

ПОСТРОЕНИЕ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ПОВЕДЕНИЯ ПЕСТИЦИДОВ В АГРОЦЕНОЗЕ

Н.Н. Семенова, Всероссийский НИИ защиты растений, Санкт-Петербург — Пушкин

В основе построения имитационных моделей системы агроценоз — пестициды лежат следующие положения эколого-токсикологической концепции рационального применения химических средств защиты растений [Новожилов, Петрова, 1991; Семенова, 1997]: пестициды воздействуют на агроценоз как на целостную систему и их динамика определяется взаимодействием с компонентами агроценоза; основными процессами, формирующими динамику пестицидов в системе почва — растение, являются процессы транслокации и деградации пестицидов; характер деградации и локализации пестицидов в компонентах системы почва — растение определяет как степень токсического воздействия на объекты мишени (биологическую эффективность), так и побочное действие (экологическую опасность); ход процессов транслокации и деградации пестицидов обуславливается группами иерархически организованных факторов биотической и абиотической природы.

Метод имитационного моделирования на основе сформулированных положений позволяет создать унифицированный инструмент для решения двух взаимосвязанных задач экотоксикологии: воспроизведения динамики пестицидов в агроценозе и оптимизации экотоксикологических параметров их применения. Оптимизация экотоксикологических параметров может трактоваться как создание оптимальной тактики применения пестицидов с минимальным побочным токсическим воздействием на окружающую среду и максимальным защитным эффектом. Количественный аспект оптимизации экотоксикологических параметров состоит в определении минимального набора наиболее информативных показателей, определяющих возможную степень токсического воздействия пестицидов на компоненты агроценоза, что позволяет разрабатывать оптимальные регламенты применения пестицидов и классифицировать пестициды по степени их экологической опасности.

В контексте системного подхода, необходимость которого следует из первого положения, лежащего в основе построения имитационной модели поведения пестицида в агроценозе, структура такой модели — это не просто совокупность выбранных компонент, а система их связей, отражающая взаимодействие между ними, их функции и функционирование всей системы в целом. Структурно-функциональная схема будущей модели определяется целью моделирования — оптимизацией применения пестицидов. Причем пестицид рассматривается не только как управляющее воздействие, но и как элемент агроценоза, т.е. учитывается механизм обратных связей: динамические взаимодействия между пестицидом — сельскохозяйственной культурой и пестицидом — объектом обработки.

Возделываемая культура — это центр, связующий все компоненты агроценоза при формировании фитосанитарной ситуации, главный средообразующий фактор и объект, к которому прилагается управляющее воздействие. Поэтому субмодель роста растения — обязательный элемент в имитационных моделях поведения пестицидов в агроценозе, выполняющий роль «динамического компартамента» и позволяющий изучать взаимосвязи между растением и пестицидом.

Схематично связь между классом моделей обрабатываемой культуры и возможностью изучать взаимовлияние пестицида и растения представлены в табл. 1. Наиболее простой результат динамического взаимодействия пестицида и растения — увеличение биомассы растения,

ведущее к уменьшению концентрации пестицида и, как следствие, к ослаблению токсического эффекта. Для оценки фактора биоразбавления пестицида можно выбрать одну из наиболее простых моделей: эмпирическую, регрессионную или двухпараметрическую детерминированную модели роста сельскохозяйственной культуры. Недостаток простых моделей заключается в невозможности идентифицировать их параметры таким образом, чтобы верификация моделей была удовлетворительной на весь период вегетации. Имитационные модели роста сельскохозяйственной культуры в условиях лимитирования по влаге и минеральному питанию или без лимитирования могут служить базой для интегральных моделей взаимодействия вредных организмов, растения и пестицида, в которых сопрягаются динамические макрохарактеристики основных компонент изучаемой системы. Такие модели относятся к моделям исследовательского характера, т.к. требуют при своем использовании большого объема входной информации, определение которой может быть затруднительно. Более перспективны обобщения имитационных моделей роста культуры. В данном случае небольшое число параметров моделей обладает ясной биологической интерпретацией и может быть откорректировано при минимальном объеме экспериментального материала.

Таблица 1. Моделирование процесса деградации пестицида в агроценозе с учетом динамики сельскохозяйственной культуры

Классы моделей сельскохозяйственной культуры	Процесс деградации
Эмпирические и регрессивные	Деградация пестицидов в растении с учетом биоразбавления
Двухпараметрические модели роста культуры	
Обобщенные модели роста культуры	
Компартментальные имитационные модели роста культуры в благоприятных условиях	Деградация пестицидов с учетом их локализации в органах, биоразбавления и фаз развития культуры
Компартментальные имитационные модели роста культуры в условиях недостатка влаги и минерального питания	Деградация пестицидов с учетом их локализации в органах, биоразбавления, фаз развития культуры, а также влияния агротехнических приемов

Изучение влияния агротехнических приемов на характер разложения пестицида в растении без учета их динамического взаимодействия может привести к неверным выводам. Поскольку деградация пестицида определяется всей совокупностью процессов, происходящих в растении, то воздействие, например, сопутствующих агрохимикатов на скорость разложения является как прямым (через изменение скорости метаболических процессов в растении), так и опосредованным (через увеличение скорости роста биомассы самого растения). Относительная скорость роста биомассы растения может составлять значительную часть от относительной скорости деградации пестицидов и превосходить максимальную вариацию этого параметра по вариантам опыта, причем это соотношение, как правило, изменяется в зависимости от фазы развития растения.

Системный подход к моделированию динамических взаимодействий между пестицидом — объектом обработки,

позволяет выявить взаимосвязи процессов деградации и транслокации пестицидов с их биологической эффективностью. В результате либо наземной обработки, либо внесения препаратов в почву происходит перераспределение пестицидов между компонентами агроценоза. С учетом последствий защитных средств эффективность их применения будет зависеть не только от концентрации пестицидов в момент обработки, но и от дальнейшего поведения, т.е. от процессов их деградации и транслокации, определяющих локализацию и пролонгированность действия пестицида. Побочное действие пестицидных ксенобиотиков, а следовательно, их экологическая опасность обуславливаются теми же процессами.

Традиционно количественная оценка токсичности пестицидов осуществляется в соответствии с соотношением доза : эффект. Полученная в лабораторных исследованиях зависимость плохо описывает результат воздействия пестицида в полевых условиях. Одна из причин неадекватности модели на основе соотношения доза — эффект в полевых условиях связана с игнорированием процессов, определяющих локализацию пестицидов. Транслокация пестицидов приводит к тому, что примененное количество препарата и количество препарата, непосредственно оказывающего воздействие на полезные и вредные организмы, могут существенно отличаться. Другая причина несоответствия связана с последствием пестицида.

В ВИЗР разработана динамическая модель взаимодействия пестицида и вредного организма. В нее включено описание процессов деградации и транслокации пестицидов на основе балансового метода динамических компартментов. При моделировании поведения пестицидов в наземной части агроценоза рассматриваются процессы их миграции в растении и проникновения в листья, а в почве — миграция по почвенному профилю, проникновение в корневую систему и сорбция твердой фазой почвы. Предполагается, что подавление роста вредного объекта в каждый момент времени осуществляется на основе сравнения текущей концентрации пестицида с учетом его локализации в соответствующем компартменте с полулетальной концентрацией пестицидов и временем воздействия.

Диаграмма (рис.) наглядно демонстрирует взаимосвязь процессов транслокации и деградации пестицидов на определенном уровне стратификации пространственного объема. Структура пространственных компартментов модели (надземная часть, корнеобитаемый слой почвы) соответствует вертикально-ярусной организации растительного сообщества. Выделенные компартменты позволяют построить модель поведения пестицидов в агроценозе с учетом абиотических (метеословия, тип и механический состав почвы, физико-химические свойства, формы и способы применения пестицидов) и биотических (особенности архитектуры и анатомо-морфологического строения сельскохозяйственной культуры) факторов.

Проникновение пестицидов в растение и взаимодействие с почвенно-поглощающим комплексом происходит на границе раздела функциональных компартментов, которые имеют чрезвычайно сложную, влияющую на ход процессов нерегулярную структуру. Математическое описание поведения пестицидов на границе раздела двух фаз осуществлялось по аналогии с методами фильтрации сигналов в случайной среде (теория автоматического управления). В нашем случае роль «фильтра» играет разделяющая поверхность. Таким образом, описывая физический процесс (сорбция для почвы, абсорбция листовой поверхностью), мы одновременно учитываем и геометрию пространства, в котором этот процесс происходит. Эффект неоднородности среды проявляется за счет крайней неравномерности скоростей движения частиц вещества. В предположении нерегулярности границы

раздела фаз процесс деградации пестицидов подчиняется не экспоненциальному закону убывания во времени, а степенному. Именно такое поведение пестицидов в почве наблюдалось в ряде полевых экспериментов. С учетом неравновесных процессов на границе компартментов мы получаем обобщение модели, содержащее как статистическую, так и детерминированную составляющие поведения пестицидов в агроценозе.

Для условно гомогенной среды интегральная модель воздействия пестицидов на объект-мишень может включать экспоненциальную модель деградации пестицида, соответствующую в простейшем случае уравнению кинетики первого порядка, а для неоднородной среды — степенную, которая описывается уравнением кинетики дробного порядка. В табл. 2 приведены результаты расчетов воздействия пестицидов на вредителя на основе этих двух зависимостей.

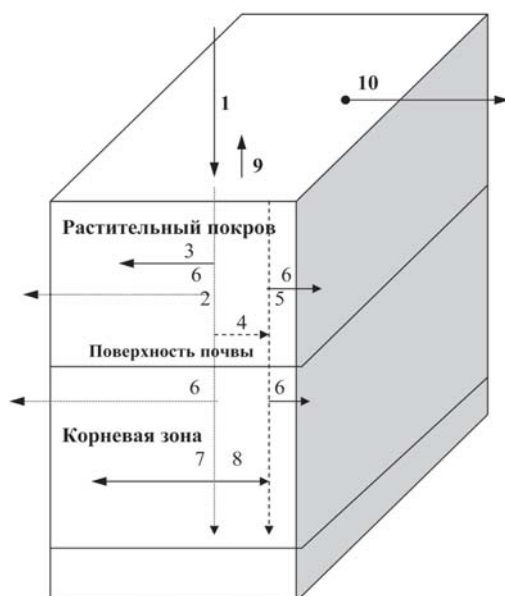
Таблица 2. Сравнительная характеристика влияния применения пестицида на тест-объект

Характер деградации пестицида	Количественные показатели деградации пестицида k (n=0,5) ¹	Производственная концентрация	Временной период, сут.	Количество особей от исходного к концу временного периода, %
Экспоненциальный	0,02	СК50	80	120
	0,02	СК90	80	15
	0,01	<СК50	80	170
	0,01	СК50	80	69
	0,01	СК90	59	<1
	0,001	СК50	80	11
	0,001	СК90	45	<1
Степенной	0,02	СК50	80	14
	0,02	СК90	46	<1

¹ $k = \ln 2 / T_{50}$ — относительная скорость разложения пестицида (T_{50} — период полураспада пестицида, сут.), n — показатель степени в уравнении кинетики дробного порядка

Очевидно, что подавление роста происходит при производственной концентрации препарата, уничтожающей 90% организмов, подвергшихся химической обработке, независимо от характера последствия. Только при относительной скорости разложения пестицида $k > 0,02$ и временном периоде больше 80 сут. можно ожидать увеличение численности тест-объекта. При значительно меньшей первоначальной концентрации пестицида, равной СК₅₀, характер последствия играет решающую роль, причем качественно картина изменения количества организмов одинакова при уменьшении коэффициентов k и n. Отметим, что все расчеты проводили при постоянной (и достаточно небольшой) относительной естественной скорости роста организмов. При увеличении относительной естественной скорости роста организмов скорость и характер разложения будут оказывать влияние на подавление роста организмов и при больших начальных концентрациях пестицида.

Суммируя вышесказанное, можно сформулировать основные принципы моделирования поведения пестицидов в агроценозе. Модели должны включать небольшое число доступных и хорошо интерпретируемых экологических и экотоксикологических параметров, отражающих влияние различных групп факторов на всю систему в целом. Значения параметров, полученных в лабораторных условиях,



Процессы, определяющие поведение пестицидов в системе растение-почва: 1 — наземная обработка посева, 2 — передвижение пестицида в растительном покрове и почве, 3 — перехват листовой поверхностью, 4 — абсорбция листовой поверхностью, 5 — перемещение пестицида в растении, 6 — деградация, 7 — сорбция почвой, 8 — поглощение корневой системой растения, 9 — испарение, 10 — снос при обработке

могут использоваться при моделировании поведения пестицидов в агроценозе с учетом неоднородности среды. Детализация моделей, описывающих связи между пестицидом и обрабатываемой сельскохозяйственной культурой, пестицидом и вредным организмом, будет зависеть от обеспечения научно-теоретической и экспериментальной информацией. Модели должны быть достаточно гибкими. По мере углубления наших знаний структура моделей должна легко видоизменяться. Наконец, субмодель роста и развития защищаемой культуры должна быть неотъемлемой частью модели, ориентированной на решение тактических задач химической защиты растений.

Как подтвердили многочисленные работы теоретического и практического характера, динамические модели детерминированного типа, относящиеся к классу моделей с распределенными параметрами, наиболее приспособлены для унифицированного описания функционирования сложных систем. В предлагаемых нами имитационных моделях учитывается как детерминированная, так и статистическая составляющие в поведении пестицидов в агроценозе, что является отражением гетерогенности среды и лучше соответствует характеру изучаемого объекта.

Таким образом, на основе системного подхода построены модели взаимодействия пестицидов с растительностью, почвой и объектом-мишенью, представляющие собой не набор эмпирических соотношений, а являющиеся компонентами интегральной динамической модели поведения пестицидов в агроценозе. Предложен новый подход к построению токсикологических моделей взаимодействия пестицидов с объектами-мишенями с использованием моделей поведения пестицидов в почве и растительности. **□**