

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.

1 Drogen und Herbizide

Die kolumbianische Regierung hat in der Vergangenheit das Breitbandherbizid Glyphosat über Coca-Feldern nahe der Grenze zu Ecuador versprüht, 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

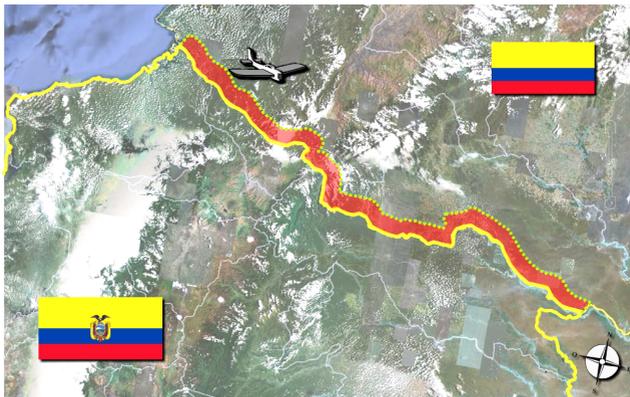


Abbildung 1: Illustration des 10 km breiten Korridors entlang der ecuadorianisch-kolumbianischen Grenze (das Flugzeug ist nicht maßstabsgetreu)

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 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:

- a) Flugbedingungen,
- b) Art der Sprühdüsen,
- c) Verteilung der Tröpfchengröße,
- d) Materialeigenschaften des Sprays und
- e) Wetterbedingungen.

Ort	Fläche (km ²)	Breitengrad	Längengrad	Wind (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

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

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

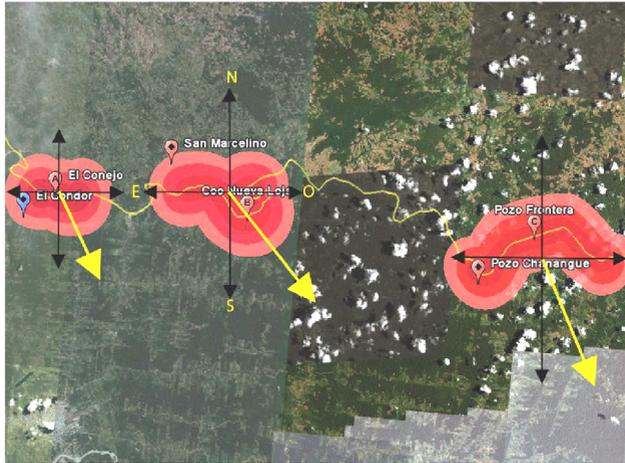


Abbildung 2: Veranschaulichung der untersuchten Grenzgebiete und der durchschnittlichen Windrichtung

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

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

Im untersuchten Fall an der kolumbianisch-ecuadorianischen Grenze betrug die durchschnittliche Tröpfchengröße $150 \mu\text{m}$, 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-ecadorianischen 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 [4, 3].

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 einer PDE. Die

[□] 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 $\frac{\partial}{\partial t}c$.

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 Elemente^[2] [8] erstellte Simulation auf einem zweidimensionalen Gebiet (siehe [4, 3] 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).^[3]

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 resultierende Mangel an verlässlichen Informationen und die vorgenommenen 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.

^[2] Nähere Informationen zur Methode der finiten Elemente (FEM) finden sich z. B. unter <https://de.wikipedia.org/wiki/Finite-Elemente-Methode>

^[3] Im Moment arbeiten wir an einer dreidimensionalen Simulation mit realistischen Parametern, siehe [2].

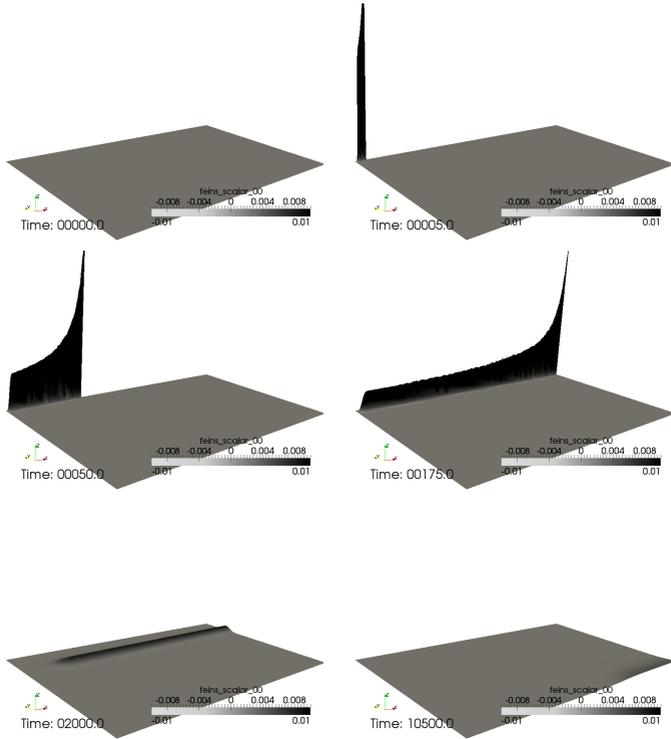


Abbildung 3: Simulation der Sprühverwehungen auf einem $16 \text{ km} \times 10 \text{ km}$ großen Gebiet: Herbizid-Konzentration c in dem Gebiet zu verschiedenen Zeitpunkten

Danksagung

Dieser Artikel wurde durch das Mathematics Translations in Europe (MaTiE) Projekt von Mathematics in Europe in Kollaboration mit IMAGINARY übersetzt. Das Projekt hat Unterstützung von der Münchner Rück. Sie können alle übersetzten Artikel auf www.mathematics-in-europe.eu finden.

Literatur

- [1] R. Ávila, E. Bravo, C. Paz y Miño und J. Valencia, *El sistema de aspersiones aéreas del Plan Colombia y sus impactos sobre el ecosistema y la salud en la frontera ecuatoriana*, 1st Aufl., Manthra Editores, Quito-Ecuador, 2007.

- [2] P. Benner, J. Lang, H. Mena und R. Schneider, *3D simulation for the Glyphosate Aerial Spray Drift at the Ecuador-Colombia border*, In preparation.
- [3] P. Benner, H. Mena und R. Schneider, *Modeling Glyphosate Aerial Spray Drift at the Ecuador-Colombia Border*, MPI Magdeburg Preprint MPIMD/14-08, April 2014, Available from <http://www.mpi-magdeburg.mpg.de/preprints/>.
- [4] ———, *Modelo para las aspersiones con glifosato: frontera Ecuador-Colombia*, Shaker-Verlag, Aachen, Germany, 2014, ISBN 978-3-8440-3061-7, 208 pages.
- [5] P. Jaramillo-Viteri und 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*, Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2010, Mathematics in Industry, Springer, 2011, Software available at <http://www.feins.org/>.
- [9] M. Teske, S. Bird, D. Esterly, T. Curbishley and S. Ray und S. Perry, *AgDRIFT: a model for estimating near-fieldspray drift from aerial applications*, Environmental Toxicology and Chemistry **21(3)** (2002), 659–671.
- [10] Franz J.E. US patent 3799758, *N-phosphonomethyl-glycine phytotoxicant compositions*, issued 1974-03-26, assigned to Monsanto Company.
- [11] Wikipedia, *Plan Colombia*, Website, http://en.wikipedia.org/wiki/Plan_Colombia.

Peter Benner *ist Direktor des Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme, Magdeburg und Professor an der TU Chemnitz.*

Hermann Mena *ist Assitant Professor in Numerischer Analyse and der Universität Innsbruck.*

René Schneider *ist Assistant Professor in Numerischer Analyse an der TU Chemnitz.*

Übersetzt aus dem Englischen von Feliks Nüske, überarbeitet von der Redaktion der "Mitteilungen der DMV"

Mathematische Gebiete
Numerik und Wissenschaftliches Rechnen

Verbindungen zu anderen Gebieten
Chemie und Geowissenschaften

Lizenz
Creative Commons BY-NC-SA 3.0

DOI
10.14760/SNAP-2014-010-DE

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
Carla Cederbaum
senior-editor@mfo.de

Mathematisches Forschungsinstitut
Oberwolfach gGmbH
Schwarzwaldstr. 9–11
77709 Oberwolfach
Deutschland

Direktor/in
Gerhard Huisken



Mathematisches
Forschungsinstitut
Oberwolfach



Klaus Tschira Stiftung
gemeinnützige GmbH



oberwolfach
FOUNDATION

IMAGINARY
open mathematics