

Abschlussbericht

„Quantitative Ansätze zur Optimierung des Multi-Kompartiment-Konzeptes und für ein modell-basiertes Risikomanagement bei der Uferfiltration in hydraulisch und hydrogeochemisch heterogenen Aquifersystemen“

Gefördert durch die Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU), Aktenzeichen 33252/01.

Verfasser

Dustin Knabe, Prof. Dr. Irina Engelhardt, Paul Hepach



Prof. Dr. Christian Griebler, He Wang



Dirk Antunovic, Dr. Björn Droste, Prof. Dr. Hans-Peter Rohns



Dr. Micha Gebel, Stephan Bürger



Berlin, November 2021

Inhaltsverzeichnis

1. Anlass und Zielsetzung des Projekts.....	8
2. Arbeitsschritte und Methoden.....	11
2.1 AP1 Labor- und Feldexperimente.....	11
2.2 AP2 Numerische Analyse	18
2.3 AP3 Toolbox	21
2.4 AP4 CCP und Bewertung des Multi-Kompartiment-Konzeptes	27
3. Ergebnisse	29
3.1 AP1 Labor- und Feldexperimente.....	29
3.2 AP2 Numerische Analyse	44
3.3 AP3 Toolbox	56
3.4 AP4 CCP und Bewertung des Multi-Kompartiment-Konzeptes	64
3.5 Transfer auf hochdurchlässige Grundwasserleiter	70
4. Diskussion	73
5. Öffentlichkeitsarbeit	78
6. Fazit.....	80
7. Literatur	82

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1. Schema der üblicherweise am HMGU/UNIVIE verwendeten Mini-Sedimentsäulen (Hofmann et al. 2016). Die flexible Verwendung offener (a) und geschlossener (gas-dichte Teflonbeutel) (b) Mediumvorratsbehälter erlaubt es Versuche unter verschiedenen Redoxbedingungen durchzuführen.....	13
Abbildung 2. Säulenversuchsanlage der Stadtwerke Düsseldorf mit Rheinwassercontainer (vorne links).	14
Abbildung 3. Schematischer Versuchsaufbau der Sedimentsäule in der Versuchsanlage des Wasserwerks Holthausen. Die einzelnen Bauelemente sind chronologisch von der Eingabe des Rheinwassers bis zu Probenahme dargestellt. Im Zu- und Ablauf sind die einbrachten Modellsand/-kiese (braun) dargestellt. Die Gesamtmächtigkeit des Einbausediments inklusive Modellsand/-kies beträgt 151,2 cm.....	15
Abbildung 4. Messstellentransekte des Wasserwerks Flehe. Jedes Kästchen (graue Kästchen = vor Projektbeginn erstellt, rot = während des Projekts erstellt) markiert die Filterstrecke einer Messstelle einer Reihe (A, B, C, D, E), Q = Entnahmebrunnen. Benennung der Beobachtungsbrunnen erfolgt mittels Position der Filterstrecke, bspw. B1 = unterste Filterstrecke der B-Reihe, B6 = oberste filterstrecke der B-Reihe. Symbole deuten die Position von Datenloggern an (P: Druck-/Temperatur-Logger, T: Temperaturlogger, M: Multiparameter-Logger (Leitfähigkeit, Redoxpotential, pH, Sauerstoffgehalt). Mehrere Druck-/Temperatur bzw. Temperatur-Logger in einem Brunnen wurden an unterschiedlichen Tiefen der Filterstrecke platziert.....	17
Abbildung 5. Messstellen am Wasserwerkflehe. Links = Grundwassermessstellen B1-3, rechts = D1-3	18
Abbildung 6. Vereinfachtes und Verallgemeinertes Modell einer Uferfiltration.	22
Abbildung 7. Der Einfluss von Parameter-korrelation auf die tatsächliche Unsicherheit von Parametern (P1, P2) nach einer Kalibration. Nur Kombinationen von P1 und P2, die in der grünen Linse liegen kommen in der Kalibration vor. Kombinationen von P1 und P2 im orangen Bereich liefern Ergebnisse, die nicht der Kalibration entsprechen.	23
Abbildung 8. Tracer- und Virendurchbruchskurven aus Versuchen in den Mini-Sedimentsäulen zum Einfluss der Fließgeschwindigkeit auf den Virentransport.....	31
Abbildung 9. Tracerdurchbruchskurven von Versuch 1. CUFB1 = Zulauf, CUFA1-5 = seitliche Probenahmestellen von unten nach oben, CUFB2 = Ablauf der Säule.	32
Abbildung 10. Tracertest mit 1 mol/L KCl-Lösung. Probe MS1 = Zulauf, Probe MS6 = Ablauf.	33
Abbildung 11. Virendurchbruchskurven aus dem zweiten mesoskaligen Säulenversuch für unterschiedliche Tiefen in der Sedimentsäule bzw. unterschiedliche Distanzen der Sedimentpassage. Die Gesamtzahl an MS2 Virenpartikeln ist der Zahl an aktiven Phagen gegenübergestellt.	34
Abbildung 12. Maximale Durchbruchkonzentrationen für aktive MS2 Phagen mit Entfernung zum Säulenzulauf. Die gestrichelte Linie steht für eine hypothetisch exponentielle Abnahme der Virenabundanz in den Peaks der Durchbruchskurven.	35
Abbildung 13. Grundwasserspiegel in Beobachtungsbrunnen A3 (rot) und E1 (braun) (Linie = Loggerdaten, Punkte = Messwerte bei der Probenahme). Rheinpegel am Wasserwerk Flehe als schwarze Linie.....	37
Abbildung 14. Wassertemperaturen in den Beobachtungsbrunnen A3, A2 und B3 sowie im Rhein. Nur Loggerdaten gezeigt.....	37
Abbildung 15. Calcium-Konzentration in den verschiedenen Beobachtungsbrunnenreihen (A,B,C,D,E) sowie dem Entnahmebrunnen (Q) und dem Rhein. Landseitige Beobachtungsbrunnen (grün und braune Farben) zeigen erhöhte Calciumkonzentrationen bei niedrigen Rheinpegel (Sommer/Herbst 2018).....	38
Abbildung 16. Saisonale Dynamik einzelner bakterieller Indikatoren im Rhein und dem Grundwasser entlang eines Transektes vom Rhein (RR-A-B) zum Förderbrunnen (Q) und darüber hinaus (C-E). TCC: Gesamtzellzahl, F: Hochwasser; M: Mittelwasser; D: Niedrigwasser; T: Wassertemperatur, LOD: Detektionslimit.	39

Abbildung 17. Saisonale Dynamik einzelner viraler Indikatoren im Rhein und dem Grundwasser entlang eines Transektes vom Rhein (RR-A-B) zum Förderbrunnen (Q) und darüber hinaus (C-E). TVPC: Gesamtvirenpartikelzahl, F: Hochwasser; M: Mittelwasser; D: Niedrigwasser; T: Wassertemperatur, LOD: Detektionslimit.....	41
Abbildung 18. Räumlich-zeitliches Auftreten der bakteriellen und viralen Fäkalindikatoren am Wasserwerk Flehe. entlang des Hauptfließweges vom Rhein zum Förderbrunnen und aus dem Hinterland zum Förderbrunnen.	42
Abbildung 19. Rückhalteeffizienz mit Uferfiltration für ausgewählte Virale und bakterielle Indikatoren. Werte für die Gesamtzellzahl (TCC), Gesamtvirenpartikelzahl (TVPC) und Adenoviren verstehen sich pro Liter Wasser. Werte für E. coli, Coliforme sind in MPN 100mL ⁻¹ angegeben. Werte für C. perfringens sind in KBE 100mL ⁻¹ , und Werte für Coliphagen sind in PFU 100mL ⁻¹ angegeben. Die Rückhalteeffizienz für Adenoviren bezieht sich ausschließlich auf die Filterstrecke zwischen dem Rhein und Messstelle A2.....	43
Abbildung 20. Gamma-Logs für Beobachtungsbrunnen B1 und D1. Gestrichelte Rechtecke markieren Lage der verfilterten Tiefen der Beobachtungsbrunnen.	44
Abbildung 21. Modellierungsergebnisse des Säulenversuchs bei Annahme einer homogenen Säule. Oben: Tracerversuch. Unten: MS2-Injektionsversuch. Gezeigt ist das Unsicherheitsintervall basierend auf 24 Kalibrationen.	45
Abbildung 22. Modellierungsergebnisse des Säulenversuchs bei Annahme einer Zwischenschicht in der Säule. Oben: Tracerversuch. Unten: MS2-Injektionsversuch. Gezeigt ist das Unsicherheitsintervall basierend auf 24 Kalibrationen.	46
Abbildung 23. Modell des Untergrundes am Wasserwerk Flehe (überhöht). Bodenzone (grau), oberer Aquifer (hellrot), unterer Aquifer (rot), Aquitard (beige), ufernahe Kolmationsschicht (blau), zentrale Kolmationsschicht (orange), mit mittlerem Wasserstand des Rheins.	47
Abbildung 24. Links: Boxplot des Sensitivitätskoeffizienten μ für verschiedene Modellvariablen. Rechts: Parameter geordnet nach dem über zeit- und ort-gemittelten Sensitivitätskoeffizienten. Farbige Säulen zeigen Parameter an die in der stochastischen Modellkalibration verwendet wurden. Die Farben der Säulen zeigen die jeweilige Parametergruppe an.	48
Abbildung 25. Monitoring-Daten und Ergebnisse der stochastischen Modellkalibration für das Flehe Modell mit dem Datensatz 2003/4 an den Messstellen B1, B2, B3 und dem Förderbrunnen Q.. a) Übersicht über die nichtmikrobiologischen Daten. b) Fäkalindikatorbakterien (E. Coli und Coliforme). Farbige Flächen markieren das Unsicherheitsintervall der stochastischen Modellkalibration.....	49
Abbildung 26. Histogramme der normalisierten Parameter für die Modellergebnisse basierend auf 375 PSO-Lösungen. Farben entsprechen Gruppen aus Abbildung 24.....	50
Abbildung 27. Zonierung des Untergrundes im Modell für die Datenreihe 2018/19. Hellere Grautöne zeigen Zonen mit tendenziell höherer hydraulischer Leitfähigkeit an.	50
Abbildung 28. Temperaturverlauf in der Messstellentransekte des Wasserwerks Flehe. Rot/Orange = Messdaten, blaue = Model, schwarz = Messdaten im Rhein. Anmerkung, in einigen Messstellen waren zwei Datenlogger verbaut, die die Temperatur jeweils am oberen und unteren Ende des verfilterten Bereichs der Messstelle aufgenommen haben (Unterschied Rot zu Orange). Die Pump Rate ist skaliert auf einen Förderbrunnen.	51
Abbildung 29. Kalibrierte Permeabilität der Kolmationsschicht im Flussbett über die 6 Perioden.	51
Abbildung 30. Konzentration des gelösten Sauerstoffes, entlang der Messstellentransekte. Rote Punkte mit Fehlerbalken = Messwerte, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.....	52
Abbildung 31. Modellierungsergebnisse für Coliforme an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte = Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.	53
Abbildung 32. Modellierungsergebnisse für Somatische Coliphagen an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte =	

Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.....	54
Abbildung 33. Grundwasserfließgeschwindigkeit im Modell an Messstelle B1 (als Darcy Geschwindigkeit) zusammen mit dem Rheinpegel.....	54
Abbildung 34 Modellierungsergebnisse für Adenoviren an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte = Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.....	55
Abbildung 35. Fehler des Surrogate-Modells im Vergleich zum PFLOTRAN Modell über die Entfernung vom Fluss. Häufigkeitsverteilung der Fehler in Form von Perzentil-Intervallen. Surrogate-Modell für Bakterien (links), Surrogate-Modell für Viren (rechts). Positiver Fehler = Surrogate Modell überschätzt Reinigungsleistung, negativer Fehler = Surrogate Modell unterschätzt Reinigungsleistung.....	56
Abbildung 36. Surrogate Model Error (farbkodiert) zusammen geplottet mit den Parameterwerten für die Darcy-Geschwindigkeit und die Dispersivität (beide normalisiert auf das Intervall [0,1]). Nur Validation Runs mit Fehlern >1 log-lvl bei 500 m Distanz vom Fluss werden gezeigt.....	57
Abbildung 37. Surrogate Model im Vergleich zu realen Daten. Für Bakterien/Coliforme (oben) und Viren/Coliphagen (unten). Daten vom Wasserwerk Flehe am Brunnen A bzw. B zur Hochwasserzeit (HW) sind aus diesem Projekt. Die Daten der anderen 4 Standorte sind aus (Partinoudi & Collins, 2007). Falls an der Messstelle keine Bakterien bzw. Viren gemessen worden sind, wurde ein Mindestreduktionsvermögen angegeben, dass vorhanden sein muss um die Ausgangskonzentration aus dem Fluss unter die Nachweißgrenze zu bringen. Für Milford und Pembroke lagen keine Virendaten vor.....	58
Abbildung 38. Startseite der Website "Pathogene im Uferfiltrat".....	60
Abbildung 39. Konfigurationsumgebung für das Surrogate Modell.....	61
Abbildung 40. Visualisierung des Modellergebnisses für die geschätzte Reinigungsleistung der Uferfiltration.....	63
Abbildung 41. Bewertungsabbildung der Reinigungsleistung.....	63
Abbildung 42. Lage des Karbonataquifers in Süd-Italien und Einzugsgebiet der Capodifume Quelle..	70
Abbildung 43. Anmischen des Uranins mit Wasser (oberes Bild) und Einleiten des Tracers in die Höhle (unteres Bild).	71

Zusammenfassung

Organische Schadstoffe, pathogene Mikroorganismen und Viren können über Kläranlagenabläufe, Mischwasserentlastungen sowie Oberflächenabfluss von landwirtschaftlich genutzten Flächen in Oberflächengewässer, Uferfiltrat, Grundwasser und damit in das Trinkwasser gelangen. Ziel des Projektes war es ein modellbasiertes Werkzeug zu entwickeln, welches Wasserwerksbetreiber bei einer prozessbasierten Risikoanalyse und Bewertung des Transports von hygienisch relevanten Mikroorganismen und Viren in der Uferfiltration unterstützt. Dafür wurde ein mehrskaliger experimenteller Ansatz konzipiert basierend auf klein- und mesoskaligen Säulenexperimenten und Felduntersuchungen über einen Zeitraum von 1,5 Jahren an einer aktiven Uferfiltrationsanlage (Wasserwerk Flehe in Düsseldorf). Die Experimente wurden modelltechnisch begleitet u.a. mit Fokus auf Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen. Die Ergebnisse wurden anwenderfreundlich aufgearbeitet in einer Webanwendung, die es bspw. Wasserwerksbetreibern ermöglichen soll, quantitative Abschätzungen für die Reinigungsleistung ihrer Uferfiltration zu bekommen, um ihre Risikoanalysen bzgl. einer mikrobiellen Kontamination im Trinkwasser zu unterstützen.

Am Helmholtz-Zentrum München (HMGU) und der Universität Wien (UNIVIE) wurden verschiedene mikrobiologische und virologische Kenngrößen, Fäkalindikatoren und Modellviren ausgewählt und methodisch getestet, um die Reinigungswirkung durch den Transport im Untergrund zu quantifizieren. Die kleinskaligen Säulenversuche unterstrichen den Einfluss der Virenlast, Fließgeschwindigkeit, Redoxbedingungen und mikrobiellen Aktivität in den Ufersedimenten auf den Rückhalt, die Inaktivierung und den Abbau von Viren während der Uferfiltration. Ein Zusammenwirken aller Einflussgrößen wurde in einem mesoskaligen Säulenversuch in einer Versuchsanlage der Stadtwerke Düsseldorf untersucht. Die Ergebnisse zeigen einen guten Rückhalt der Modellviren in der Säule.

Für die Untersuchungen auf der Feldskala wurde beginnend mit Ende Januar 2018 bis Mai 2019 am Wasserwerk Flehe regelmäßig Proben an einer Messstellentransekte genommen und vom Labor der Stadtwerke Düsseldorf auf die üblichen chemischen und physikalischen Parameter untersucht, während die Analyse auf ausgewählte mikrobiologische und virologische Kennwerte durch das HMGU und später die Universität Wien durchgeführt wurde. Die hydrogeologischen und hydrochemischen Daten zeigen, dass nach dem Winterhochwasser 2017/18, bei dem Wasser vom Rhein weit in den Aquifer gedrückt wurde, sich im Verlaufe des Frühlings und Sommers wieder eine Teilung der unterirdischen Wasserkörper zwischen flusseitigen und landseitigen Grundwasser einstellte, bspw. sichtbar anhand der Wasserisotopensignatur, der Calcium-Konzentrationen aber auch anhand der Temperatur.

Die Abnahme der üblicherweise benutzten Indikatoren (coliforme Bakterien und *E. coli*) aber auch von Coliphagen zeigen die hohe Reinigungsleistung der Ufersedimente und des oberflächennahen

Aquifers. Im Rhein konnten die meisten Fäkalindikatoren und Viren das ganze Jahr über nachgewiesen werden, während diese im Uferfiltrat nur nahe zum Rhein und zu bestimmten Zeitpunkten feststellbar waren. Besonders ein ausgeprägtes Hochwasser zu Beginn der Messperiode verursachte erhöhte Konzentrationen von Fäkalindikatorbakterien und Bakteriophagen im ufernahen Aquifer. Kleinere Hochwasserperioden im späteren Verlauf hatten diesen Effekt jedoch nicht mehr, bzw. nur im Ansatz für die Coliphagen. Während der historischen Niedrigststände des Rheins im extrem trockenen und heißen Sommer und Herbst 2018 wurden Coliforme und Clostridium perfringens gelegentlich im Rohwasser am Förderbrunnen des Wasserwerkes nachgewiesen. Ein Fokus der Untersuchungen waren auch die humanpathogenen Adenoviren. Das Auftreten und die Anzahl von Adenoviren zeigte jedoch keinerlei Zusammenhang mit physikalisch-chemischen Faktoren oder anderen Fäkalindikatoren. Die kausalen Zusammenhänge müssen in zukünftigen Arbeiten noch detailliert geklärt werden.

Im Allgemeinen zeigt sich eine gute Reduzierung der Adenoviren und aller getesteten Indikatoren entlang der Uferfiltrationsstrecke. Eine Überwachung der hygienischen Wasserqualität durch E. coli und Coliphagen hätte im Beobachtungszeitraum ausgereicht. Für eine Zukunft mit vermehrten hydrologischen Extremereignissen und andere Standorte wird neben bakteriellen Indikatoren die Berücksichtigung viren-spezifischer Indikatoren nachdrücklich empfohlen. Abschließend wird darauf hingewiesen, dass die im Moment verfügbaren Nachweismethoden für pathogene Viren nicht die notwendige Sensitivität haben. Durch das Aufkonzentrieren von Pathogenen aus großen Wasservolumina ($\geq 100L$) kann die Nachweisgrenze weiter verringert werden.

Für die Modellierung der Experimente wurden die wichtigsten Transportprozesse von Viren und Bakterien mittels einer Literaturrecherche erfasst und der Modellierungssoftware (PFLOTTRAN) hinzugefügt. Ein 2D-Modell des Transports von Pathogenen am Wasserwerk Flehe wurde zunächst basierend auf einem älteren Datensatz (2003/4) entwickelt. Mit diesem Modell wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um die wichtigsten Parameter für den Virentransport zu bestimmen. Dabei waren vor allem die Inaktivierungskoeffizienten, die Korngröße, die Größe der Mikroorganismen aber auch die hydraulische Leitfähigkeit des Aquifers und der Kolmationsschicht besonders relevant. Die Modellierung der neugewonnenen Daten vom Wasserwerk Flehe (2018/19) offenbarte eine erhöhte räumliche Heterogenität der mikrobiologischen Messwerte gegenüber den hydraulischen und hydrogeochemischen Messwerten. Dies ist zum einen der erhöhten Messunsicherheit aber auch der komplexeren Transportprozesse geschuldet. Die Modellierung konnte im Allgemeinen die gemessenen Daten gut replizieren. Hauptfaktor für das Aufkommen höher Konzentrationen von Mikroorganismen im Aquifer war vor allem die Hydraulik. Insbesondere ein schnell ansteigender Flusspegel führte zu hohen Grundwasserfließgeschwindigkeiten und niedrigen Transportzeiten, und dementsprechend erhöhten Konzentrationen von mikrobiellen Größen. Der Effekt war besonders stark bei den Coliphagen zu beobachten. Auffallend war für die Bakterien, dass

im Winter 18/19 eine höhere Reinigungsleistung vorlag als im Winter 2017/18 bei ähnlichen Grundwasserfließgeschwindigkeiten. Dies konnte im Modell erklärt werden durch die zeitliche Veränderung der Kolmationsschicht (hydraulische Durchlässigkeit, effektive Korngröße), ausgelöst vor allem durch das ausgeprägte Hochwasser im Januar 2018.

Für die Umsetzung der Modellergebnisse in der Toolbox wurde ein Konzept mittels eines Surrogate-Modells entwickelt. Dafür wurde auf Basis des Modells für das Wasserwerk Flehe ein verallgemeinertes 1D Modell einer Uferfiltration in PFLOTRAN aufgestellt. Mittels mathematischer und numerischer Algorithmen wurde für dieses 1D Modell ein analytisch lösbares Surrogate Modell (Näherungsmodell) erstellt. Dieses Surrogate Modell erlaubt es die Reinigungsleistung einer Uferfiltrationsstrecke abzuschätzen auf Basis weniger standortspezifischer Parameter (Grundwasserfließgeschwindigkeit, mittlere Korngröße des Aquifers, etc.). Für den Anwender unbekannte Prozessparameter (Inaktivierungskoeffizient, Detachmentkoeffizient, etc.) fließen als Unsicherheit in das Ergebnis mit ein. Ein Prototyp als Webanwendung (www.pathogene-uferfiltration.de) mit Erklär- und Hilfetexten wurde erstellt. Durch die Webanwendung mit dem Surrogate Modell sind Anwender in der Lage quantitative Abschätzungen für die Reinigungsleistung ihrer Uferfiltrationsstrecken bzgl. Mikroorganismen durchzuführen. Durch die Beschränkung des Projektes auf einen Standort fehlt jedoch noch eine Validierung des Surrogate Modells auf anderen Standorten, welches deshalb nur als Prototyp gelten kann.

Die Validierung des Surrogate-Modells soll Teil eines Nachfolgeprojektes werden, welches unter anderen auch den Fokus stärker auf Extremwetter und Hochwässer legen soll. Letztere waren auch in diesem Projekt ein Hauptgrund für erhöhte Konzentrationen von Viren und Fäkalindikatoren im Grundwasser.

Abschlussbericht

1. Anlass und Zielsetzung des Projekts

Während sich die Wissenschaft in der Vergangenheit vor allem dem Schicksal pathogener Bakterien gewidmet hat, ist unser Wissen über den Verbleib von pathogenen Viren in aquatischen Systemen lückenhaft. Sie gelangen mit den Ausscheidungen von Mensch und Tier ins Abwasser oder direkt in die Umwelt (Aufbringung von Mist und Gülle in der Landwirtschaft). Obwohl Kläranlagen heute sehr effizient verschiedenste Schadstoffe entfernen, ist die Reduktion von Pathogenen unvollständig und Krankheitserreger werden kontinuierlich in die Vorfluter und somit in die Oberflächengewässer abgegeben. Verschiedene Studien haben gezeigt, dass humanbürtige Viren auch in Grundwasserleitern keine Seltenheit sind (Seidel et al., 2016; Xagorarakis et al., 2014; Pronk, 2010).

Da Viren in der Regel sehr viel kleiner sind als Bakterien (10 bis 300 nm), kann angenommen werden, dass sie auch über weite Strecken transportiert werden. Bisherige Resultate zum natürlichen Rückhalt in Sedimentkörpern sind sehr widersprüchlich (Krauss & Griebler, 2011). Sicher ist, Viren können in der aquatischen Umwelt über mehrere hundert Tage infektiös bleiben. Viren sind zudem meist resistenter gegenüber Desinfektionsverfahren als Bakterien (Schijven et al., 1999). Hinzu kommt, dass bei Viren die ‚infektiöse‘ Dosis mit einem aktiven Viruspartikel viel geringer ist als bei den meisten pathogenen Bakterien (ca. 100-1000 Zellen) (Krauss & Griebler, 2011).

In der Umwelt tragen verschiedene Prozesse zur Inaktivierung und Elimination von Viren bei, bspw. UV-Licht und erhöhte Temperatur (Schijven et al., 1999). Aber auch die Anwesenheit anderer Mikroorganismen, welche die Viren angreifen, haben einen Einfluss auf die Inaktivierung (Pang et al., 2009, Feichtmayer et al., 2017). Ein wichtiger Prozess für den Rückhalt von Viren in Sedimenten und Grundwasserleitern ist ihre Sorption an geladene Oberflächen. Wenig untersucht ist bisher, ob Sorption auch mit einer Inaktivierung einhergeht und ob diese reversibel ist, bisherige Ergebnisse sind widersprüchlich (Van der Wielen et al., 2008; Pang et al., 2009; Joshi et al., 2013, Frohnert et al., 2014). Verschiedene Studien haben gezeigt, dass Sorptionsprozesse abhängig sind vom Wasserchemismus (Anwesenheit von gelösten organischen Kohlenstoff, Anwesenheit von 2-wertigen Kationen, pH-Wert, Ionenstärke), Sättigungsgrad, biologischen Faktoren, Kornverteilung des Aquifers und Mineralogie des Aquifers (Anwesenheit von Metalloxiden) (Xagorarakis et al., 2014). Für den Transport von Viren sind weiterhin relevant die Sorption an bewegliche Partikel (Co-Transport), die Bildung von Viren-Aggregaten, der Transport auf präferentiellen Fließwegen, und die Eigenschaften des Viruspartikels selbst (e.g. Syngouna & Chrysikopoulos, 2015). Von Bedeutung ist dabei auch die Heterogenität des

Grundwasserleiters (hydraulisch und hydrogeochemisch), welche insbesondere bei der Quantifizierung auf dem Feldmaßstab eine besondere Herausforderung ist.

Einen signifikanten Einfluss auf den Transport der Viren haben hydrologische Ereignisse, da es durch Hochwasserwellen oder den erhöhten Eintrag von Niederschlagswasser in den Grundwasserleiter zu einer Veränderung des Grundwasserchemismus (bspw. niedrigere Ionenstärke, veränderte Redox-Bedingungen) kommen kann, aber auch eine Veränderung der Hydraulik über höhere Fließgeschwindigkeiten oder steigende und fallende Sättigungslinien kann den Transport von Viren erhöhen oder deren Remobilisierung verursachen (Chen and Saiers, 2009; Xagorarakis et al., 2014).

Quantitativ kann der Transport von Viren mittels der Kolloid-Filtrations-Theorie (CFT) zwar beschrieben werden. Sie funktioniert jedoch nur einwandfrei für „saubere“ Substrate mit konstanten chemischen Eigenschaften und solange keine Abstoßung zwischen Kolloiden (bspw. Viren) und dem Korngerüst existiert (Hunt & Johnson, 2017; Tufenkji & Elimelech, 2004). Die Sorption von Kolloiden auf der Nanoskala ist ein äußerst komplexer Prozess mit einer Vielzahl von auftretenden Kräften, welche in der Regel mit der (erweiterten) Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO) Theorie beschrieben werden (Chrysikopolous & Syngouna, 2012). Die Summe dieser Kräfte entscheidet, ob ein Kolloid bei einem bestimmten Abstand von einer Oberfläche abgestoßen oder angezogen wird. Unter den meisten natürlichen Bedingungen sind signifikante abstoßende Kräfte vorhanden, aufgrund der negativen Oberflächenladung von Viren und der Mineralkörner (Hunt & Johnson, 2017). Neuere Untersuchungen haben gezeigt, dass unter durchschnittlich abstoßenden Verhältnissen besonders die chemische Heterogenität und die Oberflächenrauigkeit auf der Nanoskala entscheidend sind für die in verschiedensten Experimenten festgestellte Sorption von Viren unter ungünstigen Bedingungen (Hunt & Johnson, 2017; Trauscht et al., 2015; Argent et al., 2015; Bradford et al., 2013; Johnson et al., 2007).

Prozess-basierte mechanistische Modelle zur Beschreibung der Mobilisierung und Inaktivierung von Viren unter variabel gesättigten Bedingungen existieren derzeit nicht, noch wurden sie auf der mehrdimensionalen Skala auf kontrollierte Felddaten angewendet (Cheng & Saiers, 2009). Es gibt zwar verschiedene Ansätze, um die komplexen Einflüsse auf den Transport von Viren zu berücksichtigen (verschiedene Sorptionsplätze (Kvitsand et al., 2015), reversible und irreversible Sorption (Sasidharan et al., 2017), Blocken von Sorptionsplätzen (Wang et al., 2013), mechanische Filtration an kleinen Poren (Bradford et al., 2003), veränderlicher Sättigungsgrad (Cheng & Saiers, 2009)) jedoch basieren diese meist nur auf Laborexperimenten und wurden nur selten auf der Feldskala angewandt (e.g. Kvitsand et al., 2015).

Zielsetzung

Das langfristige Ziel der Arbeiten ist die Weiterentwicklung eines **Multi-Kompartiment-Konzepts** für die Uferfiltration zur besseren Abschätzung des Transports hygienisch relevanter Mikroorganismen unter Berücksichtigung der Selbstreinigungswirkung der einzelnen Kompartimente. Darüber hinaus sollen die Untersuchungen Aussagen ermöglichen, ob klima-induzierte Hochwasserereignisse und Änderungen der hydraulischen Verhältnisse und Temperatur im Oberflächen- und Grundwasser auch zu einer langfristigen Änderung des Transports und der Elimination hygienisch relevanter Mikroorganismen führen können.

Die grundlegende Idee zur Erreichung der Projektziele ist die **Quantifizierung der Mobilität von infektiösen Viren an der Übergangszone Oberflächenwasser – Grundwasser** und im **Grundwasserleiter** zur Ermittlung des Transportrisikos von hygienisch relevanten Mikroorganismen bei der Uferfiltration. Es gliedert sich in folgende Meilensteine:

Identifizierung von **Schlüsselprozessen**, wie Sorption und Inaktivierung, beim Transport von Viren unter variablen hydraulischen (gesättigt versus ungesättigt) und geochemischen Bedingungen (Redox-Bedingungen, Ionenstärke) und die Ermittlung relevanter Prozessparameter.

Durchführung eines event-basierten Monitorings am Wasserwerk Flehe zum Design einer optimalen und repräsentativen **Monitoringstrategie zur Virendetektion** auf der Feldskala.

Prozess-basierte Simulation des Transports von Viren bei der Uferfiltration zur Entwicklung eines „**Critical Control Points**“ Plans für ein Langzeit-Monitoring und einen risikobasierten Managementplan bei der Uferfiltration.

Entwicklung einer **modell- und prozess-basierten Tool-Box** für Anwender aus der Praxis, die einerseits standortspezifische Eigenschaften berücksichtigen andererseits die identifizierten Schlüsselprozesse entsprechend ihrer Relevanz abstrahieren kann.

2. Arbeitsschritte und Methoden

2.1 AP1 Labor- und Feldexperimente

Modellviren, Fäkalindikatoren und andere mikrobiologische Messgrößen

Unabhängig vom experimentellen Ansatz wurden im Vorfeld verschiedene Modellviren (Bakteriophage MS2), humanpathogene Viren (Adenoviren), Fäkalindikatoren (*E. coli* & coliforme Bakterien) und allgemeine mikrobiologische Kenngrößen (Gesamtzellzahl, ATP) ausgewählt, um die Filtereffizienz für pathogene Viren und Keime während der Sedimentpassage bei der Uferfiltration systematisch zu untersuchen. Das Messprogramm wurde ergänzt durch Analysen der Wasserchemie mit Fokus auf Wassertemperatur, pH, Hauptionen (Kat- und Anionen) und gelösten organischen Kohlenstoff (DOC). Im Folgenden sind die einzelnen mikrobiologischen Messgrößen kurz beschrieben.

Die Quantifizierung der aktiven **MS2** Modellviren erfolgte mittels Plaque-Test auf Platte; d.h. sogenannte Plaque forming Units (PFUs) wurden gezählt. Dafür wird eine frische Wasserprobe auf eine Platte mit Bakterienrasen aufgebracht. Überall dort wo ein Viruspartikel eine Wirtszelle (*E. coli*) infiziert und lysiert entsteht ein Loch (Plaque) im Bakterienrasen. Die Anzahl der Löcher steht für die Konzentration an infektiösen Viruspartikeln. Die Gesamtzahl aller MS2 Partikel wurde dazu im Vergleich mittels quantitativer PCR (qPCR) ermittelt (siehe dazu auch Adenoviren im folgenden Abschnitt).

Für die Analyse von **Adenoviren** wurde das Probenwasser (10 L) zuvor durch einen 0,2 µm Filter filtriert, um die Bakterien und größere Organismen bzw. Partikel zu entfernen. Die im Filtrat verbleibenden Viren wurden durch Zugabe von Eisenchlorid zusammen mit dem Eisen ausgefällt und abfiltriert (0,45 µm). Anschließend wurde der Niederschlag auf dem Filter durch eine Säure aufgelöst und gepuffert. Aus dieser Lösung wurde die gesamte Viren-DNA und RNA extrahiert. Mittels quantitativer PCR (digital droplet PCR) wurden die Kopien einzelner Virengenome im Vergleich zu einem Standard bestimmt und so die ursprüngliche Anzahl der Viren im Wasser errechnet. Bei am Sediment adsorbierten Viren wurde die DNA und RNA für die molekularbiologische Quantifizierung direkt vom Sediment extrahiert.

Die Fäkalindikatoren, **coliforme Bakterien** und *E. coli*, wurden mithilfe des selektiven Agars Chromocult auf Platte quantifiziert. Nach Filtration von 100 mL frischer Wasserprobe (0,45 µm) wurde der Filter auf dem Agar für 24h inkubiert bevor ‚Coliforme‘ und *E. coli* simultan ausgezählt wurden.

Ähnlich den coliformen Bakterien werden die **Coliphagen** zunehmend als viren-spezifische Fäkalindikatoren herangezogen und sind mit der Novelle im Jahr 2020 auch in das Messprogramm der

EU-Trinkwasserrichtlinie (Richtlinie (EU) 2020/2184) aufgenommen worden. Basierend auf einem Protokoll von Binder (2013) wurden die Coliphagen aus 10L Wasserproben mittels eines Kieselgurfilters zuerst in diesem aufkonzentriert und anschließend mit einem kleinen Volumen Fleischextraktlösung eluiert. Die Quantifizierung der Coliphagen, unterschieden in F+ Coliphagen und somatische Coliphagen, erfolgte mittels Plaque-Test (siehe MS2 oben).

Als Maß für die bakterielle Biomasse wurde die **Gesamtzahl der prokaryotischen Zellen (GZZ)** mittels Fluoreszenzfärbung (SybrGreen) und Durchflusszytometrie ermittelt. Wasserproben wurden dafür mit Glutardialdehyd (0,5% Endkonzentration) fixiert. Gleichermaßen wurden die **Virenpartikelgesamtzahlen (GVPZ)** quantifiziert.

Die mikrobielle Aktivität wurde über den Summenparameter **Adenosintriphosphat (ATP)** erfasst. Zellinternes ATP wurde dabei über die Gesamt-ATP Konzentration und dem extrazellulären ATP in frischem Probenwasser mittels Luziferasetest und Biolumineszenz ermittelt.

Als wichtige Begleitparameter und Steuergrößen für die mikrobielle Aktivität wurde der **gelöste organisch Kohlenstoff (DOC)** gemessen. Der DOC wurde nach Filtration der frischen Wasserprobe (0,45µm), anschließendem Ansäuern und Durchblubbern, in einem TOC Analyzer gemessen.

Kleinskalige Säulenversuche an der UNIVIE

Für systematische Untersuchungen zum Einfluss verschiedener Umweltfaktoren auf den Rückhalt (reversible und irreversible Sorption) und Transport von Viren durch wassergesättigtes und biologisch aktives Sediment wurden an der Universität Wien (UNIVIE) Experimente in Mini-Sedimentsäulen durchgeführt (Abbildung 1). Die Sedimentsäulen waren aus Glas mit einer Länge von 10,7 cm und einem Innendurchmesser von 1,3 cm. Die Säulen wurden unter Wasser mit Sediment gefüllt und an beiden Enden mit einer Edelstahlgaze und einem Silikonstopfen geschlossen. Für den Zu- und Abfluss dienten je eine Kapillare in den beiden Stopfen. Der Sand, mit dem die Säulen gepackt wurden, stammte aus seiner Bohrung am Untersuchungsstandort Flehe und hatte eine Korngröße von 0,25–0,5 mm. Die mittlere Porosität war 39%. Medium (Virenlösung, virenfrees Leitungswasser) wurde mit Hilfe von Stahlkapillaren und einer Peristaltikpumpe in die Säulen geleitet. Die Säulen wurden von unten nach oben durchströmt. Durch die Stahlgaze in den Säulen wurde der Wasserstrom verteilt und Verstopfungen verhindert. Die Standardpumprate (volumetric flow) war 3 mL min^{-1} , was einer Abstandsgeschwindigkeit von 1 m d^{-1} entspricht. Vor jedem Versuch wurden die Säulen zur Konditionierung über Nacht mit viren-freiem Wasser durchströmt. Als Medium diente in der Regel Leitungswasser. Für jeden Versuch wurde frisches Sediment in die Säulen gefüllt. Der Vorteil dieser kleinen Säulen ist, dass sie in hoher Stückzahl parallel betrieben werden können und in zeitlichen

Abständen nicht nur Wasserproben, sondern auch Sedimentproben gewonnen werden, indem einzelne Säulen für Analysen entnommen werden. In jedem der Versuche wurden parallel acht Sedimentsäulen gefahren für einen Zeitraum von zwei Wochen. Einer ersten Phase der Injektion eines Virenpulses (3,87h – 7,73h) folgte eine zweite Phase (14 Tage) wo die Säulen mit virenfreiem Wasser beschickt wurden. Alle Experimente wurden bei einer Temperatur von 12°C im Dunkeln durchgeführt.

Als Surrogat für humanpathogene Viren kam der Bakteriophage MS2 zum Einsatz. Als flüssiges Medium diente Leitungswasser, mit Ausnahme der Experimente, wo es um die erhöhte Bioaktivität ging. Diese wurden mit Flusswasser gefahren. Regelmäßige Tests zeigten, dass es keinen Hintergrund an MS2 Viren in den Sedimenten noch im Leitungs- oder Flusswasser gab. Eine Stunde vor Start der Experimente (Virenpuls) wurden die Vorratsbehälter mit MS2 und einem konservativen Tracer (Fluoreszin) beimpft. Standardvirenkonzentration (C_0) für die Experimente war 10^7 PFUs mL^{-1} mit Ausnahme jenes Experiments (Exp. 2), welches den Effekt unterschiedlicher Virenkonzentrationen zum Thema hatte. Wasserproben am Auslass der Säulen wurden manuell gesammelt, anfangs in Phase 1 alle 16 min für den Zeitraum des Virenanstiegs und alle 32 min im Plateau der Virenkonzentration, gefolgt von Phase 2 in der für einen Zeitraum von 12h alle 64 min Proben gesammelt wurden. Weitere Proben wurden nach 25 h, 1 Woche und final nach 2 Wochen gesammelt. Sediment wurde zu Beginn der 2. Phase und zu jedem weiteren Probenahmetermin (25 h, 1 Woche und 2 Wochen) gesammelt. Alle Wasser und Sedimentproben wurden bei 4°C zwischengelagert und schnellstmöglich aufbereitet.

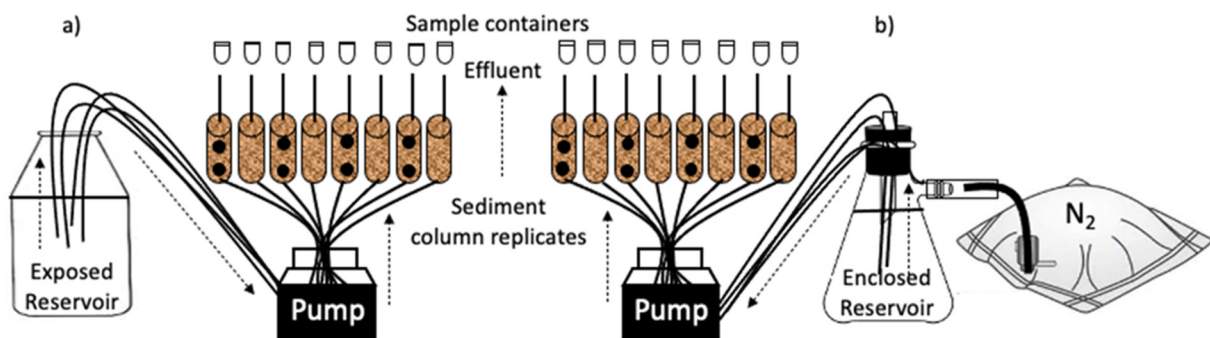


Abbildung 1. Schema der üblicherweise am HMGU/UNIVIE verwendeten Mini-Sedimentsäulen (Hofmann et al. 2016). Die flexible Verwendung offener (a) und geschlossener (gas-dichte Teflonbeutel) (b) Mediumvorratsbehälter erlaubt es Versuche unter verschiedenen Redoxbedingungen durchzuführen.

Insgesamt wurden 4 Experimente durchgeführt um 4 Einflussfaktoren (Grad der Kontamination [viral load], Fließgeschwindigkeit, Sauerstoffverhältnisse und Redoxpotential, und Bioaktivität) zu untersuchen. In Experiment 1 wurde zusätzlich zur Standard-Abstandsgeschwindigkeit (1 m Tag^{-1}) die Folgen einer geringeren Fließgeschwindigkeit ($0,5 \text{ m Tag}^{-1}$) getestet. In Experiment 2 wurden zwei weitere Virenkonzentrationen im Puls (10^4 PFUs mL^{-1} und 10^5 PFUs mL^{-1}) verfolgt. Für Experiment 3 wurden in der Virenlösung und dem zuströmenden Wasser die Sauerstoffkonzentration stark herabgesetzt (hypoxische Bedingungen) bzw. alle Medien mit Hilfe eines Reduktionsmittels

sauerstofffrei gemacht (anoxische Bedingungen). Experiment 4 wurde unter Standardbedingungen durchgeführt, jedoch wurde zuvor ein Säulenset autoklaviert (sterilisiert) und das andere durch eine entsprechende Vorlaufzeit unter Zugabe von DOC und Nährstoffen in seiner biologischen Aktivität stimuliert. Im Detail, die biologisch stimulierten Säulen wurden über einen Zeitraum von mehreren Tagen mit DOC und N/P angereichertem Flusswasser gefahren. Vor dem Virenpuls und für den restlichen Verlauf des Sediments wurden die Säulen mit sterilfiltriertem Flusswasser infiltriert.

Mesoskalige Säulenversuche bei den Stadtwerken Düsseldorf

Die Säulenversuchsanlage (2,4 m Länge, 60 cm Durchmesser) der Stadtwerke Düsseldorf AG, wurde für das aktuelle DBU Projekt angepasst, um einen klassischen Säulenversuch mit vollständiger Durchströmung von unten nach oben fahren zu können, Abbildung 2.

Tracerversuch (Vorversuch):

Für einen Vorversuch wurde eine Sand-Kiesmischung in die Säule eingebaut, die in etwa der mittleren Körnung der Aquifersedimente am Wasserwerk Flehe entspricht. Nach vollständiger Sättigung wurde zur Equilibrierung die Säule drei Wochen mit Rheinwasser durchströmt, welches aus einem IBC-Container vor Ort der Anlage über eine Pumpe zugeführt wurde. Um zu verhindern, dass sich die Trübstoffe absetzen, wurde das Wasser im Container permanent belüftet. Zum Test der Funktionalität der Messeinrichtungen und der Ermittlung der hydraulischen Kennwerte wurde dieser Vorversuch im Februar 2018 mit Bromid als konservativer Tracer durchgeführt. Dieser Vorversuch hat gezeigt, dass der Versuchsaufbau durch das



Abbildung 2. Säulenversuchsanlage der Stadtwerke Düsseldorf mit Rheinwassercontainer (vorne links).

Totvolumen im Zustrom zu einer Akkumulation des Tracers am Säulenboden und somit zu einer Durchmischung mit Rheinwasser, sowie zu einem verzögerten Transport führte. Zusätzlich zeigte die tiefenhorizontierte Beprobung über die Seitenflansche eine verfälschte Wiederfindung des Tracers (siehe auch 3.1).

Versuch Virentransport (Versuch 2):

Mit Hilfe dieser Erkenntnisse wurde die Säule für einen weiteren Versuch adaptiert, um die anfänglichen Schwierigkeiten zu beheben. Dafür wurde die untere Wanne am Zulauf mit grobkörnigem

Kies aufgefüllt, um das Totvolumen zu verringern. Weiterhin wurden die seitlichen Öffnungen an der Säule verschlossen und die tiefenhorizontierte Probenahme erfolgte nun über mehrere Schläuche, die im inneren der Säule tiefenhorizontiert positioniert wurden und darüber hinaus mit Sauerstoff- und Temperatursensoren ausgestattet waren. Die Säule wurde nun mit Sediment aus der Uferfiltrationstransekte des Wasserwerks Flehe befüllt, welches bei der Erstellung neuer Beobachtungsbrunnen gewonnen wurde. Aufgrund des hohen Kernverlustes der Liner-Bohrungen (ca. 50%) konnte die Versuchssäule jedoch nur bis zu einer Höhe von 1,20 m befüllt werden. Von unten (Port 1) nach oben (Port 5) beginnend, wurde direkt über den Filterkies im Filterdeckel sowie alle 35 cm bzw. die letzte Entnahmestelle nach 15 cm, Probenahmestellen mit Schlauchverbindern eingebaut. Um den obersten Schlauch zu fixieren und zum Ablauf hin eine durchgängige Bodensäule zu gewährleisten, wurden die letzten 10 cm mit Mittel- und Feinsand aufgefüllt. Probe 1-5 wurden mittels Peristaltikpumpe Gilson, Typ Minipuls 2) gefördert und durch einen Fraktionssammler aufgefangen (Abbildung 3).

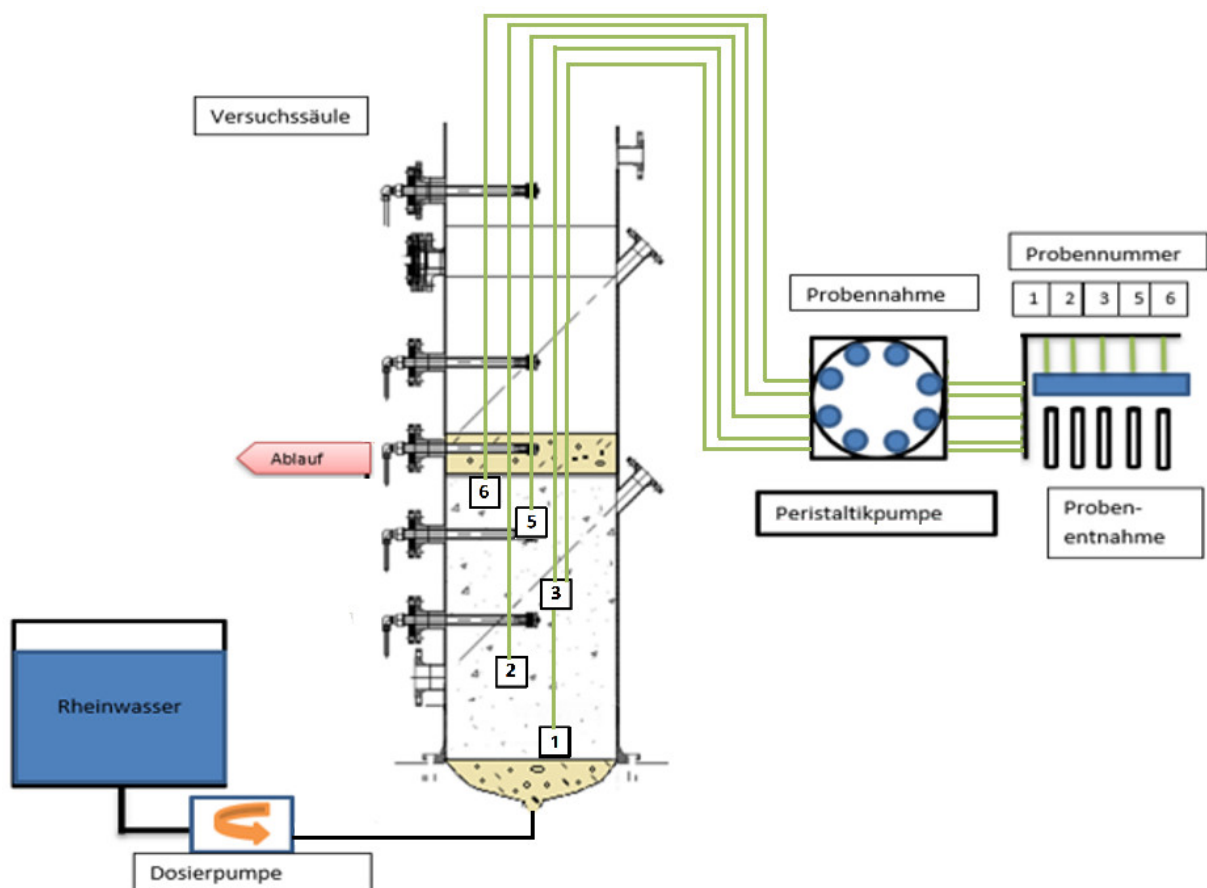


Abbildung 3. Schematischer Versuchsaufbau der Sedimentsäule in der Versuchsanlage des Wasserwerks Holthausen. Die einzelnen Bauelemente sind chronologisch von der Eingabe des Rheinwassers bis zu Probenahme dargestellt. Im Zu- und Ablauf sind die einbrachten Modellsande/-kiese (braun) dargestellt. Die Gesamtmächtigkeit des Einbausediments inklusive Modellsand/-kies beträgt 151,2 cm.

Nach Befüllung der Säule wurde nach mehrwöchiger Equilibrierung mit durchströmenden Rheinwasser zur Ermittlung der hydraulischen Kennwerte am 13.03.2019 ein Tracertest diesmal mit Kaliumchlorid als Leitfähigkeitstracer durchgeführt. Dafür wurde 1 Liter einer 1 mol/L KCl Lösung mit einer Pumprate von 6,44 L/h innerhalb von 10 Minuten injiziert. Für den weiteren Versuchsverlauf wurde die Pumprate konstant auf 6,44 L/h gehalten. Die Leitfähigkeit wurde an den Ports alle 10 Minuten über einen Zeitraum von 33 Stunden bestimmt mit einer zeitlichen Lücke in der Nacht.

Im Anschluss wurde vom 27.03.2019 bis 07.05.2019 ein Virentransportversuch mit MS2 Bakteriophagen durchgeführt. 11 L einer Bakteriophagensuspension (Modellvirus MS2) mit einer Konzentration von $1.15 \cdot 10^{10}$ PFU/mL wurden über einen Zeitraum von 100 Minuten (1,7 h) in die Säule zugegeben. In regelmäßigen Zeitintervallen wurden Wasserproben an den einzelnen Ports entnommen für den Nachweis von aktiven Phagen (als PFUs) und die Phagengesamtzahl (als Phagengenome mittels qPCR bestimmt). Am Ende des MS2 Säulenversuchs wurden aus unterschiedlichen Tiefen Sediment entnommen und ebenfalls auf die Gesamtphagenzahl und die Anzahl an aktiven Phagen untersucht.

Groß-skaliges Feldmonitoring

Unter Berücksichtigung der hydrogeologischen Eigenschaften und vorhandenen Grundwassermessstellen am Wasserwerk Flehe wurde ein Monitoringkonzept entwickelt, das zum einen eine möglichst genaue Auflösung der Prozesse der Uferfiltration wiedergibt und zum anderen mit dem Trinkwasserschutz und dem betrieblichen Ablauf des Wasserwerks vereinbar ist. Dem folgend wurden an allen Messstellen der Transekte des Wasserwerks Flehe sowie des Rheins seit dem 31.01.2018 bis zum 08.05.2019 ca. alle 2 Wochen Grundwasserproben genommen nach den gängigen Vorschriften und Normen, und auf die üblichen physikalischen (Temperatur, Druck) und hydrochemischen Parameter (pH, elektrische Leitfähigkeit, Redox-Parameter, Hauptanionen- und Kationen) sowie auf ausgewählte Spurenstoffe (Röntgenkontrastmittel, Arzneimittelreststoffe) und mikrobiologische Messgrößen (Fäkalindikatoren) im Labor der Stadtwerke Düsseldorf untersucht (Tabelle 1). Darüber hinaus wurden ungefähr alle 4 Wochen zusätzlich Proben von Mitarbeitern des HMGU genommen zu virologischen Analysen (Coliphagen, Adenoviren) sowie einiger weiterer ausgewählter mikrobiologischer Kennwerte (GZZ, ATP). Die Proben wurden teilweise bereits im Feld aliquotiert und fixiert. Der Großteil der Proben wurden gekühlt und dunkel gelagert noch am Tag der Probennahme, spätestens jedoch am folgenden Tag nach München transportiert und dort weiterverarbeitet.

Im Juli/August 2018 wurden zu den bereits vorhandenen Messstellen zusätzlich noch 5 neue Grundwassermessstellen von den Stadtwerken Düsseldorf errichtet (Abbildung 4, Abbildung 5). Ausgewählte Messstellen wurden im Juli 2018 mit Druck- und Temperaturloggern ausgestattet (Abbildung 4), um kontinuierlich insbesondere die Wasserstände und Temperaturen in den Messstellen zu erfassen. Damit wurde eine solide Datengrundlage für die Simulation der Strömung und des konservativen Stofftransportes sichergestellt.

Tabelle 1: Übersicht über die untersuchten Parameter am Standort Flehe durch das Labor der Stadtwerke Düsseldorf.

untersuchte Parameter				
physikalisch	chemisch		mikrobiologisch	Spurenstoffe
	Anionen	Kationen		
Leitfähigkeit	Fluorid	Natrium	Koloniezahl, 22°C	Benzotriazol
pH-Wert	Chlorid	Magnesium	Koloniezahl, 36°C	N,N-Dimethylsulfamid
Temperatur	Nitrat	Kalium	Escherichia coli	Methyl-1-H-Benzotriazole
	Sulfat	Calcium	Coliforme Bakterien	Chloridazon-desphenyl
	Bromid	Mangan	Pseudomonas aeruginosa	Isoproturon
	Phosphat	Eisen	Clostridium perfringens	Primidon
			intestinale Enterokokken	Terbutalin
	Summenparameter			Diuron
	TOC			Carbamazepin
				Sulfamethoxazol
				Amidotrizoesäure
				Iopamidol
				Acesulfam
				Metformin

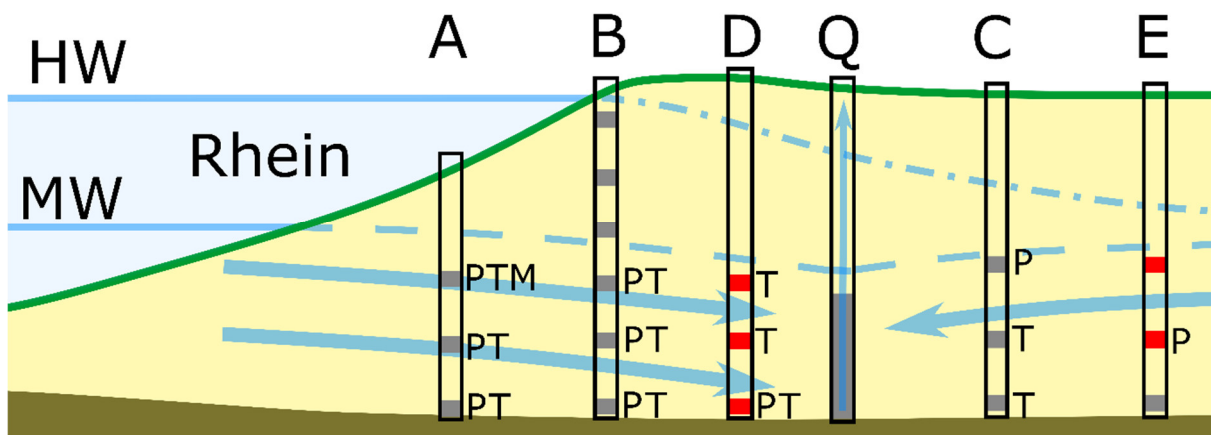


Abbildung 4. Messstellentransekte des Wasserwerks Flehe. Jedes Kästchen (graue Kästchen = vor Projektbeginn erstellt, rot = während des Projekts erstellt) markiert die Filterstrecke einer Messstelle einer Reihe (A, B, C, D, E), Q = Entnahmebrunnen. Benennung der Beobachtungsbrunnen erfolgt mittels Position der Filterstrecke, bspw. B1 = unterste Filterstrecke der B-Reihe, B6 = oberste Filterstrecke der B-Reihe. Symbole deuten die Position von Datenloggern an (P: Druck-/Temperatur-Logger, T: Temperaturlogger, M: Multiparameter-Logger (Leitfähigkeit, Redoxpotential, pH, Sauerstoffgehalt)). Mehrere Druck-/Temperatur bzw. Temperatur-Logger in einem Brunnen wurden an unterschiedlichen Tiefen der Filterstrecke platziert.



Abbildung 5. Messstellen am Wasserwerkflehe. Links = Grundwassermessstellen B1-3, rechts = D1-3

Zur Erkundung der Heterogenität des Untergrundes am Wasserwerk Flehe wurden im Herbst 2019 geophysikalische Untersuchungen vorgenommen. Dafür wurden an zwei Transekten auf Höhe von Messstellenreihe A und B quer zur Uferfiltrationsstrecke geoelektrische Widerstandsmessungen durchgeführt durch das Department Monitoring und Erkundungstechnologien des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung. Weiterhin wurden die tiefsten Messstellen jeder Messstellenreihe (A1, B1, C1, D1, E1) mittels Gamma-Ray-Logging erkundet.

2.2 AP2 Numerische Analyse

Vorarbeiten

Eine Literaturrecherche wurde durchgeführt, um die relevanten Prozesse für den Transport von Pathogenen (Viren und pathogene Bakterien) im Grundwasser zu identifizieren und insbesondere die für die Modellierung verwendeten Gleichungen zu erfassen. Das daraufhin aufgestellte Modell berücksichtigt neben advektiv-dispersiven Transport folgende Prozesse: Sorption und Desorption an/vom Korngerüst inklusive der Möglichkeit der Begrenztheit von Sorptionsplätzen (sog. „Blocking“), Sorptionsrate berechnet mittels Kolloid-Filtrationstheorie und Maxwell-Ansatz mit DLVO-Interaktionsenergien, physische Filtration an zu kleinen Poren („straining“) und Absterben bzw. Inaktivierung von Pathogenen. Die Grundlegenden Ratengleichungen für das Model sind (Knabe et al., 2021):

$$-\left. \frac{\partial c_i}{\partial t} \right|_{\text{reaction}} = r_{c_i} = f(S) k_{\text{att}} c_i - k_{\text{det}} S_i - k_{\text{inac},m,i}(c_{O_2}) c_i - k_{\text{str}} \left(\frac{d_{p_i}}{d_g} \right)^{p_{\text{str}}} c_i \quad (1)$$

$$-\frac{\partial S_i}{\partial t} = r_{S_i} = -f(S) k_{\text{att}} c_i + k_{\text{det}} S_i - k_{\text{inac},im,i}(c_{O_2}) S_i \quad (2)$$

$$f(S) = \frac{S_{max} - \sum_i S_i}{S_{max}} \quad (3)$$

Dabei ist c_i die Konzentration von Pathogen i in der Wasserphase, S_i ist die Konzentration von Pathogen i adsorbiert auf der Festphase, r_{c_i} und r_{S_i} sind die Reaktionsraten für Pathogen i in Wasser- und Festphase, k_{att} ist der Attachment oder Sorptionskoeffizient, k_{det} ist der Detachment oder Desorptionskoeffizient, $k_{inac,m/im,i}(c_{O_2})$ ist der Inaktivierungskoeffizient in der Wasserphase (m) bzw. Festphase (im), welcher vom Sauerstoffgehalt c_{O_2} abhängig sein kann, k_{str} ist der Strainingkoeffizient, p_{str} ist der Straining Exponent, d_{p_i} ist die Durchmesser von Pathogen i , d_g ist die effektive Korngröße des Untergrundmaterials, $f(S)$ ist der Blocking Faktor, und S_{max} ist die maximale Konzentration von Pathogenen an der Festphase. Für genauere Ausführungen zum Prozessmodell und die Implementierung der DLVO Interaktionsenergien siehe Knabe et al. (2021).

Als Software zur Modellierung der Hydraulik und des reaktiven Stofftransports im Untergrund wurde PFLOTRAN (www.pflotran.org) verwendet, im Projektantrag wurde dagegen noch HP2 genannt. PFLOTRANs größter Vorteil ist die Auslegung des Programms auf große Rechencluster, was die Zeit für Modellberechnungen deutlich verringert und insbesondere relevant ist für die Toolboxerstellung. Dafür wurden stochastische Verfahren eingesetzt, die viele Modellberechnungen und damit eine hohe Rechenleistung benötigen. Darüber hinaus ist PFLOTRAN Open-Source und befindet sich noch in aktiver Weiterentwicklung, so dass benötigte Anpassungen in guter Kooperation und effektiv mit den Entwicklern durchgeführt werden können.

Die notwendigen Rechenkapazitäten für die Modellberechnungen wurden dem FG Hydrogeologie der TU Berlin auf Antrag vom Norddeutschen Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN, www.hlrn.de) bewilligt, zunächst vorbereitend im Zeitraum vom 01.08.2017-31.03.2017 und dann als sog. Großprojekt (Projektkennung bek00020) im Zeitraum vom 01.04.2018-30.06.2021.

PFLOTRAN kann standardmäßig advektiv-dispersiven Transport und eine Vielzahl hydrochemischer Reaktionen simulieren, jedoch sind letztere für die Simulation des Transports von Pathogenen nur bedingt geeignet. Deshalb wurden notwendige Ergänzungen am PFLOTRAN Source Code vorgenommen, um die relevanten Prozesse und die o.g. Gleichungen hinzuzufügen. Das Arbeiten auf Source Code Level hat darüber hinaus den Vorteil einer relativ großen Flexibilität für das Hinzufügen weiterer Prozesse oder Verbesserungen an bestehenden Gleichungen.

Pathogentransportmodell Wasserwerk Flehe – Datenreihe 2003/2004

Aufbauend auf bisherigen Modellierungen am Wasserwerk Flehe (Schubert, 2002; Sharma et al, 2012; Sharma et al, 2014 (unveröffentlicht)) wurde ein 2D-Modell der Messstellentransekte des

Wasserswerks Flehe in PFLOTRAN erstellt. Randbedingungen im Modell sind zum einem der Fluss und das landseitig zuströmende Grundwasser mit gemessenen Wasserständen und Konzentrationen gelöster Stoffe, und zum anderen die durch die Wasserwerkspumpen geförderte Wassermenge.

Ein Datensatz eines Monitorings am Wasserwerk Flehe von 01/2003-03/2004 (ohne Messungen von Viren aber mit Fäkalindikatorbakterien) wurde verwendet um eine Sensitivitätsanalyse sowie eine stochastische Kalibration des Pathogentransportmodells durchzuführen (Knabe et al., 2021). Dabei wurden mittels Literaturrecherche bzw. vorhandener Daten die à priori Unsicherheiten der Parameter im Modell festgestellt, welche als Variabilität der Parameter in der Sensitivitätsanalyse verwendet wurden. Diese erfolgte für das hochparametrisierte Modell (59 Parameter) als „parameter screening“ mittels der sogenannten „Morris Indizes“ (Methodik wie in Porta et al., 2018), was vor allem geeignet ist, um insensitive Parameter zu identifizieren. Die 26 sensitivsten Parameter wurden dann in einer stochastischen Modellkalibration verwendet zusammen mit der Datenreihe 2003/2004. Eine Stochastische Kalibration erlaubt es Aussagen über die Bestimmbarkeit der Parameter zu treffen. Für die Kalibration wurde dabei ein genetischer Algorithmus verwendet (PSO, particle swarm optimization, beschrieben bspw. in Robinson & Rahmat-Samii (2004)). 375 Lösungen des PSO-Algorithmus wurden berechnet basierend auf verschiedenen Anfangsbedingungen.

Pathogentransportmodell Wasserwerk Flehe - Datenreihe 2018/2019

Da die erhobenen Daten eine höhere räumliche Auflösung haben im Vergleich zu den älteren Daten (Rhein-A-B-D-Q-C-E anstatt Rhein-B-Q-E), war ein erster Fokus auf der Heterogenität des Untergrundes am Wasserwerk Flehe. Dafür wurden insbesondere die mittels Datenloggern gesammelten zeitlich hochaufgelösten Temperatur und Wasserdruckdaten verwendet, um verschiedene Untergrundkonfigurationen im Modell zu überprüfen. Auf der Kolmationsschicht lag dabei ein weiterer Fokus. Die Kolmationsschicht entsteht in erster Linie durch den konstanten Zustrom vom Fluss zum Grundwasser auf Grund der aktiven Wasserwerkspumpen. Durch die geringeren Fließgeschwindigkeit im Grundwasser im Vergleich zum Fluss sedimentieren kleine Partikel, die den Porenraum verstopfen und die hydraulische Leitfähigkeit verringern (physical clogging). Weiterhin kann durch Biomassebildung der Porenraum weiterverstopft werden (bio-clogging). Die Aktivität von benthischen Lebensformen kann dagegen den Untergrund wieder auflockern. Schlussendlich wird die Kolmationsschicht auch beeinflusst von Erosion abhängig von der Fließgeschwindigkeit des Flusses und dessen Sedimentfracht. Da keine direkten Daten über die Kolmationsschicht vorliegen wurde anstatt einer dynamischen Modellierung der Änderungen der Kolmationsschicht mehrere Zeitperioden für die Kolmationsschicht definiert basierend auf der Hydraulik des Flusses und der Jahreszeiten.

Danach wurden zunächst die ebenfalls in guter Qualität und Quantität vorhandenen Daten für Redoxreaktionen modelliert mittels der bekannten Gleichungen aus der Literatur, vor allem der Verbrauch von gelöstem Sauerstoff mit organischem Kohlenstoff (aerobic respiration). Sowohl die Sauerstoffkonzentration als auch die mikrobielle Aktivität durch die Redoxreaktionen können einen Einfluss auf die Pathogenkonzentrationen haben (Gordon & Toze, 2003).

Das Prozessmodell für den Transport von Pathogenen und Mikroorganismen für die Datenreihe 2018/19 baut auf dem der Datenreihe 2003/4 auf, jedoch war nun ein Fokus darauf, dass Prozessmodell möglichst einfach zu halten. D.h., dass es nur Prozesse beinhaltet, die einen signifikanten Beitrag zum Ergebnis der Kalibration liefern. Dies vereinfacht die Berechnung des Surrogate Modells für die Toolbox (siehe 2.3), da weniger Parameter weniger Modellberechnungen notwendig machen. Auf Grund der Quantität an Messwerten mit positiven Detektionen standen bei der Modellierung folgende Messgrößen im Vordergrund: Coliforme Bakterien, Somatische Coliphagen, Adenoviren.

Modellierung Säulenversuch 2019

Basierend auf dem PFLOTTRAN Prozessmodell für das Wasserwerk Flehe wurde ein 1D Modell für den mesoskaligen Säulenversuch mit MS2 Viren erstellt. Das Modell umfasst sowohl den konservativen Transport für den Tracerversuch als auch den reaktiven Transport von MS2 Viren im MS2-Injektionsversuch. Das Modell wurde zunächst anhand der vorhandenen Daten an den Ports 1-5 kalibriert unter der Annahme, dass die Säule homogen ist. Wie in 3.2 gezeigt wird, ist diese Annahme jedoch wahrscheinlich inkorrekt, und das Säulenmodell wurde um eine Heterogenität im Zentralteil der Säule erweitert.

2.3 AP3 Toolbox

Die hier zu erstellende Toolbox unterstützt den Anwender bei der Risikobewertung für den Transport von Pathogenen in der Uferfiltrationsstrecke auf Basis eines von der TU Berlin entwickelten Surrogate-Modells/Näherungsmodells. Das Surrogate Model ist ein abstrahiertes vereinfachtes Modell der komplexen hydrogeologischen Modellierung mit PFLOTTRAN. Im Rahmen der Toolbox können webbasiert quantitative Abschätzungen über die Reinigungsleistung einer Uferfiltrationsstrecke auf Basis sensitiver Eingangsparameter gerechnet, ausgewertet und visualisiert werden.

Surrogate Modell

Im Folgenden soll die Methodik zur Erstellung des Surrogate Modells kurz erläutert werden.

Das Prozessmodell, welches für die Modellierung der Pathogene für den Datensatz 2018/19 vom Wasserwerk Flehe verwendet wurde, bildet die Basis. Dieses Prozessmodell wurde angewandt auf eine verallgemeinerte 1D Geometrie einer Uferfiltration, Abbildung 6. Dieses 1D Modell ist

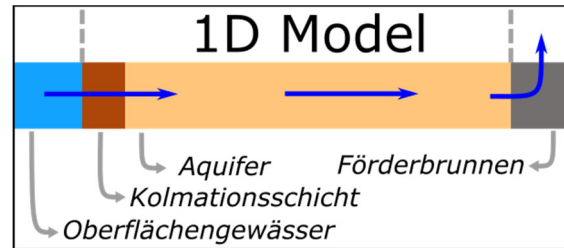


Abbildung 6. Vereinfachtes und Verallgemeinertes Modell einer Uferfiltration.

weiterhin ein PFLOTRAN Modell und enthält zunächst alle Transportprozesse und Prozessgleichungen wie im 2D Modell für das Wasserwerk Flehe sowie zusätzlich Parameter für Standortcharakteristika, insbesondere die Grundwasserfließgeschwindigkeit. Das 1D Modell ist jedoch ein steady-state Modell, d.h. es bildet nicht den zeitlichen Verlauf ab. Im 1D Modell wird im Zustrom (entspricht dem Oberflächengewässer) eine Pathogenkonzentration angelegt und die Reduktion dieser Konzentration (die Reinigungsleistung) mit Abstand vom Zustrom bestimmt. Die Prozesse und damit die Reinigungsleistung sind unabhängig vom Absolutwert der Pathogenkonzentration, und in der Toolbox wird später auch primär die Reinigungsleistung angezeigt.

Mit dem 1D Modell kann bspw. die Reinigungsleistung der Uferfiltration bei einer bestimmten Grundwasserfließgeschwindigkeit berechnet werden, jedoch nicht wie sich der Einfluss einer Hochwasserwelle, die nur wenige Tage dauert, zeitlich im Untergrund ausbreitet. Die steady-state Vereinfachung erfolgte aus zwei Gründen: 1.) zeitlich variable Randbedingungen wie der Einfluss einer Hochwasserwelle müssten exakt definiert werden, jedoch sind Anstieg und Höhe der Hochwasserwelle und deren Einfluss auf die wichtige Grundwasserfließgeschwindigkeit zu standortspezifisch; 2.) durch Steady-State verringert sich der numerische Berechnungsaufwand der einzelnen Modelldurchläufe um ein Vielfaches.

Basierend auf dem vereinfachten 1D PFLOTRAN Modell wird ein Surrogate-Modell erstellt mittels generalized Polynomial Chaos Expansion (gPCE) (siehe Dell'Oca et al., 2017). Dafür müssen eine Vielzahl von Modellberechnungen des 1D Modells durchgeführt werden, was jedoch durch die getroffenen Vereinfachungen, u.a. 1D Geometrie und Steady-State, numerisch mit den vorhandenen Mitteln durchführbar ist. Dafür musste zunächst der Wertebereich der Parameter definiert werden. Dieser spielt eine große Rolle, da für die spätere Anwendung des Surrogate Modells nur genau dieser Wertebereich wieder verwendet werden kann, da außerhalb das erstellte Surrogate Modell keine sinnvollen Werte liefert.

Die Parameter des 1D Modells und damit auch des Surrogate Modells wurden in zwei Gruppen gegliedert: (A) standortspezifische Parameter, welche den Anwendern bekannt sein müssen oder können und (B) Prozessparameter für den Pathogentransport, welche dem Anwender nicht bekannt sind, und generell auch in den wissenschaftlichen Publikationen als unsicher betrachtet werden, siehe Tabelle 2. Parameter der Gruppe (B) sollten deshalb auch als unsichere Parameter in der Toolbox eingesetzt werden. Der Wertebereich der Parameter der Gruppe (A) ist festgelegt auf Basis von erwartbaren Werten für produktive Aquifere, bspw. Korngrößen nur im Sand/Kies-Bereich, Grundwasserfließgeschwindigkeiten (Darcy-Geschwindigkeit) >0.1 m/day. Parameter der Gruppe (B), wie der Inaktivierungskoeffizient, zeigen in wissenschaftlichen Publikationen einen hohen Unsicherheitsbereich (mehrere Größenordnungen), welcher nicht immer eindeutig durch die unterschiedlichen Szenarien/Bedingungen der jeweiligen Studien zu erklären ist oder denen zuzuordnen ist. Weiterhin sind nur wenige Studien auf Feldskala und nur sehr wenige an aktiven Uferfiltrationsstandorten. Erschwerend kommt hinzu, dass Transportmodelle für Viren und Bakterien in der Regel überparametrisiert sind, d.h. die kalibrierten Parameterwerte korrelieren und sind nicht unabhängig voneinander, siehe Abbildung 7. Dies wurde durch die stochastische Kalibrierung des Modells des Wasserwerks Flehe nochmal bestätigt (siehe 3.). Die Verwendung des Unsicherheitsbereiches für Parameter der Gruppe (B) basierend auf der Literatur würde auf Grund des beschriebenen Korrelationseffekts den Wertebereich der Parameter deutlich überschätzen und die Ergebnisse des Surrogate-Modells unbrauchbar machen, da bspw. für die meisten Fälle die Unsicherheit die gesamte Bandbreite ausmachen würde von „keine Reinigungsleistung“ zu „Reinigungsleistung von 10+ Größenordnungen“.

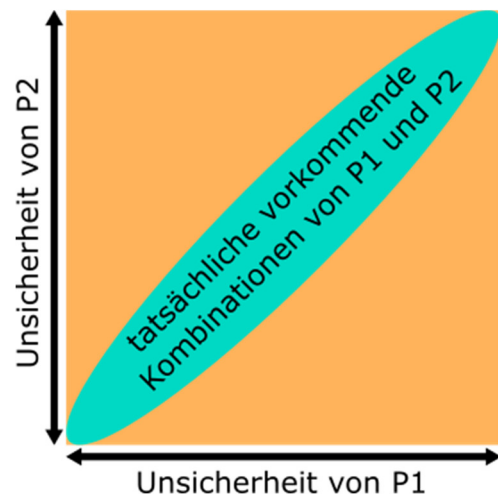


Abbildung 7. Der Einfluss von Parameterkorrelation auf die tatsächliche Unsicherheit von Parametern (P_1 , P_2) nach einer Kalibration. Nur Kombinationen von P_1 und P_2 , die in der grünen Linse liegen kommen in der Kalibration vor. Kombinationen von P_1 und P_2 im orangenen Bereich liefern Ergebnisse, die nicht der Kalibration entsprechen.

Tabelle 2. Parametergruppen A und B für die Erstellung des Surrogate-Modell.

Gruppe A	Gruppe B
<ul style="list-style-type: none"> - Grundwasserfließgeschwindigkeit - Porosität des Aquifers - Mittlere Korngröße des Aquifers - Mittlere Korngröße der Kolmationsschicht - Dispersivität 	<ul style="list-style-type: none"> - Inaktivierungskoeffizient für Pathogen in der Wasserphase - Inaktivierungskoeffizient für Pathogen adsorbiert an Festphase - Detachment/Desorptions-Koeffizient - Collision-Efficiency (α) - Straining-Koeffizient

Um den Wertebereich der Parameter der Gruppe (B) zu bestimmen wurden die Ergebnisse der stochastischen Kalibration des Flehe Modells mit dem Datensatz 2018/19 herangezogen. Eine Principal-Component-Analysis wurde durchgeführt um die 5 korrelierenden Parameter der Gruppe (B) auf wenige unkorrelierte „Superparameter“ zu reduzieren. Diese „Superparameter“ und deren Unsicherheit werden dann in der Erstellung des Surrogate-Modells verwendet anstatt der Parameter der Gruppe (B). Diese „Superparameter“ werden später in der Toolbox nicht vom Anwender gesetzt, sondern sind à priori festgelegt und eine Ursache für die Grundlegende Unsicherheit der Abschätzung. Da die Werte der Parameter der Gruppe (B) sich unterscheiden für Viren und Bakterien, werden somit zwei Surrogate-Modelle erstellt, jeweils für Bakterien basierend auf den Daten und dem Modell für Coliformen bzw. für Viren basierend auf den Daten und dem Modell für Coliphagen.

Die erstellten Surrogate-Modelle können die Ergebnisse des PFLOTTRAN Modells mit gewisser Genauigkeit replizieren, sind jedoch ein analytisch lösbares komplexes Polynom und haben damit einen deutlich geringeren Rechenaufwand. Dies erlaubt es die Unsicherheit der Parameter der Gruppe (B) (vertreten durch die neuen „Superparameter“) für die Ergebnisse zu berücksichtigen. Die Surrogate-Modelle liefern dadurch eine Abschätzung der Reinigungsleistung der Uferfiltration basierend auf den für Anwender bekannten Parametern der Gruppe (A) (standortcharakteristische Parameter) unter Berücksichtigung der Unsicherheit der für den Anwender unbekannt Parameter der Gruppe (B) (Transportprozess-Parameter).

Webanwendung

Die Aufgabenstellung bestand darin ein webbasiertes System zu schaffen, dass es Anwendern in der Praxis (Betreiber von Wasserwerken mit Uferfiltrationsanlagen) erlaubt, modellbasierte quantitative Abschätzungen für die Reinigungsleistung bzw. das Rückhaltepotential ihrer Uferfiltrationsanlagen durchzuführen. Die der Abschätzung zu Grunde liegenden Modellrechnungen sollen auf Basis eines

Näherungsmodells (Surrogate-Modell, Transportmodell basierend auf PFLOTTRAN) über eine webbasierte graphische Benutzeroberfläche (Toolbox) parametrisiert, ausgeführt und deren Ergebnisse visualisiert werden. Zur Einordnung der Ergebnisse werden die vom Modell ausgegebene Reinigungsleistung der Uferfiltration (grün / gelb / rot gemäß Ampelprinzip) mit einer Flussverschmutzung verschiedenen Belastungsgrades (niedrig, mittel, hoch, extrem) vergleichend bewertet.

Als ein erster Schritt innerhalb der Softwareentwicklung wurden unter den Projektbeteiligten die Anforderungen erfasst, die das System später erfüllen muss. Die Abläufe, ausgehend von der Datenübergabe, Parametrisierung, Prozessierung, Speicherung und Visualisierung bis hin zur Ergebnisbewertung, wurden konzeptionell geplant und für die Umsetzung und Implementierung der webbasierten Toolbox strukturiert (Softwarespezifikation).

Im Rahmen der Umsetzung werden Geodaten mit komplexen Algorithmen automatisiert in einer Serverumgebung verarbeitet. Über eine Webanwendung erfolgt die Prozessierung der Daten nach entsprechender Parametrisierung der wichtigsten Steuergrößen durch den Nutzer. Anschließend werden die Ergebnisse der Modellierung mit dem Surrogate-Modell ohne Zeitverzögerung für die Nutzer in Form von Diagrammdarstellungen visualisiert und bewertet. Der Zugang zur Webanwendung soll ohne Login möglich sein. Eine Projekt- und Nutzerverwaltung wird nicht benötigt, da Sessions nicht gespeichert werden müssen. Das hydrogeologische Modellsystem (Surrogate-Modell) soll in einer serverseitigen Mehrkernumgebung ausführbar sein.

Qualitätsziele des zu entwickelnden Prototyps sind:

- die ständige Verfügbarkeit der Software,
- ein hoher Automatisierungsgrad,
- der erleichterte Umgang mit komplexer Modellierungssoftware (Usability),
- die Leistungsfähigkeit (Performance),
- die Funktionalität.

Die technischen Randbedingungen für die Software-Infrastruktur sind wie folgt definiert:

- Serverbetriebssystem Linux mit der Container-Technologie Docker

Die zu realisierende Client-Server-Architektur der Softwareanwendung ist auf eine flexible längerfristige Entwicklungsstrategie ausgerichtet. Die Architektur der Software ist modular angelegt, so dass die Umsetzung durch verschiedene Entwickler zeitlich voneinander unabhängig erfolgen kann. Die Modellierung und die Datenhaltung sind auf dem Server angesiedelt. Der Client, welcher als

Weboberfläche realisiert wird, wird zur Darstellung bzw. Steuerung verwendet. Für die Programmierung der Software werden ausschließlich OpenSource-Bibliotheken verwendet. Der Datenaustausch zwischen Client und Server erfolgt im JSON-Format.

Als eingesetzte Programmiersprachen kommen insbesondere Python, JavaScript, HTML, CSS, PHP, diverse GIS-Tools bzw. API's zum Einsatz. Um die Unabhängigkeit der Anwendung vom Betriebssystem des Servers zu gewährleisten, werden die entsprechenden Softwarepakete über Dockercontainer ausgeführt. Auf der Clientseite kommen die weit verbreiteten Software-Bibliotheken von Bootstrap, OpenLayers und jQuery zum Einsatz.

Die Realisierung des IT-Systems hält aus Sicht der Softwareentwicklung mehrere grundlegende Bestandteile bereit, die wie folgt näher beschrieben werden:

Bereitstellung von Test- und Produktivumgebung

Um ein Client-Server-System zu erstellen, auf das die Projektbeteiligten und nach Projektabschluss die Endnutzer Zugriff haben, wurde von VisDat die entsprechende Serverhardware bereitgestellt. Für das Aufsetzen der Anwendung wurde eine zweistufige Vorgehensweise gewählt. Zunächst wurde ein lauffähiges System auf einer lokalen Entwicklungsplattform von VisDat erstellt und getestet. Das Produktivsystem wurde dann im weiteren Verlauf des Projektes auf einen von VisDat angemieteten Webserver übertragen. Die für das System notwendigen Softwarebibliotheken (bspw. Apache, PostgreSQL/POSTGIS, Mapserver, Mapproxy, GDAL, Python, Docker) wurden installiert bzw. kompiliert.

Die Test – und Produktivumgebung wurde serverseitig unter Linux Betriebssystemen mit der Container-Technologie Docker entwickelt. Dadurch lassen sich beteiligte Serverprogramme inklusive ihrer verwendeten Bibliotheken organisiert in virtuellen Containern kapseln, was zu einer Entkoppelung vom verwendeten Betriebssystem führt. Das System kann dadurch mit vergleichsweise geringem Aufwand auf andere Serverstrukturen, bspw. wenn Skalierungen notwendig werden, übertragen werden.

Datenhaltung

Die Speicherung der Modelldaten sowie der Projekt-, Sach- und Konfigurationsdaten erfolgt in einer relationalen PostgreSQL Datenbank. Auf eine Speicherung von Daten im Filesystem (binäre Datenhaltung) konnte verzichtet werden, da die hier zu verarbeitende Datenmengen mit den nötigen Schreib- und Lesezugriffen auch in einer relationalen Datenbank ausreichend performant abgearbeitet werden kann.

Technologische Umgebung der Webanwendung

Die clientseitige Entwicklung der Webanwendung erfolgt mit modernen JavaScript-Frameworks, wie Bootstrap, jQuery und OpenLayers. Serverseitig werden Softwarepakete wie Mapserver, Mapproxy und GDAL eingesetzt. Serverseitige Programmiersprachen sind PHP und Python.

Einbindung der Webanwendung in eine thematische Website

Der Aufruf der Webanwendung (Toolbox) erfolgt über eine eigens eingerichtete Website unter Nutzung des Content Management Systems WordPress. Die Website wird über die Domain „www.pathogene-uferfiltration.de“ eingebunden und enthält zusätzliche Informationen zum Projekt, den ausgeführten Feldversuchen, Modellierungen und Modellentwicklungen sowie eine thematische Einführung in die Problematik des Transports von Pathogenen und Mikroorganismen im Rahmen der Gewinnung von Trinkwasser aus Uferfiltrat.

2.4 AP4 CCP und Bewertung des Multi-Kompartiment-Konzeptes

Im Vergleich zum Projektantrag mussten an AP4 einige Anpassungen vorgenommen werden auf Grund der erhobenen Daten am Wasserwerk Flehe: i) nur wenige Detektionen mikrobiologischer Größen in den Grundwassermessstellen, gilt insbesondere für die Viren, ii) für Adenoviren nur Daten für zwei Grundwassermessstellen (jedoch eine ohne Detektionen), iii) alle Messstellen liegen im Aquifer und keine nah oder in der Kolmationsschicht bzw. der hyporheischen Zone.

Das im Antrag erwähnte Monitoringkonzept mit Critical Control Points basierend auf neu zu definierenden Indikatoren und Kennwerten konnte in der Form nicht umgesetzt werden, da zum einen zu wenige positive Detektionen der mikrobiologischen Größen vorliegen (gilt vor allem für die Viren) und zum anderen gefundene Zusammenhänge zunächst einmal nur für das Wasserwerk Flehe und den beobachteten 1-Jahreszyklus gelten. Eine Allgemeingültigkeit solcher Indikatoren und Kennwerte könnte nur aufgestellt werden bei einer deutlich breiteren Datenbasis mit mehreren Standorten und längeren Zeitraum. Dennoch wurde eine Korrelationsanalyse durchgeführt zwischen den mikrobiologischen Kenngrößen und anderen messbaren und potenziell relevanten Größen (pH, Sauerstoff, Temperatur, Konzentration zweiwertiger Ionen, Konzentration von organischem Material). Dies liefert zumindest Hinweise welche Größen möglicherweise als Indikatoren geeignet wären.

Das Modell und die Daten erlauben trotz des Fehlens von Messstellen in oder Nahe der Kolmationsschicht und der hyporheischen Zone eine Bewertung der Kompartimente in reduzierter Weise. Der Abschnitt zwischen den Messstellenreihen A und B erlaubt die Erfassung der Reinigungsleistung im Aquifer. Der Abschnitt zwischen dem Rhein und Messstellenreihe A umfasst sowohl die Kolmationsschicht, die hyporheische Zone als auch Teile des Aquifers. Unter Berücksichtigung der Entfernung zwischen A und B, und Rhein und A lässt sich nun aus dem Vergleich

der Reinigungsleistung der beiden Strecken zumindest schließen, ob eine erhöhte Reinigungsleistung im Bereich Kolmationsschicht und hyporheische Zone vorliegt. Jedoch kann der Einfluss Kolmationsschicht und der hyporheischen Zone nicht mit Sicherheit ausdifferenziert werden.

Die Sensitivitätsanalyse bzgl. der Modellparameter wurde dem AP2 zugeordnet, da es thematisch besser zu dem entwickelten Prozessmodell passt.

3. Ergebnisse

3.1 AP1 Labor- und Feldexperimente

Kleinskalige Säulenversuche

Nach Abschluss der Feldarbeiten und erfolgtem Umzug der Projektpartner vom HMGU an die Universität Wien, sowie einer weiteren Verzögerung durch die Covid-19 Pandemie, wurden im Herbst 2020 und Frühjahr 2021 die Versuche in den Mikrokosmen (Mini-Sedimentsäulen) durchgeführt. Einzelne Schlüsselparameter (siehe unten) wurden systematisch auf ihre Auswirkung auf den Virentransport bei der Uferfiltration untersucht. Getestete Faktoren waren die Wasserfließgeschwindigkeit (Exp. 1), die Ausgangskonzentration der Viren (viral load), verschiedene Redoxbedingungen bzw. Sauerstoffverhältnisse (oxisch-hypoxisch-anoxisch), und der Einfluss von mikrobieller Aktivität.

Die Ergebnisse aus den Versuchen sind in Tabelle 3 zusammengefasst. Unter Standardbedingungen (Fließgeschwindigkeit: 1 m Tag⁻¹, Virenkonzentration: 10⁷ PFU mL⁻¹, oxisch, moderate Bioaktivität) konnten nach nur 10 cm Sedimentpassage von den aktiven MS2 Phagen 66% am Säulenauslass wiedergefunden werden, während 36% der aktiven Viren über den Zeitraum von zwei Wochen hinaus an der Sedimentmatrix haften blieben. In Summe (66% + 36% = 102%) blieben alle zudosierten aktiven Phagen über den Zeitraum von zwei Wochen unter diesen Versuchsbedingungen aktiv. Die Gesamtzahl an MS2 wurde nur im Inokulum und am Säulenauslass dokumentiert. Daten zur Gesamtmasse an adsorbierten Phagenpartikeln fehlen bislang noch. 76% aller infiltrierten Phagenpartikel wurden am Säulenauslass wiedergefunden. Die fehlende Zahl an Phagenpartikeln (24% der Gesamtphagenzahl) lag zu Ende des Experiments adsorbiert vor, oder war teilweise bis vollständig abgebaut (siehe Tabelle 3; ‚Elimination‘). Alle weiteren Experimente wurden im Vergleich zu diesem Referenz-Experiment (Exp. 1a) ausgewertet.

Bei einer Verringerung der Fließgeschwindigkeit auf 0,5 m Tag⁻¹ (Exp. 1b), verringerte sich die Zahl an aktiven MS2 Phagen im Porenwasser (58%) und am Sediment (25%), die wiedererhalten wurden (in Summe 83%). Ein beachtlicher Teil der aktiven Phagen (17%) wurde während des Transports oder adsorbiert am Sediment inaktiviert. Der Anteil der Gesamtvirenzahl, der am Säulenauslass wiedererhalten wurde, sank auf 68%. Es wurde somit auch ein höherer Anteil der Viren (17-32%) eliminiert, d.h. abgebaut.

Eine niedrigere Virenlast (10⁴ PFU mL⁻¹ in Exp. 2a und 10⁵ PFU mL⁻¹ in Exp. 2b) hatte zur Folge, dass im Vergleich zum Referenzexperiment (10⁷ PFU mL⁻¹) zwar nach wie vor etwa 100% der aktiven MS2

Phagen wiedergefunden werden konnten, jedoch fand sich unter diesen Bedingungen der Großteil adsorbiert an die Sedimentmatrix wieder (72% in Exp. 2a und 90% in Exp. 2b). Ein nur kleiner Teil (24% in Exp. 2a und 15% in Exp. 2b) passierte die kurze Sedimentstrecke. Auch auf die Gesamtvirenzahl wurde eine nur kleine Fraktion am Säulenauslass wiedererhalten. Zusammengefasst, wurde bei niedrigeren Vireneinlaufkonzentrationen ein relativ höherer Anteil der Partikel in der Säule zurückgehalten. In absoluten Zahlen war die im Sediment zurückgehaltene Virenlast am höchsten bei höchster Virendotation. Zu einer signifikanten Inaktivierung von aktiven MS2 Phagen kam es in den Versuchen 2a und 2b nicht.

Am deutlichsten wirkten sich veränderte Sauerstoffkonzentrationen bzw. Redoxbedingungen auf den Virentransport aus. Wie aus Tabelle 3 ersichtlich, konnten unter anoxischen Bedingungen (Exp. 3a) nur noch 27% der zu dotierten aktiven Viren über den Zeitraum von 2 Wochen wiedergefunden werden, 7% im Säulenausfluss und 20% adsorbiert ans Sediment. Auch die Gesamtvirenmasse am Säulenausfluss ergab nur 31%; es wurden somit 69-73% aller Virenpartikel im Versuchszeitraum eliminiert. Eine Inaktivierung der Viren war noch stärker unter hypoxischen Bedingungen (niedrige Sauerstoffkonzentrationen $\leq 1\text{mg L}^{-1}$). Nur 8% der aktiven Viren wurden wiedergefunden, jedoch 42% aller Virenpartikel im Säulenausfluss. In Exp. 3b kam es also vor allem zu einer stärkeren Inaktivierung der Viren.

Einen starken Effekt zeigte auch der Versuch mit verringerter und erhöhter Bioaktivität im Säulensediment. Während die sterilen Säulen (Exp. 4a) einen fast vollständigen Wiedererhalt der aktiven MS2 Phagen (97%) zeigten mit einer nur geringen Fraktion sorbiert an die Sedimentmatrix (12%), war der Wiedererhalt der aktiven Phagen im Säulenset mit erhöhter Bioaktivität (Exp. 4b) nur 34% und damit deutlich geringer als im Referenzexperiment. Nur 9% der aktiven Virenpartikel wurden durch die Säule transportiert und 25% fanden sich an der Sedimentmatrix. Nur 63% der Gesamtvirenzahl passierte die Säulen und somit kam es zu einer starken Inaktivierung der Viren und zu einer Elimination von 3-22% (Tabelle 3). Zusammen mit den Versuchen zu den unterschiedlichen Redoxbedingungen (Exp. 3a und 3b) zeigten sich hier die deutlichsten Auswirkungen auf den Virentransport.

Tabelle 3. Wiederfindung (mass recovery) von Virenpartikeln in den unterschiedlichen Säulenexperimenten. Aktive Viren aus dem Sedimentporenwasser am Säulenauslass (M_{rw}) werden den an die Sedimentmatrix adsorbierten aktiven Viren (M_{rs}) gegenübergestellt. Ermittelt wurde des Weiteren die Gesamtvirenpartikelfracht im Säulenauslass (M_{rw}). Da Daten zu der am Sediment adsorbierten Gesamtvirenmasse noch nicht vorliegen, kann für die Elimination [%] im Moment nur ein Wertebereich angegeben werden.

Experimente	Wiederfindung nach Transport durch die Säulen	Aktive Viren		Wasser & Sediment kombiniert	Virenpartikel gesamt	Elimination Virenpartikel
		M_{rw} %	M_{rs} %	$(M_{rw} + M_{rs})$	M_{rw} %	%
1a	Standartbedingungen (Ref.)	66	36	102	76	0 – 24
1b	Verringerte Fließgeschwindigkeit	58	25	83	68	17 – 32
2a	Niedrige Virenkonzentration	24	72	96	-	4
2b	Mittlere Virenkonzentration	15	90	105	24	0 – 76
3a	Anoxische Bedingungen	20	7	27	31	69 – 73
3b	Hypoxische Bedingungen	4	4	8	42	58 – 92
4a	Keine Bioaktivität (Sterilkontrolle)	85	12	97	78	3 – 22
4b	Stimulierte Bioaktivität	9	25	34	63	37 – 66

Ausgewählte Durchbruchkurven zum Einfluss unterschiedlicher Fließgeschwindigkeiten sind beispielhaft in Abbildung 7 dargestellt. Die Daten unterstreichen den Einfluss der Fließgeschwindigkeit auf das Transportverhalten der aktiven Modellviren. Bei geringeren Fließgeschwindigkeiten kommt es, wie zu erwarten ist, zu einem verzögerten Durchbruch der Viren durch die Säule. Der Anstieg der Durchbruchkurven flacht mit abnehmender Geschwindigkeit deutlich ab, während die Peakhöhe der Durchbruchkurven mit abnehmender Geschwindigkeit sich nur unwesentlich verringert. Alle Kurven zeigen nach Ende der kontinuierlichen Virendotation (angezeigt durch die Pfeile) ein Desorptionbedingtes Tailing.

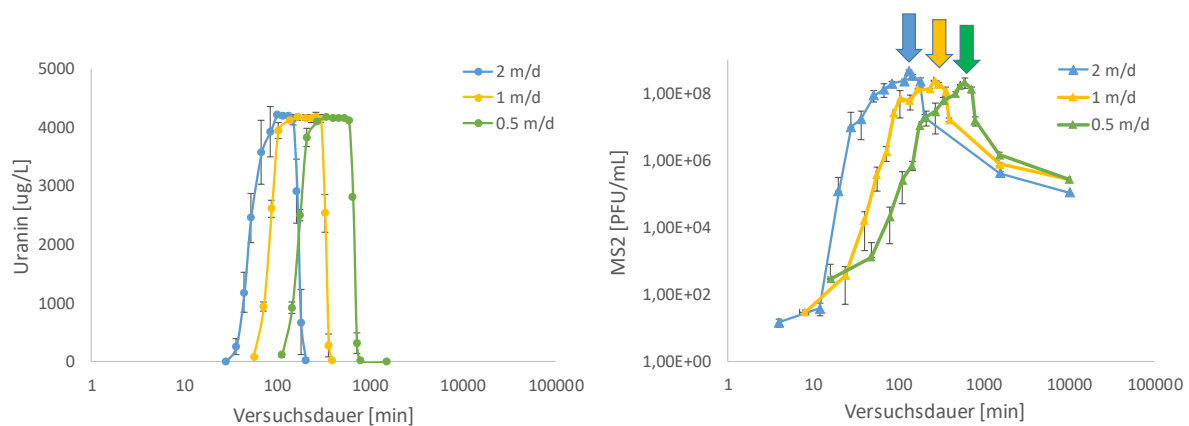


Abbildung 8. Tracer- und Virendurchbruchkurven aus Versuchen in den Mini-Sedimentsäulen zum Einfluss der Fließgeschwindigkeit auf den Virentransport.

Mesoskala Säulenversuch 2018 (Versuch 1 – Vorversuch)

Abbildung 9 zeigt die Ergebnisse des ersten Tracerversuchs (Versuch 1; Vorversuch) mit Bromid. Der Tracer wurde gelöst in 1 Liter Wasser (80mg/L Bromid, finale Konzentration) innerhalb von 20 min in die Säule injiziert. Die Pumprate von 3 L/h wurde über die gesamte Versuchsdauer aufrechterhalten.

Insgesamt ergab sich eine längere Verweilzeit des Tracers als erwartet, da basierend auf dem Volumenstrom mit einer Abstandsgeschwindigkeit von 1 m/d gerechnet worden ist. Entweder ist dies zurückzuführen auf eine höher als erwartete Porosität oder Mischungsphänomene im Totvolumen am Zulauf der Säule.

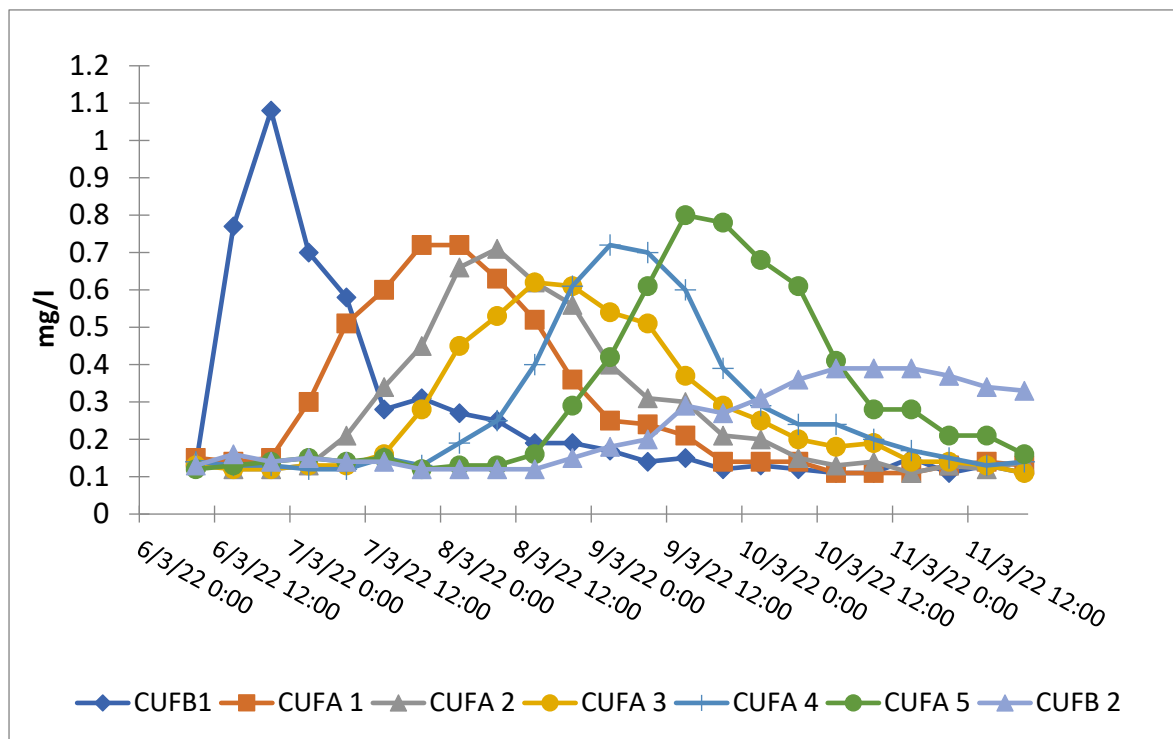


Abbildung 9. Tracerdurchbruchskurven von Versuch 1. CUFB1 = Zulauf, CUFA1-5 = seitliche Probenahmestellen von unten nach oben, CUFB2 = Ablauf der Säule.

Insgesamt verdeutlichte das Experiment die Notwendigkeit der Anpassung des experimentellen Aufbaus. Zum einen führten die vielen Verbinder und Flansche an der Großsäule zu einem erheblichen Totvolumen. Besonders der Filterdeckel unterhalb der Säule führte zu einem relevanten Totvolumen, in dem sich der Tracer nach Eingabe sammelte, mit dem Rheinwasser vermischte und dann in die Säule gepumpt wurde. Zum anderen führte die Probenahme an der Seite der Säule möglicherweise zu einer verfälschten Wiederfindung des Bromid-Tracers, wodurch die erhöhten Konzentrationen in den Messstellen CUFA4 und CUFA5 erklärt werden könnten.

Mesoskala Säulenversuch 2019 (Versuch 2)

Basierend auf den Versuch im Jahr 2018 wurden die unter 2.1 beschriebenen Änderungen vorgenommen. In Abbildung 10 sind die Ergebnisse des Tracerversuchs mit Kaliumchlorid dargestellt. Der Tracer erreicht die Entnahmestelle 5 nach ca. 800 Minuten, was einer Abstandsgeschwindigkeit von etwa 2,2 m/d und einer Porosität von ca. $n_e = 24\%$ entspricht. Für die Berechnung wurde die Zeit, die der Tracer für das Durchströmen des Kiesel im Filterverschluss benötigt nicht mitberücksichtigt.

Für die Festlegung der Förderrate von 6,44 L/h wurde eine mittlere Fließgeschwindigkeit von 1,8 m/d im quartären Aquifer angenommen. Bei einer Säulenmächtigkeit von 1,2 m und einem Porenvolumen in ca. 110 L ($n = 0,325$) wird mit einer Förderrate von 6,44 L/h eine ähnliche Abstandsgeschwindigkeit in Versuch erreicht.

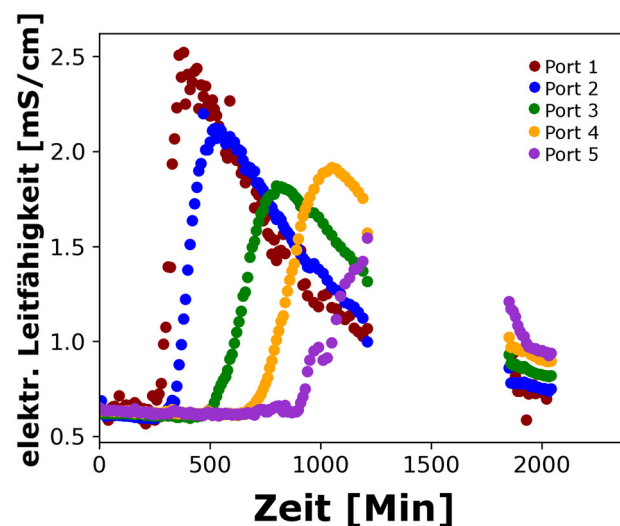


Abbildung 10. Tracertest mit 1 mol/L KCl-Lösung. Probe MS1 = Zulauf, Probe MS6 = Ablauf.

Im Anschluss an den Tracerversuch wurden 11 Liter einer Bakteriophagensuspension (Modellvirus MS2) mit einer Konzentration von $1.15 \cdot 10^{10}$ PFU/mL über einen Zeitraum von 100 Minuten (1,7 h) in die Säule zu dotiert (Abbildung 11). Nach 7 h erreichten die aktiven MS2 Phagen ihre höchste Konzentration in Port 1 (0 cm; nach 10 cm Passage im Grobkiesfilter) mit einer Durchbruchkonzentration von $4.5 \cdot 10^7$ PFU/mL. Am zweiten Port (35 cm) erreichte der höchste Durchbruch nach etwa 15 h eine Konzentration von aktiven Phagen von $1.9 \cdot 10^7$ PFU/mL. Bei 70 cm Fließstrecke durch das natürliche Sediment wurden verschiedene kleine Peaks (9h, 17h, 32h, 43h) gemessen die auf einer breiten Durchbruchskurve aufsetzen. Die höchste Konzentration an aktiven Viren ($2.18 \cdot 10^5$ PFU/mL) wurde nach 43 h beobachtet. Auch Durchbruchskurve 4 bei 105 cm Fließstrecke ist sehr breit mit kleinen Peaks bei 7h, 23h, 43h und 61h. Die hier höchste gemessene Konzentration an kultivierbaren Phagen war $1,14 \cdot 10^2$ PFU/mL. Port 5 bei 120 cm zeigte den höchsten Wert mit $9,8 \cdot 10^1$ PFU/mL nach etwa 26h Fließzeit.

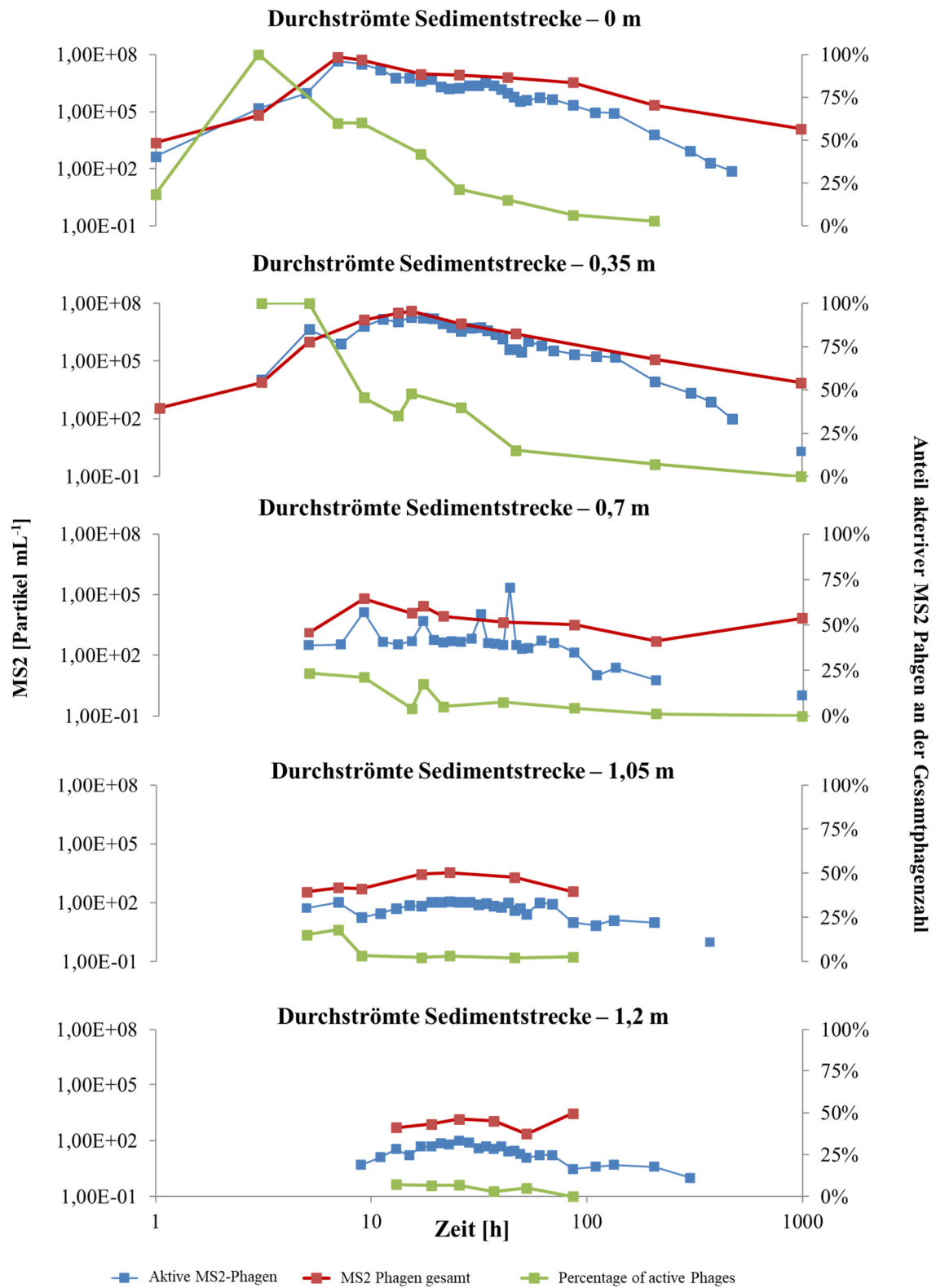


Abbildung 11. Virendurchbruchkurven aus dem zweiten mesoskaligen Säulenversuch für unterschiedliche Tiefen in der Sedimentsäule bzw. unterschiedliche Distanzen der Sedimentpassage. Die Gesamtzahl an MS2 Virenpartikeln ist der Zahl an aktiven Phagen gegenübergestellt.

Der Säulenversuch zeigt insgesamt eine effiziente Reduktion der aktiven Virenpartikel. Innerhalb einer Fließstrecke von 70 cm geht die am Port 1 gemessene Anzahl an aktiven Viren bereits um 3 Größenordnungen zurück. Nach einer Fließstrecke von 120 cm erfolgte bereits eine Reduktion um 5 Log-Stufen (Abbildung 11). Die Ergebnisse werfen jedoch noch Fragen auf. Vor allem die Virenabundanz an den Ports 1 und 2. Geht man von einer Inokulationskonzentration von mehr als 10^{10} PFUs mL^{-1} aus, überrascht die große Verdünnung im Zulauf der Säule. Geht man von einer exponentiellen Abnahme der Virenkonzentration mit der Entfernung zum Säulenzulauf aus, ist entweder die Virenkonzentration an Port 1 zu niedrig oder die an Port 2 zu hoch (Abbildung 12).

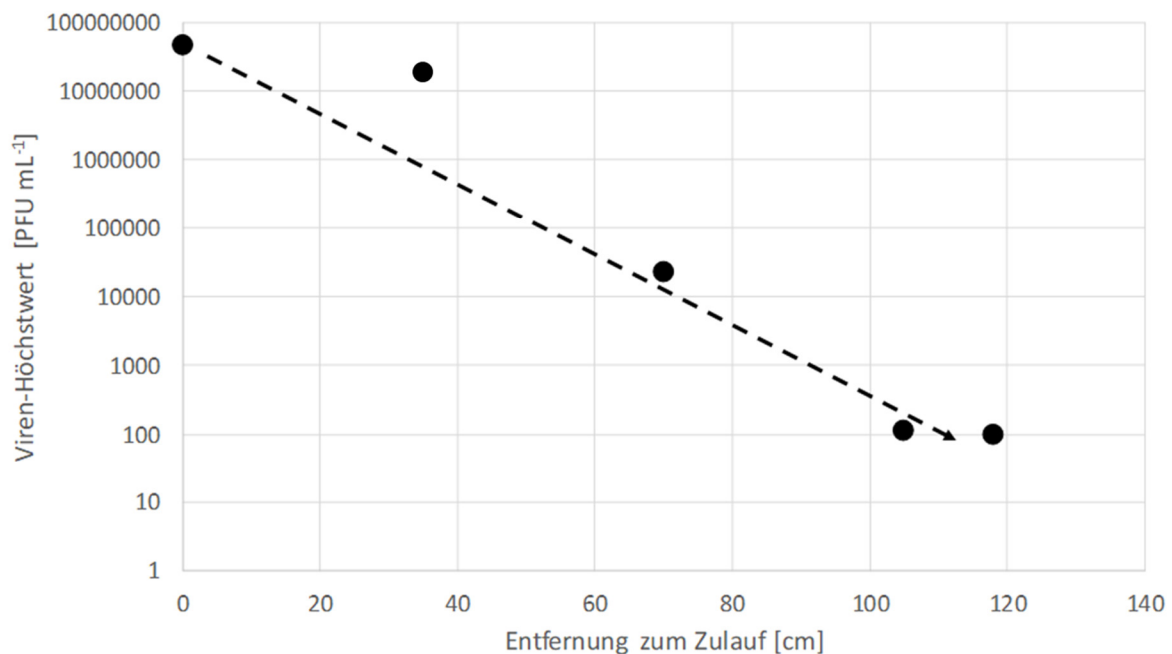


Abbildung 12. Maximale Durchbruchkonzentrationen für aktive MS2 Phagen mit Entfernung zum Säulenzulauf. Die gestrichelte Linie steht für eine hypothetisch exponentielle Abnahme der Virenabundanz in den Peaks der Durchbruchkurven.

Wie in den Mini-Säulenversuchen, wurden die zu dotierten MS2 Phagen auch in der mesoskaligen Säule auf ihre Inaktivierung hin untersucht. D. h., die Anzahl an aktiven MS2 Phagen wurde der Gesamtzahl an MS2 Phagen gegenübergestellt. Wie aus Abbildung 11 gut ersichtlich, lag die Gesamtzahl an Phagen mit Ausnahme eines einzelnen Wertes immer über jener der aktiven Phagen. Der Säulenversuch zeigt sehr deutlich, dass im Säulenzulauf noch fast alle zu dotierten Phagen aktiv und somit kultivierbar waren. Sowohl im zeitlichen Verlauf jeder Durchbruchkurve als auch mit Entfernung zum Säulenzufluss bzw. mit zunehmender Fließstrecke durch das Sediment nahm der Anteil aktiver Phagen ab. Es kam also zu einer Inaktivierung der MS2 Phagen über Raum und Zeit. An den ersten beiden Probenahmeports (0cm und 35cm) kann zu Beginn der Durchbruchkurven noch ein hoher Anteil an aktiven Phagen beobachtet werden, der jedoch noch vor dem Höhepunkt des Durchbruchs stark abnimmt. Zur Zeit der Peaks liegt der Anteil bereits bei $\leq 50\%$. Mit Ende des

Monitorings (Tag 16) sind an den beiden Probenahmeports noch etwa $7 \cdot 10^3$ Virenpartikel mL^{-1} mittels molekularer Methoden nachweisbar, der Anteil aktiver Phagen ist zu diesem Zeitpunkt bereits bei $1-2 \cdot 10^0$ bzw. unter der Nachweisgrenze ($<0,5$) (Abb. 11), 3 Größenordnungen geringer. Während der Sedimentpassage fand also eine sehr starke Inaktivierung der MS2 Phagen statt. Nach weiterer Fließstrecke wird dieser Effekt noch deutlicher. In den folgenden Durchbruchkurven erreicht der Anteil der aktiven Viren zu keinem Zeitpunkt Werte über 23% (Port 70cm), 18% (Port 105cm) und 7% (Port 120cm). Aufgrund der doch sehr hohen Nachweisgrenze für die molekulare Quantifizierung ($3,45 \cdot 10^1 - 5,98 \cdot 10^2 \text{ mL}^{-1}$) sind in diesen Sedimenttiefen nur noch Werte von kurz vor bis nach dem Virendurchbruch verfügbar.

Für die nach Versuchsende entnommenen Sedimentproben wurde nach 40 cm Fließstrecke (Sediment nahe dem Port bei 35 cm) $7,6 \cdot 10^6$ bis $1,2 \cdot 10^7$ MS2 Genome pro mL Sediment gefunden, und 5 PFU, d.h. aktive Phagenpartikel. Nach weiteren 35 cm Fließstrecke (70cm) waren in den Sedimentproben keine Phagen mehr nachweisbar, weder aktiv noch als Genome. Auf Basis dieser Daten muss davon ausgegangen werden, dass der Großteil aller zu dotierten Phagen im Verlauf des Experiments abgebaut und somit eliminiert wurde.

Feldmonitoring am Wasserwerk Flehe

Die Probenahmen am Standort Flehe fanden von Januar 2018 bis Mai 2019 statt.

Abbildung 13 zeigt exemplarisch, die Grundwasserstände für die Messstellen A3 und E1 (vgl. Abbildung 5), wobei die anderen Grundwassermessstellen nur geringfügig andere Werte aufweisen. Die direkte Nähe zum Rhein und der hydraulisch sehr leitfähige Aquifer sorgten dafür, dass sich der Jahresgang des Wasserstands im Rhein in zeitlich kurzen Abständen auch in allen Grundwassermessstellen widerspiegelte. Der Jahresgang des Rheins mit Tiefstständen im Sommer und Herbst, welche im Jahr 2018 besonders warm und trocken waren (der historisch niedrigste Stand am Rheinpegel in der Düsseldorfer Altstadt wurde am 23.10.2018 gemessen), zeigte eine deutliche Dynamik zwischen Niedrigwasser im Sommer und dem Wiederanstieg im Winter 2018/19.

In Abbildung 14 wird der Temperaturverlauf von ausgewählten Grundwassermessstellen gezeigt. Analog zum Grundwasserstand waren die Temperaturen des Rheins nach kurzer zeitlicher Verzögerung und nur wenig gedämpft in den ufernahen Grundwassermessstellen zu finden. Das landseitige Grundwasser zeigte dagegen eine sehr konstante Temperatur, wodurch die weiter vom

Rhein entfernten Grundwassermessstellen (E-Reihe) eine nur sehr geringe Beeinflussung durch den Rhein zeigen.

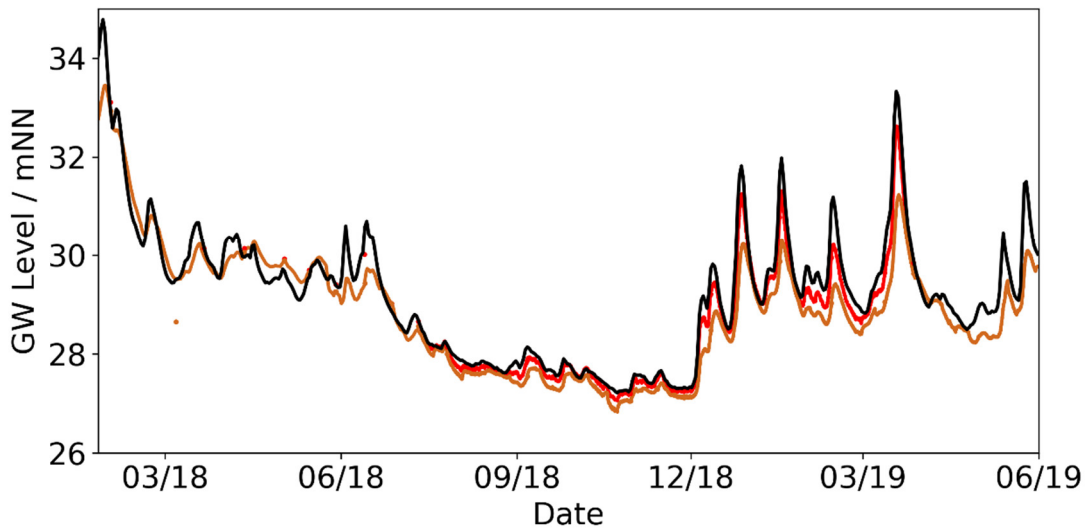


Abbildung 13. Grundwasserspiegel in Beobachtungsbrunnen A3 (rot) und E1 (braun) (Linie = Loggerdaten, Punkte = Messwerte bei der Probenahme). Rheinpegel am Wasserwerk Flehe als schwarze Linie.

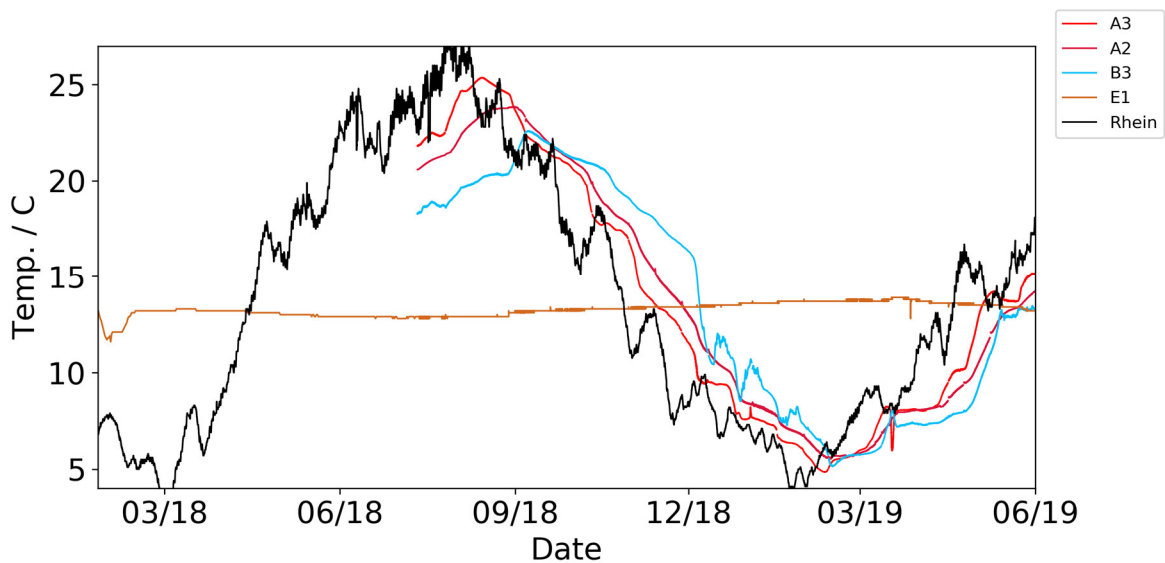


Abbildung 14. Wassertemperaturen in den Beobachtungsbrunnen A3, A2 und B3 sowie im Rhein. Nur Loggerdaten gezeigt.

Hydrochemisch ist die Beeinflussung des Grundwassers durch den Rhein sehr gut am Beispiel der Calcium-Ionen (Abbildung 15) demonstrierbar. Nach dem Winterhochwasser im Januar 2018 stellte sich im Grundwasser aller Messstellen die Calcium-Konzentration des Rheinwassers ein. Mit fallenden Rheinpegel hin zum Niedrigstand im Sommer/Herbst 2018 bildete sich eine Zweiteilung in landseitige vom Rhein unbeeinflusste Messstellen (hohe Calcium-Werte, Messstellenreihen C und E) und flussseitige vom Rhein beeinflusste Messstellen (niedrige Calcium-Werte, Messstellenreihen A, B und

D) aus. Im Entnahmebrunnen (Q) findet sich konsequenterweise eine Mischung zwischen Uferfiltrat und landseitigen Grundwasser. D.h. für die Mittel- und Niedrigwassersituation konnte die hydrochemische Signatur des Rheins und des landseitigen Grundwassers in den Messtellen unterschieden werden, während bei höheren Pegelständen die Signatur des Rheins sich weiter in den Uferbereich durchpauste.

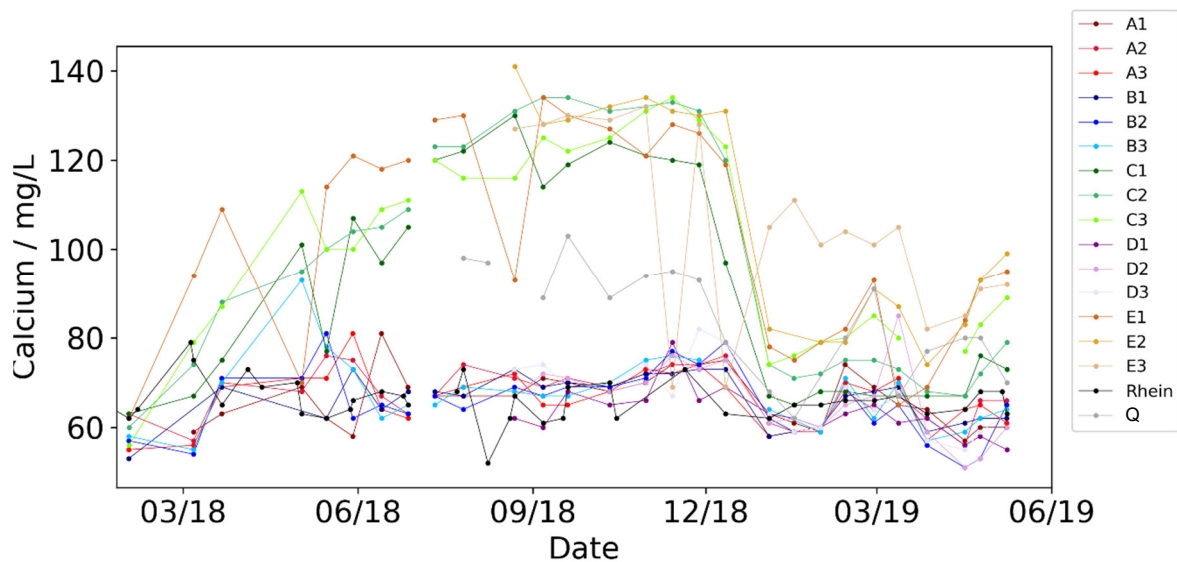


Abbildung 15. Calcium-Konzentration in den verschiedenen Beobachtungsbrunnenreihen (A,B,C,D,E) sowie dem Entnahmebrunnen (Q) und dem Rhein. Landseitige Beobachtungsbrunnen (grün und braune Farben) zeigen erhöhte Calciumkonzentrationen bei niedrigen Rheinpegel (Sommer/Herbst 2018).

Die Ergebnisse der mikrobiologisch-hygienischen Untersuchungen am Wasserwerk Flehe aus dem gesamten Untersuchungszeitraum Januar 2018 bis Mai 2019 zeigen ein sehr deutliches Bild. Die Gesamtzahl der prokaryotischen Zellen im Rheinwasser variierten von $3,0 \cdot 10^8$ bis $2,8 \cdot 10^9$ Zellen L^{-1} , mit einer positiven Korrelation zur Wassertemperatur. Mit Passage durch die Ufersedimente verringert sich die Gesamtzellzahl (GZZ) bereits um das 16-fache bis zu den Messstelle der Brunnenreihe A. Obwohl sich die mittleren Zellzahlen im weiteren Verlauf der Uferfiltration in einem ähnlichen Wertebereich befinden, kommt es zu einer weiteren Reduktion in Fließrichtung und die niedrigsten Werte wurden in der landseitigen Messstelle E1 und der Brunnenreihe C, jenseits des Förderbrunnens gemessen. Ein sehr ähnliches Muster zeigte auch die mikrobielle Aktivität (ATP Konzentrationen).

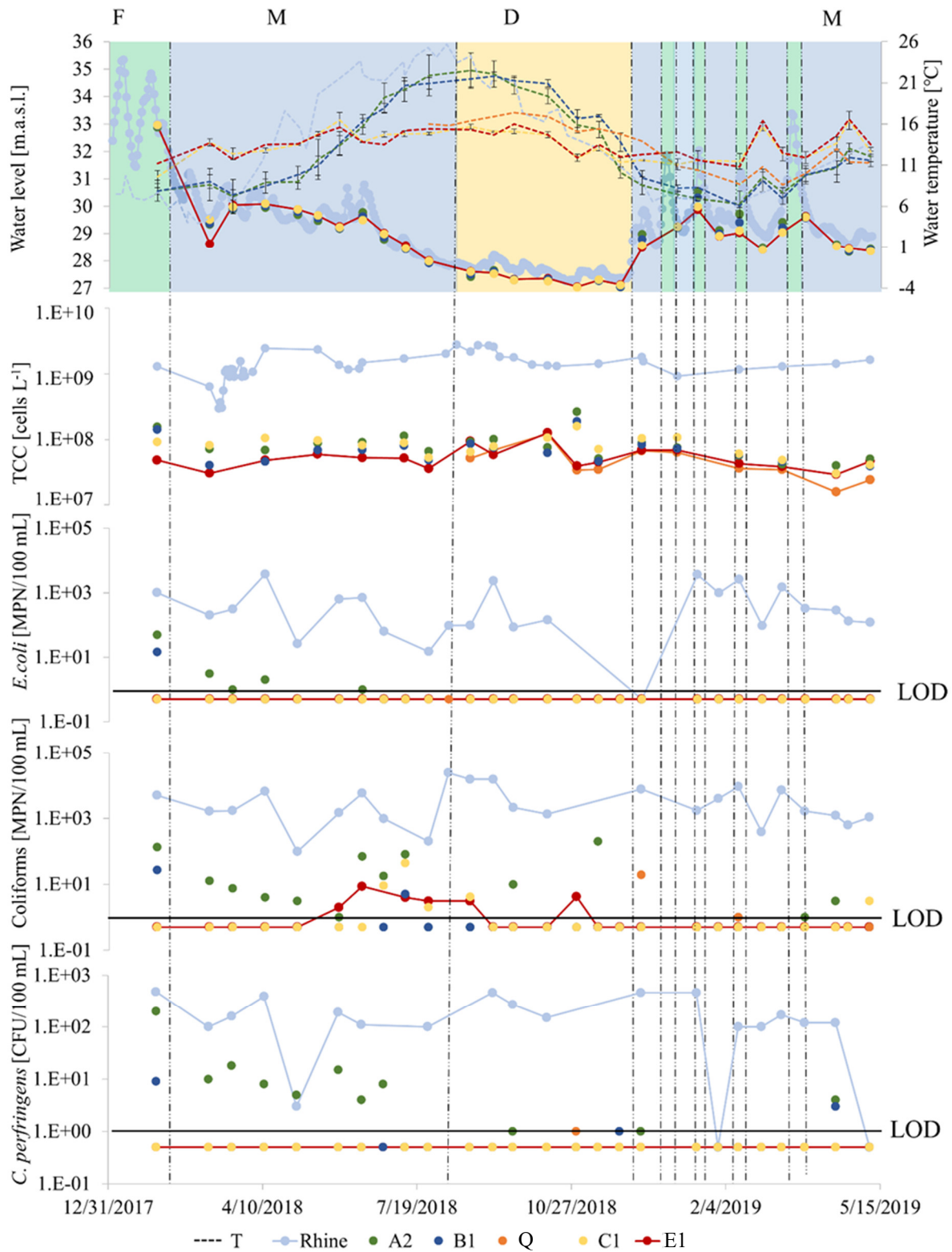


Abbildung 16. Saisonale Dynamik einzelner bakterieller Indikatoren im Rhein und dem Grundwasser entlang eines Transektes vom Rhein (RR-A-B) zum Förderbrunnen (Q) und darüber hinaus (C-E). TCC: Gesamtzellzahl, F: Hochwasser; M: Mittelwasser; D: Niedrigwasser; T: Wassertemperatur, LOD: Detektionslimit.

Der bakterielle Fäkalindikator *E. coli* war das ganze Jahr über im Rhein nachweisbar, tauchte aber nur selten im Uferfiltrat auf. Dies passiert ausschließlich bei und in Folge von hohen Wasserständen im Rhein und Hochwassersituationen (Abbildung 16). So konnte *E. coli* im flussnahen Grundwasser (Uferfiltrat) der Messstelle A2 während und im Nachgang an die Hochwassersituation im Winter 2017/2018 und Frühjahr 2018 nachgewiesen werden. Etwas weiter entfernt vom Rhein, in B2, konnte *E. coli* nur noch zu zwei Terminen nachgewiesen werden. Für den Förderbrunnen gibt es für den Winter 2017/2018 und das Frühjahr 2018 leider keine Daten. Coliforme Bakterien, immer präsent im Rheinwasser, waren auch im Uferfiltrat von A2 häufig nachzuweisen und fehlten auch in den heißen Sommermonaten nicht, die von einem Rekordniedrigwasserstand im Rhein gekennzeichnet waren (Abbildung 16). Am Förderbrunnen treten zu zwei Terminen im Winter 2018/2019 Coliforme auf. Ein ähnliches Muster wie *E. coli* zeigte der Fäkalindikator *Clostridium perfringens*, allerdings mit höheren Werten. Vor allem während und im Nachgang des Rheinhochwassers im Winter 2017/2018 als auch im Frühjahr 2019 im Nachgang eines kurzen Rheinhochwassers war *C. perfringens* in Wasserproben aus den Brunnen der Reihe A nachweisbar.

Ein ganz ähnliches Bild ergibt sich auch für die Coliphagen (Abbildung 17). Im Rhein sind sie das ganze Jahr über nachweisbar, in den Messstellen A2 und B1 tauchen sie jedoch nur bei hohen oder steigenden Wasserständen im Rhein auf bzw. im Nachgang von Hochwässern. Kein Nachweis erfolgte am Förderbrunnen. Somatische Coliphagen wurden auch einmalig im Nachgang an die lange Niedrigwasserphase in A2 und B1 gefunden. Ganz anders das Bild für die Adenoviren. Sie waren, ähnlich den anderen viralen Fäkalindikatoren das ganze Jahr über im Rhein nachweisbar, mit Abundanzen von $1,2 \cdot 10^4 \pm 3,0 \cdot 10^4$ Virenpartikeln L^{-1} , konnten aber auch in den Brunnenreihe A ganzjährig nachgewiesen werden. Die Konzentrationen lagen hier allerdings bereits 2-3 Größenordnungen niedriger ($5,8 \cdot 10^1 \pm 3,6 \cdot 10^1$ Virenpartikeln L^{-1}) und teilweise unter der theoretischen Nachweisgrenze. Keine Adenoviren konnten mehr in Stichproben der Brunnenreihe B gefunden werden (Nachweisgrenze bei ca. 10 Virenpartikeln L^{-1}).

Mit Bezug auf die unterschiedlichen hydrologischen Situationen, zeigte sich eine erhöhte Konzentration von verschiedenen Indikatoren im Oberflächenwasser, i.e. *E. coli*, *C. perfringens*, Adenoviren, F+ Coliphagen und somatischen Coliphagen, in Zeiten erhöhter Wasserstände. Die Gesamtbakterienzahl und Gesamtvirenzahl zeigten ähnliche Konzentrationen im Rheinwasser das ganze Jahr über mit leicht erhöhten Werten während der sehr warmen Niedrigwasserphase.

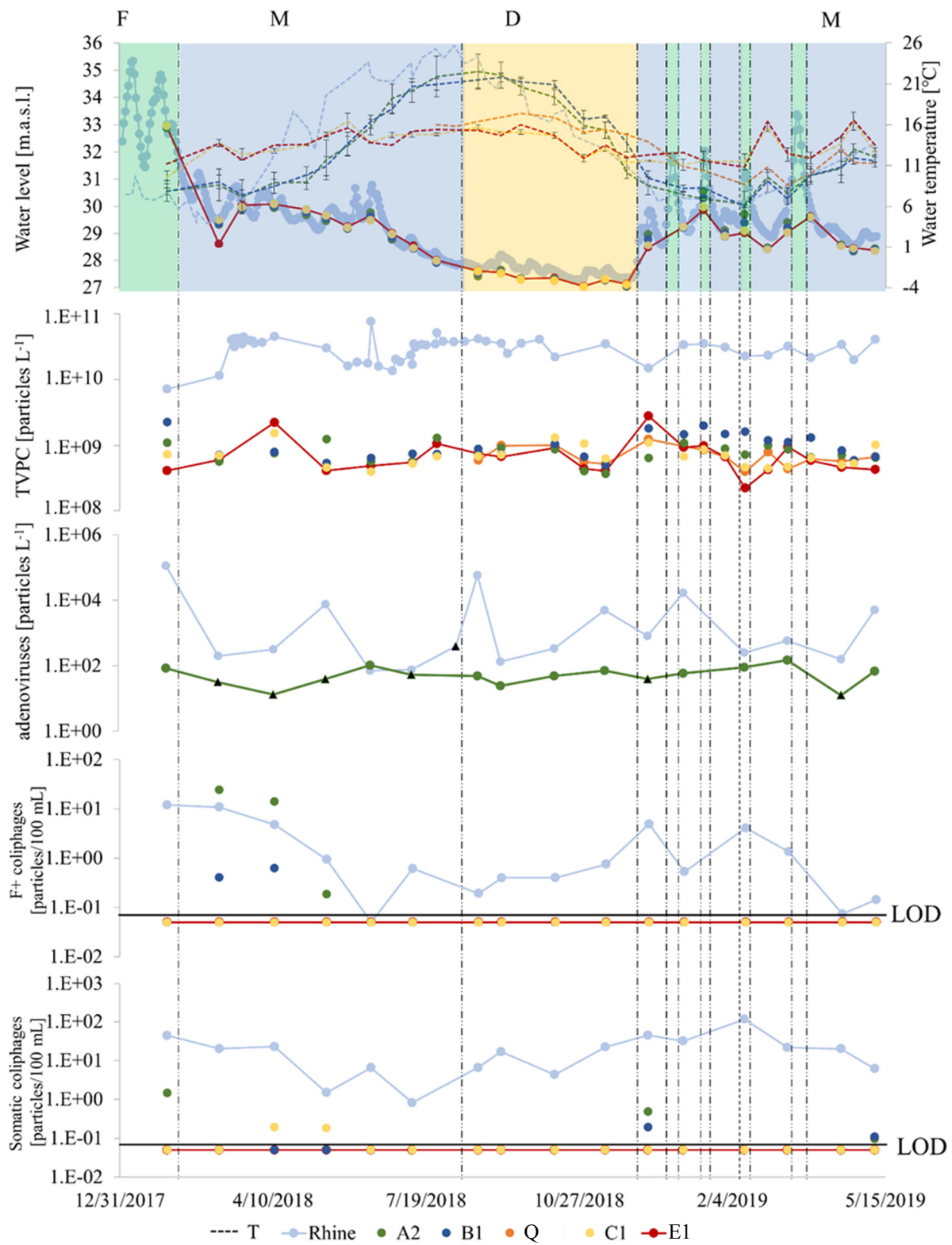


Abbildung 17. Saisonale Dynamik einzelner viraler Indikatoren im Rhein und dem Grundwasser entlang eines Transektes vom Rhein (RR-A-B) zum Förderbrunnen (Q) und darüber hinaus (C-E). TVPC: Gesamtvirenpartikelzahl, F: Hochwasser; M: Mittelwasser; D: Niedrigwasser; T: Wassertemperatur, LOD: Detektionslimit.

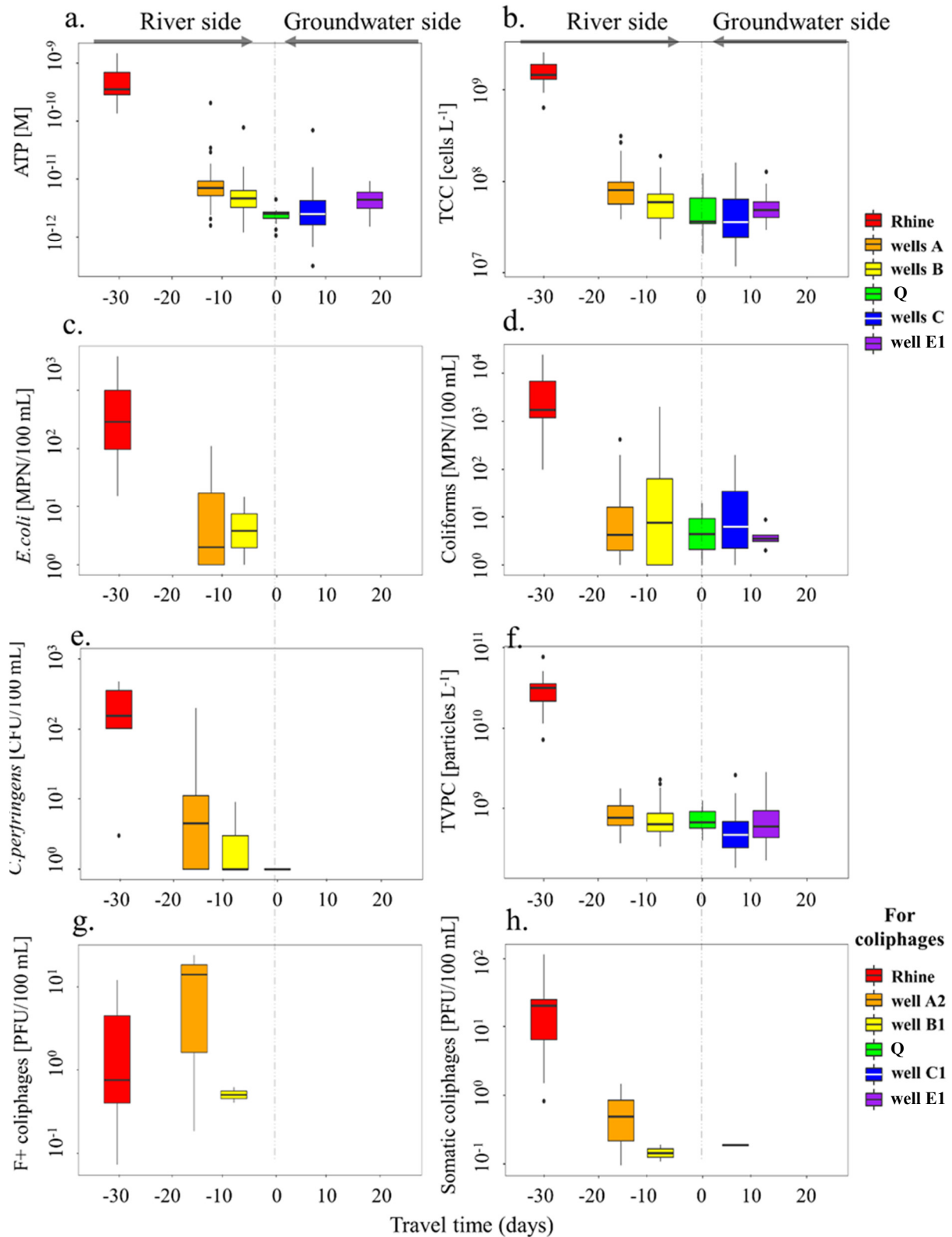


Abbildung 18. Räumlich-zeitliches Auftreten der bakteriellen und viralen Fäkalindikatoren am Wasserwerk Flehe, entlang des Hauptfließweges vom Rhein zum Förderbrunnen und aus dem Hinterland zum Förderbrunnen.

Die Filter- und Rückhalteeffizienz für die einzelnen viralen und bakteriellen Indikatoren war sehr gut (Abbildung 18) und das auch zu Zeiten von Hochwässern (Abbildung 19). Kaum ein Indikator konnte noch im Wasser aus dem Förderbrunnen nachgewiesen werden, unabhängig von der jeweiligen hydrologischen Situation. Vom Fluss bis zum Förderbrunnen kam es zu einer Reduktion der einzelnen Indikatoren von 1,6 bis 3,7 log Einheiten. Die größte Reduktion wurde für die coliformen Bakterien beobachtet (3,7 log₁₀), gefolgt von *E. coli* (3,4 log₁₀), den somatischen Coliphagen (3,1 log₁₀), *C. perfringens* (2,5 log₁₀), F+ Coliphagen (2,1 log₁₀). Die Last an Adenoviren reduzierte sich bereits auf den ersten wenigen Metern der Uferfiltration um 3,1 log₁₀. Die geringste Reduktion wurde für die Gesamtbakterienzah (1,6 log₁₀) und die Gesamtvirenpartikelzahl (1,7 log₁₀) beobachtet.

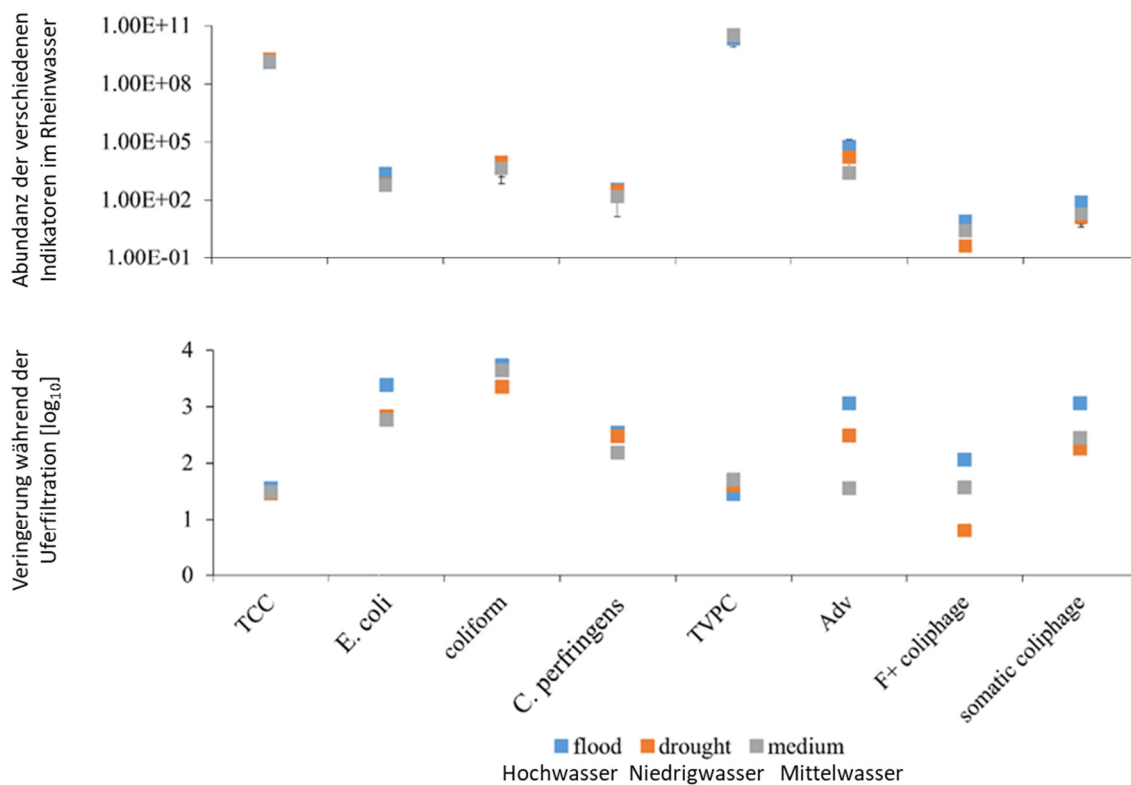


Abbildung 19. Rückhalteeffizienz mit Uferfiltration für ausgewählte Virale und bakterielle Indikatoren. Werte für die Gesamtzellzahl (TCC), Gesamtvirenpartikelzahl (TVPC) und Adenoviren verstehen sich pro Liter Wasser. Werte für *E. coli*, Coliforme sind in MPN 100mL⁻¹ angegeben. Werte für *C. perfringens* sind in KBE 100mL⁻¹, und Werte für Coliphagen sind in PFU 100mL⁻¹ angegeben. Die Rückhalteeffizienz für Adenoviren bezieht sich ausschließlich auf die Filterstrecke zwischen dem Rhein und Messstelle A2.

Geophysikalische Untersuchungen

Die Ergebnisse der geoelektrischen Untersuchungen (nicht gezeigt) deuten nur einen signifikanten Sprung im elektrischen Widerstand bei 16-20 mNN an, der mit einem Schichtübergang interpretiert werden kann. Dabei handelt es sich höchstwahrscheinlich um den Übergang vom Sand-Kies-Aquifer zum Feinsand-Silt-Aquitard, welcher auch gut in den Bohrprofilen bei 18-19 mNN anzutreffen ist. Darüber hinaus zeigen die Gamma-Logs, beispielhaft in Abbildung 20, keine signifikanten positiven Ausschläge im Aquifer, die auf tonreichere Zwischenschichten gedeutet werden könnten. Die positiven Ausschläge in Beobachtungsbrunnen A1, B1, C1 bei ca. 22 mNN

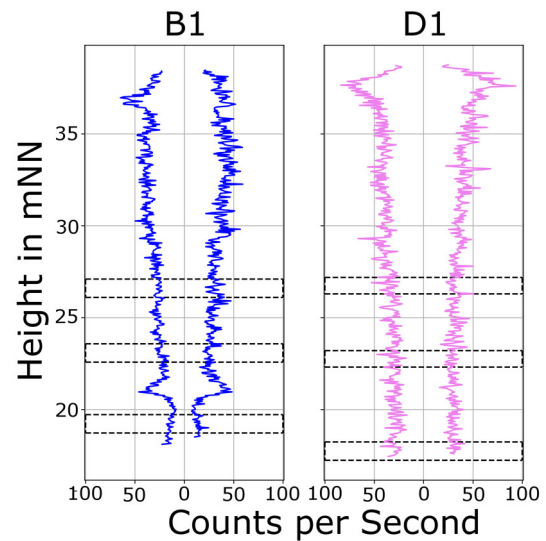


Abbildung 20. Gamma-Logs für Beobachtungsbrunnen B1 und D1. Gestrichelte Rechtecke markieren Lage der verfilterten Tiefen der Beobachtungsbrunnen.

können auf eine Tonsperre im Ausbau der Messstellen zurückgeführt werden, wie sie in den jeweiligen Ausbauplänen auch erwähnt wird. Dies wird unterstützt von der Abwesenheit des Ausschlages in Beobachtungsbrunnen D1, welcher erst im Rahmen dieses Projektes im Jahr 2018 erstellt worden ist, und keine Tonsperre im Ausbau enthält. Die kleinteiligen Muster der Gamma-Logs lassen darüber hinaus keine eindeutige Interpretation zu bzgl. des Schichtenverlauf innerhalb des Aquifers. Einzig eine leichte Abnahme der Gamma-Strahlungsdetektionen mit der Tiefe lässt sich feststellen, was als eine leichte Abnahme des Feinkornanteils interpretiert werden kann. Dies würde zusammenpassen mit den Modellierungsergebnissen (3.2), die in der Regel eine etwas höhere hydraulische Leitfähigkeit im unteren Aquiferbereich ergaben.

3.2 AP2 Numerische Analyse

Modellierung Säulenversuch 2019

Die Modellierung des Tracerversuchs hat zwei Probleme aufgezeigt. Zum einen hat die mit Filterkies aufgefüllte Wanne am Boden der Säule ein immer noch nicht insignifikantes Totvolumen, welches den initialen Tracerdurchbruch bei Port 1 zwischen Filterkies und Sedimentmaterial verzögert und ein gewisses Tailing auslöst. Um das Problem mit den nicht idealen Eigenschaften der Filterkieswanne zu umgehen, wurde für das Modell die gemessenen Werte vom Port 1 als Randbedingung festgelegt. D.h. die Filterkieswanne wurde nicht mitmodelliert. Das zweite Problem, was sich gezeigt hat, ist, dass die

hydraulischen Eigenschaften der Säule leicht heterogen sind. Das zeigt sich darin, dass bei Annahme einer einheitlichen Porosität und Dispersivität in der Säule kein gutes Modellergebnis für alle Ports erzielt werden kann. Abbildung 21 deutet eher darauf hin, dass die Porosität im unteren Bereich Port 1/2 der Säule niedriger ist als im oberen (Port 3/4/5), was wahrscheinlich mit der Befüllung der Säule zusammenhängt. Weiterhin ist auch die Höhe des Durchbruchs größer bei Port 4 als bei Port 3, was darauf hindeutet, dass Port 3 in einem schlechter durchströmten Bereich liegt.

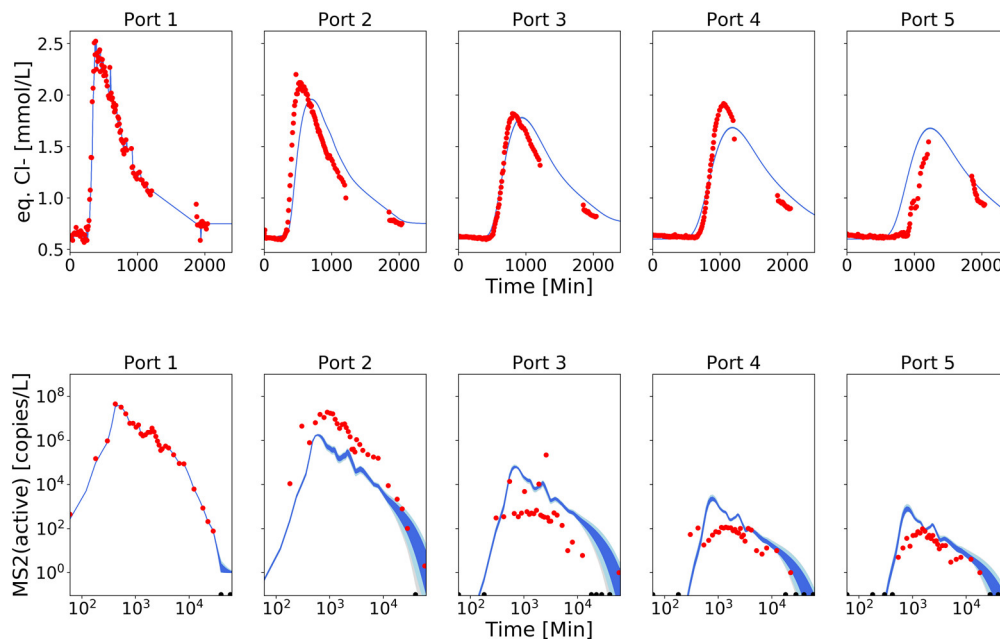


Abbildung 21. Modellierungsergebnisse des Säulenversuchs bei Annahme einer homogenen Säule. Oben: Tracerversuch. Unten: MS2-Injektionsversuch. Gezeigt ist das Unsicherheitsintervall basierend auf 24 Kalibrationen.

Die initiale Modellierung des MS2-Veruchs mit angenommen homogenen Eigenschaften der Säule hat gezeigt, dass damit die MS2 Daten nicht gut zu replizieren sind (Abbildung 21, unten). Wie die Experimentaldaten zeigen, findet die Retention von MS2 Viren hauptsächlich statt zwischen Port 2 und 3. Dies entspricht weder der log-linearen noch der hyperexponentiellen Retention, die üblicherweise in vergleichbaren Laborexperimenten mit homogenen Medien festgestellt wird. Es gibt in den Messdaten kaum Konzentrationsunterschiede zwischen Port 1 und 2, und ebenso wenig zwischen Port 4 und 5. Zusammen mit der Beobachtung aus dem Tracerversuch, dass Port 3 in einem hydraulisch schlechter durchströmten Bereich liegt, deutet es darauf hin, dass möglicherweise im Zentrum der Säule (zwischen Port 2 und 4) Sedimente mit tendenziell geringerer Korngröße vorkommen. Das könnte sowohl die höhere MS2 Retention als auch den hydraulisch schlechter durchlässigen Bereich erklären. Das Säulenmaterial wurde mangels großer Mischtechnik nur abschnittsweise und nicht für die Gesamtsäule vor der Befüllung homogenisiert. Weiterhin wurde auf Grund der limitierten Sedimentprobenmenge aus den Bohrungen am Wasserwerk Flehe Material aus dem gesamten Aquifer verwendet. Zwar wurden stark feinkörnige Lagen ausgelassen, dennoch ist nicht auszuschließen, dass

einzelne Abschnitte der Säule nicht die Eigenschaften der hydraulisch maßgeblichen Schichten am Wasserwerk Flehe aufweisen.

Deshalb wurde das Modell erweitert um eine zweite Schicht im Zentrum der Säule mit höherer Porosität und niedrigerer Korngröße. Abbildung 22 (oben) zeigt die Ergebnisse der Kalibration des Tracerversuchs für das erweiterte Modell, und dass für Ports 2,3 und 4 recht gute Übereinstimmungen erzielt werden können. Wie Abbildung 22 (unten) zeigt, lassen sich auch für den Transport von MS2 Viren gute Ergebnisse mit dem erweiterten Modell erzielen. D.h. eine Heterogenität in der Säule könnte die Erklärung sein für die beobachteten Abweichungen.

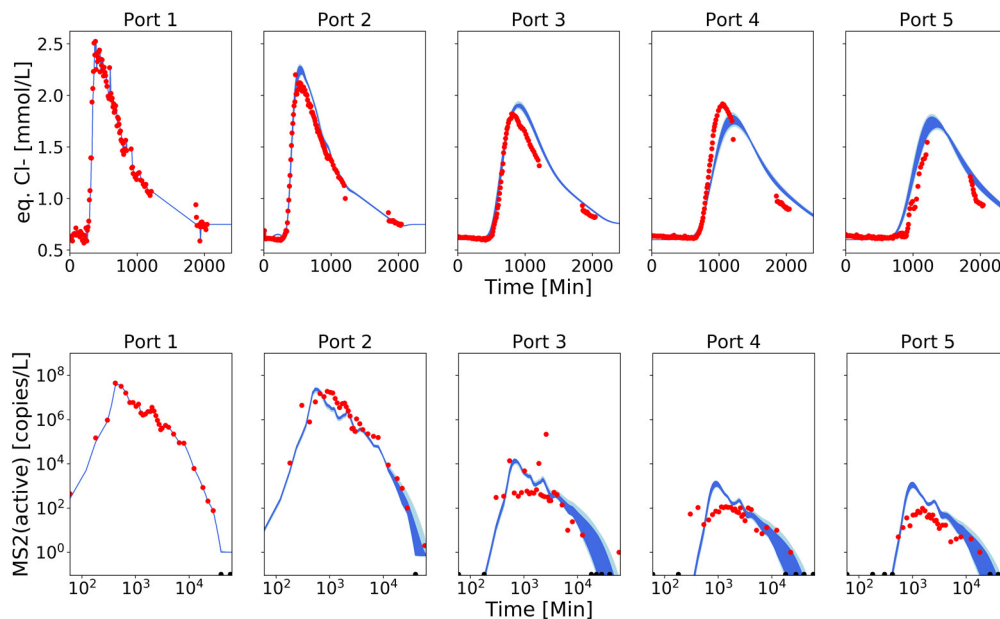


Abbildung 22. Modellierungsergebnisse des Säulenversuchs bei Annahme einer Zwischenschicht in der Säule. Oben: Tracerversuch. Unten: MS2-Injektionsversuch. Gezeigt ist das Unsicherheitsintervall basierend auf 24 Kalibrationen.

Dadurch verändert sich jedoch die Interpretation der Ergebnisse mit Hinblick auf die Übertragung auf die Feldskala. Denn im Säulenversuch wäre nun der überwiegende Teil der MS2 Retention durch eine hydraulisch schlecht leitfähige Schicht mit geringeren Korngrößen aufgetreten. Ob diese Schicht auch hydrochemisch bessere Eigenschaften für Sorption hatte, lässt sich durch das Modell nicht differenzieren, kann also nicht ausgeschlossen werden. Auf der Feldskala in einem Aquifer würden hydraulisch schlecht leitfähige Schichten umströmt werden, es sei denn sie existieren als vollständige Barrieren anstatt als lokale Phänomene. Das ist jedoch unwahrscheinlich, da dies die hydraulische Leitfähigkeit und damit die Produktivität des Gesamtaquifers schmälern würde. Damit wäre der Aquifer weniger geeignet als Standort für Förderbrunnen eines Wasserwerks. Auf der Feldskala in produktiven, hoch leitfähigen Aquiferen würde der Haupttransportweg nur auf sehr leitfähigen, grobkörnigen Schichten ruhen. Diese würden wahrscheinlich ähnlich geringe Retention aufweisen wie das obere und untere Ende unseres Säulenversuch. Dies deckt sich auch mit den Beobachtungen im

Feld (siehe 3.1), wo Coliphagen wenn zwar selten aber dennoch in Beobachtungsbrunnen B1 (>40 m entfernt vom Fluss) gefunden wurden bei etwa 2-3 Größenordnungen verringerten Konzentration.

Pathogentransportmodell Wasserwerk Flehe – Datenreihe 2003/2004

Die Modellvorstellung des Untergrundes am Wasserwerk Flehe orientierte sich für diese Datenreihe weitestgehend an den bisherigen Modellierungen (Sharma et al., 2012; Sharma et al., 2014 (unveröffentlicht)), da Erkenntnisse durch die neugewonnenen Daten noch nicht vorlagen. Der Untergrund gliedert sich demnach wie in Abbildung 23 dargestellt. Hydraulisch gering durchlässige Schichten haben sich aufgrund der konstanten Infiltration im Übergang zwischen Fluss und Aquifer gebildet (Schubert, 2001). Die Teilung des Aquifers in einem oberen und unteren Grundwasserleiter beruht auf der Modellierung des konservativen Transports von Chlorid und Temperatur mit Messwerten aus dem Jahr 2003/4 (Sharma et al., 2012), welche mit der PFLOTRAN Modellierung bestätigt wurde. Die Datenreihe aus dem Jahr 2003/4 beinhaltet jedoch nur die Beobachtungsbrunnenreihe B und den Entnahmekosten Q enthalten innerhalb der Transekte.

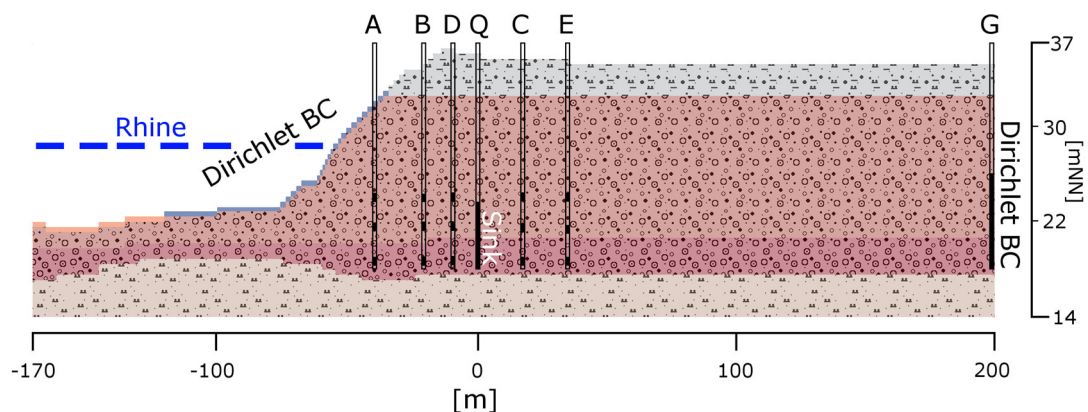


Abbildung 23. Modell des Untergrundes am Wasserwerk Flehe (überhöht). Bodenzone (grau), oberer Aquifer (hellrot), unterer Aquifer (rot), Aquitard (beige), ufernahe Kolmationsschicht (blau), zentrale Kolmationsschicht (orange), mit mittlerem Wasserstand des Rheins.

Eine Übersicht der Ergebnisse des parameter-screenings sind in Abbildung 24 dargestellt. Es zeigt sich, dass eine Vielzahl von Parameter des Colloid Transports eher insensitiv sind. Besonders relevant dagegen sind die Größe der Pathogene sowie die Inaktivierungskoeffizienten aber auch die hydraulische Durchlässigkeit der Kolmationsschicht. Darüber hinaus zeigt sich auch eine relativ große zeitliche und örtliche Variabilität, die vor allem mit dem Flusspegel und dem Abstand zum Fluss zusammenhängt. Die 26 sensitivsten Parameter aus dem parameter screening wurden verwendet für eine stochastische Modellkalibration mittels PSO (particle swarm optimization) und den Daten aus dem Untersuchungszeitraum 2003/2004. Abbildung 25 a) zeigt exemplarisch, dass für den konservativen Transport und den Wärmetransport gute Ergebnisse mit geringer Unsicherheit erzielt worden sind. Abbildung 25 b) zeigt hingegen, dass für den Transport der Fäkalindikatorbakterien

prinzipiell auch gute Ergebnisse mit dem Modell erzielt werden, jedoch dass eine hohe Unsicherheit vorliegt. Dies ist vor allem eine Folge der geringeren zeitlichen Auflösung der Daten sowie der Komplexität der Prozesse und deren Einflussfaktoren. Abbildung 26 zeigt, dass sich die Unsicherheit der Modellergebnisse auch auf die Unsicherheit der Parameter nach der Kalibration auswirkt, im Allgemeinen haben die Colloid Transport Parameter weiterhin eine hohe Unsicherheit, selbst äußerst sensitive wie die Inaktivierungskoeffizienten. Dies ist sehr wahrscheinlich auf die Korrelation der Parameter zurückzuführen (siehe auch 2.3). Die Ergebnisse des Modells und der Sensitivitätsanalyse wurden in einer wissenschaftlichen Publikation veröffentlicht (Knabe et al., 2021).

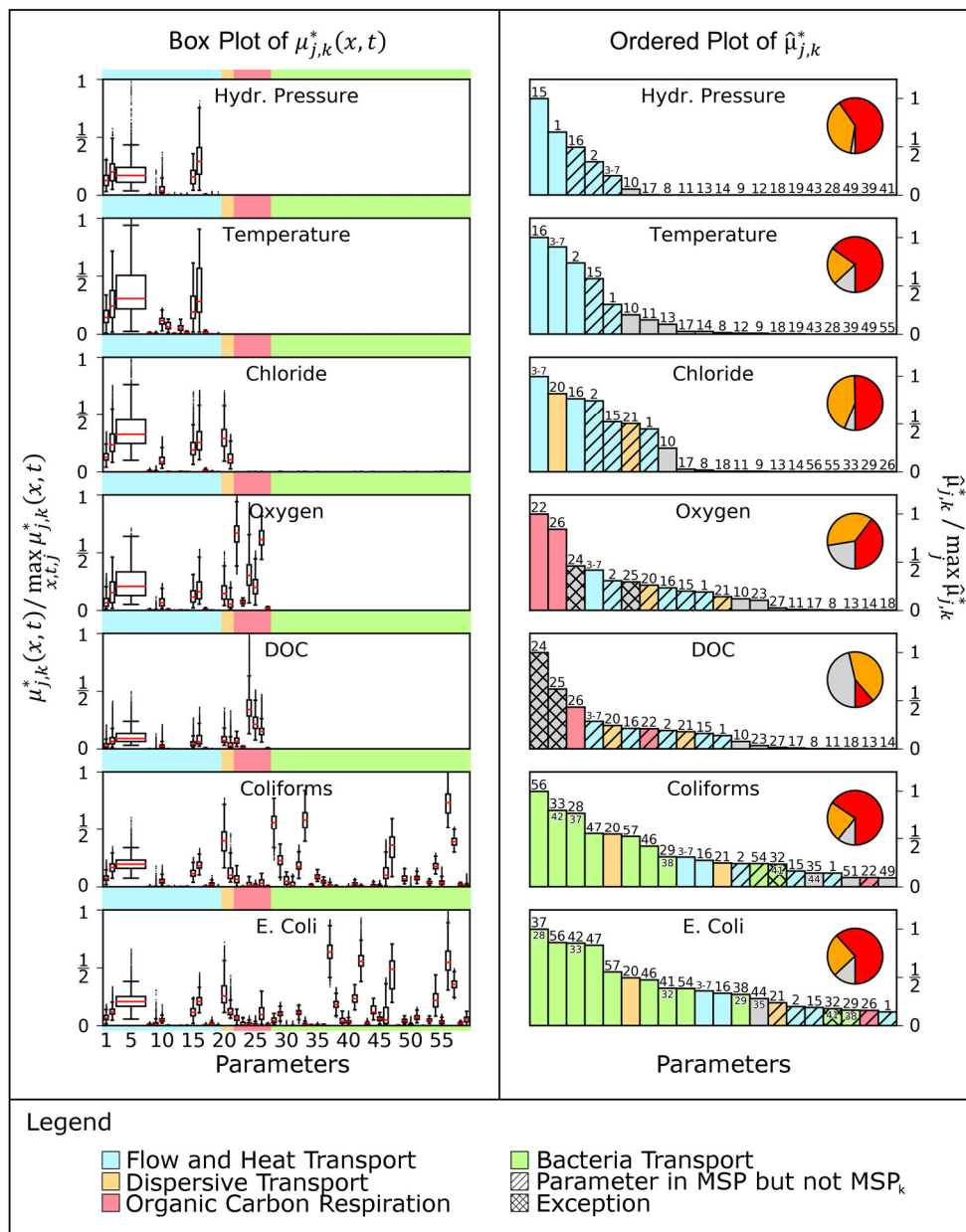


Abbildung 24. Links: Boxplot des Sensitivitätskoeffizienten μ für verschiedene Modellvariablen. Rechts: Parameter geordnet nach dem über zeit- und ort-gemittelten Sensitivitätskoeffizienten. Farbige Säulen zeigen Parameter an die in der stochastischen Modellkalibration verwendet wurden. Die Farben der Säulen zeigen die jeweilige Parametergruppe an.

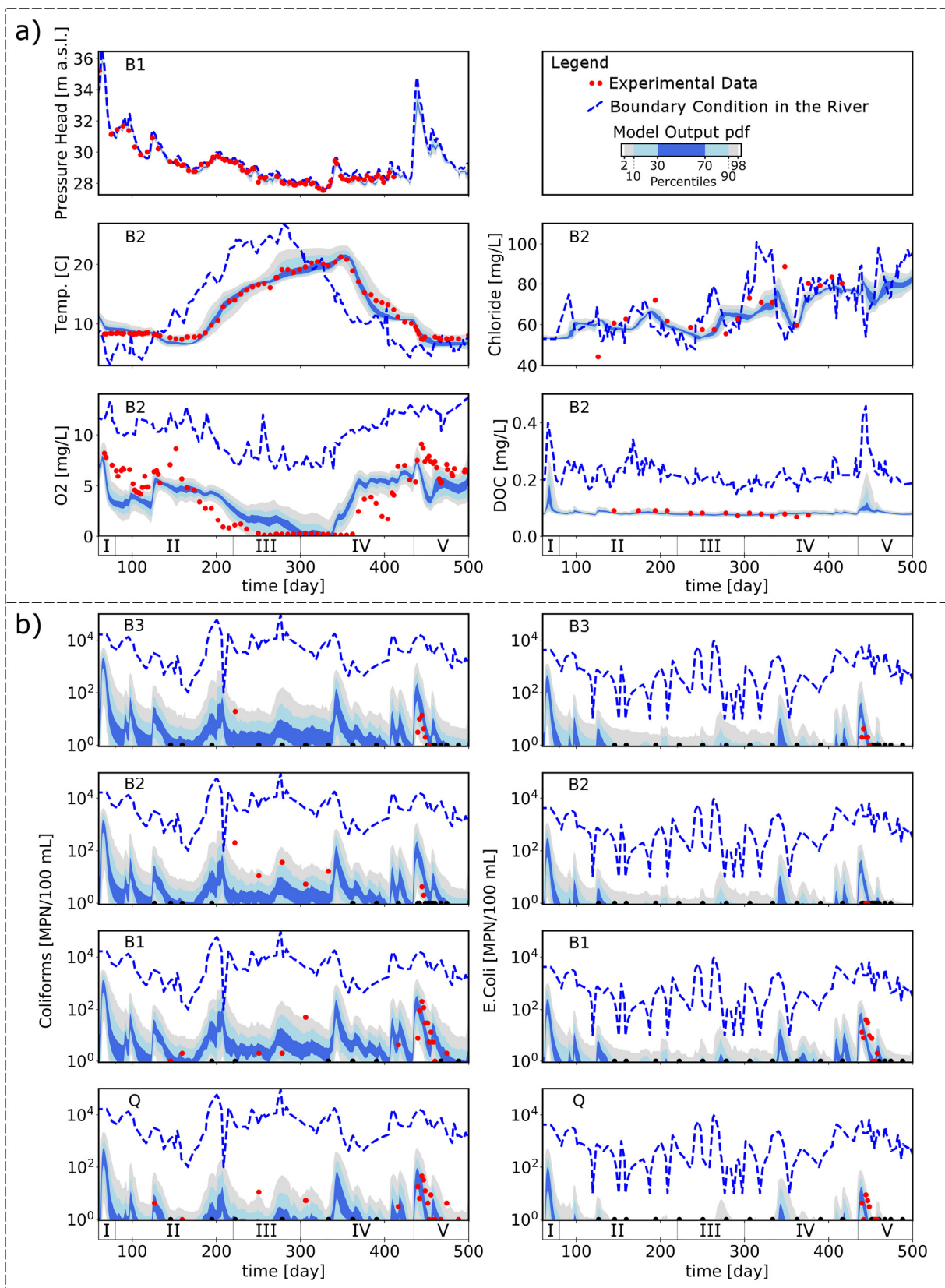


Abbildung 25. Monitoring-Daten und Ergebnisse der stochastischen Modellkalibration für das Flehe Modell mit dem Datensatz 2003/4 an den Messstellen B1, B2, B3 und dem Förderbrunnen Q.. a) Übersicht über die nichtmikrobiologischen Daten. b) Fäkalindikatorbakterien (E. Coli und Coliforme). Farbige Flächen markieren das Unsicherheitsintervall der stochastischen Modellkalibration.

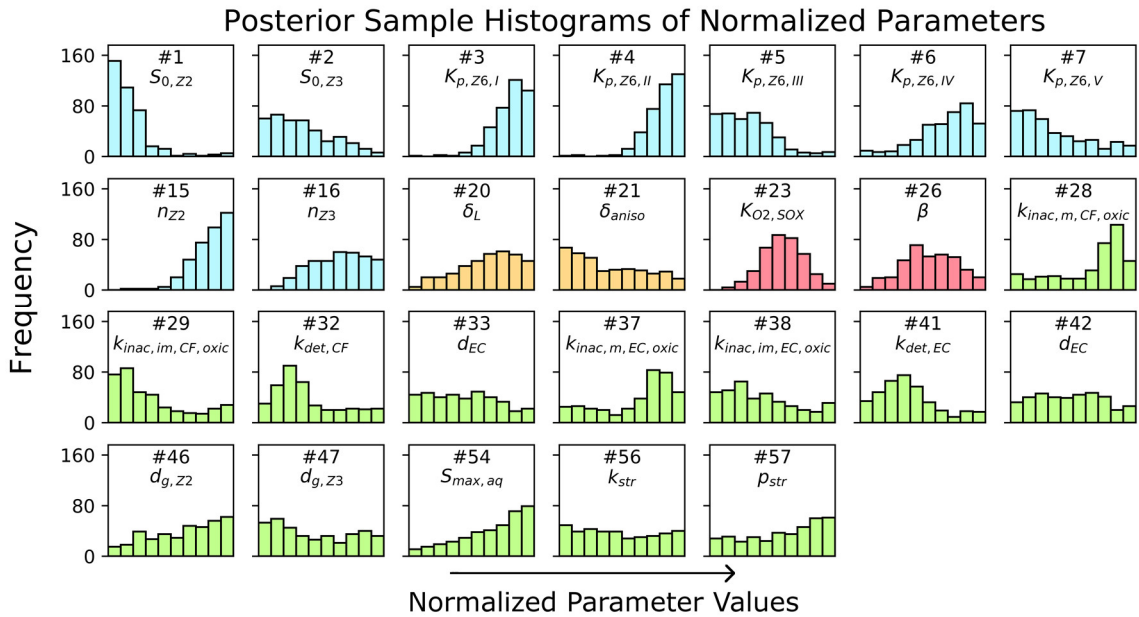


Abbildung 26. Histogramme der normalisierten Parameter für die Modellergebnisse basierend auf 375 PSO-Lösungen. Farben entsprechen Gruppen aus Abbildung 24.

Pathogentransportmodell Wasserwerk Flehe - Datenreihe 2018/2019

Erste Modellergebnisse für die Hydraulik und die Temperatur hatten gezeigt, dass bei direkter Übernahme der Untergrundzonierung aus der Modellierung des Datensatzes 2003/2004 zwar recht gute Ergebnisse erzielt werden konnten, jedoch auch, dass einige Abweichungen dabei

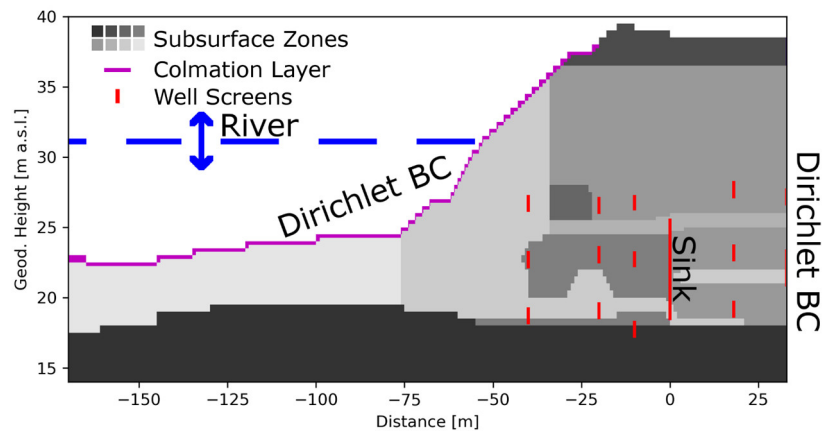


Abbildung 27. Zonierung des Untergrundes im Modell für die Datenreihe 2018/19. Hellere Grautöne zeigen Zonen mit tendenziell höherer hydraulischer Leitfähigkeit an.

auftraten, die durch auf die fehlende räumliche Auflösung im älteren Datensatz zurückzuführen sind. Durch eine dynamischere Modellierung der Kolmationsschicht, und eine komplexere Aquiferheterogenität (Abbildung 27), die sich an den Korngrößen der Bohrprofile orientiert, konnten die Abweichungen jedoch deutlich reduziert werden, sodass sehr gute Ergebnisse für Hydraulik und Wärmetransport erzielt worden sind (Abbildung 28).

Für die Kolmationsschicht im Flussbett wurden dabei 6 Perioden festgelegt, zwischen denen sich die hydraulische Leitfähigkeit auf Grund der Hydrologie ändert. Die 6 Perioden sind: i) das Hochwasser im

Januar 2018 und dessen Nachfolgen (Tag 0-40, 01/01/2018-10/02/2018), ii) Frühling mit fallenden Flusspegel (Tag 40-100, 10/02/2018-11/04/2018), iii) Deaktivieren der Wasserwerkspumpen während Wartung bis 14 Tage nach Wiederanschalten der Pumpen (Tag 100-157, 11/04/2018-07/06/2018), iv) der trockene Sommer und Herbst 2018 (Tag 157-335, 07/06/2018-02/12/2019), v) Winter 2018/19 mit Wiederanstieg des Flusspegels und dynamischen Flusspegelschwankungen (Tag 335-425, 02/12/2018-02/03/2019), vi) Frühling unter Fortführung eines dynamischen Flusspegels (Tag 435-500, 02/03/2019-16/05/2019). Für die Kolmationsschicht am Ufer wurde angenommen, dass diese eine dauerhaft niedrige hydraulische Leitfähigkeit besitzt, da sie auf Grund der geringen Wassertiefe weniger von Erosion beeinträchtigt ist, mit Ausnahme der Zeit, in der die Wasserwerkspumpen abgeschaltet sind, da dort die effluenten Verhältnisse ein „unclogging“, d.h. ein Auflockern des Porenraumes begünstigen. Mittels der Hydraulik und Temperaturdaten konnten die hydraulischen Leitfähigkeiten

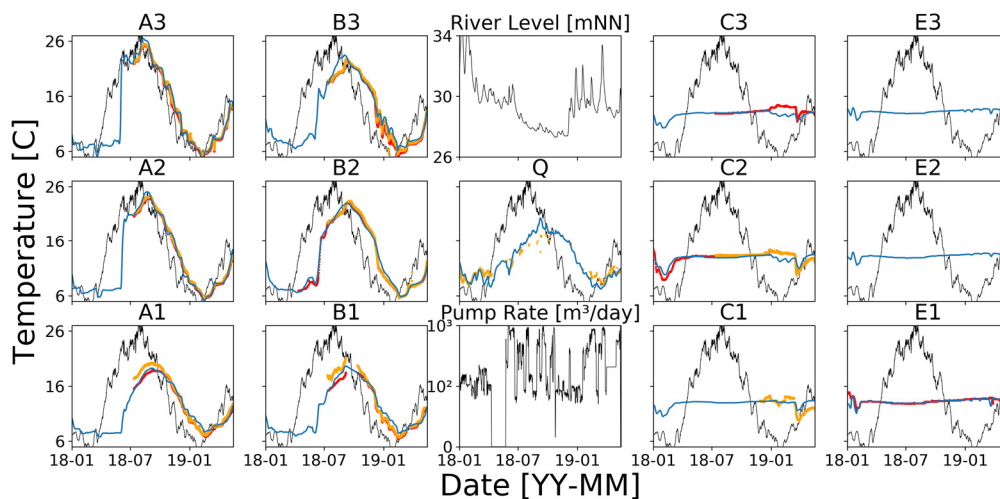


Abbildung 28. Temperaturverlauf in der Messstellen transekte des Wasserwerks Flehe. Rot/Orange = Messdaten, blaue = Model, schwarz = Messdaten im Rhein. Anmerkung, in einigen Messtellen waren zwei Datenlogger verbaut, die die Temperatur jeweils am oberen und unteren Ende des verfilterten Bereichs der Messstelle aufgenommen haben (Unterschied Rot zu Orange). Die Pump Rate ist skaliert auf einen Förderbrunnen.

der Kolmationsschicht im Flussbett in den gesetzten Perioden und der verschiedenen Aquiferzonen kalibriert werden. Für die Kolmationsschicht im Flussbett hat sich insbesondere gezeigt, dass die hydraulische Leitfähigkeit in der Hochwasserperiode am Beginn des Messzeitraumes und während der Wartungsperiode des Wasserwerks deutlich höher ist als in den späteren Zeiträumen Abbildung 29.

Für die maßgeblichen Redoxreaktion (Verbrauch von Sauerstoff mit organischem Kohlenstoff) kann schon anhand der Daten festgestellt werden, dass im Fließpfad vom Rhein zum Entnahmebrunnen noch vor den ersten Messtellen (Reihe A) der Großteil des Stoffumsatzes stattfindet. Der Hauptanteil des Sauerstoffs ist bei Messtellenreihe A schon verbraucht, und ein weiterer signifikanter Verbrauch entlang

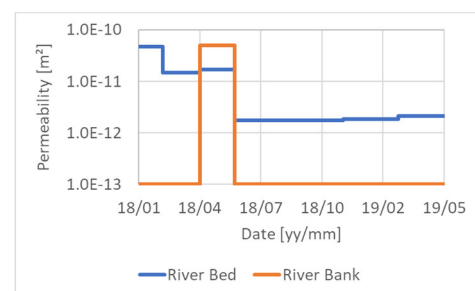


Abbildung 29. Kalibrierte Permeabilität der Kolmationsschicht im Flussbett über die 6 Perioden.

des Fließpfades kann nicht festgestellt werden, da die Messwerte an Reihe A und an Reihe B sehr ähnlich sind (Abbildung 30). Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass eine erhöhte mikrobielle Aktivität bzw. eine erhöhte Konzentration der relevanten Mikroorganismen in der Nähe oder direkt in der Kolmationsschicht am Übergang Fluss-Grundwasser auftreten. Dafür spricht, dass organischer Kohlenstoff als DOC (Dissolved Organic Carbon) bei B noch nachweisbar ist, und dass die Distanz zwischen Rhein und Reihe A (20-40 m, abhängig vom Rheinpegel) und der Abstand von Reihe A zu Reihe B (20 m) zu ähnlich sind, um die Reaktionsdifferenz zu erklären.

Die Modellierung kann unter Einbezug einer erhöhten mikrobiellen Konzentration in der Kolmationsschicht die erhobenen Daten replizieren (Abbildung 30). Die Annahme einer erhöhten mikrobiellen Konzentration in der Kolmationsschicht ist realistisch, denn zum einen ist dort die Menge an Nährstoffen am höchsten durch die Nähe zum Rhein, und zum anderen würde die geringere Korngröße in der Kolmationsschicht mit einhergehenden niedrigeren Fließgeschwindigkeiten eine Ablagerung und Biofilmbildung der Mikroorganismen fördern.

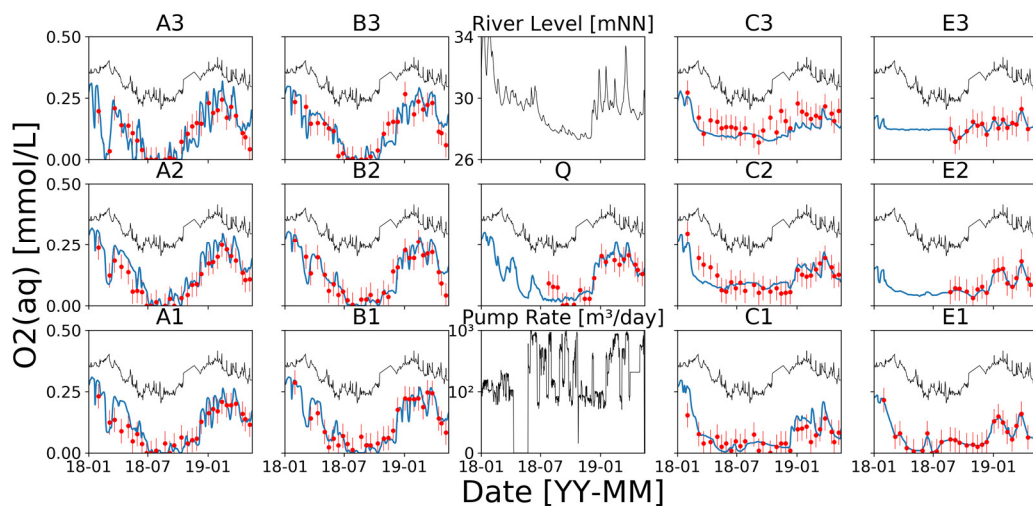


Abbildung 30. Konzentration des gelösten Sauerstoffes, entlang der Messstellen transekte. Rote Punkte mit Fehlerbalken = Messwerte, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.

Für die Modellierung der gemessenen Mikroorganismen (fokussiert auf Coliforme, Coliphagen, Adenoviren) zeigt sich schon in den Daten, dass ein hohes Maß an räumlicher Heterogenität vorliegt, in Bezug auf positive Detektionen, welches so in der Hydraulik, der Temperatur und den anderen gelösten Stoffen (Sauerstoff, Chlorid, Calcium, etc.) nicht vorkommt. Dies kann zum einen auf die komplexere Transportprozesse für Mikroorganismen und den Einfluss kleinskaliger Heterogenität, bspw. dem möglichen Vorliegen von Bereichen mit höheren Eisenoxid-Gehalten für eine lokal stärkere Sorption, zurückgeführt werden. Zum anderen ist dies sicherlich auch der höheren Mess- bzw. Analysegenauigkeit der mikrobiologischen Parameter geschuldet.

Wie Abbildung 31 zeigt, können die Messdaten für Coliforme mit dem Modell gut nachgebildet werden. Es hat sich während der Modellierung herausgestellt, dass insbesondere die Veränderung der hydraulischen Durchlässigkeit der Kolmationsschicht und damit einhergehend eine Veränderung der effektiven Korngröße der Kolmationsschicht eine wichtige Rolle spielt. Dadurch lässt sich insbesondere erklären, wieso im Winter 2018/19 nur wenige positive Detektionen mit geringen Konzentrationen auftauchen, während im Winter 2017/18 sehr hohe Konzentrationen im Grundwasser gemessen werden können. Die Fließgeschwindigkeit im Grundwasser ist im Modell ähnlich in beiden Fällen, jedoch erklärt die geringere hydraulische Durchlässigkeit/geringere effektive Korngröße der Kolmationsschicht im Winter 2018/19 eine stärkere Retention der Coliforme durch Sorption und Straining. Ebenso hat sich die hydraulische Durchlässigkeit der Kolmationsschicht erhöht, während die Pumpen des Wasserwerkes stillstanden, weshalb kurze Zeit nach Wiederanschalten der Pumpen (Mai 2018, ca. 1 Woche) hohe Konzentrationen in den Grundwassermessstellen gefunden wurden. Diese Konzentrationen fielen dann jedoch rapide ab, wahrscheinlich da sich die Durchlässigkeit der Kolmationsschicht wieder schnell absenkte nach Anschalten der Pumpen.

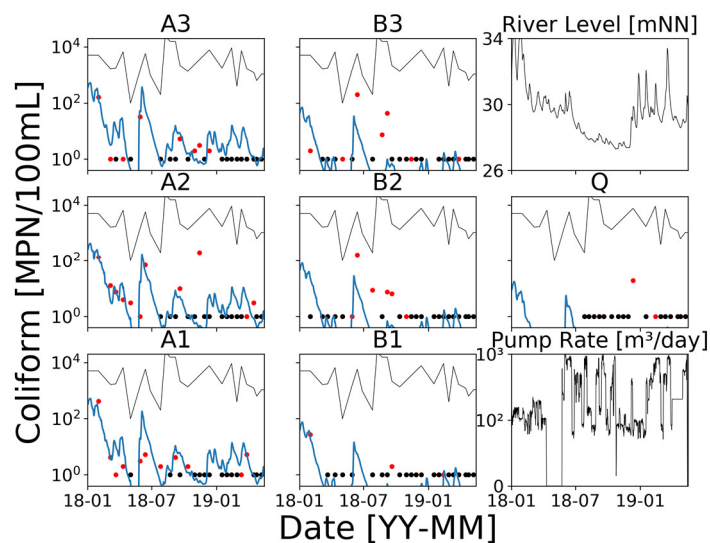


Abbildung 31. Modellierungsergebnisse für Coliforme an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte = Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.

Die Modellierung der Coliphagen erzielte ebenso gute Ergebnisse, Abbildung 32. Es zeigt sich, dass die Durchbrüche der Coliphagen sehr stark mit der Grundwasserfließgeschwindigkeit und damit der Transportzeit zusammenhängen. D.h. der Transport der Coliphagen ist stark getrieben durch Inaktivierung und weniger durch Sorption/Desorption. Die Inaktivierung der Coliphagen ist so hoch, dass nur bei sehr geringen Transportzeiten bzw. sehr hohen Grundwasserfließgeschwindigkeiten noch messbare Konzentrationen aktiver Coliphagen an den Messstellen ankommen. Da die Grundwasserfließgeschwindigkeit hoch dynamisch sein kann auf Grund der Veränderungen des

Flusspegels, was insbesondere in den Wintermonaten beobachtet wurde (Abbildung 33), hat sich gezeigt, dass das Messintervall mit 4 Wochen für Coliphagen-Messungen deutlich zu groß war. Abbildung 32 zeigt, dass laut Modell im Untersuchungszeitraum noch mehr Coliphagen-Durchbrüche an den Messstellen vorkamen insbesondere im Winter 2018/19, die durch Messungen nicht erfasst wurden.

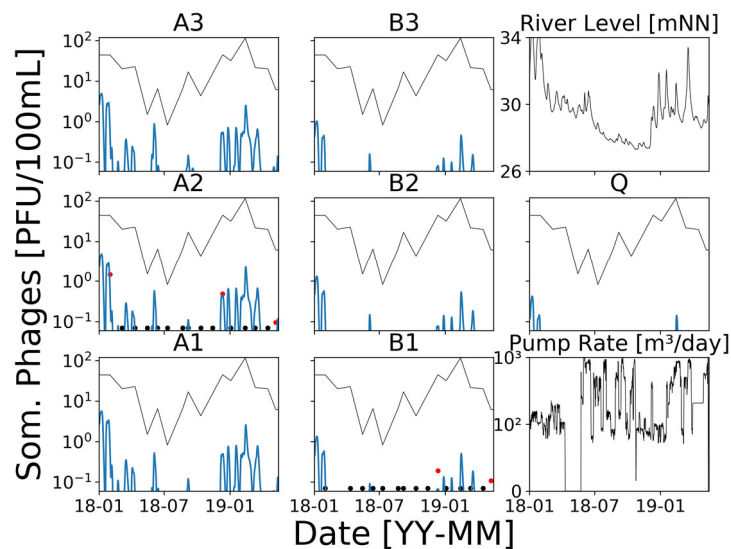


Abbildung 32. Modellierungsergebnisse für Somatische Coliphagen an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte = Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.

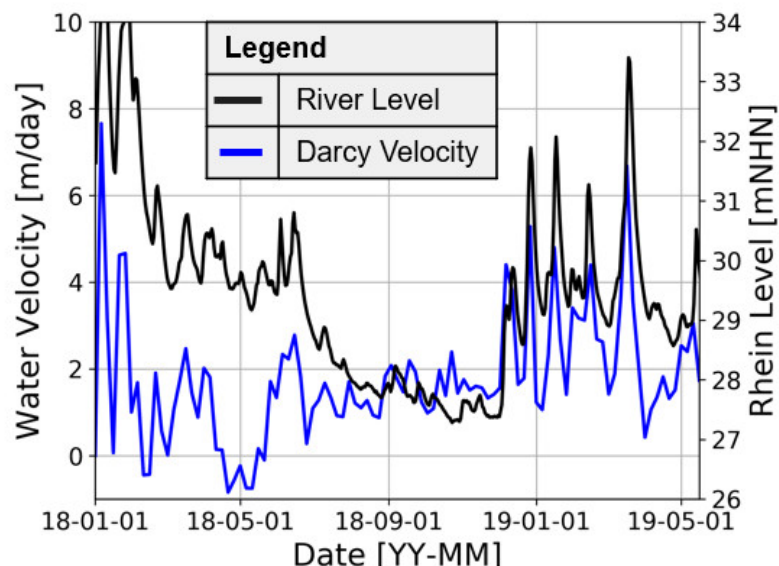


Abbildung 33. Grundwasserfließgeschwindigkeit im Modell an Messstelle B1 (als Darcy Geschwindigkeit) zusammen mit dem Rheinpegel.

Das Modell zeigt auch für die Adenoviren gute Übereinstimmungen mit den Daten, Abbildung 34. Bei Coliformen und Coliphagen wurden „lebende“/aktive Mikroorganismen gemessen, die über die Zeit inaktiviert werden („absterben“). Bei den Adenoviren wurde mittels PCR Gene und Genfragmente

gemessen, was sowohl aktive als auch inaktive Adenoviren erfasst. Diese Gene und Genfragmente zerfallen auch über die Zeit, jedoch zeigt sich im Vergleich der Kalibrierungsergebnisse, dass die Inaktivierungskoeffizienten für Coliforme und Coliphagen deutlich höher sind als der Zerfallskoeffizient für die Adenoviren (ca. eine Größenordnung). Im Modell wirkt die Kolmationsschicht als Hauptpunkt der Elimination über Sorption für die Adenoviren und auch als Puffer, sodass die starke zeitliche Variabilität im Rhein sich nicht im Grundwasser widerspiegelt. Im Unterschied zu den Coliphagen sind die Konzentrationen der Adenoviren auch im Modell weniger abhängig von der Grundwasserfließgeschwindigkeit. Ob dieser Unterschied an grundlegend anderen Transportverhalten oder an der unterschiedlichen Messmethodik liegt (nur aktive Viren für Coliphagen, aktive und inaktive für Adenoviren), ist jedoch unklar. Für die Adenoviren stehen im Grundwasser nur Daten mit positiven Detektionen in Messstelle A2 und ohne Detektionen in B1 zur Verfügung, was die Aussagekraft des Modells natürlich reduziert, und es bleibt unklar ob wie das Modell suggeriert ähnliche Konzentrationen auch in den anderen Messstellen zu finden sein müssten.

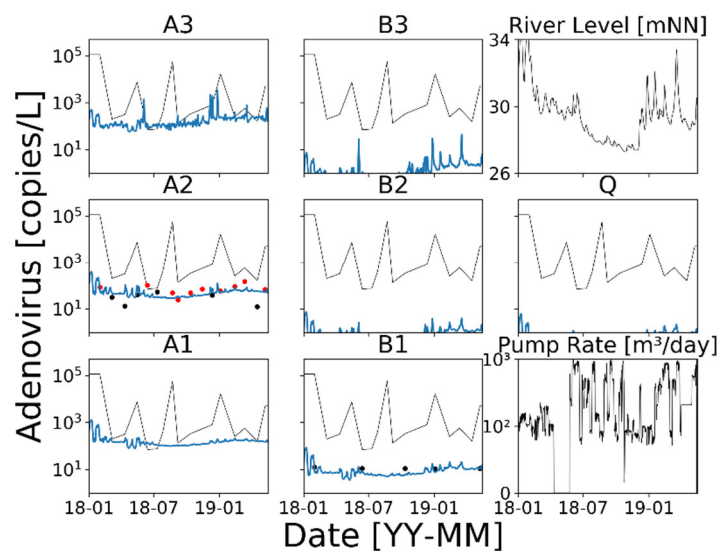


Abbildung 34 Modellierungsergebnisse für Adenoviren an den Beobachtungsbrunnen A und B sowie am Förderbrunnen Q. Rote Punkte = Messpunkte mit Detektion, schwarze Punkte = Messpunkte ohne Detektion, schwarze Linie = gemessene Konzentration im Rhein, blaue Linie = reaktives Transportmodell.

3.3 AP3 Toolbox

Surrogate Model

Im Folgenden werden die Ergebnisse des finalen Surrogate Modells präsentiert.

Durch die Principal-Component-Analysis hat sich gezeigt, dass die 5 Parameter der Gruppe (B) (siehe 2.3), in zwei „Superparameter“ zusammengefasst werden können. Wie in Tabelle 4 dargestellt reichen zwei „Superparameter“ aus um 96% bzw. 97% der Varianz zu erklären. D.h. die Reduktion von 5 auf 2 Parameter hat nur sehr wenig Informationsverlust zur Folge. Mehr „Superparameter“ zu berücksichtigen, würde zwar den Informationsverlust weiter verringern jedoch mehr Modellrechnungen bei der

Tabelle 4. Anteil der erklärten Varianz der Parameter der Gruppe (B) im Kalibrierungsergebnis durch x „Superparameter“ der Principal-Component-Analysis.

Anzahl Superparameter	Anteil Varianz [%]	
	Bakterien	Viren
1	90.4	83.2
2	95.9	97.0
3	99.4	99.9
4	99.9	100.0
5	100.0	100.0

Erstellung des Surrogate-Modells notwendig machen, sowie Allgemein die Berechnungen mit dem Surrogate-Modell durch die höhere Komplexität verlangsamen.

Das Surrogate-Modell wurde nun erstellt mit den Parametern der Gruppe (A) und den zwei „Superparametern“ stellvertretend für die Parameter der Gruppe (B). Für die Erstellung der Surrogate Modelle für Viren und Bakterien wurden jeweils 8583 verschiedene Berechnungen (Sample Runs) des 1D PFLOTRAN-Modells mit unterschiedlichen Werten für alle Parameter durchgeführt plus weitere 5000 (Validation Runs) zur Überprüfung der Genauigkeit des Surrogate Modells.

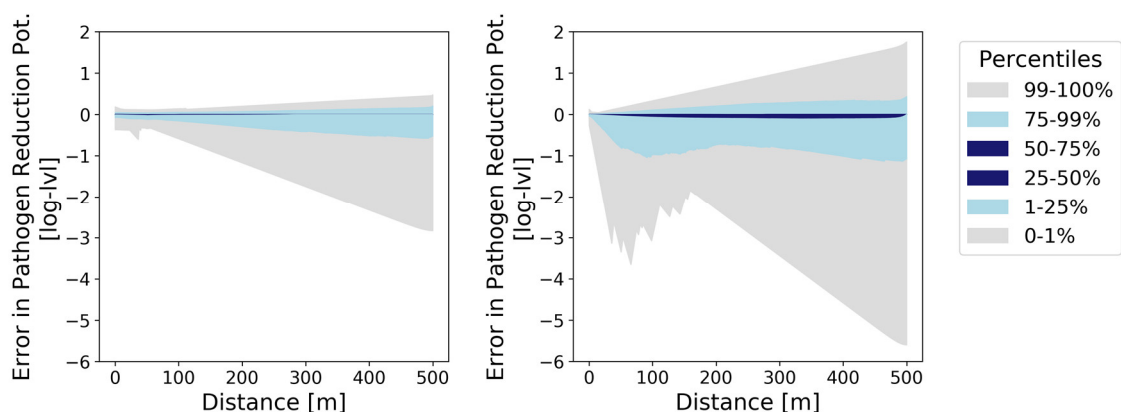


Abbildung 35. Fehler des Surrogate-Modells im Vergleich zum PFLOTRAN Modell über die Entfernung vom Fluss. Häufigkeitsverteilung der Fehler in Form von Perzentil-Intervallen. Surrogate-Modell für Bakterien (links), Surrogate-Modell für Viren (rechts). Positiver Fehler = Surrogate Modell überschätzt Reinigungsleistung, negativer Fehler = Surrogate Modell unterschätzt Reinigungsleistung.

Die Auswertung der Validation Runs zeigt, dass der auftretende Fehler zwischen PFLOTRAN Modell und Surrogate Modell bei gleichen Parametern relativ gering ausfällt (Abbildung 35). Es zeigt sich, dass für beide Surrogate-Modelle der Fehler in 98% der Fälle kleiner als eine log-Stufe ist, was sehr positiv zu bewerten ist. Fehler über einer log-Stufe treten besonders bei hohen Entfernungen vom Fluss auf. Darüber hinaus ist der Fehler bei den Surrogate-Modell für Viren etwas größer. Jedoch sind hohe Fehler (> eine log-Stufe) vermehrt am Rand des erlaubten Parameterwertebereichs zu finden (exemplarisch in Abbildung 36). Der Wertebereich ist jedoch so definiert, dass die meisten Anwendungsfälle nicht am Rand liegen werden.

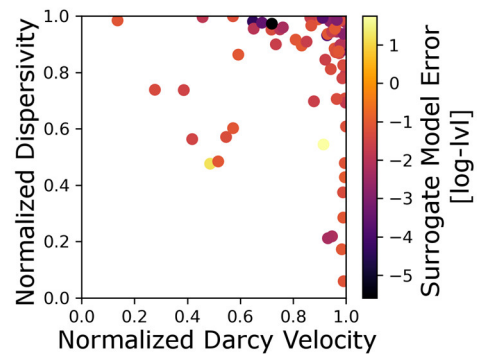


Abbildung 36. Surrogate Model Error (farbkodiert) zusammen geplottet mit den Parameterwerten für die Darcy-Geschwindigkeit und die Dispersivität (beide normalisiert auf das Intervall $[0,1]$). Nur Validation Runs mit Fehlern >1 log-|v| bei 500 m Distanz vom Fluss werden gezeigt.

Weiterhin sind die wenigen hohen Fehler in der Regel negativ, d.h. das Surrogate Modell unterschätzt die Reinigungsleistung, was weniger kritisch anzusehen ist als ein Überschätzen der Reinigungsleistung.

Um zu untersuchen ob das Surrogate Modell auch korrekte Prognosen/Abschätzungen der Reinigungsleistung macht, wurde für das Wasserwerk Flehe und für 4 weitere Standorte aus der Literatur (Partinoudi & Collins, 2007) das Surrogate Model genutzt, um die Reinigungsleistung abzuschätzen und mit der bekannten Reinigungsleistung verglichen (Abbildung 37). Da für die 4 Literaturstandorte die Korngrößen nicht bekannt waren wurde hierbei angenommen, dass diese im Bereich Grobsand-Feinkies liegt. Dadurch fallen die Unsicherheitsintervalle für diese Standorte etwas größer aus. Wie Abbildung 37 zeigt, liegt der reale Wert in den meisten Fällen im Unsicherheitsintervall der Abschätzung. Insbesondere ist die Abschätzung der Reinigungsleistung in keinem der Fälle deutlich über dem gemessenen Wert (d.h. nie größer als eine Größenordnung). Es wäre natürlich wünschenswert, dass die Unsicherheit des Surrogate Modell Ergebnisses kleiner wäre. Jedoch ist dies der Methodik geschuldet, dass nur solche Parameter direkt einfließen, die Wasserwerksbetreibern auch bekannt sind. D.h. insbesondere Prozesskoeffizienten, die lokal verschieden sein können und in der Regel nicht bekannt sind, bspw. Inaktivierung oder Detachment (Desorption), gehen als unsichere Parameter ein, welche dann die Unsicherheit des Ergebnisses dementsprechend erhöhen.

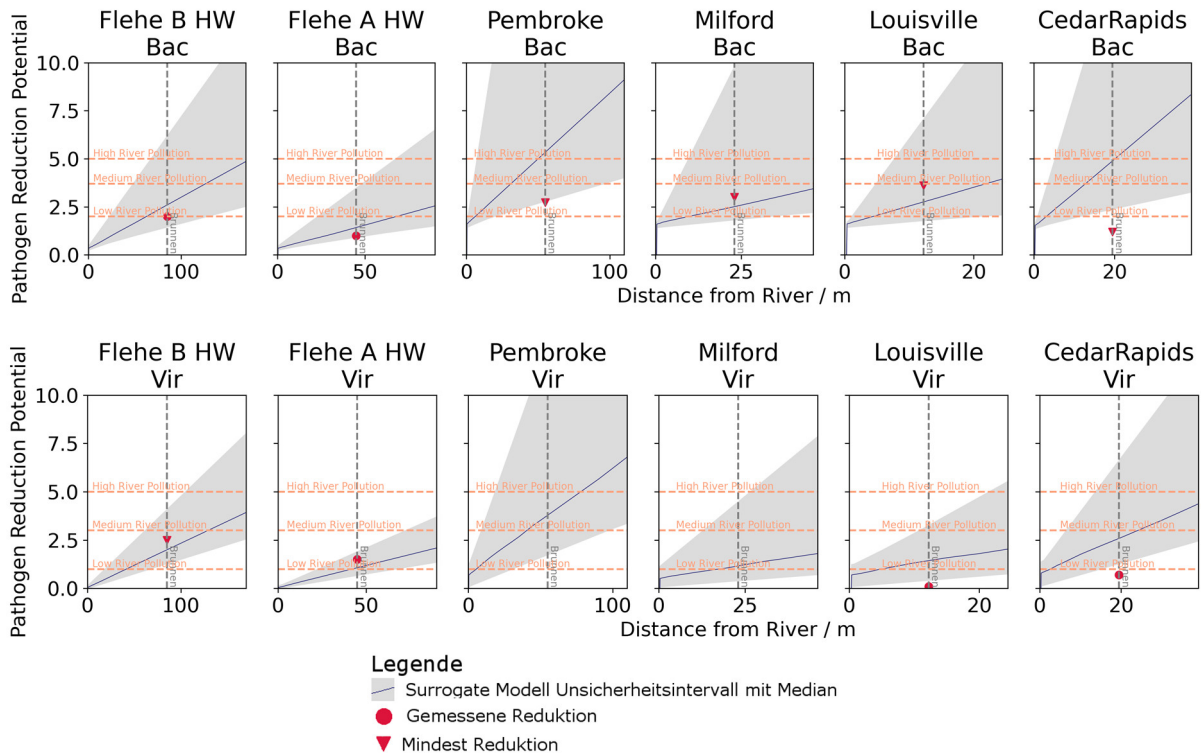


Abbildung 37. Surrogate Model im Vergleich zu realen Daten. Für Bakterien/Coliforme (oben) und Viren/Coliphagen (unten). Daten vom Wasserwerk Flehe am Brunnen A bzw. B zur Hochwasserzeit (HW) sind aus diesem Projekt. Die Daten der anderen 4 Standorte sind aus (Partinoudi & Collins, 2007). Falls an der Messstelle keine Bakterien bzw. Viren gemessen worden sind, wurde ein Mindestreduktionsvermögen angegeben, dass vorhanden sein muss um die Ausgangskonzentration aus dem Fluss unter die Nachweisgrenze zu bringen. Für Milford und Pembroke lagen keine Virendaten vor.

Webanwendung

Die Programmierung der Webanwendung (Toolbox) wurde fortlaufend an die realisierten Änderungen bzw. Weiterentwicklungen im Surrogate-Modell (Transportmodell) angepasst. Die Übergabe der jeweils aktualisierten Versionen des Surrogate-Modells als Python-Codes erfolgte durch die TU Berlin. Diese Quellcodes wurden im Hinblick auf ihre Lauffähigkeit im Zusammenhang mit der hier zu erstellenden Webanwendung geprüft und in ein auf dem Server von VisDat ausführbares Programm überführt. Dieses Serverprogramm wird von der Webanwendung aus durch den Nutzer gestartet, nachdem die für die Berechnung nötigen benutzerdefinierten Einstellungen der Steuergrößen für das Surrogate-Modell über die GUI (Graphical user interface) vorgenommen worden sind. Nach Durchführung der Berechnung gibt der Server die Ergebnisse an den Client zurück und stellt diese in der Webanwendung dar bzw. liefert eine Bewertung aus (siehe unten). Der Datenaustausch zwischen Client und Server erfolgt im JSON-Format.

Nach Übergabe der letzten Version des Python-Quell-Codes im Juli 2021, jeweils separiert für den Transport von Viren und Bakterien, war diese die Grundlage für den finalen Stand der softwareseitigen Implementierung. Die Implementierung erfolgt zunächst in der lokalen Entwicklungsumgebung auf einem lokalen Server und wurde dann auf einen Webserver von VisDat hochgeladen und somit nach Projektende auch für die Stakeholder zugänglich gemacht.

Die Webanwendung (Toolbox) wird aus einer in WordPress aufgesetzten Website gestartet, die über den Aufruf der Domain <https://pathogene-uferfiltration.de> zugänglich ist.

Die Website vermittelt dem Nutzer einen Einblick in die übergeordnete Thematik von Pathogenen bzw. deren Transport in der Uferfiltrationsstrecke im Zusammenhang mit der Trinkwassergewinnung aus Uferfiltrat. Weiterhin liefert die Website wichtige Projektinformationen (Hintergrund, Ziele, Partner) und bildet den Zugang zum Surrogate-Modell (Transportmodell) für die Abbildung der Reinigungsleistung der Uferfiltration für transportierte Pathogene in der Filterstrecke bis hin zum Brunnen im Vergleich mit einer Flussverschmutzung verschiedenen Belastungsgrades (niedrig, mittel, hoch, extrem).

Mikrobielle Krankheitserreger, wie Bakterien (E. Coli, Enterokokken, Clostridium perfringens, etc.) und Viren (Adenoviren, Enteroviren, Rotaviren, etc.) kommen im Oberflächengewässern in unterschiedlichen Konzentrationen vor. Die Belastung der Oberflächengewässer mit mikrobiellen Krankheitserregern ist zeitlich variabel, abhängig von Faktoren wie der Hydrologie (insbesondere der Abflussmenge) aber auch der Abgabemenge der Klärwerke. Für jeden speziellen Standort sollte immer die lokal auftretende Belastung (d.h. Konzentrationen) berücksichtigt werden. Auf Basis der üblicherweise auftretenden Konzentrationen (World Health Organisation 2008, Umweltbundesamt 2020) wurden hier jedoch zur Einordnung vier Szenarien definiert:

„Niedrige“ Belastung (geringe Flussverschmutzung)

100 B/100mL – 1 V/100mL

entspricht Oberflächengewässern mit geringen bis keinem Abwassereintrag außerhalb großer urbaner Räume und stark landwirtschaftlich geprägten Regionen.

„Mittlere“ Belastung (mittlere Flussverschmutzung)

5,000 B/100mL – 100 V/100mL

entspricht Oberflächengewässern in größeren und dichter besiedelten urbanen Räumen entfernt von einer Klärwerkseinleitung.

„Hohe“ Belastung (hohe Flussverschmutzung)

100,000 B/100mL – 1,000 V/100mL

entspricht Oberflächengewässern mit starkem Abwasseranteil, bspw. nah an einer Klärwerkseinleitung, sodass die Konzentrationen wenig durch Mischung oder durch Abbau im Oberflächengewässer selbst verringert werden können.

„Extreme“ Belastung (extreme Flussverschmutzung)

1,000,000 B/100mL – 100,000 V/100mL

entspricht Belastungen wie sie bei Extremereignissen auftreten könnten, bspw. bei Starkregen, welcher zu Mischwasserüberläufen und zum Eintrag ungeklärter Abwässer führen kann.

Zusätzlich werden Informationen zu dem im Projekt durchgeführten Monitoring am Wasserwerk Flehe als eine wichtige Basis für die Entwicklung des Transportmodells vermittelt.

Auf einen beschränkten Zugang zur Webanwendung über eine vorgeschaltete Login-Maske wird verzichtet, da der Nutzerkreis für das System beschränkt sein dürfte. Es hat sich gezeigt, dass ein übermäßiger „traffic“ auf dem Webserver somit nicht zu erwarten ist. Abbildung 38 zeigt die Startseite der Website.

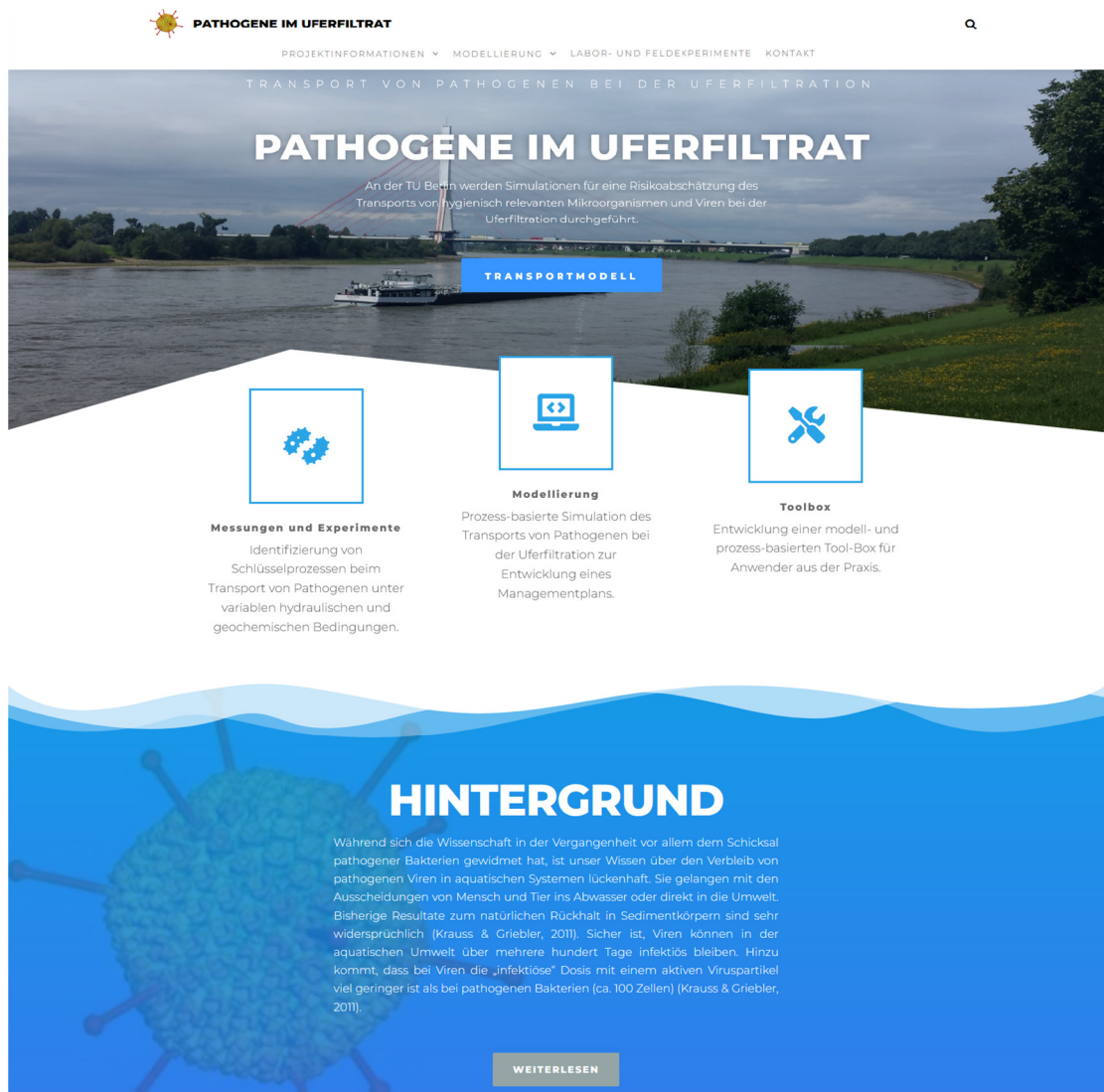


Abbildung 38. Startseite der Website "Pathogene im Uferfiltrat".

Nach einem Mouse-Click auf die Schaltfläche „Transportmodell“ gelangt der Nutzer in die Konfigurationsumgebung zur Einstellung von Steuergrößen des Surrogate-Modells (Abbildung 39). Zunächst legt der Nutzer fest, ob er die Modellierung für den Transport von Viren oder Bakterien vornehmen will. Für die weitere Konfigurierung erhält der Nutzer entsprechende begleitende Hilfen und Erläuterungen in den nachfolgenden Hilfetexten, die die Vornahme der Einstellungen in der Maske erleichtern sollen.

Pathogene
 Viren Bakterien

Entfernung des Brunnes vom Fluß [m]

 min: 0, max: 500

Fließgeschwindigkeit [m/d]

 min: 0.5, max: 10

Porosität Grundwasserleiter [-]

 min: 0.1, max: 0.4

Dispersivität [m]

 min: 1, max: 20

Median der Korngröße im Grundwasserleiter [m]

 min: 0.0005, max: 0.01

Median der Korngröße in der Kolmationsschicht [m]

 min: 0.00001, max: 0.002

[Zurücksetzen der Einstellungen](#)

Abbildung 39. Konfigurationsumgebung für das Surrogate Modell.

Folgende Hilfetexte unterstützen den Anwender bei der Konfiguration:

Entfernung des Brunnes vom Fluss [m]:

Der horizontale Abstand des Brunnes vom Fluss.

Erlaubter Wertebereich [0, 500]

Fließgeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit) [m/d]:

Die Grundwasserfließgeschwindigkeit aus dem Darcy-Gesetz (Darcy-Geschwindigkeit = hydraulische Durchlässigkeit * hydraulischer Gradient , $q = k \cdot i = k \cdot -\frac{dh}{dt}$

Falls die Abstandsgeschwindigkeit (beispielsweise aus Tracerversuchen) bekannt ist, kann die Darcy Geschwindigkeit bestimmt werden durch: $q = v_{Abstand} \cdot Porosität$

Falls nur die Pumpraten bekannt sind kann folgende Abschätzung vorgenommen werden:

$$q = \frac{Q_{pump} \cdot r_{UF}}{b \cdot M}$$

q – Darcy-Geschwindigkeit [m/Tag]

Q_{pump} – Förderrate eines Einzelnen Förderbrunnens [m³/Tag]

r_{UF} – Anteil Uferfiltrat am geförderten Wasser (Wert im Intervall [0,1])

b – Breite des Einzugsgebietes eines Förderbrunnens [m]

M – durchströmte Aquifermächtigkeit [m]

Zu beachten ist hierbei, dass diese Abschätzung die Fließgeschwindigkeit stark unterschätzen kann, falls das Einzugsgebiet des Brunnens deutlich kleiner ist, bspw. bei Hochwasser.

Erlaubter Wertebereich [0.5, 10]

Porosität Grundwasserleiter (Aquifer) [-]

Porenanteil des Aquifers, für Sande und Kiese oft im Bereich [0.1, 0.3] je nach Verdichtungs- und Mischungsgrad.

Erlaubter Wertebereich [0.1, 0.4]

Dispersivität (Dispersionslänge) [m]

Repräsentiert die Inhomogenität des Grundwasserströmungsfeldes auf Grund der Inhomogenität der Strömung auf der Porenskala, aber auch auf Grund der Heterogenität des Aquifermaterials. Sie ist im Allgemeinen ohne Experimente schlecht voraussagbar und darüber hinaus skalenabhängig. Für Anwendungen der Uferfiltration liegt sie wahrscheinlich im Bereich [0.5 m, 5 m], niedriger bei kurzem Abstand des Brunnens vom Ufer, höher bei höherem Abstand des Brunnens vom Ufer.

Erlaubter Wertebereich [1, 20]

Median der Korngröße im Grundwasserleiter (mittlerer Korndurchmesser des Aquifers) [m]

d_{50} der Korngrößenverteilung des Aquifermaterials.

Erlaubter Wertebereich [0.0005, 0.01]

Median der Korngröße in der Kolmationsschicht (effektiver Korndurchmesser der Kolmationsschicht) [m]

d_{50} der Korngrößenverteilung der Kolmationsschicht am Übergang Fluss-Grundwasser,, ist in der Regel jedoch unbekannt. Bei einer Uferfiltrationsanlage kann jedoch eine gewisse Kolmation angenommen werden, deshalb Standardannahme von [0.00001, 0.0001].

Erlaubter Wertebereich [0.00001, 0.002].

Nach Vornahme der Konfiguration berechnet das Surrogate Modell die Reinigungsleistung der Uferfiltration als pathogenes Reduktionspotenzial. Dieses Reduktionspotenzial wird für eine

Flussverschmutzung geringen, mittleren, hohen und extremen Belastungsgrades (Abbildung 40) über ein Ampelsystem (grün / gelb / rot) bewertet (Abbildung 41).

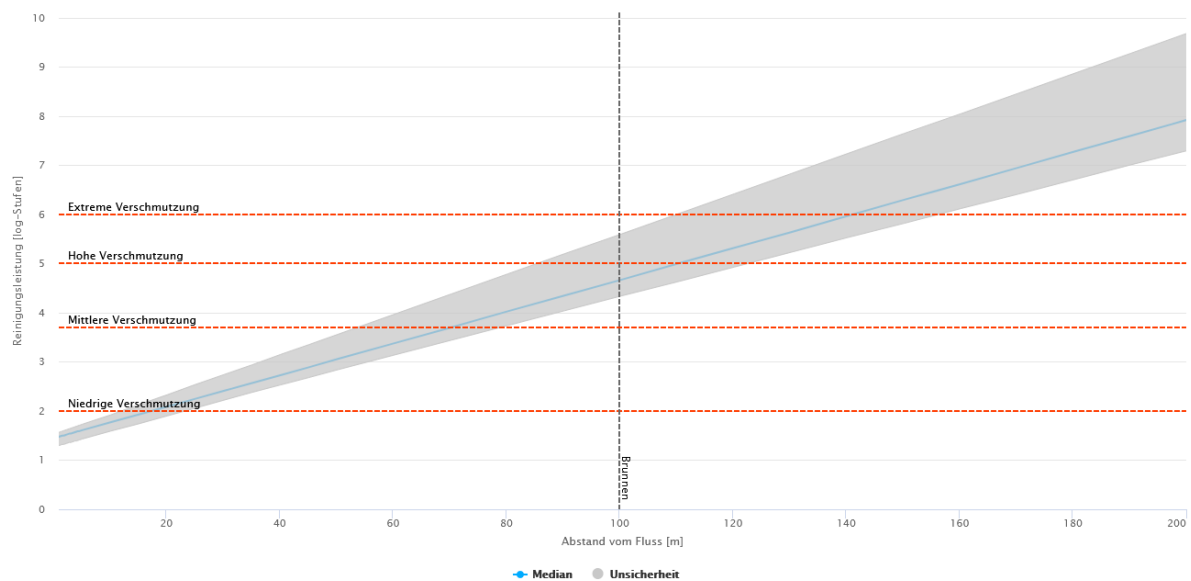


Abbildung 40. Visualisierung des Modellergebnisses für die geschätzte Reinigungsleistung der Uferfiltration.



Abbildung 41. Bewertungsabbildung der Reinigungsleistung.

Die Farben der Ampel sind dabei wie folgt zu interpretieren:

Grün:

Die geschätzte Reinigungsleistung der Uferfiltration ist ausreichend hoch. Die Konzentration der Krankheitserreger wird auf dem Weg vom Oberflächengewässer zum Fluss auf ein gutes Niveau reduziert, für Bakterien <math><1/100\text{mL}</math> und für Viren (Coliphagen) <math><0.01/100\text{mL}</math>. D.h. unterhalb der üblichen Nachweißgrenzen bei Wasserprobenahmen und -analysen.

Gelb:

Die geschätzte Reinigungsleistung der Uferfiltration ist zwar ausreichend hoch, jedoch nur knapp. Die Konzentration der Krankheitserreger wird auf dem Weg vom Oberflächengewässer zum Brunnen auf ein sicheres Niveau reduziert. Jedoch ist die niedrigste Schätzung für die Reinigungsleistung weniger als eine Größenordnung höher als die mindestbenötigte Reinigungsleistung um ein gutes Niveau zu erreichen.

Rot:

Die geschätzte Reinigungsleistung der Uferfiltration ist nicht hoch genug. Die Konzentration der Krankheitserreger wird nicht ausreichend reduziert. Die niedrigste Schätzung für die Reinigungsleistung befindet sich unterhalb der mindestbenötigten Reinigungsleistung für ein gutes Niveau.

Das Ergebnis ist grundsätzlich nur eine Schätzung und soll dem Anwender als Orientierungshilfe dienen. Es kann keine Wasseranalyse oder vollumfängliche Modellierung ersetzen.

3.4 AP4 CCP und Bewertung des Multi-Kompartiment-Konzeptes

Bewertung des Einflusses der Kompartimente in der Uferfiltration

Die erhobenen Daten und die Modellierung unterstreichen, dass die verschiedenen Kompartimente des Untergrundes (Kolmationsschicht, hyporheische Zone, Aquifer) sich unterschiedlich stark auf den Transport von Mikroorganismen auswirken.

Sowohl die Daten als auch die Modellierung haben gezeigt, dass die biologische Aktivität, feststellbar durch den Verbrauch des Sauerstoffs, im Bereich der Kolmationsschicht/hyporheischen Zone deutlich höher ist. Studien haben gezeigt, dass die Inaktivierung von Mikroorganismen/Pathogenen höher ist bei höherer biologischer Aktivität (Gordon & Toze, 2003), zum ähnlichen Ergebnis kamen auch die Minisäulen Experimente in diesem Projekt (siehe 3.1). Zum anderen ist auch klar, dass in der Kolmationsschicht durch die niedrigeren Korngrößen eine stärkere Adsorption (Attachment) vorkommt als in den Aquifersedimenten. Brunnen von Wasserwerken mit Uferfiltration werden in der Regel in produktiven, also hydraulisch besonders leitfähigen, Aquiferen gebaut werden. D.h. niedrige Korngrößen (Feinsand und kleiner) kommen dort nicht dominant vor, und selbst falls einzelne Schichten mit niedrigen Korngrößen existieren, sind sie hydraulisch nicht relevant und werden umströmt, also der Haupttransportweg im Aquifer bliebe in den grobkörnigen Bereichen, wo weniger Adsorption zu erwarten ist.

Da keine Messstellen nah an oder in der Kolmationsschicht oder der hyporheischen Zone existieren ist es nicht möglich zu unterscheiden, ob die erhöhte Retention im Fließpfad vor Erreichen der Messstelle A (vgl. Abbildung 18) in der Kolmationsschicht oder der hyporheischen Zone oder beides verursacht wurde. Es ist deshalb nicht vollkommen klar, ob die erhöhte Retention ausgelöst wird durch Sorption und Straining (d.h. primär Korngrößen gesteuert) oder durch Inaktivierung (d.h. durch die erhöhte biologische Aktivität gesteuert) oder beides. Aus Machbarkeitsgründen war es nicht möglich neue Messstellen in dem Bereich zu erstellen, da Messstellen im Rhein selbst auf Grund der Gewässertiefe sowie des Schiffverkehrs unmöglich sind, und Schrägbohrungen in der Wasserschutzzone 1 ebenso problematisch wie kostenintensiv sind.

Da Messungen an zwei Stellen im Aquifer durchgeführt wurden sind (A und B), kann der Einfluss des Aquifers abgeschätzt werden. Aus der Modellierung ergibt sich, dass eine erhöhte Retention im Bereich der Kolmationsschicht/der hyporheischen Zone notwendig ist, um die Daten zu replizieren. Auch hat sich im Modell die Erklärung über die Kolmationsschicht und die Korngrößen bewährt, zumindest für die Bakterien. Für die Viren ist wegen der geringeren Datenlage die Aussage schwieriger. Insbesondere relevant ist, dass im Verlauf des Monitorings sich die Reinigungsleistung der Uferfiltration verändert hat, wobei die hydrologisch bedingten Grundwasserfließgeschwindigkeitsänderungen diese nicht vollständig erklären konnten. Mit dem Modell konnte gezeigt werden, dass eine zeitliche Variabilität der Eigenschaften der Kolmationsschicht (hydraulische Durchlässigkeit, effektive Korngröße) diese veränderte Retentionsleistung erklären kann. Dabei scheint insbesondere ein ausgeprägtes Hochwasser einen negativen Einfluss auf die Kolmationsschicht und deren Reinigungsleistung zu haben.

Inwieweit die niedrigen Sauerstoffkonzentrationen im Sommer sich auf die Inaktivierung ausgewirkt haben, lässt sich schlecht erfassen, da nur Coliforme im Sommer häufiger gemessen wurden. Das deutet zumindest darauf hin, dass für die anderen mikrobiologischen Größen die Inaktivierung nicht so stark verringert wurde durch den geringen Sauerstoff, dass es relevant wurde. Für die Coliformen gibt es Andeutungen, dass ihre Inaktivierung im Hochsommer geringer ausfällt. Das Model, welches eine konstante Inaktivierung annimmt, unterschätzt im Hochsommer die Coliforme Konzentrationen in den Messtellen B2 und B3 (Abbildung 31). Versuche dies im Model mit einer variablen Inaktivierung basierend auf der Sauerstoffkonzentration zu replizieren waren jedoch nicht komplett erfolgreich, da der in den Daten beobachtete Effekt lokal auf B2 und B3 beschränkt scheint, die Sauerstoffkonzentrationen jedoch überall ähnlich niedrig sind.

Korrelation mikrobiologischer Größen mit anderen messbaren Größen

Die statistische Auswertung aller Daten (Tabelle 5) ergab eine negative Korrelation aller mikrobiologischer und virologischer Parameter mit der Fließzeit. Auch mit dem $\delta^{18}\text{O}$ Wert (Isotopensignatur des Wassers) und der elektrischen Leitfähigkeit (EC) gab es einen negativen Zusammenhang zu allen biologischen Kenngrößen mit Ausnahme der Adenoviren. Abgesehen von der Gesamtbakterienzahl und den coliformen Bakterien korrelierten alle anderen biologischen Indikatoren positiv mit der Konzentration an gelöstem Sauerstoff. Einen positiven Zusammenhang gab es mit dem pH Wert. Für die Adenoviren fanden sich keinerlei Korrelationen mit physikalisch-chemischen und anderen biologischen Variablen.

Wertet man die Daten aus dem Rhein und jene aus Messstellen (Uferfiltrat und oberflächennahes Grundwasser) getrennt voneinander aus zeigte sich ein differenziertes Bild (Tabelle 6 und Tabelle 7). Für die Rheinwasserproben waren nur wenige statistisch signifikante Zusammenhänge sichtbar. Die Wassertemperatur hatte beispielsweise einen negativen Zusammenhang mit den Coliphagen. Einige Indikatoren korrelierten miteinander, z.B. Coliforme, *E. coli* und *C. perfringens*. Die Adenoviren korrelierten allerdings mit keinem anderen Indikator. Für die Uferfiltrat- und Grundwasserproben korrelierten die meisten biologischen Indikatoren miteinander, jedoch gab es auch hier keinen Zusammenhang der klassischen Indikatoren und der Adenoviren. Dementsprechend können auf Basis unseres Datensatzes keine besseren Indikatoren definiert/identifiziert werden, die anstatt der jeweiligen mikrobiologischen Größen zu überwachen wären.

Tabelle 6. Korrelation zwischen ausgewählten physikalisch-chemischen und biologischen Variablen im Rhein. Unterschiedliche Signifikanzlevel sind durch Farben angezeigt, gelb : $P < 0.001$; orange: $0.001 < P < 0.01$; blau: $0.01 < P < 0.05$.

	Wasserspiegel	Temp	$\delta^{18}\text{O}$	pH	EC	DO	DOC	ATP	TVPC	TCC	<i>E.coli</i>	Coliforme	<i>C. perfringens</i>	F+ Coliphagen	Som. Coliphagen
Adenoviren	-0.01	-0.15	0.19	0.38	-0.13	0.37	0.02	0.28	-0.13	-0.07	-0.42	0.04	0.25	0.26	0.25
som. Coliphagen	0.50	-0.74	0.66	-0.21	0.04	0.62	0.38	0.14	-0.21	-0.37	0.39	0.39	0.33	0.59	
F+ Coliphagen	0.48	-0.65	0.12	-0.16	-0.02	0.48	0.15	0.12	-0.67	-0.24	0.16	0.14	0.40		
<i>C. perfringens</i>	0.20	-0.07	-0.09	-0.54	-0.52	-0.33	0.46	0.21	-0.18	0.39	0.35	0.54			
Coliforme	0.31	0.02	-0.02	-0.61	-0.11	-0.14	0.49	0.12	0.09	0.34	0.44				
<i>E. coli</i>	0.59	-0.35	-0.13	-0.32	-0.29	0.31	-0.02	0.05	0.11	-0.08					
TCC	-0.26	0.76	-0.24	-0.13	-0.25	-0.76	0.08	0.16	0.46						
TVPC	-0.16	0.50	0.08	0.07	-0.11	-0.36	-0.18	0.18							
ATP	0.05	0.09	0.57	0.40	-0.22	-0.18	-0.15								
DOC	-0.12	0.04	0.04	-0.47	0.24	-0.15									
DO	0.50	-0.89	0.58	0.09	0.17										
EC	-0.37	-0.06	0.26	0.16											
pH	-0.32	0.05	0.21												
$\delta^{18}\text{O}$	0.31	-0.53													
Temp	-0.59														

Tabelle 7. Korrelation zwischen ausgewählten physikalisch-chemischen und biologischen Variablen im Uferfiltrat und Grundwasser. Unterschiedliche Signifikanzlevel sind durch Farben angezeigt, gelb : $P < 0.001$; orange: $0.001 < P < 0.01$; blau: $0.01 < P < 0.05$.

	Wasser- spiegel	Temp	$\delta^{18}\text{O}$	pH	EC	DO	DOC	ATP	TVPC	TCC	<i>E. coli</i>	Coliforme	<i>C. perfringens</i>	F+ Coliphagen	som. Coliphagen
Adenoviren	0.21	-0.26	-0.06	0.11	-0.11	0.24	0.01	-0.41	-0.01	-0.01	-0.01	0.12	-0.27	-0.47	0.13
som. Coliphagen	0.09	-0.14	-0.09	0.23	-0.03	0.05	-0.02	0.22	0.11	0.20	0.07	-0.06	0.18	-0.08	
F+ Coliphagen	0.18	-0.24	-0.11	0.11	-0.23	0.17	-0.11	0.06	0.06	0.03	0.30	0.11	0.25		
<i>C. perfringens</i>	0.12	-0.09	-0.17	0.19	-0.30	0.02	0.12	0.29	0.20	0.22	0.46	0.33			
Coliforme	0.03	0.20	-0.16	-0.10	-0.10	-0.19	-0.03	0.09	0.04	0.27	0.35				
<i>E. coli</i>	0.28	-0.22	-0.07	0.10	-0.28	0.16	0.11	0.25	0.09	0.25					
TCC	-0.04	0.22	-0.31	0.33	-0.19	-0.38	0.33	0.59	0.45						
TVPC	0.08	-0.16	-0.15	0.36	-0.18	0.04	0.25	0.31							
ATP	0.01	-0.07	-0.42	0.46	-0.25	-0.15	0.15								
DOC	-0.27	0.03	-0.06	0.15	0.02	-0.07									
DO	0.48	-0.76	0.13	0.32	-0.28										
EC	-0.39	0.25	0.62	-0.56											
pH	0.18	-0.45	-0.53												
$\delta^{18}\text{O}$	0.04	-0.10													
Temp	-0.58														

3.5 Transfer auf hochdurchlässige Grundwasserleiter

Im Rahmen des Transfers der Ergebnisse auf einen hochdurchlässigen und damit hoch vulnerablen Grundwasserleiter wurde versucht, die Partikel-Transportgeschwindigkeiten für einen Karbonataquifer abzuleiten. Ziel der Arbeiten ist es, die Bandbreite der Strömungsgeschwindigkeit zu identifizieren und damit das Risiko für einen gut durchlässigen Grundwasserleiter für den Austrag von Pathogenen, speziell Coliphagen, abzuschätzen. Kartsgrundwasserleiter spielen eine relevante Rolle für die Wasserversorgung in Süddeutschland, wie z.B. bei der Wasserversorgung auf der Schwäbischen und Fränkischen Alp.

Auf Grund der komplexen Genehmigungslage in Deutschland für groß-skalige Tracerversuche und basierend auf Kooperationen der TU Berlin mit der Universität Neapel wurde als Untersuchungsgebiet ein Karbonatgrundwasserleiter nahe der Stadt Paestum und ca. 130 km südlich von Neapel ausgewählt, Abbildung 42. Der Karbonataquifer besteht aus intensiv verkarsteten Horizonten mit Einschaltungen von massigen Kalkgesteinen. Das Einzugsgebiet weist eine Fläche von 200 km² auf und befindet sich ausschließlich im Karbonatgestein. Bergrücken erreichen eine maximale Höhe von 1000 mNN. Die Kalksteine fallen in Richtung Mittelmeer ein und werden auf ca. 80-100 mNN durch Tonsteine begrenzt. An dieser Grenzfläche tritt als Schichtquelle die Capodifume Quelle aus, die mit einer starken und kontinuierlichen Schüttung von ca. 3 m³/s einen großen Quelltopf ausbildet. Das aus dem tiefen Grundwasserleiter entwässerte Grundwasser ist reich an gelösten Salzen und CO₂. Oberhalb des Grundwasserleiters besteht eine bis zu 500 m mächtige ungesättigte Zone, durch die das Niederschlagswasser infiltrieren muss, bevor es am Quelltopf austreten kann.

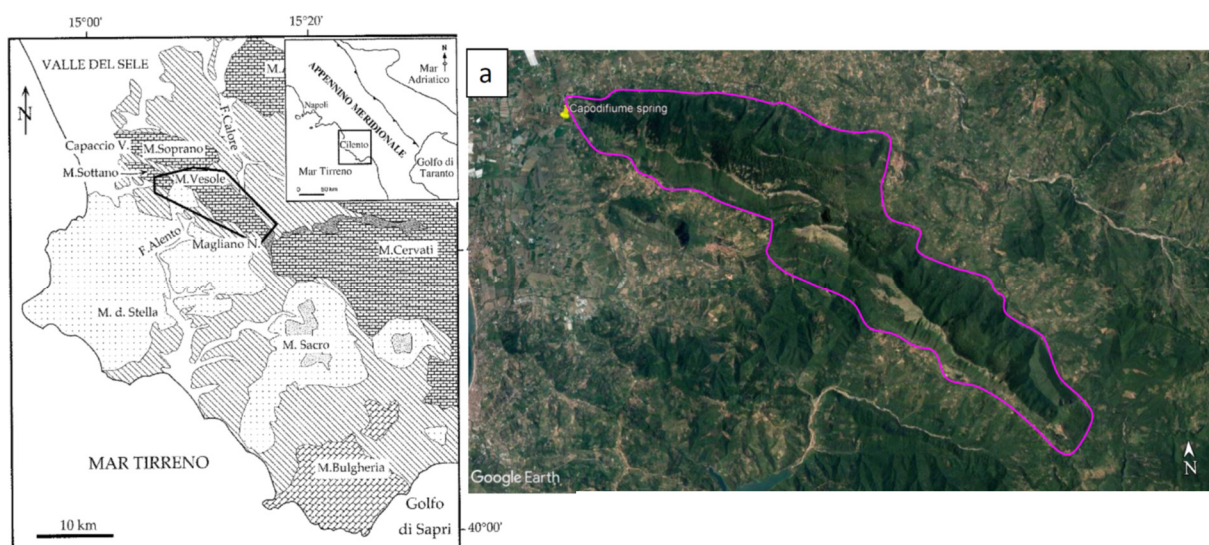


Abbildung 42. Lage des Karbonataquifers in Süd-Italien und Einzugsgebiet der Capodifume Quelle

Der Niederschlag zeigt eine zeitlich hohe Variabilität auf, mit maximalen Niederschlagsmengen im November und Dezember. Eine Regressionsanalyse hat gezeigt, dass zwischen Niederschlagsereignis und Austritt des Niederschlags im Quelltopf etwa 40 Tage vergehen.

Um die Transportwege und Infiltrationsgeschwindigkeit zu berechnen, wurde ein großskaliger Tracerversuch im Capodifume Einzugsgebiet durchgeführt. Dafür wurden 25 kg Uranin in eine Höhle eingeegeben und mit ca. 100 m³ Wasser in das Karstsystem eingespült (Abbildung 43).



Abbildung 43. Anmischen des Uranins mit Wasser (oberes Bild) und Einleiten des Tracers in die Höhle (unteres Bild).

Die Feldexperimente wurden Corona-bedingt mehrfach verschoben und konnten erst im September 2021 umgesetzt werden. Es ist davon auszugehen, dass bis Ende November der Tracer an der Capodifume Quelle ankommen wird. Für das Aufzeichnen der Tracerdurchbruchs-Kurve wurden drei Fluorimeter installiert, die mit einer zeitlichen Auflösung von 15 min die Durchbruchskurve am Quelltopf aufzeichnen werden. Die Daten werden per Internet direkt an die TU Berlin übertragen, sodass jederzeit eine Überwachung der Erstankunft und des Verlaufs der Tracerkurve möglich ist.

Zusätzlich erfolgt mittels Unterstützung der Universität Neapel eine ereignisbasierte Wasserprobenahme (große Intervalle vor der Tracerankunft und kleine Intervalle ab der Erstankunft) im Quelltopf sowie die Sammlung von Proben mittels Aktiv-Kohle-Säckchen, die alle drei Tage ausgetauscht werden. Dieses Vorgehen garantiert, dass auch bei einer niedrigen Konzentration des Tracers im Quellwasser noch eine Identifikation möglich ist.

Die Auswertung der Tracerdurchbruchs-Kurve wird erst nach Abschluss des Experiments möglich sein. Es ist zu erwarten, dass das Abklingen der Tracerkonzentration auf null erst im Frühjahr 2022 erfolgt sein wird. Es ist geplant, zusammen mit Wissenschaftlern der Universität Neapel die resultierende Tracerdurchbruchskurve auszuwerten und Charakteristiken über die Infiltrationsdynamik (Transportwege und -zeiten) abzuleiten. Ergänzend werden bereits seit drei Jahren mittels zwei Klimastationen die meteorologischen Parameter sowie mittels Drucksonden und CTD-Sonden der Grundwasserspiegel, die Grundwassertemperatur und die Leitfähigkeit des Grundwassers aufgezeichnet. Die Ergebnisse der Untersuchungen werden später ermöglichen abzuschätzen, wie groß im Unterschied zu einem langsamen porösen Grundwasserleiter, bei einem hoch permeablen Grundwasserleiter das Risiko für einen Austrag von Pathogenen über weite Strecken sein kann.

4. Diskussion

Kernpunkt des Projekts waren die Untersuchungen auf verschiedenen Skalen, von den Mini-Säulen (11 cm) über den mesoskaligen Säulenversuch (1.2 m) zu dem Feldmonitoring am Wasserwerk Flehe (≈ 100 m), von stark kontrollierten zu vollkommen unkontrollierten Bedingungen.

Virentransport auf der Laborskala

Aus der Vielzahl an Einflussgrößen für den Virentransport, die als relevant diskutiert wurden, konzentrierten sich die Untersuchungen der Mini-Sedimentsäulen (Mikrokosmen) auf die Fließgeschwindigkeit, die Virenlast, die Sauerstoffverhältnisse und die Bioaktivität im Sediment als Steuergrößen des Virentransports. Wie bereits unter 3.1 im Detail erläutert, konnten alle getestete Faktoren als wichtige Einflussgrößen bestätigt werden. Überraschend war auch der große Einfluss der Bioaktivität auf den Virentransport. Obwohl über die mögliche antagonistische Wirkung natürlicher mikrobieller Gemeinschaften in aquatischen Lebensräumen auf pathogene Viren und Bakterien wiederholt spekuliert wurde, sind empirische Daten bis heute selten (Feichtmayer et al. 2017 und darin enthaltene Zitate). Die Säulenversuche liefern dazu wichtige Erkenntnisse. Gleichfalls konnte der signifikante Einfluss von reduzierten Verhältnissen auf den Transport, die Inaktivierung und den Verbleib von Viren unterstrichen werden. Diese Erkenntnis ist vor allem für Systeme relevant die einer natürlichen Dynamik der Redoxbedingungen ausgesetzt sind. Dies trifft begrenzt auch auf den Feldstandort Düsseldorf-Flehe zu. Im Sommer 2018, wurden während der langen Hitzewelle und Trockenperiode zu einzelnen Zeitpunkten sauerstoffarme (hypoxische) bzw. sauerstofffreie (anoxische) Bedingungen in manchen Messstellen beobachtet. Abschließend wurde auch bestätigt, dass eine, durch verringerte Fließgeschwindigkeiten, erhöhte Aufenthaltszeit des infiltrierten Wassers und somit erhöhte Kontaktzeit der Viren mit der Sedimentmatrix zu einer deutlich besseren Effizienz beim Virenrückhalt führt. Da im Moment noch die Daten zur Gesamtpartikelzahl der adsorbierten Viren fehlt können zwar bereits Aussagen zum Ausmaß der Inaktivierung von Viren gemacht werden, jedoch nicht zum direkten Abbau (Elimination) von Virenpartikeln. Diese Daten werden durch weiterführende Probenanalysen bis Ende 2021 vorliegen.

Die experimentellen Ergebnisse des mesoskaligen Säulenversuchs (Mesokosmos) zeigen zunächst einen sehr effizienten Rückhalt von Viren. Auf einer Fließstrecke von nur 1,2 m kam es zu einer Verringerung der Virenausgangskonzentration von mehr als 5 Log-Stufen. Zieht man ferner in Betracht, dass die im Experiment eingesetzten Virenausgangskonzentrationen (10^7 bis 10^{10} PFUs/mL) in dieser Dimension in der Natur nie auftreten werden, kann von einem sehr effizienten Rückhalt bei der Uferfiltration ausgegangen werden. Der Versuch hat auch gezeigt, dass die enorme Reduktion von 5

Log-Stufen nur für die aktiven Virenpartikel galt, nicht jedoch für die Gesamtzahl an MS2 Phagen. Diese wurde über die Fließstrecke von 1,2 m um etwa 4 Log-Stufen reduziert. Es kam mit zunehmender Fließstrecke und auch mit zunehmender Zeit in einzelnen Säulentiefen zu einer signifikanten Inaktivierung der dotierten Phagen. Die Analysen von ausgewählten Sedimentproben, die im unmittelbaren Anschluss an den Versuch entnommen wurden, unterstreichen das große Inaktivierungspotential der Sedimentpassage. Nach 40 cm Fließstrecke (Sediment nahe dem Port 35cm) wurden zwar noch $7,6 \cdot 10^6$ bis $1,2 \cdot 10^7$ MS2 Genome pro mL Sediment gefunden, aber nur noch 5 aktive Phagenpartikel. Nach weiteren 30 cm Fließstrecke waren in den Sedimentproben keine Phagen mehr nachweisbar, weder aktiv noch als Genome. Auf Basis dieser Daten muss davon ausgegangen werden das ein Großteil aller zugegebenen Phagen relativ rasch, zumindest aber über den Zeitraum von ≥ 2 Wochen abgebaut wurde.

Die Modellierung des Mesokosmosversuchs hat gezeigt, dass möglicherweise die Befüllung der Säule nicht ideal verlief, und eine Schicht mit deutlich höherer Retention zwischen Port 2 und 4 in der Säule existierte. Diese vermutlich aus kleineren Korngrößen bestehende Schicht wäre jedoch nicht repräsentativ für die strömungsrelevanten üblicherweise grobkörnigeren Hauptaquiferschichten. Für letztere wären wahrscheinlich eher die Schichten am Anfang und Ende der Säule mit sehr geringer Retention (<0.1 log-Stufen/m) heranzuziehen, was durch die Felddaten auch bestätigt wird, da dort Coliphagen vereinzelt auch noch in 40+ m Entfernung vom Fluss gemessen worden sind (ca. 2 log-Stufen Reduktion im Vergleich zur Konzentration im Fluss).

Virentransport auf der Feldskala – Monitoring am Wasserwerk Flehe

Die Untersuchungen am Wasserwerk Flehe haben etwas mehr als ein hydrologisches Jahr erfasst (16 Monate). Das im Projektantrag erwähnte Eventmonitoring im Falle eines Hochwassers konnte nicht wie ursprünglich geplant stattfinden, da nach dem Winterhochwasser im Januar 2018 im Messzeitraum kein ausgeprägtes zusammenhängendes Hochwasser im Rhein mehr auftrat, von kürzeren Phasen mit erhöhtem Wasserstand abgesehen. Dafür gab es einen ungewöhnlich warmen und trockenen Sommer und Herbst 2018 mit Rekord-Niedrigwasserständen im Rhein. Bis zum Winter 2019 hatten sich die Wasserstände nur zum Teil erholt.

Die Felduntersuchungen lieferten einen sehr spannenden Datensatz, der in seinen Grundzügen fertig ausgewertet wurde. Zu einzelnen speziellen Aspekten laufen die Auswertearbeiten jedoch noch weiter (siehe unten). Zusammenfassend zeigen die gewonnenen Daten, dass die natürliche Reinigungsleistung durch Uferfiltration am Wasserwerk in Düsseldorf-Flehe sehr effizient ist. Auch zu Zeiten von Hochwässern und Niedrigwasser konnten zu keinem Zeitpunkt Adenoviren und nur in Ausnahmefällen Fäkalindikatoren am Förderbrunnen nachgewiesen werden. Es muss hier jedoch auch angemerkt werden, dass für die Zeitpunkte des ‚ausgeprägten‘ Hochwassers im Winter 2017/2018 keine Daten

für den Förderbrunnen vorliegen. Spätere Hochwässer waren sehr viel geringer ausgeprägt. Die von der WHO (2017) als Erwartung formulierte Reduktion von pathogenen Viren von > 2,1 Log-Stufen, wurde im Fall der Adenoviren erreicht (3,1 bis 2,5 log₁₀). Eine andere Empfehlung der WHO (2017), dass nämlich Trinkwasser eine Virenkonzentration von ≤ 1 Viruspartikel in 100 m³ Wasser enthalten soll, ist mit dem heutigen Stand der Technik (Aufkonzentration von Viren aus großen Wasservolumina) und der Molekularbiologie (Nachweisgrenze für Viren durch qPCR und ddPCR) nicht in der Routine überprüfbar, und wurde auch in der Forschung bisher nur in Ausnahmefällen umgesetzt (Pei et al., 2012; Seidel et al., 2016). Um diesen Grenzwert zu prüfen, müsste die Nachweisgrenze für Adenoviren der in diesem Projekt eingesetzten Kombination aus Aufkonzentration der Virenpartikel und molekularem Nachweis (< 11,4 particles L⁻¹) um 6-7 Größenordnungen verringert werden. Ein Risiko einer Kontamination mit Adenoviren für das Wasserwerk in Düsseldorf-Flehe ist jedoch auf Basis der Adenovirenkonzentration und der Konzentration weiterer Fäkalindikatoren im Rheinwasser ganz gut abschätzbar (siehe unten). Wie sich gezeigt hat, sind die Gesamtbakterienzahl und die Gesamtvirenpartikelzahl sehr konservative Indikatoren, da ihr Rückhalt während der Uferfiltration am geringsten war. Dies ist nicht überraschend und dadurch zu erklären, dass sich sowohl Bakterien als auch Phagen in den aquatischen Lebensräumen natürlich reproduzieren können, im Gegensatz zu einem ‚verlässlichen‘ Fäkalindikator und humanpathogenen Viren.

Unsere Ergebnisse lieferten viele Hinweise, dass auch zu Zeiten hydrologischer Extreme (Hochwasser- und Niedrigwassersituation) die natürliche Reinigungsleistung bei der Uferfiltration sehr effizient ist. Erhöhte Konzentrationen von einzelnen Indikatoren im flussnahen Uferfiltrat als auch Einzelnachweise von *C. perfringens* und coliformen Bakterien im Förderbrunnen während bzw. im Anschluss an die lange Niedrigwasserphase im Sommer 2018 weisen, darauf hin, dass hydrologische Extremsituationen als ernstzunehmendes Risiko betrachtet werden sollten.

Wie im Ergebnisteil bereits erläutert, zeigten die Ergebnisse aus den Analysen zur elektrischen Leitfähigkeit, der Wasserchemie, als auch der Wasserisotopie (¹H/²H, ¹⁸O/¹⁶O) im Fluss und Grundwasser, dass sich zur Zeit des Hochwassers 2017/2018 fast ausschließlich Flusswasser im flussnahen Aquifer befunden hat. In noch laufenden Analysen untersuchen wir wie sich das Transportverhalten eines konservativen Tracers (z.B. Isotopensignatur im Wasser, Chlorid, Temperatur) vom selektiven und reaktiven Transport von mikrobiellen Gemeinschaften unterscheidet. Ergebnisse deuten darauf hin, dass einzelne Bakteriengruppen aus der Flusswassergemeinschaft unterschiedlich gut und schnell während der Passage durch den flussnahen Aquifer zurückgehalten werden. Die noch ausstehenden Ergebnisse können Auskunft darüber geben ob man zukünftig die Rückhaltekapazität bei der Uferfiltration für einzelne Bakterien und Viren individuell bewerten müssen.

Die Ergebnisse der Modellierung des Feldversuchs haben gezeigt, dass die Variabilität der mikrobiologischen Parameter zwischen den Messtellen in der Vertikalen teilweise durch die Heterogenität des Untergrundes (hydraulische Leitfähigkeit und mittlere Korngröße) erklärt werden kann. Darüber hinaus spielt hierbei auch noch die Messunsicherheit bei den mikrobiologischen Größen eine wichtige Rolle.

In der Modellierung hat sich herausgestellt, dass die zeitliche Veränderung der Durchlässigkeit der Kolmationsschicht einen wichtigen Faktor darstellen kann für die Reinigungsleistung, insbesondere für Bakterien. Durch das starke Hochwasser Rhein im Winter 2017/18 wurde die hydraulische Durchlässigkeit der Kolmationsschicht am Wasserwerk Flehe erhöht und die Retention für Bakterien stark verringert (nur eine log-Stufe bis zu Reihe A). Im Winter 2018/19 gab es kein ausgeprägtes Hochwasser, die Durchlässigkeit der Kolmationsschicht wurde nicht erhöht, und die Retention der Bakterien war deutlich stärker (2-3 log-Stufen bei Reihe A), bei ähnlicher Fließgeschwindigkeit/Transportzeit in beiden Zeiträumen. Das unterstreicht die kritische Bedeutung von Hochwassersituationen für die Uferfiltration. Aber da die Kolmationsschicht schlecht messtechnisch erfassbar ist, insbesondere bei großen Flüssen, ergibt sich eine gewisse Unsicherheit bei Voraussagen für die Reinigungsleistung.

Für die Viren (sowohl Coliphagen als auch Adenoviren) war der Einfluss der zeitlichen Veränderung der Kolmationsschicht wenig bis gar nicht zu sehen im Modell. Dies liegt wahrscheinlich daran, dass die Viren weniger auf dem Untergrundmaterial sorbieren und deshalb weniger auf Veränderungen der effektiven Korngröße reagieren als Bakterien. Besonders bei den Coliphagen hat sich gezeigt, dass Detektionen an den Grundwassermessstellen fast ausschließlich auf die Hydraulik und kurze Transportzeiten zurückzuführen sind.

Für die Modellierung war das gute Retentionsvermögen der Uferfiltration mit Bezug auf die vorkommenden Konzentrationen von Bakterien und Viren im Rhein teilweise ein Problem. Denn zu vielen Messzeiten konnten keine Bakterien bzw. Viren gefunden, was die Aussagekraft der Modellierung natürlich beeinträchtigt.

Für Wasserwerksbetreiber und Wasserbehörden höchst interessant ist die Frage welche Indikatoren am geeignetsten sind die Belastung des Wassers mit humanpathogenen Viren vorherzusagen. Für die Adenoviren zeigten sich jedoch in den erhobenen Daten vom Wasserwerk Flehe keinerlei Korrelationen mit anderen ausgewählten Fäkalindikatoren und auch nicht mit den untersuchten physikalisch-chemischen Parametern. Mit aktuellem Wissensstand empfehlen wir ein kombiniertes Monitoring von *E. coli*, coliformen Bakterien und Coliphagen, um eine gute Voraussagbarkeit der Reinigungsleistung zu gewährleisten. Dabei sollte besonders die Hydraulik berücksichtigt werden, d.h.

Zeitpunkte mit hoher Grundwasserfließgeschwindigkeit (bspw. bei stark ansteigenden Flusspegeln/Hochwasser) weisen in der Regel die niedrigste Reinigungsleistung auf.

Entscheidungsunterstützung für Anwender in der Praxis

Ein Ziel des Projektes war die Entwicklung eines Prototyps einer Toolbox die Anwender aus der Praxis (vor allem Wasserwerksbetreiber) unterstützen kann die Reinigungsleistung einer Uferfiltrationsstrecke bzgl. mikrobiologischer Verunreinigungen abzuschätzen. Für die Toolbox wurde ein Konzept mittels Surrogate-Modell entwickelt, welches es Anwendern erlauben soll, modellbasiert die Reinigungsleistung ihrer Uferfiltrationsstrecken abschätzen zu können. Das Surrogate-Modell basiert auf einem verallgemeinerten 1D Transportmodell, welches von den enthaltenen Prozessen her auf dem Modell für das Wasserwerk Flehe beruht. Für die Benutzung des Surrogate-Modells müssen Anwender nur wenige standortspezifische Parameter kennen (u.a. Abstand des Brunnens vom Fluss, und die Grundwasserfließgeschwindigkeit, ggfs. abschätzbar über die Fördermenge. Die Einbettung des Surrogate-Modells in eine Webanwendung dient der Informationsvermittlung zum Thema „Pathogene bei der Uferfiltration“ und begleitet den Anwender zielgerichtet bei der Abarbeitung des Konfigurationsprozesses und der Auswertung der Ergebnisse.

Die Abschätzung der Reinigungsleistung hat ein Unsicherheitsintervall ausgelöst durch die Unsicherheit der Prozessparameter für den Transport von Bakterien und Viren, welche für den Prototyp auf der Unsicherheit der kalibrierten Parameter des Flehe Modells beruht. Damit ist zu erwarten, dass der Prototyp etwas spezifisch für den Standort Flehe ist, weniger in Hinblick auf die verwendeten Prozesse, diese werden sehr ähnlich sein bei anderen Uferfiltrationsstandorten, sondern mehr für die Parametrisierung der Prozessparameter. Inwieweit diese sich bei verschiedenen Uferfiltrationsstandorten unterscheidet, ist unklar. Feststeht das Sedimente und deren Mineralogie sowie auch die Wasserzusammensetzung aber auch die Bioaktivität (alles potenzielle Einflussfaktoren für den Viren- und Bakterientransport) sich von Standort zu Standort unterscheiden können. Auf der anderen Seite haben Uferfiltrationsstandorte auch gewisse Gemeinsamkeiten. Sie haben üblicherweise einen sehr produktiven Aquifer, d.h. Sedimente mit hohen hydraulischen Leitfähigkeiten und dementsprechend auch höhere Korndurchmesser. Aber auch für den Wasserchemismus finden sich häufig Gemeinsamkeiten, bspw. sehr niedrige und sehr hohe pH-Werte und elektrische Leitfähigkeiten, die den Viren- und Bakterientransport stark beeinflussen können, treten in der Regel nicht auf, da sie als Grundlage für Trinkwasser ungeeignet sind. Publierte Vergleichsdaten für andere Wasserwerke mit Uferfiltration sind vergleichsweise selten. Wie in 3.3 gezeigt, konnten beim Vergleich mit einer Gruppe von Wasserwerken in den USA gute Ergebnisse erzielt werden mit dem Surrogate-Modell.

Die Reinigungsleistung wird abgeschätzt einmal für Bakterien (von den Parametern basierend auf den Coliformen Bakterien am Wasserwerk Flehe) und für Viren (basierend auf den Somatischen Coliphagen am Wasserwerk Flehe). Auf Grund der Datenlage im Projekt wurde sich entschieden auf die Coliformen und die Somatischen Coliphagen zu stützen. Die Coliformen sind sowieso schon lange ein Indikator für bakterielle Kontamination. Somatische Coliphagen werden wie bereits erwähnt auch häufig als mögliche Indikator für humanpathogene Viren genannt. Ebenso sind Somatische Coliphagen in der Novelle der EU-Trinkwasserrichtlinie (Richtlinie (EU) 2020/2184) in das Messprogramm miteinbezogen wurden für die Überprüfung der Reinigungsleistung bzgl. einer Kontamination mit Viren. Zwar hat unser Projekt wie bereits erwähnt auch gezeigt, dass eine direkte Korrelation von Somatischen Coliphagen und Adenoviren nicht zwangsweise vorkommt. Dennoch können Somatische Coliphagen als ein Indikator für die Reinigungsleistung der Uferfiltration bzgl. viraler Partikel herangezogen werden.

Zwar konnten für AP4 nicht alle ursprünglich geplanten Schritte durchgeführt, vor allem auf Grund der Datenlage, aber dafür konnte mit der Webanwendung/Toolbox und dem Surrogate Modell ein interessantes Werkzeug angelegt werden, welches Wasserwerksbetreibern unterstützen kann bei Risikobewertungen bzgl. der Reinigungsleistung der Uferfiltration gegenüber Mikroorganismen.

5. Öffentlichkeitsarbeit

Auf wissenschaftlichen Konferenzen/Tagungen/Meetings wurden verschiedene Poster und Vorträge über das Projekt und dessen Ergebnisse vorgestellt:

1. Das Projekt selbst mit einem Fokus auf der Modellierung der Transportprozesse von Pathogenen wurde von Dustin Knabe (TUB) vorgestellt auf der Tagung der FH-DGGV (Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft – Geologische Vereinigung) in Bochum, 21.-24.03.2018 (Knabe et al.: Transport von Viren in heterogenen Aquiferen).
2. Ein weiteres Poster mit einem Fokus auf der mikrobiologischen Seite des Transports von Pathogenen bei der Uferfiltration wurde von He Wang (HMGU) vorgestellt auf der ISME (International Society for Microbial Ecology) Tagung im August 2018 in Leipzig (Wang et al.: Spatio-temporal dynamics in natural attenuation of pathogens during river bank filtration).
3. Ein drittes Poster mit dem Schwerpunkt der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse eines Transportmodells für Pathogene bei der Uferfiltration wurde von Dustin Knabe (TUB)

vorgelegt auf der European Geosciences Union General Assembly in Wien, 07.04.-12.04.2019 (Knabe et al.: Sensitivity and Uncertainty Assessment of a Model for Pathogen Transport across a River Bank Filtration set-up).

4. Ein Vortrag ebenfalls mit dem Schwerpunkt der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse eines Transportmodells für Pathogene bei der Uferfiltration wurde von Dustin Knabe (TUB) gehalten auf dem Smart-KD Workshop am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf im Februar 2020 (www.hzdr.de/smartkd).
5. Weiterhin wurden erste Ergebnisse/Erkenntnisse der Modellierung des Feldmonitorings vorgestellt von Dustin Knabe (TUB) auf der EGU General Assembly 2021 (vEGU21, 19.04.-30.04.2021) (Knabe et al: Impact of seasonal variations and transient colmation layer properties on bacteria and virus transport in bank filtration).

Die Ergebnisse und Erkenntnisse des Projekts wurden und werden über mehrere Artikel in wissenschaftlichen Journalen publiziert. Erste Daten zum Feldmonitoring am Wasserwerk in Düsseldorf-Flehe wurden im Zusammenhang mit einer neuen Methode zur mikrobiologisch-ökologischen Bewertungsmethode für Grundwasser in der Zeitschrift Water Research publiziert (Fillinger et al., 2019). Ein Artikel zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse eines Transportmodells für Pathogene bei der Uferfiltration basierend auf dem Datensatz vom Wasserwerk Flehe von 2003/4 wurde in dem Journal Water Resources Research veröffentlicht (Knabe et al., 2021). Ein Manuskript welches die Ergebnisse der Felduntersuchungen am Standort Düsseldorf-Flehe zusammenfasst (Wang et al. In prep) wurde kürzlich bei Water Research eingereicht. Ein Manuskript zur Modellierung der Felduntersuchungen befindet sich ebenfalls in fortgeschrittener Vorbereitung (Knabe et al., in prep). Weitere Manuskripte sind in Planung bzgl. des mesoskaligen Säulenversuchs, der Minisäulen, des Surrogate Modells, und der Dynamik der mikrobiellen Gemeinschaften am Standort Düsseldorf-Flehe.

Weiterhin wurde ein Artikel über das Projekt in der TU Berlin Beilage zur Zeitung „Der Tagesspiegel“ vom 02. Mai 2020 veröffentlicht. Auch wurden Ergebnisse des Projektes mit Wasserversorgern kommuniziert im April 2021 bei einem Meeting der „Arbeitsgemeinschaft der Rhein-Wasserwerke“ (ARW) und einem Meeting der „Arbeitsgemeinschaft der Wasserversorger im Einzugsgebiet der Elbe“ (AWE).

6. Fazit

Am Beispiel des Rheins hat sich gezeigt, dass fast über das ganze Jahr eine nicht unerhebliche Belastung des Flusswassers mit Krankheitserregern vorliegt. Für das Wasserwerk Düsseldorf-Flehe, welches sehr nahe am Rhein gelegen ist und einen hydraulisch sehr leitfähigen Aquifer für die Uferfiltration nutzt, hat sich jedoch gezeigt, dass das Rückhaltepotential gegenüber Krankheitserregern und Fäkalindikatoren dennoch sehr hoch und unter Normalbedingungen ausreichend ist. Die Daten zeigen auch, dass zu Zeiten von Hoch- und Niedrigwasser das Risiko einer Kontamination erhöht ist. Ein ausgeprägtes Hochwasser führte zu erhöhten Konzentrationen einiger Fäkalindikatoren im flussnahen Aquifer, die laut Modellierung auch die Wasserqualität am Förderbrunnen beeinflusst haben (leider fehlen genau für diesen Zeitraum Proben und Daten für den Förderbrunnen). In Anbetracht zukünftiger Entwicklungen des Klimas und der Rheinwasserqualität sollte dieses Risiko nicht vernachlässigt werden.

Das aufgestellte Prozessmodell konnte die vorliegenden Experimentaldaten gut nachbilden. Dabei hat sich insbesondere gezeigt, dass neben der zeitlich variablen Hydraulik als Haupteinflussfaktor für die Reinigungsleistung auch die zeitliche Veränderung der Kolmationsschicht eine Rolle spielt, jedoch stärker für Bakterien als für Viren.

Für die humanpathogenen Adenoviren muss festgestellt werden, dass keiner der üblichen Indikatoren (Fäkalindikatorbakterien, Coliphagen) das Transportverhalten der Adenoviren anzeigt. Aber die Reinigungsleistung der Uferfiltration war auch für Adenoviren so gut, dass die Konzentration in flussnahen Messstellen höchstens knapp über dem Detektionslimit lag, und weiter entfernt gar nicht mehr messbar waren.

Die Methode zur Erstellung des Surrogate Modells und dessen Einbettung in die Toolbox/Webanwendung wurden erfolgreich umgesetzt. Diese Methodik hat sich als sehr gute Möglichkeit herausgestellt, um die Ergebnisse der Modellierung zu verallgemeinern und potenziell den Stakeholdern zugänglich zu machen. Die Toolbox in Form einer Webanwendung kontextualisiert das Surrogate Modell mit Erklär- und Hilfetexten. Die Toolbox kann es Wasserwerksbetreibern ermöglichen, das Rückhaltepotential ihrer Uferfiltrationsanlagen gegenüber Pathogenen besser abzuschätzen. Es war jedoch im Rahmen dieses Projektes nicht mehr möglich die Toolbox und das Surrogate-Modell an weiteren Standorten als dem Wasserwerk Flehe zu validieren. Deshalb kann die Webanwendung nur als Prototyp angesehen werden.

Von den ursprünglichen im Antrag ausgegeben Zielen konnten nur das eventbasierte Monitoring, und der Monitoringplan mittels Critical-Control-Points (CCP) nicht realisiert werden. Ersteres da ein ausgeprägtes Hochwasser als Event im Beobachtungszeitraum am Wasserwerk Flehe nicht auftauchte,

und letzteres da CCPs mit gut messbaren Kennwerten mit der Datenlage, der Fokussierung des Projektes auf einen Standort, und ein 1-Jahresmonitoring nicht allgemein definiert werden konnten.

Durch die Covid-19 Pandemie kam es zwar zu Verzögerungen in der Projektbearbeitung jedoch konnte das Projekt trotzdem erfolgreich abgeschlossen werden.

Die Arbeiten sollen in einem Folgeprojekt fortgeführt werden, welches insbesondere die im Projekt aufgetauchten Problempunkte berücksichtigt. Zum einen soll neue Messtechnik entwickelt werden, um die Datenlage auch bei guter Reinigungsleistung der Uferfiltration zu verbessern. Zum anderen soll die Toolbox und das Surrogate Modell an anderen Standorten validiert und ggfs. verbessert werden, insbesondere soll dabei im Fokus der Einfluss von Extremwetter/Hochwasser stehen.

7. Literatur

- Argent, J., S. Torkzaban, S. Hubbard, H. Le, T. Amirianshoja, and M. Haghghi (2015), Visualization of Micro-Particle Retention on a Heterogeneous Surface Using Micro-models: Influence of Nanoscale Surface Roughness, *Transport in Porous Media*, 109(2), 239-253. 10.1007/s11242-015-0511-z
- Bradford, S. A., J. Simunek, M. Bettahar, M. T. van Genuchten, and S. R. Yates (2003), Modeling Colloid Attachment, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media, *Environmental Science & Technology*, 37(10), 2242-2250. 10.1021/es025899u
- Bradford, S. A., S. Torkzaban, and A. Shapiro (2013), A Theoretical Analysis of Colloid Attachment and Straining in Chemically Heterogeneous Porous Media, *Langmuir*, 29(23), 6944-6952. 10.1021/la4011357
- Richtlinie (EU) 2020/2184 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2020 über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch (Neufassung). (<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/?uri=CELEX:32020L2184>).
- Cheng, T., Sayers, J.E. 2009. Mobilization and transport of in situ colloids during drainage and imbibition of partially saturated porous media. *Water Resour. Res.* 45: W08414.
- Chrysikopoulos, C. V., and V. I. Syngouna (2012), Attachment of bacteriophages MS2 and ΦX174 onto kaolinite and montmorillonite: Extended-DLVO interactions, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 92, 74-83. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2011.11.028>
- Dell'Oca, A., Riva, M., & Guadagnini, A. (2017). Moment-based metrics for global sensitivity analysis of hydrological systems. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 21(12), 6219–6234. <https://doi.org/10.5194/hess-21-6219-2017>
- Deng, L., Krauss, S., Feichtmayer, J., Hofmann, R., Arndt, H. & Griebler, C. (2014) Grazing of heterotrophic flagellates on viruses is driven by feeding behavior. *Environmental Microbiology Reports*, 6: 325-330.
- Feichtmayer, J., Deng, L. & Griebler, C. (2017) Antagonistic microbial interactions: contributions and potential applications for controlling pathogens in the aquatic systems. *Front. Microbiol.* 8: 2192 (2017).
- Fillinger, L., Hug, K., Trimbach, A. M., Wang, H., Kellermann, C., Meyer, A., et al. (2019). The D-A-(C) index: A practical approach towards the microbiological-ecological monitoring of groundwater ecosystems. *Water Research*, 163, 114902. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.114902>
- Frohnert, A., Apelt, S., Klitzke, S., Chorus, I., Szewzyk, R., Selinka, H.-C. 2014. Transport and removal of viruses in saturated sand columns under oxic and anoxic conditions – Potential implications for groundwater protection. *International Journal of Hygiene and Environmental Health* 217: 861-870.
- Gordon, C., & Toze, S. (2003). Influence of groundwater characteristics on the survival of enteric viruses. *Journal of Applied Microbiology*, 95(3), 536–544. <https://doi.org/10.1046/j.1365-2672.2003.02010.x>
- Hofmann, R., Grösbacher, M., & Griebler, C. (2017). Mini Sediment Columns and Two-Dimensional Sediment Flow-Through Microcosms: Versatile Experimental Systems for Studying Biodegradation of Organic Contaminants in Groundwater Ecosystems. In T. J. McGenity, K. N. Timmis, & N. Balbina (Eds.), *Hydrocarbon and Lipid Microbiology Protocols: Meso- and Microcosms* (pp. 153–172). Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/8623_2016_210
- Hunt, R. J., and W. P. Johnson (2017), Pathogen transport in groundwater systems: contrasts with traditional solute transport, *Hydrogeology Journal*, 25(4), 921-930. 10.1007/s10040-016-1502-z
- Johnson, W. P., M. Tong, and X. Li (2007), On colloid retention in saturated porous media in the presence of energy barriers: The failure of α , and opportunities to predict η , *Water Resources Research*, 43(12). doi:10.1029/2006WR005770
- Joshi, N., Ojha, C.S.P., Sharma, P.K., Surampalli, R.Y. 2013. Parameter identification of virus transport in porous media using equilibrium and non-equilibrium models. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 1:1099-1107.

- Knabe, D., Guadagnini, A., Riva, M., & Engelhardt, I. (2021). Uncertainty analysis and identification of key parameters controlling bacteria transport within a riverbank filtration scenario. *Water Resources Research*, 57, e2020WR027911. <https://doi.org/10.1029/2020WR027911>
- Krauss, S., Griebler, C. 2011. Pathogenic microorganisms and viruses in groundwater. acatech Report No. 6; www.acatech.de
- Kvitsand, H. M. L., A. Ilyas, and S. W. Østerhus (2015), Rapid bacteriophage MS2 transport in an oxic sandy aquifer in cold climate: Field experiments and modeling, *Water Resources Research*, 51(12), 9725-9745. doi:10.1002/2015WR017863
- Pang, L. 2009. Microbial removal rates in subsurface media estimated from published studies of field experiments and large intact soil cores. *J. Environ. Qual.* 38: 1531-1559.
- Partinoudi, V. and Collins, M.R. (2007), Assessing RBF reduction/removal mechanisms for microbial and organic DBP precursors. *Journal - American Water Works Association*, 99: 61-71. <https://doi.org/10.1002/j.1551-8833.2007.tb08107.x>
- Porta, G., la Cecilia, D., Guadagnini, A., & Maggi, F. (2018). Implications of uncertain bioreactive parameters on a complex reaction network of atrazine biodegradation in soil. *Advances in Water Resources*, 121, 263–276. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2018.08.002>
- Pronk M. 2010. Auftreten von Mikroorganismen im Grundwasser. *gwa* 12: 1059-1071.
- J. Robinson, & Y. Rahmat-Samii. (2004). Particle swarm optimization in electromagnetics. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 52(2), 397–407. <https://doi.org/10.1109/TAP.2004.823969>
- Sasidharan, S., S. Torkzaban, S. A. Bradford, P. G. Cook, and V. V. S. R. Gupta (2017), Temperature dependency of virus and nanoparticle transport and retention in saturated porous media, *Journal of Contaminant Hydrology*, 196, 10-20. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2016.11.004>
- Sharma, L., J. Greskowiak, C. Ray, P. Eckert, and H. Prommer (2012), Elucidating temperature effects on seasonal variations of biogeochemical turnover rates during riverbank filtration, *Journal of Hydrology*, 428-429, 104-115. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2012.01.028>
- Sharma, L., I. Engelhardt, V. E. Post, S. Bradford, C. Ray, and H. Prommer (2014), Field-Scale Reactive Transport Modeling of Pathogen Transport during River Bank Filtration under Transient Conditions (unveröffentlichter Research Paper Entwurf)
- Schijven, J.F., Hoogenboezem, W., Hassanizadeh, S.M., Peters, J.H. 1999. Modelling removal of bacteriophages MS2 and PRD1 by dune recharge at Castricum, Netherlands. *Water Resources Research* 35: 1101-1111.
- Schubert, J. (2002), Hydraulic aspects of riverbank filtration—field studies, *Journal of Hydrology*, 266(3), 145-161. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(02\)00159-2](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(02)00159-2)
- Seidel, M., Jurzik, L., Brettar, I., Höfle, M.G. & Griebler, C. (2016) Microbial and viral pathogens in freshwater – current research aspects studied in Germany. *Environ. Earth Sci.* 75: 1384.
- Stump, C., Kellermann, C., & Griebler, C. (2019). Transport von Viren im Grundwasser – experimentelle Untersuchungen und mathematische Modellierung. *Österreichische Wasser- Und Abfallwirtschaft*, 71(9), 454–458. <https://doi.org/10.1007/s00506-019-0612-y>
- Syngouna, V. I., and C. V. Chrysikopoulos (2015), Experimental investigation of virus and clay particles cotransport in partially saturated columns packed with glass beads, *Journal of Colloid and Interface Science*, 440, 140-150. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2014.10.066>
- Trauscht, J., E. Pazmino, and W. P. Johnson (2015), Prediction of Nanoparticle and Colloid Attachment on Unfavorable Mineral Surfaces Using Representative Discrete Heterogeneity, *Langmuir*, 31(34), 9366-9378. 10.1021/acs.langmuir.5b02369
- Tufenkji, N., and M. Elimelech (2004), Deviation from the Classical Colloid Filtration Theory in the Presence of Repulsive DLVO Interactions, *Langmuir*, 20(25), 10818-10828. 10.1021/la0486638

- Umweltbundesamt (2020). Leitfaden zum Umgang mit „kurzzeitigen Verschmutzungen“ in Flussbadegewässern. https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/publikationen/2020-07-22_leitfaden_verschmutzungen-flussbadegewaesser.pdf
- Van der Wielen, P.W.J.J., Senden, W.J.M.K., Medema, G.J. 2008. Removal of bacteriophages MS2 and ϕ X174 during transport in a sandy anoxic aquifer. *Environmental Science and Technology* 42 (12): 4589-4594.
- Wang, Y., S. A. Bradford, and J. Šimůnek (2013), Transport and fate of microorganisms in soils with preferential flow under different solution chemistry conditions, *Water Resources Research*, 49(5), 2424-2436. doi:10.1002/wrcr.20174
- World Health Organization (2008). Guidelines for Drinking-water Quality Third Edition. ISBN 978 92 4 154761 1.
- Xagorarakis, I., Z. Yin, and Z. Svambayev (2014), Fate of Viruses in Water Systems, *Journal of Environmental Engineering*, 140(7), 04014020.