

UFZ-Bericht 04/2012

Numerische Simulation von thermo-hydro-mechanisch-chemisch (THM/C) gekoppelten Prozessen

Uwe-Jens Görke, Olaf Kolditz, Chan-Hee Park,
Haibing Shao, Ashok Kumar Singh, Wenqing Wang

ZE:

Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ,
Department Umweltinformatik

Förderkennzeichen:

03G0704S

Vorhabenbezeichnung:

Verbundprojekt UR III – CLEAN: Großtechnische CO₂-Speicherung zur Ausbeutesteigerung im Erdgasfeld Altmark

Vorhaben: Numerische Simulation von THMC gekoppelten Prozessen, Schwerpunkt Geomechanik (CO₂THMC) und Höchstleistungsrechnen (CO₂HPC) (TV III: GEO-PROCESSES) – Sonderprogramm GEOTECHNOLOGIEN

Laufzeit des Vorhabens:

01.07.2008 bis 30.06.2011

Berichtszeitraum:

01.07.2008 bis 30.06.2011

Schlussbericht

zum Vorhaben

Numerische Simulation von thermo-hydro-mechanisch-chemisch (THM/C) gekoppelten Prozessen

im F&E-Verbundprojekt

CLEAN

(CO₂ Large-Scale Enhanced Gas Recovery in the Altmark Natural Gas Field)

Leipzig, Dezember 2011

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. Haibing Shao
Dr. Ashok Kumar Singh
Dr. Wenqing Wang

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	ZUSAMMENFASSUNG DES VERBUNDPROJEKTES CLEAN	4
1.1	Themenkomplex „Technikumsanlage Injektion von CO ₂ “	7
1.2	Themenverbund „Bohrungsintegrität“	7
1.3	Themenverbund „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“	9
1.4	Themenverbund „Umwelt- und Prozessmonitoring“	13
1.5	Themenkomplex „Öffentliche Akzeptanz“	17
2	EINFÜHRUNG UND PROJEKTÜBERSICHT	18
2.1	Aufgabenstellung	18
2.2	Voraussetzungen für die Durchführung des Vorhabens	19
2.3	Planung und Ablauf des Vorhabens	20
2.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand	22
2.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	25
3	EINGEHENDE DARSTELLUNG DES PROJEKTS	27
3.1	Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse	27
3.2	Nutzen, Verwertung und Schutzrechtsanmeldungen	57
3.3	Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	58
3.4	Literatur	60

1 Zusammenfassung des Verbundprojektes CLEAN

CO₂ LARGE-SCALE ENHANCED GAS RECOVERY IN THE ALTMARK NATURAL GAS FIELD (CLEAN)

MAJA TESMER¹, PETER PILZ¹, MICHAEL KÜHN¹ & CLEAN-PARTNER²

¹ Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum - Zentrum für CO₂-Speicherung, Telegrafenberg, 14473 Potsdam

² im Folgenden aufgeführt:



Das Verbundprojekt CLEAN war ein Forschungs- und Entwicklungsvorhaben (F&E) von insgesamt 16 Institutionen der deutschen Wissenschaft und Wirtschaft, welches vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Zeitraum von 01.07.2008 bis 30.06.2011 gefördert wurde. Es handelte sich bei diesem F&E-Vorhaben um das wissenschaftliche Begleitprogramm zu einem EGR-Pilotprojekt („Enhanced Gas Recovery“), welches gemeinschaftlich von GDF SUEZ E&P Deutschland GmbH (GDF SUEZ) und Vattenfall Europe durchgeführt werden sollte. Hierzu wurden seitens des Lagerstättenbetreibers das nahezu vollständig abgebaute, strukturell und hydraulisch vom Hauptfeld isolierte Teilfeld Altensalzwedel ausgewählt und die zur Durchführung des Pilotprojektes erforderliche ober- und untertägige Infrastruktur eingerichtet bzw. bereitgestellt. Der Verbund CLEAN hatte zum Ziel, (1) die Möglichkeiten der Mobilisierung konventionell nicht förderbarer Erdgasmengen zur Steigerung der Erdgasförderung zu testen, und (2)

die generelle Tauglichkeit der Lagerstätte für die Injektion und Speicherung als auch die prinzipielle Injizierbarkeit von CO₂ zu untersuchen. Im Rahmen des Pilotvorhabens war geplant, nahezu 100.000 Tonnen CO₂ in das Teilfeld Altensalzwedel zu injizieren.

Der Forschungsschwerpunkt von CLEAN lag dabei in der Entwicklung und Optimierung geeigneter Technologien und Verfahren (1) zur optimalen CO₂-Injektion in Bezug auf eine größtmögliche Ausbeute des Erdgasreservoirs, (2) zur technischen Überwachung der CO₂-Ausbreitung in der Lithosphäre unter Berücksichtigung umweltrelevanter Prozesse, (3) zur Realisierung eines Langzeitbohrungsverschlusses, (4) zur Ermittlung und Beurteilung der Bohrungsintegrität älterer Bohrungen sowie (5) der Untersuchung, Beschreibung und Bewertung aller mit der CO₂-Injektion und der Verdrängung von Erdgas verbundenen Prozesse. Darüber hinaus sollte durch die Weiterentwicklung der wissenschaftlichen open-source Software OpenGeoSys (OGS) und deren Anpassung speziell an Reservoirmodellierungen ein effektives Simulationswerkzeug für künftige EGR- und CO₂-Speicherprojekte zur Verfügung gestellt werden.

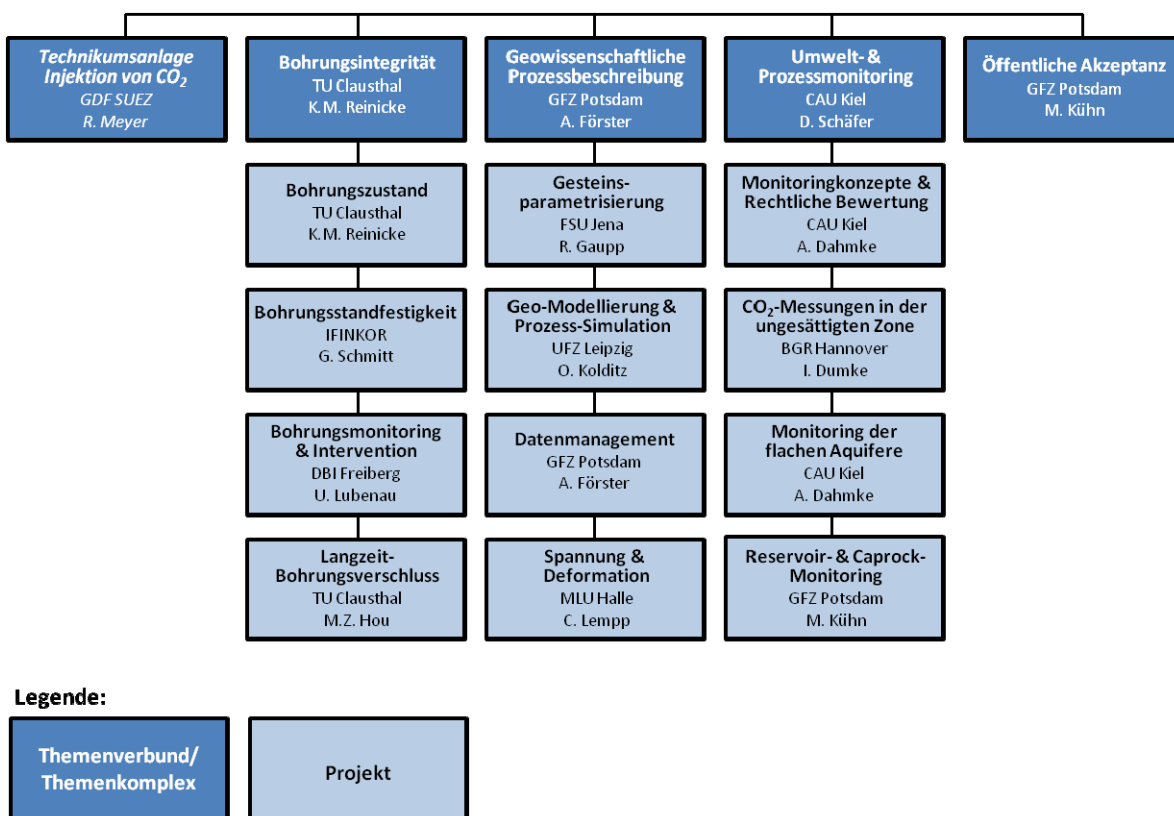


Abb. A: Organigramm des F&E-Verbundvorhabens CLEAN

Das Verbundvorhaben wurde vom Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ) in enger Abstimmung mit dem Verbundpartner und Lagerstättenbetreiber GDF SUEZ koordiniert. Drei Themenverbände bildeten den Kernbereich des Verbundvorhabens: „Bohrungsintegrität“, „Geowissenschaftliche

Prozessbeschreibung“ sowie „Umwelt- und Prozessmonitoring“ (s. Abb. A). Jeder Themenverbund setzte sich aus 4 Projekten zusammen, die wiederum den Rahmen für verschiedene Teilprojekte bildeten. Ungeachtet dieser Strukturvorgabe waren die Teilprojekte auch untereinander verbundübergreifend vernetzt.

Zusätzlich wurde der ebenfalls vom BMBF geförderte Themenkomplex „Öffentliche Akzeptanz“ zur sachlichen Aufklärung und qualifizierten Information der regionalen Bevölkerung an das F&E-Vorhaben angegliedert. Die Aktivitäten in diesem Themenkomplex wurden vom GFZ aus geleitet und in engem Kontakt mit GDF SUEZ und dem BMBF realisiert. Mit CLEAN assoziiert war zudem der Themenkomplex „Technikumsanlage – Injektion von CO₂“. Dieser von GDF SUEZ verantwortete Themenkomplex hatte sich zur Aufgabe gestellt, die technische Basis für die wissenschaftlichen Arbeiten im CLEAN-Vorhaben inklusive der Infrastruktur zur CO₂-Injektion zu Verfügung zu stellen.

Für die interne Kommunikation stand für alle Projektpartner eine von der Firma GICON entwickelte und gepflegte, Web-basierte Informationsplattform zur Verfügung.

Der unerwartet große politische Einfluss auf das bergrechtliche Genehmigungsverfahren sowie die Verzögerungen bei der Umsetzung der europäischen Richtlinie zur Abscheidung, zum Transport und zur Speicherung von CO₂ auf bundesdeutscher Ebene hatten zur Folge, dass während der Projektlaufzeit keine Erlaubnis für die Injektion von CO₂ durch die zuständige Behörde (Landesamt für Geologie und Bergwesen, Sachsen-Anhalt) erteilt wurde.

Trotz dieses massiven Einschnitts in das CLEAN-Vorhaben konnten die Arbeiten zum überwiegenden Teil erfolgreich umgesetzt werden, wobei partiell verschiedene Anpassungen an die Durchführung und Ziele erforderlich waren. Die Themenverbünde „Bohrungsintegrität“ sowie „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“ konnten ihre Ziele weitestgehend unbeeinflusst umsetzen. Im Themenverbund „Umwelt- und Prozessmonitoring“ wurden alle Projekte - mit Ausnahme des Projektes „Reservoir- & Caprock-Monitoring“ - mit geringfügigen Anpassungen realisiert. Alle im zuletzt genannten Projekt entwickelten Methoden konnten aber alternativ an anderen Standorten erfolgreich getestet werden.

Im 2. Quartal 2010 wurde, entsprechend der zu diesem Zeitpunkt immer noch unklaren politischen Rahmenbedingungen, von GDF SUEZ die Vergabe noch ausstehender Fremdleistungen ausgesetzt. Die betriebsbereite Informationsstelle in Salzwedel konnte nicht eröffnet werden. Die Öffentlichkeitsarbeit wurde an diese Situation angepasst weitergeführt. Das erarbeitete Informationsmaterial konnte alternativ im Besucherzentrum Ketzin der Öffentlichkeit präsentiert werden.

Insgesamt führten die im CLEAN-Verbundprojekt durchgeführten Arbeiten zu einer umfassenden Bewertung des EGR-Potentials der Altmark-Lagerstätte. Es wurden sowohl digitale Datenbanken und Modelle als auch Bewertungen der Bohrungsintegrität, der Förderpotentiale sowie der Folgeerscheinungen bzw. Risiken einer EGR-Technologie am

Standort Altmark erarbeitet. Auch konnten die wesentlichen in Verbindung mit einer CO₂-Speicherung in-situ ablaufenden Prozesse dokumentiert, bilanziert und beurteilt werden. Die Weiterentwicklung und Erprobung unterschiedlicher Monitoringmethoden ermöglicht eine verbesserte Überwachung von CO₂-Speicherstandorten. Hierdurch wurde der Kenntnisstand nicht nur im Bereich von EGR und CO₂-Speicherung, sondern generell für Untersuchungen des tiefen Untergrundes (z. B. Geothermie, Kohlenwasserstoffexploration) befördert. Ein weiteres Resultat des Verbundvorhabens ist die Schaffung der technischen, logistischen und konzeptionellen Voraussetzungen für die Durchführung eines EGR-Pilotprojektes mit CO₂-Injektion für den Standort Altmark.

Der wirtschaftliche Nutzen der bisher erfolgten Arbeiten besteht vorrangig in der optimierten Nutzung des potenziellen unterirdischen Speicherraumes und der Verringerung von Risiken bei künftigen EGR- bzw. CO₂-Speichervorhaben. De facto aber hängt der wirtschaftliche Erfolg der geleisteten Arbeiten in starkem Maß von der politischen Entwicklung in den nächsten Jahren und Jahrzehnten ab.

Im Folgenden werden die gewonnenen Erkenntnisse und Ergebnisse im Einzelnen vorgestellt:

1.1 Themenkomplex „Technikumsanlage Injektion von CO₂“

In diesem Themenkomplex wurden in der Projektlaufzeit folgende Arbeiten vorgenommen:

- Installation der Injektionsanlage,
- Materialbeschaffung (Rohrleitungen, Komplettierung der Injektoren),
- Schulung von Personal.

Aufgrund der während der Projektlaufzeit nicht erteilten bergrechtlichen Genehmigungen konnten die Übernahme des CO₂, die Konditionierung des CO₂, der Betrieb der Konditionierungsanlage, die Injektion des CO₂ in den Rotliegend-Speicher, die Erfassung der Platznahme des CO₂ in der Lagerstätte, die Bewertung der Injektivität der Bohrungen und des unmittelbar angrenzenden Speicherbereichs, die teilfeldbezogene Bewertung des EGR-Effektes sowie die Messung und der Nachweis der prognostizierten, gesteigerten Erdgasausbeute nicht durchgeführt werden.

1.2 Themenverbund „Bohrungsintegrität“

Im Themenverbund „Bohrungsintegrität“ standen folgende Ziele im Vordergrund der Untersuchungen und wurden in vollem Umfang erreicht:

- Entwicklung wissenschaftlicher Methoden zur Erfassung und Bewertung des Bohrungszustandes im Hinblick auf dessen langfristige Eignung für eine sichere und ökologisch unbedenkliche CO₂-Speicherung,

- Entwicklung wissenschaftlicher Konzepte zur Szenariendefinition und -bewertung möglicher CO₂-Leckagen,
- Entwicklung von Monitoringprogrammen und Maßnahmen zur Vermeidung, Reparatur und Bekämpfung von Leckagen sowie
- Entwicklung eines dauerhaften geologischen Verschlusskonzepts von Bohrungen.

Basierend auf den aktuellen Monitoringtechniken und den potenziellen, relevanten Schadensprozessen wurden Bewertungsschemata zur Beurteilung des aktuellen Bohrungszustandes sowie der Langzeitsicherheit entwickelt. Verschiedene Prüfverfahren wurden einander gegenübergestellt und evaluiert. Als relevante Schadensprozesse wurden chemische Korrosion, mechanisch-thermische Beanspruchung sowie Herstellungsdefizite identifiziert und beschrieben. Bei offenen Bohrungen besteht das Prüfschema u. a. aus Bohrlochmessungen zur Ausweisung potenzieller Leckagewege, zur Feststellung der Druckdichte sowie dem Ausschluss von Fluidbewegungen. Für verfüllte Bohrungen wurde ein Kriterienkatalog zur Beurteilung der Qualität der Verfüllung entwickelt. Die Prognose der Langzeitsicherheit wurde anhand der Methode der „Features, Events and Processes (FEPs)“ durchgeführt. In Laborexperimenten konnten Selbstheilungsprozesse im Verbundsystem (an den Grenzflächen Salz-Zement und Zement-Casing sowie innerhalb des Zements) nachgewiesen werden.

Zur Quantifizierung der langfristigen Integritätsentwicklung von Bohrungen wurden Laborexperimente zum Korrosionsverhalten unterschiedlicher Stähle im Kontakt mit scCO₂ unter verschiedenen Einflussfaktoren (Wasser, Chlor, Temperatur, Inhibitoren und den Gasen O₂, CO und H₂S) durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass das Vorhandensein von Wasser in dem System die Korrosion deutlich erhöht. Daher sollte CO₂, bevor es in Rohrleitungen oder Injektionssonden gelangt, getrocknet werden. Beimengen von Gasen sollten einen noch festzulegenden Grenzwert nicht überschreiten. Die Komplettierung der Sonden sollte mit 13Cr-Stahl erfolgen.

Nach Auswertung und Interpretation der von GDF SUEZ zur Verfügung gestellten Bohrlochuntersuchungen (1975 - 2000) im Untersuchungsgebiet wurden für repräsentative Bohrungsintervalle Festigkeitsberechnungen für alle Bohrungen gegenüber Kollaps und Bersten unter Beachtung der Korrosionsrate und injektionsbedingter Thermospannungen durchgeführt. Die berechneten Sicherheiten zeigen, dass die technische Bohrungsintegrität der 12 untersuchten Sonden für das EGR-Pilotprojekt CLEAN (3 Jahre mit insgesamt 100.000 t CO₂ Injektion) ohne weitere Intervention gegeben ist. Für den Fall einer Leckage wurden ein Maßnahmenkatalog erarbeitet und hierzu Risikoszenarien modelliert. Zementundichtigkeiten können durch Polymergelinjektionen oder Sekundärzementation behoben werden. Für Casing-Reparaturen wird die Patch-Technologie empfohlen.

Für Langzeitbohrungsverschlüsse bieten natürliche Materialien (Steinsalz, Ton, Schwefel) gegenüber Stahl und Zement einen besseren Korrosionsschutz. Deshalb

wurde für ein langzeitstabiles Bohrungsverschlussverfahren im salinaren Deckgebirge ein Konzept entwickelt, welches durch das Einbeziehen der natürlichen Kriecheigenschaften einer mehrere hundert Meter mächtigen Steinsalzformation im Verbund mit weiteren, vorgesehenen Verschlussmaterialien (Polymergele im Porenraum, Zementbrücken unterhalb der Salzbarriere) zusätzliche Sicherheit bringen soll. Zur Ermittlung der Kriechparameter von Steinsalz wurden Laborexperimente durchgeführt, die in die numerischen Simulationen des Langzeitbohrungsverschlusses einfließen. In einem Feldversuch wurde die Eignung der Verschlusstechnologie getestet. Hierzu wurde eine Bohrungssektion im Bereich der Steinsalzformation durch Ausfräsung von Verrohrung und Zementation geöffnet und die natürliche Steinsalzkonvergenz zum Verschluss der Bohrung beobachtet. Die Untersuchungen wurden von numerischen Simulationen begleitet. Im Vergleich mit den Verifikationssimulationen verliefen die in-situ Beobachtungen zur Steinsalzvolumenkonvergenz jedoch etwa 12- bis 15-fach langsamer. Das Feldexperiment wurde mit der zweiten Workover-Phase im Juni 2011 beendet. Die Begutachtung des gewonnenen Kernmaterials sowie die Auswahl von geeigneten Proben für die Laborversuche an Steinsalzkernen dauern derzeit an. Die Ergebnisse des Experiments sind im Abschlussbericht dargestellt.

1.3 Themenverbund „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“

Die Arbeiten in diesem Themenverbund waren auf ein verbessertes, ganzheitliches Systemverständnis der bei einer CO₂-Injektion bzw. CO₂-Speicherung ablaufenden physiko-chemischen Vorgänge fokussiert. Die Forschungsschwerpunkte lagen auf der umfassenden geowissenschaftlichen Charakterisierung des geologischen Gesamtsystems der Reservoirgesteine, Fluide und des Deckgebirges sowie aller durch die CO₂-Injektion induzierten Prozesse.

Folgende Zielsetzungen und Fragestellungen wurden verfolgt:

- Aufbau eines effizienten, ganzheitlichen Daten-Management-Systems zur optimalen Vernetzung der Themenverbundmitglieder als Voraussetzung einer ganzheitlichen geowissenschaftlichen Systemanalyse,
- Entwicklung neuer Laborverfahren und numerischer Methoden, die speziell auf die Belange einer CO₂-Injektion ausgelegt sind,
- Demonstration und Quantifizierung von zu erwartenden Prozessen in verschiedenen Skalen: (1) Labor, (2) Bohrlocheffekte, (3) „Nah-Feld“-Effekte, (4) Reservoir- und Deckgestein-Skala und (5) Lagerstättenskala.

Es wurde ein Web-basiertes Informationssystem zur interaktiven Benutzung für die Arbeitsgruppen des Themenverbundes entwickelt. In diesem Informationssystem wurden die von GDF SUEZ übergebenen Daten digital zur Verfügung gestellt. Es erfolgte ferner eine Verifizierung und Interpretation der geowissenschaftlichen Daten. Zusätzlich diente

das Daten-Management-System der Archivierung neu erhobener chemischer, mineralogischer und thermodynamischer Daten sowie der Bereitstellung von Modellen, Simulationen und anderer Dokumente. Hierdurch wurde eine Plattform für eine verbesserte wissenschaftliche Kommunikation und einen schnellen Transfer von Daten geschaffen.

Für das Deckgebirge wurde ein geologisches Modell entwickelt und parametrisiert. Um die vorherrschenden Stressregime zu charakterisieren und künftige Entwicklungen der Spannungszustände in Bezug auf anthropogene Einwirkungen einzuschätzen, wurden in-situ Spannungsmodellierungen durchgeführt. Die Auswertung von Archivdaten erlaubte Rückschlüsse auf den aktuellen Spannungszustand im Untersuchungsgebiet. Zusätzliche Experimente an Gesteinen wurden im Labor durchgeführt, um weitere erforderliche gebirgsmechanische Parameter für die Modelle zu erhalten. Ein 3D-ArcGIS Deckgebirgsmodell wurde für das Untersuchungsgebiet bis in eine Tiefe von etwa 3 km entwickelt. Die ebenfalls im GIS-Modell enthaltenen Daten über Bohrlochrandausbrüche zeigen den Charakter der räumlichen Verteilung von Spannungsanisotropien in unterschiedlichen geologischen Horizonten.

Die sedimentologischen Untersuchungen der Rotliegendensedimente führten zur Klassifizierung der Sandsteine in verschiedene Litho- und Diagenesefaziestypen, die auf einer kontinentalen Überflutungsebene in einem Sabhka-Milieu abgelagert wurden. Detaillierte geochemische und mineralogische Untersuchungen zeigen zudem enge Zusammenhänge zwischen geochemischer Gesteinszusammensetzung, mineralchemischen und -morphologischen Charakteristika (besonders bei Chlorit- und Karbonattypen), spezifischen (reaktiven) Mineraloberflächen und petrophysikalischen Parametern (z. B. Porosität, Permeabilität, nicht reduzierbarer Wassersättigung, „wettability“) und den verschiedenen Litho- und Diagenesetypen. Dadurch wurden in den höher porösen und permeablen äolischen Faziestypen Fluid-Gestein-Reaktionen begünstigt, die zu einer Bleichung der ursprünglich roten Sandsteine führte. In diesem Zusammenhang beteiligte Fluide führten CO₂ und Kohlenwasserstoffe, welche eine Reduzierung von Eisenverbindungen und einen Massetransport von Elementen begünstigten. Die Lithofazies beeinflusst dabei stark früh- bis spätdiagenetische Mineralbildungs- und Lösungsprozesse, welche wiederum großen Einfluss auf die Entwicklung von Porositäten und Permeabilitäten der beteiligten Gesteine ausüben. Hierbei erreichen äolische Dünen- und Flächensande die höchsten Porositäten und Permeabilitäten. Das Ausmaß der Wechselwirkungen zwischen Gestein und Fluid hängt im Wesentlichen von der Korngröße und Kornsortierung bzw. der Größe, Form und Vernetzung der Poren ab. Die gefundenen Korrelationen konnten in Clustergruppen zusammengefasst werden und können somit zukünftige PETREL™-Modellierungen verfeinern. CO₂-Beschlagungsexperimente zeigten, dass mit CO₂ gesättigte Solen zur Lösung von Mineralen und Änderungen der Fluid- und Transporteigenschaften der Sandsteine führen. Die dabei beobachteten Gesteinsalterationen zeigten große Ähnlichkeiten zu den gefundenen Phänomenen in den gebleichten (diagenetisch alterierten) Sandsteinen. In weiteren Laboruntersuchungen wurden geo-

mechanische und geohydraulische Gesteinsuntersuchungen durchgeführt, das Primärspannungsfeld ermittelt sowie ein „multi-layer caprock reservoir“-2D-Modell erstellt. Die Laboruntersuchungen bestätigen die Eignung des Teilfelds Altensalzwedel für eine Pilotinjektion der geplanten 100.000 t CO₂ und lieferten wichtige Eingangsparameter für die numerische Prozessmodellierung.

Numerische Modellierung und Simulation von Transport- und Deformationsvorgängen während der Verbringung von CO₂ in geologische Formationen führten zu einem verbesserten Prozess- und Systemverständnis, auf dessen Basis fundierte Prognosen für die Effektivität und Sicherheit der EGR-Technologie mittels CO₂-Injektion formuliert werden konnten. Zur Beschreibung der beobachteten thermo-hydro-mechanisch-chemisch gekoppelten Prozesse wurden sowohl kommerzielle Programme genutzt (z. B. Eclipse 100/300, TOUGH, FEFLOW, FLAC) als auch das wissenschaftliche open-source Softwareprojekt OGS von verschiedenen Projektpartnern weiterentwickelt. Durch Code-Vergleiche bezüglich unterschiedlicher Aspekte der EGR-Prozesskette konnten Realitätsbezug und Zuverlässigkeit der entwickelten Modelle und deren Implementierung in OGS nachgewiesen werden. Für unterschiedliche Untersuchungsskalen, die vom Bohrloch über das Reservoir-Nahfeld bis in das Gebiet der Gesamtlagerstätte reichten, wurden Modelle entwickelt und kalibriert. Zur Modellkalibrierung konnten neben Literaturdaten in vielfältiger Weise Ergebnisse von Laborexperimenten herangezogen werden, die im Projekt durchgeführt wurden (z. B. hydraulische, geomechanische und geochemische Parameter). Aufgrund der nicht genehmigten CO₂-Injektion konnten die Modellierungen nicht anhand von neu erhobenen Messdaten (Injektionsmengen, -raten, etc.) validiert werden. Die erforderliche Leistungsfähigkeit der verwendeten bzw. entwickelten numerischen Codes konnte jedoch durch ein umfangreiches Benchmarking der untersuchten Vorgänge (physikalisch-chemische Einzelprozesse, gekoppelte Phänomene unterschiedlicher Komplexität) sichergestellt werden. In realistischen Szenariensimulationen wurde u. a. im Rahmen eines Code-Vergleichs zwischen Eclipse und OGS der für das Untersuchungsgebiet geplante Tracer-Test modelliert, woraus sich Hinweise für effektive Monitoringstrategien und -verfahren ergaben.

Die Bohrlochmodelle zeigen u. a., dass bei einer gasförmigen Injektion des CO₂ in der Injektionssonde keine signifikanten thermischen Beanspruchungen des Zements oder des Casings zu erwarten sind. Basierend auf den Bohrlochmodellen wurde ein Konzept zur optimalen CO₂-Injektion entwickelt. Im Rahmen der Entwicklung geeigneter Monitoringstrategien für die Erfassung der Temperaturentwicklung in unmittelbarer Bohrlochumgebung wurde das Wiederaufwärmverhalten der Speicher- und Deckgesteinhorizonte numerisch simuliert. Wie bei allen durchgeführten Code-Vergleichen konnten auch hier sehr gute Übereinstimmungen zwischen den Ergebnissen kommerzieller Codes (hier: FEFLOW) und OGS erzielt werden.

Das Programm PHREEQC wurde weiterentwickelt und mit dem Simulationsprogramm OGS gekoppelt, um physiko-chemische Prozesse, die bei EGR und CO₂-Speicherung im Reservoir ablaufen, besser beschreiben und quantifizieren zu können. Hierzu wurde der Quellcode des Programms PHREEQC um zusätzliche Datensätze erweitert, Schnittstellen zu anderen Programmen entwickelt und eine Effizienzsteigerung der geochemischen Berechnungen durch algorithmische Beschleunigungen und Parallelisierung erreicht. In der PHREEQC/OGS-Kopplung wird u. a. die wechselseitige Lösung von CO₂ in Wasser bzw. Wasser in CO₂ bei nicht-isothermen Gasfluss in porösen Medien berücksichtigt. Dies gestattet die Modellierung von Austrocknungseffekten im bohrlochnahen Bereich und von CO₂-induzierten Fluid-Gestein-Wechselwirkungen. Ferner wurden Methoden zur Überprüfung von Unsicherheiten in chemischen Datenbanken basierend auf „small random perturbations“ entwickelt. In einem weiteren Schritt wurde eine systematische, multivariate Analyse zur Qualitätskontrolle der Datensätze und der chemischen Simulationen durchgeführt. Modellierungsergebnisse zur Injektion von CO₂ in der Altmark wurden mit veröffentlichten Ergebnissen natürlicher Analoga (z. B. Fizzy Gas Reservoir, Rotliegend, Nordsee) verglichen. Die durchgeführten Arbeiten waren maßgeblich für die Entwicklung des Simulators OGS im Bereich der geochemischen Modellierung.

Die bereits erwähnten positiven Ergebnisse von Codevergleichen mit kommerzieller Simulationssoftware zeigen, dass die im Projekt geplante Weiterentwicklung der wissenschaftlich genutzten Software OGS, als offenes, den Projektpartnern im Quellcode verfügbares System, den angestrebten Entwicklungsstand erreichen konnte. Als Vorteile gegenüber kommerziellen Lösungen sind u. a. die Realisierung innovativer Modelle für die Zustandsgleichungen realer Gase bzw. deren Mischungen sowie die modellseitige Kopplung unterschiedlicher physikalischer und chemischer Prozesse einschließlich deren effizienter Umsetzung in einem einheitlichen Softwarekonzept zu sehen. Die Software OGS enthält zudem ein flexibles Schnittstellenmanagement für den Datenaustausch mit numerischen Werkzeugen der Geoinformatik, Prä- und Postprozessoren sowie anderen Simulatoren. Algorithmen für das Höchstleistungsrechnen sind ebenso implementiert wie Schnittstellen zu wissenschaftlichen 3D-Visualisierungsinstrumenten.

Geomechanische Simulationen im bohrlochnahen Bereich, die mit hydraulischen und thermischen Prozessen gekoppelt wurden, zeigten unter den geplanten Injektionsbedingungen zu keiner Zeit das Risiko der Schädigung des Speicher- bzw. Deckgesteins. Diese Aussage ließ sich auch auf das gesamte Reservoirmodell übertragen. Das Materialverhalten aller betrachteten Gesteinsschichten erwies sich über den gesamten Zeitraum während und nach der Injektion von CO₂ als elastisch. Plastische Effekte als Anzeichen für potenzielles mechanisches Versagen wurden nicht festgestellt.

Zur Kontrolle der CO₂-Injektion und Injektivität der Speicherhorizonte wurde ein Bohrlochmodell mit dem Reservoirmodell gekoppelt. Für das Reservoirmodell wurde ein History-Matching erfolgreich durchgeführt. Die Simulationen zeigen, dass die geplante Injektion von knapp 100.000 t im Vergleich zur Größe des Injektionsgebiets nur gerin-

gen Einfluss sowohl auf den Lagerstättendruck als auch auf den Ausbeutefaktor hat. Die Ausbreitung des CO₂ variiert in Abhängigkeit von der Reservoirheterogenität und den angenommenen Injektionsregimes. Die modellierten Szenarien erlauben die Schlussfolgerung, dass es innerhalb der Injektionsphase von 2 Jahren zu keinem CO₂-Durchbruch an der 1.600 m vom Injektor entfernten Produktionssonde kommt, während in einer etwa 600 m entfernten Beobachtungssonde nach ungefähr einem Jahr bereits ein Anstieg der CO₂-Konzentrationen messbar sein sollte.

1.4 Themenverbund „Umwelt- und Prozessmonitoring“

Zu den Aufgaben dieses Themenverbundes gehörten die Entwicklung und Erprobung von Monitoringmethoden sowie die Ableitung eines Umwelt- und Betriebsmonitoringkonzeptes. Hierbei wurden die ungesättigte Zone, die oberflächennahen Grundwasserleiterkomplexe, das Deckgebirge und das Reservoir voneinander unterschieden. Folgende Ziele sollten erreicht werden:

- Die Entwicklung und Erprobung von Methoden zum Prozessmonitoring für die genannten Gebiete sowie die Durchführung des jeweiligen Monitorings:
 - geophysikalisches Monitoring (Seismik, Druck, Temperatur),
 - geochemisches und isotopengeochemisches Monitoring,
 - Erfassung der mikrobiellen Biozönosen,
 - Durchführung von Bodengasmessungen,
 - hydrogeologisches Monitoring.
- Die Erfassung der natürlich und anthropogen verursachten Schwankungsbreiten der jeweiligen Parameter und möglicher Indikatoren vor und während der EGR-Maßnahme.
- Die Bewertung der verschiedenen Methoden sowie Identifizierung, Ausweisung und Dokumentation der für ein EGR-Monitoring relevanten Parameter und Indikatoren.

Für die ungesättigte Zone sowie den Bereich der oberflächennahen Grundwasserleiterkomplexe konnte das geplante Bodengasmonitoring in vollem Umfang durchgeführt werden, da die Untersuchungen von einer CO₂-Injektion unabhängig waren. Für das Bodengasmonitoring wurde ein Messnetz mit automatischer Datenübertragung im Untersuchungsgebiet aufgebaut, welches kontinuierlich die Konzentration von CO₂ und CH₄ in der Bodenluft aufzeichnete. Die Messungen zeigen natürliche Konzentrationsschwankungen, die sowohl zeitlich als auch räumlich stark variieren. Jahreszeitlich bedingte und auch auf kurzer Zeitskala beobachtete Veränderungen sind abhängig von der Temperatur und der Bodenfeuchte, die wesentliche Steuerparameter für den mikrobiellen Abbau sind. Mikrobiologische Untersuchungen bestätigen eine relativ große und aktive

mikrobielle Population im Nahfeld der Messstationen, die natürlich vorkommendes organisches Material zu CO₂ umsetzen. Räumliche Konzentrationsunterschiede ergeben sich aus dem Flurabstand und dem Gehalt an organischen Substanzen. Um die natürliche Bandbreite der Gasmessungen abschätzen zu können, wird empfohlen, langjährige Basislinien-Messungen durchzuführen, die es dann ermöglichen sollen, CO₂-Leckagen von natürlichen Konzentrationsschwankungen zu unterscheiden.

Zur Erfassung der natürlichen Schwankungsbreiten der Konzentrationen von Wasserinhaltsstoffen in oberflächennahen Grundwasserleitern als Referenzzustand vor einer möglichen CO₂-Injektion wurde das vorhandene Grundwasserbeobachtungsnetz durch zusätzliche Beobachtungspegel erweitert. In den neuen Messstellen wurde das Grundwasser sowie die Sedimente beprobt und analysiert und damit eine Basislinie definiert. Mittels geophysikalischer Messungen (Hubschrauber gestützte Aeromagnetik, Bohrloch-Oberflächen-Geoelektrik) wurden lineare und flächenhafte Informationen zur Verteilung des elektrischen Widerstands im Untergrund gewonnen, die ebenfalls als grundlegende Basislinien-Messungen dienen und zusätzlich Aufschlüsse über die geologische Struktur am Standort liefern. Basierend auf vorhandenen geologischen Daten zur Stratigrafie des Untergrunds als auch unter Berücksichtigung der neuen Bohrprofile wurde ein geologisches Strukturmodell für die oberflächennahen Grundwasserleiter am Standort erstellt. Das Strukturmodell wurde in ein hydrogeologisches Strömungsmodell überführt und anhand gemessener Grundwasserstände kalibriert. Das hydrogeologische Modell diente als Datengrundlage zur Simulation von Szenarien zum CO₂-Aufstieg in den oberflächennahen Grundwasserkomplex und zum Einfluss der Grundwasserfließgeschwindigkeit auf die Ausbreitung der Gasphase. Darüber hinaus wurden die geochemischen Auswirkungen einer CO₂-Lösung im Grundwasser zur Beurteilung von Detektionsmöglichkeiten modelliert.

Im Bereich des Deckgebirgs- und Reservoirmonitoring wurden von den Arbeitsgruppen Monitoringkonzepte für das Untersuchungsgebiet entwickelt. Basislinien-Messungen zur Geochemie und Mikrobiologie wurden planmäßig durchgeführt, während die geophysikalischen Untersuchungen (Seismik, Druck, Temperatur) aufgrund des Projektverlaufs in der Altmark nicht umgesetzt werden konnten. Alternativ wurden von den betroffenen Arbeitsgruppen die neu- oder weiterentwickelten Monitoringmethoden (hybrides Bohrlochmesssystem, Gas-Membran-Sensor-Systeme (GMS)) und die neu erworbene Geophonkette an anderen Standorten (Groß Schönebeck, Windischeschenbach) erfolgreich getestet. Sämtliche Monitoringmethoden stehen basierend auf den durchgeführten Entwicklungen und Tests für ein Monitoring im Untersuchungsgebiet nun zur Verfügung.

Das seismische Monitoring teilte sich in die Teilbereiche aktive und passive Seismik auf. Im Bereich der aktiven Seismik wurden die Effekte der CO₂-Injektion auf die physikalischen Eigenschaften des Reservoirs aufgezeigt. Diese zeigen, dass eine direkte Lokalisierung des CO₂ im Reservoir unwahrscheinlich ist und das Hauptaugenmerk bei den Messungen auf eine Beobachtung der oberhalb des Reservoirs liegenden Grundwasser-

leiter zu richten ist. Dort sind Änderungen im seismischen Wellenfeld aufgrund größerer Dichteunterschiede zwischen CO₂ und Wasser schon bei geringen Mengen entweichenden Kohlendioxids zu erwarten. Im Teilbereich der passiven Seismik wurde im Rahmen des CLEAN-Verbundprojektes ein Algorithmus zur automatischen Lokalisierung seismischer Ereignisse basierend auf Diffraktionssummation entwickelt und erfolgreich an synthetischen Datensätzen getestet. Grundlage dieser Datensätze waren das realistische Geschwindigkeitsmodell der Altmark, die geplante Empfängergeometrie und eine P- und S-Wellen abstrahlende Quelle. Ausgehend von diesen Tests ist es möglich die Methode zu nutzen, um mögliche injektionsinduzierte seismische Ereignisse schnell zu detektieren und zu lokalisieren. Dies ist wichtig, da ein seismisches Ereignis im Caprock theoretisch zu einer Undichtigkeit der Lagerstätte und somit zu einem Austritt des CO₂ führen kann.

Die auf die Bedingungen der Altmark abgestimmten thermo-hydraulischen Simulationen zeigten, dass passive Temperaturmessungen wichtige Beiträge für eine Injektions- und Produktionsprofilierung leisten können. Die ursprünglich geplante Anwendung der Wärmepulsmethode wurde aufgrund neuer Informationen zu den standortspezifischen Reservoirbedingungen und den für das Monitoring zur Verfügung stehenden Bohrungen verworfen. Als weiterer Beitrag zur Untersuchung injektionsbedingter Änderungen im bohrlochnahen Bereich wurde eine Sensitivitätsstudie zur Anwendbarkeit des Pulsed Neutron-Gamma-Verfahrens durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass dieses Verfahren wegen des geringen Kontrasts zwischen CO₂ und den im Reservoir vorhandenen Erdgasbeständen in der Altmark nur sehr eingeschränkt anwendbar wäre.

Um bei einer künftigen CO₂-Injektion in das Gasreservoir bereits kleinste Änderungen (im ppm- bis ppb-Bereich) in der Fluid- und Gaszusammensetzung wie der Isotopensignatur detektieren zu können, wurden umfangreiche geochemische Untersuchungen von Gasen und Fluiden aus diesem Bereich vorgenommen und eine entsprechende Daten-Basislinie erstellt. Die durchgeführten Messungen belegen darüber hinaus, dass innerhalb des Gasreservoirs eine deutliche Variation der isotopischen, gas- und hydrochemischen Zusammensetzung existiert, und dass diese Variation bei einer anhaltenden Förderung dynamischen Veränderungen unterliegt. Zudem wurde deutlich, dass die Art der Probenahme Einfluss auf die verschiedenen Parameter hat. Beispielsweise führten die Einfahrten mit gebräuchlichen Probennehmern wie Doppelkugelbüchse und „Positive Displacement Sampler“ zu partiellen Entgasungen insbesondere der Gase mit geringerer Löslichkeit. Damit schränkt das Probenahmeverfahren die Sensitivität der Messkonzepte sowohl für die Gas- als auch für die Isotopenmessungen ein. Es wird daher empfohlen, für Gas- und Isotopenmessungen in den Fluiden die GSM-Technologie (Gas-Membran-Sensor) zu verwenden. Um unter den p/T-Bedingungen der Altmark eingesetzt werden zu können, wurde das GSM-System im CLEAN-Projekt weiterentwickelt und umgerüstet.

Darüber hinaus wurden an einer speziell für die p/T-Bedingungen der Altmark angepassten Hochdruckapparatur die Permeation aller reservoirrelevanten Gase durch die PDMS-Membran (Polydimethylsiloxan) des GMS unter verschiedenen p/T-Bedingungen bestimmt. Die Permeationsraten der Gase sind grundlegende Parameter für die Kalibration der GMS.

Weitere Studien haben gezeigt, dass sich die natürlichen Isotopensignaturen der Fluide signifikant von dem zu injizierenden CO₂ unterscheiden, sodass $\delta^{13}\text{C}$ und $\delta^{18}\text{O}$ die Kalkulation von Isotopenmassebilanzen ermöglichen und Aussagen über das Verhalten des injizierten CO₂ in der Lagerstätte erlauben. Anhand von Laborexperimenten wurde der Einfluss der p/T-Bedingungen und der Ionenstärke auf Isotopenfraktionierung und Kinetiken bestimmt und modelliert.

Als Ergebnis mikrobiologischer Untersuchungen wurden in moderat temperierten Produktionswässern mit PCR-SSCP-Analysen (Polymerase Chain Reaction - Single Strand Conformation Polymorphism) Mikroorganismen des Fe- und S-Kreislaufes identifiziert. Dagegen deuten die Ergebnisse der durch hohe Temperaturen und hohe Salinitäten gekennzeichneten Tiefenproben auf deutlich geringere DNA-Gehalte hin. Die nested-PCR-DGGE-Methode (Polymerase Chain Reaction - Denaturing Gradient Gel Electrophoresis) war sensitiv genug, um die direkt extrahierte DNA in den Fluidproben zu amplifizieren und verschiedene Mikroorganismen im heißen, hochsalinaren Reservoirfluid zu identifizieren. Daneben wurden Langzeitversuche zur CO₂-Exposition von Gesteinsproben aus der Altmark unter in-situ Bedingungen durchgeführt. Die Fluidzusammensetzung nach der CO₂-Exposition wies nach 10 Monaten eine leichte Erhöhung der Eisengehalte im Vergleich zur Ausgangszusammensetzung auf.

Zusammenfassend wurden standortunabhängige Monitoringempfehlungen auf Grundlage nationaler und internationaler Leitfäden zum Monitoring von CCS und EGR sowie der EU-Richtlinie erfasst, verglichen und dokumentiert. Zur Bewertung der zur Verfügung stehenden CO₂-Detektionsmethoden wurden Methodensteckbriefe erstellt, die einen schnellen Vergleich unterschiedlicher Methoden erlauben und als Grundlage zur Erstellung von Monitoringkonzepten dienen.

Neben den Arbeiten zum Monitoring erfolgten auch Betrachtungen zur Sicherheit und Umweltverträglichkeit von EGR. Schwerpunkte der Betrachtung stellten CO₂-Freisetzungen aus dem Speicherbereich bzw. der Obertageanlage dar. Es erfolgten Berechnungen zur Ausbreitung des freigesetzten CO₂ und darauf basierende Gefahrenbeurteilungen. Damit stehen belastbare Werkzeuge und Aussagen zur Bewertung derartiger Gefahrenpotenziale zur Verfügung.

1.5 Themenkomplex „Öffentliche Akzeptanz“

Der Themenkomplex „Öffentliche Akzeptanz“ hatte zum Ziel, die allgemeine Öffentlichkeit objektiv und sachkundig über das Thema „Enhanced Gas Recovery“ zu informieren und aufzuklären, um weitgehende Akzeptanz für eine großtechnische CO₂-Speicherung zu erreichen. Hierzu sollten folgende Aufgaben umgesetzt werden:

- Informationsveranstaltungen in öffentlichen Räumen,
- Qualifizierte Information der Presse,
- Installation eines internetbasierten virtuellen Informationsforums,
- Einrichtung und Betrieb eines Informationszentrums,
- Entwicklung von Informationsmaterialien und Exponaten.

Die Öffentlichkeit wurde durch Presseinformationen, auf Podiumsdiskussionen und in Interviews über die Inhalte, Ziele und den aktuellen Sachstand des F&E-Vorhabens CLEAN informiert. Anfragen einer Bürgerinitiative, der Presse und von Politikern wurden schriftlich beantwortet oder bei direkten Treffen aufgegriffen. Eine Internetplattform stellte Informationen zum F&E-Vorhaben CLEAN zur Verfügung. Die geplante Eröffnung eines Informationszentrums in Salzwedel wurde im Einvernehmen mit dem BMBF und GDF SUEZ aufgrund des Projektverlaufs ausgesetzt. Unabhängig davon wurde die Öffentlichkeitsarbeit durch das GFZ weitergeführt, u. a. auch durch Präsentation der Exponate im Besucherzentrum des Pilotstandortes Ketzin. Zudem wurden umfangreiche Informationsmaterialien (Flyer, Exponate, Informationstafeln, Filme) zusammengestellt und entwickelt. Die Informationsmaterialien wurden der Öffentlichkeit im Besucherzentrum, auf Tagungen und anderen öffentlichen Veranstaltungen zugänglich gemacht.

Danksagung

Die Autoren danken dem BMBF für die finanzielle Unterstützung des F&E-Vorhabens CLEAN, 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 CLEAN.

2 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 ihren 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 zur Verfügung.

Die Arbeiten des hier präsentierten Berichts wurden im Teilprojekt TV III.2 „Numerische Simulation thermo-hydro-mechanisch-chemisch gekoppelter Prozesse“ des Themenverbundes TV III „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“ des Forschungs- und Entwicklungsvorhabens (F&E-Vorhaben) CLEAN ausgeführt. Sie wurden unter dem Förderkennzeichen 03G0704S vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Zeitraum vom 01.07.2008 bis 30.06.2011 gefördert und vom Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ, Department Umweltinformatik realisiert. Integrierende Hauptaufgabe des F&E-Vorhabens CLEAN war die Untersuchung der Möglichkeit einer Produktivitätssteigerung und der Förderung immobiler Restgasmengen durch die Injektion von CO₂ (Enhanced Gas Recovery – EGR) im Teilfeld Altensalzwedel der Erdgaslagerstätte Altmark. Eigentümer und Betreiber dieser Lagerstätte ist die GDF SUEZ E&P Deutschland GmbH (GDF SUEZ).

2.1 Aufgabenstellung

Zielsetzung des hier dargelegten Projekts war die numerische Simulation der gekoppelten thermischen, hydrogeologischen, geomechanischen und geochemischen (THM/C) Prozesse im Nahfeldbereich, die während und nach der Injektion von CO₂ in eine nahezu ausgebeutete Erdgaslagerstätte auftreten. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stand dabei die Entwicklung von spezifischen Modellen sowie deren Integration in Simulatoren für die Bewertung des beabsichtigten EGR-Konzepts hinsichtlich Effizienz und Formationsicherheit. Mit dem Nahfeldbereich ist dabei der Teil eines Reservoirs definiert, der sich in unmittelbarer Umgebung der Injektionsbohrung befindet. In diesem Gebiet sind

durch die CO₂-Injektion substanzielle Änderungen von Druck, Temperatur, Gesteinsspannungen und chemischen Konzentrationen zu erwarten. Die Teilprozesse wirken über signifikante Kopplungsmechanismen interagierend miteinander. Im Rahmen der vorgesehenen Fokussierung auf geomechanische Prozesse war beabsichtigt, diese Kopplungsmechanismen (z.B. Poro-Perm-Effekte im Zusammenwirken hydrogeologischer und geomechanischer Vorgänge, thermomechanische Formationsschädigungen) zu quantifizieren, was mit der gegenwärtigen 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 THMC-Softwarekomponenten für Simulationen im Bereich der EGR-Technologie in Verbindung mit der Nutzung von Höchstleistungsrechentechnik (HPC).

2.2 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 Abfalldepositionierung) 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 ist das Department neben dem F&E-Vorhaben CLEAN aktuell in die Untersuchungen der vom BMBF geförderten Projektverbünde CO₂-MoPa, CO₂MAN und CO₂BENCH (als

Bestandteil des PROTECT-Verbundes) eingebunden. In diesem Zusammenhang werden differenzierte Aufgabenstellungen aus dem Bereich der Simulation gekoppelter THM/C Vorgänge im geologischen Untergrund bearbeitet. Ein verallgemeinerter 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, Höchstleistungsrechen und Software-Engineering).

2.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Analog zu den Forschungspartnern im F&E-Verbund CLEAN wurden für das hier dargelegte Projekt in der Antragsphase Kosten-, Zeit- und Arbeitspläne erstellt, die während der Projektlaufzeit in Abstimmung mit Lenkungsausschuss, Projektkoordination, relevanten Verbundpartnern und 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 übergeordneten Vorhabensziele uneingeschränkt erreicht werden.

Verfahrensbedingt (späte Einstellung von Projektpersonal durch Einhaltung gesetzlicher Fristen nach verzögertem Eingang des Bewilligungsschreibens am UFZ) ergaben sich erste Verzögerungen bereits zu Projektbeginn. Jedoch konnten anfängliche Rückstände im Bearbeitungsprozess durch teilweisen Einsatz von haushaltfinanziertem Personal bereits im ersten Jahr der Projektlaufzeit nahezu vollständig ausgeglichen werden. Diese Arbeiten betrafen u.a. eine Studie zu Materialmodellen der Felsmechanik sowie Untersuchungen zu algorithmischen Kopplungsmechanismen hydrogeologischer und geomechanischer Prozesse inklusive deren Integration in das wissenschaftliche open-source Softwareprojekt OpenGeoSys (OGS). Somit konnte die Zeitplanung über den gesamten Projektverlauf gesehen ohne gravierende Veränderungen der Projektziele eingehalten werden.

Die Entwicklung der kontinuumsmechanischen sowie der konstitutiven Modelle und Algorithmen zur gekoppelten Simulation hydrogeologischer und geomechanischer Prozesse in porösen Medien sowie deren Implementierung in OGS wurden etwa zur Hälfte

der Projektlaufzeit abgeschlossen und mit einem Benchmark umfangreich getestet (vgl. Unterabschnitt 3.1 dieses Berichts). In Abstimmung mit dem Reservoirbetreiber GDF SUEZ und den anderen im Bereich der Modellierung tätigen Verbundpartnern wurde etwa zu diesem Zeitpunkt eine generelle Anpassung der Simulationsarbeiten an die realen physikalischen Bedingungen in der betrachteten Formation vorgenommen. Da sich nach Angaben von GDF SUEZ das vorhandene Porenfluid in gasförmigem Zustand befindet, was auch für das zu injizierende CO₂ zu erwarten war, wurde das ursprüngliche Modell eines Zweiphasenflusses nahezu inkompressibler Flüssigkeiten durch das Modell des Mehrkomponenten-Gasflusses in porösen Medien abgelöst. Da bei diesen Modellen unterschiedliche Druckentwicklungen in der Formation zu erwarten sind (die Gefahr einer geomechanischen Schädigung ist im Fall des Gasflusses deutlich geringer), veränderte sich damit für die Reservoir- und Deckgebirgsschichten im für die EGR-Technologie vorgesehenen Teilgebiet Altensalzwedel der Fokus von der Untersuchung von lokalen geomechanischen Deformations- und Schädigungsprozessen hin zu nicht-isothermen Effekten besonders im Bohrlochbereich und zu Transport- sowie Diffusionsvorgängen im Gasgemisch (Porenfluid und injiziertes Fluid in Form von CO₂ oder einem Tracer-Gas). Die Modelle und Simulationsergebnisse werden ebenfalls im Unterabschnitt 3.1 dieses Berichts vorgestellt.

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. Das Ausbleiben der bergrechtlichen Genehmigungsverfahren zur CO₂-Injektion und die damit verbundenen Entscheidungen von GDF SUEZ verhinderten den avisierten Vergleich von Simulationsergebnissen mit dem beobachteten Transport- und Reaktionsverhalten des injizierten CO₂ in der ausgewählten geologischen Formation. Alternativ wurde in Zusammenarbeit mit CLEAN-Teilprojekten aus dem Bereich Monitoring die Validierung der Modelle und Verfahren mit Daten von analogen physikalischen Prozessen diskutiert. Im Ergebnis wurden das Rückerwärmungsverhalten der Formation in Bohrlochnähe nach Ende einer definierten CO₂-Injektionsperiode sowie das Transportverhalten einer Tracer-Substanz in ausgewählten Reservoirhorizonten numerisch simuliert (zu Ergebnissen siehe Unterabschnitt 3.1 dieses Berichts). Da auch hierzu keine vergleichenden Messdaten vorlagen, war es grundlegendes Ziel, anhand der Simulationsergebnisse geplante Monitoringkonzepte zu bewerten und gegebenenfalls anzupassen. In Code-Vergleichen konnte eine sehr gute Übereinstimmung von Ergebnissen kommerzieller Software mit Resultaten erzielt werden, die mit den im Projekt erarbeiteten Modellen gewonnen wurden. Das letztliche Ausbleiben auch des Tracer-Tests hatte jedoch eine Reduzierung von Simulationsarbeiten zur Folge (geplante Szenariensimulationen zur effizienteren Gestaltung der Tests wurden nicht mehr angefragt). Die damit verbundene Änderung von Arbeits- und Kostenplan wurde dem Projektträger angezeigt, die entsprechend angepassten Pläne wurden umfänglich eingehalten.

2.4 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), seimanalytischer (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 (Streit und Hills, 2004; Rutqvist et al., 2008b). Im Sinne reservoirbezogener CO₂-HM-Simulationen wurden hypothetische Fälle untersucht (Rutqvist und Tsang, 2002 – tiefes salinares Grundwassersystem), aber auch bereits realistische Feldstudien publiziert, wie etwa für die Projekte Sleipner (Norwegen, offshore-Speicherung in einem tiefen salinaren 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; Lindberg und Bergmo, 2003; White, 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 (2008), 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 Lichter (2001) betrachten modellhaft die CO₂-Ausbreitung in Kluftzonen unter Berücksichtigung von Mehrphasenflüssen (CO₂, salzhaltiges Tiefengrundwasser). Obwohl sich bereits zu Projektbeginn internationale 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 CLEAN.

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. Da die meisten dieser Computerprogramme auf eine Untermenge dieser gekoppelten Prozesse fokussiert waren, sind deren Möglichkeiten einer umfassenden Betrachtung unterschiedlicher Phänomene bis heute als eingeschränkt einzuschätzen. 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, 2007; 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 lösenden Problemen) und in Fällen, wo diese Simulatoren unterschiedliche Berechnungsgitter verwenden, durch die notwendige Dateninterpolation fehleranfällig. Aus diesem Grund ist die Entwicklung integraler Soft-

wareprojekte, wie im F&E-Vorhaben CLEAN 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. Dabei sind die für die Erdgasspeicherung entwickelten Vermischungsfunktionen an die spezifischen Bedingungen der untersuchten Lagerstätte anzupassen.

Die für Simulationen im F&E-Verbund CLEAN vom Betreiber der untersuchten Gaslagerstätte, GDF SUEZ, ausgewählte Standard-Software wird zu Vergleichszwecken mit den zu entwickelnden THM/C-Prototypen für einzelne Prozesse angewandt, die Ergebnisse analysiert und mit den verbesserten Aussagen in der Modellsimulation berücksichtigt. Bei den kommerziellen Standardprodukten handelte es sich um PETREL (Geomodell) und Eclipse 300 (Compositional Simulator – Gaslagerstättensimulator). Die Servicefirmen Schlumberger und Partner haben die Leistungsfähigkeit ihrer Produkte 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/Erdgas, die dispersive Vermischung von CO₂ und Erdgas, das Phasenverhalten CO₂/Schichtwasser, die Einlösung des CO₂ in Schichtwasser (salinare Lösung) sowie Diffusionseffekte im Schichtwasser und porendruckabhängige Permeabilitätsänderungen darstellen kann. Im Hinblick auf die Problemstellungen bezüglich Modellierung und Simulation der CO₂-Injektion in die untersuchte Lagerstätte zu EGR-Zwecken 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 wurden folgende verbundinterne Informations- und Dokumentationsdienste in Anspruch genommen:

- CLEAN-Datenmanagement-System (<http://www.clean-altmark.org>)
- interne CLEAN-Informationsplattform (<http://web.gicon.de/clean>)

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.

2.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Für die Realisierung eines integrierten Modellierungs- und Softwareansatzes im Rahmen des F&E-Vorhabens CLEAN war die intensive Zusammenarbeit aller Modellierergruppen innerhalb des Verbundes unerlässlich. Die prozessspezifischen 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 TU Dresden (Prof. R. Liedl, Thermodynamik, Zustandsgleichungen – TV III.2.2), der TU Clausthal (Prof. Z. Hou, Geomechanik; Prof. L. Ganzer, komplexe Fließvorgänge in porösen Medien – beide TV III.2.3), dem GFZ Potsdam (PD Dr. M. Kühn, Geochemie – TV III.2.2) und der Universität Kiel (Prof. S. Bauer, Geochemie, Softwareengineering – TV III.2.2). Darüber hinaus koordinierte das UFZ eine Modelliererinitiative, die alle Teilvorhaben des CLEAN-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)

Weitere Treffen der Modellierergruppen wurden auf wesentliche Initiative des UFZ am 27.01.2010 in Potsdam, 12.01.2011 in Leipzig und 27.01.2011 wiederum in Potsdam durchgeführt. Dabei ging es um die Diskussion und Vereinbarung konkreter Arbeitsschritte für die integrierte Modellentwicklung, die Modellkalibrierung und die Analyse von Ergebnissen aus Benchmark-Tests, Simulationen in verschiedenen räumlichen Skalen und Vergleichsrechnungen. Das UFZ übernahm zudem die Redaktion des fachlichen Zwischenberichts (134 S.) des Themenverbunds TV III.2 „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“ für den Zeitraum von Projektbeginn bis Dezember 2009.

Die Zuverlässigkeit numerischer Simulationsergebnisse hängt signifikant von der adäquaten Definition der für den untersuchten Anwendungsfall relevanten Prozessbedingungen und Materialparameter ab. Ein wesentliches Ergebnis der Zusammenarbeit der numerisch und experimentell arbeitenden Gruppen im CLEAN-Verbund ist die auf UFZ-

Initiative erstellte Übersicht zur Modellparametrisierung und -kalibrierung, in der für die physikalisch-chemischen Einzelprozesse sowie deren Kopplungen die erforderlichen Prozessdaten, Rand- und Anfangsbedingungen sowie Materialparameter erfasst sind. Dazu wurden die Arbeitsgruppen erfasst, die die entsprechenden Parameter benötigen, sowie verfügbare Quellen (Daten des Lagerstättenbetreibers GDF SUEZ, experimentelle Arbeiten im CLEAN-Verbund, Literatur) für diese Informationen aufgelistet. Diese Übersicht wurde in das Datenmanagementsystem des Verbunds eingepflegt und bot somit allen Interessenten einen effektiven Zugriff auf für die Modellierung und numerische Simulation benötigte Daten. Das hier dargelegte Projekt konnte beispielsweise bei der Erarbeitung des numerischen Simulationsgitters auf das wesentlich von der TU Clausthal (Prof. L. Ganzer – TV III.2.2) parametrisierte geologische Modell zurückgreifen, welches von GDF SUEZ (R. Meyer – TV III.2.3) zur Verfügung gestellt wurde. Bei der Kalibrierung konstitutiver Modellbestandteile (Materialgleichungen) arbeitete das hier dargelegte Projekt eng mit GDF SUEZ (Fluidparameter und Charakteristika der porösen Medien in den Gesteinsschichten), der TU Clausthal (Prof. Z. Hou – TV III.2.2) und der Universität Jena (Dr. D. Pudlo –TV III.1, beide Gesteinsparametrisierung) und dem GFZ Potsdam (Dr. A. Förster – TV III.3, thermische Parameter) zusammen.

Im Laufe der Projektarbeit wurden durch unterschiedliche Gruppen des übergeordneten Projekts TV III.2.2 „Gekoppelte Prozesse im Reservoir-Nahfeld“ spezifische Modellkomponenten in die vom UFZ als Hauptentwickler koordinierte wissenschaftliche Software OGS integriert (TU Dresden, Prof. R. Liedl; Universität Kiel, Prof. S. Bauer; GFZ Potsdam, PD Dr. M. Kühn). Die genannten Projektpartner entwickelten ebenso Benchmarks für die Validierung von Modellen sowie Software und wurden dabei von der TU Clausthal (Prof. Z. Hou – TV III.2.3) unterstützt. Bezüglich konkreter Anwendungssimulationen untersuchte das hier dargelegte Projekt folgende Problemstellungen gemeinsam mit Partnern aus dem F&E-Verbund CLEAN:

- Rückerwärmungsverhalten im bohrlochnahen Bereich nach Abschluss einer CO₂-Injektion (GFZ Potsdam, Dr. J. Henniges – TV IV.4.2 „Temperatur-Monitoring“)
- Simulation eines geplanten Tracer-Tests (GDF SUEZ, R. Meyer, Dr. G. Rosenthal – TV III.2.3; GFZ Potsdam, Dr. P. Pilz – TV IV.4.3 „Geochemisches Monitoring“)
- Szenariensimulationen zum Reservoirverhalten bei unterschiedlichen Injektionsbedingungen (TU Clausthal, Prof. L. Ganzer – TV III.2.3)

In diesem Zusammenhang ist insbesondere die Zusammenarbeit mit Arbeitsgruppen aus dem Bereich Monitoring zu erwähnen, die beispielhaft für die Validierung von Simulationsergebnissen anhand von Messdaten des realen Simulationsgebiets ist. Durch die ausgebliebene CO₂-Injektion konnten die Vergleiche von Simulations- mit Messergebnissen nicht erfolgen, so dass auf Vergleichsrechnungen mit kommerzieller Software ausgewichen wurde.

3 Eingehende Darstellung des Projekts

3.1 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Zentrum des hier dargestellten Projekts stand die numerische Modellierung von gekoppelten thermischen, hydrogeologischen und geomechanischen (THM) Prozessen im Nahfeld der Injektionsbohrung einer nahezu ausgebeuteten Erdgaslagerstätte während der frühen Phase (weniger als zehn Jahre) einer CO₂-Verpressung zu EGR-Zwecken. Im betrachteten Nahfeldbereich werden während und nach der CO₂-Injektion signifikante Änderungen von Lagerstättendruck, Temperatur, Gesteinsspannungen und Mischungskonzentrationen des Porenfluids 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, thermohydraulische Vorgänge, mechanische Schädigungsaspekte) zu quantifizieren, die aktuell mit kommerzieller Standardsimulationssoftware nicht erfasst werden können. Zu diesem Zweck wurden in Zusammenarbeit mit anderen Projekten des F&E-Vorhabens CLEAN adäquate Komponenten für die wissenschaftliche open-source Softwareplattform OpenGeoSys entwickelt und unter Berücksichtigung von Aspekten des Höchstleistungsrechnens realisiert.

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

- isothermer Zweiphasenfluss in deformierbaren porösen Medien und
- nichtisothermer Mehrkomponenten-Gasfluss in undeformierbaren porösen Medien

dargestellt. Wegen der komplexen Geometrien und der Vielfalt unterschiedlicher, miteinander interagierender Teilprozesse ist die Modellierung der Injektion und Ausbreitung von CO₂ im geologischen Untergrund auf unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen eine rechentechnische 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 und Implementierung problemspezifischer Modelle und Algorithmen,
- Auswahl geeigneter Primärvariablen für die Betrachtung gemischter Finite-Element-Formulierungen sowie Analyse diverser numerischer Kopplungsalgorithmen,

- Definition von prozess- und anwendungsspezifischen Benchmarks zur Validierung der Modelle und zur Qualitätskontrolle der Softwarekomponenten sowie
- Anwendungssimulationen und Szenarienstudien.

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

3.1.1 Modellierung gekoppelter thermo-hydro-mechanischer Prozesse bei der CO₂-Injektion für EGR-Zwecke

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, der 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 (CO_2 und salzhaltiges Tiefengrundwasser bei der geologischen CO_2 -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. Der Satz an Feldgleichungen für die im Projekt ebenfalls betrachteten (und für die Erdgaslagerstätte Altmark relevanten) nichtisothermen Mehrkomponenten-Gasflüsse in undeformierbaren porösen Medien beinhaltet die klassische Massebilanz für die Gasphase, die in Konzentrationen formulierten partikulären Massebilanzen der einzelnen Komponenten der Gasphase (Massetransportbeziehungen mit Advektions- und Dispersionsstermen) sowie die aus der Energiebilanz abgeleitete Wärmeleitungsgleichung für das Gesamtkontinuum. Als Primärvariable werden in diesem Fall der Porengasdruck, die Temperatur und die Konzentrationen der Komponenten der Gasphase betrachtet. Für die Herleitung der Wärmeleitungsgleichung wird 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 Material-

eigenschaften 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, je nach konkreter Prozessmodellierung (isothermer Zweiphasenfluss in deformierbaren porösen Medien oder nichtisothermer Mehrkomponenten-Gasfluss in undeformierbaren porösen Medien) 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 fester und 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). Nach eingehender Diskussion mit dem Lagerstättenbetreiber

GDF SUEZ sowie den anderen im Bereich Modellierung tätigen Partnern des F&E-Verbundes CLEAN wurde deutlich, dass sich das injizierte CO₂ unter den realen Reservoirbedingungen im gasförmigen Zustand befinden wird und im Porenraum auch auf ein gasförmiges Porenfluid, hauptsächlich bestehend aus N₂ und CH₄ trifft. Da in diesem Fall die zu erwartende Druckentwicklung auf Deformationen der Gesteinsmatrix schließen lässt, die nicht relevant sind für die Entwicklung von mechanischer Schädigung, die Temperaturunterschiede zwischen zu injizierendem CO₂ und den Formationsstrukturen jedoch nicht vernachlässigbar scheinen, wurden im weiteren Projektverlauf geeignete Feld- und Konstitutivgleichungen für den Fall des nichtisothermen Mehrkomponenten-Gasflusses in undeformierbaren porösen Medien entwickelt und in die OpenGeoSys implementiert (gekoppelte TH(X³)-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 mit EGR-Bezug dienen, wird insbesondere auf die Arbeiten Görke et al. (2011), Kolditz et al. (2012) sowie Singh et al. (2011b) der Projektbearbeiter sowie die darin zitierte Literatur verwiesen.

3.1.2 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.

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 Funktionen der Primärvariablen durch Ansatzfunktionen in geeigneten Finite-Element-Räumen ersetzt (Ortsdiskretisierung), die Interpolationsfunktionen unter Nutzung diskreter Wer-

te 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 eine Multiplikation der Massenmatrix mit dem Vektor der partiellen oder materiellen Zeitableitung der Primärvariablen, eine Multiplikation der Advektionsmatrix mit dem Vektor der Gradienten der Primärvariablen sowie eine Multiplikation 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 gesamte 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 Porendrücke), 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). Im Rahmen des F&E-Vorhabens CLEAN haben neben den Autoren dieses Berichts auch Wissenschaftler der TU Dresden, des GFZ Potsdam sowie der Universität Kiel OGS für ihre Arbeiten genutzt und um den spezifischen Aufgabenstellungen entsprechende Programmkomponenten ergänzt.

Zur Herleitung der im Projekt betrachteten gekoppelten Prozesse des isothermen Zweiphasenflusses in deformierbaren porösen Medien und des nichtisothermen Mehrkomponenten-Gasflusses in undeformierbaren porösen Medien wurde jeweils 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 erwies sich im Rahmen des Projekts der gemischte Ansatz als besonders geeignet. Im Fall des isothermen Zweiphasenflusses in deformierbaren porösen Medien wurde das Transportproblem monolithisch gelöst und iterativ mit der Lösung des Deformationsproblems verknüpft. Für die Simulation nichtisothermer Mehrkomponenten-Gasflüsse in undeformierbaren porösen Medien werden der Porengasdruck und die Temperatur im monolithischen Verfahren berechnet, die Konzentrationen der Komponenten der Gasphase iterativ dazu ermittelt.

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 Görke et al. (2011), Kolditz und De Jonge (2004), Kolditz et al. (2012), Korsawe et al. (2006), Park et al. (2011) sowie Singh et al. (2011a,b) 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 stand daher im Mittelpunkt der entsprechenden Untersuchungen im Projekt. Ziel war es, effiziente parallele Verfahren für die iterative Lösung der schwach besetzten globalen Finite-Element-Systeme bei großskaligen gekoppelten Problemstellungen zu entwickeln und in OGS zu integrieren. Für den Einsatz auf Rechnerclustern mit verteiltem Speicher lag der Fokus auf Algorithmen, bei denen die Assemblierung von globalen Matrizen und Vektoren für das Gesamtsystem nicht erforderlich ist.

Das im Projekt entwickelte 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 Lösungsalgorithmen 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 Lösungssiterationen 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 Unbekannten 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. Mit dem Ausbleiben der CO₂-Injektion in die Altmark-Lagerstätte wurden zunächst komplexe Simulationen der gekoppelten THM-Prozesse bei der Ausbreitung des CO₂ im Reservoirmaßstab hinfällig. Die konkret untersuchten Teilprozesse (siehe nachfolgende Details zu Anwendungssimulationen) konnten 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, 2010).

3.1.3 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 alleinige Option 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 Geotechnikwissenschaft 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 stellt das so genannte Benchmarking dar. Dabei 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 CLEAN in breitem Umfang reflektieren, gehörten zu den übergreifenden Querschnittsaufgaben der Partner des Themenverbundes TV III „Geowissenschaftliche Prozessbeschreibung“. 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 mehrere Benchmarks definiert, die Geometrie, Geologie, Materialeigenschaften und Prozessbedingungen der im Projekt betrachteten realen Anwendungssituation von potenziellen CO₂-EGR-Aktivitäten in der Altmark-Lagerstätte 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 numerische 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 CLEAN beteiligt.
- Konstitutiv orientierte Benchmarks: Die Auswahl von zweckmäßigen konstitutiven Beziehungen für die Bestandteile der betrachteten porösen Medien (thermodynamischen Zustandsgleichungen für die Fluideigenschaften, Deformationsgesetze der Feststoffmatrix) ist wesentlich für das Erzielen realitätsnaher Simulationser-

gebnisse. Umfangreiche Untersuchungen wurden im F&E-Verbund CLEAN 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. Singh et al., 2011b). Beiträge kamen dazu vorrangig vom UFZ und der TU Dresden (Böttcher et al., 2012) sowie von der TU Clausthal.

- 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, FEFLOW) validiert. Zu diesem Zweck wurden neben der Analyse von Literaturbeispielen u.a. vom UFZ, dem GFZ Potsdam und der TU Clausthal vereinfachte Testfälle definiert, die auf Daten der Altmark-Lagerstätte basieren. 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 CO₂-EGR-Prozess, 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,d). 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.

3.1.4 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. Das zweidimensionale Berechnungsgebiet stellt einen Vertikalschnitt der Länge 100 m und der Höhe 10 m dar, dessen Geometrie an reale Daten aus der Altmark-Lagerstätte angepasst wurden (siehe Abb. 1). Die Grenzfläche zwischen der Reservoir- und der darüber liegenden Deckgebirgsschicht liegt 6 m

oberhalb des als undurchlässig angenommenen unteren Randes des betrachteten Gebiets, das sich in etwa 3 000 m Tiefe befindet.

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 und 1 m oberhalb des unteren Randes des Berechnungsgebiets injiziert.

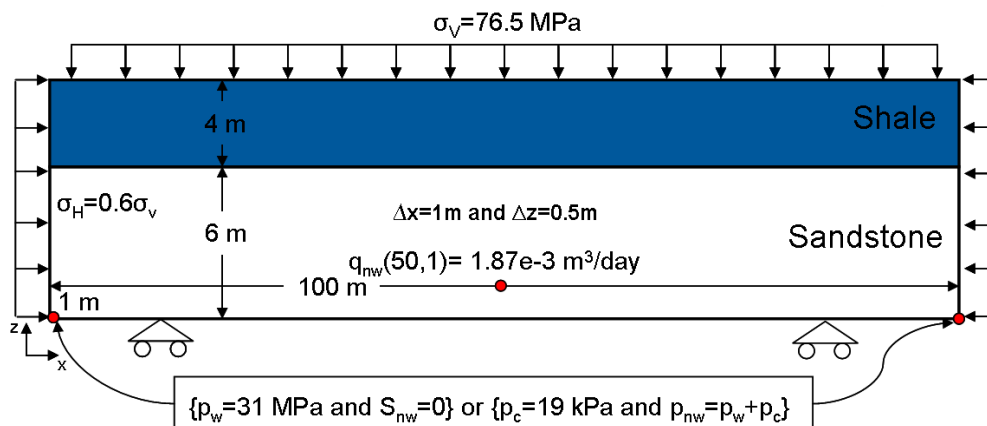


Abbildung 1: Berechnungsgebiet mit Randbedingungen für ein Testbeispiel zur Simulation des isothermen Zweiphasenflusses und der elastischen mechanischen Deformation (H^2M -Problem) unter Berücksichtigung potenziellen Schädigungsverhaltens. Bedeutung der Variablen: σ_v - lithostatische Vertikalspannung, σ_H - lithostatische Horizontalspannung, p_w - Porendruck der benetzenden Phase, p_{nw} - Porendruck der nicht benetzenden Phase, p_c - Kapillardruck, S_{nw} - Sättigung der nicht benetzenden Phase, q_{nw} - Injektionsrate für das CO₂.

Ausgehend von einer angenommenen Gesamtmenge von 10 000 t CO₂, die über einen Zeitraum von insgesamt 20 Jahren verpresst werden, ergibt 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 $734,27 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ berechnet (vgl. Span und Wagner, 1996). Die weiteren Eigenschaften der beteiligten Fluide und Gesteine sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Zur Vereinfachung der Aufgabenstellung werden isotherme Bedingungen angenommen.

Die Anfangsbedingungen wurden entsprechend der hydrostatischen Situation für die Fluide und den lithostatischen Eigenschaften für die Gesteine in der betrachteten Tiefe von etwa 3 000 m definiert. Der hydrostatische Zustand wurde auch als Randbedingung für die Simulation des Zweiphasenflusses in den unteren Eckknoten des Berechnungsgebiets angenommen. Die mechanische Belastungsrandbedingung in Form einer vertikalen Flächenpressung entspricht am oberen Rand dem lithostatischen Druck. An den Seitenrändern wirkt eine horizontale Flächenpressung, deren Betrag unter Berücksich-

tigung der Querkontraktion der Gesteine 60% des Betrags des lithostatischen Drucks entspricht (siehe Abb. 1).

Table 1: *Eigenschaften der Fluide und Gesteine für das H^2M -Problem bei Betrachtung einer Reservoir- und einer Deckgebirgsschicht unter Berücksichtigung potenziellen Schädigungsverhaltens.*

Fluideigenschaften			
Eigenschaft	Einheit	Porenfluid	CO ₂
Dichte	kg·m ⁻³	1173	734,27
Dynamische Viskosität	Pa·s	1,252×10 ⁻³	6,24×10 ⁻⁵
Restsättigung	–	0,1	0,1
Maximalsättigung	–	0,9	0,9
Gesteinseigenschaften			
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 betrachtete 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 alternative Auswahl von Primärvariablen für das Transportproblem der beteiligten Fluide. In der Projektlaufzeit wurden im Rahmen von OGS ein Druck-Druck-Schema (pp-Schema, hier: Kapillardruck und Druck der CO₂-Phase) und ein Druck-Sättigungs-Schema (pS-Schema, hier: Druck der Porenfluid-Phase und Sättigung der CO₂-Phase) realisiert. Aus der Literatur ist bekannt, dass die Auswahl dieser Primärvariablen einen wesentlichen Einfluss auf die Stabilität der verwendeten Lösungsalgorithmen hat (siehe z.B. Schrefler und Gawin, 1996). Für das geomechanische Teilproblem bieten sich die Koeffizienten des Verschiebungsvektors elementar als geeignete Primärvariable an.

Die aus der Literatur bekannten Unterschiede im Lösungsverhalten der alternativen Schemata für die Auswahl der Primärvariablen des Transportproblems der Fluide eines Zweiphasenflusses in porösen Medien wird durch die Analyse des hier betrachteten Testbeispiels bestätigt. Während bei Verwendung des pS-Schemas das injizierte CO₂

dazu tendiert, sich vertikal bis in die Deckgebirgsschicht auszubreiten, verbleibt das CO₂ im Rahmen des pp-Schemas über die gesamte Prozesszeit von 100 Jahren vollständig in der Reservoirschicht. Zudem ist die mit dem pS-Schema berechnete maximale CO₂-Sättigung größer als die mit dem pp-Schema ermittelte (vgl. Abb. 2).

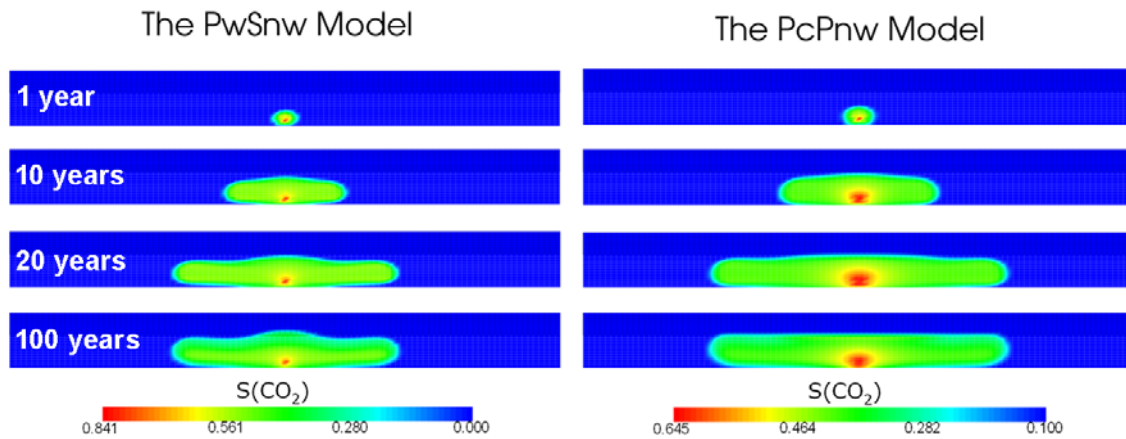


Abbildung 2: CO₂-Sättigung $S(\text{CO}_2)$ nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre). Vergleich der numerischen Ergebnisse des pS-Schemas und des pp-Schemas.

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

$$f_s^H = \frac{p}{\sigma_3} \quad (1)$$

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

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

im Rahmen der beiden grundlegenden numerischen Ansätze untersucht. Die Materialparameter C_k (Kohäsionsfaktor) und θ (interner Reibungswinkel) können für gängige Gesteinsarten der Literatur entnommen werden. Das Risiko lokaler potenzieller Schädigung besteht in den materiellen Punkten, in denen mindestens einer der beiden Sicherheitsfaktoren einen Wert größer als Eins annimmt. Bei gleichbleibender Injektionsrate konnte beobachtet werden, dass sich die mechanische Stabilität generell mit der Zeit und bei zunehmender Ausdehnung der unterirdischen CO₂-Fahne verbessert (das heißt, die entsprechenden Werte der Sicherheitsfaktoren verringern sich). Wie Abb. 3 zeigt, ist eine lokale hydraulische Schädigung unter den im Projekt simulierten 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.

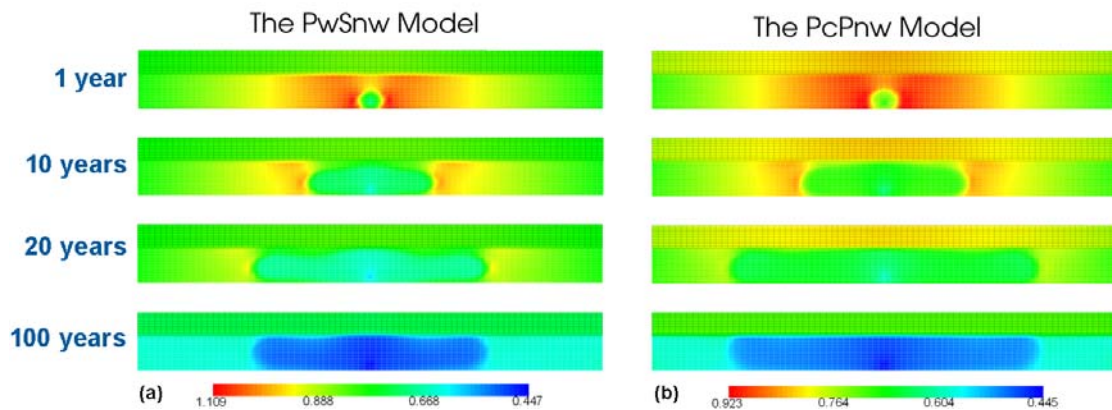


Abbildung 3: Sicherheitsfaktoren für die hydraulische Schädigung nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre). Vergleich der numerischen Ergebnisse des pS-Schemas und des pp-Schemas.

Zusätzlich zu dem in der Literatur diskutierten Gefährdungspotenzial an der Grenzfläche zwischen Deckgebirgs- und Reservoirschicht zeigte sich, 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.

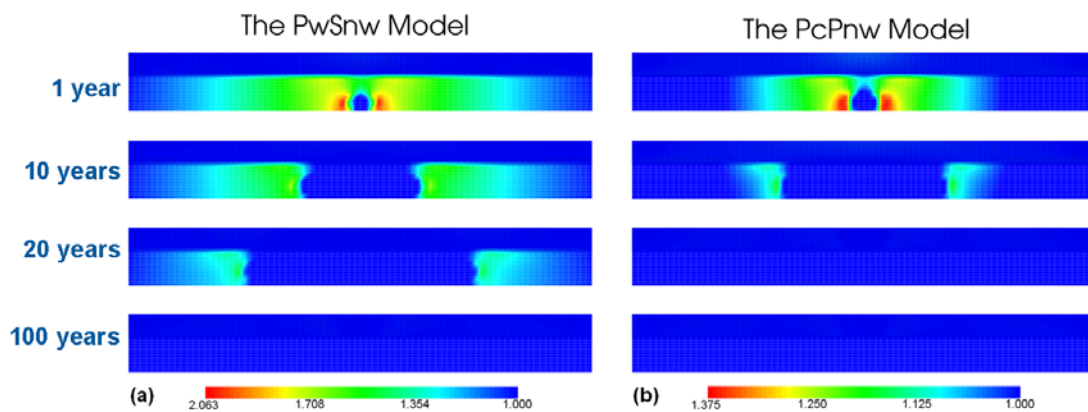


Abbildung 4: Sicherheitsfaktoren für die Scherschädigung nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre). Vergleich der numerischen Ergebnisse des pS-Schemas und des pp-Schemas.

Die räumliche Verteilung des Risikos mechanischer Instabilitäten basierend auf dem Kriterium der Scherschädigung folgt ähnlichen Trends wie das Risiko einer hydraulischen Schädigung (siehe Abb. 4). 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. Da insbesondere die Porendruckbedingungen im analysierten Teil der Altmark-Lagerstätte auf gasförmige Porenfluide schließen lassen, wurde der Einfluss einer möglichen Vermischung von flüssigen und/oder superkritischen Fluiden nicht untersucht.

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 Deckgebirgs- und Reservoirschicht als auch die 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-Injektionsszenario hinsichtlich der Auswirkungen auf die Grenzfläche zwischen der Deckgebirgs- und der Reservoirschicht gesondert im Detail für beide Schädigungsmechanismen untersucht.

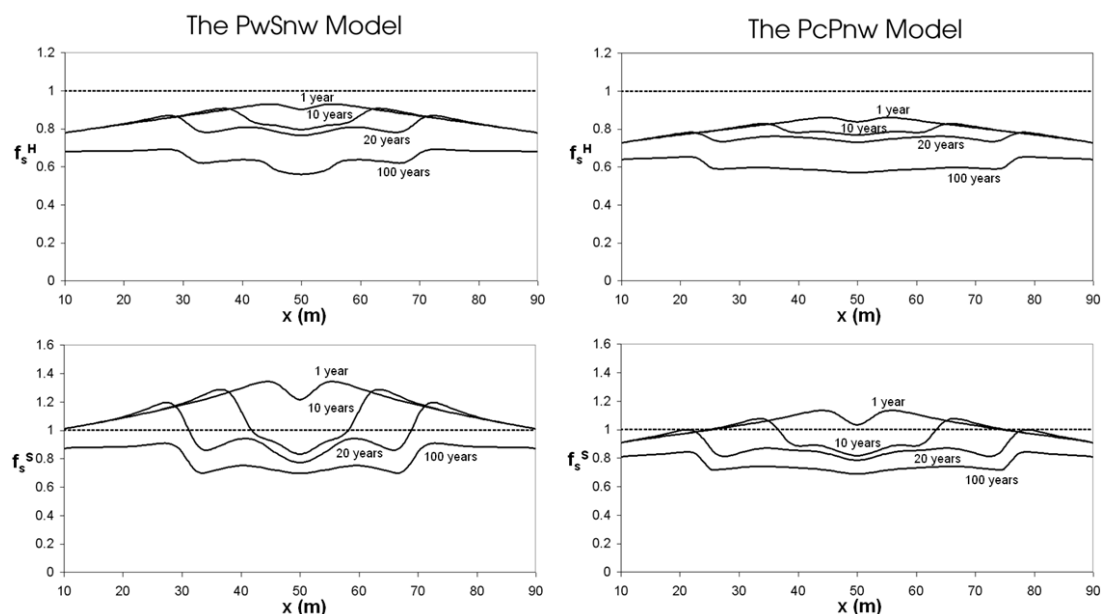


Abbildung 5: Sicherheitsfaktoren f_s^H für die hydraulische Schädigung (obere Reihe) und f_s^S für die Schubschädigung entlang der Grenzfläche zwischen Deck- und Reservoirschicht nach 1, 10, 20 und 100 Jahren (Injektionsperiode: 20 Jahre. Vergleich der numerischen Ergebnisse des pS-Schemas und des pp-Schemas).

Wie in Abb. 5 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 verdeutlicht das hier diskutierte Beispiel, 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.

3.1.5 Anwendungssimulationen und Szenarienstudien: Rückerwärmungsanalyse

Das hier diskutierte Anwendungsbeispiel befasst sich mit der numerischen Simulation des Temperaturverhaltens in der Nähe der Injektionsbohrung bei Verpressung von CO₂ in eine mehrschichtige, nahezu ausgebeutete Erdgaslagerstätte, die als Restporen gas ein homogenes Gemisch aus CH₄ und N₂ enthält. Ausgangspunkt ist die Untersuchung der Fragestellung, ob ein Temperaturmonitoring im Bohrlochbereich zur Überwachung der Injektions- und Nachinjektionsprozesse geeignet ist. Mit Hilfe eines Temperaturmonitorings können die Bereiche der Injektionsbohrung erfasst werden, über die das injizierte Fluid in die geologische Formation gelangt. Aus experimenteller Sicht ist die Frage von großem Gewicht, ob die konkreten Informationen über die Temperaturentwicklung in den Formationsschichten ausreichen, Menge und Zusammensetzung des Porenfluids im Injektionsbereich zu bestimmen. Von speziellem Interesse war zudem die Analyse des Rückerwärmungsverhaltens der Formation nach Beendigung der Injektion von CO₂ mit niedrigerer Temperatur verglichen mit dem natürlichen geothermischen Zustand, da der Injektionsvorgang mit dem Abkühlen der involvierten geologischen Schichten verbunden ist. Die hier dargestellten Arbeiten befassen sich konkret mit der Simulation des Rückerwärmungsverhaltens. Sie wurden in Zusammenarbeit mit Partnern aus dem Themenverbundbereich TV IV.4.2 „Temperatur-Monitoring“ des F&E-Vorhabens CLEAN (Dr. J. Henniges, GFZ Potsdam) durchgeführt.

Für die Modellierung der Transportprozesse im betrachteten Testbeispiel ist die Lösung eines gekoppelten, nichtisothermen Problems des Mehrkomponenten-Gasflusses TH(X³)

in porösen Medien erforderlich. Die notwendigen Feldgleichungen werden aus den entsprechenden Masse- und Energiebilanzen abgeleitet. Der Porendruck p des jeweiligen Fluidgemischs, die Temperatur T sowie die Masseanteile x_k der einzelnen Komponenten des Porenfluids wurden als Primärvariable ausgewählt, das gekoppelte Problem im Rahmen des Finite-Element-Verfahrens mit einem gemischten monolithisch-partitionierten Ansatz gelöst. Zur Validierung der entwickelten Modelle und Softwarekomponenten wurde ein Vergleich der OGS-Resultate mit Simulationsergebnissen des kommerziellen Produkts FEFLOW durchgeführt. Einzelheiten zur Theorie und numerischen Umsetzung der grundlegenden Feldgleichungen sowie zu konstitutiven Annahmen, hier speziell zur Ermittlung der konstitutiven Eigenschaften des als reales Gas betrachteten Porenfluidgemischs in Abhängigkeit von Porendruck, Temperatur und Zusammensetzung sind in den Arbeiten von Singh et al. (2011a,b, 2012a) dargelegt.

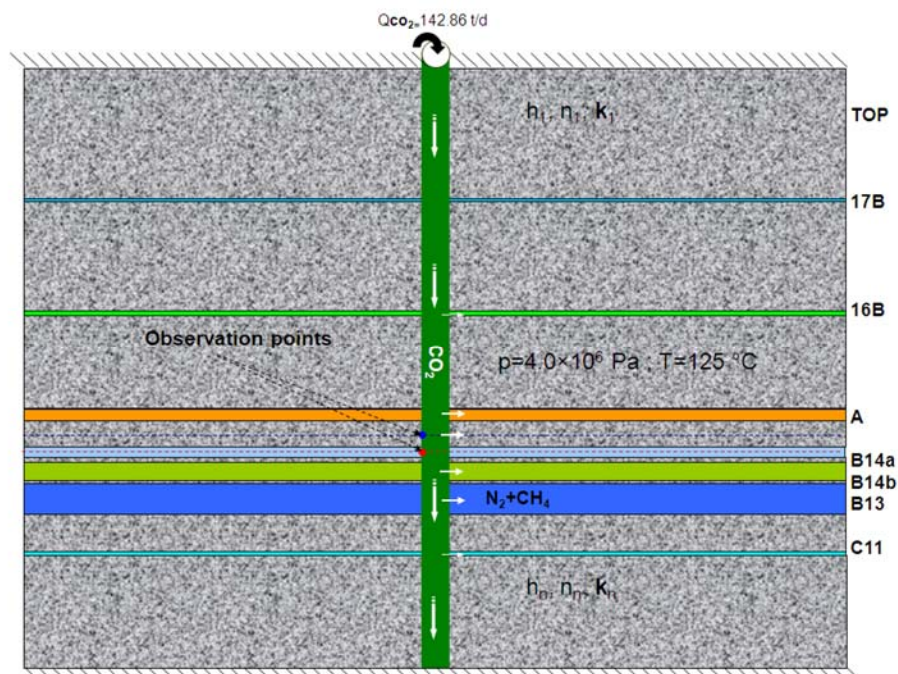


Abbildung 6: Schematische Modelldarstellung der CO_2 -Injektion in eine mehrschichtige, nahezu ausgebeutete Erdgaslagerstätte.

Zur Modellierung des Testbeispiels wird ein Ausschnitt aus dem Teilfeld Altensalzwedel der Altmark-Erdgaslagerstätte betrachtet. Unter der vereinfachenden Annahme, dass die Ausbreitung des injizierten CO_2 als axialsymmetrischer Vorgang angenähert werden kann, entspricht das Berechnungsgebiet einem vertikalen Querschnitt der Formation in etwa 3 000 m Tiefe und erfasst die unmittelbare Umgebung der Injektionsbohrung S13. Das ausgewählte, zweidimensionale Gebiet mit einer Höhe von 176 m und einer Breite von 250 m enthält sieben Reservoirschichten mit dazwischen liegenden Deckgebirgsschichten niedriger Permeabilität. Die Geometrie des Berechnungsmodells und ausgewählte Prozessparameter sind in Abb. 6 dargestellt.

Die Reservoirschichten variieren z.T. deutlich in ihren Eigenschaften, wie der vertikalen Ausdehnung, der Porosität und Permeabilität. Entsprechende Daten wurden von GDF SUEZ, dem Betreiber der Lagerstätte, über das Datenmanagementsystem von CLEAN zur Verfügung gestellt und von den Partnern des GFZ Potsdam entsprechend den experimentellen Gegebenheiten zur Erfassung von Temperatur-Logs an die Bedingungen des Testbeispiels angepasst (siehe Tabelle 2).

Tabelle 2: Ausgewählte, gemittelte Materialeigenschaften der Reservoirschichten.

Schicht	Mächtigkeit (m)	Porosität	Intrinsische Permeabilität (mD)
17B	1,0	0,123	10
16B	1,5	0,105	10
A	3,5	0,110	10
B14a	3,0	0,160	100
B14b	5,5	0,155	60
B13	9,0	0,165	60
C12	1,0	0,155	60

Die thermischen Parameter wurden für alle Reservoirschichten mit den gleichen Werten angenommen: Wärmeleitfähigkeit der festen Phase $2,77 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, spezifische Wärmekapazität der festen Phase bei konstantem Druck $960 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Für die Schichten des Deckgebirges wurden einheitliche Parameter festgelegt: Porosität 0,01, intrinsische Permeabilität $1\times 10^{-4} \text{ mD}$, Wärmeleitfähigkeit der festen Phase $2,36 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, spezifische Wärmekapazität der festen Phase bei konstantem Druck $925 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Die Dichte der Gesteine wurde in allen geologischen Schichten des Berechnungsgebiets mit dem gleichen Wert $2\,650 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ angenommen, die des CO_2 mit dem Wert $94,9 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

Entsprechend den realen Gegebenheiten im Teilfeld Altensalzwedel wird mit einem Lagerstättendruck von 4 MPa und einer Temperatur von 125°C operiert. Das 102°C warme CO_2 wird mit einer Rate von 142,86 Tonnen pro Tag injiziert (volumetrische Injektionsrate: $0,017424 \text{ m}^3\cdot\text{s}^{-1}$), woraus sich ein Druck am Bohrgrund von 5,8 MPa ergibt.

Das zweidimensionale Berechnungsgebiet wurde mit 44 125 Rechteckelementen diskretisiert, wobei in radialer Richtung variable Gittergrößen mit einem Minimum von 0,1 m verwendet wurden. Die Gittergröße in der vertikalen z-Richtung betrug konstant 0,5 m. Zur Verbesserung der Stabilität der nichtlinearen Berechnung wurde ein adaptives Zeitschrittverfahren verwendet, wie es beispielsweise bei Wang et al. (2011) beschrieben ist. Während das Temperaturfeld im Verlauf der zehntägigen Injektionsperiode durch unterschiedliche Transporteffekte beeinflusst wurde (u.a. Advektion, konduktiver Anteil der Wärmeleitung), lag der Schwerpunkt bei der Simulation des Rückerwärmungsver-

haltens nach Beendigung der Injektion auf dem konduktiven Anteil der Wärmeleitung. Als Anfangsbedingung wurde dabei die Temperaturverteilung zum Abschluss der CO₂-Injektion genutzt. Zudem wurde in der gesamten Formation ein konstanter Porendruck von 4 MPa angenommen.

In einer Nachinjektionsperiode von 100 Tagen wurde die transiente Temperaturentwicklung während der Rückerwärmung analysiert. Die beobachteten Prozesse waren wesentlich von der Dauer der Injektion, dem Zeitraum nach deren Beendigung, der Injektionsrate, der Temperatur des injizierten CO₂ sowie den hydraulischen und thermischen Eigenschaften der Bestandteile der porösen Medien abhängig. Im folgenden werden ausgewählte Ergebnisse diskutiert.

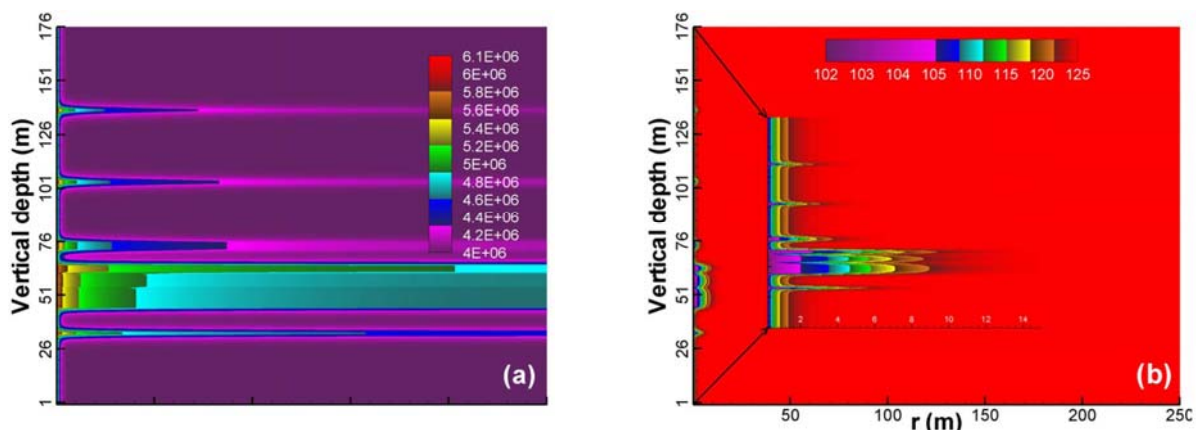


Abbildung 7: Verteilung von Porendruck in Pa (a) und Temperatur in °C (b) am Ende der Injektionsperiode als Ausgangspunkt für das Rückerwärmungsverhalten.

Die Druck- und Temperaturverteilung im Berechnungsgebiet zum Ende der Injektionsphase ist in Abb. 7 dargestellt. Erwartungsgemäß ist die Druckausbreitung in den Reservoirschichten im Vergleich zu den Deckgebirgsschichten deutlich ausgeprägter. Folglich ist der Wärmetransport im Verlauf der Injektionsphase vorrangig durch advective Prozesse in den Reservoirschichten und konduktive Prozesse in den dazwischen liegenden Deckgebirgsschichten geprägt. Durch die vergleichsweise sehr große effektive volumetrische Wärmekapazität der Formation breitet sich das Temperaturfeld gegenüber dem Porendruckfeld in einem wesentlich kleineren Gebiet aus. Da sich die effektive volumetrische Wärmekapazität eines porösen Mediums mit wachsender Porosität verringert, ist die Wärmeausbreitung in den Reservoirschichten ausgeprägter als in den Deckgebirgsschichten.

Zum besseren Vergleich der Wärmeausbreitung in den unterschiedlichen geologischen Schichten sind in Abb. 8 die Temperaturprofile entlang der Mittellinien der Reservoirschicht mit der größten Permeabilität (Schicht B14a) und der benachbarten Deckgebirgsschicht NB14a dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich während der Phase der

CO₂-Injektion die Temperatur in der durchlässigeren Schicht B14a in einem größeren Radius als in der nahezu undurchlässigen Schicht NB14a verringert hat.

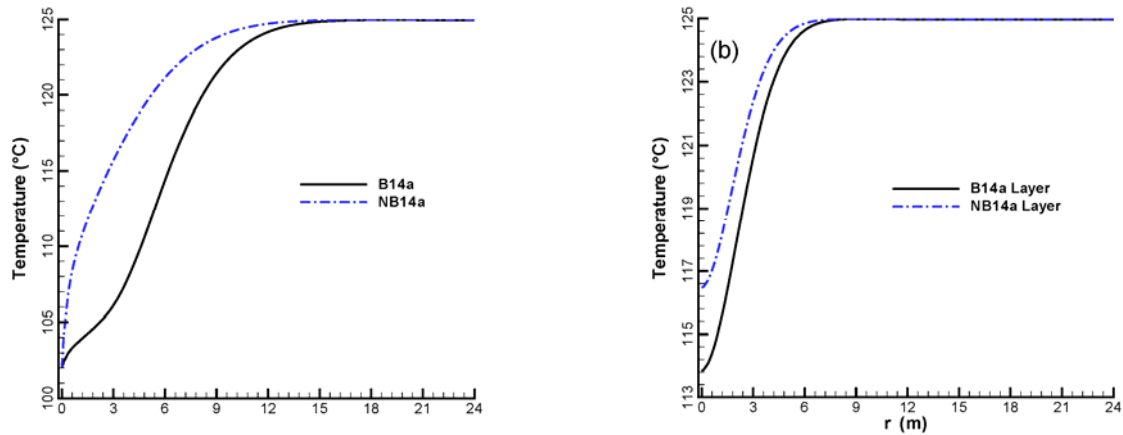


Abbildung 8: Temperaturprofile entlang der Reservoirschichten mit der größten und der kleinsten Permeabilität (d.h. B14a und NB14a) am Ende der Injektionsperiode (a) und zehn Tage nach Beendigung der Injektion (b).

Während der Nachinjektionsphase gleichen sich die Temperaturprofile der einzelnen geologischen Schichten immer stärker an und nehmen letztlich den natürlichen geothermischen Zustand der Formation ein (zum Verhalten am zehnten Tag nach dem Ende der CO₂-Verpressung siehe Abb. 8b).

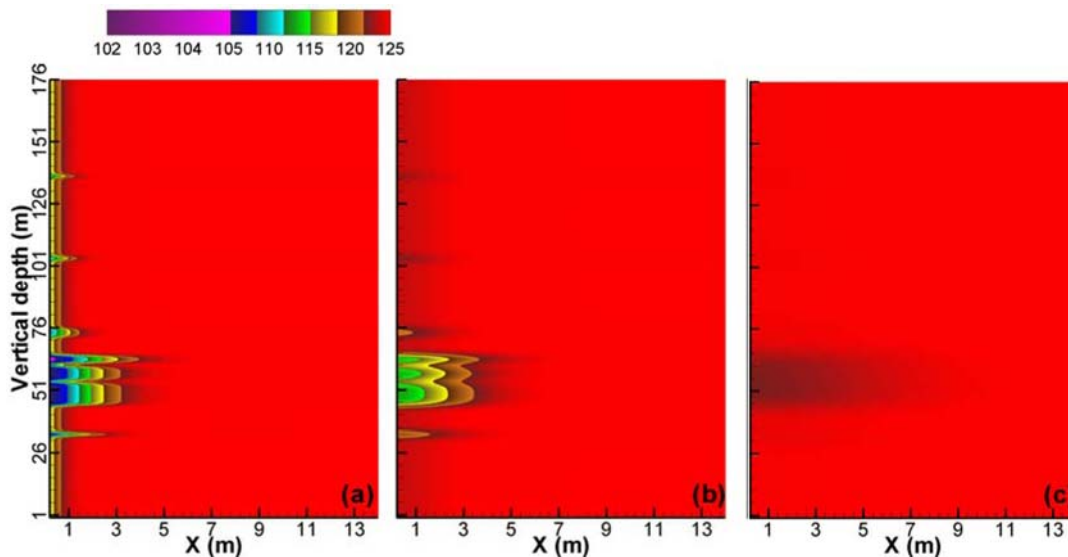


Abbildung 9: Temperaturverteilung in der Rückwärmungsphase 1, 10 und 100 Tage nach Beendigung der CO₂-Injektion (von links nach rechts).

Die unter Berücksichtigung des im Projekt entwickelten und in OGS implementierten Modells des isothermen Mehrkomponenten-Gasflusses in porösen Medien berechnete

Temperaturverteilung für die Zeitpunkte ein, zehn und 100 Tage nach Beendigung der CO₂-Injektion werden in Abb. 9 gezeigt. Erwartungsgemäß gibt es einen Wärmefluss in Richtung des Bohrlochs. Dabei passt sich die Temperatur in den Reservoirschichten rascher an die natürlichen Bedingungen in der Formation an als in den Deckgebirgsschichten. Wie in Abb. 9c ersichtlich, hat sich 100 Tage nach Beendigung der Injektion bereits wieder eine nahezu gleichförmige Temperaturverteilung eingestellt.

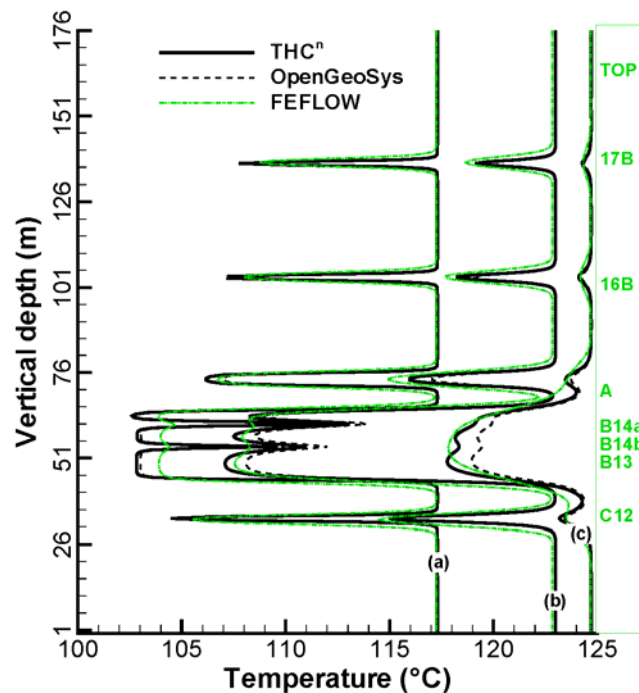


Abbildung 10: Temperaturprofile an der Injektionsbohrung über die Höhe des betrachteten Gebiets 1, 10 und 100 Tage nach Beendigung der CO₂-Injektion (von links nach rechts). Vergleich der Berechnungsergebnisse von OGS (vereinfachte Betrachtung der Gasphase und konsistentes Mehrkomponenten-Gasfluss-Modell in porösen Medien) und FEFLOW.

Abb. 10 illustriert den Vergleich von Simulationsergebnissen mit unterschiedlichen numerischen Modellen und Softwareprodukten am Beispiel der Temperaturprofile entlang des Bohrlochs S13 nach einem, zehn und 100 Tagen der Nachinjektionsphase. Dem im Projekt entwickelten TH(X³)-Modell (natürliches Porenfluid als Gemisch aus 25% CH₄ und 75% N₂ zuzüglich des injizierten CO₂, Berücksichtigung der Abhängigkeit spezifischer Materialparameter von Porendruck, Temperatur und Fluidzusammensetzung) wird in OGS ein vereinfachtes Modell gegenübergestellt, bei dem das Porenfluid vollständig aus CO₂ besteht und die Materialparameter als konstant angesetzt werden. Als kommerzielles Softwareprodukt wird FEFLOW in den Vergleich einbezogen. Die Darstellung in Abb. 10 zeigt eine gute Übereinstimmung zwischen allen diskutierten Simulationsergebnissen, die sich mit zunehmender Dauer immer stärker annähern. Gleichzeitig zeigt Abb. 10 den Effekt der Nutzung des verbesserten Modells des Mehrkomponenten-Gasflusses. Hier stimmen die Ergebnisse zu Beginn der Nachinjektionsphase nahezu identisch mit denen des vereinfachten Modells überein, weichen dann allerdings in Gebieten

mit großen Temperaturgradienten insbesondere wegen der unterschiedlichen Annahmen bezüglich der Materialparameter zunehmend voneinander ab.

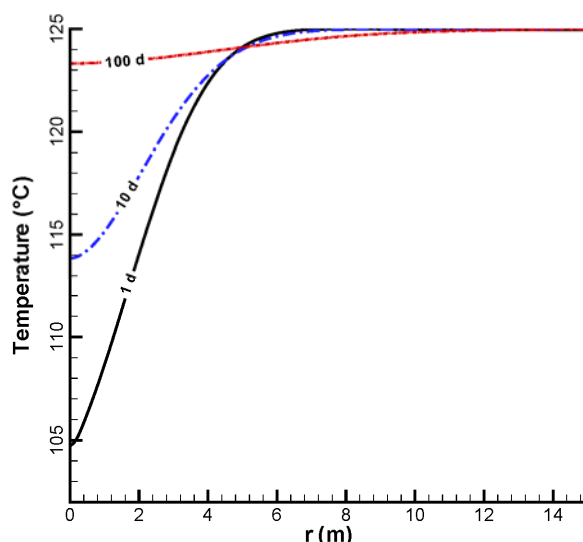


Abbildung 11: Temperaturprofile entlang der Reservoirschicht mit der höchsten Permeabilität (B14a) zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten nach Beendigung der CO₂-Injektion.

Das in Abb. 11 zu verschiedenen Zeitpunkten der Nachinjektionsphase dargestellte Temperaturprofil entlang der Mittellinie der Reservoirschicht B14a verdeutlicht, dass der thermische Gradient entlang dieser Schicht am ersten Tag nach Beendigung der CO₂-Injektion lokal sehr groß ist, sich später aber deutlich verringert und die gesamte betrachtete Schicht einen thermischen Gleichgewichtszustand anstrebt.

An diesem Beispiel konnte im Vergleich mit kommerziellen Softwareprodukten die gute Eignung der im Projekt entwickelten und in OGS implementierten Modelle des nichtisothermen Mehrkomponenten-Gasflusses in porösen Medien nachgewiesen werden. Die lokal bestehenden Unterschiede in den Simulationsergebnissen lassen sich vorrangig auf Unterschiede in den numerischen Kopplungsstrategien zurückführen. Prozesstechnisch zeigten die Simulationen, dass während der Injektionsphase von CO₂ mit geringerer Temperatur (im Vergleich zu den natürlichen geothermischen Bedingungen in der betrachteten Formation) signifikante Temperaturänderungen zu erwarten sind. Diese sind besonders durch advektiven Wärmetransport in Verbindung mit der CO₂-Ausbreitung bedingt. Im Gegensatz dazu ist das Rückwärmungsverhalten nach Beendigung des Injektionsvorgangs durch konvektiven Wärmetransport geprägt. Die transienten Prozesse in dieser Phase hängen wesentlich von den hydraulischen und thermischen Parametern der fluiden und festen Bestandteile der porösen Medien in der Formation ab. Wegen der deutlich ausgeprägteren Abkühlung während der CO₂-Injektion ist der Gradient der Rückwärmung in den Reservoirschichten größer als in den Deckgebirgsschichten. Dieses Verhalten ist eine offensichtliche Konsequenz der unterschiedlichen Materialeigenschaften (z.B. Porosität, Permeabilität).

3.1.6 Anwendungssimulationen und Szenarienstudien: Tracer-Test-Simulation

Tracer-Tests zur Charakterisierung des geologischen Untergrunds, bei denen leicht nachweisbare Materialien (Tracer-Substanzen) in die betreffende Formation injiziert werden, sind bereits seit mehreren Dekaden Gegenstand der Diskussion in der Fachliteratur (vgl. Wallick und Jenkins, 1954, sowie darin zitierte Referenzen). Aus Messdaten von Konzentration und Ankunftszeit der Tracer-Substanz an Beobachtungsbohrungen können beispielsweise Informationen über Fließwege sowie die mögliche Existenz von undurchlässigen Verwerfungen in der Formation gewonnen werden. Zusätzlich können aus der Analyse von Tracer-Tests gemittelte Werte für bestimmte physikalische Größen für die involvierten porösen Medien bzw. darin ablaufende Prozesse abgeleitet werden, darunter Fließgeschwindigkeit, Permeabilität, Sättigung sowie Diffusions- und Dispersionsparameter. Somit erlauben Tracer-Tests fundamentale Einblicke in den geologischen Untergrund, seine Eigenschaften sowie Prozessbedingungen, und dienen gleichermaßen der Parametrisierung und Validierung numerischer Modelle für die Simulation des hydro-mechanischen Verhaltens der betrachteten Formation. Gegenwärtig zählen Tracer-Tests zu den unverzichtbaren Technologien für die Beobachtung von Grundwasserleitern und die Abschätzung von Fließeigenschaften tief liegender geologischer Formationen auf der Reservoirskala.

Die gewünschten Ergebnisse von Tracer-Tests lassen sich maßgeblich mit konservativen Tracer-Substanzen erzielen: Chemisch inerten fluiden Stoffen, die nicht mit Mineralien oder anderen Fluiden reagieren und auch nicht zerfallen. In diesem Kontext hat sich Kr als Tracer-Substanz bewährt (vgl. Freifeld et al., 2005; Zimmer et al., 2010). Für die mehrschichtige Formation im Teilfeld Altensalzwedel der Altmark-Lagerstätte war ein konservativer Tracer-Test unter Einsatz von Kr konzipiert, mit dessen Hilfe die Ausbreitungsgeschwindigkeit von CO₂ in den Reservoirschichten zwischen unterschiedlichen existierenden Bohrungen abgeschätzt werden sollte. Gegenüber den oben zitierten Anwendungen von Kr als Tracer-Substanz hätte ein Tracer-Test in der hier betrachteten Formation die Besonderheit des Einsatzes von Kr in einer Erdgaslagerstätte (anstelle eines tiefen Grundwasserleiters), einer deutlich größeren Menge der Tracer-Substanz und einer um mehr als das Zehnfache größeren Entfernung zwischen Injektions- und Beobachtungsbohrung. Zur Abschätzung der zu erwartenden Zeiträume und zur Optimierung der Monitoringstrategie wurde der geplante Tracer-Test zunächst mit der wissenschaftlichen open-source Softwareplattform OGS und dem kommerziellen Programm Eclipse 100/300 simuliert. Weiterhin wurden in diesen Simulationen die Mobilität des natürlichen Porenfluids untersucht und spezifische Formationsparameter abgeschätzt. Die OGS-Simulation wurde von den Autoren dieses Berichts durchgeführt. Dabei gab es eine enge Zusammenarbeit mit Partnern aus den Themenverbundbereichen TV III.2.2 (R. Meyer, Dr. G. Rosenthal, GDF SUEZ – geologisches Modell und Simulationen mit Eclipse 100/300) sowie TV IV.4.3 „Geochemisches Monitoring“ (Dr. P. Pilz, GFZ Potsdam – Konzeption des Tracer-Tests und Monitoringsstrategie) des F&E-Vorhabens CLEAN.

Basierend auf dem Konzept des Tracer-Tests wurden wesentliche Rand- und Prozessbedingungen für die numerischen Simulationen definiert. Es war vorgesehen 20 m^3 (STP) Kr als Tracer-Substanz gemeinsam mit insgesamt $30\,000 \text{ m}^3$ (STP) N_2 als Trägerfluid über die Bohrung S13 (Abb. 12) in die Formation zu injizieren. Aus prozesstechnischen Gründen sind lediglich die obersten Reservoirschichten (ROF, 17B und 16B) der Lagerstätte für die Injektion verfügbar. Das in den Bohrungen S16 und S14 geförderte Gas sollte kontinuierlich mit einer Rate von $50 \text{ cm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ beprobt werden. Die genannten Beobachtungsbohrungen befinden sich entsprechend in einer Entfernung von 916 m bzw. 1 506 m von der Injektionsbohrung S13. Für die kontinuierliche Echtzeit-Gasanalyse war der Einsatz eines portablen Quadrupol-Massenspektrometers geplant. Im natürlichen Porenfluid der Altmark-Lagerstätte wurden Baseline-Konzentrationen für die Tracer-Substanz von $[\text{Kr}] \leq 1,8 \text{ ppmv}$ gemessen. Somit kann ein signifikanter Anstieg der Kr-Konzentrationen bereits im ppmv-Bereich detektiert werden.

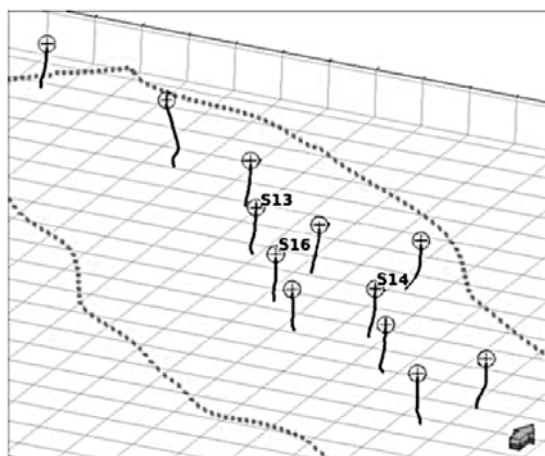


Abbildung 12: Detail eines schematischen geographischen Modells der Altmark-Lagerstätte mit der Injektionsbohrung S13 und den Beobachtungsbohrungen S14 und S16 für die Simulation der Ausbreitung eines Tracer-Mediums (entsprechend einem Lagerstättenmodell des Betreibers GDF SUEZ).

Im Rahmen der im Projekt betriebenen Modellentwicklung wurde der virtuelle Tracer-Test mit dem in OGS realisierten und oben detaillierter beschriebenen Mehrkomponenten-Gasfluss-Ansatz simuliert. Der Tracer-Transport wird vorrangig durch Gradienten des Porendrucks ausgelöst (advektiver Transport, dessen Geschwindigkeit über das modifizierte Darcy-Gesetz definiert ist). Zudem führen Dispersionseffekte im Porenfluidgemisch zu räumlicher Ausbreitung der Tracer-Fahne verbunden mit einer Verringerung der Konzentration der Tracer-Substanz. Die Dichte des Porenfluidgemischs bei gegebenen, konstanten Werten für Druck und Temperatur wurde mit den Zustandsgleichungen nach Peng-Robinson berechnet. Zur Charakterisierung des hydrodynamischen Dispersionsensors werden Werte für den Exponenten, den Eigendiffusionskoeffizienten, die Tortuosität und die Dispersivität benötigt, die im vorliegenden Fall einer Publikation von

Vargaftik (1975) entnommen wurden. Für die Berechnung der Eigenschaften des Porenfluidgemischs wurde ein eigenes Modell unter Nutzung der kritischen Konstanten der Komponenten des Gasgemischs, ihrer so genannten azentrischen Faktoren sowie der Energie- und Distanzparameter entwickelt. Details der mathematischen und numerischen Aspekte des verwendeten Mehrkomponenten-Gasfluss-Modells werden in den Arbeiten von Singh et al. (2011a,b, 2012b) diskutiert. Für das konkrete Testbeispiel wurden zusätzlich folgende Annahmen getroffen:

- Die im Porenfluid gelöste Tracer-Substanz führt nicht zu Veränderungen der physikalischen Parameter anderer beteiligter Fluidkomponenten (z.B. Dichte, Viskosität).
- Im Reservoir herrschen während des gesamten Simulationsprozesses isotherme Bedingungen bei einer Formationstemperatur von 120°C.
- Die Tracer-Substanz unterliegt keinem Masseverlust.

Unter Verwendung des beschriebenen Mehrkomponenten-Gasfluss-Modells wurden mit OGS die Injektion von Kr als konservativer Tracer-Substanz in die obersten drei Reservoirschichten des Teilfelds Altensalzwedel der Altmark-Lagerstätte über die Bohrung S13 simuliert und die Ausbreitung des Tracers sowie das Durchbruchverhalten an den Beobachtungsbohrungen S14 und S16 analysiert. Das betrachtete, dreidimensionale Berechnungsgebiet mit den drei obersten Reservoirschichten sowie zwei dazwischen liegenden Deckgebirgsschichten wurde mit 12 610 Hexaeder-Elementen räumlich diskretisiert. An der Injektionsbohrung beträgt seine Dicke 62 m, während die horizontale Ausdehnung durch die Entfernungen zwischen Injektions- und Beobachtungsbohrungen gegeben ist. Struktur, Geometrie und Parametrisierung des Simulationsmodells wurden entsprechend dem statischen Modell definiert, das vom Lagerstättenbetreiber GDF SUEZ auf dem Datenmanagementsystem von CLEAN zur Verfügung gestellt wurde. Die Parametrisierung (history match) erfolgte dabei unter Nutzung des Simulators Eclipse.

Basierend auf den realen Formationsbedingungen wurden folgende Anfangs- und Randbedingungen für das Simulationsmodell definiert:

- Anfangsbedingungen: Der Porendruck in der Formation wurde vor Beginn der Injektion als einheitlich mit einem Wert von 4 Mpa angenommen. Die Zusammensetzung des natürlichen Porenfluids betrug 26% CH₄ und 76% N₂.
- Randbedingungen: Der Fluidfluss über die äußeren Formationsgrenzen wurde unterdrückt. An den Beobachtungsbohrungen S14 und S16 wurde kontinuierlich Porenfluid mit Raten von entsprechend 45 000 m³ bzw. 20 000 m³ gefördert.
- Quellterme: Die Simulation des virtuellen Tracer-Tests begann mit der Injektion von 15 000 m³ (STP) N₂ innerhalb eines Tages, gefolgt von einer injektionsfreien Phase von 30 Tagen. Anschließend wurden 20 m³ (STP) Kr innerhalb eines Tages injiziert. Nach einer erneuten Wartezeit von einem Tag erfolgte die Injektion von

weiteren 15 000 m³ (STP) N₂ wiederum innerhalb eines Tages, um den Transport der Tracer-Substanz zu unterstützen.

Die wichtigsten Parameter der für die Tracer-Injektion genutzten und in etwa 3 000 m Tiefe liegenden Reservoirschichten sind in Tabelle 3 zusammengefasst. Für beide Deckgebirgsschichten wurde eine Porosität von 0,014 und eine Permeabilität von 0,1 mD angenommen. Die Massedichte der Felsformationen wurde in den Reservoirschichten mit 2 460 kg·m⁻³ angesetzt, in den beiden Deckgebirgsschichten hingegen mit 2 700 kg·m⁻³ bzw. 2 940 kg·m⁻³.

Tabelle 3: Ausgewählte Materialeigenschaften der für die Tracer-Injektion genutzten Reservoirschichten.

Schicht	Mächtigkeit (m)	Porosität	Intrinsische Permeabilität (mD)
ROF	5	0,510	2,33
17B	6	0,088	1,39
16B	4	0,105	1,48

In Abb. 13 sind die Abhängigkeit der Dichte und Viskosität der Komponenten des Porenfluids vom Druck dargestellt, die vom National Institute for Science and Technology für die jeweils kritische Temperatur zur Verfügung gestellt wurden und hier bei der Berechnung physikalischer Eigenschaften des Porenfluidgemischs berücksichtigt wurden.

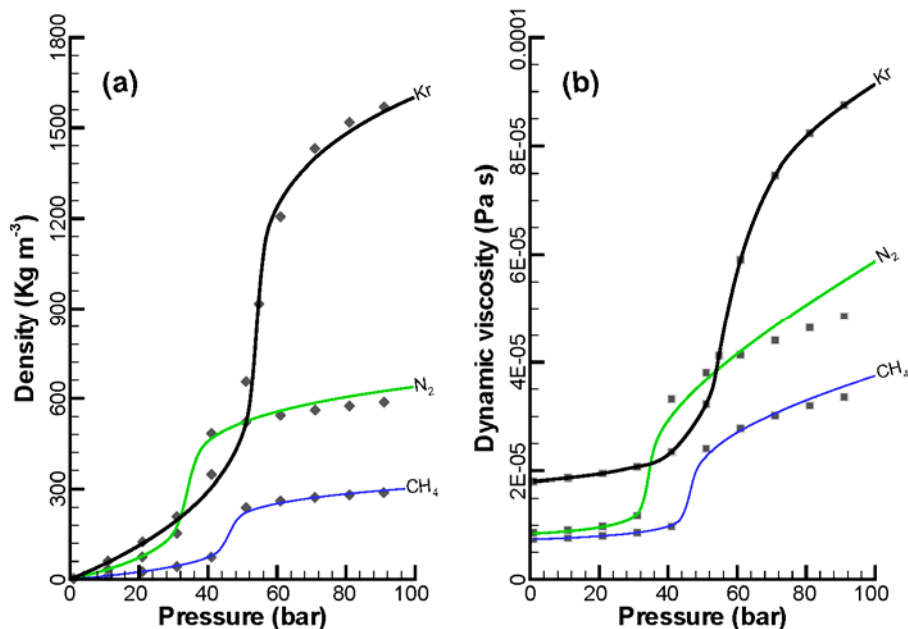


Abbildung 13: Abhängigkeit der Dichte (a) und dynamischen Viskosität (b) der Komponenten der betrachteten Gasmischung vom Druck bei der jeweiligen kritischen Temperatur. Die Einzelsymbole repräsentieren Daten des National Institute for Science Technology (NIST).

Im Folgenden werden ausgewählte numerische Ergebnisse der Simulation des konzipierten Tracer-Tests diskutiert. Ein wichtiges Resultat für die Entscheidung zur Durchführung des Tests ist die in Abb. 14 präsentierte Entwicklung der Konzentration der Tracer-Substanz an den Beobachtungsbohrungen S14 und S16 (Durchbruchkurven). Erwartungsgemäß kann an der näher zur Injektionsposition gelegenen Bohrung S16 eine geringere Durchbruchzeit verglichen mit der Beobachtungsbohrung S14 ermittelt werden. Zudem ist die Kr-Konzentration an der Bohrung S16 um etwa vier Größenordnungen größer als an der Bohrung S14.

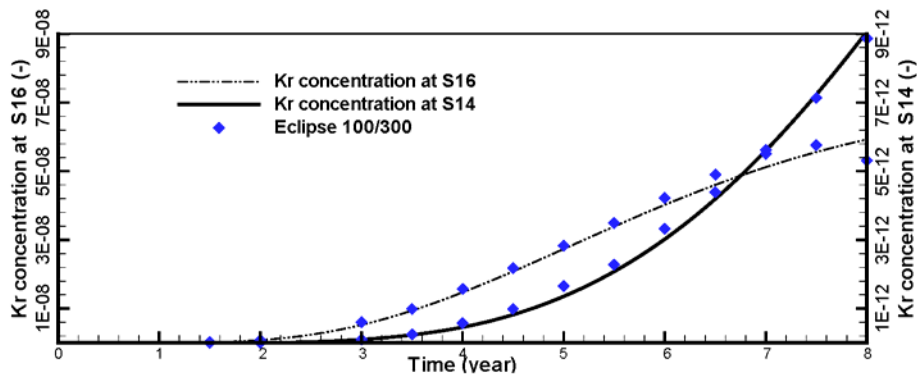


Abbildung 14: Durchbruchkurven für das Tracer-Medium an den Beobachtungsbohrungen S14 und S16. Vergleich der numerischen Resultate von OGS mit Simulationsergebnissen von Eclipse 100/300.

Abb. 14 demonstriert die sehr gute Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen der beiden verwendeten Softwareprojekte OGS und Eclipse. An der Bohrung S14 weisen die nahezu identischen numerischen Resultate beider Simulatoren auf ein monotonen Wachstum der Kr-Konzentration hin. Erkennbare quantitative und auch qualitative Abweichungen in den Berechnungsergebnissen zeigen sich bezüglich der Durchbruchkurve an der Bohrung S16 etwa sieben Jahre nach der Kr-Injektion. Während OGS über den gesamten Zeitraum eine zunehmende Kr-Konzentration ermittelt (wenn auch ab etwa sechs Jahren nach der Injektion mit verringerter Rate), wurde mit Eclipse zum Ende des betrachteten Zeitraums hin eine Verringerung der Kr-Konzentration ermittelt. Die genauen Ursachen dieser Unterschiede konnten in der Projektlaufzeit nicht ermittelt werden, sind aber sehr wahrscheinlich in unterschiedlichen numerischen Ansätzen beider Programme zu suchen.

Das Profil der Tracer-Konzentration entlang der kürzesten Verbindung zwischen der Injektionsbohrung S13 und der Beobachtungsbohrung S16 ist in Abb. 15 für vier verschiedene Zeitpunkte nach Beendigung des Injektionsprozesses dargestellt. Dabei entspricht die Lage der Injektionsbohrung der linken Begrenzung der Wegachse. Das Maximum der Profile nimmt mit der Zeit immer kleinere Werte an, verlagert aber seinen Ort nur unwesentlich in Richtung der Beobachtungsbohrung. Die Fläche unter den gezeigten Kurven repräsentiert die Menge der injizierten Tracer-Substanz. Aus der Breite der Profilkurven, dem Konzentrationsmaximum sowie der Lage der Schnittpunkte der Kurven

können unter bestimmten Annahmen physikalische Parameter des Transportprozesses wie Fließgeschwindigkeit und Diffusionskoeffizient abgeschätzt werden (vgl. Singh et al., 2012b und darin zitierte Literatur).

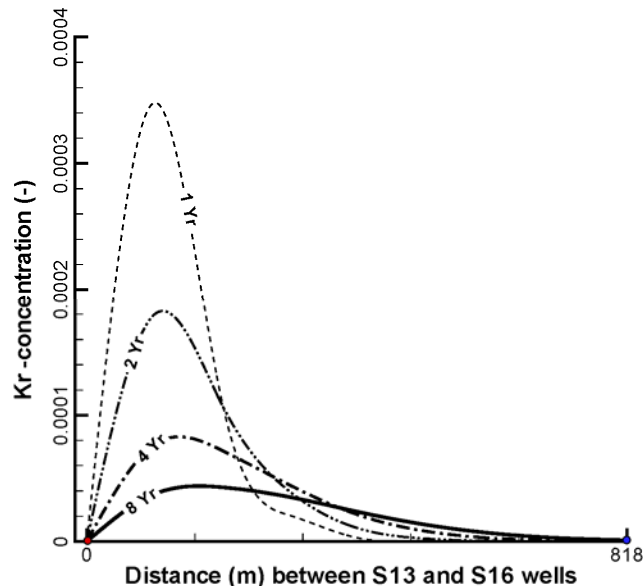


Abbildung 15: Profile der Konzentration des Tracer-Mediums entlang der direkten Verbindung zwischen der Injektionsbohrung S13 (entspricht der Distanz 0 m) und der Beobachtungsbohrung S16 zu verschiedenen Zeitpunkten.

In Abb. 16 wird die zeitliche Entwicklung des Porendrucks an der Injektionsbohrung und an den Beobachtungsbohrungen S14 und S16 während der Injektionsphase und in den ersten Monaten nach der Injektion der Tracer-Substanz dokumentiert.

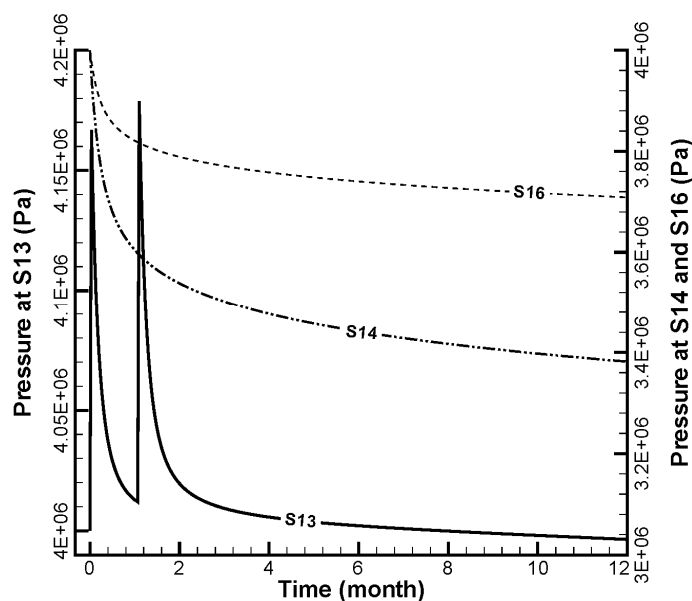


Abbildung 16: Porendruckentwicklung in den betrachteten Bohrungen. In der Bohrung S13 erfolgt die Injektion des Tracer-Mediums, die Bohrungen S14 und S16 dienen der Förderung von Restgasmengen aus der Lagerstätte.

Während an den Bohrungen S14 und S16 ein kontinuierlicher Druckabfall zu beobachten ist, weist der Druckverlauf an der Injektionsbohrung Sprünge auf, die auf die zum Teil sehr aktive Verpressung des N_2 als Trägerfluid für die Tracer-Substanz zurückzuführen ist. Nach dem Ende der zweiten Phase der N_2 -Injektion fällt der Porendruck an der Injektionsbohrung S13 asymptotisch ab, was auch der andauernden Produktion von Porenfluid über die Bohrungen S14 und S16 geschuldet ist.

Zur Charakterisierung der spezifischen Transportprozesse in der betrachteten Formation sind in Abb. 17 Porendruckprofile entlang der kürzesten Verbindung zwischen der Injektionsbohrung S13 und der Beobachtungsbohrung S16 für vier verschiedene Zeitpunkte während und nach der Injektionsphasen dargestellt.

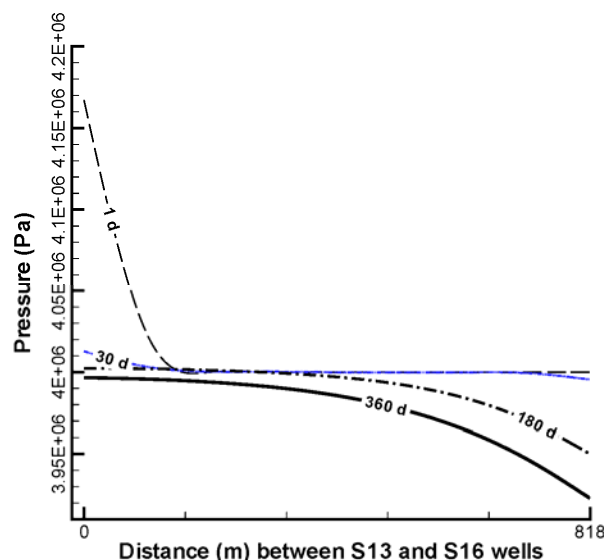


Abbildung 17: Porendruckprofile entlang der direkten Verbindung zwischen der Injektionsbohrung S13 und der Beobachtungsbohrung S16 zu verschiedenen Zeitpunkten.

Der erste Tag ist der Beginn der ersten Phase der N_2 -Injektion und zeigt in einem steilen Profil deren beträchtliche Intensität. Zum Vergleich ist das Druckprofil am Tag 30, dem Zeitpunkt der Kr-Injektion ein deutlich gedämpfteres Profil. Die Druckverläufe an den Tagen 180 und 360 verdeutlichen die Tatsache, dass die andauernde Produktion von Porenfluid über die Bohrungen S14 und S16 den Transport der Tracer-Substanz beschleunigen.

In diesem Abschnitt wurden einige Ergebnisse der numerischen Simulation des konzipierten Tracer-Tests analysiert. Die Verteilung und Entwicklung der Konzentration der Tracer-Substanz sowie das Durchbruchverhalten an den Beobachtungsbohrungen sind dabei die wesentlichen Resultate, die eine Einschätzung von Formations- und Prozesseigenschaften ermöglichen. Dabei erweisen sich die Durchbruchzeiten als deutlich vom Abstand zwischen Injektions- und Beobachtungsbohrung sowie Injektions- und Produktionsraten abhängig. Detailliertere Diskussionen und Interpretationen der Simulationsergebnisse finden sich bei Singh et al. (2012b).

Da die numerischen Simulationen unter den gegebenen Bedingungen unzureichend lange Durchbruchzeiten an den Beobachtungsbohrungen erwarten ließen (ca. zwei Jahre an der Bohrung S16 und etwa drei Jahre an der Bohrung S14), wurde der Tracer-Test nicht realisiert. Für eine deutliche Verkürzung der Durchbruchzeiten und die Erhöhung der Tracer-Konzentration an den Beobachtungsbohrungen werden folgende Alternativen vorgeschlagen:

- Verwendung einer Tracer-Substanz mit besseren Fließeigenschaften,
- Vergrößerung der injizierten Menge der Tracer-Substanz und/oder
- Nutzung von Reservoirschichten mit größerer Permeabilität (so hat beispielsweise die durchlässigste Schicht eine nahezu 100fach größere Permeabilität verglichen mit den vorgegebenen oberen drei Reservoirschichten).

Die numerische Simulation dieser (und möglicher anderer) Alternativen im Sinne von Szenarienstudien verdeutlicht den Nutzen numerischer Methoden zur effizienten Optimierung praktischer Prozesse. In der Projektlaufzeit konnten diese Studien nicht mehr durchgeführt werden. Mit OGS ist jedoch ein flexibles Instrumentarium verfügbar, das in verschiedenen Vergleichen mit kommerziellen Softwareprodukten seine Eignung zur Simulation geotechnischer Problemstellungen nachgewiesen hat.

3.2 Nutzen, Verwertung und Schutzrechtsanmeldungen

Die Entwicklung, numerische Realisierung und Anwendung eines integrativen Modellierungsinstrumentariums für die Simulation problemspezifischer, gekoppelter THM/C-Prozesse leistet einen wesentlichen methodischen Beitrag zur systematischen Analyse von Vorgängen bei der CO₂-Injektion und Ausbreitung in geologischen Untergrund. Damit wird die Prognostizierbarkeit von physikalisch-chemischen Prozessen, die für die Durchführung von EGR- und/oder 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 CLEAN 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.

Neben dem unmittelbaren Nutzen für Forschungs- und Industriepartner sind die verallgemeinerbaren, vom Standort 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, Software-

komponenten) 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 und chemischen Prozesse 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 CLEAN 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 zu EGR-Zwecken, der CO₂-Speicherung und anderer geotechnischer 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.

3.3 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. Birkholzer and Zhou, 2009; Class et al., 2009; Dentz and Tartakovsky, 2009; Ringrose et al., 2011; Rutqvist et al. 2008b; Vidal-Gilbert 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 mit bestimmen (z.B. numerische Verfahren für die Simulation von Mehrphasen-Mehrkomponenten-Flüssen in 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.

3.4 Literatur

3.4.1 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.

- 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.
- 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.
- Class H, Ebigbo 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.
- 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.
- Freifeld BM, Trautz RC, Kharaka YK, Phelps TJ, Myer LR, Hovorka SD et al. (2005): The U-tube: a novel system for acquiring borehole fluid samples from a deep geologic CO₂ sequestration experiment. *Journal of Geophysical Research* 110:B10203.
- García J (2003): Fluid dynamics of carbon dioxide disposal into saline aquifers. PhD Thesis, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California.
- 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.
- 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.
- 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): *Benchmarks and examples for thermo-hydro-mechanical/chemical processes in porous media*. *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.
- 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*.
- 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. I, pp. 489-494.
- 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.
- 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, Kovscek 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, Tchelepi 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 at al. (2011): Characterisation of the Krechba CO₂ storage site: Critical elements controlling injection performance. *Energy Procedia* 4:4672-4679.
- 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.
- 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.
- Van der Meer LGH (1996): Computer modeling of underground CO₂ storage. *Energy Conversation and Management* 37(6-8):1155-1160.
- Vargaftik NB (1975): *Tables on the thermo-physical properties of liquids and gases*. Hemisphere Publication Corp., New York.

- 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.
- Wallick GC, Jenkins R (1954): Analysis of short-time tracer injection in underground formations. *Journal of Applied Physics* 25(12):1491-1496.
- 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.
- Zimmer M, Erzinger J, Kujawa C (2010): CO₂-SINK Group. The Gas Membrane Sensor (GMS): A new method for gas measurements in deep boreholes applied at the CO₂-SINK site. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5(4):995-1001.

3.4.2 Erfolgte Veröffentlichungen

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

- 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 (2011): 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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, Schnicke T, Kolditz O (2011): Parallel finite element method and time stepping control for non-isothermal poro-elastic problems. Computers Materials & Continua 21(3):217-235.

3.4.3 Geplante Veröffentlichungen

Eine Veröffentlichung mit ausgewählten Ergebnissen der im Projekt durchgeführten Arbeiten ist im Rahmen des GEOTECHNOLOGIEN Science Reports in der Springer Buchreihe „Advanced Technologies in Earth Sciences“ im Druck. Diese Ergebnisse sind Teil einer kompakten Darstellung des Zusammenwirkens von Modellierer-Arbeiten im F&E-Vorhaben CLEAN, die vom UFZ redaktionell erarbeitet wurde.

Auf maßgebliche Initiative des UFZ ist es gelungen, dem F&E-Vorhaben CLEAN einen Sonderband der Zeitschrift „Environmental Earth Sciences“ zu widmen, der voraussichtlich Mitte 2012 erscheinen wird. Das UFZ ist dabei im Editorial Board vertreten und verantwortet mehrere Beiträge, die in Zusammenarbeit mit anderen Teilprojekten aus CLEAN entstanden sind und somit auch die enge Verknüpfung unterschiedlicher Themen im Verbundprojekt illustrieren (z.B. Modellierung/Monitoring).

Bei den genannten Manuskripten und einer weiteren geplanten Veröffentlichung, das sich aktuell im abschließenden Begutachtungsprozess befindet handelt es sich um folgende Beiträge:

- Böttcher N, Taron J, Kolditz O, Park C-H, Liedl R (2012): Evaluation of equations of state for CO₂ in numerical simulations. Environmental Earth Sciences, CLEAN Special Issue (submitted).

- Hou Z, Gou Y, Taron J, Görke U-J, Kolditz O (2012): Thermo-hydro-mechanical modeling of CO₂-EGR: Results and code comparison. Environmental Earth Sciences, CLEAN Special Issue (submitted).
- Kolditz O, Bauer S, Bilke L, Boettcher 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, CLEAN Special Issue (accepted).
- Kolditz O, Bauer S, Böttcher N, Elsworth D, Görke U-J, McDermott C-I et al. (2012c): 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).
- Kolditz O, Bauer S, Beyer C, Böttcher N, Dietrich P, Görke U-J et al. (2012d): A systematic for CO₂ benchmarking. Environmental Earth Sciences, CLEAN Special Issue (submitted).
- 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, CLEAN Special Issue (submitted).
- Singh AK, Baumann G, Henniges J, Görke U-J, Kolditz O (2012a): Numerical analysis of thermal effects during carbon dioxide injection with enhanced gas recovery: a case study for the Altmark gas field. Environmental Earth Sciences, CLEAN Special Issue (submitted).
- Singh AK, Pilz P, Zimmer M, Kalbacher T, Görke U-J, Kolditz O (2012b): Numerical simulation and geophysical monitoring of tracer transport in the Altmark gas field. Environmental Earth Sciences, CLEAN Special Issue (submitted).

3.4.4 Vorträge

Auf den CLEAN-Jahrestreffen 2009, 2010 und 2011 jeweils in Potsdam 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 CLEAN in kooperativen Vorträgen und Postervorträgen vorgestellt. Auf einzelnen dieser Veranstaltungen konnten ausgewählte Projektarbeiten auch detailliert erläutert werden. Diese Beiträge sowie Vorträge und Postervorträge, 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, Böttcher N, Wang W, Park C-H, Liedl R, Kolditz O (2009): Multiphase flow in deformable porous media: application to carbon dioxide capture and storage. Postervortrag zum CLEAN-Statusseminar, Potsdam (Germany), 15.-16.01.2009.

- 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, 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, 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, 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, Böttcher N, Görke, U-J, Liedl R, Kolditz O (2010): Non-isothermal compositional gas flow during EGR processes – benchmarks and application. Postervortrag zum GEOTECHNOLOGIEN-Statusseminar „Geological storage of CO₂“, Jena (Germany), 27.-28.09.2010.
- Singh AK, Böttcher N, Wang W, Park C-H, Görke U-J, Kolditz O (2010): Nonisothermal effects on two-phase flow. Postervortrag zum CLEAN-Statusseminar, Potsdam (Germany), 28.01.2010.
- 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, Böttcher N, Baumann G, Awemo KN, Görke U-J, Kolditz O (2011): Non-isothermal compositional gas flow modelling: carbon dioxide injection and enhanced gas recovery at Altmark gas field. CLEAN Final Conference, Potsdam (Germany), 17.-18.05.2011.
- Singh AK, Böttcher N, Görke U-J, Wang W, Kolditz O (2011): Nonisothermal compositional gas flow during carbon dioxide storage and enhanced gas recovery. IVth International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering (COUPLED PROBLEMS 2011), Kos Island (Greece), 20.-22.06.2011.
- 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.