



- Arbeitsbereich Wasserwirtschaft und Wasserversorgung -

Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch
genutzter Aquifere:

**Entwicklung und Anwendung eines benutzerfreundlichen
geochemisch-hydrothermodynamischen Modells**

- Endbericht -

Förderkennzeichen: **0326995 B**

Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Wilfried Schneider

Bearbeiter: Dr. Michael Kühn
Prof. Dr.-Ing. Wilfried Schneider

Bearbeitungszeitraum: 1. 1. 1997 – 31. 10. 2001

Hamburg, den 31. Oktober 2001

Hausanschrift:
Schwarzenbergstr. 95
D-21073 Hamburg

Postanschrift:
D-21071 Hamburg

Telefon: 040 / 42878 - 3094
Telefax: 040 / 42878 - 2999
e-mail: w.schneider@tu-harburg.de

Zusammenfassung

Die geothermische Nutzung geeigneter Aquifere stellt einen Eingriff in das eng gekoppelte System von Gesteinsmatrix und strömendem Wasserkörper sowie der zugehörigen Stoff- und Energiebilanz dar. Die Intensität dieser Nutzung verursacht entsprechend rasche physikalische und chemische Systemveränderungen.

Die in diesem Projekt bearbeiteten Fragestellungen sind Bestandteil des Gesamtkonzepts des aus insgesamt vier Einzelprojekten bestehenden Verbundvorhabens „Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere“ und eng mit den Themen der anderen Projekte verflochten. Das Gesamtprojekt wurde vom Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben in Hannover koordiniert. Die Hauptbeiträge dieses Projektes sind:

- die Entwicklung eines geochemischen Moduls für das Computerprogramm SHEMAT zur Berechnung von Mineralgleichgewichten in hochsalinaren Lösungen für in-situ Temperaturen und Drucke bei der hydrogeothermalen Energiegewinnung,
- die Entwicklung einer benutzerfreundlichen grafisch basierten WINDOWS Oberfläche zur schnellen und sicheren Erstellung von Modellen (inklusive Dokumentation und Tutorial),
- die exemplarische Anwendung des Programmpaketes Processing SHEMAT / SHEMAT zur Simulation von Strömung, Wärmeausbreitung, Stofftransport und chemischen Reaktionen in typischen Modellaquiferen:
 - in Abhängigkeit von förderbedingten Änderungen des Druck- und Temperaturfeldes im Umfeld eines idealisierten Injektionsbrunnen,
 - zur Simulation der geothermischen Langzeitnutzung des potentiellen Standortes Stralsund,
 - zur Evaluierung des Programms SHEMAT durch eine umfangreiche dreidimensionale Simulation des geothermischen Reservoirs von Waiwera (Neuseeland).
- die Abschätzung von Subsidenz an der Erdoberfläche als Folge von Druckabbau in einem „typischen“ Modellaquifer,

Erstes Projektziel war es, ein geochemisch-hydrothermodynamisches Modul für das Simulationsprogramm SHEMAT zu entwickeln, um mögliche Mineralfällungen prognostizieren zu können. Die notwendigen thermodynamischen Gleichgewichtsberechnungen müssen für Wässer mit hohen Ionenstärken und hohen Temperaturen durchgeführt werden, um die geologischen und physikalischen Randbedingungen der in Norddeutschland potentiell nutzbaren Reservoirs adäquat nachbilden zu können.

Ausgangspunkt ist eine Auswahl potentieller Mineralreaktionen, die aus der Literatur bekannt sind. Die Fällungsprodukte haben in Laborexperimenten und auch in geothermischen Systemen selbst zu Permeabilitätsveränderungen geführt. Es handelt sich dabei u.a. um Eisenhydroxid (FeOH_3), Kieselsäure (SiO_2), Schwermetallsulfide (MS_x), Calcit (CaCO_3), Anhydrit (CaSO_4), Eisensulfid (FeS) und auch noch Baryt (BaSO_4). Es wird angenommen, dass den Fällungsreaktionen aufgrund der daraus resultierenden Porenraumverringerungen eine größere Bedeutung zukommt als möglichen Lösungsreaktionen. Aus den aufgeführten Fällungsprodukten lässt sich das Spektrum von Elementen ableiten, die innerhalb des chemischen Moduls Berücksichtigung finden sollten.

Ein ideales Modell für die Berechnung von Aktivitätskoeffizienten in geochemischen oder technischen Simulationsprogrammen müsste folgende Eigenschaften besitzen: Konsistenz mit den Hauptsätzen der Thermodynamik; kompakte mathematische Form; hohe Genauigkeit über einen weiten Bereich der Randbedingungen Druck, Temperatur und Ionenstärke der Lösungen; Anwendbarkeit auf das möglichst komplette System der Elemente des Periodensystems. Zur Zeit existiert kein Modell, das diese Voraussetzungen komplett erfüllt.

Die quantitative Abschätzung möglicher Fällungsreaktionen erfolgt mit Hilfe der Sättigungsindizes. Der Sättigungsindex spiegelt den Sättigungszustand einer Lösung bezüglich eines Minerals wieder und kann mit den Modellvorstellungen von Pitzer oder Debye-Hückel ermittelt werden. Aufgrund der hohen internen Konsistenz und Genauigkeit der Berechnungen mit den Pitzer-Gleichungen bieten diese den erfolversprechendsten Ansatz zur Berechnung der Speziesaktivitäten und Minerallöslichkeiten in hochsalinaren Lösungen. Aus diesem Grund wurde das Programm SHEMAT mit einem geochemischen Speziationsmodul ausgestattet, das auf dem Programm PHRQPITZ basiert.

In der folgenden Zusammenstellung der erarbeiteten Systemvoraussetzungen des chemischen Moduls ist das zur Zeit abgedeckte Spektrum an Spezies, Mineralen, Salzgehalten, Temperaturen und Drucken durch die rote Farbe gekennzeichnet. Durch die zur Zeit verfügbaren thermodynamischen Basisdaten ist der Umfang begrenzt.

- **Spezies:** Na-K-Ca-Mg-Ba-Sr-H-Cl-SO₄-OH-HCO₃-CO₃-CO₂-H₂O-Fe-Si-M-S
- **Minerale:** Carbonate, Sulfate, Chloride, Fe-Hydroxid, Kieselsäure, Sulfide
- **Salzgehalte:** 0 – 300 g/L
- **Temperaturen:** 0 – 150°C
- **Drucke:** 1 – 250 bar

Zweites Projektziel war die Erstellung einer benutzerfreundlichen WINDOWS-Oberfläche. Diese Oberfläche ermöglicht eine komfortable Handhabung des Simulationsmodells, dient als Eingabehilfe beim Modellaufbau und unterstützt die Visualisierung der Simulationsergebnisse.

Die Entwicklung der grafisch gesteuerten Benutzerschnittstelle wurde durchgeführt auf Grundlage des Quellcodes des Programms Processing MODFLOW. Das Programm wurde u.a. erweitert, um die notwendigen Eingabeparameter für den Wärme- und Stofftransport sowie für die chemischen Reaktionen zu erfassen.

Die Einarbeitung in die Bedienung der grafischen Benutzeroberfläche ist in einem „Tutorial“ ausführlich anhand einer Schritt für Schritt Anweisung beschrieben. Dort wird am Beispiel des potentiellen Geothermiestandortes Stralsund im Detail gezeigt, wie ein Simulationsmodell in „Processing SHEMAT“ aufgebaut wird und wie, nach erfolgter Berechnung mit SHEMAT, die Ergebnisse mit Hilfe der Visualisierungswerkzeuge bearbeitet werden können. Zusätzlich ist eine umfangreiche Hilfefunktion in die grafische Benutzeroberfläche integriert, die zu jeder Zeit an jeder Stelle des Programms Informationen zur Bedienung liefert.

Zentrales Entwicklungsergebnis des Verbundvorhabens ist das Simulationswerkzeug „Processing SHEMAT / SHEMAT“. Mit seiner Hilfe ist das experimentell und aus Betriebs- erfahrungen bisher noch nicht zugängliche Langzeitverhalten der Speichereigenschaften eines geothermisch genutzten Sandsteinaquifers zuverlässiger quantifizierbar.

Drittes Projektziel war es, mit dem Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT Anwendungsrechnungen für Modellaquifere durchzuführen, um das hydraulische, thermische und mechanische Verhalten geothermisch genutzter Aquifere zu untersuchen. Zunächst wurden Prozesse im Nahbereich einer Injektionsbohrung simuliert. Dieses System wurde dann auf den potentiellen Geothermiestandort Stralsund erweitert, um die dortigen Möglichkeiten der geothermischen Wärmegewinnung abzuschätzen und das Langzeitverhalten des bereits erbohrten Reservoirs zu untersuchen. Zur Evaluierung des Programms SHEMAT wurde eine umfangreiche dreidimensionale Simulation des geologisch gut untersuchten geothermischen Reservoirs von Waiwera (Neuseeland) durchgeführt.

Aufgrund der geologischen Voraussetzungen in Deutschland ist die Nutzung hydrogeothermaler Wärme vor allem an tiefe Aquifere und die Installation eines Dublettensystems aus Produktions- und Injektionsbohrung gebunden. Aufgrund der Tatsache, dass die Injektivität eines Reservoirs sehr sensibel auf Veränderungen im Nahbereich der Injektionsbohrung reagiert, wurde das Verhalten einer Injektionsbohrung als erstes Anwendungsbeispiel konzeptionell untersucht. Für die Studie wurde ein hypothetischer Aquifer ausgewählt, der typische Eigenschaften von in Norddeutschland geothermisch genutzten Reservoiren aufweist.

Die Wässer in den Reservoiren des Norddeutschen Beckens sind zum größten Teil hochsalinär und bezüglich der Mineralgleichgewichte zu den Carbonaten und Sulfaten der Erdalkalien in Sättigung oder nahe dem thermodynamischen Lösungsgleichgewicht. Die Minerale Anhydrit (CaSO_4) und Baryt (BaSO_4) sind hinsichtlich ihrer potentiellen Lösung bzw. Fällung für den Reinjektionsprozess von Bedeutung. Durch die Reinjektion des abgekühlten Wassers kommt es zur Störung des Gleichgewichts zwischen dem Reservoirgestein und dem Formationswasser. Die Lösung und Fällung von Mineralen verändert die Permeabilität des Gesteins. Um die Permeabilitätsentwicklung im Reservoir vorhersagen zu können, braucht man ein detailliertes Verständnis der komplexen Wechselwirkungen zwischen der Strömung, der Wärmeausbreitung, dem Stofftransport und den chemischen Reaktionen. Es müssen Voraussagen für den vollen Betriebszeitraum einer GHZ getroffen werden, was einzig und allein durch numerische Simulationen möglich ist.

Die Modellrechnungen haben gezeigt, dass die Temperatur des verpressten Wassers einen bedeutenden Einfluss auf die hydraulischen und chemischen Prozesse im Umfeld einer Injektionsbohrung hat. Außerdem kommt es zur Überlagerung der physikalischen und chemischen Prozesse. Die Lösung von Anhydrit im Umfeld der Bohrung führt dort zu einer Permeabilitätserhöhung, welche die Permeabilitätsverringering im Bereich der Temperaturfront dominiert. Es kommt insgesamt zu einer Abschwächung der thermisch ausgelösten Verringerung der hydraulischen Leitfähigkeit des Aquifers. Im Gegensatz zum Anhydrit, das eine retrograde Löslichkeit zeigt, führt das prograde Löslichkeitsverhalten des Baryts zu einer Übersättigung im Wasser und zu einer Fällung im Bereich um die Bohrung. Aufgrund der geringen Mengen kommt es in diesem Fall aber zu keiner Veränderung der Permeabilität.

Zweites Anwendungsbeispiel ist der Standort Stralsund (Nord-Ost-Deutschland an der Ostsee). Aus geologischer Sicht repräsentiert dieser Standort den nördlichen Rand des Nordostdeutschen Beckens. Hier wurde mit 3 Bohrungen im Mittleren Buntsandstein der Detfurth-Sandstein als geothermisch nutzbarer Aquifer nachgewiesen.

Aus den vorhandenen geologischen, physikalischen und chemischen Daten wurde das numerische Modell aufgebaut, um das Langzeitverhalten des Reservoirs zu quantifizieren. Wie in der Fallstudie des Injektionsbrunnens hat sich auch hier gezeigt, dass die Entwicklung der hydraulischen Leitfähigkeit des Aquifers vor allem von der Injektionstemperatur abhängig ist. Die aufgrund der Temperaturerniedrigung in der Umgebung der Injektionsbohrung auftretende Lösung von Calcit und Anhydrit führt zu einer Erhöhung der Permeabilität, wodurch der Temperatureffekt abgeschwächt wird. Die Porenraumstruktur bestimmt die Größe der Permeabilitätsveränderung. Mit dieser Studie konnte gezeigt werden, dass die Lokation Stralsund auch über einen Zeitraum von 80 Jahren ohne permeabilitätsbedingte Reinjektions-schwierigkeiten betrieben werden kann.

Drittes Anwendungsbeispiel und die damit verbundene Evaluierung des Programms SHEMAT, ist die Untersuchung des Reservoirs von Waiwera. Waiwera ist eine kleine Stadt an der Ostküste der Nordinsel Neuseelands. Unterhalb der Stadt befindet sich ein hydrogeothermales Reservoir, das sich zunächst durch heiße Quellen am Strand der Stadt bemerkbar gemacht hatte. Die erste schriftlich belegte Nutzung des Reservoirs begann im Jahr 1863. Ursprünglich waren alle angelegten Brunnen artesisch, ab dem Jahr 1969 mussten jedoch Pumpen zur Förderung des Wassers eingesetzt werden. Auch die heißen Quellen am Strand von Waiwera versiegten in den Jahren 1975 und 1976. Die sinkenden Wasserstände in den Brunnen veranlasste die zuständige Behörde (Auckland Regional Council) eine Bestandsaufnahme durchzuführen, um den Schutz und die nachhaltige Nutzung des Reservoirs mit Hilfe eines Managementplans in Zukunft zu gewährleisten. Auf Grundlage dieses umfangreichen Datensatzes wurde mit Processing SHEMAT ein Modell für das Gebiet von Waiwera aufgebaut.

Das Modellgebiet umfasst den Bereich der Stadt Waiwera sowie das Estuar des Waiwera Flusses mit dem geothermischen Reservoir im Zentrum. Das numerische Modell wurde in Anlehnung an die geologischen Bedingungen aufgebaut. Es wird davon ausgegangen, dass das geothermische Wasser durch eine Störungszone in den Aquifer eintritt. Von der Landseite aus kommt es zu einem Zustrom von kaltem Grundwasser in das Reservoir. Zur Seeseite existiert eine Salz-Süßwasser Grenzschicht aufgrund des Einflusses des Meerwassers auf das Untersuchungsgebiet. Das Modell wurde mit Hilfe der Temperaturverteilungen, die in den Bohrungen gemessen wurden, kalibriert.

Die numerischen Modellierungen haben gezeigt, dass sich ein stabiler natürlicher Zustand des Reservoirs nach 600 Jahren einstellt. Die Simulationsergebnisse für den natürlichen Zustand des Reservoirs wurden als Ausgangsbedingungen für die Berechnungen der Nutzungsszenarien des Aquifers verwendet, die aus den vorliegenden Informationen zur Entwicklung des Wasserverbrauchs abgeleitet wurden.

Geochemische Simulationen mit dem Reaktionsmodul von SHEMAT des geothermischen Wassers, des Grundwassers und des Wassers im Estuar haben gezeigt, dass alle im Gleichgewicht mit dem Mineral Calcit sind. Aufgrund der Mischung von drei verschiedenen Wässern und wechselnder Temperaturbereiche innerhalb des Untersuchungsgebietes muss mit möglichen Fällungen von Calcit, die zu Permeabilitätsveränderungen führen können, gerechnet werden. Unter den gegenwärtigen chemischen und physikalischen Bedingungen im geothermischen Reservoir von Waiwera ist Calcit die einzige Mineralphase, bei der mit Fällungen gerechnet werden muss.

Abschließend lässt sich für die Untersuchungen des geothermischen Reservoirs von Waiwera sagen, dass nach der Kalibrierung des Modells, die Simulationen mit Hilfe von Felddaten

evaluiert werden konnten. Die Betrachtung der Temperaturverteilungen sowie der Salzwasserkonzentrationen innerhalb des Aquifers zeigen auf, dass die Nutzung des Reservoirs bislang nicht nachhaltig ist. Aufgrund der komplexen sich überlagernden Prozesse im Reservoir kommt es zur Fällung und Lösung von Calcit, die aber keinen Einfluss auf die hydraulischen Eigenschaften des Aquifers ausüben.

Viertes Projektziel war es, die Subsidenz an der Erdoberfläche als Folge von Druckabbau in einem „typischen“ Modellaquifer abzuschätzen. Die Förderung von Fluiden, wie Wasser, Öl oder Gas, kann die flächenhafte Absenkung der Landoberfläche (Subsidenz) zur Folge haben. Im Rahmen der weltweiten Bewirtschaftung von Grundwasserreservoirs sind umfangreiche Fälle von Subsidenz bekannt. Hinsichtlich der Betriebssicherheit und Umweltverträglichkeit Geothermischer Anlagen muss eine Abschätzung für möglicherweise auftretende Subsidenz als Folge der Nutzung dieser tief liegenden Aquifere durchgeführt werden. Grund dafür ist, dass sich in der Vergangenheit gezeigt hat, dass es beim Betrieb von Geothermischen Anlagen zu erheblicher Subsidenz kommen kann. So wurden bis zu 14 m Subsidenz am Wairakei-Feld in Neuseeland festgestellt, ausgelöst durch eine Geothermische Anlage, die seit 1950 in Betrieb ist.

Es wurde eine Parameterstudie durchgeführt, die gezeigt hat, dass die hydraulischen Kennwerte der setzungsempfindlichen Schicht (hier Tonstein) für die Absolutwerte der Subsidenz einen geringen Einfluss haben. Im Gegensatz dazu sind die hydraulischen Kennwerte des geothermisch genutzten Grundwasserleiters (hier Sandstein) für die Subsidenz, die vor allem in der Tonsteinschicht auftritt, von entscheidender Bedeutung. Aufgrund der Tatsache, dass die Kennwerte des Grundwasserleiters im allgemeinen besser bekannt sind als die der darüber liegenden Schichten, ist eine Abschätzung der Subsidenz leichter möglich.

Diese Untersuchungen haben gezeigt, dass bei den Norddeutschen Gegebenheiten davon ausgegangen werden kann, dass die Subsidenz in keinem Fall Werte im Meterbereich annehmen wird. Für den Fall eines "typischen" Reservoirs ergibt sich eine maximale Subsidenz im Bereich der Förderbohrung von 18 mm. Bei den durchgeführten Betrachtungen bleibt das überlagernde Gesteinsgewölbe unberücksichtigt, das evtl. eine stützende Funktion ausübt, so dass die Setzung im Reservoir sich nicht bis an die Oberfläche auswirken kann.

INHALT

I. Einführung und Projektübersicht	1
1. Aufgabenstellung	1
1.1. Hydrogeothermale Energiegewinnung	1
1.2. Problemstellung	3
2. Durchführung des Projektes	4
2.1. Voraussetzungen für das FE-Vorhaben	4
2.2. Planung und Ablauf.....	4
2.3. Wissenschaftlicher und technischer Stand.....	6
2.4. Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	7
II. Ergebnisbericht	9
1. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse.....	9
1.1. Entwicklung des chemischen Moduls	9
1.1.1. Systemvoraussetzungen	9
1.1.2. Aktivitätsberechnungen	11
1.1.3. Vergleich der Pitzer-Gleichungen und der Debye-Hückel-Theorie.....	14
1.1.4. Chemisches Modul –CHEMEQ-	15
1.2. Entwicklung der grafischen Benutzeroberfläche Processing SHEMAT	23
1.2.1. Definition des Modellgebietes und der Randbedingungen.....	24
1.2.2. Definition der räumlichen Modelleingangsparameter	26
1.2.3. Simulationsläufe	28
1.2.4. Visualisierungs- und Zusatzwerkzeuge und Hilfefunktion	28
1.3. Anwendungsrechnungen für typische Modellaquifere	32
1.3.1. Fallstudie einer Injektionsbohrung	32
1.3.2. Lokation Stralsund.....	41
1.3.3. Evaluierung von SHEMAT anhand der Lokation Waiwera.....	47
1.4. Subsidenzabschätzung im Umfeld einer Geothermischen Heizanlage.....	56

1.4.1. Subsidenz	56
1.4.2. Untersuchtes Modellsystem.....	57
1.4.3. Abschätzung mit Hilfe analytischer Lösungen	58
1.4.4. Anwendung des MODFLOW "Interbed-Storage-Package"	60
1.4.5. Numerische Parameteranalyse	61
2. Verwertbarkeit der Ergebnisse.....	64
3. Fortschritt bei anderen Stellen	66
4. Veröffentlichungen im Rahmen des Projekts	68
Zitierte Literatur	71

I. Einführung und Projektübersicht

Die geothermische Nutzung geeigneter Aquifere stellt einen Eingriff in das eng gekoppelte System von Gesteinsmatrix und strömendem Wasserkörper sowie der zugehörigen Stoff- und Energiebilanz dar. Die Intensität dieser Nutzung verursacht entsprechend rasche physikalische und chemische Systemveränderungen.

Das Projekt „Entwicklung und Anwendung eines benutzerfreundlichen geochemisch-hydrothermodynamischen Modells“ ist Teil des Verbundvorhabens „Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere“. Ziel des Vorhabens, bestehend aus 4 Einzelprojekten, war es, die Veränderung der Porosität bzw. Permeabilität des Fluid - Gesteinssystems, die in einem geothermisch genutzten Aquifer durch Lösungs- und Fällungsreaktionen verursacht werden abzuschätzen. Auf Grundlage von Daten aus realen Aquifersystemen sollten numerische Fallstudien durchgeführt werden, um die zu erwartenden hydraulischen, thermischen und mechanischen Veränderungen in solchen Aquifern näherungsweise quantifizieren zu können.

Die spezifischen Aufgabenstellungen der einzelnen Projekte waren arbeitsteilig eng miteinander verknüpft. Das Projekt der Technischen Universität Hamburg-Harburg (TUHH) wird im folgenden Bericht ausgeführt.

1. Aufgabenstellung

1.1. Hydrogeothermale Energiegewinnung

Die Geothermischen Heizanlagen (GHZ) auf der Grundlage hydrothermaler niedrig enthalpischer Energie werden gewöhnlich durch ein sogenanntes Dublettensystem, mit einer Produktions- und einer Reinjektionsbohrung, verwirklicht. Die heißen Tiefenwässer werden über die Produktionsbohrung gefördert, über Wärmetauschersysteme abgekühlt und anschließend durch die Reinjektionsbohrung wieder in den Speicherhorizont verbracht. Die Reinjektion der Thermalwässer ist aus zwei Gründen notwendig. Zum einen dient sie der optimalen Energienutzung des Speichers, weil die Temperatur- und Druckverringerung im Aquifer minimiert wird (DARWIS et al., 1995). Zum anderen sind die Wässer meist hoch-mineralisiert und enthalten toxische Inhaltsstoffe wie Bor- und Arsenverbindungen sowie Schwermetalle (WERES, 1988). Damit ist eine oberflächennahe Entsorgung ohne eine kostspielige und intensive Vorbehandlung ausgeschlossen.

In Abbildung I-1 ist der Wasserkreislauf einer GHZ schematisch dargestellt. Die Entfernungen zwischen den beiden Bohrungen betragen jeweils 1-2 km und sind so dimensioniert, dass ein Durchbruch der Kältefront des injizierten Wassers in der Förderbohrung frühestens nach

dreißig Jahren erwartet wird. Dieser Betriebszeitraum ist notwendig, um die Wirtschaftlichkeit einer solchen Geothermischen Anlage zu gewährleisten. Zur optimalen Nutzung der Heizanlagen mit einer ganzjährigen Grundauslastung wird versucht, neben Wohngebieten und öffentlichen Gebäuden, industrielle Abnehmer mit einzubinden (SCHIEFERDECKER et al., 1991).

Die Möglichkeiten der Nutzung niedrigthermaler Schichtwässer sind von der Erfüllung bestimmter geologischer Voraussetzungen abhängig. Geeignete Speicher sind poröse, hochpermeable Gesteine, deren Porenraum mit Schichtwasser, in speziellen Fällen auch mit Gas oder Öl gefüllt ist. Es handelt sich dabei in erster Linie um Sandsteine und Carbonate. Die Speichergesteine (Porenspeicher) zeichnen sich durch eine intergranulare Porosität aus, die es dem Fluid ermöglicht, sich im Speicher zu bewegen. Die Größe des Porenraums ist abhängig von der Größe, Form, Sortierung und Packung der Klasten. Für praktische Belange ist die Nutzporosität wichtig. Sie umfasst den Raum der miteinander in Verbindung stehenden Poren, in dem eine Bewegung von Schichtwasser unter den speichereigenen Druck- und Temperaturbedingungen möglich ist.

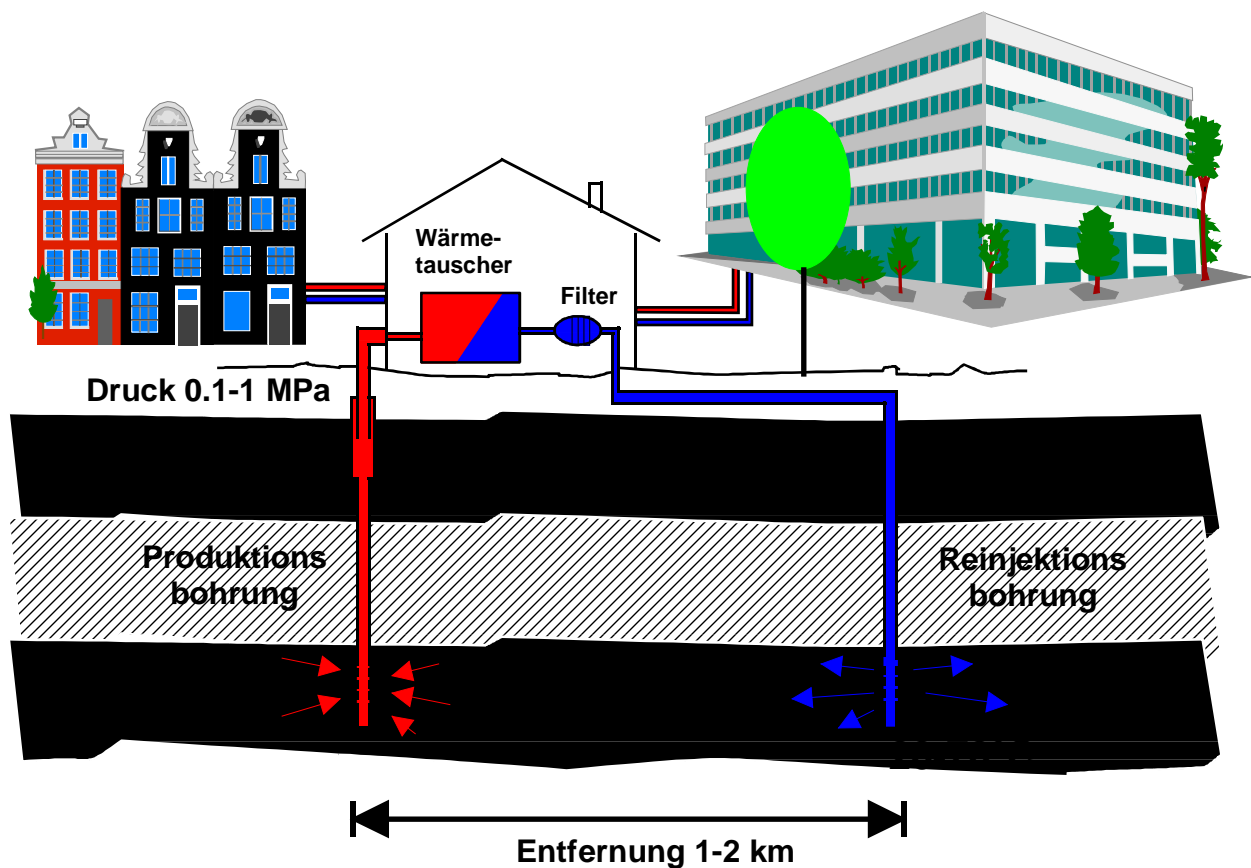


Abbildung I-1: Wasserkreislauf einer Geothermischen Heizanlage mit Wärmeabnehmern. Die niedrigenergetische Energiegewinnung wird über ein Dublettensystem aus Produktions- und Reinjektionsbohrung verwirklicht. Die Thermalwassertemperaturen unterscheiden sich voneinander in Abhängigkeit von der Tiefe des aufgeschlossenen Aquifers.

Relativ reine, bindemittelarme und gut sortierte Sandsteine mittlerer Korngröße weisen Nutzporositäten von 20-30 % auf und genügen damit den Anforderungen der niedrig enthalpischen, Geothermischen Energienutzung (SCHÖN & ROCKEL, 1991). Ein weiterer wichtiger geologischer Qualitätsparameter ist die hydraulische Leitfähigkeit des Gesteins. Sie wird beeinflusst von der Permeabilität des Gesteins sowie der Viskosität und der Dichte des Fluids. Die Permeabilität ist eine gesteinspezifische Konstante und beschreibt den Einfluss des Porensystems auf die Wasserbewegung unabhängig von den Fluideigenschaften. Die Abgabe- und Aufnahmefähigkeit des Speichers für Wasser wird vor allem durch die Kompressibilität des Fluids und des Gesteinsgefüges bestimmt.

Beim „Abbau“ eines Geothermischen Speichers werden im projektierten Zeitraum von 30 Jahren rund 25 Millionen Kubikmeter Thermalwasser über die Produktionsbohrung gefördert und über die Reinjektionsbohrung wieder verbracht. Diese Wassermengen führen zu starken hydraulischen Belastungen der Bohrungen und des Speichers, die mit thermischen, physiko-chemischen, mechanischen und mikrobiologischen Effekten gekoppelt sind (SEIBT, 1991).

1.2. Problemstellung

Bei der Exploration und Nutzung geothermischer Reservoirs ist es in ganz Europa immer wieder zu folgenschweren Veränderungen der Aquifere im Bereich der Injektion gekommen. Die Ursache war in vielen Fällen eine Permeabilitätsreduzierung der wasserführenden Schicht, die durch Minerallösungs- und -fällungsreaktionen ausgelöst wurde. Das führte dazu, dass der Verpressdruck erhöht werden musste, um die Injektionsrate konstant zu halten.

Die primäre Zielsetzung des Vorhabens ist die Abschätzung der Veränderung von Porosität bzw. Permeabilität des Fluid-Gesteins-Systems, die in einem geothermisch genutzten Aquifer durch Lösungs- und Ausfällungsreaktionen verursacht wird. Folgende Untersuchungspunkte wurden in diesem Zusammenhang behandelt:

- eine Ankopplung der chemischen Systemkomponente an die Dynamik der Gesteinsmatrix und des Wasserkörpers sowie an die Wärmebilanz des Systems;
- die Entwicklung einer Benutzeroberfläche zur Erleichterung der praktischen Nutzung des entwickelten Programmsystems, welche die interaktive Modellerstellung unterstützt sowie die simulationsbegleitende Darstellung der Ergebnisse ermöglicht;
- die Untersuchung von Fragestellungen an konkreten Aquiferen, bei dem das erstellte, komplexe dynamische Fluid-Transport-Reaktions-System die Ausgangsbasis bildet.

2. Durchführung des Projektes

2.1. Voraussetzungen für das FE-Vorhaben

Der größte Teil der in Deutschland erzeugten Geothermischen Energie wird zu Heizzwecken aus den heißen Wässern tiefer Aquifere gewonnen. Wegen des steten Nachfließens von Wärme aus dem Erdinnern an die Oberfläche wird die geothermische Energie zu den erneuerbaren Energien gezählt. In den Forschungsprogrammen der Bundesregierung zu den Themen Erneuerbare Energien und Energieforschung und Energietechnologien wird daher neben anderen auch die geothermische Energie angesprochen. Als Forschungsschwerpunkt werden neben der Hot-Dry-Rock-Technologie insbesondere "Untersuchungen zur Nutzung hydrothermalen Vorkommen im Untergrund durch neue Verfahren und Methoden"¹ genannt und in diesem Zusammenhang speziell das Problem der hohen Lösungsfracht vieler tiefer Aquiferwässer angesprochen².

Das durchgeführte Gesamtprojekt hat zu diesem Aspekt einen wichtigen Beitrag geleistet, indem die Veränderung der hydraulischen Eigenschaften eines aktiv bewirtschafteten Geothermischen Aquifers aufgrund von temperaturabhängigen Lösungs- und Ausfällungsreaktionen umfassend analysiert und modelliert wurde. Die Bandbreite der Untersuchungen reichte hierbei von Labormessungen und der Erfassung der relevanter Daten über theoretische Entwicklungen zur Beschreibung der Kinetik der hydrochemischen Reaktionen und die Veränderung der Porenraumgeometrie durch Lösung und Ausfällung bis hin zur Umsetzung dieser Entwicklungen in ein benutzerfreundliches Simulationsprogramm.

2.2. Planung und Ablauf

Die Struktur des Verbundvorhabens „Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere“, das sich in vier einzelne, inhaltlich aufeinander abgestimmte Projekte gliedert, ist in Abbildung I-2 dargestellt. Die Gesamtkoordination erfolgte durch das Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA, Projektleiter Dr. C. Clauser, Koordinator Dr. J. Bartels) in Hannover.

Die Bearbeitung des vorliegenden Projektes mit dem Arbeitstitel „Entwicklung und Anwendung eines benutzerfreundlichen geochemisch-hydrothermodynamischen Modells“ erfolgte im Zeitraum von Januar 1997 bis Oktober 2001. Die Koordination der Arbeiten sowie des

¹ Energieforschung und Energietechnologien - Förderschwerpunkte der Bundesregierung, 1993. Bundesministerium für Forschung und Technologie, Bonn

² Erneuerbare Energien: Stand - Aussichten - Forschungsziele, 1992. Bundesministerium für Forschung und Technologie, Bonn

Informationsaustausches innerhalb des Projektes und zu den anderen Projekten des Verbundvorhabens erfolgte durch den Projektleiter.

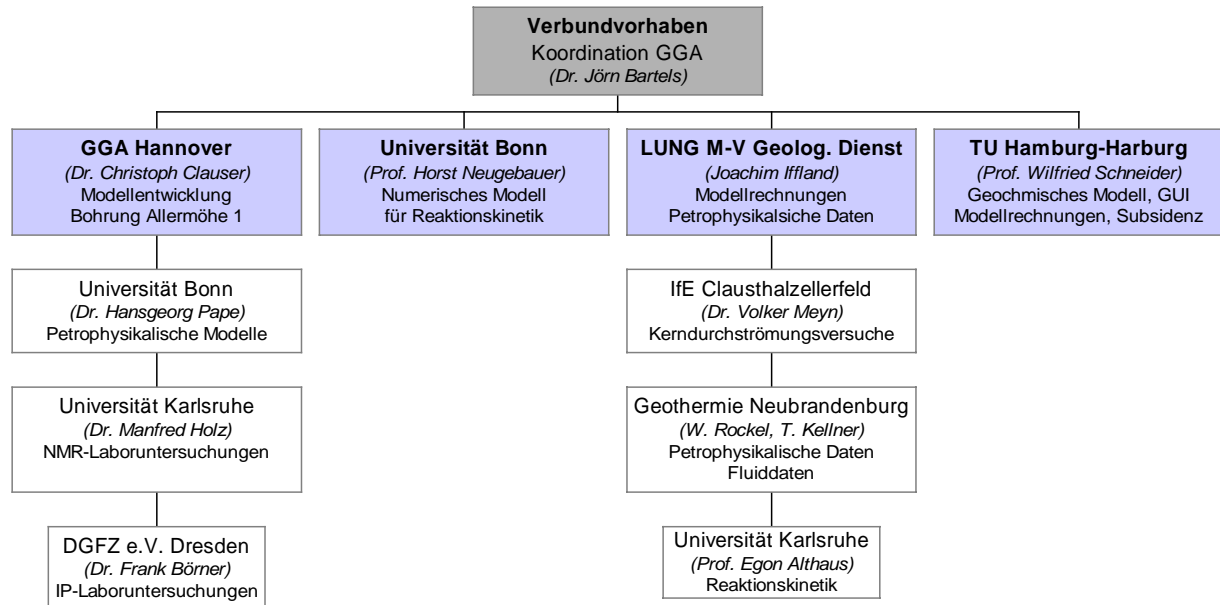


Abbildung I-2: Struktur des Verbundvorhabens hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere mit Projektpartnern und Unteraufnehmern.

Mit dem hier dargestellten Teilprojekt werden schwerpunktmäßig 4 Hauptziele verfolgt:

1. Verbesserung der mathematischen Modellierung wechselseitig gekoppelter Prozesse (Strömung, Wärme- und Stofftransport sowie Lösung und Fällung) durch Verknüpfung des weiterentwickelten dreidimensionalen geothermischen Simulationsprogramm SHEMAT mit einem bestehenden geochemischen Modell.
2. Entwicklung einer anwenderfreundlichen, leicht handhabbaren, grafisch orientierte Version des gekoppelten Simulationsmodells, die unter WINDOWS verschiedene Prä- und Postprozessorprogramme zur Vereinfachung der Dateneingabe und -ausgabe bereitstellt.
3. Die Anwendung des entwickelten gekoppelten Simulationsmodell zur Modellierung der wechselseitig gekoppelten Prozesse Strömung, Wärme- und Stofftransport sowie Lösung und Fällung am Beispiel eines gut erkundeten Aquifersystems sowie zur Untersuchung „typischer“ Modellaquifere. Ziel dieser Untersuchungen ist die Eignungsbeurteilung von geothermisch genutzten oder zu nutzenden Aquiferen.
4. Durchführung von Sensitivitätsanalysen und Parameterstudien zur Abschätzung der Subsidenz im Umfeld einer Geothermischen Heisanlage. Dabei steht die Frage im Vordergrund, welche der Modelleingangsparameter für die Beurteilung der Geothermischen Nutzbarkeit von Aquiferen maßgeblich sind.

2.3. Wissenschaftlicher und technischer Stand

Zur Berechnung der chemischen Speziation stehen mittlerweile mehr als 50 Computerprogramme zur Verfügung, die sich in erster Linie hinsichtlich der mathematischen Behandlung der thermodynamischen Aktivität, der Temperatureffekte und der Redoxreaktionen voneinander unterscheiden. Die Auswahl von einem geochemischen Modell, das zur Kopplung mit SHEMAT verwendet werden soll, muss sich an die spezifischen Gegebenheiten von geothermisch genutzten Aquiferen orientieren.

Im durchgeführten Forschungsvorhaben richtete sich das Hauptaugenmerk auf diejenigen geochemischen Modelle, die für den Temperatur- und Druckbereich geothermisch genutzter Aquifere anwendbar sind. NORDSTROM et al. (1979) wendeten für den identischen Anwendungsfall verschiedene Programmcodes an und stellten dabei nur geringfügige Unterschiede in den Berechnungsergebnissen fest. Für Berechnungen von Fällungs- und Lösungsvorgängen in Temperaturbereichen von bis zu 300°C werden weltweit am häufigsten die Programme SOLMINEQ (KHARAKA & BARNES, 1973) und EQ3/6 (WOLERY, 1983) angewandt. Für Speziationsberechnungen im Niedrigtemperaturbereich bei gering salinaren Grundwässern gibt es zahlreiche Anwendungen der Programme PHREEQC (PARKHURST, 1995) und WATEQF (PLUMMER et al., 1976). Fällungs- und Lösungsreaktionen werden durch WATEQF nicht berechnet.

Zur Berechnung der Speziesaktivitäten in hochsalinaren Lösungen bieten die Pitzer-Gleichungen (PITZER, 1973) den erfolgversprechendsten Ansatz (WOLERY & JACKSON, 1990). Die drei Programme PHRQPITZ (PLUMMER et al., 1988), SOLMINEQ und EQ3/6 unterstützen die Berechnung der Speziesaktivitäten und Mineralgleichgewichte mit Hilfe der Pitzer-Gleichungen. Aufgrund begrenzter Basisdaten ist jedoch die Modellierung der Redoxgleichgewichte sowie die Betrachtung höherer Drucke und Temperaturen mit dem Interaktionsmodell von Pitzer bisher nicht möglich oder fehlerhaft.

Keines der Programme PHREEQC, EQ3/6, SOLMINEQ oder PHRQPITZ ist in der Lage für alle Randbedingungen (Salzgehalt-Temperatur-Druck) die Lösungs- und Fällungsreaktionen zu berechnen. Daher war eine der Hauptaufgaben dieses Projektes ein neues geochemisches Modul mit einem erweiterten Datensatz zu entwickeln.

Auf dem Gebiet der Grundwassermodellierung werden seit einigen Jahren zunehmend anwenderfreundliche WINDOWS-Benutzeroberflächen für Personalcomputer programmiert. Besonders sei in diesem Zusammenhang auf die Programmcodes Processing Modflow (PM) von CHIANG & KINZELBACH (1993) bzw. Processing Modflow for Windows (PMWIN) von CHIANG (1995) hingewiesen, weil sie hinsichtlich Komfort, Übersichtlichkeit und Handhabung ausgezeichnete Qualitäten besitzen. Sämtliche Eingaben von Modellparametern werden

grafisch unterstützt und interaktiv vorgenommen. Die Daten werden im wesentlichen mit Hilfe der Computer-Maus auf einem Zeichenfeld eingegeben. Alle erforderlichen Daten werden angezeigt. Für ein gekoppeltes geochemisches - hydrothermodynamisches Simulationsmodell existiert bislang keine WINDOWS-Benutzeroberfläche für Personalcomputer. Eine anwenderfreundliche WINDOWS-Benutzeroberfläche erlaubt eine rasche und übersichtliche Dateneingabe. Außerdem vermittelt die grafische Benutzeroberfläche sehr viel mehr Informationen als textorientierte Dateneingabe. Mit der Programmierung der Benutzeroberfläche soll die Anwendbarkeit von SHEMAT in Forschung und Praxis deutlich verbessert werden.

Die numerische Simulation gekoppelter Transportprozesse hat in den letzten Jahren ein gesteigertes Interesse erfahren. Dies wurde nicht zuletzt auch durch immer leistungsfähigere Rechner ermöglicht, welche die Lösung auch anspruchsvoller mehrdimensionaler Gleichungssysteme gestatten. In diesem Zusammenhang sind beispielsweise die Programmcodes SUTRA (VOSS, 1984; VOSS & SOUZA, 1987) und FEFLOW (DIERSCH, 1996, 1997) zu nennen, die bereits für zahlreiche Anwendungsfälle eingesetzt wurden. Diese Programmcodes berücksichtigen jedoch nicht den Einfluss von Permeabilitätsveränderungen auf das Strömungsfeld über die mit ihnen einhergehenden Veränderungen der Permeabilität. Die Berücksichtigung dieser Vorgänge scheiterte bisher am ungeklärten Zusammenhang zwischen Permeabilität und Porosität. Die Notwendigkeit der Rückkopplung dieser diagenetischen Prozesse auf das Strömungsfeld ist jedoch offensichtlich. Lösung und Fällung beeinflussen unmittelbar das Porenvolumen sowie die Porenraumgeometrie und damit die Permeabilität der porösen Matrix. Durch die Einbindung des im Teilvorhaben des GGA weiterentwickelten fraktalen Ansatzes in das Programm SHEMAT ist es möglich, diese Rückkopplung zu realisieren. Diese Untersuchungen wurden in enger Zusammenarbeit mit den Arbeitsgruppen der Teilvorhaben durchgeführt.

2.4. Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das BMBF Verbundvorhaben "Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere" (FKZ 0326995) wurde durchgeführt unter der Leitung der Geologischen Gemeinschaftsaufgaben (GGA) aus Hannover. Entsprechend der thematischen Breite des Vorhabens wurden unterschiedliche Aspekte in mehreren Teilprojekten durch verschiedene Arbeitsgruppen bearbeitet. Die zentrale Koordinierung durch die GGA sorgte für die erforderliche Kommunikation zwischen den Teilprojekten.

Neben den übrigen drei am Verbundvorhaben beteiligten Projekten und den durch Unteraufträge in das Projekt eingebundenen Forschungseinrichtungen und Firmen (vgl. Abbildung I-2) gab es über die gesamte Bearbeitungsdauer einen ständigen Austausch über

Vorhaben und Resultate mit der Projektgruppe Geothermie am GeoForschungsZentrum Potsdam.

Zur Diskussion und zum Erfahrungsaustausch bezüglich geochemischer Fragestellungen wurde ein ständiger Kontakt zu den Arbeitsgruppen Geochemie der Universität Bremen sowie Umweltgeochemie der Universität Heidelberg gepflegt.

Ein intensiver wissenschaftlicher Austausch wurde mit dem Institut für Geothermie der Universität Auckland in Neuseeland aufgebaut. Im Rahmen der internationalen Geothermischen Tagungen 1999 und 2000 wurden Vorträge über die Forschungsarbeiten dieses Teilprojekts gehalten. Darüber hinaus wurde das im Rahmen des Verbundvorhabens entwickelte Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT dort vorgestellt. Die Zusammenarbeit mit dem Institut für Geothermie hat zu weiteren Veröffentlichungen geführt.

II. Ergebnisbericht

1. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Grundvoraussetzung, um die komplexen Vorgänge in einem geothermischen Aquifer mit Hilfe eines Simulationsmodells beschreiben zu können, ist ein gekoppeltes Modell zur Berechnung der Strömung, des Stofftransports, der Wärmeausbreitung und chemischer Reaktionen.

In dem Teilprojekt "Entwicklung und Anwendung eines benutzerfreundlichen geochemisch-hydrothermodynamischen Modells" wurden folgende Ziele verfolgt:

- Entwicklung eines chemischen Moduls für das Programm SHEMAT,
- Entwicklung der grafischen Benutzeroberfläche Processing SHEMAT,
- Anwendungsrechnungen für typische Modellaquifere,
- Abschätzung der Subsidenz im Umfeld einer Geothermischen Heizanlage.

1.1. Entwicklung des chemischen Moduls

Erstes Projektziel war es, ein geochemisch-hydrothermodynamisches Modul für das Simulationsprogramm SHEMAT zu entwickeln, um mögliche Mineralfällungen prognostizieren zu können. Die notwendigen thermodynamischen Gleichgewichtsberechnungen müssen für Wässer mit hohen Ionenstärken und hohen Temperaturen durchgeführt werden, um die geologischen und physikalischen Randbedingungen der in Norddeutschland potentiell nutzbaren Reservoirare adäquat nachbilden zu können.

1.1.1. Systemvoraussetzungen

Ausgangspunkt der Entwicklung eines chemischen Moduls war eine Auswahl potentieller Mineralreaktionen, die im Rahmen der Nutzung geothermischer Reservoirare auftreten können. Aus der Literatur sind verschiedene Fällungsprodukte bekannt, die in Laborexperimenten und auch in geothermischen Systemen selbst zu Permeabilitätsveränderungen geführt haben, (Tabelle II-1). Es handelt sich dabei u.a. um Eisenhydroxid (FeOH_3), Kieselsäure (SiO_2), Schwermetallsulfide (MS_x), Calcit (CaCO_3), Anhydrit (CaSO_4) und Eisensulfid (FeS). Zusätzlich ist auch noch Baryt (BaSO_4) zu nennen, denn für die spezifischen chemisch-physikalischen Randbedingungen der geothermischen Heizanlage Neustadt-Glewe hat sich in geochemischen Modellierungen herausgestellt, dass die Fällung von Bariumsulfat wahrscheinlich ist (KÜHN, 1997). In der Tabelle sind die gefällten Minerale, das untersuchte System und die Referenz angegeben. Es wird angenommen, dass den Fällungsreaktionen aufgrund der daraus resultierenden Porenraumverringierungen eine größere Bedeutung zukommt als möglichen Lösungsreaktionen.

Tab. II-1: Potentielle Fällungsreaktionen als Folge geothermischer Nutzung.

Fällungsprodukt	BEARBEITER	System
Eisenhydroxid (Fe(OH) ₃)	Potter et al., 1981	Labor (Sandstein)
Kieselsäure (SiO ₂)	Brown et al., 1995	Rohrleitungen
Schwermetallsulfide (MS _x)	Akaku, 1990	Fushime, Japan
Calcit (CaCO ₃)	Sanyal et al., 1985	Miravalles, Costa Rica
Anhydrit (CaSO ₄)	Akaku, 1990	Fushime, Japan
Eisensulfid (FeS)	Criaud et al., 1989	Pariser Becken
Baryt (BaSO ₄)	Kühn et al., 1997	Modellierungen

Aus den in Tabelle II-1 aufgeführten Fällungsprodukten lässt sich ein Spektrum von Elementen ableiten, die innerhalb des chemischen Moduls Berücksichtigung finden sollten, um alle potentiellen Reaktionen bei den gekoppelten Simulationen geothermisch genutzter Aquifere berücksichtigen zu können. In Kombination mit den physikalischen Randbedingungen, die in geothermischen Reservoiren des norddeutschen Beckens angetroffen werden, ergeben sich folgende Systemvoraussetzungen für das zu entwickelnde geochemische Modul:

- **Spezies:** Na-K-Ca-Mg-Ba-Sr-H-Cl-SO₄-OH-HCO₃-CO₃-CO₂-H₂O-Fe-Si-M-S
- **Minerale:** Carbonate, Sulfate, Chloride, Fe-Hydroxid, Kieselsäure, Sulfide
- **Salzgehalte:** 0 – 300 g/L
- **Temperaturen:** 0 – 150°C
- **Drucke:** 1 – 250 bar

Das zur Zeit im entwickelten geochemischen Modul abgedeckte Spektrum an Spezies ist durch die rote Farbe gekennzeichnet. Der Umfang ist abhängig von den verfügbaren thermodynamischen Basisdaten, die im Folgenden detailliert beschrieben werden. Ein Ziel für die Zukunft ist es, dass System noch zu erweitern.

Aus der Kombination der Spezies ergeben sich die modellierbaren Mineralgruppen, die ebenfalls rot gekennzeichnet sind. Das entwickelte chemische Modul ist zur Zeit in der Lage die Löslichkeiten der Carbonate, Sulfate, Chloride sowie der Kieselsäure zu berechnen.

Aufgrund der gegebenen Milieubedingungen in den Formationswässern geothermisch genutzter Aquifere Norddeutschlands sind hohe Anforderungen an die chemische Simulation gestellt. Es handelt sich meistens um Solen mit Salzgehalte von über 100 g/L. Das vorliegende

Modell berücksichtigt Salinitäten von 0 g/L bis zur Sättigung - für NaCl entspricht das z.B., in Abhängigkeit von der Temperatur, um die 300 g/L. Die Temperaturen in den nutzbaren Aquiferen liegen zwischen 50 und 120°C. Aus diesem Grund ist das System für einen Temperaturbereich von 0-150°C entwickelt worden. Die Speicherhorizonte befinden sich in Teufen von über 1000 m bis 2500 m. Das würde die Berücksichtigung des Drucks bis zu 250 bar erfordern. Aufgrund von mangelhaften oder nicht verfügbaren thermodynamischen Daten bleibt die Druckzunahme zur Zeit im Modell noch unberücksichtigt.

Die quantitative Abschätzung möglicher Fällungsreaktionen erfolgt mit Hilfe der Sättigungsindizes. Der Sättigungsindex (SI) spiegelt den Sättigungszustand einer Lösung bezüglich eines Minerals wieder und ist definiert als:

$$SI = \log \frac{IAP}{K} \quad (II-1)$$

In der Gleichung wird das Ionenaktivitätsprodukt IAP mit der Gleichgewichtskonstanten aus dem Löslichkeitsprodukt des betreffenden Minerals K verglichen. Ist der SI positiv, ist das Mineral übersättigt und wird möglicherweise ausfallen. Eine Mineralphase befindet sich mit dem untersuchten Wasser im thermodynamischen Gleichgewicht, wenn der Sättigungsindex im Bereich von Null liegt. Dabei werden Sättigungen zwischen -0.2 und +0.2 SI von LANGMUIR & MELCHIOR (1985) als gesättigte Lösungen angesehen, während MONNIN & RAMBOZ (1996) die Grenze bei ± 0.05 SI setzen. Ein negativer Sättigungsindex bedeutet Untersättigung bezüglich des betrachteten Minerals. Die Bestimmung der Sättigungsindizes setzt die Kenntnis der Aktivitäten der gelösten Spezies voraus, deren Berechnung im Folgenden genauer betrachtet werden soll.

1.1.2. Aktivitätsberechnungen

Eine Näherungsrechnung zur Bestimmung der Aktivitäten in Lösungen ist die Debye-Hückel-Gleichung (DEBYE & HÜCKEL, 1923), welche die in Lösungen auftretenden weitreichenden elektrostatischen Wechselwirkungen beschreibt:

$$\log \gamma_i = - \frac{Az_i^2 \sqrt{I}}{1 + Ba_i^0 \sqrt{I}} \quad (II-2)$$

A und B sind temperaturabhängige Konstanten, I ist die Ionenstärke, a^0 ein ionenspezifischer Parameter, angepasst durch „mean-salt“ Aktivitätskoeffizienten (PYTKOWICZ, 1983), und z_i ist die spezifische Ladung. Die Ionenstärke wird beschrieben durch:

$$I = \frac{1}{2} \sum_i m_i z_i^2. \quad (II-3)$$

Zur Berechnung der Speziesaktivitäten in Lösungen höherer Ionenstärken wird gewöhnlich das von PITZER (1973) entwickelte und durch PITZER & SIMONSON (1986) weiterentwickelte Modell der interionischen Wechselwirkungen herangezogen. Dieser semi-empirische Ansatz beschreibt die Konzentrationsabhängigkeit der freien Enthalpie für nicht ideale Zustände. Die freie „Excess-Enthalpie“ G^{ex} , welche die Differenz zwischen der idealen und realen freien Enthalpie angibt, wird von PITZER mit Hilfe einer Virialgleichung (Potenzreihenentwicklung) beschrieben:

$$\frac{G^{\text{ex}}}{w_w RT} = f(I) + \sum_i \sum_j m_i m_j B(I) + \sum_i \sum_j \sum_k m_i m_j m_k C_{ijk} + \dots \quad (\text{II-4})$$

Die Wassermenge w_w , die Ionenstärke I sowie die Molalitäten m (Mol pro Kilogramm Wasser) der beteiligten Spezies i, j und k gehen in die Gleichung ein. Der erste Term $f(I)$ beinhaltet das Debye-Hückel Gesetz als ersten Virialkoeffizienten. Er ist nur von der Ionenstärke und nicht von individuellen Parametern der Lösung abhängig und beschreibt die weitreichenden elektrostatischen Wechselwirkungen. Der zweite Virialkoeffizient B repräsentiert die spezifischen, binären, kurzreichenden Wechselwirkungen zwischen den Komponenten i und j in der Lösung. Die entsprechenden ternären Wechselwirkungen zwischen i, j und k werden durch den dritten Virialkoeffizienten C beschrieben. Für ideal verdünnte Lösungen geht die Gleichung in das Debye-Hückel-Grenzgesetz über. Virialkoeffizienten höherer Ordnung sind integrierbar, doch zur Beschreibung hochsalinärer Lösungen sind die ersten drei ausreichend (PITZER, 1991). Die Aktivitätskoeffizienten der Kationen werden folgendermaßen berechnet:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_M = & z_M^2 F + \sum_a m_a (2B_{Ma} + ZC_{Ma}) + \sum_c m_c (2\Phi_{Mc} + \sum_a m_a \Psi_{Mca}) \\ & + \sum_{a < a'} \sum m_a m_{a'} \Psi_{aa'M} + |z_M| \left| \sum_c \sum_a m_c m_a C_{ca} \right. \end{aligned} \quad (\text{II-5})$$

sowie der Anionen mit

$$\begin{aligned} \ln \gamma_X = & z_X^2 F + \sum_c m_c (2B_{cX} + ZC_{cX}) + \sum_a m_a (2\Phi_{Xa} + \sum_c m_c \Psi_{Xac}) \\ & + \sum_{c < c'} \sum m_c m_{c'} \Psi_{cc'X} + |z_X| \left| \sum_c \sum_a m_c m_a C_{ca} \right. \end{aligned} \quad (\text{II-6})$$

Dabei ist m die Molalität des Ions mit den Indizes M, c , und c' für Kationen und X, a , und a' für Anionen. Die doppelten Summen $c < c'$ und $a < a'$ berücksichtigen alle Paare, die aus verschiedenen Kationen und Anionen aufgebaut sind. Die Funktion F beinhaltet eine veränderte Form der Debye-Hückel-Gleichung sowie die Ableitungen des zweiten Virialkoeffizienten nach der Ionenstärke:

$$F = -A^\phi \left[\frac{\sqrt{I}}{1 + b\sqrt{I}} + \frac{2}{b} \ln(1 + b\sqrt{I}) \right] + \sum_c \sum_a m_c m_a B'_{ca} \quad (II-7)$$

$$+ \sum_{c < c'} \sum_{c''} m_c m_{c'} \Phi'_{cc''} + \sum_{a < a'} \sum_{a''} m_a m_{a'} \Psi'_{aa''}$$

mit dem Debye-Hückel Parameter A^ϕ gegeben durch:

$$A^\phi = 1400684 \left(\frac{\rho_w}{DT} \right)^{3/2}$$

und mit der Dichte des Wasser ρ_w sowie der Dielektrizitätskonstante D des reinen Wassers.

Der zweite Virialkoeffizient B ergibt sich aus:

$$B_{MX} = \beta_{MX}^{(0)} + \beta_{MX}^{(1)} g(\alpha_1 \sqrt{I}) + \beta_{MX}^{(2)} g(\alpha_2 \sqrt{I}) \quad \text{und} \quad B'_{MX} = \beta_{MX}^{(1)} \frac{g'(\alpha_1 \sqrt{I})}{I} + \beta_{MX}^{(2)} \frac{g'(\alpha_2 \sqrt{I})}{I} \quad (II-8)$$

Für monovalente Ionen ist $\alpha_1=2$ und $\alpha_2=0$ (PITZER, 1973), wohingegen für 2-2 Elektrolyte und höhere Valenzen $\alpha_1=1.4$ und $\alpha_2=12.0$ sind (PITZER & SILVESTER, 1976). Die Funktionen g und g' sind gegeben durch:

$$g(x) = 2 \left[1 - (1+x)e^{-x} \right] / x^2 \quad \text{und} \quad g'(x) = -2 \left[1 - \left(1+x + \frac{1}{2}x^2 \right) e^{-x} \right] / x^2 \quad (II-9)$$

mit $x=\alpha\sqrt{I}$. Der dritte Virialkoeffizient ist prinzipiell von der Ionenstärke abhängig, doch gibt es dafür nur einen experimentellen Hinweis (PHUTELA & PITZER, 1986). Daher ist C nach PITZER (1991) unter Vernachlässigung der Ionenstärke definiert als:

$$C_{MX} = C_{MX}^\phi / (2\sqrt{|z_M z_X|}) \quad (II-10)$$

und der Koeffizient zu C_{MX} , Z , ist gegeben mit:

$$Z = \sum_i m_i |z_i|. \quad (II-11)$$

Die Parameter $\beta^{(0)}$, $\beta^{(1)}$, $\beta^{(2)}$, und C^ϕ definieren die Variablen B und C und sind mit Löslichkeitsdaten eines Salzes, also eines binäres Systems angepasst. Die Parameter Φ und Ψ der zweiten und dritten Virialkoeffizienten werden mit Hilfe von ternären Systemen aus Versuchen mit zwei Salzen bestimmt. Φ beschreibt die Kation-Kation- und Anion-Anion-Wechselwirkung, während der Parameter Ψ für Kation-Kation-Anion- und Anion-Anion-Kation-Wechselwirkungen definiert ist. Werte von Φ_{ij} sind gegeben mit:

$$\Phi_{ij} = \Theta_{ij} + {}^E\Theta_{ij}(I) \quad \text{und} \quad \Phi'_{ij} = {}^E\Theta'_{ij}(I) \quad (II-12)$$

Θ_{ij} ist der einzige einstellbare Parameter und ist für jedes Kationen und Anionen-Paar definiert.

Die Terme ${}^E\Theta_{ij}(I)$ und ${}^E\Theta'_{ij}(I)$ beinhalten die von PITZER (1973) definierten elektrostatischen

Mischungseffekte von unsymmetrischen Kation-Kation- und Anion-Anion-Paaren. Die Werte $\epsilon_{\Theta_{ij}(I)}$ und $\epsilon_{\Theta'_{ij}(I)}$ sind nur von der Ionenladung und der Ionenstärke der Lösung abhängig und werden Null, wenn i und j beim Kation- oder Anion-Paar die selbe Ladung besitzen. Die Parameter Ψ_{ijk} sind für verschiedene Kombinationen von zwei Kationen und einem Anion oder zwei Anionen und einem Kation eingeführt. Ψ wird wie Θ_{ij} von den Daten der Zweisalzlösungen (ternäres System) abgeleitet.

1.1.3. Vergleich der Pitzer-Gleichungen und der Debye-Hückel-Theorie

Ein ideales Modell für die Berechnung von Aktivitätskoeffizienten in geochemischen oder technischen Simulationsprogrammen müsste folgende Eigenschaften besitzen: Konsistenz mit den Hauptsätzen der Thermodynamik; kompakte mathematische Form; hohe Genauigkeit über einen weiten Bereich der Randbedingungen Druck, Temperatur und Ionenstärke der Lösungen; Anwendbarkeit auf das möglichst komplette System der Elemente des Periodensystems. Zur Zeit existiert kein Modell, das diese Voraussetzungen komplett erfüllt.

Die Modellvorstellungen von PITZER (1973) und DEBYE-HÜCKEL (1923) repräsentieren verschiedene Möglichkeiten der Berechnung von Ionenaktivitäten in Lösungen. Debye und Hückel beschreiben das Lösungsmittel, in den meisten Fällen Wasser, als strukturloses Dielektrikum und die Lösungsinhalte als einheitliche Kugeln mit zentrierten Ladungen. Die weitreichenden Coulomb Kräfte, die nur von der Ionenstärke der Lösung abhängen, bewirken, dass jedes Ion in der Lösung von einer dynamischen Ionensphäre umgeben ist. Pitzer hat die Debye-Hückel Theorie erweitert und ein semi-empirisches Modell entwickelt, welches die spezifischen chemischen Wechselwirkungen zwischen den Ionen der Lösung mit einbezieht. Die Wechselwirkungen können mit Hilfe von einfachen binären (ein Salz, z.B. NaCl) und tertiären Lösungen (zwei Salze, z.B. NaCl und KCl oder NaCl und NaSO₄) quantifiziert werden.

Aufgrund der hohen internen Konsistenz und Genauigkeit der Berechnungen mit den Pitzer-Gleichungen (PITZER, 1973) bieten diese den erfolgsversprechendsten Ansatz zur Berechnung der Speziesaktivitäten und Minerallöslichkeiten in hochsalinaren Lösungen (WOLERY & JACKSON, 1990; KÜHN, 1997).

Als ein typisches Beispiel ist in Abbildung II-1 die Löslichkeit von Gips in Abhängigkeit der Konzentration von NaCl bei Raumtemperatur dargestellt. Zum einen wurde die Berechnung mit Hilfe der Pitzergleichungen und zum anderen mit der Debye-Hückel-Theorie durchgeführt. Die grünen Dreiecke und braunen Punkte sind experimentelle Daten von BLOCK & WATERS (1968) und MARSHALL & SLUSHER (1966). Es ist deutlich, dass für NaCl-Konzentrationen größer als 0.5 mol/L, nur die Anwendung des Pitzer Formalismus zu exakten Ergebnissen führt.

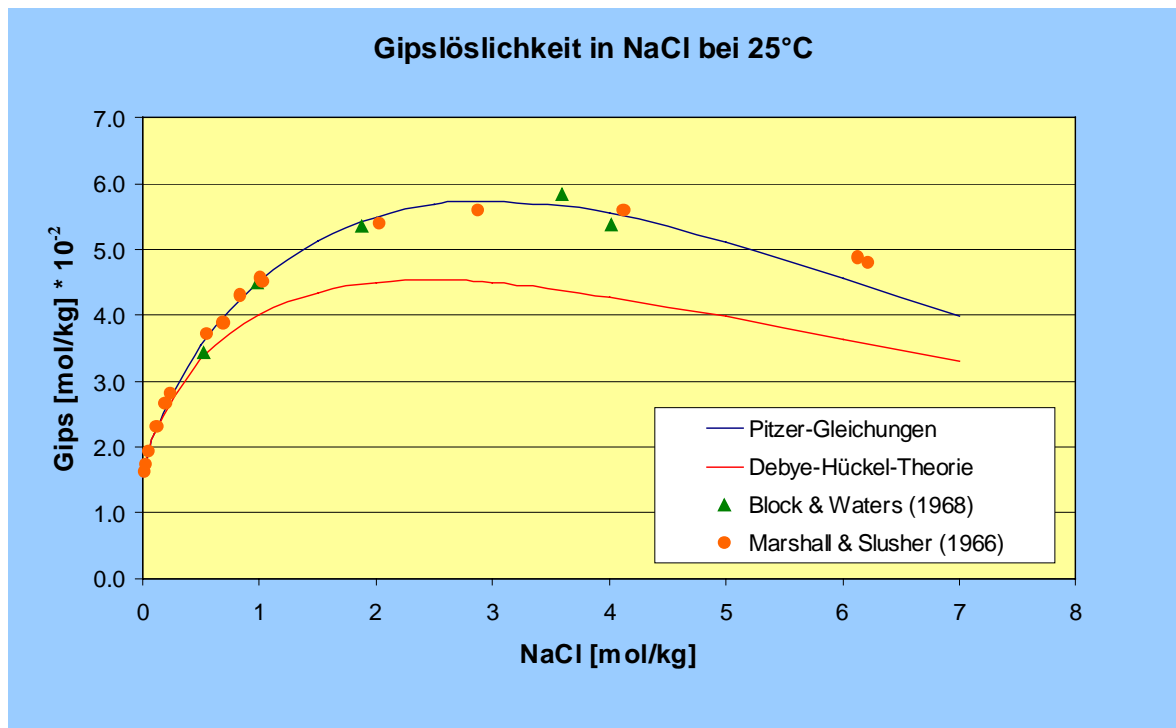


Abbildung II-1: Gipslöslichkeit in Abhängigkeit der NaCl-Konzentration bei Raumtemperatur. Experimentelle Daten im Vergleich zu Berechnungen mit den Pitzer-Gleichungen und der Debye-Hückel-Theorie.

Wegen der höheren Genauigkeit der Pitzer-Gleichungen wurde das Programm SHEMAT mit einem geochemischen Speziationsmodul ausgestattet (CHEMEQ), das auf dem Programm PHRQPITZ (PLUMMER et al., 1988) basiert. Alle anderen in Abschnitt I-2.3. aufgezählten Programme zur Berechnung geochemischer Reaktionen unterstützen nicht die Berechnung der Ionenaktivitäten mit den Pitzergleichungen oder die Quelltexte der Programme sind nicht erhältlich.

1.1.4. Chemisches Modul –CHEMEQ–

Das numerische Modell CHEMEQ ist eine Weiterentwicklung des geochemischen Simulationsprogramms PHRQPITZ (PLUMMER et al., 1988). Das PHRQPITZ Modell beruht vor allem auf den Pitzer-Gleichungen und -Interaktionsparametern, die von HARVIE & WEARE (1980) sowie WEARE et al. (1984) veröffentlicht wurden. Der Programmcode ist erhältlich mit einer partiell verifizierten Datenbasis, die für Berechnungen von hochsalinaren Lösungen bei 25°C entwickelt worden ist. Das darin enthaltene System beinhaltet die Spezies: Na-K-Ca-Mg-H-Cl-SO₄-OH-HCO₃-CO₃-CO₂-H₂O.

Für die Anwendung eines geochemischen Moduls auf geothermische Systeme und die Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichte in Thermalwässern ist es notwendig, dass für Temperaturen, die deutlich über 25°C liegen akkurate Ergebnisse erzielt werden. Für den in diesem Projekt speziellen Fall der Bearbeitung hydrogeothermaler Reservoirs ist ein

Temperaturbereich von 25 bis 150°C notwendig. Eine umfangreiche Literaturrecherche wurde durchgeführt, die für unterschiedliche Elemente in unterschiedlichen Temperaturbereichen von –60 bis 350°C Pitzer-Parameter erbrachte. Hauptsächlich sind die Daten gültig für Temperaturen von 25 bis 250°C (Tabelle II-2).

Tab. II-2: Literaturstellen mit Pitzer-Parameter für erhöhte Temperaturen. Die Tabelle beinhaltet die Autoren sowie die untersuchten Systeme und deren gültigen Temperaturbereich.

Autoren	SYSTEM
GREENBERG & MOLLER (1989)	Na-K-Ca-Cl-SO ₄ (0 to 250°C)
SPENCER et al. (1990)	Mg-Cl-SO ₄ (-60 to <25°C)
PABALAN & PITZER (1987a)	Mg-Cl-SO ₄ (>25 to 250°C)
PABALAN & PITZER (1987b)	Na-OH (25 to 250°C)
HOLMES et al. (1987)	H-Cl (to 350°C)
HOLMES & MESMER (1992)	H-HSO ₄ -SO ₄ (25 to 200°C)
HARVIE et al. (1984)	HCO ₃ -CO ₃ -SO ₄ /Na/K/Mg/Ca/H (25°C)
HE & MORSE (1993)	Na-K-Ca-Mg-Cl-SO ₄ -H ₂ CO ₃ (0-90°C)
AZAROURAL et al. (1997)	Na-K-Ca-Mg-Cl-SO ₄ -HCO ₃ -SiO ₂ -H ₂ O (<250°)
MONNIN (1999)	Na-K-Ca-Mg-Ba-Sr-Cl-SO ₄ -H ₂ O (25-200°C)

Auf Grundlage der Daten aus den genannten Literaturstellen wurde der Programmcode von PHRQPITZ und dessen Datensätze erweitert, so dass eine Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichte mit temperaturabhängigen Pitzer-Interaktions-Parametern im gewünschten Temperaturbereich möglich ist.

In der zitierten Literatur wird vor allem Gleichung (II-13) zur Berechnung der Pitzer-Parameter bei unterschiedlichen Temperaturen verwendet. Es handelt sich hierbei um eine Anpassung der isothermen Parameter mit Hilfe von Koeffizienten, die aus experimentellen Daten abgeleitet werden.

$$P(T) = a_1 + a_2 T + \frac{a_3}{T} + a_4 \ln(T) + \frac{a_5}{(T-263)} + a_6 T^2 + \frac{a_7}{(680-T)} + \frac{a_8}{(T-227)} \quad (\text{II-13})$$

Hierbei ist $P(T)$ ein Pitzer-Koeffizient und a_1 bis a_8 sind die Temperaturkoeffizienten und T die absolute Temperatur. Im Programm PHRQPITZ werden die Terme, die den kritischen Bereich des Wassers sowie den Temperaturbereich unter dem Gefrierpunkt repräsentieren, vernachlässigt, weil sie nicht zum relevanten Temperaturbereich gehören (PLUMMER et al., 1988). Die Gleichung (II-14) zeigt die resultierende Anpassung für die Temperaturabhängigkeit von $P(T)$ in Abhängigkeit der Koeffizienten c_1 bis c_5 . T_R ist die Referenztemperatur von 298.15°K. Der Koeffizient c_1 ist der Wert von $P(T)$ bei der Temperatur T_R .

$$P(T) = c_1 + c_2(T - T_R) + \frac{c_3}{(T - T_R)} + c_4 \ln\left(\frac{T}{T_R}\right) + c_5(T^2 - T_R^2) \quad (\text{II-14})$$

In Abbildung II-2 sind die Pitzer-Parameter von Ba-Cl und CO₂-Mg-SO₄ dargestellt, wie sie in der Literatur angegeben werden und die Ergebnisse, die man erhält, wenn Gleichung (II-14) angewendet wird. Dieser Vergleich zeigt, dass für den relevanten Temperaturbereich von 25 bis 150°C die Werte sehr gut übereinstimmen, obwohl in Gleichung (II-14) eine geringere Anzahl Temperaturkoeffizienten verwendet wurde. Diese Kontrolle wurde für alle Pitzer-Parameter durchgeführt.

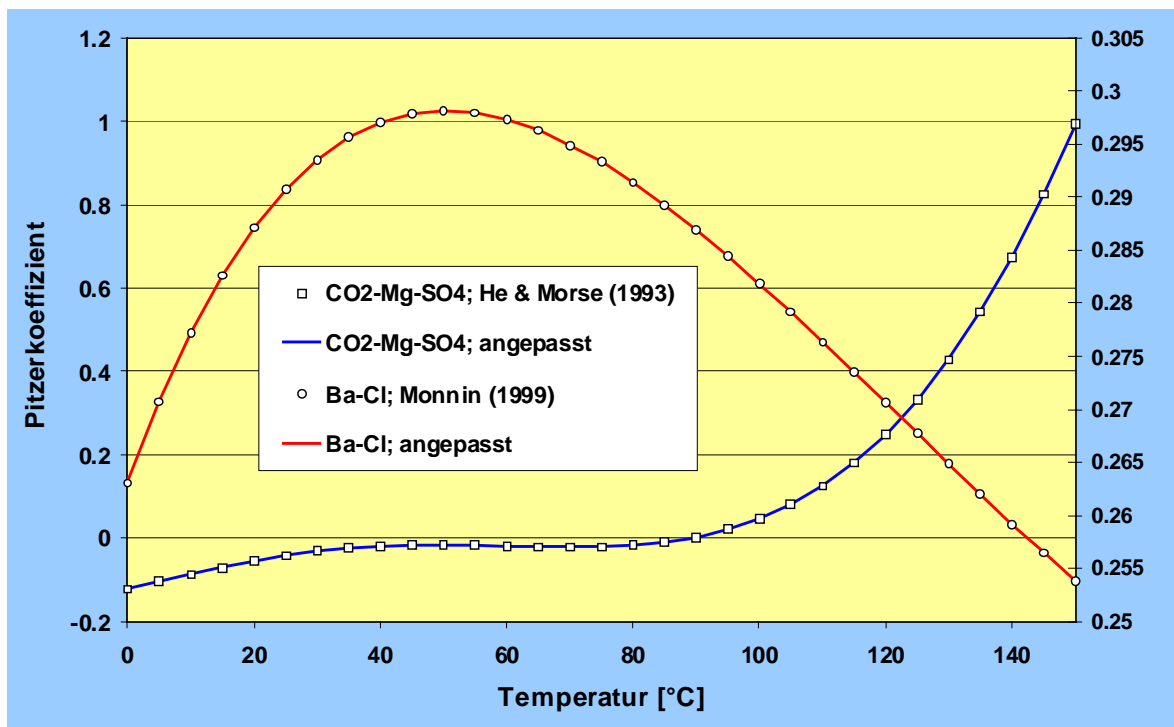


Abbildung II-2: Anpassung der Pitzer-Parameter mit fünf Temperatur-Koeffizienten (CHEMEQ, blaue und rote Kurve) verglichen mit der Anpassung basierend auf acht Koeffizienten (Literatur, weiße Punkte und Quadrate).

Der Programmcode sowie die Datensätze wurden erweitert, so dass das chemische Modul nun das System Na-K-Ca-Mg-Ba-Si-H-Cl-SO₄-OH-(HCO₃-CO₃-CO₂)-H₂O mit der notwendigen Genauigkeit beinhaltet, verifiziert für Temperaturen von 0-150°C. Das Kalk-Kohlensäure-System (in Klammern angegeben) ist nur gültig im Temperaturbereich 0 bis 90°C (KÜHN et al., im Druck; eine komplette Liste der verwendeten Pitzer-Interaktions-Parameter ist im Anhang angegeben und liegt dem Computerprogramm als allgemein zugänglicher Datensatz bei).

Aufgrund der möglicherweise unvollständigen oder ungenauen Daten aus der Literatur wurde das geochemische Modul CHEMEQ zunächst hinsichtlich der zu berechnende Systeme auf seine Zuverlässigkeit überprüft. Diese Untersuchung wurde durchgeführt, indem experimentelle Daten aus der Literatur mit den entsprechenden Simulationsergebnissen verglichen wurden.

Aufgrund der Tatsache, dass der Hauptbestandteil der Solen in den geothermischen Wässern NaCl ist, wurde zunächst das ternäre System Na-K-Cl untersucht. Die Simulationsergebnisse wurden mit den Labordaten von CORNEC & KROMBACH (1932), BLASDALE (1918), ACKOUMOV & WASSILIJEW (1932) und BERGMANN & VLASSOV (1949) verglichen.

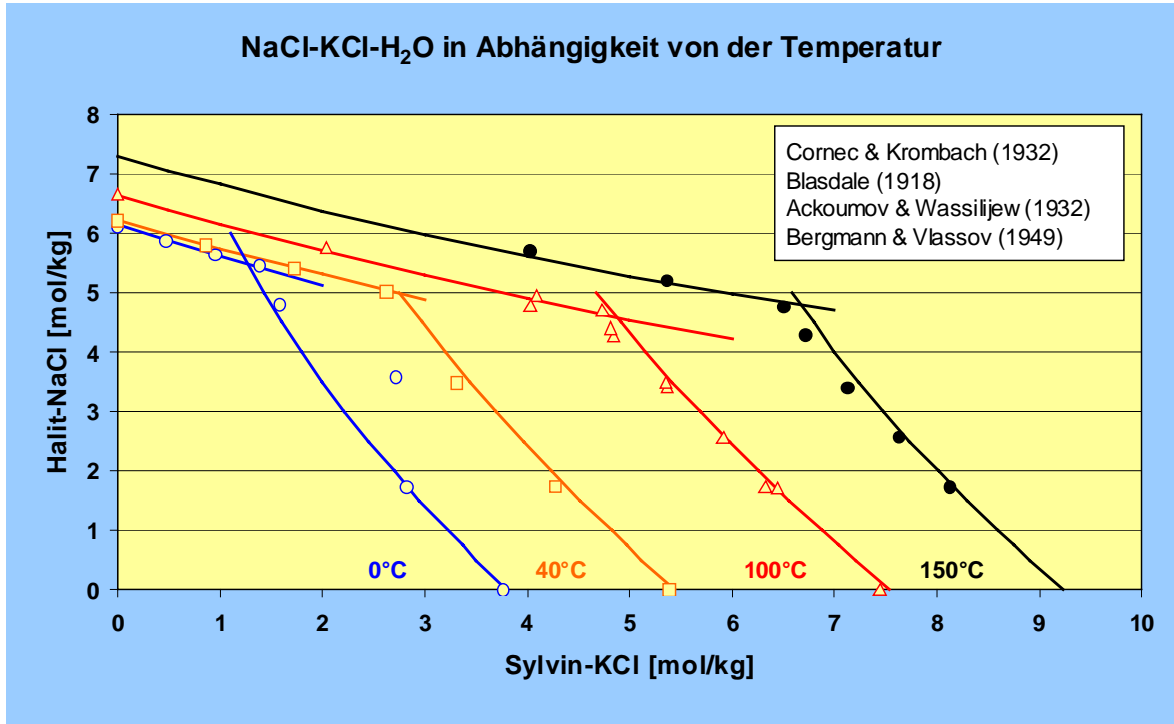


Abbildung II-3: Löslichkeit von Halit in KCl-Lösung und Sylvinit in NaCl-Lösung. Simulationsergebnisse mit CHEMEQ im Vergleich zu experimentellen Daten.

In Abbildung II-3 sind die Modellierungsergebnisse als durchgezogene Linien aufgetragen, während die experimentellen Daten als entsprechende gleichfarbige Punkte dargestellt sind. Sowohl Halit als auch Sylvinit zeigen ein progrades Löslichkeitsverhalten. Mit steigender Temperatur ist mehr Mineral löslich.

Das geochemische Modul soll nicht nur zur Berechnung der thermodynamischen Gleichgewichte in binären und ternären Lösungen genutzt werden, wie sie zur Parametrisierung genutzt werden, sondern auch zur Berechnung von Minerallöslichkeiten in komplexeren Systemen. Die Löslichkeit von Anhydrit für variierende NaCl-Konzentrationen ist in Abbildung II-4 dargestellt für das System Na-Ca-Cl-SO₄-H₂O. Die Simulationsergebnisse stimmen mit veröffentlichten Daten von BLOUNT & DICKSON (1969) und BOCK (1961) überein. Entsprechende Untersuchungen wurden ebenfalls für die Minerale Baryt und Calcit durchgeführt (Abbildungen II-5 bis II-6). Die Mineralphasen Anhydrit und Baryt sind an dieser Stelle exemplarisch dargestellt, weil sie für die Untersuchung des Verhaltens einer geothermischen Injektionsbohrung ausgewählt wurden (vgl. II-1.3.1.).

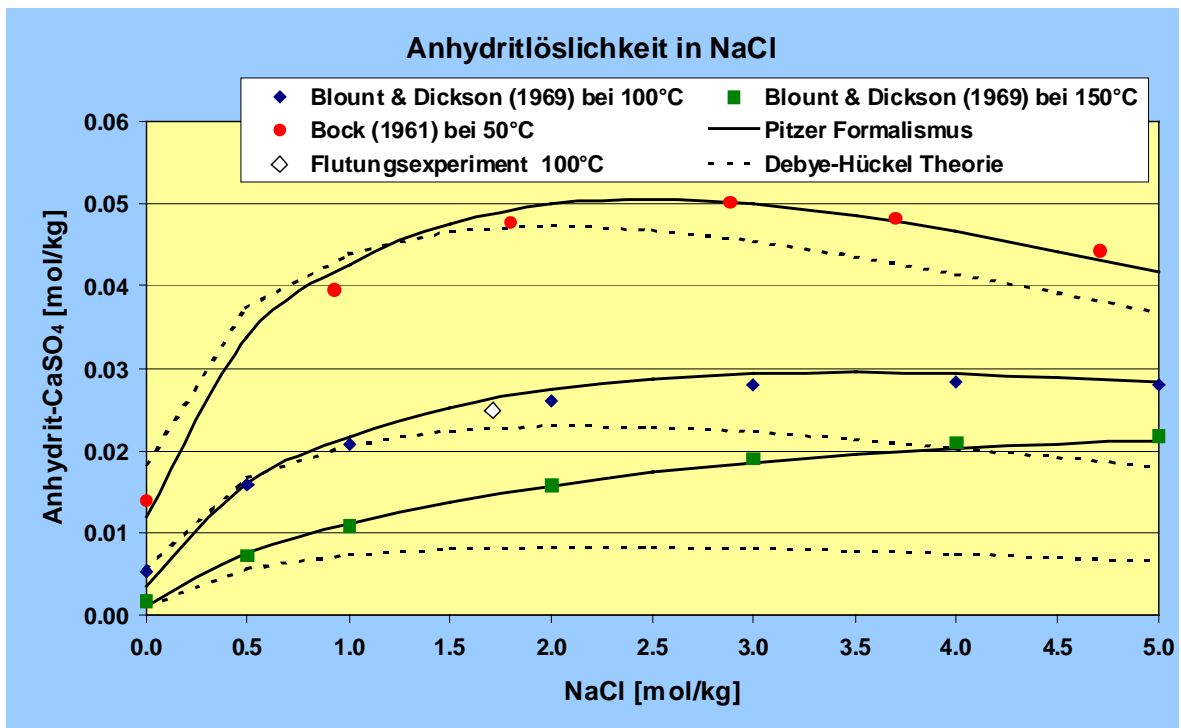


Abbildung II-4: Löslichkeit von Anhydrit in NaCl Lösung bei 50, 100 und 150°C.

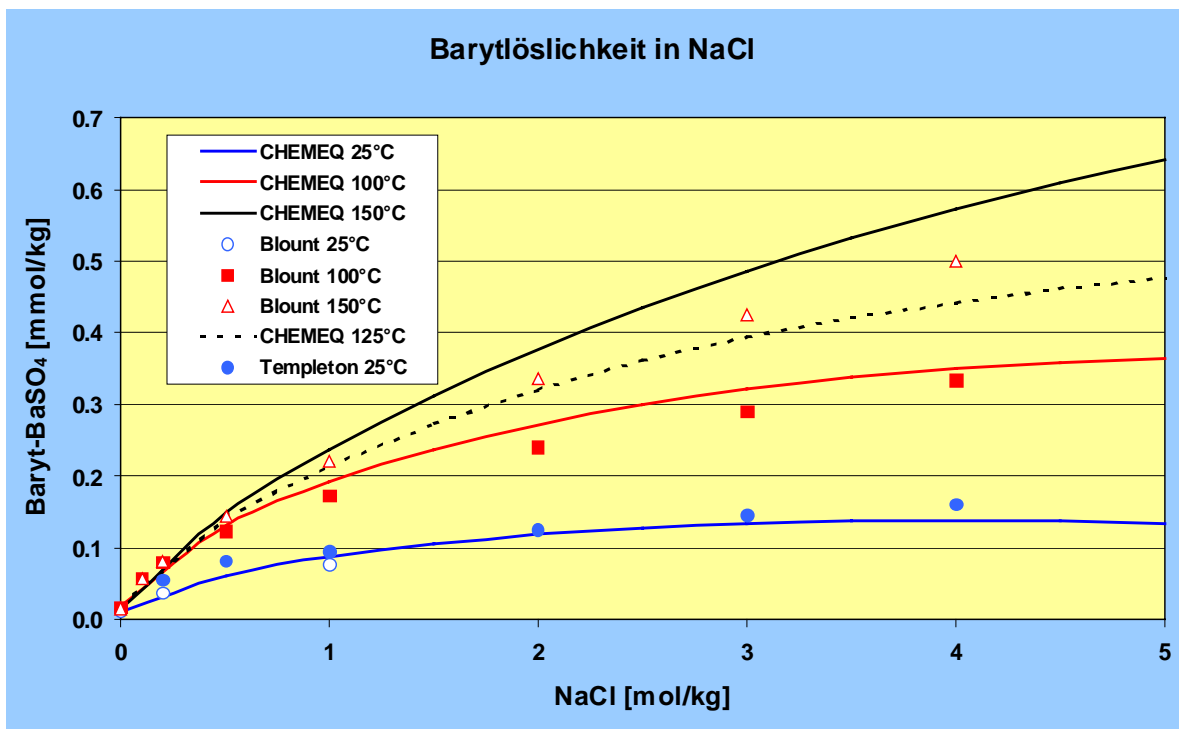


Abbildung II-5: Löslichkeit von Baryt in NaCl Lösung bei 25, 100 und 150°C.

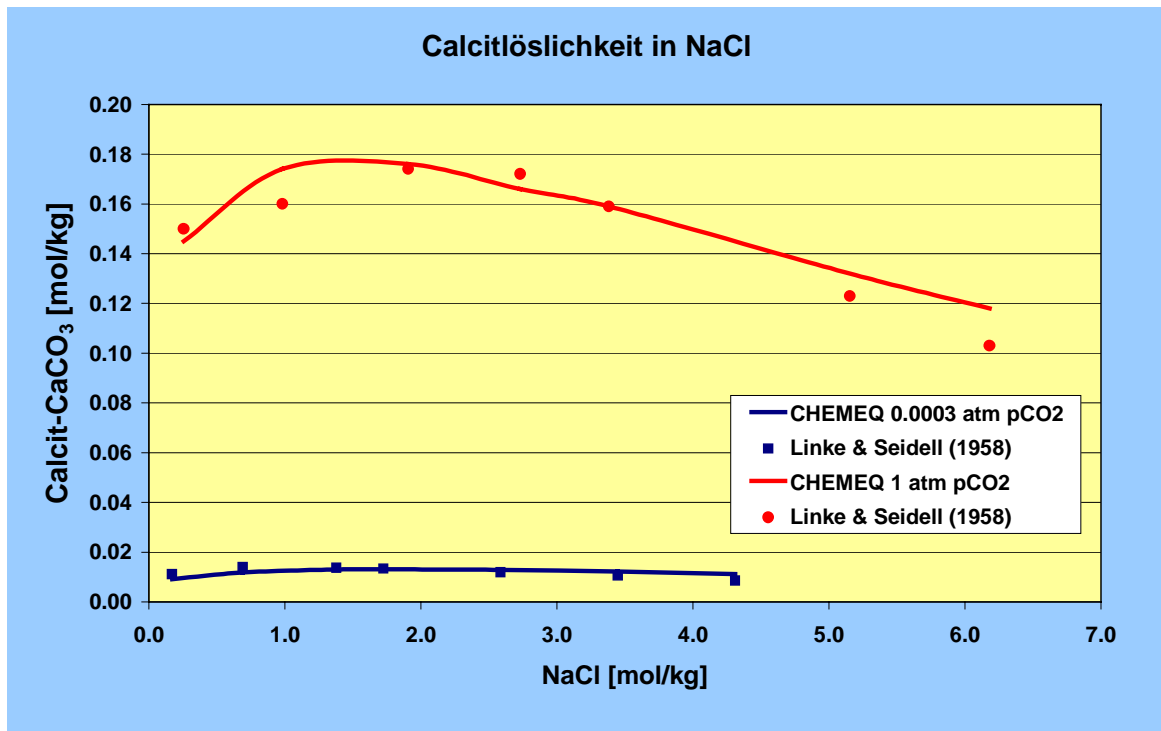


Abbildung II-6: Löslichkeit von Calcit in NaCl Lösung bei Kohlendioxid Partialdrücken von 0.0003 und 1 atm.

Aufgrund der oben aufgeführten Systemparameter muss neben dem Einfluss der Temperatur auf die Löslichkeit von Mineralen auch die Abhängigkeit vom Druck untersucht werden. Die Löslichkeit von Mineralen nimmt grundsätzlich mit steigendem Druck zu (MONNIN & RAMBOZ, 1996) und daher muss bei veränderten Druckbedingungen in der Lösung mit einer Veränderung der thermodynamischen Gleichgewichte gerechnet werden (AGGARWAL et al., 1990). Während der geothermischen Wärmegewinnung durchläuft das geförderte Wasser zunächst eine Druckreduzierung vom Formationsdruck bis auf den Anlagendruck Obertage, der zwischen 1-10 bar liegt. Durch diese Druckreduzierung kann es im Wasser zu Mineralübersättigungen mit daraufhin folgenden Fällungsreaktionen kommen. Bei der Reinjektion erhöht sich der Druck wieder bis auf Formationsdruck, wodurch das Fällungsrisiko wieder reduziert wird.

In der Literatur sind keine druckabhängigen Pitzer-Koeffizienten verfügbar und Daten zur Minerallöslichkeit im Druckbereich bis 250 bar sind nur vereinzelt zu finden. Aufgrund der Bedeutung für die geothermische Energiegewinnung herrscht hier Forschungsbedarf. MONNIN (1990) quantifizierte den Einfluss des Druckes auf die Ionenaktivitäten in Lösung im Bereich 1 – 300 bar auf 4 bis 14 % und schließt daraus, dass es für diese Bedingungen ausreichend ist, druckabhängige Löslichkeitskonstanten für die geochemischen Modellierungen zu verwenden, soweit entsprechenden Datensätze vorliegen. Aus Abbildung II-7 wird erkennbar, dass der Druck eine erhebliche Veränderung der Löslichkeit zwischen 1 und 250 bar für Anhydrit bewirkt.

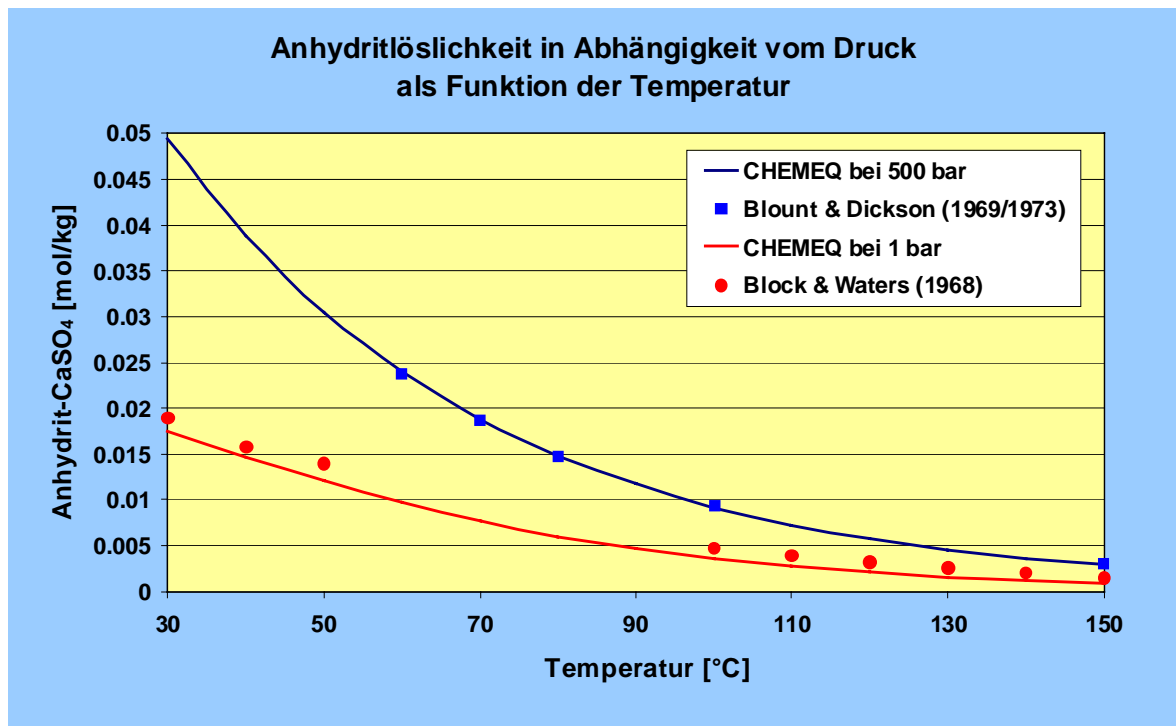


Abbildung II-7: Löslichkeit von Anhydrit in Abhängigkeit der Temperatur bei Normaldruck und 500 bar.

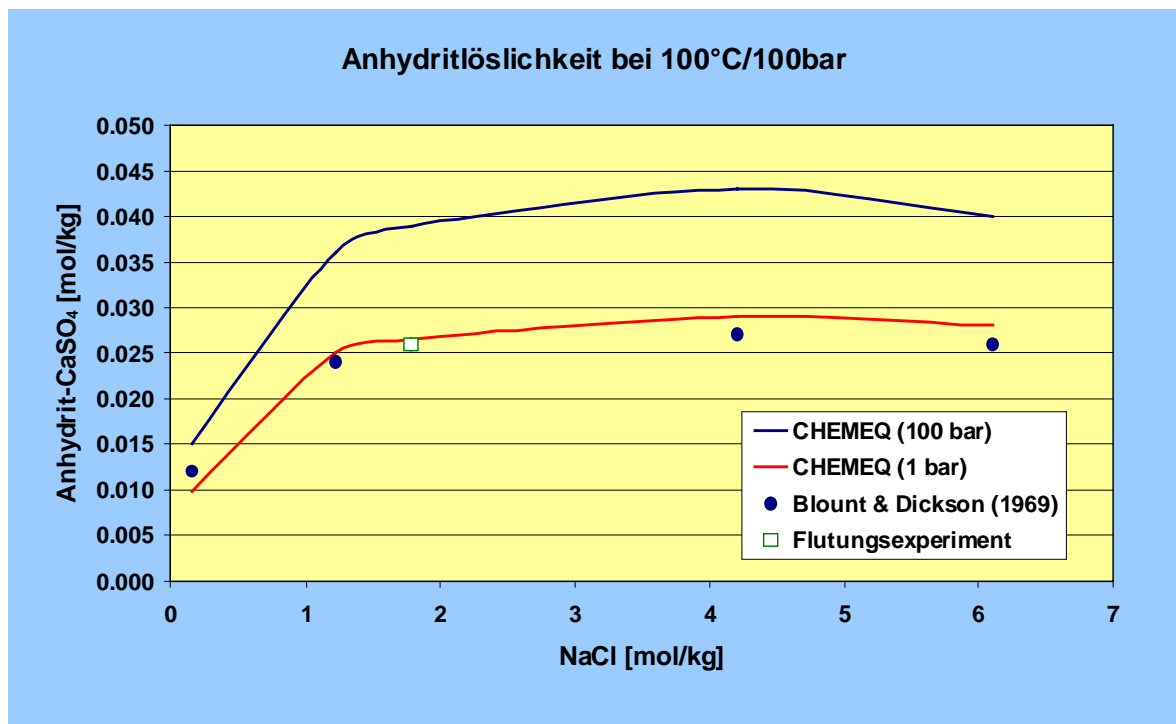


Abbildung II-8: Löslichkeit von Anhydrit mit angepassten Gleichgewichtskonstanten für Normaldruck und 100 bar im Vergleich zu experimentellen Daten.

Aus verfügbaren Anhydrit Löslichkeitsdaten für Drücke von 500 bar wurde ein druckabhängiger Datensatz abgeleitet und für vergleichende Berechnungen verwendet. In Abbildung II-8 sind die

Ergebnisse im Vergleich zu experimentellen Daten von BLOUNT & DICKSON (1969, 1973) sowie zu dem im Rahmen dieses Verbundvorhabens durchgeführten Durchströmungsexperimentes (Technische Universität Clausthal-Zellerfeld) dargestellt. Hieraus wird deutlich, dass für einen Druck von 100 bar für die Löslichkeit von Anhydrit bessere Ergebnisse mit dem Datensatz für Normaldruck erzielt werden. Dies hat zu der Entscheidung geführt, für die weiteren Untersuchungen die Druckabhängigkeit zu vernachlässigen, solange keine detaillierteren experimentellen Daten vorliegen.

1.2. Entwicklung der grafischen Benutzeroberfläche Processing SHEMAT

Zweites Projektziel war die Erstellung einer benutzerfreundlichen WINDOWS-Oberfläche. Diese Oberfläche ermöglicht eine komfortable Handhabung des Simulationsmodells, dient als Eingabehilfe beim Modellaufbau und unterstützt die Visualisierung der Simulationsergebnisse.

Die Entwicklung der grafisch gesteuerten Benutzerschnittstelle wurde durchgeführt auf Grundlage des Quellcodes des Programms Processing MODFLOW von CHIANG & KINZELBACH (1991). Das Programm wurde u.a. erweitert, um die notwendigen Eingabeparameter für den Wärme- und Stofftransport sowie für die chemischen Reaktionen zu erfassen (Abbildung II-9).

Das Hauptmenü ist unterteilt in die Punkte "File" (Dateibearbeitung), "Grid" (Definition des Modellgebietes), "Type" (Simulation und Kopplungen bestimmen), "Time" (Bearbeitung der Zeitparameter), "Flow, Heat, Transport" (Zuordnung der Reservoireigenschaften), "Reaction" (Reaktionsparameter festlegen), "Models" (Start der Simulationen), "Tools und Help" (zusätzliche Werkzeuge). Der "Grid-Editor" ermöglicht den Modellaufbau vor dem Hintergrund georeferenzierter Karten. Im weiteren wird auf einige Punkte detaillierter eingegangen, wobei auf eine ausführliche Darstellung der grafischen Benutzeroberfläche im Processing SHEMAT Benutzerhandbuch hingewiesen sein soll (PS.pdf auf beiliegender CD).

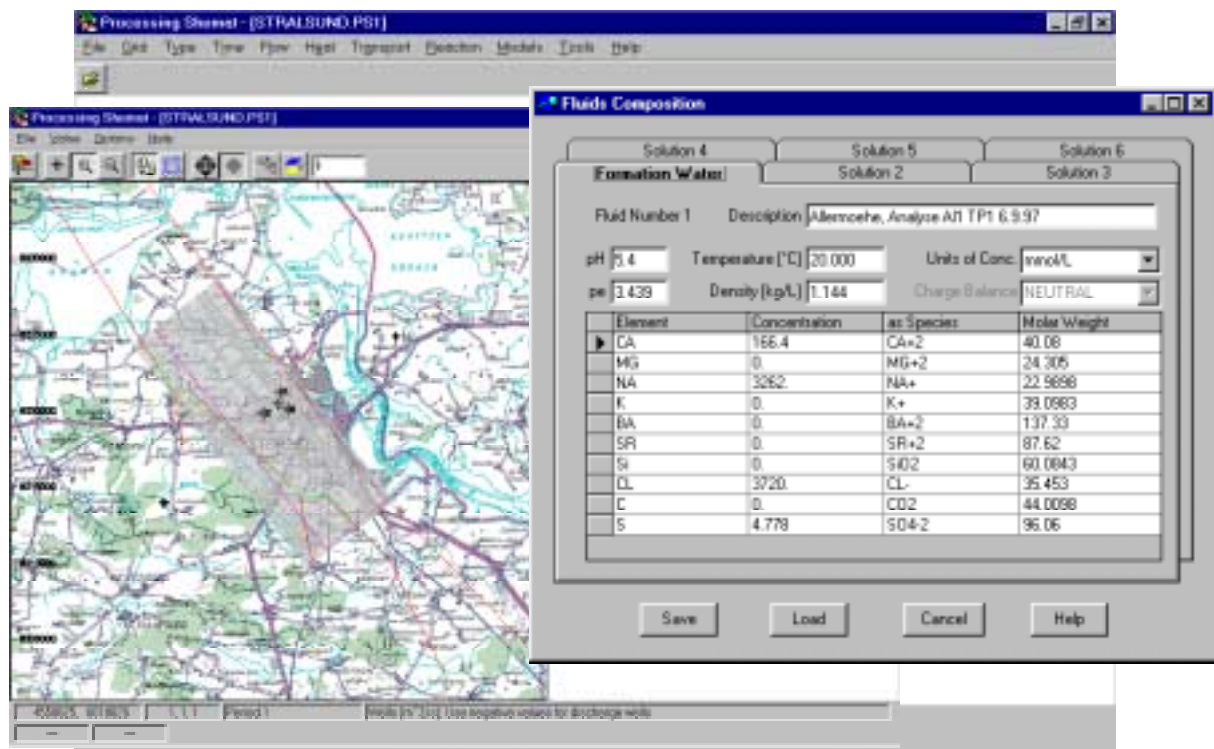


Abbildung II-9: Screen-shots der grafischen Benutzeroberfläche "Processing SHEMAT". Im Hintergrund ist das Hauptmenü mit den Rubriken "File, Grid, Type, Time, Flow, Heat, Transport, Reaction, Models, Tools und Help" zu erkennen. Linker Hand ist der Grid Editor zu sehen mit der Funktionalität georeferenzierte Karten als Grundlage für den Modellaufbau zu verwenden. Rechter Hand ist ein Beispiel für die Definition der chemischen Zusammensetzung einer Lösung gezeigt.

1.2.1. Definition des Modellgebietes und der Randbedingungen

Im Hauptmenu „Grid“ definiert der Benutzer zunächst das Modellgebiet. Dies geschieht, indem er im Menu „Grid|Mesh Size“ zunächst die Anzahl und Größe der Zellen für das Finite-Differenzen Netz angibt sowie die Anzahl an Schichten (Layer) des Modells. Die Schichten können horizontal oder vertikal zu einem dreidimensionalen Netz verknüpft werden. Bei der Verwendung zylindrischer Koordination (Cylindrical) existiert nur eine vertikale Modellebene. Im Menu „Grid|Layer Type“ wird die Schichtdicke festgelegt (Abbildung II-10).

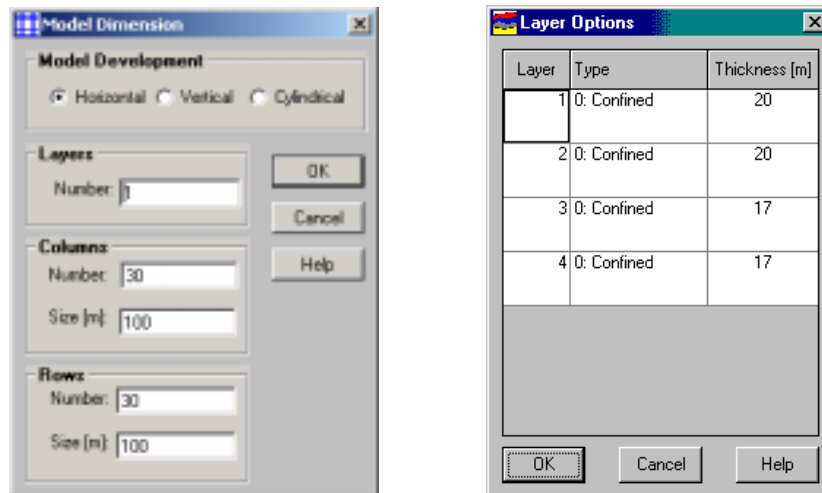


Abbildung II-10: Menu „Grid|Mesh Size“ zur Definition der Modelldimensionen sowie das Menu „Grid|Layer Type“ zur Beschreibung der Modellschichten.

Die Philosophie des Modellaufbaus in „Processing SHEMAT“ beruht auf der Definition von „Property Zones“ im Menüpunkt „Grid|Property Zones“. Hier wird über den „Grid-Editor“ (Abbildung II-11) die räumliche Verteilung von Zonen mit unterschiedlichen, aber innerhalb einer Gruppe einheitlichen Eigenschaften festgelegt. Dies ist vor dem Hintergrund zu sehen, dass eine zu untersuchende Lokation aus verschiedenen geologischen Strukturen aufgebaut ist, mit jeweils von einander abweichender Gesteinsparameter. In den im folgenden vom Benutzer abzuarbeitenden Hauptpunkten des Menus (Flow, Heat, Transport, Reaction) werden dann einer jeden definierten „Property Zone“ die zugehörigen Eigenschaften für Strömung, Wärmeausbreitung, Transport und Reaktion zugeordnet.

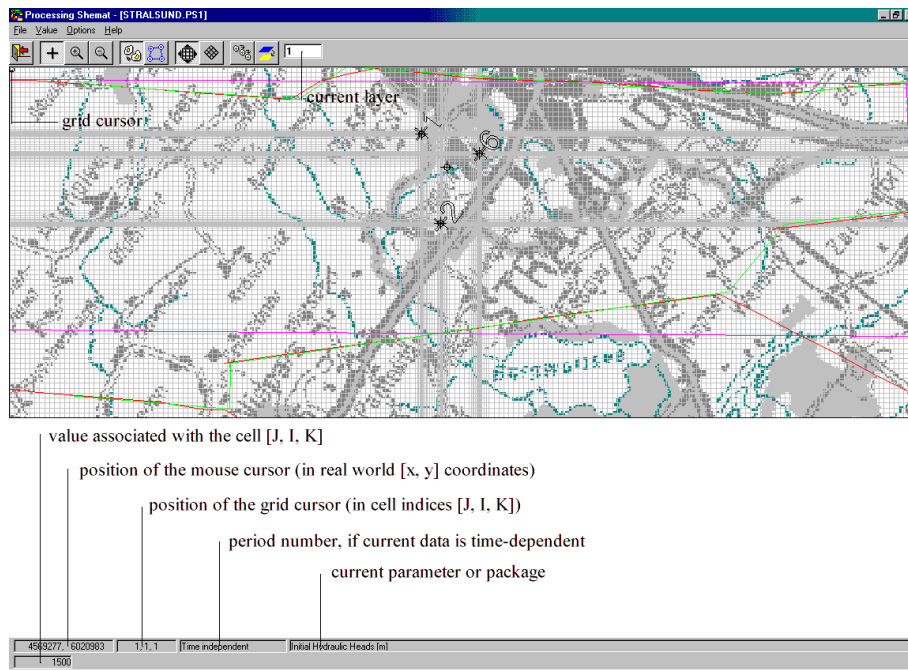


Abbildung II-11: „Grid-Editor“ zur Definition der räumlichen Modellparameter.

Der Anwender hat die Wahl, welche Art der Simulation er durchführen möchte. Zur Verfügung stehen Strömung, Wärmetransport, Stofftransport und chemische Reaktion, die in unterschiedlichen Kombinationen zur Anwendung kommen können. Strömung, Wärmetransport und Reaktion können unabhängig voneinander berechnet werden, wobei die Simulation des Stofftransports zumindest die Strömung immer voraussetzt. Diese Eingaben werden im Menü „Type|Simulation“ gemacht (Abbildung II-12, links).

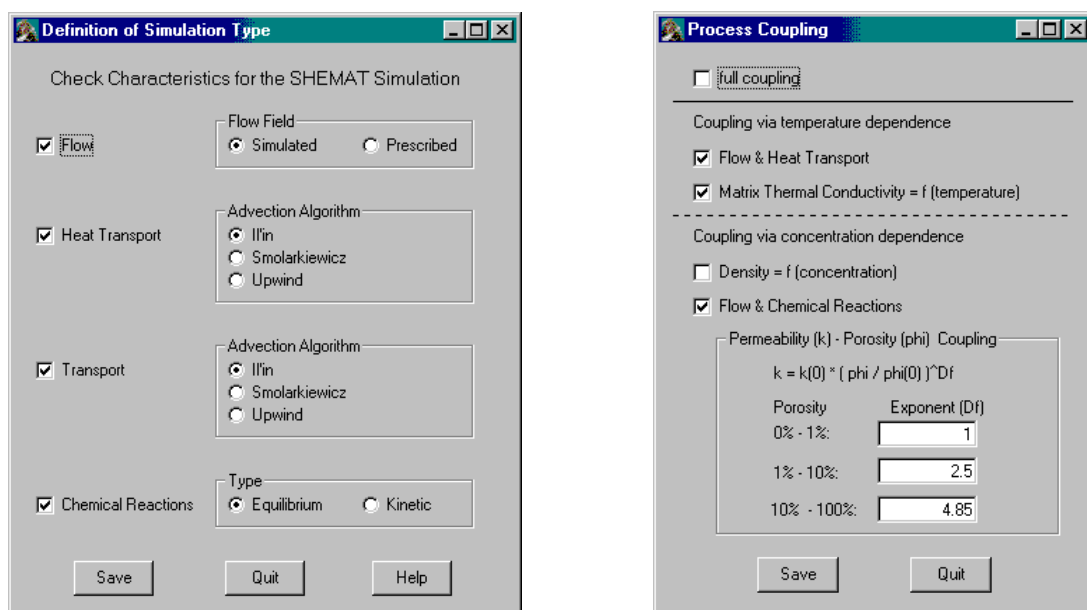


Abbildung II-12: Menü „Type|Simulation“ und „Type|Coupling“ zur Definition der Simulationsart sowie der Kopplung der einzelnen Prozesse.

Im Menu „Type|Coupling“ muss der Benutzer entscheiden, inwieweit die zu berechnenden Prozesse mit einander gekoppelt simuliert werden sollen (Abbildung II-12, rechts). Einzelne Prozesse sind koppelbar, aber auch eine vollständige Kopplung kann eingestellt werden. Folgende Kopplungen bzw. Abhängigkeiten der Prozesse untereinander sind immer gegeben oder können in SHEMAT aktiviert werden:

- Temperaturabhängigkeit der Wassereigenschaften (Viskosität, Dichte, Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit, Kompressibilität – immer aktiv);
- Konzentrationsabhängigkeit der Dichte des Wassers;
- Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit der Matrix;
- Temperaturabhängigkeit und Einfluss der Ionenstärke auf die chemischen Reaktionen (immer aktiv);
- Porositätsänderungen durch chemische Reaktionen (Fällung und Lösung);
- Permeabilitätsveränderungen durch Porositätsveränderungen.

Der Benutzer von SHEMAT hat die Möglichkeit stationäre, Zeit unabhängige Simulationen oder mit bis zu 100 Perioden instationäre Rechnungen durchzuführen (Abbildung II-13).

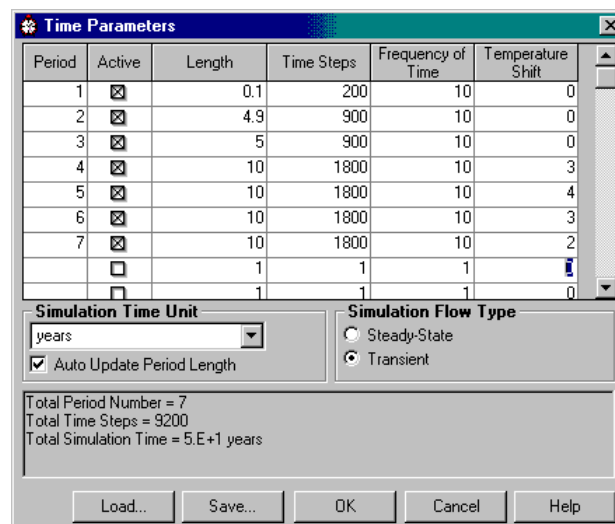


Abbildung II-13: Menu „Time|Time Parameters“ zur Definition der Simulationsperioden.

1.2.2. Definition der räumlichen Modelleingangsparameter

Die Definition des räumlichen Ausgangszustandes für die Simulationsrechnungen wird für die einzelnen vom Benutzer ausgewählten und zu berechnenden Prozesse Strömung, Wärmeausbreitung, Stofftransport und/oder chemische Reaktionen in den Hauptmenupunkten „Flow“, „Heat“, „Transport“ und „Reaction“ durchgeführt. Dabei werden zum einen den definierten geologischen Strukturen („Property Zones“) charakteristische Stoffeigenschaften zugeordnet und zum anderen Werte für Ausgangsbedingungen festgelegt, die unabhängig von den vorhandenen geologischen Strukturen sind.

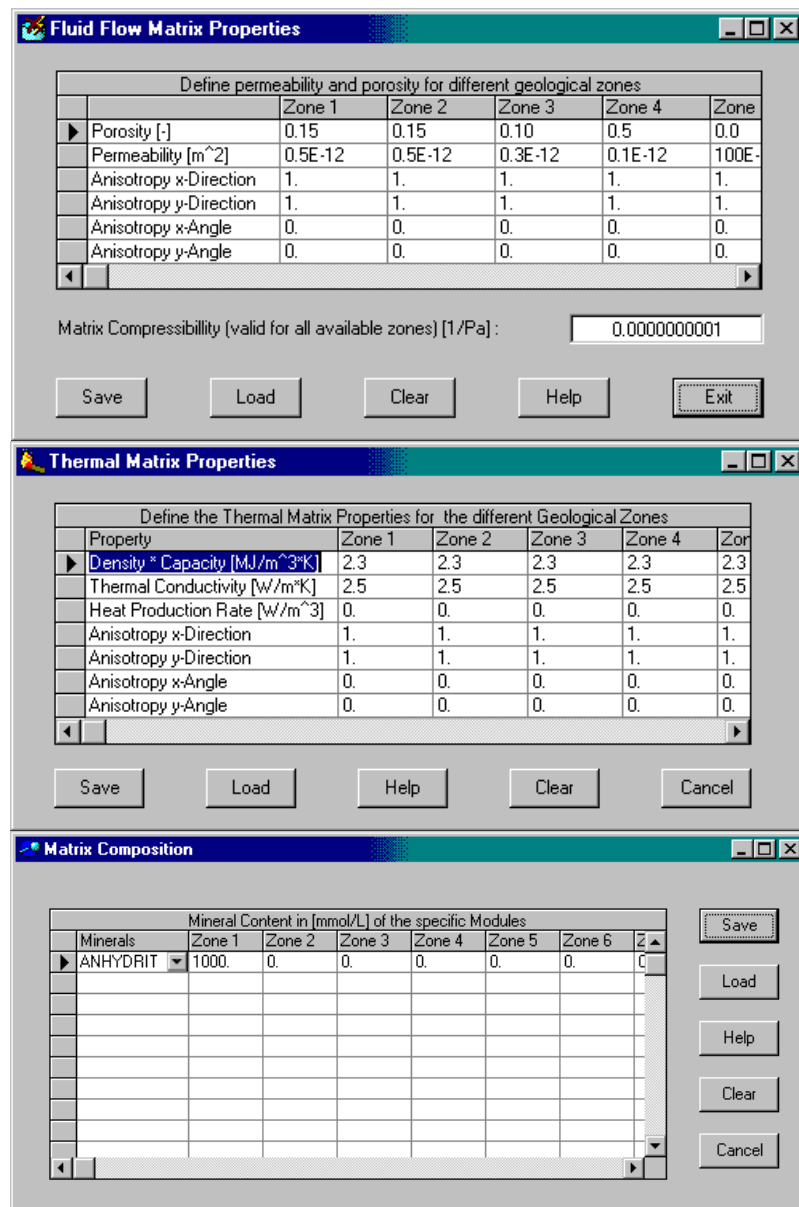


Abbildung II-14: Die Definition der charakteristischen Stoffeigenschaften der „Property Zones“ für die Strömungs-, Wärme-, und Stoffeigenschaften der geologischen Strukturen im Simulationsgebiet.

Die Definition der charakteristischen Stoffeigenschaften der „Property Zones“ bzw. geologischen Strukturen, die für das Simulationsgebiet festgelegt wurden, beinhaltet die nachfolgend aufgeführten Punkte (Abbildung II-14):

- ◆ Strömung („Flow“)
 - Porosität
 - Permeabilität
 - Anisotropie der Permeabilität
- ◆ Wärmeausbreitung („Heat“)
 - Wärmeleitfähigkeit und Dichte

- Wärmekapazität
- Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit
- ◆ Chemische Reaktionen („Reaction“)
 - Mineralgehalt

Zusätzlich zu den Eigenschaften des Festgesteins, die über die geologischen Strukturen zugeordnet werden, gibt es einige Parameter, die unabhängig davon für das Simulationsgebiet definiert werden müssen. Dieses geschieht im „Grid-Editor“ (Abbildung II-11), wobei jeder einzelnen Zelle des Modells ein individueller Wert zugeordnet werden kann. Bei diesen handelt es sich um die hydraulischen Höhen, die Ausgangstemperatur und die Verteilung verschiedener Wässer einerseits sowie die Randbedingungen der Prozesse Strömung, Wärmeausbreitung und Stofftransport andererseits (s. SHEMAT Dokumentation für Details). Basierend auf dem Datensatz des chemischen Moduls lassen sich die Zusammensetzungen chemischer Lösungen (Abbildung II-9, „Fluids Composition“) und deren Verteilung im Modellgebiet definieren.

1.2.3. Simulationsläufe

Nach dem vollständigen Aufbau des Modells lässt der Benutzer von der grafischen Benutzeroberfläche „Processing SHEMAT“ die Eingabedatei für das Simulationsprogramm „SHEMAT“ schreiben. Diese Anweisung erfolgt aus dem Menu „Models|Create SHEMAT Inputfiles“. Während des Erstellungsprozesses wird vom Programm die Vollständigkeit der angegebenen Daten kontrolliert. Ist dies fehlerfrei geschehen, kann der Simulationslauf direkt oder aus dem Menu „Models|Run SHEMAT“ gestartet werden.

Der Programmaufbau von „SHEMAT“ bietet weiterhin die Funktionalität, dass die Ergebnisdatei einer Simulation wiederum als Eingabedatei für eine diese Simulation fortsetzende Berechnung verwendet werden kann. Über den Menüpunkt „Models|Serialized Run“ wird der Fortsetzungslauf vollautomatisch gestartet, nachdem Sicherungen der Ergebnisdateien von der Benutzeroberfläche angelegt wurden.

Zur Kontrolle und detaillierten Untersuchung der chemischen Eigenschaften der Wässer, die für das Simulationsgebiet im Menu „Reaction|Fluids Composition“ definiert wurden, kann das im Programm „SHEMAT“ integrierte chemische Rechenmodul „CHEMEQ“ separat gestartet werden. Damit kann z.B. das Löslichkeitsverhalten von Mineralphasen in den Wässern im voraus untersucht werden.

1.2.4. Visualisierungs- und Zusatzwerkzeuge und Hilfefunktion

Im Hauptmenu „Tools“ stehen Funktionalitäten zur direkten Darstellung der Simulationsergebnisse zur Verfügung. Es sind aber auch Werkzeuge zur Umwandlung der erstellten

Ergebnisfiles in Eingabedateien zur Verwendung in kommerziellen Grafikprogrammen wie „Surfer“ oder „TecPlot“ vorhanden.

Aus den von „SHEMAT“ erstellten Ergebnisdateien können zweidimensionale Schnitte der räumlichen Verteilung der Systemparameter erstellt werden. Die Auswahl des darzustellenden Parameters sowie die Lage des gewünschten Schnittes als auch Anzeigemodalitäten werden im Menu „Tools|Result Viewer|Spatial Distribution“ festgelegt (Abbildung II-15).

Die zeitliche Veränderung einzelner Systemparameter kann anhand von vor der Simulation zu definierenden Beobachtungspunkten über den Menüpunkt „Tools|Result Viewer|Temporal Development“ angezeigt werden (Abbildung II-16).

Für den Fall, dass eine dreidimensionale Simulation oder eine vertikale zweidimensionale durchgeführt worden ist, können sogenannte „Logs“ für das Systemgebiet erstellt werden. Beispiel wäre die Temperaturverteilung von der Oberfläche des Modells bis zum tiefsten Punkt, vergleichbar zu einer Temperaturverteilung, die im Gelände in einer Bohrung gemessen werden kann (Abbildung II-17).

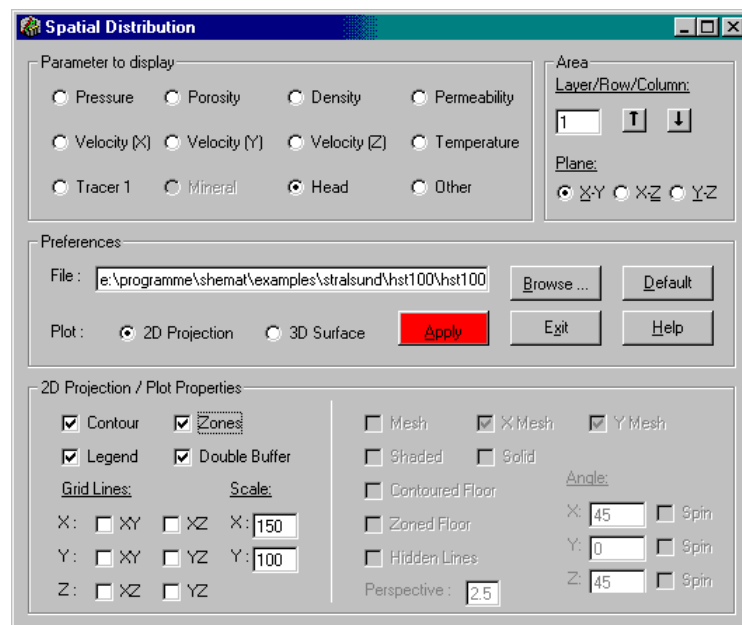


Abbildung II-15: Menu „Tools|Result Viewer|Spatial Distribution“ .

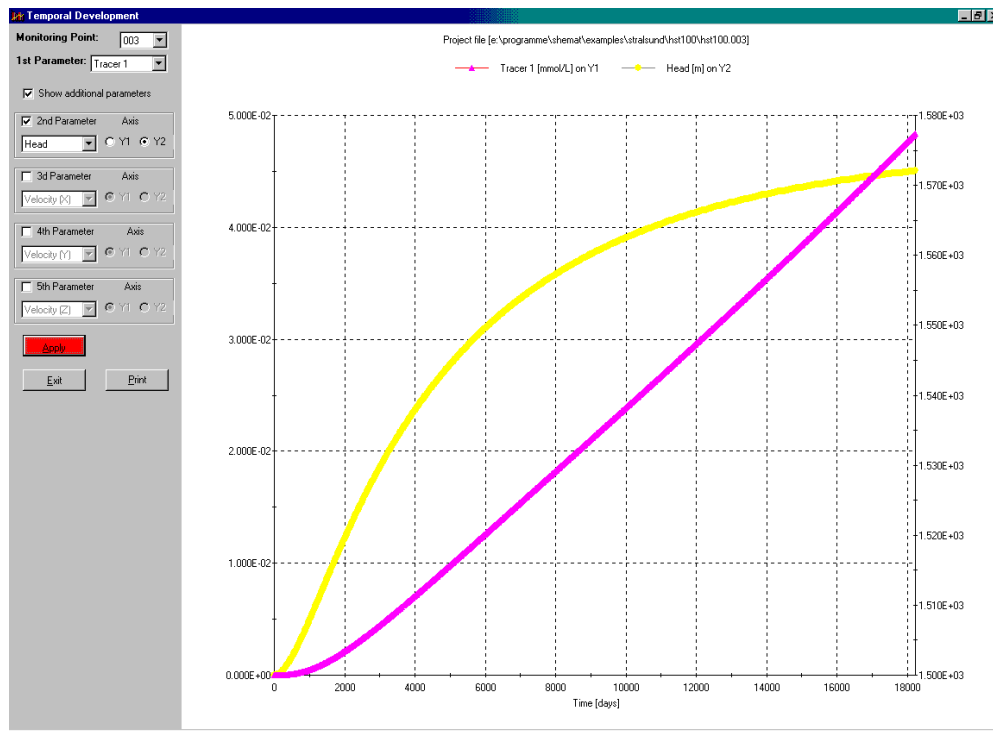


Abbildung II-16: Menu „Tools|Result Viewer|Temporal Development“ zur Darstellung von Zeitverläufen spezieller Parameter an Beobachtungspunkten des Systems.

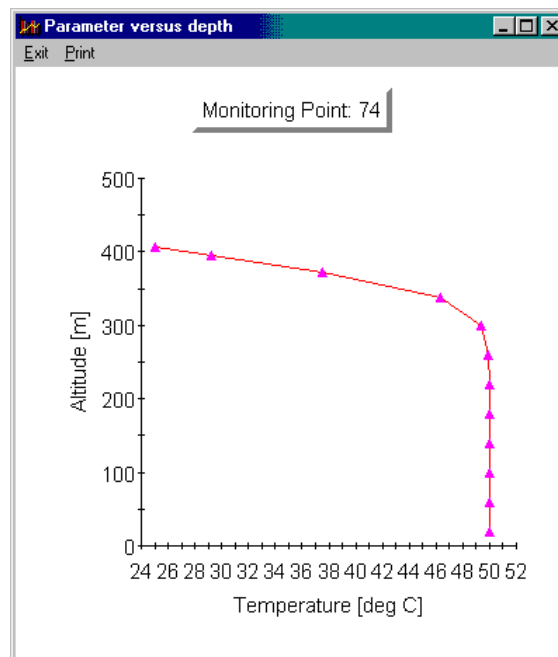


Abbildung II-17: Menu „Tools|Result Viewer|Monitoring Logs“ zur Darstellung von senkrechten räumlichen Verteilungen spezieller Parameter. Vergleichbar zum „Temperatur-Log“ eines Bohrlochs.

Die Einarbeitung in die Bedienung der grafischen Benutzeroberfläche ist in einem „Tutorial“ ausführlich anhand einer Schritt für Schritt Anweisung beschrieben. Dort wird am Beispiel des potentiellen Geothermiestandortes Stralsund im Detail gezeigt, wie ein Simulationsmodell in

„Processing SHEMAT“ aufgebaut wird und wie nach erfolgter Berechnung mit SHEMAT die Ergebnisse mit Hilfe der Visualisierungswerkzeuge bearbeitet werden können.

Eine umfangreiche Hilfefunktion ist in die grafische Benutzeroberfläche integriert (Abbildung II-18) und liefert zu jeder Zeit an jeder Stelle des Programms Informationen zur Bedienung. Das Benutzerhandbuch und die Hilfefunktion sind inhaltlich identisch.

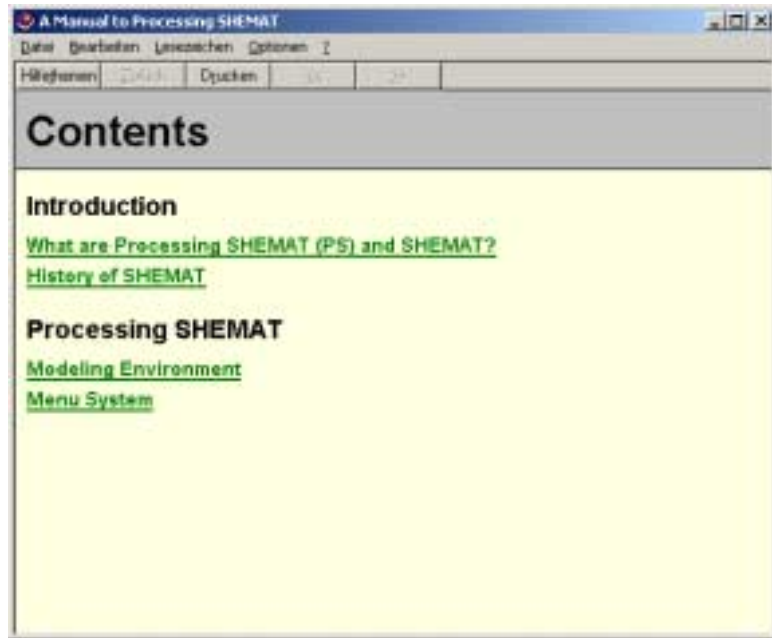


Abbildung II-18: Hilfefunktion der Benutzeroberfläche, inhaltlich identisch mit dem Benutzerhandbuch von „Processing SHEMAT“.

1.3. Anwendungsrechnungen für typische Modellaquifere

Drittes Projektziel war es, mit dem Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT Anwendungsrechnungen für Modellaquifere durchzuführen, um das hydraulische, thermische und mechanische Verhalten geothermisch genutzter Aquifere zu untersuchen. Zunächst wurden Prozesse im Nahbereich einer Injektionsbohrung simuliert. Dieses System wurde dann erweitert auf den potentiellen Geothermiestandort Stralsund, um die dortigen Möglichkeiten der geothermischen Wärmeabgewinnung abzuschätzen und das Langzeitverhalten des bereits erbohrten Reservoirs zu untersuchen. Zur Evaluierung des Programms SHEMAT wurde eine umfangreiche dreidimensionale Simulation des geologisch gut untersuchten geothermischen Reservoirs von Waiwera (Neuseeland) durchgeführt.

1.3.1. Fallstudie einer Injektionsbohrung

Aufgrund der geologischen Voraussetzungen in Deutschland ist die Nutzung hydrogeothermaler Wärme vor allem an tiefe Aquifere und die Installation eines Dublettensystems aus Produktions- und Injektionsbohrung gebunden (vgl. II-1). Grundvoraussetzung der Reservoireigenschaften für die erfolgreiche Energiegewinnung sind möglichst hohe Temperaturen des Formationswassers und ausreichende Förderraten. Damit sind die Tiefe und die Permeabilität des Reservoirs die Schlüsselparameter für die Energiegewinnung. Aufgrund der Tatsache, dass die Injektivität eines Reservoirs sehr sensibel auf Veränderungen im Nahbereich der Injektionsbohrung reagiert (± 10 m, Boisdet et al., 1989) wurde diese konzeptionelle Untersuchung durchgeführt. Ziel dieser numerischen Studie war es, Veränderungen von Reservoireigenschaften zu untersuchen, die vor allem durch chemische Prozesse ausgelöst worden sind.

Die Wässer in den Reservoiren des Norddeutschen Beckens sind zum größten Teil hochsalinär und bezüglich der Mineralgleichgewichte zu den Carbonaten und Sulfaten der Erdalkalien in Sättigung oder nahe dem thermodynamischen Lösungsgleichgewicht. Das Mineral Anhydrit (CaSO_4) wurde in einigen Reservoiren Norddeutschlands angetroffen, die hinsichtlich ihrer Tauglichkeit zur geothermalen Energiegewinnung untersucht wurden. Z.T. wurden Zementationen des Reservoirs durch Anhydrit gefunden, welche zu einer substantiellen Verringerung der Permeabilität des Gesteins geführt haben. Bei geochemischen Simulationen von Baryt (BaSO_4) hat sich ein potentielles Fällungsrisiko für den Reinjektionsprozess gezeigt (KÜHN, 1997). Aufgrund dieser Erkenntnisse und der Tatsache, dass Anhydrit bzw. Baryt Minerale repräsentieren, die retrograd bzw. progrades Löslichkeitsverhalten zeigen (retrograd: sinkende Löslichkeit mit steigender Temperatur; prograd: steigende Löslichkeit mit steigender Temperatur), wurden diese Minerale für die folgenden Untersuchungen ausgewählt.

Durch die Reinjektion des abgekühlten Wassers kommt es zur Störung des Gleichgewichts zwischen dem Reservoirgestein und dem Formationswasser. Es kann temperaturinduziert zur Lösung und Fällung von Mineralen kommen, welche die Permeabilität des Gesteins verändern. Um die Permeabilitätsentwicklung im Reservoir vorhersagen zu können, braucht man ein detailliertes Verständnis der hoch komplexen Wechselwirkungen zwischen der Strömung, der Wärmeausbreitung, dem Stofftransport und den chemischen Reaktionen. Es müssen Voraussagen für den vollen Betriebszeitraum einer GHZ getroffen werden, was einzig und allein durch numerische Simulationen möglich ist.

Für die Studie wurde ein hypothetischer Aquifer ausgewählt, der aber typische Eigenschaften von in Norddeutschland geothermisch genutzten Reservoiren aufweist. Der Aquifer befindet sich in einer Tiefe von 1500 m, hat eine Mächtigkeit von 30 m und eine Formationstemperatur von 100°C. Es handelt sich um einen Sandstein mit einer Porosität von 15 % und einer Permeabilität von 1 Darcy.

Das Modellgebiet hat eine Abmessung von 51 m mal 51 m mit der Injektionsbohrung genau im Zentrum. Injiziert wurden 50 m³/h Wasser mit einem Salzgehalt von 100 g/L, einer Temperatur von 20°C und einem pH Wert von 7 (KÜHN et al., 1999).

Die Umgebung der Bohrung wurde als homogen und isotrop angenommen. Der Aquifer wurde zum Liegenden und Hangenden als undurchlässig definiert und an allen vier seitlichen, vertikalen Rändern wurde eine konstante hydraulische Höhe von 1500 m festgelegt, welche die hypothetische Tiefe des Aquifers widerspiegelt.

Im ersten Fall wurde ein Anhydritgehalt von 0.85 Gew% bzw. 8.16 g pro kg Gestein angenommen, der homogen als Zement im gesamten Modellgebiet verteilt war. Im zweiten Fall war das aktive Mineral Baryt mit einer Konzentration von 0.004 Gew% was 4.2x10⁻² g pro kg Gestein entspricht. Im injizierten Fluid lag neben Natrium und Chlorid zusätzlich eine Barium- und Sulfatkonzentration von 0.24 mmol/L vor, die der thermodynamischen Gleichgewichtskonzentration der Sole für die Reservoirtemperatur von 100°C entspricht. Alle anderen Randbedingungen waren identisch.

Die zunächst durchgeführten isothermen Simulationen ergaben, dass sich ein hydraulisches Gleichgewicht im Verlauf der ersten Stunden nach dem Beginn der Injektion einstellt. Dabei treten Strömungsgeschwindigkeiten von 7.3 m/Tag direkt an der Bohrung und 0.3 m/Tag an den Rändern des Modellgebietes auf. Für diagnostische Zwecke wurde ein Tracer mit dem Wasser injiziert, der nach etwa vier Tagen den Modellrand erreicht. Aus diesem Grund wurde die Gesamtzeit für die weiteren Simulationen auf die entsprechende Zeitdauer begrenzt.

Wird die Temperatur mit berücksichtigt, ist erkennbar, dass sich kein hydraulisches Gleichgewicht im untersuchten Zeitraum einstellt. Abbildung II-19 zeigt, dass die hydraulische

Höhe in 2.5 m Entfernung von der Bohrung stetig ansteigt, auch während der zweiten Hälfte der Simulationszeit, wenn die Temperatur bereits konstant 20°C ist. Aus dem Vergleich der Durchgangskurven wird ersichtlich, dass die Temperaturfront im untersuchten Gebiet langsamer wandert als die Tracerfront. Das Wasser muss den Gesteinsverband auskühlen, was bedeutet, dass die Geschwindigkeit der Temperaturfront direkt abhängig ist von der Wärmekapazität des Gesteins.

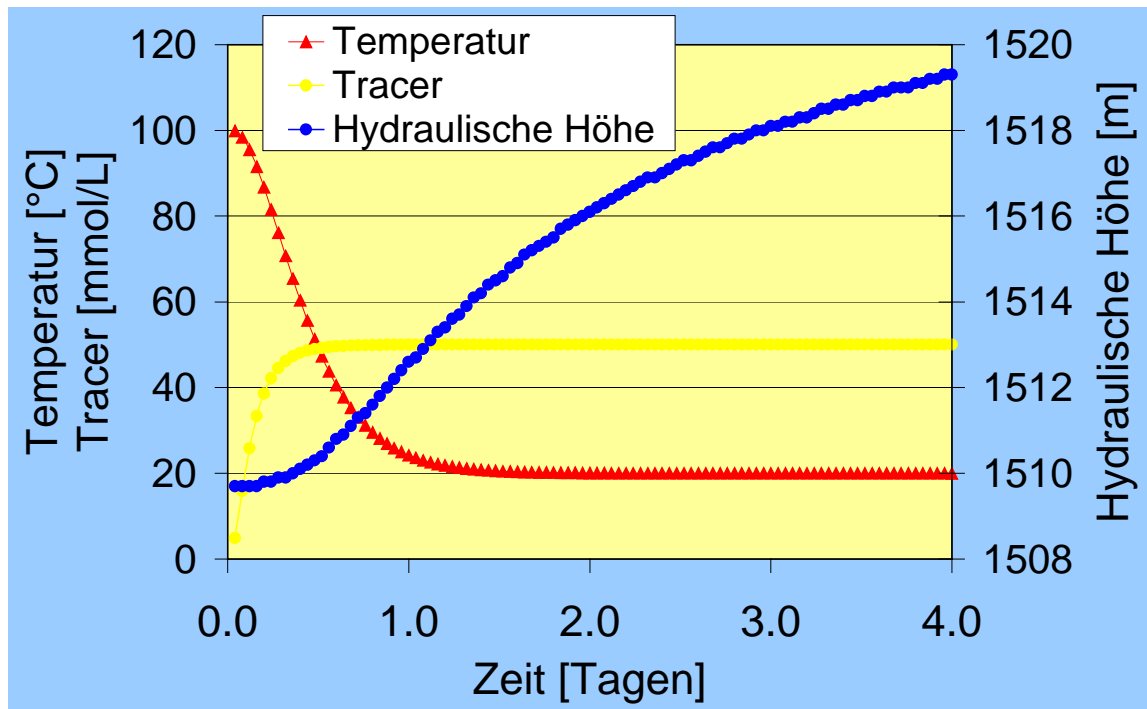


Abbildung II-19: Zeitliche Entwicklung der hydraulischen Höhe, der Temperatur und der Tracerkonzentration an einem Beobachtungspunkt 2.5 m entfernt von der Injektionsbohrung.

Um die Abhängigkeit des Injektionsdruckes von der Temperatur im Detail zu untersuchen wurden Simulationen durchgeführt bei der die Reinjektionstemperaturen zwischen 20°C und 100°C variiert wurden. In Abbildung II-20 ist die räumliche Verteilung der hydraulischen Höhe dargestellt, wie sie sich nach vier Tagen simulierter Zeit einstellt. Es ist erkennbar, dass mit sinkender Injektionstemperatur die resultierende hydraulische Höhe steigt, die notwendig ist, um die konstante Reinjektionsrate von 50 m³/h aufrechtzuerhalten. Die maximale hydraulische Höhe von 1560 m, bei einer Reinjektionstemperatur von 20°C, entspricht einem notwendigen Verpressdruck von 0.6 MPa bezüglich der Ausgangshöhe von 1500 m. Die Ursache für dieses Verhalten ist die Temperaturabhängigkeit der Viskosität des Wassers. Mit sinkender Temperatur steigt die Viskosität η und nach Gleichung II-15 verringert sich damit auch die hydraulische Leitfähigkeit k_f der Formation.

$$k_f = (k \cdot \rho \cdot g) / \eta \quad (\text{II-15})$$

Hierbei ist ρ die Dichte und g die Erdbeschleunigung. Dies ist auch der Grund, warum kein hydraulisches Gleichgewicht im Untersuchungszeitraum erreicht wird, denn der Bereich im Aquifer, der mit kaltem Wasser gefüllt ist, wächst stetig weiter und damit wird die hydraulische Leitfähigkeit des Aquifers stetig kleiner.

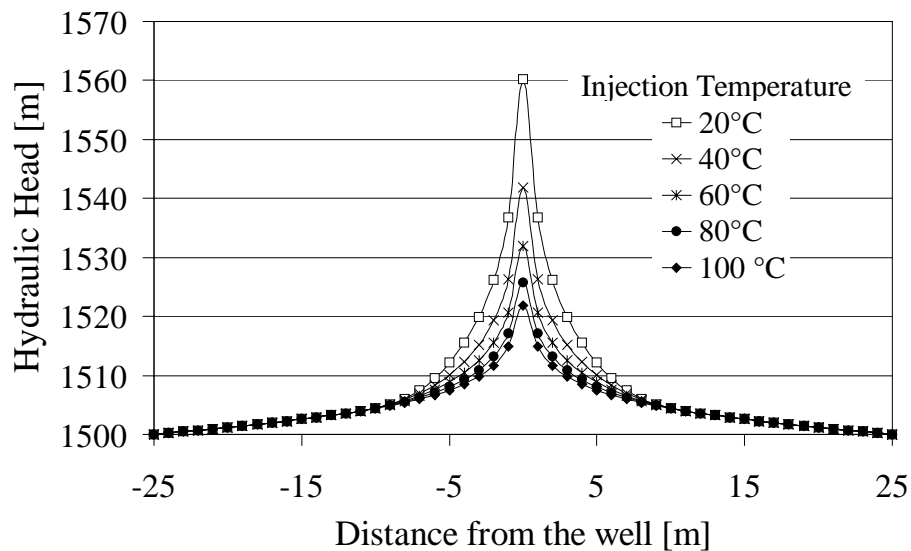


Abbildung II-20: Räumliche Verteilung der hydraulischen Höhe nach vier Tagen Simulationszeit in Abhängigkeit von der Injektionstemperatur.

Der Sandstein des Reservoirs ist zementiert mit 0.8 Gew% Anhydrit, der mit dem injizierten Wasser in Abhängigkeit der Temperatur reagiert. Die Ausgangskonzentration des Minerals im Gestein entspricht 8.16 g pro kg Gesteinsverband, die homogen verteilt ist. Die zeitliche Entwicklung der Simulation des reaktiven Transports am Beobachtungspunkt in 4 m Entfernung von der Bohrung ist in Abbildung II-21 dargestellt.

Während der ersten 1.5 Tage steigt die Anhydritmenge an. Von diesem Zeitpunkt an sinkt sie, bis nach etwa vier Tagen das gesamte Anhydrit aufgelöst ist. Die Temperatur sinkt innerhalb von 2.5 Tagen von der Ausgangstemperatur 100°C auf die Injektionstemperatur von 20°C ab, während im identischen Zeitraum die Ca-Konzentration von 25 mmol/L auf 66 mmol/L ansteigt. Zeitgleich mit der restlosen Anhydritlösung sinkt die Ca-Konzentration plötzlich ab. Aus diesem Verhalten lässt sich ablesen, dass die Temperatur die Löslichkeit des Calciums in der Umgebung der Bohrung bestimmt. An diesem Punkt muss man berücksichtigen, dass die Löslichkeit von Anhydrit mit steigender Temperatur absinkt. Abbildung II-21 zeigt deutlich den Anstieg von Ca in der Lösung mit sinkender Temperatur. Die Gleichgewichtskonzentration bei 100°C liegt bei 25 mmol/L und bei 20°C bei 66 mmol/L.

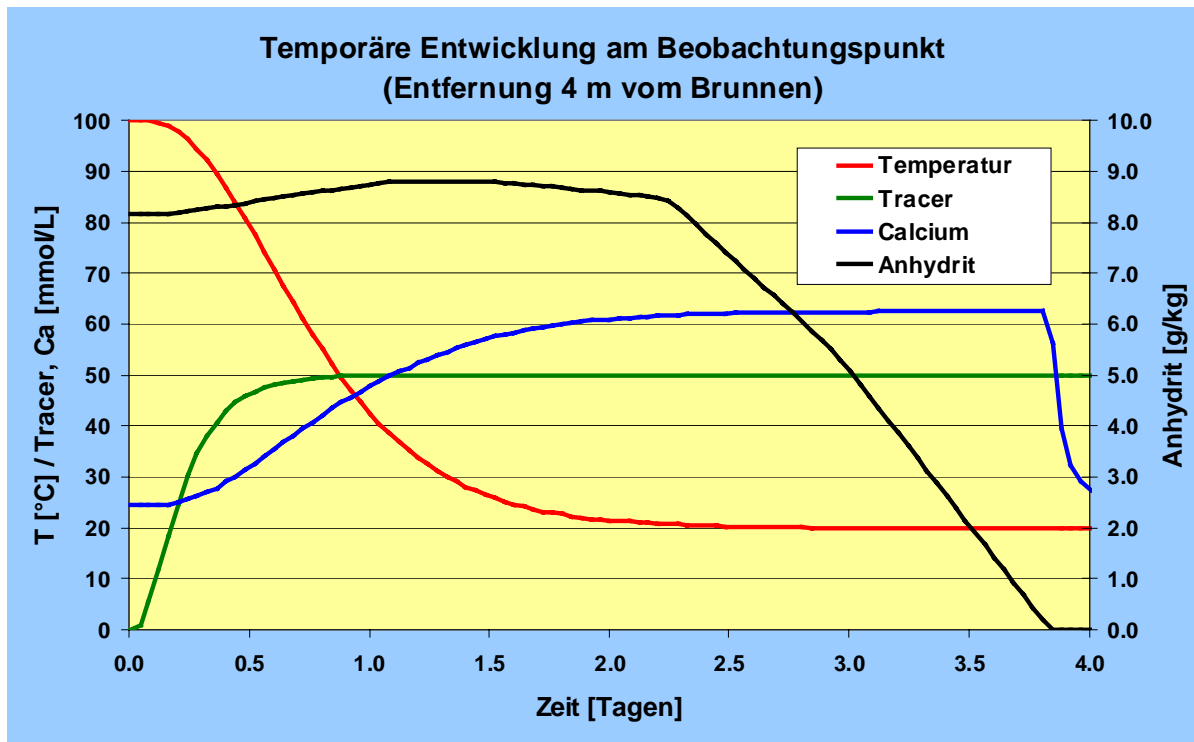


Abbildung II-21: Temperatur, Calcium- und Tracerkonzentration sowie Anhydritmenge als Funktion der Zeit an einem Beobachtungspunkt in einer Entfernung von 4 m von der Injektionsbohrung. Die Entwicklung der Tracerfront ist etwa 3-4 mal so schnell wie die der Temperaturfront. Die Calciumkonzentration ist vor allem abhängig von der Temperatur. Sobald der gesamte Anhydritgehalt am Beobachtungspunkt weggelöst ist, sinkt die Calciumkonzentration spontan ab.

Die resultierende Anhydritverteilung im Untersuchungsgebiet am Ende der Simulationsperiode von 4 Tagen ist in Abbildung II-22 dargestellt. Die Modellrechnungen mit dem Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT zeigen, dass direkt um die Injektionsbohrung Anhydrit in einem Radius von 3 m komplett weggelöst wurde. Daran schließt sich ein Bereich an, in dem sich das Mineral angereichert hat. Diese Anhydritverteilung beruht darauf, dass die Injektion von 20°C kaltem Wasser die Lösung von Anhydrit um die Bohrung bewirkt. Das gelöste Anhydrit (Calciumsulfat, CaSO_4) wird von der Injektionsbohrung ausgehend radialsymmetrisch durch den Aquifer transportiert.

Wie weiter oben dargelegt, ist der Transport der gelösten Stoffe erheblich schneller im Vergleich zur Temperatursausbreitung (Abbildung II-21). Das führt dazu, dass das kalte Wasser, welches für eine Temperatur von 20°C mit Anhydrit im Gleichgewicht ist, die sich von der Bohrung ausbreitende Temperaturfront von hinten erreicht. Das Wasser heizt sich wieder auf. Da Anhydrit mit steigender Temperatur schlechter löslich ist, kommt es zur Fällung und Anreicherung von Anhydrit im Bereich des Temperaturgradienten.

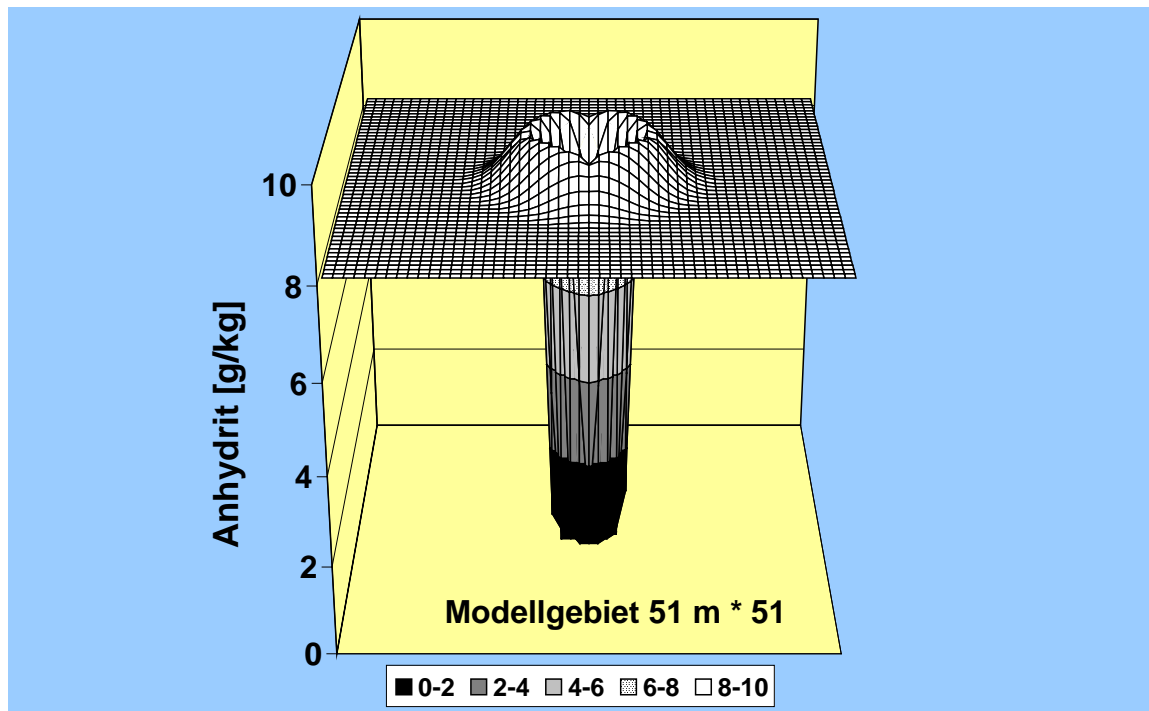


Abbildung II-22: Verteilung des Minerals Anhydrit im Modellgebiet für einen simulierten Zeitraum von vier Tagen. Um die Injektionsbohrung (Zentrum des Gebiets) ist Anhydrit vollständig weggelöst. Im Bereich der Temperaturfront ist das Mineral angereichert im Vergleich zur Ausgangsmineralmenge von 8.2 g/kg (entspricht 0.85 Gew%).

Die Minerallösung im Einflussbereich des kalten injizierten Wassers führt zu einer Porositäts- und damit gleichzeitig zu einer Permeabilitätserhöhung des Aquifermaterials, während die Fällung von Anhydrit im Bereich der Temperaturfront zu einer Permeabilitätsverringerung führt. Schließlich wird das umgelagerte Anhydrit mit fortschreiten der Temperaturfront immer wieder gelöst und abtransportiert. Die Entwicklung der Permeabilität hängt in Abhängigkeit der nach PAPE et al. (1999) im Programm SHEMAT integrierten Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung vom verwendeten fraktalen Exponenten ab (BARTELS et al., 2000). Die Berechnung der Permeabilität während der Simulation erfolgt nach Gleichung II-16.

$$k = k_0 (\phi / \phi_0)^{\text{exp}} \quad (\text{II-16})$$

In der Gleichung ist k die Permeabilität, ϕ die Porosität und exp der fraktale Exponent. Der Index „0“ repräsentiert jeweils die Ausgangsbedingungen. Es wurde eine Sensitivitätsstudie mit den Exponenten 1, 3, 4.85 und 7 durchgeführt. Der Exponent 1 beschreibt Permeabilitätsveränderungen eines durchschnittlichen Sandsteins im Porositätsbereich zwischen 0 und 1 %. Der Exponent 3 wird häufig verwendet, wenn keine detaillierten Informationen vorliegen. Er ist typisch für einen reinen, quarzitisches zementierten Sandstein mit glatten Oberflächen der Sandsteinkörner. Der Exponent 4.85 wurde aus umfangreichen petrophysikalischen Messungen an Anhydrit zementierten Sandsteinen bestimmt. Zusätzlich wurde der Exponent 7

untersucht, um starke Permeabilitätsänderungen im Vergleich zu den kleineren Exponenten zu untersuchen. Die zeitliche Entwicklung der Permeabilität am Beobachtungspunkt ist in Abbildung II-23 in Abhängigkeit des verwendeten fraktalen Exponenten dargestellt.

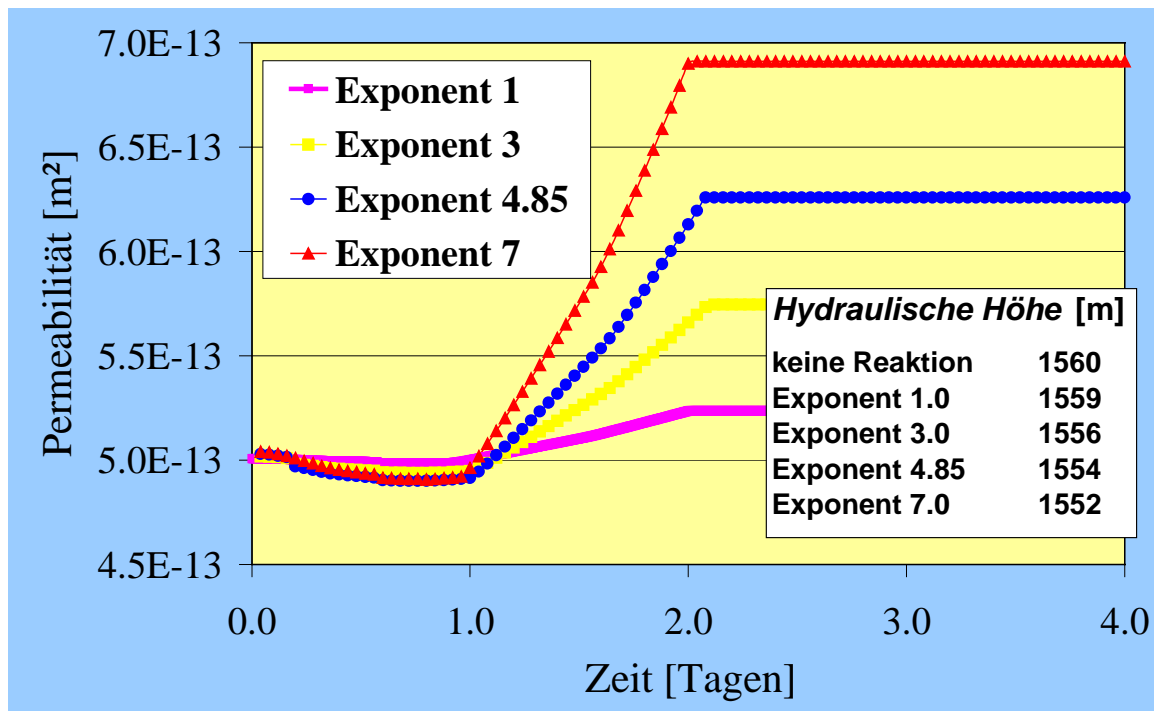


Abbildung II-23: Permeabilität in Abhängigkeit der Zeit am Beobachtungspunkt in 2.5 m Entfernung vom Injektionsbrunnen. Es wurden verschiedene fraktale Exponenten verwendet.

Während des ersten Tages sinkt die Permeabilität leicht ab. Von dort an steigt sie in Abhängigkeit des fraktalen Exponenten steil an, bis sie nach 2 Tagen, wenn alles Anhydrit gelöst ist, einen konstanten Wert erreicht. Je größer der verwendete Exponent, desto größer ist die Erhöhung der Durchlässigkeit des Aquifermaterials an dieser Stelle. Für die verwendeten Exponenten 1, 3, 4.85 und 7 resultieren hydraulische Höhen an der Bohrung von 1559, 1556, 1554 und 1552 Meter. Diese Beobachtungen zeigen zum einen, dass die Permeabilitäts-erhöhung um die Bohrung, die Permeabilitätsniedrigung an der Temperaturfront dominiert, denn durch den reaktiven Transport, der im Reservoir stattfindet, wird die Durchlässigkeit insgesamt erhöht. Zum anderen lässt sich sagen, dass der negative Effekt der Injektion von kaltem Wasser auf die Durchlässigkeit des Reservoirs durch die chemischen Reaktionen teilweise kompensiert wird. Und das in stärkerem Maße, je größer der zu beobachtende fraktale Exponent der Permeabilitäts-Porositätsbeziehung ist.

Während Anhydrit ein retrograd lösliches Mineral ist, löst sich Baryt in Wässern mit geringer Temperatur schlechter. Aus dieser Tatsache ergibt sich für die zweite konzeptionelle Studie des Injektionsbrunnen ein konträres Verhalten. In der Abbildung II-24 ist die zeitliche Entwicklung der Bariumkonzentration gezeigt. Aufgrund der sehr geringen Barytmenge im Gestein ist diese Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere

normalerweise nicht bekannt. Aus diesem Grund ist die Barytmenge als Konzentrationsveränderung in mmol/L Porenlösung dargestellt.

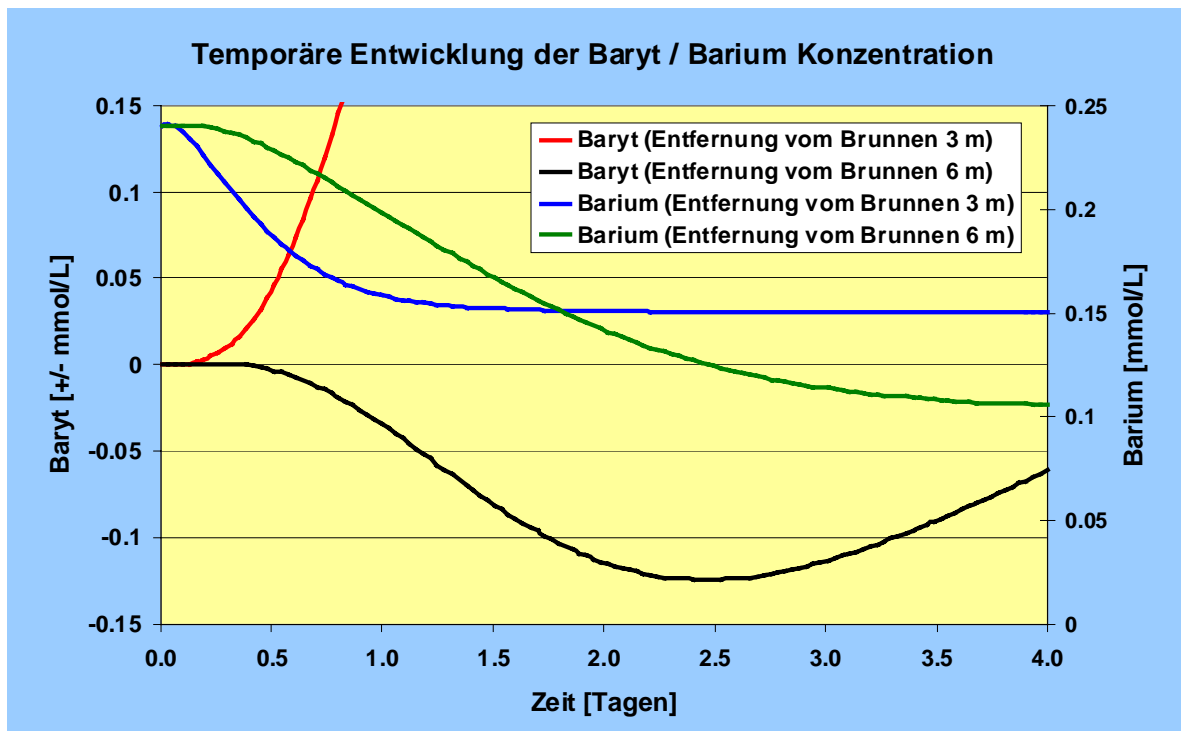


Abbildung II-24: Bariumkonzentration und Veränderung des Barytgehaltes im Gestein in Abhängigkeit der Zeit und des Abstandes vom Injektionsbrunnen.

Am 3 m vom Brunnen entfernten Beobachtungspunkt erhöht sich die Barytmenge vom Beginn der Simulation an. Nach weniger als einem Tag übersteigt die Veränderung bereits 0.15 mmol/L und steigt im weiteren Verlauf bis auf 1.75 mmol/L nach vier Tagen. An dieser Position verringert sich die Bariummenge in der Lösung innerhalb von 2 Tagen vom Startwert 0.24 mmol/L auf 0.15 mmol/L und bleibt von da an konstant. Am zweiten Beobachtungspunkt in 6 m Entfernung zum Brunnen sinkt die Barytmenge des Gesteins zunächst um 0.125 mmol/L innerhalb der ersten 2.5 Tage ab und steigt von da an kontinuierlich. Die Bariumkonzentration sinkt innerhalb der vier Tage Simulationszeit auf konstant 0.11 mmol/L ab. Die beobachteten Prozesse führen zu einer Barytanreicherung um die Bohrung (Abbildung II-25).

Das ursprünglich für 100°C mit Baryt gesättigte Formationswasser ist bei der Verpress-temperatur von 20°C bezüglich des Minerals übersättigt. Aus diesem Grund kommt es während der Reinjektion zur Fällung von BaSO_4 und zu einer Anreicherung um die Bohrung. An beiden Beobachtungspunkten (3 m und 6 m) stellt sich eine konstante Bariumkonzentration in der Lösung ein, wobei keine der Gleichgewichtskonzentration von 0.095 mmol/L bei 20°C entspricht. Dieses Verhalten erklärt sich über die Kinetik dieses Prozesses. Die Reaktion ist an keinem der beiden gewählten Beobachtungspunkte bis zum thermodynamischen Gleichgewicht fortgeschritten.

Am 6 m entfernten Beobachtungspunkt kommt es zunächst zu einer Verringerung der Barytmenge des Gesteins, weil das Wasser in der nahen Umgebung der Bohrung den größten Teil Ba und SO_4 bereits durch den Fällungsprozess verloren hat. Das Wasser befindet sich also für die Injektionstemperatur im Bereich der Sättigung während es sich in Richtung des Beobachtungspunktes bewegt. Da der Transportprozess schneller ist als die Wanderungsgeschwindigkeit der Temperaturfront erreicht das Wasser die Temperaturfront und heizt sich wieder auf, wodurch sie im Bezug zum Mineral Baryt wieder untersättigt ist. Es kommt zur Lösung des Minerals und zu einer Anreicherung im Gestein. Wenn die Temperaturfront den Beobachtungspunkt passiert hat, wechselt der Prozess und es kommt zur Fällung.

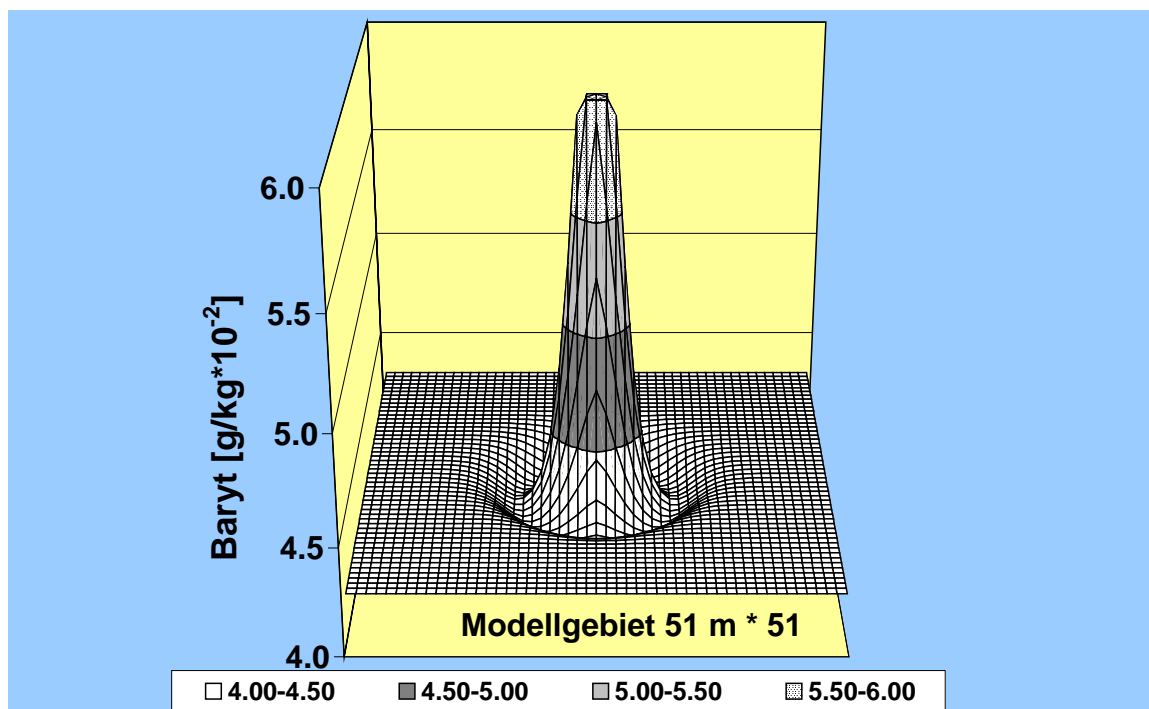


Abbildung II-25: Verteilung von Baryt im Modellgebiet für einen simulierten Zeitraum von vier Tagen. Um die Bohrung ist es zu einer Anreicherung des Minerals gekommen und an der Temperaturfront zu einer Verringerung.

Im Verlauf der Simulation kommt es zu keiner signifikanten Veränderung der hydraulischen Höhen, denn die gefällte Barytmenge ist im Modellgebiet so gering, dass keine Permeabilitätsveränderung beobachtet werden kann.

Als Fazit lässt sich feststellen, dass die Temperatur des verpressten Wassers einen bedeutenden Einfluss auf die hydraulischen und chemischen Prozesse im Umfeld einer Injektionsbohrung hat. Außerdem kommt es zur Überlagerung der physikalischen und chemischen Prozesse, die nur mit Hilfe einer gekoppelten numerischen Simulation im Detail aufgeklärt werden können. Die Lösung von Anhydrit im Umfeld der Bohrung führt dort zu einer Permeabilitätserhöhung, welche die Permeabilitätsverringerung im Bereich der Temperaturfront dominiert. Es kommt insgesamt zu einer Abschwächung der thermisch ausgelösten Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere

Verringerung der hydraulischen Leitfähigkeit des Aquifers. Im Gegensatz zum Anhydrit, das eine retrograde Löslichkeit zeigt, führt das prograde Löslichkeitsverhalten des Baryts zu einer Übersättigung im Wasser und zu einer Fällung im Bereich um die Bohrung. Aufgrund der geringen Mengen kommt es in diesem Fall aber zu keiner Veränderung der Permeabilität.

1.3.2. Lokation Stralsund

Zweites Anwendungsbeispiel ist der Standort Stralsund (Nord-Ost-Deutschland an der Ostsee). Aus geologischer Sicht repräsentiert dieser Standort den nördlichen Rand des Nordostdeutschen Beckens. Hier wurde mit 3 Bohrungen im Mittleren Buntsandstein der Detfurth-Sandstein in Tiefen von 1500 bis 1600 m als 33 bis 36 m mächtiger, geothermisch nutzbarer Aquifer nachgewiesen. Das Projektgebiet liegt innerhalb einer ca. 5 km breiten, nordwest-südost streichenden Bruchscholle mit relativ ruhigen Lagerungsverhältnissen. Sie wird nach Nordosten und Südwesten über weite Strecken von Störungszonen mit Sprunghöhen (Versatz) von mehreren 100 m begrenzt.

Der Detfurth-Sandstein ist in den Bohrprofilen als gut sortierter und schwach verfestigter Fein- bis Mittelsandstein mit wechselndem Schluff- und Grobsandanteilen ausgebildet. Der Schichtungstyp ist stark wechselhaft. Nach der Mineralführung ist der Detfurth-Sandstein ein feldspatführender Quarzsandstein mit geringen Tonmineral- ($\leq 2\%$) und Zementgehalten (4 – 5 %). Der Gesteinszement besteht überwiegend aus Karbonat und untergeordnet aus Anhydrit. Die Porositäten variieren zwischen 15 und 30 %, die Permeabilitäten zwischen 0.1 und $2 \mu\text{m}^2$. Die entsprechenden Mittelwerte betragen 24 % bzw. $0.54 \mu\text{m}^2$. Der Anteil großer Porenradien ($>5 \mu\text{m}$) liegt bei etwa 80 Prozent.

Aus den vorhandenen Daten wurde das numerische Modell aufgebaut. Das Modellgebiet umfasst 18 km mal 7 km und wird von den geologischen Störungszonen abgeschlossen. Der erschlossene Aquifer wurde mit einer Porosität von 23.9 % und einer Permeabilität von 0.54 Darcy definiert. Die Teufe und damit die hydraulische Höhe am Beginn der Simulation beträgt 1500 m. Das Reservoir ist 34 m mächtig und es herrscht dort eine Formationstemperatur von 58°C . Zementiert ist der Sandstein mit etwa 4.5 Gew% Calcit sowie 0.4 Gew% Anhydrit.

Beim Formationswasser handelt es sich um eine Sole mit einem Gesamtsalzgehalt von 290 g/L. Das Wasser setzt sich vor allem aus den Elementen/Ionen Na-K-Cl sowie Mg-Ca-SO₄ sowie einem geringen Teil Kohlensäure zusammen. Der pH-Wert beträgt 5.2.

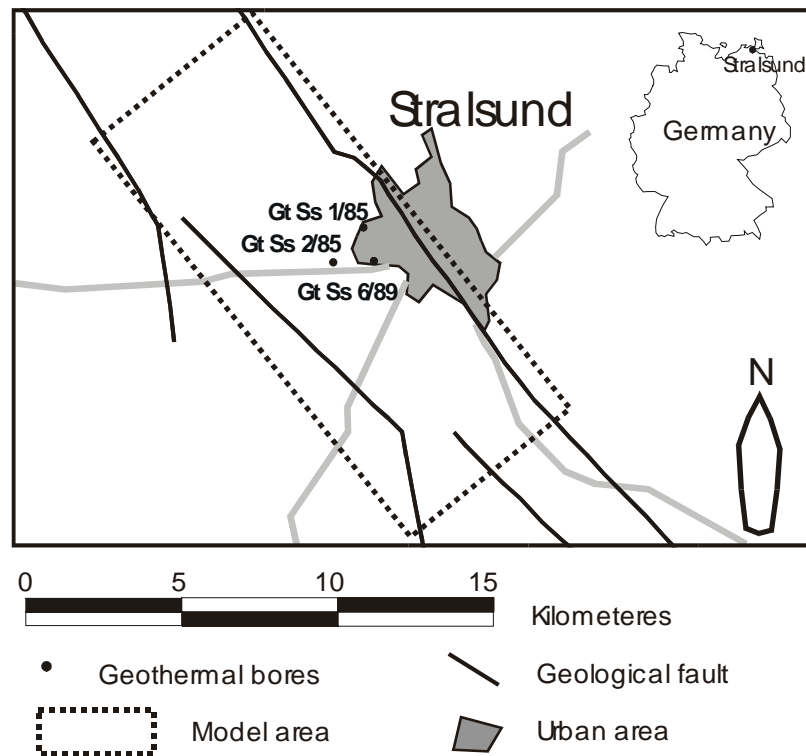


Abbildung II-26: Potentieller Geothermiestandort Stralsund mit den Bohrungen Gt St 1/85, 2/85 und 6/89. Das Reservoir wird teilweise durch geologische Störungen begrenzt.

Die Simulation der geothermischen Nutzung des Modellgebietes wurde mit zwei Bohrungen als Förderbohrungen ($2 \cdot 50 \text{ m}^3/\text{h}$, Gt St 1/85 und 6/89) und einem Injektionsbrunnen ($100 \text{ m}^3/\text{h}$, Gt St. 2/85) vorgenommen. Das geförderte Wasser wurde mit einer Temperatur von 20°C reinjiziert. Die simulierte Betriebsphase der Geothermischen Heizanlage betrug 80 Jahre.

Eine Untersuchung des Langzeitverhaltens eines geothermischen Reservoirs beinhaltet zunächst die Quantifizierung der hydraulischen Bedingungen für den betrachteten Zeitraum. In Abbildung II-27 ist die Tracer- und Temperaturverteilung nach 10 Jahren Reinjektion von 100 m^3 Wasser pro Stunde gezeigt. Deutlich erkennbar ist, dass die Tracerfront (600 m entfernt von der Bohrung) schneller voranschreitet als die Temperatur (325 m von der Bohrung). Das Gestein muss durch das kalte Wasser erst ausgekühlt werden.

Am Ende von 50 Jahren ist erkennbar, dass die Tracerfront gerade die Produktionsbohrungen erreicht hat, was bedeutet, dass das ursprünglich geförderte und wieder verpresste Wasser die Produktionsbohrung wieder erreicht hat (Abbildung II-28). Die Temperaturfront hingegen ist immer noch 790 m bzw. 1030 m von den Produktionsbohrungen entfernt. Die Beobachtung der zeitlichen Entwicklung der Temperatur an den Produktionsbohrungen Gt St 6/89 und Gt St 1/85 zeigt, dass der Durchbruch der Temperatur nach 55 bzw. 75 stattfindet, wobei aber auch nach 80 Jahren die Temperaturerniedrigung erst maximal 4°C beträgt (Abbildung II-29).

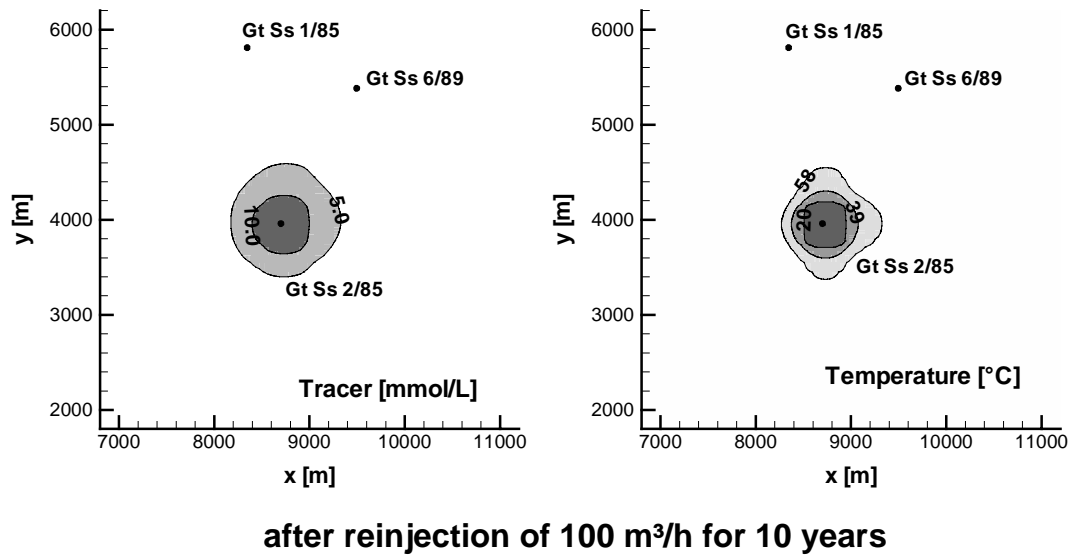


Abbildung II-27: Tracerverteilung und Temperatúrausdehnung um die Injektionsbohrung (Gt Ss 2/85) nach 10 Jahren Reinjektion von 100 m³/h. Die Bildausschnitte zeigen den Bereich zwischen den drei Bohrungen (Produktionsbohrungen Gt Ss 1/85 und Gt Ss 6/89) im Zentrum des modellierten Gebietes von 18.000 m * 7.000 m.

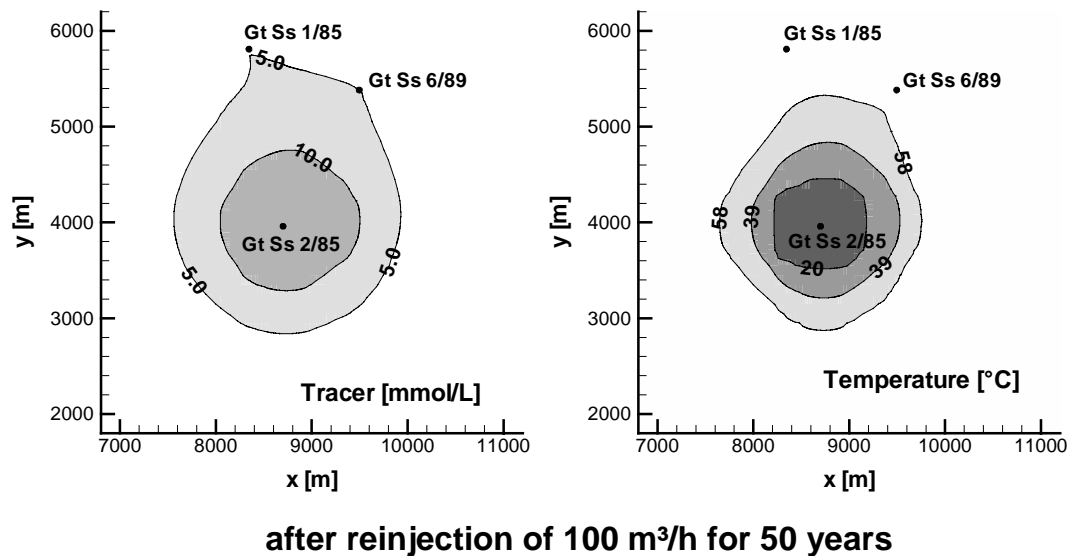


Abbildung II-28: Tracerverteilung und Temperatúrausdehnung um die Injektionsbohrung (Gt Ss 2/85) nach 50 Jahren Reinjektion von 100 m³/h. Die Tracerfront hat gerade die Produktionsbrunnen erreicht.

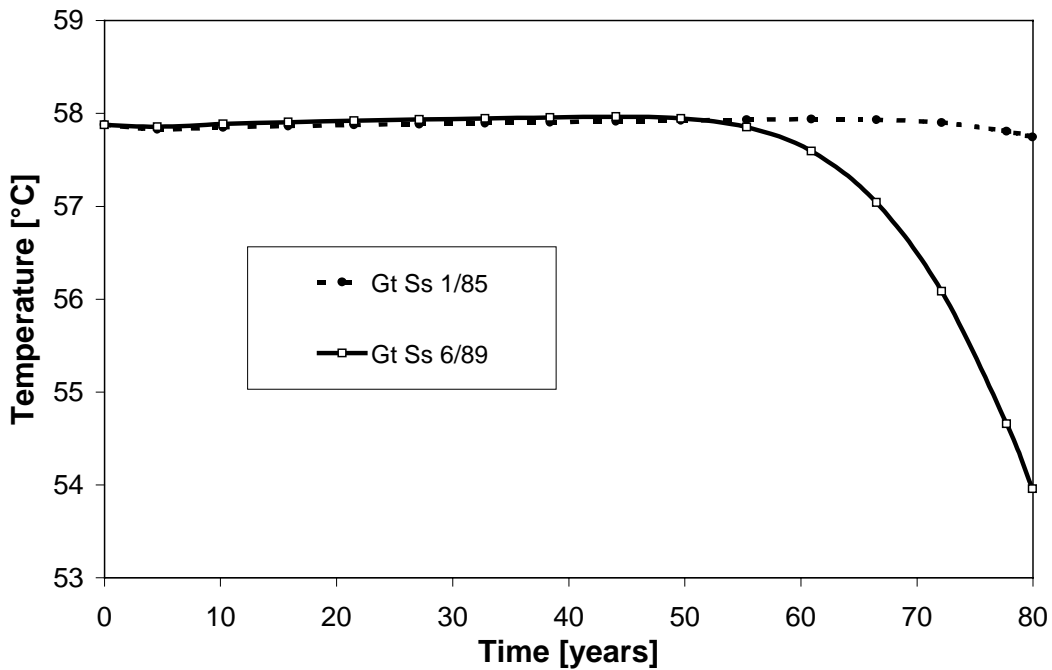


Abbildung II-29: Beginn der Temperaturabnahme in den Produktionsbohrungen nach 55 (Gt St 6/89) bzw. 75 Jahren (Gt St 1/85).

Beide betrachteten Minerale (Calcit und Anhydrit) weisen eine retrograde Löslichkeit auf. Das heißt, mit sinkender Temperatur ist mehr Mineral löslich. Das geförderte Wasser, das ursprünglich mit dem Mineralbestand für 58°C im Gleichgewicht war, wird nun auf 20°C abgekühlt und wieder reinjiziert. Bei der geringeren Temperatur sind erhöhte Mengen an Calcit und Anhydrit löslich. Die Verringerung der Calcitmenge erfolgt innerhalb eines kleineren Bereichs als die Verringerung der Anhydritmenge (Abbildung II-30).

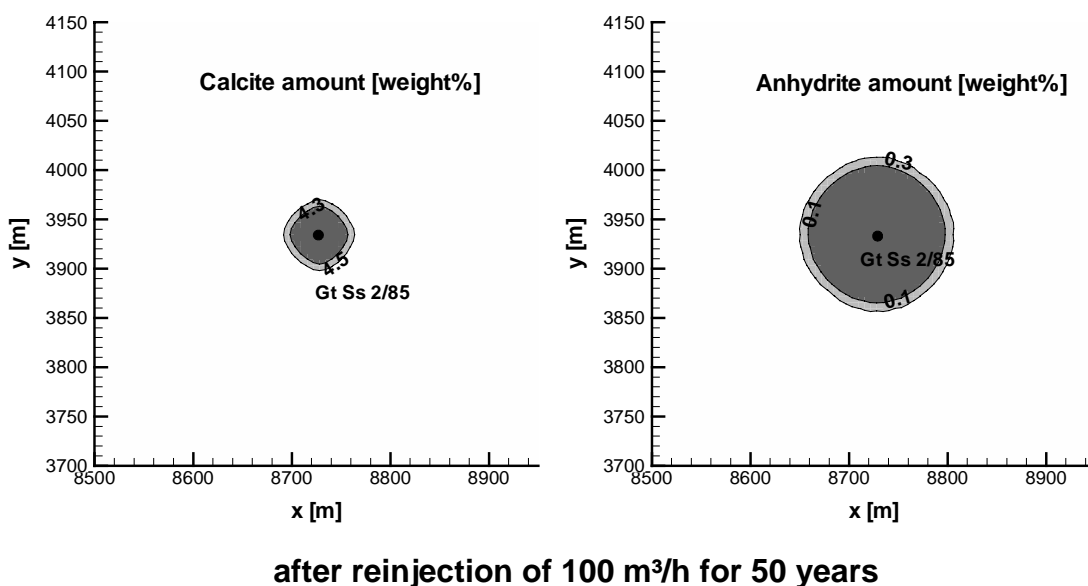


Abbildung II-30 Mineralverteilung von Calcit und Anhydrit um die Injektionsbohrung.

Die resultierende Mineralverteilung in Abbildung II-30 zeigt den Zustand nach 50 Jahren Reinjektion. Die Isolinien 4.5 und 0.4 Gew% begrenzen das unbeeinflusste Gebiet außerhalb der Reaktionszone. Die Isolinien 4.3 und 0.38 Gew% schließen den Bereich aus, in dem 95 % der Ausgangsmineralmengen noch erhalten sind. Der Bereich, in dem eine Verringerung der Calcitkonzentration stattgefunden hat, ist kleiner als der Bereich, in dem sich Anhydrit gelöst hat. Maximale Reduktion hat in beiden Fällen zur vollständigen Lösung geführt.

Durch die Minerallösung von Calcit und Anhydrit kommt es zu einer Erhöhung der Porosität und damit der Permeabilität um die Injektionsbohrung. Die Porosität hat sich von 0.239 auf maximal 0.275 erhöht. In Abhängigkeit des fraktalen Koeffizienten der Reaktion führt dies zu maximalen Permeabilitäten von $0.83 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ bzw. $1.6 \times 10^{-12} \text{ m}^2$. In Abbildung II-31 sind die Permeabilitätsveränderungen dargestellt. Die Isolinie $0.54 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ repräsentiert den Bereich außerhalb dessen keine Reaktionen stattgefunden haben (Ausgangswert). Die Isolinie $0.69 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ begrenzt den Bereich mit einer 25 %igen Erhöhung der Permeabilität.

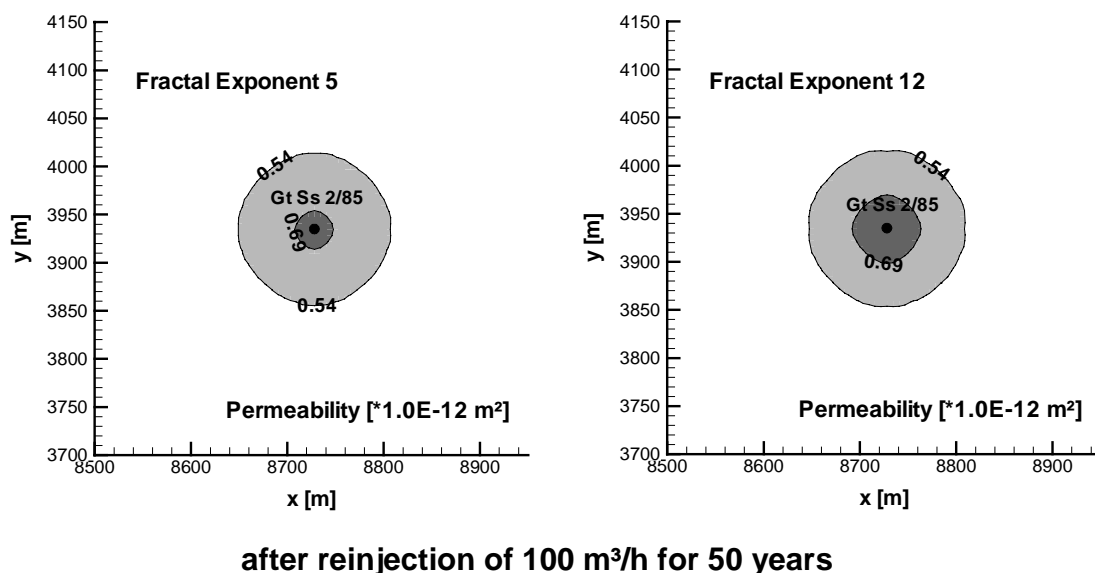


Abbildung II-31 Permeabilitätserhöhung im Umkreis der Injektionsbohrung Gt St 2/85. Die Isolinie $0.54 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ schließt den Bereich aus in dem keine Reaktionen stattgefunden haben und die Isolinie $0.69 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ den Bereich innerhalb dessen eine 25 %ige Erhöhung stattgefunden hat.

Vom Gesichtspunkt des Betriebs einer GHZ ist der Verpressdruck an der Injektionsbohrung der wichtigste Speicherparameter. In Abbildung II-32 ist der Verpressdruck in Form der Piezometerhöhen an der Injektionsbohrung als Funktion der Zeit dargestellt. Dargestellt ist ein Zeitraum von 80 Jahren. Ausgehend von einer Piezometerhöhe von 1500 m (in Anlehnung an die Teufenlage), steigt die Piezometerhöhe unter der Annahme, dass nur Strömung und Wärmeausbreitung jedoch keine chemischen Reaktionen stattfinden auf über 1610 m und auch nach 80 Jahren ist noch kein Gleichgewicht erreicht.

Erklärbar ist dieses Phänomen mit der im Vergleich zur Formationstemperatur erhöhten Viskosität des Wassers im Bereich der Injektion, wodurch sich die hydraulische Leitfähigkeit des Speichers verringert. Da sich der Bereich, der mit kaltem Wasser gefüllt ist, immer weiter ausdehnt, wird kein Gleichgewicht erreicht. Diese Druckerhöhung ist ein rein thermischer Effekt.

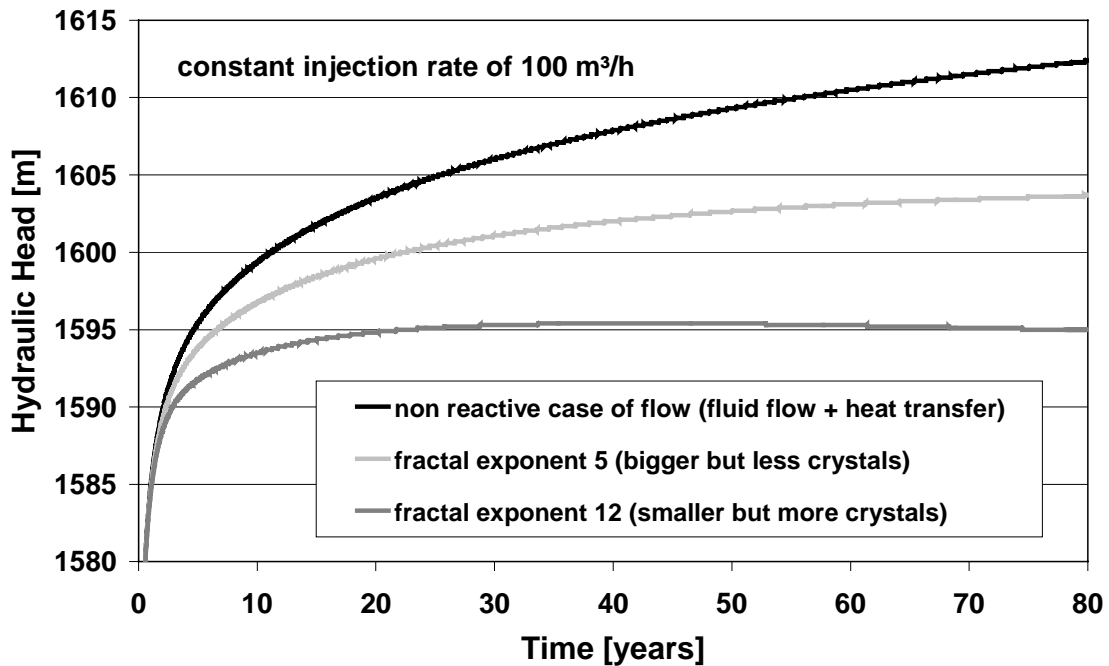


Abbildung II-32: Entwicklung der Piezometerhöhe bei konstanter Injektionsrate an der Injektionsbohrung im Verlauf des simulierten Betriebs von 50 Jahren. Ausgehend von 1500 m (keine Förderung) steigt die Piezometerhöhe für den Fall bei dem nur Strömung und Wärmetransport betrachtet werden auf über 1610 m an. Der thermische Effekt wird durch die Minerallösungsreaktionen abgeschwächt.

Mit den gleichzeitig ablaufenden chemischen Reaktionen schwächt sich die Erhöhung der Piezometerhöhe ab, was deutlich macht, dass die Lösung der Minerale um die Bohrung einen großen Einfluss auf die hydraulische Leitfähigkeit ausübt. Die Veränderung der hydraulischen Leitfähigkeit ist abhängig von der Art der Zementation. Die Lösung natürlicher Zemente von Calcit und Anhydrit, die sich über lange Zeiträume gebildet haben (kleiner fraktaler Exponent), hat einen geringeren Effekt, als die Lösung von Mineralzementen die durch schnelle Umlagerungsreaktionen gebildet wurden (großer fraktaler Exponent, Abbildung II-32). Der Einfluss der chemischen Reaktionen auf die Piezometerhöhe ist geringer als der thermische. Die Speichereigenschaften werden im Falle von Calcit und Anhydrit durch diese verbessert.

Die numerische Untersuchung des Standortes Stralsund hat gezeigt, dass SHEMAT ein geeignetes Werkzeug ist, um das Langzeitverhalten eines Reservoirs zu quantifizieren. Voraussetzung für die Simulation sind umfangreiche Daten des Wassers und des Gesteins, die vorhanden sein müssen. Auch in diesem Beispiel hat sich gezeigt, dass die Entwicklung der Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere

hydraulischen Leitfähigkeit des Aquifers vor allem anderen von der Injektionstemperatur abhängig ist. Die Lösung von Calcit und Anhydrit in der Umgebung der Injektionsbohrung aufgrund der Temperaturerniedrigung führt zu einer Erhöhung der Permeabilität, wodurch der Temperatureffekt abgeschwächt wird. Die Porenraumstruktur (definiert über den fraktalen Exponenten) bestimmt die Größe der Permeabilitätsveränderung. Mit dieser Studie konnte gezeigt werden, dass die Lokation Stralsund auch über einen Zeitraum von 80 Jahren ohne permeabilitätsbedingte Reinjektionsschwierigkeiten betrieben werden kann.

1.3.3. Evaluierung von SHEMAT anhand der Lokation Waiwera

Waiwera ist eine kleine Stadt an der Ostküste der Nordinsel Neuseelands. Sie liegt etwa 50 km nördlich der Stadt Auckland. Unterhalb der Stadt befindet sich ein hydrogeothermales Reservoir, das sich zunächst durch heiße Quellen am Strand der Stadt bemerkbar gemacht hatte. Die erste schriftlich belegte Nutzung des Reservoirs begann im Jahr 1863. Ursprünglich waren alle angelegten Brunnen artesisch, ab dem Jahr 1969 mussten jedoch Pumpen zur Förderung des Wassers eingesetzt werden. Auch die heißen Quellen am Strand von Waiwera versiegten in den Jahren 1975 und 1976.

Bis in das Jahr 1970 stieg die Nutzung des geothermischen Wassers kontinuierlich an. Danach wurde der Wasserverbrauch sogar noch gesteigert. Im Jahre 1975 informierten die Bürger von Waiwera die zuständige Behörde (Auckland Regional Water Board, ARWB; heute Auckland Regional Council, ARC) über sinkende Wasserstände in den Brunnen. Durch das ARC wurde eine Bestandsaufnahme durchgeführt, um den Schutz und die nachhaltige Nutzung des Reservoirs mit Hilfe eines Managementplans in Zukunft zu gewährleisten. Auf Grundlage dieses umfangreichen Datensatzes wurde mit Processing SHEMAT ein Modell für das Gebiet von Waiwera aufgebaut, um eine gekoppelte Simulation der Prozesse Strömung, Wärmeausbreitung, Stofftransport und Reaktion durchzuführen. Mit Hilfe des numerischen Modells wurde folgenden Fragen nachgegangen:

- Kann mit Hilfe von SHEMAT der natürliche Zustand des Reservoirs in einem numerischen Modell nachvollzogen werden?
- Ist das Modell in der Lage, den Einfluss der geothermischen Nutzung auf die Druckverhältnisse, die Temperaturverteilung und Stoffkonzentrationen aufzuzeigen und damit als evaluiertes Werkzeug für das Reservoirmanagement zur Verfügung zu stehen?
- Treten aufgrund der Nutzung chemische Reaktionen im Reservoir auf, die Aquifereigenschaften beeinflussen?

Das Modellgebiet umfasst den Bereich der Stadt Waiwera sowie das Estuar des Waiwera Flusses (Abbildung II-33). Die Geologie des Reservoirs wird durch den Waitemata Group

Sandstein bestimmt. Die geschichtete Gesteinsformation ist geklüftet und bildet den Aquifer aus dem alle vorhandenen Brunnen fördern (ARWB/ARC, 1980, 1987, 1991, 1999).

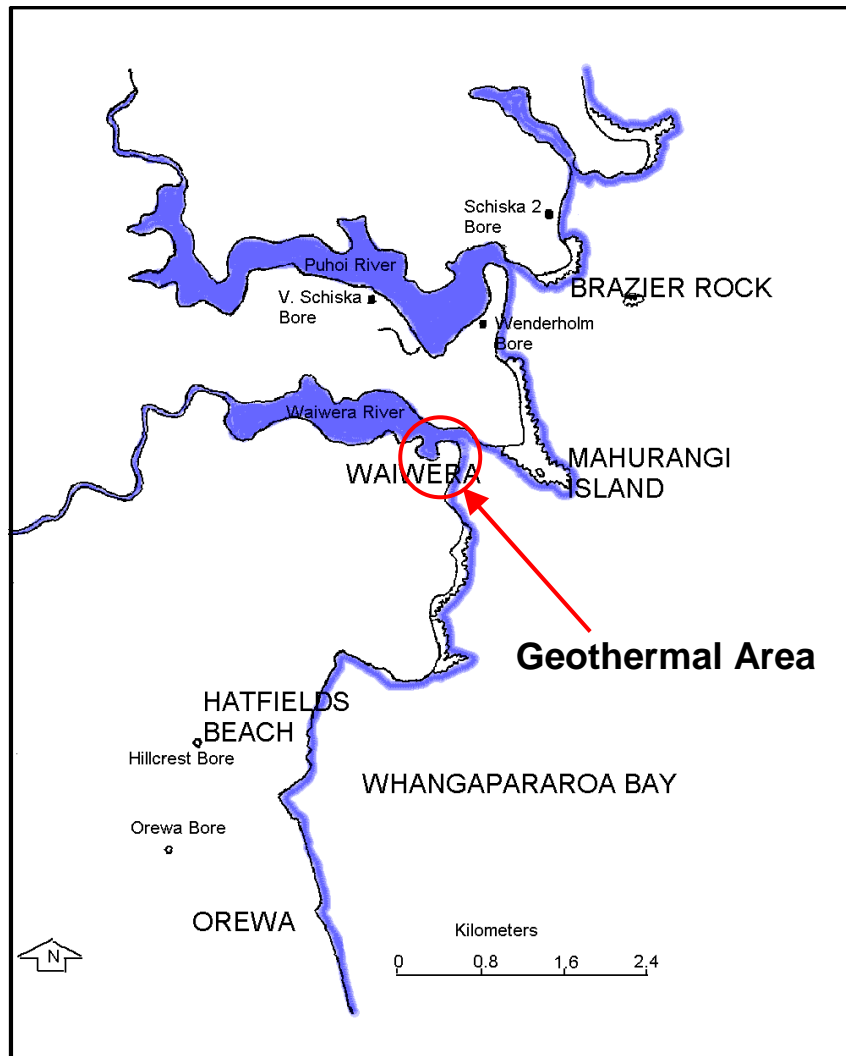


Abbildung II-33: Untersuchungsgebiet Waiwera (Neuseeland)

Das Modellgebiet umfasst 5 km mal 7 km mit dem geothermischen Reservoir im Zentrum und wurde in Anlehnung an die geologischen Bedingungen begrenzt. Der konzeptionelle Aufbau des Reservoirs ist in Abbildung II-34 gezeigt. Es kann davon ausgegangen werden, dass das geothermische Wasser mit einer Temperatur von etwa 50°C durch eine Störungszone von unten in den Aquifer eintritt. Es wird davon ausgegangen, dass es sich hierbei um Niederschlagswasser handelt, die außerhalb des Bereichs des Reservoirs in bis zu 2000 m tief liegende Schichten versickert sind und sich dort erwärmt haben. Von der Landseite aus kommt es zu einem Zustrom von kaltem Grundwasser in das Reservoir (westlicher Rand des Modellgebietes). Zur Seeseite existiert eine Salz-Süßwasser Grenzschicht aufgrund des Einflusses des Meerwassers auf das Untersuchungsgebiet (östlicher Rand). Die Randbedingungen des Modells sind im Detail in Abbildung II-35 angegeben.

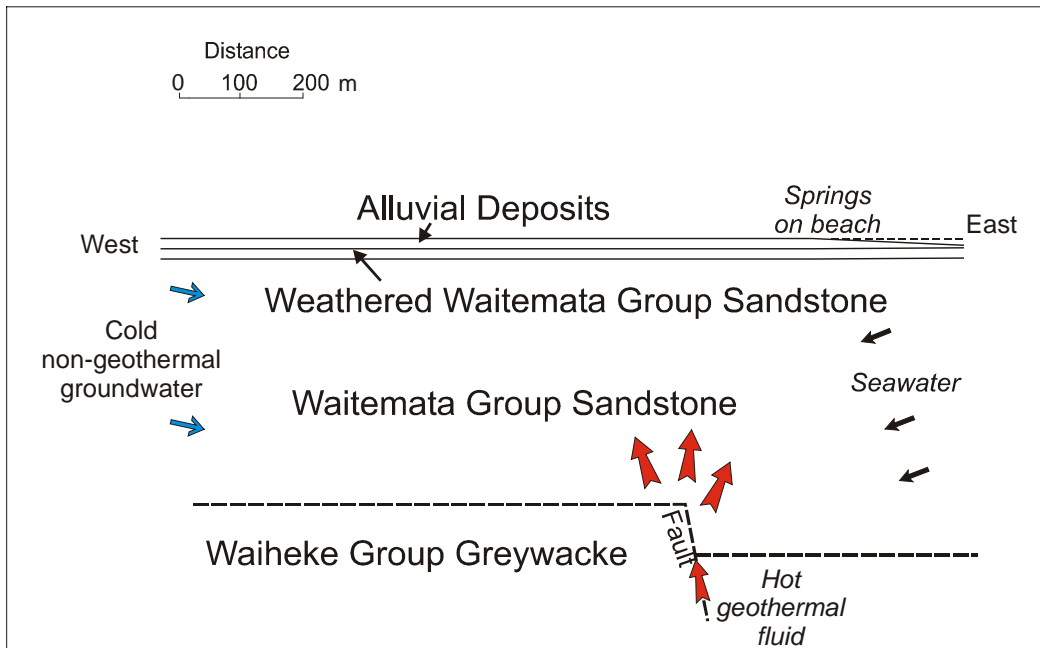


Abbildung II-34: Konzeptionelles Modell des Reservoirs. Das geothermische Wasser strömt durch eine Störung in den Aquifer, der von der Landseite durch kaltes Grundwasser und von der Seeseite durch Meerwasser beeinflusst wird.

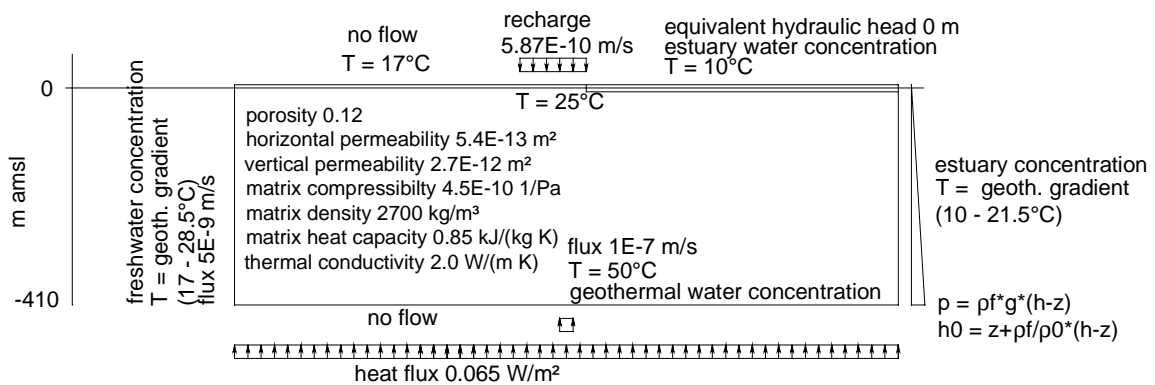


Abbildung II-35: Randbedingungen des numerischen Modells und Reservoireigenschaften.

Aufgrund der Tatsache, dass die zur Verfügung stehenden Daten der hydraulischen Höhen nicht den notwendigen Genauigkeitsanforderungen entsprachen, wurde das Modell mit Hilfe der Temperaturverteilungen, die in den Bohrungen gemessen wurden, kalibriert. Numerische Modellierungen mit einer insgesamt simulierten Zeit von 6000 Jahren haben gezeigt, dass sich ein stabiler natürlicher Zustand des Reservoirs nach bereits 600 Jahren einstellt. In Abbildung II-36 zeigt die Temperaturverteilung einer Bohrung von Waiwera. Im Vergleich sind die berechneten Werte (rote Dreiecke) neben den gemessenen Temperaturen (schwarze Punkte) dargestellt. Simulation und Messung stimmen sehr gut überein.

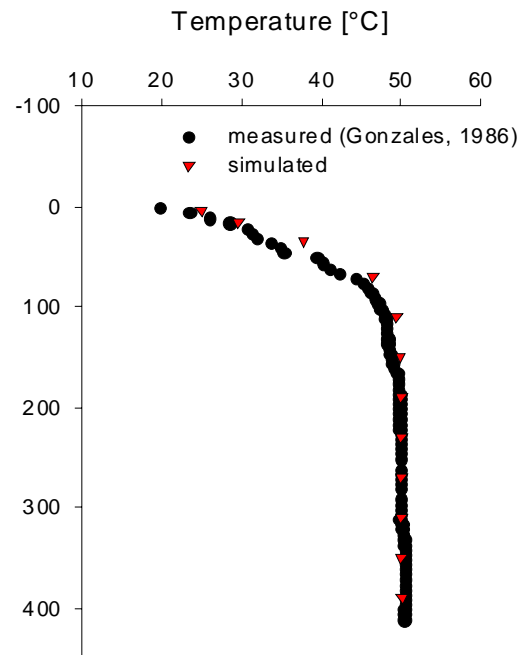


Abbildung II-36: Temperaturprofil einer Bohrung. Berechnete und gemessene Werte im Vergleich.

Die resultierende Temperaturverteilung für den natürlichen Zustand des Aquifers ist in Abbildung II-37 in einem Schnitt durch das Reservoir von West nach Ost gezeigt. Es ist deutlich, dass das zentrale Gebiet von Waiwera vor allem durch konvektiven Wärmetransport bestimmt wird und die Randbereiche durch konduktiven.

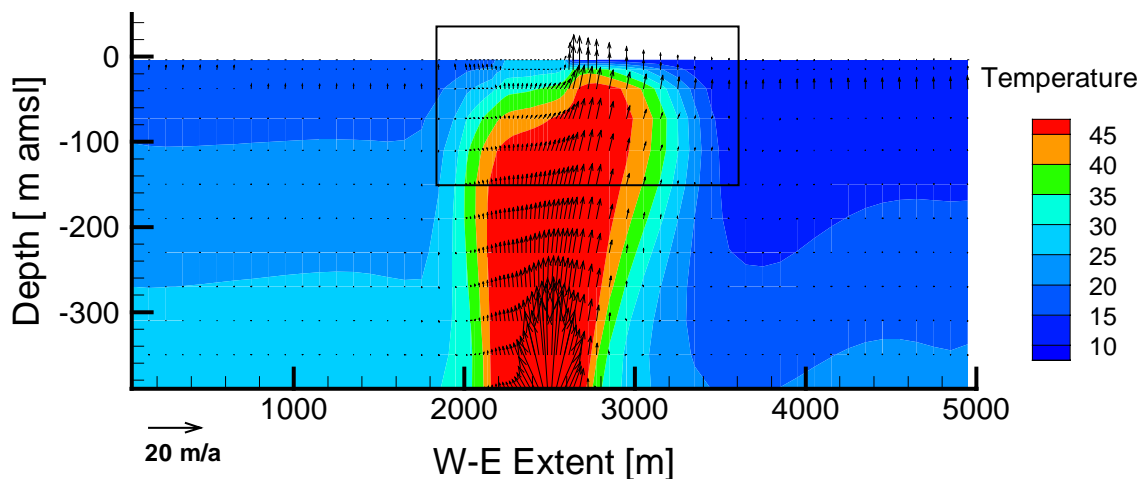


Abbildung II-37: Temperaturverteilung im Untersuchungsgebiet für den natürlichen Zustand. Die Pfeile stellen Strömungsrichtung und Strömungsgeschwindigkeit dar (markiertes Detail entspricht Abbildung II-39).

Die Verteilung der Salzkonzentration des Untersuchungsgebietes ist in einem identischen Schnitt in Abbildung II-38 dargestellt. Die Verteilung von NaCl zeichnet die Mischungszonen von geothermischen Wasser und frischem Grundwasser auf der westlichen Seite und Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere

geothermischen und Meerwasser auf der östlichen Seite nach. Das durch die Störung einströmende geothermische Wasser verhindert das Eindringen des Meerwassers in den Aquifer.

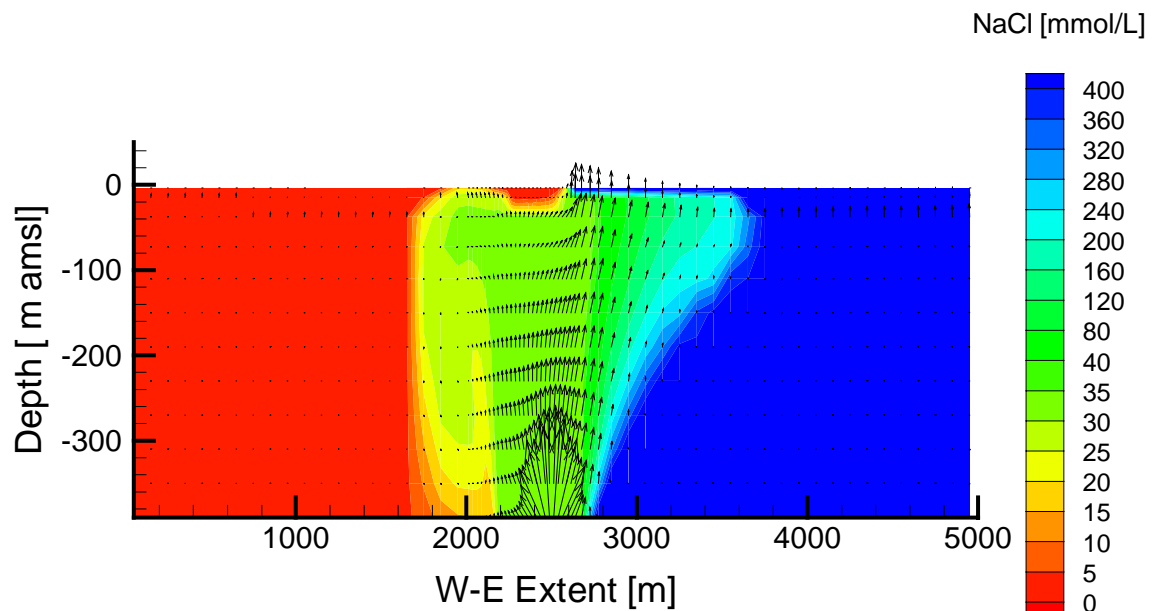


Abbildung II-38: NaCl-Verteilung im Untersuchungsgebiet für den natürlichen Zustand. Die Pfeile stellen Strömungsrichtung und Strömungsgeschwindigkeit dar.

Die Simulationsergebnisse für den natürlichen Zustand des Reservoirs wurden als Ausgangsbedingungen für die Berechnungen der Nutzungsszenarien des Aquifers verwendet. Aus den vorliegenden Informationen zur Entwicklung des Wasserverbrauchs wurde ein Nutzungsszenarium abgeleitet (Stöfen et al., 2000). Die Warmwassernutzung begann im Jahre 1863. Der letzte artesische Brunnen versiegte im Jahr 1969. Für die Periode von 1889 bis 1969 und den in dieser Zeit stetig steigenden Verbrauch wurde eine mittlere produzierte Wassermenge von 500 m^3 pro Tag angenommen. Bis in das Jahr 1980 wurde aufgrund des verstärkt steigenden Verbrauchs eine Förderung von $2000 \text{ m}^3/\text{Tag}$ angesetzt. Ab 1980 gibt es detaillierte Erhebungen über den tatsächlichen Verbrauch des geothermischen Wassers. Daher konnten für die Periode von 1986 bis 1998 folgende Förderraten festgelegt werden: $1560 \text{ m}^3/\text{Tag}$ (bis 1986), $1100 \text{ m}^3/\text{Tag}$ (bis 1990) und $1000 \text{ m}^3/\text{Tag}$ (bis 1998). Der Verbrauch von $1000 \text{ m}^3/\text{Tag}$ wurde auch für die Prognose bis in das Jahr 2018 angesetzt. Bis in das Jahr 1998 wurde der größte Teil des geothermischen Wassers aus zwei Bohrungen gefördert, die im oberen Teil des Aquifers verfiltert sind. Seit 1998 wird die entsprechende Menge aus einem neuen, im tieferen Bereich des Reservoirs verfilterten Brunnens, produziert.

In Abbildung II-39 ist die Temperaturverteilung, in Abhängigkeit der Nutzungsart, gezeigt. Zum Vergleich ist die Temperaturverteilung des natürlichen Zustands dargestellt. Es handelt sich um

das markierte Detail im oberen Bereich des Modells aus der Abbildung II-37. Der Bereich erstreckt sich von 1800 m bis 3600 m in west-östlicher Ausrichtung und von der Oberkante des Modells bis in 100 m Tiefe.

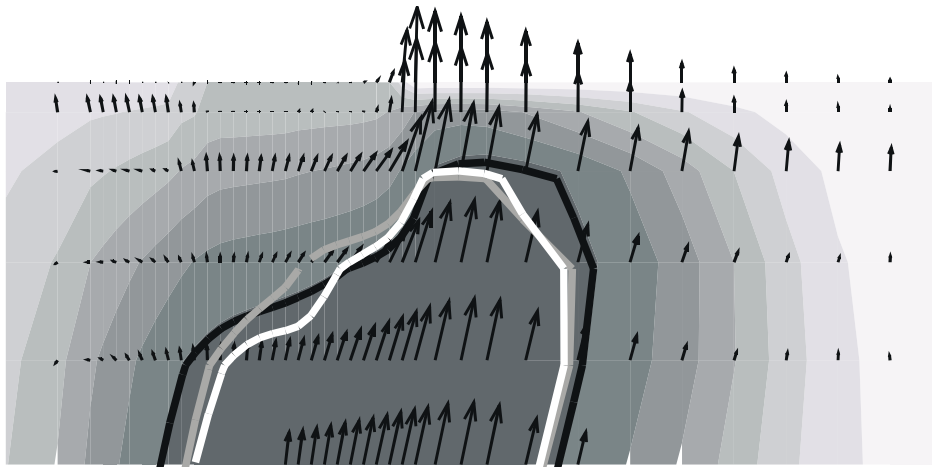


Abbildung II-39: Detail der Temperaturverteilung (vgl. Abbildung II-37) von 1800 m bis 3600 m in west-östlicher Richtung und den oberen 100 m des Modells. Die schwarze, weiße und graue Linie repräsentieren jeweils die 45°C Isotherme für den natürlichen Zustand, die Nutzung in 1980 und in 2018.

Mit der schwarzen, grauen und weißen Linie sind die 45°C Isothermen gekennzeichnet, die sich im natürlichen Zustand und für die Nutzungen in den Jahren 1980 bzw. 2018 ergeben. Es ist erkennbar, dass ausgelöst durch die Produktion bis in das Jahr 1980, mit zwei Bohrungen im oberen Bereich des Grundwasserreservoirs, die Bereiche mit den höchsten Temperaturen deutlich abgesenkt werden (weiße Kurve). Mit der Installation des tiefen Brunnens geht dieser Effekt zurück und es kommt wieder zu einem Anstieg des Ausdehnungsbereiches des heißen Wassers (graue Kurve), wobei der natürliche Ausgangszustand bislang noch nicht wieder erreicht werden konnte (schwarze Kurve).

In Abbildung II-40 ist die Salzkonzentration in der Bohrung aufgetragen, die dem Meerwasser-einfluss am stärksten unterliegt. Es ist zu sehen, dass es zum Eindringen von Meerwasser in die Bohrung kommt. Die schwarzen Punkte repräsentieren den berechneten natürlichen Zustand des Systems. Die roten Dreiecke zeigen, dass im Jahr 1980 ein sehr starker Einfluss des Meerwassers vorlag. Mit der verringerten Produktion bis ins Jahr 1998 (grüne Quadrate) kommt es zu einem Rückgang der Salzwasserkonzentration im oberen Bereich der Bohrung. Die Prognose für das Jahr 2018 (gelbe Rauten) zeigt, dass sich in dieser Bohrung der natürliche Zustand wieder einstellt.

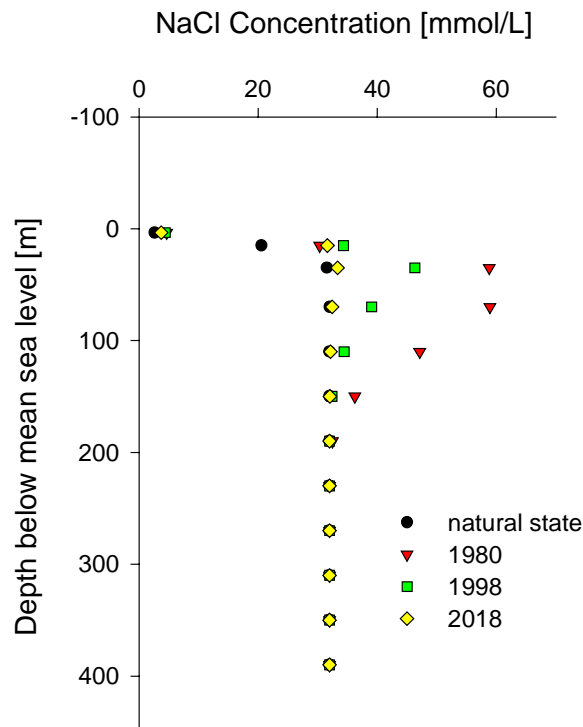


Abbildung II-40: Salzkonzentration in der vom Meer am meisten beeinflussten Bohrung in Abhängigkeit vom Produktionsregime.

Die zugehörige räumliche Verteilung der Salzkonzentration im Untersuchungsgebiet ist in Abbildung II-41 dargestellt. Der Ausschnitt zeigt das Zentrum des Modellgebietes im Bereich der Stadt Waiwera in einer Tiefe von 35 m. Die Graustufen und durchgezogenen schwarzen Kurven repräsentieren den berechneten natürlichen Zustand des Reservoirs. Die gestrichelten Linien zeigen die Verteilung der Salzkonzentration im Aquifer für das Jahr 1980. Die gepunkteten Kurven sind das Ergebnis der Prognose für das Jahr 2018.

Aus der Darstellung wird deutlich, dass das Pumpregime der 1980er Jahre eine, im Vergleich mit dem natürlichen Zustand, starke Meerwasserintrusion im südlichen Bereich des Aquifers hervorgerufen hat. Dieses Ergebnis stimmt mit Messungen der Salzkonzentration in den Bohrungen des Untersuchungsgebietes überein. Die Prognose für das Jahr 2018 zeigt, dass die Reduktion der Förderrate zu einem Rückzug der Salzwasserfront führt, wobei der natürliche Zustand aber noch nicht wieder hergestellt ist.

Geochemische Simulationen (mit dem Reaktionsmodul CHEMEQ von SHEMAT) des geothermischen Wassers, des Grundwassers und des Wassers im Estuar, so wie sie analysiert worden sind, haben gezeigt, dass alle im Gleichgewicht mit dem Mineral Calcit sind (KÜHN et al. 2001). Die Sättigungsindizes sind 0.02 für das zuströmende Grundwasser, 0.09 für das geothermische Wasser und -0.03 für das Meerwasser (Estuar).

Aufgrund der Mischung von drei verschiedenen Wässern und wechselnder Temperaturbereiche innerhalb des Untersuchungsgebietes muss mit möglichen Fällungen von Calcit, die zu Permeabilitätsveränderungen führen können, gerechnet werden.

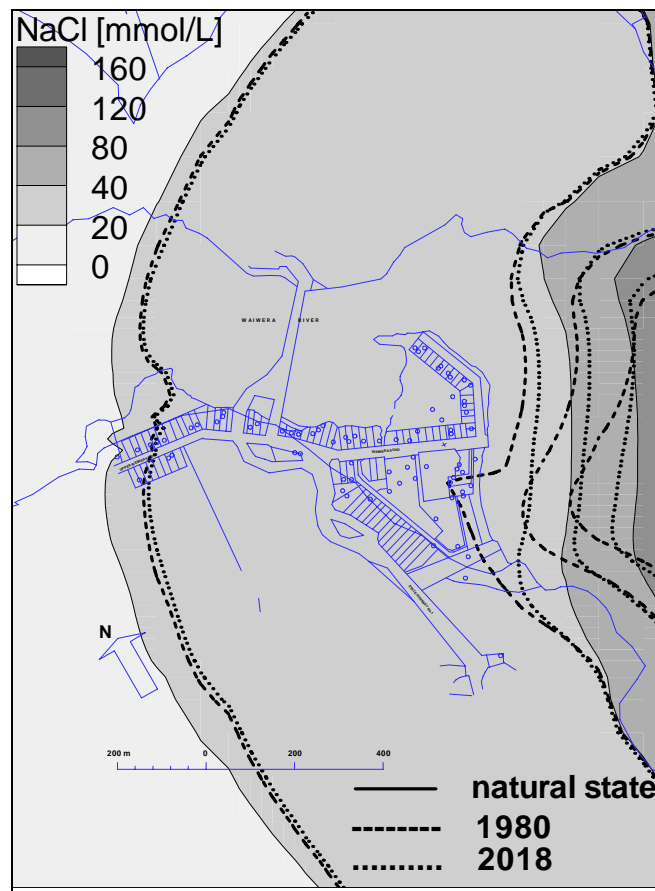


Abbildung II-41: Berechnete Verteilung der Salzkonzentration im Zentrum des Reservoirs in einer Tiefe von 35 m. Die Graustufen und die durchgezogenen Linien zeigen den natürlichen Zustand. Die gestrichelten und gepunkteten Linien zeigen die Konzentrationsverteilung für die Jahre 1980 und 2018.

Unter den gegenwärtigen chemischen und physikalischen Bedingungen im geothermischen Reservoir von Waiwera ist Calcit die einzige Mineralphase bei der mit Fällungen gerechnet werden muss. Die geologische Erkundung des Reservoirs hat gezeigt, dass der Sandstein z.T. mit Calcit zementiert ist (ARWB 1980; ARC 1997).

Die gekoppelte Simulation von Strömung, Wärmeausbreitung, Stofftransport und chemischen Reaktionen des Gebietes Waiwera hat gezeigt, dass Fällung als auch Lösung von Calcit im Untersuchungsgebiet stattfindet. Abbildung II-42 zeigt, dass es im zentralen Bereich, in dem das geothermische Wasser aufsteigt, zur Fällung von Calcit kommt. Dieser Bereich wird von einer Region umschlossen in der Calcitlösung stattfindet. Zum westlichen Rand des Gebietes wird der Bereich, in dem Calcitlösung stattfindet, wiederum von einer Fällungsregion begrenzt. Es handelt sich hierbei um die Mischungszone zwischen zuströmendem Grundwasser und geothermischem Wasser.

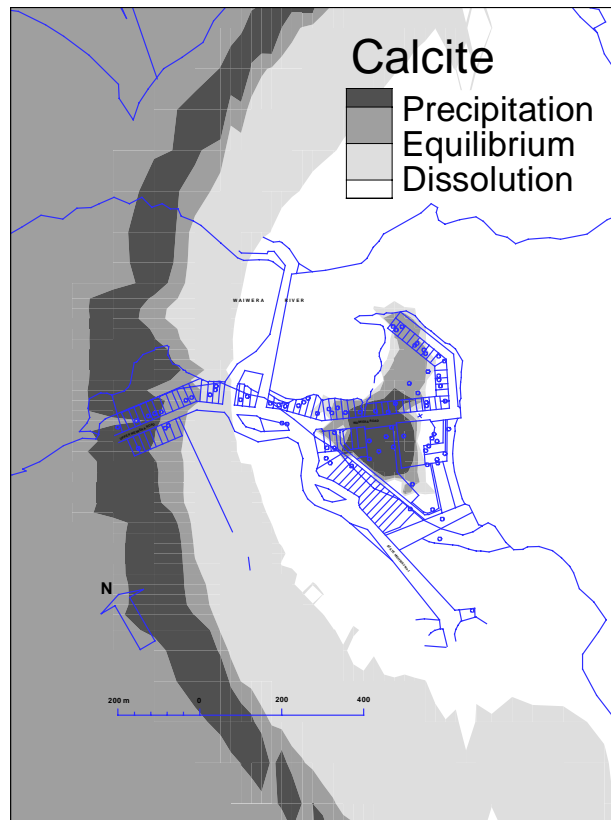


Abbildung II-42: Zentraler Bereich des Reservoirs von Waiwera in 35 m Tiefe in dem Calcit Fällung und Lösung stattfindet. Der Lösungsbereich (weiß) umschließt den Bereich in dem der das geothermische Wasser aufsteigt und Fällung des Minerals auftritt (dunkelgrau). Zum Westen wird das Gebiet durch eine Fällungszone begrenzt, die im Mischungsbereich vom Grundwasser und dem geothermischen Wasser liegt.

Aufgrund der Tatsache, dass die gelösten und gefällten Mineralmengen sehr gering sind, kommt es zu keiner, die hydraulischen Eigenschaften des Reservoirs beeinflussenden Alteration des Aquifers (KÜHN et al., 2001).

Abschließend lässt sich für die Untersuchungen des geothermischen Reservoirs von Waiwera sagen, dass SHEMAT ein geeignetes Werkzeug zur Untersuchung des Langzeitverhaltens geothermisch genutzter Aquifere ist. Nach der Kalibrierung des Modells konnten die Simulationen mit Hilfe von Felddaten evaluiert werden.

Die Betrachtung der Temperaturverteilungen sowie der Salzwasserkonzentrationen innerhalb des Aquifers zeigen auf, dass die Nutzung des Reservoirs bislang nicht nachhaltig ist.

Aufgrund der komplexen sich überlagernden Prozesse im Reservoir kommt es zur Fällung und Lösung von Calcit, die aber keinen Einfluss auf die hydraulischen Eigenschaften des Aquifers ausüben.

1.4. Subsidenzabschätzung im Umfeld einer Geothermischen Heizanlage

Die Förderung von Fluiden, wie Wasser, Öl oder Gas, kann die flächenhafte Absenkung der Landoberfläche (Subsidenz) zur Folge haben. Im Rahmen der weltweiten Bewirtschaftung von Grundwasserreservoirien sind umfangreiche Fälle von Subsidenz bekannt. Es handelt sich dabei um genutzte Aquifere mit Teufenlagen von oberflächennah bis in Tiefen von 4000 m (GAMBOLATTI et al., 1996). Hinsichtlich der Betriebssicherheit und Umweltverträglichkeit Geothermischer Anlagen muss eine Abschätzung für möglicherweise auftretende Subsidenz als Folge der Nutzung dieser tief liegenden Aquifere durchgeführt werden. Grund dafür ist, dass sich in der Vergangenheit gezeigt hat, dass es beim Betrieb von Geothermischen Anlagen zu erheblicher Subsidenz kommen kann. So wurden bis zu 14 m Subsidenz am Wairakei-Feld in Neuseeland festgestellt, ausgelöst durch eine Geothermische Anlage, die seit 1950 in Betrieb ist. Die Subsidenzraten in der Zeitspanne bis heute betragen bis zu 500 mm/Jahr. Die Subsidenz tritt dort auf einer Fläche von 1 km² auf (ALLIS, 1982; ALLIS et al., 1997). Subsidenz dieser Größenordnung ist jedoch bisher nur für Anlagen bekannt, bei denen das Thermalwasser ausschließlich gefördert und nicht wieder eingeleitet wird und zusätzlich mächtige, wenig konsolidierte Tonschichten im Bereich der Förderbrunnen vorliegen. Im Bereich der in Norddeutschland geothermisch genutzten Gebiete wird das geförderte Thermalwasser über Injektionsbrunnen in den Untergrund zurückgeführt, weil aufgrund seiner Salinität eine oberflächennahe Entsorgung ausgeschlossen ist.

Die Ursachen sowie Vorhersagemöglichkeiten für Subsidenz, die beim Betrieb von Geothermischen Anlagen mit einer Förder- und einer Injektionsbohrung in Norddeutschland auftreten können, werden hier diskutiert.

1.4.1. Subsidenz

Das Senken und Heben von Landoberflächen wird durch elastoplastische Verformungen der Locker- und Festgesteine bewirkt. In der Bodenmechanik ist der Begriff der Setzung für die Verformung poröser Medien gebräuchlicher. Subsidenz entsteht durch Änderungen der effektiven Spannung, die durch ein Abfallen der Fluidspannung in den Poren verursacht wird, bedingt durch Veränderungen des Strömungsfeldes bei unveränderter totaler Spannung (BUSCH et al., 1993).

Zwei Ansätze existieren zur Analyse von Setzung bzw. Subsidenz. Der quantitative Zusammenhang zwischen der Steigerung der effektiven Spannung und Kompression ist von TERZAGHI (1925) erstmals erwähnt. Die daraus folgende Konsolidationstheorie von TERZAGHI, die den zeitlichen Ablauf der Kompression beschreibt, geht von einem einaxialen Spannungszustand aus, d.h. die Querdehnung wird nicht berücksichtigt. Demgegenüber lieferte BIOT (1941) einen Ansatz, die Subsidenz unter Beachtung eines dreiaxialen Spannungszustandes zu beschreiben. Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere

zustandes zu betrachten. Grundsätzlich ist Setzung ein dreidimensionales Phänomen. In der Praxis der Bodenmechanik ist der Ansatz von TERZAGHI aber gebräuchlicher. Er wird als Näherung an die entsprechende Lösung von BIOT betrachtet. In der Bodenmechanik wird in den meisten durchgeführten Analysen der Subsidenz angenommen, dass die Deformationen, sowohl des Strömungsfeldes als auch des Sediments, hauptsächlich in der senkrechten Richtung auftreten. Das heißt, jede seitliche Deformation wird vernachlässigt. In diesem Fall stimmen die Theorien von BIOT und TERZAGHI überein. Für den Fall, dass die laterale Deformation eine signifikante Rolle spielt, verringern sich die Beträge der Subsidenz. Das bedeutet, dass die einaxiale Betrachtungsweise nach TERZAGHI eine sogenannte „worst case“ Abschätzung liefert. Um einen Überblick über die zu erwartende Subsidenz beim Betrieb Geothermischer Anlagen zu erhalten wird im folgenden die einaxiale Betrachtungsweise nach TERZAGHI angewendet.

Eine weitere mögliche Ursache für Subsidenz, neben dem Porenwasserdruckabfall, ist die Wiedereinleitung des abgekühlten Wassers. Die Temperaturdifferenz zwischen der ursprünglichen Formationstemperatur und dem eingeleiteten kalten Wasser kann eine Kontraktion des Gesteinsmaterials im Bereich des Injektionsbrunnens zur Folge haben. Eine dadurch ausgelöste Absenkung ist abhängig vom Längendehnungskoeffizienten des Bodenmaterials und dem aktuellen Temperaturunterschied des geförderten und eingeleiteten Wassers.

1.4.2. Untersuchtes Modellsystem

Der typische Speicher, aus dem in Norddeutschland mineralisiertes Thermalwasser gefördert wird, ist ein hochporöser, bindemittelarmer Sandstein des Mesozoikums. In erster Linie kommen die Wässer aus den geologischen Formationen Unterkreide bis Rät in Betracht. Die Tiefenlage der mesozoischen Aquifere beträgt 500 bis 3000 m. Unter Voraussetzung der durchschnittlichen Geothermischen Tiefenstufe (3°C pro 100 m), entspricht das einem potentiellen Temperaturintervall von 25 bis 100°C , sofern keine Temperaturanomalien vorliegen. Die Mineralisation besteht zum größten Teil aus Natriumchlorid und erhöht sich im Durchschnitt mit je 100 m Tiefenzunahme um 10 g/l (SCHULZ & WORMBS, 1991).

Aus den verfügbaren Daten wurde exemplarisch ein für Norddeutschland typischer Grundwasserleiter für die numerischen Simulationen festgelegt. Dieser genutzte Grundwasserleiter soll in 1500 m Tiefe liegen und eine Mächtigkeit von 50 m haben. Das Grundwasser wird bis kurz unter die Geländeroberkante als gespannt angenommen. Von den über dem Grundwasserspeicher liegenden Schichten wird nur die direkt überlagernde Schicht mit in die Betrachtungen einbezogen. Diese Schicht soll eine Tonsteinschicht sein. Die verwendeten Kennwerte für den genutzten Grundwasserleiter und für die darüber liegende

Tonsteinschicht sind in Tabelle 4 aufgelistet. Die Anordnung der Sondendublette bestehend aus der Produktions- und der Injektionsbohrung ist in Abbildung II-43 dargestellt. Die Bohrungen haben einen Abstand von 900 m. Beide Bohrungen sind über die gesamte Sandsteinschicht zwischen 1450 und 1500 m Tiefe verfiltert (vollkommene Brunnen).

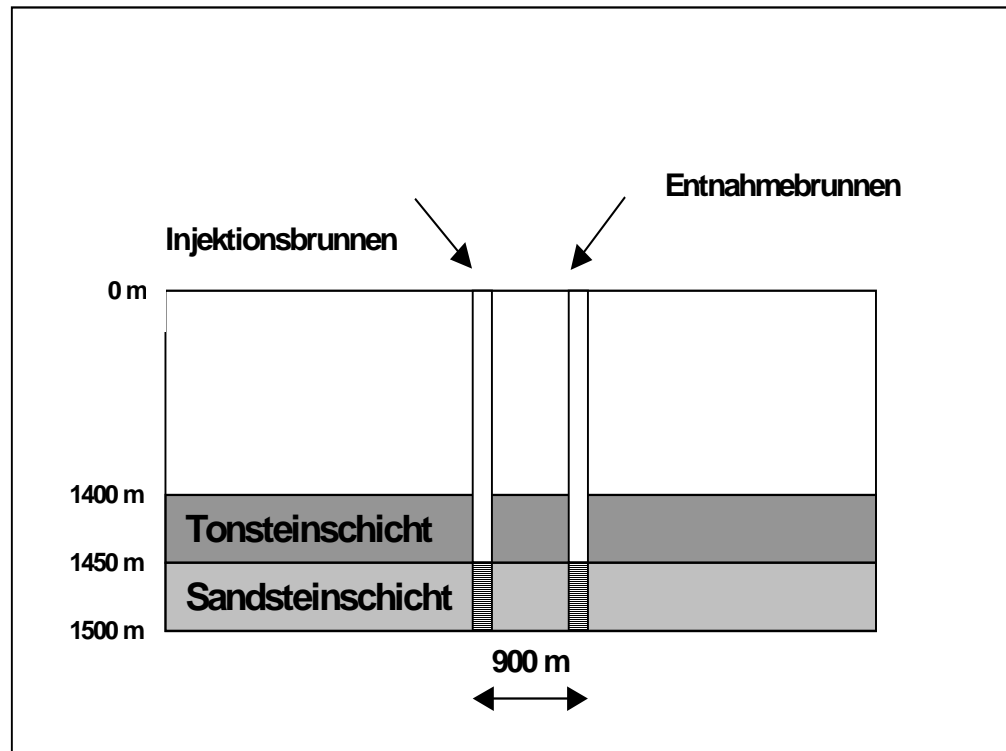


Abbildung II-43: Berechnete Subsidenz im Vergleich mit der im Geothermischen Gebiet von Wairakei gemessenen Werten.

1.4.3. Abschätzung mit Hilfe analytischer Lösungen

Eine durchschnittlich zu erwartende Absenkung der Druckspiegelhöhe durch den Betrieb eines Förderbrunnens einer Geothermischen Anlage ist 30 m. Daraus lässt sich eine veränderte Druckhöhe errechnen, die dem Grundwasserleiter als neues Festpotential zugeordnet wird. Es wird angenommen, dass die Porenwasserdruckabnahme im Grundwasserleiter über die gesamte Mächtigkeit konstant und unendlich ausgedehnt erfolgt. Subsidenz folgt aus der Veränderung, d.h. Zunahme der effektiven Spannung, die sich aus der Abnahme des Porenwasserdruckes errechnet. Eine Absenkung der Wassersäule um 30 m entspricht einem Porenwasserdruckabfall von 300 kN/m^2 auf 14700 kN/m^2 (Ausgangsdruck 15000 kN/m^2 , Tiefe 1500 m). Die effektive Spannung σ' wird aus der Beziehung zwischen der totalen Spannung σ und dem Porenwasserdruck p errechnet:

$$\sigma = \sigma' + p \quad (\text{II-16})$$

Die totale Spannung ergibt sich aus der Wichte des Bodens multipliziert mit der Tiefe. Mit einer Wichte des Bodens von 21 kN/m^2 und bei einer Teufe von 1500 m ergibt sich eine totale Spannung von 31500 kN/m^2 . Daraus folgt eine effektive Spannung von 16800 kN/m^2 (Ausgangsspannung 16500 kN/m^2).

Die Berechnung der Subsidenz oder Setzung s folgt aus der Summe:

$$s = \sum_{i=1}^n \alpha_i \Delta \sigma_i' \Delta z_i \quad (\text{II-17})$$

Für die Setzungsberechnung mit Hilfe der Gefügekompessibilität α werden geologische Schichten in i Unterschichten mit einer Mächtigkeit Δz_i aufgeteilt, um der Variation der Kompessibilität mit der Tiefe Rechnung zu tragen (CRAIG, 1992).

Die Gefügekompessibilität lässt sich für die Sandsteinschicht aus dem dimensionslosen Speicherkoeffizienten berechnen, der für einen typischen Geothermischen Aquifer zwischen 10^{-4} und 10^{-6} liegt (freundl. mündl. Mitteilung Dr. Poppei, Firma Geothermie Neubrandenburg). Der Speicherkoeffizient wird aus Felddaten bestimmt und berücksichtigt aus diesem Grund die vorliegende effektive Spannung. Die Gefügekompessibilität α kann in Abhängigkeit des Speicherkoeffizienten S_s , der Kompessibilität des Fluids β , der Porosität n , der Dichte des Wassers ρ sowie der Erdbeschleunigung g mit Gleichung II-18 bestimmt werden:

$$\alpha = \frac{S_s}{\rho g} - \beta n \quad (\text{II-18})$$

Je größer der Speicherkoeffizient einer Formation ist, desto größer ist die Subsidenz, die in dieser Schicht aufgrund der Porenwasserdruckabnahme folgen kann. Aus diesem Grund wird der größte Speicherkoeffizient von 10^{-4} für die Berechnung der Gefügekompessibilität nach Gleichung II-18 herangezogen ("worst-case" Abschätzung). Für eine Schichtdicke von 50 m , eine Dichte des Wassers von 1000 kg/m^3 , der Erdbeschleunigung von 9.81 m/s^2 sowie der Kompessibilität des Wassers von $4.8 \cdot 10^{-10} \text{ Pa}^{-1}$ bei einer Porosität von 0.25 ergibt sich eine Gefügekompessibilität von $8.4 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$. Mit den angegebenen Werten lässt sich für die Sandsteinformation mit Gleichung II-17 eine Subsidenz von 1.3 mm berechnen.

Für Tonsteine liegen keine Speicherkoeffizienten für den betrachteten Teufenbereich vor. Daher wird eine Abschätzung der Gefügekompessibilität, der setzungsempfindlichen Schicht, mit der effektiven Spannung und dem Kompressionsbeiwert dieser Schicht durchgeführt. Die Kompressionsbeiwerte für Tone liegen zwischen 0.1 und 0.5 . Daraus folgen bei einer effektiven Spannung von 16500 kN/m^2 Gefügekompessibilitäten zwischen $2.0 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$ und $9.8 \cdot 10^{-9} \text{ Pa}^{-1}$

für 1500 m Tiefe. Nach Gleichung II-17 beträgt die Subsidenz bei einer 50 m mächtigen Tonsteinschicht dann zwischen 147 mm und 29.5 mm.

Die Gefügekompressibilitäten des Sandsteins und des Tonstein unterscheiden sich um etwa zwei Größenordnungen. Daraus folgt, dass die Setzung im Sandstein 20fach geringer ist als die im Tonstein. Für die weiteren Modellierungen wird daher die Subsidenz der Sandsteinschicht vernachlässigt.

1.4.4. Anwendung des MODFLOW "Interbed-Storage-Package"

Das „Interbed-Storage Package“ (LEAKE & PRUDIC, 1991) wurde für die Simulation von Kompaktionsprozessen entwickelt, die in Aquifersystemen stattfinden. Das Package ist integriert in das modulare, auf finite Differenzen beruhende Grundwasserströmungsmodell MODFLOW (HARBAUGH & McDONALD, 1996) vom U.S. Geological Survey.

Im „Interbed-Storage Package“ wird angenommen, dass die Komprimierung oder Dehnung des Sediments zur Änderung des hydraulischen Drucks proportional ist. Die Proportionalitätskonstante ist das Produkt aus der Gerüstkomponente des Speicherkoeffizienten und der Mächtigkeit des Sediments. Die Integration in das Grundwassermodell MODFLOW wurde durch einen zusätzlichen Term in der Strömungsgleichung realisiert.

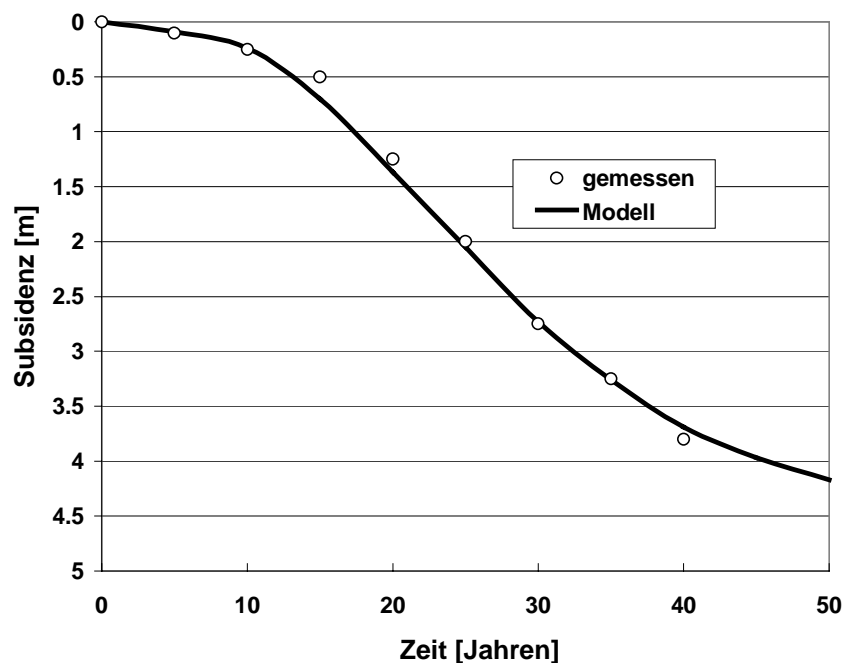


Abbildung II-44: Berechnete Subsidenz im Vergleich mit der im Geothermischen Gebiet von Wairakei gemessenen Werten.

Aufgrund der Tatsache, dass MODFLOW ein isothermisches Strömungsmodell ist, wurde zunächst durch Vergleichsrechnungen mit Daten aus der Literatur gezeigt (ALLIS et al., 1997; Absenkungsprozesse im Bereich der Geothermischen Anlage Wairakei, Neuseeland), dass das Modell unter Verwendung von temperaturangepassten hydraulischen Leitfähigkeiten in der Lage ist, die auftretende Subsidenz zu berechnen (Abbildung II-44). Auf dieser Grundlage lassen sich Abschätzungen für den Betrieb einer Geothermischen Anlage treffen.

1.4.5. Numerische Parameteranalyse

Die Parameterstudie hat gezeigt, dass die hydraulischen Kennwerte der setzungsempfindlichen Schicht (hier Tonstein) für die Absolutwerte der Subsidenz einen geringen Einfluss haben. Im Gegensatz dazu sind die hydraulischen Kennwerte des geothermisch genutzten Grundwasserleiters (hier Sandstein) für die Subsidenz, die vor allem in der Tonsteinschicht auftritt, von entscheidender Bedeutung. Aufgrund der Tatsache, dass die Kennwerte des Grundwasserleiters im allgemeinen besser bekannt sind als die der darüber liegenden Schichten, ist eine Abschätzung der Subsidenz leichter möglich. In Tabelle II-3 ist eine entsprechende Bewertung der in der Parameterstudie untersuchten Einflussparameter gegeben.

Tabelle II-3: Ergebnisse der Parameterstudie. Bewertung der Einflussgrößen.

Parameter	Subsidenz
geringe Permeabilität der Sandschicht	+++
hohe Kompressibilität der Tonsteinschicht	+++
geringe Mächtigkeit der Sandschicht	++
hohe Mächtigkeit der Tonsteinschicht	++
hohe Permeabilität der Tonsteinschicht	+
hohe Anisotropie der Tonsteinschicht	-

+++ stark erhöhend / ++ erhöhend / + Geringer erhöhend
- verringernd

Über die Absenkung (hydraulische Höhen) im Umfeld des Förderbrunnens wird die Subsidenz der Tonsteinschicht beeinflusst. Daraus resultiert, dass Parametervariationen in der Sandsteinschicht eine entscheidende Rolle spielen, weil diese die Absenkung maßgeblich bestimmen. Unter sonst gleichen Bedingungen erhöht sich die Subsidenz in der Tonsteinschicht und die Ausdehnung des subsidenzbeeinflussten Bereichs mit abnehmender Mächtigkeit und Permeabilität der Sandsteinschicht. Die Variation der Permeabilität der setzungsempfindlichen Tonsteinschicht hingegen zeigt keinen Einfluss auf den Betrag der Subsidenz und auch die Reichweite verändert sich nur vergleichsweise gering. Es zeigt sich jedoch, dass sich mit verringerter Permeabilität des Tonsteins, der Gleichgewichtszustand (Zeitpunkt der max. Subsidenz) später und mit erhöhter Permeabilität früher einstellt. Die

Erhöhung der Mächtigkeit bzw. der Kompressibilität der Tonsteinschicht hat eine Erhöhung der Subsidenz sowie eine vergrößerte Reichweite der Subsidenz zur Folge.

Diese Untersuchungen haben gezeigt, dass bei den Norddeutschen Gegebenheiten davon ausgegangen werden kann, dass die Subsidenz in keinem Fall Werte im Meterbereich annehmen wird. Für den Fall eines "typischen" Reservoirs ergibt sich eine maximale Subsidenz im Bereich der Förderbohrung von 18 mm (Abbildung II-45). Dieser Wert liegt unter dem Wert von 2 cm, der in der Baubranche als kritisch angesehen wird (SCHNEIDER, 1994).

Bei den bis hierher gemachten Betrachtungen bleibt das überlagernde Gesteinsgewölbe unberücksichtigt, das evtl. eine stützende Funktion ausübt, so dass die Setzung im Reservoir sich nicht bis an die Oberfläche auswirken kann. Es ist an dieser Stelle nicht möglich, detaillierte Angaben über die Möglichkeit oder Größe dieses Effekts zu machen.

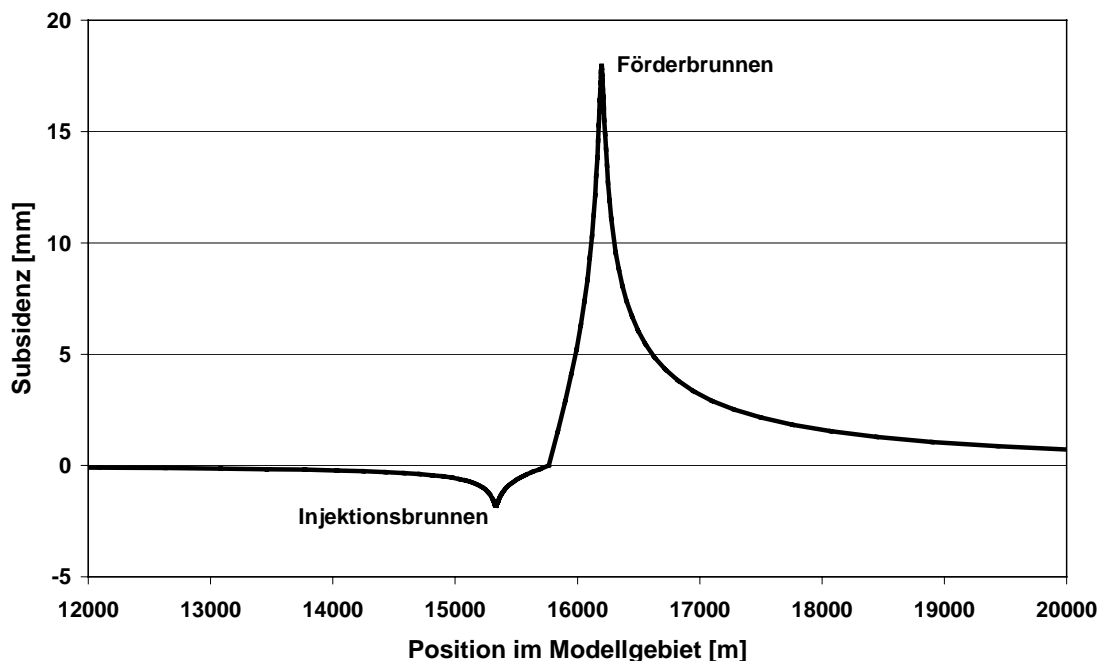


Abbildung II-45: Längsschnitt auf Höhe der Brunnen der Geothermischen Heizanlage eines "typischen" Aquifers. Dargestellt ist die Subsidenz, die aufgrund der Förderung und Rückleitung des Geothermischen Wassers auftritt.

Die größte prognostizierte Subsidenz von knapp 180 mm im Falle eines schlecht permeablen Reservoirs liegen bereits in einem Bereich, der eine wirtschaftliche Nutzung ausschließt. Durchaus ein Problem stellt die Kompressibilität der überlagernden Tonsteinschicht dar. Bei einer zehnmal höheren Kompressibilität kann die Subsidenz Werte von 180 mm erreichen. Aufgrund der Tatsache, dass für die betrachteten Teufen nur unzureichende und grob abgeschätzte Kompressibilitätsdaten vorliegen, soll hier auf Forschungsbedarf hingewiesen werden.

Beachtet werden muss, dass es sich bei den durchgeführten Simulationen um "worst-case" Abschätzungen handelt, da die Berechnungen mit dem Setzungsmodell nach Terzaghi (eindimensional) und nicht nach Biot (dreidimensional) durchgeführt wurden. Für entsprechende Berechnungen nach Biot würde sich die Subsidenz noch verringern.

An der Geothermischen Anlage Neustadt-Glewe wurden Untersuchungen im Gelände durchgeführt. In einigen Bereichen wurde eine Absenkung von 3 cm gemessen (ABSCHLUSSBERICHT, 1997). Das zeigt, dass die Simulationen des hier zu Grunde gelegten "typischen" Aquifers, der stark an den Eigenschaften des Reservoirs in Neustadt-Glewe angelehnt wurde, relativ gut mit den Feldbeobachtungen übereinstimmen.

Vergleicht man die analytisch berechnete Absenkung um die Injektionsbohrung von 42 mm, ausgelöst durch eine mögliche Kontraktion des Gesteins aufgrund der Abkühlung, mit der berechneten Schwellung von 1.8 mm aufgrund des Reinjektionsdruckes (Abbildung II-44), so ist ersichtlich, dass diese beiden Prozesse einander entgegenwirken, sich jedoch nicht aufheben. In der Summe wird ein Betrag erreicht, welcher der im Feld beobachteten Absenkung entspricht. Damit ergibt sich eine Subsidenz sowohl für den Bereich der Förder- und der Injektionsbohrung im Zentimeterbereich (2-3 cm).

Abschließend lässt sich sagen, dass Subsidenz im Bereich von zehner Metern, wie sie in Wairakei (Neuseeland) beobachtet wurde, vermutlich nur durch eine Überproduktion des Reservoirs auftreten und das geförderte Wasser nicht wieder injeziert wird. Hinzukommt, dass die setzungsempfindliche Schicht in Wairakei, aufgrund des deutlich dichter an der Oberfläche gelegenen Reservoirs, eine um 5 Größenordnungen höhere Kompressibilität aufweist.

2. Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die Nutzung und Verwertung der Ergebnisse dieses Projektes erfolgt hauptsächlich als Bestandteil des gesamten Verbundvorhabens „Hydraulisches, thermisches und mechanisches Verhalten geothermisch genutzter Aquifere“ (FKZ 0326995).

Die in diesem Vorhaben erzielten Ergebnisse sind von direkter Bedeutung für eine Reihe gegenwärtig diskutierter Projekte zur hydrothermalen Erdwärmenutzung, indem sie einen Beitrag zur Bewertung des Betriebsrisikos über die gesamte geplante Betriebsdauer leisten. Durch die bestehenden Kontakte zu an solchen Projekten beteiligten oder interessierten Partnern in Forschung und Industrie, Publikationen und Tagungspräsentationen sind die Ergebnisse, Entwicklungen und Möglichkeiten, die aus dem Verbundvorhaben erwachsen bereits während des Verlaufs weitgehend bekannt gemacht worden (vgl. II-4. – Veröffentlichungen im Rahmen des Projekts). Dazu diente auch das Kolloquium „Prognose des Langzeitverhalten geothermisch genutzter Aquifere“, das im April 2000 in Aachen veranstaltet wurde und in dem die Resultate des Verbundvorhabens den potentiellen Nutzern aus Industrie und Forschung detailliert vorgestellt wurden.

Zentrales Entwicklungsergebnis des Verbundvorhabens, in das die Entwicklungen und neu erarbeiteten petrophysikalischen und hydrogeochemischen Ansätze der vier Teilprojekte eingeflossen sind, ist das Simulationswerkzeug „Processing SHEMAT / SHEMAT“. Mit seiner Hilfe ist das experimentell und aus Betriebserfahrungen bisher noch nicht zugängliche Langzeitverhalten der Speichereigenschaften eines geothermisch genutzten Sandsteinaquifers zuverlässiger quantifizierbar.

Bereits jetzt wird das Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT von einer Reihe von Forschungseinrichtungen und mit der Nutzung hydrogeothermaler Energie befasster Firmen im Rahmen von Forschungsprojekten genutzt und hat zu Veröffentlichungen, Dissertationen und Diplomarbeiten beigetragen. Die aktuelle Nutzerliste mit Angabe der Verwendungszwecke ist an der TU Hamburg-Harburg (m.kuehn@tu-harburg.de) erhältlich.

Eine Darstellung des Programmpaketes und der Ergebnisse ist Bestandteil des WWW-Angebots des Instituts für Angewandte Geophysik der RWTH Aachen (<http://www.rwth-aachen.de/geop/>) und des Arbeitsbereichs Wasserwirtschaft und Wasserversorgung der TU Hamburg-Harburg (<http://www.tu-harburg.de/www/>). Dort ist die entwickelte Software auch verfügbar.

Mit Hilfe von Simulationsrechnungen können optimierte, den konkreten hydrogeochemischen und Zementationsbedingungen angepasste Nutzungsszenarien für jeden Standort erarbeitet werden. Im Rahmen eines vom BMWi geförderten Forschungsvorhabens an der RWTH

Aachen (FKZ 0327095) ist eine weitere Entwicklung bereits angelaufen, in der u.a. auf der Basis des jetzt zur Verfügung stehenden Simulationsprogramms das Aufschlussrisiko von teilweise zementierten Rät aquiferen in NE-Deutschland verringert werden soll. Dort kann und soll auch die Zusammenarbeit mit Energieversorgern als potentiellen Betreibern aufgebaut werden.

Es können bei der Auswahl von Standorten für geothermische Heizzentralen Empfehlungen erarbeitet werden, wie das Betriebsrisiko durch Konditionierung des Thermalwassers oder bestimmte Betriebsweisen der Anlage minimiert werden kann. Es ist weiterhin möglich, den Einfluss von Betriebsstörungen auf das Injektionsverhalten abzuschätzen. Weitergehend ist eine Bewertung von Maßnahmen zur Beseitigung von Betriebsstörungen hinsichtlich ihrer Wirkung auf das Injektionsverhalten möglich.

Ein wichtiges Anwendungsgebiet ergibt sich aus der wachsenden Nutzung von Aquiferen als Wärme- und Kältespeicher. Die dabei ablaufenden zyklischen Temperaturvariationen (Jahresgang) können bei Überschreitung von Grenzwerten zu Mineralsfällungs- und Lösungsreaktionen führen. Durch für den jeweiligen Aquifer maßgeschneiderte Wärme- bzw. Kälteeinträge muss das vermieden werden. Mit SHEMAT steht dabei sowohl in der Planungs- als auch in der Betriebsphase ein geeignetes Werkzeug zur Verfügung. Insbesondere wird der dort relevante Temperatur- und Salinitätsbereich, wie in diesem Projekt nachgewiesen, quantitativ zuverlässig beherrscht.

Damit steht ein wichtiges Werkzeug zur Verfügung, dass bei der Planung einer wirtschaftlichen Nutzung hydrothormaler Ressourcen in Norddeutschland für jeden potentiellen Betreiber von unmittelbarem ökonomischen Interesse ist. Auf diese Weise hat das Forschungsvorhaben einen Beitrag dazu geleistet, dass das vorhandene Erdwärmepotential in dieser Region verstärkt wirtschaftlich genutzt werden kann. Vergleichbare systematische Studien und Simulationswerkzeuge sind derzeit auf dem Markt nicht verfügbar.

Schutzrechte oder Patente wurden im Rahmen dieses Projektes nicht angemeldet.

3. Fortschritt bei anderen Stellen

Vergleichbare systematische Studien und Modellierungswerkzeuge sind derzeit auf dem Markt nicht verfügbar. Insbesondere ist hierbei die Simulation von Lösungs- und Fällungsreaktionen bei erhöhten Temperaturen in hochsalinaren Wässern zu erwähnen und die daraus resultierenden Rückkopplungen der Porositätsveränderungen auf die hydraulische Leitfähigkeit des Reservoirs.

Im Rahmen des vom BMBF geförderten und vom GFZ Potsdam koordinierten Verbundforschungsvorhabens „Evaluierung geowissenschaftlicher und wirtschaftlicher Bedingungen für die Nutzung geothermaler Ressourcen“ wurden von SEIBT et al. (1999) Ergebnisse zur Untersuchung von Minerallöslichkeiten in Abhängigkeit des Gasgehaltes der geothermischen Wässer vorgestellt. Die geochemischen Modellierungen konnten aufgrund der Verwendung des Programms SOLMINEQ (Kharaka & Barnes, 1973) unter Berücksichtigung variierender Drucke durchgeführt werden. Es hat sich gezeigt, dass das Entweichen von Kohlendioxid aus der flüssigen Phase mit Karbonat- und Eisenausfällungen verbunden sein kann. Diese Ergebnisse zeigen die Bedeutung der Gasgleichgewichte für die geochemische Modellierung geothermischer Wässer auf. Es ist jedoch zur Zeit aufgrund der fehlenden thermodynamischen Daten noch nicht möglich in hochsalinaren Lösungen für verschiedene Drucke exakte Berechnungen durchzuführen (vgl. II-1.1).

Die Dissertation von Wenderoth (1998) stellt die Ergebnisse von numerischen Modellrechnungen für den Betrieb geothermischer Dubletten unter den Bedingungen von Aquiferen aus dem norddeutschen Becken dar. Damit befindet sie sich mit Untersuchungsgegenstand und Methodik nahe an der Thematik in diesem Projekt. Die interessantesten Schwerpunkte der Arbeit von Wenderoth lagen jedoch auf der Untersuchung des Wärmeaustausches mit Grund- und Deckgebirge des Aquifers und der Rolle der Temperaturabhängigkeit der Viskosität. Es konnte auf die Ergebnisse dieser Arbeit zurückgegriffen werden, besonders hinsichtlich der Entscheidung 2- oder 3-dimensional zu rechnen und bei der zeitlichen Entwicklung der Fördertemperaturen. Hauptresultat ist eine deutlich verringerte Durchbruchzeit bei 2-dimensionalen Modellen, welche den Wärmetransport aus dem Liegenden und Hangenden vernachlässigen und die Quantifizierung des Effekts, dass die Temperaturabhängigkeit der Viskosität zum bevorzugten Zufluss von wärmeren Wasser an der Förderbohrung führt und damit die Lebensdauer einer Anlage verlängert. Es ist zu erwähnen, dass die Untersuchungen von Wenderoth sich ausschließlich auf Strömung und Wärmetransport beschränkt haben. Das verwendete Simulationsprogramm FEFLOW ist nicht in der Lage, komplexe chemische Prozesse und permeabilitätsverändernde Rückkopplungen zu berücksichtigen. Dies ist jedoch mit SHEMAT möglich.

WHITE & CHRISTENSON (2000) haben ein Modell aufgebaut für ein hydrothermales Reservoir und dieses mit dem Programm TOUGH (PRUESS, 1987) simuliert. Darin haben sie die Wechselwirkungen zwischen Wasser und Gestein untersucht im Hinblick auf die Bildung sekundärer Minerale. Die Simulation wurde für einen geologischen Zeitraum von 15,000 Jahren durchgeführt für einen begrenzten Satz an Spezies (H_2O , H^+ , Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^- , HS^- , SiO_2 , Al^{+++} , Ca^{++} , K^+), wobei für das untersuchte Gebiet keine hohen Salinitäten berücksichtigt werden mussten. Zudem ist das Programm TOUGH, im Gegensatz zu SHEMAT, nicht in der Lage Permeabilitätsveränderungen mit in die Simulationen einzubeziehen.

4. Veröffentlichungen im Rahmen des Projekts

Die Ergebnisse, die im hier dargestellten Projekt gewonnen wurden, sind im Rahmen von Vorträgen auf Kongressen und Beiträgen in Fachzeitschriften bereits veröffentlicht oder dort im laufenden Verfahren (eingereichte Manuskripte).

Die bisher zur Verfügung stehenden geochemischen Simulationsprogramme (vgl. I-2.3.) wurden zunächst auf ihre Tauglichkeit für die in diesem Projekt vorgesehenen Aufgaben geprüft. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen wurden als Poster und Manuskript veröffentlicht:

- KÜHN M. & SCHNEIDER W. (1998): Entwicklung und Anwendung eines geochemisch-hydrothermodynamischen Modells – Betrachtung des geochemischen Moduls. In: Geothermie: Forschung, Entwicklung, Markt (Hrsg.: Geothermische Vereinigung), 5. Geothermische Fachtagung, 12.05.-15.05.1998, Straubing. 324-331

Ein chemisches Modul für ein numerisches Simulationsprogramm in der Art wie es in Abschnitt II/1.1. beschrieben ist wurde in der Literatur bislang noch nicht veröffentlicht. Aus diesem Grund sind die durchgeführten Arbeiten unter folgendem Titel als Kapitel für ein Fachbuch eingereicht worden und zur Zeit im Druck:

- KÜHN M., BARTELS J., PAPE H., SCHNEIDER W. & CLAUSER C. (im Druck): Modeling Chemical Brine-Rock Interaction in Geothermal Reservoirs. in: *Water Rock Interaction* (eds. Stober, I., Bucher, K.), Kluwer Verlag

Das Programmpaket Processing SHEMAT / SHEMAT und dessen Anwendung für die Untersuchung geothermischer Aquifere (Abschnitte II/1.1. und II/1.2.) wurde der nationalen und internationalen Fachwelt durch Posterpräsentationen vorgestellt:

- KÜHN M., BARTELS J., PAPE H., SCHNEIDER W. & CLAUSER C. (2000): A simulation tool for modeling chemical brine-rock interaction in geothermal reservoirs. 6. Geothermische Fachtagung, 19.10.-20.10.2000, Herne.
- KÜHN M., BARTELS J., PAPE H., SCHNEIDER W. & CLAUSER C. (2000): Modeling Chemical Brine-Rock Interaction in Geothermal Reservoirs. AGU Conference, 10.12.-16.12.2000, San Francisco.

Voruntersuchungen die hinsichtlich der Fragestellung der Simulation von Permeabilitätsveränderungen durchgeführt wurden, sind als Vortrag präsentiert worden:

- KÜHN M., BARTELS J., PAPE H., SCHNEIDER W. & CLAUSER C. (1999): Simulation of permeability changes in aquifers caused by chemical reactions, 10th meeting of the

European Union of Geosciences (28. March - 1. April 1999, Strasbourg), Terra Abstracts, 4 (1) S. 585

Die Ergebnisse der Untersuchungen zum Verhalten einer Injektionsbohrung (Abschnitt II/1.3.1.) wurden im Rahmen eines Vortrags und als Manuskript veröffentlicht:

- KÜHN M., SCHNEIDER W., BARTELS J., PAPE H., CLAUSER C. (1999): Numerical simulation of chemically induced permeability changes during heat mining in hot aquifers, Proceedings of 21st New Zealand Geothermal Workshop 1999, Auckland University, S. 223-228

Die Ergebnisse der Fallstudie für das geothermische Reservoir Stralsund (Abschnitt II/1.3.2.) wurden im Rahmen eines Vortrags veröffentlicht:

- KÜHN M., BARTELS J. & IFFLAND J. (2000): Hydraulisches und thermisches Langzeitverhalten geothermisch genutzter Aquifere - Wechselwirkung von Strömung, Wärmeausbreitung, Transport und Reaktion. HydroGeoEvent 2000 - Wasser-Gesteins-Wechselwirkungen, Heidelberg, 29.09.-4.10.2000, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft **12** S. 35

und sind weiterhin in einer Fachzeitschrift zur Veröffentlichung eingereicht:

- KÜHN M., BARTELS J. & IFFLAND J. (eingereicht): Long term behavior of reservoir properties of a geothermally used aquifer - Interaction between flow, heat transfer, transport, and chemical reactions. Geothermics

Die Evaluierung des numerischen Simulationsinstruments SHEMAT ist am Beispiel des geothermischen Reservoirs Waiwera durchgeführt (Abschnitt II/1.3.3.). Ausgangsbasis dieser Untersuchungen war eine im Rahmen des Projekts durchgeführte Diplomarbeit:

- STÖFEN H. (2000): Development of a heat transfer and solute transport model as a tool for sustainable management of the thermal water reservoir Waiwera, New Zealand. Technische Universität Hamburg-Harburg, 80 S.

Die Untersuchungen wurden erweitert und im Rahmen eines Vortrags und als Manuskript veröffentlicht:

- STÖFEN H., KÜHN M., SCHNEIDER W. (2000): A heat transfer and solute transport model as a tool for sustainable management of the geothermal reservoir Waiwera, New Zealand. Proceedings of 22nd New Zealand Geothermal Workshop 2000, Auckland University, S. 273-278

Das aufgebaute Modell für den Standort Waiwera ist dann in einem weiteren Schritt auf die Untersuchung permeabilitätsverändernder chemischer Prozesse erweitert worden und ist im Rahmen eines Posters und eines Manuskripts veröffentlicht:

- KÜHN M., STÖFEN H., SCHNEIDER W. (2001): Coupled flow, heat transfer, solute transport, and chemical reactions within the thermal water reservoir Waiwera, New Zealand. in: *New Approaches Characterizing Groundwater Flow* (eds. Seiler / Wohnlich), Balkema Verlag, S. 1001-1005

Die Ergebnisse zur Abschätzung der Subsidenz (Abschnitt II/1.4.) sind zur Veröffentlichung in der Fachzeitschrift Grundwasser angenommen:

- KÜHN M., STÖFEN H., SCHNEIDER W. (im Druck): Abschätzung der Subsidenz für den Betrieb von Geothermischen Anlagen mit Förder- und Injektionsbohrung. Grundwasser

Zitierte Literatur

- ABSCHLUßBERICHT (1997): Abschlußbericht für das Forschungsvorhaben Geowissenschaftliche, geotechnologische und verfahrenstechnische Forschungsarbeit zur Vervollkommnung des Verfahrens der Nutzung geothermischer Ressourcen im Hinblick auf das Langzeitverhalten. Förderkennzeichen BMBF 0326912A, WM M-V 420-664.12.4 & 420-664.1-4
- ACKOUMOV, E. I., & WASSILJEW, B. B. (1932): *Zh. Obshch. Khim.*, **2**, 271-289.
- AGGARWAL, P. K., GUNTER, W. D., & KHARAKA Y. K. (1990): Effect of Pressure on Aqueous Equilibria. In: *ACS Symposium Series, Chemical Modeling of Aqueous Systems II* (D. C. Melchior und R. L. Bassett, eds.), **No. 416**, Chap. 7, American Chemical Society, Washington DC, 87-101.
- AKAKU K. (1990): Geochemical study on mineral precipitation from geothermal waters in the Fushime field, Kyushu, Japan; *Geothermics* **19** (5) S. 455-467.
- ALLIS, R.G., ZHAN, X. & CAREY, B. (1997): Modelling of Subsidence at Warakei and Ohaaki Fields. Proceedings 19th NZ Geothermal Workshop.
- ARC (1991): Waiwera geothermal groundwater resources statement and allocation plan. *Auckland Regional Council, Technical Publication No. 112*.
- ARC (1999): Waiwera geothermal groundwater water resource assessment report. *Auckland Regional Council, Technical Publication No. 115*.
- ARWB (1980): Waiwera water resource survey - Preliminary water allocation/management plan. *Auckland Regional Water Board, Technical Publication No. 17*.
- ARWB (1987): Waiwera thermal groundwater allocation and management plan 1986. *Auckland Regional Water Board, Technical Publication No. 39*.
- AZAROUAL, M., FOUILLAC, C., & MATRAY, J. M. (1997): Solubility of silica polymorphs in electrolyte solutions, I. Activity coefficients of aqueous silica from 25° to 250°C, Pitzer's parameterisation. *Chemical Geology*, **140**, 155-165.
- BARTELS, J., KÜHN, M., PAPE, H., & CLAUSER, C. (2000): A New Aquifer Simulation Tool for Coupled Flow, Heat Transfer, Multi-Species Transport and Chemical Water-Rock Interactions. Proceedings of World Geothermal Congress 2000, Kyushu - Tohoku, Japan, May 28 - June 10, (2000) pp 3997-4002
- BERGMANN, A.G. & VLASSOV N. A. (1949): *Izv. Sektora Fiz.-Khim. Analiza*, Inst. Obsch. Neorgan. Khim., Akad. Nauk SSSR, **17**, 312-337.

- BIOT M.A. (1941): General Theory of Three-Dimensional Consolidation. *Journal of Applied Physics*, **12**, 155-164.
- BLASDALE, W.C. (1918): *Ind. Eng. Chem.*, **10**, 344-347.
- BLOCK, J., & WATERS, O.,B. (1968): The CaSO₄-Na₂SO₄-NaCl-H₂O System at 25°C to 100°C. *Journal of Chemical Engineering*, **13** (3), 336-344.
- BLOUNT C.W. (1977): Barite solubilities and thermodynamic quantities up to 300°C and 1400 bars, *American Mineralogist* **62** S. 942-957.
- BLOUNT, C. W. & DICKSON F. W. (1969): The solubility of anhydrite (CaSO₄) in NaCl-H₂O from 100 to 450°C and 1 to 1000 bars. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **33**, 227-245.
- BLOUNT, C. W., & DICKSON F. W. (1973): Gypsum-Anhydrite Equilibria System CaSO₄-H₂O and CaCO₃-NaCl-H₂O. *American Mineralogist*, **58**, 323-331.
- BOCK, E. (1961): On the Solubility of Anhydrous Calcium Sulphate and of Gypsum in Concentrated Solutions of Sodium Chloride at 25°C, 30°C, 40°C, and 50°C. *Canadian Journal of Chemistry*, **39**, 1746-1751.
- BOISDET A., CAUTRU J.P., CZERNICHOWSKI-LAURIOL I., FOUCHER J.C., FOUILLAC C., HONNEGGER J.L. & MARTIN J.C. (1989), "Experiments on reinjection of geothermal brines in the deep Triassic sandstones." European Geothermal update, Proceedings of the 4th International Seminar on the results of EC Geothermal Energy., Florence, 27-30 April 1989, S. 419-428.
- BROWN K.L., FREESTON D.H., DIMAS Z.O. & SLATTER A. (1995): Pressure drop due to silica scaling; in: *Proceedings of the 17th New Zealand Geothermal Workshop 1995*, M.P. Hochstein (Hrsg.), Geothermal Institute, University of Auckland, S. 163-167.
- BUSCH, K.-F., LUCKNER,L. & THIEMER, K. (1993): Lehrbuch der Hydrogeologie - Geohydraulik. Gebrüder Borntraeger Berlin Stuttgart. 3. Auflage.
- CHIANG W.H. & KINZELBACH W. (1993): Processing Modflow (PM) Version 3.0: Users Guide and documentation: pp 96., Department of Civil Engineering, Kassel University, Germany.
- CHIANG W.H. (1995): Processing Modflow for Windows (PMWIN). A simulation system for modeling groundwater processes with MODFLOW, PMPATH for Windows; PEST, MT3D and MODPATH.
- CORNEC, E., & KROMBACH, H. (1932): *Compt. Rend.* **194**, 714-716.
- CRAIG, R.F. (1992): Soil Mechanics. Fifth Edition. Chapman & Hall. London.

- CRIAUD A., FOUILLAC C. & MARTY B. (1989): Low enthalpy geothermal fluids from the Paris basin. 2-Oxidation-Reduction state and consequences for the prediction of corrosion and sulfide scaling, *Geothermics* **18** (5/6) S. 711-727.
- DARWIS R.S., TAMPUBOLON T., SIMATUPANG R. & ASDASSAH D. (1995): Study of water reinjection on the Kamojang Geothermal Reservoir Performance, Indonesia; in: *Proceedings of the 17th New Zealand Geothermal Workshop 1995*, M.P. Hochstein (Hrsg.), Geothermal Institute, University of Auckland, S. 185-192.
- DEBYE P. & HÜCKEL E. (1923): Zur Theorie der Elektrolyte, *Phys. Z.* **24** S. 185-206, 305-325. Zitiert in MATTHEß G. (1990), *Die Beschaffenheit des Grundwassers-Lehrbuch der Hydrogeologie Band 2*, Gebrüder Bornträger, Berlin 2. Auflage, 498 S.
- DIERSCH H.-J. (1996): FEFLOW - Physikalische Modellgrundlagen.- WASY GmbH, Berlin, Februar 1996.
- DIERSCH H.-J. (1997): Finite element modelling of recirculating density-driven saltwater intrusion processes in groundwater.- *Adv. in Water Res.* (11), No. 1, 25-43.
- GAMBOLATTI G., PUTTI M. & TEATINI P. (1996): Land subsidence, in: *Hydrology of Disasters* (ed. Vijay P. Singh), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 231-268
- GREENBERG J.P. & MOLLER N. (1989): The prediction of mineral solubilities in natural waters: A chemical equilibrium model for the Na-K-Ca-Cl-SO₄-H₂O system to high concentration from 0 to 250°C, *Geochimica et Cosmochimica Acta* **53** S. 2503-2518.
- HARBAUGH A.W. & McDONALD M.G. (1996): User's documentation for MODFLOW-96, an update to the U.S. Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model, USGS Open-File Report 96-485
- HARVIE C.E. & WEARE J.H. (1980): The prediction of mineral solubilities in natural waters: The Na-K-Mg-Ca-Cl-SO₄-H₂O system from zero to high concentrations at 25°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **44** S. 981-997.
- HARVIE C.E., MOLLER N. & WEARE J.H. (1984): The prediction of mineral solubilities in natural waters: The Na-K-Mg-Ca-H-Cl-SO₄-OH-HCO₃-CO₃-CO₂-H₂O system to high ionic strength at 25°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **48** S. 723-751.
- HE, S. & MORSE, J. W. (1993): The carbonic acid system and calcite solubility in aqueous Na-K-Ca-Mg-Cl-SO₄ solutions from 0-90 °C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **57**, 3533-3554.
- HOLMES, H. F., BAES, C. F. B. JR., & MESMER, R. E. (1987): The enthalpy of dilution of HCl_(aq) to 648 K and 40 MPa: Thermodynamic properties. *J. Chem. Thermodyn.*, **19**, 863-890.

- HOLMES, H.,F. & MESMER, R. E. (1992): Isopiestic studies of $\text{H}_2\text{SO}_{4(\text{aq})}$ at elevated temperatures -Thermodynamic properties. *J. Chem. thermodyn.*, **24**, 317-328.
- KHARAKA Y.K. & BARNES I. (1973): SOLMNEQ: Solution-mineral equilibrium computations.- NTIS Technical Report PB 214-899, Springfield, Virginia.
- KÜHN M. (1997): Geochemische Folgereaktionen bei der Hydrogeothermalen Energiegewinnung, *Berichte, Fachbereich Geowissenschaften, Universität Bremen*, Nr. **92** 129 p
- KÜHN M., BARTELS J., PAPE H., SCHNEIDER W. & CLAUSER C. (im Druck): Modeling Chemical Brine-Rock Interaction in Geothermal Reservoirs. in: *Water Rock Interaction* (eds. Stober, I., Bucher, K.), Kluwer Verlag
- KÜHN, M., STÖFEN, H., & SCHNEIDER, W. (2001): Coupled, Flow, Heat Transfer and Solute Transport, and Chemical Reactions within the Thermal Water Reservoir, Waiwera, New Zealand, *Proceedings of 31st IAH Conference New Approaches to Characterizing Groundwater Flow, München: 1001-1005*
- LANGMUIR & MELCHIOR (1985): The geochemistry of Ca, Sr, Ba and Ra sulfates in some deep brines from the Palo Duro Basin, Texas; *Geochimica et Cosmochimica Acta* 49 S. 2423-2432.
- LEAKE, S.A. & PRUDIC, D.E. (1991): Documentation of a Computer Program to Simulate Aquifer-System Compaction using the Modular Finite-Difference Ground-Water Flow Model. *Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey*.
- LINKE W.F. & SEIDELL A. (1958): *Solubilities: Inorganic and Metal-Organic Compounds*. Princeton, New Jersey, Vol 1 A – Ir.
- MARSHALL, W. I., & SLUSHER, R. (1966): Thermodynamics of Calcium Sulfate Dihydrate in Aqueous Sodium Chloride Solutions, 0-110°C. *Journal of Physical Chemistry*, **70** (12), 4015-4027.
- MONNIN C. & RAMBOZ C. (1996): The anhydrite saturation index of the ponded brines and sediment pore waters of the Red Sea deeps, *Chemical Geology* 127 S. 141-159.
- MONNIN, C. (1990): The influence of pressure on the activity coefficients of the solutes and on the solubility of minerals in the system Na-Ca-Cl-SO₄-H₂O to 200°C and 1 kbar, and to high NaCl concentration. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **54**, 3265-3282.
- Monnin, C. (1999): A thermodynamic model for the solubility of barite and celestite in electrolyte solutions and seawater to 200°C and to 1 kbar. *Chemical Geology*, **127**, 141-159.

- NORDSTROM et al. (1979): A comparison of computerized chemical models for equilibrium calculations in aqueous systems. In: Jenne, E.A., ed. *Chemical modeling in aqueous systems*.- American Chemical Society Symposium Series 93: 857 - 892.
- PABALAN, R. T., & PITZER, K. S. (1987a): Thermodynamics of concentrated electrolyte mixtures and the prediction of mineral solubilities to high temperatures for mixtures in the system Na-K-Mg-Cl-SO₄-OH-H₂O. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **51**, 2429-2443.
- PABALAN, R. T., & PITZER, K. S. (1987b): Thermodynamics of NaOH_(aq) in hydrothermal solutions. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **51**, 829-837.
- PAPE, H., CLAUSER, C., & IFFLAND, J. (1999). Permeability prediction based on fractal pore-space geometry. *Geophysics*, **64** (5), 1447-1460.
- PARKHURST D.L. (1995): *PHREEQC, A Computer Program for Speciation, Reaction-Path, Advective Transport, and Inverse Geochemical Calculations*, U.S. Geological Survey, Dallas, 143 S.
- PHUTELA R.C. & PITZER K.S. (1986): Thermodynamics of electrolyte mixtures. Enthalpy and the effect of temperature on the activity coefficient, *Journal of Solution Chemistry* **15** S. 649.
- PITZER K.S. & SILVESTER L.F. (1976): Thermodynamics of electrolytes. VI. Weak electrolytes including H₃PO₄. *Journal of Solution Chemistry* **5** (4) S. 269-277.
- PITZER K.S. & SIMONSON J.M. (1986): Thermodynamics of multicomponent, miscible, ionic systems: Theory and equations, *Journal of Physical Chemistry* **90** (13) S. 3005-3009.
- PITZER K.S. (1973): Thermodynamics of electrolytes. I. Theoretical basis and general equations. *The Journal of Physical Chemistry* **77** (2) S. 268-277.
- PITZER K.S. (1991): Ion interaction approach: Theory and data correlation, in: *Activity Coefficients in Electrolyte Solutions*, Pitzer K.S. (Hrsg.), CRC Press Boca Raton, 2nd Edition, S. 76-153.
- PLUMMER L.N., JONES B.F. & TRUESDELL A.H. (1976): WATEQF: A computer program for calculating chemical equilibria of natural waters.-. U.S. Geological Survey Water Resources Investigations Report 76-13.
- PLUMMER L.N., PARKHURST D.L., FLEMING G.W. & DUKE S.A. (1988): *A Computer Program Incorporating Pitzer's Equations for Calculation of Geochemical Reactions in Brines*, U.S. Geological Survey, Reston, 306 S.
- POTTER J.M., DIBBLE W.E. & NUR A. (1981): Effects of temperature and solution composition on the permeability of St. Peters sandstone-Role of iron (III); *Journal of Petroleum Technology* **33** (5), S. 905-907.

- PRUESS K. (1987): TOUGH User's guide, Lawrence Berkeley Laboratory Report LBL-20700.
- PYTKOWICZ R.M. (1983): *Equilibria, nonequilibria and natural waters*, John Wiley & Sons, New York, 353 S.
- SANYAL S.K, MCNITT J.R., KLEIN C.W. & GRANADOS E.E. (1985): An investigation of wellbore scaling at the Miravalles Geothermal Field, Costa Rica; in: *Proceedings of the 10th Workshop Geothermal Reservoir Engineering, Jan 22-24, 1985*, Ramey H.J., Kruger P., Miller F.G., Horne R.N., Brigham W.E. & Gudmundsson J.S. (Hrsg.), S. 37-44.
- SCHIEFERDECKER B., BECKMANN H.-J. & BACHMANN I. (1991): Zur Wirtschaftlichkeit der Nutzung niedrigthermaler Tiefenwässer, in: BUßMANN W., KABUS F. & SEIBT P. (Hrsg.): *Geothermie-Wärme aus der Erde*, C.F. Müller, Karlsruhe, S. 155-165.
- SCHNEIDER K.-J. (1994): *Bautabellen für Ingenieure*. 11. Auflage, Werner Verlag Düsseldorf
- SCHÖN M. & ROCKEL W. (1991): Nutzung niedrigthermaler Tiefenwässer-Geologische Grundlagen, in: BUßMANN W., KABUS F. & SEIBT P. (Hrsg.): *Geothermische Energie*, C.F. Müller, Karlsruhe, S. 12-23.
- SCHULZ & WORMBS (1991): *Geothermie – ein Überblick. Geothermische Energie Forschung und Anwendung in Deutschland*. C.F. Müller Karlsruhe.
- SEIBT A., NAUMANN D. & HOTH P. (1999): Lösung und Entlösung von Gasen in Thermalwässern – Konsequenzen für den Anlagenbetrieb. In: *Geothermisches Heizwerk Neustadt-Glewe: Zustands- und Stoffparameter, Prozeßmodellierungen, Betriebserfahrungen und Emissionsbilanzen* (Hrsg.: Schallenberg K., Erbas K., Huenges E. & Menzel H.) Scientific Technical Report **STR99/04**, GeoForschungsZentrum Potsdam, 63-86.
- SEIBT P. (1991): Abbauüberwachung von Geothermiespeichern; in: BUßMANN W., KABUS F. & SEIBT P. (Hrsg.): *Geothermie-Wärme aus der Erde*, C.F. Müller, Karlsruhe, 1. Auflage, S. 107-116.
- SPENCER, R. J., MOLLER N., & WEARE, J. H. (1990): The prediction of mineral solubilities in natural waters: A chemical equilibrium model for the system Na-K-Ca-Cl-SO₄-H₂O at temperatures below 25°C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, **54**, 575-590.
- STÖFEN H., KÜHN M. & SCHNEIDER W. (2000): A heat transfer and solute transport model as a tool for sustainable management of the geothermal reservoir Waiwera, New Zealand. *Proceedings of the 22st New Zealand Geothermal Workshop 2000*, Auckland University: 273-278
- TEMPLETON, C. C. (1960): Solubility of Barium Sulfate in Sodium Chloride Solutions from 25° to 95°C. *Journal of Chemical and Engineering Data*, **5** (4), 514-516.
- TERZAGHI, K. (1925): *Erdbaumechanik auf Bodenphysikalischer Grundlage*, Deuticke, S. 399.

- VOSS C.I. & SOUZA W.R. (1987): Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone.- *Water Resources Res.* 23 (10): 1851-1866.
- VOSS C.I. (1984): A Finite-Element Simulation Model for saturated-unsaturated, fluid-density-dependent Groundwater Flow with Energy Transport or chemically-reactive single-species Solute Transport.- U. S. Geological Survey, Water Resources Invest. Rep. 84-4369
- WERES O. (1988): Environmental protection and the chemistry of geothermal fluids; *Geotherm. Sci. & Tech.* 1 (3) S. 253-302
- WHITE S.P. & CHRISTENSON B.W. (2000): Modelling the alteration halo of a diorite intrusion. Proceedings of World Geothermal Congress 2000, Kyushu - Tohoku, Japan, May 28 - June 10, (2000) pp 3969-3974
- WOLERY T.J. & JACKSON K.J. (1990): Activity coefficients in aqueous salt solutions, in: *ACS Symposium Series, Chemical Modeling of Aqueous Systems II* (D.C. Melchior und R.L. Bassett, Hrsg.), **No. 416**, Chap. 2, American Chemical Society, Washington DC, 16-29.
- WOLERY T.J. (1983): EQ3NR: A computer program for geochemical aqueous speciation - solubility calculations: Users guide and documentation.- UCRL-53414, Lawrence Livermore National Laboratory Livermore, California.

