράλληλα, από τον θάνατο των μικροοργανισμών

($K_{da(20)}$) αυξάνεται το υλικό που βρίσκεται στο εσωτερικό της λίμνης, το οποίο προκαλεί και μείωση της διαφάνειας του νερού. Τα Σχήματα 4-14 και 4-15 παρουσιάζουν τους δείκτες ευαισθησίας και την σειρά ταξινόμησης των παραμέτρων για την διαφάνεια.



Σχήμα 4-14: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος «one-at-a-time»



Σχήμα 4-15: Ιεράρχηση παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος «one-at-a-time»

Σε επόμενο κεφάλαιο, θα γίνει σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων όλων των μεθόδων καθώς και μεταξύ των καθολικών με την τοπική, διότι όπως αναφέραμε αυτή επιλέχθηκε για την απλότητα και την ταχύτητα εφαρμογής της. Επομένως, θα πρέπει να ελεγχθούν τα

αποτελέσματά της, σε σχέση με τις πιο έγκυρες καθολικές, αλλά και να αξιολογηθεί η χρησιμότητά της, δεδομένου και των περιορισμών της.

4.2.3 Μέθοδος FAST

Η μέθοδος FAST αποτελεί μια εναλλακτική τεχνική και προσέγγιση στην κλασική μέθοδο διασπορών για τον υπολογισμό των δεικτών ευαισθησίας. Η FAST διεκπεραιώνεται με πολύ λιγότερο υπολογιστικό κόστος και χρόνο, ωστόσο έχει περιορισμό στα αποτελέσματά της, καθώς υπολογίζει μόνο τους δείκτες για τις πρώτης τάξης επιδράσεις της εκάστοτε παραμέτρου. Με αυτό δεδομένο, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τους δύο βασικούς στόχους της ανάλυσης ευαισθησίας, την ιεράρχηση όλων των παραμέτρων, αλλά και την διαλογή τους σε σημαντικές και μη – σημαντικές. Η βάση της τεχνικής είναι παρόμοια με τις μεθόδους διασπορών, ωστόσο αλλάζει το κομμάτι της δημιουργίας τυχαίων δειγμάτων για τις τιμές των παραμέτρων, αλλά και ο αριθμητικός υπολογισμός των δεικτών. Όπως ήδη αναφέρθηκε, για την μέθοδο αυτή αλλά και για όλες τις υπόλοιπες που εφαρμόστηκαν, αποφασίστηκε η ανάλυση ευαισθησίας να πραγματοποιηθεί με την χρήση μόνο της μέσης ετήσιας τιμής στο στοιχείο πλήρους μίξης τρία. Η επιλογή αυτή βασίζεται στην καλύτερη απόκριση που εμφανίζεται να έχουν όλοι οι δείκτες ευαισθησίας, για την τιμή αυτή, στην ανάλυση «one-at-a-time», ενώ χωρικά είναι ιδανικό αφού είναι αντιπροσωπευτικό της κύριας πηγής φόρτισης για την μελέτη μας.

Η γενική μεθοδολογία και πρακτική της μεθόδου FAST παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2 και επομένως στο κομμάτι αυτό απλά θα παρουσιαστούν μόνο οι τελικοί τύποι που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό των δεικτών ευαισθησίας.

$$A_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \cos(js) ds$$

$$B_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \sin(js) ds$$

$$\bar{Var}_i(Y) = 2 \sum_{j=1}^{\infty} (A_{jw_i}^2 + B_{jw_i}^2)$$

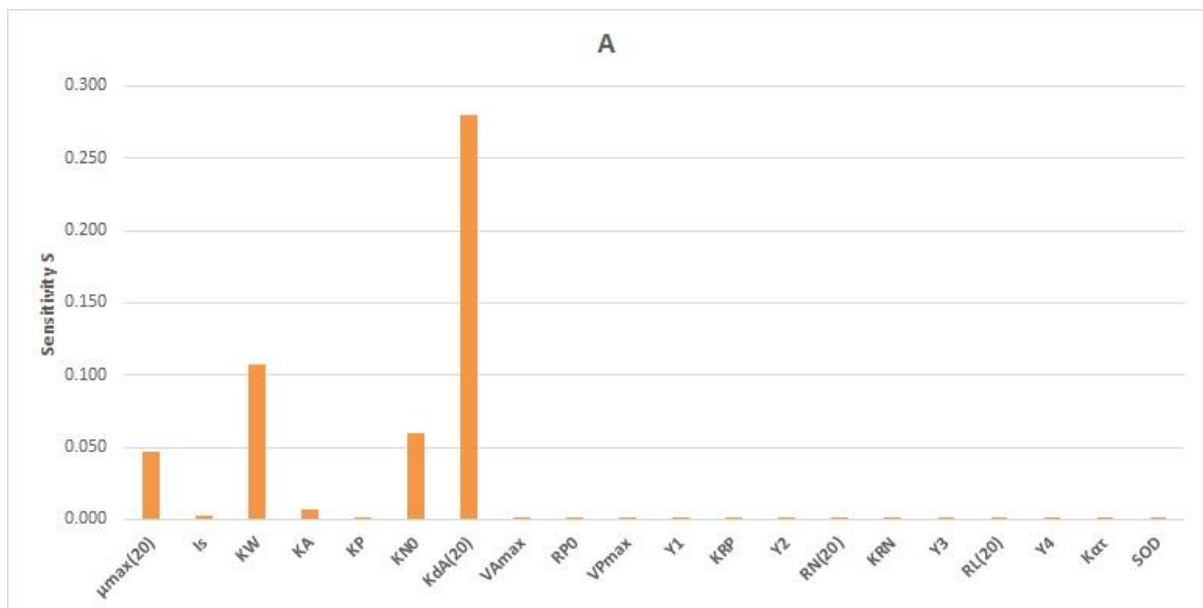
$$\bar{Var}(Y) = 2 \sum_{j=1}^{\infty} (A_j^2 + B_j^2)$$

$$S_i = \bar{Var}_i(Y) / \bar{Var}(Y)$$

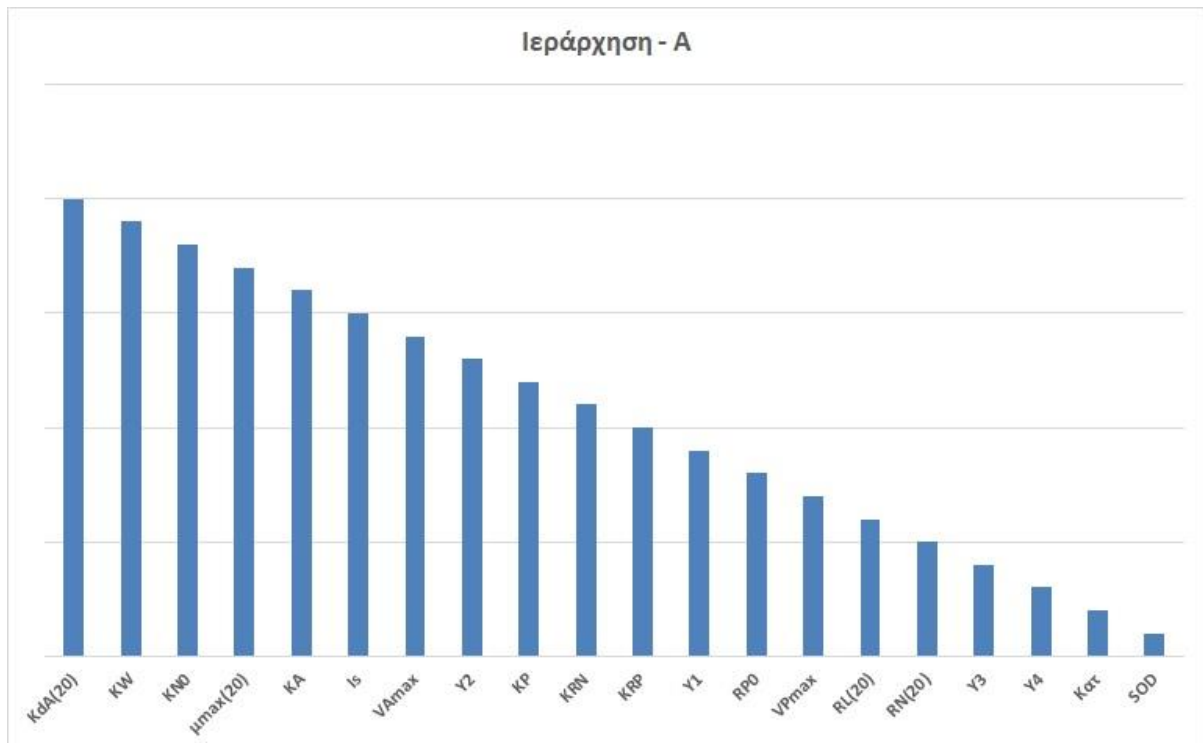
Όπως αναφέρθηκε, η μέθοδος FAST είναι μια καθολική μέθοδος, άρα τα αποτελέσματά της έχουν μεγαλύτερη ορθότητα. Αυτό συμβαίνει, διότι οι παράμετροι μεταβάλλονται ταυτόχρονα και τυχαία στο διάστημα τιμών τους με αποτέλεσμα να επηρεάζουν η μια την άλλη. Επομένως, η ποσοτικοποίηση της αλληλεπίδρασης των παραμέτρων μεταξύ τους δεν παρέχεται με την μέθοδο αυτή, ωστόσο έχει ληφθεί υπόψη στον τελικό υπολογισμό της σημαντικότητάς τους. Το όριο σημαντικότητας για τους δείκτες ορίστηκε ως 0.01, σύμφωνα με την Cosenza et al., (2013), πράγμα που σημαίνει ότι υπάρχει δυνατότητα διαλογής όπως αναφέρθηκε και για την μέθοδο «one-at-a-time». Για την μέθοδο πραγματοποιήσαμε 8 377 επαναλήψεις του αρχικού μοντέλου ευτροφισμού για την εύρεση των δεικτών σημαντικότητας. Παρακάτω, παρουσιάζονται τα διαγράμματα για τους δείκτες ευαισθησίας για όλες τις μεταβλητές του μοντέλου με την μορφή κατακόρυφων ραβδογραφημάτων. Η μέθοδος προσφέρει και δυνατότητα ακριβής ταξινόμησης των παραμέτρων σύμφωνα με τις τιμές των δεικτών τους. Η ιεράρχηση των παραμέτρων για κάθε μεταβλητή, παρουσιάζεται παρακάτω με την μορφή κατακόρυφων ραβδογραφημάτων.

Όσον αφορά την διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, αυτή πραγματοποιήθηκε σύμφωνα με το όριο που θέσαμε (0.01). Παρατηρείται ότι υπάρχουν παράμετροι, οι οποίες είναι σημαντικές σχεδόν για όλες τις μεταβλητές. Πιο συγκεκριμένα σε αυτές περιλαμβάνονται οι $\mu_{\max(20)}$, K_w , $K_{da(20)}$ και K_{No} , οι οποίες έχουν σημαντική τιμή στον δείκτη τους σχεδόν για όλες τις μεταβλητές, με εξαίρεση τα νιτρικά. Για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, παρατηρείται ότι οι σημαντικές παράμετροι περιλαμβάνουν τις τέσσερις που αναφέρθηκαν προηγουμένως. Αυτό δείχνει ότι εξαρτάται κυρίως από την ανάπτυξη και τον

θάνατο του φυτοπλαγκτού και του ζωοπλαγκτού ($\mu_{\max(20)}$, $K_{da(20)}$), από την μείωση του ποσού της ακτινοβολίας που φτάνει στους μικροοργανισμούς λόγω αιωρούμενων στερεών (K_w) αλλά και από την συγκέντρωση των θρεπτικών και κυρίως τον ρυθμό κατανάλωσης του αζώτου (K_{NO}) για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών. Τα Σχήματα 4-16 και 4-17 παρουσιάζουν τους δείκτες ευαισθησίας και την σειρά ταξινόμησης για την χλωροφύλλη.

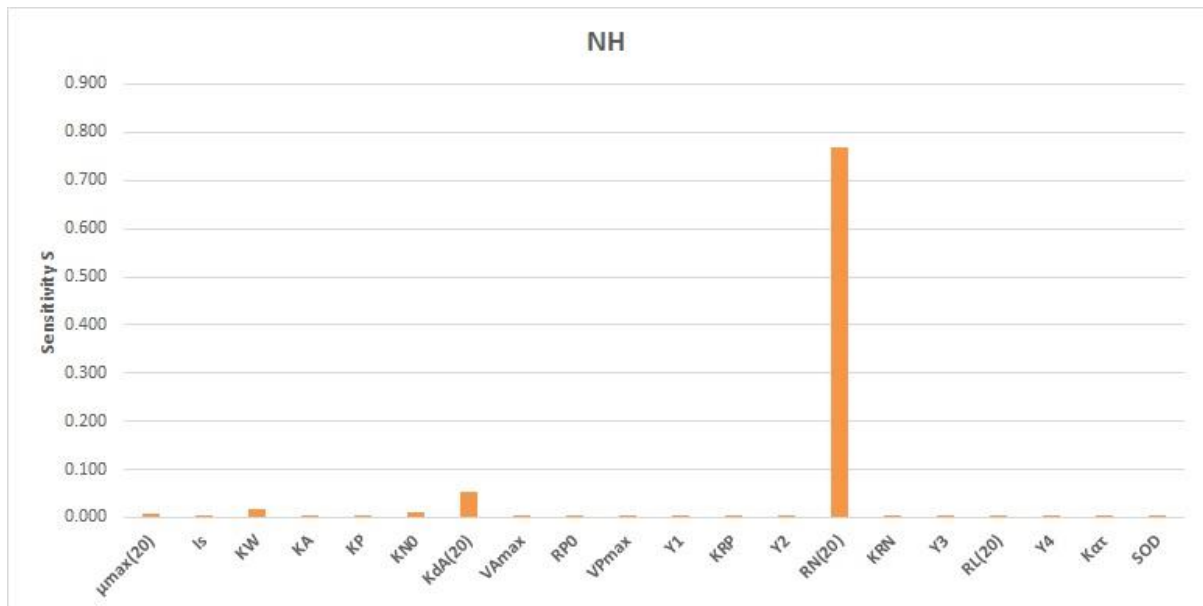


Σχήμα 4-16: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST



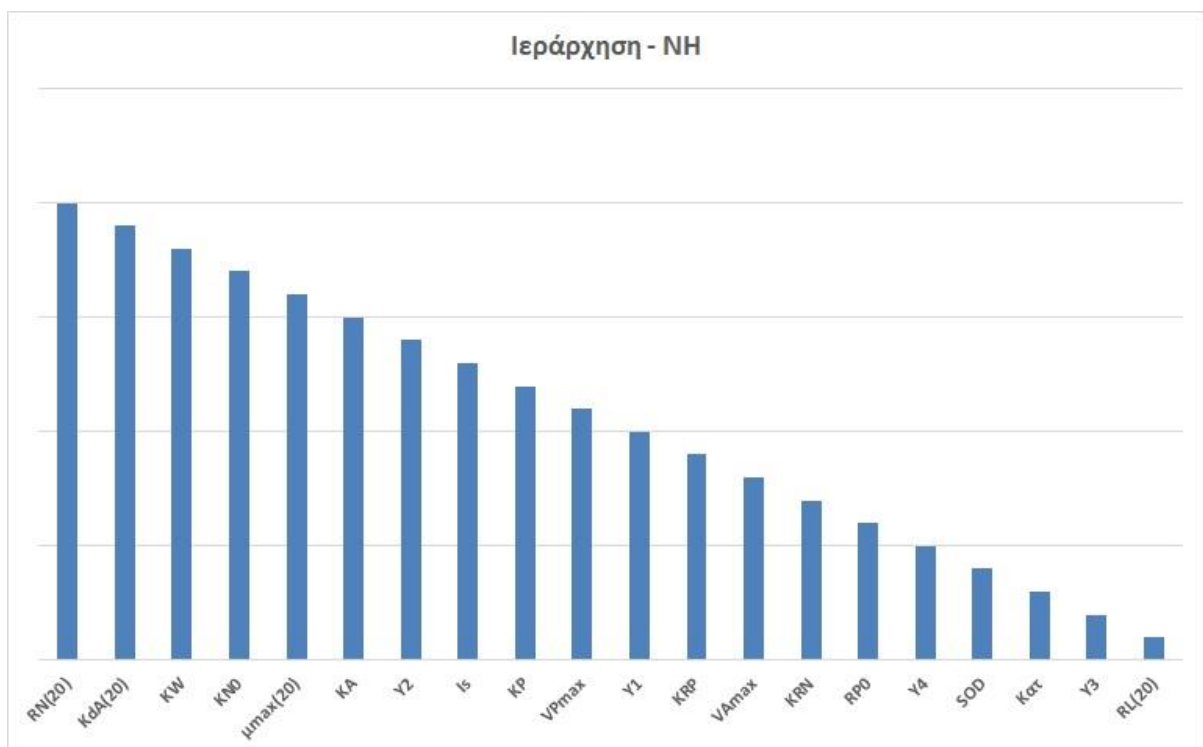
Σχήμα 4-17: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST

Στην συνέχεια παρατηρείται ότι για τις μεταβλητές του αζώτου και πιο συγκεκριμένα για τα νιτρικά υπάρχουν δύο παράμετροι πάνω από το όριο με την μια να είναι εξαιρετικά σημαντική, η $R_{N(20)}$ με τιμή ίση με $S = 0.869$. Το ίδιο παρατηρείται και για το αμμωνιακό άζωτο ($R_{N(20)}$ με τιμή ίση με $S = 0.768$), στο οποίο όμως υπάρχουν και άλλες σημαντικές παράμετροι, χωρίς ωστόσο να έχουν τόσο μεγάλες τιμές. Όπως είναι αναμενόμενο, οι παράμετροι που είναι σημαντικές αφορούν φαινόμενα νιτροποίησης, καθώς και θανάτου των μικροοργανισμών αφού λόγω αυτού, εμπλουτίζεται η λίμνη με αμμωνιακό άζωτο.

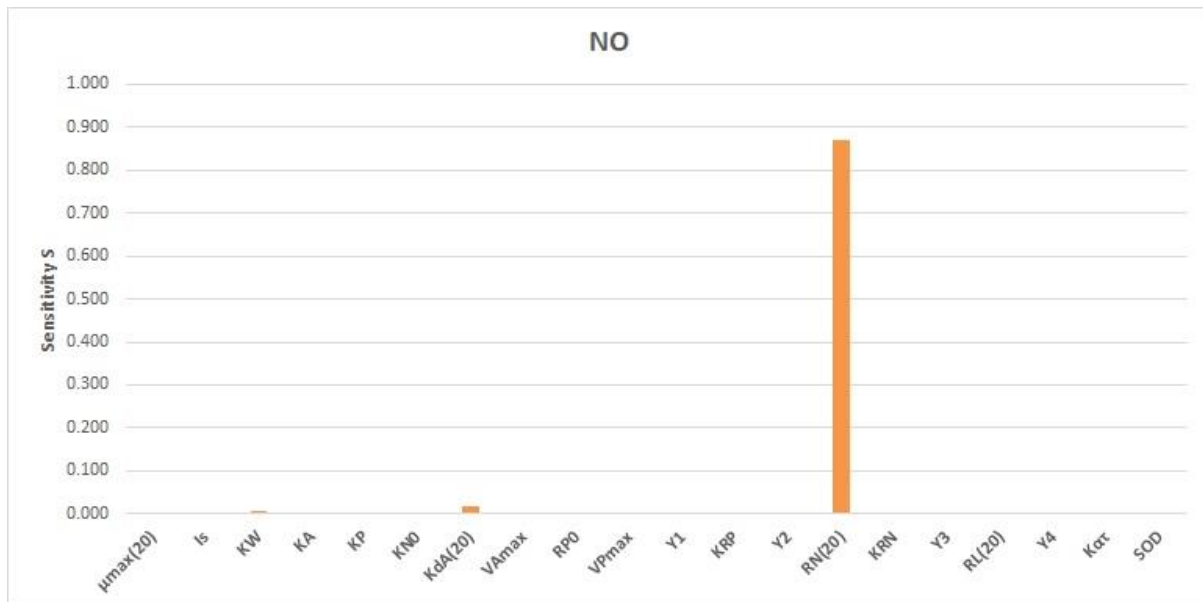


Σχήμα 4-18: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος FAST

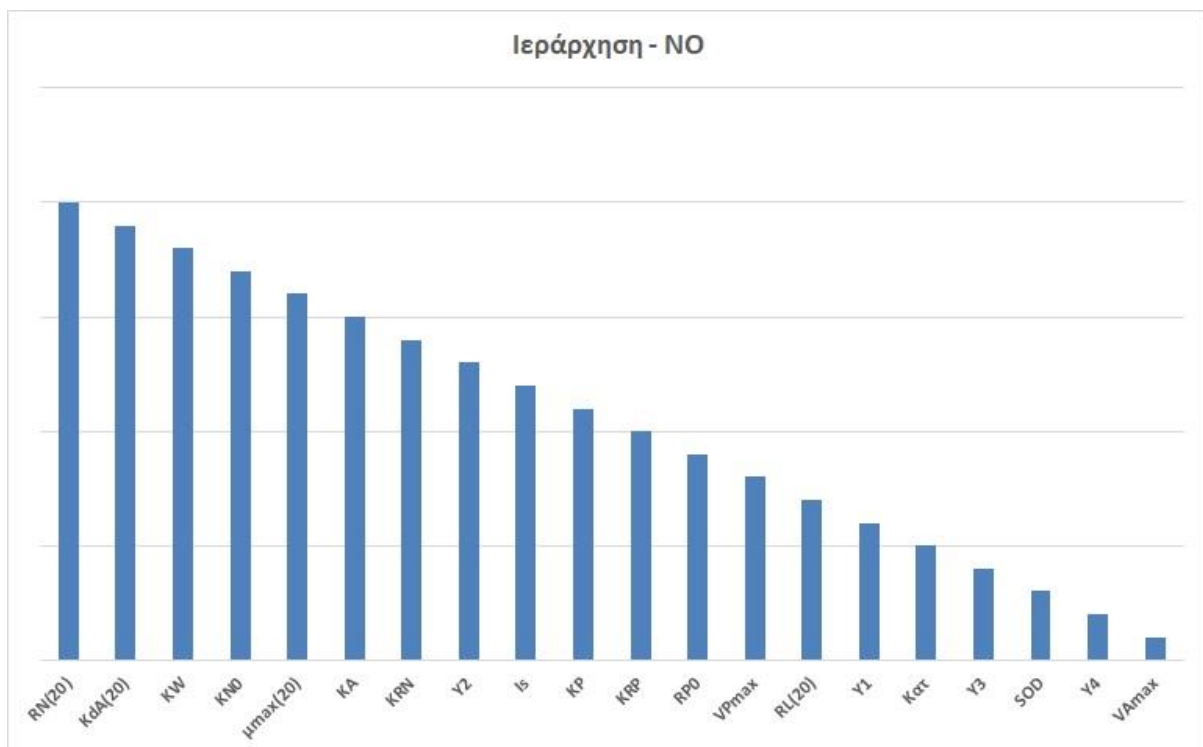
Στο Σχήμα 4-18 και 4-20 παρουσιάζονται οι δείκτες ευαισθησίας για την μεταβλητή του αμμωνιακού αζώτου και των νιτρικών αντίστοιχα, ενώ στο Σχήμα 4-19 και 4-21 η ιεράρχηση των παραμέτρων για αυτές.



Σχήμα 4-19: Ιεράρχηση παραμέτρων για το αμμωνιακό άζωτο, μέθοδος FAST



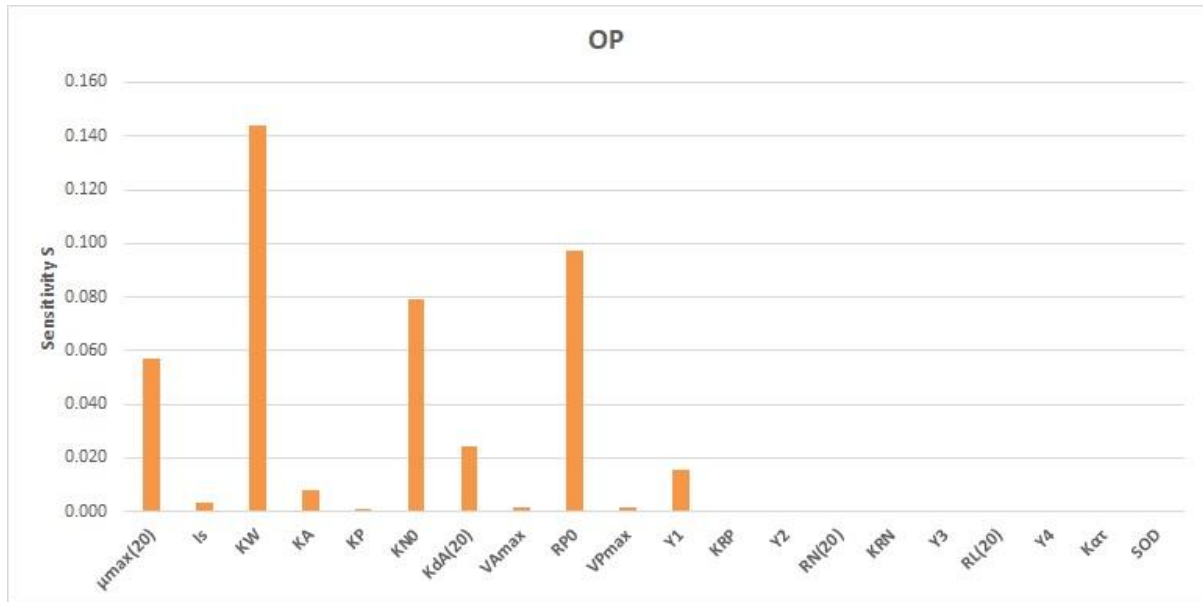
Σχήμα 4-20: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος FAST



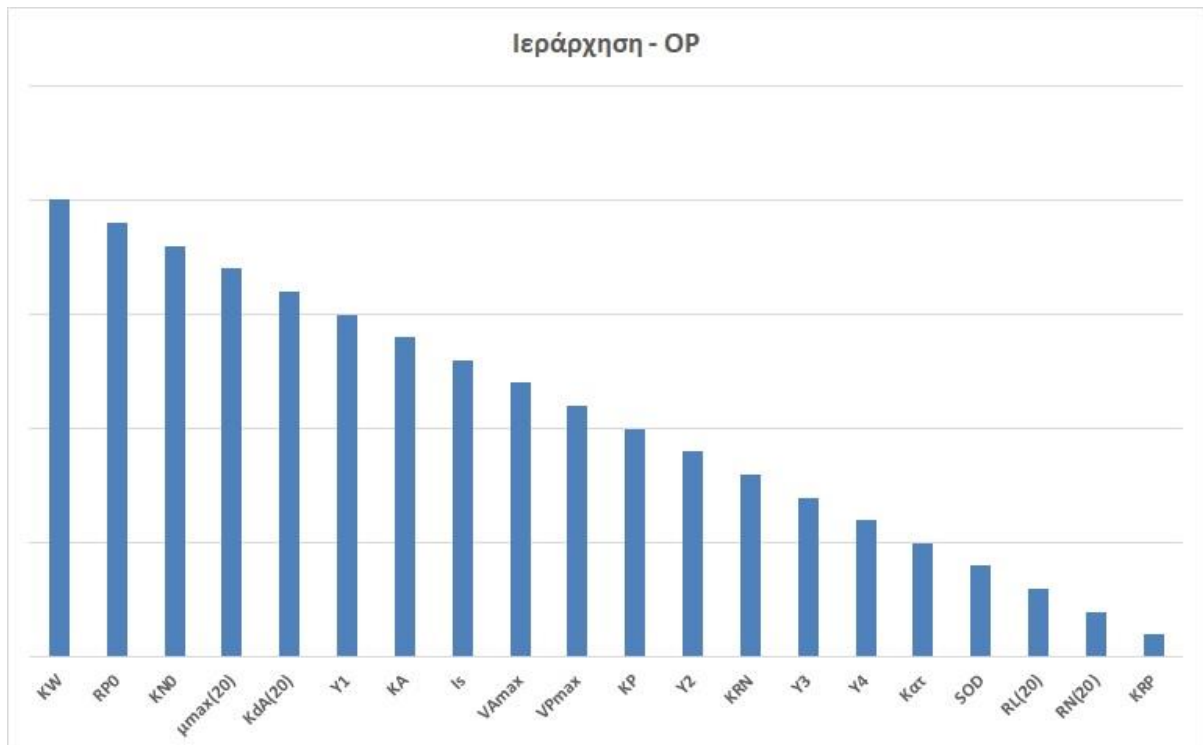
Σχήμα 4-21: Ιεράρχηση παραμέτρων για τα νιτρικά, μέθοδος FAST

Ο οργανικός φώσφορος έχει έξι σημαντικές παραμέτρους με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας: K_W , R_{PO} , K_{NO} , $\mu_{max}(20)$, $K_{da}(20)$, και Y_1 . Οι διεργασίες οι οποίες έχουν την μεγαλύτερη βαρύτητα είναι: η μείωση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας λόγω αιωρούμενων στερεών (K_W) η μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο (R_{PO}), η ανάπτυξη των

φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών και ο ρυθμός κατανάλωσης του αζώτου για αυτήν ($\mu_{\max(20)}$ και K_{NO} , αντίστοιχα), ο θάνατος των μικροοργανισμών ($K_{da(20)}$) και το ποσοστό περιεκτικότητας αυτών σε φώσφορο (Y_1), μιας και αυτό συμβάλλει στην τροφοδότηση του συνολικού συστήματος με φώσφορο. Το Σχήμα 4-22 περιλαμβάνει τους δείκτες ευαισθησίας για τον οργανικό φώσφορο και το Σχήμα 4-23 την ιεράρχηση των παραμέτρων για αυτόν.

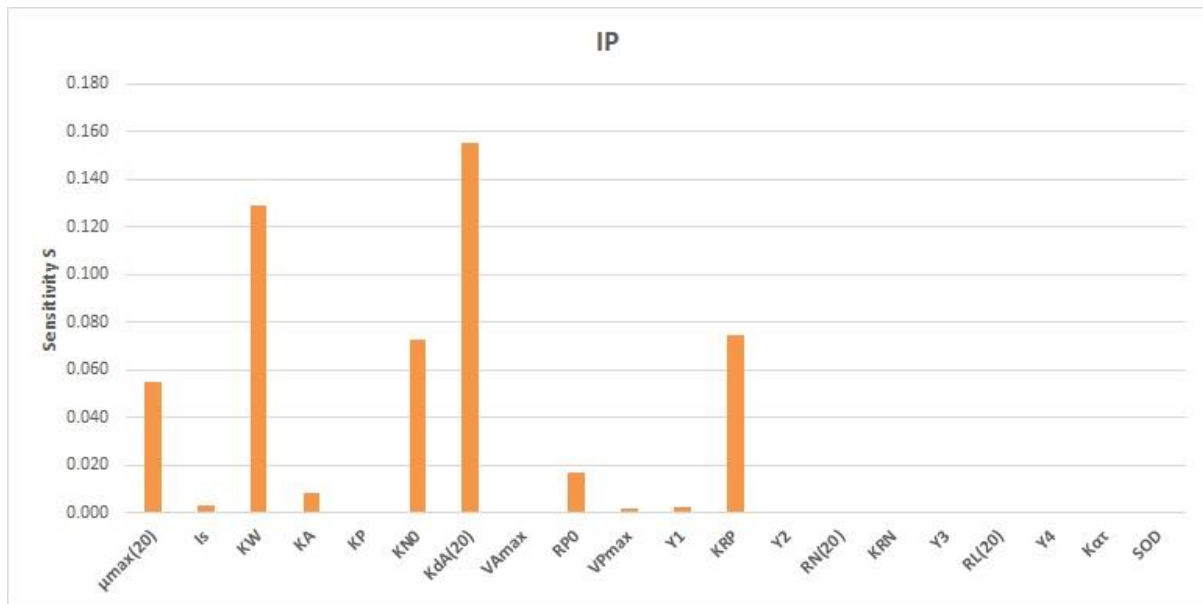


Σχήμα 4-22: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος FAST



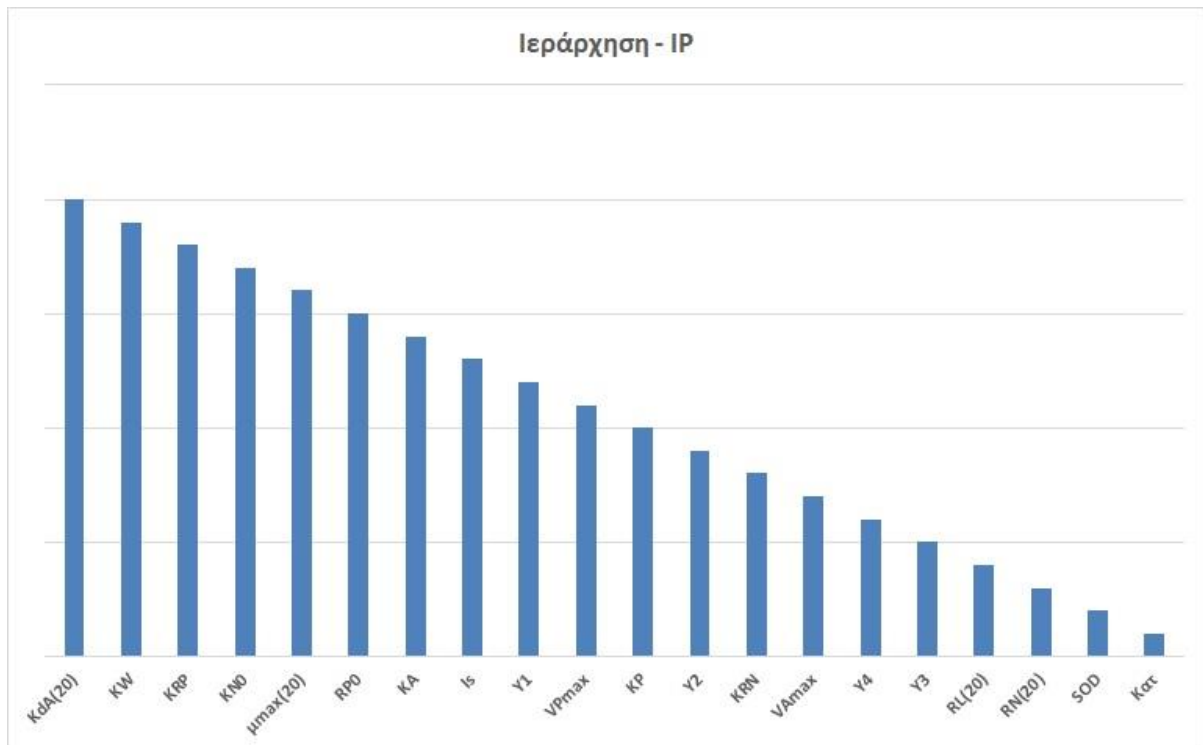
Σχήμα 4-23: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό φώσφορο, μέθοδος FAST

Ο ανόργανος φώσφορος έχει έξι σημαντικές παραμέτρους οι οποίες είναι ως επί το πλείστον ίδιες με αυτές του οργανικού, ενώ έχουν διαφορετική σειρά σημαντικότητας: $K_{da(20)}$, K_W , K_{RP} , K_{NO} , $\mu_{\max(20)}$, και R_{PO} . Επομένως ο ανόργανος φώσφορος, εξαρτάται κυρίως από τον θάνατο των μικροοργανισμών ($K_{da(20)}$), που δημιουργεί και επιπλέον αιωρούμενα στερεά (K_W), τα οποία περιέχουν οργανικό φώσφορο και αυτός θα μετατραπεί σε ανόργανο (R_{PO}). Παράλληλα η τροφοδότηση ανόργανου φωσφόρου μέσω πυθμενικών αποθέσεων (K_{RP}) συμβάλλει σημαντικά στην μεταβλητότητά του. Η ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών ($\mu_{\max(20)}$), η οποία εξαρτάται από τον ρυθμό κατανάλωσης του αζώτου ($\mu_{\max(20)}$), συμβάλλει επίσης για την μεταβλητή του ανόργανου φωσφόρου.



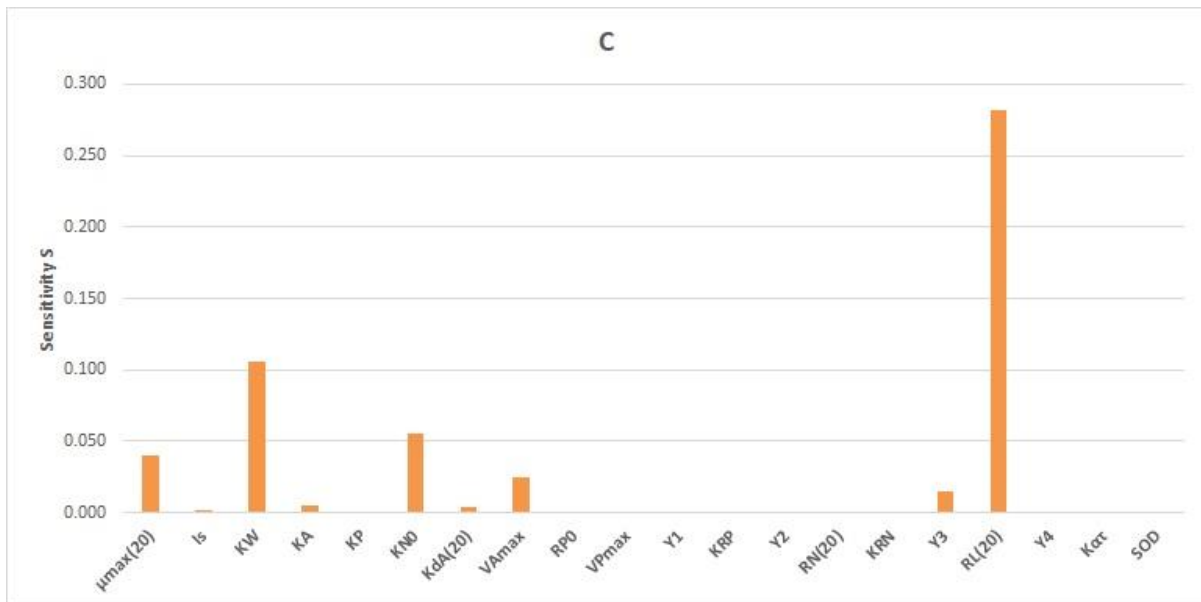
Σχήμα 4-24: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος FAST

Στο Σχήμα 4-24 παρουσιάζονται οι δείκτες ευαισθησίας για τον ανόργανο φώσφορο, ενώ η ιεράρχηση των παραμέτρων για την μεταβλητή αυτή φαίνεται στο Σχήμα 4-25.

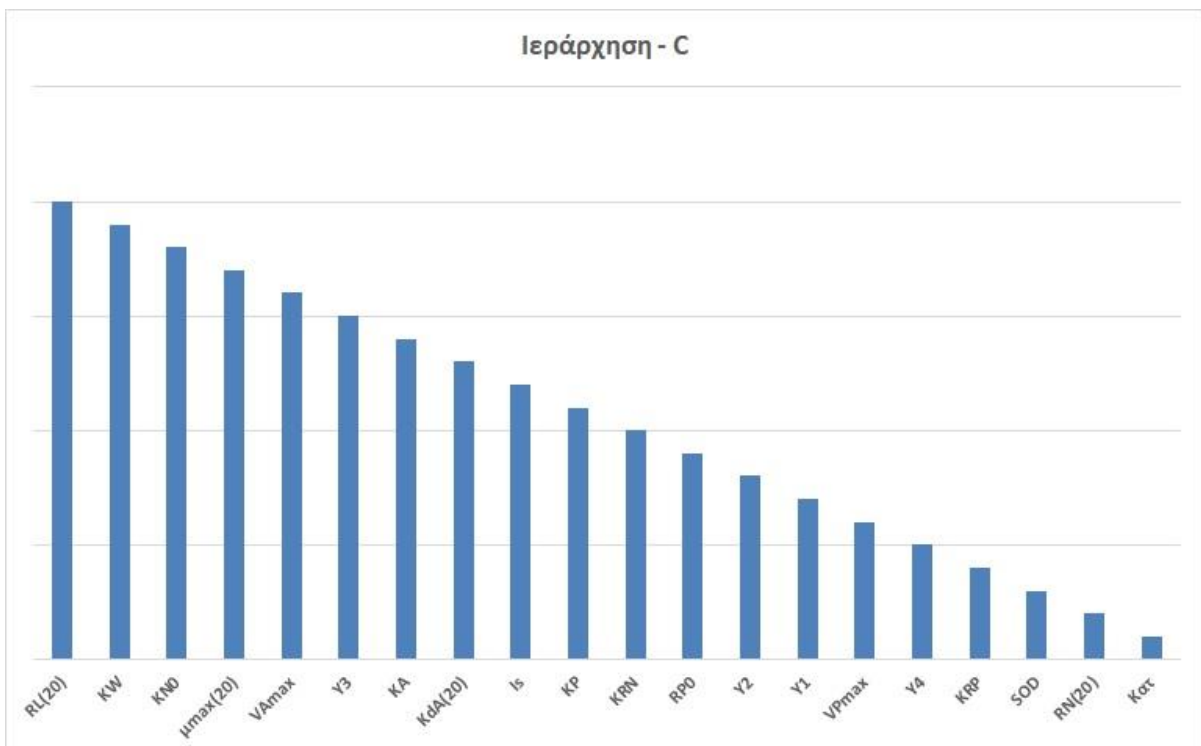


Σχήμα 4-25: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον ανόργανο φώσφορο, μέθοδος FAST

Για τον οργανικό άνθρακα συμβαίνει κάτι ανάλογο με σημαντικότερες παραμέτρους να αναδεικνύονται οι: $R_{L(20)}$, K_W , K_{NO} , $\mu_{max(20)}$, V_{Amax} και Y_3 . Οι διεργασίες, οι οποίες κρίνονται σημαντικές είναι: η οξείδωση του οργανικού άνθρακα ($R_{L(20)}$), η κατανάλωση του άνθρακα μέσω της μετατροπής του για την ανάπτυξη του φυτοπλαγκτού ($\mu_{max(20)}$, Y_3), η καθίζηση του φυτοπλαγκτού (V_{Amax}) αλλά και η μείωση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας λόγω των αιωρούμενων στερεών (K_W), η οποία πρακτικά συμβάλλει και στα προηγούμενα. Επίσης, σημαντικός είναι και ο ρυθμός κατανάλωσης του αζώτου για την ανάπτυξη νέων φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών (K_{NO}). Οι τιμές των δεικτών ευαισθησίας για την μεταβλητή του οργανικού άνθρακα παρουσιάζονται στο Σχήμα 4-26, ενώ η ιεράρχηση των παραμέτρων φαίνεται στο Σχήμα 4-27.



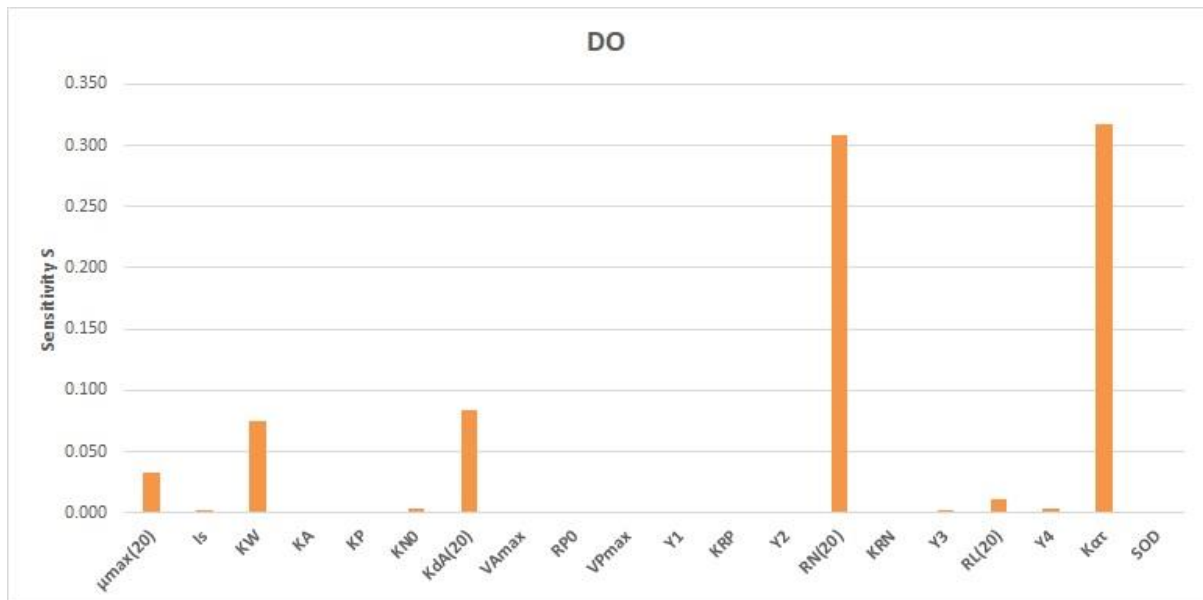
Σχήμα 4-26: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος FAST



Σχήμα 4-27: Ιεράρχηση παραμέτρων για τον οργανικό άνθρακα, μέθοδος FAST

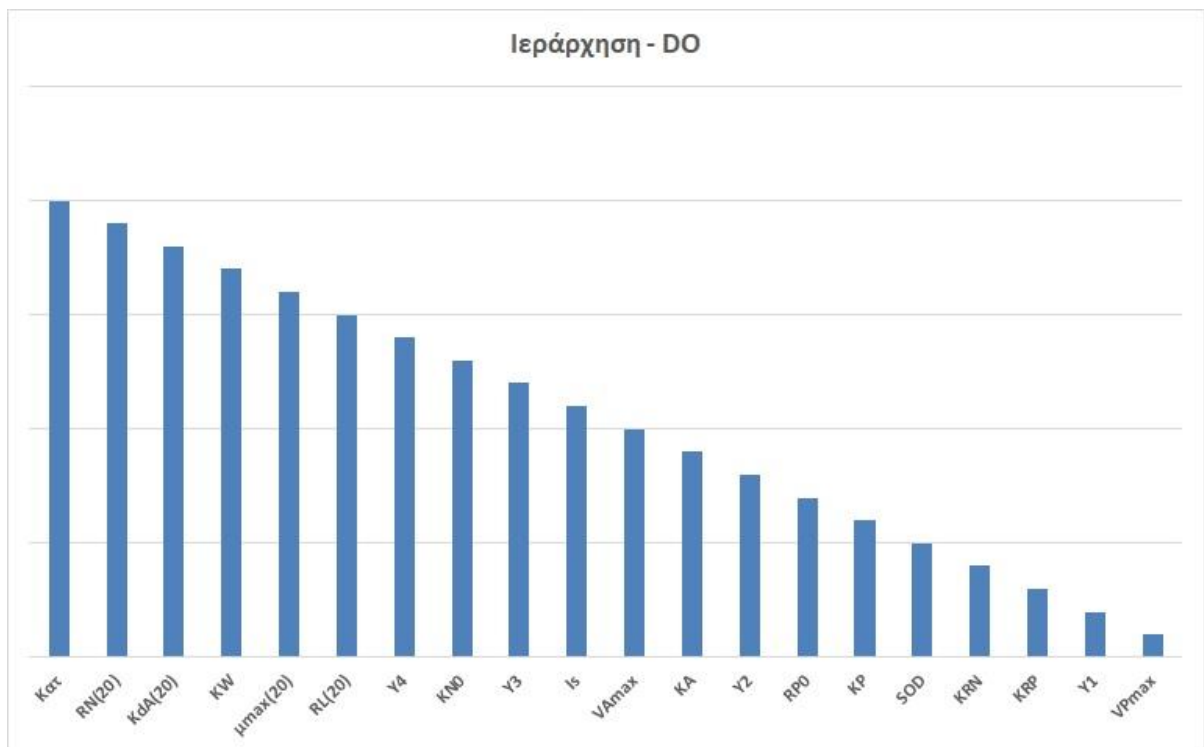
Το διαλυμένο οξυγόνο, με την μέθοδο αυτή, έχει διάφορες σημαντικές παράμετροι, που σημαίνει ότι η προηγούμενη μέθοδος «one-at-a-time», υστερούσε στην επιλογή κατάλληλων τιμών για αυτές στα αντίστοιχα διαστήματά τους. Πιο συγκεκριμένα σημαντικές παράμετροι αποτελούν οι εξής: K_{at} , $R_N(20)$, $\mu_{\max}(20)$, K_w , $K_{da}(20)$ και $R_L(20)$. Επομένως συμπεραίνεται, ότι το διαλυμένο οξυγόνο επηρεάζεται από την διεργασία του φυσικού

επαναερισμού ($K_{ατ}$), την νιτροποίηση ($R_{N(20)}$) διότι η αντίδραση αυτή απαιτεί οξυγόνο για να πραγματοποιηθεί, την θολότητα λόγω των αιωρούμενων στερεών (K_w), την ανάπτυξη και τον θάνατο του φυτοπλαγκτού και του ζωοπλαγκτού ($\mu_{max(20)}$, $K_{da(20)}$) και τέλος από τον ρυθμό οξείδωσης του άνθρακα ($R_{L(20)}$), αφού για την αντίδραση αυτή απαιτείται οξυγόνο.



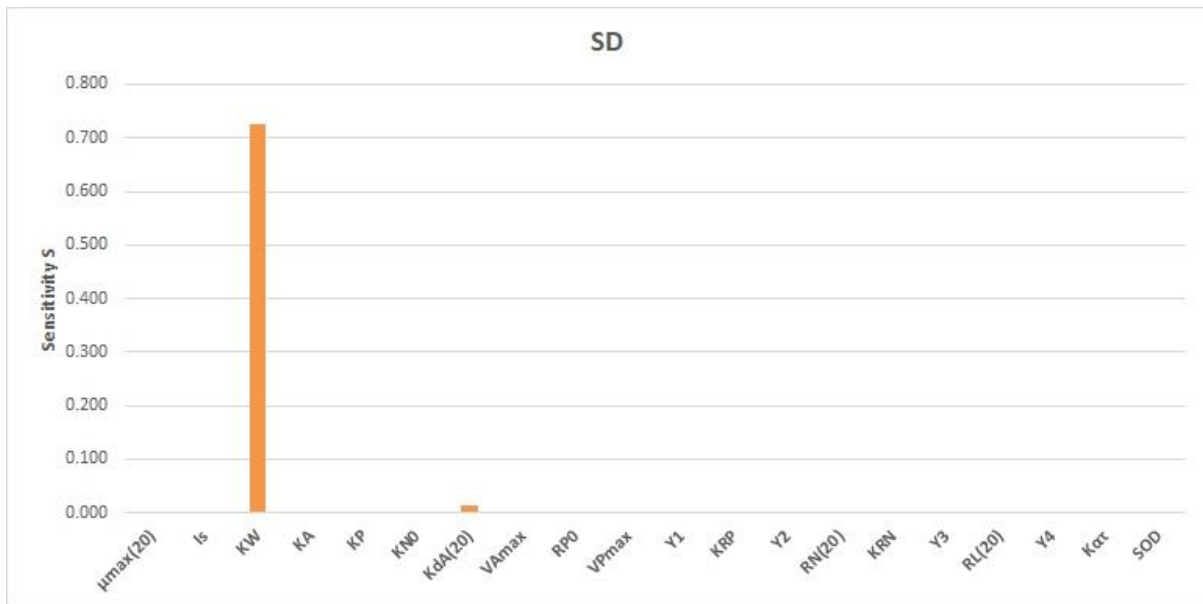
Σχήμα 4-28: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος FAST

Οι τιμές των δεικτών ευαισθησίας για την μεταβλητή του διαλυμένου οξυγόνου παρουσιάζονται στο Σχήμα 4-28, ενώ η ιεράρχηση των παραμέτρων φαίνεται στο Σχήμα 4-29.

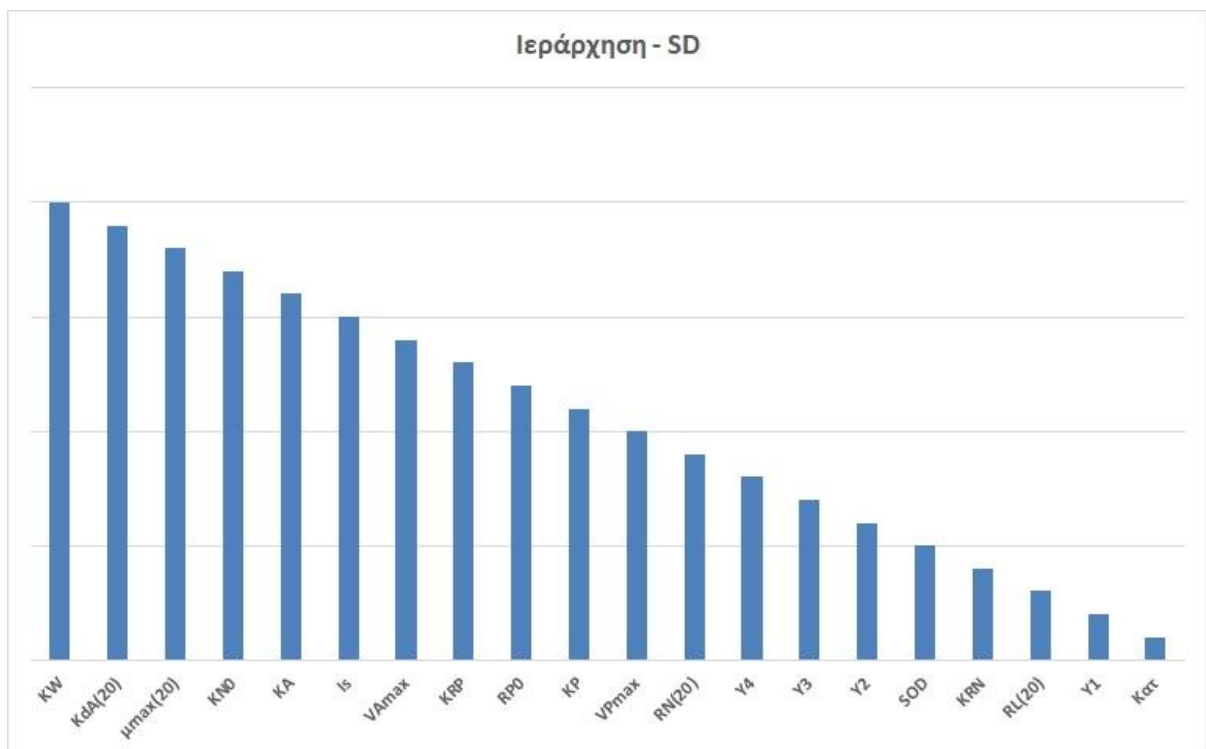


Σχήμα 4-29: Ιεράρχηση παραμέτρων για το διαλυμένο οξυγόνο, μέθοδος FAST

Για την μεταβλητή της διαφάνειας, σημαντικές παράμετροι αναδεικνύονται μόνο δύο, η K_w και η $K_{da(20)}$. Επομένως, παρατηρείται ότι για την διαφάνεια παίζουν ρόλο τα αιωρούμενα στερεά στην υδάτινη στήλη (K_w) και ο ρυθμός θανάτου των μικροοργανισμών ($K_{da(20)}$), καθώς το φαινόμενο αυτό έχει άμεση συμβολή στην δημιουργία νέων αιωρούμενων στερεών. Στα επόμενα Σχήματα 4-30 και 4-31 παρουσιάζονται οι τιμές των δεικτών ευαισθησίας για την μεταβλητή της διαφάνειας, καθώς και η ιεράρχηση των παραμέτρων.



Σχήμα 4-30: Δείκτες ευαισθησίας των παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος FAST



Σχήμα 4-31: Ιεράρχηση παραμέτρων για την διαφάνεια, μέθοδος FAST

Τελικά σχεδόν για όλες τις μεταβλητές, η μέθοδος βγάζει αναμενόμενα αποτελέσματα ως προς ποιες παράμετροι και συνεπώς ποιες διεργασίες είναι πιο σημαντικές στα φαινόμενα που περιγράφονται. Συνολικά, από την ανάλυση με την μέθοδο FAST προέκυψαν 12 σημαντικές παραμέτρους, ενώ οι υπόλοιπες οκτώ ήταν μη – σημαντικές. Παράλληλα,

παράχθηκαν ορθά και ακριβή αποτελέσματα για όλες τις μεταβλητές, καθώς και για το διαλυμένο οξυγόνο στο οποίο υπήρχαν θέματα στην μέθοδο «one-at-a-time».

4.2.4 Μέθοδος Morris

Στην συνέχεια εφαρμόστηκε η μέθοδος Morris, η οποία βασίζεται σε διαταραχές που πραγματοποιούνται ταυτόχρονα. Με αυτόν τον τρόπο, λαμβάνονται υπόψη οι σχέσεις και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Παράλληλα, εξετάζονται οι διαφοροποιήσεις και η μεταβλητότητα των μεγεθών εξόδου του μοντέλου, σύμφωνα και με όλες τις παραμέτρους. Η μέθοδος βασίζεται σε πεπερασμένες διαφορές και πιο συγκεκριμένα οι δείκτες ευαισθησίας υπολογίζονται με βάση την μέση τιμή των διαφορών αυτών, από τον παρακάτω τύπο:

$$S_i = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r EE^j$$

Το EE (Elementary Effect) για κάθε δείκτη j , αποτελεί την διαφορά μεταξύ της τιμής της μεταβλητής εξόδου του μοντέλου λόγω διαταραχής Δ $y(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + \Delta, x_{i+1}, \dots, x_n)$, για την εκάστοτε παράμετρο εισόδου, και της τιμής της μεταβλητής εξόδου χωρίς την διαταραχή αυτήν $y(x_1, \dots, x_n)$.

$$EE_i(x_1, \dots, x_n, \Delta) = \frac{y(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + \Delta, x_{i+1}, \dots, x_n) - y(x_1, \dots, x_n)}{\Delta}$$

όπου η διαταραχή Δ λαμβάνει τιμές στο διάστημα $\{1/(p-1), \dots, 1 - 1/(p-1)\}$ και $p = 6$ είναι ο αριθμός των επιπέδων. Τα μεγέθη τα οποία απεικονίζουν την σημαντικότητα της κάθε παραμέτρου και της αλληλεπίδρασης που έχει αυτή με τις υπόλοιπες, δίνονται από την μέση τιμή μ και την διασπορά σ του συνόλου των EEs αντίστοιχα.

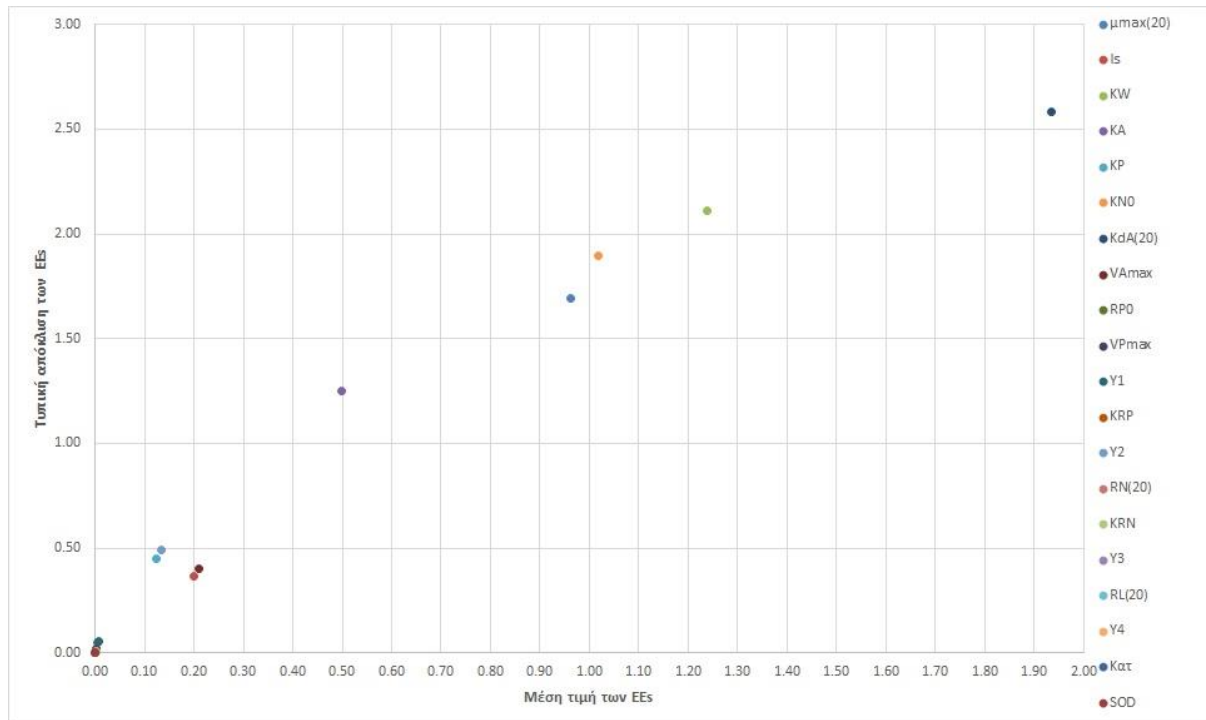
Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε περαιτέρω έρευνα της μεθόδου αυτής με μικρότερο πλήθος παραμέτρων (13), διότι ο υπολογιστικός φόρτος για τις αρχικές (20) αποδείχθηκε υπέρογκος,

καθώς πρέπει να επιτευχθεί και η κατάλληλη σύγκλιση. Παράλληλα για την μέθοδο Morris, λόγω και του αυξανόμενου υπολογιστικού φόρτου για την παραγωγή ορθών και αποδεκτών αποτελεσμάτων, αποφασίστηκε να πραγματοποιηθεί ανάλυση ευαισθησίας μόνο για την χλωροφύλλη. Αυτό βασίζεται στο γεγονός, ότι αυτή αποτελεί το σημαντικότερο μέγεθος από αυτά που περιγράφουν το φαινόμενο του ευτροφισμού, ενώ η κατανόηση του τρόπου με τον οποίο μεταβάλλεται και επηρεάζεται από τις παραμέτρους, κρίνεται εξαιρετικά σημαντική. Η επιλογή των παραμέτρων ώστε να μειωθεί το πλήθος τους από 20 σε 13, πραγματοποιήθηκε σύμφωνα με την μέθοδο FAST, αλλά και με την μέθοδο «one-at-a-time». Πιο συγκεκριμένα, σύμφωνα με το όριο σημαντικότητας για τον δείκτη ευαισθησίας, επιλέχθηκαν οι παράμετροι που είναι σημαντικές για όλες τις μεταβλητές που προσομοιώνει το μοντέλο. Με αυτόν τον τρόπο, αποκλείστηκαν οι μη – σημαντικές και μειώθηκε έτσι το πλήθος τους.

Για την μέθοδο Morris επιλέχθηκε όριο σημαντικότητας ίσο με 0.1, δηλαδή η μέση τιμή μ των EEs της εκάστοτε παραμέτρου πρέπει να είναι μεγαλύτερη από 0.1 για να θεωρηθεί αυτή σημαντική. Ωστόσο όπως αναφέρθηκε, η μέθοδος αυτή λαμβάνει υπόψη της και αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Αυτό φαίνεται από την τιμή της τυπικής απόκλισης σ των EEs για κάθε παράμετρο, η οποία δείχνει εάν η παράμετρος συμμετέχει σε αλληλεπιδράσεις με τις υπόλοιπες. Επομένως για να αναγνωριστούν οι σημαντικές και μη παράμετροι, θα πρέπει να ληφθούν υπόψη και τα δύο μεγέθη αλλά και ο κατάλληλος συνδυασμός τους. Παρακάτω παρουσιάζονται σε διάγραμμα διασποράς οι τιμές (μ , σ) όλων των παραμέτρων για την μεταβλητή A. Ποιοτικά, όσο πιο δεξιά στο διάγραμμα βρίσκεται ένα σημείο, τόσο πιο σημαντική είναι και η αντίστοιχη παράμετρος. Αντίστοιχα όσο πιο ψηλά βρίσκεται, τόσο περισσότερο συμμετέχει σε αλληλεπιδράσεις με τις υπόλοιπες παραμέτρους. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι, τιμή μ χαμηλότερη του ορίου σημαντικότητας δεν είναι ικανή συνθήκη για να αποκλειστεί μια παράμετρος, διότι εάν συμμετέχει σε αλληλεπιδράσεις είναι φυσικό να θεωρείται σημαντική για το μοντέλο. Για την μέθοδο πραγματοποιήθηκαν 420 000 επαναλήψεις του αρχικού μοντέλου ευτροφισμού για την εύρεση των δεικτών σημαντικότητας. Όπως αναφέρθηκε, η μέθοδος εφαρμόστηκε μόνο με την μεταβλητή A και για τις δύο αναλύσεις (20 και 13 παράμετροι).

Στο Σχήμα 4-32 παρουσιάζεται το διάγραμμα για τους δείκτες ευαισθησίας των 20 παραμέτρων για την μεταβλητή A στην μορφή διαγράμματος διασπορών. Η μέθοδος

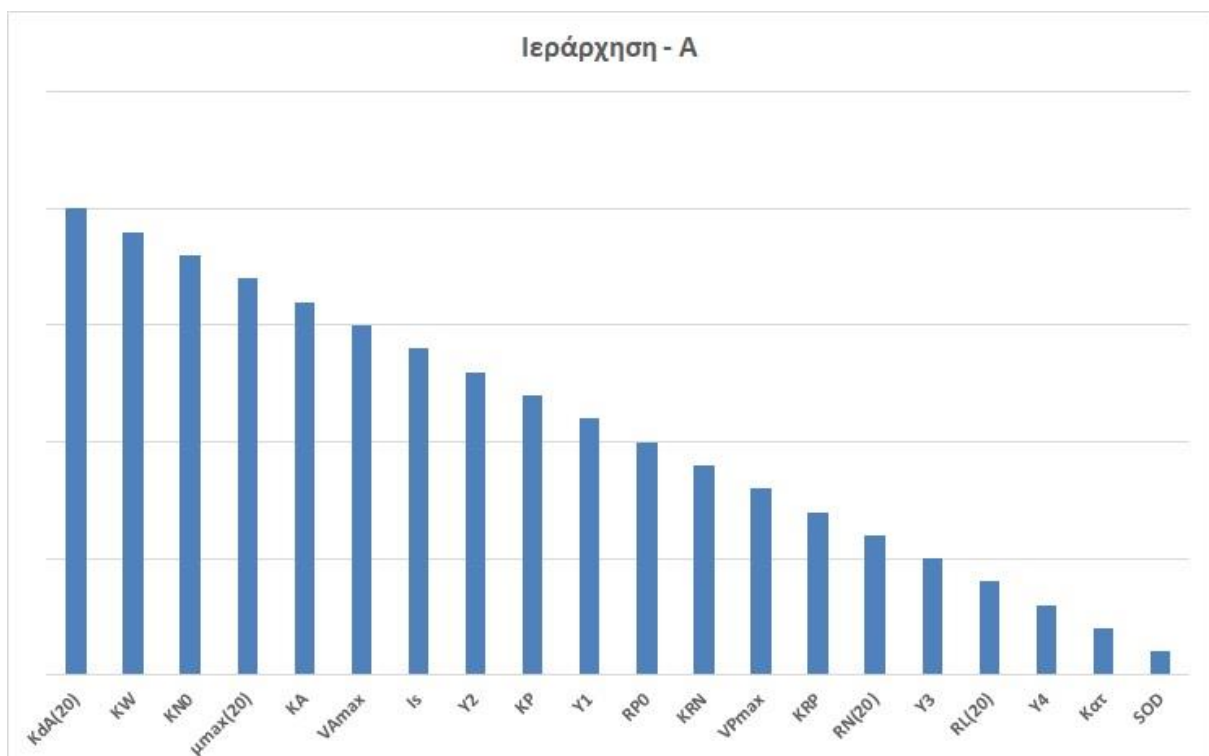
προσφέρει και δυνατότητα ακριβής ταξινόμησης των παραμέτρων, σύμφωνα με τις τιμές των δεικτών τους. Η ιεράρχηση των παραμέτρων για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, παρουσιάζεται με την μορφή κατακόρυφου ραβδογραφήματος στο Σχήμα 4-33.



Σχήμα 4-32: Διάγραμμα διασποράς (μ, σ), μέθοδος Morris για 20 παραμέτρους

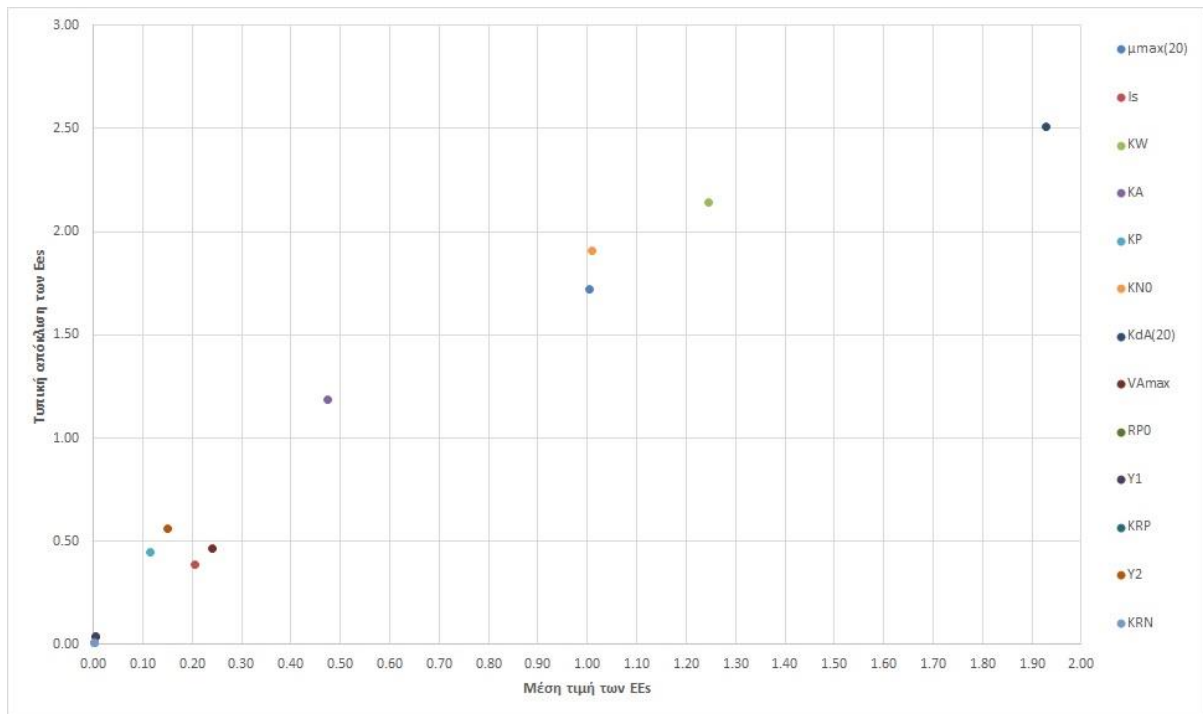
Αρχικά για την ανάλυση με τις 20 παραμέτρους, υπάρχουν συνολικά εννέα παράμετροι που αναδεικνύονται σημαντικές, σύμφωνα με το όριο 0.1. Αυτές είναι με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας οι: $K_{da(20)}$, K_W , K_{NO} , $\mu_{max(20)}$, K_A , V_{Amax} , I_s , Y_2 και K_P . Οι διεργασίες που συμβάλλουν στην μεταβλητότητα της συγκέντρωσης της χλωροφύλλης περιλαμβάνουν τις εξής: τον ρυθμό θανάτου και ανάπτυξης του φυτοπλαγκτού και του ζωοπλαγκτού ($K_{da(20)}$, $\mu_{max(20)}$), την ταχύτητα καθίζησης υλικού από τον θάνατο των μικροοργανισμών (V_{Amax}), την ποσότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας (I_s) και την μείωση αυτής, λόγω αιωρούμενων στερεών (K_W) αλλά και λόγω φυσικής θολότητας (K_A). Επιπλέον, παρατηρείται ότι παράμετροι που αφορούν τα θρεπτικά (N, P), όπως ο ρυθμός κατανάλωσής τους για την ανάπτυξη των μικροοργανισμών (K_{NO} , K_P), καθώς και η περιεκτικότητα του φυτοπλαγκτού σε άζωτο (Y_2) είναι εξίσου σημαντικές. Παράλληλα από τις τιμές της τυπικής απόκλισης για τις παραμέτρους, παρατηρείται ότι όλες όσες κρίθηκαν σημαντικές συμμετέχουν και σε αλληλεπιδράσεις και με την ίδια φθίνουσα σειρά όπως και για την σημαντικότητά τους.

Δηλαδή οι πιο σημαντικές συμμετέχουν και σε περισσότερες αλληλεπιδράσεις, ενώ όσο μειώνεται η σημαντικότητά τους, μειώνονται και οι αλληλεπιδράσεις. Τέλος παρατηρείται ότι δεν υπάρχουν μη – σημαντικές παράμετροι, λόγω της μέσης τιμής τους μ , οι οποίες να συμμετέχουν σε αλληλεπιδράσεις. Επομένως μπορεί να θεωρηθούν μη – σημαντικές, διότι η ταυτόχρονα χαμηλή τιμή μ και σ αποτελεί ικανή και αναγκαία συνθήκη για τον αποκλεισμό αυτών.



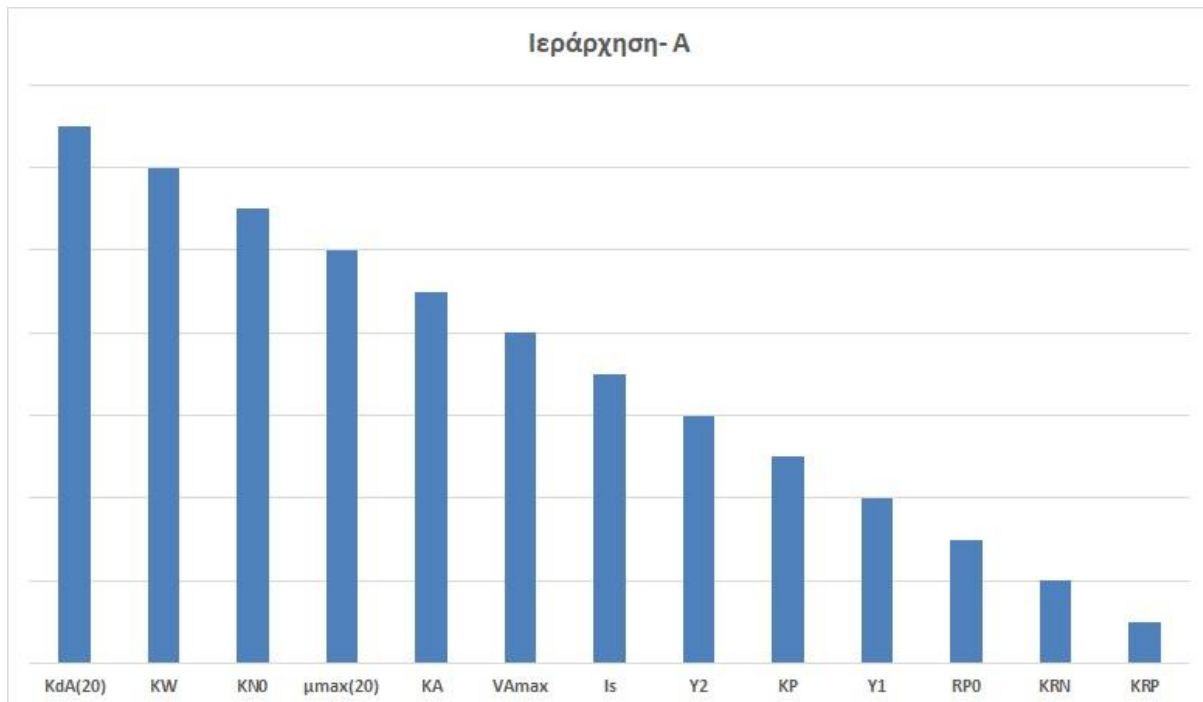
Σχήμα 4-33: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris

Στο Σχήμα 4-34 παρουσιάζεται το διάγραμμα για τους δείκτες ευαισθησίας των 13 παραμέτρων για την μεταβλητή A στην μορφή διαγράμματος διασπορών. Η μέθοδος προσφέρει και δυνατότητα ακριβής ταξινόμησης των παραμέτρων, σύμφωνα με τις τιμές των δεικτών τους.



Σχήμα 4-34: Διάγραμμα διασποράς (μ , σ), μέθοδος Morris για 13 παραμέτρους

Στην συνέχεια, πραγματοποιήθηκε η μέθοδος Morris για 13 μόνο παραμέτρους, οι οποίες επιλέχθηκαν από τα αποτελέσματα της μεθόδου FAST, αλλά και της Morris με τις 20. Σύμφωνα με τα όρια σημαντικότητας για κάθε μέθοδο και την διαλογή τους σε σημαντικές και μη, καθώς και σύμφωνα με την ταξινόμησή τους επιλέχθηκαν οι εξής 13: $\mu_{\max(20)}$, I_s , K_w , K_A , K_P , K_{NO} , $K_{da(20)}$, V_{Amax} , R_{PO} , Y_1 , K_{RP} , Y_2 και K_{RN} . Για το ίδιο όριο σημαντικότητας $\mu = 0.1$, σημαντικές παράμετροι προκύπτουν οι 10 από αυτές. Πιο συγκεκριμένα, με φθίνουσα σειρά σημαντικότητας, είναι οι εξής: $K_{da(20)}$, K_w , K_{NO} , $\mu_{\max(20)}$, K_A , V_{Amax} , I_s , Y_2 και K_P . Αυτές είναι σημαντικές λόγω της τιμής του μ και οι περισσότερες συμμετέχουν σε αλληλεπιδράσεις, ενώ και η σειρά τους είναι παρόμοια με αυτήν για την Morris με τις 20. Γενικότερα, η μέθοδος Morris, πραγματοποιήθηκε και με μικρότερο πλήθος παραμέτρων για να αυξηθεί το δείγμα, και άρα να επιτευχθεί καλύτερη σύγκλιση των τιμών των δεικτών. Η ιεράρχηση των παραμέτρων για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, παρουσιάζεται στο Σχήμα 4-35 με την μορφή κατακόρυφου ραβδογραφήματος.



Σχήμα 4-35: Ιεράρχηση παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris

4.2.5 Μέθοδος διασπορών (κλασικοί δείκτες Sobol)

Οι καθολικές μέθοδοι έχουν την δυνατότητα να ποσοτικοποιούν την αλληλεπίδραση μεταξύ των παραμέτρων εισόδου, να υπολογίζουν την σημαντικότητα τους, αλλά και να αναγνωρίζουν με μεγαλύτερη σιγουριά αυτές που τελικά δεν είναι σημαντικές για το μοντέλο μας. Ωστόσο όπως αναφέρθηκε, απαιτούν σημαντικές υπολογιστικές δυνατότητες και αντίστοιχα περισσότερο χρόνο προσομοίωσης (Cosenza et al., 2013).

Στην παρούσα εργασία επιλέχθηκε η μέθοδος διασπορών, με υπολογισμό των δεικτών Sobol. Οι δείκτες αυτοί, ποσοτικοποιούν την σημαντικότητα κάθε παραμέτρου για τις μεταβλητές εξόδου, αλλά και την αλληλεπίδραση μεταξύ των παραμέτρων αυτών. Βασίζονται στον υπολογισμό διασπορών και διαχωρίζονται σε πρώτης τάξης επιδράσεις (S_i) και σε δείκτες συνολικών επιδράσεων (S_{Ti}). Παρακάτω παρουσιάζονται οι τύποι με τους οποίους υπολογίζονται οι δείκτες.

$$S_i = \frac{Var_{X_i}(E_{X_{-i}}(Y|X_i))}{Var(Y)}$$

$$S_{Ti} = 1 - \frac{Var_{X-i}(E_{X_i}(Y|X-i))}{Var(Y)}$$

Το E συμβολίζει την αναμενόμενη τιμή και το Var την διασπορά του εκάστοτε μεγέθους. Πρακτικά ο δείκτης S_i υπολογίζει την συνεισφορά της παραμέτρου i στην διασπορά $Var(Y)$, χωρίς να λαμβάνει υπόψη τις τυχόν αλληλεπιδράσεις μεταξύ αυτής και των υπόλοιπων παραμέτρων. Αντίθετα, ο δείκτης S_{Ti} , επιτρέπει την αξιολόγηση των αλληλεπιδράσεων όλων των παραμέτρων που μελετάμε. Γενικά, όσο μεγαλύτερος είναι ο δείκτης S_i , τόσο πιο σημαντική είναι η επίδραση της αντίστοιχης παραμέτρου εισόδου στο τελικό αποτέλεσμα. Όσον αφορά τον αποκλεισμό παραμέτρων ως μη – σημαντικές, θα πρέπει να ληφθεί υπόψη και η αλληλεπίδρασή τους, μέσω της διαφοράς των δύο δεικτών. Πιο συγκεκριμένα, μια παράμετρος με χαμηλό S_i δεν μπορεί να αποκλειστεί, διότι εάν έχει υψηλό S_{Ti} σημαίνει ότι συμμετέχει και σε πολλές αλληλεπιδράσεις. Επομένως, θα πρέπει να εξεταστούν τόσο οι δείκτες όσο και η διαφορά μεταξύ τους ($S_i - S_{Ti}$) (Cosenza et al., 2013).

Η μέθοδος αυτή, εφαρμόστηκε για κατάλληλο αριθμό επαναλήψεων σύμφωνα με την αντίστοιχη βιβλιογραφία, αλλά και για αριθμό επαναλήψεων πολύ μεγαλύτερο από τον προτεινόμενο. Ωστόσο, αποδείχθηκε εξαιρετικά ακριβή υπολογιστικά και χρονικά, δεδομένου ότι υπάρχει και η απαίτηση για ορθά και αποδεκτά αποτελέσματα. Επομένως, όσα παράχθηκαν δεν μπορούν να γίνουν δεκτά, μιας και δεν είναι και λογικά ως προς την φύση του φαινομένου το οποίο προσομοιώνουμε. Στο επόμενο κεφάλαιο, θα εξηγηθεί περαιτέρω η μη – εγκυρότητας της μεθόδου, ενώ θα προταθούν και λύσεις για την ορθή εφαρμογή της.

4.3 Αξιολόγηση μεθόδων

4.3.1 Σύγκλιση μεθόδων

Η ανάλυση ευαισθησίας περιλαμβάνει την δημιουργία δειγμάτων που αποτελούνται από τις τιμές των παραμέτρων, οι οποίες έχουν παραχθεί με κάποιο τυχαίο τρόπο. Η δειγματοληψία πραγματοποιείται για την εισαγωγή πολλών διαφορετικών και τυχαίων συνθηκών και έχει ως στόχο την πλήρη και ακριβή προσομοίωση των φυσικών φαινομένων. Παράλληλα στην ανάλυση ευαισθησίας, περιλαμβάνεται και η διαδικασία της πρόβλεψης, στην οποία

εισέρχονται στατιστικά λάθη και αβεβαιότητες. Ο κυριότερος παράγοντας στην διαδικασία της δειγματοληψίας, είναι το μέγεθος του δείγματος N , το οποίο στις μεθόδους ανάλυσης ευαισθησίας συνδέεται άμεσα και με τον αριθμό των επαναλήψεων για το μοντέλο μας. Γενικότερα, όσο μεγαλύτερο είναι το μέγεθος του δείγματος, τόσο περισσότερες διαφορετικές συνθήκες του φαινομένου περιλαμβάνονται στην προσομοίωσή μας, το οποίο οδηγεί σε καλύτερες προβλέψεις και σε συνολικά καλύτερη σύγκλιση των αποτελεσμάτων της μεθόδου. Η επιλογή του μεγέθους του δείγματός (N), εξαρτάται από: την φύση του φαινομένου που προσομοιώνεται, από το πλήθος των παραμέτρων (M), από την εκάστοτε μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας που χρησιμοποιείται, αλλά και από τους περιορισμούς για τον υπολογιστικό φόρτο. Επομένως, κάθε μέθοδος ανάλυσης ευαισθησίας έχει διαφορετική σύγκλιση και ακρίβεια στην πρόβλεψή της, και για τον λόγο αυτό θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη μαζί με τα αποτελέσματά της.

Μια τεχνική της στατιστικής που χρησιμοποιείται στην αξιολόγηση της σύγκλισης στις δειγματοληπτικές μεθόδους, είναι η τεχνική «bootstrapping». Αποτελεί μια πιο γρήγορη διαδικασία ελέγχου του αρχικού μεγέθους του δείγματος, διότι παράγει αποτελέσματα χωρίς απαραίτητα την εκτέλεση πολλών επιπρόσθετων προσομοιώσεων. Η τεχνική «bootstrapping» πραγματοποιείται με την κατασκευή νέων δειγμάτων και τον εκ νέου υπολογισμό τιμών, οι οποίες προκύπτουν από αυτά. Αναλόγως την μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας, τα νέα δείγματα είναι είτε μικρότερου μεγέθους και υποσύνολα του αρχικού, είτε καινούργια και μεγαλύτερου μεγέθους σε σχέση με το αρχικό. Γενικότερα το μέγεθος ενός δείγματος κρίνεται αποτελεσματικό, όταν τα αποτελέσματα που προκύπτουν από αυτό είναι παρόμοια με τα αντίστοιχα, εάν επιλεγόταν μικρότερο ή μεγαλύτερο μέγεθος δείγματος. Με αυτόν τον τρόπο ελέγχεται η σύγκλιση των τιμών που προκύπτουν από το δείγμα που επιλέχθηκε, καθώς όπως είναι λογικό όσο μεγαλύτερο είναι αυτό, τόσο θα πλησιάζει και στην πλήρη απεικόνιση του φαινομένου το οποίο προσομοιώνει το μοντέλο. Επομένως, οι περιορισμοί στον υπολογιστικό φόρτο για τους υπολογιστές αλλά και στους χρόνους προσομοίωσης, καθορίζουν την επιλογή ενός κατάλληλου αρχικού μεγέθους δείγματος και στην συνέχεια την εφαρμογή της τεχνικής «bootstrapping».

Όσον αφορά την σύγκλιση των μεθόδων, χρησιμοποιούνται τρεις διαφορετικούς δείκτες, έναν για την σύγκλιση των τιμών των δεικτών ευαισθησίας ($Stat_{indices}$), έναν για την ιεράρχηση των παραμέτρων ($Stat_{ranking}$) και έναν για την διαλογή των μη – σημαντικών

παραμέτρων ($Stat_{\text{screening}}$). Ο πρώτος δείκτης σύγκλισης ορίζεται ως η μέγιστη τιμή των διαφορών μεταξύ του άνω και του κάτω ορίου εμπιστοσύνης για κάθε δείκτη ευαισθησίας των παραμέτρων και ο τύπος υπολογισμού παρουσιάζεται παρακάτω:

$$Stat_{\text{indices}} = \max_{i=1 \dots M} (S_i^{ub} - S_i^{lb})$$

όπου S_i^{ub} και S_i^{lb} , τα άνω και κάτω όρια του δείκτη ευαισθησίας για την παράμετρο i και M το πλήθος των παραμέτρων που εισέρχονται στην μέθοδο (Sarrazin et al., 2016). Όσο μικρότερη είναι η τιμή του δείκτη τόσο καλύτερη σύγκλιση έχει επιτευχθεί στην μέθοδο, με το όριο σύγκλισης να τίθεται στο 0.05.

Ο δεύτερος δείκτης σύγκλισης αφορά την σειρά ιεράρχησης των παραμέτρων και κατά πόσο είναι ακριβής αυτή για το αρχικό δείγμα που επιλέχθηκε. Χρησιμοποιείται ένας μορφοποιημένος συντελεστής Spearman, ο οποίος εισάγει μεγαλύτερη βαρύτητα για τις πιο σημαντικές παραμέτρους. Αρχικά, υπολογίζονται οι δείκτες S_i για όλα τα διαφορετικά δείγματα που δημιουργήθηκαν από το «bootstrapping» και στην συνέχεια οι παράμετροι ταξινομούνται αναλόγως με την σημαντικότητά τους. Η θέση τους μετά την ταξινόμηση αποτελεί τον αριθμό R_i , ενώ οι εκθέτες j, k υποδεικνύουν τα αντίστοιχα δείγματα από το «bootstrapping». Ο τροποποιημένος συντελεστής δίνει μεγαλύτερη βαρύτητα στις διαφορές των θέσεων ιεράρχησης των πιο σημαντικών παραμέτρων, ενώ εάν υπάρχουν διαφορές για τις μη – σημαντικές παραμέτρους η βαρύτητά τους είναι μειωμένη.

$$\rho_{s,j,k} = \sum_{i=1}^M |R_i^j - R_i^k| \frac{\max_{j,k}(S_i^j, S_i^k)^2}{\sum_{i=1}^M \max_{j,k}(S_i^j, S_i^k)^2}$$

Για το $\rho_{s,j,k}$ υπολογίζονται οι τιμές R_i και S_i για κάθε πιθανό ζευγάρι μεταξύ των δειγμάτων j, k που έχουν δημιουργηθεί. Τελικά, ο δείκτης για την σύγκλιση της ιεράρχησης των παραμέτρων είναι η τιμή του διαστήματος εμπιστοσύνης 95%, από τα $\rho_{s,j,k}$ που προκύπτουν από όλους τους πιθανούς συνδυασμούς (Sarrazin et al., 2016). Όσο μικρότερη είναι η τιμή

του δείκτη τόσο καλύτερη σύγκλιση έχει επιτευχθεί στην μέθοδο, με το όριο σύγκλισης να τίθεται στο 1.

$$Stat_{ranking} = Q_{0.95}(\rho_{s,j,k})_{j,k}$$

Όσον αφορά την διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, ο δείκτης είναι παρόμοιος με αυτόν που χρησιμοποιείται για την σύγκλιση των τιμών των δεικτών, $Stat_{indices}$. Η διαφορά εντοπίζεται στις τιμές S_i , από τις οποίες υπολογίζονται οι διαφορές μεταξύ του άνω και κάτω ορίου εμπιστοσύνης και από τις οποίες τελικά προκύπτει ο δείκτης $Stat_{screening}$. Πιο συγκεκριμένα για την διαλογή, χρησιμοποιούνται μόνο οι δείκτες για τις παραμέτρους που έχουν θεωρηθεί μη – σημαντικές λόγω του ορίου T που επιλέχθηκε (Sarrazin et al., 2016). Όσο μικρότερη είναι η τιμή του δείκτη, τόσο καλύτερη σύγκλιση έχει επιτευχθεί στην μέθοδο, με το όριο σύγκλισης να τίθεται στο 0.05.

$$X_0 = \{x_i \text{ when } S_i < T\}$$

$$Stat_{screening} = \max_{x_i \in X_0} (S_i^{ub} - S_i^{lb})$$

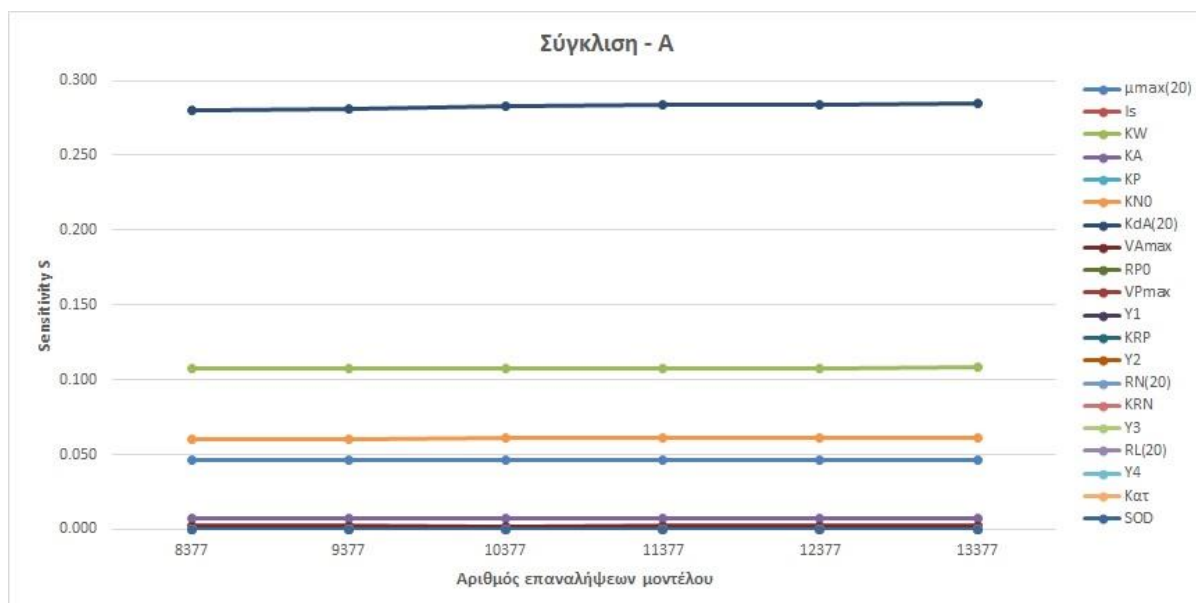
A. Μέθοδος «one-at-a-time»

Η μέθοδος «one-at-a-time» αποτελεί τοπική μέθοδος ανάλυση ευαισθησίας και επομένως οι τιμές των παραμέτρων δεν επιλέγονται με τυχαίο τρόπο, αλλά μέσω μιας σταθερής διαταραχής. Συνεπώς, δεν εμπεριέχει κάποια διαδικασία κατασκευής δείγματος και δεν τίθεται θέμα σύγκλισης αυτής.

B. Μέθοδος FAST

Για την μέθοδο FAST επιλέχθηκε δείγμα μεγέθους $N_{FAST} = 8\ 377$, δηλαδή το μοντέλο ευτροφισμού πραγματοποίησε 8 377 επαναλήψεις, το οποίο αποτελεί και το ελάχιστο που

απαιτεί η μέθοδος αυτή. Για την FAST, η διαδικασία του «bootstrapping» διεκπεραιώθηκε με την κατασκευή τριών νέων δειγμάτων μεγαλύτερου μεγέθους του αρχικού (9 877, 11 377 και 12 877). Για όλες τις μεταβλητές οι δείκτες $Stat_{indices}$ και $Stat_{screening}$ είναι πρακτικά μηδέν, το οποίο σημαίνει ότι έχει επέλθει σύγκλιση για τις τιμές των δεικτών ευαισθησίας των παραμέτρων, ενώ παράλληλα έχει επιτευχθεί η διαλογή των μη – σημαντικών παραμέτρων. Όσον αφορά την ιεράρχηση, για τις περισσότερες μεταβλητές έχει επέλθει και για αυτήν η σύγκλιση, ωστόσο για κάποιες από αυτές ο δείκτης είναι μεγαλύτερος της μονάδας. Ο δείκτης $Stat_{ranking}$ του αμμωνιακού αζώτου ισούται με 2, ενώ ο αντίστοιχος για την μεταβλητή της διαφάνειας ισούται με 17.428, με όριο σύγκλισης την μονάδα. Αυτό προκαλεί προβληματισμό, διότι δεν επιτρέπει να βγουν συμπεράσματα για την ιεράρχηση των παραμέτρων. Ωστόσο, εφόσον οι τιμές των δεικτών ευαισθησίας έχουν συγκλίνει και άρα δεν θα αλλάξουν, ενώ παράλληλα έχει πραγματοποιηθεί ορθή διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές κα μη, συμπεραίνεται ότι η ιεράρχηση δεν παρουσιάζει προβλήματα στις σημαντικές παραμέτρους, οι οποίες έχουν και το μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Επιπλέον, παρατηρείται ότι και για τις δύο αυτές μεταβλητές οι σημαντικές παράμετροι είναι πολύ λίγες (τέσσερις και δύο αντίστοιχα) και με πολύ μεγάλες τιμές στον δείκτη ευαισθησίας της πιο σημαντικής τους παράμετρο σε σχέση με τις υπόλοιπες σημαντικές. Για το αμμωνιακό άζωτο, 0.768 η σημαντικότερη και 0.053 η αμέσως επόμενη και για την διαφάνεια, 0.726 η σημαντικότερη και 0.013 η αμέσως επόμενη. Σύμφωνα με τα παραπάνω καθώς και με τον τύπο με τον οποίο υπολογίζεται ο δείκτης $Stat_{ranking}$, συμπεραίνεται ότι για τις δύο αυτές μεταβλητές δεν είναι απαραίτητο να επέλθει σύγκλιση και της ιεράρχησης των παραμέτρων. Οι διαφορές στην σειρά ταξινόμησης των παραμέτρων προκύπτουν μόνο για τις μη – σημαντικές, όμως επειδή υπάρχει μια παράμετρος με πολύ μεγάλο δείκτη σημαντικότητας, μεγεθύνεται η τιμή του δείκτη σύγκλισης. Συνεπώς, για τις σημαντικές παραμέτρους, δεν υπάρχουν πρακτικά θέματα με την σειρά ταξινόμησής τους. Παρ' όλα αυτά, για τις δύο αυτές μεταβλητές, με αύξηση των επαναλήψεων μπορεί να επιτευχθεί σύγκλιση και για την ιεράρχηση. Ενδεικτικά στο Σχήμα 4-36, παρουσιάζεται το διάγραμμα σύγκλισης των τιμών S_i για όλες τις παραμέτρους, σε σχέση με τον αριθμό των επαναλήψεων του μοντέλου.



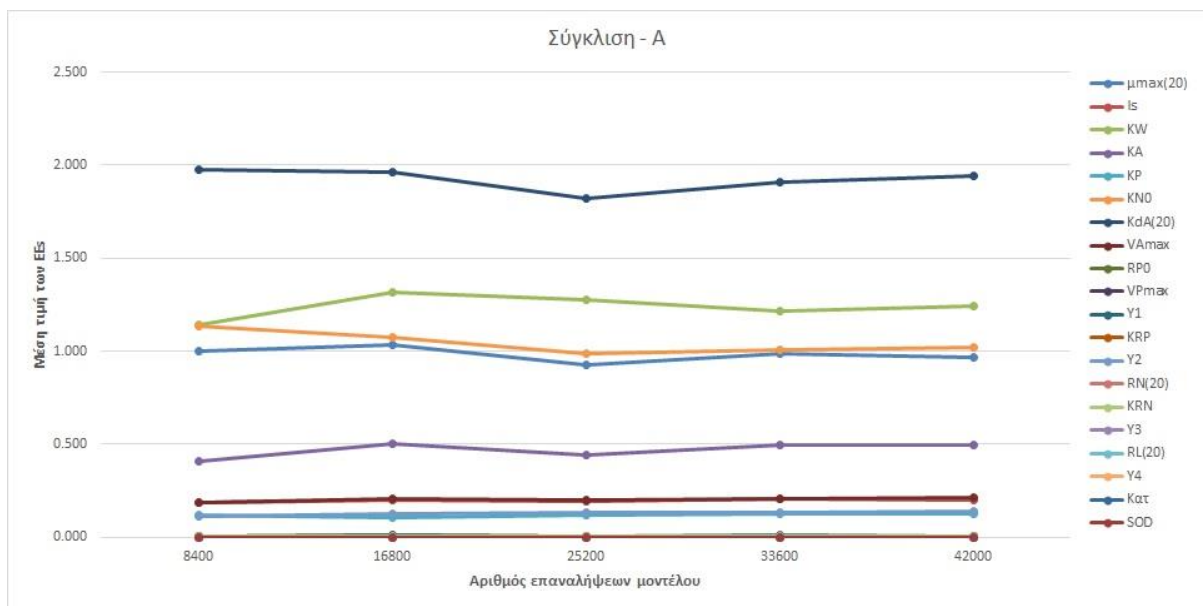
Σχήμα 4-36: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος FAST

Γ. Μέθοδος Morris

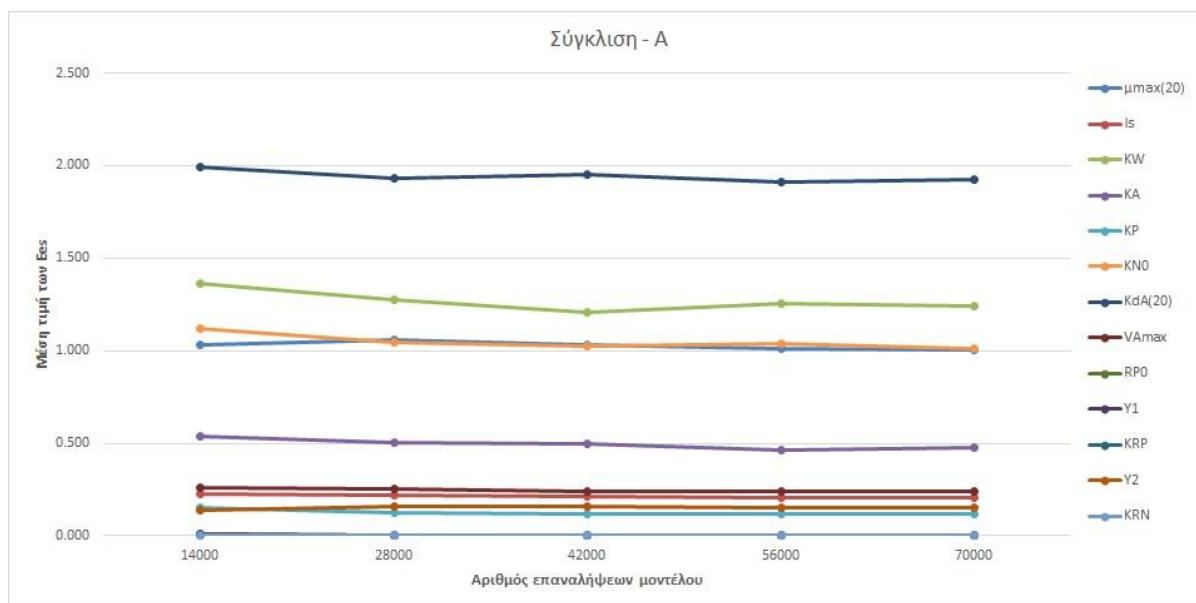
Για την μέθοδο Morris για τις 20 παραμέτρους, επιλέχθηκε δείγμα μεγέθους $N_{\text{Morris}(20)} = 42\ 000$, που σημαίνει ότι και το μοντέλο ευτροφισμού πραγματοποίησε 42 000 επαναλήψεις. Παράλληλα, δημιουργήθηκαν 4 μικρότερα δείγματα υποσύνολα του αρχικού, με την τεχνική «bootstrapping», διαφόρων μεγεθών για να συγκριθούν οι τιμές των δεικτών, η ιεράρχηση των παραμέτρων, καθώς και η διαλογή τους σε σημαντικές και μη. Ο δείκτης σύγκλισης για την ιεράρχηση $Stat_{\text{ranking}}$, ισούται με μηδέν και επομένως η σειρά ταξινόμησης των παραμέτρων έχει σταθεροποιηθεί. Αντίστοιχα ο δείκτης σύγκλισης της διαλογής $Stat_{\text{screening}}$ ισούται με 0.004, με όριο το 0.05, και συνεπώς οι μη – σημαντικές παράμετροι έχουν αναγνωριστεί. Ο δείκτης των τιμών των δεικτών ευαισθησίας $Stat_{\text{indices}}$ ισούται με 0.253, με όριο το 0.05, το οποίο σημαίνει ότι οι τιμές των δεικτών δεν έχουν συγκλίνει. Ωστόσο, λόγω της σύγκλισης της διαλογής και της ιεράρχησης δεν θα υπάρξουν αλλαγές, όπως μη- σημαντικές παράμετροι να γίνουν σημαντικές ή αλλαγές στην τιμή κάποιας σημαντικής παραμέτρου με αποτέλεσμα διαφορετική σειρά ταξινόμησης.

Στο προηγούμενο κεφάλαιο αναφέρθηκε, ότι εφαρμόστηκε η μέθοδος Morris και για 13 παραμέτρους, με στόχο την καλύτερη σύγκλιση χωρίς να ανέβει υπερβολικά πολύ ο αριθμός των επαναλήψεων και αντίστοιχα οι χρόνοι προσομοίωσης. Επιλέχθηκε δείγμα μεγέθους $N_{\text{Morris}(13)} = 70\ 000$, ενώ η διαδικασία του «bootstrapping» πραγματοποιήθηκε με τον ίδιο ακριβώς τρόπο όπως προηγουμένως. Οι δείκτες $Stat_{\text{ranking}}$, $Stat_{\text{screening}}$ έχουν τις ίδιες

πρακτικά τιμές, ενώ ο δείκτης $Stat_{indices}$ ισούται με 0.148. Επομένως, παρατηρείται ότι η σύγκλιση γίνεται καλύτερη με την αύξηση του δείγματος, ωστόσο τελικά δεν επιτεύχθηκε σύμφωνα με το όριο. Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, ο συνιστώμενος αριθμός επαναλήψεων για να επιτευχθεί σύγκλιση θα πρέπει να είναι μεγαλύτερος από $(10 - 100) * M$, όπου M το πλήθος των παραμέτρων (Sarrazin et al., 2016). Για το μοντέλο αυτό, ο αριθμός αυτός ισούται με 2 000 (ή 1 300) επαναλήψεις, ωστόσο όπως παρατηρήθηκε και μέσα από την εφαρμογή της μεθόδου οι επαναλήψεις αυτές δεν αρκούν για την πλήρη σύγκλιση όλων των δεικτών. Από όλα τα παραπάνω, τα αποτελέσματα της μεθόδου Morris είναι χρήσιμα για την διαλογή και την ιεράρχηση των παραμέτρων, ενώ για τις αριθμητικές τιμές των δεικτών ευαισθησίας θα πρέπει να ληφθεί υπόψη η αδυναμία σύγκλισης. Ενδεικτικά στα Σχήματα 4-37 και 4-38, παρουσιάζονται διαγράμματα σύγκλισης των τιμών μ για όλες τις παραμέτρους, σε σχέση με τον αριθμό των επαναλήψεων του μοντέλου, για την ανάλυση με 20 και τις 13 παραμέτρους αντίστοιχα.



Σχήμα 4-37: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris



Σχήμα 4-38: Διάγραμμα σύγκλισης παραμέτρων για την χλωροφύλλη, μέθοδος Morris

Δ. Μέθοδος Sobol

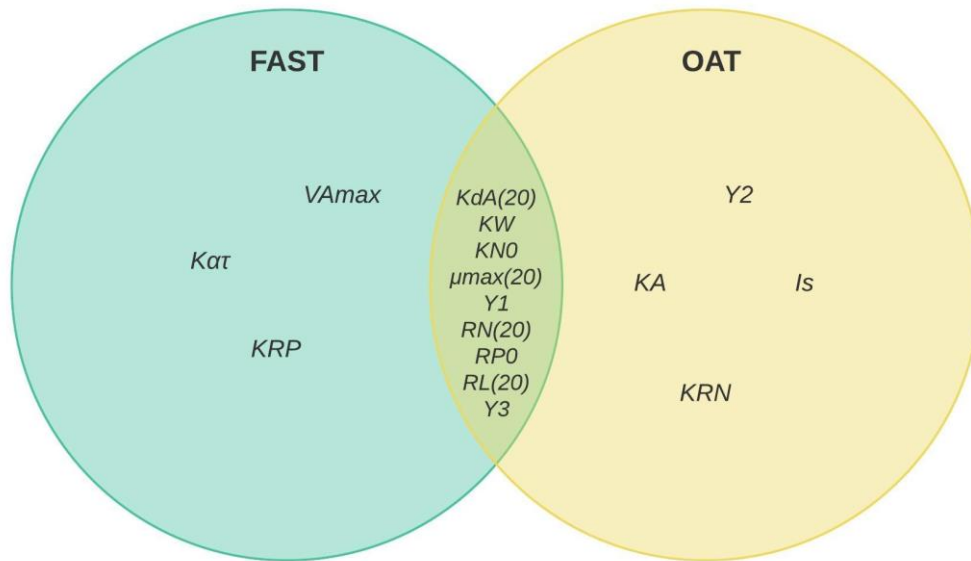
Για την μέθοδο Sobol, επιλέχθηκε δείγμα μεγέθους $N_{Sobol} = 220\ 000$, που σημαίνει ότι και το μοντέλο ευτροφισμού πραγματοποίησε 220 000 επαναλήψεις. Παράλληλα, δημιουργήθηκαν 10 μικρότερα δείγματα υποσύνολα του αρχικού, με την τεχνική «bootstrapping», διαφόρων μεγεθών για να συγκριθούν οι τιμές και η ιεράρχηση των παραμέτρων. Στην μέθοδο αυτή δεν υπολογίζονται άνω και κάτω όρια για τα S_i , επομένως για τους δείκτες σύγκλισης $Stat_{indices}$ και $Stat_{screening}$ χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές των δεικτών S_i που προκύπτουν από αυτά. Η μέθοδος όπως έχει αναφερθεί ήδη, δεν παράγαγε ορθά και αποδεκτά αποτελέσματα, καθώς δεν έχει επέλθει σύγκλιση για κανέναν από τους τρεις δείκτες. Σύμφωνα με την βιβλιογραφία, ο συνιστώμενος αριθμός επαναλήψεων για να επιτευχθεί σύγκλιση θα πρέπει να είναι μεγαλύτερος από $1000 \cdot M$, όπου M το πλήθος των παραμέτρων (Sarrazin et al., 2016). Για το μοντέλο, ο αριθμός αυτός ισούται με 20 000 επαναλήψεις, ωστόσο όπως παρατηρήθηκε και μέσα από την εφαρμογή της μεθόδου οι επαναλήψεις αυτές δεν αρκούν. Συγκεκριμένα, ο δείκτης σύγκλισης για τις τιμές των δεικτών ευαισθησίας αλλά και για τον δείκτη της διαλογής ισούται με $Stat_{indices} = Stat_{screening} = 0.315$, ενώ όπως αναφέρθηκε το όριο είναι 0.05 και για τους δύο. Αντίστοιχα για την ιεράρχηση, η τιμή του δείκτη είναι $Stat_{ranking} \gg 1$, που είναι και το όριο σύγκλισης για αυτόν. Από όλα τα παραπάνω, λαμβάνεται και η απόφαση για μη χρήση των αποτελεσμάτων της μεθόδου Sobol.

4.3.2 Σύγκριση μεθόδων

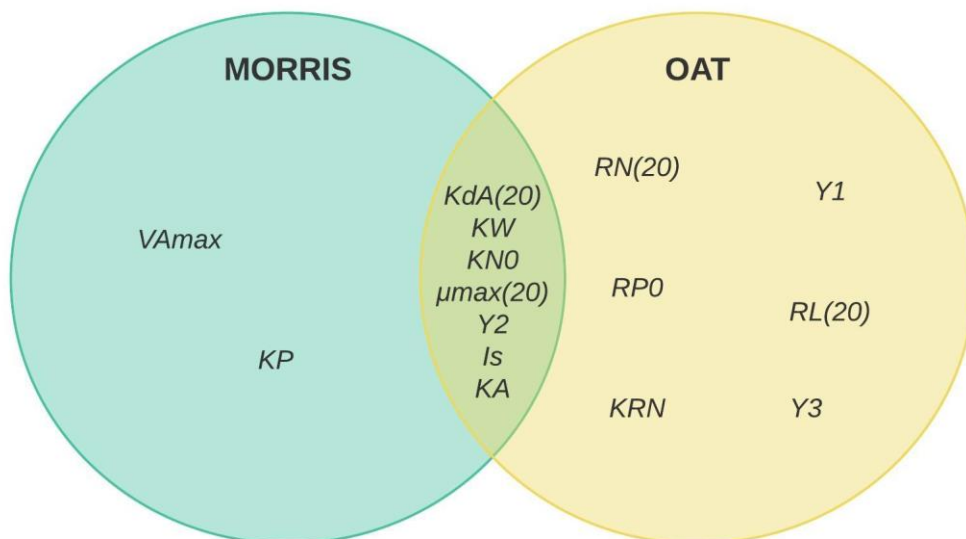
Η μέθοδος «one-at-a-time» αποτελεί τοπική μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας και επομένως έχει τα αντίστοιχα μειονεκτήματα και πλεονεκτήματα που συζητήθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια. Η μέθοδος FAST αποτελεί καθολική μέθοδο, ενώ η Morris αποτελεί ένα υβρίδιο μεταξύ των δύο. Επομένως, η σύγκριση μεταξύ των μεθόδων αυτών θα πρέπει να γίνει με κατάλληλα κριτήρια, τα οποία να έχουν εφαρμογή και για τις τρεις μεθόδους. Πιο συγκεκριμένα, συγκρίνονται: 1) το πλήθος των σημαντικών και μη – σημαντικών παραμέτρων που παράγει η κάθε μέθοδος, 2) η σειρά ταξινόμησής τους και οι διαφορές που υπάρχουν, 3) ποιες από τις παραμέτρους είναι σημαντικές ή μη και 4) ο αριθμός επαναλήψεων που πραγματοποίησε η κάθε μέθοδος. Για την μέθοδο «one-at-a-time» και την μέθοδο FAST, οι συγκρίσεις αυτές πραγματοποιούνται χρησιμοποιώντας δεδομένα από όλες τις μεταβλητές του μοντέλου ευτροφισμού. Αντίθετα η Morris όπως αναφέρθηκε ήδη, διεκπεραιώθηκε μόνο για την χλωροφύλλη και συνεπώς θα γίνει σύγκριση των κριτηρίων μόνο για αυτήν την μεταβλητή με τις άλλες δύο μεθόδους.

Όσον αφορά την διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, δημιουργούνται διαγράμματα Venn ανά δύο μεθόδους με στόχο να φανούν ποιοτικά ποιες παράμετροι είναι σημαντικές για την κάθε μια από αυτές, αλλά και ποιες είναι σημαντικές ταυτόχρονα και για τις δύο. Μεταξύ των μεθόδων «one-at-a-time» και FAST υπάρχουν εννέα παράμετροι οι οποίες είναι σημαντικές και για τις δύο, ενώ η FAST έχει άλλες τρεις σημαντικές και η «one-at-a-time» άλλες τέσσερις σημαντικές. Επομένως υπάρχει σχετικά καλή συμφωνία μεταξύ τους ως προς την διαλογή των παραμέτρων. Τα παραπάνω παρουσιάζονται με διάγραμμα Venn με στόχο την καλύτερη απεικόνιση και κατανόησή τους στο Σχήμα 4-39.

Μεταξύ των μεθόδων «one-at-a-time» και Morris υπάρχουν οκτώ παράμετροι οι οποίες είναι σημαντικές και για τις δύο, ενώ η Morris έχει άλλες δύο σημαντικές και η «one-at-a-time» έχει άλλες έξι σημαντικές. Συνεπώς και για αυτές τις δύο μεθόδους, υπάρχει καλή συμφωνία για τις κοινές σημαντικές παραμέτρους, ωστόσο η Morris έχει λιγότερες επιπλέον σημαντικές σε σχέση με την άλλη, η οποία ίσως και να υπερεκτιμά την σημαντικότητα κάποιων. Το διάγραμμα Venn με τις σημαντικές παραμέτρους για κάθε μέθοδο και τις αντίστοιχες κοινές για τις δύο μεθόδους παρουσιάζεται στο Σχήμα 4-40.



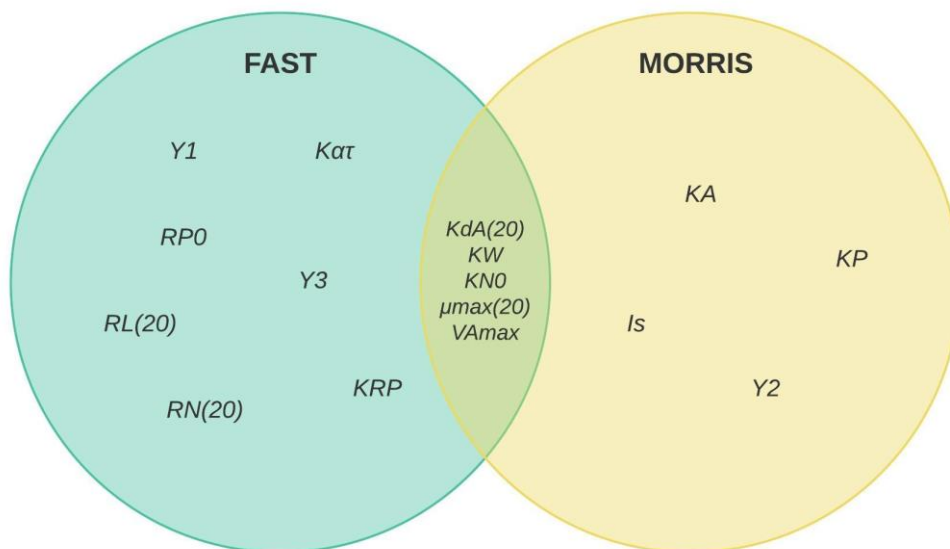
Σχήμα 4-39: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST και «one-at-a-time»



Σχήμα 4-40: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους Morris και «one-at-a-time»

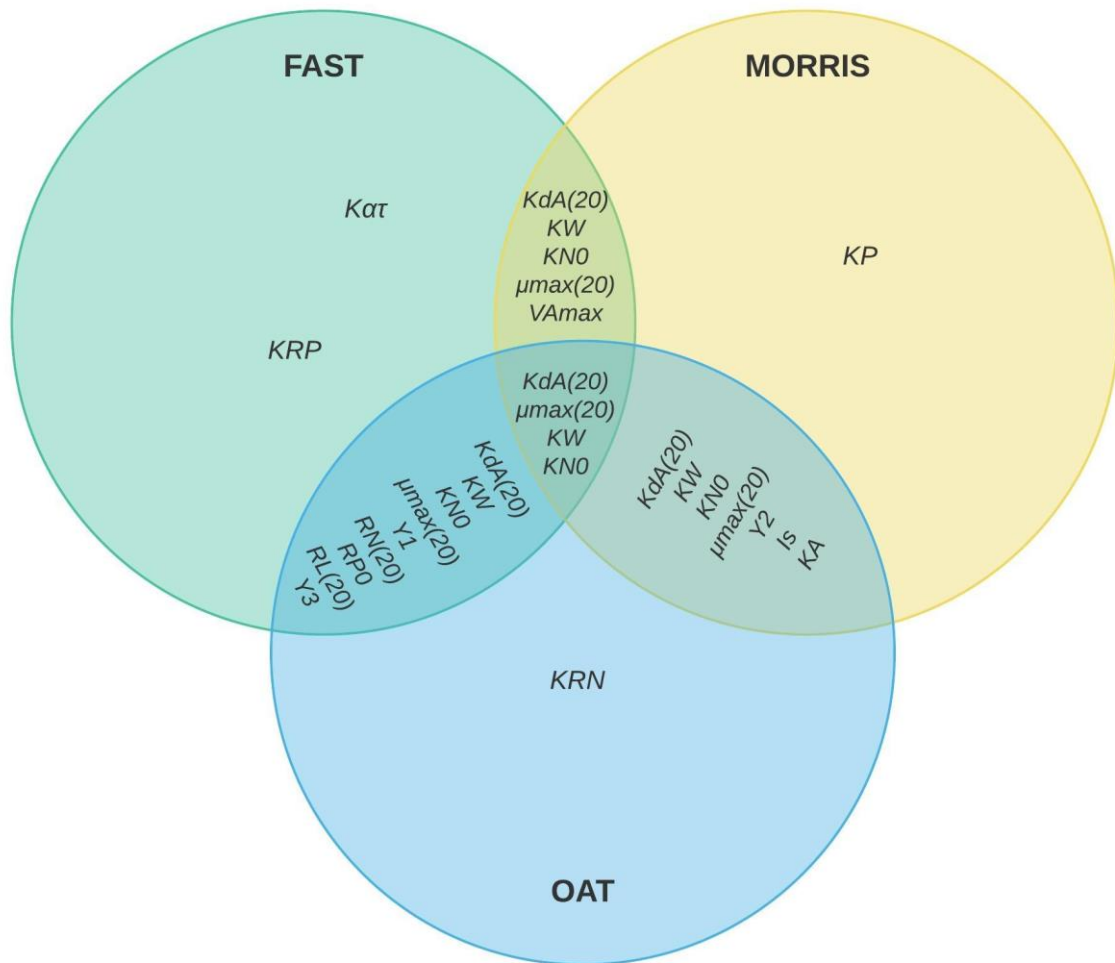
Μεταξύ των δύο καθολικών μεθόδων Morris και Fast, υπάρχουν πέντε παράμετροι, οι οποίες είναι σημαντικές και για τις δύο. Η FAST έχει επιπλέον επτά σημαντικές παραμέτρους, ενώ η Morris έχει επιπλέον τέσσερις. Στο σημείο αυτό υπενθυμίζεται, ότι οι σημαντικές παράμετροι της μεθόδου Morris προκύπτουν μόνο από την μεταβλητή της χλωροφύλλης και όπως είναι φυσικό θα είναι λιγότερες, σε σχέση με την FAST για την οποία υπάρχουν

πληροφορίες για όλες τις μεταβλητές εξόδου. Αν παρατηρηθούν οι επτά επιπλέον σημαντικές παραμέτρους αυτής, περιγράφουν διεργασίες που σχετίζονται με την νιτροποίηση και γενικότερα το άζωτο ($R_{N(20)}$), τον επαναερισμό (K_{at}), την οξείδωση του οργανικού άνθρακα ($R_{L(20)}$, Y_3) και την μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο και γενικότερα τον φώσφορο (R_{P0} , Y_1 , K_{RP}). Επομένως είναι ασφαλές να γίνει η υπόθεση, ότι εφόσον πραγματοποιούταν ανάλυση ευαισθησίας για την μέθοδο Morris και για όλες τις υπόλοιπες μεταβλητές, πιθανόν να εμφανίζονταν κάποιες από τις προηγούμενες παραμέτρους ως σημαντικές, που είναι μη – σημαντικές για την χλωροφύλλη. Το αντίστοιχο διάγραμμα Venn για τις δύο μεθόδους αυτές παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.41.



Σχήμα 4-41: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST και Morris

Το Σχήμα 4-42 αποτελεί το διάγραμμα Venn και των τριών μεθόδων μαζί. Παρατηρούνται σημαντικές παράμετροι με συμφωνία και των τριών μεθόδων οι: $K_{dA(20)}$, K_W , K_{N0} και $\mu_{max(20)}$. Επίσης, οπτικοποιούνται και οι διαφορές για την μέθοδο Morris που ήδη αναφέρθηκαν, λόγω και της ανάλυσης της μεθόδου αυτής μόνο για την μεταβλητή της χλωροφύλλης.



Σχήμα 4-42: Διάγραμμα Venn για σύγκριση των σημαντικών παραμέτρων για τις μεθόδους FAST, Morris και «one-at-a-time»

Όσον αφορά το πλήθος των σημαντικών παραμέτρων εισάγεται ο δείκτης σχετικότητας *Rel*, ο οποίος υπολογίζει τις σημαντικές ή μη παραμέτρους σε σχέση με το σύνολο αυτών στην ανάλυση ευαισθησία μας. Μια παράμετρος είναι σημαντική (μη – σημαντική) όταν είναι σημαντική (μη – σημαντική) τουλάχιστον για μια μεταβλητή εξόδου. Ο δείκτης παίρνει τιμές από μηδέν, όπου καμία παράμετρος δεν είναι σημαντική (ή μη – σημαντική) και ένα όπου όλες οι παράμετροι είναι σημαντικές (ή μη – σημαντικές) (Cosenza et al., 2013). Ο τύπος για τον υπολογισμό του δείκτη σχετικότητας παρουσιάζεται παρακάτω:

$$Rel = \frac{\text{πλήθος σημαντικών (ή μη – σημαντικών) παραμέτρων}}{\text{συνολικό πλήθος παραμέτρων}}$$

Για την μέθοδο «one-at-a-time» ο δείκτης σχετικότητας για τις σημαντικές παραμέτρους ισούται με 0.65, που σημαίνει ότι το 65% των παραμέτρων αναγνωρίστηκαν ως σημαντικές (13 από τις 20). Αντίστοιχα ο δείκτης σχετικότητας για τις μη – σημαντικές παραμέτρους, είναι το συμπληρωματικό 35% (επτά από τις 20). Για την μέθοδο FAST, υπολογίζεται ο δείκτης σχετικότητας σημαντικών παραμέτρων ίσος με 0.6 (12 από τις 20) και αυτός για τις μη – σημαντικές ίσος με 0.4 (οκτώ από τις 20). Παρατηρούμε ότι οι μέθοδοι όσον αφορά το πλήθος σημαντικών και μη – σημαντικών παραμέτρων είναι σχεδόν ίδιες. Αντίθετα, η μέθοδος Morris έχει δείκτη σχετικότητας για τις σημαντικές παραμέτρους ίσο με 0.45 (εννέα από τις 20) και για τις μη – σημαντικές ίσο με 0.55 (11 από τις 20). Συνεπώς υπάρχει μια αισθητή διαφορά μεταξύ της Morris και των δύο άλλων μεθόδων, ωστόσο μπορεί να εξηγηθεί όπως προηγουμένως, αφού οι παράμετροι για αυτήν προέκυψαν από την ανάλυση μόνο της χλωροφύλλης. Οι τιμές για τους δείκτες σχετικότητας όλων των μεθόδων παρουσιάζονται στον Πίνακα 4-5.

Πίνακας 4-5: Δείκτης σχετικότητας Rel, σημαντικών και μη – σημαντικών παραμέτρων για κάθε μέθοδο

Δείκτης σχετικότητας Rel	Μέθοδος «one-at-a-time»	Μέθοδος Morris	Μέθοδος FAST
Σημαντικές παράμετροι	0.65	0.45	0.60
Μη – σημαντικές παράμετροι	0.35	0.55	0.40

Όσον αφορά την σειρά ταξινόμησης για την κάθε μέθοδο, χρησιμοποιείται ένας τροποποιημένος συντελεστής θέσης (PF), ο οποίος παρουσιάζεται παρακάτω (Ruano et al., 2012):

$$PF = \sum_{k=1}^n \frac{|P_{k,i} - P_{k,j}|}{\mu_{P_{k,i}, P_{k,j}}}$$

όπου n το πλήθος όλων των παραμέτρων, i και j δύο διαφορετικές μέθοδοι ανάλυσης ευαισθησίας, $P_{k,i}$ και $P_{k,j}$ είναι οι θέσεις στην σειρά ταξινόμησης της k παραμέτρου για την i και την j μέθοδο αντίστοιχα και $\mu_{P_{k,i},P_{k,j}}$ ο μέσος όρος των δύο προηγούμενων μεγεθών. Ο δείκτης ποσοτικοποιεί τις διαφορές στην ιεράρχηση μεταξύ των μεθόδων ενώ όσο μικρότερη τιμή έχει, τόσο λιγότερες διαφορές υπάρχουν μεταξύ τους. Για τις μεθόδους «one-at-a-time» και FAST υπολογίστηκε ο δείκτης για κάθε μεταβλητή εξόδου, ενώ για την μέθοδο Morris υπολογίστηκε και έγινε σύγκριση με τις δύο προηγούμενες, μόνο για την μεταβλητή της χλωροφύλλης.

Μεταξύ των μεθόδων «one-at-a-time» και Morris ο συντελεστής θέσης είναι ίσος με 9.58, πράγμα που σημαίνει ότι η σειρά ταξινόμησης των δύο μεθόδων δεν απέχει κατά πολύ, μιας και όσο πλησιάζει στην τιμή μηδέν ο συντελεστής, τόσο καλύτερη συμφωνία υπάρχει μεταξύ τους. Για τις μεθόδους FAST και «one-at-a-time» υπολογίζεται ο συντελεστής θέσης για κάθε μεταβλητή εξόδου και έτσι υπάρχουν οκτώ τιμές. Η μέση τιμή όλων των συντελεστών, δηλαδή το αντιπροσωπευτικό μέγεθος της συμφωνίας μεταξύ των μεθόδων, ισούται με 9.56. Η συμφωνία τους βρίσκεται περίπου στα ίδια επίπεδα όπως των δύο προηγούμενων, με την ανάλυση να έχει πραγματοποιηθεί για όλες τις μεταβλητές εξόδου του μοντέλου. Ενδιαφέροντα στοιχεία λαμβάνονται από τους επιμέρους συντελεστές για τις μεταβλητές, όπως για παράδειγμα του οργανικού άνθρακα, ο οποίος ισούται με 7.49 και είναι και ο ελάχιστος για τις δύο μεθόδους. Αντίθετα για το διαλυμένο οξυγόνο, ο συντελεστής ισούται με 11.32 και έχει την μέγιστη τιμή από όλους. Αυτό είναι αναμενόμενο, διότι όπως έχει αναφερθεί ήδη προέκυψαν προβλήματα στα αποτελέσματα της «one-at-a-time», σε σχέση και με την FAST. Αντίστοιχα μεταξύ των Morris και FAST ο συντελεστής ισούται με 1.84, αρκετά μικρότερος από πριν, το οποίο δείχνει ότι η συμφωνία για την ταξινόμηση των δύο αυτών μεθόδων είναι πολύ καλή, ακόμα και με δεδομένα μόνο για την χλωροφύλλη για την μέθοδο Morris. Οι τιμές για τον συντελεστή θέσης για όλους τους συνδυασμούς μεταξύ των μεθόδων που εφαρμόστηκαν παρουσιάζονται στον Πίνακα 4-6. Όπως αναφέρθηκε, μεταξύ των μεθόδων FAST και «one-at-a-time», υπολογίζονται οκτώ συντελεστές, ένας για κάθε μεταβλητή εξόδου. Στον Πίνακα 4-6 παρουσιάζονται ο ελάχιστος και ο μέγιστος από αυτούς, στο εσωτερικό των παρενθέσεων, καθώς και ο μέσος όρος για όλες τις μεταβλητές εξόδου.

Πίνακας 4-6: Συντελεστής θέσης PF, μεταξύ δύο μεθόδων

Συντελεστής θέσης PF	«One-at-a-time»	Morris	FAST
«One-at-a-time»	-	9.58	9.56, (7.49 - 11.32)
Morris	9.58	-	1.84
FAST	9.56, (7.49 - 11.32)	1.84	-

Ο αριθμός των επαναλήψεων N που χρειάστηκε η κάθε μέθοδος έχει συζητηθεί στο προηγούμενο κεφάλαιο περί σύγκλισης των μεθόδων, οπότε η σύγκριση γίνεται απλώς μεταξύ των αριθμητικών τους τιμών. Για την μέθοδο «one-at-a-time», η οποία δεν έχει δειγματοληπτική διαδικασία απαιτούνται δύο προσομοιώσεις για κάθε παράμετρο (-30% και +30% των αρχικών τιμών τους) και μια επιπλέον για την κατάσταση αναφοράς. Επομένως για την μέθοδο «one-at-a-time» πραγματοποιήθηκαν $N_{OAT} = 41$ επαναλήψεις. Για την μέθοδο FAST χρησιμοποιήθηκε η ελάχιστη τιμή επαναλήψεων που απαιτεί η μέθοδος για την διεκπεραίωσή της, η οποία ισούται με 8 377. Αυτές οι επαναλήψεις απαιτούνται για την παραγωγή αποτελεσμάτων για μια μεταβλητή εξόδου του μοντέλου και στην εργασία αναλύθηκαν και οι οκτώ. Στο σύνολο για την μέθοδο FAST, πραγματοποιήθηκαν $N_{FAST} = 67\ 016$ επαναλήψεις. Για την μέθοδο Morris, όπως έχει αναφερθεί ήδη, πραγματοποιήθηκε ανάλυση ευαισθησίας μόνο για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, διότι ο υπολογιστικός φόρτος ήταν υπέρογκος για την εξαγωγή αποτελεσμάτων και για τις υπόλοιπες επτά. Συνολικά λοιπόν, για την μέθοδο Morris πραγματοποιήθηκαν $N_{Morris} = 40\ 000$ επαναλήψεις. Ενδεικτικά, στον Πίνακα 4-7 παρουσιάζονται οι τιμές των επαναλήψεων που πραγματοποίησε το μοντέλο για κάθε μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας.

Πίνακας 4-7: Αριθμός επαναλήψεων μοντέλου, για κάθε μέθοδο

Αριθμός επαναλήψεων μοντέλου	N
Μέθοδος «one-at-a-time»	41
Μέθοδος Morris	40 000
Μέθοδος FAST	67 016

5 Συμπεράσματα

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας δημιουργήθηκε ένα μαθηματικό μοντέλο ποιότητας νερού, στο προγραμματιστικό περιβάλλον του Matlab, το οποίο προσομοιώνει το φαινόμενο του ευτροφισμού σε λίμνες και παράκτια υδάτινα σώματα. Το μοντέλο βασίζεται στις φυσικές, βιολογικές και χημικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό του υδάτινου οικοσυστήματος όπως: η φωτοσύνθεση, η ανάπτυξη και ο θάνατος των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών, η νιτροποίηση, η οξείδωση του οργανικού άνθρακα, η μετατροπή του οργανικού φωσφόρου σε ανόργανο, ο επαναερισμός της λίμνης κ.ά. Επίσης διαθέτει τις κατάλληλες παραμέτρους, 20 στο πλήθος τους, για την ορθή και ακριβή προσομοίωση όλων αυτών των διαδικασιών. Υπολογίζει τις συγκεντρώσεις οκτώ μεταβλητών εξόδου σε χρονικό ορίζοντα τριών χρόνων, από τις οποίες αντλούνται πληροφορίες για την τροφική κατάσταση του υδάτινου σώματος. Οι μεταβλητές, τις οποίες υπολογίζει είναι: η χλωροφύλλη, το αμμωνιακό άζωτο, τα νιτρικά, ο οργανικός και ο ανόργανος φώσφορος, ο οργανικός άνθρακας, το διαλυμένο οξυγόνο και η διαφάνεια του νερού.

Στην συνέχεια, ο κώδικας του μοντέλου τροποποιήθηκε με τέτοιο τρόπο, ώστε να δίνει την δυνατότητα διεκπεραίωσης ανάλυσης ευαισθησίας για όλες τις παραμέτρους του. Ο στόχος της ανάλυσης ευαισθησίας ήταν: 1) η εύρεση του δείκτη σημαντικότητας των παραμέτρων, προκειμένου να ποσοτικοποιηθεί η επιρροή αυτών στο μοντέλο, 2) η ιεράρχηση των παραμέτρων με σειρά σημαντικότητας και 3) η διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, ώστε να αποφασιστεί σε ποιες από αυτές θα δοθεί μεγαλύτερη βαρύτητα και ποιες θα αποκλειστούν από την ανάλυσή μας.

Για την ανάλυση ευαισθησίας, χρησιμοποιήθηκαν τέσσερις εναλλακτικές μέθοδοι: 1) η μέθοδος «one-at-a-time», 2) η μέθοδος FAST, 3) η μέθοδος Morris και 4) η μέθοδος διασπορών με δείκτες Sobol. Ακολούθησε μια σειρά εφαρμογών του βασικού μοντέλου προσομοίωσης για την κάθε μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας, προκειμένου να αναγνωριστούν οι διεργασίες, οι οποίες είναι οι πιο ευαίσθητες και πιο σημαντικές για το μοντέλο. Από την ανάλυση των αποτελεσμάτων της εργασίας προέκυψαν αρκετά συμπεράσματα, τα σημαντικότερα από τα οποία συνοψίζονται παρακάτω:

- Ειδικότερα για το μοντέλο ευτροφισμού το οποίο αναπτύχθηκε στην διπλωματική εργασία, παρατηρούμε ότι σημαντικότερες παράμετροι με συμφωνία και των τριών μεθόδων αναδεικνύονται οι εξής: $K_{dA(20)}$, K_W , K_{NO} και $\mu_{max(20)}$. Επομένως, οι διεργασίες οι οποίες έχουν και την μεγαλύτερη βαρύτητα για το φαινόμενο του ευτροφισμού είναι: η φθορά των μικροοργανισμών, η μείωση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας λόγω αιωρούμενων στερεών στο εσωτερικό της υδάτινης στήλης, η ανάπτυξη των φωτοσυνθετικών μικροοργανισμών καθώς και ο ρυθμός με τον οποίο καταναλώνεται το άζωτο για την ανάπτυξη αυτήν. Οι παρατηρήσεις αυτές, προκύπτουν από τα αποτελέσματα και των τριών μεθόδων για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, η οποία αποτελεί και την σημαντικότερη για το μοντέλο που αναπτύχθηκε. Επίσης, υπάρχουν παράμετροι που αφορούν άλλες σημαντικές διεργασίες, οι οποίες δεν παρατηρούνται από όλες τις μεθόδους. Οι διεργασίες αυτές είναι: η νιτροποίηση ($R_{N(20)}$), η μετατροπή οργανικού σε ανόργανο φωσφόρο (R_{PO}), η οξείδωση του οργανικού άνθρακα ($R_{L(20)}$), καθώς και η ποσότητα της προσπίπτουσας ακτινοβολίας και η μείωσή της λόγω φυσικής θολότητας του νερού (I_s , K_A). Συνεπώς συμπεραίνεται ότι, στις σημαντικότερες διεργασίες για το φαινόμενο του ευτροφισμού περιλαμβάνονται, όσες αναδεικνύονται και από τις τρεις μεθόδους, ενώ για τις υπόλοιπες προτείνεται η εφαρμογή της μεθόδου Morris για όλες τις μεταβλητές του μοντέλου, με στόχο την επαλήθευση ή τον αποκλεισμό τους.
- Η τοπική μέθοδος «one-at-a-time» αποτελεί την απλούστερη και την ταχύτερη μέθοδο ανάλυσης ευαισθησίας. Αναλόγως την μεταβλητή για την οποία εξάγονται αποτελέσματα, μπορεί να υπερεκτιμήσει το πλήθος των σημαντικών παραμέτρων ή αντίθετα να το υποεκτιμήσει, όπως και έγινε για την μεταβλητή του διαλυμένου οξυγόνου. Από την ανάλυση για όλες τις μεταβλητές εξόδου, σημαντικές παράμετροι για το μοντέλο προκύπτουν οι εξής: $\mu_{max(20)}$, K_A , Y_2 , I_s , K_{NO} , $K_{dA(20)}$, K_W , $R_{N(20)}$, Y_1 , R_{PO} , $R_{L(20)}$, Y_3 , και K_{RN} . Συνολικά είναι μια μέθοδος, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο για διαλογή, μιας και η ιεράρχηση δεν είναι ικανοποιητική όπως έδειξε και η σύγκριση με τις υπόλοιπες μεθόδους. Ωστόσο, θα πρέπει να ληφθεί υπόψη η πολυπλοκότητα του μοντέλου και του φαινομένου που προσομοιώνει αυτό, διότι εάν πραγματοποιηθεί μια πρώτη διαλογή στις παραμέτρους με στόχο την μείωση του πλήθους τους, υπάρχει περίπτωση να αποκλειστούν σημαντικές παράμετροι λόγω

των υποεκτιμήσεων που αναφέραμε. Συνεπώς, εάν το μοντέλο προσομοίωσης είναι σχετικά σύνθετο και ο μελετητής δεν έχει χρονικούς περιορισμούς, προτείνεται η χρήση αυτής της μεθόδου μόνο για την εξαγωγή μιας αρχική ποιοτικής εικόνας του φαινομένου και όχι για την διαλογή των παραμέτρων.

- Η καθολική μέθοδος FAST, αποτελεί ιδανική για όλους τους στόχους της ανάλυσης ευαισθησίας. Έχει δυνατότητα διαλογής των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, ιεράρχησής τους με σειρά σημαντικότητας αλλά και ποσοτικοποίηση της ευαισθησίας τους με κατάλληλους δείκτες. Επιπλέον, αξιολογείται ως μια σχετικά οικονομική μέθοδος, όσον αφορά τους χρόνους προσομοίωσης που απαιτεί για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων της. Από την ανάλυση για όλες τις μεταβλητές εξόδου, σημαντικές παράμετροι του μοντέλου προκύπτουν οι εξής: $K_{dA(20)}$, K_W , K_{NO} , $\mu_{max(20)}$, $R_{N(20)}$, R_{PO} , Y_1 , K_{RP} , $R_{L(20)}$, V_{Amax} , Y_3 , και K_{cat} . Παράλληλα, εφόσον περιλαμβάνει την διαδικασία της δειγματοληψίας τυχαίων αριθμών, σημαντικό ρόλο για την συνολική αξιολόγησή της παίζει και η σύγκλιση των αποτελεσμάτων της. Για το μοντέλο ευτροφισμού, παρατηρείται εξαιρετική συμπεριφορά σύγκλισης, πρακτικά για όλες τις μεταβλητές εξόδου, δεδομένου και του σχετικά χαμηλού αριθμού επαναλήψεων που απαιτεί η μέθοδος. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η μέθοδος δεν παρουσιάζει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων, το οποίο για πιο σύνθετα και μη – γραμμικά μοντέλα αποτελεί περιορισμό. Σε αυτήν την περίπτωση, προτείνεται η χρήση της μεθόδου extended – FAST, η οποία αποτελεί μια επέκταση της μεθόδου FAST, και έχει την δυνατότητα να υπολογίσει κατάλληλους δείκτες για την αλληλεπίδραση των παραμέτρων. Παράλληλα, η e – FAST δεν απαιτεί επιπλέον πολλές περισσότερες επαναλήψεις, σε σχέση με την FAST και σίγουρα απαιτεί λιγότερες από άλλες αντίστοιχες μεθόδους όπως η κλασική μέθοδος διασπορών με τους δείκτες Sobol. Συνολικά, η μέθοδος FAST αποτελεί μια από τις καλύτερες μεθόδους ανάλυσης ευαισθησίας και προτείνεται για μοντέλα που έχουν παρόμοια συμπεριφορά και πλήθος παραμέτρων, με αυτό που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας.
- Η μέθοδος Morris αποτελεί υβρίδιο μεταξύ τοπικών και καθολικών μεθόδων, διότι η κατασκευή των δειγμάτων της πραγματοποιείται με πολλαπλές σταθερές διαταραχές

για κάθε παράμετρο. Έχει δυνατότητες για διαλογή των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, για ιεράρχηση αυτών με σειρά σημαντικότητας και για ποσοτικοποίηση της ευαισθησίας τους, καθώς και των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους με κατάλληλους δείκτες. Γενικά, αξιολογείται ως μια σχετικά ακριβή μέθοδος, όσον αφορά τους χρόνους προσομοίωσης που απαιτεί για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων της, δεδομένου και της απαίτησης για την σύγκλιση αυτών. Η μέθοδος είναι ιδανική για διαλογή και ιεράρχηση, μιας και έχει πολύ καλή συμφωνία με την μέθοδο FAST, ενώ η σύγκλισή τους έχει επιτευχθεί σχετικά εύκολα. Επίσης, για την διαλογή λαμβάνονται υπόψη και οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων, οι οποίες απεικονίζονται από την μέθοδο, κάτι που ήταν αδύνατο με τις δύο προηγούμενες μεθόδους. Όσον αφορά τις τιμές των δεικτών ευαισθησίας, η σύγκλισή τους είναι πιο απαιτητική και χρειάζεται πολύ μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων, ακόμα και για την εναλλακτική με μικρότερο πλήθος παραμέτρων που εφαρμόστηκε. Παράλληλα, λόγω των χρονικών περιορισμών και του υπολογιστικού κόστους στην παρούσα εργασία, εξάχθηκαν αποτελέσματα μόνο για την χλωροφύλλη για αυτήν την μέθοδο. Από την ανάλυση για την μεταβλητή της χλωροφύλλης, σημαντικές παράμετροι προκύπτουν οι εξής: $K_{dA(20)}$, K_W , K_{NO} , $\mu_{max(20)}$, K_A , V_{Amax} , I_S , Y_2 και K_P . Συνεπώς, προκειμένου να σχηματιστεί ολοκληρωμένη άποψη για την αξιολόγηση της μεθόδου Morris αλλά και για τις σημαντικές παραμέτρους της, θα πρέπει να εξαχθούν αποτελέσματα και για τις υπόλοιπες επτά μεταβλητές εξόδου. Εφόσον η ανάλυση ολοκληρωθεί για όλες τις μεταβλητές εξόδου, πιθανόν να ξεπεραστούν και όποια προβλήματα προέκυψαν από την σύγκριση με τις υπόλοιπες μεθόδους. Συνολικά, η μέθοδος Morris αποτελεί μια καλή αρχική μέθοδος ανάλυσης ευαισθησίας, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την διαλογή των παραμέτρων, ώστε να αποκλειστούν οι μη – σημαντικές και να μειωθεί το πλήθος τους, για την διεκπεραίωση επόμενων – και πιο απαιτητικών – καθολικών μεθόδων.

- Η καθολική μέθοδος διασπορών με δείκτες Sobol, αποτελεί ιδανική για όλους τους στόχους της ανάλυσης ευαισθησίας. Έχει δυνατότητα διαλογής των παραμέτρων σε σημαντικές και μη, ιεράρχησής τους με σειρά σημαντικότητας αλλά και ποσοτικοποίηση της ευαισθησίας τους, καθώς και των αλληλεπιδράσεων με κατάλληλους δείκτες. Επομένως, παρέχει μια ολοκληρωμένη περιγραφή της σχέσης

των παραμέτρων με τις μεταβλητές εξόδου, αλλά και των αλληλεπιδράσεων των διαδικασιών που προσομοιώνουν αυτές. Ωστόσο, η φύση και η τεχνική της μεθόδου θέτει εμπόδια για την διεκπεραίωσή της, με το μεγαλύτερο να είναι αυτό του αριθμού επαναλήψεων. Για το μοντέλο, λόγω της πολυπλοκότητάς του και του πλήθους των παραμέτρων του, οι απαιτήσεις της μεθόδου για την εξαγωγή αποτελεσμάτων, έστω και για μια μεταβλητή εξόδου, είναι υπερβολικές χωρίς να συνυπολογίζεται και η απαίτηση για σύγκλιση αυτών. Συνεπώς για το μοντέλο προσομοίωσης της εργασίας, η μέθοδος Sobol αξιολογείται ως εξαιρετικά ακριβή και πρακτικά μη – εφαρμόσιμη. Δεδομένου των πληροφοριών που παρέχει, εφόσον εφαρμοστεί και παράξει ακριβή και ορθά αποτελέσματα, προτείνεται η περαιτέρω διερεύνησή της με αύξηση του αριθμού των επαναλήψεων, ή εναλλακτικά η χρήση της μεθόδου extended – FAST, η οποία αναφέρθηκε και προηγουμένως.

- Όσον αφορά την σύγκλιση των μεθόδων, παρατηρείται ότι ο αριθμός των επαναλήψεων που προτείνεται από την βιβλιογραφία δεν είναι επαρκής για το μελετώμενο φαινόμενο. Βασικά αίτια για αυτό, είναι το πλήθος των παραμέτρων, αλλά και η πολυπλοκότητα του φαινομένου και των διεργασιών που περιγράφονται από το μοντέλο. Σχεδόν για όλες τις μεθόδους που εφαρμόστηκαν κατασκευάστηκαν μεγαλύτερα – και μερικές φορές πολύ μεγαλύτερα – δείγματα από τα προτεινόμενα, ενώ για την μέθοδο Sobol δεν επιτεύχθηκε τελικά η σύγκλιση. Επιπλέον, όσο μεγαλώνουν τα δείγματα και ο αριθμός των επαναλήψεων, όπως είναι φυσικό αυξάνονται και οι χρόνοι προσομοίωσης για τις μεθόδους. Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω, προτείνεται στον μελετητή να γνωρίζει τον σκοπό για τον οποίο θα πραγματοποιήσει την ανάλυση ευαισθησίας, προκειμένου να αποφασίσει την μέθοδο που θα επιστρατεύσει, δεδομένου και των απαιτήσεων αυτής για παραγωγή ορθών αποτελεσμάτων και για σύγκλιση.
- Όπως παρατηρήθηκε, είναι καλή πρακτική να εφαρμόζεται παραπάνω από μία μέθοδος ανάλυσης ευαισθησίας στο μοντέλο προσομοίωσης. Με αυτόν τον τρόπο, δίνεται η δυνατότητα σύγκρισης και αξιολόγησης των μεθόδων με πιο σφαιρικό τρόπο. Παράλληλα, παρατηρούνται συμπεριφορές και μοτίβα στα αποτελέσματα της κάθε μιας, τα οποία μπορεί να είναι κοινά για όλες, ή μεμονωμένα για μια από τις

μεθόδους. Συνεπώς από την σύγκρισή τους, αναγνωρίζονται πεδία συμφωνίας των αποτελεσμάτων, στα οποία δίνεται και μεγαλύτερη προσοχή, ενώ τυχόν ακραίες περιπτώσεις αποκλείονται ως μεμονωμένα περιστατικά της εκάστοτε μεθόδου.

- Μέσω της μεθόδου FAST, σχηματίζεται μια ποιοτική εικόνα για τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ όλων των παραμέτρων και επομένως σχολιάζεται και η συνολική συμπεριφορά του μοντέλου. Για την μέθοδο αυτή έχουμε αποτελέσματα για όλες τις μεταβλητές εξόδου, το οποίο επιτρέπει τον σχηματισμό μια ποιοτικής έστω, αλλά σίγουρα πιο ολοκληρωμένης, εικόνας των αλληλεπιδράσεων σε σχέση με αυτήν από την μέθοδο Morris, για την οποία υπάρχουν αποτελέσματα μόνο για την χλωροφύλλη. Το μοντέλο ευτροφισμού της διπλωματικής εργασίας χαρακτηρίζεται κυρίως από μη – γραμμική συμπεριφορά, καθώς εμφανίζονται αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παράμετρών του για όλες τις μεταβλητές εξόδου. Επομένως, κρίνεται απαραίτητη η ολοκλήρωση της μεθόδου Morris και για τις υπόλοιπες μεταβλητές, αλλά και η εφαρμογή καθολικής μεθόδου που θα ποσοτικοποιεί τις αλληλεπιδράσεις αυτές με κατάλληλους δείκτες (μέθοδος Sobol, μέθοδος extended – FAST).
- Το μοντέλο ευτροφισμού μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για εφαρμογές με φυσικά δεδομένα από λίμνες και παράκτια υδάτινα σώματα. Συνεπώς απαιτείται κατάλληλη βαθμονόμηση, ώστε να είναι ακριβή τα αποτελέσματά του σε σχέση και με τις φυσικές παρατηρήσεις. Μέσω της ανάλυσης ευαισθησίας, αναγνωρίζονται οι μη – σημαντικές παράμετροι, οι οποίες στην συνέχεια αποκλείονται και από την διαδικασία της βαθμονόμησης. Παράλληλα μετά την ολοκλήρωση της βαθμονόμησης, η ανάλυση ευαισθησίας συμβάλλει στην επιλογή καλύτερων ευρών τιμών των σημαντικών παραμέτρων. Επίσης, ερευνά την απαιτούμενη ακρίβεια που θα πρέπει να δοθεί για τις μετρήσεις των τιμών των παραμέτρων, η οποία εξαρτάται από την σημαντικότητα της εκάστοτε παραμέτρου. Όπως είναι λογικό, μια παράμετρος η οποία θεωρείται σημαντική, προτείνεται να έχει καλή ακρίβεια μέτρησης, σε σχέση με κάποια που έχει αποκλειστεί από το μοντέλο. Ως εκ τούτου, εάν το μοντέλο χρησιμοποιηθεί για οποιαδήποτε μελέτη εφαρμογής, προτείνεται να διερευνηθεί η σχέση των δύο αυτών διαδικασιών, για να επιτευχθεί απλούστερα και ορθότερα η βαθμονόμηση του.

Αναφορές

Anderson, B., Borgonovo, E., Galeotti, M., Roson, R., 2014. Uncertainty in climate change modeling: can global sensitivity analysis be of help? *Risk Anal.* 34 (2), 271e293.

Baroni, G., Tarantola, S., 2014. A general probabilistic framework for uncertainty and global sensitivity analysis of deterministic models: a hydrological case study. *Environ. Model. Softw.* 51, 26e34.

Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Adv. Water Resour.* 16, 41e51.

Borgonovo, E., 2007. A new uncertainty importance measure. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 92, 771e784.

Borgonovo, E., 2008. Sensitivity analysis of model output with input constraints: a generalized rationale for local methods. *Risk Anal.* 28, 667e680.

Butler, M.P., Reed, P.M., Fisher-Vanden, K., Keller, K., Wagener, T., 2014. Identifying parametric controls and dependencies in integrated assessment models using global sensitivity analysis. *Environ. Model. Softw.* 59, 10e29.

Campolongo, F., Cariboni, J., Saltelli, A., 2007. An effective screening design for sensitivity analysis of large models. *Environ. Model. Softw.* 22 (10), 1509e1518.

Campolongo, F., Saltelli, A., 1997. Sensitivity analysis of an environmental model: an application of different analysis methods. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 57 (1), 49e69.

Campolongo, F., Tarantola, S., & Saltelli, A., 2000. Sensitivity analysis as an ingredient of modeling. *Statistical Science*, 15(4), 377–395. <https://doi.org/10.1214/ss/1009213004>

Canale, R. P., & Vogel, A. H., 1974. Effects of temperature on phytoplankton growth. *Journal of the environmental engineering Division*, 100(1), 231-241.

Canale, R. P., 1976. Modeling biochemical processes in aquatic ecosystems.

Chapra S.C. and Canale R.P., 1991. *Long-term phenomenological model of phosphorus and oxygen in stratified lakes*. *Water Res.* 25(6): 707-715

Chapra, S.C. and Reckhow K.H., 1983. *Engineering approaches for lake management. Vol.1Q Data analysis and empirical management. Vol 2: Mechanistic modeling.* Butterworth Publishers. ISBN 0-250-40392-7

Chen, C. W., & Orlob, G. T., 1972. Ecologic simulation for aquatic environments. *Systems analysis and simulation in ecology*, 3, 475-588.

Cosenza, A., Mannina, G., Vanrolleghem, P. A., & Neumann, M. B., 2013. Global sensitivity analysis in wastewater applications: A comprehensive comparison of different methods. *Environmental Modelling & Software*, 49, 40–52.
<https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2013.07.009>

Cukier, R.I., Fortuin, C.M., Shuler, K.E., Petschek, A.G., Schaibly, J.H., 1973. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory. *J. Chem. Phys.* 59 (8), 3873e3878.

Devenish, B. J., Francis, P. N., Johnson, B. T., Sparks, R. S. J., & Thomson, D. J., 2012. Sensitivity analysis of dispersion modeling of volcanic ash from Eyjafjallajökull in May 2010: SENSITIVITY ANALYSIS OF ASH DISPERSION. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 117(D20).
<https://doi.org/10.1029/2011JD016782>

Di Toro, D. M., O'CONNOR, D. J., & Thomann, R. V., 1971. A dynamic model of the phytoplankton population in the Sacramento—San Joaquin Delta.

DUGDALE, R. C., 1985. The effects of varying nutrient concentration on biological production in upwelling regions. *Sta*, 14, 8.

Dugdale, R. C., Wilkerson, F. P., Grimanis, A. P., & PAPADOPOU-LOU, C., 1985. Use of isotops to identify the food sources of jellyfish blooms: natural marine ecosystems or sewage effluents. *Year Report «Studies on the Biology and Ecology of jellyfish in Greek waters»*, National Centre for Marine Research-UNEP, Athens, 2-9.

Eshenroder, R. L., 1977. Effects of intensified fishing, species changes, and spring water temperatures on yellow perch, *Perca flavescens*, in Saginaw Bay. *Journal of the Fisheries Board of Canada*, 34(10), 1830-1838.

Freedman, P. L., & Canale, R. P., 1977. Aquatic Macrophytes in White Lake, Michigan. *Journal of the Environmental Engineering Division*, 103(3), 431-444.

Freer, J., Beven, K., Ambrose, B., 1996. Bayesian estimation of uncertainty in runoff prediction and the value of data: an application of the GLUE approach. *Water Resour. Res.* 32 (7), 2161e2173.

Gargas, E., Nielsen, C. S., & Lønholdt, J., 1976. An incubator method for estimating the actual daily planktonalgae primary production. *Water Research*, 10(10), 853-860.

Gibson, G., Carlson R., Simpson J., Smeltzer E., Gerritson J., Chapra S., Heiskary S., Jones J., and Kennedy R., 2000. *Nutrient Criteria Technical Guidance Manual: Lakes and Reservoirs*. Washington: United States Environmental Protection Agency, Office of Science and Technology, EPA-822-B00-001

Håkanson L., 1999. *On the principles and factors determining the predictive success of ecosystem models, with a focus on lake eutrophication models*. Elsevier, *Ecological Modelling* 121: 139–160

Hall, J., Boyce, S., Wang, Y., Dawson, R., Tarantola, S., Saltelli, A., 2009. Sensitivity analysis of hydraulic models. *ASCE J. Hydraul. Eng.* 135 (11), 959e969.

Hamm, N., Hall, J., Anderson, M., 2006. Variance-based sensitivity analysis of the probability of hydrologically induced slope instability. *Comput. Geosci.* 32 (6), 803e817.

Harper, E., Stella, J.C., Fremier, A., 2011. Global sensitivity analysis for complex ecological models: a case study of riparian cottonwood population dynamics. *Ecol. Appl.* 21 (4), 1225e1240.

Helton, J., 1993. Uncertainty and sensitivity analysis techniques for use in performance assessment for radioactive waste disposal. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 42 (2e3), 327e367.

Hession W.C., McBride M., Parsons J. E., Reckhow K. H., (n.d.). *Evaluation of the Water Quality Model EUTROMOD*. Southern Cooperative Series Bulletin. Retrieved July 11, 2015, from <http://s1004.okstate.edu/S1004/Regional-Bulletins/Modeling-Bulletin/NEW10-19-00EutromodWEB.html#20110>

Hill, M., Tiedeman, C., 2007. *Effective Groundwater Model Calibration: with Analysis of Data, Sensitivities, Predictions, and Uncertainty*. John Wiley & Sons.

Homma, T., Saltelli, A., 1996. Importance measures in global sensitivity analysis of nonlinear models. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 52 (1), 1e17.

- Howard, R., 1988. Decision analysis: practice and promise. *Manag. Sci.* 34 (6), 679e695.
- Iman, R., Helton, J., 1988. An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Anal.* 8, 71e90.
- Iman, R., Hora, S., 1990. A robust measure of uncertainty importance for use in fault tree system analysis. *Risk Anal.* 10, 401e406.
- Jacques, J., Lavergne, C., Devictor, N., 2006. Analysis in presence of model uncertainty and correlate inputs, *Reliability Engineering and System Safety* 91, 1126–1134.
- Kelleher, C., Wagener, T., McGlynn, B., Ward, A.S., Gooseff, M.N., Payn, R.A., 2013. Identifiability of transient storage model parameters along a mountain stream. *Water Resour. Res.* 49 (9), 5290e5306.
- Khare, Y., Martinez, C. J., Muñoz-Carpena, R., Bottcher, A. “Del”, & James, A., 2019. Effective global sensitivity analysis for high-dimensional hydrologic and water quality models. *Journal of Hydrologic Engineering*, 24(1), 04018057. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HE.1943-5584.0001726](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0001726)
- Kleijnen, J., Helton, J., 1999a. Statistical analyses of scatterplots to identify important factors in large-scale simulations, 1: review and comparison of techniques. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 65 (2), 147e185.
- Kucherenko, S., Tarantola, S., Annoni, P., 2012. Estimation of global sensitivity indices for models with dependent variables. *Comput. Phys. Commun.* 183 (4), 937e946.
- Larsen, S., 1974. Phosphorus-a limiting factor in future food production. *NJAS wageningen journal of life sciences*, 22(4), 270-274.
- Li, X., Hao, L., Yang, L., Li, G., & Nan, R., 2019. Enhanced lake-eutrophication model combined with a fish sub-model using a microcosm experiment. *Environmental Science and Pollution Research*, 26(8), 7550–7565. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-04069-y>
- Minunno, F., van Oijen, M., Cameron, D., Pereira, J., 2013. Selecting parameters for bayesian calibration of a process-based model: a methodology based on canonical correlation analysis. *SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif.* 1 (1), 370e385.
- Morris, M., 1991. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics* 33 (2), 161e174.

- Nakhaei, N., Boegman, L., Mehdizadeh, M., & Loewen, M., 2019. Hydrodynamic modeling of Edmonton storm-water ponds. *Environmental Fluid Mechanics*, 19(2), 305–327. <https://doi.org/10.1007/s10652-018-9625-5>
- Nguyen, T., de Kok, J., 2007. Systematic testing of an integrated systems model for coastal zone management using sensitivity and uncertainty analyses. *Environ. Model. Softw.* 22 (11), 1572e1587.
- Norton, J., 2015. An introduction to sensitivity assessment of simulation models. *Environ. Model. Softw.* 69, 166e174.
- Nossent, J., Elsen, P., Bauwens, W., 2011. Sobol sensitivity analysis of a complex environmental model. *Environ. Model. Softw.* 26 (12), 1515e1525.
- Nyholm, N., 1978. A simulation model for phytoplankton growth and nutrient cycling in eutrophic, shallow lakes. *Ecological Modelling*, 4(2-3), 279-310.
- Oakley, J., O'Hagan, A., 2004. Probabilistic sensitivity analysis of complex models: a bayesian approach. *J. R. Stat. Soc. Ser. B Stat. Methodol.* 66, 751e769.
- O'Connor, D. J., 1976. The concentration of dissolved solids and river flow. *Water Resources Research*, 12(2), 279-294.
- O'Connor, D. J., Thomann, R. V., & Di Toro, D. M., 1973. *Dynamic water quality forecasting and management*. US Government Printing Office.
- Pastres, R., Chan, K., Solidoro, C., Dejak, C., 1999. Global sensitivity analysis of a shallow-water 3D eutrophication model. *Comput. Phys. Commun.* 117, 62e74.
- Paton, F.L., Maier, H.R., Dandy, G.C., 2013. Relative magnitudes of sources of uncertainty in assessing climate change impacts on water supply security for the southern Adelaide water supply system. *Water Resour. Res.* 49 (3), 1643e1667.
- Pianosi, F., Beven, K., Freer, J., Hall, J. W., Rougier, J., Stephenson, D. B., & Wagener, T., 2016. Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow. *Environmental Modelling & Software*, 79, 214–232. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.02.008>

- Pianosi, F., Sarrazin, F., & Wagener, T., 2015. A matlab toolbox for global sensitivity analysis. *Environmental Modelling & Software*, 70, 80–85. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2015.04.009>
- Poole, H. H., & Atkins, W. R. G., 1929. Photo-electric measurements of submarine illumination throughout the year. *Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom*, 16(1), 297-324.
- Powell, S., Baker, K., 1992. Management Science, the Art of Modeling with Spreadsheets, fourth ed. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA.
- Rakovec, O., Hill, M.C., Clark, M.P., Weerts, A.H., Teuling, A.J., Uijlenhoet, R., 2014. Distributed Evaluation of Local Sensitivity analysis (DELSA), with application to hydrologic models. *Water Resour. Res.* 50 (1), 409e426.
- Richardson, W. L., & Bierman Jr, V. J., 1976. A Mathematical Model of Pollutant Cause. *WATER QUALITY CRITERIA RESEARCH OF THE U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY*, 138.
- Riecken S., 1995. *A compendium of water quality models*. Water Quality Branch, Environmental Protection Department, Ministry of Environment, Lands and Parks
- Saltelli, A., D'Hombres, B., 2010. Sensitivity analysis didn't help. A practitioner's critique of the stern review. *Glob. Environ. Change* 20 (2), 298e302.
- Saltelli, A., Marivoet, J., 1990. Non-parametric statistics in sensitivity analysis for model output: a comparison of selected techniques. *Reliab. Eng. Syst. Saf.* 28 (2), 229e253.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., Tarantola, S., 2008. *Global Sensitivity Analysis. The Primer*. Wiley.
- Saltelli, A., Tarantola, S., Chan, K.P.-S., 1999. A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output. *Technometrics* 41 (1), 39e56.
- Sarrazin, F., Pianosi, F., & Wagener, T., 2016. Global Sensitivity Analysis of environmental models: Convergence and validation. *Environmental Modelling & Software*, 79, 135–152. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.02.005>
- Saunders, L., Perrin, J., & Gammack, D., 1962. Ultrasonic irradiation of some phospholipid sols. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 14(1), 567-572.

Schaibly, J. H., & Shuler, K. E., 1973. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. II Applications. *The Journal of Chemical Physics*, 59(8), 3879-3888.

Shin, M.-J., Guillaume, J.H., Croke, B.F., Jakeman, A.J., 2013. Addressing ten questions about conceptual rainfall-runoff models with global sensitivity analyses in *R. J. Hydrol.* 503 (0), 135e152.

Sieber, A., Uhlenbrook, S., 2005. Sensitivity analyses of a distributed catchment model to verify the model structure. *J. Hydrol.* 310 (1e4), 216e235.

Singh, R., Wagener, T., Crane, R., Mann, M.E., Ning, L., 2014. A vulnerability driven approach to identify adverse climate and land use change combinations for critical hydrologic indicator thresholds: application to a watershed in Pennsylvania, USA. *Water Resour. Res.* 50, 3409e3427.

Sobol, I. M., 2001. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Mathematics and computers in simulation*, 55(1-3), 271-280.

Sobol', I., 1993. Sensitivity analysis for non-linear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiment* 1, 407e414, translated from Russian: I.M. Sobol', Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models *Mat. Model.* 2 (1990), 112e118.

Sobol', I., Kucherenko, S., 2009. Derivative based global sensitivity measures and their link with global sensitivity indices. *Math. Comput. Simul.* 79 (10), 3009e3017.

Spear, R., Hornberger, G., 1980. Eutrophication in peel inlet. II. Identification of critical uncertainties via generalized sensitivity analysis. *Water Res.* 14 (1), 43e49.

Spear, R.C., Grieb, T.M., Shang, N., 1994. Parameter uncertainty and interaction in complex environmental models. *Water Resour. Res.* 30 (11), 3159e3169.

Tang, Y., Reed, P., Wagener, T., van Werkhoven, K., 2007b. Comparing sensitivity analysis methods to advance lumped watershed model identification and evaluation. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 11, 793e817.

Tarantola, S., Gatelli, D., & Mara, T. A., 2006. Random balance designs for the estimation of first order global sensitivity indices. *Reliability Engineering & System Safety*, 91(6), 717–727.

<https://doi.org/10.1016/j.ress.2005.06.003>

- Thomann, R. V., 1975. *Mathematical modeling of phytoplankton in Lake Ontario* (Vol. 1). National Environmental Research Center
- Valiela, I., 1984. Producers and processes involved in primary production. In *Marine ecological processes* (pp. 3-37). Springer, New York, NY.
- van Griensven, A., Meixner, T., Grunwald, S., Bishop, T., Diluzio, M., Srinivasan, R., 2006. A global sensitivity analysis tool for the parameters of multi-variable catchment models. *J. Hydrol.* 324 (1e4), 10e23.
- van Werkhoven, K., Wagener, T., Reed, P., Tang, Y., 2009. Sensitivity-guided reduction of parametric dimensionality for multi-objective calibration of watershed models. *Adv. Water Resour.* 32 (8), 1154e1169.
- VICAIRE (Visual Campus in Hydrology and Water Ressources). Module 2: Qualitative Hydrology, 2006. *Chapter 9: Water Quality Modeling*
- Wagener, T., Boyle, D., Lees, M., Wheater, H., Gupta, H., Sorooshian, S., 2001. A framework for development and application of hydrological models. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 5, 13e26.
- Walker W.W. Jr., 1986. *Empirical methods for predicting eutrophication in impoundments*. Technical Report E-81-9. U.S. Vicksburg, Mississippi: Army Engineer Waterways Experiment Station. Environmental Laboratory.
- Walker, J. D., Rees, P. S., & Walsh, T. K., 2009. The importance of in-stream hydraulics in river water quality models: Lessons from the blackstone river. *World Environmental and Water Resources Congress 2009*, 1–9. [https://doi.org/10.1061/41036\(342\)296](https://doi.org/10.1061/41036(342)296)
- Wang, J., Li, X., Lu, L., & Fang, F., 2013. Parameter sensitivity analysis of crop growth models based on the extended Fourier Amplitude Sensitivity Test method. *Environmental Modelling & Software*, 48, 171–182. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2013.06.007>
- Wang, X., Zhang, S., Liu, S., & Chen, J., 2012. A two-dimensional numerical model for eutrophication in Baiyangdian Lake. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*, 6(6), 815–824. <https://doi.org/10.1007/s11783-011-0383-6>
- Young, P.C., Spear, R.C., Hornberger, G.M., 1978. Modeling badly defined systems: some further thoughts. In: *Proceedings SIMSIG Conference*, Canberra, pp. 24e32.

Ρώμας, Ε., Νουτσόπουλος Κ., Ανδρεαδάκης Α., και Μαμάης Δ., 2006. Θεωρητική τεκμηρίωση του μοντέλου δίαιτας ρύπων σε λίμνες «Λέρνη», Ολοκληρωμένη Διαχείριση Υδατικών Συστημάτων σε Σύζευξη με Εξελιγμένο Υπολογιστικό Σύστημα (ΟΔΥΣΣΕΥΣ), Ανάδοχος: ΝΑΜΑ Σύμβουλοι Μηχανικοί και Μελετητές Α.Ε., Τεύχος 8α, 70 σελίδες. Αθήνα: Τομέας Υδατικών Πόρων, Υδραυλικών και Θαλάσσιων Έργων – Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.