

DIE GEWINNUNG VON HIGHER TIER-DATEN AUS LYSIMETERSTUDIEN MIT *INVERSE PELMO*

EXTRACTION OF HIGHER TIER DATA FROM LYSIMETER STUDIES USING *INVERSE PELMO*

Hintergrund und Ziele

Im Rahmen der Zulassung von Pflanzenschutzmitteln müssen für alle Wirkstoffe und relevanten Metabolite Umweltkonzentrationen im Boden, Oberflächenwasser und Grundwasser berechnet werden. Die Eingabeparameter für die Modelle erhält man gewöhnlich aus Labor- oder Freilandstudien. Kürzlich wurde von der EU-FOCUS-Arbeitsgruppe eine dritte Methode vorgeschlagen, bei der Freilandstudien (meist Lysimeter) mit Hilfe der inversen Modellierungstechnik analysiert werden, so dass Sorptions- und Abbauparameter in einem Schritt verfügbar werden. In diesem Projekt wurde eine entsprechende Software entwickelt und getestet.

Projektbeschreibung

Zunächst wurde ein automatisches Parameter-Optimierungstool (hier „PEST“) mit einem Versickerungsmodell (hier „PELMO 4“) mit Hilfe der neuen Software *inversePELMO* verbunden. Wie das Schema (Figure 1) verdeutlicht, ist das Verfahren kompliziert und erfordert detaillierte Kenntnisse über das Versickerungsmodell, so dass selbst für erfahrene Benutzer eine Optimierung ohne eine unterstützende Software kaum durchführbar ist. Mit *inversePELMO* ist es möglich, die Sorptions- und Abbauparameter zu finden, die die Ergebnisse des Experiments optimal beschreiben. Dazu werden alle wichtigen Daten der Studie (z. B. Temperatur, Flüsse) verwendet.

Ergebnisse

Das Verfahren wird mit Hilfe einer Lysimeterstudie über 17 Monate demonstriert. Nach erfolgreicher Optimierung von Wasserhaushalt und Substanzverhalten stimmen die Substanzflüsse in Lysimeter und Modellierung hervorragend überein (siehe Figure 2). Für die Interpretation der Lysimeterstudie ist häufig die Frage interessant, was passiert wäre, wenn die Lysimeterstudie über einen längeren Zeitraum durchgeführt worden wäre. Eine derartige Vorhersage kann leicht auf Basis der Ergebnisse von *inversePELMO* und der tatsächlichen

Wetterdaten nach der Studie gemacht werden. Die entsprechenden Ergebnisse (Figure 3) zeigen eindeutig, dass die Studie nicht das Maximum abgedeckt hatte. Vielmehr wäre dies wohl erst drei Monate später erreicht worden.

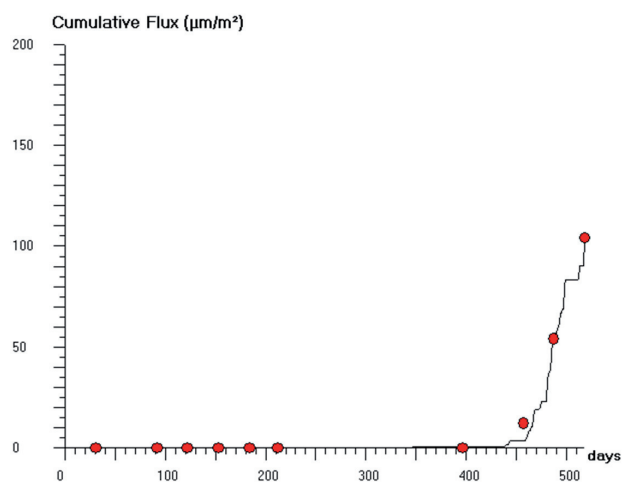


Figure 2: Cumulative substance fluxes in the lysimeter (circle) and simulation (line).

Fazit

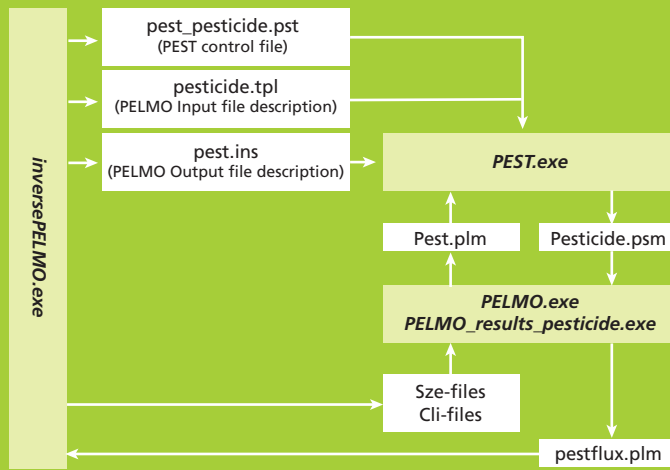
Es wurde gezeigt, dass das Tool *inversePELMO* zufriedenstellend arbeitet und sinnvolle Beschreibungen der Prozesse während der Freilandstudie liefert. Weiterhin können Ergebnisse von *inversePELMO* auch eingesetzt werden im Rahmen von

- Prognosen zu fiktiven Verlängerungen der Studie
- Übertragungen der Ergebnisse der Freilandstudie auf andere Klimabedingungen
- Übertragungen der Ergebnisse der Studie auf andere Anwendungsmuster
- Verwendung der Ergebnisse als Basis für eine „Higher Tier Modellierung“.

Auftraggeber / Sponsor

Umweltbundesamt (UBA), FKZ 360 03 50

F 1



Background and aims

The registration of pesticides requires the calculation of environmental concentrations for active compounds and relevant metabolites in soil, groundwater and surface water. Laboratory and field studies are traditionally used to generate the necessary modelling input parameters, but a third methodology was recently suggested by the EU-FOCUS working group. The idea is to analyse outdoor (especially lysimeter) studies, using the “inverse modelling technique”, which allows sorption and degradation parameters to be estimated in a single step. In this project, we have developed and tested the *inversePELMO* software.

Approach

The software combines an optimization tool (in this case, PEST) with a leaching model (in this case, PELMO 4). As shown in the flow chart (Fig. 1), inverse modelling studies require detailed information about the leaching model including its input and output file structures. Even experienced users would find it difficult to complete the complex inverse modelling procedure unless special supporting software is available. The *inversePELMO* software offers the necessary support to find the sorption and degradation parameters that best describe the lysimeter studies. Each analysis is based on all the recorded experimental data (e. g. rainfall, temperature, percolate and substance fluxes).

Results

We have demonstrated the procedure using lysimeter results collected over 17 months. After the careful optimization of soil hydrology and pesticide fate data, the substance fluxes in the lysimeter fitted well to the computer model (Fig. 2). When lysimeter data are interpreted it is often interesting to speculate on the outcome of an extended study. The *inversePELMO* software allows such outcomes to be predicted based on the actual weather conditions after the original study is completed. The results shown in Figure 3 clearly demonstrate that the

lysimeter study did not cover the peak maximum, which was instead predicted to occur three months later.

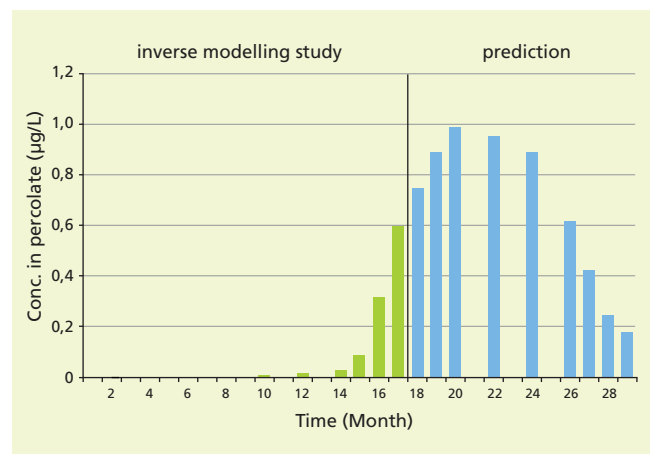


Figure 3: Hypothetical extension of a lysimeter study based on *inversePELMO*.

Conclusions

Our results showed that *inversePELMO* works well and provides adequate interpretations of the key processes in lysimeter studies. However, the inverse modelling approach also allows further questions to be addressed, such as:

- Predicting the most likely outcome if the lysimeter study had been extended
- Translating lysimeter results to different environmental conditions (e. g. a different climate)
- Translating lysimeter results to different substance application strategies (e. g. a different application rate)
- Using the optimized parameter setting for higher-tier modelling with refined parameters.

Contact / Ansprechpartner

Dr. Michael Klein
 Tel: +49 2972 302 - 317
 michael.klein@ime.fraunhofer.de

Figure 1: Flow chart of inverse PELMO methodology.