

Optimierung der Grundwasserreinigung mittels eines digitalen Zwillings

Gert Rehner, Anastasia August, Eduard Alesi, Aron Kneer, Martin Reder und Britta Nestler

DE Der Klimawandel beeinträchtigt die Grundwasserneubildung und führt zu sinkenden Pegelständen. Wenn Grundwasserleiter unreinigt werden, bleiben sie oft Jahrzehntelang belastet. Herkömmliche Sanierungsmethoden mittels Abpumpen sind ineffektiv und verschwenden wertvolle Ressourcen. Grundwasserkirculationsbrunnen stellen eine innovative Lösung dar, sie arbeiten energieeffizient und beeinträchtigen die Wasserbilanz nicht. Sie sind in der Lage, Schadstoffe aus horizontal gelagerten feinkörnigen Schichten gezielt vertikal auszuwaschen. Das Ziel der Forschungsarbeit ist es, durch numerische Modelle die Effizienz und die Auslegung solcher Brunnen zu optimieren. Mit Hilfe digitaler Zwillinge lassen sich Strömungsdynamiken und das Schadstoffverhalten in porösen Medien detaillierter analysieren und prognostizieren, dies steigert die Nachhaltigkeit von Sanierungsprozessen.

EN Climate change is having a negative effect on groundwater recharge which is leading to lower water levels. Contaminated groundwater often remains polluted for decades. Traditional remediation methods based on Pump & Treat are inefficient and resource-intensive. Groundwater Circulation Wells (GCWs) provide a more sustainable solution by circulating water vertically to remove pollutants from fine-grained layers, while consuming minimal energy and maintaining the water balance. Our project aims to optimize the efficiency and design of GCWs through numerical models. Digital twins assist in analyzing flow dynamics and enhancing pollutant capture, thereby increasing the sustainability of remediation processes.

Der Klimawandel wirkt sich erheblich auf den Grundwasserhaushalt aus. Die Verminderung oder gar das Ausbleiben von Niederschlägen erschwert die Grundwasserneubildung und erhöht die Gefahr von Verunreinigungen. Einmal durch Industrie- oder Agrochemikalien verunreinigt sind Grundwasserleiter häufig auf Jahrzehnte, wenn nicht Jahrhunderte hin aus belastet und stark Nutzungseingeschränkt. Bisher eingesetzte Reinigungs- und Abpumpverfahren sind insbesondere in heterogen aufgebauten Grundwasserleitern wenig effizient, energieintensiv und gehen verschwenderisch mit der wertvollen Ressource Grundwasser um. Eine zukunftsweisende Möglichkeit, verunreinigte Grundwasserleiter zu reinigen, stellen Grundwasserkirculationsbrunnen (GCW) dar, die die Wasserbilanz nicht beeinträchtigen, energiearm arbeiten und feinkörnige schadstoffbeladene Schichten im Untergrund effektiv hydraulisch durchspülen können. Die Dimensionierung solcher Brunnenkonstruktionen und deren Wirkungsweise wird bis heute größtenteils noch auf Basis empirisch abgeleiteter Formelwerke durchgeführt. Die Arbeit der Projektpartner zielt daher darauf ab, anhand numerischer Modelle – Simulationen mit Digitalen Zwillingen – die Auslegung solcher Brunnen und die Prognose der Reinigungsleistung zu optimieren.

Beschreibung des Brunnenprinzips

Zur Wassergewinnung dienen meistens Porengrundwasserleiter, die aus einer Wechsellagerung von Schichten unterschiedlicher Korngrößen bestehen. Die im Einflussbereich von Pumpbrunnen dominierenden horizontalen Strömungen sprechen solche kontaminierten Schichten nicht ausreichend an. Eine jahrelange diffusive Schadstofffreisetzung ins umgebende Wasser ist die Folge. Nur mit vertikalen Fließbewegungen im Grundwasserleiter lassen sich Kontaminanten effizient herauslösen.

Das Konzept der vertikalen Grundwasserkirculation wurde in Deutschland Ende der 1980er Jahre entwickelt und beschreibt einen Brunnen, der mindestens zwei hydraulisch getrennte Filterabschnitte aufweist (GCW). [1, 2] Das Wasser wird aus einem Abschnitt entnommen und in einen anderen zurückgeführt, der entweder tiefer oder höher liegen kann. Zwischen beiden Filterstrecken bildet sich ein hydraulischer

[1] Herrling, B., Stamm, J., Buermann, W., 1991a. Hydraulic circulation system for in situ bioreclamation and/or in situ remediation of stripable contamination. In: Hinchee, R.E., Olfenbuttel, R.F. (Eds.), *In Situ Bioreclamation*. Butterworth-Heinemann, Boston, MA, USA, pp. 173–195. <https://doi.org/10.1016/B978-0-7506-9301-1.50015-9>.

[2] Herrling, B., Stamm, J., 1992. Numerical results of calculated 3D vertical circulation flows around well with two screen sections for in situ or on-site aquifer remediation. In: Proceedings of IX Int. Conf. On Computational Methods in Water Resources, June 1992. Denver, CO (USA). ORCID /0000-0002-3729-0166/work/142248429

Gradient aus, der das Wasser in der Brunnenumgebung zu einem vertikalen Strömen zwingt. Es entsteht eine achsen-symmetrische Grundwasserzirkulationszelle, die eingelagerte Schadstoffe in feinkörnigen Schichten gezielt vertikal ausspült. Sehr häufig wird das infiltrierte Wasser mit Hilfsreagenzien angereichert (Nährstoffe zum mikrobiellen Abbau von Schadstoffen, Oxidationsmittel etc.). Die Wahl der Zirkulationsrichtung hängt von der Schadstoffverteilung

und den hydrogeologischen Bedingungen des Standorts ab. Bei größeren Mächtigkeiten von Grundwasserleitern kann es mitunter erforderlich sein, mehrere Filterstrecken in einer Achse anzurordnen, um Kreislaufströmungen besser steuern zu können bzw. verschiedene Grundwasserstockwerke getrennt zu bearbeiten.

Standardzirkulationen werden typischerweise für Schadstoffe wie chlorierte Lösungsmittel verwendet, die schwerer als Wasser sind, um sie in tieferen Abschnitten des Grundwasserleiters zu mobilisieren. Bei Kontaminationen durch Leichtphasen (z. B. Diesel, Heizöl) wird eine inverse Zirkulation bevorzugt. Durch die Zugabe von Nährstoffen entsteht eine mikrobiologisch aktive Behandlungszone zum Abbau von Schadstoffen. Zum Aufbau einer Spülströmung im Aquifer ist keine Wasserentnahme notwendig, während Abpumpmaßnahmen darauf beruhen, frisches unbelastetes Wasser aus der Brunnenumgebung ständig mit Schadstoffen aufzuladen und nach Reinigung in die Kanalisation oder ein Gewässer abzuleiten.

Reicht der Abbau im Grundwasserleiter für bestimmte Kontaminationen nicht aus, müssen zusätzliche Anlagenkomponenten für die Reinigung des Wassers eingesetzt werden, das den Brunnen durchströmt. Dies können beispielsweise mit speziell geformten und beschichteten Füllkörpern gefüllte Biofilter sein. Deren Positionierung kann wahlweise direkt im Brunneninneren oder oberirdisch erfolgen. Die Dimensionierung hinsichtlich der erforderlichen Beströmungsdynamik und der Prognose des Adsorptions- bzw. Abbauverhaltens stellt hohe Anforderungen an die Modellierungssoftware.

Beschreibung der Experimente mit dem Reaktor

Zur Ermittlung des hydraulischen Verhaltens von Schüttungen mit hohlen Füllkörpern war eine Reihe von Versuchen erforderlich. Eine Säule mit unbeschichteten Körperchen wurde mit verschiedenen Durchflussraten beströmt und dabei die auftretenden Differenzdrücke in unterschiedlichen Distanzen von der Einlassöffnung erfasst und aufgezeichnet. Es ließ sich mit geeigneten Drucktransmittern eine

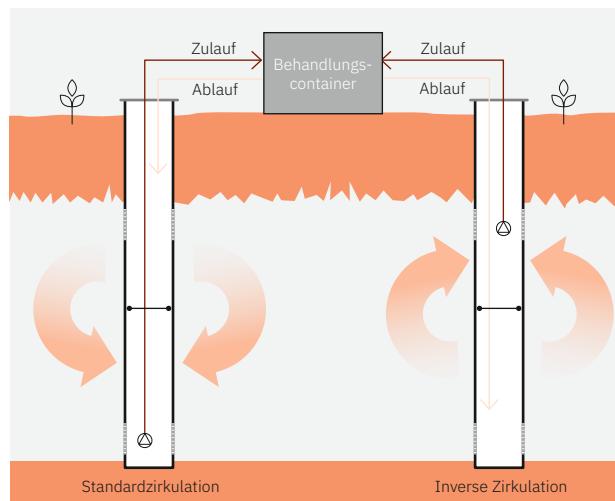


Abb. 1: Betriebsweisen eines GCW; links Standardzirkulation, rechts inverse Zirkulation



Abb. 2: Füllkörper; links unbeschichtete und rechts beschichtete Füllkörper, Schichtdicke ca. 100 µm (Foto: Eduard Alesi)

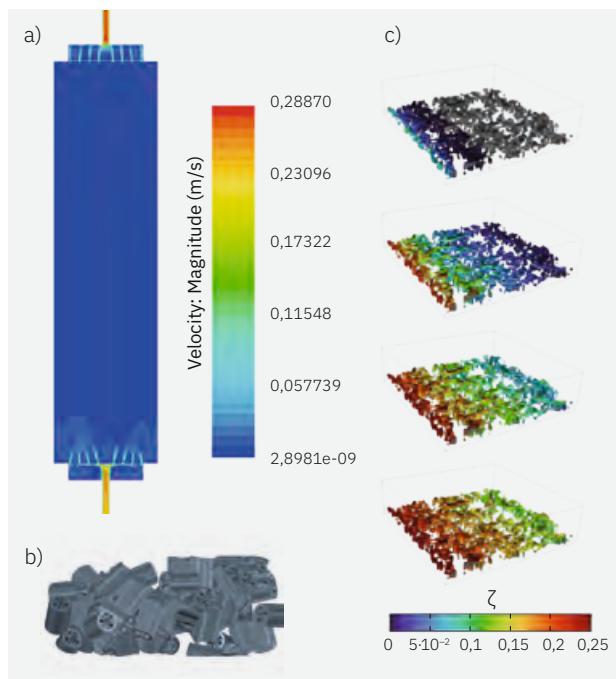
Abb. 3: Säule mit beschichteten Füllkörpern (Foto: Eduard Alesi)



Auflösung von bis zu 0,01 Pa erzielen. Erkenntnisse über die Strömungsgeschwindigkeiten in der Säule erbrachten impulsartige Einleitungen von definierten Heißwassermengen unter Variation der Durchflussraten. Da Wärme sich wie ein Markierungsstoff (Tracer) verhält, konnte über eingebaute Thermosensoren die Ausbreitung der Wärmefront innerhalb der Säule verfolgt und damit Hinweise für die Kalibrierung der Modellierungssoftware abgeleitet werden.

Anschließend erfolgte eine Bestromung von beschichteten Partikeln mit einer Benzoesäure-haltigen Lösung, um deren Adsorptionsverhalten zu testen. Daraus resultierten wichtige Erkenntnisse für die Modellbildung.

Abb. 4: a) Reaktor, Simulationsergebnisse: Geschwindigkeitsverteilung beim Durchströmen von unten, b) Füllkörper, c) Beschichtung der Füllkörper, Simulationsergebnisse von oben nach unten: Die Sättigung mit dem Schadstoff im Laufe der Zeit beim Durchströmen von links (Simulation: a) Anastasia August, b) + c) Martin Reder)



Mit Hilfe digitaler Zwillinge lassen sich Strömungsdynamiken und das Schadstoffverhalten in porösen Medien detaillierter analysieren.

Modellierung am Computer

Am Institut für Digitale Materialien der Hochschule Karlsruhe unterstützen wir die Experimente mithilfe von Computermodellen und Simulationen. Dabei kommt es entscheidend auf den Einsatz von digitalen Zwillingen der entsprechenden Anlagen und ihrer Elemente. In der Untergrundsanierung können digitale Modelle auf mehreren Ebenen eingesetzt werden: auf der Meterskala, der Zentimeterskala und der Mikrometerskala.

Auf der Meterskala wird ein digitales Modell des gesamten Reaktors erstellt. Dieses Modell ermöglicht es, verschiedene Szenarien zu simulieren, um den Betrieb zu optimieren und potenzielle Probleme frühzeitig zu erkennen. Beispielsweise kann der digitale Zwilling verwendet werden, um den Fluss von kontaminiertem Wasser durch den Reaktor zu analysieren und die effizienteste Methode zur Schadstoffentfernung zu ermitteln. Durch die Visualisierung und Anpassung der Reaktorparameter in der digitalen Umgebung können reale Anpassungen gezielt und fundiert vorgenommen werden (Abb. 4a).

Eine Ebene tiefer, auf der Zentimeterskala, konzentriert sich der digitale Zwilling auf das aus Füllkörpern bestehende Granulat (s. Abb. 2) im Reaktorkern. Ein digitales Modell auf dieser Skala bildet die Struktur und Anordnung der Füllkörper ab. Durch die Simulation auf dieser Skala können wir die Effizienz des Granulats bei der Schadstoffbindung untersuchen. Es ist möglich, die Durchflussdynamik der Reinigungsmittel durch die Granulatmatrix zu analysieren (Abb. 4b).

Auf der Mikrometerskala, schließlich, wird ein digitales Modell der Beschichtung des Granulats erstellt. Diese Beschichtung spielt eine entscheidende Rolle bei der Funktionalität der Füllkörper, da sie die spezifische Reaktionsoberfläche darstellt, an der die Schadstoffe gebunden oder umgewandelt werden. Mit einem digitalen Modell kann man die molekularen Mechanismen der Schadstoffbindung und -reaktion detailliert untersuchen. Man kann die Wirksamkeit verschiedener Beschichtungsmaterialien vergleichen und die besten Kombinationen identifizieren (Abb. 4c).

Die Integration digitaler Zwillinge auf verschiedenen Skalen ermöglicht ein umfassendes Verständnis der komplexen Prozesse in der Untergrundsanierung. Von der Meterskala des gesamten Reaktors über die Zentimeterskala des Granulats bis hin zur Mikrometerskala der Füllkörperbeschichtung liefern diese Modelle wertvolle Einblicke und ermöglichen gezielte Optimierungen. Durch die Simulation und Analyse auf diesen verschiedenen Ebenen kann man die Effizienz und Nachhaltigkeit von Sanierungsprozessen erheblich verbessern und somit einen wichtigen Beitrag zum Umweltschutz leisten. **X**

Autor:innen

Gert Rehner

Senior Geologist, IEG Technologie GmbH

Dr. Anastasia August

Gruppenleiterin am Institut für Digitale Materialien, an der HKA, Gruppenleiterin am KIT

Dr. Eduard Alesi, CEO

IEG Technologie GmbH

Dr.-Ing. Aron Kneer

TinniT Technologies GmbH und Hochschule Karlsruhe

Dr. Martin Reder

Gruppenleiter am Institut für Digitale Materialien an der HKA

Prof. Dr. Britta Nestler

Professorin und Leiterin des Instituts für Digitale Materialien an der HKA, Institutsleiterin am KIT

Kontakt

Prof. Dr. Britta Nestler

HKA – Hochschule Karlsruhe

Fakultät für Informatik und Wirtschaftsinformatik

Moltkestr. 30, 76133 Karlsruhe

E-Mail: britta.nestler@h-ka.de