



Evaluierung und Vergleich von PHREEQC-Datenbanken zur Erstellung einer optimierten Version für Geothermiekraftwerke

Michael Trumpp, Lars H. Ystroem, Thomas Kohl und Fabian Nitschke

Wofür geochemische Modellierung?

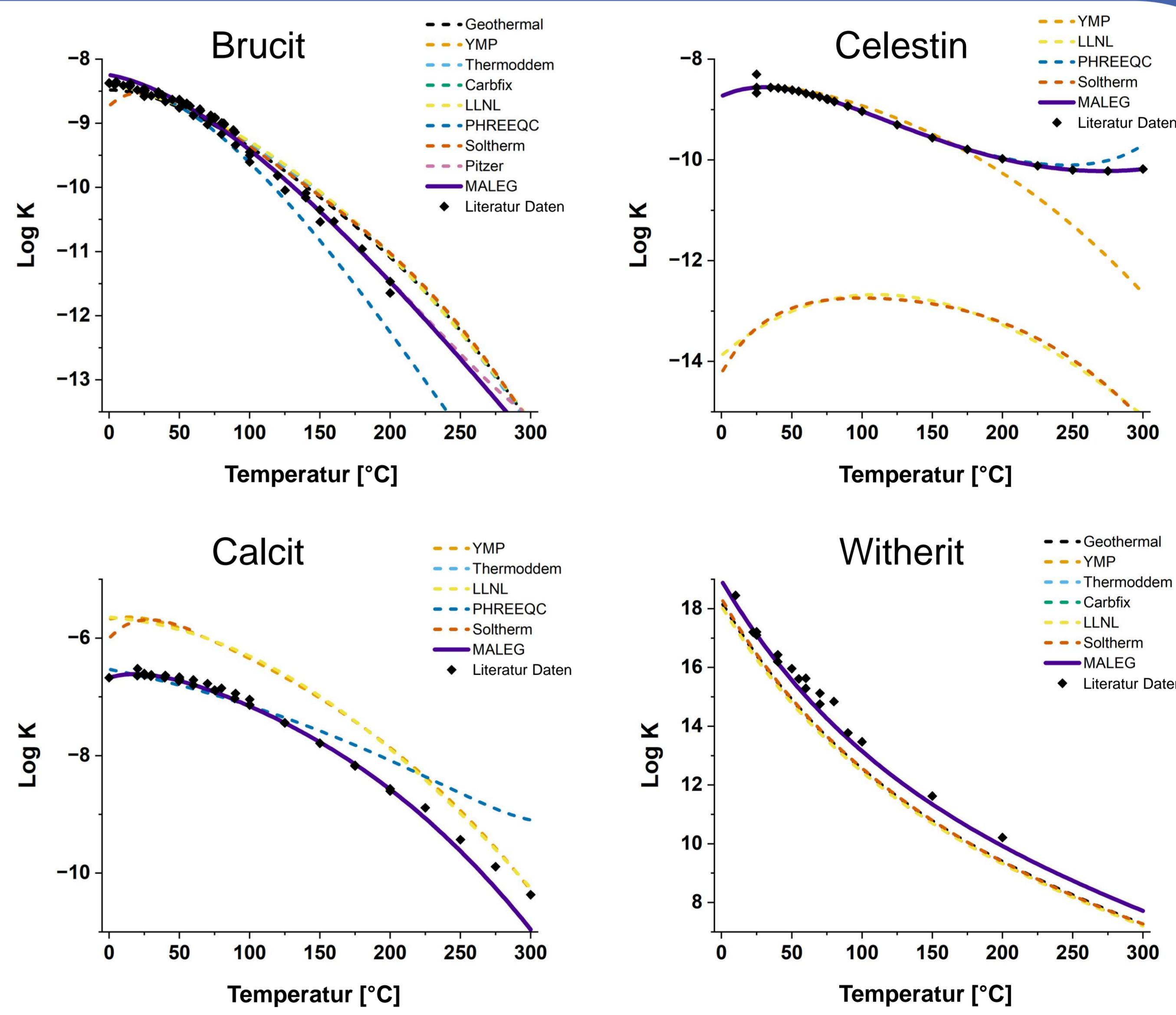
- Wasser-Gestein-Gas-Wechselwirkungen
- Mineralausfällung
- Entgasungsprozesse
- CO₂-Speicherung
- Nukleare Endlagerung
- Rohstoffextraktion (z.B. Lithium, Bor)
- Geothermische Exploration

Die Feinheit des geochemischen Modellierens

- Modellierungssoftware benötigt eine thermodynamische Datenbank (TD), welche die thermodynamischen Größen z.B. Gibbs-Energie oder die Löslichkeitskonstante K aller beteiligten aquatischen, mineralischen und gasförmigen Spezies enthält.
- TDs basieren auf unterschiedlichen Quellen der thermodynamischen Parameter
 - Dies führt zu abweichenden Modellergebnissen desselben Models, basierend auf der verwendeten TD

Limitierung der thermodynamischen Größen

- Thermodynamische Größen werden aus experimentellen Daten abgeleitet, die mit bestimmten Unsicherheiten behaftet sind und auf unterschiedlichen methodischen und experimentellen Ansätzen beruhen
- Gültige Temperatur- und Druckbereiche werden aus den experimentellen Bedingungen abgeleitet und interpoliert
- Je größer die Differenz zu bekannten Werten, desto größer die Unsicherheit und Abweichung, auf Grund von unterschiedlichen Extrapolationsmethoden



Unterschiede der thermodynamischen Datenbanken

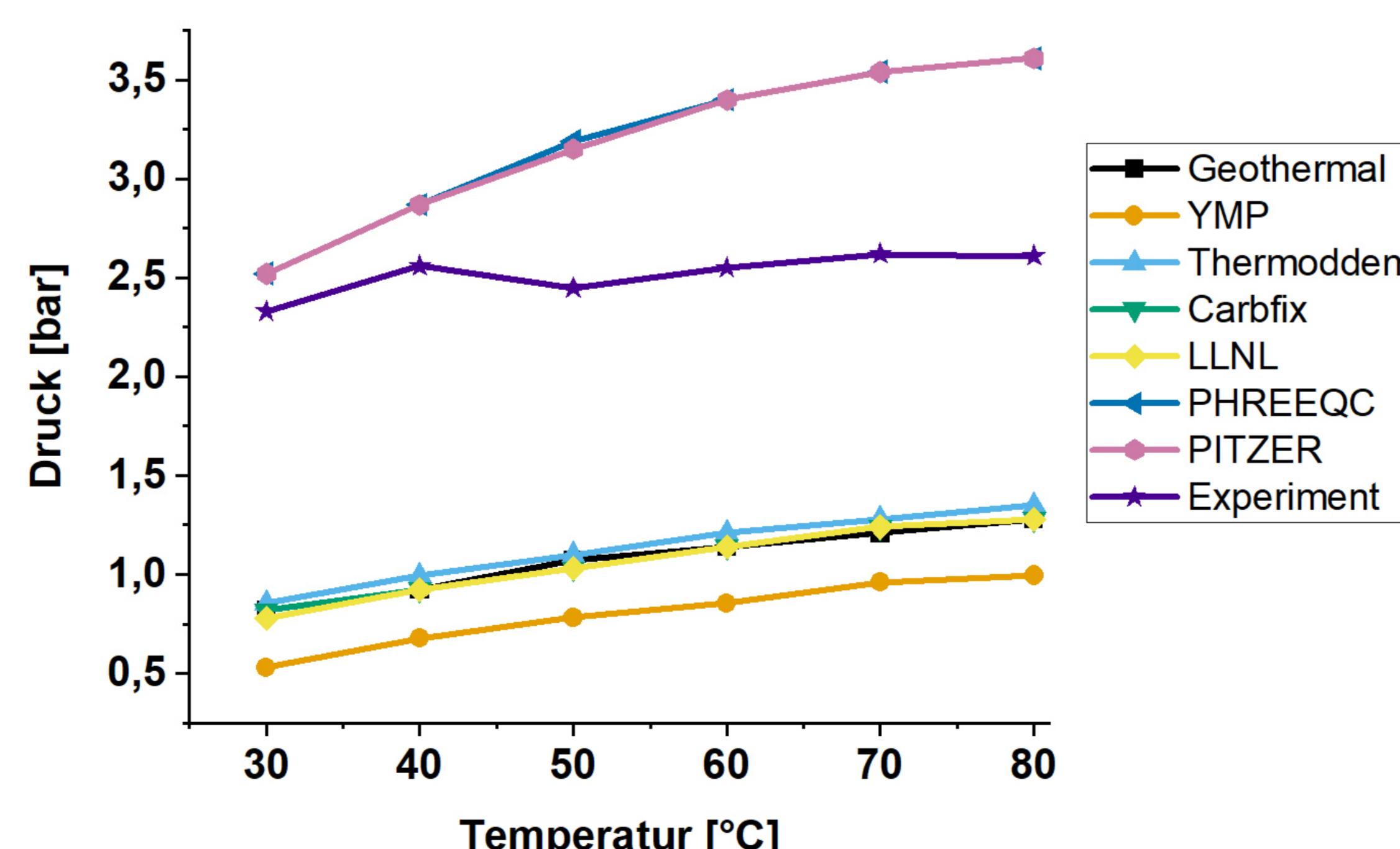
- Enthalten unterschiedliche Spezies und Reaktionsgleichungen
 - Verwendung von verschiedenen Zustandsgleichungen
 - Gültige P/T-Bedingungen unterscheiden sich
 - Die Quellen der thermodynamischen Größen sind nicht immer nachvollziehbar
 - Thermodynamische Größen müssen miteinander konsistent sein
- Vergleich der modellierten Löslichkeitskonstanten K mit verifizierten Experimentwerten aus der Literatur, zur Identifizierung der besten thermodynamischen Datensätze für die Modellierung von Prozessen in Geothermiekraftwerken. Insgesamt wurden über 20 Mineralphasen untersucht und in einer neuen Datenbank zusammengefasst.

Vergleich zwischen modelliertem und gemessenem Entgasungsdruck in Abhängigkeit der Temperatur in einem Geothermiekraftwerk

- Das Experiment wurde im Bypass unter in situ Kraftwerksbedingungen durchgeführt
 - Gasblasen wurden in einer dafür konzipierten Gasfalle gesammelt
 - Nur ein kleiner Anteil der gelösten Gaskomponente entgaste in die Gasphase
- Die TDs können den Entgasungsprozess nicht akkurat reproduzieren. Entweder sind mehr Daten nötig oder die zugrunde liegende Berechnung muss optimiert werden. Lediglich zwei TDs kommen den experimentellen Daten nahe.

Konzentration der gelösten Gasphase und derer Komponenten

Gasphase	Stickstoff	Kohlenstoff-dioxid	Methan	Schwefel-wasserstoff
Konzentration [mmol/l]	0.92	6.88	1.43	0.19



Zusammenfassung

- Experimentelle Daten sind die Grundlage für fundierte thermodynamische Parameter und präzise Modellierungsergebnisse.
- Die Auswahl zwischen den spezialisierten TDs für die aktuelle Fragestellung ist entscheidend
- Es sind zusätzliche Studien erforderlich, um hochwertige experimentelle Daten für erhöhte Temperaturen, Drücke und unterschiedliche pH-Werte zu gewinnen.

