### Evaluation of CO<sub>2</sub> Injection Processes in Geological Formations for Site Screening

Von der Fakultät Bau- und Umweltingenieurwissenschaften der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

### Andreas Kopp

aus Furtwangen

Hauptberichter: Nebenberichter: Nebenberichter: Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig Prof. Dr. rer. nat. Christoph Clauser (RWTH Aachen) Prof. Dr. Helge Dahle (University of Bergen, Norway)

Tag der mündlichen Prüfung: 28.5.2009

Institut für Wasserbau Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung Universität Stuttgart

2009

# Contents

Al	bstract						
Ζι	usamı	nenfas	sung	i			
1	Intr	oductio	on .	L			
	1.1	Trapp	ing Mechanisms	5			
	1.2	Objec	tive of the Study	3			
	1.3	State	of the Art	9			
2	Con	ceptua	I, Mathematical and Numerical Model 1	5			
	2.1	Basic	Definitions	5			
		2.1.1	Phases and Components	5			
		2.1.2	State of Aggregation	3			
		2.1.3	Phase Change	7			
		2.1.4	Equation of State	3			
		2.1.5	Mole- and Mass Fraction	9			
		2.1.6	Salinity $\ldots \ldots 1$	9			
	2.2	Syster	n Properties	)			
		2.2.1	Spatial Scales	)			
		2.2.2	Fluid Properties	2			
		2.2.3	Matrix Properties	9			
		2.2.4	Fluid-Matrix Interaction Properties	)			
		2.2.5	Equilibrium Assumptions	5			
	2.3	Flow a	and Transport Processes	3			
		2.3.1	Advection	3			
		2.3.2	Buoyancy	7			
		2.3.3	Molecular Diffusion	7			
		2.3.4	Mechanical Dispersion	3			
		2.3.5	Heat Conduction	3			
		2.3.6	Heat Convection	3			
		2.3.7	Inter-Phase Mass and Energy Transfer	)			
	2.4	Mathe	ematical and Numerical Model - Overview	)			
	2.5	The S	imulation Platform MUFTE-UG	)			

I

3	Pro	perties of Potential Geological Formations	43
	3.1	Calculated Statistical Characteristics	43
	3.2	Test on Hypothesised Statistical Distributions	44
	3.3	Test on Mutual Parameter Interrelations	45
	3.4	Definition of Typical Reservoirs	46
	3.5	Summary and Conclusion	48
4	Dim	ensional Analysis	51
	4.1	Derivation of Dimensionless Formulation	51
		4.1.1 Fractional Flow Formulation	51
		4.1.2 Characteristic Values	53
		4.1.3 Dimensionless Numbers	54
		4.1.4 Dimensionless Pressure and Saturation Equations	55
	4.2	Preliminary Definitions of Risk and Storage Capacity	56
	4.3	Analytical Investigations	56
		4.3.1 Dimensionless Numbers Dependent on Selections of Characteristic Values	57
		4.3.2 Dimensionless Functions A,B, and C	60
		4.3.3 Dimensionless Gradients	61
	4.4	Numerical Investigations	61
		4.4.1 Plume evolution in a 1-D gravitation-free reservoir	62
		4.4.2 Plume evolution in a radially symmetric 3-D reservoir	66
		4.4.3 Qualitative Dependencies of Risk and Storage Capacity on Dimension-	
		less Numbers	69
	4.5	Summary and Conclusion	70
5	Ana	lysis of Storage Capacity	71
	5.1	Discussion of Storage Capacity	71
		5.1.1 Resource-Reserve Pyramids	71
		5.1.2 Doughty Model	73
		5.1.3 CSLF Model	74
		5.1.4 Proposed model	75
	5.2	Numerical Investigations	76
		5.2.1 Plume evolution in a 1-D gravitation-free reservoir	77
		5.2.2 Plume evolution in a radially symmetric 3-D reservoir	79
		5.2.3 Interpretation of storage capacity using dimensionless numbers	83
	5.3	Summary and Conclusion	84
6	Sen	sitivity Analysis	87
	6.1	Discussion of Sensitivity Analysis	87
		6.1.1 The Morris Method	88
	6.2	Parameters	90
	6.3	Numerical Investigations	91

		6.3.1	Model Set-up	91
		6.3.2	Results	91
	6.4	Summ	ary and Conclusion	98
7	Risk	Analy	sis	99
	7.1	Discus	ssion of Risk	100
		7.1.1	Risk Scenarios in $CO_2$ storage	100
		7.1.2	Time aspect	100
		7.1.3	Screening and Ranking Frameworks	101
		7.1.4	Risk Analysis Concept	101
	7.2	Param	neters	104
		7.2.1	Primary Parameters	107
		7.2.2	Secondary Parameters	107
		7.2.3	Procedure of Defining a Simulation Case	111
	7.3	Nume	rical Investigations	112
		7.3.1	Model Set-up	112
		7.3.2	The "CO2 Community Grid"	112
		7.3.3	Results	113
	7.4	Qualit	ative Sensitivity Considerations	119
	7.5	Summ	ary and Conclusion	122
_				
8	Fina	I Rema	arks	125
	8.1	Summ	ary	125
	8.2	Conclu	usions	127
	8.3	Outlo	ok	130
Bi	bliogr	raphy		133
Δ	Mat	hemati	ical and Numerical Model	145
	A.1	Mathe	ematical Model for Multi-Phase Processes - the 2p-module	145
		A.1.1	Conservation of Mass and Momentum	145
		A.1.2	Mass Balance Equations	146
		A.1.3	Closure Relations	146
		A.1.4	Primary Variables	147
	A.2	Mathe	ematical Model for Non-Isothermal Multi-Phase Multi-Component Pro-	
		cesses	- the 2p2cni-module	148
		A 2 1	Conservation of Mass Momentum and Energy	148
		A.2.2	Mass Balance Equations	149
		A 2 3	Energy Balance Equation	150
		A 2.4	Closure Belations	150
		A.2.5	Primary Variables	151
	A 3	Initial	and Boundary Conditions	152
				104

	A.4 Discretisation in Space and Time	152			
	A.5 Linearisation and Solution	157			
В	Detailed derivation of Equations 4.21, 4.22, and 4.25	159			
С	Tables	161			
D	Output List				
	D.1 Peer-Reviewed	163			
	D.2 Non Peer-Reviewed (selected)	164			
Ε	Mittelungen / Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart	165			

## Abstract

The concentration of greenhouse gases in the atmosphere has increased due to tremendous human fossil fuel consumption since the Industrial Revolution. This is most likely the cause for an observed global increase in the average temperature and for the changing climate. It is expected that further global warming will have drastic ecological and economic impacts. No single technology will be sufficient to achieve the necessary emission reductions. Carbon dioxide capture and storage (CCS) is a promising technology which could make a substantial contribution. It is a process which captures  $CO_2$  from large local sources and then stores it away from the atmosphere. Storage capacity estimates for deep saline aquifers are most promising. The initial procedure for selecting a few aquifers for a CCS project is called site screening. Aquifers identified in site screening then have to prove their suitability in further investigations. Site screening is a challenging task, since usually few data are available and the prognosis of the complex processes occurring in a reservoir after  $CO_2$  injection is difficult.

This study aims at improving the insight into  $CO_2$  injection processes in geological formations to assist site screening. The criteria in site screening include the estimation of the storage capacity, which should be sufficient to store the long-term production of the  $CO_2$ source, and the long-term ability to store  $CO_2$ , which is related to the efficiency of the project and risk arising due to possible  $CO_2$  leakages.

At first, the statistical characteristics of storage sites in potential geological formations are calculated by analysis of a large database. The parameter ranges and distributions are used to define typical reservoirs and serve as a basis for generating random reservoir setups respecting statistical characteristics. The relation of forces occurring in reservoirs after  $CO_2$  injection is analysed by dimensional analysis. By the identification of dominant forces and processes, reservoirs with different parameter setups are compared with respect to their potential  $CO_2$  storage capacity and risk. A sophisticated concept for estimating the  $CO_2$  storage capacity of geological formations is developed. Detailed, time-dependent storage-capacity estimates are calculated in numerical experiments. The results are interpreted using the simultaneously calculated ratios of forces. The influence of individual reservoir parameters on storage capacity and risk is investigated in a sensitivity analysis. Finally, a risk analysis on potential  $CO_2$  leakage through pre-existing wells is performed. In numerous numerical experiments, individual parameters are randomly sampled from the statistical parameter distributions and leakage is calculated. A risk surface is derived which represents the average risk for  $CO_2$  leakage through pre-existing wells for any site with unknown reservoir properties.

## Zusammenfassung

Aufgrund des enormen Verbrauchs an fossilen Brennstoffen in den letzten 160 Jahren, stieg die Konzentration der Treibhausgase in der Atmosphäre stark an. Dieser Anstieg der Treibhausgaskonzentrationen ist mit größter Wahrscheinlichkeit die Ursache für den weltweiten Temperaturanstieg und die beobachteten Klimaveränderungen. Man erwartet, dass ein weiterer Temperaturanstieg zu tiefgreifenden ökologischen Veränderungen und ökonomischen Belastungen führen wird. Eine einzelne Technologie oder Maßnahme wird die nötige Verringerung der Treibhausgasemissionen nicht leisten können, deshalb muss gleichzeitig eine ganze Reihe an Maßnahmen ergriffen werden. Zu diesen Maßnahmen gehören z.B. eine effizientere Energiegewinnung und -nutzung, der Ausbau der Nutzung regenerativer Energien, die erhöhte Verwendung treibhausgasarmer Brennstoffe, die Abscheidung des  $CO_2$  im Abgasstrom von großen  $CO_2$ -Produzenten und die anschließende Einlagerung in tiefe geologische Schichten oder der Tiefsee (CCS), eine Umstellung auf eine weniger klimabelastende Landwirtschaft, die Aufforstung, sowie der eventuelle Ausbau der Kernenergie zur Stromerzeugung.

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Abscheidung und Speicherung von  $CO_2$  in tiefen geologischen Schichten. Das  $CO_2$  wird hierbei im Abgasstrom von z.B. Kohle, Gas oder Ol betriebenen Kraftwerken abgeschieden, mittels Rohrleitungen zur Speicherstätte geleitet und dann in eine mindestens 800 m unter der Tagesoberfläche liegende, poröse, mit Salzwasser gefüllte Gesteinsschicht eingepresst. Nach der Injektion breitet sich das  $CO_2$  als freie Phase lateral aus. Gleichzeitig steigt es aufgrund der wesentlich geringeren Dichte gegenüber dem Salzwasser auf. Ein gewisser Anteil löst sich dabei im Salzwasser. Um ein weiteres Aufsteigen zu verhindern, werden Formationen für ein solches Vorhaben ausgewählt, die über eine geringdurchlässige Deckschicht (Caprock) verfügen. An dieser Deckschicht wird das CO<sub>2</sub> durch den nicht zu überwindenden Eindringdruck aufgehalten. Die Deckschicht kann jedoch auch geologische Schwachstellen aufweisen oder kann durch menschliche Aktivitäten, z.B. gebohrte Brunnen, potentielle Fließpfade für ein Entweichen des CO<sub>2</sub> aufweisen. Dies verursacht zum einen das Risiko für ein Scheitern des Vorhabens, nämlich das Abtrennen des CO<sub>2</sub> für geologische Zeiträume aus dem Kohlenstoffkreislauf und der Atmosphäre, zum anderen besteht ein Gesundheitsrisiko von Menschen die mit ausgetretenem CO<sub>2</sub> in Kontakt kommen sowie der Beeinträchtigung von Tieren, Pflanzen und ganzer Okosysteme.

In Deutschland wird diese Technologie aktuell intensiv erforscht. Im GEOTECHNOLO-GIEN Projekt, gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) und der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG), werden in zwei Phasen "Technologien für eine sichere und dauerhafte Speicherung des Treibhausgases CO<sub>2</sub>" erforscht und entwickelt. Wichtige Einzelprojekte sind hierbei CO2-TRAP (Entwicklung und Bewertung innovativer Strategien zur Speicherung und dauerhaften Fixierung von  $CO_2$  in geologischen Formationen), CLEAN (Wissenschaftliches Begleitprogramm zur CO<sub>2</sub>-Injektion im zweitgrößten Erdgasfeld Europas "Altmark" zur Steigerung der Erdgasförderraten), CO2-MoPa (Modellierung und Parametrisierung von CO<sub>2</sub>-Speicherung in tiefen, salinen Formationen für Dimensionierungs- und Risikoanalysen), CO2SEALS (Abdichtungsprozesse bei der geologischen Speicherung von CO2: Ein integrierter Ansatz von Laborexperimenten zur numerischen Simulation auf der Reservoirskala) und COAST (Forschung und Entwicklung für die Standortexploration und -charakterisierung im Rahmen eines industrielles Demonstrationsprojektes zur Einlagerung von CO<sub>2</sub> in einem Buntsandstein-Salzwasseraquifer in Nordfriesland). Desweiteren wird, im Rahmen des von der Europäischen Union und der Industrie geförderten CO2SINK-Projekts, seit Juni 2008  $CO_2$  in eine salzwasserführende Schicht in Ketzin (nahe Berlin) eingepresst. Das Projekt will anhand eines in-Situ Labors die Lücke zwischen den zahlreichen wissenschaftlichen und ingenieurstechnischen Modellvorstellungen bezüglich der geologischen CO<sub>2</sub> Speicherung und einem vollwertigen Demonstrationsprojekt schließen.

Der Projektzyklus eines typischen  $CO_2$  Speichervorhabens beinhaltet zunächst die Abschätzung der zu erwartenden Emissionen über den gesamten Produktionszeitraum des Kraftwerks (o.ä.). Anschließend erfolgt die Suche nach geeigneten Formationen in der Region. Wurde eine Vorauswahl getroffen, erfolgt für die identifizierten Standorte eine detaillierte Charakterisierung durch die Entwicklung eines geologischen Modells, die Untersuchung der  $CO_2$  Ausbreitung und des Druckaufbaus durch numerische Simulationen, sowie eine umfassende Risikobewertung. Letztendlich wird ein geeigneter und sicherer Standort ausgewählt und ein Antrag über eine  $CO_2$  Speicherung an die zuständige Genehmigungsbehörde gestellt. Nach erfolgter Genehmigung wird dann für bis zu mehreren Jahrzehnten  $CO_2$  injiziert sowie die Ausbreitung des  $CO_2$  und der Druckaufbau innerhalb der Formation überwacht. Abschließend wird der Standort stillgelegt und weiter überwacht.

#### Zielsetzung der Arbeit

Mit der vorliegenden Arbeit soll das Prozessverständnis von  $CO_2$  Injektionen in geologische Formationen verbessert werden um die anfängliche Standortauswahl innerhalb einer Region zu unterstützen. Diese Phase eines Projekts ist typischerweise durch einen Mangel an detaillierten Standortinformationen gekennzeichnet. Um eine Vorauswahl treffen zu können, muss dennoch die Speicherkapazität einer Formation abgeschätzt werden. Außerdem sollte die Eignung der Formation das  $CO_2$  über lange Zeiträume sicher verwahren zu können nachgewiesen werden. Dieser Nachweis ist nötig um den Projekterfolg sicherzustellen sowie eventuelle Risiken zu vermeiden. Die Untersuchung dieser Fragestellungen erfolgt in dieser Arbeit über die statistische Analyse einer Datenbank relevanter Formationsparameter, sowie über analytische und numerische Experimente.

Ein wichtiger Aspekt ist hierbei die ausschließliche Betrachtung des Injektionszeitraumes, d.h. es werden Zeiträume bis zu ~20 Jahren kontinuierlicher Injektion untersucht. Dieser Injektionszeitraum ist von hoher Bedeutung für die resultierende Speicherkapazität und die Risikobewertung. Alle Langzeitprozesse, wie z.B. geochemische Reaktionen, hängen von diesem anfänglichen Ausbreitungszeitraum ab, da nur in den Teilen der Formation weitere Reaktionen stattfinden können, die auch vom  $CO_2$  erreicht werden. Ebenso ist das Risiko für ein Austreten des  $CO_2$  aus der Formation während des Injektionszeitraumes am höchsten, da hier der entstehende Überdruck am größten ist und sich die  $CO_2$  Fahne stetig ausbreitet. Nach Injektionsende sinkt der entstandene Überdruck wieder ab und sekundäre Einschlussmechanismen, wie z.B. der Einschluss des  $CO_2$  im Porenraum als nicht mehr verdrängbare Phase aufgrund von Mehrphasen-Gesetzmäßigkeiten, die Lösung des  $CO_2$ im Formationswasser sowie die geochemische Bindung des  $CO_2$  in Mineralen, führen zu einem beträchtlichen Sicherheitszuwachs. Zudem ist nach Abgleich gemessener Daten mit berechneten Simulationswerten (und Anpassung der Simulationsparameter) das Vertrauen in die Ergebnisse numerischer Prognoserechnungen hoch.

#### Das numerische Modell zur Beschreibung der CO<sub>2</sub> Speicherung

Die Entwicklung eines numerischen Modells, welches es ermöglicht die relevanten physikalischen und thermodynamischen Prozesse während einer  $CO_2$  Injektion in geologische Formationen zu simulieren, war nicht Bestandteil dieser Arbeit. Es wurde ein am Institut für Wasserbau bereits entwickeltes Modell verwendet, weshalb die Leistungsfähigkeit hier nur kurz beschrieben wird.

Die Strömung und der Transport von  $CO_2$  in einer porösen, starren Gesteinsmatrix werden je nach Fragestellung entweder mit einem 2-Phasen oder einem komplexeren 2-Komponenten-2-Phasen Ansatz beschrieben. Bei beiden Ansätzen existiert eine CO<sub>2</sub>-Phase sowie eine Wasserphase. Im 2-Komponenten-2-Phasen Ansatz finden Lösungsprozesse der Komponenten (also CO<sub>2</sub> oder Wasser) in der jeweils anderen Phase statt und der diffusive Transport wird über einen Fickschen Ansatz beschrieben. Die Beschreibung der advektiven Flüsse erfolgt durch das Darcy-Gesetz. Die Eigenschaften der beiden Fluidphasen sowie der eventuelle Massentransfer der Komponenten zwischen den beiden Phasen werden in Abhängigkeit von Druck und Temperatur beschrieben. Die entstehenden Temperaturänderungen werden im 2-Komponenten-2-Phasen Ansatz ebenfalls berechnet. Die beschriebenen konzeptionellen Modelle, bzw. ihre mathematischen und numerischen Realisationen, sind in das Simulationsprogramm MUFTE-UG (**MU**ltiphase Flow Transport and Energy Model on Unstructured Grids) implementiert. Das Modell bewies in internationalen Vergleichsstudien die Fähigkeit zur adäquaten Beschreibung eines solchen Systems mit guter Übereinstimmung der Ergebnisse zu anderen kommerziellen und nicht-kommerziellen Simulationsprogrammen.

#### Analyse einer umfangreichen Datenbank

Die Eigenschaften potentieller geologischen Formationen wurden in einer Datenbankanalyse untersucht. Die öffentlich zugängliche Datenbank des "National Petroleum Council" der Vereinigten Staaten mit den Werten von über 1200 eingetragenen Reservoiren wurde hierfür verwendet. In dieser Datenbank sind zahlreiche Eigenschaften wie z.B. die Durchlässigkeit, die Porosität, die Tiefe und die durchschnittliche Temperatur von Ölreservoiren in den U.S.A. verzeichnet. Die Annahme ist hierbei, dass sich die Eigenschaften dieser Olreservoire nicht wesentlich von den Eigenschaften potentieller, salzwasserführender Formationen unterscheiden. In statistischen Testverfahren hat sich gezeigt, dass die Parameterverteilungen keinen statistischen Standardverteilungen folgen. Aus dem Zusammenhang zwischen der Tiefe und der Temperatur wurde eine Verteilung für den geothermalen Gradienten entwickelt. Zwischen der absoluten Permeabilität und der Porosität kann ein Zusammenhang vermutet werden, wie z.B. eine Carman-Kozeny Beziehung. Die Korrelationskoeffizienten zwischen den anderen Parameterverteilungen sind gering. Die Bandbreiten und Verteilungen der relevanten Parameter wurden ermittelt um daraus typische Speicherformationen zu definieren, wie z.B. eine Formation mit Medianwerten, eine warme Formation, eine kalte Formation, eine tiefe Formation usw. Zusätzlich wurden typische Formationen definiert durch z.B. Rekombination der Formation mit Medianwerten mit gemessenen relativen Permeabilitäts-Sättigungs Beziehungen. Die ermittelten Parameterverteilungen wurden ebenfalls verwendet um zufällige Kombinationen von Formationseigenschaften zu generieren, die dennoch die statistischen Verteilungen berücksichtigen.

#### Dimensionsanalyse

In einem ersten Schritt wurden die dominierenden Kräfte und relevanten Prozesse in einer Dimensionsanalyse identifiziert und bewertet. Die geltenden Mehrphasen-Bilanz-Gleichungen wurden durch die Einführung so genannter *charakteristischer Größen* entdimensionalisiert. D.h. die physikalischen Einheiten der Gleichungen werden entfernt, indem die einheitenbehafteten Variablen relativ zu den charakteristischer Größen dargestellt werden. Um das zu erreichen, müssen charakteristische Größen für die Länge, die Zeit, die Geschwindigkeit und den Druck gefunden werden. Hierbei sind die Größen Geschwindigkeit, Länge und Zeit voneinander abhängig. Die entdimensionalisierten Bilanzgleichungen wurden so umgeformt, dass dimensionslose Kennzahlen darin zu finden sind. Diese Kennzahlen stellen Kräfteverhältnisse im porösen Medium dar. Die Kapillarzahl stellt hierbei das Verhältnis von Kapillarkräften zu viskosen Kräften dar und die Gravitationszahl stellt das Verhältnis von Gravitationskräften zu viskosen Kräften dar. Letztendlich bestehen die so umgeformten Bilanzgleichungen aus dimensionslosen Kennzahlen, dimensionlosen Gradienten und sättigungsabhängigen, dimensionslosen Funktionen. Die einzelnen Terme sowie das Verhältnis der Terme zueinander, welches ausschlaggebend ist für das Ausbreitungsverhalten des  $CO_2$  im Untergrund, konnte nun elegant durch die Wahl der charakteristischen Größen untersucht werden.

Zunächst wurden die charakteristischen Größen unabhängig voneinander und über eine große Bandbreite variiert um ein mathematisches Verständnis für das Systemverhalten zu entwickeln. Um dann ein physikalisches Systemverständnis zu erlangen, mussten die charakteristischen Größen in Abhängigkeit voneinander variiert werden. So konnte im vorliegenden Fall der CO<sub>2</sub>-Ausbreitung im porösen Medium z.B. die charakteristische Länge durch eine typische Frontbreite abgeschätzt werden. Wobei sich die charakteristische Zeit dann herleitete aus der Dauer, die eine solche Front benötigt um einen gewählten Punkt in der Formation zu passieren. Da diese Abschätzungen durch die komplexen gegenseitigen Abhängigkeiten äußerst schwierig sind, wurden numerische 1-D und 3-D Experimente Als Basis der Untersuchungen wurden die bereits definierten typischen durchgeführt. Ziel war es nun, aus der Analyse der dimensionslosen Speicherformationen gewählt. Kennzahlen, qualitative Abschätzungen treffen zu können über die Speicherkapazität einer Formation und der Eignung, das CO<sub>2</sub> über lange Zeiträume sicher verwahren zu können. Dazu wurden zunächst vereinfachte Definitionen dieser beiden Kriterien getroffen. Es konnte dann gezeigt werden, dass eine kleine Gravitationszahl, d.h. schwache Gravitationskräfte im Verhältnis zu den viskosen Kräften, und zum Teil auch eine hohe Kapillarzahl, d.h. starke Kapillarkräfte im Verhältnis zu den viskosen Kräften, von Vorteil sind, d.h. dies führte zu hohen Speicherkapazitäten und einer sichereren Verwahrung. Die quantitativen Auswirkungen der simultanen Variation beider Kennzahlen müssen jedoch noch weiter Untersucht werden.

#### Analyse der Speicherkapazität einer geologischen Formation

Damit in einem nächsten Schritt die Speicherkapazität einer geologischen Formation in Abhängigkeit der geologischen Parameter abgeschätzt werden konnte, musste zunächst die Definition der Speicherkapazität festgelegt werden. Es gibt bis dato keine allgemein akzeptierte Definition der Speicherkapazität und verschiedene Forschergruppen und Institutionen nutzen verschiedene Ansätze, was teilweise zu widersprüchlichen Ergebnissen führt wenn es um die Abschätzung lokaler, regionaler oder globaler Speicherkapazitäten geht. In dieser Arbeit wurde ein Konzept weiterentwickelt, welches von der *Task Force for Review and Identification of Standards for CO\_2 Storage Capacity Estimation* zur Nutzung vorgeschlagen wird. Dieses Konzept der sog. *Resource-Reserve Pyramids* berücksichtigt verschiedene Aspekte der  $CO_2$ -Speicherung wie z.B. verschiedene prozessabhängige Zeitskalen, verschiedene räumliche Bewertungsskalen und verschiedene Speichermöglichkeiten. In der sog. *Techno-Economic Resource-Reserve Pyramid* werden die Kapazitätsabschätzungen in verschiedene

Ebenen eingeteilt, je nach immanenter Unsicherheit der Schätzung und nach den Kosten der Speicherung. Auf der untersten Ebene steht die theoretische Kapazität einer Formation, dies ist der verfügbare Porenraum abzüglich der aufgrund von Mehrphasengesetzmäßigkeiten nicht verdrängbaren Wasseranteile. Auf der nächst höheren Ebene steht die effektive Kapazität. Sie ist eine Untermenge der theoretischen Kapazität. Teile der theoretischen Kapazität welche durch geologische oder ingenieurstechnische Gründe nicht erschlossen werden können, werden hier nicht berücksichtigt. Auf den höheren Ebenen werden dann legislatorische und Genemigungsaspekte sowie Aspekte der Infrastruktur usw. integriert. In dieser Arbeit interessiert die Relation der theoretischen zur effektiven Kapazitätsebene. Hier wurde ein volumenbasierter Speicherkoeffizient C definiert, der die theoretische in die effektive Kapazität überführt. Der Speicherkoeffizient C kann noch in weitere Einzelfaktoren zerlegt werden. Auf dieses Detail soll in dieser Zusammenfassung aber nicht weiter eingegangen werden. In der effektiven Kapzität, welche ein Speichervolumen darstellt, kann eine bestimmte Masse  $CO_2$  gespeichert werden, hier als  $M_{eff}$  bezeichnet. Der Koeffizient C und die Masse $M_{\rm eff}$ wurden nun mit Hilfe numerischer 1-D und 3-D Simulationen der definierten typischen Speicherformationen berechnet und diskutiert. Es konnten vielerlei Aspekte der Speicherung gezeigt werden, so z.B. der Einfluss der relativen Permeabilitäten, des Kapillardrucks oder der Injektionsrate. In der Literatur gibt es bislang keine belastbaren Abschätzungen von C und  $M_{\text{eff}}$  für die vorhandene Bandbreite möglicher Formationsparameter, so dass diese Arbeit einen entscheidenden Fortschritt in dieser Richtung darstellt. Es wurde weiterhin gezeigt, dass es möglich ist die berechneten Koeffizienten C und die Massen  $M_{\rm eff}$  mit Hilfe der entwickelten (dimensionslosen) Kennzahlen abzuschätzen. Die in dem vorangegangenen Kapitel bereits vermutete Vorteilhaftigkeit kleiner Gravitationszahlen sowie zum Teil hoher Kapillarzahlen konnte nun quantitativ bestätigt werden. Die berechneten Speicherkoeffizienten aller betrachteten Fälle sind kleiner als 18%, d.h. weniger als 18% des vorhandenen Porenraums kann zur CO<sub>2</sub> Speicherung genutzt werden. Überträgt man den höchsten berechneten Speicherkapazitätskoeffizienten auf die Jahresproduktion eines typischen kohlebefeuerten Kraftwerks (Ausstoß 1 MtCO<sub>2</sub> pro Jahr) über einen Zeitraum von 25 Jahren, so erhält man eine CO<sub>2</sub>-Fahne mit einem Radius von 1.83 km (weitere Annahmen hierbei sind eine Formationsdicke von  $100 \,\mathrm{m}$  und eine  $\mathrm{CO}_2$ -Dichte von  $660.7 \,\mathrm{kg/m^3}$ ).

#### Sensitivitätsanalyse

Die Frage nach dem Einfluss einzelner Formationsparameter auf das Modellergebnis wurde in einer Sensitivtätsanalyse beantwortet. Als Modellergebnis dienten hier wieder Kriterien, welche repräsentativ sind für die Abschätzung der Speicherkapazität einer Formation sowie Kriterien zur Risikobewertung einer möglichen  $CO_2$ -Leckage. Die sog. Morris Methode wurde hier angewandt um auf eine sehr effiziente Weise eine Rangfolge der qualitativen Parametereinflüsse zu entwickeln. Diese Methode untersucht den gesamten definierten Parameterraum, wobei jeweils ein Parameter variiert wird. Somit wird an jedem untersuchten Punkt im Parameterraum ein lokales Sensitivitätsmaß ermittelt. Gemittelt über alle untersuchten Punkte ergibt sich daraus eine qualitative Abschätzung des Parametereinflusses welcher in Relation zu den Einflüssen der anderen Parameter zu bewerten ist. Betrachtet man die Standardabweichung der lokalen Sensitivitäten lässt sich, in Relation zu den Standardabweichungen der lokalen Sensitivitäten der anderen Parameter, eine Parameterinteraktion oder ein nicht-lineares Parameterverhalten ermitteln. Es wurden 15 Formationsparameter ausgewählt und zufällig über den gesamten, jeweils physikalisch sinnvollen Bereich untersucht. Insgesamt wurden 64 individuelle Parameterkombinationen erstellt und simuliert. Diese 64 Fälle zufällig generierter Parameterkombinationen bilden die Grundlage für die Sensitivitätsanalyse. Als einflussreichste Parameter wurden die absolute Permeabilität, das Injektionsintervall, und die Formationstiefe identifiziert. Hingegen waren die  $CO_2$  Injektionstemperatur und der Fallwinkel der Formation eher vernachlässigbar.

#### Risikoanalyse

In einer abschließenden Risikoanalyse wurde das Risiko bezüglich einer  $CO_2$ -Leckage an einem Brunnen in einiger Entfernung zum Injektionsbrunnen untersucht. Dabei wurden vier einflussreiche Formationsparameter bezüglich ihres Einflusses auf das potentielle Risiko einer Leckage statistisch untersucht.

Diese Untersuchung hatte verschiedene Ziele. Zum ersten soll sie die Möglichkeit bieten, verschiedene Formationen in Abhängigkeit ihrer Eigenschaften bezüglich des potentiellen Risikos miteinander zu vergleichen. Dies soll bei der Entscheidungsfindung helfen, für welche Formationen weitere Untersuchungen vielversprechend sind. Zum zweiten soll sie bei der Positionierung des Injektionsbrunnens helfen, der von mehreren potentiellen Leckage-Brunnen umgeben sein könnte.

Die unabhängigen Formationsparameter sind hierbei die Porosität, der geothermale Gradient, die Tiefe der Formation und die Anisotropie zwischen horizontaler und vertikaler absoluter Permeabilität. Diese Parameter wurden als unabhängig ausgewählt da sie einerseits in der Sensitivitätsanlyse als einflussreiche Parameter identifiziert wurden und andererseits eine Parameterverteilung für die statistische Untersuchung vorhanden war. Die Beschränkung auf vier unabhängige Parameter war aufgrund des hohen Rechenaufwandes nötig den eine Betrachtung aller einflussreichen Parameter verursacht hätte. Die weiteren Formationsparameter wurden durch Funktionalitäten der unabhängigen Parameter ausgedrückt. Diese Funktionalitäten beruhen auf einer umfassenden Literaturrecherche.

Das Risiko wurde durch die Wahrscheinlichkeit mit der eine solche Leckage auftreten könnte berechnet, multipliziert mit der entwichenen CO<sub>2</sub>-Masse in Abhängigkeit von der Zeit seit Injektionsbeginn und in Abhängigkeit von der Distanz zwischen Injektionsbrunnen und Leckage-Brunnen. Das Risiko hat somit die Einheit einer Masse. Zahlreiche Simulationen wurden durchgeführt mit jeweils unterschiedlichen Formationseigenschaften. Die Formationseigenschaften wurden dabei so festgelegt, dass jeweils drei der vier unabhängigen Parameter zufällig aus der Parameterdatenbank generiert wurden. Der vierte unabhängige Parameter, die Anisotropie der absoluten Permeabilität, wurde zufällig aus einer Parameterverteilung generiert die auf einem theoretischen Modell basiert. Die statistischen Verteilungen der Parameter wurden somit berücksichtigt. Die umfangreichen numerischen Simulationen wurden mit Hilfe des "CO2 Community Grid" durchgeführt, einer virtuellen Forschungsumgebung die es ermöglicht örtlich getrennte Supercomputer (Parallelrechner) in den Ländern Dänemark, Finnland und Norwegen über ein zentrales Zugangsportal einfach und einheitlich zu nutzen.

Aus dem berechneten Risiko wurde dann eine analytische Gleichung entwickelt. Mit dieser Gleichung ist es möglich schnell und einfach eine quantitative Abschätzung für das durchschnittliche, potentielle Risiko einer Leckage zu erhalten in Abhängigkeit der Zeit und der Distanz zum Leckage-Brunnen. Dies ist generell auch für mehrere Brunnen möglich, sofern die Brunnen sich nicht gegenseitig beeinflussen. Des Weiteren konnten die vier unabhängigen Formationsparameter bezüglich ihres Einflusses auf das Risiko untersucht werden. Den höchsten Einfluss hatte dabei der geothermale Gradient und die Tiefe der Formation. Ein steigender geothermaler Gradient und eine geringere Formationstiefe verursachten ein größer werdendes Risiko zu einem gewählten Zeitpunkt, d.h. das Risiko stieg früher an. Die Anisotropie der absoluten Permeabilität hatte einen gewissen Einfluss in einiger Distanz des Leckage-Brunnens zum Injektionsbrunnen. Hier führte eine größer werdende Anisotropie zu jedem gewählten Zeitpunkt zu einem größeren Risiko. Interessanterweise hatte die Porosität keinen Einfluss auf das potentielle Risiko. Dieses Verhalten ist begründet in der Abhängigkeit der absoluten Permeabilität von der Porosität. Mit größer werdender Porosität, und somit erwarteter langsamerer Ausbreitung der CO<sub>2</sub>-Fahne, verursacht durch den vergrößerten verfügbaren Porenraum, steigt auch die absolute Permeabilität, was eine schnellerer Ausbreitung der CO<sub>2</sub>-Fahne vor allem in den Bereichen direkt unterhalb des Caprocks verursacht. Diese beiden Effekte heben sich gegenseitig auf und das Risiko war hier nahezu unabhängig von Variationen der Porosität.

Abschließend wurde eine umfassende Diskussion über die Sensitivität der getroffenen Annahmen in Bezug auf das potentielle Risiko geführt. Dabei waren wichtige Diskussionspunkte die Bedeutung der Berücksichtigung weiterer unabhängiger Parameter, die Wahl unterschiedlicher Funktionalitäten für die Berechnung der abhängigen Parameter, die Bedeutung der Berücksichtigung zusätzlicher Prozesse (wie z.B. geochemische Prozesse) sowie der Einfluss realer geologischer Formationsgeometrien und Strukturen.

Zusammenfassend kann diese Arbeit zu einem verbesserten Prozessverständniss von  $CO_2$ -Injektionen in geologische Formationen beitragen. Die anfängliche Standortauswahl für ein  $CO_2$  Speicherprojekt innerhalb einer Region kann durch einfach anzuwendende Abschätzungen maßgeblich unterstützt werden. Die Abschätzungen berücksichtigen dabei die wichtigsten Faktoren eines Speichervorhabens; dies sind die Speicherkapazität einer Formation und das potentielle Risiko, welches durch Leckage-Brunnen in der Umgebung der Injektionsstelle entstehen könnte.