

A növények peszticid-felvételének matematikai modellezése

Ujfaludi L.

Eszterházy Károly Főiskola

Abstract

Mathematical modelling of plants' pesticide uptake. The outlines of a new research programme are described in this article. Two basic types of pesticide uptake models exist: analytical and numerical models. The analytical models offer exact mathematical solutions, their use is simple and they claim a modest hardware background, but many simplifications in the flow conditions, and pesticide parameters are necessary in their use. Numerical models, on the other hand, offer a complex solution for problems with sophisticated boundary and initial conditions, varying pesticide parameters etc. Their use demands an advanced hardware background and a careful and tedious preliminary work in data arrangement. Joining the long term research programme of the Egerfood Research Centre, it seems more practical to use simple analytical models to examine the pesticide uptake of plants. An existing computer programme, developed earlier for environmental student practical trainings, can be the basis of this model. Another problem is the assessment of risk in terms of pesticide properties such as half life and adsorption parameters. Similar methods exist for aquifer risk assessment but they can not be transformed directly to the plants' pesticide uptake.

A modellezés irodalma

A peszticidek transzportjának és átalakulásainak becslésére számos matematikai modellt fejlesztettek ki az utóbbi évtizedekben. Módszertani szempontból a modellek két csoportba oszthatók: *analitikus- és numerikus modellekre*. Az *analitikus modellek* egzakt matematikai megoldásokon alapulnak, jellemzőjük, hogy kevés input-adatot igényelnek, számítástechnikai háttér-igényük kicsi és kezelésük viszonylag könnyű. Használatuk során azonban a kezdeti- és határfeltételek, az áramlási tér jellemzése és a peszticidek tulajdonságai tekintetében számos egyszerűsítő feltevés szükséges. (Ezért az analitikus modelleket sok

esetben előzetes becslésekre, közelítő, összehasonlító vizsgálatokra használják.) Ezzel szemben a *numerikus modellekkel* lehetőség nyílik a probléma komplex módon történő kezelésére: tetszőleges kezdeti- és határfeltételek, inhomogén áramlási terek, időben változó áramlási feltételek és peszticid-tulajdonságok figyelembevételére. A numerikus modellek kiterjedt számítástechnikai ismereteket, jelentős hardver-háttérrel igényelnek, a modell-paraméterek becslése hosszadalmas és körültekintő előkészítő munkát kíván. Kifejlesztettek ún. *hibrid modelleket* is, ahol az analitikus modellel előzetes becsléseket végeznek egyszerűsített feltételek figyelembevételével, majd a részletesebb vizsgálatokra a numerikus modellt használják.

Az analitikus modellek tipikus példája Hantush és Marino modellje (*Hantush and Marino, 1996*), amelyet a peszticidok talajvíz-szennyezésének becslésére fejlesztettek ki. Ide sorolható az EKF Fizika Tanszékén 1992-ben kidolgozott oktatási célú AQUACONT számítógépi program is (*Ujfaludi & Vida, 1994*), amelyet 15 éve folyamatosan használnak a környezettan szakos hallgatók gyakorlati képzésében.

A numerikus modellek számos változata hozzáférhető különböző (pl. internetes) forrásokon. Közülük azok, amelyek az USA-EPA (Environmental Protection Agency) támogatásával készültek, díjmentesen letölthetők a webről. Rendszerint igen nagy az input-adatigényük és jelentős számítástechnikai háttérrel feltételeznek. Jelenleg az irodalomban fellelhető modellek közül – megítélésünk szerint – legnagyobb teljesítőképességű az Egyesült Államok több egyetemén kooperációban kifejlesztett IPM-CS (Integrated Pesticide Transport Modeling System) modell (*Chu and Marino, 2007*). A modellel 3 fázisú (adszorbeált, oldott és gőzfázisú) peszticid-transzportot lehet szimulálni a gyökér és a növényi lomb zónájában. A modell adat-előkészítő, számítási és utóértékelő blokkból áll, Windows-bázisú kiegészítő egységekkel: közvetlenül kapcsolódik egy Excel-bázisú táblázatkezelő és grafikus feldolgozó egységhez; a bemeneti adat-egységről közvetlenül behívhatók az ismertebb peszticid adatbázisok, tehát a modell rendkívül felhasználó-barát. Az ismertetés szerint a peszticidok transzportfolyamatait a modell igen átfogóan, komplex módon szimulálja. A beszívárgás transzport folyamatait – az általános gyakorlattól eltérően – a telítetlen talajvízmozgás Richards-egyenletével számolja, ami a folyamatok pontosabb nyomon követését teszi lehetővé. Ugyanakkor ez az újítás jelentősen megnöveli az input-adat- és a számítástechnikai háttér-igényt.

Az EGERFOOD vizsgálatai

Az EKF-en működő EGERFOOD Regionális Tudásközpont kutatási programjában kiterjedten vizsgálják a peszticidok transzport- és átalakulási folyamatait. A fotodegradációs vizsgálatok során négy, egymástól szerkezetileg jelentősen eltérő növényvédőszer UV-sugárzás hatására bekövetkező bomlásának me-

chanizmusát vizsgálták (Virág, D., 2006). Az eredmények szerint a négy peszticid (karbendazim, acetoklór, simazin, klórpifosz) fotodegradációjának reakciókinetikája jelentős eltéréseket mutatott. A peszticidek és bomlástermékek biológiai hatását tesztorganizmusokon vizsgálták. Megállapították, hogy a bomlástermékek jelentősen módosíthatják a talaj mikrobiota összetételét.

A vizsgálatok másik célkitűzése a növények számára biológiailag hozzáférhető peszticid mennyiségek becslése. Ennek előzetes vizsgálatait során kiterjedten vizsgálták különböző szerkezetű peszticidek talajszemcséken történő adszorpciós folyamatait. Az egyik vizsgálat során négy peszticid adszorpciós karakterét vizsgálták homok- és barna erdőtalajon (az előbbieken vizsgált peszticidek közül három itt is szerepelt, a karbendazim helyett azonban itt diuront vizsgáltak). A peszticiddel kezelt talajmintákból öt különböző extraháló szerrel távolították el a szermaradványokat (kloroformot, metanolt, acetátpuffert, kalcium-klorid- és humuszsav-oldatot használtak extraháló szerként). A K_d megoszlási tényezőre kapott értékek a talajtól és az extraháló szertől függően széles tartományban változtak (Virág, D. – Kiss, A., 2007). Egy másik vizsgálat célja annak kiderítése volt, hogy a peszticidek poláros jellege hogyan befolyásolja az adszorpciós tulajdonságokat (Csutorás, Cs. – Kiss, A., 2006). A vizsgálatok itt is homok- és barna erdőtalajra és öt peszticidre (atrazin, simazin, terbutrin, prometrin, diuron) terjedtek ki. Megállapították, hogy a poláros, vagy apoláros jelleg meghatározó szerepet játszik a talaj-pesticid kölcsönhatásnál és a növekvő poláros jelleggel együtt nő az adszorpció kötésének erőssége. Az említett „*in vitro*” vizsgálatokon kívül „*in vivo*” vizsgálatokra is sor került; ennek során közvetlen mérésekkel vizsgálták egyes növények peszticid-felvételét (Szováti, K. és mások, 2007).

A szennyezések transzportjának elméleti alapjai

A szennyezőanyagok a folyókban és a talajvizekben elsősorban áramlás révén terjednek. Ha az áramláson kívül más tényezők nem hatnának, akkor egy adott helyen bebocsátott szennyezőanyag változatlan koncentrációval haladna az áramlás fő irányában, az áramlás átlagsebességével. (A továbbiakban impulzusjelleggel történő szennyezőanyag-bebocsátásokat vizsgálunk). A sebesség és az áramlási tér egyenletlensége miatt azonban minden esetben létrejön egy elkeveredés, amelynek eredményeképp áramlás közben az impulzusszerűen bebocsátott szennyezőanyag koncentrációja folyamatosan csökken, a szennyezett térfogat viszont állandóan nő.

Talajban történő transzport esetén a szennyezőanyag részecskéi az áramló vízzel a pórusokban haladnak, és elkeveredésüket három különböző folyamat is elősegíti; ezek a következők: (1) az egyes pórusokban az áramlási sebesség a keresztmetszeten belül változik, (2) a nagyobb átmérőjű pórusokban az áramlás átlagsebessége nagyobb (ez a két hatás a Poiseuille-törvényből következik), (3) a

szemcsék jelenléte elterelő hatást gyakorol a vízre és a szennyezőanyagra egyaránt. Az említett három hatás eredője az ún. *hidrodinamikai diszperzió*, amely egy viszonylag homogén talajrétegen belül is jelentős elkeveredést okoz (Bear, 1972). Nagy kiterjedésű, inhomogén szerkezetű (rétegzett, vagy anizotróp) talajformációkban ehhez járul még a különböző áteresztőképességű rétegekben a különböző áramlási sebességek miatt létrejött elkeveredés. Az előbbi jelenséget mikroszkópikus, az utóbbit makroszkópikus, vagy regionális diszperzióknak nevezik. („Elkeveredés”, vagy „diszperzió” alatt azt a folyamatot értjük, amelynek során a szennyezőanyag részecskéi szétszóródnak – diszpergálódnak – azaz egyre nagyobb térfogatban oszlanak el, tehát a koncentrációjuk csökken.) A diszperzió mindkét esetben jóval nagyobb az áramlás főirányában, mint az arra merőleges irányokban. Az áramlás irányában ható elkeveredést a hosszirányú (longitudinális) diszperziós tényezővel (D_L), az áramlásra merőleges elkeveredést a keresztirányú (transzverzális) diszperziós tényezővel (D_T) jellemezzük. Az irodalomban használatos még az ún. diszperziós hossz (α), amelynek szintén van longitudinális (α_L) és transzverzális (α_T) értéke; ezek kapcsolata a megfelelő diszperziós tényezőkkel:

$$D_L = \alpha_L U \quad \text{és} \quad D_T = \alpha_T U \quad (1)$$

ahol U az áramlás középsebessége.

Szennyezőanyag transzportja párhuzamos áramlásban

A következő szakaszban a szennyezések transzportjának néhány egyszerű, idealizált esetét mutatjuk be. Az egyszerűsítés egyik tipikus esete az, amikor a transzportfolyamatokat párhuzamos áramlásban vizsgáljuk, és az áramlási tér minden pontjában a sebesség ugyanakkora. Ilyen áramlások a valóságban csak igen ritkán fordulnak elő, de ezek matematikai leírása viszonylag egyszerű és a kapott összefüggések közelítő becslésekre alkalmasak olyan esetekben is, amikor az áramlási tér nem ideális.

A peszticidek transzportja a csapadékvíz függőleges beszivárgása útján történik, ilyenkor *egydimenziós (függőleges) transzportról* beszélhetünk. A szennyezőanyag ilyenkor csak az áramlás irányában képes elkeveredni, vagyis csak longitudinális diszperzióval kell számolni. Ideális szennyezőanyag esetére a transzportegyenlet a következő formában írható (Clark, 1996):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2)$$

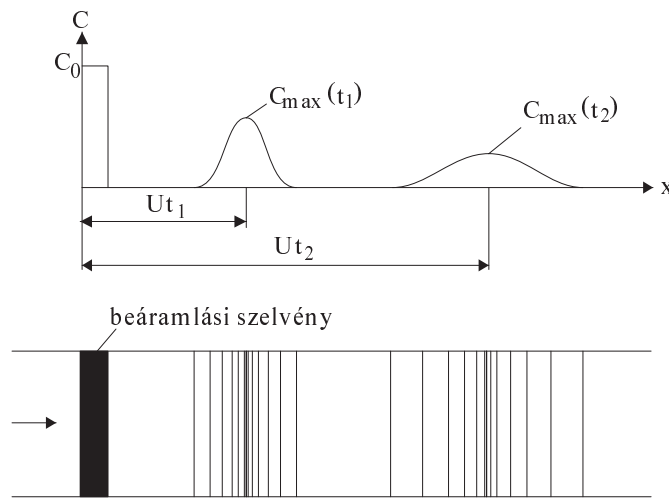
ahol C szennyezőanyag koncentrációja, x a helykoordináta az áramlás irányában, t az idő. (Az olyan szennyezőanyagot, amelynek transzportját csak az áramlás és

a diszperzió befolyásolja, *ideális-, vagy konzervatív szennyezőanyag*nak nevezük.)

Impulzus-jellegű szennyezés esetén a koncentrációt az áramlási hossz és az idő függvényében az (1) egyenlet egzakt megoldása adja:

$$C = C_0 \frac{V}{An\sqrt{4\pi D_L t}} e^{-\frac{(x-Ut)^2}{4D_L t}} \quad (3)$$

ahol C a koncentráció tetszőleges időpontban, C_0 a kezdeti koncentráció, amely $t = 0$ időpontban az $x = 0$ helyen bebocsátott szennyezéshez tartozik, V a szennyezőanyag teljes térfogata, A az áramlási keresztmetszet, n a talaj hézagtérfogata (porozitása), D_L a hosszirányú diszperziós tényező, t a bebocsátástól eltelt idő, U az áramlás középsebessége.



1. ábra: A koncentráció csökkenése konzervatív szennyező esetén

A (2) egyenlet egy időben egyre inkább ellapuló haranggörbe (Gauss-görbe – tkp. az ún. Gauss-féle valószínűségi sűrűségfüggvény) egyenlete (1. ábra). Az exponenciális kifejezés a haranggörbe két leszálló ágát, az előtte lévő törtes kifejezés a mindenkor csúcskoncentrációt adja meg; a haranggörbe csúcsa az áramlás U középsebességével halad. A csúcskoncentráció az idő elteltével egyre csökken, miközben a szennyezett zóna hossza egyre nő; jellemző paraméter a szórásnégyzet:

$$\sigma_L^2 = 2D_L t \quad (4)$$

fizikai jelentése: annak a sávnak a hossza, ahol a szennyezőanyag molekuláinak 95%-a található: $1,96 \sigma_L$. Mivel a konzervatív szennyezőanyag mennyisége időben nem változik, a haranggörbe alatti terület időben állandó.

Bomlás

Egyes szennyezők a transzportfolyamat közben lebomlanak (pl. radioaktív izotópok, szerves anyagok, peszticidek, mikroorganizmusok) ezek koncentrációja az idő függvényében az alábbi összefüggés szerint csökken (*Bear, 1972*):

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \quad (5)$$

ahol C a t -időpontbeli, C_0 a kezdeti koncentráció, λ a bomlási állandó. A bomlási állandó és a T felezési idő között a

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T} \quad (6)$$

összefüggés érvényes.

Adszorpció

Talajvizekben történő áramláskor egyes szennyezőanyagok megkötődnek (adszorbeálódnak) a talajszemcsék felületén, vagy a talajban lévő szerves anyagokon. Az adszorpció mértékét a megoszlási tényezővel (K_d) szokás jellemezni; ez az adszorbeálódott és az oldatban maradt anyagmennyiség hányadosa (*De Smedt, 1992.*):

$$K_d = \frac{M_a}{M_o} \quad (7)$$

Az adszorpció révén megkötött szennyezőanyag nem halad tovább az áramlásban, ami a bebocsátástól távoli helyeken a szennyezés késleltetett megjelenését eredményezi. A késleltetés mértékét az ún. retardációs tényező (R) fejezi ki:

$$R = \frac{U}{U_a} \quad (8)$$

ahol U az ideális szennyezőanyag, U_a az adszorbeálódó szennyezőanyag áramlási sebessége (az ideális szennyezőanyag az áramlás középsebességével halad). A retardációs és a megoszlási tényező kapcsolata az alábbi egyenlettel fejezhető ki:

$$R = 1 + \frac{1 - n_e}{n_e} \rho_t K_d \quad (9)$$

ahol n_e a talaj effektív hézagterfogata, ρ_t a talajszemcsék sűrűsége. A hézagterfogat a talajban lévő pórusok V_p térfogatának és a talaj teljes V_t térfogatának hányadosa:

$$n = \frac{V_p}{V_t} \quad (10)$$

míg az effektív hézagterfogat a hézagterfogatnak az a hányada, amelyben áramlás van. Ez általában kisebb a hézagterfogatnál; a tapasztalat szerint:

$$n_e = 0,2 \dots 0,8 n \quad (11)$$

Szerves anyagot tartalmazó talajoknál a megoszlási tényező az alábbi egyenlettel számítható (De Smedt, 1992):

$$K_d = K_{od} \frac{m_o}{m_t} \quad (12)$$

ahol m_o a talajban lévő szerves anyag tömege, m_t a talaj teljes tömege, K_{od} a szerves anyagra vonatkozó ún. particionálási tényező.

A koncentráció időbeli változását leíró differenciálegyenlet a legáltalánosabb esetet – bomló és adszorbeálódó szennyezőanyagot – feltételezve (Clark, 1996):

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C \quad (13)$$

Ennek matematikai megoldása talajvízáramlás esetére:

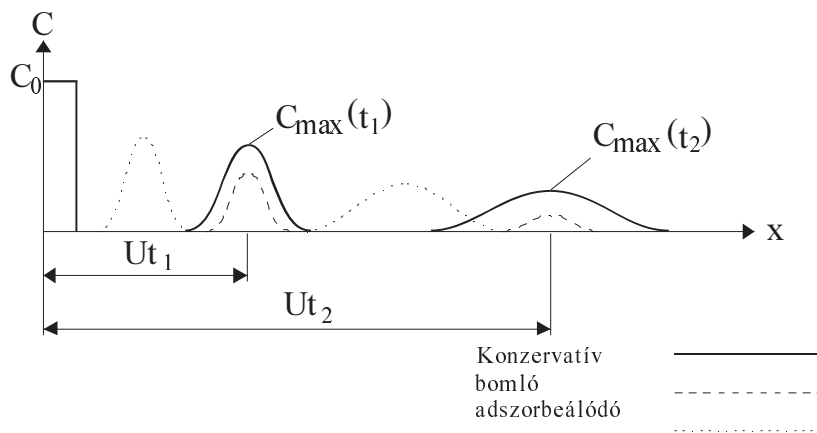
$$C = C_0 \frac{V}{An\sqrt{4\pi D_L / R}} \exp \left[-\frac{\left(x - U \frac{t}{R}\right)^2}{4D_L \frac{t}{R}} - \lambda t \right] \quad (14)$$

ahol a jelölések megegyeznek a korábbiakkal. A megoldás alakilag hasonló az ideális szennyezőanyagra kapott Gauss-féle valószínűségi eloszlás sűrűségfüggvényével (2. egyenlet); az idő függvényében itt is egyre inkább ellapuló haranggörbét kapunk. Az adszorpció miatt azonban a szennyezőanyag itt R -szer lassabban halad, mint az áramlási sebesség, a bomlás következtében pedig a szennyező mennyisége egyre csökken, vagyis az idő függvényében csökken a Gauss-görbe alatti terület (2. ábra).

A modell paraméterei

A továbbiakban a peszticidek függőleges beszivárgásának vizsgálatára szorítkozva, négy paraméter van, amely alapvetően meghatározza a koncentráció alakulását, ezek: az U áramlási sebesség, a D_L hosszirányú (longitudinális) diszperziós tényező, az R retardációs tényező és a λ bomlási állandó.

Az áramlási sebesség estünkben a függőleges beszivárgási sebesség; a (3) és a (14) egyenlet szerinti egzakt matematikai megoldásokban U értékét állandónak feltételezték (ezért viszonylag „egyszerű” a megoldások alakja). A beszivárgási sebesség valójában időben változik, a változás leírására számos félempirikus és empirikus összefüggés létezik (Rajkai, 2004), (Ujfaludi, 1986). Változó sebesség számításba vételére a (3) és a (14) egyenlet csak úgy használható, ha a beszivárgást szakaszokra bontjuk és egy-egy szakaszon belül a sebességet állandónak tekintjük. (Az irodalomban ezt az eljárást a probléma *szemidiszkrét* megoldásának nevezik – szembeállítva a *folytonos* megoldásokkal, amit a tisztán analitikus megoldások nyújtanak.) A szakaszokra bontás a pontos leírás érdekében szükséges, viszont jelentősen megnehezíti a számítást.



2. ábra: Koncentráció-eloszlások a bomlás és az adszorpció figyelembevételével

A hosszirányú diszperziós tényező (D_L) a sebességgel az (1) egyenlet szerint szoros kapcsolatban van. Az 1970-es és a 80-as években számos törekvés történt arra, hogy meghatározzák D_L és egyes talajfizikai jellemzők (szemcseméret, vízáteresztési tényező, stb.) kapcsolatát (Jackson, 1980). Saját korábbi vizsgálataink során (Ujfaludi, 1986) természetes talajmintákkal végzett laboratóriumi vizsgálatok alapján a talaj szemcsemérete és az α_L diszperziós hossz között a következő empirikus összefüggést határoztuk meg:

$$\alpha_L = 48 (d_{50})^{1.5} \quad (15)$$

ahol d_{50} a talaj közepes szemcsemérete, amely az egyenletbe m -ben helyettesítendő és akkor α_L -et is m -ben kapjuk.

Az R retardációs (késleltetési) tényező, mint a (9) egyenlet mutatja, egyenesen arányos a K_d megoszlási tényezővel, a talajjellemzők a kapcsolati függvény meredekségét befolyásolják.

A (12) egyenlet a szerves anyag adszorpcióban játszott szerepét mutatja; újabb vizsgálatok szerint számos egyéb tényező is befolyásolja a K_d megoszlási tényező értékét. Weber és mások (2003) irodalmi adatokra épülő részletes elemzése szerint K_d értékét a szerves anyag tartalom kívül az agyagtartalom és a pH-érték is befolyásolja. Több mint 50 peszticidre kiterjedő vizsgálatok során empirikus összefüggéseket állapítottak meg a fenti tényezők hatásának figyelembevételére. Példaképpen idézzük a simazinra és a diuronra megadott egyenleteiket:

$$\begin{aligned} \text{simazin:} \\ K_d = 5.3 + 0.2(OM) + 0.02(Cl) - 0.73(pH) + /-0.7 \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \text{diuron:} \\ K_d = -1.4 + 3.26(OM) - 0.1(OM)^2 + /-1.1 \end{aligned} \quad (17)$$

ahol OM a szerves anyag (organic matter) részaránya, Cl az agyagtartalom (clay) részaránya. Az idézett szerzők minden egyes peszticidre megadták a fellelhető irodalmi K_d -értékek átlagértékét is, amelyeket esetleg közelítő becslésekre lehet használni. Felhívják azonban a figyelmet arra, hogy az átlagérték használata jelentős hibát okozhat, mivel az értékek szórása igen nagy.

A mérgező anyagok tulajdonságainak egyik frekvenciált információforrása az EXTOXNET weboldal. Itt az EGERFOOD-ban használt egyes peszticidek jellemző paramétereire az 1. táblázatban közölt értékek találhatóak. A felezési, ill. lebomlási idő (hol így, hol úgy nevezik) tekintetében igen nagy a szórás; nyilvánvalóan ez a paraméter is függ – a megoszlási tényezőhöz hasonlóan – a talajjellemzőktől. A megoszlási tényezőt minden esetben egyetlen számértékkel adják meg, ami igen pontatlan értékelésekhez vezethet.

1. táblázat

Peszticid	Felezési/lebomlási idő (nap)	Particionálási tényező (K_{od})	Megoszlási tényező (K_d)
Diuron	30...365	480	nincs adat
Acetoklór	56...84	nincs adat	3,03
Simazin	28...149	130	1,96
Klórpirifosz	60...120	6070	4,699
EPTC	6...32	200	3,204

A 2. táblázatban 3 peszticidre megadjuk az EGERFOOD-ban két különböző talajmintán mért (*Virág, D. – Kiss, A., 2007*), és ugyanezekre a talajokra két becslési eljárás alapján (*de Smedt, 1992 és Weber és mások, 2003*) számolt K_d -értékeket; az eltérések láthatóan igen jelentősek.

2. táblázat

Peszticid	Talajtípus	K_d (mért) CaCl ₂ ⁽¹⁾	K_d (mért) humuszsav (²)	K_d (becsült) de Smedt	K_d (becsült) Weber
Simazin	Homok	0,385	0,411	7,83	1,90
	Barna erdei	0,292	0,234	6,71	1,12
Diuron	Homok	0,344	0,097	23,5	3,50
	Barna erdei	0,412	0,330	20,1	5,62
EPTC	Homok	158	195	15,7	nincs adat
	Barna erdei	122	275	13,43	nincs adat

¹ – extrahálószer: 0,01 mólos CaCl₂-oldat

² – extrahálószer: SERA-humuszsav 0,5 ml/l

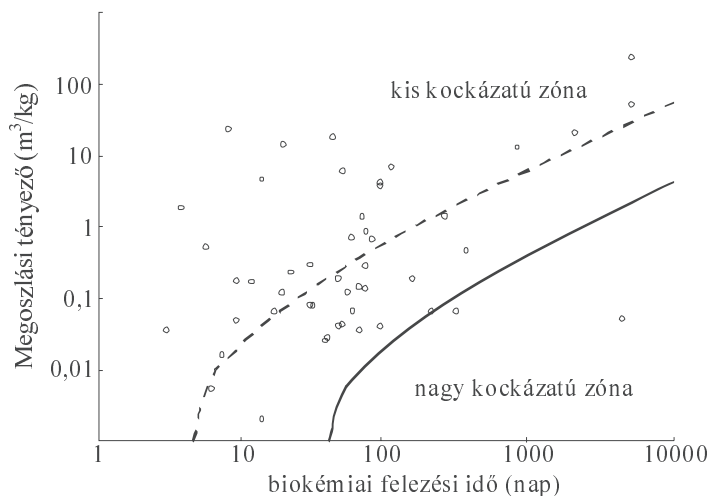
Kockázatelemzés

Az adszorpció, a bomlás és az áramlás körülményeinek együttes figyelembevételével meghatározható a szennyezés kockázata különböző típusú szennyezésekre. A kockázati tényező definíciója de Smedt (1992) szerint:

$$K = \frac{UT}{LR} \quad (18)$$

ahol U az áramlás sebessége, T a felezési idő, L az áramlási úthossz és R a retardációs tényező. A fenti kockázati tényezőt a felszínről beszivárgó szennyezés talajvízre gyakorolt hatásának jellemzésére definiálták. Nyilvánvaló, hogy a talajvizekre nézve azok a szennyezőanyagok jelentenek kis kockázatot, amelyek gyorsan bomlanak, és/vagy erősen adszorbeálódnak. Fordítva: nagy kockázatot

jelentenek a lassan bomló, nem adszorbeálódó szennyezőanyagok (3. ábra). Egy másik szempont: a szennyező transzport sebessége és az áramlási hossz. Azok a szennyezők jelentenek nagy kockázatot a talajvizekre, amelyek nagy sebességgel áramlanak és rövid úton elérik a víztartó réteget.



3. ábra: Talajvízszennyezések kockázati tényezője a bomlás és az adszorpció figyelembevételével

Nyilvánvaló, hogy a fenti kockázati tényezőt nem lehet változatlan formában alkalmazni a növények peszticid-felvételi kockázatára. Könnyen belátható pl., hogy K nem lehet egyenesen arányos az U beszivárgási sebességgel, hiszen a növényi felvétel szempontjából éppen a lassan beszivárgó anyagok jelentenek nagyobb kockázatot. Szükséges ezért egy új kockázati tényező definiálása, amely kifejezi a peszticid-talaj-növény kölcsönhatás valóságos kockázati viszonyait.

Következtetések

Az újabb szakirodalom áttekintése alapján megállapítható, hogy a numerikus modellekkel ma már a peszticidek transzportja a legbonyolultabb kezdeti- és határfeltételek esetén is nyomon követhető. A koncentráció várható értékeire hely- és idő függvényében becslések adhatók az összes kísérő jelenség (diszperzió, adszorpció, bomlás stb.) figyelembevételével. Az irodalmi közlésekből kiderül, hogy a nagyobb teljesítőképességű modellek, pl. a bevezetőben említett IPM-CS létrehozása jelentős méretű kutatócsoport több éves munkájának eredménye. A már kidolgozott modell terepi adatokkal történő tesztelése szintén több éves előkészítő munka után, jelentős pénzügyi támogatás igénybevételével vált lehetővé. A numerikus modellek egy része (köztük az IPM-CS modell is) térí-

tésmentesen használható és rendkívül felhasználóbarát, nem látszik tehát célszerűnek egy újabb numerikus modell fejlesztésébe kezdeni.

Az ilyen modellek használatának legkritikusabb pontja a működtetéshez szükséges input-adatok előállítása. A peszticidek adszorpciós- és bomlási jellemzőinek bizonytalanságát a fenti rövid áttekintéssel megkíséreltük érzékeltetni. További, hasonló nagyságrendű probléma a talajfizikai jellemzők bizonytalansága. A vízáteresztőképességi együttható, a hézagterefogat, a diszperziós tényező meghatározása még vízzel telített talajokra, laboratóriumi körülmények között is csak jelentős hibával határozható meg. Részleges víztelítettség esetén a probléma jóval bonyolultabb, terepi alkalmazásoknál ilyen esetben a fenti paraméterek megbízható becslése a lehetetlennel határos. A legnagyobb teljesítőképességű modellek a beszivárgó víz mennyiségét csapadék-idősorok alapján számolják, a pontos számításhoz azonban párolgási-, hőmérsékleti-, szél-, stb. adatok szükségesek, tehát teljes meteorológiai idősorokat kell a modellezésbe bevonni.

Az IPM-CS modell tesztelésénél minden lehetséges eszközt, adatszerzési és adatfeldolgozási stratégiát bevetettek és végül részletes összehasonlítást végeztek a modellel számított és a terepi méréssel kapott peszticid-koncentrációk között, 3 különböző mélységű talajrétegben. A statisztikai összehasonlításoknál használatos ún. korrelációs tényezők értékére végül 0,45 és 0,74 közötti értéket kaptak, ami (különösen az alsó határérték) igen gyenge adategyezésnek felel meg. A gyenge korreláció oka nyilvánvalóan a bemeneti adathalmaz egyes elemeinek említett bizonytalansága, amit a legnagyobb módszertani alapossággal felépített modell-rendszer sem tud ellensúlyozni.

Figyelembe véve az EGERFOOD Regionális Tudásközpont ez irányú kutatási tevékenységét, az időbeli és a pénzügyi korlátokat, valamint a közvetlen gyakorlati igényeket, a peszticidek transzportjának nyomon követése (a biológiailag hozzáférhető mennyiségek becslése, mint végső cél) és a kockázatok megbízható becslése érdekében az alábbi K+F tevékenységeket javasoljuk.

1. Gyors, egyszerű analitikus becslési eljárás kidolgozását az EGERFOOD által korábban rendszeresen vizsgált peszticidek transzportjának, adszorpciójának és növények általi felvételének meghatározására; olyan módszer kidolgozását, amelynek kevés az input-adatigénye. A beszivárgás számítására a legegyszerűbb dugattyú-modell (piston-flow model) alkalmazása lenne célszerű, amely azonban a beszivárgási front időben lassuló előrehaladását szakaszokra bontással (a fent már említett *szemidiszkrét* eljáráshoz hasonlóan) közelíti. A becslési eljárást a már meglévő, fentebb említett AQUACONT oktatóprogram javított és korszerűsített változatára lehetne alapozni. (Az AQUACONT-programot röviden ismertetjük a FÜGGELÉK-ben.)

2. A becslési eljárás ellenőrzésére néhány laboratóriumi kísérlet elvégzését a korábban már vizsgált talajok, növények és peszticidok felhasználásával. A vizsgálatoknak ki kell terjedni:
 - a talajfizikai jellemzők (vízáteresztő képesség, hézagterefogat, szemcseméret-eloszlás, talajösszetétel) mérésére,
 - a peszticid koncentrációjának térbeli és időbeli nyomon követésére klímakamrában nevelt növényben és annak talajkörnyezetében.
3. Olyan kockázatbecslési eljárás kidolgozását, amely a talaj minősége, az alkalmazott peszticid és a növényféleség figyelembevételével jellemző mérőszámot ad a kockázat mértékére és alternatívákat ad az alkalmazónak kisebb kockázattal járó növény-védőszer(ek) kiválasztására.

Hivatkozások

- Bear, J.: Dynamics of fluids in porous media. American Elsevier, New York, 1972.
- Chu, X. and Marino, M.: IPM-CS: A windows-based integrated pesticide transport model for a canopy-soil system. Environmental Modelling & Software, Vol.22, pp.1316–1327., 2007.
- Clark, M.M.: Transport modeling for environmental engineers and scientists. Wiley Interscience Publication, New York, 1996.
- Csutorás, Cs. and Kiss, A.: Investigation of the interaction of pesticides with different soil samples. Eszterházy Károly Főiskola tudományos közleményei; tanulmányok a környezettudományok köréből. Líceum Kiadó, Eger, 2006.
- de Smedt, F.: Groundwater pollution. Laboratory of Hydrology, Free University of Brussels, 1992.
- Hantush, M.M. and Marino, M.A.: An analytical model for the assessment of pesticide exposure levels in soils and groundwater. Environ. Model. Assess. 1996/4.
- Jackson, R. E. (ed.): Aquifer contamination and protection. UNESCO, Paris, 1980.
- Rajkai, K.: A víz mennyisége, eloszlása és áramlása a talajban. MTA Talajtani és Agrokémiai Kutató Intézet, Budapest, 2004.
- Szováti, K., Kiss, A., Murányi, Z., B.Tóth, Sz., Virág, D.: Comparative examination on model systems of pesticides' biological uptake. Transactions of XIII. Symposium on Pesticide Chemistry, Piacenza, Italy, 2007.
- Ujfaludi, L.: Longitudinal dispersion tests in non-uniform porous media. Hydrological Sciences Journal, 1986. No.12.
- Ujfaludi, L.: Terepkísérletek a Szigetköz szivárgási viszonyainak feltárása céljából. Kutatási zárójelentés, VITUKI, Budapest, 1986.
- Ujfaludi, L., Vida, J.: AQUACONT – A computer program of pollution transport in waters. Proceedings of a workshop on „Harmonisation of east-west radioactive pollutant measurement, standardisation of techniques.” Budapest, 1994.
- Virág, D.: Peszticidok fotodegradációs mechanizmusának elemzése és lehetséges biológiai hatásának modellezése. XXVII. OTDK díjazott hallgatóinak dolgozatai, EKF Líceum Kiadó, Eger, 2006.
- Virág, D., Kiss, A.: Comparative studies to model bioavailability of pesticides in distinctive soil types. Acta Agraria Debreceniensis, 2007 (in press)

Weber, J. B., Wilkerson, G. G., Reinhardt, C. F.: Calculating pesticide sorption coefficients (K_d) using selected soil properties. *Cemosphere* 55 (2004) pp. 157-166.
<http://extoxnet.orst.edu.htm>

FÜGGELEK

(Az AQUACONT program rövid ismertetése)

Az EKF-en 1992-ben indult a környezettani képzés az ugyanebben az évben megalapított Környezettudományi Tanszék irányításával. Nem sokkal ezután került sor az AQUACONT oktatóprogram kidolgozására, amely a környezettani képzés gyakorlati foglalkozásainak anyaga lett és máig folyamatosan használatban van (*Ujfaludi & Vida, 1994*). A program vízben oldható szennyezőanyagok transzportjának számítására alkalmas, impulzus-jellegű szennyező-beáramlás esetén. Használatakor figyelembe vehető az áramlás, a szennyezőanyag hidrodinamikai diszperziója, adszorpciója és bomlása. A program a DOS operációs rendszerben futtatható (a korszerű számítógépeken is működőképes, de használata a mai, modern operációs rendszerekhez képest nehézkes). Az AQUACONT egy- és kétdimenziós transzport kezelésére egyaránt alkalmas, de itt csak az egydimenziós esettel foglalkozunk, mivel a peszticidek függőleges beszivárgása egydimenziós problémaként kezelhető.

A program operatív része DEMO és SZÁMÍTÁS nevű blokkokat tartalmaz; mindkettő magában foglalja a **Konzervatív szennyezés**, a **Bomlás** és az **Adszorpció** nevű opciókat. A DEMO ezek bármelyikére felrajzolja a szennyezőanyag koncentráció-eloszlását három egymást követő időpontban (az 1. és a 2. ábrához hasonlóan). A SZÁMÍTÁS nevű blokk a begépett input adatok alapján tetszőleges időpontban kiszámolja a koncentráció-értékeket, majd felrajzolja az aktuális eloszlási görbét. Tovább lépéskor 25 tetszőlegesen választott helykoordinátához megadja a koncentráció-értékeket, amelyeket táblázatos formába rendez. A szükséges input-adatok a következők.

1. Konzervatív szennyezés esetén:

- Kezdeti koncentráció
- Szennyezőanyag mennyisége
- Beáramlási felület
- Talaj hézagterfogata
- Áramlási sebesség
- Diszperziós tényező
- Idő

2. Bomló szennyezés esetén:

- ua., mint 1-nél, továbbá
- a bomló anyag felezési ideje

3. Adszorbeálódó szennyezés esetén

- ua., mint 1-nél, továbbá
- az adszorbeálódó anyag retardációs tényezője

A program a (3) és a (14) egyenletekkel megadott egzakt matematikai megoldások alapján számol; jelenlegi formájában az adszorpciót és a bomlást együttesen nem, csak alternatív módon tudja kezelni.