



INSIDE

Stadtwerke München GmbH
Innovative Energie Pullach
Karlsruher Institut für Technologie

Verbundvorhaben: Induzierte Seismizität & Bodendeformation als Interferenzaspekte beim Betrieb von Geothermieranlagen in der süddeutschen Molasse – Untersuchungen zu einem ver-besserten Prozessverständnis im tiefen Untergrund und Maßnahmen zur Risikominimierung

VERGLEICH VON MOOSE/TIGER UND COMSOL MULTIPHYSICS ANHAND EINES THM MODELLS DES STANDORTES PULLACH

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Klimaschutz



aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Grant agreement number

Karlsruher Institut für Technologie:	03EE4008A
SWM Services GmbH:	03EE4008B
Innovative Energie für Pullach GmbH:	03EE4008C

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Titel:	Vergleich von Moose/TIGER und Comsol Multiphysics anhand eines THM Modells des Standortes Pullach
Arbeitspaket:	AP4: Reservoirmodellierung
Meilenstein:	M4.3.1 Teil 2
Fälligkeitsdatum:	05.2020
Tatsächliches Datum:	13.09.2022
Partner:	Zuständig: KIT beteiligte Partner: IEP, SWM
Ansprechpartner:	Robert Egert Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Institut für Angewandte Geowissenschaften Abteilung Geothermie Adenauerring 20b, Geb. 50.40 76131 Karlsruhe, Germany Email: robert.egert@kit.edu Phone: +49 721 608 45289
Autoren:	KIT : R. Egert
Version:	1.0

Version	Datum	Beschreibung der Ergänzungen, Änderungen, Überprüfungen
1.0	02.12.2022	Erste geteilte Version

INHALTSVERZEICHNIS

1	EINLEITUNG	5
2	METHODIK	5
2.1	Hydraulisch-mechanischer Benchmark.....	5
2.1.1	Allgemeine Beschreibung	5
2.1.2	Numerische Implementierung.....	6
2.2	Gekoppeltes THM-Modell des Pullach Reservoirs	7
2.2.1	Allgemeine Beschreibung	7
2.2.2	Numerische Implementierung.....	8
3	ERGEBNISSE	9
3.1	Hydraulisch-mechanischer Benchmark.....	9
3.2	Gekoppeltes THM-Modell des Pullach Reservoirs	10
3.2.1	Thermo-hydraulischer Vergleich	11
3.2.2	Thermo-hydraulisch-mechanischer Vergleich	14
4	DISKUSSION	17
5	ZUSAMMENFASSUNG.....	17
6	LITERATURVERZEICHNIS.....	18

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1: Meshes die Modellierung mit a) TIGER und b) Comsol. Auf Grund der feinen Elementauflösung, sind für das Comsol Mesh nur in der rechten Modellhälfte die einzelnen Elemente dargestellt.6

Abbildung 2: FE-Mesh des Pullach Geothermiereservoirs. Zu sehen ist die Oberkante des Malm Epsilon und im Hintergrund die Ränder bis hin in das Tertiär.9

Abbildung 3: Hydraulisch-mechanischer Vergleich von TIGER und Comsol mit einer analytischen Lösung. A) Spannungsänderungen nach 36 Tagen im Abstand zur Injektionsquelle. B) Spannungsänderungen im Abstand von 206 m mit zunehmender Injektionsdauer.....10

Abbildung 4: Vergleich zwischen TIGER (a und c) und Comsol (b und d) nach einer Simulation von 50 Betriebsjahren hinsichtlich der absoluten Reservoirtemperaturen (a und b), der Temperaturänderungen durch den Betrieb (c und d). Die Temperaturunterschiede zwischen beiden Modellen betragen weniger als $\pm 10\text{ }^{\circ}\text{C}$ (e) während ein Großteil der Knoten identische Werte aufweist (f).12

Abbildung 5: Vergleich zwischen TIGER (a und c) und Comsol (b und d) nach einer Simulation von 50 Betriebsjahren hinsichtlich der absoluten Reservoirdrücke (a und b), der Druckänderungen durch den Betrieb (c und d). Die Druckunterschiede zwischen beiden Modellen betragen weniger als $\pm 0.2\text{ MPa}$ (e) während eines Großteiles der Knoten identische Werte aufweist (f).13

Abbildung 6: Initiale effektive Spannungen des THM Vergleichsmodells des Geothermiereservoirs in Pullach als Ergebnis von TIGER (normale Linien) und Comsol (gestrichelte Linien).15

Abbildung 7: Änderung der effektiven Vertikalspannung vom initialen Spannungszustand im Vergleich zur thermo-hydraulisch induzierten Spannungsumlagerung nach 50 Betriebsjahren a) in TIGER und b) in Comsol.....15

Abbildung 8: Vergleich der effektiven Spannungsmagnituden im Bereich der Bohrung Pullach Th3 über die Tiefe. a) Initiale effektive Spannungen, b) Spannungszustand nach 30 Betriebsjahren unter Berücksichtigung thermo-poroelastischer Effekte. Die Auflösung der Linien ist bedingt durch die Evaluation der Spannungen einerseits elementweise (TIGER) und andererseits knotenweise mit Interpolation dazwischen (Comsol).16

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1: Parametrisierung des HM Benchmarks.....6

Tabelle 2: Materialparametrisierung innerhalb der Modellierungen, verwendete Quellen: ^aPei et al. (2020),^bLafogler et al. (2016),^cPotten (2020), ^dBohnsack et al. (2021)7

1 EINLEITUNG

Dieses Dokument ist Teil des “Arbeitspakets 4: Reservoirmodellierung – Thermo-hydraulisch-mechanische (THM) Modellierungen (AP 4.4)” des INSIDE Projekts und beinhaltet den “Meilenstein 4.3.1”. Es representiert den Vergleich der Simulationen des Reservoirmodells des Geothermiestandortes Pullach zwischen der open-source Finite Element (FE) Anwendung MOOSE/TIGER (THMC smluator for GEoscience Research) und der kommerziellen Software Comsol Multiphysics. Hierbei werden mittels identischem Reservoirmodell und -parametrisierung die Unterschiede zwischen den beiden Softwarelösungen anhand der verschiedener Modellierungsparameter (Porendruck, Temperature, etc.) verglichen. Ziel ist es, die in TIGER implementierten physikalischen Prozesse zu verifizieren sowie Unterschiede im weiterführenden Modellierungsablauf aufzuzeigen.

Im ersten Schritt wird ein stark vereinfachtes hydraulisch-mechanisches Modell einer punktförmigen Fluidinjektion erstellt und die multiphysikalischen Prozesse und deren gegenseitige Kopplung verifiziert, um die korrekte Funktion des neuartigen open-source Simulationstools zu garantieren. Im zweiten Schritt werden zwei identische Modelle des Pullach Geothermiereservoirs erzeugt und deren lithofazielle Einheiten mittels deren THM Materialeigenschaften anhand von Literaturwerten parametrisiert. Für weitere Details sei hierbei auch auf das AP 4.3 verwiesen. Mittels eines 50-jährigen Betriebsszenarios, angelehnt an den Betrieb im Jahr 2020, werden die langfristigen Unterschiede in den kritischen Variablen Porendruck, Temperatur sowie Spannungsänderungen untersucht, quantifiziert und anschließend diskutiert. Die zu erwartenden Unterschiede können dabei vielfältiger Natur sein und z.B. durch die Integration von Bohrungen, dem regionalen Spannungsfeld, Randbedingungen sowie Limitierungen in der Simulationsumgebung hervorgerufen werden.

2 METHODIK

Der Vergleich der beiden Modellierungsansätze wird in zwei Schritten mittels eines hydro-mechanischen Validierungsszenarios und mittels des für die TH(M)-Modellierung erzeugten Meshes des Geothermiereservoirs Pullach durchgeführt. Auf eine ausführliche Beschreibung der thermo-hydro-mechanischen Grundlagen wird verzichtet. Die physikalischen Prozesse sind zusammen mit einer ausführlichen thermo-hydraulischen Validierung der TIGER Anwendung in Gholami Korzani et al. (2020) und Egert et al. (2020) dargestellt.

2.1 HYDRAULISCH-MECHANISCHER BENCHMARK

Zur Verifikation der Implementierung der hydraulisch-mechanischen (poroelastischen) Kopplung innerhalb des TIGER Codes wurde ein Validierungsfall nach Altmann et al. (2010) gewählt, welcher auf der analytischen Lösung nach Rudnicki (1986) basiert.

2.1.1 ALLGEMEINE BESCHREIBUNG

Der Benchmark Fall besteht aus einem dreidimensionalen Zylinder mit 25 km Tiefe/Radius bei dem in einer Tiefe von 5 km Fluid mit einer konstanter Fließrate von 20 l/s in ein homogenes Reservoir injiziert wird (Altmann et al. 2010). Die Unter- und Außenseite werden gegen einen Versatz in Normalenrichtung fixiert (Roller-BC), während sich die Oberfläche frei deformieren kann. Hydraulisch

stellt das Modell ein undrainiertes Reservoir dar, bei dem weder Fluid in noch aus dem Modell fließen kann (No-Flow-BC). Schwerkraft wird für das Basismodell vernachlässigt. Das Modell berücksichtigt weder einen initialen Porendruck noch eine initiale Vorspannung. Ziel ist es, die durch die Injektion hervorgerufenen Spannungsänderungen zwischen den einzelnen Modellen/Software und der analytischen Lösung zu vergleichen. Die Parametrisierung des Reservoirs ist in Tabelle 1 dargestellt.

Tabelle 1: Parametrisierung des HM Benchmarks

Parameter	Einheit	Wert
Reservoir Permeabilität	m ²	10 ⁻¹⁴
Injektionsrate	m ³ /s	0.02
Erste Lamé Konstante	GPa	15.2
Zweite Lamé Konstante	GPa	10.2
E-Modul	GPa	26.4
Poisson Verhältnis	-	0.3
Porosität	-	0.091
Gesteinsdichte	kg/m ³	2500
Biot Faktor	-	0.45
Kompressibilität des porösen Mediums	1/GPa	4.55 * 10 ⁻²

2.1.2 NUMERISCHE IMPLEMENTIERUNG

Für die TIGER-Modellierung wurde eine Mesh mit der Software Gmsh von Geuzaine und Remacle (2017) erzeugt. Das unstrukturierte Modell besteht aus 605.417 Tetraeder-Elementen mit einer variablen Elementgröße zwischen 2 m und 500 m (Abbildung 1a). COMSOL bietet dagegen die Möglichkeit entsprechende Modelle 2D-Achsensymmetrisch zu erzeugen und zu lösen, was zu einer Vereinfachung des Lösungsaufwandes führt und keine externe Mesh-Software benötigt. Das COMSOL Modell besteht aus 71.700 Rechtecken mit einer variablen Elementgröße zwischen 0,5 m und 500 m (Abbildung 1b).

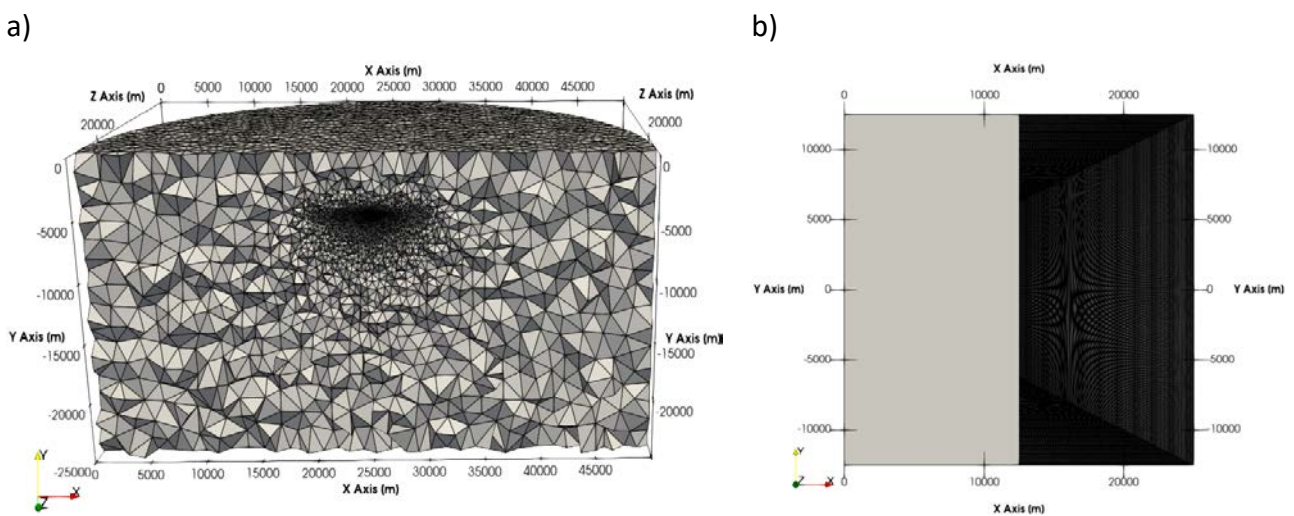


Abbildung 1: Meshes der Modellierung mit a) TIGER und b) Comsol. Auf Grund der feinen Elementauflösung, sind für das Comsol Mesh nur in der rechten Modellhälfte die einzelnen Elemente dargestellt.

Die physikalischen Grundlagen zur Lösung dieses mechanischen poroelastischen Problems sind in Egert et al. (2022) dargestellt. Die konstante Fließrate wird in beiden Modellen über eine Punktquelle mit konstantem Massenstrom integriert, welche hieraus zu einem radialen Druckanstieg führt.

2.2 GEKOPPELTES THM-MODELL DES PULLACH RESERVOIRS

In einem weiteren, deutlich realitätsnäheren Anwendungsfall wird ein Produktionsszenario innerhalb des geothermischen Reservoirs in Pullach bei München unter identischen Rahmenbedingungen und bei identischem Elementgitter simuliert. Das Ziel ist hierbei der Vergleich der praktischen Umsetzung der thermo-hydraulisch-mechanischen Kopplung sowie weiterführender softwarespezifischer numerischer Implementierungen (z.B. offene Filterstrecken, regionales Spannungsfeld, Stabilisierung der Lösung oder komplexe Eingangsparameter).

2.2.1 ALLGEMEINE BESCHREIBUNG

Zum Vergleich wird das numerische Modell des geothermischen Reservoirs von Pullach genutzt und ein kontinuierliches Produktionsszenario über 50 Jahre hinweg simuliert. Angenommen werden hierbei konstante Fließraten und Reinjektionstemperaturen, die dem Jahresmittel des Jahres 2020 entsprechen. Die Fließraten betragen in der Produktion 24 l/s (Th2) bzw. 26 l/s (Th1a) und in der Reinjektion 50 l/s (Th3) bei einer Injektionstemperatur von 62 °C. Als Produktionstemperatur wird die jeweilige lokale Temperatur (>100 °C) angenommen. Das Modell besitzt einen quaderförmigen Aufbau mit einer Ausdehnung von 11x11x3 km und ist in Richtung des lokalen Spannungsfeldes mit einer Rotation von 1,7° gegen den Uhrzeigersinn orientiert (Ziegler und Heidbach 2020). Das Modell ist in einer Tiefe zwischen 1 und 4 km unter dem Meeresspiegel lokalisiert, was einer Tiefe von ca. 1,5 km TVD unterhalb der Geländeoberkante entspricht. Der Ursprung des Modells liegt im Bereich der Bohrung Pullach Th2 bei Rechts: 4464773,890914 und Hoch: 5325797,890914 im GK4-Bezugssystem. Enthalten sind die stratigraphischen Einheiten zwischen dem oberen Kristallin (Modelunterkante) und dem Tertiär (Modelloberkante) jeweils inklusive teiler dieser strukturellen Einheiten. Besonderer Fokus liegt auf den geothermisch nutzbaren Horizonten innerhalb des mesozoischen Malms, welcher in drei individuelle Lithologien unterteilt ist. Im Modell werden tiefenabhängige Temperatur- und Porendruckbedingungen als Initial- (IC) und Randbedingungen (BC) berücksichtigt, welche das Resultat verschiedener experimenteller Messungen und Kalibrationschritte sind. Für die Parametrisierung des Reservoirfluids sei auf die Veröffentlichung Egert et al. (2022) verwiesen. Die Materialparametrisierung der lithofaziellen Einheiten ist, soweit veröffentlichter Literatur entnommen, in Tabelle 2 dargestellt und fokussiert sich auf die Reservoirseinheiten.

Tabelle 2: Materialparametrisierung innerhalb der Modellierungen, verwendete Quellen: ^aPei et al. (2020), ^bLafogler et al. (2016), ^cPotten (2020), ^dBohnsack et al. (2021)

	Einheit	Tertiär	Liegende Mergel	Lithotam-nienkalk	Malm zeta	Malm epsilon	Malm alpha	Kristallin
Thermische Expansion^a	1/K	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶	6,3x10 ⁻⁶
Permeabilität^b	m ²	10 ⁻¹⁷	10 ⁻¹⁷	10 ⁻¹⁷	Kali.t	Kali.	Kali.	10 ⁻¹⁸
Porosität^b	-	0,001	0,001	0,001	0,01	0,02	0,001	0,001

Kompres- sibilität^{c,d}	1/GPa	0,4	0,4	0,4	0,5	0,5	0,5	0,4
Wärme- kapazität^b	J/ (kg.K)	750	750	750	800	800	800	750
Wärme- leitfähigkeit^b	W/ (m.K)	2,75	2,75	2,75	3,4	3,4	3,4	3,2

2.2.2 NUMERISCHE IMPLEMENTIERUNG

Das numerische FE-Modell wurde mittels der Software MeshIt erzeugt (Cacace und Blöcher 2015). Diese Software ermöglicht die Erstellung komplexer unstrukturierter Elementgitter in Form von Tetraedern ausgehend von einzelnen stratigraphischen Horizonten. Darüber hinaus können Störungszonen sowie Bohrungen als niedrigdimensionale Elemente in die Modelle integriert werden. Im Rahmen dieser Studie bietet diese Software den großen Vorteil, ein identisches unstrukturiertes Mesh sowohl für TIGER als auch Comsol exportieren zu können. Diese Funktion erlaubt es, etwaige gitterbedingte Unsicherheiten bereits im Vorfeld ausschließen zu können und den Vergleich auf die numerische Implementierung zu legen.

Das hieraus resultierende Mesh besteht final aus 825.127 Elementen (Abbildung 2). Das Elementgitter weist einen feinen Gitterabstand im Nahbereich der Bohrungen sowie im Malmreservoir von mindestens 9 m auf, welcher zu den Außenrändern hin auf bis zu 300 m (im Tertiär und Kristallin) zunimmt. Die Schichtdicke der einzelnen lithologischen Einheiten sind stark variierend und direkt aus den seismischen Daten überführt. Lateral und initial sind Temperatur- und Porendruckgradienten als tiefenabhängige Dirichlet-Randbedingung angelegt. Der lokale Spannungsvektor nach Seithel et al. (2015) wird initial in das Modell und als Neumann-Randbedingung lateral als tiefenabhängige Funktion der Dichte und des übergeordneten Spannungsfeldes vereinfacht in das Modell integriert sowie die Unterseite im Raum fixiert. Schwerkraft wirkt innerhalb des gesamten Modells hydrostatisch und lithostatisch sowie als zusätzliche Auflast an der Oberkante des Modells, um die 1,5 km fehlende Überdeckung zu simulieren. Die Bohrungen sind jeweils über ihre offene Filterstrecke in das Elementgitter als 1D Linienelemente integriert. Extraktion und Injektion werden in beide Modelle als Massenfluss angelegt. In TIGER erfolgt dies am obersten Knoten der offenen Filterstrecke als Dirac-Funktion. Durch die Möglichkeit, Fluidströmung im Bohrloch zu simulieren, wird entsprechend diese Fließrate durch das gesamte Bohrloch extrahiert/injiziert. Comsol erfordert hierbei mehr Vorbereitung. Die offene Filterstrecke muss hierfür zusätzlich innerhalb der Software auf Reservoir- und Nichtreservoir aufgeteilt werden, da Comsol Bohrungen als 1D Randbedingungen interpretiert und Fluidströmung innerhalb dieser Bohrungen somit nicht simuliert werden kann. Entsprechend wird die Gesamtließrate gleichmäßig auf alle beteiligten Knoten aufgeteilt, was bei Anwendung in Nichtreservoir-Bereichen zu sehr starken, in der Realität nicht vorhandenen, Druckanstiegen führt. Um einen ausführlichen Vergleich sowie eine Identifikation zu ermöglichen, wird in einem ersten Schritt eine reine thermisch-hydraulische Modellierung verglichen und die direkten Unterschiede in Form von Temperatur und Porendruck quantifiziert. Im zweiten Schritt wird mittels einer thermisch-hydraulisch-mechanischen Modellierung auch der Einfluss auf das Spannungsfeld und die Unterschiede in der poroelastischen Kopplung verglichen und dargestellt.

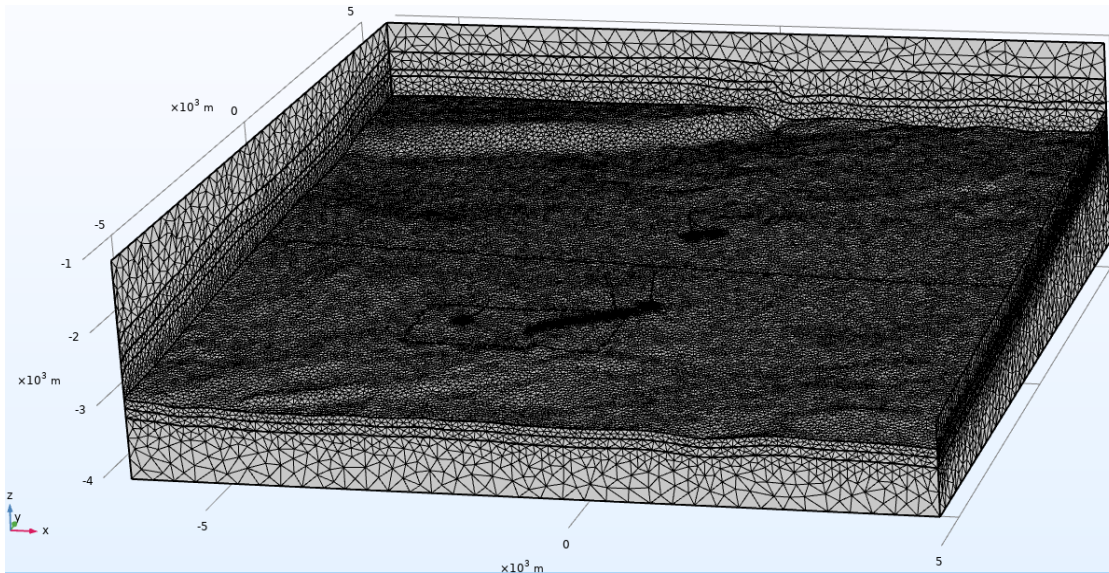


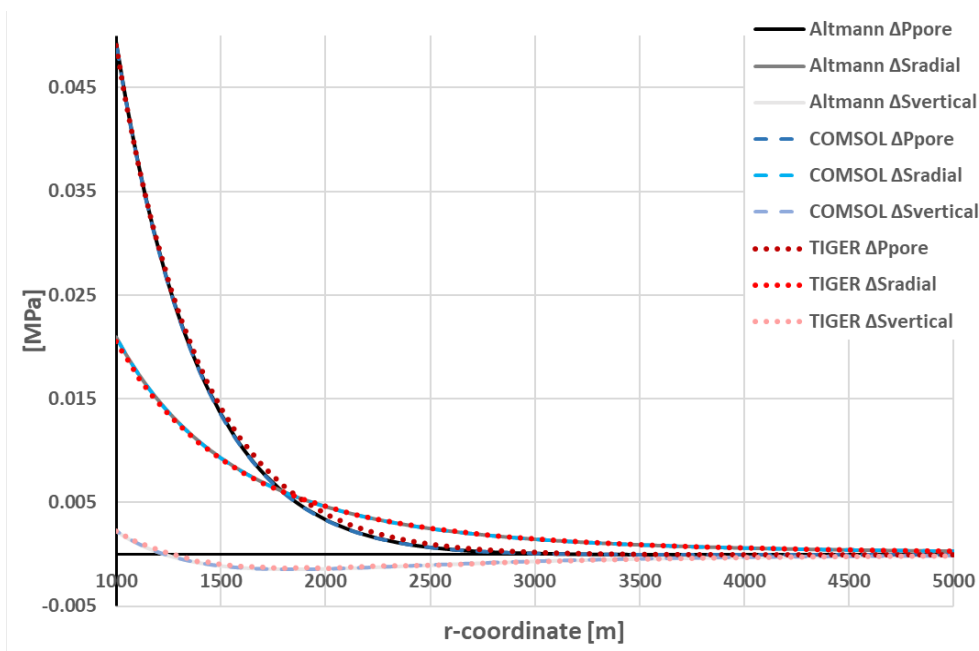
Abbildung 2: FE-Mesh des Pullach Geothermiereservoirs. Zu sehen ist die Oberkante des Malm Epsilon und im Hintergrund die Ränder bis hin in das Tertiär.

3 ERGEBNISSE

3.1 HYDRAULISCH-MECHANISCHER BENCHMARK

Die Ergebnisse der beiden Simulationsumgebungen TIGER und Comsol werden sowohl räumlich als zeitlich mit der analytischen Lösung nach Rudnicki (1986) verglichen. Verglichen werden neben der Porendruckänderung sowohl die Änderungen der Radial- (bzw. ΔP_{radial}) als auch Vertikalspannung nach 34 Tagen kontinuierlicher Injektion mit zunehmendem Abstand zum Injektionspunkt ($r = 0$, Abbildung 1a). Zudem werden in einem konstanten Abstand von $r = 206$ m die Änderungen in den Spannungen mit zunehmender Injektionszeit betrachtet (Abbildung 3b).

a)



b)

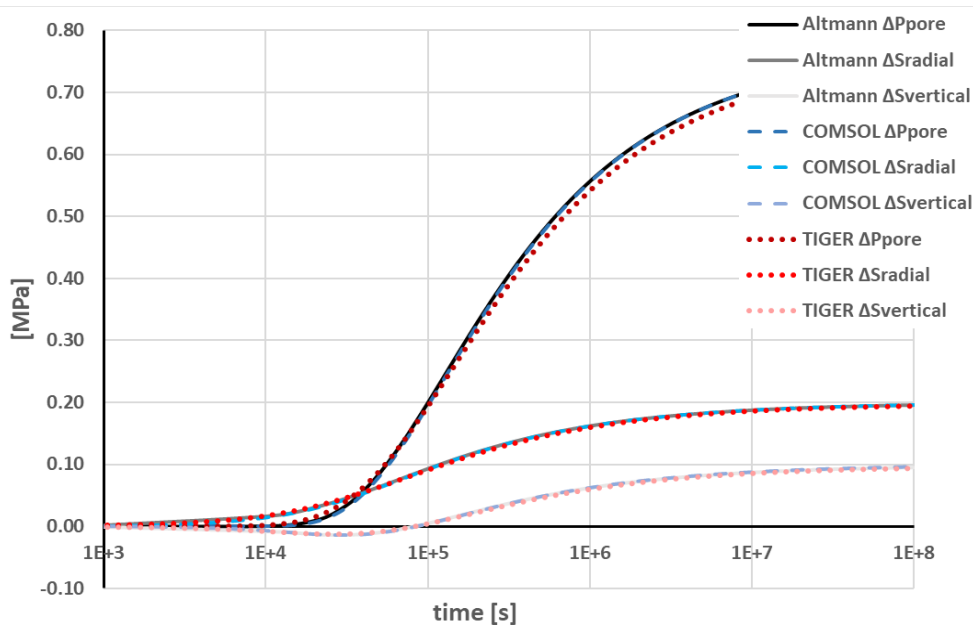


Abbildung 3: Hydraulisch-mechanischer Vergleich von TIGER und Comsol mit einer analytischen Lösung. A) Spannungsänderungen nach 36 Tagen im Abstand zur Injektionsquelle. B) Spannungsänderungen im Abstand von 206 m mit zunehmender Injektionsdauer.

Die Ergebnisse beider FE-Softwares zeigen hierbei eine sehr gute Übereinstimmung (R^2 über 99,5 %) mit der analytischen Lösung der poroelastischen Gleichung sowohl hinsichtlich des hydraulischen Porendrucks als auch hinsichtlich der zu erwartenden mechanischer Spannungsänderungen. Es kann gezeigt werden, dass es keinen Unterschied macht, ob ein Modell 2D radialsymmetrisch (Comsol) oder vollständig 3D (TIGER) gelöst wird, allerdings durch eine 2D Lösung ein Vorteil hinsichtlich der Simulationsdauer erreicht werden kann. Leichte Unterschiede ergeben sich lediglich in der Ausbreitung der Porendruckänderungen in den Ergebnissen der TIGER-Simulationen sowohl räumlich (leichte Überschätzung) als auch zeitlich (leicht Unterschätzung). Dies ist zurückzuführen auf die minimale Elementgröße im Nahbereich der Injektion und dem starken graduellen Anstieg der Elementgröße. Eine feinere Diskretisierung (und damit verbundene längere Simulationsdauer) verringert nachweislich entsprechende Unterschiede auch in der TIGER Simulation. Entsprechend sind die Abweichungen der Comsol-Modellierung zur analytischen Lösung auf Grund vierfach kleinerer Elemente (nahe der Injektion) geringer.

3.2 GEKOPPELTES THM-MODELL DES PULLACH RESERVOIRS

Im vorherigen Kapitel konnte gezeigt werden, dass die Integration der hydraulisch-mechanischen physikalischen Gleichungen sowie deren gegenseitige Kopplung erfolgreich umgesetzt wurde. In einem weiteren und realitätsnahen Anwendungsfall wird die thermo-hydraulisch-mechanische Kopplung mittels des geothermischen Reservoirs in Pullach untersucht. Neben den bereits verifizierten Gleichungen, müssen hier weiterführende Prozesse und Modellierungsparameter angepasst werden, um ein bestmögliches Ergebnis zu erzielen. Diese weiterführenden Modellierungsparameter bzw. deren explizite Umsetzung ist dabei stark softwarespezifisch, weshalb im Folgenden leichtere Unterschiede in den Ergebnissen zu erwarten sind.

3.2.1 THERMO-HYDRAULISCHER VERGLEICH

In einem ersten Schritt wird eine thermo-hydraulische Simulation des Langzeit-Betriebsszenarios verglichen, bei dem Fluid mit 50 l/s in Pullach Th3 injiziert und aus den Bohrungen Pullach Th1a und Pullach Th2 produziert wird. Ein Vergleich der Ergebnisse erfolgt hierbei nach einem kontinuierlichen Betrieb von 50 Jahren. Hierzu werden lokal aufgelöst die Absolutwerte der Variablen des Porendrucks und der Temperatur beider Modelle miteinander verglichen.

$$T_{diff} = T_{TIGER} - T_{Comsol} \quad (\text{Gl. 1})$$

$$P_{diff} = P_{TIGER} - P_{Comsol} \quad (\text{Gl. 2})$$

Abbildung 4 zeigt die absoluten Temperaturen sowie die Temperaturänderung nach 50 Betriebsjahren sowie eine Differenztemperatur zwischen beiden Modellierungsansätzen im 3D-Modell sowie als Histogramm. In beiden Modellen findet im Bereich der Oberkante des Malm Epsilon eine Abkühlung von einigen 100 m um die Injektionsbohrung statt, welche in Richtung der Produktionsbohrungen elongiert ist. Darüber hinaus kann eine leichte Zunahme der Produktionstemperatur in beiden Bohrungen und Modellen nachgewiesen werden. Wie aus Abbildung 4e und Abbildung 4f hervorgeht ist der Radius dieser Abkühlung allerdings nicht vollkommen identisch. Negative Werte in der nach Gleichung 1 berechneten Temperaturdifferenz weisen auf eine stärkere Ausbreitung der Abkühlungsfront im TIGER Modell hin. In Richtung der Produktionsbohrung (positive X-Achse) zeigen diese negativen Temperaturdifferenzen daher eine stärkere Elongation zur Bohrung Pullach Th2 hin, während in negativer x-Richtung eine verstärkte Temperaturabnahme im Comsol-Modell bestimmt wurde. In vom Kraftwerksbetrieb weniger stark gestörten Bereichen des Reservoirs zeigen beide Modelle eine komplette Übereinstimmung der zu erwartenden Temperaturen (Abbildung 4f). Die beobachteten Temperaturdifferenzen beider Modellierungsumgebungen im Nahbereich von Pullach Th3 sind auf zwei unterschiedliche Gründe zurückzuführen. Erstens nutzen beide Modellierungsprogramme eine unterschiedliche Art der Lösungsstabilisierung, welche in stark konvektiv geprägten Bereichen für eine erfolgreiche Lösung des Modells notwendig ist und künstlich die Diffusivität mittels eines empirischen Faktors erhöht. TIGER nutzt hierbei Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG), welches künstlich in Strömungsrichtung die Diffusivität mittels eines Faktors, bestimmt aus der lokalen Elementeometrie, erhöht. Comsol nutzt Crosswind diffusion zur Modellstabilisierung, welches eine deutlich stärkere Dämpfung in das Modell induziert, so allerdings die Lösung des Problems auch stark vereinfacht und beschleunigt. Zweitens führt die Vernachlässigung der vertikalen Bohrlochströmung im Comsol Modell zu einer lateral gleichmäßigen Ausbreitung der Druck- und Temperaturfront über das gesamte Reservoir, während im TIGER-Modell zu Beginn der offenen Filterstrecke der größte Druckgradient und eine verstärkte Temperatursausbreitung stattfindet, während in tieferen Reservoirbereichen bedingt durch kleinere Druckgradienten verringerte Konvektion stattfindet.

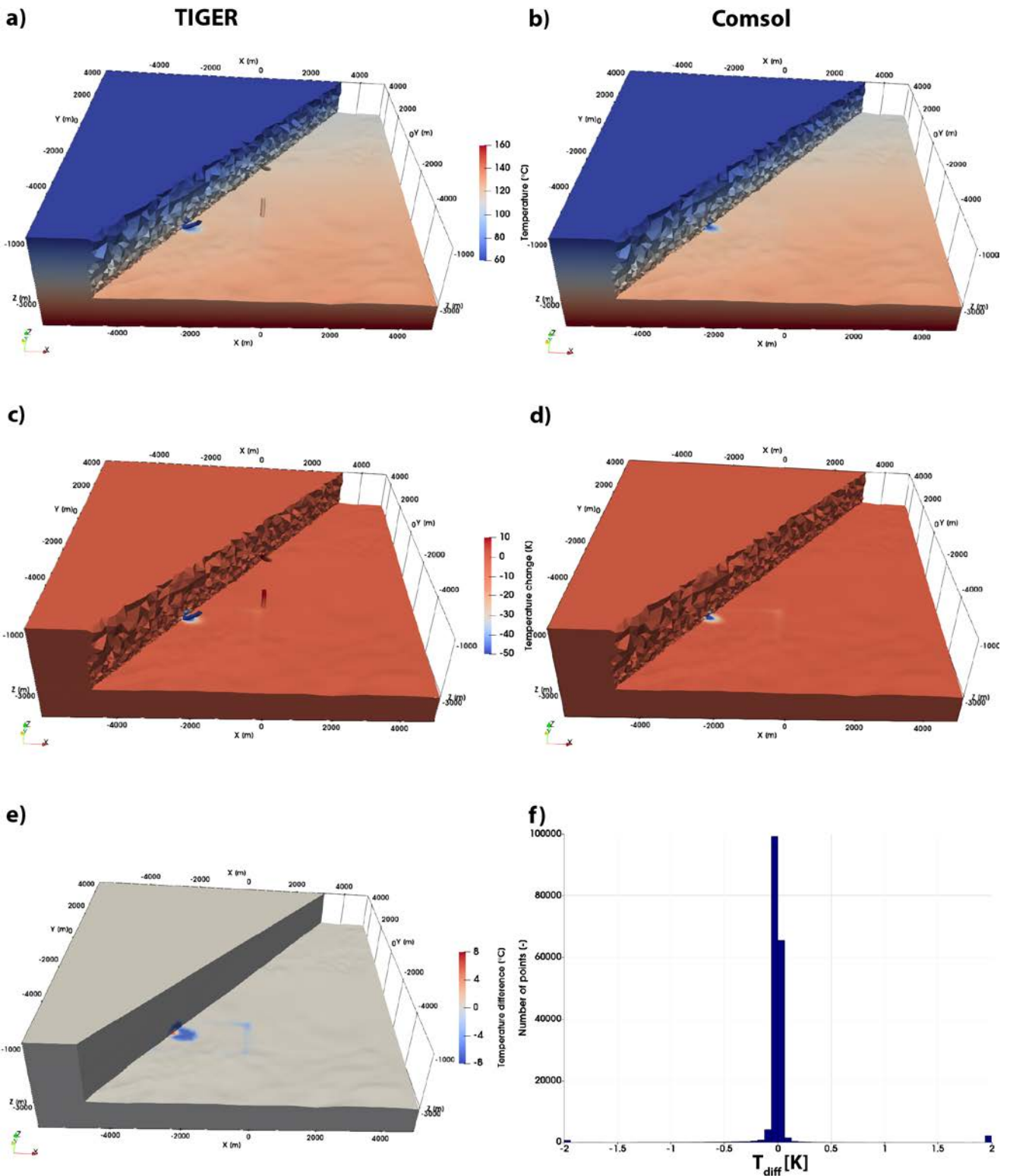


Abbildung 4: Vergleich zwischen TIGER (a und c) und Comsol (b und d) nach einer Simulation von 50 Betriebsjahren hinsichtlich der absoluten Reservoirtemperaturen (a und b), der Temperaturänderungen durch den Betrieb (c und d). Die Temperaturunterschiede zwischen beiden Modellen betragen weniger als ± 10 °C (e) während ein großer Teil der Knoten identische Werte aufweist (f).

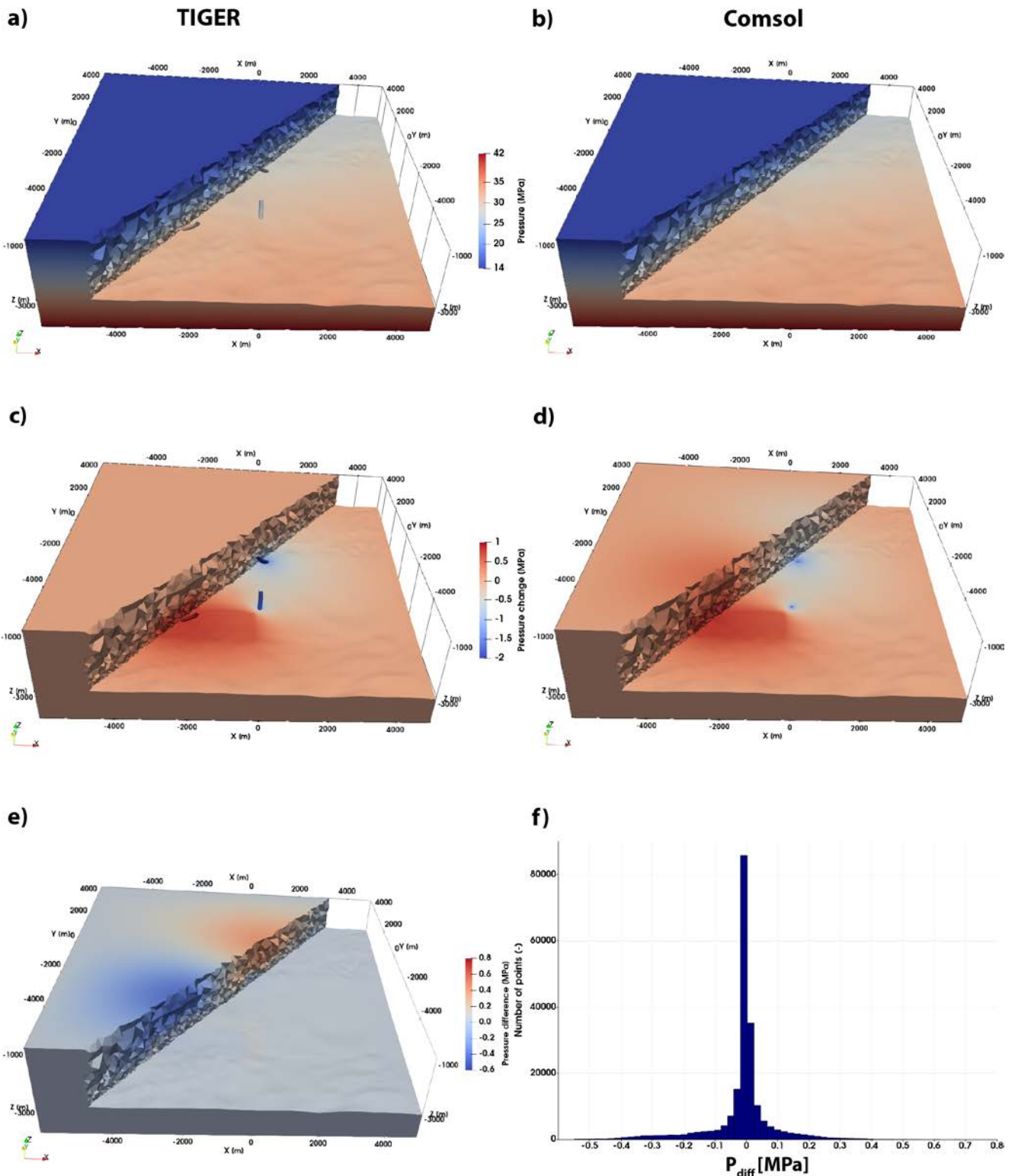


Abbildung 5: Vergleich zwischen TIGER (a und c) und Comsol (b und d) nach einer Simulation von 50 Betriebsjahren hinsichtlich der absoluten Reservoirdrücke (a und b), der Druckänderungen durch den Betrieb (c und d). Die Druckunterschiede zwischen beiden Modellen betragen weniger als ± 0.2 MPa (e) während eines Großteiles der Knoten identische Werte aufweist (f).

Analog der Temperaturverteilung zeigt auch die Porendruckverteilung makroskopisch nur kleinere Unterschiede zwischen den beiden Modellierungssoftwares nach 50 Betriebsjahren (Abbildung 5). Um die Injektionsbohrung ist ein Druckanstieg von unter 1 MPa zu erwarten, während die Druckabnahme in beiden Produktionsbohrungen unter 2 MPa beträgt. Darüber hinaus ist die Unterkante des

hochdurchlässigen Malm Zeta Riffkörper in beiden Modellen durch einen flächigen Druckanstieg an der Oberkante des Malm Epsilon deutlich hervorgehoben. In den Abbildung 5e und Abbildung 5f ist die Druckdifferenz nach Gleichung 2 zwischen beiden Modellierungen räumlich sowie als Histogramm dargestellt.

Die Unterschiede in der Porendruckausbreitung beider Modellierungen liegen wiederum in den hydraulisch gestörten Nahbereichen um die jeweiligen Bohrungen und betragen nur wenige kPa bis hin zu maximal $\pm 0,4$ MPa direkt an den Bohrungen. Im Allgemeinen zeigt Comsol hierbei stärkere Druckveränderungen bei gegebener Fließrate im Vergleich zu dem TIGER Modell. So zeigen negative Werte in Abbildung 5e einen verstärkten Druckanstieg im Comsol Modell an der Bohrung Pullach Th3. Die Druckunterschiede im Nahbereich der Bohrungen sind zu erwarten und auf den bereits beschriebenen Effekt der unterschiedlichen Integration von Bohrungen und Fließbeziehungen zurückzuführen. Diese führen dazu, dass die angenommenen Fließraten auf deutlich weniger offene Filterstrecke verteilt sind und somit auch die Austauschfläche mit dem Reservoir und den leicht bzw. schlecht durchlässigen Nichtreservoirbereichen stark verkürzt, bzw. im Comsol-Modell nicht vorhanden, ist. Entsprechend ist die größere Ausbreitung des gestörten Druckfeldes auf der induzierten höheren Druckgradienten innerhalb des Reservoirs zurückzuführen.

3.2.2 THERMO-HYDRAULISCH-MECHANISCHER VERGLEICH

In einem weiteren Anwendungsfall wird das bestehende TH-Modell des Pullach Szenarios um eine mechanische Komponente sowie das lokale Spannungsfeld erweitert und die thermo-poroelastischen Spannungsänderungen durch Produktion/Injektion verglichen. Unterschiede sind hierbei bereits in den initialen mechanischen Parametrisierung des Modells zu erwarten, da TIGER die mechanische Gleichungen in totalen Spannungen berechnet, während Comsol das effektive Spannungssystem zur Modelllösung nutzt (Comsol Multiphysics 2020b). Entsprechend muss auch das regionale Spannungsfeld nach Seithel et al. (2015) für das Comsol Modell zuvor in effektive Spannungen abzüglich der Porendruckkomponente umgerechnet werden (Comsol Multiphysics 2020a). Der initiale Spannungsvektor wird in beide Modelle als initiale Bedingung integriert. Während TIGER diesen in Abhängigkeit der lokalen Gesteinsparametrisierung (Gesteinsdichte, E-Modul und Poisson-Zahl) in ein THM Gleichgewicht bringt und in effektive Spannungen überführt, werden die Spannungskomponenten in Comsol auf die transienten effektiven Spannungsänderungen lediglich mit jedem Zeitschritt aufaddiert, so dass keine Veränderungen im initialen Gleichgewichtszustand hervorgerufen werden.

Abbildung 6 zeigt den initialen Spannungszustand des Vergleichmodells ermittelt aus beiden Simulationsumgebungen nahe der Bohrung Pullach Th1a im nördlichen Bereich des Modells. Deutlich sichtbar ist der Unterschied in den softwareseitigen Hintergrundprozessen. In der TIGER-Simulation finden Gleichgewichtsprozesse in Abhängigkeit der lokalen Materialparameter und Hydraulik statt, die in der Abbildung durch tiefenabhängige Spannungsakkumulationen an den lithofaziellen Grenzflächen bzw. in den weicheren Einheiten deutlich zu erkennen sind. Der Übergang der liegenden Mergel hin zu den tieferen Schichten des Lithotamnienkalks ist hierbei am prominentesten und bedingt durch einen starken Kontrast im Elastizitätsmodul zwischen weichem (Mergel) und hartem Gestein (Kalkstein). Dagegen wird in Comsol das lineare tiefenabhängige Profil der Gleichung auf den Spannungsvektor übertragen. Entsprechend dieses unterschiedlichen leicht initialen Spannungszustandes ist ein räumlich aufgelöster Vergleich der absoluten Spannungen nur bedingt weiterzuverfolgen. Stattdessen bietet sich ein Vergleich der thermo-hydraulisch induzierten Spannungsänderungen im Nahbereich der Injektionsbohrung Pullach Th3 sowie der Produktionsbohrungen Pullach Th1a und Th2 an.

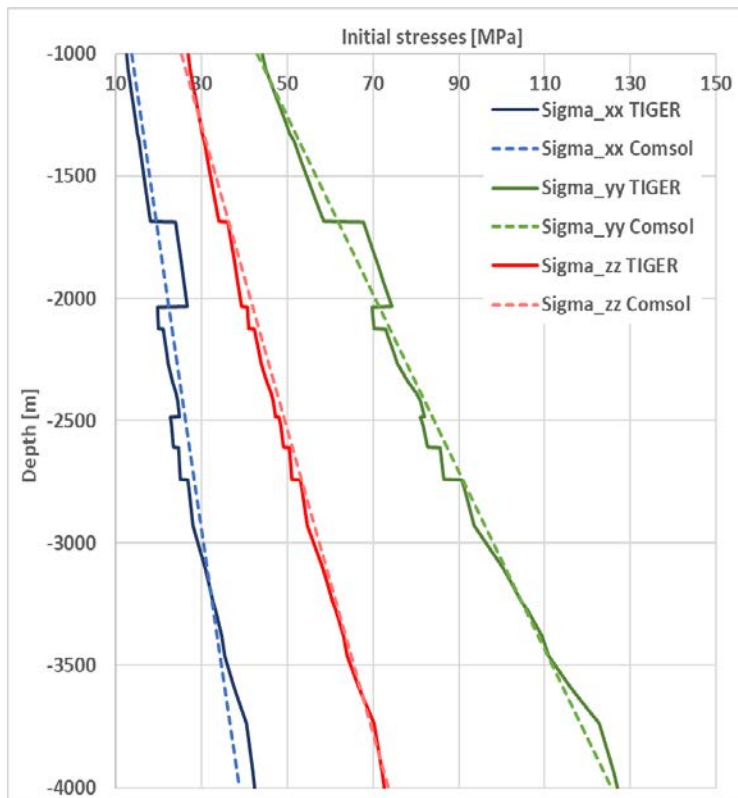


Abbildung 6: Initiale effektive Spannungen des THM Vergleichsmodells des Geothermiereservoirs in Pullach als Ergebnis von TIGER (normale Linien) und Comsol (gestrichelte Linien).

Abbildung 7 zeigt die Veränderung der effektiven Vertikalspannung nach 50 Jahren kontinuierlichen Betriebs. In großen Teilen des Modells erfolgen keinerlei Spannungsänderungen. Im Bereich der Produktionsbohrungen Th1a und Th2 führen poroelastische Änderungen zu einer Zunahme der effektiven Spannungen um bis zu 3 MPa in beiden Modellen. Bedingt durch den leicht unterschiedlichen Abkühlungsradius um die Injektionsbohrung Pullach Th3 (vgl. Abbildung 4) unterscheidet sich auch thermo-elastisch beeinflusste Spannungsfeld speziell im Nahbereich dieser Bohrung. Während die Magnitude in beiden Simulationen mit bis zu -15 MPa identisch ist, führt die stärker elongierte Abkühlungsfront des TIGER-Modells auch zu entsprechenden Spannungsumlagerungen in Richtung der Bohrung Pullach Th2.

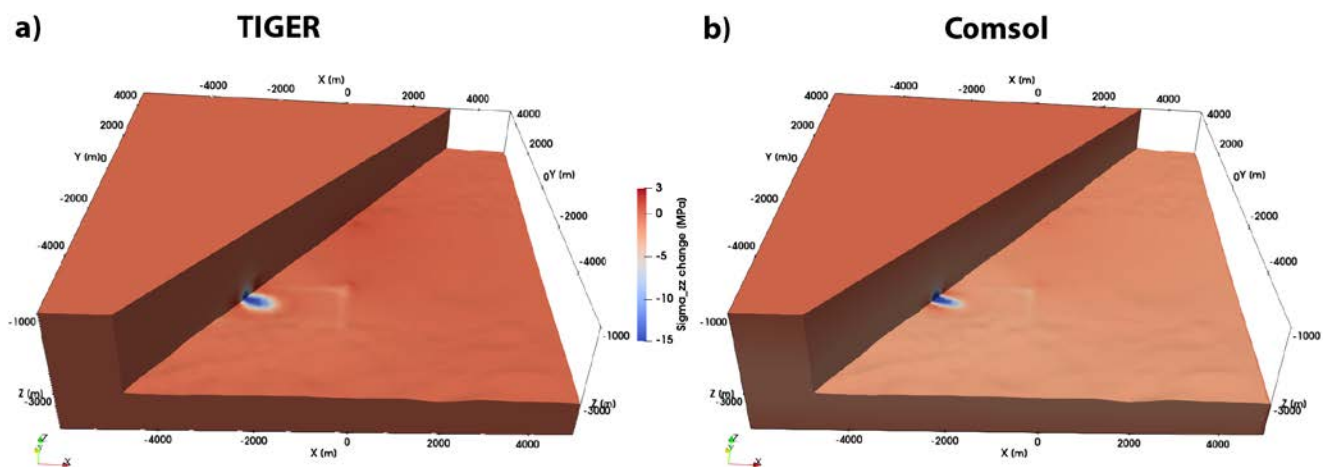


Abbildung 7: Änderung der effektiven Vertikalspannung vom initialen Spannungszustand im Vergleich zur thermo-hydraulisch induzierten Spannungsumlagerung nach 50 Betriebsjahren a) in TIGER und b) in Comsol.

Entsprechend fokussiert sich der weitere Vergleich der Spannungen auf die Bohrung Pullach Th3 und den lokal überlagernden Effekten von thermisch und hydraulisch-induzierten Spannungsänderungen.

Abbildung 8 zeigt die effektiven Vertikal- sowie Horizontalspannungen für beide Modellierungen (TIGER und Comsol) vor Betriebsbeginn (Abbildung 8a) sowie nach 50 Jahren kontinuierlichen Kraftwerksbetriebs (Abbildung 8b). Während die Spannungen in großen Teilen des Modells eine gute Übereinstimmung aufweisen, zeigen sich im TIGER-Modell, analog der Abbildung 6, bereits initiale Spannungsumlagerungen an den lithofaziellen Grenzflächen bzw. Materialkontrasten, die auf den geschichteten Aufbau zurückzuführen sind.

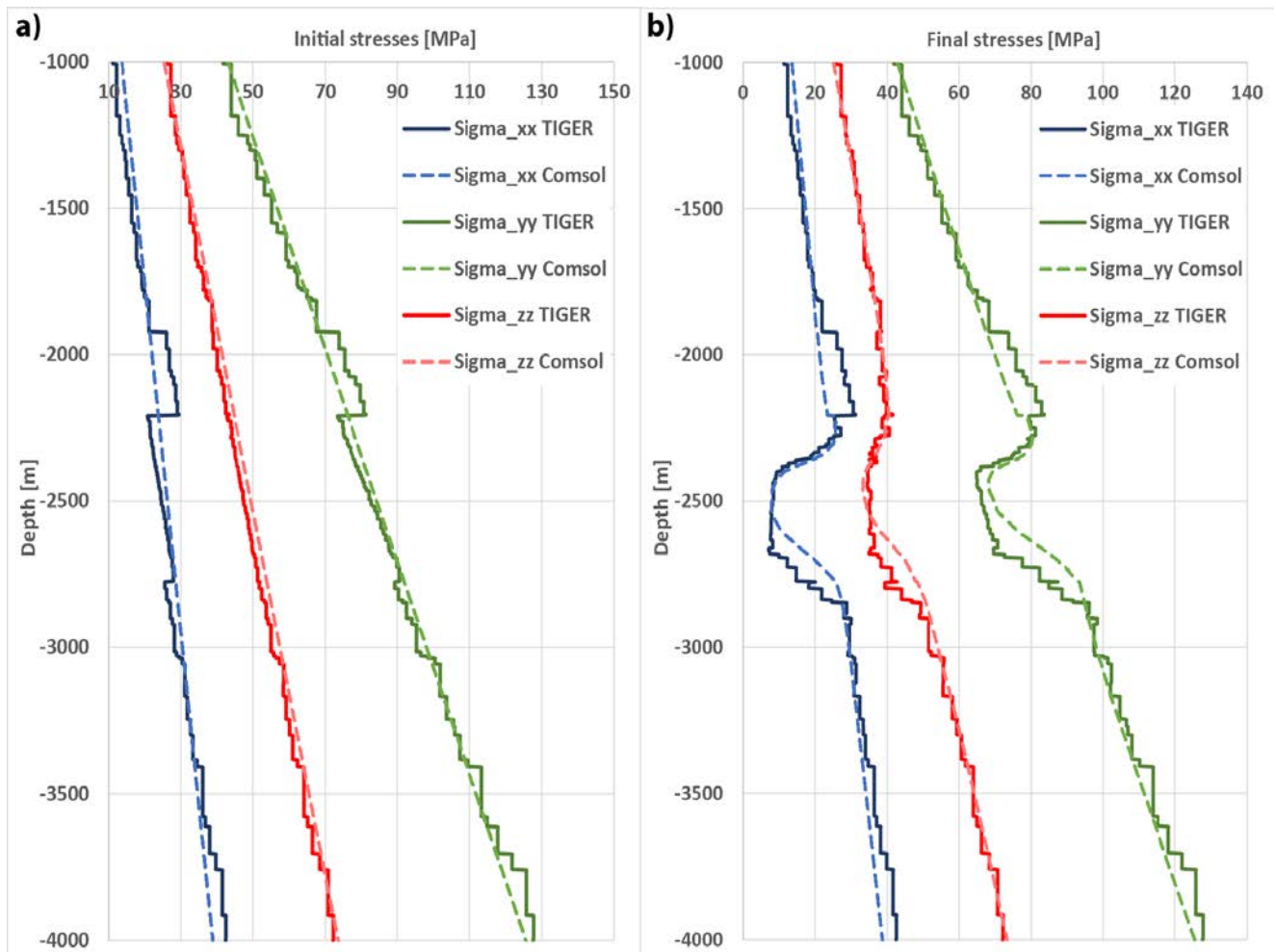


Abbildung 8: Vergleich der effektiven Spannungsmagnituden im Bereich der Bohrung Pullach Th3 über die Tiefe. a) Initiale effektive Spannungen, b) Spannungszustand nach 30 Betriebsjahren unter Berücksichtigung thermo-poroelastischer Effekte. Die Auflösung der Linien ist bedingt durch die Evaluation der Spannungen einerseits elementweise (TIGER) und andererseits knotenweise mit Interpolation dazwischen (Comsol).

Die Magnituden der THM-induzierten Spannungsänderungen beider Modellierungen von bis zu 15 MPa sind eine direkte Folge des linearen thermischen Expansionskoeffizienten, welcher für jurassische Kalksteine und Dolomite im Münchner Bereich der Malme Werte von ca. 6.3×10^{-6} [1/K] oder höher auf weisen kann (Pei et al. 2020). Hierbei weisen beide Modelle eine hohe Übereinstimmung für alle Komponenten des Spannungsvektors innerhalb des hydraulisch gut durchlässigen Malm Zeta Reservoirs auf. Leichtere Unterschiede sind lediglich unterhalb des Reservoirs im Malm Epsilon (ca. zwischen -2730 und -2850 m) zu sehen, während der Tiefe Malm und das Kristallin (Malm Gamma) ungestört sind. Insgesamt sind die ermittelten Unterschiede im Vergleich zu den Unsicherheiten der lithofaziellen Einheiten und deren Parametrisierung von untergeordneter Rolle.

4 DISKUSSION

Neben den bereits aufgezeigten Unterschieden in der softwarespezifischen Integration spezieller Eigenschaften (Bohrungen, Stabilisierung konvektiver Prozesse) weisen beide Simulationsumgebungen auch Unterschiede in der eigentlichen Lösung der Fragestellungen auf. Dies ist u.a. die Wahl des linear und nichtlinearen Lösungsalgorithmus als solches. Zur Vergleichszwecken wurde bei beiden Simulationsumgebungen ein Newton-basierter Approximationsalgorithmus angewendet und alle Variablen (Druck, Temperatur, Versatz x,y,z) vollständig gekoppelt gelöst. Das Lösungsverfahren zeichnet sich durch eine hohe Flexibilität und Genauigkeit bei der Lösung stark nichtlinearer Fragestellungen mit einer großen Anzahl an Freiheitsgraden aus (Permann et al. 2020). Beide Simulationsumgebungen besitzen allerdings noch weitere, teilweise besser optimierte Verfahren, welche sich allerdings deutlicher unterscheiden. Speziell TIGER bietet hier den Vorteil einer vollständigen Integration des PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) Paketes, welches eine Vielzahl von Lösungsalgorithmen, -Optimierungen, Skaliermöglichkeiten aber Zeitschrittoptimierungsfunktionen beinhaltet (Balay et al. 2016). Trotz eines ähnlichen Lösungsalgorithmuses, weisen die Simulationsumgebungen dennoch große Unterschiede in der praktischen Anwendung auf. Das vorgestellte THM TIGER Modell konnte problemlos auf einem normalen Desktopcomputer mit 8 Kernen und 32 GB Arbeitsspeicher in weniger als 3 Stunden gelöst werden. Das Comsol Modell hingegen konnte als THM Modell mit dem verfügbaren Arbeitsspeicher nicht gelöst werden. Stattdessen musste auf den Hochleistungscomputer des KIT zurückgegriffen werden. Hierbei konnte bei 12 Prozessorkernen und 178 GB Arbeitsspeicher eine ähnliche Simulationsdauer von unter 3 Stunden erreicht werden. Ein weiterer Unterschied besteht in den Pre- und Postprozessierungsmöglichkeiten. Comsol nutzt ein eigenes entwickeltes Format sowohl für das initiale Elementgitter als auch für die Darstellung der Ergebnisse. Ein Import weiterer Formate ist nicht möglich, während im Export zumindest ein rudimentäres open-source-Format (VTU) unterstützt wird. TIGER basiert auf der open-source LibMesh-Plattform (Kirk et al. 2006). Diese erlaubt den Import und Export einer Vielzahl offener und geschlossener Dateiformate höherer Ordnung, wodurch ein Austausch und eine externe Kopplung deutlich erleichtert wird. Ein auffallender Unterschied ist hierbei, dass innerhalb einer Datei beliebig viele Zeitschritte und -punkte gespeichert und prozessiert werden können, während Comsol für jeden Zeitschritt entweder eine eigene Datei oder eine zusätzliche Variable benötigt wird.

5 ZUSAMMENFASSUNG

Im Rahmen des Projekts INSIDE wurde ein Vergleich zwischen der kommerziellen Finite Elemente (FE) Simulationssoftware Comsol Multiphysics und der neu entwickelten MOOSE bzw. TIGER Anwendung durchgeführt, um die verschiedenen Lösungsansätze hinsichtlich thermo-hydraulisch-mechanischer Fragestellungen in geothermischen Reservoiren zu vergleichen. Hierbei konnte in einem ersten Schritt gezeigt werden, dass in beiden Programmen die identischen physikalischen Gleichungen und gegenseitigen Interaktionen integriert sind und diese auch zu identischen Lösungen einer vereinfachten Fragestellung führen. In einem zweiten Schritt wurde das geothermische Reservoir des Projektstandortes Pullach unter der Annahme eines 50 Jahre andauernden kontinuierlichen Kraftwerksbetriebs simuliert und hierbei neben der Lösung physikalischer Prozesse der Fokus auch auf die Integration geothermie-typischer Eigenschaften (z.B. Kaltwasserinjektion in Bohrungen, konvektiver Wärmetransport, regionales Spannungsfeld) gelegt. Hierbei konnte gezeigt werden, dass kleinere Unterschiede in den Ergebnissen der zu lösenden Variablen Druck, Temperatur, sowie

lateral und horizontaler Versatz zu beobachten sind, diese allerdings Vergleich zu typischen geologischen und lithofaziellen Unsicherheiten eine eher untergeordnete Rolle spielen. Diese Unterschiede sind dabei keine Folge der zu lösenden Gleichungen, sondern eine direkte Folge dieser geothermie-bezogenen Besonderheiten und deren unterschiedlicher Integration in die jeweilige Modellierungsplattform. Ein weiterführender Vergleich der THM- bzw. spannungs-induzierten seismischen Wellenausbreitung wurde im Rahmen dieser Studie verworfen, da nur wenige physikalische Lösungsansätze existieren und ein Vergleich analytischer Annahmen zu sehr großen Unsicherheiten in den zu vergleichenden Ergebnissen führen würde.

6 LITERATURVERZEICHNIS

- Altmann J.B., Müller T.M., Müller B.I., Tingay M.R., Heidbach O. (2010): Poroelastic contribution to the reservoir stress path. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 47(7):1104–1113. doi: 10.1016/j.ijrmms.2010.08.001
- Balay S., Abhyankar S., Adams M., Brown J., Brune P., Buschelman K., Dalcin L., Eijkhout V., Gropp W., Karpeyev D., Kaushik D., Knepley M., Curfman McInnes L., Rupp K., Smith B., Zampini S., Zhang H. (2016): PETSc User Manual, Technical Report ANL-95/11 - Revision 3.7. Argonne National Laboratory
- Bohnsack D., Potten M., Freitag S., Einsiedl F., Zosseder K. (2021): Stress sensitivity of porosity and permeability under varying hydrostatic stress conditions for different carbonate rock types of the geothermal Malm reservoir in Southern Germany. *Geotherm Energy* 9(1). doi: 10.1186/s40517-021-00197-w
- Cacace M., Blöcher G. (2015): MeshIt—a software for three dimensional volumetric meshing of complex faulted reservoirs. *Environ Earth Sci* 74(6):5191–5209. doi: 10.1007/s12665-015-4537-x
- Comsol Multiphysics (2020a): COMSOL Multiphysics Reference Manual
- Comsol Multiphysics (2020b): Structural Mechanics Module 5.6: User's Guide
- Egert R., Gaucher E., Savvatis A., Goblirsch P., Kohl T. (2022): Numerical determination of long-term alterations of THM characteristics of a Malm geothermal reservoir during continuous exploitation: PROCEEDINGS European Geothermal Congress, Berlin
- Egert R., Gholami Korzani M., Held S., Kohl T. (2020): Thermo-hydraulic Modeling of an Enhanced Geothermal System in the Upper Rhine Graben using MOOSE/TIGER: PROCEEDINGS World Geothermal Congress 2020, Reykjavik
- Geuzaine C., Remacle J.-F. (2017): Gmsh Reference Manual: The documentation for Gmsh 2.16
- Gholami Korzani M., Held S., Kohl T. (2020): Numerical based filtering concept for feasibility evaluation and reservoir performance enhancement of hydrothermal doublet systems. *Journal of Petroleum Science and Engineering*:106803. doi: 10.1016/j.petrol.2019.106803
- Kirk B.S., Peterson J.W., Stogner R.H., Carey G.F. (2006): libMesh: a C++ library for parallel adaptive mesh refinement/coarsening simulations. *Engineering with Computers* 22(3-4):237–254. doi: 10.1007/s00366-006-0049-3
- Lafogler M., Bartels J., Wenderoth F., Savvatis A., Steiner U., Schubert A., Nießner R., Baumann T. (2016): Quantifizierung der lokalen und Prognose der regionalen hydraulischen und

hydrochemischen Reservoireigenschaften des Malmaquifers auf Basis eines Push-Pull-Tests am Standort Pullach (Puma). Endbericht

- Pei L., Blöcher G., Milsch H., Zimmermann G., Zhang H., Li X., Huenges E. (2020): Analysis of measured thermally induced rock deformation. *Measurement* 163:108004. doi: 10.1016/j.measurement.2020.108004
- Permann C.J., Gaston D.R., Andrš D., Carlsen R.W., Kong F., Lindsay A.D., Miller J.M., Peterson J.W., Slaughter A.E., Stogner R.H., Martineau R.C. (2020): MOOSE: Enabling massively parallel multiphysics simulation. *SoftwareX* 11:100430. doi: 10.1016/j.softx.2020.100430
- Potten M. (2020): Geomechanical characterization of sedimentary and crystalline geothermal reservoirs. Dissertation
- Rudnicki J.W. (1986): Fluid mass sources and point forces in linear elastic diffusive solids. *Mechanics of Materials* 5(4):383–393. doi: 10.1016/0167-6636(86)90042-6
- Seithel R., Steiner U., Müller B., Hecht C., Kohl T. (2015): Local stress anomaly in the Bavarian Molasse Basin. *Geotherm Energy* 3(1):77. doi: 10.1186/s40517-014-0023-z
- Ziegler M.O., Heidbach O. (2020): The 3D stress state from geomechanical–numerical modelling and its uncertainties: a case study in the Bavarian Molasse Basin. *Geotherm Energy* 8(1). doi: 10.1186/s40517-020-00162-z