

UFZ-Bericht 07/2012

Numerische Simulation geomechanischer Prozesse bei der Verpressung von CO₂

Uwe-Jens Görke, Olaf Kolditz, Chan-Hee Park, Joshua Taron, Wenqing Wang,
Norihiro Watanabe, Björn Zehner

ZE:

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ,
Department Umweltinformatik

Förderkennzeichen:

03G0686D

Vorhabenbezeichnung:

Verbundprojekt UR II – CO₂-MoPa: Modellierung und Parametrisierung von CO₂-Speicherung in tiefen, salinen Speichergesteinen für Dimensionierungs- und Risikoanalysen

Vorhaben: Numerische Simulation geomechanischer Prozesse bei der Verpressung von CO₂ – Sonderprogramm GEOTECHNOLOGIEN

Laufzeit des Vorhabens:

01.04.2008 bis 31.03.2011; kostenneutral verlängert bis 31.12.2011

Berichtszeitraum:

01.04.2008 bis 31.12.2011

Schlussbericht

zum Vorhaben

Numerische Simulation geomechanischer Prozesse bei der Verpressung von CO₂

im F&E-Verbundprojekt

CO₂-MoPa

(Modellierung und Parametrisierung von CO₂-Speicherung in tiefen, salinen Speichergesteinen für Dimensionierungs- und Risikoanalysen)

Leipzig, Juni 2012

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung - UFZ

Projektleitung:

Prof. Dr. Olaf Kolditz

Beteiligte Wissenschaftler:

Dr. Uwe-Jens Görke
Prof. Dr. Olaf Kolditz
Dr. Chan-Hee Park
Dr. Joshua Taron
Dr. Wenqing Wang
Dr. Norihiro Watanabe
Dr. Björn Zehner

Redaktion:

Dr. Uwe-Jens Görke, Prof. Dr. Olaf Kolditz

Kontaktadresse:

Prof. Dr. Olaf Kolditz
Leiter Department Umweltinformatik
Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ
Permoserstraße 15
04318 Leipzig
Tel.: +49 (0)341 235 1250
Fax: +49 (0)341 235 1939
E-Mail: olaf.kolditz@ufz.de
URL: <http://www.ufz.de>



GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Die Verantwortung für den Inhalt
dieser Veröffentlichung liegt bei
den Autoren.

Inhaltsverzeichnis

1	EINFÜHRUNG UND PROJEKTÜBERSICHT	4
1.1	Aufgabenstellung	4
1.2	Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens.....	5
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens	7
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand	8
1.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	11
2	EINGEHENDE DARSTELLUNG DES PROJEKTS	16
2.1	Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse.....	16
2.2	Nutzen, Verwertung und Schutzrechtsanmeldungen	58
2.3	Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	59
2.4	Literatur	60

1 Einführung und Projektübersicht

Neben anderen Konzepten zählt das Verfahren des Abscheidens, Transports und der geologischen Speicherung von CO₂ (Carbon dioxide Capture and Storage – CCS) zu den weltweit diskutierten Optionen, im Sinne einer Übergangstechnologie zur Verringerung des Eintrags schädlicher Treibhausgase in die Atmosphäre beizutragen. Das Verfahren ist nicht nur für die Energiewirtschaft mit ihrem hohen Anteil fossiler Energieträger von Interesse, sondern auch für andere CO₂-intensive Wirtschaftszweige, wie beispielsweise der Zementindustrie. Im Jahr 2005 veröffentlichte der Zwischenstaatliche Klimawandelausschuss (Intergovernmental Panel on Climate Change – IPCC) einen Sonderbericht, in dem Stand, Perspektiven und Wissenslücken von Verfahren der geologischen Langzeitspeicherung von CO₂ aufgezeigt werden (IPCC, 2005). Der Modellierung und Simulation von Injektion und Ausbreitung des CO₂ im geologischen Untergrund kommt dabei eine entscheidende Bedeutung für das Verständnis der dabei auf unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse sowie für die Beurteilung von Effizienz und Sicherheit der ausgewählten Speicher zu. Von den potenziell möglichen geologischen Speicherformationen stehen in Deutschland tiefe, saline Grundwassersysteme sowie (nahezu) ausgebeutete Erdgaslagerstätten mit zweckmäßig nutzbaren Kapazitäten zur Verfügung.

Die Arbeiten des hier präsentierten Berichts wurden im Teilprojekt M1b „Numerische Simulation geomechanischer Prozesse bei der Verpressung von CO₂“ des Forschungs- und Entwicklungsvorhabens (F&E-Vorhaben) CO₂-MoPa ausgeführt. Sie wurden unter dem Förderkennzeichen 03G0686D vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Zeitraum vom 01.04.2008 bis 31.12.2011 gefördert und vom Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ, Department Umweltinformatik realisiert. Integrierende Hauptaufgabe des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa war die Analyse, Bewertung und Quantifizierung von Speichermechanismen bei der Verpressung von CO₂ in tiefe, saline Grundwasserformationen (Aquifere). Am Beispiel virtueller Standorte sollten Prozeduren für Dimensionierungs- und Risikoanalysen entwickelt werden, die wesentlich auf experimentell untersetzten Modellierungsansätzen beruhen und Hinweise auf die optimale Gestaltung von Erkundungs-, Nutzungs- und Monitoringstrategien für potenzielle CO₂-Reservoirs beinhalten.

1.1 Aufgabenstellung

Zielsetzung des hier dargelegten Projekts war die numerische Simulation der geomechanischen Prozesse, die bei der Injektion von superkritischem CO₂ in tiefe, saline Formationen auftreten. Motivation für diese Analysen sind die beständige Entwicklung kontinuierlicher sowie das potenzielle Auslösen spontaner Deformationsprozesse im Wirtsgestein und deren zeitliche Evolution. Dabei sind starke Wechselwirkungen zu hydrogeologischen Charakteristika (Porosität, Permeabilität, Kapillardruckänderungen)

bei zusätzlicher Beeinflussung durch Temperaturvariationen zu berücksichtigen. Als Voraussetzung für eine realitätsnahe Simulation der interessierenden Vorgänge wurde die Entwicklung gekoppelter thermo-hydro-mechanischer (THM) Modelle zur Erfassung der thermischen, hydrogeologischen und mechanischen Prozesse sowie deren Interaktionen identifiziert. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stand die Entwicklung von spezifischen, gekoppelten Modellen sowie deren Integration in Simulatoren, vorrangig in das wissenschaftliche open-source Softwareprojekt OpenGeoSys (OGS). Bezüglich der numerischen Kopplung der unterschiedlichen physikalischen Prozesse sollten sowohl partitionierte als auch monolithische Schemata realisiert und getestet werden. Neben einer umfangreichen Modell- und Softwarevalidierung mit Benchmarks waren Szenariensimulationen mit Fokussierung auf das Nah- und das Fernfeld vorgesehen. Die Arbeiten sollten gleichzeitig der Vorbereitung der mittelfristigen Kopplung zu geochemischen Vorgängen (z.B. reaktiver Transport) dienen, die Forschungsgegenstand weiterer Teilprojekten des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa waren.

Im Kontext des Gesamtvorhabens sollte mit der gemeinsamen Entwicklung numerischer Modelle sowie der Erhebung von Datengrundlagen im Verbundprojekt die vollständige, abgestimmte und konsistente Beschreibung der relevanten Vorgänge im geologischen Untergrund erreicht werden. Damit werden ein umfassendes konzeptionelles Verständnis einzelner Speichermechanismen sowie quantifizierbare Vorhersagen des Verhaltens von CO₂ im Untergrund ermöglicht, die für Planung, langfristige Bewertung und Risikoanalyse von Technologien zur geologischen CO₂-Speicherung erforderlich sind. Mit dem oben erwähnten Nahfeldbereich ist dabei der Teil eines Reservoirs definiert, der sich in unmittelbarer Umgebung der Injektionsbohrung befindet, das Fernfeld bezieht die Formationsränder mit ein. Besonders im Nahfeld sind durch die CO₂-Injektion substantielle Änderungen von Druck, Temperatur, Gesteinsspannungen und chemischen Konzentrationen zu erwarten. Die Teilprozesse wirken über signifikante Kopplungsmechanismen interagierend miteinander. Im Rahmen der Fokussierung auf geomechanische Prozesse war beabsichtigt, diese Kopplungsmechanismen (z.B. Poro-Perm-Effekte im Zusammenwirken hydrogeologischer und geomechanischer Vorgänge) zu quantifizieren, was auch aktuell mit der kommerziellen Standardsoftware nicht oder nur über die ineffiziente Kopplung unterschiedlicher spezialisierter Simulatoren mittels Austausch von Dateien möglich ist. Ein wesentliches Bestreben dieser Untersuchungen war die projektübergreifende Entwicklung von thermo-hydro-mechanisch-chemisch (THM/C) gekoppelten Softwarekomponenten für Simulationen im Bereich der CCS-Technologie in Verbindung mit der Nutzung von Höchstleistungsrechentechnik.

1.2 Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens

Das Department Umweltinformatik wurde im Jahr 2007 am UFZ in Leipzig eingerichtet. Die Departmentleitung wird in gemeinsamer Berufung auf die Professur für Angewandte Umweltsystemanalyse an der Technischen Universität Dresden durch Prof. O. Kolditz

ausgeübt. Derzeit umfasst das Forschungsprofil des Departments für Umweltinformatik vier Schwerpunkte:

- In der Energie- und Umweltforschung stehen Fragestellungen aus verschiedenen geotechnischen Bereichen (Geothermie, CO₂-Speicherung, untertägige Abfalldeponierung) und der Energiespeicherung im Vordergrund, die durch die Modellierung und numerische Simulation von gekoppelten THM/C Prozessen in porösen Medien beschrieben werden. Neben der Modell- und Programmentwicklung sind umfangreiches Benchmarking und realistische Standortstudien Bestandteil der Untersuchungen.
- Die Hydrosystemanalyse umfasst die Grundwassermodellierung und die Betrachtung gekoppelter Oberflächen- und Grundwassersysteme.
- Im Bereich Wissenschaftliches Rechnen steht die Entwicklung effizienter numerischer Verfahren für gekoppelte Mehrfeldprobleme sowie Mehrskalensysteme im Mittelpunkt der Forschungsarbeiten. Ein besonderer Schwerpunkt ist hierbei das Höchstleistungsrechnen.
- Für die effektive und anschauliche Darstellung sowie Diskussion von Modellen, Messdaten und Simulationsergebnissen entwickelt das Department Methoden der Wissenschaftlichen 3D-Visualisierung.

Auf dem Gebiet der CO₂-Speicherung als wesentlicher Bestandteil von CCS-Prozessen war das Department neben dem F&E-Vorhaben CO₂-MoPa in die Untersuchungen des vom BMBF geförderten Projektverbundes CLEAN eingebunden und tritt aktuell als Projektpartner in den BMBF-Vorhaben CO₂MAN und CO₂BENCH (als Bestandteil des PROTECT-Verbundes) auf. In diesem Zusammenhang werden differenzierte Aufgabenstellungen aus dem Bereich der Simulation gekoppelter THM/C Vorgänge im geologischen Untergrund bearbeitet. Der dabei entwickelte verallgemeinerte Modellansatz gestattet die Erfassung unterschiedlicher Zeit- und Längenskalen sowie die Modellierung von Prozessen in unterschiedlichen Formationstypen (tiefe, saline Grundwassersysteme – Mehrphasenfluss, Erdgaslagerstätten – nichtisothermer Mehrkomponenten-Gasfluss in deformierbaren porösen Medien).

Für die Methoden- und Modellentwicklung verfügt das Department Umweltinformatik des UFZ über Expertisen seiner Mitarbeiter in den Bereichen Angewandte Mathematik, Kontinuumsmechanik, Thermodynamik und Materialtheorie. Das UFZ ist Mitglied im internationalen OpenGeoSys-Konsortium (www.opengeosys.net) zur Modellierung von gekoppelten THM/C-Prozessen in porösen Medien und koordiniert die Entwicklung dieses wissenschaftlichen open-source Softwareprojekts. Dabei kann das Department umfangreiche Erfahrungen auf dem Gebiet der Angewandten Informatik vorweisen (Datenintegration, Visualisierung, Höchstleistungsrechnen und Software-Engineering).

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Analog zu den Forschungspartnern im F&E-Verbund CO₂-MoPa wurden für das hier dargelegte Projekt in der Antragsphase Kosten-, Zeit- und Arbeitspläne erstellt, die während der Projektlaufzeit in Abstimmung mit Beirat, Projektkoordination, relevanten Verbundpartnern aus Forschung und Industrie sowie dem Projektträger an die jeweils aktuelle Situation angepasst wurden. Dabei kann festgestellt werden, dass die Arbeiten im Projekt insgesamt weitestgehend planmäßig verliefen. Ungeachtet der nachfolgend erläuterten Anpassungen an die ursprüngliche Projektplanung konnten die Vorhabensziele uneingeschränkt erreicht werden.

Das Bewilligungsschreiben für das hier dargelegte Teilprojekt des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa ging verzögert etwa zwei Wochen nach dem geplanten Projektbeginn am UFZ ein. Die anschließende Stellenausschreibung und Auswahl geeigneter Kandidaten bewirkte somit verfahrensbedingt (Einhaltung gesetzlicher Fristen) Verzögerungen beim Mittelabfluss in der ersten Phase der Projektbearbeitung. Hinzu kam die schwierige Situation, qualifiziertes Personal aus dem Bereich der Ingenieurwissenschaften mit den notwendigen fachspezifischen und informationstechnischen Kenntnissen zu gewinnen. Aus diesem Grund wurde die ursprünglich beantragte PostDoc-Stelle in zwei Doktorandenstellen aufgeteilt, von denen die erste drei Monate nach dem geplanten Projektbeginn besetzt werden konnte. Die zeitnahe Einstellung eines zweiten Doktoranden scheiterte zunächst an der späten Absage eines potenziellen Kandidaten, so dass die zweite Stelle erst 16 Monate nach offiziellem Projektstart besetzt werden konnte.

Aufgrund der personellen Situation im Teilprojekt erfolgte in Abstimmung mit dem Projektträger die Änderung der Kosten-, Zeit- und Arbeitspläne in der Form, dass eine kostenneutrale Verlängerung der Projektlaufzeit um ein halbes Jahr, bis zum 31.12.2011, vereinbart wurde. Die anfänglichen Rückstände im Bearbeitungsprozess konnten durch teilweisen Einsatz von haushaltfinanziertem Personal über die gesamte Projektlaufzeit betrachtet vollständig ausgeglichen werden. Diese Arbeiten betrafen u.a. Vorbereitungen zur numerischen Realisierung unterschiedlicher Ansätze der Simulation von Mehrphasenflüssen in porösen Medien, eine Studie zu Materialmodellen der Felsmechanik sowie Untersuchungen zu algorithmischen Kopplungsmechanismen hydrogeologischer und geomechanischer Prozesse inklusive deren Integration in das wissenschaftliche open-source Softwareprojekt OGS.

Den wesentlichen Teil der hier dargelegten Projektarbeiten nahmen Konzept- und Modellentwicklung, numerische Implementierung sowie Modell- und Softwarevalidierung durch Benchmarking ein, die im ursprünglich beantragten Rahmen erfolgten. In enger Abstimmung mit den anderen Verbundpartnern wurde zudem ein Anwendungsbeispiel definiert, an dem in (virtuellen) Szenarienstudien die Ausbreitung des injizierten CO₂ im Untergrund sowie insbesondere die Einflüsse auf die Geomechanik des untersuchten Gebiets analysiert werden konnten. Im erwähnten Beispiel wurde eine reale geologische

Struktur betrachtet, die mit gemessenen sowie aus der Literatur entnommenen Materialkennwerten sowie hypothetischen Prozessdaten parametrisiert wurde. Die Simulationsergebnisse wurden im Rahmen eines Codevergleichs diskutiert. In der letzten Projektphase wurden aus den Resultaten der durchgeführten Arbeiten Wissens- und Erkenntnislücken definiert und konzeptionelle Vorschläge für deren Bearbeitung in einer beabsichtigten, jedoch nicht realisierten zweiten Phase des F&E-Verbundes CO₂-MoPa formuliert (z.B. numerische Behandlung von Brüchen und Verwerfungen in den betrachteten geologischen Strukturen, verbesserte Modellierung des beobachteten Materialverhaltens der Gesteinsmatrix, inverse Modellierung zur Modellkalibrierung).

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Der IPCC-Sonderbericht zu CCS (IPCC, 2005) betont, dass numerische Simulationen einen entscheidenden Anteil bei der Konzipierung und Bewirtschaftung von CO₂-Speichersystemen haben werden und dass es insbesondere Forschungs- und Entwicklungsbedarf bei der Untersuchung von Prozesskopplungen gibt (Fischedick et al., 2007).

Mathematische und numerische Modelle von Transport- und Deformationsprozessen in porösen Medien werden seit mehreren Dekaden entwickelt und für die Untersuchung verschiedener Problemstellungen genutzt (z.B. Grundwasserströmung, Konsolidierungsprobleme in Böden). Im Gegensatz dazu war die Modellierung von Vorgängen bei der geologischen CO₂-Speicherung zu Projektbeginn eher noch als in Anfängen stehend zu sehen. Die Komplexität der dabei ablaufenden Prozesse verlangt das Einbeziehen unterschiedlicher Forschungsgebiete in die Untersuchungen (z.B. Hydrologie, Geotechnologie, numerische Mechanik und Mathematik). Während sich vor etwa zehn Jahren nur wenige Publikationen mit diesem Thema beschäftigten (García, 2003; Lindeberg, 1997; Oldenburg et al., 2001; Pruess und García, 2002; van der Meer, 1996), erschien etwa zur Zeit des Projektbeginns eine wachsende Anzahl numerischer (Basburg et al., 2007; Doughty und Pruess, 2004; Ennis-King und Paterson, 2005; Flett et al., 2007; Ghanbari et al., 2006; Imaseki et al., 2005; Le Gallo et al., 2006; Pruess et al., 2003), semianalytischer (Nordbotten und Celia, 2006; Nordbotten et al., 2005b; Saripalli und McGrail, 2002) und analytischer (Nordbotten et al., 2004, 2005a; Riaz et al., 2006) Studien. Im Rahmen der numerischen Simulationen wurden die Fähigkeiten geschaffen, komplexere Probleme zu betrachten (z.B. Kopplung verschiedener Prozesse, Mehrskalenaspekte, Berücksichtigung von Heterogenitäten und unterschiedlicher geologischer Bedingungen), dennoch blieb die Entwicklung effizienter und stabiler numerischer Algorithmen eine große Herausforderung.

Beim Studium der Fachliteratur zur Analyse des aktuellen Kenntnisstandes bei der Modellierung von Prozessen der geologischen CO₂-Speicherung fiel auf, dass mehrere Arbeiten auf die Simulation von hydromechanischen (HM) Prozessen einschließlich der Versagensanalyse fokussiert waren (Rutqvist et al., 2008b; Streit und Hillis, 2004). Im Sinne reservoirbezogener CO₂-HM-Simulationen wurden hypothetische Fälle untersucht

(Rutqvist und Tsang, 2002 – tiefes, salines Grundwassersystem), aber auch bereits realistische Feldstudien publiziert, wie etwa für die Projekte Sleipner (Norwegen, offshore-Speicherung in einem tiefen, salinen Grundwassersystem – Chadwick et al., 2004), Weyburn (Kanada, onshore Enhanced Oil Recovery Projekt – White et al., 2004), In Salah (Algerien, nahezu ausgebeutetes Gasreservoir – Ringrose et al., 2009). Erste Ansätze für numerische Simulationen zur Konzipierung und Bewirtschaftung von CO₂-Speichern wurden zudem im Zusammenhang mit der Bearbeitung von Demonstrationsprojekten entwickelt (z.B. Ennis-King et al., 2003; Lindeberg und Bergmo, 2003; White et al., 2005).

Teilaspekte von vollständig gekoppelten THM/C-Modellen bei der CO₂-Problematik, wie z.B. Mehrphasen- und hydromechanische Effekte, wurden am Lawrence Berkeley National Laboratory von Pruess (2007), Pruess et al. (2001), Rutqvist und Stephansson (2003) sowie Rutqvist und Tsang (2002, 2005) untersucht. Li et al. (2006) zeigten in Modellstudien, dass THM-Prozesse für die Bewertung der Stabilität von Störungszonen wichtig sind und seismische Aktivitäten auslösen können. Sie untersuchten das Zusammenwirken folgender Prozesse: Temperaturänderungen, initialer Spannungszustand, Injektionsdruck und Auftriebskräfte. McPherson und Lichtner (2001) betrachten modellhaft die CO₂-Ausbreitung in Klüftzonen unter Berücksichtigung von Mehrphasenflüssen (CO₂, salzhaltiges Tiefengrundwasser). Obwohl sich bereits zu Projektbeginn international signifikante Fortschritte bei der Modellierung der geologischen CO₂-Speicherung abzeichneten, gab es zu diesem Zeitpunkt sehr wenige Anwendungen über den gesamten relevanten Zeitraum, über den eine potenzielle CO₂-Speicherformation bewertet werden muss. Zudem war das Maß unklar, in welchem eine volle Kopplung aller physikalisch-chemischen Prozesse erforderlich ist, die bei der geologischen CO₂-Speicherung zu erwarten sind und welche Genauigkeit bei der konstitutiven Modellierung erforderlich ist, um eine ausreichende Bewertung der Speicherformationen durchführen zu können. Diese Fragen standen u.a. im Mittelpunkt der Untersuchungen der Modellierergruppen im F&E-Vorhaben CO₂-MoPa.

Korrespondierend mit der beschriebenen Modellentwicklung waren auch bereits zu Projektbeginn kommerzielle und wissenschaftliche numerische Simulatoren für die Analyse von Mehrphasenflüssen in porösen Medien, geomechanischer Deformationen einschließlich Bruch- und Schädigungsprozesse, unterschiedlicher nichtisothermer Effekte und geochemischer Reaktionen verfügbar. Deren Möglichkeiten einer umfassenden Betrachtung unterschiedlicher Phänomene sind bis heute als eingeschränkt einzuschätzen, da die meisten dieser Computerprogramme auf eine Untermenge dieser gekoppelten Prozesse fokussiert sind. Numerische Studien zur geologischen CO₂-Speicherung wurden und werden vorrangig unter Nutzung kommerzieller Simulatoren durchgeführt, die für den Bereich der Erdöl- und Erdgasförderung oder der geothermischen Energieproduktion entwickelt wurden (Lichtner, 2001; Nitao, 1996; Pruess, 2004; Schlumberger, 2007; Steefel, 2001; White und Oostrom, 1997). Diese Softwareprodukte sind hoch

spezialisiert, um den Anforderungen an die Reservoirsimulation zu genügen (Mehrphasen-Mehrkomponenten-Fluss und Wärmetransport; z.B. Eclipse, TOUGH2). Alle oben genannten konzeptionellen und numerischen Weiterentwicklungen für die realistische Modellierung der geologischen CO₂-Speicherung zu integrieren, ist für existierende Codes außerordentlich aufwändig, in vielen Fällen sogar unrealistisch. Selbst die Kopplung unterschiedlicher spezialisierter Simulatoren ist ineffizient (vielfacher Austausch von Dateien für nichtlineare, iterativ zu lösende Probleme) und in Fällen, wo diese Simulatoren unterschiedliche Berechnungsgitter verwenden, durch die notwendige Dateninterpolation fehleranfällig. Aus diesem Grund ist die Entwicklung integraler Softwareprojekte, wie im F&E-Vorhaben CO₂-MoPa angelegt, mit wesentlichen Vorteilen bezüglich Effektivität, Flexibilität und Genauigkeit verbunden.

Aufgrund der Komplexität der Modellierung gekoppelter Prozesse unterstreicht der bereits mehrfach erwähnte IPCC-Bericht die Notwendigkeit der Programmvalidierung und des Programmvergleichs, um die Verlässlichkeit der numerischen Simulationen zu garantieren. Pruess et al. (2004) führten anhand verschiedener Szenariensimulationen einen Benchmark-Vergleich von Softwareprodukten zur CO₂-Speicherung durch. Der Codevergleich ist als Methode im THM/C-Bereich etabliert, nach wie vor in der Literatur jedoch zumeist auf hydraulische Aspekte beschränkt (Class et al., 2009; Pruess et al., 2004). Als beispielgebend können hier die umfangreichen Vergleichsstudien gelten, die auf dem Gebiet der Endlager-Modelle veröffentlicht wurden (Birkholzer et al., 2006; Rutqvist et al., 2008a). Ennis-King et al. (2003) demonstrierten den Nutzen von Szenariensimulationen für die Identifikation der sensitiven hydraulischen Parameter. Existierende Standard-Simulationswerkzeuge, wie z.B. PETREL/Eclipse oder FLAC, sollen zu Vergleichszwecken für einzelne Prozesse herangezogen werden.

Die für Simulationen im F&E-Verbund CO₂-MoPa von Projektpartnern der CAU Kiel ausgewählte Standard-Software (PETREL – Geomodel; Eclipse 100/300 – Lagerstätten-simulator) bzw. das von der Universität Stuttgart entwickelte Programmsystem DuMuX werden zu Vergleichszwecken mit den zu erarbeitenden THM/C-Prototypen für einzelne Prozesse angewandt, die Ergebnisse analysiert und mit den verbesserten Aussagen in der Modellsimulation berücksichtigt. Die Servicefirmen Schlumberger und Partner haben die Leistungsfähigkeit ihrer Produkte (Eclipse) hinsichtlich der CO₂-Modellierung spezifisch erweitert. Mit Eclipse/CO₂ Store (Hurter und Berge, 2007; Orr et al., 2007) steht ein Modell zur Verfügung, das sowohl das Phasenverhalten CO₂/Schichtwasser, die Einlösung des CO₂ in Schichtwasser (salinare Lösung) sowie Diffusionseffekte im Schichtwasser und poren-druckabhängige Permeabilitätsänderungen darstellen kann. Im Hinblick auf die Problemstellungen bezüglich Modellierung und Simulation der CO₂-Injektion in den betrachteten Speichertyp - tiefe, saline Aquifere – sind zwei Einschränkungen bei der Benutzung des ausgewählten kommerziellen Simulators zu beachten: Nichtisotherme Effekte und eine direkte Kopplung mit geomechanischen Simulationsmodellen werden derzeit nicht berücksichtigt.

Fortschritte im Bereich der Modellierung und Simulation von Prozessen bei der geologischen Speicherung von CO₂, die aus der Literatur im Verlauf der Projektbearbeitung bekannt wurden, sind im Unterabschnitt 3.3 dieses Berichts dargestellt und repräsentativ mit Referenzen belegt. Für die Literaturrecherchen wurden die Internetseiten relevanter Fachzeitschriften sowie das Web of Knowledge genutzt. Zudem wurde der folgende verbundinterne Informations- und Dokumentationsdienste in Anspruch genommen:

- CO₂-MoPa-Datenmanagement-System (<http://www.c02-mopa.de>)

Da es sich bei den konkreten Projektarbeiten im Wesentlichen um die Entwicklung von Konzepten, Modellen, Algorithmen und Softwarekomponenten handelte, wurden keine bekannten Konstruktionen, technologische Verfahren oder Schutzrechte für die Durchführung dieser Arbeiten benutzt.

1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das übergeordnete Ziel des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa bestand in der Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Modellierungsinstrumentariums sowie einer Datenbasis, die strukturelle, geometrische, hydrogeologische, gechemische und geomechanische Aspekte einer virtuellen, geologischen CO₂-Speicherung erfassen und somit die Dimensionierung und Risikoanalyse von CO₂-Speichervorhaben in tiefen, salinen Formationen unterstützen. Abb. 1 verdeutlicht die Struktur und Zusammenarbeit im Verbund.

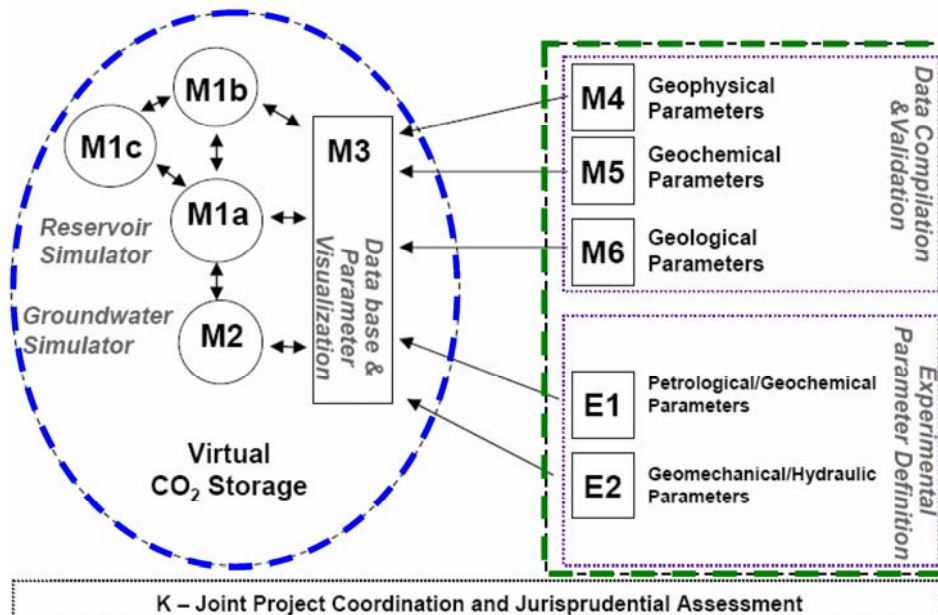


Abbildung 1: Teilprojektstruktur des F&E-Verbundes CO₂-MoPa mit wesentlichen inhaltlichen Verknüpfungen.

Für die Realisierung eines integrierten Modellierungs- und Softwareansatzes im Rahmen des F&E-Vorhabens CO2-MoPa war die intensive Zusammenarbeit aller Modellierergruppen innerhalb des Verbundes unerlässlich. Prozessspezifische Fragestellungen wurden dabei in erster Linie bilateral bearbeitet. So kooperierten beispielsweise die Bearbeiter des hier dargelegten Projekts vom UFZ bei der Modellentwicklung und –integration eng mit der CAU Kiel (Prof. S. Bauer; numerisches Konzept, Geochemie, Softwareengineering, Benchmarking, Anwendungssimulationen – Teilprojekt M1a) und der Universität Stuttgart (Prof. H. Class; hydro-mechanische Systemmodellierung, Kopplungsmechanismen und –software, Benchmarking mit Codevergleichen – Teilprojekt M1c). Darüber hinaus koordinierte das UFZ eine Modelliererinitiative, die alle Partner der Modellentwicklung des CO2-MoPa-Verbundes sowie externe Experten ansprach und während der Projektlaufzeit drei Workshops in Leipzig durchführte. Zu diesen Veranstaltungen präsentierten die einzelnen Gruppen den Stand ihrer Arbeiten, und es wurden gezielt Synergien in der Modell- und Softwareentwicklung herausgearbeitet:

- 1. Modellierer-Workshop: 30.01.2009 (26 Teilnehmer, 17 Vorträge)
- 2. Modellierer-Workshop: 19.03.2010 (22 Teilnehmer, 11 Vorträge)
- 3. Modellierer-Workshop: 29.09.2010 (27 Teilnehmer, 13 Vorträge)

Ein weiteres Treffen mit wesentlicher Beteiligung des UFZ fand am 22.07.2009 in Stuttgart statt. Dort ging es um die Diskussion und Vereinbarung konkreter Arbeitsschritte für die Simulation von Mehrphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien, die Definition von Benchmark-Tests sowie die Vereinbarung von Vergleichsrechnungen.

Die Zuverlässigkeit numerischer Simulationsergebnisse hängt signifikant von der adäquaten Definition der für den untersuchten Anwendungsfall relevanten konstitutiven Beziehungen (inklusive deren Kalibrierung mit Messergebnissen – Parameteridentifikation) und Prozessbedingungen ab. Ein wesentliches Ergebnis der Zusammenarbeit von numerisch und experimentell arbeitenden Gruppen im CO2-MoPa-Verbund ist die gemeinsame Auswertung und Diskussion der an der CAU Kiel (Prof. V. Feeser – Teilprojekt E2) gewonnenen Daten geomechanischer Laborversuche an Sandsteinproben. Dabei konnte festgestellt werden, dass die üblicherweise verwendeten Materialmodelle der linearen Elastizität für die Beschreibung des Verhaltens der Feststoffmatrix poröser Sedimentgesteine keine hinreichende Erfassung der in zyklischen, einachsigen Druckversuchen sowie in Triaxialversuchen beobachteten Phänomene wie Hysteresen im Spannungs-Dehnungs-Verhalten bzw. Spannungsrelaxation gestatten (siehe Abb. 2). Für eine systematische Untersuchung dieser, von der Belastungsgeschwindigkeit abhängiger Effekte, die dem typischen viskoelastischen Materialverhalten von Festkörpern wie Elastomere oder auch (weiche) biologische Gewebe prinzipiell ähneln, wird ein separat gefördertes Forschungsprojekt unter Beteiligung von Partnern aus der experimentellen und der Kontinuumsmechanik (thermodynamisch konsistente Materialtheorie) sowie der

numerischen Simulation angeregt. Dabei sollte gleichzeitig die Relevanz der Einbeziehung der beschriebenen inelastischen Effekte auf Simulationsergebnisse analysiert werden. Zur Diskussion des beobachteten Materialverhaltens von Sandstein und möglicher konstitutiver Ansätze arbeiten die beteiligten Gruppen der CAU Kiel und des UFZ an einer gemeinsamen wissenschaftlichen Veröffentlichung unter dem Titel „An investigation of nonlinear rate-dependent deformation of Obernkirchner sandstone“, die bei der Zeitschrift „Mechanics of Materials“ eingereicht werden soll.

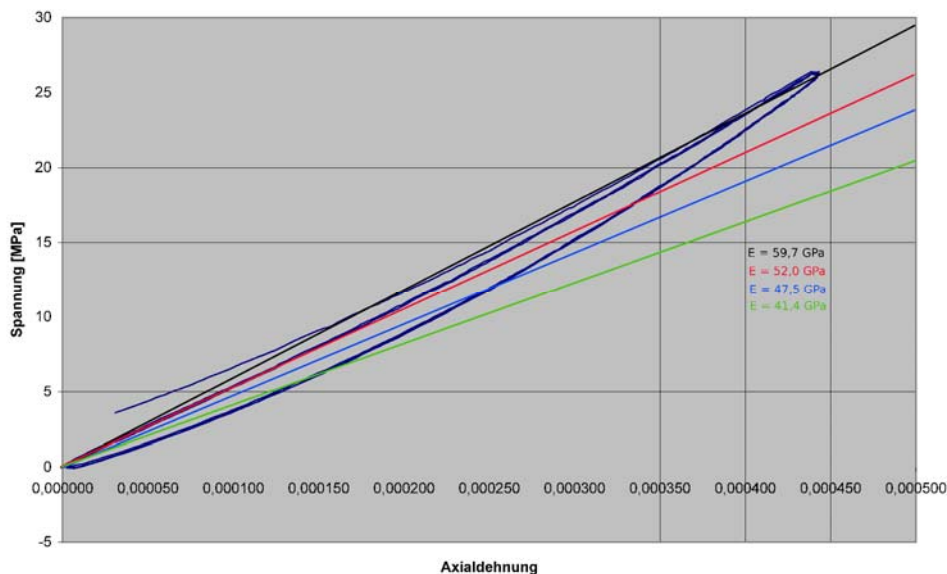


Abbildung 2: Streuung des Elastizitätsmoduls für das Materialmodell zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens der festen Phase der betrachteten porösen Medien (hier: Sandstein) basierend auf Experimenten im Teilprojekt E2 des F&E-Verbundes CO2-MoPa.

Bei der Konzipierung und Kalibrierung konstitutiver Modellbestandteile (Zustandsgleichungen für fluide Phasen, Materialgleichungen für die feste Phase der betrachteten porösen Medien) arbeitete das hier dargelegte Projekt zudem eng mit dem Teilprojekt E1 (CAU Kiel; Prof. A. Holzheid) zusammen. Für Anwendungssimulationen der potentiellen Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund konnte beispielsweise bei der Erarbeitung des numerischen Simulationsgitters auf das wesentlich von der CAU Kiel (Prof. S. Bauer – Teilprojekt M1a) parametrisierte geologische Modell zurückgegriffen werden, welches vom Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein (Dr. T. Liebsch-Dörschner - Teilprojekt M6) zur Verfügung gestellt wurde. Gemeinsam mit Projektpartnern von der CAU Kiel (Prof. H.-J. Götze – Teilprojekt M3) wurden Instrumentarien zur wissenschaftlichen 3D-Visualisierung von geologischen und Simulationsmodellen, geophysikalischen Erkundungs- und Monitoringdaten sowie numerischen Simulationsergebnissen erarbeitet. Diese stehen für die Darstellung auf unterschiedlichen Visualisierungssystemen an der CAU Kiel und am UFZ in Leipzig

(vgl. Abb. 3) zur Verfügung und gestatten neben der wissenschaftlichen Analyse sowie Diskussion von Modellen und Projektergebnissen auch die Darstellung der untersuchten Systeme und Prozesse für eine anschauliche Diskussion mit der Öffentlichkeit.



Abbildung 3: Interaktive 3D-Visualisierung des Geologischen Modells von Schleswig-Holstein (Daten: LLUR-SH) im TESSIN VISLab des UFZ in Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt M3 (IfG/CAU) des F&E-Verbundes CO2-MoPa (Gocad-Modell: Thomsen, CAU; Visualisierung: Zehner, UFZ).

Die numerischen Projektergebnisse, die auf ein zu erwartendes Verhalten des injizierten CO₂ im geologischen Untergrund hinweisen, sind signifikant für das Prozessverständnis und geben darüber hinaus wesentliche Hinweise für die Konzipierung geophysikalischer Monitoringverfahren (z.B. Festlegung relevanter geologischer Horizonte, Hinweise auf zu erwartende CO₂-Konzentrationen für die Festlegung der Messgenauigkeit). In diesem Kontext arbeitete das hier dargelegte Projekt eng mit der Arbeitsgruppe Seismik und geoelektrische Analysen der CAU Kiel zusammen (Prof. W. Rabbel – Teilprojekt M4).

Im Laufe der Projektarbeit wurden durch unterschiedliche Teilprojekte des F&E-Verbundes CO2-MoPa spezifische Modellkomponenten in die vom UFZ als Hauptentwickler koordinierte wissenschaftliche Software OGS integriert bzw. Schnittstellen zu anderen kommerziellen (Eclipse, Schlumberger) sowie wissenschaftlichen (DuMuX, Universität Stuttgart) Simulationsprogrammen gestaltet (CAU Kiel, Prof. S. Bauer; Universität Stuttgart, Prof. H. Class). Die genannten Projektpartner entwickelten ebenso Benchmarks für die Validierung von Modellen sowie Software. Bezüglich konkreter Beispiele untersuchte das hier dargelegte Projekt folgende Problemstellungen gemeinsam mit Partnern aus dem F&E-Verbund CO2-MoPa:

- Analyse des Lösungsverhaltens eines semipartitionierten Finite-Element-Ansatzes für die Zweiphasen-Strömung in deformierbaren porösen Geomaterialien an einem einachsigen Beispiel,
- Untersuchung des Transport-, Deformations- und Schädigungsverhaltens im Nahfeldbereich an der Grenze einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht bei CO₂-Injektion,
- Untersuchung des Transport- und Deformationsverhaltens im erweiterten Nahfeldbereich einer fiktiven Injektionsbohrung während der Verpressung von CO₂ in eine potenzielle Speicherformation (CAU Kiel, Prof. S. Bauer; Universität Stuttgart, Prof. H. Class).

In Bauer et al. (2012) wird ein Überblick über Struktur, Aufgaben, Konzepte und Ergebnisse des F&E-Verbundes CO₂-MoPa gegeben.

Danksagung

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) sowie den beteiligten Industriepartnern EnBW Energie Baden-Württemberg AG, E.ON Energie AG, E.ON Gas Storage AG, RWE Dea AG, Vattenfall Europe Technology Research GmbH, Wintershall Holding AG und Stadtwerke Kiel AG für die finanzielle Unterstützung des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa, dem Sonderprogramm GEOTECHNOLOGIEN für die sehr gute Kooperation, den Projektpartnern für die effektive Zusammenarbeit und die erbrachten Leistungen sowie dem Projektträger Jülich, Außenstelle Rostock, für die herausragende Betreuung des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa.

2 Eingehende Darstellung des Projekts

2.1 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Zentrum des hier dargestellten Projekts stand die numerische Modellierung von gekoppelten hydrogeologischen und geomechanischen Prozessen im Nah- und Fernfeld der Injektionsbohrung einer (virtuellen) tiefen, salinen Grundwasserformation (Aquifer) während der frühen Phase (weniger als zehn Jahre) einer CO₂-Verpressung zu Speicherezwecken. Ergänzt wurden die Untersuchungen durch Einbeziehung des Einflusses von Temperaturänderungen (THM-Prozesse). Besonders im Nahfeldbereich werden während und nach der CO₂-Injektion in Abhängigkeit von den geologischen und Prozessbedingungen signifikante Änderungen von Lagerstättendruck, Temperatur, Gesteinsspannungen und Mischungskonzentrationen des Porenfluids erwartet (und teils beobachtet), die auf elementare Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen physikalischen und chemischen Prozessen schließen lassen. Es war beabsichtigt, einige dieser gekoppelten Prozesse (z.B. Poro-Perm-Effekte, mechanische Schädigungsaspekte) zu quantifizieren, die zum Zeitpunkt der Antragstellung mit kommerzieller Standardsimulationssoftware nicht oder nur unter spezifischen Bedingungen erfasst werden konnten. Zu diesem Zweck wurden in Zusammenarbeit mit anderen Teilprojekten des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa adäquate Komponenten für die wissenschaftliche open-source Softwareplattform OpenGeoSys (OGS) entwickelt und unter Berücksichtigung von Aspekten des Höchstleistungsrechnens realisiert.

In diesem Bericht werden die Modellierungskonzepte und –ansätze sowie exemplarische Ergebnisse von Benchmark- und Anwendungssimulationen unterschiedlicher Kopplungsszenarien komplexer physikalischer Prozesse mit Schwerpunkt auf

- isothermer Zweiphasenfluss in deformierbaren porösen Medien unter Berücksichtigung von Schädigungsaspekten der Gesteinsmatrix

dargestellt. Nichtisotherme Prozesse wurden in die Betrachtungen integriert, erwiesen sich jedoch unter den angenommenen Betriebsbedingungen als wenig relevant für den Verlauf der Strömungsprozesse und die Ausbildung von Deformationen in den untersuchten porösen Medien. Die hier vorgestellten fundamentalen Konzepte, Modelle und Algorithmen sind von übergeordneter Relevanz und lassen sich mit problemspezifischen Modifikationen auf unterschiedliche Aufgabenstellungen im Bereich der porösen Medien anwenden. Entsprechende Entwicklungsarbeiten wurden nicht nur im hier dargelegten Vorhaben sondern auch in anderen Projekten geleistet, die sich u.a. mit weiteren Anwendungen im Bereich der geologischen CO₂-Speicherung befassten (vgl. Görke et al., 2012b; Kühn et al., 2009, 2012).

Wegen der komplexen Geometrien und der Vielfalt differenter, miteinander interagierender Teilprozesse ist die Modellierung der Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund auf unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen eine rechen-

technische Herausforderung. Aus diesem Grund wird eine sukzessive Konzept- und Modellentwicklung mit dem Ziel einer umfassenden gekoppelten Simulation der relevanten physikalisch-chemischen Effekte vorgeschlagen, wobei zunächst die für die untersuchten Skalen wesentlichen Teilvorgänge integriert wurden. In diesem Zusammenhang wurden im Berichtszeitraum die folgenden Teilaufgabenstellungen für die numerische Analyse vollständig gekoppelter Probleme untersucht:

- konzeptionelle Auswahl der Bilanzgleichungen und konstitutiven Beziehungen für die Simulation der betrachteten THM-Prozesse,
- Entwicklung problemspezifischer Modelle und Algorithmen sowie deren Implementierung in OGS,
- Auswahl geeigneter Primärvariablen für die Betrachtung gemischter Finite-Element-Formulierungen sowie Analyse unterschiedlicher numerischer Kopplungsalgorithmen,
- Definition von prozess- und anwendungsspezifischen Benchmarks zur Validierung der Modelle und zur Qualitätskontrolle der Softwarekomponenten sowie
- Anwendungssimulationen und Szenarienstudien.

Zur Erarbeitung konzeptioneller Grundlagen, die Definition von Geometrien, Anfangs- und Randbedingungen sowie von Prozess- und konstitutiven Parametern arbeiteten die Autoren eng mit anderen Projekten des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa zusammen. Details sind im Unterabschnitt 2.5 dieses Berichts aufgeführt.

2.1.1 Modellierung gekoppelter thermo-hydro-mechanischer Prozesse bei der CO₂-Injektion in tiefe, saline Aquifere

Konzeptionelle Grundlage der im Projekt entwickelten Modelle zur Simulation von Transport- und Deformationsprozessen in porösen Medien stellt die Mischungstheorie ergänzt um das Konzept der Volumenanteile dar. Im Rahmen dieser erweiterten Mischungstheorie können alle kinematischen und physikalischen Größen auf der Makroebene in einem kontinuumsmechanischen Sinn als lokale statistische Mittelungen ihrer Werte auf der unterliegenden Mikroebene angesehen werden. Diese Vorstellung ist gleichbedeutend mit der Annahme, dass die Masseanteile aller Bestandteile eines Mehrphasenmediums gleichzeitig präsent und statistisch gleichförmig über das gesamte Kontrollvolumen verteilt sind. In diesem Sinn wird der reale poröse materielle Körper theoretisch durch ein Gesamtkontinuum ersetzt, das vollständig und gleichmäßig durch sich überlappende homogenisierte Partialkontinua ausgefüllt ist. Mit anderen Worten, alle Phasen und/oder Komponenten eines porösen Mediums werden im Rahmen der modifizierten Mischungstheorie als „verschmierte“ Ersatzkontinua mit reduzierter Massedichte dargestellt. Folglich können die Bewegungsvorgänge und die physikalischen Prozesse der einzelnen Bestandteile eines porösen Mediums sowie auch des Gesamtkontinuums mit anerkannten

phänomenologischen Methoden der Kontinuumsmechanik beschrieben werden. Zur Erfassung der Mikrostruktur eines porösen Mediums auf makroskopischer Ebene werden skalare Variablen wie die Volumenanteile (z.B. die Porosität als summarischer Volumenanteil aller fluiden Bestandteile des Gesamtkontinuums) oder die Sättigungen definiert.

Entsprechend den Annahmen über poröse Medien können geologische Formationen, die für die Aufnahme von CO₂ vorgesehen sind, als Mischung eines Feststoffgerüsts (Gesteinsmatrix) und eines Porenfluidanteils bestehend aus

- einer partikulären Flüssigkeit bzw. einem partikulären Gas (Einphasenfluss in porösen Medien) oder
- einem nicht mischbaren Gemenge von Flüssigkeiten und/oder Gasen (Mehrphasenfluss in porösen Medien) bzw.
- einem mischbaren Fluidgemenge verschiedener, teils miteinander reagierender Komponenten mit möglichen Phasenübergängen basierend auf Verdunstungs-, Kondensations- bzw. Ausfällungsvorgängen (Mehrphasen-Mehrkomponenten-Fluss in porösen Medien)

angesehen werden.

Die bestimmenden Feldgleichungen für die Modellierung von Transport- und Deformationsprozessen beim Mehrphasen-Mehrkomponenten-Fluss in deformierbaren porösen Medien werden auf der Basis der lokalen, partikulären Bilanzbeziehungen der Bestandteile eines porösen Mediums formuliert. Im Einzelnen handelt es sich dabei um die Masse- und Impulsbilanzen sowie, bei nichtisothermen Prozessen, die Energiebilanzen. Zusätzlich wird angenommen, dass die Bilanzbeziehungen sowohl der Bestandteile eines porösen Mediums als auch des Gesamtkontinuums analog zu den klassischen Beziehungen der Kontinuumsmechanik für Einphasenmaterialien formuliert werden können. Wechselwirkungsmechanismen zwischen den einzelnen Bestandteilen eines porösen Mediums werden mit Hilfe so genannter Austauschterme in den partikulären Bilanzbeziehungen beschrieben. Zur Definition der Bilanzbeziehungen des Gesamtkontinuums wird die Superposition der partikulären Relationen genutzt.

Entsprechend der konkreten Aufgabenstellung für die Betrachtung komplexer Vorgänge im geotechnischen Bereich werden die Bilanzbeziehungen unter Berücksichtigung spezifischer Annahmen in den erforderlichen Primärvariablen formuliert. Beispielsweise wird im isothermen Fall des Zweiphasenflusses in deformierbaren porösen Medien (CO₂ und salzhaltiges Tiefengrundwasser bei der geologischen CO₂-Speicherung) in der Regel der Masseaustausch zwischen den einzelnen Phasen vernachlässigt, zusätzlich werden alle Phasen als intrinsisch inkompressibel angesehen. Zu den erforderlichen Feldgleichungen gehören in diesem Fall die Massebilanzen der beiden fluiden Phasen (unter Berücksichtigung der Massebilanz der festen Phase) sowie die Impulsbilanz des Gesamtkontinuums. Die Verschiebungen der festen Phase („verschmierte“ Feststoffmatrix) des porösen

Mediums beschreiben die Deformationsprozesse als Primärvariable, Transportvorgänge der fluiden Phasen können durch Druck- und/oder Sättigungsgrößen charakterisiert werden. In den Satz an Feldgleichungen für nichtisotherme Prozesse in porösen Medien wird zudem die aus der Energiebilanz abgeleitete Wärmeleitungsgleichung für das Gesamtkontinuum integriert. Zu den oben genannten Primärvariablen wird in diesem Fall die Temperatur hinzugefügt. Für die Herleitung der Wärmeleitungsgleichung wird dabei hier, der üblichen Vorgehensweise für die betrachteten Anwendungen folgend, die Existenz lokaler thermischer Gleichgewichtszustände angenommen (einheitliche Temperatur aller beteiligten Phasen und Komponenten des porösen Mediums).

Während die aus den Bilanzbeziehungen abgeleiteten Feldgleichungen fundamentale physikalische, chemische und thermodynamische Eigenschaften der betrachteten Materie unabhängig von deren spezifischen Materialeigenschaften beschreiben, differiert die Reaktion eines physikalischen Körpers auf äußere Einflüsse in der Realität je nach dessen Beschaffenheit und konstitutiven Eigenschaften. Aus diesem Grund sind die grundlegenden Feldgleichungen um Materialgleichungen (konstitutive Beziehungen) zu ergänzen, die das materialspezifische Verhalten charakterisieren. Im mathematischen Sinn ist diese Feststellung äquivalent mit der Formulierung eines geschlossenen Gleichungssystems zur Modellierung physikalisch-chemischer Prozesse (übereinstimmende Anzahl von Gleichungen und Unbekannten), das aus Bilanz- und konstitutiven Beziehungen besteht. Im Kontext der betrachteten geotechnischen Problemstellung werden folgende konstitutive Beziehungen benötigt:

- Relationen für die Austauschterme in spezifischen Bilanzbeziehungen individueller Bestandteile des Gesamtkontinuums (beispielhaft sind Annahmen für die Impulsaustauschterme zwischen der festen und fluiden Phasen, mit deren Hilfe sich aus den Impulsbilanzen der fluiden Phasen die partikulären Darcyschen Gesetze zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen der festen und den unterschiedlichen fluiden Phasen ableiten lassen),
- Konstitutiv- und Zustandsgleichungen für Porenfluideigenschaften, wie Druck, Dichte, Viskosität, kritische Parameter, relative Permeabilität sowie Sättigung (z.B. Ansätze von Brooks-Corey oder van Genuchten für Beziehungen zwischen Kapillardruck sowie relativer Permeabilität und Sättigung),
- Beziehungen zwischen dem Tensor der Effektivspannungen und dem elastischen Anteil des Verzerrungstensors bezüglich der festen Phase des porösen Mediums (z.B. Hookesches Gesetz der linearen Elastizität) sowie gegebenenfalls Entwicklungsgleichungen für spezifische innere Variable bei inelastischem Materialverhalten der festen Phase (z.B. Fließregeln bei elastisch-plastischen Effekten),
- Entwicklungsgleichungen für Schädigungsvariablen im Fall zu erwartender Mikrorissbildung in der Gesteinsmatrix (im hier dargestellten Projekt wurden beispielsweise hydraulische und Schubversagenskriterien betrachtet),

- Relationen für die thermischen Parameter des Gesamtkontinuums ausgehend von den partikulären Werten für dessen Bestandteile sowie gegebenenfalls Gleichungen für die Temperaturabhängigkeit spezifischer Materialparameter.

In Übereinstimmung mit der Zielstellung des hier dargestellten Projekts wurden in einer ersten Bearbeitungsphase die relevanten Feld- und Konstitutivgleichungen für den Fall des isothermen Zweiphasenflusses in deformierbaren porösen Medien unter Berücksichtigung potenziellen Schädigungsverhaltens der Gesteinsmatrix entwickelt und in die wissenschaftliche open-source Softwareplattform OpenGeoSys implementiert (gekoppelte H²M-Simulation). Entsprechend der Ziel- und Aufgabenstellung wurden im weiteren Projektverlauf geeignete Feld- und Konstitutivgleichungen für den Fall des nichtisothermen Fluidflusses in deformierbaren porösen Medien entwickelt und in die OpenGeoSys implementiert (gekoppelte THM-Simulation). Zu Details der konzeptionellen Grundlagen der verwendeten erweiterten Mischungstheorie sowie den konkreten Feld- und Konstitutivgleichungen, die als Basis für die im Projekt durchgeführte Modellierung und Simulation gekoppelter thermo-hydro-mechanischer Probleme bei der Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund dienen, wird insbesondere auf die Arbeiten Görke et al. (2010, 2011a,b), Kolditz et al. (2011, 2012a) sowie Singh et al. (2011b) der Projektbearbeiter sowie die darin zitierte Literatur verwiesen.

2.1.2 Numerische Realisierung im Rahmen der objektorientierten wissenschaftlichen open-source Softwareplattform OpenGeoSys (OGS)

Die numerische Behandlung der betrachteten nichtlinearen, gekoppelten Probleme zur Simulation thermischer, hydrogeologischer und geomechanischer Prozesse sowie deren Wechselwirkungen basiert auf der Auswertung der relevanten Feldgleichungen in Verbindung mit geeigneten Zeit- und Ortsdiskretisierungsverfahren. Unter Nutzung des Verfahrens der gewichteten Residuen werden zunächst die schwachen Formulierungen (integrale Variationsdarstellungen über das gesamte betrachtete Simulationsgebiet) der als lokales System von Differentialgleichungen vorliegenden Feldgleichungen abgeleitet. Dabei werden, im Rahmen einer Standard-Galerkin-Prozedur, die lokalen Bilanzbeziehungen mit geeigneten Testfunktionen multipliziert und über das Simulationsgebiet integriert, das über das Volumen der Gesteinsmatrix definiert wird. Als geeignete Testfunktionen gelten beliebige Funktionen mit angemessenen Anforderungen an Stetigkeit und Differenzierbarkeit, die notwendig die Realisierung homogener wesentlicher Randbedingungen (Dirichlet-Randbedingungen) erfüllen (vgl. Görke et al., 2012a).

Um das System der schwachen Formulierungen in den gewünschten Primärvariablen zu definieren, werden zweckmäßige konstitutive Beziehungen integriert (z.B. Spannungs-Verzerrungs-Beziehungen der festen Phase des porösen Mediums für das Einführen des Verschiebungsvektors bzw. Druck-Dichte- und/oder Druck-Sättigungs-Relationen für die fluiden Phasen des porösen Mediums). Nachfolgend werden die kontinuierlichen Funkti-

onen der Primärvariablen durch Ansatzfunktionen in geeigneten Finite-Element-Räumen ersetzt (Ortsdiskretisierung), die Interpolationsfunktionen unter Nutzung diskreter Werte der Variablen in den Gitterknoten des Finite-Element-Netzes darstellen. Als Ergebnis dieser Ortsdiskretisierung liegt in der Regel ein algebraisches System nichtlinearer, miteinander gekoppelter Gleichungen mit den Knotenwerten der Primärvariablen als Unbekannte vor. Es enthält im allgemeinen Fall auf seiner linken Seite ein Produkt der Massenmatrix mit dem Vektor der partiellen oder materiellen Zeitableitung der Primärvariablen, ein Produkt der Advektionsmatrix mit dem Vektor der Gradienten der Primärvariablen sowie ein Produkt der Laplace-Matrix mit dem Vektor der Knotenwerte der Primärvariablen selbst. In die rechte Seite des Gleichungssystems sind die Wirkungen äußerer Einflüsse integriert (Oberflächenbelastungen, Flüsse durch die Oberfläche des betrachteten Berechnungsgebiets).

Im partiellen Lastschritt (auch: Zeitschritt) einer Finite-Element-Simulation, die die vollständige Belastungsgeschichte betrachtet, ist jeweils ein, gegebenenfalls gekoppeltes, lineares algebraisches Gleichungssystem zu lösen. Aus diesem Grund sind die Ableitungen der Primärvariablen in dem oben genannten, nach dem Ort diskretisierten System der schwachen Formulierungen durch geeignete Zeitdiskretisierungsverfahren zu eliminieren. Anschließend ist eine Linearisierung des Systems nach einem gängigen inkrementell-iterativen Verfahren vorzunehmen. Somit ist in jedem Lastschritt ein lineares Gleichungssystem mit den Inkrementen der Knotenwerte der Primärvariablen als Unbekannte zu lösen. Für den Fall, dass dieses System miteinander gekoppelte Gleichungen enthält (Primärvariable unterschiedlichen physikalischen Typs – z.B. Verschiebungen der Feststoffmatrix und Porendrucke), existieren prinzipiell die folgenden Lösungskonzepte:

- Monolithischer Ansatz: Das gekoppelte Gleichungssystem wird im Rahmen einer gemischten Finite-Element-Methode gleichzeitig gelöst. Dieser Ansatz zeichnet sich in der Regel durch hohe numerische Genauigkeit und Effizienz aus. Eine mathematische Herausforderung ist hingegen die Entwicklung stabiler Elementformulierungen für die gemischten Finite-Element-Ansatzfunktionen insbesondere bei mehr als zwei unterschiedlichen Typen von Primärvariablen.
- Partitionierter Ansatz: Bei dieser Vorgehensweise werden die einzelnen Gleichungen im Lastschritt nacheinander gelöst, wobei die jeweils nicht als Unbekannte betrachteten Primärvariablen aus vorherigen Lösungen als bekannt angenommen werden. Kopplungsterme werden mit diesen Annahmen auf der rechten Seite der aktuell betrachteten Gleichung berücksichtigt oder durch geeignete Approximationen in die Lösung integriert. Der gesamte Lösungsprozess wird im Lastschritt so oft iterativ wiederholt, bis alle Primärvariablen eine vorgegebene Genauigkeit erreicht haben. Dieses Verfahren ist gegenüber dem monolithischen Ansatz deutlich zeitaufwendiger und nicht in allen Fällen zwingend stabil.

- Gemischter Ansatz: Beinhaltet das gekoppelte Gleichungssystem mehr als zwei unterschiedliche Primärvariable, bietet die Behandlung eines Teils des Systems im monolithischen Verfahren mit partitionierter Kopplung zum Rest des Systems häufig den besten Kompromiss hinsichtlich Stabilität, Genauigkeit und Effizienz der Lösung.

Die im Projekt entwickelten numerischen Modelle und Algorithmen wurden in die wissenschaftliche open-source Softwareplattform OpenGeoSys (OGS) implementiert. OGS ist ein internationales Softwareprojekt zur Modellierung von gekoppelten THM/C-Prozessen in porösen Medien, dessen Entwicklung vom UFZ koordiniert wird (vgl. Kolditz et al., 2012a,b). Im Rahmen des F&E-Vorhabens CO2-MoPa haben neben den Autoren dieses Berichts auch Wissenschaftler der CAU Kiel OGS für ihre Arbeiten genutzt und um den spezifischen Aufgabenstellungen entsprechende Programmkomponenten ergänzt.

Zur Herleitung der im Projekt betrachteten gekoppelten Prozesse des isothermen bzw. nichtisothermen Zweiphasenflusses in deformierbaren porösen Medien wurde bezüglich der Zeitdiskretisierung ein verallgemeinertes Einschritt-Differenzenverfahren genutzt. Das Diskretisierungsschema enthält einen Wichtungsfaktor, mit dem spezifische Ansätze eingestellt werden können, von denen das implizite Euler-Verfahren (auch: Euler Rückwärts) wegen seiner unbedingten numerischen Stabilität das in der Praxis komplexer Problemstellungen am häufigsten genutzte und auch von den Autoren favorisierte ist. Für die Linearisierung der nichtlinearen Finite-Element-Gleichungen können in OGS wahlweise die konsistente Linearisierung nach der Newton-Raphson-Methode oder das Picard-Verfahren genutzt werden, bei dem die Systemmatrizen vereinfachend während der Iterationen innerhalb eines Lastschritts konstant gehalten werden. Zur Lösung der gekoppelten Problemstellungen wurden verschiedene Ansätze miteinander verglichen (siehe Abschnitt 3.1.5).

Nach Orts- und Zeitdiskretisierung sowie Linearisierung der schwachen Formulierungen ist im Rahmen der Lösung des gemischten Anfangs-Randwert-Problems in jedem Linearisierungsschritt ein lineares algebraisches Gleichungssystem auszuwerten, für dessen Lösung in OGS vorrangig iterative Verfahren (z.B. Methode der konjugierten Gradienten) mit Vorkonditionierung verwendet werden. Details zur allgemeinen Finite-Element-Theorie gekoppelter Problemstellungen sowie der numerischen Realisierung der im Projekt entwickelten Modelle im Rahmen von OGS sind besonders in den Arbeiten von Görke et al. (2011a), Kolditz und De Jonge (2004), Kolditz et al. (2012a,b), Korsawe et al. (2006), Park et al. (2011) sowie Singh et al. (2010, 2011a) der Projektbearbeiter sowie der darin angegebenen Literatur dargestellt.

Die Finite-Element-Simulation nichtlinearer gekoppelter Problemstellungen unter realistischen Bedingungen, wie der im Projekt bearbeiteten geotechnischen Anwendungen, erfordert das vielfache Generieren und Lösen von Gleichungssystemen mit einer sehr großen Anzahl von Unbekannten sowie die anschließende, wiederholte Analyse der

Simulationsergebnisse. Neben dem Einsatz effizienter numerischer Algorithmen für spezifische Teilprobleme des gesamten Berechnungsprozesses werden Verfahren des Höchstleistungsrechnens im Sinne der Parallelisierung von Simulationsschritten zunehmend wichtiger, um Ergebnisse in akzeptablen Rechenzeiten zu erzielen.

Im Kontext von Finite-Element-Simulationen sind die Assemblierung und die Lösung der globalen Systemgleichungen in jedem Linearisierungsschritt grundlegende Bestandteile des Berechnungsprozesses, die zudem einen immer größeren Anteil an der gesamten Simulationszeit beanspruchen, je größer das System ist. Während die Parallelisierung der Generierung lokaler Systemmatrizen und –vektoren auf Elementebene wegen der hinfälligen Kommunikation zwischen den einzelnen Teilprozessen in diesem Stadium der Simulation eine natürliche Grundlage besitzt, ist die Parallelisierung der Analyse des globalen Finite-Element-Systems deutlich anspruchsvoller und gehörte daher zu den Aufgabenstellungen des Projekts.

Das verwendete Parallelisierungskonzept beruht in seinen grundlegenden Eigenschaften auf dem Gebietszerlegungsverfahren (domain decomposition concept), bei dem das Finite-Element-Gitter a priori in Teilgebiete entsprechend der Anzahl der verfügbaren Rechnerprozessoren zerlegt wird. Für eine ausbalancierte Unterteilung der Gesamtgitter (ausgeglichene Anzahl von Unbekannten in den separierten Teilgebieten zur Reduzierung von Wartezeiten einzelner Prozessoren) wird die frei verfügbare Software zur Graph-Partitionierung METIS genutzt. Die eigentliche Lösung eines globalen Finite-Element-Systems erfolgt mit speziellen Verfahren der konjugierten Gradienten, den so genannten Krylov-Unterraum-Verfahren. Diese Klasse iterativer Lösungsverfahren benötigt nur Matrix-Vektor-Multiplikationen und Skalarprodukte. Damit gestaltet sich die Behandlung schwach besetzter Matrizen besonders effizient. Wegen der spezifischen Gittertopologie sind Systemmatrizen von Finite-Element-Anwendungen in der Regel schwach besetzt. Zudem sind Krylov-Unterraum-Verfahren einfach parallelisierbar, da sie die Gesamtmatrix während der Lösungsiterationen nicht benötigen. Die Assemblierung von (Teil)Systemmatrizen und –vektoren sowie die Berechnung entsprechender lokaler Matrix-Vektor-Produkte finden vielmehr in den einzelnen Teilbereichen der Gebietszerlegung statt. Der Krylov-Unterraum-Löser nutzt anschließend die parallel generierten Matrix-Vektor-Produkte aus den Teilgebieten, um die Gesamtlösung iterativ anzupassen. Damit wird die Kommunikation zwischen den Prozessoren während des Lösens des Gesamtsystems auf ein geringes Maß beschränkt und betrifft vorrangig gemeinsame Gitterknoten auf Teilgebietsrändern. Während der Parallelverarbeitung generiert und verwaltet jeder beteiligte Prozessor die Matrizen und Vektoren des ihm zugeordneten Teilgebiets selbst auf einem lokalen Niveau. Zur Akkumulation der lokalen Lösungsanteile von den einzelnen Prozessoren werden MPI-Funktionen genutzt.

Aus eigenen und Literaturanalysen ist bekannt, dass die Effizienz paralleler Finite-Element-Lösungen (speed-up) unter anderem wesentlich von der Größe der Teilbereiche im Rahmen eines Gebietszerlegungsverfahrens abhängt. Bei einer geringen Anzahl von

Unbekanntes pro Teilgebiet kann das Verhältnis der Zeit für lokale Rechenoperationen auf dem einzelnen Prozessor zu der Zeit für Kommunikation zwischen den Prozessen so ungünstig sein, dass mit einer Zerlegung in weitere Teilgebiete keine sinnvolle Effizienzsteigerung erzielt werden kann. Diese Diskrepanz für Aufwand und Nutzen für parallele numerische Simulationen nimmt mit der rasanten Steigerung der Leistungsfähigkeit der Prozessoren weiter zu. Daher konnten die konkret untersuchten Teilprozesse (siehe nachfolgende Details zu Anwendungssimulationen) im hier dargelegten Projekt unter vereinfachenden Bedingungen simuliert werden (kleinere räumliche Skalen, zweidimensionale Modellierung, Vernachlässigung spezifischer physikalischer Prozesse), wofür die entwickelte parallele OGS-Version wegen der vergleichsweise geringen Problemgröße nicht effizient eingesetzt werden kann. Aus diesem Grund wurden die parallelen Algorithmen teilweise an existierenden Beispielen aus anderen geotechnischen Anwendungsbereichen (z.B. Endlagerforschung) getestet und zeigten dort sehr gute Ergebnisse hinsichtlich ihrer Effizienz (zu Theorie, Umsetzung und Ergebnissen der entwickelten parallelen Modelle siehe Wang und Kolditz, 2010; Wang et al., 2009, 2011b).

2.1.3 Benchmarking

Geschlossene Lösungen für Problemstellungen aus Natur- und Ingenieurwissenschaften sind auf Situationen beschränkt, die unter stark vereinfachenden Annahmen definiert sind, verglichen mit den Prozessen, Eigenschaften und Bedingungen, die in der Realität typischerweise modelliert werden. Das ist besonders für geotechnische Anwendungen relevant, die durch das miteinander gekoppelte Wirken unterschiedlicher physikalischer und chemischer Prozesse in porösen Mehrphasenmedien, ausgeprägte Heterogenitäten der Untersuchungsgebiete, anisotropes Materialverhalten und eingeschränkte Verfügbarkeit von *in situ* Messergebnissen charakterisiert sind. Die Entwicklung geeigneter numerischer Modelle und die Nutzung entsprechender Simulationssoftware sind die alleinigen Optionen für komplexe Zustandsanalysen und Prognosestudien geotechnischer Problemstellungen, wie der im Projekt betrachteten Injektion und Ausbreitung von CO₂ in tiefen geologischen Formationen.

Um ihre Übereinstimmung mit den in der Geotechnik gültigen Normen zu demonstrieren, müssen Modelle und Software zur Analyse geotechnischer Anwendungen vor ihrem Praxiseinsatz hinreichend validiert werden. Eine anerkannte Methode für Modell- und Softwarevalidierung ist mit dem so genannten Benchmarking verfügbar. In diesem Zusammenhang stellen Benchmarks klar definierte Beispiele für die Prozesssimulation unter vereinfachenden Annahmen dar, die mit existierenden analytischen Lösungen und/oder experimentellen Daten verglichen werden können. Liegen für komplexe Situationen weder analytische noch experimentelle Ergebnisse vor, ist der Vergleich zwischen unterschiedlichen wissenschaftlichen und/oder kommerziellen Softwarelösungen eine erprobte Methode, die Funktionalität, Zuverlässigkeit und Genauigkeit von Softwareentwicklungen objektiv zu beurteilen.

Die Entwicklung und Analyse von Benchmarks, die die Anforderungen an Modellierung und Simulation der spezifischen Aufgabenstellungen im F&E-Vorhaben CO2-MoPa in breitem Umfang reflektieren, gehörten zu den übergreifenden Querschnittsaufgaben aller Verbundpartner aus dem Modellierungsbereich. Unter Koordination des UFZ wurden sowohl die Methodologie des Validierungsprozesses als auch konkrete Testbeispiele für die Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund systematisiert. In diesem Zusammenhang wurden Benchmarks definiert, die Geometrie, Geologie, Materialeigenschaften und Prozessbedingungen der im Projekt betrachteten realen Anwendungssituation von potenziellen Speicheraktivitäten in tiefen, salinen Aquiferen in vereinfachender Form berücksichtigen. Methodisch basiert die Validierung von Modellen und Software sowohl auf klassischen Benchmarks mit verfügbaren analytischen und/oder experimentellen Ergebnissen als auch auf der vergleichenden Simulation unter Nutzung unterschiedlicher Softwarelösungen. Die Strategie zur Benchmarkauswahl und –entwicklung basiert auf drei wesentlichen Aspekten:

- Prozessorientierte Benchmarks für die numerischen Analyse partikulärer und gekoppelter Prozesse mit Bezug zur geologischen CO₂-Verpressung: Zur Validierung von Projektergebnissen für partikuläre physikalische und chemische Prozesse wurden systematisch geeignete Benchmarks aus der Literatur ausgewählt. Weiterhin konnte auf existierende Benchmarks zur Simulation gekoppelter Prozesse zunehmender Komplexität in porösen Medien zurückgegriffen werden (z.B. kompressibler Fluss (H), Zweiphasenfluss (H²), Konsolidierungsprobleme (HM, H²M), Thermomechanik (TM) bis hin zu nichtisothermen Konsolidierungsproblemen mit Zweiphasenfluss (TH²M)). An der Entwicklung prozessorientierter Benchmarks waren alle mit Modellierung befassten Partner des F&E-Verbundes CO2-MoPa beteiligt.
- Konstitutiv orientierte Benchmarks: Die Auswahl von zweckmäßigen konstitutiven Beziehungen für die Bestandteile der betrachteten porösen Medien (thermodynamische Zustandsgleichungen für die Fluideigenschaften, Deformationsgesetze der Feststoffmatrix) ist wesentlich für das Erzielen realitätsnaher Simulationsergebnisse. Umfangreiche Untersuchungen wurden im F&E-Verbund CO2-MoPa auf dem Gebiet der Zustandsgleichungen für das injizierte CO₂ und die in der Formation vorhandenen Porenfluide angestellt. Unter Berücksichtigung der Fluideigenschaften Dichte, Viskosität, Enthalpie, Entropie, Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit wurden unterschiedlich komplexe Zustandsgleichungen analysiert und teilweise weiterentwickelt (vgl. Böttcher et al., 2012).
- Szenarienbasierte Benchmarks: Die numerischen Modelle für nichtlineare, gekoppelte Probleme mit hohem Komplexitätsgrad wurden in vergleichenden Studien von OGS mit unterschiedlichen kommerziellen Softwarelösungen (z.B. Eclipse, TOUGH) validiert. Zu diesem Zweck wurden neben der Analyse von Literaturbeispielen vereinfachte Testfälle definiert, die auf Daten realer geolo-

gischer Strukturen basieren, die unter den gegebenen Annahmen prinzipiell für eine Speicherung von CO₂ geeignet sind. Details können den nachfolgenden Erläuterungen zu einigen Anwendungssimulationen entnommen werden. Ein in diesem Bericht nicht ausführlich dargestelltes Beispiel befasst sich mit dem THM-Verhalten im Reservoir (ebener, vertikaler Querschnitt) in der Produktions-, Injektions- und Nachinjektionsphase bei einem hypothetischen Injektions- und Speicherprozess, für das eine gute Übereinstimmung von Berechnungsergebnissen zwischen den Simulationsprogrammen TOUGH und OGS erzielt werden konnte (vgl. Hou et al., 2012).

Die im Projekt entwickelte Benchmark-Systematik wurde in wesentlichen Teilen auf eine standardisierte Weise dokumentiert (Kolditz et al., 2012a,c). Sie spiegelt die relevanten physikalischen und chemischen Prozesse, die Kopplungsphänomene sowie typische Formationsbedingungen und konstitutive Eigenschaften der Bestandteile der untersuchten porösen Medien wider. Die Benchmarkdefinition umfasst jeweils eine Zusammenfassung der Motivation, eine kurze Problembeschreibung, die Eingangsdaten, die Modellparametrisierung, Informationen zu den numerischen Algorithmen und Details zur Darstellung der Ergebnisse.

2.1.4 Modellentwicklung: Auswahl geeigneter Primärvariablen für die Simulation von Zweiphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien

Die Auswahl geeigneter Primärvariablen für die numerische Lösung von Feldproblemen mit Zeit- und Ortsdiskretisierungsverfahren ist bedeutsam für die Effizienz und Stabilität der Verfahren (siehe z.B. Schrefler und Gawin, 1996) sowie für die Vergleichbarkeit von Simulationsergebnissen mit in Labor- und Feldversuchen erfassten Daten (z.B. leichte messtechnische Zugänglichkeit der ausgewählten physikalischen Variablen). Im Rahmen der Modellierung partikulärer physikalischer Prozesse ist die Wahl der Primärvariablen vergleichsweise einfach und widerspruchsfrei und lässt sich aus der jeweils bestimmenden Bilanzgleichung unter Berücksichtigung grundlegender konstitutiver Überlegungen begründen. So wird beispielsweise der Verschiebungsvektor als die natürliche und grundlegende kinematische Größe zur Beschreibung von Deformationsvorgängen allgemein als Primärvariable für die numerische Lösung von Problemen der Festkörpermechanik anerkannt. In der Strömungsmechanik fällt die Wahl in der Regel auf die Strömungsgeschwindigkeit oder den Fluiddruck. Deutlich vielfältiger und komplexer sind die Möglichkeiten der Auswahl von Primärvariablen bei gekoppelten Problemen, wenn analoge physikalische Prozesse mehrere beteiligter Phasen und/oder unterschiedliche physikalische Vorgänge mit ihren gegenseitigen Interaktionen zu berücksichtigen sind.

Die Entwicklung numerischer Modelle des Mehrphasenflusses in porösen Medien hat ihren Ursprung in der strömungsmechanisch orientierten Betrachtung von Problemstellungen der Erdölexploration und der Grundwasserkontamination mit Schadstoffen (vgl. Collins, 1961). Mit zunehmender Integration numerischer Verfahren in das Analyse- und Prognoseinstrumentarium der Bodenmechanik und Geotechnologie wurden Zugänge zur Simulation von Mehrphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien entwickelt, die stärker von Methoden der Festkörpermechanik geprägt waren (z.B. Gawin et al., 1995). Der unterschiedliche Fokus auf einzelne Teilprozesse des Gesamtsystems poröses Medium führte zur bevorzugten Nutzung unterschiedlicher numerischer Konzepte für die Modellierung der gekoppelten Vorgänge. Während in der Hydrogeologie in der Regel lokale Verfahren der Einhaltung der Massebilanzen favorisiert werden (Verfahren der Finiten Differenzen oder Finiten Volumen), wird in der Bodenmechanik und Geotechnologie vorrangig die Methode der Finiten Elemente genutzt, die eine globale Erfüllung der Massebilanzen gewährleistet. Neben den abweichenden numerischen Basiskonzepten stehen in den oben genannten Anwendungsgebieten auch unterschiedliche physikalische Aspekte im Mittelpunkt der Betrachtungen: In der Hydrogeologie sind die partikulären Phasendrucke und/oder Phasensättigungen entscheidend für das Verständnis der untersuchten Systeme, spielen bei geotechnischen Problemen die Grenzflächen zwischen den beteiligten Fluiden und die dort herrschenden Kapillarkwirkungen eine wesentliche Rolle für die Stabilität der Gesamtsysteme. Die ursächlichen physikalischen Prozesse und die numerischen Konzepte spielen eine wichtige Rolle bei der Auswahl der Primärvariablen zur Beschreibung von Mehrphasenflüssen in porösen Medien. Park et al. (2011) und die darin enthaltene Literatur geben einen umfassenden Überblick über den Stand der Forschung auf diesem Gebiet.

Als Teilaspekt für die im hier dargelegten Projekt vollzogene Entwicklung anwendungsspezifischer numerischer THM-Modelle zur Simulation der gekoppelten Prozesse bei der geologischen CO₂-Speicherung wurde die Integration von Algorithmen zur Behandlung von Zweiphasen-Fluid-Transportproblemen in porösen Medien im Rahmen eines Finite-Element-Ansatzes betrachtet. Die relevanten Transportgleichungen basieren auf den Massebilanzen der beteiligten Fluide unter Berücksichtigung der partikulären Darcy-schen Beziehungen, die sich aus den Impulsbilanzen der fluiden Phasen ableiten lassen. Zusätzlich sind die Sättigungsbedingung (die Summe aller Partikulärsättigungen ergibt stets den Wert Eins), die Definition des Kapillardrucks als Differenz des Partikulärdrucks der nicht benetzenden Phase und des Partikulärdrucks der benetzenden Phase

$$p_c = p_{nw} - p_w \quad (1)$$

sowie geeignete Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen als konstitutive Relationen zu erfassen. In Abhängigkeit von der Wahl der Primärvariablen stellt sich das geschlossene Gleichungssystem in unterschiedlicher Weise dar, als Variablensatz werden in der Literatur folgende Varianten diskutiert (vgl. Park et al., 2011):

- Bei der traditionellen, natürlichen Erweiterung der Modellierung des Fluidtransports von Einphasen- auf Mehrphasenbedingungen werden die Partikulärdrücke der beteiligten Fluide im Rahmen eines Druck-Druck-Schemas als Primärvariable betrachtet (vgl. Azis und Settari, 1979; Pinder und Gray, 1977). Aus verschiedenen Motiven hat sich dieser Ansatz jedoch nicht durchgesetzt. Hauptgrund ist die schwierige Handhabung von Termen zur Erfassung der Kapillarwirkungen.
- Am häufigsten sind in der Literatur (sowie in relevanten Softwaresystemen) Druck-Sättigungs-Schemata anzutreffen (vgl. Helmig und Huber, 1998; Kueper und Frind; 1991), in deren Rahmen der Partikulärdruck der einen Fluidphase und die Sättigung der gleichen oder der anderen Fluidphase als Primärvariable definiert werden. Vorteil dieser Ansätze ist die vergleichsweise einfache Handhabung von Termen zur Erfassung von Kapillarwirkungen, die sich lediglich in Orts- nicht aber in Zeitableitungen manifestieren. Die Lösung des entstehenden Gleichungssystems vom elliptisch-hyperbolischen Typ kann jedoch zu numerischen Schwierigkeiten führen, die generell so genannte Upwind-Verfahren zur Stabilisierung der Lösung erfordern. Das trifft besonders dann zu, wenn aufgrund von Heterogenitäten im betrachteten System die Sättigungsverläufe nicht stetig sind.
- Eine alternative Wahl der Primärvariablen für die Modellierung des Transportproblems von zwei fluiden Phasen in porösen Medien stellt die Verwendung des Kapillardrucks und des Partikulärdrucks der nicht benetzenden Phase als Unbekannte dar (vgl. Lewis et al., 1989; Sanavia et al., 2006). Mit diesem Ansatz ist es möglich, die Stetigkeit des Kapillardruckverlaufs im Simulationsgebiet ohne zusätzliche numerische Aufbereitung zu gewährleisten.

In der Projektlaufzeit wurden im Rahmen des Software-Projekts OGS ein Druck-Druck-Schema (pp-Schema, hier: Kapillardruck und Partikulärdruck der CO₂-Phase) und ein Druck-Sättigungs-Schema (pS-Schema, hier: Partikulärdruck der Porenfluid-Phase und Sättigung der CO₂-Phase) für die Behandlung von Zweiphasenflüssen in porösen Medien realisiert. Dabei wurden keine zusätzlich numerisch stabilisierende Algorithmen, wie z.B. Upwind-Verfahren integriert. Das Lösungsverhalten der implementierten Konzepte wurde an Benchmarks mit gegebener analytischer Lösung bzw. vorhandenen experimentellen Daten untersucht.

McWhorter und Sunada (1990) haben eine analytische Lösung für den einachsigen Fall des Zweiphasenflusses durch eine Säule abgeleitet, der allein durch Kapillarwirkungen angetrieben wird. Interessant ist dabei der Fall, wenn diese Säule aus zwei unterschiedlichen porösen Medien besteht, an deren Grenzfläche eine Diskontinuität in der Sättigung des benetzenden Fluids auftritt. Während im homogenen Fall pS- und pp-Schema das analytische Ergebnis sehr gut reproduzieren können, ist bei heterogenen Materialien das realisierte pS-Schema im Gegensatz zum pp-Schema nicht in der Lage, die Diskontinuität im Sättigungsverlauf numerisch darzustellen. Hierzu wäre eine zusätzliche

numerische Stabilisierung erforderlich, die derzeit für Standard Finite-Element-Verfahren nicht erfolgreich realisiert sind (für Details siehe Park et al., 2011).

Ein weiteres Testbeispiel zur Untersuchung des Lösungsverhaltens der in OGS realisierten Finite-Element-Konzepte zur Simulation des Transportverhaltens zweier fluider Phasen in porösen Medien soll hier näher erläutert werden. Kueper und Frind (1991) entwickelten ein numerisches Modell, um ihr Experiment zur Schadstoffausbreitung in heterogen ausgebildeten Böden (Kueper et al., 1989) zu simulieren. In diesem Experiment wurde ein Glasquader von 60 cm Breite, 80 cm Länge und 0,6 cm Dicke mit vier verschiedenen Sandphasen gefüllt und anschließend vollständig mit Wasser gesättigt. Durch Glaswände wurden die Sandphasen wie in Abb. 4 ersichtlich strukturiert.

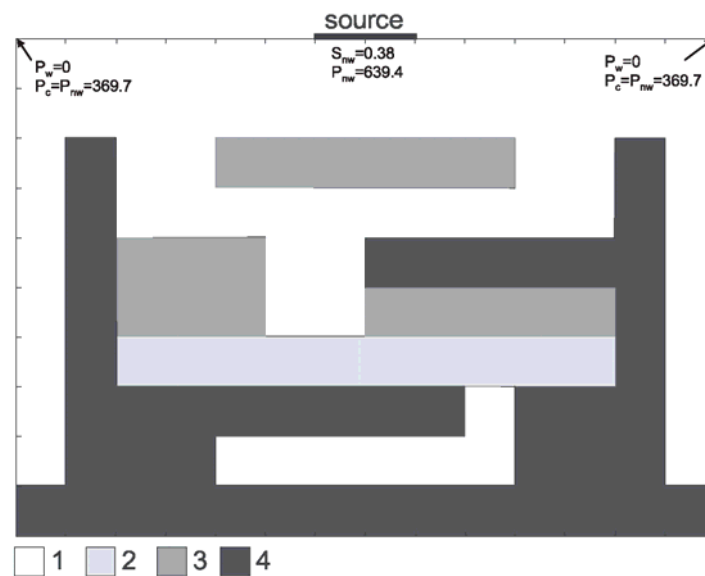


Abbildung 4: Schematische Darstellung einer experimentellen Anordnung zur Untersuchung der Ausbreitung von Schadstoffen in gesättigten porösen Medien (Kueper et al., 1989). Geometrische Konfiguration der unterschiedlichen Sandphasen (1...4) und Randbedingungen. Bedeutung der Variablen: p_w – Partikulärdruck der benetzenden Phase, p_{nw} – Partikulärdruck der nicht benetzenden Phase, p_c – Kapillardruck, S_{nw} – Sättigung der nicht benetzenden Phase.

An einem oberen Randstück der experimentellen Anordnung wird kontinuierlich eine wasserunlösliche Schadstoffphase mit größerer Dichte als Wasser (im Englischen: dense nonaqueous phase liquid – DNAPL) eingeleitet. Zum Ort der Schadstoffquelle und den mit den konzeptionellen numerischen Ansätzen korrespondierende Randbedingungen siehe Abb. 4. Für die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung sowie die Relation zwischen relativer intrinsischer Permeabilität und Sättigung wurde von den Autoren das Brooks-Corey Modell verwendet. Die entsprechenden konstitutiven Parameter für die vier Sandphasen wurden experimentell ermittelt und sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Tabelle 1: *Hydraulische Eigenschaften der vier Sandphasen im Experiment von Kueper et al. (1989) für das Modell nach Brooks-Corey.*

Sandphase	Eindring- druck (Pa)	Index der Porenraum- verteilung	Residualsät- tigung der benetzen- den Phase	Intrinsische Permeabili- tät (D)	Porosität
1	369,73	3,86	0,078	504,00	0,40
2	434,45	3,51	0,069	205,00	0,39
3	1.323,95	2,49	0,098	52,60	0,39
4	3.246,15	3,30	0,189	8,19	0,41

Nach Beginn des Schadstoffeintritts wird zunächst mit beiden numerischen Schemata der gleiche, physikalisch begründete Prozess der Schadstoffausbreitung ermittelt. Wenn die Schadstofffahne die erste heterogene Grenzschicht zwischen der durchlässigsten Phase und einer weniger durchlässigen Phase im oberen Bereich der experimentellen Anordnung erreicht, weicht das weitere Lösungsverhalten der betrachteten Konzepte mit unterschiedlicher Wahl der Primärvariablen jedoch deutlich voneinander ab. Während bei Verwendung des pS-Schemas eine Infiltration des Schadstoffes in die weniger durchlässige Sandphase zu beobachten ist, weicht die Schadstofffahne im Fall des pp-Schemas dieser Sandphase aus und es kommt zur Ausbildung von relevanten Porendrücken an der Grenzschicht (siehe auch Abb. 5).

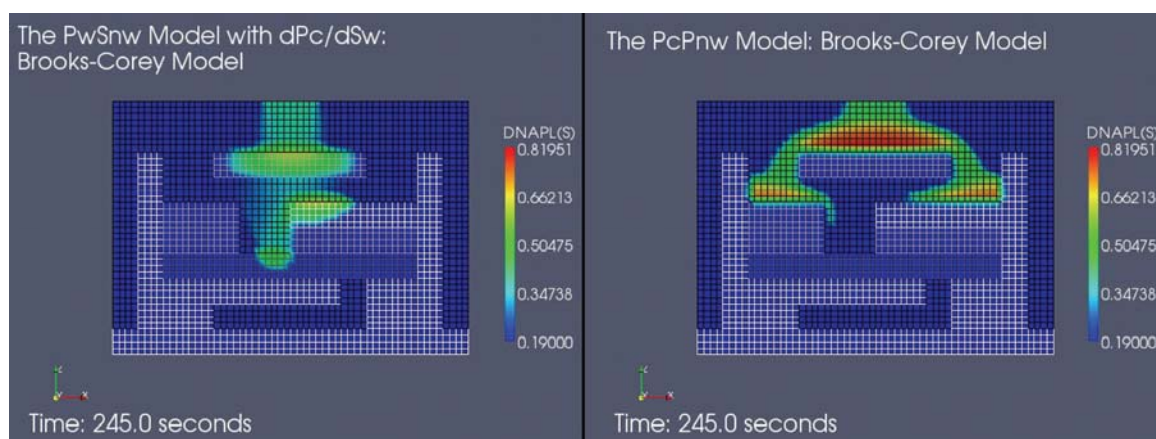


Abbildung 5: *Vergleich von Simulationsergebnissen des Experiments von Kueper et al. (1989) unter Verwendung numerischer Ansätze mit unterschiedlichen Primärvariablen. Das pp-Schema (rechts) zeigt eine gute Übereinstimmung mit der experimentell ermittelten Schadstoffverteilung nach 245 Sekunden.*

Wie mit dem pp-Schema simuliert, wird auch im Experiment ein Umfließen der weniger durchlässigen Sandstrukturen registriert. Helmig und Huber (1998) berichteten für ein analoges Experiment das gleiche, der Physik widersprechende Lösungsverhalten numerischer pS-Schemata bei der Simulation von Zweiphasenflüssen in porösen Medien mit heterogenen Strukturen. Mit dem dargestellten Beispiel wurde somit der in der Fachliteratur diskutierte Sachverhalt bestätigt, dass die betrachteten Transportprozesse erst bei Integration stabilisierender Upwind-Verfahren in den numerischen Prozess zu physikalisch sinnvollen Ergebnissen führen, wenn die üblicherweise realisierten pS-Schemata zur Anwendung kommen. Gleichzeitig konnte gezeigt werden, dass bei Nutzung eines pp-Schemas mit dem Kapillardruck als einer der relevanten Primärvariablen das im Experiment beobachtete Transportverhalten im Rahmen eines Finite-Element-Ansatzes, der auf einer Standard-Galerkin-Prozedur basiert, physikalisch korrekt modelliert werden kann, ohne eine zusätzliche numerische Stabilisierung einzusetzen. Mit diesem Ansatz kann die für die Genauigkeit des Lösungsverhaltens wichtige Stetigkeit des Kapillardruckverlaufs über Grenzschichten heterogener Strukturen hinweg auf natürliche Art und Weise erfüllt werden. Zudem verbessert der Verzicht auf zusätzliche numerische Stabilisierungsalgorithmen die Effizienz des Simulationsprozesses in seiner Gesamtheit. Das ist insbesondere bei Kopplung der Fluidtransportprozesse mit mechanischen Deformationsvorgängen und dem Wärmetransport von Bedeutung.

2.1.5 Modellentwicklung: Vergleich von partitionierten und monolithischen Ansätzen für die Lösung der gekoppelten Beziehungen zur Charakterisierung von hydraulisch-mechanisch gekoppelten Prozessen in deformierbaren porösen Medien

Hydraulische Transportvorgänge und mechanische Deformationsprozesse in porösen Medien beeinflussen sich gegenseitig. So wirken einerseits der Porendruck und Dissipationseffekte über die Effektivspannungen auf den mechanischen Gesamtzustand des Systems. Andererseits verursachen mechanische Deformationen und die Kompression der festen Phase eines porösen Mediums Veränderungen im Porenraum, die sich auf die hydraulischen Eigenschaften des Materials auswirken.

Die konzeptionellen Grundlagen für die Herleitung eines nach Zeit und Ort diskretisierten Systems von Feldgleichung für die Lösung gekoppelter Problemstellungen wurden in Abschnitt 3.1.1 dieses Berichts allgemein erläutert. Bezogen auf die Modellierung von Zweiphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien dienen die lokalen Massebilanzen der fluiden Phasen als Ausgangspunkt für die Entwicklung der entsprechenden Transportgleichungen. Im vorliegenden Fall werden die fluiden Phasen als nicht mischbar angenommen. Ausgehend von der lokalen Massebilanz der festen Phase des porösen Mediums wird die materielle Zeitableitung der Porosität als Funktion von Dichte und Geschwindigkeit der materiellen Teilchen der festen Phase dargestellt und in die partikulären Massebilanzen der fluiden Phasen integriert. Damit enthalten diese Gleichungen Kopplungsterme des Fluidtransports zur mechanischen Deformation der festen

Phase und werden abschließend unter Berücksichtigung der lokalen, partikulären Impulsbilanzen der fluiden Phasen (in der Form als Darcysches Gesetz) sowie konstitutiver Annahmen in den gewünschten Primärvariablen dargestellt (vgl. Abschnitt 3.1.4 dieses Berichts). Für den allgemeinen Fall der Kompressibilität aller Phasen des betrachteten porösen Mediums wird u.a. eine Biotsche Formulierung für die materielle Zeitableitung der Dichte der festen Phase berücksichtigt (vgl. Lewis und Schrefler, 1998). Zudem werden kleine Deformationen angenommen. Das System der Feldgleichungen wird durch die lokale Impulsbilanz für das Gesamtkontinuum komplettiert. Diese stellt die bestimmende Beziehung zur Charakterisierung des mechanischen Deformationszustandes dar und enthält über die Effektivspannungen Kopplungsterme zu den hydraulischen Prozessen. Die im hier dargelegten Projekt erarbeiteten Feldgleichungen für den Ein- und Zweiphasenfluss in porösen Medien (HM- bzw. H²M-Prozesse) werden in Görke et al. (2011a,b; 2012a) und Taron et al. (2011) im Detail diskutiert.

Wie im Abschnitt 3.1.2 dieses Berichts dargelegt, können die nach Zeit und Ort diskretisierten Feldgleichungen eines gekoppelten Systems im Rahmen eines gemischten Finite-Element-Verfahrens gleichzeitig gelöst werden (Behandlung einer gekoppelten Systemmatrix – monolithischer Ansatz), oder jeweils einzeln in einem iterativen Prozess innerhalb eines Zeitschritts (partitionierter Ansatz). Bei mehr als zwei Gleichungen können zudem Teile des Systems in einem monolithischen Verfahren gelöst und im Rahmen eines partitionierten Konzepts an die restliche(n) Gleichung(en) gekoppelt werden. Ein solcher gemischter (oder hybrider) Ansatz ist in der wissenschaftlichen Software OGS beispielsweise für H²M-Prozesse realisiert. Dabei werden die Transportgleichungen für die fluiden Phasen monolithisch miteinander verknüpft und iterativ an die Beziehung zur Modellierung der mechanischen Deformationen gekoppelt.

Nach Implementierung der Algorithmen zur numerischen Modellierung von H²M-Prozessen wurden zunächst am Beispiel des Einphasenflusses in deformierbaren porösen Medien (HM-Prozesse) die monolithische und die partitionierte Vorgehensweise der Lösung des gekoppelten Systems miteinander verglichen. Bei dem in der Literatur auch als Terzaghi-Problem bekannten Benchmark (vgl. Taron et al., 2011), wird eine gesättigte Gesteinssäule mit initial druckloser Fluidphase am oberen Ende kontinuierlich mit einer mechanische Belastung beaufschlagt. Durch die Kompression der Säule kommt es zum Aufbau und einem raschen Anstieg des Porendrucks mit nachfolgendem Abfluss von Porenfluid über den durchlässigen oberen Rand (alle anderen Ränder sind undurchlässig). In der simulierten Aufgabenstellung hat die Säule eine Länge von 50 cm und wird im Rahmen der Finite-Element-Diskretisierung gleichmäßig in 50 Gitterelemente unterteilt. Geometrie, Randbedingungen und erwartete Druckverläufe für das Beispiel sind in Abb. 6 dargestellt.

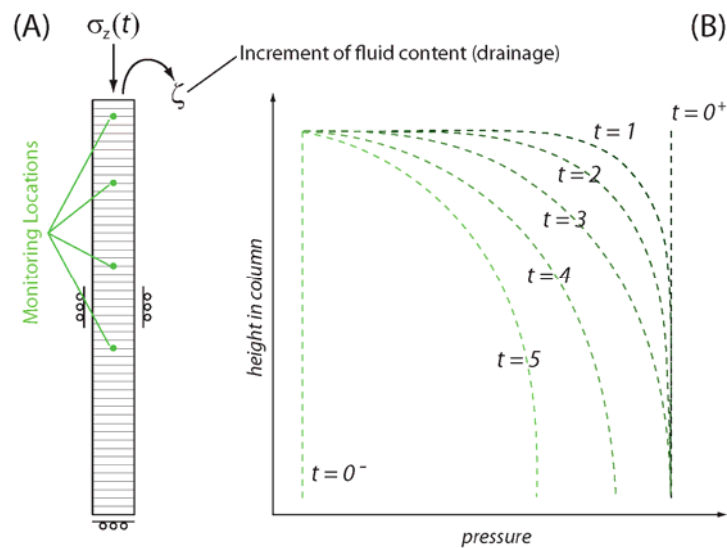


Abbildung 6: Terzaghi-Problem. (A): 2D-Säule (initialer Porendruck 0 MPa) mit mechanischer Belastung am durchlässigem oberen Rand. Die anderen Ränder sind undurchlässig und längs ihrer Ausrichtung beweglich gelagert. Verschiedene Messpunkte für Porendruck und Verschiebung sind angegeben. (B): Erwartete Porendruckprofile über die Säulenlänge zu unterschiedlichen Zeitpunkten bei stufenförmiger Lasteinleitung.

Als Porenfluid wird Wasser bei einer Temperatur von 25°C mit einer (konstanten) Dichte von $997,05 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ und einer dynamischen Viskosität von $8,9008 \times 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ angenommen. Die Materialparameter der festen Phase des betrachteten porösen Mediums mit dem Kompressionsmodul im Trockenzustand von 8 GPa, der Querkontraktionszahl von 0,2, der Porosität von 0,19, der intrinsischen Permeabilität von $1,9 \times 10^{-13} \text{ m}^2$ und dem Biot-Koeffizienten von 0,8 entsprechen etwa den Werten, wie sie für Berea Sandstein aus der Literatur bekannt sind.

Für das betrachtete Beispiel sind analytische Lösungen bezüglich der zeitlichen Entwicklung von Porendruck und Verschiebung verfügbar (siehe Taron et al., 2011). In Abb. 7 werden die analytisch ermittelten Porendruckverläufe in den angegebenen Messpunkten mit den numerischen Ergebnissen des monolithischen und des partitionierten Lösungsansatzes für das gekoppelte HM-Problem verglichen. Unter den gewählten Bedingungen stimmen die analytischen und numerischen Ergebnisse sehr gut überein. Leichte Abweichungen sind zunächst in dem Messpunkt festzustellen, der am weitesten vom oberen Rand mit der Belastungsvorrichtung entfernt ist. Das trifft sowohl für den monolithischen als auch für den partitionierten gekoppelten Lösungsansatz zu. Die Genauigkeit der Lösung transienter Prozesse lässt sich jedoch mit der Integration eines adaptiven Zeitschrittverfahrens in das numerische Lösungskonzept für die nichtlineare Aufgabenstellung verbessern. Dieses Verfahren basiert auf der Verringerung der Rate der Porendruckdissipation über einen partikulären Zeitschritt (vgl. Wang et al., 2011a).

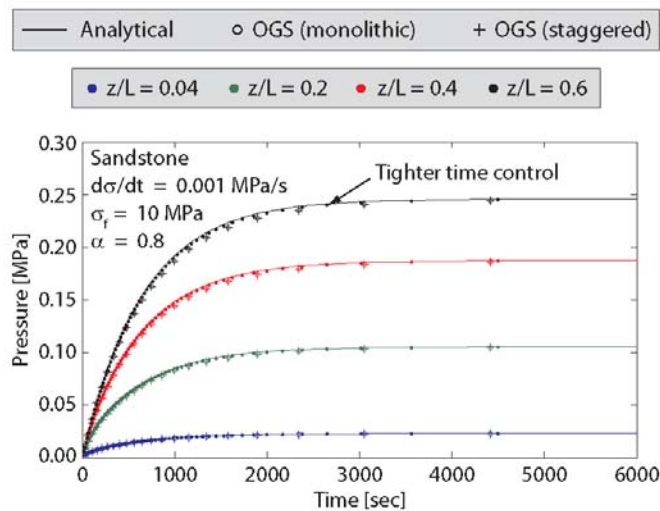


Abbildung 7: Terzaghi-Problem. Ausgewählte Ergebnisse der HM-Kopplung. Porendruckverläufe in den angegebenen Messpunkten (vgl. Abb. 6).

Weitere numerische Studien mit unterschiedlichen Materialeigenschaften der beteiligten Phasen des porösen Mediums (z.B. Granit als Gesteinsmatrix, variierende Kompressibilitätseigenschaften des Porenfluids) und veränderten Randbedingungen (z.B. Variation der Belastungsgeschwindigkeit zeigten, dass der monolithische Ansatz für alle Bedingungen ein stabiles Lösungsverhalten zeigt. Hingegen traten Konvergenzprobleme mit dem partitionierten Ansatz für den Fall auf, dass das Porenfluid, verglichen mit der Kompressibilität der Körner der Gesteinsmatrix, als nahezu inkompressibel angenommen wurde. Die Stabilität des partitionierten Ansatzes verbesserte sich mit der Verminderung des so genannten Skempton-Koeffizienten. Dieser Parameter beschreibt das Verhältnis der Änderung des effektiven Porendrucks zur Änderung der maximalen Hauptspannung des Effektivspannungstensors (vgl. Taron et al., 2011) und kann somit als ein unmittelbares Maß für den Grad der Kopplung von hydraulischen und (geo)mechanischen Prozessen angesehen werden. So weist beispielsweise ein niedriger Wert des Skempton-Koeffizienten auf eine schwache Kopplung hin, für die partitionierte Lösungsansätze ein stabiles numerisches Verhalten zeigen. Der Skempton-Koeffizient wird im Sinne einer verbesserten numerischen Stabilität positiv beeinflusst, indem die Porosität der relevanten Materialien vergrößert wird. Als generell problematisch erwies sich die Verwendung des partitionierten Konzepts im Fall von stufenförmiger Lasteinleitung, d.h. bei extrem großen Belastungsgeschwindigkeiten. Aus den hier diskutierten Projektergebnissen kann die Empfehlung abgeleitet werden, die Stabilität der Lösung hydro-mechanisch gekoppelter Aufgabenstellungen aus dem Anwendungsbereich zunächst an einfachen Beispielen, wie dem beschriebenen Terzaghi-Problem, unter Berücksichtigung der realen konstitutiven und Prozessparameter zu analysieren.

Am Beispiel des Terzaghi-Problems wurde weiterhin untersucht, ob sich die Stabilitätsprobleme des partitionierten Lösungsansatzes für gekoppelte HM-Probleme auch im Fall

eines gemischten Konzepts für die Simulation von Zweiphasenflüssen in deformierbaren porösen Medien bestätigen. Dazu wurden den beteiligten Porenfluiden hydraulische Parameter (initiale und residuale Sättigungen, relative Permeabilitäten, Kompressibilitätseigenschaften) zugeordnet, die zu effektiven Parametern führten, die denen der Eigenschaften des Porenfluids aus dem oben diskutierten HM-Beispiel entsprechen. Damit konnte die dort abgeleitete analytische Lösung auch für die H²M-Problestellung ihre Gültigkeit beibehalten. Für die Lösung des gekoppelten Problems wurde ein gemischter Ansatz gewählt, in dessen Rahmen das Zweiphasen-Transportproblem monolithisch mit einem pS-Schema gelöst wurde und eine iterative, partitionierte Kopplung an das mechanische Deformationsproblem erfolgte.

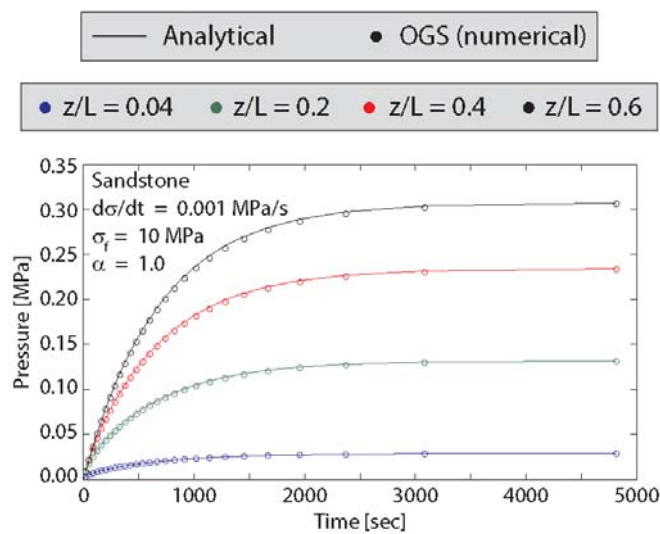


Abbildung 8: Terzaghi-Problem. Ausgewählte Ergebnisse der H²M-Kopplung. Porendruckverläufe in den angegebenen Messpunkten (vgl. Abb. 6).

Wie Abb. 8 beispielhaft zeigt, wurden auch für das H²M-Beispiel sehr gute Übereinstimmungen zwischen analytischen und numerischen Ergebnissen erzielt. Bezüglich der Lösungsstabilität gelten die gleichen Einschränkungen, wie sie für das HM-Problem nachgewiesen wurden. Auch hier ist insbesondere das Verhältnis der Charakteristika von fluiden Phasen und der festen Gesteinsmatrix entscheidend für das Lösungsverhalten des Kopplungsschemas, wenn kein vollständig monolithischer Ansatz gewählt wird.

2.1.6 Modellentwicklung: Simulation von nichtisothermen Zweiphasenflüssen in tiefen, salinen Aquiferen

Die numerische Simulation von gekoppelten Fluid- und Wärmetransportvorgängen in porösen Medien trägt seit mehreren Dekaden zum besseren Prozessverständnis bei vielfältigen geowissenschaftlichen Anwendungen bei. Typische Beispiele sind dafür Grundwassersanierung, Endlagerung und Geothermie, bei denen der nichtisotherme

Prozesscharakter nicht vernachlässigt werden kann bzw. bewusst ausgenutzt wird. Hohe Temperaturen und/oder große Temperaturgradienten führen im Gestein zu thermischen Dehnungen, die Schädigungen im Material verursachen können (z.B. Mikrorisse). Fluidströmungen in porösen Medien können unter dem Einfluss hoher Temperaturen von nichtlinearen physikalischen Effekten wie Verdampfung und beschleunigten Diffusionsprozessen geprägt sein. Zudem ist der Temperatureinfluss auf kapillare Effekte bekannt, der sich in Veränderungen der Oberflächenspannung an den Grenzflächen zwischen verschiedenen Porenfluiden manifestiert.

Wie in Singh et al. (2011a) sowie darin zitierten weiteren Arbeiten im Detail dargelegt ist, werden die Feldgleichungen für den zunächst angenommenen Fall des nichtisothermen Zweiphasenflusses in nichtdeformierbaren porösen Medien unter Berücksichtigung von Verdampfungsprozessen aus den partikulären Massebilanzen der beteiligten Fluide sowie der Energiebilanz des Gesamtkontinuums entwickelt. Letztere führt unter der in Abschnitt 3.1.1 dieses Berichts erläuterten Annahme des lokalen thermischen Gleichgewichts zur Wärmeleitungsgleichung für das betrachtete poröse Medium. Dabei werden der advektive Wärmetransport durch die Strömungsvorgänge, die Wärmeleitung in fluiden Phasen und Gesteinsmatrix sowie die Latentwärme bei Verdampfungsprozessen berücksichtigt. Nach Anwendung der mehrfach erwähnten Zeit- und Ortsdiskretisierungsverfahren folgt letztlich ein gekoppeltes System nichtlinearer Gleichungen zur numerischen Simulation von H²T-Prozessen in porösen Medien, das im Rahmen des hier dargelegten Projekts bezüglich der Primärvariablen als ppT-Schema formuliert wurde. In diesem Zusammenhang dienen der Kapillardruck, der partikuläre Porendruck einer Gasphase (z.B. trockene Luft) oder einer anderen, nicht benetzenden fluiden Phase sowie die Temperatur als Primärvariable. Analog zu den in Abschnitt 3.1.5 beschriebenen H²M-Prozessen erfolgt die Lösung der gekoppelten H²T-Vorgänge im Rahmen eines gemischten Ansatzes – während die Gleichungen für den Zweiphasenfluss in einem monolithischen Konzept gleichzeitig gelöst werden, erfolgt die Kopplung zur Wärmeleitungsgleichung iterativ als partitioniertes Lösungsschema (vgl. Singh et al., 2011a).

Das entwickelte gekoppelte Modell zur numerischen Lösung von nichtisothermen Zweiphasenflüssen in porösen Medien wurde zunächst an dem von McWhorter und Sunada (1990) präsentierten Beispiel des Fluidtransports in einer horizontalen Säule getestet. Dieses klassische Testbeispiel wurde in seiner originären Formulierung bereits in Abschnitt 3.1.4 erwähnt und hier um nichtisotherme Aspekte erweitert. Im initialen Zustand wurde die Säule als teilgesättigt angenommen, wobei die Poren mit einem homogenen Gemisch aus Wasserdampf und Luft gefüllt sind. Während dieses Gemisch eine Temperatur von 353,15 K aufweist, wurde zur Initiierung von Transportprozessen am linken Ende der Säule Wasser mit einer Temperatur von 283,15 K injiziert, die über einen Zeitraum von 7.000 s numerisch simuliert wurden (zu Details von Modell, Anfangs- und Randbedingungen siehe auch Abb. 9).

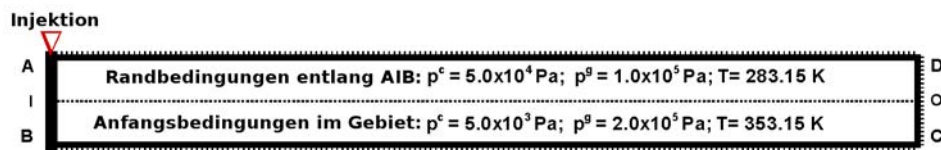


Abbildung 9: Nichtisotherme Erweiterung des Beispiels von McWhorter und Sunada (1990) für Zweiphasenfluss in porösen Medien. Schematische Modelldarstellung mit Rand- und Anfangsbedingungen.

Das betrachtete Berechnungsgebiet wurde im Rahmen der gekoppelten Finite-Element-Analyse durch 260 eindimensionale Elemente mit linearen Ansatzfunktionen räumlich diskretisiert. Während die beteiligten Porenfluide in Analogie zu den originalen Benchmarkbedingungen von McWhorter und Sunada (isotherme Transportprozesse von Öl und Wasser als fluiden Phasen) gleiche Eigenschaften aufweisen (Dichte: $1.000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, dynamische Viskosität: $0,001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$), sind weitere Parameter des porösen Mediums sowie die Materialeigenschaften der festen Phase in Tabelle 2 gegeben.

Tabelle 2: Materialeigenschaften der festen Phase für die nichtisotherme Erweiterung des Beispiels von McWhorter und Sunada (1990) für Zweiphasenfluss in porösen Medien.

Eigenschaft	Wert	Einheit
Dichte	2.000	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
Wärmekapazität	1.091	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
Wärmeleitfähigkeit	0,42	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
Eindringdruck	5.000	Pa
Intrinsische Permeabilität	$1,0\times 10^{-10}$	m^2
Porosität	0,3	–

Am Vergleich des für den isothermen Fall numerisch ermittelten Verlaufs der Porenwassersättigung für einen Zeitpunkt 7.000 s nach Beginn der Wasserinjektion mit einer von McWhorter und Sunada (1990) angegebenen (quasi)analytischen Lösung kann die Güte und Zuverlässigkeit des beschriebenen Modellansatzes zum Zweiphasenfluss in porösen Medien nachgewiesen werden (vgl. Abb. 10). Im weiteren Projektverlauf wurde das nichtisotherme Verhalten des betrachteten Systems mit unterschiedlichen Prozessannahmen untersucht:

- Bei Betrachtung eines vollständig nichtisothermen Falls wurden die Dichte und dynamische Viskosität der fluiden Phasen, die spezifische Wärmekapazität und die Wärmeleitfähigkeit sowie der Eindringdruck (über Oberflächenspannung und Benetzungswinkel) als temperaturabhängig angesehen. Spezifische Relationen sind in Singh et al. (2011a) und der dort zitierten Literatur angegeben.

- Unter der Annahme, dass Kapillardruckphänomene nicht von der Temperatur abhängig seien, wurde der Eindringdruck als Parameter des Kapillardruck-Sättigungs-Modells nach Brooks-Corey konstant gehalten.
- Zur Abschätzung des Einflusses von Temperatureffekten auf das betrachtete System, deren Ursache in Verdampfungsprozessen zu suchen ist, wurde in einer weiteren Fallstudie die Latentwärmeentwicklung vernachlässigt.

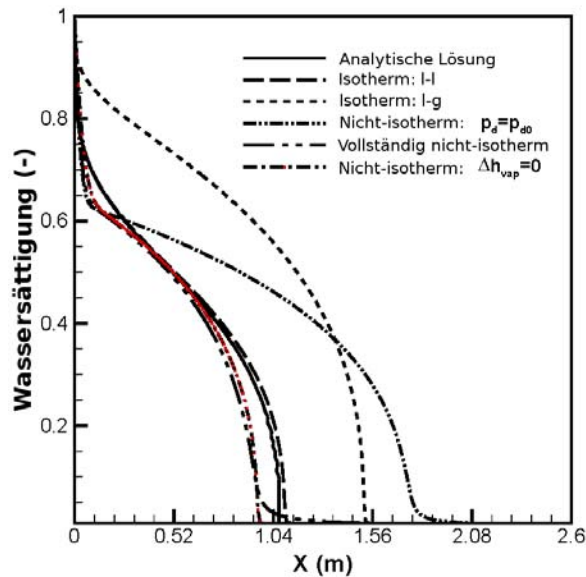


Abbildung 10: Nichtisotherme Erweiterung des Beispiels von McWhorter und Sunada (1990) für Zweiphasenfluss in porösen Medien. Vergleich von Ergebnissen für die Verteilung der Porenwassersättigung im quasistatischen Zustand (nach 7.000 s) in Abhängigkeit von den Prozessbedingungen.

Wie die in Abb. 10 dargestellten Ergebnisse der unterschiedlichen Szenarienstudien besonders am Beispiel des Eindringdrucks auffällig zeigen, kann die Vernachlässigung von Temperatureinflüssen gravierende Auswirkungen auf die Berechnungsergebnisse haben. Zudem wird bereits für den isothermen Fall deutlich, dass die Berücksichtigung der realen Phasenzustände der fluiden Konstituierenden des porösen Systems von großer Bedeutung für die Modellaussagen ist.

Das entwickelte nichtisotherme Modell des Zweiphasenflusses in porösen Medien zeigte eine spezifische Relevanz für Prozesse mit großen Temperaturgradienten und Phasenumwandlungsaspekten (z.B. Transformation flüssiger in gasförmige Bestandteile durch Verdampfung). Bei der im F&E-Verbund CO2-MoPa diskutierten geologischen Speicherung von CO₂ in tiefen, salinen Aquiferen wird die Verpressung des Klimagases im superkritischen Zustand angestrebt. Phasenumwandlungen hin zum gasförmigen Zustand sind z.B. wegen der dann abnehmenden Speicherkapazität nicht gewünscht und unter den herrschenden physikalischen Bedingungen auch nicht zu erwarten. Auch ist in den für die Verpressung von CO₂ in Aquiferspeicher bevorzugten geologischen Tiefen nicht

mit den extremen Temperaturbedingungen zu rechnen, wie sie für tiefe Geothermieprojekte typisch sind und dort zwingend die Berücksichtigung nichtisothermer Effekte erfordern (siehe beispielsweise Taron und Elsworth, 2009). Aus diesen Gründen wurden im Rahmen des dargelegten Projekts über das präsentierte Beispiel hinaus keine weiteren konkreten Anwendungen der nichtisothermen Modelle untersucht. Die vorliegenden Verfahren und Algorithmen zur Kopplung von Mehrphasenflüssen mit Wärmetransportvorgängen in porösen Medien sind einsatzbereit und können vorzugsweise im Kontext eines gemischten Lösungskonzepts problemlos iterativ, partitioniert mit der Simulation mechanischer Deformationsprozesse verknüpft werden. Spezifische Modellentwicklungen zur Simulation nichtisothermen Verhaltens des Untergrundes bei der geologischen CO₂-Speicherung, die sich insbesondere mit der realistischeren Modellierung der temperaturabhängigen Charakteristika von Gasgemischen und der Erfassung von thermisch-hydraulischen Kopplungseffekten (z.B. Joule-Thomson-Effekt, viskose Erwärmung) befassen wurden im Rahmen von Untersuchungen zur Verpressung von CO₂ in (nahezu) ausgebeutete Erdgaslagerstätten zu Zwecken des Enhanced Gas Recovery (EGR) durchgeführt (vgl. Singh et al., 2011b) und stehen im Simulationsprogramm OGS in vollem Umfang zur Verfügung.

2.1.7 Anwendungssimulationen und Szenarienstudien: Mechanisches Schädigungsverhalten

Im Rahmen der Untersuchungen zum isothermen Zweiphasenfluss in deformierbaren porösen Medien wurde ein Testbeispiel zur Untersuchung des Schädigungsverhaltens an der Grenzfläche zwischen einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht der betrachteten geologischen Formation definiert.

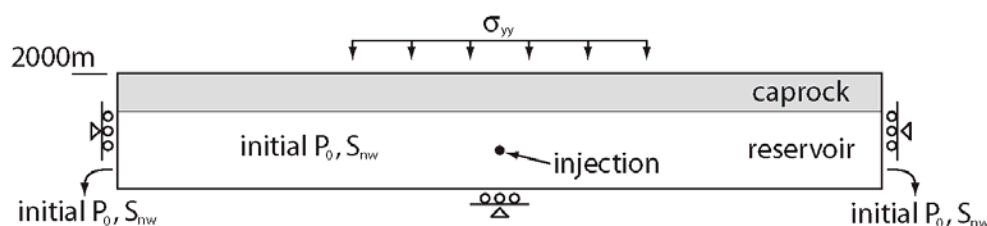


Abbildung 11: Berechnungsgebiet mit Randbedingungen für ein Testbeispiel zur Simulation des isothermen Zweiphasenflusses und der elastischen mechanischen Deformation (H^2M -Problem) unter Berücksichtigung potenziellen Schädigungsverhaltens.

Das zweidimensionale Berechnungsgebiet stellt einen Vertikalschnitt der Länge 100 m und der Höhe 10 m dar, wobei die Grenzfläche zwischen der Reservoir- und der darüber liegenden Deckgebirgsschicht 6 m oberhalb des als undurchlässig angenommenen unteren Randes des betrachteten Gebiets liegt. Es wird angenommen, dass die Reservoirschicht in gesättigter Form mit einem Porenfluid in flüssigem Zustand gefüllt ist. Das

CO₂ wird über eine punktförmige Quelle mittig im betrachteten Querschnitt des Berechnungsgebiets injiziert (siehe Abb. 11).

Zunächst wurde ein sehr konservatives Injektionsszenario mit moderaten Material- und Prozessbedingungen betrachtet, die einem möglichen Speicherhorizont in etwa 2.000 m Tiefe entsprechen. Die Anfangsbedingungen wurden entsprechend der hydrostatischen Situation für die Fluide und den lithostatischen Eigenschaften für die Gesteine definiert. Dabei wurde der hydrostatische Zustand des Porendrucks von 20 MPa für das gesamte Gebiet angenommen. Die mechanische Belastungsrandbedingung in Form einer vertikalen Flächenpressung entspricht am oberen Rand dem lithostatischen Druck von 44 MPa. An den Seitenrändern wirkt eine horizontale Flächenpressung, deren Betrag unter Berücksichtigung der Querkontraktion der Gesteine 60% des Betrags des lithostatischen Drucks entspricht. Das CO₂ wurde mit einem konstanten Druck von 22 MPa injiziert. Um die Ausbildung eines möglichst natürlichen, ungestörten mechanischen Spannungsfeldes zu erreichen wurde an den vertikalen Gebietsrändern die Horizontalverschiebung unterbunden, am unteren Gebietsrand hingegen die Vertikalverschiebung. Bereits hier soll darauf hingewiesen werden, dass in realen geologischen Reservoiren wegen möglicher tektonischer Spannungsanteile eine größere Gefahr von Instabilitäten bestehen wird, als es den Ergebnissen im betrachteten hypothetischen, konservativen Beispiel entspricht.

Der Reservoirschicht wurden Materialparameter für die Gesteinsmatrix zugeordnet, die einem typischen Sandstein entsprechen: Elastizitätsmodul 14,4 GPa, Querkontraktionszahl 0,2 und Biot-Koeffizient 0,8. Für die Deckgebirgsschicht wurden analoge Parameter gewählt, um stabilere physikalische Bedingungen für die numerische Lösung zu erzeugen. Weitere Modellparameter sind Tabelle 3 zu entnehmen.

Tabelle 3: Eigenschaften der Fluide und Gesteine für das H²M-Problem bei Betrachtung einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht unter Berücksichtigung potenzieller Schädigung.

Fluideigenschaften			
Eigenschaft	Einheit	Porenfluid	CO ₂
Restsättigung	–	0,3	0,02
Maximalsättigung	–	0,7	0,98
Gesteinseigenschaften			
Eigenschaft	Einheit	Deckgebirgsschicht	Reservoirschicht
Porosität	–	0,02	0,19
Intrinsische Permeabilität	m ²	1,9 × 10 ⁻¹⁷	1,9 × 10 ⁻¹³

Basierend auf dem berechneten Porendruck p und den ermittelten Hauptspannungen $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$ in der Gesteinsmatrix wurde die Entwicklung von so genannten Sicherheitsfaktoren f_s^H für die hydraulische Schädigung mit

$$f_s^H = \frac{p}{\sigma_3} \quad (2)$$

und f_s^S für die Scherschädigung nach dem Mohr-Coulomb-Kriterium (vgl. Jaeger et al., 2007)

$$f_s^S = \frac{|\sigma_1 - \sigma_3|}{2C_h \cos \varphi + [(\sigma_1 + \sigma_3) - 2p] \sin \varphi} \quad (3)$$

im Rahmen der beiden grundlegenden numerischen Ansätze untersucht. Die Materialparameter C_h (Kohäsionsfaktor) und φ (interner Reibungswinkel) können für gängige Gesteinsarten der Literatur entnommen werden, hier wurden die Werte $C_h = 50$ MPa und $\tan \varphi = 0,6$ gewählt. Das Risiko lokaler potenzieller Schädigung besteht in den materiellen Punkten, in denen mindestens einer der beiden Sicherheitsfaktoren einen Wert größer als Eins annimmt.

Die Ergebnisse für die Simulation von Zweiphasenflüssen in porösen Medien zeigten zunächst für das betrachtete, stark vereinfachte System einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht sowie das angenommene konservative Injektionsszenario keine signifikanten Differenzen hinsichtlich der Modellierung als rein hydraulischer H²-Prozess bzw. als hydraulisch-mechanisch gekoppelter H²M-Prozess, wenn lediglich die Ausbreitung der CO₂-Fahne im Untergrund betrachtet wird (siehe Abb. 12).

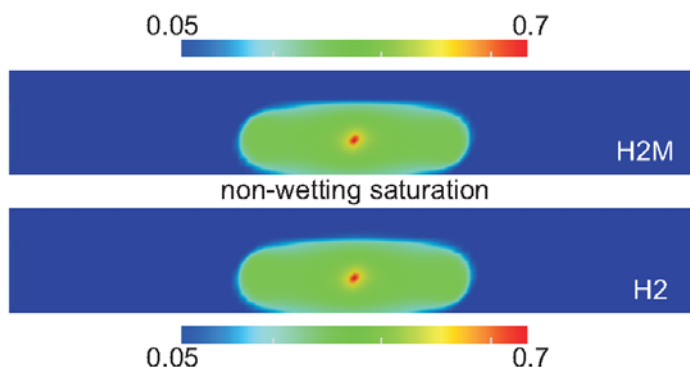


Abbildung 12: Vergleich der numerischen Lösungen für den Zweiphasenfluss in porösen Medien mit (oben) und ohne (unten) Berücksichtigung von mechanischen Deformationsprozessen.

Aussagen zur Reservoirintegrität und der potenziellen Schädigung intakten Gesteins durch physikalische Prozesse während der CO₂-Injektion können jedoch nur im Rahmen einer gekoppelten H²M-Simulation getroffen werden. Die Ergebnisse entsprechender

Analysen für das skizzierte Beispiel sind für zwei unterschiedliche Werte des Kohäsionsfaktors in Abb. 13 dargestellt. Mit dem niedrigeren Wert für den Kohäsionsfaktor soll ein Fall imitiert werden, bei dem eine Vorschädigung im Gestein anzutreffen ist.

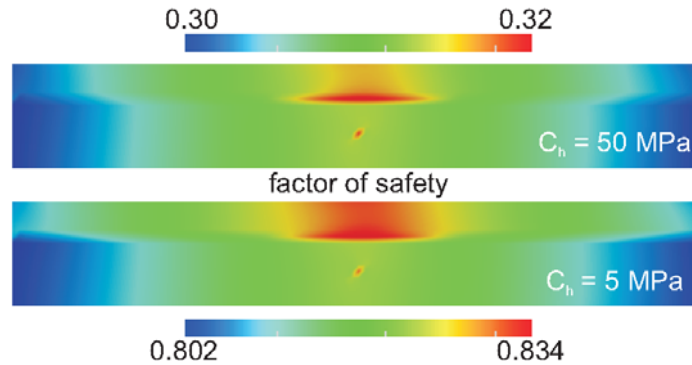


Abbildung 13: Sicherheitsfaktoren für die Scherschädigung bei Verwendung unterschiedlicher Kohäsionsfaktoren.

Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass der Sicherheitsfaktor für eine potenzielle Scherschädigung in keinem der beiden betrachteten Fälle verletzt wird, d.h., unter den simulierten, konservativen Modellbedingungen bezüglich der Anfangsstabilität, der Diskontinuität von Materialeigenschaften über die geologischen Schichten hinweg sowie des Injektionsdrucks ist keine mechanische Schädigung der Formationsmaterialien zu erwarten, bzw. keine weitere Entwicklung eventuell vorhandener Vorschädigungen. Die gefährdeten Abschnitte für die mögliche Entstehung mechanischer Instabilitäten sind jedoch deutlich erkennbar. So besteht das größte Risiko einer Scherschädigung offensichtlich am Übergang zwischen der Reservoir- und der Deckgebirgsschicht nahe der Injektionsbohrung, was sich auch mit Untersuchungen von Rutqvist und Tsang (2002) deckt. Obwohl es in den Abbildungen wegen der Dominanz der materialbedingten Effekte nicht sehr ausgeprägt ist, kann zusätzlich ein Bereich erhöhten Risikos einer mechanischen Instabilität am Rand der sich ausbreitenden CO₂-Fahne festgestellt werden. Für erste Untersuchungen des mechanischen Verhaltens des betrachteten Systems an den Grenzflächen zwischen dem Porenfluid und dem injizierten Fluid wurden Material- und Prozessbedingungen gewählt, die sich von den bisher diskutierten konservativen deutlich unterscheiden.

Die Anfangsbedingungen wurden für die weiteren Untersuchungen erneut entsprechend der hydrostatischen Situation für die Fluide und den lithostatischen Eigenschaften für die Gesteine in einer nunmehr betrachteten Tiefe von etwa 3.000 m definiert (zu den grundsätzlichen Modellbedingungen siehe erneut Abb. 11). Ausgehend von einer angenommenen Gesamtmenge von 10.000 t CO₂, die über einen Zeitraum von insgesamt 20 Jahren verpresst werden sollten, ergab sich eine volumetrische Injektionsrate für das CO₂ von $1,87 \times 10^{-3} \text{ m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$. Hierzu wurde die Dichte des superkritischen CO₂ unter Annahme eines geothermischen Gradienten von $25^\circ\text{C} \cdot \text{km}^{-1}$ und einer Temperatur von

10°C an der Erdoberfläche zu 734,27 kg·m⁻³ berechnet (vgl. Span und Wagner, 1996). Die weiteren Eigenschaften der beteiligten Fluide und Gesteine sind in Tabelle 4 zusammengefasst.

Tabelle 4: Eigenschaften der Fluide und Gesteine für das modifizierte H²M-Problem bei Betrachtung einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht.

Fluideigenschaften			
Eigenschaft	Einheit	Porenfluid	CO ₂
Dichte	kg·m ⁻³	1.173	734,27
Dynamische Viskosität	Pa·s	1,252×10 ⁻³	6,24×10 ⁻⁵
Restsättigung	–	0,1	0,1
Maximalsättigung	–	0,9	0,9
Gesteineigenschaften			
Eigenschaft	Einheit	Deckgebirgsschicht (Schiefer)	Reservoirschicht (Sandstein)
Elastizitätsmodul	GPa	0,2	21
Querkontraktionszahl	–	0,2	0,25
Porosität	–	0,01	0,15
Intrinsische Permeabilität	m ²	1,0×10 ⁻²⁰	1,0×10 ⁻¹⁷

Das modifizierte Beispiel wurde u.a. zum Vergleich unterschiedlicher numerischer Ansätze für die Modellierung von Zweiphasenflüssen in porösen Medien genutzt. Konkret handelt es sich dabei um die in Abschnitt 3.1.4 dieses Berichts diskutierte alternative Auswahl von Primärvariablen für das Transportproblem der beteiligten Fluide.

Bei gleichbleibender Injektionsrate konnte beobachtet werden, dass sich die mechanische Stabilität mit der Zeit und bei zunehmender Ausdehnung der unterirdischen CO₂-Fahne verbessert (das heißt, die entsprechenden Werte der Sicherheitsfaktoren verringern sich). Wie Abb. 14 zeigt, ist eine lokale hydraulische Schädigung unter den hier angenommenen Bedingungen ein unwahrscheinliches Ereignis, was sich auch mit Aussagen anderer Autoren deckt (vgl. Rutqvist et al., 2008b). Lediglich bei Verwendung des numerischen pS-Schemas ist für eine kurze Zeit nach Injektionsbeginn lokal in unmittelbarer Umgebung der Injektionsbohrung eine Überschreitung des betreffenden Sicherheitswertes festzustellen.

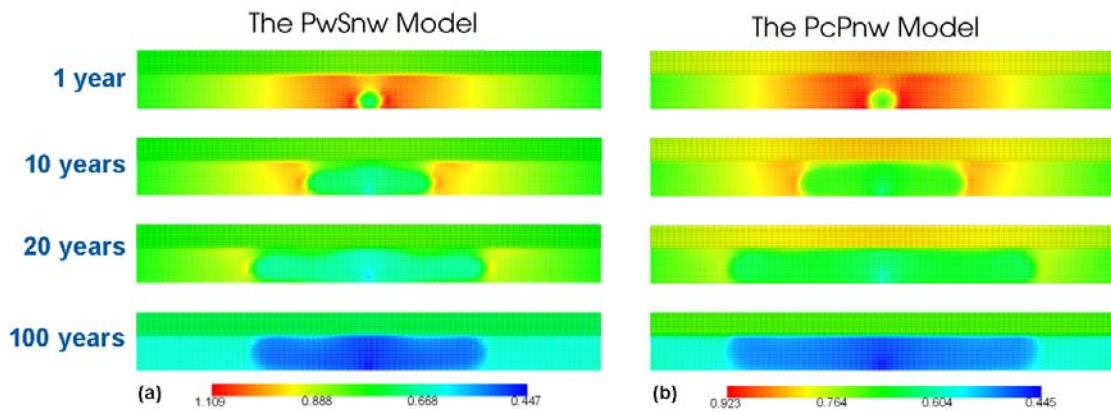


Abbildung 14: Sicherheitsfaktoren für die hydraulische Schädigung nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre). Vergleich der numerischen Ergebnisse des *pS*-Schemas und des *pp*-Schemas.

Zusätzlich zu dem in der Literatur diskutierten und unter den oben angegebenen konservativen Bedingungen auch im hier dargelegten Projekt nachgewiesenen Gefährdungspotenzial an der Grenzfläche zwischen Reservoir- und Deckgebirgsschicht zeigte sich nunmehr deutlich, dass die Gebiete des größten Schädigungsrisikos in der Reservoirschicht während der Injektionsphase konsistent die Außengrenzen der CO₂-Fahne abbilden. Nahezu unmittelbar nach Beendigung der CO₂-Injektion stellte sich im betrachteten Gebiet der natürliche Zustand der mechanischen Stabilität wieder ein.

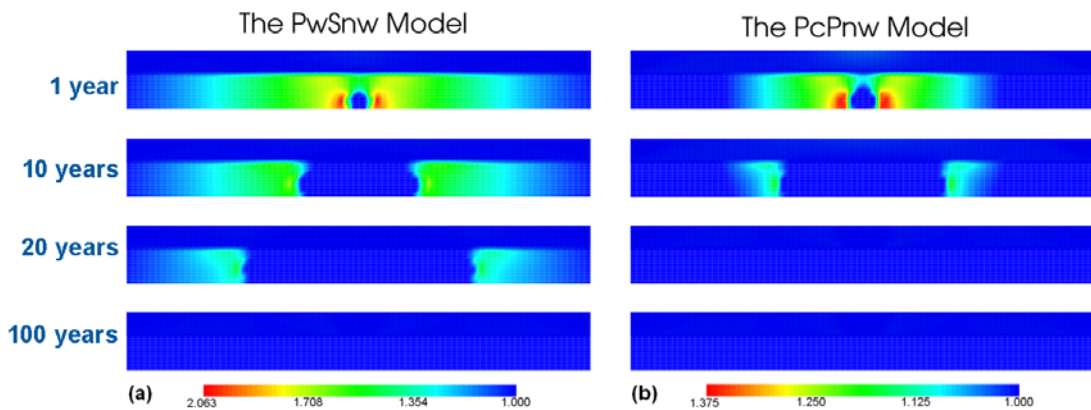


Abbildung 15: Sicherheitsfaktoren für die Scherschädigung nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre). Vergleich der numerischen Ergebnisse des *pS*-Schemas und des *pp*-Schemas.

Die räumliche Verteilung des Risikos mechanischer Instabilitäten basierend auf dem Kriterium der Scherschädigung folgt ähnlichen Trends wie das Risiko einer hydraulischen Schädigung (siehe Abb. 15). Auch hier sind Gebiete an der Front zwischen dem Porenfluid und dem injizierten CO₂ besonders gefährdet. In diesem Zusammenhang ist jedoch zu beachten, dass bei dem hier diskutierten Beispiel keine Vermischung der beiden Fluide zugelassen wurde. Für diesen Fall ist ein geringeres Schädigungsrisiko

anzunehmen, da keine scharfe Ausbreitungsfront mit teils erheblichen Druckgradienten zu erwarten ist.

Im Gegensatz zur Analyse des hydraulischen Schädigungsverhaltens wurde bei der Untersuchung der Scherschädigung ein deutlich größeres Versagensrisiko berechnet. Es tritt besonders in der ersten Zeit nach Injektionsbeginn auf und ist für die Grenzfläche zwischen Reservoir- und Deckgebirgsschicht als auch an den Außengrenzen der CO₂-Fahne innerhalb der Reservoirschicht wahrscheinlich.

Die mechanische Stabilität des Deckgebirges ist von herausragender Bedeutung für die Sicherheit einer geologischen Formation im Fall der Injektion von CO₂ (Schädigungen im Deckgebirge können zur potenziellen Öffnung unerwünschter Leckagewege für das im Vergleich zu natürlichen Porenfluiden leichtere CO₂ führen). Aus diesem Grund wurde das für das Testbeispiel definierte CO₂-Injektionszenario hinsichtlich der Auswirkungen auf die Grenzfläche zwischen der Deckgebirgs- und der Reservoirschicht nochmals gesondert im Detail für beide Schädigungsmechanismen untersucht.

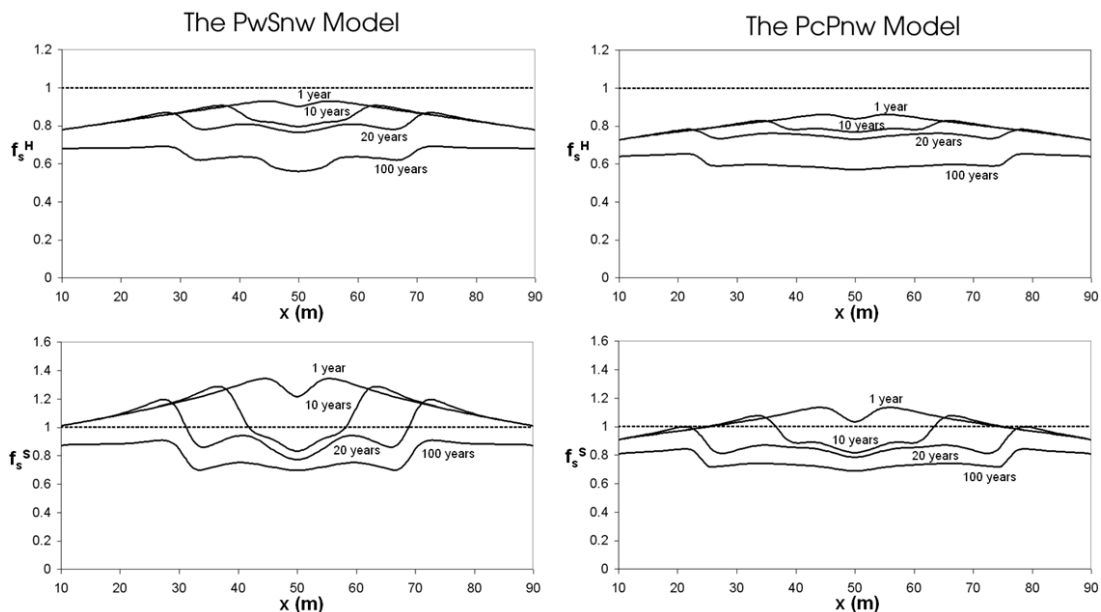


Abbildung 16: Sicherheitsfaktoren f_s^H für die hydraulische Schädigung (obere Reihe) und f_s^S für die Scherschädigung entlang der Grenzfläche zwischen Deck- und Reservoirschicht nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre. Vergleich der numerischen Ergebnisse des pS-Schemas und des pp-Schemas).

Wie in Abb. 16 zu erkennen ist, besteht bei der gewählten Injektionsrate von 500 Tonnen CO₂ pro Jahr kein Risiko einer hydraulischen Schädigung an der Grenzfläche zwischen den beiden Formationsschichten. Ein signifikantes Versagenspotenzial besteht jedoch hinsichtlich einer möglichen Scherschädigung. Das Risiko der Bildung von Mikrorissen im Gestein der Deckgebirgsschicht aufgrund hoher Scherbeanspruchung besteht besonders in der ersten Zeit nach Injektionsbeginn und wird im Fall der numerischen Nutzung des pS-Schemas als erheblich größer im Vergleich zum pp-

Schema eingeschätzt. Die Risiken einer mechanischen Schädigung verringern sich jedoch im Verlauf des Injektionsprozesses und besonders nach dessen Beendigung deutlich.

Aus konzeptioneller Sicht unterstreicht das hier diskutierte Beispiel die in Abschnitt 3.1.4 erläuterten Ergebnisse, dass die Auswahl des grundlegenden numerischen Ansatzes bezüglich der Primärvariablen für das Transportproblem der beteiligten Fluide (pS- oder pp-Schema) einen signifikanten Einfluss auf die Charakteristika der CO₂-Ausbreitung in der Formation besitzt. Damit gewinnt die Wahl der Primärvariablen auch wesentliche Bedeutung für die Vorhersage der mechanischen Gebirgsstabilität bei der geologischen Verbringung von CO₂. Unter den hier definierten Bedingungen werden mit dem pS-Schema größere Wahrscheinlichkeiten für eine mechanische Schädigung ermittelt. In der Praxis ist für die Wahl der geeigneten Primärvariablen beispielsweise zu beachten, ob in der relevanten Formation Kapillarwirkungen eine wesentliche Rolle spielen.

2.1.8 Anwendungssimulationen und Szenarienstudien: Reservoirsimulation

In den vorhergehenden Abschnitten dieses Berichts wurde die Entwicklung der Modelle und numerischen Algorithmen für die Simulation von gekoppelten thermo-hydro-mechanischen Prozessen in porösen Medien mit spezieller Anwendung auf die geologische CO₂-Speicherung in tiefen, salinen Aquiferen vorgestellt. Die Erarbeitung dieses Instrumentariums war Ziel des hier dargelegten Teilprojekts im F&E-Verbund CO₂-MoPa. Im Kontext der bisherigen Übersichtsdarstellungen, die durch Literaturangaben mit Verweis auf detailliertere Informationen ergänzt wurden, standen die Diskussion der Analyse spezifischer physikalischer Prozesse einschließlich ausgewählter Kopplungskonzepte und deren Validierung mit Benchmarks unterschiedlicher Komplexität im Mittelpunkt.

Obwohl im F&E-Verbund CO₂-MoPa die Entwicklung und Validierung von Methoden für die Charakterisierung, Erkundung und Simulation sowie das Monitoring virtueller Speicherformationen geplant waren, konnten die erarbeiteten Simulationsinstrumentarien in der abschließenden Projektphase auch an einem Anwendungsbeispiel basierend auf realen geologischen Modellen mit hypothetischen Prozessparametern getestet werden. Wesentliche Fragestellungen waren dabei die Untersuchung der grundsätzlichen physikalischen Relevanz der entwickelten gekoppelten Modelle, der Analyse von Effizienz und Stabilität der numerischen Modelle bei Betrachtung großskaliger Anwendungen sowie das Systematisieren von Hinweisen zur Optimierung von Monitoringkonzepten. Für den Einsatz zweckmäßiger Monitoringverfahren an geeigneten Positionen sind beispielsweise Studien zur Abschätzung der zu erwartenden Größenordnung von Porendrucksignalen und der geographischen Ausbreitung der CO₂-Fahne von Interesse.

Für die Anwendungssimulation wurde zunächst von Verbundpartnern des Landesamts für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein ein statisches geologisches Modell

des Gebiets Wagrien, einem Bereich des Ostholstein-Blocks, generiert und mit lithologischen sowie petrophysikalischen Parametern (Porositäten, Permeabilitäten) ergänzt. Grundlage waren dafür der von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) erstellte Geotektonische Atlas von Norddeutschland sowie Daten von Bohrungen aus dem betrachteten Gebiet, die im Kohlenwasserstoff-Fachinformationssystem verfügbar sind. Das statische geologische Modell wurde zunächst mit der speziell für diese Zwecke entwickelten kommerziellen Software Gocad erarbeitet und für die Simulation von Verbundpartnern der CAU Kiel nach Einfügen spezifischer geometrischer Oberflächen (z.B. für die Definition von Randbedingungen) in ein PETREL-Modell transferiert. Aus diesem wurde ebenfalls an der CAU Kiel ein Simulationsgitter generiert, das über eine im Rahmen von CO₂-MoPa entwickelte Schnittstelle in ein Simulationsmodell für die wissenschaftliche Software OGS umgewandelt werden konnte (vgl. Abb. 17).

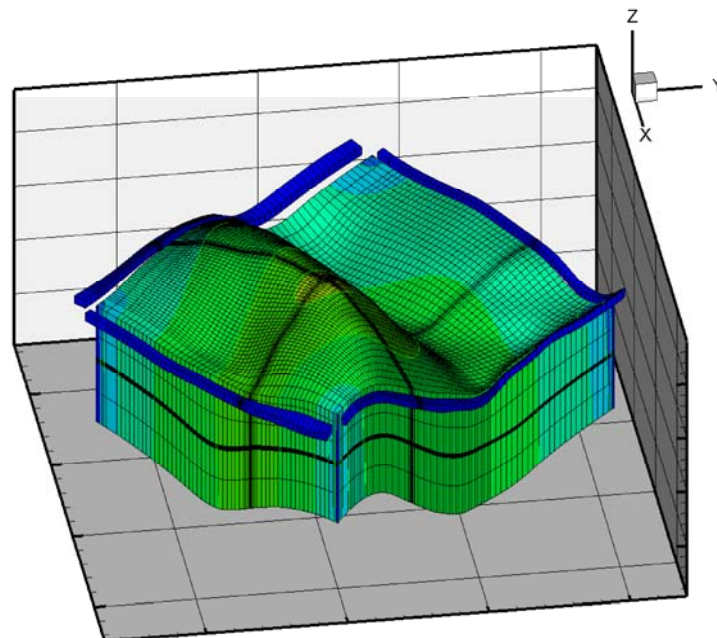


Abbildung 17: Simulationsgitter für den Standort Wagrien zur Modellierung einer virtuellen geologischen CO₂-Speicherung.

Das ausgewählte Gebiet hat eine horizontale Ausdehnung von 28 x 29 km mit einer Mächtigkeit der geologischen Horizonte von insgesamt ca. 1.250 m. Es beinhaltet zwei potenzielle Reservoirschichten, drei halbdurchlässige Deckgebirgsschichten und zwei Barrierekomplexe. Eine virtuelle Injektionsbohrung wird in die Flanke einer Antiklinalstruktur integriert, wobei der untere Injektionspunkt in etwa 2.200 m Tiefe im mittleren Bundsandstein liegt (vgl. Rosenbaum et al., 2012 sowie weitere Schlussberichte von Partnern des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa, die wegen der unterschiedlichen Laufzeit der Teilprojekte teilweise zum Zeitpunkt der Erstellung dieses Berichts noch nicht veröffentlicht sind). Das Berechnungsgitter für die Finite-Element-Simulationen besteht aus 93.434 Hexaederelementen mit insgesamt 102.898 Gitterknoten.

Um das prinzipielle Lösungsverhalten des entwickelten Simulationsinstrumentariums und die physikalische Relevanz von Berechnungsergebnissen bei großskaligen Anwendungen zu testen, wurde zunächst der Fall des isothermen Einphasenflusses ohne Berücksichtigung von mechanischen Deformationen betrachtet. Das Formationsfluid wird im gesamten Modellgebiet mit einer Dichte von $1.000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, einer dynamischen Viskosität von $5,1 \times 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ und einem Anfangsdruck von 1 MPa angenommen. Über die virtuelle Injektionsbohrung wird ein Fluid mit gleichen Eigenschaften 24 Stunden lang mit einer konstanten Rate von $0,1 \text{ m}^3\cdot\text{s}^{-1}$ injiziert. Der Hauptinjektionshorizont weist eine intrinsische Permeabilität von 50 mD sowie eine Porosität von 0,13 auf. In Abb. 18 ist die Porendruckverteilung nach Abschluss der Injektion dargestellt.

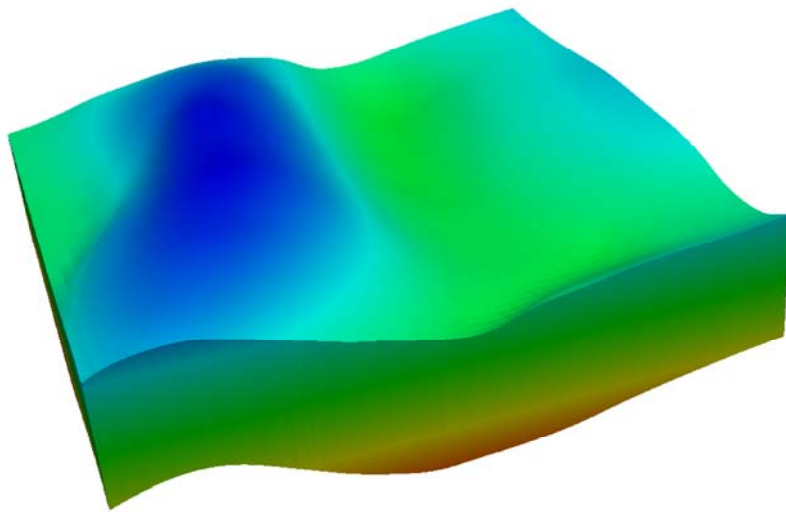


Abbildung 18: Simulation des Einphasenflusses in den porösen Reservoir- und Deckgebirgsschichten des Standorts Wagrien mit dem FEM-Simulator OGS. Darstellung der Verteilung des Porendrucks für hypothetische Prozessbedingungen.

Das Lösungsverhalten für das hier dargelegte Szenario war uneingeschränkt stabil, das Ergebnis für den dargestellten Lastschritt lag nach wenigen Minuten vor. Ein Vergleich der mit OGS simulierten Porendruckverteilung im Bereich 17...38 MPa mit Daten einer Eclipse-Modellierung (CAU Kiel; 22,2...36,4 MPa) brachte sehr gute Ergebnisse.

Von Verbundpartnern der CAU Kiel wurde im Weiteren das betrachtete Modellgebiet Wagrien auf der Basis von Labordaten, die aus anderen Teilprojekten des F&E-Verbundes CO₂-MoPa gewonnen werden konnten, sowie mittels Literaturangaben für den isothermen Fall des Zweiphasenflusses parametrisiert. Vom hypothetischen Prozess der CO₂-Injektion über einen Zeitraum von 40 Jahren bei einer konstanten Injektionsrate von $2.500 \text{ m}^3\cdot\text{d}^{-1}$ sowie einer Nachinjektionszeit von 80 Jahren wurden mit der wissenschaftlichen Finite-Element-Software OGS während der Projektlaufzeit erste Teilprozesse untersucht. In Abb. 19 ist ein ausgewähltes Ergebnis für den Porendruck dargestellt, dass das typische Ausbreitungsverhalten des injizierten CO₂ im Untergrund zeigt.

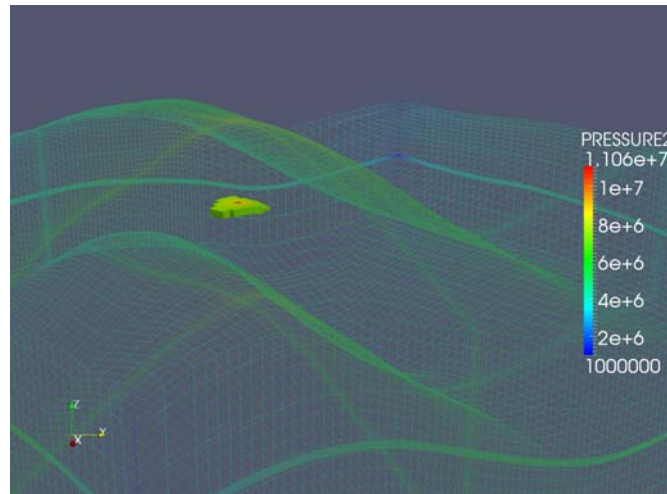


Abbildung 19: Simulation des Zweiphasenflusses in porösen Medien bei der hypothetischen CO₂-Injektion in eine potenzielle Speicherformation des Standorts Wagrien mit dem FEM-Simulator OGS. Darstellung der Verteilung des Porendrucks.

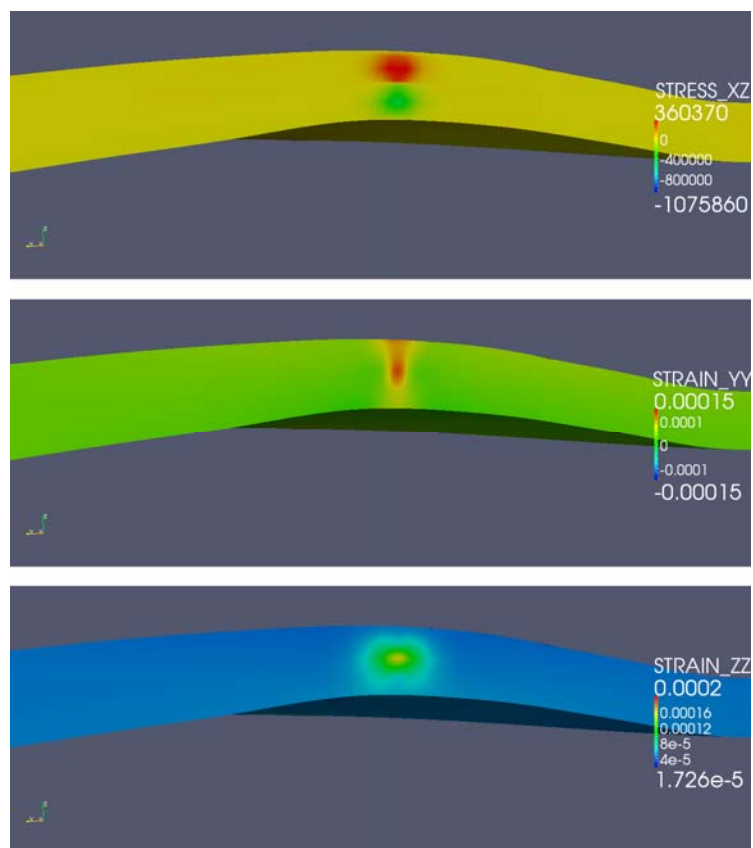


Abbildung 20: Simulation des Zweiphasenflusses gekoppelt mit mechanischen Deformationsprozessen bei der hypothetischen CO₂-Injektion in eine potenzielle Speicherformation des Standorts Wagrien mit dem FEM-Simulator OGS. Darstellung der Verteilung von Koeffizienten des Spannungstensors im Nahfeld der virtuellen Injektionsbohrung.

Für den simulierten Zeitraum zeigten die Simulationsergebnisse für den Zweiphasenfluss im betrachteten Modellgebiet eine gute Übereinstimmung zwischen den Simulatoren OGS (UFZ) und Eclipse (CAU Kiel) bezüglich der grundlegenden Effekte. Gleiches lässt sich auch für die H²M-Kopplung im Vergleich zwischen den Programmen OGS und DuMuX (Universität Stuttgart) sagen. Ausgewählte OGS-Ergebnisse des mechanischen Deformationszustandes sind für diesen Fall in Abb. 20 dargestellt.

Mit den in diesem Abschnitt diskutierten Ergebnissen kann gezeigt werden, dass die entwickelten und in OGS implementierten Modelle zur Simulation gekoppelter Prozesse in porösen Medien auch auf der Skala von Anwendungssimulationen physikalisch sinnvolle Resultate liefern. Noch beobachtete quantitative Variationen zwischen Ergebnissen unterschiedlicher Simulatoren sind auf konzeptionelle und algorithmische Unterschiede der verwendeten Softwareplattformen zurückzuführen, die sich bei der vergleichsweise groben Diskretisierung des Modellgebiets und vereinfachenden Annahmen bezüglich Material- und Prozessbedingungen stärker auswirken. Wie Benchmarks und reale Testbeispiele aus anderen Projekten bzw. Anwendungsbereichen gezeigt haben, führen Modellverfeinerungen (z.B. Gittergrößen) auf der Basis von Konvergenzstudien und stärker an reale Bedingungen ausgerichtete Parametrisierungen der konstitutiven Beziehungen sowie der den Prozess steuernden Anfangs- und Randbedingungen zu vergleichbaren Ergebnissen zwischen unterschiedlichen Simulationsprogrammen, wenn die Physik der Prozesse in den verwendeten Modellen adäquat abgebildet wird.

2.1.9 Erweiterte numerische Systembetrachtungen: Unsicherheitsanalysen

In diesem und im folgenden Abschnitt werden Konzepte und Ergebnisse von Studien vorgestellt, die im Zuge der Antragstellung nicht explizit Gegenstand des hier dargelegten Teilprojekts des F&E-Verbundes CO2-MoPa waren, die aber wesentlich zu realitätsnahen numerischen Simulationen der gekoppelten Prozesse bei der geologischen CO₂-Speicherung beitragen. Es handelt sich dabei um Unsicherheitsanalysen in Bezug auf verschiedene Systemparameter (insbesondere konstitutiver Art), die bei lückenhaftem Datenangebot zur Parametrisierung der Modelle die Berechnungsergebnisse im Sinne vorgegebener Wahrscheinlichkeiten vertrauenswürdiger gestalten, sowie um die Einbeziehung vorhandener geologischer Diskontinuitäten (z.B. Verwerfungen, Brüche) der betrachteten Gesteinsformationen in die Simulationsmodelle. In beiden Fällen wurden Modellentwicklungen im Rahmen des hier dargelegten Projekts vorgenommen, für Testbeispiele wurde zunächst auf vorhandene Daten geothermischer Reservoirs zurückgegriffen, da die dort ablaufenden thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Prozesse prinzipiell mit den gleichen Ansätzen simuliert werden können, die hier für die Verpressung von CO₂ in tiefe, saline Aquifere erarbeitet wurden. Die systematische Weiterentwicklung und Untersuchung von Methoden zur Unsicherheitsanalyse und zur modellmäßigen Erfassung geologischer Diskontinuitäten war für eine beantragte und positiv begutachtete zweite Phase des F&E-Vorhabens CO2-MoPa vorgesehen.

Datenunsicherheit bedingt durch ein lückenhaftes Datenangebot ist eines der größten Probleme bei der zuverlässigen numerischen Reservoiranalyse in geotechnischen Anwendungen wie der geologischen CO₂-Speicherung. Aus technischen und Kostengründen können Bohrlochdaten, die eine direkte Zugänglichkeit zu den betrachteten Materialien ermöglichen, nur lokal und in begrenztem Umfang erhoben werden. Großflächige geophysikalische Messungen (z.B. aktive und passive Seismik, Geoelektrik) sind ebenfalls sehr kostenintensiv, liefern zudem nur indirekte Aussagen über die hydraulischen und mechanischen Eigenschaften des Untergrundes, die durch mathematische Modelle aus Wellengeschwindigkeiten oder elektrischen Widerständen approximiert werden müssen, und sind in der Regel auf bestimmte Tiefenbereiche begrenzt. Das führt dazu, dass bei der Lösung numerischer Feldprobleme die Modelle teilweise mit Daten parametrisiert werden, die aus verfügbaren Messungen inter- oder extrapoliert wurden und daher mit Unsicherheiten behaftet sind.

Im industriellen geotechnischen Bereich (z.B. Erdöl- und Erdgasgewinnung) wird zur Parametrisierung von Berechnungsmodellen häufig die Methode des so genannten *history matching* genutzt, bei der die bekannte Geschichte von Betriebsprozessen (z.B. Entwicklung von Förderraten und/oder Reservoirdrücken) durch Parameteranpassung numerisch möglichst genau simuliert wird. Auf der Basis dieser Parametrisierungen sind nachfolgend Prognosesimulationen für den weiteren Reservoirbetrieb möglich. Es ist bekannt, dass derartige inverse Modellierungen (Ermittlung von Parametern, als „Ursache“ der Prozesse, aus den Prozessverläufen – aus der „Wirkung“ der Parameter) nicht zu einer eindeutigen Lösung führen können. Daher werden beispielsweise im Rahmen von Monte-Carlo-Analysen unterschiedliche Realisierungen der Modellparametrisierung untersucht, die zu vergleichbaren Simulationsergebnissen führen. Damit können die Parameterunsicherheiten erfasst und die Relevanz von Variationen einzelner Parameter für die Entwicklung physikalisch-chemischer Feldvariablen untersucht werden. Zu diesem Zweck wird mit geostatistischen Techniken (z.B. unconditionierte oder konditionierte Gauss-Simulation) eine Vielzahl stochastisch äquivalenter Parameterverteilungen ermittelt, die die unvollständige Datenlage berücksichtigen. Diese Vorgehensweise der Modellparametrisierung ist besonders dann zweckmäßig, wenn kein *history matching* durchgeführt werden kann, da für einen Standort, der beispielsweise für eine geologische CO₂-Speicherung, für die Gewinnung geothermischer Energie oder für die Endlagerung vorgesehen ist, vorher keine geotechnische Nutzung erfolgte. Die detaillierte Darstellung der konzeptionellen und methodischen Grundlagen von Unsicherheitsanalysen sowie des im Folgenden diskutierten Beispiels ist in der Arbeit von Watanabe et al. (2010) und darin zitierter Literatur angegeben.

Für Unsicherheitsanalysen thermo-hydro-mechanisch gekoppelter Prozesse, die mit den im hier dargelegten Projekt entwickelten Modellen und Softwareinstrumentarien simuliert werden können, wurde zunächst ein typisches petrothermales System in Kristallin-gestein zur Gewinnung geothermischer Energie untersucht. Das betrachtete gekoppelte

System umfasst thermo-hydraulische Fließvorgänge in porösen Medien, advektiven und diffusiven Wärmetransport sowie thermoelastische mechanische Deformationsvorgänge, welche mit den in die wissenschaftliche Finite-Element-Software OGS implementierten Modellen simuliert wurden. Die thermischen, geohydraulischen und geomechanischen Reservoirparameter wurden als räumlich zufällig verteilte Variable betrachtet und die unterschiedlichen Parameterrealisierungen mit einem konditionierten Gauss-Schema ermittelt. In diesem Zusammenhang wurden vorhandene Bohrlochdaten als bekannt vorausgesetzt.

Das betrachtete Beispiel basiert auf Daten des wissenschaftlichen Geothermie-Pilotprojekts in Bad Urach mit einer Reservoirtiefe von 3.850 m bis 4.150 m. Die beiden Bohrungen zur Injektion und Produktion von Wasser liegen 400 m voneinander entfernt (vgl. Abb. 21).

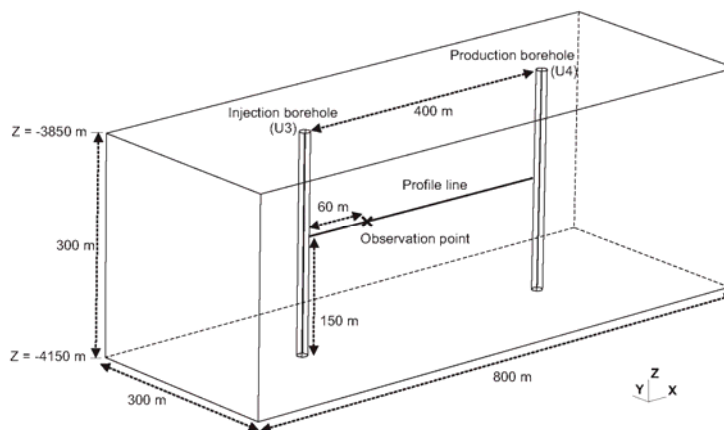


Abbildung 21: Schematische Modelldarstellung des Berechnungsgebiets zur Untersuchung von Parameterunsicherheiten.

Als Anfangsbedingungen wurden für die verschiedenen Feldvariablen lineare, tiefenabhängige Verteilungen für den hydrostatischen Porendruck, den lithostatischen Spannungszustand und die Temperaturverteilung unter Annahme eines geothermischen Gradienten von $0,3 \text{ K} \cdot \text{m}^{-1}$ ermittelt. An der Injektionsbohrung wurde ein Überdruck von 10 MPa, an der Produktionsbohrung ein Unterdruck von 10 MPa eingestellt, das injizierte Fluid hatte eine Temperatur von 50°C . Horizontalverschiebungen wurden an allen vertikalen Gebietsrändern, Vertikalverschiebungen am unteren Gebietsrand verhindert. Auf den oberen Gebietsrand wurde in vertikaler Richtung der lithostatische Druck aufgebracht.

Die statistischen Parameter für die untersuchten und variierten Gesteinseigenschaften sind in Tabelle 5 zusammengefasst. Als Wahrscheinlichkeitsverteilungen wurden die Normalverteilung und ein Varioagrammkonzept mit kugelförmiger Oberfläche gewählt. Da nicht ausreichend Daten für eine sinnvolle statistische Darstellung vorhanden waren, wurden die Gesteinsdichte und der thermische Ausdehnungskoeffizient als konstant angenommen.

Table 5: *Zugewiesene statistische Eigenschaften für ausgewählte Gesteinsvariable zur Untersuchung von Parameterunsicherheiten.*

Parameter	Mittelwert	Standard- abweichung	Einheit
Intrinsische Permeabilität (ungestört)	$21,8 \times 10^{-18}$	$7,17 \times 10^{-18}$	m ²
Porosität	$4,05 \times 10^{-3}$	$8,2 \times 10^{-4}$	–
Wärmeleitfähigkeit	2,79	0,08	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹
Spezifische Wärmekapazität	850	55,5	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Elastizitätsmodul	64	0,8	GPa
Querkontraktionszahl	0,225	0,08	–

Zunächst wurden zehn Monte-Carlo-Simulationen des vollständigen, gekoppelten Finite-Element-Problems durchgeführt, um den Einfluss stochastische Verteilungen der einzelnen Parameter auf das Langzeitverhalten des Reservoirs zu untersuchen. Dabei erwies sich, dass Variationen der intrinsischen Permeabilität (hier: um zwei Zehnerpotenzen) den weitaus größten Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben (vgl. Watanabe et al., 2010). Der spezifischen Wärmekapazität des Gesteins, die dessen Wärmespeicherfähigkeit charakterisiert, kam der folgende Rang in der Sensibilität der untersuchten physikalischen Parameter zu.

Nach der Sensitivitätsanalyse für die einzelnen Parameter wurden für Variationen der Parameter, die sich als am sensitivsten erwiesen, jeweils 100 Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt, um statistisch repräsentative Berechnungsergebnisse zu erzielen. Grund für diese stufenartige Vorgehensweise ist der enorme numerische Aufwand der für eine vollständige, dreidimensionale, gekoppelte THM-Simulation des betrachteten Problems zu bewältigen ist. Selbst bei der erfolgten Nutzung von Höchstleistungsrechentechnik (parallele Berechnung unterschiedlicher statistischer Realisierungen sowie parallelisierte Behandlung jeder einzelnen Simulation) wurden für eine komplette Monte-Carlo-Studie leicht Rechenzeiten von mehreren Tagen beansprucht. In Abb. 22 ist eine ausgewählte der 100 für die intrinsische Permeabilität ermittelten heterogenen Verteilungen dargestellt, auf deren Basis das Langzeitverhalten des Reservoirs in vollständigen Finite-Element-Simulationen simuliert wurde und eine statistische Auswertung der Ergebnisse erfolgte. Diese Auswertung zeigte bezüglich der Temperaturentwicklung im Reservoir, dass die größten Unsicherheiten (ausgedrückt durch die Varianz) erwartungsgemäß an den Orten der größten Temperaturgradienten auftreten, z.B. im Bereich der sich ausbreitenden Abkühlungsfront. Unter den angenommenen Bedingungen wurde dabei im

betrachteten Beispiel für die Temperatur eine maximale Standardabweichung ermittelt, die ca. 2% des Mittelwertes beträgt.

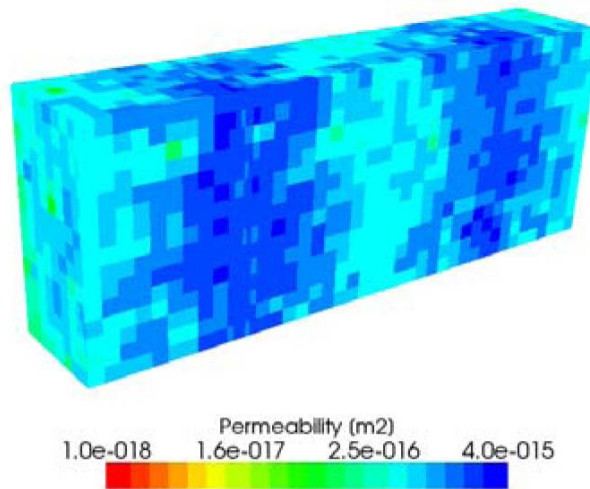


Abbildung 22: Ausgewählte stochastische Verteilung der intrinsischen Permeabilität in einem stimulierten Reservoir zur Untersuchung von Parameterunsicherheiten.

Abb. 23 illustriert verschiedene Unsicherheitsbereiche für das Temperaturprofil zu einem ausgewählten Zeitpunkt, die sich aus einer unterschiedlichen Anzahl berücksichtigter Realisierungen im statistisch aufbereiteten Simulationsergebnis ableiten lassen (hier: 20%, 80% und 100%).

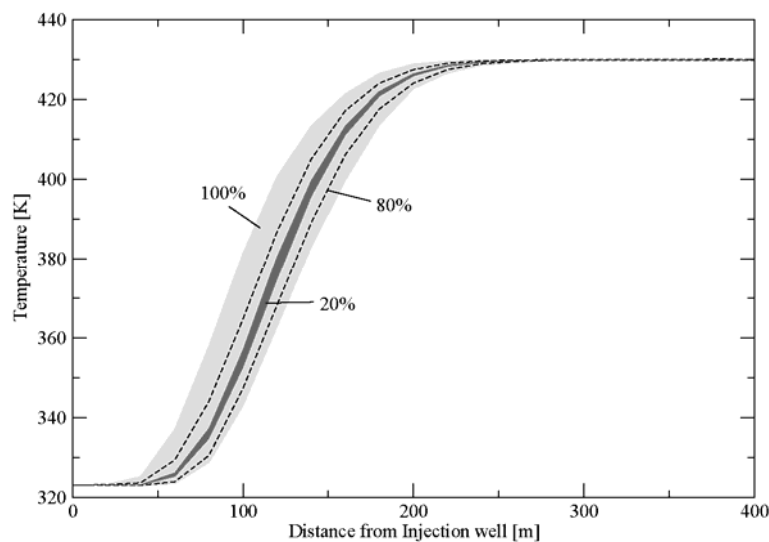


Abbildung 23: Unsicherheitsbereiche für das Temperaturprofil im untersuchten Reservoir nach 15 Jahren Betriebszeit als Ergebnis einer Monte-Carlo-Analyse mit der intrinsischen Permeabilität als stochastischen Parameter.

Mit dem diskutierten Beispiel wurde eine typische Situation für geotechnische Anwendungen simuliert, bei der Modellparametrisierungen mit lückenhaften Datenangaben verbunden sind. Stochastische Unsicherheitsanalysen sind oftmals die einzige Möglich-

keit, zu statistisch abgesicherten Simulationsergebnissen für die komplexen Prozesse im geologischen Untergrund zu gelangen. Gleichzeitig sind weitere konzeptionelle Studien erforderlich, die Methoden der Unsicherheitsanalyse so weiterzuentwickeln, dass auch auf der Basis eines sehr begrenzten Informationsangebots, zuverlässige stochastische Eigenschaften für die relevanten Modellparameter abgeleitet werden können.

2.1.10 Erweiterte numerische Systembetrachtungen: Berücksichtigung von Verwerfungen und Bruchflächen

Großskalige geomechanische Simulationen (z.B. auf der Reservoir-Skala) erfordern die Berücksichtigung der realen Gebirgsstrukturen aller relevanten Formationsschichten. Zu den geologischen Strukturelementen gehören häufig Verwerfungen und/oder Brüche, die das hydro-mechanische Prozessverhalten in der betrachteten Schicht wesentlich beeinflussen. Einerseits können beispielsweise Verwerfungen hydraulisch dicht sein, d.h., einen Transport von Porenfluid über diese Diskontinuität hinweg behindern, andererseits weisen gerade Brüche häufig eine gegenüber der ungestörten Gesteinsmatrix deutlich größere hydraulische Leitfähigkeit auf. Natürlich oder anthropogen erzeugte geomechanische Einflüsse können ihrerseits auf die Größe und Eigenschaften von Verwerfungen und Brüchen rückwirken, die deren hydraulische Durchlässigkeit verändern. Die modellmäßige Berücksichtigung von Brüchen als diskrete hydraulische Leiter ist dann erforderlich, wenn ihr Einfluss auf das Verhalten des Gesamtsystems bei Betrachtung der vorliegenden geometrischen Gegebenheiten die Verwendung eines Homogenisierungsansatzes, wie es z.B. das hier verwendete Konzept der Modellierung poröser Medien darstellt, nicht erlaubt. Eine strukturelle angemessene Behandlung von Brüchen ist zudem bei geotechnischen Verfahren mit Aspekten des *Fracking* unumgänglich (z.B. Geothermie, Schiefergasgewinnung).

Für numerische Simulationen stellen Verwerfungen und Brüche im geologischen Untergrund ein großes Problem dar, da sie sich, anders als etwa Mikrofissuren im Gestein, in der Regel einer klassischen kontinuumsmechanischen Modellierung entziehen und als diskrete Strukturelemente (Diskontinuitäten) in einem ansonsten kontinuierlichen Modellgebiet behandelt werden müssen. Nach der Entwicklung, Implementierung und Validierung von Modellen für die Betrachtung gekoppelter THM-Prozesse in porösen Medien mit der spezifischen Anwendung für die geologische CO₂-Speicherung in tiefe, saline Aquifere, wurde im hier dargelegten Teilprojekt des F&E-Verbundes CO₂-MoPa mit der Entwicklung und Implementierung geeigneter Modelle zur Berücksichtigung von Verwerfungen und Brüchen im Untergrund begonnen. Grundzüge der entsprechenden konzeptionellen Vorstellungen sowie ein erstes Testbeispiel sollen im Folgenden kurz erläutert werden, ausführliche Darstellungen finden sich in Watanabe et al. (2011, 2012).

Aus mathematischer Sicht stellen Brüche (wie auch Risse, Verwerfungen) mechanische Diskontinuitäten dar, die als Interface zwischen Gesteinsblöcken fungieren, deren

Verschiebungen an den gegenüberliegenden Bruchrändern nicht übereinstimmen. Daher sind diese geologischen Strukturen den numerischen Lösungsverfahren nicht inhärent, die auf kontinuierlichen Lösungsansätzen beruhen – etwa der Finite-Element-Methode. Ein weit verbreiteter Ansatz zur Behandlung der betrachteten Diskontinuitäten ist für geotechnische Anwendungen die Definition spezieller Interface-Elemente, die, mit spezifischen Eigenschaften versehen, in das Berechnungsgitter integriert werden und die Diskontinuität in sich als kontinuierliche Funktion abbilden. Im Rahmen von FEM-Diskretisierungen erfordern diese Interface-Elemente jedoch die Definition von Doppelknoten, was die Gebietsvernetzung gerade für reale, großskalige 3D-Anwendungen, die Neuvernetzung im Falle von Risswachstum und auch adaptive Gittermodifikationen sehr aufwändig gestaltet. Zudem wird die Lösung gekoppelter Problemstellungen erschwert, wenn ein Partikulärprozess Interface-Elemente benötigt, der andere hingegen nicht, da die Primärvariable, die diesen Prozess charakterisiert im Bereich der mechanischen Diskontinuität einen stetigen Verlauf aufweist.

Ein alternativer Ansatz zur numerischen Behandlung mechanischer Diskontinuitäten ist die erweiterte Finite-Element-Methode (extended finite element method – XFEM), die zunächst für den Bereich der Rissbruchmechanik bei technischen Materialien entwickelt wurde (vgl. Belytschko und Black, 1999). Im Rahmen dieses Konzepts werden die Diskontinuitäten direkt als spezielle Ansatzräume mit Sprungfunktionen für lokale, spezifische Primärvariable abgebildet. Diese lokale Anreicherung auf der funktionalen Ebene der Ansatzräume vermeidet einen Eingriff in Gitterstrukturen, die weiterhin kontinuierlich gestaltet werden und somit auch problemlos für die unterschiedlichen Prozesse eines gekoppelten Systems genutzt werden können. Nachteile von XFEM-Konzepten sind die größere Komplexität hinsichtlich der numerischen Integration in den betroffenen Gitterregionen sowie der insgesamt erhöhte numerische Aufwand wegen der variierenden Anzahl von Primärvariablen im Gesamtsystem.

Im Verlauf des hier dargelegten Projekts wurden in OGS sowohl das Konzept der Interface-Elemente als auch ein XFEM-Ansatz integriert. Dabei wurde das XFEM-Modell für die Berücksichtigung bereits existierender Verwerfungen und/oder Brüche in gekoppelten HM-Systemen leicht modifiziert. Konkret wurden für Gebiete mit Diskontinuitäten Elemente mit niedriger dimensionierten Ansatzfunktionen verwendet, die Anreicherung der Ansatzräume nur für die Verschiebungsvariablen vorgenommen und eine Funktion der relativen Rissverschiebung eingeführt (vgl. Watanabe et al., 2012). Wesentlicher Vorteil ist wiederum die Verwendung gleicher Simulationsgitter für den M-Prozess und den H-Prozess, was darüber hinaus auch die Verwendung (und Kopplung) unterschiedlicher Simulationsprogramme für die Partikulärprozesse gestattet. In Abb. 24 ist ein einfaches Testbeispiel mit einem System von zwei sich kreuzenden Rissen dargestellt, mit dem zunächst für einen rein mechanischen Deformationsvorgang beide OGS-Konzepte zur numerischen Behandlung von Verwerfungen, Brüchen und Rissen getestet wurden. Der Vergleich der Ergebnisse in Abb. 25 zeigt deren gute Übereinstimmung.

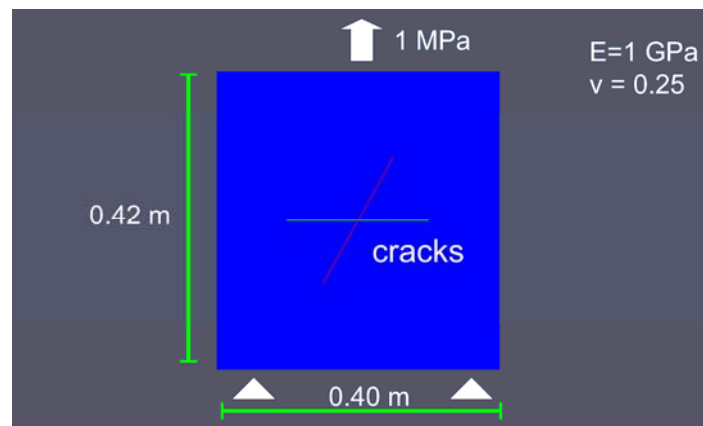


Abbildung 24: Schematische Modelldarstellung, Randbedingungen und Materialparameter für die Simulation der mechanischen Deformation eines Blockes mit zwei sich kreuzenden Rissen.

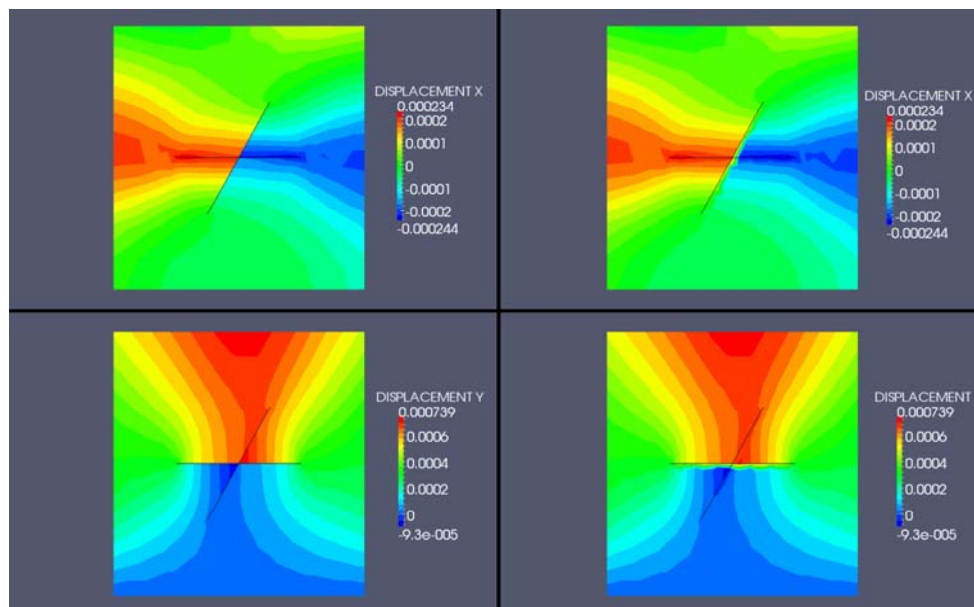


Abbildung 25: Ergebnisse der Simulation der mechanischen Deformation eines Blockes mit zwei sich kreuzenden Rissen. Links: FEM-Konzept unter Verwendung von Interface-Elementen; Rechts: Modellierung mit modifiziertem XFEM-Ansatz.

2.2 Nutzen, Verwertung und Schutzrechtsanmeldungen

Die Entwicklung, numerische Realisierung und Anwendung eines integrativen Modellierungsinstrumentariums für die Simulation problemspezifischer, gekoppelter THM-Prozesse leistet einen wesentlichen methodischen Beitrag zur systematischen Analyse von Vorgängen bei der CO₂-Injektion und Ausbreitung im geologischen Untergrund. Damit wird die Prognostizierbarkeit von physikalischen Prozessen, die für die Durchführung von CO₂-Speicherprojekten relevant sind auf verschiedenen Zeit- und Längenskalen verbessert. Das hier dargelegte Projekt ist wesentlicher Bestandteil des komplexen wissenschaftlichen Ansatzes im F&E-Vorhaben CO₂-MoPa zur Modell- und Softwareentwicklung, der mit seinen inhaltlich übergreifenden konzeptionellen und methodischen Aspekten der Betrachtung aller miteinander gekoppelten Teilprozesse eine führende wissenschaftliche Rolle bei der effizienten Planung und Bewirtschaftung der untersuchten geotechnischen Systeme einnimmt und praxisrelevante Ergebnisse der Prozesssimulation für industrielle Zwecke erwarten lässt. Im Kontext des Gesamtvorhabens ist dabei zu erwähnen, dass mit der Einbeziehung von reaktiven Transportprozessen durch Projektpartner der CAU Kiel ein umfassender Komplex von gekoppelten thermischen, hydrogeologischen, geomechanischen und auch geochemischen (THM/C) Prozessen betrachtet werden kann.

Neben dem unmittelbaren Nutzen für Forschungs- und Industriepartner sind die verallgemeinerbaren, von konkreten Standorten unabhängigen Ergebnisse und Lösungen des Projekts auch für öffentliche Behörden, Netzwerke und Transferstellen von Interesse, da sie die Möglichkeit bieten, Standortanalysen, Szenarienstudien sowie Sicherheitseinschätzungen mit großer Praxisrelevanz für die Speicherbeurteilung und Genehmigungsverfahren durchzuführen. Weiterhin können die Projektergebnisse (Methoden, Modelle, Softwarekomponenten) als Grundlage für standardisierte Abläufe bei der Charakterisierung, Dimensionierung und Genehmigung der betrachteten sowie verwandter geotechnischer Problemstellungen dienen (z.B. Endlagerung, Geothermie, geologische Energiespeicherung), da die grundlegenden kontinuumsmechanischen und konstitutiven Modelle sowie die notwendige Softwarearchitektur ähnlich sind.

Das entwickelte Modellierungsinstrumentarium für die unterschiedlichen physikalischen Prozesse (bei gleichzeitiger Einbeziehung reaktiver, geochemischer Vorgänge durch Projektpartner der CAU Kiel) wurde im Rahmen des wissenschaftlichen Softwareprojekts OpenGeoSys numerisch realisiert. Dieses Simulationssystem nutzt ein open-source Konzept, was einem großen Nutzerkreis den flexiblen Zugang zu den Programmquellen ermöglicht sowie die langfristige Integration weiterer Modelle und Methoden im Rahmen nachfolgender Forschungsvorhaben unterstützt.

Der wissenschaftliche Erfolg des Projekts wurde maßgeblich durch die erfolgte und weiterhin geplante Veröffentlichung von Projektansätzen und –ergebnissen in anerkannten, internationalen Fachzeitschriften und die Präsentation auf nationalen und internationalen Konferenzen bestimmt (siehe Unterabschnitt 3.4 dieses Berichts). Ein Teil dieser

Aktivitäten konnte gemeinsam mit anderen Partnern des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa realisiert werden. Mit der Publikation und Präsentation von Projektergebnissen wurde der wissenschaftliche Kenntnisstand zur allgemeinen Methodik und zu spezifischen Fragestellungen der Modellierung gekoppelter physikalischer und chemischer Prozesse im geologischen Untergrund bei dessen Nutzung zur CO₂-Speicherung und für andere geotechnische Anwendungen erweitert. Neben der Veröffentlichung in wissenschaftlichen Publikationen sind die Projektergebnisse auch geeignet, Grundlage für das Erstellen standardisierter Leitfäden und Handlungsempfehlungen sowie von spezifischen Nachweisregelungen im Rahmen der CCS-Gesetzgebung zu bilden.

Da die hier dargelegten Projektergebnisse ausschließlich theoretischer und numerischer Natur sind, wurden vom UFZ keine Schutzrechte für die entwickelten Methoden und Algorithmen sowie für die durchgeführten Szenariensimulationen angemeldet bzw. erteilt. Fremde Schutzrechtsanmeldungen wurden nicht in Anspruch genommen.

2.3 Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Die Thematik der numerischen Simulation gekoppelter Prozesse bei der Injektion und Ausbreitung von CO₂ in tiefen geologischen Formationen ist weltweit von großer Aktualität. Eine zunehmende Anzahl diesbezüglicher wissenschaftlicher Veröffentlichungen (für einen repräsentativen Querschnitt siehe z.B. Bickle, 2009; Birkholzer und Zhou, 2009; Celia und Nordbotten, 2009; Class et al., 2009; Dentz und Tartakovsky, 2009; Kempka et al. 2010; Michael et al., 2010; Ringrose et al., 2011; Rutqvist et al. 2008b; Vidal-Gilbert et al. 2009; Xu et al., 2011; Yamamoto et al. 2009) und spezialisierter Symposien auf Tagungen unterschiedlicher fachlicher Ausrichtung (z.B. Jahrestagungen der European Geosciences Union (EGU) und der American Geophysical Union (AGU), International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT), verschiedene Konferenzaktivitäten der European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS)) legen Zeugnis davon ab. Durch Auswertung der einschlägigen Fachliteratur und Diskussionen mit anerkannten Wissenschaftlern z.B. bei Konferenzbesuchen floss der aktuelle internationale Stand der Methoden und Ergebnisse permanent in die eigenen Analysen ein. Dabei zeigte sich, dass die im hier dargelegten Projekt erarbeiteten Verfahren, Algorithmen und Softwareprodukte dem wissenschaftlichen Standard in vollem Umfang entsprechen und ihn in wesentlichen Teilen selbst mit bestimmen (z.B. numerische Verfahren für die Simulation von Mehrphasen-Flüssen in deformierbaren porösen Medien, integrative Softwarekonzepte für gekoppelte Problemstellungen).

Korrespondierend mit der Modellentwicklung verbessern sich auch die Möglichkeiten kommerzieller und wissenschaftlicher Software, Mehrphasenflüsse in porösen Medien, geomechanische Deformationen einschließlich Schädigungsereignissen, nichtisotherme Effekte und geochemische Reaktionen, die im Zusammenhang mit der geologischen

CO₂-Speicherung relevant sind, numerisch zu simulieren. Modellstudien zur Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund nutzen gegenwärtig meist kommerzielle Simulationsprogramme, die für den Bereich der Erdöl- und Erdgasförderung entwickelt wurden (z.B. Eclipse (Schlumberger), TOUGH (Lawrence Berkeley National Laboratory - LBNL), NUFT, CRUNCH (beide Lawrence Livermore National Laboratory-LLNL), STOMP (Pacific Northwest National Laboratory - PNNL), FLOTRAN (Los Alamos National Laboratory - LANL)). Diese Softwareprojekte sind in der Regel auf die Modellierung einer Untermenge des Gesamtkomplexes der gekoppelten physikalischen und chemischen Prozesse fokussiert, die bei geotechnischen Anwendungen im Untergrund ablaufen. Möglichkeiten zur Programmerweiterung für die umfassende Behandlung unterschiedlicher, miteinander interagierender Phänomene sind dabei stark eingeschränkt, meist nur den Entwicklern, nicht aber den Nutzern zugänglich und in der Regel durch Kopplung unterschiedlicher Systeme einschließlich eines ineffizienten Datenaustauschs über Dateien realisiert. Das im hier dargelegten Projekt verfolgte Konzept einer integrativen Softwareentwicklung gewährleistet im Gegensatz dazu von vornherein eine deutlich verbesserte Effizienz und Flexibilität.

Trotz eingeschränkter Erweiterungspotenziale stellen die oben genannten Simulatoren bewährte, praktikable und anerkannte Instrumentarien zur Simulation von relevanten Prozessen bei der geologischen CO₂-Speicherung dar. Darüber hinaus wurde 2009 vom Department of Energy der Regierung der Vereinigten Staaten die ASCEM-Initiative gestartet (<http://ascemdoe.org>), in der sich fünf nationale Laboratorien zur gemeinsamen Entwicklung modularer, integrierter Höchstleistungsrechnermodelle für die Simulation umweltrelevanter gekoppelter THM/C Prozesse im geologischen Untergrund organisiert haben. Zu diesen Laboratorien zählen die oben genannten Institutionen LBNL, PNNL und LANL, zudem ist das LLNL in die Arbeit integriert. Der Durchführungsplan der Initiative wurde im September 2010 bestätigt. Das hier beschriebene OGS-Konsortium unterhält wissenschaftliche Kontakte zum LBNL und betreibt zudem aktiv die Bildung einer zu ASCEM analogen europäischen Initiative des Zusammenschlusses unterschiedlicher Modellierergruppen zur abgestimmten Entwicklung integrativer Softwareprojekte für die Simulation geotechnischer Anwendungen, die den internationalen Standard wesentlich mitbestimmt.

2.4 Literatur

2.4.1 Referenzen

Die im Folgenden aufgeführten Referenzen geben Quellen eigener Vorarbeiten und von Fremdliteratur an, die im Abschnitt 2 und im Unterabschnitt 3.1 dieses Berichts zitiert werden.

Aziz K, Settari A (1979): Petroleum reservoir simulation. Applied Science Publishers, London.

- Basbug B, Gumrah F, Oz B (2007): Simulating the effects of deep saline aquifer properties for CO₂ sequestration. *Journal of Canadian Petroleum Technology* 46:30-38.
- Belytschko T, Black T (1999): Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 45(5):601-620.
- Bickle MJ (2009): Geological carbon storage. *Nature Geoscience* 2:815-818.
- Birkholzer JT, Rutqvist J, Sonnenthal E, Barr D, Chijimatsu M, Kolditz O et al. (2006): Geomechanical/geochemical modeling studies conducted within the international DECOVALEX project. *Proceedings of the International High-Level Radiactive Waste Management Conference, Las Vegas*.
- Birkholzer JT, Zhou Q (2009): Basin-scale hydrogeologic impacts of CO₂ storage: capacity and regulatory implications. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3:745-756.
- Chadwick RA, Zweigel P, Gregersen U, Kirby GA, Holloway S, Johannessen PN (2004): Geological reservoir characterization of a CO₂ storage site: the Utsira Sand, Sleipner, northern North Sea. *Energy* 29:1371-1381.
- Celia MA, Nordbotten JM (2009): Practical modeling approaches for geological storage of carbon dioxide. *Ground Water* 47(5):627-638.
- Class H, Ebigo A, Helmig R, Dahle HK, Nordbotten JM, Celia MA et al. (2009): A benchmark study on problems related to CO₂ storage in geologic formations: summary and discussion of the results. *Computers and Geosciences* 13(4):409-434.
- Collins RE (1961): *Flow of fluids through porous materials*. Reinhold Pub. Corp., New York.
- Dentz M, Tatarkovsky DM (2008): Abrupt-interface solution for carbon dioxide injection into porous media. *Transport in Porous Media* 51(7):1-13.
- Doughty C, Pruess K (2004): Modeling supercritical carbon dioxide injection in heterogeneous porous media. *Vadose Zone Journal* 3:837-847.
- Ennis-King J, Gibson-Poole CM, Lang SC, Paterson L (2003): Long term numerical simulation of geological storage of CO₂ in the Petrel sub-basin, North West Australia. *Proceedings of the 6th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-6)*, Gale J, Kaya Y (Eds.), Kyoto Japan, Pergamon, Vol. I, pp. 507-511.
- Ennis-King J, Paterson L (2005): Role of convective mixing in the long-term storage of carbon dioxide in deep saline formations, *SPE Journal* 10:349-356.
- Fischedick M, Esken A, Luhmann H, Schüwer D, Supersberger N (2007): *Geologische CO₂-Speicherung als klimapolitische Handlungsoption – Technologien, Konzepte, Perspektiven*. Wuppertal Spezial Nr. 35.
- Flett M, Gurton R, Weir G (2007): Heterogeneous saline formations for carbon dioxide disposal: Impact of varying heterogeneity on containment and trapping. *Journal of Petroleum Science and Engineering* 57:106-118.
- García J (2003): *Fluid dynamics of carbon dioxide disposal into saline aquifers*. PhD Thesis, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California.

- Gawin D, Baggio P, Schrefler BA (1995): Coupled heat, water and gas-flow in deformable porous-media. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 20: 969-987.
- Ghanbari S, Al-Zaabi Y, Pickup GE, Mackay E, Gozalpour F, Todd AC (2006): Simulation of CO₂ storage in saline aquifers. *Chemical Engineering Research and Design* 84(9): 764-775.
- Helmig R, Huber R (1998): Comparison of Galerkin-type discretization techniques for two-phase flow in heterogeneous porous media. *Advances in Water Resources* 21: 697-711.
- Hurter S, Berge J (2007): Simulations for CO₂-injection projects with a compositional simulator. *Proceedings of the SPE Offshore Europe Conference, Aberdeen, Scotland.*
- Imaseki Y, Ohsumi T, Tomoda T, Uno M, Ohkuma H (2005): Numerical simulation of the injection and migration behaviour of carbon dioxide. In: *Proceedings of the 7th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, Vancouver*, pp. 2181-2184.
- IPCC special report on carbon dioxide capture and storage (2005): Metz B, Davidson O, de Cominck HC, Loos M, Meyer LA (Eds.), Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.
- Jaeger JC, Cook NGW, Zimmermann RW (2007): *Fundamentals of rock mechanics*. 4th Edition, Blackwell, Malden, MA.
- Kempka T, Kühn M, Class H, Frykman P, Kopp A, Nielsen CM, Probst P (2010): Modelling of CO₂ arrival time at Ketzin – Part I. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 4(6): 1007-1015.
- Kolditz O, De Jonge J (2004): Non-isothermal two-phase flow in low-permeable porous media. *Computational Mechanics* 33(5): 345-364.
- Kolditz O, Görke U-J, Shao H, Wang W (Eds., 2012a): *Thermo-hydro-mechanical/chemical processes in fractured porous media: benchmarks and examples*. Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 86, Springer.
- Korsawe J, Starke G, Wang W, Kolditz O (2006): Finite element analysis of poro-elastic consolidation in porous media: Standard and mixed approaches. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195: 1096-1115.
- Kueper BH, Abbott W, Farquhar G (1989): Experimental observations of multiphase flow in heterogeneous porous media. *Journal of Contaminant Hydrology* 5: 83-95.
- Kueper BH, Frind EO (1991): Two-phase flow in heterogeneous porous-media. 1. Model development. *Water Resources Research* 27(6): 1049-1057.
- Le Gallo Y, Trenty L, Michel A, Vidal-Gilbert S, Parra T, Jeannin L (2006): Long-term flow simulation of CO₂ storage in saline aquifers. In: *Proceedings of the 8th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, Trondheim.*
- Lewis RW, Roberts PJ, Schrefler BA (1989): Finite-Element modeling of 2-phase heat and fluid-flow in deforming porous-media. *Transport in Porous Media* 4: 319-334.

- Lewis RW, Schrefler BA (1998): The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media. 2nd Ed., John Wiley & Sons, West Sussex, England.
- Li Q, Wu Z, Bai Y, Yin X, Li X (2006): Thermo-hydro-mechanical modeling of CO₂-sequestration system around a fault environment. *Pure and Applied Geophysics* 163: 2585-2593.
- Lichtner PC (2001): FLOTRAN user's manual. Los Alamos National Laboratory Report LA-UR-01-2349, Los Alamos, NM.
- Lindeberg E (1997): Escape of CO₂ from aquifers. *Energy Conversion and Management* 38: 235-240.
- Lindeberg E, Bergmo P (2003): The long-term fate of CO₂ injected into an aquifer. Proceedings of the 6th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-6), Gale J, Kaya Y (Eds.), Kyoto Japan, Pergamon, Vol. 1, pp. 489-494.
- McPherson BJOL, Lichtner PC (2001): CO₂ sequestration in deep aquifers. In: Proceedings of the First National Conference on Carbon Sequestration, Washington, DC, U.S.A., May 14-17.
- McWhorter DB, Sunada DK (1990): Exact integral solution for 2-phase flow. *Water Resources Research* 26: 399-413.
- Michael K, Golab A, Shulakova V, Ennis-King J, Allinson G, Sharma S, Aiken T (2010): Geological storage of CO₂ in saline aquifers – A review of the experience from existing storage operations. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 4(4): 659-667.
- Nitao JJ (1996): The NUFT code for modeling nonisothermal, multiphase, multicomponent flow and transport in porous media. *EOS, Transactions of the American Geophysical Union* 74(3): 313.
- Nordbotten JM, Celia MA (2006): Similarity solutions for fluid injection into confined aquifers. *Journal of Fluid Mechanics* 561: 307-327.
- Nordbotten J, Celia M, Bachu S (2004): Analytical solutions for leakage rates through abandoned wells. *Water Resources Research* 40(4): W04204.
- Nordbotten JM, Celia MA, Bachu S (2005a): Injection and storage of CO₂ in deep saline aquifers: Analytical solution for CO₂ plume evolution during injection. *Transport in Porous Media* 58: 339-360.
- Nordbotten J, Celia M, Bachu S, Dahle H (2005b): Semi-analytical solution for CO₂ leakage through an abandoned well. *Environmental Science and Technology* 39(2): 602-611.
- Oldenburg CM, Prues K, Benson SM (2001): Process modeling of CO₂ injection into natural gas reservoirs for carbon sequestration and enhanced gas recovery. *Energy Fuels* 15: 293-298.
- Orr FM, Jessen K, Seto CJ (2007): Using analytical solutions in compositional streamline simulation of a field scale CO₂-injection project in a condensate reservoir. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering* 10(4): 393-405.

- Pinder GF, Gray WG (1977): Finite element simulation in surface and subsurface hydrology. Academic Press, New York.
- Pruess K (2004): The TOUGH codes – a family of simulation tools for multiphase flow and transport processes in permeable media. *Vadose Zone Journal* 3: 738-746.
- Pruess K (2007): On CO₂ fluid flow and heat transfer behavior in the subsurface, following leakage from a geologic storage reservoir. *Environmental Geology* 54: 1677-1686.
- Pruess K, García J (2002): Multiphase flow dynamics during CO₂ injection into saline aquifers. *Environmental Geology* 42: 282-295.
- Pruess K, García J, Kovalick T, Oldenburg C, Rutqvist J, Steefel C et al. (2004): Code intercomparison builds confidence in numerical simulation models for geologic disposal of CO₂, *Energy* 29: 1431-1444.
- Pruess K, Tsang CF, Law DHS, Oldenburg CM (2001): Intercomparison study of simulation models for geologic sequestration of CO₂. Proceedings of the First National Conference on Carbon Sequestration, LBNL.
- Pruess K, Xu TF, Apps J, García J (2003): Numerical modeling of aquifer disposal of CO₂, *SPE Journal* 8(1): 49-60.
- Riaz A, Hesse M, Tchalepi HA, Orr FM Jr (2006): Onset of convection in a gravitationally unstable diffusive boundary layer in porous media. *Journal of Fluid Mechanics* 548: 87-111.
- Ringrose P, Atbi M, Mason D, Espinassous M, Myhrer Ø, Iding M, Mathieson A, Wright I (2009): Plume development around well KB-502 at the In Salah CO₂ storage site. *First Break* 27: 85-89.
- Ringrose PS, Roberts DM, Gibson-Poole CM, Bond C, Wightman R, Taylor M et al. (2011): Characterisation of the Krechba CO₂ storage site: Critical elements controlling injection performance. *Energy Procedia* 4: 4672-4679.
- Rosenbaum S, Hese F, Liebsch-Dörschner T, Offermann P, Rheinländer J, Thomsen C (2012): Geologische Modelle der Deck- und Speichergesteine Schleswig-Holstein: Schlussbericht zum Teilvorhaben M6 im F&E-Verbund CO₂-MoPa. Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume des Landes Schleswig-Holstein (LLUR) – Geologischer Dienst.
- Rutqvist J, Barr D, Birkholzer JT, Chijimatsu M, Kolditz O, Liu Q et al. (2008a): Results from an international simulation study on coupled thermal, hydrological, and mechanical processes near geological nuclear waste repositories. *Nuclear Technology* 163(1): 101-109.
- Rutqvist J, Birkholzer JT, Tsang CF (2008b): Coupled reservoir-geomechanical analysis of the potential for tensile and shear failure associated with CO₂ injection in multi-layered reservoir-caprock systems. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 45(2): 132-143.
- Rutqvist J, Stephansson O (2003): The role of hydromechanical coupling in fractured rock engineering. *Hydrogeology Journal* 11(1): 7-40.

- Rutqvist J, Tsang C-F (2002): A study of caprock hydromechanical changes associated with CO₂ injection into a brine formation, *Environmental Geology* 42:296-305.
- Rutqvist J, Tsang C-F (2005): Coupled hydromechanical effects of CO₂-injection. In: *Underground injection science and technology*, Tsang CF, Apps LA (Eds.), Elsevier, pp. 649-679.
- Sanavia L, Pesavento F, Schrefler BA (2006): Finite element analysis of non-isothermal multiphase geomaterials with application to strain localization simulation. *Computational Mechanics* 37:331-348.
- Saripalli P, McGrail P (2002): Semi-analytical approaches to modeling deep well injection of CO₂ for geological sequestration. *Energy Conversation and Management* 43(2):185-198.
- Schlumberger (2007): Eclipse Technical Description 2007.1.
- Schrefler BA, Gawin D (1996): The effective stress principle: incremental or finite form? *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 20:785-815.
- Span R, Wagner W (1996): A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1100 K at pressures up to 800 MPa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 25(6):1509-1596.
- Steeffel CI (2001): CRUNCH. Lawrence Livermore National Laboratory Report, Livermore, CA.
- Streit JE, Hillis RR (2004): Estimating fault stability and sustainable fluid pressures for underground storage of CO₂ in porous rock. *Energy* 29:1445-1456.
- Taron J, Elsworth D (2009): Thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in the evolution of engineered geothermal reservoirs. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 46(5):855-864.
- Van der Meer LGH (1996): Computer modeling of underground CO₂ storage. *Energy Conversation and Management* 37(6-8):1155-1160.
- Vidal-Gilbert S, Nauroy J-F, Brosse E (2009): 3D geomechanical modeling for CO₂ geologic storage in the Dogger carbonates of the Paris Basin. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3(3):288-299.
- White DJ, Burrowes G, Davis T, Hajnal Z, Hirsche K, Hutcheon I et al. (2004): Greenhouse gas sequestration in abandoned oil reservoirs: The International Energy Agency Weyburn pilot project. *GSA Today* 14:4-10.
- White MD, Oostrom M (1997): STOMP, Subsurface Transport Over Multiple Phases. Pacific Northwest National Laboratory Report PNNL-11218, Richland, WA.
- White SP, Allis RG, Moore J, Chidsey T, Morgan C, Gwynn W et al. (2005): Simulation of reactive transport of injected CO₂ on the Colorado Plateau, Utah, USA. *Chemical Geology* 217(3-4):387-405.
- Xu T, Spycher N, Sonnenthal E, Zhang G, Zheng L, Pruess K (2011): TOUGHREACT Version 2.0: A simulator for subsurface reactive transport under non-isothermal multiphase flow conditions. *Computers & Geosciences* 37:763-774.

Yamamoto H, Zhang K, Karasaki K, Marui A, Uehara G, Nishikawa N (2009): Numerical investigation concerning the impact of CO₂ geological storage on regional groundwater flow. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3: 586-599.

2.4.2 *Erfolgte Veröffentlichungen*

Im Laufe des Projektzeitraums wurden im Projekt erarbeitete Methoden, Konzepte und Ergebnisse in folgenden Arbeiten veröffentlicht:

Bauer S, Class, H, Evert M, Feeser V, Götze H, Holzheid A et al. (2012): Modeling, parametrization and evaluation of monitoring methods for CO₂ storage in deep saline formations: the CO₂-MoPa project *Environmental Earth Sciences* (in press, doi: 10.1007/s12665-012-1707-y).

Böttcher N, Taron J, Kolditz O, Park C-H, Liedl R (2012): Evaluation of thermal equations of state for CO₂ in numerical simulations. *Environmental Earth Sciences* (in press, doi: 10.1007/s12665-012-1704-1).

Görke U-J, Park C-H, Taron J, Wang W, Kolditz O (2010): Modeling of multi-phase transport and deformation processes in saline aquifers during CO₂ sequestration. In: *Proceedings of the XVIIIth International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR2010)*, Carrera J (Ed.), CIMNE, Barcelona.

Görke U-J, Park C-H, Wang W, Singh AK, Kolditz O (2011a): Numerical simulation of multiphase hydromechanical processes induced by CO₂ injection in deep saline aquifers. *Oil and Gas Science and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles* 66(1): 105-118.

Görke U-J, Taron J, Singh AK, Wang W, Kolditz O (2011b): Towards the generic conceptual and numerical framework for the simulation of CO₂ sequestration in different types of georeservoirs. In: *Proceedings of the IVth International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS 2011)*, Papadrakakis M, Oñate E, Schrefler B (Eds.), Kos Island.

Görke U-J, Kaiser S, Bucher A, Kreissig R (2012a): A consistent mixed finite element formulation for hydro-mechanical processes in saturated porous media at large strains based on a generalized material description. *European Journal of Mechanics – A/Solids* 32: 88-102.

Görke U-J, Kolditz O, Park C-H, Shao H, Singh AK, Wang W (2012b): Numerische Simulation von thermo-hydro-mechanisch-chemisch (THM/C) gekoppelten Prozessen. *CLEAN-Schlussbericht. UFZ-Bericht 04/2012*.

Hou Z, Gou Y, Taron J, Görke U-J, Kolditz O (2012): Thermo-hydro-mechanical modeling of carbon dioxide injection for enhanced gas-recovery (CO₂-EGR): a benchmarking study for code comparison. *Environmental Earth Sciences* (in press, doi: 10.1007/s12665-012-1703-2).

Kolditz O, Böttcher N, Bauer S, Görke U-J, Park C-H, Wang W (2011): Numerical simulation of two-phase flow in deformable porous media: application to carbon

- dioxide storage in the subsurface. In: *Managing Groundwater and the Environment, Proceedings of ModelCare 2009: Calibration and Reliability in Groundwater Modeling*, Wang Y, Ge S, Hill MC, Zheng C (Eds.), IAHS Publ. 341, pp. 228-234.
- Kolditz O, Bauer S, Bilke L, Böttcher N, Delfs J-O, Fischer T et al. (2012b): OpenGeoSys: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Environmental Earth Sciences* (in press, doi:10.1007/s12665-012-1546-x).
- Kolditz O, Bauer S, Beyer C, Böttcher N, Dietrich P, Görke U-J et al. (2012c): A systematic benchmarking approach for geologic CO₂ injection and storage. *Environmental Earth Sciences* (in press, doi:10.1007/s12665-012-1656-5).
- Kühn M, Kempka T, Class H, Bauer S, Kolditz O, Görke U-J et al. (2009): Prozessmodellierung und Risikoabschätzung. In: *GEOTECHNOLOGIEN Science Report Nr. 14, Die dauerhafte geologische Speicherung von CO₂ in Deutschland - Aktuelle Forschungsergebnisse und Perspektiven*, Stroink L, Gerling JP, Kühn M, Schilling FR (Eds.), Koordinierungsbüro GEOTECHNOLOGIEN, Potsdam, pp. 66-77.
- Kühn M, Tesmer M, Pilz P, Meyer R, Reinicke K, Foerster A et al. (2012): CLEAN: CO₂ large-scale enhanced gas recovery in the Altmark natural gas field (Germany): project overview. *Environmental Earth Sciences* (in press, doi:10.1007/s12665-012-1714-z).
- Park C-H, Taron J, Görke U-J, Singh AK, Kolditz O (2011): The fluidal interface is where the action is in CO₂ sequestration and storage: Hydromechanical analysis on mechanical failure. *Energy Procedia* 4:3691-3698.
- Singh AK, Wang W, Park C-H, Görke U-J, Kolditz O (2010): Non-isothermal effects on multi-phase flow in porous medium. In: *Proceedings of the XVIIIth International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR2010)*, Carrera J (Ed.), CIMNE, Barcelona.
- Singh AK, Böttcher N, Wang W, Park C-H, Görke U-J, Kolditz O (2011a): Non-isothermal effects on multi-phase flow in porous medium: CO₂ disposal into a saline aquifer. *Energy Procedia* 4:3889-3895.
- Singh AK, Görke U-J, Kolditz O (2011b): Numerical simulation of non-isothermal compositional gas flow: application to carbon dioxide injection into gas reservoirs. *Energy* 36:3446-3458.
- Taron J, Park C-H, Görke U-J, Wang W, Kolditz O (2011): Numerical analysis of CO₂ injection into deformable saline reservoirs: benchmarking and initial observations. In: *Proceedings of the IVth International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS 2011)*, Papadrakakis M, Oñate E, Schrefler B (Eds.), Kos Island.
- Wang W, Kosakowski G, Kolditz O (2009): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers and Geosciences* 35(8):1631-1641.

- Wang W, Kolditz O (2010): Sparse matrix and solver objects for parallel finite element simulation of multi-field problems. In: High performance computing and applications: Second International Conference, HPCA 2009, Zhang W, Chen Z, Douglas CC, Tong W (Eds.), Lecture Notes in Computer Science, Springer, Berlin, pp. 418-425.
- Wang W, Görke U-J, Kolditz O (2011a): Adaptive time stepping with automatic control for modeling nonlinear H2M coupled processes in porous media. In: Proceedings of the 45th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium (ArmaRocks 2011), Curran Associates, Inc. Red Hook, NY, pp. 2262-2268.
- Wang W, Schnicke T, Kolditz O (2011b): Parallel finite element method and time stepping control for non-isothermal poro-elastic problems. *Computers Materials & Continua* 21(3): 217–235.
- Watanabe N, Kolditz O, Wang W, Taron J, Görke U-J (2011): Mechanically enriched fracture elements for a problem in fractured rocks. In: Proceedings of the International Conference on Extended Finite Element Method (XFEM2011), Cardiff, p. 133.
- Watanabe N, Wang W, McDermott C, Taniguchi T, Kolditz O (2010): Uncertainty analysis of thermo-hydro-mechanical (THM) coupled processes in heterogeneous porous media. *Computational Mechanics* 45: 263-280.
- Watanabe N, Wang W, Taron J, Görke U-J, Kolditz O (2012): Lower-dimensional interface elements with local enrichment: application to coupled hydro-mechanical problems in discretely fractured porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 90(8): 1010-1034.

2.4.3 Geplante Veröffentlichungen

Auf maßgebliche Initiative des UFZ ist es gelungen, einige Arbeiten, die Konzepte und Ergebnisse des F&E-Vorhabens CO₂-MoPa thematisieren, in einem Sonderband der Zeitschrift „Environmental Earth Sciences“ zur geologischen Speicherung von CO₂ zu platzieren. Dieser Sonderband erscheint voraussichtlich Ende 2012, die entsprechenden Artikel sind im Unterabschnitt 3.4.2 dieses Berichts aufgeführt. Darüber hinaus befinden sich die folgenden Veröffentlichungen in der Phase der Manuskripterstellung bzw. bereits im abschließenden Begutachtungsprozess:

- Hinkes R, Görke U-J, Feeser V, Kolditz O (2012): An investigation of nonlinear rate-dependent deformation of Obernkirchner sandstone. *Mechanics of Materials* (in preparation).
- Kolditz O, Bauer S, Böttcher N, Elsworth D, Görke U-J, McDermott C-I et al. (2012d): Numerical simulation of two-phase flow in deformable porous media: Application to carbon dioxide storage in the subsurface. *Mathematics and Computers in Simulation* (revision under review).

2.4.4 Vorträge

Auf den CO₂-MoPa-Jahrestreffen 2009, 2010 und 2011 jeweils in Kiel sowie den GEOTECHNOLOGIEN-Statusseminaren zur geologischen CO₂-Speicherung 2009 in Aachen, 2010 in Jena und 2011 in Potsdam wurden Ergebnisse des Projekts gemeinsam mit Partnern aus dem F&E-Verbund CO₂-MoPa in kooperativen Vorträgen und Postervorträgen präsentiert. Auf einzelnen dieser Veranstaltungen konnten ausgewählte Projektarbeiten auch detailliert erläutert werden. Diese Beiträge sowie Vorträge und Poster, mit denen sich das Projekt auf internationalen Tagungen und Konferenzen präsentierte, sind im Folgenden aufgeführt:

- Böttcher N, Singh AK, Park C-H, Wang W, Taron J, Görke U-J et al. (2011): Non-isothermal flow in porous media for CO₂ sequestration applications. SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences, Long Beach (USA), 21.-24.03.2011.
- Görke U-J, Watanabe N, Kolditz O (2009): Numerische Simulation von Zweiphasenströmungen in porösen Medien mit Anwendung auf die Injektion von CO₂ in den Untergrund. CO₂-MoPa-Statusseminar, Kiel (Germany), 28.01.2009.
- Görke U-J, Park C-H, Wang W, Kolditz O (2009): Coupled numerical simulation of multiphase flow in deformable porous media during CO₂ sequestration. IIIrd International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS 2009), Ischia Island (Italy), 08.-10.06.2009.
- Görke U-J, Park C-H, Wang W, Singh AK, Kolditz O (2009): Numerical simulation of multiphase flow in deformable porous subsurface media. Postervortrag zur International Conference on Non-linearities and Upscaling in Porous Media, Stuttgart (Germany), 05.-07.10.2009.
- Görke U-J, Park C-H, Taron J, Wang W, Kolditz O (2010): Numerische Simulation geomechanischer Prozesse bei der Verpressung von CO₂. Postervortrag zum CO₂-MoPa-Statusseminar, Kiel (Germany), 16.-17.02.2010.
- Görke U-J, Park C-H, Wang W, Kolditz O (2010): Modeling of multi-phase transport and deformation processes in saline aquifers during CO₂ sequestration. XVIIIth International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR2010), Barcelona (Spanien), 21.-24.06.2010.
- Görke U-J, Taron J, Wang W, Watanabe N, Kolditz O (2011): Numerical simulation of geomechanical processes during CO₂ injection and storage. Postervortrag zum CO₂-MoPa-Statusseminar, Kiel (Germany), 19.-20.05.2011.
- Görke U-J, Taron J, Singh AK, Wang W, Kolditz O (2011): Towards the generic conceptual and numerical framework for the simulation of CO₂ sequestration in different types of georeservoirs. IVth International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS 2011), Kos Island (Greece), 20.-22.06.2011.

- Kolditz O, Böttcher N, Görke U-J, Liedl R, Park C-H, Wang W (2009): Numerical simulation of multiphase flow in deformable porous media with application to CO₂ storage in deep saline aquifers. 7th International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling "Managing Groundwater and the Environment" (ModelCARE 2009), Wuhan (China), 20.-23.09.2009.
- Kolditz O, Görke U-J, Park C-H, Wang W, Singh AK (2009): Two-phase flow in deformable porous media: Application to CO₂ storage. SIAM Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences, Leipzig (Germany), 15.-18.06.2009.
- Kolditz O, Bauer S, Bilke L, Böttcher N, Delfs J-O, Fischer T et al. (2011): OpenGeoSys: An open source initiative for numerical simulation of THM/C processes in porous media. Scientific Discovery through Advanced Computing Conference (SciDAC2011), Denver CO (USA), 20.-14.07.2011.
- Park C-H, Wang W, Görke U-J, Kolditz O (2009): Numerical simulation of multiphase geohydromechanical processes induced by CO₂ injection in deep saline aquifers. IFP International Conference on Deep Saline Aquifers for Geological Storage of CO₂ and Energy, Rueil-Malmaison (France), 27.-29.05.2009.
- Park C-H, Wang W, Görke U-J, Kolditz O (2009): A benchmark test for Svalbard 2009 by OpenGeoSys: The $p_w S_{nw}$ and $p_c p_{nw}$ models. Workshop "Modeling and risk assessment of geological storage of CO₂", Svalbard (Norway), 03.-07.08.2009.
- Park C-H, Wang W, Görke U-J, Singh AK, Kolditz O (2009): Modeling CO₂ injection in deep saline deformable aquifers. Postervortrag zum Workshop "Modeling and risk assessment of geological storage of CO₂", Svalbard (Norway), 03.-07.08.2009.
- Park C-H, Taron J, Görke U-J, Singh AK, Kolditz O (2010): The fluidal interface is where the action is in CO₂ sequestration and storage: Hydromechanical analysis on mechanical failure. 10th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT10), Amsterdam (The Netherlands), 19.-23.09.2010.
- Singh AK, Wang W, Park C-H, Görke U-J, Kolditz O (2010): Non-isothermal effects on multi-phase flow in porous medium. XVIIIth International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR2010), Barcelona (Spanien), 21.-24.06.2010.
- Singh AK, Wang W, Görke U-J, Kolditz O (2011): Mixed convection instability during carbon dioxide storage into deep saline aquifers. Postervortrag zur European Geosciences Union General Assembly (EGU2011), Wien (Austria), 03.-08. April 2011.
- Taron J, Park C-H, Wang W, Watanabe N, Görke, U-J, Kolditz O (2011): Numerical modeling of H²M processes of CO₂ storage in deep saline aquifers. Postervortrag zum CO₂-MoPa-Statusseminar, Kiel (Germany), 19.-20.05.2011.