

Pestizid-Schutzgebiet-Management (PuMa) –
Eine Webanwendung zur Ermittlung und Vermeidung des Eintrags
von Pflanzenschutzmitteln in aquatische Schutzgebiete

DBU-AZ 35922
Laufzeit: 1.7.2021 - 30.6.2023

SCHLUSSBERICHT

Leipzig, September 202

Prof. Dr. Matthias Liess, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Leipzig
Marco Foit, Softwareentwicklung, Leipzig

Projektkennblatt
der
Deutschen Bundesstiftung Umwelt



Az	35922/01	Referat	33/2	Fördersumme	123.460 €
----	-----------------	---------	-------------	-------------	------------------

Antragstitel **Pestizid-Schutzgebiet-Management (PuMa) – Eine Webanwendung zur Ermittlung und Vermeidung des Eintrags von Pflanzenschutzmitteln in aquatische Schutzgebiete**

Stichworte Pestizide, Eintragsmodell, Webanwendung
Aquatische Schutzgebiete, Simulation, Reduktionsmaßnahmen

Laufzeit	Projektbeginn	Projektende	Projektphase(n)
2 Jahre	1.7.2021	30.6.2023	x

Zwischenberichte	1 (30.6.2022)
------------------	---------------

Bewilligungsempfänger	Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH -UFZ Department System-Ökotoxikologie	Tel +49 341 2351578
		Fax
	Permoserstr. 15 04318 Leipzig	Projektleitung Prof. Dr. Matthias Liess
		Bearbeiter Matthias Liess Philipp Vormeier Bhaskar Majumder

Kooperationspartner Marco Foit, freiberuflicher Softwareentwickler, Leipzig

Zielsetzung und Anlaß des Vorhabens

Viele Studien zeigen, dass chemische Pflanzenschutzmittel auch über weite Distanzen transportiert werden können und so die Umwelt belasten. Auch entlegene Schutzgebiete sind davon betroffen und werden hierdurch beeinträchtigt, was insbesondere Insektenpopulationen nachhaltig schädigt. Dies konnte durch ein deutschlandweites Kleingewässermonitoring (KgM) bestätigt werden (Liess et al., 2021).

Das Ziel des Projekts PuMa bestand zum einen in der Entwicklung eines Modells zur Vorhersage des PSM-Eintrags in aquatische Schutzgebiete über weite Distanzen auf Basis der Messdaten des KgM. Und zum anderen in der Entwicklung einer Webanwendung, in der dieses Modell verwendet wird, um das ökologische Risiko eines PSM-Eintrags zu bewerten, einfache, beispielhafte PSM-Reduktionsmöglichkeiten zu simulieren und verschiedene landwirtschaftliche Szenarien miteinander zu vergleichen.

Darstellung der Arbeitsschritte und der angewandten Methoden

Für die Modellierung des PSM-Eintrags in aquatische Schutzgebiete wurden zunächst Monitoringdaten aus dem Kleingewässermonitoring und die Eingangsdaten des Modells aufbereitet. Hierzu wurden auf Basis von Landnutzungsdaten, PSM-Spritzserien ('Spritztagebücher') und Erhebungen zum deutschlandweiten Pestizideinsatz 'modellierte PSM-Applikationskarten' für die verwendeten Probenahmestellen erstellt. Zusätzlich erfolgte eine Datenaufbereitung zu chemischen Eigenschaften von PSM-Wirkstoffen und Wetterdaten für die betrachteten Probenahmestellen. Für die eigentliche Modellierung wurden die wahrscheinlich eingesetzten PSM-Aufwandmengen abhängig von Windrichtung und Entfernung gewichtet und zu einer Größe aggregiert (Drift Potential). Anschließend wurde das Modell unter Berücksichtigung weiterer Umweltparameter sowie chemischer Eigenschaften der PSM-Wirkstoffe mit linearer Mehrfachregression erzeugt.

Für die Webanwendung wurde nach einer Spezifikation von Modellalgorithmen und Modelldaten in einem iterativen Prozess zunächst ein erster funktionaler Prototyp entwickelt. Mit Hilfe dieses Prototypen wurde das Konzept der Webanwendung evaluiert und weiter ausgearbeitet. Nach dem Design der grafischen Benutzerschnittstelle und einer Ausarbeitung des Softwareentwurfs erfolgte schließlich die Implementierung einer ersten Version der Anwendung.

Ergebnisse und Diskussion

Mit der Modellierung des PSM-Eintrags in aquatische Schutzgebiete konnte ein Zusammenhang zwischen dem Einsatz chemischer Pflanzenschutzmittel in der Landwirtschaft und den in Kleingewässern gemessenen Pestizidkonzentrationen auch für große Distanzen gezeigt werden. Dabei zeigte sich dieser Zusammenhang deutlicher für Wirkstoffe mit hoher Wasserlöslichkeit und kleinem Dampfdruck.

Eine große Herausforderung für die Modellierung stellte die Datenbasis dar. Da flächendeckende Monitoringdaten zum Pestizideinsatz im Umkreis der untersuchten Probenahmestellen nicht zur Verfügung standen, musste für die Entwicklung des Eintragsmodells der wahrscheinliche PSM-Einsatz aus Erhebungen zur landwirtschaftlichen Praxis abgeleitet werden. Mit dem entwickelten 'Drift Potential Model' können zurzeit die Größenordnungen wahrscheinlicher Peak-Konzentrationen abgeschätzt werden. Um die Genauigkeit der Vorhersage zu erhöhen, wäre eine Verbesserung der Datenbasis und weitere Forschung zu potenziellen Einflussfaktoren nötig.

Mit einer ersten Version der Webanwendung PuMa können modellierte PSM-Einträge und Maßnahmen zur PSM-Reduktion simuliert und ökologisch bewertet werden. Durch den Einsatz einer interaktiven Karte im Zentrum der grafischen Benutzeroberfläche werden potenzielle Quellen und ökologische Risiken in einem räumlichen Zusammenhang veranschaulicht. Dies erlaubt ein exploratives Erarbeiten und Vergleichen verschiedener landwirtschaftlicher Szenarien und PSM-Reduktionsmöglichkeiten. Eine einfache ökologische Risikobewertung des PSM-Eintrags wird zurzeit mit Hilfe von Grenzwerten für Invertebraten, Algen und Fische vorgenommen.

Die Vorhersage des PSM-Eintrags ist zurzeit auf Schutzgebiete (und vergleichbare Naturflächen) beschränkt und basiert auf einem einzigen Vorhersagemodell. Die Integration weiterer Eintragspfade (z.B. Abschwemmung bzw. Runoff) und Indikatoren zur ökologischen Risikobewertung (z.B. zur Beurteilung der Biodiversität) ist zurzeit noch nicht möglich.

Öffentlichkeitsarbeit und Präsentation

Die Veröffentlichung der Ergebnisse der Modellierung wird vorbereitet. Für die Veröffentlichung der Webanwendung wurde eine einfache Website entworfen und umgesetzt (<https://puma-app.de>). Die Website umfasst einen erläuternden Text zum Hintergrund des Projekts, einen Button zum Starten der Anwendung, die Möglichkeit zur Kontaktaufnahme sowie Informationen zu Nutzungsbedingungen und Datenschutz. Eine erste Entwicklerversion der Webanwendung wurde auf dem Webserver installiert.

Fazit

Die Webanwendung PuMa zeigt das Potenzial GIS-basierter Software, um Risiken und Handlungsoptionen beim Umgang mit chemischen Pflanzenschutzmitteln zu demonstrieren (<https://puma-app.de>). Um die gegenwärtigen Limitierungen der Webanwendung zu überwinden, ist von den Kooperationspartnern der Ausbau der Anwendungssoftware im Rahmen eines Folgeprojekts (PuMa 2.0) geplant. Hierzu soll die Webapplikation durch die Integration zahlreicher Schnittstellen zu einer offenen, digitalen Plattform für Umweltforschung weiterentwickelt werden, die sich tief in das bestehende IT-Umfeld von Anwendern aus Forschung, Landwirtschaft, Verwaltung und Umweltschutz integrieren lässt.

Inhaltsverzeichnis

1	KURZFASSUNG DES BERICHTS	6
2	EINFÜHRUNG UND MOTIVATION	7
3	MODELLIERUNG DES PSM-EINTRAGS	7
3.1	Aufbereitung der Messdaten	7
3.1.1	Herkunft der Messdaten: Deutschlandweites Kleingewässermonitoring (KgM)	7
3.1.2	Auswahl der Probenahmestellen und Anwendungsbereich des Modells	8
3.2	Aufbereitung der Eingangsdaten	9
3.2.1	Aufbereitung von Landnutzungsdaten	10
3.2.2	Datenaufbereitung für modellierte PSM-Spritzserien.....	11
3.2.3	Datenaufbereitung für modellierte Pflanzenschutzmittel	12
3.2.4	Datenaufbereitung für modellierte PSM-Applikationskarten	13
3.2.5	Datenaufbereitung zu chemischen Eigenschaften von PSM-Wirkstoffen.....	14
3.2.6	Aufbereitung von Wetterdaten.....	14
3.3	Modellierung des PSM-Eintrags	15
3.3.1	Drift Potential.....	15
3.3.1.1	Gewichtungsfaktor Wind	15
3.3.1.2	Gewichtungsfaktor Entfernung.....	16
3.3.1.3	Maximaler Einflussradius.....	17
3.3.2	Fertigstellung des Eintragsmodells.....	17
4	ENTWICKLUNG DER WEBANWENDUNG	19
4.1	Prototyp und iterativer Entwicklungsprozess	19
4.1.1	R-Skript und Spezifikation von Modellalgorithmen und -daten	19
4.1.2	Erster funktionaler Prototyp der Webanwendung.....	19
4.1.3	Evaluierung des Prototyps und weitere konzeptionelle Ausarbeitung	20
4.1.4	Design der grafischen Benutzerschnittstelle.....	21
4.1.5	Ausarbeitung des Softwareentwurfs.....	22
4.1.6	Implementierung.....	23
4.2	Datenaufbereitung	24
4.2.1	PSM-Daten	24
4.2.2	PSM-Reduktionsmaßnahmen.....	24
4.2.3	Deutschlandweite Landnutzungsdaten	25
4.2.4	Kleingewässerabschnitte in NSG und Waldgebieten	25
4.3	Erste Version der Webanwendung	25
5	VERÖFFENTLICHUNG.....	27
6	FAZIT UND AUSBLICK.....	27
7	LITERATUR	29

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Beispiel für Probenehmer aus dem Projekt Kleingewässermonitoring (KgM)	8
Abbildung 2: Beispiel für eine ausgewählte Probenahmestelle. Zwischen Kleingewässerquelle und Probenahmestelle wird hier keine Landwirtschaft betrieben.	9
Abbildung 3: Modellierte PSM-Spritzserien (Model Spray Series) zur Beschreibung der Anwendungsintensität von Pestiziden für die Hauptanbaukulturen	11
Abbildung 4: Modellierte Pflanzenschutzmittel (Model PPP) mit ihrer Wirkstoffzusammensetzung für Hauptanbaukulturen	13
Abbildung 5: Illustration der Verknüpfung von Landnutzungsdaten, Model Spray Series und Model PPP zu modellierten PSM-Applikationskarten für alle Wirkstoffe und Probenahmen	14
Abbildung 6: Untersuchung verschiedener Potenzen der Entfernung. Hier für 78 Samples von 13 empirisch ausgewählten Substanzen und Exponenten im Intervall [-7; +4].	16
Abbildung 7: Modellergebnisse für KgM-Probenahmen aus den Jahren 2019 und 2021. Die Samples wurden auf Basis von Wasserlöslichkeit und Dampfdruck in drei Gruppen eingeteilt.....	18
Abbildung 8: Ein erster Prototyp der Webanwendung PuMa. Mithilfe des Prototyps konnten bereits verschiedene Anwendungsfälle für einen kleinen Kartenausschnitt simuliert und evaluiert werden.....	20
Abbildung 9: Grafisches Layout der Benutzerschnittstelle von PuMa mit einer Toolbar am linken und einer Sidebar für Einstellungs- und Ergebnis-Panel am rechten Rand des Anwendungsfensters. Im Zentrum der Programmoberfläche steht eine interaktive Karte.	21
Abbildung 10: Beispiele für einzelne Elemente der grafischen Benutzerschnittstelle von PuMa. Hier: Alle Panels der Sidebar. Zur besseren Orientierung wurde für jedes Panel ein eigenes Icon entwickelt.	22
Abbildung 11: Screenshot der PuMa-App. Im Beispiel wurden Schläge in Windrichtung ausgewählt, auf denen der Wirkstoff Acetamiprid eingesetzt wird.....	26
Abbildung 12: Ein Screenshot der PuMa-Website (puma-app.de).....	27

1 Kurzfassung des Berichts

Im Projekt wurde zum einen ein Vorhersage-Modell für den Eintrag chemischer Pflanzenschutzmittel in aquatische Schutzgebiete (*Drift Potential Model*) erarbeitet. Weiterhin wurde eine Webanwendung (*PuMa*), in der dieses Modell eingesetzt wird erstellt. Hiermit können PSM-Einträge berechnet werden, ökologische Risiken bewertet und benutzerfreundlich PSM-Reduktionsmöglichkeiten simuliert werden.

Mit dem *Drift Potential Model* konnte ein Zusammenhang zwischen dem Einsatz chemischer Pflanzenschutzmittel in der Landwirtschaft und den in Kleingewässern gemessenen Pestizidkonzentrationen für große Distanzen gezeigt werden. Der Zusammenhang zeigte sich um so deutlicher für Wirkstoffe mit hoher Wasserlöslichkeit und kleinem Dampfdruck. Das *Drift Potential Model* ermöglicht eine Abschätzung von Größenordnungen wahrscheinlicher Peak-Konzentrationen. Eine Veröffentlichung des Modells wird zurzeit vorbereitet.

Mit der Webanwendung *PuMa* können auf einer interaktiven Karte Beobachtungspunkte ausgewählt werden, für die dann PSM-Einträge mithilfe des *Drift Potential Model* berechnet und ökologisch bewertet werden. Die Webanwendung ermöglicht dabei verschiedene, beispielhafte Maßnahmen zur PSM-Reduktion zu simulieren. Auf der Karte werden hierzu potenzielle Quellen für den PSM-Eintrag und ökologische Risiken in einem räumlichen Zusammenhang veranschaulicht. Dies ermöglicht es Anwendern, verschiedene landwirtschaftliche Szenarien und PSM-Reduktionsmöglichkeiten zu erarbeiten und zu vergleichen. Die Webanwendung zeigt das Potenzial GIS-basierter Anwendungssoftware, um Risiken und Handlungsoptionen beim Umgang mit chemischen Pflanzenschutzmitteln zu demonstrieren. Die Webanwendung befindet sich zurzeit noch in der Entwicklung, eine erste Version kann über die Website des Projekts gestartet werden.

2 Einführung und Motivation

Viele Studien zeigen, dass per Abdrift Pflanzenschutzmittel (PSM) auch über weite Distanzen transportiert und in die Umwelt eingetragen werden können (D. Guerniche et al., 2016). Auch entlegene Schutzgebiete stehen somit unter einem ständigen anthropogenen Druck durch PSM. Insbesondere das Vorkommen von PSM in aquatischen Schutzgebieten führt zu einer Bedrohung von dort lebenden Arten. Besonders Insektenpopulationen werden so nachhaltig geschädigt wie durch ein deutschlandweites Monitoring bestätigt wurde (Liess et al., 2021). Dies widerspricht nicht nur den Zielen der Wasserrahmenrichtlinie, alle europäischen Oberflächengewässer in einen guten chemischen und ökologischen Zustand zu überführen (Berger et al., 2018), sondern führt auch zu einem Verlust vulnerabler Arten. Die Identifikation und das Verständnis sämtlicher Eintragspfade ist somit zwingende Voraussetzung, um gezielte Maßnahmen zu einer Reduktion des PSM-Eintrags in die Umwelt einleiten zu können.

Vor diesem Hintergrund entwickelten die Kooperationspartner im Rahmen des Projekts ein Modell zur Vorhersage des PSM-Eintrags in aquatische Schutzgebiete über den Luftweg (*Drift-Potential-Model*) und eine darauf basierende Webanwendung (*PuMa*), um das ökologische Risiko von PSM-Einträgen zu bewerten und einfache, beispielhafte PSM-Reduktionsmöglichkeiten zu simulieren.

Im vorliegenden Schlussbericht werden zunächst Arbeiten, Methoden und Ergebnisse beider Teile erläutert. Zum Schluss werden die Ergebnisse des Projekts noch einmal insgesamt diskutiert, um einen Ausblick auf ein mögliches Folgeprojekt zu geben.

3 Modellierung des PSM-Eintrags

3.1 Aufbereitung der Messdaten

3.1.1 Herkunft der Messdaten: Deutschlandweites Kleingewässermonitoring (KgM)

Ausgangspunkt für die Modellierung des PSM-Eintrags in aquatische Schutzgebiete waren deutschlandweite Pestizid-Messungen, die im Rahmen des Projekts Kleingewässermonitoring (KgM) durchgeführt wurden. Für das KgM wurden an 140 Probestellen in den Jahren 2018, 2019 und 2021 Messungen auf Pestizidrückstände vorgenommen und damit für über 100 Fließgewässerabschnitte der chemische und biologische Zustand erfasst. Im KgM wurden sowohl Schöpfproben als auch ereignisbasierte Wasserproben genommen. Die Ergebnisse des KgM zeigten, dass an über 73% der Probenahmestellen für mindestens einen Wirkstoff die regulatorisch akzeptablen Konzentrationen (RAK) überschritten wurden. Über 80 % der untersuchten Fließgewässerabschnitte erfüllten auf Basis des SPEAR-Index nicht die Qualitätskriterien für einen guten ökologischen Zustand (Liess et al., 2022).



Abbildung 1: Beispiel für Probennehmer aus dem Projekt Kleingewässermonitoring (KgM)

3.1.2 Auswahl der Probenahmestellen und Anwendungsbereich des Modells

Im Rahmen des KgM wurden an insgesamt 22 Probenahmestellen Rückstände von PSM-Wirkstoffen nachgewiesen, obwohl zwischen der Gewässerquelle und der Probenahmestelle keine Landwirtschaft betrieben wurde und auch keine Punktquelle für einen PSM-Eintrag verantwortlich war. Weil für diese Stellen, unter Berücksichtigung von Mindestabständen und Einzugsgebieten, ein Pestizideintrag durch Runoff oder direkte Abdrift über den Luftweg (während oder kurz nach der PSM-Anwendung) unwahrscheinlich ist, kann hier von einem Transportweg über größere Distanzen ausgegangen werden.



Abbildung 2: Beispiel für eine ausgewählte Probenahmestelle.
Zwischen Kleingewässerquelle und Probenahmestelle wird hier keine Landwirtschaft betrieben.

Zwischen Mitte April und Mitte Juli (Hauptausbringungszeitraum der Pestizide) wurden insgesamt 134 Schöpfproben und 36 ereignisbasierte Proben an diesen Stellen erhoben. 7 der 22 Gewässerstellen liegen direkt in Naturschutzgebieten und vier unmittelbar benachbart von Naturschutzgebieten nach den Kriterien des Bundesamts für Naturschutz (BfN). Für das im Rahmen des Projekts *PuMa* entwickelte Modell wurden alle Fließgewässerabschnitte einbezogen, die den zuvor genannten Kriterien entsprechen. Das wissenschaftliche Interesse und Ziel des Projekts *PuMa* bestand in der Entwicklung eines Modells zur Vorhersage des Eintrags von PSM-Wirkstoffen für Gewässerstellen mit vergleichbaren Eigenschaften.

3.2 Aufbereitung der Eingangsdaten

Um eine Korrelation gemessener Wirkstoffkonzentrationen mit der PSM-Anwendung in der Landwirtschaft zu untersuchen, lag ein Schwerpunkt bei der Datenaufbereitung darin, den landwirtschaftlichen PSM-Einsatz in der Umgebung der ausgewählten KgM-Messspunkte zum Zeitpunkt der Probenahmen möglichst genau zu bestimmen. Aufzeichnungen zur realen Pestizidanwendung in der Landwirtschaft lagen zu den ausgewählten Probenahmestellen und -zeitpunkten nicht vor oder waren für eine Modellierung der PSM-Drift über große Distanzen unzureichend (Daten nicht für alle Probenahmestellen und -jahre bzw. nicht für größere Radien vorhanden), so dass Daten zu einem wahrscheinlichen PSM-Einsatz aus

anderen Daten abgeleitet werden mussten. Die Entwicklung dieser *modellierten PSM-Anwendungsdaten* erfolgte dabei in drei Schritten:

- 1) In einem ersten Schritt wurde zu den ausgewählten Stellen und Probejahren des KgM-Projekts die wahrscheinliche landwirtschaftliche Nutzung in der Umgebung der Probenahmestelle bestimmt. Hierzu wurden für die Jahre 2018, 2019 und 2021 Auswertungen zur landwirtschaftlichen Nutzung des Thünen Instituts herangezogen, die aus einer systematischen Bildanalyse von Satellitenbildern (Blickensdörfer et al.) gewonnen wurden.
- 2) In einem zweiten Schritt wurden für die identifizierten Landnutzungsformen bzw. Anbaukulturen historische PSM-Spritztagebücher ausgewertet, um eine typische Intensität der PSM-Anwendung in Bezug auf verschiedene Pestizid-Arten (hier: Herbizide, Fungizide, Insektizide) im Verlauf eines Jahres zu bestimmen (*modellierte PSM-Spritzserie*).
- 3) In einem dritten Schritt wurden schließlich für alle identifizierten Anbaukulturen und Probejahre die wahrscheinlich eingesetzten PSM-Wirkstoffmengen auf der Grundlage der PAPA-Erhebungen des Julius Kühn Instituts (JKI) und der PSM-Datenbank des Bundesamts für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) ermittelt (*modellierte PSM-Wirkstoffmengen*).

Mit der Aufbereitung von Daten zur Beschreibung einer realistischen PSM-Anwendungspraxis für die Hauptanbaukulturen wurde nicht nur die Grundlage für die Modellierung des PSM-Eintrags über große Distanzen geschaffen. Die erzeugten Daten konnten auch dazu verwendet werden, um in der parallel entwickelten Webapplikation realistische Vorgabewerte für eine Anwendung des Modells bereitzustellen.

Neben den Daten zur wahrscheinlichen PSM-Anwendung in der Landwirtschaft wurden zusätzlich Daten zu den chemischen Eigenschaften der gemessenen PSM-Wirkstoffe aus der *Pesticide Properties DataBase (PPDB, IUPAC)* und Wetterdaten *des Deutschen Wetterdienstes (DWD)* für sämtliche Probenahmestellen und -zeitpunkte aufbereitet, um sie im Rahmen der Modellierung berücksichtigen zu können. Auf Details und Herausforderungen in der Datenaufbereitung wird in den folgenden Unterabschnitten näher eingegangen.

3.2.1 Aufbereitung von Landnutzungsdaten

Die Landnutzungsdaten des Thünen Instituts lagen jeweils für die Kalenderjahre der ausgewählten KgM-Probenahmen (2018, 2019 & 2021) als Rastergrafik (GeoTIFF) für das Gebiet der gesamten Bundesrepublik vor. Jeder Pixel einer Grafik entspricht dabei einer Fläche von ca. 100m² (Kantenlänge ca. 10m) und wurde in der Auswertung des Thünen Instituts jeweils einer landwirtschaftlichen Nutzungsform zugeordnet. In einem ersten Aufbereitungsschritt wurden die Kartendaten für sämtliche Probenahmestellen automatisiert mit Radien von zunächst 10km (später bis zu 100km) zugeschnitten. Die hierdurch extrahierten Kartenausschnitte wurden für erste Analysen vektorisiert, um Flächengrößen, geometrische Schwerpunkte, Entfernungen und Richtungen der identifizierten landwirtschaftlichen Flächen bzw. Schläge mit Bezug zum jeweiligen Messpunkt bestimmen zu können. Für spätere Analysen wurden die extrahierten Ausschnitte zusätzlich direkt als Rastergrafik verarbeitet, um genauere Auswertungen auf 'Pixelebene' zu ermöglichen.

3.2.2 Datenaufbereitung für modellierte PSM-Spritzserien

Um möglichst realistische Annahmen über den tatsächlichen PSM-Einsatz zum Zeitpunkt der Probenahmen treffen zu können, wurden insgesamt 831 dokumentierte PSM-Spritzserien ('Spritztagebücher') aus den Jahren 2006 bis 2019 ausgewertet. In einem ersten Ansatz wurden die in den PSM-Spritzserien verwendeten Wirkstoffmengen für jede Kultur und den gesamten Zeitraum mit verschiedenen Methoden aggregiert, um so wahrscheinliche Anwendungsmengen zum Zeitpunkt der Probenahmen zu ermitteln. Dieser Ansatz wurde jedoch zu einem späteren Zeitpunkt wieder verworfen, da ein nicht unerheblicher Anteil, der in den Daten aufgezeichneten PSM-Anwendungen zeitlich weit vor den Probenahmen dokumentiert wurde, und die verwendeten Wirkstoffe teilweise nicht mehr zugelassen waren. Ein einfaches Weglassen dieser Wirkstoffe wiederum hätte eine nicht akzeptable Verzerrung des berechneten Wirkstoffprofils zur Folge gehabt.

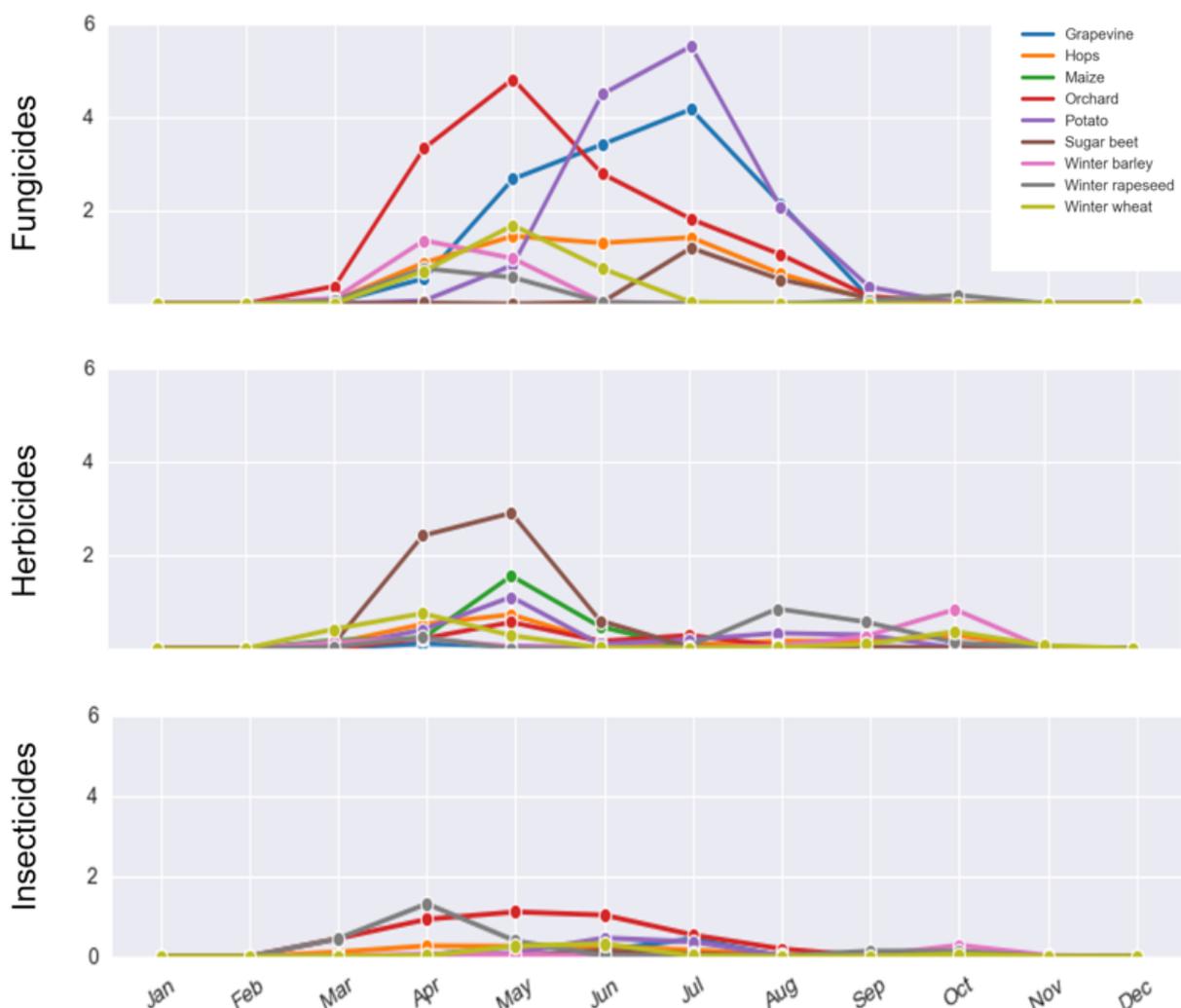


Abbildung 3: Modellierte PSM-Spritzserien (Model Spray Series) zur Beschreibung der Anwendungsintensität von Pestiziden für die Hauptanbaukulturen

Um die Daten dennoch für die Modellierung nutzbar zu machen, wurden in einem zweiten Ansatz die dokumentierten Wirkstoffmengen zu jeder Anbaukultur und jedem Pestizidtyp

(hier: Herbizide, Fungizide und Insektizide) und für jeden Ausbringungsmonat auf die jeweils zugelassene Aufwandmengen des Wirkstoffs bezogen ("normiert"). Hierdurch konnte die wahrscheinliche Anwendungsintensität und -häufigkeit eines Pestizidtyps für jede Hauptanbaukultur bestimmt werden. Damit konnte von konkreten PSM-Wirkstoffen abstrahiert und dennoch, in Annäherung, eine durchschnittliche landwirtschaftliche Praxis beschrieben werden. Die Zahl der "normierten Anwendungsdosen" pro Pestizidtyp und Monat konnte anschließend mit den durchschnittlich für eine Anbaukultur verwendeten Wirkstoffmengen im Jahr der Probenahme verknüpft werden (vgl. 3.2.3).

Die Datenaufbereitung dieser *modellierten Spritzserien (Model Spray Series)* gestaltete sich sehr aufwendig, da u.a. Bezeichnungen für die verwendeten Pflanzenschutzmittel und Wirkstoffe zuerst abgeglichen und vereinheitlicht werden mussten. Weil eine ausreichende Datenmenge nur für die Hauptanbaukulturen bestand, wurden Spritzserien für sonstige Anbaukulturen auf Basis der Hauptanbaukulturen modelliert.

3.2.3 Datenaufbereitung für modellierte Pflanzenschutzmittel

Als Datenbasis für die in den Probejahren durchschnittlich eingesetzten Wirkstoffmengen, wurden hauptsächlich die vom JKI veröffentlichten *Statistischen Erhebungen zur Anwendung von Pflanzenschutzmitteln in der Praxis (PAPA)* verwendet.

Die in den Erhebungen dokumentierten Wirkstoffmengen für die Hauptanbaukulturen wurden zuerst auf jeweils zugelassene Aufwandmengen bezogen ("normiert"). Anschließend wurden diese "normierten Wirkstoffmengen" für jeden Pestizidtyp (hier: Herbizide, Fungizide und Insektizide) und jede Anbaukultur auf eine "Anwendungsdosis" skaliert.

Bei sonstigen Anbaukulturen, die nicht Teil der PAPA-Erhebungen sind, wurde in ähnlicher Weise verfahren. Als Grundlage dienten hier jedoch die durchschnittlichen Wirkstoffmengen aller Pflanzenschutzmittel, die für die jeweilige Anbaukultur laut Pflanzenschutzmittel-Datenbank des BVL im Jahr der Probenahme zugelassen waren.

Um die Konfidenz in diesen Ansatz zu erhöhen wurde zusätzlich ein Abgleich mit den ebenfalls vom BVL veröffentlichten Jahresabsatzmengen für die in Deutschland verkauften Wirkstoffe vorgenommen. Zu jeder Anbaukultur und jedem Pestizidtyp ergab sich durch die beschriebene Skalierung der Wirkstoffmengen jeweils ein *modelliertes Pflanzenschutzmittel (Model PPP)*, das mit den Anwendungsdosen der modellierten PSM-Spritzserie (vgl. 3.2.2) monatsgenau verknüpft werden konnte.

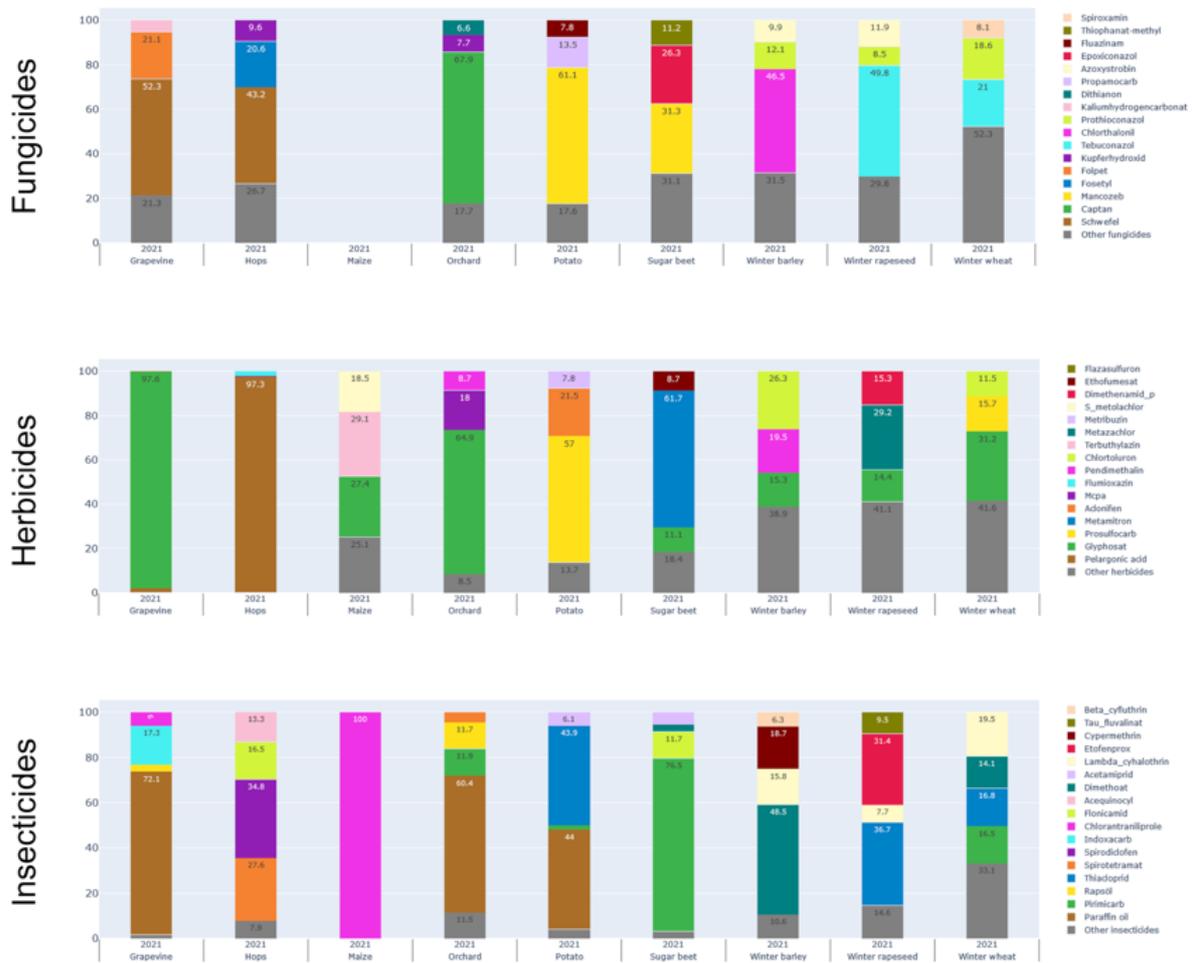


Abbildung 4: Modellerte Pflanzenschutzmittel (Model PPP) mit ihrer Wirkstoffzusammensetzung für Hauptbaukulturen

3.2.4 Datenaufbereitung für modellierte PSM-Applikationskarten

Die zuvor aufbereiteten Daten zur landwirtschaftlichen Landnutzung (3.2.1) wurden anschließend mit den *modellierten PSM-Spritzserien* (3.2.2, *Model Spray Series*) und *Pflanzenschutzmitteln* (3.2.3, *Model PPP*) zu *modellierten PSM-Applikationskarten* verknüpft. Diese Verknüpfung wurde monatsgenau für jede Probe der insgesamt 56 Substanzen, die an den 22 ausgewählten KgM-Probenahmestellen gemessen wurden, vorgenommen. Dies führte zur Generierung von über 1000 *modellierten PSM-Applikationskarten*.

Beispiel: NI_WabeREF 05/19

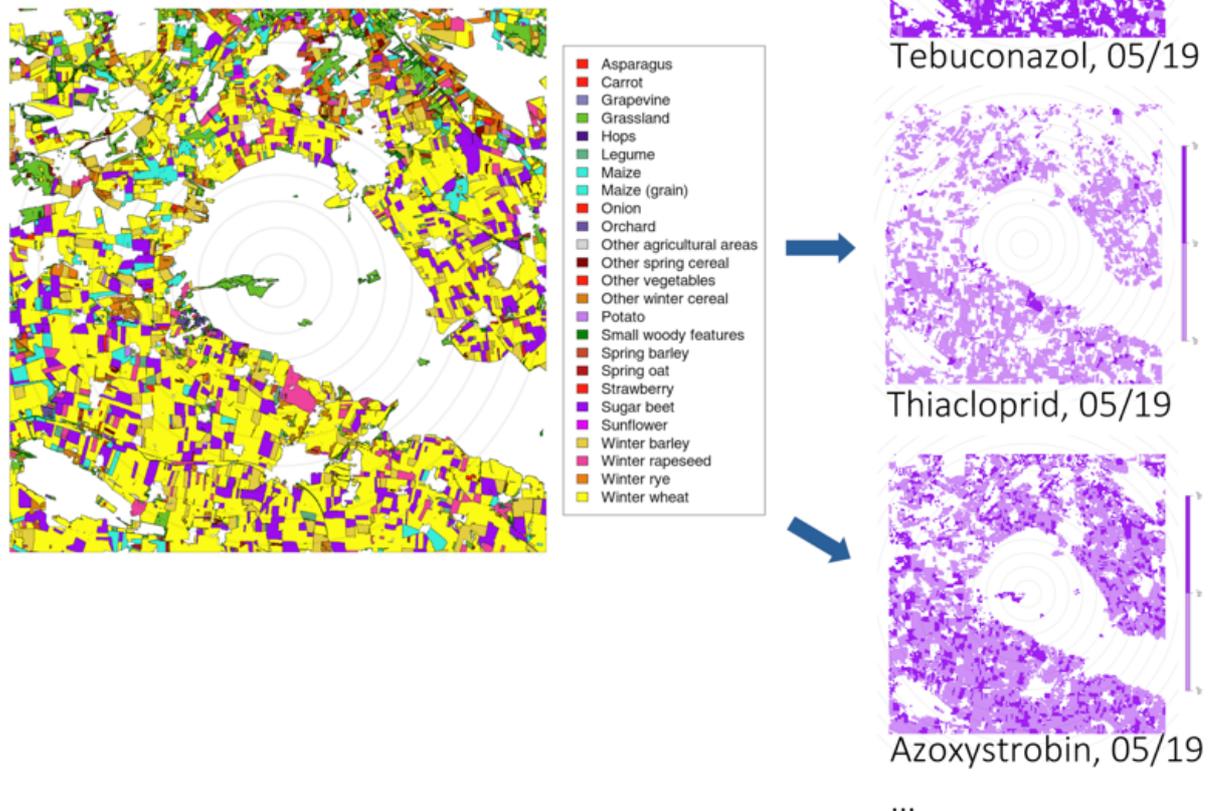


Abbildung 5: Illustration der Verknüpfung von Landnutzungsdaten, Model Spray Series und Model PPP zu modellierten PSM-Applikationskarten für alle Wirkstoffe und Probenahmen

3.2.5 Datenaufbereitung zu chemischen Eigenschaften von PSM-Wirkstoffen

Um die chemischen Eigenschaften der in den Proben detektierten Wirkstoffrückstände in die Modellierung mit einbeziehen zu können, wurden Daten aus der *Pesticide Properties DataBase (PPDB, IUPAC)* verwendet.

3.2.6 Aufbereitung von Wetterdaten

Um Windrichtung, Niederschlagsmenge und Temperatur am Tag der Probenahme in die Modellierung mit einbeziehen zu können, wurden Daten des Deutschen Wetterdienstes (DWD) aufbereitet. Hierzu wurden mit Hilfe des Webdienstes *Meteostat* zunächst automatisch die zu den Probenahmestellen nächstgelegenen Wetterstationen ermittelt, um anschließend die jeweiligen Wetterdaten abzurufen.

3.3 Modellierung des PSM-Eintrags

Das Forschungsziel des Projekts bestand in der Entwicklung eines einfachen Modells zur quantitativen Bestimmung der Größenordnungen des Pestizideintrags in aquatische Schutzgebiete über große Distanzen. Auch wenn durch die zuvor beschriebene Auswahl der Messdaten bereits mehrere Eintragspfade ausgeschlossen werden konnten (vgl. 3.1.2), war es ausdrücklich nicht das Ziel des Projekts, die genauen Transportwege bzw. Mechanismen des Transports von Pestiziden über große Distanzen zu erklären. Vielmehr ging es um die Untersuchung einfacher quantitativer Zusammenhänge zwischen den gemessenen Wirkstoffkonzentration und den wahrscheinlich in der Landwirtschaft ausgebrachten Wirkstoffmengen sowie weiterer Einflussfaktoren wie chemische Stoffeigenschaften und Umweltparameter.

3.3.1 Drift Potential

Um die PSM-Applikationskarten (vgl. 3.2.4) für die weitere statistische Auswertung nutzbar zu machen, wurden, auf der Basis einfacher Arbeitshypothesen, die georeferenzierten Aufwandmengen der Wirkstoffe für jede Applikationskarte anhand verschiedener Faktoren gewichtet und anschließend zu jeweils einer Größe aufsummiert. Als letztendliche Gewichtungsfaktoren wurden dabei die Aufwandmenge, die Flächengröße des landwirtschaftlichen Schlages, die Entfernung zwischen dem Ort der Ausbringung und der Probenahmestelle, sowie ein auf der vorherrschenden Windrichtung basierender Gewichtungsfaktor verwendet. Die resultierende, akkumulierte Größe wurde als *Drift Potential* bezeichnet.

Mit Hilfe einfacher linearer Regressionen wurde im Folgenden zunächst untersucht, inwieweit das *Drift Potential* allein bereits mit den jeweiligen Messwerten aus dem KgM korrelierte. Die Untersuchung ergab, dass zumindest für einzelne Wirkstoffe (z.B. Tebuconazol) und empirisch zusammengestellte Wirkstoffgruppen bereits eine starke Korrelation festgestellt werden konnte. Für diese Untersuchung programmierten die Kooperationspartner mehrere Tools und Skripte, um den Einfluss verschiedener Gewichtungsfaktoren auf die Korrelation mit dem *Drift Potential* zu testen. Mit diesem Software-gestützten Ansatz konnte der Einfluss einzelner Gewichtungsfaktoren für verschiedene Wertebereiche untersucht werden, um so, in einem iterativen Prozess, eine Parametrisierung dieser Faktoren vorzunehmen.

3.3.1.1 Gewichtungsfaktor Wind

Um die Gewichtung der PSM-Aufwandmengen in Abhängigkeit von der Windrichtung zu parametrisieren, wurden u.a. folgende Parameter genauer untersucht: Größe des Kreissektors, für den ein erhöhter Windeinfluss angenommen wird, Zeitraum vor der Probenahme zur Ermittlung einer mittleren Windrichtung, Mindestwindgeschwindigkeit und Art der Probenahme (Schöpfprobe bzw. Ereignisprobe). Dabei konnte zumindest für empirisch ausgewählte Wirkstoffe ein signifikanter Einfluss des Windes festgestellt werden. Eine größere Korrelation konnte dabei für Kreissektoren von ca. 30 Grad, einer mittleren Windrichtung für die letzten 5 Tage vor der Probenahme und einer Mindestwindgeschwindigkeit von 2m/s festgestellt werden. Der Einfluss der Windrichtung war zudem bei den untersuchten Wirkstoffen und Probenahmestellen für Schöpfproben etwas signifikanter als

für Ereignisproben. Ein Einfluss der Windrichtung konnte jedoch nicht für alle Substanzen und Probenahmestellen des KgM festgestellt werden. Weitere Forschung ist hier nötig, um weitere Faktoren näher zu untersuchen (z.B. Grad der Bewaldung und Hanglage).

3.3.1.2 Gewichtungsfaktor Entfernung

Um eine Gewichtung der Aufwandmengen der PSM-Wirkstoffe in Abhängigkeit von der Entfernung zur Probenahmestelle zu untersuchen, wurden die Aufwandmengen mit verschiedenen Potenzen der Entfernung gewichtet, um so das *Drift Potential* für einen (sinnvollen) Wertebereich von Exponenten zu berechnen. Anschließend wurden einfache, lineare Regressionsmodelle gebildet, um die KgM-Messdaten mit dem *Drift Potential* zu erklären. Dabei konnte für empirisch ausgewählte Gruppen von Wirkstoffen gezeigt werden, dass eine stärkere (negative) Korrelation mit den KgM-Messwerten vorliegt, sobald die Aufwandmengen mit der Entfernung zum Quadrat gewichtet werden ($1/d^2$). Es konnte jedoch nicht für alle Substanzen und Probenahmestellen des KgM ein gleichermaßen signifikanter Einfluss der Entfernung festgestellt werden.

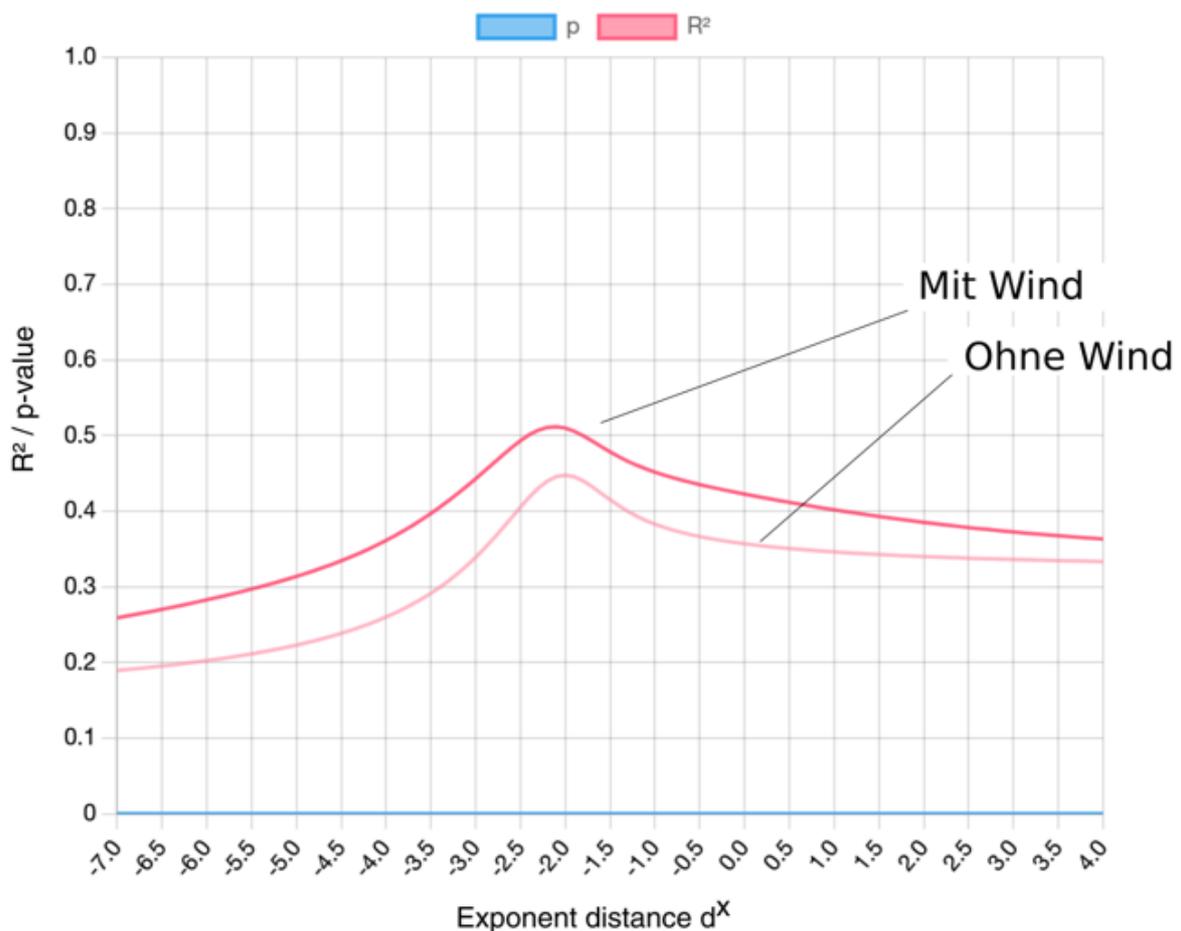


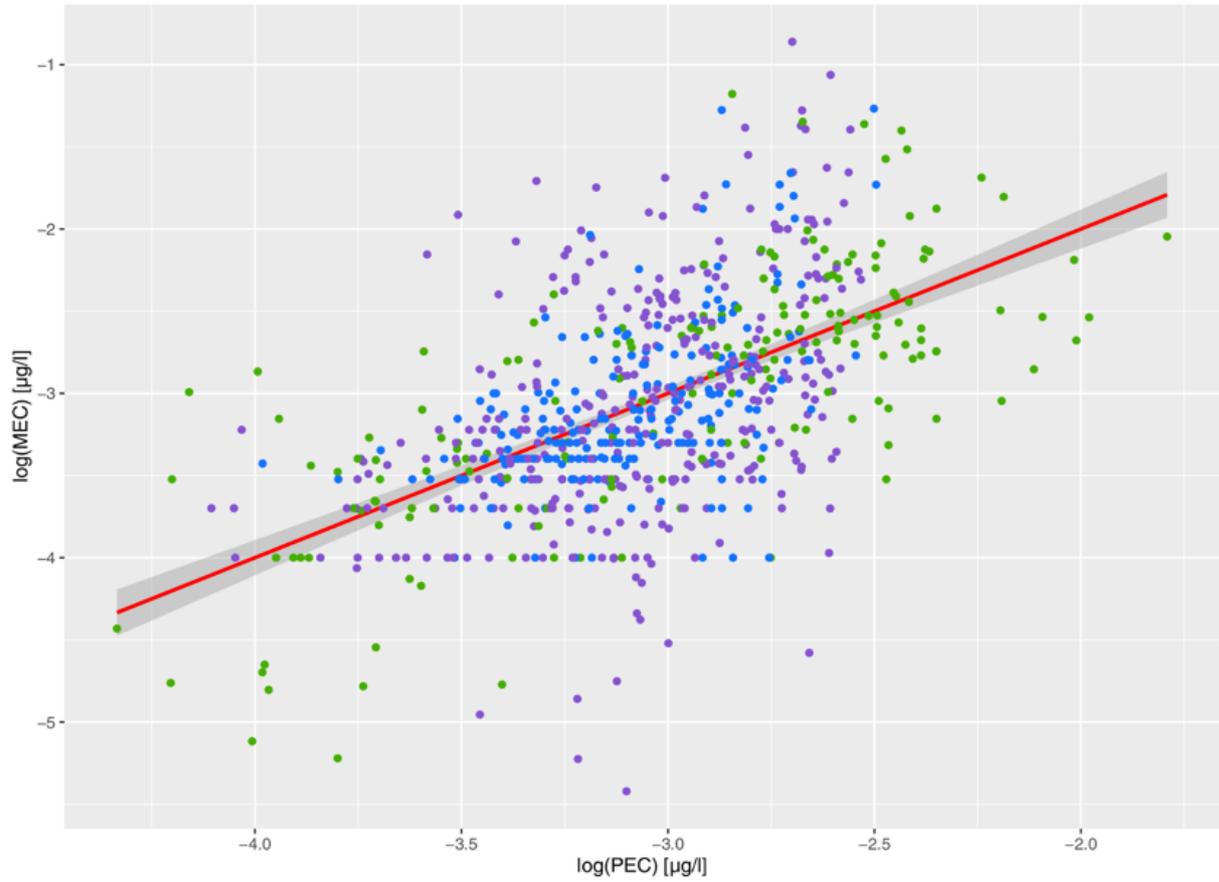
Abbildung 6: Untersuchung verschiedener Potenzen der Entfernung. Hier für 78 Samples von 13 empirisch ausgewählten Substanzen und Exponenten im Intervall [-7; +4].

3.3.1.3 Maximaler Einflussradius

Zur Ermittlung eines maximalen Einflussradius wurde analog verfahren. Das *Drift Potential* wurde dabei automatisiert für Radien von 0 bis 100km berechnet. D.h. PSM-Anwendungen innerhalb des jeweils untersuchten Einflussradius wurden für einen untersuchten Einflussradius berücksichtigt und PSM-Anwendungen außerhalb des Radius blieben unberücksichtigt. Anschließend wurden einfache, lineare Regressionsmodelle gebildet, um die KgM-Messdaten mit dem jeweils berechneten *Drift Potential* zu erklären. Dabei konnte für empirisch ausgewählte Gruppen von PSM-Wirkstoffen gezeigt werden, dass stärkere Korrelationen erst ab einem Einflussradius von ca. 7,5 km vorliegen. Je kleiner der Einflussradius gewählt wird, desto schwächer wird auch die Korrelation. In vielen Fällen war eine Modellbildung für sehr kleine Einflussradien (< 1,5km) nicht mehr möglich, da hier die gemessenen Substanzen auf der Grundlage der modellierten PSM-Applikationskarten gar nicht eingesetzt wurden (*Drift Potential* = 0).

3.3.2 Fertigstellung des Eintragsmodells

In einem ersten Schritt der Modellierung konnten mit Hilfe der eingeführten Größe *Drift Potential* bereits einfache, lineare Regressionsmodelle für einzelne PSM-Wirkstoffe und kleinere, empirisch ausgewählte Wirkstoffgruppen gebildet werden. In einem zweiten Schritt wurde das *Drift Potential* neben anderen Größen in einer multiplen linearen Regressionsanalyse eingesetzt, um ein größeres, vereinheitlichtes Modell bilden zu können. Hierzu wurden sowohl Umweltparameter am Tag und am Ort der Probenahme als auch chemische Stoffeigenschaften der PSM-Wirkstoffe als Prädiktorvariablen betrachtet. In einem iterativen Prozess konnten empirisch drei größere Wirkstoffgruppen ermittelt werden, die anhand von Grenzwerten für die Stoffeigenschaften Dampfdruck (*vapor pressure*) und Wasserlöslichkeit (*solubility in water*) gebildet werden konnten. Von den betrachteten Prädiktorvariablen wurden neben dem Dampfdruck und der Wasserlöslichkeit der Wirkstoffe noch die Umweltparameter Niederschlag (*precipitation*) und Höchsttemperatur (*max temperature*) am Tag der Probenahme gewählt. Für die 3 Gruppen mit insgesamt 755 Samples von 48 PSM-Wirkstoffen aus den Jahren 2019 und 2021 konnte so für das kombinierte Modell ein Bestimmtheitsmaß von 0,314 (p -Wert < 0,001) ermittelt werden.



Group			Samples*			Substances	R ²	p
	Water solubility [mg/l]	Vapour Pressure [mPa]	Grab	Event	Total			
	> 100	< 10 ⁻¹	121	63	184	16	0.526	< 10 ⁻²⁷
		≥ 10 ⁻¹	131	86	217	12	0.267	< 10 ⁻¹³
	< 100	≥ 10 ⁻⁷	206	148	354	20	0.197	< 10 ⁻¹⁵
Combined			458	297	755	48	0.314	< 10⁻⁶²

* Samples from KgM 2019 & 2021

Abbildung 7: Modellergebnisse für KgM-Probenahmen aus den Jahren 2019 und 2021. Die Samples wurden auf Basis von Wasserlöslichkeit und Dampfdruck in drei Gruppen eingeteilt.

4 Entwicklung der Webanwendung

4.1 Prototyp und iterativer Entwicklungsprozess

4.1.1 R-Skript und Spezifikation von Modellalgorithmen und -daten

Eine detaillierte Ausarbeitung des Softwareentwurfs der Webanwendung *PuMa* erforderte bereits zu Beginn des Projekts eine möglichst verbindliche Spezifikation der zu entwickelnden Modellalgorithmen und -daten. Eine nur technische bzw. abstrakte Spezifikation stellte jedoch keine praxisnahe Hilfe im Rahmen des Projekts dar. Die Modellalgorithmen zur Vorhersage des Eintrags von PSM-Wirkstoffen wurden daher von den Projektpartnern zunächst als Skripte in der Programmiersprache R umgesetzt, um so eine gemeinsame Arbeitsgrundlage für das Projekt zu schaffen und Änderungen am Modell besser diskutieren zu können. Dabei wurden fehlende Formeln aus der PSM-Eintrags-Modellierung zunächst durch Platzhalter und fehlende Modelldaten durch generierte Daten ersetzt. Im Laufe des Projekts wurden Platzhalter und generierte Daten dann in einem iterativen Prozess, Schritt für Schritt, durch endgültige Modellalgorithmen und -daten ausgetauscht und ergänzt. Dieses Vorgehen erwies sich als sehr praxisnah: Das von den Projektpartnern gemeinsam entwickelte Skript diente daher nicht nur der Spezifikation von Algorithmen und Daten, sondern auch als 'Tool' für die Projekt-interne Kommunikation. Ein erstes Skript beschrieb bereits alle Schritte und Schnittstellen, um einen modellierten PSM-Eintrag für eine ausgewählte Region berechnen zu können. Im Laufe des Projekts wurde es dann mehrfach überarbeitet und ergänzt.

4.1.2 Erster funktionaler Prototyp der Webanwendung

Auf der Grundlage des R-Skripts wurde zur Mitte des Projekts ein erster funktionaler Prototyp der Webanwendung entwickelt. D.h. die Kernfunktionalität der Webanwendung wurde zunächst ohne Berücksichtigung ästhetischer Kriterien implementiert, um mögliche Probleme im Konzept und Interaktionsdesign frühzeitig identifizieren und beheben zu können, noch bevor das endgültige Design für die Webanwendung erarbeitet wurde.

Mithilfe des Prototyps konnten bereits verschiedene Anwendungsfälle (Use Cases) für einen kleineren Kartenausschnitt simuliert werden, um die Kernfunktionalität der Webanwendung zu testen und ein tieferes Verständnis über alle notwendigen Interaktionselemente zu erlangen. So war es mit diesem ersten Prototypen bereits u.a. möglich ...

1. auf einer interaktiven Karte neue Beobachtungsstandorte anzulegen und vorhandene Standorte zu bearbeiten bzw. zu löschen,
2. Agrarflächen anzuzeigen und diese entweder manuell oder mithilfe verschiedener Auswahlkriterien zu selektieren,
3. die landwirtschaftliche Nutzungsart bereits selektierter Agrarflächen manuell oder nach verschiedenen Kriterien zu bearbeiten,
4. ausgewählte Flächen nach verschiedenen Kriterien zu sortieren, um so u.a. Flächen zu identifizieren, von denen der größte Anteil eingetragener Pestizide am Beobachtungsstandort stammt,

- den berechneten bzw. modellierten PSM-Eintrag am Beobachtungsstandort anzuzeigen und mit dem PSM-Eintrag eines vorgegebenen Nutzungsszenarios zu vergleichen.

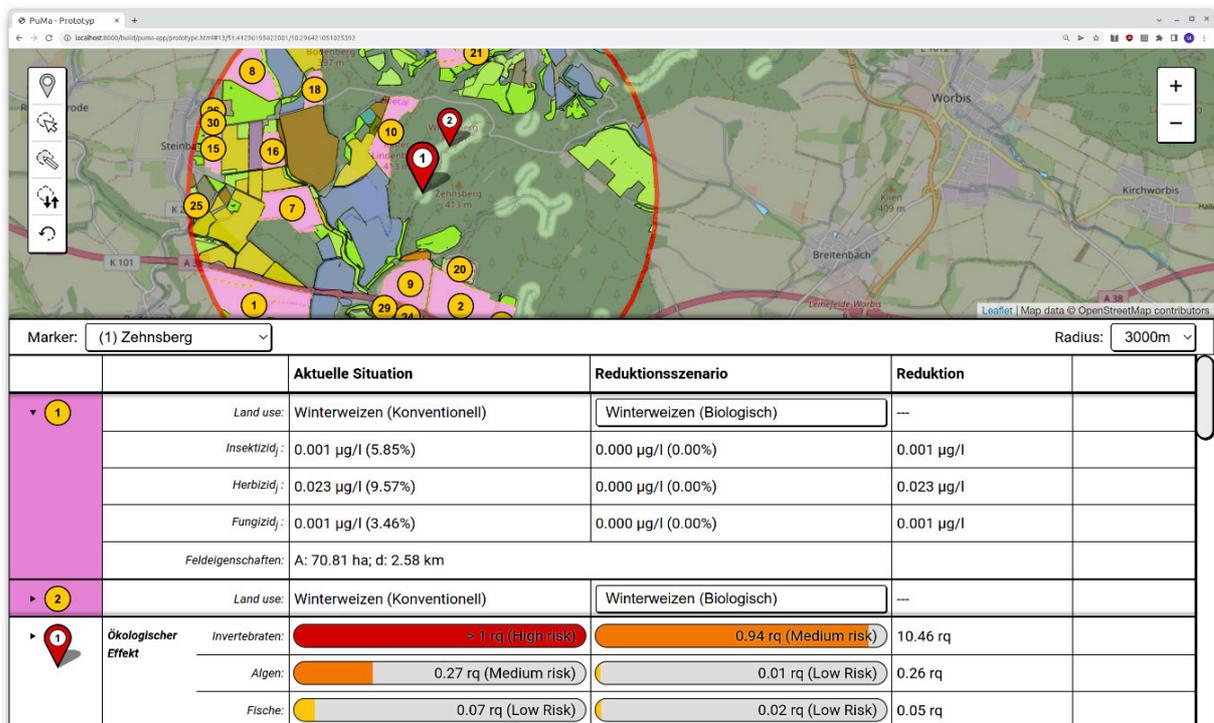


Abbildung 8: Ein erster Prototyp der Webanwendung PuMa. Mithilfe des Prototyps konnten bereits verschiedene Anwendungsfälle für einen kleinen Kartenausschnitt simuliert und evaluiert werden.

4.1.3 Evaluierung des Prototyps und weitere konzeptionelle Ausarbeitung

Der Prototyp der Webanwendung wurde im weiteren Verlauf des Projekts genutzt, um das bisherige Konzept und Interaktionsdesign der Webanwendung zu evaluieren. Der Prototyp wurde zudem auf einem Statusseminar der DBU-Förderinitiative zur Mitte des Projekts präsentiert. Auf dem Seminar gab es für diesen ersten Zwischenstand weiteres Feedback und Vorschläge, wie sich die bisherigen Konzepte, Einsatz- und Anwendungsmöglichkeiten der App noch verbessern und erweitern lassen könnten. So konnte mit einer Evaluierung des Prototypen u.a. festgestellt werden, ...

- dass sich sowohl die bereits implementierten als auch geplanten Anwendungswerkzeuge in einfache Datenbankabfragen übersetzen lassen und der Einsatz einer internen Datenbank ein einfache und flexible Erweiterbarkeit des Softwareentwurfs sicherstellen könnte,
- dass in das Konzept der Webanwendung sowohl eine Liste von Vorschlägen mit konkreten Maßnahmen und Techniken zur PSM-Reduktion als auch eine Möglichkeit zur Verwendung eigener PSM-Anwendungsserien integriert werden sollte,
- dass das Layout der grafischen Benutzeroberfläche des Prototypen insbesondere bei der Auswahl einer großen Anzahl von Schlägen nicht ökonomisch genug mit dem zur Verfügung stehenden Platz umgeht und

- dass eine Gegenüberstellung der PSM-Eintragssimulation von zwei landwirtschaftlichen Szenarien zwar sinnvoll ist, aber eine gleichzeitige Darstellung beider Szenarien nicht zwingend nötig ist.

Die Evaluierung des Prototypen wurde von den Partnern auch genutzt, um in der zweiten Hälfte des Projekts die Grundlagen für ein Folgeprojekt (PuMa 2.0) zu erarbeiten.

4.1.4 Design der grafischen Benutzerschnittstelle

Die Evaluierung des Prototypen bildete auch die Grundlage für die Ausgestaltung der grafischen Benutzerschnittstelle. Um für die Kartenkomponente mehr Platz zu schaffen, wurde das Layout insgesamt noch einmal überarbeitet. Neben der Integration einer *Toolbar* für Werkzeuge zur Auswahl und Bearbeitung von Schlägen am linken Rand des Anwendungsfensters, wurde am rechten Rand des Fenster eine *Sidebar* integriert, um Platz für Einstellungen von Modellparametern (z.B. Niederschlag, Wind, Temperatur) und die Ergebnisanzeige (modellierte Wirkstoffkonzentrationen und ökologische Risikobewertung) zu schaffen (**Abbildung 9**).

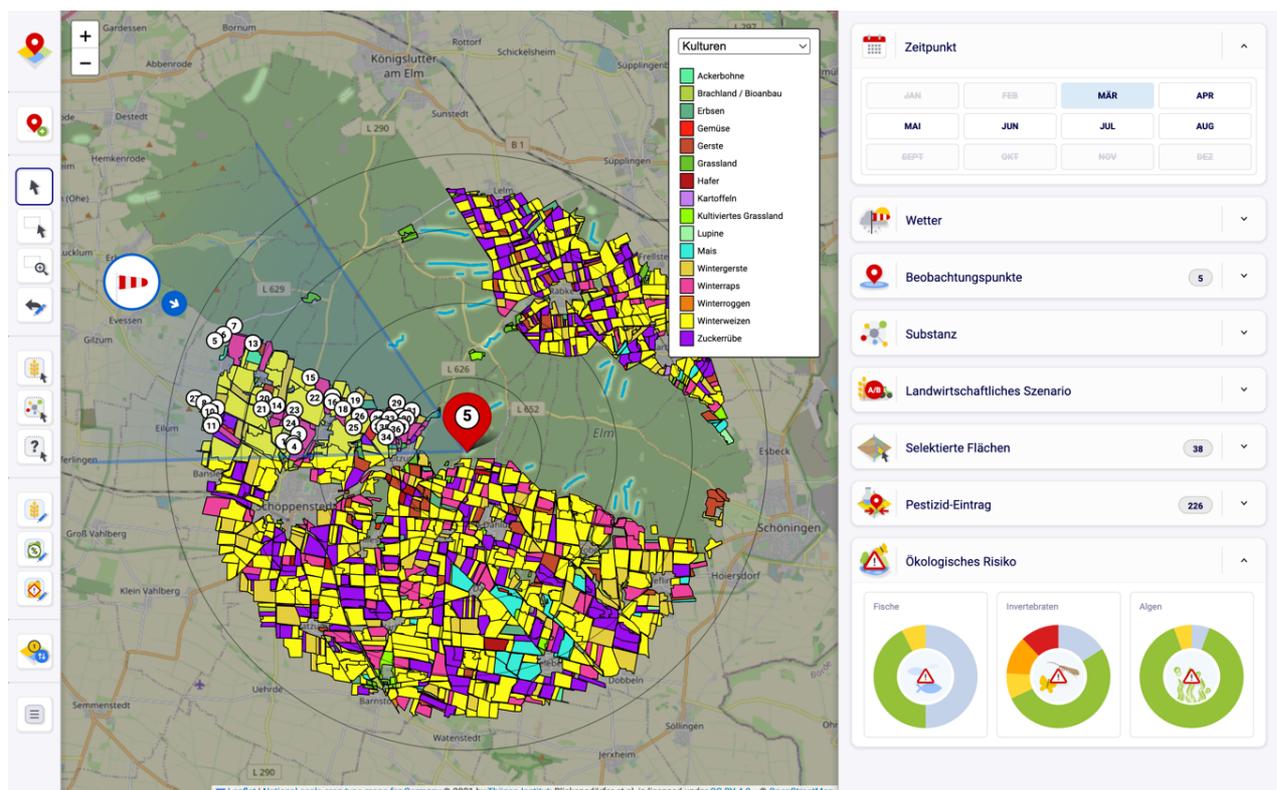


Abbildung 9: Grafisches Layout der Benutzerschnittstelle von PuMa mit einer Toolbar am linken und einer Sidebar für Einstellungs- und Ergebnis-Panel am rechten Rand des Anwendungsfensters. Im Zentrum der Programmoberfläche steht eine interaktive Karte.

Auf eine gleichzeitige Darstellung der Eintragsmodellierung für zwei landwirtschaftliche Szenarien wurde sowohl aus Platz- als auch Performancegründen verzichtet. Stattdessen wurde eine Möglichkeit geschaffen, um zwischen beiden Szenarien hin- und herzuschalten. Um die visuelle Orientierung zu verbessern, wurde für alle Werkzeuge und *Panels* jeweils ein eigenes Icon entwickelt.

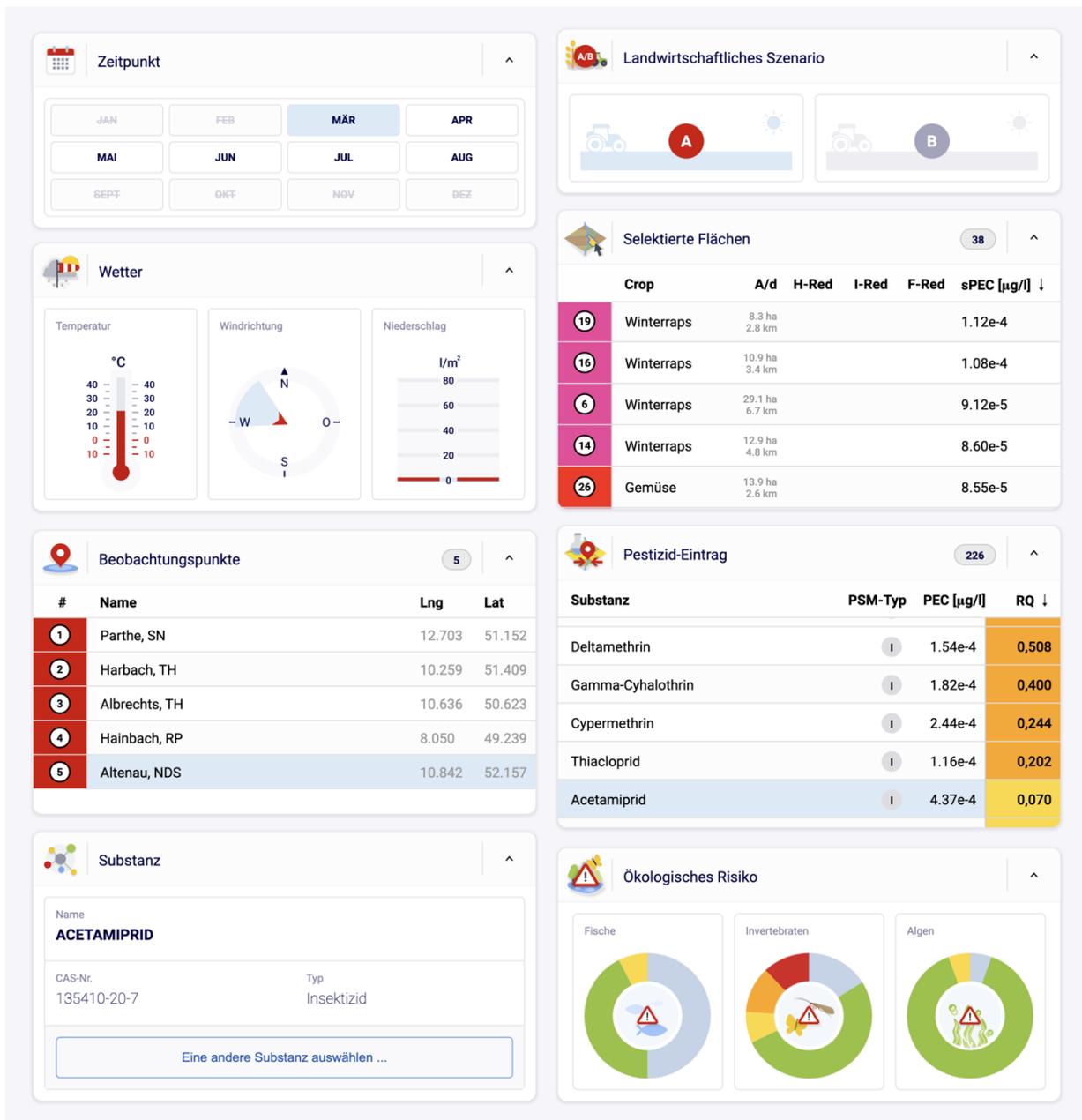


Abbildung 10: Beispiele für einzelne Elemente der grafischen Benutzerschnittstelle von PuMa. Hier: Alle Panels der Sidebar. Zur besseren Orientierung wurde für jedes Panel ein eigenes Icon entwickelt.

4.1.5 Ausarbeitung des Softwareentwurfs

Zur Ausarbeitung des Softwareentwurfs wurden zunächst alle wesentlichen Komponenten der Softwarearchitektur mit ihren entsprechenden Datenstrukturen, Programmierschnittstellen und internen Kommunikationsprotokollen spezifiziert. Für die grafische Benutzerschnittstelle wurde eine eigene Komponentenbibliothek konzipiert (Kartenkomponente, Einstellung von Niederschlag, Wind, Temperatur etc.). Mithilfe des Prototypen und auf Grundlage zahlreicher Tests in der Entwurfsphase konnte gezeigt werden, dass die Berechnung des PSM-Eintrags, also die eigentliche Anwendung des Modells, vollständig im Web-

browser des Anwenders durchgeführt werden kann, sobald alle hierfür erforderlichen Daten vom Server heruntergeladen wurden. Die im Softwareentwurf eingesetzte Server-Software wird also nicht für die eigentliche Berechnung des PSM-Eintrags benötigt und beschränkt sich in ihrer Funktion auf die Bereitstellung statischer Daten (Kartendaten, Agrarflächen, Pestiziddaten, etc.). Dies vereinfachte den Softwareentwurf erheblich.

Die rechenintensivsten Schritte bei der Anwendung des Modells sind GIS-Operationen, mit denen u.a. Distanz und Richtung von Agrarflächen für einen bestimmten Beobachtungskreis bestimmt werden. Zwar nimmt die Rechenzeit mit einer Zunahme des gewählten Radius stark zu, beläuft sich jedoch bei der gegenwärtigen Implementierung auch bei einem Radius von mehr als 7,5km nur auf wenige Sekunden, was für die Praxis noch kein signifikantes Problem darstellt. Durch einen sinnvollen Einsatz von *Web Workern* im Softwareentwurf konnte zudem eine nebenläufige Berechnung des PSM-Eintrags realisiert werden, so dass es nicht zu einer Blockierung der grafischen Programmoberfläche kommt, auch wenn eine zeitintensive Berechnung durchgeführt wird.

Um die Implementierung der Webanwendung insgesamt zu vereinfachen wurden verschiedene Open-Source-Lösungen in den Softwareentwurf integriert. So wurde u.a. für GIS-Operationen innerhalb des Browsers die Software-Bibliothek *turf.js* und für die Darstellung von Kartendaten die Web-Komponente *Leaflet.js* verwendet. Durch den konsequenten Einsatz einer internen Datenbank (WebAssembly-Portierung von *SQLite*) konnte ein sehr flexibler und modularer Aufbau der Software realisiert werden. So werden sämtliche Operationen und Nutzeraktionen in der Webanwendung intern in einfache Datenbankabfragen übersetzt. Dies ermöglicht nicht nur eine einfache Erweiterbarkeit der Software, sondern bereitet technisch schon jetzt eine Verwendung von Projektdateien (einfache *SQLite*-Dateien) für künftige Versionen der Anwendung vor (PuMa 2.0).

4.1.6 Implementierung

Die Implementierung der Webanwendung erfolgte in zwei Abschnitten: Mit dem *Back-End* wurde der Teil der Software implementiert, der die Kommunikation zwischen Webbrowser und Webserver, den Zugriff auf die interne Datenbank, die Modellalgorithmen sowie eine Verwaltung des internen Anwendungszustands umfasst (d.h. der 'unsichtbare' Teil der Software). Mit dem *Front-End* wurde der Teil der Software implementiert, der die grafische Benutzeroberfläche umfasst (d.h. der 'sichtbare' Teil der Software).

Als vorteilhaft für die Umsetzung des *Back-Ends* erwies sich, dass auf dem Webserver lediglich statische Daten bereitgestellt werden mussten, da die eigentliche Berechnung des PSM-Wirkstoff-Eintrags erst im Webbrowser des Anwenders erfolgt. Hierdurch konnte auch eine zeitaufwendige Einrichtung des Webserver vermieden und ein Betrieb der Anwendung zu vernachlässigbaren Kosten sichergestellt werden. Eine größere Herausforderung stellte jedoch die technische Einbindung der internen *SQLite*-Datenbank dar. Hier kam es leider zu vielen, teils unvorhergesehenen Problemen und Verzögerungen in der Entwicklungsarbeit. Insbesondere die störungsfreie Kommunikation mit der Datenbank über einen *Web Worker* stellte eine besondere Herausforderung dar. Eine technisch optimale Integration der Datenbank war zudem nur durch die Verwendung neuester Browser-Technologien möglich, die zum Projektende leider noch nicht von allen Webbrowser-Herstellern umgesetzt wurden (z.B. das Origin Private File System, OPFS). Der gewählte Ansatz, eine im Browser lauffähige, interne Datenbank in die Webanwendung zu integrieren, erwies sich dennoch als sehr vorteilhaft und zukunftssicher: So konnten alle Tools und Nutzerinteraktionen in der App

direkt und vollständig in SQL implementiert werden. Die Modularität und Erweiterbarkeit dieses Ansatzes beschleunigte nicht nur den weiteren Entwicklungsprozess, sondern vereinfachte auch die Implementierung automatisierter Tests. Hierdurch konnte eine gute Grundlage für zukünftige Erweiterungen der Webanwendung geschaffen werden. Die größte Herausforderung bei der Umsetzung des Front-Ends bestand in der Darstellung einer großen Anzahl landwirtschaftlicher Schläge (Polygone) und Symbole (Icons, Nummerierungen, etc.) mit Hilfe der verwendeten Kartenkomponente. Hierbei kam es in Tests leider häufig zu Performance-Problemen. Diesen konnte zwar durch eine Vereinfachung der Polygonzüge von landwirtschaftlichen Schlägen und weiteren Optimierungen entgegengewirkt werden. Allerdings konnten noch nicht alle Darstellungsprobleme vollständig behoben werden.

4.2 Datenaufbereitung

Die Datenaufbereitung für die Webanwendung umfasste Daten zu chemischen Pflanzenschutzmitteln, PSM-Reduktionsmaßnahmen, deutschlandweite Landnutzungsdaten sowie eine deutschlandweite Auswahl von Kleingewässerabschnitten in Naturschutzgebieten (NSG) und Waldgebieten und wird in den folgenden Abschnitten näher erläutert.

4.2.1 PSM-Daten

Standardmäßig nutzt die Webanwendung für ein landwirtschaftliches Szenario die in Abschnitt 3.2.3 beschriebenen *'modellierten Pflanzenschutzmittel'*. Diese Daten konnten mit nur geringen Anpassungen auch für die Webanwendung aufbereitet werden. Um es Anwendern der Webanwendung zusätzlich zu ermöglichen, eigene PSM-Anwendungsserien zu erstellen und nutzen, wurden zusätzlich auch PSM-Daten auf der Grundlage der *'Online-Datenbank Pflanzenschutzmittel'* des Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (BVL) aufbereitet. Die Daten mussten für die Webanwendung in einem automatisierten Prozess noch etwas vereinfacht und vereinheitlicht werden.

4.2.2 PSM-Reduktionsmaßnahmen

Im Rahmen des nun abgeschlossenen Projekts PuMa (1.0) war es zeitlich leider nicht möglich, eine umfassende Liste mit PSM-Reduktionsmaßnahmen zu erarbeiten und zu integrieren. Die Projektpartner beschlossen dennoch eine einfache Liste von beispielhaften PSM-Reduktionsmaßnahmen in die App aufzunehmen und erhielten hierzu dankenswerter Weise einige entsprechende Informationen von Prof. Bunke, der die Projekte der DBU-Förderinitiative mit seinem Projekt begleitete. Dies ermöglichte zum einen eine beispielhafte Integration anderer Projekte der Förderinitiative und zum anderen eine praxisnähere Darstellung von möglichen Maßnahmen zur PSM-Vermeidung. Das Ergebnis stellt noch keine befriedigende Lösung dar. Eine Recherche und Datenaufbereitung zu weiteren PSM-Reduktionsmaßnahmen soll daher im Rahmen eines Folgeprojekts (PuMa 2.0) durchgeführt werden.

4.2.3 Deutschlandweite Landnutzungsdaten

Wie bereits für die Modellierung wurden auch für die Webanwendung deutschlandweite Landnutzungsdaten des Thünen Instituts verwendet (vgl. Abschnitt 3.2.1). Da in ersten Tests eine Darstellung einer großen Anzahl landwirtschaftlicher Schläge (Polygone) im Webbrowser die Performance der Anwendung negativ beeinflusste und die genauen Umrisse der Schläge für die Berechnung des PSM-Eintrags für das in Kapitel 3 beschriebene Modell nur eine untergeordnete Rolle spielen, wurden die Landnutzungsdaten in einem automatisierten Prozess zunächst vektorisiert und anschließend stark vereinfacht (Reduktion der Knoten in Polygonzügen).

4.2.4 Kleingewässerabschnitte in NSG und Waldgebieten

Das in Kapitel 3 beschriebene Modell schätzt einen PSM-Wirkstoff-Eintrag über den Luftweg für große Distanzen ab. Andere PSM-Eintragspfade (z.B. durch Runoff oder Abdrift über kleinere Distanzen kurz nach der PSM-Applikation) werden vom Modell nicht berücksichtigt. Daher wurden für die Modellierung auch nur solche Proben gewählt, bei denen zwischen Kleingewässerquelle und Probenahmestelle ein entsprechend großer Abstand zur Landwirtschaft besteht. Das ursprüngliche Konzept der Webanwendung sah vor, mit identischen Auswahlkriterien vergleichbare Kleingewässerabschnitte für das gesamte Gebiet der Bundesrepublik Deutschland auszuwählen. Jedoch erwies sich eine Berücksichtigung von Gewässerquellen, Fließrichtungen und Einzugsgebieten für alle Kleingewässer als technisch zu anspruchsvoll und konnte daher nicht realisiert werden. In Annäherung wurden für die Webanwendung solche Kleingewässerabschnitte ausgewählt, die in NSG oder Waldgebieten liegen und einen Mindestabstand von 100m zur Landwirtschaft aufweisen. Aufgrund der großen Datenmenge und einer entsprechend hohen Zahl von GIS-Operationen erfolgte die automatisierte Datenaufbereitung in mehreren Teilschritten (auf Bundesländerebene) und stellte einen sehr rechen- bzw. zeitintensiven Prozess dar (bei einer Rechenzeit von ca. 36 Stunden auf der verwendeten Workstation für ganz Deutschland). Aufgrund technischer Schwierigkeiten musste dieser Prozess leider mehrmals abgebrochen, optimiert und anschließend wiederholt werden bis er schließlich erfolgreich abgeschlossen werden konnte.

4.3 Erste Version der Webanwendung

Eine umfassende Beschreibung sämtlicher Programmfunktionen der entwickelten Webanwendung ist im Rahmen dieses Projektberichts nicht möglich. Für einen ersten Eindruck sollen in diesem Abschnitt jedoch zumindest die Grundfunktionen der Anwendung kurz erläutert werden.

Im Zentrum der in **Abbildung 11** dargestellten grafischen Benutzeroberfläche befindet sich eine interaktive Karte. Auf dieser Karte können Anwender Beobachtungspunkte bzw. Marker setzen. Sobald ein Marker zur Karte hinzugefügt wurde, werden in einem Umkreis sämtliche landwirtschaftliche Flächen bzw. Schläge angezeigt. Auf Basis der zuvor erwähnten Daten des Thünen Instituts wird diesen Schlägen dabei standardmäßig immer eine Landnutzung zugeordnet, die von Anwendern später noch geändert werden kann. Wurde ein Marker gesetzt, so wird eine Berechnung des modellierten PSM-Eintrags für den markierten Punkt durchgeführt. Das Ergebnis dieser Berechnung ist in einem Panel am rechten Rand des

Anwendungsfensters zu sehen. Dort werden für die in der Umgebung eingesetzten Wirkstoffe die eingetragenen Konzentrationen (in der Einheit $\mu\text{g/l}$) tabellarisch angezeigt. Mit sogenannten Risikoquotienten (RQ) werden diese Ergebnisse dann auf regulatorisch akzeptable Konzentrationen bezogen (RAK). Auf Basis dieser Bewertung des ökologischen Risikos werden die dargestellten Wirkstoffkonzentrationen farbig hinterlegt. Wirkstoffe, von denen potenziell ein Risiko für Algen, Invertebraten oder Fische ausgehen kann, werden in einem zweiten Panel zu Gruppen zusammengefasst. Das ökologische Risiko dieser Wirkstoffgruppen wird jeweils in Form von Ringdiagrammen dargestellt.

Anwender können ein landwirtschaftliches Szenario auf zwei Arten ändern, um so eine Reduktion des PSM-Eintrags zu simulieren: Zum einen können eigene, alternative PSM-Anwendungsserien erstellt und auf einzelne Schläge angewendet werden. Zum anderen können den Schlägen generelle Maßnahmen zur Reduktion des PSM-Einsatzes zugeordnet werden. In beiden Fällen wählen Anwender zunächst die Schläge aus, die sie bearbeiten wollen. Die Auswahl erfolgt dabei entweder manuell per Maus oder anhand von Auswahlkriterien (z.B. Art der Anbaukultur, eingesetzter Wirkstoff, Entfernung des Schlags zum Beobachtungspunkt, Größe der Anbaufläche, Lage in Bezug zur Windrichtung etc.).

Auf der Karte können sowohl die eingesetzten Anbaukulturen als auch die Aufwandmengen einzelner PSM-Wirkstoffe farbig dargestellt werden.

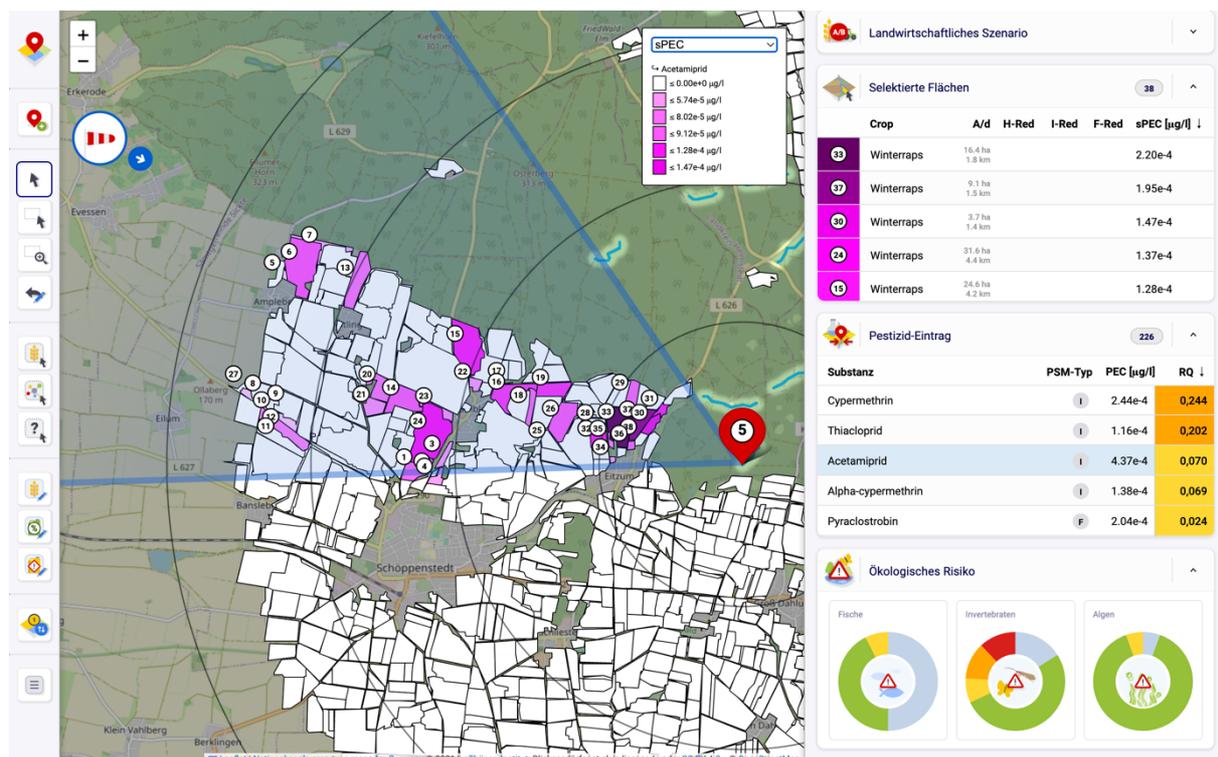


Abbildung 11: Screenshot der PuMa-App. Im Beispiel wurden Schläge in Windrichtung ausgewählt, auf denen der Wirkstoff Acetamidrid eingesetzt wird.

Letzteres kann bei der Erkennung potenzieller Eintragspfade helfen. Zur Bewertung des Effekts von Reduktionsmaßnahmen ist es möglich, Änderungen an der Landwirtschaft in zwei Szenarien vorzunehmen, um diese vergleichen zu können. Neben Änderungen am dargestellten landwirtschaftlichen Szenario, ist auch eine Änderung der für das Modell relevanten Umweltparameter möglich (Windrichtung, Höchsttemperatur, Niederschlag).

5 Veröffentlichung

Eine Veröffentlichung der Ergebnisse der Modellierung wird vorbereitet. Für die Veröffentlichung der Webanwendung wurde eine einfache Website entworfen und umgesetzt (*puma-app.de*). Die Website umfasst einen erläuternden Text zum Hintergrund des Projekts, einen Button zum Starten der Anwendung, die Möglichkeit zur Kontaktaufnahme sowie Informationen zu Nutzungsbedingungen und Datenschutz. Eine erste Entwicklerversion der Webanwendung wurde bereits auf dem Webserver installiert. Aus technischen Gründen ist eine Verwendung der App vorerst nur mit den Webbrowsern Chrome (Google), Edge (Microsoft), Brave (Brave Software) und weiteren Browsern, die auf Chromium basieren, möglich.

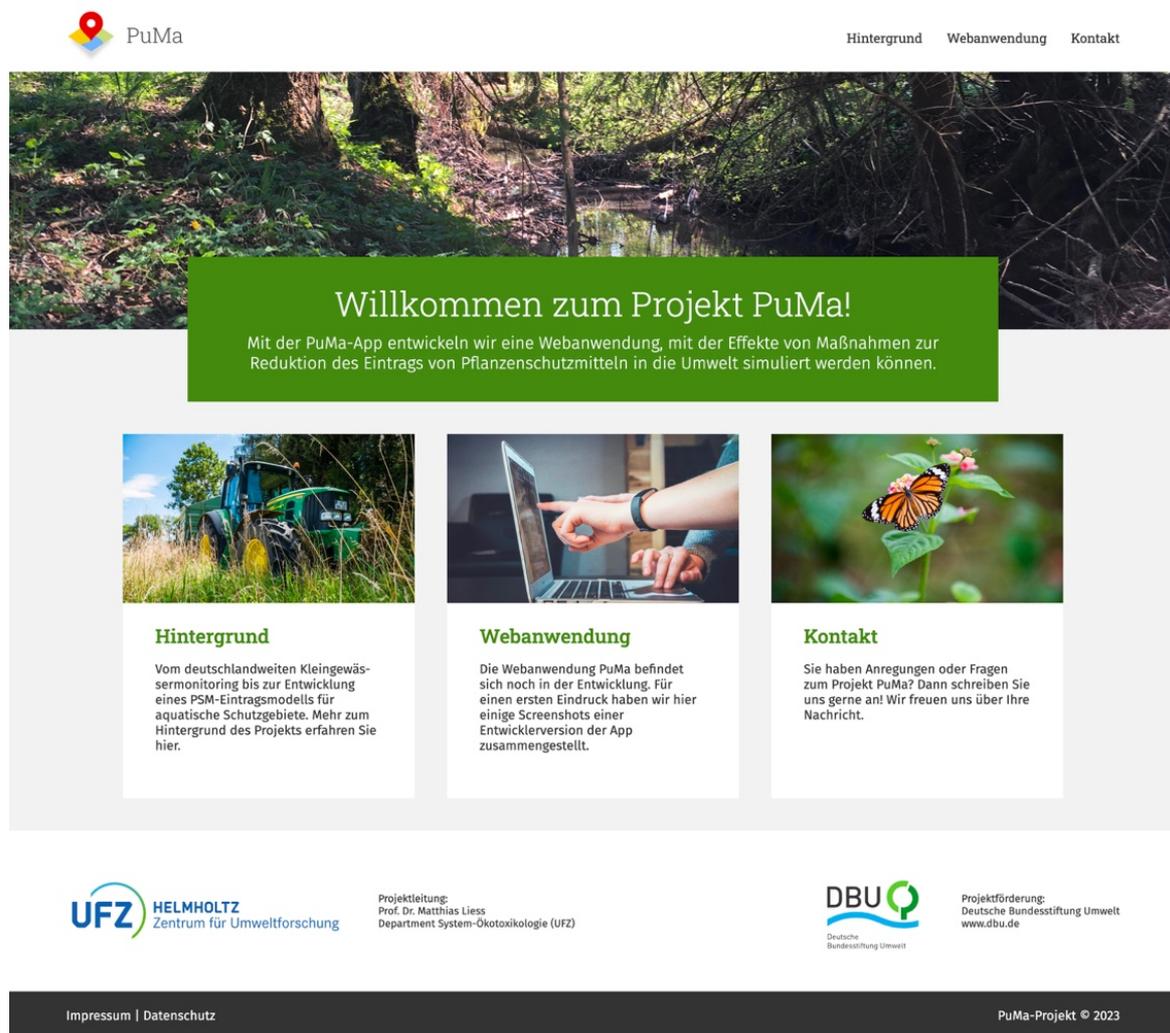


Abbildung 12: Ein Screenshot der PuMa-Website (*puma-app.de*)

6 Fazit und Ausblick

Mit dem *Drift Potential Model*, das in diesem Projekt entwickelt wurde, konnte ein Zusammenhang zwischen dem Einsatz chemischer Pflanzenschutzmittel in der Landwirtschaft und

den in Kleingewässern gemessenen Pestizidkonzentrationen auch für große Distanzen gezeigt werden. Dabei zeigte sich dieser Zusammenhang deutlicher für Wirkstoffe mit hoher Wasserlöslichkeit und kleinem Dampfdruck. Eine große Herausforderung für die Modellierung stellte die Datenbasis dar. Da flächendeckende Daten zum Pestizideinsatz im Umkreis der untersuchten Probenahmestellen nicht zur Verfügung standen, musste für die Entwicklung des Eintragsmodells der wahrscheinliche PSM-Einsatz aus Erhebungen zur landwirtschaftlichen Praxis abgeleitet werden. Mit dem entwickelten *Drift Potential Model* können zurzeit Größenordnungen wahrscheinlicher Peak-Konzentrationen abgeschätzt werden. Um die Genauigkeit der Vorhersage zu verbessern, wäre die Untersuchung weiterer potenzieller Einflussfaktoren und eine Verbesserung der Datenbasis nötig.

Die erste Version der Webanwendung zeigt das große Potenzial GIS-basierter Anwendungssoftware, um Risiken und Handlungsoptionen beim Umgang mit chemischen Pflanzenschutzmitteln zu demonstrieren. So können in der Anwendung schon jetzt modellierte PSM-Einträge und Maßnahmen zur gezielten PSM-Reduktion simuliert und ökologisch bewertet werden. Durch den Einsatz einer interaktiven Karte im Zentrum der grafischen Benutzeroberfläche werden in *PuMa* potenzielle Quellen und ökologische Risiken im räumlichen Zusammenhang veranschaulicht. Dies erlaubt ein exploratives Erarbeiten und Vergleichen verschiedener landwirtschaftlicher Szenarien und PSM-Reduktionsmöglichkeiten.

Dennoch sind Funktionsumfang und Einsatzmöglichkeiten von *PuMa* noch begrenzt. So erfolgt die Vorhersage des PSM-Eintrags zurzeit nur für Schutzgebiete (und vergleichbare *Naturflächen*) und basiert auf einem einzigen Vorhersagemodell für einen PSM-Eintrag über den Luftweg. Andere Eintragspfade (z.B. durch Abschwemmung bzw. Runoff) wurden noch nicht berücksichtigt. Eine einfache ökologische Risikobewertung des PSM-Eintrags wird zurzeit mit Hilfe von Grenzwerten für Invertebraten, Algen und Fische vorgenommen. Die Aufnahme weiterer Indikatoren (z.B. zur Beurteilung der Effekte für die Biodiversität) ist zurzeit noch nicht möglich und die Simulation von PSM-Reduktionsmaßnahmen auf wenige Beispiele beschränkt.

Um diese Limitierungen zu überwinden, ist von den Kooperationspartnern der Ausbau der Webanwendung im Rahmen eines Folgeprojekts (*PuMa 2.0*) geplant. Hierzu soll die Anwendung durch die Integration zahlreicher Schnittstellen zu einer offenen, digitalen Plattform für Umweltforschung weiterentwickelt werden, die sich tief in das bestehende IT-Umfeld von Anwendern aus Forschung, Landwirtschaft, Verwaltung und Umweltschutz integrieren lässt.

7 Literatur

- Berger, E., Haase, P., Schäfer, R. B., and Sundermann, A. (2018). "Towards stressor-specific macroinvertebrate indices: Which traits and taxonomic groups are associated with vulnerable and tolerant taxa?" *The Science of the total environment*. 619-620, pp. 144–154.
- Blickensdörfer, L., Schwieder, M., Pflugmacher, D., Nendel, C., Erasmi, S., and Hostert, P. (2022). "Mapping of crop types and crop sequences with combined time series of Sentinel-1, Sentinel-2 and Landsat 8 data for Germany" *Remote Sensing of Environment*. Vol. 269, p. 112831
- D. Guerniche, K. Thomas, M. Trapp, R. Kubiak, U. Hommen, M. Klein, S. Reichenberger, J. Pires, and T. Preuß (2016). "Bewertung des Eintrags von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer: Weiterentwicklung der Konzepte zur Modellierung der Einträge über die Expositionspfade Runoff, Erosion und Drainage unter Berücksichtigung der Harmonisierungsanforderungen im zukünftigen europäischen Zulassungsverfahren" *GERDA – GEobased Runoff, erosion and Drainage risk Assessment for Germany*, Final report. Umweltbundesamt, Dessau, Germany
- Liess, M., and Ohe, P. C. von der (2005). "Analyzing effects of pesticides on invertebrate communities in streams," *Environmental toxicology and chemistry*. Vol. 24, No. 4: pp. 954–965.
- Liess, M., Liebmann, L., Vormeier, P., Weisner, O., Altenburger, R., Borchardt, D., Brack, W., Chatzinotas, A., Escher, B., Foit, K., Gunold, R., Henz, S., Hitzfeld, K.L., Schmitt-Jansen, M., Kamjunke, N., Kaske, O., Knillmann, S., Krauss, M., Küster, E., Link, M., Lück, M., Möder, M., Müller, A., Paschke, A., Schäfer, R.B., Schneeweiss, A., Schreiner, V.C., Schulze, T., Schüürmann, G., von Tümpling, W., Weitere, M., Wogram, J., Reemtsma, T. (2021). "Pesticides are the dominant stressors for vulnerable insects in lowland streams." *Water Research*. 201
- Liess, M., Liebmann, L., Lück, M., Vormeier, P., Weisner, O., Foit, K., Knillmann, S., Schäfer, R.B., Schulze, T., Krauss, M., Brack, W., Reemtsma, T., Halbach, K., Link, M., Schreiner, V.C., Schneeweiss, A., Möder, M., Weitere, M., Kaske, O., von Tümpling, W., Gunold, R., Ulrich, N., Paschke, A., Schüürmann, G., Schmitt-Jansen, M., Küster, E., Borchardt, D. (2022). "Umsetzung des Nationalen Aktionsplans zur nachhaltigen Anwendung von Pflanzenschutzmitteln (NAP) – Pilotstudie zur Ermittlung der Belastung von Kleingewässern in der Agrarlandschaft mit Pflanzenschutzmittel-Rückständen. Abschlussbericht." Texte Umweltbundesamt 2022
- Julius-Kühn-Institut (JKI). "Bekanntmachung zu den Erhebungen zur Anwendung von Pflanzenschutzmitteln in der Praxis (PAPA-Erhebungen)" vom 17. Juli 2020 - Bundesanzeiger, BAnz AT 28.08.2020 B1, Website: <https://papa.julius-kuehn.de>

Schriever, C. A., Ohe, P. C. von der, and Liess, M. (2007). "Estimating pesticide runoff in small streams," *Chemosphere*. Vol. 68, No. 11: pp. 2161–2171.

Strassemeyer, J., Daehmlow, D., Dominic, A.R., Lorenz, S. und Golla, B. (2017): SYNOPS-WEB, an online tool for environmental risk assessment to evaluate pesticide strategies on field level. *Crop Protection* 97: 28-44.

Vormeier P, Liebmann L, Weisner O, Liess L. 2023. Width of vegetated buffer strips to protect aquatic life from pesticide effects. *Water research*. 231,2023, 119627.