

4. Workshop der **Arbeitsgemeinschaft Simulation:**
Grundlagen und Methoden der Modellbildung und
Simulation
Aachen, 28. 2. - 1. 3. 2007

***Simulationsrechnungen in der
geothermischen Reservoircharakterisierung***

C. Clauser, M. Kühn, D. Mottaghy, V. Rath



Worum geht es?

Geothermischen Reservoircharakterisierung:

- Gekoppelte, nicht-lineare Prozesse
- Systemanalyse
- Parameterschätzung
- Systemoptimierung

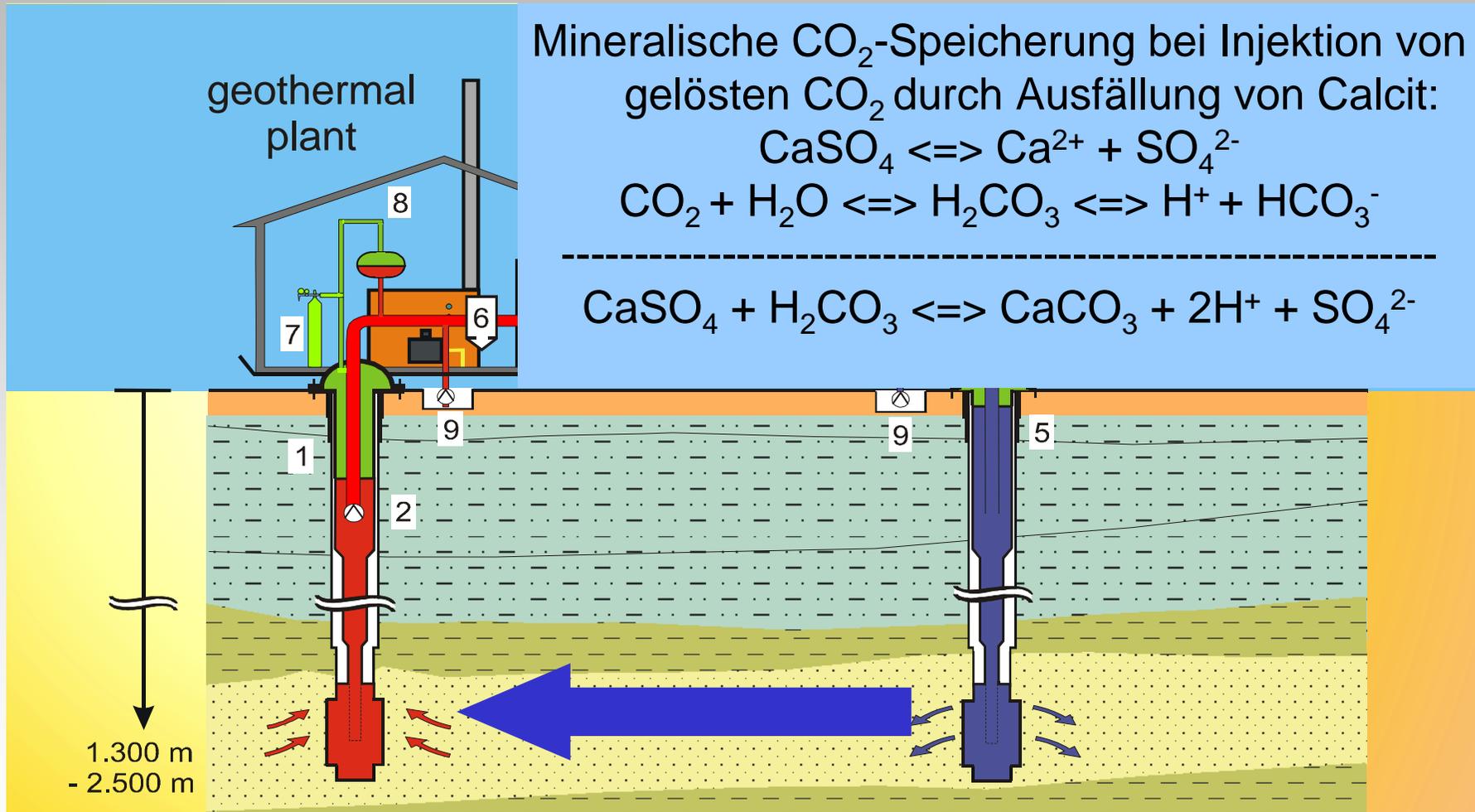
Gliederung

- Reaktiver Transport: Chemische Reaktionen
 - chemische Reaktionen und Transport in Gesteinsporen
 - Erdwärmennutzung und CO₂-Bindung
- {Reaktiver Transport: Phasenumwandlung
 - instationärer Wärmetransport mit Permafrost: Inversion des Paläotemperaturverlaufs an der Erdoberfläche}
- Parameterschätzung und Systemoptimierung
 - Gesteinswärmeleitfähigkeit und hydraulische Permeabilität
 - Optimierung der Exploration einer geothermischen Lagerstätte

Reaktiver Transport: Chemische Reaktionen

- Hydrothermale Energiegewinnung aus Heißwasser-aquiferen und geologische Randbedingungen eines Standorts
- Prinzipien der reaktiven Transportsimulation und besondere chemische und physikalische Grundlagen
- Validierung des numerischen Modells
- Reaktive Transportsimulationen (3 Konzepte) zur Erweiterung des Systemverständnisses

Hydrothermale Energiegewinnung und CO₂ Speicherung



Mineralische CO₂-Speicherung bei Injektion von gelösten CO₂ durch Ausfällung von Calcit:

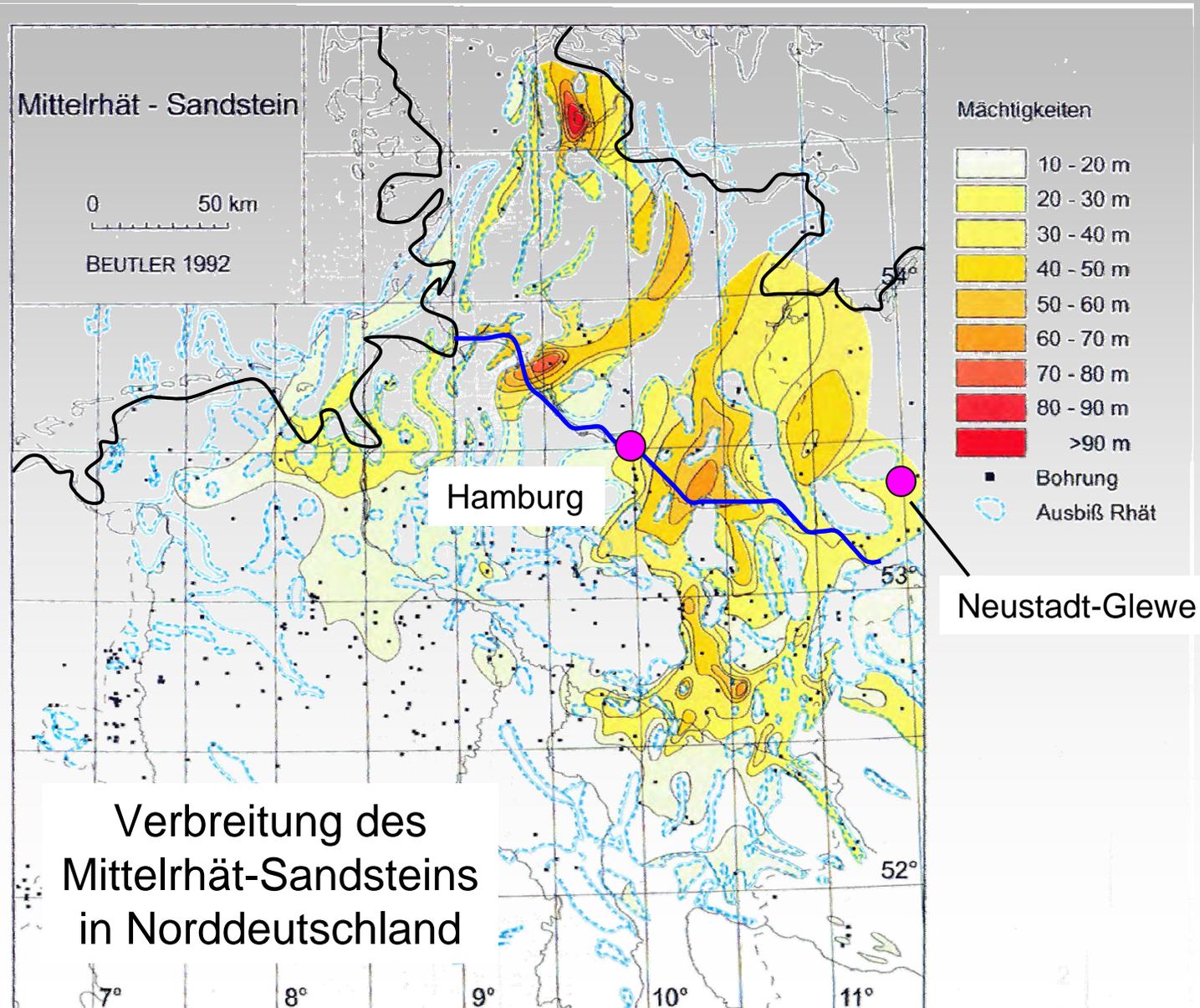


Reservoir-Randbedingungen:

Porosität > 20 %; Permeabilität: 0.1 – 1 × 10⁻¹² m²

Mächtigkeit > 20 m; Fördermenge > 50 m³/h

Hydrothermale Lagerstätten im Rhät



Stratigraphie:

Quartär

Tertiär

Obere Kreide

Untere Kreide

Dogger

Lias

Keuper (Rhät)

Buntsandstein

Zechstein



Systemanalyse

- Wie kam es zur Zementation des Porenraums?
 - Risikoabschätzung für zukünftige Projekte
- Gibt es Alternativen am Standort Allermöhe?
 - Kann die Bohrung ggf. stimuliert werden?
- Beantwortung dieser Fragen mit Hilfe der reaktiven Transportsimulation
- Computergestützte Systemanalyse: Minimierung von Risiken, Kosten und Zeit bei Exploration, Nutzung von Ressourcen und Erstellung von Sanierungskonzepten

Konzeption – Mathematik - Numerik

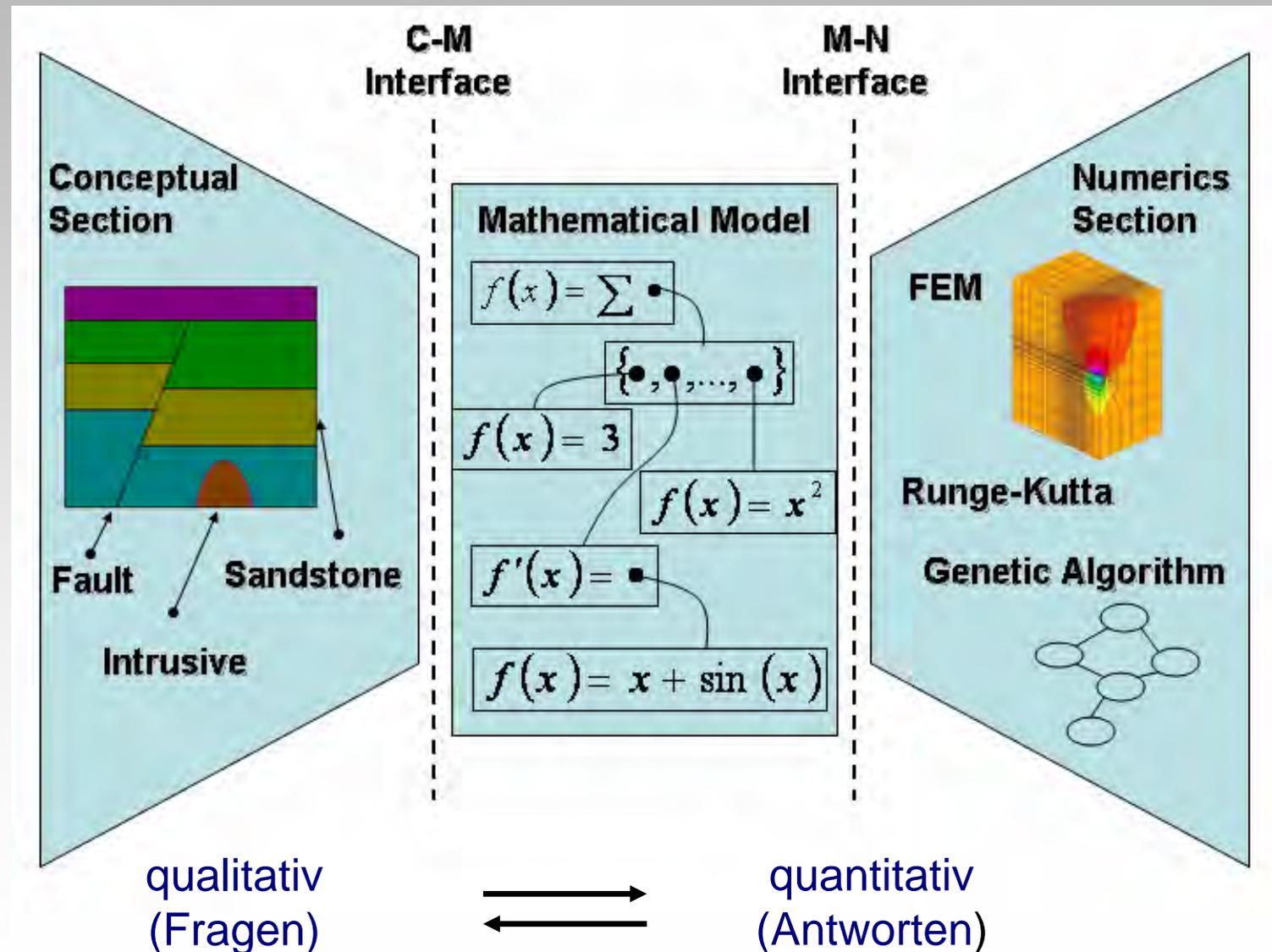
Architektur

Geodynamische
Geschichte

Treibende Kraft
der Strömung

Herkunft und
Reservoire der
Wässer

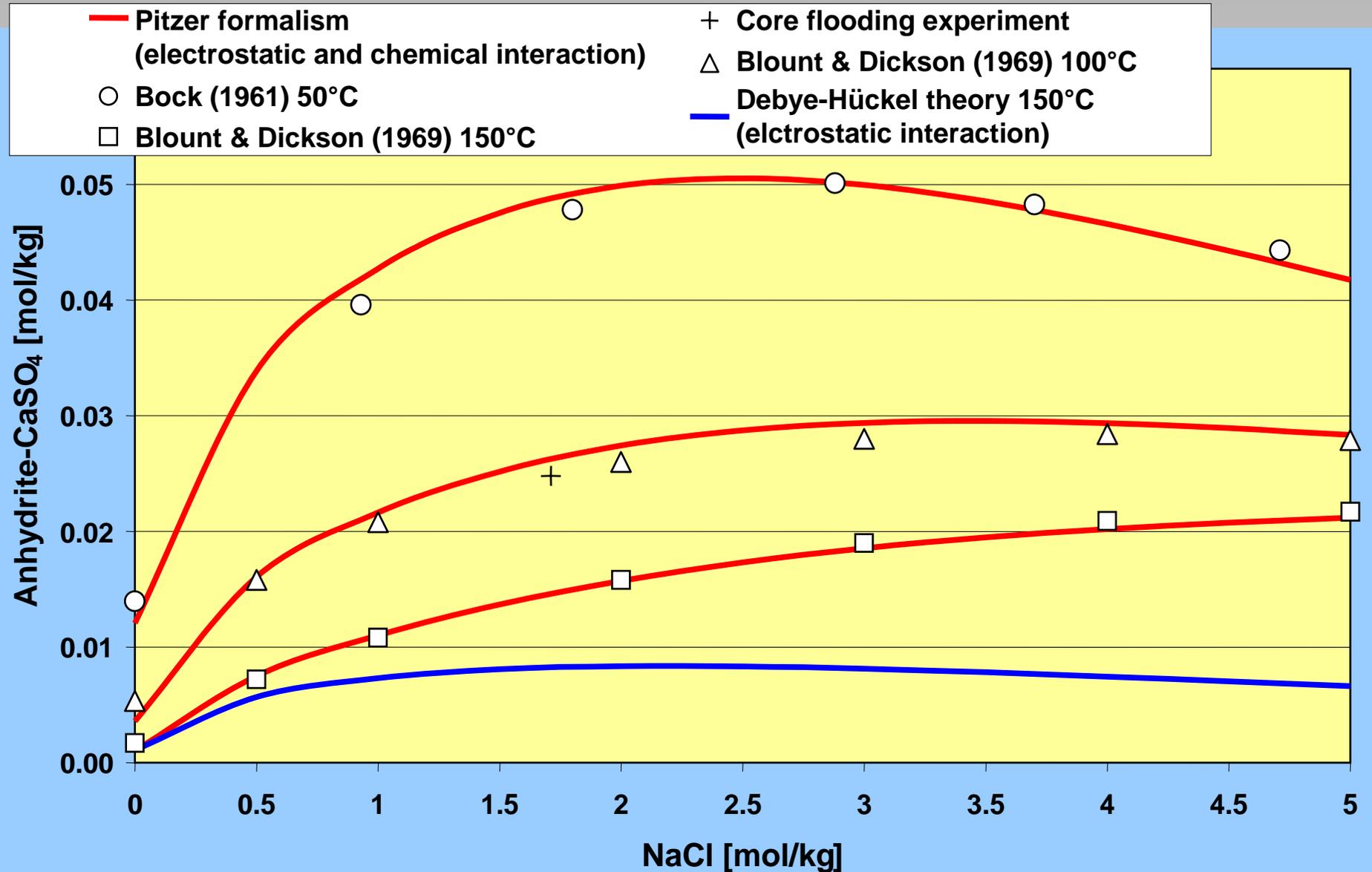
Chemische
Prozesse



Komplexität des Systems

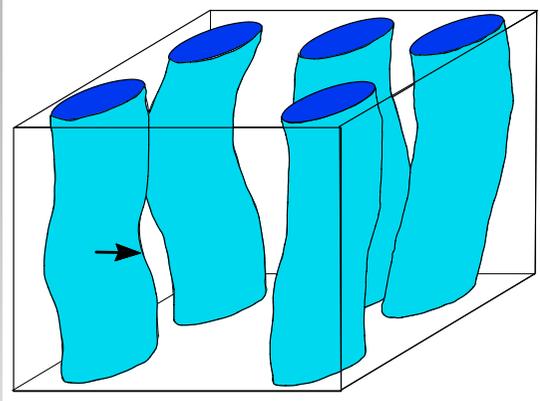
| von ... Abhängigkeit der / des ... | Strömung | Wärme- transport | Stoff- transport | Chemische Reaktionen | Mechanische Deformation |
|--|---|---|---|--|--|
| Strömung | Druck → Wasser- eigenschaften | Temperatur → Wasser- eigenschaften | Konzentration → Wasser- eigenschaften | Porosität → Permeabilität | Druck (Wasser) Porosität → Permeabilität |
| Wärmetransport | Konvektion | Temperatur → Wasser- / Gesteins- eigenschaften | Salinität → Wasser- eigenschaften | Reaktions- wärme | Porosität |
| Stofftransport | Advektion | Diffusion (T-Gradient) | Diffusion (Konz- Gradient) | Quellen / Senken (Lösung / Fällung) | Permeabilität |
| Chemische Reaktionen | Abhängigkeit Reaktionen vom Druck | Abhängigkeit Reaktionen von Temperatur | Abhängigkeit Reaktionen von Salinität | Gekoppelte Reaktionen | Abhängigkeit Reaktionen vom Druck |
| Mechanische Deformation | Druck → Gesteins- eigenschaften | Temperatur → Gesteins- eigenschaften | Salinität → Gesteins- eigenschaften | Änderungen Mineralogie → Änderungen Rheologie | Gefüge- entwicklung Dilatanz |

Anhydrit (CaSO_4) – Löslichkeitsverhalten

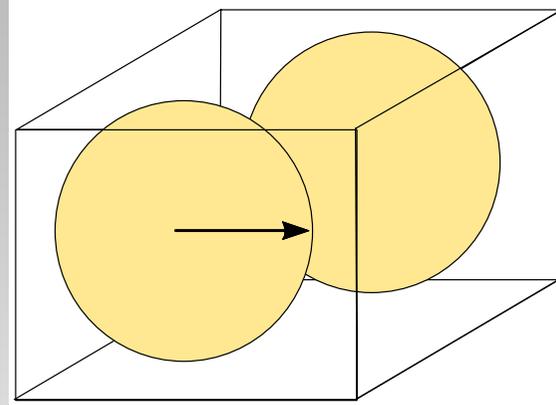


Porenraumgeometrie und $k - \Phi$

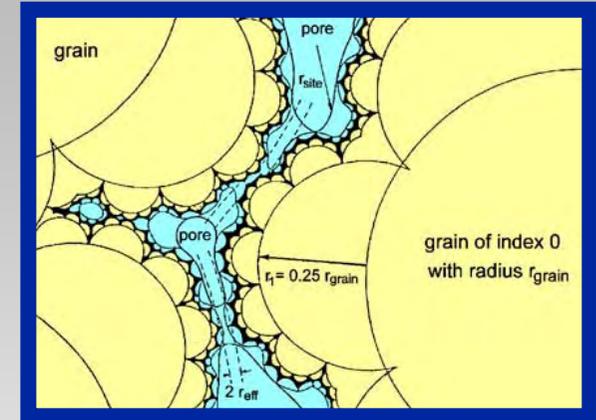
Kopplung



Kozeny-Carman



glatte runde Kugeln



**fraktaler Porenraum
(Pape et al. 1999)**

$$k \propto \Phi$$

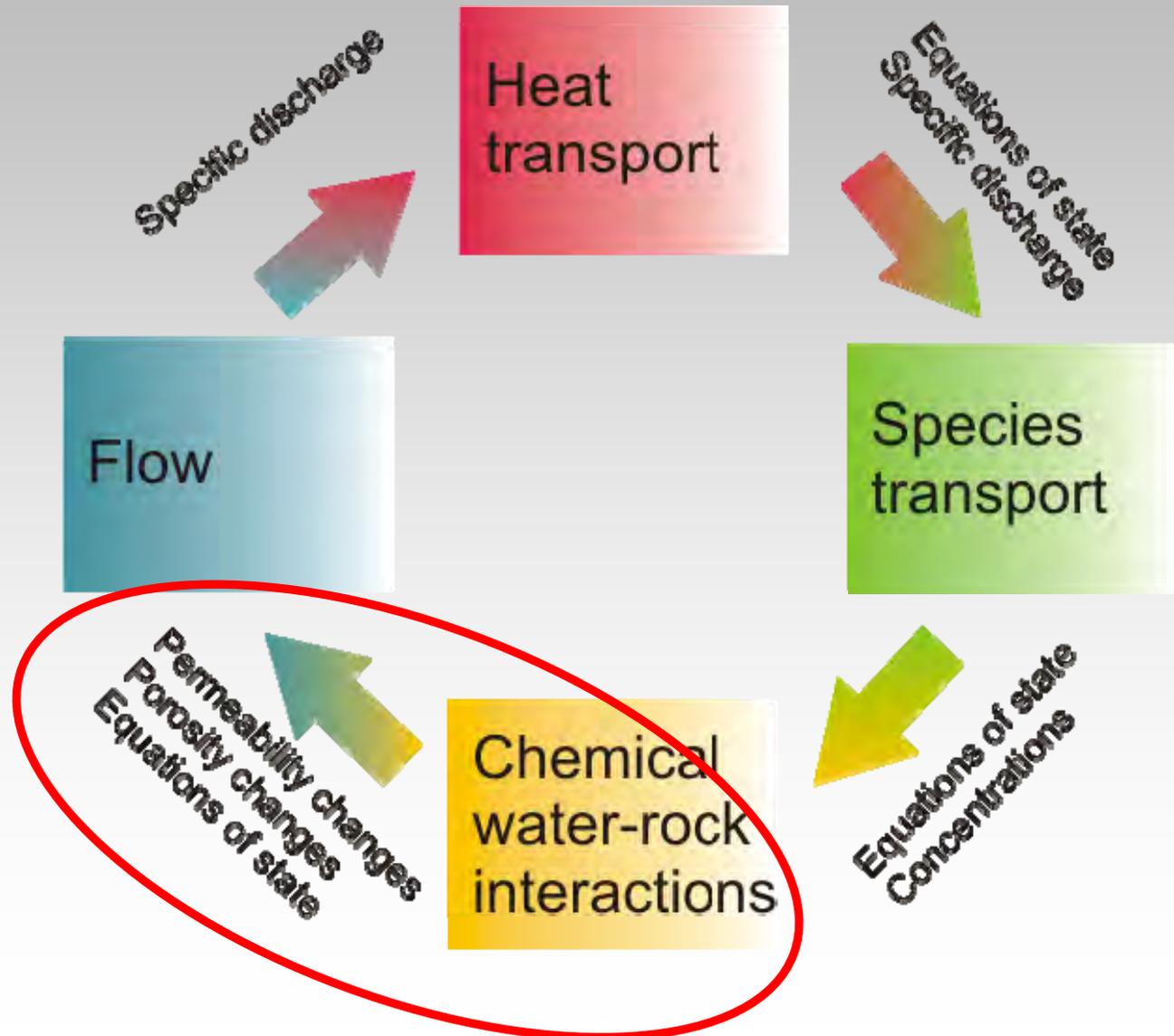
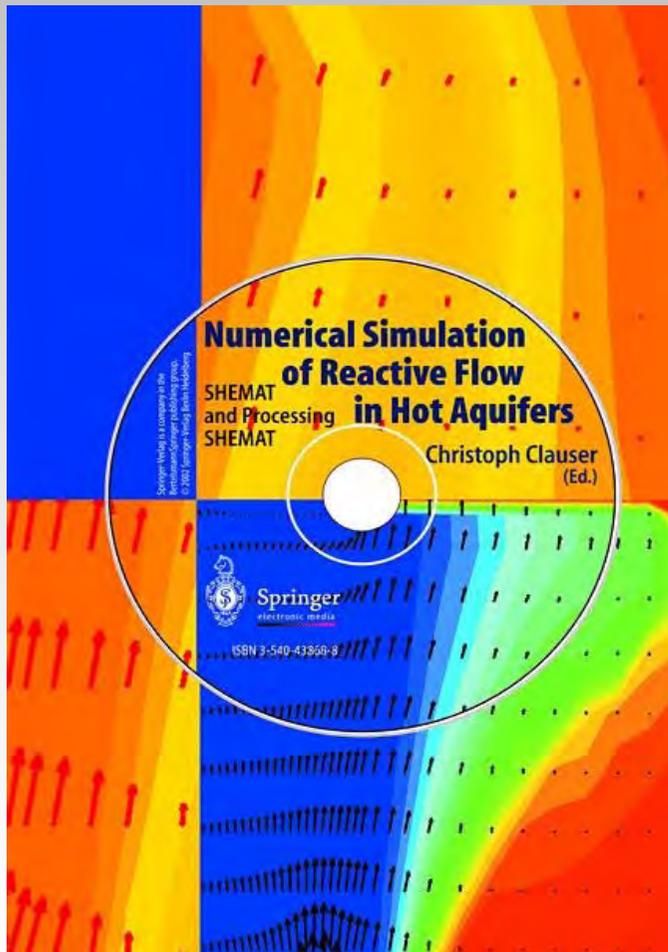
(Kozeny-Carman)

$$k \propto \Phi^3$$

(glattwandige Kugeln)

$$k = A_1\Phi + A_2\Phi^2 + A_3\Phi^{10} \text{ (zementierte Sandsteine)}$$

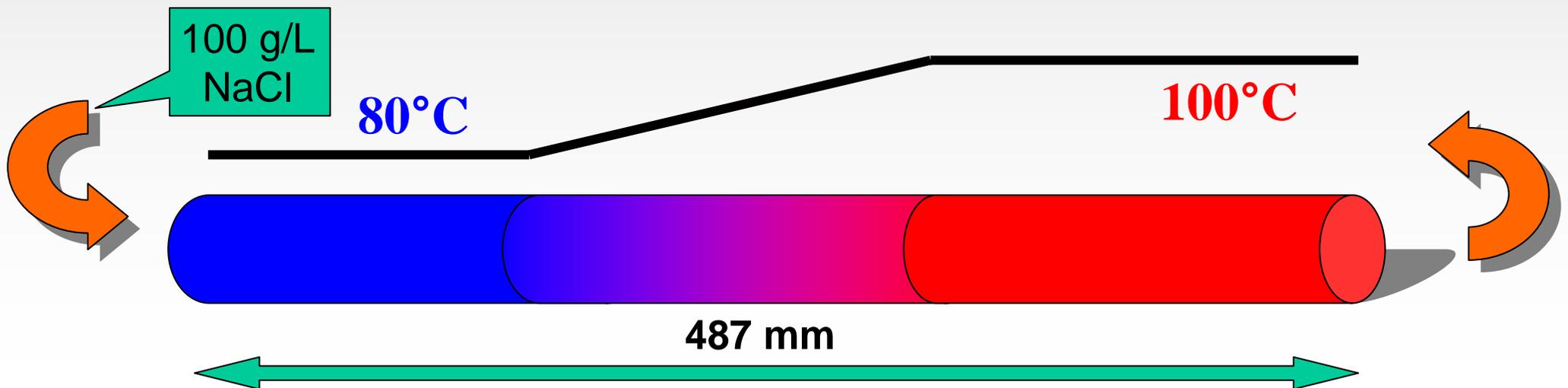
Numerisches Modell - SHEMAT



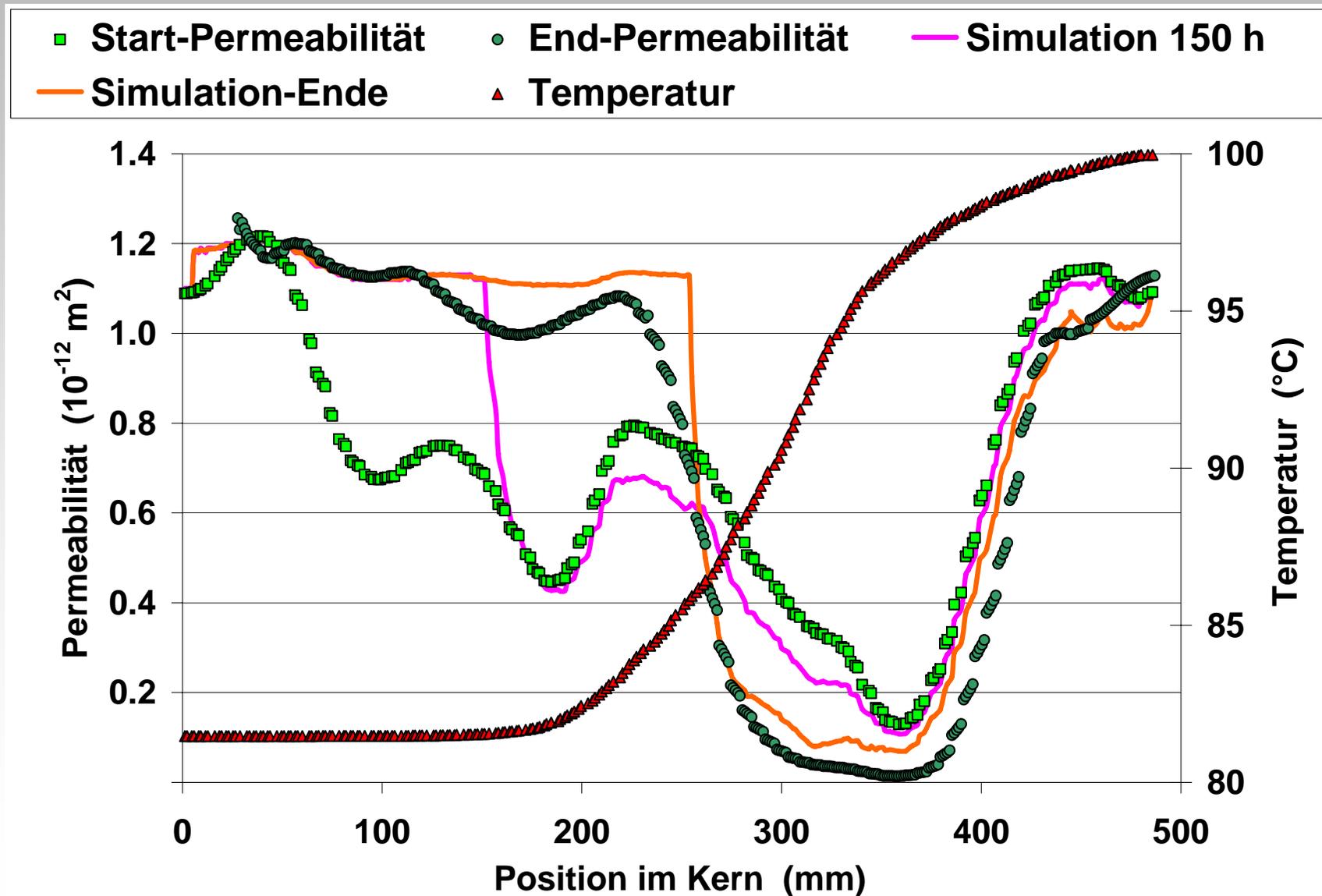
Validierung des numerischen

Modells

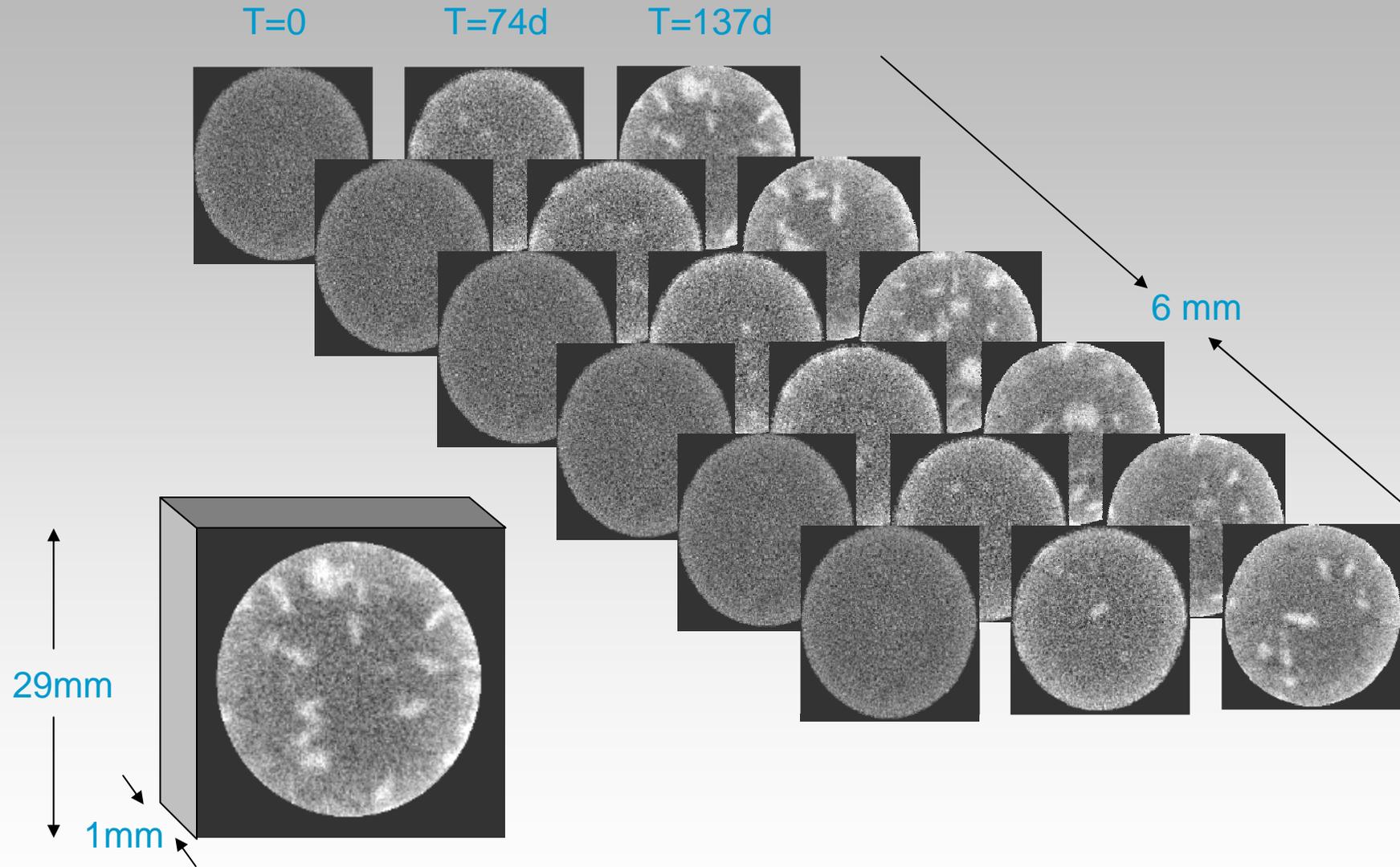
- Kerndurchströmungsexperiment
- Geothermische Heizzentrale im Labormaßstab
- Präpariert mit Anhydrit (CaSO_4 , inhomogen)
- Auflösung von Anhydrit im Temperaturgradienten
- Dauer des Experiments 20 Tage (474 Stunden)



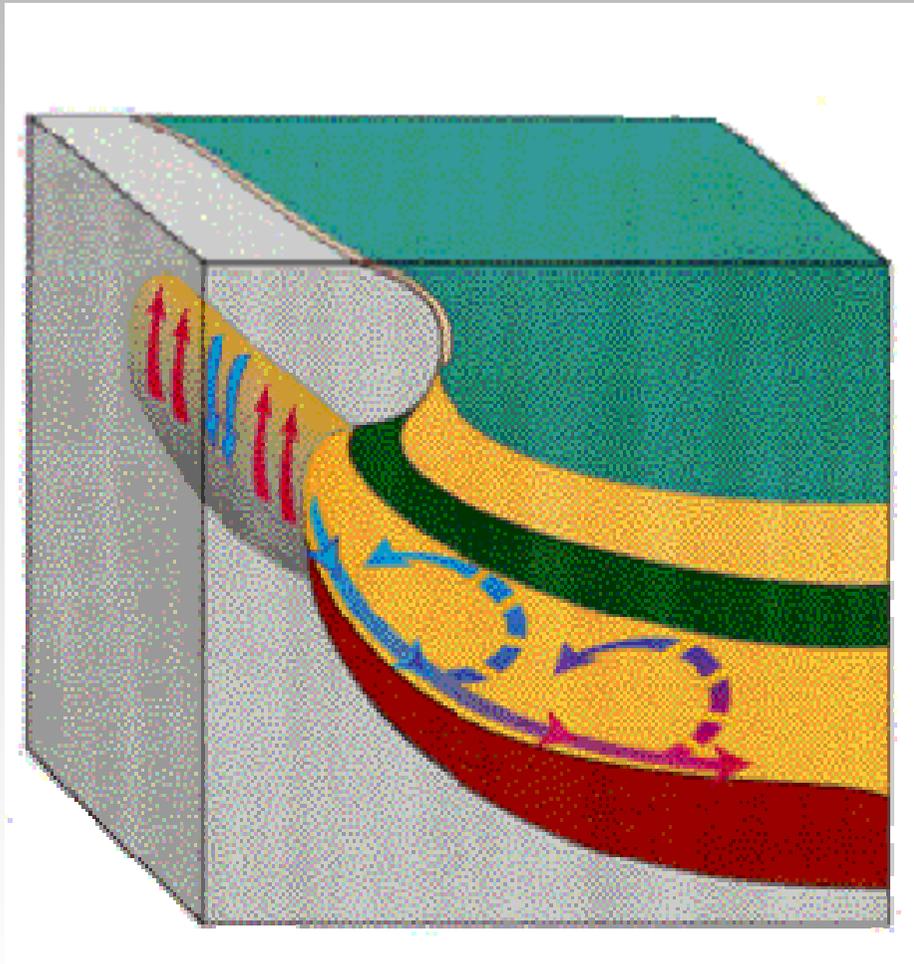
Laborergebnisse \Leftrightarrow Numerische Simulation



Keimbildung im Bentheimer Sandstein-Kern



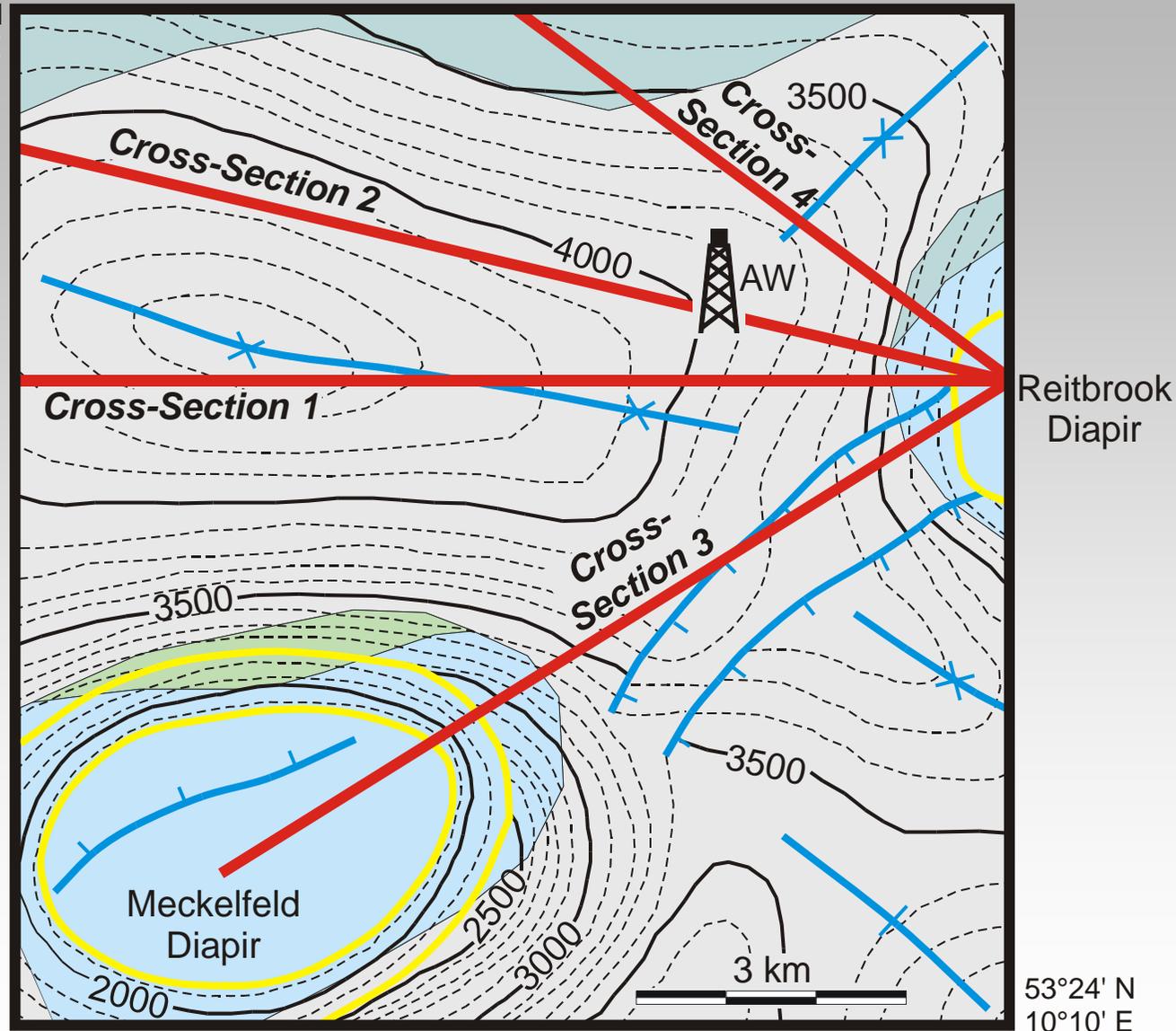
1. Konzept – Ablaugung vom Salzstock



- Gips / Anhydrit in Diapiren
- Lösung / Ablaugung von CaSO_4 am Salzstock
- Transport von Ca^{2+} und SO_4^{2-} in tiefere Bereiche des Aquifers
- Ausfällung von Anhydrit und Zementation des Porenraums

Geologische Karte – Unterkreide

53°30' N
10°00' E



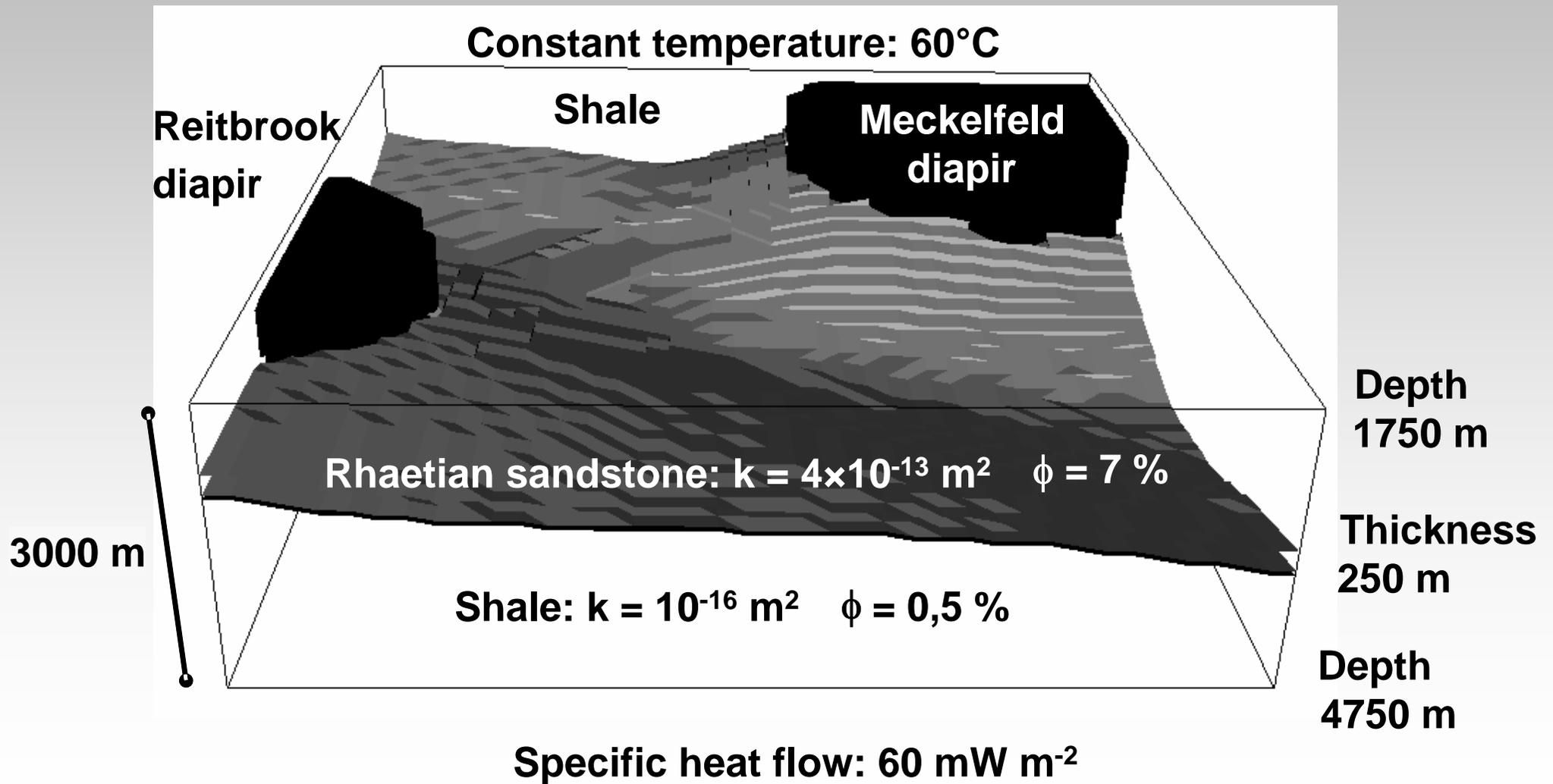
Reitbrook
Diapir

Lowermost Cretaceous
Upper Jurassic
Middle Jurassic
Pemian Salt

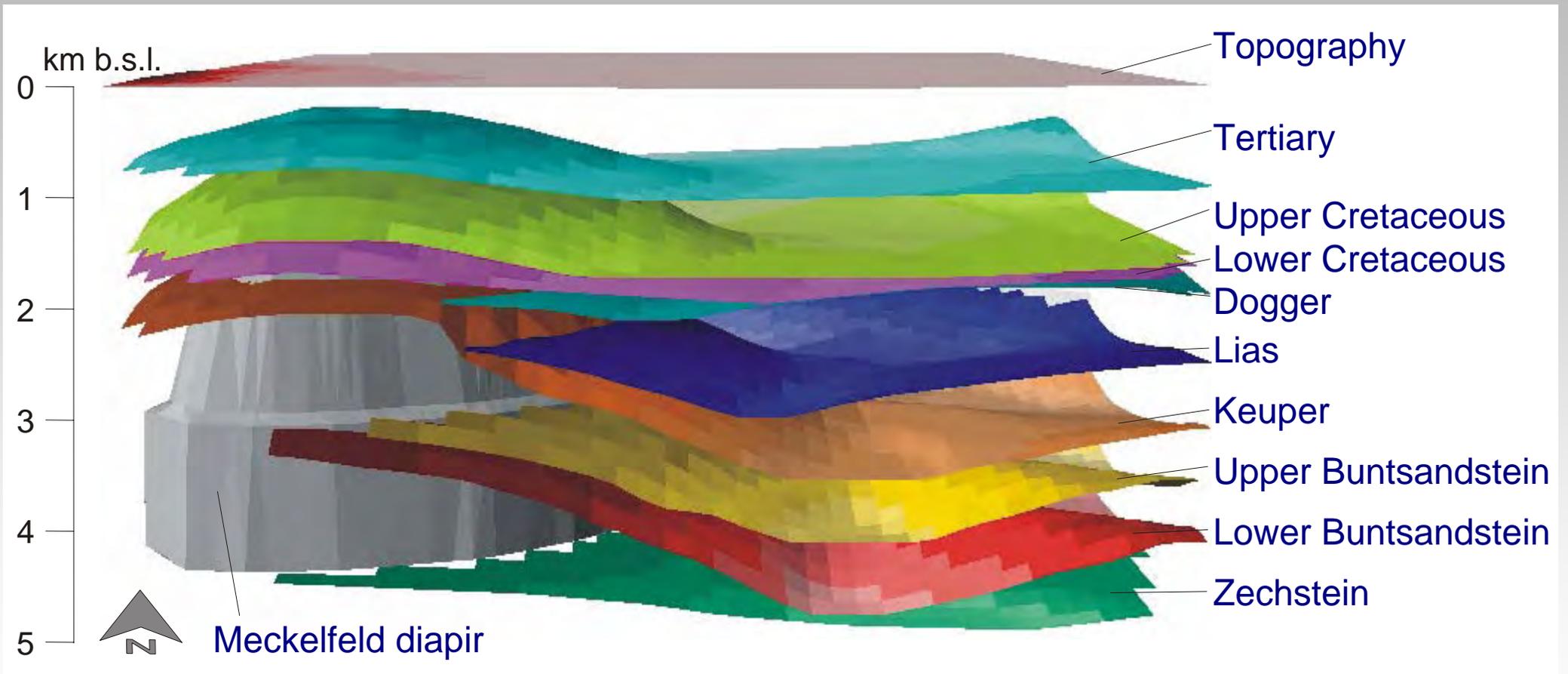
Major Normal Fault
Syncline Axis
Anticline Axis
Boundary of Salt Domes

53°24' N
10°10' E

Konzeptioneller Modellaufbau

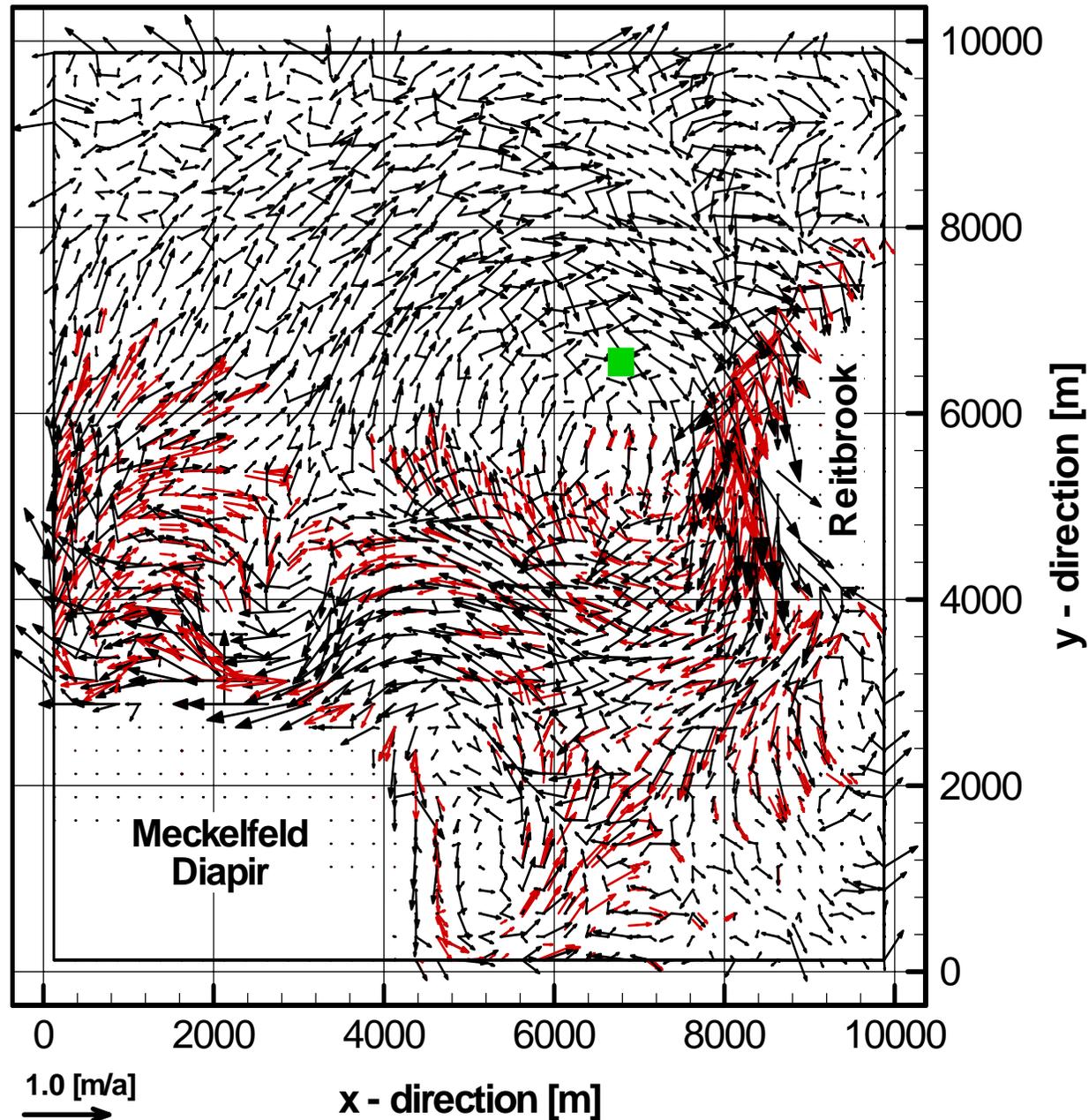


Hamburg-Allermöhe 3D-Struktur

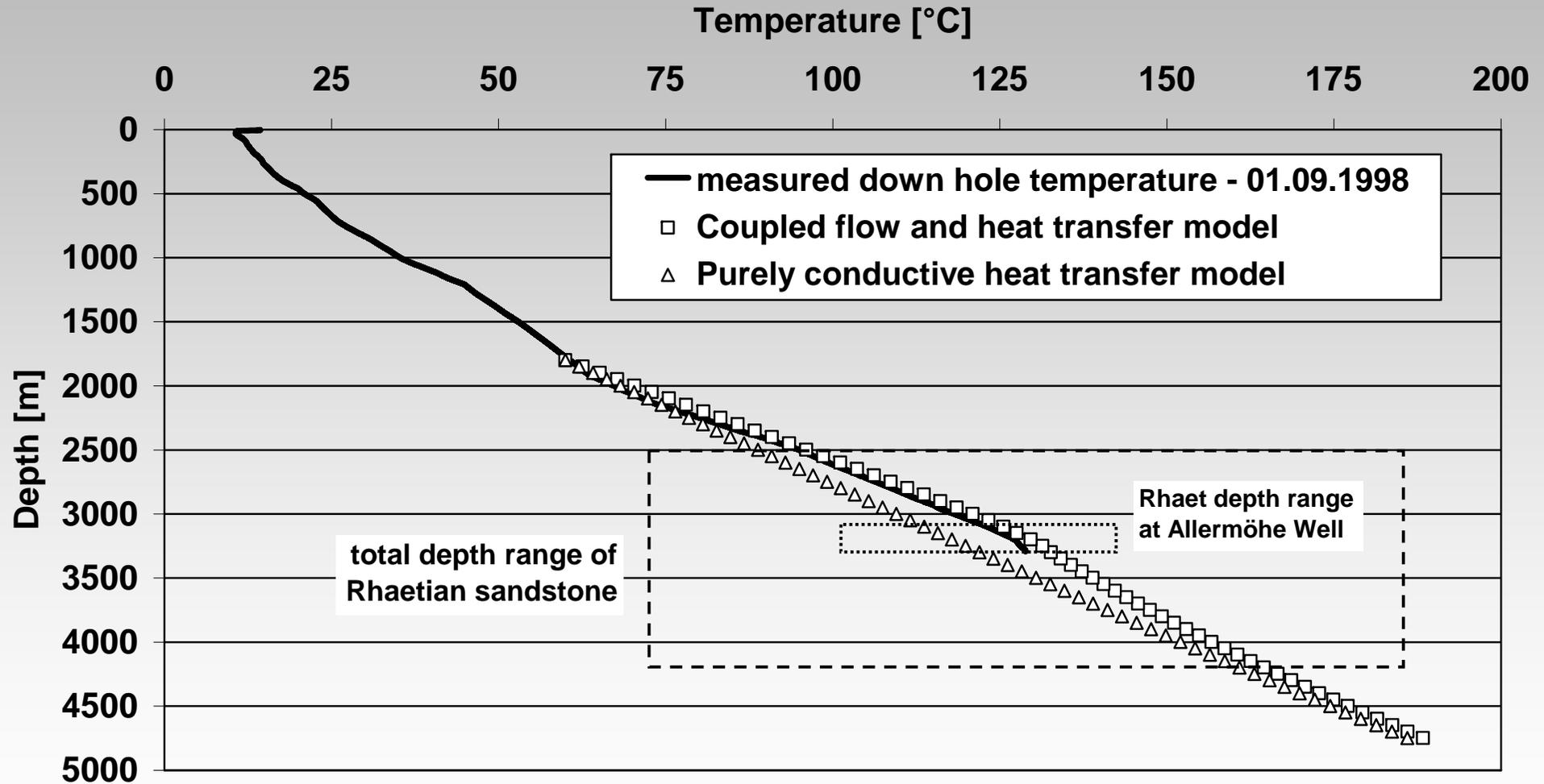


GIS-Modell: 11 km x 11 km, Tiefe 5000 m

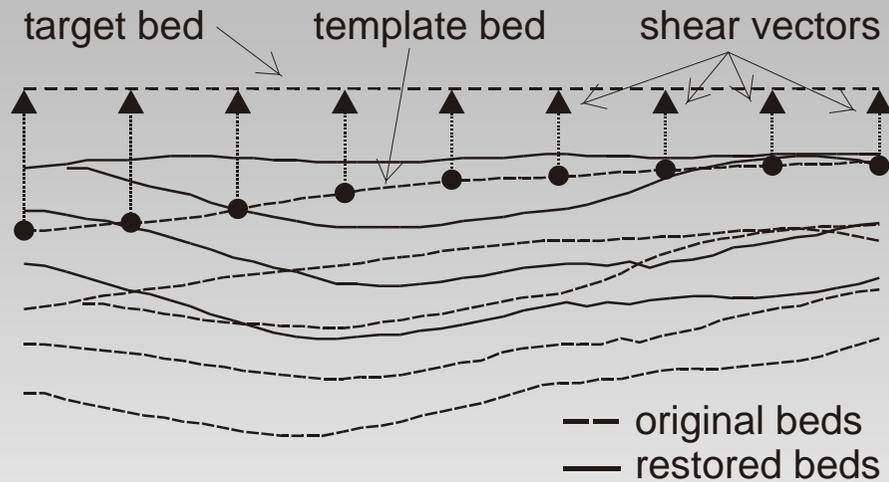
Konvektion - Großräumige Zementation



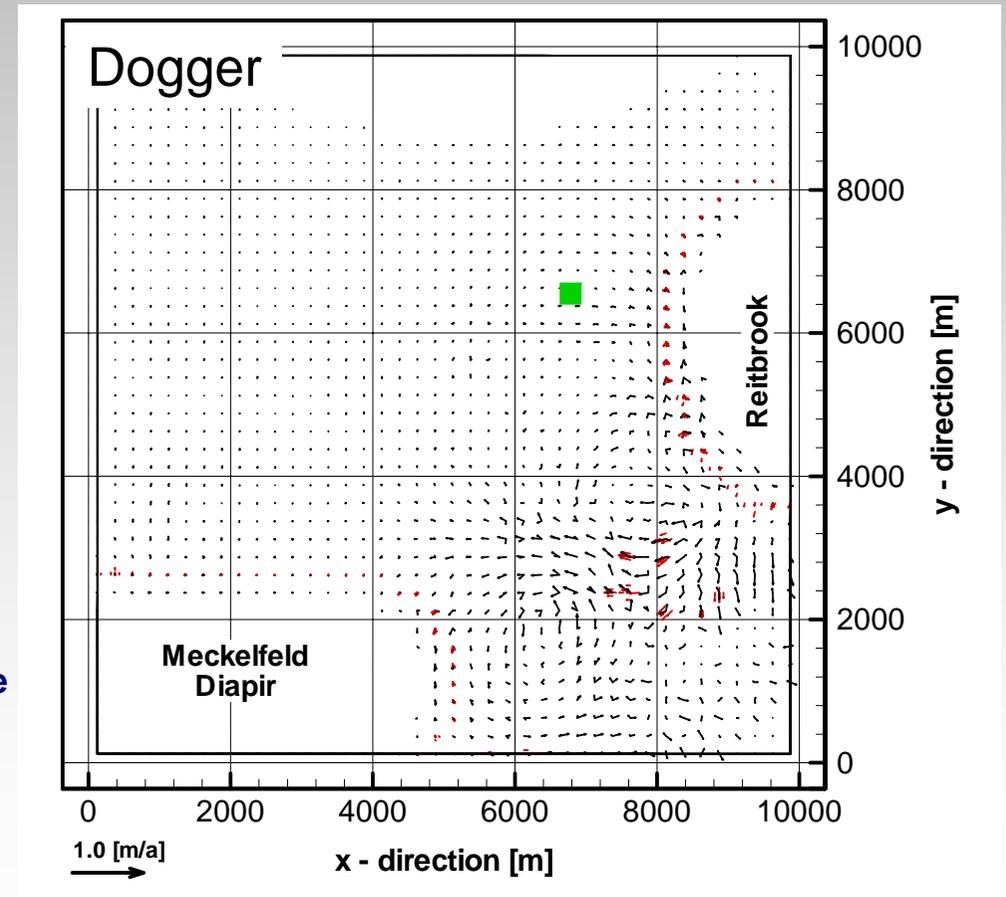
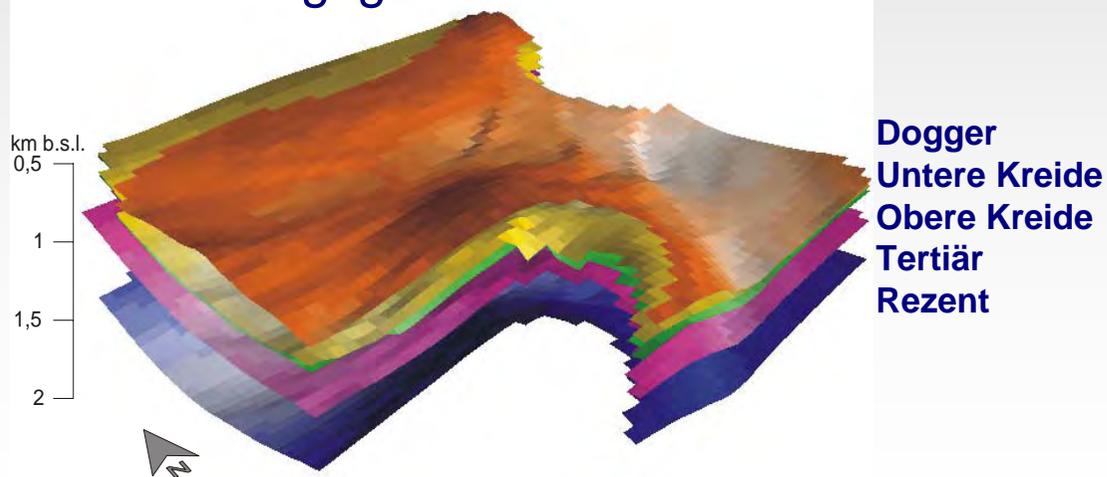
Temperaturprofil – Hamburg-Allermöhe



Palinspastische Rekonstruktion



Entwicklungsgeschichte des Rhät



2. Konzept – Hochtemperaturereignisse

schichtgebundene Strömung

$$v_D \approx 1 \text{ m a}^{-1}$$

$$T = 75^\circ\text{C}$$

$$c_{\text{CaSO}_4} = 35 \text{ mmol L}^{-1}$$

$$c_{\text{NaCl}} = 1,7 \text{ mol L}^{-1}$$



Anhydrit-Zementation

$$T = 125^\circ\text{C}$$

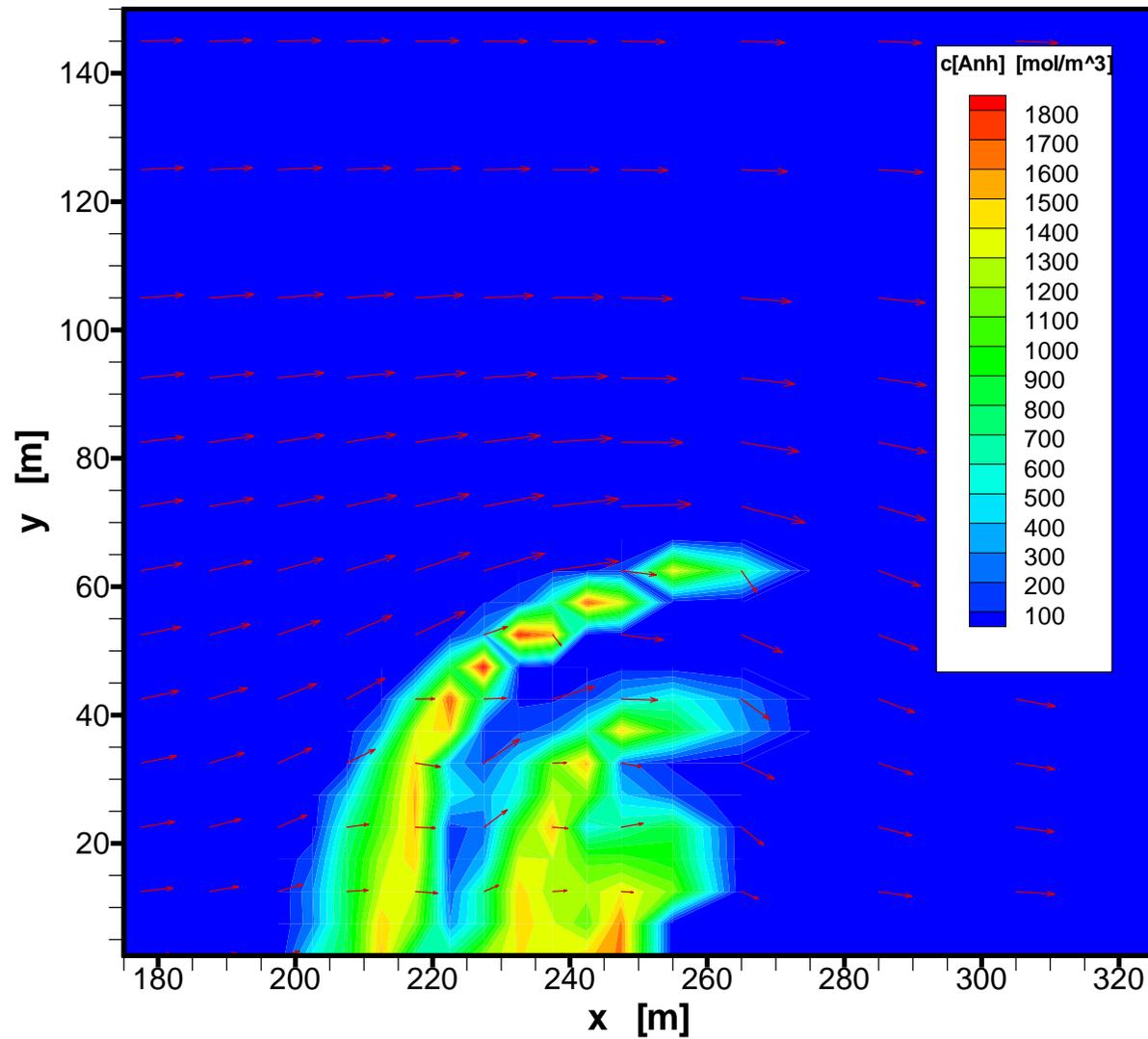
$$c(\text{CaSO}_4) = 15 \text{ mmol L}^{-1}$$

$$c(\text{NaCl}) = 1,7 \text{ mol L}^{-1}$$

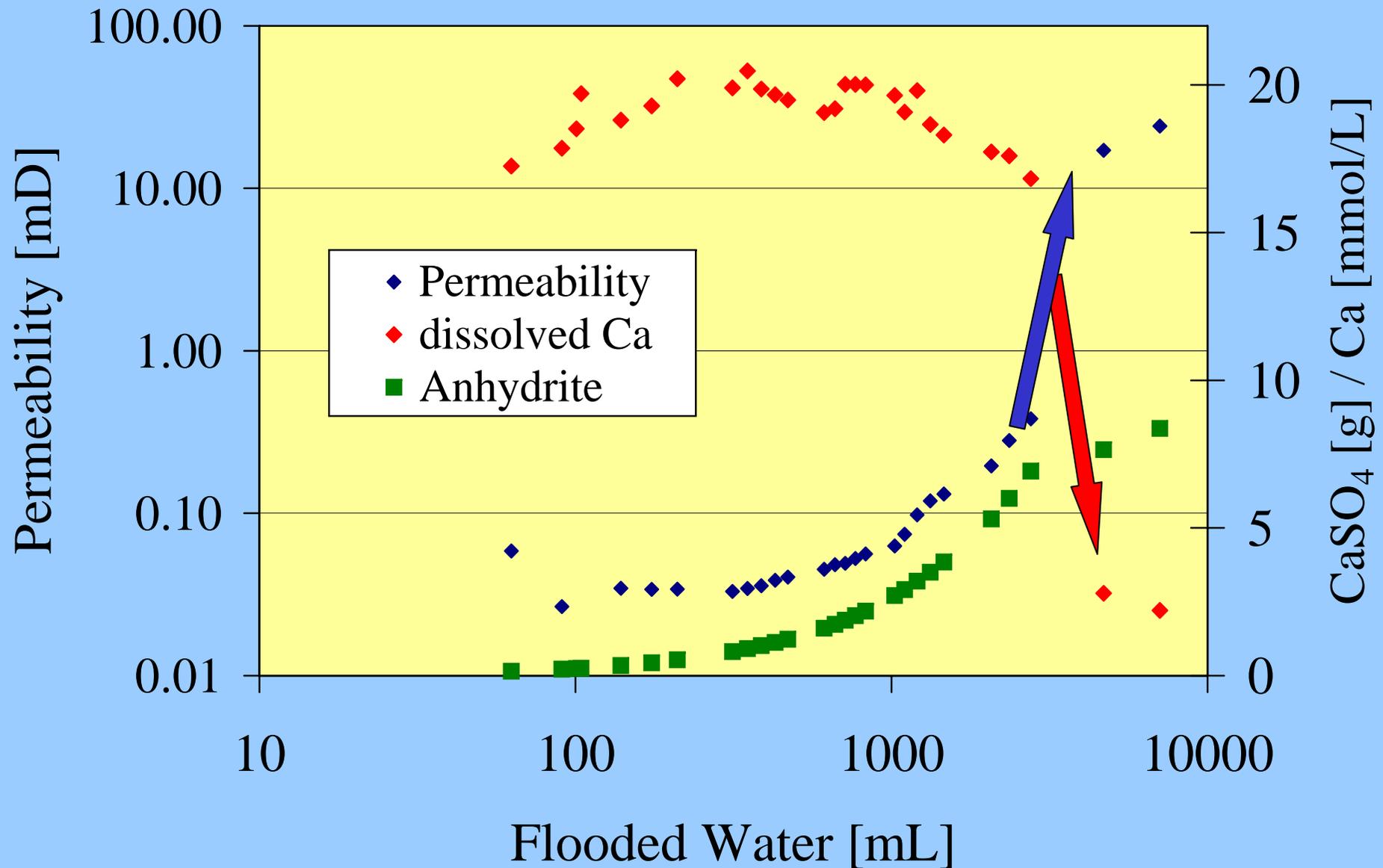


episodischer
Aufstrom
heißen Wassers
entlang einer
Störung,
freigesetzt aus
tiefer Überdruckzone

Punktquelle - Kleinräumige Zementation



3. Konzept - Bohrlochstimulation



Bildung präferentieller Fließwege

Heterogenität:

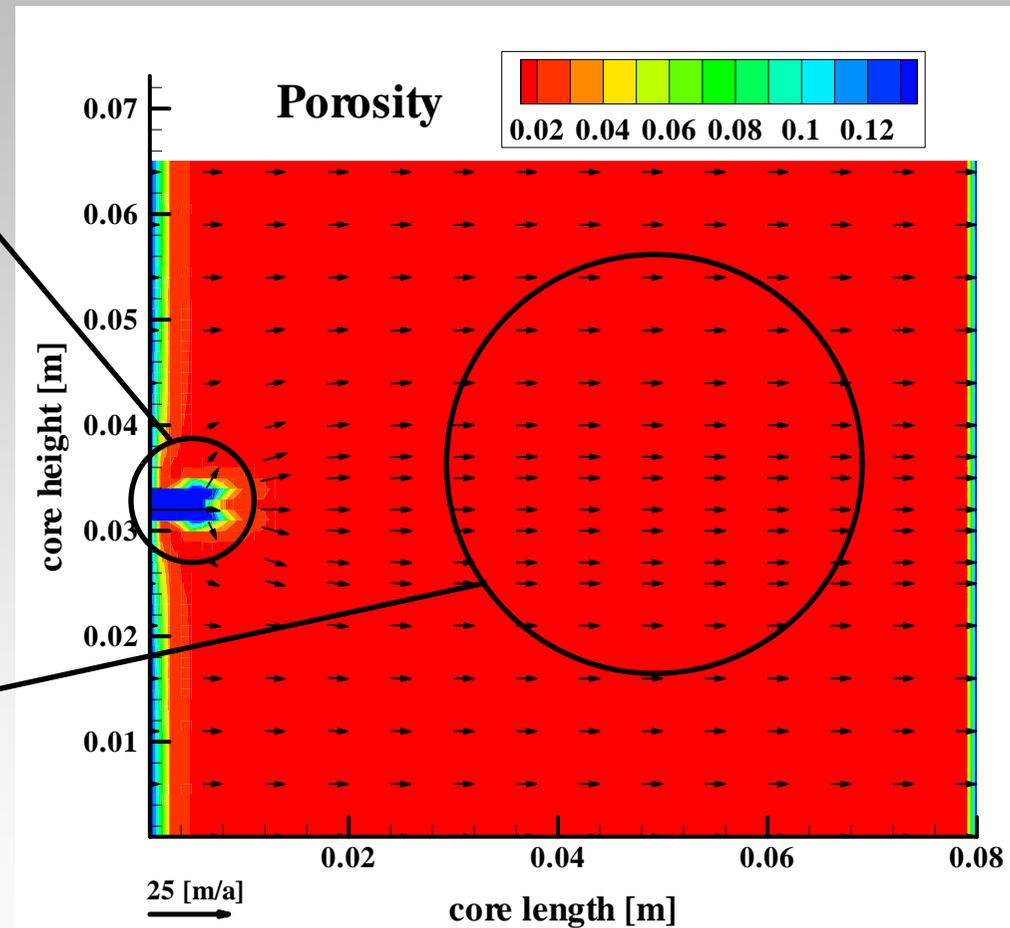
$$\Phi = 13.7 \%$$

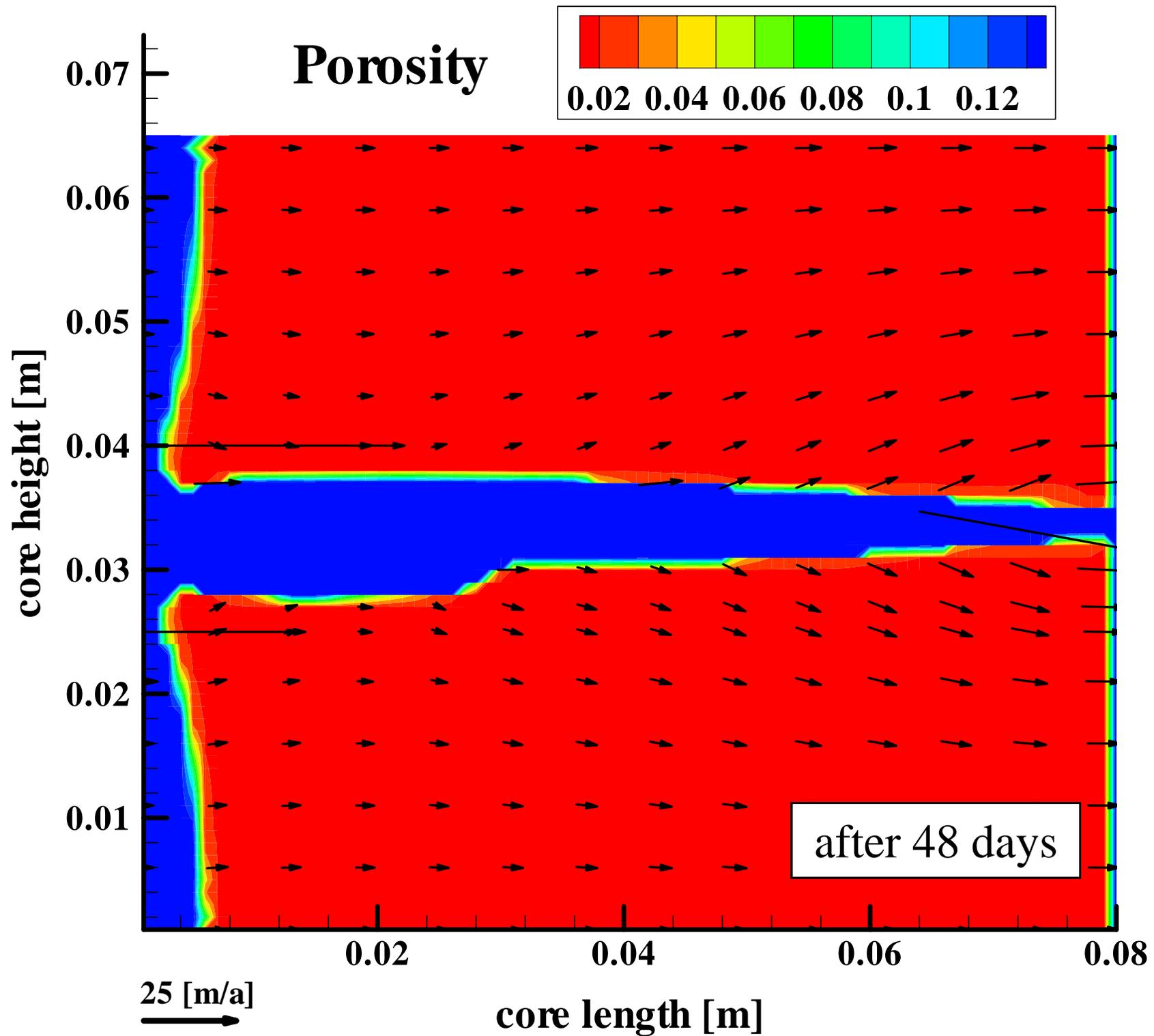
$$k = 54.0 \text{ mD}$$

Homogener Kern:

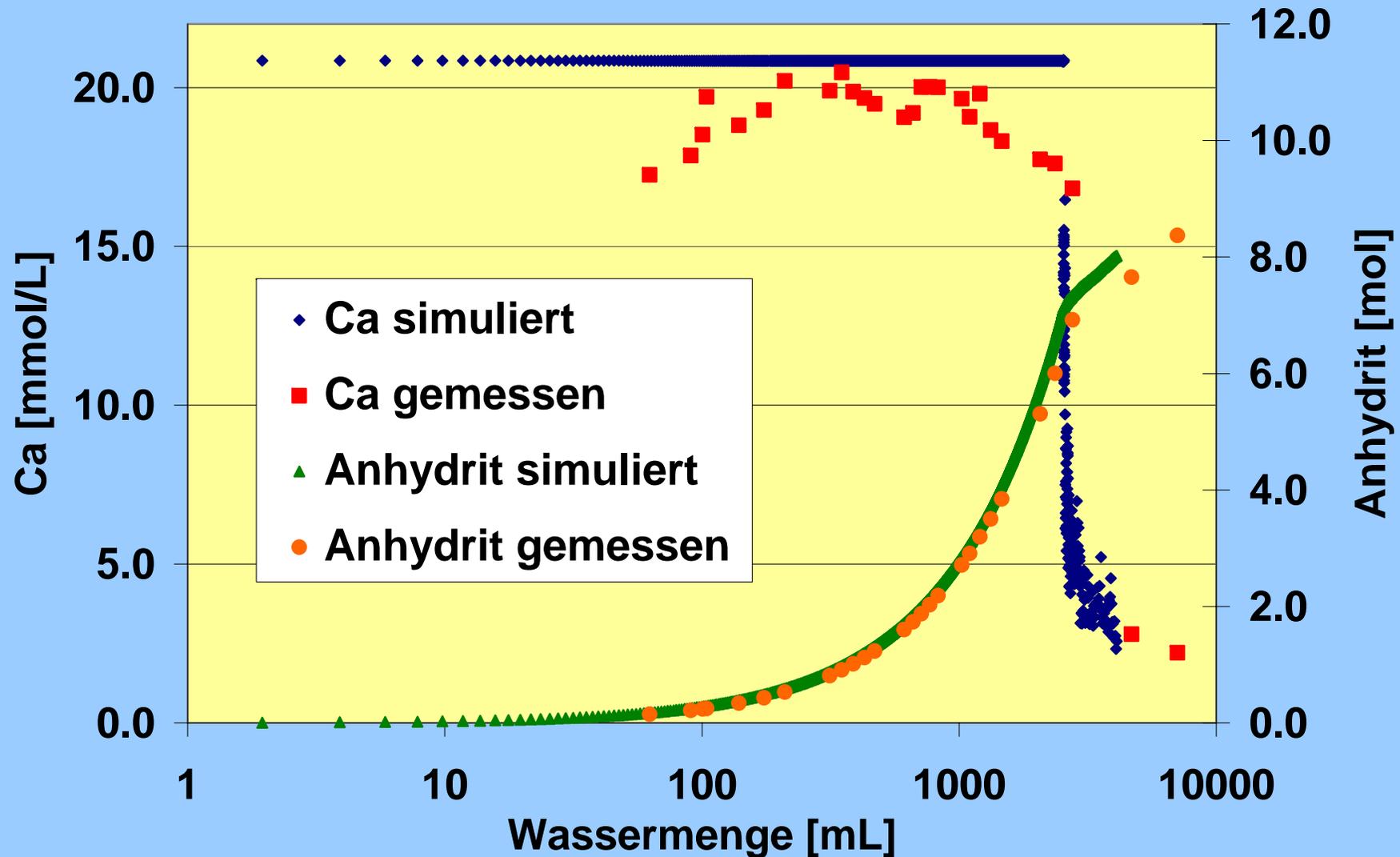
$$\Phi = 1.9 \%$$

$$k = 0.05 \text{ mD}$$





Laborergebnisse \Leftrightarrow Numerische Simulation



Fazit - Bedeutung für den Standort

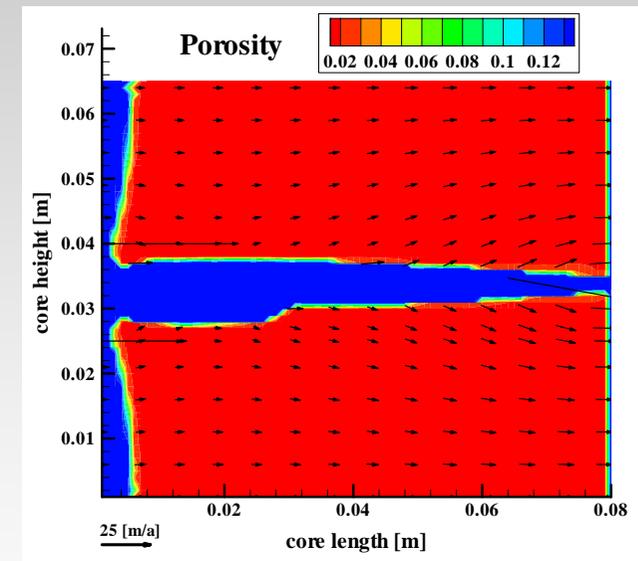
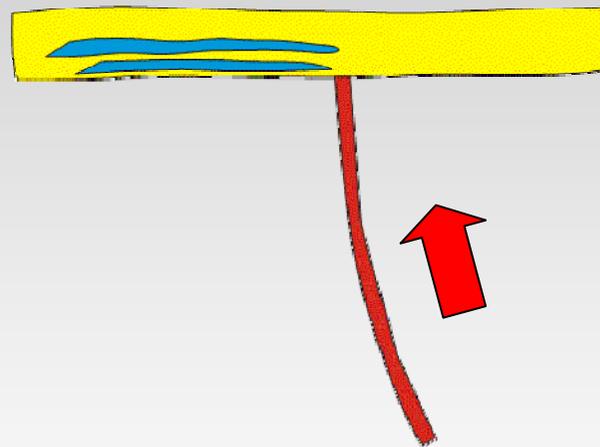
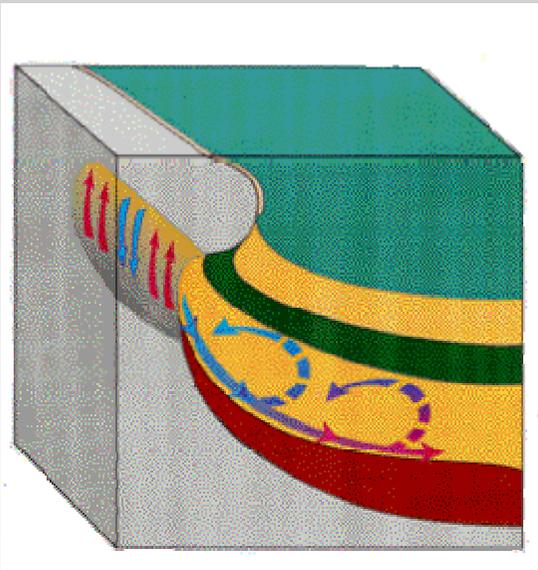
1. Konzept



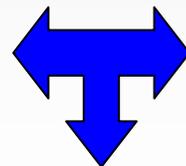
2. Konzept



3. Konzept



unwahrscheinlich



möglich

nicht ökonomisch

Kombination (in Arbeit)

Parameterschätzung und Systemoptimierung

Beispiel:

Gesteinswärmeleitfähigkeit und hydraulische Permeabilität abgeleitet aus gemessenen Temperaturen und hydraulischen Potenzialen

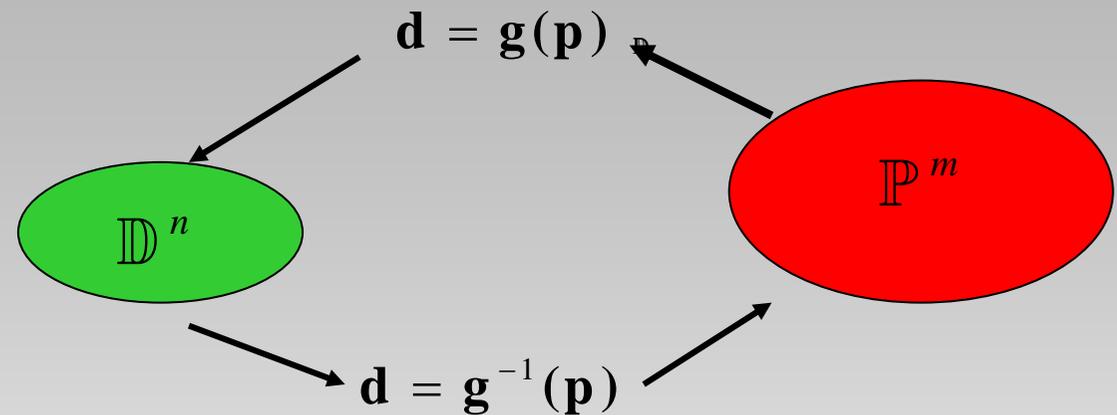
Parameterschätzung mit SHEM_AD

Vorwärtsproblem:

von den m **Parametern**
zu den n **Daten**

Inversion:

von den n **Daten**
zu den m **Parametern**



Warum inverse Modellierungen?

- ➔ „Optimale“ Werte für Systemparameter (Kalibrierung)
- ➔ Sensitivitäts- und Auflösung bei gegebener Datenbasis
- ➔ Unsicherheitsschätzung
- ➔ Modellbasierte Planung von Exploration und Nutzung

Bayes'sche Theorie

$$\Theta_B = (\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p}))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p})) + (\mathbf{p} - \mathbf{p}_a)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_a) = \min!$$

\mathbf{C}_d und \mathbf{C}_p : A-priori Kovarianzmatrizen; $r = d - g(p)$: Residuum.
 Differentiation nach \mathbf{p} und Gauss-Newton-Methode ergibt
 Iterationsverfahren:

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^a + (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1} \cdot \mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p}^k)] \quad (\text{Parameterraum})$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^a + \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T (\mathbf{J} \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} \cdot [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p}^k)] \quad (\text{Datenraum})$$

$$J_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial p_j}, \quad \mathbf{J} \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$$

n Daten und m Parameter

Berechnung der Jacobimatrix
 \mathbf{J} erfolgt durch AD

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_p^{apo} &= (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1} \\ &= \mathbf{C}_p - \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T (\mathbf{J} \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} \mathbf{J} \mathbf{C}_p \end{aligned}$$

a-posteriori Kovarianz

Automatisches Differenzieren (AD)

in out
foo(a, b, c, x, y, z)



$$\frac{\partial y}{\partial a}$$



g_foo(a, **g**_a, b, c, x, y, **g**_y, z)

1. *Programmcode zur Berechnung einer Funktion f*



2. *Vorgabe von unabhängigen (→ "Parameter") und abhängigen Variablen (→ "Daten")*



3. *Programmcode zur Berechnung von f und ihrer Ableitungen*

Beispiel AD: Funktionswert und

Ableitung

$$\vdots$$

$$u = \sin(x)$$

$$v = u * x$$

$$\vdots$$


$$\vdots$$

$$u = \sin(x)$$

$$g_u = \cos(x) * g_x$$

$$v = u * x$$

$$g_v = x * g_u + u * g_x$$

$$\vdots$$

- Code besteht aus wenigen **elementaren Funktionen** (+, -, *, sin, ...) mit **bekannten Ableitungen**
- Anwendung der **Kettenregel**
- Akkumulation erzeugt Ableitungen **ohne zusätzlichen Abschneidefehler**

AD im „Reverse Mode“

Berechnung der Ableitung der Funktion f (des Rechenprogramms) bzw. der Zielfunktion $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ (z. B. Varianz) nach den m abhängigen Parametern.

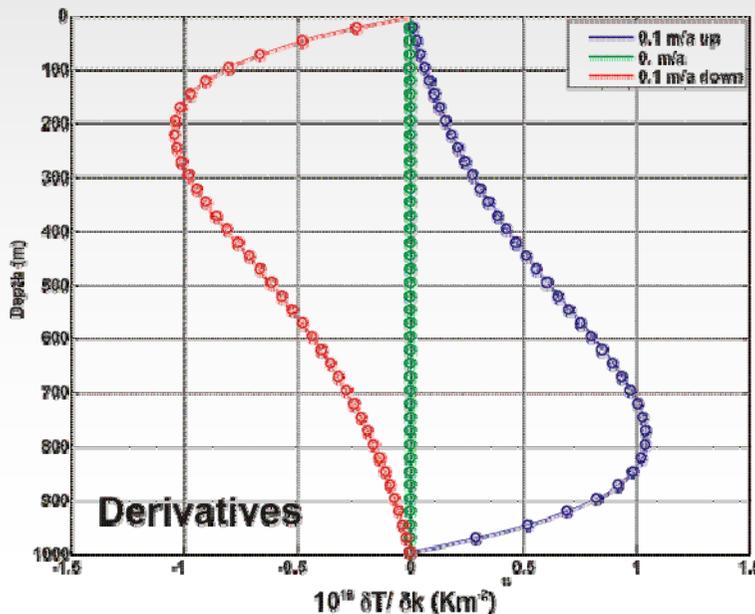
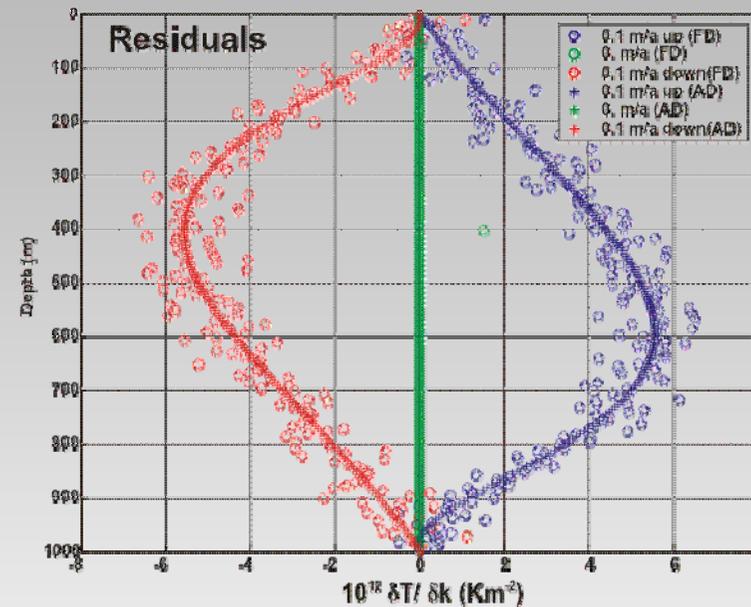
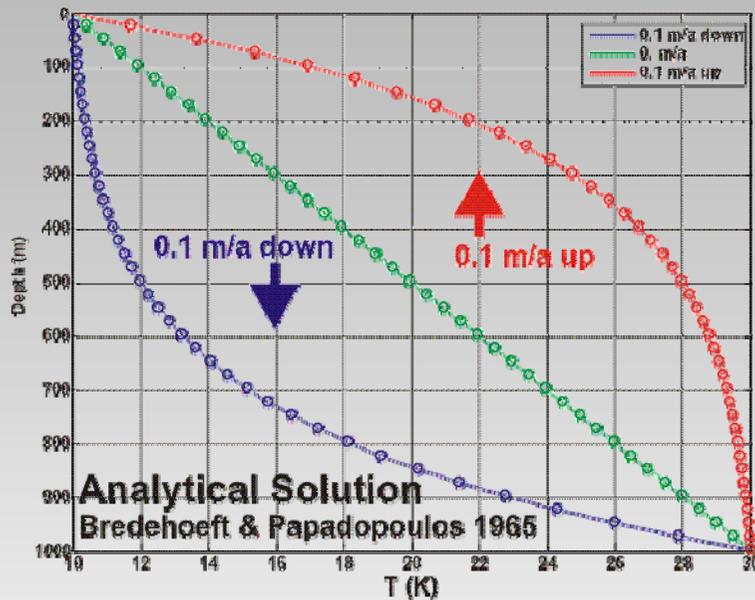
Die Zeit t zur Berechnung des n -dimensionalen Gradienten ∇F relativ zu der von F ist unabhängig von n : $t(F + \nabla F)/t(F) \approx \text{const}$

Bemerkung:

- **Einige effiziente Optimierungsalgorithmen (Quasi-Newton, NLCG) erfordern nur Gradienten**
- **Modellbewertung, Sensitivitäts- und Auflösungsuntersuchungen profitieren von der expliziten Berechnung der vollständigen Jacobimatrix**

| | |
|---------------------|--------------------------------|
| | $\frac{t(F + \nabla F)}{t(F)}$ |
| Forward Mode | $O(n)$ |
| Reverse Mode | $O(m)$ |

Verifikation mit analytischer Lösung für Wärmetransport gekoppelt mit Vertikalströmung

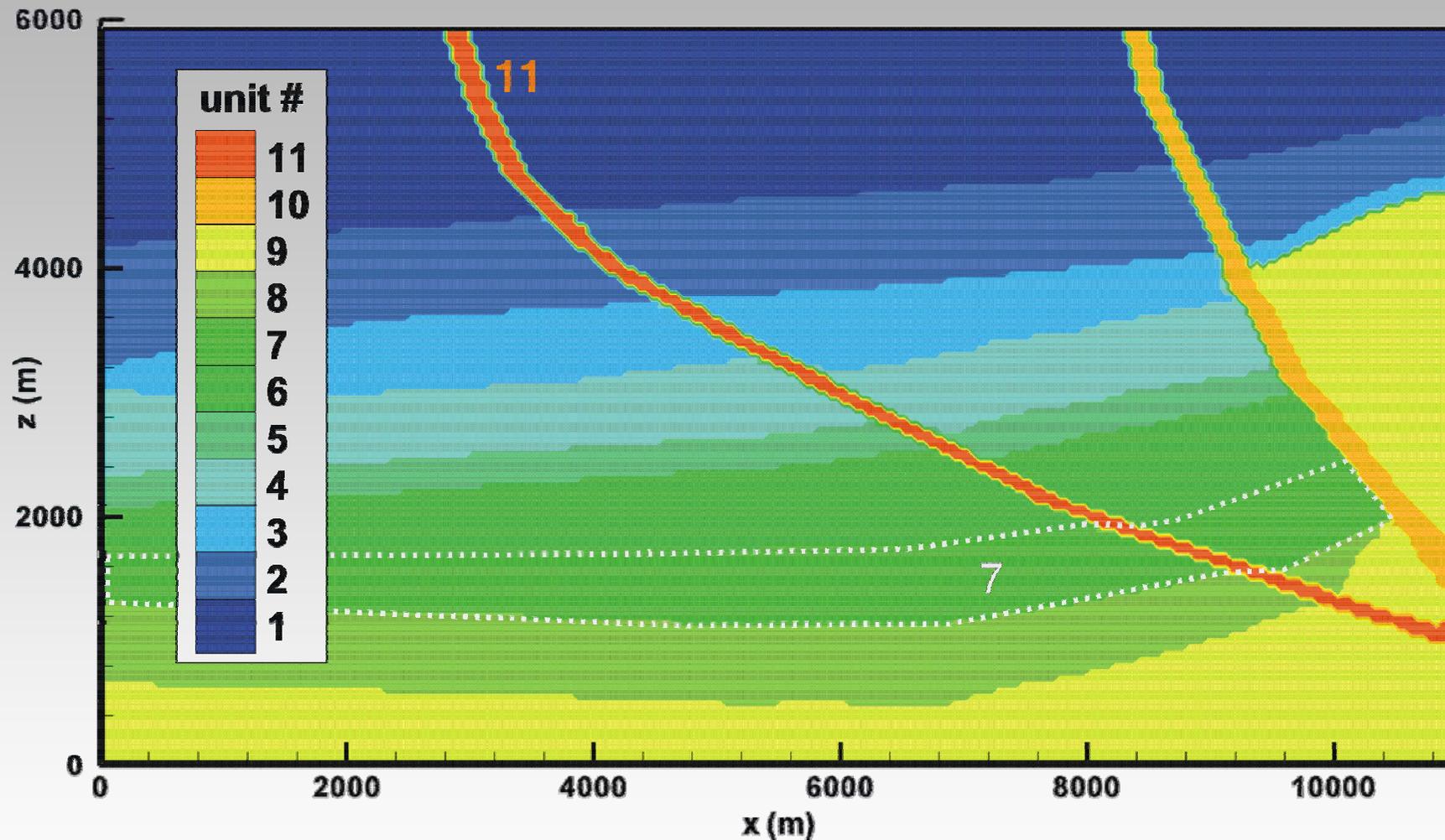


$$T(z) = T_0 + (T_1 - T_0) \frac{\exp(-(z - z_0) Pe / \Delta z) - 1}{\exp(-Pe) - 1}$$

$$Pe = \frac{(\rho c)_f v \Delta z}{\lambda}$$

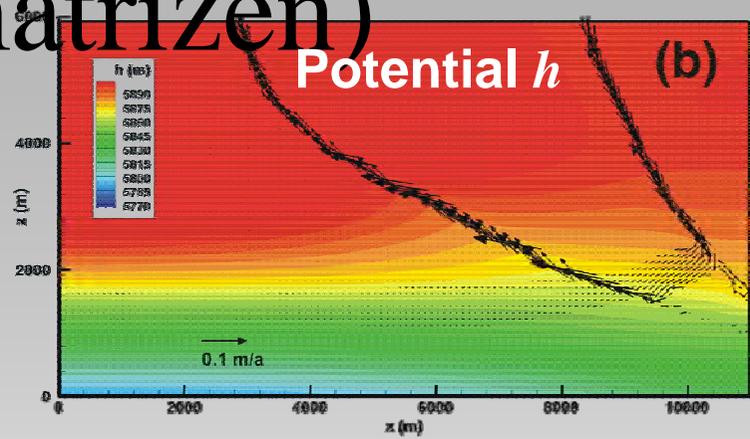
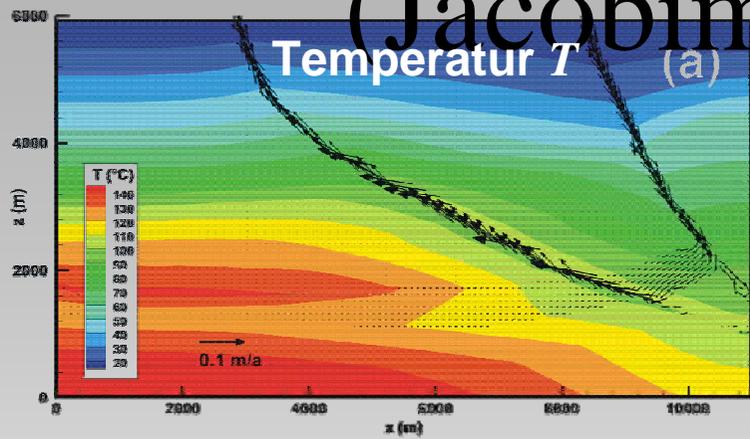
$$v = \frac{g \rho k \Delta h}{\mu \Delta z}$$

Beispiel: Freie Konvektion

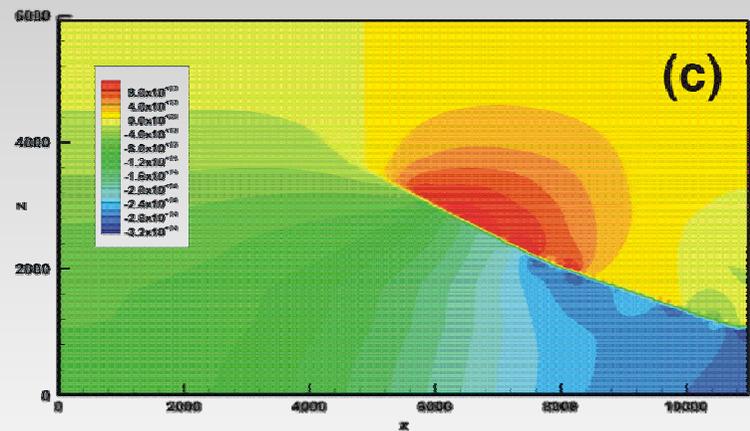


- **Zone 11: hochpermeabel; Zone 7 mäßig permeabel**
- **Parameter: ρ , λ , k für alle Zonen**
- **Dichteströmung**

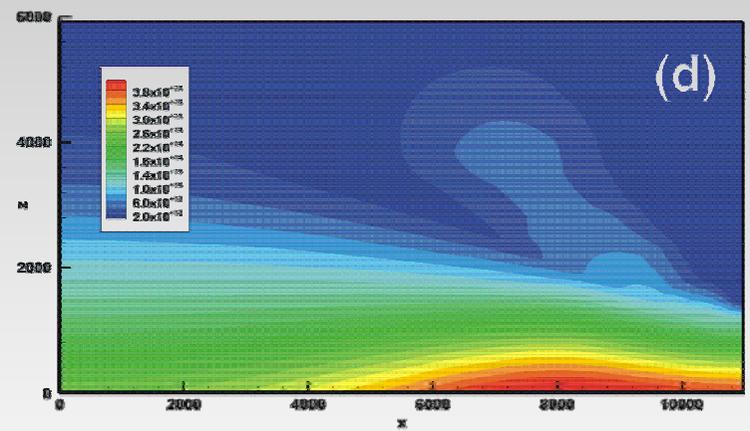
Beispiel für Sensitivitäten (Jacobimatrizen)



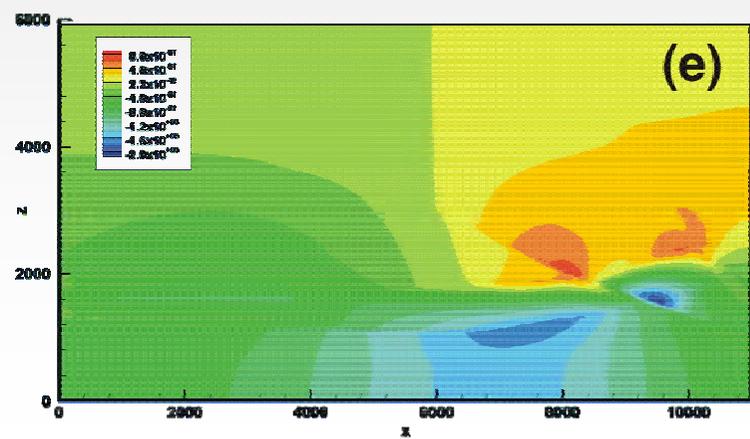
$$J_{11}^T = \frac{\partial T}{\partial k_{11}}$$



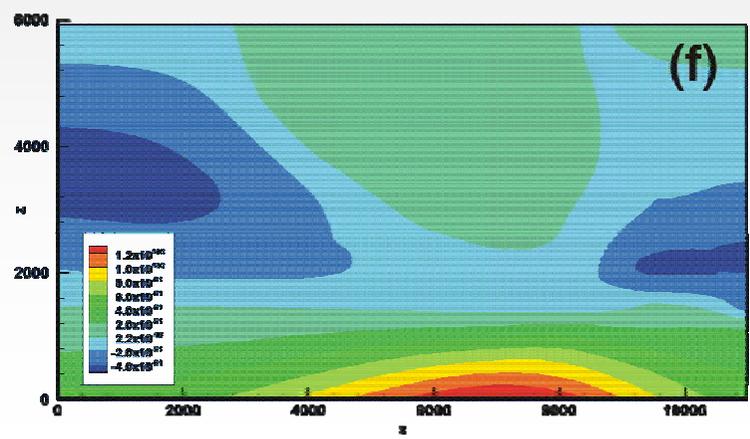
$$J_{11}^h = \frac{\partial h}{\partial k_{11}}$$



$$J_7^T = \frac{\partial T}{\partial k_7}$$



$$J_7^h = \frac{\partial h}{\partial k_7}$$

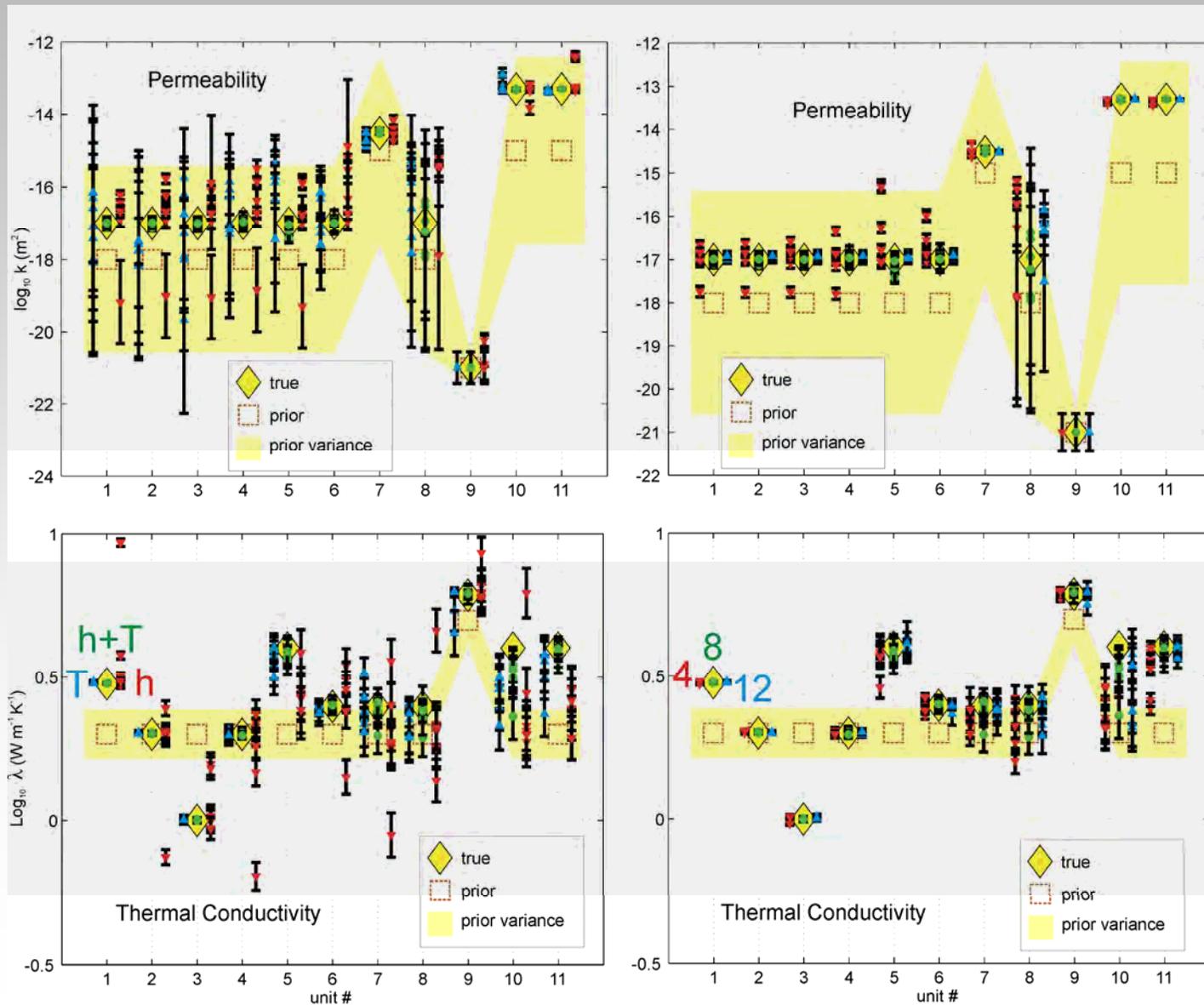


Inversionsergebnisse: Numerische

Experimente

Inversion von T und h

Bohrungszahl



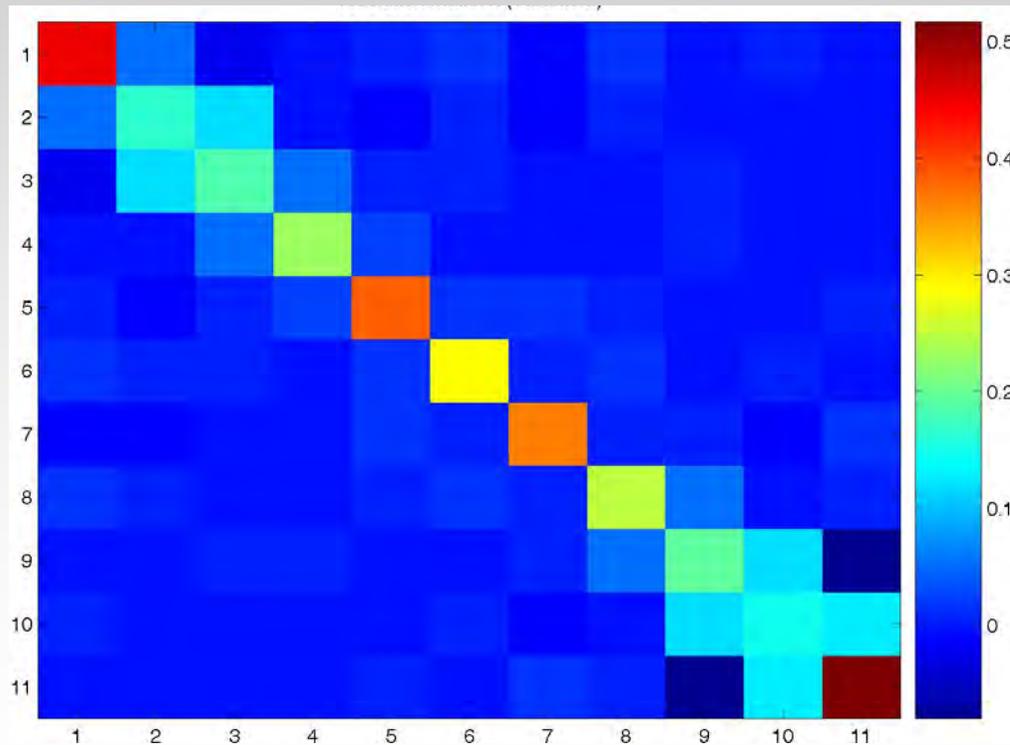
- Zufällig ausgewählte Bohrungen (Ort, Tiefe)
- Additives Rauschen
 $\Delta T = N(0,0.5)$
 $\Delta h = N(0,0.5)$

Parameterauflösungs-Matrizen (R_p)

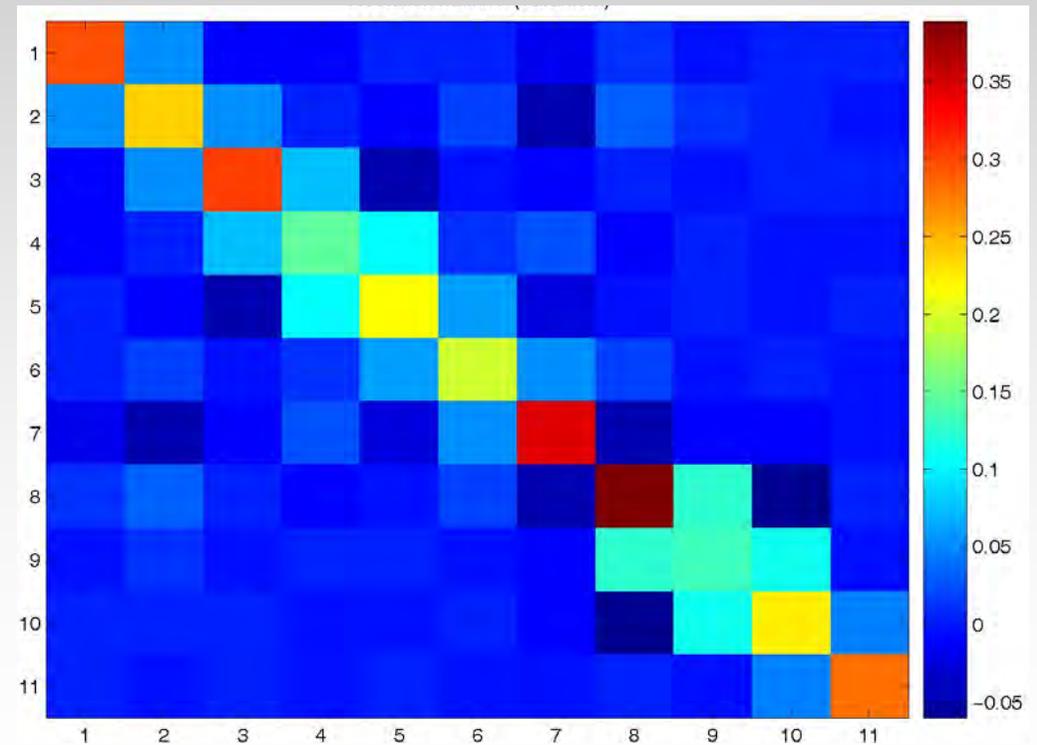
$$\mathbf{p}^{est} = \mathbf{R}_p \mathbf{p}^{true};$$

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{I} - \mathbf{C}_p^{apo} (\mathbf{C}_p^{apr})^T$$

Auflösungsmatrix für λ



Auflösungsmatrix für k



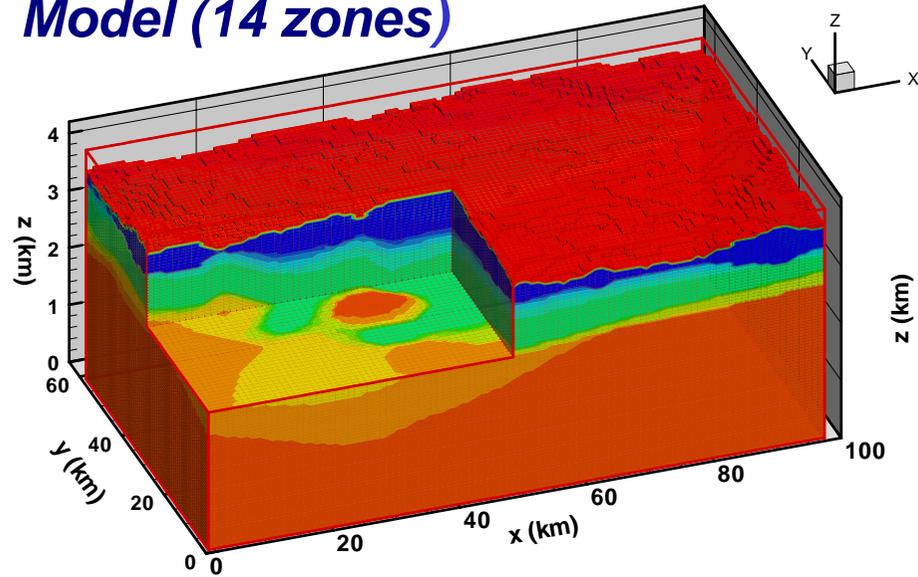
Parameterschätzung und Systemoptimierung

Beispiel:

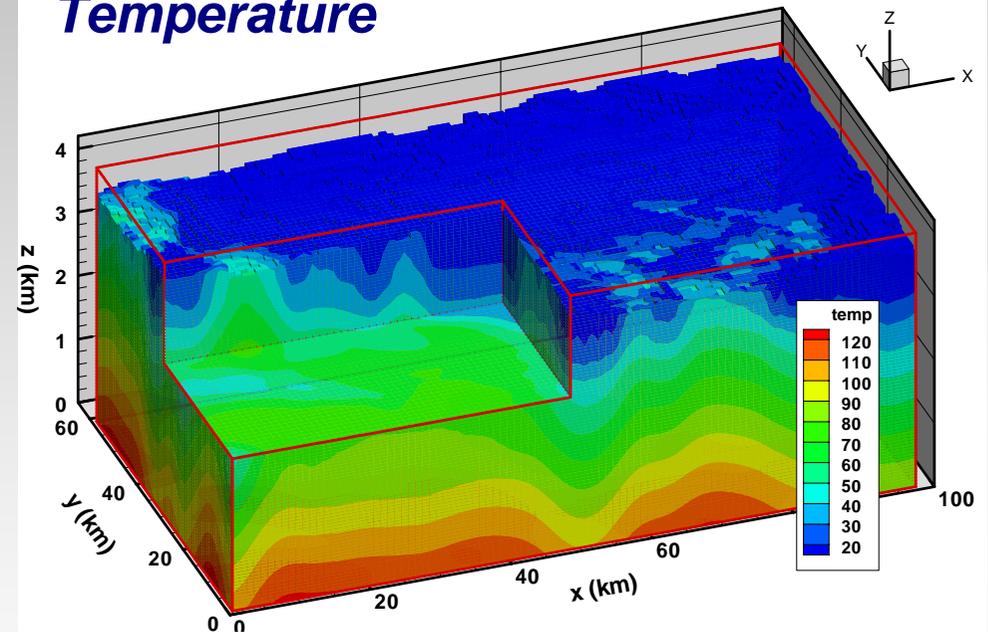
Optimierung der Exploration einer geothermischen
Lagerstätte

Auslegung von Experimenten mit Hilfe eines 3D-Modells

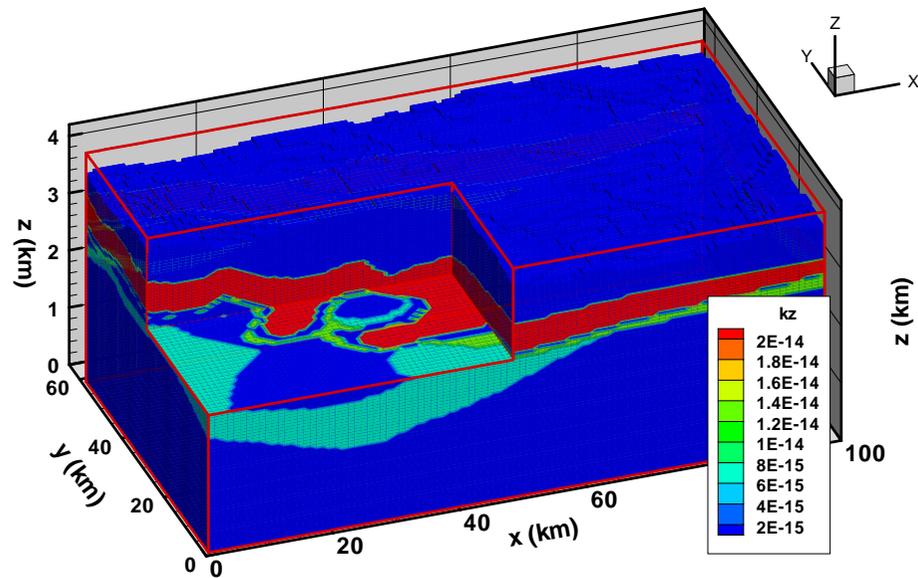
Model (14 zones)



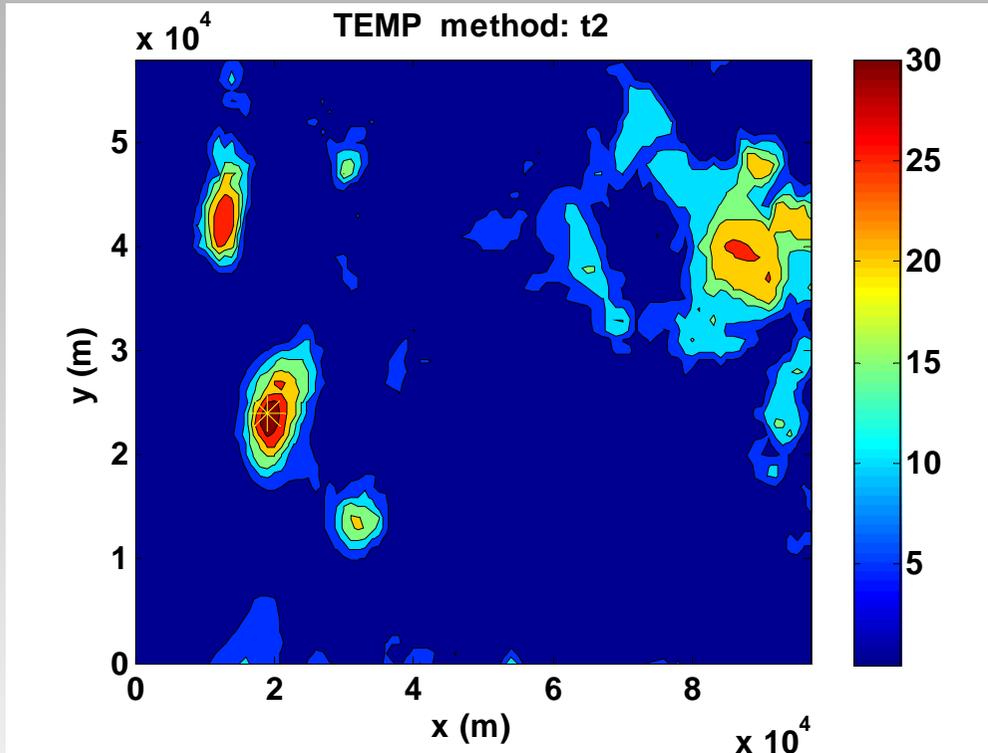
Temperature



Permeability



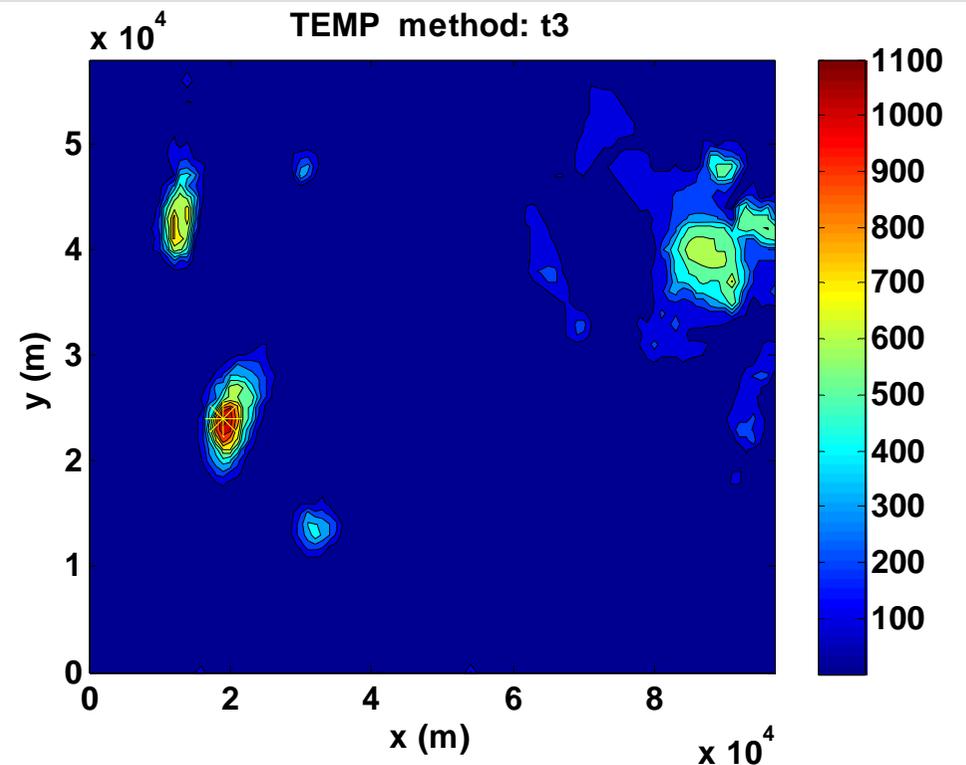
Qualitätsindikatoren der Auslegung



Verallgemeinerte Inverse G^+ :

$$G^+ = (J^T C_d^{-1} J + C_p^{-1}) J^T$$

$$[U \Lambda V] = G^+; \quad \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_n \end{bmatrix}$$



$$t_2 = \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} = \frac{\text{Spur}(G^+)}{\lambda_{\max}}$$

$$t_3 = \prod_{i=1}^N \lambda_i = \det(G^+)$$

Zusammenfassung 1

Direktes Problem

- **Analyse des Systemverhaltens für die in der geothermischen Reservoirsimulation typische nicht-lineare Kombination mehrerer physikalischer und chemischer Prozesse**
- **Unterscheidung von wahrscheinlicheren von unwahrscheinlicheren Szenarien der Entstehung von Lagerstätten**
- **Prozessverständnis ist Voraussetzung für Erfolg versprechende Maßnahmen zur technischen Manipulation von Reservoirien**

Zusammenfassung 2

Inverses Problem

- **Schätzung wichtiger Reservoireigenschaften und ihrer Unsicherheiten**
- **Analyse der Systemempfindlichkeit in Bezug auf die Variation Reservoireigenschaften**
- **Optimierung der Explorationsstrategie von Lagerstätten hinsichtlich der Anzahl, Lage und Tiefe teurerer Explorationsbohrungen**

Danksagung

- Dr. Axel Baermann (Dr. Baermann & Partner)
- Dr. Jörn Bartels (RWTH Aachen, jetzt Geothermie Neubrandenburg)
- Dr. Andreas Günther (BGR Hannover)
- Jens Kröger (Umweltbehörde Hamburg)
- Reinhard Krug (RWTH Aachen)
- Dr. Volker Meyn (TU Clausthal-Zellerfeld)
- Darius Mottaghy (RWTH Aachen, jetzt Geophysica Beratungsgesellschaft mbH)
- Dr. Hansgeorg Pape (RWTH Aachen)
- Dr. Heinke Stöfen (TU Hamburg-Harburg)
- Dr. Roland Wagner (RWTH Aachen, jetzt GEOWATT, Zürich)
- Dr. Martin Zarth (Umweltbehörde Hamburg)

BMBF, BMU, BMWi, DFG für finanzielle Förderung