Ein optimierter semi-analytischer hydromechanischer Kopplungsansatz für die geologische CO_2-Speicherung

-

Hydraulische Reaktivierung von Störungen

Von der Fakultät für Bauingenieurwesen
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Markus Adams

Berichter: Universitätsprofessor Dr.-Ing. Martin Ziegler
Universitätsprofessor Dr. rer. nat. Dr. h. c. (USST) Rafig Azzam

Tag der mündlichen Prüfung: 26.07.2019

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Hochschulbibliothek online verfügbar.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis **V**

Tabellenverzeichnis **XIII**

Symbolverzeichnis **XV**

Kurzfassung **XXI**

Abstract **XXIII**

1 Einleitung **1**

1.1. Motivation ... 2
1.2. Zielsetzung und Gliederung der Arbeit ... 3

2 Geologische Speicherung von Kohlenstoffdioxid **5**

2.1. Beschreibung der Carbon Capture and Storage Technologie (CCS) ... 5
2.2. Speicherung von CO_2 in salzwasserführenden Grundwasserleitern ... 7
2.2.1. Rückhaltemechanismen ... 8
2.2.2. Schlüsselindikatoren für die Bewertung eines potenziellen CO_2-Speichers ... 9
2.2.3. Verbreitung potenzieller Speicherstandorte in Deutschland ... 11
2.3. Bisherige Anwendungen von CCS ... 12
2.4. Diskussion und Bewertung ... 14
2.4.1. Leistungsfähigkeit und wirtschaftliche Perspektive ... 14
2.4.2. Unsicherheiten und Risiken ... 15
2.4.3. Risikoanalysen und aktueller Forschungsbedarf ... 17

3 Stratigraphie und Strukturgeologie **21**

3.1. Genese von Gesteinen ... 21
3.2. Plattentektonik und Gebirgsbildung (Orogenese) ... 24
3.3. Entstehung der Sedimentgesteine des Zentraleuropäischen Beckens ... 29
3.3.1. Sedimente des Trias ... 30
3.3.2. Sedimente des Jura, der Kreide und des Känozoikums ... 32
3.4. Geologische Störungen ... 32
3.4.1. Tektonische Faktoren bei der Entstehung von Störungen ... 34
3.4.2. Nicht-tektonische Faktoren bei der Entstehung von Störungen ... 36
3.4.3. Beschaffenheit von Störungen ... 38
3.5. Zusammenfassung ... 41

4 Prozessmodellierung von geologischer CO_2-Speicherung in salzwasserführenden Formationen 43

4.1. Beschreibung der auftretenden Prozesse ... 43
4.2. Grundlagen der hydraulischen Prozesse ... 48
4.2.1. Definitionen ... 48
4.2.2. Mehrphasenfluss als thermodynamischer Prozess ... 49
4.2.3. Fluideigenschaften ... 51
4.2.4. Mehrphasenfluss unter teilgesättigten Bedingungen ... 52
4.2.5. Kontinuumsmechanische Grundgleichungen ... 59
4.3. Grundlagen der geomechanischen Prozesse ... 61
4.3.1. Theorie der effektiven Spannungen nach Terzaghi und Biot ... 62
4.3.2. Stoffgesetze ... 65
4.4. Thermo-hydromechanische Kopplungen von Mehrphasenfluidfluss-Simulationen ... 79
4.4.1. Arten der thermo-hydromechanischen Kopplung ... 80
4.4.2. Ansätze zur Beschreibung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung einer Störung ... 83
4.5. Zusammenfassende Bewertung und aktueller Forschungsbedarf ... 84

5 Formulierung eines semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes 87

5.1. Methodik des neuen Ansatzes ... 87
5.2. Konzeptionelle Grundannahmen ... 90
5.3. Formulierung des neuen Ansatzes ... 93
5.3.1. Verwendete Definitionen ... 93
5.3.2. Mathematische Beschreibung des neuen Ansatzes ... 96
5.3.3. Zugrundeliegende Hypothesen ... 99
5.3.4. Anwendung des neuen Ansatzes ... 101
5.4. Methodik zur Validierung des neuen Kopplungsansatzes ... 102
5.5. Zusammenfassung ... 102

6 Berechnungsmodelle und numerische Umsetzung 103

6.1. Gliederung ... 103
6.2. Beschreibung des verwendeten Programmsystems ... 104
6.2.1. Funktionsweise von ABAQUS ... 104
6.2.2. Validierung der hydromechanischen Funktionsweise von ABAQUS ... 107
6.3. Numerische Implementierung des neuen Ansatzes in ABAQUS ... 110
6.4. Beschreibung der synthetischen Modellvariationen ... 114
6.4.1. Stratigraphische Beschreibung des synthetischen Basismodells und der daraus entwickelten Modellvariationen ... 115

6.4.2. Beschreibung des Berechnungsausschnitts, der Diskretisierung und der Randbedingungen 121
6.4.3. Definition der verwendeten Homogenbereiche, Bezugselemente und Referenzelemente für den semi-analytischen Kopplungsansatz 123
6.4.4. Verwendete Stoffgesetze, Parametrisierung und Initialisierung des Modells 126
6.4.5. Modellierung des Injektionsprozesses 130

7 Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes für Einphasenfluidfluss durch die Störung 131

7.1. Zielsetzung und Gliederung 131
7.2. Gesamtübersicht, inhaltliche Zuordnung und Beschreibung der Parameterstudien 132
7.3. Beschreibung der hydromechanischen Prozesse am Beispiel einer Modellvariation 137
7.3.1. Ergebnisse und Diskussion 137
7.3.2. Qualitative Verifizierung der Simulationsergebnisse 144
7.4. Ergebnisse von Untersuchungsreihe 1 zur Ermittlung der Anwendungsgrenzen und zur Validierung der Hypothesen 146
7.4.1. Untersuchung zum Einfluss der horizontalen Diskretisierung der Störung 146
7.4.2. Ermittlung der Anwendungsgrenzen einer Basissimulation 149
7.4.3. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 1 154
7.4.4. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 2 160
7.4.5. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 3 und 4 162
7.5. Diskussion der Ergebnisse von Untersuchungsreihe 1 167
7.5.1. Untersuchung zum Einfluss der horizontalen Diskretisierung der Störung 167
7.5.2. Ermittlung der Anwendungsgrenzen einer Basissimulation 168
7.5.3. Untersuchungen zur Validierung der Hypothesen 1 bis 4 170
7.6. Ergebnisse und Diskussion von Untersuchungsreihe 2 zur Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes 174
7.7. Zusammenfassung und Fazit 185

8 Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes für Mehrphasenfluidfluss durch die Störung 187

8.1. Zielsetzung 187
8.2. Numerische Umsetzung und Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes 187

8.3. Modellbeschreibung des untersuchten synthetischen geologischen CO_2-Speichers 189
8.3.1. Beschreibung der verwendeten Modellvariation, Homogenbereiche, Bezugs- und Referenzelemente 189
8.3.2. Beschreibung des Berechnungsausschnitts, der räumlichen Diskretisierung und der Randbedingungen 190
8.3.3. Definition der verwendeten Homogenbereiche, Bezugselemente und Referenzelemente für den semi-analytischen Kopplungsansatz 190
8.3.4. Verwendete Stoffgesetze, Parametrisierung und Initialisierung des Modells 191
8.4. Simulationsdurchführung und Simulationsübersicht 193
8.5. Ergebnisse und Diskussion der FE-Simulationen 195
8.6. Zusammenfassung und Fazit 203

9 Zusammenfassung und Ausblick 205

Literaturverzeichnis 211

Vorveröffentlichungen 223

Anlagen 225

Abbildungsverzeichnis

Bild 2.1 Prozesskette des Carbon Capture and Storage-Verfahrens (EnergieAgentur.NRW (2009)). Die bereits diskutierten Prozesse Abscheidung und Transport sind mit der Zahl 1 beziehungsweise 2 gekennzeichnet. 6

Bild 2.2 Schematische Darstellung eines geeigneten Speicher-Barrierekomplexes für die Speicherung von CO_2 in tief liegenden geologischen Formationen (Tonstein oberes linkes Bild; Sandstein unteres linkes Bild). Hier exemplarisch für die Speicherung in salzwasserführenden GWLs, erschöpften Erdgas- und Erdölfeldern und in nicht abbauwürdigen Kohleflözen (CO_2GeoNet (2009)). 7

Bild 2.3 Darstellung der zeitlichen Abfolge von physikalischen und chemischen Rückhaltemechanismen (Trapping mechanisms), die eine sichere langfristige CO_2-Speicherung bewirken (IPCC (2005)). 8

Bild 2.4 Weltweite Verteilung von potenziell für die geologische Speicherung von CO_2 geeigneten Sedimentbecken (Bradshaw und Dance (2004)). 9

Bild 2.5 Ablagerungen des Buntsandsteins im Norddeutschen Becken als potenzieller Speicherkomplex. Kategorisierung nach Mächtigkeit und Tiefenlage (Ausschnitt aus Reinhold et al. (2011)). 12

Bild 2.6 Beispiele potenzieller Leckageszenarien (CO_2GeoNet (2009)). 16

Bild 3.1 Aufbau der Erde und Konvektionsströmungen im Erdinneren (Ergänzt nach Meschede (2015)). 22

Bild 3.2 Der Kreislauf der Gesteine zeigt die unterschiedlichen Zyklen bei der Bildung, Verwitterung, Sedimentation und Metamorphose von Gesteinen im oberflächennahen Bereich der Erdkruste (Meschede (2015)). 23

Bild 3.3 Die geologische Zeitskala der letzten eine Milliarde Jahre (ICS-Standard) zeigt die für die Gestalt der heutigen oberflächennahen Erdkruste in Mitteleuropa verantwortlichen Orogenesen und Hauptabsenkungsstadien (zusammengestellt aus Meschede (2015) und Elicki und Breitkreuz (2016)). 24

Bild 3.4 Die schematische Darstellung der plattentektonischen Vorgänge an der Erdoberfläche und im Erdmantel zeigt die Auswirkungen von konstruktiven, destruktiven und konservativen Plattenrändern (Meschede (2015)). 25

Bild 3.5 Die zyklische Abfolge von plattentektonischen Prozessen (Wilson-Zyklus) zeigt die Wechselwirkung zwischen konstruktiven und destruktiven Plattenrändern bei der Ozean- und der Gebirgsbildung (Meschede (2015)). 26

Bild 3.6 Überblick über die plattentektonische Geschichte Mitteleuropas; die Positionen der Gebiete Deutschlands sind rot hinterlegt (verändert nach Meschede (2015)). a) cadomische Orogenese; b) kaledonische Orogenese; c) variszische Orogenese; d) alpidische Orogenese. 27

Bild 3.7 Das geologische Querprofil vom Harz bis in die Ostsee zeigt exemplarisch das Senkungsgebiet des Zentraleuropäischen Beckens sowie die Schichtfolge der unterschiedlichen Sedimentschichten (Meschede (2015) umgezeichnet und ergänzt nach Krawczyk et al. (2008)). 29

Bild 3.8 Der starke Rückgang des Meerespiegels im Trias bewirkte verschiedenartige deltaische bis terrestrische Ablagerungsbedingungen bei der Sedimentation der Keuperformationen. a) Meeresspiegelschwankungen im Phanerozoikum (Meschede (2015) basierend auf Haq et al. (1987)); b) Stratigraphische Abfolge der Trias-Sedimente im Norddeutschen Becken und angrenzenden Regionen. (Meschede (2015) basierend auf Menning et al. (2002), (2011); Menning und Hendrich (2005), (2012); Peryt et al. (2010)) 30

Bild 3.9 Die Raumlage einer Störung wird durch die Streichrichtung α, die im Uhrzeigersinn von der Nordrichtung aus gemessen wird und den Fallwinkel β_F beschrieben. Im Fall einer Abschiebung lässt sich der Gesamtversatz in seine Bestandteile aufgliedern (in Anlehnung an Reuther (2012)). 33

Bild 3.10 Zusammenhang zwischen tektonischer Struktur, Deformation und Hauptspannungsrichtungen: a) Abschiebung, b) Horizontalverschiebung, c) Aufschiebung (Reuther (2012)). 34

Bild 3.11 Mögliche Bruchfiguren bei der Lithosphärenstreckung a) durch Aufdomung, b) reine Scherung (McKenzie-Modell), c) einfache Scherung (Wernicke-Modell) und d) Delamination (Reuther (2012) dort verändert nach Lister et al. (1986)). 35

Bild 3.12 Grafische Ermittlung der abweichenden Orientierung der maximalen Hauptspannung σ_1 und der Störungsneigung zweier Formationen mit unterschiedlichen Scherfestigkeiten für einen gleichförmigen Spannungszustand mittels Polplan im Mohr'schen Spannungsdiagramm (verändert nach Mandl (1988)). 37

Bild 3.13 Grafische Ermittlung der abweichenden Orientierung der maximalen Hauptspannung σ_1 und der Störungsneigung zweier Formationen mit unterschiedlichen Scherfestigkeiten für den Fall einer Unterlagerung einer fließenden Formation mittels Polplan im Mohr'schen Spannungsdiagramm. Links: extensives Regime. Rechts: kompressives Regime (verändert nach Mandl (1988)). 38

Bild 3.14 Schema einer Verwerfungszone mit zwei Bruchflächen von der Erdoberfläche bis in eine Krustentiefe von über 15 km. In der spröden Oberkruste bis in eine Tiefe bis ca. 15 km entstehen zunächst unverfestigte, dann verfestigte Kataklasite. In der duktilen Unterkruste wird die Störungszone breiter und es entstehen Mylonite (aus Reuther (2012)). 39

Bild 3.15 Charakteristischer Aufbau von Störungszonen: (a) zeigt einen einzelnen Störungskern (fault core) umgeben von einer stark fragmentierten Störungszone (engl.: „damage zone") und (b) mehrere Störungskerne, die teilweise miteinander verbunden sind, umgeben von stark fragmentierten Störungszonen (Faulkner et al. (2010)) 40

Bild 3.16 Korrelation zwischen der Breite der fragmentierten Störungszone (engl.: „damage zone") und dem Versatz (displacement) einer Störung (Faulkner et al. (2010)). 41

Bild 4.1 Schematischer Schnitt durch das Norddeutsche Becken zeigt die geologische CO_2-Speicherung in Antiklinalstrukturen (Knopf et al. (2010)). 45

Bild 4.2 Die maximale Ausdehnung der CO_2-Fahne in der Detfurth-Formation erreicht die geologischen Störungen nach einer Injektionsdauer von 20 Jahren nicht (Tillner (2015)). 46

Bild 4.3 p/T-Phasendiagramm von Kohlendioxid definiert mögliche Phasenzustände (Quelle: http://anorganik.chemie.vias.org/phasendiagramm_pt_reinstoffe.html; 21.08.2017). 50

Bild 4.4 Grenzflächenspannung und Benetzungswinkel zwischen zwei Fluiden und einem Festkörper (Finsterle (1993)). ... 53
Bild 4.5 Kapillare Steighöhe h_c und entsprechender Kapillardruck p_c am Beispiel einer in Wasser getauchten Kapillare (aus Finsterle (1993)). ... 54
Bild 4.6 Definition der residualen und der effektiven Sättigungen (verändert aus Finsterle (1993)). ... 55
Bild 4.7 Links: Bestimmung der Brooks-Corey Parameter λ und P_d. Rechts: Kapillardruck-Sättigungs-Kurven nach Brooks und Corey (1964) und van Genuchten (1980) (aus Finsterle (1993)). ... 56
Bild 4.8 Relative Permeabilitäten der benetzenden k_{rw} und der nicht benetzenden Phase k_{rn} (CO_2) sowie Kapillardruck in Abhängigkeit der benetzenden Phase S_w für einen Sandstein (Kempka und Kühn (2013)). ... 58
Bild 4.9 Normalenrichtung und Wirkrichtung der an einem freigeschnittenen Würfel angreifenden Komponenten des Spannungstensors. ... 66
Bild 4.10 Darstellung eines Spannungszustands P im Hauptspannungsraum und grafische Darstellung seiner Zerlegung in einen hydrostatischen und einen deviatorischen Anteil. ... 67
Bild 4.11 Darstellung des Hauptspannungsraums aus einer Blickrichtung senkrecht zur Deviatorebene auf den Ursprung des Koordinatensystems. ... 68
Bild 4.12 Charakteristischer Spannungs-Dehnungsverlauf an einer hochporösen Sandsteinprobe im Ödometerversuch zeigt einen linear approximierbaren Steifemodul E_S im Entlastungs- und Wiederbelastungsast (grüne Linie). ... 72
Bild 4.13 Mohr-Coulombsche Fließfläche im Hauptspannungsraum. ... 74
Bild 4.14 Darstellung der Fließgrenze nach Mohr-Coulomb sowie einer assoziierten und nicht assoziierten Fließregel. ... 75
Bild 4.15 Beispiele für die Gestalt plastischer Potenziale in der Deviatorebene (ABAQUS (2010)). ... 76
Bild 4.16 Charakteristischer Spannungs-Dehnungsverlauf eines porösen Gesteins und zugehörige Entwicklung der Dilatanz (Mandl (1988)). ... 77
Bild 4.17 Spannungs-Dehnungsverhalten eines Materials unter Annahme von Verfestigung, Entfestigung und ideal plastischem Materialverhalten. ... 78
Bild 4.18 Möglichkeiten der Abbildung von entfestigendem Materialverhalten in der Mohr-Coulombschen Theorie. ... 78
Bild 4.19 Neutrale Entlastung und entfestigendes Materialverhalten in Folge einer kontinuierlichen Porendruckerhöhung nach Beginn der Plastifizierung. ... 79
Bild 4.20 Kopplungsschema einer hydromechanischen Einwegkopplung. ... 81
Bild 4.21 Kopplungsschema einer hydromechanischen Zweiwegkopplung. ... 82
Bild 5.1 Schematische Darstellung der Methodik des neuen semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes. ... 89
Bild 5.2 Exemplarische Diskretisierung einer Störung durch Bezugselemente. ... 94
Bild 5.3 Indifferenter Porendruckanstieg durch Bezug der Porenzahlentwicklung eines Bezugselements auf die Porendruckentwicklung desselben Bezugselements. ... 95

Bild 5.4 Schematische Darstellung der verwendeten Linearisierung und Parametrisierung einer $e(p_{ref})$-Funktion, die das hydromechanische Verhalten eines einzigen BZE der Störung repräsentiert. ... 96

Bild 5.5 Schematische Darstellung der Linearisierung und Parametrisierung einer normierten $(e/e_0)(p_{ref}/p_0)$-Funktion. ... 98

Bild 5.6 Prinzip der Approximation eines exemplarischen $e(p_{ref})$-Verlaufs einer Zweiweg- durch die korrigierte linearisierte $e(p_{ref})$-Funktion einer Einwegkopplung ... 100

Bild 6.1 Modell zur Simulation eines 1D Konsolidationsproblems ... 107

Bild 6.2 Schematische Darstellung eines CPE8RP Elementes. ... 108

Bild 6.3 Konsolidationskurve ABAQUS vs. analytische Lösung (lineare Auftragung). ... 109

Bild 6.4 Das Flussdiagramm veranschaulicht die Funktionsweise der numerischen Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in ABAQUS. Die Kopplungsparameter p_{ref} und $T_{j,i}$ sind grün hinterlegt. ... 113

Bild 6.5 Strukturgeologisches 3D-Modell des potenziellen Beeskow-Birkholz CO_2-Speicherstandortes inklusive der benachbarten Störungen Lausitzer Abbruch (Störung 1) und der Fürstenwalde-Gubener Störung (Störung 2, 3, 4) (Tillner (2015)) ... 116

Bild 6.6 Synthetisches Basismodell, auf dem die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Modellvariationen basieren. ... 118

Bild 6.7 Schematische Darstellung von Modellvariation 7 zeigt zwei Barrieregesteinsformationen und einen vertikalen Versatz von 60 m. ... 121

Bild 6.8 Größe des Berechnungsausschnitts (EANG (2014)). ... 122

Bild 6.9 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für die Modellvariationen M1, M2, M3, M4, M5 und M8 ... 124

Bild 6.10 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für die Modellvariationen M6 (links) und M7 (rechts). ... 125

Bild 6.11 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für Modellvariation 9. ... 126

Bild 7.1 Die schematische Darstellung von Modellvariation M7 zeigt die Lage der betrachteten Elemente zur Ermittlung der untersuchten Hebungen der GOK, der Porendruckänderungen, der q-p-Diagramme in den BZEs 5 und 7, der maximalen Relativverschiebung sowie der Entwicklung des Seitendruckbeiwerts im Bereich der größten beobachteten Horizontalverschiebung ... 137

Bild 7.2 M7: Grafische Darstellung der horizontalen Stauchungen des Hangenden und Liegenden im Nahbereich der Störung (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht). ... 140

Bild 7.3 M7: Grafische Darstellung der vertikalen Stauchungen des Hangenden und Liegenden im Nahbereich der Störung (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht). ... 140

Bild 7.4 M7: Die Grafische Darstellung zeigt eine sichelförmige Verteilung der horizontalen Verschiebungen des ableitenden Blocks. Das rote Kästchen markiert das Element mit der größten Deformation im ableitenden Keil (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht). ... 141

Bild 7.5 M7: Grafische Darstellung der vertikalen Verformungen des ableitenden Blocks (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht). ... 142

Bild 7.6 Das q-p-Diagramm zeigt das mechanische Verhalten der Störung während der Injektions- und Postinjektionsphase für die BZEs 5 und 7. 142

Bild 7.7 Die zeitliche Entwicklung des Verhältnisses aus effektiven Horizontal- und Vertikalspannungen im Bereich des Liegenden mit den größten Horizontalverformungen beschreibt die Änderungen des Spannungszustands im Nahbereich der Störung. 144

Bild 7.8 Die Darstellung der plastischen Dehnungen in horizontaler Richtung für eine Diskretisierung mit 3 (links), 5 (mittig) und 7 (rechts) Elementen zeigt eine qualitativ identische Verteilung von plastifizierten Bereichen (Skalierungsfaktor 500)..... 147

Bild 7.9 M1: Vergleich der zeitlichen Referenzporendrücke $p_{ref}(t)$ zur Quantifizierung des Einflusses der Störungsdiskretisierung. 148

Bild 7.10 M1: Vergleich der zeitlichen Porenzahlentwicklung e(t) in BZE 4 zur Quantifizierung des Einflusses der Störungsdiskretisierung. 148

Bild 7.11 M1P1: Einfluss des Reibungswinkels φ der Störung auf den $e(p_{ref})$-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelten Linien stellen lineare Approximationen der jeweiligen Kurvenabschnitte dar, wobei die schwarz gestrichelte Linie exemplarisch den bilinearen ansteigenden Ast für φ = 35° durch die Methode der kleinsten Quadrate linear annähert..... 149

Bild 7.12 M1P2: Einfluss des Initialspannungszustandes auf den $e(p_{ref})$-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelten Linien stellen lineare Approximationen der jeweiligen Kurvenabschnitte dar, wobei die schwarz gestrichelte Linie exemplarisch den bilinearen ansteigenden Ast für φ = 35° durch die Methode der kleinsten Quadrate linear annähert..... 151

Bild 7.13 M1P3: Einfluss des Dilatanzwinkels ψ der Störung auf den $e(p_{ref})$-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar..... 152

Bild 7.14 M1P6: Einfluss des Dilatanzwinkels ψ der Störung auf den $e(p_{ref})$-Kurvenverlauf von zweiweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar. 153

Bild 7.15 M1P7: Die $e(p_{ref})$-Kurvenverläufe von zweiweggekoppelten Simulationen zeigen invariantes Verhalten in Bezug auf den Sensitivitätsexponenten n. Hier exemplarisch für BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar..... 154

Bild 7.16 M1P5: Die $e(p_{ref})$-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für die BZEs 1 und 4 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5×10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar. 155

Bild 7.17 M1P5: Die $e(p_{ref})$-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 1 und 4 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5×10^{-15} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar. 156

Bild 7.18 M7P5: Die $e(p_{ref})$-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 ($R^2 \leq 0{,}95$) und 6 ($R^2 \geq 0{,}95$) zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5×10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate nur

eingeschränkt invariantes Verhalten. Die rot gestrichelten Linien stellen hierbei jeweils eine Linearisierung des ansteigen Astes der blauen und der schwarzen Graphen dar. 156

Bild 7.19 M7P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 und 6 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar. 157

Bild 7.20 M7P5: Die Abweichungen der zeitlichen Entwicklung des Porendrucks in den BZEs (Punkt 1 bis 9) verdeutlichen den großen Einfluss der initialen Permeabilität auf die Porendruckentwicklung. 158

Bild 7.21 M9P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 und 11 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung des ansteigen Astes dar. 159

Bild 7.22 M1P4: Eine Variation der initialen Störungspermeabilität k zeigt, dass sich die Neigungen α_1, α_2 und α_3 der e(p_{ref})-Kurven invariant bezüglich dieser Größe verhalten, wobei höhere Permeabilitäten ausschließlich zu einer Verschiebung dieser Kurven um $\Delta p_{kontr\ 1}$ auf der Abszisse führen. Exemplarisch dargestellt sind die Ergebnisse von BZE 1 und 4. 161

Bild 7.23 M1P8: Die grauen e(p_{ref})-Kurven veranschaulichen das nicht-lineare Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen für initiale Störungspermeabilitäten von a) k= 10^{-16} m², b) k= 10^{-15} m² und c) k= 10^{-14} m². Zwei mögliche Approximationen durch den semi-analytischen Ansatz unter Verwendung von Permeabilitätsmultiplikatoren in der Basissimulation zeigen für einen Faktor 2,5 die blau gestrichelten und für einen von 5 die rot gestrichelten Linien. Abweichend wurde die Approximation von c) durch die Basissimulation aus b) durchgeführt. 163

Bild 7.24 M1P9: Die grauen e(p_{ref})-Kurven veranschaulichen das nicht-lineare Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung einer initialen Permeabilität von 10^{-16} m². Zwei mögliche Approximationen durch den semi-analytischen Ansatz unter Verwendung von Permeabilitätsmultiplikatoren in der Basissimulation zeigen für einen Faktor 2,5 die blau gestrichelte und für einen von 5 die rot gestrichelte Linie. 164

Bild 7.25 Eine statische Umrechnung der Porenzahlentwicklung der zweiweggekoppelten Simulation mit höchster Injektionsrate (hellgrau) und der linearisierten Basissimulation mit einem Permeabilitätsfaktor von 5 (rot gestrichelte Linie) aus Bild 7.23 a) in die zugehörigen Permeabilitätsmultiplikatoren zeigt in erster Näherung die Abweichungen zwischen den approximierenden und zu approximierenden Funktionen. Dargestellt sind die Graphen von Bezugspunkt 1 und 4. 166

Bild 7.26 Verwendete Linearisierung (schwarze Linien) und Parametrisierung (Rotbuchstaben) der Basissimulation für M1 und k = 5 x 10^{-16} m². 175

Bild 7.27 M1: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. 177

Bild 7.28 M2: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. 177

Bild 7.29 M3: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet. ... 178

Bild 7.30 M4: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet. ... 179

Bild 7.31 M5: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet. ... 179

Bild 7.32 M6: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0027 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich für BZE 7 und BZE 8 geringe Abweichungen verzeichnet. ... 180

Bild 7.33 M8: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0027 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet. ... 181

Bild 7.34 M5: $k_{initial} = 10^{-16}$ m², 0,0032 kg/s/m: Ein Vergleich der Porenzahlentwicklungen in BZE 1, 5, 6 und 7 zeigt die Überschätzung der Porenzahl zu Beginn der Simulation und eine Unterschätzung zum Ende. ... 182

Bild 8.1 Der Modellauschnitt von Modellvariation M10 zeigt die betrachteten Gesteinsformationen sowie die definierten Homogenbereiche. Die BZEs (Punkt 1 bis 8) sind als schwarze Rechtecke und das Referenzelement p_{ref} als rotes Quadrat dargestellt. ... 189

Bild 8.2 Verwendete relative Permeabilitäts-Gassättigungskurven für die Fluidphase k_{rf} nach Mualem (1976) und van Genuchten (1980) sowie die Gasphase k_{rg} nach Corey (1954). ... 193

Bild 8.3 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,00153 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rote gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden Kopplungsmethoden von 5 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 5,7 erreicht. ... 196

Bild 8.4 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0019 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rote gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden

Kopplungsmethoden von 10 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 7,85 erreicht. 197

Bild 8.5 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rot gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden Kopplungsmethoden von 20 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 12,85 erreicht. 198

Bild 8.6 In Modellvariation M10 erreicht die CO_2-Fahne nach 6 Jahren Injektionsdauer mit einer Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m die Störung (Zweiwegkopplung)..... 199

Bild 8.7 Ausbreitung der CO_2-Fahne nach einer Injektionsdauer von 20 Jahren für M10 und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m (Zweiwegkopplung)..... 200

Bild 8.8 Ausbreitung der CO_2-Fahne nach 50 Jahren Simulationszeit für M10 und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m (Zweiwegkopplung)..... 200

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1 Geologische Schlüsselindikatoren für die Bewertung eines potenziellen CO_2-Speichers (Chadwick et al. (2008)). ... 10

Tabelle 2.2 Bedeutsame EGR-, EOR- und ECBM-Projekte (IPCC (2005)) ... 13

Tabelle 2.3 Bedeutsame reine CO_2-Speicherprojekte (IPCC (2005)). ... 13

Tabelle 3.1 Charakteristische Eigenschaften der Keuper-Formationen im Norddeutschen Becken (zusammengestellt aus Beutler und Nitsch (2005)). ... 31

Tabelle 6.1 Verwendete Parameter. ... 108

Tabelle 6.2 Mächtigkeit, Porosität und Permeabilität von vier Rerservoir- und drei Barrieregesteinsformationen (modifiziert nach Tillner (2015)). ... 117

Tabelle 6.3 Verwendete Variationen des Basismodells. ... 119

Tabelle 6.4 Verwendete Element- und Knotenanzahl. ... 123

Tabelle 6.5 Verwendete Basisparametrisierung von Modellvariation M1 bis M8. ... 127

Tabelle 7.1 Gesamtübersicht der in Untersuchungsreihe 1 durchgeführten Parameterstudien und Parametervariationen. ... 133

Tabelle 7.2 Gesamtübersicht der in Untersuchungsreihe 2 verwendeten Parameterstudien zur Validierung des semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes. ... 134

Tabelle 7.3 Inhaltliche Zuordnung der in Untersuchungsreihe 1 durchgeführten Simulationen. ... 135

Tabelle 7.4 Gegenüberstellung der Ergebnisse einer elasto-plastischen und einer rein elastischen Simulation. ... 138

Tabelle 7.5 Bestimmtheitsmaße R^2 einer linearen Approximation von zweiweggekoppelten $e(p_{ref})$-Funktionen durch die verwendete semi-analytische Parametrisierung unter Berücksichtigung von zwei unterschiedlichen Permeabilitätsmultiplikatoren der Basissimulation. Für BZE 1 und 4 aus M1P8 unter Berücksichtigung einer Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m². ... 165

Tabelle 7.6 Übersicht bezüglich des in den Parameterstudien jeweils variierten Parameters und des daraus resultierenden Einflusses auf invariantes Verhalten der semi-analytischen Parametrisierung. ... 167

Tabelle 7.7 Verwendete semi-analytische Parametrisierung für M1 und $k = 10^{-16}$ m². ... 176

Tabelle 7.8 Zusammenstellung der ermittelten absoluten und relativen Abweichungen des Referenzporendrucks p_{ref} zwischen zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen für $k = 10^{-16}$ m² nach 20 Jahren Injektionszeit. ... 181

Tabelle 7.9 Kumulation des am Auslass der Störung in den höhergelegenen GWL verdrängten Fluidvolumens für alle Modellvariationen, einer initialen Störungspermeabilität von 10^{-16} m² und der höchsten Injektionsrate ... 184

Tabelle 8.1 Vertikale Diskretisierung der Gesteinsformationen von Modellvariation M10. ... 190

Tabelle 8.2 Verwendete Material- und Fluidparameter von Modellvariation M10. ... 192

Tabelle 8.3 Gesamtübersicht der durchgeführten Simulationen und variierten Parameter zur Validierung von Hypothese 5. ... 194

Tabelle 8.4 Verwendete semi-analytische Parametrisierung für M10 und $k = 10^{-16}$ m². ... 195

Tabelle 8.5 Gegenüberstellung der maximalen Ausbreitung der CO_2-Fahne in der Störung und im Reservoir für die betrachteten sechs Szenarien von M10. 201

Tabelle 8.6 Eine Gegenüberstellung der für die zweiweg- und die semi-analytisch gekoppelten Simulationen benötigten Rechenzeit zeigt eine maximale Zeitersparnis um den Faktor 15,2. 202

Symbolverzeichnis

Lateinische Zeichen

c_M	[J/kg·K]	spezifische Wärmekapazität der Kornmatrix
c_V	[m²·s^{-1}]	Konsolidationsbeiwert
c	[MPa]	Kohäsion
D_{DL}	[m²·s^{-1}]	Diffusionskoeffizient
dt	[s]	Zeitinkrement
dε	[-]	Dehnungsrate
dV	[m³]	Volumenänderung
E	[MPa]	E-Modul
E_S	[MPa]	Steifemodul
e	[-]	Porenzahl
F^κ	[-]	Massen- beziehungsweise Wärmeflussterm
G	[MPa]	Schubmodul
g	[m·s^{-2}]	Erdbeschleunigung
h_c	[m]	kapillare Steighöhe
h_β^κ	[J·kg^{-1}]	spezifische Enthalpie der Komponente κ in Phase β
I_1	[-]	1. Hauptinvariante der Hauptspannungen
I_2	[-]	2. Hauptinvariante der Hauptspannungen
I_3	[-]	3. Hauptinvariante der Hauptspannungen
J_1	[-]	1. Grundinvariante des Deviators
J_2	[-]	2. Grundinvariante des Deviators
J_3	[-]	3. Grundinvariante des Deviators
K	[MPa]	Kompressionsmodul des Korngerüstes
K_S	[MPa]	Kompressionsmodul der Gesteinsmatrix
K_f	[MPa]	Kompressionsmodul des Fluids
k	[m²]	intrinsische Permeabilität
k_β	[m·s^{-1}]	hydraulische Leitfähigkeit der Phase β
$k_{r\beta}$	[-]	relative Permeabilität der Phase β

k_{rf}	[-]	relative Permeabilität der Fluidphase
k_{rg}	[-]	relative Permeabilität der Gasphase
M^{κ}	[-]	Massen- beziehungsweise Wärmeanreicherungsterm
M_W	[kg·mol^{-1}]	Molekulargewicht des Fluids
m	[kg]	Masse
m_{vG}	[-]	van Genuchten Parameter zur Beschreibung der Steigung der Kapillardruck-Sättigungskurve
n	[-]	Sensitivitätsexponent zur Aktualisierung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung
n, $\bar{n}$	[-]	Einheitsvektor
p	[MPa]	Porendruck
p_c	[MPa]	Kapillardruck
p_D	[MPa]	Dampfdruck
p_d	[MPa]	kapillarer Eindringdruck
p_g	[MPa]	Gesamtdruck der Gasphase
p_l	[MPa]	Gesamtdruck der Fluidphase
p_{ref}	[MPa]	Referenzporendruck
Q	[MPa]	plastisches Potenzial
q^{κ}	[-]	Quellen- beziehungsweise Senkenterm
R	[J·K^{-1}mol^{-1}]	ideale Gaskonstante
r_D	[-]	relative Luftfeuchtigkeit
S_β	[-]	Partialsättigung der Phase β
S_g	[-]	Sättigung der Gasphase
S_l	[-]	Sättigung der Fluidphase
$S_{r\beta}$	[-]	Residualsättigung der Phase β
$S_{e\beta}$	[-]	effektive Sättigung der Phase β
T	[°C, K]	Temperatur
T_V	[-]	dimensionslose Konsolidationszeit
U	[-]	Konsolidationsgrad
u_β	[J·kg^{-1}]	innere Energie der Phase β
V	[m³]	Volumen

V_p	[m³]	Porenvolumen
V_s	[m³]	Volumens der Gesteinsmatrix
v_f	[m·s^{-1}]	Filtergeschwindigkeit
X	[-]	Massenanteil
X_{sm}	[-]	Massenanteil NaCl

Griechische Zeichen

α_{Str}	[°]	Streichwinkel
α	[-]	Biot-Koeffizient
α_1	[°]	1. semi-analytischer Neigungswinkel
α_2	[°]	2. semi-analytischer Neigungswinkel
α_3	[°]	3. semi-analytischer Neigungswinkel
$p_{kontr\ 1}$	[MPa]	1. semi-analytischer Kontrollporendruck
$p_{kontr\ 2}$	[MPa]	2. semi-analytischer Kontrollporendruck
α_T	[-]	Wärmeausdehnungskoeffizient
α_{vG}	[Pa^{-1}]	van Genuchten Parameter zur Berücksichtigung des kapillaren Eindringdrucks
β_F	[°]	Fallwinkel
β	[-]	Phase
$\delta\varepsilon_{ij}^{pl}$	[-]	plastisches Dehnungsinkrement
$\delta\sigma_{ij}$	[-]	Spannungsinkrement
$\Delta\phi$	[-]	Änderung des Porenanteils/ der Porosität
Δp	[MPa]	Porendruckänderung
$\Delta\sigma$	[MPa]	Spannungsänderung
ΔV	[m³]	Volumenänderung
ε	[-]	Dehnung
ε_{ftp}	[-]	plastische Dehnungen infolge von Zugversagen
ε_{fsp}	[-]	plastische Dehnungen infolge von Scherversagen
ε_V	[-]	volumetrischer Dehnungsanteil
ε_q	[-]	Formänderungsanteil
ε_1	[-]	größte Hauptdehnung

ε_2	[-]	mittlere Hauptdehnung
ε_3	[-]	kleinste Hauptdehnung
φ	[°]	Reibungswinkel
ϕ	[-]	Porenanteil/ Porosität
Γ	[-]	Gebietsrand
γ	[kN·m^{-3}]	Wichte
γ_f	[kN·m^{-3}]	Fluidwichte
γ_d	[kN·m^{-3}]	Trockenwichte
κ	[-]	Komponente
λ	[-]	Steigung der $p_c(S_e)$-Kurve
μ_β	[Pa·s]	dynamische Viskosität der Phase β
ν	[-]	Poissonzahl
∇X_β^κ	[-]	Konzentrationsgradient
∇T	[-]	Temperaturgradient
ρ_f	[kg·m^{-3}	Dichte der Fluidphase
ρ_β	[kg·m^{-3}]	Dichte des Phase β
ρ_{CO2}	[kg · m^{-3}]	Dichte des gelösten CO_2
ρ_S	[kg · m^{-3}]	Kornrohdichte
σ	[MPa]	Spannung
σ`	[MPa]	effektive Spannung
σ_1	[MPa]	größte Hauptspannung
σ_2	[MPa]	mittlere Hauptspannung
σ_3	[MPa]	kleinste Hauptspannung
$\sigma_\perp$	[MPa]	Normalspannungen
$\sigma_\parallel$	[MPa]	Horizontalspannungen
σ_{ij}	[MPa]	Komponenten des Cauchyschen Spannungstensors
σ_{fg}	[MPa]	Grenzflächenspannung zwischen zwei Fluiden
σ_{sf}	[MPa]	Grenzflächenspannung zwischen Fluid und Feststoff
τ	[MPa]	Schubspannung

ϑ	[°]	Gleifugenwinkel
Ψ	[°]	Dilatanzwinkel
Θ	[°]	Lode-Winkel

Häufige Indizes

0	Ausgangszustand
diff	diffusiv
el	elastisch
g	Gas
ges	gesamt
i	zum Zeitpunkt i
i ± 1	der Zeitpunkt i folgende oder vorausgehende Zeitschritt
ini	initial
min	minimal
max	maximal
pl	plastisch
ref	Referenz

Häufige Abkürzungen

BECCS		Biomass energy with carbon capture and storage
BZE		Bezugselement
CCS		Carbon Capture and Storage
CO_2		Kohlenstoffdioxid
EuTRACE		European Transdisciplinary Assessment of Climate Engineering
$e(p_{ref})$	[%]	Funktion der Porenzahl in Abhängigkeit des Referenzporendrucks
GOK		Geländeoberkante
GWL		Grundwasserleiter
H_2O		reines Wasser
IPPC		Intergovernmental Panel on Climate Change
M		Modellvariation
NaCl		Natriumchlorid
P		Parameterstudie

Kurzfassung

Um der weltweiten Erderwärmung und dem dadurch verursachten Klimawandel zu begegnen, stellt **C**arbon **C**apture and **S**torage (CCS) eine vielversprechende Technologie dar, um den Zeitraum bis die weltweite Energiewirtschaft auf eine CO_2-neutrale Energieerzeugung umgestellt ist, zu überbrücken. Hierbei wird CO_2 aus den Rauchgasen von Kraftwerken abgeschieden, um anschließend langfristig in tiefliegenden geeigneten Formationen gespeichert zu werden. Damit CO_2-Speicherstandorte sicher betrieben werden können, sind unerwünschte Prozesse wie beispielsweise die Freisetzung von gespeichertem CO_2 in die Atmosphäre, die Migration von CO_2 oder Formationsfluid aus tieferen Grundwasserleitern in oberflächennahe Süßwasserhorizonte sowie die Reaktivierung von Störungen, zu vermeiden. Hierfür sind sowohl deterministische und probabilistische Risikoanalysen notwendig.

Da die Untersuchung des Prozesses einer hydraulischen Reaktivierung von geologischen Störungen rechenzeitintensive hydromechanisch gekoppelte numerische Simulationen erfordert, sind probabilistische Risikobetrachtungen, die eine Vielzahl von Realisierungen bedingen, nicht uneingeschränkt möglich. Für die Realisierung der Simulationen werden in der Regel sequenzielle Kopplungsmethoden verwendet. Hierbei wird der Mehrphasenfluidfluss-Prozess durch ein hydraulisches Programmsystem simuliert. Die hiermit ermittelte Porendruckverteilung wird anschließend nach jedem Simulationsschritt an ein geomechanisches Programmsystem übertragen, um einen hieraus resultierenden neuen Spannungs-Dehnungszustand zu ermitteln. Dieser wird in Form von aktualisierten Porositäten und Permeabilitäten an das hydraulische Programmsystem zurückgegeben, wobei der Datentransfer sowohl sequenziell iterativ oder nicht iterativ erfolgen kann.

Um eine signifikante Rechenzeitersparnis zu erzielen, wird im Rahmen dieser Arbeit eine Kopplungsmethode entwickelt, in der aus dem Mehrphasenfluidfluss-Prozess resultierende Porendruckverteilungen weiterhin von einem hydraulischen Programmsystem ermittelt werden. Die aus einer Störungsreaktivierung resultierende geomechanische Antwort wird hierbei jedoch für unterschiedliche Bezugselemente innerhalb der Störung durch semi-analytische Funktionen in Abhängigkeit eines im Schnittpunkt zwischen Speicherformation und Störung definierten Referenzporendrucks berechnet.

Die Parametrisierung des neuen Kopplungsansatzes erfolgt auf Basis einer hydromechanisch einweggekoppelten Einphasenfluidfluss-Simulation. Die mit dieser ermittelten Porenzahlentwicklungen einzelner Bezugselemente innerhalb der Störung werden auf einen einzigen im Schnittpunkt zwischen Speicherformation und Störung definierten Referenzporendrucks bezogen. Auf Basis der Ergebnisse einer Vielzahl von Parameterstudien, in denen hydromechanisch ein- und zweiweggekoppelte Simulationen unter Berücksichtigung von Einphasenfluidfluss mit dem

Programmsystem ABAQUS durchgeführt wurden, konnte eine Gesetzmäßigkeit bezüglich der charakteristischen Verläufe dieser $e(p_{ref})$-Funktionen ermittelt werden. Diese ermöglicht es den $e(p_{ref})$-Verlauf durch fünf Parameter mathematisch zu beschreiben.

Damit das hydromechanische Verhalten einer Störung durch die semi-analytische Parametrisierung zufriedenstellend beschrieben werden kann, müssen jedoch gewisse Kriterien erfüllt sein, die im Rahmen dieser Arbeit in fünf Hypothesen beschrieben wurden. Während Hypothese 1 bis 4 Invarianz der charakteristischen $e(p_{ref})$-Verläufe in Bezug auf Größen wie die Injektionsrate oder initiale Störungspermeabilität postulieren, besagt Hypothese 5, dass während des CO_2-Injektionsprozesses das hydraulische Verhalten geologischer Störungen aufgrund von Rückhaltemechanismen vorwiegend durch die hydraulischen Eigenschaften des Formationsfluids bestimmt wird.

Die Durchführung von zwei Untersuchungsreihen, die jeweils aus einer Vielzahl von Parameterstudien bestehen, ermöglichte es unter Verwendung des Programmsystems ABAQUS die Hypothesen 1 bis 4 unter Annahme von Einphasenfluidfluss zu validieren. In diesem Zusammenhang wurden neun synthetische stratigraphisch und strukturgeologisch unterschiedliche Modellvariationen, vier unterschiedliche Injektionsraten sowie unterschiedliche initiale Störungspermeabilitäten berücksichtigt.

Für die numerische Implementierung des semi-analytischen Ansatzes in ABAQUS wurde eine neue Arbeitsumgebung entwickelt. Diese ermöglicht es, das konstitutive Verhalten einzelner Elemente in FE-Simulationen diskret durch analytische Ansätze zu beschreiben. Auf Basis von Zwischenergebnissen der numerischen Simulation können hierdurch einzelne Randbedingungen oder Materialparameter sukzessive nach jedem Simulationsschritt aktualisiert werden. Prinzipiell lassen sich auf diese Art und Weise sämtliche Materialparameter, die in ABAQUS in Abhängigkeit einer Feldvariablen definiert werden können sowie Randbedingungen wie beispielsweise die Temperatur, durch die neu entwickelte Arbeitsumgebung während einer FE-Simulation von außen steuern. Hierdurch ist diese Arbeitsumgebung auch für andere Fragestellungen, die eine komplexe Kopplung von analytischen und numerischen Methoden erfordern, adaptierbar.

Abschließend wurde Hypothese 5 unter Verwendung der Programmsysteme TOUGH2-MP/ECO_2N und $FLAC^{3D}$ für einem Anwendungsfall unter Berücksichtigung von Mehrphasenfluidfluss validiert. Hierzu wurde die Injektion von CO_2 in eine tiefliegende Speicherformation unter Berücksichtigung von drei unterschiedlichen Injektionsraten simuliert. Hierbei wurde durch Verwendung des neu entwickelten semi-analytischen Kopplungsansatzes gegenüber einer sequenziell nicht iterativen Kopplung eine Rechenzeitersparnis um den Faktor 15 erzielt.

Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen, einen neuen semi-analytischen Kopplungsansatz zur Untersuchung des hydromechanischen Verhaltens von geologischen Störungen, die durch induzierte Porendruckerhöhungen hydraulisch reaktiviert wurden, zu validieren. Da in diesem Zusammenhang eine exponentielle Permeabilitäts-Porositätsbeziehung verwendet wurde, konnte hierbei ein hohes Maß an nicht-linearen hydromechanischen Effekten berücksichtigt werden. Aufgrund der erzielten signifikanten Rechenzeitersparnis können mit diesem Ansatz zukünftig probabilistische Risikoanalysen durchgeführt.

Abstract

Carbon Capture and Storage (CCS) is a promising technology to reduce the anthropogenic impact on global warming and climate change. It provides the possibility to inject the CO_2 immission of, i.e., coal fired power plants into the geological subsurface and to retain it for thousands of years. Such a storage is necessary until the worldwide electricity industry uses renewable resources to produce electric power.

Estimating the efficiency and sustainability of geological subsurface utilization, i.e., Carbon Capture and Storage (CCS) requires an integrated risk assessment approach, considering the occurring coupled processes, beside others, the potential reactivation of existing faults. In this context, hydraulic and mechanical parameter uncertainties as well as different injection rates have to be considered and quantified in a probabilistic manner to elaborate reliable environmental impact assessments. Consequently, the required sensitivity analyses consume significant computational time due to the high number of realizations that have to be carried out.

For this purpose, iterative and non iterative two-way coupled simulations are state of the art. Using this type of coupling, the pore pressure distribution induced by CO_2 injection into saline reservoirs is determined by a multiphase fluid flow simulator and transferred afterwards to a second simulator, which estimates the corresponding geomechanical response, i.e., stresses and strains. Based on these results, the porositiy and permeability of certain elements are updated. After transferring these parameters back to the multiphase fluid flow simulator, the next run starts. Due to the high computational costs of two-way coupled simulations in large-scale 3D multiphase fluid flow systems, these are not applicable for the purpose of uncertainty and risk assessments.

Hence, an innovative semi-analytical hydromechanical coupling approach for hydraulic fault reactivation will be introduced in this manuscript. This approach determines the void ratio evolution in representative fault elements using one preliminary one-way coupled base simulation, considering one model geometry and one set of hydromechanical parameters. The void ratio development is then approximated and related to one reference pressure at the fault base to get $e(p_{ref})$ functions. The parametrization of the resulting functions is then directly implemented into a multiphase fluid flow simulator to carry out the semi-analytical coupling for the simulation of hydromechanical processes. Hereby, the iterative parameter exchange between the multiphase and mechanical simulators is omitted, since the update of porosity and permeability is controlled by one reference pore pressure at the fault base. The suggested procedure is capable to reduce the computational time required by coupled hydromechanical simulations of a multitude of injection rates by a factor of up to 15.

A multitude of hydromechanically one- and two-way coupled single-phase fluid flow simulations were carried out with ABAQUS, to find a principle describing the characteristic run of $e(p_{ref})$ functions. Hence, the hydromechanical behavior of geological faults represented by the run of these curves can be mathematically described by five semi-analytical parameters.

For that purpose, some criteria, i.e., the invariant behavior of the semi-analytical parameters with respect to the injection rate and the initial fault permeability are formulated by four hypotheses. During the process of CO_2 injection, one further hypothesis additionally assumes the hydraulic behavior of faults to be influenced mainly by the fluid properties of brine as a consequence of trapping mechanisms retaining the CO_2 plume to migrate towards faults.

Based on extensive numerical investigations executed with ABAQUS comprising a multitude of parametric studies the first four hypotheses could be validated for the assumption of single-phase fluid flow. In this context, nine different synthetic geological models, four varying injection rates and many different initial fault permeabilities were investigated.

For the numerical implementation of the semi-analytical coupling approach into ABAQUS a new frame work was implemented, to describe the constitutional behavior of certain elements by discrete analytical approaches. Hence, intermediate results of each simulation step can be used to update boundary conditions and material properties by an analytical approach.

Finally, hypothesis five was validated by the execution of a case study under consideration of multiphase fluid flow simulated by the TOUGH2-MP/ECO2N und FLAC3D simulators. Therefore, the injection of CO_2 into a saline aquifer considering three different injection rates was investigated. A comparison between results of two-way and semi analytically coupled simulations shows the validity of the new computationally efficient approach.

The results of this scientific work point out that the semi-analytical coupling approach is capable to investigate the hydromechanical behavior of hydraulically reactivated geological faults induced by CO_2 injection into saline aquifers. In advance, the suggested procedure reduces the computational time required by coupled hydromechanical simulations of a multitude of injection rates by a factor of up to 15.

As a power law porosity-permeability relationship was used for the numerical simulations, a high degree of non-linear hydromechanical effects could be considered. Due to the benefit of low computational time, the new approach is capable to be used for probabilistic risk assessments.

1 Einleitung

Die Kohlenstoffdioxid-Konzentration der Atmosphäre hat sich in den letzten zwei Jahrhunderten von 0,028 % auf etwa 0,04 % erhöht. Neben anderen Treibhausgasen, wie beispielsweise Methan, Lachgas und Fluorkohlenwasserstoffe wird CO_2 als Hauptursache der globalen Erderwärmung angesehen. Eine Akkumulation dieser Gase in der Atmosphäre verhält sich durchlässig für die kurzwellige Strahlung des Sonnenlichts. Ein Teil dieser kurzwelligen Strahlung wird von der Erdoberfläche absorbiert und als langwellige Strahlung reflektiert. Dadurch, dass eine solche Akkumulation jedoch undurchlässig für langwellige Strahlung ist, führt ein Anstieg der Konzentration von Klimagasen folglich zu einer Erhöhung der thermischen Energie in der Erdatmosphäre, was wiederum eine globale Erderwärmung zur Folge hat. Laut Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC (2013a)) herrscht in der Wissenschaft mittlerweile großer Konsens, dass der Klimawandel durch die Verbrennung von fossilen Energieträgern vom Menschen verursacht wird.

Hierdurch hat sich laut IPCC (2013b) die mittlere globale Temperatur in den letzten beiden Jahrhunderten gegenüber dem vorindustriellen Niveau um 0,8 °C erhöht. Der aktuelle IPCC Klimabericht (IPCC (2014)) präsentiert Ergebnisse von Klimamodellen, mit denen mögliche Auswirkungen von unterschiedlichen Zukunftsszenarien auf die prognostizierte Erderwärmung bis zum Ende des 21. Jahrhunderts (durchschnittliches Mittel 2081-2100) im Vergleich zur aktuellen mittleren Temperatur (durchschnittliches Mittel 1986-2005) simuliert wurden. Bei einer stringenten Verringerung des weltweiten CO_2-Ausstoßes ist ein zusätzlicher Temperaturanstieg zwischen 0,3 bis 1,7 °C wahrscheinlich, wohingegen eine Erwärmung von 2,6 bis 4,8 °C im Fall einer weiterhin exzessiven Verbrennung von fossilen Energieträgern zu erwarten ist.

Die ökologischen Folgen einer weiteren Erderwärmung äußern sich in einem massiven Wandel des heutigen Klimas, der sich beispielsweise durch ein weiteres Abschmelzen der Gletscher und einem damit verbundenen Anstieg der Weltmeere, weniger Niederschlag in bereits heute trockenen Weltregionen sowie eine Erhöhung der mittleren Niederschlagsmenge in feuchten Gegenden äußern wird. Da mit einer Intensivierung auftretender Unwetter zu rechnen ist, kann sich die Versorgungslage der Bevölkerung mit Grundnahrungsmitteln in vielen Regionen der Welt verschlechtern, wodurch sich die Gefahr eines Ausbrechens von Krisen und Kriegen erhöht.

Auf der UN-Klimakonferenz 2015 in Paris haben sich die Teilnehmerstaaten auf ein Klimaabkommen mit dem Ziel geeinigt, die globale Erderwärmung bis zum Ende des 21. Jahrhunderts auf deutlich unter 2 °C im Vergleich zum vorindustriellen Niveau zu begrenzen. Damit dieses Ziel erreicht wird, müssen sich laut IPCC (2014) die weltweiten CO_2-Emissionen bis 2050 um mindestens 50 % gegenüber 2010 verringern, um im Verlauf der zweiten Hälfte des Jahrhunderts gegen Null zu tendieren und bis zum Ende des 21. Jahrhunderts sogar negative Werte anzunehmen.

Hierzu muss der CO_2-Gehalt der Atmosphäre durch technische Maßnahmen aktiv verringert werden.

Vielversprechende Maßnahmen liegen in einer Steigerung der Energieeffizienz durch technischen Fortschritt, einer massiven Verbesserung der Dämmung von Gebäuden und einem Ausbau der erneuerbaren Energien. Trotz des derzeitigen massiven weltweiten Ausbaus der erneuerbaren Energien, betrug der Anteil von fossilen Energieträgern am weltweiten Primärenergiebedarf im Jahr 2013 immer noch etwa 87 % (BGR (2014)). Vor dem Hintergrund gelten die **C**lean **C**oal **T**echnologies (CCT) als Brückentechnologie für den Zeitraum, bis die weltweite Energiewirtschaft vollständig auf eine CO_2-neutrale Energieerzeugung umgestellt ist (IPCC (2005)). Neben einer Steigerung der Energieeffizienz von Kohlekraftwerken stellt **C**arbon **C**apture and **S**torage (CCS) eine wesentliche Stütze dieser Technologien dar. Mittels CCS wird CO_2 aus den Rauchgasen von Kraftwerken abgeschieden und in geeigneten geologischen Formationen mit hohen Permeabilitäten und Porositäten, wie später in Kapitel 2.2 detailliert beschrieben, langfristig gespeichert.

Alle Zukunftsszenarien des IPCC (2014), mit denen das „Zwei-Grad-Ziel“ erreicht werden kann, berücksichtigen in den entsprechenden Zukunftsszenarien CCS und **B**io **E**nergy with **C**arbon **C**apture and **S**torage (BECCS). Internationale Studien (IEA (2011), IEAGHG (2009), IEAGHG (2011), IPCC (2014)) legen nahe, dass sich durch die Verstromung von Biomasse und anschließender geologischer Speicherung des hierbei anfallenden CO_2 (BECCS) negative CO_2-Netto-Emissionsraten erreichen lassen.

1.1. Motivation

Um die Effizienz, die Nachhaltigkeit und die Sicherheit einer potenziellen Nutzung des tiefen geologischen Untergrundes zur geologischen Speicherung von CO_2 ermitteln und bewerten zu können, sind Risikoanalysen erforderlich. Hierbei sind generell alle potenziell auftretenden Prozesse, wie beispielsweise die hydraulische Reaktivierung von geologischen Störungen zu berücksichtigen. In diesem Zusammenhang sind eine Bandbreite von Parameterunsicherheiten und CO_2-Injektionsraten zu untersuchen, um potenzielle Schadensereignisse zu identifizieren und deren Risiko realistisch einschätzen zu können. Hierfür kommen sowohl deterministische als auch probabilistische Ansätze zum Einsatz.

Deterministische Ansätze verwenden in der Regel Ergebnisse von numerischen Simulationen, die eine Vielzahl von komplexen Wechselwirkungen zwischen den bei der geologischen CO_2-Speicherung auftretenden chemischen, hydraulischen, mechanischen und thermischen Prozessen berücksichtigen. Dabei kommen monolithisch oder sequenziell gekoppelte Simulationen zum Einsatz. Sowohl aus Gründen der Kopplungskomplexität als auch aufgrund der Modellgröße, sind die dazu erforderlichen Simulationen in der Regel extrem rechenzeitintensiv, weshalb nur eine beschränkte Anzahl an Realisierungen möglich ist. Aufgrund dessen werden die betrachteten Parameter in der Regel sehr konservativ angesetzt (IPCC (2005)). Wegen der geringen Anzahl an

Stichproben ist eine aussagekräftige Wahrscheinlichkeitsverteilung der einzelnen Parameterkombinationen nur eingeschränkt möglich, was wiederum dazu führt, dass das tatsächliche Risiko nur schwer einzuschätzen ist.

Probabilistische Ansätze hingegen betrachten eine hohe Anzahl von Realisierungen, wodurch die Wahrscheinlichkeitsverteilung der betrachteten Parameterkombinationen statistisch fundiert ist. Eine dafür erforderliche hohe Anzahl an untersuchten Szenarien ist jedoch nur durch erhebliche Vereinfachungen des Modells, die in einer Reduktion der gekoppelt betrachteten Prozesse und/ oder einer verringerten Kopplungsqualität erzielt werden kann, zu erreichen. Häufig kommen auch ausschließlich analytische Methoden zum Einsatz.

Eine hydraulische Reaktivierung von geologischen Störungen kann einerseits eine hydraulische Verbindung zwischen unterschiedlichen Grundwasserhorizonten und andererseits induzierte Seismizität (Mikroerdbeben) bewirken. Um ungünstige Parameterkombinationen und Injektionsraten, die eine Gefährdung darstellen, zu identifizieren und das damit einhergehende Schadenspotenzial zu quantifizieren, ist die Verwendung von rechenzeitintensiven hydromechanisch gekoppelten Simulationen unerlässlich. Bisher ist es folglich nur möglich, das mit diesem Prozess verbundene Risiko ausschließlich deterministisch zu betrachten.

1.2. Zielsetzung und Gliederung der Arbeit

Um die erforderliche Rechenzeit für numerische Prozesssimulationen signifikant zu reduzieren und somit einer probabilistischen Risikoanalyse zugänglich zu machen, wird im Rahmen dieser Arbeit eine neue hydromechanische Kopplungsmethode auf Basis eines semi-analytischen Ansatzes entwickelt. Dieser ermöglicht es, für eine Bandbreite von Injektionsraten und einzelnen Parameterkombinationen innerhalb einer signifikant reduzierten Rechenzeit, das Eintreten einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen und ein zugehöriges Schadenspotenzial zu ermitteln.

Im Folgenden wird das Prinzip der CCS-Technologie zunächst in Kapitel 2 beschrieben. Hierbei wird ein Überblick über den Prozess der Abscheidung und des Transportes, potenzielle Speichermöglichkeiten, Anforderungen an potenzielle Speicherstandorte und Rückhaltemechanismen (Trapping mechanisms) gegeben. Abschließend werden Chancen und Risiken, die mit der Anwendung verbunden sind, aufgezeigt und unterschiedliche Methoden der Risikoanalyse erläutert.

In Kapitel 3 werden stratigraphische und strukturgeologische Aspekte, wie die Entstehung und die Beschaffenheit von Sedimentbecken und Störungen thematisiert. In diesem Zusammenhang werden charakteristische Bedingungen am Beispiel des Norddeutschen Beckens herausgearbeitet, um eine Grundlage für die Erstellung von synthetischen Modellstandorten, die in einem späteren Teil dieser Arbeit für die Validierung des neuen Kopplungsansatzes genutzt werden, zu erarbeiten.

Kapitel 4 liefert die theoretischen Grundlagen, mit denen die unterschiedlichen hydraulischen (Kapitel 4.2) und mechanischen Prozesse (Kapitel 4.3), die bei der Injektion von CO_2 in salzwasserführende Grundwasserleiter (GWL) auftreten, mathematisch beschrieben und modelliert werden können. In diesem Zusammenhang wird zu Beginn in Kapitel 4.1 eine detaillierte Beschreibung der auftretenden Prozesse, bei denen CO_2 Formationsfluide (Sole) in andere Bereiche

des Reservoirs oder über Störungen in höher gelegene Grundwasserleiter verdrängt werden, präsentiert. Der Fokus liegt dabei auf dem Prozess der hydraulischen Reaktivierung von Störungen. In diesem Zusammenhang werden Ergebnisse anderer wissenschaftlicher Arbeiten diskutiert, um eine Basis für die Erarbeitung des semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes in Kapitel 5 bereitzustellen. Kapitel 4.4 erläutert bereits existierende hydromechanische Kopplungsansätze. Das Kapitel endet mit einer Zusammenfassung, in der zudem der aktuelle Forschungsbedarf aufgezeigt wird.

Aufbauend auf den theoretischen Grundlagen und der Prozessbeschreibung aus Kapitel 4 wird der neue hydromechanische Kopplungsansatz in Kapitel 5 formuliert. Hierbei werden konzeptionelle Annahmen bezüglich des auftretenden Fluidflusses und des hydromechanischen Verhaltens von Störungen in Form von fünf Hypothesen definiert. Abschließend wird eine Methodik zur späteren Validierung dieser Annahmen und der semi-analytischen Kopplung definiert.

In Kapitel 6 werden auf Basis der Ergebnisse aus Kapitel 3 synthetische geologische Modelle definiert, die in den Kapiteln 7 und 8 verwendet werden. Zudem wird das hierzu verwendete Programmsystem ABAQUS und die numerische Implementierung des neuen Ansatzes beschrieben. Hierzu wird im Rahmen dieser Arbeit eine neue Arbeitsumgebung zur Aktualisierung von lokalen Permeabilitäten durch ein externes Programmsystems entwickelt und umgesetzt.

In Kapitel 7 erfolgt die generelle Validierung des neuen Kopplungsansatzes sowie die diesem zugrunde liegenden Hypothesen für den Fall einer ausschließlichen Durchströmung der Störung mit Formationsfluid unter Verwendung des Programmsystems ABAQUS. Die Validierung erfolgt für eine Vielzahl von synthetischen geologischen Modellen unter Berücksichtigung von unterschiedlichen Injektionsraten.

Die Validierung des neuen Ansatzes für den Fall eines kombinierten Fluidflusses von CO_2 und Formationsfluid durch eine hydraulisch reaktivierte Störung unter Verwendung der Programmsysteme TOUGH2-MP/ECO$_2$N und FLAC^{3D} erfolgt in Kapitel 8. Hierzu wird der neue Kopplungsansatz programmtechnisch durch Verwendung der Programmiersprache FISH in die Schnittstelle zwischen beiden Programmen implementiert. In diesem Zusammenhang wird die Leistungsfähigkeit des neuen Ansatzes in Bezug auf die Ersparnis an Rechenzeit ermittelt.

Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse sowie einem Ausblick auf den weiteren Forschungsbedarf, der sich aus den Erkenntnissen dieser Arbeit ergibt.

2 Geologische Speicherung von Kohlenstoffdioxid

Das folgende Kapitel liefert einen kurzen Einstieg in die Thematik **C**arbon **C**apture and **S**torage (CCS). Zu Beginn wird eine generelle Beschreibung der Technologie gegeben. Hieran schließt sich eine explizite Beschreibung der Speicherung von CO_2 in salzwasserführenden Grundwasserleitern an, bei der die wirkenden Rückhaltemechanismen (trapping mechanisms), die Schlüsselindikatoren für die Bewertung eines potenziellen CO_2-Speichers und die Verbreitung geeigneter Speicher-Barrierekomplexe in Deutschland im Fokus stehen. Anschließend liefert eine Literaturrecherche einen Überblick zu bisherigen weltweiten praktischen Anwendungen von CCS. Zudem werden Chancen und Risiken dieser Technologie beschrieben, wobei insbesondere unterschiedliche Ansätze für Risikoanalysen im Vordergrund stehen. Abschließend wird die Notwendigkeit des aktuellen Forschungsbedarfs formuliert.

2.1. Beschreibung der Carbon Capture and Storage Technologie (CCS)

Die Abscheidung und Speicherung des klimaschädlichen Treibhausgases CO_2 aus den Rauchgasen von Kraftwerken (CCS) gilt als eine vielversprechende Technologie, um den anthropogenen Anteil am weltweiten CO_2-Ausstoß zu reduzieren und somit dem Klimawandel entgegenzuwirken. In einem ersten Schritt wird hierbei das bei der Verstromung von fossilen Energieträgern anfallende CO_2 aus dem Rauchgas abgeschieden. Dies kann mithilfe von drei unterschiedlichen Verfahren vor der Verbrennung (Pre-Combustion), während der Verbrennung (Oxyfuel-Verfahren) oder nach der Verbrennung (Post-Combustion) erfolgen (IPCC (2005), EnergieAgentur.NRW (2009)).

Bei der Vergasung von festen Brennstoffen bei hoher Temperatur in Kraftwerken (**I**ntegrated **G**asification **C**ombined **C**ycle (IGCC)) wird beispielweise Kohle in ein sogenanntes Synthesegas (Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff) umgewandelt. Anschließend wird das CO durch Zugabe von Wasserdampf zu CO_2 oxidiert, wobei zusätzlicher Wasserstoff entsteht. Das CO_2 wird anschließend direkt vor der Verbrennung abgeschieden und der Wasserstoff in Gas- und Dampfturbinen verstromt. Mithilfe dieses Verfahrens lassen sich potenziell auch Biomasse, Abfälle und Klärschlämme verstromen (BECCS).

Beim Oxyfuel-Verfahren entsteht durch eine Erhöhung des Sauerstoffanteils im Brennraum bei der direkten Verbrennung von Kohle weniger Rauchgas als bei der herkömmlichen Verbrennung. Das Rauchgas setzt sich hauptsächlich aus Wasserdampf und CO_2 zusammen. Durch Kondensation des Rauchgases wird H_2O entfernt und das weiterhin gasförmige CO_2 kann anschließend direkt abgeschieden werden.

Bei der Abscheidung nach der Verbrennung, kommt die sogenannte Gaswäsche zum Einsatz. Hierbei wird das entstandene Rauchgas durch eine Waschflüssigkeit geleitet, wobei diese chemisch mit dem CO_2 reagiert und es bindet. Durch anschließendes Erhitzen der Waschflüssigkeit gast das CO_2 wieder aus und kann aufgefangen werden. Bei allen drei Verfahren wird zusätzliche Energie benötigt, was wiederum den Wirkungsgrad der Kraftwerke reduziert. Nach bisherigem Kenntnisstand können 80 – 90 % des bei der Verbrennung fossiler Brennstoffe anfallenden CO_2 abgeschieden werden. Dies verringert jedoch den Wirkungsgrad der Kraftwerke um 8 - 12 Prozentpunkte (EnergieAgentur.NRW (2009)).

Nach erfolgter Abscheidung wird das CO_2 unter hohem Druck (10 bis 80 MPa) flüssig oder unter atmosphärischem Druck gasförmig in der Regel über Transportleitungen zum Speicherort befördert. Denkbare, jedoch ökonomisch weniger sinnvolle Alternativen, stellen der Transport von verflüssigtem CO_2 per Schiff, Bahn oder LKW dar (IPCC (2005)). Die Prozesskette des CCS-Verfahrens ist in Bild 2.1 exemplarisch dargestellt.

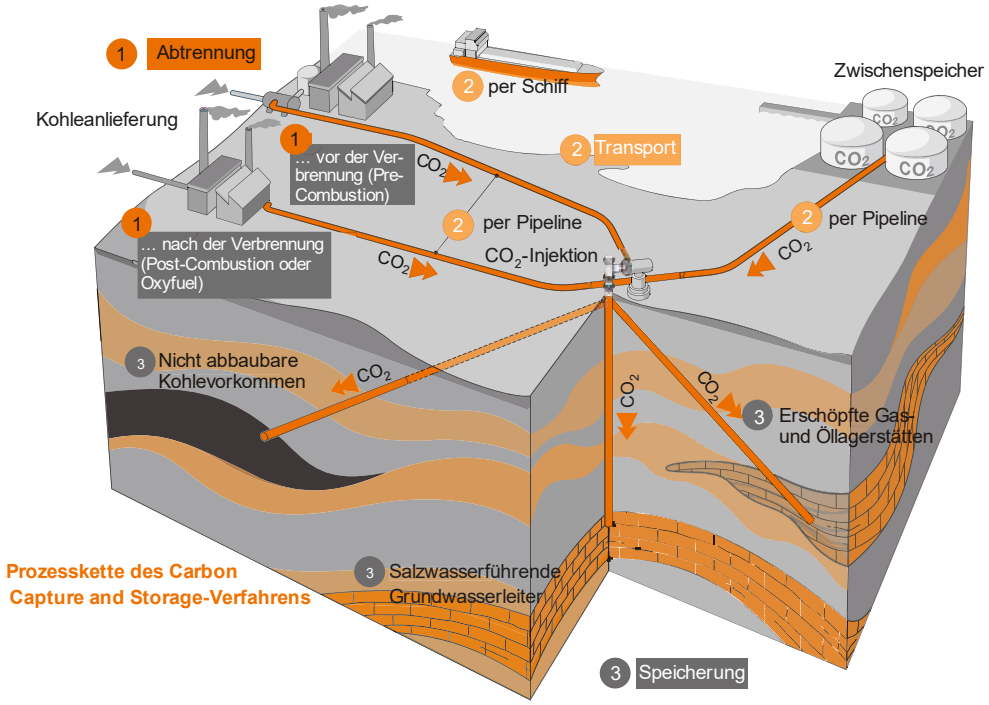


Bild 2.1 Prozesskette des Carbon Capture and Storage-Verfahrens (EnergieAgentur.NRW (2009)). Die bereits diskutierten Prozesse Abscheidung und Transport sind mit der Zahl 1 beziehungsweise 2 gekennzeichnet.

Potenzielle Speichermöglichkeiten (siehe mit 3 gekennzeichnete graue Punkte in Bild 2.1) von CO_2 stellen laut Holloway (2005) und dem Bericht des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC (2005)) erschöpfte Erdgas- und Erdöllagerstätten, nicht abbaubare Kohlevorkommen, die Tiefen der Ozeane und salzwasserführenden Grundwasserleitern dar. Hierbei kommt den salzwasserführenden GWLs, bei denen es sich um poröse Formationen im geologischen Untergrund handelt, aufgrund ihrer weltweiten Verbreitung und ihres hohen potenziellen

Speichervolumens eine bedeutende Rolle zu. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich ausschließlich auf die CO_2-Speicherung in salzwasserführenden GWLs.

2.2. Speicherung von CO_2 in salzwasserführenden Grundwasserleitern

Bei der Speicherung von CO_2 in salzwasserführenden GWLs wird über eine oder mehrere Injektionssonden CO_2 in geeignete Speicherkomplexe injiziert. Zur Steigerung der Injektionsmenge in Reservoiren von geringer Mächtigkeit, kommen mehrere hundert Meter lange Horizontalbohrungen zum Einsatz. Bild 2.2 zeigt eine schematische Darstellung eines potenziellen Speicherstandortes.

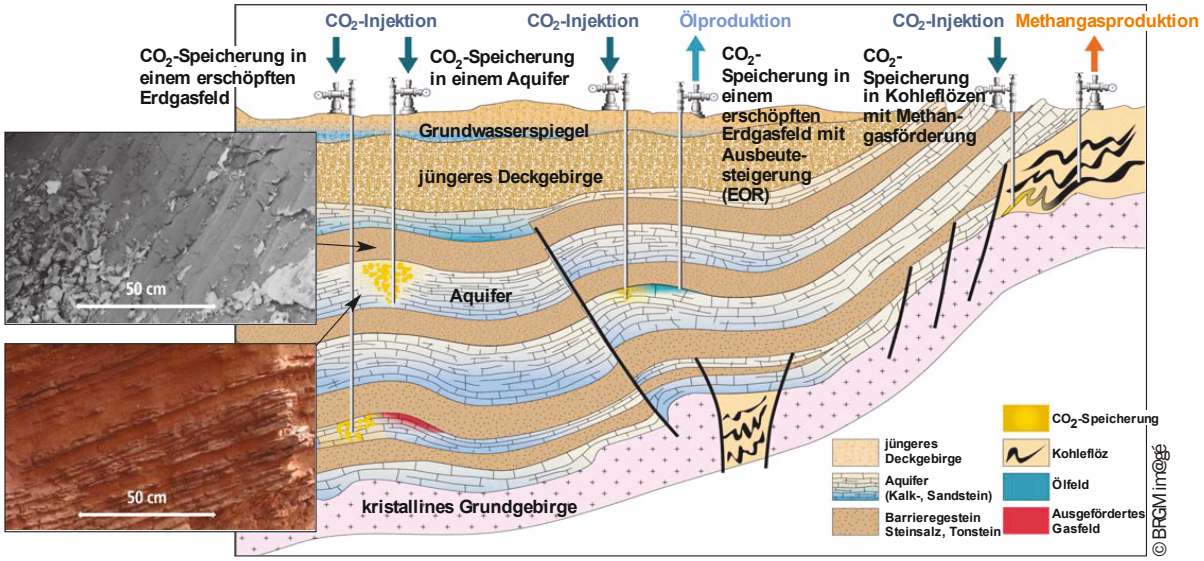


Bild 2.2 Schematische Darstellung eines geeigneten Speicher-Barrierekomplexes für die Speicherung von CO_2 in tief liegenden geologischen Formationen (Tonstein oberes linkes Bild; Sandstein unteres linkes Bild). Hier exemplarisch für die Speicherung in salzwasserführenden GWLs, erschöpften Erdgas- und Erdölfeldern und in nicht abbauwürdigen Kohleflözen (CO_2GeoNet (2009)).

Die Darstellung in Bild 2.2 zeigt eine Wechselfolge von Gesteinsformationen mit relativ hoher (Sandstein) und geringer (Tonstein) Porosität und Permeabilität, die entsprechend als Reservoir- oder als Barriereformation bezeichnet werden. Das Porensystem dieser Formationen ist mit salzhaltigem Formationsfluid gefüllt. Wird CO_2 in einen salzwasserführenden GWL injiziert, verdrängt es das vorhandene Formationsfluid und füllt einen Teil des Porenraums. Infolge des hierbei auftretenden Volumenstroms kommt es zu einem Porendruckanstieg, dessen Höhe im Wesentlichen von der Permeabilität, der Temperatur und der Mächtigkeit des Speichergesteins sowie den hydraulischen Fluidparametern, Dichte, dynamische Viskosität und relative Permeabilität des verdrängten Formationsfluids und des CO_2 bestimmt wird. Dadurch, dass sich Formationsfluid und CO_2 nicht miteinander mischen, treten Migrationsprozesse von zwei unterschiedlichen

Fluidphasen auf. Die theoretischen Konzeptionen, die einer numerischen Modellierung eines solchen Mehrphasenfluidflusses zugrunde liegen, werden ausführlich in Kapitel 4.2 erläutert.

Damit ein Speicherstandort wirtschaftlich betrieben werden kann, muss das Reservoir gewisse Druck- und Temperaturbedingungen, wie sie etwa in einer Tiefe größer als 800 m vorliegen, aufweisen. Der kritische Punkt von CO_2 im Phasendiagramm liegt bei einem Druck von 73,8 bar und einer Temperatur von 31,0 °C. Für Druck- und Temperaturzustände, die oberhalb dieses Punktes liegen, nimmt CO_2 einen überkritischen Zustand an, in dem es eine Dichte zwischen 500 und 800 kg/m³ aufweist. Beispielsweise nimmt eine Tonne CO_2 bei einer Dichte von 700 kg/m³ ein Volumen von 1,43 m³ ein, was sich unter Annahme einer Reservoir-Porosität von 30 % und einer CO_2-Sättigung von 80 % in weniger als 6 m³ Gestein speichern lässt, während dieselbe Masse bei 0 °C unter atmosphärischen Druck ein Volumen von 509 m³ einnehmen würde (Holloway (2005)).

Die Ausbreitung der CO_2-Fahne im Reservoir erfolgt nach der Injektion durch Fluidfluss infolge injektionsbedingter oder natürlicher hydraulischer Gradienten, des Auftriebs infolge von Dichteunterschieden, Diffusion und Dispersion infolge von Konzentrationsgradienten und in gelöster Form durch die Fließgeschwindigkeit des Formationsfluids.

2.2.1. Rückhaltemechanismen

Die erfolgreiche langfristige Speicherung von CO_2 (> 10.000 Jahre) hängt im Wesentlichen von den vier, in Bild 2.3 dargestellten Rückhaltemechanismen (Trapping mechanisms) ab.

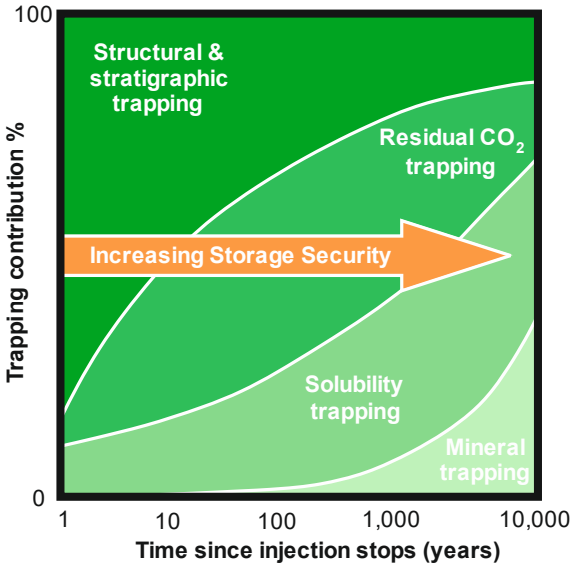


Bild 2.3 Darstellung der zeitlichen Abfolge von physikalischen und chemischen Rückhaltemechanismen (Trapping mechanisms), die eine sichere langfristige CO_2-Speicherung bewirken (IPCC (2005)).

Dadurch, dass das injizierte CO_2 eine geringere Dichte als das verdrängte Fluid besitzt, steigt es nach oben auf. Dieser Prozess wird durch eine geologische Barriere in Form einer gering permeablen überlagernden Gesteinsformation beendet. Die dauerhafte Wirksamkeit dieser

strukturellen Falle (**Structural & stratigraphic trapping**) hängt vornehmlich von der Integrität des vorhandenen Deckgesteins ab, wobei vorwiegend Antiklinalsysteme zum Einsatz kommen.

Aufgrund der Tatsache, dass Formationsfluid und CO_2 nicht miteinander mischbar sind, können Bereiche im Speichergestein entstehen, in denen die CO_2-Konzentration unterhalb der zugehörigen Residualsättigung liegt. Wie später in Kapitel 4.2.4 ausführlich erklärt wird, handelt es sich hierbei um einen Zustand, in dem das CO_2 von Kapillarkräften in den engen Porenkanälen gehalten wird. In diesem Zustand existiert keine zusammenhängende CO_2-Phase mehr, sodass ein Darcy-Fließen nicht mehr möglich ist. In diesem Fall kann das CO_2 trotz einer Dichtedifferenz zum Umgebungswasser nicht aufsteigen, sondern wird im Porenraum des Gesteins zurückgehalten (**Residual CO_2 trapping**).

Ein weiterer Rückhaltemechanismus liegt darin begründet, dass sich gasförmiges CO_2 in Form von Kohlensäure im Formationsfluid löst (**Solubility trapping**). In diesem Fall steigt die Dichte des Fluids an und die Lösung sinkt infolge von Auftrieb des Formationsfluids nach unten ab. Durch die Lösung von CO_2 sinkt der pH-Wert des Mediums, so dass eine leichte Säure entsteht, die mit den Bestandteilen des Speichergesteins reagiert und über einen Zeitraum von Jahrhunderten und Jahrtausenden zu einer Mineralisierung des CO_2 führt (**Mineral trapping**). Alle aufgeführten Prozesse laufen in unterschiedlich langen Zeitspannen ab und liefern einen über die Zeit variablen Beitrag zur Sicherheit der Speicherung von CO_2 im geologischen Untergrund. Generell lässt sich sagen, dass die Speichersicherheit, also die Wahrscheinlichkeit, dass das injizierte CO_2 tatsächlich im tiefen geologischen Untergrund verbleibt, mit der Zeit zunimmt.

2.2.2. Schlüsselindikatoren für die Bewertung eines potenziellen CO_2-Speichers

Als Ergebnis einer ausführlichen Recherche von international zugänglichen geologischen Daten, erstellten Bradshaw und Dance (2004) die in Bild 2.4 dargestellte Übersicht über die weltweite Verbreitung von potenziell zur CO_2-Speicherung geeigneten Sedimentbecken. Hierbei werden diese abstufend von äußerst vielversprechend bis nicht vielversprechend klassifiziert.

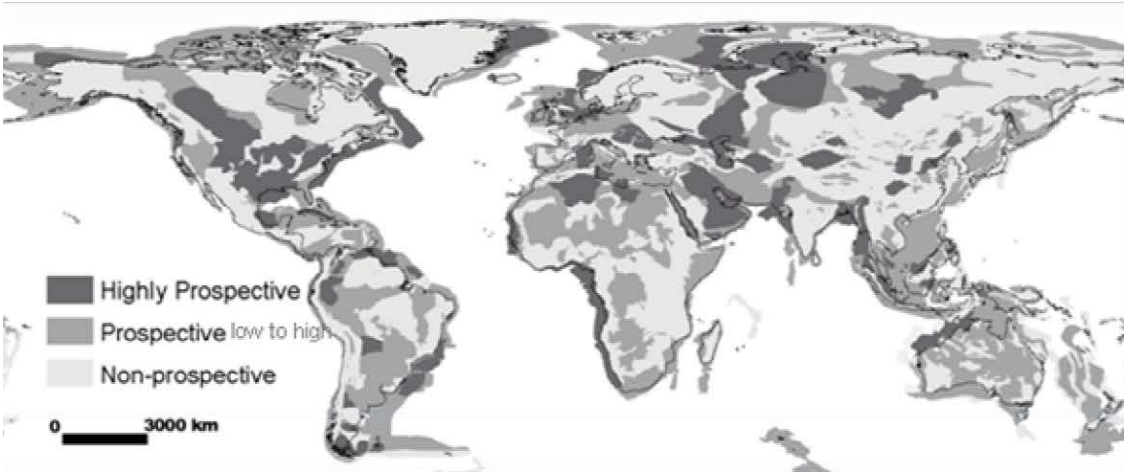


Bild 2.4 Weltweite Verteilung von potenziell für die geologische Speicherung von CO_2 geeigneten Sedimentbecken (Bradshaw und Dance (2004)).

Da es sich hierbei nur um eine grobe Übersicht handelt, müssen potenzielle Standorte lokal auf ihre Eignung überprüft werden. Nichtsdestotrotz verdeutlicht die Grafik das weltweite große Speicherpotential von salzwasserführenden GWLs.

In einer Zusammenfassung der Ergebnisse aus den Projekten CO2STORE und SACS liefern Chadwick et al. (2008) in Tabelle 2.1 Grenzwerte für Parameter, die einen potenziellen Standort in die Kategorien als geeignet und nicht geeignet klassifizieren.

Tabelle 2.1 Geologische Schlüsselindikatoren für die Bewertung eines potenziellen CO_2-Speichers (Chadwick et al. (2008)).

	Positive Indikatoren	**Negative Indikatoren**
Parameter Reservoir		
Statische Speicherkapazität	Die ermittelte Speicherkapazität ist deutlich größer als die geplante Injektionsmenge	Die ermittelte Speicherkapazität ist so groß wie die geplante Injektionsmenge
Dynamische Speicherkapazität	Die prognostizierten maximalen Speicherdrücke liegen unterhalb der Grenzwerte, die eine Integrität des Deckgesteins und des Reservoirs gewährleisten	Die prognostizierten maximalen Speicherdrücke gefährden die Integrität des Deckgesteins und des Reservoirs
Tiefe	> 1000 m und < 2500 m	< 800 m und > 2500 m
Mächtigkeit	> 50 m	< 20 m
Porosität	> 20 %	< 10%
Permeabilität	$> 5 \cdot 10^{-13}$ m²	$< 2 \cdot 10^{-13}$ m²
Salinität	> 100 g/l	< 30 g/l
Stratigraphie	homogen	Stark inhomogen und komplexe Fluidwegigkeit
Parameter Barrieregestein		
Laterale Kontinuität	Einheitliche Stratigraphie und keine oder nur schmale Störungszonen	Nicht einheitliche Stratigraphie und mittlere bis große Störungszonen
Mächtigkeit	> 100 m	< 20 m
Kapillarer Eindringdruck	Viel höher als der prognostizierte maximale Speicherdruck	So hoch wie der prognostizierte maximale Speicherdruck

Die wesentlichen Parameter lassen sich dahingehend zusammenfassen, dass geeignete Reservoire tiefer als 800 m unterhalb der Geländeoberkante liegen, eine Porosität von $\phi \geq 10\ \%$ und eine Permeabilität von $k \geq 2 \cdot 10^{-13}\ m^2$ aufweisen. Geeignete Barrieregesteine zeichnen sich durch einen kapillaren Eindringdruck aus, der oberhalb des prognostizierten maximalen Speicherdrucks liegt. Ein hoher kapillarer Eindringdruck resultiert aus einer geringen Porosität und Permeabilität. Zudem sollten sie eine intakte Integrität mit keiner oder nur einer geringen Durchörterung mit schmalen Störungen und eine Mächtigkeit von mehr als 100 m besitzen. Neben diesen Eigenschaften ist zudem die räumliche Lage eines potenziellen Speicherstandortes von großer Bedeutung. In Bezug auf Seismizität empfehlen sich hinsichtlich einer erhöhten Speichersicherheit Sedimentbecken, die sich in der Mitte einer Kontinentalplatte oder an tektonisch nicht wirksamen Plattenrändern befinden (IPCC (2005)). In diesem Zusammenhang empfehlen sich aufgrund ihrer Wirkung als Strukturfalle Antiklinalsysteme.

2.2.3. Verbreitung potenzieller Speicherstandorte in Deutschland

Basierend auf diesen Kriterien haben Reinhold et al. (2011) in ihrem Abschlussbericht für den Standort Deutschland potenzielle Speicher-Barrierekomplexe identifiziert. Hierfür wurden zugängliche Nachweisdatensätze von Tiefbohrungen und Ergebnisse von seismischen Messungen ausgewertet, die in 18 Potenzialkarten zusammengefasst worden sind. Untersucht wurden permische und mesozoische Speicher-Barrierekomplexe, insbesondere die Komplexe Rotliegend-Zechstein, und die triassischen Sedimentgesteine des Buntsandsteins, Muschelkalks und Keupers. Der regionale Schwerpunkt der Untersuchung lag im Bereich des Norddeutschen Beckens, des Thüringer Beckens, des Fränkischen Beckens, der Hessischen Senke und des Alpenvorlandbeckens.

Bezüglich der Kriterien Schichtmächtigkeit, Tiefenlage und dem Vorhandensein eines Barrierekomplexes eignen sich vor allem die Reservoirgesteine des Rotliegend im Norddeutschen-, Fränkischen und Thüringischen Becken, die Buntsandsteinformationen des Norddeutschen Beckens, der Muschelkalk des Oberrheingrabens und des westlichen Teils des Alpenvorlandbeckens, die Ablagerungen des Oberen Keuper des Norddeutschen Beckens und Formationen des Mittleren und Unteren Jura im Alpenvorlandbecken. Teile der Kreideablagerungen des Norddeutschen Beckens klassifizieren Reinhold et al. (2011) als zusätzlich schützendes Barrieregestein.

Hinsichtlich der Kriterien Porosität und Permeabilität werden die Formationen des Rotliegend aufgrund ihrer hohen Lagerungsdichte und ausgeprägten Zementation nur als eingeschränkt verwendbar eingestuft. Exemplarisch ist die räumliche Lage der besonders vielversprechenden Buntsandsteinformationen im Norddeutschen Becken in Bild 2.5 dargestellt.

Bild 2.5 Ablagerungen des Buntsandsteins im Norddeutschen Becken als potenzieller Speicherkomplex. Kategorisierung nach Mächtigkeit und Tiefenlage (Ausschnitt aus Reinhold et al. (2011)).

2.3. Bisherige Anwendungen von CCS

Im Folgenden werden einige bedeutende Industrie- und Forschungsprojekte vorgestellt, bei denen eine größere Menge CO_2 in geologische Formationen injiziert wurde. Generell ist bei diesen Projekten zu unterscheiden, ob der Fokus auf der ausschließlichen dauerhaften Einlagerung von CO_2 liegt oder ob die Injektion vornehmlich zur Produktivitätssteigerung bei der Förderung von Erdgas (**E**nhanced **G**as **R**ecovery EGR), Erdöl (**E**nhanced **O**il **R**ecovery EOR) oder Methan (**E**nhanced **C**oal **B**ed **M**ethane ECBM) dient.

Häufig enthalten Kohlenwasserstofflagerstätten einen erheblichen Anteil an CO_2 als Nebenprodukt. Im Fall der zuletzt genannten Techniken dient die Abscheidung und anschließende Injektion von CO_2 dazu, den infolge der Förderung fallenden Reservoirdruck wieder zu erhöhen, um den prozessbedingten Anteil der in der Kohlenstofflagerstätte verbleibenden Kohlenwasserstoffe auf ein Minimum zu reduzieren. Zudem wird auf diese Art und Weise eine zusätzliche

Belastung der Atmosphäre durch die so vermiedene Förderung von CO_2 verhindert. Bedeutsame EGR, EOR und ECBM Projekte im Industrie- und Forschungsmaßstab sind Tabelle 2.2 zu entnehmen (IPCC (2005)).

Tabelle 2.2 Bedeutsame EGR-, EOR- und ECBM-Projekte (IPCC (2005)).

Projekt	Staat	Art der Speicherung	Injektions-beginn	Injektions-rate [to/Tag]	Speicher-tonnage [kto]
Weyburn	Kanada	EOR	2000	3.000 - 5.000	20.000
Yubari	Japan	ECBM	2004	10	0,2
Recopol	Polen	ECBM	2003	1	0,1
In Salah	Algerien	EGR	2004	3.000 – 4.000	17.000
K12B	Niederlande	EGR	2004	100 – 1.000	8.000
Fenn Big Valley	Kanada	ECBM	1998	50	0,2
Qinshui Basin	China	ECBM	2003	30	0,15

Eine Auflistung von CO_2-Speicherprojekten im industriellen und Forschungsmaßstab ist in Tabelle 2.3 zu sehen (IPCC (2005)):

Tabelle 2.3 Bedeutsame reine CO_2-Speicherprojekte (IPCC (2005)).

Projekt	Staat	Art der Speicherung	Injektions-beginn	Injektions-rate [to/Tag]	Speicher-tonnage [kto]
Sleipner	Norwegen	GWL	1996	3.000	20.000
Ketzin	Deutschland	salzwasser-führender GWL	2008 - 2013	72	67
Frio	USA	salzwasser-führender GWL	2004	177	1,6
Snohvit	Norwegen	salzwasser-führender GWL	2008	2.000	700

Schäfer et al. (2015) berichten im Rahmen des aktuellen EuTRACE-Berichtes zudem von einem erfolgreich durchgeführten Projekt, bei dem die klassische CCS-Methode mit „KlimaEngineering“ beziehungsweise Geoengineering kombiniert wurde (BECCS). Bei diesem Verfahren wird

Biomasse verstromt, die durch den Anbau schnell wachsender Pflanzen erzeugt wird. Das dabei anfallende CO_2 wird hierbei in der Regel durch das IGCC-Verfahren sequestriert und anschließend im geologischen Untergrund dauerhaft gespeichert. Im Bericht wird explizit darauf hingewiesen, dass BECCS die einzige Möglichkeit bietet, den CO_2 Gehalt der Atmosphäre nachhaltig zu senken. Bei dem genannten Projekt handelt es sich um das „Bio-Energy with Carbon Capture and Storage Projekt in Decatur, Illinois, über das auch von Finley et al. (2013) und von Gollakota und McDonald (2014) berichtet wird.

2.4. Diskussion und Bewertung

Die Nutzung von CCS zur langfristigen Speicherung von CO_2 im geologischen Untergrund bietet vielversprechende Möglichkeiten um den vom Menschen gemachten Klimawandel und den damit einhergehenden Treibhauseffekt abzumindern. Die Technologie wurde in den letzten 20 Jahren international intensiv erforscht und durch Pilotstandorte von Forschungseinrichtungen als auch durch die Industrie im Großmaßstab unter realen Bedingungen erfolgreich getestet (vgl. Kapitel 2.3). Trotzdem gibt es innerhalb der EU -vor allem auch in Deutschland- in der politischen Diskussion kritische Stimmen, die die Risiken höher bewerten als die Chancen, die sich durch die Anwendung von CCS ergeben. Ungeachtet dessen unterstreicht die Europäische Kommission in ihrem Statusbericht zur Umsetzung der CCS-Direktive 2009/31/EC an das Europäische Parlament (COM (2014)) die große Bedeutung von CCS zur Erreichung der gesetzten CO_2-Einsparziele. In den folgenden beiden Unterkapiteln werden die Chancen und Risiken diskutiert.

2.4.1. Leistungsfähigkeit und wirtschaftliche Perspektive

Die ökonomische und ökologische Leistungsfähigkeit von CCS hängt im Wesentlichen von der energetischen Effizienz des Abscheidungsprozesses und des Transportes ab. Die hierfür zusätzlich benötigte Energie reduziert einerseits den Wirkungsgrad der Kraftwerke, was wiederum die Wirtschaftlichkeit des Verfahrens reduziert. Andererseits führt ein hieraus resultierender erhöhter Verbrauch von fossilen Energieträgern zu einer Verschlechterung der ökologischen Bilanz des Verfahrens. Ungeachtet dieser Faktoren hängt die Anwendbarkeit von CCS maßgebend von dem ortsnahen Vorhandensein von geeigneten Speichermöglichkeiten ab.
Wie in Kapitel 2.2 beschrieben, stellen salzwasserführende GWLs das größte Speicherpotential auf dem Festland dar. Da geeignete Sedimentbecken auf allen Kontinenten verbreitet sind und zudem häufig in der Nähe von großen Industrieregionen vorkommen, eignen sie sich, um einen Großteil des abgeschiedenen CO_2 aufzunehmen.
Das weltweite Speicherpotential von salzwasserführenden GWLs wurde durch eine Reihe von Autoren abgeschätzt, was aufgrund der lückenhaften Datenlage und der großen Unsicherheiten zu einer großen Bandbreite von potenziellen CO_2-Speicherkapazitäten geführt hat. Holloway (2005) gibt unter Verweis auf unterschiedliche Autoren eine Bandbreite zwischen 400 und 10.000 Gt CO_2 an. Im gemeinsamen Bericht des BMWi, BMU und BMBF für die Bundesregierung (2007) wird das potenzielle Speicherpotenzial in salzwasserführenden GWLs für Deutschland zwischen 12 und 28 Gt CO_2 abgeschätzt. Unter Berücksichtigung eines momentanen jährlichen weltweiten

CO_2-Ausstoßes von etwa 30 Gt (IPCC (2013a)) und der Annahme einer mittleren Speicherkapazität von 3000 Gt lässt sich bei zukünftigen Emissionen auf dem heutigen Stand theoretisch der gesamte CO_2-Ausstoß der kommenden hundert Jahre langfristig speichern. Aufgrund der hohen Kapazitäten eignet sich CCS als Brückentechnologie für die Übergangszeit während der die komplette weltweite Energieversorgung auf klimafreundliche und nachhaltige Methoden umgestellt werden kann (IPCC (2005)).
Dennoch lag im Jahr 2013 der Anteil von fossilen Energieträgern am weltweiten Primärenergiebedarf trotz des derzeitigen massiven weltweiten Ausbaus der erneuerbaren Energien immer noch bei etwa 87 %. Betrachtet man lediglich die weltweite Stromproduktion im Jahr 2013, so betrug allein der Anteil von Kohle 40 % am Energiemix (BGR (2014)).
Im 5. Sachstandsbericht des IPCC (2014) wurden sogenannte repräsentative Konzentrationspfade (RCPs) definiert, die für unterschiedliche prognostizierte Treibhausgaskonzentrationen der Atmosphäre im Jahr 2100 sogenannte Strahlungsantriebe definieren. Strahlungsantriebe haben die Einheit W/m² und stellen eine im Vergleich zum Jahr 1850 zusätzliche Heizlast für die Atmosphäre dar, wodurch wiederum der mittlere Temperaturanstieg erhöht wird. Insgesamt gibt es vier Szenarien RCP2.6, RCP4.5, RCP6 und RCP8.5. Durch diese Klassifizierung mittels Strahlungsantriebe lassen sich unterschiedliche Zukunftsszenarien, wie beispielsweise die Entwicklung der Weltbevölkerung oder die Zusammensetzung des Energiemixes, miteinander vergleichen. Schäfer et al. (2015) berichten davon, dass das Szenario RCP2.6 das Einzige ist, das die Einhaltung des Ziels einer maximalen Erderwärmung von 2 °C bis zum Jahr 2100 wahrscheinlich macht. Des Weiteren weisen sie darauf hin, dass 101 von 116 Szenarien, die im IPCC (2014) zum Referenzszenario RCP2.6 zusammengefasst worden sind, irgendeine Form einer anthropogenen Verringerung der Treibhausgase in der Atmosphäre (Greenhouse gas removal) berücksichtigen.
Eine vielversprechende Methode dies zu erreichen sehen die Autoren in der Verstromung von Biomasse in Kombination mit CCS (BECCS). BECCS stellt eine sehr neue Disziplin dar, deren Wirksamkeit im Großmaßstab erst noch erprobt werden muss. Jedoch können Erfahrungen, die mit CCS in der Vergangenheit gemacht worden sind, auf diese Technologie übertragen werden (IEAGHG (2009), IEAGHG (2011), IEA (2011)).
Um den CO_2-Ausstoß von Kohlekraftwerken in China nachhaltig zu senken, plant die EU zurzeit die „**N**ear **Z**ero **E**missions **C**oal (NZEC)“ Initiative mit China, in der CCS-Demonstrationsprojekte im industriellen Maßstab umgesetzt werden sollen.

2.4.2. Unsicherheiten und Risiken

Ebenso wie die Nutzung anderer technischer Anwendungen auch, birgt die Anwendung der CCS-Technologie Risiken. Das Risiko einer Anwendung ergibt sich aus dem Produkt der Bewertung oder der tatsächlichen Höhe des Gefahrenpotentials eines Schadensereignisses und dessen Eintrittswahrscheinlichkeit. Im Folgenden werden mögliche Schadensereignisse, die im Zusammenhang mit CCS stehen können, die Bewertung ihres Gefahrenpotentials und ihrer Eintrittswahrscheinlichkeit diskutiert. Eine ausführliche Zusammenstellung ist IPCC (2005) zu entnehmen.

Mögliche Prozesse, die zu einem Schadensereignis führen können, stellen beispielsweise die Freisetzung von gespeichertem CO_2 in die Atmosphäre, die Migration von CO_2 oder Formationsfluid aus tieferen GWLs in oberflächennahe Süßwasserhorizonte oder die Reaktivierung von Störungen dar. Während die ersten beiden Prozesse aus der Migration von Fluiden und Stoffen resultieren, wird der dritte Prozess durch injektionsbedingte Porendruckerhöhungen hervorgerufen, die wiederum eine Reaktivierung von Störungen bewirken können.

Eine grafische Darstellung von möglichen Leckagepfaden, die eine Migration von CO_2 beziehungsweise Formationsfluid in höher gelegene Formationen hervorrufen können, ist in Bild 2.6 abgebildet. Die schematische Darstellung zeigt einen tiefliegenden salzwasserführenden GWL, in den CO_2 mittels einer Injektionssonde injiziert wird. Überlagert wird dieses Reservoir von einem Barrieregestein, über dem sich ein zu schützender süßwasserführender GWL befindet. Mögliche Leckagen sind mit den Kleinbuchstaben a – c gekennzeichnet. Zu nennen sind hierbei Undichtigkeiten des Barrieregesteins, Undichtigkeiten entlang geologischer Störungen und Undichtigkeiten entlang von Altbohrungen. Undichtigkeiten des Barrieregesteins können einerseits aus der natürlichen Porosität des Gesteins selbst, wenn der Porendruck oberhalb des kapillaren Eindringdrucks liegt, resultieren. Andererseits kann die Integrität des Barrieregesteins durch eine bereits im Vorhinein existierende Klüftigkeit oder aber infolge einer mechanischen Überbeanspruchung des Gesteins negativ beeinträchtigt sein.

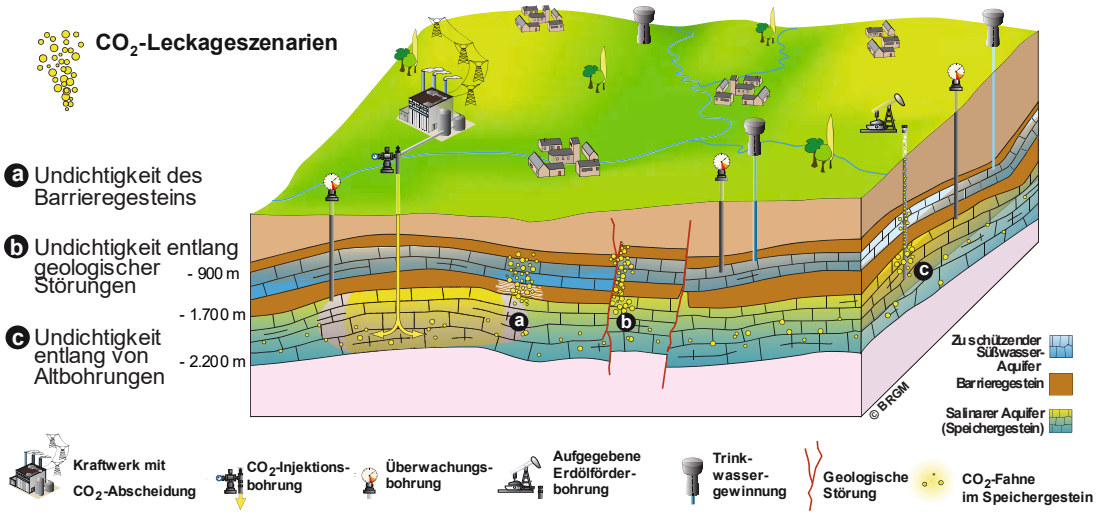


Bild 2.6 Beispiele potenzieller Leckageszenarien (CO_2GeoNet (2009)).

Die genannten Prozesse können wiederum potenzielle Schadensereignisse zur Folge haben. Eine Migration von CO_2 in die Atmosphäre bewirkt beispielsweise, globalmaßstäblich betrachtet, einen erneuten Anstieg der CO_2-Konzentration, was vornehmlich die Wirksamkeit der Speichermaßnahme negativ beeinträchtigt. Auf lokaler Ebene ist es jedoch auch möglich, dass es oberflächennah vor allem in Senken, Kellern oder anderen untertägigen Bauwerken und in oberen Bodenschichten zu einer kritischen CO_2-Konzentration kommt, die sich negativ auf Flora, Fauna und den Menschen auswirken kann.

Eine Migration von CO_2 in Süßwasserhorizonte kann zu einer Bildung von Kohlensäure führen, die den pH-Wert des Grundwassers reduziert und auf diese Art und Weise eine Mobilisierung von Schadstoffen bewirken kann. Eine Verdrängung von Formationsfluid aus tiefen Formationen hingegen kann zu einer Versalzung des Grundwassers führen, woraus ebenfalls in darüber liegenden GWLs eine negative Beeinträchtigung der Trinkwasserqualität resultieren kann.

Durch die Reaktivierung von geologischen Störungen kann induzierte Seismizität auftreten. Die hierdurch verursachten Mikrobeben wirken sich gegebenenfalls negativ auf die Standsicherheit oder die Gebrauchstauglichkeit oberflächennaher Bauwerke aus (Zoback und Gorelick (2012), Keranen et al. (2013)). Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass die auftretenden Magnituden dieser Beben in der Regel zwischen 2 und 4 liegen (Baujard et al. (2014), Dorbath et al. (2009), Frick und Kaltschmitt (2008)), ist die Standsicherheit von Gebäuden in der Regel nicht gefährdet. Gleichwohl kann es zu einer Gefährdung von Böschungen und natürlichen Hängen kommen. Insbesondere, wenn diese sich bereits vor dem Ereignis im Bereich der Grenztragfähigkeit befunden hatten. Infolge von Dilatanz können sich durch den Schervorgang zudem die Permeabilität und die Porosität der Störung erhöhen. Hierdurch verändert sich auch deren hydraulische Durchlässigkeit, weshalb eventuell vormals hydraulisch nicht wirksame Störungen plötzlich einen potenziellen Leckagepfad darstellen können.

Bezüglich der Eintrittswahrscheinlichkeit der einzelnen Schadensereignisse lassen sich aufgrund der fehlenden Langzeiterfahrung im Zusammenhang mit CCS nur bedingt Aussagen machen. Aufgrund der Tatsache, dass natürlich vorkommende Speicher von Kohlenwasserstoffen über geologisch lange Zeiträume von zum Teil mehreren Millionen Jahren ihre Dichtigkeit unter Beweis gestellt haben, lässt sich jedoch schließen, dass intaktes Barrieregestein in der Lage ist Gasspeicher ausreichend abzudichten. Diese Annahme deckt sich auch mit den Erfahrungen, die mit künstlichen Erdgasspeichern im geologischen Untergrund in der Vergangenheit gemacht wurden. Diese Methode der temporären Gasspeicherung wird von einer Vielzahl von Industrieländern seit Jahrzehnten erfolgreich praktiziert, wobei nur wenige dokumentierte signifikante Leckagen bekannt sind (IPCC (2005)).

2.4.3. Risikoanalysen und aktueller Forschungsbedarf

In Kapitel 2.4.2 wurden Prozesse diskutiert, die zu Schadensereignissen führen können. Um das Schadenspotenzial und dessen Eintrittswahrscheinlichkeit zu quantifizieren und einen potenziellen Standort hinsichtlich seiner Eignung zu bewerten, ist die Durchführung von Risikoanalysen erforderlich (COM (2014), EU-Richtlinie (2009)).

Da hierzu weltweit kein gültiges Regelwerk existiert, erfolgt die Bewertung von Risiken individuell für jedes Projekt und unter Verwendung unterschiedlicher Ansätze, die sich, hinsichtlich ihrer Methodik sowie den getroffenen Annahmen und Vereinfachungen, stark unterscheiden (Gerstenberger et al. (2013)). Der aktuelle Bericht des „National Energy Technology Laboratory“ des Energieministeriums der USA zum Stand der Forschung von Risikoanalysen für die geologische CO_2-Speicherung (NETL 2011) gibt einen umfassenden Überblick über weltweit

verwendete Methoden und Werkzeuge. Der Bericht unterteilt die verwendeten Methoden hinsichtlich ihrer Risikocharakterisierung in qualitative, semi-quantitative und quantitative Ansätze. Während die qualitativen Ansätze primär auf Expertenwissen zurückgreifen, um individuelle Szenarien zu beurteilen, verwenden die semi-quantitativen und quantitativen Ansätze deterministische und probabilistische Methoden. Eine quantitative Analyse von Unsicherheiten komplexer gekoppelter Systeme, wie sie bei der CO_2-Speicherung auftreten, ist erst durch die Entwicklung von geeigneten numerischen Programmsystemen und Kopplungsmethoden der letzten Jahre möglich.

Die auftretenden Prozesse werden hierbei in der Regel mithilfe numerischer Methoden, wie beispielsweise der Finite-Elemente-Methode oder der Finite-Differenzen-Methode, simuliert. Da sich die einzelnen bei der geologischen CO_2-Speicherung auftretenden Prozesse gegenseitig beeinflussen, sind bei der Prozess-Modellierung thermo-hydromechanische und auch chemische Kopplungen (THMC) erforderlich. Sowohl aufgrund der daraus resultierenden Komplexität als auch durch die Verwendung von großen Modellen führen selbst einzelne Simulationen zu erheblichen Rechenzeiten. Deshalb betrachten deterministische Ansätze ausschließlich eine geringe Bandbreite von Parametervariationen, die in der Regel konservativ definiert sind. Hierdurch werden die Risiken aufgrund einer unzureichenden Einschätzung der Eintrittswahrscheinlichkeit zum Teil erheblich überschätzt.

Parameterunsicherheiten bestehen primär infolge einer geringen Informationsdichte über die geologische und hydrogeologische Beschaffenheit des Speicherstandortes sowie die Inhomogenitäten der anstehenden Gebirgsformationen. Um eine realistische Einschätzung der hieraus resultierenden Risiken zu erlangen, beaufschlagen probabilistische Ansätze diese Parameter mit Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Anschließend werden mithilfe eines Simulationswerkzeugs unter Verwendung der definierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die ermittelten Ereignisse Risiken ermittelt. Eine solche probabilistische Herangehensweise erfordert jedoch eine erhebliche Anzahl von Simulationen, die im Gegensatz zur bereits erwähnten hohen Rechenzeit komplexer Simulationen steht. In Anbetracht dessen, sind hierfür gekoppelte numerische Simulationen nur eingeschränkt praktizierbar.

Eine Lösung dieses Problems liegt einerseits in einer Reduktion der Anzahl der berücksichtigten gekoppelten Prozesse oder in Abstrichen bei der Kopplungsqualität. So ist es zweckdienlich auf eine Kopplung von Prozessen, die auf unterschiedlicher Zeitskala ablaufen, zu verzichten (NETL 2011). Hierzu zählen beispielsweise der Verzicht einer Berücksichtigung des Einflusses einer Mineralisierung von CO_2 und eine damit einhergehende Veränderung der Permeabilität des Reservoirgesteins auf hydraulische Prozesse wie Fluidmigration während des Injektionsprozesses. Zudem werden sequenzielle Kopplungen häufig nicht iterativ oder aber als hydromechanische Einwegkopplung durchgeführt. Trotz allem bleibt die Rechenzeit in beiden Fällen hoch. Zudem kommen bei der Durchführung von probabilistischen Simulationen auch stark vereinfachende analytische Ansätze zum Einsatz, die sich relativ einfach in Form von Tabellenkalkulationen programmieren lassen. Bowden und Rigg (2004) bewerten beispielsweise verschiedene Standorte

mithilfe einer Monte Carlo Analyse, bei der die betrachteten Prozesse in MS Excel programmiert sind.

Komplexere Methoden wie sie beispielweise im „Certification Framework (CF)“ von Oldenburg et al. (2009) beziehungsweise in „CO_2-PENS“ von Stauffer et al. (2009) und Zhang et al. (2006) Verwendung finden, nutzen hydraulische Programmsysteme wie beispielsweise TOUGH, die direkt von einem Simulationswerkzeug wie GoldSim gesteuert werden. Hierdurch können eine große Anzahl von hydraulischen Simulationen von unterschiedlichen Szenarien durchgeführt werden, deren Risiko anschließend probabilistisch ermittelt werden kann. Allen angeführten Ansätzen ist jedoch gemein, dass sie Schwachstellen im Barrieregestein, wie beispielsweise Störungen und Altbohrungen als hydraulische Leckagepfade statisch berücksichtigen. Dynamische Aspekte, wie sich verändernde Permeabilitäten und Porositäten infolge von mechanischen Verformungen, werden jedoch komplett vernachlässigt. Indem hierbei auf eine hydromechanische Kopplung verzichtet wird, wird dieser Prozess erheblich vereinfacht.

Trotz einer erheblichen Steigerung der Rechenleistung von Prozessoren in den vergangenen Jahren, stellt diese im Hinblick auf große numerische Rechenmodelle immer noch den limitierenden Faktor dar. Um jedoch eine ausreichend hohe Anzahl von gekoppelten Simulationen für sowohl deterministische als auch probabilistische Risikoanalysen unter Berücksichtigung von Parameter- und konstitutiven Unsicherheiten durchführen zu können, liegt ein hohes Potenzial in der Optimierung der Kopplungsmethodik von gekoppelten Simulationen. Zur Beseitigung dieses Defizits besteht ein erheblicher Forschungsbedarf.

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein semi-analytischer Kopplungsansatz zur rechenzeitlichen Optimierung von hydromechanisch gekoppelten numerischen Simulationen von geologischen Störungen, die durch CO_2-Injektion in salzwasserführende GWLs hydraulisch reaktiviert werden, erarbeitet.

3 Stratigraphie und Strukturgeologie

Das folgende Kapitel liefert einen kurzen Überblick über die erdgeschichtliche Entstehung der für die geologische Speicherung von CO_2 geeigneten Sedimentformationen. Am Beispiel des Norddeutschen Beckens werden dessen stratigrafischer Aufbau und Bandbreiten der auftretenden Schichtmächtigkeit der einzelnen Formationen erarbeitet. Des Weiteren liefert dieses Kapitel eine Literaturrecherche bezüglich der Entstehung und der Beschaffenheit von geologischen Störungen. Diese Informationen dienen dazu, in Kapitel 6.4 synthetische Speicherstandorte für die Validierung der neuen hydromechanischen Kopplung zu definieren. Eine detailliertere Übersicht des Inhalts von Kapitel 3 ist in Elicki und Breitkreuz (2016), Mattauer (1993), Mandl (1988), Meschede (2015), Reuther (2012) und Stirrup und Heierli (1984) zu finden.

3.1. Genese von Gesteinen

Der Aufbau der etwa 4,5 Mrd. Jahre alten Erde gliedert sich, wie in Bild 3.1 dargestellt, in einen festen inneren und einen flüssigen äußeren Kern, die Mesosphäre (unterer Mantel), die Asthenosphäre (oberer Mantel) und die Lithosphäre (Erdkruste und oberster Mantel). Die Dicke der festen Erdkruste nimmt hierbei jedoch nur einen Bruchteil des Erddurchmessers ein. Da die Asthenosphäre zu einem geringen Teil (3 – 5 %) aufgeschmolzen ist, verhält sie sich über geologische Zeiträume betrachtet plastisch, sodass die festen Lithosphärenplatten gewissermaßen auf ihr „schwimmen“ (Meschede (2015)).

Aufgrund der relativ schlechten Wärmeleitfähigkeit von Gesteinen, wird die im Erdinneren gespeicherte Wärme, deren Potential sich infolge des Zerfalls von radioaktiven Elementen ständig erneuert, über sogenannte Potentialströmungen nach außen transportiert. Hierbei steigt heißes Material in der Mesosphäre von unten nach oben auf und kühleres Material sinkt im Gegenzug ab. Konvektionsströmungen, deren Umwälzungsprozesse in Bild 3.1 schematisch als rote Pfeile dargestellt sind, bewirken Plattentektonik.

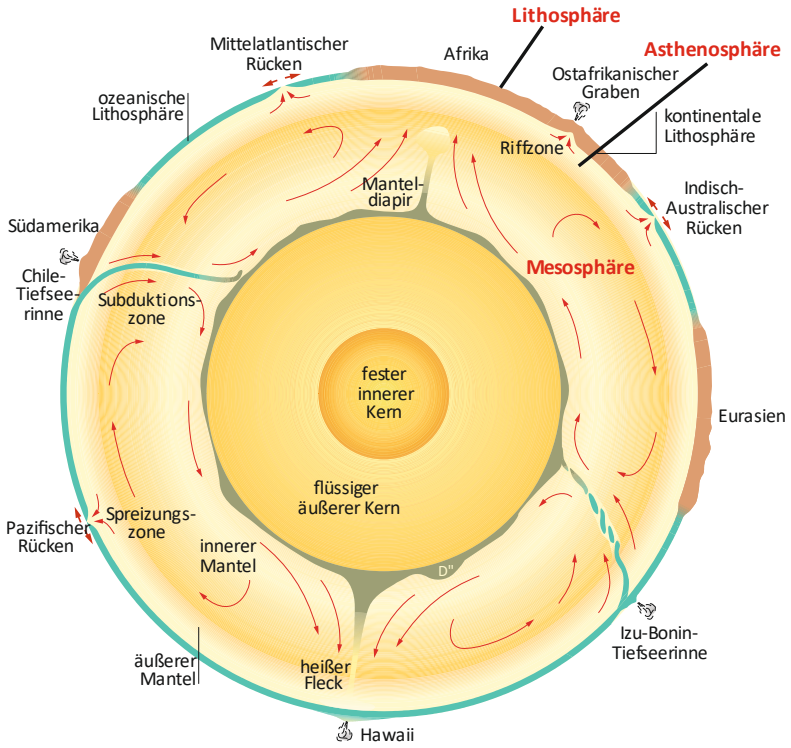


Bild 3.1 Aufbau der Erde und Konvektionsströmungen im Erdinneren (Ergänzt nach Meschede (2015)).

Die wichtigsten gesteinsbildenden Mineralien sind Quarz, Feldspat, Glimmer und Eisen-Magnesium-Mineralien. Hierbei verhält sich Quarz, bei dem es sich um die reine Erscheinungsform von Siliziumdioxid (SiO_2) handelt, unter Verwitterungseinfluss sehr stabil. Feldspat und Glimmer gehören hingegen zur Gruppe der Aluminosilikate und zerfallen an der Erdoberfläche in geologischen Zeiträumen betrachtet in Relation zu Quarz schnell, wenn sie Regenwasser ausgesetzt sind. Ihre Verwitterungsprodukte sind der Hauptbestandteil von Ton und Tonstein. Eisen-Magnesium-Silikate sind ebenfalls sehr instabil und verwittern relativ schnell. Ein fünftes, häufig vorkommendes Mineral, ist Kalzit. Hierbei handelt es sich um die normale Erscheinungsform von Kalziumkarbonat ($CaCO_3$). Während die vier erstgenannten Mineralien während des Abkühlvorgangs in Erstarrungsgesteinen gebildet werden, entsteht Kalzit hauptsächlich durch die Ablagerung von lebenden Organismen oder direkt durch Ausfällung von Kalzium aus Gewässern durch Evaporation.

Gesteine wiederum sind ein Gemisch aus unterschiedlichen Mineralien. Sie lassen sich in Erstarrungsgesteine, Sedimentgesteine und metamorphe Gesteine unterscheiden. Für die geologische CO_2-Speicherung in salzwasserführenden GWLs sind ausschließlich Sedimentgesteine von Bedeutung. Aufgrund ihrer Schichtung weisen sie in der Regel ein anisotropes hydraulisches und mechanisches Verhalten auf.

Entsprechend des in Bild 3.2 dargestellten Kreislaufs der Gesteine werden Erstarrungsgesteine durch Verwitterung in Kies, Sand, Schluff und Ton zerkleinert. Diese Erosionsprodukte werden anschließend durch Wind, Wasser oder Eis transportiert und anschließend an Land, in Flüssen,

Seen oder im Meer abgelagert, sodass mächtige Schichtpakete entstehen, aus denen sich wiederum Sedimentgesteine entwickeln können. Werden Erstarrungs- oder Sedimentgesteine hohem Druck und/oder hoher Temperatur ausgesetzt, können sie in metamorphe Gesteine umgewandelt werden. Bei Temperaturen von etwa 1000 °C schmelzen Gesteine erneut auf und können erneut zu Erstarrungsgesteinen umgewandelt werden.

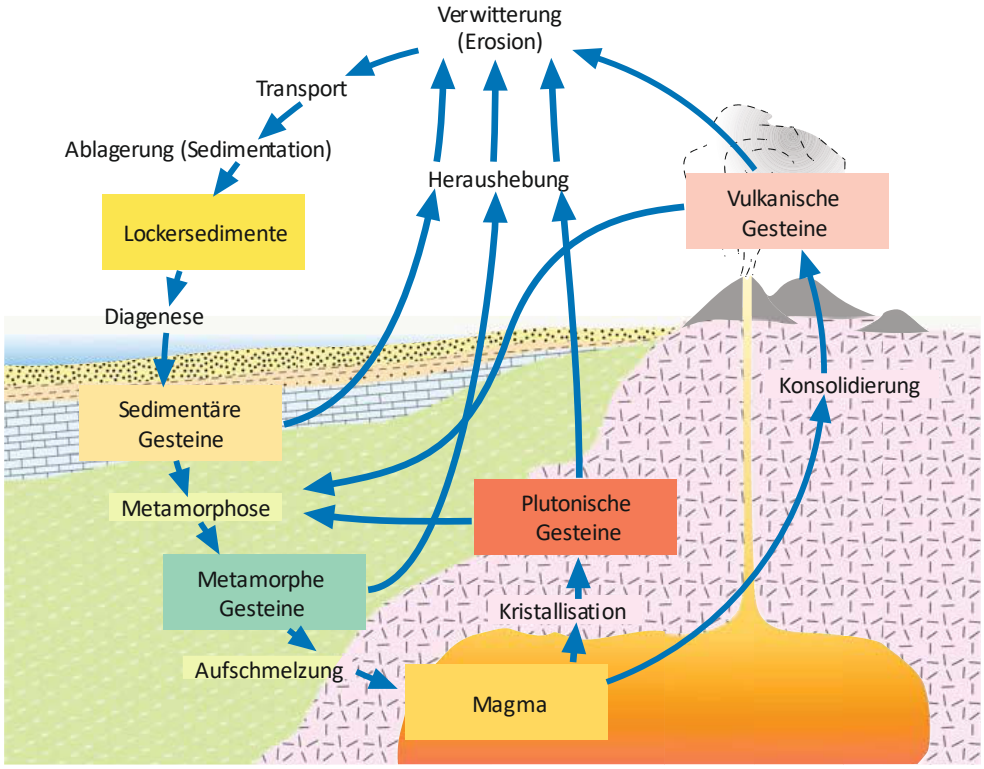


Bild 3.2 Der Kreislauf der Gesteine zeigt die unterschiedlichen Zyklen bei der Bildung, Verwitterung, Sedimentation und Metamorphose von Gesteinen im oberflächennahen Bereich der Erdkruste (Meschede (2015)).

3.2. Plattentektonik und Gebirgsbildung (Orogenese)

Im Laufe der Erdgeschichte war und ist das Erscheinungsbild der Erde einem ständigen Wandel unterworfen. Die Genese des oberen Bereichs der heutigen Lithosphäre wurde, wie in Bild 3.3 dargestellt, in den Erdzeitaltern der letzten eine Milliarde Jahre geprägt. Als ein wesentlicher Motor wirkt hierbei die Plattentektonik, die die Lithosphärenplatten mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten und Richtungen aufeinander einwirken lässt, wobei ihre Plattenränder kompressiv (gebirgsbildend) oder dehnend aufeinander einwirken.

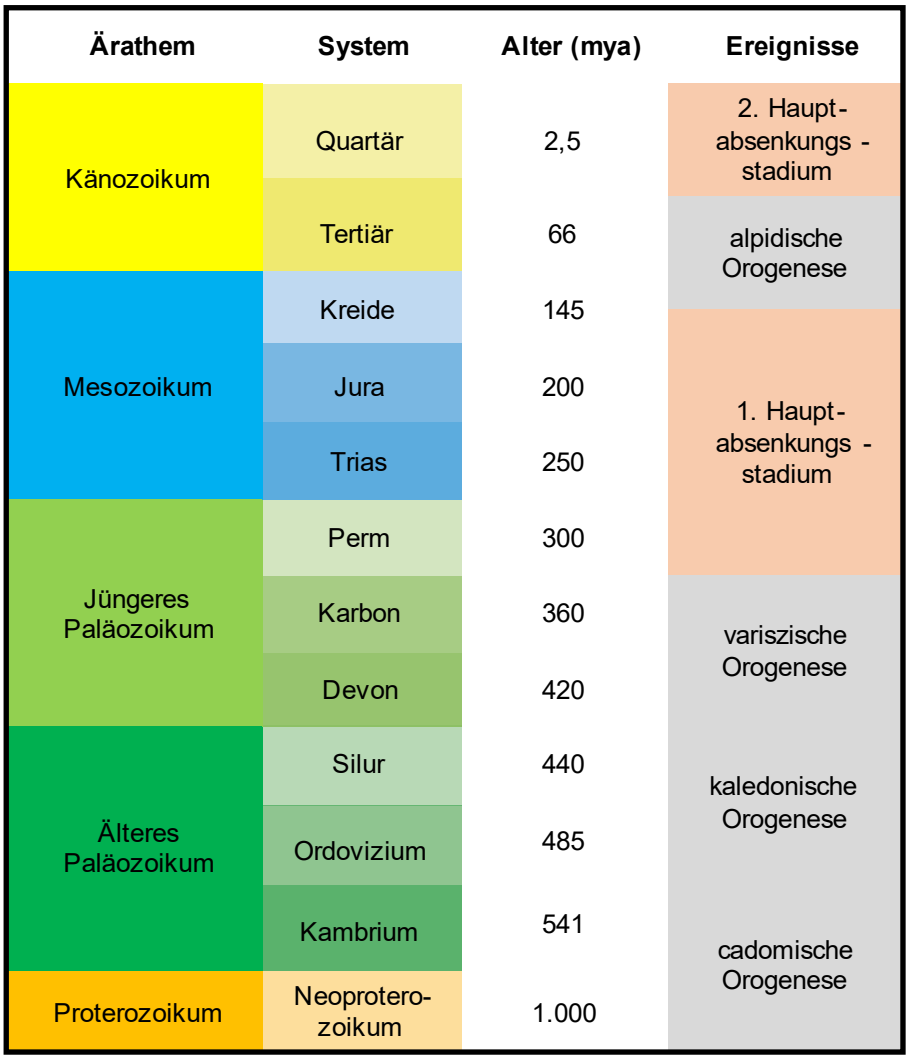


Bild 3.3 Die geologische Zeitskala der letzten eine Milliarde Jahre (ICS-Standard) zeigt die für die Gestalt der heutigen oberflächennahen Erdkruste in Mitteleuropa verantwortlichen Orogenesen und Hauptabsenkungsstadien (zusammengestellt aus Meschede (2015) und Elicki und Breitkreuz (2016)).

Hierbei lassen sich, wie in Bild 3.4 zu sehen, konstruktive, destruktive und konservative Plattengrenzen unterscheiden.

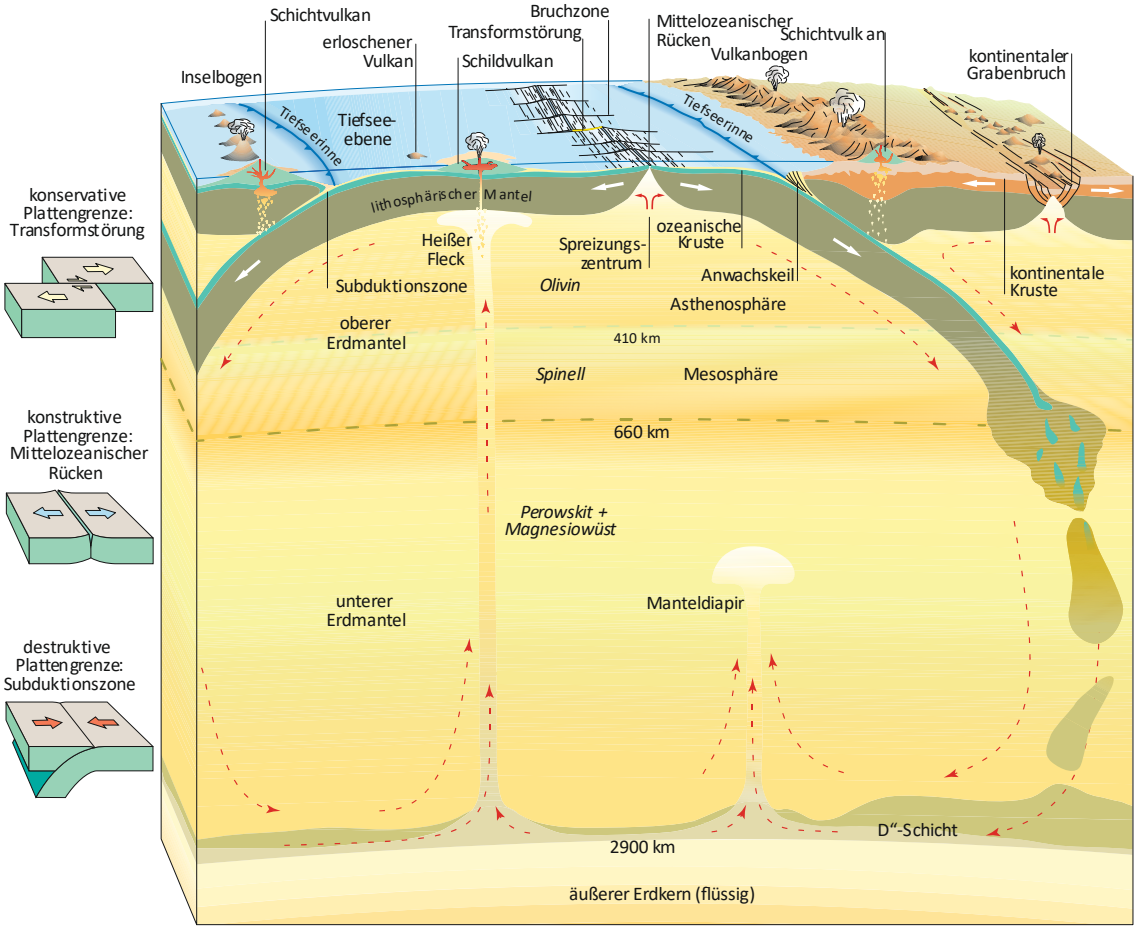


Bild 3.4 Die schematische Darstellung der plattentektonischen Vorgänge an der Erdoberfläche und im Erdmantel zeigt die Auswirkungen von konstruktiven, destruktiven und konservativen Plattenrändern (Meschede (2015)).

Entfernen sich zwei konstruktive Plattenränder voneinander, so wird der sich bildende Zwischenraum mit flüssigem Gestein aus dem Erdinneren aufgefüllt und es kommt zu einer Neubildung von Erdkruste. Da sich der Erdradius nicht weiter vergrößert, muss dieser Zugewinn an Erdkruste an einer anderen Stelle reduziert werden. Dies findet an sogenannten destruktiven Plattenrändern statt, die miteinander kollidieren. Hierbei schiebt sich die schwerere ozeanische unter die leichtere kontinentale Kruste, um anschließend im Erdinneren wieder eingeschmolzen zu werden. Gleiten zwei Platten aneinander vorbei, ohne dass es zu einer Neubildung oder einem Abtauchen von Erdkruste kommt, spricht man von sogenannten Transformstörungen, deren Plattenränder als konservativ bezeichnet werden.

Bei plattentektonischen Prozessen werden unterschiedliche zyklische Abfolgen, die sich im sogenannten Wilson-Zyklus in Bild 3.5 darstellen lassen, unterschieden.

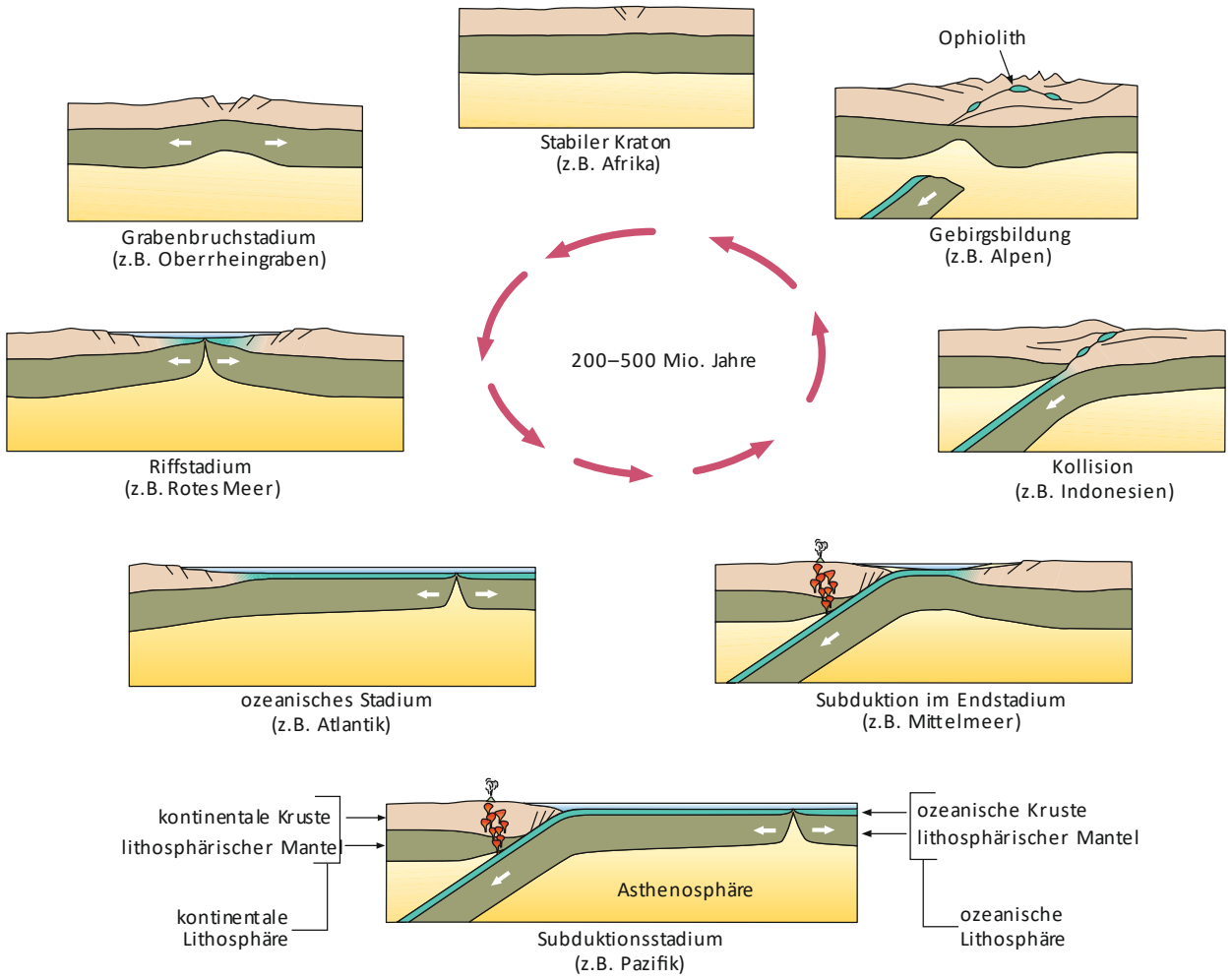


Bild 3.5 Die zyklische Abfolge von plattentektonischen Prozessen (Wilson-Zyklus) zeigt die Wechselwirkung zwischen konstruktiven und destruktiven Plattenrändern bei der Ozean- und der Gebirgsbildung (Meschede (2015)).

Hierbei tritt zu Beginn des Zyklus an einer Schwachstelle der Erdkruste ein Grabenbruch auf, der die zuvor intakte Kontinentalplatte zweiteilt. Deren konstruktive Ränder driften in der Folgezeit weiter auseinander, sodass es zur Bildung eines Ozeans und zur Neubildung von ozeanischer Kruste kommt. Im weiteren Verlauf kann dieser Prozess blockiert werden, wodurch es im Übergangsbereich zwischen alter kontinentaler und neuer ozeanischer Kruste zu einem neuen Bruch kommt und die ozeanische Platte unter die kontinentale Platte geschoben wird. Infolgedessen bilden sich in diesem Bereich zwei destruktive Plattenränder aus und es kommt im weiteren Verlauf zur Gebirgsbildung. In deren Verlauf kann sich der zuvor gebildete Ozean wieder komplett schließen, wodurch die oberen Sedimentschichten, die sich in diesem abgelagert haben, zu einem Gebirge wie beispielweise den Alpen aufgefaltet werden.

Vor etwa 750 Mio. Jahren im ausgehenden Proterozoikum begann der Superkontinent Rodinia in kleinere Kontinentalplatten zu zerfallen. Durch die in der Folgezeit stattfindende Plattentektonik öffneten und schlossen sich große Ozeane, wodurch sämtliche Orogenesen (Faltengebirgsbildung) des Paläozoikums bewirkt worden sind. Legt man den Fokus auf die plattentektonische Geschichte

Mitteleuropas, so ist das dort anstehende Grundgebirge der kontinentalen Kruste von drei aufeinanderfolgenden orogenen Phasen des Paläozoikums geprägt. Hierbei handelt es sich um die cadomische, die kaledonische und die variszische Orogenese. Es wurde hauptsächlich im Mesozoikum und im Känozoikum gebildet und unterlagert die heutigen „oberflächennahen" Sedimentgesteine.

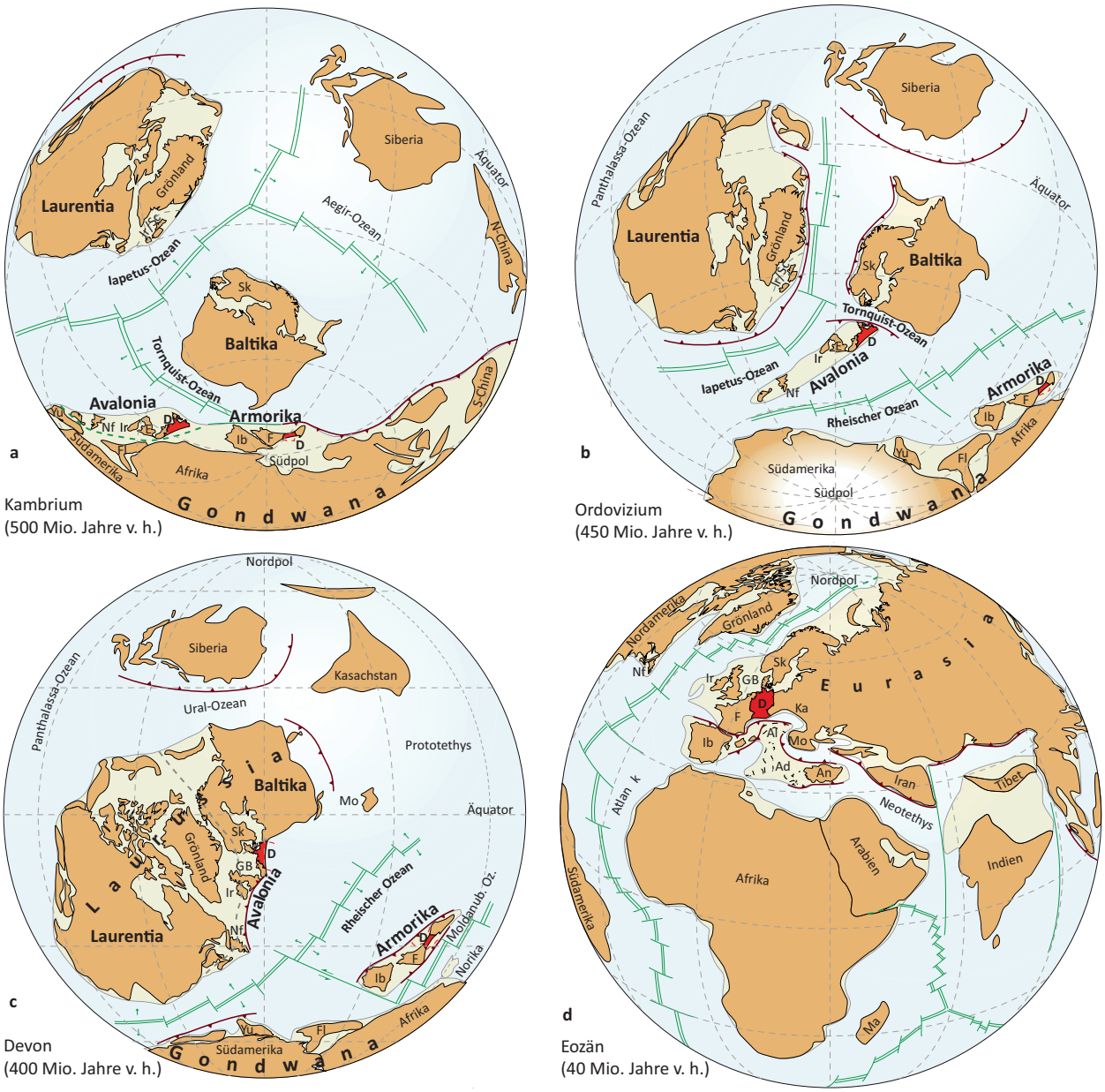


Bild 3.6 Überblick über die plattentektonische Geschichte Mitteleuropas; die Positionen der Gebiete Deutschlands sind rot hinterlegt (verändert nach Meschede (2015)).
a) cadomische Orogenese; b) kaledonische Orogenese; c) variszische Orogenese; d) alpidische Orogenese.

Wichtige Phasen während der plattentektonischen Geschichte Mitteleuropas sind in Bild 3.6 dargestellt. Zur besseren Orientierung ist die erdgeschichtlich stark wandernde Lage Deutschlands

in den Darstellungen rot hervorgehoben. Des Weiteren ist zu erkennen, dass Nord- und Mitteldeutschland in frühen Zeiten auf unterschiedlichen Platten lagen und erst während der variszischen Gebirgsbildung miteinander kollidierten. Dies ging mit der Bildung der heutigen Mittelgebirge einher.

Durch die im frühen Kambrium beginnende Grabenbildung zwischen Baltika und Laurentia sowie zwischen Baltika und Gondwana und dem damit einhergehenden Auseinanderdriften dieser Kontinentalplatten bildeten sich der Tornquist- und der Iapetus-Ozean (vgl. Bild 3.6 a). Die dadurch hervorgerufenen Spannungen auf die Kontinentalplatten bewirkte die cadomische Orogenese, deren oberflächennahe Auswirkung heute noch im nordschottischen Faltengebirge zu sehen ist. Das im Zuge dieser Gebirgsbildung geprägte Gestein bildet in der Tiefe das heutige Grundgebirge Mitteleuropas.

Infolge der im Kambrium einsetzenden und ihren Höhepunkt im Ordovizium findende Bildung des Rheischen Ozeans, die durch eine Abtrennung Avalonias (heutiges Norddeutschland und England) vom Großkontinent Gondwana hervorgerufen wurde, schlossen sich der Tornquist- und der Iapetus-Ozean wieder. Dieser Vorgang, in dem sich Baltika, Avalonia und Laurentia zu dem Großkontinent Laurussia verbanden, wird als kaledonische Orogenese bezeichnet und bewirkte eine Faltung des nördlichen Mitteleuropas und Skandinaviens (vgl. Bild 3.6 b). Oberflächennah ist das kaledonische Gebirge heute noch in Norwegen und im Süden Schottlands zu finden. Im Devon lagerten sich zudem im Rheischen Ozean mächtige Sedimentschichten ab, die sich heute in den variszischen Grundgebirgskomplexen Mitteleuropas finden lassen.

Die letzte große Gebirgsbildung des Paläozoikums findet ihren Höhepunkt im späten Devon und im Karbon. Die variszische Orogenese wird durch die Schließung des Rheischen Ozeans hervorgerufen (vgl. Bild 3.6 c). In dieser erdgeschichtlichen Phase kollidieren die Kontinentalplatten Laurussia und Gondwana miteinander, in deren finaler Phase am Ende des Perm sich der Superkontinent Pangäa gebildet hat und sich infolgedessen die Kontinentalplatten Armorika und Laurussia verbunden haben. Hierdurch kam es zu einer Verbindung Nord- und Mitteldeutschlands, in deren Verlauf die heutigen Mittelgebirge aufgefaltet worden sind. Zum Ende dieser orogenen Phase entstand erneut ein instabiler Superkontinent namens Pangäa. Dessen Auseinanderbrechen stand wiederum am Anfang eines neuen Wilson-Zyklus, der bis heute andauert. Zudem fand ein Übergang von einem kompressiven zu einem dehnenden Spannungsregime statt. Daher verursachten die auftretenden Krustendehnungen lokale Absenkungen von Grabenstrukturen, die zu einer verstärkten Bildung von geologischen Becken, wie beispielweise das Zentraleuropäische Becken, im Bereich von Bruchzonen führten.

Ab der Oberen Kreide treten in Mitteleuropa erneut kompressive Plattenbewegungen auf, durch die ehemalige Grabenstörungen in Auf- oder Überschiebungsstörungen invertiert wurden. Dieser Prozess wurde durch die alpidische Orogenese, die während der Kreide und des Tertiär ihren Höhepunkt fand und bis heute andauert, hervorgerufen. Sie stellt die letzte große Gebirgsbildung in Mitteleuropa dar. Während dieser Phase kollidierten, wie in Bild 3.6 d zu sehen, die afrikanische und die eurasische Platte miteinander und falteten in Europa unter anderem die Alpen und die Pyrenäen auf.

Im Tertiär ist die plattentektonische Entwicklung wieder vom Zerfall Pangäas gekennzeichnet, wodurch im Zentraleuropäischen Becken erneut tektonische Dehnungsvorgänge auftreten, weshalb Störungen dort heute überwiegend als Abschiebungsregime vorliegen. Beutler und Stackebrandt (2012) sprechen in diesem Zusammenhang von einem zweiten Hauptabsenkungsstadium.

3.3. Entstehung der Sedimentgesteine des Zentraleuropäischen Beckens

In den auf die jeweiligen Orogenesen folgenden Erdzeitaltern erodierten die jeweils gebildeten Faltengebirge zu einem erheblichen Teil. Die so entstandenen Abbauprodukte haben sich in teilweise kilometerdicken Schichten in geologischen Becken abgelagert und wurden anschließend durch die wirkenden Überlagerungsdrücke und infolge von Diagenese in Sedimentgesteine umgewandelt. Wie in Bild 3.7 exemplarisch für das Senkungsgebiet des Zentraleuropäischen Beckens dargestellt, wurden die heutigen „oberflächennahen“, teilweise bis zu 10 km dicken Sedimentformationen während der letzten 250 Mio. Jahren im Mesozoikum (Trias, Jura, Kreide) und im Känozoikum (Tertiär, Quartär) gebildet. Wie bereits in Kapitel 2.3 beschrieben, eignen sich für die geologische Speicherung von CO_2 aufgrund ihrer Tiefenlage sowie dem Vorhandensein von ausreichend mächtigen überlagernden Deckschichten aus Ton- bzw. Schluffstein die salzwasserführende GWLs der triassischen Keuper- und Buntsandsteinformationen. Diese sind in Bild 3.7 hellrosa hinterlegt und oberhalb der Permsedimente Rotliegend und Zechstein zu verorten.

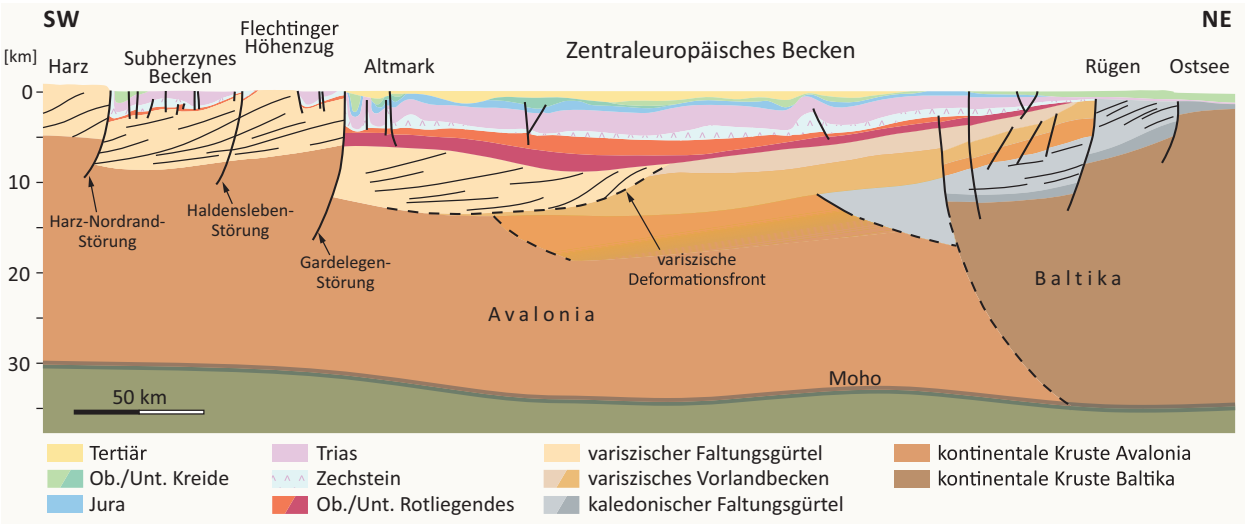


Bild 3.7 Das geologische Querprofil vom Harz bis in die Ostsee zeigt exemplarisch das Senkungsgebiet des Zentraleuropäischen Beckens sowie die Schichtfolge der unterschiedlichen Sedimentschichten (Meschede (2015) umgezeichnet und ergänzt nach Krawczyk et al. (2008)).

3.3.1. Sedimente des Trias

In Bild 3.8 b ist eine stratigraphische Abfolge der Trias-Sedimente dargestellt. Diese gliedern sich in die Unterstufen Buntsandstein, Muschelkalk und Keuper. Im Folgenden wird die Stratigraphie der triassischen Formationen am Beispiel des Norddeutschen Beckens kurz geschildert. In diesem Zusammenhang werden mittlere Schichtmächtigkeiten aus der Literatur ermittelt. Diese Informationen dienen später in Kapitel 6.4 dazu, synthetische Modellstandorte für die Validierung des neuen Kopplungsansatzes zu definieren.

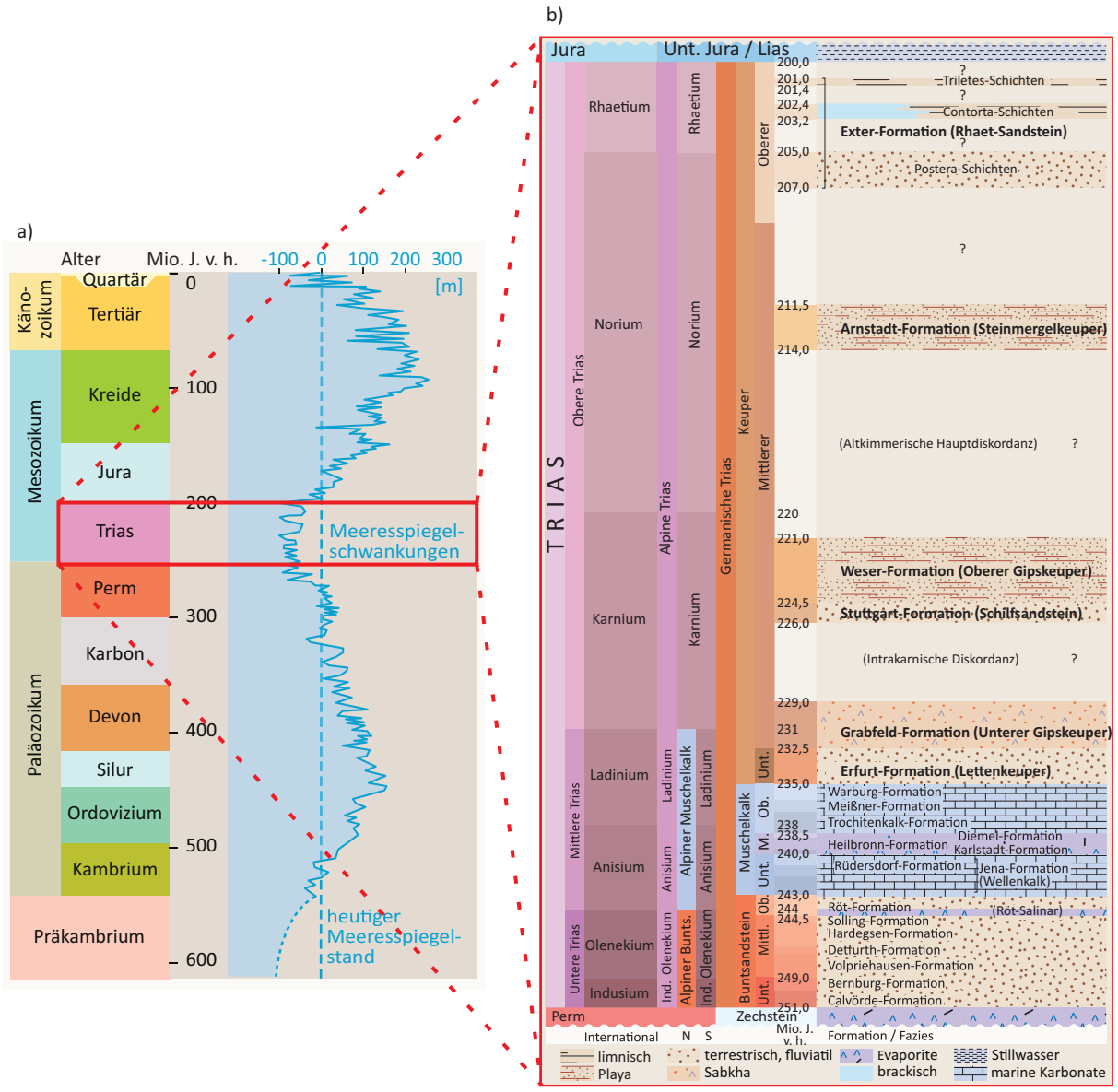


Bild 3.8 Der starke Rückgang des Meeresspiegels im Trias bewirkte verschiedenartige deltaische bis terrestrische Ablagerungsbedingungen bei der Sedimentation der Keuperformationen. a) Meeresspiegelschwankungen im Phanerozoikum (Meschede (2015) basierend auf Haq et al. (1987)); b) Stratigraphische Abfolge der Trias-Sedimente im Norddeutschen Becken und angrenzenden Regionen. (Meschede (2015) basierend auf Menning et al. (2002), (2011); Menning und Hendrich (2005), (2012); Peryt et al. (2010)).

Aufgrund des starken Rückgangs des Meeresspiegels während des Trias (vgl. Bild 3.8 a) waren die Erosions- und Ablagerungsbedingungen im Zentraleuropäischen Becken eher terrestrisch, teilweise deltaisch geprägt. Während in den nördlichen Regionen die Sedimente fluviatil (von Flüssen) und limnisch (von stehenden Süßwasserseen) in großen Schwemmlandebenen abgelagert wurden, dominierten im südlichen Bereich Mitteleuropas deltaische, lagunäre ästuriane Ablagerungen im Bereich der Gezeiten (Meschede (2015)).

Beutler und Nitsch (2005) erwähnen für diesen Zeitraum zudem schwache und meist kurzzeitige marine Ingressionen, die den geringen Meeresspiegelschwankungen geschuldet sind. Stackebrandt und Manhenke (2004) beschreiben die Buntsandsteinformationen des Landes Brandenburg als Wechselfolgen von Sand- und Tonstein, wobei der Anteil der Tonsteinformationen überwiegt. Hierbei geben sie mittlere Mächtigkeiten für den Unteren Buntsandstein von 300 m, für den Mittleren Buntsandstein zwischen 200 m bis 400 m und für den Oberen Buntsandstein zwischen 60 m und 150 m an. Die Muschelkalkformationen besitzen eine mittlere Mächtigkeit von insgesamt 300 m. Für das Norddeutsche Becken geben Beutler und Nitsch (2005) durchschnittliche Schichtmächtigkeiten des Keupers zwischen 600 bis 700 m an. In Schwellenzonen kann diese bis auf 100 m zurückgehen und sich wiederum lokal in Gräben auf 1000 bis 5000 m vergrößern.

Entsprechend der stratigraphischen Abfolge aus Bild 3.8 b wurden für die Keuper-Formationen in Tabelle 3.1 die charakteristischen Eigenschaften hinsichtlich Gesteinsart, Ablagerungsmilieu und Schichtmächtigkeit aus Beutler und Nitsch (2005) zusammengestellt.

Tabelle 3.1 Charakteristische Eigenschaften der Keuper-Formationen im Norddeutschen Becken (zusammengestellt aus Beutler und Nitsch (2005)).

Formation	Gesteinsart	Ablagerungsmilieu	Schichtmächtigkeit
Exter	Überwiegend fein- bis mittelkörnige Sandsteine, Tonstein	Lakustrine, fluviatile Sedimente	100 – 150 m
Arnstadt	Tonstein	Lakustrine Sedimente	100 – 150 m
Weser	Tonstein und Evaporit	Lakustrine und marine Sedimente	100 – 150 m
Stuttgart	Fein- bis mittelkörnige Sandsteine	Fluviatile Sedimente	20 – 100 m
Grabfeld	Pelit-Evaporit-Formation: Tonstein, Knollen- und Bankgips	Lakustrine und marine Sedimente	150 – 220 m
Erfurt	Intensiver Wechsel von Sandstein, Tonstein und Karbonat	Lakustrine, fluviatile und marine Sedimente	60 – 80 m

Unter Bezug auf Kapitel 2.2 lässt sich festhalten, dass tiefliegende Sandsteinformationen potenzielle Reservoire für die Speicherung von CO_2 darstellen, weil sie aus fein- bis mittelkörnigen Sandsteinen bestehen. Da diese in der Regel eine hinreichend hohe Permeabilität und Porosität aufweisen, ermöglichen es diese eine ausreichend große Menge CO_2 aufzunehmen. Zudem werden diese Formationen von mächtigen und gering permeablen Barrieregesteinen überlagert, die das Reservoir abdichten.

3.3.2. Sedimente des Jura, der Kreide und des Känozoikums

Gegen Ende des Trias und zu Beginn des Jura stieg der Meeresspiegel, wie in Bild 3.8 a dargestellt, allmählich wieder an und erreichte zur Mitte der Kreide vor etwa 100 Mio. Jahren mit mehr als 200 m oberhalb des heutigen Niveaus seinen Höhepunkt. Zudem senkte sich die Erdkruste weiter ab, sodass sich der Großteil des heutigen Mitteleuropa unterhalb des Meeresspiegels befand. Das Klima änderte sich von aride (wüstenhaft) während des Trias zu subtropisch und weiter zu tropisch im Jura. Während der Kreide änderte es sich letztendlich zu einem extremen Treibhausklima, was ein komplettes Abschmelzen der Vereisung der Polkappen zur Folge hatte. Während des Zeitraums Unterer Jura bis Untere Kreide bildeten sich im Norddeutschen Becken mächtige Schichten vorwiegend aus Tonstein und Mergel, deren Schichtmächtigkeiten zwischen wenigen Dekametern bis über 600 m regional stark variieren (Stackebrandt und Manhenke (2004)).

Zu Beginn der Oberkreide hat das Kreidemeer seine größte Ausbreitung erfahren und bedeckte nahezu flächendeckend Mitteleuropa. Während dieser Periode bildeten sich mehrere hundert Meter dicke Kalksteinschichten, die jedoch in manchen Regionen vollständig abgetragen worden sind, sodass die Mächtigkeit der Oberkreideablagerungen lokal stark schwankt. Beispielsweise nennen Stackebrandt und Manhenke (2004) Schichtmächtigkeiten für das Land Brandenburg zwischen Null Metern und in Senken bis zu mehr als 800 m. Im Osten und Nordosten des Landes werden durchschnittliche Mächtigkeiten zwischen 200 m bis 400 m verortet.

Die beiden oberflächennahen Formationen bilden tertiäre Tone und Schluffe sowie quartäre Sande, deren Schichtmächtigkeiten ebenfalls stark variieren. Für die Tone und Schluffe der Rupelschichten, die die tiefliegenden salzwasserführenden GWLs von den oberflächennahen süßwasserführenden GWLs trennen, geben Stackebrandt und Manhenke (2004) exemplarisch für Brandenburg Schichtmächtigkeiten von ca. 80 m in einer Tiefe zwischen 100 bis 300 m an.

3.4. Geologische Störungen

Die im Folgenden beschriebenen allgemeinen Sachverhalte zu geologischen Störungen sind überwiegend aus Reuther (2012) und Mandl (1988) zusammengefasst und können dort vertieft werden. Infolge von tektonischer Beanspruchung kommt es infolge von Scherversagen zu einem Bruch des vormals intakten Gesteins und es bildet sich eine Bruchfläche aus. Verschieben sich die beiden so entstandenen Ufer relativ zueinander und tritt ein Versatz auf, so spricht man von einer Verwerfung beziehungsweise einer Störung. Die räumliche Lage einer Störung wird durch die Streichrichtung und dem Fallwinkel definiert. Wie in Bild 3.9 zu sehen, beschreibt die

Streichrichtung die Schnittlinie einer Verwerfungsfläche mit einer gedachten horizontalen Ebene. Deren Orientierung wird durch den Streichwinkel α_{Str} ausgedrückt, der von der Nordrichtung aus positiv im Uhrzeigersinn gemessen wird. Der Fallwinkel β_F ist durch den Winkel definiert, der sich zwischen der Verwerfungsfläche und ihrer Projektion auf die Horizontale ergibt. Der Gesamtversatz zwischen zwei Abrisspunkten, die sich jeweils auf einem Hangend- und einem Liegendblock befinden, ist exemplarisch für eine Schrägabschiebung in Bild 3.9 dargestellt. Er lässt sich in einen Horizontal-, einen Abschiebungs- und einen Vertikalversatz zerlegen.

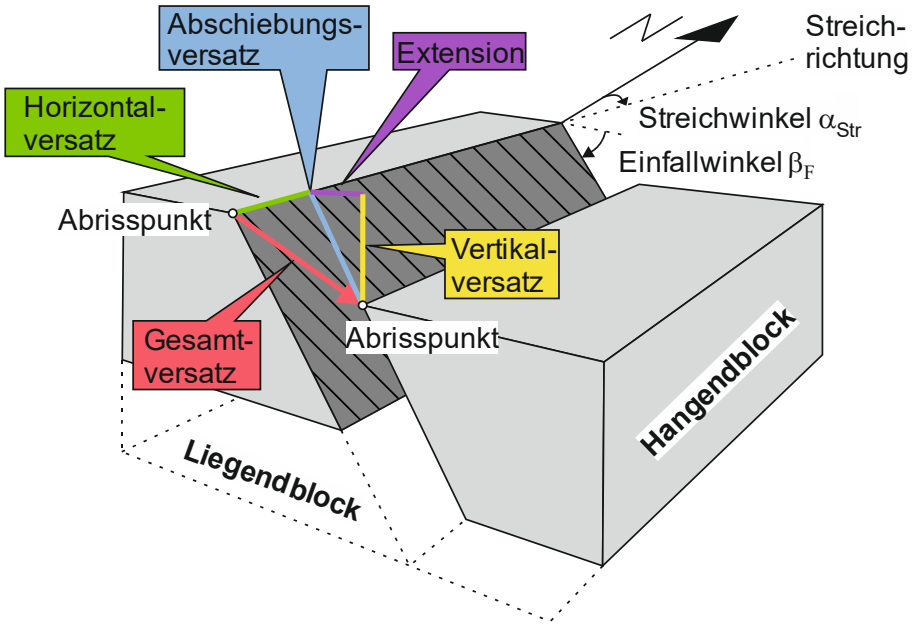


Bild 3.9 Die Raumlage einer Störung wird durch die Streichrichtung α, die im Uhrzeigersinn von der Nordrichtung aus gemessen wird und den Fallwinkel β_F beschrieben. Im Fall einer Abschiebung lässt sich der Gesamtversatz in seine Bestandteile aufgliedern (in Anlehnung an Reuther (2012)).

In Abhängigkeit des wirkenden Spannungsregimes tritt entweder eine Extension (Ausweitung) oder eine Einengung beziehungsweise Verkürzung des Felses auf. Die Anderson-Theorie (Anderson (1951)) setzt vereinfacht voraus, dass Störungen im oberen Bereich der Erdkruste (bis in 10-15 km Tiefe) durch ein Scherversagen nach dem Mohr-Coulomb'schen Bruchkriterium entstehen. Deshalb unterscheidet diese, wie in Bild 3.10 zu sehen, drei unterschiedliche Ausrichtungen der drei Hauptspannungsrichtungen. Der sich hierbei zwischen der maximalen kompressiven Hauptspannung σ_1 und der Bruchebene einstellende Winkel ϑ lässt sich in Abhängigkeit des inneren Reibungswinkels des Gesteins φ nach Gleichung (3.1) berechnen.

$$\vartheta = \pm 45° - \frac{\varphi}{2} \tag{3.1}$$

Wirkt die maximale kompressive Hauptspannung σ_1 in vertikaler Richtung, so entsteht, wie in Bild 3.10 a dargestellt, eine Abschiebung (normal faulting), deren Abschiebungsfläche beispielsweise für einen inneren Reibungswinkel von $\varphi = 30°$ theoretisch mit $\beta_F = 60°$ einfällt. Für den

Fall, dass die mittlere kompressive Hauptspannung σ_2 vertikal orientiert ist, tritt infolge horizontaler Scherung eine Horizontalverschiebung (strike-slip faulting) auf, deren Verwerfungsfläche ebenfalls um den Winkel ϑ aus der Richtung von σ_1 gedreht verläuft. Im dritten Fall ist die minimale kompressive Hauptspannung vertikal orientiert (Bild 3.10 c), was eine Aufschiebung zur Folge hat, deren Verwerfungsfläche mit ungefähr 30° deutlich flacher einfällt als im Fall einer Abschiebung. Bei einer Aufschiebung wird älteres Material über jüngeres geschoben, weshalb ein vertikales Profil somit eine Wiederholung von stratigrafischen Abfolgen aufzeigt.

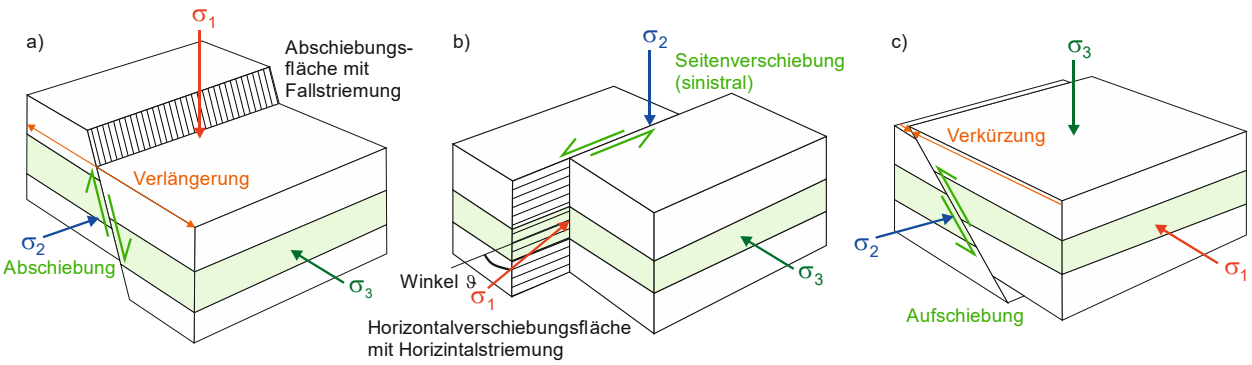


Bild 3.10 Zusammenhang zwischen tektonischer Struktur, Deformation und Hauptspannungsrichtungen: a) Abschiebung, b) Horizontalverschiebung, c) Aufschiebung (Reuther (2012)).

Reuther (2012) führt in diesem Zusammenhang an, dass das Mohr-Coulombsche Bruchkriterium nur für Brüche Gültigkeit besitzt, die in einem isotropen Material an einem Punkt unter gleichförmiger Spannung auftreten, deren Scherfuge sich eben einstellt. Da das betrachtete Felspaket in der Regel nicht reibungsfrei auf liegenden Formationen aufgelagert ist und folglich in der „Kontaktfläche“ Schubspannungen auftreten, ist dies jedoch häufig nicht der Fall. Hafner (1951) hat für einen stark horizontal belasteten Felsblock unter Berücksichtigung von Schubspannungen an der Unterkante und an den Seitenrändern gezeigt, dass die hierbei horizontal orientierten maximalen Hauptspannungstrajektorien gebogen verlaufen und lateral ausklingen. In diesem Fall liegt ein inhomogener Spannungszustand vor, bei dem sich die Hauptspannungen betrags- und richtungsmäßig in jedem Punkt des Blocks ändern. Hierdurch begründet er das Auftreten von gekrümmten Störungsflächen, wie sie auch tatsächlich in der Natur mit zunehmender Tiefe als listrische Störungen zu beobachten sind. Gleichwohl stimmen die in tektonisch aktiven Regionen der Erde bestimmten Hauptspannungsrichtungen mit dem Andersen-Modell überein (Reuther (2012)), da oberflächennahe Gesteinsformationen häufig von Formationen mit einem relativ geringen Reibungswiderstand, wie beispielsweise Salzlagen des Trias, unterlagert werden. Becker (2000) nennt als Beispiel das Schweizer Faltenjura.

3.4.1. Tektonische Faktoren bei der Entstehung von Störungen

Infolge von Dehnungstektonik kommen als Ursache von Störungen einerseits die Aufdomung des Erdmantels beziehungsweise lokal aufsteigende Plutone oder Salzdiapire infrage. Andererseits kann jedoch auch Plattentektonik das Entstehen von Störungen bewirken. Je nachdem, ob sich

hierbei die Lithosphäre symmetrisch oder asymmetrisch streckt, lassen sich die hierbei entstehenden Bruchfiguren unterscheiden.

Die unterschiedlichen Grundmodelle sind in Bild 3.11 dargestellt. Im Fall einer Aufdomung von liegenden Formationen wird das direkt darüberliegende Deckgebirge gedehnt und es entstehen gerade/ lineare Abschiebungen. Infolge von gegensinnig einfallenden Abschiebungen kommt es durch ein Absinken des dazwischenliegenden Bereichs zu einer Grabenbildung (Bild 3.11 a).

Dehnen sich die duktile und die spröde Kruste der Lithosphäre symmetrisch, so tritt eine reine Scherung auf (McKenzie (1978)). In diesem Fall verlaufen die Abgleitungen nahe der Erdoberfläche zunächst gerade und steil, nehmen jedoch mit der Tiefe zur spröd-duktilen Übergangszone hin eine gekrümmte (listrische) Form an (Bild 3.11 b).

Im Fall der einfachen Scherung nach Wernicke (1985) wird die Lithosphäre asymmetrisch gestreckt. Hierbei treten ebenfalls im oberen Bereich steile und gerade Bruchflächen auf, die dann in der duktilen Kruste weiterhin gerade verlaufend abflachen und erst an der Basis der Lithosphäre enden. Beim Delaminations-Modell (Lister et al. (1986)) treten im erdoberflächennahen Bereich listrische Bruchflächen auf, die sich dann als gerade, bis in die Asthenosphäre reichende Bruchflächen fortpflanzen. Durch die dabei stark ausgeprägte Ausdünnung des Hangendblocks, kommt es zu einer Entlastung des Liegendblocks, sodass dieser isostatisch aufsteigt und damit tiefkrustale metamorphe Gesteine an die Erdoberfläche gelangen.

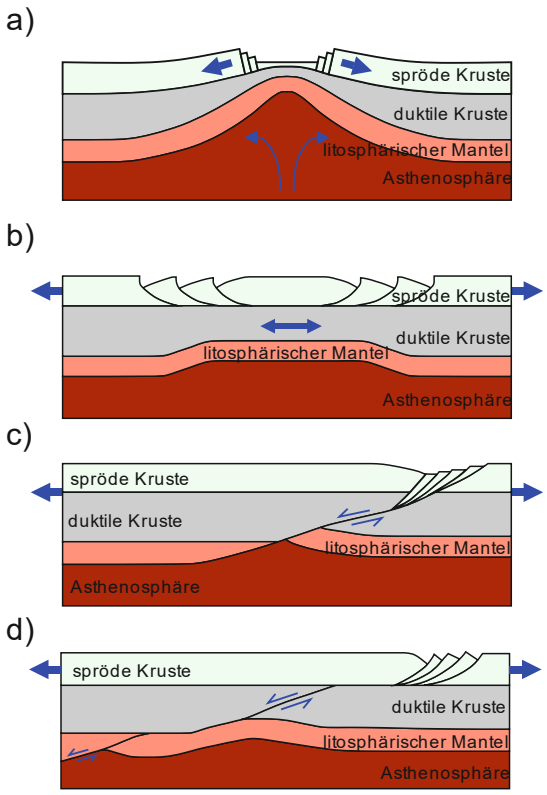


Bild 3.11 Mögliche Bruchfiguren bei der Lithosphärenstreckung a) durch Aufdomung, b) reine Scherung (McKenzie-Modell), c) einfache Scherung (Wernicke-Modell) und d) Delamination (Reuther (2012) dort verändert nach Lister et al. (1986)).

Im Zusammenhang mit kompressiven Spannungsregimen beschreibt Reuther (2012) ebenfalls das Auftreten von gerade und listrisch verlaufenden Bruchflächen. Diese werden jedoch an dieser Stelle nicht weiter vertieft. Aufgrund der zuvor in Kapitel 2.2 beschriebenen Schlüsselindikatoren für CO_2-Speicher und die häufige Nutzung von Antiklinalen, stellt Bild 3.11 a) eine typische Störungsgeometrie für Sedimentbecken dar.

3.4.2. Nicht-tektonische Faktoren bei der Entstehung von Störungen

Ergänzend zu den bereits betrachteten tektonischen Ursachen von Störungen, bietet Mandl (1988) eine erweiterte Übersicht von nicht-tektonisch induzierten Ursachen. Hierzu führt er stark wechselnde Scherfestigkeiten von sich überlagernden Gesteinsformationen (z.B. Sandstein und Tonstein), das Auftreten von duktilem Fließen einer liegenden als Gleitschicht wirkenden Schicht mit äußerst geringer Scherfestigkeit (z.B. Salzstein) oder aber Bereiche mit einem stark erhöhten Porendruck an.

Die beiden erstgenannten Fälle werden im Folgenden kurz erläutert. Im Fall eines Schichtwechsels zwischen zwei Formationen mit unterschiedlichen Scherfestigkeiten treten gerade, jedoch in dem jeweiligen Material unterschiedlich geneigte, Störungsflächen auf. Die von der Vertikalen abweichende Orientierung der maximalen Hauptspannungen σ_1 sowie der Störungsneigungen in beiden Schichten werden jeweils für einen Spannungszustand im Bruchzustand durch das in Bild 3.12 dargestellte Mohr'sche Spannungsdiagramm durch die Konstruktion eines Polplans ermittelt. Hierzu wurden für einen gleichförmigen Spannungszustand die Spannungskreise sowohl in blau für die Formation mit einem hohem ($\varphi_1 = 42°$ und $c_1 = 20$ MPa) als auch in grün für einen geringeren Scherwiderstand ($\varphi_2 = 15°$ und $c_2 = 5$ MPa) gezeichnet. In der Kontaktfläche beider Schichten wurde eine Schubspannung in Höhe von $\tau = 10$ MPa bei einer effektiven vertikalen Normalspannung von $\sigma_\perp = 100$ MPa berücksichtigt, weshalb in beiden Fällen eine Drehung der maximalen Hauptnormalspannung σ_1 aus der Vertikalrichtung auftrat (Formation 1 um 5° und Formation 2 um 13°). Unter Berücksichtigung von Gleichung (3.1) stellt sich die jeweilige Scherfuge um den Winkel ϑ aus der Richtung der maximalen Hauptspannungsnormalen gedreht ein (Formation 1 um 24° und Formation 2 um 37,5°). Es ist gut zu erkennen, dass die Störungsneigung in Formation 2 (geringerer Scherwiderstand) deutlich flacher verläuft als die in Formation 1.

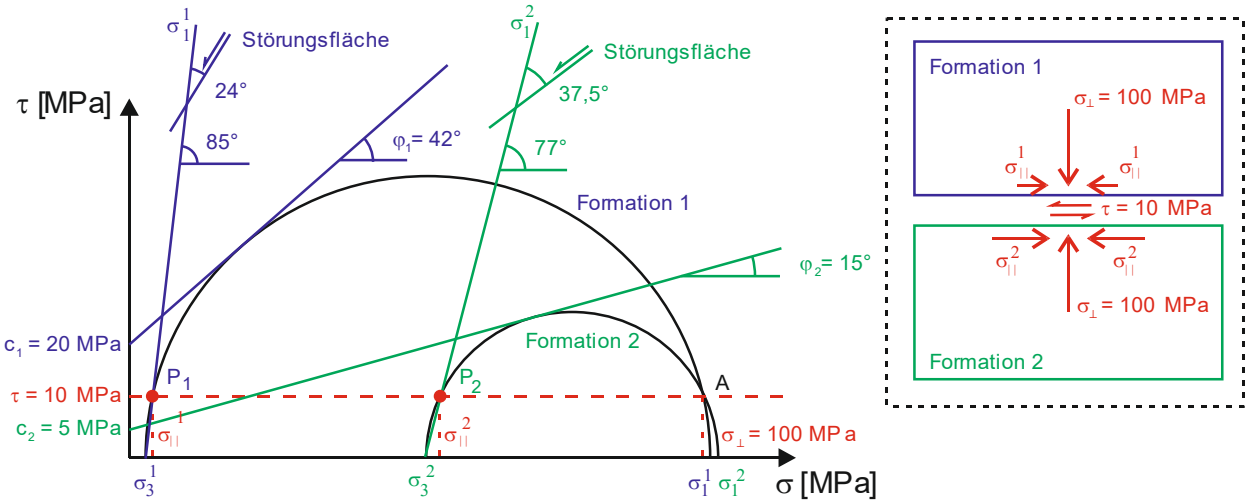


Bild 3.12 Grafische Ermittlung der abweichenden Orientierung der maximalen Hauptspannung σ_1 und der Störungsneigung zweier Formationen mit unterschiedlichen Scherfestigkeiten für einen gleichförmigen Spannungszustand mittels Polplan im Mohr'schen Spannungsdiagramm (verändert nach Mandl (1988)).

Im zweiten Fall wird Formation 1 aus dem letzten Beispiel von einer reibungslosen Formation 2 mit einer hohen Kohäsion ($\varphi_2 = 0°$ und $c_2 = \tau_{max}$) unterlagert. Infolge von Fließverformungen einer weichen Formation 2 unterlagernden Formation (z.B. Steinsalz) kommt es zu einer Übertragung von Schubspannungen in die Kontaktfläche zwischen Formation 1 und 2, die sich sukzessive mit zunehmender Entfernung vom Zentrum des duktilen Fließens bis auf τ_{max} steigern. Die sich hierbei einstellenden Spannungszustände und Bruchfiguren für ein extensives (links) und ein kompressives (rechts) Spannungsregime zeigt Bild 3.13. Infolge der im Vergleich zum vorherigen Beispiel deutlich höheren Schubspannungen in der Kontaktfläche, vergrößert sich für die Spannungszustände in beiden Formationen die Verdrehung der Hauptspannungsrichtung σ_1 aus der Vertikalen, was wiederum ein weiteres Abflachen der Störungsneigung im Bereich der Kontaktfläche bewirkt (für Material 2 verläuft diese sogar horizontal). Mandl (1988) nimmt in diesem Beispiel an, dass sich Formation 1 deutlich steifer verhält als Formation 2, was zur Folge hat, dass die auftretenden Schubspannungen komplett von Formation 1 aufgenommen werden und sukzessive in Richtung der Geländeoberkante durch Spannungsumlagerungen abgebaut werden. Dies bewirkt wiederum nach oben hin steiler verlaufende Störungen, wodurch diese eine listrische Form annehmen. Im Fall eines extensiven Spannungsfeldes treten hierbei im Zentrum der Extension gerade Bruchflächen auf, die auf Höhe der Kontaktfläche enden. Die maximale Hauptspannungsrichtung verläuft in diesem Fall vertikal.

Im unteren Teil von Bild 3.13 sind für das bereits diskutierte extensive (links) und das kompressive Spannungsregime (rechts) die Polpläne der Spannungskreise von Formation 1 in blau und Formation 2 in grün für den jeweiligen Nahbereich der Kontaktfläche dargestellt. Für den extensiven Fall wird deutlich, dass die Schubspannungen bis auf τ_{max} anwachsen müssen (gebogene, gestrichelte rote Linie), um die horizontalen Spannungen $\sigma_{||}^1$ in Formation 1 soweit zu verringern, dass aktives Bruchversagen auftritt. Hierbei fällt die Störung dann mit

$\beta_F = 90° - 58° + 24° = 56°$ ein, um anschließend direkt horizontal in Formation 2 einzumünden. Liegt ein kompressives Spannungsregime vor, wie es schematisch im oberen rechten Teil von Bild 3.13 zu sehen ist, steigern sich die horizontalen Spannungen $\sigma_{||}^1$ so weit, bis es zu einem passiven Bruchversagen kommt. Hierbei drehen sich die Hauptspannungen σ_1 und σ_3, wie im rechten Mohr'schen Spannungsdiagramm zu erkennen, soweit, bis die maximale Komponente in nahezu horizontaler Richtung wirkt, was Aufschiebungen im Bereich der Störung zur Folge hat. Die Beträge von τ_{max} sind im linken als auch im rechten Diagramm gleich groß. Da die auftretenden Spannungszustände im passiven Fall jedoch deutlich größer ausfallen, sind die rechten Spannungskreise kleiner skaliert.

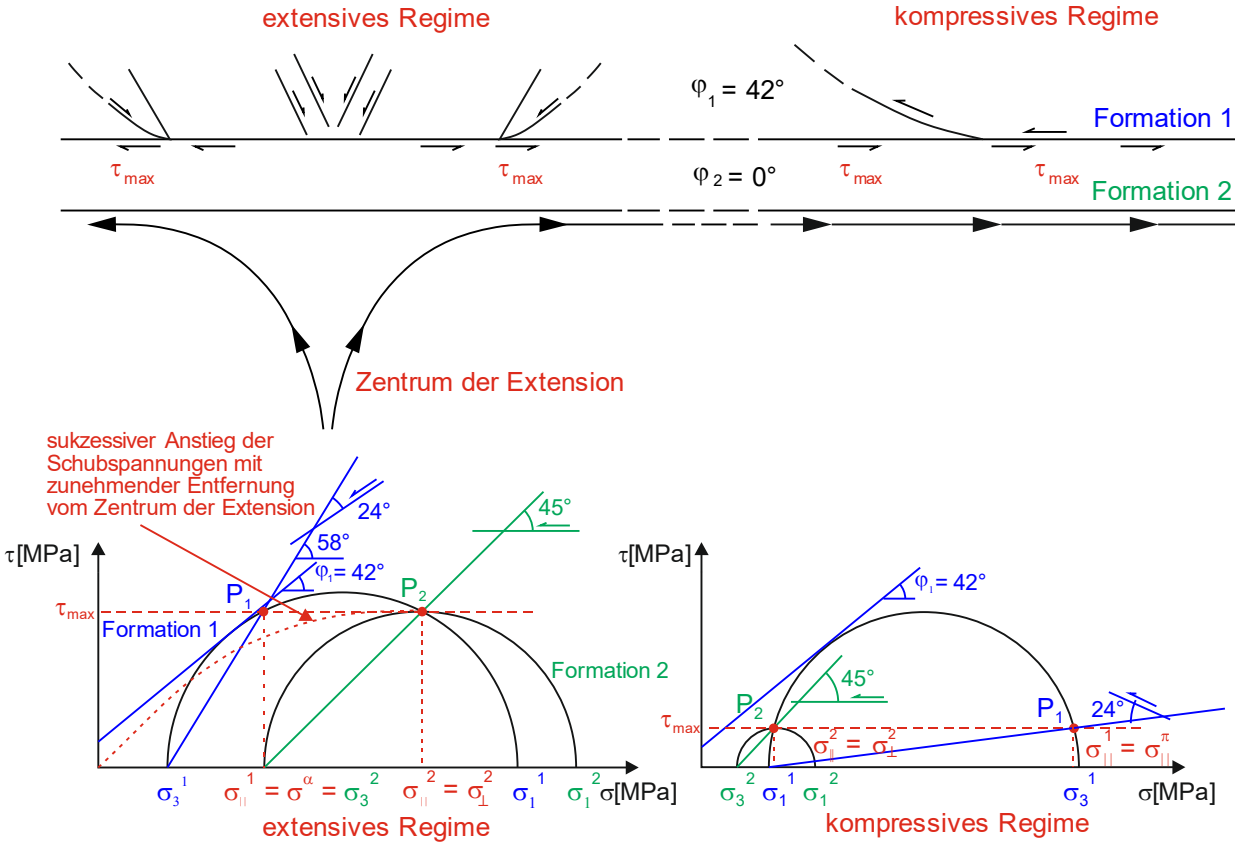


Bild 3.13 Grafische Ermittlung der abweichenden Orientierung der maximalen Hauptspannung σ_1 und der Störungsneigung zweier Formationen mit unterschiedlichen Scherfestigkeiten für den Fall einer Unterlagerung einer fließenden Formation mittels Polplan im Mohr'schen Spannungsdiagramm. Links: extensives Regime. Rechts: kompressives Regime (verändert nach Mandl (1988)).

3.4.3. Beschaffenheit von Störungen

Im Verlauf des Abschervorgangs bilden sich im Nahbereich der Störungsfläche sogenannte Sekundärrisse, wie beispielsweise planare Zugrisse, planare Scherrisse oder Parabelrisse. Dies führt zu einer Fragmentierung des Gesteins und es entsteht sogenannte Kataklase, deren Bruchstücke sich unterschiedlich groß, unsortiert, eckig mit scharfen Kanten und meist noch intern zerbrochen darstellen (Reuther (2012)). Haben diese Bruchstücke einen Durchmesser zwischen 1 mm

bis zu 50 cm, so werden sie als Störungsbrekzie bezeichnet. Bei einem Durchmesser kleiner als 1 mm handelt es sich um Mikrobrekzien und im Fall größer 50 cm um Megabrekzien. Im oberen Bereich der Erdkruste kommen auch tonartige Körnungen vor, die als Störungsletten bezeichnet werden. Infolge einer weiteren Verzweigung der Sekundärrisse, die durch ein Auftreten von Porenwasserüberdrücken auch noch vergrößert werden kann, bilden sich Störungszonen deren zerriebenes Gesteinsmaterial sich sowohl richtungslos als auch eingeregelt darstellt. Wie Bild 3.14 zu entnehmen, bestehen Verwerfungs- oder Störungszonen in den oberen 4 bis 5 Kilometern ausschließlich aus nicht kohäsiven Kataklasiten, wobei sich mit zunehmender Tiefe durch diagenetische Verfestigung kohäsive bilden. Ab einer Temperatur oberhalb von 300°C, wie sie in einer Tiefe unter 10 bis 15 km auftreten, treten metamorphe Umbildungen auf.

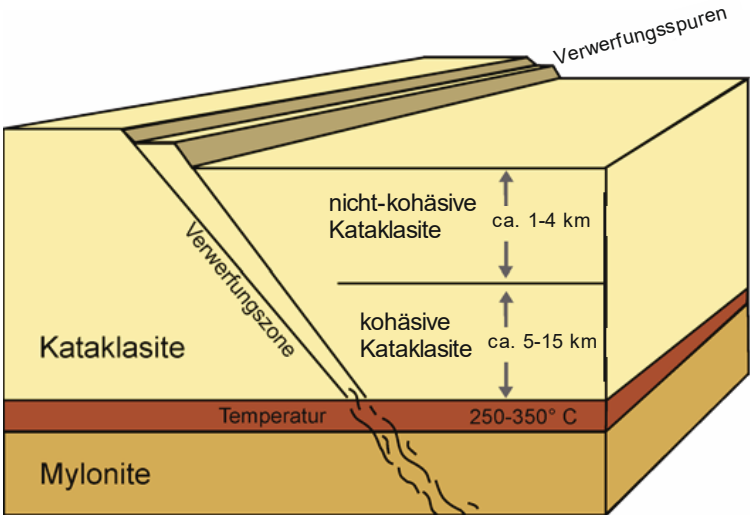


Bild 3.14 Schema einer Verwerfungszone mit zwei Bruchflächen von der Erdoberfläche bis in eine Krustentiefe von über 15 km. In der spröden Oberkruste bis in eine Tiefe bis ca. 15 km entstehen zunächst unverfestigte, dann verfestigte Kataklasite. In der duktilen Unterkruste wird die Störungszone breiter und es entstehen Mylonite (aus Reuther (2012)).

Caine et al. (1996), Faulkner et al. (2010) und Gudmundsson et al. (2010) gliedern Störungen, wie in Bild 3.15 dargestellt, generell in einen Störungskern (fault core) und eine fragmentierte Zerrüttungszone (engl.: „damage zone“) zum ungestörten Fels. Sie charakterisieren den Störungskern als einen stark fragmentierten und zerriebenen Bereich, der die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften eines isotropen porösen Mediums besitzt. Die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften der Störungszone sind überwiegend durch die Porosität der intakten Gesteinsmatrix und die Orientierung und Beschaffenheit der enthaltenen Klüfte charakterisiert. Je nach dem Grad der vorhandenen Klüftung und deren Verbindung miteinander, kann sich der Übergangsbereich mechanisch und hydraulisch als sehr heterogen und anisotrop oder auch als isotrop darstellen.

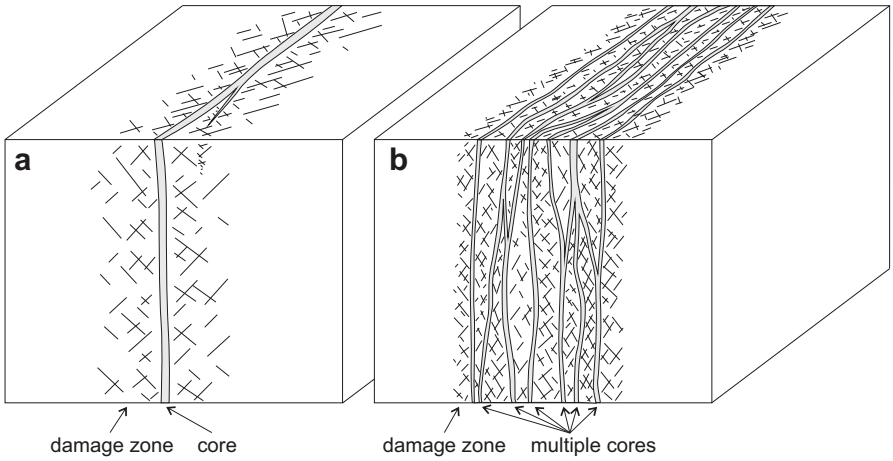


Bild 3.15 Charakteristischer Aufbau von Störungszonen: (a) zeigt einen einzelnen Störungskern (fault core) umgeben von einer stark fragmentierten Störungszone (engl.: „damage zone“) und (b) mehrere Störungskerne, die teilweise miteinander verbunden sind, umgeben von stark fragmentierten Störungszonen (Faulkner et al. (2010)).

Wie in Bild 3.15 b zu sehen, existieren auch mehrere hundert Meter breite Zerrüttungszonen mit multiplen Störungskernen, die sich teilweise miteinander verbinden.

Gudmundsson et al. (2010) beschreiben die Permeabilität des Störungskerns um mehrere Größenordnungen geringer als die der Störungszone. Aus diesem Grund wirkt die Störungszone als Fluidleiter und der Störungskern als eine Barriere, der einen Fluidfluss senkrecht zur Störung verhindert. Caine et al. (1996) berichten davon, dass eine Störung nicht unbedingt aus beiden Elementen bestehen muss. Es existieren ebenfalls Störungen, die ausschließlich nur aus einem Kern oder einer Zerrüttungszone bestehen. Je nachdem, wie groß der relative Anteil des Störungskerns an der gesamten Störungszone ist, wirkt die gesamte Störung entweder als Fluidleiter, Barriere oder als Kombination aus beiden (Fluidleiter entlang der Störung und als Barriere senkrecht zum Störungskern). Störungen beeinflussen auch die hydraulische Leitfähigkeit von GWLs, indem sie diese kreuzen und dadurch den Fluidfluss im Fall einer geringen Permeabilität behindern.

Generell bewerten alle drei Autoren die mechanischen und hydraulischen Eigenschaften von Störungen räumlich und zeitlich als äußerst heterogen. Faulkner und Rutter (1998) sowie Wibberley und Shimamoto (2003) geben für hydraulisch gering wirksame Störungen Bandbreiten für die Permeabilität des Kerns zwischen 10^{-17} und 10^{-21} m² und für die Störungszone zwischen 10^{-14} und 10^{-16} m² an. Faulkner et al. (2010) fassen auf Basis einer Auswertung von veröffentlichten Bohrlochmessungen die Gesamtpermeabilität von Störungen zwischen 10^{-16} und $4 \cdot 10^{-11}$ m² zusammen. Bezüglich der E-Moduln geben Gudmundsson et al. (2010) für den Störungskern einen Wert von 0,1 GPa und für die Störungszone eine Bandbreite zwischen 1 bis 10 MPa an.

Eine Korrelation zwischen dem Versatz einer Störung und der Breite der fragmentierten Störungszone (engl.: „damage zone“) wurde von vielen Autoren (Faulkner et al. (2010), Mitchell und Faulkner (2009), Savage und Brodsky (2011), Vermilye und Scholz (1998) und Wibberly et al. (2008)) untersucht. In Bild 3.16 ist exemplarisch eine Korrelation zwischen der

Breite der Störungszone und dem Versatz einer Störung dargestellt. Faulkner et al. (2010) haben hierzu Ergebnisse eigener Feldstudien durch eine hyperbolische Funktion approximiert und diese mit Ergebnissen von anderen Autoren in Relation gesetzt. Es ist gut zu erkennen, dass die Breite der Störungszone zwischen wenigen Zentimetern und über hundert Metern betragen kann. Diese Bandbreite deckt sich mit der Arbeit von Gudmundsson et al. (2010).

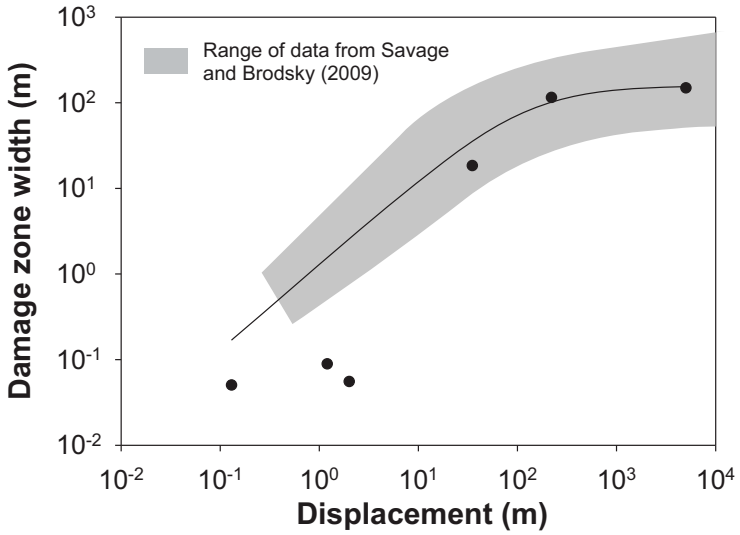


Bild 3.16 Korrelation zwischen der Breite der fragmentierten Störungszone (engl.: „damage zone“) und dem Versatz (displacement) einer Störung (Faulkner et al. (2010)).

3.5. Zusammenfassung

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die tektonischen Prozesse der letzten 700 Mio. Jahre die Erdkruste wesentlich geprägt haben. Während dieses Zeitraums haben sich in orogenen/ kompressiven Phasen durch Faltungen und Aufschiebungen Gebirge gebildet, bei deren Entstehung es infolge einer damit einhergehenden Überbeanspruchung der gestauchten Gesteinsformationen zu einer Bildung von Störungen kam. Durch natürliche Verwitterung wurden die neu gebildeten Gebirge zersetzt, anschließend durch Schwerkraft, Wasser und Wind abtransportiert und an anderer Stelle abgelagert. In Phasen, in denen dehnende Spannungsregime vorherrschen bilden sich entweder durch eine Überbeanspruchung der belasteten Gesteinsformationen Abschiebungen oder es werden bereits vorhandene Störungen durch Inversionstektonik reaktiviert. In beiden Fällen kommt es lokal zur Bildung von Beckenstrukturen, in denen wiederum zersetztes Material sedimentiert und infolge von Kompaktion und Diagenese in Sedimentgesteinen umgewandelt wird. Solche Sedimentgesteine bilden heute den obersten Teil der Erdkruste in weiten Teilen der Erde. Je nachdem, ob es sich bei dem Verwitterungs- oder Ausfällungsprodukt überwiegend um Feldspat, Quarz, Kalziumkarbonat oder Salze gehandelt hat, haben sich grundwasserleitende (Sandstein) oder grundwasserstauende Formationen (Tonstein) gebildet. Diese Wechselfolgen bilden heutzutage die Reservoir- beziehungsweise die Barrieregesteine für eine geologische Speicherung unterschiedlichster Fluide und Gase, wie beispielsweise CO_2. Barrieregesteine können Mächtigkeiten von mehreren hundert Metern aufweisen.

Durchörtert werden diese Formationen häufig von Störungen, die in Abhängigkeit ihrer Beschaffenheit entweder als Fluidleiter, als Barriere oder eine Kombination aus beidem wirken. Störungen bestehen in der Regel aus einem Störungskern und einer weniger oder stärker fragmentierten Störungszone, dessen Breite in Korrelation zur Größe des Störungsversatzes steht. Störungen verlaufen in Abhängigkeit ihrer Entstehung eben oder auch gekrümmt (listrisch) und können oberflächennah im Bereich einer weicheren liegenden Formation (z.B. Zechstein) enden oder aber auch bis tief an den Fuß der Lithosphäre reichen. Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich Abschiebungen betrachtet.

Störungen stellen sich in ihrer Gesamtheit als sehr heterogen dar. Störungszonen, die als Fluidleiter fungieren, können in Abhängigkeit ihres Fragmentierungsgrades und der Orientierung der vorhandenen Klüfte sowohl isotrope als auch anisotrope Eigenschaften aufweisen. Die im Rahmen dieses Kapitels zusammengestellte stratigraphische Beschreibung von Sedimentformationen des Norddeutschen Beckens, die entsprechende Recherche von Bandbreiten für vorkommende Mächtigkeiten und die Beschreibung der Beschaffenheit von Störungen bilden die Basis für eine Definition von synthetischen Modellstandorten, die in den Kapiteln 7 und 8 zur Validierung des neuen Ansatzes verwendet werden.

4 Prozessmodellierung von geologischer CO_2-Speicherung in salzwasserführenden Formationen

Zu Beginn des folgenden Kapitels werden die Ergebnisse einer Literaturrecherche hinsichtlich der bei der geologischen CO_2-Speicherung auftretenden hydromechanischen Prozesse und ihre Wechselwirkung beschrieben. Hierbei liegt der Fokus auf der Prozessbeschreibung der hydraulischen Reaktivierung von Störungen. Hieran schließt sich in zwei weiteren Teilkapiteln eine Darstellung der wesentlichen theoretischen Grundlagen zur mathematischen Beschreibung der zuvor diskutierten hydraulischen und mechanischen Prozesse an. Anschließend werden existierende thermo-hydromechanische Kopplungsarten diskutiert, mit denen die Wechselwirkung zwischen den hydraulischen und geomechanischen Prozessen abgebildet werden kann. In diesem Zusammenhang werden verwendete Kopplungsparameter und analytische Ansätze zur Beschreibung der Permeabilitäts- Porositätsbeziehung erläutert. Das Kapitel endet mit einer Zusammenfassung und Diskussion bezüglich der Eignung der vorgestellten Kopplungsarten im Hinblick auf eine Verwendung für eine probabilistische Risikoanalyse. Abschließend wird der sich daraus ergebende weitere Forschungsbedarf definiert.

4.1. Beschreibung der auftretenden Prozesse

Im Zusammenhang mit der geologischen CO_2-Speicherung in salzwasserführenden GWLs sind eine Vielzahl unterschiedlicher Prozesse zu betrachten, die durch thermische, chemische, hydraulische, mechanische oder biologische Einwirkungen oder Materialeigenschaften beeinflusst werden. Einige dieser Prozesse, wie beispielsweise die in Kapitel 2.2 beschriebenen Rückhaltemechanismen, lassen sich isoliert von anderen betrachten, weil sie beispielsweise auf unterschiedlichen Zeitskalen wirksam sind. Andere hydraulische und geomechanische Prozesse interagieren wiederum direkt miteinander. Im Folgenden werden die hydromechanischen Prozesse, wie sie infolge von CO_2-Injektion in salzwasserführenden GWLs ablaufen kurz beschrieben.

Übersteigt der Injektionsdruck den kapillaren Eindringdruck des Reservoirgesteins, so wird das ursprünglich den Porenraum ausfüllende Formationsfluid teilweise in andere Bereiche verdrängt. Das injizierte CO_2 nimmt in Abhängigkeit seines thermodynamischen Zustands nach Injektion unter entsprechenden Temperatur- und Druckbedingungen einen überkritischen Zustand ein, in dem es ungefähr 30 – 50 % der Dichte und ungefähr ein Zehntel der dynamischen Viskosität des Formationsfluids besitzt (IPCC (2005), Holloway (2005)). Da CO_2 und Formationsfluid zwei nichtmischbare Fluide darstellen, treten teilgesättigte Zustände auf, wodurch es wiederum zu einer Verringerung der relativen Permeabilität für beide Fluide kommt. Hierdurch reduziert sich die effektive Permeabilität des Reservoirs.

Durch den Verdrängungsprozess des Formationsfluids baut sich im Nahbereich der Injektionsstelle ein hydraulischer Gradient auf, dessen Höhe sich entsprechend der Permeabilität, der Porosität und der Mächtigkeit des Reservoirgesteins sowie den hydraulischen Randbedingungen einstellt. Der hierdurch einsetzende instationäre Fluidfluss bewirkt einen Stofftransport, der sich wiederum aus einem advektiven, von der Fließgeschwindigkeit gesteuerten und einem durch Konzentrationsunterschiede bewirkten diffusiven Anteil zusammensetzt.

Infolge des Injektionsprozesses baut sich im Reservoir ein Druck auf, der sich innerhalb kürzester Zeit über mehrere Kilometer um den Injektionsbrunnen herum ausbreitet. Hydraulische Simulationen mit und ohne Berücksichtigung von Störungen wurden von einer Vielzahl von Autoren für synthetische (Birkholzer et al. (2009, 2011), Oldenburg und Rinaldi (2011)) und für potenzielle Standorte ((Nicot (2008), Tillner et al. (2013, 2016), Yamamoto et al. (2009), Zhou et al. (2010)) durchgeführt. Hierbei wurden, unter Berücksichtigung einer Injektionsdauer von 30 Jahren und einer Injektionsrate von 1,52 Mt/Jahr, bis in eine Distanz von mehr als 100 km von der Injektionsstelle entfernt Porendruckänderungen beobachtet (Birkholzer et al. (2009)). So zeigen die Simulationsergebnisse von Röhmann et al. (2013), dass sich durch CO_2-Injektion in einen 20 m mächtigen salzwasserführenden GWL mit einer Permeabilität von 4×10^{-13} m² innerhalb von zehn Tagen im Nahbereich eines Injektionsbrunnens ein Porendruckanstieg von 9,4 MPa aufgebaut hat, der sich über einen Radius von 3.500 m abbaut. Während eines Injektionszeitraums von 20 Jahren hat sich die mittlere Porendruckerhöhung auf 7,9 MPa reduziert. Zum Injektionsstopp erstreckt sich die Porendruckerhöhung über einen Radius von 35.000 m.

Trotz dieses hohen absoluten Druckanstiegs treten jedoch, aufgrund der großen Strecke über die dieser abgebaut wird, großmaßstäblich betrachtet nur geringe hydraulische Gradienten auf. Unter der vereinfachten Annahme eines linearen Potenzialabbaus entspräche dies einem „mittleren“ hydraulischen Gradienten von 0,26. Für eine hydraulische Durchlässigkeit von 4×10^{-6} m/s würde hieraus eine Filtergeschwindigkeit von lediglich 32,8 m/a resultieren. Bei dieser Abschätzung handelt es sich zwar um eine stark vereinfachte Näherung des Problems, die vernachlässigt, dass im Nahbereich der Injektionssonde sicherlich höhere Gradienten auftreten als in größerer Entfernung. Dennoch verdeutlicht dieses Rechenbeispiel, dass die auftretenden Filtergeschwindigkeiten betragsmäßig relativ gering sind. In Anbetracht der relativ geringen Permeabilität von tiefen Reservoirgesteinen und der daraus resultierenden geringen Fließgeschwindigkeit, können in Bezug auf den Stofftransport von CO_2 und Formationsfluid innerhalb des Reservoirs und durch das Barrieregestein diffusive Prozesse relevant werden (IPCC 2005).

In der Regel werden geologische CO_2-Speicher in Antiklinalen, wie sie schematisch in Bild 4.1 dargestellt sind, angelegt. Dadurch, dass CO_2 eine geringere Dichte als das Formationsfluid besitzt, steigt es auf und sammelt sich an der Unterseite des Barrieregesteins. Hierdurch wirkt die Antiklinale als strukturelle geologische Falle (IPCC 2005, Holloway (2005)). Die maximale Speichermasse an CO_2 wird so gewählt, dass sie im Gesteinsvolumen unterhalb der Antiklinalen gespeichert werden kann (Knopf et al. (2010)).

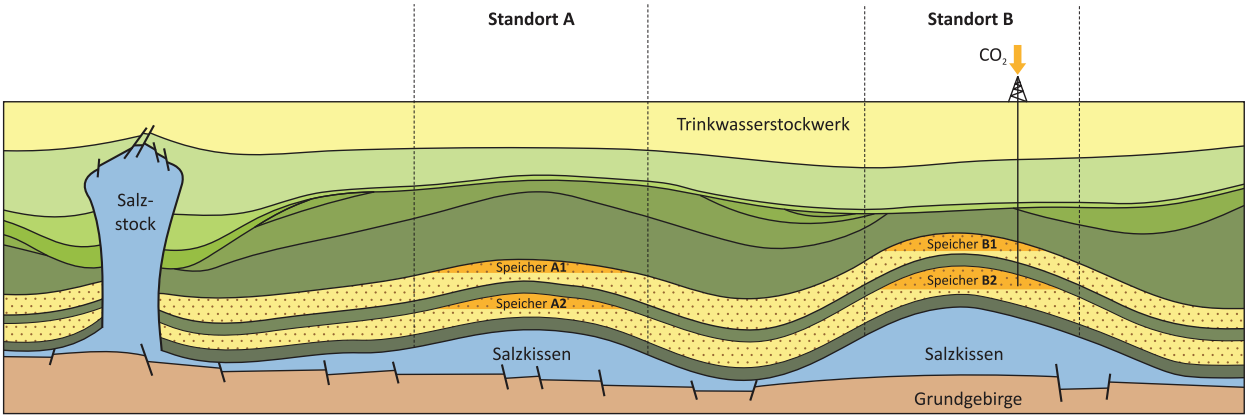


Bild 4.1 Schematischer Schnitt durch das Norddeutsche Becken zeigt die geologische CO_2-Speicherung in Antiklinalstrukturen (Knopf et al. (2010)).

Das hierbei verdrängte Formationsfluid fließt in andere Bereiche des Reservoirs oder kann gegebenenfalls über potenzielle Leckagewege, wie geologische Störungen oder alte Bohrungen, in höher gelegene GWLs verdrängt werden, weshalb die theoretische Gefahr einer Versalzung von Trinkwasserhorizonten besteht (IPCC (2005)).

Eine Porendruckerhöhung im Reservoir führt zu einer Reduzierung der effektiven Spannungen. Hierdurch kommt es zu einer Entlastung des Reservoirgesteins, was mit einer Ausdehnung einhergeht, woraus wiederum Hebungen an der Geländeoberfläche resultieren. Die Ausdehnung wird jedoch durch das darüber liegende Deckgebirge teilweise behindert, weshalb Zwangsspannungen im Liegenden und im Hangenden entstehen. Diese Spannungen bewirken lokale Änderungen des initialen Spannungszustandes, weshalb ein Überschreiten der Bruchfestigkeit des Gesteins durch eine kontrollierte Injektion verhindert werden muss. In diesem Zusammenhang ist auch ein Überschreiten der Zugfestigkeit des Gesteins zu untersuchen. Des Weiteren ist bei der Untersuchung der Integrität des Barrieregesteins auch der Einfluss von Kriechen zu berücksichtigen (Cook (1965), Moore und Byerlee (1992), Mutschler et al. (2009) und Wittke (2014)). Die Untersuchung der Integrität des Reservoir- und des Barrieregesteins sind jedoch nicht Bestandteil dieser Arbeit.

Geologische Störungen stellen Schwachstellen im Deckgestein dar, die in Abhängigkeit ihrer Permeabilität eine hydraulische Verbindung zwischen unterschiedlichen GWLs herstellen. Mbia et al. (2014) haben für den potenziellen dänischen CO_2-Speicherstandort Vedsted die Porendruckentwicklung in höher gelegenen GWLs untersucht, die über geologische Störungen mit dem Reservoir verbunden sind. Hierbei wiesen die Störungen Permeabilitäten zwischen 10^{-18} und 10^{-12} m² auf. Das untersuchte Reservoir befindet sich in 1700 bis 2000 m Tiefe. In den einweggekoppelten Simulationen haben sie für Störungspermeabilitäten kleiner als 10^{-15} m² keinen Porendruckanstieg in höher gelegenen GWLs beobachten können. Permeabilitäten zwischen 10^{-15} und 10^{-12} m² führten zu einem Anstieg von 0,3 bis 5,0 bar.

Tillner et al. (2013, 2016) haben am Beispiel des potenziellen CO_2-Speicherstandort in Beeskow-Birkholz im Norddeutschen Becken gezeigt, dass hydraulisch wirksame Störungen nicht zwingend zu einer Versalzung oberflächennaher GWLs führen müssen. Das Top des potenziellen Reservoirs

der Beeskow Antiklinale befindet sich in einer Tiefe von ca. 1070 m, weist eine Mächtigkeit von 23 m auf und ist von einer Wechselfolge von drei Barrieregesteinen mit Mächtigkeiten zwischen 35 und 320 m und GWLs mit einer Mächtigkeit zwischen 8 und 140 m überlagert. Wie in Bild 4.2 zu sehen, existieren in einer Entfernung von mehreren Kilometern zur Injektionsbohrung vier regionale Hauptstörungen.

In einer Parameterstudie wurde einerseits die Permeabilität der Störungen zwischen 10^{-11} und 10^{-13} m² variiert. Zudem wurde der hydraulische Einfluss der Störungen auf die Durchlässigkeit des Reservoirs und der höhergelegenen GWLs im Bereich ihrer Schnittlinie untersucht, indem die hydraulischen Randbedingungen entweder offen oder geschlossen simuliert wurden. Die Permeabilität des Reservoirs betrug 4 x 10^{-13} m² und es wurde ein Injektionszeitraum von 20 Jahren untersucht. Hierbei wurde im Reservoir unter Annahme von hydraulisch nicht wirksamen Störungen und im Schnittpunkt der Störungen mit dem Reservoir geschlossenen hydraulischen Randbedingungen ein maximaler mittlerer Porendruckanstieg im Reservoir von 60 bar beobachtet. Im Fall von teilweise hydraulisch wirksamen Störungen wurde im Reservoir ein maximaler mittlerer Porendruckanstieg von 20 bar erzielt, der in den darüber liegenden GWLs zu mittleren Porendruckanstiegen von etwa 4 bar geführt hat. Insgesamt wurde in allen Szenarien nur ein geringer Fluss von Formationsfluid in höher gelegene GWLs beobachtet, was mit den relativ geringen auftretenden Filtergeschwindigkeiten begründet wird. Hierbei stammt das in die oberen GWLs verdrängte Formationsfluid ausschließlich aus den oberen Bereichen der Störungen. Die maximale Ausbreitung der CO_2-Fahne nach 20 Jahren Injektionsdauer ist in Bild 4.2 farblich hinterlegt. In keinem der Szenarien hat sie eine der Störungen erreicht. An der Oberkante der Antiklinalen wurde unterhalb des Barrieregesteins eine CO_2-Sättigung bis zu 80 % beobachtet.

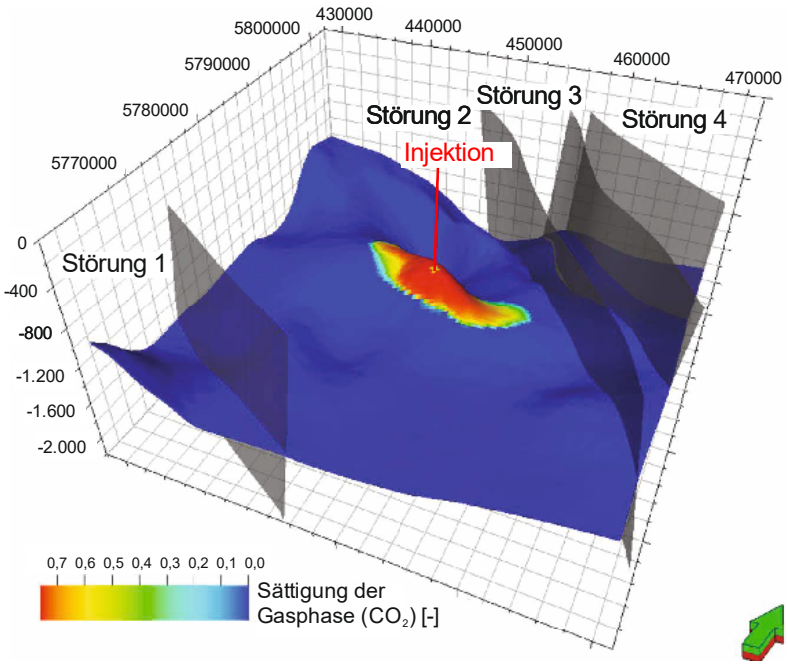


Bild 4.2 Die maximale Ausdehnung der CO_2-Fahne in der Detfurth-Formation erreicht die geologischen Störungen nach einer Injektionsdauer von 20 Jahren nicht (Tillner (2015)).

Durch den Porendruckanstieg im Bereich der Störungen kann es jedoch passieren, dass diese infolge eines Überschreitens des Bruchkriteriums und daraus resultierenden plastischen Verformungen, hydraulisch reaktiviert werden. Dies kann mit einem Anstieg der Porosität und der Permeabilität einhergehen. Hierdurch können auch Störungen, die zuvor hydraulisch nicht wirksam waren ($k < 10^{-15}$ m²), zu potenziellen Leckagewegen für Formationsfluide und das injizierte CO_2 werden. Da mechanische Verformungen des Porensystems mit einer Veränderung der hydraulischen Durchlässigkeit einhergehen, wirken sich diese wiederum direkt auf den Fluidfluss aus. Deshalb muss dieser Prozess hydromechanisch gekoppelt betrachtet werden (Cappa und Rutqvist (2011), Settari und Mourits (1994) und Tran et al. (2005)).

Der Prozess einer Störungsreaktivierung geht häufig mit dem Auftreten von seismischen Ereignissen einher (Vilarrasa et al. (2016), Rutqvist et al. (2014, 2016)). Faulkner et al. (2010) berichten davon, dass hierdurch die Permeabilität von Störungen um mehrere Größenordnungen ansteigen kann. In der Literatur findet man numerische Untersuchungen von Prozesssimulationen einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen sowohl für synthetische Standorte (Cappa und Rutqvist (2011), Nguyen et al. (2016) und Rinaldi et al. (2014a, b)) als auch für potenzielle reale Standorte, wie das Southern San Joaquin Basin in Kalifornien (Jeanne et al. (2016)).

Jeanne et al. (2016) haben hierbei in 24 Szenarien den Einfluss unterschiedlicher Initialspannungszustände auf das Auftreten von seismischen Ereignissen infolge einer Störungsreaktivierung untersucht. Hierzu haben sie die Injektion von CO_2 über einen Zeitraum von 50 Jahren in einen etwa 3.000 m tief gelegenen salzwasserführenden GWL untersucht. In dem Untersuchungsgebiet wurde eine ebene, bis zur Geländeoberkante reichende Störung mit einer initialen Permeabilität im Bereich des Barrieregesteins von 4×10^{-16} m² berücksichtigt. Das Reservoir wird von zwei GWLs und zwei Barrieregesteinen überlagert, wobei die Mächtigkeit der ersten das Reservoir überlagernden Barriereformation 250 m beträgt. In den Simulationen wurde ein maximaler Porendruckanstieg am Störungsfuß von etwa 15 MPa nach 50 Jahren erreicht. Zudem wird ausschließlich ein Fluss von Formationsfluid in das darüber gelegene Reservoir beobachtet, was mit einem maximalen Porendruckanstieg im darüber gelegenen GWL von 4 MPa einherging. Nach einem 50-jährigen Injektionszeitraum wurde nur ein minimaler CO_2-Fluss im unteren Bereich der Störung beobachtet.

Des Weiteren wurde von Cappa und Rutqvist (2011) die hydraulische Reaktivierung einer zuvor hydraulisch gering durchlässigen Störung ($k = 10^{-16}$ m²) an einem synthetischen Speicherstandort als hydromechanische sequenzielle Zweiwegkopplung untersucht. In diesem Zusammenhang wurde über einen Zeitraum von fünf Jahren CO_2 in ein 1500 m tief gelegenes, 100 m mächtiges Reservoir injiziert, das von einer 150 m mächtigen Barriereformation überlagert wurde. Um einen Fluidfluss von CO_2 in die Störung hinein zu erzielen, wurde eine äußerst geringe Entfernung von nur 500 m zwischen Injektionssonde und Störung gewählt. In der Simulation wurde ein maximaler Porendruckanstieg von 10 MPa am Übergang zwischen Störung und Reservoir beziehungsweise von etwa 0,75 MPa am „Auslass“ der Störung in den höhergelegenen GWL beobachtet. Zudem wurde eine maximale CO_2-Sättigung am unteren „Einlass“ der Störung in Höhe von 50 % erzielt. Hierbei kam es jedoch nach fünf Jahren ausschließlich zu erhöhten CO_2-Konzentrationen im

unteren Teil der Störung. Aufgrund einer Permeabilitätszunahme in Höhe von 1,5 Größenordnungen trat jedoch im Zeitraum nach Injektionsstopp eine vollständige Durchströmung der Störung mit CO_2 auf. Ergänzend haben Cappa und Rutqvist (2011) zusätzlich dieselbe Simulation unter Verwendung einer Einwegkopplung ohne Anpassung der Porosität und der Permeabilität ausgeführt. In diesem Fall fielen die erzielten Porendrücke im Reservoir um etwa 25 % höher aus als in der Basissimulation und es kam zu keinem Eintritt von CO_2 in die Störung. Diese Studie verdeutlicht die Notwendigkeit einer Zweiwegkopplung im Fall von reaktivierten Störungen.

4.2. Grundlagen der hydraulischen Prozesse

Um die auf mikroskopischer oder molekularer Ebene stattfindenden Prozesse in einer großräumigen Simulation abbilden zu können, ist eine Betrachtung als Kontinuum notwendig. Bei diesem Maßstabswechsel müssen Abstraktionen, wie beispielsweise die Einführung einer über das Kontinuum gemittelten Filtergeschwindigkeit verwendet werden. Zudem lassen sich hierdurch für einzelne finite Teilbereiche des Ganzen, kontinuumsmechanische Grundgleichungen, kinematische Beziehungen und Gleichgewichtsbetrachtungen in Form von Differenzialgleichungen formulieren. Diese lassen sich durch Linearisierung mit numerischen Methoden wie beispielsweise der Finite-Elemente-Methode oder der Finite-Differenzen-Methode unter Vorgabe von Rand- und Initialbedingungen lösen. Die im Folgenden beschriebenen mathematischen Formulierungen und Zustandsgleichungen werden im Rahmen dieser Arbeit für die Mehrphasenfluidfluss-Simulationen verwendet. Eine detaillierte Beschreibung der verwendeten Programmsysteme erfolgt in den entsprechenden Kapiteln, in denen sie eingesetzt werden.

In diesem Unterkapitel werden die theoretischen Grundlagen für die mathematische Beschreibung von hydraulischen Prozessen formuliert, wie sie bei der Injektion von CO_2 in tiefliegende Reservoire auftreten. Einen detaillierteren Überblick hierzu bieten Class (2001), Finsterer (1993), Pruess et al. (1999) und Pruess (2005).

4.2.1. Definitionen

Bei der geologischen Speicherung von CO_2 sind die auftretenden Fluidströme als ein Mehrphasenfluidfluss-Prozess zu betrachten. In diesem Zusammenhang sind die Begriffe Phase, Komponente und Lösung zu unterscheiden. Eine Phase wird durch den Aggregatzustand eines kompressiblen Mediums definiert. Hierbei werden die Zustände gasförmig, überkritisch, flüssig und fest unterschieden. Gase und Flüssigkeiten werden in diesem Zusammenhang allgemein als Fluide bezeichnet. Das Vorhandensein mehrerer Phasen setzt voraus, dass die vorhandenen Fluide nicht miteinander mischbar sind. Dies resultiert daher, dass zwischen den Fluiden eine Grenzfläche besteht und entsprechend der Fluidzusammensetzung eine Grenzflächenspannung vorliegt, die in porösen Medien wiederum zu einer Kapillardruckdifferenz führt. Im Fall von Flüssigkeiten können mehrere Phasen nebeneinander existieren. Im Fall von Gasen, bedingt durch ihre generelle Mischbarkeit, existiert jedoch nur eine Gasphase.

Eine Phase kann wiederum aus einer oder mehreren Komponenten bestehen. Als Komponente bezeichnet man eine Substanz mit bestimmter chemischer Zusammensetzung, die im Modell als eine Einheit aufgefasst wird. Entscheidend ist, dass in den aufgestellten Bilanzgleichungen der Anteil einer jeden Komponente in Abhängigkeit ihres Massenanteils berücksichtigt wird. Der Massenanteil X_β^κ definiert sich als Quotient aus der Masse m der Komponente κ in der Phase β bezogen auf die Gesamtmasse der Phase β durch

$$X_\beta^\kappa = \frac{m_\beta^\kappa}{m_\beta}. \tag{4.1}$$

Die Summe aller Massenanteile einer Phase ergibt dementsprechend den Wert 1.

Im Fall von salzwasserführenden GWLs stellt sich das ursprünglich den Porenraum des Speichergesteins ausfüllende Fluid als Lösung dar. Formationsfluid setzt sich aus unterschiedlichen mit Wasser in Lösung gegangenen Komponenten, wie beispielsweise Natriumchlorid (NaCl) zusammen. Liegt ein thermodynamisches Gleichgewicht vor, so ist die Verteilung der einzelnen Komponenten auf die einzelnen Phasen bekannt. Ändert sich jedoch der thermodynamische Zustand, so kann es zu einer Änderung der Phase oder der Phasenzusammensetzung kommen, die sich über Zustandsgleichungen ermitteln lassen.

4.2.2. Mehrphasenfluss als thermodynamischer Prozess

Im Folgenden werden die Begriffe Phasenzustand, Phasenübergang und Phasenwechsel erläutert. In Abhängigkeit der thermodynamischen Variablen Druck und Temperatur lassen sich die physikalischen Fluideigenschaften Dichte, Viskosität und innere Energie definieren. Hierbei definiert der Phasenzustand, ob eine Komponente in der Phase gasförmig, flüssig oder ob beide Phasen gleichzeitig vorliegen. Ein Wechsel der Phase wird hierbei als Phasenübergang bezeichnet. Ändert sich hingegen der Phasenzustand von einem Einphasen- in ein Zweiphasensystem, so bezeichnet man dies als einen Phasenwechsel. Ein solcher kann entweder durch einen Verdrängungsvorgang, wie er bei der Injektion von CO_2 entsteht, zustande kommen oder infolge einer Änderung der thermodynamischen Variablen Druck und Temperatur.

Das exemplarisch für Kohlenstoffdioxid in Bild 4.3 dargestellte Phasendiagramm gibt einen Überblick über die möglichen Phasenzustände in Abhängigkeit der thermodynamischen Variablen. In diesem Diagramm lassen sich der Sublimationspunkt, der kritische Punkt und der Tripelpunkt ablesen. Eine Besonderheit von CO_2 liegt darin, dass es unter atmosphärischem Druck (1,01325 bar) keinen Schmelzpunkt und keinen Siedepunkt besitzt, die den Wechsel zwischen fest und flüssig und zwischen flüssig und gasförmig definieren. Im Fall von CO_2 existiert unter Normaldruck nur ein Wechsel von fest auf gasförmig. Diesen Effekt beobachtet man beispielsweise im Fall des Verdampfens von Trockeneis ($N_{2,f}$). Im Tripelpunkt liegen alle Phasen miteinander im Gleichgewicht. Die rote Linie zwischen dem Nullpunkt und dem Tripelpunkt wird als Sublimationsdruckkurve, die zwischen dem Tripelpunkt und dem kritischen Punkt als Siedepunktkurve bezeichnet. Beide Kurven zusammen stellen die sogenannte Sättigungsdampfdruckkurve dar. Den

Übergang zwischen fest und flüssig bezeichnet man als Schmelzdruckkurve. Der kritische Punkt von CO_2 liegt bei einer Temperatur von 31,21 °C und einem Druck von 73,82 bar. Er definiert den Wechsel zwischen unterkritischem (gasförmig oder flüssig) und überkritischem CO_2. Für thermodynamische Variablen, die oberhalb des kritischen Punktes liegen, besitzt CO_2 eine hohe Dichte und eine geringe Viskosität. Dieser Zustand wird bei der geologischen CO_2-Speicherung angestrebt, weil hierdurch der Porenraum am ökonomischsten genutzt wird. Im unterkritischen Zustand kann CO_2 für Drücke oberhalb der Sättigungsdampfdruckkurve flüssig und unterhalb gasförmig sein. Zustände, die auf der Kurve liegen, können flüssig und gasförmig zugleich sein. Aufgrund der Temperatur- und Druckzustände, wie sie in geologischen Reservoiren herrschen, sind ausschließlich die Siedepunktkurve und der kritische Punkt von Bedeutung.

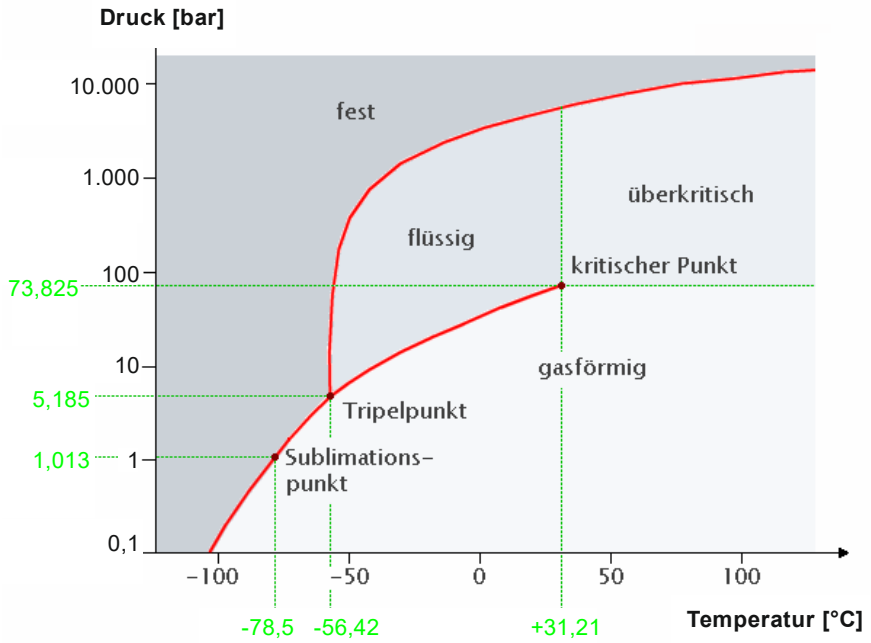


Bild 4.3 p/T-Phasendiagramm von Kohlendioxid definiert mögliche Phasenzustände (Quelle: http://anorganik.chemie.vias.org/phasendiagramm_pt_reinstoffe.html; 21.08.2017).

Setzt sich ein Gasgemisch aus unterschiedlichen Komponenten, wie beispielsweise aus Wasserdampf und gasförmigem CO_2 zusammen, so lässt sich der Gesamtdruck der Gasphase unter Annahme eines idealen Gasgemisches aus der Summe der Partialdrücke bestimmen.

$$p_g = p_{D,H_2O} + p_{D,CO_2}. \tag{4.2}$$

mit:

p_g	:	Gesamtgasdruck	[Pa]
$p_{D,H2O}$	:	Partialdruck Wasserdampf	[Pa]
$p_{D,CO2}$	:	Partialdruck gasförmiges CO_2	[Pa]

Aufgrund des Effektes der sogenannten Gasdruckerniedrigung, der sich auf das Vorhandensein von Kapillarkräften zurückführen lässt, kann der Dampfdruck $p_{D,H2O}$ auch unterhalb des Sättigungsdampfdrucks liegen. Der erniedrigte Partialdruck des Wasserdampfes lässt sich über die Anwendung der Kelvin Gleichung zur Ermittlung der relativen Luftfeuchtigkeit r_D bestimmen.

$$r_D = \exp\left(-\frac{p_c \cdot M_W}{\rho_f \cdot R \cdot T}\right) \tag{4.3}$$

mit:

r_D	:	relative Luftfeuchtigkeit	[-]
p_c	:	Kapillardruck	[Pa]
R	:	ideale Gaskonstante ~ 8,314	$[J \cdot K^{-1} mol^{-1}]$
T	:	Temperatur	[K]
M_W	:	Molekulargewicht des Fluids	$[kg \cdot mol^{-1}]$
ρ_f	:	Dichte der flüssigen Phase	$[kg \cdot m^{-3}]$

Mithilfe dieser ergibt sich der entsprechende Partialdruck des Wasserdampfes dann entsprechend Gleichung (4.4) zu

$$p_{D,H2O} = r_D \cdot p_{Sat}. \tag{4.4}$$

Angesichts der gegebenen thermischen Randbedingungen eines CO_2-Speichers, in dem in der Regel Temperaturen deutlich unterhalb von 100 °C herrschen, kann jedoch auf die Berücksichtigung des relativ geringen Anteils des Partialdrucks des Wasserdampfes am Gesamtgasdruck verzichtet werden (Spycher und Pruess (2003), Pruess (2005)). Folglich ist der Gesamtdruck nach Gleichung (4.2) dann identisch mit dem Partialdruck der CO_2-Phase.

4.2.3. Fluideigenschaften

Um die in den Kontinuitätsgleichungen verwendeten Flussterme zu parametrisieren, müssen die Fluideigenschaften des strömenden Formationsfluids sowie die des gasförmigen, flüssigen und überkritischen CO_2 bekannt sein. Hierbei handelt es sich um die Dichte und die dynamische Viskosität, die beide druck- und temperaturabhängig sind. In diesem Zusammenhang wird die Druckabhängigkeit von der Kompressibilität c $[Pa^{-1}]$ und die Temperaturabhängigkeit vom thermischen Ausdehnungskoeffizienten α_T $[K^{-1}]$ der jeweiligen Komponente bestimmt. Mithilfe beider Faktoren wird die relative Dichte- beziehungsweise Volumenänderung ins Verhältnis zur Druck- beziehungsweise Temperaturänderung gesetzt. Beide Parameter werden durch Zustandsgleichungen beschrieben.

Generell unterscheiden die verwendeten Module des Programmpakets TOUGH2-MP/ECO$_2$N, die im Rahmen dieser Arbeit für die hydraulische Simulation der Mehrphasenfluidfluss-Simulationen

verwendet werden, nur zwischen einer Fluidphase und einer Gasphase. Die Fluidphase besteht hierbei aus reinem H_2O, in dem NaCL und gegebenenfalls CO_2 gelöst sind. Die Gasphase besteht entweder aus gasförmigem, flüssigem oder überkritischem CO_2. Da auf eine Ermittlung des Partialdrucks des Wasserdampfes verzichtet wird, kann die gegenseitige Lösung von H_2O und CO_2 in der Gas- beziehungsweise in der Fluidphase nicht wie sonst häufig üblich mittels des Gesetzes von Henry erfolgen. Aus diesem Grund werden die gelösten Anteile der entsprechenden Phase nach Spycher und Pruess (2005) ermittelt.

Generell werden hierbei die Fluidparameter für das Formationsfluid und reines H_2O aus Battistelli et al. (1997) und für reines CO_2 aus Spycher und Pruess (2003) verwendet. Die aus mehreren Komponenten zusammengesetzten Fluidparameter der flüssigen und der gasförmigen Phasen werden entsprechend der vorkommenden Massenanteile gewichtet ermittelt. Die Dichte der Fluidphase errechnet sich in diesem Zusammenhang nach Gleichung (4.5).

$$\frac{1}{\rho_f} = \frac{1 - X_{Fluid}^{CO_2}}{\rho_b} + \frac{X_{Fluid}^{CO_2}}{\rho_{CO_2}} \tag{4.5}$$

mit:

$X_{Fluid}^{CO_2}$	:	Massenanteil von gelöstem CO_2 in Fluidphase	[-]
ρ_f	:	Dichte der Fluidphase	[kg · m^{-3}]
ρ_b	:	Dichte des Formationsfluids	[kg · m^{-3}]
ρ_{CO2}	:	Dichte des gelösten CO_2	[kg · m^{-3}]

Bei der Ermittlung der dynamischen Viskosität des Formationsfluids wird der gelöste CO_2-Anteil vernachlässigt, sodass ausschließlich der Wert für reines Salzwasser verwendet wird. In Anbetracht des relativ geringen Anteils von Wasserdampf in der gasförmigen CO_2-Phase werden in TOUGH2-MP/ECO2N für Temperaturen unterhalb von 110 °C Fluidparameter von reinem CO_2 unter Berücksichtigung des jeweiligen Phasenzustandes verwendet.

4.2.4. Mehrphasenfluss unter teilgesättigten Bedingungen

Fluidgefüllte poröse Medien lassen sich generell als mehrphasige Systeme betrachten. Wird vereinfachend angenommen, dass das System aus zwei nicht miteinander mischbaren Fluidphasen (Wasser und CO_2) und der festen Gesteinsmatrix besteht, so lassen sich die Prozesse der geologischen CO_2-Speicherung als Dreiphasensystem darstellen. Hierbei werden die beiden Fluidphasen wiederum in eine benetzende und eine nicht benetzende Phase unterteilt. Zwischen den Molekülen beziehungsweise den Atomen innerhalb einer Phase wirken van der Waals Kräfte, die diese „zusammenhalten“. Bildet man für ein Molekül innerhalb einer Flüssigkeit oder eines Gases die Summe, der auf dieses Teilchen einwirkenden Kräfte, so heben sie sich auf. Betrachtet man hingegen ein Molekül am Rand der Phase, so kommt es zu einem einseitigen Wirken der Kräfte, sodass das Molekül in Richtung des Zentrums angezogen wird. Hierdurch wird die Oberfläche der

Phase minimiert und es bildet sich eine kugelförmige Gestalt. Dadurch, dass sich der Betrag der van der Waals Kräfte in beiden Phasen unterscheidet, bildet sich zwischen diesen eine Grenzfläche, auf der wiederum eine sogenannte Grenzflächenspannung σ_{ij} wirkt.

Überträgt man dies auf ein poröses Medium s, dessen Poren von zwei unterschiedlichen Fluiden g und f ausgefüllt sind, so tritt, wie in Bild 4.4 gezeigt, zwischen beiden Fluiden die Grenzflächenspannung σ_{fg}, zwischen Fluid f und dem Feststoff σ_{sf} und zwischen Fluid g und dem Feststoff σ_{sg} auf. Zudem stellt sich zwischen der Grenzfläche der beiden nicht mischbaren Phasen und dem Festkörper ein Benetzungswinkel α ein.

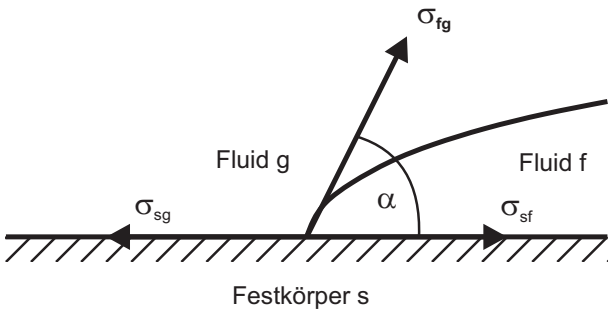


Bild 4.4 Grenzflächenspannung und Benetzungswinkel zwischen zwei Fluiden und einem Festkörper (Finsterle (1993)).

Betrachtet man nun den Benetzungswinkel α zwischen der Grenzfläche der beiden Fluide und dem Feststoff, so wird das Fluid, für das sich ein spitzer Winkel einstellt, als das den Feststoff benetzende bezeichnet. Das andere stellt folglich das nicht benetzende Fluid dar. Im Fall der geologischen CO_2-Speicherung werden das Formationsfluid/ Salzwasser als benetzende und das CO_2 als nicht benetzende Phasen bezeichnet.

Wird dieser Gedankengang auf die in Bild 4.5 dargestellte kreisrunde, in ein Wasserbecken getauchte Kapillare mit dem Durchmesser 2 r übertragen, so steigt der Wasserpegel innerhalb der Röhre um die kapillare Steighöhe h_c. Dieser Effekt der Kapillarität liegt darin begründet, dass sich zwischen der benetzenden und der nicht benetzenden Phase ein Meniskus ausbildet und sich infolgedessen eine Grenzflächenspannung σ_{fg} aufbaut, die unter dem Benetzungswinkel α zur Berandung der Pore geneigt ist und entlang des kreisrunden Umfangs des Schnittpunktes mit der Wandung der Kapillare wirkt.

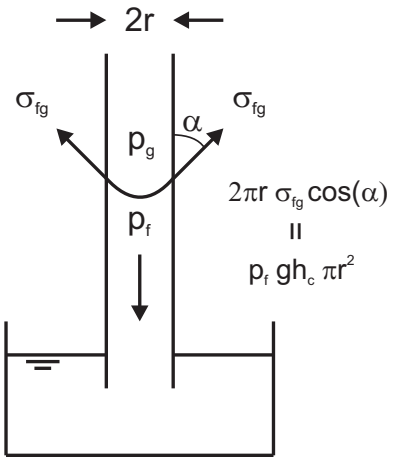


Bild 4.5 Kapillare Steighöhe h_c und entsprechender Kapillardruck p_c am Beispiel einer in Wasser getauchten Kapillare (aus Finsterle (1993)).

Eine Integration der Grenzflächenspannung über den Umfang der Kapillare und ein Aufstellen des Kräftegleichgewichts in vertikaler Richtung unter Berücksichtigung der angehängten Wassersäule, liefert die rechnerische kapillare Steighöhe h_c respektive den wirkenden Kapillardruck (Gleichung (4.6)).

$$p_c = \rho_f \cdot g \cdot h_c = \frac{2 \cdot \sigma_{fg} \cdot \cos \alpha}{r} \tag{4.6}$$

Bezieht man nun diesen Kapillardruck p_c auf die Drücke innerhalb der benetzenden (p_f) und der nicht benetzenden Phase (p_g), so stellt dieser entsprechend Gleichung (4.7) die Differenz der beiden Partialdrücke dar.

$$p_c = p_g - p_f \tag{4.7}$$

Da die Poren des porösen Mediums mit zwei nicht mischbaren Fluiden gefüllt sind, liegt für dieses System eine Teilsättigung vor. Hierbei beträgt die Summe der jeweiligen Partialsättigungen $S_\beta = 1$, wobei S_β in Abhängigkeit des jeweiligen Sättigungsgrades zwischen der Residualsättigung $S_{r\beta}$ und 1 liegt ($S_{r\beta} \leq S_\beta \leq 1$). Die Residualsättigung bezeichnet einen Zustand, in der Phase β nicht mehr zusammenhängend ist, sodass ein Darcy-Fließen dieser Phase unterhalb dieser Sättigung nicht mehr möglich ist. Die relative Permeabilität beträgt unterhalb der Residualsättigung folglich 0, während die der anderen dem Wert Eins entspricht. Aus diesem Grund bietet es sich an, die Sättigung als effektive Sättigung zu definieren. Hierzu existieren die in Gleichung (4.8) und (4.9) dargestellten Varianten.

$$S_{e\beta} = \frac{S_\beta - S_{r\beta}}{1 - S_{r\beta}} \qquad (S_{r\beta} \leq S_\beta \leq 1) \tag{4.8}$$

$$S_e = \frac{S_f - S_{rf}}{1 - S_{rf} - S_{rg}} \qquad (S_{rf} \leq S_f \leq 1 - S_{rg}) \tag{4.9}$$

In Gleichung (4.8) wird, wie in Bild 4.6 anschaulich verdeutlicht, die Differenz zwischen der aktuellen Sättigung einer Phase S_β und ihrer Residualsättigung auf die Differenz zwischen vollständiger Sättigung und ihrer Residualsättigung bezogen. In Variante 2 wird hingegen die Differenz zwischen der aktuellen Fluidsättigung und der Residualsättigung des Fluids in Relation zur Differenz zwischen der vollständigen Sättigung und den entsprechenden Residualsättigungen der Gas- und der Fluidphasen gesetzt. Die effektive Sättigung S_e aus Gleichung (4.9) ist folglich für den Sättigungsbereich zwischen den Residualsättigungen beider Fluide definiert, während sich die effektive Sättigung $S_{e\beta}$ aus Gleichung (4.8) auf den Bereich zwischen 1 und der entsprechenden Residualsättigung bezieht.

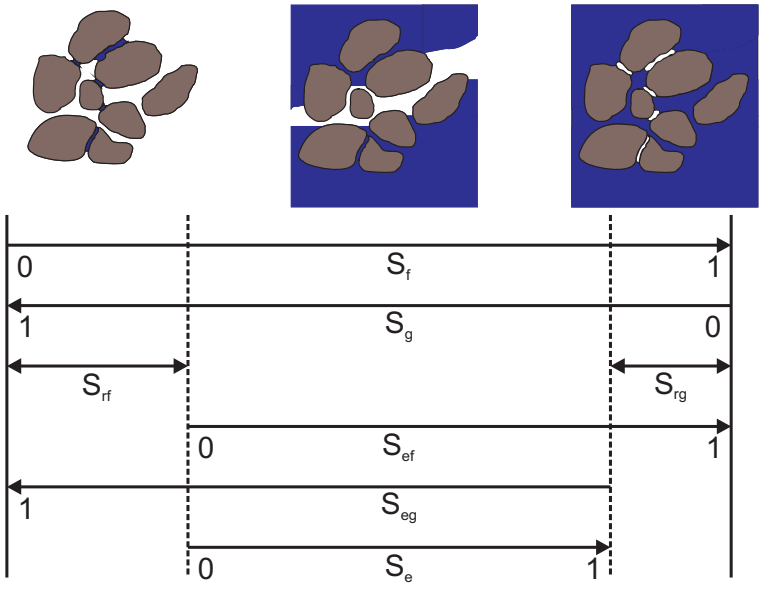


Bild 4.6 Definition der residualen und der effektiven Sättigungen (verändert aus Finsterle (1993)).

Um eine makroskopische Betrachtungsweise anstellen zu können, wird der Einfluss der Kapillarität durch sogenannte Kapillardruckkurven, die in Abhängigkeit der Fluidsättigung der benetzenden Phase aufgetragen wird, repräsentiert. Finsterle (1993) begründet diese Beziehung dadurch, dass die kapillare Steighöhe in Gleichung (4.6) über den Porenradius gesteuert wird. Hieraus folgt, dass sich eine Phase bei abnehmender Sättigung in immer kleinere Poren zurückzieht und folglich der Kapillardruck entsprechend ansteigt. Wird beispielsweise CO_2 in ein Porensystem injiziert, so muss der Druck in dieser Gasphase um den Betrag des Kapillardrucks höher sein als der Porendruck der benetzenden Phase, damit Formationsfluid/ Salzwasser verdrängt werden kann. Mit abnehmender Sättigung des benetzenden Fluids wird dieses in Poren mit kleinerem Radius verdrängt, sodass auch der auftretende Kapillardruck entsprechend Gleichung (4.6) steigt.

Brooks und Corey (1964) haben herausgefunden, dass die in Bild 4.7 (links) als gestrichelte Linie dargestellte Funktion des Kapillardrucks in Abhängigkeit der effektiven Sättigung S_e im doppellogarithmischen Maßstab aufgetragen, die Form einer Gerade annimmt. Durch Ableitung dieser Gerade erhält man die Steigung λ. Die Kurve ist um den Betrag des kapillaren Eindringdrucks P_d

nach oben verschoben. Dieser Druck muss überwunden werden, damit die nicht benetzende Phase in das Porensystem eindringen kann. Hierdurch verdrängt sie die benetzende Phase, wodurch sich deren Sättigung entsprechend reduziert. Hierauf basierend haben sie ihre Kapillardruck-Sättigungs-Funktion aufgestellt, wie sie Gleichung (4.10) zu entnehmen ist.

$$p_c(S_f) = P_d \, (S_e)^{\frac{-1}{\lambda}} \qquad (S_{rf} \leq S_f \leq 1 - S_{rg}) \tag{4.10}$$

mit:

λ	:	Steigung der $p_c(S_e)$-Kurve	[-]
p_d	:	Kapillarer Eindringdruck	[Pa]

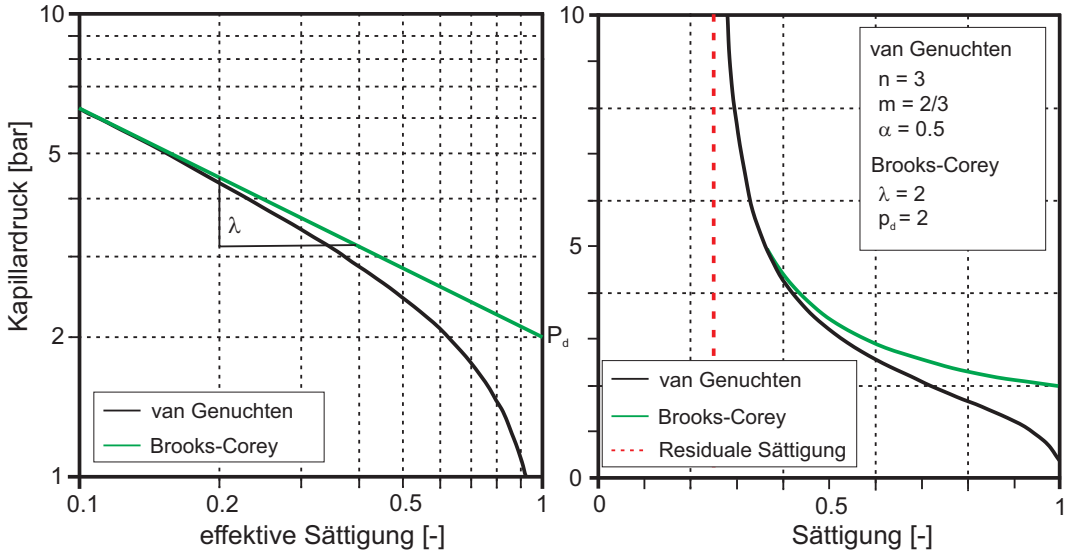


Bild 4.7 Links: Bestimmung der Brooks-Corey Parameter λ und P_d. Rechts: Kapillardruck-Sättigungs-Kurven nach Brooks und Corey (1964) und van Genuchten (1980) (aus Finsterle (1993)).

Eine zweite weitverbreitete Funktion zur Beschreibung des Kapillardrucks stellt Gleichung (4.11) dar. Hierbei handelt es sich um die Formulierung nach van Genuchten (1980).

$$p_c(S_f) = \frac{1}{\alpha_{vG}} \left[(S_e)^{\frac{-1}{m_{vG}}} - 1 \right]^{1-m} \qquad (S_{rf} \leq S_f \leq 1 - S_{rg}) \tag{4.11}$$

mit:

α_{vG}	:	van Genuchten Parameter	[Pa^{-1}]
m_{vG}	:	van Genuchten Parameter	[-]

Die Gegenüberstellung in Bild 4.7 (rechts) zeigt, dass beide Ansätze im niedrigen Sättigungsbereich deckungsgleich sind, jedoch im Bereich hoher Sättigungen voneinander abweichen. Im Vergleich zu Laborergebnissen bildet Gleichung (4.11) den Verlauf im Bereich hoher Sättigungen

realistischer ab. Die van Genuchten Parameter α und m lassen sich entsprechend den Gleichungen (4.12) bis (4.14) aus den Parametern von Brooks und Corey (1964) ermitteln.

$$n = \lambda + 1 \tag{4.12}$$

$$\alpha_{vG} = \frac{1}{P_d} \tag{4.13}$$

$$m_{vG} = 1 - \frac{1}{n} \tag{4.14}$$

Wie bereits zu Beginn des Kapitels formuliert, setzt die Kontinuumsbetrachtung eines porösen Mediums bestimmte Annahmen, wie beispielsweise die Einführung einer mittleren Filtergeschwindigkeit, voraus. Hierbei wird der komplexe Fluidfluss durch ein Porensystem approximiert, indem vereinfacht angenommen wird, dass das Fluid durch das Gesamtvolumen des Referenzkörpers fließt. Diese Approximation vernachlässigt jedoch, dass in der Realität ausschließlich das Porenvolumen durchflossen werden kann. Unter Annahme von laminarem Fließen sowie eines homogenen Mediums besagt das Gesetz von Darcy, dass die Filtergeschwindigkeit v proportional zum Druckgradienten ∇p ist. Mit diesem Ansatz können auch anisotrope poröse Gesteine betrachtet werden. In diesem Fall sind sowohl die hydraulische Leitfähigkeit als auch die auftretenden Gradienten in Form eines richtungsabhängigen Vektors zu definieren (Mandl (1988)).

Die Relation zwischen beiden Größen bestimmt die hydraulische Leitfähigkeit k_β [m/s], die als ein Fließwiderstand zu betrachten ist und sich entsprechend Gleichung (4.15) ergibt. Im Fall von Mehrphasenfluss ist diese Gleichung mit der relativen Permeabilität $k_{r\beta}$ zu multiplizieren, sodass in der verallgemeinerten Form k_β als eine effektive Permeabilität für jede Phase vorliegt.

$$k_\beta = k \cdot k_{r\beta} \cdot \frac{\rho_\beta \cdot g}{\mu_\beta} \tag{4.15}$$

mit:

k_β	:	hydraulische Leitfähigkeit der Phase β	[m/s]
k	:	intrinsische Permeabilität	[m²]
$k_{r\beta}$	:	relative Permeabilität	[-]
ρ_β	:	Dichte der Phase β	[kg/m³]
g	:	Erdbeschleunigung	[m/s²]
μ_β	:	dynamische Viskosität der Phase β	[Pa·s]

Die effektive Permeabilität oder effektive Leitfähigkeit k_β, die im Folgenden noch definiert wird, setzt sich aus einem rein geometrischen Anteil, der den Aufbau des Porensystems berücksichtigt,

und einem hydraulischen Anteil, der die Eigenschaften des strömenden Fluids repräsentiert, zusammen. Hierbei entspricht k der intrinsischen Permeabilität, k_{rb} der relativen Permeabilität, ρ_β der Dichte von Phase β, g der Erdbeschleunigung und μ_β der der dynamischen Viskosität des strömenden Fluids β.

Bei der relativen Permeabilität handelt es sich um eine dimensionslose Zahl zwischen null und eins, die das Verhältnis zwischen der effektiven Permeabilität unter Teilsättigung und der absoluten Permeabilität, bei der der Porenraum zu 100 % mit der jeweiligen Phase gesättigt ist, ausdrückt. Aufgrund von teilgesättigten Zuständen reduziert sich der für den Durchfluss des jeweiligen Fluids zur Verfügung stehende Anteil des Porenraums. Generell wird angenommen, dass die größeren Poren vom nicht benetzenden und die kleinen Poren vom benetzenden Medium durchflossen werden. Zu dieser relativen Verringerung des Fließquerschnittes tritt zusätzlich Tortuosität auf, die daraus resultiert, dass das jeweils strömende Fluid vom jeweils anderen Fluid gefüllte Bereiche umfließen muss, was zu einer Verlängerung des Fließweges führt. Bild 4.8 zeigt exemplarisch relative Permeabilitäts-Sättigungs-Kurven und Kapillardrucksättigungskurven für einen Sandstein. Die nicht benetzende Phase ist hierbei CO_2.

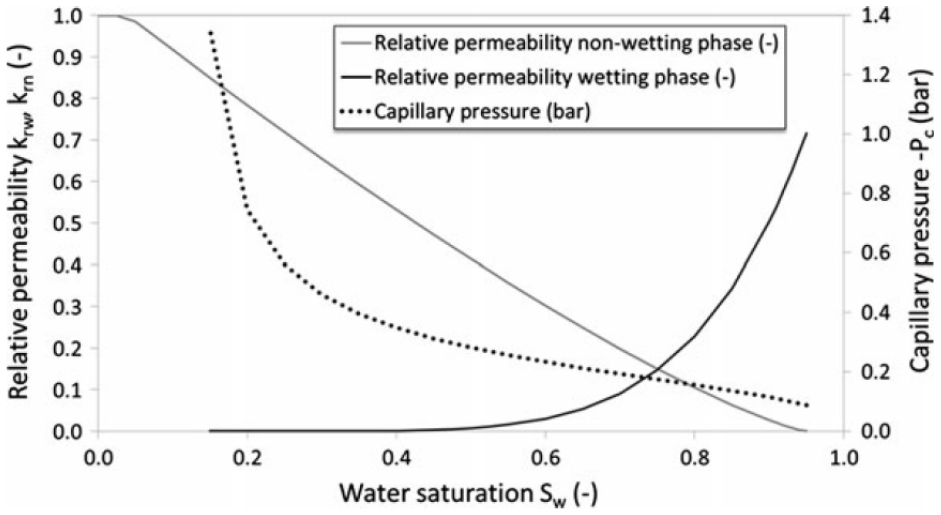


Bild 4.8 Relative Permeabilitäten der benetzenden k_{rw} und der nicht benetzenden Phase k_{rn} (CO_2) sowie Kapillardruck in Abhängigkeit der benetzenden Phase S_w für einen Sandstein (Kempka und Kühn (2013)).

Es ist gut zu erkennen, dass sich bereits bei einer Reduktion der Fluidsättigung auf 0,75 die relativen Permeabilitäten beider Fluide auf 20 % ihrer absoluten Permeabilität reduzieren. Obwohl hierbei der Porenraum zu einem Teil von CO_2 durchströmt wird, dessen dynamische Viskosität im kritischen Zustand um mehr als eine Größenordnung höher ist als die des Formationsfluids, verringert sich in diesem Fall die effektive Permeabilität beider Fluide.

In Abhängigkeit von Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen lassen sich wiederum unter Berücksichtigung des Gesetzes von Hagen-Poiseuille, der Berechnung des mittleren hydraulischen Radius und der Berücksichtigung eines empirischen Ansatzes von Tortuosität und einer Verringerung

des Fließquerschnitts proportional zur Sättigung, Funktionen zur Ermittlung der relativen Permeabilität in Abhängigkeit der Fluidsättigung definieren. Neben anderen möglichen Ansätzen bietet der Ansatz von van Genuchten (1980) und Mualem (1976), wie in den Gleichungen (4.16) und (4.17) zu sehen, die Möglichkeit die relative Permeabilität in Abhängigkeit der effektiven Sättigung aus Gleichung (4.9) quantitativ zu berechnen.

$$k_{rf} = S_e^{\varepsilon} \cdot \left[1 - \left(1 - S_e^{1/m}\right)^m\right]^2 \tag{4.16}$$

$$k_{rg} = (1 - S_e)^{\gamma} \cdot \left[1 - S_e^{1/m}\right]^{2 \cdot m} \tag{4.17}$$

mit:

ε, γ	:	Formparameter für den Vernetzungsgrad der Poren	
k_{rf}	:	relative Permeabilität der Fluidphase	[-]
k_{rg}	:	relative Permeabilität der Gasphase	[-]

Hierbei stellen ε und γ Formparameter dar, die den Vernetzungsgrad der Poren berücksichtigen. Laut van Genuchten (1980) können $\varepsilon = 0{,}5$ und $\gamma = 1/3$ gesetzt werden.

4.2.5. Kontinuumsmechanische Grundgleichungen

Zur mathematischen Formulierung des Mehrphasenflussprozesses werden kontinuumsmechanische Grundgleichungen verwendet, mit denen die Masse, der Impuls und die Energie bilanziert werden. Die Impuls-/ beziehungsweise die Bewegungsgleichungen werden hierbei in TOUGH2-MP/ECO$_2$N über das verallgemeinerte Gesetz von Darcy für Mehrphasenfluss, bei dem der Fluidfluss getrennt für jede Phase unter Berücksichtigung von effektiven Permeabilitäten ermittelt wird, aufgestellt.

Zudem wird für die drei betrachteten Komponenten H_2O, CO_2, NaCl jeweils eine Massenbilanzgleichung aufgestellt. Da die Komponenten als unterschiedliche Phasen in Erscheinung treten können, wird in jeder Massenbilanz über den jeweiligen Phasenzustand summiert. Der Massenfluss von NaCl wird dadurch berücksichtigt, dass dieses in Lösung gehen kann und entsprechend mit dem Fluidfluss des H_2O migriert. Die thermodynamische Unbekannte „Temperatur“ wird über die Energiebilanz ermittelt. Diese vier Gleichungen werden auch als Erhaltungsgleichungen bezeichnet und stellen sich in allgemeiner Form, wie in Gleichung (4.18) dargestellt, dar.

$$\frac{d}{dt} \int_V M^{\kappa} \, dv = \int_{\Gamma} F^{\kappa} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \int_V q^{\kappa} \, dv \tag{4.18}$$

Hierbei steht der Index κ für die Komponenten CO_2, H_2O, NaCl und Wärmeenergie, wohingegen M^κ den Massen- beziehungsweise den Wärmeanreicherungsterm, F^κ den Massen- beziehungsweise den Wärmeflussterm und q^κ einen Quellen- oder Senkenterm darstellen. In dieser Gleichung wird die Änderung der Masse und Energie in dem Volumen V innerhalb eines Zeitinkrementes dt den Zu- und Abflüssen über den Gebietsrand Γ und den Quellen und Senken innerhalb eines betrachteten Volumens gegenübergestellt. Mit **n** wird in diesem Fall der Einheitsvektor bezeichnet, der senkrecht auf dem Gebietsrand steht.

Der Massenanreicherungsterm gliedert sich entsprechend Gleichung (4.19)

$$M^\kappa = \phi \sum_\beta \left(S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot X_\beta^\kappa \right), \tag{4.19}$$

wobei das Produkt aus Porenanteil ϕ und Phasensättigung S_β dem Porenteil, der von der Phase β eingenommen wird, entspricht. X_β^κ repräsentiert den Massenanteil der jeweiligen Komponente innerhalb der Phase β.

Der Wärmeanreicherungsterm stellt sich entsprechend Gleichung (4.20) dar.

$$M^E = (1 - \phi) \cdot \rho_M \cdot C_M \cdot T + \phi \sum_\beta \left(S_\beta \cdot \rho_\beta \cdot u_\beta \right), \tag{4.20}$$

mit:

ρ_M	:	Dichte der Kornmatrix	[kg/m³]
c_M	:	spezifische Wärmekapazität der Kornmatrix	[J/kg·K]
T	:	Temperatur	[K]
u_β	:	innere Energie der Phase β	[J/kg]

Der Massenfluss F einer Komponente κ entspricht dem Produkt aus der Filtergeschwindigkeit u_β und der Dichte der Phase β und setzt sich entsprechend Gleichung (4.21) aus einem advektiven und einem diffusiven Anteil zusammen.

$$F^\kappa = \rho_\beta \cdot u_\beta = \sum_\beta \left(F_\beta \cdot X_\beta^\kappa \right) + F_{diff}^\kappa \tag{4.21}$$

Hierbei wird der advektive Anteil durch das verallgemeinerte Gesetz von Darcy unter Berücksichtigung eines Druckgradienten und der Gravitation beschrieben:

$$F_\beta = -k \cdot \frac{k_{r\beta} \cdot \rho_\beta}{\mu_\beta} \cdot \left(\nabla p_\beta - \rho_\beta \cdot g \right) \tag{4.22}$$

Durch die relativ geringe intrinsische Permeabilität des Speichergesteins und eventuell vorhandener Störungen, sind die auftretenden Filtergeschwindigkeiten so gering, dass Prozesse infolge von

Diffusion aufgrund eines Konzentrationsgradienten bedeutsam werden können. Dieser Prozess wird durch das Fick'sche Gesetz (4.23) beschrieben.

$$F^{\kappa}_{diff} = -D_{DL} \cdot \rho_{\beta} \cdot \nabla X^{\kappa}_{\beta} \tag{4.23}$$

mit:

D_{DL}	:	Diffusionskoeffizient	[m²/s]
$\nabla X_{\beta}^{\kappa}$	:	Konzentrationsgradient	[-]

Der Wärmefluss setzt sich entsprechend Gleichung (4.21) aus einem konduktiven und einem konvektiven Anteil zusammen.

$$F^{E} = -K \cdot \nabla T + \sum_{\beta} \sum_{\kappa} h^{\kappa}_{\beta} \cdot F^{\kappa}_{\beta} \tag{4.24}$$

mit:

∇T	:	Temperaturgradient	[-]
h_{β}^{κ}	:	spezifische Enthalpie der Komponente κ in Phase β	[J/kg]
K	:	gemittelte Wärmeleitfähigkeit	$[\frac{J}{s \cdot m \cdot K}]$

Mit diesen vier Differenzialgleichungen stehen somit die vier primären thermodynamischen Variablen Porendruck p_g der Gasphase, Massenanteil NaCl X_{sm}, Gassättigung S_g und Temperatur T zur Verfügung, um den Prozess des Mehrphasenflusses zu beschreiben. Aufgrund der Komplexität ist das Differenzialgleichungssystems ausschließlich numerisch zu lösen. Im Rahmen dieser Arbeit werden für die Simulation von Mehrphasenflussprozessen das Programmsystem TOUGH2-MP/ECO2N verwendet. Das Programm berücksichtigt grundsätzlich eine Gas- und eine Fluidphase, wobei die Komponenten H_2O und darin gelöstes NaCl der Fluidphase und CO_2 der Gasphase zugerechnet werden. Für thermodynamische Zustände unterhalb des kritischen Punktes kann die Gasphase entweder aus gasförmigem oder flüssigem, oberhalb dieses Punktes ausschließlich aus überkritischem CO_2 bestehen.

Die fehlenden thermodynamischen Variablen wie der Porendruck der Fluidphase p_f und die Fluidsättigung S_f lassen sich entsprechend der zuvor beschriebenen theoretischen Zusammenhänge aus den vier Primärvariablen ableiten. Die Fluideigenschaften für beide Phasen werden ebenfalls ständig in Abhängigkeit der Primärvariablen aktualisiert.

4.3. Grundlagen der geomechanischen Prozesse

Das folgende Kapitel beschreibt mögliche Stoffgesetze und Bruchkriterien zur Beschreibung des elasto-plastischen Spannungs-Dehnungsverhaltens im Rahmen geomechanischer Prozesse, die bei der geologischen CO_2-Speicherung auftreten. Diesbezüglich werden die geologischen Einheiten

Reservoirgestein, Barrieregestein und Störung unterschieden. Ergänzend werden die Grundlagen der Elastizitäts- und die Plastizitätstheorie erläutert sowie der Einfluss von poroelastischen Effekten im Hinblick auf die Definition von effektiven Spannungen diskutiert.

4.3.1. Theorie der effektiven Spannungen nach Terzaghi und Biot

Mandl (1988) beschreibt Fels generell als ein poröses Medium, das in der Regel wassergesättigt ist. Aus diesem Grund geht er auch im Fall einer geringen Porosität davon aus, dass es sich um ein zusammenhängendes Porensystem handelt, weshalb generell effektive anstelle totaler Spannungen bei der Bestimmung des Bruchzustands sowie bei der Ermittlung von elastischen Verformungen anzusetzen sind.

In den zwanziger Jahren des 20. Jahrhunderts entwickelte Karl von Terzaghi eine erste Form der Konsolidationstheorie für eindimensionale Entwässerungszustände in porösen Medien. Er formulierte diese Theorie unter Berücksichtigung des linear-elastischen Stoffgesetzes, dem Strömungsgesetz von Darcy, der Kontinuitätsgleichung und dem Gesetz der effektiven Spannungen, wie es in Gleichung (4.25) dargestellt ist.

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma' + \Delta p \tag{4.25}$$

Hierbei entspricht $\Delta\sigma$ der totalen Spannungsänderung, die in einem porösen Medium wirkt. Sie setzt sich aus der Summe der effektiven Spannungsänderung $\Delta\sigma$‘, die ausschließlich auf das Korngerüst wirkt und der Porendruckänderung Δp zusammen. Dadurch, dass dieser Theorie die Annahme von inkompressiblen Gesteinskörnern zugrunde liegt, werden bei der Konsolidationstheorie nach Terzaghi und folglich in der Formulierung der effektiven Spannungen keine poroelastischen Effekte berücksichtigt.

Das Gesamtvolumen V_{ges} eines porösen Mediums setzt sich aus der Summe des Volumens der Gesteinsmatrix V_s und dem Porenvolumen V_p zusammen.

$$V_{ges} = V_s + V_p \tag{4.26}$$

Treten nun infolge von Kompression oder Dekompression volumetrische Dehnungen auf, so ist unter Berücksichtigung einer inkompressiblen Gesteinsmatrix davon auszugehen, dass die resultierende Volumenänderung ΔV_{ges} sich ausschließlich auf die Änderung des Porenvolumens ΔV_p auswirkt.

Werden poroelastische Effekte berücksichtigt, so treten aufgrund einer Änderung der effektiven Spannungen zusätzlich volumetrische Dehnungen der Gesteinsmatrix ΔV_s auf, die im Fall einer Erhöhung der effektiven Spannungen zu einer Reduzierung und im Fall einer Verringerung zu einer Vergrößerung von V_s führen. Diese Änderung von ΔV_s ist folglich bei der Ermittlung von ΔV_p entsprechend Gleichung (4.27) zu berücksichtigen.

$$\Delta V_p = \Delta V_{ges} - \Delta V_s \tag{4.27}$$

Im Fall von Fluidinjektion in ein Reservoir, bei der signifikante Porendruckanstiege bei gleichzeitig nahezu konstant bleibenden totalen Spannungen auftreten, kann es zum sogenannten Mandl-Cryer-Effekt (Cryer (1963)) kommen. Dieser Effekt besagt, dass bei solchen Prozessen unter Berücksichtigung von Poroelastizität ein höherer Porendruckanstieg zu verzeichnen ist als er bei Verwendung der Konsolidationstheorie von Terzaghi zu erwarten gewesen wäre. Dies ist darauf zurück zu führen, dass es infolge einer Reduzierung der effektiven Spannungen zu einer Vergrößerung von V_s kommt, was wiederum das Porenvolumen V_p um diesen Anteil verringert. Eine solche Reduzierung der Porosität bewirkt dabei eine zusätzliche Erhöhung des Porendrucks. Von diesem Effekt wird in der 6. Auflage des Grundbautaschenbuches (Smoltczyk (2001)) auch im Zusammenhang mit zwei- oder dreidimensionalen Konsolidationsproblemen berichtet.

Eine allgemeine dreidimensionale Konsolidationstheorie unter Berücksichtigung von poroelastischen Effekten wurde von Biot (1962) basierend auf seinen vorherigen Arbeiten hergeleitet. In seiner Herleitung betrachtet er einen Zustand, bei dem sich in einem Bodenelement der Porendruck erhöht, wohingegen sich die wirkenden totalen Spannungen nicht verändern. Mandl (1988) beschreibt diesen Zustand, indem er gedanklich ein poröses, trockenes Bodenkontinuum in situ herausschneidet. Dieses Element wird anschließend allseitig durch perforierte, verschiebbare Platten belastet. In diesem Fall entsprechen die inneren effektiven Spannungen den totalen Spannungen.

Dann wird dieses Bodenelement in Wasser getaucht, was dazu führt, dass sich das Bodenelement aufgrund des verringerten effektiven Spannungszustands ausdehnt. Im Fall von behinderter Dehnung treten hierdurch Zwangsspannungen auf. Zudem wird das Kontinuum von außen mit Δp zusätzlich belastet. Damit sich der ursprüngliche Betrag der totalen Spannungen infolge dieser Zwangsspannungen nicht erhöht, verschiebt Mandl die äußeren Platten gedanklich soweit, bis sich die ursprünglichen totalen Spannungen zuzüglich Δp wieder einstellen. Dieser Vorgang geht mit einer Volumenzunahme einher.

Um diesen Zustand in seinem Modell abzubilden, definierte Biot einen fiktiven Modul H. Dieser Modul beschreibt die theoretische Volumenänderung ΔV_{ges} des Kontinuums, die eine Porendruckänderung Δp unter konstant bleibenden totalen Spannungen bewirken würde, wenn es sich frei verschieben könnte. Zudem nahm er an, dass in diesem Fall lediglich der Porendruck Δp auf die Gesteinsmatrix wirkt und folglich für eine daraus resultierende volumetrische Dehnung $\Delta V_s/V_s$, die durch den Kompressionsmodul K_s gesteuert wird, verantwortlich ist (Gleichung (4.28)).

$$\frac{\Delta V_s}{V_s} = \frac{\Delta p}{K_s} \tag{4.28}$$

$$\frac{\Delta V_{ges}}{V} = \left(\frac{1}{K} - \frac{1}{H}\right) \cdot \Delta p \tag{4.29}$$

Da jetzt ausschließlich Δp als äußere zusätzliche Last auf das Kontinuum wirkt, definierte Biot die volumetrische Dehnung $\Delta V_{ges}/V$ entsprechend Gleichung (4.29), wobei K dem Kompressionsmodul des Korngerüstes entspricht. Sollte in dieser Situation trotzdem eine volumetrische Dehnung auftreten, so nahm er an, dass diese nur mit einer Volumenänderung der Gesteinsmatrix ΔV_s zu erklären ist. Aus diesem Grund setzte er die Gleichungen (4.28) und (4.29) gleich und erhält somit eine Gleichung zur Ermittlung des unbekannten Moduls H. Die weitere Herleitung ist Mandl (1988) zu entnehmen. Letztendlich führt diese sowohl zu Gleichung (4.30), die die effektiven Spannungen nach Biot definiert, als auch zu Gleichung (4.31), die den poroelastischen Einfluss auf die Änderung des Porenvolumens beschreibt.

$$\sigma' = \sigma + \alpha \cdot p \tag{4.30}$$

$$\frac{\Delta V_p}{V} = \frac{1}{K}\left[\frac{\alpha \cdot \left(\Delta\sigma_1' + \Delta\sigma_2' + \Delta\sigma_3'\right)}{3} + (1 - \alpha) \cdot \phi \cdot \Delta p\right] \tag{4.31}$$

$$\alpha = 1 - \frac{K}{K_S} \tag{4.32}$$

Unter Berücksichtigung der Vorzeichenkonvention, nach der Druckspannungen negativ und Porendrücke positiv definiert sind, verdeutlicht Gleichung (4.31), dass Poroelastizität bei einer Porendruckerhöhung zu einer Ausdehnung der Gesteinsmatrix führt. Dies reduziert die Änderung des Porenvolumens ΔV_p infolge von elastischen Dehnungen, womit wiederum ein zusätzlicher Porendruckanstieg einhergeht. Der Biot-Koeffizient α in Gleichung (4.32) wird auch als sogenannte Porendruckwirksamkeit bezeichnet, da er über das Verhältnis des Kompressionsmoduls des Korngerüstes im Verhältnis zum Kompressionsmodul der Gesteinsmatrix die Höhe des wirksam werdenden Porendrucks auf die effektiven Spannungen beschreibt. Er kann theoretisch Werte zwischen „0“ und 1 annehmen.

Albrecht (2015), Skomedal und Hettema (2002), Trautwein (2005) und Wang (2000) geben typische Biot-Koeffizienten von dicht gelagerten Sandsteinen zwischen 0,64 und 0,85 an. Im Fall von hochporösen Gesteinen kann laut Albrecht (2015) α in der Regel zu eins angenommen werden.

Mandl (1988) berichtet davon, dass die effektiven Spannungen nach Biot in der Praxis häufig ausschließlich durch Berücksichtigung von Gleichung (4.30) unter Vernachlässigung von Gleichung (4.31) ermittelt werden. Dies kann unter Umständen zu einer erheblichen Überschätzung der Scherfestigkeit von Fels führen. Neben der Tatsache, dass eine Vielzahl von Laborversuchen gezeigt haben, dass die Theorie der effektiven Spannungen nach Terzaghi in Kombination mit der Bruchbedingung nach Mohr-Coulomb die Scherfestigkeit von Boden und Gestein zufriedenstellend beschreibt, spricht er sich aufgrund der häufig fehlerhaften Anwendung der Theorie der effektiven Spannungen nach Biot für die generelle Verwendung der effektiven Spannungen nach Terzaghi aus. Altmann et al. (2014), Deichmann und Evans (2007) und Valley und Evans (2007) berichten ebenfalls davon, dass die Verwendung der effektiven Spannungen

nach Terzaghi in Kombination mit dem Bruchkriterium von Mohr-Coulomb den Prozess der hydraulischen Reaktivierung von Störungen zufriedenstellend beschreibt. Für die Untersuchung des Bruchverhaltens von dicht gelagerten Reservoirgesteinen empfehlen Altmann et al. (2014) jedoch die Verwendung der effektiven Spannungen nach Biot.

Die beiden im Rahmen dieser Arbeit angewendeten Programmsysteme ABAQUS und FLAC^{3D} berücksichtigen Poroelastizität auf unterschiedliche Weise. ABAQUS verwendet ausschließlich den poroelastischen Einfluss auf die volumetrischen Dehnungen entsprechend Gleichung (4.31) durch Berücksichtigung von Kompressionsmoduln für die Gesteinsmatrix K_s und des Fluids K_f unter genereller Verwendung der effektiven Spannungen nach Terzaghi. Abweichend hiervon berücksichtigt FLAC^{3D} für den Fall, dass α ungleich eins ist, sowohl die effektiven Spannungen nach Biot als auch den poroelastischen Einfluss auf die Volumenänderung des Porenraums.

4.3.2. Stoffgesetze

Stoffgesetze stellen mathematische Modelle dar, die das mechanische Verhalten von Materialien wie beispielsweise Boden oder Fels beschreiben, indem sie eine Beziehung zwischen den wirkenden Spannungen und den daraus resultierenden Verzerrungen herstellen. Die im Folgenden beschriebenen Sachverhalte können in Muir Wood (1990) vertieft werden. Spannungszustände in einem bestimmten Punkt innerhalb der Materie lassen sich durch den Cauchyschen Spannungstensor, wie er sich im linken Teil von Gleichung (4.33) darstellt, beschreiben.

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} \tag{4.33}$$

Hierbei handelt es sich um einen Tensor der 2. Stufe. Schneidet man gedanklich einen Würfel aus einem Kontinuum heraus, so wirken, wie Bild 4.9 zu entnehmen, die Komponenten des Tensors als Spannungen auf dessen Schnittflächen, sofern das beliebig wählbare Achsenkreuz mit der Orientierung des Würfels zusammenfällt. Hierbei definiert der erste Index die Normalenrichtung der Fläche, auf die die Spannung wirkt und der zweite Index die Wirkrichtung der aus der Spannung resultierenden Kraft. Spannungen mit gleichen Indizes repräsentieren Normalspannungen, die eine Volumenänderung des Würfels bewirken, während Spannungskomponenten mit unterschiedlichen Indizes Schubspannungen darstellen, die eine Gestaltänderung herbeiführen.

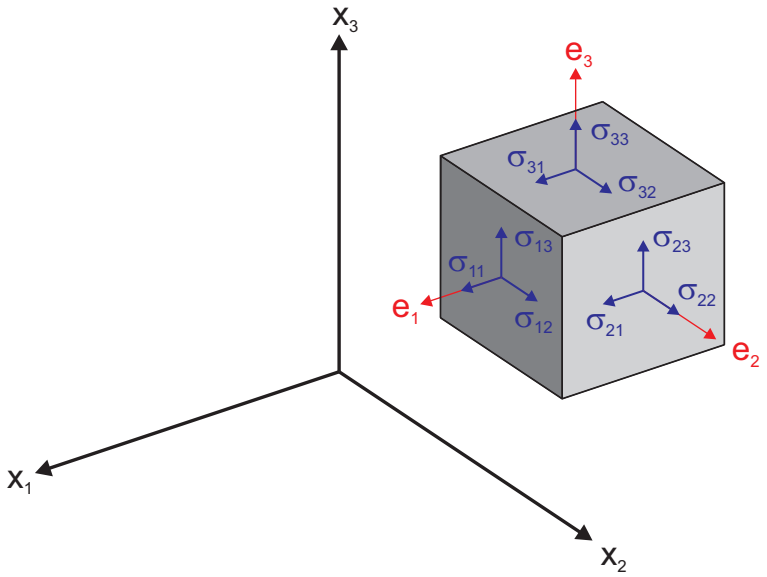


Bild 4.9 Normalenrichtung und Wirkrichtung der an einem freigeschnittenen Würfel angreifenden Komponenten des Spannungstensors.

Um die mathematische Formulierung von Stoffgesetzen zu erleichtern, bietet es sich an, Invarianten des Cauchyschen Spannungstensors oder des Hauptspannungstensors zu verwenden. Sie stellen eine skalare Größe der Spannungskomponenten des Tensors dar, die sich unabhängig von der gewählten Basis verhalten und lassen sich in drei Haupt- (Gleichung (4.34) bis (4.36)) und drei Grundinvarianten (Gleichung (4.37) bis (4.39)) unterteilen. Grundinvarianten lassen sich, weil sie eine Teilmenge der drei Hauptinvarianten darstellen, aus diesen bilden.

$$I_1 = \sigma_{ii} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} \tag{4.34}$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \cdot \left(\sigma_{ij} \cdot \sigma_{ij} - \sigma_{ii} \cdot \sigma_{jj} \right) \tag{4.35}$$

$$I_3 = \det \left[\sigma_{ij} \right] \tag{4.36}$$

$$J_1 = \sigma_{ii} = I_1 \tag{4.37}$$

$$J_2 = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \cdot \sigma_{ji} = \frac{1}{2} I_1^2 - I_2 \tag{4.38}$$

$$J_3 = \frac{1}{3} \sigma_{ij} \cdot \sigma_{jk} \cdot \sigma_{ki} = \frac{1}{3} I_1^3 - I_1 \cdot I_2 + I_3 \tag{4.39}$$

Mittels Hauptachsentransformation lässt sich jeder beliebige Spannungszustand, wie auf der rechten Seite von Gleichung (4.33) dargestellt, in seinen Hauptspannungszustand überführen. In diesem Spannungszustand verschwinden die Schubspannungen, weshalb sich der Spannungszustand entsprechend Bild 4.10 im sogenannten Hauptspannungsraum oder Haigh-Westergaard-Raum als Vektor $\bar{P}$ darstellen lässt. Im Hinblick auf eine numerische Umsetzung ist es zudem

sinnvoll, den Vektor $\bar{P}$ in einen hydrostatischen Anteil $\overline{0N}$ und einen deviatorischen Anteil $\overline{NP}$ zu zerlegen. Der Vektor NP liegt hierbei innerhalb der sogenannten Deviatorebene oder π-Ebene und steht senkrecht auf $\overline{0N}$. Als Funktionen der Hauptspannungen stellen sich die Hauptinvarianten in Form der folgenden drei Gleichungen dar.

$$I_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \tag{4.40}$$

$$I_2 = \sigma_1 \cdot \sigma_2 + \sigma_2 \cdot \sigma_3 + \sigma_1 \cdot \sigma_3 \tag{4.41}$$

$$I_3 = \sigma_1 \cdot \sigma_2 \cdot \sigma_3 \tag{4.42}$$

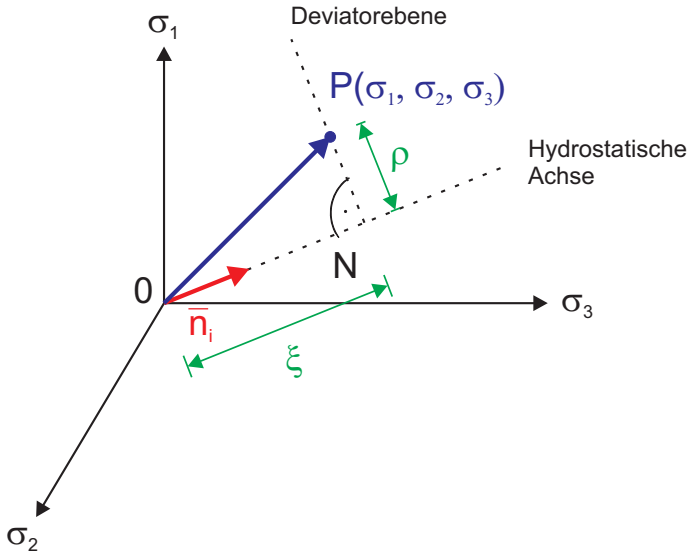


Bild 4.10 Darstellung eines Spannungszustands P im Hauptspannungsraum und grafische Darstellung seiner Zerlegung in einen hydrostatischen und einen deviatorischen Anteil.

Eine Projektion der drei Koordinatenachsen auf die Deviatorebene mit Blickrichtung entlang des hydrostatischen Anteils stellt Bild 4.11 dar. Um die räumliche Position des Spannungspunktes P zu definieren, wird in FE-Programmpaketen wie beispielsweise ABAQUS oder FLAC 3D, anstatt der Verwendung der Koordinaten (σ_1, σ_2, σ_3) eine Formulierung durch (ξ, ρ, Θ) verwendet. ξ entspricht hierbei der Strecke $|\overline{0N}|$, ρ der Strecke $|\overline{NP}|$ und Θ dem sogenannten Lode-Winkel. Θ beschreibt hierbei den Winkel, der von der Projektion der σ_1-Achse auf die Deviatorebene und dem Vektor $\overline{NP}$ eingeschlossen wird. Er ist im Gegenuhrzeigersinn positiv definiert. Wie nachfolgend erläutert, werden hierzu die Invarianten I_1, J_2 und $\cos(3\Theta)$ benötigt. Im Folgenden wird eine verkürzte Herleitung dieses Winkels Θ sowie der Invariante $\cos(3\Theta)$ erfolgen. Eine detaillierte Darstellung ist Ottosen und Ristinmaa (2005) zu entnehmen.

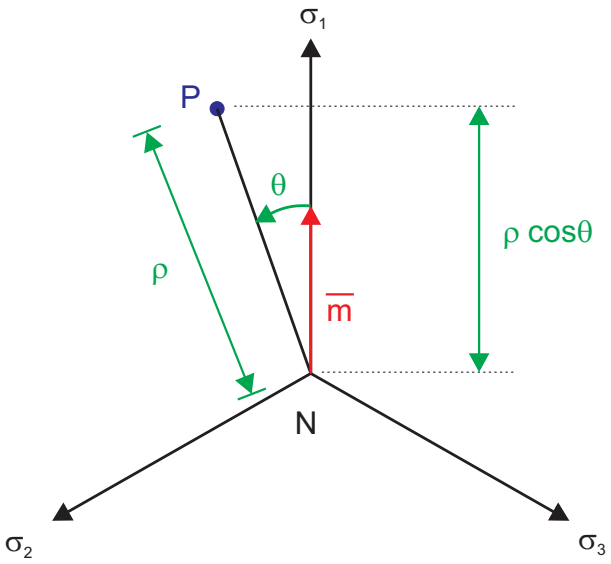


Bild 4.11 Darstellung des Hauptspannungsraums aus einer Blickrichtung senkrecht zur Deviatorebene auf den Ursprung des Koordinatensystems.

Entlang der Raumdiagonalen lässt sich ein Einheitsvektor $\bar{n}$ entsprechend Gleichung (4.43) formulieren.

$$\bar{n} = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1) \tag{4.43}$$

Durch Bildung des Skalarproduktes des Vektors $P(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ mit $\bar{n}$ erhält man die Länge der Projektion von P auf den Einheitsvektor in folgender Form:

$$\xi = n^T \cdot \overline{0P} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,[1,\,1,\,1]\begin{bmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\end{bmatrix} = \frac{I_1}{\sqrt{3}} \tag{4.44}$$

In diesem Zusammenhang lässt sich I_1 mittels Gleichung (4.40) bestimmen. Der Vektor $\overline{0N}$ ergibt sich durch Multiplikation von ξ mit $\bar{n}$ in der Form

$$\overline{0N} = \frac{I_1}{3}\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 1\end{bmatrix}. \tag{4.45}$$

Unter Verwendung von Hauptspannungen erhält man den Vektor $\overline{NP}$ entsprechend Gleichung (4.46) durch Vektoraddition.

$$\overline{NP} = \overline{0P} - \overline{ON} = \begin{bmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\end{bmatrix} - \frac{I_1}{3}\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}s_1\\ s_2\\ s_3\end{bmatrix} \tag{4.46}$$

Die Komponenten s_1, s_2 und s_3 entsprechen hierbei den Hauptspannungsanteilen des Deviators. Die Grundinvarianten des Deviators stellen sich in Form der Hauptspannungen entsprechend der Gleichungen (4.47) bis (4.49) dar.

$$J_1 = s_{ii} = s_1 + s_2 + s_3 \tag{4.47}$$

$$J_2 = \frac{1}{2} \cdot s_{ij} \cdot s_{ij} = \frac{1}{6}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2] \tag{4.48}$$

$$J_3 = \frac{1}{3} s_{ij} \cdot s_{jk} \cdot s_{ki} = (\sigma_1 - \sigma_m)\ (\sigma_2 - \sigma_m)(\sigma_3 - \sigma_m) \tag{4.49}$$

mit:

$\sigma_m = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$

Die Länge ρ ergibt sich, indem entsprechend Gleichung (4.50) der Betrag von $\overline{NP}$ gebildet wird. Diese Formulierung lässt sich entsprechend (4.51) durch die Invariante J_2 ausdrücken. Die Invariante J_2 entspricht hierbei Gleichung (4.48).

$$\rho = \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2} \tag{4.50}$$

$$\rho = \sqrt{2J_2} \tag{4.51}$$

Durch Aufstellung eines Einheitsvektors $\bar{m}$ in der Deviatorebene entlang der Projektion der σ_1-Achse in folgender Form

$$\bar{m} = \frac{1}{\sqrt{6}}\ (2,-1,-1), \tag{4.52}$$

lässt sich mittels Trigonometrie die Gleichung für den Winkel Θ entsprechend Gleichung (4.53) aufstellen.

$$\rho \cdot \cos\theta = \bar{m}^T \overline{NP} = \frac{1}{\sqrt{6}}\ [2,-1,-1] \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{bmatrix} \tag{4.53}$$

Durch Umformung von Gleichung (4.53) entsprechend Ottosen und Ristinmaa (2005) erhält man final die dritte benötigte Invariante $\cos(3\Theta)$ entsprechend folgender Gleichung:

$$\cos(3\theta) = \frac{3\sqrt{3}}{2}\ \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \tag{4.54}$$

Die Invarianten J_2 und J_3 entsprechen den Gleichungen (4.48) und (4.49). Für den allgemeinen Fall lassen sich auch direkt die Invarianten des Cauchy Spannungstensors einsetzen. Die Gleichungen (4.44) und (4.51) verdeutlichen, dass jeder Spannungszustand mit den Koordinaten ξ, ρ und Θ durch die Verwendung des hydrostatischen und des deviatorischen Anteils dargestellt werden kann. In der Geotechnik werden häufig die hiervon abgewandelten Roscoe-Invarianten verwendet, wobei gilt:

$$\overline{0N} = p = \frac{1}{3} I_1 \tag{4.55}$$

$$\overline{NP} = q = \sqrt{3J_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2} \tag{4.56}$$

$$\theta = \frac{1}{3} \arccos \left[\frac{3\sqrt{3}}{2} \frac{J_3}{J_2^{3/2}} \right] \tag{4.57}$$

4.3.2.1. Elastizitätstheorie

Die Elastizitätstheorie beschreibt die Wechselwirkung zwischen komplett reversiblen mechanischen Deformationen $\Delta\varepsilon$ und den daraus resultierenden Spannungsänderungen $\Delta\sigma$. Die Gesetzmäßigkeit hierfür wird durch das Hookesche Gesetz für den eindimensionalen Fall in der Form $E = \Delta\sigma/\Delta\varepsilon$ ausgedrückt. Zur Beschreibung des elastischen Verhaltens im isotropen Fall genügen die beiden elastischen Konstanten ν und E. Hierbei entsprechen ν der Poissonzahl und E dem Elastizitätsmodul.

Für die Betrachtung von porösen Medien wie Boden und Fels bietet es sich an, abgewandelte elastische Konstanten in Form von Gleichung (4.58) und (4.59) zu verwenden.

$$K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \tag{4.58}$$

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \tag{4.59}$$

Mithilfe dieser beiden Konstanten lassen sich die elastischen Verformungen in einen volumetrischen Anteil ε_V und einen gestaltändernden Anteil $\bar{\varepsilon}$ unterteilen, wobei der Kompressionsmodul K die Höhe der Volumenänderung und der Schubmodul G die Gestaltänderung steuert.

Anisotrope Zustände, wie sie häufig bei geklüftetem Fels und Sedimentgesteinen auftreten, lassen sich in Form von transversaler Isotropie durch fünf unabhängige elastische Konstanten entsprechend Gleichung (4.60) beschreiben.

$$\begin{Bmatrix}\sigma_{xx}\\ \sigma_{yy}\\ \sigma_{zz}\\ \sigma_{xy}\\ \sigma_{xz}\\ \sigma_{yz}\end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1\frac{1-n\nu_2^2}{(1+\nu_1)\,m} & E_1\frac{1+n\nu_2^2}{(1+\nu_1)\,m} & E_1\frac{\nu_2}{m} & 0 & 0 & 0\\ E_1\frac{1+n\nu_2^2}{(1+\nu_1)\,m} & E_1\frac{1-n\nu_2^2}{(1+\nu_1)\,m} & E_1\frac{\nu_2}{m} & 0 & 0 & 0\\ E_1\frac{\nu_2}{m} & E_1\frac{\nu_2}{m} & E_2\frac{1-\nu_1}{m} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{E_1}{2(1+\nu_1)} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & G_2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix}\varepsilon_{xx}\\ \varepsilon_{yy}\\ \varepsilon_{zz}\\ \varepsilon_{xy}\\ \varepsilon_{xz}\\ \varepsilon_{yz}\end{Bmatrix} \tag{4.60}$$

mit:

$n = E_1/E_2$

$m = (1 - \nu_1 - 2n\nu_2^2)$

Hierbei ist der E-Modul parallel zur Klüftung mit E_1 und senkrecht dazu mit E_2 definiert. Weitere Elastizitätskonstanten stellen der Schubmodul parallel zur Klüftung G_2 und die Poissonzahlen ν_1 und ν_2 parallel beziehungsweise senkrecht zur Klüftung dar. Im isotropen Fall vereinfacht sich Gleichung (4.60) entsprechend. Eine detaillierte Beschreibung von transversaler Isotropie ist Wittke (2014) zu entnehmen.

Um die volumetrische Dehnung ε_V und die Formänderung ε_q zu ermitteln, ist es zunächst erforderlich, die aus Gleichung (4.60) erhaltenen, auf die Koordinatenrichtungen bezogenen Dehnungen durch Hauptachsentransformation in ihre Hauptdehnungsanteile ε_1, ε_2 und ε_3 zu überführen. Aus diesen lassen sich dann wiederum entsprechend den Gleichungen (4.61) und (4.62) ε_V und ε_q ermitteln.

$$\varepsilon_V = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \tag{4.61}$$

$$\varepsilon_q = \frac{\sqrt{2}}{3} \cdot \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_3)^2} \tag{4.62}$$

Elastisches Materialverhalten kann sich als linear und nicht-linear-elastisch darstellen. Böden weisen im Gegensatz zu Fels ein ausgeprägt nicht linear-elastisches Verhalten auf. Aus diesem Grund stellt sich der E-Modul, beziehungsweise der Steifemodul E_S, der sich mittels Ödometerversuch durch einaxiale Belastung bei behinderter Seitendehnung bestimmen lässt, nicht als eine Konstante, sondern spannungsabhängig dar. Zwischen beiden Moduln besteht entsprechend Gleichung (4.63) ein linearer Zusammenhang.

$$E = E_S \frac{(1+\nu)(1-2\nu)}{1-\nu} \tag{4.63}$$

Magmatische oder metamorphe Gesteine weisen tendenziell linear-elastisches Materialverhalten auf, weshalb es in diesem Fall in der Regel ausreicht, einen konstanten E-Modul zu verwenden Wittke (2014). Mandl (1988) beschreibt das Verhalten von Fels für maximale Dehnungsänderungen zwischen ein und drei Prozent als bereichsweise linear-elastisch. Gleichwohl zeigen Sedimentgesteine in Abhängigkeit ihrer Genese häufig nicht linear-elastisches Verhalten. Stellvertretend für den qualitativen Verlauf eines Sedimentgesteins, ist in Bild 4.12 der im Ödometer- beziehungsweise KD-Versuch ermittelte Spannungs-Dehnungsverlauf eines hochporösen Sandsteins dargestellt. Trotz einer Darstellung im halblogarithmischen Maßstab ist ein spannungsabhängiges Verhalten zu erkennen. Der Erstbelastungsast lässt sich in diesem Fall bereichsweise linear approximieren, während der Ent- und Wiederbelastungsast im halblogarithmischen Maßstab näherungsweise durch einen konstanten Steifemodul abgebildet werden kann. Die maximalen Spannungsänderungen, die in den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen beobachtet wurden, sind im Diagramm farblich hinterlegt. Infolge von CO_2-Injektion in ein Reservoir wurde während der Injektionsphase eine maximale Reduktion der effektiven Spannungen in Höhe von 8 MPa, auf die ein anschließender Wiederanstieg erfolgte, beobachtet (rote Schraffur). Im Barrieregestein wurde durch die Störungsreaktivierung eine maximale Spannungszunahme in Höhe von ungefähr 4 MPa festgestellt, die im Bereich des Erstbelastungsastes durch eine blaue Schraffur dargestellt ist. Diese Darstellung verdeutlicht, dass die Annahme von linear-elastischem Materialverhalten für die im Rahmen dieser Arbeit zu erwartenden Spannungsänderungen hinreichend genaue Ergebnisse liefert, sofern die unterschiedlichen Steifigkeiten bei Be- und Entlastung berücksichtigt werden.

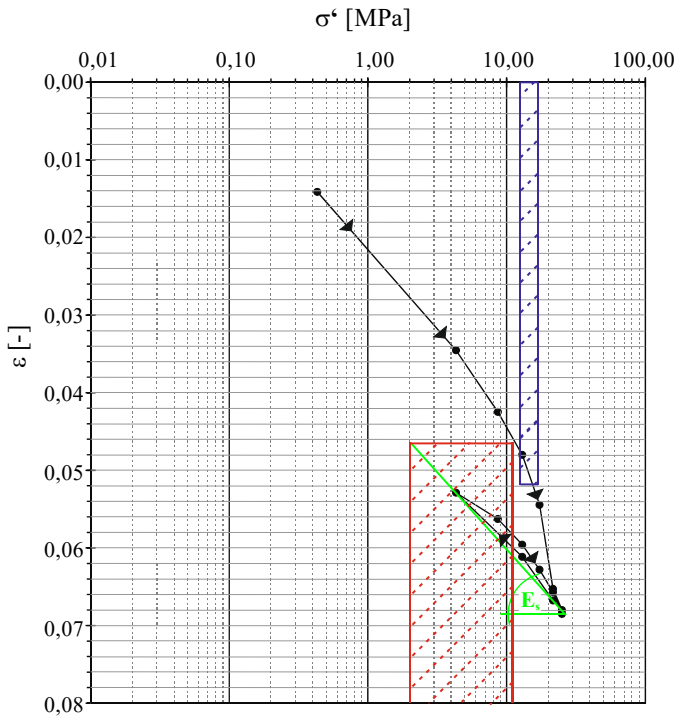


Bild 4.12 Charakteristischer Spannungs-Dehnungsverlauf an einer hochporösen Sandsteinprobe im Ödometerversuch zeigt einen linear approximierbaren Steifemodul E_S im Entlastungs- und Wiederbelastungsast (grüne Linie).

4.3.2.2. Elasto-plastische Stoffgesetze

Bei der Simulation von CO_2-Speichern sind bezüglich der auftretenden geomechanischen Prozesse prinzipiell die geologischen Einheiten Reservoirgestein, Barrieregestein und geologische Störung zu unterscheiden. Die maximale Höhe der Injektionsdrücke ist generell so zu wählen, dass die Integrität des Reservoirs und der geologischen Barriere nicht beeinträchtigt wird. In diesem Zusammenhang ist ein Überschreiten der Bruchfestigkeit dieser beiden Einheiten zu vermeiden, damit eine Schaffung aufwärtsgerichteter Fluidwegigkeiten für Formationsfluid und CO_2 infolge eines Auftretens von Rissen im Gestein vermieden wird. Dadurch, dass sich das Reservoir infolge der induzierten Porendruckerhöhung ausdehnt und somit das darüber liegende Barrieregestein belastet, treten Zwangsspannungen im Hangenden und Liegenden auf. In diesem Zusammenhang ist laut (Cook (1965), Moore und Byerlee (1992), Mutschler et al. (2009) und Wittke (2014)) für das Barrieregestein (Tonstein) auch der Einfluss von Kriechen zu untersuchen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden jedoch primär die hydromechanischen Prozesse einer hydraulischen Reaktivierung von geologischen Störungen untersucht. Dadurch, dass es sich entsprechend den Erläuterungen aus Kapitel 3.4 hierbei um Brüche oder vielmehr Schwächezonen in der Erdkruste handelt, die bereits vor Injektionsbeginn vorhanden sind, ist die wesentliche Geometrie der Bruchfigur bereits vorgegeben. Infolge einer Reduktion der effektiven Spannungen innerhalb der Störung können Spannungszustände entstehen, die zu einem Erreichen des Bruchkriteriums führen. Im Fall von Abschiebungen tritt ein Abrutschen des Hangenden ein, wodurch es zu plastischen Verformungen der Störung kommt. Aufgrund von Dilatanz erhöhen sich hierdurch die Porosität und damit auch die Permeabilität. Dieser Vorgang dauert so lange an, bis es durch Spannungsumlagerungen in andere Bereiche der Störung und des angrenzenden Gesteins zu einem neuen Gleichgewichtszustand kommt. Angesichts einer hieraus resultierenden Begrenzung der plastischen Verformungen, ist selbst bei Wahl eines ideal plastischen Stoffgesetzes die Zunahme der plastischen Verformungen begrenzt. Ein geeignetes Stoffgesetz muss folglich in der Lage sein, plastisches Verhalten unter Berücksichtigung von Dilatanz abzubilden.

Aktuelle internationale Veröffentlichungen zum Thema geologische CO_2-Speicherung beziehungsweise zur generellen hydraulischen Reaktivierung von Störungen und zu induzierter Seismizität empfehlen die Verwendung von elasto-plastischen, isotropen oder anisotropen Stoffgesetzen auf Basis des Mohr-Coulombschen Bruchkriteriums (Altmann et al. (2014), Langhi et al. (2010), Nguyen et al. (2016), Orlic (2016), Pan et al. (2016), Rutqvist et al. (2016), Verdon und Stork (2016), Vilarrasa et al. (2016), Zhang et al. (2015), Zhang et al. (2013), Zhang et al. (2011), Zhang et al. (2010), Zhang et al. (2009)). Des Weiteren werden Adaptionen dieses Stoffgesetzes in Form eines „jointed rock“ beziehungsweise „ubiquitous-joint“ Modells verwendet (Cappa und Rutqvist (2011) und Jeanne et al. (2016)).

Wie bereits in Kapitel 3.4.3 diskutiert, beschreiben Wibberly et al. (2008), Faulkner (2010) und Gudmundsson (2010) Störungen eher durch ein richtungsloses, zerriebenes und geklüftetes Gefüge als durch gerichtete durchgehende Klüfte. Bezugnehmend auf deren Arbeiten und aufgrund des komplexen und im tiefen geologischen Untergrund auch nur schwer zu untersuchenden Auf-

baus von Störungen, verwenden Zhang et al. (2011) und die Mehrzahl der zitierten Autoren bezüglich elastischer und hydraulischer Parameter isotrope Modelle. Cappa und Rutqvist (2011) empfehlen für richtungslose Gefüge die Verwendung eines isotropen plastischen Stoffgesetzes auf Basis des Bruchkriteriums von Mohr-Coulomb. Lassen sich jedoch in der Störung gerichtete Schwächezonen ausmachen, so verwenden sie ein „jointed rock“ beziehungsweise „ubiquitious joint“ Modell. Zudem weisen sie darauf hin, dass die Untersuchung der bei der geologischen CO_2-Speicherung auftretenden Prozesse auf regionalem Maßstab erfolgen muss. Allein aus diesem Grund schließen sie die Modellierung einer Störung in allen ihren Details, wie beispielsweise die Abbildung multipler Störungskerne, in ihren Arbeiten prinzipiell aus.

Für die Ermittlung von komplexen Spannungs-Dehnungsbeziehungen existieren generell hochwertige Stoffgesetze, wie beispielsweise die Hypoplastizität Kolymbas (1978, 1988) oder die Cam Clay-Theorie (Roscoe et al. (1963) und Roscoe und Burland (1968)). Jedoch sind diese im Zusammenhang mit Störungen nur schwer zu parametrisieren, weshalb im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich ein elasto-plastisches Stoffgesetz auf Basis des Mohr-Coulombschen Bruchkriteriums verwendet wird.

Plastizität

Die Unterscheidung, ob sich ein Spannungszustand im elastischen oder im plastischen Bereich befindet, wird durch die sogenannte Fließfläche F definiert. Generell können nur Spannungszustände auftreten, die sich unterhalb oder auf der Fließfläche befinden. Im Fall der Mohr-Coulombschen Fließbedingung nimmt sie entsprechend der Darstellung in Bild 4.13 die Form eines Kegels mit sechseckiger Grundfläche in der Deviatorebene an.

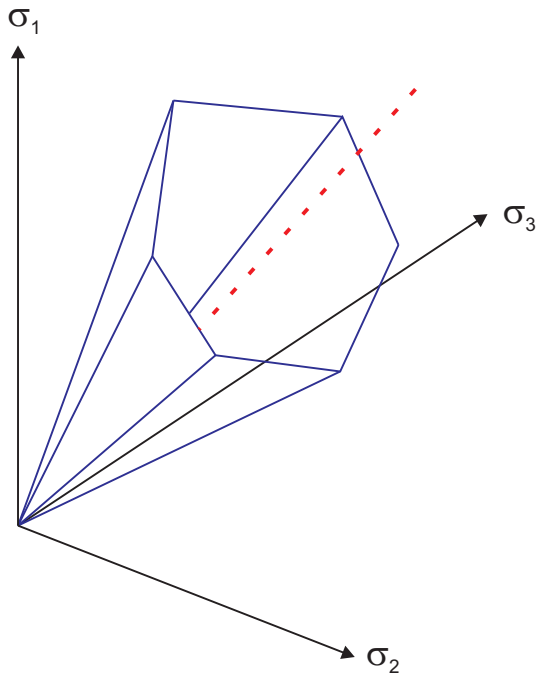


Bild 4.13 Mohr-Coulombsche Fließfläche im Hauptspannungsraum.

Diese spezielle Form lässt sich dadurch erklären, dass bei der Aufstellung der Grenzzustandsbedingung in der Form von Gleichung (4.64) ausschließlich die höchste σ_{max} und die kleinste Hauptspannung σ_{min} Eingang finden. Insgesamt existieren somit sechs unterschiedliche Kombinationen in denen die drei Hauptspannungen jeweils minimale und maximale Beträge einnehmen können, weshalb es zu einer sechsseitigen Grundfläche des Kegels kommt.

$$f = \frac{1}{2}(\sigma_{max} - \sigma_{min}) + \frac{1}{2}(\sigma_{max} + \sigma_{min})\sin\varphi - c\cdot\cos\varphi = 0 \tag{4.64}$$

Eine Darstellung dieser Grenzzustandsbedingung ist in Bild 4.14 dargestellt. Die Grafik verdeutlicht, dass sich generell aus den drei Spannungen eines Hauptspannungszustands (σ_{min}, σ_{mit}, σ_{max}) drei Mohrsche Spannungskreise zeichnen lassen, wovon jeweils der größte für den Bruchzustand maßgebend ist. Die Öffnungsweite des Kegels wird über den Betrag des Reibungswinkels bestimmt. Je größer in diesem Zusammenhang der Reibungswinkel ist, desto steiler verläuft die Wandung des Kegels.

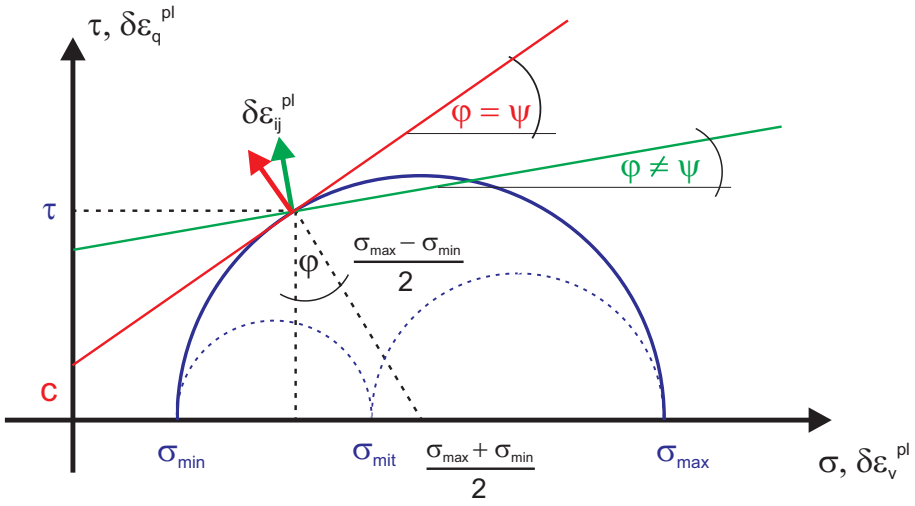


Bild 4.14 Darstellung der Fließgrenze nach Mohr-Coulomb sowie einer assoziierten und nicht assoziierten Fließregel.

Für Spannungszustände, die sich unterhalb der Fließfläche ($f < 0$) befinden, treten ausschließlich elastische Verformungen auf. Befindet sich der Spannungszustand jedoch auf der Fließfläche ($f = 0$), so sind Fallunterscheidungen zu treffen. Liegt in diesem Zustand eine direkte Entlastung vor, so treten weiterhin ausschließlich elastische Verformungen auf, kommt es jedoch zu einer Belastung, so beginnt plastisches Fließen. Im Fall einer neutralen Be-/ Entlastung, während der sich der Spannungszustand auf der Fließfläche bewegt, wie es beispielsweise im Fall einer kontinuierlichen Porendruckabsenkung innerhalb der Störung vorkommt, treten ebenfalls plastische Verformungen auf. Der Betrag des plastischen Dehnunginkrementes $\delta\varepsilon_{ij}^{pl}$ wird mit Hilfe eines plastischen Potenzials Q berechnet.

$$\delta\varepsilon_{ij}^{pl} = \lambda \frac{\delta Q}{\delta \sigma_{ij}} \tag{4.65}$$

Wie in Bild 4.14 zu sehen, steht das plastische Dehnungsinkrement $\delta\varepsilon_{ij}^{pl}$ senkrecht auf dem plastischen Potenzial. Für den Sonderfall, dass das plastische Potenzial mit der Fließbedingung zusammenfällt ($\psi = \varphi$), handelt es sich um eine assoziierte Fließregel. Im allgemeinen Fall, wie er in der Regel bei porösen Medien vorliegt, ist $\psi < \varphi$ und es liegt eine nicht-assoziierte Fließregel vor. Die Ableitung des plastischen Potenzials Q in Gleichung (4.65) gibt die Richtung des Vektors des plastischen Dehnungsinkrementes $\delta\varepsilon_{ij}^{pl}$ vor. Der Betrag des Vektors wird über den Faktor λ gesteuert. Diesen erhält man durch das Aufstellen der sogenannten Konsistenzbedingung mit den benachbarten Elementen. Da sich im Fall von ideal plastischem Materialverhalten theoretisch unendliche Dehnungen unter konstanter Spannung einstellen, tritt erst eine Beendigung dieser Verformung ein, nachdem es zu einer Spannungsumlagerung in nicht plastifizierte Bereiche gekommen ist. Die Form von plastischen Potenzialen kann in der Deviatorebene eine unterschiedliche Gestalt annehmen. ABAQUS verwendet beispielsweise, wie in Bild 4.15 zu sehen, das plastische Potenzial nach Menétrey und Willam (1995).

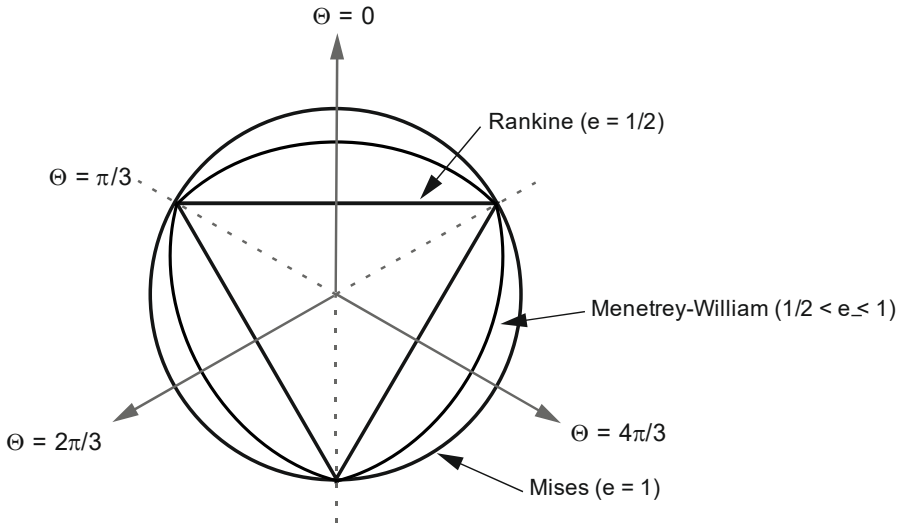


Bild 4.15 Beispiele für die Gestalt plastischer Potenziale in der Deviatorebene (ABAQUS (2010)).

Der in Bild 4.14 dargestellte Vektor der plastischen Dehnung lässt sich wiederum in einen volumetrischen Anteil (horizontal) und einen Scheranteil (vertikal) zerlegen. Mit geringer werdendem Dilatanzwinkel, verringert sich der volumetrische Anteil.

Verfestigung und Entfestigung

In der Realität verhalten sich poröse Medien wie Böden und Fels jedoch nicht ideal plastisch. Mandl (1988) beschreibt das plastische Verhalten von porösen, körnigen Materialien entsprechend Bild 4.16. Zu Beginn der Scherbelastung verhält sich das Material elastisch und es treten kompressive Verformungen auf. Ab einer bestimmten Scherspannung τ_y entstehen erste Mikrorisse im

Material, was dazu führt, dass sich das Volumen des Materials erhöht (Dilatanz). Hierbei erhöht sich die Dilatanzrate bis zur Maximalspannung kontinuierlich, was mit verfestigendem Materialverhalten, also einer Spannungszunahme einhergeht. Nach Erreichen der Bruchspannung kommt es zu einem kontinuierlichen Spannungsabfall, der bis zum Erreichen der Restscherfestigkeit mit einer abnehmenden Dilatanzrate einhergeht. Ab Erreichen der Restscherfestigkeit ist keine weitere Volumenzunahme mehr zu verzeichnen.

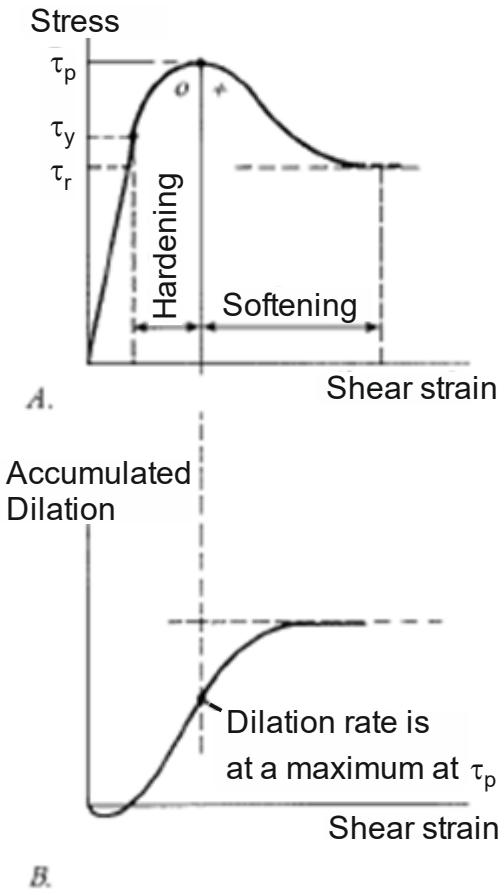


Bild 4.16 Charakteristischer Spannungs-Dehnungsverlauf eines porösen Gesteins und zugehörige Entwicklung der Dilatanz (Mandl (1988)).

Das Spannungs-Dehnungsverhalten einer Probe unter Annahme von verfestigendem, entfestigendem und ideal plastischem Materialverhalten ist idealisiert in Bild 4.17 dargestellt. Eine beobachtete Spannungszunahme beziehungsweise -abnahme kann hierbei durch eine Aufweitung oder Verkleinerung der Fließfläche erklärt werden.

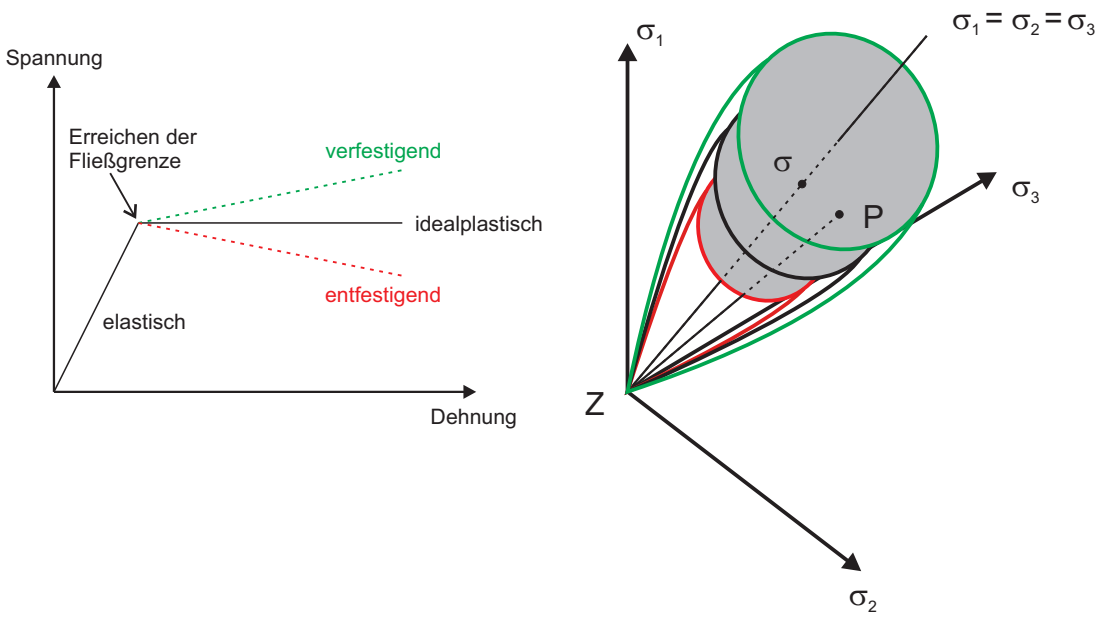


Bild 4.17 Spannungs-Dehnungsverhalten eines Materials unter Annahme von Verfestigung, Entfestigung und ideal plastischem Materialverhalten.

Entfestigendes Materialverhalten kann im Rahmen der Mohr-Coulombschen Theorie durch eine Reduktion des Reibungswinkels oder der Kohäsion in Abhängigkeit der eingetretenen plastischen Scherdehnung $\bar{\varepsilon}$ erfolgen. Eine solche Reibungs- oder Kohäsionsentfestigung flacht, wie in Bild 4.18 dargestellt, den Verlauf der Fließfläche ab, was zu einer geringeren maximal aufnehmbaren Scherspannung führt.

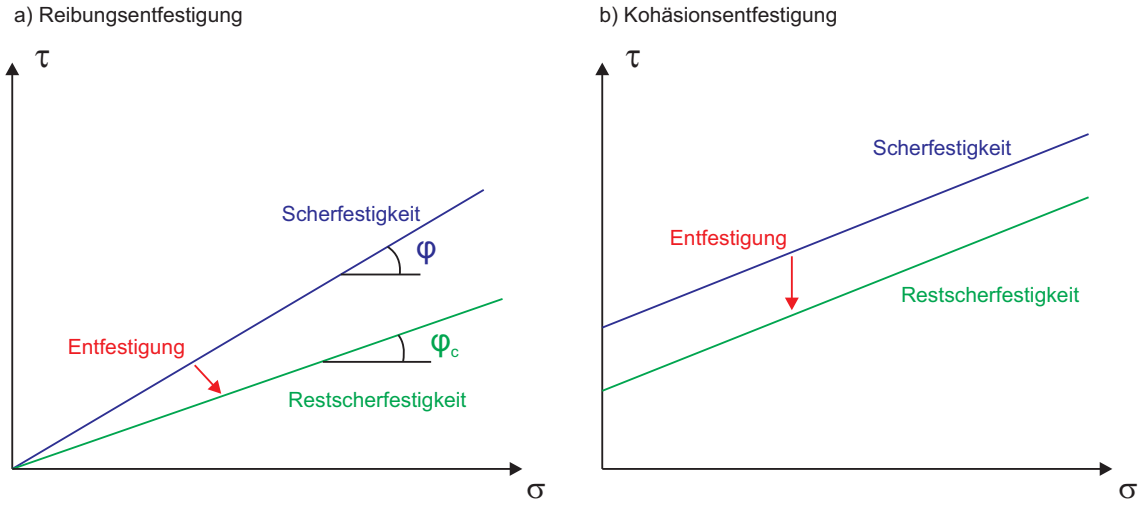


Bild 4.18 Möglichkeiten der Abbildung von entfestigendem Materialverhalten in der Mohr-Coulombschen Theorie.

Auch wenn ideal plastisches Materialverhalten das reale Verhalten von Boden und Fels nur unzureichend abbildet, liefert es für geringe plastische Dehnungen zufriedenstellende Ergebnisse (Mandl (1988)). Für die im Rahmen dieser Arbeit angestellten Untersuchungen trifft diese Ein-

schränkung aufgrund von Spannungsumlagerungen in benachbarte Felsbereiche, die die plastischen Verformungen der Störung auf ein geringes Maß begrenzen, zu. Im Fall der Simulation des Prozesses einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen reduziert ein weiterhin ansteigender Porendruck in den Störungselementen auch nach dem Beginn von plastischem Fließen weiterhin die effektiven Spannungen. Hierbei wandert der Spannungspfad entsprechend Bild 4.19 als neutrale Entlastung entlang der Fließfläche, was zu einem entfestigendem Materialverhalten führt.

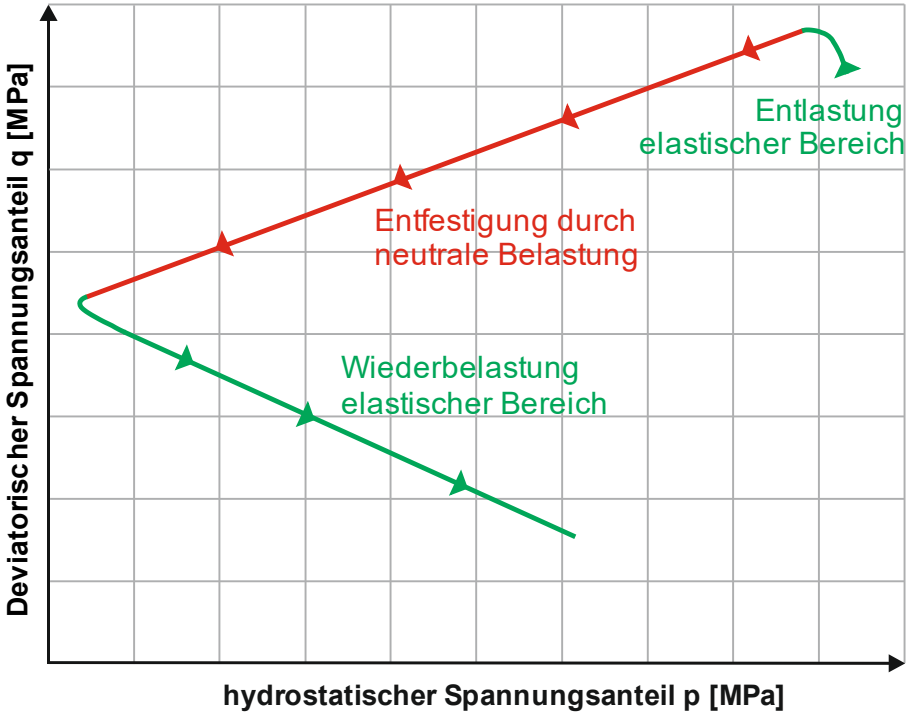


Bild 4.19 Neutrale Entlastung und entfestigendes Materialverhalten in Folge einer kontinuierlichen Porendruckerhöhung nach Beginn der Plastifizierung.

„Jointed rock“ beziehungsweise „ubiquitous joint“-Modelle stellen eine Abwandlung des Mohr-Coulomb-Modells dar. In diesem Zusammenhang werden in einem Kontinuum zusätzlich Bruchflächen definiert. Für beide Komponenten ist es möglich, jeweils eine eigene Fließfläche nach Mohr-Coulomb zu definieren. Durch einen Abgleich des jeweils aktuellen Spannungszustands im Kontinuum beziehungsweise auf den Scherflächen mit der jeweiligen Fließflächen wird überprüft, ob plastisches Verhalten in einer der beiden Komponenten oder beiden gleichzeitig eintritt.

4.4. Thermo-hydromechanische Kopplungen von Mehrphasenfluidfluss-Simulationen

Um die gegenseitige Beeinflussung der in den vorherigen Kapiteln erläuterten hydraulischen und geomechanischen Prozesse bei der geologischen CO_2-Speicherung abbilden zu können, ist eine sogenannte hydromechanische Kopplung erforderlich. Hierfür gibt es generell vier mögliche Ansätze, die sich hinsichtlich ihrer Komplexität und einer damit korrelierenden Rechenzeit voneinan-

der unterscheiden. Im folgenden Kapitel wird zu Beginn eine kurze Beschreibung der unterschiedlichen Kopplungsansätze gegeben. Der zweite Teil befasst sich mit analytischen Ansätzen zur Beschreibung von Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen.

4.4.1. Arten der thermo-hydromechanischen Kopplung

Hydromechanische Kopplungen lassen sich generell hinsichtlich ihrer Kopplungsart in die Typen Einwegkopplung, iterative oder nicht iterative sequenzielle Zweiwegkopplung und in monolithische Kopplungen klassifizieren. Abgesehen von Letzterer kommt bei allen Varianten jeweils ein separates Programmsystem für die thermohydraulische und die geomechanische Simulation zum Einsatz. Gekoppelt werden beide Programme über die Kopplungsparameter mittlerer Porendruck p, Temperatur T und volumetrische Dehnung ε_V. In diesem Zusammenhang ermittelt das hydraulische Programmsystem den Fluid- beziehungsweise den Gasdruck der nichtbenetzenden Phase p_g (CO_2), den Fluiddruck der benetzenden Phase p_l (Formationsfluid), die Sättigung der benetzenden Phase S_l und im Fall von nicht isothermen Simulationen die Temperatur T. Auf Basis der ersten drei Größen wird mithilfe von Gleichung (4.66) durch Anwendung des Prinzips der effektiven Spannungen für teilgesättigte Böden nach Bishop (1959) ein gemittelter Porendruck in einem Nebenprogramm ermittelt.

$$p = S_l \cdot p_l + (1 - S_l)\, p_g \tag{4.66}$$

Der so ermittelte Porendruck wird als Kopplungsparameter zur Ermittlung der aus dieser Porendruckänderung resultierenden volumetrischen Dehnung ε_V an das geomechanische Programmsystem übergeben. In einem weiteren Nebenprogramm wird dann für diesen Kopplungsparameter eine neue Porosität ϕ ermittelt, auf deren Basis dann mithilfe von Permeabilitäts-Porositätsansätzen, wie sie in Kapitel 4.4.2 beschrieben werden, die intrinsische Permeabilität k aktualisiert wird.

Einwegkopplung

Die schwächste Form möglicher Kopplungsarten stellt die sogenannte Einwegkopplung dar. Bei dieser findet, wie in Bild 4.20 dargestellt, keine Rückkopplung vom geomechanischen zum hydraulischen Programmsystem statt, weshalb hierbei der Einfluss von sich ändernden Permeabilitäten und Porositäten auf die hydraulischen Prozesse nicht berücksichtigt wird. Eine Einwegkopplung liefert ausschließlich im Fall von hohen initialen Porositäten und Permeabilitäten der geologischen Einheiten zufriedenstellende Ergebnisse, weil in diesem Fall ein Auftreten von volumetrischen Dehnungen zu keinem weiteren signifikanten Anstieg der beiden Größen führt. Dies ist beispielsweise im Fall von hydraulisch wirksamen geologischen Störungen der Fall, für die überprüft werden soll, ob es infolge von Porendruckänderungen im Reservoir zu einer Überschreitung des Bruchkriteriums kommen kann (Röhmann et al. (2013), Orlic (2016)).

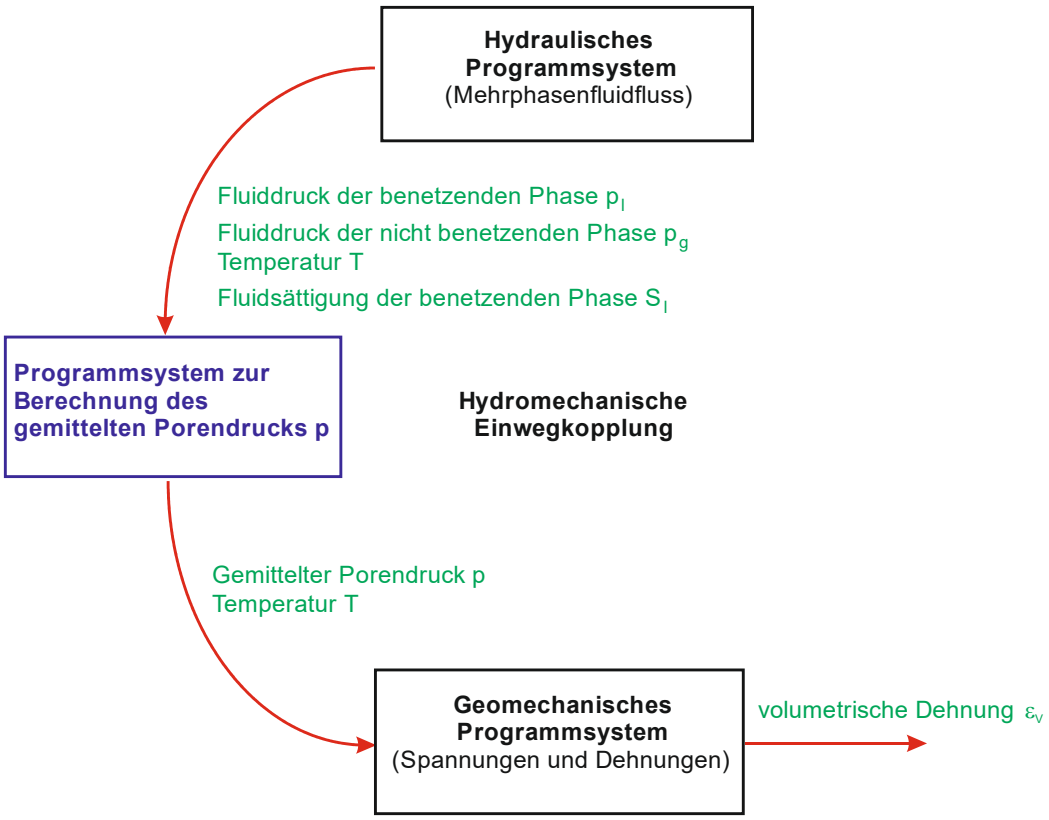


Bild 4.20 Kopplungsschema einer hydromechanischen Einwegkopplung.

Zweiwegkopplung

Eine weitverbreitete Variante von hydromechanischen Kopplungen stellt die Zweiwegkopplung dar. Hierbei existiert entsprechend Bild 4.21 ein sequentieller Datentransfer zwischen beiden Programmsystemen. Dieser kann iterativ und nicht iterativ stattfinden. Im Fall der iterativen Kopplung wird innerhalb eines Berechnungsschrittes mehrfach zwischen beiden Programmen iteriert, bis beide konvergieren. Während einer nicht iterativen Kopplung findet nur einmal pro Simulationsschritt ein Datenaustausch in beide Richtungen statt. Tran et al. (2005) berichten davon, dass sich mit beiden Varianten vergleichbare Ergebnisse erzielen lassen. Hierzu ist jedoch im Fall der nicht iterativen Kopplung eine feinere zeitliche Diskretisierung erforderlich, um zu verhindern, dass die Porendruckgradienten pro Berechnungsschritt zu groß werden. Im Fall von zu groß gewählten Zeitinkrementen können konstante Kopplungsparameter während eines Zeitschrittes dazu führen, dass die Ergebnisse von der exakten Lösung in erheblichem Maße divergieren. Durch die Verwendung einer ausreichend feinen zeitlichen Diskretisierung in iterativen und nicht iterativen Kopplungen lässt sich die Qualität der Ergebnisse verbessern (Tran et al. (2005)).

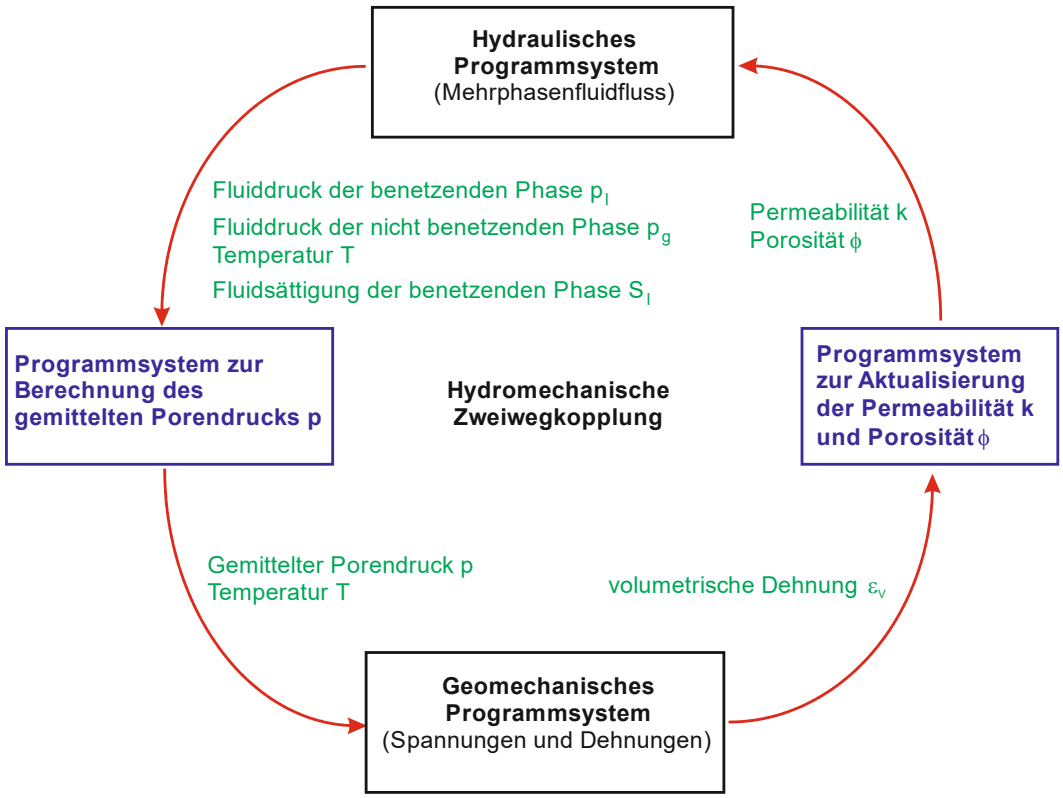


Bild 4.21 Kopplungsschema einer hydromechanischen Zweiwegkopplung.

Tran et al. (2005) verweisen des Weiteren auf die hohe Flexibilität von Zweiwegkopplungen in Bezug auf die Wahl der verwendbaren Programmsysteme hervor. Hierdurch können neue Forschungsergebnisse relativ schnell implementiert werden, was die weite Verbreitung dieser Kopplungsart im Zusammenhang mit Reservoirsimulationen erklärt. Sequentielle Zweiwegkopplungen werden in diesem Zusammenhang unter anderem von Cappa und Rutqvist (2011), Chabab und Kempka (2016), Lautenschläger et al. (2013), Righetto et al. (2013), Zhang et al. (2011), Nguyen et al. (2016), Rinaldi et al. (2014a, b), Rutqvist et al. (2007) und Tillner et al. (2016) verwendet. Eine Statistik aus dem Statusbericht 2011 zum Stand der Technik von CCS-Risikoanalysen des US Energieministeriums NETL (2011) verweist darauf, dass gekoppelte TOUGH2-MP/ECO_2N (hydraulisch) und $FLAC^{3D}$ (geomechanisch) Programmsysteme zu den am häufigsten genutzten Programmen in den U.S.A gehören. Genutzt werden diese unter anderem von Cappa und Rutqvist (2011), Jeanne et al. (2016), Kempka et al. (2013, 2014, 2015), Rinaldi et al. (2014a, b), Rutqvist et al. (2007), Röhmann et al. (2013) und Tillner et al. (2013, 2015, 2016).

Monolithische Kopplung

Eine monolithische Kopplung stellt eine geschlossene Lösung dar, in der die aufgestellten Differenzialgleichungen direkt in einem Programmsystem implementiert sind und simultan gelöst werden. Der Vorteil dieser Kopplungsart, wie sie beispielsweise Programme wie ABAQUS und OpenGeoSys verwenden, liegt darin begründet, dass sie aufgrund des entfallenden Iterationsprozesses zwischen dem hydraulischen und dem geomechanischen Programmsystem den

gegenseitigen Einfluss von Porendruckänderungen und Verformungen direkt abbilden, wodurch wiederum schneller als in einer Zweiwegkopplung Konvergenz erzielt wird.

Ein großer Nachteil dieser Programmsysteme liegt jedoch darin begründet, dass ihr Anwendungsspektrum begrenzt ist. So sind beispielsweise in ABAQUS (monolithische Kopplung) aber auch in FLAC^{3D} (Zweiwegkopplung) keine thermodynamischen Gleichungen zur Beschreibung von Mehrphasenflussprozessen implementiert. Zudem verwenden beide Programme im Fall von teilgesättigten Zuständen nur einen konstanten atmosphärischen Druck für die nicht benetzende Phase, weshalb beide Programme für Reservoirsimulationen mit unterschiedlichen Fluiden nicht anwendbar sind.

Des Weiteren existieren monolithische Programmierungen für teilgesättigte Zustände, wie beispielsweise von Holler (2006), die für beide Phasen separate Porendrücke ermitteln. Jedoch enthalten diese ebenfalls keine thermodynamischen Zustandsgleichungen, die Phasenwechsel berücksichtigen. Programme wie beispielweise OpenGeoSys können wiederum prinzipiell Mehrphasenflusssimulationen durchführen, monolithische Kopplungen erfordern jedoch aufgrund der hohen Elementanzahl weiterhin relativ hohe Rechenzeiten (Tran et al. (2005)), so dass die erforderlich hohe Anzahl von Simulationen, wie sie für eine probabilistische Risikoanalyse erforderlich sind, ebenfalls nicht in einer akzeptablen Rechenzeit durchgeführt werden können.

4.4.2. Ansätze zur Beschreibung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung einer Störung

Wie bereits in Kapitel 3.4.3 diskutiert, stellt die fragmentierte Zerrüttungszone (engl.: „damage zone“) im Gegensatz zum Störungskern (fault core) den eigentlichen hydraulisch durchlässigen Bereich einer geologischen Störung dar. Hierbei hängt die Höhe der intrinsischen Permeabilität im Wesentlichen vom Grad der Fragmentierung, der Rissgeometrie (isotrop oder anisotrop), der Rissöffnungsweite und der Permeabilität des intakten Gesteins ab (Wibberley et al. (2008)). Da sich Störungen häufig als sehr inhomogen darstellen, können bestehende Ansätze zur Beschreibung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen nur eine Näherung an die Realität darstellen, weshalb generell bezüglich der Formulierung solcher Ansätze ein hoher Forschungsbedarf besteht (Cappa und Rutqvist (2011), Zhang et al. (2011).

In der Literatur finden sich eine Vielzahl unterschiedlicher Beziehungen zur Beschreibung der Permeabilitätsanpassung, wie beispielsweise Carman (1956), Connolly (1997), Crawford et al. (2002), Kozeny (1953) und Verma und Pruess (1988), um nur einige zu nennen.

Im Folgenden werden zwei Ansätze für den isotropen und den anisotropen Fall beschrieben, die von Cappa und Rutqvist (2011), Gou et al (2016), Rinaldi et al. (2014a, b) zur Permeabilitäts-Porositätsanpassung verwendet werden. Für den Fall, dass eine Zerrüttungszone innerhalb einer geologischen Störung stark und richtungslos fragmentiert ist, empfehlen die Autoren die Verwendung des isotropen Ansatzes nach Chin et al. (2000).

$$\phi_i = 1 - \left(1 - \phi_0\right)\exp(-\varepsilon_V) \tag{4.67}$$

$$k_i = k_0 \left(\frac{\phi_i}{\phi_0} \right)^n \tag{4.68}$$

Hierbei bezeichnet ϕ_i und k_i die Porosität beziehungsweise die Permeabilität für einen bestimmten Dehnungszustand, ϕ_0 und k_0 die initiale Porosität und Permeabilität, ε_V die volumetrische Dehnung und n einen Exponenten zur Anpassung der Funktion an Laborergebnisse, wobei n Werte zwischen 3 und 25 annehmen kann.

Stellen sich die Klüfte der Zerrüttungszone als durchgehend, ausgerichtet und mit einheitlicher Kluftöffnungsweite und einheitlichem Kluftabstand dar, so eignet sich der Ansatz nach Hsiung et al. (2005).

$$\phi_i = \phi_0 + \Delta\phi_{fp} \tag{4.69}$$

$$\Delta\phi_{fp} = \varepsilon_{ftp} + \varepsilon_{fsp} \cdot \tan\psi \tag{4.70}$$

$$k_i = k_0 \left[\frac{a}{c(c\sigma'_n + 1)} \sqrt{\frac{\phi_0}{12 \cdot k_0}} + \frac{\varepsilon_{ftp} + \varepsilon_{fsp} \cdot \tan\psi}{\phi_0} \right] \tag{4.71}$$

Hierbei entsprechen a und c empirischen Konstanten, deren Ermittlung Rinaldi et al. (2014a) entnommen werden kann. ε_{ftp} und ε_{fsp} repräsentieren plastische Dehnungen infolge von Zug- und Scherversagen. Bei diesem anisotropen Ansatz werden auftretende plastische Scherdehnungen durch Multiplikation mit dem Tangens des Dilatanzwinkels ψ und gegebenenfalls unter Berücksichtigung von Zugspannungen in eine Änderung der Porosität $\Delta\phi_{fp}$ umgerechnet. Diese wird dann ähnlich wie beim Ansatz nach Chin et al. (2000) dazu genutzt, um die Permeabilität anzupassen.

Einen weiteren möglichen Ansatz zur Anpassung der Permeabilität stellt der von Wittke (2014) verwendete dar. Hierbei wird die Weitenänderung von parallel verlaufenden Klüften mit einheitlicher Kluftweite durch eine kubische Funktion in eine geänderte Kluftpermeabilität umgerechnet. Auch wenn die Permeabilität wie in diesem Fall durch diskrete Ansätze in Abhängigkeit der geänderten Kluftweite aktualisiert wird, muss diese für die Verwendung in der hydraulischen Simulation mittels numerischer FE- oder FD-Simulationen trotzdem in eine auf das Kontinuum gemittelte Permeabilität umgerechnet werden.

4.5. Zusammenfassende Bewertung und aktueller Forschungsbedarf

Zu Beginn von Kapitel 4 wurden die bei der geologischen CO_2-Speicherung ablaufenden Prozesse erläutert. Der Fokus lag hierbei auf der Beschreibung von Fluidflüssen durch hydraulisch wirksame und hydraulisch reaktivierte geologische Störungen. In diesem Zusammenhang zeigt eine Literaturrecherche, dass es infolge von CO_2-Injektion in ein Reservoir zu einem schnellen und

weiträumigen Anstieg des Porendrucks kommt. Hierbei werden insgesamt hohe Porendruckänderungen beobachtet. Da sich jedoch ein Großteil des Potenzials im Nahfeld des Injektionsbrunnens abbaut, treten aufgrund des weiträumigen Potenzialabbaus in einer größeren Entfernung nur geringe Porendruckgradienten auf. Dies führt wiederum zu geringen Filtergeschwindigkeiten des verdrängten Formationsfluids und der CO_2-Fahne.

Aufgrund dessen, dass CO_2 in der Regel in Antiklinalstrukturen gespeichert wird, steigt es im Reservoir auf und weist unterhalb des Barrieregesteins die höchsten Sättigungen auf. Hierdurch wird vorher das den Porenraum ausfüllende Formationsfluid in andere Bereiche des Reservoirs oder über geologische Störungen gegebenenfalls in höhergelegene GWLs verdrängt. Ergebnisse aktueller Forschungsarbeiten, deren Fokus auf der Modellierung von realen Standorten liegt, zeigen, dass angesichts der häufig nur wenige Meter pro Jahr betragenden Migrationsgeschwindigkeit des CO_2 im Reservoir, geologische Störungen während des Injektionszeitraums in der Regel nur von Formationsfluid durchströmt werden. Ausschließlich Forschungsergebnisse von synthetischen Standorten deuten im Fall einer extrem geringen Entfernung zwischen Injektionsstelle und Störung darauf hin, dass innerhalb der ersten Jahre ein geringer Fluidfluss von CO_2 in eine Störung hinein zu beobachten ist.

In zwei weiteren Unterkapiteln wurde eine Einführung in Stoffgesetze und mathematische Formulierungen zur Beschreibung der zuvor thematisierten hydraulischen und geomechanischen Prozesse gegeben. In diesem Zusammenhang wurde herausgearbeitet, dass der Prozess einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen zufriedenstellend durch ein linear-elastisches ideal plastisches Stoffgesetz unter Verwendung des Bruchkriteriums von Mohr-Coulomb beschrieben werden kann. Eine Literaturreche hierzu zeigt, dass für richtungslos geklüftete Zerrüttungszonen in der Regel ein isotropes Materialverhalten und im Fall von orientierten, durchgehenden Klüften mit ungefähr gleicher Kluftöffnungsweite ein anisotropes Stoffgesetz, wie beispielsweise „jointed rock“ beziehungsweise „ubiquitous joint“, verwendet werden kann.

Eine weitere Literaturrecherche zum Thema „Effektive Spannungen“ hat gezeigt, dass in gering porösen Sedimentgesteinen poroelastische Effekte bedeutsam werden können, weshalb die effektiven Spannungen nach dem Prinzip von Biot bestimmt werden müssen. In hochporösen Formationen kommt dieser Effekt in der Regel weniger zum Tragen. Das Bruchversagen von geologischen Störungen soll hingegen generell mit den effektiven Spannungen nach Terzaghi erfolgen.

Da sich geologische Störungen in der Natur generell als sehr heterogen darstellen und hydraulische und geomechanische Materialparameter aufgrund der schwierigen Zugänglichkeit nur schwer bestimmt werden können, ist es schwierig realistische Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen zu formulieren. Deshalb wird von vielen Autoren darauf verwiesen, dass auf diesem Gebiet erheblicher Forschungsbedarf besteht. Dadurch, dass geologische Störungen aus einem mehr oder weniger regelmäßigen Netz aus Rissen bestehen, ist es im Gegensatz zu oberflächennah anstehendem geklüftetem Fels zudem nur bedingt möglich, die Permeabilität diskret als Fluidfluss durch einzelne Klüfte zu ermitteln. Zudem ist selbst im Fall einer Permeabilitätsaktualisierung durch einen diskreten Ansatz, wegen der erforderlichen Durchführung von hydraulischen Simulationen

mittels FD- beziehungsweise FE-Programmsystemen, die diskrete Permeabilität der Klüfte in eine über das Kontinuum gemittelte umzurechnen.

Dadurch, dass der Fokus dieser Arbeit auf der Entwicklung und Validierung eines neuen semi-analytischen Kopplungsansatzes liegt, soll die zu verwendende Permeabilitäts-Porositätsbeziehung möglichst komplex sein, indem sie ein Höchstmaß an nicht-linearen hydromechanischen Effekten berücksichtigt. Deshalb wird im Rahmen dieser Arbeit analog zu einer Vielzahl aktueller Arbeiten die Permeabilitäts-Porositätsbeziehung nach Chin et al. (2000) verwendet, um die hydraulischen und geomechanischen Responsen miteinander zu koppeln. Dadurch, dass in diesem Ansatz Porositätsänderungen einen exponentiellen Einfluss auf die Permeabilität besitzen, soll gewährleistet sein, dass die Gültigkeit des neuen Ansatzes auch für weniger komplexe Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen gegeben ist.

Für hydromechanische Kopplungen existieren monolithische und sequenzielle Ein- und Zweiwegkopplungen, die sich hinsichtlich ihrer Komplexität und ihrer Flexibilität erheblich voneinander unterscheiden. Dies führt wiederum zu unterschiedlich hohen Rechenzeiten. Der Vorteil einer freien und flexiblen Kombinationsmöglichkeit unterschiedlicher Programmsysteme im Fall von sequenziellen Kopplungen, wird im Fall von iterativ gekoppelten Programmen durch eine gegenüber monolithischen Kopplungen in der Regel höhere Rechenzeit erkauft. Der Vorteil einer Einwegkopplung in Bezug auf geringere Rechenzeiten und eine geringere Komplexität vermindert wiederum die Qualität der Simulationsergebnisse. Deshalb kann sie nur angewendet werden, wenn die geomechanische Antwort für den Fluidfluss vernachlässigbar ist. Dies ist beispielsweise bei einer hohen Permeabilität und Porosität der Störung der Fall.

Im Hinblick auf probabilistische Risikobetrachtungen, für die eine Vielzahl von Realisierungen erforderlich ist, sind jedoch alle existierenden hydromechanischen Kopplungen nur eingeschränkt einsetzbar, weil selbst für die schwächste Form der Kopplung die jeweilige Rechenzeit immer noch erheblich ist. Deshalb besteht auf dem Gebiet einer Optimierung solcher Kopplungsansätze erheblicher Forschungsbedarf. Um weiterhin die Flexibilität von sequenziellen Zweiwegkopplungen zu erhalten, wird im Rahmen dieser Arbeit, wie im folgenden Kapitel näher erläutert, ein semi-analytischer Kopplungsansatz entwickelt, der es ermöglicht, die Rechendauer von sequenziellen Zweiwegkopplungen signifikant zu reduzieren. Hierdurch wird es ermöglicht, sequenzielle Zweiwegkopplungen im Rahmen von probabilistischen Risikobetrachtungen einzusetzen.

5 Formulierung eines semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes

Wie bereits in den Kapiteln 2 und 4 diskutiert, sind hydromechanisch gekoppelte numerische Simulationen aufgrund ihrer hohen Rechenzeit für den Einsatz in probabilistischen Risikoanalysen nur eingeschränkt anwendbar. Eine gekoppelte Betrachtung, in der die Wechselwirkung zwischen hydraulischen und geomechanischen Prozessen berücksichtigt wird, ist jedoch, wie in Kapitel 4.1 beschrieben, gerade im Hinblick auf die Untersuchung von hydraulisch reaktivierten geologischen Störungen, unerlässlich. Um dieser Forderung nachzukommen, wird in Kapitel 5 ein neuer semi-analytischer Ansatz formuliert, der die erforderliche Rechenzeit von sequenziellen Zweiwegkopplungen erheblich reduziert. Diese Optimierung ermöglicht die zukünftige Durchführung einer Vielzahl von hydromechanisch gekoppelten Reservoirsimulationen unter Berücksichtigung des Einflusses von hydraulisch reaktivierten Störungen.

5.1. Methodik des neuen Ansatzes

Entsprechend den Erläuterungen in Kapitel 4.4 ist im Fall von monolithischen Kopplungen das Differenzialgleichungssystem zur Bestimmung der Primärvariablen, wie beispielsweise Verformungen und Porendrücke der Gas- und der Fluidphase, geschlossen formuliert. In diesem Zusammenhang werden Konsolidationsprobleme unter Berücksichtigung von Quellen- und Senkentermen gelöst, indem der Einfluss von mechanischen Verformungen auf das Porenvolumen in der Formulierung der Kontinuitätsgleichungen direkt integriert ist. Dies erfolgt unter Einbeziehung eines Stoffgesetzes, Erfüllung des Kräftegleichgewichts zwischen inneren und äußeren Kräften und der Verwendung von kinematischen Beziehungen. Dadurch, dass das Differenzialgleichungssystem hierbei jedoch geschlossen numerisch gelöst wird, ist ein Einsparpotenzial an Rechenzeit bei monolithischen Kopplungen nur sehr begrenzt, beziehungsweise gar nicht gegeben.

Im Gegensatz hierzu bieten sequenzielle Kopplungen aufgrund ihrer Formulierung die Möglichkeit, den sequenziellen Datentransfer zwischen dem hydraulischen und dem geomechanischen Simulator durch Approximationen zu optimieren. Hierdurch wird die erforderliche Rechenzeit signifikant reduziert. Der im Folgenden vorgestellte Kopplungsansatz verfolgt dieses Ziel, indem er unter Berücksichtigung von in Kapitel 5.2 definierten konzeptionellen Grundannahmen, das hydromechanische Verhalten von Störungen durch semi-analytische Funktionen approximiert. Vorweggenommene Begriffsdefinitionen, wie beispielsweise Bezugs- oder Referenzelement, werden in Kapitel 5.3 detailliert erläutert. Entsprechend der schematischen Darstellung im blauen Kasten von Bild 5.1 können dadurch die Porenzahländerungen e von Bezugselementen (BZEs) der Störung in Abhängigkeit eines einzelnen, zuvor in dem hydraulischen Programmsystem

ermittelten Referenzporendrucks p_{ref} in einem Nebenprogramm ermittelt werden. Die hierzu erforderlichen $e(p_{ref})$-Funktionen werden, wie im roten Kasten von Bild 5.1 dargestellt, auf Basis von Ergebnissen einer einzelnen einweggekoppelten Basissimulation unter Berücksichtigung von Einphasenfluidfluss (grüner Kasten) kalibriert und parametrisiert.

Hierzu werden in der Basissimulation, die repräsentativ für eine bestimmte Parameterkombination ist, die zeitlichen Verläufe der Porenzahlen e in einzelnen BZEs sowie die Porendruckentwicklung in einem einzigen Referenzelement p_{ref} numerisch ermittelt. Indem anschließend die Porenzahlen der BZEs in Relation zum Referenzporendruck p_{ref} gesetzt werden, ergeben sich charakteristische Kurvenverläufe, die sich wiederum linearisieren und durch fünf Parameter beschreiben lassen. Die Begriffsdefinitionen, die charakteristischen Kurvenverläufe sowie die Arbeitsweise des neuen Ansatzes werden in Kapitel 5.3 erläutert.

Die so aktualisierten Porenzahlen werden dazu genutzt, die Porosität und Permeabilität der entsprechenden BZEs zu aktualisieren. Diese werden anschließend in einer Schleife zurück an das hydraulische Programmsystem transferiert. Hierdurch ist es für eine Vielzahl unterschiedlicher Injektionsraten einerseits möglich, das Eintreten einer hydraulischen Reaktivierung zu überprüfen, andererseits können die daraus resultierenden Auswirkungen auf den Fluidfluss durch die Störung quantifiziert werden. Da die geomechanischen Antworten direkt durch den semi-analytischen Ansatz ermittelt werden, entfällt die sequenzielle Durchführung von geomechanischen Simulationen, was zu einer erheblichen Rechenzeitersparnis führt.

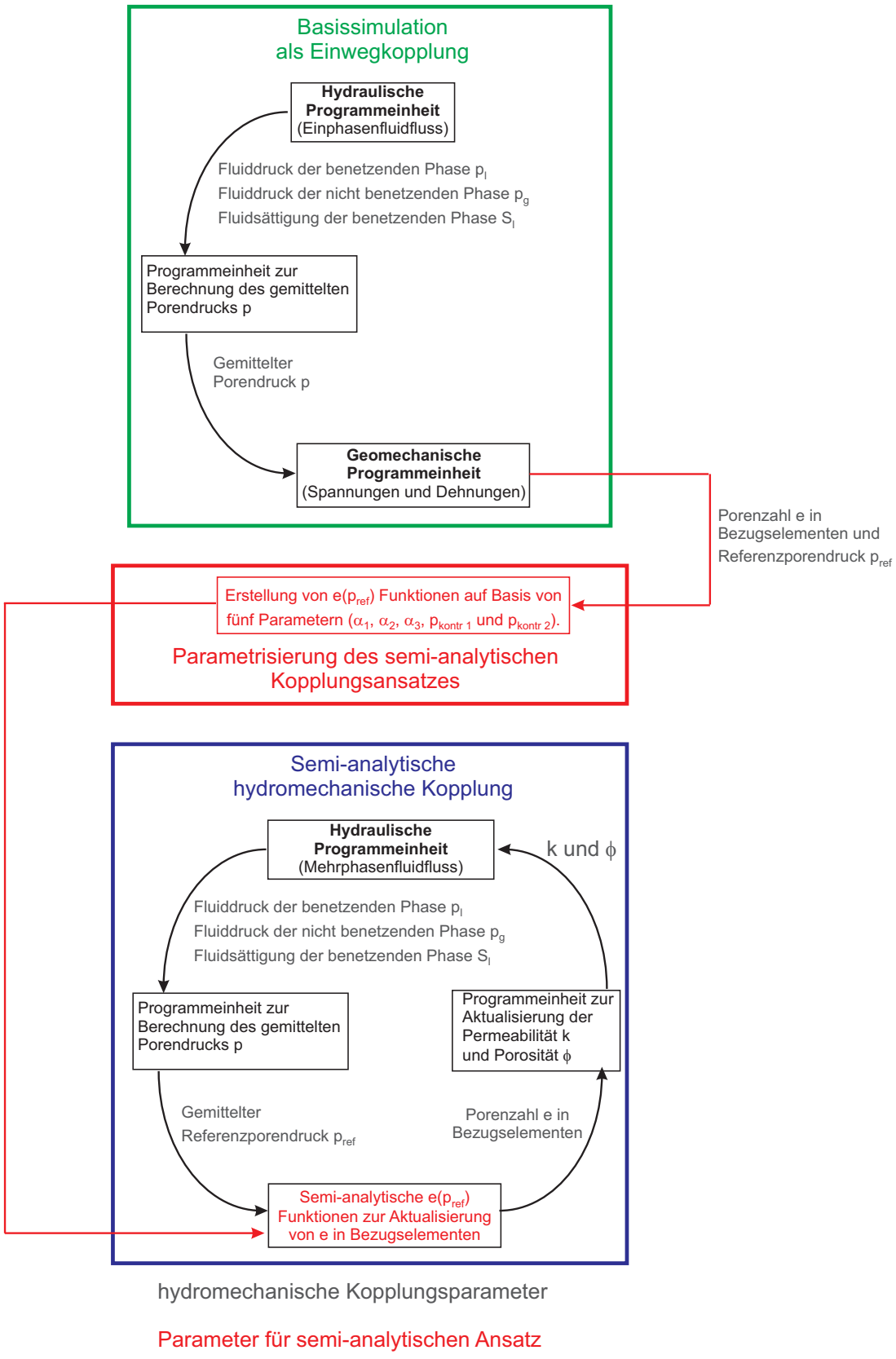


Bild 5.1 Schematische Darstellung der Methodik des neuen semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes.

5.2. Konzeptionelle Grundannahmen

Eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit des neuen semi-analytischen Kopplungsansatzes liegt darin, dass sich die hydromechanischen Wechselwirkungen innerhalb von Störungen diskret über einen funktionalen Zusammenhang in Abhängigkeit eines Referenzporendrucks beschreiben lassen. Damit dieser zu einer erheblichen Rechenzeitersparnis führt, müssen die semi-analytisch ermittelten Parameter zudem für eine möglichst große Bandbreite von zu variierenden Materialparametern und Randbedingungen eine zufriedenstellende Abbildung der auftretenden Prozesse liefern. Anwendungsgrenzen für Parameterkombinationen, die mittels einer einzigen Basissimulation abgebildet werden können, werden im Rahmen einer Parameterstudie in Kapitel 7.4 und 7.5 erarbeitet.

Damit die in Kapitel 5.1 vorgestellte Methodik des semi-analytischen Kopplungsansatzes anwendbar ist, müssen die hydromechanischen Prozesse der geologischen CO_2-Speicherung und der hydraulischen Reaktivierung von Störungen in geeigneter Weise approximiert werden. Auf Basis der Prozessbeschreibung und der Literaturrecherche aus Kapitel 4.1 werden im Folgenden die dem neuen Kopplungsansatz zugrundeliegenden konzeptionellen Grundannahmen formuliert und begründet.

Isotherme Randbedingungen im Bereich der Störung

Entsprechend der Darstellung in Kapitel 4.4.1 stellen die Temperatur und der nach dem Prinzip der effektiven Spannungen für teilgesättigte Böden nach Bishop (1959) gemittelte Porendruck die beiden Kopplungsparameter für den Datentransfer vom hydraulischen zum geomechanischen Programmsystem dar. Unter Annahme von isothermen Randbedingungen während des Betrachtungszeitraums werden im geomechanischen Programmsystem Änderungen des Spannungs- und Dehnungszustands ausschließlich auf Basis des gemittelten Porendrucks ermittelt.

Aufgrund dessen, dass CO_2 in der Regel im überkritischen Zustand in das Reservoir injiziert wird, muss dessen Temperatur oberhalb von 31,04 °C liegen. Geeignete Speicherformationen befinden sich, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, idealerweise minimal in 800 m und maximal in 2500 m Tiefe. Unter Annahme eines geothermischen Temperaturgradienten von 30 °C/km und einer Temperatur von 10°C im oberflächennahen Bereich liegen in diesen Tiefen folglich initiale Temperaturen zwischen 34 °C und 85 °C vor.

Aus diesem Grund kann es infolge des deutlichen Temperaturunterschiedes im Bereich der CO_2-Fahne lokal zu einer Absenkung der Reservoirtemperatur kommen, was sowohl mit thermischen Verformungen als auch mit geänderten hydraulischen Fluideigenschaften einhergehen kann. Da CO_2 in der Regel in Antiklinalstrukturen injiziert wird, bleibt die Beeinflussung durch den Temperaturunterschied jedoch lokal begrenzt. Diese Annahme wird zudem durch die geringe Fließgeschwindigkeit des verdrängten Formationsfluids gestützt (vgl. Kapitel 4.1), wodurch eine Abkühlung der angrenzenden Formationen ausschließlich über die Wärmeleitfähigkeit des Reservoirgesteins gesteuert wird. Im Rahmen des in dieser Arbeit vorgestellten Ansatzes werden isotherme Bedingungen im störungsnahen Bereich angenommen.

Reservoir- und Barrieregesteinsintegrität

Durch die diskrete Abbildung des hydromechanischen Verhaltens der Störung, kann eine gegebenenfalls eintretende Überschreitung der Bruchfestigkeit des Reservoir- und des Barrieregesteins mit dem semi-analytischen Kopplungsansatz nur indirekt überprüft werden. Wie im folgenden Unterkapitel näher erläutert, wird eine Integrität der beiden geologischen Einheiten dadurch gewährleistet, dass die Basissimulation mit einem Maximaldruck durchgeführt wird, der unterhalb der Bruchfestigkeit des angrenzenden Gesteins liegt. Folglich müssen die auftretenden Reservoirporendrücke, der anschließend mithilfe dieser Kalibrierung durchgeführten semi-analytisch gekoppelten Simulationen, unterhalb des in der Basissimulation erzielten Maximaldrucks liegen. Der Einfluss von Kriechen wird bei der Untersuchung der Barrieregesteinsintegrität im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Effektive Spannungen nach Terzaghi

Im Rahmen der neuen Kopplung entfällt der sequenzielle Datentransfer zwischen dem hydraulischen und dem geomechanischen Programmsystem. Folglich können poroelastische Effekte entsprechend der in Kapitel 4.3.1 vorgestellten Konsolidationstheorie nach Biot, die gegebenenfalls die Porendruckentwicklung im Reservoir beeinflussen könnten, durch den neuen semi-analytischen Ansatz nicht abgebildet werden.

Wie bereits zuvor in Kapitel 2.2.2 erläutert, müssen geeignete Reservoire Porositäten höher als 10 % aufweisen. Daher ist die aus poroelastischen Effekten zu erwartende Beeinflussung des Porendrucks als eher gering einzuschätzen. Dies begründet sich durch einen mit der Porosität sinkenden Kompressionsmodul von porösen Sandsteinformationen, der den Betrag des Quotienten aus dem Kompressionsmodul des porösen Felses und dem der Gesteinsmatrix verringert (vgl. Formel (4.32)). Dies hat wiederum eine geringere Porendruckwirksamkeit α zur Folge. Entsprechend der Literaturrecherche aus Kapitel 4.3.1, sind poroelastische Effekte eher in Formationen mit geringer Porosität, wie beispielsweise in dicht gelagerten Sandsteinformationen des Rotliegend, zu erwarten.

Das Grundbau-Taschenbuch (Witt (2017)) gibt beispielsweise für die Körner von quarzitischem Sandstein eine Kompressibilität in Höhe von $2{,}7 \times 10^{-5}$ m²/MN an, was einem Kompressionsmodul von 37,0 GPa entspricht. Des Weiteren wird dort eine Bandbreite für den E-Modul des entsprechenden Gesteins zwischen 15 bis 50 GPa angegeben. Nichtsdestotrotz können E-Moduln von Sandsteinen mit einer hohen Porosität auch erheblich unterhalb dieser Werte liegen. So geben beispielsweise Winterkorn und Fang (1991) entsprechende Bandbreiten zwischen 0,5 und 8 GPa an. Die Annahme, dass Sandsteine mit einer Porosität von größer als 10 % E-Moduln zwischen 1,0 und 10,0 GPa aufweisen, führt folglich unter der Verwendung eines Kompressionsmoduls in Höhe von 37,0 GPa und einer Poissonzahl von 0,25 zu Porendruckwirksamkeiten α zwischen 0,98 und 0,82. Im Rahmen dieser Arbeit ist es aufgrund dieser Werte vertretbar, dass ausschließlich die Theorie der effektiven Spannungen nach Terzaghi berücksichtigt wird.

Keine Permeabilitätsanpassung im Reservoir und in Grundwasserleitern

Im Rahmen des neuen Kopplungsansatzes werden Porositätsänderungen im Reservoir und in gegebenenfalls vorhandenen GWLs infolge elastischer Deformationen, die aus einer Reduzierung der dort wirkenden effektiven Spannungen resultieren, durch Vorgabe einer Kompressibilität des porösen Gesteins direkt durch das hydraulische Programmsystem übernommen. Eine hieraus resultierende Permeabilitätsänderung wird in diesem Zusammenhang nicht berücksichtigt. Dies begründet sich einerseits dadurch, dass Sandsteine trotz einer hohen Porosität relativ hohe Kompressionsmodule aufweisen, die wiederum zu geringen elastischen volumetrischen Dehnungen führen. Setzt man exemplarisch den Kompressionsmodul einer Sandsteinformation in Höhe von 10 GPa in Relation zu einer Porendruckerhöhung im Reservoir in Höhe von 100 bar, so beträgt der Quotient aus beiden 1000.

Andererseits weisen geeignete Reservoire Porositäten auf, die oberhalb von 10 % liegen. Aufgrund dessen führen zu erwartende volumetrische Dehnungen von kleiner als 10^{-3}, unter Verwendung von Gleichung (4.67), zu äußerst geringen Porositätsänderungen, was wiederum nach Gleichung (4.68) ausschließlich vernachlässigbare Permeabilitätsänderungen zur Folge hat.

Annahme eines Einphasenfluidflusses durch die Störung in der Basissimulation

Als letzte konzeptionelle Grundannahme wird im Rahmen der Formulierung des neuen Ansatzes bezüglich der Durchführung einer Basissimulation zur Kalibrierung des semi-analytischen Ansatzes vereinfachend angenommen, dass die Störung im maßgebenden Betrachtungszeitraum der Injektionsphase ausschließlich von Formationsfluid durchflossen wird. Diese Annahme stützt sich auf die in Kapitel 4.1 präsentierten Ergebnisse einer Literaturrecherche, in der eine Vielzahl veröffentlichter Simulationsergebnisse zeigt, dass sowohl bei von Anfang an hydraulisch wirksamen als auch bei erst im Laufe des Injektionsprozesses hydraulisch reaktivierten Störungen kein oder kein nennenswerter CO_2-Fluidfluss in eine Störung hinein zu beobachten ist.

Dies erklärt sich durch die Wirkung von Antiklinalen als sogenannte strukturelle Falle (vgl. Kapitel 2.2.1), durch die geringe Fließgeschwindigkeit von CO_2 und Formationsfluid durch das Reservoir sowie durch die in Kapitel 2.2.2 beschriebenen Anforderungen einer möglichst geringen Durchörterung des Barrieregesteins mit nur wenigen kleinen Störungen. Aufgrund des zuletzt genannten Punktes wird davon ausgegangen, dass in der Praxis ausschließlich in einem ausreichend großen Abstand zu vorhandenen Störungen CO_2 injiziert wird. Folglich führt das durch CO_2 verdrängte Formationsfluid zu einem einphasigen Fluidfluss durch gegebenenfalls vorhandene Störungen.

Für den Fall, dass die CO_2-Fahne trotzdem eine Störung erreicht, muss das CO_2, bevor es die Störung durchströmen kann, zuerst Teile des zuvor den Porenraum ausfüllenden Formationsfluids verdrängen. Damit dies geschehen kann, muss der Gasdruck der CO_2-Phase um den Betrag des kapillaren Eindringdrucks höher sein als der Fluiddruck des zu verdrängenden Formationsfluids (vgl. Kapitel 4.2.4). Hierdurch werden die Porenräume mit CO_2 oder mit Formationsfluid gefüllt, wodurch teilgesättigte Zustände entstehen.

Obwohl die dynamische Viskosität von überkritischem CO_2 etwa um den Faktor 10 höher als die von Formationsfluid ist, erhöht sich in diesem Fall die hydraulische Leitfähigkeit der Gasphase nicht signifikant (IPCC (2005)). Denn durch das Auftreten von teilgesättigten Zuständen sind relative Permeabilitäten zu berücksichtigen (vgl. Kapitel 4.2.4), die wiederum die jeweilige hydraulische Leitfähigkeit erheblich reduzieren. Wie in Bild 4.8 dargestellt, kann bereits eine Fluidsättigung von 0,75 dazu führen, dass sich die relativen Permeabilitäten der Fluid- und der Gasphase auf 0,15 reduzieren.

Deshalb wird im Rahmen dieser Arbeit davon ausgegangen, dass in den vollständig gesättigten Bereichen der Störung weiterhin die hydraulische Leitfähigkeit des Formationsfluids für die Höhe der auftretenden Porendruckentwicklung im Speicher maßgebend ist. Die Validierung der Annahme, dass für die Durchführung der Basissimulation die Verwendung von Einphasenfluidfluss realistisch ist, wird in Kapitel 8 durch die Auswertung von Mehrphasenfluidfluss-Simulationen unter Berücksichtigung des neuen semi-analytischen Kopplungsansatzes erbracht.

5.3. Formulierung des neuen Ansatzes

Aufbauend auf der in Kapitel 5.1 beschriebenen Methodik des neuen Ansatzes wird dieser im Folgenden beschrieben. Zu Beginn werden in diesem Zusammenhang verwendete Definitionen erläutert, auf deren Basis anschließend die mathematische Beschreibung des neuen Kopplungsansatzes durch fünf semi-analytische Parameter formuliert wird. Damit diese Formulierung Gültigkeit besitzt, wird von den verwendeten semi-analytischen Parametern invariantes Verhalten in Bezug auf Größen, wie beispielsweise die Injektionsrate und die initiale Störungspermeabilität, vorausgesetzt. Kapitel 5.3.3 bietet eine Zusammenstellung der hierfür angenommenen Hypothesen, die in den Kapiteln 7.4 und 7.5 validiert werden.

5.3.1. Verwendete Definitionen

Der neue semi-analytische Ansatz bildet das hydromechanische Verhalten einer Störung ab, indem er einzelne Bereiche der Störung in Homogenbereiche einteilt und diese stellvertretend durch jeweilige BZEs beschreibt. Für jedes dieser BZEs wird wiederum, wie bereits in Kapitel 5.1 erläutert, jeweils eine semi-analytische Funktion auf Basis der numerischen Ergebnisse einer einzigen Basissimulation aufgestellt.

Homogenbereiche und Bezugselemente

Die Einteilung einer geologischen Störung in Homogenbereiche ist exemplarisch in Bild 5.2 dargestellt. Die Abbildung zeigt die schematische Darstellung eines CO_2-Speicherstandortes unter Berücksichtigung eines Reservoirs, einer Barriereformation und eines höhergelegenen GWL. Die beiden wasserleitenden Schichten sind über eine geologische Störung miteinander verbunden. Jedem dieser farblich hinterlegten Homogenbereiche wird jeweils ein in Bild 5.2 als schwarzes Quadrat gekennzeichnetes BZE zugeordnet. Jedes BZE repräsentiert das hydromechanische Verhalten aller Elemente, die diesem durch den Homogenbereich zugeordnet worden sind. Eine

Zuordnung der Störungselemente zu einem Homogenbereich erfolgt auf Basis der Ergebnisse der Basissimulation. In diesem Zusammenhang sind Elemente, die zum gleichen Zeitpunkt annähernd die gleiche Porenzahländerung erfahren haben, zu einen Homogenbereich zusammenzufassen. Die hierbei getroffene Einteilung muss für den gesamten Simulationszeitraum gelten. In Kapitel 7.4.1 wird eine solche Zuordnung exemplarisch am Beispiel einer Parameterstudie, in der der Einfluss der Störungsdiskretisierung auf die Porendruckentwicklung untersucht wird, erläutert.

Referenzporendruck p_{ref}

Zusätzlich ist im zweidimensionalen Fall, wie in Bild 5.2 gezeigt, pro Störung ein Referenzelement an der geometrischen Schnittstelle zwischen Störung und Reservoir zu definieren. Im dreidimensionalen Fall ist eine Störung zusätzlich in die räumliche Tiefe in Homogenbereiche zu unterteilen, weshalb in diesem Fall mehrere Referenzelemente zu definieren sind. Mithilfe der Basissimulation wird für jedes Referenzelement die zeitliche Entwicklung des Referenzporendrucks ermittelt. Anschließend werden alle Porenzahlentwicklungen der einzelnen BZEs in Relation zu diesem gesetzt. Im Rahmen einer semi-analytisch gekoppelten Simulation stellt dieser Referenzporendruck, wie im blauen Kasten von Bild 5.1 dargestellt, den einzigen Kopplungsparameter zwischen dem hydraulischen Programmsystem und dem semi-analytischen Kopplungsansatz dar. Er steuert im jeweiligen Simulationsschritt die Porenzahlentwicklung der einzelnen Homogenbereiche.

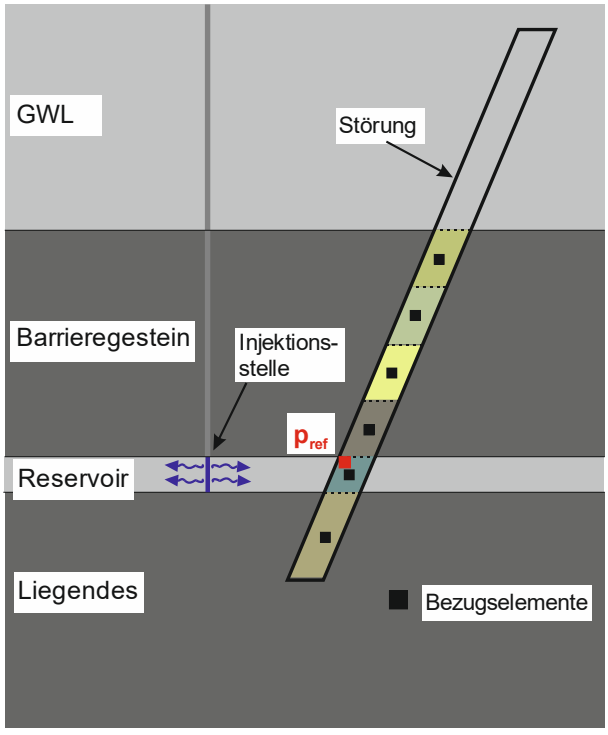


Bild 5.2 Exemplarische Diskretisierung einer Störung durch Bezugselemente.

Im Fall einer niedrigen initialen Störungspermeabilität können, infolge von instationärem Fluidfluss, Porendruckanstiege zeitlich verzögert in einzelnen Bereichen der Störung auftreten.

Erreichen hierdurch die effektiven Spannungen ein kritisches Niveau, für das die Fließkurve erreicht wird, beschreibt der Spannungspfad, wie exemplarisch in Bild 4.19 zu sehen und in Kapitel 4.3.2.2 beschrieben, nach Erreichen der Bruchbedingung eine neutrale Entlastung entlang der Fließfläche. Hierdurch kommt es zu einem entfestigenden Materialverhalten, wodurch Spannungen in höhergelegene Bereiche umgelagert werden. Dies kann dort wiederum zu Verformungen führen, die bereits auftreten, bevor an dieser Stelle ein Porendruckanstieg zu verzeichnen ist. Der Bezug der Porenzahlentwicklung eines solchen Bezugselements auf die Porenzahlentwicklung desselben Elements würde in diesem Fall, wie in Bild 5.3 dargestellt, zu einem indifferenten Anstieg der Porenzahl führen, der mathematisch nicht beschrieben werden kann. Dieser stellt sich in Form eines vertikalen Kurvenverlaufs dar.

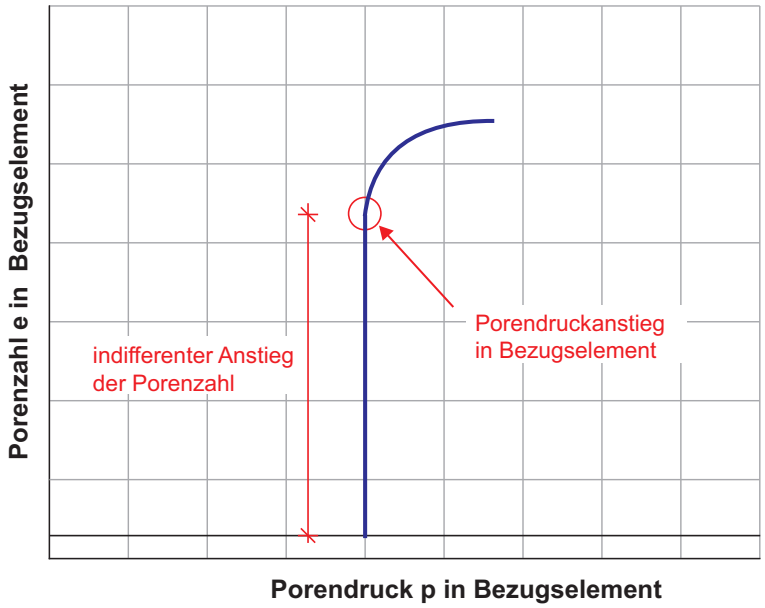


Bild 5.3 Indifferenter Porendruckanstieg durch Bezug der Porenzahlentwicklung eines Bezugselements auf die Porendruckentwicklung desselben Bezugselements.

Bei der Verwendung des semi-analytischen Ansatzes wird die Porenzahl der jeweiligen Bezugselemente jedoch in Relation zu einem tiefer gelegenen Referenzporendruck gesetzt. Dieser bildet einen durch CO_2-Injektion induzierten Porendruckanstieg im Reservoir zeitnah ab. Hierdurch können auch porendruck- beziehungsweise zeitunabhängige Prozesse durch den Bezug auf einen einzigen Kopplungsparameter (Referenzporendruck) abgebildet werden.

Andererseits kann eine geringe Störungspermeabilität auch dazu führen, dass höher gelegene Bereiche nach Injektionsstopp weiterhin Porendruckanstiege und eine damit einhergehende Erhöhung der Porenzahl verzeichnen, während sich der Referenzporendruck bereits verringert. Solche Zustände führen, wie in Bild 5.4 zu sehen, im Anfangsstadium der Postinjektionsphase zu einem horizontalen oder schwach geneigten Kurvenverlauf, der sich durch zeitabhängige Konsolidationsprozesse erklären lässt.

Da die Porenzahlentwicklung aus höhergelegenen Bereichen der Störung auf einen einzigen tiefer gelegenen Referenzporendruck bezogen wird, kann die Verwendung des semi-analytischen

Ansatzes, wie später in Kapitel 7.6 beschrieben, unter Annahme einer konstanten Injektionsrate sowohl zeitunabhängige als auch –abhängige Einflüsse auf das Scherverhalten abbilden.

5.3.2. Mathematische Beschreibung des neuen Ansatzes

Um die Formulierung des neuen Ansatzes mathematisch beschreiben zu können, werden die Porenzahlen der einzelnen BZEs in der Einheit Prozent in Relation zum Referenzporendruck mit der Einheit MPa gesetzt. Bild 5.4 zeigt qualitativ den charakteristischen Verlauf einer sogenannten $e(p_{ref})$-Funktion für ein BZE der Störung, die mittels einer einweggekoppelten hydromechanischen Basissimulation ermittelt wurde. Der Verlauf der blauen Kurve startet zu Injektionsbeginn mit einer initialen Porenzahl e_0, um dann nach einer kurzen Übergangsphase, in der ausschließlich geringe elastische Dehnungen auftreten, mit zunehmendem Referenzporendruck p_{ref} sukzessive anzusteigen. Die hohen Porenzahlzuwächse in Phase 2 sind auf plastische Verformungen zurückzuführen, die nachdem der effektive Spannungszustand im BZE das Bruchkriterium erreicht hat, auftreten.

Nach Injektionsstopp verbleibt die Kurve für eine gewisse Dauer auf dem Wert der maximal erreichten Porenzahl, obwohl der Referenzporendruck bereits fällt. Dieses Verhalten ist im Fall einer geringen Störungspermeabilität charakteristisch für höhergelegene BZEs. Da sich der Porendruck im Reservoir schneller als in den oberen Bereichen der Störung abbaut, treten zeitliche Effekte auf, die sich durch einen horizontalen oder sogar weiter ansteigenden Pfad auszeichnen. Nachdem der Referenzdruck einen gewissen Kontrollporendruck ($p_{kontr\,2}$) erreicht hat, fällt die Kurve nach einem gewissen Zeitraum kontinuierlich ab.

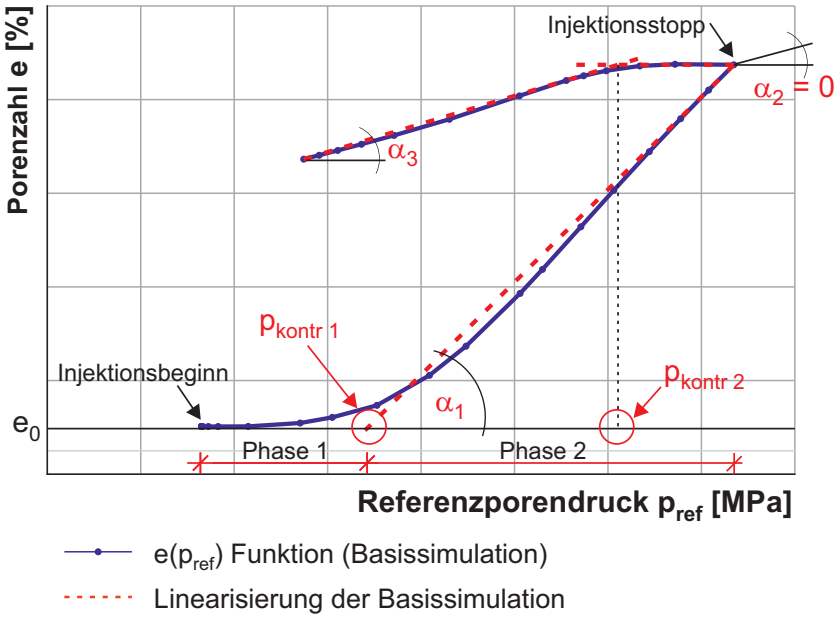


Bild 5.4 Schematische Darstellung der verwendeten Linearisierung und Parametrisierung einer $e(p_{ref})$-Funktion, die das hydromechanische Verhalten eines einzigen BZE der Störung repräsentiert.

Eine solche Kurve ist für die Injektionsphase und die Postinjektionsphase bereichsweise stetig und lässt sich partiell differenzieren. Unter Vernachlässigung der initialen Phase kurz nach Injektionsbeginn lässt sich der ansteigende Ast durch Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate, wie in Bild 5.4 als rote gestrichelte Linie dargestellt, hinreichend genau linear approximieren. Hierdurch erhalten wir eine unter dem Winkel α_1 geneigte Gerade, die die um e_0 verschobene x-Achse im Punkt $p_{kontr\,1}$ schneidet. Dieser Schnittpunkt repräsentiert sozusagen den Kontrollporendruck im Referenzelement, ab dem Plastifizierung in dem entsprechenden BZE eintritt.

Die Postinjektionsphase lässt sich wiederum in zwei Bereiche mit unterschiedlicher Neigung aufteilen. Durch Differenzierung der Kurve in einem Punkt kurz nach Injektionsstopp und in einem weiteren im mittleren Teil des abfallenden Pfades, lässt sich der Kurvenverlauf der Postinjektionsphase ebenfalls linear durch zwei Tangenten beschreiben, die unter den Winkeln α_2 und α_3 geneigt sind. Beide Geraden schneiden sich im Punkt $p_{kontr\,2}$.

Bei der Verwendung dieser anschaulichen Darstellungsform ist bei der Auswertung der $e(p_{ref})$-Funktionen, insbesondere bei der Ermittlung der beschriebenen Winkelbeziehungen, auf eine konsistente Skalierung der Achsen zu achten. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Strecke von einem Prozent Porenzahl so skaliert ist, dass sie der Strecke von einem MPa auf der x-Achse entspricht.

Eine weitere mögliche Darstellungsform des funktionalen Zusammenhangs zwischen der Porenzahl e und dem Referenzporendruck p_{ref} zeigt Bild 5.5. In diesem Fall wird die Porenzahl e auf die initiale Porenzahl e_0 und der Referenzporendruck p_{ref} auf den Initialporendruck p_0 normiert. Diese Darstellung bietet den Vorteil, dass hierbei die Neigungen der einzelnen Funktionsäste eindeutig definiert sind. Zudem lassen sich durch die Verwendung dieser Darstellungsform verschiedene Standorte mit unterschiedlichen initialen Referenzporendrücken in einem Diagramm darstellen und somit vergleichen.

Bei der praktischen Anwendung von mit dieser Methode ermittelten Parametern ist jedoch darauf zu achten, dass der durch die hydraulische Programmeinheit ermittelte Referenzporendruck p_{ref} durch p_0 dividiert werden muss, bevor die Porenzahl e semi-analytisch berechnet werden kann. Die auf diese Weise erhaltene normierte Porenzahl muss entsprechend mit e_0 multipliziert werden, bevor dieser Wert wiederum an die hydraulische Programmeinheit zurück transferiert wird.

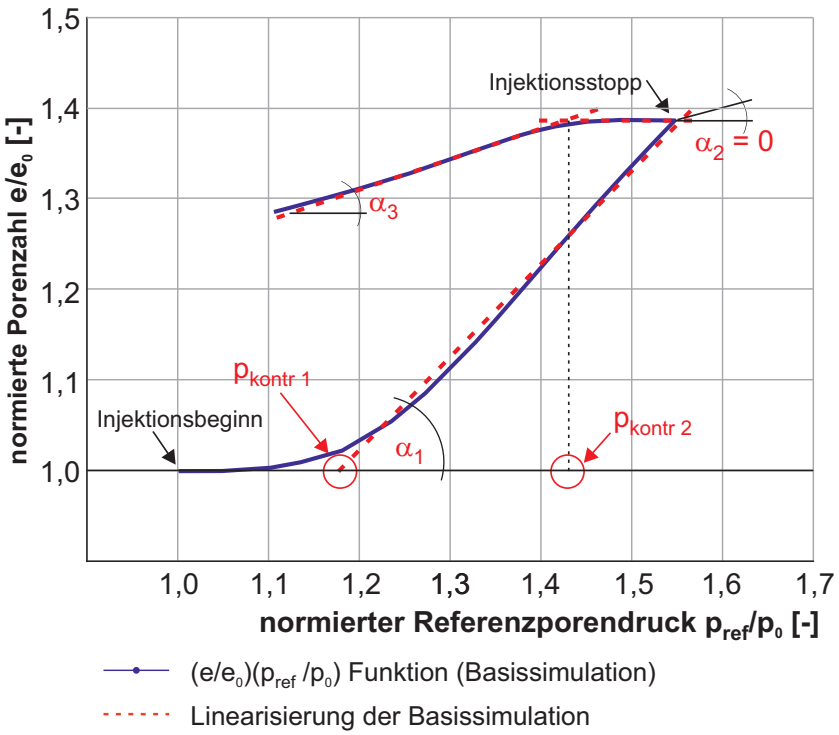


Bild 5.5 Schematische Darstellung der Linearisierung und Parametrisierung einer normierten $(e/e_0)(p_{ref}/p_0)$-Funktion.

Durch die bereichsweise Aufteilung in drei separate Teilfunktionen lässt sich die Funktion einfach programmieren und in numerische Simulationen implementieren. Durch Bildung der Differenz aus den Referenzporendrücken p_{ref} des aktuellen Berechnungsschrittes p_{ref}^{i} und dem des vorherigen p_{ref}^{i-1} kann ermittelt werden, ob der Porendruck steigt oder fällt. Generell startet die Simulation mit der initialen Porenzahl e_0. Im Fall von steigenden Porendrücken muss die Fallunterscheidung getroffen werden, ob der aktuelle Referenzporendruck p_{ref}^{i} kleiner oder größer als $p_{kontr\,1}$ ist. Im ersten Fall wird die Porenzahl weiterhin zu e_0 gesetzt, im zweiten wird sie entsprechend Gleichung (5.1) aktualisiert.

$$e_i = e_{i-1} + \left(p_{ref}^{i} - p_{ref}^{i-1}\right) \cdot \tan \alpha_1 \qquad \text{für grad } p_{ref} > 0 \text{ und } p_{ref} > p_{kontr\,1} \tag{5.1}$$

$$e_i = e_{i-1} - \left(p_{ref}^{i-1} - p_{ref}^{i}\right) \cdot \tan \alpha_2 \qquad \text{für grad } p_{ref} < 0 \text{ und } p_{ref} > p_{kontr\,2} \tag{5.2}$$

$$e_i = e_{i-1} - \left(p_{ref}^{i-1} - p_{ref}^{i}\right) \cdot \tan \alpha_3 \qquad \text{für grad } p_{ref} < 0 \text{ und } p_{ref} < p_{kontr\,2} \tag{5.3}$$

Kommt es zwischen zwei Simulationsschritten zu einem Porendruckabfall, so ist wiederum zu unterscheiden, ob p_{ref} größer oder kleiner als $p_{kontr\,2}$ ist. Auf Basis der Porenzahl e^{i-1} des vorausgegangenen Berechnungsschrittes errechnet sich im ersten Fall die aktuelle Porenzahl e_i nach Gleichung (5.2) und im zweiten nach (5.3).

5.3.3. Zugrundeliegende Hypothesen

Um den zuvor formulierten Ansatz für eine möglichst große Anzahl von Injektionsraten anwenden zu können, ist es zwingend erforderlich, dass sich die fünf Parameter $p_{kontr\,1}$, $p_{kontr\,2}$, α_1, α_2 und α_3 in Bezug zur Injektionsrate invariant verhalten. Des Weiteren ist nachzuweisen, dass sich das hydromechanische Verhalten einer Zweiwegkopplung näherungsweise durch den Verlauf einer Einwegkopplung approximieren lässt. Im Folgenden werden fünf Hypothesen formuliert, die für eine Anwendbarkeit des neuen Ansatzes erfüllt sein müssen. Eine Validierung dieser erfolgt in den Kapiteln 7.4, 7.5 und 8.

Hypothese 1

Die mittels einer hydromechanisch einweggekoppelten Basissimulation generierten $e(p_{ref})$-Funktionen verlaufen aufgrund der konstanten Permeabilität bereichsweise nahezu linear und lassen sich infolgedessen zufriedenstellend approximieren. Zudem verhalten sich die Parameter $p_{kontr\,1}$, α_1, α_2 und α_3 in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariant. Ein Kriterium für Invarianz stellt in diesem Zusammenhang die lineare Approximation von sämtlichen mit unterschiedlich hohen Injektionsraten ermittelten $e(p_{ref})$-Kurven mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2 \geq 0{,}95$ dar. Bezugsgröße ist hierbei die mit der höchsten Injektionsrate ermittelte semi-analytische Parametrisierung.

Hypothese 2

Damit sich das hydromechanische Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen für eine Vielzahl von Injektionsraten durch eine einweggekoppelte approximieren lässt (Hypothese 4), ist es erforderlich, dass die Parameter α_1, α_2 und α_3 gegenüber der initialen Störungspermeabilität invariant sind. Zudem ist nachzuweisen, dass höhere initiale Permeabilitäten lediglich zu einer Verringerung von $p_{kontr\,1}$ und infolgedessen, wie in Bild 5.6 zu erkennen, zu einer Verschiebung der linear approximierten $e(p_{ref})$-Funktion auf der x-Achse führen. In diesem Zusammenhang bewirkt eine höhere hydraulische Leitfähigkeit einen besseren Fluidfluss in die Störung, weshalb ein geringerer Porendruckgradient erforderlich ist, um in den BZEs einen kritischen Porendruck zur Erreichung des Bruchkriteriums zu bewirken. Zudem ist anzunehmen, dass der Wert von $p_{kontr\,1}$ ab einer bestimmten initialen Permeabilität gegen einen festen Wert konvergiert.

Hypothese 3

Durch die aktualisierte Permeabilität verlaufen die $e(p_{ref})$-Funktionen im Fall einer Zweiwegkopplung nicht-linear und „bauchen“ mit zunehmender Injektionsrate stärker aus. Der Referenzporendruck, ab dem die Störung in diesem Fall plastifiziert ($p_{kontr\,1}$) verhält sich in Bezug auf die Injektionsrate trotzdem invariant.

Hypothese 4

Alle durch die Verwendung einer Zweiwegkopplung generierten $e(p_{ref})$-Kurven lassen sich durch die mit einer einweggekoppelten Simulation erzeugten $e(p_{ref})$-Funktion hinreichend genau approximieren. Angesichts der gleich bleibenden Permeabilität während einer einweggekoppelten Simulation verläuft die $e(p_{ref})$-Kurve, wie in Bild 5.6 dargestellt, flacher als die der nicht-linearen

Kurve einer Zweiwegkopplung. Eine gute Approximation erfordert folglich, dass diese um ein geeignetes $\Delta p_{kontr\,1}$ auf der x-Achse verschoben wird. Dies erfolgt dadurch, dass für die Basissimulation eine in Relation zu der zu approximierenden zweiweggekoppelten Simulation erhöhte initiale Störungspermeabilität verwendet wird. Ein Kriterium für die Wahl dieser erhöhten initialen Permeabilität wird auf Basis einer Parameterstudie in Kapitel 7.4 erarbeitet.

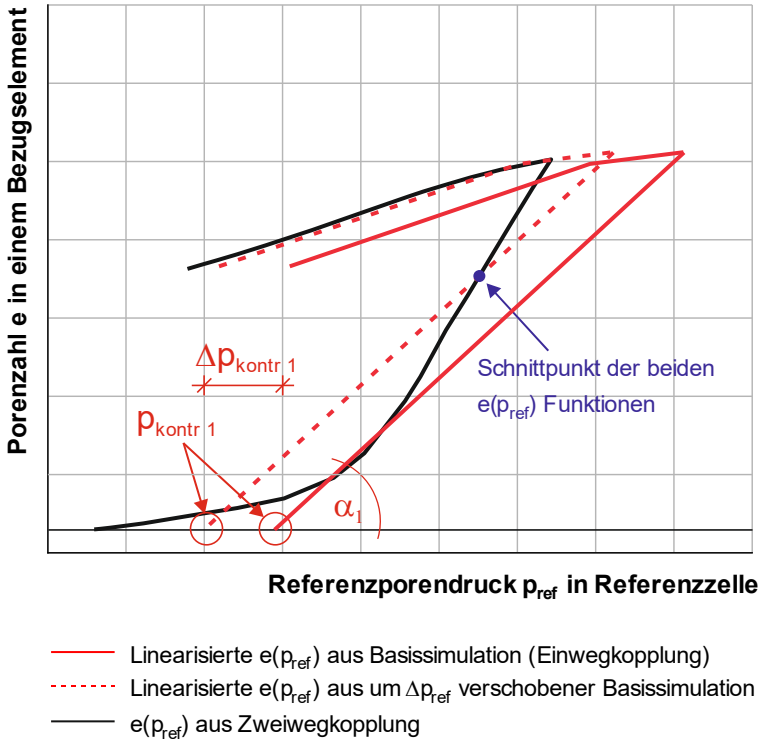


Bild 5.6 Prinzip der Approximation eines exemplarischen $e(p_{ref})$-Verlaufs einer Zweiweg- durch die korrigierte linearisierte $e(p_{ref})$-Funktion einer Einwegkopplung.

Hypothese 5

Wie bereits in Kapitel 5.2 formuliert, strömt während der Injektionsphase überwiegend Formationsfluid durch die Störung, sodass dieser Prozess durch eine Basissimulation unter Berücksichtigung von Einphasenfluidfluss abgebildet werden kann. Für den Fall, dass die CO_2-Fahne die Störung erreicht und in diese strömt, ist des Weiteren nachzuweisen, dass mittels der linearisierten und parametrisierten Basissimulation auch der Fluidfluss unter teilgesättigten Bedingungen approximiert werden kann.

5.3.4. Anwendung des neuen Ansatzes

Um den semi-analytischen Ansatz zu parametrisieren, wird zuerst eine Injektionsrate definiert, die so hoch gewählt ist, dass mit dieser vorhandene Störungen reaktiviert werden, die Integrität des Reservoir- und des Barrieregesteins jedoch nicht negativ beeinträchtigt wird. Eine Untersuchung der jeweiligen Integrität hat durch die Verwendung eines Bruchkriteriums in der Basissimulation zu erfolgen. Mit dieser Injektionsrate wird anschließend eine einzige einweggekoppelte Einphasenfluidfluss-Simulation durchgeführt. Auf Basis der Ergebnisse dieser Basissimulation werden anschließend, wie in Kapitel 5.3.2 beschrieben, die Funktionen zur Parametrisierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes erstellt, indem die Porenzahlentwicklungen der Bezugspunkte in Relation zu einem Referenzporendruck p_{ref} gesetzt werden. Anschließend werden diese linearisiert und durch die fünf Parameter $p_{kontr\,1}$, $p_{kontr\,2}$, α_1, α_2 und α_3 parametrisiert, um dann entsprechend der Darstellung im blauen Kasten von Bild 5.1 mittels der neuen hydromechanischen Kopplung die Permeabilitäts-Porositätsanpassung in den BZEs zu steuern.

Damit zweiweggekoppelte Simulationen durch die semi-analytischen Funktionen approximiert werden können, müssen diese, wie in Bild 5.6 dargestellt, um $\Delta p_{kontr\,1}$ verschoben werden. Hierzu wird die Basissimulation mit einer im Verhältnis zu den anschließend durchzuführenden zweiweggekoppelten Simulationen erhöhten initialen Störungspermeabilität, durchgeführt. In Kapitel 7.4 wird durch Ergebnisse von Parameterstudien gezeigt, dass eine generelle Erhöhung mit einem Multiplikator von 5 zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

Für die Durchführung von semi-analytisch gekoppelten Simulationen dürfen ausschließlich Injektionsraten verwendet werden, bei denen der resultierende maximale Reservoirdruck unterhalb desjenigen der Basissimulation liegt. Deshalb kann unter Berücksichtigung der praktizierten Verschiebung der $e(p_{ref})$-Kurven hin zu einem geringeren $p_{kontr\,1}$ davon ausgegangen werden, dass die Integrität des Reservoirs und des Barrieregesteins auch in den semi-analytisch gekoppelten Simulationen gewährleistet ist.

5.4. Methodik zur Validierung des neuen Kopplungsansatzes

Die in den folgenden Kapiteln durchgeführte Validierung des neuen Kopplungsansatzes orientiert sich an der Struktur der in Kapitel 5.3.3 formulierten Hypothesen. Hierzu werden in Kapitel 7.4 unter Verwendung des Finite-Elemente-Programms ABAQUS umfassende Parameterstudien durchgeführt. Diese dienen einerseits dazu herauszufinden, ob sich die durch eine Basissimulation ermittelte semi-analytische Parametrisierung auf die Simulation von Szenarien, die von dieser abweichende Materialparameter verwenden, übertragen lässt. Andererseits wird die Gültigkeit der fünf aufgestellten Hypothesen nachgewiesen.

Die Validierung des semi-analytischen Ansatzes selbst erfolgt in den Kapiteln 7.6 und 8. Hierzu wird unter Annahme der Gültigkeit von Hypothese 5 aus Kapitel 5.3.3 in einem ersten Schritt unter Verwendung des Programms ABAQUS der neue Kopplungsansatz für den Fall validiert, dass ausschließlich Formationsfluid durch die Störung strömt. Nachdem der Ansatz für Einphasenfluidfluss in Kapitel 7.6 validiert wurde, wird anschließend in Kapitel 8 unter Verwendung der sequenziell gekoppelten Programmsysteme TOUGH2-MP/ECO_2N und $FLAC^{3D}$ Hypothese 5 bewiesen. Hierdurch wird demonstriert, dass eine Anwendbarkeit des neuen Ansatzes für Mehrphasenflussprozesse gegeben ist.

Die generelle Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes erfolgt durch einen direkten Vergleich der Ergebnisse von zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung gleicher Randbedingungen und Injektionsraten. Hierzu wird die zeitliche Entwicklung der Porendruckverteilung in den BZEs der Störung als Vergleichsgröße gewählt. Die Wahl dieser Größe begründet sich dadurch, dass der Fluidfluss (Darcy) direkt durch Porendruckgradienten gesteuert wird. Eine identische Porendruckverteilung führt folglich zu identischen Gradienten und damit zu identischen Fluidflüssen.

5.5. Zusammenfassung

Zu Beginn von Kapitel 5 wurde die generelle Methodik des semi-analytischen Kopplungsansatzes erläutert. Des Weiteren wurden in einem zweiten Schritt die konzeptionellen Annahmen, die diesem Ansatz zugrunde liegen, formuliert und unter Bezug auf die theoretischen Betrachtungen in Kapitel 4.1 begründet. Hierauf aufbauend erfolgte die mathematische Formulierung des neuen Ansatzes in Kapitel 5.3. Hierzu wurden wichtige Begrifflichkeiten des neuen Ansatzes wie beispielsweise sogenannte Porenzahl-Referenzdruck-Funktionen ($e(p_{ref})$-Funktionen) erläutert und definiert. Zudem wurden für die Anwendbarkeit des neuen Ansatzes fünf Hypothesen formuliert, deren jeweilige Gültigkeit im folgenden Kapitel validiert wird. Zum Ende des Kapitels wurde eine Erläuterung zum praktischen Gebrauch des semi-analytischen Ansatzes gegeben. Zudem wurde die Methodik zur generellen Validierung des neuen Ansatzes in den Kapiteln 7.6 und 8 beschrieben.

6 Berechnungsmodelle und numerische Umsetzung

6.1. Gliederung

Da sich der Kopplungsparameter zwischen dem hydraulischen und dem geomechanischen Programmsystem in isothermen sequenziellen Zweiwegkopplungen als ein aus den Partialdrücken der Gas- und der Fluidphase gemittelter Porendruck darstellt, werden Spannungen und Dehnungen im geomechanischen Modell ausschließlich auf Basis dieses gemittelten Porendrucks ermittelt. Dadurch, dass es sich bei diesem Porendruck um eine approximierte Größe handelt, werden die Einflüsse von thermodynamischen Effekten und von relativen Permeabilitäten generell nur mittelbar in den Spannungs-Dehnungsantworten des geomechanischen Programmsystems abgebildet. Des Weiteren ist bei der Prozesssimulation einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen ausschließlich die Wirkung, also die betragsmäßige Höhe des auftretenden Porendrucks von Bedeutung, wohingegen die Ursache der Porendruckerhöhung eine untergeordnete Rolle spielt. Beispielsweise hätte sich ein identischer Spannungs- und Verformungszustand ebenso gut mit einer vergleichbaren Porendruckverteilung eingestellt, deren Ursache in der Injektion eines anderen Fluids als CO_2 gelegen hätte.

Um den maßgebenden Einfluss von unterschiedlichen Materialparametern auf das Spannungs-Dehnungsverhalten von Störungen eindeutig zu identifizieren, werden die in Kapitel 7 präsentierten Simulationen unter Annahme der Gültigkeit von Hypothese 5 aus Kapitel 5.2 als Einphasenfluidfluss-Simulationen durchgeführt. Hierzu wird das FE-Programm ABAQUS verwendet, dessen numerische Methodik zur Lösung von hydromechanischen Differenzialgleichungen in Kapitel 6.2 beschrieben und anhand des eindimensionalen Terzaghi-Problems validiert wird. Die numerische Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in ABAQUS wird anschließend in Kapitel 6.3 erläutert.

Unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Literaturrecherchen aus den Kapiteln 2, 3 und 4.1 wird in Kapitel 6.4 ein synthetischer Modellstandort definiert, für den wiederum neun unterschiedliche stratigraphische Varianten des Hangenden formuliert werden. Zudem werden der verwendete Modellausschnitt und dessen Diskretisierung, die verwendeten Stoffgesetze, die Parametrisierung, die Initialisierung der Modelle und die Randbedingungen definiert. Abschließend wird die numerische Umsetzung des Injektionsprozesses erläutert.

6.2. Beschreibung des verwendeten Programmsystems

6.2.1. Funktionsweise von ABAQUS

Die im Folgenden beschriebene Funktionsweise des Finite-Elemente-Programmsystems ABAQUS kann in ABAQUS (2010) vertieft werden. In der Formulierung von ABAQUS wird Boden und Fels als ein deformierbares poröses Medium betrachtet, dessen Elementvolumen V sich aus den drei Phasen Feststoff V_s, Fluid V_f und Luft V_a zusammensetzt. Die Poren des Elementvolumens können mit einem benetzenden Fluid voll- oder teilgesättigt sein. Für die Formulierung der implementierten Stoffgesetze werden effektive Spannungen nach der Theorie von Terzaghi verwendet. Die Formulierung der effektiven Spannungen für teilgesättigte Böden nach Bishop (1959) sind im Programmsystem ABAQUS dahingehend vereinfacht, dass für die nicht-benetzende Phase vereinfachend ein konstanter vernachlässigbarer atmosphärischer Luftdruck angesetzt wird.

Volumenänderungen des Dreiphasenmodells werden getrennt für die Phasen Feststoff, Fluid und das Korngerüst des porösen Mediums unter Verwendung des jeweiligen Kompressionsmoduls ermittelt. Unter Berücksichtigung von plastischen Dehnungen setzt sich die Dehnungsrate $d\varepsilon$ folglich, wie in Gleichung (6.1) dargestellt, zusammen.

$$d\varepsilon = \left(d\varepsilon_s^{vol} + d\varepsilon_f^{vol}\right) \cdot \mathbf{I} + d\varepsilon^{el} + d\varepsilon^{pl} \tag{6.1}$$

Hierbei entsprechen $d\varepsilon_s{}^{vol}$ und $d\varepsilon_f{}^{vol}$ der volumetrischen Dehnungsrate der Feststoffphase und des Fluids, $d\varepsilon^{el}$ und $d\varepsilon^{pl}$ der elastischen und der plastischen Dehnungsrate des Korngerüsts und $\mathbf{I}$ dem Einheitstensor.

Bei mechanischen Randwertproblemen existieren generell unabhängige Feldgrößen, wie Verschiebungsfelder, Verzerrungsfelder und Spannungsfelder. Diese lassen sich durch Vektoren und Tensoren beschreiben. Durch das Aufstellen der Gleichgewichtsbedingungen zwischen inneren und äußeren Kräften, durch die Verknüpfung von Verschiebungen und Verzerrungen mittels kinematischer Beziehungen und durch die Verwendung eines Stoffgesetzes, das Spannungen und Verzerrungen miteinander in Relation setzt, lässt sich für die Lösung von mechanischen Randwertproblemen ein System von partiellen Differenzialgleichungen herleiten. Diese werden im Hinblick auf eine numerische Lösung in Abhängigkeit der Verschiebungsfreiheitsgrade formuliert. Im Fall von hydromechanischen Randwertproblemen treten zusätzlich, wie bereits in Kapitel 4.2 beschrieben, Porendruckfreiheitsgrade auf. Im Fall von Einphasenfluidfluss erhöht sich entsprechend die Anzahl der Freiheitsgrade um einen einzigen zusätzlichen Porendruck.

Zur Lösung eines Systems von partiellen Differenzialgleichungen bietet sich die Methode der Finite-Elemente an. Hierbei wird für die Formulierung der mechanischen Differentialgleichungen anstatt der zuvor erwähnten Gleichgewichtsbedingungen an einem einzelnen Punkt das Prinzip der virtuellen Verrückungen verwendet. Hierbei werden Gleichgewichtsbedingungen am gesamten Körper betrachtet.

Das Programmsystem ABAQUS verwendet hierzu das Prinzip der Verrückungsraten. Dazu werden die Summe der inneren und der äußeren Arbeit in der in Gleichung (6.2) dargestellten Form bilanziert.

$$\int_V \sigma : \delta\varepsilon dV = \int_F t \cdot \delta v dF + \int_V f \cdot \delta v dV + \int_V s \cdot \phi \cdot \rho_f \cdot g \cdot \delta v dV \tag{6.2}$$

Hierbei repräsentiert der linke Teil der Gleichung das Integral der inneren Arbeit, wobei der Term über den integriert wird, dem Skalarprodukt aus dem totalen Cauchyschen Spannungstensor σ und der symmetrischen Verzerrungsrate $\delta\varepsilon$ entspricht. Der rechte Teil der Gleichung setzt sich aus der Summe der Integrale über die äußere Arbeit zusammen. Die Terme lassen sich in ein Integral über die äußere Arbeit der Randspannungen und zwei über die Volumenkräfte unterteilen. Der Anteil der Volumenkraft wird um einen Anteil zur Berücksichtigung des Porenfluids erweitert. Hierbei entspricht im rechten Fluidterm s der Sättigung, ϕ der Porosität, ρ_f der Fluiddichte und g der Erdbeschleunigung. Die Größen δv, t und f stellen das virtuelle Geschwindigkeitsfeld, die wirkende Randspannung und die Volumenkraft dar.

Für die Lösung des hydraulischen Randwertproblems wird in ABAQUS zusätzlich die auf die initiale Fluiddichte ρ_f^0 normierte Kontinuitätsgleichung in Form von Gleichung (6.3) verwendet.

$$\frac{d}{dt}\left(\int_V \frac{\rho_f}{\rho_f^0} \cdot s \cdot \phi \, dV\right) = - \int_S \frac{\rho_f}{\rho_f^0} \, s \cdot \phi \cdot \bar{n} \cdot v_f \, dF \tag{6.3}$$

Hierbei wird die innerhalb eines Zeitinkrementes auftretende Zuwachsrate des im Kontrollvolumen zusätzlich gespeicherten Fluidvolumens, dem über die Elementränder in das Element strömenden Volumenstrom gegenübergestellt. v_f entspricht hierbei der Filtergeschwindigkeit des Fluids, $\bar{n}$ dem Normalenvektor senkrecht zur durchflossenen Fläche, ρ_f der aktuellen Fluiddichte und ρ_f^0 der initialen Referenzfluiddichte. Das Differential der Kontinuitätsgleichung wird über das implizite Eulerverfahren (Rückwärts-Euler-Verfahren) integriert. Für die Diskretisierung des hydraulischen Fluidflusses wird das bereits für die Diskretisierung des Kontinuums verwendete FE-Netz verwendet, wobei das Fluid durch dessen Ränder strömen kann.

Unter Vernachlässigung von thermischen Dehnungen stellt sich die mechanische Formulierung einer kompressiblen Fluidphase und eines kompressiblen Feststoffs, wie den Gleichungen (6.4) und (6.5) zu entnehmen, dar.

$$\frac{\rho_f}{\rho_f^0} \approx 1 + \frac{p_f}{K_f} \tag{6.4}$$

$$\frac{\rho_s}{\rho_s^0} \approx 1 + \frac{1}{K_s}\left(s \cdot p_f + \frac{p}{1 - \phi}\right) \tag{6.5}$$

Hierbei stellt p_f den Porendruck der benetzenden Phase und p den hydrostatischen Anteil der Hauptspannungen dar.

Die Porosität definiert sich entsprechend Gleichung (6.6) zu

$$\phi = \frac{dV_p}{dV} = 1 - \frac{dV_s}{dV}. \tag{6.6}$$

Durch Multiplikation mit $\frac{dV_s^0}{dV_s^0}$ und $\frac{dV^0}{dV^0}$ ergibt sich

$$\phi = 1 - \frac{dV_s}{dV_S^0} \cdot \frac{dV^0}{dV} \cdot \frac{dV_S^0}{dV^0}. \tag{6.7}$$

Diese Gleichung lässt sich wiederum zu

$$\frac{1 - \phi}{1 - \phi^0} = \frac{J_s}{J} \tag{6.8}$$

umformen. Hierbei entsprechen $J_s = \frac{dV_s}{dV_S^0}$ und $J = \frac{dV}{dV^0}$ dem jeweiligen Quotienten aus dem aktuellen und dem initialen Feststoff- beziehungsweise Elementvolumen.

Durch Einsetzen der Gleichungen (6.4) und (6.5) in (6.8) und anschließendem Umformen stellt sich unter Vernachlässigung von thermischen Einflüssen die mechanische Antwort der Porosität unter Berücksichtigung eines kompressiblen Fluids und Feststoffes entsprechend der folgenden Gleichung dar.

$$\frac{\rho_f}{\rho_f^0} \cdot \phi \approx 1 - \frac{1}{J}\left(1-\phi^0\right) + \frac{p}{K_s} + p_f\left(\frac{1}{K_f} + \frac{\left(1 - \phi^0\right)}{J}\left(\frac{1}{K_s} - \frac{1}{K_f}\right)\right) \tag{6.9}$$

In Gleichung (6.9) entspricht K_s dem Kompressionsmodul des Feststoffs und K_f dem Kompressionsmodul des Fluids.

Als Freiheitsgrade treten hierbei Verschiebungen und Porendruck als Knotenvariablen auf. Durch eine geometrische Diskretisierung wird das Kontinuum in Finite Elemente zerlegt, die mittels Randknoten miteinander verbunden sind. Verschiebungen beziehungsweise Geschwindigkeiten innerhalb des Elementes werden durch sogenannte Ansatzfunktionen, die linear oder quadratisch sein können, in Abhängigkeit der Knotenvariablen ermittelt. Durch deren Verwendung können die partiellen Differentialgleichungen in ein algebraisches Gleichungssystem überführt werden, das sich numerisch lösen lässt. Mithilfe der Vorgabe eines initialen Ausgangszustandes und der Verschiebungs- und Porendruckrandbedingungen kann für das Randwertproblem somit eine Näherungslösung gefunden werden.

Die Gleichgewichtsbedingung und die Kontinuitätsgleichung werden in ABAQUS monolithisch gekoppelt simultan gelöst. Im Fall geometrischer oder physikalischer Nichtlinearität wird zur Integration das Newton-Verfahren verwendet. Mit dem Programmsystem ABAQUS können hydromechanisch gekoppelte Simulationen instationär durchgeführt werden.

Zur Parametrisierung der hydraulischen Kontinuitätsgleichung ist in ABAQUS die hydraulische Leitfähigkeit mit der Einheit m/s zu definieren. Diese ist in tabellarischer Form in Abhängigkeit der Porenzahl e und/oder der Temperatur in der Initialisierung der Materialdefinition zu übergeben. Zudem ist es möglich, diesen Fluidparameter auch in Abhängigkeit einer sogenannten freien Feldvariablen zu formulieren. Dies ermöglicht es, wie im Rahmen der numerischen Implementierung des neuen Ansatzes in ABAQUS in Kapitel 6.3 beschrieben, die hydraulische Leitfähigkeit durch ein separates Programm während der Simulation anzupassen und somit die Standardanalyse entsprechend zu modifizieren. Generell lassen sich alle temperatur- oder feldvariablenabhängigen Materialparameter auf diese Art und Weise steuern. Die hydraulische Leitfähigkeit ist bereits bei der Initialisierung des Modells zu definieren. Dadurch, dass entsprechend Gleichung (6.9) die Porosität ϕ direkt als feststehende Variable in die zu lösende Differenzialgleichung integriert ist, kann die Porenzahl e in ABAQUS während einer Simulation nicht frei definiert werden.

6.2.2. Validierung der hydromechanischen Funktionsweise von ABAQUS

Die Eignung von ABAQUS für die Untersuchung von hydromechanischen Fragestellungen wurde im Rahmen dieser Arbeit anhand des eindimensionalen Terzaghi-Problems überprüft. Hierzu ist der Konsolidationsprozess des in Bild 6.1 dargestellten, zwei Meter hohen, einen Meter breiten, homogenen und mit einer Oberflächenspannung von 100 kPa belasteten Bodenkörpers numerisch abgebildet worden.

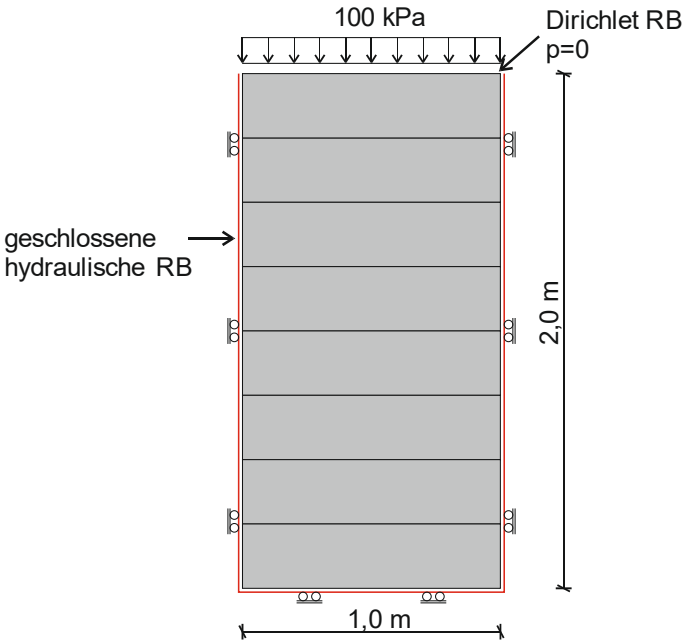


Bild 6.1 Modell zur Simulation eines 1D Konsolidationsproblems

Das Kontinuum wurde in vertikaler Richtung durch acht und in horizontaler Richtung durch ein CPE8RP Element diskretisiert. Mithilfe dieses Elementtyps können mit ABAQUS hydromechanische Simulationen von ebenen Verformungszuständen durchgeführt werden. In diesem Zusammenhang werden die Spannungs- und Verformungszustände innerhalb des Elementes ermittelt, indem die Verläufe der ermittelten Verschiebungen und Porendrücke zwischen den Elementknoten mittels quadratischer beziehungsweise linearer Ansatzfunktionen approximiert werden. Zur Lösung der Differenzialgleichungen verwendet dieser, in Bild 6.2 schematisch dargestellte Elementtyp, eine reduzierte Anzahl von Gauß-Integrationspunkten.

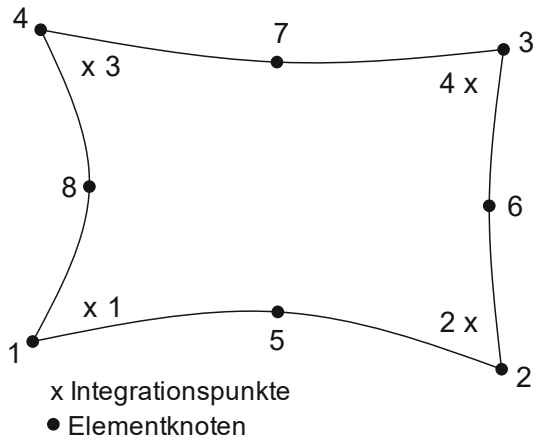


Bild 6.2 Schematische Darstellung eines CPE8RP Elementes.

Die Seitenränder des Modells sind in horizontaler und die Unterkante in vertikaler Richtung fest gelagert. Einseitige Drainage ist dadurch gewährleistet, dass abgesehen von der Oberkante für alle Ränder geschlossene hydraulische Randbedingungen definiert worden sind. An der Oberkante wird durch Vorgabe einer Dirichlet-Randbedingung in Höhe von Null eine drucklose Drainage realisiert. Die verwendeten Materialparameter sind Tabelle 6.1 zu entnehmen.

Tabelle 6.1 Verwendete Parameter.

k_f-Wert [m/s]	E-Modul [MPa]	ν [-]	γ_d [kN/m³]	ϕ [-]	γ_f [kN/m³]
10^{-10}	10	0,25	19,4	0,03	10

Die Simulation wurde in vier Simulationsschritten durchgeführt. In Simulationsschritt 1 wurde das Modell initialisiert und mit einer Erdbeschleunigung in Höhe von 10 m/s² equilibriert. Anschließend (Schritt 2) wurde die Oberflächenlast innerhalb von einer Sekunde linear auf das System aufgebracht. Während dieses Zeitraums war die hydraulische Randbedingung an der Oberkante geschlossen. In Schritt 3 wurde die Dirichlet-Randbedingung in Höhe von null an der Oberkante aktiviert, sodass einseitige Drainagebedingungen vorliegen. Die Aktivierung der Randbedingung erfolgte plötzlich innerhalb von einer Sekunde. Um Konvergenz zu erzielen, wurde ein zeitliches Startinkrement von 10^{-7} Sekunden verwendet. Im finalen Schritt 4 ist dann der Konsolidationszeitraum von 10 Jahren simuliert worden.

Für die in der numerischen Simulation in Abhängigkeit der Zeit ermittelten Setzungen wurde unter Verwendung der analytischen Gleichungen (6.10) bis (6.13) gemäß der eindimensionalen Konsolidationstheorie von Terzaghi der Konsolidationsgrad U und die dimensionslose Konsolidationszeit T_v berechnet. Die numerisch ermittelte Endsetzung $s(t=\infty)$ beträgt 1,66 cm.

$$C_V = \frac{k_f \cdot E_S}{\gamma_F} \tag{6.10}$$

$$E_S = \frac{E\,(1 - \nu)}{(1 + \nu) \cdot (1 - 2\nu)} \tag{6.11}$$

$$T_V = \frac{C_V}{\gamma_F \cdot d^2} \tag{6.12}$$

$$U = \frac{s(t)}{s(t=\infty)} \tag{6.13}$$

Die Auftragung des Konsolidationsgrades U in Abhängigkeit von T_v ist in Bild 6.3 dargestellt. Die Validierung der mit ABAQUS ermittelten Konsolidationskurve erfolgt durch einen direkten Vergleich mit der analytischen Lösung aus DIN 4019 (2015). Da beide Kurven nahezu deckungsgleich verlaufen, gilt die hydromechanische Funktionsweise von ABAQUS für den 1D-Fall mit Einphasenfluss als validiert.

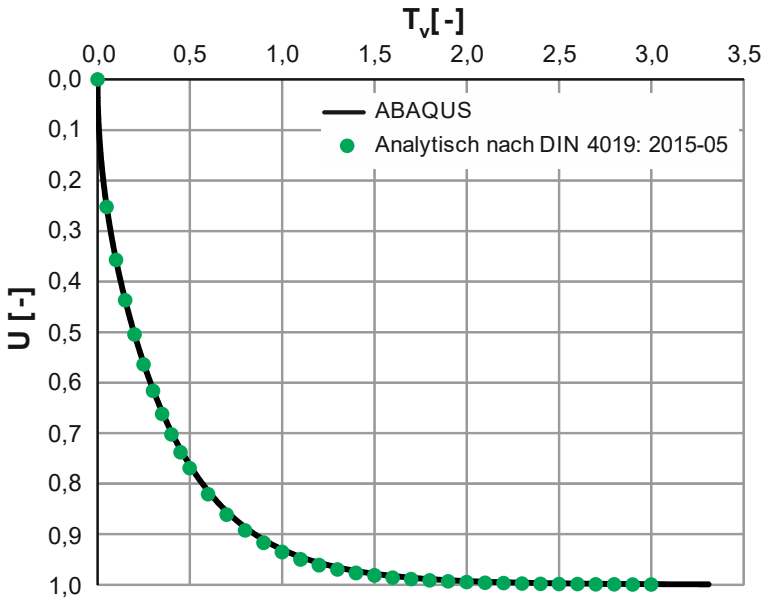


Bild 6.3 Konsolidationskurve ABAQUS vs. analytische Lösung (lineare Auftragung).

6.3. Numerische Implementierung des neuen Ansatzes in ABAQUS

Im Folgenden wird die numerische Implementierung der in Kapitel 5.3.2 formulierten mathematischen Beschreibung des semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes beschrieben. Die hierzu geschaffene Arbeitsumgebung ermöglicht es, zwischen den jeweiligen Simulationsschritten des Programmsystems ABAQUS mittels Feldvariablen frei definierbare Parameter durch ein autonom operierendes Programmsystem zu steuern. Hierdurch können Materialparameter und Randbedingungen, wie beispielsweise der Reibungswinkel, die Temperatur oder, wie im Rahmen dieser Arbeit erforderlich, die hydraulische Durchlässigkeit durch ein Stoffgesetz oder einen analytischen Ansatz in Abhängigkeit eines beliebigen Parameters angepasst werden. Diese Methode ermöglicht es, komplexe Interaktionen zwischen Inhomogenitäten wie geologischen Störungen und dem eigentlichen Modell vollautomatisch in FE-Simulationen mit ABAQUS zu simulieren. Dadurch lassen sich räumlich begrenzt auftretende hydromechanische Prozesse in einer Störung durch analytische Ansätze beschreiben. Deren großräumige Auswirkungen werden dann durch entsprechend modifizierte Randbedingungen im FE-Modell, anschließend im nächsten Simulationsschritt ermittelt. Durch Wahl geeigneter Kopplungsparameter kann somit der Response des analytischen Ansatzes mit Zwischenergebnissen der FE-Simulation gekoppelt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die im Folgenden beschriebene Arbeitsumgebung dazu genutzt, um den hydromechanischen Prozess einer hydraulischen Reaktivierung von geologischen Störungen durch einen semi-analytischen Ansatz abzubilden und in eine hydrodynamische Reservoirsimulation zu implementieren. Hierzu wurde die mathematische Beschreibung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in der Programmiersprache C# programmiert. Als Kopplungsparameter zwischen dem autonom arbeitenden Programmsystem und ABAQUS dienen p_{ref} und die Feldvariable T. Da in ABAQUS, wie bereits in Kapitel 6.2.1 beschrieben, die Materialparameter bereits in der ursprünglich zur Modellequilibrierung verwendeten Eingabedatei zu definieren sind, wird die hydraulische Leitfähigkeit der Störung in Abhängigkeit einer Feldvariablen in folgender Form definiert

```
*Material, name=Störung

*Permeability, specific= x.

Durchlässigkeitsbeiwert kf1,    Porenzahl e1,    Feldvariable T1

Durchlässigkeitsbeiwert kf2,    Porenzahl e2,    Feldvariable T2

Durchlässigkeitsbeiwert kfj,    Porenzahl ej,    Feldvariable Tj.
```

Entsprechend der von ABAQUS verwendeten Konvention stellt die erste Position dieser Formulierung den Betrag des Durchlässigkeitsbeiwertes k_f, die zweite Position die zugehörige Porenzahl e und die dritte Position die Temperaturvariable T dar. Weil im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich isotherme Simulationen durchgeführt werden, wird die Durchlässigkeit folglich in Abhängigkeit der frei definierbaren Temperaturrandbedingung definiert. Um Missverständnisse

auszuschließen, wird diese Randbedingung im Folgenden als Feldvariable bezeichnet. Die Rangfolge der jeweiligen Feldvariablen nimmt in dieser Formulierung mit größer werdender Positionsnummer zu. So wird beispielsweise im Fall einer hydromechanischen Zweiwegkopplung die dritte Position nicht definiert, was zu einer ausschließlichen Abhängigkeit der Durchlässigkeit von der Porenzahl führt. Im Fall der semi-analytischen Kopplung wird die zweite Position nicht berücksichtigt und der k_f-Wert ausschließlich durch die ranghöhere Feldvariable gesteuert.

Damit anschließend die Durchlässigkeit der einzelnen Homogenbereiche der Störung in Abhängigkeit der jeweiligen Parametrisierung des zugehörigen BZE durch den semi-analytischen Ansatz gesteuert werden kann, sind für die Elementknoten der einzelnen Homogenbereiche, wie nachfolgend dargestellt, separate Feldvariablenbereiche (Temperaturfelder) zu definieren:

*Initial Conditions, type=TEMPERATURE

Knotensatz von Homogenbereich 1, T_1

Knotensatz von Homogenbereich 2, T_1

Knotensatz von Homogenbereich n, T_1

Hierbei wird jedem Knotensatz die initiale Durchlässigkeit von Feldvariable T_1 zugeordnet.

Das in Bild 6.4 dargestellte Flussdiagramm beinhaltet die als grüne Kästen mit kontinuierlicher Linie dargestellten Schnittstellen, die eine Kommunikation zwischen ABAQUS und dem externen Programmsystem ermöglichen. Die grün gestrichelten Kästen stellen keine unmittelbaren Schnittstellen dar. Sie werden jedoch entweder zur weiteren Verwertung der Kopplungsparameter oder zum Transfer dieser benötigt.

Die Funktionsweise der numerischen Implementierung wird im Folgenden erläutert. Insgesamt werden die fünf unterschiedlichen Dateiformate Eingabedatei (.inp), Startdatei (Windows-Batchdatei), Ergebnisdatei (ODB-Dateien), Datendatei (.dat) und Textdatei (.txt) benötigt, um zwischen den beiden verwendeten Programmsystemen zu kommunizieren.

Damit die Aktualisierungen auf Basis der Zwischenergebnisse eines jeden Simulationsschrittes durchgeführt werden können, wird jeder einzelne Simulationsschritt in einer separaten Eingabedatei definiert. Durch die Verwendung der „Restart-Funktion“ von ABAQUS werden Zustandsgrößen wie beispielsweise Porendrücke und effektive Spannungen der jeweiligen Simulation in einer Ergebnisdatei gespeichert und für den folgenden Simulationsschritt bereitgestellt. Diese beiden ausschließlich von ABAQUS benötigten Dateisätze sind in Bild 6.4 durch rote Kästen symbolisiert.

Für jeden Simulationsschritt wird von ABAQUS eine Datendatei erstellt, in die der Betrag des Referenzporendrucks geschrieben wird. Dieser wird anschließend von der Programmierung des semi-analytischen Ansatzes (blauer Kasten in Bild 6.4) unter Berücksichtigung der Porenzahl $e_{i,n-1}$ und des Referenzporendrucks $p_{ref,n-1}$ aus dem Vorschritt n-1 zur Aktualisierung der Permeabilität und der Porosität benötigt. In einem ersten Schritt wird auf Basis dieser drei Größen die Porenzahl $e_{i,n}$ des aktuellen Schrittes n angepasst, indem die hierzu erforderliche, für jedes BZE erstellte

und in einer Textdatei abgelegte Parametrisierung aufgerufen wird. Anschließend wird $e_{i,n}$ in die entsprechende Porosität $\phi_{i,n}$ umgerechnet, um unter Verwendung von Gleichung (4.68) die Permeabilität und anschließend auf Basis der hinterlegten dynamischen Viskosität sowie der Fluiddichte den Durchlässigkeitsbeiwert $k_{f,i}$ für jedes BZE i zu ermitteln.

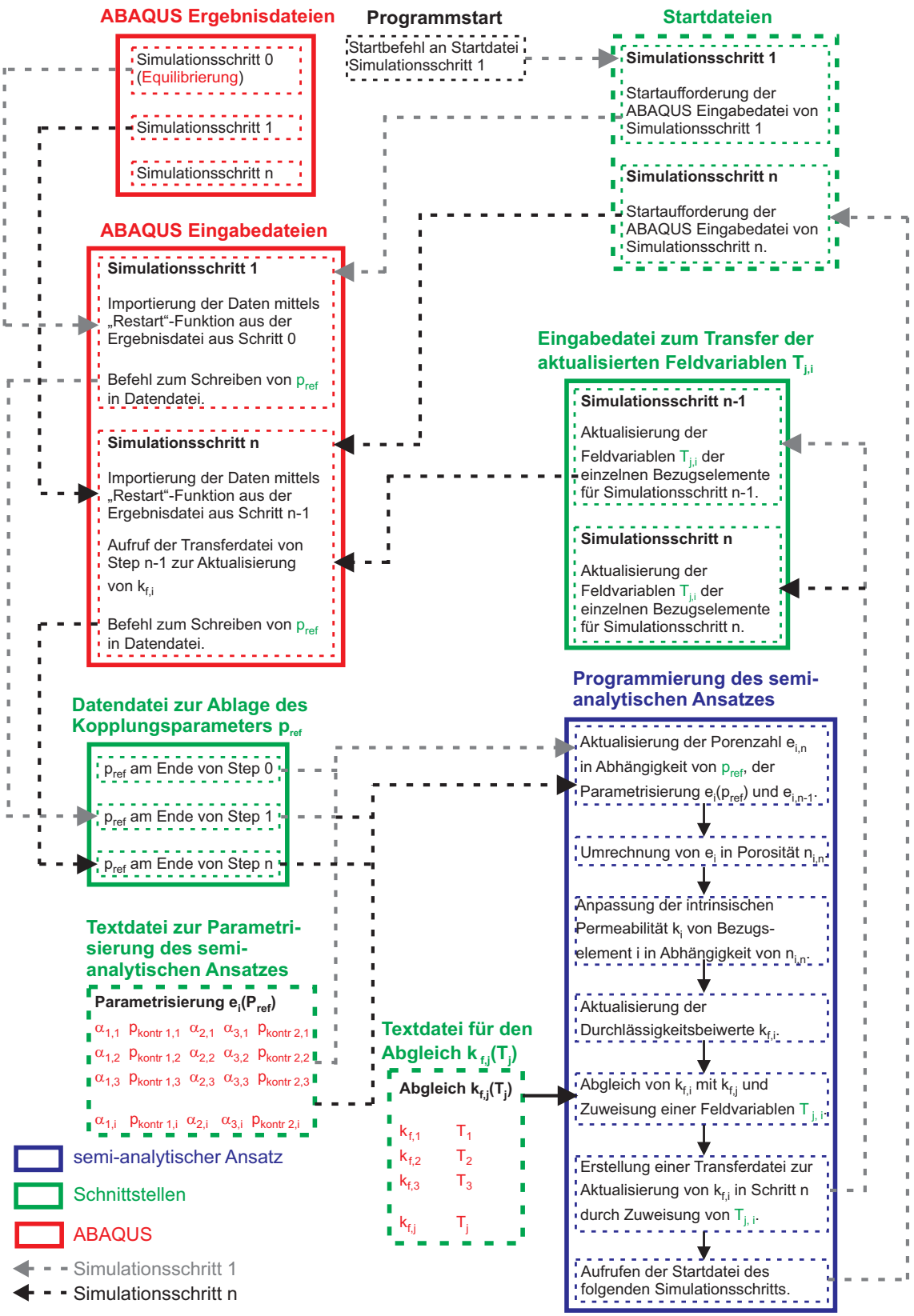


Bild 6.4 Das Flussdiagramm veranschaulicht die Funktionsweise der numerischen Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in ABAQUS. Die Kopplungsparameter p_{ref} und $T_{j,i}$ sind grün hinterlegt.

Diese Größen werden anschließend durch einen Abgleich mit einer Textdatei, in der die generelle Zuordnung zwischen der Feldvariable T_j und der zugehörigen Durchlässigkeit $k_{f,j}$ definiert ist, in die entsprechende Feldvariable $T_{j,i}$ übersetzt. Der Index j bezeichnet in diesem Fall den generellen Zusammenhang zwischen dem Durchlässigkeitsbeiwert $k_{f,j}$ und der Feldvariablen T_j, während $T_{j,i}$ zusätzlich auf das zugehörige BZE verweist.

Abschließend erfolgt die automatische Erstellung einer Eingabedatei für den Transfer der Feldvariablen $T_{j,i}$ für jedes BZE an den folgenden Simulationsschritt mit ABAQUS. Nach Bereitstellung dieser Datei wird automatisch die Startdatei zur Einleseaufforderung der Eingabedatei des folgenden Simulationsschrittes aufgerufen. Diese enthält wiederum den Befehl, den Inhalt der den Kopplungsparameter $T_{j,i}$ enthaltenden Eingabedatei einzulesen, um die Durchlässigkeitsbeiwerte der jeweiligen Homogenbereiche zu aktualisieren.

Die semi-analytisch gekoppelte Simulation wird zu Beginn durch Aufruf der Programmstartdatei (schwarz gestrichelter Kasten), die ABAQUS auffordert den ersten Simulationsschritt zu beginnen und die Ergebnisse der Equilibrierung einzulesen, gestartet. Nachdem der letzte Simulationsschritt von ABAQUS gelöst wurde, endet dieser Prozess automatisch. Die Abfolge der einzelnen zuvor beschriebenen Schritte sowie der Informationsfluss ist in Bild 6.4 für den ersten Simulationsschritt durch eine grau gestrichelte und für die anschließenden Simulationsschritte n durch eine schwarz gestrichelte Linie repräsentiert.

Aufgrund dessen, dass ABAQUS, wie bereits in Kapitel 6.2.1 beschrieben, eine monolithische hydromechanische Kopplung verwendet, stellt die Porenzahl, respektive die Porosität, keine frei definierbare Variable dar. Deshalb ist mit diesem Programmsystem ausschließlich in Bezug auf die Anpassung der Permeabilität eine Einwegkopplung im eigentlichen Sinn durchzuführen. Im Fall der hier beschriebenen semi-analytischen Kopplung, wird die Anpassung der Permeabilität, ausschließlich auf Basis einer durch die externe Programmierung in Abhängigkeit des Referenzporendrucks ermittelte Porosität, korrekt angepasst. Es ist jedoch nicht möglich die so ermittelte Porosität in der ABAQUS-Simulation zu verwenden. Aus diesem Grund wurden bei der Validierung des neuen Kopplungsansatzes in Kapitel 7.6 zusätzlich zum direkten Vergleich der Porendruckentwicklungen, sowohl die tatsächlich in ABAQUS verwendete als auch die auf Basis von p_{ref} semi-analytisch ermittelte Porenzahlentwicklung miteinander verglichen. Dieser direkte Vergleich ermöglicht es, einen hierbei gegebenenfalls aufgetretenen Fehler zu quantifizieren.

6.4. Beschreibung der synthetischen Modellvariationen

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen wird im folgenden Unterkapitel ein synthetisches geologisches Basismodell definiert, das sich am geologischen Profil des 80 km südöstlich von Berlin gelegenen potenziellen CO_2-Speicherstandortes Beeskow-Birkholz orientiert. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Literaturrecherchen aus Kapitel 2.2, 3.4 und 4.1 werden zudem in Bezug auf die Formationsmächtigkeit, die Anzahl von Reservoir-Barrieregesteinswechselfolgen, die Größe von Störungsversätzen sowie die Anzahl von Störungen neun Variationen des Basismodells untersucht. Hierdurch erfolgt die Validierung des neuen semi-

analytischen Kopplungsansatzes unter Berücksichtigung von charakteristischen Standortbedingungen des Nordostdeutschen Beckens.

Des Weiteren werden die für diesen Modellstandort verwendeten Material- und Fluidparameter, die mechanischen und hydraulischen Rand- und Initialbedingungen, Stoffgesetze und die verwendete Modelldiskretisierung formuliert. Das Kapitel schließt mit einer Beschreibung der numerischen Umsetzung des Injektionsprozesses.

6.4.1. Stratigraphische Beschreibung des synthetischen Basismodells und der daraus entwickelten Modellvariationen

Das im Rahmen der folgenden numerischen Untersuchungen verwendete Basismodell orientiert sich an der Geologie und den hydraulischen Bedingungen des potenziellen CO_2-Speicherstandortes Beeskow-Birkholz südöstlich von Berlin. Das Untersuchungsgebiet ist Teil einer mesozoischen Antiklinalstruktur, die sich oberhalb eines Salzdiapirs der Zechsteinformation befindet. Die folgenden Erläuterungen sind soweit nicht explizit zitiert, aus Tillner (2015), Tillner et al. (2013, 2016) und Röhmann et al. (2013) entnommen.

Die Antiklinalstruktur des Untersuchungsgebietes erstreckt sich etwa über eine Länge von 20 km und eine Breite von 5 km und streicht in Nordwest-Südost-Richtung. Wie dem strukturgeologischem Modell in Bild 6.5 zu entnehmen, befinden sich nur wenige Kilometer vom Top der Antiklinalstruktur entfernt vier geologische Störungen, die dem Lausitzer Abbruch und der Fürstenwalde-Gubener Störung zuzuordnen sind. Aufgrund dessen, dass sich das Norddeutsche Becken momentan im sogenannten zweiten Hauptabsenkungsstadium befindet, handelt es sich bei den Störungen um Abschiebungen (Beutler und Stackebrandt (2012)). Die Beeskow-Antiklinale wurde infolge der Orogenese der Alpen und einer gleichzeitig stattfindenden Belastung durch Sedimentablagerungen gebildet, indem salztektonische Bewegungen zu einer Aufdomung der Zechsteinformation geführt haben. Hierdurch wurden die vorliegenden geologischen Einheiten lokal angehoben. Die Oberkante des heutigen Salzdiapirs befindet sich in einer Tiefe von etwa 1.550 m. Stackebrandt und Manhenke (2004) berichten davon, dass beide Störungen vornehmlich das Deckgestein durchörtern. Tillner et al. (2013) und Tillner (2015) berücksichtigen in ihren Simulationen für den Lausitzer Abbruch Störungsversätze von bis zu 60 m und für die Fürstenwalde-Gubener Störung bis zu 130 m.

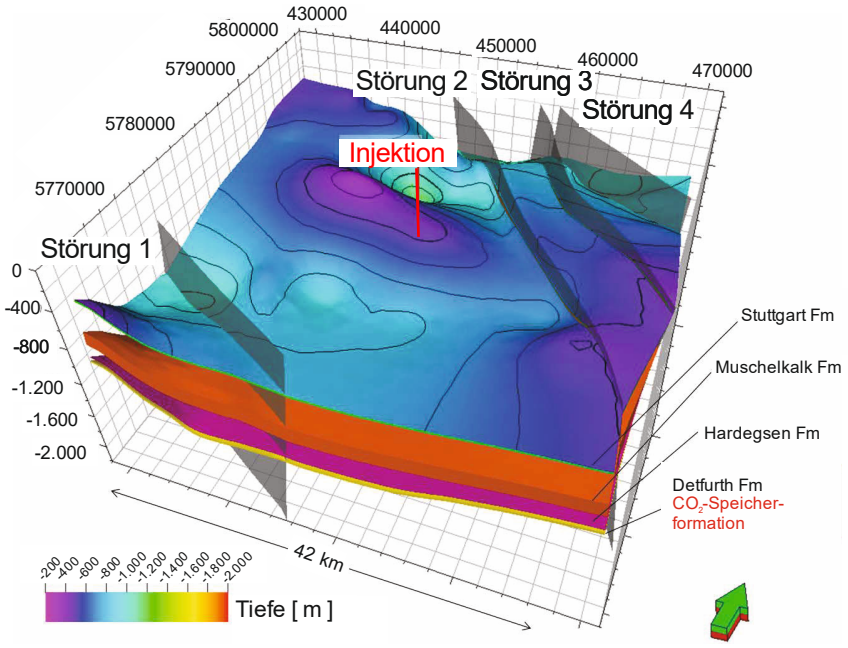


Bild 6.5 Strukturgeologisches 3D-Modell des potenziellen Beeskow-Birkholz CO_2-Speicherstandortes inklusive der benachbarten Störungen Lausitzer Abbruch (Störung 1) und der Fürstenwalde-Gubener Störung (Störung 2, 3, 4) (Tillner (2015)).

Potenzielle Reservoir-Barrieregesteinswechselfolgen für die CO_2-Speicherung stellen bei diesem Standort die triassischen Formationen des Buntsandsteins, des Muschelkalks und Keupers dar. Als Reservoire bieten sich in diesem Zusammenhang die Detfurth-Formation, die Hardegsen-Formation, der untere Muschelkalk und die Stuttgart-Formation an. Eine Übersicht bezüglich der jeweiligen Mächtigkeit, der Porosität und der Permeabilität bietet Tabelle 6.2.

Tabelle 6.2 Mächtigkeit, Porosität und Permeabilität von vier Rerservoir- und drei Barrieregesteinsformationen (modifiziert nach Tillner (2015)).

Formation	Mächtigkeit [m]	Porosität [%]	Permeabilität [m²]	Lithostratigraphische Gruppe	Funktion
Stuttgart	20	25	$1x10^{-13}$	Mittlerer Keuper	Reservoir
Barriere-gestein 3	320	-	-	Mittlerer und Oberer Muschel-kalk/ Unterer Keuper	Barrieregestein
Muschelkalk	140	20	$2x10^{-13}$	Unterer Muschelkalk	Reservoir
Barriere-gestein 2	220	-	-	Oberer Buntsandstein	Barrieregestein
Hardegsen	8	16	$3x10^{-13}$	Mittlerer Buntsandstein	Reservoir
Barriere-gestein 1	35	-	-		Barrieregestein
Detfurth	23	17	$4x10^{-13}$		Reservoir

Es zeigt sich, dass im Untersuchungsgebiet die potenziellen Reservoirformationen eine Mächtigkeit zwischen 8 und 140 m aufweisen. Diese werden von geeigneten Barrieregesteinen überlagert, die wiederum Mächtigkeiten zwischen 35 und 320 m besitzen. Die Oberkante der Detfurth-Formation befindet sich in einer Tiefe von etwa 1.080 m. Die dortige mittlere Temperatur wird unter Annahme eines geothermischen Gradienten von 30 °C/km und einer Oberflächentemperatur von 10 °C zu 40 °C angenommen. Die Porosität und Permeabilität der Reservoirformationen werden von den Autoren zwischen 16 und 25 % beziehungsweise zwischen 1 x 10^{-13} und 4 x 10^{-13} m² angegeben.

Die oberhalb der Stuttgart-Formation anstehenden Formationen stellen sich, wie in Tabelle 3.1 angegeben, der für das Nordostdeutsche Becken charakteristischen Schichtfolge des Keupers dar. Darüber schließen sich, wie in Kapitel 3.3.2 beschrieben überwiegend Barrieregesteinsformationen des Jura, der Kreide und des Känozoikums an.

Basierend auf diesen Informationen zum Standort Beeskow-Birkholz, wurde das in Bild 6.6 dargestellte synthetische Basismodell definiert. Es enthält ein 20 m mächtiges Reservoir, einen 50 m mächtigen oberflächennahen süßwasserführenden GWL und eine mit 70 °einfallende, in horizontaler Richtung 20 m breite geologische Störung. Es wird angenommen, dass die Störung in einer Tiefe von 1.500 m endet.

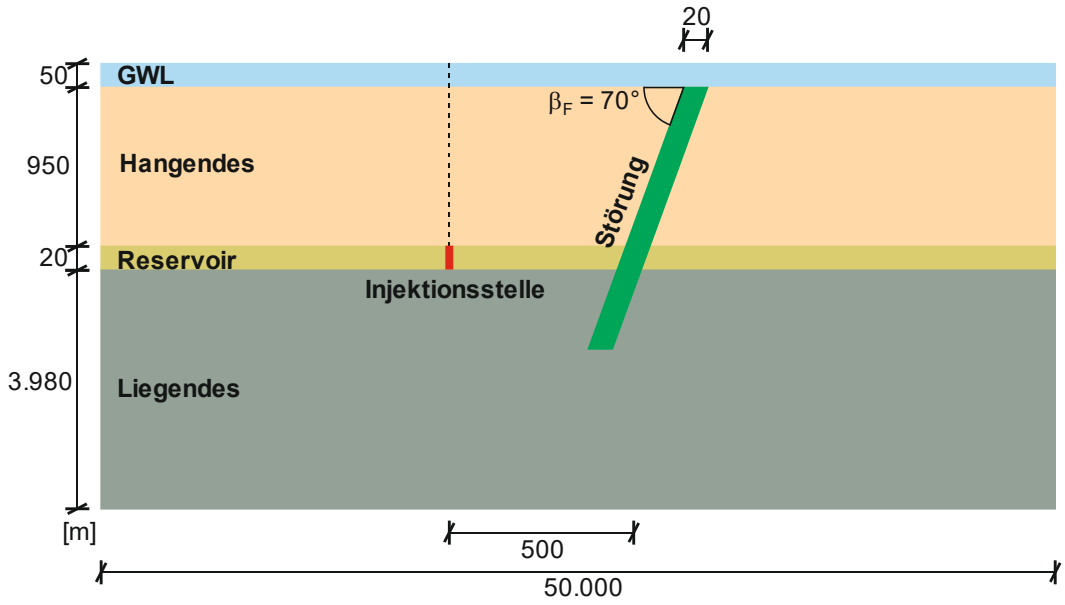


Bild 6.6 Synthetisches Basismodell, auf dem die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Modellvariationen basieren.

Die Oberkante des Reservoirs befindet sich 1.000 m unter der Geländeoberkante. Die Wahl einer Reservoirmächtigkeit von 20 m begründet sich durch die in Tabelle 2.1 definierten Schlüsselindikatoren. Eine Mächtigkeit von weniger als 20 m wird dort als ein Ausschlusskriterium definiert, wohingegen Reservoire mit einer höheren Mächtigkeit als geeignet bezeichnet werden. Eine höhere Mächtigkeit führt aufgrund der höheren Transmissivität zu einem geringeren Porendruckanstieg infolge von Fluidinjektion, was jedoch im Hinblick auf die Untersuchung von hydraulischen Reaktivierungen von Störungen, wie sie im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden, nicht zielführend ist.

Unter Bezug auf die Arbeiten von Tillner et al. (2013) und Tillner (2015) in denen für den Standort Beeskow-Birkholz Störungsversätze von 60 m beziehungsweise 130 m beschrieben werden, begründet sich unter Verweis auf die in Bild 3.16 dargestellte Korrelation zwischen dem Störungsversatz und einer zugehörigen Breite der fragmentierten Störungszone die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Störungsbreite von 20 m. Da eine höhere oder geringere Störungsbreite lediglich zu einer Erhöhung oder Verringerung der Transmissivität der Störung führt, die wiederum ausschließlich den Speicherdruck im Reservoir beeinflusst, wird auf eine Variation im Rahmen dieser Arbeit verzichtet.

Die geologische Schichtung des 950 m mächtigen Hangenden stellt in den einzelnen Modellvariationen eine variable Größe dar. Da der Fokus dieser Arbeit auf der Erarbeitung eines neuen semi-analytischen Kopplungsansatzes liegt und dieser für eine Vielzahl von Parametervariationen zu validieren ist, wird für alle Modellvariationen vereinfachend eine horizontale Schichtung der geologischen Formationen angenommen. Hierdurch werden die realen geologischen Bedingungen vereinfacht. Da in diesem Zusammenhang jedoch nicht die Eignung von realen Standorten untersucht wird, kann diese Vereinfachung akzeptiert werden.

Ein weiterer Grund für die Wahl von horizontal verlaufenden Formationen liegt darin begründet, dass es hierbei zu einem Wegfall der geologischen strukturellen Falle kommt. Dies ermöglicht eine räumliche Ausbreitung der CO_2-Fahne in Richtung der Störung innerhalb eines realistischen Injektionszeitraums, was für die Validierung des Ansatzes unter Berücksichtigung einer mehrphasigen Durchströmung der Störung entscheidend ist. Wie bereits in Kapitel 4.1 beschrieben, ist dieser Fall unter Berücksichtigung einer strukturellen Falle innerhalb eines relevanten Betrachtungszeitraumes nicht zu erwarten. In Anlehnung an Cappa und Rutqvist (2011) wird des Weiteren für sämtliche untersuchten Modellvariationen eine Entfernung zwischen der Injektionsstelle und der Störung von 500 m angenommen.

Die stratigraphische Gliederung des Hangenden, das in allen Modellen eine Mächtigkeit von 950 m besitzt, stellt neben der Störungstiefe, der Größe des Störungsversatzes und der Anzahl an Störungen, einen Variationsparameter dar, der für das in Bild 6.6 dargestellte Basismodell in daraus abgeleiteten Modellvariationen variiert wird. Eine Übersicht der untersuchten Modellvariationen ist Tabelle 6.3 zu entnehmen. Die grafische Darstellung sämtlicher Modellvariationen ist Anhang A zu entnehmen.

Tabelle 6.3 Verwendete Variationen des Basismodells.

Modell-variation	Anzahl Barrieregesteins-formationen	Mächtigkeiten der Formationen des Hangenden [m]		Größe des Störungs-versatzes [m]	Anzahl Störungen	Tiefe Unterkante der Störung [m]
		GWL	Barrieregestein			
M1	1	450	500	-	1	1.300
M2	1	650	300	-	1	1.500
M3	1	450	500	60	1	1.500
M4	1	450	500	100	1	1.500
M5	1	450	500	140	1	1.500
M6	2	80	500/ 370	140	1	1.500
M7	2	20	500/ 430	60	1	1.500
M8	1	450	500	-	2	1.500
M9	4	10/ 10/ 100	100/ 200/ 200/ 330	-	1	1.500

Die einzelnen Modelle besitzen eine unterschiedliche Komplexität. Während die geologische Gliederung des Hangenden von Modell 1 und 2 bewusst einfach gehalten wurde, was sich lediglich

durch eine einzige geologische Barriere und keinen Störungsversatz äußert, gliedert sich beispielsweise das Hangende in Modell 9 in vier Barrieregesteine und drei salzwasserführende GWLs. Begründen lassen sich die Unterschiede dadurch, dass mit Modell 1 vorwiegend eine Vielzahl von Parametervariationen durchgeführt wird, um ein generelles Verständnis der Parametereinflüsse zu erlangen, während die komplexeren Modelle vornehmlich für die Validierung des neuen Ansatzes verwendet werden.

Eine Modellierung der Hangendformation oberhalb des Barrieregesteins durch einen 450 m beziehungsweise 650 m mächtigen GWL in den Modellen 1 bis 5 stellt hierbei eine Vereinfachung von Modell 6 dar. In beiden Fällen ist die Mächtigkeit des höhergelegenen GWL so gewählt, dass es in diesem zu keinem signifikanten Porendruckanstieg infolge einer Porendruckdissipation kommt. Geringere Mächtigkeiten zwischen 10 und 20 m, wie sie unter anderem auch im Untersuchungsgebiet Beeskow-Birkholz (vgl. Tabelle 6.2) vorkommen, erfahren aufgrund der geringeren Transmissivität der Formation einen Porendruckanstieg, der wiederum einen Porendruckanstieg im oberen Teil der Störung bewirkt. Dieser Einfluss wird explizit durch den geologischen Aufbau von Modell 7 und 9 untersucht.

In den Modellen 3 bis 5 wird die Geologie aus Modell 1 verwendet. Als einziger Parameter wird hierbei jedoch der Störungsversatz zwischen 60 und 140 m variiert, um den Einfluss dieses Parameters auf die Anwendbarkeit des neuen semi-analytischen Ansatzes zu quantifizieren. Die verwendeten Größen des Störungsversatzes orientieren sich einerseits an der in Bild 3.16 dargestellten Korrelation zwischen der Breite des fragmentierten Bereichs einer Störung und des Störungsversatzes sowie an den zuvor beschriebenen lokalen Gegebenheiten des Standortes Beeskow-Birkholz. In den Modellen die keinen Störungsversatz abbilden, wird der Störungseinfluss auf die hydraulischen Bedingungen der wasserleitenden Formationen dadurch berücksichtigt, dass den Elementen im Überschneidungsbereich die niedrigen Permeabilitäten der Störung zugewiesen werden. Hierdurch werden die Reservoire wie beim Vorhandensein eines Versatzes ebenfalls in zwei Bereiche gegliedert, zwischen denen der Fluidfluss gehemmt ist.

Modell 8 stellt ebenfalls eine Adaption von Modell 1 dar. Es berücksichtigt jedoch zwei 1.000 m voneinander entfernte Störungen. Die mit diesem Modell erhaltenen Ergebnisse zeigen, dass der neue Ansatz auch diesen Fall zufriedenstellend abbilden kann.

Modell 7 in Bild 6.7 zeigt stellvertretend für alle anderen Variationen exemplarisch die Gliederung des Hangenden. In dieser Modellvariation werden zwei 500 m beziehungsweise 430 m mächtige Barrieregesteinsformationen und ein 20 m mächtiger GWL modelliert. Zudem besitzt dieses Modell einen Störungsversatz in Höhe von 60 m, der sämtliche GWLs um genau diesen Versatz gegeneinander verschiebt. Damit ein Fluidfluss zwischen beiden Seiten des Reservoirs entsteht, muss somit ein Teil der Störung durchströmt werden.

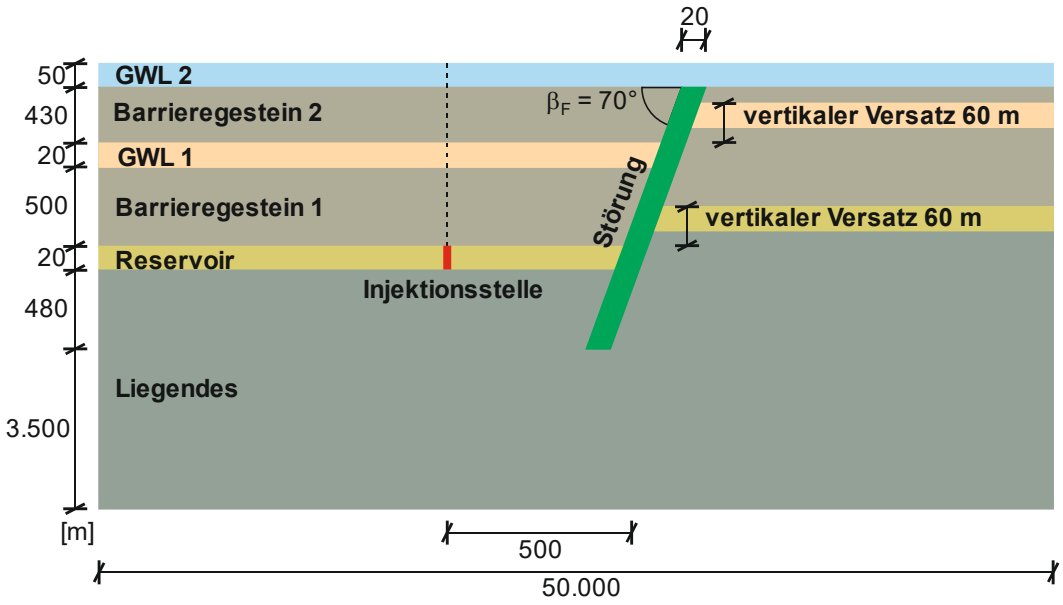


Bild 6.7 Schematische Darstellung von Modellvariation 7 zeigt zwei Barrieregesteinsformationen und einen vertikalen Versatz von 60 m.

Basierend auf der in Kapitel 3.3 diskutierten Literaturrecherche wurde in den Modellvariationen eine maximale Mächtigkeit einzelner Barrieregesteinsformationen bis zu 500 m berücksichtigt. Dies begründet sich durch den stratigraphischen Aufbau des Norddeutschen Beckens. Tabelle 3.1 fasst hierzu mittlere Schichtmächtigkeiten von permeablen und nicht permeablen Schichten zusammen (Beutler und Nitsch (2005)). Es zeigen sich die charakteristischen Wechselfolgen von Sand- und Tonsteinen, bei denen abgesehen von singulären lokalen Gegebenheiten, in der Regel keine Barrieregesteinsformationen von mehr als 500 m Mächtigkeit anstehen. Das Liegende wird in seiner Gesamtheit als eine homogene Gesteinsformation definiert.

6.4.2. Beschreibung des Berechnungsausschnitts, der Diskretisierung und der Randbedingungen

Die Anwendung der Methode der Finiten-Elemente oder anderer numerischer Methoden setzt die Wahl eines geeigneten Berechnungsausschnittes des zu untersuchenden geologischen Systems voraus. Die mechanische Wirkung der abgeschnittenen Außenbereiche wird hierbei durch Vorgabe von Kraft- oder Verschiebungsrandbedingungen an den Rändern des Modellausschnitts definiert. Dadurch, dass diese in der Praxis nur schwierig zu ermitteln sind, empfiehlt der Arbeitskreis Numerik in der Geotechnik (EANG) der DGGT den Ausschnitt ausreichend groß zu wählen, damit Verschiebungsrandbedingungen mit dem Wert Null verwendet werden können (EANG 2014). In diesem Zusammenhang sind mindestens zwei Simulationen mit sich unterscheidenden Berechnungsausschnitten zu untersuchen. Damit der kleinere Ausschnitt verwendet werden kann, dürfen die Ergebnisse nur um wenige Prozent voneinander abweichen.

Im Fall von geotechnischen Bauwerken wie beispielsweise Baugruben ist dies in der Regel der Fall, wenn, wie in Bild 6.8 dargestellt, die Abstände zwischen dem zu untersuchenden Objekt und

dem unteren beziehungsweise äußeren Rand, dem zwei- bis dreifachen der Breite beziehungsweise der Tiefe des Bauwerks entsprechen.

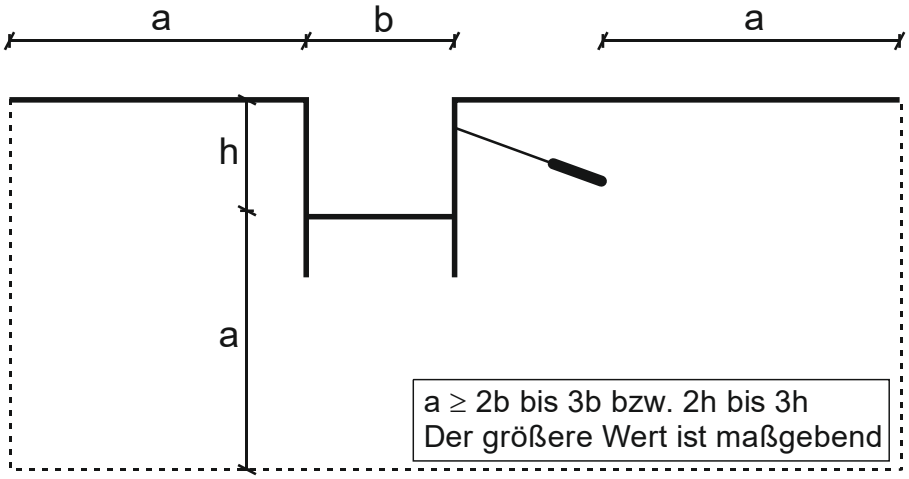


Bild 6.8 Größe des Berechnungsausschnitts (EANG (2014)).

Im Fall einer 1.500 m tief reichenden, unter 70° einfallenden Störung entspricht in unserem Fall h = 1.500 m und b ~ 513 m. In diesem Fall sind folglich ein seitlicher und ein unterer Abstand zwischen 3.000 bis 4.500 m einzuhalten. Wie in Bild 6.7 zu sehen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein vertikaler Ausschnitt von 5.000 m gewählt. Der untere Modellrand ist durch vertikal und die seitlichen Modellränder durch horizontal unverschiebliche Auflager gehalten.

Im Fall von Reservoirsimulationen sind zusätzlich hydraulische Randbedingungen in Form von Dirichlet- beziehungsweise Neumann-Randbedingungen zu definieren. Aufgrund des langen Simulationszeitraums, der zu einem weiträumigen Porendruckanstieg führt, wurde ein 50 km breiter Modellausschnitt gewählt, um ungestörte Randbedingungen zu gewährleisten. Durch die Definition von Dirichlet-Randbedingungen wurde der Porendruck auf den seitlichen Modellrändern zeitlich konstant auf den jeweiligen initialen Porendruck fixiert. An der Geländeoberkante beträgt der Porendruck über den gesamten Simulationszeitraum null. Zwischen den einzelnen Formationen beziehungsweise der Störung ist Fluidfluss zugelassen.

Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten 2D-Simulationen wurde ein ebener Dehnungszustand angenommen. Die in Kapitel 7 diskutierten Simulationsergebnisse wurden mit dem Programmsystem ABAQUS durchgeführt. Hierzu wurden CPE8RP-Elemente verwendet, die die mechanischen Knotenverschiebungen beziehungsweise die ermittelten Porendrücke an den Knoten durch quadratische beziehungsweise lineare Ansatzfunktionen über das zugehörige Element approximieren. Für die Lösung der Differenzialgleichung verwendet dieser Elementtyp, wie in Bild 6.2 zu sehen, vier Gauß-Integrationspunkte.

Für den Nahbereich der Störung und Injektionsstelle, der sich horizontal über 1.500 m und vertikal über 2.000 m erstreckt, wurde ein maximales Seitenverhältnis der Elemente von 2:1 eingehalten. Basierend auf den Ergebnissen einer in Kapitel 7.4 präsentierten und in Kapitel 7.5 diskutierten Parameterstudie, in der der Einfluss der horizontalen Störungsdiskretisierung auf die

Simulationsergebnisse untersucht wurde, wurde eine Standarddiskretiserung definiert. Im Folgenden wird in allen Simulationen die Störung in horizontaler Richtung durch drei Elemente mit einer Breite von 6,67 m diskretisiert. Das Reservoir wurde in vertikaler Richtung durch vier jeweils 5 m hohe und 10 m breite Elemente diskretisiert. Außerhalb des Nahbereichs wurde das FE-Netz zu den Rändern hin sukzessive aufgeweitet, wodurch in den Randbereichen Elemente mit einer maximalen Kantenlänge von etwa 400 m resultieren. Eine Übersicht über die verwendete Element- und Knotenanzahl der einzelnen Modellvariationen liefert Tabelle 6.4.

Tabelle 6.4 Verwendete Element- und Knotenanzahl.

Modellvariation	Elementanzahl	Knotenanzahl
M1	39.414	118.863
M2	44.958	135.501
M3	47.256	142.395
M4	46.902	141.333
M5	47.872	144.243
M6	50.985	153.860
M7	40.579	122.290
M8	43.272	130.405
M9	41.726	125.725

Wie in Tabelle 6.4 zu sehen, bewegt sich die verwendete Diskretisierung zwischen 39.414 und 50.985 Elementen und damit einhergehend zwischen 118.863 und 153.860 Knoten.

6.4.3. Definition der verwendeten Homogenbereiche, Bezugselemente und Referenzelemente für den semi-analytischen Kopplungsansatz

Damit der semi-analytische Kopplungsansatz angewendet werden kann, sind für die Störung, wie in Kapitel 5.3.1 formuliert, Homogenbereiche zu definieren. Durch die Anwendung des neuen Kopplungsansatzes wird die Entwicklung der Porenzahl eines jeden Homogenbereichs, entsprechend Kapitel 5.3.4, durch die jeweilige Ansatzfunktion des entsprechenden BZE gesteuert.

Die Gliederung einer Störung in Homogenbereiche basiert auf den Ergebnissen einer Basissimulation. Eine Vielzahl von im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen hat gezeigt, dass relativ große Bereiche der Störung eine gleichmäßige Porenzahlentwicklung durch eine Druckerhöhung im Reservoir erfahren (vgl. Kapitel 7.4.1). Deshalb wurde für den Teil der Störung, der sich im Hangenden befindet, ein maximaler Abstand zwischen zwei BZEs entlang der Störung von 130 m definiert. Für Störungsbereiche, deren Wirtsgestein das Liegende darstellt,

wurde dieser Abstand auf maximal 250 m erhöht. Ein weiteres Kriterium hinsichtlich der Definition von Homogenbereichen stellen physikalische Gegebenheiten, wie beispielsweise wechselnde Materialparameter, dar.

Für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Modellvariationen ist die jeweilige verwendete Unterteilung in Homogenbereiche sowie die Definition von Bezugs- und Referenzelementen in den folgenden drei Abbildungen dargestellt. Hierbei berücksichtigen die in Bild 6.9 dargestellten Modellvariationen eine, die in Bild 6.10 zwei und die in Bild 6.11 vier Barrieregesteinsformationen.

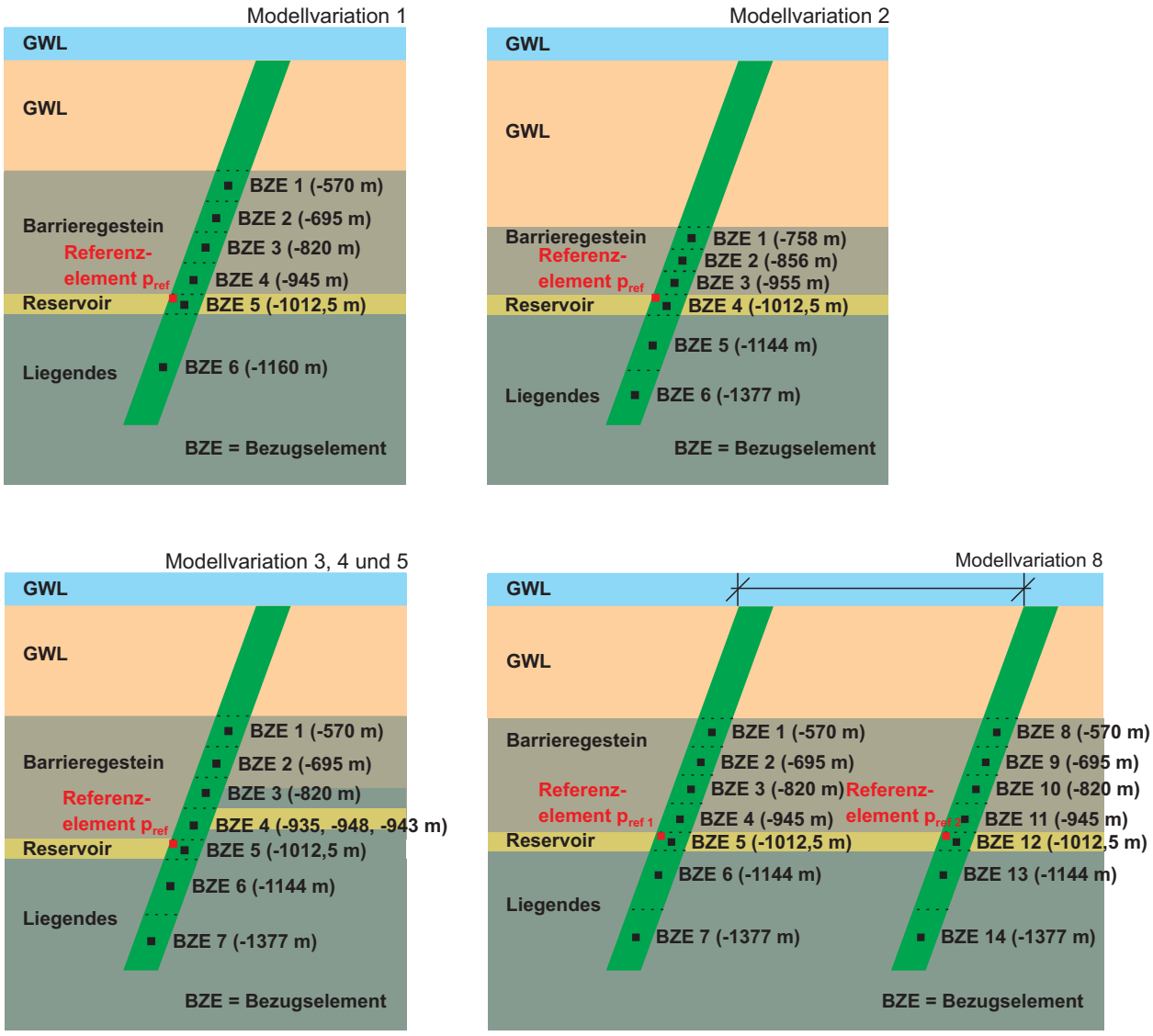


Bild 6.9 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für die Modellvariationen M1, M2, M3, M4, M5 und M8.

Neben der Anzahl von verwendeten Homogenbereichen, die durch gestrichelte Linien untergliedert werden, sind in den Abbildungen auch Angaben bezüglich der mittleren Tiefe der BZEs, die sich ungefähr in der Mitte der Homogenbereiche befinden, enthalten. Abgesehen von Modellvariation 8 wurde zudem für alle Modelle ein Referenzporendruck p_{ref} an der Schnittstelle

von Reservoir und Störung auf Höhe des oberen Randes des Reservoirs definiert. Der Mittelpunkt dieses Elements liegt für alle Modelle in einer Tiefe von 1012,5 m. Da Modellvariation 8 zwei Störungen enthält, sind entsprechend zwei Referenzelemente erforderlich. Insgesamt verwenden diese Modelle sieben BZEs und Homogenbereiche. Dadurch, dass die Störung in Modell 1 nur bis in eine Tiefe von 1.300 m reicht, konnte in diesem Fall die erforderliche Anzahl an BZEs auf sechs reduziert werden.

Bild 6.10 zeigt, dass Modell 6 zehn und Modell 7 neun BZEs verwenden, um den neuen Ansatz zu parametrisieren. In dem Teil der Störung, der sich oberhalb von GWL 1 befindet, wurde die Lage der BZEs am rechten Rand der Störung definiert. Dies erklärt sich, wie später in Kapitel 7.4 und 7.5 durch die Auswertung von Parameterstudie 0 detailliert erläutert, dadurch, dass in diesen Bereichen kein oder nur ein sehr geringer Porendruckanstieg aufgetreten ist. Aufgrund von Spannungsumlagerungen aus den tieferliegenden Bereichen der Störung, in denen eine großräumige Porendruckerhöhung aufgetreten ist, tritt in diesem Fall eine Lokalisierung von Spannungsänderungen auf und es plastifiziert nur ein kleiner Bereich der Störung. Deshalb wurde ausschließlich für den betroffenen Teil der Störung eine entsprechende Anpassung der Porosität und der Permeabilität durchgeführt.

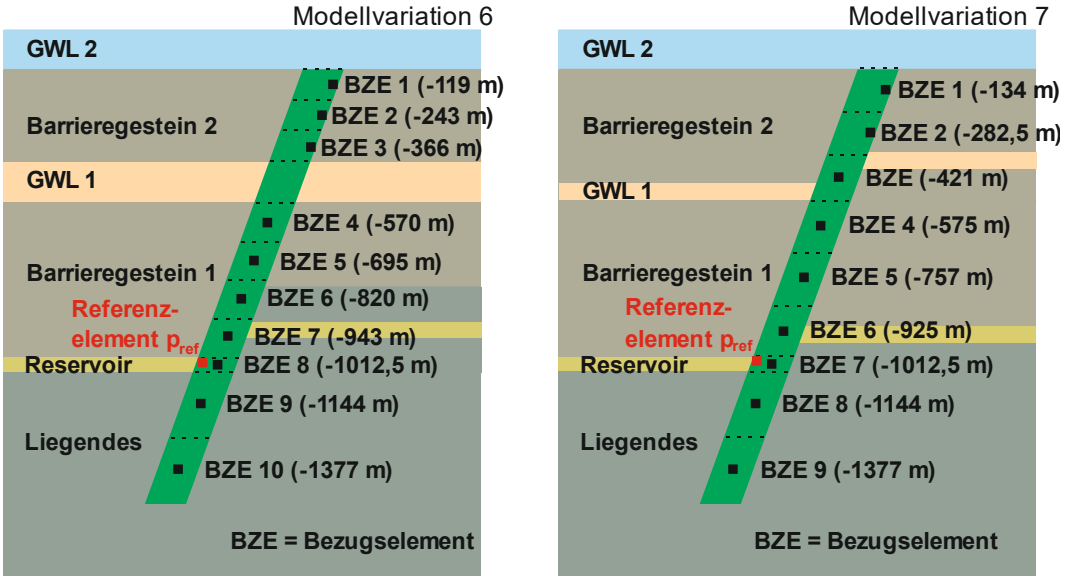


Bild 6.10 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für die Modellvariationen M6 (links) und M7 (rechts).

Für die Parametrisierung des komplexesten Modells mit vier aufeinander folgenden Fluidleiter-Barrieregesteinwechselfolgen sind 14 BZEs erforderlich. In diesem Modell werden die an Barrieregesteine angrenzenden Bereiche in zwei und die an GWLs angrenzenden in einen Homogenbereich untergliedert. Hierdurch entstehen in vertikaler Richtung maximale Unterteilungen von 100 m.

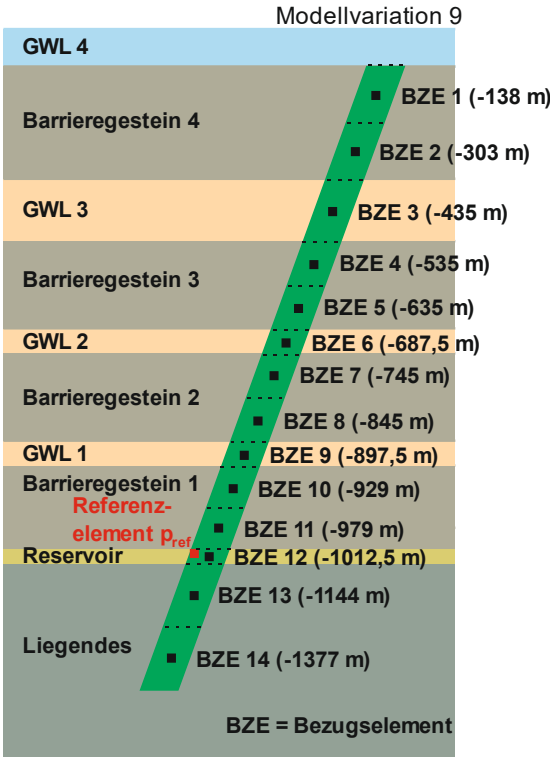


Bild 6.11 Definition von Homogenbereichen, Bezugs- und Referenzelementen für Modellvariation 9.

Abweichend zu den Modellen 6, 7 und 9 wird für die in Bild 6.9 dargestellten oberen Störungsbereiche, die eine Sandsteinformation durchörtern, vereinfacht die initiale Permeabilität der angrenzenden Sandsteinformation verwendet. Dies begründet sich dadurch, dass in diesen Fällen der anstehende Sandstein das ursprüngliche Wirtsgestein darstellt. Folglich ist hierfür im Vergleich zu dem Teil, der sich im Barrieregestein befindet, eine höhere Permeabilität anzunehmen.

6.4.4. Verwendete Stoffgesetze, Parametrisierung und Initialisierung des Modells

Für die folgenden Simulationen wurde linear-elastisch, ideal plastisches Materialverhalten unter Verwendung des Mohr-Coulombschen Bruchkriteriums angenommen. Eine detaillierte Begründung dieser Wahl erfolgte bereits in Kapitel 4.3.2. Unter Bezugnahme auf Kapitel 4.3.1 wird das Prinzip der effektiven Spannungen nach Terzaghi verwendet. Folglich wird in den durchgeführten Simulationen keine Poroelastizität nach der Theorie von Biot berücksichtigt.

Die in Tabelle 6.5 dargestellte Parameterkombination stellt den sogenannten Referenzfall für die Parametrisierung der Modellvariationen M1 bis M8 dar. Sie gliedert sich nach den in Bild 6.7 beziehungsweise in Anhang A verwendeten Formationsbezeichungen. Dadurch, dass die stratigraphische Gliederung des Hangenden in den einzelnen Modellvariationen eine variable Größe darstellt, werden die entsprechenden Formationen mit GWL und Barrieregestein bezeichnet. In den Modellvariationen M6 und M7 unterteilt sich das Hangende in zwei GWLs und zwei Barrieregesteine, weshalb die Angaben aus Tabelle 6.5 für jeweils beide gelten. Für die in Kapitel 7.6

durchgeführte Validierung des neuen Kopplungsansatzes wird ausschließlich die Referenzparametrisierung verwendet. In den in Kapitel 7.4 beschriebenen Parameterstudien werden einzelne Parameter des Referenzfalls variiert, um den jeweiligen Einfluss auf das hydromechanische Verhalten von Störungen zu untersuchen. Eine detaillierte Dokumentation der variierten Parameter wird im entsprechenden Kapitel gegeben.

Tabelle 6.5 Verwendete Basisparametrisierung von Modellvariation M1 bis M8.

Parameter	Referenz	GWL GOK	Hangendes		Reservoir	Liegendes	Störung
			GWL	Barriere-gesteine			
E Modul [GPa]	Cappa und Rutqvist (2011)	10	10	10	10	10	1
Poissonzahl ν [-]		0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Kornrohdichte ρ_s [kg/m³]		2.260	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260
Biotkoeffizient		1	1	1	1	1	1
Reibungswinkel φ [°]	angenommen	-	30	25	30	25	25
Kohäsion c [MPa]	Röhmann et al. (2013)	-	5	5	5	5	-
Dilatanzwinkel ψ [°]	angenommen	-	10	10	10	10	20
Porosität ϕ [-]	Cappa und Rutqvist (2011)	0,1	0,1	0,01	0,1	0,01	0,05
Permeabilität k [m²]		10^{-14}	10^{-14}	10^{-19}	10^{-13}	10^{-19}	variabel
Temperatur T [°C]	angenommen	10	20	35	40	40	35
Salinität [% NaCl bezogen auf Masse]	Tillner et al. (2013)	0	10	15	20	20	15
Fluiddichte ρ_f [kg/m³]	In Abhängigkeit der Temperatur und der Salinität berechnet	1.000	1.065	1.100	1.135	1.135	1.100
Dynamische Viskosität [Pa·s]		$1{,}3 \cdot 10^{-3}$	$1{,}0 \cdot 10^{-3}$	$0{,}7 \cdot 10^{-3}$	$0{,}7 \cdot 10^{-3}$	$0{,}7 \cdot 10^{-3}$	$0{,}7 \cdot 10^{-3}$

Aufgrund der hohen Anzahl von Reservoir-Barrieregesteinswechselfolgen stellt Modellvariation M9 einen Sonderfall dar. Deshalb wurde für dieses Modell eine abweichende Parametrisierung der Formationen des Hangenden verwendet, die Anhang B zu entnehmen ist. Die verwendeten Parameter orientieren sich bezüglich der verwendeten E-Moduln an Röhmann et al. (2013).

Die Modellparametrisierung wurde so gewählt, dass für realistische Porendruckerhöhungen im Reservoir und in der Störung eine hydraulische Reaktivierung der Störung eintritt. Aus diesem Grund wurden beispielsweise die Porosität und Permeabilität des Reservoirs so gewählt, dass sie sich entsprechend der in Tabelle 2.1 angegeben Schlüsselindikatoren für potenzielle Standorte an der Grenze zwischen geeigneten und nicht geeigneten Standorten bewegen. Die verwendeten Scherparameter Reibungswinkel φ und Kohäsion c orientieren sich wiederum an typischen Werten, wie sie von Röhmann et al. (2013) sowie Cappa und Rutqvist (2011) verwendet werden. Eine Kohäsion der Störungszone wird unter Verweis auf Kapitel 3.4.3 generell nicht angesetzt.

Für die Permeabilität des Reservoirs wurde im Rahmen dieser Arbeit anisotropes Verhalten berücksichtigt, indem die vertikale Permeabilität gegenüber der in Tabelle 6.5 angegeben horizontalen um den Faktor 10 reduziert wurde. In Anbetracht dessen, dass im Rahmen dieser Arbeit die hydraulische Reaktivierung von Störungen untersucht wird, die zuvor hydraulisch inaktiv oder nur gering durchlässig waren, wurde die initiale Permeabilität der Störung zwischen 10^{-14} m² und 10^{-16} m² variiert. Diese Bandbreite stützt sich auf die Ergebnisse der Literaturrecherche aus Kapitel 4.1. In dieser wurde eine Vielzahl von Arbeiten diskutiert, die gezeigt haben, dass Störungen mit initialen Permeabilitäten niedriger als 10^{-15} m² hydraulisch inaktiv sind. An dieser Stelle wird explizit auf die Arbeiten von Mbia et al. (2014) und Cappa und Rutqvist (2011) verwiesen. Da eine detaillierte Abbildung von Störungsheterogenitäten, wie beispielsweise die Berücksichtigung von Störungskernen, in großmaßstäblichen Reservoirsimulationen wegen der dafür erforderlichen feingliedrigen Diskretisierung nicht zielführend ist, wird im Rahmen dieser Arbeit entsprechend Cappa und Rutqvist (2011) eine über die Störungsbreite gemittelte Permeabilität und Porosität verwendet.

Generell stellt die verwendete Parametrisierung, insbesondere die Verwendung von identischen E-Moduln und Poissonzahlen für eine Vielzahl unterschiedlicher Gesteinsformationen und für unterschiedliche Tiefen eine starke Vereinfachung der in situ zu erwartenden Zustände dar. Beispielsweise sind für Tonsteine tendenziell geringere E-Moduln als für Sandsteine zu erwarten. Die 8. Ausgabe des Grundbautaschenbuchs (Witt (2017)) liefert für Sand- und Tonsteine Bandbreiten zwischen 15 bis 50 GPa beziehungsweise zwischen 8 bis 30 GPa. Dessen ungeachtet können diese Werte vor allem im Hinblick auf Sandsteine mit einer höheren Porosität auch deutlich unterhalb dieser Werte liegen. So gibt Fang (1991) Bandbreiten für E-Moduln von Sandsteinen zwischen 0,5 und 8 GPa an. Zudem weisen diese Größen, wie bereits in Kapitel 4.3.2.1 erläutert, ein spannungsabhängiges Verhalten auf.

Ebenso stellt die Annahme eines isotropen elastischen und hydraulischen Verhaltens von Gestein in diesem Zusammenhang eine grobe Näherung dar, weil Sedimentgesteine aufgrund ihrer Genese und einer eventuell vorhandenen Klüftung generell transversales Materialverhalten aufweisen können (vgl. Kapitel 4.3.2.1).

Gleichwohl ist die verwendete Parametrisierung für die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit geeignet, weil die Verwendung von transversal isotropen Parametern die Simulationsergebnisse in Bezug auf die Entwicklung von volumetrischen Dehnungen der Störung ausschließlich quantitativ, jedoch nicht qualitativ beeinflussen würde. Da der Fokus dieser Arbeit auf der Implementierung und Validierung des neuen semi-analytischen Kopplungsansatzes liegt, wurden primär generelle Abhängigkeiten und Einflüsse von Materialparametern auf den Prozess der hydraulischen Reaktivierung von Störungen identifiziert. Untergeordnete Einflüsse, die die Ergebnisse ausschließlich quantitativ beeinflussen, wurden hierbei nach Möglichkeit ausgeschlossen, weil sie die Interpretation der Ergebnisse, beispielsweise durch Überlagerungseffekte verschiedener zusammenwirkender Mechanismen, erschweren. Die verwendete isotrope Parametrisierung orientiert sich hinsichtlich der verwendeten Parameter E-Moduln, Poissonzahl, Kornrohdichte, Porosität und Permeabilität an Cappa und Rutqvist (2011)

Die Kompressibilität des Fluids wird generell zu 2,3 GPa angenommen. Die Fluiddichte ρ_f und die dynamische Viskosität μ wurden unter Annahme von isothermen Bedingungen in Abhängigkeit der Temperatur und Salinität nach Battistelli et al. (1997) ermittelt. Unter Annahme eines geothermischen Gradienten von 30°C/km wurden für die jeweiligen Formationen mittlere Temperaturen ermittelt. Diese sowie die für die jeweilige Formation verwendete Salinität sind Tabelle 6.5 zu entnehmenden. Mit einer Erdbeschleunigung von 9,81 m/s² wurde auf Basis der ermittelten dynamischen Viskosität und Fluiddichte eine entsprechende hydraulische Leitfähigkeit nach Gleichung (4.15) ermittelt. Unter Berücksichtigung der in Tabelle 6.5 angegebenen Fluiddichten herrscht an der Oberkante des Reservoirs ein initialer Porendruck von 10,62 MPa.

Im Fall von zweiweggekoppelten Simulationen wird, wie in Kapitel 4.4.2 beschrieben und in Kapitel 4.5 begründet, der Ansatz nach Chin (Chin et al. (2000)) verwendet. Der Sensitivitätsexponent n wird hierbei zu 10 angenommen, weil in Anlehnung an Cappa und Rutqvist (2011) soll hierdurch eine Zunahme der Störungspermeabilität in Höhe von einer Magnitude erzielt werden.

Für die Initialisierung des Referenzfalls wird ein Verhältnis der effektiven horizontalen Spannung zur vertikalen Spannung von 0,45 angenommen. Da sich, aufgrund der geneigten Störungsgeometrie sowie von dem Wirtsgestein abweichenden elastischen Parametern im Nahfeld der Störung ein im Vorfeld nicht explizit zu ermittelnder Initialspannungszustand einstellt, wird dieser in einer Vorberechnung bestimmt. Hierzu wird, in erster Näherung in Abhängigkeit der tiefenabhängigen vertikalen effektiven Spannung und dem gewählten Seitendruckbeiwert in Höhe von 0,45, analytisch ein homogener Initialspannungszustand berechnet und als Initialbedingung für die FE-Berechnungen definiert. Da es sich hierbei um eine erste Näherung handelt, treten infolge der Equilibrierung der inneren und äußeren Kräfte Verformungen des initialen Systems auf, die wiederum zu einer Änderung der effektiven Spannungen und der Porendrücke führen. Mit den auf diese Art und Weise ermittelten neuen effektiven Spannungen und Porendrücken wird die Equilibrierung des Modells wiederholt, indem diese Größen an den entsprechenden Knoten und Integrationspunkten des Modells als aktualisierter Initialzustand eingelesen werden. Dies erfolgt durch Verwendung der in ABAQUS implementierten sogenannten „user subroutines“ UPOREP und SIGINI (ABAQUS (2010)).

6.4.5. Modellierung des Injektionsprozesses

Für die im Rahmen dieser Arbeit mit ABAQUS durchgeführten Simulationen wurde der Injektionsprozess durch die Definition von Neumann-Randbedingungen auf den Rändern der Injektionselemente abgebildet. Hierzu wird eine zu untersuchende Injektionsrate (kg/s/m) durch Division mit der Fluiddichte des Injektionsmediums in einen entsprechenden Volumenstrom umgerechnet. Die Größenordnung der untersuchten Injektionsraten orientiert sich an Cappa und Rutqvist (2011). Da es sich bei den in Kapitel 7 durchgeführten Simulationen um Einphasenfluidfluss-Simulationen handelt und die Fluiddichte während der gesamten Simulation als konstant angenommen wird, bleibt der Divisor bei dieser Umrechnung konstant. Durch Division des so ermittelten Volumenstroms durch die Gesamtrandfläche der Injektionselemente, wird eine entsprechende Filtergeschwindigkeit berechnet, die über den Befehl „DFlow“ als Neumann-Randbedingung auf die Ränder der Injektionselemente aufgebracht wird. Hierdurch werden während des Simulationszeitraums instationäre hydraulische Zustände berechnet, die wiederum die mechanischen Spannungs- und Verformungszustände beeinflussen. Die verwendete zeitliche Diskretisierung und zugehörige Filtergeschwindigkeiten sind Anhang C zu entnehmen. Insgesamt wurden ein Injektionszeitraum von 20 Jahren und eine Postinjektionsphase von 30 Jahren simuliert. Dieser Zeitraum wurde, beginnend mit einer Sekunde und schließend mit 5 Jahren, problemorientiert in 36 einzelne nicht äquidistante Simulationsschritte unterteilt. Während der Simulationsschritte wurden die Zeitschrittgrößen von ABAQUS automatisch ermittelt. Die Filtergeschwindigkeit wurde während der ersten zehn Simulationsschritte, die einen Zeitraum von zehn Tagen repräsentieren, sukzessive auf den finalen Wert gesteigert. Innerhalb eines Berechnungsschrittes wurden die Steigerungen der Filtergeschwindigkeit linear zunehmend aufgebracht. Nach 20-jähriger Injektionsphase wurden die Randbedingungen der Injektionselemente aufgehoben, wodurch sich die Porendrücke im Modell während der anschließenden Postinjektionsphase sukzessive verringert und schließlich dem Initialzustand angenähert haben. Eine Auflistung der akkumulierten Simulationszeiten ist in Anhang C zu finden.

7 Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes für Einphasenfluidfluss durch die Störung

7.1. Zielsetzung und Gliederung

In diesem Kapitel werden der semi-analytische Kopplungsansatz und die diesem zugrunde liegenden Hypothesen unter der Annahme eines Einphasenfluidflusses durch eine Störung validiert. In diesem Zusammenhang werden die Ergebnisse von zwei Untersuchungsreihen, die jeweils eine Vielzahl von Parameterstudien enthalten, präsentiert und diskutiert. Der Fokus von Untersuchungsreihe 1 liegt hierbei vornehmlich auf einer Variation von Materialparametern, während in Untersuchungsreihe 2 die unterschiedlichen stratigraphischen und strukturgeologischen Gegebenheiten der in Kapitel 6.4.1 definierten Modellvariationen untersucht werden. Für die zweite Untersuchungsreihe wird ausschließlich die in Tabelle 6.5 definierte Basisparametrisierung verwendet. Eine Gesamtübersicht bezüglich dieser beiden Untersuchungsreihen liefert Kapitel 7.2. In diesem Zusammenhang werden die einzelnen Parameterstudien hinsichtlich der variierten Parameter beschrieben und in den Gesamtkontext eingeordnet.

In Kapitel 7.3 werden die beobachteten hydromechanischen Prozesse exemplarisch für die Modellvariation 7 detailliert beschrieben und diskutiert. Die hierbei gewonnen Ergebnisse werden dazu genutzt, die numerischen Simulationen durch einen qualitativen Vergleich mit anderen Arbeiten zu verifizieren.

Die in Kapitel 7.4 präsentierten und in Kapitel 7.5 diskutierten Ergebnisse der Untersuchungsreihe 1 basieren auf Parameterstudien, in denen durch hydromechanisch einweg- und zweiweggekoppelte Simulationen die Feinheit der horizontalen Störungsdiskretisierung, wesentliche Scherparameter der Störung, die E-Moduln des Liegenden, der Initialspannungszustand des Gesamtmodells, die Injektionsraten, die Sensitivitätsexponenten von Gleichung (4.68) zur Aktualisierung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung und die initiale Permeabilität der Störung variiert werden.

Die Ergebnisse von Untersuchungsreihe 1 sollen einerseits zeigen, dass eine unterschiedliche Störungsdiskretisierung die Simulationsergebnisse einer durch Porendruckanstieg induzierten hydraulischen Störungsreaktivierung nur quantitativ, jedoch nicht qualitativ beeinflusst. Hierdurch wird gezeigt, dass die generelle Einteilung der Störung in Homogenbereiche zur Parametrisierung des semi-analytischen Ansatzes von der gewählten Diskretisierung unabhängig ist. Andererseits werden Anwendungsgrenzen für die Gültigkeit einer einzelnen Basissimulation ermittelt. Hierbei wird überprüft, ob sich die mittels einer einzigen Basissimulation ermittelte Parametrisierung des semi-analytischen Ansatzes auch auf Simulationen, die andere Materialparameter verwenden, übertragen lässt. Des Weiteren werden die in Kapitel 5.3.3 formulierten Hypothesen, die dem

neuen Kopplungsansatz zugrunde liegen, validiert. Um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, werden hierzu die Simulationsergebnisse als e(p_{ref})-Kurven, in denen die Porenzahlentwicklungen der BZEs in Abhängigkeit des Referenzporendrucks p_{ref} aufgetragen sind, dargestellt.

Die in Kapitel 7.6 präsentierten Ergebnisse von Untersuchungsreihe 2 unter Berücksichtigung von sieben unterschiedlichen Modellvariationen werden dazu verwendet, den semi-analytischen Kopplungsansatz zu validieren. Dies erfolgt durch einen direkten Vergleich von Porendruckverläufen aus semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen sowie von akkumulierten Fluidflüssen durch die Störung. Das Kapitel 7.7 fasst die gesamten Ergebnisse abschließend zusammen und beendet Kapitel 7 mit einem Fazit.

7.2. Gesamtübersicht, inhaltliche Zuordnung und Beschreibung der Parameterstudien

Im Folgenden wird ein Überblick über die im Rahmen dieses Kapitels präsentierten und diskutierten Parameterstudien gegeben. Hierfür liefern Tabelle 7.1 für Untersuchungsreihe 1 und Tabelle 7.2 für Untersuchungsreihe 2 eine Gesamtübersicht bezüglich der variierten Parameter. Um die einzelnen Parameterstudien eindeutig zuzuordnen, wird für die Bezeichnung der jeweiligen Modellvariation die in Tabelle 6.3 eingeführte Nomenklatur verwendet. Hierbei werden die Modellvariationen durch den Buchstaben M und die mit diesen durchgeführten Parameterstudien durch den Buchstaben P eindeutig definiert, wobei auf beide Buchstaben jeweils eine Ziffer folgt.

Die Spalten drei und vier in beiden Tabellen geben Auskunft über den jeweils im Verhältnis zum Referenzfall (Kapitel 6.4.3) variierten Parameter. In diesem Zusammenhang nennt die Tabelle in Spalte drei den variierten Parameter, um diesen wiederum in Spalte vier zu quantifizieren. Die Spalten fünf, sechs und sieben machen Angaben zur Kopplungsart, zur verwendeten initialen Störungspermeabilität und zur untersuchten Injektionsrate. Tabelle 7.2 zeigt sämtliche Simulationsreihen, die für die Validierung des neuen hydromechanischen Kopplungsansatzes in Kapitel 7.6 verwendet werden.

Tabelle 7.1 Gesamtübersicht der in Untersuchungsreihe 1 durchgeführten Parameterstudien und Parametervariationen.

Modell-variation	Parameter-studie	Variierter Parameter		Kopplungsart	$k_{Störung}$ [m²]	Injektions-rate [kg/s/m]
		Parameter [Einheit]	Werte			
M1	P0	Störungsdis-kretisierung [-	3, 5, 7	Einwegkopplung	$5{,}0 \times 10^{-16}$	0,0032
M1	P1	$\varphi_{Störung}$ [°]	15, 25, 35	Einwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-15}$	0,0027
M1	P2	σ'_h/σ'_v (effektiv)	0,45, 0,55, 0,65	Einwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-15}$	0,0027
M1	P3	$\psi_{Störung}$ [°]	10, 15, 20	Einwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-15}$	0,0027
M1	P4	$k_{Störung}$ [m²]	$2{,}5 \times 10^{-16}$ $5{,}0 \times 10^{-16}$ $7{,}5 \times 10^{-16}$ $1{,}0 \times 10^{-15}$ $2{,}5 \times 10^{-15}$ $5{,}0 \times 10^{-15}$ $7{,}5 \times 10^{-15}$ $1{,}0 \times 10^{-14}$ $2{,}5 \times 10^{-14}$	Einwegkopplung	-	0,0027
M1, M7	P5	Injektionsrate [kg/s/m]	0,0018 0,0023 0,0027 0,0032	Einwegkopplung	$5{,}0 \times 10^{-16}$ $5{,}0 \times 10^{-15}$	-
M9					$5{,}0 \times 10^{-16}$	
M1	P6	$\psi_{Störung}$ [°]	10, 15, 20	Zweiwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-15}$	0,0027
M1	P7	Sensitivitäts-exponent n	10, 15, 20	Zweiwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-15}$	0,0027
M1	P8	Siehe Tabelle 7.2				
M1	P9	E-Modul des Liegenden [GPa]	30	Einwegkopplung	$2{,}5 \times 10^{-16}$ $5{,}0 \times 10^{-16}$	0,0032
				Zweiwegkopplung	$1{,}0 \times 10^{-16}$	0,0018 0,0023 0,0027 0,0032

Tabelle 7.2 Gesamtübersicht der in Untersuchungsreihe 2 verwendeten Parameterstudien zur Validierung des semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes.

Modell-variation	Parameter-studie	Variierter Parameter		Kopplungsart	$k_{Störung}$ [m²]	Injektions-rate [kg/s/m]
		Parameter [Einheit]	Werte			
M1	P8	-	-	Einwegkopplung	$2{,}5\cdot10^{-16}$ $5{,}0\cdot10^{-16}$ $5{,}0\cdot10^{-15}$ $5{,}0\cdot10^{-14}$	0,0027
		Injektions-rate [kg/s/m]	0,0018 0,0023 0,0027 0,0032	Zweiwegkopplung semi-analytisch	$1{,}0\cdot10^{-16}$ $1{,}0\cdot10^{-15}$ $1{,}0\cdot10^{-14}$	-
M2, M3, M4, M5	P8	-	-	Einwegkopplung	$5{,}0\cdot10^{-16}$ $5{,}0\cdot10^{-15}$	0,0032
		Injektions-rate [kg/s/m]	0,0018 0,0023 0,0027 0,0032	Zweiwegkopplung semi-analytisch	$1{,}0\cdot10^{-16}$ $1{,}0\cdot10^{-15}$	-
M6, M8	P8	-	-	Einwegkopplung	$5{,}0\cdot10^{-16}$	0,0032
		Injektions-rate [kg/s/m]	0,0018 0,0023 0,0027	Zweiwegkopplung semi-analytisch	$1{,}0\cdot10^{-16}$	-

Eine inhaltliche Zuordnung von Untersuchungsreihe 1, in der die jeweiligen Parameterstudien ihrer Zielsetzung zugeordnet werden, liefert Tabelle 7.3. Entsprechend dieser Struktur werden in Kapitel 7.4 die Ergebnisse der Parameterstudien präsentiert und in Kapitel 7.5 diskutiert.

Tabelle 7.3 Inhaltliche Zuordnung der in Untersuchungsreihe 1 durchgeführten Simulationen.

Zielsetzung	Zugehörige Parameterstudie
Untersuchung zum Einfluss der horizontalen Diskretisierung der Störung	M1P0
Ermittlung der Anwendungs-grenzen einer Basissimulation	M1P1, M1P2, M1P3, M1P6, M1P7
Validierung von Hypothese 1	M1P5, M7P5, M9P5
Validierung von Hypothese 2	M1P4
Validierung von Hypothese 3	M1P8 (nur Zweiwegkopplung)
Validierung von Hypothese 4	M1P8 (Ein- und Zweiwegkopplung), M1P9, M1P6, M1P7
Validierung von Hypothese 5	erfolgt in Kapitel 8

In Parameterstudie M1P0 wird die Anzahl der für die horizontale Diskretisierung der Störung verwendeten Elemente zwischen drei, fünf und sieben Elementen variiert. In diesem Zusammenhang wurde darauf geachtet, dass entsprechend etablierter Netzqualitätskriterien ein relatives Verhältnis der Elementbreite zur Höhe im Nahbereich der Störung von fünf eingehalten wird. Durch diese Studie wird dem Umstand Rechnung getragen, dass die Ergebnisse von FE-Simulationen in hohem Maße von der Diskretisierung abhängen. Da der Fokus dieser Arbeit auf der Implementierung und Validierung eines neu entwickelten semi-analytischen Kopplungsansatzes liegt, steht eine Quantifizierung dieses Einflusses nicht im Vordergrund dieser Arbeit. Des Weiteren wird für alle Simulationen die gleiche Störungsdiskretisierung verwendet. Daher wirkt sich ein Fehler praktisch in allen Ergebnissen gleich aus. Die Zielsetzung dieser Parameterstudie liegt vielmehr darin zu überprüfen, ob die Diskretisierung einen qualitativen Einfluss auf die Lokalisierung und die Erscheinungsform von plastifizierten Störungsbereichen hat.

Für die Ermittlung des Anwendungsbereichs einer für die Parametrisierung des semi-analytischen Ansatzes genutzten Basissimulation, wurde in den Parameterstudien M1P1, M1P2, M1P3 in einweggekoppelten Simulationen der Reibungswinkel φ zwischen 15° und 35°, der effektive Initialspannungszustand σ_h/σ_v zwischen 0,45 und 0,65 und der Dilatanzwinkel ψ zwischen 10° und 20° variiert. Ergänzend wurde in den Parameterstudien M1P6 und M1P7 durch die Verwendung von zweiweggekoppelten Simulationen der Einfluss einer Variation des Dilatanzwinkels zwischen 10° und 20° und des Sensitivitätsexponenten n zwischen 10 und 20 auf den Verlauf der $e(p_{ref})$-Kurven untersucht. Die Zielsetzung dieser Untersuchungen liegt darin zu überprüfen, ob sich in Bezug auf einen dieser Parameter invariantes Verhalten oder ein vernachlässigbarer Einfluss zeigt, sodass die mittels einer Basissimulation erstellte Parametrisierung auf eine größere Anzahl von Szenarien im Rahmen weiterführender Untersuchungen übertragen werden kann.

Da Informationen über die Beschaffenheit von Störungen in der Praxis häufig nur in einer geringen Aufschlussdichte vorliegen, findet im Rahmen dieser Arbeit eine Untersuchung des Einflusses von unterschiedlichen, aus beispielsweise wechselnden Scherparametern resultierenden Homogenbereichen innerhalb der Störung nicht statt. Der Einfluss von Inhomogenitäten ließe sich jedoch mit dem neuen Ansatz durch eine entsprechend angepasste Wahl von BZEs abbilden. Der jeweilige Einfluss von heterogenen Scherparametern wird in diesem Fall über entsprechende $e(p_{ref})$-Funktionen für jedes BZE berücksichtigt.

Die Validierung von Hypothese 1, die, entsprechend der Definition in Kapitel 5.3.3, invariantes Verhalten der Parameter α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf die Höhe der Injektionsrate postuliert, erfolgt durch die Parameterstudie M1P5, in der unterschiedliche Injektionsraten von 0,0018, 0,0023, 0,0027 und 0,0032 kg/s/m untersucht werden. Die Raten wurden so gewählt, dass in allen untersuchten Szenarien eine hydraulische Reaktivierung der Störung eintritt. In den Studien M7P5 und M9P5 wird zusätzlich überprüft, ob sich das angenommene invariante Verhalten auch für komplexere stratigraphische Gegebenheiten zeigt.

Hypothese 2, die invariantes Verhalten der Parameter α_1, α_2, α_3 in Bezug auf die initiale Störungspermeabilität voraussetzt, wird durch die Ergebnisse von M1P4 nachgewiesen. Hierzu wird diese in 2,5er-Schritten zwischen $2{,}5 \times 10^{-16}$ und $2{,}5 \times 10^{-14}$ m² variiert. Die Betrachtung einer heterogenen Verteilung der Permeabilität innerhalb der Störung wird im Rahmen dieser Arbeit nicht untersucht, weil eine solche Inhomogenität lediglich einen Zustand zwischen zwei homogenen Permeabilitäten mit unterschiedlicher initialer Permeabilität darstellt.

Zur Überprüfung der Gültigkeit von Hypothese 3 werden die Ergebnisse der zweiweggekoppelten Simulationen von Parameterstudie M1P8 verwendet. Durch die Untersuchung von vier unterschiedlichen Injektionsraten soll hierbei gezeigt werden, dass die Nichtlinearität beziehungsweise das Ausbauchen der $e(p_{ref})$-Kurven mit höherer Injektionsrate zunimmt, $p_{kontr\,1}$ jedoch konstant bleibt.

Ein direkter Vergleich dieser Kurvenscharen mit $e(p_{ref})$-Verläufen von einweggekoppelten Basissimulationen, für die eine erhöhte Störungspermeabilität verwendet wurde, wird zur Validierung von Hypothese 4 genutzt. Hierbei wird gezeigt, dass die Verläufe von $e(p_{ref})$-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen durch den linearisierten Verlauf einer Basissimulation zufriedenstellend approximiert werden können. Des Weiteren wird durch eine Auswertung der Ergebnisse der Parameterstudien M1P6, M1P7 und M1P9 bestätigt, dass Basissimulationen, die einen Permeabilitätsmultiplikator in Höhe von 5 verwenden, auch für eine erweiterte Bandbreite von Parametervariationen geeignet sind.

Für die generelle Validierung des semi-analytischen Ansatzes werden die in Tabelle 7.2 aufgelisteten Modellvariationen M1 bis M6 und M8 verwendet. In diesem Zusammenhang werden entsprechend Anhang C die Injektionsraten zwischen 0,0018 und 0,0032 kg/s/m und die initiale Störungspermeabilität zwischen 10^{-16} und 10^{-14} m² variiert.

7.3. Beschreibung der hydromechanischen Prozesse am Beispiel einer Modellvariation

Im Rahmen dieser Arbeit werden ausschließlich synthetische Modellvariationen untersucht, weshalb die Simulationsergebnisse durch einen qualitativen Vergleich mit Ergebnissen anderer Arbeiten validiert werden. Da sich die Simulationsergebnisse aller betrachteten Modellvariationen nur quantitativ voneinander unterscheiden, wird im Folgenden stellvertretend für alle anderen die Simulation, für die der höchste Porendruckanstieg im Reservoir verzeichnet wurde, detailliert ausgewertet. Um die hydromechanischen Prozesse zu beschreiben und zu diskutieren, wurde hierzu für Modellvariation M7 eine Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m, eine Störungspermeabilität von 5×10^{-16} m² und eine Einwegkopplung verwendet. Die Ergebnisse werden einerseits dazu genutzt, die auftretenden Prozesse zu erklären und andererseits diese durch einen qualitativen Vergleich mit Ergebnissen anderer Arbeiten zu validieren. Die verwendete Geologie von M7 ist Anhang A zu entnehmen.

7.3.1. Ergebnisse und Diskussion

In diesem Zusammenhang werden die Hebungen der Geländeoberkante (GOK) in drei Punkten, die maximale Relativverschiebung der Störung (engl.: „fault slip“), die Entwicklung der effektiven Spannungen im Nahbereich der Störung und die maximalen Porendruckerhöhungen an der Injektionsstelle, im Referenzelement und in GWL 1 ausgewertet. Die jeweilige Lage der hierzu verwendeten Elemente ist in Bild 7.1 durch rote Quadrate gekennzeichnet.

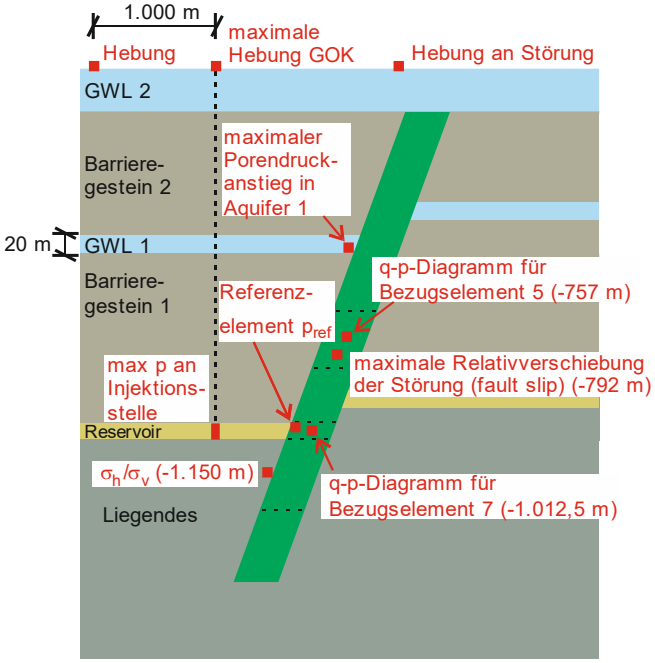


Bild 7.1 Die schematische Darstellung von Modellvariation M7 zeigt die Lage der betrachteten Elemente zur Ermittlung der untersuchten Hebungen der GOK, der Porendruckänderungen, der q-p-Diagramme in den BZEs 5 und 7, der maximalen Relativverschiebung sowie der Entwicklung des Seitendruckbeiwerts im Bereich der größten beobachteten Horizontalverschiebung.

Tabelle 7.4 zeigt eine Gegenüberstellung der maximalen Porendruckerhöhungen an der Injektionsstelle, im Referenzelement p_{ref} und in GWL 1, die maximale Relativverschiebung der Störung sowie drei Hebungen an der Geländeoberkante nach einer 20-jährigen Injektionsdauer. Um die Auswirkung der Störungsreaktivierung auf die genannten Größen zu ermitteln, wurde die Simulation sowohl elasto-plastisch als auch rein elastisch durchgeführt. Da in der rein elastischen Simulation keine Reaktivierung stattfindet, können die auftretenden hydromechanischen Prozesse durch einen direkten Vergleich identifiziert werden.

Tabelle 7.4 Gegenüberstellung der Ergebnisse einer elasto-plastischen und einer rein elastischen Simulation.

Ergebnis	elasto-plastisch	rein elastisch
Maximaler Porendruckanstieg an Injektionsstelle [MPa]	8,05	8,46
Maximaler Porendruckanstieg im Referenzelement [MPa]	7,54	7,97
Maximaler Porendruckanstieg in GWL 1 [MPa]	0,55	1,0
maximale Relativverschiebung der Störung (fault slip) [m]	0,152	-
Maximale Hebung der GOK [cm]	5,9	6,1
Hebung der GOK direkt an der Störung [cm]	-1,0	4,2
Hebung der GOK in einer Entfernung von 1.000 m zur Injektionsstelle [cm]	5,3	5,0

In der elasto-plastischen Simulation wurde an der Injektionsstelle ein maximaler Porendruckanstieg in Höhe von 8,05 MPa ermittelt. Bildet man den Quotienten aus dem maximal und dem initial aufgetretenen Porendruck für das oberste Injektionselement (mittlere Tiefe 1002,5 m), so beträgt dieser 1,74. Basierend auf Erfahrungen aus dem langjährigen Betrieb untertägiger Gasspeicher in Deutschland definiert Sedlacek (1999) eine maximal erlaubte Porendruckerhöhung um den Faktor 1,68 in Bezug zum Initialporendruck des Reservoirs, damit die Integrität des Reservoir- und des Barrieregesteins gewährleistet bleibt. Dieser Wert wurde in den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen ausschließlich in der hier präsentierten Simulation im Injektionsbereich überschritten. Obwohl dieser maximal zulässige Wert in der hier vorgestellten Simulation überschritten wurde, ist jedoch das Bruchkriterium in keinem Element des angrenzenden Gesteins erfüllt. Aus diesem Grund können die gewählten Injektionsraten für die verwendete Parametrisierung als zulässig betrachtet werden. Generell steigt der Porendruck im Reservoir und in der Störung in allen Simulationen während des Injektionsprozesses sukzessive an, um sich dann nach Injektionsstopp infolge einsetzender Konsolidationsprozesse wieder zu verringern.

Für das im Schnittpunkt von Reservoir und Störung gelegene Referenzelement p_{ref} wurde eine maximale Porendruckerhöhung von 7,54 MPa beobachtet. Aufgrund einer Durchströmung der

Störung mit Formationsfluid erhöht sich der Porendruck im höhergelegenen GWL 1 um 0,55 MPa. Dieser Anstieg lässt sich durch die relativ geringe Mächtigkeit dieses Grundwasserleiters von nur 20 m erklären. Durch die daraus resultierende geringe Transmissivität baut sich durch das zuströmende Fluid ein Porendruck auf, weshalb das migrierte Formationsfluid nicht drucklos in den GWL fließen kann. Hierdurch werden auch in höhergelegenen Bereichen der Störung Porendruckanstiege verzeichnet. Die in Kapitel 7.5 ausführlich diskutierten Ergebnisse von Modellvariation M6 und M9 zeigen, dass dies im Fall von mächtigeren zwischengelagerten GWLs nicht der Fall ist. Insgesamt sind während des Injektionszeitraums 46,6 m³/m Formationsfluid in GWL 1 geströmt, wobei der Fluidfluss nach etwa 5 Jahren Injektionszeit eingesetzt hat.

Im Fall der rein elastischen Simulation, in der die Störung nicht reaktiviert wurde, betragen die Porendruckerhöhungen an der Injektionsstelle 8,46 MPa, im Referenzelement 7,97 MPa und in GWL 1 1,0 MPa. Da sowohl die elasto-plastische als auch die rein elastische Simulation als Einwegkopplung, in der keine Aktualisierung der Permeabilität stattfindet, durchgeführt wurden, lassen sich die Abweichungen der Porendruckerhöhungen einerseits auf eine Änderung der Porosität und andererseits auf eine infolge der Dilatanz vergrößerte durchflossene Netzweite in der Störung zurückführen.

Des Weiteren zeigt sich, dass in der elasto-plastischen Simulation die maximale Hebung der GOK in Höhe von 5,9 cm in einer horizontalen Entfernung von 460 m zur Injektionsstelle aufgetreten ist, während direkt an der Störung eine Setzung von 1,0 cm und in einer Entfernung von 1.000 m eine Hebung von 5,3 cm zu verzeichnen ist (vgl. Bild 7.1). In der rein elastischen Simulation ergab sich direkt oberhalb der Injektionsstelle eine maximale Hebung in Höhe von 6,1 cm, direkt an der Störung eine von 4,2 cm und in einer Entfernung von 1.000 m eine von 5,0 cm. Vergleicht man die beiden maximalen, oberhalb der Injektionsstelle auftretenden Hebungen, so sind beide aufgrund von relativ identischen Porendruckerhöhungen nahezu gleich groß. Da jedoch in der elasto-plastischen Simulation plastische Verformungen in den Störungselementen zu beobachten sind, deuten die Hebungsunterschiede in 1.000 m Entfernung und direkt an der Störung darauf hin, dass das Hangende Schubverformungen erfahren hat, was wiederum direkt an der Störung zu Setzungen und in größerer Entfernung zur Injektionsstelle zu zusätzlichen Hebungen geführt hat. Hieraus lässt sich schlussfolgern, dass die Verformungen des Hangenden und der Störung zu Änderungen der effektiven Spannungen im angrenzenden Gestein geführt haben, was dort wiederum elastische Stauchungen und Verformungen bewirkt hat.

Die räumliche Verteilung der elastischen Stauchungen wird in den folgenden Abbildungen visualisiert, wobei Bild 7.2 die horizontalen und Bild 7.3 die vertikalen Anteile im angrenzenden Gebirge zum Zeitpunkt des Injektionsstopps nach 20 Jahren zeigt. Um diese hervorzuheben, werden durch eine in beiden Abbildungen identische Farbskalierung ausschließlich aufgetretene Stauchungen des Liegenden und des Hangenden farblich hervorgehoben, wobei die höchsten Stauchungen blau und die geringsten rot dargestellt sind, wohingegen sämtliche Dehnungen grau hinterlegt sind.

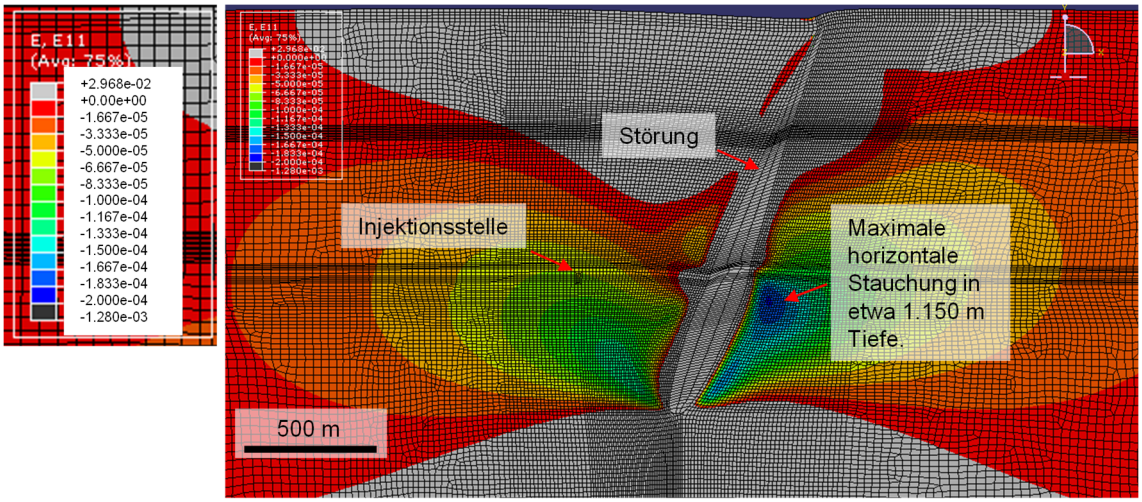


Bild 7.2 M7: Grafische Darstellung der horizontalen Stauchungen des Hangenden und Liegenden im Nahbereich der Störung (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht).

Wie Bild 7.2 zu entnehmen ist, sind die maximalen horizontalen Stauchungen von 1,8 x 10^{-4} in einer Tiefe von 1.150 m im Störungsnahbereich des Liegenden aufgetreten. Diese relativ geringen Stauchungen bewirken an dieser Stelle eine maximale Spannungsänderung in Höhe von 1,8 MPa. Da diese Änderung in Relation zum Initialspannungszustand in Höhe von 5,5 MPa eine verhältnismäßig geringe Spannungsänderung von nur rund 30 % darstellt, kann die Verwendung eines konstanten E-Moduls, wie bereits in Kapitel 4.3.2 erläutert, als geeignet eingestuft werden. Die direkt an die Störung angrenzenden Bereiche der Gesteinsformationen weisen aufgrund der Durchlässigkeit des Felses Porendruckerhöhungen auf, was wiederum zu Dehnungen der Elemente führt.

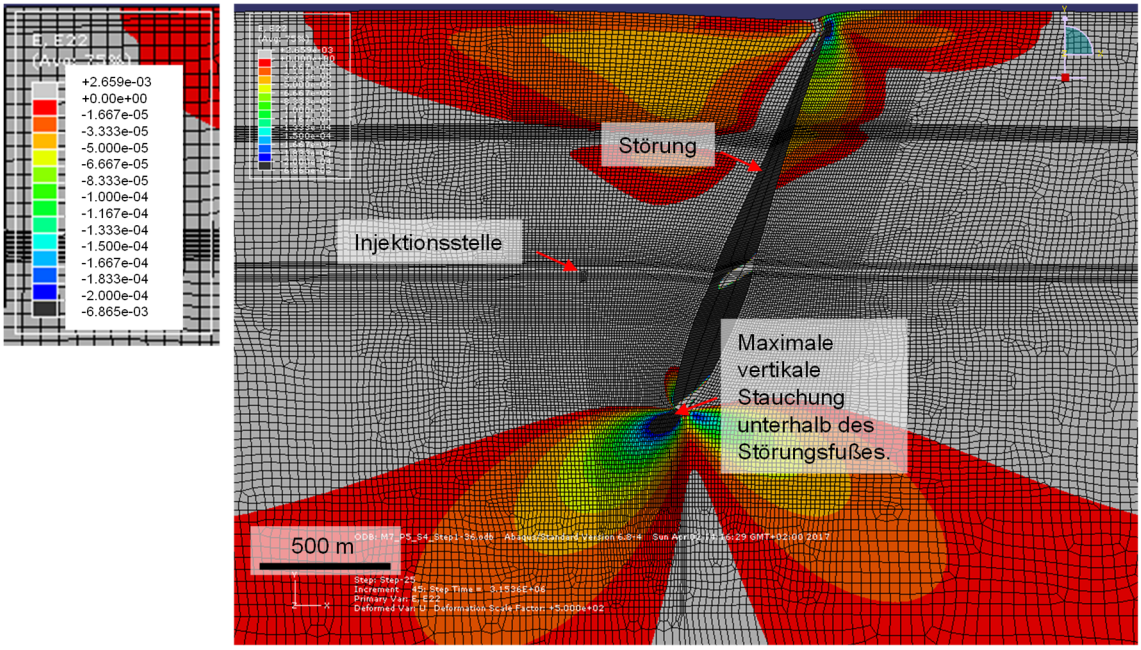


Bild 7.3 M7: Grafische Darstellung der vertikalen Stauchungen des Hangenden und Liegenden im Nahbereich der Störung (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht).

Die rot hinterlegten Bereiche stellen Zonen dar, die keinerlei oder nur geringe Verformungen erfahren haben. Die dabei aufgetretenen Stauchungen klingen nach beiden Seiten relativ symmetrisch innerhalb eines Radius von etwa 1.500 bis 2.000 m ab.

Bild 7.3 zeigt die Verteilung der vertikal aufgetretenen elastischen Stauchungen. Diese sind bis in eine Tiefe von etwa 2.500 m (1.000 m unterhalb des Störungsfußes) zu verorten. Entsprechend treten auch nur bis in diese Tiefe Spannungsänderungen auf, weshalb davon ausgegangen werden kann, dass der Modellausschnitt ausreichend groß gewählt wurde, um ungestörte mechanische Randbedingungen zu gewährleisten. Maximale Stauchungen in Höhe von $3{,}6 \times 10^{-4}$ sind im Nahbereich des Störungsfußes in 1.500 m Tiefe zu lokalisieren. Dies geht mit maximalen Spannungsänderungen von etwa 3,6 MPa einher. Verglichen mit dem Initialspannungszustand in Höhe von 17,5 MPa entspricht dies einer Spannungserhöhung um 20 %, die ebenfalls als gering einzustufen ist.

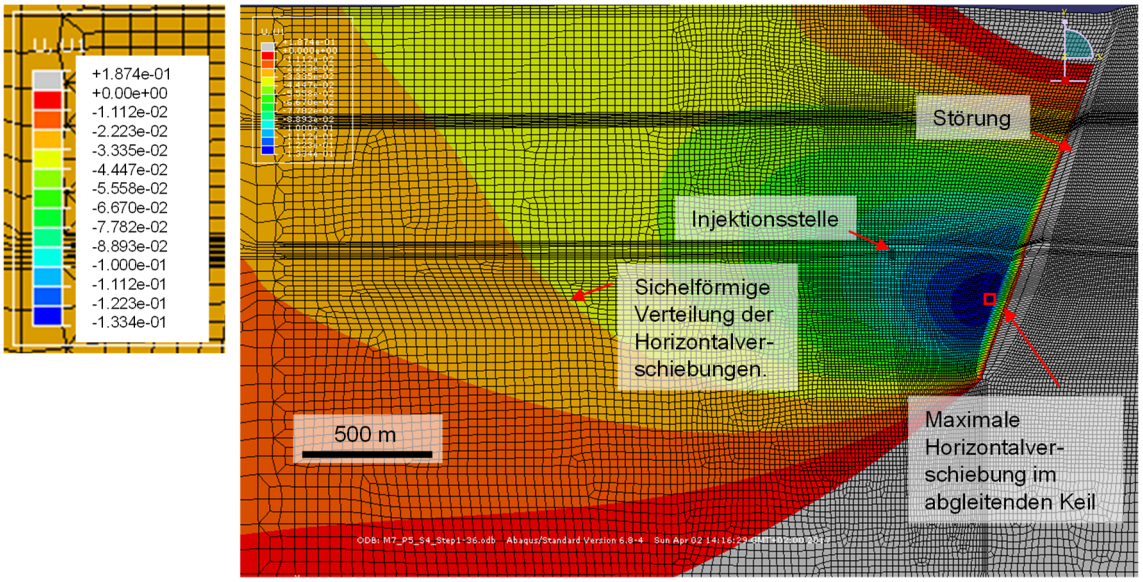


Bild 7.4 M7: Die Grafische Darstellung zeigt eine sichelförmige Verteilung der horizontalen Verschiebungen des abgleitenden Blocks. Das rote Kästchen markiert das Element mit der größten Deformation im abgleitenden Keil (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht).

Die aus der Abschiebung resultierenden horizontalen Verschiebungsanteile des abgleitenden Keils sind in Bild 7.4, die vertikalen Setzungen in Bild 7.5 zu sehen. Es zeigt sich eine deutliche sichelförmige Verteilung von Bereichen mit gleichen Horizontalverformungen, die mit zunehmender Entfernung von der Störung betragsmäßig abnehmen. Wie Bild 7.4 zu entnehmen, treten die maximalen Horizontalverschiebungen in Höhe von 13,3 cm in einer Tiefe von etwa 1.100 bis 1.300 m direkt an die Störung angrenzend auf (blauer Bereich in Bild 7.4), während die maximalen Vertikalverschiebungen in Höhe von 3,8 cm (blauer Bereich in Bild 7.5) unterhalb des Störungsfußes zu verorten sind. Die Hebungsanteile des Hangenden sind in Bild 7.5 grau hinterlegt.

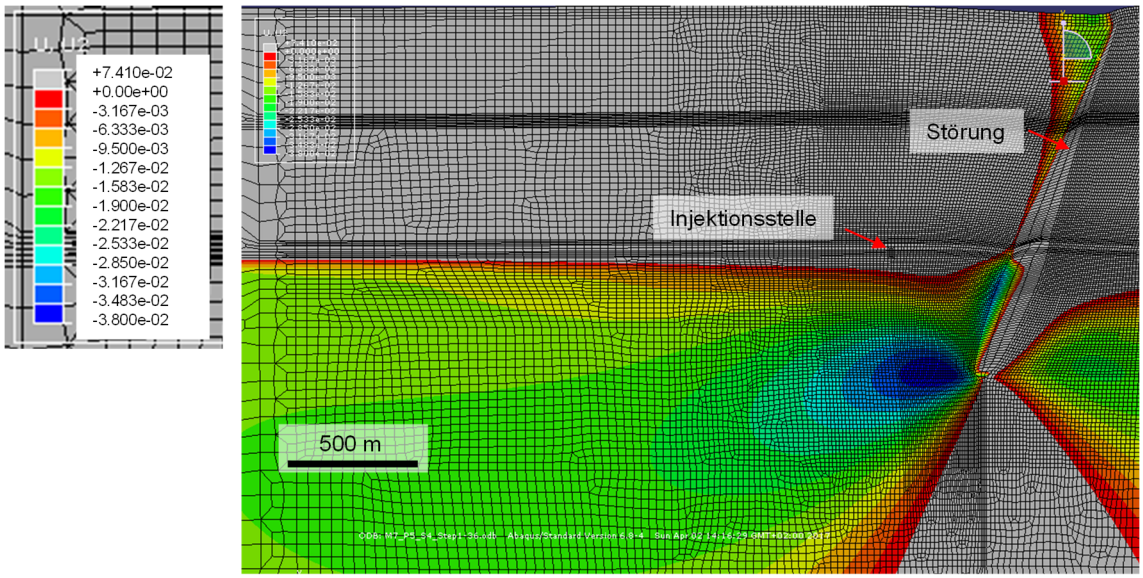


Bild 7.5 M7: Grafische Darstellung der vertikalen Verformungen des abgleitenden Blocks (Netzausschnitt um Skalierungsfaktor 500 überhöht).

Die Resultierende aus beiden Verschiebungsanteilen bewirkt folglich, wie Tabelle 7.4 zu entnehmen ist, im Verhältnis zur rein elastischen Simulation zusätzliche Geländehebungen in einer Entfernung von mehr als 1.000 m zur Injektionsstelle, während der Störungsnahbereich Setzungen erfährt. Eine maximale Relativverschiebung der Störung (engl.: „fault slip“) in Höhe von 0,152 m ist in einer Tiefe von 792 m zu verzeichnen.

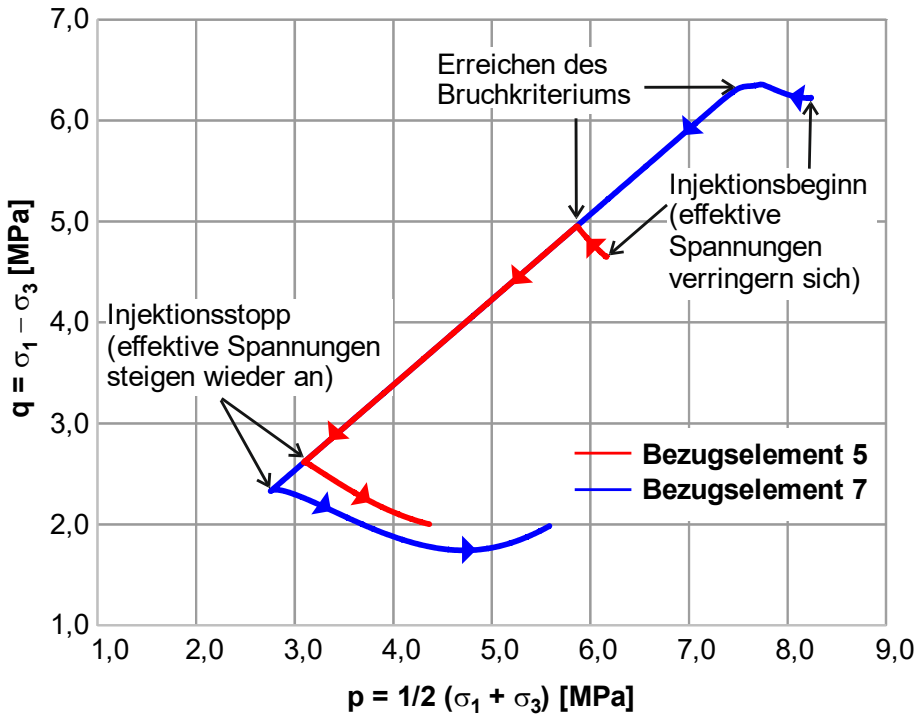


Bild 7.6 Das q-p-Diagramm zeigt das mechanische Verhalten der Störung während der Injektions- und Postinjektionsphase für die BZEs 5 und 7.

Um den Prozess der hydraulischen Reaktivierung näher zu untersuchen, wurde das in Bild 7.6 dargestellte q-p-Diagramm erstellt. Es zeigt den Verlauf der über die mittlere Hauptspannung aufgetragenen Deviatorspannung für die BZE 5 und 7 für den gesamten Simulationszeitraum. Ausgehend vom jeweiligen Initialspannungszustand zu Injektionsbeginn, weisen beide Verläufe infolge des induzierten Porendruckanstiegs eine sukzessive Reduzierung der mittleren Hauptspannung auf, die mit einem Anstieg der Deviatorspannung einhergeht. Hierdurch kommt es wiederum zu Spannungsumlagerungen in höhergelegene Bereiche der Störung. Dieser Vorgang findet solange statt, bis der Spannungspfad das Bruchkriterium, das den Übergang von rein elastischen zu plastischen Spannungs- und Verformungsanteilen definiert, erreicht.

Ab diesem Punkt wandern die Spannungspfade aufgrund des fortwährenden Porendruckanstiegs entlang des plastischen Potenzials, das im τ-σ-Diagramm unter dem Dilatanzwinkel ψ geneigt ist. Hierdurch verringern sich die Deviator- und die mittlere Hauptspannung kontinuierlich. Dieses entfestigende Materialverhalten bewirkt wiederum zusätzliche Spannungsumlagerungen in noch nicht plastifizierte Störungsbereiche. Dieser Prozess geht mit dilatantem Verhalten einher, was zu einem sukzessiven Anwachsen der volumetrischen Dehnungen in den betroffenen Elementen führt. Dieser Vorgang endet zum Zeitpunkt des Injektionstopps, ab dem es wieder zu einem Anwachsen der mittleren Hauptspannung und zu einer weiteren Reduzierung der Deviatorspannung kommt. In dieser Phase verlässt der Spannungspfad das plastische Potenzial und es treten ausschließlich elastische Verformungen auf, die mit einer Kompression der Störung einhergehen.

Da sich BZE 7, wie in Bild 7.1 dargestellt, ungefähr in derselben Tiefe wie das Reservoir befindet, reagiert die Spannungsresponse unmittelbar auf Porendruckänderungen, was sich während der Anfangs- und der Endphase in einer geschwungenen Form äußert. Während BZE 7 bereits nach 5 Tagen einen Porendruckanstieg verzeichnet, wird in BZE 5 ein solcher erst nach etwa 365 Tagen beobachtet. Trotzdem steigt die Deviatorspannung im höhergelegenen Element bereits nach einer Injektionsdauer von 124 Tagen an, wohingegen ein solcher Anstieg in BZE 7 bereits nach 39 Tagen zu verzeichnen ist. Diese zeitliche Differenz zwischen dem einsetzenden Porendruckanstieg und dem Beginn der einsetzenden Änderungen der Deviatorspannung lassen sich durch Spannungsumlagerungen erklären. Diese führen dazu, dass das Bruchkriterium in BZE 5 erst nach 480 Tagen erreicht wird, während BZE 7 bereits nach 78 Tagen plastifiziert.

Ungefähr sechs Jahre nach Injektionsstopp steigen die Deviatorspannungen in BZE 7 wieder an, was sich durch die Krümmung in der Spannungsresponse des Wiederbelastungsastes im q-p-Diagramm äußert. Sowohl dieser Effekt als auch die generelle Kompression der Störung nach Injektionsstopp, lassen sich durch die in Bild 7.7 dargestellte zeitliche Entwicklung des Verhältnisses aus effektiven horizontalen und vertikalen Spannungsanteilen erklären. Die rote Linie zeigt stellvertretend für alle anderen Nahbereiche der Störung den Verlauf für ein unmittelbar an die Störung angrenzendes Element des Liegenden in einer Tiefe von 1.150 m. An dieser durch ein rotes Kästchen in Bild 7.1 und Bild 7.4 markierten Stelle wurden während der Simulation die höchsten Verformungen und Spannungsänderungen beobachtet.

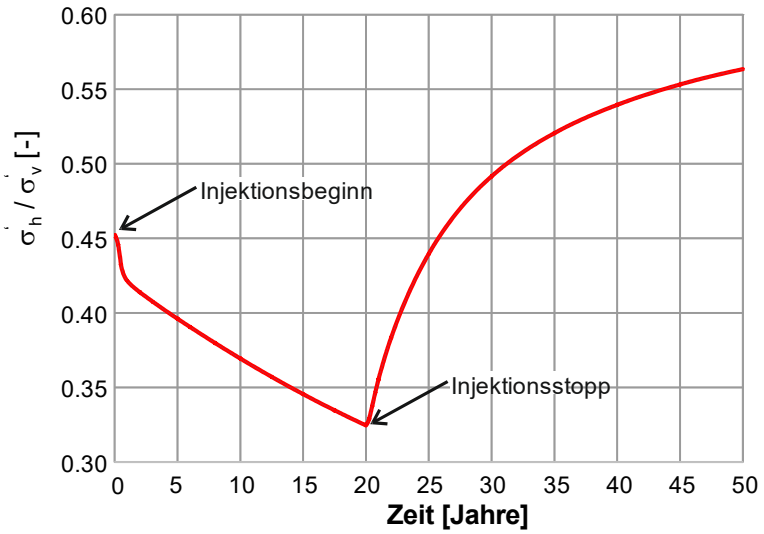


Bild 7.7 Die zeitliche Entwicklung des Verhältnisses aus effektiven Horizontal- und Vertikalspannungen im Bereich des Liegenden mit den größten Horizontalverformungen beschreibt die Änderungen des Spannungszustands im Nahbereich der Störung.

Es zeigt sich, dass sich das initiale Spannungsverhältnis von ursprünglich 0,45 während des Prozesses der Störungsreaktivierung kontinuierlich auf 0,325 verringert hat, um dann nach Injektionsstopp kontinuierlich innerhalb von sechs Jahren wieder auf den Ausgangswert anzusteigen. Aufgrund des in Bild 7.6 dargestellten, sich signifikant geänderten Spannungszustands in der Störung, stellt sich ein neues Gleichgewicht ein, was während der Postinjektionsphase zu einem sukzessiven Anstieg des Seitendruckbeiwerts auf bis zu 0,56 führt. Hieraus resultiert wiederum die in Bild 7.6 während der Postinjektionsphase beobachtete Wiederbelastung, mit der elastische Stauchungen einhergehen, die die Störung komprimieren.

7.3.2. Qualitative Verifizierung der Simulationsergebnisse

Die Verifizierung der durchgeführten Simulationen erfolgt durch einen Vergleich der in Kapitel 7.3.1 beschriebenen und diskutierten Ergebnisse mit Arbeiten anderer Autoren. Hierzu dienen primär die Maximalhebungen der Geländeoberkante und die maximale Relativverschiebung der Störung (engl.: „fault slip“) als Vergleichsgröße. Damit eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse gegeben ist, wurden Arbeiten ausgewählt, die in Bezug auf die verwendeten Materialparameter, die maximalen Porendruckerhöhungen im Reservoir, die Tiefe der Speicherformation und hinsichtlich der hydromechanischen Kopplungsart identische oder ähnliche Parameter und Randbedingungen verwenden. Diese Kriterien erfüllen die bereits in Kapitel 4.1 erläuterten und diskutierten Arbeiten von Cappa und Rutqvist (2011) in Bezug auf die Vergleichsgröße „fault slip“ sowie Röhmann et al. (2013) und Tillner (2015) in Bezug auf die Hebung der Geländeoberkante.

Bei dem Modell von Röhmann et al. (2013) und Tillner (2015) handelt es sich um das adaptierte und in Kapitel 6.4 beschriebene stratigraphische Modell. In dieser Studie wurde über einen Zeitraum von 20 Jahren CO_2 in die 1080 m tief gelegene Detfurth-Formation injiziert. Die Simulation wurde als hydromechanisch einweggekoppelte 3D-Simulation ausgeführt, wobei alle Störungen

als hydraulisch geschlossen definiert worden sind. Während die Speicherformation einen E-Modul von 27,7 GPa besitzt, wurden die E-Moduln oberhalb dieser gelegenen Formationen in Höhe von 8,5, 4,0 und 2,6 GPa definiert.

Nach einer Injektionsdauer von 20 Jahren wurde eine maximale Porendruckerhöhung im Reservoir in Höhe von 7,9 MPa ermittelt, die an der Geländeoberkante eine maximale Hebung von 2,1 cm bewirkt hat. Aufgrund dessen, dass in dieser Simulation keine Reaktivierung der Störung eingetreten ist, werden diese Ergebnisse mit denen aus der rein elastischen Realisierung von Modellvariation M7 verglichen. In dieser wurde entsprechend der Angaben in Tabelle 7.4 eine maximale Porendruckerhöhung von 8,46 MPa und eine maximale Hebung der GOK von 6,1 cm erzielt. Ein Vergleich der maximalen Hebungen zeigt eine Abweichung um den Faktor 2,9. Unter Berücksichtigung von ähnlich hohen Speicherdrücken in beiden Simulationen, lassen sich die vorhandenen Abweichungen einerseits darauf zurückführen, dass die verwendeten E-Moduln des Reservoirs um den Faktor 2,77 voneinander abweichen. Da der Großteil der Deformationen in der Speicherformation stattfindet, führt linear-elastisches Materialverhalten zu entsprechenden Abweichungen bei den Verformungen. Andererseits führt die entfallende Gewölbewirkung in 2D-Simulationen ebenfalls zu höheren Geländehebungen. Trotz der festgestellten Abweichungen konnte jedoch gezeigt werden, dass mit der Parametrisierung und Initialisierung von Modellvariation M7 plausible Ergebnisse erzielt wurden.

Geländehebungen ähnlicher Größenordnung wurden auch für den CO_2-Speicherstandort „In Salah Gas Project“ in Algerien durch satellitenbasierte Vermessung (InSAR) ermittelt. An diesem Standort wurden über einen Zeitraum von fünf Jahren jährlich zwischen 0,5 bis 1,0 Millionen Tonnen CO_2 in eine etwa 1.800 m tief gelegene und 20 m dicke Speicherformation injiziert. Rutqvist et al. (2010) berichten davon, dass für einen Porendruckanstieg in Höhe von etwa 10 MPa eine Geländehebung von 1,6 cm ermittelt wurden.

In Bezug auf die Vergleichsgröße „fault slip“ wurde von Cappa und Rutqvist (2011) unter Verwendung von identischen E-Moduln, Poissonzahlen und Scherparametern für den in Kapitel 4.1 beschriebenen synthetischen Standort unter Berücksichtigung einer Porendruckerhöhung in der Speicherformation in Höhe von etwa 9 MPa und einer unter 80° einfallenden Störung eine Relativverschiebung der Störung in Höhe von 11,5 cm erzielt. Für Modellvariation M7 wurde, wie Tabelle 7.4 zu entnehmen ist, mit einem maximalen Porendruckanstieg von 8 MPa und einer unter 70° einfallenden Störung eine Relativverschiebung von 15,2 cm ermittelt. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass beide Porendruckanstiege ähnlich groß sind, lässt sich die Abweichung durch den Einfluss der um 10° flacher einfallenden Störung in Modellvariation M7 erklären. Beide Ergebnisse liegen quantitativ in der gleichen Größenordnung, weshalb die Ergebnisse der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen plausibel sind.

7.4. Ergebnisse von Untersuchungsreihe 1 zur Ermittlung der Anwendungsgrenzen und zur Validierung der Hypothesen

Im folgenden Kapitel werden die Simulationsergebnisse der Parameterstudien entsprechend ihrer in Tabelle 7.3 formulierten Zielsetzung präsentiert. Um eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten, werden diese für die Parameterstudien P1 bis P9 in Form von $e(p_{ref})$-Kurven, wie sie in Kapitel 5.3 eingeführt worden sind, dargestellt. Die aufgetretenen Effekte werden durch eine um einen Faktor 5 überhöhte Darstellung der $e(p_{ref})$-Kurven hervorgehoben. Abweichend von diesem Auswertungsschema werden die Ergebnisse der Parameterstudie P0 zur Ermittlung des Einflusses der Störungsdiskretisierung auf die Ergebnisse durch $p_{ref}(t)$- und $e(t)$-Grafen, in denen der Referenzporendruck und die Porenzahlentwicklung in Abhängigkeit der Zeit aufgetragen sind, miteinander verglichen. Zur Vermeidung von Redundanzen enthalten die folgenden Darstellungen ausschließlich die Ergebnisse einzelner Bezugspunkte. Der Vollständigkeit halber sind die hier nicht enthaltenen Ergebnisse in diesen Fällen Anhang D zu entnehmen. Die genaue Lage der im Rahmen dieser Auswertung betrachteten Bezugspunkte ist der Definition von Homogebereichen in Kapitel 6.4.3 zu entnehmen.

7.4.1. Untersuchung zum Einfluss der horizontalen Diskretisierung der Störung

Zur qualitativen und quantitativen Beurteilung des Einflusses der horizontalen Störungsdiskretisierung auf die hydraulischen und mechanischen Simulationsergebnisse wurde die Störung von Modellvariation M1 in Parameterstudie P0 in horizontaler Richtung mit drei, fünf und sieben Elementen diskretisiert. Die vertikale Diskretisierung blieb in diesem Zusammenhang unverändert.

Die drei Ausschnitte der visualisierten FE-Ergebnisse in Bild 7.8 zeigen die zum Zeitpunkt des Injektionsstopps ermittelten horizontalen plastischen Dehnungen für die drei untersuchten Diskretisierungen. Die verwendete Elementanzahl nimmt hierbei von links nach rechts zu. Für alle drei Abbildungen wurde die gleiche farbliche Skalierung verwendet, wobei die Farbe Rot eine plastische Dehnung von 0,018 und Blau eine Dehnung von Null signalisiert. Der in allen Abbildungen enthaltene rote Punkt kennzeichnet den Übergang zwischen dem Barrieregestein und dem höhergelegenen GWL.

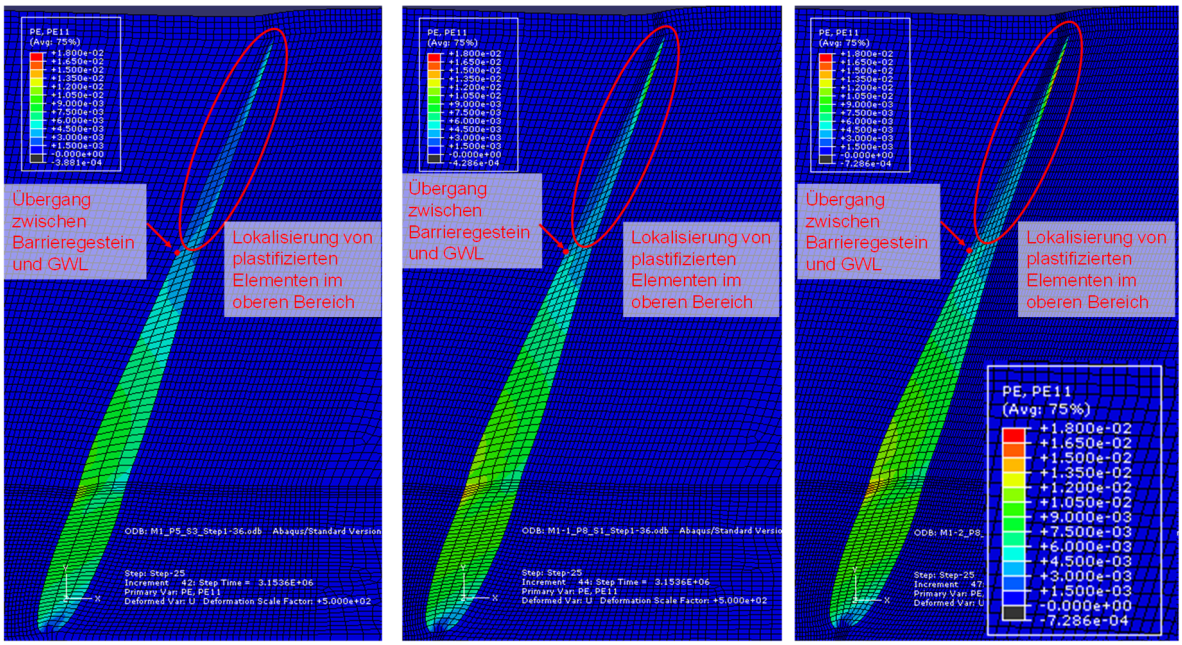


Bild 7.8 Die Darstellung der plastischen Dehnungen in horizontaler Richtung für eine Diskretisierung mit 3 (links), 5 (mittig) und 7 (rechts) Elementen zeigt eine qualitativ identische Verteilung von plastifizierten Bereichen (Skalierungsfaktor 500).

Es zeigt sich, dass die plastifizierten Störungselemente für alle drei Diskretisierungen qualitativ identisch verteilt sind. Der untere Teil der Störung, der sich auf Höhe des Barrieregesteins, des Reservoirs und des Liegenden befindet, plastifiziert über die gesamte Breite, wohingegen der obere Teil der Störung eine Lokalisierung von Elementen, die das Bruchkriterium erreicht haben, am rechten Störungsrand aufweist. Zudem zeigen die plastifizierten Störungselemente des unteren Teils der Störung über die Breite betragsmäßig ähnlich hohe plastische Dehnungen auf. In vertikaler Richtung nehmen die Dehnungsbeträge aller Simulationen nach oben hin kontinuierlich ab. Aufgrund der höchsten Anzahl an Elementen zeigt die rechte Abbildung die homogenste Verteilung von Elementen, die eine ähnlich hohe Dehnung erfahren haben, wohingegen in der linken Abbildung größere Abstufungen zu erkennen sind.

Des Weiteren erfahren im unteren Bereich der Störung alle Elemente, die sich in derselben Tiefe befinden, einen fast identischen Porendruckanstieg, wohingegen im oberen Störungsbereich kein oder nur ein minimaler Porendruckanstieg festzustellen ist.

Der quantitative Einfluss auf die hydraulischen Simulationsergebnisse wird durch den zeitlichen Porendruckverlauf im jeweiligen Referenzelement in Bild 7.9 verdeutlicht. Hierbei repräsentieren die grüne, die rote und die blaue Kurve den mit sieben, fünf und drei Elementen ermittelten Porendruck. Die Porendruckverläufe steigen während der Injektionsphase kontinuierlich an, um sich dann nach Injektionsstopp kontinuierlich zu verringern. Hierbei findet der betragsmäßig größte Druckabbau während der ersten zwei Jahre nach Injektionstopp statt. Insgesamt wird durch eine Diskretisierung mit sieben Elementen ein maximaler Porendruck in Höhe von ungefähr 17,5 MPa erreicht. Zudem zeigt sich, dass mit feiner werdender Diskretisierung die Ergebnisse gegen einen

finalen Wert konvergieren. Eine maximale Abweichung in Höhe von 0,9 MPa ist zum Zeitpunkt des Injektionsstopps zwischen den Simulationen mit drei und sieben Elementen festzustellen.

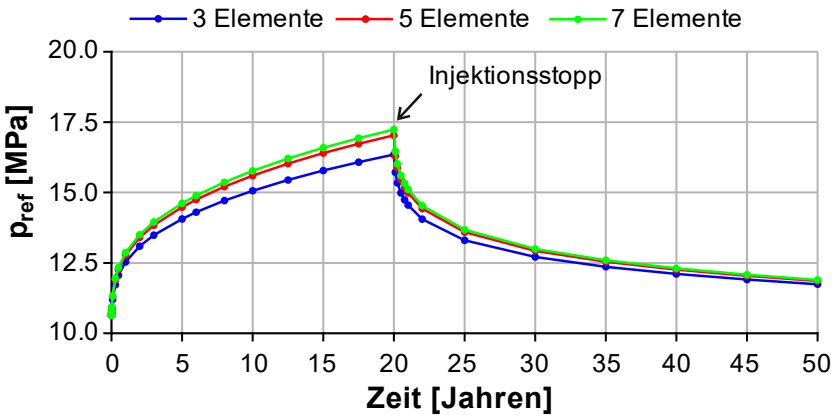


Bild 7.9 M1: Vergleich der zeitlichen Referenzporendrücke $p_{ref}(t)$ zur Quantifizierung des Einflusses der Störungsdiskretisierung.

Auf dieselbe Art und Weise werden die mechanischen Ergebnisse durch die verwendete Diskretisierung beeinflusst. Bild 7.10 zeigt exemplarisch die zeitliche Entwicklung der Porenzahl in Bezugspunkt 4. Die in Anhang D abgebildeten Grafen der anderen Bezugspunkte zeigen qualitativ einen gleichen Kurvenverlauf. Im Fall einer Diskretisierung mit drei Elementen fallen die maximal erreichten Porenzahlen aufgrund des geringsten Porendruckanstiegs ebenfalls geringer aus als in den beiden anderen Simulationen. Insgesamt wird eine maximale Porenzahl in Bezugspunkt 4 in Höhe von etwa 6,3 % mit einer Diskretisierung durch sieben Elemente erzielt. Die Tiefenlage der jeweiligen BZEs ist Kapitel 6.4.3 zu entnehmen.

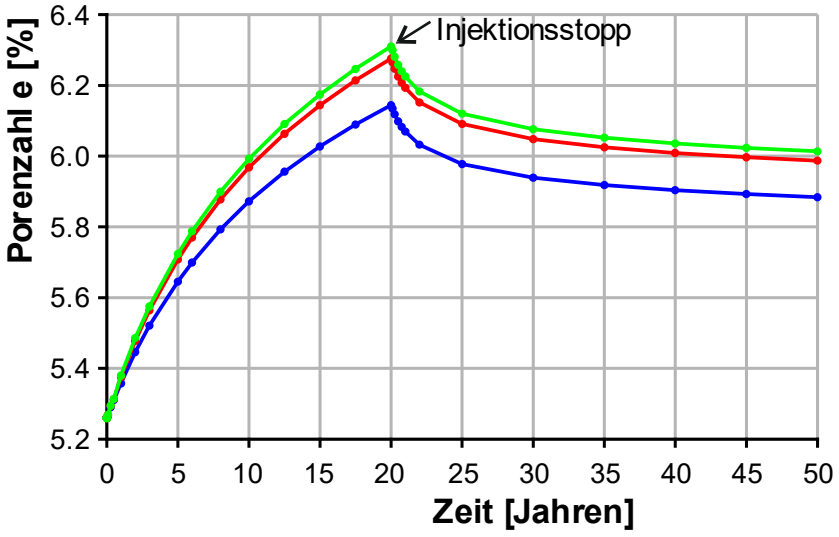


Bild 7.10 M1: Vergleich der zeitlichen Porenzahlentwicklung e(t) in BZE 4 zur Quantifizierung des Einflusses der Störungsdiskretisierung.

7.4.2. Ermittlung der Anwendungsgrenzen einer Basissimulation

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Parameterstudien P1, P2, P3, P6 und P7 aus Untersuchungsreihe 1 präsentiert, um zu überprüfen, ob die e(p_{ref})-Kurven einer Basissimulation in Bezug auf die untersuchten Materialparameter oder Randbedingungen invariantes Verhalten aufweisen. Sollte dies der Fall sein, so ist es möglich, die Anwendbarkeit einer einzelnen Basissimulation auf diese Parameter auszuweiten und somit die Effizienz des semi-analytischen Ansatzes gegenüber einer Zweiwegkopplung zusätzlich zu erhöhen.

Wie Tabelle 7.1 zu entnehmen ist, wurde hierzu in einweggekoppelten Simulationen der Reibungswinkels φ in P1 zu 22,5°, 25° und 35°, der Initialspannungszustand σ'_h/σ'_v in P2 zu 0,45, 0,55 und 0,65, der Dilatanzwinkel ψ in P3 zu 10°, 15° und 20° definiert. Zudem wurde in zweiweggekoppelten Simulationen in P6 ein Dilatanzwinkel in Höhe von 10°, 15° und 20° und in P7 ein Sensitivitätsexponent n von 10, 15 und 20 untersucht.

Exemplarisch für den Bezugspunkt 4 sind die Ergebnisse für P1 in Bild 7.11, für P2 in Bild 7.12, für P3 in Bild 7.13, für P6 in Bild 7.14 und für P7 in Bild 7.15 dargestellt. Es zeigen sich in allen Simulationen die bereits in Kapitel 5.3.2 beschriebenen charakteristischen e(p_{ref})-Verläufe und die in Kapitel 7.3 erläuterten Prozesse. Die Lage von Bezugspunkt 4 ist Bild 6.9 auf Seite 124 zu entnehmen. Nach einer anfänglichen Phase mit relativ geringen rein elastischen Deformationen, geht die Kurve in einen unter α_1 geneigten steileren Bereich über, der durch das Auftreten von plastischen Deformationen gekennzeichnet ist.

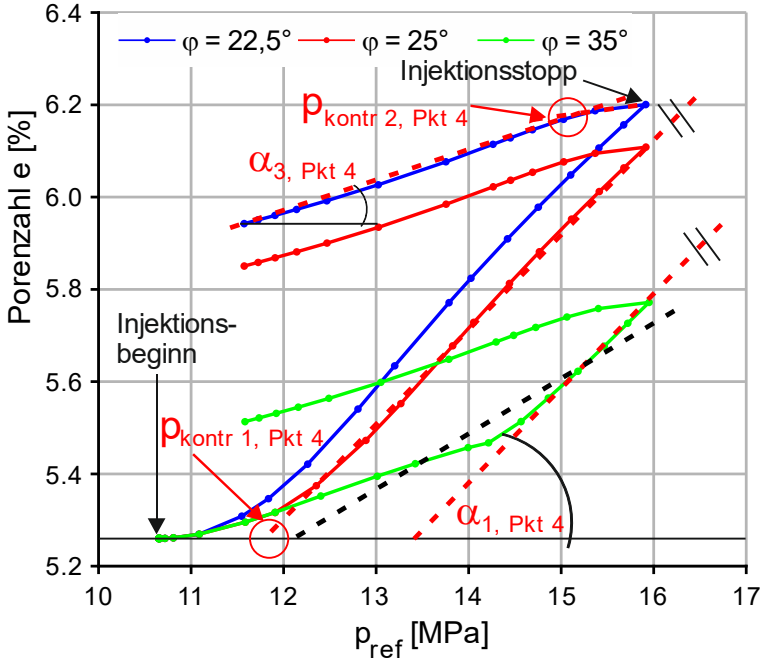


Bild 7.11 M1P1: Einfluss des Reibungswinkels φ der Störung auf den e(p_{ref})-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelten Linien stellen lineare Approximationen der jeweiligen Kurvenabschnitte dar, wobei die schwarz gestrichelte Linie exemplarisch den bilinearen ansteigenden Ast für φ = 35° durch die Methode der kleinsten Quadrate linear annähert.

Nach Injektionsstopp reduziert sich die Porenzahl mit sinkendem Referenzporendruck wieder. In dieser Phase treten, wie in Kapitel 7.3 erläutert, ausschließlich elastische Verformungen auf. Dieser Prozess findet anfänglich unter einem relativ flachen Winkel α_2 statt. Nach Erreichen des Kontrollporendrucks $p_{kontr\,2}$ verläuft der fallende Ast unter α_3 geneigt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurde auf die Darstellung des Winkels α_2 verzichtet. Die gestrichelten Linien in allen beschriebenen Bildern stellen Linearisierungen der jeweiligen Kurvenabschnitte dar. Diese sind exemplarisch für einzelne Kurven dargestellt.

Da die Porenzahlentwicklungen von allen BZEs auf denselben Referenzporendruck bezogen werden, nehmen die $e(p_{ref})$-Kurven für BZEs, in denen größere Deformationen aufgetreten sind, generell einen steileren Verlauf an, was sich wiederum in größeren α_1 Winkeln ausdrückt (vgl. Anhang D).

Für alle drei Simulationen von M1P1 ist in Bild 7.11 zu beobachten, dass eine Variation des Reibungswinkels ausschließlich zu einer Veränderung des Parameters $p_{kontr\,1}$ führt, während die Parameter α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\,2}$ für alle Reibungswinkel identisch bleiben, was sich durch einen parallelen Verlauf der jeweiligen Kurvenabschnitte zeigt (rot gestrichelte Linien). Da ein höherer Reibungswinkel erst nach Auftreten eines höheren Porendrucks zu einem Erreichen der Grenzzustandsbedingung führt, verschiebt sich die gesamte Kurve nach rechts. Ein hierdurch verspätet eintretender Plastifizierungsbeginn führt zu geringeren plastischen Dehnungen, was wiederum mit einer geringeren Zunahme der Porenzahl einhergeht. Des Weiteren führt die später einsetzende Plastifizierung im Fall der grünen Kurve zu höheren anfänglichen elastischen Verformungen, was sich in einem bilinearen Verlauf des ersten ansteigenden Astes ausdrückt.

Eine lineare Approximation in Form einer Tangente an den unter α_1 ansteigenden Ast führt, wie in Bild 7.11 zu sehen, für niedrige Reibungswinkel (blaue und rote Kurve), für die nur geringe anfängliche elastische Verformungen auftreten, zu einer zufriedenstellenden Näherung des Anfangsbereichs (Bestimmtheitsmaß $R^2 = 0{,}99$). Im Fall eines hohen Reibungswinkels von $\varphi = 35°$ würde eine solche Approximation jedoch dazu führen, dass erst ab einem $p_{kontr\,1}$ von etwa 13,4 MPa eine Aktualisierung der Porenzahl stattfindet. Hierdurch wird die Porenzahlentwicklung im Vergleich zur approximierten Kurve (grüne Kurve) bereits um 0,2 % Prozentpunkte unterschätzt. Um auch bilineare Verläufe des ansteigenden Astes abbilden zu können, wird dieser Bereich im Rahmen des semi-analytischen Ansatzes wie in Kapitel 5.3.2 definiert, durch die Methode der kleinsten Quadrate angenähert. Exemplarisch ist für die grüne Funktion in Bild 7.11 eine solche Approximation durch die schwarz gestrichelte Linie dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass sich die auftretenden Abweichungen hierdurch erheblich verringern lassen, was mit einer geringeren Neigung α_1 und einem von 13,4 auf 12,1 MPa reduzierten $p_{krit\,1}$ einhergeht. Durch diese Approximationsmethode wird ein Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0{,}944$ erreicht.

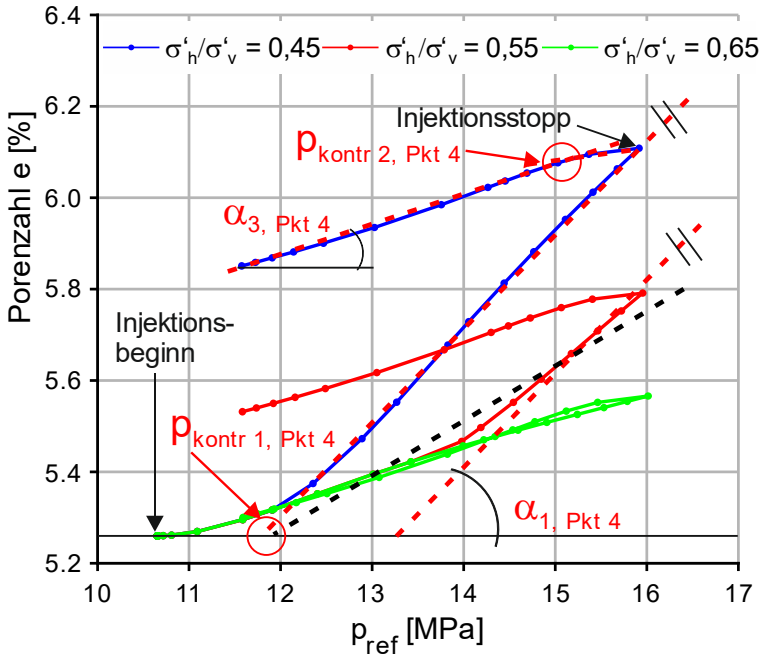


Bild 7.12 M1P2: Einfluss des Initialspannungszustandes auf den e(p_{ref})-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelten Linien stellen lineare Approximationen der jeweiligen Kurvenabschnitte dar, wobei die schwarz gestrichelte Linie exemplarisch den bilinearen ansteigenden Ast für $\varphi = 35°$ durch die Methode der kleinsten Quadrate linear annähert.

Da es sich im Fall von M1P1, M1P2 und M1P3 um einweggekoppelte Simulationen handelt, führt die entfallende Aktualisierung der Permeabilität für jeweils alle drei Simulationen zu einem nahezu identischen Porendruckanstieg in Höhe von 16,0 MPa. Ein Vergleich zwischen Tabelle 6.5 und Tabelle 7.1 zeigt, dass die für die Ermittlung der roten Kurve in Bild 7.11, der blauen Kurve in Bild 7.12 und der grünen Kurve in Bild 7.13 verwendeten Parametrisierungen alle der Basisparametrisierung entsprechen und die Kurven folglich identisch verlaufen.

In Bild 7.12 zeigt sich für M1P2, dass ein höherer Initialspannungszustand ebenfalls, wie bereits in M1P1 gezeigt, ausschließlich zu einer verzögerten Plastifizierung führt, was sich erneut ausschließlich in einem veränderlichen $p_{kontr\,1}$ wiederspiegelt. Die Neigungen α_1, α_2 und α_3 und $p_{kontr\,2}$ bleiben hiervon erneut unberührt.

Ein Seitendruckbeiwert in Höhe von 0,55 führt im ansteigenden Ast zu einem bilinearen Verlauf, während ein Beiwert von 0,65 ausschließlich elastische Verformungen bewirkt, was sich durch einen flacheren linearen Verlauf des ansteigenden Astes ausdrückt. Durch eine Näherung mit der Methode der kleinsten Quadrate weisen die Neigungen α_1 jedoch für alle Kurven abweichende Neigungen auf. Die lineare Approximation der roten Kurve weist hierbei ein Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0{,}977$ auf. Aufgrund des linear-elastischen Materialverhaltens ist die Neigung α_1 der grünen Kurve identisch mit α_3. Da für das Szenario mit einem Seitendruckbeiwert von 0,45 Plastifizierung ab dem niedrigsten Porendruckdruckniveau einsetzt, sind in diesem Fall die größten Porenzahlerhöhungen zu beobachten.

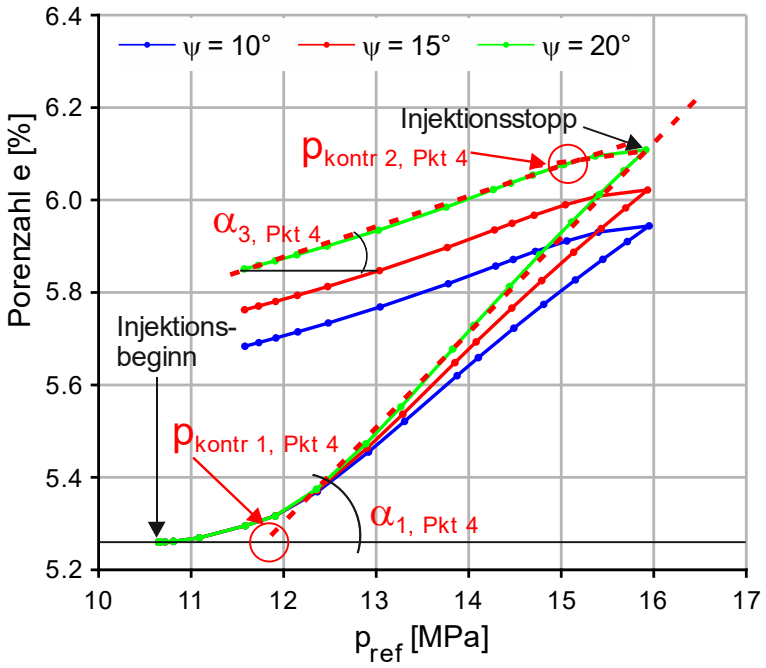


Bild 7.13 M1P3: Einfluss des Dilatanzwinkels ψ der Störung auf den e(p_{ref})-Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

Wie in Bild 7.13 zu erkennen ist, beeinflusst eine Variation des Dilatanzwinkels lediglich die Neigung α_1 des ansteigenden Astes, während die restlichen Parameter des semi-analytischen Ansatzes von dieser Variation unberührt bleiben. Dieses Verhalten begründet sich dadurch, dass die Plastifizierung in allen Simulationen mit einem identischen $p_{kontr\,1}$ von etwa 11,9 MPa beginnt und die Bereiche des Entlastungsastes parallel verlaufen. Durch den unterschiedlichen Dilatanzwinkel starten diese in jedem Szenario lediglich von einem unterschiedlich hohen Ausgangsniveau, weshalb die unter α_2 und α_3 geneigten Kurven ausschließlich in vertikaler Richtung verschoben sind. Weil in allen Simulationen von M1P3 für die Parametrisierung ein φ von 25° und ein Seitendruckbeiwert von 0,45 verwendet worden sind, treten entsprechend der mit diesen Parametern erzielten Ergebnisse aus M1P1 und M1P2 aufgrund der frühzeitigen Plastifizierung keine bilinearen Verläufe des ansteigenden Astes auf.

Wie in Bild 7.14 und Bild 7.15 zu erkennen, zeigen die Ergebnisse der zweiweggekoppelten Simulationen im Vergleich zu den Ergebnissen der Einwegkopplung generell einen geringeren maximalen Porendruckanstieg. Angesichts der hierbei durchgeführten Anpassung der Permeabilität ist entsprechend Bild 7.14 für den geringsten Dilatanzwinkel in Höhe von 10° für die drei durchgeführten Simulationen der höchste Porendruckanstieg in Höhe von etwa 15,2 MPa zu verzeichnen. Des Weiteren zeigt sich, dass der Dilatanzwinkel, wie bereits zuvor im Fall von M1P3, ausschließlich die Neigung von α_1 beeinflusst, während die anderen Parameter hiervon unbeeinflusst bleiben.

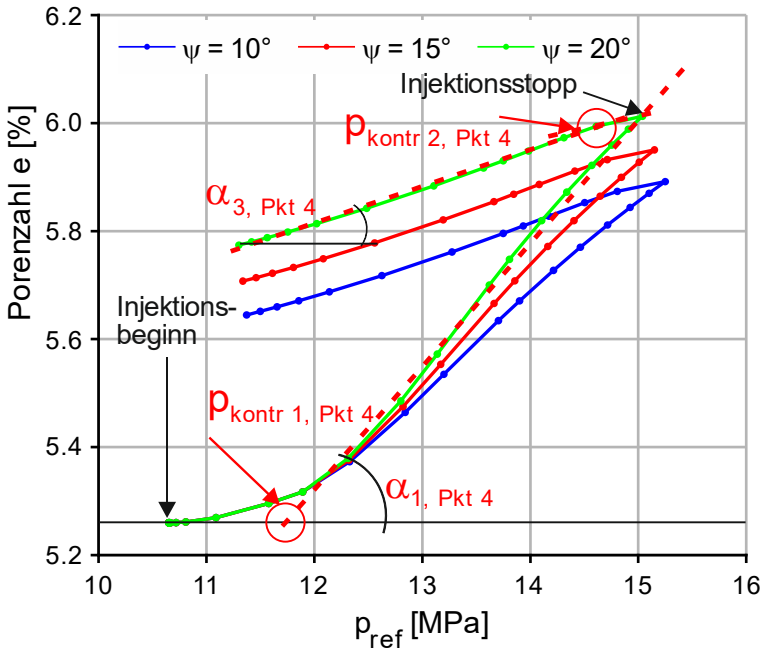


Bild 7.14 M1P6: Einfluss des Dilatanzwinkels ψ der Störung auf den e(p_{ref})-Kurvenverlauf von zweiweggekoppelten Simulationen in BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

Aufgrund der identischen Parametrisierung, zeigen die grüne Kurve in Bild 7.14 und die blaue Kurve in Bild 7.15 identische Verläufe. Im Fall von M1P7 weist die Parametervariation, die zu dem geringsten Permeabilitätsmultiplikator zur Anpassung der Permeabilität führt, ebenfalls den höchsten maximalen Porendruckanstieg im Referenzelement auf. Für die hier untersuchten Parameter ergibt sich eine Bandbreite zwischen 14,2 und 15,0 MPa. Dennoch liegen alle drei Referenzporendrücke unterhalb der mit einer Einwegkopplung in M1P1, M1P2 und M1P3 erzielten Werte. Die semi-analytische Parametrisierung, insbesondere die α_1-Neigungen in Bild 7.15 zeigen jedoch in Bezug auf die Variation des Sensitivitätsexponenten deutlich invariantes Verhalten. Dies zeigt sich dadurch, dass alle Kurven im ansteigenden Pfad übereinanderliegen, beziehungsweise im Postinjektionsbereich parallel verlaufen. Unter Verweis auf die in Anhang D dargestellten Ergebnisse aller BZEs ist jedoch darauf hinzuweisen, dass es in höher gelegenen BZEs der Störung dennoch zu Abweichungen von dem beobachteten invarianten Verhalten kommt. Ein direkter Vergleich zwischen den jeweiligen Kurvenverläufen für n = 10 und n = 20 zeigt für Bezugspunkt 1 (-570 m) gering unterschiedliche Neigungen, die zwischen beiden Kurven zu einer maximalen Porenzahlabweichung von ungefähr 0,05 Prozentpunkten führen.

Die verwendete Zweiwegkopplung bewirkt zudem einen leicht nicht-linearen Kurvenverlauf der e(p_{ref})-Funktionen im ansteigenden Ast. Dies führt zu einem Abflachen der Kurvenverläufe, wodurch die Zuwachsraten der Porenzahl mit ansteigendem Referenzporendruck geringer ausfallen.

Unter Verweis auf den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten exponentiellen Ansatz zur Anpassung der Permeabilität (vgl. Gleichung (4.68)) und auf die in BZE 1 eher gering ausfallenden Porenzahlerhöhungen, führt diese Differenz nur zu äußerst geringen Abweichungen

zwischen den Permeabilitätsmultiplikatoren. Deshalb wird die beobachtete Abweichung als vernachlässigbar eingestuft.

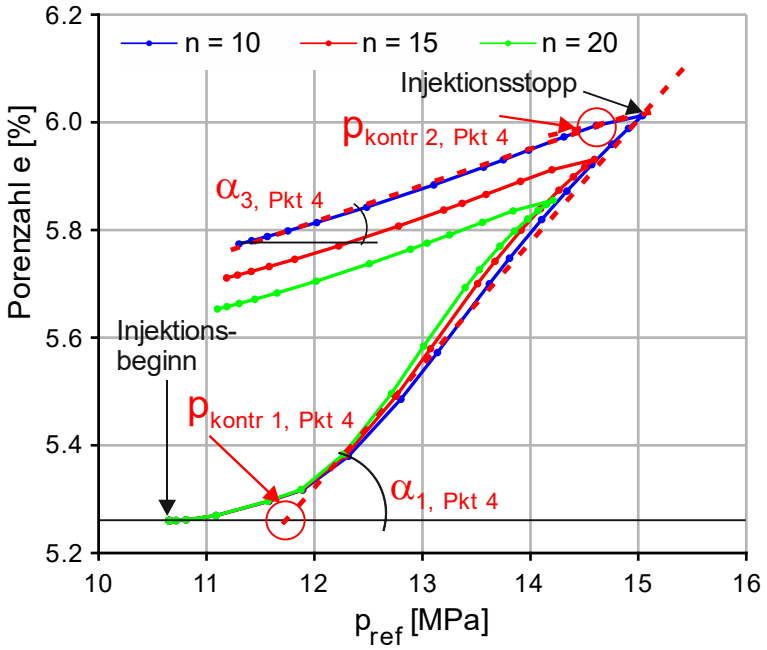


Bild 7.15 M1P7: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von zweiweggekoppelten Simulationen zeigen invariantes Verhalten in Bezug auf den Sensitivitätsexponenten n. Hier exemplarisch für BZE 4. Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

7.4.3. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 1

Zur Validierung von Hypothese 1 werden als Nächstes Ergebnisse von einweggekoppelten Simulationen präsentiert, die entsprechend Tabelle 7.1 vier unterschiedliche Injektionsraten berücksichtigen und für die Modellvariationen M1, M7 und M9 durchgeführt worden sind. Hierbei wurden für M1 und M7 eine initiale Störungspermeabilität in Höhe von 5 x 10^{-16} und 5 x 10^{-15} m² verwendet, wohingegen im Zusammenhang mit M9 ausschließlich eine von 5 x 10^{-16} m² untersucht wurde.

Die mit der geringeren Permeabilität von k = 5 x 10^{-16} m² ermittelten Ergebnisse sind für M1P5 in Bild 7.16, für M7P5 in Bild 7.18 und für M9P5 in Bild 7.21 dargestellt, wohingegen die mit der höheren Permeabilität (5 x 10^{-15} m²) erzielten entsprechend für M1P5 in Bild 7.17 und für M7P5 in Bild 7.19 abgebildet sind. Es werden die Ergebnisse von fünf Simulationsreihen vorgestellt, bei denen die jeweiligen e(p_{ref})-Kurven exemplarisch für jeweils zwei Bezugspunkte erläutert werden. Die Bezugspunkte wurden so gewählt, dass sich beide in allen drei Modellvariationen ungefähr in der gleichen Tiefe befinden. Hierbei zeigen die rechten Graphen die Ergebnisse eines 950 m tief und etwa 50 m oberhalb des Reservoirs gelegenen Bezugselementes. Das BZE der linken Abbildungen ist in einer Tiefe von etwa 570 m zu verorten, wobei es sich in den Modellvariationen M1 und M7 circa 70 m unterhalb des oberen und in M9 unterhalb des dritten GWL befindet. Die genaue Lage der BZEs ist für M1 in Bild 6.9, für M7 in Bild 6.10 und für M9 in Bild 6.11 auf

den Seiten 124 bis 126 dargestellt. Aufgrund ihrer jeweiligen Lage innerhalb der Störung stellen beide BZEs Schlüsselelemente dar. Während das tiefergelegene den Fluidfluss aus dem Reservoir in die Störung hinein steuert, beeinflusst der hydromechanische Response des höher gelegenen den Fluidfluss aus der Störung in einen höhergelegenen GWL, in den die Störung entwässert. Alle Kurven zeigen erneut den zuvor in Kapitel 5.3.2 beschrieben charakteristischen e(p_{ref})-Verlauf. Zudem werden auch in diesem Fall die in Kapitel 7.3 beschriebenen Prozesse beobachtet.

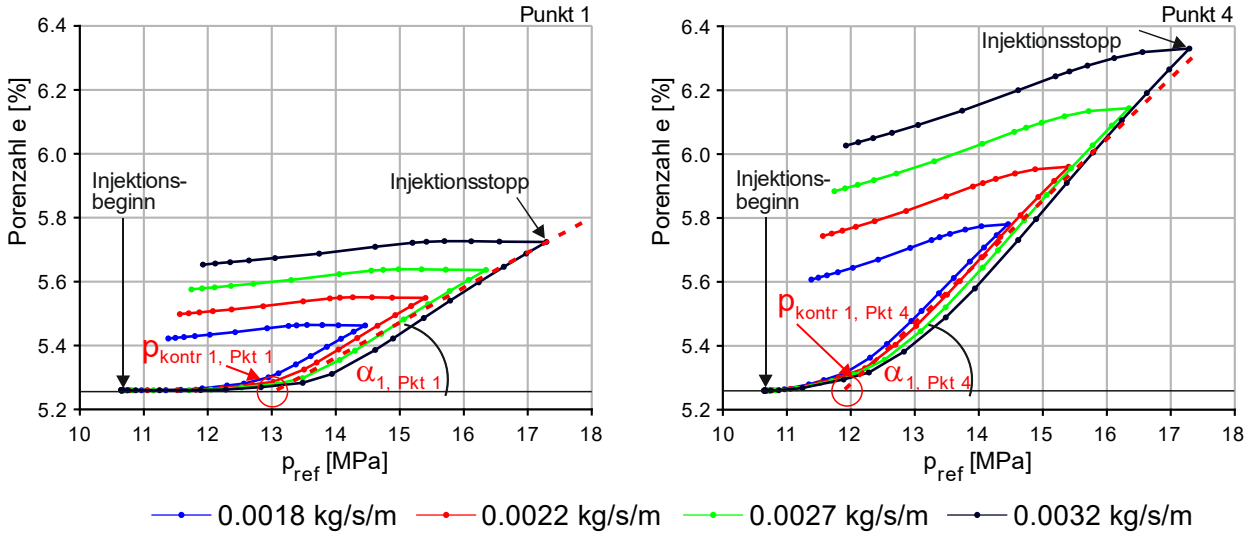


Bild 7.16 M1P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für die BZEs 1 und 4 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

Bild 7.16 zeigt die Ergebnisse, die mit einer initialen Störungspermeabilität von 5 x 10^{-16} m² erzielt worden sind. Die dargestellten Kurven weisen für die höchste Injektionsrate einen maximalen Porendruckanstieg im Referenzelement in Höhe von 17,2 MPa auf. Dies geht mit maximalen Porenzahlerhöhungen in in BZE 1 auf 5,7 % und in BZE 4 auf 6,35 % einher. Es ergeben sich in den jeweiligen BZEs für alle Injektionsraten identische Parameter α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$, was sich darin äußert, dass sowohl die Kurvenbereiche der Injektions- als auch der Postinjektionsphase jeweils gleich geneigt verlaufen. Zudem startet in allen vier Fällen der unter α_1 geneigte ansteigende Ast ab einem gleich hohen Referenzporendruck von $p_{kontr\ 1}$. In BZE 4 beträgt dieser 11,9 MPa, wohingegen sich dieser in BZE 1 auf 13,1 MPa beläuft. Die gestrichelten roten Linien stellen den Verlauf des mithilfe der Methode der kleinsten Quadrate linearisierten ansteigenden Funktionsbereichs der mit der höchsten Injektionsrate generierten Funktionen (schwarze Kurven) dar. Im höhergelegenen GWL sind für alle vier Injektionsraten keine Porendruckerhöhungen aufgetreten.

Die Ergebnisse für eine initiale Permeabilität von 5 x 10^{-15} m² in Bild 7.17 stellen sich qualitativ identisch wie bei den zuvor beschriebenen dar, wohingegen aufgrund der geringeren initialen Permeabilität die maximal erzielten Porendrücke in Höhe von 14,7 MPa geringer ausfallen. Entsprechend geringer ist der maximale Porenzahlanstiege nur 5,9 %. Für α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ zeigt sich in Bezug auf die verwendete Injektionsrate erneut invariantes Verhalten.

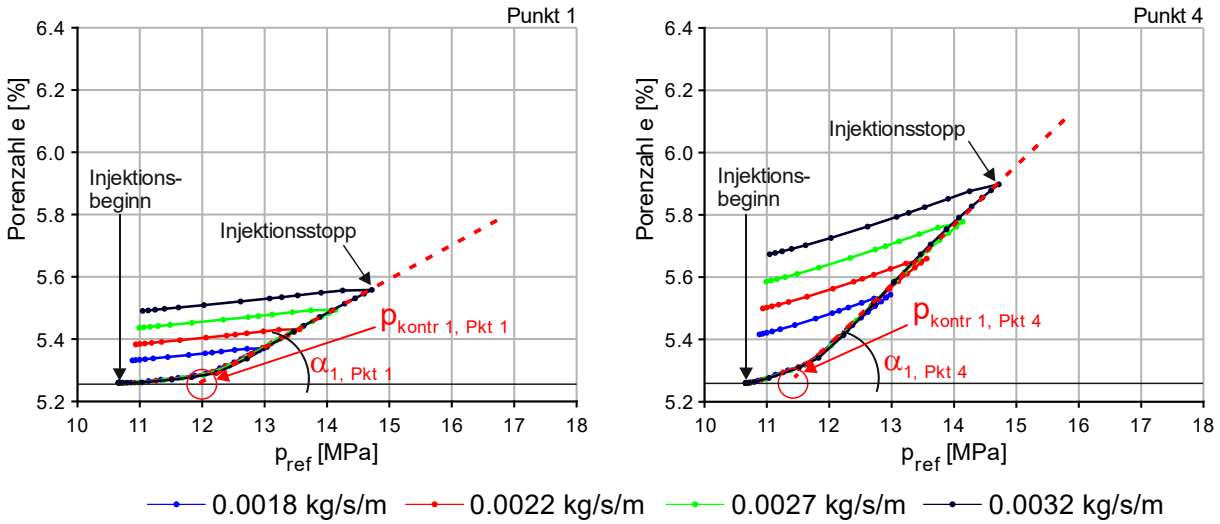


Bild 7.17 M1P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 1 und 4 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

Bild 7.18 und Bild 7.19 zeigen die Ergebnisse für M7P5 unter Berücksichtigung einer Permeabilität von k = 5 x 10^{-16} m² beziehungsweise von k = 5 x 10^{-15} m². Für die geringere Permeabilität ist im Fall der höchsten Injektionsrate ein maximaler Porendruck im Referenzelement von 18,3 MPa aufgetreten, wohingegen sich dieser unter Verwendung der höheren Permeabilität auf 15,8 MPa beläuft. Entsprechend ergeben sich maximale Porenzahlen von 6,5 % beziehungsweise von 6,4 % für Bezugspunkt 6 und von 5,9 % beziehungsweise 6,2 % für BZE 4.

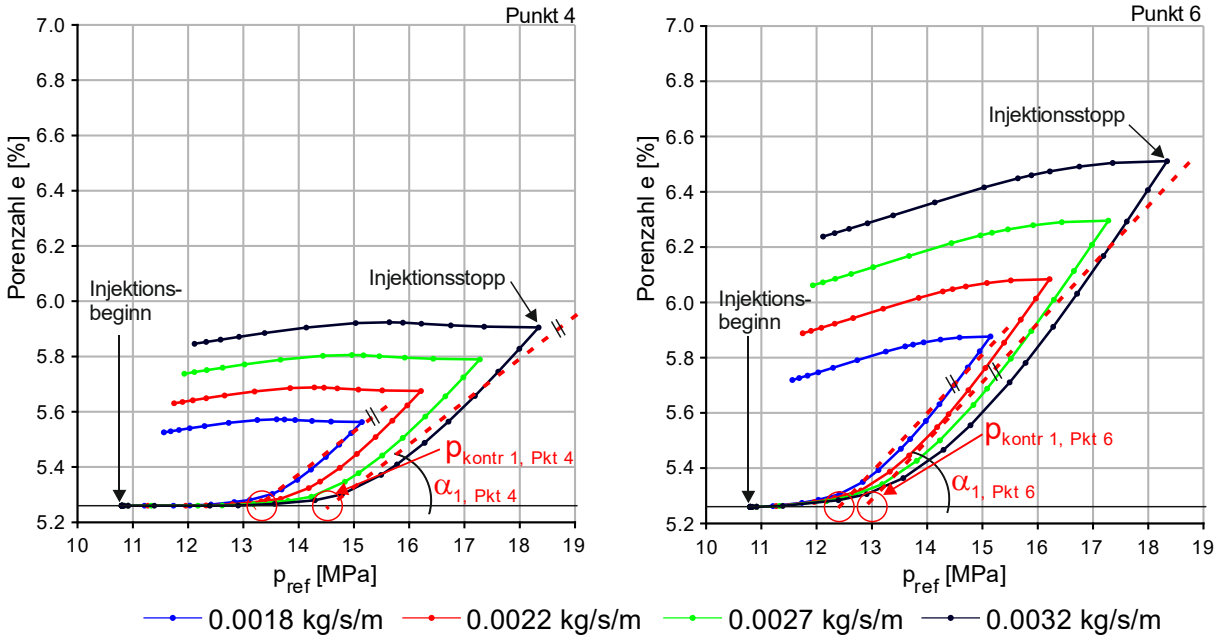


Bild 7.18 M7P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 ($R^2 \leq 0{,}95$) und 6 ($R^2 \geq 0{,}95$) zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate nur eingeschränkt invariantes Verhalten. Die rot gestrichelten Linien stellen hierbei jeweils eine Linearisierung des ansteigen Astes der blauen und der schwarzen Graphen dar.

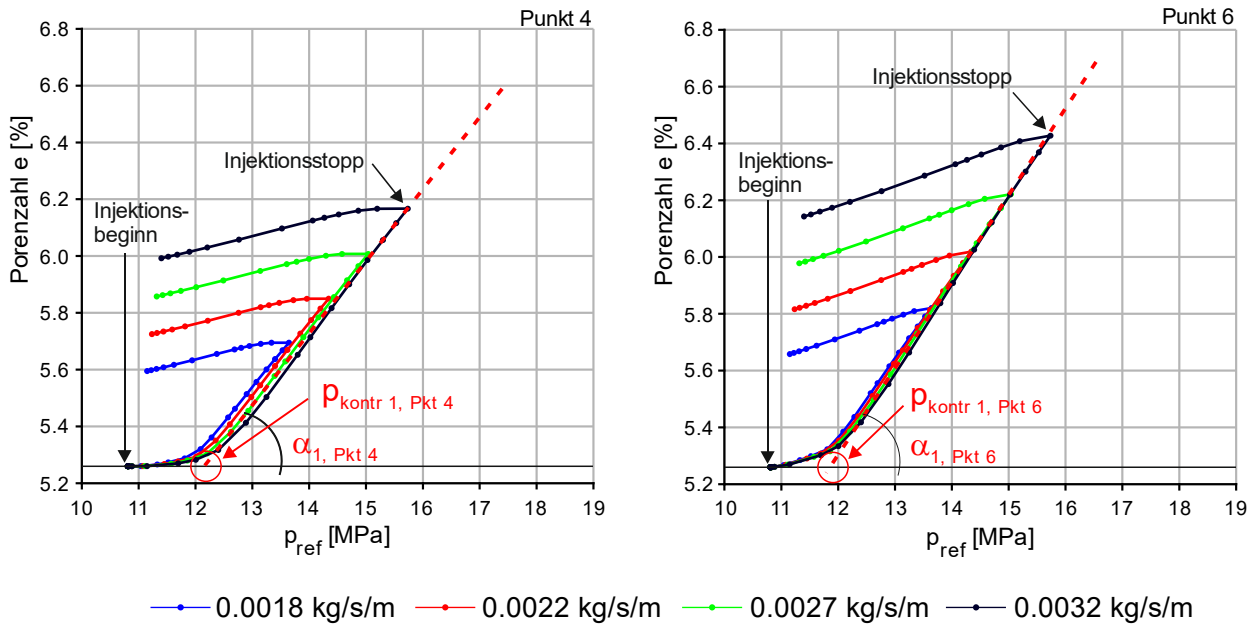


Bild 7.19 M7P5: Die e(p_{ref})-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 und 6 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung der ansteigen Äste dar.

Dieser vermeintliche Widerspruch bezüglich der zu beobachtenden geringen Porenzahldifferenzen zwischen beiden Szenarien mit der höchsten Injektionsrate in Höhe von 0,1 Prozentpunkten für BZE 6 und 0,3 Prozentpunkten für BZE 4 und der relativ hohen Porendruckdifferenz im Referenzelement in Höhe von 2,5 MPa lässt sich durch den Einfluss der unterschiedlich hohen initialen Störungspermeabilität erklären. Hierzu stellt Bild 7.20 einen Vergleich zwischen den mit beiden Permeabilitäten und jeweils einer maximalen Injektionsrate ermittelten zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZE an.

Die mit einer Permeabilität von 5 x 10^{-15} m² erzielten Ergebnisse sind durch rote, die mit einer von 5 x 10^{-16} m² erzielten durch schwarze Linien dargestellt. Zur besseren Orientierung sind die beiden Porendruckentwicklungen von BZE 7 (Punkt 7), das sich in der Tiefe des Reservoirs befindet, abweichend gestrichelt dargestellt. Obwohl für die Simulation mit der geringeren Permeabilität um 2,6 MPa höhere Porendrücke im Reservoir auftreten, fallen die Porendrücke in den Bezugspunkten 1 bis 5 im Fall der höheren Permeabilität um teilweise bis zu 1,3 MPa höher aus, während für die geringere Permeabilität teilweise so gut wie keine Porendruckanstiege in diesen BZEs beobachtet werden. Dieser Effekt lässt sich auf die höhere hydraulische Leitfähigkeit zurückführen, die dem verdrängten Fluid weniger Widerstand entgegen setzt, weshalb sich der Porendruck schneller über eine größere Entfernung ausbreiten kann. Diese Porendruckverteilungen gehen mit Porendruckanstiegen in GWL 1 um 0,55 MPa respektive 1,42 MPa einher. Dieses beobachtete Verhalten wird auch, wie detailliert in Kapitel 4.1 geschildert, von Jeanne et al. (2016), Mbia et al. (2014) und Tillner et al. (2013) beschrieben.

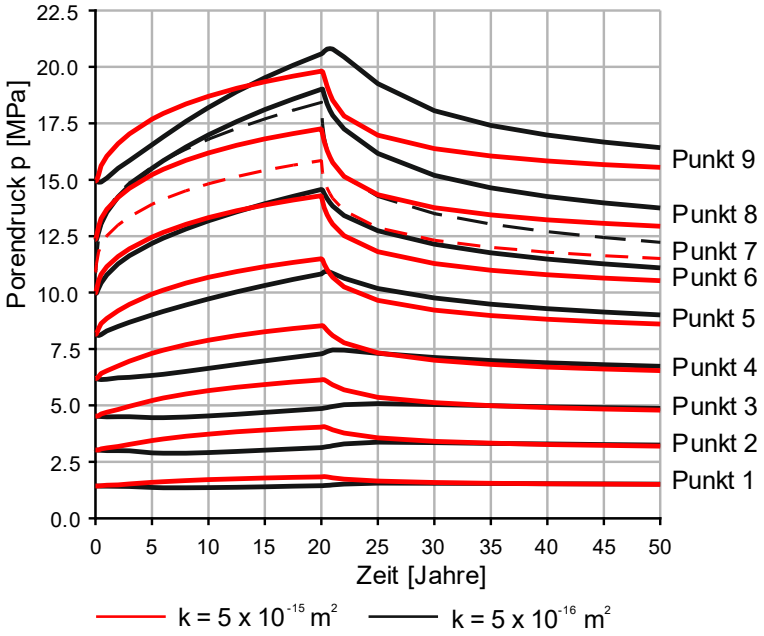


Bild 7.20 M7P5: Die Abweichungen der zeitlichen Entwicklung des Porendrucks in den BZEs (Punkt 1 bis 9) verdeutlichen den großen Einfluss der initialen Permeabilität auf die Porendruckentwicklung.

Die zusätzlichen Porendrücke in den höhergelegenen Störungsbereichen (Bezugspunkte 1 bis 5) führen des Weiteren zu einer zusätzlichen Verringerung der dort wirkenden effektiven Spannungen. Hieraus resultieren zusätzliche plastische volumetrische Dehnungen, wodurch sich wiederum die höheren Porenzahlentwicklungen erklären. Ein Vergleich aller in Anhang D dargestellten Ergebnisse von Parameterstudie P5 zeigt, dass dieser Effekt für sämtliche höher gelegenen Bezugspunkte zu beobachten ist. Insbesondere für Bezugspunkt 1 zeigt sich, dass die maximale Porenzahl trotz eines vergleichbaren Porendruckanstiegs um etwa 0,2 Prozentpunkte höher ausfällt. Dieser Effekt lässt sich wiederum auf zusätzliche Spannungsumlagerungen aus tiefergelegenen Störungsbereichen aufgrund des zusätzlichen Porendrucks zurückführen.

In Bild 7.18 wurde der erste Anstieg der $e(p_{ref})$-Funktion von BZE 4 (Punkt 4) und 6 (Punkt 6) sowohl für die höchste als auch für die geringste Injektionsrate linear approximiert. Beide resultierenden Geraden weisen dieselbe Neigung α_1 auf, jedoch unterschiedliche Werte für $p_{kontr\,1}$. Während der Kontrollporendruck im Fall von BZE 4 für die geringste Injektionsrate 13,2 MPa beträgt, liegt dieser für die Simulation mit der höchsten Injektionsrate bei 14,5 MPa. Diese Differenz führt dazu, dass zwischen beiden Kurven in vertikaler Richtung eine Porenzahldifferenz von 0,25 Prozentpunkten zu verzeichnen ist. Eine Approximation der $e(p_{ref})$-Funktionen aller Injektionsraten mit der semi-analytischen Parametrisierung der höchsten, führt dazu dass die Kurven der beiden höchsten Injektionsraten beide ein Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0{,}99$ aufweisen, während die der geringsten lediglich mit einem von $R^2 = 0{,}42$ abgebildet werden kann. Aufgrund dieser stark abweichenden Bestimmtheitsmaße stellt sich der Kontrollporendruck $p_{kontr\,1}$ dieses BZE in Bezug auf die Injektionsrate als variant dar. Bezüglich BZE 6 lassen sich die ansteigenden Pfade aller Injektionsraten durch die Parametrisierung mit der höchsten mit einem

Bestimmtheitsmaß von $R^2 \geq 0{,}95$ annähern. Die in Bild 7.19 dargestellten $e(p_{ref})$-Kurven für eine Permeabilität von 5×10^{-15} m² zeigen wieder uneingeschränkt invariantes Verhalten für alle BZEs.

Obwohl für die Ermittlung der in Bild 7.16 und Bild 7.18 dargestellten Kurvenverläufe sowohl eine identische Störungspermeabilität (5×10^{-16} m²) als auch eine gleiche Mächtigkeit des oberhalb des Reservoirs gelegenen Barrieregesteins (500 m) verwendet wurden, weisen die Grafen von M7P5 größere Abweichungen von der linearen Approximation auf als die in Bild 7.16 abgebildeten.

Bild 7.21 zeigt die $e(p_{ref})$-Verläufe für die Simulationsreihe M9P5. Neben einem maximalen Porendruckanstieg im Referenzelement auf 17,0 MPa und einer damit einhergehenden Porenzahl von etwa 6,3 % ist in Bezug auf die Injektionsrate in allen BZEs invariantes Verhalten der $e(p_{ref})$-Verläufe zu verzeichnen. Die Bestimmtheitsmaße betragen in allen BZEs $R^2 \geq 0{,}95$. Jedoch sind für die oberhalb von Bezugspunkt 7 gelegenen Bereiche geringe Abweichungen von der linearen Approximation zu verzeichnen. Hierbei weist Bezugspunkt 4 im Fall der geringsten Injektionsrate (blaue Kurve) die höchsten beobachteten Abweichungen in Höhe von 0,1 Prozentpunkten auf. Abschließend ist festzuhalten, dass in allen untersuchten Szenarien kein invariantes Verhalten für den Parameter $p_{kontr\,2}$ festzustellen ist.

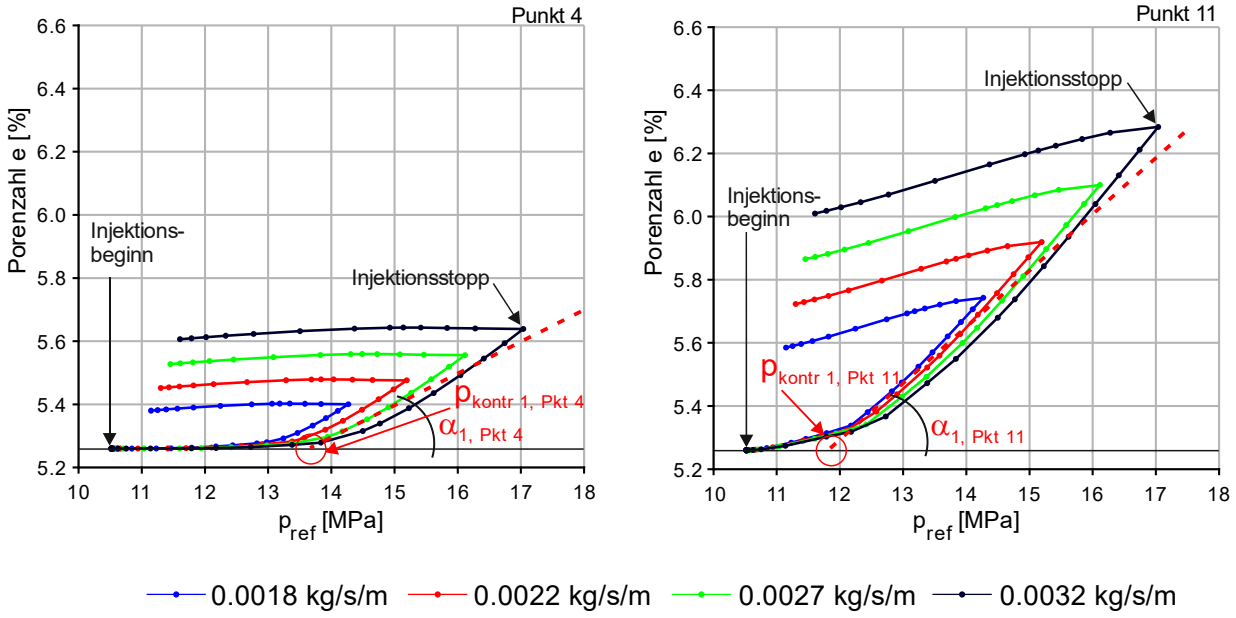


Bild 7.21 M9P5: Die $e(p_{ref})$-Kurvenverläufe von einweggekoppelten Simulationen für BZE 4 und 11 zeigen unter Verwendung einer Störungspermeabilität von 5×10^{-16} m² in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten ($R^2 \geq 0{,}95$). Die rot gestrichelte Linie stellt hierbei eine Linearisierung des ansteigen Astes dar.

7.4.4. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 2

Die nachfolgend präsentierten Ergebnisse von hydromechanisch einweggekoppelten Simulation, bei denen die initiale Störungspermeabilität für Modellvariation M1 zwischen $2{,}5 \times 10^{-16}$ und $2{,}5 \times 10^{-14}$ m² variiert wurde, dienen zur Validierung von Hypothese 2. Dargestellt sind in Bild 7.22 stellvertretend für sämtliche andere Bezugspunkte die $e(p_{ref})$-Kurven der Bezugspunkte 1 und 4. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind die Ergebnisse für eine Permeabilität kleiner als $k = 10^{-15}$ m² in Grautönen hinterlegt und als durchgezogene oder gestrichelte Linien dargestellt. Die beiden rot gestrichelten Linien stellen wiederum die lineare Approximation des ansteigenden Astes während der Injektionsphase für $k = 2{,}5 \times 10^{-15}$ (linke Gerade) und $k = 2{,}5 \times 10^{-16}$ m² (rechte Gerade) dar.

Für diese Simulationsreihe wurden die größten Porendruckanstiege im Referenzelement in Höhe von 16,7 MPa mit der geringsten Störungspermeabilität und die höchsten Porenzahlerhöhungen von 6,15 % mit einer Permeabilität von $5{,}0 \times 10^{-16}$ m² erzielt. Die parallel unter α_2 und α_3 geneigt verlaufenden Postinjektionsbereiche sowie die parallel verlaufenden linear approximierten Bereiche der Injektionsphase sämtlicher $e(p_{ref})$-Kurven zeigen, dass sich die Parameter α_1, α_2 und α_3 in Bezug auf unterschiedliche initiale Störungspermeabilitäten invariant verhalten. Wie in Bild 7.22 zu erkennen, werden diese Kurven jedoch, aufgrund eines varianten Kontrollporendrucks $p_{kontr\,1}$, mit größer werdender Permeabilität auf der x-Achse nach links verschoben. Dieser Wert nimmt, wie durch die rechte rot gestrichelte Linie in Bild 7.22 zu erkennen, mit der geringsten Permeabilität für BZE 4 den Wert 12,2 MPa und für BZE 1 den Wert 13,6 MPa an, um dann für Permeabilitäten von $k \geq 2{,}5 \times 10^{-15}$ m² (linke rot gestrichelte Linie) gegen 11,2 MPa beziehungsweise 11,8 MPa zu konvergieren. Folglich ist festzuhalten, dass die semi-analytische Parametrisierung für Permeabilitäten von $k \geq 2{,}5 \times 10^{-15}$ m² identisch und damit invariant ist. Durch die Verschiebung der Kurven in Abhängigkeit von $p_{kontr\,1}$ verhält sich $p_{kontr\,2}$ ebenfalls variant.

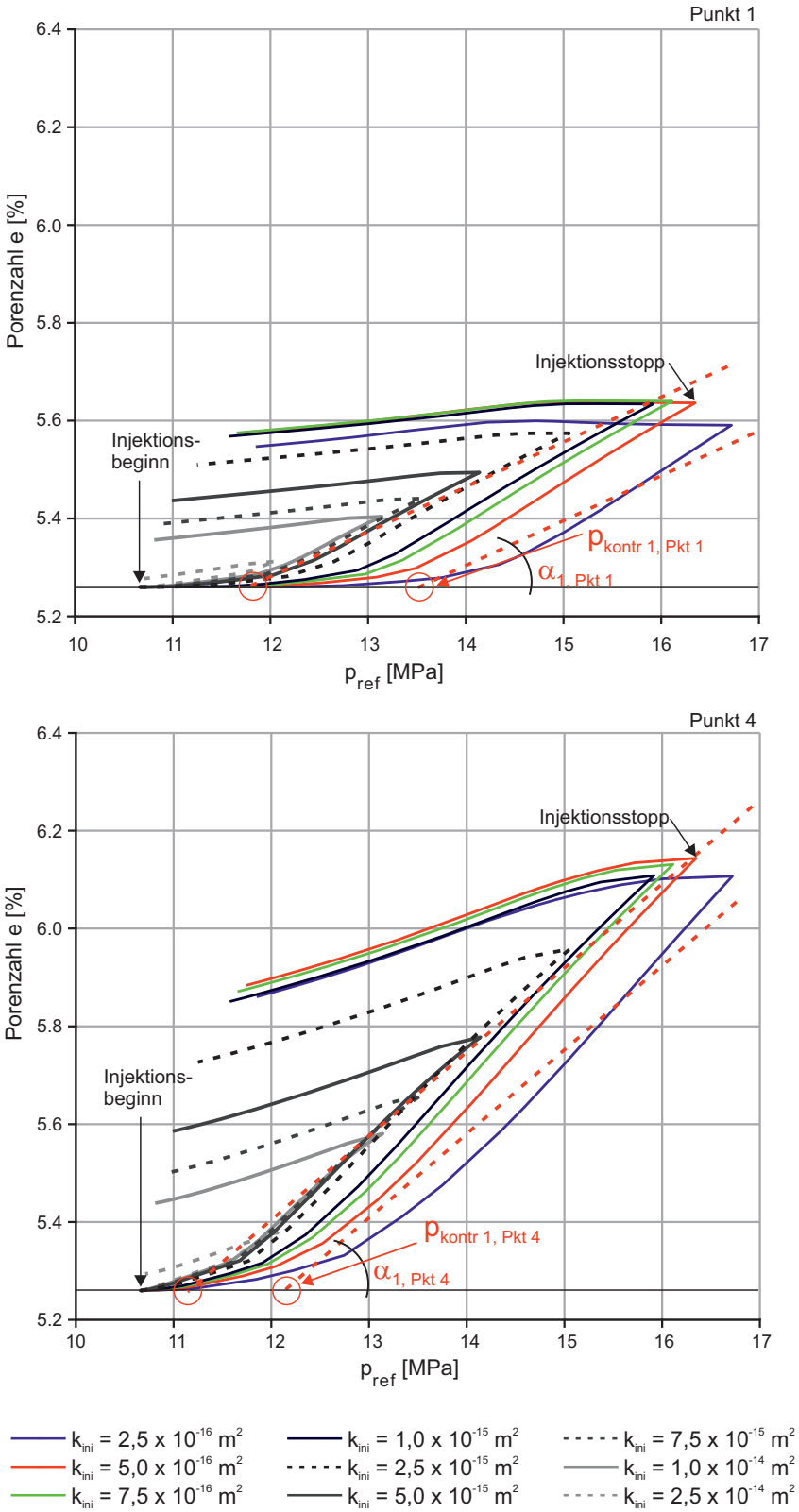


Bild 7.22 M1P4: Eine Variation der initialen Störungspermeabilität k zeigt, dass sich die Neigungen α_1, α_2 und α_3 der e(p_{ref})-Kurven invariant bezüglich dieser Größe verhalten, wobei höhere Permeabilitäten ausschließlich zu einer Verschiebung dieser Kurven um $\Delta p_{kontr\ 1}$ auf der Abszisse führen. Exemplarisch dargestellt sind die Ergebnisse von BZE 1 und 4.

7.4.5. Untersuchung zur Validierung von Hypothese 3 und 4

Die im Folgenden präsentierten Ergebnisse der Parameterstudien M1P8 und M1P9 dienen zur Validierung der in Kapitel 5.3.3 formulierten Hypothesen 3 und 4. In diesem Zusammenhang wurden die geometrische Form der qualitativ unterschiedlich verlaufenden $e(p_{ref})$-Funktionen von ein- und zweiweggekoppelten Simulationen ermittelt, indem vier unterschiedliche Injektionsraten verwendet worden sind. Während M1P8 die in Kapitel 6.4.4 definierte Basisparametrisierung verwendet, berücksichtigt M1P9 für das Liegende einen erhöhten E-Modul in Höhe von 30 GPa.

Bild 7.23 zeigt die $e(p_{ref})$-Kurven von M1P8 und Bild 7.24 die von M1P9, wobei die Ergebnisse der zweiweggekoppelten Simulationen in Grautönen dargestellt sind. Wie bereits in den vorherigen Unterkapiteln praktiziert, werden die $e(p_{ref})$-Funktionen der BZEs 1 und 4 stellvertretend für alle anderen dargestellt. Die in Bild 7.23 gezeigten Ergebnisse von zweiweggekoppelten Simulationen verwenden drei unterschiedliche initiale Permeabilitäten in Höhe von $k = 10^{-16}$, $k = 10^{-15}$ und $k = 10^{-14}$ m², wohingegen Bild 7.24 ausschließlich Ergebnisse für eine Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² enthält. Mit der höchsten Injektionsrate wurde in allen Fällen der höchste Referenzporendruck erzielt, wobei sich bei M1P8 für die geringste Permeabilität ein Wert in Höhe von 17,2 MPa, für die mittlere einer von 15,5 MPa und für die höchste einer von 13,0 MPa ergibt. Diese Anstiege gehen entsprechend mit den größten beobachteten Porenzahlerhöhungen einher.

Für M1P9 ist für die höchste Injektionsrate ein maximaler Porendruck von 18,2 MPa zu beobachten. Ein Vergleich zwischen den unter Punkt a) in Bild 7.23 dargestellten Kurven mit denen aus Bild 7.24 zeigt, dass eine Verdreifachung des E-Moduls des Liegenden in M1P9 zu einem zusätzlichen Porendruckanstieg von 1,0 MPa geführt hat. Aufgrund des höheren E-Moduls fallen, verglichen mit dem Referenzfall aus M1P8, für dieses Szenario die Porenzahlerhöhungen geringer aus. Beispielsweise zeigt ein Vergleich der Ergebnisse für Bezugspunkt 6 (siehe Anhang D) für M1P9 eine maximale Porenzahl von 5,95 %, während für M1P8 eine in Höhe von 6,4 % erreicht wird. Da es sich in beiden Fällen um Zweiwegkopplungen handelt, ist folglich die Porendruckabweichung auf die entsprechend geringere Porenzahlentwicklung für M1P9 zurückzuführen, weil sie wiederum zu einem geringeren Anstieg der Permeabilität führt. Ein Vergleich der höhergelegenen Bezugspunkte zeigt diesen Effekt in abgeschwächter Form.

Die $e(p_{ref})$-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen zeigen für beide Abbildungen einen nicht-linearen Verlauf im ansteigenden Ast, was sich durch ein Ausbauchen der Kurven äußert. Ein Vergleich der Kurven sämtlicher Bezugspunkte in Anhang D zeigt, dass dieser Effekt hauptsächlich in höhergelegenen Bezugspunkten auftritt. Zudem verstärkt er sich mit zunehmender Injektionsrate und schwächt sich, wie in Bild 7.23 zu erkennen, mit größer werdender initialer Permeabilität ab. Entsprechend sind die größten nicht-linearen Effekte für eine initiale Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m² zu verzeichnen. Das Ausbauchen der Kurven lässt sich durch die sukzessive Aktualisierung der Permeabilität und der Porosität erklären, die dazu führt, dass sich der hydraulische Widerstand permanent ändert. Dies drückt sich folglich in einer stets verändernden Neigung des ansteigenden Bereiches der Injektionsphase aus.

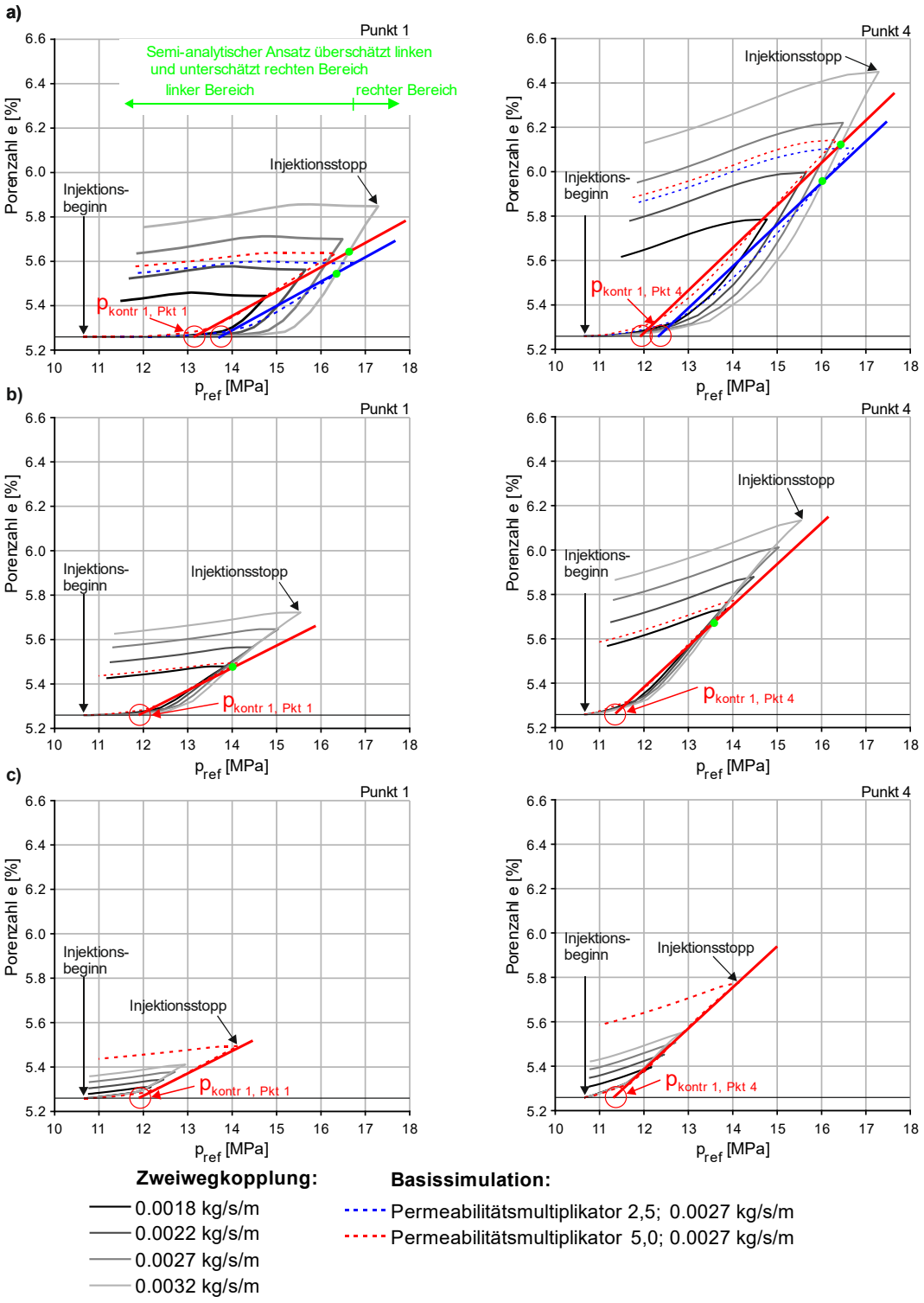


Bild 7.23 M1P8: Die grauen e(p_{ref})-Kurven veranschaulichen das nicht-lineare Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen für initiale Störungspermeabilitäten von a) k= 10^{-16} m², b) k= 10^{-15} m² und c) k= 10^{-14} m². Zwei mögliche Approximationen durch den semi-analytischen Ansatz unter Verwendung von Permeabilitätsmultiplikatoren in der Basissimulation zeigen für einen Faktor 2,5 die blau gestrichelten und für einen von 5 die rot gestrichelten Linien. Abweichend wurde die Approximation von c) durch die Basissimulation aus b) durchgeführt.

Zu Beginn der Injektionsphase verlaufen die Pfade der jeweiligen Kurven deckungsgleich. Die Kurvenbereiche der Postinjektionsphase zeigen weiterhin, wie bereits bei den $e(p_{ref})$-Kurven der einweggekoppelten Simulationen gesehen, ein bilineares Verhalten.

Des Weiteren enthalten beide Abbildungen die Ergebnisse von einweggekoppelten Basissimulationen. Für die Simulationen mit einer Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m² werden zwei unterschiedliche Permeabilitätsmultiplikatoren in Höhe von 2,5 (blau gestrichelte Kurve) und von 5,0 (rot gestrichelte Kurve) untersucht. Im Fall der in Bild 7.23 b) dargestellten Simulationsreihe ist hingegen ausschließlich ein Multiplikator in Höhe von 5,0 verwendet worden. Diese Wahl ist auf die Ergebnisse aus Kapitel 7.4.4 zur Validierung von Hypothese 2 zurückzuführen, die gezeigt haben, dass sich $p_{kontr\ 1}$ für Permeabilitäten größer als $k = 2{,}5 \times 10^{-15}$ m² invariant verhält. Aus diesem Grund wurde diese semi-analytische Parametrisierung ebenfalls für die Approximation der zweiweggekoppelten Simulation in Bild 7.23 c) verwendet. Generell zeigen die $e(p_{ref})$-Kurven der Basissimulationen im ansteigenden Ast lineares Verhalten.

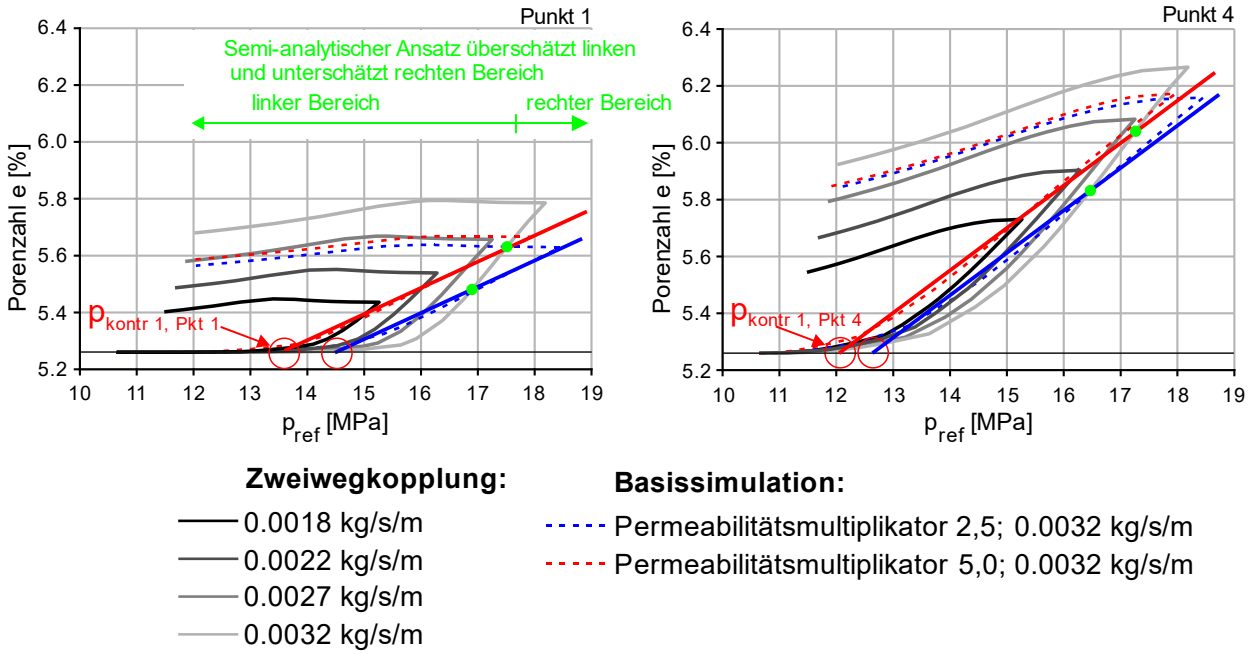


Bild 7.24 M1P9: Die grauen $e(p_{ref})$-Kurven veranschaulichen das nicht-lineare Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung einer initialen Permeabilität von 10^{-16} m². Zwei mögliche Approximationen durch den semi-analytischen Ansatz unter Verwendung von Permeabilitätsmultiplikatoren in der Basissimulation zeigen für einen Faktor 2,5 die blau gestrichelte und für einen von 5 die rot gestrichelte Linie.

Zur Validierung von Hypothese 4 wurden die Kurven der einweg- und zweiweggekoppelten Simulationen in Bild 7.23 und Bild 7.24 übereinander gelegt. Da die Graphen der Basissimulation generell flacher geneigt verlaufen als die der Zweiwegkopplungen und zudem $p_{kontr\ 1}$ auf einem niedrigeren Porendruckniveau startet, schneiden die Kurven der Basissimulation die der zweiweggekoppelten. Exemplarisch sind diese Schnittstellen mit der Kurve der jeweils höchsten Injektionsrate als grüne Punkte markiert. Es fällt auf, dass die Approximation des semi-analytischen Ansatzes die Kurven der Zweiwegkopplung im Bereich links vom Schnittpunkt über- und im rechten Bereich unterschätzt. Die größten absoluten Abweichungen werden für die Kurven mit der

geringsten Permeabilität in Bild 7.23 a) beobachtet. Zudem fallen diese für die höher gelegenen Bezugspunkte größer aus als für die tiefergelegenen (vgl. Anhang D). Im Fall von BZE 1 in Bild 7.23 a) können im Vergleich zur roten Linie, die den Verlauf der parametrisierten Basissimulation unter Verwendung eines Permeabilitätsmultiplikators von 5 repräsentiert, Abweichungen von bis zu 0,25 Prozentpunkten festgestellt werden.

Um die Qualität der linearen Approximation der zweiweggekoppelten $e(p_{ref})$-Funktionen durch die semi-analytische Parametrisierung unter Berücksichtigung eines Permeabilitätsmultiplikators von 2,5 beziehungsweise 5,0 zu beurteilen, wurden die in Tabelle 7.5 dargestellten Bestimmtheitsmaße R^2 ermittelt.

Tabelle 7.5 Bestimmtheitsmaße R^2 einer linearen Approximation von zweiweggekoppelten $e(p_{ref})$-Funktionen durch die verwendete semi-analytische Parametrisierung unter Berücksichtigung von zwei unterschiedlichen Permeabilitätsmultiplikatoren der Basissimulation. Für BZE 1 und 4 aus M1P8 unter Berücksichtigung einer Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m².

	Bestimmtheitsmaße R^2 [-]							
Permeabilitätsmultiplikator der Basissimulation [-]	2,5				5,0			
Verwendete Injektionsrate [kg/s/m]	0,0018	0,0022	0,0027	0,0032	0,0018	0,0022	0,0027	0,0032
Punkt 1	0,6	0,90	0,81	0,80	0,96	0,92	0,89	0,84
Punkt 4	0,98	0,96	0,94	0,93	0,98	0,95	0,96	0,94

Für BZE 1 lassen sich unter Berücksichtigung eines Permeabilitätsmultiplikators von 2,5 Bestimmtheitsmaße zwischen $0,6 \leq R^2 \leq 0,9$ ermitteln, wohingegen sie für einen Multiplikator von 5,0 zwischen $0,84 \leq R^2 \leq 0,96$ liegen. Die Bestimmtheitsmaße von BZE 4 weisen für beide semi-analytischen Parametrisierungen Werte zwischen etwa 0,93 und 0,98 auf. Hieraus lässt sich schließen, dass im Fall von geringen Permeabilitäten die nicht-linearen $e(p_{ref})$-Verläufe besser durch Verwendung eines Permeabilitätsmultiplikators von 5,0 in der Basissimulation approximiert werden können.

Die $e(p_{ref})$-Funktionen von Szenarien, die eine höhere initiale Permeabilität verwenden, weisen generell ein geringeres nicht-lineares Verhalten auf. Deshalb fallen die Abweichungen zwischen der Linearisierung und den $e(p_{ref})$-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen, wie in Bild 7.23 b) und c) zu erkennen, vernachlässigbar gering aus. In diesen Fällen werden für alle untersuchten Modellvariationen Bestimmtheitsmaße von etwa $R^2 = 0,99$ erreicht.

In der Postinjektionsphase verlaufen sowohl die Pfade der Basis- als auch der zweiweggekoppelten Simulation parallel, weshalb dieser Bereich gut linear approximiert werden kann. Zudem zeigen Bild 7.23 a) und Bild 7.24 nach Injektionsstopp ausschließlich für eine Störungspermeabilität in Höhe von $k = 10^{-16}$ m² ein ausgeprägtes unter α_2 geneigtes Plateau, während dieses, falls überhaupt vorhanden, für höhere Permeabilitäten vernachlässigbar gering ist. Beispielsweise verläuft

es im Fall der zweiweggekoppelten Simulation von M1P9 für die höchste Injektionsrate zwischen 18,2 MPa und 16,0 MPa.

Um die Auswirkung dieser maximal auftretenden Abweichungen zwischen der linearen Approximation und den Verläufen der zweiweggekoppelten Simulationen auf den verwendeten Permeabilitätsmultiplikator zu ermitteln, wurden diese unter Verwendung von Gleichung (4.68) rechnerisch für die in Bild 7.23 a) dargestellte ungünstigste Approximation ermittelt. Hierzu wurden für den Zeitraum der Injektionsphase sowohl die Porenzahlentwicklung der linearisierten Basissimulation (rot gestrichelte Linie) als auch die der zu approximierenden zweiweggekoppelten Simulation mit der höchsten Injektionsrate verwendet. Entsprechend der Parametrisierung der zweiweggekoppelten Simulation ist ein Sensitivitätsexponent von 10 berücksichtigt worden.

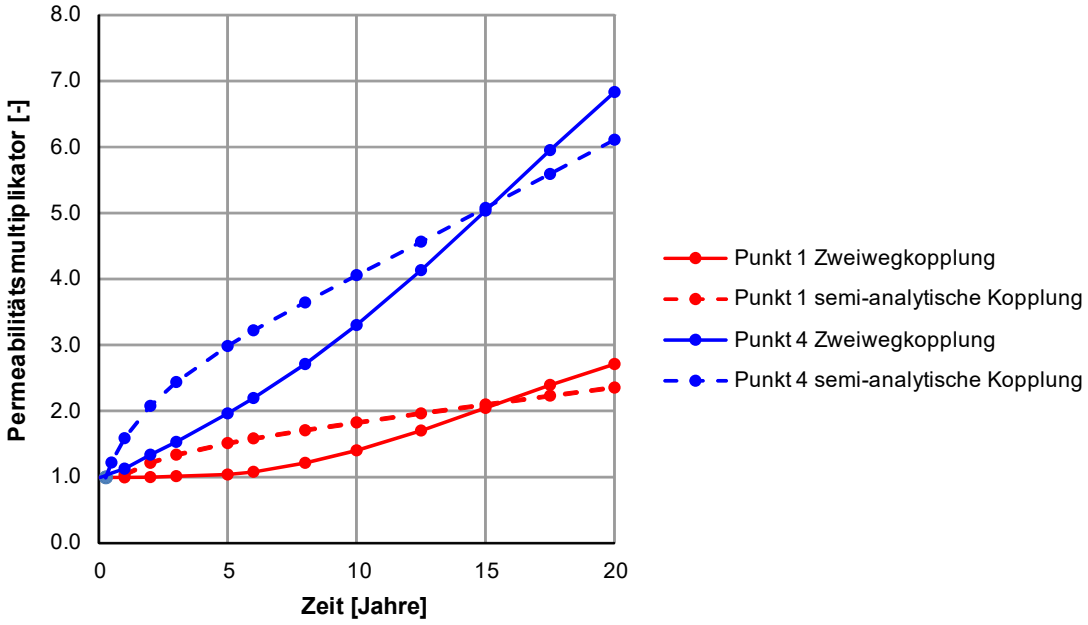


Bild 7.25 Eine statische Umrechnung der Porenzahlentwicklung der zweiweggekoppelten Simulation mit höchster Injektionsrate (hellgrau) und der linearisierten Basissimulation mit einem Permeabilitätsfaktor von 5 (rot gestrichelte Linie) aus Bild 7.23 a) in die zugehörigen Permeabilitätsmultiplikatoren zeigt in erster Näherung die Abweichungen zwischen den approximierenden und zu approximierenden Funktionen. Dargestellt sind die Graphen von Bezugspunkt 1 und 4.

Die Permeabilitätsmultiplikatoren starten mit dem Wert eins und erhöhen sich entsprechend der wachsenden Porenzahl sukzessive während der ersten 20 Jahre. Die Ergebnisse für die semi-analytische Kopplung sind als gestrichelte und die der Zweiwegkopplung als durchgezogene Linie dargestellt, wobei für Bezugspunkt 1 rot und für Bezugspunkt 4 blau verwendet wurde. Es ist zu erkennen, dass es in beiden Bezugspunkten in den ersten fünf Jahren zu einer Überschätzung der Permeabilität um den Faktor 2 kommt, die sich innerhalb der nächsten zehn Jahre auf 0 verringert, um sich dann nach 15 Jahren Injektionsdauer sukzessive zu einer geringen Unterschätzung von etwa 10 % zu entwickeln.

7.5. Diskussion der Ergebnisse von Untersuchungsreihe 1

In diesem Unterkapitel werden die in Kapitel 7.4 präsentierten Ergebnisse diskutiert, wobei der Fokus auf einer Überprüfung der in Kapitel 7.1 und 7.2 formulierten Zielsetzung liegt. Tabelle 7.6 liefert hierzu eine Übersicht, die den ermittelten Einfluss des jeweiligen Parameters auf die damit ermittelten e(p_{ref})-Kurven und infolgedessen auf die semi-analytischen Parameter zusammenfasst.

Tabelle 7.6 Übersicht bezüglich des in den Parameterstudien jeweils variierten Parameters und des daraus resultierenden Einflusses auf invariantes Verhalten der semi-analytischen Parametrisierung.

Parameter-studie	variierter Parameter [Einheit]	Kopplungsart	semi-analytische Parameter	
			variant	invariant
P0	Störungsdiskretisierung	Einwegkopplung	-	-
P1	$\varphi_{Störung}$ [°]	Einwegkopplung	α_1, $p_{kontr\ 1}$	α_2, α_3, $p_{kontr\ 2}$
P2	σ'_h/σ'_v (effektiv) [-]	Einwegkopplung	α_1, $p_{kontr\ 1}$	α_2, α_3, $p_{kontr\ 2}$
P3	$\psi_{Störung}$ [°]	Einwegkopplung	α_1	α_2, α_3, $p_{kontr\ 1}$,
P4	$k_{Störung}$ [m²]	Einwegkopplung	$p_{kontr\ 1}$, $p_{kontr\ 2}$	α_1, α_2, α_3
P5	Injektionsrate [kg/s/m]	Einwegkopplung	($p_{kontr\ 1}$),$p_{kontr\ 2}$	α_1, α_2, α_3, ($p_{kontr\ 1}$)
P6	$\psi_{Störung}$ [°]	Zweiwegkopplung	α_1, $p_{kontr\ 2}$	α_2, α_3, $p_{kontr\ 1}$
P7	Sensitivitätsexponent n	Zweiwegkopplung	$p_{kontr\ 2}$	α_1, α_2, α_3, $p_{kontr\ 1}$
P8	Injektionsrate [kg/s/m]	Ein- und Zweiwegkopplung	-	-
P9	E-Modul des Liegenden	Ein- und Zweiwegkopplung	-	-

7.5.1. Untersuchung zum Einfluss der horizontalen Diskretisierung der Störung

Die Auswertung der Ergebnisse in Kapitel 7.4.1 hat gezeigt, dass unterschiedliche horizontale Störungsdiskretisierungen bei der Simulation des Prozesses einer hydraulischen Reaktivierung von Störungen infolge von Porendruckanstiegen zu qualitativ ähnlichen Ergebnissen führen. Es wurde für alle drei untersuchten Diskretisierungen beobachtet, dass die Elemente im unteren, an das Barrieregestein, das Reservoir und das Liegende angrenzenden Bereich der Störung über die gesamte Störungsbreite Porendruckanstiege erfahren. Hierdurch erreichen sämtliche hiervon betroffenen Elemente das Bruchkriterium, wodurch sie plastifizieren, während die höhergelegen Bereiche der Störung, deren Elemente keinen Porendruckanstieg erfahren, eine Lokalisierung von plastifizierenden Elementen aufweisen.

Dieser Effekt ist darauf zurückzuführen, dass es aus den tiefergelegenen und dadurch früher plastifizierenden Störungsbereichen zu Spannungsumlagerungen in die höhergelegenen kommt. Spannungsänderungen, die nicht auf Porendruckanstiege, sondern ausschließlich auf mechanische Spannungsumlagerungen zurückzuführen sind, führen in der Regel zu einer Spannungslokalisierung, die zu einer lokalen Überschreitung des Bruchkriteriums führt (Kleine Vennekate (2013), Muir Wood (1990), Rice (1973) und Rudnicki und Rice (1975)).

Ein Vergleich der Porenzahlentwicklungen in den plastifizierten Störungselementen hat gezeigt, dass diese im Fall einer horizontalen Diskretisierung mit sieben Elementen die homogenste Verteilung aufweisen. Eine Diskretisierung mit lediglich drei Elementen weist hingegen eine größere Varianz über die Breite und die Tiefe der Störung auf.

Des Weiteren zeigt sich auch bei einer quantitativen Betrachtung der Ergebnisse ein Einfluss der Diskretisierungsfeinheit. So fallen die zeitlichen Entwicklungen des Porendrucks und der Porenzahl in den BZEs mit feiner werdender Diskretisierung betragsmäßig höher aus. Hierbei konvergieren die Simulationsergebnisse gegen einen festen Wert, wobei zwischen den Ergebnissen mit fünf und sieben Elementen nur noch minimale Abweichungen zu verzeichnen sind.

Da der Fokus dieser Arbeit auf der Erarbeitung und der Validierung eines neuen semi-analytischen hydromechanischen Kopplungsansatzes liegt, der die Porenzahlentwicklung von definierten Homogenbereichen durch das Verhalten einzelner BZEs abbildet, wird hierzu für die durchzuführenden Simulationen die ungünstigste Diskretisierung verwendet. Aufgrund der heterogensten horizontalen und vertikalen Verteilung von Porenzahländerungen stellt dies die Diskretisierung mit drei Elementen dar.

Die generelle Einteilung der Störung in Homogenbereiche (siehe Kapitel 5.3.1) hat auf den Ergebnissen der Basissimulation zu erfolgen. In Anbetracht der relativ homogenen Verteilung von Porenzahländerungen wurden für die in diesem Kapitel diskutierten Simulationen maximale Abstände zwischen einzelnen BZEs in Höhe von 130 m für Störungselemente, die an das Hangende angrenzen, und Abstände von 250 m für diejenigen, die an das Liegende angrenzen, definiert.

7.5.2. Ermittlung der Anwendungsgrenzen einer Basissimulation

Für die Untersuchung der Anwendbarkeit einer durch eine einzige Basissimulation ermittelte semi-analytische Parametrisierung für die Simulation von Szenarien, die von der Basissimulation abweichende Materialparameter verwenden, wurden die Parameterstudien P1, P2, P3, P6 und P7 durchgeführt. Die Ergebnisse sind hinsichtlich des Einflusses des jeweils untersuchten Parameters auf den Verlauf der damit generierten $e(p_{ref})$-Funktionen und folglich auf die semi-analytischen Parameter in Tabelle 7.6 zusammengefasst.

Es lässt sich festhalten, dass abweichende Reibungswinkel (P1) und Initialspannungszustände (P2) unterschiedlich hohe Porendrücke bedingen, um eine Störungsreaktivierung herbeizuführen. Folglich verhält sich $p_{kontr\,1}$ in beiden Fällen bezüglich des Reibungswinkels beziehungsweise des Initialspannungszustands variant. Zudem treten im Fall von hohen Reibungswinkeln und horizontalen Drücken zusätzlich zu den plastischen auch relativ große elastische Verformungen auf,

die während der Injektionsphase zu einem bilinearen Verlauf des ansteigenden Pfades der $e(p_{ref})$-Funktion führen. In diesem Fall ist dieser Bereich durch die Verwendung der Methode der kleinsten Quadrate zu approximieren, was wiederum zur Folge hat, dass sich α_1 in Bezug auf die untersuchten Parameter ebenfalls als variant darstellt. Die Parameter α_2, α_3, $p_{kontr\,2}$ verhalten sich hingegen invariant.

Eine Variation des Dilatanzwinkels beeinflusst die Neigung des plastischen Potenzials auf der Fließfläche (vgl. Kapitel 4.3.2), woraus betragsmäßig unterschiedlich hohe plastische Verformungen resultieren. Diese bewirken wiederum unterschiedlich hohe Porenzahlentwicklungen. Entsprechend hat sich für ein- (P3) als auch für zweiweggekoppelte Simulationen (P6) gezeigt, dass sich α_1 in Bezug auf den Dilatanzwinkel als variant darstellt. Da sich aufgrund der aktualisierten Permeabilität und Porosität bei Verwendung einer Zweiwegkopplung für alle drei untersuchten Dilatanzwinkel unterschiedlich hohe Referenzporendrücke aufbauen, wurde zudem für P6 variantes Verhalten von $p_{kontr\,2}$ beobachtet. Hierdurch startet der elastische Response der $e(p_{ref})$-Funktion nach Injektionsstopp von einem unterschiedlich hohen maximalen Referenzporendruck.

Die Untersuchung von unterschiedlich großen Sensitivitätsexponenten n (P7) zur Anpassung der Permeabilität in Abhängigkeit der Porosität (Gleichung (4.68)) durch zweiweggekoppelte Simulationen hat gezeigt, dass sich, abgesehen von $p_{kontr\,2}$, in diesem Fall alle semi-analytischen Parameter invariant verhalten.

Abschließend lässt sich festhalten, dass der aus einer Verwendung von unterschiedlichen Reibungswinkeln, Dilatanzwinkeln oder Initialspannungszuständen resultierende Einfluss auf die Neigung α_1 als nicht vernachlässigbar einzustufen ist. Deshalb lässt sich die auf den Ergebnissen einer Basissimulation und der damit verbundenen Materialparameter beruhende semi-analytische Parametrisierung nicht auf andere Anwendungsfälle übertragen. Diesbezüglich ist eine solche Parametrisierung ausschließlich für eine Variation der Sensitivitätsexponenten anwendbar. Hierzu ist jedoch das variante Verhalten von $p_{kontr\,2}$ gegenüber dem Sensitivitätsexponenten zu vernachlässigen.

Entsprechend der Definition in Kapitel 5.3.2 stellt $p_{kontr\,2}$ den Schnittpunkt zwischen den beiden unter α_2 und α_3 geneigten Linearisierungen des rein elastischen $e(p_{ref})$-Pfades der Postinjektionsphase dar. Hierbei steuert der unter α_2 geneigte Referenzporendruckbereich der $e(p_{ref})$-Funktion das viskose Verhalten der Porenzahlresponse. Das Auftreten eines solchen Plateaus ist darauf zurückzuführen, dass in diesem Fall eine Verringerung der Porenzahl in höhergelegenen Bezugspunkten zeitverzögert einsetzt, weil eine Porendruckverringerung im tiefergelegenen Referenzelement sich nicht unmittelbar auf den Porendruck des höhergelegenen Elementes auswirkt. Generell wird das Auftreten dieses Bereichs, wie in Bild 7.23 a) und Bild 7.24 zu sehen, ausschließlich für geringe initiale Permeabilitäten in ausgeprägter Form beobachtet, während dieser Effekt für geringere Permeabilitäten (Bild 7.23 b) und c)) vernachlässigbar ist.

Zudem ist im Referenzelement nach Injektionstopp generell eine relativ schnelle Porendruckabnahme zu verzeichnen. Beispielsweise beträgt diese für M1, wie in Bild 7.9 gut zu erkennen, innerhalb weniger Wochen 2,5 MPa. Infolgedessen ist der Zeitraum in dem dieser viskose Effekt

zum Tragen kommt im Verhältnis zur gesamten Postinjektionsphase als relativ gering einzustufen. Da dieser Effekt sowohl bei der Verwendung von Ein- als auch von Zweiwegkopplungen beobachtet wird, werden folglich ausschließlich betragsmäßige Differenzen zwischen dem definierten Wert von $p_{kontr\,2}$ im semi-analytischen Ansatz und dem tatsächlich in einer zweiweggekoppelten Simulation auftretenden Wert wirksam. Trotz allem wird der Einfluss dieser potenziellen Fehlerquelle in Kapitel 7.6 durch einen direkten Vergleich von Porendruckverteilungen, die semi-analytisch und zweiweggekoppelt simuliert worden sind, quantifiziert.

7.5.3. Untersuchungen zur Validierung der Hypothesen 1 bis 4

Im Folgenden werden die in den Kapiteln 7.4.3 bis 7.4.5 präsentierten Ergebnisse der Parameterstudien P4, P5, P8 und P9 im Hinblick auf eine Validierung der Hypothesen 1 bis 4 diskutiert.

Hypothese 1

Hypothese 1 besagt, dass sich sowohl der den Injektionsprozess als auch die Postinjektionsphase beschreibende Pfad einer $e(p_{ref})$-Funktion von einweggekoppelten Simulationen hinreichend genau linear approximieren lässt. Zudem setzt sie voraus, dass sich die zur Beschreibung dieser Approximation erforderlichen Parameter α_1, α_2, α_3, $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$ in Bezug auf die Injektionsrate invariant verhalten. Für die Validierung wurden die Modellvariationen M1, M7 und M9 verwendet, die sich, wie in Anhang A zu sehen, hinsichtlich ihrer jeweiligen geologischen Gliederung unterscheiden.

Abgesehen von $p_{kontr\,2}$ konnte diese Hypothese uneingeschränkt für alle untersuchten Störungspermeabilitäten für M1 und M9 und eingeschränkt für die geologischen Bedingungen von M7 validiert werden. Wie für BZE 4 von M7 unter Berücksichtigung einer Permeabilität von 5×10^{-16} m² in Bild 7.18 zu sehen ist, weisen die Kontrollporendrücke $p_{kontr\,1}$ für unterschiedliche Injektionsraten im Maximum Abweichungen von 1,3 MPa auf, während sich diese für BZE 6 lediglich auf 0,5 MPa belaufen. Diese Abweichungen gehen für die oberhalb von BZE 5 gelegenen Elemente mit Bestimmtheitsmaßen von $R^2 \leq 0{,}95$ einher. Im Fall von M9 lassen sich für diese initiale Störungspermeabilität ebenfalls Abweichungen in höhergelegenen BZEs feststellen. Jedoch lassen sich die $e(p_{ref})$-Kurven aller BZEs durch die mit der höchsten Injektionsrate ermittelten semi-analytischen Parametrisierung mit einem Bestimmtheitsmaß $R^2 \geq 0{,}95$ abbilden, weshalb entsprechend der Definition aus Kapitel 5.3.3 invariantes Verhalten vorliegt.

Vergleicht man die Kurven aus Bild 7.18 mit den in Bild 7.16 dargestellten Ergebnissen einer auf den ersten Blick vergleichbaren Modellvariation, so fällt auf, dass die $e(p_{ref})$-Kurven von M1 im Gegensatz zu den Ergebnissen von M7 bei gleicher Permeabilität und gleicher Mächtigkeit der ersten Barriereformation (500 m) invariantes Verhalten aufzeigen. Dieses Verhalten lässt sich dadurch begründen, dass im Fall von M1 der höhergelegene GWL eine so große Mächtigkeit aufweist, dass das aus der Störung verdrängte Fluid drucklos darin entwässern kann. Folglich beträgt der, durch das 500 m mächtige Barrieregestein vorgegebene, maximale Sickerweg unter Berücksichtigung eines Fallwinkels von 70° 530 m. Im Fall von M7 befindet sich oberhalb der ersten geologischen Barriere lediglich ein 20 m mächtiges Reservoir, das wiederum von einem 430 m

mächtigen Barrieregestein überlagert wird. Wie die Simulationsergebnisse von M7 zeigen, kam es für beide untersuchten Störungspermeabilitäten im höhergelegenen GWL zu Porendruckerhöhungen, die im Fall der geringeren 0,55 MPa und im Fall der höheren 1,42 MPa betragen.

Die im Gegensatz zu M1, für M7 im höhergelegenen GWL beobachtete Porendruckerhöhung lässt sich aufgrund der geringeren Mächtigkeit durch eine entsprechend geringer ausfallende Transmissivität begründen. Durch die entfallende drucklose Entwässerung in GWL 1 verhält sich die geologische Barriere von M7 folglich wie ein 950 m mächtiges Barrieregestein.

Dennoch zeigen im Fall von M7 die mit einer Permeabilität von 5×10^{-15} m² ermittelten $e(p_{ref})$-Kurven invariantes Verhalten. Eine Begründung hierfür liefert die Gegenüberstellung der zeitlichen Porendruckentwicklungen in allen Bezugspunkten für beide initialen Störungspermeabilitäten in Bild 7.20. Es zeigt sich, dass im Fall der geringeren Permeabilität ausschließlich die BZEs 5 bis 9 signifikante Porendruckerhöhungen erfahren, während in den höhergelegenen Elementen 1 bis 4 keine oder nur sehr geringe beobachtet werden. Im Fall der höheren Permeabilität erfahren alle BZEs Porendruckerhöhungen. Dies führt dazu, dass die für diese BZEs ermittelten Porenzahlentwicklungen bezogen auf den Referenzporendruck alle lineares Verhalten zeigen. Im Fall der geringeren Permeabilität verhalten sich ausschließlich die $e(p_{ref})$-Kurven von BZE 5 bis 9 invariant. Folglich ist für M7 ausschließlich für die in Bild 7.19 dargestellte Situation mit einer Permeabilität in Höhe von 5×10^{-15} m² uneingeschränkt invariantes Verhalten gegeben.

Die in Bild 7.18 für M7 zu erkennenden relativ großen Abweichungen von $p_{kontr\,1}$ betreffen ausschließlich höhergelegene BZEs von Simulationen mit der geringsten Injektionsrate. Da diese insgesamt nur sehr geringe Porenzahlerhöhungen aufweisen, wirkt sich ein durch die Abweichung auftretender Fehler folglich nur gering aus. Dessen Höhe wird durch die Untersuchung eines 950 m mächtigen Barrieregesteins im Zusammenhang mit der Validierung von Hypothese 5 in Kapitel 8 ermittelt.

Ein ähnliches Verhalten zeigen die in Bild 7.21 dargestellten Ergebnisse für P9. In diesem Fall wird das Hangende durch drei GWLs unterteilt, wobei die unteren jeweils eine Mächtigkeit von 10 m aufweisen, während der obere, dessen Basis in 480 m Tiefe liegt, eine Mächtigkeit von 100 m besitzt. Die Auswertung der Ergebnisse zeigt, dass es in den beiden unteren GWLs und in BZE 4 bis 14 zu Porendruckerhöhungen kommt, weshalb die $e(p_{ref})$-Kurven dieser Homogenbereiche in Bezug auf die Injektionsrate invariantes Verhalten aufweisen. Im Fall des höhergelegenen GWL sowie BZE 1 bis 3 sind entsprechend keine Porendruckanstiege zu verzeichnen, was dazu führt, dass diese Bereiche geringe Abweichungen für Szenarien mit der geringsten Injektionsrate aufweisen. Das Hangende von M9 wirkt folglich wie eine etwa 500 m mächtige geologische Barriere.

Abschließend lässt sich für Hypothese 1 festhalten, dass sie für alle untersuchten Barrieregesteinsmächtigkeiten und Schichtwechselfolgen im Fall $k \geq 5 \times 10^{-16}$ m² uneingeschränkt Gültigkeit besitzt. Im Fall von Barrieregesteinsmächtigkeiten von mehr als 500 m oder Schichtwechselfolgen die infolge einer Zwischenlagerung von gering mächtigen GWLs wie eine solche wirken (vgl. M7), ist diese für Permeabilitäten von $k \leq 5 \times 10^{-16}$ m² nur eingeschränkt gültig. In diesem Fall zeigt $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf die Injektionsrate variantes Verhalten auf. Der hieraus resultierende Einfluss wird jedoch im Hinblick auf die zuvor angestellte Argumentation als gering eingestuft.

Hypothese 2

Hypothese 2 kann anhand der in Kapitel 7.4.4 vorgestellten Ergebnisse uneingeschränkt validiert werden. Für unterschiedliche initiale Störungspermeabilitäten verhalten sich α_1, α_2 und α_3 invariant. Der Parameter $p_{kontr\,1}$ verhält sich hingegen variant, weil er mit zunehmender Permeabilität einen geringeren Wert annimmt. Da $p_{kontr\,1}$ für Permeabilitäten von $k \geq 2{,}5 \times 10^{-15}$ m² gegen einen festen Wert konvergiert, kann eine mit dieser Permeabilität ermittelte semi-analytische Parametrisierung auch für Simulationen die eine geringere verwenden, genutzt werden.

Hypothese 3

Die Ergebnisse aus Kapitel 7.4.5 haben gezeigt, dass die $e(p_{ref})$-Kurven von zweiweggekoppelten Simulationen ein in Abhängigkeit der verwendeten Störungspermeabilität mehr oder weniger ausgeprägtes nicht-lineares Verhalten zeigen. Da im Fall von Zweiwegkopplungen die Permeabilität und Porosität sukzessive angepasst wird, kommt der nicht lineare Effekt besonders bei geringen initialen Permeabilitäten zum Tragen. Hierdurch konnte die Gültigkeit von Hypothese 3 bestätigt werden.

Hypothese 4

Ein direkter Vergleich von $e(p_{ref})$-Kurven in Kapitel 7.4.5 hat verdeutlicht, dass die Verläufe von zweiweggekoppelten Simulationen durch den linearisierten Verlauf einer einweggekoppelten Basissimulation approximiert werden können. Es hat sich gezeigt, dass der ansteigende $e(p_{ref})$-Pfad der Basissimulation aufgrund der nicht durchgeführten Anpassung der Permeabilität und Porosität flacher verläuft. Um die Kurven der Zweiwegkopplung hinreichend genau zu approximieren, ist es entsprechend der Definition von Hypothese 4 deshalb erforderlich, dass die gesamte Kurve, wie in Bild 5.6 dargestellt, um ein geeignetes $\Delta p_{kontr\,1}$ nach links auf der x-Achse verschoben wird.

Angesichts der Gültigkeit von Hypothese 2 ist dies möglich, indem für die Basissimulation eine gegenüber der zu approximierenden Simulation (Zweiwegkopplung) erhöhte initiale Störungspermeabilität verwendet wird. Im Rahmen von P8 wurde der Einfluss von Permeabilitätsmultiplikatoren in Höhe von 2,5 und 5,0 auf die semi-analytische Parametrisierung untersucht. Für zu approximierende Störungen, deren initiale Permeabilitäten höher als 10^{-16} m² sind, betragen in allen durchgeführten Untersuchungen die Bestimmtheitswerte $R^2 = 0{,}99$, weshalb von einer hinreichend genauen Approximation ausgegangen werden kann (vgl. Bild 7.23 b).

Für eine zu untersuchende Permeabilität von 10^{-16} m² und eines Permeabilitätsmultiplikators von 5,0 in der Basissimulation, weisen alle sechs BZEs von M1P8 Bestimmtheitswerte zwischen $R^2 = 0{,}84$ für höhergelegene BZEs, die ein starkes nicht-lineares Verhalten aufweisen, und $R^2 = 0{,}98$ für tiefer liegende BZEs auf. Der in Tabelle 7.5 angestellte Vergleich zwischen den aus der Verwendung von beiden Permeabilitätsmultiplikatoren resultierenden Bestimmtheitsmaßen zeigt, dass besonders die der höher gelegenen BZEs für einen Multiplikator von 5,0 signifikant höher ausfallen. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus P6 und P7, die gezeigt haben, dass ein erhöhter Permeabilitätsanstieg infolge höherer Porenzahlen beziehungsweise der Verwendung höherer Sensitivitätsexponenten nicht zu steigenden Referenzporendrücken führt, wird im Folgenden ein genereller Multiplikator von 5,0 zur Parametrisierung des semi-analytischen

Ansatzes verwendet. Gleichwohl kam es trotz der Verwendung eines Permeabilitätsmultiplikators von 5,0 zu absoluten Abweichungen zwischen der Approximationsgeraden und der zu approximierenden Kurve von maximal 0,25 Prozentpunkten im Fall von BZE 1.

Da der linearisierte Anstieg der Basissimulation flacher verläuft, kommt es in der Regel zu einem Schnittpunkt mit der zu approximierenden Kurve (vgl. Bild 7.23 und Bild 7.24). Hieraus folgt, dass für Referenzporendrücke, die unterhalb dieses Schnittpunktes liegen, die Porenzahlentwicklung über- und für welche die oberhalb liegen die Porenzahlentwicklung unterschätzt wird. Aufgrund der bereits erwähnten niedrigen Bestimmtheitswerte für manche Approximationen sowie der verhältnismäßig großen absoluten Abweichungen wurden für BZE 1 und 4 in erster Näherung aus den Porenzahlentwicklungen der Approximationsgeraden und der zu approximierenden Funktion zugehörige Permeabilitätsmultiplikatoren berechnet.

Der direkte Vergleich dieser beiden Ergebnisse in Bild 7.25 zeigt eine maximale Überschätzung der Permeabilität innerhalb der ersten fünf Jahre, die sich sukzessive egalisiert, um sich dann wiederum nach 15 Jahren in eine zehnprozentige Unterschätzung zu entwickeln. Da es sich bei dieser Betrachtung ausschließlich um eine statische Betrachtung in erster Näherung handelt, die im Fall der Permeabilitätsentwicklung der Approximationsgeraden keine hydromechanische Kopplung berücksichtigt, gibt diese Darstellung nur eine qualitative Orientierung. In einer semi-analytisch gekoppelten Simulation würde dieser Prozess jedoch dynamisch simuliert. Hierbei wird eine anfängliche Überschätzung der Permeabilität zu einem geringeren Porendruckanstieg führen, der gleichzeitig eine geringere Porenzahlentwicklung zur Folge hat. Hierdurch verringern sich die tatsächlich auftretenden Abweichungen zwischen einer semi-analytischen und einer Zweiwegkopplung. Im Fall der Unterschätzung nach 15 Jahren Injektionsdauer verhält es sich entsprechend umgekehrt.

Eine Extrapolation der in Bild 7.25 dargestellten Kurven für $t \rightarrow \infty$, würde theoretisch auch die zum Zeitpunkt t =20 Jahre noch relativ geringe Abweichung einen großen Wert einnehmen lassen. Dies ist jedoch einerseits dadurch ausgeschlossen, dass der maximal zulässige Speicherdruck begrenzt ist (Sedlacek (1999)) und andererseits die Porenzahlentwicklung aufgrund der sich in Abhängigkeit des auftretenden Porendrucks sukzessive vergrößernden Permeabilität gegen einen stationären Wert konvergiert.

Dieser Effekt wurde bereits durch zweiweggekoppelte Simulationen in den Parameterstudien P6 und P7 durch die Betrachtung unterschiedlich hoher Dilatanzwinkel und Sensitivitätsexponenten untersucht. Die Ergebnisse haben gezeigt, dass der auftretende Porendruck mit steigenden Parametern geringer ausfällt. Infolgedessen ist auch der Porendruckanstieg im Fall einer Variation dieser Parameter begrenzt. Insgesamt beeinflusst folglich eine Über- oder Unterschätzung der Porenzahlentwicklung den auftretenden Porendruck ähnlich wie eine Variation des Sensitivitätsexponenten.

Der in diesen Fällen tatsächlich auftretende Fehler lässt sich ausschließlich durch einen direkten Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklung von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen beziffern. Dies erfolgt im kommenden Unterkapitel 7.6.

7.6. Ergebnisse und Diskussion von Untersuchungsreihe 2 zur Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes

Im folgenden Unterkapitel werden die unter Verwendung von zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen ermittelten zeitlichen Porenzahlentwicklungen miteinander verglichen, um den Einfluss der in Hypothese 1 und 4 definierten Linearisierungen auf die Simulationsergebnisse zu quantifizieren. Unter Berücksichtigung von sieben stratigraphisch und strukturgeologisch unterschiedlich gegliederten Modellvariationen wird der semi-analytische hydromechanische Kopplungsansatz unter Voraussetzung der Gültigkeit von Hypothese 5 validiert.

Die hierzu durchgeführten Simulationen verwenden die in Kapitel 6.4 definierten Modellvariationen, Parametrisierungen und Homogenbereiche. Einen Gesamtüberblick bezüglich der insgesamt durchgeführten Simulationen, der variierten Parameter und der verwendeten hydromechanischen Kopplungsarten liefert Tabelle 7.2 auf Seite 134.

Die Simulationen lassen sich in drei unterschiedliche Simulationsarten gliedern. Damit der neue Kopplungsansatz parametrisiert werden kann, wird zuerst für jede Parameterstudie jeweils eine einweggekoppelte Basissimulation durchgeführt. Entsprechend der Ergebnisse aus Kapitel 7.5.3 wird für diese ein Permeabilitätsmultiplikator von 5,0 verwendet. Durch Multiplikation mit diesem wird dann die in der jeweiligen Validierungssimulation verwendete initiale Störungspermeabilität erhöht. Für die Validierung selbst werden die Simulationen sowohl zweiweg- als auch semi-analytisch gekoppelt durchgeführt. Hierzu wird für beide Simulationsarten die gleiche initiale Permeabilität verwendet. Für die Modellvariationen M1 bis M6 und M8 werden die in Anhang C dargestellten Injektionsraten und die zugehörige zeitliche Diskretisierung verwendet. Wie Tabelle 7.2 zu entnehmen ist, werden des Weiteren für M1 die Permeabilitäten $k = 10^{-16}$, $k = 10^{-15}$ und $k = 10^{-14}$ m², für M2 bis M5 $k = 10^{-16}$ und $k = 10^{-15}$ sowie für M6 und M8 ausschließlich $k = 10^{-16}$ m² untersucht.

Die linearisierten und parametrisierten $e(p_{ref})$-Kurven der Basissimulation für M1 unter Berücksichtigung einer Störungspermeabilität von 5×10^{-16} m² sind für BZE 1 bis 6 exemplarisch in Bild 7.26 dargestellt. Die Parametrisierung erfolgt entsprechend der Beschreibung in Kapitel 5.3.2.

Die beiden Kontrollporendrücke $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$ sowie die Neigungen α_1, α_2 und α_3 sind dort beispielhaft für den Verlauf von BZE 1 beziehungsweise BZE 2 dargestellt. Die $e(p_{ref})$-Kurven dieser Basissimulation zeigen eine maximale Porenzahl von ungefähr 6,15 % für BZE 4, 5 und 6. Diese gehen mit einem maximalen Referenzporendruck von 16,35 MPa einher. Die Kurvenverläufe dieser drei Kurven verlaufen nahezu deckungsgleich, was sich entsprechend in ähnlichen resultierenden semi-analytischen Parametern wiederspiegelt. Die komplette Parametrisierung ist Tabelle 7.7 zu entnehmen.

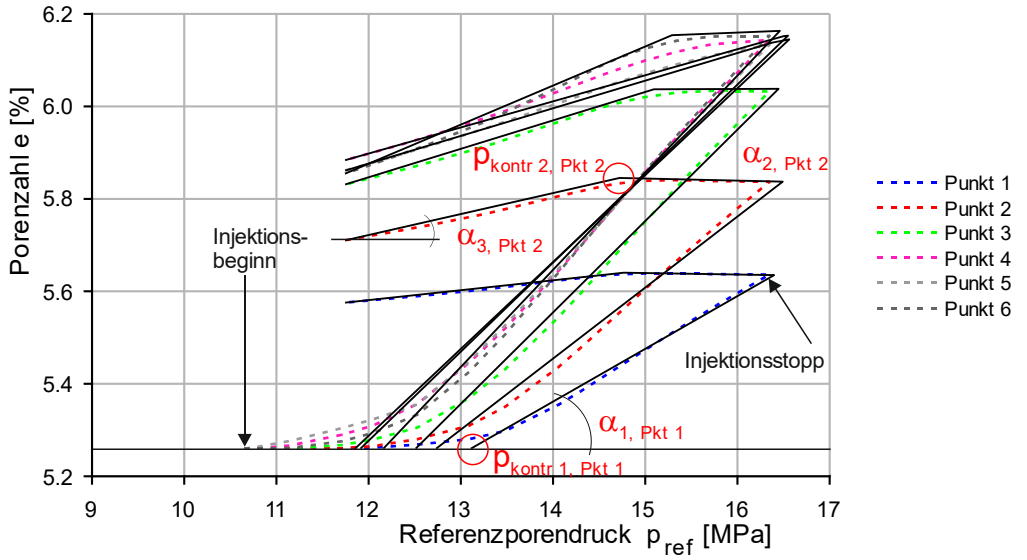


Bild 7.26 Verwendete Linearisierung (schwarze Linien) und Parametrisierung (Rotbuchstaben) der Basissimulation für M1 und k = 5 x 10^{-16} m².

Aufgeführt sind die Parametrisierung der Neigungen α_1, α_2 und α_3 sowie die beiden Kontrollporendrücke $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$. Die verwendeten Parametrisierungen der anderen Modellvariationen sind für die entsprechenden Permeabilitäten Anhang E zu entnehmen. Dort sind jeweils die Parametrisierungstabellen eines Standortes für beide untersuchten initialen Permeabilitäten auf einer Seite zusammengefasst. Ein Vergleich der beiden Tabellen eines Standortes zeigt, dass wegen der Gültigkeit von Hypothese 2 für beide Permeabilitäten die Neigungen α_1 und α_3 nur geringfügig voneinander abweichen, wohingegen die beiden unterschiedlichen Kontrollporendrücke zu einer Verschiebung der $e(p_{ref})$-Kurven auf der x-Achse führen. Für die geringste Permeabilität nehmen beide Parameter die höchsten Beträge ein. Da der unter α_2 geneigte Bereich im Fall einer mit k = 5 x 10^{-15} m² durchgeführten Basissimulation nahezu komplett verschwindet, kommt es aufgrund einer ungenauen Ermittlung zu geringen Abweichungen zwischen den α_2-Winkeln. Die Kurven aller im Folgenden verwendeten Basissimulationen konnten mit einem Bestimmtheitsmaß von $R^2 = 0{,}99$ linearisiert werden.

Tabelle 7.7 Verwendete semi-analytische Parametrisierung für M1 und k = 10^{-16} m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven [°]			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	α_1	α_2	α_3	$P_{kontr\ 1}$	$P_{kontr\ 2}$
1	6,5	-0,2	1,2	13,1	14,8
2	8,8	-0,3	2,6	12,7	14,7
3	11,1	0,0	3,5	12,5	15,1
4	11,0	1,2	3,2	11,9	16,5
5	10,8	2,3	3,4	11,9	16,4
6	11,8	0,5	4,5	12,2	15,3

Durch die bereits in Kapitel 7.5 festgestellte gute Approximierbarkeit von zweiweggekoppelten e(p_{ref})-Funktionen durch eine Basissimulation (vgl. Hypothese 1 und 2) sind für die in Anhang F dargestellten Ergebnisse mit einer initialen Permeabilität von 10^{-15} m² und 10^{-14} m² zwischen beiden Kopplungsarten ausschließlich vernachlässigbare Porendruckabweichungen feststellbar. Deshalb werden an dieser Stelle ausschließlich die zeitlichen Porendruckentwicklungen von zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen, die eine initiale Permeabilität von 10^{-16} m² berücksichtigen, diskutiert. Zudem liegt bei diesen der Fokus ausschließlich auf denjenigen Simulationen mit der höchsten Injektionsrate, weil für diese die größten Abweichungen zu verzeichnen sind. Im Fall von M1 bis M5 beträgt diese 0,0032 kg/s/m und im Fall von M6 und M8 0,0027 kg/s/m. Bei den zuletzt genannten hätte eine Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zu unrealistisch hohen Porendrücken geführt.

In diesem Unterkapitel werden ausschließlich geologische Modelle untersucht, die eine maximal 500 m mächtige Barriereformation enthalten oder deren geologische Barriereformationen wie eine maximal 500 m mächtige wirken. Da alle von einem höhergelegenen GWL mit hoher Mächtigkeit überlagert sind, wird in diesem in allen Simulationen keine Porendruckerhöhung festgestellt.

Die in den folgenden sieben Abbildungen dargestellten zeitlichen Porendruckentwicklungen in den Bezugspunkten zeigen qualitativ alle den gleichen Verlauf auf. Nach Injektionsbeginn steigen die Porendrücke sukzessive an, um nach 20 Jahren Injektionszeit ihr Maximum zu erreichen. Nach Injektionsstopp verringern sich diese wieder und konvergieren gegen ihren Initialwert. Bild 7.27 zeigt einen Vergleich der Porendruckentwicklungen für Modellvariation M1. In diesen Simulationen wurde in der zweiweggekoppelten Simulation ein maximaler Referenzporendruck in Höhe von 17,29 MPa und für die semi-analytische ein Wert von 17,286 MPa erzielt. Diese gehen mit maximalen Porenzahlen von 6,42 % beziehungsweise 6,54 % in BZE 5 einher, was wiederum zu einem maximalen Permeabilitätsmultiplikator von 7,8 führt. Der Vergleich der zeitlichen Porendruckverläufe infolge einer Zweiwegkopplung (blaue Linie) und einer semi-analytischen Kopplung (rot gestrichelte Linie) zeigt folglich eine sehr gute Übereinstimmung.

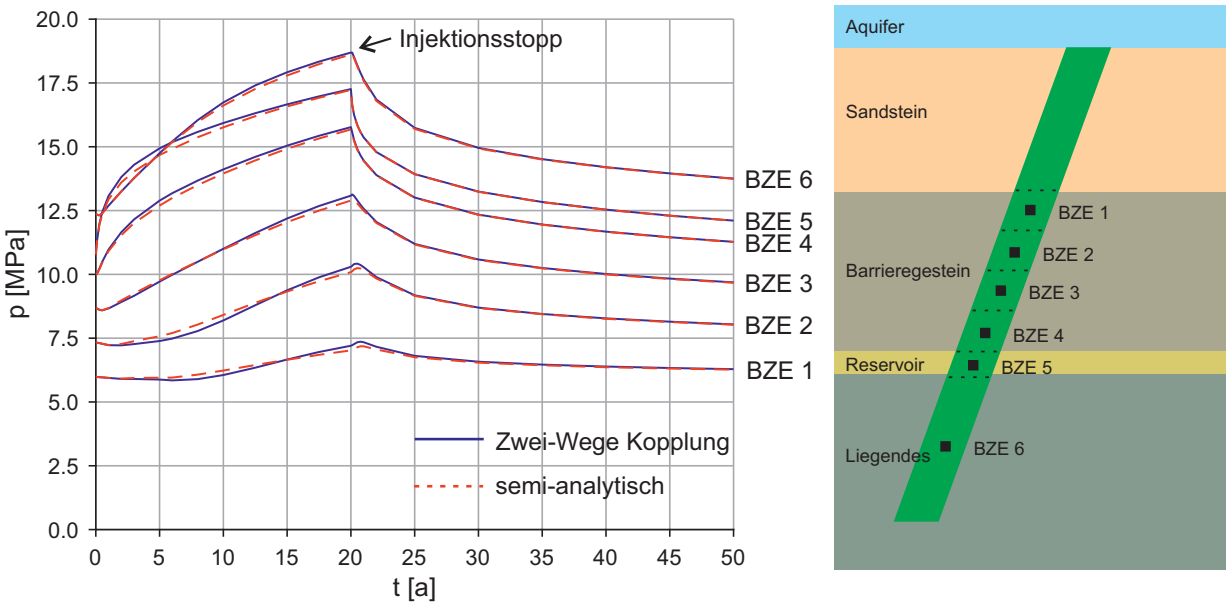


Bild 7.27 M1: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung.

Die in Bild 7.28 für M2 zu sehenden Porendruckentwicklungen der Bezugspunkte 1 bis 6 stimmen ebenfalls gut überein. Hierbei geht im zweiweggekoppelten Fall ein maximaler Referenzporendruck von 17,18 MPa mit einer maximalen Porenzahl von 6,49 % in Bezugspunkt 5 einher, während im semi-analytischen Fall ein Porendruckanstieg auf 17,24 MPa zu einer Porenzahl von 6,50 % führt. Dadurch wird ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 7,7 erreicht.

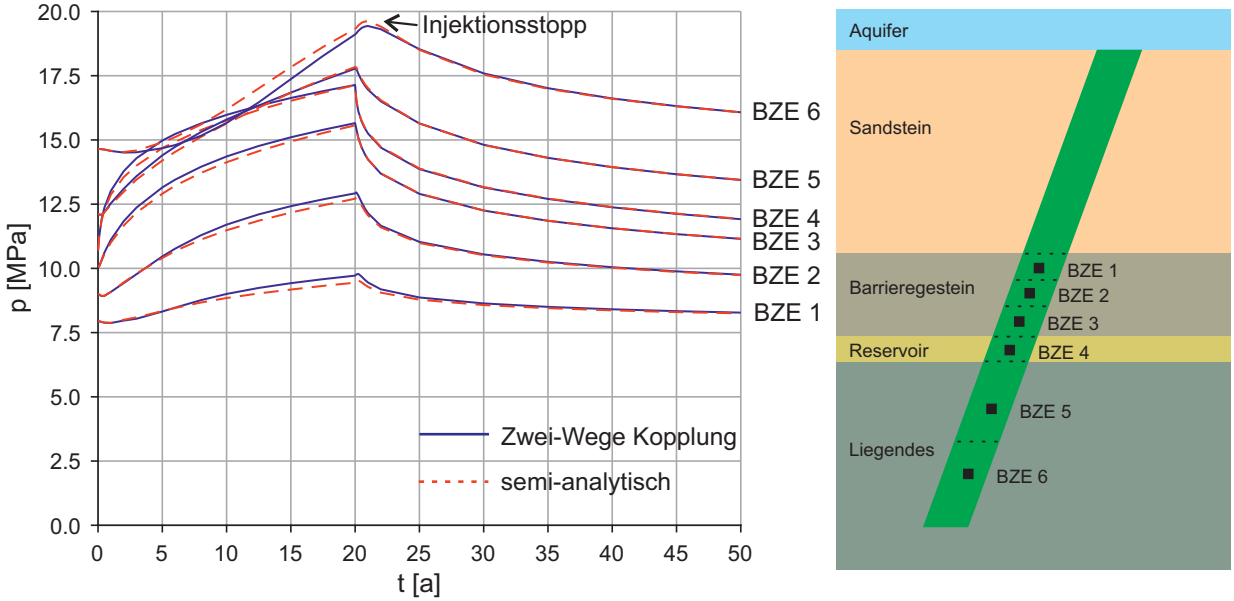


Bild 7.28 M2: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung.

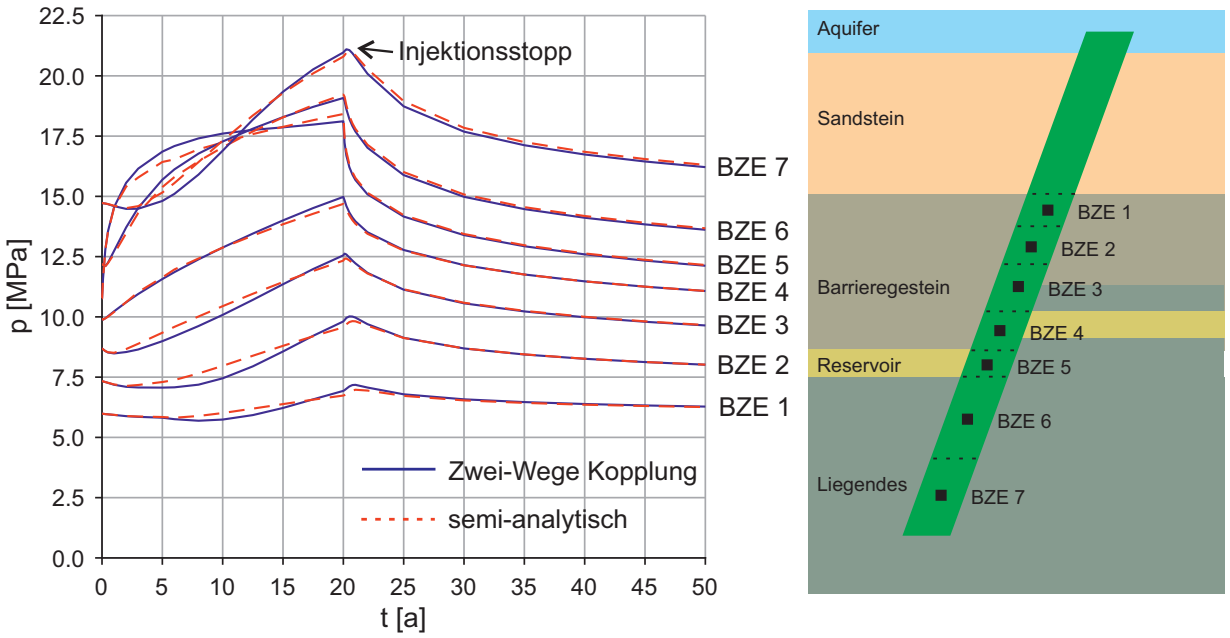


Bild 7.29 M3: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet.

Im Verhältnis zu M1 ist in den Modellen M2 bis M6 und M8 aufgrund des um 200 m tiefer gelegenen Störungsfußes im untersten BZE ein um fünf Jahre verzögerter Porendruckanstieg zu beobachten, was sich durch einen parabelförmigen Verlauf äußert. Im zweiweggekoppelten Fall von M3 in Bild 7.29 beträgt der maximale Referenzporendruck 18,0 MPa und im anderen Fall 18,3 MPa. Dies führt zu einer maximal erreichten Porenzahl von 6,6 % beziehungsweise 6,9 % in BZE 6, einhergehend mit einem Permeabilitätsmultiplikator von 9,9 im semi-analytischen Fall.

Für die in Bild 7.30 und Bild 7.31 dargestellten Ergebnisse von M4 und M5 betragen die maximalen Porendrücke der zweiweggekoppelten Simulationen im Referenzelement 18,5 MPa beziehungsweise 18,75 MPa, wodurch maximale Porenzahlen von 7,1 % respektive 7,2 % in BZE 6 erreicht werden. Der anfängliche Porendruckabfall von BZE 7 ist darauf zurückzuführen, dass es infolge von Dilatanz zu einer Vergrößerung des Porenvolumens innerhalb der Störung kommt. Aufgrund der geringen Permeabilität fließt jedoch nur wenig Formationsfluid in den tiefer gelegenen Teil der Störung. Hierdurch kommt es zu dem dargestellten Porendruckabfall. Im Fall von M4 und M5 ist die etwas höhere Porendruckerhöhung im Reservoir auf die höheren Versatzmaße der Störung zurückzuführen. Ein Vergleich der Ergebnisse von Modellvariation M1, die unter ansonsten identischen Bedingungen keinen Störungsversatz berücksichtigt, mit M5 verdeutlicht den großen Einfluss eines solchen auf die Porendruckentwicklung. Im Fall von M5 wird aufgrund eines Versatzes von 140 m ein um 1,45 MPa höherer Porendruck im Referenzelement erzielt.

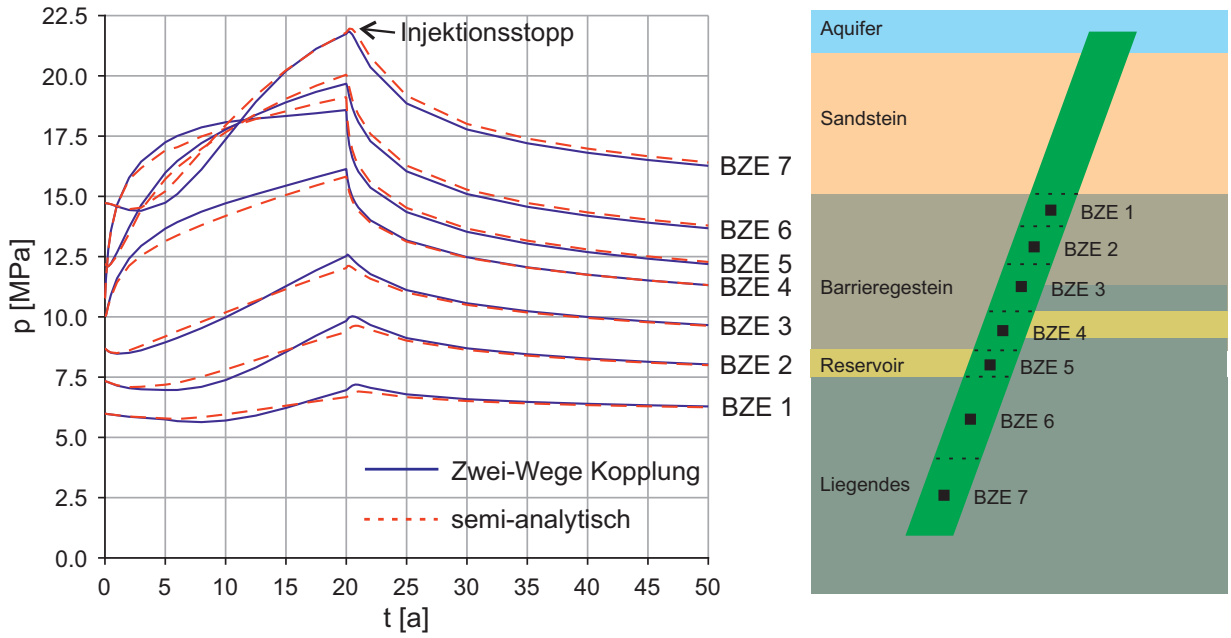


Bild 7.30 M4: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet.

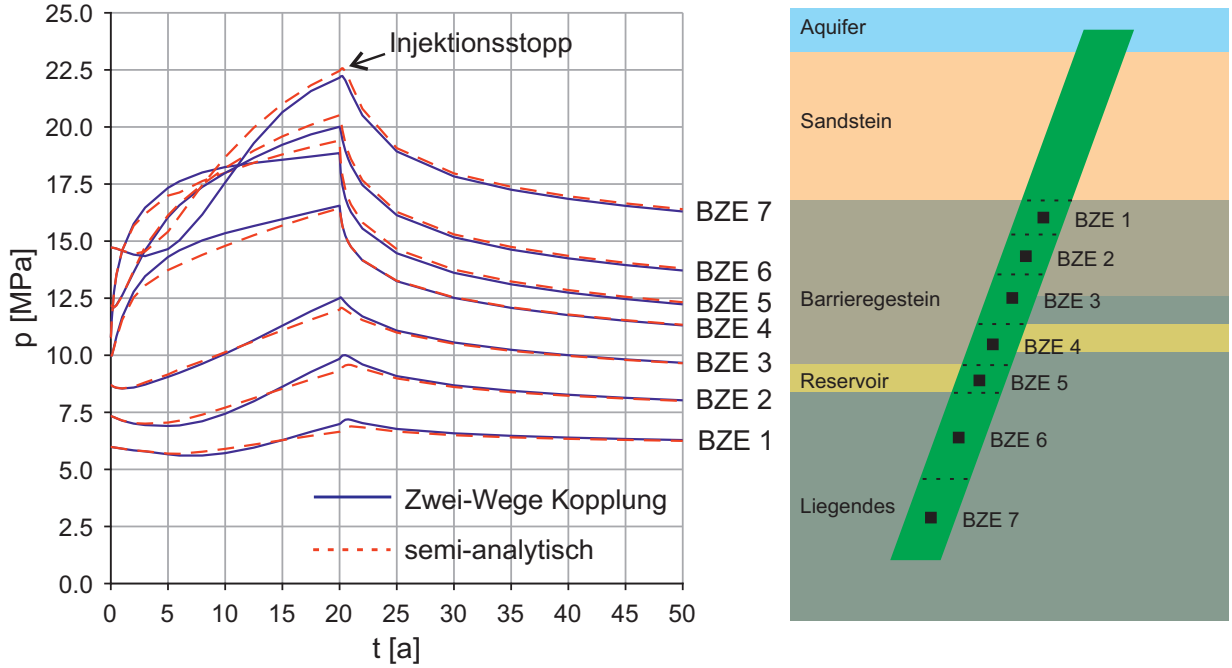


Bild 7.31 M5: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0032 kg/s/m zeigen eine äußerst gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet.

Die Ergebnisse der semi-analytischen Kopplung zeigen für M4 einen maximalen Referenzporendruck von 19,0 MPa nach 20 Jahren Injektionszeit und damit einhergehend eine maximale Porenzahl in BZE 6 in Höhe von 6,9 %. Im Fall von M5 betragen diese Werte 19,3 MPa und 7,2 %. Hierbei wird für M4 ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 13,0 und für M5 einer von 18,6 erzielt.

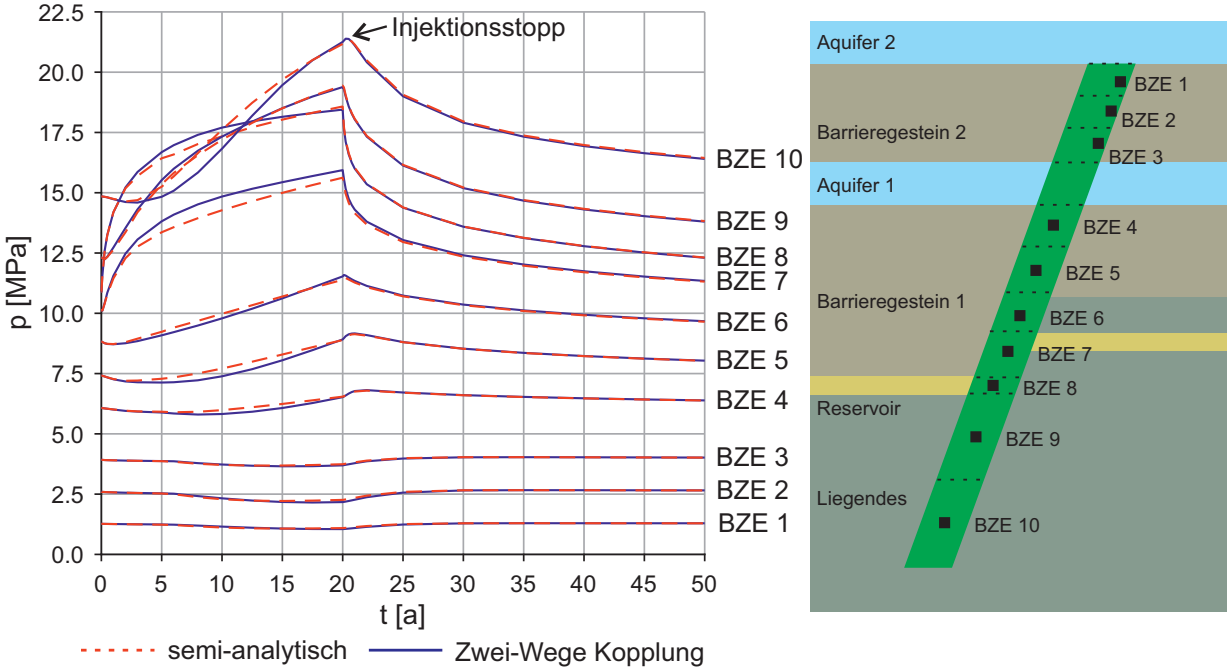


Bild 7.32 M6: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0027 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich für BZE 7 und BZE 8 geringe Abweichungen verzeichnet.

Qualitativ ähnliche Verläufe zeigen ebenfalls die in Bild 7.32 dargestellten zeitlichen Porendruckverläufe in den Bezugspunkten 1 bis 10 von M6. Dieser Standort zeigt für die Zweiwegkopplung einen maximalen Referenzporendruck von 18,3 MPa einhergehend mit einer maximalen Porenzahl von 6,9 % in BZE 9. Für die semi-analytische Kopplung steigt der Referenzdruck auf 18,5 MPa und führt zu einer Porenzahl von 6,78 %, die mit einem Permeabilitätsmultiplikator von 10,9 einhergeht.

Bild 7.33 zeigt die zeitlichen Porendruckverläufe für Modellvariation M8, die zwei 1000 m voneinander entfernt liegende geologische Störungen repräsentiert. Hierbei weist im Fall der Zweiwegkopplung der Referenzporendruck der ersten Störung einen Wert von 18,3 MPa und der der Zweiten einen von 17,1 MPa auf. Es wurden in BZE 6 beziehungsweise 13 maximale Porenzahlen von 7,0 % und 6,2 % verzeichnet. Im semi-analytischen Fall wurden ein Referenzporendruck p_{ref1} von 18,5 MPa und ein p_{ref2} von 17,0 MPa, einhergehend mit Porenzahlen in Höhe von 6,7 % beziehungsweise 6,35 % beobachtet. Dies ging mit einem maximalen Permeabilitätsmultiplikator von 10,2 einher.

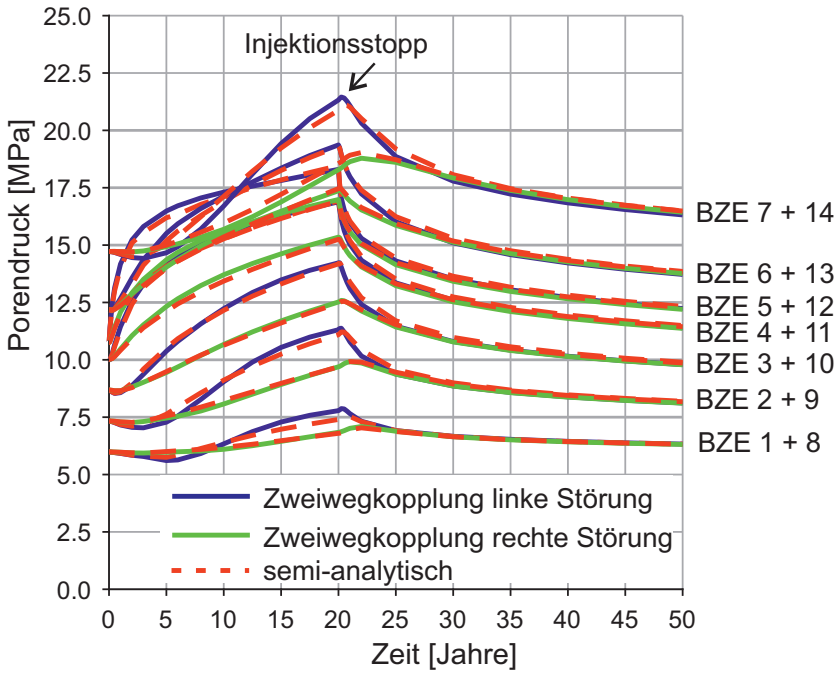


Bild 7.33 M8: Die zeitlichen Porendruckverläufe von semi-analytisch und zweiweggekoppelten Simulationen unter Verwendung von $k_{initial} = 10^{-16}$ m² und einer Injektionsrate von 0,0027 kg/s/m zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Es werden ausschließlich nach etwa 3 bis 10 Jahren für tiefergelegene und nach etwa 5 bis 15 Jahren für höhergelegene BZEs geringe Abweichungen verzeichnet.

Eine Zusammenfassung der absoluten und relativen Abweichungen der Referenzporendrücke in Abhängigkeit der Kopplungsart liefert Tabelle 7.8.

Tabelle 7.8 Zusammenstellung der ermittelten absoluten und relativen Abweichungen des Referenzporendrucks p_{ref} zwischen zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen für $k = 10^{-16}$ m² nach 20 Jahren Injektionszeit.

Modellvariation	Referenzporendrücke p_{ref} [MPa]		Absolute Abweichung Δp_{ref} [MPa]	Prozentuale Abweichung [%]
	Zweiwegkopplung	semi-analytisch		
M1	17,29	17,286	-0,004	-0,02
M2	17,18	17,24	+0,06	+0,35
M3	18,0	18,3	+0,3	+1,6
M4	18,5	19,0	+0,5	+2,7
M5	18,75	19,3	+0,55	+2,9
M6	18,3	18,5	+0,2	+1,1
M8 (Störung 1)	18,3	18,5	+0,2	+1,1
M8 (Störung 2)	17,1	17,0	-0,1	-0,6

Es fällt auf, dass die semi-analytische Kopplung die Referenzporendrücke in der Regel gering überschätzt. Ein Vergleich der Porendruckentwicklungen in den Bezugspunkten zeigt, dass es für die oberhalb des Reservoirs gelegenen Bezugspunkte in der Anfangsphase zu einer geringen Unterschätzung kommt, während der Druck der unterhalb des Reservoirs gelegenen tendenziell überschätzt wird. Insgesamt ist jedoch festzuhalten, dass die mit der semi-analytischen Kopplung ermittelten zeitlichen Porendruckentwicklungen sowohl in den Bezugs- als auch in den Referenzelementen, verglichen mit denen der als Vergleichssimulation dienenden Zweiwegkopplung, in allen Simulationen eine sehr gute Übereinstimmung zeigen.

Entsprechend der Zusammenstellung von Tabelle 7.8 ist für M5 eine maximale absolute Abweichung von 0,55 MPa festzustellen, was einer relativen Abweichung von 2,9 % entspricht. Zudem weist diese Modellvariation, wie in Bild 7.31 zu sehen, ebenfalls die höchsten Abweichungen zwischen den zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs auf. Für BZE 7 betragen diese nach 7,5 Jahren Injektionsdauer 1,29 MPa. Dies entspricht bei einem Vergleich der absoluten Porendrücke einer Überschätzung des Porendrucks um 8% durch den semi-analytischen Ansatz. Die mit beiden Kopplungsarten ermittelten Porendrücke gleichen sich jedoch bis zum Ende der Injektionsperiode wieder an.

Im Folgenden werden durch eine detaillierte Auswertung der Porenzahlentwicklungen von M5 die Effekte, die zu diesen Abweichungen führen, herausgearbeitet. Hierzu werden wie in Bild 7.34 zu sehen, die zeitlichen Porenzahlentwicklungen der Zweiwegkopplung (blaue Linien) und des semi-analytischen Ansatzes (schwarz gestrichelte Linien) miteinander verglichen. Dargestellt sind exemplarisch die Entwicklungen für BZE 1, 5, 6 und 7, da sie die größten Abweichungen aufweisen.

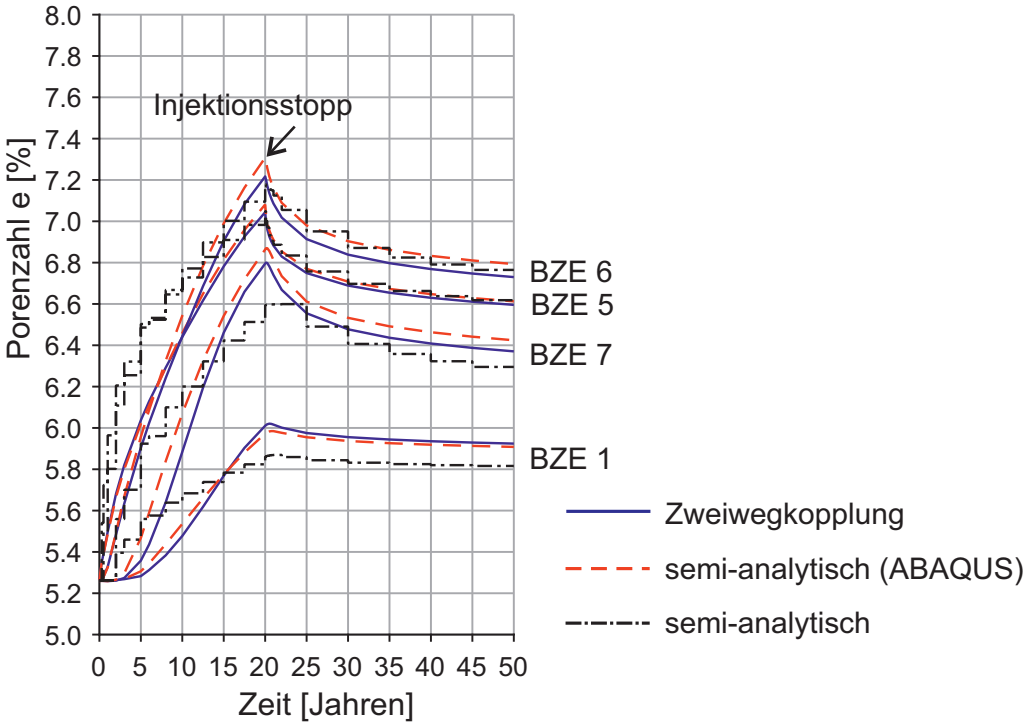


Bild 7.34 M5: $k_{initial} = 10^{-16}$ m², 0,0032 kg/s/m: Ein Vergleich der Porenzahlentwicklungen in BZE 1, 5, 6 und 7 zeigt die Überschätzung der Porenzahl zu Beginn der Simulation und eine Unterschätzung zum Ende.

Da im semi-analytischen Ansatz die Porenzahl nur einmal zu Beginn des Simulationsschrittes aktualisiert wird, weisen die zugehörigen Verläufe eine treppenartige Struktur auf. Wie bereits in Kapitel 6.2 beschrieben, koppelt ABAQUS die hydromechanischen Prozesse hingegen monolithisch. Deshalb ändern sich die Porenzahl in der zweiweggekoppelten Simulation während eines Simulationsschrittes sukzessive, was zu einem kontinuierlichen Verlauf ohne Sprünge führt.

Es zeigt sich, dass der semi-analytische Ansatz, entsprechend der Begründung in Kapitel 7.5.3, die Porenzahlentwicklung in der Anfangsphase nach Injektionsbeginn überschätzt und sowohl in der Phase vor Injektionsstopp als auch in der Postinjektionsphase unterschätzt. Während sich die beobachteten Abweichungen zwischen beiden Porenzahlentwicklungen in den anderen BZEs sowohl in dieser als auch in denen der anderen Simulationen generell niedriger oder sogar vernachlässigbar gering darstellen, betragen in diesem Ausnahmefall die höchsten anfänglichen Abweichungen (BZE 7) kurzfristig 0,5 Prozentpunkte. Eine Überschätzung der Porenzahl bewirkt wiederum eine schnellere Permeabilitätserhöhung in den Störungselementen. Folglich resultieren die anfänglich geringeren Porendrücke in den oberhalb des Reservoirs gelegenen BZEs (vgl. Bild 7.27 bis Bild 7.33) daraus, dass aufgrund der höheren Permeabilität und Porosität der Referenzporendruck p_{ref} anfangs geringer ausfällt. Eine Überschätzung des Porendrucks in den tiefer gelegenen BZEs kommt wiederum daher, dass sich der Druck aufgrund der höheren Permeabilität schneller in tiefere Regionen der Störung ausbreiten kann.

Zusätzlich ist in Bild 7.34 als rot gestrichelte Linie der Verlauf der während der semi-analytischen Kopplung in ABAQUS tatsächlich verwendeten Porenzahl dargestellt. Wie bereits in Kapitel 6.2 erläutert, kann während einer ABAQUS-Simulation, dadurch bedingt, dass das Programmsystem eine monolithische Kopplung verwendet, ausschließlich die Permeabilität autonom von außen gesteuert werden. Weil es sich bei der Porenzahl um keine frei definierbare Variable handelt, wird diese während der Simulation durch die monolithische Kopplung iterativ durch ABAQUS selbst angepasst. Wie in Bild 7.34 zu erkennen, zeigen sich erwartungsgemäß zwischen den roten und den blauen Kurven Abweichungen, jedoch tritt dadurch, dass die rot gestrichelten Linien nicht deckungsgleich mit den schwarz gestrichelten verlaufen, ein Fehler auf.

Dieser wurde in erster Näherung in den Parameterstudien P1, P2 und P3 ermittelt. Da bei diesen die Simulationen einweggekoppelt durchgeführt wurden, bewirkte die monolithische Kopplung eine Beeinflussung des ermittelten Porendrucks durch die abweichenden Porenzahlen. Hierbei wurden, wie in Bild 7.11 bis Bild 7.13 zu erkennen, für absolute Porenzahlabweichungen von 0,4 Prozentpunkten lediglich Porendruckabweichungen von 0,05 MPa beobachtet. Folglich wird der in den semi-analytisch gekoppelten Simulationen auftretende Fehler als vernachlässigbar gering eingeschätzt.

Abschließend liefert Tabelle 7.9 einen Vergleich der kumulierten Volumenströme aller Modellvariationen, die über einen Zeitraum von 20 Jahren Injektionszeit aus der Störung in den höhergelegenen GWL geflossen sind. In dieser Auswertung wurden ausschließlich die zuvor ausgewerteten Szenarien berücksichtigt, die eine Störungspermeabilität von 10^{-16} m² und die maximale Injektionsrate verwenden.

Tabelle 7.9 Kumulation des am Auslass der Störung in den höhergelegenen GWL verdrängten Fluidvolumens für alle Modellvariationen, einer initialen Störungspermeabilität von 10^{-16} m² und der höchsten Injektionsrate.

Verdrängtes Fluidvolumen [m³/m]			
Modellvariation	**Zweiwegkopplung**	**semi-analytische Kopplung**	**Prozentuale Abweichung [%]**
M1	27,2	30,0	10,2
M2	69,7	67,7	2,9
M3	15,5	17,0	9,7
M4	16,4	15,0	8,5
M5	18,4	13,2	28,2
M6	5,5	8,6	56,4
M8 (linke Störung)	57,8	40,9	29,2
M8 (rechte Störung)	13,0	15,0	15,4

Dargestellt sind sowohl die Volumenströme der Zweiweg- als auch der semi-analytischen Kopplung. Das aus der Störung in den höhergelegenen GWL verdrängte Volumen entspricht im Fall von M6 0,3 % und im Fall von M2 3,9 % des insgesamt in das Reservoir injizierten Fluidvolumens. In Anbetracht der Tatsache, dass es sich lediglich um einen Betrachtungszeitraum von 20 Jahren handelt, ist die Leckage als hoch einzustufen. Da es sich hierbei jedoch um hydraulisch reaktivierte Störungen handelt, stellt die Höhe der ermittelten Fluidflüsse eine realistische Größe dar. Von im Zusammenhang mit reaktivierten Störungen ermittelten erhöhten Fluidflüssen solcher Größenordnung berichtet ebenfalls die in Kapitel 4.1 detailliert erläuterte Arbeit von Cappa und Rutqvist (2011).

Unter Vernachlässigung der Ergebnisse von Modellvariation M6, die aufgrund der geringsten absoluten Werte einen Ausnahmefall darstellen, wird die größte absolute Abweichung für die linke, 500 m von der Injektionsstelle entfernt gelegene Störung von M8 verzeichnet. Das mit der Zweiwegkopplung ermittelte höhere Fluidvolumen lässt sich dadurch erklären, dass im semi-analytischen Ansatz die Porenzahlentwicklung von Störung 1 etwas geringer und die von Störung 2 etwas höher als in der zweiweggekoppelten Simulation ausfällt. Bei vergleichbaren Drücken resultiert hieraus nach dem Gesetz von Darcy eine entsprechend geringe Filtergeschwindigkeit. Die Abweichungen belaufen sich im Fall von M8 folglich auf 29,2 %. Dessen ungeachtet liegen alle beobachteten Abweichungen innerhalb eines akzeptablen Rahmens.

Dadurch, dass der Fluidfluss im Reservoir im Fall von M8 zusätzlich durch die zweite Störung behindert ist, baut sich unter ansonsten identischen Bedingungen zwischen den beiden Störungen ein im Verhältnis zu M1 höherer Porendruck im Reservoir auf. Solche Effekte werden, wie in Kapitel 4.1 erläutert, auch von Tillner et al. (2013) und Tillner (2015) beschrieben. Hierdurch fällt der Referenzporendruck p_{refl} von M8 entsprechend um 1,45 MPa höher aus, was in Kombination mit größeren Porenzahlanstiegen dazu führt, dass der Betrag des verdrängten Fluidvolumens um mehr als das Doppelte höher ausfällt.

Die anderen in Anhang F dargestellten Ergebnisse von Simulationen, die eine geringere initiale Störungspermeabilität verwenden, zeigen qualitativ dieselben Verläufe wie die zuvor beschriebenen. Es werden jedoch allgemein geringere Porendrücke und ein geringerer Porenzahlanstieg beobachtet. Zudem fallen die Abweichungen zwischen den Porendrücken der beiden hydromechanischen Kopplungen vernachlässigbar gering aus. Insgesamt lässt sich festhalten, dass für alle untersuchten Modellvariationen sowohl unter Berücksichtigung von unterschiedlichen initialen Störungspermeabilitäten als auch von unterschiedlichen Injektionsraten für die Verläufe der mit beiden Kopplungsarten ermittelten zeitlichen Porendrücke eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt werden kann. Hieraus resultiert zudem, dass das in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten variante Verhalten von $p_{kontr\,2}$ vernachlässigbar ist. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass die teilweise anfänglich hohen Porenzahlabweichungen zwischen den $e(p_{ref})$-Funktionen aus Zweiwegkopplungen und deren semi-analytischen Approximation (Hypothese 4) nur zu geringen Abweichungen in Bezug auf die Entwicklung der Porendrücke und der akkumulierten Fluidflüsse führen. Unter Berücksichtigung von sieben stratigraphisch und strukturgeologisch unterschiedlich gegliederten Modellvariationen konnte der hydromechanische Kopplungsansatz für Einphasenfluidfluss validiert werden.

7.7. Zusammenfassung und Fazit

Zu Beginn von Kapitel 7 wurden die charakteristischen hydromechanischen Prozesse, die im Zusammenhang mit hydraulisch reaktivierten Störungen auftreten, anhand von Modellvariation M7 beschrieben und diskutiert. Zudem wurden anhand der Ergebnisse dieser Modellvariation die Simulationsergebnisse dieser Arbeit qualitativ durch einen Vergleich von Ergebnissen anderer Autoren validiert.

Durch eine detaillierte Auswertung von Parameterstudie P0 konnte anschließend gezeigt werden, dass sich die plastifizierten Bereiche einer infolge von Porendruckanstieg reaktivierten Störung für unterschiedliche Störungsdiskretisierungen qualitativ ähnlich verteilen. In Abhängigkeit der Störungsdiskretisierung haben die Ergebnisse jedoch auch quantitative Abweichungen erkennen lassen. Hierdurch stellen sich Bereiche, die betragsmäßig ähnlich hohe plastische Dehnungen erfahren haben, im Fall einer gröberen räumlichen Diskretisierung heterogener dar. Infolge dessen wurde festgelegt, dass die Einteilung in Homogenbereiche auf den Ergebnissen der Basissimulation zu erfolgen hat.

Im sich hieran anschließenden Kapitel 7.4.2 wurde untersucht, ob es möglich ist, die auf Grundlage einer Basissimulation ermittelte semi-analytische Parametrisierung auf andere, von der Parametrisierung der Basissimulation abweichende mechanische Materialparameter zu übertragen. Durch Auswertung und Diskussion der Ergebnisse der Parameterstudie P1 bis P3, P6 und P7 konnte gezeigt werden, dass eine Übertragbarkeit auf abweichende Materialparameter, wie beispielsweise den Reibungswinkel oder Dilatanzwinkel, nicht möglich ist. Es ist jedoch gelungen, nachzuweisen, dass eine Variation des Sensitivitätsexponenten in zweiweggekoppelten Simulationen zu invariantem Verhalten der semi-analytischen Parameter in Bezug auf diese Größe führt. Für diesen Parameter ist folglich eine Übertragbarkeit der semi-analytischen Parametrisierung gegeben.

Des Weiteren ist es gelungen die Hypothesen 1 bis 4 durch die Parameterstudien P4, P5, P8 und P9 zu validieren. Zudem konnte in diesem Rahmen gezeigt werden, dass die semi-analytische Parametrisierung einer Basissimulation auf unterschiedliche Permeabilitäten übertragen werden kann, wenn diese höher als $k = 2{,}5 \times 10^{-15}$ m² sind. Zudem konnte im Rahmen der Validierung von Hypothese 2 und 4 die generelle Eignung eines Permeabilitätsmultiplikators von 5 für die Durchführung von Basissimulationen nachgewiesen werden.

Die Simulationsergebnisse zur Validierung von Hypothese 1 haben jedoch verdeutlicht, dass der semi-analytische Parameter $p_{kontr\ 1}$, für Standorte mit einer Barrieregesteinsmächtigkeit von größer als 500 m oder vergleichbar wirkende Wechsellagerungen von geologischen Formationen, in Zusammenhang mit Permeabilitäten von $k \leq 5 \times 10^{-16}$ m² nicht uneingeschränkt invariantes Verhalten zeigt. Die Höhe des hieraus resultierenden Fehlers wird in Kapitel 8 quantifiziert.

Bei der Validierung von Hypothese 3 und 4 wurde zudem gezeigt, dass die $e(p_{ref})$-Kurven von zweiweggekoppelten Simulationen für eine Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² ein ausgeprägt nicht-lineares Verhalten aufweisen. Für deren Approximation durch den semi-analytischen Ansatz wurden in diesen Fällen insbesondere für höhergelegene BZEs minimale Bestimmtheitsmaße von $R^2 = 0{,}84$ ermittelt. Im Rahmen der generellen Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in Kapitel 7.6 konnte dieser Einfluss zu maximalen Porendruckabweichungen von acht Prozent in den Bezugspunkten und zu knapp drei Prozent im Referenzelement quantifiziert werden. Zu guter Letzt ist es in diesem Kapitel gelungen, den semi-analytischen Kopplungsansatz unter Annahme von Einphasenfluidfluss durch die Störung, für sieben stratigraphisch und strukturgeologisch unterschiedlich gegliederte Modellvariationen, zu validieren. Im folgenden Kapitel wird die Gültigkeit von Hypothese 5 durch Mehrphasenfluidfluss-Simulationen überprüft.

8 Validierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes für Mehrphasenfluidfluss durch die Störung

8.1. Zielsetzung

Die in Kapitel 8 präsentierten Ergebnisse von Mehrphasenfluidfluss-Simulationen dienen dazu, die in Kapitel 5.3.3 formulierte Hypothese 5 zu validieren. Im Fall einer niedrigen Störungspermeabilität in Kombination mit einer mehr als 500 m mächtigen Barrieregesteinsformation zeigt der semi-analytische Parameter $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten (Hypothese 1) nicht uneingeschränkt invariantes Verhalten. Diese Problematik wurde in Kapitel 7.5.3 ausführlich diskutiert. Deshalb wird im Folgenden zusätzlich quantifiziert, in welcher Größenordnung sich ein hierbei gegebenenfalls auftretender Fehler auf die Porendruckentwicklung auswirkt. Um dies zu ermöglichen, wurde für die Simulationen dieses Kapitels eine von M1 abgewandelte Modellvariation verwendet, die eine 950 m mächtige Barrieregesteinsformation berücksichtigt.

8.2. Numerische Umsetzung und Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes

Für die Simulation von Mehrphasenfluidfluss-Prozessen in Reservoiren sind hydromechanisch gekoppelte numerische Simulationen Stand der Wissenschaft und Forschung (Altmann et al. (2014), Cappa und Rutqvist (2011), Kempka und Kühn (2013), Rutqvist und Tsang (2002), Rutqvist et al. (2007, 2008); Rutqvist (2010). Aufgrund der in Kapitel 4 beschriebenen Komplexität von hydraulischen Mehrphasenfluidfluss-Prozessen und deren Wechselwirkung mit mechanischen Responsen der durchflossenen Gesteinsformationen und geologischen Störungen bieten sich sequenziell gekoppelte Mehrphasenfluidfluss- und geomechanische Programmsysteme an (Settari und Mourits (1994), Settari et al. (2005), Settari (2012), Kempka et al. (2014, 2015), Tillner et al. (2014), Walters et al. (2002)).

Im Rahmen dieses Kapitels werden die Programmsysteme TOUGH2-MP/ECO_2N und $FLAC^{3D}$ dazu genutzt, um die zuvor in Kapitel 4.4 beschriebenen hydromechanischen sequenziellen Kopplungen (Cappa und Rutqvist (2011), Itasca (2013), Kempka und Kühn (2013), Pruess et al. (1999), Pruess (2005) und Zhang et al. (2008)) sowie die in Kapitel 5 eingeführte semi-analytische Kopplung auszuführen. Hierbei werden ausschließlich sequenziell nicht-iterative Kopplungen verwendet. TOUGH2-MP/ECO_2N führt hierbei die erforderlichen Mehrphasenfluidfluss-Simulationen durch, während das Programmsystem $FLAC^{3D}$ die geomechanische Spannungs- und Verformungsantwort auf Basis von gemittelten Porendrücken ermittelt.

Zur Lösung der in Kapitel 4.2 und 4.3 beschriebenen hydraulischen und mechanischen Differenzialgleichungssysteme verwenden beide Programmsysteme die Methode der Finiten-Differenzen (FDM). Bei dieser Methode handelt es sich, wie bei der in Kapitel 6.2 beschriebenen Finite-Elemente-Methode (FEM) um eine numerische Näherungsmethode, um partielle Differenzialgleichungen in ein numerisch lösbares algebraisches Gleichungssystem zu überführen. Im Gegensatz zur Finite-Elemente-Methode, bei der diese Überführung durch die Verwendung von Ansatzfunktionen geschieht, wird bei der Finite-Differenzen-Methode ein Kontinuum durch die Definition von endlich vielen Gitterpunkten in finite Abschnitte/ Differenzen unterteilt. Für jeden Knoten lassen sich anschließend Differenzenquotienten bilden, mit denen sich dann wiederum die Ortsableitungen der Differenzialgleichung approximieren lassen.

Zur Lösung dieser algebraischen Gleichungssysteme verwendet TOUGH2-MP/ECO$_2$N das Newton-Raphson-Verfahren (Pruess et al. (1999)). Hierbei handelt es sich um ein implizites Lösungsverfahren, bei dem nach jedem Iterationsschritt die globale Steifigkeitsmatrix neu berechnet werden muss. Im Gegensatz hierzu verwendet FLAC^{3D} ein explizites Lösungsverfahren bei dem der Deformationstensor als Funktion der Ausgangskoordinaten (Lagrange-Formulierung) formuliert ist. Der Vorteil von expliziten Lösungsverfahren liegt darin, dass die globale Steifigkeitsmatrix nicht für jeden Berechnungsschritt neu aufgestellt und invertiert werden muss, wodurch sich geringere Rechenzeiten ergeben. Da es sich in diesem Fall jedoch um eine Vorwärtsintegration handelt, bei der die Verschiebungen des Folgeschritts i+1 ausgehend von den Ergebnissen des aktuellen i berechnet werden, können die Ergebnisse von der exakten Lösung in erheblichem Maße divergieren (von Wolffersdorf und Schweiger (2017) in GB-TB (Witt (2017))). Um dies zu verhindern, sind ausreichend kleine Zeitschritte erforderlich (Tran et al. (2005), von Wolffersdorf und Schweiger (2017) in GB-TB (Witt (2017))).

Wie bereits zuvor in Kapitel 4.2 beschrieben, verwendet TOUGH2-MP/ECO$_2$N vier unterschiedliche Differenzialgleichungen um die Primärvariablen Partialporendruck der Gasphase p_g, Massenanteil NaCl X_{sm}, Gassättigung S_g und Temperatur T zu lösen.

Für die Umsetzung einer sequenziellen nicht-iterativen hydromechanischen Kopplung zwischen beiden Programmsystemen dient eine in FLAC^{3D} implementierte Schnittstelle, die in der Programmiersprache FISH formuliert ist. Diese Schnittstelle ermöglicht es, durch die Definition von sogenannten Extravariablen, Kopplungsparameter wie den gemittelten Porendruck p, die Temperatur T, Porositäten ϕ und Permeabilitäten k zum Ende eines Simulationsschrittes im Zwischenspeicher abzulegen. Somit stehen diese Informationen für die Folgesimulation des entsprechend anderen Programmsystems zur Verfügung.

Zudem ermöglicht diese Schnittstelle autonome Rechenoperationen, wie sie bei der Implementierung des semi-analytischen Kopplungsansatzes erforderlich sind, auszuführen. Folglich wird diese Schnittstelle bei der Durchführung von semi-analytisch gekoppelten Simulationen dazu genutzt, um zwischen dem neuen Ansatz und TOUGH2-MP/ECO$_2$N zu kommunizieren. In diesem Fall berechnet das Mehrphasenfluidfluss-Programmsystem gemittelte Porendrücke, die in Form des Referenzporendrucks als Extravariable im Zwischenspeicher der Schnittstelle abgelegt werden.

Anschließend erfolgt dann auf Basis des aktuellen Referenzporendrucks und dem Wert des vorherigen Schrittes die semi-analytische Aktualisierung der Porenzahlen in den BZEs. Mit diesen Werten wird anschließend die Permeabilität der zugehörigen Homogenbereiche aktualisiert. Durch Ablage von beiden Parametern als Extravariablen im Zwischenspeicher stehen diese der Folgesimulation von TOUGH2-MP/ECO$_2$N zur Verfügung.

8.3. Modellbeschreibung des untersuchten synthetischen geologischen CO_2-Speichers

8.3.1. Beschreibung der verwendeten Modellvariation, Homogenbereiche, Bezugs- und Referenzelemente

Entsprechend der Zielsetzung dieses Kapitels wurde Modellvariation M1 adaptiert, um den in Bild 8.1 dargestellten und in diesem Kapitel verwendeten Modellstandort zu definieren. In diesem Zusammenhang wurde die Mächtigkeit der Barrieregesteinsformation auf 950 m erhöht. Um für die Validierung von Hypothese 5 einen möglichst großen Fluidfluss der Gasphase in die Störung zu erzielen, wurde zusätzlich die Transmissivität der Störung erhöht, indem die Breite auf 40 m verdoppelt wurde.

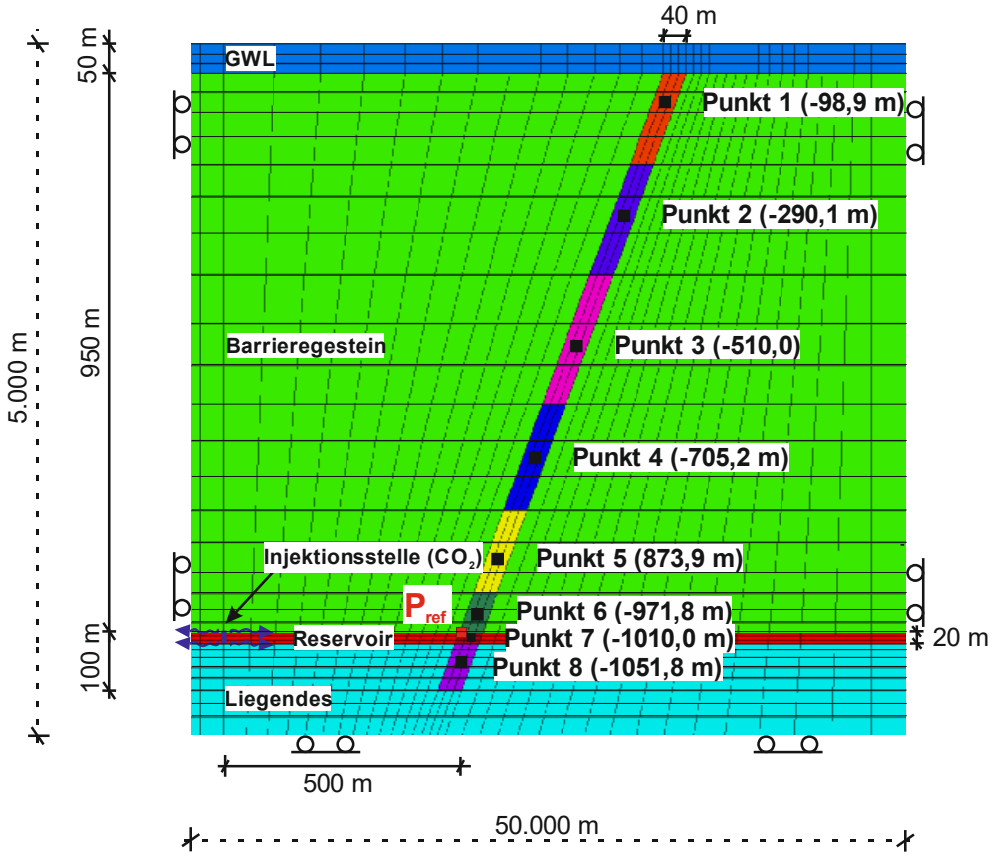


Bild 8.1 Der Modellauschnitt von Modellvariation M10 zeigt die betrachteten Gesteinsformationen sowie die definierten Homogenbereiche. Die BZEs (Punkt 1 bis 8) sind als schwarze Rechtecke und das Referenzelement p_{ref} als rotes Quadrat dargestellt.

8.3.2. Beschreibung des Berechnungsausschnitts, der räumlichen Diskretisierung und der Randbedingungen

Um ungestörte hydraulische und mechanische Randbedingungen definieren zu können, wird ein identischer Modellausschnitt wie beim in Kapitel 6.4 definierten Basismodell verwendet. Die Modellhöhe und Breite sind Bild 8.1 zu entnehmen. Als mechanische Randbedingungen wurden an der Modellunterkante vertikale und an den Seiten horizontale Auflager gesetzt. Hydraulisch offene Randbedingungen wurden an den Rändern im Bereich der grundwasserführenden Formationen sowie an der Geländeoberkante durch entsprechende Dirichlet-Randbedingungen definiert. An den Rändern der Barrieregesteinsformation und des Liegenden wurden an den Modellrändern, der Grenze zum Reservoir, zur Störung und zum GWL geschlossene hydraulische Randbedingungen gesetzt, um einen möglichst hohen Fluidfluss der Gasphase in die Störung zu erzielen.

Die in Bild 8.1 dargestellte Modellvariation M10 wurde entsprechend Tabelle 8.1 in vertikaler Richtung diskretisiert.

Tabelle 8.1 Vertikale Diskretisierung der Gesteinsformationen von Modellvariation M10.

Formation	Elementanzahl in vertikaler Richtung
GWL	3
Barrieregestein	19
Reservoir	3
Liegendes	46

In diesem Zusammenhang wurde der obere GWL in vertikaler Richtung durch drei, das Barrieregestein durch 19, das Reservoir durch drei und das Liegende durch 46 Elementreihen diskretisiert. Die horizontale Diskretisierung wurde so optimiert, dass die von den Programmsystemen geforderten Qualitätsanforderungen eingehalten sind. Die Störung ist entsprechend der Definition aus Kapitel 7.4.1 in horizontaler Richtung durch drei Elemente diskretisiert.

8.3.3. Definition der verwendeten Homogenbereiche, Bezugselemente und Referenzelemente für den semi-analytischen Kopplungsansatz

Die geologische Störung wurde, wie in Bild 8.1 zu sehen, in acht Homogenbereiche eingeteilt, deren jeweiliges hydromechanisches Materialverhalten durch jeweils ein BZE (Punkt 1 bis 8) beschrieben wird. Die Tiefenlage der jeweiligen BZEs ist ebenfalls Bild 8.1 beziehungsweise Tabelle 8.4 zu entnehmen. Zusätzlich wurde im Übergangsbereich zwischen Störung und Reservoir ein Referenzelement für die Ermittlung von p_{ref} definiert.

Abgesehen vom obersten Homogenbereich, der vier Elementreihen beinhaltet, enthalten die anderen in vertikaler Richtung drei. Um das Qualitätskriterium bezüglich eines maximal zulässigen

Größenverhältnisses von zwei in Bezug auf zwei benachbarte Elemente einzuhalten, wurde die Maschenweite des FE-Netzes von der Oberkante des Reservoirs und von der Unterseite des GWL zur Mitte der Barrieregesteinsformation hin aufgeweitet. Hierdurch wurde zwischen BZE 2 und 3 ein Abstand von 220 m erzielt, während sich dieser im unteren Bereich auf bis zu 40 m reduziert.

8.3.4. Verwendete Stoffgesetze, Parametrisierung und Initialisierung des Modells

Bezüglich der verwendeten Stoffgesetze und der in Tabelle 8.2 dargestellten Materialparameter orientiert sich M10 an der Definition von Kapitel 6.4.4. Entsprechend gilt für den Standort linear-elastisches und ideal plastisches Materialverhalten unter Verwendung der Mohr-Coulombschen Bruchbedingung. Hinsichtlich der Materialparameter weicht M10 vom Basismodell dahingehend ab, dass im Reservoir eine isotrope Permeabilität von 10^{-13} m² angesetzt wurde. Aufgrund der Erfahrungen aus den vorangegangenen Simulationen, in denen keine Überschreitungen im Hangenden und im Liegenden aufgetreten sind, wird folglich rein elastisches Materialverhalten für das Barrieregestein und das Liegende definiert.

Die Permeabilitäts-Porositätsanpassung erfolgt ebenfalls nach Gleichung (4.67) und (4.68), wobei ein Sensitivitätsexponent von 10 verwendet wird.

Da die im Rahmen dieses Kapitels durchgeführten Simulationen Mehrphasenfluidfluss berücksichtigen, wird in diesem Fall der vorhandene Porenraum von beiden Fluiden durchflossen. Infolge der hierdurch auftretenden, in Kapitel 4.2 beschrieben Prozesse, sind für beide Fluidphasen in Abhängigkeit der Gassättigung relative Permeabilitäten zu definieren, wodurch sich die hydraulische Leitfähigkeit des vom jeweiligen Medium durchströmten Porenraums reduziert. Hieraus resultieren, verglichen mit Einphasenfluidfluss, höhere Partialdrücke in den jeweiligen Phasen.

Um den hieraus resultierenden Effekt zwischen der Einphasenfluidfluss-Basissimulation und der zweiweggekoppelten Mehrphasenfluidfluss-Simulation zu erhöhen, wurde in den folgenden Simulationen grundsätzlich keine Salinität der Formationsfluide berücksichtigt. Für die Berechnung der jeweiligen relativen Permeabilität wurden die in Tabelle 8.2 angegebenen Parameter verwendet.

Tabelle 8.2 Verwendete Material- und Fluidparameter von Modellvariation M10.

Parameter	Quellennachweis	Reservoir	Barriere-gestein	Liegendes	GWL [GOK]	Störung
E-Modul [GPa]	Cappa und Rutqvist (2011)	10	10	10	10	1
Poissonzahl ν [-]	Cappa und Rutqvist (2011)	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Kornrohdichte ρ_s [kg/m³]	Cappa und Rutqvist (2011)	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260
Biot-Koeffizient α [-]	Cappa und Rutqvist (2011)	1	1	1	1	1
Reibungswinkel φ [ ]	Cappa und Rutqvist (2011)	-	-	-	-	25
Dilatanzwinkel ψ [ ]	Cappa und Rutqvist (2011)	-	-	-	-	20
Porosität ϕ [-]	Cappa und Rutqvist (2011)	0,1	-	-	0,1	0,05
Permeabilität k [m²]	Cappa und Rutqvist (2011)	10^{-13}	-	-	10^{-14}	10^{-16}
Residualsättigung der Gasphase (CO_2) [-]	Cappa und Rutqvist (2011)	0,05	-	-	0,05	0,05
Residualsättigung der Fluidphase [-]	angenommen	0,15	-	-	0,15	0,15
Kapillarer Eindringdruck P_d [kPa] (van Genuchten (1980))	angenommen	12,6	-	-	12,6	12,6
Parameter m_{vG} [-] (van Genuchten (1980))	angenommen	0,65	-	-	0,65	0,65

Die hieraus resultierenden Kurven sind in Bild 8.2 dargestellt. Für die Berechnung der relativen Permeabilität der Fluidphase k_{rf} wurde Gleichung (4.16) (Mualem (1976) und van Genuchten (1980)) und für die Bestimmung der relativen Permeabilität der Gasphase k_{rg} Gleichung (4.17)

verwendet. Im zweiten Fall wurden hierzu, entsprechend der Angaben des TOUGH 2 Handbuchs (Pruess et al. (1999)), die Exponenten nach Corey (1954) verwendet.

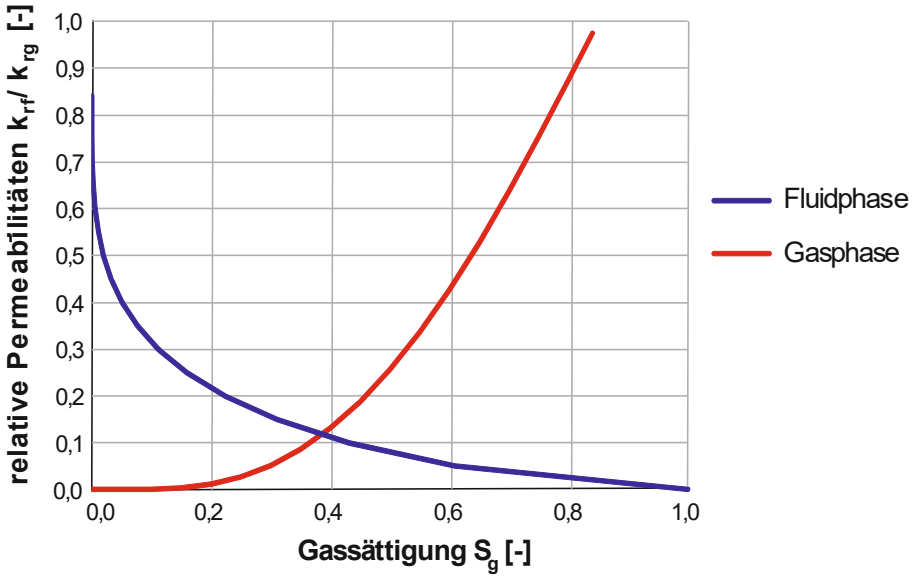


Bild 8.2 Verwendete relative Permeabilitäts-Gassättigungskurven für die Fluidphase k_{rf} nach Mualem (1976) und van Genuchten (1980) sowie die Gasphase k_{rg} nach Corey (1954).

Unter Annahme eines Atmosphärendrucks von 0,101325 MPa beträgt der Porendruck an der Oberkante des Reservoir 9,91 MPa. Die Fluidparameter Dichte und dynamische Viskosität wurden für H_2O und CO_2 entsprechend der in Kapitel 7 beschriebenen Simulationen nach Battistelli et al. (1997) und Spycher et al. (2003) ermittelt.

8.4. Simulationsdurchführung und Simulationsübersicht

Eine Übersicht der durchgeführten Simulationen liefert Tabelle 8.3. Insgesamt wurden eine Basissimulation, für die entsprechend der Ergebnisse aus Kapitel 7.5.3 ein Permeabilitätsmultiplikator von 5,0 verwendet wurde, sowie jeweils drei zweiweg- und semi-analytisch gekoppelte Simulationen durchgeführt. Die im folgenden vorgestellten Mehrphasenfluidfluss-Simulationen wurden im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes am Deutschen GeoForschungsZentrum GFZ Potsdam, einem Projektpartner aus dem vom BMBF/DFG-Sonderprogramm GEOTECHNOLOGIEN geförderten Verbundprojekt CO_2RINA, durchgeführt.

Tabelle 8.3 Gesamtübersicht der durchgeführten Simulationen und variierten Parameter zur Validierung von Hypothese 5.

Simulationsart	Phasenfluss	Initiale Störungspermeabilität [m²]	Injektionsrate [kg/s/m]
Basissimulation	Einphasenfluidfluss	5×10^{-16}	0,00180
Zweiwegkopplung	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00153
Zweiwegkopplung	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00190
Zweiwegkopplung	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00230
semi-analytisch	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00153
semi-analytisch	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00190
semi-analytisch	Mehrphasenfluidfluss	1×10^{-16}	0,00230

Die Basissimulation berücksichtigt einen Injektionszeitraum von 20 Jahren, während der H_2O mit einer Rate von 0,0018 kg/s/m injiziert wird. Im Fall der anderen Simulationen wurden CO_2-Injektionsraten in Höhe von 0,00153, 0,0019 und 0,0023 kg/s/m simuliert. Der Simulationsprozess erfolgte durch die Definition von drei Injektionselementen (Pruess (2005)) im Reservoir. In allen Simulationen wurde eine Postinjektionsphase von 30 Jahren berücksichtigt. Weil bei der Validierung von Hypothese 1 in Kapitel 7.4.3 und 7.5.3 für die $e(p_{ref})$-Kurven von M7 in Bezug auf die Injektionsrate unter Berücksichtigung der niedrigsten Störungspermeabilität variantes Verhalten festzustellen ist, wird in diesem Kapitel ausschließlich eine initiale Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² untersucht, um den daraus resultierenden Einfluss auf die Porendrücke zu ermitteln.

Im Rahmen der durchgeführten Simulationen wurde die automatische Zeitdiskretisierung des Programmsystems TOUGH2-MP/ECO_2N verwendet. Hierdurch wird in Abhängigkeit der vorgegebenen Konvergenzkriterien und der Komplexität der Problemstellung in jeder Simulation die Anzahl der Simulationsschritte entsprechend vom Programmsystem gewählt. Aufgrund dessen, dass sequenziell nicht iterative Kopplungen eine ausreichend feine Diskretisierung erfordern (Tran et al. (2005), von Wolffersdorf und Schweiger (2017) in GB-TB (Witt (2017))), wurden im Rahmen dieser Simulationen, wie in Tabelle 8.6 aufgelistet, zwischen 132 und 235 Kopplungszeitpunkte verwendet, wobei das kleinste Zeitinkrement zu Simulationsbeginn 250 Sekunden und das maximale zum Ende der Simulation 796 Tage beträgt.

Die mithilfe der Ergebnisse der Basissimulation ermittelte und Tabelle 8.4 zu entnehmende semi-analytische Parametrisierung erfolgte entsprechend der in Kapitel 5.3.2 gegebenen Beschreibung.

Tabelle 8.4 Verwendete semi-analytische Parametrisierung für M10 und k = 10^{-16} m².

		Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven [°]			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**Tiefe [m]**	α_1	α_2	α_3	$P_{kontr\ 1}$	$P_{kontr\ 2}$
1	98,9	3,9	0,0	1,0	12,3	12,83
2	290,1	11,7	0,0	2,6	12,44	13,07
3	510,0	15,1	0,0	3,6	12,3	13,34
4	705,2	15,6	0,0	4,1	12,06	13,74
5	873,9	13,8	0,0	4,1	11,77	14,14
6	971,8	11,2	0,4	3,6	11,61	14,38
7	1010,0	9,6	1,9	3,3	11,53	13,97
8	1051,8	7,2	0,4	2,9	11,62	14,52

8.5. Ergebnisse und Diskussion der FE-Simulationen

Die folgenden drei Abbildungen vergleichen die zeitlichen Porendruckentwicklungen von zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen, wobei Bild 8.3 die Ergebnisse für eine CO_2-Injektionsrate von 0,00153 kg/s/m zeigt, während die in Bild 8.4 und in Bild 8.5 dargestellten Simulationsergebnisse solche von 0,0019 kg/s/m beziehungsweise von 0,0023 kg/s/m berücksichtigen.

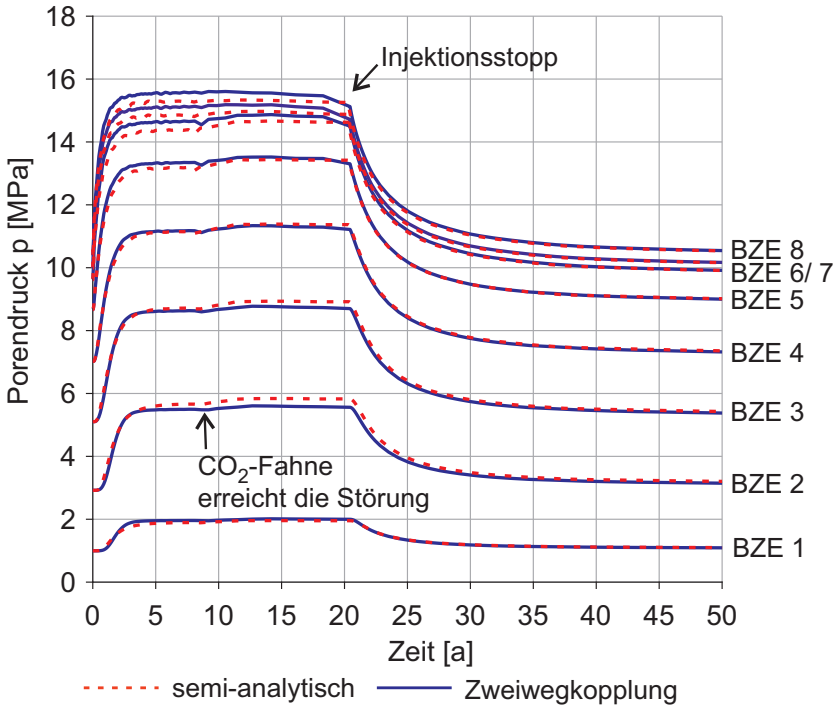


Bild 8.3 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,00153 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rote gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden Kopplungsmethoden von 5 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 5,7 erreicht.

Die Porendrücke zeigen in allen drei Simulationen einen starken anfänglichen Anstieg innerhalb der ersten drei Jahre, um sich anschließend auf einem nahezu konstanten Niveau einzupendeln. Nach Injektionsstopp bauen sich diese Drücke sukzessive über einen Zeitraum von 30 Jahren ab, wobei der stärkste Porendruckabbau während der ersten fünf Jahre nach Injektionsstopp erfolgt. Die kleinen Porendruckschwankungen auf Höhe des Porendruck-Plateaus sind auf aus Mehrphasenfluidfluss resultierende Effekte zurückzuführen. Insbesondere ist in diesem Zusammenhang die Berücksichtigung der relativen Permeabilitäten des Formationsfluids und CO_2 zu nennen (vgl. Bild 8.2), wodurch sich die effektive Permeabilität des Reservoirs reduziert.

Ein Vergleich mit den in Kapitel 7 beschriebenen Porendruckverläufen zeigt jedoch qualitative Unterschiede. Während die mit TOUGH2-MP/ECO$_2$N und FLAC^{3D} ermittelten Porendruckverläufe ein ausgeprägtes Plateau aufweisen, kommt es bei den Ergebnissen der ABAQUS-Simulationen zu einem fortdauernden sukzessiven Anstieg. Dieser Effekt lässt sich dadurch erklären, dass im Fall der ABAQUS-Simulationen angesichts der monolithischen Kopplung Porenzahländerungen in den an die Störung angrenzenden Formationen, vor allem aber dem Reservoir, stattgefunden haben. Bei den mit TOUGH2-MP/ECO$_2$N und FLAC^{3D} durchgeführten Simulationen erfolgte eine Permeabilitäts- und Porositätsaktualisierung ausschließlich innerhalb der Störungselemente. Des Weiteren wurde in der rein hydraulischen Simulation für die grundwasserleitenden Formationen keine Porenkompressibilität definiert. Aus diesem Grund steigen in diesen Fällen die Porendrücke

im Reservoir deutlich schneller an, wodurch sich im Reservoir, aufgrund entfallender hydromechanischer Effekte, schneller eine Art stationärer Zustand einstellt. Diese Porendruckentwicklung wirkt sich, wie in den drei Abbildungen zu erkennen, entsprechend auf die Porendrücke der innerhalb der Störung gelegenen Bezugspunkte aus.

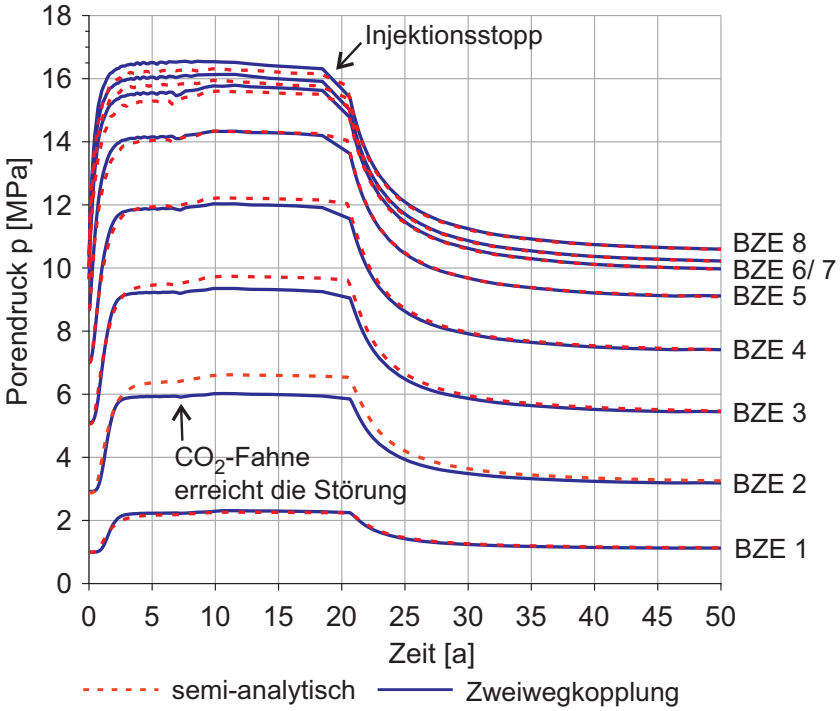


Bild 8.4 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k = 10^{-16}$ m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0019 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rote gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden Kopplungsmethoden von 10 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 7,85 erreicht.

Für die Simulation mit der niedrigsten Injektionsrate (Bild 8.3) tritt im Reservoir ein maximaler Porendruckanstieg von 5,25 MPa, für die mittlere einer von 6,17 MPa und für die höchste einer von 7,06 MPa auf. Diese Anstiege gehen wiederum mit maximal beobachteten Permeabilitätsmultiplikatoren von 5,7, 7,85 und 12,85 einher. Sie wurden in allen drei Simulationen in BZE 4 (Punkt 4) ermittelt, das entsprechend für die jeweilige Injektionsrate maximale Porenzahlen in Höhe von 6,3 %, 6,55 % und 6,9 % verzeichnet.

Ein Vergleich der Porendruckanstiege innerhalb der BZEs zwischen Modellvariation M1 und M10 zeigt ebenfalls erhebliche Unterschiede. Betrachtet man beispielsweise BZE 1 aus M1 (vgl. Bild 7.27) und BZE 3 aus M10, die beide ungefähr in der gleichen Tiefe liegen, so wird in letzterem Fall, wegen der entfallenden drucklosen Entwässerung in den höhergelegen GWL ein Porendruckanstieg für die in Bild 8.5 dargestellte Situation von circa 4,5 MPa erreicht. Abweichend hiervon erfährt BZE 1 hingegen nahezu keinen Porendruckanstieg.

Ein Vergleich der Porenzahlentwicklungen der Simulationsergebnisse aus Kapitel 7 mit den hier vorgestellten zeigt ähnlich hohe Anstiege. Da für M10 innerhalb höher gelegener BZEs jedoch höhere Porendruckanstiege zu verzeichnen sind, fallen die Porenzahlen hier ebenfalls etwas höher aus. Es lässt sich insgesamt festhalten, dass die mit beiden Programmsystemen ermittelten Simulationsergebnisse vergleichbare Ergebnisse liefern.

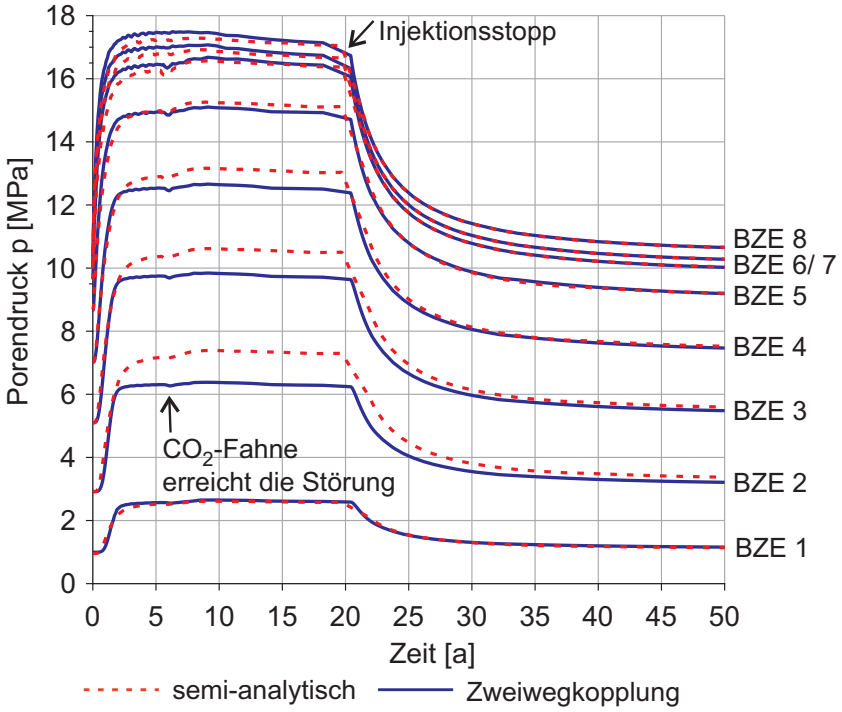


Bild 8.5 Der Vergleich der zeitlichen Porendruckentwicklungen in den BZEs unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von k = 10^{-16} m² und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der zweiweg- (blaue Linie) und der semi-analytisch gekoppelten Simulation (rot gestrichelte Linie). Eine maximale absolute Porendruckabweichung zwischen beiden Kopplungsmethoden von 20 % wurde für BZE 2 beobachtet. Es wurde ein maximaler Permeabilitätsmultiplikator von 12,85 erreicht.

Ein direkter Vergleich der in Bild 8.3 bis Bild 8.5 dargestellten Porendruckverläufe von beiden Kopplungsmethoden zeigt wiederum eine gute bis sehr gute Übereinstimmung. Selbst unter Berücksichtigung einer ungünstigen Barrieregesteinsmächtigkeit von 950 m, wodurch der semi-analytische Parameter $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten variantes Verhalten zeigt (vgl. Kapitel 7.5.3), treten in BZE 2 zwischen beiden Kopplungsarten im Fall der höchsten Injektionsrate Abweichungen von maximal 20 % auf. Hierbei überschätzt der semi-analytische Ansatz die Porendruckentwicklung der Zweiwegkopplung. Für die Ergebnisse der niedrigeren Injektionsraten fallen die Abweichungen entsprechend geringer aus, wobei für die geringste eine Abweichung von 5 % und für die mittlere eine von 10 % zu beobachten ist.

Die in unterschiedlicher Höhe aufgetretenen Abweichungen lassen sich darauf zurückführen, dass in dieser Parameterstudie die Basissimulation mit einer H_2O-Injektionsrate von 0,0018 kg/s/m durchgeführt wurde, was zu einem maximalen Porendruckanstieg im Reservoir von 5,1 MPa ge-

führt hat. Infolge des zuvor erwähnten varianten Verhaltens von $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf die Injektionsrate nimmt dieser Parameter, wie in Bild 7.18 für M7 zu erkennen, für geringe Injektionsraten auch einen entsprechend kleineren Wert an. Deshalb kommt es in den semi-analytisch gekoppelten Simulationen für höhere Injektionsraten entsprechend zu einer verfrühten Aktualisierung der Permeabilität und der Porosität, woraus wiederum die beobachtete beschleunigte Druckausbreitung in höhergelegene Bereiche der Störung resultiert.

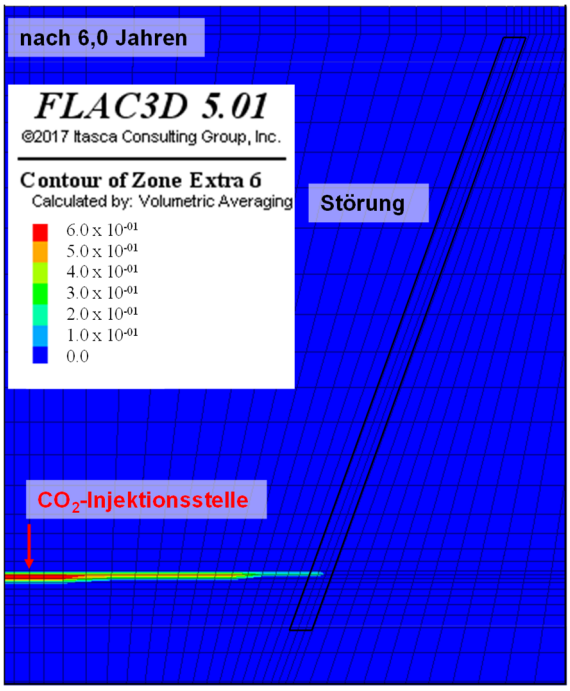


Bild 8.6 In Modellvariation M10 erreicht die CO_2-Fahne nach 6 Jahren Injektionsdauer mit einer Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m die Störung (Zweiwegkopplung).

Die Ausbreitung der CO_2-Fahne zwischen der Injektionsstelle und der Störung ist für den Zeitpunkt sechs Jahre nach Injektionsbeginn in Bild 8.6, zu Injektionsstopp in Bild 8.7 und nach 30 Jahren Postinjektionsphase in Bild 8.8 dargestellt. Für die maximale Injektionsrate von 0,0023 kg/s m erreicht die CO_2-Fahne nach ungefähr sechs Jahren die Störung. Bis zum Zeitpunkt des Injektionsstopps hat sich die CO_2-Phase, wie in Bild 8.7 zu erkennen, im unteren Bereich der Störung ausgebreitet, um dann nach 50 Jahren innerhalb der Störung die größte Ausbreitung bis in eine Tiefe 165 m oberhalb des Reservoirs zu erreichen.

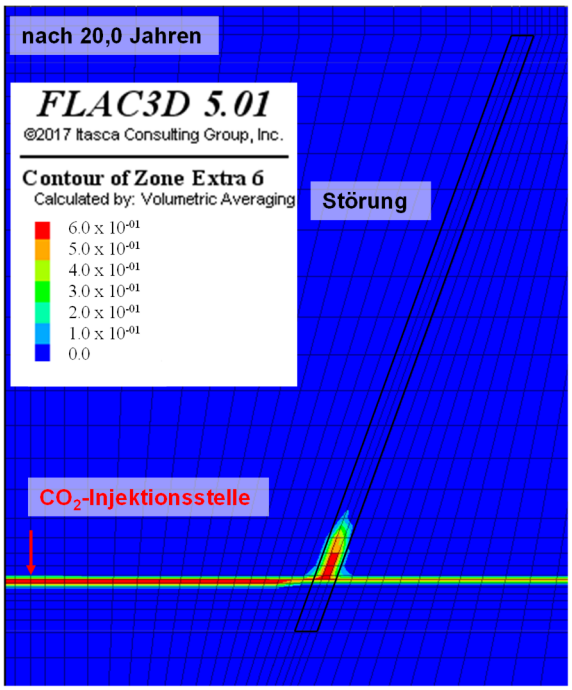


Bild 8.7 Ausbreitung der CO_2-Fahne nach einer Injektionsdauer von 20 Jahren für M10 und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m (Zweiwegkopplung).

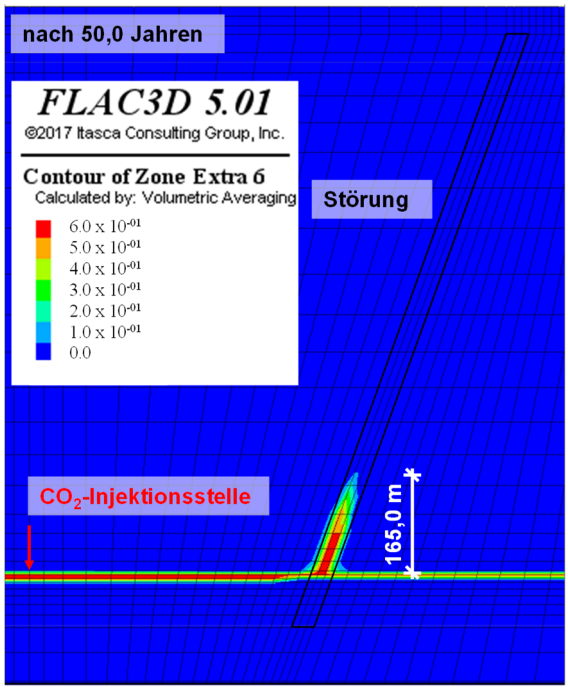


Bild 8.8 Ausbreitung der CO_2-Fahne nach 50 Jahren Simulationszeit für M10 und einer CO_2-Injektionsrate von 0,0023 kg/s/m (Zweiwegkopplung).

Eine Zusammenstellung der Ergebnisse aller durchgeführten Simulationen liefert Tabelle 8.5. Diese gliedert sich in die beiden verwendeten Kopplungsarten, wobei sie die Ergebnisse dieser beiden Rubriken zusätzlich nach der jeweils verwendeten Injektionsrate unterteilt. Zudem werden bezüglich der CO_2-Fahne Angaben zum Zeitpunkt des Erreichens der Störung, zum maximalen

Ausbreitungsradius im Reservoir und zur maximalen Ausbreitung innerhalb der Störung gemacht. Die letzte Spalte liefert Informationen zur maximal beobachteten Gassättigung in der Störung. Es zeigt sich, dass mit steigender Injektionsrate, abgesehen vom Zeitpunkt des Erreichens der Störung, sämtliche in Tabelle 8.5 dargestellten Parameter anwachsen. So erreicht beispielsweise die mit der höchsten Injektionsrate erzeugte Fahne die Störung bereits nach sechs Jahren, während diese im Fall der geringsten hierzu 8,5 Jahre benötigt. Ebenso verhält es sich mit der radialen Ausbreitung im Reservoir in Höhe 2.620 m und mit der Ausbreitung innerhalb der Störung bis in eine Tiefe von -835,0 m. Des Weiteren wird mit der höchsten Injektionsrate ebenfalls die maximal beobachtete Gassättigung von 60,0 % erzielt.

Zum jeweiligen Zeitpunkt, an dem die CO_2-Phase die Störung erreicht, treten, wie in Bild 8.3 bis Bild 8.5 eingezeichnet, abrupte Porendruckänderungen in den Bezugspunkten der Störung auf, die letztendlich zu einer geringen Porendruckerhöhung führen. Dieser Effekt ist auf das Auftreten von teilgesättigten Bedingungen zurückzuführen (vgl. Kapitel 4.2.4). Der daraus resultierende Einfluss von relativen Permeabilitäten bewirkt, dass sich die effektive Permeabilität des Reservoirs reduziert. Damit die Kontinuitätsbedingung weiterhin eingehalten ist, müssen sich entsprechend höhere Gradienten einstellen, woraus die entsprechenden Porendruckschwankungen resultieren. Diesen Effekt beschreiben Cappa und Rutqvist (2011) ebenfalls in ihrer Arbeit.

Tabelle 8.5 Gegenüberstellung der maximalen Ausbreitung der CO_2-Fahne in der Störung und im Reservoir für die betrachteten sechs Szenarien von M10.

Kopplungs-art	Injektions-rate [kg/s/m]	CO_2-Fahne erreicht Störung [Jahre]	Maximaler Ausbreitungs-radius im Reservoir [m]	Maximale CO_2-Ausbreitung in Störung [Tiefe in m]	Maximale Gassättigung in Störung [%]
Zweiweg	0,00153	8,5	2.093	-905,0	53,2
	0,00190	7,5	2.290	-870,0	57,3
	0,00230	6,0	2.620	-835,0	60,0
semi-analytisch	0,00153	8,5	2.040	-900,0	53,5
	0,00190	7,5	2.370	-860,0	57,5
	0,00230	6,0	2614	-855,0	60,0

Da, wie in Bild 8.8 zu sehen, selbst in der Simulation mit der höchsten Injektionsrate die CO_2-Fahne die Störung nicht vollständig durchströmt hat, ist entsprechend in keiner Simulation CO_2 in den höhergelegenen GWL migriert. Es lässt sich folglich festhalten, dass bis zu dem Zeitpunkt, ab dem die CO_2-Fahne die Störung erreicht, der Porendruckanstieg innerhalb der Störung ausschließlich, wie in Hypothese 5 formuliert, durch die Eigenschaften der Fluidphase gesteuert wird. Zudem ist in Bild 8.3 bis Bild 8.5 zu beobachten, dass die Auswirkungen einer an-

schließenden Durchströmung der Störung durch eine Gas- und eine Fluidphase auf die Porendruckentwicklung als gering einzuschätzen ist. Deshalb kann die generelle Annahme von Hypothese 5 als richtig identifiziert werden.

Im Rahmen der hier präsentierten zweiweggekoppelten Simulationen wurde für deren Durchführung, wie Tabelle 8.6 zu entnehmen ist, eine Rechenzeit zwischen 21,5 und 38 Stunden benötigt. Da für alle Simulationen eine automatische Zeitdiskretisierung durch das Programmsystem TOUGH2-MP/ECO$_2$N verwendet wurde, konnte, wie in Tabelle 8.6 dargestellt, von den jeweiligen Programmsystemen in Abhängigkeit der Injektionsrate unterschiedlich schnell Konvergenz erzielt werden. Durch die entfallende sequenzielle hydromechanische Kopplung zwischen TOUGH2-MP/ECO$_2$N und FLAC^{3D}, die vom semi-analytischen Ansatz übernommen wurde, konnte die erforderliche Rechenzeit auf 1,5 beziehungsweise 2,5 Stunden reduziert werden. Folglich beläuft sich die erzielte relative Zeitersparnis auf einen Faktor zwischen 14,3 und 15,2.

Tabelle 8.6 Eine Gegenüberstellung der für die zweiweg- und die semi-analytisch gekoppelten Simulationen benötigten Rechenzeit zeigt eine maximale Zeitersparnis um den Faktor 15,2.

	Injektionsrate [kg/s/m]		
	0,00153	**0,0019**	**0,0023**
Anzahl der verwendeten Kopplungsschritte Zweiwegkopplung	182	153	189
Anzahl der verwendeten Kopplungsschritte semi-analytische Kopplung	235	183	132
Rechenzeit Zweiwegkopplung [h]	38,0	29,0	21,5
Rechenzeit semi-analytische Kopplung [h]	2,5	2,0	1,5
Faktor Zeitersparnis [-]	**15,2**	**14,5**	**14,3**

Die präsentierten Ergebnisse bezüglich der Porendruckentwicklung und der Entwicklung der simulierten CO_2-Konzentration haben eine gute bis sehr gute Übereinstimmung gezeigt. Deshalb kann Hypothese 5 für den hier betrachteten Fall als validiert angesehen werden. Die hierbei beobachtete enorme Rechenzeitersparnis um einen maximalen Faktor von 15,2 unterstreicht in diesem Zusammenhang das hohe Potenzial des neuen semi-analytischen Ansatzes.

Durch die Wahl einer Barrieregesteinsmächtigkeit von 950 m konnte zudem gezeigt werden, dass der Einfluss des varianten Verhaltens von $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten zu einer maximal auftretenden Abweichung von 20 Prozent führt. Eine mögliche Lösung, diese Abweichungen zukünftig zu verringern, kann in einer zusätzlichen Definition von Anwendungsgrenzen für eine Basissimulation liegen. Da sich der in der Basissimulation erzielte maximale Porendruckanstieg im Reservoir auf 5,1 MPa beläuft, haben die Vergleiche der Porendruckentwicklungen gezeigt, dass sich mit der aus dieser Simulation resultierenden Parametrisierung

am besten das in Bild 8.3 dargestellte Szenario mit der geringsten Injektionsrate abbilden lässt. In beiden Fällen fiel der maximal beobachtete Porendruckanstieg im Reservoir ähnlich hoch aus (vgl. Bezugspunkt 7 in Bild 8.3). Entsprechend sollte in zukünftigen Untersuchungen geprüft werden, ob sich im Fall einer hohen Barrieregesteinsmächtigkeit eine geeignete Bandbreite für maximale Abweichungen bezüglich des Porendrucks im Reservoir zwischen der Basissimulation und der zu approximierenden Simulation definieren lässt. Es bietet sich folglich an, eine mittlere Injektionsrate für die Ausführung der Basissimulation zu verwenden.

Obwohl die Ergebnisse dieser Parameterstudie vielversprechende Ergebnisse geliefert haben, muss die allgemeingültige Validierung zukünftig durch eine größere Anzahl von zusätzlichen Mehrphasenfluidfluss-Simulationen nochmals bestätigt werden.

8.6. Zusammenfassung und Fazit

In den zuvor präsentierten Mehrphasenfluidfluss-Simulationen wurden drei unterschiedlich hohe Injektionsraten für eine 950 m mächtige Barrieregesteinsformation untersucht und als Zweiweg- und semi-analytische Kopplung ausgeführt. Ein direkter Vergleich von zeitlichen Porendruckentwicklungen in den Bezugspunkten hat Abweichungen von maximal 20 Prozent zwischen beiden Kopplungsarten ergeben.

Als Gründe für diese Abweichungen konnten einerseits aus dem Mehrphasenfluidfluss resultierende Effekte, wie beispielsweise eine verringerte hydraulische Leitfähigkeit infolge von relativen Permeabilitäten (Hypothese 5), als auch der Einfluss des varianten Verhaltens von $p_{kontr\,1}$ im Fall von hohen Barrieremächtigkeiten (Hypothese 1) identifiziert werden. Da in dieser Parameterstudie sowohl die Barrieregesteinsmächtigkeit als auch das Injektionsfluid variiert wurden, konnten die beobachteten Abweichungen nicht eindeutig dem Einfluss eines der beiden Parameter zugeordnet werden. Gleichwohl konnte der maximal auftretende Fehler für eine Kombination aus beiden Parametern zu höchstens 20 Prozent quantifiziert werden.

Des Weiteren hat eine Gegenüberstellung der mit der jeweils verwendeten hydromechanischen Kopplungsart ermittelten Ausbreitung der CO_2-Phase sowie entsprechender Konzentrationen ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung gezeigt. Hierdurch kann Hypothese 5 für diesen betrachteten Standort als validiert angesehen werden. Für eine allgemeingültige Validierung von Hypothese 5 ist es jedoch erforderlich, in zukünftigen Arbeiten noch zusätzliche Parameterstudien mit Mehrphasenflusssimulationen durchzuführen, um die hier durchgeführte Validierung zu bestätigen. Dennoch haben die im Rahmen dieses Kapitels erzielten Ergebnisse gezeigt, dass eine zukünftige Anwendung des semi-analytischen Kopplungsansatzes in hydromechanisch gekoppelten Reservoirsimulationen vielversprechend ist. In diesem Zusammenhang ist vor allem die in Tabelle 8.6 dokumentierte Rechenzeitersparnis um den Faktor 15, die durch die Anwendung des neuen semi-analytischen Ansatzes erzielt wurde, hervorzuheben.

9 Zusammenfassung und Ausblick

In den letzten zwei Jahrhunderten hat sich die Kohlenstoffdioxid-Konzentration der Atmosphäre kontinuierlich von 0,028 % auf etwa 0,04 % erhöht. Neben anderen Treibhausgasen, wie beispielsweise Methan, Lachgas und Fluorkohlenwasserstoffe wird CO_2 als Hauptursache der globalen Erderwärmung angesehen. Um diesen Prozess zu verlangsamen oder sogar in Zukunft zu stoppen, haben sich die Teilnehmerstaaten auf der UN-Klimakonferenz 2015 in Paris durch Abschluss eines Klimaabkommens dazu entschlossen, die globale Erderwärmung bis zum Ende des 21. Jahrhunderts auf deutlich unter 2 °C im Vergleich zum vorindustriellen Niveau zu begrenzen. Damit dieses Ziel erreicht wird, sind die weltweiten CO_2-Emissionen bis 2050 um mindestens 50 % gegenüber 2010 zu verringern.

Da die weltweite Energiewirtschaft bis zu ihrer vollständigen Umstellung auf eine CO_2-neutrale Energieerzeugung weiterhin in erheblichem Maß auf die Verstromung fossiler Energieträger angewiesen ist, gilt **C**arbon **C**apture and **S**torage (CCS) als Brückentechnologie, um einerseits die Ziele der Klimakonferenz zeitnah zu erreichen und andererseits die weltweite Versorgung mit elektrischem Strom zu gewährleisten. Mittels CCS wird CO_2 aus Rauchgasen von Kraftwerken abgeschieden und in geeigneten tiefliegenden geologischen Formationen langfristig gespeichert.

Um die Sicherheit solcher CO_2-Speicherstandorte zu gewährleisten, müssen Prozesse die zu einem Schadensereignis führen können vermieden werden. Hierzu zählen beispielsweise die Freisetzung von gespeichertem CO_2 in die Atmosphäre, die Migration von CO_2 oder Formationsfluid aus tieferen GWLs in oberflächennahe Süßwasserhorizonte oder die Reaktivierung von Störungen. Während die ersten beiden Prozesse aus der Migration von Fluiden und Stoffen resultieren, wird der dritte Prozess durch injektionsbedingte Porendruckerhöhungen hervorgerufen, die wiederum eine Störungsreaktivierung bewirken können. Um die Effizienz, die Nachhaltigkeit und die Sicherheit einer potenziellen Nutzung des tiefen geologischen Untergrundes zur geologischen Speicherung von CO_2 ermitteln und bewerten zu können, fordern rechtsverbindliche Regelwerke, wie beispielweise die EU-Richtlinie 2009/31, Risikoanalysen. In diesem Zusammenhang sind zur Abschätzung der Unsicherheiten eine Bandbreite von Parametern und CO_2-Injektionsraten zu untersuchen, um potenzielle Schadensereignisse zu identifizieren und deren Risiko realistisch einschätzen zu können. Hierfür kommen sowohl deterministische als auch probabilistische Ansätze zum Einsatz.

Deterministische Ansätze verwenden in der Regel Ergebnisse von numerischen Simulationen, die eine Vielzahl von komplexen Wechselwirkungen zwischen den bei der geologischen CO_2-Speicherung auftretenden chemischen, hydraulischen, mechanischen und thermischen Prozessen berücksichtigen. Dabei kommen monolithisch oder sequenziell gekoppelte Simulationen zum Einsatz. Sowohl aus Gründen der Kopplungskomplexität als auch aufgrund der Modellgröße, sind die

dazu erforderlichen Simulationen in der Regel rechenzeitintensiv, weshalb nur eine beschränkte Anzahl an Realisierungen möglich ist. Wegen der geringen Anzahl an Stichproben ist eine aussagekräftige Wahrscheinlichkeitsverteilung der einzelnen Parameterkombinationen nur eingeschränkt möglich, wodurch das tatsächliche Risiko nur schwer einzuschätzen ist.

Probabilistische Ansätze hingegen betrachten eine hohe Anzahl von Realisierungen, wodurch die Wahrscheinlichkeitsverteilung der betrachteten Parameterkombinationen statistisch fundiert ist. Eine dafür erforderliche hohe Anzahl an untersuchten Szenarien ist jedoch nur durch erhebliche Vereinfachungen des Modells, die durch eine Reduktion der gekoppelt betrachteten Prozesse und/ oder einer verringerten Kopplungsqualität erzielt werden können, zu erreichen.

Eine hydraulische Reaktivierung von geologischen Störungen kann einerseits eine hydraulische Verbindung zwischen unterschiedlichen Grundwasserhorizonten und andererseits induzierte Seismizität (Mikroerdbeben) bewirken. Um ungünstige Parameterkombinationen und Injektionsraten, die eine Gefährdung darstellen, zu identifizieren und das damit einhergehende Schadenspotenzial zu quantifizieren, ist die Verwendung von rechenzeitintensiven hydromechanisch sequenziell oder monolithisch gekoppelten Simulationen unerlässlich. Folglich ist es bisher nur möglich, das mit diesem Prozess verbundene Risiko ausschließlich deterministisch zu betrachten.

Trotz einer erheblichen Steigerung der Rechenleistung von Prozessoren in den vergangenen Jahren, stellt diese im Hinblick auf große numerische Rechenmodelle immer noch den limitierenden Faktor dar. Um jedoch eine ausreichend hohe Anzahl von gekoppelten Simulationen für sowohl deterministische als auch probabilistische Risikoanalysen unter Berücksichtigung von Parameter- und konstitutiven Unsicherheiten durchführen zu können, liegt ein hohes Potenzial in der Optimierung der Kopplungsmethodik von gekoppelten Simulationen. Zur Beseitigung dieses Defizits besteht folglich ein erheblicher Forschungsbedarf.

Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen einen neuen Kopplungsansatz zur Rechenzeitoptimierung von hydromechanisch gekoppelten numerischen Simulationen von geologischen Störungen, die durch CO_2-Injektion in salzwasserführende GWLs hydraulisch reaktiviert werden, zu erarbeiten. Dieser ermöglicht es zukünftig, sowohl das hiermit verbundene Schadenspotenzial deterministisch als auch aufgrund der gegebenen Möglichkeit einer Vielzahl von numerischen Simulationen die damit verbundene Eintrittswahrscheinlich probabilistisch zu ermitteln. Da durch Verwendung des neuen Ansatzes beide Größen realistisch festgestellt werden können, ist es folglich möglich Risiken zu bestimmen, um somit einen potenziellen Speicherstandort hinsichtlich seiner Eignung zu bewerten.

Der im Rahmen dieser Arbeit erarbeitete Kopplungsansatz beschreibt das hydromechanische Verhalten von geologischen Störungen durch semi-analytische Funktionen. Diese werden durch die numerische Durchführung einer Basissimulation ermittelt, die repräsentativ für eine bestimmte Parameterkombination und eine Störungsgeometrie ist. Die zeitlichen Verläufe der Porenzahlen in einzelnen BZEs werden jeweils auf die Porendruckentwicklung in einem einzigen Referenzelement p_{ref} bezogen. Die so erhaltenen Funktionen lassen sich durch zwei Kontrollporendrücke $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$ sowie drei Neigungswinkel α_1, α_2 und α_3 beschreiben.

Bei der Anwendung des semi-analytischen Kopplungsansatzes wird der Mehrphasenfluidfluss-Prozess durch ein eigenständiges Programmsystem simuliert. Die anschließende Datenübergabe von Porendrücken und Temperaturen an das geomechanische Programmsystem zur Ermittlung der entsprechenden Spannungs-Dehnungsantwort entfällt im Rahmen dieser Kopplung jedoch. Stattdessen werden die infolge von Porendruckerhöhung induzierten mechanischen Verformungen einzelner BZEs semi-analytisch durch den neuen Ansatz ermittelt. Diese lassen sich wiederum in geänderte Porositäten umrechnen, wodurch über Permeabilitäts-Porositäts-Beziehungen die zugehörigen Permeabilitäten entsprechend angepasst werden. Diese beiden Größen werden für jedes BZE zurück an die hydraulische Programmeinheit übertragen.

Damit der semi-analytische Kopplungsansatz funktionieren kann, müssen bezüglich der Abbildung des hydromechanischen Verhaltens geologischer Störungen bestimmte Kriterien erfüllt sein, die in Form von fünf Hypothesen formuliert worden sind. Unter Annahme von weiteren fünf konzeptionellen Grundannahmen, wie beispielsweise isothermen Randbedingungen, die Verwendung des Prinzips der effektiven Spannungen nach Terzaghi, keiner Permeabilitätsänderung im Speichergestein sowie keiner negativen Beeinflussung der Speicher- und Barrieregesteinsintegrität, wurden hierzu neun Parameterstudien in Untersuchungsreihe 1 durchgeführt, um die mathematische Beschreibung des neuen Ansatzes zu formulieren und die aufgestellten Hypothesen zu validieren.

In einem ersten Schritt wurden hydromechanisch ein- und zweiweggekoppelte Simulationen unter Annahme eines Einphasenfluidflusses durchgeführt, um die damit erzielten Simulationsergebnisse miteinander zu vergleichen. Hierzu wurden die Porenzahlentwicklungen e einzelner Störungselemente auf einen Referenzporendruck p_{ref} im Schnittpunkt zwischen der Speicherformation und der Störung bezogen. Für die Aktualisierung der Permeabilität im Fall der zweiweggekoppelten Simulationen wurde hierzu eine exponentielle Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung nach Chin et al. (2000) verwendet. Aufgrund der entfallenden Permeabilitäts- und Porositätsanpassung zeigen die so erhaltenen $e(p_{ref})$-Kurven der einweggekoppelten Simulationen ein lineares Verhalten während des Injektionszeitraums (Hypothese 1), wohingegen die der zweiweggekoppelten ein teilweise ausgeprägt nicht-lineares aufweisen (Hypothese 3). Zudem konnte im Rahmen der hierzu durchgeführten Parameterstudien festgestellt werden, dass die Neigung der mittels einer Einwegkopplung ermittelten $e(p_{ref})$-Kurve während des Injektionszeitraums flacher verläuft als die der Zweiwegkopplung. Der $e(p_{ref})$-Pfad nach Injektionsstopp zeigt in beiden Fällen identische Verläufe, die sich leicht gekrümmt darstellen. Durch zwei Tangenten lassen sich diese bilinear approximieren.

Dieses beobachtete Verhalten wurde dazu genutzt, den charakteristischen Kurvenverlauf von einweggekoppelten Simulationen durch die zuvor genannten fünf semi-analytischen Parameter in Abhängigkeit des Referenzporendrucks mathematisch zu beschreiben. Mithilfe dieser Formulierung ist es des Weiteren möglich, das hydromechanische Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen auf Basis der semi-analytischen Parametrisierung zu formulieren.

Zudem ist es gelungen aufzuzeigen, dass eine weitere Forderung von Hypothese 1, die in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten der Parametrisierung postuliert, in guter

Näherung eingehalten ist. Damit sich das Verhalten von zweiweggekoppelten Simulationen durch die Parametrisierung einer einweggekoppelten Basissimulation beschreiben lässt (Hypothese 4), konnte zudem gezeigt werden, dass sich die Neigungen α_1, α_2 und α_3 in Bezug auf unterschiedliche initiale Störungspermeabilitäten invariant verhalten (Hypothese 2). $P_{kontr\,1}$ verringert sich hierbei mit zunehmender Störungspermeabilität und konvergiert gegen einen festen Wert.

Durch die Gültigkeit von Hypothese 2 konnte in zusätzlichen Parameterstudien gezeigt werden, dass ein Permeabilitätsmultiplikator von 5 für die Durchführung der Basissimulation geeignet ist, um zweiweggekoppelte Simulationen durch die Parametrisierung einer Basissimulation abzubilden (Hypothese 4).

Nachdem die Gültigkeit von Hypothese 1 bis 4 validiert werden konnte, wurde in Untersuchungsreihe 2 unter Verwendung von sieben synthetischen geologischen Modellvariationen, jeweils vier unterschiedlichen Injektionsraten sowie von unterschiedlichen Störungspermeabilitäten der semi-analytische Kopplungsansatz für einen Einphasenfluidfluss validiert. Hierzu wurden die zeitlichen Porendruckentwicklungen sowie die akkumulierten Fluidflüsse durch die Störung zweiweg- und semi-analytisch gekoppelter Simulationen miteinander verglichen. Dadurch, dass die synthetischen Speicherstandorte eine unterschiedliche Anzahl von Grundwasserleitern mit variierender Mächtigkeit und eine unterschiedliche Anzahl von geologischen Störungen aufweisen, konnte die Anwendbarkeit des Ansatzes für eine große Bandbreite stratigraphischer und strukturgeologischer Geologien nachgewiesen werden.

Da die semi-analytische Parametrisierung des neuen Ansatzes durch die Ergebnisse einer Basissimulation erfolgt, ist diese folglich ausschließlich auf anschließende Untersuchungen beschränkt, die identische Materialparameter verwenden. Um eine Erweiterung des Anwendungsbereichs zu überprüfen, wurden zusätzliche Parameterstudien unter Berücksichtigung unterschiedlicher Materialparameter durchgeführt. Hierdurch konnte gezeigt werden, dass eine semi-analytische Parametrisierung im Zusammenhang mit unterschiedlichen Sensitivitätsexponenten zur Beschreibung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung, unterschiedlichen Injektionsraten und unterschiedlichen initialen Störungspermeabilitäten $k \geq 2{,}5 \cdot 10^{-15}$ m² verwendet werden können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Einphasenfluidfluss-Simulationen mit dem Programmsystem ABAQUS durchgeführt. Damit der semi-analytische Ansatz numerisch umgesetzt werden konnte, wurde eine neue Arbeitsumgebung entwickelt. Diese ermöglicht es, das konstitutive Verhalten einzelner Elemente in FE-Simulationen diskret durch analytische Ansätze zu beschreiben. Auf Basis von Zwischenergebnissen der numerischen Simulation können hierdurch einzelne Randbedingungen oder Materialparameter sukzessive nach jedem Simulationsschritt aktualisiert werden. Prinzipiell lassen sich auf diese Art und Weise sämtliche Materialparameter, die in ABAQUS in Abhängigkeit einer Feldvariablen definiert werden können, sowie Randbedingungen wie beispielsweise Temperatur, durch die neu entwickelte Arbeitsumgebung während einer FE-Simulation von außen steuern. Hierdurch ist die neu entwickelte Arbeitsumgebung auch für andere Fragestellungen, die eine komplexe Kopplung von analytischen und numerischen Methoden erfordern, adaptierbar.

Abschließend konnte für einen Anwendungsfall die Anwendbarkeit des neuen Kopplungsansatzes für Mehrphasenfluidfluss-Simulationen, in denen die CO_2-Phase die hydraulisch reaktivierte geologische Störung erreicht, nachgewiesen werden (Hypothese 5). Hierzu wurde unter Verwendung der sequenziell gekoppelten Programmsysteme TOUGH2-MP/ECO_2N und $FLAC^{3D}$ die Injektion von CO_2 unter Verwendung von drei unterschiedlichen Injektionsraten in eine tiefliegende Speicherformation simuliert. Die semi-analytische Parametrisierung erfolgte in diesem Fall durch eine Basissimulation, in der die hydraulische Reaktivierung der Störung durch die Injektion von H_20 (Einphasenfluidfluss) erfolgte. Durch Anwendung des semi-analytischen Ansatzes, konnte die erforderliche Rechenzeit im Vergleich zu den auf Basis einer Zweiwegkopplung durchgeführten Simulationen in allen drei Simulationen um den Faktor 15 reduziert werden.

Folglich ist es im Rahmen dieser Arbeit gelungen, einen rechenzeitoptimierten Ansatz zu entwickeln, mit dem das Eintreten einer hydraulischen Störungsreaktivierung sowie das daraus resultierende Schadenspotenzial in Form von aufgetretenen Fluidflüssen ermittelt werden kann. Da die Mehrphasenfluidfluss-Simulationen in Bezug auf die Rechenzeitersparnis und die erzielte Ergebnisqualität vielversprechend sind, empfiehlt sich der neue semi-analytische Ansatz für eine zukünftige Anwendung in sowohl deterministischen als auch probabilistischen Risikoanalysen im Zusammenhang mit untertägiger CO_2-Speicherung. Da jedoch die Validierung von Hypothese 5 lediglich auf Basis eines Anwendungsbeispiels erfolgt ist, sollte sich der zukünftige Forschungsschwerpunkt darauf konzentrieren diese auf eine breitere Basis zu stellen. Hierzu sollte eine Reihe zusätzlicher Mehrphasenfluidfluss-Simulationen durchgeführt werden. Zudem empfiehlt es sich, in einem nächsten Schritt den neuen Ansatz bezüglich der Qualität der Ergebnisse und der Rechenzeitersparnis im Zusammenhang mit einem realen Speicherstandort unter Verwendung von komplexeren stratigraphischen und strukturgeologischen Geologien zu testen. Hierzu sollten, wie im Rahmen dieser Arbeit praktiziert, die zeitlichen Porendruckentwicklungen sowie die aufgetretenen Fluidflüsse von zweiweg- und semi-analytischen Kopplungen miteinander verglichen werden.

Da im Zusammenhang mit der Validierung von Hypothese 1 im Fall von Barrieregesteinen die eine höhere Mächtigkeit als 500 m aufweisen, einzelne höhergelegene BZEs bezüglich der Injektionsrate variantes Verhalten gezeigt haben, sollte der daraus resultierende Einfluss auf die Simulationsergebnisse von semi-analytisch gekoppelten Simulationen ermittelt werden. Ungeachtet dessen, dass im Rahmen dieser Arbeit der hieraus resultierende Einfluss im Fall der Mehrphasenfluidfluss-Simulationen zu einer maximalen Abweichung von 20 % ermittelt wurde, konnte dieser jedoch nicht explizit dem Effekt eines gemeinsamen Auftretens von Gas- und Fluidphase beziehungsweise der ungünstigen Barrieregesteinsmächtigkeit zugeordnet werden.

Um Nebeneffekte, die eine eindeutige Überprüfung der generellen Anwendbarkeit des semi-analytischen Ansatzes erschweren, zu vermeiden, wurden neben dem exponentiellen Ansatz zur Anpassung der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung linear-elastisches und ideal plastisches Materialverhalten zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens von Störungen verwendet. Da dieser Ansatz das komplexe mechanische Verhalten von Störungen nur eingeschränkt abbildet, sollte zusätzlich in zukünftigen Arbeiten eine Anwendbarkeit für komplexere Stoffgesetze überprüft werden.

Aktuell laufen im Rahmen dieser Arbeit am Lehrstuhl für Geotechnik im Bauwesen in Kooperation mit dem Deutschen GeoForschungsZentrum GFZ Potsdam Arbeiten zur Erweiterung des semi-analytischen Ansatzes auf den 3D-Fall. Es ist geplant, die aktuellen vielversprechenden Ergebnisse zeitnah in einer international anerkannten Fachzeitschrift zu publizieren.

Literaturverzeichnis

ABAQUS (2010): Unified Finite Element Analysis. User's Manual Version 6.10. 2010. Providence, Rohde Island, USA: Dassault Systèmes. Simulia Corporation.

Albrecht, D. (2015): Untersuchungen zum Spannungseinfluss auf die Fluiddurchlässigkeit von Rotliegend Tight Gas Sandsteinen. Dissertation an der Technischen Universität Clausthal, Clausthal.

Altmann, J.B., Müller, B.I.R., Müller, T.M., Heidbach, O., Tingay, M.R.P., Weißhardt, A., (2014): Pore pressure stress coupling in 3D and consequences for reservoir stress states and fault reactivation. Geothermics, 52:195-205.

Anderson, E.M. (1951): The dynamics of faulting and dyke formation with application to Britain. Oliver & Boyd, Edinburgh, S. 191.

Battistelli, A. C. Calore and K. Pruess, 1997. The Simulator TOUGH2/EWASG for Modeling Geothermal Reservoirs with Brines and Non-Condensible Gas. Geothermics, 26(4):437-464.

Baujard, C., Schoenball, M., Kohl, T., Dorbath, L. (2014): Large magnitude events during injections in geothermal reservoirs and hydraulic energy: A heuristic approach. Geothermics Vol. 52, S. 140-152.

Becker, A. (2000): The Jura Mountains – an active foreland fold-and-belt?. Tectonophysics 321, S. 381-406.

Beutler, G., Nitsch, E. (2005): Deutsche Stratigraphische Kommission Stratigraphie von Deutschland IV – Keuper, 3 Paläogeographischer Überblick. Deutsche Stratigraphische Kommission (Hrsg). Cour. Forsch.-Inst. Senckenberg 253, S. 1-296. ISBN 3-510-61376-7.

Beutler, G., Stackebrandt, W. (2012): Der Schollenbau des Tafeldeckgebirges von Brandenburg – Vorschlag für eine einheitliche Benennung. Brandenburgische Geowissenschaftliche Beiträge 19 (2012), Heft 1. Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe Brandenburg, Cottbus, S. 93 – 109.

Birkholzer, J.T., Zhou, Q., Tsang, C.F. (2009): Large-scale impact of CO_2 storage in deep saline aquifers: A sensitivity study on pressure response in stratified systems. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 3, S. 181-194.

Birkholzer, J.T., Nicot, J.P., Oldenburg, C.M., Zhou, Q., Kraemer, S., Bandilla, K. (2011): Brine flow up a well caused by pressure perturbation from geologic carbon sequestration. Static and dynamic evaluations. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 5, S. 850-861.

Bishop, A.W. (1959): The principle of effective stress. Teknisk Ukeblad, Vol. 39, S. 859-863.

BGR (2014): Energiestudie 2014. Reserven, Ressourcen und Verfügbarkeit von Energierohstoffen (18). – S. 131, Hannover.

Biot, M.A. (1962): Mechanics of deformation and acoustic propagation in porous media. Journal of Applied Physics Vol. 33, Nr. 4, S. 1482-1498.

Bowden, A.R., Rigg, A. (2004): Assessing risk in CO_2 storage projects. APPEA Journal, Volume 44, S. 677-702.

Bradshaw, J., Dance, T. (2004): Mapping geological storage prospectivity of CO_2 for the world's sedimentary basins and regional source to sink matching. Proceedings of the 7th International Conference on Greenhouse Gas Technologies, Vol 2; peer reviewed Papers and Plenary Presentations. Eds. E.S. Rubin, D.W. Keith and C.F. Gilboy, Pergamon, 2005, S. 583 – 592.

Brooks, A., Corey, A. (1964): Hydraulic properties of porous media. Colorado State University Hydrology Paper No. 3, Fort Collins, Colorado, U.S.A..

Cook, N.G.W. (1965): The Failure of Rock. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Vol 2, S. 389-403.

Caine, J.S., Evans, J.P., Forster, C.B. (1996): Fault zone architecture and permeability structure. Geology 24 (11), S.1025-1028.

Cappa, F., Rutqvist, J. (2011): Modeling of coupled deformation and permeability evolution during fault reactivation induced by deep underground injection of CO2. International Journal of Greenhouse Gas Control, 5:336-346.

Carman, P.C. (1956): Flow of gases through porous media. London: Butterworths Scientific Publ., IX, S. 182f.

Chin, L.Y., Raghavan, R., Thomas, L.K. (2000): Fully coupled geomechanics and fluid flow analysis of wells with stress-dependent permeability. SPE J, 5(1):32–45, Paper 58968.

Chadwick, A., Arts, R., Bernstone, C., May, F., Thibeau, S., Zweigel, P. (2008): Best Practice for the Storage of CO_2 in Saline Aquifers – Observations and guidelines from the SACS and CO2STORE projects. British Geological Survey, Keyworth, Nottingham.

Class, H. (2001): Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien. Dissertation, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart; Heft 105.

Chabab E., Kempka T. (2016): Quantification of fluid migration via faults requires two-way cou-pled hydromechanical simulations. Energy Procedia, Vol.97, S. 372-378.

CO_2GeoNet (2009): Geologische CO_2-Speicherung – was ist das eigentlich?. CO_2GeoNet Das europäische Exzellenznetzwerk für die geologische Speicherung von CO_2. ISBN: 978-2-7159-2456-7.

COM (2014) 99 final: Report from the European Commission to the European Parliament and the Council on the implementation of Derective 2009/31/EC on the geological storage of carbon dioxide. Europäische Kommission. Brüssel.

Connolly, J.A.D. (1997): Devolatilization-generated fluid pressure and deformation-propagated fluid flow during prograde regional metamorphism. Journal of Geophysical Research, Vol. 102, S. 18149-18173.

Corey, A.T. (1954): The Interrelation Between Gas and Oil Relative Permeabilities. Producers Monthly (1954), S. 38-41.

Crawford, B.R., Myer, E.D., Woronov, A., Faulkner, D.R., Rutter, E.H. (2002): Porosity-permeability relationship in clay-bearing fault gouge. Society of Petroleum Engineers Inc. SPE/ISRM 78218, Rock Mechanics Conference, October 2002.

Cryer, C.W. (1963): A comparison of the Three-Dimensional Consolidation Theories of Biot and Terzaghi. Quarterly J. Mechanics Appl. Mathematics 16, S. 401-412.

DIN 4019 (2015): Baugrund - Setzungsberechnung.

Dorbath, L., Cuenot, N.G.A., Frogneux, M. (2009): Seismic response of the fractured and faulted granite of Soultz-sous-Forêts (France) to 5 km deep massive water injections.Geophysical Journal International Vol. 177,S. 653–675.

EANG (2014): Empfehlungen des Arbeitskreises Numerik in der Geotechnik – EANG. Deutsche Gesellschaft für Geotechnik DGGT. Ernst & Sohn, Berlin (2014).

Elicki, O., Breitkreuz, C. (2016): Die Entwicklung des Systems Erde. Springer Spektrum. ISBN 978-3-662-47191-3.

EnergieAgentur NRW (2009): Kohlendioxidabtrennung und –speicherung. Fakten zu CCS. Informationsbroschüre. EnergieAgentur.NRW 06/2009. Ministerium für Wirtschaft, Mittelstand und Energie des Landes NRW.

EU-Richtlinie (2009): Richtlinie 2009/31/EG Des europäischen Parlaments und des Rates vom 23. April 2009. Über die geologische Speicherung von Kohlendioxid.

Fang, H.-Y (1991): Foundation Engineering Handbook. Springer Science + Business Media, New York (1991). ISBN 978-1-4757-5273-1.

Faulkner, D.R., Rutter, E.H. (1998): The gas permeability of clay-bearing fault gouge at 20°C. Faults, Fault sealing and fluid flow in Hydrocarbon Reservoirs, (editors G. Jones, Q. Fisher and R.J. Knipe). Geological Society London Special Publications (1998), S. 147-156.

Faulkner, D.R., Jackson, C.A-L., Lunn, R.J., Schlische, R.W., Shipton, Z.K., Wibberley, C.A.J., Withjack, M.O. (2010): A review of recent developments concerning the structure, mechanics and fluid flow properties of fault zones. Journal of structural Geology 32, S 1557-1575. doi:10.1016/j.jsg.2010.06.009.

Finsterle, S. (1993): Inverse Modellierung zur Bestimmung hydrogeologischer Parameter eines Zweiphasensystems. Institutsmitteilung 121, Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich.

Frick, S., Kaltschmitt, M. (2008): Ökologische Aspekte der tiefen Erdwärmenutzung – Analyse und Bewertung lokaler Umwelteffekte. Erdöl, Erdgas, Kohle Vol. 124, S. 323–328.

Gemeinsamer Bericht des BMWi, BMU und BMBF für die Bundesregierung (2007): Entwicklungsstand und Perspektiven von CCS-Technologien in Deutschland. Berlin

Gudmundsson, A., Simmenes, T.H., Larsen, B., Philipp, S.L. (2010): Effects of internal structure and local stresses on fracture propagation, deflection, and arrest in fault zones. Journal of Structural Geology 32, S. 1643-1655.doi: 10.1016/j.jsg2009.08.013.

Hafner, W. (1951): Stress distribution and faulting. Geol. Soc. Am. Bull, 62, S. 373-398.

Haq, B.U., Hardenbol, J., Vail, P.R. (1987): Chronology of fluctuating sea levels since the Triassic. Science 235: S. 1156-1167.

Holloway, S. (2005): Underground sequestration of carbon dioxide – a viable greenhouse gas mitigation option. Energy, 30, S. 2318-2333.

IPCC (2005): IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA.

IPCC (2013a): Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge, UK: Cambridge University Press.

IPCC (2013b): Summary for Policymakers. In: Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley (eds.) Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, S. 1–30.

IPCC (2014): Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Group I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Core Writing Team, R.K. Pachaurl and L.A. Meyer (eds.)]. IPCC, Geneva, Switzerland, S. 1-151.

IEAGHG (2009): Biosmass CCS Study, Cheltenham, UK. International Energy Agency Greenhouse Gas R&D Programme (IEAGHG).

IEAGHG (2011): Potential for Biomass and Carbon Dioxide Capture and Storage, Cheltenham, UK. International Energy Agency Greenhouse Gas R&D Programme (IEAGHG).

IEA (2011): Combining Bioenergy with CCS. Reporting and Accounting for Negative Emissions under UNFCCC and the Kyoto Protocol, Paris, France: International Energy Agency.

Itasca (2013): FLAC^{3D} – Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions. User's Manual.

Jeanne, P., Rutqvist, J., Wainwright, H.M., Foxall, W., Bachmann, C., Zhou, Q., Rinaldi, A.P., Birkholzer, J. (2016): Effects of in situ stress measurement uncertainties on assessment of predicted seismic activity and risk associated with hypothetical industrial.scale geologic CO_2 sequestration operation. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 873-885.

Kempka, T., Kühn, M. (2013): Numerical simulations of CO_2 arrival times and reservoir pressure coincide with observation from the Ketzin pilot site, Germany. Environmental Earth Sciences Vol. 70, S. 3675-368.

Kempka, T., Klapperer, S., Norden, B. (2014): Coupled hydromechanical simulations demonstrate system integrity at the Ketzin pilot site for CO_2 storage, in: Rock Engineering and Rock Mechanics: Structures in and on Rock Masses; Proceedings of EUROCK 2014, ISRM European Regional Symposium, edited by: Alejano, L., Perucho, A., Olalla, C., and Jiménez, R., Leiden: CRC Press/Balkema, 1317–1322.

Kempka, T., Nielsen, C.M., Frykman, P., Shi, J.Q., Bacci, G., Dalhoff, F. (2015): Coupled Hydro-Mechanical Simulations of CO2 Storage Supported by Pressure Management Demonstrate Synergy Benefits from Simultaneous Formation Fluid Extraction. Oil & Gas Science and Technology, 70(4):599–613.

Keranen, K.M., Savage, H.M., Abers, G.A., Cochran, E.S. (2013): Potentially induced earthquakes in Oklahoma, USA: links between wastewater injection and the 2011 Mw 5.7 earthquake sequence. Geology, 41, S. 699-702.

Kleine Vennekate, G. (2013): Numerische Simulationen zur Scherfugenentwicklung in Sand-Ton-Wechselfolgen. Dissertation am Lehrstuhl für Geotechnik im Bauwesen an der RWTH Aachen, Aachen.

Knopf, S., May, F., Müller, C., Gerling, J.P. (2010): Neuberechnung möglicher Kapazitäten zur CO2-Speicherung in tiefen Aquifer-Strukturen. Energiewirtschaftliche Tagesfragen. Jahrgang 60, Heft 4.

Kolymbas, D. (1978): Ein nichtlineares viskoplastisches Stoffgesetz für Böden. Institut für Bodenmechanik und Felsmechanik, Universität Fridericiana in Karlsruhe.

Kolymbas, D. (1988): Eine konstitutive Theorie für Böden und andere körnige Stoffe. Institut für Bodenmechanik und Felsmechanik, Universität Fridericiana in Karlsruhe.

Kozeny, J. (1953): Hydraulik: Ihre Grundlagen und praktische Anwendungen. Wien: Springer, 1953. S. 588f.

Krawczyk, C.M., McCann, T., Cocks L.R.M., England, R.W., Mc Bridge, J.H., Wybraniec, S. (2008): Caledonian tectonics. Precambrian and Paleozoic. The Geology of Central Europe, Bd. 1. The Geological Society, London, S. 303-381.

Langhi, L., Zhang, Y., Gartrell, A., Underschultz, J., Dewhurst, D. (2010): Evaluating hydrocarbon trap integrity during fault reactivation using geomechanical three-dimensional modeling: An example from the Timor Sea, Australia. AAPG Bulletin, 94(4):567–591.

Lautenschläger, C.E.R., Righetto, G.L., Inoue, N., Fontoura, S.A.B. (2013): Advances on Partial Coupling in Reservoir Simulation: A New Scheme of Hydromechanical Coupling. 2013 North Africa Technical Conference & Exhibition. SPE Paper Number 164657

Lister, G.S., Etheridge, M.A., Symonds, P.A. (1986): Application of the detachment fault model to the formation of passive continental margins. Geology, 14: S. 246-250.

Mandl, G. (1988): Mechanics of tectonic faulting – models and basic concepts. Developments in Structural Geology 1, ed. H.J. Zwart, Elsevier.

Mbia, E.N., Frykman, P., Nielsen, C.M., Fabricius, I.L., Pickup, G.E., Sörensen, A.T. (2014): Modeling of the pressure propagation due to CO_2 injection and the effect of fault permeability in a case study of the Vedsted structure, Northern Denmark. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 28, S. 1-10.

McKenzie, D.P. (1978): Some remarks on the development of sedimentary basins. Earth Planet. Sci. Lett., 40: S. 25-32.

Menétrey, Ph., Willam, K.J. (1995): Triaxial Failure Criterion for Concrete and its Generalization. ACI Structural Journal, vol. 92 (May/June 1995), Sp. 311–318.

Meschede, M. (2015): Geologie Deutschlands – Ein Prozessorientierter Ansatz. Springer Spektrum. ISBN 978-3-662-45297-4.

Menning, M. (2002): Deutsche Stratigraphische Kommission (2002) Eine geologische Zeitskala 2002. Deutsche Stratigraphische Kommission (Hrsg) Stratigraphische Tabelle von Deutschland 2002.

Menning, M., Hendrich A. (2005): Erläuterungen zur Stratigraphischen Tabelle von Deutschland 2005 (ESTD 2005). Newsl Stratigr 41(1/3), S. 1-405 (19 Taf.; Berlin, Stuttgart).

Menning, M., Schröder, B., Plein, E., Simon, T., Lepper, J., Röhling, H.G., Heunisch, C., Stapf, K., Lützner, H., Käding, K.C., Paul, J., Horn, M., Hagdorn, H., Beutler, G.,

Nitsch, E. (2011): Beschlüsse der Deutschen Stratigraphischen Kommission 1991-2010 zu Perm und Trias von Mitteleuropa. Z Dt Ges Geowiss 162, S. 1-18.

Menning, M., Hendrich A. (2012): Deutsche Stratigraphische Kommission (2012) Eine geologische Zeitskala 2002. Deutsche Stratigraphische Kommission (Hrsg) Stratigraphische Tabelle von Deutschland Kompakt 2012, Potsdam.

Mitchell, T.M., Faulkner, D.R. (2009): The nature and origin of off-fault damage surrounding strike-slip fault zones with a wide range of displacements.: A field study from the Atacama fault zone, northern Chile. Journal of Structural Geology 31(8), S. 802-816.

Moore, D.E., Byerlee, J. (1992): Relationships between sliding behavior and internal geometry of laboratory fault zones and some creeping and locked strike-slip faults of California. Tectonophysics Vol. 211, S. 305-316.

Mualem, Y. (1976): A new Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media. Water Resources Research Vol. 12, No. 3, S. 513-522

Muir Wood, D. (1990): Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics. Cambridge University Press, Cambridge.

Mutschler, T., Triantafyllidis, T., Balthasar, K. (2009): Geotechnical Investigations of Cap Rocks above CO_2-Reservoirs. Energy Procedia Vol. 1, No. 1, Februar 2009, S. 3375-3382.

NETL (2011): Best practices for: Risk Analysis and Simulation for Geologic Storage of CO_2. National Energy Technology Laboratory. U.S. Department of Energy. DOE/NETL-2011/1459, S. 16 ff.

Nguyen, B.N., Hou, Z., Last, G.V., Bacon, D.H. (2016): Three-dimensional analysis of a faulted CO_2 reservoir using an Eshelby-Mori-Tanka approach to rock elastic properties and fault permeability. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 828-845.

Nicot, J.P. (2008): Evaluation of large-scale CO_2 storage on fresh-water sections in aquifers: An example from the Texas Gulf Coast Basin. International Journal of Greenhouse Gas Control, Volume 2, S. 582-593.

Oldenburg, C.M., Bryant, S.L., Nicot, J.P. (2009): Certification framework based on effective trapping for geologic carbon sequestration. International Journal of Greenhouse Gas Control, Volume 3, No. 4, S. 444-457.

Oldenburg, C.M., Rinaldi, A.P. (2011): Buoyancy Effects on Upward Brine Displacement Caused by CO_2 Injection. Transport in Porous Media, Vol. 87, S. 525-540.

Orlic, B. (2016): Geomechanical effects of CO_2 storage in depleted gas reservoirs in the Netherlands: Inferences from feasibility studies and comparison with aquifer storage. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 846-859.

N.S. Ottosen, M. Ristinmaa: The Mechanics of Constitutive Modeling. Elsevier, Amsterdam 2005, ISBN 0-08-044606-X, S. 149 f.

Pan, P., Wu, Z., Feng, X., Yan, F. (2016): Geomechanical modeling of CO2 geological storage: A review. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 936-947.

Peryt, T.M., Geluk, M.C., Mathiesen, A., Paul, J., Smith, K. (2010): Zechstein. Doornenbal JC, Stevenson AG (Hrsg) Petroleum Geological Atlas of the Southern Permian Basin Area. EAGE Publications b.v., Houston, S. 123-147.

Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G. (1999): TOUGH2 User's Guide, Version2.0. Report LBNL-43134, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California.

Pruess, K. (2005): ECO2N: A TOUGH2 Fluid Property Module for Mixtures of Water, NaCl, and CO_2. Report LBNL-57952, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California.

Reinhold, K., Müller, C., Riesenberg, C. (2011): Informationsystem Speichergesteine für den Standort Deutschland – Synthese (Abschlussbericht). Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe Berlin/ Hannover. Berlin/ Hannover 2011.

Reuther, C.D. (2012): Grundlagen der Tektonik – Kräften und Spannungen der Erde auf der Spur. Springer Spektrum. ISBN 978-3-8274-2065-7.

Rice, J.R. (1973): The initiation and growth of shear bands. Plasticty and Soil Mechanics. Hrsg.: A. C. Palmer. Cambridge, S. 263-274.

Righetto, G.L., Lautenschläger, C.E.R., Inoue,N., Fontoura, S.A.B. (2013): Analysis of the hydromechanical behavior of fault zones in petroleum reservoirs. EUROCK 2013 – The 2013 ISRM International Symposium.

Rinaldi, A.P., Rutqvist, J., Cappa, F. (2014a): Geomechanical effects on CO2 leakage through fault zones during large-scale underground injection. International journal of Greenhouse Gas Control Vol. 20 (2014), S. 117-131.

Rinaldi, A.P., Jeanne, P., Rutqvist, J. (2014b): Effects of fault-zone architecture on earthquake magnitude and gas leakage related to CO2 injection in a multi-layered sedimentary system. Greenhouse Gas Science and Technology Vol. 4 (2014), S. 99-120.

Rudnicki, J.W., Rice, J.R. (1975): Conditions for the localization of deformation in pressure-sensitive dilatant materials. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 23, S. 371-394.

Roscoe, K.H., Schofield, A.N., Thurairajah, A. (1963): Yielding of clays in states wetter than critical. Geotechnique, Vol. 13 (3), S. 211-240.

Roscoe, K.H., Burland, J.B. (1968): On the generalized stress-strain behaviour of 'wet' clay. Engineering plasticity. Hrsg.: J. Heyman and F. A. Leckie. Cambridge, Cambridge University Press, S. 535-609.

Röhmann, L., Tillner, E., Magri, F., Kempka, T. (2013): Fault reactivation and ground surface uplift assessment at a prospective German CO_2 storage site. Energy Procedia, Vol. 40, S. 437-446.

Rutqvist, J., Tsang, C.-F. (2002). A study of caprock hydromechanical changes associated with CO_2 injection into a brine aquifer. Environ. Geol. 42, 296–305.

Rutqvist, J., Birkholzer, J., Cappa, F., Tsang, C.F. (2007): Estimating maximum sustainable injection pressure during geological sequestration of CO_2 using coupled fluid flow and geomechanical fault-slip analysis. Energy Conversion and Management, Vol. 48, S. 1798–1807.

Rutqvist, J., Birkholzer, J., Tsang, C.F. (2008): Coupled reservoir geomechanical analysis of the potential for tensile and shear failure associated with CO_2 injection in multilayered reservoir–caprock systems. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 45:132–143.

Rutqvist, J. (2010): Coupled reservoir-geomechanical analysis of CO2 injection and ground deformations at In Salah, Algeria. International Journal of Greenhouse Gas Control, 4:225–230.

Rutqvist, J., Vasco, D.W., Myer, L. (2010): Coupled reservoir-geomechanical analysis of CO_2 injection and ground deformations at In Salah, Algeria. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 4 (2010), S. 225-330.

Rutqvist, J., Cappa, F., Rinaldi, A.P., Godano, M. (2014): Modeling of induced seismicity and ground vibrations associated with geologic CO_2 storage, and assessing their effects on surface structures and human perception. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 24 No.6, S. 64-77.

Rutqvist, J., Rinaldi, A.P., Cappa, F., Jeanne, P., Mazzoldi, A., Urpi, L., Guglielmi, Y., Vilarrasa, V. (2016): Fault activation and induced seismicity in geological carbon storage – Lessons learned from recent modeling studies. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 789-804.

Savage, H.M., Brodsky, E.E. (2011): Collateral damage: Evolution with displacement of fracture distribution and secondary fault strands in fault damage zones. Journal of Geophysical Research: Solid Earth 116(B3), S. 14 ff.

Schäfer, S., Lawrence, M., Stelzer, H., Born, W., Low, S., Aaheim, A., Adriázola, P., Betz, G., Boucher, O., Carius, A., Devine-Right, P., Gullberg, A. T., Haszeldine, S., Haywood, J., Houghton, K., Ibarrola, R., Irvine, P., Kristjansson, J.-E., Lenton, T., Link, J. S. A., Maas, A., Meyer, L., Muri, H., Oschlies, A., Proelß, A., Rayner, T., Rickels, W., Ruthner, L., Scheffran, J., Schmidt, H., Schulz, M., Scott, V., Shackley, S., Tänzler, D., Watson, M., Vaughan, N. (2015): The European Transdisciplinary Assessment of Climate Engineering (EuTRACE): Removing Greenhouse Gases from the Atmosphere and Reflecting Sunlight away from Earth. Funded by the European Union's Seventh Framework Programme under Grant Agreement 306993.

Sedlacek, R. (1999): Untertage Erdgasspeicherung in Europa [Underground Gas Storage in Europe]. Erdöl Erdgas Kohle, 115 (11), S. 537-540.

Settari, A., Mourits, M. (1994): Coupling of geomechanics and reservoir simulation models. In Computer Methods and Advances in Geomechanics. pp. 2151-2158. Siriwardane & Zanan (eds.), Balkema, Rotterdam.

Settari A., Bachman, R.C., Walters, D.A. (2005): How to approximate effects of geomechanics in conventional reservoir simulation. SPE Annual Technical Conference and Exhibition. SPE Paper Number 97155-MS.

Settari A. (2012): Workflow for coupled geomechanical and reservoir problems – recent experiences. 74th EAGE Conference & Exhibition incorporating SPE EUROPEC 2012.

Skomedal, E., Hettema, M.H. (2002): Effects of Pore Pressure and Stress Path on Rock Mechanical Properties for HPHT Application. SPE/ISRM 78152.

Smoltczyk, U. (2001): Grundbau-Taschenbuch, 6. Auflage. Ernst & Sohn Verlag für Architektur und technische Wissenschaften, Berlin.

Stackebrandt, W., Manhenke, V., Eds. (2004): Atlas zur Geologie von Brandenburg. 1:1 000 000. Landesamt für Geowissenschaften und Rohstoffe Brandenburg (LGRB), S 16 ff.

Stauffer, P.H., Viswanathan, H.S., Pawar, R.J., Guthrie, G.D. (2009): A system model for geologic sequestration of carbon dioxide. Environmental Science & Technology, Volume 43, No. 3, S. 565-570.

Stirrup, M., Heierli, H. (1984): Grundwissen in Geologie. Ott Verlag, Thun. ISBN 3-7225-6286-4.

Spycher, N., Pruess, K., Ennis-King, J. (2003): CO_2-H_2O Mixtures in the Geological Sequestration of CO_2. I. Assessment and Calculation of Mutual Solubilities from 12 to 100°C and up to 600 bar. Geochimica et Cosmochimica. Acta, 67(16):3015.

Spycher, N., Pruess, K. (2005): CO_2-H_2O Mixtures in the Geological Sequestration of CO_2. II. Partitioning in Chloride Brines at 12 to 100°C and up to 600 bar. Geochimica et Cosmochimica. Acta, 69(13): S. 3309-3320.

Tillner, E., Kempka, T., Nakaten, B., Kühn, M. (2013): Brine migration through fault zones: 3D numerical simulations for a prospective CO_2 storage site in Northeast Germany. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 19, November 2013, S. 689-703.

Tillner, E., Shi, J.Q., Bacci, G., Nielsen, C.M., Frykman, P., Dalhoff, F., Kempka, T. (2014): Coupled Dynamic Flow and Geomechanical Simulations for an Integrated Assessment of CO_2 Storage Impacts in a Saline Aquifer. Energy Procedia, 63:2879–2893.

Tillner, E. (2015): Quantification of upward brine displacement from saline aquifers and mechanical effects in geological CO_2 storage. Dissertation am Fachbereich Geowissenschaften der Freien Universität Berlin, Berlin.

Tillner, E., Langer, M., Kempka, T., and Kühn, M. (2016): Fault damage zone volume and initial salinity distribution determine intensity of shallow aquifer salinisation in subsurface storage, Hydrol. Earth Syst. Sci., 20, 1049-1067.

Tran, D., Nghiem, L., Buchanan, L. (2005): Improved iterative coupling of geomechanics with reservoir simulation. SPE Reservoir Simulation Symposium 2005, Houston, Texas, U.S.A. SPE 93244.

Trautwein, U. (2005): Poroelastische Verformungen und petrophysikalische Eigenschaften von Rotliegend Sandsteinen. Dissertation an der Technischen Universität Berlin, Berlin.

Van Genuchten, M.Th. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. Soil Science Society of America J, 44(5):892-898.

Verdon, J.P., Stork, A.L. (2016): Carbon Capture and Storage, geomechanics and induced seismic activity. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 928-935.

Verma, A., Pruess, K. (1988): Thermohydrologic conditions and silica redistribution near high-level nuclear wastes emplaced in saturated geological formations. Journal of Geophysical Research, Vol. 93, No. B2, S. 1159-1173.

Vermilye, J.M., Scholz, C.H. (1998): The process zone: a microstructural view of fault groth. Journal of Geophysical Research – Solid Earth 103(B6), S 12223-12237.

Vilarrasa, V., Makhnenko, R., Gheibi, S. (2016): Geomechanical analysis of the influene of CO_2 injection location on fault stability. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 8, (2016), S. 805-818.

von Wolffersdorf, P.A., Schweiger, H.F. (2017) in GBT (Witt (2017)**:** Grundbau-Taschenbuch, 8. Auflage. Ernst & Sohn Verlag für Architektur und technische Wissenschaften, Berlin., S. 655 ff.

Walters, D.A., Settari, A., Kry, R.P. (2002): Coupled geomechanical and reservoir modeling investigating poroelastic effects of cyclic steam stimulation in the cold lake reservoir. SPE Reservoir Evaluation & Engineering 5(2):507-516. SPE Paper Number 80997-PA.

Wang, H. (2000): Theory of linear poroelasticity with application to geomechanics and hydrology. Princeton University Press.

Wernicke, B. (1985): Uniform normal-sense simple shear of the continental lithosphere. Can. J. Earth Sci. 22: S. 108-125.

Wibberly, C.A.J., Yielding, G., Toro, G. (2008): Recent advances in the understanding of fault zone internal structure: a review. In: Wibberley, C.A.J., Kurz, W., Imber, J., Holdsworth, R.E., Collettini, C. (Eds.), The Internal Structure of Fault Zones: Implications for Mechanical and Fluid-Flow Properties. Geological Society Special Publications 299, S. 5-33.

Wibberley, C.A., Shimamoto, J. (2003): Internal structure and permeability of major strike-slip fault zones: the Median Tectoni Line in Mie Prefecture, Southwest Japan. Journal of Structural Geology. Vol. 25, S. 59-78.

Winterkorn, H.F., Fang, H-X. (1991): Foundation Engineering Handbook, Kapitel 3: Soil Technology and Engineering Properties of Soils. Springer Science + Business Media, LLC, New York, US. ISBN 978-1-4757-5273-1.

Witt, K.J. (2008): Grundbau-Taschenbuch, 7. Auflage. Ernst & Sohn Verlag für Architektur und technische Wissenschaften, Berlin.

Witt, K.J. (2017): Grundbau-Taschenbuch, 8. Auflage. Ernst & Sohn Verlag für Architektur und technische Wissenschaften, Berlin.

Wittke, W. (2014): Rock Mechanics Based on an Anisotropic Jointed Rock Model (AJRM). Ernst & Sohn, Berlin, Germany. ISBN 978-3-433-03079-0. S. 39 f.

Yamamoto, H., Zhang, K., Karasaki, K., Marui, A., Uehara, H., Nishikawa, N. (2009): Numerical investigation concerning the impact of CO_2 geologic storage on regional groundwater flow. International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 3, No. 5, S. 586-599.

Zoback, M.D., Gorelick, S.M. (2012): Earthquake triggering and large-scale geologic storage of carbon dioxide. Proceedings of the National Academy of Sciences.

Zhang, K., Wu, Y.S., Pruess, K. (2008): User's Guide for TOUGH2-MP – A Massively Parallel Version of the TOUGH2 Code. Report LBNL-315E, Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California.

Zhang, Y., Oldenburg, C.M., Finsterle, S. Gudmundur, S.B. (2006): System-level modeling for geological storage of CO2. In Proceedings: TOUGH Symposium. Berkeley, CA (USA).

Zhang, Y., Gartrell, A., Undershultz, J.R., Dewhurst, D.N. (2009): Numerical modelling of strain localisation and fluid flow during extensional fault reactivation: Implcations for hydrocarbon preservation. Journal of Structural Geology 31 (2009), S. 315-327.

Zhang, Y., Roberts, P.A., Murphy, B. (2010): Understanding regional structural controls on mineralization at the century deposit: A numerical modelling approach. Journal of Geochemical Exploration 106 (2010), S. 244-250.

Zhang, Y., Underschultz, J.R., Gartrell, A., Dewhurst, D.N., Langhi, L. (2011): Effects of regional fluid pressure gradients on strain localisation and fluid flow during fault reactivation. Marine and Petroleum Geology, 28:1703-1713.

Zhang, Y., Schaubs, P.M., Sheldon, A., Poulet, T., Karrech, A. (2013): Modelling fault reactivation and fluid flow around a fault restraining step-over structure in the Laverton gold region, Yilgarn Craton, Western Australia. Geofluids (2013), 13, S. 127-139.

Zhang, Y., Langhi, L., Schaubs, P.M., Piane, C.D., Dewhurst, D.N., Stalker, L., Michael, K. (2015): Geomechanical stability of CO_2 containment at the South West Hub Western Australia: a coupled geomechanical-fluid flow modelling approach. International Journal of Greenhouse Gas Control. Vol. 37, S. 12-23.

Zhou, Q., Birkholzer, J., Mehnert, E., Lin, Y., Zhang, K. (2010): Modeling Basin- and Plume-Scale Processes of CO_2 Storage for Full-Scale Deployment.Ground Water, Vol. 48, No. 4, S. 494-514.

Vorveröffentlichungen

Teilergebnisse aus dieser Arbeit wurden in den im Folgenden aufgelisteten Publikationen und Forschungsberichten vorab veröffentlicht.

Entsprechend § 5 Abs. 4 der Promotionsordnung der Fakultät für Bauingenieurwesen der Rheinisch Westfälischen Technischen Hochschule Aachen in der Fassung vom 13.07.2015 geschah dies im Einvernehmen mit dem Betreuer Univ.-Prof. Dr.-Ing. Martin Ziegler und wurde der Fakultät für Bauingenieurwesen mit Schreiben vom 06.01.2015, 25.04.2016 und 07.09.2018 angezeigt.

Adams, M., Feinendegen, M., Ziegler, M., Kempka, T. (2014): Geomechanical simulation of the injection of CO_2 into saline aquifers with respect to risk assessment. In: Rock engineering and rock mechanics: structures in and on rock masses; proceedings of Eurock 2014, ISRM European Regional Symposium, Vigo, Spain, 26 – 28 May 2014 / Leandro R. Alejano (eds.), Leiden, CRC Press/Balkema, 2014, S. 305, ISBN 978-1-138-00149-7.

Adams, Markus (2014): Geomechanische Simulation von CO_2 - Injektionen in salinare Aquifere vor dem Hintergrund der Reaktivierung von Störzonen. In: 33. Baugrundtagung: Forum für junge Geotechnik-Ingenieure; Beiträge der Spezialsitzung; Estrel Convention Center Berlin, 23. – 26.9.2014 / Hrsg.: Deutsche Gesellschaft für Geotechnik e.V., Essen, DGGT, 2014, S. 159-166 ISBN: 978-3-9813953-7-2.

Adams, M., Feinendegen, M., Tillner, E., Kempka, T., Ziegler, M. (2015): An innovative hydro-mechanical coupling approach for fault reactivation. In: DYNAMIC EARTH from Alfred Wegener to today and beyond, Abstracts, GeoBerlin 2015, Annual Meeting of DGGV – DMG, 4-7 October 2015, Berlin.

Kahnt, R., Martin, M., Kutzke, A., Kempka, T., Tillner, E., Eckart, M., Schlüter, R., Krooß, B.M., Hildenbrand, A., Gensterblum, Y., Neukum, C., Klebingat, S., Adams, M., Feinendegen, M. (2015): C0$_2$RINA: Integrierte Risikoanalyse für die CO_2 - Speicherung im geologischen Untergrund. Endbericht: BMBF Verbundprojekt 03G0780D

Adams, M., Feinendegen, M., Tillner, E., Kempka, T., Ziegler, M. (2015): Geologische CO_2 - Speicherung: Vergleich unterschiedlicher Kopplungsansätze für die hydraulische Reaktivierung von Störzonen. In: Aktuelle Forschung in der Bodenmechanik 2015: Tagungsband zur 2. Deutschen Bodenmechanik Tagung, Bochum / Tom Schanz, Achim Hettler (Hrsg.), Berlin (u.a.), Springer Vieweg, 2015, S. 243-258, ISBN 978-3-662-45990-4.

Kahnt, R., Kutzke, A., Martin, M., Eckart, M., Schlüter; R., Kempka, T., Tillner, E., Hildenbrand, A., Krooss, B.M., Gensterblum, Y., Adams, M., Feinendegen, M., Klebingat, S., Neukum, C. (2015): "CO_2RINA" - CO_2 storage risk integrated analysis. In: Geological storage of CO_2: long term security aspects / Axel Liebscher … eds., Cham, Springer, 2015, S. 139-166, (Geotechnologien science report; 22), ISBN 978-3-319-13929-6; doi: 10.1007/978-3-319-13930-2_7.

Adams, M.; Kempka, T.; Chabab, E.; Ziegler, M. (2018): An innovative computationally efficient hydromechanical coupling approach for fault reactivation in geological subsurface utilization. In: Computers & Geosciences, Vol. 111 (Febr 2018), S. 46-57, ISSN: 0098-3004, https://doi.org/10.1016/j.cageo.2017.10.007

Anlagen

A Verwendete Modellvariationen 227

Modellvariation 1 227
Modellvariation 2 227
Modellvariationen 3, 4 und 5 228
Modellvariation 6 228
Modellvariation 7 229
Modellvariation 8 229
Modellvariation 9 230

B Parametrisierung 231

Verwendete Parametrisierung für Modellvariation M9 231

C Zeitliche Diskretisierung und Neumann-Randbedingungen 232

Verwendete zeitliche Diskretisierung und Neumann-Randbedingungen zur Simulation des Injektionsprozesses 232

D Ergebnisse der Parameterstudien aus Kapitel 7.4 234

P0: Variation der Störungsdiskretisierung (Einwegkopplung) 234
P1: Variation des Reibungswinkel φ (Einwegkopplung) 235
P2: Variation des Initialspannungszustandes (Einwegkopplung) 236
P3: Variation des Dilatanzwinkels ψ (Einwegkopplung) 237
P4: Variation der initialen Störungspermeabilität (Einwegkopplung) 238
P5: Variation der Injektionsrate (Einwegkopplung) 239
P6: Variation des Dilatanzwinkels φ (Zweiwegkopplung) 248
P7: Variation des Sensitivitätsexponenten n (Zweiwegkopplung) 249
P8: Einwegkopplung vs. Zweiwegkopplung 250
P9: Variation des E-Moduls des Liegenden 253

E Verwendete semi-analytische Parametrisierungen in Kapitel 7.6 254

Modellvariation M1: 254
Modellvariation M2: 255
Modellvariation M3: 256
Modellvariation M4: 257
Modellvariation M5: 258

Modellvariation M6:..... 259
Modellvariation M8:..... 260

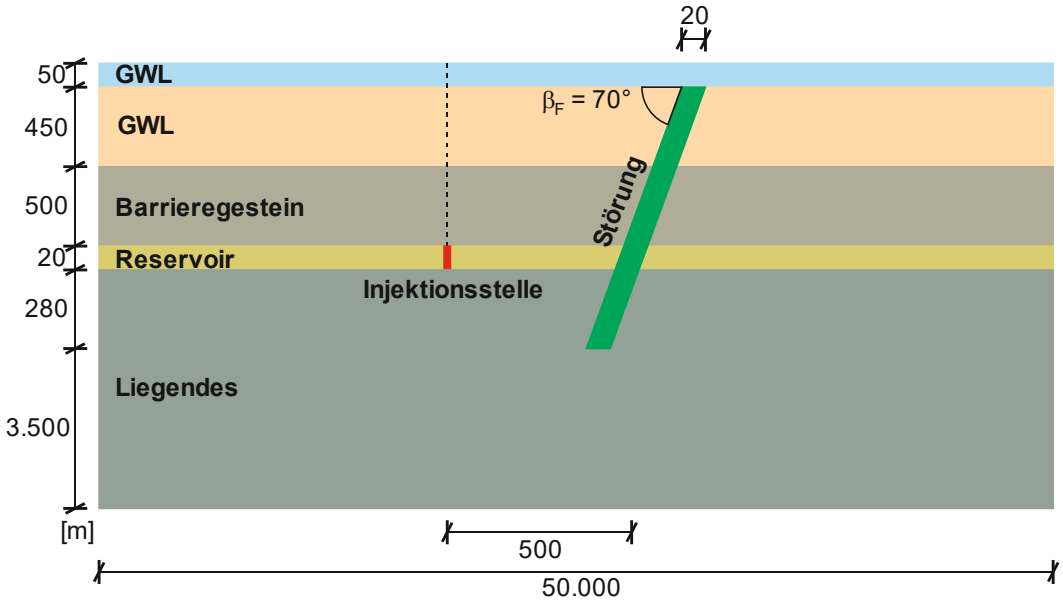
F Ergebnisse der Validierung aus Kapitel 7.6 261

Modellvariation M1:..... 261
Modellvariation M2:..... 264
Modellvariation M3:..... 266
Modellvariation M4:..... 268
Modellvariation M5:..... 270
Modellvariation M6:..... 272
Modellvariation M8:..... 273

A Verwendete Modellvariationen

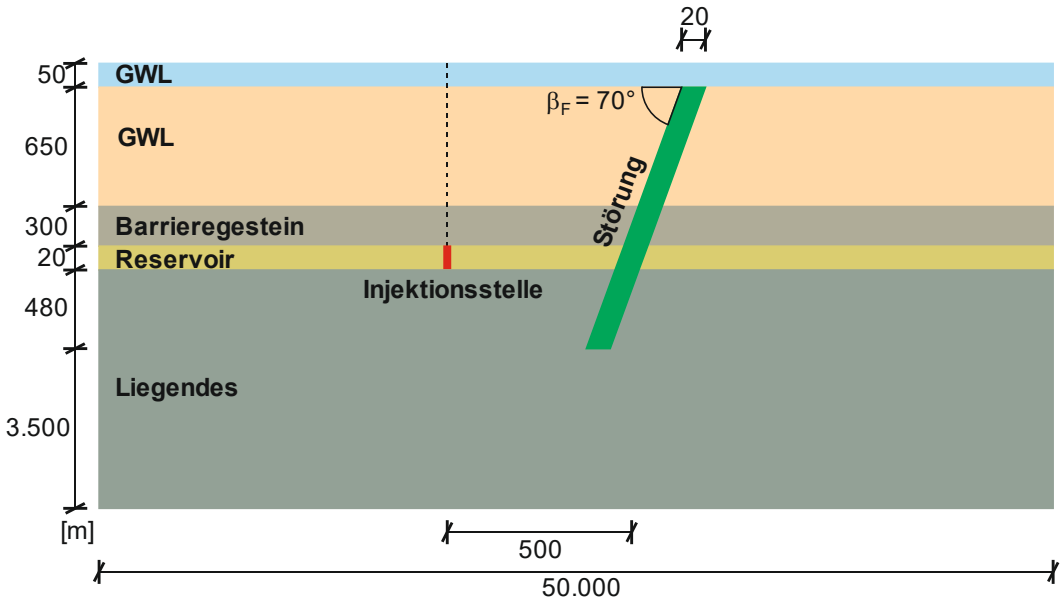
Modellvariation 1

Eine 500 m mächtige Barrieregesteinsformation, kein Störungsversatz, eine Störung.



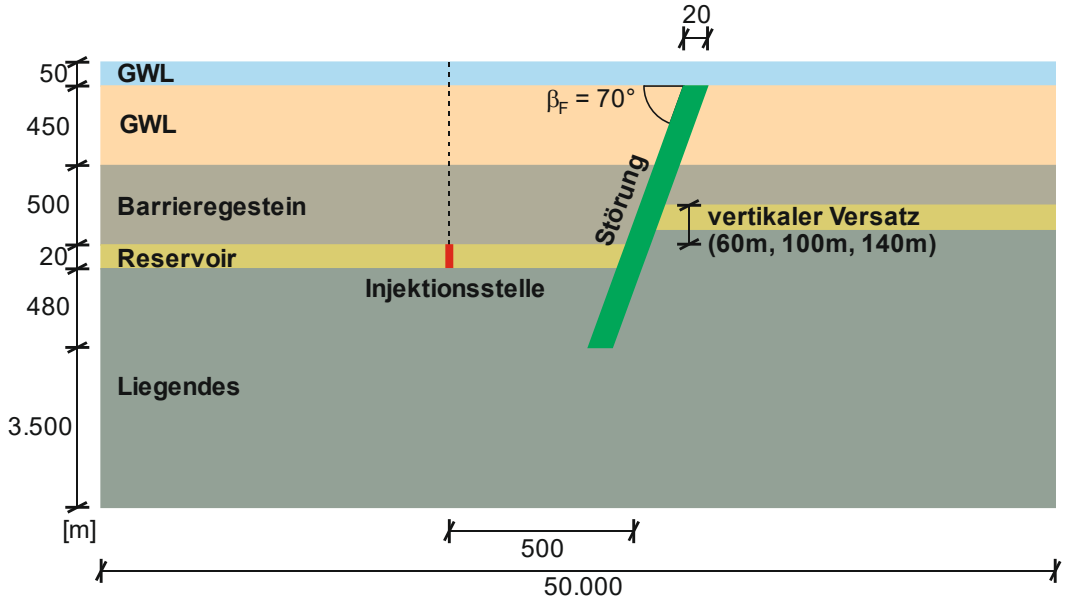
Modellvariation 2

Eine 300 m mächtige Barrieregesteinsformation, kein Störungsversatz, eine Störung.



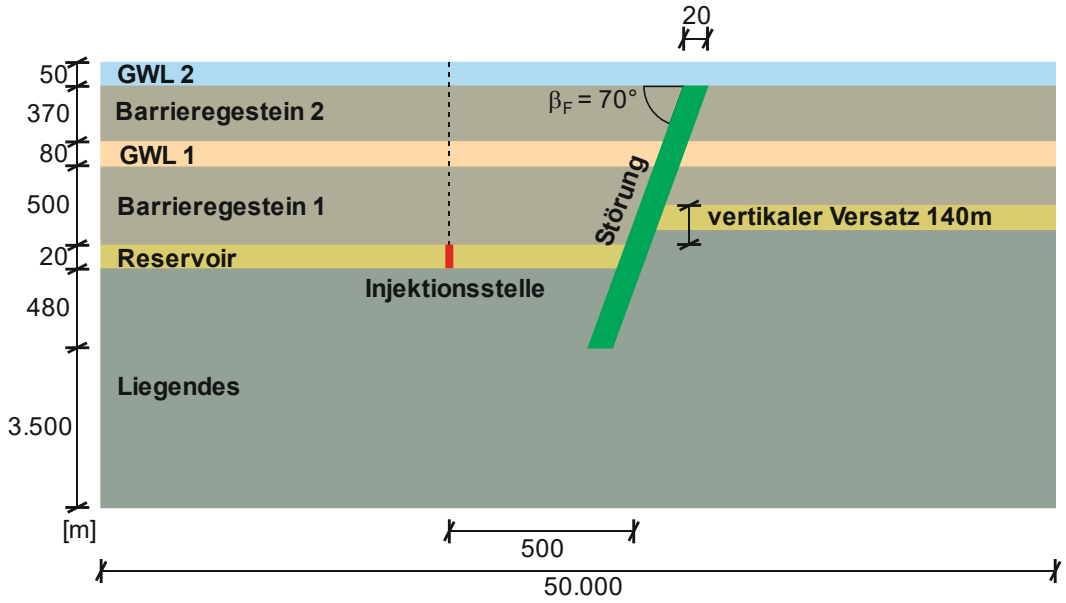
Modellvariationen 3, 4 und 5

Eine 500 m mächtige Barrieregesteinsformation, Störungsversatz 60 m, 100 m beziehungsweise 140 m, eine Störung.



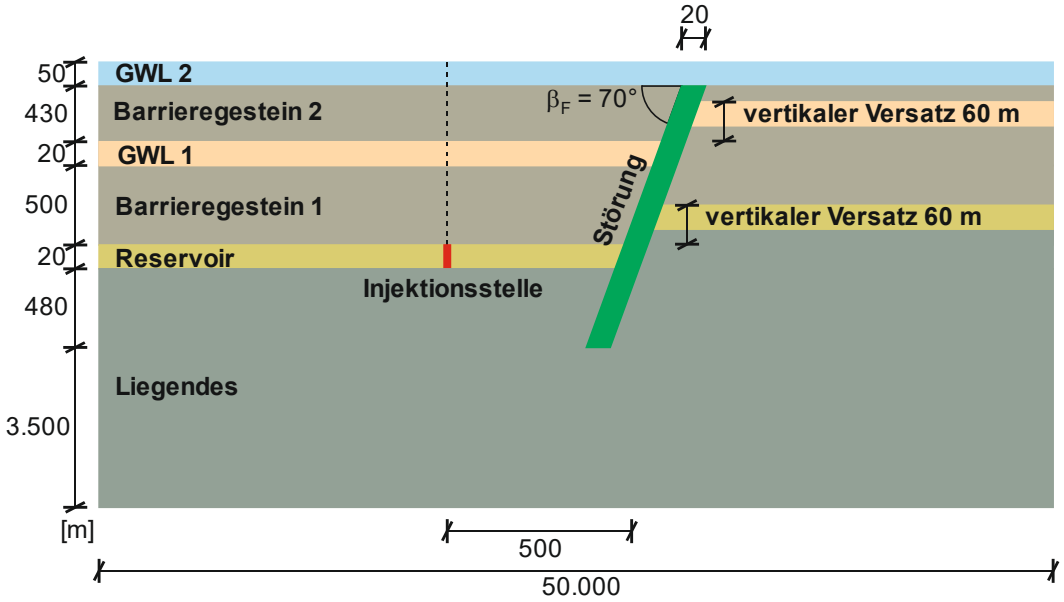
Modellvariation 6

Zwei 500 m beziehungsweise 370 m mächtige Barrieregesteinsformationen, Störungsversatz 140 m, eine Störung.



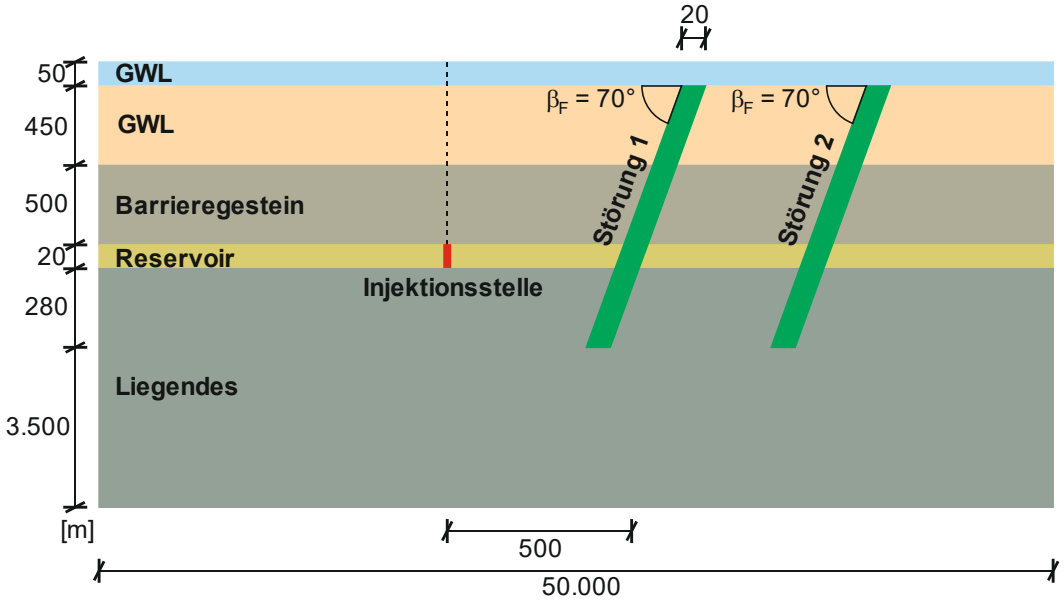
Modellvariation 7

Zwei 500 m beziehungsweise 430 m mächtige Barrieregesteinsformationen, Störungsversatz 60 m, eine Störung.



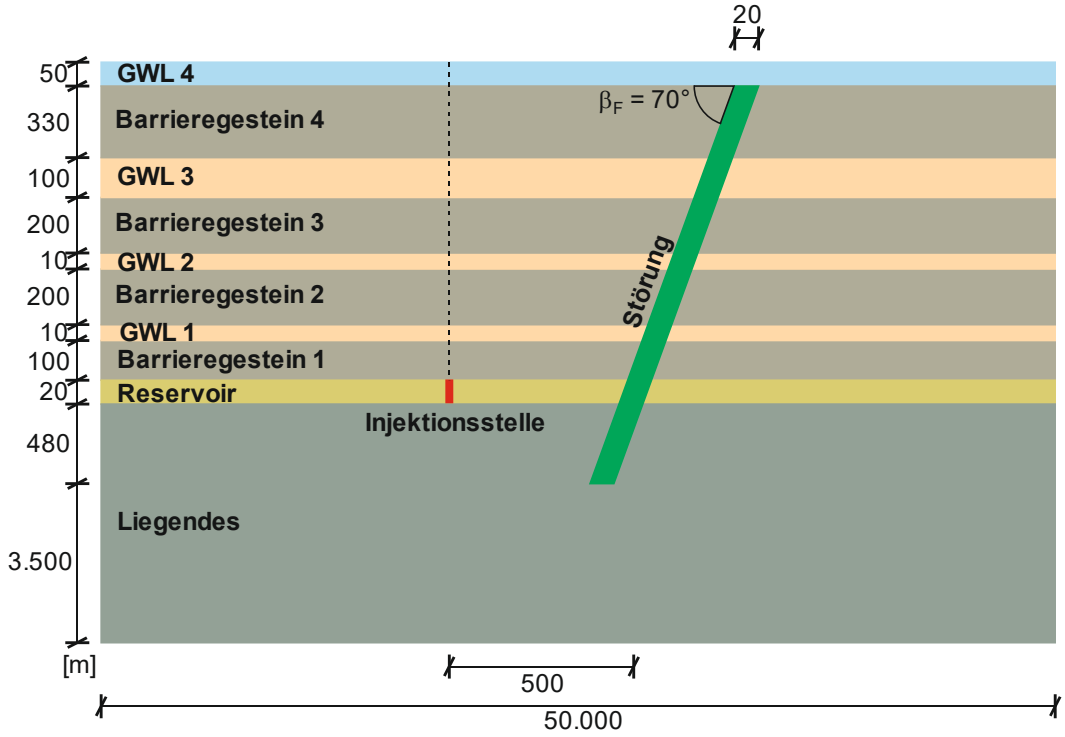
Modellvariation 8

Eine 500 m mächtige Barrieregesteinsformation, kein Störungsversatz, zwei Störungen.



Modellvariation 9

Vier 100 m, 200 m beziehungsweise 330 m mächtige Barrieregesteinsformationen, kein Störungsversatz, eine Störung.



B Parametrisierung

Verwendete Parametrisierung für Modellvariation M9

Parameter	Hangendes							
	GWL				Barrieregestein			
	1	2	3	4	1	2	3	4
E Modul [GPa]	10	10	8,5	2,6	10	10	10	4
Poissonzahl ν [-]	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
Kornrohdichte ρ_s [kg/m³]	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260	2.260
Biot	1	1	1	1	1	1	1	1
Reibungswinkel φ [°]	30	30	30	-	25	25	25	25
Kohäsion c [MPa]	5	5	5	-	5	5	5	5
Dilatanzwinkel ψ [°]	10	10	10	10	10	10	10	10
Porosität ϕ [-]	0,1	0,1	0,1	0,1	0,01	0,01	0,01	0,01
Permeabilität k [m²]	10^{-14}	10^{-14}	10^{-14}	10^{-14}	10^{-19}	10^{-19}	10^{-19}	10^{-19}
Temperatur T [°C]	35	35	20	10	35	35	35	20
Salinität [% NaCl bezogen Masse]	15	15	10	0	15	15	15	10
Fluiddichte ρ_f [kg/m³]	1.100	1.100	1.065	1.000	1.100	1.100	1.100	1.065
Dynamische Viskosität [Pa·s]	$0{,}7\cdot10^{-3}$	$0{,}7\cdot10^{-3}$	$1{,}0\cdot10^{-3}$	$1{,}3\cdot10^{-3}$	$0{,}7\cdot10^{-3}$	$0{,}7\cdot10^{-3}$	$0{,}7\cdot10^{-3}$	$1{,}0\cdot10^{-3}$

C Zeitliche Diskretisierung und Neumann-Randbedingungen

Verwendete zeitliche Diskretisierung und Neumann-Randbedingungen zur Simulation des Injektionsprozesses.

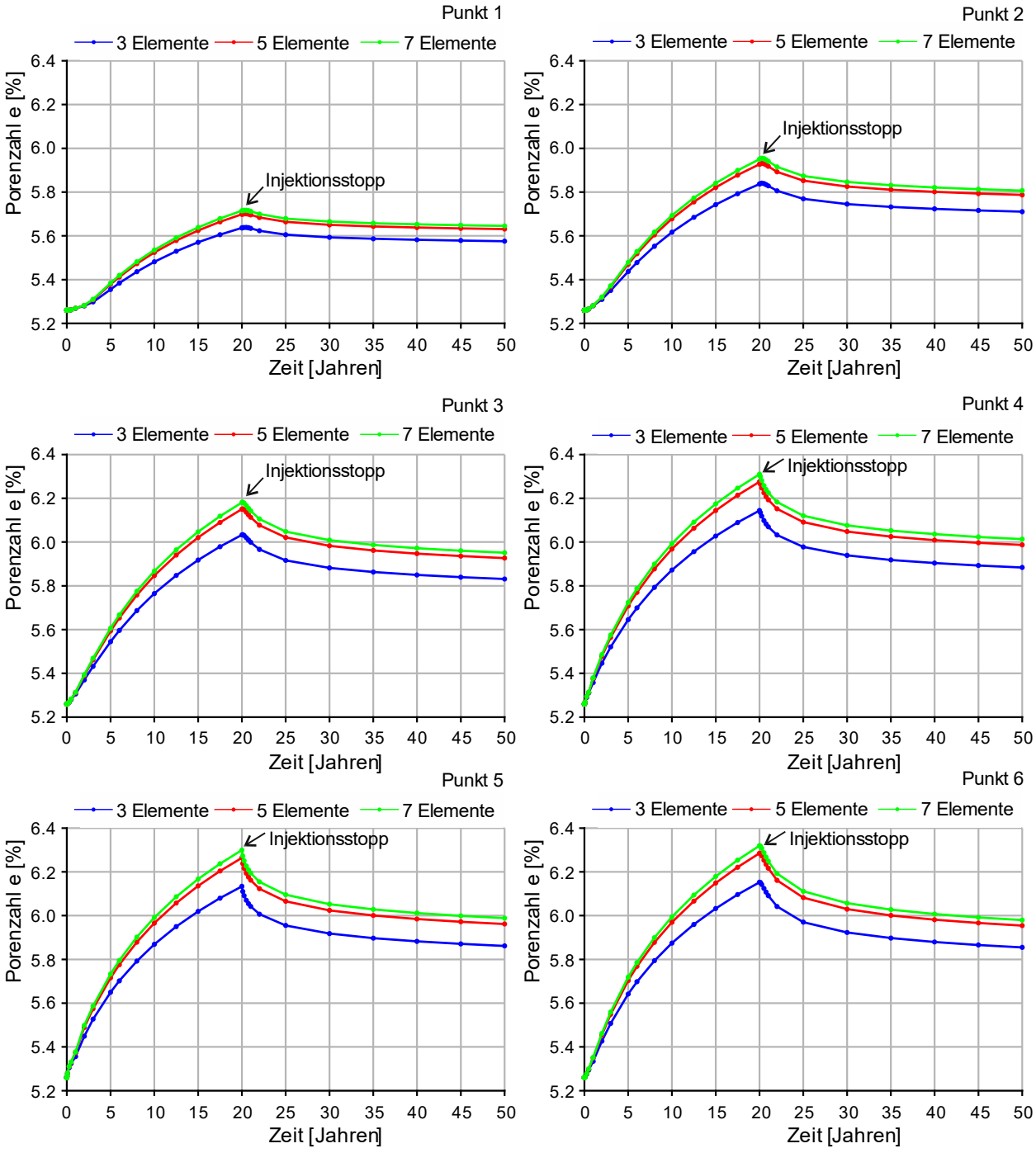
Simulations-schritt	Akkumulierte Simulationszeit				Zur Injektionsrate [kg/s/m] zugehörige Filtergeschwindigkeit [m/s]			
	[s]	[h]	[d]	[a]	0,0018	0,0023	0,0027	0,0032
1	1.000				$3\cdot10^{-9}$	$4\cdot10^{-9}$	$5\cdot10^{-9}$	$6\cdot10^{-9}$
2	2.000				$4\cdot10^{-9}$	$5\cdot10^{-9}$	$6\cdot10^{-9}$	$7\cdot10^{-9}$
3	4.000				$5\cdot10^{-9}$	$6\cdot10^{-9}$	$7\cdot10^{-9}$	$8\cdot10^{-9}$
4		3,33			$6\cdot10^{-9}$	$7\cdot10^{-9}$	$8\cdot10^{-9}$	$9\cdot10^{-9}$
5		6,66			$7\cdot10^{-9}$	$8\cdot10^{-9}$	$9\cdot10^{-9}$	$1\cdot10^{-8}$
6		10			$8\cdot10^{-9}$	$9\cdot10^{-9}$	$1\cdot10^{-8}$	$2\cdot10^{-8}$
7			1		$9\cdot10^{-9}$	$1\cdot10^{-8}$	$2\cdot10^{-8}$	$3\cdot10^{-8}$
8			2		$1\cdot10^{-8}$	$2\cdot10^{-8}$	$3\cdot10^{-8}$	$4\cdot10^{-8}$
9			5		$2\cdot10^{-8}$	$3\cdot10^{-8}$	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$
10			10		$3\cdot10^{-8}$	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$
11			30		$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
12			100		$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
13			180		$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
14				1	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
15				2	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
16				3	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
17				5	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
18				6	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
19				8	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
20				10	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
21				12,	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$
22				15	$4\cdot10^{-8}$	$5\cdot10^{-8}$	$6\cdot10^{-8}$	$7\cdot10^{-8}$

23	17,5	$4 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-8}$
24	20	$4 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-8}$	$6 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-8}$
25	20,1	Postinjektionsphase			
26	20,25				
27	20,5				
28	20,75				
29	21				
30	22				
31	25				
32	30				
33	35				
34	40				
35	45				
36	50				

D Ergebnisse der Parameterstudien aus Kapitel 7.4

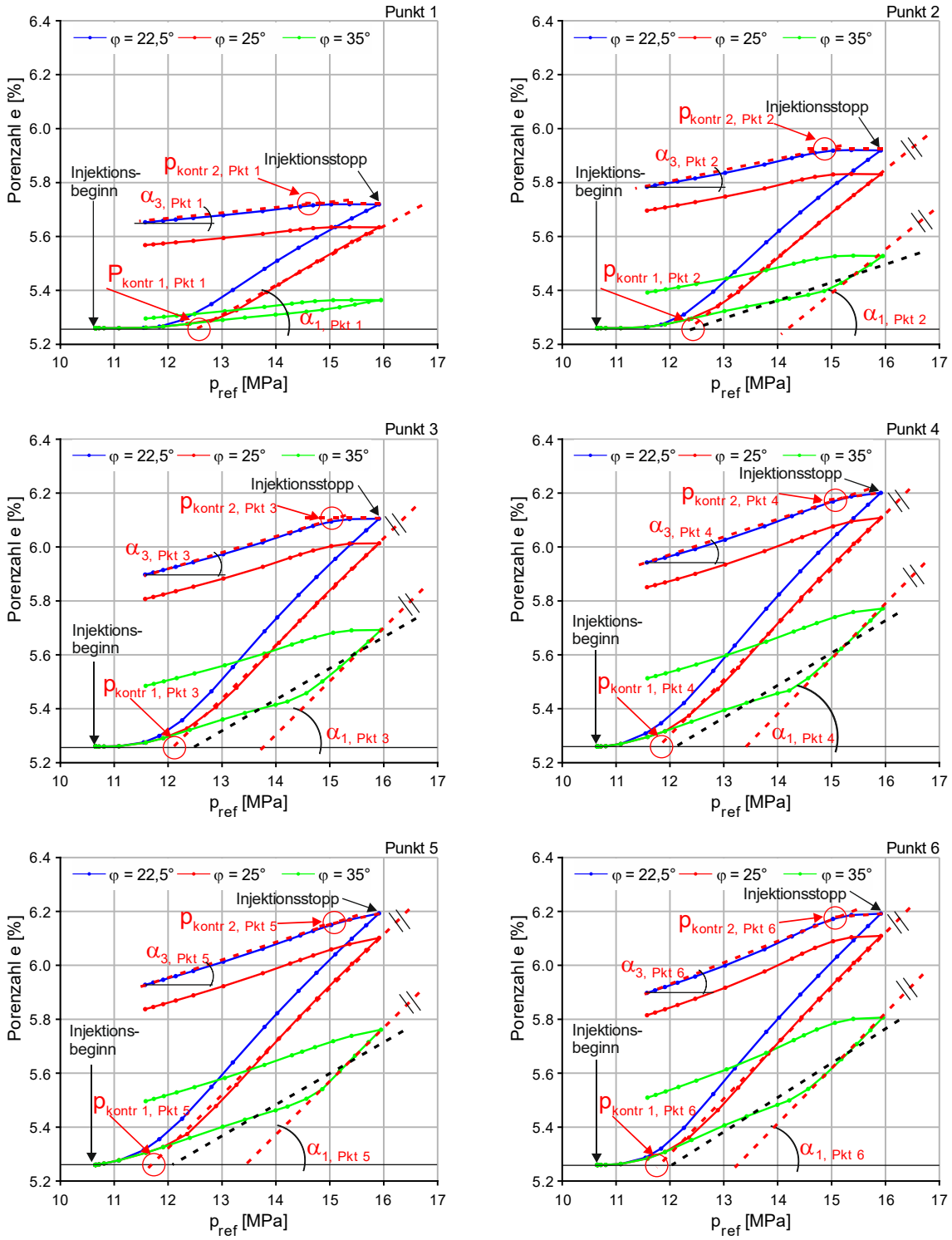
P0: Variation der Störungsdiskretisierung (Einwegkopplung)

Parameterstudie M1P0 zeigt, dass die Porenzahlentwicklungen mit zunehmender Elementanzahl gegen einen festen Wert konvergieren.



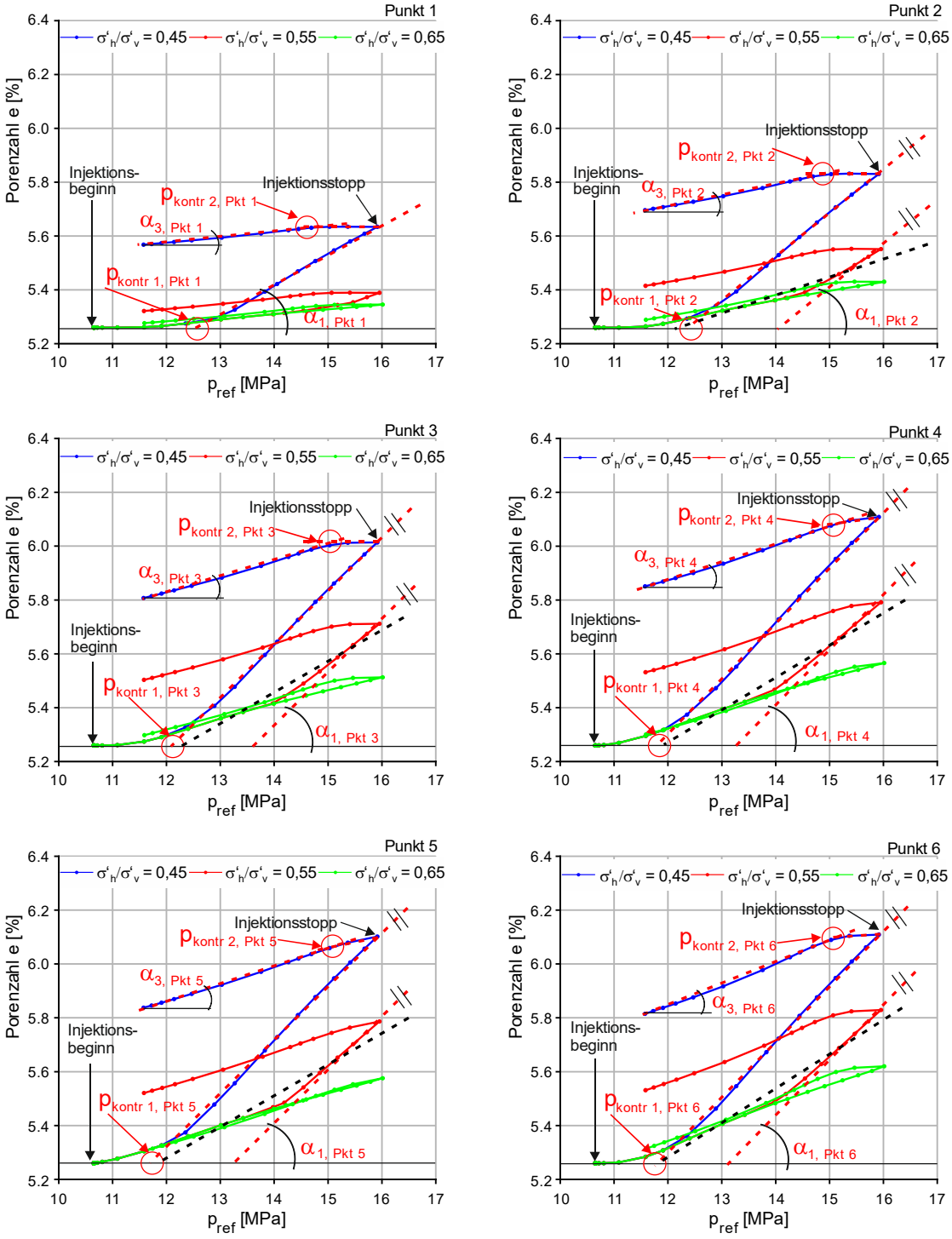
P1: Variation des Reibungswinkel φ (Einwegkopplung)

Parameterstudie M1P1 zeigt für alle untersuchten Reibungswinkel φ identische Neigungen α_1, α_2 und α_3 (rot gestrichelte Linien) im ansteigenden Ast. Durch eine lineare Approximation mittels der Methode der kleinsten Quadrate (schwarz gestrichelte Linie) weicht die Neigung α_1 des bilinear ansteigenden Astes für φ = 35° jedoch von denen der anderen ab.



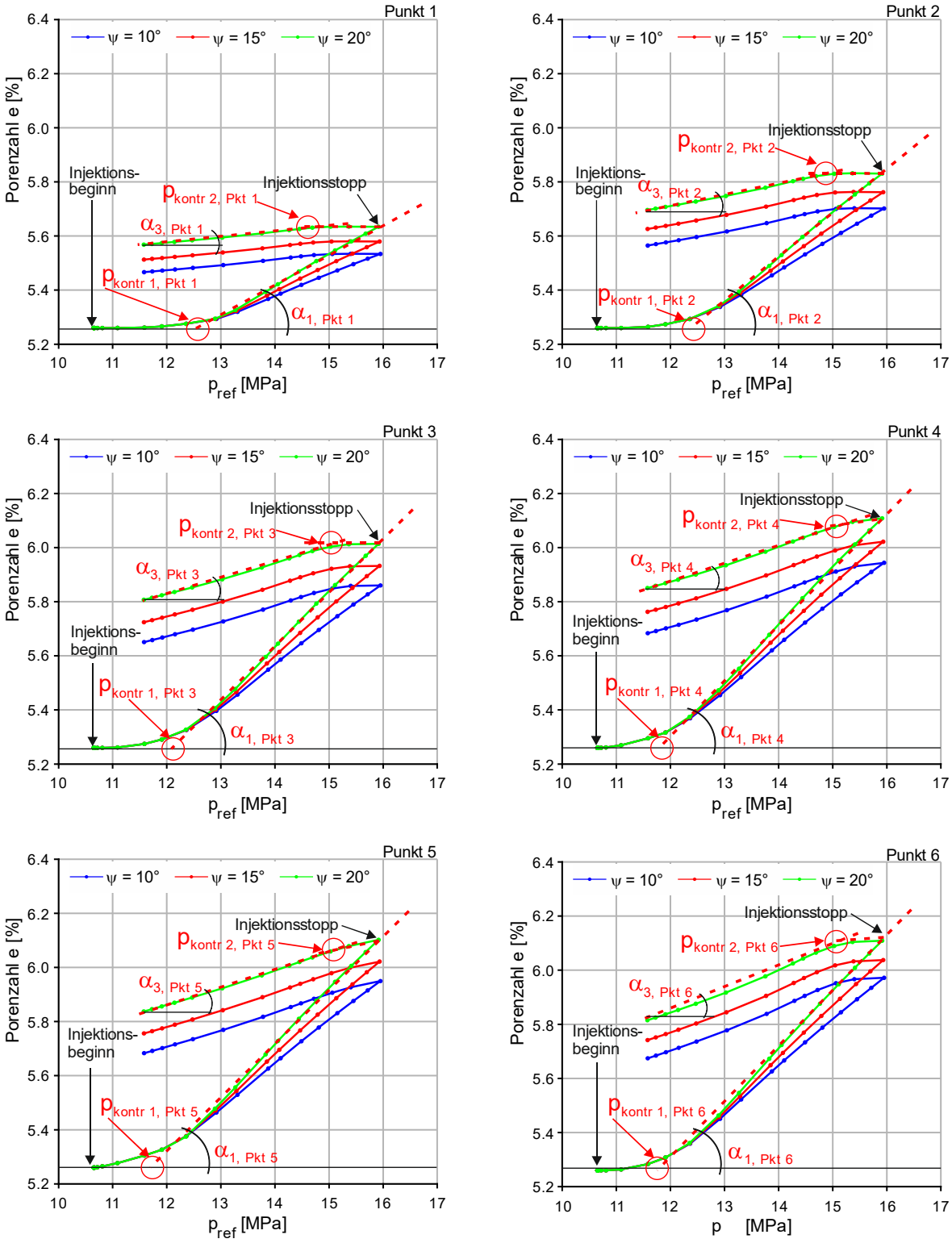
P2: Variation des Initialspannungszustandes (Einwegkopplung)

Parameterstudie M1P2 zeigt für $\sigma'_h/\sigma'_v = 0{,}45°$ und $\sigma'_h/\sigma'_v = 0{,}55°$ identische Neigungen α_1, α_2 und α_3 (rot gestrichelte Linie). Durch eine lineare Approximation mittels der Methode der kleinsten Quadrate (schwarz gestrichelte Linie) weicht die Neigung α_1 des bilinear ansteigenden Astes für $\sigma'_h/\sigma'_v = 0{,}55°$ jedoch von denen der anderen ab. $\sigma'_h/\sigma'_v = 0{,}65°$ zeigt nur elastische Verformungen.



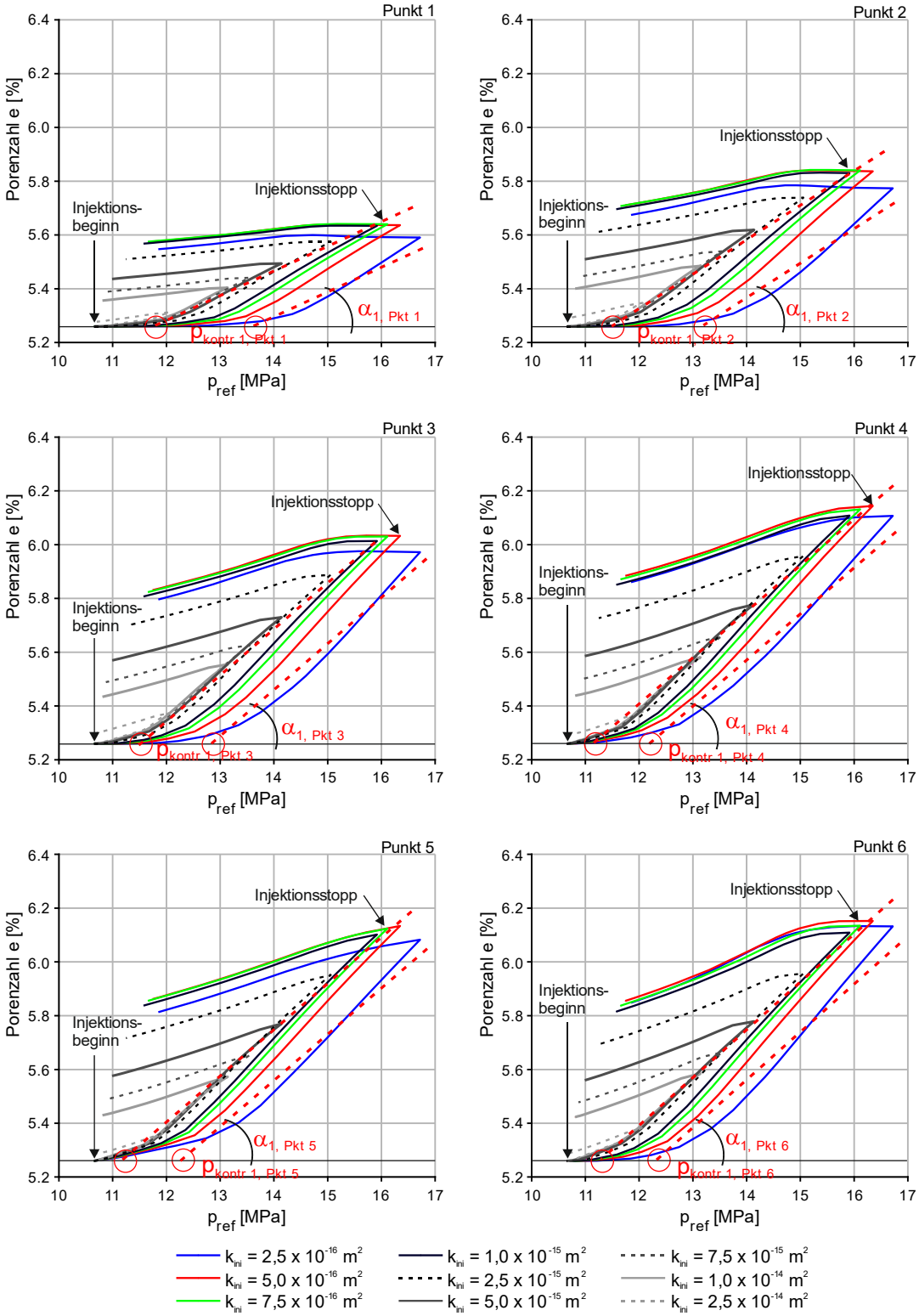
P3: Variation des Dilatanzwinkels ψ (Einwegkopplung)

Parameterstudie M1P3 zeigt für unterschiedliche Dilatanzwinkel der Störung eine variierende Neigung α_1 und identische Neigungen α_2 und α_3 sowie identische $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$.



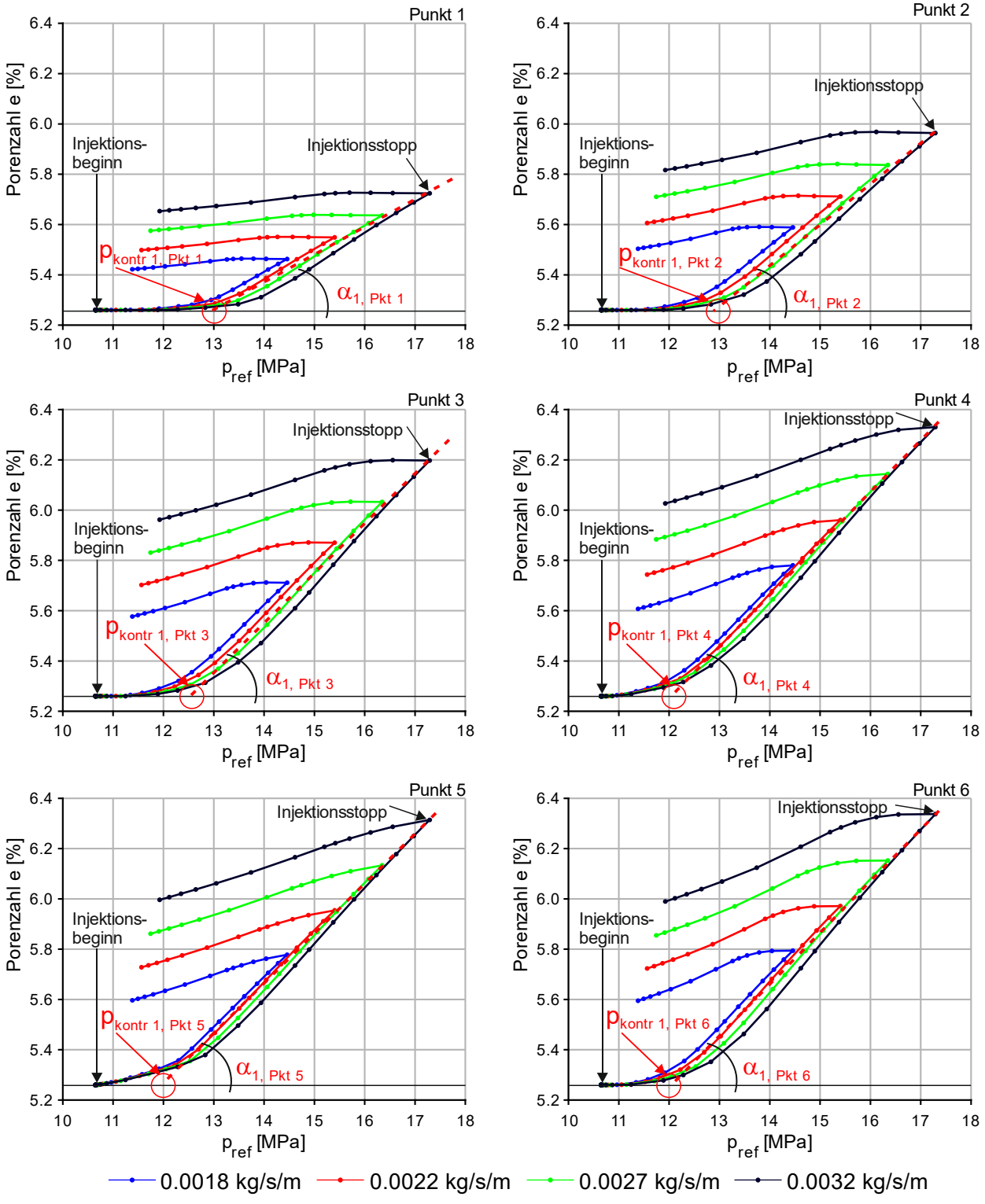
P4: Variation der initialen Störungspermeabilität (Einwegkopplung)

Parameterstudie M1P4 zeigt für unterschiedliche initiale Permeabilitäten identische Neigungen α_1, α_2, α_3. $p_{kontr\,1}$ ist jedoch variabel und konvergiert mit abnehmender Permeabilität gegen einen festen Wert.

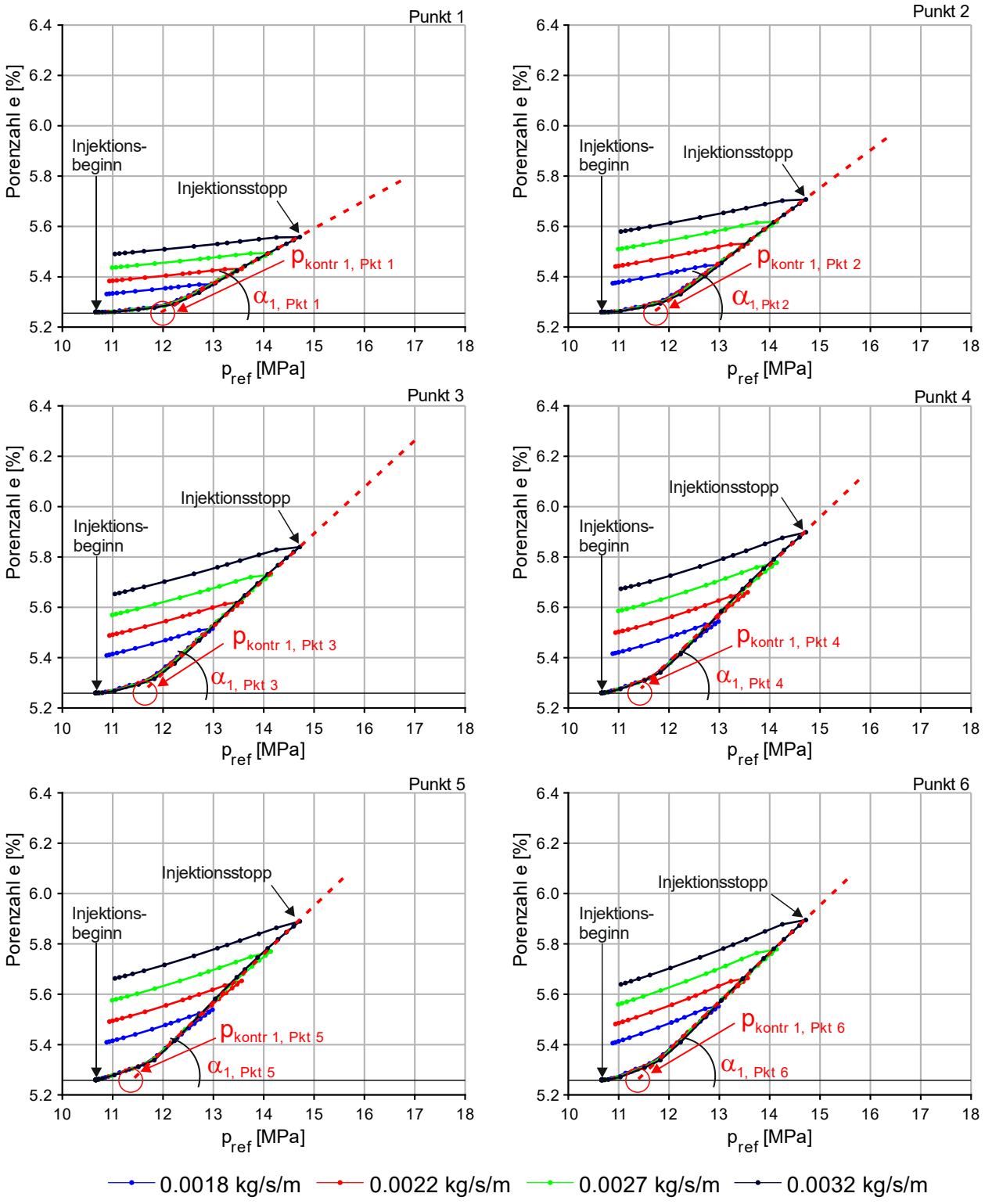


P5: Variation der Injektionsrate (Einwegkopplung)

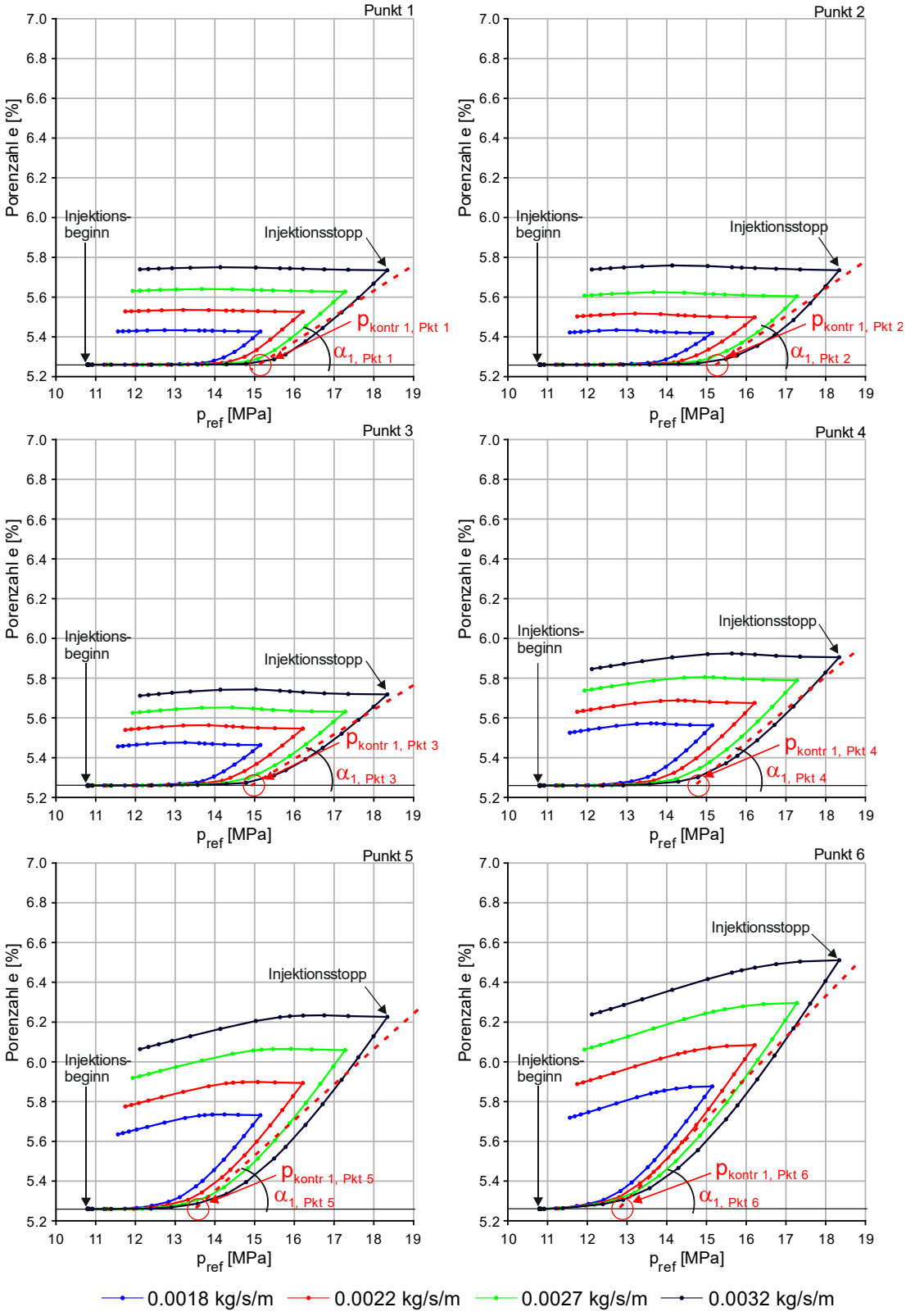
Parameterstudie M1P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\,1}$.



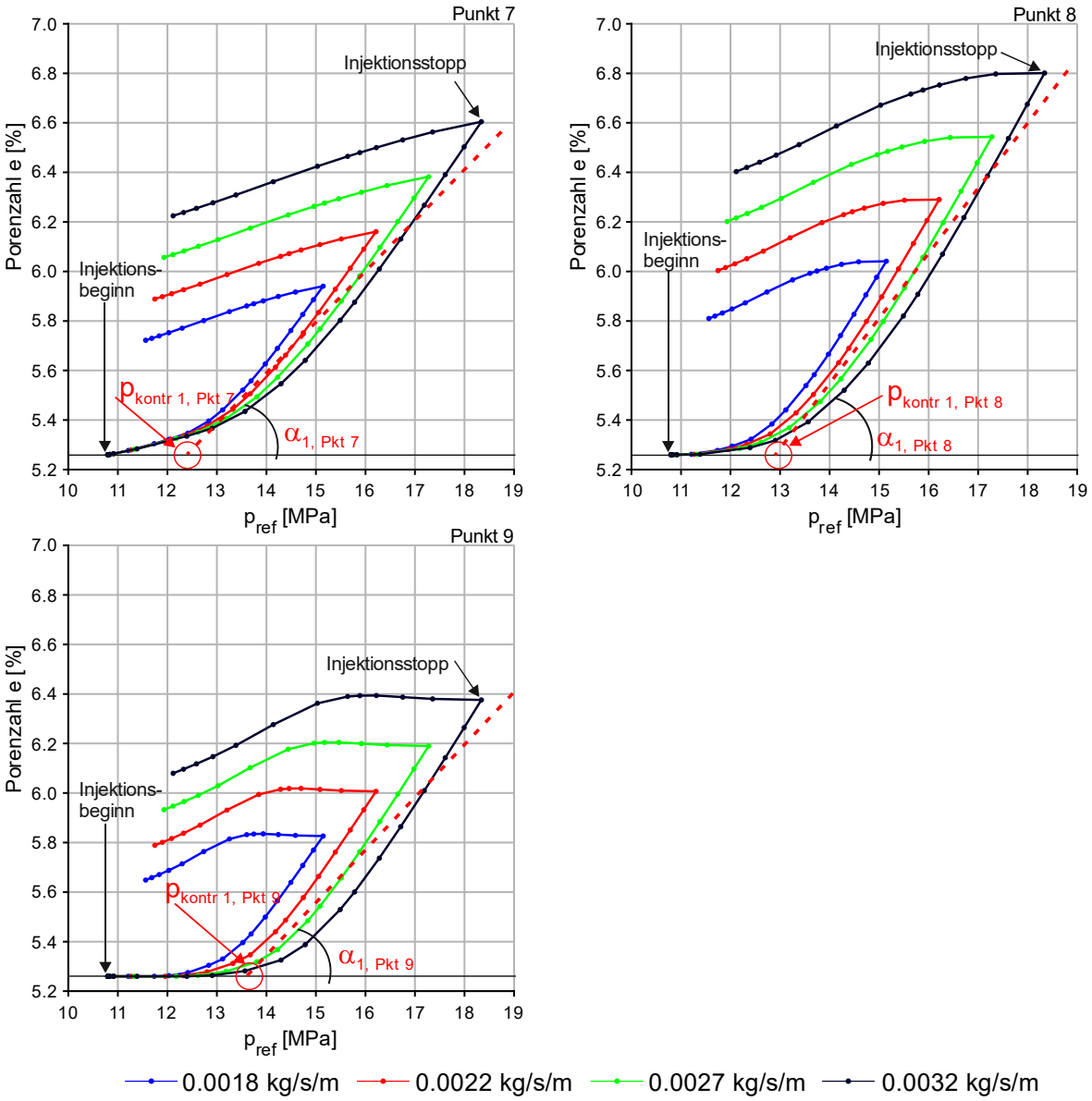
Parameterstudie M1P5 zeigt für k = 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\,1}$.



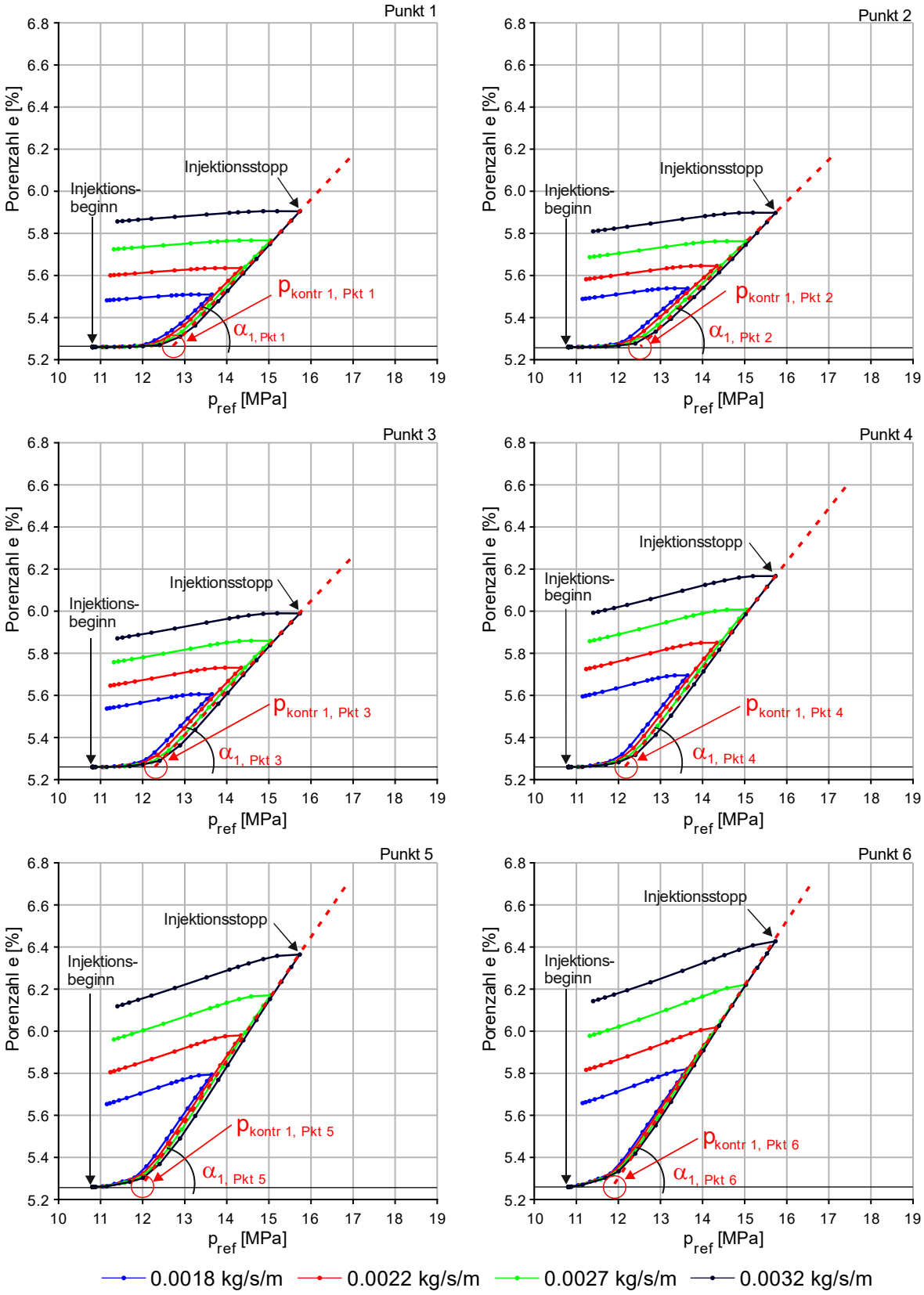
Parameterstudie M7P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und nur eingeschränkt invariantes Verhalten für $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugspunkte 1 bis 6)



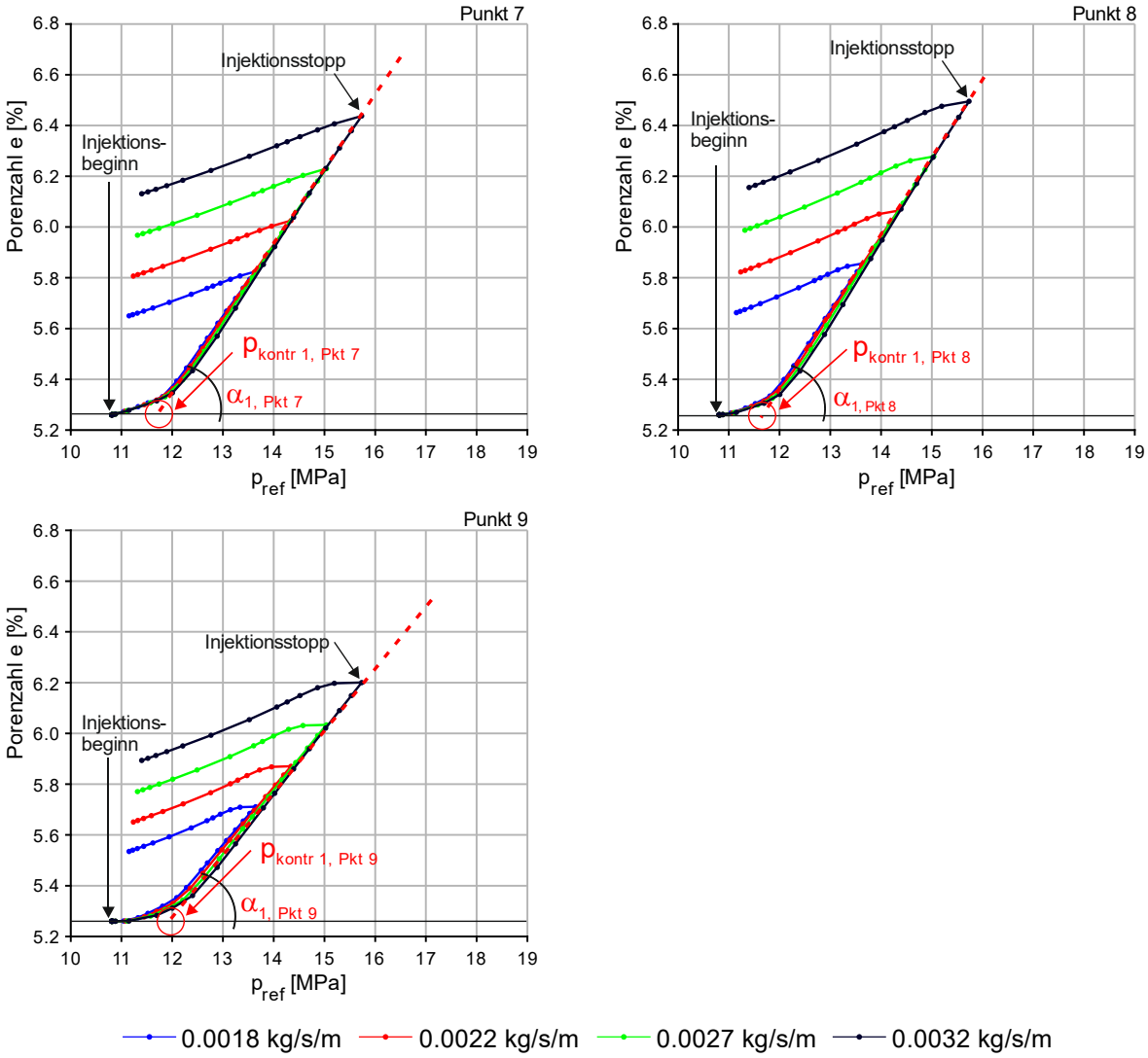
Parameterstudie M7P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und nur eingeschränkt invariantes Verhalten für $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugspunkte 7 bis 9)



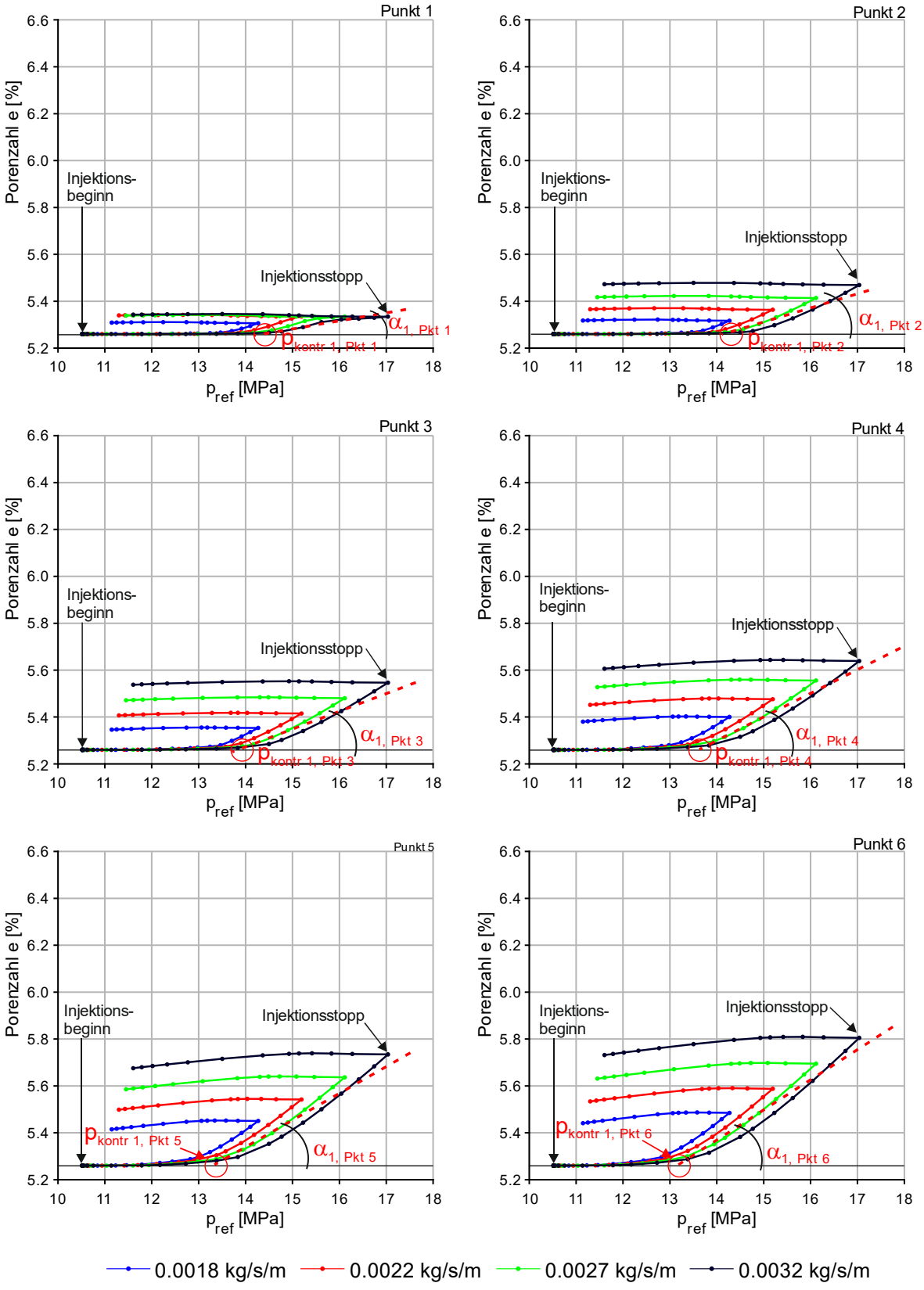
Parameterstudie M7P5 zeigt für k = 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugpunkt 1 bis 6).



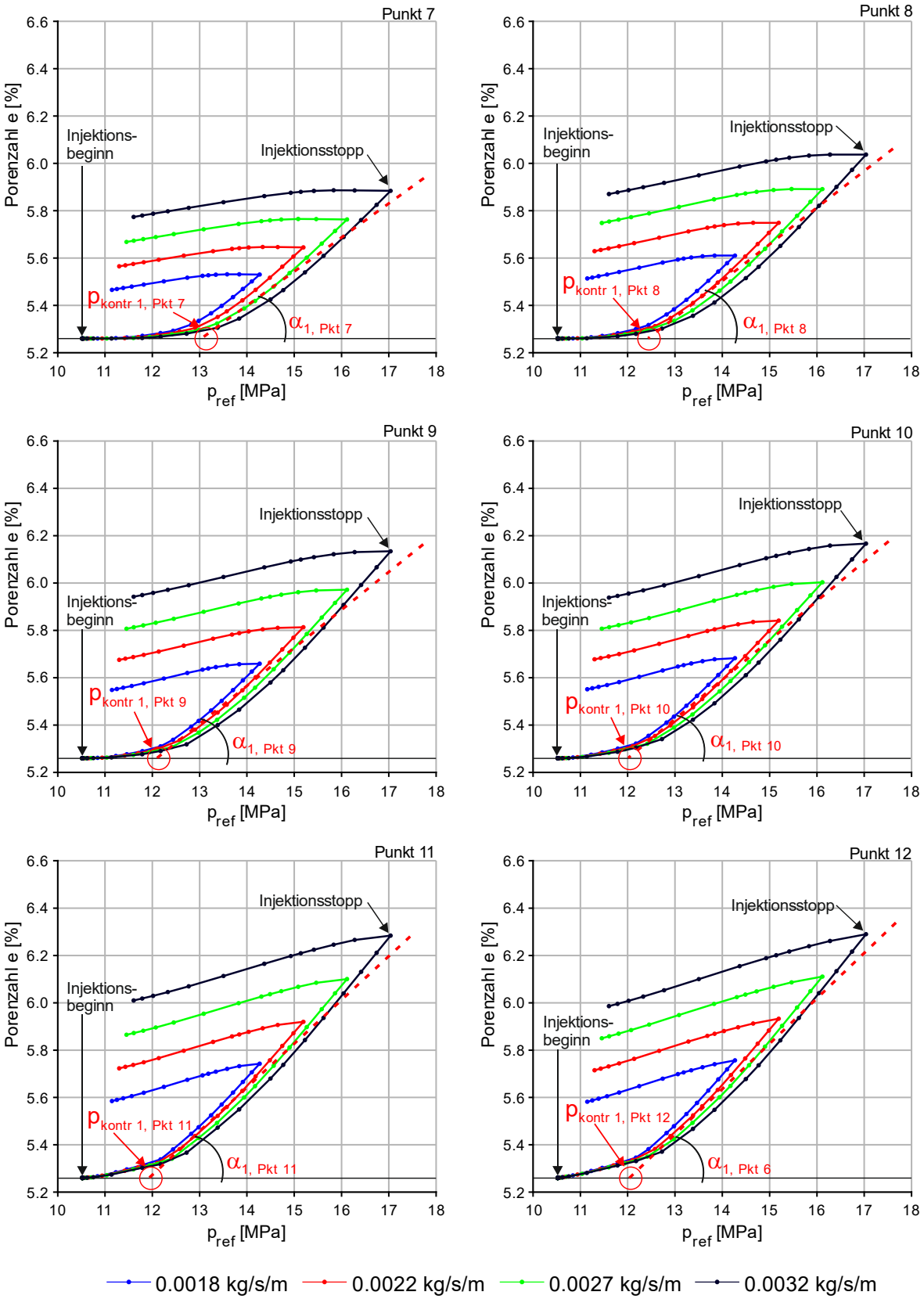
Parameterstudie M7P5 zeigt für k = 5 x 10^{-15} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugpunkt 7 bis 9).



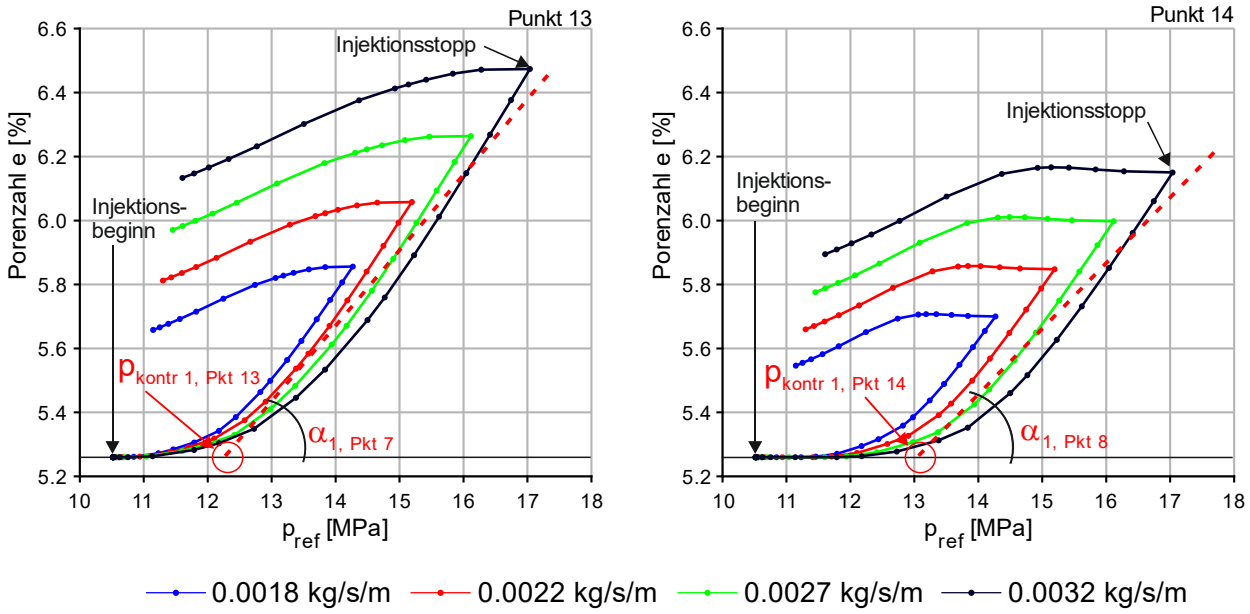
Parameterstudie M9P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugpunkt 1 bis 6).



Parameterstudie M9P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugpunkt 7 bis 12).

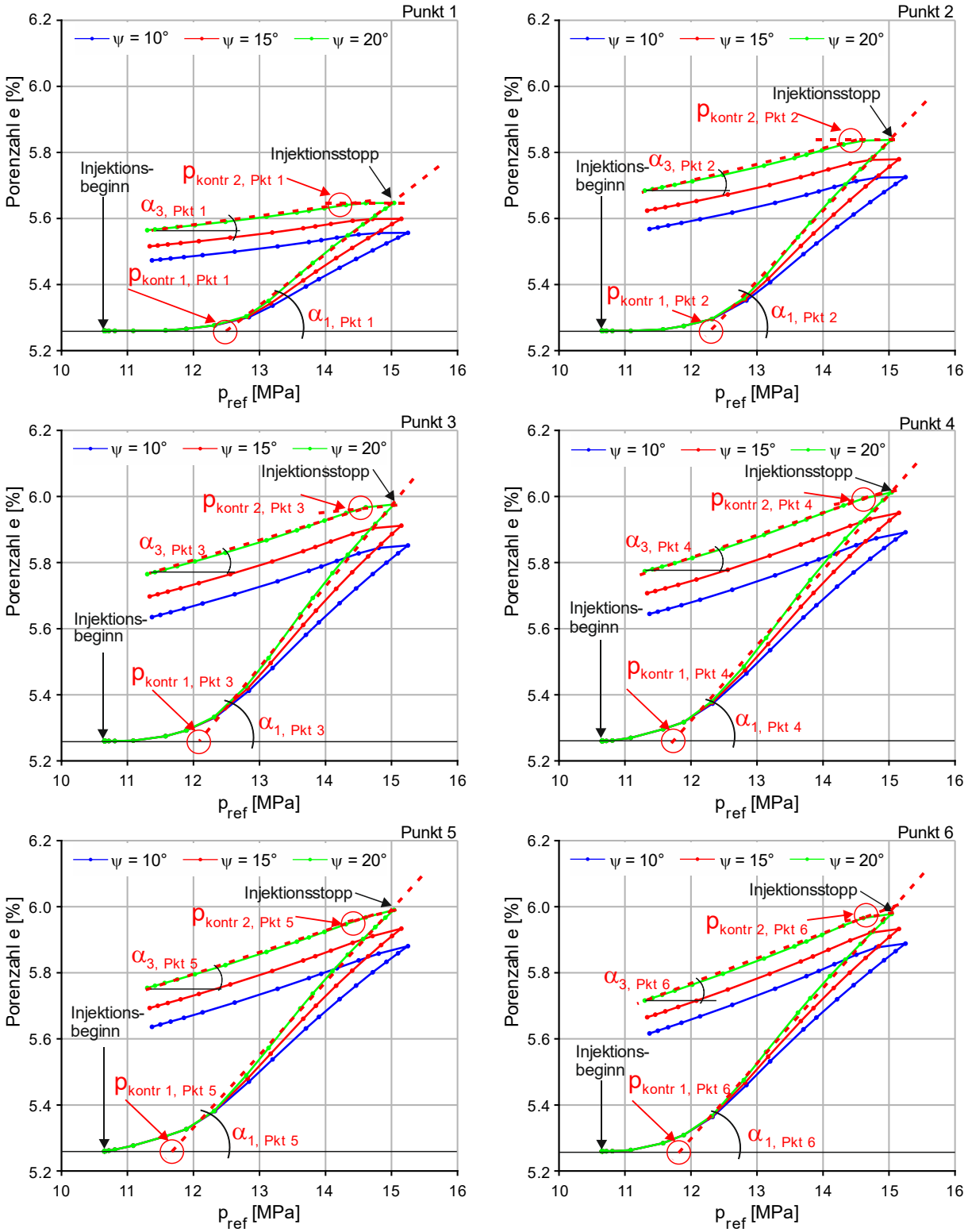


Parameterstudie M9P5 zeigt für k = 5 x 10^{-16} m² in Bezug auf unterschiedliche Injektionsraten invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\ 1}$ (hier Bezugpunkt 13 bis 14).



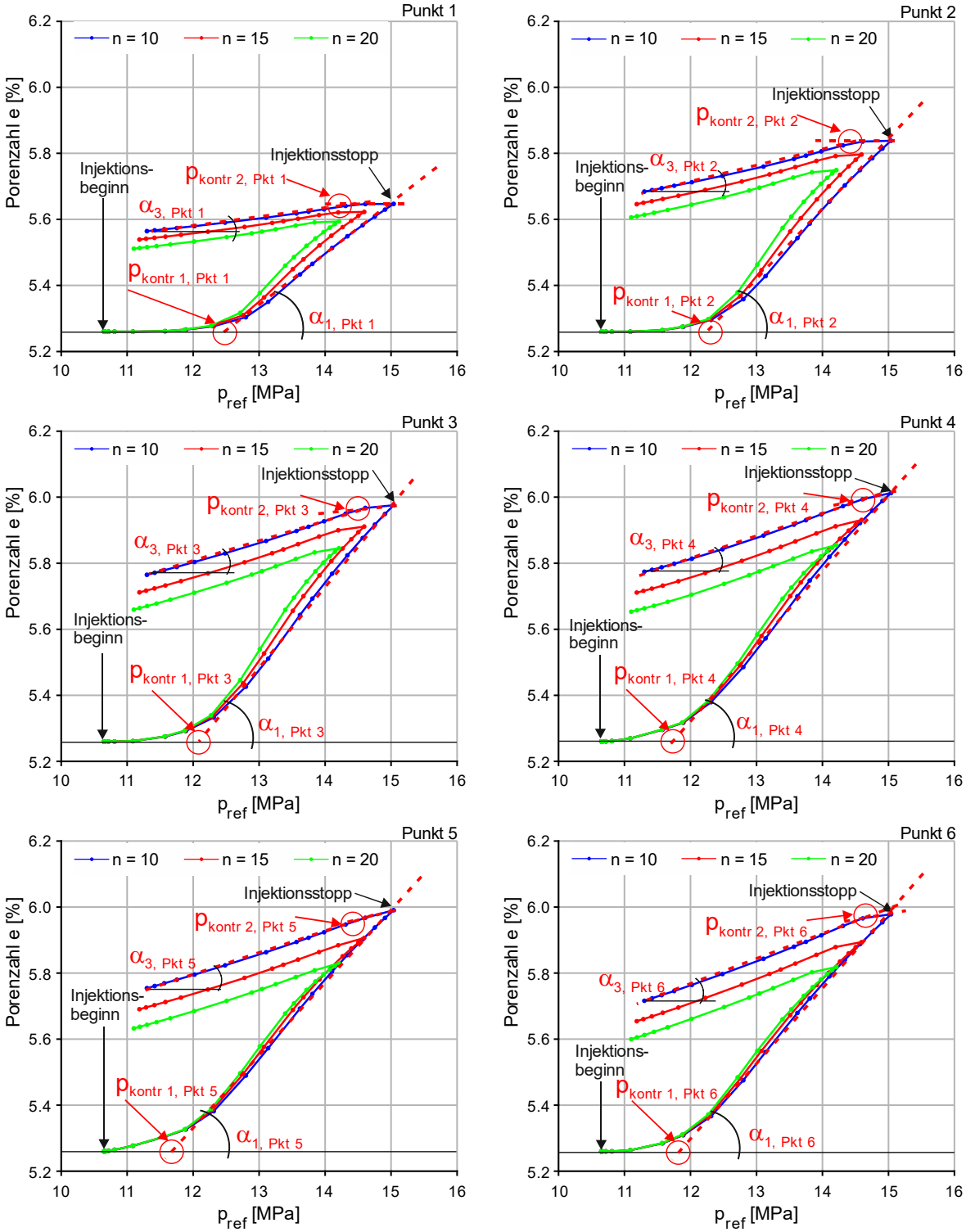
P6: Variation des Dilatanzwinkels φ (Zweiwegkopplung)

Parameterstudie M1P6 zeigt für unterschiedliche Dilatanzwinkel der Störung eine variierende Neigung α_1 und identische Neigungen α_2 und α_3 sowie identische $p_{kontr\,1}$ und $p_{kontr\,2}$.



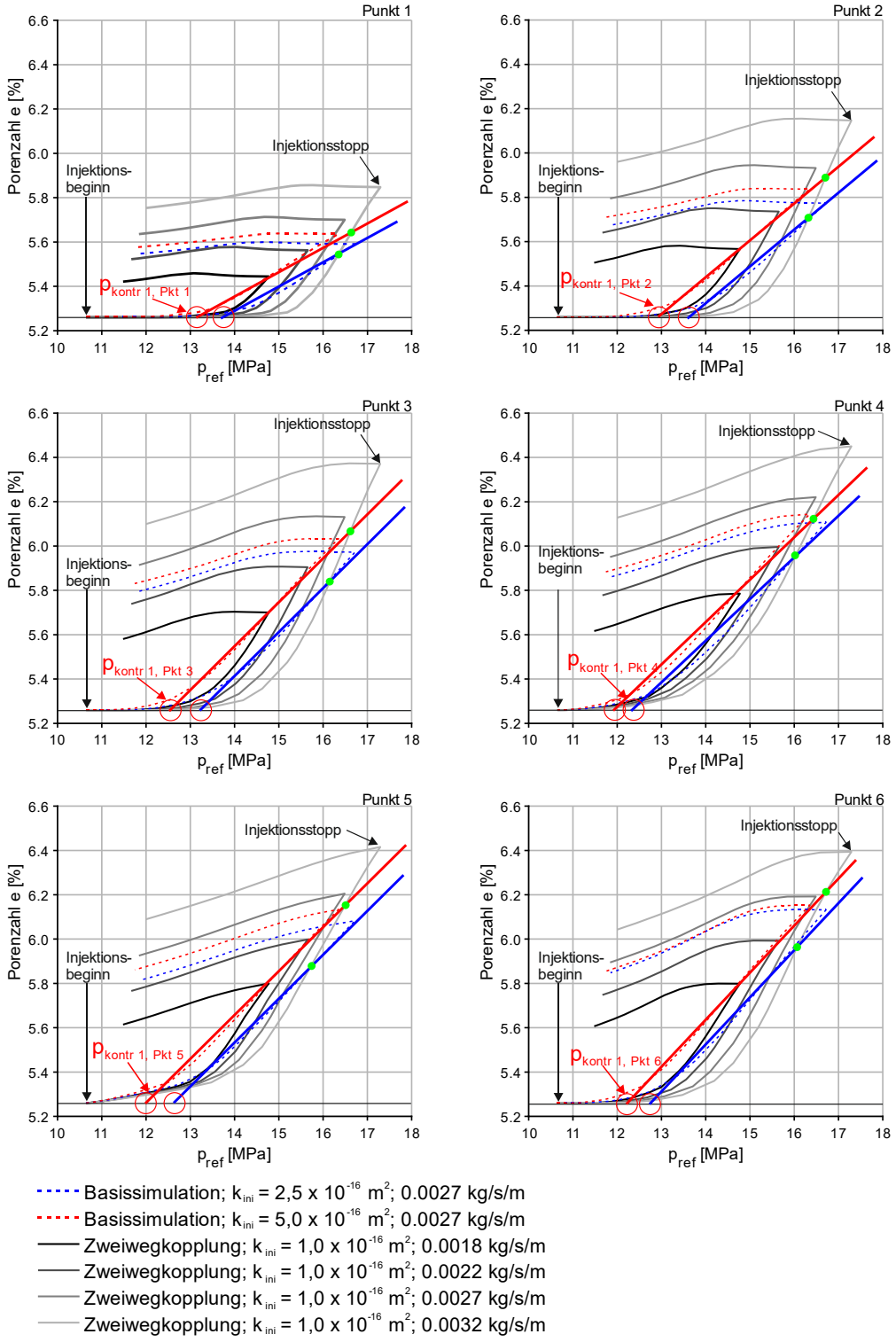
P7: Variation des Sensitivitätsexponenten n (Zweiwegkopplung)

Parameterstudie M1P7 zeigt invariantes Verhalten von α_1, α_2, α_3 und $p_{kontr\,1}$ in Bezug auf unterschiedliche Sensitivitätsexponenten n.

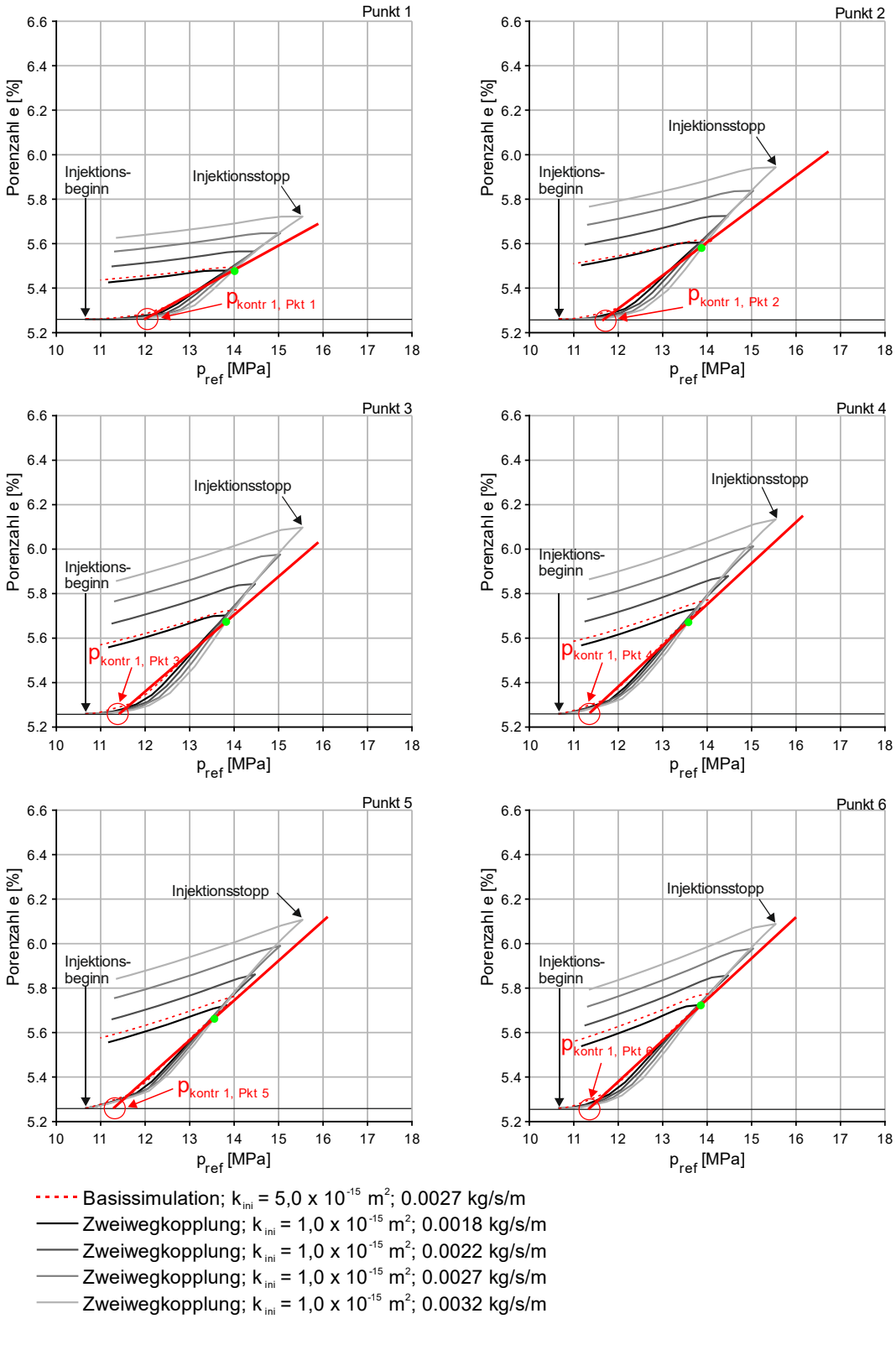


P8: Einwegkopplung vs. Zweiwegkopplung

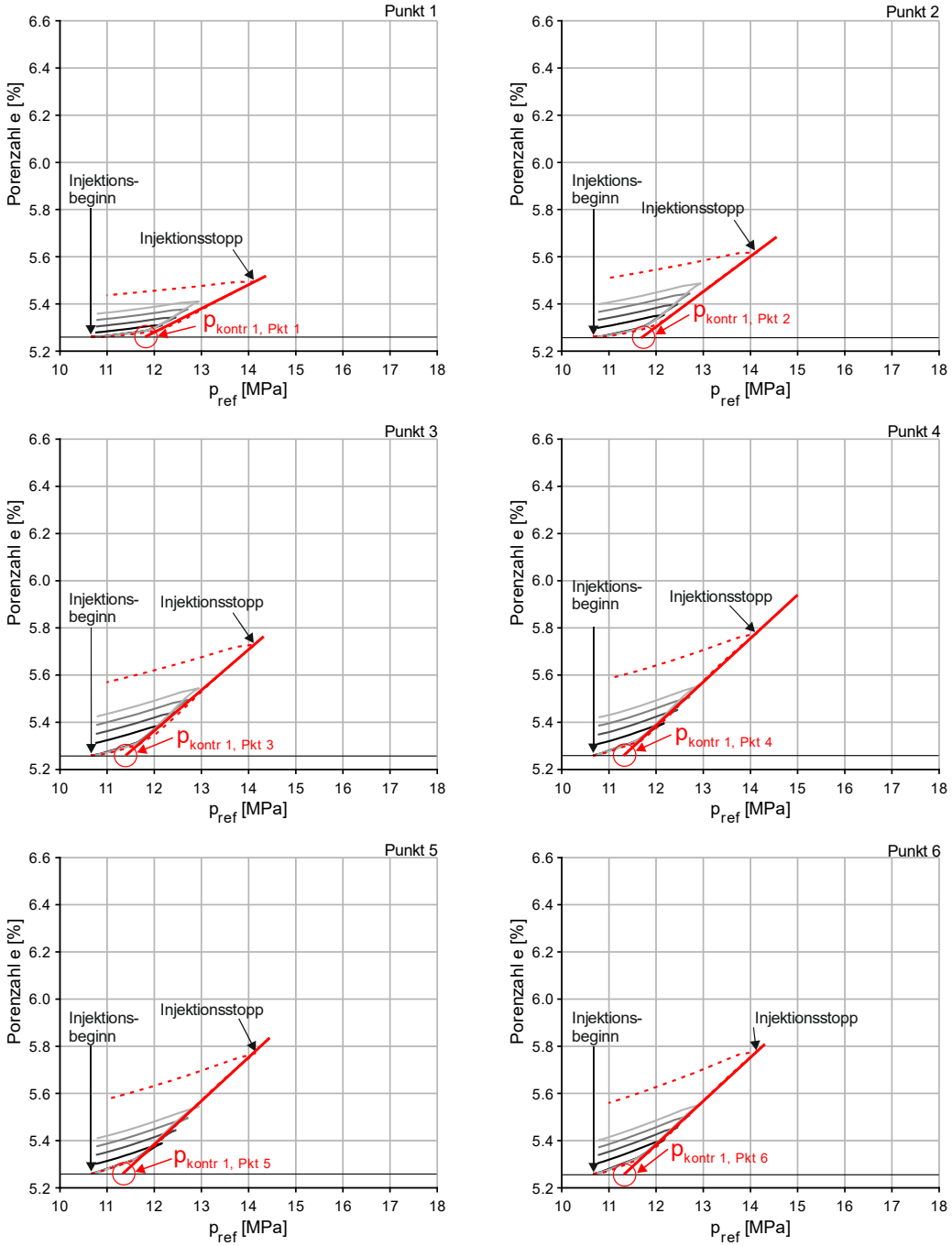
Parameterstudie M1P8 zeigt die lineare Approximation des ansteigenden Astes von nicht-linearen e(p_{ref})-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen durch den semi-analytischen Ansatz für eine initiale Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m². Für die Basissimulationen wurden Permeabilitätsmultiplikatoren von 2,5 und 5,0 verwendet.



Parameterstudie M1P8 zeigt die lineare Approximation des ansteigenden Astes von nichtlinearen e(p_{ref})-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen durch den semi-analytischen Ansatz für eine initiale Permeabilität von $k = 10^{-15}$ m². Für die Basissimulationen wurde ein Permeabilitätsmultiplikator von 5,0 verwendet.

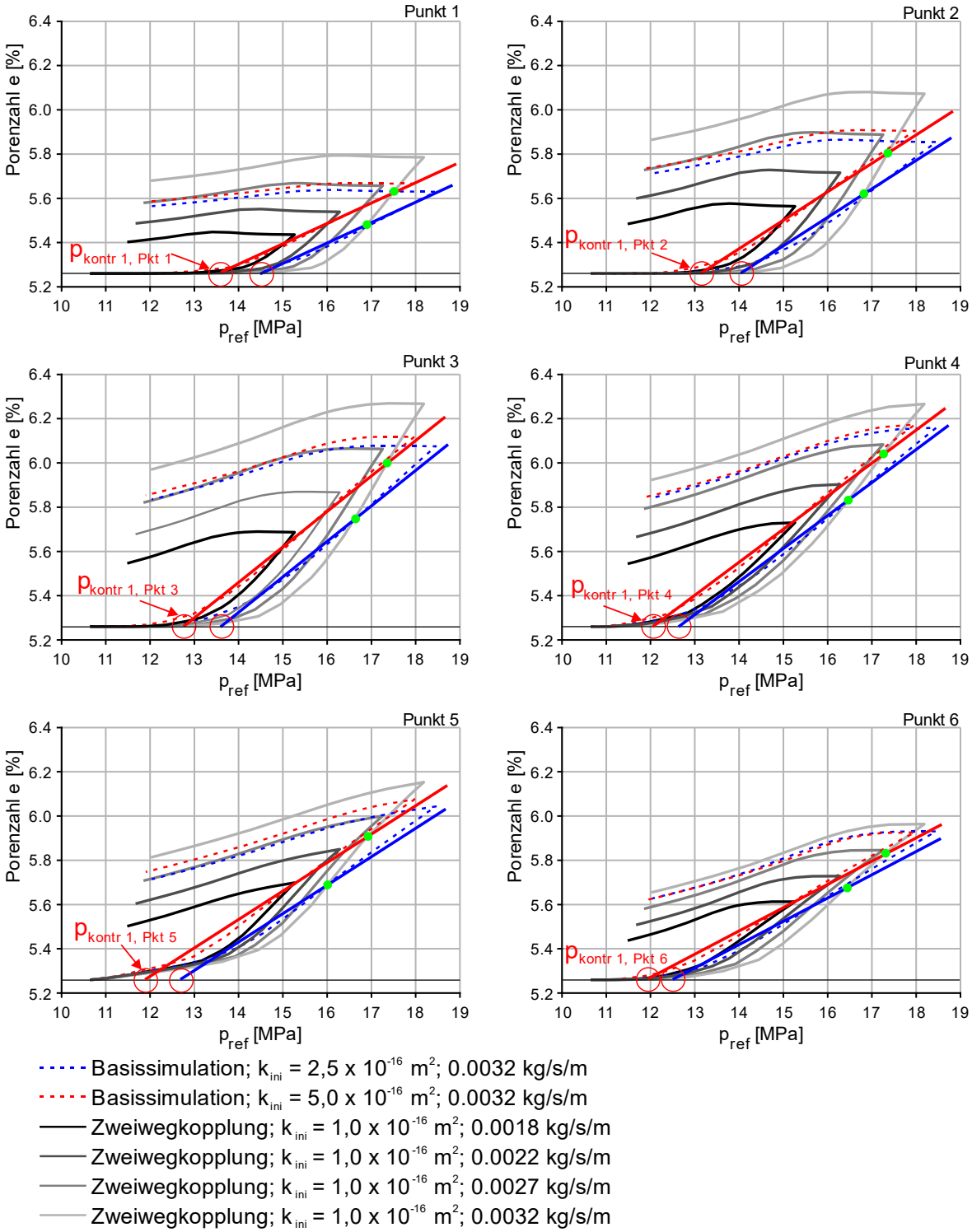


Parameterstudie M1P8 zeigt die lineare Approximation des ansteigenden Astes von nicht-linearen e(p_{ref})-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen durch den semi-analytischen Ansatz für eine initiale Permeabilität von k = 10^{-14} m². Für die semi-analytische Parametrisierung wurde die Basissimulation mit einer initialen Permeabilität von k = 5 x 10^{-15} m² verwendet.



P9: Variation des E-Moduls des Liegenden

Parameterstudie M1P9 zeigt die lineare Approximation des ansteigenden Astes von nicht-linearen e(p_{ref})-Funktionen aus zweiweggekoppelten Simulationen durch den semi-analytischen Ansatz für eine initiale Permeabilität von $k = 10^{-16}$ m². Für die Basissimulationen wurden Permeabilitäts-multiplikatoren von 2,5 und 5,0 verwendet.



E Verwendete semi-analytische Parametrisierungen in Kapitel 7.6

Modellvariation M1:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	6,5	-0,2	1,2	13,1	14,8
2	8,8	-0,3	2,6	12,7	14,7
3	11,1	0,0	3,5	12,5	15,1
4	11,0	1,2	3,2	11,9	16,5
5	10,8	2,3	3,4	11,9	16,4
6	11,8	0,5	4,5	12,2	15,3

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m² und $k_{initial} = 10^{-14}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	6,1	-0,4	1,1	11,9	14,0
2	8,5	-0,5	2,1	11,7	14,1
3	10,7	0,2	3,0	11,5	14,1
4	11,0	1,9	3,6	11,4	14,2
5	10,7	2,6	3,6	11,4	14,5
6	11,5	0,6	4,1	11,4	14,1

Modellvariation M2:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	6,9	-0,2	1,4	12,9	16,1
2	9,3	0,0	2,6	12,4	16,2
3	10,7	1,2	3,2	12,0	16,7
4	10,2	2,3	3,6	11,8	16,2
5	12,7	0,5	5,2	12,3	15,4
6	12,9	-0,1	5,6	13,5	14,4

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	6,2	0,7	1,4	11,5	13,9
2	9,0	1,6	2,6	11,4	14,0
3	10,2	2,7	3,4	11,2	14,3
4	10,8	3,0	3,6	11,2	14,3
5	13,1	1,7	4,9	11,2	13,7
6	12,5	-0,2	5,2	11,5	13,6

Modellvariation M3:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	8,2	0,0	1,0	15,1	15,4
2	10,5	-0,1	1,9	14,7	15,5
3	12,2	-0,1	2,8	14,2	16,1
4	13,5	0,4	3,3	13,5	16,5
5	12,9	2,4	4,0	12,6	16,8
6	15,7	-0,1	5,6	13,3	16,6
7	14,8	-0,1	6,2	14,5	15,2

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	7,8	0,2	1,2	12,0	14,7
2	10,2	0,4	2,2	11,8	14,8
3	12,7	1,1	3,1	11,7	14,7
4	13,2	2,1	3,7	11,5	14,8
5	13,2	3,3	4,1	11,4	15,0
6	15,4	2,0	5,2	11,5	14,7
7	14,2	0,2	5,8	11,7	14,6

Modellvariation M4:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	7,7	-0,1	0,8	15,5	16,1
2	10,2	-0,2	1,6	15,3	16,2
3	11,6	-0,1	2,4	14,5	16,7
4	12,7	1,2	3,3	13,5	17,5
5	13,7	2,6	3,8	13,0	17,9
6	16,3	0,1	5,1	13,8	17,5
7	15,3	-0,1	5,3	15,1	16,0

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	7,8	-0,1	1,2	12,1	14,8
2	10,2	-0,1	2,2	11,9	14,8
3	12,1	0,4	3,2	11,8	14,8
4	13,2	2,0	4,0	11,5	14,8
5	14,1	3,0	4,2	11,4	14,9
6	15,9	1,4	5,2	11,5	14,8
7	14,7	-0,5	5,4	11,8	14,7

Modellvariation M5:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	7,2	-0,1	0,8	15,1	15,7
2	9,6	-0,2	1,7	14,8	15,8
3	10,9	0,0	2,1	14,0	16,2
4	12,4	1,4	3,3	13,0	17,2
5	13,0	2,7	3,9	12,7	17,2
6	15,6	0,3	5,3	13,4	16,6
7	15,1	-0,1	5,6	14,7	15,4

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	7,7	0,3	1,2	12,2	14,7
2	9,9	0,7	2,2	11,9	14,7
3	11,4	1,3	3,0	11,8	14,7
4	13,6	2,8	4,0	11,5	14,8
5	14,9	3,5	4,2	11,5	15,3
6	15,8	2,5	4,9	11,5	15,0
7	14,5	0,8	5,0	11,9	14,9

Modellvariation M6:

Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	6,7	-0,1	0,0	16,0	16,1
2	8,2	-0,2	0,1	16,4	15,1
3	5,7	-0,1	0,2	15,9	14,0
4	7,4	-0,1	0,7	15,4	15,2
5	9,3	-0,2	1,3	15,0	15,8
6	10,3	0,0	1,9	14,2	16,5
7	12,3	1,2	3,3	13,2	17,3
8	12,8	2,6	3,9	12,8	17,1
9	16,2	0,1	5,4	13,5	16,7
10	15,7	-0,1	6,0	14,8	15,3

Modellvariation M8:

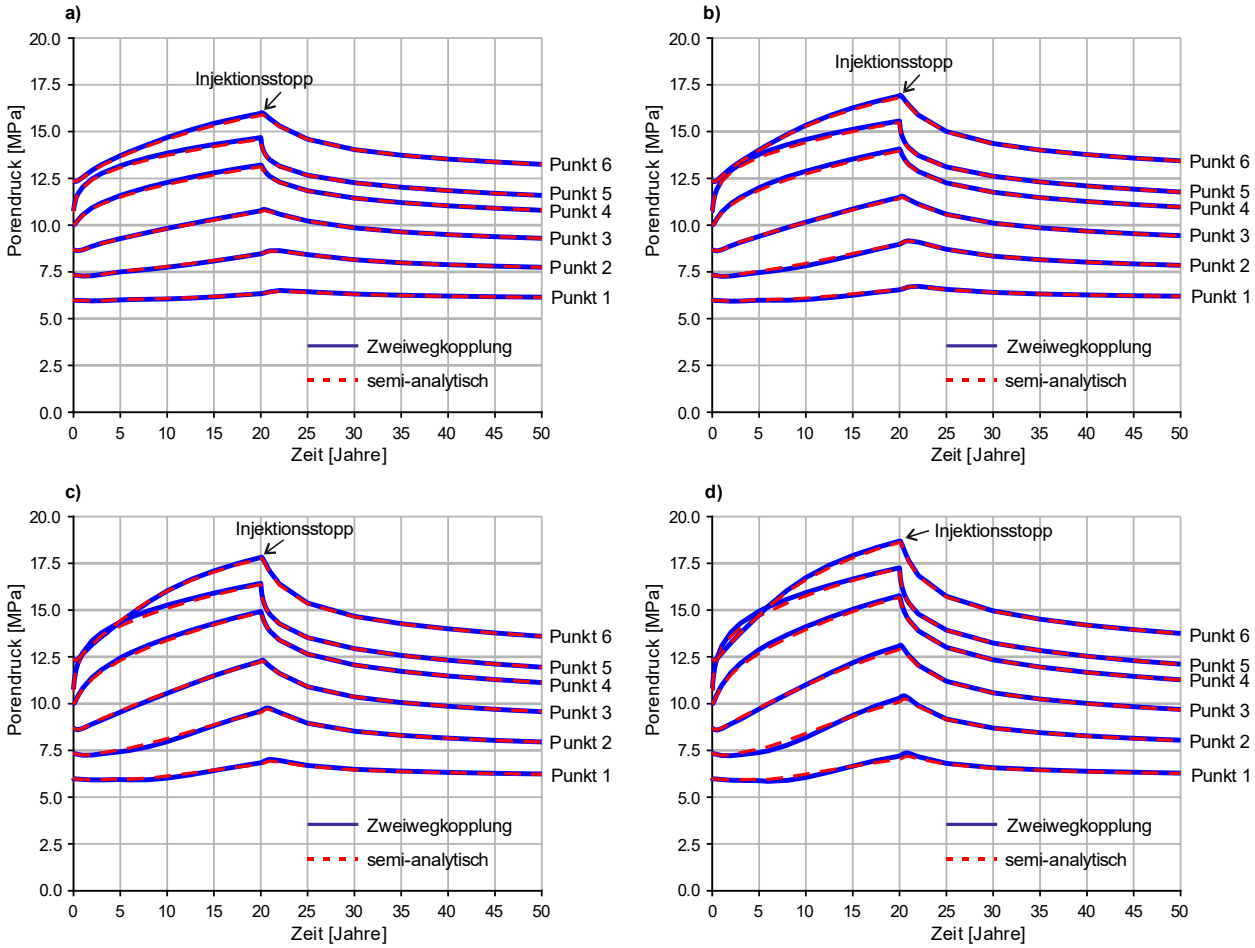
Verwendet für eine initiale Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².

	Neigungen der parametrisierten e(P_{ref})-Kurven			Kontrollporendrücke im Referenzelement (P_{ref}) [MPa]	
Bezugselement	**α_1 [°]**	**α_2 [°]**	**α_3 [°]**	**$P_{kontr\ 1}$**	**$P_{kontr\ 2}$**
1	8,5	-0,1	1,2	14,9	17,1
2	11,8	-0,4	2,4	14,7	17,5
3	14,0	-0,3	3,4	14,1	18,0
4	13,4	1,0	3,8	13,1	18,6
5	12,7	2,3	3,8	13,0	18,1
6	16,3	0,3	5,6	13,8	17,2
7	15,5	0,0	6,5	15,2	15,7
8	5,7	-0,3	1,1	13,9	16,3
9	8,4	-0,5	2,1	13,5	16,5
10	10,5	-0,6	3,1	13,0	16,8
11	11,4	0,5	3,4	12,5	17,4
12	11,2	1,9	3,5	12,5	17,1
13	13,0	-0,5	4,7	12,8	16,5
14	12,0	-0,8	4,7	13,9	15,4

F Ergebnisse der Validierung aus Kapitel 7.6

Modellvariation M1:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



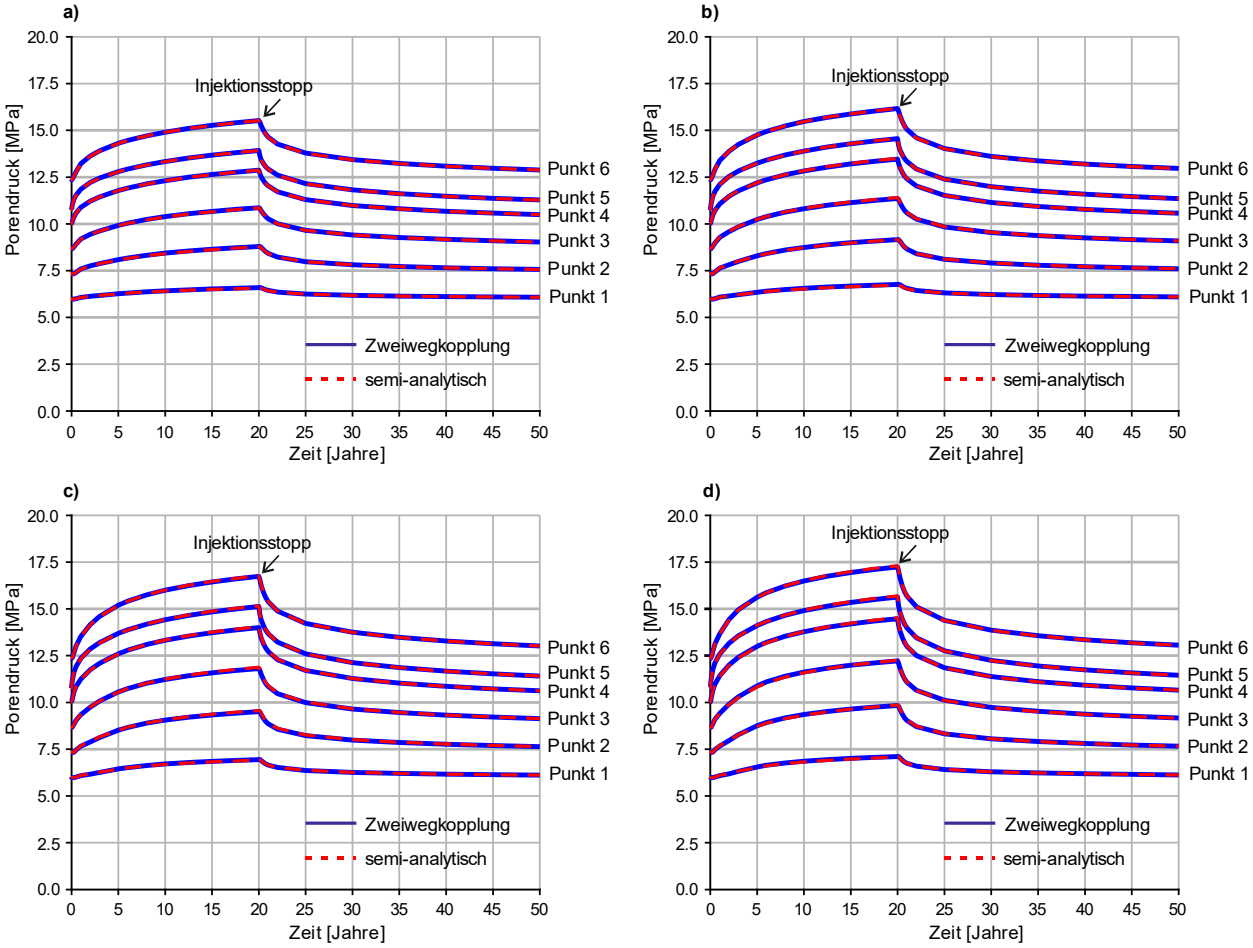
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².



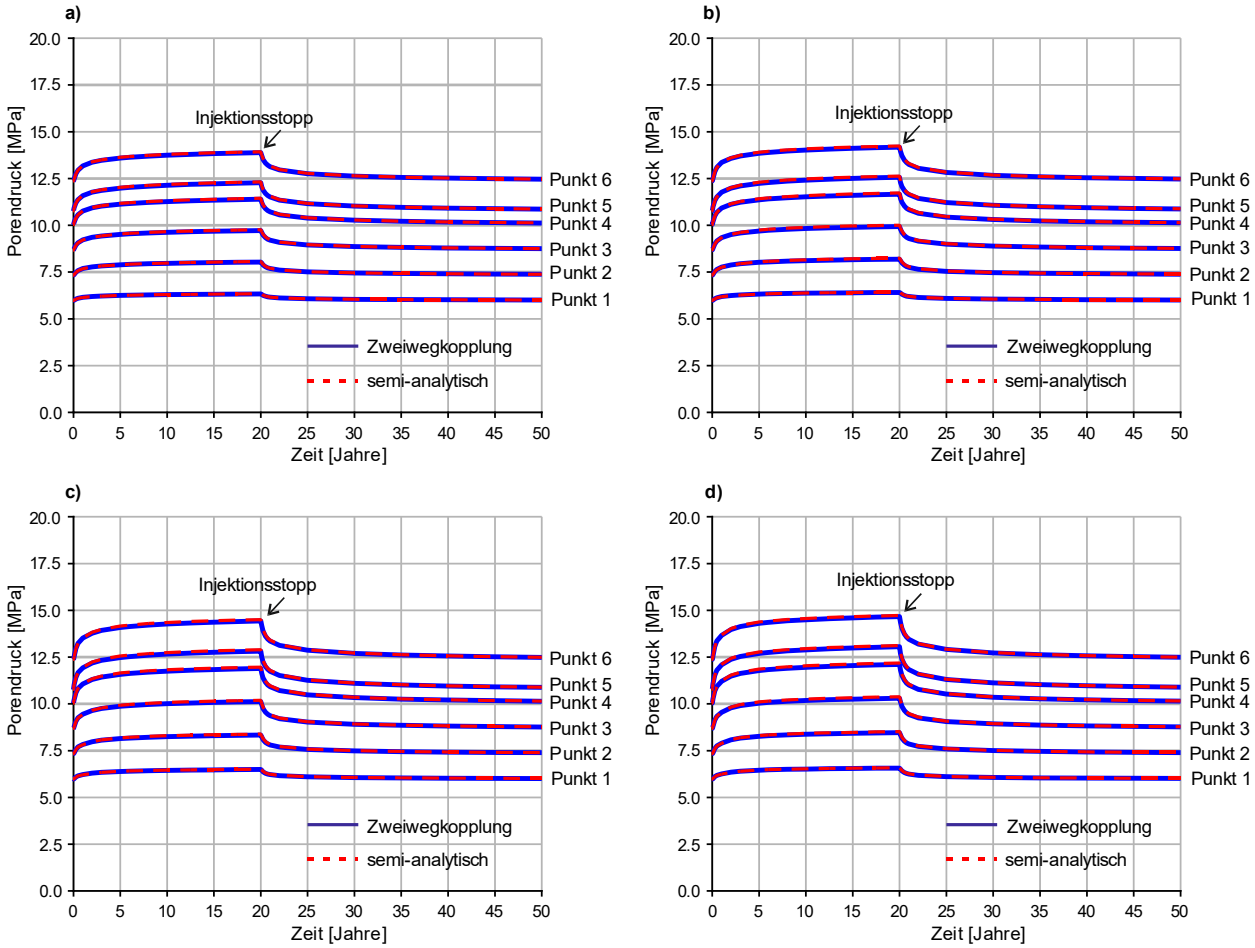
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-14}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

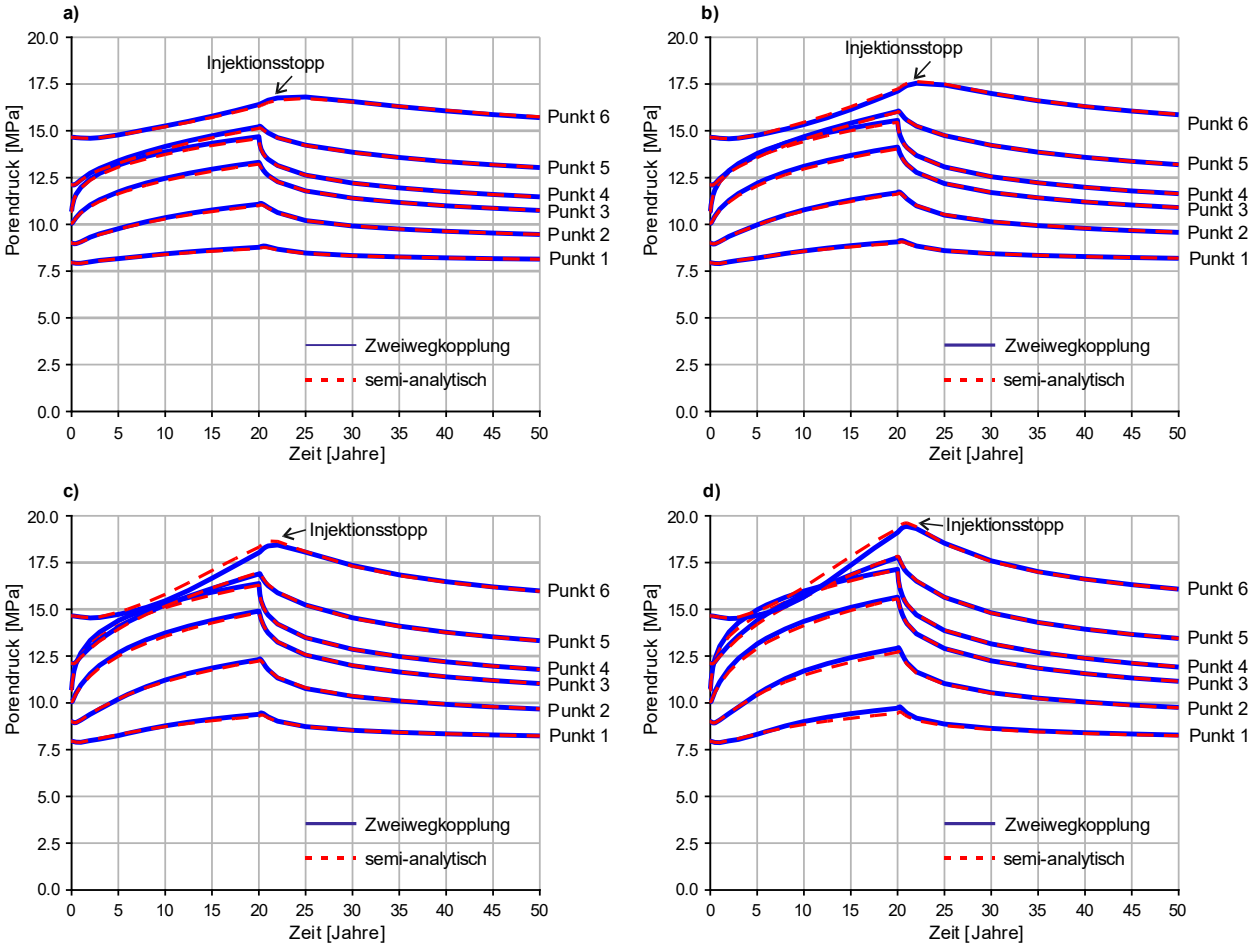
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M2:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



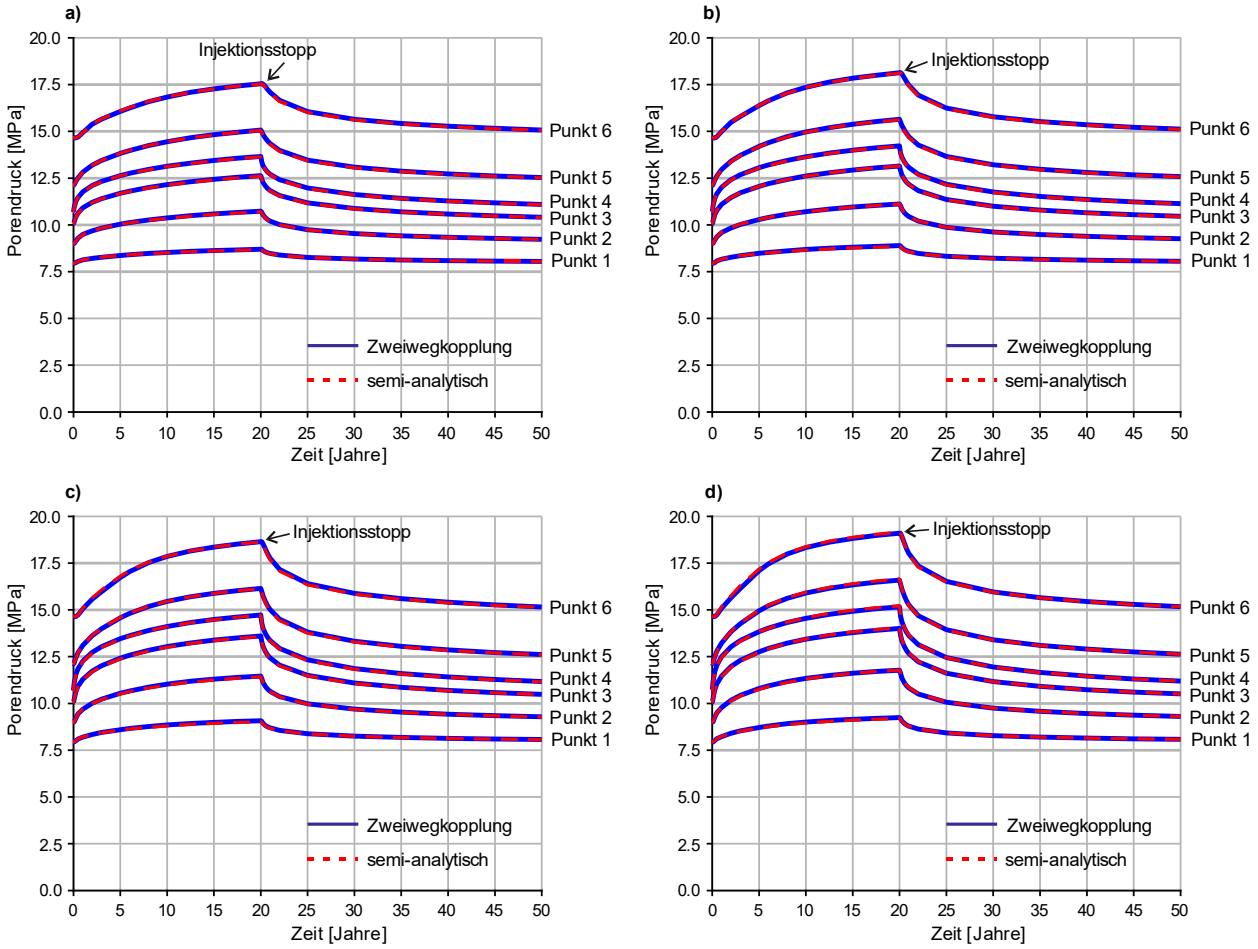
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

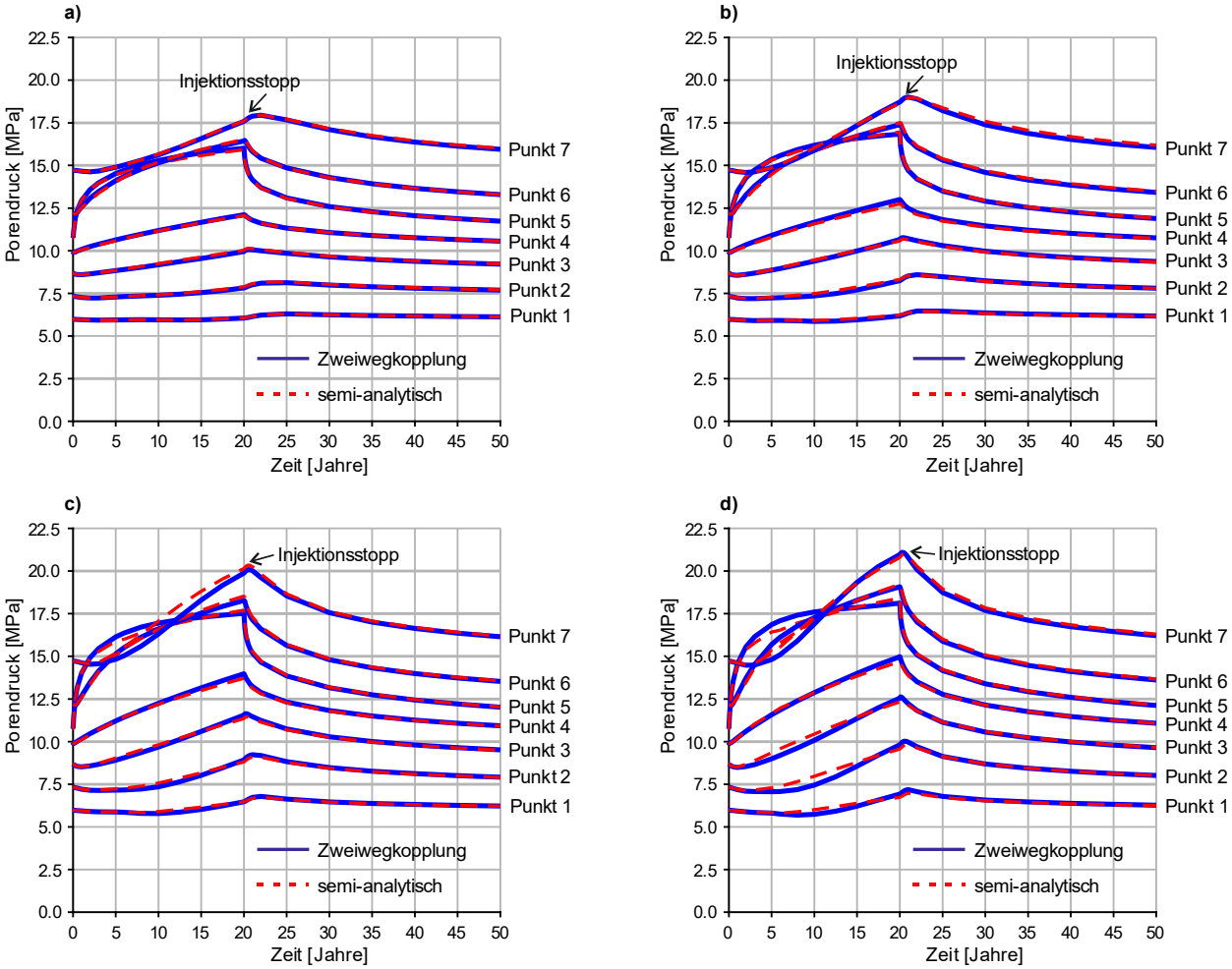
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M3:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



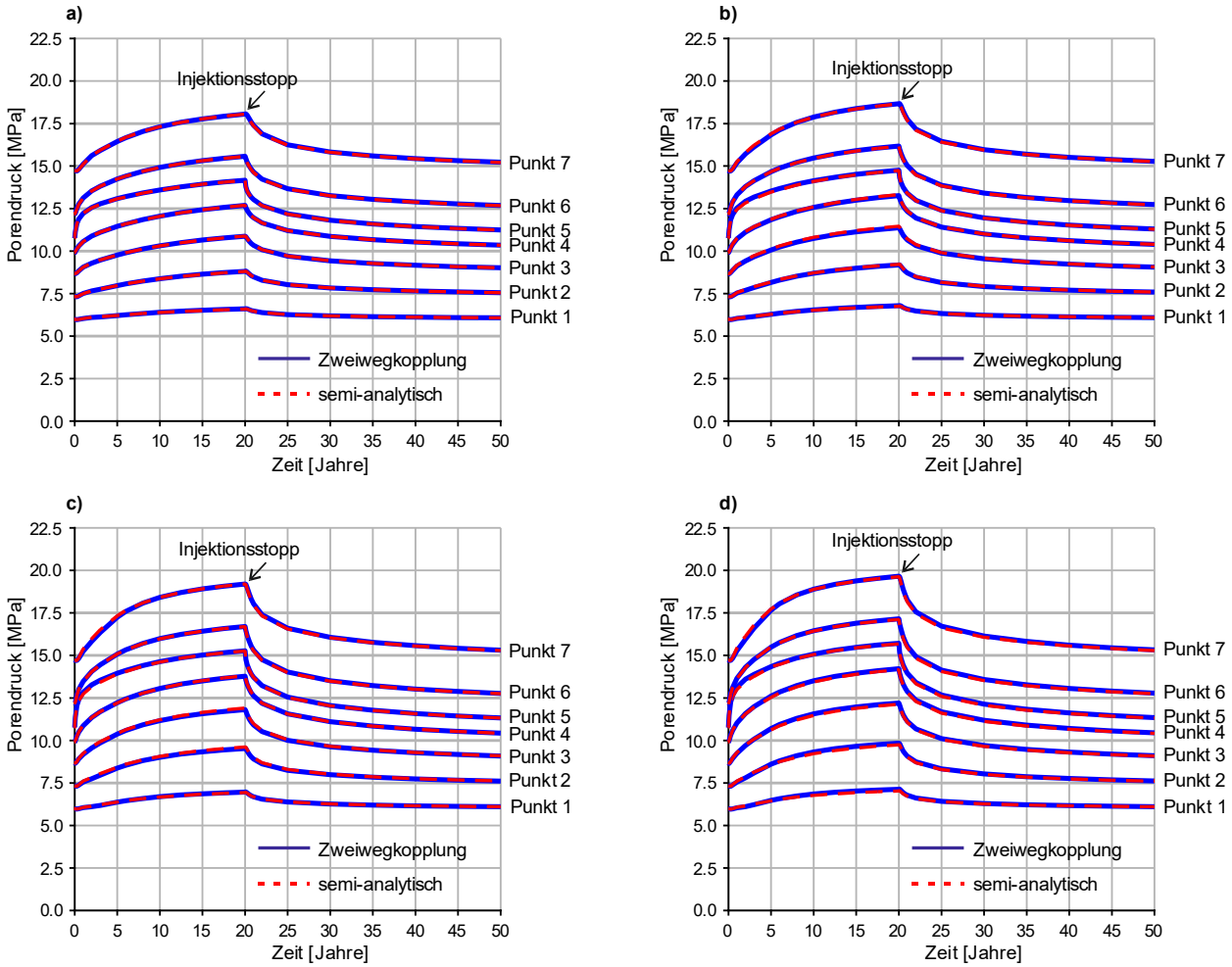
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

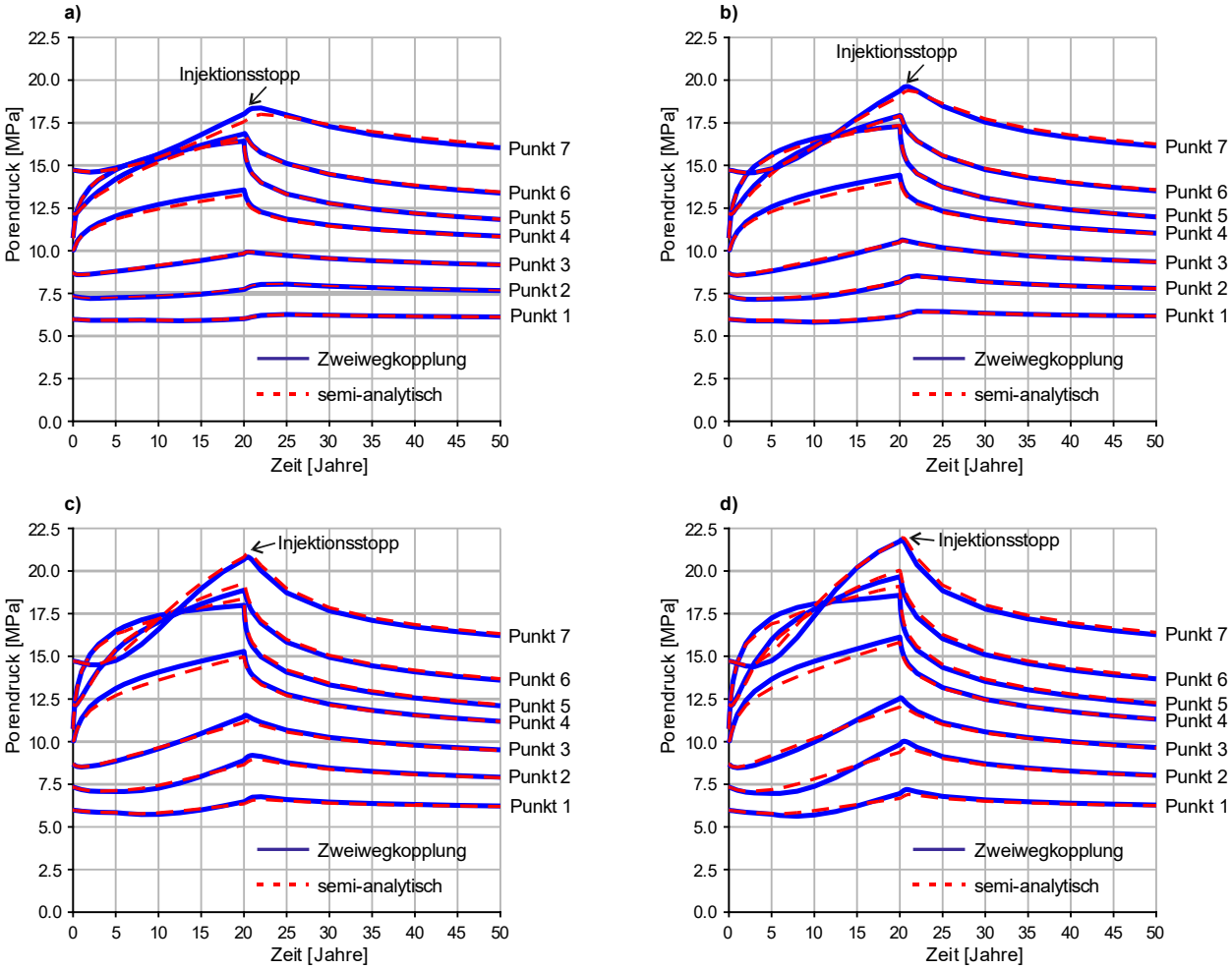
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M4:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



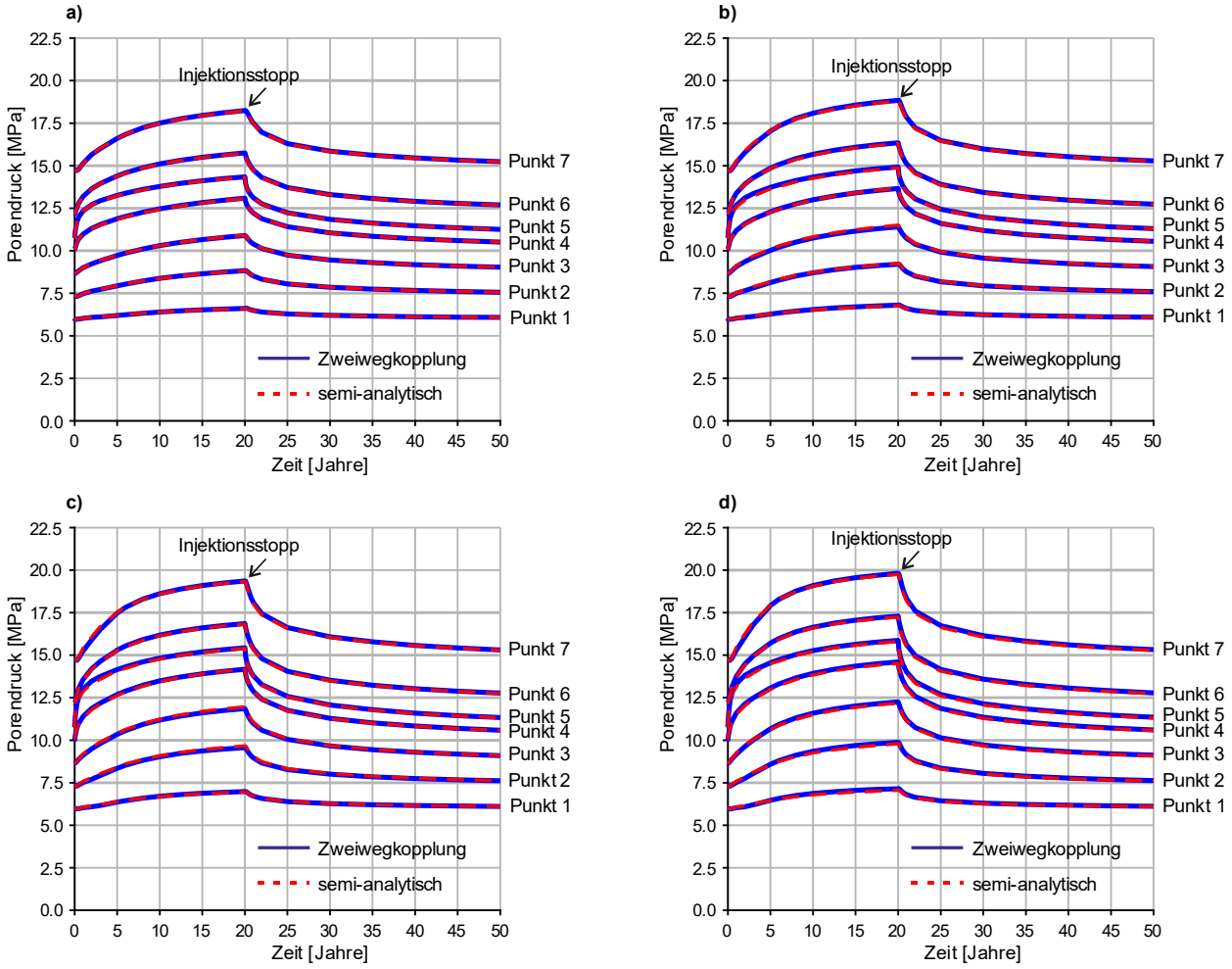
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

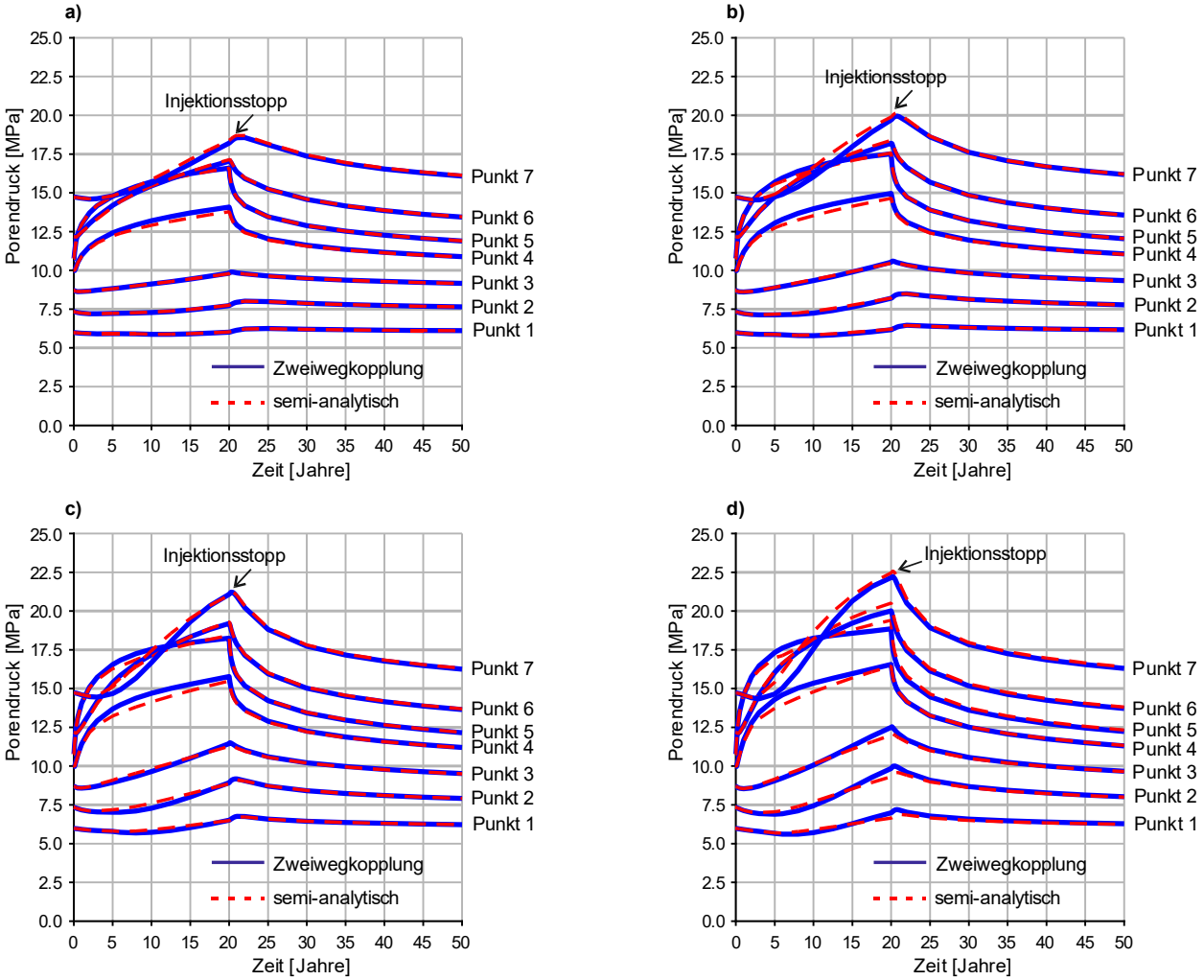
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M5:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



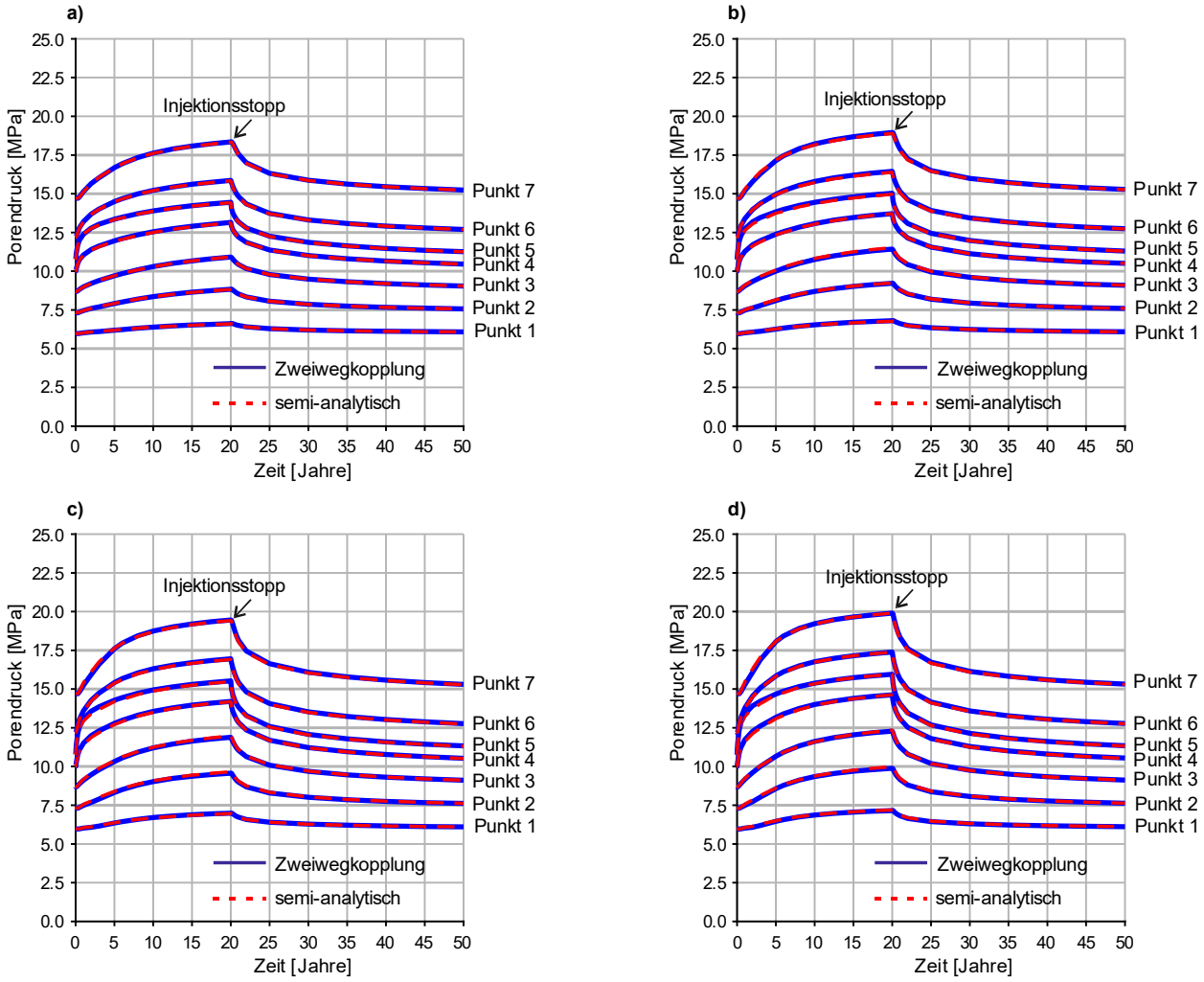
a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-15}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

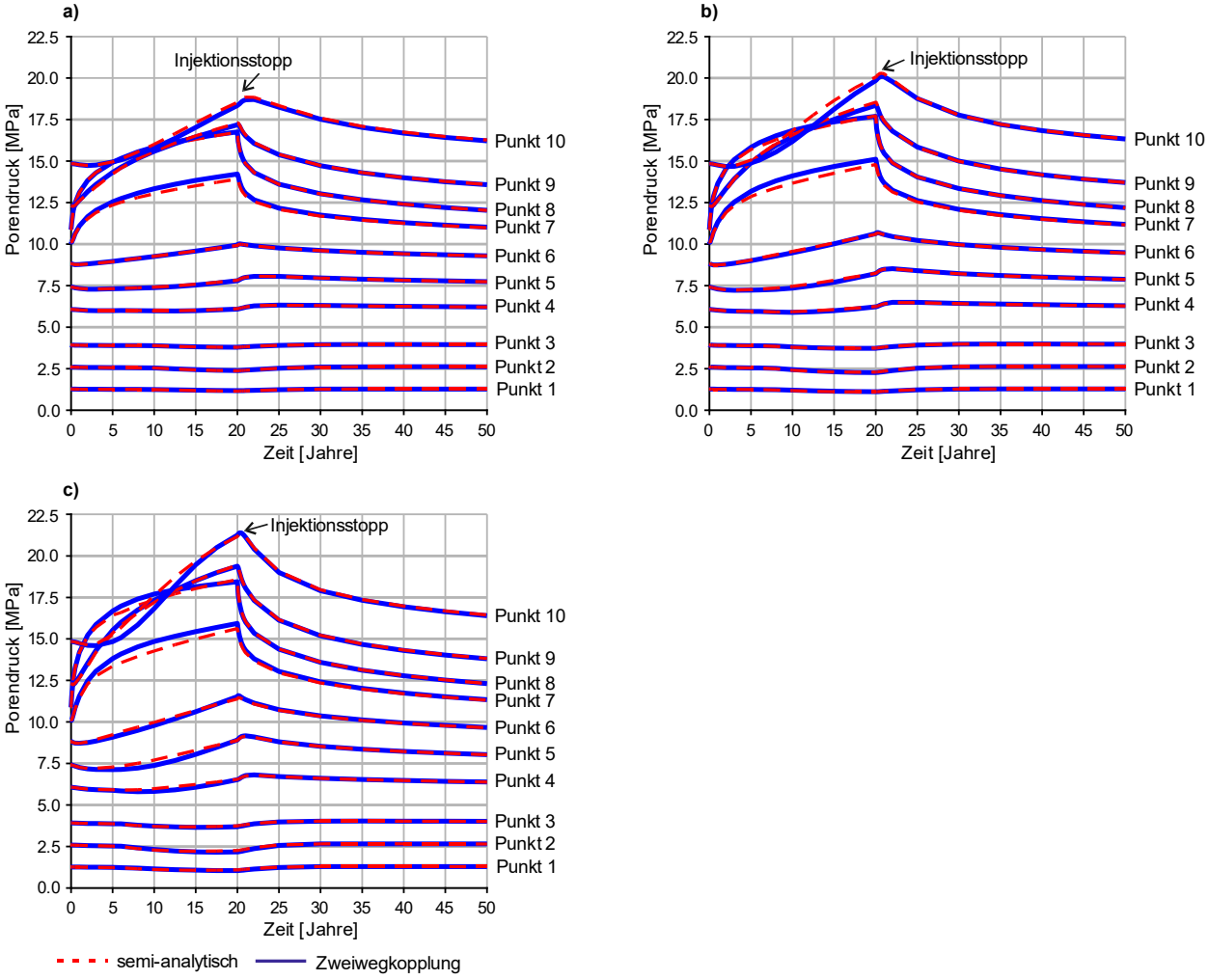
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M6:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

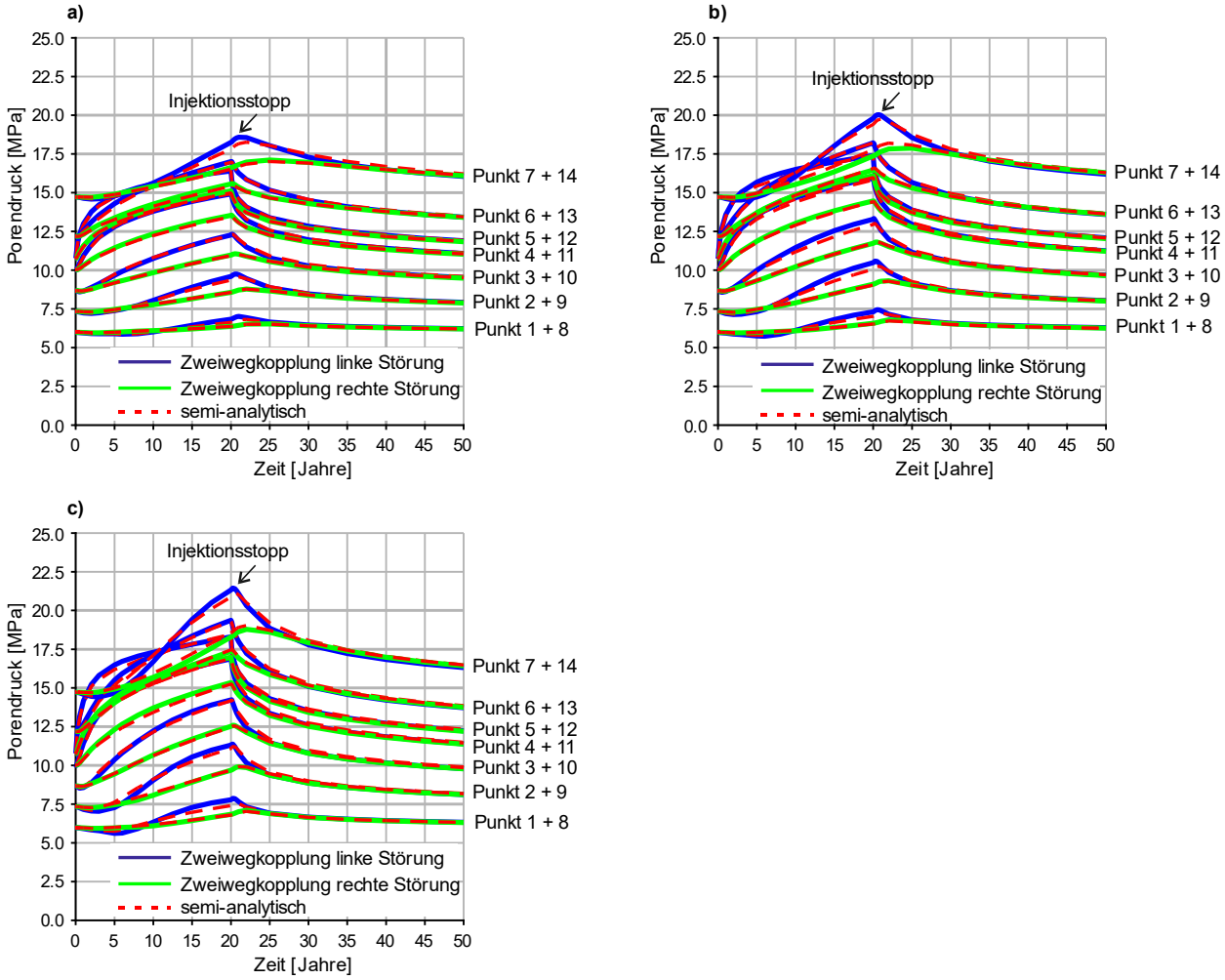
b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s

d) Injektionsrate 0,0032 kg/m/s

Modellvariation M8:

Vergleich von zeitlichen Porendruckverläufen aus zweiweg- und semi-analytisch gekoppelten Simulationen unter Berücksichtigung einer initialen Störungspermeabilität von $k_{initial} = 10^{-16}$ m².



a) Injektionsrate 0,0018 kg/m/s

b) Injektionsrate 0,0022 kg/m/s

c) Injektionsrate 0,0027 kg/m/s