

Numerische Grundwassermodellierung:
Konzeption, Anwendung, Entscheidungsgrundlage

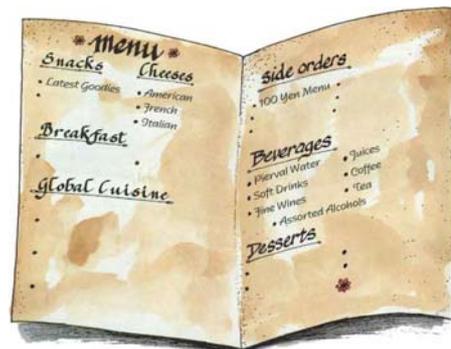
Graz, 25. Juni 2008



Modellbasierte technisch-ökonomische Bewertung und Optimierung von Grundwasserhaltungs und - sanierungsmaßnahmen

Michael Finkel, ZAG Tübingen
Peter Bayer, IfU/ETH Zürich

Menu des Tages



- Was heißt "Optimierung"?
- Grundlagen der Modell-basierten Optimierung
- Fallstudie 1: Wasserhaltung im Ruhrgebiet
- Fallstudie 2: Grundwassersanierung im Bereich einer Petrochemiefabrik

Was heißt "Optimierung"

▪ Empirische Optimierung

→ Verbesserungen techn. Maßnahmen in der Praxis aufgrund von Erfahrungswerten

z.B. bei im Betrieb befindlichen Maßnahmen aus der Auswertung von Daten zur bisherigen Sanierungsleistung beruhen

→ ebenfalls auf Erfahrungswerten und Expertenwissen beruhende Vorauswahl von Verfahrensalternativen

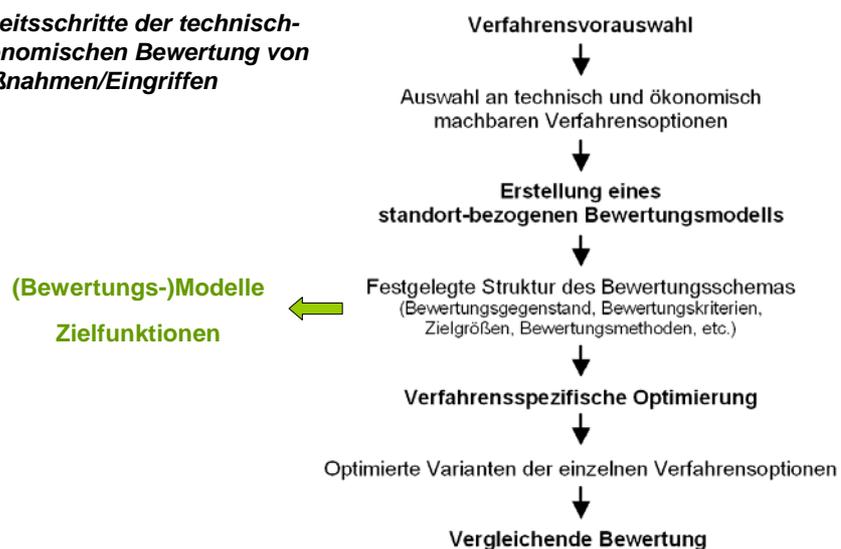
▪ Modell-basierte Optimierung

→ Methodischer (systematischer) Vergleich von Maßnahmenvarianten unter Anwendung von mathematischen Simulationsmodellen

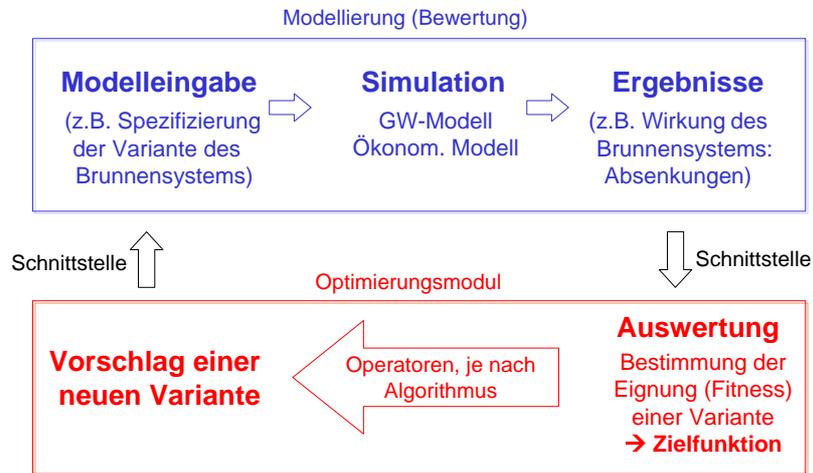
Modelle bilden Wirkung der technischen Maßnahmen ab und berechnen die entsprechenden Kosten

Modell-basierte Optimierung als Planungshilfe

Arbeitsschritte der technisch-ökonomischen Bewertung von Maßnahmen/Eingriffen



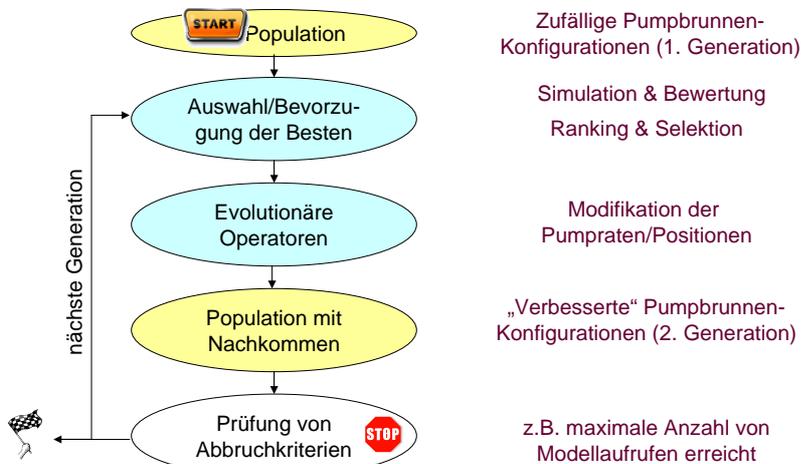
Verknüpfung von Modellierung und Optimierung



Optimierung: Evolutionäre Algorithmen (CMA-ES)

Algorithmen, die bei der Lösungssuche den biologischen Evolutionsprozess nachahmen.

... am Beispiel der Optimierung von Brunnenanlagen



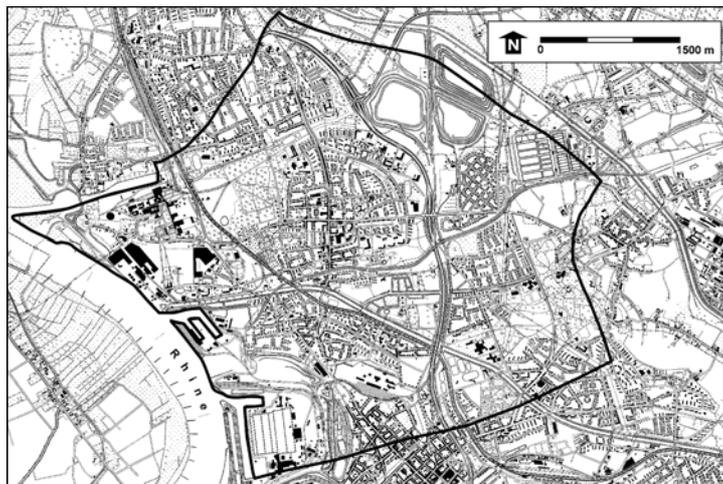
Fallstudie 1: Wasserhaltung in Duisburg-Aldenrade



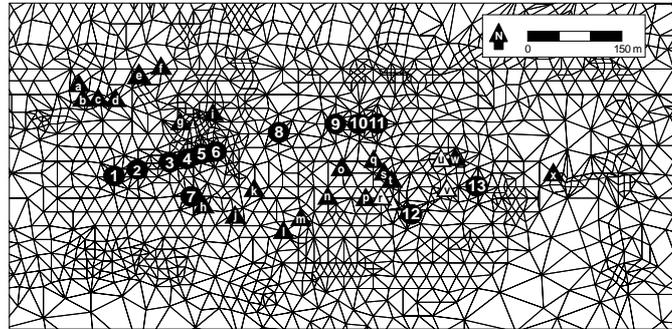
- Steinkohlebergbau seit über 100 Jahren
- Bis vor kurzem Förderung von 3.5 Mio. t Steinkohle per anno
- Bergsenkungen (Subsidenz bis 2020 ca. 5m)
- Insgesamt müssen rd. 5 Mio. m³ Grundwasser pro Jahr gefördert werden!



Standort Duisburg-Aldenrade: Grundwassermodell



Ausgangslage: Absenkungsziele



Absenkungsziele sind lokal definiert: Knoten ▲ bis ▲

Fragestellungen (1)

- **Lässt sich Gesamtpumprate der bestehenden Anlage weiter reduzieren?**
- **Welche Absenkungsziele sind maßgebend für die Optimierung ? (→ „neuralgische Punkte“)**
- **Kann mit dem Bau neuer Brunnen eine Verbesserung erreicht werden?
An welchen Positionen sind diese Brunnen zu bauen?**

Optimierung: Zielfunktion 1 ("objective function", OF)

Minimierung der Gesamtpumprate Q_{tot} der bestehenden Brunnen

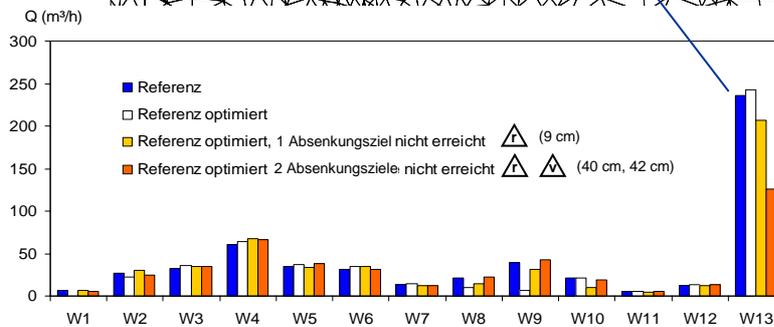
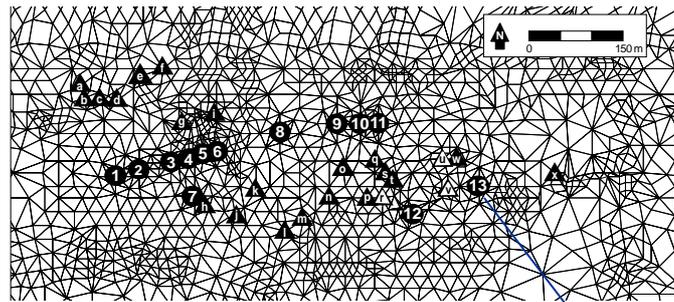
$$OF_1 = \sum_{i=1}^{13} Q_i \cdot 10^{10 \cdot \text{Pen}^{0.6}} = Q_{\text{tot}} \cdot 10^{10 \cdot \text{Pen}^{0.6}}$$

mit "Pen" als Strafterm:

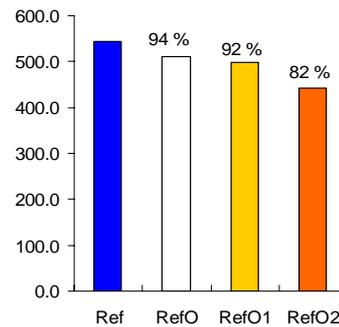
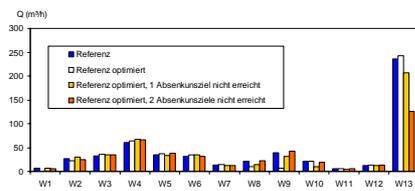
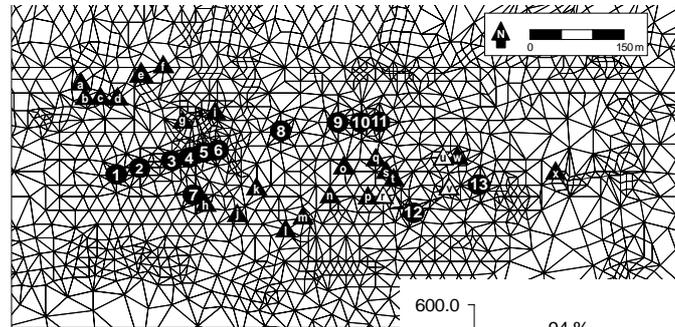
Pen = 0 wenn alle Absenkungsziele eingehalten werden

Pen > 0 wenn Absenkungsziele verletzt werden

Optimierung: Ergebnisse für das bestehende System



Optimierung: Ergebnisse für das bestehende System



Fragestellungen (2)

- Lässt sich Gesamtpumprate der bestehenden Anlage weiter reduzieren?
- Welche Absenkungsziele sind maßgebend für die Optimierung? (→ „neuralgische Punkte“)
- Kann mit dem Bau neuer Brunnen eine Verbesserung erreicht werden?
An welchen Positionen sind diese Brunnen zu bauen?

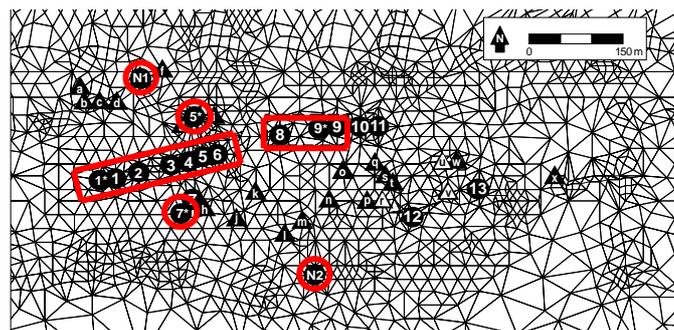
Optimierung: Zielfunktion 2 ("objective function", OF)

Minimierung der Gesamtpumprate Q_{tot} für die bestehenden und neuen Brunnen

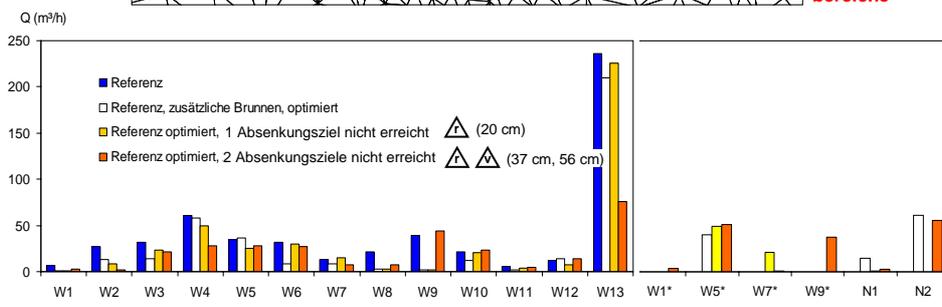
$$OF_2 = \left(\sum_{i=1}^{13} Q_i + \sum_{j=1}^J Q_j(x_j, y_j) \right) \cdot 10^{10 \cdot \text{Pen}^{0.6}} = Q_{\text{tot}} \cdot 10^{10 \cdot \text{Pen}^{0.6}}$$

mit J neuen Brunnen am Ort (x_j, y_j) :

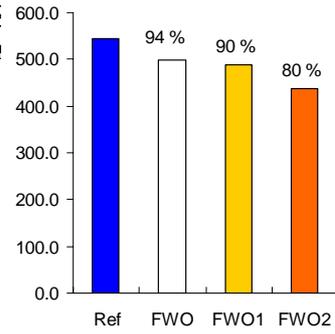
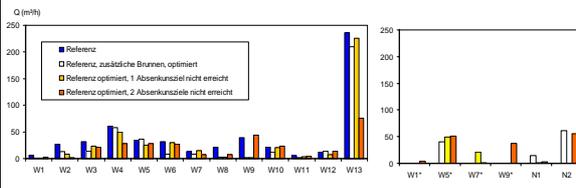
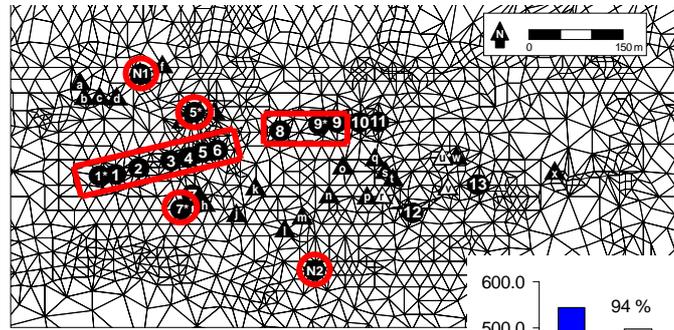
Optimierung: Ergebnisse für ein modifiziertes System



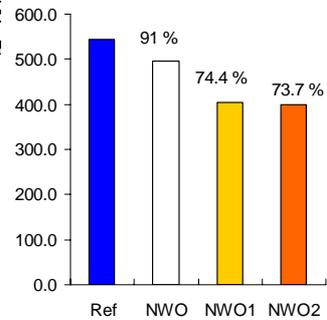
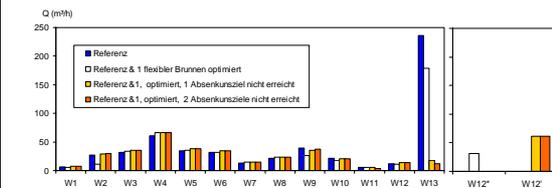
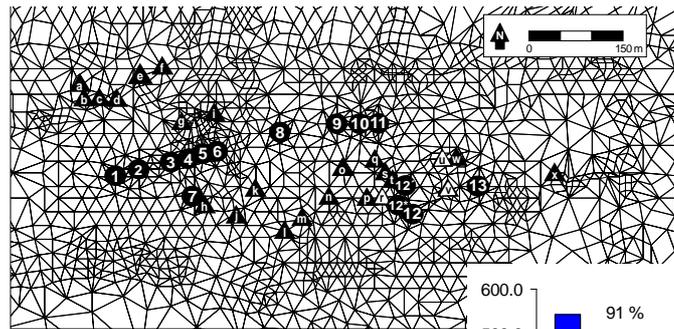
vorgegebene
Platzierungs-
bereiche



Optimierung: Ergebnisse für ein modifiziertes System



Optimierung: Ergebnisse für ein modifiziertes System



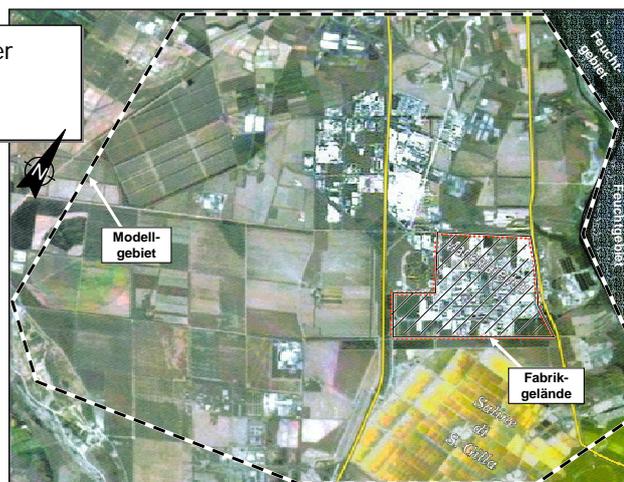
Resümee (1)

- Die Durchführung einer Modell-basierten Optimierung unterstützt den Planer und liefert Vorschläge für optimale Varianten
- Die Modell-basierte Optimierung ist einem "Trial-and-error"-Vorgehen i.A. überlegen, weil Intuition keine Rolle spielt.

Fallstudie 2: Grundwassersanierung

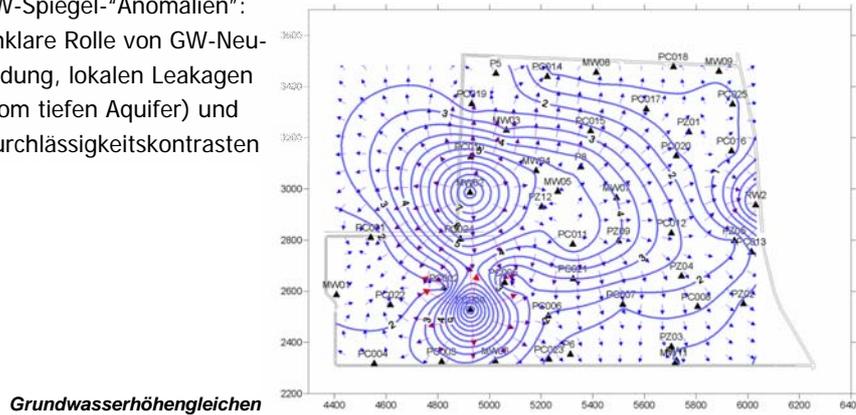
Petrochemische Fabrik

- Lage direkt an der Mittelmeerküste
- Fläche: ~ 2 km²



Petrochemie-Fabrik: Hydraulische Bedingungen

- Freier Grundwasserleiter über schluffig-tonigen Schichten
- Heterogene quartäre Ablagerungen (von Kies bis Schluff)
- Divergente (+/- stationäre) Strömungsverhältnisse
- GW-Spiegel-"Anomalien":
Unklare Rolle von GW-Neubildung, lokalen Leakagen (vom tiefen Aquifer) und Durchlässigkeitskontrasten



Petrochemie-Fabrik: Grundwasserverunreinigung

Schadstoffe

CKW: **1,2-DCA**, TCE, VC, cDCE, Chloroform, etc.

PAK: **Naphthalin**, Acenaphthen, etc.

BTEX: **Benzol**, Ethylbenzol, Toluol, etc.

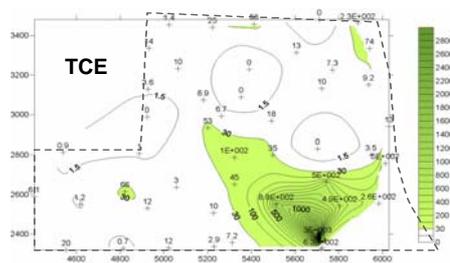
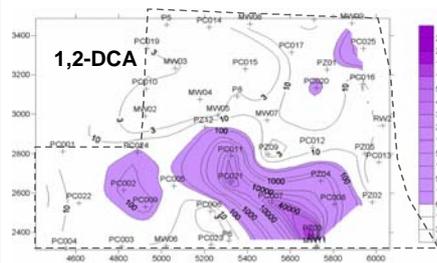
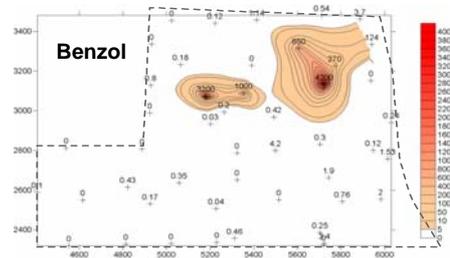


Compound of Concern (COC)	Maximum Concentration (µg/l)	MCL (DM 471/99) (µg/l)	MCL (DLgs31/2001) (µg/l)
Benzene	4200	1	1
Toluene	4900	15	NS
1,1,2-TCA	2500	0.2	NS
1,2-DCA	240 000	3	3
Chloroform	5500	0.15	NS
DCM	2050	NS	NS
PCE	3000	1.1	NS
TCE	5100	1.5	NS
1,1-DCE	2780	0.05	NS
1,2-DCE	3100	60	NS
VC	7000	0.5	0.5

... über 50 Verbindungen identifiziert!

Schadstofffahnen im Grundwasser: Kernbereiche

Konzentrationsverteilung der prioritären Schadstoffe im Grundwasser

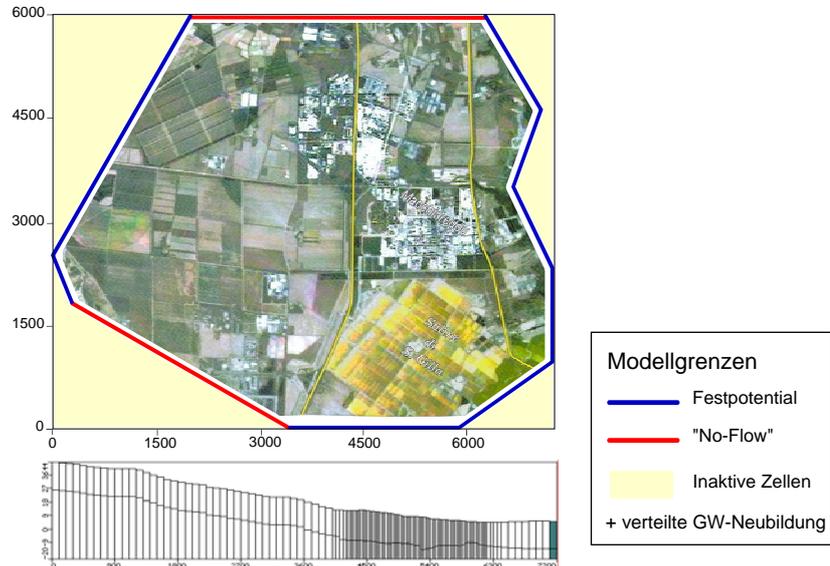


Ausgangslage: Sanierungssystem, Fragestellung

- Sanierung mit Pump-and-Treat
- Vorhandenes Schadstoffspektrum erschwert Wasseraufbereitung
- Erwartete Einsparungen durch eine getrennte bzw. spezifische Aufbereitung von CKWs und PAKs/BTEX:
 - CKWs durch katalytische Dechlorierung (Palladium)
 - PAKs/BTEX durch Aktivkohle
- Können die Sanierungsbrunnen so angeordnet werden, dass eine getrennte Fassung der Kernbereiche der CKW- und PAK/BTEX-Fahne möglich ist?

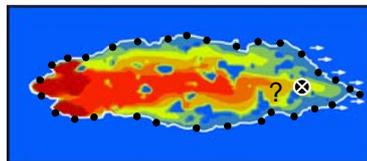
Ausgangslage: GW-Strömungsmodell (MODFLOW)

Geeichtes Modell der Fa. I.M.E.S.



Optimierungsstrategie: 3-stufiges Vorgehen

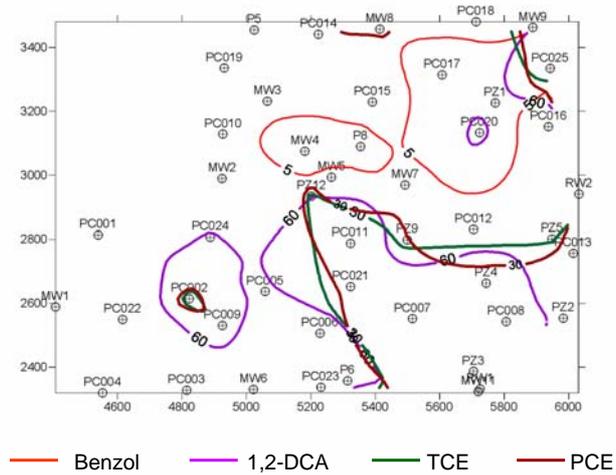
- 1. Stufe: **Hydraulische Optimierung** (Anwendung Strömungsmodell)
 - Suche nach den besten Brunnenkonfigurationen
 - Eignungsbewertung durch ein sogen. "advective Control"-Schema ("forward tracking" von Partikeln mit MODPATH, ausgehend vom Fahnenrand)



- 2. Stufe: **Transportmodellierung (MT3DMS)**
 - Modellierung für die zuvor bestimmten Brunnenkonfiguration(en)
- 3. Stufe: **Reaktordimensionierung & Kostenkalkulation**
 - auf der Grundlage der Ergebnisse (Durchbruchskurven) der 2. Stufe

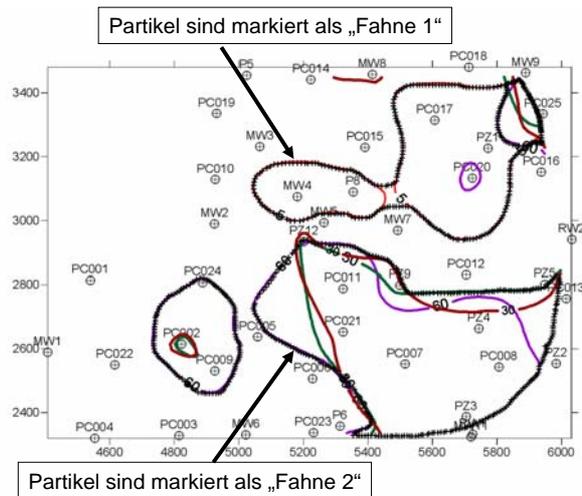
Kernbereiche der Schadstofffahnen

Graphische Überlagerung der Fahnenkernbereiche



"Particle Tracking"

Partikel-Startpunkte entlang der Einhüllenden der Fahnenkernbereiche



Zielfunktionen (OF) für die hydraulische Optimierung

(A) "Normale" Erfassung beider Schadstofffahnen

$$OF = (1 + pen_c) \cdot \sum_{i=1}^{n_{well}} Q_i(x_i, y_i)$$

$$pen_c = w_c \cdot \left(1 - \sum_{i=1}^{n_{well}} R_{cap,i} \right) \quad R_{cap,i} = \frac{n_{Part,erfasst\ von\ Brunnen\ i}}{n_{Part,gesamt}}$$

(B) Getrennte Erfassung der Schadstofffahnen

$$OF = (1 + pen_c + pen_{cc}) \cdot \sum_{i=1}^{n_{well}} Q_i(x_i, y_i)$$

$$pen_{cc} = w_{cc} \cdot \left(1 - \sum_{i=1}^{n_{well}} CC_i \right) \quad CC_i = \frac{\min_j R_{cap,i,j}}{\max_j R_{cap,i,j}}$$

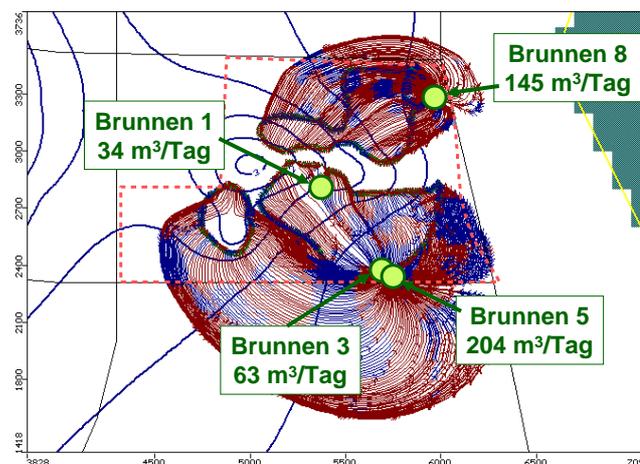
$CC_i = 0 \Rightarrow$ Brunnen i erfasst nur Partikel einer Schadstofffahne

$CC_i > 0 \Rightarrow$ Brunnen i erfasst Partikel beider Schadstofffahnen

Ergebnis der hydraulischen Optimierung

Differenzierte (getrennte) Erfassung der beiden Schadstofffahnen

Optimierte Lage der Brunnen und optimierte Pumpraten, Szenario1

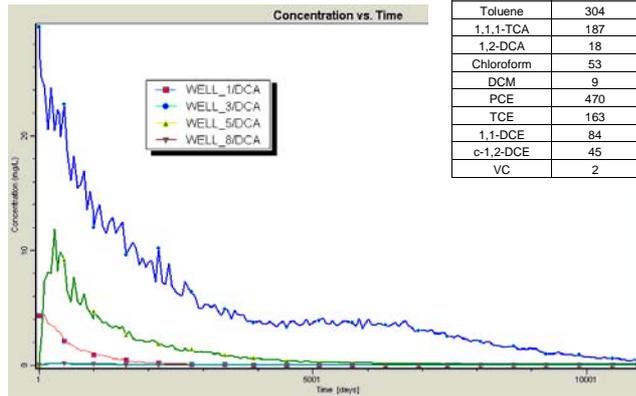


Gesamtpumprate = 446 m³/Tag (→ 30% Einsparung gegenüber bisheriger Planung mit "Trial and Error" und nicht getrennter Erfassung)

2. Stufe: Transportmodellierung mit MT3D-MS

Simulation für optimierte Brunnenkonfiguration(en) aus Stufe 1

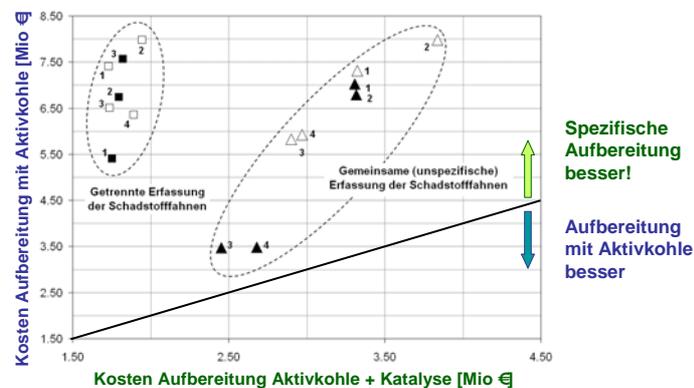
- Berechnung der Schadstoffkonzentration im Förderwasser der einzelnen Brunnen
- Zeitraum: 30 Jahre



Compound	K _{oc} (ml/g)	K _d	R _r	Mobility Class (Fetter, 2001)
Benzene	84	8.36E-02	1.5	high
Toluene	304	3.04E-01	2.9	moderate
1,1,1-TCA	187	1.87E-01	2.2	moderate
1,2-DCA	18	1.83E-02	1.1	very high
Chloroform	53	5.28E-02	1.3	high
DCM	9	8.76E-03	1.1	very high
PCE	470	4.70E-01	3.9	moderate
TCE	163	1.63E-01	2.0	moderate
1,1-DCE	84	8.36E-02	1.5	high
c-1,2-DCE	45	4.49E-02	1.3	very high
VC	2	2.47E-03	1.0	very high

3. Stufe: Reaktordimensionierung und Kostenrechnung

- Aus Stufe 1 und 2 bekannt: Pumpraten und Schadstoffkonzentrationen
- Reaktordimensionierung: Volumina der Reaktoren, Materialmengen, Intervalle für den Füllmaterialaustausch, etc.
- Dynamische Kostenrechnung: Investitionen, Betriebs- u. Unterhaltungskosten
- Vergleich zwischen Spezifische Aufbereitung → Aktivkohle + Katalyse
Gemeinsame Aufbereitung → Nur Aktivkohle



Resümee (2)

- Die Durchführung einer Modell-basierten Optimierung unterstützt den Planer und liefert Vorschläge für optimale Varianten
- Die Modell-basierte Optimierung ist einem "Trial-and-error"-Vorgehen überlegen, weil Intuition keine Rolle spielt.
- **Die Anwendung von Optimierungsverfahren ist für eine Vielzahl an Fragestellungen möglich**
 - Effiziente und robuste Optimierungsverfahren sind verfügbar
 - Kopplung mit jeder Art von Simulationsmodell ist über Schnittstellen möglich
 - Unterschiedlichste Zielsetzungen können durch entsprechende Zielfunktionen abgebildet werden