

## Numerische Simulation der Kohlendioxidspeicherung im Untergrund

Um den weiteren Anstieg der CO<sub>2</sub> Konzentration in der Atmosphäre durch die Verbrennung fossiler Brennstoffe von vor-industriellen 280 auf heute 380 Moleküle pro eine Million Moleküle Luft zu bremsen, wird international die Speicherung im Untergrund als eine Option diskutiert. Das CO<sub>2</sub> muss dafür zunächst z.B. im Kraftwerk von den übrigen Abgasen abgetrennt werden. Anschließend wird das CO<sub>2</sub> unter Druck in eine geologische Formation eingepresst und gespeichert. Das immer gebräuchlicher werdende Akronym hierfür ist CCS (,Carbon Capture and Storage'). Eine Tiefe der geologischen Formation von 600 bis 800 m unter der Geländeoberkante ist dabei mindestens notwendig um die Druck- und Temperaturbedingungen zu garantieren, damit das üblicherweise gasförmige CO<sub>2</sub> im sog. ,überkritischen Zustand' vorliegt. Die Dichte in diesem Zustand liegt dann bei über 600 kg/m<sup>3</sup> und man kann den vorgefundenen Porenraum sehr effektiv zur Speicherung ausnutzen, außerdem sind die Auftriebskräfte minimiert. Denn trotz der hohen Dichte ist das CO<sub>2</sub> immer noch leichter als die in dieser Tiefe meist vorgefundene Salzlake. Damit erfährt es Auftriebskräfte und neigt dazu, sich seinen Weg zurück in die Atmosphäre zu suchen. Es gibt nun einige Prozesse die dies verhindern können. Unter der ,hydrodynamischen Falle' versteht man das Aufhalten des aufsteigenden Kohlendioxids an einer geringdurchlässigen, geologischen Barriere, dem sog. ,Cap-Rock'. Im Bild dargestellt ist der Aufstieg einer injizierten CO<sub>2</sub>-Menge, das Aufstauen unterhalb eines Cap-Rocks (nicht dargestellt) und die daraus resultierende Ansammlung am höchsten Punkt der geologischen Schicht.

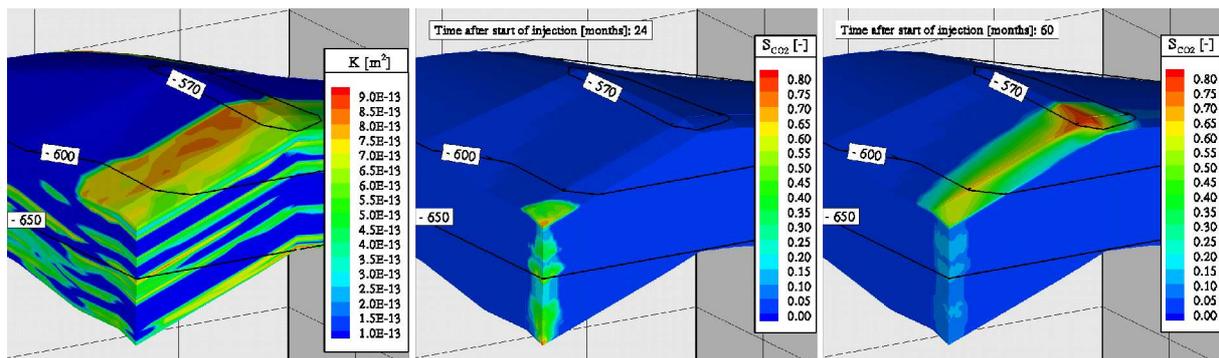


Bild: Zu sehen ist eine am zentralen, senkrechten Injektionsbrunnen (vordere Kante) aufgeschnittene geologische Schicht. Somit sieht man in etwa ¼ des gesamten Modells. Die gesamte laterale Modellausdehnung beträgt 25 km<sup>2</sup>. Schwarze Linien stellen Isolinien der Tiefe (d.h. Tiefe in Meter unterhalb der Geländeoberkante) dar. Links: Durchlässigkeitsverteilung eines heterogenen Untergrunds. Rot dargestellt sind gut durchlässige Bereiche, blau dargestellt niedrig durchlässige Bereiche. Mitte/Rechts: Sättigungsverteilung (Volumenanteil des von der CO<sub>2</sub>-Phase eingenommenen Porenraums) nach 2 bzw. 5 Jahren Injektionszeit.

Bei der ,residuellen Falle' wird das CO<sub>2</sub> in den Porenzwischenräumen durch Oberflächenspannungseffekte zurückgehalten. Dieser Effekt ist im Bild (rechts) zu sehen. Es werden geringe Sättigungen zurückgelassen in Bereichen in denen CO<sub>2</sub> bereits vorhanden war, die aber den weiteren Aufstieg nicht verhindern konnten. Die Lösung des Fluids in der Salzlake stellt eine weitere Möglichkeit der Speicherung dar (,Löslichkeitsfalle'). In dem dann gelösten Zustand hat das CO<sub>2</sub> keine Neigung zum weiteren Aufstieg mehr. Die geochemische Reaktion des CO<sub>2</sub> mit dem Gestein selbst und der einhergehenden Bildung von Mineralen wird als ,chemische Falle' bezeichnet. Diese Prozesse sind nicht streng getrennt zu betrachten, vielmehr laufen sie auf verschiedenen Zeitskalen ab und tragen in der Summe zur Speicherkapazität einer Formation bei. Unterscheiden kann man sie aber sehr wohl in Bezug

auf die Speichersicherheit. Ist z.B. das CO<sub>2</sub> chemisch in Form von Mineralen gebunden, besteht keine Möglichkeit der Rückkehr in den ‚freien‘ Zustand, und die Speichersicherheit kann als sehr hoch angenommen werden. Anders bei der hydrodynamischen Falle, d.h. dem Aufstau an geringdurchlässigen Schichten. Das CO<sub>2</sub> unterliegt immer noch starken Auftriebskräften, und kann eventuell über die hier zu betrachtenden Zeiträume von hunderten bis tausenden von Jahren wieder entweichen, sei es schleichend oder durch auftretende Störungen, wie geologische Verschiebungen.

Die offenen Fragen sind aufgrund dieser ‚neuen‘ Idee, nicht nur was die Speicherung im Untergrund anbelangt, vielfältig. Z.B. ist die Berechnung der zur Verfügung stehenden weltweiten Kapazität immer noch ungewiss. Die Aufsuchung potentieller Speicherstätten und die anschließende detaillierte Feststellung der Eignung stellt ein weiteres Problem dar. Hier nun kommt die numerische Simulation der beschriebenen Prozesse in Betracht. Zunächst ist sie ein unverzichtbarer Baustein für ein umfassendes Prozessverständnis. Experimente sind aufgrund der hohen Drücke und Temperaturen sehr schwierig zu realisieren. Großtechnische Versuche in realen geologischen Formationen aufgrund der schweren Beobachtbarkeit in der Tiefe sowie den unklaren oder fehlenden politischen Rahmenbedingungen ebenso.

Konzeptionell stellt die numerische Simulation der CO<sub>2</sub> Speicherung einen Mehrphasenprozess im porösen Medium dar. Dieses Konzept wird am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung seit Jahren bei anderen umweltrelevanten Fragestellungen verfolgt, z.B. der Schadstoffausbreitung im Untergrund, Sanierungsszenarien, Gas-Wasser-Strömungen in Brennstoffzellen, etc. Aber auch in der Erdölindustrie, bei der Simulation der Prozesse in einem Ölreservoir, besteht ein großer Erfahrungsschatz. Man kann dabei grundsätzlich zwischen Mehrphasenmodellen ohne Phasenübergänge und Mehrphasen-Mehrkomponenten-Modellen, die den Übergang von Komponenten (CO<sub>2</sub> und Wasser) in andere Phasen beschreiben, unterscheiden. Ein solches Mehrphasen-Mehrkomponenten-Modell (MUFTE-UG) wird am Lehrstuhl seit vielen Jahren entwickelt und erlaubt nun die Forschung an solchen Fragestellungen. Es werden dazu bei uns im Hause zahlreiche Forschungsprojekte bearbeitet, an denen internationale Experten aus weltweit führenden Institutionen beteiligt sind. Insbesondere bestehen im CO<sub>2</sub>-Bereich enge Kooperationen mit Partnern an der Universität Bergen/Norwegen (Prof. Dahle, Dr. Nordbotten), der Princeton University (Prof. Celia) und der Montana State University (Prof. Cunningham und Spangler).

Das von der EU im Rahmen des 6. Forschungsprogramms geförderte Projekt ‚CO<sub>2</sub>SINK‘ hat den Anspruch, die Basis für eine mögliche ‚on-shore‘ Speicherung zu legen. Dabei wird CO<sub>2</sub> in einen salinen Aquifer in der Nähe von Berlin injiziert und mittels neuester Messtechnik genauestens beobachtet. Dabei soll vor allem die Lücke geschlossen werden zwischen wissenschaftlich konzeptioneller Arbeit und technischer Umsetzung unter realen Bedingungen, inklusive dem nötigen politischen Genehmigungsprozess. Wir begleiten das Projekt mit umfassenden numerischen Simulationen zur CO<sub>2</sub> Ausbreitung im Untergrund und helfen insbesondere bei Fragestellungen wie:

- Simulation von sog. ‚what-if‘ Szenarien. Während der gesamten Projektlaufzeit sind detaillierte numerische Simulationen nötig, die z.B. helfen den Ort der Beobachtungsstellen festzulegen, das Layout des Injektionsbrunnens zu wählen, Hinweise auf die Steuerung der oberirdischen verfahrenstechnischen Anlagen (Druck, Temperatur) zu geben, die natürlich stark abhängig sind von den Prozessen im Reservoir selbst und den Messtechnikern quantitative und zeitliche Rahmendaten über zu erwartende Ereignisse vorzugeben.

- Nach einer umfassenden Eichung des Modells sind Aussagen über Langzeiteffekte möglich, d.h. dem Verbleib des CO<sub>2</sub>, einerseits örtlich aber auch über die Art der Speicherung (hydrodynamisch, residuell oder in Lösung).
- Aussagen über die Speichersicherheit und evtl. Risiken einer Leckage.

Der Projektstart war bereits 2004, im März 2007 beginnen die Bohrarbeiten. Es ist das erste Projekt, welches eine Speicherung auf dem europäischen Kontinent vorsieht. Es sind insgesamt 40 Institutionen aus 15 europäischen Ländern beteiligt.

Die von der deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) geförderte ‚International Research Training Group ‚Non-linearities and upscaling in porous media‘ (**IRTG**) beschäftigt sich mit der Verbesserung des grundlegenden, wissenschaftlich-konzeptionellen Verständnisses der nicht-linearen Prozesse und des ‚Upscaling‘, angewandt auf verschiedene umweltrelevante und technischen Fragestellungen. Es werden hierbei stochastische Methoden entwickelt, sowie effiziente und optimale numerische Schemata zur Beschreibung der Probleme gesucht. Ein Teil der Aufgaben umfasst auch die Speicherung von CO<sub>2</sub> in geologischen Schichten. Um solch komplexe Probleme zu lösen, ist eine internationale und interdisziplinäre Ausrichtung der Beteiligten unabdingbar. Die teilnehmenden Wissenschaftler kommen aus so diversen Fachrichtungen wie der Mathematik, dem wissenschaftlichen Rechnen, der Physik, dem Umwelt- und Bauingenieurwesen, den Geowissenschaften und den Petroleum-Ingenieurwissenschaften. Beteiligte Institutionen sind die TU Delft, die TU Eindhoven, die Utrecht Universität und die Universität Stuttgart.

Bei dem von der DFG und dem BMBF im Rahmen des GEOTECHNOLOGIEN Forschungsprogramms geförderten Projekts ‚Numerische Untersuchung zur CO<sub>2</sub> Sequestrierung in geologischen Formationen - problemorientierte **Benchmarks**‘ sollen numerische und analytische Konzepte im Hinblick auf verschiedene Probleme bei diversen Speicherszenarien untersucht werden. Dabei sind Vergleiche zwischen numerischen Studien und analytischen Analysen, sowie vergleichende Simulationen mit verschiedenen Codes unabdingbar. Es soll das Verständnis der komplex miteinander gekoppelten Prozesse, welche in den Formationen stattfinden, verbessert werden. Es soll ebenfalls die Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Modelle untersucht werden. Speziell in diesem Projekt bestehen enge Verknüpfungen mit Projekten der oben genannten Partner aus Bergen und Princeton.

Benchmarks, welche typische Probleme in Bezug auf die CO<sub>2</sub>-Speicherung im Untergrund darstellen, wurden bereits definiert. Sie sollen helfen, eine gemeinsame Basis für Diskussionen über die wichtigsten Aspekte, offene Fragen, Risiken und Möglichkeiten zu schaffen. Von großer Bedeutung ist ebenfalls die Untersuchung der wichtigsten Prozesse in Bezug auf die oben diskutierten Fragestellungen anhand von Sensitivitätsanalysen mit exemplarischen Modellproblemen auf verschiedenen Skalen.

Das ebenfalls von GEOTECHNOLOGIEN geförderte Projekt ‚**CO<sub>2</sub>TRAP**‘, beschäftigt sich mit einer möglichen Speicherung von CO<sub>2</sub> in nicht-abbaubaren Kohleflözen in stillgelegten Kohlegruben. Diese zählen mit zu den ökonomisch attraktivsten geologischen Formationen für die Lagerung von CO<sub>2</sub>, da bei der Adsorption von CO<sub>2</sub> an der Kohle gleichzeitig Methan desorbiert und freigesetzt wird (sog. ‚Enhanced Coalbed Methane‘ (ECBM)), sodass durch die Nutzung des Methans die Kosten der CO<sub>2</sub> Speicherung verringert werden können. Die Ziele des Forschungsprojektes sind die

- Entwicklung physikalisch-mathematischer Modellansätze für die CO<sub>2</sub>-Adsorption in Kohleflözen und gleichzeitige Desorption von Methan
- Implementierung dieser Ansätze in die vorhandenen numerischen Mehrphasen-Mehrkomponenten Simulationsprogramms (MUFTE-UG)

- Validierung des Modells durch Vergleich mit Laborexperimenten, die vom LEK (Lehrstuhl für Geologie, Geochemie und Lagerstätten des Erdöls und der Kohle ) an der RWTH Aachen durchgeführt werden.

Ein wichtiger Meilenstein der Arbeiten des Lehrstuhls im Bereich der Kohlendioxidspeicherung wird an gemeinsam mit Bergen und Princeton organisierter internationaler Workshop sein. Ziel des Workshops ist es, gemeinsam mit Vertretern aus Industrie und Forschung, die Probleme der Praktiker zu identifizieren und dabei die Möglichkeiten aufzuzeigen, die die Modellierung der physikalischen Prozesse bei der Lösung der Probleme bieten können. Des Weiteren wird es darum gehen, die Zuverlässigkeit numerischer Modelle durch den Vergleich verschiedener Codes an ausgewählten Benchmarks zu untersuchen. Termin des Workshops ist der 2.-4. April **2008**.