

Drogen, Herbizide und numerische Simulation

Peter Benner, Hermann Mena, René Schneider

Die kolumbianische Regierung versprüht Unkrautbekämpfungsmittel (Herbizide) über Coca-Feldern, um die Drogenproduktion im Land zu reduzieren. Sprühverwehungen entlang der Grenze Kolumbiens zu Ecuador wurden zu einem internationalen Streitfall. Wir haben ein mathematisches Modell für die Ausbreitung der Chemikalien in der Luft entwickelt, das es uns ermöglicht, das Phänomen am Computer zu simulieren.

I Drogen und Herbizide

Die kolumbianische Regierung hat in der Vergangenheit das Breitbandherbizid Glyphosat über Coca-Feldern nahe der Grenze zu Ecuador versprüht,¹ um die Drogenproduktion im Land zu reduzieren. Glyphosat wurde im Jahr 1970 entdeckt und von der Firma Monsanto unter dem Namen Roundup auf den Markt gebracht [10]. Das Patent lief im Jahr 2000 aus. Seitdem wird das Herbizid von vielen Firmen produziert und ist unter verschiedenen Namen auf dem Markt erhältlich, beispielsweise als Buccaneer, Razor Pro, usw. In Kolumbien wird das Mittel schon seit einer Weile eingesetzt, verstärkt seit dem Start des *Plan Colombia* im Jahr 2000. Dabei handelte es sich um eine vom kolumbianischen Präsidenten Andrés Pastrana zwischen 1998 und 1999 ins Leben gerufene Initiative, die sich die Beendigung des bewaffneten Konflikts in Kolumbien und die Schaffung einer Strategie gegen den Kokainhandel zum Ziel setzte. Sie wurde von den USA durch militärische und finanzielle Hilfe zur Drogenbekämpfung unterstützt.

Ein kontroverser Bestandteil dieses Anti-Drogen-Programms war das Versprühen von Herbiziden aus der Luft mit dem Ziel, Coca-Felder zu zerstören. Dieses Vorgehen stieß auf heftige Kritik, da auf diese Art auch legal genutzte Felder in Mitleidenschaft gezogen wurden und sich bei der den Herbiziden ausgesetzten Bevölkerung Gesundheitsschäden beobachten ließen [11]. Sprühverwehungen auf ecuadorianischer Seite wurden für die Bevölkerung der Grenzregion zu einem großen Problem. Die negativen Auswirkungen auf Gesundheit und Landwirtschaft konnten beobachtet und durch intensive Studien bestätigt werden (siehe z. B. [1]). Daher verständigten sich Kolumbien und Ecuador im Jahr 2005 darauf, den Einsatz von Chemikalien innerhalb eines zehn Kilometer breiten Korridors entlang der Grenze zu unterlassen (siehe Abbildung 1). Dennoch zeigten auf ecuadorianischem Gebiet vorgenommene Messungen, dass nach wie vor erhebliche Mengen an Glyphosat-Dunst nach Ecuador geweht wurden. Im Jahr 2007 wurde der Einsatz von Glyphosat ganz eingestellt, und ein Verfahren vor dem internationalen Gerichtshof eingeleitet. Der Fall wurde



Abbildung 1. Illustration des 10 km breiten Korridors entlang der ecuadorianisch-kolumbianischen Grenze (das Flugzeug ist nicht maßstabsgetreu)

im September 2013 mit einer Vereinbarung beigelegt, die „Vorgehensweisen für den Herbizideinsatz durch Kolumbien festlegt, die Verpflichtung der beiden Regierungen zum Informationsaustausch festhält, und ein Verfahren zur Beilegung von Streitigkeiten etabliert“ [7]. Kolumbien stimmte außerdem der Zahlung von 15 Millionen US-Dollar an Ecuador zu [5].

2 Einsatz von Sprays im Grenzgebiet

Spezielle Verfahren und Richtlinien für die Anwendung von Sprays sind vor allem in der Landwirtschaft entwickelt worden, um die Effektivität von Pflanzenschutzmitteln zu maximieren, und um die Risiken für Mensch und Umwelt zu minimieren. Im Falle der Anwendung von Sprays an der ecuadorianisch-kolumbianischen Grenze war es zum Teil nicht möglich, diese Vorgaben einzuhalten. So verhinderte die Topografie der Region die Einhaltung der vorgeschriebenen Maximal-Flughöhe während des Sprühens. Teilweise wurden die Richtlinien aber auch einfach nicht beachtet, wie zum Beispiel die Vorgaben zur Tröpfchengröße (siehe [1] und die darin angegebenen Referenzen). Auf Grund dieser Sachverhalte war es erforderlich, ein neues mathematisches Modell zu entwickeln (siehe Abschnitt 3). Dieses sollte in der Lage sein, die besonderen Sprühmethoden an der Grenze sowie die damit verbundenen technischen Schwierigkeiten (Größe der Sprühzone, die nötige Genauigkeit) zu beachten. Die meisten vorherigen Modelle, wie AgDrift [9], benötigen zumindest die folgenden Eingabedaten:

- Flugbedingungen,
- Art der Sprühdüsen,
- Verteilung der Tröpfchengröße,
- Materialeigenschaften des Sprays und
- Wetterbedingungen.

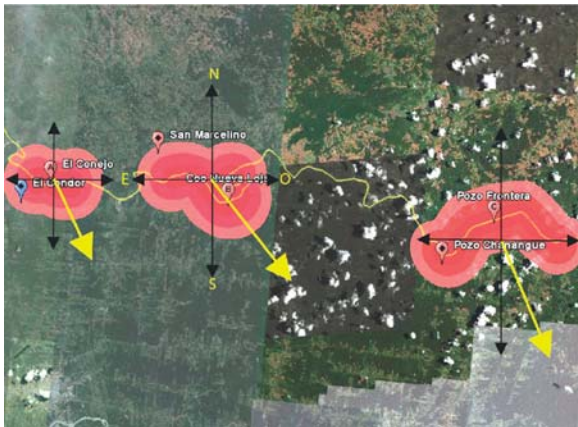


Abbildung 2. Veranschaulichung der untersuchten Grenzgebiete und der durchschnittlichen Windrichtung

Tabelle 1. Fläche, Lage und durchschnittliche Windgeschwindigkeit der untersuchten Gebiete

Ort	Fläche (km ²)	Breiten-grad	Längen-grad	Wind-geschwindigkeit (km/h)
El Conejo	8.8 × 10	0.23	-76.90	7
San Marcelino	12.9 × 10	0.24	-76.76	6
Chanangue	16.0 × 10	0.23	-76.60	5

Im Fall des Einsatzes an der Grenze von Ecuador zu Kolumbien sind (a), (b) und (c) unbekannt. Zudem sind (d) und (e) schwer einzuschätzen, da die genaue Zusammensetzung des Herbizids nicht bekannt ist und sich keine Wetterstationen in der Nähe der Einsatzgebiete des Sprays befinden. Diese Gebiete wurden in Zusammenarbeit mit einem interdisziplinären Team aus Biologen, Ingenieuren und Geophysikern ausgewählt, die die Auswirkungen des Herbizideinsatzes auf Menschen, Tiere und Böden untersuchen wollten. Abbildung 2 zeigt die durchschnittliche Windrichtung in diesen Gebieten. Tabelle 1 enthält die genaue Lage der Gebiete.

Es folgen einige international gültige Richtlinien für das Versprühen aus der Luft [6]:

Man sollte

- immer die Windrichtung überprüfen,
- einen Mindestabstand von 46 m zu ungeschützten Personen einhalten,
- die größtmögliche Tröpfchengröße verwenden (die empfohlene Mindestgröße der Tröpfchen ist 500 μm),
- nur bei Windgeschwindigkeiten zwischen 4,7 und 16,2 km/h sprühen,
- möglichst nicht bei niedriger Luftfeuchtigkeit oder hoher Temperatur sprühen,
- nicht bei Inversionswetterlagen sprühen und
- eine maximale Flughöhe von 25 m während des Sprühens nicht überschreiten.

Im untersuchten Fall an der kolumbianisch-ecuadorianischen Grenze betrug die durchschnittliche Tröpfchen-

größe 150 μm , die Flughöhe während des Sprühens betrug bis zu 80 m [1], und in einigen Gebieten war die Luftfeuchtigkeit zu gering und die Temperatur zu hoch.

3 Mathematisches Modell

Unser Ziel war es, echte Messdaten mit unserem mechanistischen Verständnis von Sprühverwehungen in Verbindung zu bringen. Dafür benötigten wir ein mathematisches Modell, um die Messdaten in die Sprache der Mathematik zu übersetzen und mithilfe der Statistik und partieller Differentialgleichungen auszuwerten. Wir haben versucht, Muster in den Daten zu erkennen und daraus neue Erkenntnisse über den zugrundeliegenden Prozess zu gewinnen. Die Genauigkeit eines solchen Modells hängt natürlich von der Qualität der Daten und von den bei der Modellbildung gelegten Schwerpunkten ab, also davon, welche Aspekte als wichtig eingestuft werden und welche nicht.

Die meisten bisher durchgeführten Studien über Sprühverwehungen haben sich auf das Ausmaß der Verwehungen nahe der besprühten Felder unter verschiedenen Wetterbedingungen und Sprühmethoden konzentriert. Wenn wir ein mathematisches Modell für das spezielle Sprühverfahren von Glyphosat an der kolumbianisch-ecuadorianischen Grenze erstellen wollen, dann muss es in der Lage sein, folgende Kriterien zu berücksichtigen: Geringe Tröpfchengröße, Diffusion und Transport sind die dominierenden Phänomene, die darzustellenden Gebiete sind deutlich größer als die Sprühquellen, die Sprühhöhe liegt über der empfohlenen Maximalhöhe (25 m), was stärkere Verdunstung und Verwehung zur Folge hat, und viele weitere Parameter sind unbekannt.

Wenn wir die vollständige physikalische Dynamik des Sprays darstellen wollten, dann müssten wir die Navier-Stokes-Gleichungen lösen, ein sehr kompliziertes System partieller Differentialgleichungen. Selbst mit der gegenwärtig verfügbaren Computerleistung ist dies in einer gekoppelten Simulation mit den zugrundeliegenden Konvektions-Diffusionsgleichungen extrem aufwendig und ohne Einsatz von Supercomputern kaum möglich. Stattdessen schlagen wir ein vereinfachtes Modell zur qualitativen und quantitativen Beschreibung der Sprühverwehungen vor. Wir gehen davon aus, dass die aus dem Flugzeug ausgestoßene Spraywolke aus Tröpfchen unterschiedlicher Größe besteht, deren Verteilung von den Durchführungsbedingungen abhängt, z. B. der Zerteilung von Tröpfchen in Folge von Turbulenzen.

Die größeren Tröpfchen werden innerhalb eines kleinen Radius zu Boden fallen. Deshalb sind sie für das zu untersuchende Phänomen großflächiger Sprühverwehungen über eine Distanz von mehr als 10 km nicht relevant.

Winzige Tröpfchen hingegen besitzen eine sehr geringe Masse im Verhältnis zu ihrer Oberfläche. Deshalb fallen

sie nicht einfach herunter, sondern verhalten sich eher wie in der Luft aufgelöste Nebeltröpfchen. Ihre Bewegung wird in erster Linie durch die Bewegung der sie umgebenden Luft bestimmt. Vom Wind getragen können diese Tröpfchen weite Distanzen zurücklegen.

Da wir nicht in erster Linie an der Bewegung einzelner Tröpfchen interessiert sind, fokussieren wir uns auf die Konzentration der Tröpfchen und des Herbizids in der Luft. Die Dynamik der Konzentration über lange Zeiträume wird vor allem durch zwei Effekte bestimmt:

1. Transport (Konvektion) in Folge der mittleren Strömungsgeschwindigkeit der umgebenden Luft und durch den (sehr langsamen) Fall der kleinen Tröpfchen, sowie
2. Diffusion, d. h. lokaler Ausgleich von Konzentrationsunterschieden auf Grund geringfügiger zufälliger Bewegungen der Teilchen und von Turbulenzen der umgebenden Luft (Geschwindigkeitsschwankungen auf kleinem Raum und auf kurzen Zeitskalen).

Das führt zu der folgenden *Konvektions-Diffusions-Gleichung*,

$$f = \frac{\partial}{\partial t} c - k_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} c - k_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} c - k_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} c + b_x \frac{\partial}{\partial x} c + b_y \frac{\partial}{\partial y} c + b_z \frac{\partial}{\partial z} c \quad (1)$$

in $\Omega \times (0, T)$.

Hier verwenden wir die folgenden Bezeichnungen:

- $f = f(x, y, z, t)$ ist die Ausstoßrate des Flugzeugs,
- $c = c(x, y, z, t)$ ist die unbekannte Konzentration als Funktion des Ortes (x, y, z) und der Zeit t ,
- $k_x, k_y, k_z > 0$ sind die Diffusionskonstanten,
- b_x, b_y, b_z sind die Einträge des Windgeschwindigkeitsvektors,
- Ω ist der für die Sprühverwehung in Frage kommende räumliche Bereich und
- T ist die maximale Simulationszeit.

Eine vollständige Beschreibung der Gleichung findet sich in [3, 4].

Unser Modell (1) ist eine partielle Differentialgleichung (PDE), d. h. eine Gleichung, die die partiellen Ableitungen einer Funktion in Beziehung zur Funktion selbst setzt. Die Mathematik verfügt über relativ einfache Methoden, die zeigen, dass diese Gleichung eine eindeutige Lösung besitzt, aber es ist überhaupt nicht einfach, diese Lösung auch zu berechnen. Jedoch verfügen wir über numerische Methoden, mit deren Hilfe sich die Lösung ausreichend genau annähern lässt. Die Anwendung dieser Methoden führt zu einer *numerischen Simulation* der Phänomene. Im nächsten Abschnitt zeigen wir einige Ergebnisse der Simulationen.

Als partielle Differentialgleichung ist unser Modell (1) im Prinzip von der gleichen Bauart wie das vollständige physikalische Modell (mehrphasige Navier-Stokes-Gleichung). Jedoch ist es eine viel einfachere Variante ei-

ner PDE. Die numerische Approximation von Lösungen des vereinfachten Modells (1) benötigt viel weniger Rechenoperationen und Speicher als das vollständige physikalische Modell. Das macht unser Modell (1) praktisch lösbar, während eine Lösung des vollständigen physikalischen Systems mit herkömmlicher Rechentechnik unerreichbar ist und auf absehbare Zukunft auch bleiben wird.

4 Numerische Simulationen

Zur Illustration präsentieren wir eine mithilfe der Software FEINS für finite Elemente³ [8] erstellte Simulation auf einem zweidimensionalen Gebiet (siehe [3, 4] für eine detailliertere Beschreibung). Wir betrachten das Gebiet um Chanangue (siehe Tabelle 1), ein rechteckiges Gebiet mit einer Größe von $16 \text{ km} \times 10 \text{ km}$ und einer Windgeschwindigkeit von 5 km/h . Abbildung 3 zeigt die Simulation der Sprühverwehungen zu verschiedenen Zeiten. Zu Beginn der Simulation kann man hohe Konzentrationen des Herbizids in der Nähe des Flugzeugs beobachten. Mit fortschreitender Zeit verteilt sich das Herbizid über eine größere Fläche bei geringerer Konzentration (Dispersion und Diffusion), während es durch den Wind transportiert wird (Konvektion).⁴

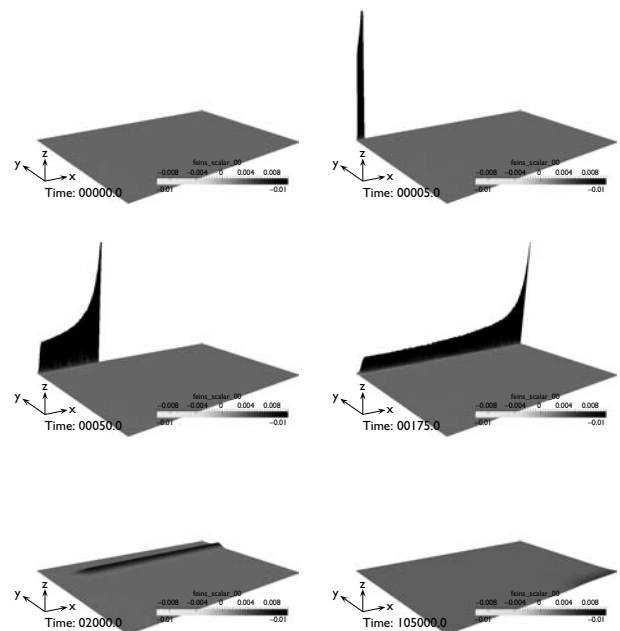


Abbildung 3. Simulation der Sprühverwehungen auf einem $16 \text{ km} \times 10 \text{ km}$ großen Gebiet: Herbizid-Konzentration c in dem Gebiet zu verschiedenen Zeitpunkten

5 Schlussfolgerungen

Die wesentlichen Eingangsgrößen unseres Modells müssen geschätzt werden. Beispielsweise sind die Wetterbedingungen nur in Form von Durchschnittswerten nahe gelegener Orte vorhanden. Der daraus resultieren-

de Mangel an verlässlichen Informationen und die vorgegenommenen Vereinfachungen begrenzen die Genauigkeit der Ergebnisse. Dennoch ermöglicht es das Modell, bestimmte Parameter, z. B. den Einfluss der Ausstoßposition des Sprays auf die Sprühverwehungen, zu untersuchen. Insgesamt zeigt dieses Projekt, dass angewandte und numerische Mathematik nützlich sein können, um Fragen von gesellschaftlicher Relevanz anzugehen, und sogar um politische Streitigkeiten auf internationalem Level beizulegen. Das Projekt hatte den wichtigen Nebeneffekt, den Stand der Forschung in angewandter Mathematik in Ecuador voranzubringen, einem Land in dem die Mathematik bis jetzt noch keinen überragenden Ruf genießen konnte.

Danksagung. Die Autoren danken Felix Nüske von imaginary.org für die gelungene Übersetzung des englischsprachigen Artikels in die deutsche Sprache.

Anmerkungen

- Über die aktuelle Situation hinsichtlich des Versprühens von Glyphosat liegen uns keine gesicherten Erkenntnisse vor.
- Da c eine Funktion mehrerer Variablen ist, kann sie partiell nach x, y, z und t abgeleitet werden. Wir bezeichnen diese Ableitungen mit $\frac{\partial}{\partial x}c, \frac{\partial}{\partial y}c, \frac{\partial}{\partial z}c$ und $\frac{\partial}{\partial t}c$.
- Nähere Informationen zur Methode der finiten Elemente (FEM) finden sich z. B. unter <https://de.wikipedia.org/wiki/Finite-Elemente-Methode>
- Im Moment arbeiten wir an einer dreidimensionalen Simulation mit realistischen Parametern, siehe [2].

Literatur

- [1] R. Ávila, E. Bravo, C. Paz y Miño, and J. Valencia. *El sistema de aspersiones aéreas del Plan Colombia y sus impactos sobre el ecosistema y la salud en la frontera ecuatoriana*. Manthra Editores, Quito-Ecuador, 1st edition, 2007.
- [2] P. Benner, J. Lang, H. Mena, and R. Schneider. 3D simulation for the glyphosate aerial spray drift at the Ecuador-Colombia border. In *Vorbereitung*.
- [3] P. Benner, H. Mena, and R. Schneider. Modeling glyphosate aerial spray drift at the Ecuador-Colombia border. *Applied Mathematical Modelling*, available online 18 June 2015. DOI: 10.1016/j.apm.2015.04.057.
- [4] P. Benner, H. Mena, and R. Schneider. *Modelo para las aspersiones con glifosato: frontera Ecuador-Colombia*. Shaker-Verlag, Aachen, Germany, 2014. 208 pages.
- [5] P. Jaramillo-Viteri and C. Kraul. Los Angeles Times. Colombia to pay Ecuador 15 million to settle coca herbicide suit. Website (16/09/2013), 2013.
- [6] G. Matthews. *Pesticide Application Methods*. Longman Scientific & Technical, Essex, England, 1992.
- [7] International Court of Justice. Press Release No. 2013/20 (17/09/2013), Case removed from the Court's List at the request of the Republic of Ecuador. Website, 2013. <http://www.icj-cij.org/docket/files/138/17526.pdf>.
- [8] R. Schneider. FEINS: Finite element solver for shape optimization with adjoint equations. In *Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2010*, Mathematics in Industry. Springer, 2011. Software verfügbar unter <http://www.feins.org/>.
- [9] M. Teske, S. Bird, D. Esterly, T. Curbishley and S. Ray, and S. Perry. AgDRIFT: a model for estimating near-fieldspray

drift from aerial applications. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 21(3):659–671, 2002.

- [10] Franz J.E. US patent 3799758. N-phosphonomethyl-glycine phytotoxicant compositions. herausgegeben 1974-03-26, zugewiesen an Monsanto Company.
- [11] Wikipedia. Plan colombia. Website. http://en.wikipedia.org/wiki/Plan_Colombia.

Prof. Dr. Peter Benner, Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Sandtorstraße 1, 39106 Magdeburg benner@mpi-magdeburg.mpg.de

Dr. Hermann Mena, Numerische Analysis, Universität Innsbruck, Technikerstraße 13, 6020 Innsbruck. hermann.mena@uibk.ac.at

Dr. Rene Schneider, rene.schneider@feins.org

Peter Benner hat an der RWTH Aachen Mathematik studiert. 1997 Promotion, 2001 Habilitation am Zentrum für Technomathematik der U Bremen. Seit 2010 Wissenschaftliches Mitglied und Direktor am Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg, Leitung der Abteilung „Computational Methods in Systems and Control Theory“. Hauptforschungsinteressen: numerische lineare und multilineare Algebra, numerische Methoden in der System- und Regelungstheorie, Modellordnungsreduktion dynamischer Systeme, Optimierung und Steuerung partieller Differentialgleichungen, Entwicklung effizienter Algorithmen für moderne Computerarchitekturen und deren Umsetzung in mathematische Software.



Hermann Mena ist Autor zweier Bücher und zahlreicher wissenschaftlicher Publikationen. PhD in Mathematik (2007), PostDoc an der TU Chemnitz, Associate Professor an der Escuela Politecnica Nacional (Ecuador). Gastwissenschaftler an vielen Universitäten (u. a. am MIT). Seit 2013 Assistant Professor an der U Innsbruck, wo er gerade an seiner Habilitation arbeitet. Forschungsinteressen u. a.: angewandte Mathematik, numerische Analysis, Computational Science, lineare quadratische Optimierung, fuzzy methods in der Ökonomie.



Dr. René Schneider, geb. 1977. Von 1997 bis 2002 Studium Technomathematik an der TU Chemnitz. Anschließend Promotion an der University of Leeds, School of Computing, 2006. Von 2005 bis 2015 TU Chemnitz, erst als wissenschaftlicher Mitarbeiter, später Akademischer Assistent. Vertretung des Lehrstuhls Numerische Analysis an der TU Dresden 2011 bis 2012.



Schnappschüsse moderner Mathematik aus Oberwolfach werden von Teilnehmerinnen und Teilnehmern des wissenschaftlichen Programms des Mathematischen Forschungsinstituts Oberwolfach (MFO) geschrieben. Das Schnappschuss-Projekt hat zum Ziel, Verständnis und Wertschätzung für moderne Mathematik und mathematische Forschung in der allgemeinen Bevölkerung weltweit zu fördern. Es begann als Teil des Projekts „Oberwolfach trifft IMAGINARY“, welches von der Klaus Tschira Stiftung gefördert wird. Das Projekt wurde auch von der Oberwolfach Stiftung sowie vom MFO unterstützt. Alle Schnappschüsse können unter www.imaginary.org/snapshots sowie unter www.mfo.de/snapshots abgerufen werden.

Editorin: Lea Renner, junior-editors@mfo.de
 Chefeditorin: Dr. Carla Cederbaum, cederbaum@mfo.de
 Direktor: Prof. Dr. Gerhard Huisken

Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach gGmbH, Schwarzwaldstraße 9–11, 77709 Oberwolfach

Lizenz: Creative Commons BY-NC-SA 3.0. DOI: 10.14760/SNAP-2014-010-DE