

## **Masterarbeit / Bachelorarbeit**

### **Modellierung und Simulation eines Granulären Aktivkohle (GAK) – Filters zu weitergehenden Abwasserbehandlung**

### **Modeling and simulation of a granular activated carbon (GAC) filter for advanced wastewater treatment**

Granuläre Aktivkohle (GAK) – Filter bilden zusammen mit Ozonung den Stand der Technik zur weitergehenden Abwasserbehandlung, um Gewässer vor Spurenstoffen und anderen sog. *emerging contaminants* zu schützen. Des Weiteren verschärft der Klimawandel weitere Herausforderungen wie Dürre-resistente Wasserversorgung. GAK-Filter werden damit in Zukunft eine noch wichtigere Rolle spielen durch den vermehrten Einsatz in der Wiederverwendung von kommunalem Abwasser für z.B. landwirtschaftliche oder städtische Bewässerung. In den GAK-Filtern treten verschiedene Prozesse zeitgleich auf: konvektiver und diffusiver Transport durch den Filter, Adsorption und biologischer Abbau. Die Identifizierung und Quantifizierung der Einzelprozesse zum verbesserten Verständnis stellt aktuell eine relevante Forschungsrichtung dar ([Acevedo Alonso et al. 2021](#); [Yuan et al. 2022](#)). Ein verbessertes Verständnis soll dazu führen, dass GAK-Filter noch effizienter betrieben werden können, und kann die Grundlage für eine Vorhersage des Durchbruchs einzelner Stoffe oder Stoffgruppen durch den GAK-Filter bereiten. Ziel dieser Arbeit ist die simulative Modellbildung und -weiterentwicklung auf Basis von Pilotierungsergebnissen und einer bereits bestehenden Modellierung davon in der open source Software [CADET](#) (mit Python-Interface).

Im Rahmen der Arbeit sollst Du:

- das Modell an die erweiterten Experimentalergebnisse anpassen (Parameterfitting) und validieren.
- ein Submodell für Spurenstoffen z.B. Pestizide und Konkurrenz mit Bulk-Organik implementieren.
- eine Sensitivitätsanalyse bzgl. Schlüsselparametern durchführen.
- einen Modellvergleich mit anderen dokumentierten Modellen durchführen: z.B. Acevedo Alonso et al. 2021, logistische Regression, Joss 2021.
- die Simulationsergebnisse mit wiss. Methoden analysieren und aufbereiten.

Das solltest Du mitbringen:

- Interesse am Themenkomplex Wasser – Umweltbelastungen/ Spurenstoffelimination – Klimaveränderungen und/ oder Adsorption
- Vorkenntnisse in Python (wünschenswert aber nicht notwendig)
- Selbstständige und lösungsorientierte Arbeitsweise

Das nimmst Du mit:

- Vertiefte Kenntnisse über die Adsorption und Verfahrenstechnik
- Systematische Bearbeitung wissenschaftlicher Problemstellungen inkl. numerischer und verfahrenstechnischer Optimierungsprobleme
- Üben und Verinnerlichen von Präsentations- und Vortragstechniken

**Studierende:** Umweltingenieurwesen, Verfahrenstechnik, Computational Engineering Science, o.ä.

**Beginn:** ab sofort

#### **Ansprechpartner:**

**Dr.-Ing. Benedikt Aumeier (RWTH ISA)**

0241 - 80 23551

[aumeier@isa.rwth-aachen.de](mailto:aumeier@isa.rwth-aachen.de)

## **Master thesis / Bachelor thesis**

### **Modellierung und Simulation eines Granulären Aktivkohle (GAK) – Filters zu weitergehenden Abwasserbehandlung**

### **Modeling and simulation of a granular activated carbon (GAC) filter for advanced wastewater treatment**

Granular activated carbon (GAC) filters, together with ozonation, represent the state of the art for advanced wastewater treatment to protect water bodies from micropollutants and other emerging contaminants. Furthermore, climate change is exacerbating other challenges such as drought-resistant water supplies. GAC filters will thus play an even more important role in the future due to their increased use in the reuse of municipal wastewater for e.g. agricultural or urban irrigation. Several processes occur simultaneously in GAC filters: convective and diffusive transport through the filter, adsorption and biodegradation. Identification and quantification of the individual processes for improved understanding is currently a relevant research direction ([Acevedo Alonso et al. 2021](#); [Yuan et al. 2022](#)). Improved understanding should lead to more efficient operation of GAC filters and can prepare the basis for predicting the breakthrough of individual substances or groups of substances through the GAC filter. The goal of this work is simulative model building and further development based on pilot results and an existing modeling of it in the open source software [CADET](#) (with Python interface).

Within the scope of the work you shall:

- adapt the model to the extended experimental results (parameter fitting) and validate it.
- implement a submodel for trace substances e.g. pesticides and competition with bulk organics.
- perform a sensitivity analysis on key parameters.
- perform a model comparison with other documented models: e.g. Acevado Alonso et al. 2021, logistic regression, Joss 2021.
- analyze and prepare the simulation results using scientific methods.

What you should bring:

- interest in the complex of topics water - environmental pollution/ trace substance elimination - climate change and/ or adsorption.
- previous knowledge in Python (desirable but not necessary)
- independent and solution-oriented way of working

What you get:

- in-depth knowledge of adsorption and process engineering
- systematic approach to scientific problems including numerical and process optimization problems
- practice and internalization of presentation and lecture techniques

**Students:** Environmental Engineering, Chemical Engineering, Computational Engineering Science, or similar

**Start:** from now

#### **Contact person:**

**Dr.-Ing. Benedikt Aumeier (RWTH ISA)**

0241 - 80 23551

[aumeier@isa.rwth-aachen.de](mailto:aumeier@isa.rwth-aachen.de)