

Uwe-Jens Görke, Thomas Vienken, Olaf Kolditz,  
Peter Dietrich, Sebastian Bauer (Eds.)

---

## **Auswirkungen der Nutzung des geo- logischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher – Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungsprognosen**



## Schlussbericht (Sachbericht)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ, Department für Umweltinformatik, Department Monitoring- und Erkun- dungstechnologien	<b>Förderkennzeichen:</b> 03EK3022B
<b>Vorhabenbezeichnung:</b> Verbundvorhaben <b>ANGUS+</b> : Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher - Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungsprognosen (ANGUS+)	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2012 – 31.12.2016	<b>Berichtszeitraum</b> 01.07.2012 – 31.12.2016



GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

**ENERGIE**SPEICHER  
Forschungsinitiative der Bundesregierung

Die Verantwortung für  
den Inhalt dieser Ver-  
öffentlichung liegt bei  
den Autoren.

## Schlussbericht zum Verbundvorhaben

# ANGUS+

## **Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende**

-

## **Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungs- prognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes**



**Am Verbund beteiligte Institutionen**

- Angewandte Geologie, Angewandte Geophysik und Geohydrmodellierung, Institut für Geowissenschaften, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Physische Geographie - Landschaftsökologie und Geoinformation, Geographisches Institut, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Department Monitoring und Erkundungstechnologien und Department Umweltinformatik, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ
- Department Reservoirtechnologien, Helmholtz Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungszentrum GFZ GmbH
- Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik, Ruhr-Universität Bochum

**Wissenschaftliche Projektkoordination**

Prof. Dr. S. Bauer und Prof. Dr. A. Dahmke, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

**Kontakt**

Prof. Dr. Sebastian Bauer & Prof. Dr. Andreas Dahmke

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel  
Institut für Geowissenschaften

Ludewig-Meyn-Straße 10, 24118 Kiel, Germany

Tel: +49 (0)431 880-2857

Fax: +49 (0)431 880-7606

E-mail: [sebastian.bauer@gpi.uni-kiel.de](mailto:sebastian.bauer@gpi.uni-kiel.de) & [ad@gpi.uni-kiel.de](mailto:ad@gpi.uni-kiel.de)

**Projektförderung**

Das Projekt ANGUS+ wurde gefördert durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im Rahmen der Energiespeicher Forschungsinitiative. Betreut wurde das Verbundvorhaben durch den Projektträger Jülich.



## **Vorwort**

Der vorliegende Schlussbericht des Verbundvorhaben ANGUS+ „Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende - Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungsprognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes - ANGUS+“ dient der umfassenden Darstellung der Projektergebnisse und der gemeinsam durchgeführten Arbeiten der einzelnen Zuwendungsempfänger des Forschungsverbundes. Diese sind im Einzelnen:

- Angewandte Geologie, Angewandte Geophysik und Geohydrmodellierung, Institut für Geowissenschaften, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Physische Geographie - Landschaftsökologie und Geoinformation, Geographisches Institut, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Department Monitoring und Erkundungstechnologien und Department Umweltinformatik, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ
- Department Reservoirtechnologien, Helmholtz Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungszentrum GFZ GmbH
- Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik, Ruhr-Universität Bochum

Das Verbundprojekt wurde im Rahmen der gemeinsamen Initiative des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi), des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) und des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) zur Förderung von Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet von Energiespeichertechnologien (Förderinitiative Energiespeicher) aufgrund der Bekanntmachung vom 21.04.2011 konzipiert. Das Projekt wurde im Rahmen der „Förderinitiative Energiespeicher“ durch das BMBF vom 01.07.2012 bis 30.06.2017 gefördert und durch den Projektträger Jülich betreut.

Im Folgenden werden im Teil I des Endberichtes die Aufgabenstellung und Ziele, die Voraussetzungen zur Durchführung des Vorhabens, die Planung und der Ablauf des Vorhabens, der wissenschaftliche Stand zu Projektbeginn, die Zusammenarbeit mit anderen Stellen sowie eine übergeordnete Kurzfassung der Verbundprojektergebnisse dargestellt. In Teil II erfolgt dann die detaillierte Darstellung der Ergebnisse der einzelnen Arbeitspakete des ANGUS+ Verbundes. Die Teile I und II.1 sind aufgrund der sehr integrativen Struktur des Verbundvorhabens gemeinsam durch alle Partner erstellt worden und daher für alle Verbundpartner identisch. Die Berichtsteile II.2 bis Schluss sind für jeden Antragsteller spezifisch dargestellt.

## **Danksagung**

Die Autoren danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) für die finanzielle Unterstützung, dem Sonderprogramm „Forschungsinitiative Energiespeicher“ für die gute Kooperation, den Projektpartnern für die effektive Zusammenarbeit und die erbrachten Leistungen sowie dem Projektträger Jülich für die herausragende und unterstützende Betreuung des Verbundvorhabens ANGUS+.



## Inhalt

Autoren.....	12
Abbildungsverzeichnis.....	13
Tabellenverzeichnis.....	16
I. Kurzdarstellung des Projektes ANGUS+ .....	17
I.1. Aufgabenstellung.....	17
I.2. Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde .....	18
I.3. Planung und Ablauf des Vorhabens.....	22
I.4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde .....	26
I.5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen .....	31
I.6. Übergeordnete Ergebnisse des ANGUS+ Verbundvorhabens .....	38
Zitierte Literatur .....	40
II. Eingehende Darstellung des Projektes ANGUS+ .....	46
II.1. Verwendung der Zuwendung und erzieltes Ergebnis im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele.....	46
II.1.1. AP 1 PARAMETERISIERUNG.....	46
(1) AP 1.1 Parametrisierung des tiefen geologischen Untergrundes .....	46
(2) AP 1.2 Parametrisierung der oberflächennahen geologischen Schutzgüter .....	48
(3) AP 1.3 Geostatistische Analysen hydraulischer, geochemischer, mineralogischer und geophysikalischer Daten des Norddeutschen Untergrundes.....	50
(4) AP 1.4 Entwicklung von Konzepten zur Standorterkundung und von Monitoringstrategien zur optimierten Nutzung oberflächennaher Wärmespeicher.....	52
(5) AP 1.5 Parametrisierung der oberirdischen infrastrukturellen Gegebenheiten und raumplanerischer Vorgaben.....	58
(6) AP 1.6 Experimentelle Parameterbestimmung geomechanischer Kenngrößen von Fels- und Salzgesteinen sowie des geomechanisch-seismischen Verhaltens norddeutscher Lockergesteine bei periodischem Wärmeeintrag und -entzug.....	60
(7) AP 1.7 Untersuchung der Folgereaktion in oberflächennahen unterirdischen Schutzgütern im Zuge des Eintrags untertägig gespeicherter Gase .....	65
(8) AP 1.8 Geochemische Untersuchung von Auswirkungen oberflächennaher, geologischer Wärmespeicher im urbanen Raum.....	69
(9) AP 1.9 Mikrobiologische Parametrisierung und experimentelle Untersuchungen zum Einfluss von Temperaturerhöhungen, Schadstoffexpositionen und Gasleckagen .....	80
II.1.2. AP 2 MODELLENTWICKLUNG .....	88
(1) AP 2.1 Modellentwicklung zur Simulation der Speicherung von Druckluft, CH <sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H <sub>2</sub> in Salzkavernen .....	88
(2) AP 2.2 Modellentwicklung zur Simulation der Speicherung von CH <sub>4</sub> bzw. Erdgas, Sole, Druckluft und Wärme in tiefen porösen Gesteinen .....	90

(3)	AP 2.3 Modellentwicklung zur Simulation von Leckagen in oberflächennahen Grundwasserleitern und zum seismischen Monitoring von tiefen Speichern und Leckagen ..	93
(4)	AP 2.4 Modellentwicklung zur Beeinflussung des flachen Grundwassers durch Wärmespeicherung .....	96
(5)	AP 2.5 Methodenentwicklung zur Simulation bzw. Erfassung der Auswirkungen der unterirdischen Speichermaßnahmen auf die raumplanerisch festgelegten Schutz- und Vorranggebiete .....	99
II.1.3.	AP 3 MAßNAHMENBEZOGENE SZENARIENANALYSEN .....	101
(1)	AP 3.1 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von Salzkavernen zur Speicherung von Druckluft, CH <sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H <sub>2</sub> , einschließlich Bewertung geeigneter Monitoring-Methoden.....	101
(2)	AP 3.2 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von tiefen, porösen geologischen Speichern zur Einlagerung von Sole und Speicherung von Druckluft, CH <sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H <sub>2</sub> .....	105
(3)	AP 3.3 Ausbreitung von Gasleckagen aus tiefen Speichern und ihre geochemische Beeinflussung oberflächennaher unterirdischer Schutzgüter .....	110
(4)	AP 3.4 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von oberflächennahen geothermischen Anlagen und deren Monitoring; Änderung des Strömungs- und Transportregimes, Gefährdungen des Grundwassers durch Leckagen und Interaktion mit Altlasten.....	116
(5)	AP 3.5 Auswirkung der Kopplung der untersuchten geologischen Speicheroptionen auf die oberirdische Raumplanung unter Berücksichtigung des Aspektes der Energieversorgungsinfrastruktur .....	120
II.1.4.	AP 4 GROßSKALIGE RAUMPLANUNG DES UNTERGRUNDES MIT MULTIPLLEN SPEICHERSZENARIEN .....	122
(1)	AP 4.1 Analyse und Dimensionierung der maximalen und optimalen Speicherkapazitäten für Energiestoffe und/oder Wärme anhand der Szenarienanalysen....	122
(2)	AP 4.2 Kopplung der untersuchten geologischen Speicheroptionen unter Berücksichtigung der bestehenden und geplanten oberirdischen Raumordnung, insbesondere bestehender Schutzgebiete .....	126
(3)	AP 4.3 Entwicklung von Methoden zur Datenintegration und Datenvisualisierung (Virtuelle Realitäten) für die Raumplanung des Untergrundes .....	128
(4)	AP 4.4 Erstellung von Leitfäden zur optimierten Raumplanung des tiefen geologischen Untergrundes einschließlich seiner Überwachung, und zur Nutzung des oberflächennahen geologischen Untergrundes im Hinblick auf die Energiespeicherung.....	131
	Zitierte Literatur .....	134
II.2.	Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises.....	145
II.3.	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit .....	145
II.4.	Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere der Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans.....	146
II.5.	Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen .....	148
	Zitierte Literatur (Abschnitte II.2 bis II.5) .....	150

---

II.6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse des Zuwendungsempfängers.....	151
Publikationen in Fachzeitschriften.....	151
Bücher / Buchkapitel .....	151
Tagungsbeiträge mit Abstracts .....	152
Abschlussarbeiten mit Projektbezug.....	154

## Autoren

### **Christian-Albrechts-Universität zu Kiel**

*Institut für Geowissenschaften, Geohydromodellierung (AG Bauer):*

Sebastian Bauer, Katharina Benisch, Christof Beyer, Anke Boockmeyer, Jens-Olaf Delfs, Dedong Li, Wolf Tilmann Pfeiffer, Steffi Popp, Bo Wang

*Institut für Geowissenschaften, Angewandte Geologie (AG Dahmke):*

Márton Berta, Andreas Dahmke, Frank Dethlefsen, Markus Ebert, Nicolas Koproch, Ralf Köber, Klas Lüders, Dirk Schäfer, Janine Struß, Carla Wiegers

*Institut für Geowissenschaften, Angewandte Geologie / Geomechanik (AG Feeser):*

Volker Feeser, Robert Hinkes

*Institut für Geowissenschaften, Angewandte Geophysik (AG Rabbel):*

Said Attia al Hagrey, Daniel Köhn, Wolfgang Rabbel

*Geographisches Institut, Landschaftsökologie und Geoinformation (AG Duttmann):*

Rainer Duttmann, Michael Nolde, Malte Schwanebeck

### **Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH – UFZ**

*Department Monitoring und Erkundungstechnologien (AG Dietrich):*

Peter Dietrich, Linda Firmbach, Sophie Schelenz, Thomas Vienken,

*Department Umweltinformatik (AG Kolditz):*

Lars Bilke, Norbert Böttcher, Uwe-Jens Görke, Olaf Kolditz, Thomas Nagel, Marc Walther

### **Helmholtz Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungszentrum GFZ GmbH**

*Department Reservoirtechnologien (AG Würdmann):*

Anne Kleyböcker, Tobias Lienen, Anke Westphal, Hilke Würdemann

### **Ruhr-Universität Bochum**

*Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik (AG Schanz):*

Achim v. Blumenthal, Kavan Khaledi, Diethard König, Elham Mahmoudi, Tom Schanz

*Abbildungsverzeichnis*

Abbildung I.3-1: ANGUS+ Projektstruktur mit Querschnittsthemen .....	22
Abbildung I.3-2: Struktur und inhaltliche Zuordnung der Arbeitspakete und Unterarbeitspakete im Verbundvorhaben ANGUS+.....	23
Abbildung 1.1.4-1: Vergleich errechneter und gemessener elektrischer Widerstände aus Lüders et al. (2016). .....	54
Abbildung 1.1.4-2: Innovatives Erkundungskonzept aus Vienken et al. (2015). .....	56
Abbildung 1.1.5-1: Verfügbare und zur Verfügung gestellte Geodaten bezüglich Energieinfrastruktur und Raumordnung in Schleswig-Holstein (Stand 03/2016). .....	58
Abbildung 1.1.5-2: Vorhandene und geplante oberirdische Freileitungen, Seekabel und Umspannstationen sowie Lage von unterirdischen Salzstrukturen und Teilgebietsmodellen im geologischen Strukturmodell von S-H.....	59
Abbildung 1.1.5-3: 3D-Voxelmodelle der Geodatensätze zur Lage von oberirdischen Grundwasservorranggebieten aus der Raumordnung (links) und zum Verlauf von Hochspannungsleitungen (rechts). .....	60
Abbildung 1.1.6-1: Interaktion AP 1.6, AP 2.1 und AP 3.1. ....	61
Abbildung 1.1.6-2: Schematischer Aufbau der Versuchseinrichtung.....	62
Abbildung 1.1.6-3: Eindimensionaler Kompressionsversuch an einem mittelplastischen Ton und mechanischer und zyklischer thermischer Beaufschlagung. a) Vorgabe der zyklischen Temperatur und Probenantwort Porenzahl und p-Wellengeschwindigkeit über die Zeit. b) Signifikante Zusammenhänge zwischen Proben temperatur und Porenzahl sowie Porenzahl und p-Wellengeschwindigkeit.....	64
Abbildung 1.1.6-4: a) Hydraulische Durchlässigkeit eines wassergesättigten, mittelplastischen Tons bei zyklischer Temperaturänderung, b) Kompressionswellengeschwindigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Die Pfeilrichtung gibt die Veränderung mit zunehmender Anzahl der Heiz-Kühl-Zyklen an.....	65
Abbildung 1.1.8-1: In Kreislaufsäulenversuchen gemittelt über zwei Sedimente und alle untersuchten Temperaturen bestimmte elementspezifische Reversibilität von Sorptions- bzw. Desorptionsreaktionen (a), sowie Kategorisierung von Spurenelementen und Schwermetallen je nach Verhalten bei Temperaturanstieg basierend auf Daten von Bonte et al. 2013b, Jesušek et al. 2013 und Lüders et al. in prep. (b). .....	71
Abbildung 1.1.8-2: Arsenatkonzentration im Ablauf von Säulenversuche (Datenpunkte) bei Starttemperaturen von 10°C (oben) und 70°C (unten). Die Temperaturkurve (blaue Linie) zeigt die Heiz- bzw. Kühlperioden an und die Modellanpassungen (rote Linie) wurden mit PHREEQC erstellt.....	71
Abbildung 1.1.8-3: Vergleich der prozentualen Sorption von Arsenat an Goethit bei unterschiedlichen Temperaturen und kleiner ( $C_0 = 1 \text{ mg/l As(V)}$ , links) bzw. hoher Startkonzentration ( $C_0 = 10 \text{ mg/l As(V)}$ , rechts) bei unterschiedlichen diskreten pH-Werten. ....	72
Abbildung 1.1.8-4: Vergleich der Dauer bis zum Erreichen von 30 bzw. 50% Gasphasensättigung im Anstrom eines Wärmespeichers (a), sowie der Verringerung von Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit im Wärmespeicher bei einer max. residualen Gasphasensättigung von 30% (b) zwischen drei Szenarien gelöster Gaskonzentrationen (nach Lüders et al. 2016, siehe auch für detaillierte Randbedingungen). .....	73

Abbildung 1.1.8-5: Abbauratenkonstanten des mikrobiellen Abbaus von WTF-Inhaltsstoffen (Carnegie & Ramsay 2009, Chapman & Duggleby 1967, Chua et al. 2001, Gibson & Suflita 1986, Heesel et al. 2010, Herzog et al. 2013, Ilieva et al. 2012, Kazumi et al. 1995, Liu et al. 2011, 2013, Matthies & Schink 1993, McGahey & Bouwer 1992, Siotto et al. 2012, Spahr et al. 2012, Tihm et al. 2012, TOXNET 2016, Ward et al. 1985, Weiss et al. 2006, Williams & Evans 1975). .....	75
Abbildung 1.1.8-6: Maximalkonzentrationen im Brunnen bei einem EWS-Abstand von 100 m (EWS im direkten Anstrom der Entnahme positioniert) im Vergleich zum Richtwert bei einer Entnahme von a) 1.000.000 m <sup>3</sup> /a und b) 125.000 m <sup>3</sup> /a .....	76
Abbildung 1.1.8-7: Löslichkeiten aus den Schüttelversuchen für a) PCE, b) TCE, c) trans-DCE und d) cis-DCE, e) und f) nach Gl.1 berechnete Löslichkeiten für Stoffe der BTEX-Gruppe und ausgewählter PAK's in Relation zur Löslichkeit bei 10°C.....	78
Abbildung 1.1.8-8: Aus Säulenversuchen ermittelte transiente Massentransferkoeffizienten (a);aus interfaziellen Tracerversuchen ermittelte effektive spezifische Wasser-TCE-Kontaktflächen in Abhängigkeit der Temperatur und der TCE-Porensättigung (Messpunkte: Symbole, $y=a*\ln(x)+b$ : gepunktete Linie) (b); a- und b-Wert der jeweiligen logarithmischen Ausgleichsfunktion (c); aus Gl.1 ermittelte temperaturabhängige logarithmische Funktion mit Messpunkten sowie den inter- bzw. extrapolierten Kurven für 20, 40 und 70°C (d).....	78
Abbildung 1.1.8-9: Aus dem quer zur Fließrichtung aufgenommenen Probenahmeprofil gemessene TCEaq-Massenflüsse der Gerinneversuche (links); gegenüber dem Verhältnis von A0 /va (rechts). .....	79
Abbildung 1.1.9-1: Genetisches Fingerprinting von 16S rRNA Genfragmenten aus Fluidproben der 10°C- und 70°C-Sedimentsäulen über das Säulenprofil (oben, Mitte, unten). Signifikante Unterschiede zwischen unten und oben in der 10°C-Säule. Ähnliche Gemeinschaften über das Säulenprofil in der 70°C-Säule.....	83
Abbildung 1.1.9-2: Genetisches Fingerprinting von 16S rRNA-Genfragmenten aus Fluidproben mit Nitrat- und Ethylenglykolzugabe im Quarzsand (Qz) und Aquifersediment (Aq) in der Adaptionsphase (Eq), sowie nach zwei (M2) und vier Monaten (M4) Ethylenglykolzugabe. ....	86
Abbildung 1.2.1-1: Radial- und Umfangsspannungen (links) sowie Radialverschiebungen (rechts) bei der zyklischen Beanspruchung einer Scheibe mit Loch zur Analyse der elasto-plastischen Anteile des konstitutiven Salzmodells nach Minkley aus Nagel et al. (2017). Vergleich der numerischen Lösung (gestrichelte Linien) mit einem numerischen Ansatz nach Senseny et al. (1989; durchgezogenen Linien). .....	89
Abbildung 1.2.5-1: Schema der verwendeten Open-Source- Komponenten des ANGUS+ RIS. ....	99
Abbildung 1.2.5-2: Screenshot der 3D webGIS Komponente des Informationssystems. ....	100
Abbildung 1.3.1-1: Konvergenzverhalten einer kugelförmigen und einer zylindrischen Kaverne bei zyklischen Be- und Entladevorgängen im Vergleich zwischen der Simulation mechanischen Verhaltens und thermo-mechanischen Verhaltens aus Böttcher et al. (2017). .....	102
Abbildung 1.3.1-2: Automatische Lokalisierung von mikroseismischen Ereignissen entlang einer Verwerfungszone induziert durch eine Gasleckage (a). Die direkte Kartierung von Änderungen der P-Wellengeschwindigkeit in der Umgebung einer zyklisch belasteten Kaverne mit Hilfe der FWI (b). .....	103
Abbildung 1.3.2-1: Schema induzierter hydraulischer (H), thermischer (T), geochemischer (C) und geomechanischer (M) Effekte durch den Betrieb eines tiefen Porengasspeichers.....	105
Abbildung 1.3.2-2: Vergleich zwischen dem wahren P-Wellengeschwindigkeitsmodells eines realistischen Wasserstoffspeichers, dem Ergebnis der FWI Kartierung und dem relativen Geschwindigkeitsfehler für eine VSP- (a-c) und Cross-Well Akquisitionsgeometrie (d-f). ....	109

Abbildung 1.3.5-1: Voxelmodelle der verorteten jährlichen Stromerzeugung aus Windkraftanlagen (links) und des räumlich differenzierten Wärmebedarfs von Gebäuden (rechts) im Modellgebiet Schleswig-Holstein. ....	121
Abbildung 1.3.5-2: Potenzialräume visualisiert im 3D webGIS (dunkel grüne Bereiche), basierend auf einer ersten rein geometrischen Abfrage im Anwendungsfall „Druckluftspeicherung (CAES) in Salzkavernen“ im Modellgebiet. ....	122
Abbildung 1.4.2-1: Potenzialräume für Druckluftspeicherung (CAES) in Salzkavernen (dunkelgrüne Voxel) im Südwesten von Schleswig-Holstein als Ergebnis bei zusätzlicher Berücksichtigung von Geodaten zur Raumplanung und Energieinfrastruktur bei der Abfrage im 3D webGIS .....	127
Abbildung 1.4.2-2: Einbindung der exportierten Potenzialräume (rote Rasterzellen) in das proprietären GIS „ArcMap“ in Kombination mit Geodatensätze zur Geologie (Salzstrukturen) und Raumplanung (Landesentwicklungsplan, Regionalpläne) über einem Satellitenbild im Südwesten von Schleswig-Holstein. ....	128
Abbildung 1.4.3-1: Nutzung der Datenexport-Funktion im 3D webGIS am Beispiel des Formats VTK im Koordinatensystem UTM32N. ....	129
Abbildung 1.4.3-2: Ausschnitt aus der 3D-Visualisierung eines hypothetischen Kavernenfeldes in einem Salzstock in Schleswig-Holstein (Grafik: Lars Bilke, Visualisierungszentrum des UFZ). ...	130

*Tabellenverzeichnis*

Tabelle 1.1.4-1: Übersicht verschiedener geophysikalischer Messmethoden und relevanter geophysikalischer Parameter.....	53
Tabelle 1.1.8-1: Kenndaten einzelner in AP 1.8.1 durchgeführter Säulenversuche (SV) und Batchtests (BT). .....	70
Tabelle 1.1.8-2: Eignung verschiedener Untersuchungsansätze für die jeweiligen Prozesse in einem „Schnelltest“. ++: favorisierter Prognoseansatz, +: für erste Einschätzung geochemischer Auswirkungen geeignet; o: eingeschränkt hilfreich; -: ungeeignet; n: nicht untersucht. ....	74

## I. KURZDARSTELLUNG DES PROJEKTES ANGUS+

### I.1. Aufgabenstellung

Die verstärkte Nutzung erneuerbarer Energiequellen im Rahmen der „Energiewende“ in Deutschland impliziert ein zukünftig stark fluktuierendes Energiedargebot aus erneuerbaren Quellen. Ziel für das Jahr 2050 sind Anteile erneuerbarer Energien von 60% am Bruttoendenergieverbrauch bzw. 80% am Bruttostromverbrauch (Bundesministerium für Wirtschaft und Energie 2015). In Schleswig-Holstein hat die erneuerbare Energieproduktion im Jahr 2014 bereits Anteile von 24% des Endenergieverbrauchs und 78% des Bruttostromverbrauchs erreicht (Statistisches Amt für Hamburg und Schleswig-Holstein 2016) und dürfte im Jahr 2016 die 100% erreicht haben. Die stark fluktuierende erneuerbare Wind- und Solarenergie kann bei hohen Anteilen an der Energieproduktion jedoch nur dann sinnvoll genutzt werden, wenn neben dem Stromnetzausbau auch neue Methoden und Technologien für die Energiespeicherung entwickelt und umgesetzt werden. Geotechnische Energiespeicher in Form von Porengasspeichern oder Kavernenspeicher für Wasserstoff oder Methan aus erneuerbarer Erzeugung sowie für Druckluft zur Stabilisierung der fluktuierenden Energieerzeugung aus erneuerbaren Quellen als auch geologische Wärmespeicher als saisonale Puffersysteme bieten potenziell große Speicherkapazitäten, hohe Ein- und Ausspeicherraten sowie eine große Spanne an Zykluszeiten, die von Bereichen einiger Stunden bis zu saisonaler Speicherung reichen können. In Abhängigkeit von der lokalen Infrastruktur, dem regionalen Bedarf und den geologischen Voraussetzungen können geotechnische Energiespeicher darüber hinaus gezielt in der Nähe zu Energieproduzenten und zu Energieverbrauchern platziert werden. Daher wird geologischen Energiespeichern in der Diskussion der Energiewende eine große Rolle insbesondere als längerfristige Speicheroption mit großen Kapazitäten zugeschrieben.

Der Einsatz von Strom aus Zeiten höherer Produktion als des Verbrauchs zur Herstellung von Wasserstoff und Methan als „Windgas“ oder zur Erzeugung von Druckluft mit anschließender kurz- oder langfristigen Speicherung, jeweils in Porenspeichern oder Kavernen im Salzgestein, und späteren Rückverstromung können dabei Techniken zur Überbrückung des zeitlichen Versatzes zwischen Bedarf und erneuerbarer Stromproduktion teilweise sein. Die oberflächennahe Wärmespeicherung, sowohl in offenen als in geschlossenen Systemen, kann insbesondere im urbanen Raum und in Kombination mit Solarthermie und Abwärme aus gewerblichen Prozessen als längerfristiges bis saisonales Puffersystem zur Wärme- und Kälteversorgung von Gebäuden und städtischen Quartieren beitragen und somit eine wesentliche Erhöhung des Anteils regenerativer Energiequellen bei der Wärmeversorgung ermöglichen. Dazu könnte auch bisher abgeregelter „Überschussstrom“ aus Windkraftanlagen oder Solaranlagen in so genannte „Windwärme“ umgewandelt und in unterirdische Wärmespeicher eingespeist werden.

Grundsätzlich bestehen bei den genannten geologischen Speicheroptionen für synthetisches oder natürliches Methan oder Druckluft z. T. langjährige Erfahrungen aus dem Speicherbetrieb im nationalen wie internationalen Kontext. Ebenso bestehen bereits einige Erfahrungen mit offenen als auch geschlossenen Wärmespeichern im Untergrund. Vor einem großtechnischen und verbreiteten Einsatz an geologischen Energiespeichern sind jedoch sowohl für einzelne Speichertechnologien als auch für deren Einsatz im Untergrund noch Forschungs- und Entwicklungsarbeiten durchzuführen. Dieser Forschungsbedarf bezieht sich auf einzelne der induzierten auftretenden Effekte wie

mechanische Effekte bei der Kavernenspeicherung oder im Porengasspeicher bei kurzen Speicherzyklen, sowie insbesondere die mechanischen, chemischen und hydraulischen Auswirkungen und Effekte von Hochtemperaturwärmespeichern im Untergrund. Da der Betrieb eines untertägigen Energiespeichers einen Eingriff in den geologischen Untergrund darstellt, müssen die induzierten Auswirkungen und Effekte quantifiziert und prognostiziert werden. Dies würde zum einen eine verlässliche Dimensionierung der Speicher und der Speichercharakteristika erlauben, zum anderen kann auf dieser Basis die räumliche Größe der einzelnen Speicher abgeschätzt und Speicherpotenziale im Untergrund insgesamt bestimmt werden.

Diese Ausführungen machen deutlich, dass für die Nutzung geotechnischer Energiespeicher ein grundlegendes und hinreichendes System- und Prozessverständnis von großskaligen Georeservoirs erforderlich ist, um die komplexen und sich z. T. rückkoppelnden Auswirkungen der Speichernutzungen untereinander und auf Schutzgüter wie z. B. das Grundwasser bewerten zu können. Dies ist die Grundlage für die Bewertung der Potenziale sowie der Risiken für die nachhaltige Nutzung geotechnischer Energiespeicher im Rahmen einer unterirdischen Raumplanung, die eine ökologische, ökonomische und nachhaltige Nutzung der Ressource Unterirdischer Raum ermöglicht. Eine verstärkte Nutzung des geologischen Untergrundes als Speichermedium erfordert daher zum einen eine bessere Kenntnis der vorliegenden unterirdischen Gegebenheiten, eine Prognose der induzierten Prozesse, und eine Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung dieser verschiedenartigen Eingriffe sowie ihrer Umweltauswirkungen.

Die übergeordneten Ziele des Projektes ANGUS+ sind daher:

- die Parametrisierung unterirdischer Räume für die prozessorientierte Betrachtung als Datenbasis der Bewertung der unterirdischen Speicher, wobei sowohl Eigenschaften der Formationen als auch Prozessparameter aus der Literatur zusammengestellt sowie in eigenen experimentellen Arbeiten bestimmt werden,
- die Entwicklung bzw. Weiterentwicklung eines numerischen Open-Source-Modells zur Prognose der induzierten gekoppelten thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Prozesse,
- die Definition von realistischen Szenarien zur Nutzung des geologischen Untergrundes als Energiespeicher. Diese Szenarien werden numerisch simuliert und im Hinblick auf Speichercharakteristiken und induzierten Auswirkungen ausgewertet,
- die Ableitung und Validierung von geeigneten Umweltmonitoring- und Interventionskonzepten für die betrachteten Speicheroptionen, und
- die Konzeption einer Methodik und Erstellung von zwei Kompendien, die eine großskalige und holistische Raumplanung des Untergrundes für tiefe unterirdische Speicheroptionen als auch die oberflächennahe unterirdische Wärmespeicherung unterstützen soll.

## **I.2. Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde**

Das ANGUS+ Verbundvorhaben ist in die vier großen Themengebieten „Parametrisierung“, „Modellentwicklung“, „Szenarienanalyse“, und „Unterirdische Raumplanung“ strukturiert. Die einzelnen Arbeitsgruppen brachten die jeweils notwendige Expertise zur Bearbeitung der Arbeitspakete in Kooperation mit ausgewählten Arbeitsgruppen der Verbundpartner ein.

Das Institut für Geowissenschaften an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel hat aufgrund seiner breiten fachlichen Aufstellung im Bereich der Angewandten Geowissenschaften einen verhältnismäßig großen Anteil an den Arbeitspaketen. Diese breite Beteiligung der CAU am Forschungsvorhaben ANGUS+ ergibt sich aus fachlich relevanten theoretischen Vorarbeiten wie auch aus der notwendigen apparativen Ausstattung. Darüber hinaus stehen Prof. Dr. Sebastian Bauer und Prof. Dr. Andreas Dahmke an der CAU für die Koordination des Verbundes zur Verfügung. Grundlegend für die Projektstruktur ist eine strukturelle Verzahnung aller Partner über die Arbeitspakete hinweg, um enge interdisziplinäre Bezüge systematisch zu verankern. Diese Struktur der Arbeitspakete, in denen die Arbeitspakete rein inhaltlich definiert und somit teilweise von mehreren Arbeitsgruppen von mehreren Institutionen bearbeitet werden, erfordert einen hohen integrativen und koordinativen Aufwand, führt jedoch auch zu einer engen Verbindung der Projektarbeiten.

Die Forschungsschwerpunkte der Arbeitsgruppe Geohydromodellierung unter der Leitung von Prof. Dr. Sebastian Bauer umfassen die Entwicklung und Implementierung von numerischen Methoden zur Simulation der gekoppelten unterirdischen Strömungs- und reaktiven Transportprozesse in porösen Medien. Von besonderem Interesse sind dabei hydraulische, mechanische, thermische und geochemische Aspekte, deren Kopplung und die praxisnahe numerische Simulation. Arbeitsfelder sind die Hydrologie und Hydrogeologie (Karst, Umwelttracer, Erkundungsmethoden) sowie Geotechnik (Endlagerung, Geothermie). Hauptaugenmerk der letzten Jahre war die Programmentwicklung am Simulationssystem OpenGeoSys mit Arbeiten zur Software-Struktur und zu reaktiven Transportprozessen in Ein- und Mehrphasensystemen, sowohl für Grundwasserkontaminationen als auch für die Bereiche der CO<sub>2</sub>-Speicherung und der Geothermie. Die Arbeitsgruppe war an BMBF Verbänden (KORA, CO<sub>2</sub>-MoPa, CLEAN) und DFG-Projekten (Forschergruppe Poröse Medien) beteiligt und hat seit Jahren Erfahrung in der Koordination und Durchführung von Verbundvorhaben.

Der Lehrstuhl für Angewandte Geologie unter der Leitung von Prof. Dr. Andreas Dahmke besitzt langjährige Erfahrung in der Anwendung numerischer reaktiver Transportmodelle mit dem Ziel der Erkundung und des Monitorings von Altlasten oder CO<sub>2</sub>-Intrusionen im Grundwasser (z. B. BMBF-Projekte KORA, CO<sub>2</sub>-MoPa). Die Durchführung des CO<sub>2</sub>-Injektionsversuchs auf großer Feldskala und numerische Simulationen der Mehrphasenströmung (CLEAN, EU-ModelProbe) vervollständigen diese Untersuchungen. Im BMBF-Projekt CLEAN werden die Erkenntnisse zu einem Monitoringkonzept für großräumige Standorte zusammengefasst. Ein weiterer langjähriger Forschungsschwerpunkt ist die experimentelle Untersuchung von Grundwasser-Mineral-Reaktionen und die hydrogeochemische Modellierung der Versuchsergebnisse. Schwerpunkt der Arbeiten z. B. in den BMBF-Vorhaben RUBIN-II und GaFeR war die Untersuchung geochemischer Mehrphasenbeziehungen (NAPL, Wasser, Festphasen, Gasphasen). Im vom Land Schleswig-Holstein finanzierten und vom Lehrstuhl koordinierten Projekt GeoCITTI (oberflächennahe Wärmespeicherung) wird der Einfluss der Temperatur auf die Grundwasserqualität experimentell bestimmt. Insgesamt ist der Lehrstuhl seit Jahren erfolgreich mit der Koordination nationaler und internationaler interdisziplinärer F&E-Vorhaben betraut.

Organisatorisch angegliedert an die Arbeitsgruppe Angewandte Geologie ist Prof. Dr.-Ing. Volker Feeser, der eigenständig die Fächer Ingenieurgeologie und Geomechanik am Institut für Geowissenschaften vertritt. Die Arbeitsgruppe besitzt langjährige Erfahrungen im

Bereich der Hochdruckexperimente zur Charakterisierung der mechanischen und hydraulischen Gesteinseigenschaften. Das Gesteinsphysikalische Labor ist zur komplexen Untersuchung petrophysikalischer Eigenschaften unter hohen Spannungen und Temperaturen eingerichtet (z. B. 3D-Würfelpresse, Triaxialanlage mit Karman-Druckzelle, Hochdruckzelle) und war bereits an Forschungsprojekten wie CO<sub>2</sub>-MoPa, GASSTAB oder FINO3-Neptun beteiligt.

Die Arbeitsgruppe Angewandte Geophysik der CAU unter der Leitung von Prof. Dr. Wolfgang Rabbel befasst sich mit der Entwicklung und Anwendung geophysikalischer Feldmessverfahren, die zur Erkundung und Überwachung des Untergrundes von der Erdoberfläche (wenige m Tiefe) bis in die tiefere Erdkruste (10er km) Tiefen eingesetzt werden. Wichtige Feldmessprojekte der letzten Jahre befassten sich mit der zerstörungsfreien Untersuchung von Böden (EU-Projekt iSOIL), archäologischen Stätten (BMBF-Projekte im Rahmen von NTG, EU Intensive Program) und marinem Baugrund in der Nord- und Ostsee, insbesondere für offshore Windkraftanlagen (BMU-Projekt FINO3). In Verbundvorhaben wurden Verfahren zur Beurteilung des geothermischen Potenzials entwickelt (BMU-Projekt MeProRisk) und Strategien zur Überwachung untertägiger CO<sub>2</sub>-Speicherung entwickelt bzw. evaluiert. Im Rahmen des Sonderforschungsbereichs 574 (DFG) wurde der Transport von Fluiden in der Erdkruste seismologisch erforscht. Eine besondere Expertise der Arbeitsgruppe liegt im Kombinieren unterschiedlicher geophysikalischer Feldmessverfahren gestützt auf numerischen Simulationsrechnungen.

Der Lehrstuhl für Landschaftsökologie und Geoinformation (LGI) unter der Leitung von Prof. Dr. Rainer Duttmann verfügt über langjährige Erfahrung in der Anwendung und Entwicklung rechnergestützter Verfahren zur flächenhaften Modellierung von Wasser- und Stofftransporten auf Landoberflächen und in der ungesättigten Bodenzone sowie in der auf geostatistischen Methoden aufsetzenden Regionalisierung bodenphysikalischer und -hydrologischer Umweltprozessvariablen und Umweltprozesse (z. B. DFG-Verbundvorhaben „Soil structure dynamics and land use effects on preferential water and chemical fluxes in paddy rice fields at different spatial scales“). Der Antragsteller ist seit 20 Jahren auf dem Gebiet der Geographischen Informationsverarbeitung tätig. Er ist wissenschaftlicher Leiter des 2009 gegründeten Zentrums für Geoinformation an der CAU (ZfG) (EFRE-Projekt „Kompetenzzentrum Geoinformation“). Seine Arbeitsschwerpunkte liegen auf der räumlichen Prognose und Bewertung oberflächengebundener Umweltprozesse (u. a. Modellierung von Winderosionsrisiken für das MLUR und LLUR Schleswig-Holstein) und dem Aufbau von Geodateninfrastrukturen für nationale und internationale Forschungsprojekte wie im EU-FP7-Projekt „CLIMB“, in dem der Antragsteller als Leiter des Work Package 2 „Geodata management“ beteiligt ist.

Das Department Umweltinformatik unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. Olaf Kolditz wurde im Jahr 2007 am UFZ in Leipzig eingerichtet in gemeinsamer Berufung auf die Professur für Angewandte Umweltsystemanalyse an der TU Dresden. Die wissenschaftlichen Schwerpunkte liegen in der Angewandten Mathematik (Numerische Methoden für Mehrfeldprobleme) und der Angewandten Informatik (Datenintegration, Visualisierung, Höchstleistungsrechnen und Software-Engineering). Neben der Methodenentwicklung besteht ein sehr starker Anwendungsbezug in der Hydrologie, der Geotechnik und der Energiespeicherforschung. In der Hydrologie stehen Hydrosystemanalyse und integriertes Wasserressourcenmanagement in verschiedenen klimatisch sensiblen Modellregionen im Vordergrund. Das Anwendungsportfolio in der Geotechnik reicht von Endlagerung und

CO<sub>2</sub>-Speicherung bis hin zur tiefen und flachen Geothermie. Die technische Energiespeicherung als Anwendungsfeld ist relativ neu, dabei geht es um die Entwicklung thermischer Feststoffspeicher in Zusammenarbeit mit der DLR in Stuttgart. Das UFZ ist Mitglied des internationalen OpenGeoSys-Konsortiums ([www.opengeosys.net](http://www.opengeosys.net)) zur Modellierung thermo-hydro-mechanisch-chemischer (THMC) Prozesse in porösen Medien.

Das 2005 gegründete Department Monitoring- und Erkundungstechnologien (MET) unter der Leitung von Prof. Dr. Peter Dietrich beschäftigt sich mit der Entwicklung von Technologien und Messkonzepten zur Erkundung des oberflächennahen Untergrundes. Als Werkzeug dient hierzu die Forschungsplattform MOSAIC (MOdel driven Site Assessment, Information and Control). Das Department MET kann dabei auf eine umfassende geophysikalische Ausrüstung und Direct-Push (DP)-Ausrüstung zurückgreifen. In den letzten Jahren hat sich das Department intensiv mit der Entwicklung von geophysikalischen Messkonzepten vor dem Hintergrund hydrogeologischer Fragestellungen auseinandergesetzt. Ein weiteres breites Forschungsfeld stellt die kombinierte Nutzung von geophysikalischen Messkonzepten mit DP-Technologien zur Charakterisierung des Untergrundes inklusive Grundwasserleitern dar. Diese ermöglichen beispielsweise die Umsetzung von schleppgeophysikalischen Messungen in Kombination mit DP gestützten, hochauflösenden Tiefenprofilen in situ gemessener geotechnischer oder hydrogeologischer Parameter. Dieses Messkonzept wird u. a. im laufenden, EU finanzierten Projekt „Modelprobe“, in dem das Department ein Teilprojekt leitet, weiter entwickelt. Insbesondere die Messkombination von Oberflächenwellenseismik und DP gestützten CPT-Sondierungen zur geotechnischen Untersuchung des Untergrundes war Gegenstand des Projektes „Comextech“. Im Vordergrund standen hierbei die Verknüpfung von geotechnischen und seismischen Untersuchungen zu einem Gesamtkonzept und die Ableitung von standortspezifischen Parameterbeziehungen. Im EU finanzierten Projekt „iSOIL“, welches vom Department geleitet wird, werden Messkonzepte zur Integration von geophysikalischen Messungen in bodenkundliche Untersuchungen weiterentwickelt sowie standortspezifische Parameterbeziehungen abgeleitet.

Der Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik unter der Leitung von Prof. Dr. Tom Schanz beschäftigt sich seit 15 Jahren detailliert mit der Einlagerung toxischen Abfalls in tief gelegene unterirdische Hohlräume, sowohl ehemalige Bergwerke als auch Kavernen. Als Wirtsgestein wurden sowohl Konfigurationen im Salz als auch im Tonstein analysiert. Die zu Grunde liegenden Prozesse wurden theoretisch, experimentell und numerisch als gekoppelte Mehrfeldprobleme behandelt. Die international führenden experimentellen Grundlagen ermöglichen eine Kontrolle bzw. Erfassung der relevanten thermischen, mechanischen, hydraulischen und chemischen Einflussgrößen. Für die unterschiedlichsten Geomaterialien (poröse Materialien, Ton, Sand, Festgestein, Salz und Salzbaustoffe) wurden Konstitutivbeziehungen validiert, verifiziert und implementiert. Ein weiterer Schwerpunkt umfasst die Modellvalidierung mittels statistischer und inverser Methoden. Dieses Vorgehen erlaubt u. a. eine optimale Aufstellung und Analyse von Monitoringprogrammen. Die Arbeiten werden seit vielen Jahren von der DFG dem BMBF, BMU und BMWi gefördert.

Die Arbeitsgruppe Mikrobielles GeoEngineering des Internationalen Geothermiezentrums am GeoForschungsZentrum (GFZ) unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Hilke Würdemann beschäftigt sich seit 2004 mit mikrobiologischen Fragestellungen in den Themenbereichen Geothermie, CO<sub>2</sub>-Speicherung und energetische Biomassenutzung. Die Charakteri-

sierung mikrobieller Biozönosen in Aquiferen unterschiedlicher Teufe und Salinität bildet den Schwerpunkt der Forschungsarbeiten. Wechselwirkungen zwischen der mikrobiellen Biozönose und der geotechnischen Nutzung des Untergrundes stehen im Mittelpunkt. Mit Hilfe mikrobiologischer, geochemischer und mineralogischer Methoden werden die unterirdischen Prozesse analysiert, die sowohl physikochemische Reaktionen als auch mikrobiologische Reaktionen zwischen Gas, Fluiden und Gesteinsmineralen umfassen. Häufig zeigen sich ähnliche Probleme bei verschiedenen geotechnischen Verfahren bezüglich des Einflusses der Mikroorganismen auf Injektivität und Ökonomie des Anlagenbetriebs (SES-CT-2004-502599, BMBF 3G0760A, BMBF 03G0704A, BMU 0327634, BMU 0325201). Auch auf dem Forschungsgebiet der energetischen Nutzung feuchter Biomasse konnte die Arbeitsgruppe aufzeigen, dass detaillierte mikrobiologische und chemische Untersuchungen für das Prozessverständnis und damit die Prozessoptimierung elementar sind. Es zeigte sich, dass die biologisch induzierte Mineralbildung eine wesentliche Rolle für die Prozessstabilität in Biogasanlagen gespielt hat (VolksWagen-Stiftung AZ: II/80 703, BMU 03KB018).

### I.3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Thematisch ist der Verbund in die Themengebiete „Parametrisierung“, „Modellentwicklung“, „Szenarienanalyse“, und „Unterirdische Raumplanung“ gegliedert.

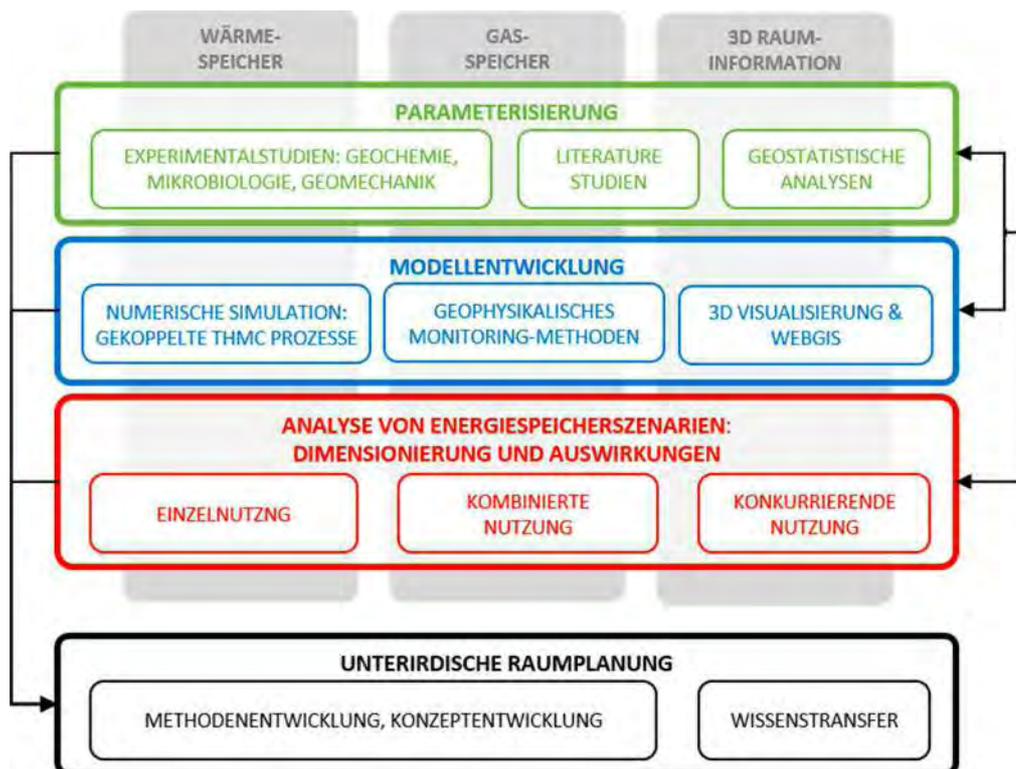


Abbildung I.3-1: ANGUS+ Projektstruktur mit Querschnittsthemen.

Der Einsatz der Arbeitsgruppen der Verbundpartner ist zumeist nicht auf die Beteiligung an nur einem der eng verzahnten Themengebiete beschränkt, sondern die Arbeitsgruppen tragen in der integrativ angelegten Projektstruktur (Abbildung I.3-1) mit der Wärmespeicherung, der Gasspeicherung und der 3D-Rauminformation als Querschnittsthemen

an unterschiedlichen Stellen zur Verflechtung der Projektarbeiten und der erzielbaren Projektergebnisse bei.

Das Projekt ist in insgesamt 23 Arbeitspakete in den vier Themenbereichen gegliedert (Abbildung I.3-2). In das Teilgebiet „Parametrisierung“ entfallen dabei neun Arbeitspakete. Diese befassen sich einerseits mit der Akquise und Erfassung der vorhandenen Gesteins- und Fluideigenschaften des tiefen sowie oberflächennahen Untergrundes (AP 1.1 bzw. AP 1.2) und mit der geostatistischen Analyse der akquirierten Daten (AP 1.3). Die oberirdische Energie-Infrastruktur wird in AP 1.5 parametrisiert. Mögliche Auswirkungen der Energiespeicherung bei Regelbetrieb und Störfällen auf den Speicherbetrieb sowie die unmittelbare Umgebung und auf oberflächennahe Aquifere werden auf induzierte geomechanische (AP 1.6), geochemische (AP 1.7 und AP 1.8) und mikrobiologische Prozesse hin untersucht. In diesen Arbeitspaketen werden die relevanten Prozesse daher experimentell untersucht und parametrisiert. Die Erkundung und das Monitoring oberflächennaher Wärmespeicherstandorte ist Gegenstand von AP 1.4.

#### Konzepte zur Planung des unterirdischen Raumes

- AP4.1 Analyse und Dimensionierung von Speicherkapazitäten
- AP4.2 Kopplung von unterirdischen Speicheroptionen
- AP4.3 Datenintegration und Datenvisualisierung
- AP4.4 Leitfäden zur Raumplanung des Untergrundes

#### Szenarienanalyse

- AP3.1 Auswirkungen von Salzkavernen
- AP3.2 Auswirkungen tiefer Porenspeicher
- AP3.3 Ausbreitung von Gasleckagen
- AP3.4 Auswirkungen oberflächennaher Geothermie
- AP3.5 Auswirkungen auf Schutz- und Vorranggebiete

#### Parametrisierung

- AP1.1 Parametrisierung des tiefen Untergrundes
- AP1.2 Parametrisierung des oberflächennahen Untergrundes
- AP1.3 Geostatistische Datenanalyse
- AP1.4 Erkundung und Monitoring flacher Wärmespeicher
- AP1.5 Parametrisierung der oberirdischen Infrastruktur
- AP1.6 Ermittlung des geomechanischen Verhaltens
- AP1.7 Geochemische Folgereaktionen von Speichergasen
- AP1.8 Geochemische Auswirkungen der Wärmespeicherung
- AP1.9 Mikrobiologische Parametrisierung

#### Modellentwicklung

- AP2.1 Gasspeicherung in Kavernenspeichern
- AP2.2 Gasspeicherung in Porenspeicher
- AP2.3 Auswirkungen und seismische Detektion von Leckagen
- AP2.4 Auswirkungen oberflächennaher Geothermie
- AP2.5 Schutz- und Vorranggebiete, Infrastruktur

Abbildung I.3-2: Struktur und inhaltliche Zuordnung der Arbeitspakete und Unterarbeitspakete im Verbundvorhaben ANGUS+.

Die Entwicklung numerischer Open-Source-Modelle mit spezieller Eignung für die Simulation gekoppelter thermischer, hydraulischer, mechanischer und chemischer Prozesse im Grundwasser und den umgebenden Gesteinsformationen ist Gegenstand des Teilbereichs „Modellentwicklung“ in AP 2. Dies umfasst im Einzelnen die Entwicklung von numerischen Werkzeugen für die Simulation von Gasspeichern in Kavernen (AP 2.1), von

Gasspeichern in porösen Formationen (AP 2.2), von Fluid-Leckagen in oberflächennahe Aquifere (AP 2.3) und von Auswirkungen der oberflächennahen Wärmespeicherung (AP 2.4). Die Entwicklung eines 3D-WebGIS mit Einbindung von Schutz- und Vorranggebieten sowie Infrastruktur ist Gegenstand von AP 2.5. Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen aus AP 1 können dabei neu implementierte Modellkomponenten validieren, und umgekehrt unterstützen numerische Simulationen das Design experimenteller Ansätze und die Prozess-Parametrisierung.

Die im Projekt entwickelten Simulationswerkzeuge werden in AP 3 „Szenarienanalyse“ mit den erarbeiteten Parametrisierungen zusammengeführt. Virtuelle synthetische Standorte werden vollständig und realistisch parametrisiert, der Speicherbetrieb soll aus der Betriebsführung real existierender Speicher oder aus Szenarien der zukünftigen Produktion erneuerbarer Energien abgeleitet werden. Die durch den Speicherbetrieb im Untergrund potenziell induzierten Prozesse werden hier analysiert mit Blick auf Gasspeicherung in Kavernen (AP 3.1), auf Gasspeicherung in porösen Medien (AP 3.2), auf die Ausbreitung von Fluidleckagen (AP 3.3) und auf Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund (AP 3.4). Schließlich sind die Auswirkungen des Speicherbetriebs auf Schutz- und Vorranggebiete Gegenstand des AP 3.5.

Die Entwicklung von Konzepten der unterirdischen Raumplanung in AP 4 wird gestützt durch die Dimensionierung verschiedener Speicheroptionen anhand ausgeführter virtueller Szenarien (AP 4.1) und die Analyse gekoppelter Nutzungsmöglichkeiten verschiedener Speicheroptionen (AP 4.2). Die technische Integration und Visualisierung der dabei benötigten und produzierten 3D-Raumdaten ist Gegenstand von AP 4.3. In AP 4.4 wird schließlich die Konzeption einer Methodik und Erstellung von zwei Kompendien für eine großskalige und holistische Raumplanung des Untergrundes mit verschiedenen Nutzungsszenarien unter Berücksichtigung der Belange einer bestehenden oberirdischen Raumplanung erarbeitet, um die Ergebnisse des Projektes auch für den verwaltungsrechtlichen Vollzug und allgemein die „Praxis“ verfügbar zu machen. Das erste Kompendium soll dabei die tiefen unterirdischen Speicheroptionen umfassen und deren potenzielle Umweltauswirkungen beschreiben, das zweite die oberflächennahe unterirdische Wärmespeicherung betrachten.

Im Projektverlauf haben sich gegenüber der ursprünglichen Planung durch unvorhergesehene personelle Änderungen und Schwierigkeiten bei der Rekrutierung qualifizierter neuer Mitarbeiter zu Projektbeginn Verzögerungen ergeben, die im weiteren Projektverlauf aufgeholt werden konnten. Dazu hat neben der Umorganisation einzelner Arbeiten insbesondere eine kostenneutrale Projektverlängerung bis Dezember 2016 beigetragen. Mit diesen Verzögerungen und der kostenneutralen Verlängerung waren Mittelverschiebungen verbunden, die intensiv im Verbund vorbereitet und anschließend den Anträgen gemäß vom Projektträger bewilligt wurden. Eine zweite kostenneutrale Projektverlängerung mit geringem finanziellen Umfang nur an der CAU Kiel bis Juni 2017 wurde beantragt, um die Fertigstellung der aufwändigen numerischen Simulationen und deren Auswertung als auch die Auswertung der Laborarbeiten zu ermöglichen. Gleichzeitig dient diese der Erstellung der geplanten Kompendien zur oberflächennahen Wärmespeicherung bzw. zur Energiespeicherung im tiefen Untergrund, deren druckreife Fertigstellung in der zweiten Jahreshälfte 2017 im Rahmen der Berichtspflicht der CAU Kiel erfolgen wird.

Insgesamt kann festgestellt werden, dass, abgesehen von den zeitlichen Verzögerungen, die zur Verfügung stehenden Projektmittel überwiegend wie geplant eingesetzt werden konnten und nur die Umwidmungen kleinerer Beträge im Projektverlauf notwendig wurde. Ebenso konnten die meisten der durchgeführten experimentellen Arbeiten und der Arbeiten zur Modellentwicklung und Szenarienanalyse erfolgreich abgeschlossen werden. Als Ausnahme dazu steht die Beschaffung einer Triaxialpresse, die aufgrund herstellerbedingter fehlerhafter Funktionalität nicht wie geplant in Betrieb genommen werden konnte und sich die Arbeiten daher auf Tests und Kalibrierung des Geräts zur Fehlerdiagnose und Fehlerbehebung beschränken mussten.

Im Projektverlauf wurden zwei zweitägige Retreats des Gesamtverbundprojekts nachträglich beantragte und durch den Projektträger bewilligt. Diese Treffen haben mit ihrem Format maßgeblich zur notwendigen Abstimmung und Integration der Projektarbeiten zwischen den Partnern beigetragen und darüber hinaus es ermöglicht, die große inhaltliche Breite des Verbundvorhabens zu diskutieren, auszubauen und entsprechende fachliche Verknüpfungen zu identifizieren und auszubauen. Dabei wurden sowohl in Bezug auf konkrete Arbeitspaket-Aktivitäten als auch in Bezug auf Arbeitspaket- und Arbeitsgruppen-übergreifende Querschnittsthemen jeweils erhebliche Fortschritte erzielt, die die inhaltliche Arbeit im Projekt erheblich unterstützte. Als Mittel zur Koordination solcher stark integrativen Verbundprojekte hat sich diese Form der Projekttreffen sehr bewährt.

Während der Laufzeit des Projektes wurden mehrere öffentliche Workshops zu Themen des Verbundvorhabens durchgeführt, auf denen die Thematik diskutiert und der Kenntnisstand ermittelt werden sollte. Eine vollständige Zusammenstellung findet sich in Kapitel I.5, hier sei nur auf das öffentliche Symposium zum Projektauftritt im Juli 2013, den Wärmewende-Workshop im Mai 2014, sowie die Workshops zur Ergebnisvorstellung und integrativen Diskussion der Erkenntnisse zur urbanen Wärmespeicherung im März 2017 und zur Raumplanung des Untergrundes im Mai 2017 verwiesen. Ein öffentliches Symposium wird für Ende 2017 geplant und zielt als integrierte Abschluss- und Auftaktveranstaltung auf die Vorstellung der Projektergebnisse aus ANGUS+ und der geplanten Arbeiten im Anschlussvorhaben ANGUS II ab.

Zur Verbreitung der Projektergebnisse und Erkenntnisse wurden neben einer Vielzahl von wissenschaftlichen Publikationen in Fachjournalen und in etwas breiter aufgestellten Verbandzeitungen auch ein Themenheft im Springer Journal „Environmental Earth Sciences“ mit dem Titel „Subsurface Energy Storage“ herausgegeben. In diesem Themenheft sind insgesamt 27 wissenschaftliche und peer-reviewte Fachartikel aus dem ANGUS+-Verbund sowie weitere eingeladene Beiträge, unter anderem einer zum Verbundprojekt H2STORE, gebündelt. Dadurch soll eine größere Aufmerksamkeit für das Thema der untertägigen Energiespeicherung und auch für die Erkenntnisse des Projektes erreicht werden.

Ein Förderantrag für das Nachfolgeprojekt „Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher - Integration unterirdischer Speichertechnologien in die Energiesystemtransformation am Beispiel des Modellgebietes Schleswig-Holstein“ (ANGUS II) wurde im September 2016 im Rahmen der Ausschreibung „Forschung für eine umweltschonende, zuverlässige und bezahlbare Energieversorgung“ beim BMWi eingereicht (Einreichung der Projektskizze im Februar 2016) und im November 2016 bewilligt. ANGUS II greift wesentliche Grundzüge des Projekts ANGUS+ im Sinne der Kombination von Parametrisierung, Modellentwicklung,

Szenarienanalyse und Entwicklung von Raumordnungskonzepten auf. Neue Schwerpunkte werden gesetzt auf der Prozesscharakterisierung in geringdurchlässigen Gesteinsschichten und auf der Integration von untertägigen Energiespeichern in den Betrieb von Kraftwerksanlagen und in das Energiesystem unter Berücksichtigung von potenziellen Ausbaupfaden innerhalb der nächsten Jahrzehnte.

#### **I.4. Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde**

Der geologische Untergrund wird zur Gewinnung von Roh- und Energiestoffen, zur Einlagerung von z. B. CO<sub>2</sub> und radioaktivem Material sowie zur Zwischenspeicherung von Erdgas, Druckluft oder von Energie in Form von Wärme und Kälte genutzt. Der intensive gesellschaftliche Diskurs macht jedoch deutlich, dass eine auf die technische Machbarkeit konzentrierte Vorgehensweise ohne eine unabhängige Begleitforschung zu den mit der Technologie potenziell verbundenen Umweltauswirkungen und Risiken keine ausreichende gesellschaftliche Akzeptanz erhält. Bei einer gleichzeitig zunehmenden Bedeutung der Nutzung des Untergrundes als geologisches Speichermedium im Rahmen der Energiewende ist die Bewertung großräumiger und nachhaltig induzierter Umweltauswirkungen durch Eingriffe in den Untergrund notwendig.

Einzelne dieser induzierten Auswirkungen, wie z. B. Salzwasseraufstieg (Grube 2000), induzierte Seismizität (Majer et al. 2007), Veränderung des Druckregimes (Birkholzer et al. 2009) und Schadstoffmobilisierung (Shao et al. 2009; O'Carroll & Sleep 2007) sind bereits im Vorwege untersucht worden. Zum Zeitpunkt der Antragstellung existierten nur wenige Studien zum Einfluss der Temperatur auf den Grundwasserleiter, die dann einschränkend Gleichgewichtsbedingungen voraussetzen (z. B. Arning et al. 2006), nur einzelne Prozesse betrachten (z. B. Brons et al. 1991; Griffioen und Appelo 1993), oder nur mikrobiologische Effekte (z. B. Brielmann et al. 2011). Kombinierte Untersuchungen dieser Effekte auf der für eine unterirdische Raumplanung erforderlichen Skala waren bisher nicht durchgeführt worden.

Die numerische Simulation von Szenarien zur Bewertung und Quantifizierung von Umweltauswirkungen einzelner Maßnahmen findet zunehmend Einzug in die Praxis. So konnten z. B. auch von den Antragstellern verfolgte Ansätze zur Simulation von Maßnahmen und Monitoringansätzen im Grundwasser bereits für die Bewertung, Validierung und Verbesserung von Erkundungs- und Monitoringmethoden genutzt werden (Schäfer et al. 2004; Bauer et al. 2006; Beyer et al. 2007; Rein et al. 2009). Der hierbei erfolgreich verwendete Ansatz des virtuellen synthetischen Standortes (Schäfer et al., 2002; Benisch et al. 2012; Bauer et al. 2012), der vollständig parametrisierbar ist und somit die Unsicherheiten und Datenlücken eines realen Einzelstandortes umgeht, kann direkt auf die geologische Speicherung übertragen werden.

In den zum Zeitpunkt der Antragstellung verfügbaren Leitfäden von Verbänden und Verwaltungen zur Fragestellung der Umweltauswirkungen der Untergrundnutzung werden mögliche Gefährdungen nur qualitativ beschrieben (z. B. Bayerisches Staatsministerium für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz und Bayerisches Staatsministerium für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie 2005; Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein 2006; Niedersächsisches Umweltministerium 2006; Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen 2004; Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg 2005). Quantitative Daten, die eine fundierte Bewertung in einem integralen Modellansatz für größere Raumskalen ermöglichen würden, existierten kaum

(Hähnlein et al. 2011). Die unzureichende wissenschaftliche Validierung von Planungsleitfäden betraf im Allgemeinen auch die Standorterkundung und das Wirkungsmonitoring. Unterschiedliche Nutzungsszenarien, damit einhergehende unterschiedliche Ansprüche an den Untergrund, die Variabilität des hydrogeologischen Regimes und die komplexen Prozesse und Wechselwirkungen in Grundwasserleitern (vgl. Arning et al. 2006) konnten bislang bei der Planung, der Installation und dem Betrieb geothermischer Speicher nicht ausreichend berücksichtigt und erfasst werden. Angepasste Monitoringstrategien zur Gewährleistung einer ökologisch und energetisch nachhaltigen Nutzung thermischer Speicher im oberflächennahen Untergrund fehlten. Spezielle Betrachtungen des innerstädtischen Untergrundes mit einerseits großem Nutzungs- und Konfliktpotenzial und andererseits hoher Grundwasservulnerabilität fehlte ebenso.

Verbunden mit der potenziell großen Skala der betrachteten Auswirkungen und Prozesse ist die Notwendigkeit der Parametrisierung der betrachteten geologischen Einheiten. Für einzelne geologische Bereiche bzw. in einzelnen Bundesländern existierten zum Zeitpunkt der Antragstellung Parametersätze zu entsprechenden Strukturen (siehe z. B. Baldschuhn et al. 1996; Hese und Liebsch-Dörschner 2010). Geomechanische und geochemische Eigenschaften sind in der Regel jedoch unbekannt oder nur lokal und somit nicht repräsentativ (Ebert 2011).

Salzgesteine sind durch ein sehr komplexes inelastisches Materialverhalten gekennzeichnet. Irreversible Deformationsanteile, geschwindigkeitsabhängiges Festigkeitsverhalten sowie Schädigungs- und Verheilungseffekte werden in den real auftretenden Belastungsbereichen beobachtet. Deutliche Fortschritte wurden bei der Entwicklung konstitutiver Beziehungen für die Vorhersage von Spannungs- und Deformationsfeldern im Bereich unterirdischer Bauwerke in Salzstöcken erzielt, insbesondere durch Forschung zu Fragestellungen in Verbindung mit der geologischen Einlagerung radioaktiver Abfälle (vgl. Hunsche und Hampel 1999). Im Bereich des Kavernenbaus und -betriebs ist zu Projektbeginn jedoch die Untersuchung von Schadensakkumulationen und Verheilungsprozessen im Salzgestein nicht üblich. Die Anwendung der bekannten Materialgleichungen für Salzgesteine auf realistische geotechnologische Probleme ist mit der Unsicherheit ihrer Übertragbarkeit von einfachen auf komplexe mechanische Zustände verbunden.

Die Intrusion gespeicherter Gase wie Methan (Beal et al. 2009; Deutzmann und Schink 2011) oder Luftsauerstoff in oberflächennahe Aquifere kann zur Reduktion oder Oxidation von Mineralphasen wie beispielsweise Eisen(III)-(hydro)oxiden oder Pyrit führen. Hierdurch kann unter anderem eine Freisetzung von Spurenelementen initiiert werden. Spurenelemente könnten jedoch auch in Form von Sulfiden wieder gebunden, und dem Grundwasser entzogen werden. Die Auswirkungen dieser Prozesse auf das Schutzgut Grundwasser wurden bis zum Zeitpunkt der Antragstellung nicht im Hinblick auf eine Speicherung der genannten Gase und damit unter Berücksichtigung im Leckagefall zu erwartender Gaspartialdrücke untersucht.

Obwohl die Temperatur eine Schlüsselgröße für geochemische und biologische Prozesse ist, wurden die ökologischen Aspekte der geothermischen Nutzung von Aquiferen bis zum Zeitpunkt der Antragstellung nicht systematisch bearbeitet (z. B. Brielmann et al. 2011). Die Auswirkungen der Temperaturänderung auf die natürliche Lebensgemeinschaft und die Geochemie der Wässer waren noch weitgehend unbekannt und beschränkten sich auf einfache geochemische Untersuchungen (z. B. Arning et al. 2006). Studien zeigten jedoch, dass Mikroorganismen aufgrund effektiver Anpassungsmechanismen auch in

Habitaten vorkommen, in denen physikalische und chemische Extreme wie hohe Temperaturen und/oder hohe Salinität herrschen (Rothschild und Mancinelli 2001; Rampelotto 2010).

Die Mobilität natürlicher vorkommender Spurenmetalle wie Schwermetalle oder Arsen in Aquiferen kann mittels verschiedener Sorptionsisothermen beschrieben werden. Wichtig bei der Bestimmung der Sorptionsisothermen ist nicht nur die Wahl des Sorbats (Spurenmetall), sondern auch die des Sorbenten (Aquifermaterial). Dzombak und Morel (1990) untersuchten das Sorptionsverhalten verschiedener Spurenmetalle auf Eisenhydroxiden und lieferten damit den zum Zeitpunkt der Antragstellung einzigen im Modellprogramm PHREEQC verfügbaren Datensatz zur Berechnung einer Spurenmetallsorption an Partikeloberflächen. Nur wenige grundlegende Untersuchungen existierten bislang zur Abhängigkeit der Sorptionsprozesse von erhöhten oder veränderlichen Temperaturen (z. B. El-Batouti et al. 2003; Angove et al. 1998, Johnson et al. 1990). Ebenso wurde das Ausbreitungsverhalten unter variablen Drücken bislang nicht untersucht und Transferfunktionen zur Skalierung der vorhandenen Beobachtungen auf andere Temperatur- und Druckbereiche existierten zum Zeitpunkt der Antragstellung nicht.

Bei einer Erwärmung des Untergrundes spielt langfristig insbesondere die hohe Temperatursensibilität der mikrobiologischen Gemeinschaften eine Rolle für die geochemische Zusammensetzung des Grundwassers. Mikroorganismen steuern nicht nur den Abbau redox-sensitiver Grundwasserinhaltsstoffe wie Nitrat und Sulfat, sondern spielen eine ebenso maßgebliche Rolle in der natürlichen Schadstoffminderung (NA, „Natural Attenuation“) organischer Schadstoffe wie BTEX oder LCKW in Grundwasserleitern (Hori et al. 2009, Deeb und Alvarez-Cohen 1999, Fletcher et al. 2011, Friis et al. 2007). Unklar war zum Zeitpunkt der Antragstellung, ob sich in einem Grundwasserleiter Organismen entwickeln oder ansiedeln können, die auch bei Temperaturen >35-40°C (thermophil) effektiv Abbau betreiben können.

Ob und inwieweit die Leckage des Wärmeträgers in das Grundwasser durch defekte Geothermiesonden bei funktionierenden Warnsystemen in der haustechnischen Anlage eine signifikante Gefährdung, z. B. für Trinkwassergewinnungsanlagen darstellt, wurde quantitativ anhand von Szenarienanalysen bisher kaum bearbeitet. Erste Studien untersuchten das Abbauverhalten z. B. von Glykol im Untergrund (z. B. Klotzbücher et al. 2007), wobei auch hier über den Einfluss der z. B. im Wärmeträger enthaltenen Additive wenig bekannt war (Klotzbücher et al. 2007). Für eine realistische Risikoabschätzung sind derartige Untersuchungen notwendig.

Aus der Altlastensanierung sind einige Verfahren bekannt, in denen eine Temperaturerhöhung im kontaminierten Sediment bewusst herbeigeführt wird, um den Schadstoff kontrolliert zu mobilisieren und/oder abzubauen (z. B. Pollard et al. 1994; Koschitzky et al. 2000). Andererseits gilt z. B. das Vorhandensein von Altlasten als wichtiges Ausschlusskriterium für die oberflächennahe Wärmespeicherung im Untergrund. Jesušek et al. (2013) zeigen jedoch, dass der gezielte Einsatz von Temperatur über die bisher bekannten Technologien hinaus die Altlastensanierung fördern kann. Zum Zeitpunkt der Antragstellung fehlten systematische Standortuntersuchungen dazu, wie die oberflächennahe Wärmespeicherung als Sanierungsmethode gezielt eingesetzt werden könnte, um die Limitierung im Hinblick auf kontaminierte unterirdische Räume zu überwinden.

Zur Prognose etwaiger Umweltauswirkungen wie auch zur gesamtwirtschaftlichen Auslegung von geologischen Speicherräumen mit gegebenenfalls unterschiedlicher oder sogar

multipler Nutzung sind prozess-orientierte numerische Simulationsprogramme notwendig. Dabei müssen diese Programme die ablaufenden Prozesse und ihre Wechselwirkungen darstellen können. Geotechnische Anwendungen können mit einer Reihe etablierter kommerzieller Programmsysteme simuliert werden, z. B. ECLIPSE (Schlumberger 2010), STARS (CMG 2010), FLAC3D (Itaska 2011), FEFLOW (FEFLOW 2011), SHEMAT (Clauuser et al. 2003), MT3DMS (Zheng 2010). Alle genannten Codes können jedoch nur ein Teil des notwendigen Prozessspektrums abdecken. Benötigt werden daher Simulationsprogramme, die hydraulische, mechanische, thermische und chemische Prozesse für den gesamten Auswirkungsraum eines geologischen Energiespeichers gekoppelt darstellen können, wie TOUGH (Pruess 2004) HYTEC (van der Lee et al. 2002) oder das im Projekt ANGUS+ verwendete und weiterentwickelte Open-Source-Simulationsprogramm Open-GeoSys (Kolditz und Bauer 2004; Wang und Kolditz 2007). Mit der Simulation gekoppelter Prozesse sind hohe Rechenzeiten verbunden. Anstrengungen zur Parallelisierung werden unternommen (Wang et al. 2009; Zhang et al. 2008), die oben genannten Anwendungen konnten jedoch zum Zeitpunkt der Antragstellung nicht den gesamten absehbaren Auswirkungsraum einer geologischen Speicherung darstellen.

Bisher nur unzureichend bzw. nicht untersucht ist der Temperatureinfluss auf die kinetischen Reaktionskonstanten im Hinblick auf einen neuen stationären Zustand zwischen Gas-, Wasser und Gesteinsphase. Die Charakterisierung und anschließende Implementierung entsprechender Prozesse in numerischen Simulationswerkzeugen steht aus.

Aufgrund des Fehlens quantitativer Auswirkungsanalysen werden in bestehenden Leitfäden und Regelwerken die üblichen Monitoringansätze für Grundwasser angeführt, die im Wesentlichen auf dem Einsatz von Grundwassermessstellen beruhen. Wie bereits aus der Altlastensanierung bekannt, sind Grundwassermessstellen aufgrund ihrer eingeschränkten räumlichen Aussagekraft nur bedingt geeignet, eine hinreichende Erkundung bzw. ein hinreichendes Monitoring zu gewährleisten (Schäfer et al. 2004; Bauer et al. 2006; Beyer et al. 2007; Bauer et al. 2012). Dies gilt umso mehr für die durch Wärmezugabe induzierten hydrochemischen und mikrobiellen Prozesse in den stofflich heterogen zusammengesetzten Grundwasserleitern. Analog zu den Ergebnissen in der Altlastenforschung sind deshalb Erkundungs- und Monitoringkonzepte zu entwickeln, die integrale und punktgestützte Messmethoden kombinieren, um eine hinreichende Aussagegenauigkeit für Hauptparameter zu erhalten (vgl. Schmelzbach et al. 2011).

Die Aufgaben der Geophysik im Bereich der Gasspeicherung liegen vor allem in der Entwicklung von Technologien zur Erkundung des Untergrundes für mögliche Speicher, sowie in der Kartierung und Überwachung der Migration von Plumes und möglichen Leckagen in die darüber liegenden Formationen, insbesondere Grundwasserleiter. Zahlreiche Studien zur Speicherung von Gas, insbesondere CO<sub>2</sub>, verwenden seismische Verfahren zur Kartierung und Überwachung (z. B. Mathieson et al. 2010; Bergmann et al. 2011; Chadwick et al. 2010) in Kombination mit Bohrloch-ERT (Electric Resistivity Tomography) mit fest installierten Elektroden für eine quasi-kontinuierliche Überwachung von Plumes (Carrigan et al. 2009; al Hagrey 2011; 2012) sowie Controlled-Source Electromagnetic (CSEM) (Streich et al. 2010; 2011a; 2011b). Aeroelektromagnetik könnte ebenfalls ein vielversprechendes Verfahren zur Untersuchung von großflächigen Salzintrusionen (Steuer et al. 2009; Auken et al. 2009; Smith et al. 2011) sein. Um kleinskalige Leckagestrukturen in der Umgebung einer Kaverne oder eines Porenspeichers abbilden zu können, bedarf es eines hochauflösenden geophysikalischen Verfahrens. Die Wellen-

forminversion (FWI) ist ein seismisches Abbildungsverfahren, bei dem ausgehend von einem langwelligen Hintergrundmodell die Verteilung der Materialparameter im Untergrund gewonnen werden kann. Synthetische Studien zur Detektion von natürlichen Gaslagerstätten in komplexen Verwerfungszonen, geologischen Falten und Salzstrukturen wurden von Sirgue (2003), Shin und Cha (2008), Shin und Ha (2008) für akustische Medien, sowie von Choi et al. (2008a; 2008b), Brossier (2009), Köhn (2011) und Köhn et al. (2010; 2012) für elastische Medien durchgeführt. Diese Studien demonstrieren die hohe räumliche Auflösung der Materialparameter. Synthetische Studien zur räumlichen und zeitlichen Auflösung von Leakage-Strukturen beschränkten sich bis zum Zeitpunkt der Antragstellung auf einfache geologische Reservoirmodelle (Hogan et al. 2008) sowie laufzeitbasierte Tomographieansätze in Crosswell-Geometrien (Spetzler et al. 2008). Hauptanwendungsgebiet der Wellenformtomographie sind natürliche Gasreservoirs, welche in ein einfaches geologisches Hintergrundmedium eingebettet sind. Eine hochauflösende Abbildung der komplexen dreidimensionalen Struktur sowie von Leakage-Pfaden eines realen Gasreservoirs gelang erstmals durch Sirgue et al. (2008; 2010) mit Hilfe einer akustischen FWI. Der Schlüssel zu einer effizienten Anwendung der FWI sind schnelle Vorwärtsalgorithmen zur Berechnung des seismischen Wellenfeldes. Neben einfachen Finite-Differenzen Ansätzen mit variablen Gittern (Jastram 1992; Jastram und Behle 1991; Jastram und Tessmer 1994; Falk 1998; Hayashi et al. 2001; Kang und Baag 2004) ist in den Jahren vor der Antragstellung die Entwicklung von Finite-Elemente Methoden basierend auf dem diskontinuierlichen Galerkinverfahren (Dumbser und Käser 2006; 2007; Käser und Dumbser 2006; Käser et al. 2007) forciert worden. Diese versprechen eine höhere Genauigkeit bei der Modellierung von komplexen geologischen Modellen bei gleichzeitiger Reduktion der Rechenzeit (Brossier et al. 2008; Brossier 2009; Etienne et al. 2010).

Leistungsfähige netzbasierte Server-GIS-Systeme gestatten zentrale Geodatenhaltung und -speicherung bei gleichzeitig dezentralen Zugriffs-, Editier- und Analysemöglichkeiten, insbesondere für Datensätze mit einer Vielzahl unterschiedlicher thematischer und geometrischer Eigenschaften. Beispiele für die Anwendung von Geodatenstrukturen in komplexen Datennetzen beschreiben Nolde et al. (2010). Mit dem Ziel, die Datenkonformität, die Interoperabilität und die Austauschbarkeit von Daten ebenso zu gewährleisten wie einen effektiven Zugriff auf verfügbare Daten, wurden auf europäischer und nationaler Ebene die Grundlagen für OGC- bzw. ISO-konforme Geodateninfrastrukturen erarbeitet und Metadatenbanken geschaffen (Ehlers 2006; Nolde 2010). Diese Standards bilden die Grundlage für die Entwicklung einer Geodaten-Server-Anwendung, die eine strukturierte Sach- und Metadatenhaltung ermöglicht und eine Bereitstellung räumlicher Daten sowie deren (karto-)graphische Visualisierung über die entsprechenden Netzdienste gewährleistet. Die methodische Kernkomponente eines solchen Informationssystems können Verfahren der Entscheidungsunterstützung bilden, wie des „multiattributive decision making“ und des „multiobjective decision making“. Derartige Methoden finden insbesondere bei der Lösung komplexer räumlicher Entscheidungsprobleme Anwendung, bei denen gleichzeitig mehrere Zielvorgaben innerhalb eines Planungsraumes zu berücksichtigen und gegeneinander abzuwägen sind (z. B. Herzig 2005; Klug 2002; 2007). Vergleichbar mit den u. a. von Mosimann et al. (2001) und Lütz et al. (2007) beschriebenen methodischen Ansätzen zur Entwicklung multifunktionaler räumlicher Leitbilder lassen sich schließlich Nutzungseignungen, -konkurrenzen und -unverträglichkeiten mittels semi-quantitativer

Verfahren der ökologischen Risikoanalyse und Raumbewertung auf Basis von Entscheidungsmatrizen räumlich differenziert ausweisen.

## **I.5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen**

### *Koordination*

Der ANGUS+ Forschungsverbund hat, vertreten in erster Linie durch die Projektleitung und wissenschaftliche Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter eine Vielzahl an öffentlichen Veranstaltungen ausgerichtet, um Kontakte zu Anwendern, Planern und zu Entscheidungsträgern sowie zu anderen Forschungsverbänden zu gewinnen und um Konzepte und Methoden des Projekts allgemein bekannt zu machen und kritisch zu diskutieren. Insbesondere im Bereich der Konzeptentwicklung für die unterirdische Raumplanung und bei der Methodenentwicklung war diese Abstimmung hilfreich, um auf die Anwendbarkeit der Methoden und Konzepte sowie weiteren Forschungsbedarf hin zu prüfen, sowie politische, wirtschaftliche, rechtliche und wissenschaftliche Rahmenbedingungen aufzuzeigen und zu diskutieren. Ebenso wurden auch wissenschaftlich-technische Fragestellungen z. B. der Modellentwicklung oder der Szenariendefinition im Kontext externer Forschungsaktivitäten mit externen Partnern diskutiert. Die aus dem ANGUS+ Verbund heraus organisierten oder mitorganisierten Tagungen sind im Folgenden zusammengestellt:

- Öffentliches ANGUS+ Kickoff-Meeting: Unterirdische geologische Energiespeicher und Raumplanung des Untergrunds – das Projekt ANGUS+ (eine Veranstaltung des Projekts ANGUS+), 17.-18.07.2013 in Kiel
- OpenGeoSys Community Meeting: Simulation of Subsurface Use (eine Veranstaltung des Projekts ANGUS+), 18.-20.11.2013 in Kiel
- Workshop: Energiewende nicht ohne Wärmewende - Rechtliche Randbedingungen, volkswirtschaftliche Konzepte und technologische Ansätze zur Überschussstromnutzung und Wärmespeicherung (Eine Veranstaltung in Kooperation zwischen ANGUS+/CAU und ergoTOP – I.A.U. GmbH, 26.05.2014 in Kiel)
- Jahrestagung der Deutschen Akademie für Landeskunde e.V: Energielandschaften Schleswig-Holsteins (eine Veranstaltung der Deutschen Akademie für Landeskunde e.V. mit Unterstützung durch ANGUS+/CAU), 24.10.2014 in Kiel
- Fachgespräch: Unterirdische Wärmespeicherung im Spannungsfeld Grundwasserschutz – Grundwassernutzung (Eine Veranstaltung in Kooperation der CON-SULAQUA Hamburg und ANGUS+/CAU), 01.03.2017 in Hamburg
- Workshop: Auswirkung von oberflächennaher Geothermie und Wärmespeicherung auf den Untergrund (Eine Veranstaltung des Landesforschungszentrums Geothermie, der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel / ANGUS+, der Hochschule Merseburg und des Karlsruher Institut für Technologie), 20.-21.03.2017 in Karlsruhe
- 80. Tagung der Arbeitsgemeinschaft Norddeutscher Gologen (Eine Veranstaltung des Geologischen Dienstes am Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holstein in Kooperation mit dem GEOMAR Helmholtz-Zentrum für Ozeanforschung Kiel und der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel / ANGUS), 06.-09.06.2017 in Rendsburg
- Workshop: Konzepte und Methoden für eine quantitative Raumplanung des Untergrundes (Eine Veranstaltung des ANGUS Projekts), 18.05.2017 in Kiel

Neben der Ausrichtung von öffentlichen Veranstaltungen für und mit Anwendern und Entscheidungsträgern wurde auch durch die (Co-)Organisation von Sessions zur Nutzung des unterirdischen Raumes, insbesondere auf großen geowissenschaftlichen Fachkonferenzen, eine Möglichkeit zum intensiven Austausch und zur Verbreitung der Ergebnisse des ANGUS+ Projektes geschaffen. Mit der thematischen Ausrichtung von Fachsessions kann versucht werden, Forschungsthemen gezielter in den Fokus zu rücken, aber auch Ansätze der experimentellen Analyse und der Modellentwicklung können so aus unterschiedlichen inhaltlichen Perspektiven diskutiert werden.

- Jahrestagung der Fachsektion Hydrogeologie der Deutschen Geologischen Gesellschaft 2014 "Grundwasser trifft Boden und Energie", 28.-31.05.2014 in Bayreuth; Session „Wärme-, Energie- und Kohlenstoffspeicherung im Untergrund“ (Prof. Dr. Sebastian Bauer, Prof. Dr. Andreas Dahmke (beide CAU) als Session Convener)
- Jahrestagung 2015 der European Geosciences Union (EGU), 12.-17.04.2015 in Wien (AT)
  - Session: "Development of strategies towards a sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface" (Dr. Thomas Vienken als Session Convener, Prof. Dr. Peter Dietrich (beide UFZ) als Co-Convener)
- UFZ Energy Days 2016, 22.-23.03.2016 in Leipzig; Session "Exploitation of subsurface resources for thermal and substantial energy storage within the context of the transformation of the energy system" (Prof. Dr. Sebastian Bauer (CAU) und Prof. Dr. Olaf Kolditz (UFZ) als Session-Convener).
- Jahrestagung 2016 der European Geosciences Union (EGU), 17.-22.04.2016 in Wien (AT)
  - Session: "Process quantification and modelling in subsurface utilization" (Prof. Dr. Sebastian Bauer (CAU) als Co-Convener)
  - Session: "Development of strategies towards a sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface" (Dr. Thomas Vienken als Session Convener, Prof. Dr. Peter Dietrich (beide UFZ) als Co-Convener)
- Jahrestagung 2017 der European Geosciences Union (EGU), 08.-13.04.2017 in Wien (AT)
  - Session: "Process quantification and modelling in subsurface utilization" (Prof. Dr. Sebastian Bauer (CAU) als Co-Convener)
- UFZ Energy Days 2017, 15.-16.0.2017 in Leipzig, Session " Experimental and numerical analysis of subsurface energy system managed for storage operations" (Eine Veranstaltung unter Mitwirkung des ANGUS Projekts / UFZ Leipzig)

Innerhalb des Verbundes wurden die ANGUS+ Projektaktivitäten auf internen Workshops abgestimmt, geplant und koordiniert. Externe Teilnehmer wurden z. T. für inhaltliche, methodische und perspektivenbezogene Abstimmungen zusätzlich eingeladen:

- 1. ANGUS+ Gesamtverbundtreffen, 19.-20.06.2013 in Kiel
- 2. ANGUS+ Gesamtverbundtreffen, 01.-03.09.2014 in Lübeck-Travemünde
- 3. ANGUS+ Gesamtverbundtreffen, 07.-09.09.2015 in Asendorf
- ANGUS+ Koordinationstreffen, 27.02.2014 in Kiel

In Zusammenarbeit mit der Redaktion der Fachzeitschrift „Environmental Earth Sciences“ wurde im Berichtszeitraum durch die ANGUS+ Projektkoordination die Veröffentlichung einer Topical Collection der Fachzeitschrift Environmental Earth Sciences zum Thema „Subsurface Energy Storage“ koordiniert (ISSN: 1866-6299). Als Gast-Editoren zeichnen für das Themenheft Prof. Dr. Sebastian Bauer, Prof. Dr. Andreas Dahmke und Prof. Dr. Olaf Kolditz verantwortlich. Neben 23 Veröffentlichungen aus dem gesamten Forschungsspektrum des Projekts ANGUS+ ist auch das geologisch ausgerichtete Verbundprojekt H2STORE der Forschungsinitiative Energiespeicher mit einem eingeladenen Beitrag vertreten. Durch die Sammlung wesentlicher Projektergebnisse in einem Themenheft kann ein höherer Bekanntheitsgrad für die Ergebnisse erzielt sowie die inhaltliche Breite des Projekts dargestellt werden.

Prof. Dr. Andreas Dahmke (CAU) ist als Koordinator des Projekts ANGUS+ Mitglied im acatech-Arbeitskreis „Oberflächennahe Wärmespeicherung und Geothermie zur Wärmeversorgung in Ballungszentren“, der bereitet eine nationale Initiative zur regenerativen Wärmeversorgung insbesondere von Ballungszentren vorbereitet. Prof. Dr. Andreas Dahmke agiert weiterhin als Mitglied des 2014 durch das Energiewendeministerium Schleswig-Holstein gegründeten, unabhängigen Beirates für Energiewende und Klimaschutz (Energiewendebeirat) mit Vertretern aus Naturschutz, Wirtschaft, Forschung und Politik aus Schleswig-Holstein.

Für einen Abgleich der Methoden zur unterirdischen Raumplanung wurde darüber hinaus regelmäßiger Kontakt zur Staatskanzlei und zum Wirtschaftsministerium des Landes Schleswig-Holstein gehalten, da dort Ergebnisse des Projektes zur Raumbeanspruchung untertägiger Energiespeicher sowie den geologischen Voraussetzungen in die Landesplanung eingepflegt werden sollen.

Austausch bestand ebenso regelmäßig mit den geowissenschaftlichen Partnerprojekten InSpEE und H2STORE, um sich über Projektinhalte und Ansätze auszutauschen und abzustimmen. Dies wurde zumeist im Rahmen von gemeinsam besuchten Veranstaltungen erreicht, es gab auch einen gemeinsamen Austauschtag unter Teilnahme des UFZ bei der BGR und der KBB in Hannover, der ganz diesem Zweck gewidmet war.

Wissenschaftlicher Austausch fand insbesondere auch mit einem vom Umweltbundesamt geförderten Projekt zur unterirdischen Raumplanung statt. Vertreten durch Prof. Dr. Andreas Dahmke, Prof. Dr. Sebastian Bauer und Dr. Frank Dethlefsen wurde das ANGUS+ Projekt dort in den wissenschaftlichen Beirat eingebunden und zu den Workshops und Projekttreffen eingeladen. Hierbei konnten die konkreten Ergebnisse des ANGUS+-Projektes diskutiert und in das UBA Projekt eingebracht werden. In Kooperation mit der Staatskanzlei SH und dem ANGUS+ Projekt fand auch einer der Regionalworkshops in Kiel statt.

Inhaltlicher Austausch fand auch mit dem CO2BRIM-Projekt statt, welches sich mit der Untersuchung von Salzwasseraufstiegen im Zuge einer CO<sub>2</sub>-Verpressung befasste. Hierbei wurde an Workshops teilgenommen und dort die Nutzung des Untergrundes diskutiert und wesentlicher Input bezüglich Soleverdrängung sowie numerischen Modellansätzen gegeben bzw. erhalten.

Ebenso wurde das ANGUS+-Projekt auf den unten genannten Vernetzungs- und Statusseminaren der Förderinitiative Energiespeicher präsentiert. Innerhalb der Energiespeicherinitiative wurde die Kontaktpflege der drei geowissenschaftlichen Verbände

ANGUS+, InSpEE und H2STORE durch Prof. Dr. Sebastian Bauer übernommen. Im Zuge dieser Koordination der Projektaktivitäten gab es Informationsgespräche auf bilateraler Basis, Vertreter der genannten Verbände haben in eingeladenen Beiträgen auf ANGUS+ Veranstaltungen und im Environmental Earth Sciences Themenheft „Subsurface Energy Storage“ ihre Arbeiten präsentiert.

- Vernetzungstreffen der Leuchtturmprojekte der "Energiespeicher" Forschungsinitiative der Bundesregierung, 21.-22.01.2013 in Bonn
- Statusseminar der "Energiespeicher" Forschungsinitiative der Bundesregierung, 22.-23.04.2015 in Berlin

Daneben wurde insbesondere durch die Koordinatoren Prof. Dr. Sebastian Bauer und Prof. Dr. Andreas Dahmke eine Vielzahl von hier nicht einzeln aufgeführten Vorträgen auf diversen regionalen, nationalen und internationalen Veranstaltungen gehalten, um das Projekt bekannt zu machen und entsprechende wissenschaftliche Kontakte zu knüpfen.

#### *Christian-Albrechts-Universität zu Kiel (CAU)*

Als modellzentrierte Arbeitsgruppe hat die AG Geohydrummodellierung unter Leitung von Prof. Dr. Sebastian Bauer innerhalb des ANGUS+ Verbundes eng mit der AG Kolditz im Rahmen der Modellentwicklung kooperiert, da als gemeinsame Grundlage der wissenschaftliche Open-Source-Code OpenGeoSys ([www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org)) gemeinsam genutzt und für die jeweiligen Projektaufgaben weiterentwickelt wurde. Dabei wird die langfristige Sicherung und Verwahrung des Codes über öffentlich zugängliche so genannte repositories und Open-Source-Internetseiten gemeinsam betrieben, um die Software langfristig zu sichern und die Erkenntnisse und entwickelten Methoden verfügbar zu halten.

Zur Erstellung, dem Aufbau und der Parametrisierung der synthetischen Speichermodelle wurden Geodaten zu Schichtaufbau und Formationscharakteristiken vom Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume des Landes Schleswig-Holstein (LLUR-SH) bezogen und verwendet. Dieser Kontakt besteht bereits seit Vorgängerprojekten und wird sich auch in Zukunft als wesentlich für die Datenbereitstellung erweisen.

Ein wesentlicher Anteil der Arbeiten zur Parametrisierung der Energie-Infrastruktur zur Einbindung in das im Projekt ANGUS+ entwickelte web-basierte 3D-Rauminformationssystem (RIS) war zunächst mit erheblicher Datenakquise verbunden. Die im Folgenden genannten Behörden und Firmen haben Daten zur Verwendung im Sinne des ANGUS+ Forschungsverbundes zur Verfügung gestellt:

- Landesamt für Vermessung und Geoinformation Schleswig-Holstein: Geobasisdaten für das Land Schleswig-Holstein (ATKIS, Gebäudeumringe, 3D-Gebäudemodell)
- Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holstein: Geodaten zu Windkraft- und Biogasanlagen, Grundwasserkörper und geologisches 3D-Strukturmodell für Schleswig-Holstein
- Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie (BSH): Geodaten zu offshore Windparks und Stromleitungen
- Tennet TSO GmbH: Geodaten zum Stromnetzausbau (Westküstenleitung)

- E.ON Hanse: Bereitstellung von Stromnetzplänen Mittelspannung
- HanseWerk AG: Bereitstellung von Geodaten zu Hochdruck-Gasleitungen

Die Modellierung von Wärmespeicherbedarf und -potenzial konnte in Kooperation mit Prof. Dr. Constantin Kinias (FH Kiel) für Gebäude in den Landkreisen Nordfriesland und Heide vorangetrieben werden, die Firma ergoTOP trug insbesondere mit der Modellierung von Gebäudespeichern für Wärme bei. Die Integration energiebezogener unterirdischer Nutzungsoptionen in die Raumplanung wurde im Projektverlauf eng mit der Staatskanzlei Schleswig-Holstein abgestimmt.

Die Entwicklung, Erprobung und Verifikation verschiedener Randbedingungen und Modellparameter für Software zur Vorwärtsmodellierung, Inversion und Interpretation geoelektrischer und elektromagnetischer Daten wurde mit verschiedenen externen Kooperationspartnern koordiniert. Ein aktiver Austausch von Informationen und Erfahrungen bezüglich methodischer Entwicklungen und verschiedener (konventioneller und unkonventioneller) Anwendungsbereiche fand insbesondere statt mit Esben Auken (Department of Geoscience - Geology, Aarhus University, Dänemark), Meng Heng Loke (Geotomo Software, Malaysia), Manika Prasad (Colorado School of Mines, Golden, USA), Johannes Michaelsen (ConsulAqua, Hamburg) und Sherif Hanafy (King Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Saudi Arabien).

Wichtige externe Partner bei der Entwicklung der seismischen "Full-Waveform-Inversion" (FWI) Methodik waren im Besonderen Denise De Nil (Asse GmbH) in Bezug auf die Weiterentwicklung der seismischen Modellierungs/FWI-Codes sowie eines mikroseismischen Monitoringkonzeptes, Olaf Hellwig (TU Bergakademie Freiberg) mit einer Performance Optimierung der seismischen Modellierungs-Codes, sowie André Kurzmann, Anna Przebindowska und Thomas Bohlen (Karlsruhe Institut für Technologie) mit Untersuchungen des Einflusses von visko-akustischen Effekten auf die Ergebnisse einer akustischen FWI.

Daniel Wehner (Norwegian University of Science and Technology) kooperierte mit dem Projekt ANGUS+ im Zusammenhang mit der Entwicklung einer Joint-Inversion von gravimetrischen Daten und seismischer Wellenformen.

Die Anwendung und Überprüfung der im Projekt ANGUS+ entwickelten FWI-Methodik wurde in Kooperation mit Eva Dokter (The University of Edinburgh) bei der Anwendung einer SH-FWI auf einen oberflächennahen Felddatensatz und mit Moritz Fehr (Ruhr-Universität Bochum) und Michael Auras (Institut für Steinkonservierung e.V., Mainz) auf einen Rayleighwellendatensatz umgesetzt.

Das Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holstein hat ein detaillierte geologische Strukturdaten und die Parameter für den Standort Ellerbeker Rinne zur Verfügung gestellt. Auf Grundlage dieser Datenbasis wurde der virtuelle Standort zur numerischen Simulation von Gasaufstiegen im Projekt ANGUS+ parametrisiert.

Für die Durchführung von Laborversuchen mit natürlichem Aquifersediment sowie auch für die Charakterisierung oberflächennaher Aquifersedimente insbesondere hinsichtlich geochemischer Parameter war die Beschaffung entsprechender Sedimentproben in Form von Bohrkernen erforderlich. In ANGUS+ war für den Zweck der Sedimentgewinnung insgesamt ein Betrag von 22.000€ vorgesehen, der, aufgrund von Kosteneinsparungen, für die Finanzierung von Probenahmen vornehmlich aus Teufen von nur bis zu 10 m

unter Geländeoberkante vorgesehen war. Im Projektverlauf ergab sich die Gelegenheit einer Kooperation mit dem Landesbetrieb für Küstenschutz, Nationalpark und Meeresschutz Schleswig-Holstein (LKN SH): An dem Standort Bönebüttel bei Neumünster erfolgten Bohrungen durch das LKN SH zur Errichtung von Grundwassermessstellen, und durch eine Kofinanzierung seitens des ANGUS+ Projektes war es möglich, zusätzlich dort auch eine Sedimentkernentnahme für die Teufenbereiche 4-12 m sowie 67-77 m unter Geländeoberkante zu ermöglichen. Sogar kostenfrei war die Bereitstellung von mehr als 50 Sedimentkernen von Teufen von bis zu 125 m unter Geländeoberkante durch die Wasserversorgungsunternehmen Wasserverband Süderdithmarschen, Wasserverband Norderdithmarschen und Wasserzweckverband Wasserwerk Kuden. Der Kontakt zu den Unternehmen und die Befürwortung der Probenüberlassung an die Universität Kiel erfolgten durch das Ingenieurbüro GeoSystem (Kiel), welches die Bauleitung der Bohrungen ausführte. Damit war eine Probenbeschaffung, dessen Kosten wohl ansonsten hunderttausend Euro deutlich überschritten hätte und damit im Projekt nicht finanzierbar gewesen wäre, möglich geworden.

Die Definition repräsentativer Grundwasserzusammensetzungen Schleswig-Holsteins erforderte eine fundierte Kenntnis hydrochemischer Parameterwerteverteilungen. Hydrochemische Analysen oberflächennaher Grundwässer werden seit Jahrzehnten vom Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holsteins (LLUR SH) auf Basis von Grundwassermessnetzen durchgeführt und in Form einer Datenbank verwaltet. Diese Datenbank wurde dem ANGUS+ Vorhaben vollständig und kostenfrei für wissenschaftliche Zwecke durch das LLUR SH zur Verfügung gestellt.

Im Rahmen des Forschungsvorhabens CO<sub>2</sub>-MoPa stellten Unternehmen der Kohlenwasserstoffindustrie (EnBW Energie Baden-Württemberg AG, E.ON Energie AG, E.ON Gas Storage AG, RWE Dea AG, Vattenfall Europe Technology Research GmbH, Wintershall Holding GmbH) der Universität Kiel Datensätze zur Gesteinspermeabilität, der mineralogischen und geochemischen Zusammensetzung der Gesteine sowie von Fluidzusammensetzungen des tiefen Untergrundes (Nord-)Deutschlands kostenfrei zur Verfügung. Diese Unternehmen wurden durch den Wirtschaftsverband Erdöl-Erdgas (WEG) vertreten, und die Vermittlung zwischen WEG und der Universität Kiel erfolgte durch das Landesamt für Bergbau, Energie und Geologie Niedersachsens (LBEG). Im Rahmen des Forschungsvorhabens ANGUS+ wurde die Nutzungsgestattung der Daten durch die Dateneigentümer, bzw. durch den WEG kostenfrei verlängert.

#### *Helmholtz Zentrum für Umweltforschung UFZ GmbH (UFZ)*

Für die Diskussion relevanter Prozesse der Thermodynamik und Geomechanik beim Betrieb von Salzkavernen unterhielten die Verbundpartner des Vorhabens ANGUS+ regelmäßige Kontakte zum ebenfalls im Rahmen der Speicherinitiative von BMBF, BMWi und BMU geförderten Verbundprojekt InSpEE (Informationssystem Salzstrukturen). Als sehr hilfreich erwiesen sich in diesem Zusammenhang Konsultationen mit Mitarbeitern der Firma KBB Underground Technologies in Hannover. So wurden beispielsweise gemeinsam thermodynamische und hydraulische Prozessbedingungen beim Betrieb von Salzkavernen zur Gasspeicherung diskutiert, um die Notwendigkeit der numerischen Betrachtung echt gekoppelter Prozesse zu erörtern. Auf zwei gemeinsamen Workshops im Mai 2013 in Hannover und im November 2014 in Leipzig wurden auch technische und prozessabhängige Verständnisfragen geklärt sowie Geometrie, Betriebs- und Rahmenbe-

dingungen für die Definition einer realitätsnahen Modellkaverne festgelegt. Der Kavernenworkshop 2014 wurde ebenfalls dazu genutzt, erste Überlegungen zur Definition von Standard-Szenarien für die Kavernensimulation mit dem Ziel deren späterer Einbindung in Szenarien zur systemischen Untergrundnutzung anzustellen.

Aufbauend auf bestehenden Kontakten und früheren gemeinsamen Projekten arbeitete der Partner UFZ des Verbundes ANGUS+ bei der Konzipierung und Kalibrierung konstitutiver Modellbestandteile zur Beschreibung des Verhaltens von Salzgestein eng mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) zusammen. Weiterer, aktueller Forschungsbedarf im Bereich der Salzmechanik wurde zu einem vom UFZ organisierten Rundgespräch mit Experten verschiedener Fachbereiche (Kontinuumsmechanik, Geophysik, Anwendung) im Oktober 2013 in Leipzig diskutiert. Dabei wurden insbesondere Fragen zur Modellierung der Bildung und Entwicklung von Diskontinuitäten (z. B. Mikroschädigungen, Risse) in Geomaterialien als weitgehend unerforscht identifiziert. Basierend auf diesem Treffen konnten durch das UFZ neue Kontakte mit dem Institut für Gebirgsmechanik GmbH Leipzig für eine vertiefte wissenschaftliche Diskussion sowie die gemeinsame Entwicklung und numerische Umsetzung erweiterter Konstitutivbeziehungen der Salzmechanik aufgenommen werden.

Für das Monitoring der Auswirkungen einer umfassenden Anwendung oberflächennaher Geothermie im urbanen Raum wurde durch den Partner UFZ im Verbund ANGUS+ in einem entsprechend geothermisch intensiv genutzten Wohngebiet in Köln-Junkersdorf ein räumlich und zeitlich hochauflösendes Grundwassertemperaturmonitoring durchgeführt. Das UFZ arbeitete dabei in enger Kooperation mit dem Umwelt- und Verbraucherschutzamt der Stadt sowie dem Erftverband. Weitere Feldversuche zur Feldevaluierung innovativer Erkundungs- und Monitoringtechniken am Standort Leipzig fanden in enger Abstimmung mit dem Amt für Umweltschutz der Stadt Leipzig statt.

Das Potenzial für das Auftreten von Nutzungs- oder Interessenkonflikten bei der Verwertung oberflächennaher geothermischer Ressourcen ist insbesondere im urbanen Raum mit intensiver thermischer Bewirtschaftung des Untergrundes hoch. Um dem entgegenzuwirken, bedarf es einer angepassten Planung und Dimensionierung der Systeme zur thermischen Untergrundnutzung. Am Beispiel eines Neubaugebietes in der Stadt Taucha bei Leipzig wurde daher durch das UFZ ein Konzept für die verbesserte, standortspezifische Erkundung des Untergrundes erprobt. Dabei wurden enge Kontakte zum WOTA-Verband (Firmenverband aus Immobilienbetreuungs-, Grundbesitz- und Verwertungsgesellschaften der Stadt Taucha) sowie der Stadtverwaltung Taucha (Fachbereich Bauwesen) genutzt.

#### *Helmholtz Zentrum Potsdam, Deutsches GeoForschungszentrum GFZ GmbH (GFZ)*

Die Universität Kiel (AP 1.7 und AP 1.8) stellte dem GFZ in AP 1.9 aus den Batch- und Sedimentsäulenversuchen Fluid- und Sedimentproben für die molekularbiologischen Untersuchungen zur Verfügung. Die geochemischen Daten aus AP 1.7 und AP 1.8 wurden gemeinsam mit den Ergebnissen der molekularbiologischen Analysen aus AP 1.9 ausgewertet und auf Konferenzen präsentiert sowie in Publikationen veröffentlicht.

*Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik, Ruhr-Universität Bochum (RUB)*

Während der Projektbearbeitung gab es Kooperationen mit den internen Projektpartnern. Durchgängig wurden bei der Bearbeitung gemeinsamer Arbeitspakete (AP 2.1 und AP 3.1) mit der AG Kolditz vom UFZ die Informationen zu den einzelnen Arbeitsschritten ausgetauscht. Bei mehreren Treffen wurden unter anderem Simulationsrandbedingungen (Geometrien, Lastszenarien) definiert, sodass eine Grundlage geschaffen wurde, um die erzielten Resultate miteinander vergleichen zu können.

Darüber hinaus fand ein Erfahrungsaustausch mit mehreren Kavernenbetreibern statt (darunter die KBB), welche für eine möglichst realitätsnahe Annahme der Betriebsszenarien sehr hilfreich waren. Mit einem anderen Kavernenbetreiber wurde überdies eine Kooperationsvereinbarung beschlossen, wobei die Arbeiten dazu noch laufen. Weiterer Austausch fand statt mit der TU Clausthal sowie mit der TU Bergakademie Freiberg (mit letztgenannter konnte Probenmaterial für die experimentellen Untersuchungen beschafft werden).

Die Analyse seismischer Kenngrößen für die Kavernenüberwachung wurde in Kooperation mit der AG Rabbel realisiert. Für die Parametrisierung wurden Zuarbeiten durchgeführt, die im AP 1.1 der AG Dahmke zur Verfügung gestellt wurden.

## **I.6. Übergeordnete Ergebnisse des ANGUS+ Verbundvorhabens**

Das wesentliche übergeordnete Ergebnis des ANGUS+-Projektes ist die Entwicklung eines Konzeptes und eines methodischen Instrumentariums zur quantitativen Raumplanung des Untergrundes. Dies ermöglicht die systematische Beschreibung und Prognose der unterirdischen Auswirkungen und des Raumbedarfs von Energiespeichern wie Druckluftspeichern, Wasserstoff- oder Methangasspeichern sowie Wärmespeichern im Kontext der nationalen Transformation des Energiesystems. Dieses Konzept erlaubt auch die Berücksichtigung anderer unterirdischer Nutzungen. In diesem Konzept können sowohl die Energiespeicher dimensioniert, d. h. Speicherkapazitäten und Speicherraten sowie mögliche Zykluszeiten für geotechnische Speicher und somit deren Einsatzmöglichkeiten ermittelt, als auch die induzierten Auswirkungen anhand ihrer Raumbeanspruchung räumlich und zeitlich aufgelöst quantitativ beschrieben werden. Dazu werden die thermischen, hydraulischen, mechanischen und chemischen Prozesse, die durch Einrichtung und Betrieb eines solchen untertägigen Speichers induziert werden, charakterisiert, am Einsatzort des Speichers parametrisiert und anhand numerischer Modelle prognostiziert. Daraus kann eine ortskonkrete Dimensionierung, der Raumbedarf sowie eventuelle Nutzungskonflikte der Energiespeicher abgeleitet und bewertet werden. Die Energiespeicher können so in eine Planung der unterirdischen Nutzungen im Sinne einer nachhaltigen ökologischen und ökonomischen Bewirtschaftung des Untergrundes eingebunden werden.

Dabei wesentliche erzielte Erfolge sind die Ermittlung der notwendigen geologischen Formationscharakteristiken, der Prozessparameter sowie die Identifikation der in geotechnischen Speichern ablaufenden induzierten Prozesse durch experimentelle Laboruntersuchungen. Hierbei wurden insbesondere geochemische und mikrobiologische Effekte sowie mechanische Prozesse für ausgewählte potenzielle Speicherformationen im norddeutschen Raum untersucht und quantifiziert. Die Datengrundlage wurde auf statistische Signifikanz und Vollständigkeit bewertet, da diese als Basis der Modellsimulationen we-

sentlich die Genauigkeit und Verlässlichkeit der Prognosen beeinflusst. Ebenso zählt zu den wesentlichen Erfolgen die Weiterentwicklung numerischer Modellwerkzeuge, welche die Auswirkungs- und Dimensionierungsanalysen der betrachteten Energiespeicheroption nun ortskonkret für realistische Speicherformationen unter realen Randbedingungen und bei konkreter Betriebsführung der Energiespeicher erlauben. Als Fortentwicklung der bisherigen Eignungspotenzialansätze, die qualitativ prinzipielle Nutzungspotenziale für geologische Formationen ausweisen, können anhand dieser Werkzeuge und basierend auf den experimentellen Erkenntnissen Charakteristiken für geotechnische Speicher wie Speichergröße, Kapazität und erzielbare Ein- und Ausspeicherraten im Rahmen einer Dimensionierungsanalyse ortskonkret ermittelt werden. Darüber hinaus können die zeitliche und räumliche Dynamik der Nutzungsauswirkungen verschiedenster Energiespeichertypen im Hinblick auf eine Reihe von Parametern und Untergrundeigenschaften wie z. B. Temperatur-, Druck-, Wasserqualitäts- oder Permeabilitätsveränderungen, bis hin zur Induzierung von Leckagen für die bisher bearbeiteten Reservoirformationen, im Kontext der bestehenden Infrastruktur an der Geländeoberfläche und für die genutzten Speicherformation quantifiziert werden.

Damit wurde und wird ein Instrumentarium geschaffen, das Auswirkungen einzelner als auch Wechselwirkungen zwischen unterschiedlichen Nutzungsoptionen des geologischen Untergrundes konkret beschreiben kann. Dieses Instrumentarium kann in Zukunft zu einer Regelung und optimierten Nutzung des geologischen Untergrundes führen und bei der Planung der für die Energiewende notwendigen Infrastruktur unterstützen. Die dafür in ANGUS erarbeiteten Konzepte und Methoden wurden und werden weiterhin durch Publikationen und Workshops öffentlich vorgestellt und allgemein zugänglich gemacht. Da die zusammengestellten sowie die im Projekt neu bestimmten Daten nun als Open-Data zur Verfügung stehen und die Weiterentwicklung der numerischen Simulationsprogramme auf Open-Source-Ansätzen beruht, steht diese Methodik auch für die Anwendung prinzipiell zur Verfügung. Aufgrund der Allgemeinheit des Ansatzes können nicht nur geotechnische Energiespeicher sondern alle untertägigen Nutzungen einbezogen werden, für die sich die Auswirkungen quantitativ prognostizieren lassen. Hier besteht für weitere Aspekte und induzierte Prozesse einzelner Speicheroptionen sowie eine Vielzahl weiterer Speicherformationen weiterhin Forschungsbedarf bezüglich der Identifizierung und Parametrisierung der Prozesse ebenso wie bei der Prognose durch numerische Simulation. Die zukünftig noch gewonnenen Erkenntnisse können direkt in das allgemeine in diesem Verbundvorhaben entwickelte Konzept integriert werden. Darüber hinaus ist ein Informationssystem entwickelt worden, das die relevanten ober- und unterirdischen Daten enthält und durch Verschneidung von Daten die Ermittlung von Raumzusammenhängen ermöglicht und diese visualisiert.

Damit können die entwickelten Konzepte, Methoden und das Instrumentarium in der Landesplanung bei der unterirdischen Raumplanung und bei der Allokation von unterirdischen Ressourcen durch Landes- und Bundesbehörden eingesetzt werden. Auch die den geologischen Untergrund nutzende Wirtschaft wird bei der Planung der oberirdischen Infrastruktur, dem Bau von zukünftigen Energieerzeugungsanlagen und bei der Errichtung von Speichermöglichkeiten im Untergrund unterstützt, gesellschaftlich akzeptierte und nachhaltige Schutz-, Management und Bewirtschaftungskonzepte zu entwickeln.

*Zitierte Literatur*

- al Hagrey S (2011) CO<sub>2</sub> plume modeling in deep saline reservoirs by 2D ERT in boreholes. *The Leading Edge* 30:24–33. doi: 10.1190/1.3535429
- al Hagrey SA (2012) 2D Optimized Electrode Arrays for Borehole Resistivity Tomography and CO<sub>2</sub> Sequestration Modelling. *Pure and Applied Geophysics* 169:1283–1292. doi: 10.1007/s00024-011-0369-0
- Angove MJ, Johnson BB, Wells JD (1998) The Influence of Temperature on the Adsorption of Cadmium(II) and Cobalt(II) on Kaolinite. *Journal of Colloid and Interface Science* 204:93–103. doi: 10.1006/jcis.1998.5549
- Arning E, Kölling M, Schulz HD, Panteleit B, Reichling J (2006) Einfluss oberflächennaher Wärmegewinnung auf geochemische Prozesse im Grundwasserleiter. *Grundwasser* 11:27–39. doi: 10.1007/s00767-006-0116-0
- Auken E, Christiansen A, Westergaard J, Kirkegaard C, Foged N, Viezzoli A (2009) An integrated processing scheme for high-resolution airborne electromagnetic surveys, the SkyTEM system. *Exploration Geophysics* 40:184–192. doi: 10.1071/EG08128
- Baldschuhn R, Binot F, Fleig S, Kockel F (2001) *Geotektonischer Atlas von Nordwest-Deutschland und dem - deutschen Nordsee-Sektor*. Schweitzerbart Science Publishers, Hannover
- Bauer S, Beyer C, Kolditz O (2006) Assessing measurement uncertainty of first-order degradation rates in heterogeneous aquifers. *Water Resour Res* 42:W01420. doi: 10.1029/2004WR003878
- Bauer S, Class H, Ebert M, Feeser V, Götz H, Holzheid A, Kolditz O, Rosenbaum S, Rabbel W, Schäfer D, Dahmke A (2012) Modeling, parameterization and evaluation of monitoring methods for CO<sub>2</sub> storage in deep saline formations: the CO<sub>2</sub>-MoPa project. *Environ Earth Sci* 67:351–367. doi: 10.1007/s12665-012-1707-y
- Bayerisches Staatsministerium für Umwelt, Gesundheit und Verbraucherschutz und Bayerisches Staatsministerium für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie (2005) *Oberflächennahe Geothermie, Heizen und Kühlen mit Energie aus dem Untergrund*.
- Beal EJ, House CH, Orphan VJ (2009) Manganese- and Iron-Dependent Marine Methane Oxidation. *Science* 325:184–187. doi: 10.1126/science.1169984
- Benisch K, Bauer S (2012) Investigation of large-scale pressure propagation and monitoring for CO<sub>2</sub> injection using a real site model. In: *Models – Repositories of Knowledge (Proceedings ModelCARE2011)*. International Association of Hydrological Sciences, Leipzig, D, pp 245–251
- Bergmann P, Yang C, Lüth S, Juhlin C, Cosma C (2011) Time-lapse processing of 2D seismic profiles with testing of static correction methods at the CO<sub>2</sub> injection site Ketzin (Germany). *Journal of Applied Geophysics* 75:124–139. doi: 10.1016/j.jappgeo.2011.05.005
- Beyer C, Chen C, Gronewold J, Kolditz O, Bauer S (2007) Determination of First-Order Degradation Rate Constants from Monitoring Networks. *Ground Water* 45:774–785. doi: 10.1111/j.1745-6584.2007.00348.x
- Birkholzer JT, Zhou Q, Tsang C-F (2009) Large-scale impact of CO<sub>2</sub> storage in deep saline aquifers: A sensitivity study on pressure response in stratified systems. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 3:181–194. doi: 10.1016/j.ijggc.2008.08.002
- Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (2015) *Die Energie der Zukunft - Vierter Monitoring-Bericht zur Energiewende: Kurzfassung*. BMWi, Berlin
- Brielmann H, Lueders T, Schreglmann K, Ferraro F, Avramov M, Hammerl V, Blum P, Bayer P, Griebler C (2011) Oberflächennahe Geothermie und ihre potenziellen Auswirkungen auf Grundwasserökosysteme. *Grundwasser* 16:77. doi: 10.1007/s00767-011-0166-9

- Brons HJ, Griffioen J, Appelo CAJ, Zehnder AJB (1991) (Bio)geochemical reactions in aquifer material from a thermal energy storage site. *Water Research* 25:729–736. doi: 10.1016/0043-1354(91)90048-U
- Brossier R (2009) Seismic imaging of 2D visco-elastic media by full waveform inversion: methodological developments and applications. PhD thesis, Université Nice Sophia Antipolis
- Brossier R, Virieux J, Operto S (2008) Parsimonious finite-volume frequency-domain method for 2-D P–SV-wave modelling. *Geophysical Journal International* 175:541–559. doi: 10.1111/j.1365-246X.2008.03839.x
- Carrigan CR, Ramirez AL, Newmark RL, Aines RD, Friedmann SJ (2009) Application Of ERT For Tracking CO<sub>2</sub> Plume Growth And Movement At The SECARB Cranfield Site. 8th Annual Conference on Carbon Capture and Sequestration. Pittsburgh, PA.
- Chadwick A, Williams G, Delepine N, Clochard V, Labat K, Sturton S, Buddensiek M, Dillen M, Nickel M, Lima A, Arts R, Neele F, Rossi G (2010) Quantitative analysis of time-lapse seismic monitoring data at the Sleipner CO<sub>2</sub> storage operation. *The Leading Edge* 29:170–177. doi: 10.1190/1.3304820
- Choi Y, Min D-J, Shin C (2008a) Two-dimensional waveform inversion of multi-component data in acoustic-elastic coupled media. *Geophysical Prospecting* 56:863–881. doi: 10.1111/j.1365-2478.2008.00735.x
- Choi Y, Min D-J, Shin C (2008b) Frequency-Domain Elastic Full Waveform Inversion Using the New Pseudo-Hessian Matrix: Experience of Elastic Marmousi-2 Synthetic Data. *Bulletin of the Seismological Society of America* 98:2402–2415. doi: 10.1785/0120070179
- Clauser C (Hrsg.) (2003) Numerical Simulation of Reactive Flow in Hot Aquifers. Springer-Verlag Berlin Heidelberg
- CMG (2010) STARS Fact Sheet, Computer Modelling Group Ltd. [www.cmgroup.com/software](http://www.cmgroup.com/software)
- Deeb RA, Alvarez-Cohen L (1999) Temperature effects and substrate interactions during the aerobic biotransformation of BTEX mixtures by toluene-enriched consortia and *Rhodococcus rhodochrous*. *Biotechnology and Bioengineering* 62:526–536. doi: 10.1002/(SICI)1097-0290(19990305)62:5<526::AID-BIT4>3.0.CO;2-8
- Deutzmann JS, Schink B (2011) Anaerobic Oxidation of Methane in Sediments of Lake Constance, an Oligotrophic Freshwater Lake. *Applied and Environmental Microbiology* 77:4429–4436. doi: 10.1128/AEM.00340-11
- Dumbser M, Käser M (2006) An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes – II. The three-dimensional isotropic case. *Geophysical Journal International* 167:319–336. doi: 10.1111/j.1365-246X.2006.03120.x
- Dumbser M, Käser M, Toro EF (2007) An arbitrary high-order Discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes – V. Local time stepping and p-adaptivity. *Geophysical Journal International* 171:695–717. doi: 10.1111/j.1365-246X.2007.03427.x
- Dzombak DA, Morel FMM (1990) Surface Complexation Modeling: Hydrous Ferric Oxide. John Wiley & Sons
- Ebert M (2011) Reaktionen mit dem Formationswasser, dem Formationsgestein und dem Deckgestein, in: Grossmann, J. et al. (Hrsg.), Sicherheit und Umweltverträglichkeit der CO<sub>2</sub>-Speicherung - Speicherprozesse. Bericht für das Umweltbundesamt (FKZ 3708 49 112 2).
- Ehlers M (2006) Geodateninfrastrukturen. In: Traub KP, Kohlus J (Hrsg) GIS im Küstenzonenmanagement. Wichmann. S 138 – 149
- El-Batouti M, Sadek OM, Assaad FF (2003) Kinetics and thermodynamics studies of copper exchange on Na–montmorillonite clay mineral. *Journal of Colloid and Interface Science* 259:223–227. doi: 10.1016/S0021-9797(02)00173-X

- Etienne V, Chaljub E, Virieux J, Glinsky N (2010) An hp-adaptive discontinuous Galerkin finite-element method for 3-D elastic wave modelling. *Geophysical Journal International* 183:941–962. doi: 10.1111/j.1365-246X.2010.04764.x
- Falk J (1998) Efficient seismic modelling of small-scale inhomogeneities by the Finite-difference method. PhD thesis, Universität Hamburg.
- Fletcher KE, Costanza J, Cruz-Garcia C, Ramaswamy NS, Pennell KD, Löffler FE (2011) Effects of elevated temperature on Dehalococcoides dechlorination performance and DNA and RNA biomarker abundance. *Environ Sciences & Technology* 45:712–718. doi: 10.1021/es1023477
- Friis AK, Heimann AC, Jakobsen R, Albrechtsen H-J, Cox E, Bjerg PL (2007) Temperature dependence of anaerobic TCE-dechlorination in a highly enriched Dehalococcoides-containing culture. *Water Research* 41:355–364. doi: 10.1016/j.watres.2006.09.026
- Griffioen J, Appelo CAJ (1993) Nature and extent of carbonate precipitation during aquifer thermal energy storage. *Applied Geochemistry* 8:161–176. doi: 10.1016/0883-2927(93)90032-C
- Grube A, Wichmann K, Hanh J, Nachtigall K (2000) Geogene Grundwasserversalzung in den Porengrundwasserleitern Norddeutschlands und ihre Bedeutung für die Wasserwirtschaft. *TZW Schriftenreihe* 9
- Hähnlein S, Blum P, Bayer P (2011) Oberflächennahe Geothermie – aktuelle rechtliche Situation in Deutschland. *Grundwasser* 16:69–75. doi: 10.1007/s00767-011-0162-0
- Hayashi K, Burns DR, Toksöz MN (2001) Discontinuous-grid finite difference seismic modeling including surface topography. *Bulletin of the Seismological Society of America* 91:1750–1764
- Herzig A (2007) Entwicklung eines GIS-basierten Entscheidungsunterstützungssystems als Werkzeug nachhaltiger Landnutzungsplanung. Dissertation, Christian-Albrechts Universität zu Kiel
- Hese F, Liebsch-Dörschner T (2010) Parametrisierung von Strukturen im Untergrund Schleswig-Holsteins. Landesamt für Umwelt, Natur und ländliche Räume S.-H.
- Hogan C, Hedlin K, Margrave G, Lamoureux M (2008) Feasibility testing of 4D seismic monitoring with full-waveform tomography. *CREWES*
- Hori K, Hiramatsu N, Nannbu M, Kanie K, Okochi M, Honda H, Watanabe H (2009) Drastic change in cell surface hydrophobicity of a new bacterial strain, *Pseudomonas* sp. TIS1-127, induced by growth temperature and its effects on the toluene-conversion rate. *Journal of Bioscience and Bioengineering* 107:250–255. doi: 10.1016/j.jbiosc.2008.11.003
- Hunsche U, Hampel A (1999) Rock salt — the mechanical properties of the host rock material for a radioactive waste repository. *Engineering Geology* 52:271–291. doi: 10.1016/S0013-7952(99)00011-3
- Itasca (2011) *FLAC3D*. [www.itascacg.com/flac3d](http://www.itascacg.com/flac3d)
- Jastram C (1992) Seismische Modellierung mit Finite Differenzen höherer Ordnung auf einem Gitter mit vertikal variierendem Gitterabstand. PhD thesis, Universität Hamburg
- Jastram C, Behle A (1991) Elastic modeling by finite difference and the rapid expansion method (REM). In: *SEG Technical Program Expanded Abstracts 1991*. Society of Exploration Geophysicists, pp 1573–1576
- Jastram C, Tessmer E (1994) Elastic modelling on a grid with vertically varying spacing1. *Geophysical Prospecting* 42:357–370. doi: 10.1111/j.1365-2478.1994.tb00215.x
- Jesušek A, Grandel S, Dahmke A (2013) Impacts of subsurface heat storage on aquifer hydrogeochemistry. *Environmental Earth Sciences* 69:1999–2012. doi: 10.1007/s12665-012-2037-9
- Johnson BB (1990) Effect of pH, temperature, and concentration on the adsorption of cadmium on goethite. *Environmental Science & Technology* 24:112–118. doi: 10.1021/es00071a014

- Kang T-S, Baag C-E (2004) Finite-Difference Seismic Simulation Combining Discontinuous Grids with Locally Variable Timesteps. *Bulletin of the Seismological Society of America* 94:207–219. doi: 10.1785/0120030080
- Käser M, Dumbser M (2006) An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes – I. The two-dimensional isotropic case with external source terms. *Geophysical Journal International* 166:855–877. doi: 10.1111/j.1365-246X.2006.03051.x
- Käser M, Dumbser M, De La Puente J, Igel H (2007) An arbitrary high-order Discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes — III. Viscoelastic attenuation. *Geophysical Journal International* 168:224–242. doi: 10.1111/j.1365-246X.2006.03193.x
- Klotzbücher T, Kappler A, Straub KL, Haderlein SB (2007) Biodegradability and groundwater pollutant potential of organic anti-freeze liquids used in borehole heat exchangers. *Geothermics* 36:348–361. doi: 10.1016/j.geothermics.2007.03.005
- Klug H (2002) Methodisch-konzeptuelle Landschaftsentwicklung über prozess-orientierte, funktional-haushaltliche landschaftsökologische Leitbilder. In: *SIR-Mitteilungen und Berichte* 30:43-52
- Klug H (2007) Participative landscape planning using a GIS approach for facilitation. In: Mander PDÜ, Wiggering PDH, Helming DK (Hrsg.) *Multifunctional Land Use*. Springer Berlin Heidelberg, S 195–223
- Köhn D (2011) Time Domain 2D Elastic Full Waveform Tomography. Dissertation, Christian-Albrechts Universität zu Kiel
- Köhn D, De Nil D, Kurzmann A, Przebindowska A, Bohlen T (2012) On the influence of model parametrization in elastic full waveform tomography. *Geophysical Journal International* 191:325–345.
- Köhn D, De Nil D, Przebindowska A, Kurzmann A, Bohlen T (2010) 2D Elastic Full Waveform Tomography of Synthetic Marine Reflection Seismic Data. In: *72nd EAGE Conference and Exhibition incorporating SPE EUROPEC 2010*.
- Kolditz O, Bauer S (2004) A process-oriented approach to computing multi-field problems in porous media. *Journal of Hydroinformatics* 6:225–244.
- Koschitzky H-P, Theurer T, Schmidt R, Winkler A, Farber A (2000) Pilot-scale study of steam injection for thermal in-situ remediation of the unsaturated zone below a hazardous waste site. In: *Contaminated Soil 2000: Proceedings of the Seventh International FZK/TNO Conference on Contaminated Soil, 18-22 September 2000, Leipzig, Germany*. Thomas Telford, 989 S
- Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein (2006) *Geothermie in Schleswig-Holstein: Leitfaden für oberflächennahe Erdwärmelanlagen*.
- Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen (2004) *Wasserwirtschaftliche Anforderungen an die Nutzung von oberflächennaher Erdwärme, Merkblätter Band 48, Essen*.
- Lütz M, Bastian O, Röder M, Syrbe RU (2007) Szenarienanalyse zur Veränderung von Agrarlandschaften. Eine Fallstudie aus dem Moritzburger Kleinkuppengebiet (Sachsen). *Naturschutz und Landschaftsplanung* 39:205–211.
- Majer EL, Baria R, Stark M, Oates S, Bommer J, Smith B, Asanuma H (2007) Induced seismicity associated with Enhanced Geothermal Systems. *Geothermics* 36:185–222. doi: 10.1016/j.geothermics.2007.03.003
- Mathieson A, Midgley J, Dodds K, Wright I, Ringrose P, Saoul N (2010) CO<sub>2</sub> sequestration monitoring and verification technologies applied at Krechba, Algeria. *The Leading Edge* 29:216–222. doi: 10.1190/1.3304827
- Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg (2005) *Leitfaden zur Nutzung von Erdwärme mit Erdwärmesonden*.

- Mosimann T (2001) Entwicklung prozessual begründeter landschaftsökologischer Leitbilder für funktional vielfältige Landschaften. Selbstverlag des Zentralausschuß für deutsche Landeskunde e. V.
- Niedersächsisches Umweltministerium (2006) Leitfaden Erdwärmennutzung in Niedersachsen: Genehmigungsvoraussetzungen, insbesondere für Erdwärmesonden mit einer Heizleistung bis 30 kW.
- Nolde M, Duttmann R, Blaschek M, Klein U (2010) Geodateninfrastrukturen und ihre Anwendungen in der Praxis. PIK - Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation 33:245–252. doi: 10.1515/piko.2010.043
- O'Carroll DM, Sleep BE (2007) Hot water flushing for immiscible displacement of a viscous NAPL. Journal of Contaminant Hydrology 91:247–266. doi: 10.1016/j.jconhyd.2006.11.003
- Pollard SJT, Hruddy SE, Fedorak PM (1994) Bioremediation of Petroleum- and Creosote-Contaminated Soils: a Review of Constraints. Waste Management & Research 12:173–194. doi: 10.1177/0734242X9401200207
- Pruess K (2004) The TOUGH Codes—A Family of Simulation Tools for Multiphase Flow and Transport Processes in Permeable Media. Vadose Zone Journal 3:738–746. doi: 10.2113/3.3.738
- Rampelotto PH (2010) Resistance of Microorganisms to Extreme Environmental Conditions and Its Contribution to Astrobiology. Sustainability 2:1602–1623. doi: 10.3390/su2061602
- Rein A, Bauer S, Dietrich P, Beyer C (2009) Influence of temporally variable groundwater flow conditions on point measurements and contaminant mass flux estimations. J Contam Hydrol 108:118–133. doi: 10.1016/j.jconhyd.2009.06.005
- Rothschild LJ, Mancinelli RL (2001) Life in extreme environments. Nature 409:1092–1101. doi: 10.1038/35059215
- Schäfer D, Dahmke A, Kolditz O, Teutsch G (2002) The “Virtual Aquifers” – Concept as a Tool for Evaluation of Exploration, Remediation and Monitoring Strategies. In: Deutsche Forschungsgemeinschaft (Hrsg) Geochemical Processes. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, pp 154–172
- Schäfer D, Schlenz B, Dahmke A (2004) Evaluation of Exploration and Monitoring Methods for Verification of Natural Attenuation Using the Virtual Aquifer Approach. Biodegradation 15:453–465. doi: 10.1023/B:BIOD.0000044600.81216.00
- Schlumberger (2010) Eclipse Technical Description 2010.2
- Schmelzbach C, Tronicke J, Dietrich P (2011) Three-dimensional hydrostratigraphic models from ground-penetrating radar and direct-push data. Journal of Hydrology 398:235–245. doi: 10.1016/j.jhydrol.2010.12.023
- Shao H, Dmytrieva SV, Kolditz O, Kulik DA, Pflingsten W, Kosakowski G (2009) Modeling reactive transport in non-ideal aqueous-solid solution system. Applied Geochemistry 24:1287–1300. doi: 10.1016/j.apgeochem.2009.04.001
- Shin C, Cha YH (2008) Waveform inversion in the Laplace domain. Geophysical Journal International 173:922–931. doi: 10.1111/j.1365-246X.2008.03768.x
- Shin C, Ha W (2008) A comparison between the behavior of objective functions for waveform inversion in the frequency and Laplace domains. Geophysics 73:VE119-VE133. doi: 10.1190/1.2953978
- Sirgue L (2003) Inversion de la forme d'onde dans le domaine fréquentiel de données sismiques grands offsets. Thèse de doctorat, Université Paris 11
- Sirgue L, Barkved OI, Dellinger J, Etgen J, Albertin U, Kommedal JH (2010) Thematic Set: Full waveform inversion: the next leap forward in imaging at Valhall. First Break 28:65–70. doi: 10.3997/1365-2397.2010012
- Sirgue L, Etgen JT, Albertin U (2008) 3D Frequency Domain Waveform Inversion Using Time Domain Finite Difference Methods. In: 70th EAGE Conference and Exhibition incorporating SPE EUROPEC 2008. Roma, Italia

- Smith RS, Koch R, Hodges G, Lemieux J (2011) A comparison of airborne electromagnetic data with ground resistivity data over the Midwest deposit in the Athabasca basin. *Near Surface Geophysics* 9:319–330. doi: 10.3997/1873-0604.2011002
- Spetzler J, Xue Z, Saito H, Nishizawa O (2008) Case story: time-lapse seismic crosswell monitoring of CO<sub>2</sub> injected in an onshore sandstone aquifer. *Geophysical Journal International* 172:214–225. doi: 10.1111/j.1365-246X.2007.03614.x
- Statistisches Amt für Hamburg und Schleswig-Holstein (2016) Erneuerbare Energien in Zahlen für Schleswig-Holstein - Versorgungsbeitrag in den Jahren 2006-2014, Ausbauszenarien Strom und Wärme bis zum Jahr 2025, Treibhausgasminderung und wirtschaftliche Effekte. Statistisches Amt für Hamburg und Schleswig-Holstein, Kiel
- Steuer A, Siemon B, Auken E (2009) A comparison of helicopter-borne electromagnetics in frequency- and time-domain at the Cuxhaven valley in Northern Germany. *Journal of Applied Geophysics* 67:194–205. doi: 10.1016/j.jappgeo.2007.07.001
- Streich R, Becken M, Matzander U, Ritter O (2011a) Strategies for land-based controlled-source electromagnetic surveying in high-noise regions. *The Leading Edge* 30:1174–1181. doi: 10.1190/1.3657078
- Streich R, Becken M, Ritter O (2010) Imaging of CO<sub>2</sub> storage sites, geothermal reservoirs, and gas shales using controlled-source magnetotellurics: Modeling studies. *Chemie der Erde - Geochemistry* 70:63–75. doi: 10.1016/j.chemer.2010.05.004
- Streich R, Becken M, Ritter O (2011b) 2.5D controlled-source EM modeling with general 3D source geometries. *Geophysics* 76:F387–F393. doi: 10.1190/geo2011-0111.1
- van der Lee J, De Windt L, Lagneau V, Goblet P (2002) Presentation and application of the reactive transport code HYTEC. *Developments in Water Science* 47:599–606. doi: 10.1016/S0167-5648(02)80114-9
- Wang W, Kolditz O (2007) Object-oriented finite element analysis of thermo-hydro-mechanical (THM) problems in porous media. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 69:162–201. doi: 10.1002/nme.1770
- Wang W, Kosakowski G, Kolditz O (2009) A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers & Geosciences* 35:1631–1641. doi: 10.1016/j.cageo.2008.07.007
- Zhang K, Wu Y, Pruess K (2008) User's Guide for TOUGH2-MP -A Massively Parallel Version of the TOUGH2 Code. LBNL-315E.
- Zheng C (2010) MT3DMS v5.3 Supplemental User's Guide.

## **II. EINGEHENDE DARSTELLUNG DES PROJEKTES ANGUS+**

### **II.1. Verwendung der Zuwendung und erzieltes Ergebnis im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele**

#### **II.1.1. AP 1 PARAMETERISIERUNG**

##### **(1) AP 1.1 Parametrisierung des tiefen geologischen Untergrundes**

Im Arbeitspaket AP 1.1 „Parametrisierung des tiefen geologischen Untergrundes im Hinblick auf geologische Strukturen, sowie hydraulische, mechanische, thermische, geophysikalische und geochemische Eigenschaften und Prozesse“ sollen Kriterien für eine Eignung von Formationen als stofflicher oder thermischer Speicher zusammengestellt, eine Datenbasis und Datenbank zur Parametrisierung geologischer Funktionen weiterentwickelt sowie ausgewählte geologische Formationen für Detailuntersuchungen und Szenariensimulationen parametrisiert werden. Diese Arbeiten dienen somit der Vorbereitung sowohl der Arbeiten zur Programmentwicklung und der numerischen Szenariensimulationen als auch der Verfügbarmachung von Daten.

Für die Speicheroptionen Wasserstoffspeicherung, Methanspeicherung, Druckluftspeicherung und Wärmespeicherung wurden die bei einer geologischen Speicherung auftretenden wesentlichen Effekte identifiziert. Für eine Gasspeicherung werden zusätzlich zu den hydraulischen Prozessen, die das Mehrphasenfließverhalten beschreiben, auch der Transport von chemischen Komponenten in den mobilen Phasen (Gasphase und Wasserphase), geochemische Reaktionen zwischen Gasphase, Wasserphase und Festphase (Gestein), Temperaturänderungen aufgrund Gaskompression/-expansion oder von der Reservoirtemperatur abweichender Injektionstemperatur und geomechanische Prozesse (Spannungsaufbau und Verschiebungen) berücksichtigt. Für Wärmespeicherung wurde ein ähnliches Prozessspektrum ermittelt, wobei nur Einphasenhydraulik mit einer mobilen Wasserphase betrachtet wurde. Für diese Effekte wurden die entsprechenden Prozessgleichungen zusammengestellt sowie die für eine Simulation benötigten Parameter bestimmt und in einer tabellarischen Übersicht zusammengestellt und mit Quellenangaben referenziert.

Weiterhin wurden typische Speicherbedingungen für Gasspeicher bestimmt. Diese umfassen eine Fallenstruktur, die für Wasserstoff deutlich steiler ist als für Methan, abdichtende Barrierschichten im Hangenden und Liegenden, ausreichendes Reservoirvolumen, eine ausreichende Injektivität bzw. Produktivität der Speicherformation. Weitere Kriterien sind geringe Sensitivitäten gegenüber Permeabilitätsreduktionen durch Effekte der residualen Sättigungen und geomechanischen Reaktionen des Gesteinsverbandes sowie die Abwesenheit von korrodierenden Komponenten und die Abwesenheit von geochemischen Reaktionen, die das Speichergas umsetzen oder zu korrodierenden Stoffen führen. Daraus ergeben sich Grenzen und Mindestanforderungen für Parameter, hierbei insbesondere für das Speichervolumen, das durch das Porenvolumen

repräsentiert wird ( $>40$  mio.  $m^3$ ), die hydraulische Permeabilität ( $>0.1$  Darcy) sowie Tiefenlagen von 300 bis 1.500 m.

Für geothermische Wärmespeicher sind die Speicherbedingungen variabler, da unterschiedliche Speichersysteme eingesetzt werden können. Für offene Systeme (ATES Aquifer Thermal Energy Storage) mit einer oder mehrerer Brunnendoubletten sind hydraulisch hochdurchlässige Formationen mit keiner natürlichen Grundwasserströmung, einer hohen Porosität und Mächtigkeiten von einigen 10er Metern geeignet. Wie im Fall der Gasspeicherung auch sollten keine geochemischen Reaktionen auftreten, die die Permeabilität der Speicherformation verringern oder zu starker Mineralbildung an den Wärmetauschern führen. Für geschlossene Systeme (BTES Borehole Thermal Energy Storage) können auch gering permeable und teilgesättigte Formationen verwendet werden. Aufgrund der benötigten Anzahl an Bohrlöchern sind BTES-Speicher nur in Tiefen bis einige hundert Meter finanziell tragbar.

Für die Szenariensimulationen am Standort konnte auf geologische Standortmodelle aus einem Vorläuferprojekt zurückgegriffen werden, welche die tieferen Formationen, insbesondere die hydraulisch durchlässigen Sandsteinformationen umfasst. Darüber hinaus wurde ein weiteres Standortmodell erstellt, welches neben den tiefen Schichten auch den oberflächennahen Untergrund mit einer quartären Rinnenstruktur umfasst und somit die oberen 5.000 m Untergrund durchgängig beschreibt. Das Modell enthält mehrere Salzstöcke und somit auch Fallenstrukturen, sodass alle im Projekt betrachteten Speicheroptionen damit untersucht werden können. Das Modell wurde anhand der zusammengestellten Parametertabelle parametrisiert.

Um die in AP 2.3 entwickelten geophysikalischen Monitoringverfahren mit den Szenariensimulationen von Porenspeichern und Gasleckagen in oberflächennahe Aquifere zu testen, wird eine realistische Verknüpfung der physikalischen Eigenschaften der Gesteinsmatrix mit den Parametern der Fluid- und Gasphasen aus den Mehrphasenströmungssimulationen benötigt. Diese Verknüpfung basiert auf einem realistischen Gesteinsmodell zur Berechnung von effektiven Materialparametern. Im Fall der Seismik erfolgt diese Berechnung der effektiven elastischen Moduli im Reservoir über die Gassmann-Gleichung, während die effektive Dichte durch Mittelung der relativen Beiträge der Dichten der Gesteinsmatrix, der Gas- und der Fluidphase berechnet wurde. Die Verteilung der spezifischen Widerstände in der Speicherformation wurde anhand der Archie-Gleichung bestimmt. Diese Beziehungen wurden in die geophysikalischen Simulationsprogramme integriert, welche die Szenariensimulationen mit den geophysikalischen Modellierungs- und Inversionscodes verknüpfen.

Für ein vorgegebenes stratigraphisches und lithologisches Modell wurden typische Schwankungen der Dichtebereiche aus der Literatur (insbesondere für das Norddeutsche Becken) entnommen, gemittelt und über empirische Beziehungen mit den seismischen Primär- und Sekundärwellen- Geschwindigkeiten verknüpft. Die so abgeleiteten elastischen Materialparameter und Dichten konnten anschließend in die Datenbank zur Parametrisierung des Untergrundes integriert werden.

Die in diesem Teilprojekt geplante Datenbank wurde aufgebaut und die erhobenen und ausgewerteten Daten wurden eingepflegt. Diese Datenbank wird in AP 1.3 beschrieben, und daher hier nicht weiter erläutert.

Die Ziele dieses Arbeitspaketes AP 1.1 wurden somit vollständig erreicht. Die Ergebnisse sind in den Leitfäden in der Betrachtung der Parameterverfügbarkeit und der Ableitung der Prozessgleichungen abgebildet. Ebenso wurden diese in allen Publikationen für Modellrechnungen verwendet und für die dort ausgeführten Beispiele ausführlich dokumentiert.

## (2) AP 1.2 Parametrisierung der oberflächennahen geologischen Schutzgüter

Das Arbeitspaket 1.2 dient der Definition von geowissenschaftlichen Parametern und Auswirkungsprozessen für die Parametrisierung numerischer Simulationen, die eingehend in Dethlefsen et al. (2016) beschrieben sind und sowohl bei Szenarien zu Gasleckagen (AP 3.3), die potenziell an Standorten unterirdischer Gasspeicherung entstehen können, als auch bei Szenarien der oberflächennahen Wärmespeicherungsmaßnahmen (AP 3.4) erforderlich sind. Die Aufgabe spiegelte sich in der Definition der Meilensteine des Arbeitspaketes, Parametrisierung von oberflächennahen Prozessen (M 1.2.1) sowie Parametrisierung typischer oberflächennaher Standorte als Grundlage der Szenarienmodellierung (M 1.2.2), wider. Die für das Erreichen der Meilensteine erforderlichen geowissenschaftlichen Daten ließen sich in strukturgeologische, hydraulische, hydro- bzw. geochemische, geophysikalische und geomechanische Parametergruppen unterteilen.

- Geologische Strukturdaten des oberflächennahen Untergrundes von vier Beispielstandorten wurden aus Arbeiten des LLUR SH (Hese et al. 2012; Scheer et al. 2007) bezogen. Diese Daten erlaubten eine Darstellung der präquarternen Formationen, quartäre Einheiten wie glaziale Schmelzwassersande und Geschiebemergel waren in den Strukturmodellen nicht ausdifferenziert.
- Grundlegende hydraulische Eigenschaften (Agster 1996, 2010; Otto et al. 2004) sowie auch Wärmetransportparameter (Otto 2012) bedeutsamer oberflächennaher Formationen Schleswig-Holsteins lagen in Form von Berichten des LLUR SH oder anderen öffentlichen Quellen (Wüstenhagen et al. 1990; Schwerdtfeger 1985) vor. Zur Parametrisierung von Mehrphasen-Transportsimulationen (Wiegiers et al. 2012) erforderliche Parameter wie Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen oder Sättigungs-Permeabilitäts-Beziehungen liegen für oberflächennahe Formationen Norddeutschlands nicht vor, so dass Analogie aus anderen Regionen (Esposito, Benson 2012) herangezogen wurden.
- Hydrochemische Daten in Form von Grundwasserzusammensetzungen oberflächennaher Formationen werden vom LLUR SH in einer Datenbank vorgehalten, die dem ANGUS+ Vorhaben freundlicher Weise zur Verfügung gestellt wurde. Auswertungen der Datenbankinhalte im AP 1.2 erlaubten die Definition typischer Grundwasserzusammensetzungen (Dethlefsen et al. 2017). Geochemisch-mineralogische Parameter oberflächennaher Formationen hingegen waren kaum verfügbar, weswegen eigene laboranalytische Bestimmungen dieser Parameter durchgeführt wurden, was sich zu dem zweiten Bearbeitungsschwerpunkt des AP entwickelte.
- Typische Spannweiten geophysikalische Parameter norddeutscher Formationen wurden aus der Literatur übernommen (Schön 1983; Hese et al. 2012; Inselmann 1985). Ferner wurden zu weiteren Archie-Konstanten (Archie 1942) Daten aus der Literatur (Salem 2001) entnommen oder selbst abgeleitet (Wunderlich et al. 2013).

- Grundlegende geomechanische Parameter von Locker- und Festgesteinsformationen wurden recherchiert und dokumentiert (Lemppenau 2015). Dennoch blieb festzustellen, dass beispielsweise die Anwendbarkeit bestehender Konstitutivmodelle auf Fragestellungen der Wärmeabhängigkeit geomechanischer Prozesse noch Gegenstand der wissenschaftlichen Diskussion ist (Dethlefsen et al. 2016; ANGUS+ 2014). Siehe hierzu insbesondere Resultate aus AP 1.6.

Mit der hier aufgeführten Parametersammlung waren die in Form von Meilensteinen gesteckten Ziele erfüllt, wobei der Hauptteil der Arbeiten bereits in 2013 abgeschlossen war. Die Definition von Auswirkungsprozessen war nicht nur Gegenstand des AP 1.2 (siehe Meilenstein M 1.2.1), sondern wurde darüber hinaus in weiteren Arbeitspaketen (AP 1.6: Geomechanik, AP 1.7: Gasleckagen, AP 1.8: Wärmespeicherung, AP 1.9: Mikrobiologie) eingehend experimentell untersucht.

Die defizitäre Datenlage hinsichtlich der geochemisch-mineralogischen Parameter oberflächennaher Sedimente zeigte jedoch den Bedarf an eigenen laboranalytischen Parameterbestimmungen im AP 1.2 auf. Dies wurde als zweiter Bearbeitungsschwerpunkt des AP aufgenommen. Das Probenmaterial aus Kernbohrungen wurde einerseits in Kooperation mit dem LKN SH gewonnen und andererseits durch die freundliche Unterstützung von Wasserversorgungsunternehmen (WV Süderdithmarschen, WV Norderdithmarschen, WZV WW Kuden) und des Ingenieurbüros GeoSystem (Kiel) kostenfrei zur Verfügung gestellt. Damit war die Probenbeschaffung, dessen Kosten wohl ansonsten hunderttausend Euro überschritten hätten und damit im Projekt nicht finanzierbar gewesen wären, größtenteils unentgeltlich. Da auch die eigenen Laborarbeiten im Wesentlichen in Form von Abschlussarbeiten sowie durch studentische Hilfskräfte ausgeführt wurden, war der große zusätzliche Aufwand im AP zu bewältigen.

An den gewonnenen Sedimentproben wurden geochemische (Schlund 2014; Nöthlich 2016), mineralogische (Dessauer 2015) und auch hydraulische (von Oelsen 2013; van Geffen 2016) Analyseverfahren angewendet. Geochemisch wurden an Proben von pleistozänen Schmelzwassersanden, pliozänen Kaolinsanden sowie miozänen Braunkohlesanden die organischen und anorganischen Kohlenstoffgehalte (155 Proben), der Gehalt an reduzierten Schwefelverbindungen (97 Proben) und die Verteilung von zwei- bzw. dreiwertigen Eisenverbindungen (134 Proben) bestimmt. Diese Parameter geben quantitative Informationen der reaktiven Sedimenteigenschaften, insbesondere deren pH-Pufferkapazitäten sowie deren Potenziale an Elektronenakzeptoren und -donatoren. Weiterhin wurden die Relationen der analysierten Festphasenbestandteile zur jeweiligen hydraulischen Durchlässigkeit des Probenabschnittes gesetzt und auch statistische Verfahren zur Gruppierung der Daten angewendet. Exemplarisch wurden auch Vollaufschlüsse (Hoppe 2014) der Sedimente und Bestimmungen der Kationen- (Mascus 2012) und Anionen- (Lagmüller 2015) Austauschkapazitäten durchgeführt. Vorläufige Datenauswertungen finden sich in den zitierten Abschlussarbeiten und in ANGUS+ (2015; 2016; 2017), und die abschließende Datenauswertung ist in Vorbereitung (Dethlefsen et al. in prep.).

Bestreben der Festphasenuntersuchungen war, analog zu typischen Grundwasserzusammensetzungen schleswig-holsteinischer Aquifere auch typische, geochemisch-mineralogische Daten der Aquifere herauszuarbeiten. Während zur Beurteilung der Grundwasserzusammensetzungen Daten aus mehr als 800 Messstellen verfügbar waren, die eine statistisch fundierte Auswertung erlaubten, standen für die Festphasenuntersuchungen lediglich Proben aus sechs Bohrungen zur Verfügung. Auch wenn pro Bohrung

z. T. dutzende Proben analysiert wurden, sind selbstverständlich belastbare Aussagen hinsichtlich der räumlichen Repräsentativität der Ergebnisse nicht möglich; dafür wären wohl zumindest um eine Größenordnung mehr Bohrungen erforderlich, was das Arbeitspaket zu leisten nicht im Stande war. Dennoch ist mit Abschluss der sedimentcharakterisierenden Analysen erstmals ein Datensatz erstellt worden, der diese Parameter schleswig-holsteinischer Sedimente erfasst.

### (3) AP 1.3 Geostatistische Analysen hydraulischer, geochemischer, mineralogischer und geophysikalischer Daten des Norddeutschen Untergrundes

Das Arbeitspaket 1.3 befasst sich wie das zuvor beschriebene AP 1.2 mit der Sammlung, Aufbereitung und Interpretation geowissenschaftlicher Daten als Grundlage weitergehender Arbeiten im Forschungsvorhaben. Das AP 1.3 fokussiert sich dabei auf Daten des „tiefen“ Untergrundes Norddeutschlands, der durch Formationen des Perms, des Mesozoikums sowie denen des Alttertiärs definiert wird. Die im Forschungsvorhaben CO<sub>2</sub>-MoPa diesbezüglich konzipierte und im Wesentlichen mit Fachdaten der Kohlenwasserstoffindustrie gefüllte Projektdatendank (Dethlefsen et al. 2012) wurde zu diesem Zweck weitergenutzt, da die Nutzungserlaubnis der Daten seitens der Dateneigentümer auch für ANGUS+ erteilt wurde. Als erster Abschnitt im AP wurden die Meilensteine zur Abstimmung über Möglichkeit und Notwendigkeit der Datenhaltung mit anderen Arbeitspaketen (M 1.3.1) sowie die Erfassung neuer Parametergruppen in die Datenbank (M 1.3.2) bearbeitet. Im zweiten Arbeitsschritt wurde die Auswertung der Dateninhalte vorangetrieben.

#### *Datenrecherchen und Ergänzung der Datenbank*

In projektinternen Arbeitstreffen in 2012 und 2013 wurde zunächst das Potenzial einer Weiterentwicklung der Datenbank abgestimmt. Die Datenbank enthält orts- und teufenkonkrete und zu geologischen Formationen zugeordnete Werte zu Gesteinsporositäten und -permeabilitäten sowie zu Konzentrationen gelöster Formationswasserinhaltsstoffe sowie gelöster Gase als auch Mineralzusammensetzungen. Weitere Werte zur Beschreibung hydraulischer Prozesse, wie Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen, sowie auch zu geophysikalischen und geomechanischen Parametergruppen waren in der Datenbank nicht erfasst. Bei Recherchen musste Pfeiffer (2017) jedoch feststellen, dass zu Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen keine Werte von Gesteinen aus Deutschland veröffentlicht waren, so dass er zur Parametrisierung seiner numerischen Modelle Werte von Gesteinen außerhalb Deutschlands verwenden musste. Eine Erfassung dieser recherchierten Werte in der Projektdatenbank, die sich auf (Nord-)Deutschland beschränkt, war daher nicht sinnvoll. Weiterhin recherchierte Lemppenau (2015) typische Wertespannweiten zu geomechanischen sowie al Hagrey & Köhn (unveröff.) zu geophysikalischen Parametern. Da diese Wertespannweiten jedoch keine orts- und teufenkonkreten Daten darstellten, war es auch hier nicht sinnvoll, diese in die Datenbankstruktur einzupflegen, womit die Meilensteine dieses AP als erfüllt anzusehen sind.

### *Datenauswertung und Datennutzung*

Die vier ANGUS+ Typstandorte (Wagrien, Nusse, Lauenburg, Elmshorn) stellten Strukturen aus Schleswig-Holstein dar und wurden in geologischen Modellen zunächst mit homogenen Verteilungen von durchschnittlichen Porositäts- und Permeabilitätsdaten parametrisiert (siehe AP 1.1), die noch aus dem Vorhaben CO<sub>2</sub>-MoPa bekannt waren (Hese et al. 2012). Für jede Formation konnte so zunächst je eine Wertespannweite für die Porosität wie auch für die Permeabilität festgelegt werden, die aus Daten rechtlichen Gründen seitens des LLUR SH nicht mit orts- bzw. teufenkonkreten Messungen oder statistischen Merkmalen wie Häufigkeitsverteilungen versehen waren. Die von der KW-Industrie erhobenen, detaillierten und originären Messwerte dieser Parameter an den vier Standorten standen dem ANGUS+ Forschungsvorhaben nicht zur Verfügung.

Um einen Eindruck von heterogenen Verteilungen von Porositäts- und Permeabilitätswerten in Speicherformationen zu erhalten, wurden die vornehmlich aus Niedersachsen stammenden Inhalte der Projektdatenbank verwendet. Neben einer einfachen, statistischen Auswertung der Porositäten und Permeabilitäten wurden auch horizontale und vertikale Korrelationslängen dieser hydraulischer Parameter, sowie auch von Mineralgehalten, berechnet (Dethlefsen et al. 2014). Damit konnte auch eine statistisch begründete, heterogene Verteilung dieser hydraulischen Parameterwerte in Speicherformationen zur Verwendung in geologischen Modellen für numerische Szenarienanalysen generiert werden. Es blieb jedoch festzustellen, dass diese heterogenen Parameterfelder rein geostatistisch berechnet waren und keine weitergehende, sedimentologisch begründete Interpretation enthielten. Diese ist grundsätzlich in Form von Faziesmodellen möglich, wenn über die geostatistische Interpretation der Daten hinaus auch weitergehende Kenntnisse beispielsweise der typischen und lokalen, räumlich differenzierten Sedimentablagerungsbedingungen und deren Auswirkungen auf das sedimentäre Gefüge durch Kernansprachen, Dünnschliffe und geophysikalische Bohrlochuntersuchungen bekannt sind. Dies wird am Beispiel des Gasfeldes Thönse dargestellt (Gaupp 1991), was ergänzend für die Erstellung von 3D- heterogenen Porositäts- und Permeabilitätsfeldern verwendet wurde (siehe AP 1.1, AP 3.2).

Nach Betrachtung der hydraulischen Formationseigenschaften erfolgte die Auswertung von in der Projektdatenbank abgelegten Zusammensetzungen der Formationswässer. Die ersten Schritte bestanden dabei darin, die Plausibilität der in der Projektdatenbank abgelegten Formationswasserzusammensetzungen anhand von Ionenbilanzen zu überprüfen, fehlende Angaben zu Inhaltsstoffen zu identifizieren und nach Möglichkeit auf Basis von geochemischen Modellrechnungen zu ergänzen, so dass die In-situ-Zusammensetzungen der Formationswässer rekonstruiert werden konnten (Goldschagg 2014). Auf dieser Basis sollten dann repräsentative Formationswasserzusammensetzungen analog zu den Grundwässern des oberflächennahen geologischen Einheiten (Dethlefsen et al. 2017) herausgearbeitet werden. Dabei war zu definieren, wie die Grundgesamtheit der Analysen in repräsentative Unterbereiche einzuteilen sein könnte, beispielsweise ob für verschiedene geologische Formationen, für bestimmte Tiefenbereiche oder aber für unterschiedliche geographische Regionen repräsentative Einheiten zu bilden sind. Aus der Literatur ist eine der Zunahme der Salinität mit der Teufe bekannt (Wolfgramm et al. 2011), die nicht durch die Auswertungen der Projektdatenbank in ANGUS+ nachvollziehbar war (Struß 2015). Der Grund für eine teufenabhängige bzw. teufenunabhängige

Salinität ist darin zu sehen, dass die, hauptsächlich von der Erdöl- und Erdgasindustrie gewonnenen und in ANGUS+ verwendeten, Formationswasserproben vornehmlich aus Randsenken von Salzstöcken oder Salzmauern stammen, in denen Kohlenwasserstoffe zu erwarten waren oder gefunden wurden. Im Gegensatz dazu fokussierte die geothermische Nutzung tiefer Formationswässer sowie Erkundungsarbeiten in der früheren DDR, die hauptsächlich der Studie von Wolfgramm et al. (2011) zu Grunde liegen, nicht auf durch Salztektonik gestörte Bereiche. Damit hat die Nähe des Brunnens zu einer Salzformation den größten, erkannten Einfluss auf die Zusammensetzung der Formationswasserprobe. Für eine weitergehende Quantifizierung dieses Einflusses wäre zumindest die genaue Kenntnis der Brunnenabstände zu den Salzformationen nötig, was nur unter Zuhilfenahme von detaillierten 3D-Strukturmodellen der entsprechenden Regionen, die dem ANGUS+ Verbund nicht vorlagen.

Es bleibt festzustellen, dass in den CO<sub>2</sub>-MoPa und ANGUS+ Vorhaben alle in der Datenbank abgelegten Informationen mit Ausnahme von Erdgaszusammensetzungen einer ersten Auswertung unterzogen wurden. Für weitergehende Datenauswertungen, beispielsweise zur Erstellung regionaltypischer Parameterzusammenstellungen oder Korrelationen von Parameterwerten aus verschiedenen Gruppen (z. B. Formationswasser und Petrochemie), sind jedoch künftig noch weiterführende Arbeiten sinnvoll. Dabei wäre es ausgesprochen wünschenswert, wenn die von der Kohlenwasserstoffindustrie erhobenen Datensätze der Forschung vollständig zugänglich wären.

#### (4) AP 1.4 Entwicklung von Konzepten zur Standorterkundung und von Monitoringstrategien zur optimierten Nutzung oberflächennaher Wärmespeicher

Im Rahmen des Arbeitspakets AP 1.4 wurden folgende Aufgabenstellungen bearbeitet:

- Aufarbeiten von Leitfäden und Regelwerken zur Analyse des verwaltungstechnischen Ist-Zustandes für Erkundung und Monitoring bei Bau und Betrieb oberflächennaher Wärmespeicher.
- Durchführung von Untersuchungen zur Evaluierung der Eignung geophysikalischer Messmethoden für das Temperaturmonitoring von Wärmespeichern.
- Ableiten/Bewerten von geophysikalischen Erkundungs- und Monitoringansätzen von oberflächennahen, unterirdischen Wärmespeichern in urbanen Räumen.
- Durchführung von Feldexperimenten zur Erhebung geophysikalischer/hydrogeologischer Parameter sowie Testen/Validieren von Erkundungs- und Monitoringverfahren.

*Aufarbeiten von Leitfäden und Regelwerken zur Analyse des verwaltungstechnischen Ist-Zustandes für Erkundung und Monitoring bei Bau und Betrieb oberflächennaher Wärmespeicher:*

Hierbei wurden vornehmlich Vorschriften beim Bau und Betrieb flacher geothermischer Anlagen berücksichtigt. Der verwaltungstechnische Ist-Zustand lässt sich wie folgt zusammenfassen: Die Vielzahl der länderspezifischen Planungsleitfäden verdeutlicht die Problematik, dass in der Regel keine einheitlichen Vorschriften und Richtlinien existieren. Für

den Bau und Betrieb werden aufgrund der unterschiedlichen geologischen Gegebenheiten daher häufig lediglich Abstände von geothermischen Installationen wie Erdwärmesonden zueinander bzw. zur Grundstücksgrenze definiert sowie Temperaturgrenzwerte für die Abkühlung bzw. das Erwärmen vorgegeben. Diese Vorgaben unterscheiden sich auf Bundeslandebene. Beim Bau und Betrieb von Anlagen <30 kW Heizleistung wird in der Regel von einer Vorerkundung (VDI 4640-1, 2010) und einem Monitoring, u. a. aus wirtschaftlichen Gründen, abgesehen. Nur bei dem Betrieb großer geothermischer Anlagen (häufig Wasser-Wasser-Anlagen) für die Klimatisierung von Wohn- oder Industriestandorten werden Vorversuche für die Dimensionierung sowie Installation einer oder mehrerer Grundwassermessstellen für Monitoringzwecke im Rahmen der wasserrechtlichen Genehmigung verlangt. Bei der Installation von Erdwärmesonden wird im Rahmen der Vorerkundung dafür häufig der Thermal Response Test eingesetzt, ein Test der die Installation einer Erdwärmesonde voraussetzt und über den in der Regel integral über die Tiefe, mit neueren Apparaturen auch tiefendifferenziert, Parameter wie die scheinbare Wärmeleitfähigkeit und der thermische Bohrlochwiderstand ermittelt werden können. Die Anforderungen an die Temperaturmessstellen und die Messtechnik für das Grundwassertemperaturmonitoring richten sich häufig nach den LAWA Richtlinien für die Beobachtung und Auswertung von Grundwassertemperaturen (1987). Die Herausforderung besteht dabei in der Erfassung schon geringer Temperaturunterschiede im urbanen Raum. Die Ergebnisse wurden im Rahmen des ANGUS+ Kick-Off-Meetings in Kiel im Juli 2013 in Form eines Posters präsentiert.

*Tabelle 1.1.4-1: Übersicht verschiedener geophysikalischer Messmethoden und relevanter geophysikalischer Parameter.*

<b>Messmethode</b>	<b>relevante geophysikalische Parameter</b>
Seismik	seismische Geschwindigkeit, Dichte
Gravimetrie	Dichte
Magnetik	magnetische Suszeptibilität
Geoelektrische Widerstandsmethoden	spezifischer elektrischer Widerstand
Elektromagnetik	elektrische Leitfähigkeit
Bodenradar	Dielektrizitätszahl, elektrische Leitfähigkeit
Radiometrische Methoden	natürliche Radioaktivität
Nuklearphysikalische Methoden	Dichte, Wassergehalt

*Durchführung von Untersuchungen zur Evaluierung der Eignung geophysikalischer Messmethoden für das Temperaturmonitoring von Wärmespeichern:*

Im Rahmen dieser Aufgabenstellung wurden zunächst Literaturrecherchen zu verschiedenen geophysikalischen Messmethoden, den entsprechend relevanten geophysikalischen

Parametern und deren Temperaturabhängigkeit durchgeführt. Tabelle 1.1.4-1 bietet eine kurze Übersicht der betrachteten Verfahren.

Bei der Auswertung der wissenschaftlichen Grundlagen erwies sich die Anwendung geoelektrischer Widerstandsmessungen, vorzugsweise als Bohrlochinstallationen, als die am besten geeignete Methode für das geophysikalische Temperaturmonitoring an oberflächennahen Wärmespeichern im urbanen Raum aufgrund der Sensitivitäten gegenüber Temperaturänderungen und Abschirmung gegenüber störenden Einflüssen. Die weiteren Untersuchungen wurden daher auf diese Methode fokussiert. Hierzu wurden Analysen auf Labor- und Feldskala durchgeführt. Neben eigenen Säulenversuchen wurden in enger Zusammenarbeit mit der Universität Kiel dort stattfindende Untersuchungen zur Erfassung der Bildung von Gasphasen an beheizten, wassergesättigten Sedimentsäulen mit einem geoelektrischen Monitoring begleitet. Hieran konnte das entsprechende Modell von Dachnov zur Temperaturabhängigkeit gemessener elektrischer Widerstandswerte experimentell überprüft werden, siehe Abbildung 1.1.4-1 aus Lüders et al. (2016).

Darauf aufbauend wurden verschiedene Feldexperimente auf einer Testfläche auf dem Gelände des UFZ in Leipzig durchgeführt. Den Experimenten zum geoelektrischen Temperaturmonitoring ging eine sehr intensive hydrostratigraphische Vorerkundung unter Anwendung innovativer vertikal hochauflösender Direct Push Messtechnik voraus (siehe u. a. Seibertz et al. 2016). Zudem wurden die Experimente bereits im Vorfeld von einem intensiven Monitoring der Grundwassertemperatur und hydrogeologischem Monitoring begleitet. Dafür wurden zahlreiche Grundwassermessstellen auf dem Testfeld installiert und mit Monitoringmesstechnik ausgestattet (u. a. Einsatz von Tidbit-Temperatursensoren, Levelloggern und Temperaturmesstechnik mittels faseroptischer Kabel). Im Rahmen der Feldversuche wurden Aufheizexperimente im oberflächennahen Untergrund bis ca. 16 m Tiefe unter Geländeoberkannte durchgeführt und die Temperaturentwicklung im Untergrund sowohl mittels konventioneller Messsensorik, als auch mittels vier installierter Bohrlochelektrodenketten verfolgt.

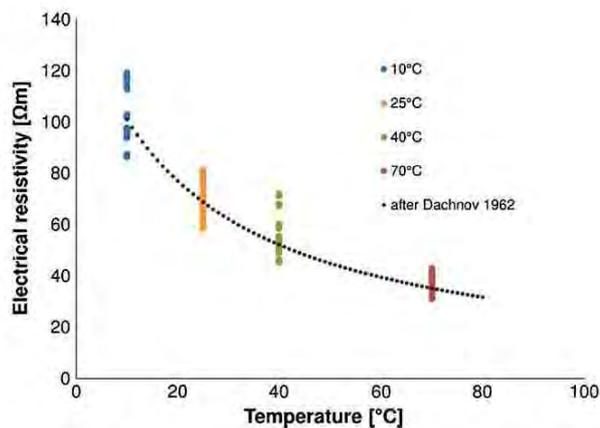


Abbildung 1.1.4-1: Vergleich errechneter und gemessener elektrischer Widerstände aus Lüders et al. (2016).

Die Ergebnisse belegen, dass die Nutzung der Widerstandsgeoelektrik auch unter Feldbedingungen möglich ist. Der Vorteil liegt in dem größeren Integrationsvolumen der Methode, dass u. a. durch den vertikalen Abstand der Elektroden, den lateralen Abstand der Bohrlochelektroden und die verschiedenen Messkonfigurationen bestimmt wird. So kann letztlich auch eine Temperaturfahne zwischen den Elektrodenketten erfasst werden. Als deutlicher Nachteil gegenüber dem klassischen messstellenbasierten Temperaturmo-

Monitoring muss der erhöhte Zeitaufwand bei der Installation der Bohrlochelektroden, für die Ermittlung der optimalen Messkonfiguration, sowie für das Einrichten, die Kontrolle und insbesondere die Auswertung der Messdaten gesehen werden. Jede Art des Monitorings ist unweigerlich mit einem Kostenaufwand verbunden, der bei der Wirtschaftlichkeitsanalyse von oberflächennahen Wärmespeichern berücksichtigt werden muss. Daher muss es das Ziel sein, mittels einer zuverlässigen Vorerkundung und Modellparametrisierung etwaige Umweltauswirkungen im Vorfeld möglichst genau vorherzusagen, um damit das Auswirkungsmonitoring auf ein Mindestmaß reduzieren zu können.

*Ableiten/Bewerten von geophysikalischen Erkundungs- und Monitoringansätzen von oberflächennahen, unterirdischen Wärmespeichern in urbanen Räumen:*

Die Anforderungen, die eine nachhaltige Bewirtschaftung von Wärmespeichern an den oberflächennahen Untergrund stellt, variieren zwischen den verschiedenen Speicherszenarien (z. B. Be- und Entladefrequenz). Eine detaillierte Vorerkundung ist damit die Grundvoraussetzung für das Abschätzen des Speicherpotenzials (Grundlage der Speicherdimensionierung) und der Speichereffizienz (Grad der Rückgewinnung). Darüber hinaus ist die Vorerkundung unerlässlich für die zuverlässige Vorhersage der induzierten Temperaturänderung im Untergrund und deren Ausbreitung. Bei der Vorerkundung im Vorfeld von Bau und Betrieb eines Wärmespeichers ist die Parametrisierung des Untergrundes bzgl. der relevanten Strömungs- und Wärmetransportprozesse von besonderer Bedeutung. Die zur Beschreibung der konduktiven Wärmetransportprozesse sensitivsten Parameter sind die Wärmeleitfähigkeit und die Wärmekapazität. Zur Charakterisierung des advektiven Wärmetransportes muss zusätzlich die Grundwasserdynamik bestimmt werden. Um den Einfluss von Advektion und Konduktion auf den Wärmetransport im Untergrund zu bewerten, müssen die für die Erschließung relevanten Schichten, deren Eigenschaften und Mächtigkeit sowie die Mächtigkeit der ungesättigten Zone bekannt sein. Die Ermittlung der unbeeinflussten Grundwassertemperaturen, sofern im urbanen Raum erfassbar, sind für die abschließende Bewertung der induzierten Temperaturänderungen von großer Bedeutung. Aufbauend auf diesen Anforderungen wurde ein Erkundungskonzept abgeleitet (Vienken et al. 2015), das ursprünglich für die Erkundung kontaminierter Standorte entwickelt wurde. Es soll die Grundlage für einen zuverlässigen, nachvollziehbaren und effizienten Entscheidungsprozess bei der Planung von Wärmespeichern bieten. Das Konzept basiert auf:

- Machbarkeitsstudie, die sowohl regulative Rahmenbedingungen, als auch die generelle Eignung des Untergrundes für einen ökonomisch und ökologisch nachhaltigen Betrieb untersucht.
- Detailerkundung auf Grundlage a) Charakterisierung der Untergrundstruktur, b) Bestimmung relevanter hydraulischer Parameter, c) Messung relevanter thermophysikalischer Parameter unter Kombination oberflächengeophysikalischer und vertikal hochauflösender Sondiervverfahren.
- Modellbasierten Szenarienanalysen für die Ermittlung der optimalen Systemkonfiguration.
- Visualisierung der erhobenen Daten und Ergebnisse zur Identifikation fehlender Daten und zur Prüfung der Konsistenz von Daten aus verschiedenen Quellen.

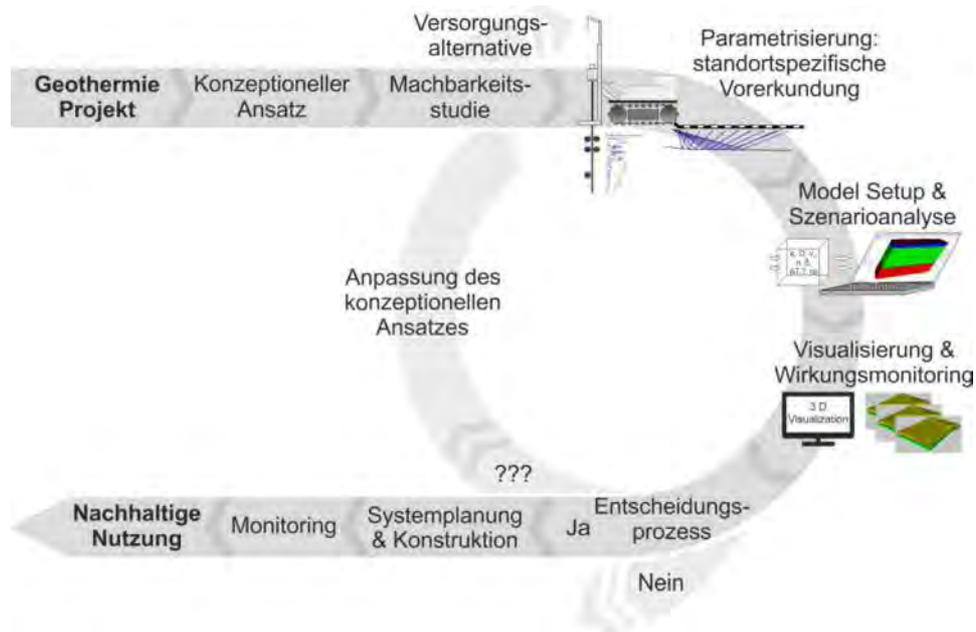


Abbildung 1.1.4-2: Innovatives Erkundungskonzept aus Schelenz (2017) nach Vienken et al. (2015).

#### Durchführung von Feldexperimenten zur Erhebung geophysikalischer/hydrogeologischer Parameter sowie Testen/Validieren von Erkundungs- und Monitoringverfahren:

Feldexperimente wurden sowohl auf der Testfläche auf dem UFZ-Gelände in Leipzig, als auch auf zwei ausgewählten Teststandorten durchgeführt. Bei einem der Standorte handelt es sich um ein Wohngebiet im Kölner Westen mit starker geothermischer Nutzung. Hier wurden Simulationen zu induzierten Temperaturfahnen einzelner geothermischer Anlagen durchgeführt (Lindner 2015) und von einem großskaligen Grundwassertemperaturmonitoring begleitet. Im Zeitraum 2013-2016 lassen sich dabei Grundwassertemperaturänderungen um mehrere Zehntel Grad feststellen. Bei dem zweiten Testgebiet handelt es sich um ein Neubaugebiet in der Stadt Taucha, etwa 8 km nordöstlich von Leipzig als Fallbeispiel eines Wohnquartiers mit potenzieller intensiver thermischer Nutzung des oberflächennahen Untergrundes. In ihrer Summe kann der Wärmebedarf in Wohnquartieren schnell mehrere hundert kW betragen für die geothermische Installationen mit einer Gesamtinstallationslänge von mehreren Kilometern benötigt werden. An dem Fallbeispiel Taucha wurden durch den kombinierten Einsatz von Oberflächengeophysik und minimal invasiver Direct Push Sondiertechnik umfangreiche Datensätze der Untergrundeigenschaften zur Modellparametrisierung erhoben (siehe u. a. Guth 2014), die insbesondere die relevanten Parameter hydraulische Leitfähigkeit und Wärmeleitfähigkeit beinhalteten. An dem Standort konnten zudem zentrale Teile des vorgestellten Erkundungsansatzes, insbesondere die Detailerkundung, erfolgreich getestet werden. Dabei wurde evaluiert, in wie weit die mittels innovativer Erkundungstechnik gewonnenen Daten den auf Grundlage einfacher Literaturrecherchen ermittelten Daten zur Auslegung von Erdwärmesondensystemen sowie der Simulation der Umweltauswirkungen überlegen sind. Dabei zeigte sich deutlich die Relevanz des Themas: Neben einer wesentlich verbesserten Vorhersage der Umweltauswirkungen können zudem durch eine optimierte Erkundung im Beispielgebiet Bohr- und Installationskosten von bis zu 1.850 EUR (bei angenommenen Bohr- und Installationskosten von 50 EUR pro m Erdwärmesonde) pro Haus gespart werden. Auf

Wohngebietsskala mit 53 Häusern entspricht dies einer Gesamtsumme von 98.050 EUR, die geschätzten Erkundungskosten von ca. 20.000-25.000 EUR gegenüberstehen. Für die Umsetzung bedarf es aber neuer übergeordneter Konzepte für die geothermische Quartiersentwicklung, wie z. B.:

- 1) Eine übergeordnete Erkundung des Wohngebietes mit individueller, grundstücksbasierter geothermischer Nutzung. Die für die Planung geothermischer Systeme relevanten Daten werden dem Hausbesitzer zur Verfügung gestellt. Auf dieser Grundlage kann eine individuelle Entscheidung über das einzusetzende Heizsystem und dessen Dimensionierung getroffen werden.
- 2) Eine gemeinsame Erkundung des Wohngebietes mit koordinierter Installation: Hierbei werden alle Gebäude des Wohngebietes, deren Eigentümer Interesse an der Erdwärmenutzung haben, mit dieser versorgt. Die Installation wird durch den Grundstücksentwickler in Form eines Wärmecontractingmodells angeboten.
- 3) Geothermische Versorgung des gesamten Wohngebietes zur Bereitstellung von Wärme bzw. Kälte als Teil der lokalen Infrastruktur: Hierbei bietet der Grundstücksentwickler die Versorgung aller Häuser mit Erdwärme an. Die Errichtung und Wartung des Systems sind vergleichbar mit der Infrastruktur der Wasser- und Stromversorgung.

Detaillierte Informationen zu der Fallstudie Taucha finden sich in Schelenz et al. (2017).

Die Projektziele des Arbeitspaketes „Entwicklung von Konzepten zur Standorterkundung und von Monitoringstrategien zur optimierten Nutzung oberflächennaher Wärmespeicher“ wurden vollständig erfüllt und die entsprechenden Meilensteine erreicht.

Nach Aufarbeitung von Leitfäden und Regelwerken zur Analyse des verwaltungstechnischen Ist-Zustandes für Erkundung und Monitoring bei Bau und Betrieb von Anlagen zur Nutzung oberflächennaher Geothermie ergab sich aus den uneinheitlichen Regelungen ein hoher Bedarf zur Ableitung von Erkundungs- und Monitoringkonzepten vor allem beim Bau und Betrieb kleinskaliger Anlagen zur thermischen Nutzung des oberflächennahen Untergrundes, die in Wohngebieten eine große Anwendungsdichte erreichen können. Dafür wurden Anforderungen an geophysikalische Erkundungs- und Monitoringverfahren in urbanen Räumen formuliert und gängige Verfahren bewertet. Im Rahmen der Evaluierung von Methoden für das geophysikalische Temperaturmonitoring wurden zunächst Literaturrecherchen zu verschiedenen geophysikalischen Messmethoden, den entsprechenden relevanten Parametern und deren Temperaturabhängigkeit durchgeführt. Bei der Auswertung der wissenschaftlichen Grundlagen und basierend auf verschiedenen Labor- und Feldversuchen erwies sich die Anwendung geoelektrischer Widerstandsmessungen, vorzugsweise als Bohrlochinstallationen, als die am besten geeignete Methode für das geophysikalische Temperaturmonitoring. Aufbauend auf den o. g. Ergebnissen wurden entsprechende Erkundungs- und Monitoringkonzepte abgeleitet. Umfangreiche Feldexperimenten wurden daraufhin zur zuverlässigen Erhebung relevanter geophysikalischer und hydrogeologischer Parameter sowie zum weiteren Testen und Validieren der abgeleiteten Konzepte erfolgreich durchgeführt.

(5) AP 1.5 Parametrisierung der oberirdischen infrastrukturellen Gegebenheiten und raumplanerischer Vorgaben

Das Ziel dieses Arbeitspaketes war die Parametrisierung der oberirdischen Energie-Infrastruktur und der vorhandenen raumplanerischen Festsetzungen und Vorgaben im Untersuchungsgebiet Schleswig-Holstein (S-H), sowie deren Integration in die aufzubauende Geodatenbasis (Meilenstein 1.5.1). Diese Datenbasis sollte als eine Grundlage für die Abbildung des ober- und unterirdischen Planungsraums in einem dreidimensionalen Datenmodell dienen und für die Analysen zu den Auswirkungen der Kopplung der untersuchten Speicheroptionen mit der oberirdischen Raumplanung, der vorhandenen Energieversorgungsinfrastruktur (AP 3.5), sowie den vorhandenen Schutzgütern (AP 4.2) mittels der in AP 2.5 entwickelten Methodik genutzt werden. Dazu sollten die (energiesystem-)relevanten oberirdischen Geodaten zu Energieerzeugung, -übertragung, -speicherung und -verbrauch, sowie vorhandene Raumordnungspläne und darin ausgewiesene Eignungs-, Vorrang- und Schutzgebiete berücksichtigt werden.

Abbildung 1.1.5-1 gibt eine Übersicht zu den, im Rahmen einer kontinuierlichen Recherche, bei unterschiedlichen datenhaltenden Stellen abgerufenen Geodatensätzen bezüglich der Energieinfrastruktur und der Raumordnung in S-H. Es werden die jeweils verfügbaren Datenformate, die Aktualität des gelieferten Datensatzes, die enthaltenen Parameter, sowie die Verfügbarkeit bei den datenhaltenden Stellen (online oder auf Anfrage) gelistet. Für Erläuterungen zur Auswahl und Art der Datensätze, sowie zu Hemmnisse bei der Beschaffung (siehe Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“).

Landesfachbereich	Verfügbare Geo-Daten	Datenformat	Aktualität	relevante Parameter	datenhaltende Stelle	Verfügbarkeit	Anmerkungen
<b>Energieerzeugung</b>							
<b>zu vorhandenen Anlagen</b>							
Kraftwerkliste	Excel-Tabelle	11/2015	Adresse, Energieträger, Leistung, Netzanschluss	Bundesnetzagentur	online verfügbar	konv. Kraftwerke, Wind- und Solarparks, Pumpspeicher (≥ 10 MW)	
Anlagenstammdaten EEG ÖNB	Excel-Tabelle	12/2014	Postleitzahlenbereich, Energieträger, inst. Leistung	Übertragungsnetzbetreiber	online verfügbar	keine Veröffentlichung mehr nach 12/2014	
Anlagenstammdaten EEG ÖNB energymap	csv-Datei	08/2015	Koordinaten, Adresse, Energieträger, inst. Leistung	Deutsche Gesellschaft für Sonnenenergie	online verfügbar	Datenaufbereitung 2016 eingestellt	
Anlagenstammdaten EEG Anlagenregister	Excel-Tabelle	12/2015	Koordinaten, Adresse, Energieträger, inst. Leistung, Netzanschluss	Bundesnetzagentur	online verfügbar	nur Meldungen ab 08/2014	
genehmigte Anlagen BinschG	Excel-Tabelle	02/2014	Koordinaten, inst. Leistung, Nebentritte, Rotordurchmesser	Landesamt	auf Anfrage	Windkraft- und Biogasanlagen	
GeoSeaPorta	shape-Datei	03/2014	Standorte und Abgrenzungen von Windparks	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	auf Anfrage	Einschränkungen für Nutzung und Veröffentlichung	
offshore Windkraftanlagen	Grakl	2015	inst. Leistung von Windparks, Anzahl Anlagen, inst. Leistung	Stiftung offshore-Windenergie	online einsehbar	kann Daten aus GeoSeaPorta zugeordnet werden	
<b>zu geplanten Anlagen</b>							
GeoSeaPorta	shape-Datei	03/2014	Standorte und Abgrenzungen von geplanten Windparks	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	auf Anfrage	online einsehbar	
offshore Windkraftanlagen	Grakl	2015	geplante inst. Leistung von Windparks, Anzahl Anlagen, inst. Leistung	Stiftung offshore-Windenergie	online einsehbar		
<b>zu Potenzial für Anlagen</b>							
Studie zu Potenzialen und Ausbauprozesse EE	Grakl	05/2014	Prognosen auf Kreis- und Gemeindeebene (Wind, Solar, Biomasse)	Pöyry Deutschland GmbH / Ministerium	nicht angefragt	intem	Methodik Windkraft beruht auf heute ungünstigen Windeignungsgebieten
Potenziale tiefer Geothermie, Kavernenspeicher	shape-Datei	2014	Lage und Ausdehnung von geologischen Strukturen mit Potenzial	Landesamt	online einsehbar		
<b>Energieübertragung</b>							
<b>zu vorhandenen Leitungen</b>							
ATKIS Basis DLM Unverändert	shape-Datei	2013	Verlauf/Freihaltungen + Spannungsebene, oberird. Pipeline	Landesvermessungsamt	auf Anfrage	nur oberirdische Leitungen erfasst	
ATKIS Basis DLM Punktdaten	shape-Datei	2013	Standorte Umspannwerke, oberird. Speicher, Kraftwerke + Energieträger	Landesvermessungsamt	auf Anfrage	Anlagen erneuerbare Energien unvollständig	
Netzplan Mittelspannung (Auszug)	CAD-Datei	2015	Verlauf Mittelspannungsleitungen	Netzbetreiber	auf Anfrage	Einschränkungen für Nutzung und Veröffentlichung	
GeoSeaPorta	shape-Datei	03/2014	Verlauf von Seekabeln, Umspannplattformen, Anlandungspunkte	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	auf Anfrage	Einschränkungen für Nutzung und Veröffentlichung	
Netzplan Hochdruckspeisungen	CAD-Datei	2015	Verlauf Hochdruckspeisungen	Netzbetreiber	auf Anfrage	Einschränkungen für Nutzung und Veröffentlichung	
Netzplan Ferngasleitungen	Grakl	2015	Verlauf Ferngasleitungen, Leitungsart, Gas-Arten	Netzbetreiber	online einsehbar	nicht geneferenziert, keine Reaktion auf Anfrage nach Geo-Daten	
<b>zu geplanten Leitungen</b>							
Netzausbau Hoch-/Hochspannung	shape-Datei	2015	Korridore für mögliche Ferntrassierung (inkl. Vorzugskorridor)	Übertragungsnetzbetreiber	auf Anfrage	endgültige Trassenentwürfe stehen noch nicht fest	
Netzausbau 110 kV	Grakl	2015	Verlauf von geplanten Freileitungen und Erdkabeln	Netzbetreiber	online einsehbar	nicht geneferenziert, keine Reaktion auf Anfrage nach Geo-Daten	
Netzausbau offshore (GeoSeaPorta)	shape-Datei	03/2014	Verlauf von geplanten Seekabeln, geplante Umspannplattformen	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	auf Anfrage	online einsehbar	
Netzausbau Ferngasleitungen	Grakl	2015	Verlauf von standardisierten notwendigen Gasleitungen	Bundesamt für Seeschifffahrt und Hydrographie	online einsehbar	Netzentwicklungsplan (NEP) Gas der Netzbetreiber	
<b>Energiespeicherung</b>							
<b>zu vorhandenen Speichern</b>							
Unterlage-Gespicher allgemein	Grakl	2015	grober Standort im Bundesland, Speicherart, Speichermedium	LEEG Niedersachsen	online einsehbar	Publikation in Zeitschrift "Erdöl Erdgas Kohle"	
Kavernen Standorte	Text	2015	Adresse, Anzahl Kavernen, Speichermedium, Speicherolumen	Speicherbetreiber	online einsehbar	Informationen von Internetseite der Betreiber	
<b>Grundlage für Analysen</b>							
<b>zur Energieerzeugung</b>							
DWD Messstationen	csv-Datei	2014	Koordinaten, stündliche Windgeschwindigkeiten	Deutscher Wetterdienst	online verfügbar	Service: Wetterdaten und Statistiken Express (WESTE) XL	
Netzgebiet Kataliter	Grakl	2014	Abgrenzung Netzgebiete, zugehörige Windenergieflächen	Netzbetreiber	online einsehbar	nicht geneferenziert, „EEG-Kataliter“ Schleswig-Holstein Netz AG	
<b>zur Energieübertragung</b>							
ATKIS Basis DLM Unverändert	shape-Datei	2013	Straßenverläufe (möglicher Verlauf Rohrleitungen in Wärmenetzen)	Landesvermessungsamt	auf Anfrage		
zum Energiebedarf	shape-Datei	2014	Gebäudegeometrien (Grundfläche, mittlere Gebäudehöhe, Volumen)	Landesvermessungsamt	auf Anfrage		
amtliche Hausumringe	shape-Datei	2014	Gebäudegeometrie (Grundriss)	Landesvermessungsamt	auf Anfrage		
Standorte von Wärmenetzen	Wreklap	2014	Koordinaten, Adresse des Betreibers, Primärenergiefaktor (PF)	Landesvermessungsamt	online einsehbar	Daten im Digitalen Atlas Nord	
zum Speicherbedarf	csv-Datei	2015	Netzgebiet, Ort des Eingangs, Anlagencharakterist	Netzbetreiber	online verfügbar		
Einsätze Einspeisemanagement 110 kV Netz	Grakl	2012	Einspeisemanagement auf Gemeindeebene (Postleitzahlenbereiche)	Ecofys GmbH / Ministerium	nicht angefragt	Methodik basiert auf Anlagenstammdaten EEG DGS energymap	
<b>Raumordnung</b>							
<b>Landesplanung</b>							
Landesentwicklungsplan 2010	gdb-Datei	2010	Geökofaktwerke, Schwepunktfläche Rotstoffgewinnung, Endölgewinnung	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung des LEP für 2016 angekündigt	
<b>Regionalplanung</b>							
Regionalplan Planungsraum I	gdb-Datei	2012	Vorrang-, Vorbehaltsgebiete Grundwasser, Naturschutz, Rohstoffe	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung der Regionalpläne angekündigt	
Regionalplan Planungsraum II	gdb-Datei	2012	Vorrang-, Vorbehaltsgebiete Grundwasser, Naturschutz, Rohstoffe	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung der Regionalpläne angekündigt	
Regionalplan Planungsraum III	gdb-Datei	2012	Vorrang-, Vorbehaltsgebiete Grundwasser, Naturschutz, Rohstoffe	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung der Regionalpläne angekündigt	
Regionalplan Planungsraum IV	gdb-Datei	2012	Vorrang-, Vorbehaltsgebiete Grundwasser, Naturschutz, Rohstoffe	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung der Regionalpläne angekündigt	
Regionalplan Planungsraum V	gdb-Datei	2012	Vorrang-, Vorbehaltsgebiete Grundwasser, Naturschutz, Rohstoffe	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	Fortschreibung der Regionalpläne angekündigt	
Windenergiegebiete	shape-Datei	2012	Flächen für aktuelle und zukünftige Windkraftnutzung	Landesplanungsbehörde	auf Anfrage	bisherige als ungültig erklärt (Ulrich ÖVG Schleswig 01/2015)	
<b>weitere Planungen</b>							
Naturschutzgebiete	shape-Datei	2014	Grenzen der Schutzgebiete	Landesamt	auf Anfrage	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Natura 2000 (EU-Vogelschutz, FFH)	shape-Datei	2014	Grenzen der Schutzgebiete	Landesamt	auf Anfrage	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Ramsar-Gebiete	shape-Datei	2014	Grenzen der Schutzgebiete	Landesamt	auf Anfrage	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
nationale Schutzgebiete	shape-Datei	2014	Grenzen der Schutzgebiete	European Environment Agency EEA	online verfügbar	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Natura 2000 Gebiete	shape-Datei	2014	Grenzen der Schutzgebiete	European Environment Agency EEA	online verfügbar	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Wasserschutzgebiete	pdf-Dateien	2014	Abgrenzungen der Wasserschutzgebiete im Verordnungstext	Landesamt	online verfügbar	nicht geneferenziert, siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Grundwasserertragsstellen	shape-Datei	2014	Punktdaten zu Grundwasserertragsstellen	Landesamt	auf Anfrage	siehe auch „Landschafts- und Umweltas“	
Bergbauergiebungen	shape-Datei	2016	Aufschutts-, Erlaubnis-, Bergwerksleistungsbereiche	Landesamt	online verfügbar	für Norddeutsches Land LEEG Niedersachsen	
<b>zusätzliche Aspekte</b>							
Zensus 2011 Bevölkerung pro km <sup>2</sup>	shape-Datei	05/2011	Bewölkungszahl pro km <sup>2</sup> Rasterlee	Statistisches Bundesamt	online verfügbar	Raster- und Datensatz einzeln herunterladbar	
Digitales Landschaftsmodell DLM 250	shape-Datei	2014	Siedlungsflächen, Industrieflächen, Tagbauflächen	Bundesamt für Kartographie und Geodäsie	online verfügbar	BKG Dienstleistungszentrum „Open Data“	

Abbildung 1.1.5-1: Verfügbare und zur Verfügung gestellte Geodaten bezüglich Energieinfrastruktur und Raumordnung in Schleswig-Holstein (Stand 03/2016).

Der Koordinaten- bzw. Adressbezug der zur Verfügung gestellten Datensätze erlaubt zum einen die zweidimensionale, kartographische Abbildung der Energieinfrastrukturen und der Gebiets- und Raumkategorien der Raumordnung in Schleswig-Holstein, in Kombination mit eigens in GIS-Formate konvertierte geologischen Datensätzen (hier: Salzstrukturen und Modellgebietsgrenzen) in einem regulären 2D GIS (Abbildung 1.1.5-2).

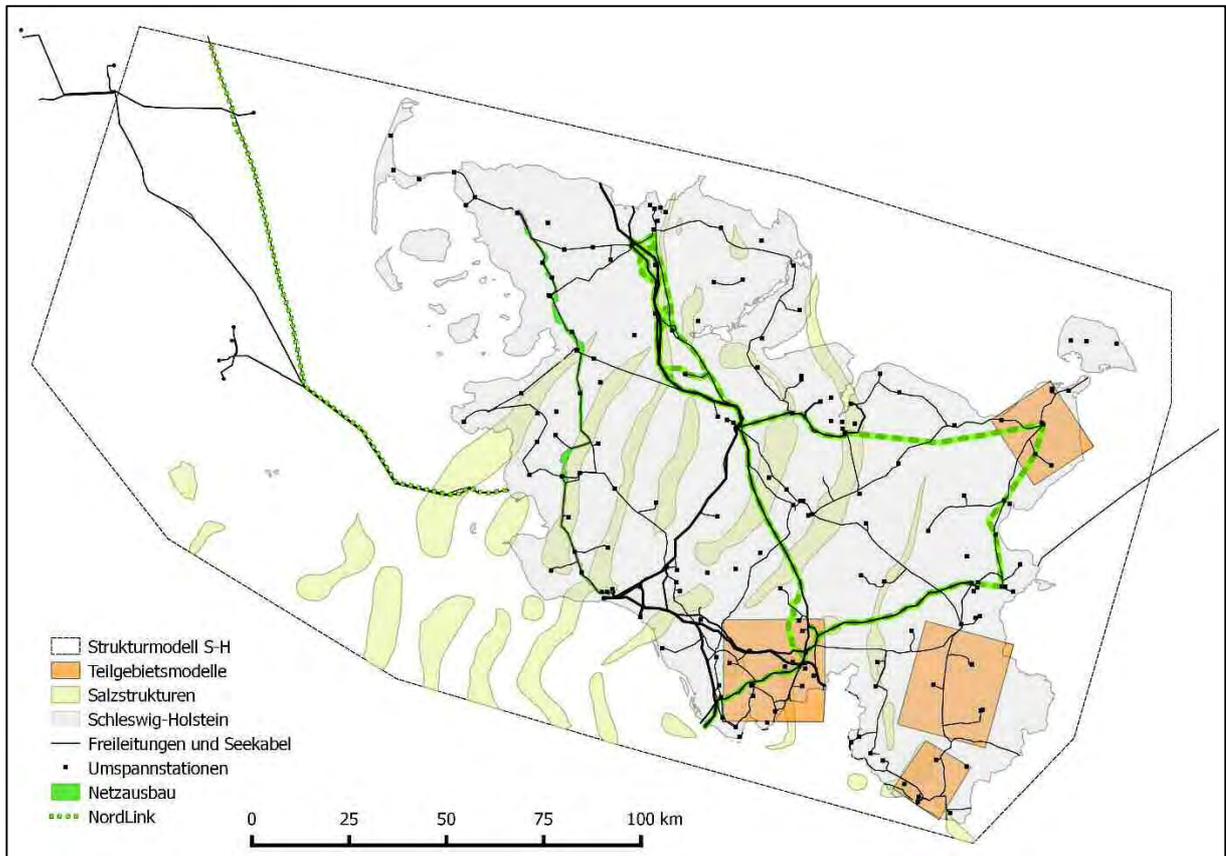


Abbildung 1.1.5-2: Vorhandene und geplante oberirdische Freileitungen, Seekabel und Umspannstationen sowie Lage von unterirdischen Salzstrukturen und Teilgebietsmodellen im geologischen Strukturmodell von S-H.

Mittels einer eigens entwickelten Prozessierungsmethodik konnten die zur Verfügung gestellten Geodatensätze zur Energieinfrastruktur und Raumordnung, sowie die vorhandenen geologischen Informationen zum anderen in einheitliche 3D-Voxelmodelle überführt werden (Abbildung 1.1.5-3). So können die oberirdischen Geodaten schließlich auch im dreidimensionalen Abfragewerkzeug des entwickelten 3D webGIS für die unterirdische Raumplanung in Kombination mit den dreidimensionalen geologischen Datensätzen verwendet und angesprochen werden (vgl. AP 2.5, siehe Nolde et al. 2016a; Nolde et al. 2016b).

Die im Rahmen des AP durchgeführten Recherche-, Abfrage- und Parametrisierungsarbeiten ergaben, dass Geodaten zur oberirdischen Energieinfrastruktur, Schutzgütern und Raumordnung bei unterschiedlichsten Akteuren in unterschiedlichsten Formaten oft räumlich exakt, aber teilweise auch inhaltlich inkonsistent vorgehalten werden. Diese Vielfalt an Akteuren (Ministerien, Landesämter, private Unternehmen, gemeinnützige Vereinigungen) und auch an Datenformaten erschwerte eine rasche und einheitliche Zusammenstellung der benötigten Geodaten. Die Aktualität der verfügbaren Geodatensätze wird allgemein durch die kontinuierlichen Veränderungen in der oberirdischen Energieinfrastruktur im Rahmen der Energiewende geprägt. Eine kontinuierliche, konsistente und

kurzfristige Aktualisierung der Datenbestände von Seiten der datenhaltenden Stellen ist selten gegeben. Wäre dies der Fall, hätte eine kontinuierliche Abfrage im Rahmen des AP allerdings auch zu einem erheblichen Mehraufwand geführt, da im Modellgebiet Schleswig-Holstein selten eine simple, frei zugängliche Bereitstellung der aktuellsten Geodaten zu den relevanten Themen gegeben war (siehe Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“).

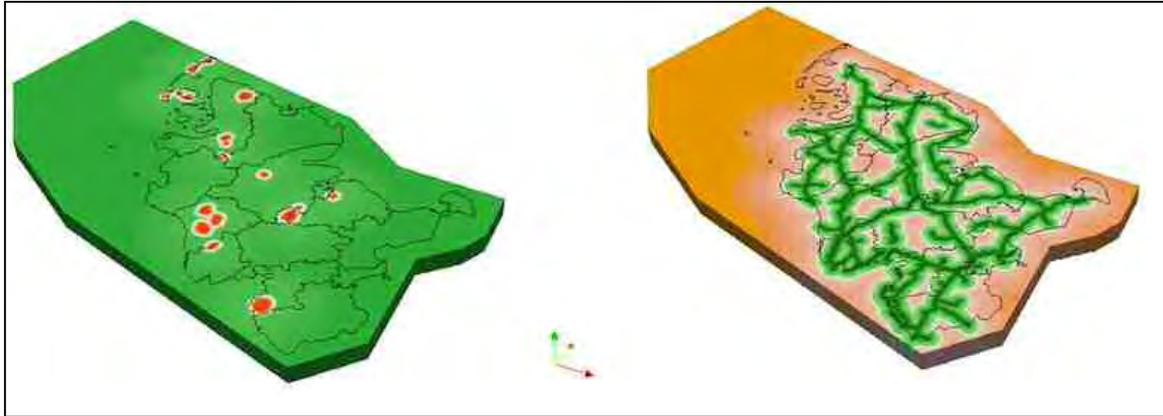


Abbildung 1.1.5-3: 3D-Voxelmodelle der Geodatensätze zur Lage von oberirdischen Grundwasservorranggebieten aus der Raumordnung (links) und zum Verlauf von Hochspannungsleitungen (rechts).

(6) AP 1.6 Experimentelle Parameterbestimmung geomechanischer Kenngrößen von Fels- und Salzgesteinen sowie des geomechanisch-seismischen Verhaltens norddeutscher Lockergesteine bei periodischem Wärmeeintrag und -entzug

*AP 1.6.1 Geomechanische THM Parameter für Fels- und Salzgestein*

Kavernen in tief liegende Salzformationen gelten, zum einen aufgrund ihres küstennahen und somit in guter Erreichbarkeit zu erneuerbaren Energiequellen (z. B. Offshore-Windparks) gelegenen Vorkommens, als aussichtsreiche Option für die Speicherung von Energie (z. B. in Form komprimierter Luft oder Wasserstoff) und für die Harmonisierung der teils stark schwankenden Netzauslastung. Zum anderen ist Salzgestein wegen seines stark viskosen Materialverhaltens und der sehr geringen Permeabilität prinzipiell für die verlustfreie Speicherung von Fluiden geeignet. Die Natur der erneuerbaren Energien bedingt eine stark fluktuierende Energieeinspeisung bzw. -entnahme in die Kavernen und somit eine zyklisch wechselnde Belastungssituation auf das umgebende Wirtsgestein.

Die Beschreibung des Materialverhaltens von Salzgestein unter den speziellen zyklischen thermo-mechanischen Belastungsbedingungen ist eine notwendige Grundlage für Simulationsberechnungen solcher Szenarien.

In enger Kooperation mit AP 2.1 und AP 3.1 können auf Basis numerischer Berechnungen mit zunächst simplen Modellansätzen Belastungspfade bestimmt werden, die als Eingangsgrößen für die Experimente herangezogen werden (Mahmoudi et al. 2016). Messwerte aus den experimentellen Untersuchungen dienen sodann zur Verbesserung des Stoffgesetzes und zur Optimierung der entsprechenden Modellparameter. Die Iteration dieser Arbeitsschritte soll zu einer sukzessiven Annäherung der Prognosen für das

Kavernenverhalten an realistische Szenarien unter Einbeziehung der komplexen und sich überlagernden Einflüsse und Randbedingungen führen (vgl. Abbildung 1.1.6-1).

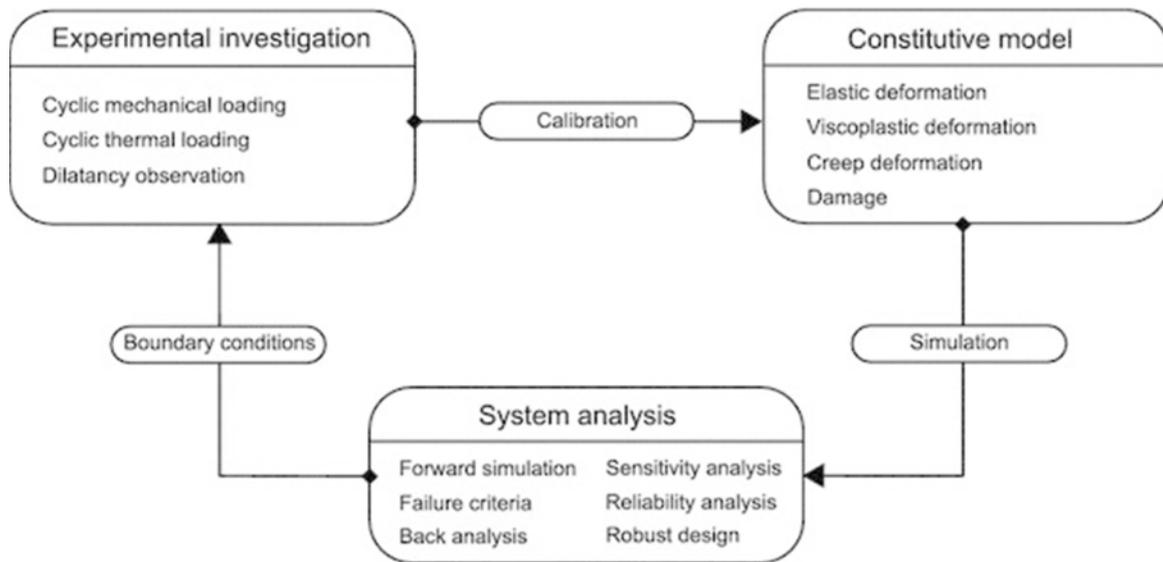


Abbildung 1.1.6-1: Interaktion AP 1.6, AP 2.1 und AP 3.1.

Während für statische Belastungssituationen umfangreiche Literaturdaten vorliegen ist der Umfang zyklischer Laborversuche an Salzgestein sehr begrenzt. Meist sind bei den wenigen bekannten Versuchen die aufgebrachten Randbedingungen nicht sehr eng angelehnt an den Betrieb von Salzkavernen zur Energiespeicherung. Insbesondere zyklisch-thermische Lastaufbringung blieb dabei bisher unberücksichtigt. Für eine optimale Kalibrierung der Stoffparameter des verwendeten Stoffgesetzes ist der Umfang bisheriger aus der Literatur bekannten Untersuchungen nicht ausreichend, weshalb die Durchführung weiterer auf die Fragestellung zugeschnittener Versuche notwendig ist.

Um spannungs-, temperatur- und ratenabhängige Einflüsse auf das Kriech- und Schädigungsverhalten von Steinsalz anwendungsbezogen und realistisch abbilden zu können, wurde ein neuer Triaxialprüfstand (vgl. Abbildung 1.1.6-2) konzipiert und installiert. Hierbei können Seitendruck, axialer Druck und Temperatur jeweils autark und zyklisch geregelt werden um beliebige Belastungszustände in einem Druckbereich von 0-40 MPa und einem Temperaturbereich von 20-80°C frei einzustellen. Der Seitendruck wird über eine VPC (Volume Pressure Controller) in einem Bereich von 0-100 bar geregelt und mittels eines Druckumsetzers (Faktor  $n=4$ ) auf das entsprechende Druckniveau verstärkt. Mittels der VPC lassen sich zudem Volumenänderungen bestimmen. Die axiale Spannung wird mit einem Pneumatikzylinder über einen Stempel auf die Versuchsprobe übertragen. Eine vorgeschaltete APC (Air Pressure Controller) ermöglicht die Regelung des Luftdrucks. Durch die Wandung der Triaxialzelle führt eine Rohrleitung, durch die ein Fluid geströmt werden lassen kann. Ein daran angeschlossenes Thermostat pumpt temperiertes Wasser durch diese Leitungen hindurch. Die Wärmeenergie wird von der Zellwand auf das Zellfluid und nachfolgend auf die Salzprobe übertragen. Die Temperatur des Wassers im Thermostat, des Zellfluids, sowie in den Stempeln nahe der Probenendflächen wird kontinuierlich protokolliert.

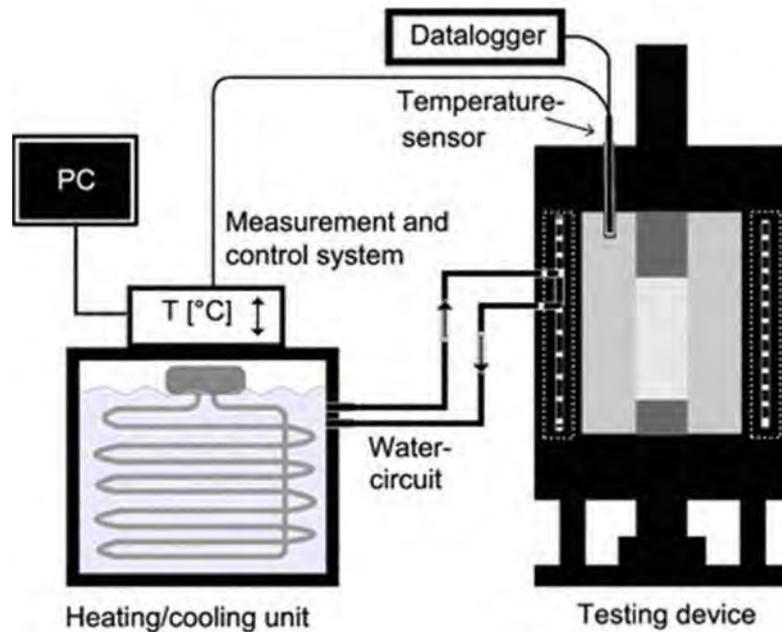


Abbildung 1.1.6-2: Schematischer Aufbau der Versuchseinrichtung.

Die Probenverformung wird zudem durch insgesamt 9 induktive Wegaufnehmer (LVDT – Linear Variable Differential Transformer) aufgezeichnet. Dabei messen jeweils 3 Stück die axiale Verformung am Probenfuß und am Probenkopf sowie die radiale Verformung in mittlerer Probenhöhe. Die Messpunkte in einer Messebene sind jeweils um  $120^\circ$  versetzt angeordnet. Mit den in einer Ebene jeweils gemittelten Messwerten wird auf die Proben-  
dehnung geschlossen.

Ein für die Integrität einer Salzkaverne als besonders kritisch zu bewertendes und daher im Fokus der Messwerterfassung stehendes Materialverhalten ist die Schädigungsentwicklung bzw. das Dilatanzverhalten während der einwirkenden Belastungen. Ein Indikator dafür ist, durch die Entstehung von Mikrorissen im Salzgestein, die Volumenänderung bzw. -vergrößerung der Probe im Versuch. Eine weitere messbare Größe zur Detektion von Dilatanzverhalten in der Salzprobe ist die sich ändernde Wellenlaufzeitgeschwindigkeit, die mit zunehmender Mikrorissausbildung abnimmt. In den Stempeln zwischen denen die Probe positioniert ist, sind dazu Piezoelemente integriert die jeweils als Transmitter bzw. Receiver eines mechanischen Impulses dienen. Durch den Piezo-Effekt wird ein aufgebrachtes elektrisches Signal in einen mechanischen Impuls umgewandelt und in die Probe eingeleitet. Gegenüberliegend wird durch das zweite Piezoelement das Signal wieder zurück umgewandelt. Mit der gemessenen Zeit zwischen Erzeugung auf der einen und dem Empfang des Signals auf der gegenüberliegenden Seite und der aktuellen Länge der Bodenprobe kann die Wellengeschwindigkeit ermittelt werden. Durch Gegenüberstellung mit der Wellengeschwindigkeit der Probe vor der Lastaufbringung kann das Dilatanzverhalten bewertet werden. Geophysikalische Methoden zum potenziellen In-situ-Monitoring basieren ebenfalls auf der Beobachtung der Veränderung der elastischen Wellenausbreitung im Gestein (Köhn et al. 2016a).

Signifikante Wechselwirkungen der unterschiedlichen Belastungsarten sowie unterschätzte Systemreaktionen erforderten umfangreiche Kalibrierungsmaßnahmen und Umbauausführungen, was unter anderem auch ursächlich dafür ist, dass der zeitliche Rahmen

gedehnt werden musste und bisher keine Endresultate vorliegen. Die Versuche dauern noch an.

Die hier zu erzielenden Versuchsergebnisse können danach für die Kalibrierung des in AP 2.1 entwickelten Stoffgesetzes herangezogen werden, um die entsprechenden Stoffgesetzparameter für realistische Belastungsszenarien abzuleiten und die tatsächliche Überlagerung der unterschiedlichen Einflüsse auf das Verformungsverhalten abzubilden.

Neben der Analyse des Steinsalzverhaltens bei der Energiespeicherung in Salzkavernen wurden auch geomechanische Bodenkennwerte für Schichten einer typischen, im Rahmen der Untersuchungen in Angus+ im Fokus stehenden, Lithographie der geologischen Formation „Norddeutsches Becken“ zusammengetragen und den Projektpartnern, u. a. AP 1.1, weitergegeben.

#### *AP 1.6.2 Geomechanische und seismische Parameter für Lockergesteine*

Die Ziele des AP 1.6.2 „Geomechanische und seismische Parameter für Lockergesteine“ sind die thermisch-hydraulisch-mechanisch-seismische (THMS) Parametrisierung von Typus-Lockergesteinen der nordeuropäischen Tiefebene mittels bodenmechanischer Laborversuche und die Quantifizierung der mechanischen Gesteinsantworten auf zyklische Temperaturpfade im triaxialen Spannungs-Verformungs-Raum, der hydraulischen Parameter Wasserdurchlässigkeit und Porosität sowie des Laufzeitverhaltens elastischer Wellen. Anhand von Laboruntersuchungen sollten zum einen die Bereitstellung von Stoffansätzen und deren Eingangparameter für die numerische THM-Modellierung verschiedener Szenarien von Geländebewegungen infolge einer saisonalen Aufheizung und Abkühlung des oberflächennahen Untergrunds, zum anderen eine Sensitivitätsanalyse seismischer Verfahren zur Abklärung der Tauglichkeit einer mittelbaren seismischen Abbildung mechanischer Zustandsänderungen während eines thermischen Speicherbetriebs ermittelt werden. Zu diesem Zweck war die Beschaffung einer innovativen Triaxial-Versuchseinrichtung notwendig und beantragt.

Als zu untersuchende Typus-Lockergesteine wurden ein Braunkohlefeinsand, ein Glimmerton, ein Tarraston sowie ein Geschiebemergel ausgewählt und Materialproben gewonnen und bodenmechanisch klassifiziert und beschrieben. Ebenso wurde das ein-dimensionale isotherme Konsolidations- und Schwellverhaltens dieser Typus-Lockergesteine bestimmt. Diese Materialcharakteristiken stehen somit langfristig zur Verfügung.

Da zum Zeitpunkt des Projektstarts eine geeignete THMS-Triaxial-Versuchseinrichtung im Handel nicht erhältlich war, wurde ein entsprechendes Anlagenkonzept erarbeitet und die Firma Global Digital Systems mit dem Bau der Versuchsanlage beauftragt. Während der Inbetriebnahme und der Kalibrierung der Versuchsanlage stellte sich jedoch heraus, dass erhebliche Mängel in der technischen Ausführung und der Steuerung der Anlage bestanden. Trotz zweier umfangreicher Revisionen durch den Hersteller konnte die Betriebstauglichkeit während der Projektlaufzeit trotz intensiver Bemühungen nicht erreicht werden, so dass unsere Arbeiten an und mit der THMS-Triaxial-Versuchsanlage während des gesamten Projektzeitraumes auf Mängelnachweise gegenüber dem Hersteller beschränkt waren.

Aufgrund dieses Sachverhalts und zur Kompensation dieses Ausfalls wurde daher ein weiteres THMS-Versuchsgerät entworfen und in der eigenen Institutswerkstatt an der CAU Kiel hergestellt und erfolgreich kalibriert und in Betrieb genommen. Hierbei handelt

es sich um ein sogenanntes Ödometer, welches allerdings nur monoaxiale Verformungsversuche erlaubt.

Ein Langzeitversuch gibt Einblick in das Konsolidationsverhalten, die Kriechrate und die Zähigkeitsparameter eines mittelplastischen Tons unter mechanischer und thermischer Belastung. Auf die zyklische Temperaturänderung in der zweiten Versuchsphase reagiert der untersuchte Ton mit einer gleichgerichteten zyklischen Erhöhung und Erniedrigung seiner Porenzahl (Abbildung 1.1.6-3a) sowie einer langfristigen thermischen Verfestigung und Überkonsolidierung des Tons. Es zeigt sich weiterhin, dass der Zusammenhang zwischen Porenzahl und p-Wellengeschwindigkeit ebenfalls proportional und signifikant ist, so dass die p-Wellengeschwindigkeit als Indikator für die Konsolidierung genutzt werden kann.

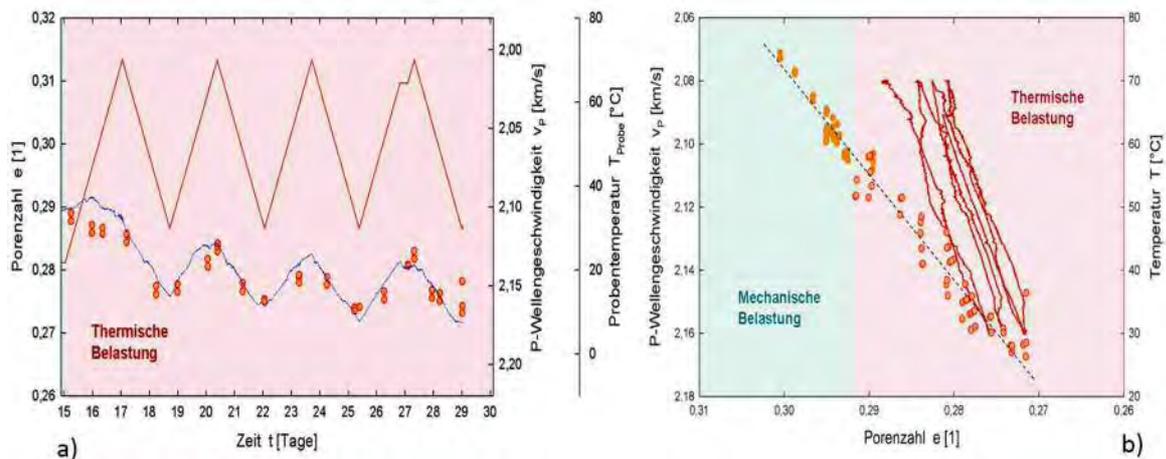


Abbildung 1.1.6-3: Eindimensionaler Kompressionsversuch an einem mittelplastischen Ton und mechanischer und zyklischer thermischer Beaufschlagung. a) Vorgabe der zyklischen Temperatur und Probenantwort Porenzahl und p-Wellengeschwindigkeit über die Zeit. b) Signifikante Zusammenhänge zwischen Proben temperatur und Porenzahl sowie Porenzahl und p-Wellengeschwindigkeit.

Zur Bestimmung der temperaturabhängigen hydraulischen Wasserleitfähigkeit wurde das Ödometer entsprechend erweitert und durch umfangreiche Umbauten ausgerüstet, so dass Durchströmungsversuche mit wechselnden Richtungen und bei variablen Temperaturen durchgeführt werden können. Messungen an demselben Ton wie im vorangegangenen Experiment ergaben für Temperaturen im Bereich von 20°C bis 80°C eine Zunahme der Wasserdurchlässigkeit mit zunehmender Temperatur (Abbildung 1.1.6-4a) um ca. 1 Größenordnung, was in erster Linie auf die Viskosität des Wassers zurückgeführt werden kann. Mit jedem Durchströmungszyklus verringerte sich die Filtergeschwindigkeit aufgrund von Partikelverlagerungen in der Tonmatrix, sodass eine bleibende Veränderung des Materialverhaltens induziert wird. Die Abnahme der elastischen Parameterwerte der Gesteinsmatrix und des Porenwassers mit zunehmender Temperatur führen dabei zu einer Verringerung der Kompressionswellengeschwindigkeit mit zunehmender Temperatur (Abbildung 1.1.6-4b).

Zu Projektende muss festgestellt werden, dass das Ziel, Eingangparameter für die numerische THM-Modellierung verschiedener Szenarien von Geländebewegungen infolge einer saisonalen Aufheizung und Abkühlung des oberflächennahen Untergrunds zur Verfügung zu stellen, nicht erreicht wurde. Grund dafür ist die bis heute nicht vorhandene Betriebstauglichkeit der für diesen Zweck im Rahmen des Projekts entwickelten und beschafften THMS-Triaxial-Versuchsanlage. Daraus kann geschlossen werden, dass die-

se Versuche unter thermisch variablen Bedingungen nicht Stand der Technik sind, da die thermischen Veränderungen nicht nur das untersuchte Material sondern immer auch die Versuchsanlage beeinflussen. Hier ist grundsätzliche Methodenentwicklung zur thermischen Entkopplung gefordert, um die benötigten Versuche durchführen zu können.

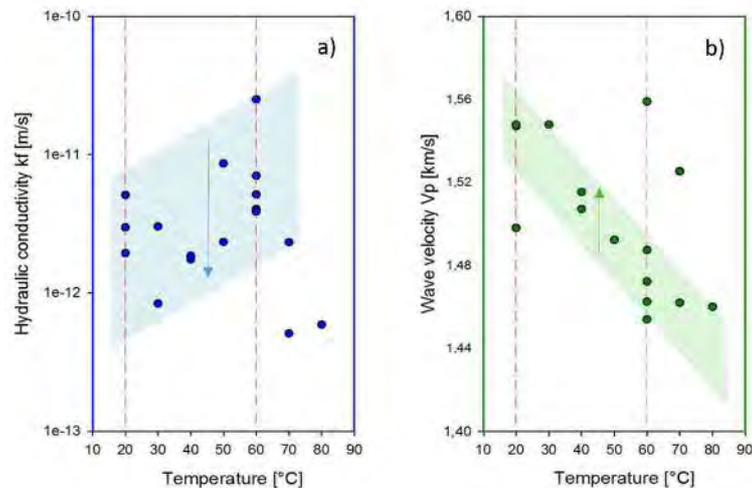


Abbildung 1.1.6-4: a) Hydraulische Durchlässigkeit eines wassergesättigten, mittelplastischen Tons bei zyklischer Temperaturänderung, b) Kompressionswellengeschwindigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Die Pfeilrichtung gibt die Veränderung mit zunehmender Anzahl der Heiz-Kühl-Zyklen an.

Durch Realisierung einer alternativen Versuchsanlage einschließlich dessen erfolgreicher mechanisch-thermischer Kalibrierung konnte nachgewiesen werden, dass die gestellten Anforderungen bezüglich des Betriebs unter variablen Spannungszuständen und bei zyklischen Temperaturänderungen für einen vereinfachten eindimensionalen Versuchsaufbau als Ödometer erfüllt werden können. Diese Anlage kann auch zur Bestimmung temperaturabhängiger hydraulischer Durchlässigkeiten genutzt werden. Anhand dieser Anlage konnte beispielhaft für eines der identifizierten Materialien gezeigt werden, dass ein überkonsolidierter Ton auf eine zyklische Temperaturveränderung mit einer gleichgerichteten Änderung der Porenzahl und mit einer allmählichen Porenraumverringerung als thermische Verfestigung reagiert. Ebenso kann eine Zunahme der Wasserdurchlässigkeit mit zunehmender Temperatur und die gleichzeitige Abnahme der p-Wellengeschwindigkeit identifiziert werden. Dieses Gerät steht für weitere Versuche im Rahmen anderer Forschungsprojekte und zur weiteren Materialcharakterisierung prinzipiell zur Verfügung.

#### (7) AP 1.7 Untersuchung der Folgereaktion in oberflächennahen unterirdischen Schutzgütern im Zuge des Eintrags untertägig gespeicherter Gase

##### *Geochemische Folgereaktionen einer Druckluftintrusion*

Um ein „fundiertes Prozessverständnis bei Folgereaktionen bei Gasleckagen“ (Meilenstein M 1.7) aufzubauen, wurden die Auswirkungen von Druckluft-, Methan- und Wasserstoffintrusion in flache Aquifere unter entsprechenden Druck-, Temperatur- und Fließbedingungen in Laborexperimenten zu untersucht. Zunächst wurden Versuche zur Pyritoxidation mit Sauerstoff als reaktivem Gas unter verschiedenen Druckbedingungen ( $O_2$  Partialdruck bis 11 bar) durchgeführt. Es wurden hauptsächlich zwei Versuchsaufbauten

verwendet. Der als „Hochdruckversuch“ bezeichnete Versuchsaufbau bestand im Wesentlichen aus einer 50x4 cm messenden Titansäule mit untersuchtem Sediment, einer Druckzelle aus Titan zur Aufsättigung des Versuchswassers mit Sauerstoff bei gewählten Partialdrücken und zwei HPLC Pumpen zur Aufrechterhaltung des Durchflusses durch das Versuchssystem. Die Versuchsanlage wurde bereits im CO<sub>2</sub>-MoPa Vorhaben konzipiert und beschafft (Haase et al. 2014), war jedoch auch in ANGUS+ fortwährend weiter zu entwickeln und an die Erfordernisse anzupassen. Für die Messung hoher Sauerstoffkonzentrationen unter hohem Druck wurde beispielsweise eine neue Methode auf optischer Basis anstelle der üblicherweise verwendeten Clark Elektrode eingerichtet. Der als „Normaldruckversuch“ bezeichnete Aufbau war analog zu dem Hochdruckversuch aufgebaut, nur bestanden die Komponenten im Wesentlichen aus Glas. Für die Versuche zur Untersuchung der Pyritoxidation wurde miozäner Braunkohlesand aus einem Aufschluss in Schleswig-Holstein und mit Pyrit angereicherter Quarzsand sowie Leitungswasser, was ggf. mit Sauerstoff angereichert war, verwendet.

Die Oxidation von Pyrit in den Laborversuchen zeigte sich durch eine stöchiometrisch proportionale Abnahme der Sauerstoff- und Zunahme der Sulfatkonzentration. Die Reaktionsrate hing grundsätzlich vom Sauerstoff Partialdruck ab, was laut Williamson & Rimstidt (1994) zusätzlich zu dem pH-Wert als Raten steuernder Faktor zu erwarten war. Über die Versuchslaufzeit verringerte sich jedoch darüber hinaus die jeweilige Pyritoxidationsrate, so dass der sukzessive Aufbau einer passivierenden Schicht aus Reaktionsprodukten auf den Pyritmineralen postuliert wurde, die ausgeprägter mit höheren Sauerstoffpartialdrücken wurde. Zur Erweiterung des Verständnisses der Pyritoxidationskinetik bei Sauerstoffpartialdrücken von bis zu 11 bar wurden die erhobenen experimentellen Ergebnisse daher zur Parametrisierung eines geochemischen Prozessmodells in PHREEQC verwendet. Insbesondere wurde dabei die im Experiment beobachtete Passivierung der Pyritoberflächen durch die Reaktion mit Sauerstoff berücksichtigt. Die Ergebnisse der Laboruntersuchungen sowie das entwickelte Prozessmodell sind als Berta et al. (2016) publiziert. Die Ergebnisse dieser Studie wurden weiterhin genutzt, um in Kooperation mit AP 3.3 ein 3D-Mehrphasen-Reaktions-Transportmodell aus Standortkala hinsichtlich der neuen Erkenntnisse der Pyritoxidationskinetik zu parametrieren (Berta et al. 2017).

#### *Geochemische Folgereaktionen einer Methanintrusion*

Die Auswirkungen einer Intrusion von methangesättigtem Wasser in einen oberflächennahen Aquifer wurden in Säulenversuchen unter Atmosphärendruck untersucht, und der Versuchsbau war analog zu den „Normaldruckversuchen“. Zusätzlich zu Versuchen mit einem Aquifersediment aus Neumünster wurde Quarzsand mit 0,5% Goethit zur Untersuchung einer möglichen reduktiven Lösung von Eisen(III)-Mineralen durch Umsatz des Reduktionsmittels Methan aufgebaut, ebenso eine Säule bestehend aus 2/3 Sand und 1/3 eines marinen Sedimentes aus einer Sulfat-Methan-Übergangszone in der Kieler Förde. Zu Beginn wurden die Säulen mit Leitungswasser durchströmt, um ein oberflächennahes, aerobes System zu simulieren (Koch 2014). Nach 11 Wochen wurde Grundwasser aus dem Aquifer bei Neumünster durch die Säulen geleitet um Aquiferbedingungen darzustellen (Becker 2014). Das Durchströmen von methangesättigtem Wasser durch natürliches Sediment eines oberflächennahen Aquifers zeigte im beobach-

teten Zeitraum von mehr als einem Jahr keine Oxidation von Methan durch Sauerstoff, Nitrat oder Sulfat als Elektronenakzeptoren (Berta et al. 2015).

#### *Geochemische Folgereaktionen einer Wasserstoffintrusion*

Zur Untersuchung der Folgereaktionen von Wasserstoffintrusionen in oberflächennahe Aquifere wurden zunächst Durchflussstandreaktoren (2 l Glasflaschen) eingesetzt und natürliches, pleistozänes Aquifersediment sowie Grundwasser aus Neumünster verwendet. Dem Grundwasser wurde Nitrat zugesetzt, und es wurde kontinuierlich in die Reaktoren eingeleitet, um einen steten Nachschub an Elektronenakzeptoren zu erreichen. Das Grundwasser wurde ebenfalls kontinuierlich mit Wasserstoff beaufschlagt, so dass sich ein konstanter Wasserstoffpartialdruck von ca. 1 bar einstellen konnte. Die Ergebnisse zeigten das schnelle Einsetzen einer Nitratreduktion, die anfänglich zur Bildung von Nitrit und später zur Bildung von Ammonium und vermutlich  $N_2/N_2O$  führte. Nach rund fünf Versuchstagen stiegen die gelösten Eisenkonzentrationen an, was auf den Beginn einer Fe(III)-Reduktion hinweist. Nach rund 15 Tagen wurde eine Acetatfreisetzung beobachtet, die indikativ für den Beginn einer mikrobiellen Acetogenese ist. Die Acetogenese führte zur Verminderung der gelösten  $CO_2$ -Konzentration und verursachte eine Steigerung des pH-Wertes von 8 auf 9.5. Letztendlich wurde parallel zur Acetogenese auch Sulfat reduziert, was vermutlich zur Ausfällung von Eisensulfiden führte (Mascus 2015).

Da die Wasserstoffkonzentration in den Durchflussstandreaktoren konstant gehalten wurde, konnte der Wasserstoffverbrauch nicht quantifiziert werden. Außerdem zeigte es sich, dass die Nitratreduktion so schnell erfolgte, dass sich mit diesem Versuchsansatz keine Reaktionskinetik ermitteln lies. Daher wurden für weitere Untersuchungen vier parallel betriebene Säulenversuche mit Längen zwischen 5 und 20 cm mit identischem Sediment und Zulaufwasser im Gleichgewicht zu einem Wasserstoffpartialdruck von 1 bar verwendet. Das Wasser/Feststoffverhältnis entsprach damit realistischen Aquiferbedingungen, allerdings wurden deutlich höhere Abstandsgeschwindigkeiten von bis zu 20 m/d in den Versuchen realisiert, die so nicht in Grundwasserleitern zu erwarten sind, da nur so der Verbrauch des Elektronendonators  $H_2$  sowie des Elektronenakzeptors Nitrat mit einer höheren zeitlichen Auflösung (Minuten statt Tagen) untersucht werden konnte. Die Ergebnisse zeigten eine sehr hohe Nitratreduktionsrate von bis zu 3.3 mM/h, die damit um den Faktor 2.4 bis 140 höher ist, als aus Literaturangaben zu erwarten war (0.023-1.4 mM/h). Da Nitrit nur zeitweise und in kleinen Konzentrationen aufgetreten ist, kann davon ausgegangen werden, dass Nitrat bis  $N_2/N_2O$  reduziert wurde (Berger 2015).

Zur Untersuchung des Einflusses höherer Wasserstoffkonzentrationen wurden Hochdruckversuche mit Wasserstoffpartialdrücken von bis zu 25 bar durchgeführt, was einer Intrusion in Grundwasserleiter von bis zu 250 m Teufe entspricht. Im Versuch wurde das pleistozäne Grundwasser aus Neumünster mit deionisiertem Wasser verdünnt, um karbonatische Ausfällungen in der Versuchsanlage zu verhindern. Die im Hochdruckversuch beobachteten Konzentrationsprofile zeigten, dass es zu einer Abnahme der Wasserstoffgehalte entlang der Fließstrecke kam, gleichzeitig die Gehalte an Sulfat und gelöstem  $CO_2$  abnahmen und eine Freisetzung von Acetat beobachtet werden konnte. Damit zeigten sich im Säulenversuch die gleichen Prozesse, die auch in den vorherigen Experimenten beobachtet werden konnten, eine wasserstoffinduzierte Sulfatreduktion neben einer Acetogenese.

Die Abnahme der  $H_2$ -, der Sulfat- und der  $CO_2$ -Gehalte sowie die Zunahme der Acetatgehalte wurden nicht signifikant durch die Höhe der Wasserstoffkonzentration beeinflusst. Die Ergebnisse deuteten darauf hin, dass die zu erwartenden Folgereaktionen einer Wasserstoffleckage in unterschiedlichen Teufen mit vergleichbaren Raten auftreten werden, vermutlich aufgrund des hohen Überschusses an Wasserstoff, der damit nicht ratenlimitierend wirkt. Die Ergebnisse deuten auch darauf hin, dass es, im Gegensatz zu natürlichen Systemen mit regelmäßig sehr kleinen  $H_2$ -Konzentrationen, nicht zu einer Zonierung von Redoxreaktionen kommen würde, sondern diese nebeneinander auftreten könnten. Die wesentlichen Laborergebnisse fanden zur Aufstellung eines konsistenten Prozessmodells Verwendung, in dem die Verminderung der gelösten Wasserstoffkonzentrationen in Relation zu den Einzelprozessen Sulfatreduktion, Acetatproduktion sowie Karbonatfällung gesetzt wurde. Dieses Prozessmodell war in der Lage, die erzielten Laborergebnisse zu beschreiben. Weiterhin wurden ergänzende Schüttelversuche unter Verwendung von Aquifersediment und wasserstoffgesättigtem Grundwasser angesetzt, bei denen der Salzgehalt zwischen 0,35 und 350 g/L variiert wurde. Es zeigte sich, dass sich die Wasserstoffkonzentration bei Salzgehalten kleiner oder gleich 11 g/L über die Versuchslaufzeit deutlich stärker verminderte als bei höheren Salzgehalten, was auf die Dominanz einer mikrobiell katalysierten Reaktion hinweist, die bei höheren Salzgehalten inhibiert wurde. Diese erzielten Laborergebnisse sowie das entwickelte Prozessmodell waren Gegenstand eines zur Veröffentlichung eingereichten Manuskriptes (Berta et al. submitted).

In einer späten Versuchsphase wurde dem Wasserstoffgas die zusätzliche Gaskomponente  $CO_2$  in einem Massenanteil von 1% zur Senkung des pH-Wertes zugefügt. Durch die Einführung der  $CO_2$ -Gaskomponente konnte der pH-Wert des Zulaufwassers von ca. 8,5 bis 10 auf ca. 6,7 bis 8,2 gesenkt werden und damit für Grundwasser typischere Werte erreichen. Diese pH-Wert Absenkung verursachte die Abnahme der Acetatproduktion in der Versuchssäule sowie ein Einsetzen einer Formiat- und Methanproduktion (Metzgen 2016). Eine Weiterführung der Versuche hat im ANGUS II Forschungsvorhaben begonnen, und eine Verwertung der Ergebnisse dieser zweiten Versuchsphase steht noch aus.

### *Fazit des Arbeitspaketes 1.7*

Die im AP durchgeführten Untersuchungen erlauben eine grundlegende Parametrisierung geochemischer Prozesse nach einer potenziellen Intrusion der Gase Luft, Methan und Wasserstoff in oberflächennahe Aquifere. Dabei ist insbesondere der stetig weiterentwickelte Versuchsstand zur Durchführung von Hochdruckversuchen (in ANGUS+ bis 25 bar) herauszuheben, der auch im Folgeprojekt ANGUS II Verwendung findet. Von einer Existenz einer vergleichbaren Apparatur anderenorts ist nicht bekannt. Alle wesentlichen, in ANGUS+ verwendeten Methodiken und erzeugten Ergebnisse dieses Arbeitspaketes sind in (Berta 2017) detailliert erläutert. Dies dient auch zur Dokumentation der Erreichung des Meilensteines M 1.7.

(8) AP 1.8 Geochemische Untersuchung von Auswirkungen oberflächennaher, geologischer Wärmespeicher im urbanen Raum

*AP 1.8.1 und AP 1.8.4 Quantifizierung standortspezifischer oberflächennaher Veränderungen der hydrogeochemischen Grundwasserzusammensetzung als Funktion der Temperatur*

Wird der oberflächennahe Untergrund in Zukunft als thermischer Speicher genutzt, kann unter gewissen Umständen mit einer Veränderung der hydrochemischen und mikrobiellen Zusammensetzung gerechnet werden (z. B. Bonte et al. 2013a; 2013b; Jesušek et al. 2013a). Um zukünftig im Rahmen eines „Schnelltests“ in praxistauglichen Zeiträumen von 3-6 Monaten standortspezifische Prognosen hinsichtlich zu erwartender geochemischer Auswirkungen (CaCO<sub>3</sub>-Fällung, SiO<sub>2</sub>-Lösung, Verschiebungen im Redoxmilieu, Gasphasenbildung, Freisetzung von Spurenelementen und Schwermetallen, sowie Austauschprozessen) erstellen zu können, wurden experimentelle Ansätze und geochemische Modellrechnungen hierauf angepasst und auf ihre Eignung hin getestet. Darüber hinaus wurde der Temperatureinfluss auf Sorptionsgleichgewichte von An- und Kationen an Goethit und Kaolinit, als repräsentative Vertreter von in Aquiferen auftretenden Mineralen mit hoher Austauscherkapazität, grundlegend untersucht, um funktionale Zusammenhänge zu erkennen und Möglichkeiten zu erarbeiten, in Simulationsmodellen den Temperatureinfluss auf Sorptionsprozesse zu implementieren.

Die Untersuchungen erfolgten mit drei pleistozänen Sanden, einem tertiären Braunkohlesand sowie natürlichem Grundwasser aus pleistozänen bzw. dem tertiären Aquifer(en) im Wesentlichen anhand von Säulenversuchen (SV) und Batchtests (BT) (Tabelle 1.1.8-1). Zudem erfolgte eine Analyse der Sedimente hinsichtlich Korngrößenverteilung, Elementzusammensetzung, leicht lösbarem Si-Anteil (siehe ANGUS+ 2017), der Mineralzusammensetzung, OC- / IC-Gehalt, Sulfidgehalt und Ionenaustauschkapazitäten (AP 1.7). Eine durch ansteigende Temperaturen ausgelöste Gasphasenbildung (siehe ANGUS+ 2015; 2016), sowie die mögliche Fällung von Karbonaten (siehe ANGUS+ 2016) wurden des Weiteren in geochemischen Modellrechnungen quantifiziert. Goethit und Kaolinit, z. T. vermischt mit Quarzsand, wurde in Schüttelversuchen, Umlaufsäulenversuchen und Säulenversuchen mit NaNO<sub>3</sub> oder NaCl-Elektrolytlösungen mit Ionenstärken zwischen 0,001 M bis 0,1 M, sowie in Titrationsversuchen eingesetzt, um die Temperaturabhängigkeit des Sorptionsverhalten von Arsenat oder Zink zu untersuchen.

In verschiedenen Säulenversuchen konnte eine zeitliche Begrenzung der C<sub>org</sub>-Freisetzung und ein Trend zu stärker reduzierenden Bedingungen bei einem Temperaturanstieg gezeigt werden (siehe bspw. auch Bonte et al. 2013a; 2013b und Jesušek et al. 2013a). Dabei korreliert die C<sub>org</sub>-Freisetzung nicht (generell) mit dem C<sub>org</sub>-Gehalt der Festphase (siehe ANGUS+ 2016), vielmehr wirken wahrscheinlich Art und Bindungsform des C<sub>org</sub>'s kontrollierend. Weitestgehend unveränderte gelöste C<sub>org</sub>-Konzentrationen im Zuge einer durch Nitratzugabe induzierten Nitratreduktion in Durchfluss-SV (10 – 70°C) zeigen, dass hauptsächlich ursprünglich der Festphase entstammender C<sub>org</sub> abgebaut wurde (siehe ANGUS+ 2017). In Lösung würde sich demnach nur nicht bzw. kaum bioverfügbarer C<sub>org</sub> ansammeln (siehe z. B. auch Robador et al. 2010). Dies bedeutet, dass die bei Temperaturerhöhungen häufig ansteigenden C<sub>org</sub>-Konzentrationen in Lösung kein Maß für bei einer Temperaturerhöhung sich einstellende stärker reduzierende Bedingungen sind. Wieviel C<sub>org</sub> aus der Festphase umgewandelt und anschließend abgebaut werden kann,

wäre somit direkt abhängig vom Temperaturbereich und den spezifisch ablaufenden  $C_{org}$ -Umsatzreaktionen.

Tabelle 1.1.8-1: Kenndaten einzelner in AP 1.8.1 durchgeführter Säulenversuche (SV) und Batchtests (BT).

	Maße [cm]	Kontakt- zeit [h]	ausgetauschte Porenvolumen [-]	Temperaturen [°C]	Details in
<b>große Durchfluss-SV</b>	110 x 10	36 & 202	165 & 11	10, 25, 40, 70	ANGUS+ (2014; 2015; 2016; 2017)
<b>Elutions-SV</b>	30 x 4	2,1	1200	10 & 70	ANGUS+ (2015)
<b>Kreislauf-SV</b>	40 x 6	bis 603	-	10, 25, 40, 70	ANGUS+ (2016)
<b>Umlauf-SV</b> (Sorption)	5 x 2	bis 240	-	10, 25, 40, 70	ANGUS+ (2014; 2015)
<b>Durchfluss-SV</b> (Sorption)	30 x 4	18	bis 480	10, 70 im Wechsel, (25, 40)	ANGUS+ (2015; 2016)
<b>2 L - BT</b>	-	bis 312	-	10, 25, 40, 70	ANGUS+ (2016)
<b>100 mL - BT</b>	-	bis 640	-	10, 25, 40, 70	ANGUS+ (2017)
<b>20 mL -BT</b> (Sorption)		bis 480	-	10,25,40,70	ANGUS+ (2014; 2015; 2016)

Element- und sedimentspezifisch kann es bei ansteigenden Temperaturen zu einer, auch im Ausmaß sehr variablen, Freisetzung- bzw. Festlegung von Spurenelementen und Schwermetallen kommen (siehe ANGUS+ 2016). Bei einer auf die Heizphase (25, 40 & 70°C) folgenden Rückkühlung auf 10°C waren Konzentrationsänderungen in Kreislauf-SV bei den meisten Elementen zu über 50% reversibel (siehe ANGUS+ 2017, Abbildung 1.1.8-1a). In Durchfluss-SV nahm die Freisetzungsintensität bei allen untersuchten Elementen mit Ausnahme von Barium mit zunehmender Versuchsdauer ab, wodurch auch die Freisetzungsdauer begrenzt war. Von insgesamt 31 betrachteten Spurenelementen und Schwermetallen überschritt lediglich As sedimentübergreifend Geringfügigkeits-schwellen (LAWA 2016) bzw. Trinkwassergrenzwerte (BMJV 2001) (Abbildung 1.1.8-1b und Lüders et al. in prep.).

Schüttel- und Umlaufsäulenversuche zeigten, dass eine Temperaturerhöhung die sorptive Festlegung von Arsenat an typischen sorptionsrelevanten Oberflächen verringert und die von Zink verstärkt, wobei sich auch zeigte, dass das Sorptionsverhalten von Arsenat an Goethit darüber hinaus konzentrationsabhängig ist. Die insgesamt vergleichsweise kleinen temperaturbedingten Änderungen der Oberflächeneigenschaften erschweren aufgrund des kleinen Verhältnisses von Oberflächen zu Lösungsvolumen die Untersuchung

in klassischen Batch- aber auch Umlaufsäulenversuchen. Aufgrund des umgekehrt großen Verhältnisses von Oberfläche zu Lösungsvolumen in natürlichen durchströmten Systemen, haben die kleine Änderungen der Oberflächeneigenschaften aber signifikante Auswirkungen auf die Lösungskonzentration in den betrachteten Systemen.

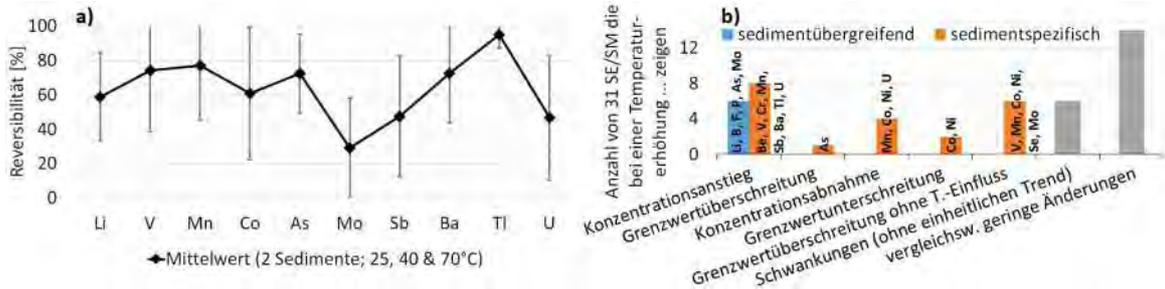


Abbildung 1.1.8-1: In Kreislaufsäulenversuchen gemittelt über zwei Sedimente und alle untersuchten Temperaturen bestimmte elementspezifische Reversibilität von Sorptions- bzw. Desorptionsreaktionen (a), sowie Kategorisierung von Spurenelementen und Schwermetallen je nach Verhalten bei Temperaturanstieg basierend auf Daten von Bonte et al. 2013b, Jesušek et al. 2013 und Lüders et al. in prep. (b).

So zeigten Säulenversuche bei wechselnden Temperaturen (10°C und 70°C) mit einem Quarzsand-Goethit-Gemisch und einer As(V) Zulaufkonzentration von rd. 1 mg/l, dass bei 10°C ein langsamerer Durchbruch von Arsenat im Vergleich zu 70°C erfolgt und eine Temperaturerhöhung zur Freisetzung von Arsenat führt, wobei die Konzentration im Ablauf der Versuche um rund 75% erhöht wurden (Abbildung 1.1.8-2). Im Gegensatz dazu führte eine Temperaturniedrigung von 70° auf 10°C zu einer Verminderung der Ablaufkonzentration um rd. 75%.

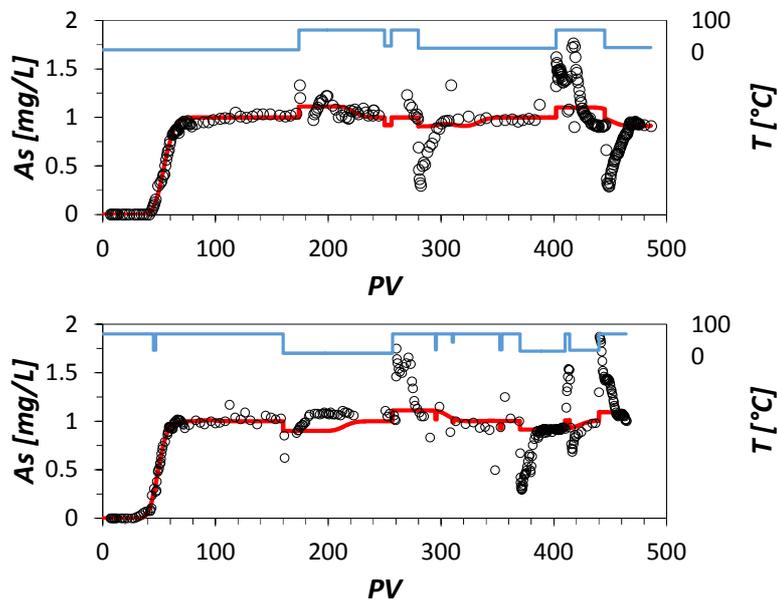


Abbildung 1.1.8-2: Arsenatkonzentration im Ablauf von Säulenversuche (Datenpunkte) bei Starttemperaturen von 10°C (oben) und 70°C (unten). Die Temperaturkurve (blaue Linie) zeigt die Heiz- bzw. Kühlperioden an und die Modellanpassungen (rote Linie) wurden mit PHREEQC erstellt.

Konsequente Temperaturwechsel in den Säulenversuchen zeigten, dass der Temperatureinfluss auf die Sorption bzw. Desorption von Arsenat nahezu vollständig reversibel ist. Eine Simulation der Versuchsergebnisse unter Annahme linearer Sorptionsisothermen als Funktion von T und Gleichgewichtsbedingungen zeigte, dass

sich der Temperatureinfluss zwar qualitativ nachzeichnen lässt, das Ausmaß der Freisetzung bzw. Festlegung aber deutlich unterschätzt wird.

Eine verstärkte Freisetzung von Arsenat (bzw. anderer anionisch vorliegender Spurenelemente) sowie die verstärkte Festlegung von Zink (bzw. anderer kationisch vorliegender Spurenelement) kann auf eine Abnahme des Ladungsnulldpunktes (PZC) typischer sorptionsreaktiver Oberflächen mit steigender Temperatur zurückgeführt werden. Wird die Abnahme des PZC durch einen durch andere Reaktionen (Redoxreaktionen, Minerallösung oder -fällung) verursachten pH-Wertanstieg bei Erhöhung der Temperatur begleitet, wie es sich regelmäßig in den Versuchen mit natürlichen Materialien zeigte, wird die (reversible) Desorption von Anionen bzw. Sorption von Kationen nochmals verstärkt.

Schüttelversuche mit Goethit bei 20°C, 40°C und 70°C im pH-Bereich zwischen 4 und 12 und unterschiedlich hohen Arsenat-Ausgangskonzentrationen (ca. 1 und 10 mg/l) (Ebert in prep.) zeigten neben der signifikanten pH-Wert- und Temperaturabhängigkeit der Arsenatsorption im pH-Bereich 7 bis 11 ebenfalls eine deutliche Abhängigkeit von der Arsenatkonzentration. So nimmt mit steigendem pH-Wert unabhängig von der Ausgangskonzentration ( $C_0$ ) der sorbierte Arsenatanteil deutlich ab. Bei einem  $C_0$  von 1 mg/l zeigte sich zusätzlich eine Verminderung der Sorptionsleistung mit steigender Temperatur, während im gesamten pH-Bereich bei höherem  $C_0$  von 10 mg/l As(V) eine Zunahme der Sorption mit steigender Temperatur beobachtet wurde (Abbildung 1.1.8-3). Die Bedeutung dieses Effektes im Hinblick auf eine oberflächennahe Wärmespeicherung kann derzeit nicht vollständig abgeschätzt werden, zumal sich in der Literatur bislang keine Hinweise zu einer ähnlichen Beobachtung finden.

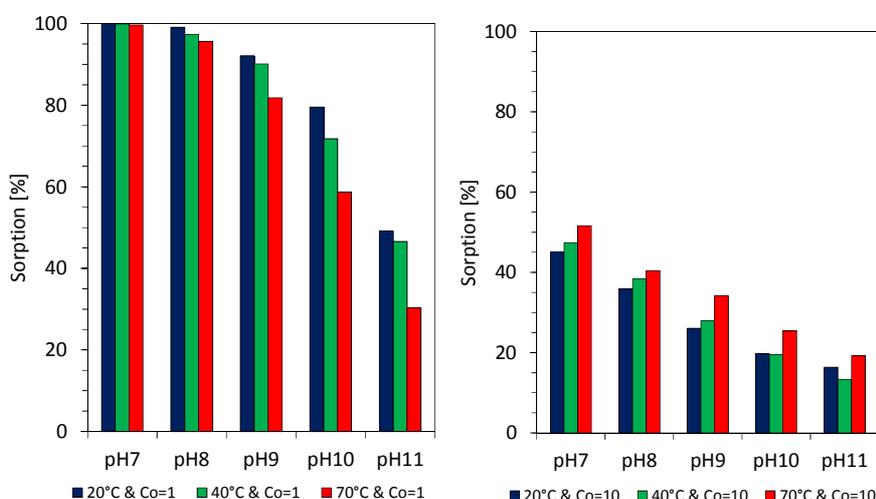


Abbildung 1.1.8-3: Vergleich der prozentualen Sorption von Arsenat an Goethit bei unterschiedlichen Temperaturen und kleiner ( $C_0 = 1$  mg/l As(V), links) bzw. hoher Startkonzentration ( $C_0 = 10$  mg/l As(V), rechts) bei unterschiedlichen diskreten pH-Werten.

Gasphasenbildung, Karbonatfällung und Si-Lösung beeinflussen die Wassersättigung bzw. Porosität im Aquifer und können somit Auswirkungen auf die Grundwasserströmung, den advektiven Wärmetransport, die Wärmekapazität und die Wärmeleitfähigkeit haben. Geochemische Gleichgewichtsberechnungen zeigten, dass die Gasphasenbildung bei Temperaturen  $\leq 85^\circ\text{C}$  auf die obersten 15 m begrenzt bleibt, sofern im Grundwasser lediglich Gase im Gleichgewicht zur Atmosphäre gelöst sind (Lüders et al. 2016). Am Beispiel eines saisonalen Wärmespeichermodells ( $60^\circ\text{C}$ ; 0,02 m/d; Popp et al. 2015a) durchgeführte Szenarienrechnungen (siehe Lüders et al. 2016 für detaillierte Randbedin-

gungen) zeigten, dass je nach Art und Gesamtgasdruck gelöster Gase im Anstrom eines Wärmespeichers Gasphasensättigungen von 30 bzw. 50% innerhalb von ~15 (Szenarien mit N<sub>2</sub> oder N<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub>, Abbildung 1.1.8-4a) bzw. ~29 Jahren (Szenario mit N<sub>2</sub>+CH<sub>4</sub>, Abbildung 1.1.8-4a) erreicht werden. Deutlich schneller stellen sich Gasphasensättigungen von 30 bzw. 50% nur ein, wenn ein Gas mit wesentlich höherer Löslichkeit wie bspw. CO<sub>2</sub> (Szen. N<sub>2</sub>+CO<sub>2</sub> in Abbildung 1.1.8-4a) (nahezu) gesättigt vorliegt. Eine residuale Gasphasensättigung von 50% würde dabei zur Abnahme der hydraulischen Durchlässigkeit um knapp eine Größenordnung führen. Wird angenommen, dass nach dem Erreichen einer maximalen residualen Gasphasensättigung eine im Anstrom eines Wärmespeichers zusätzlich gebildete Gasphase in den Wärmespeicher migriert, so würden nur beim N<sub>2</sub>+CO<sub>2</sub>-Szenario mit ~16 bzw. ~3% nennenswerte Verringerungen der Wärmekapazität bzw. Wärmeleitfähigkeit auftreten (Abbildung 1.1.8-4b).

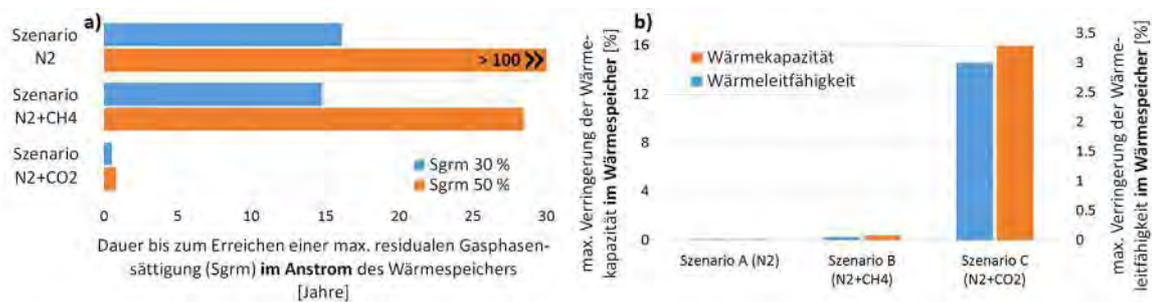


Abbildung 1.1.8-4: Vergleich der Dauer bis zum Erreichen von 30 bzw. 50% Gasphasensättigung im Anstrom eines Wärmespeichers (a), sowie der Verringerung von Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit im Wärmespeicher bei einer max. residualen Gasphasensättigung von 30% (b) zwischen drei Szenarien gelöster Gaskonzentrationen (nach Lüders et al. 2016, siehe auch für detaillierte Randbedingungen).

Ein Vergleich der Ca-Konzentrationsabnahmen, die zum einen in Durchflusssäulenversuchen gemessen und zum anderen auf Basis der Ausgangswässer mit dem Programm PhreeqC berechnet wurden, zeigte, dass sich CaCO<sub>3</sub>-Übersättigungen und -Ausfällungen bei Temperaturanstiegen auch für reale Aquifersysteme durch thermodynamische Gleichgewichtsberechnungen abschätzen lassen (siehe ANGUS+ 2016). Bei Verwendung der chemischen Zusammensetzung des Standortwassers und den gleichen Randbedingungen wie bei den Berechnungen zur Gasphasenbildung (20°C/m & 0,02 m/d, siehe Lüders et al. 2016) führt eine Karbonatfällung in 30 Betriebsjahren zu einer Porositätsverringerng von ca. 1‰. Der mit einer NaOH-Extraktion bestimmte leicht lösliche SiO<sub>2</sub>-Anteil, welcher sedimentabhängig zu einer maximalen Porositätszunahme von 1,2-3,6‰ führen kann, deutet im Vergleich mit dem Si-Lösungsverhalten in Säulenversuchen darauf hin, dass eine NaOH-Extraktion zur Abschätzung der max. zu erwartenden SiO<sub>2</sub>-Lösung bei Temperaturen von bis zu 70°C genutzt werden kann (siehe ANGUS+ 2017).

In Abhängigkeit der benötigten Genauigkeit und der Auswahl der in einem „Schnelltest“ zu prognostizierenden Prozesse können jeweils verschiedene Untersuchungsansätze die geeignete Wahl darstellen (Tabelle 1.1.8-2). Zur Bewertung, ob weitergehende Untersuchungen erforderlich sind, kann eine erste Einschätzung geochemischer Auswirkungen einer Wärmespeicherung innerhalb von 1-2 Monaten durch eine Kombination aus entsprechend kurzen Laborversuchen und geochemischen Modellrechnungen erfolgen. Für eine Prognose von Intensität und Dauer der meisten durch Temperaturerhöhungen ausgelösten bzw. intensivierten Prozesse werden Versuche im Zeitrahmen von 6-9 Monaten benötigt, da keine direkten Transferterme zwischen bspw. Batchtests bzw. Elutions-SV und großen Durchfluss-SV aufgestellt werden können.

Eine detaillierte Gesamtschau unter Einbeziehung weiterer Literatur wird im Kapitel „chemische Auswirkungen“ des „Kompendiums wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“ (siehe Anlage) ausgeführt.

Tabelle 1.1.8-2: Eignung verschiedener Untersuchungsansätze für die jeweiligen Prozesse in einem „Schnelltest“. ++: favorisierter Prognoseansatz, +: für erste Einschätzung geochemischer Auswirkungen geeignet; o: eingeschränkt hilfreich; -: ungeeignet; n: nicht untersucht.

	CaCO <sub>3</sub> - Fällung	SiO <sub>2</sub> - Lösung	Verschie- bungen im Redoxmilieu	Gas- phasen- bildung	Freisetzung von Spuren- elementen	Versuchs- dauer
<b>große Durch- fluss-SV</b>	++	++	o	+	++	6-9 Monate
<b>Elutions-SV</b>	+	o	-	+	-	2 Monate
<b>Kreislauf-SV</b>	o	+	++	-	+	2 Monate
<b>Batchtests</b>	+	n	-	-	+	1-2 Wochen
<b>Festph.-anal.</b>	n	+	-	N	-	Wochen
<b>Modellrechn.</b>	+	n	n	+	n	Wochen

#### AP 1.8.2 Risikoanalyse der Leckagegefahr von Wärmeträgerflüssigkeiten aus Erdwärmesonden

WTF-Inhaltsstoffe können potenziell grundwassergefährdend sein, insbesondere wenn sie eine hohe Mobilität im Grundwasser aufweisen und eine eingeschränkte mikrobielle Abbaubarkeit und/oder eine toxische Wirkung gegenüber aquatischen Organismen zeigen (Ilieva et al. 2012). Häufig verwendete Additive auf die diese Eigenschaften zutreffen sind z. B. 1-H-Benzotriazol (BT), Tolyltriazol (TT), 2-Ethylhexansäure (2-EHS), Sebacin-säure (SS) und Benzoessäure (BS). Schwerpunkt des AP 1.8.2 war die Durchführung einer Risikoanalyse der Leckagegefahr von Erdwärmesonden (EWS) zur Einschätzung der Gefährdung des Trinkwasserschutzes anhand von Literaturrecherchen sowie experimentellen und numerischen Untersuchungen. Zur Quantifizierung des Ausbreitungsverhaltens von Wärmeträgerfluiden (WTF) im Grundwasser wurden dazu Verdünnungs-, Abbau- und Sorptionsprozesse von WTF-Inhaltsstoffen numerisch untersucht, um Aussagen über eine potenzielle Gefährdung von Grund- und Trinkwasser zu treffen.

Die Literaturrecherche umfasst eine Zusammenstellung zu Abbau- und Sorptionsparametern von organischen WTF-Inhaltsstoffen (Frostschutzmittel) und Additiven (Korrosionsinhibitoren, Biozide, Tenside, Duft- und Farbstoffe) und dient als Prognosegrundlage für das Abbauverhalten von WTF (z. B. Abbildung 1.1.8-5).

Während für einige Substanzen keine Daten verfügbar sind (Abbildung 1.1.8-5), lässt sich für viele häufig verwendete Inhaltstoffe z. B. eine typische Abhängigkeit des Abbaus vom Redoxmilieu ableiten, bei der die Abbauraten von aeroben über nitratreduzierende zu fermentativen, eisen(III)reduzierenden und sulfatreduzierenden Bedingungen hin abnehmen.

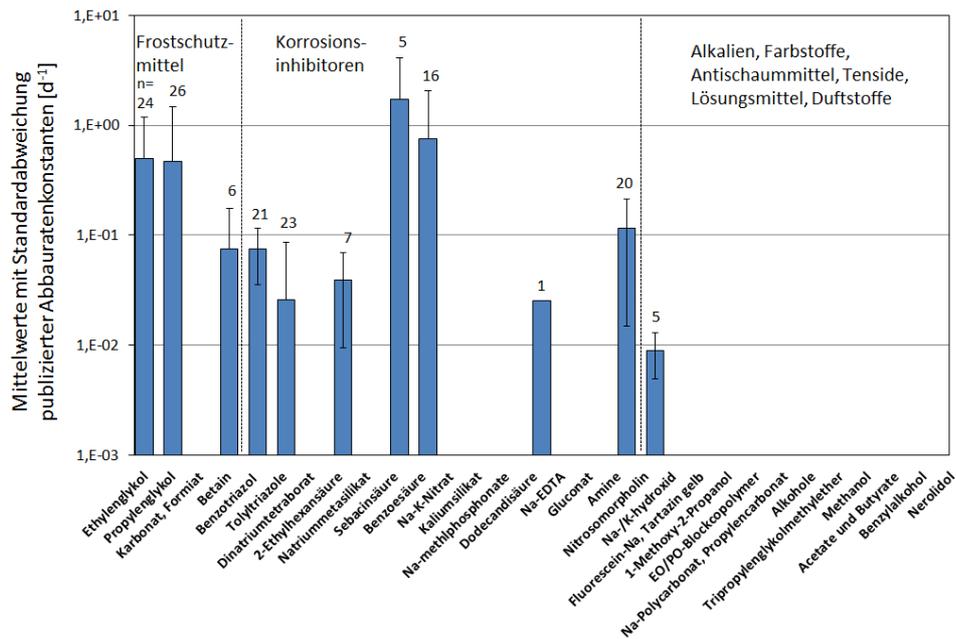


Abbildung 1.1.8-5: Abbauratenkonstanten des mikrobiellen Abbaus von WTF-Inhaltsstoffen (Carnegie & Ramsay 2009, Chapman & Duggleby 1967, Chua et al. 2001, Gibson & Suflita 1986, Heesel et al. 2010, Herzog et al. 2013, Ilieva et al. 2012, Kazumi et al. 1995, Liu et al. 2011, 2013, Matthies & Schink 1993, McGahey & Bouwer 1992, Siotto et al. 2012, Spahr et al. 2012, Tiehm et al. 2012, TOXNET 2016, Ward et al. 1985, Weiss et al. 2006, Williams & Evans 1975).

Die experimentellen Untersuchungen zielten auf die Parametrisierung einer Abbaukinetik für Ethylenglykol (EG) ab, bei der die Reaktionsrate abhängig von der Elektronenakzeptorkonzentration ist (siehe ANGUS+ 2016). Dazu wurden Säulenversuche zur Bestimmung der Abbaukinetik von EG in Abhängigkeit der Nitratkonzentration im Grundwasser ( $>2$  mg/L, 100 mg/L, 400 mg/L  $NO_3^-$ ) durchgeführt, die tendenziell hohe Abbauraten 1. Ordnung des Abbaus über Nitratreduktion (MW:  $14 d^{-1}$ ), gefolgt von Abbauraten des fermentativen Abbaus (MW:  $13 d^{-1}$ ) und dem über Sulfatreduktion (MW:  $4 d^{-1}$ ) zeigten. Da die Ratenkonstanten bei der Zugabe hoher Nitratkonzentrationen wesentlich niedriger waren als in den Säulen mit geringerer, wird vermutet, dass es durch erhöhte Gasphasensättigung in den Porenräumen zu einer Porositätsverringern und somit einer Aufenthaltszeitverkürzung gekommen ist, wodurch die Ratenkonstanten vermutlich zu niedrig berechnet wurden. Im Vergleich zur Literatur liegen die Ratenkonstanten der Säulenversuche möglicherweise aufgrund des für Aquiferbedingungen realistischeren Sediment/Lösungsvolumen-Verhältnisses und somit einer wesentlich höheren Mikroorganismendichte 2-3 Größenordnungen über bisher publizierten Werten von Mikrokosmen und Batchversuchen. Aufgrund dieser unerwarteten Ergebnisse ist die Parametrisierung einer Kinetik bei der die Reaktionsrate abhängig von der Elektronenakzeptorkonzentration ist für den EG-Abbau via Nitratreduktion weder sinnvoll noch erforderlich. Die Ergebnisse bedeuten jedoch auch, dass die von Dörr et al. (in prep.) prognostizierte EG-Fahnausbreitung eher eine konservative Abschätzung darstellt und nur von einem sehr geringen Gefährdungspotenzial für EG-Leckagen auszugehen ist.

Die numerischen Untersuchungen zum Ausbreitungsverhalten von WTF-Inhaltsstoffen im Grundwasser wurden zum einen unter natürlichen hydraulischen Verhältnissen (Dörr et al. in prep.) und zum anderen unter der Annahme einer Trinkwasserentnahme (Struß et al. in prep.) untersucht. Die Simulationen unter natürlichen hydraulischen Verhältnissen (siehe ANGUS+ 2014; 2015; 2016) wurden unter Berücksichtigung von Verdünnung,

Abbau und Sorption exemplarisch für häufig auftretende Randbedingungen norddeutscher Aquifere ( $v_a$ :  $7 \cdot 10^{-6}$  m/s,  $K_f$ -Wert:  $10^{-3}$  m/s) und den kompletten Austritt des WTFs aus einer 50 m langen EWS für EG (350 g/L) und für BT (3,5 g/L) durchgeführt und zeigten, dass für EG schon bei verhältnismäßig langsamem fermentativen Abbau ( $k_1 = 2 \cdot 10^{-2} \text{ d}^{-1}$ ) ein Abstand von 100-200 m ausreichte, um den herangezogenen Richtwert (1 mg/L) zu unterschreiten. Für BT reichte bei verhältnismäßig schnellem sulfatreduzierenden Abbau ( $k_1 = 10^{-2} \text{ d}^{-1}$ ) ebenfalls ein Abstand von 200 m aus, um den Richtwert (0,01 mg/L) zu unterschreiten. Bei langsamem sulfatreduzierenden Abbau ( $k_1 = 10^{-3} \text{ d}^{-1}$ ) waren hingegen Abstände  $>800$  m nötig. Die Simulationen unter Annahme einer Trinkwasserentnahme (siehe ANGUS+ 2017) wurden für ebenfalls häufig auftretende Randbedingungen norddeutscher Aquifere ( $K_f$ -Wert:  $5 \cdot 10^{-4}$  m/s,  $v_a$ :  $5 \cdot 10^{-6}$  m/s), einer Gesamtentnahmerate von 125.000-1.000.000  $\text{m}^3/\text{a}$  und den kompletten Austritt des WTFs aus einer 100 m langen EWS (variierende Entfernung/Position zum Brunnen) für EG (800 g/L), BT (1,1 g/L), TT (3,5 g/L), 2-EHS (17,5 g/L), SS (12,8 g/L) und BS (9,5 g/L) durchgeführt und die Maximalkonzentrationen im Entnahmebrunnen mit Richtwerten verglichen. Die Simulationen zeigen, dass unter den hier angenommenen Randbedingungen der Richtwert, mit Ausnahme von SS, bereits bei einem Abstand von 100 m zwischen EWS und Trinkwasserbrunnen weit unterschritten wird (Abbildung 1.1.8-6).

Da die Ergebnisse zeigen, dass im Fall einer Leckage schon geringe Abstände ausreichen, um eine mögliche Nutzung des Grundwassers zur Trinkwasserversorgung sicherzustellen, erscheinen pauschale Abstandsvorgaben (von zurzeit  $>1000$  m) daher zumindest unter diesem Aspekt diskussionswürdig.

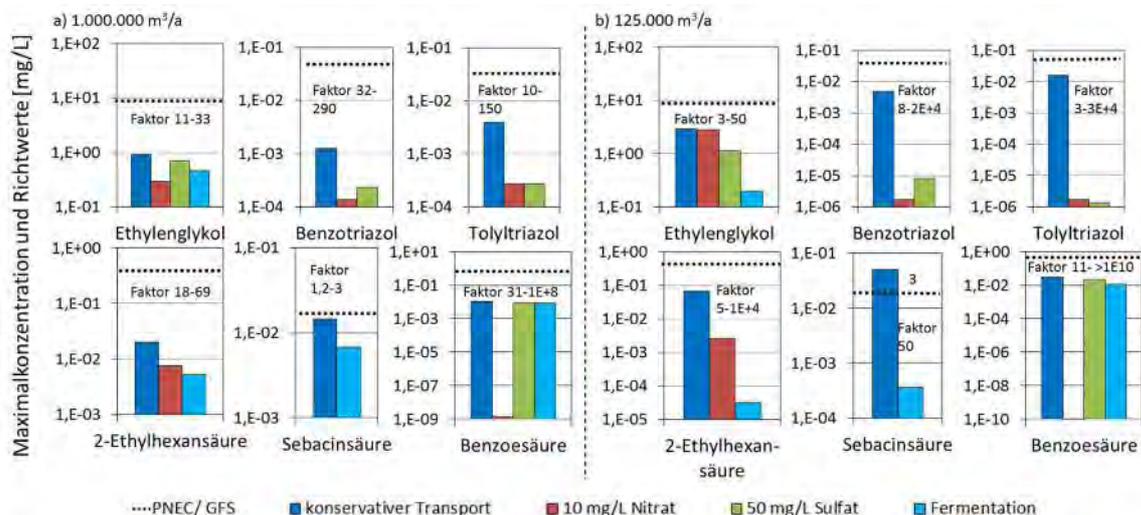


Abbildung 1.1.8-6: Maximalkonzentrationen im Brunnen bei einem EWS-Abstand von 100 m (EWS im direkten Anstrom der Entnahme positioniert) im Vergleich zum Richtwert bei einer Entnahme von a) 1.000.000  $\text{m}^3/\text{a}$  und b) 125.000  $\text{m}^3/\text{a}$ .

### AP 1.8.3 Quantifizierung des Temperatureinflusses auf das Mobilitätsverhalten von CKW

Bei der Entscheidung ob und inwieweit saisonale Wärmespeicher im urbanen geologischen Untergrund ein wesentliches Element der städtischen Wärmeversorgung werden können, sind auch die Auswirkungen von Temperaturerhöhungen auf das Emissionsverhalten von Altlasten zu berücksichtigen. Zu dieser Fragestellung existieren jedoch nur wenige Untersuchungen. Ein wesentlicher temperaturabhängiger Emissionspfad in das Grundwasser ist hierbei die NAPL-Lösung. Um eine Grundlage für eine differenzierte

Einschätzung bei einer Wärmespeicherung zu erwartender CKW-Lösung zu schaffen, zielte AP 1.8.3 darauf ab, den Temperatureinfluss auf die CKW-Lösung in Gerinneversuchen unter verschiedenen Randbedingungen zu quantifizieren und damit eine Datenbasis für die Validierung bestehender Modelle in AP 3.4 zu schaffen.

Die Gerinneversuche wurden mit einem definiert eingebauten TCE-Phasenkörper unter Variation der TCE-Porensättigung ( $S_n$ ) (6-14%) und der Fließgeschwindigkeit ( $v_a$ ) (0,1-0,45 m/d) für Temperaturen zwischen 10 und 70°C durchgeführt (siehe ANGUS+ 2016; Popp et al. 2016). Da die damit einhergehenden Unterschiede in der effektiven NAPL-Wasser-Kontaktzeit bei den jeweiligen Strömungsgeschwindigkeiten nicht direkt berechnet werden können, die Kontaktzeit jedoch einen wesentlichen Faktor für die effektive TCE-Emission darstellt, wurde zur Auswertung der Versuche das Verhältnis von spezifischer NAPL-Wasser-Kontaktfläche ( $A_0$ ) [ $\text{cm}^2/\text{cm}^3$ ] zur Abstandsgeschwindigkeit ( $v_a$ ) [ $\text{cm}/\text{d}$ ] berechnet. Zur Quantifizierung der effektiven spezifischen NAPL-Wasser-Kontaktfläche in Abhängigkeit der Temperatur (10, 30 und 60°C) wurden interfazielle Tracerversuche (IFT) unter Variation der TCE-Porensättigung (4-17%) durchgeführt (siehe ANGUS+ 2016). Um  $A_0$  für alle bei den Gerinneversuchen durchgeführten Temperaturen (20, 40 und 70°C) unter Berücksichtigung der TCE-Porensättigung bestimmen zu können, wurden im ersten Schritt eine logarithmische Ausgleichsfunktion ( $A_0 = a * \ln(S_n) + b$ ) an die Ergebnisse der IFT für jede Temperatur angepasst (Abbildung 1.1.8-7b). Im zweiten Schritt wurden jeweils die Parameter a und b gegen die Temperatur (T) aufgetragen und diese durch eine exponentielle Ausgleichsfunktion ( $a = m * e^{nT}$ ) approximiert (Abbildung 1.1.8-7c). Hieraus ergibt sich folgender funktionaler Zusammenhang:

$$A_0 = a(m_a * e^{n_a * T}) * \ln(S_n) + b(m_b * e^{n_b * T}) \quad \text{Gl.1}$$

Da für die Interpretation der erzielten Ergebnisse sich zusätzliche Untersuchungen zum Einfluss der Temperatur auf die Löslichkeit sowie der Lösungskinetik als notwendig erwiesen, wurden ergänzend Säulenversuche mit geringer TCE-Porensättigung (2-5%) zur Quantifizierung des Massentransferkoeffizienten durchgeführt (siehe ANGUS+ 2016). Um die Temperaturabhängigkeit der Löslichkeit für wesentliche NAPL-Vertreter zu quantifizieren, wurden zum einen publizierte Löslichkeitsdaten zusammengestellt und neu nach Knauss, Copenhaver (1995) ausgewertet und zum anderen aufgrund Unstimmigkeiten in diesen Daten für die Gruppe der chlorierten Ethene Löslichkeitsbestimmungen in Abhängigkeit der Temperatur in Schüttelversuchen durchgeführt (siehe ANGUS+ 2017).

Die Löslichkeitsuntersuchungen (siehe Koproch et al. in prep.; Anlage „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“) zeigten, dass sich für die meisten CKWs entgegen bisher gängiger Annahmen von mit der Temperatur stetig steigenden Löslichkeiten ein Löslichkeitsminimum zwischen 20 und 40°C ausbildet (Abbildung 1.1.8-7a-d). Im Fall einer Temperaturerhöhung wird am Beispiel von TCE die Löslichkeit von 10°C erst bei Temperaturen von über 60°C überschritten. Auch für die BTEX-Stoffgruppe zeigt sich ein Löslichkeitsminimum, welches sich hier jedoch zwischen 10 und 20°C befindet (Abbildung 1.1.8-7f). Mit bis zu Faktor 20 steigt die Löslichkeit durch eine Temperaturerhöhung von 10 auf 70°C bei den PAK's am stärksten (Abbildung 1.1.8-7e).

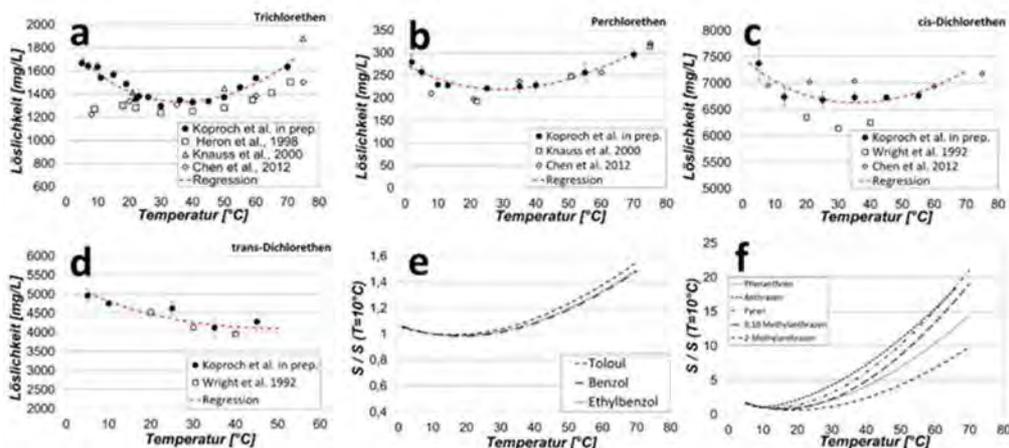


Abbildung 1.1.8-7: Löslichkeiten aus den Schüttelversuchen für a) PCE, b) TCE, c) trans-DCE und d) cis-DCE, e) und f) nach Gl.1 berechnete Löslichkeiten für Stoffe der BTEX-Gruppe und ausgewählter PAK's in Relation zur Löslichkeit bei 10°C.

Die Säulenversuche zeigten zu Beginn für einen kurzen Zeitraum von ca. 12-25 ausgetauschten Porenvolumen Konzentrationen nahe der Löslichkeit (ANGUS+ 2016) und um im Mittel 2 Größenordnungen abnehmende TCE-Konzentrationen im weiteren Versuchsverlauf. Die hieraus ermittelten Massentransferkoeffizienten waren dabei bei 70°C gegenüber 10°C um bis zu 10-fach erhöht (Abbildung 1.1.8-8a). Die experimentell bestimmten effektiven spezifischen NAPL-Wasser-Kontaktflächen stiegen im untersuchten TCE-Porensättigungsbereich zwischen 10 und 30°C um den Faktor 1,5-2 sowie zwischen 10 und 60°C um den Faktor 5-7 an (Abbildung 1.1.8-8b). Mit den nach Gl.1 berechneten  $A_0$ -Verläufen in Abhängigkeit der TCE-Porensättigung lassen sich die experimentell bestimmten  $A_0$  gut wiedergeben. Anhand der berechneten Kurven zeigt sich dann zwischen 10 und 70°C eine Erhöhung der Kontaktflächen um den Faktor 10 (Abbildung 1.1.8-8d).

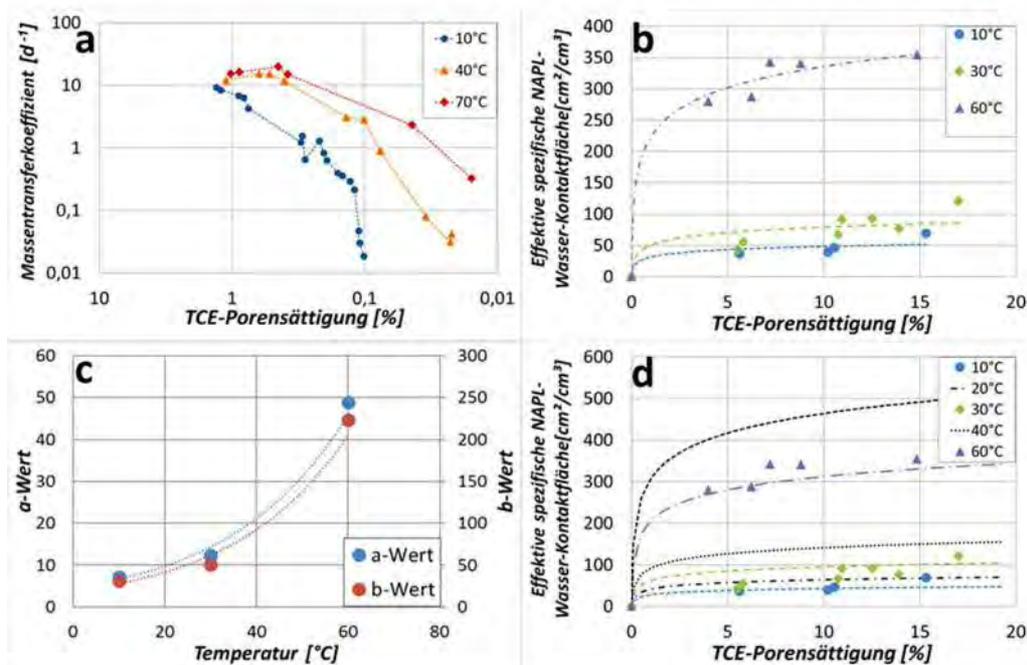


Abbildung 1.1.8-8: Aus Säulenversuchen ermittelte transiente Massentransferkoeffizienten (a); aus interfaziellen Tracer-versuchen ermittelte effektive spezifische Wasser-TCE-Kontaktflächen in Abhängigkeit der Temperatur und der TCE-Porensättigung (Messpunkte: Symbole,  $y=a*\ln(x)+b$ : gepunktete Linie) (b); a- und b-Wert der jeweiligen logarithmischen Ausgleichsfunktion (c); aus Gl.1 ermittelte temperaturabhängige logarithmische Funktion mit Messpunkten sowie den inter-bzw. extrapolierten Kurven für 20, 40 und 70°C (d).

Insgesamt traten in den Gerinneversuchen durch eine Temperaturänderung nur relativ geringe Änderungen der TCE-Massenflüsse (max. 32%) sowie der TCE-Maximalkonzentrationen (max. 12%) auf (Abbildung 1.1.8-9 links). Bei der Erwärmung von 20 auf 40°C blieben die TCE-Massenflüsse weitgehend konstant oder gingen um 8% geringfügig zurück, während die Maximalkonzentrationen in einem ähnlichen Verhältnis wie die Löslichkeiten für diese Temperaturen um 6-10% zurückgingen. Bei der Erwärmung von 40 auf 70°C stiegen dagegen die TCE-Massenflüsse um 12-32% und die TCE-Maximalkonzentrationen um 6-12% an, wobei die TCE-Maximalkonzentrationen damit nur in einem Fall ( $S_n = 12-14\%$ ) über (6%) den TCE-Maximalkonzentrationen von 20°C lagen. Da unter allen untersuchten Randbedingungen (insbesondere bei 0,1 und 0,25 m/d) die TCE-Massenflüsse bei 20°C geringer sind als aus dem Verhältnis der TCE-Löslichkeiten der untersuchten Temperaturen für eine Gleichgewichtslösung zu erwarten wäre, ist auch bei den hier verwendeten TCE-Porensättigungen von 6-14% von einer Beeinflussung der TCE-Freisetzung durch kinetische Effekte und damit einer langsameren Lösung bei geringeren Temperaturen auszugehen. Dies verdeutlicht auch der Anstieg der TCE-Massenflüsse mit zunehmendem  $A_0/v_a$  [h/cm<sup>2</sup>] (Abbildung 1.1.8-9 rechts) und somit mit zunehmender Kontaktzeit im Verhältnis zur verfügbaren durchflusswirksamen NAPL-Kontaktfläche.

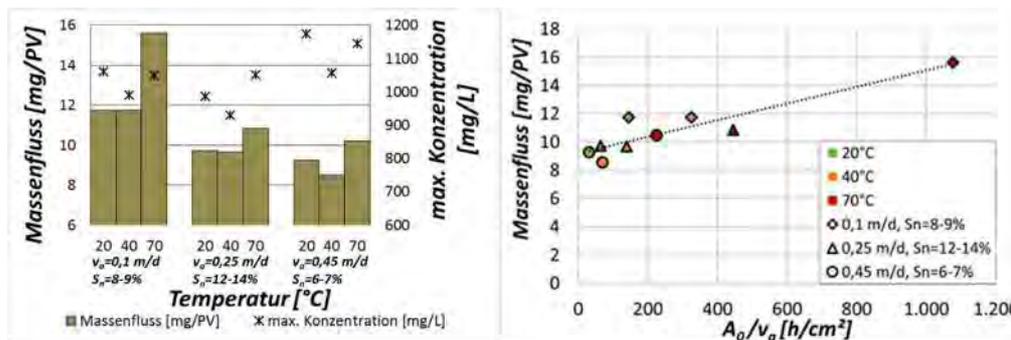


Abbildung 1.1.8-9: Aus dem quer zur Fließrichtung aufgenommenen Probenahmeprofil gemessene TCE<sub>aq</sub>-Massenflüsse der Gerinneversuche (links); gegenüber dem Verhältnis von  $A_0/v_a$  (rechts).

Die experimentellen Ergebnisse haben gezeigt, dass bei einer Wärmespeicherung für Stoffe wie CKW's, die ein temperaturabhängiges Löslichkeitsminimum besitzen, auch verringerte Massenflüsse auftreten können. Bei sehr geringen NAPL-Residualsättigungen bzw. kurzen NAPL-Wasser-Kontaktzeiten ist hingegen auf Grund einer beschleunigten Lösungskinetik auch bereits bis 40°C mit erhöhten Massenflüssen zu rechnen. Dies ist zu einem großen Teil auf die Vergrößerung der effektiven spezifischen NAPL-Wasser-Kontaktfläche zurückzuführen. Da auf Grund von Verdünnung und typischerweise heterogen vorliegender NAPL-Verteilungen auch im Dezimetermaßstab sowohl kinetische Lösungs-limitierung und Gleichgewichtslösung gleichzeitig auftreten können, und die Temperaturbeeinflussung beider Prozesse unterschiedlich ist, sind beide Prozesse in entsprechenden Prognoseansätzen zu berücksichtigen, sofern im Grundwasser noch keine Sättigungskonzentrationen erreicht sind. Für CKW's kann es hierbei z. B. zu einem gegenläufigen Temperatureffekt von sinkender Löslichkeit und beschleunigter Lösungskinetik kommen, sodass in der Summe für die mittleren Temperaturbereiche kaum Unterschiede im Massenfluss auftreten, wie dies auch in den Gerinneversuchen beobachtet wurde. Erst ab mittleren Temperaturen wie z. B. >40°C für TCE, wenn ein Anstieg in der Löslichkeit und eine beschleunigte Lösungskinetik zusammenkommen, ist unabhängig von NAPL-Sättigung und Kontaktzeit mit einem Anstieg im CKW-Massenfluss zu rech-

nen. Auf Grund der auf Feldmaßstab häufig vorliegenden langen Kontaktzeiten, wird in vielen Fällen hierfür bereits die Berücksichtigung der temperaturabhängigen Löslichkeiten voraussichtlich relativ gute Abschätzungen zu Auswirkungen von Temperaturänderungen ermöglichen. Die Übertragbarkeit der hier abgeleiteten Zusammenhänge bleibt durch Feldversuche zu verifizieren. Die hier dargestellten Ergebnisse bieten neben einer Optimierung bestehender Modelle auch eine Basis zur Optimierung bestehender thermischer Grundwassersanierungsverfahren und zur Kombination von Wärmespeicherung im geologischen Untergrund mit Grundwassersanierung.

(9) AP 1.9 Mikrobiologische Parametrisierung und experimentelle Untersuchungen zum Einfluss von Temperaturerhöhungen, Schadstoffexpositionen und Gasleckagen

Ziel der Forschungsarbeiten in AP 1.9 war es, die Batch- und Sedimentsäulenversuche aus AP 1.7 und AP 1.8 mikrobiologisch zu bewerten. Neben Säulenversuchen zur Temperaturerhöhung, Freisetzung von organischer Substanz und Additivzugabe bei Kontaminationen wurden auch Gasleckageexperimente molekularbiologisch untersucht. Zuerst wurde ein Monitoringprogramm aus verschiedenen, sich ergänzenden molekularbiologischen Verfahren zur Bestimmung der gesamten bakteriellen Abundanz, dem Vorkommen verschiedener stoffwechselphysiologischer Gruppen und der Erfassung ihrer Stoffwechselaktivität inklusive Anpassung der Verfahren an die verschiedenen Standorte entwickelt. Es zeigte sich, dass die Kombination aus genetischem Fingerprinting und quantitativer Polymerasekettenreaktion (qPCR) gut geeignet war, um die Zusammensetzung der mikrobiellen Biozönose qualitativ und quantitativ zu erfassen. Mit Hilfe des genetischen Fingerprintings wurden für die verschiedenen Versuchsansätze Mikroorganismen identifiziert und Tabellen zum Vorkommen der verschiedenen Vertreter und den ihnen zugeordneten Fähigkeiten erstellt. Sofern die Ergebnisse bereits publiziert sind, wurden die Sequenzen der identifizierten Mikroorganismen in der Online-Datenbank „GenBank“ veröffentlicht. Daneben wurden mittels spezifischer Primer stoffwechselphysiologische Gruppen wie Sulfat-reduzierende Bakterien (SRB) und Schwefel-oxidierende Bakterien (SOB) quantifiziert. Zur Interpretation der molekularbiologischen Charakterisierung der mikrobiellen Gemeinschaft wurden Veränderungen in der Fluidchemie herangezogen, um die dominierenden Stoffwechselprozesse zu identifizieren. Ein weiterer Fokus der Untersuchungen lag auf dem Monitoring potenziell pathogener Mikroorganismen, insbesondere bei einer Temperaturerhöhung im Sediment. Als typische potenziell pathogene Vertreter wurden in AP1.9 die Gattungen *Legionella* und *Pseudomonas* als Leitorganismen für das Monitoring ausgewählt. Daneben wurde auch das Vorkommen nicht-tuberkulöser Mykobakterien quantifiziert, da diese ubiquitär im Boden vorkommen und auch potenzielle Erreger von Krankheiten sein können. Es zeigte sich, dass die qPCR mit dem Einsatz spezifischer Primer geeignet war, diese drei Gruppen in den Sedimentsäulenversuchen zu quantifizieren. Im Folgenden werden die Ergebnisse zu den Versuchen mit Temperaturerhöhung, Additivzugabe und Gasleckage zusammengefasst dargestellt.

### Auswirkungen einer Temperaturerhöhung auf die Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft in Sedimentsäulenversuchen

Ziel des Versuchs war es, Veränderungen im Untergrund infolge von Temperaturerhöhungen zu untersuchen und die möglichen Auswirkungen auf geochemische und biologische Prozesse im Boden und Grundwasser zu erfassen. Sedimentsäulen (110 cm Länge, 10 cm Durchmesser) waren mit Pleistozänem Sand aus einer Bohrung in Odderade befüllt (AP 1.8). Sie wurden mit Leitungswasser und einer Fließgeschwindigkeit von  $0,75 \text{ m d}^{-1}$  bei Temperaturen von  $10^\circ\text{C}$ ,  $25^\circ\text{C}$ ,  $40^\circ\text{C}$  und  $70^\circ\text{C}$  von unten nach oben durchströmt (Lüders et al. 2016). Fluidproben wurden nach der Säulenpassage entnommen und mikrobiologisch analysiert.

#### *Veränderungen der Zusammensetzung und Abundanz der bakteriellen Biozönose in Abhängigkeit von der Temperatur*

Das genetische Fingerprinting zeigte bereits zum Zeitpunkt der Equilibrium-Phase, in der alle Säulen bei  $10^\circ\text{C}$  durchströmt wurden, Unterschiede in der Zusammensetzung der bakteriellen Biozönose (Lienen et al. 2017). Dies weist auf Inhomogenitäten beim Packen der Säulen mit dem Sediment hin, die Unterschiede in den mikrobiellen Gemeinschaften zur Folge hatten. Neben Bakterien der Stämme *Proteobacteria* und *Bacteroidetes* wurde die Gemeinschaft von Vertretern der Stämme *Firmicutes* und *Acidobacteria* dominiert. Mit Beginn der Temperaturerhöhung unterschied sich die Biozönose insbesondere bei  $70^\circ\text{C}$  deutlich von den Gemeinschaften in den geringer temperierten Fluiden. Thermophile Mikroorganismen aus der Familie der *Thermoanaerobacteriaceae* sowie Bakterien der Gattung *Thermoanaerobaculum* etablierten sich. Die Abundanz der *Bacteria* blieb mit der Temperaturerhöhung weitgehend konstant und sie war bei allen Temperaturen auf einem ähnlichen Niveau.

#### *Interaktion von Sulfat-reduzierenden und Schwefel-oxidierenden Bakterien*

Sowohl Sulfat-reduzierende als auch Schwefel-oxidierende Bakterien wurden in den Fluiden der Säulen nachgewiesen. Bei  $40^\circ\text{C}$  und  $70^\circ\text{C}$  zeigten die geochemischen Daten eine temporäre Sulfatreduktion. Diese ging einher mit einem Anstieg der Abundanz von SRB. Gleichzeitig nahm auch das Vorkommen von SOB in den Fluiden zu. Sehr wahrscheinlich kam es in den Sedimentsäulen zu einer Interaktion dieser beiden physiologischen Gruppen. Sulfat wurde von SRB zu Sulfid reduziert und das Sulfid von SOB zum Sulfat oxidiert. Somit ergab sich ein Schwefelkreislauf, der zur Folge hatte, dass sich keine chemischen Verbindungen wie beispielsweise Schwefelwasserstoff akkumulierten.

#### *Temperatureinfluss auf die Abundanz potenziell pathogener Mikroorganismen*

Ein Fokus der Arbeiten in AP 1.9 lag auf dem Monitoring potenziell pathogener Mikroorganismen. Aus der Trink- und Brauchwasserversorgung ist hier vor allem die Gattung *Legionella* bekannt. Daneben kommen potenziell pathogene Bakterien wie die Gattungen *Mycobacterium* und *Pseudomonas* ubiquitär im Boden vor. Um die Auswirkungen einer Temperaturerhöhung im Boden auf diese Mikroorganismen zu untersuchen, wurde mit Hilfe etablierter spezifischer Primer die Abundanz dieser Gattungen mittels qPCR in den Fluiden der Sedimentsäulen bestimmt (Dutil et al. 2007; Bergmark et al. 2012).

Sowohl bei *Pseudomonas* als auch bei *Legionella* nahm das Vorkommen bei allen Temperaturen mit zunehmender Versuchsdauer ab. Bei den NTM nahm die Abundanz bei

10°C, 25°C und 70°C ab, wohingegen sie bei 40°C konstant blieb. Das Temperaturoptimum von Mykobakterien liegt bei 30°C bis 37°C mit einem Temperaturbereich von 25°C bis 50°C. Demnach war keine substantielle Erhöhung der Genkopienzahlen bei 10°C und 70°C zu erwarten. Die weitgehend konstante Abundanz bei 40°C lässt sich mit dem Temperaturoptimum erklären. Die verschiedenen Spezies der Gattung *Mycobacterium* unterscheiden sich in Bezug auf ihre optimale Wachstumstemperatur. Vermutlich waren in den Säulen vermehrt Arten abundant, deren Temperaturoptimum bei annähernd 40°C lag. Daneben war sehr wahrscheinlich auch die stärkere Mobilisierung von organischem Kohlenstoff aus dem Sediment in der 40°C-Säule im Vergleich zur 25°C-Säule ursächlich für die erhöhte Abundanz der chemoorganotrophen Organismen. Für NTM wurden bisher keine Grenzwerte in Bezug auf die maximal tolerierbare Zellzahl im Trinkwasser festgelegt. Aus der Literatur geht hervor, dass vor allem immungeschwächte Personen einem erhöhten Infektionsrisiko bei Exposition mit NTM ausgesetzt sind. Eine mögliche Infektionsquelle ist kontaminiertes Leitungswasser. Die Ergebnisse des Laborversuchs deuten darauf hin, dass eine Temperaturerhöhung im Untergrund allein keine Vermehrung potenziell pathogener Mikroorganismen verursacht und sich damit das Infektionsrisiko nicht erhöht.

#### Auswirkungen einer zusätzlichen Zugabe von Organik auf die Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft in Sedimentsäulenversuchen

In einem zweiten Temperaturversuch wurden Säulen mit tertiären Sedimenten (obere Braunkohlensande) befüllt und kontinuierlich mit Leitungswasser (10°C, 25°C, 40°C, 70°C) und verschiedenen Additiven durchströmt. Zuerst wurde dem Fluid Acetat im Überschuss zugegeben, das bei unterschiedlichen mikrobiellen Stoffwechselforgängen als Elektronendonator verwendet werden kann, um die Mobilisierung von organischem Material im Boden durch erhöhte Temperaturen zu simulieren (Jesušek et al. 2013b). Zur Untersuchung der Temperaturabhängigkeit des anaeroben Abbaus von organischen Schadstoffen wurde in einem weiteren Versuch dem Leitungswasser Toluol beigemischt.

#### Änderungen der Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaft in Abhängigkeit von der Temperatur (nach Acetatzugabe)

Die Charakterisierung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft mit genetischem Fingerprinting zeigte temperaturbedingte Unterschiede. Bei allen Temperaturen wurden fakultative Denitrifizierer sowie SRB identifiziert (Westphal et al. 2017). Bei 40°C wurde zudem die höchste Diversität der SRB beobachtet. Korrespondierend zur höchsten Sulfatreduktionsrate wurde auch die höchste Genkopienzahl und damit die höchste Abundanz von SRB in der 40°C-Sedimentsäule nachgewiesen. Die höchste Diversität von Fermentierern bei 70°C deutet auf eine temperaturbedingte Freisetzung von Organik aus dem Sediment hin. Dies wird durch Bilanzen des Kohlenstoffs und terminaler Elektronenakzeptoren bestätigt. Ein Vergleich der Stoffbilanzen mit den Quantifizierungen der DNA und bakteriellen Abundanzen zeigt, dass vor allem bei Temperaturen von 40°C und 70°C mehr Organik umgesetzt wurde als durch die gemessene Acetatabnahme zu erwarten war. Das deutet auf einen Abbau organischer Verbindungen hin, die infolge der erhöhten Temperatur mobilisiert und damit bioverfügbar wurden. Darüber hinaus zeigen die Bilanzen, dass in allen Säulen die gleichen metabolischen Prozesse abliefen, auch wenn die Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaft unterschiedlich war. Dies entspricht den Ergebnissen des

genetischen Fingerprintings mit dem eine mikrobielle Gemeinschaft unterschiedlicher Struktur aber gleicher Funktion bei den untersuchten Temperaturen nachgewiesen wurde.

#### *Raum-zeitliche Sukzession der bakteriellen Gemeinschaft*

Die räumliche Sukzession in den Sedimentsäulen infolge der Zugabe von Acetat wurde bei 10°C und 70°C untersucht. Hierzu wurden Fluide entlang der Fließstrecke an der Säule entnommen. Genetische Fingerprintanalysen zeigten geringe Unterschiede der mikrobiellen Biozönose bei 70°C, wohingegen sich die Gemeinschaften in den 10°C Fluiden zu Beginn und Ende der Säulenpassage deutlich unterschieden (Abbildung 1.1.9-1).

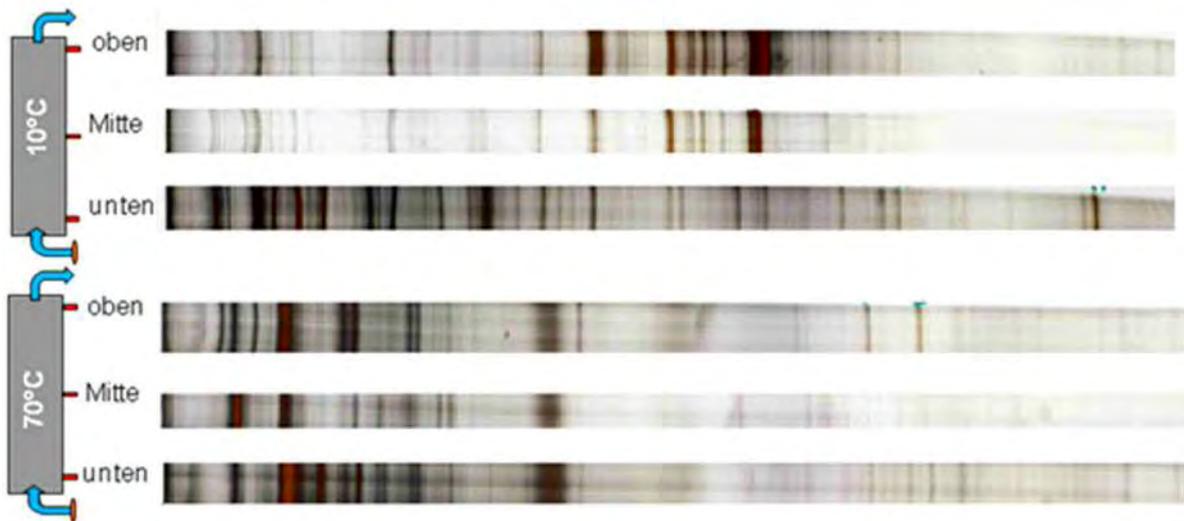


Abbildung 1.1.9-1: Genetisches Fingerprinting von 16S rRNA Genfragmenten aus Fluidproben der 10°C- und 70°C-Sedimentsäulen über das Säulenprofil (oben, Mitte, unten). Signifikante Unterschiede zwischen unten und oben in der 10°C-Säule. Ähnliche Gemeinschaften über das Säulenprofil in der 70°C-Säule.

Die Unterschiede innerhalb des Profils der 10°C-Säule lassen sich durch einen späteren Betriebsbeginn erklären. Die 70°C-Säule war bereits vier Monate eher in Betrieb genommen worden, was die Anpassung an die thermophilen Bedingungen erklärt. Zudem laufen Stoffwechselprozesse bei erhöhten Temperaturen schneller ab. So wurde mit dem Wasser Sauerstoff in die Säulen eingetragen, der bei 10°C langsamer als bei 70°C verstoffwechselt wurde. Daher wurden im unteren Bereich der 10°C-Säule vorwiegend aerobe Mikroorganismen detektiert. Nach Sauerstoff ist Nitrat der energetisch günstigste Elektronenakzeptor und wird bevorzugt verwertet, wenn Sauerstoff verbraucht ist. Daher wurden im Auslass der 10°C-Säule vorwiegend Nitratreduzierer detektiert und die Nitratkonzentration nahm über die Fließstrecke ab. Ist Nitrat als Elektronenakzeptor erschöpft, werden Elektronenakzeptoren wie Mangan(IV), Eisen(III) und Sulfat genutzt. Zum Zeitpunkt der Probenahme war das Nitrat in der 10°C-Säule offensichtlich ausreichend verfügbar, so dass keine Sulfatreduktion stattfand. Folglich wurden keine SRB identifiziert und im Fluid des oberen Auslasses waren sowohl Nitrat- und Eisen-reduzierende Bakterien als auch Bakterien dominant, die neben einer Eisen- und/oder Nitratreduktion auch fermentieren können. Diese metabolisch flexiblen Mikroorganismen wurden in den anderen Profilhöhen nicht nachgewiesen. In der 70°C temperierten Säule wurden Sauerstoff und andere terminale Elektronenakzeptoren schneller verstoffwechselt und daher war die in der Adaptionsphase auftretende raum-zeitliche Sukzession weiter fortgeschritten.

Offensichtlich war über das gesamte Säulenprofil das Redoxpotenzial soweit erniedrigt, dass die Sulfatreduktion dominierte. Auf Grund des niedrigen Redoxpotenzials wurden daher bei 70°C Sulfat- und Thiosulfatreduzierer sowie Fermentierer in Fluiden aller Profilhöhen nachgewiesen.

#### *Methanproduktion in 25°C-Sedimentsäule*

Etwa 110 Tage nach Versuchsbeginn wurde in der 25°C-Säule erstmals eine Methanbildung nachgewiesen (Jesušek et al. 2013b). Während in den anderen Säulen keine Methanogenese stattfand, wurde in der 25°C-Säule ab diesem Zeitpunkt kontinuierlich Methan gebildet. Außerdem wurde nur in der 25°C-Sedimentsäule eine abnehmende Acetatkonzentration über das Säulenprofil gemessen. Durch genetische Fingerprintanalysen wurde sowohl in der 25°C-Säule, als auch in der 40°C-Säule das Acetat-oxidierende, methanbildende Archaeon *Methanosaeta concilii* nachgewiesen (Westphal et al. 2017). Die quantitative Analyse zeigte korrespondierend zur Methanbildung die höchste Anzahl spezifischer 16S rRNA Genkopien für *Methanosaeta concilii* in der 25°C-Säule. Das Temperaturoptimum von *M. concilii* liegt bei ca. 37°C, wobei Vertreter der Gattung *Methanosaeta* auch bei bis zu 70°C nachgewiesen wurden. Dementsprechend ist davon auszugehen, dass *M. concilii* bei 40°C und 70°C durch organische Verbindungen oder Schwermetalle gehemmt wurde, die infolge der erhöhten Temperatur freigesetzt wurden.

#### *Abbau von organischen Schadstoffen - Beispiel Toluol*

Zur Untersuchung des Einflusses der Temperatur auf den Abbau organischer Schadstoffe wurde dem Wasser Toluol als Modellsubstanz zugegeben. Zum anaeroben Abbau sind unterschiedliche Bakteriengattungen befähigt, die phylogenetisch zu keiner einheitlichen Gruppe gehören. Toluolabbauer können zur Oxidation aromatischer Verbindungen Nitrat, Eisen(III) und Sulfat als terminale Elektronenakzeptoren nutzen. Zudem kann auch ein fermentativer Abbau von Aromaten erfolgen. Außerdem können fermentierende Bakterien in Syntrophie mit SRB oder methanogenen Archaeen Stoffwechsel betreiben.

Ein Abbau des Toluols setzte in den Sedimentsäulen ca. acht Wochen nach Beginn der Toluolzugabe ein. Genetische Fingerprintanalysen zeigten eine deutliche Veränderung der Zusammensetzung der mikrobiellen Gemeinschaft durch den Wechsel der zugeführten Kohlenstoffquelle von Acetat zu Toluol. Unter anaeroben Bedingungen wird Toluol hauptsächlich unter Reduktion von Nitrat abgebaut. Die Gattungen *Thauera* und *Azoarcus*, die häufig im Boden vorkommen und am Abbau beteiligt sind, wurden auch in den Säulen detektiert. Weiterhin wurden Vertreter aus der Gruppe der Deltaproteobakterien nachgewiesen, die Sulfat oder Eisen(III) zur Oxidation von Toluol nutzen. Neben der sulfatreduzierenden Gattung *Desulfobacula*, die verschiedene aromatische Verbindungen wie Toluol oxidiert, wurde *Geobacter sulfurreducens* detektiert, der u. a. Eisen(III) und Schwefel reduziert und ebenfalls Toluol als Elektronendonator verwenden kann.

#### *Biologische Sanierung kontaminierter Böden*

Ziel des Versuchs war es, die geochemischen und biologischen Veränderungen im Untergrund infolge einer Leckage von Wärmeträgerfluiden zu untersuchen und die im Zuge einer Bodensanierung mit Nitrat auftretenden Prozesse sowie mögliche Auswirkungen auf den Boden und das Grundwasser zu beurteilen. Hierzu wurden jeweils drei Sedimentsäulen (110 cm Länge) mit pleistozänem Sand und drei Sedimentsäulen mit Quarzsand

befüllt (AP 1.8) und mit Leitungswasser und einer Geschwindigkeit von  $0,75 \text{ m d}^{-1}$  durchströmt. In der viermonatigen Adaptionphase wurde den Säulen Nitrat in zwei verschiedenen Konzentrationen ( $100$  und  $400 \text{ mg L}^{-1}$ ) über die wässrige Phase zugeführt und mit einem Ansatz ohne Nitratzugabe verglichen. Anschließend wurde als Modells substanz für eine Kontamination im Bereich eines Erdsondenfeldes Ethylenglykol mit einer Konzentration von  $100 \text{ mg L}^{-1}$  in die Säulen eingeleitet. Eine mikrobiologische Charakterisierung der Fluidproben wurde während der Adaptionphase (Eq) sowie nach zwei Monaten (M2) und vier Monaten (M4) Ethylenglykolzugabe durchgeführt. Die bakterielle Diversität wurde per genetischem Fingerprinting und die Abundanz mit der quantitativen PCR bestimmt.

Das genetische Fingerprinting zeigte sowohl Sediment-abhängige Unterschiede in der Zusammensetzung der bakteriellen Gemeinschaft als auch Unterschiede auf Grund der zugegebenen Nitratmenge (Abbildung 1.1.9-2). Die Bandenprofile in allen Ansätzen änderten sich zudem mit der Versuchsdauer. Die Identifizierung der Bakterien ergab eine von Mikroorganismen des Phylums *Proteobacteria* dominierte Biozönose. Während sich bei anderen fluidchemischen Parametern wie Nitrat und Sulfat keine Veränderungen über das Säulenprofil ergaben, wies die Zunahme von Acetat (AP 1.8) darauf hin, dass der Abbau von Ethylenglykol ohne Nitratzugabe überwiegend über Gärung ablief. Korrespondierend dazu wurden mittels genetischem Fingerprinting vorwiegend fermentierende Bakterien nachgewiesen. Sowohl beim Quarzsand als auch beim Aquifersediment dominierten sowohl Nitrat-reduzierende Bakterien (NRB) als auch Fermentierer die bakterielle Biozönose, wenn Nitrat in einer Konzentration von  $100 \text{ mg/L}$  zugegeben wurde. Korrespondierend dazu nahm die Nitratkonzentration über das Säulenprofil ab und die Acetatkonzentration zu (AP 1.8). Daneben etablierten sich Eisen-reduzierende Bakterien der Gattungen *Ferribacterium* und *Geobacter* in beiden Sedimenten sowie ein Sulfat-reduzierendes Bakterium der Gattung *Desulfovibrio* im Aquifersediment. Der Nachweis dieser physiologischen Gruppen weist darauf hin, dass neben Nitratreduktion und Fermentation auch Eisen- und Sulfatreduktion in den Säulen zum Abbau des Ethylenglykols beitragen. Bei einer Nitratzugabe von  $400 \text{ mg/L}$  wurden vorwiegend NRB als dominante Mikroorganismen im genetischen Fingerprinting nachgewiesen. Dementsprechend war der überwiegende stoffwechselphysiologische Prozess zum Ethylglykolabbau die Nitratreduktion, was sich in einer deutlichen Abnahme des Nitrats über das Säulenprofil (AP 1.8) zeigte.

In Bezug auf die Abundanz der Bacteria und der SRB zeigten sich keine signifikanten Veränderungen. Die Zusammensetzung der bakteriellen Lebensgemeinschaft hatte sich zwar qualitativ geändert, die Größenordnung der Genkopien änderte sich nicht. Vermutlich waren die Bedingungen in Bezug auf die Verfügbarkeit von organischem und anorganischem Kohlenstoff in den Säulen nicht ausreichend, um einen vermehrten Energiegewinn und damit Biomassezuwachs zu bewirken. Offensichtlich waren Zu- und Abnahme von Zellmasse im Gleichgewicht, so dass sich keine Unterschiede beim Vorkommen zeigten.

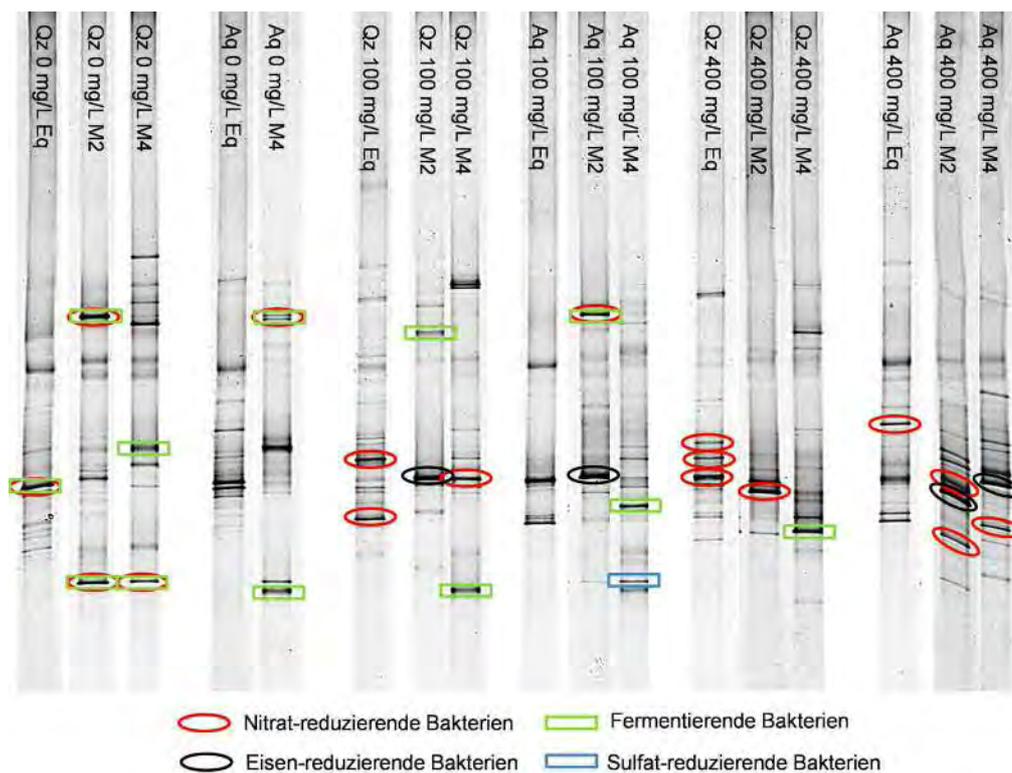


Abbildung 1.1.9-2: Genetisches Fingerprinting von 16S rRNA-Genfragmenten aus Fluidproben mit Nitrat- und Ethylenglykzugabe im Quarzsand (Qz) und Aquifersediment (Aq) in der Adaptionsphase (Eq), sowie nach zwei (M2) und vier Monaten (M4) Ethylenglykzugabe.

### Auswirkungen von Gasleckagen auf die Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaften in Sedimentsäulen

Ziel der Versuche war es, die Veränderungen im Redoxregime, in den Mineralphasen sowie in der Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft ausgelöst durch Gasleckagen im Untergrund und die möglichen Auswirkungen auf geschützte Ressourcen zu studieren.

#### *Einfluss einer Sauerstoffexposition auf die mikrobielle Biozönose*

Um die Auswirkungen von Druckluftleckagen in oberflächennahen Aquiferen zu untersuchen, wurden kleine Sedimentsäulen (30 cm Länge), die mit zwei unterschiedlichen Sedimenten befüllt waren (obere Braunkohlensande und künstliches mit 0,5% Pyrit angereichertes Sediment), mit Sauerstoff-angereichertem Leitungswasser bei Raumtemperatur und einer Geschwindigkeit von  $0,6 \text{ m d}^{-1}$  durchströmt (AP 1.7). Im Rahmen des Experiments mit reinem Sauerstoff [ $p(\text{O}_2)$  1 bar] und Luft [ $p(\text{O}_2)$  0,21 bar] sollten neben der aeroben Atmung, vor allem die Pyritoxidation untersucht werden. Die Veränderungen in der Zusammensetzung der mikrobiellen Biozönose wurden über vier Monate untersucht. Das genetische Fingerprinting zeigte unterschiedliche mikrobielle Lebensgemeinschaften abhängig vom Sediment und der Gasexposition sowie der Versuchsdauer. Bakterien der Stämme *Proteobacteria* und *Bacteroidetes* dominierten die Gemeinschaft. Die nachgewiesenen Mikroorganismen wurden bereits in anderen Untersuchungen im Boden und Grundwasser gefunden. In allen Fluiden wurden Sequenzen des Eisen-oxidierenden Bakteriums *Acidovorax* nachgewiesen. Daneben wurden vor allem in den mit Luft durch-

strömten Säulen Sequenzen gefunden, die dem Schwefel-oxidierenden Bakterium *Thioprofundum* zugeordnet sind. Die Eisenoxidierer und Schwefeloxidierer waren vermutlich an der Pyritoxidation beteiligt.

#### *Einfluss einer Methanexposition auf die mikrobielle Biozönose*

Das Ziel eines weiteren Experimentes war die Simulation einer Methanleckage im oberflächennahen Untergrund und die damit einhergehenden Auswirkungen auf geochemische Prozesse und die mikrobielle Lebensgemeinschaft im Boden. Der Fokus der Untersuchung lag auf der anaeroben Methanoxidation. In kleinen Sedimentsäulen (30 cm Länge), die mit vier unterschiedlichen Sedimenten befüllt waren (Pleistozäner Sand [NMS1/NMS2], marines Sediment [MAR] und künstliches mit 0,5% Goethit [GOE] angereichertes Sediment), wurde eine Methanleckage mit einem Partialdruck von 1 bar simuliert (AP 1.7). Die Säulen wurden mit einer Geschwindigkeit von  $0,6 \text{ m d}^{-1}$  bei Raumtemperatur mit Methan-angereichertem Wasser durchströmt. In einem Zeitraum von vier Monaten wurden zwei Fluidproben für die molekularbiologischen Untersuchungen aus den Säulen entnommen. Das genetische Fingerprinting zeigte sowohl Unterschiede in der bakteriellen Lebensgemeinschaft für die verschiedenen Sedimente als auch für den Zeitpunkt der Untersuchung. Die bakterielle Diversität hatte nach vier Monaten abgenommen, während die relative Abundanz einzelner Bakterien erhöht war. Offensichtlich hatte sich die Biozönose an die veränderten Bedingungen adaptiert. Bakterien des Phylums *Proteobacteria* dominierten die Gemeinschaft. Als Methan-verwertende Mikroorganismen wurden Vertreter der Familien *Methylococcaceae* und *Methylophilaceae* identifiziert. Nach vier Monaten Versuchsdauer hatten sich methanotrophe Gattungen in den Sedimentsäulen etabliert. Korrespondierend dazu nahm die Methankonzentration in beiden NMS-Säulen und der MAR-Säule ab (AP 1.7). Der Nachweis von sowohl aeroben als auch anaeroben Bakterien lässt auf verschiedene Mikrohabitate innerhalb der Sedimentsäulen mit unterschiedlichen Sauerstoffkonzentrationen schließen. Neben der qualitativen Charakterisierung der Zusammensetzung der bakteriellen Biozönose in den verschiedenen Säulen mit Hilfe des genetischen Fingerprintings lag der Fokus in diesem Experiment auch auf der quantitativen Analyse verschiedener stoffwechselphysiologischer Gruppen. Vor allem die SRB spielen in den anaeroben Bereichen des Bodens eine wichtige Rolle. Ein Vergleich des SRB-Vorkommens in den vier Säulen über einen Zeitraum von vier Monaten zeigte eine konstant geringe Abundanz im GOE-Sediment, während die Genkopien in den anderen Sedimenten um den Faktor 10 bis 100 höher lagen. Innerhalb von vier Monaten verringerte sich die SRB-Abundanz im MAR-Sediment um den Faktor 10 und im NMS2-Sediment um den Faktor 100. Die Anzahl der Genkopien nahm im NMS1-Sediment im selben Zeitraum um den Faktor 1.000 zu. Das erhöhte Vorkommen der SRB korrespondierte mit einer Abnahme der Sulfatkonzentration in den Fluiden der Sedimentsäulen um 5% (NMS1), 10% (NMS2) und 20% (MAR) (AP 1.7). Die Ergebnisse zeigen, dass sich die indigene mikrobielle Gemeinschaft nach einer längeren Adaptationszeit an die Methanexposition angepasst hatte und Stoffwechseltypen dominierten, die zur Oxidation des Methans beitrugen.

#### Zusammenfassung der mikrobiologischen Untersuchungen und Ausblick

Eine Veränderung der Umweltbedingungen durch Temperaturerhöhung, Additivzugabe oder Gaszufuhr beeinflusste die Zusammensetzung, Diversität und Abundanz der mikrobiellen Lebensgemeinschaft. Die mikrobielle Biozönose konnte sich schnell an die verän-

dernten Bedingungen anpassen. Bei einer Temperaturerhöhung blieben dominante mikrobielle Prozesse erhalten. Die Erfassung von Daten zur Mikrobiologie ist essentiell, um Vorhersagen über Veränderungen im Untergrund durch dessen Nutzung zu treffen und Modellierungsansätze zu verbessern. Da Standort-spezifische Unterschiede in der Zusammensetzung der mikrobiellen Lebensgemeinschaft durch die Anpassung an die äußeren Veränderungen auftreten, müssen Laborversuche unter den jeweiligen Bedingungen durchgeführt werden. Die Erkenntnisse aus Laborversuchen sollten in einem nächsten Schritt in situ an geothermischen Anlagen und Anlagen zur Gasspeicherung überprüft werden. Hierzu besteht noch erheblicher Forschungsbedarf.

### **II.1.2. AP 2 MODELLENTWICKLUNG**

#### **(1) AP 2.1 Modellentwicklung zur Simulation der Speicherung von Druckluft, CH<sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H<sub>2</sub> in Salzkavernen**

Übergeordnetes Ziel von AP 2.1 war die Entwicklung, numerische Umsetzung und softwaretechnische Realisierung von Prozessmodellen zur Simulation thermisch-hydraulisch-mechanisch (THM) gekoppelter Vorgänge im Wirtsgestein um Salzkavernen für die Speicherung stofflicher Energieträger in zyklischen Betriebsmodi. Basierend auf den Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik wurden die Feldgleichungen zur Beschreibung der gekoppelten Prozesse formuliert sowie Algorithmen zu deren numerischer Lösung im Rahmen von Orts- und Zeitdiskretisierungsverfahren (hier: gemischter Finite-Element-Ansatz) entwickelt.

Ein wesentlicher methodischer, anwendungsgetriebener Schwerpunkt dieses Arbeitspakets war die Auswahl und Weiterentwicklung von Deformationsgesetzen, die das mechanische Verhalten von Salzgestein insbesondere im Fall zyklischer Belastung mit vergleichsweise kurzen Zyklen in der Größenordnung von Tagen realistisch beschreiben. Im Ergebnis intensiver Recherchen, Gesprächen mit externen Fachleuten und Diskussionen innerhalb der Kavernengruppe des Vorhabens ANGUS+ mit den Verbundpartnern UFZ sowie den Universitäten Bochum und Kiel wurden die für den Betrieb von Salzkavernen charakteristischen Eigenschaften von Steinsalz identifiziert (z. B. visko-elastisch-plastisches Verhalten, Dilatations- und Verheilungseffekte, Veränderung hydromechanischer Eigenschaften in der Auflockerungszone).

Aus Literaturrecherchen wurde deutlich, dass die verfügbaren Materialmodelle der Salzmechanik in einachsiger oder dreidimensionaler Hauptachsenformulierung vorliegen. Das führt zu Nachteilen bei der Beschreibung von Schubspannungszuständen, wie sie beispielsweise in der komplexen Geometrie von Salzkavernen auftreten und dort zu Konturabbrüchen führen können. Aus diesem Grund wurde für das Materialmodell nach Minkley (welches andere Materialmodelle der Salzmechanik als Untermenge enthält – z. B. Burgers, Lubby II) eine verallgemeinerte, tensorielle Darstellung entwickelt und in die wissenschaftliche Open-Source-Simulationsplattform OpenGeoSys des Verbundpartners UFZ implementiert (Nagel et al. 2017). Testbeispiele zeigen sehr gute Übereinstimmungen mit vorhandenen Lösungen (vgl. Abbildung 1.2.1-1) sowie ein deutlich verbessertes Konvergenzverhalten gegenüber herkömmlichen Formulierungen. Damit konnte die

Leistungsfähigkeit dieser Implementierung von Materialmodellen in einer generalisierten Form nachgewiesen werden. Diese Option wurde für die späteren Szenariensimulationen für eine Typkaverne in AP 3.1 genutzt.

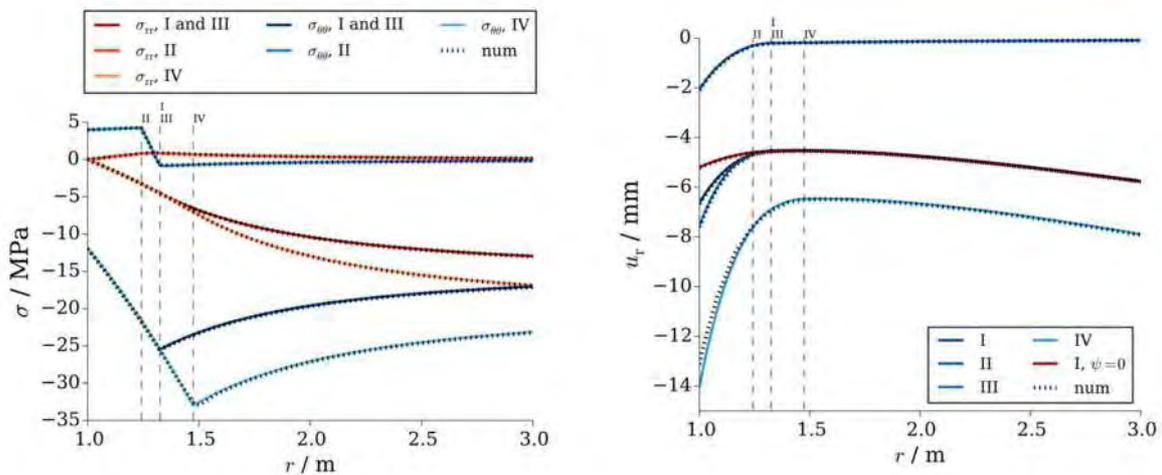


Abbildung 1.2.1-1: Radial- und Umfangsspannungen (links) sowie Radialverschiebungen (rechts) bei der zyklischen Beanspruchung einer Scheibe mit Loch zur Analyse der elasto-plastischen Anteile des konstitutiven Salzmodells nach Minkley aus Nagel et al. (2017). Vergleich der numerischen Lösung (gestrichelte Linien) mit einem numerischen Ansatz nach Senseny et al. (1989; durchgezogene Linien).

Zur Modell- und Softwarevalidierung wurden numerische Benchmarks definiert und mit OpenGeoSys bearbeitet. Im Mittelpunkt standen dabei der Test von Materialmodellen der Salzmechanik (z. B. uni- und triaxialer Druckversuch, Schubversuch, Platte mit Loch) sowie die numerische Analyse einer vereinfachten Typkaverne mit linear-elastischem und elastisch-plastischem Materialmodell. Diese Benchmarks wurden in der Reihe der Benchmark-Bücher, die unter maßgeblicher Redaktion des UFZ im Springer-Verlag erscheinen, aufgenommen und stehen auf der Internet-Seite [www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org) in der Benchmark-Bibliothek von OpenGeoSys zum Download zur Verfügung (vgl. Nagel & Böttcher 2015).

In Abstimmung mit Partnern aus dem Verbundprojekt InSpEE der Speicherinitiative der Bundesregierung wurden thermodynamische und hydraulische Prozessbedingungen beim Betrieb von Salzkavernen zur Gasspeicherung diskutiert. Dabei wurden die mechanischen Prozesse im Wirtsgestein als der prägende Vorgang identifiziert. Thermische Prozesse sind in den beobachteten Temperaturbereichen nicht zu ignorieren, können jedoch sequenziell mit den mechanischen Prozessen gekoppelt werden. Hydraulische Prozesse in den Kavernenwänden können auf der Skala der Betrachtung kompletter Kavernen oder Kavernenfelder vernachlässigt werden, da die Auflockerungszonen an den Kavernenrändern von geringer Dimension gegenüber den Systemdimensionen sind.

Im Rahmen dieses Arbeitspakets wurde durch den Verbundpartner Ruhr-Universität Bochum ein allgemeines geomechanisches Konstitutivgesetz entwickelt, welches neben den beim zyklischen Betrieb von Kavernenspeichern bereits oben genannten relevanten Einwirkungen unter Beachtung elastischer, plastischer, zeitabhängiger bzw. viskoser Eigenschaften auch das Schädigungsverhalten des Steinsalzes konkret berücksichtigt. Das Materialverhalten von Steinsalz ist abhängig von vielschichtigen Einflüssen und zeigt unterhalb bzw. oberhalb der Dilatanzgrenze unterschiedliches makro- und mikroskopisches Verhalten. Die Dehnungsraten ergeben sich dabei aus der Superposition ihrer Anteile (vgl. Khaledi et al. 2016b).

Hierbei wurden die elastischen Dehnungsraten nach Hooke und thermisch induzierte Verformungen durch Ansatz einer linearen thermischen Expansion angenommen. Zur Beschreibung der ratenabhängigen plastischen Verformung unter Berücksichtigung volumetrischer Dilatanz und Kompression wurde das viskoplastische Modell nach Desai / Perzyna verwendet. Das plastische zeitabhängige Materialverhalten wurde im konstitutiven Modell durch Einbindung des „steady-state Norton creep law“ berücksichtigt.

Im Spannungsbereich oberhalb der Dilatanzgrenze werden Faktoren wie die Entwicklung von Mikrorissen, die Schädigung, die Änderung der Permeabilität und das Langzeitversagen signifikant. In dem hier entwickelten Stoffgesetz wurde die Quantifizierung der Schädigung sowie der Mikrorisse durch Integration des Energie-Kriteriums nach Cristescu realisiert. Dabei wird die Menge der Energie, die bei Kompression gespeichert bzw. bei Dilatanz freigesetzt wird, mit der volumetrisch inelastischen Arbeit pro Volumeneinheit verknüpft. Wenn dabei definierte Grenzwerte der Energiedissipation überschritten werden, versagt das Material.

Das entwickelte Stoffgesetz wurde in das FEM-Programm Code\_Bright implementiert und unter Verwendung geeigneter Versuchsdaten parametrisiert. Code\_Bright ist eine wissenschaftliche Programmentwicklung der Politècnica de Catalunya, Barcelona zur Simulation gekoppelter THM-Prozesse in geotechnologischen Anwendungen. Der Quellcode ist dem Verbundpartner zugänglich und diente u. a. in AP 3.1 als Basis für weitergehende numerische Untersuchungen.

Mit den Forschungsarbeiten und -ergebnissen konnte zusammenfassend gezeigt werden, dass die erarbeiteten Modelle und numerischen Algorithmen sowie deren Realisierung im Rahmen der wissenschaftlichen Softwareplattformen OpenGeoSys und Code\_Bright prinzipiell geeignet sind, gekoppelte THM-Prozesse bei der zyklischen Be- und Entladung von Salzkavernen zum Zwecke der Speicherung stofflicher Energieträger realitätsnah numerisch zu beschreiben. Damit wurden die Projektziele in diesem Arbeitspaket vollständig erreicht. Code-Vergleiche zwischen OpenGeoSys und Code\_Bright wurden am Beispiel einer Typkaverne vorgenommen und sind in den Ausführungen zu Arbeitspaket AP 3.1 dieses Berichts dargelegt. Während Code\_Bright eine externe Simulationsplattform darstellt liegt die Koordination der Entwicklungskompetenzen (und die Hauptentwicklungszuständigkeit) für OpenGeoSys beim Verbundpartner UFZ des Vorhabens ANGUS+. OpenGeoSys ist eine Open-Source-Entwicklung – der Quellcode, Testbeispiele, Literatur und Dokumentationen stehen auf der Internet-Seite [www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org) zur Verfügung. Die vollständige Verfügbarkeit der Quellen von OpenGeoSys verbessert die Effizienz und Flexibilität der Nutzung dieser Softwareplattform, von der auch die anderen Verbundpartner im Vorhaben ANGUS+ profitieren. In diesem Bericht wird die umfassende Nutzung und Erweiterung von OpenGeoSys im Rahmen einer Reihe weiterer Arbeitspakete angeführt.

## (2) AP 2.2 Modellentwicklung zur Simulation der Speicherung von CH<sub>4</sub> bzw. Erdgas, Sole, Druckluft und Wärme in tiefen porösen Gesteinen

Im Arbeitspaket AP 2.2 „Modellentwicklung zur Simulation der Speicherung von CH<sub>4</sub> bzw. Erdgas, Sole, Druckluft und Wärme in tiefen porösen Gesteinen“ sollen die in AP 1.1

identifizierten Prozesse in Prozessgleichungen umgesetzt und die Berechnung dieser gekoppelten Prozesse in den verwendeten Simulatoren ECLIPSE (Schlumberger) und OpenGeoSys (Kolditz et al. 2012) ermöglicht werden. Dafür soll die bestehende Schnittstelle zwischen diesen Programmen für die Beschreibung von Gasspeicherung in porösen Formationen notwendigen Mehrphasen-Mehrkomponenten-Ansätze neu implementiert und um die Kopplung zwischen Hydraulik, Geomechanik und thermischen Effekten erweitert werden.

Ein wesentlicher Bestandteil der Arbeiten dieses Arbeitspaketes bestand in der Neuimplementierung und Erweiterung der zum Projektbeginn existierenden Schnittstelle zwischen dem Open-Source-Simulator OpenGeoSys und dem industriell vertriebenen Simulator ECLIPSE. Dabei wurde ein für die Simulation der Gasspeicherung notwendiger Mehrphasen-Mehrkomponenten-Ansatz implementiert und effizient in den Datenstrukturen umgesetzt (Pfeiffer et al. 2016b). Da die Simulatoren unterschiedliche numerische Diskretisierungsverfahren verwenden, mussten geeignete Interpolationsmethoden für die Übertragung der Primär- und Sekundärvariablen getestet und implementiert werden, wobei hier auf Vorarbeiten aus einem früheren Projekt aufgebaut werden konnte. Es zeigte sich, dass genaue Ergebnisse erhalten werden können, wenn die Änderungen der räumlich verteilten Variable gegenüber dem letzten Zeitschritt interpoliert werden, anstatt des Gesamtwertes der Variablen. Der Datentransfer zwischen den Modellen kann bis auf eine doppelte Angabe einiger Werte der jeweiligen Komponenten zwecks Konsistenzchecks vollständig automatisiert und redundanzfrei durchgeführt werden. Da beide Simulatoren mit leicht unterschiedlich implementierten Zustandsgleichungen arbeiten, ergeben sich in einzelnen Fällen geringe Abweichungen bei Benchmarkvergleichsrechnungen zwischen dem gekoppelten OpenGeoSys-ECLIPSE Simulator und reinen OpenGeoSys Simulationen. Da die exakte Implementierung im kommerziellen Code ECLIPSE nicht bekannt ist, kann diese leichte Diskrepanz auch nicht weiter reduziert werden. Die Schnittstelle wurde ebenso um eine zeit- und ratenabhängige Steuerung der Injektions- und Förderbohrungen in ECLIPSE durch OpenGeoSys erweitert, sodass diese nun im Programmverlauf flexibel angepasst werden können.

Neben der Kopplung der Simulatoren für die Beschreibung der Mehrphasenströmung wurden auch thermische Effekte implementiert. Diese treten auf, sobald die Temperatur des injizierten Gases von der Reservoirtemperatur abweicht. Dafür mussten die einzelnen Phasengeschwindigkeiten aus ECLIPSE an OpenGeoSys übergeben werden, um den Wärmetransport in solch einem Mehrphasensystem zu bestimmen. Darüber hinaus wurde noch der Joule-Thomson-Effekt implementiert, der bei Gasexpansion oder Kompression zu einer Temperaturveränderung des Gases führt. Daher wurde der Joule-Thomson-Effekt für die Schnittstelle als auch in OpenGeoSys implementiert, um diesen flexibel betrachten zu können (Pfeiffer et al. 2016b).

Ein wesentlicher Punkt dieses Arbeitspaketes war die Umsetzung der Kopplung zwischen Mehrphasenströmung und geomechanischen Effekten. Letztere lassen sich gut und flexibel für eine Reihe von Materialien in OpenGeoSys abbilden (Benisch et al. 2013). Daher wurde die Schnittstelle in einem weiteren Schritt so erweitert, dass die für eine hydraulisch-mechanisch gekoppelte Simulation notwendigen Daten ebenfalls vollständig über die Schnittstelle ausgetauscht werden können. Dabei wurde sowohl eine einfache nicht-iterative Kopplung zwischen Strömung und Mechanik implementiert, als auch die iterativ gekoppelte Version, welche die genauesten Ergebnisse – allerdings auch bei erheblichen

Rechenzeitkosten – ermöglicht (Magri et al. 2015). Dazu wurden im Simulator OpenGeoSys die entsprechenden Kopplungsterme abgeleitet und implementiert und ein spezieller Ablauf in der Kopplung entwickelt, um die Initialisierung im Simulator ECLIPSE auch im hydraulisch-mechanisch gekoppelten Fall konsistent durchzuführen.

Alle Implementierungen an der Schnittstelle sowie am Simulator OpenGeoSys wurden durch eine Reihe von dezidierten Vergleichsrechnungen (Benchmarks) aufsteigender Komplexität getestet und verifiziert (Pfeiffer et al. 2015, 2016b). Dabei konnte gezeigt werden, dass die entwickelten Methoden zuverlässig genaue Ergebnisse bei den gekoppelten Simulationen erbringen. Diese Modellvergleiche und Verifikationsrechnungen umfassen das Testen der Kopplung für Einphasenströmung, Mehrphasenströmung, Mehrphasen-Mehrkomponentenströmung, isotherme und nicht-isotherme Strömung und die Kopplung mit Reaktionen und der Rückkopplung auf die Entstehung bzw. den Verbrauch von Gaskomponenten und Gasphase durch geochemische Reaktionen. Diese Vergleichsrechnungen sind über die Benchmark-Bibliothek von OpenGeoSys dokumentiert und als rechenbare und überprüfte Beispiele hinterlegt ([www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org)), um die entwickelten Methoden langfristig zu sichern.

Der Workflow zur Gittererstellung für ECLIPSE und auch für die Nutzung in OpenGeoSys nutzt den Präprozessor Petrel zur effizienten und detailgetreuen Darstellung des dreidimensionalen Schichtaufbaus im Untergrund und zur Erstellung von Rechengittern. Diese Gitter weisen aufgrund der komplexen Geometriesituationen, die im Untergrund auftreten können, sogenannte entartete Zellen auf, d. h. verformte Quader mit weniger als acht Eckpunkten. Diese Zellen können im gekoppelten Simulator durch eine oder mehrere geeignete Elemente aus der Elementbibliothek von OpenGeoSys beschrieben werden, wobei oftmals weitere Zellunterteilungen notwendig werden, um konsistente Flächenkontakte zu gewährleisten. Daher wurde ein Konverter erstellt, der mit Petrel erzeugte Gitter in konsistente Finite-Elemente-Gitter umwandelt. Neben der räumlichen Komplexität im Untergrund kann der neu entwickelte Gitterkonverter auch Bohrpfade für die für Zugaben oder Entnahmen verwendete Bohrlöcher sowie die verfilterten Bereiche als Quell- und Senkenterme darstellen. Auch der Gitterkonverter wurde für eine Reihe von Testbeispielen und für Anwendungssimulationen getestet und verbessert, sodass dieser nun als geeignetes effizientes Werkzeug zur Verfügung steht (Wang & Bauer 2016).

Die Ziele dieses Arbeitspaketes AP 2.2 wurden somit erreicht. Einzig das Ziel, lokale Gitterverfeinerungen auch in den gekoppelten Simulationen einzusetzen und die Schnittstelle entsprechend zu erweitern, konnte nicht umgesetzt werden, da sich diese Arbeiten als im Detail erheblich aufwändiger und zeitintensiver herausstellten als vorhergesehen. Die Ergebnisse dieses Arbeitspaketes sind als Abgeleitete Prozessgleichungen in den Leitfäden dargestellt, die Programmentwicklung und die Entwicklung des Gitterkonverters sind in den Publikationen Pfeiffer et al. (2016), Magri et al. (2015) und Wang & Bauer (2016) ausführlich dargestellt. Die Szenariensimulationen aus AP 3 beruhen auf den hier durchgeführten Arbeiten zur Programmentwicklung. Die für die Verifikation verwendeten Testbeispiele sind entweder in der Publikation Pfeiffer et al. (2016b) oder im vom Springer-Verlag verlegten Benchmark-Buch (Kolditz et al. 2015) hinterlegt und zugänglich.

(3) AP 2.3 Modellentwicklung zur Simulation von Leckagen in oberflächennahen Grundwasserleitern und zum seismischen Monitoring von tiefen Speichern und Leckagen

Im Arbeitspaket AP 2.3 „Modellentwicklung zur Simulation von Leckagen in oberflächennahen Grundwasserleitern und zum seismischen Monitoring von tiefen Speichern und Leckagen“ sollen zum einen Methoden zur effizienten Simulation von geochemischen Reaktionen im Nahbereich von Leckagepfaden im Rahmen von gekoppelter thermisch-hydraulisch-chemischer Prozesse bei der Leckage von Speichergasen aus tiefliegenden Kavernen- und Porenspeichern entwickelt und implementiert werden. Dies umfasst eine kleinskalige Gitterauflösung, Methoden zur Berechnung von geochemischen Reaktionen nur in Teilbereichen des Netzes sowie die Implementierung von Temperaturabhängigkeiten. Zum anderen sollen numerische Methoden zur Simulation der seismischen Wellenausbreitung auf geometrisch flexiblen Finite-Elementen- und Finite-Differenzen-Gittern entwickelt, sowie der Ansatz einer seismischen Full Waveform Inversion (FWI) speziell für das Monitoring von Kavernen- und Porenspeichern optimiert werden.

Zur Steigerung der Effizienz der Simulation kleinskaliger Prozesse in großen Gebieten durch lokale Gitterverfeinerungen sollten Methoden der a-priori Gitterverfeinerung mit Behandlung von irregulären Knoten in OpenGeoSys implementiert werden. Da jedoch bereits relativ früh im Projekt die Entscheidung fiel, die Szenariensimulationen der Gasleckagen (AP 3.3) zunächst mit der Software TOUGH2 durchzuführen, wurden die Implementierungen zunächst zurückgestellt. Für die Szenariensimulationen war dies insgesamt unproblematisch, da sich die Verwendung von TOUGH2 in AP 3.3 als zweckmäßig erwies und die diesbezüglichen Projektarbeiten im Projektjahr 2014 weitgehend abgeschlossen wurden. Aus diesem Grund wurde auf eine Nachführung der Gitteradaption in OpenGeoSys verzichtet. Eine weitere Aufgabe von AP 2.3 war die Implementierung der in den Laborexperimenten von AP 1.8 zu identifizierenden funktionalen Druck- und Temperaturabhängigkeiten der Sorption, um die in AP 1.8 zu ermittelnden Parametrisierungen für gekoppelte Simulation anwenden zu können. Diese Arbeiten konnten nicht durchgeführt werden, da die experimentellen Ergebnisse, die die funktionalen Zusammenhänge hätten ermitteln sollen, aufgrund wechselnder Mitarbeiter in AP 1.8 nicht rechtzeitig zur Verfügung stehenden und entsprechend ausgewertet wurden. Es wurden vorbereitende Arbeiten durchgeführt, die eine zügige Implementierung ermöglichen, sobald diese Zusammenhänge quantifiziert zur Verfügung stehen.

Zur effizienten Einbindung der sehr rechenaufwändigen geochemischen Reaktionsprozesse sollen Methoden des geochemischen Front-Trackings und Steady-States entwickelt und implementiert werden. Da diese Verfahren auch für die Szenariensimulationen zu den biogeochemischen Auswirkungen von Wärmespeichern genutzt werden können, wurden insgesamt drei verschiedene Verfahren erfolgreich implementiert und getestet. Diese erlauben eine automatisierte, temporäre lokale Deaktivierung einzelner Knoten des Rechengitters für Reaktionsberechnungen, wodurch der Rechenaufwand auch für die Gesamtsimulation signifikant reduziert werden kann, da die geochemischen Reaktionen oftmals einen erheblichen Teil der Gesamtrechnenzeit ausmachen. Die Arbeiten beinhalten Tests zu einer möglichen Reaktivierung der Reaktionsberechnungen für zuvor deaktivierte Knoten, da bei zeitlich dynamischer Konzentrationsverteilung Teilgebiete zu einem späteren Zeitpunkt der Simulation wieder relevant für das Systemverhalten werden können (z. B. wenn sich eine Leckagefahne ausbreitet).

Bei Methode 1, dem sogenannten „Front-Tracking“ wird eine Deaktivierung eines einzelnen Knotens durch das Auswerten der Reaktionsraten in der Nachbarschaft des Knotens vorgenommen. Es handelt sich also um ein räumliches Auswerteverfahren. Dabei wird die Position einer in ein zuvor nichtreaktives Teilgebiet eindringende Reaktionsfront erkannt und die in den folgenden Zeitschritten von der Front erreichbaren Knoten identifiziert, um diese rechtzeitig vor dem tatsächlichen Eintreffen der Front für Reaktionsberechnungen zu aktivieren. Das Front-Tracking eignet sich sowohl für geochemische Gleichgewichtsberechnungen als auch für kinetisch limitierte Reaktionssysteme und erfordert die Einhaltung des Courant-Kriteriums, da sich Reaktionsfronten sonst u. U. schneller ausbreiten, als die Knoten aktiviert werden können.

Methode 2 betrachtet nur die lokale der Summe der Änderungen der relativen Konzentrationen aller Spezies zwischen zwei Zeitschritten nach dem Transport. Die Methode ist in erster Linie für geochemische Gleichgewichtsberechnungen anwendbar und nutzt aus, dass identische Konzentrationen nach dem Transport im neuem und im alten Zeitschritt zu identischen Reaktionen führen.

Bei Methode 3 werden die Konzentrationen nach den Reaktionen des alten Zeitschrittes mit den Konzentrationen des Transportes des neuen Zeitschrittes verglichen. In diesem Fall herrscht Stationarität des Transports und der Geochemie, und die geochemischen Berechnungen müssen nicht erneut durchgeführt werden.

Für alle drei Methoden wurden Performance-Tests anhand von verschiedenen Benchmark-Rechnungen durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass sowohl für Systeme mit vornehmlich gleichgewichts-geochemischen Berechnungen (v. a. mit den Methoden 2 und 3) als auch für kinetisch limitierte Systeme (v. a. Methode 1) deutliche Rechenzeitreduktionen um mehr als 50% bei Erhaltung hoher Rechengenauigkeiten erzielt werden können.

Die Entwicklung des 2D Finite-Elemente-Codes BIRGIT zur effizienten Modellierung von seismischen Wellen, basierend auf einem diskontinuierlichen Galerkin-Ansatz, konnte im Rahmen des Projekts erfolgreich abgeschlossen werden. Um außerhalb des Gasspeichers mit relativ großen Elementen rechnen zu können, erfolgte die Implementierung von räumlich variablen Basisfunktionen höheren Grades ( $N = 1-16$ ). Die Rechenzeit des Codes ließ sich durch eine Parallelisierung mit MPI (Message Passing Interface) reduzieren, wobei die Aufteilung des Rechengebiets auf die unterschiedlichen Knoten eines Hochleistungsrechners mit der METIS-Bibliothek optimiert wurde. Für eine schnelle und effiziente Diskretisierung von komplexen 2D-Modellen und die Erzeugung des Finite-Elemente-Gitters dient eine Schnittstelle zu dem Open-Source-Mesher Gmsh.

Der vor Projektbeginn bereits bestehende seismische 2D Modellierungs-/Inversionscode DENISE, basierend auf einer Finite-Differenzen-Methode, wurde umfassend umstrukturiert, modularisiert und erweitert. Eine signifikante Vereinfachung in der Bedienbarkeit erleichtert die Definition von beliebig komplexen Full-Waveform-Inversion (FWI)-Workflows über eine Parameterdatei. Besonders wichtig für eine effiziente FWI ist die Optimierung der Parallelisierung des Vorwärtsproblems. Durch eine detaillierte Analyse der Speicherzugriffe und Kommunikationszeiten innerhalb des Codes konnten in enger Kollaboration mit Kollegen von der TU Bergakademie Freiberg Schwachstellen in der MPI-Parallelisierung aufgedeckt und durch die Implementierung einer persistenten MPI-Kommunikation sowie einer MPI\_CART Topologie die Performance der Codes um ca. 40% verbessert werden.

Neben P-SV-Wellen in (an)-isotropen visko-elastischen Medien lässt sich auch die Ausbreitung von SH-Wellenfelder modellieren und invertieren. Damit können unabhängig voneinander  $V_p$ -,  $V_s$ - und Dichtemodelle durch eine hierarchische FWI bestimmt werden. Synthetische Tests an Standarddatensätzen zur Vergleichszwecken und eine Anwendung auf einen oberflächennahen SH-Wellendatensatz zeigen das große Potenzial des Ansatzes (Köhn et al. 2015a, Köhn 2015). Durch Erweiterung des Codes auf den visko-elastischen Fall ließ sich der Einfluss von seismischer Dämpfung auf das Ergebnis einer seismischen Wellenforminversion näher untersuchen (Kurzmann et al. 2013). Darüber hinaus ermöglichte der viskoelastische Code eine erste erfolgreiche 2D-Wellenforminversion von Ultraschalldaten im Labor und Feldmaßstab (Köhn et al. 2016b).

Neben den 2D Finite-Differenzen und Finite-Elementen-Codes wurde weiterhin der Code SAVA entwickelt, mit dem sich die 3D-Ausbreitung von seismischen Wellen in triklin anisotropen elastischen Medien (21 Komponenten des elastischen Tensors sind ungleich Null) berechnen und invertieren lässt (Köhn et al. 2015b). Eine sehr effiziente MPI-Parallelisierung führt zu einem minimalen Datenaustausch zwischen den CPUs und damit drastisch reduzierten Rechenzeiten. Benchmarks auf dem NEC-Cluster des Rechenzentrums der CAU Kiel zeigten ein superlineares Skalierungsverhalten bei Verwendung von bis zu 1.000 CPU Cores. Ein räumlich variables kartesisches FD-Gitter ermöglicht eine sehr feine Diskretisierung der Speicherformation und eine gröbere Abtastung der Umgebung, was zu einer signifikanten Verringerung der Rechenzeit führt. Speziell für die Überwachung von Gasspeichern wurde eine seismische FWI-Strategie entwickelt, bestehend aus einer sehr genauen Baseline-Kartierung (Köhn et al. 2014) und einem Time-Lapse Monitoring (al Hagrey et al. 2014a). Dabei besteht die Baseline-Kartierung aus einer Kombination von Ersteintritts-/Reflexionstomographie und FWI. Zur Reduktion der Rechenzeit bei der Überwachung von tiefen Speichern lässt sich optional das sogenannte Grid-Injektionsverfahren verwenden, bei dem die FWI auf einen Bereich um die Speicherformation reduziert und die Ausbreitung der seismischen Wellen über dem Speicher aus einer Baseline Modellierung berechnet wird. Abhängig von der Größe und Tiefe des Gasspeichers ergibt sich eine Reduktion der Rechenzeit um den Faktor 20 und des Speicherbedarfs um einen Faktor 25. Die Integration von weiteren geophysikalischen Verfahren wie Geoelektrik (al Hagrey et al. 2014a) und Gravimetrie (Wehner et al. 2015, Wehner 2015), erlaubt eine Reduktion von Mehrdeutigkeiten und damit eine Verbesserung der Auflösung kleinskaliger Strukturen im Untergrund.

Die hier entwickelten hydrologischen Modellmethoden konnten verifiziert werden und erlauben im Anwendungsfall deutlich verringerte Rechenzeiten bei der Bestimmung von geochemischen Folgereaktionen. Die ursprünglich geplanten Arbeiten zur Gitterverfeinerung und zur temperaturabhängigen Sorption wurden nicht durchgeführt, wobei sich jedoch keine Auswirkungen auf die Arbeiten zur Szenariensimulation ergaben. Die in diesem AP entwickelten seismischen Modellierungs- und Inversionscodes bilden den Ausgangspunkt für umfangreiche Tests der geophysikalischen Monitoringstrategien anhand von realistischen Modellszenarien für Kavernenspeicher (AP 3.1), zur Ausbreitung von Gasen in Porenspeichern (AP 3.2), sowie für Gasleckagen in oberflächennahe Aquifere (AP 3.3). Die Ziele der Modellentwicklung wurden dabei vollständig erreicht, sodass die Programme für die Szenariensimulationen wie geplant zur Verfügung standen. Die Arbeiten zur Modellentwicklung sind umfangreich in den genannten Publikationen hinterlegt und beschrieben, sodass weitere Nutzungen, auch außerhalb des Projektes, leicht möglich sind.

#### (4) AP 2.4 Modellentwicklung zur Beeinflussung des flachen Grundwassers durch Wärmespeicherung

AP 2.4 „Modellentwicklung zur Beeinflussung des flachen Grundwassers durch Wärmespeicherung“ hatte die Erweiterung des Programmcodes OpenGeoSys zur Simulation der Einflüsse oberflächennaher geothermischer Wärmespeicher auf den Untergrund und das Grundwasser zum Ziel. Dies umfasste zum einen die Implementierung von Temperaturabhängigkeiten von Parametern und THMC-Prozessmodellen und zum anderen die Entwicklung von Methoden zur effizienten Simulation großskaliger Erdsonden-Wärmespeicher.

Wesentliche Parameter der nicht-isothermen Grundwasserströmung und des damit gekoppelten Wärmetransports sind Dichte und Viskosität des Grundwassers. Die Änderungen dieser Parameter mit der Temperatur wirken auf die lokalen hydraulischen Durchlässigkeiten eines Aquifers, was zur Entstehung von lokalen Strömungsfokussierungen und konvektiven Auftriebsströmungen im Grundwasser führen kann. Weiterhin zu berücksichtigen sind Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit des Wassers sowie der Gesteinsmatrix.

Bezüglich dieser Parameter wurde das bisher in OpenGeoSys implementierte nichtisotherme Dichtemodell, welches eine lineare Approximation der Dichteänderung mit der Temperatur verwendet, um das nichtlineare Dichtemodell der PTB (1990) ergänzt, welches den funktionalen Zusammenhang über den gesamten Temperaturbereich von 0-100°C wesentlich realitätsnäher abbilden kann. Zur Beschreibung der Änderung der Viskosität mit der Temperatur wurde ein empirisches Viskositätsmodell von Yaws (2009) implementiert. Die in OpenGeoSys implementierten Methoden zur Berechnung der Temperaturabhängigkeiten von Wärmekapazitäten und Wärmeleitfähigkeiten erwiesen sich als zweckmäßig, weshalb diesbezüglich keine Erweiterungen des Programmcodes vorgenommen wurden. Die Einflüsse der temperaturabhängigen Parameter auf die gekoppelte Grundwasserströmung und den Wärmetransport im Betrieb von Wärmespeichern wurde anhand von Sensitivitätsrechnungen untersucht und verifiziert (Hintze 2015; Boockmeyer & Bauer 2014). Dabei zeigte sich, dass insbesondere dichtegetriebene konvektive Strömungskomponenten bei Hochtemperaturwärmespeichern zu erheblichen Performanceverlusten führen können.

Zur Simulation der thermisch-hydraulischen Auswirkungen auf das mechanische Verhalten des Bodens sollten in Zusammenarbeit mit den experimentellen Arbeiten in AP 1.6 Parametrisierungen der temperaturabhängigen Parameter anhand des Critical-State Modells (CamClay-Modell) implementiert werden. Da es anhand der in diesem AP durchgeführten Untersuchungen letztendlich nicht gelang, ein parametrisiertes Modell der zyklischen TH-Belastung und resultierenden Änderung der Eigenschaften poröser Medien abzuleiten, konnten die geplanten Modellerweiterungen in OpenGeoSys nicht umgesetzt werden. Für erste Abschätzungen der thermo-mechanischen Effekte wurden in den Szenariensimulationen (siehe AP 3.4) deshalb die bereits in OpenGeoSys implementierten linear-elastischen Materialmodelle aktiviert und verwendet. Materialmodelle des zyklischen Verhaltens können nachgeführt werden, sobald diese vorliegen.

Zur Prognose der Einflüsse von Wärmespeichermaßnahmen auf das Verhalten von mit organischen Schadstoffen kontaminierten Aquiferen wurden sehr umfangreiche Pro-

grammerweiterungen bereits existierender isothermer reaktiver Prozessmodelle in OpenGeoSys durchgeführt. Dazu wurden die Temperaturabhängigkeiten von geochemischen Gleichgewichtskonstanten, Löslichkeiten und Freisetzungskinetiken von Schadstoffen und gelöstem organischen Kohlenstoff, mikrobiellen Wachstums- bzw. Abbauraten, Diffusionskoeffizienten etc. implementiert. Dieser umfangreiche Themenkomplex stellt den Schwerpunkt der Arbeiten in AP 2.4 dar. Durch Studium der bisher publizierten Fachliteratur sowie unter der Berücksichtigung der Ergebnisse aus AP 1.8 wurden geeignete Parametrisierungsansätze identifiziert und im Programm-Code umgesetzt. Zur Beschreibung der thermischen Bewegung von im Wasser gelösten Substanzen wurden die Modelle für Diffusionskoeffizienten um die empirische Temperaturabhängigkeit nach Yaws (2009) erweitert. Dieser Ansatz weist eine gute Übereinstimmung mit anderen Formulierungen (z. B. Stokes-Einstein-Gleichung (Cussler 2009); Wilke & Chang 1955; Worch 1993) auf und hat den Vorteil, dass für viele umweltrelevante Substanzen Parameter für das Yaws-Modell tabelliert sind (Yaws 2009). Die Temperaturabhängigkeiten der Löslichkeit von nichtwässrigen Phasen (organische Phasen, Gasphasen) wurden durch empirische Beziehungen von Knauss et al. (2000) sowie Fernández-Prini et al. (2003) implementiert. Die bereits existierenden kinetischen Beschreibungen der Lösungs- bzw. Abscheidungsprozesse von organischen Phasen (NAPL) wurden durch Einbindung dieser neuen Parametermodelle auf nichtisotherme Verhältnisse erweitert und anhand der Ergebnisse der TCE-Lösungsexperimente aus AP 1.8 erfolgreich verifiziert (Popp et al. 2016; siehe AP 3.4). Für die Lösung bzw. Abscheidung von Gasphasen wurde ein kinetisches Modell nach Holocher et al. (2003) implementiert. Die temperaturbedingte Freisetzung von gelöstem organischem Kohlenstoff aus Aquifersedimenten wurde auf Grundlage von Messdaten von Jesušek et al. (2013a) mit einem temperaturabhängigen Verteilungskoeffizienten-Ansatz beschrieben.

Das Wachstum von Mikroorganismen zeigt innerhalb organismenspezifischer Temperaturgrenzen (minimale bzw. maximale Wachstumstemperatur) ein Optimum mit maximaler Wachstumsrate. Zur Beschreibung dieses Wachstumsverhaltens wurden empirische Modellfunktionen von Rosso et al. (1995) sowie Zwietering et al. (1991) implementiert, die sich gut an umweltrelevante Wachstumsprozesse von z. B. CKW-abbauenden Mikroorganismen anpassen lassen (Popp et al. 2015a). Thermodynamische Limitierungen von kinetischen mikrobiellen Prozessen wurden mit Modellansätzen nach Jin & Bethge (2003) und LaRowe et al. (2012) implementiert. Die entwickelten Parametermodelle wurden durch eine Vielzahl gezielter Benchmarking-Rechnungen und Vergleiche mit analytischen Lösungen oder Berechnungen anderer Programme verifiziert. Die dabei berechneten Simulationsergebnisse zeigen eine korrekte Implementierung der nichtisothermen Parametermodelle für Löslichkeiten, Diffusionskoeffizienten, Wachstumsraten und thermodynamische Effekte. Diese Vergleichsrechnungen sind über die Benchmark-Bibliothek von OpenGeoSys dokumentiert und langfristig als rechenbare und überprüfte Beispiele hinterlegt ([www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org)), um die entwickelten und implementierten Methoden langfristig zu sichern und für zukünftige Arbeiten verfügbar zu halten.

Die Modellentwicklungen sind in Popp et al. (2015a) und Beyer et al. (2016) zusammengefasst dargestellt. Letztere Publikation stellt zudem einen Satz an Benchmarks und Prozess-Sensitivitätsuntersuchungen zum Test von numerischen Modellen des nichtisothermen reaktiven Transports im Kontext der Interaktion von Temperaturänderungen durch geothermische Untergrundnutzungen und Altlasten vor.

Neben der Implementierung der nicht-isothermen Parameter- und Prozessmodelle waren umfangreiche konzeptionelle und numerische Entwicklungsarbeiten für eine effiziente Darstellung von Erdwärmesonden-Feldern, wie sie bei geothermischen Wärmespeichern in gering durchlässigen porösen Medien zum Einsatz kommen, notwendig. Die physikalisch korrekte Darstellung der Wärmeübertragung zwischen Sonde und Erdreich erfordert eine hohe räumliche Auflösung der Materialübergänge und des geometrischen Aufbaus der Sonde. Eine Simulation von Sondenfeldern mit zwei- bis dreistelliger Anzahl an untereinander gekoppelten Soden erfordert spezielle Strategien zur Reduktion des Rechenaufwands. Der hierzu entwickelte und in Boockmeyer und Bauer (2016) vorgestellte geometrische Vereinfachungsansatz erlaubt diesbezüglich erhebliche Rechenzeiterparnisse um Faktoren von bis zu 1:30.

Weitere Vereinfachungen der Sondenmodelle und somit zusätzliche erhebliche Gewinne an Recheneffizienz lassen sich durch einen spezifisch angepassten und implementierten Ansatz über so genannte Non-Neighbour-Node-Connections erzielen. Diese erlauben es, geometrisch komplexe Stellen mit hohem Diskretisierungsaufwand im Rechengitter (z. B. Sondenkopplungen und U-Rohr-Füße) durch lineare und von Fließrichtung und Fließgeschwindigkeit abhängige Austauschflüsse zu ersetzen, die sowohl advective als auch diffusive Flüsse simulieren können (z. B. Meier zu Beerentrup 2016). Die korrekte Umsetzung und Praxistauglichkeit der Modellansätze und Gittervereinfachungen wurde durch Vergleiche von Simulationen mit voll ausdiskretisierten Sondenmodellen mit voller geometrischer Komplexität sowie an experimentellen Daten einer Einzelsonde (Beier et al. 2011) verifiziert sowie anhand von Betriebsdaten eines Erdsonden-Wärmespeichers in Dänemark (PlanEnergie 2013) die Praxistauglichkeit demonstriert (Boockmeyer und Bauer 2016; Meier zu Beerentrup 2016). Der voll ausdiskretisierte Ansatz konnte auch erfolgreich zur Verifizierung und Ableitung von Näherungsberechnungen für teil-isolierte Bohrlochsonden eingesetzt werden, was den Nutzen der hochauflösenden detailgetreuen Modelle unterstreicht (Schulte et al. 2016).

Als Ergebnis dieses APs steht somit ein umfangreiches und flexibles Simulationswerkzeug zur detaillierten und prozessbasierten Simulation des Betriebs und der damit verbundenen thermisch-hydraulisch-geochemischen Auswirkungen von Wärmespeichern (sowohl offene (Grundwasserbrunnen) als auch geschlossene (Erdsonden) Systeme) zur Verfügung. Alle Ziele dieses APs wurden, mit Ausnahme der Implementierung der geomechanischen Materialmodelle, vollständig erreicht. Es zeigt sich also, dass diese Prozesse, soweit sie quantifiziert und mit parametrisierten Materialmodellen vorliegen, in Prozess-orientierte Simulationsprogramme implementiert und für Prognoserechnungen genutzt werden können. Die Szenariensimulationen aus AP 3.4 basieren auf den hier zusammengefassten Arbeiten zur Programmentwicklung. Die für die Verifikation verwendeten Testbeispiele sind in der Publikation Beyer et al. (2016) oder auf der OpenGeoSys-Projektseite ([www.opengeosys.org](http://www.opengeosys.org)) als Vergleichsrechnungen hinterlegt und zugänglich, sodass die entwickelten Methoden langfristig und für weitere Nutzungen in Folgeprojekten oder Standortanwendungen gesichert sind.

(5) AP 2.5 Methodenentwicklung zur Simulation bzw. Erfassung der Auswirkungen der unterirdischen Speichermaßnahmen auf die raumplanerisch festgelegten Schutz- und Vorranggebiete

Ziel dieses Arbeitspaketes war die Entwicklung eines GIS-basierten Server-Informationssystems, welches als zentrale Plattform für die Speicherung und Visualisierung der verfügbaren Geodaten zur Energieinfrastruktur und Raumordnung (vgl. AP 1.5), der vorhandenen geologischen Fachdaten, sowie der im Rahmen des Projektes erzeugten Modellierungsergebnisse dienen sollte.

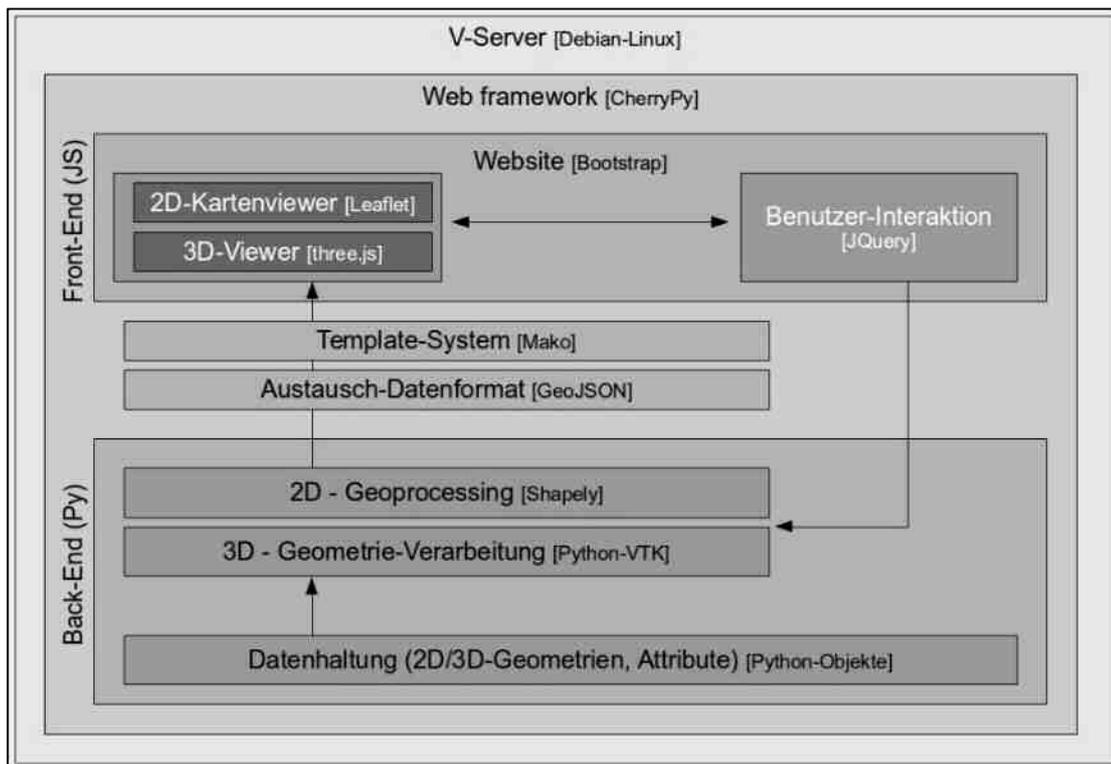


Abbildung 1.2.5-1: Schema der verwendeten Open-Source-Komponenten des ANGUS+ RIS.

Abweichend von der Beschreibung des AP im Projektantrag wurde kein explizites Entscheidungsunterstützungssystem im eigentlichen Sinne entwickelt, welches Aspekte wie die Integration von Komponenten aus der ökologischen Risikoanalyse und der Umweltverträglichkeitsprüfung mittels Entscheidungsbäumen enthält. Die Diskussion im Projektverbund zeigte, dass ein internetbasiertes 3D/2D Geo-Informationssystem (3D webGIS) sinnvoller ist, welches kombinierte räumliche Abfragen zu den drei Datendisziplinen Energieinfrastruktur, Raumordnung und Geologie zur Identifikation und Visualisierung von dreidimensionalen Such- bzw. Potenzialräumen für unterirdische Energiespeicher ermöglicht. Die Beschränkung auf dieses Informationssystem basierte dabei auf der Erkenntnis, dass sich die in Arbeitspaketen 3.1 bis 3.4 mittels lokalen geologischen Standortmodellen ermittelten Nutzungs-, Auswirkungs- und Monitoring-Räume einzelner Speicherarten (Bauer et al. 2015) nicht generalisieren und auf Speicher in anderen Lokationen im geologischen Untergrund von Schleswig-Holstein übertragen lassen. Somit konnte im Rahmen des AP auf keine verallgemeinerbaren Modellierungsergebnisse aus den anderen APs zurückgegriffen werden, sondern es musste eine Abfragelogik zur Identifikation von mög-

lichen Potenzialräumen für unterirdische Energiespeicher in Schleswig-Holstein implementiert werden, die auf den derzeit verfügbaren Geodaten zur Energieinfrastruktur, Raumordnung und Geologie in Schleswig-Holstein basiert. Zur Präzisierung der Abfrageergebnisse wurden eigens zusätzliche, bisher so nicht vorhandene, Geo-Datensätze (1 km<sup>2</sup> Raster zur jährliche Stromerzeugung aus Windkraftanlagen und zum jährlichen Wärmebedarf im Gebäudebestand) für das Untersuchungsgebiet erzeugt und jeweils als 3D-Voxelmodell in das webGIS integriert (siehe AP 3.5).

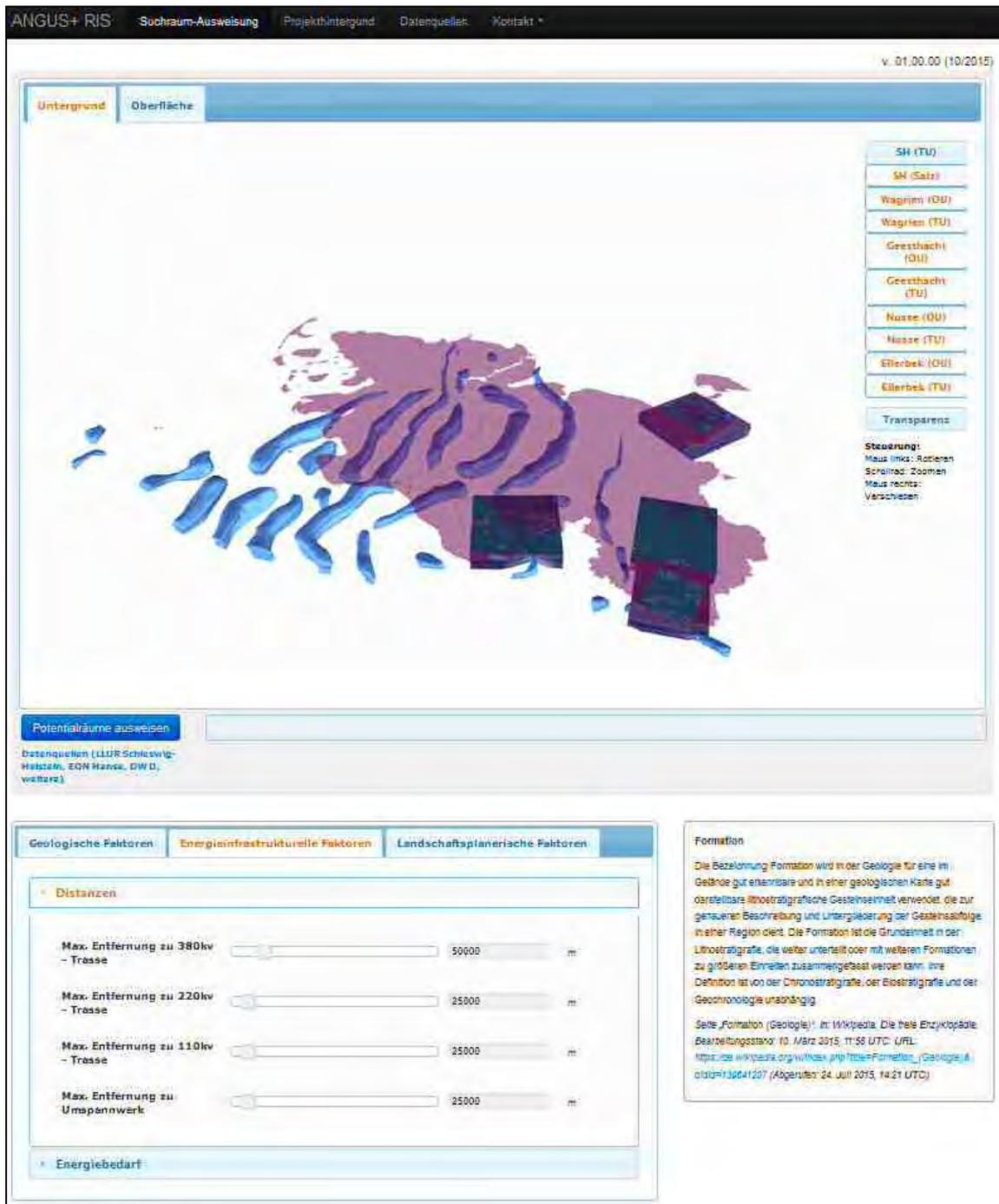


Abbildung 1.2.5-2: Screenshot der 3D webGIS Komponente des Informationssystems.

Die Implementierung des webbasierten Prototypen eines Informationssystems für die unterirdische Raumplanung (ANGUS+ RaumInformationssystem, [www.angus-ris.uni-](http://www.angus-ris.uni-)

[kiel.de](http://kiel.de)) wurde mittels Open-Source-Komponenten, anstatt wie vorgesehen mit proprietären ArcGIS Softwarelösungen umgesetzt (Abbildung 1.2.5-1). Dies soll eine kostenneutrale Nutzung und Erweiterung des Prototypens in den vorhandenen IT-Strukturen der zuständigen Planungsbehörden ermöglichen.

Die im Back-End des ANGUS RIS als 3D-Voxelmodelle vorgehaltenen Geodatenätze zur Energieinfrastruktur, Raumordnung und Geologie enthalten für jedes Voxel, neben fachlichen Informationen, auch Informationen zu ihrer Lage im Raum und der Entfernung zu anderen Voxel. Dies ermöglicht kombinierte, räumliche Abfrage durch den Nutzer mittels simpler Schieberegler über das HTML-basierte Interface des JavaScript Front-Ends (Abbildung 1.2.5-2).

Die gewählte Open-Source-Architektur des Informationssystems erlaubt prinzipiell die spätere Integration weiterer relevanter Geodatenätze als 3D-Voxelmodelle und die Implementierung zusätzlicher Abfrage-Algorithmen. Für detaillierte Erläuterungen zum Aufbau und Funktion des 3D webGIS und dessen Anwendung am Beispiel der Druckluftspeicherung in Salzkavernen siehe AP 3.5, sowie Nolde et al. 2016a, Nolde et al. 2016b und Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“.

### **II.1.3. AP 3 MAßNAHMENBEZOGENE SZENARIENANALYSEN**

#### **(1) AP 3.1 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von Salzkavernen zur Speicherung von Druckluft, CH<sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H<sub>2</sub>, einschließlich Bewertung geeigneter Monitoring-Methoden**

In AP 3.1 sollten, basierend auf parametrisierten Szenarien aus AP 1.1 sowie dem in AP 2.1 entwickelten Simulationsinstrumentarium numerische Untersuchungen zum charakteristischen Verhalten von Salzkavernen und des umgebenden Wirtsgesteins bei quasistatischem Betrieb sowie bei zyklischen Be- und Entladevorgängen der Speicherkavernen durchgeführt werden. Aus systematischen Sensitivitätsstudien für relevante Prozessparameter sollten Hinweise für einen sicheren, effizienten und ökologisch nachhaltigen Kavernenbetrieb sowie die Gestaltung von Monitoringverfahren zu dessen Überwachung abgeleitet werden. Die Ergebnisse des Arbeitspakets sollten Eingang in die Überarbeitung von Handlungsempfehlungen für Entwickler, Betreiber, Planungs- und Genehmigungsinstitutionen finden.

In Abstimmung zwischen den an Modellierung und Simulation für stoffliche Energiespeicherung in Salzkavernen beteiligten Arbeitsgruppen der Universitäten Kiel und Bochum sowie des UFZ wurde zunächst das axialsymmetrische Modell einer typischen Salzkaverne entwickelt. Bei der Festlegung realitätsnaher Geometrien sowie Betriebs- und Randbedingungen wurden zudem Konsultationen mit der Firma KBB Underground Technologies Hannover, als Partner im Verbund InSpEE, genutzt. Mit diesem Modell wurden im ersten Schritt geomechanische Simulationen unter der vereinfachenden Annahme linear-elastischen Materialverhaltens bei statischen und zyklischen Lastverläufen durchgeführt. Damit konnte ein prinzipieller Vergleich von Modellen und Simulationsergebnissen zwischen den Softwareprojekten OpenGeoSys und Code\_Bright (entwickelt von der Politécnica de

Catalunya, Barcelona und genutzt vom Verbundpartner der Ruhr-Universität Bochum) mit zufriedenstellenden Ergebnissen realisiert werden.

Aufbauend auf den separaten Betrachtungen von Deformationsvorgängen wurden vollständig thermomechanisch gekoppelte Simulationen eines zyklischen Kavernenbetriebs durchgeführt. Dabei erwärmt sich eine Kaverne bei Druckerhöhung, während die Temperatur bei der Ausspeicherung wieder fällt. Die schwankenden Temperaturen im Kaverneninnenraum verändern die mechanischen Eigenschaften des Wirtsgesteins im Kavernen nahfeld. Dies betrifft vorrangig die Kriechrate, aber auch die Elastizität des Salzgesteins. Zudem kommt es im Bereich um die Kavernenwandung zu thermisch induzierten Spannungen. Ein Vergleich zwischen isothermer und nichtisothermer Simulation zeigt, dass der einfachere Ansatz die Konvergenzrate unabhängig von der Kavernenform unterschätzt (vgl. Abbildung 1.3.1-1).

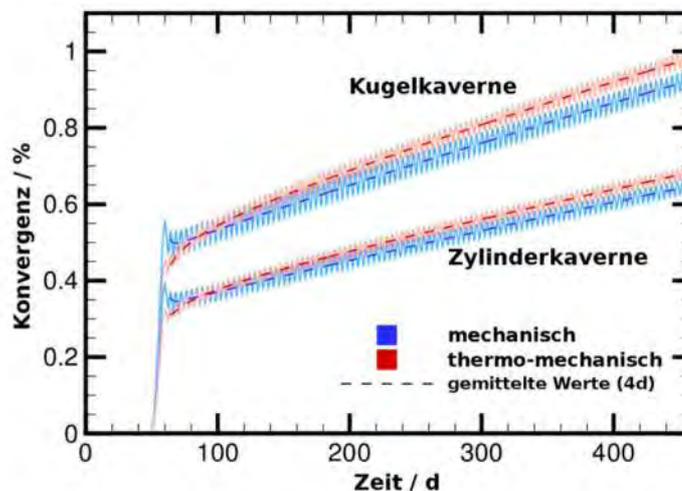


Abbildung 1.3.1-1: Konvergenzverhalten einer kugelförmigen und einer zylindrischen Kaverne bei zyklischen Be- und Entladevorgängen im Vergleich zwischen der Simulation mechanischen Verhaltens und thermo-mechanischen Verhaltens aus Böttcher et al. (2017).

Für die systematische Untersuchung von Prozessen bei der zyklischen Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen wurden zwischen den Verbundpartnern mehrere Modellszenarien definiert. Dies sind im Einzelnen:

- S1: Simulation einer Einzelkaverne im zyklischen Gasspeicherbetrieb,
- S2: Simulation eines Ausschnittes der Kavernenwand, um eventuell auftretende Schädigung durch zyklische Belastungen zu untersuchen,
- S3: Simulation eines kleinen Kavernenfeldes zur Untersuchung von Nachbarschaftswechselwirkungen und
- S5: Untersuchungen zu den Potenzialen geophysikalischer Monitoringverfahren zur Detektion von in S2 modellierten Schädigungen der Kavernenwand.

Zur detaillierten Beschreibung der definierten Szenarien (siehe Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“)

Vom Verbundpartner Ruhr-Universität Bochum wurden in diesem Arbeitspaket weitere numerische Simulationen durchgeführt, um die Auswirkungen realistischer Betriebsszenarien einer Energiespeicherkaverne im Hinblick auf das thermo-mechanische Kurzzeitverhalten, die Langzeitstandfestigkeit, das Kriech- und Schädigungsverhalten sowie

Kopplungseffekte im Zusammenhang mit Änderungen in der Dilatanzzone zu bewerten. Von den Szenariestudien konnten kritische Betriebsszenarien sowie optimierte Monitoring-Messprogramme hinsichtlich von Messpunktpositionen sowie der dort zu messenden Parameter abgeleitet werden.

Mit der Software GID wurden in diesem Zusammenhang typische Salzkavernen mit idealisierten Geometrien modelliert um zunächst, unter Verwendung des neu implementierten Stoffgesetzes (vgl. AP 2.1), verschiedene statische und zyklische thermo-mechanische Belastungsszenarien zu simulieren. Alle bezüglich Spannungszustand und Verformungen relevanten Schritte vor Inbetriebnahme der Kaverne, d. h. während der Kavernenherstellung, wurden dabei ebenfalls berücksichtigt. Die Stabilität der Kaverne wurde durch die Überprüfung definierter Kriterien, nämlich „No-Dilatancy“, „No-damage“ und „No-tensile stress“, analysiert (Khaledi et al. 2016a).

In einer nächsten Phase wurden anspruchsvolle mathematische Methoden genutzt, um Sensitivitätsanalysen durchzuführen und somit Parameter zu identifizieren, welche einen maßgeblichen Einfluss auf die zuvor definierten Kriterien haben und somit eine höhere Präzision bei der Bestimmung erfordern. Probabilistische Methoden (z. B. Monte-Carlo Simulation, Subset Simulation) wurden zur Bestimmung der Versagenswahrscheinlichkeiten bei anzunehmenden Unsicherheiten sämtlicher Eingangsparameter bzw. der Bestimmung maximaler Ausnutzungsgrade bei einem für die betrachtete Anwendung zulässigen Risiko verwendet (Mahmoudi et al. 2016). Durch die Integration von Meta-Modellen konnte zudem der Rechenaufwand signifikant reduziert werden, um effizientere Simulationsergebnisse mit einem höheren Informationsgehalt zu erzielen.

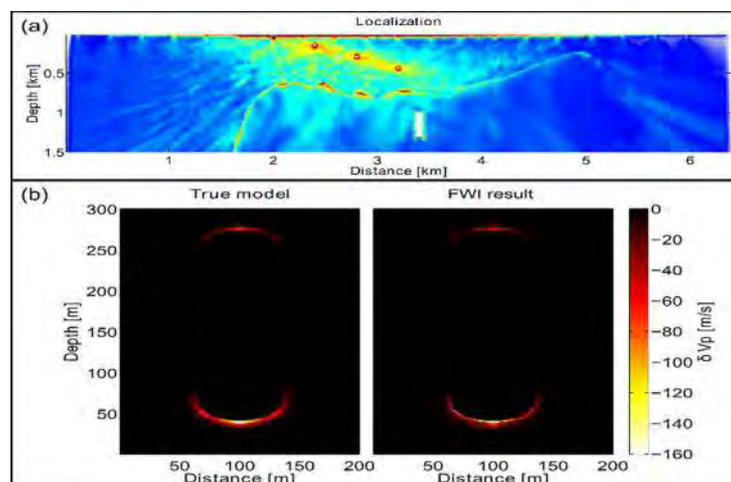


Abbildung 1.3.1-2: Automatische Lokalisierung von mikroseismischen Ereignissen entlang einer Verwerfungszone induziert durch eine Gasleckage (a). Die direkte Kartierung von Änderungen der P-Wellengeschwindigkeit in der Umgebung einer zyklisch belasteten Kaverne mit Hilfe der FWI (b).

Im Rahmen dieses Arbeitspakets wurden darüber hinaus Methoden eingeführt, die es erlauben, für geplante Monitoring-Konzepte die optimalen Sensor-Positionen zu ermitteln, um so die Qualität der Messwerte zu maximieren (vgl. Hölter et al. 2015). Zweckmäßige Monitoring-Konzepte sind erforderlich, um mögliche Risiken der Kavernenspeicherung, wie sie z. B. potenzielle Gasleckagen von der Injektionsbohrung entlang von Auflockerungs- oder Verwerfungszone mit erhöhter Permeabilität darstellen, zuverlässig und rechtzeitig erkennen zu können.

Der nichtreguläre Betrieb einer Kaverne kann zu Materialversagen im umgebenden Salz bis zum teilweisen Kollaps der Kaverne führen. Diese Probleme sind mit dem Auftreten von mikroseismischen Ereignissen assoziiert (Shapiro 2015), die sich mit Hilfe geophysikalischer Verfahren indirekt nachweisen lassen. Für die Überwachung mikroseismischer Ereignisse in komplexen Salzstrukturen wurde vom Verbundpartner CAU ein automatisches Monitoring-Konzept, basierend auf Reverse Time Modelling (Gajewski & Tessmer 2005) und seismischer Full Waveform Inversion (FWI) entwickelt und anhand von numerischen Szenarien unterschiedlicher Komplexität erfolgreich getestet (Köhn et al. 2016c/2016a; Abbildung 1.3.1-2).

Der direkte Nachweis von Änderungen elastischer Materialparameter in der Umgebung einer Salzkaverne aufgrund starker zyklischer Belastung stellt eine große Herausforderung für die Geophysik dar. Anhand eines Finite-Elemente-Modells, welches das mechanische Verhalten des Salzes inklusive möglicher Schädigungen in der Umgebung einer idealisierten Kaverne unter zyklischer Belastung beschreibt, konnte abgeschätzt werden, dass die größten Änderungen der elastischen Materialeigenschaften in einer maximal 5 m mächtigen Schicht am Boden und dem Dach der Kaverne auftreten. Der lokale Charakter und die geringen Variationen der Materialparameter sind zu klein um sie mit klassischen laufzeitomographischen Ansätzen zu erfassen. Aus diesem Grund wurde vom Verbundpartner CAU eine hochauflösende, elastische FWI Strategie zum Monitoring dieser kleinskaligen Strukturen entwickelt. Diese konnte für unterschiedliche Messgeometrien mit Hilfe des Finite-Elemente-Modells der Kaverne erfolgreich getestet werden (Köhn et al. 2016a/2016b; Abbildung 1.3.1-2). Damit wurden sämtliche im Antrag formulierten Ziele von AP 3.1 zur geophysikalischen Überwachung von Kavernen erfüllt.

Auch die Projektziele zur Entwicklung von Typszenarien und Sensitivitätsstudien für den Betrieb von Salzkavernen zur saisonalen und kurzzykligen Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen wurden vollständig erfüllt. Die simulierten Szenarien dienten als Grundlage für die Analyse wesentlicher Prozesse und Parameter sowie für die prognostizierende Auslegung von Salzkavernen beim Speicherbetrieb. Dabei wurde bezüglich der betrachteten Prozesse das Deformationsverhalten im Wirtsgestein als prägender Vorgang identifiziert. Thermische Prozesse sind in den betrachteten, realistischen Temperaturbereichen nicht zu ignorieren und zeigen eine deutliche Rückkopplung zum Deformationsverhalten. So hängt beispielsweise die Konvergenzrate von Salzkavernen von den herrschenden Temperaturverhältnissen ab. Dieser Aspekt ist insofern anwendungsrelevant und bei der Dimensionierung von Salzkavernen zu berücksichtigen, da die Entwicklung der Kavernenkonvergenz großen Einfluss auf die Häufigkeit der durchzuführenden Nachspülungen hat und zudem äußerst wichtig für die Prognose des Setzungsverhaltens des obertägigen Geländes ist. Ein weiteres wichtiges, anwendungsrelevantes Projektergebnis ist der Nachweis, dass es abhängig von der Ein- und Ausspeicherfrequenz des Speichergases aufgrund dessen thermodynamischer Eigenschaften zu kritischen thermischen Spannungszuständen in der Kavernenwand kommen kann, was der maximal möglichen Speicherfrequenz ein praktisches Limit setzt. Für die Entwicklung geeigneter numerischer Algorithmen zur Behandlung des gekoppelten thermo-mechanischen Problems konnte gezeigt werden, dass die thermischen Prozesse sequenziell mit mechanischen Prozessen gekoppelt werden können, was die numerische Stabilität gegenüber monolithisch gekoppelten Simulationen verbessert. Die Prozesssimulationen gaben Hinweise darauf, dass hydraulische Prozesse in den Kavernenwänden auf der Skala der Betrachtung kompletter Kavernen und

Kavernenfelder vernachlässigt werden können, da die Auflockerungszonen an den Kavernenrändern von geringer Dimension gegenüber den Systemdimensionen sind. Diese Aussage deckt sich auch mit Erfahrungen, die in der Diskussion mit Experten aus dem Anwendungsbereich (hier z. B. KBB Underground Technologies) kommuniziert wurden. Erkenntnisse, die sich aus den Sensitivitätsstudien und Szenariensimulationen für die Anpassung von Handlungsempfehlungen für den Planungsprozess von Speicherkavernen in Salzstöcken ergeben sind in der Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“ dargelegt.

(2) AP 3.2 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von tiefen, porösen geologischen Speichern zur Einlagerung von Sole und Speicherung von Druckluft, CH<sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H<sub>2</sub>

In AP 3.2 „Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von tiefen, porösen geologischen Speichern zur Einlagerung von Sole und Speicherung von Druckluft, CH<sub>4</sub> bzw. synthetischem sowie natürlichem Erdgas und H<sub>2</sub>“ sollten die induzierten hydraulischen, thermischen, geochemischen und geomechanischen Effekte von tiefen Gasspeichern anhand von numerischen Szenariensimulationen untersucht werden. Des Weiteren sollte die Anwendung von geophysikalischen Monitoringmethoden sowie der seismischen Wellenforminversion, Geoelektrik und Gravimetrie auf die betrachteten tiefen Gasspeicher getestet werden. Als Grundlage für die in AP 3.2 durchgeführten Szenariensimulation wird auf die in AP 1.1 entwickelten Szenarien sowie auf die in AP 2.1 und AP 2.2 durchgeführte Modellentwicklung zurückgegriffen.

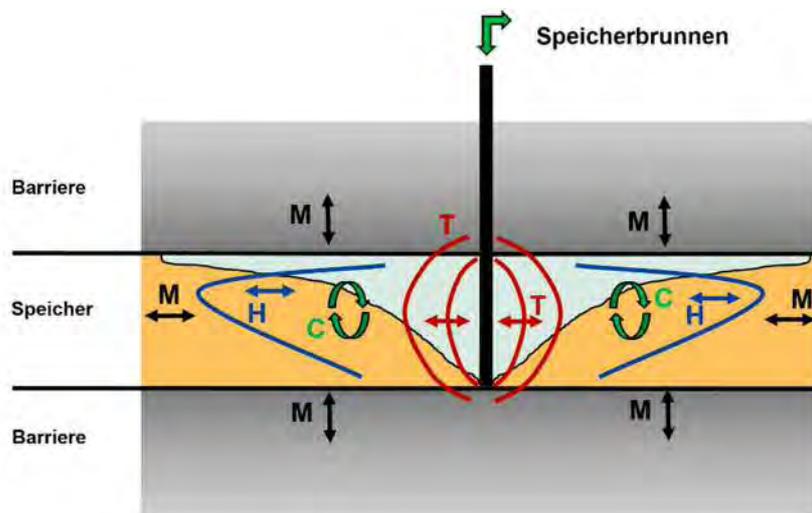


Abbildung 1.3.2-1: Schema induzierter hydraulischer (H), thermischer (T), geochemischer (C) und geomechanischer (M) Effekte durch den Betrieb eines tiefen Porengasspeichers.

Der Betrieb von tiefen Porengasspeichern verursacht induzierte thermische, hydraulische, geochemische und geomechanische Effekte (siehe Abbildung 1.3.2-1), die eine Raumbeanspruchung im Untergrund repräsentieren. Diese wurden im Projekt für die Gasspeicheroptionen Druckluftspeicher und Wasserstoffspeicher ausführlich untersucht.

Für die Simulation eines Druckluftspeichers in einer porösen Formation wurde ein Speicherszenario basierend auf dem Gasturbinen-Druckluftspeicherkraftwerk in Huntorf, welches anders als im Projekt betrachtet über einen Kavernenspeicher verfügt, aufgebaut. Die installierten Gasturbinen erreichen eine Leistung von 312 MW bei einer erforderlichen Massestromrate von 417 kg/s und einem Minimaldruck von 42 bar (Crotogino et al. 2001). Der Betriebszyklus sieht zwei Ausspeicherperioden von je 6 Stunden pro Tag vor. Außerhalb der Ausspeicherperioden wird der Gasspeicher mit einem Luftmassenstrom von 430 kg/s beladen. Als Speicherstandort wurde eine synthetische radialsymmetrische Antiklinalstruktur in 700 m Tiefe und mit 20 m Mächtigkeit verwendet. Die Parametrisierung des Speicherkomplexes erfolgte in Anlehnung an typische Parameterwerte der Rhät-Sandsteine, eine potenzielle Speicherformation im Norddeutschen Becken darstellend (siehe AP 1.1; Wang & Bauer 2017). Rückwirkungen durch geomechanische Effekte werden implizit durch angewendete Drucklimitierungen der Speicherbohrungen berücksichtigt, und nicht explizit simuliert. Der initiale Druck liegt tiefenbedingt bei ca. 72 bar.

Zunächst wurde anhand einer Designstudie die Anzahl der notwendigen Brunnen in Abhängigkeit der Permeabilität ermittelt, die sich je nach vorliegender Parametrisierung zwischen drei und zwanzig ergibt. Durch die Injektion des Speichergases und die horizontale Verdrängung des Formationswassers werden im Nahbereich der Speicherbrunnen während der Speichererrichtung Überdrücke von bis zu 145% des Ausgangsdrucks erreicht, was im Bereich der Drucklimitierung liegt. Die Ausdehnung der Gasphase nach der Speichererrichtung hat einen Radius von ca. 500 m, was dem für Speicherezwecke direkt genutzten Raum entspricht. Im Speicherbetrieb schwankt der Druck nur noch um ca.  $\pm 30\%$  des Ausgangsdrucks (Wang & Bauer 2017), der höchste Druck tritt also während der Speichererrichtung auf. Der Speicherbetrieb erfolgt durch Kompression und Expansion des eingespeicherten Gases, weshalb die räumliche Ausdehnung der Gasphase im Untergrund zeitlich konstant ist. Dies erfordert einen hohen Kissengasanteil von ca. 97% und die durch den Speicherbetrieb induzierten zyklischen Druckschwankungen sind auf die Ausdehnung der Gasphase begrenzt. Die Ausspeicherrate ist damit druckabhängig und fällt über die Zeit ab, sodass für kürzere Zeiträume als die angenommenen 6 Stunden um ca. 30% höhere Leistungen erzielt werden können. Bei konstanter Leistung des Kraftwerks und damit konstanter Ausspeicherrate kann diese Rate in einem ca. 25% längeren Zeitraum erreicht werden.

Der großräumige Druckanstieg wird durch die Verdrängung des Formationswassers während der Speichererrichtung verursacht, ist nicht durch den zyklischen Betrieb beeinflusst und nimmt mit zunehmendem Abstand von der Injektionsbohrung ab. Ein großräumiger Druckanstieg um mehr als 5 bar liegt für das 12-fache der Erstreckung der Gasphase vor, bei einem Schwellwert von 10 bar ergibt sich eine vierfache Erstreckung. Geochemische Effekte wurden nicht explizit simuliert, da die dafür notwendigen konsistenten und repräsentativen geochemischen Reaktionsschemata nicht der Literatur entnommen werden können und die Erstellung dieser sich als sehr zeitaufwändig und aufgrund der heterogenen Datenlage als sehr komplex herausstellte. Allerdings kann die Ausdehnung der Gasphase als Proxy für die Bereiche, in denen potenziell geochemische Folgereaktionen zu erwarten sind, verwendet werden. Dieser ist auf den Nahbereich mit ca. 500 m Radius beschränkt.

Für die Simulation eines Wasserstoffspeichers existiert kein Referenz- bzw. Analogstandort. Aus diesem Grund wurde ein generisches „worst-case“ Szenario entwickelt unter der

Annahme von Phasen geringer bis keiner Stromproduktion aus erneuerbaren Energien über Zeiträume von je 7 Tagen welche in etwa alle 3 Monate auftreten. Gegenübergestellt mit dem durchschnittlichen Stromverbrauch von Schleswig-Holstein ergibt sich somit ein Speicherbedarf von etwa 223 GWh bei einer durchschnittlichen Last von 1.356 MW unter Berücksichtigung einer Effizienz von 60% bei der Rückverstromung (Datengrundlage: MELUR 2013).

Für die Quantifizierung der Ausprägung induzierter hydraulischer Effekte wurde zunächst, basierend auf einem bestehenden Strukturmodell (Hese 2012), ein geologisches Detailmodell einer existierenden Antiklinalstruktur in Schleswig-Holstein erstellt. An dem gegebenen Standort dienen die Rhätsandsteine als Speicherformation, welche im Bereich des Tops der Struktur partiell erodiert sind. Der Gasspeicher liegt dadurch an einer der Flanken der Struktur. Die Mächtigkeit der Speicherformation nimmt mit zunehmender Entfernung zum Top der Struktur zu, wobei diese im Bereich der Speicherbrunnen bei mindestens 13 m liegt. Die hydraulischen Auswirkungen einer H<sub>2</sub>-Speicherung wurden sowohl mit homogen als auch heterogen parametrisierten Szenariensimulation untersucht. Hierfür wurden zunächst mit Hilfe eines Faziesmodells 25 heterogene Parameterverteilungen generiert (Pfeiffer et al. 2017). Hiervon ausgehend wurden homogene Parameterverteilungen erstellt, um den Einfluss von Speicherbetriebsszenarien zu untersuchen.

Gegeben durch die Flexibilität des Szenariensimulationsansatz konnten verschieden Speicherkonfigurationen getestet werden. Die simulierten Speicheroperationen wurden wahlweise mit 5 vertikalen oder 11 horizontalen Brunnen durchgeführt. Die simulierten Speicher sind dabei so dimensioniert das sie etwa 25% (370 MW) bzw. 100% (1490 MW) des definierten Speicherbedarfs abdecken. Um diese Leistung zur Verfügung zu stellen werden die Zielentnahmeraten pro Brunnen auf 1 mio. sm<sup>3</sup>/d (m<sup>3</sup> unter Oberflächenbedingungen definiert als 1 bar und 10°C), bzw. etwa 1,7 mio. sm<sup>3</sup>/d festgesetzt. Wie auch schon im Falle des Druckluftspeicherszenarios wurden geomechanische Rückwirkungen nur implizit über die minimalen und maximalen Drücke in den Speicherbrunnen während des Betriebs berücksichtigt und nicht explizit quantifiziert. Der initiale Druck im Bereich der Speicherbrunnen liegt bei rund 50 bar, bedingt durch die Tiefe der Speicherformation.

Wie auch schon im Falle des Druckluftspeichers bedingt die initiale Befüllung einen Druckanstieg innerhalb des Speichers auf bis zu 137% des initialen Druckes. Der direkt genutzte Bereich der Speicherformation, gegeben durch die Ausdehnung der Gasphase, erstreckt sich im Falle des kleineren Speichers auf etwa 5 km x 700 m x 20 m (Länge x Breite x Mächtigkeit) und im Falle des großen Speichers mit 11 Speicherbrunnen auf etwa 7 km x 750 m x 20 m. Die heterogenen Szenariensimulation zeigen dabei eine grosse Abhängigkeit der Gasphasenverteilung von der räumlich variablen Ausprägung der Reservoirpermeabilität. Die gezykelten Gasvolumina entsprechen unabhängig vom betrachteten Speicher etwa 35% des gesamten verfügbaren Gasvolumens. Der Speicherbetrieb erfolgt wie auch schon im Falle des Druckluftspeichers primär über die Kompressibilität und Expansion des Speichergases in der Formation sodass sich die Ausdehnung der Gasphase nur unwesentlich ändert.

Die stärksten Druckspiegelschwankungen während des Speicherbetriebs sind auf die Gasphase und somit den direkt genutzten Bereich des Speichers beschränkt, wobei der Druck maximal zwischen etwa 137% und 60% der initialen Werte schwankt. Die großräumig induzierten Druckänderungen sind ein Resultat der initialen Verdrängung des Forma-

tionswassers durch Befüllung des Speichers. Im Vergleich mit dem Nahbereich des Speichers ist der Druckanstieg in größeren Distanzen von den Speicherbrunnen stark gedämpft, so dass beispielsweise eine Druckänderung von mehr als 5 bar nur bis zu einer Entfernung von etwa dem dreieinhalbfachen der Ausdehnung der Gasphase auftritt (Pfeiffer et al. 2017). Des Weiteren zeigen die Szenariensimulationen keine direkte Abhängigkeit vom gespeicherten Gasvolumen sondern vielmehr von dem genauen Speicherbetriebsschema, was durch sehr ähnliche Druckauswirkungen im Falle des 25% und des 100% Speichers zu erkennen ist. Die Heterogenität der Speicherformation führt lediglich zu sehr lokalen Variationen des induzierten Drucksignals innerhalb des direkt genutzten Raumes.

Thermische Effekte durch eine  $H_2$ -Speicherung wurden zum einen anhand einer um  $25^\circ C$  über der Reservoirtemperatur erhöhten Injektionstemperatur untersucht, zum anderen wurden die Auswirkungen des Joule-Thomson-Effektes betrachtet. Es zeigte sich, dass die erhöhte Injektionstemperatur zu einer nur lokalen, sich primär konduktiv ausbreitenden Temperaturveränderung im Nahbereich der Injektionsbrunnen führt. Horizontal bleibt diese Temperaturveränderung auf kleine Bereiche der Gasphase beschränkt, anders als die hydraulischen Effekte ist die Ausprägung findet auch eine vertikale Ausbreitung der Wärme in die Deckschichten statt. Maximale Temperaturänderungen direkt am Brunnen erreichen dabei die Werte der angenommenen Temperaturdifferenz und fallen mit zunehmendem Abstand vom Injektionsbrunnen schnell ab. Aufgrund des geringen Joule-Thomson-Koeffizienten von  $H_2$  und der Dämpfung des induzierten Temperatursignals durch die residuale Wasserphase und die Gesteinsmatrix wurde kein signifikanter induzierter thermischer Joule-Thomson-Effekt für die angenommene Betriebsführung ermittelt. Für die Abschätzung der induzierten thermischen Effekte wurde der in AP 2.2 entwickelte gekoppelte Simulator OpenGeoSys-ECLIPSE genutzt (Pfeiffer et al. 2016b).

Induzierte geochemische Effekte einer Wasserstoffspeicherung wurden im Rahmen des Projektes in grundlegenden Arbeiten durchgeführt. Hierfür wurden zum einen erste Simulationen zu geochemischen Folgereaktionen einer  $H_2$ -Speicherung anhand von Batch-Modellen verschiedener geochemischer Systeme erstellt (Götz 2014). Dabei zeigte sich, dass die Anwesenheit von Sulfat grundsätzlich zu geochemischen Folgereaktionen und der Bildung von Schwefelwasserstoff führt. Die Verfügbarkeit ist jedoch sediment- und lokationsspezifisch, und die vorhandenen Daten lassen keine generalisierten Schlussfolgerungen zu. Aufbauend auf diese Arbeiten wurde ein konsistentes Fluid-Mineral-System für die Rhät-Sandsteine in Norddeutschland aufgebaut (Spaar 2016), welches als Grundlage für zukünftige quantifizierende Szenariensimulationen zu geochemischen Folgereaktionen einer  $H_2$ -Speicherung genutzt werden kann. Es zeigte sich jedoch, dass der Aufbau konsistenter Reaktionsschemata zur Beschreibung der Formationswässer ein sehr komplexer und zeitaufwändiger Prozess ist, der nur für einzelne konkrete Standortvorhaben geleistet werden kann.

Für die Überwachung von Porenspeichern im tiefen Untergrund mit Hilfe geophysikalischer Methoden wurde im Rahmen des ANGUS+ Projektes ein integrativer geophysikalischer Monitoringansatz entwickelt. Zentraler Bestandteil ist dabei das in AP 2.3 realisierte Konzept einer seismischen Full Waveform Inversion (FWI), welche die Strukturen des tiefen Untergrundes vor der Gasinjektion hochauflösend kartieren kann. Mit Hilfe von regelmäßig durchgeführten Wiederholungsmessungen und der Auswertung dieser Daten mit einer Time-Lapse FWI lassen sich Änderungen in der Form und Größe der Gaspha-

senverteilung durch die zyklische Injektion und Entleerung des Porenspeichers nachweisen. Als Ergänzung zur Seismik kann mit Hilfe der Geoelektrik und Gravimetrie die Form der Gasphasenverteilung verifiziert werden.

Das so entwickelte integrative geophysikalische Monitoringkonzept wurde anhand von unterschiedlich komplexen Porenspeicherszenarien für Druckluftspeicher (al Hagrey et al. 2014a) und Wasserstoffspeicher (Pfeiffer et al. 2016a) erfolgreich getestet. Allgemein ergab die Szenarienanalyse, dass die Form und Ausdehnung einer 20 m mächtigen Wasserstoffspeicherformation in ca. 500 m Tiefe mit einer Kombination von Oberflächenseismik und Vertical-Seismic-Profiling (VSP) gut erfasst werden kann (Abbildung 1.3.2-2a-c). Allerdings ist die Kombination aus Reflexionsseismik von der Oberfläche und VSP auf einen Frequenzbereich von maximal 100 Hz beschränkt. Legt man eine mittlere P-Wellengeschwindigkeit von 2.700 m/s in dem Reservoir zugrunde, so kann die FWI der VSP Daten Strukturen bis zu einer Ausdehnung von minimal 14 m abbilden. Für die Auflösung von Detailstrukturen, insbesondere von potenziellen Gasleckagen, ist eine seismische Cross-Well Akquisitionsgeometrie mit einer Maximalfrequenz von 1000 Hz erforderlich (Abbildung 1.3.2-2d-f). Die FWI der Cross-Well Daten kann ca. 1,4 m große Strukturen auflösen. Während das Auflösungsvermögen einer Cross-Well Geometrie sehr viel besser ist als das einer VSP Geometrie, ist die Messung von qualitativ hochwertigen Daten mit großem Signal-zu-Rausch Verhältnis zeitaufwändig und teuer, da der Abstand zwischen den Bohrlöchern klein sein muss, um möglichst hochfrequente Wellen messen zu können. Neben der Gassättigung und Gasdichte, hat auch der Porendruck einen signifikanten Einfluss auf die räumlichen Variationen der seismischen P-Wellengeschwindigkeit im Reservoir. Bei den hier betrachteten Szenarien wurde der Einfluss des Porendrucks im verwendeten Gesteinsmodell noch vernachlässigt. Bei einer Felddatenanwendung können die Amplituden der seismischen Geschwindigkeitsanomalien größer und entsprechend einfacher für die FWI detektierbar sein.

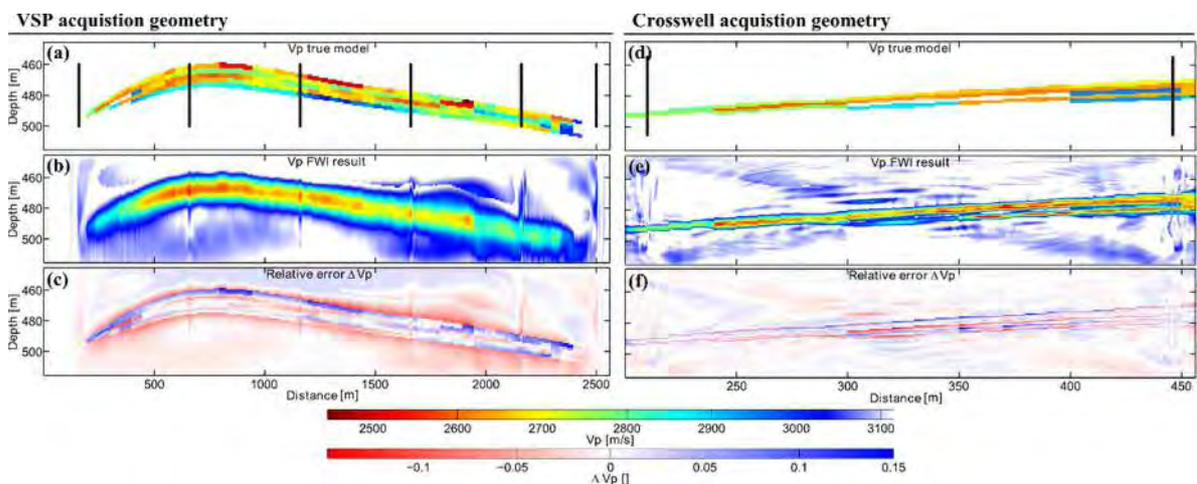


Abbildung 1.3.2-2: Vergleich zwischen dem wahren P-Wellengeschwindigkeitsmodell eines realistischen Wasserstoffspeichers, dem Ergebnis der FWI Kartierung und dem relativen Geschwindigkeitsfehler für eine VSP- (a-c) und Cross-Well Akquisitionsgeometrie (d-f).

In einem zweiten Schritt können die hochaufgelösten Strukturmodelle aus der FWI als Nebenbedingung für die geoelektrische Widerstandstomographie (Electrical Resistivity Tomography ERT) verwendet werden. Die Kombination aus FWI und geoelektrischer Kartierung mit optimierter Datenakquisition kann vergleichbar hochaufgelöste Abbildungen der

räumlichen Verteilungen der elastischen und elektrischen Materialparameter im Reservoir liefern. Gleichzeitig werden Mehrdeutigkeiten bei der ERT Kartierung deutlich reduziert.

Eine Unterscheidung zwischen  $H_2$  und  $N_2$  sind weder mit der FWI noch der ERT möglich, da der Einfluss beider Gaskomponenten auf die elektro-elastischen Eigenschaften nicht unterscheidbar ist. Auch eine gravimetrische Monitoringstrategie konnte bei dem betrachteten Szenario nicht angewendet werden, da der Massenunterschied durch die  $H_2$ -Injektion zu klein und Schwereanomalien entsprechend nicht messbar sind. Der Einsatz von Gravimetrie wäre erst bei einem dreimal so großen  $H_2$ -Injektionsvolumen vorstellbar. Entsprechend lässt sich auch der Speicherfüllstand nicht mit geophysikalischen Verfahren ermitteln. Weder direkt durch die Kartierung der  $H_2$ -Verteilung, noch indirekt, da sich der Gas-Wasser-Kontakt während der Befüllung und Entleerung nicht verschiebt.

Eine weitere Fragestellung von AP 3.2 war die geophysikalische Überwachung der Verpressung von Salzwasser, sowie die Detektion möglicher Salzwasserleckagen. Das in den Untersuchungen entwickelte und an verschiedenen Szenarien getestete, geophysikalische Monitoringkonzept ist in AP 3.3 genauer beschrieben.

Die Ziele des Arbeitspaketes sind in weiten Teilen erreicht worden. Anhand der Beispielszenarien einer Druckluft- und  $H_2$ -Speicherung konnte die Methodik zur Ermittlung induzierter hydraulischer und thermischer Effekte bei der Speichererrichtung und im zyklischen Betrieb erfolgreich demonstriert und für die untersuchten Szenarien quantifiziert werden. Die konkrete quantitative Ausprägung der Effekte ist jedoch nicht nur von den geologischen Bedingungen sondern auch von dem betrachteten Betriebsszenario abhängig. Die Simulationsmethodik zur Bestimmung geochemischer Auswirkungen steht prinzipiell zur Verfügung, jedoch stellte sich die Ableitung formationsspezifischer geochemischen Reaktionsschemata als zu komplex und zeitaufwändig heraus, sodass diese Arbeiten nur beschränkt durchgeführt werden konnten. Für die geophysikalischen Arbeiten ergibt sich als Fazit, dass die Gasphasenverteilung im Speicher mit einer seismischen FWI von Reflexions- und VSP-Daten kartiert werden kann. Die Auflösung von Detailstrukturen wie z. B. kleinskalige Gasleckagen erfordert dabei jedoch den Einsatz einer Cross-Well Akquisitionsgeometrie. Ergänzend zur hochauflösenden seismischen FWI liefert die ERT Informationen über die Verteilung der elektrischen Parameter im Untergrund. Eine Unterscheidung zwischen den Gaskomponenten ist bei dem betrachteten Szenario mit keinem geophysikalischen Verfahren möglich. Entsprechend kann die Geophysik keine Aussagen über den Speicherfüllstand liefern. Kleinskalige Gasleckagen in der Nähe der Speicherformation ließen sich dagegen mit dem entwickelten integrativen geophysikalischen Monitoringansatz frühzeitig erkennen.

### (3) AP 3.3 Ausbreitung von Gasleckagen aus tiefen Speichern und ihre geochemische Beeinflussung oberflächennaher unterirdischer Schutzgüter

Erstes Ziel des Arbeitspakets ist eine Abschätzung der Gefährdung des Schutzguts Grundwasser durch die Speicherung von Gasen im tiefen Untergrund. Mit Hilfe numerischer Szenariensimulationen sollte die Ausbreitung von Druckluft, Methan und Wasserstoff in oberflächennahen Aquiferen untersucht werden, wenn diese z. B. aufgrund einer Leckage bis an die Oberfläche migrieren. Die aus der Gasintrusion resultierenden geo-

chemischen Veränderungen sollten zunächst unter Vernachlässigung der Gasausbreitung simuliert werden, um abzuschätzen, in wie weit geltende Grenzwerte überschritten werden können. Die gekoppelte Simulation von Gasausbreitung und geochemischen Reaktionen sollte nur für einen sehr einfachen Fall durchgeführt werden. Ebenso sollte die Ausbreitung salinen Wassers untersucht werden, das aufgrund eines Druckaufbaus bei der Gasspeicherung in oberflächennahe Aquifere intrudiert. Das zweite Ziel des APs ist die Entwicklung eines Konzepts zur Detektion von Gasleckagen insbesondere durch geophysikalische Methoden, die einen großen Aquiferbereich überwachen können. Dazu sollten unterschiedliche geophysikalische Methoden anhand der simulierten Szenarien zur Ausbreitung von Gasen und salinem Wasser virtuell getestet werden.

#### *Wahrscheinlichkeit von Gasleckagen aus unterirdischen Speichern*

Bereits im Antrag wurde dargestellt, dass Leckagen an Gasspeichern durchaus möglich sind und dass die Untersuchung der Folgen und der Detektierbarkeit solcher Leckagen eine wichtige Voraussetzung für die Umsetzung sind. Über die ursprüngliche Antragsplanung hinaus wurden die von Evans (2007a) zur Verfügung gestellten Daten der Erdgasindustrie ausgewertet. Evans (2007b) beschreibt 557 Zwischenfälle aus den Jahren 1950 bis 2009, was durchschnittlich 9-10 Zwischenfällen pro Jahr entspricht. Bei 31 (5,6%) dieser Zwischenfälle wurde eine Gasmigration in den geologischen Untergrund entdeckt und dokumentiert. Weitere 140 Zwischenfälle sind auf ein geologisches Versagen zurückzuführen, so dass eine Gasmigration in den geologischen Untergrund möglich ist, aber nicht explizit dokumentiert wurde. Berücksichtigt man zusätzlich eine unbekannte Dunkelziffer nicht dokumentierter Fälle, sind Gasleckagen aus geologischen Speichern nicht so selten wie oft angenommen wird.

#### *Gasausbreitung in oberflächennahen Grundwasserleitern*

Simulationen mit dem Programm TOUGH zur Ausbreitung von Wasserstoff, Methan und Druckluft in oberflächennahen Grundwasserleitern wurden für unterschiedliche Leckageraten durchgeführt. Mit Hilfe einer Sensitivitätsanalyse wurde ermittelt, dass effektive Porosität, Druck und Leckagerate einen hohen Einfluss auf die Größe der sich entwickelnden Gasphasenkörper haben. Aufgrund der unterschiedlichen Kompressibilität der Gase sind die Erkenntnisse zur Ausbreitung eines Gases nur schwer auf ein anderes Gas übertragbar.

Zusätzlich wurde der Einfluss der Grundwasserströmung und der Neigung des hangenden Grundwasserstauers untersucht. Die natürliche Grundwasserströmung hat nur einen geringen Einfluss auf die Ausbreitung eines Gasphasenkörpers, transportiert jedoch gelöste Gase in den Abstrom. Die Neigung des hangenden Grundwasserstauers hat wiederum keine Auswirkungen auf das in gelöster Form transportierte Gas, ist jedoch maßgebend für die Richtung, in die der Gasphasenkörper migriert. Die Ausbreitung der Gasphase und die davon ausgehenden Fahne von Gas in gelöster Form, die in den Abstrom migriert, definiert den Bereich, in dem geochemische Veränderungen des Aquifers möglich sind.

Die Ausbreitung von Gasen in realen geologischen Strukturen wurde für den Standort des BMBF-Projekts CLEAN (Wiegiers et al. 2012) und am Beispielstandort Elmshorn un-

tersucht, der mit zwei Salzstöcken und der eiszeitlichen Ellerbeker Rinne typisch für Norddeutschland ist. Es wurden unterschiedliche Positionen für eine punktuelle Gasleckage angenommen, wobei drei typische Ausbreitungsmuster beobachtet wurden:

- Das Gas migriert unter dem in diesem Gebiet flächig ausgeprägten Hamburger Ton ohne ihn zu durchdringen.
- Das Gas folgt dem steilsten Gradienten des hangenden Hamburger Tons und migriert in die Hanglagen der Salzstöcke, wenn die Leckage in Nähe eines Salzstocks liegt.
- Leckagen bis zur Oberfläche treten in der eiszeitlichen Rinne und an den Salzstöcken auf, wo der Hamburger Ton Lücken aufweist.

#### *Simulation zum Leckagepfad von Gas entlang eines casings*

Da sich die Leckagerate als wichtiger sensibler Parameter für die Größe des zu erwartenden Gasphasenkörpers erwiesen hat, wurden zusätzlich zur ursprünglichen Planung Simulationen mit OpenGeoSys durchgeführt, um den Weg des Gases entlang des casings einer Bohrung zu simulieren. Das Modell kann die Prozesse zwar wiedergeben, die resultierenden Leckageraten hängen jedoch stark von den im Modell angenommenen Systemdurchlässigkeiten von casing, umgebendem Zement und Sediment ab, die in der Realität unbekannt sind. Prognosen zur Leckagerate bleiben daher mit hohen Unsicherheiten behaftet.

#### *Simulation einer Salzwasserintrusion in das Schutzgut Grundwasser*

Für die Intrusion von Salzwasser wurde ebenfalls systematisch der Einfluss unterschiedlicher Aquiferparameter, sowie der natürlichen Grundwasserströmung als auch der Neigung des liegenden Grundwasserstauers mit Hilfe von TOUGH simuliert (Wiegiers & Schäfer 2015). Leckagerate, effektive Porosität und Permeabilität haben einen starken Einfluss auf die horizontale Ausbreitung des Salzwasserkörpers. Aufgrund der höheren Dichte strömt das saline Wasser zwar in Neigungsrichtung des Grundwasserstauers, bereits eine geringe natürliche Grundwasserströmung kann das saline Wasser jedoch ablenken. Eine stärkere Grundwasserströmung dominiert die Ausbreitung, so dass die Topografie des liegenden Grundwasserstauers praktisch keinen Einfluss mehr hat. Für einen realen Standort bedeutet dies, dass Richtung, Geschwindigkeit und zeitliche Veränderung der Grundwasserströmung möglichst detailliert bestimmt werden sollten.

Die Ausbreitung salinen Wassers in realen Aquifersystemen wurde für den Standort des BMBF-Projekts CLEAN und für die Ellerbeker Rinne untersucht. Erwartungsgemäß breitet sich das saline Wasser an der Aquifersohle aus und folgt der Grundwasserströmung. Zur Detektion sind Grundwassermessstellen zu empfehlen, die im unteren Aquiferbereich verfiltert sind, da in voll verfilterten Messstellen eine Vermischung auftreten kann, die zu Konzentrationen unterhalb der Nachweisgrenze führen kann.

#### *Simulation des Salzaufstiegs entlang einer vertikalen Wegsamkeit*

Zusätzlich zur ursprünglichen Planung wurde die Leckage salinen Wassers entlang einer offenen Störungszone mit OpenGeoSys simuliert. Bei einer Abfolge mehrerer Aquifere

schichtet sich das dichtere Salzwasser auf der Sohle des tiefsten Aquifers ein und verdrängt das in diesem Aquifer vorhandene Wasser in die nächst höhere Schicht (Delfs et al. 2016). Dort wiederholen sich die Einschichtung und die Verdrängung des dort vorhandenen salinen Wassers in die nächste Schicht. Wie bereits im Rahmen der CO<sub>2</sub>-Verpressung vermutet, wird es nach dieser Simulation nicht zu einer Intrusion von salinem Tiefenwasser in flache Süßwasseraquifere kommen, sondern Wasser aus dem obersten salinen Aquifer wird in den Süßwasseraquifer eindringen. In Norddeutschland wäre dies z. B. salines Wasser aus den unteren Braunkohlesanden.

#### *Simulation mikrobieller und chemischer Folgereaktionen, zunächst entkoppelt von der Gasausbreitung*

In AP 1.2 & 1.3 wurden vier für Norddeutschland typische Aquifersysteme identifiziert und parametrisiert, für die mit OpenGeoSys die geochemischen Folgereaktionen bei einem Eintritt von Wasserstoff, Methan oder Druckluft simuliert wurden. In einem Szenario wurde der langsame, flächige, diffusive Eintritt der gelösten Gase durch den darunterliegenden Stauer in die Typaquifere betrachtet. Für alle drei Gase sind die dadurch verursachten geochemischen Veränderungen jedoch sehr gering, da die Massenflüsse der Gase nur klein sind. Eine Detektion ist nur mit hohem Aufwand möglich, da Veränderungen nur direkt oberhalb des Stauers auftreten. Ein zweites Szenario ist eine punktuelle Gasleckage, die zu einem Gasphasenkörper im oberflächennahen Aquifer geführt hat. Vereinfachend wurde der Gasphasenkörper im Modell als immobil angenommen.

Eine Intrusion von Wasserstoffgas führt nach den aus der Literatur bekannten Prozessen zur Reduktion vorhandener Oxidationsmittel wie Nitrat oder Sulfat, sowie zur Methanogenese. Aufgrund des hohen Überschusses an Wasserstoff laufen diese Reaktionen gleichzeitig ab. Da in den Laborversuchen auch eine Acetogenese beobachtet wurde (AP 1.7), wurde Acetat als Zwischenprodukt in weiteren Szenarien ebenfalls berücksichtigt, was ca. eine Größenordnung geringere Methankonzentrationen und einen 2 Einheiten geringeren Anstieg des pH-Werts bewirkt. In beiden Fällen ist eine geophysikalische Detektion aufgrund der abnehmenden elektrischen Leitfähigkeit möglich.

In den Laborversuchen (AP 1.7) konnte kein mikrobieller Abbau von Methan beobachtet werden. Im Modell, das mit Hilfe von Literaturangaben parametrisiert wurde, findet ein Abbau mit Nitrat oder Sulfat zwar statt, er ist aber sehr langsam. Aufgrund der geringen mikrobiellen Umsätze verändern sich pH und elektrische Leitfähigkeit kaum, die geophysikalische Detektion einer Methanintrusion über ihre geochemischen Veränderungen scheint nicht erfolgversprechend, die direkte Messung der Methankonzentrationen wird empfohlen.

Druckluft enthält als geochemisch reaktive Komponenten Sauerstoff (20,95%) und CO<sub>2</sub> (0,04%), wobei das CO<sub>2</sub> nur geringfügige geochemische Veränderungen verursacht. In aeroben Aquiferen sind die durch eine Druckluftleckage verursachten geochemischen Veränderungen sehr gering. In anaeroben Aquiferen kann eine Pyritoxidation stattfinden, die zu einer Versauerung des Grundwassers führt, die jedoch durch vorhandene Karbonate gepuffert wird. Verwendet das Modell die in der Literatur beschriebene Pyritoxidationskinetik (Rimstidt & Vaughan 2003), ist die Pyritoxidation deutlich schneller als unter Verwendung der in AP 1.7 ermittelten Kinetik, die eine Passivierung der Pyritoberfläche aufgrund hoher pH-Werte berücksichtigt. Es wird vermutet, dass die Pyritoxidation ver-

langsam abläuft, so lange im Sediment ausreichend pH-Wert puffernde Karbonate (z. B. Calcit) vorhanden sind, wobei die Calcitgehalte realer Sedimente kaum bekannt sind. Sinkt der pH-Wert nach Verbrauch des pH-Puffers ab, lösen sich voraussichtlich auch die passivierenden Mineralschichten auf dem Pyrit auf, was die Pyritoxidation beschleunigt. Da sich der Sauerstoff kaum im Aquifer ausbreitet, wird eine Detektion über die verursachten geochemischen Veränderungen empfohlen, wie z. B. Sulfatanstieg, pH-Abnahme und Zunahme der elektrischen Leitfähigkeit, die auch geophysikalisch messbar ist.

#### *Kopplung der Mehrphasenströmung und der Reaktionen*

Zur gekoppelten Simulation von Mehrphasenströmung und Geochemie stand das Programm TOUGHREACT zur Verfügung. Rein geochemische Probleme lassen sich mit diesem Modell gut auf kleiner Skala lösen. Auf einer Skala, auf der eine relevante Gasausbreitung stattfindet, ist es jedoch nicht gelungen ein Simulationsergebnis für gleichzeitige Mehrphasenströmung und Geochemie zu erhalten. Es ist unklar, ob es sich um ein Problem im Programm oder bei der Bedienung handelt. Für die durchgeführten geochemischen Simulationen (ohne Gasausbreitung) wurde daher das Programm OpenGeoSys verwendet.

#### *Detektion von Gasleckagen und Salzwasserintrusionen mit geophysikalischen Verfahren*

Die im AP modellierten Szenarien zur Gasleckage und Salzwasserintrusion bildeten die Grundlage für die Entwicklung von geophysikalischen Monitoringstrategien. Dazu wurde die Verteilung der Gas-, bzw. Salzwasserphasen aus den Simulationsergebnissen mit adäquaten petrophysikalischen Beziehungen (z. B. Archie, Gassmann) in geophysikalische Modelle (elektrische Widerstände, elastische Materialparameter und Dichten) umgerechnet. Randbedingungen wie Druck und Temperaturverteilungen sind dabei an Werte aus dem Norddeutschen Becken angelehnt. Mit numerischen Codes zur seismischen, bzw. elektrischen Vorwärtsmodellierung und Inversion wurden synthetische Datensätze für die vorgegebenen geophysikalischen Modelle erzeugt und diese im Anschluss invertiert.

Zur Überwachung von Gasleckagen konnten wir einen integrativen Monitoringansatz verschiedener sich ergänzender geophysikalischer Methoden entwickeln (al Hagrey et al. 2014b, al Hagrey et al. 2016). Dieser integrative Monitoringansatz besteht aus einer seismischen Full Waveform Inversion (FWI), elektrischer Widerstandstomographie (ERT), 3D Gravimetrie-Modellierung und der Transienten-Elektromagnetik (TEM). Gemeinsame Eigenschaften wie Dichte, elektrischer Widerstand und elastische Parameter werden von den einzelnen Methoden unabhängig bestimmt, womit man einerseits Mehrdeutigkeiten reduzieren, andererseits die räumliche Auflösung verbessern kann. Die FWI und ERT werden zur genauen Kartierung der Gasanomalien verwendet, wobei sich die Auflösung der ERT Ergebnisse durch eine genaue FWI Kartierung signifikant erhöht. Auf der anderen Seite lässt sich das gering aufgelöste langwellige Dichtemodell in der FWI durch die Gravimetrie erheblich besser bestimmen (Wehner et al. 2015, Wehner 2015). Aus den verschiedenen elektromagnetischen Methoden im Zeit- und Frequenz-Bereich wird die TEM Methode wegen ihrer größeren Eindringtiefe und besseren Auflösung angewandt. Luftgestützte TEM wird hauptsächlich eingesetzt, um große Areale mit minimalem Aufwand zu überwachen und Teilgebiete mit möglichen Leckage-Anomalien zu isolieren.

Diese Teilgebiete können anschließend im Detail mit Hilfe unseres integrativen Ansatzes untersucht werden.

Im Fall von Salzwasserleckagen ist dieser Monitoringansatz nur teilweise anwendbar. Während elektro(magnetische) Verfahren wie ERT und TEM in der Lage sind die Salzwasserintrusion in einen Grundwasserleiter bereits ein halbes Jahr nach Beginn der Intrusion sowohl zu detektieren, als auch zu überwachen, lässt sich die Anomalie der Salzwasserfahne mit Seismik und Gravimetrie nicht auflösen (al Hagrey et al. 2014c).

### *Fazit des Arbeitspaketes 3.3*

Die vorgesehenen Simulationen zur Ausbreitung von Gasen oder salinem Wasser wurden auf kleiner und großer räumlicher Skala und in realistischen geologischen Strukturen erfolgreich abgeschlossen. Für die untersuchten Szenarien oder auch für spätere reale Standorte ist eine Gefährdungsabschätzung technisch möglich. Die simulierten Szenarien sind realistisch, aufgrund des geringen Wissens über den geologischen Untergrund (insbesondere bei tieferen Aquiferen) bleibt aber unsicher, ob sie tatsächlich der Realität entsprechen würden. Parameter zur Beschreibung der Mehrphasenströmung sind kaum bekannt. Sogar „einfache“ Parameter wie hydraulische Durchlässigkeit oder Porosität liegen für tiefere Aquifersysteme kaum vor. Die Migration der Gase bis an die Oberfläche hängt darüber hinaus von kaum bekannten geologischen Details ab. Es ist z. B. unklar, ob Gase wie im Modell angenommen ungehindert von den umgebenden Aquiferen in die eiszeitliche Rinne eindringen können, oder ob dünne Tonschichten die Gasmigration behindern. Auch die Gasdurchlässigkeit an der Grenze zwischen Salzstock und aufgeschobenen Geringleitern ist unklar, ebenso ist über Klüfte in diesem Bereich oft nichts bekannt. Problematisch ist weiterhin die Prognose einer Leckagerate, da Parameter für den Bereich in Nähe des casings unbekannt sind. Weitere Untersuchungen und ein Test der Prognosefähigkeit von Modellen anhand realer Gasinjektionen, wie z. B. im BMBF-Projekt TestUM vorgesehen, sind unbedingt erforderlich.

Auch die Simulationen der zu erwartenden mikrobiellen und geochemischen Reaktionen zur Abschätzung geochemischer Veränderungen wurden erfolgreich abgeschlossen. Reaktionen und erforderliche Parameter sind prinzipiell aus der Literatur bekannt. Die in AP 1.7 durchgeführten Laborexperimente zeigen jedoch, dass insbesondere unter den bisher kaum untersuchten hohen Drücken Abweichungen von den bisher in der Literatur beschriebenen Kinetiken möglich sind. Zusammen mit der geringen Kenntnis über die chemische Zusammensetzung von Sedimenten und über mikrobielle Parameter bleibt auch hier eine Aussageunsicherheit, die sich nur durch Untersuchungen an realen Leckagen verringern lässt.

Nicht erfolgreich war die gleichzeitige Simulation von Gasausbreitung und chemischen Reaktionen auf größerer Skala. Wesentliche Probleme sind die hohen Rechenzeiten in der Größenordnung von Jahren, sowie numerische Stabilitätsprobleme, sobald die geochemische Simulation in nur einer Rechenzelle versagt. Hier ist die Weiterentwicklung geeigneter Modellprogramme erforderlich.

Anhand der simulierten Szenarien wurden geophysikalische Methoden zur Detektion einer Leckage erfolgreich getestet. Der neu entwickelte Ansatz der Anwendung und simultanen Auswertung mehrerer geophysikalischer Methoden sollte in der Lage sein,

Gasleckagen und Salzwasserintrusionen zu entdecken. Ein realer Test auf Feldskala, der z. B. im BMBF-Projekt TestUM möglich gewesen wäre, steht noch aus.

Zusätzlich zur ursprünglichen Projektplanung wurde anhand von Literatur die Häufigkeit von Gasleckagen in oberflächennahe Aquifere eingeschätzt. Da sich die Leckagerate als wichtiger Parameter für die Größe des beeinflussten Bereichs durch Gase oder salines Wasser herausgestellt hat, wurde zusätzlich versucht, diesen Parameter genauer zu quantifizieren.

(4) AP 3.4 Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von oberflächennahen geothermischen Anlagen und deren Monitoring; Änderung des Strömungs- und Transportregimes, Gefährdungen des Grundwassers durch Leckagen und Interaktion mit Altlasten

Übergeordnetes Ziel von AP 3.4 „Unmittelbare und mittelbare Auswirkung des Baus und Betriebs von oberflächennahen geothermischen Anlagen und deren Monitoring; Änderung des Strömungs- und Transportregimes, Gefährdungen des Grundwassers durch Leckagen und Interaktion mit Altlasten“ war die Analyse der thermisch-hydraulisch-mechanisch-geochemischen Auswirkungen des Betriebs von geothermischen Wärmespeichern im oberflächennahen Untergrund anhand von virtuellen Szenariensimulationen.

Vorraussetzungen für die Durchführung der sehr rechenintensiven Simulationen waren zum einen die Erweiterung des Simulationscodes OpenGeoSys hinsichtlich der nichtisothermen Prozess- und Parametermodelle, wie diese in AP 2.4 durchgeführt und erläutert sind, zum anderen die Anschaffung und Installation von parallelisierten Hochleistungsrechnern. Die entsprechenden Investitionsmittel wurden wie vorgesehen eingesetzt, die davon beschafften 12 Linux-Rechenknoten mit insgesamt 192 CPUs wurden in den HPC-Cluster der Universität Kiel integriert und haben sich im Einsatz bei den Szenariensimulation im ANGUS+-Projekt sehr bewährt. Ohne diese Rechenknoten wären die Szenariensimulationen im ANGUS+-Projekt nur in sehr reduziertem Umfang möglich gewesen. Allerdings ist die Nutzung dieser Knoten mit erheblichen Parallelisierungsbemühungen und einer aufwändigeren Nutzung, verglichen mit PCs, verbunden.

Der erste Schwerpunkt der Arbeiten ist die Simulation des Betriebs und der Auswirkungen von thermischen Speichern im Untergrund. Die unmittelbare Auswirkung von Wärmespeichern ist eine lokale und typischerweise zyklische Änderung des Temperaturfelds im Untergrund. Diese Temperaturveränderung wirkt sich darüber hinaus auf die Parameter der Grundwasserströmung aus und führt so zu einer Beeinflussung des Fließregimes im Speicherumfeld. Diese thermisch-hydraulischen Zustandsänderungen können wiederum geomechanische Zustände im Untergrund beeinflussen und so zu Hebungs- und Setzungserscheinungen führen. Ebenfalls wirken sich Temperaturänderungen auf eine Vielzahl bio-geo-chemischer Prozesse und Reaktionen aus (z. B. Freisetzung und Abbau von organischem Kohlenstoff, Sorption/Desorption von Spurenelementen und Schwermetallen, Minerallösung-/fällung etc.), sodass aus dem Betrieb von Wärmespeichern Änderungen der Grundwassergeochemie und -qualität resultieren können. Alle Prozesse können sich zudem untereinander durch Änderungen der Fluid- oder Gesteinseigenschaften (z. B. Viskosität, Porosität, Wärmeleitfähigkeit etc.) beeinflussen. Die Projektziele in die-

sem Schwerpunkt wurden im Wesentlichen und im für das Projekt notwendigen Maß erreicht, die entsprechend benötigten Speichersimulationen konnten aufgrund der Vorarbeiten in AP 2.4 durchgeführt und quantifizierend bilanziert werden.

Zur Durchführung der Szenariensimulationen wurden zunächst auf Grundlage einer Literaturrecherche hinsichtlich der Dimensionen und Rahmenbedingungen im Betrieb befindlicher Wärmespeicher in Deutschland und Europa zwei grundsätzliche Nutzungsszenarien für Aquifer-Wärmespeicher (so genannte ATES) sowie Erdsonden-Wärmespeicher (so genannte BTES) definiert. Die Dimensionen der simulierten Speicher orientieren sich in den räumlichen und energetischen Größenordnungen grob an den Anlagen in Rostock-Brinkmannshöhe (ATES; Bauer et al. 2010; 2013) bzw. Crailsheim (BTES, Bauer et al. 2009), ohne diese jedoch exakt nachzubilden. Die Szenarien wurden in numerische Modelle umgesetzt und hinsichtlich der Untergrundeigenschaften für typische norddeutsche Aquifere (ATES) bzw. Grundwasser-Geringleiter (BTES) parametrisiert, wie diese in AP 1.1 und 1.3 ermittelt und durch weitere Recherche ergänzt wurden. Im ATES-Fall wurde eine oder mehrere Brunnendoubletten in einem 20 m mächtigen Grundwasserleiter betrachtet, im BTES-Fall ein Bohrlochspeicher aus 60 Erdwärmesonden mit je 50 m Länge. Der Betrieb der Anlagen wurde über Zeiträume von jeweils 20 Jahren als saisonale Speicher mit jeweils sechsmonatigen Wärmeinjektionen bzw. Wärmeextraktionen simuliert, wobei variable Temperaturspreizungen bis 80°C betrachtet wurden. Für die Speicher ergeben sich Be-/Entladekapazitäten von 3.760 / 2.850 MWh (ATES) bzw. 1.735 / 1.423 MWh (BTES) pro Jahreszyklus als Größenordnung und durchschnittliche Ein- bzw. Ausspeicherraten von 0,86 / 0,65 MW (ATES) bzw. 0,4 / 0,33 MW (BTES). Die erzielbaren Werte sind stark von der Betriebsführung abhängig und werden im Detail in AP 4.1 erläutert.

Die berechneten Temperatur- und Grundwasser-Strömungsfelder wurden hinsichtlich der aus dem Betrieb resultierenden thermischen und hydraulischen Auswirkungen ausgewertet. Die für das ATES- und das BTES-System berechneten Temperaturfelder zeigen eine kontinuierliche Wärmeausbreitung im Untergrund über den simulierten Nutzungszeitraum von 20 Jahren, die sich aus den jährlichen Wärmeverlusten des Speichers ergibt. Die tatsächlich für die Speicherung genutzten unterirdischen Räume, d. h. die Bereiche, aus denen Wärme innerhalb eines Entladungszyklus zurückgewonnen werden können, betragen ca. 100 x 132 x 20 m bzw. 56 x 56 x 50 m (B\*H\*T) für das ATES bzw. BTES-Szenario, was ca. 262.800 und 155.500 m<sup>3</sup> entspricht. Durch Kartierung der Bereiche mit einer gegenüber der Hintergrundtemperatur erhöhten Temperatur konnten die durch den Speicherbetrieb thermisch beeinflussten Räume quantifiziert werden. Die Größe dieser Räume ist dabei von der Höhe des als signifikant betrachteten Schwellenwerts der Temperaturänderung gegenüber  $\Delta T$  abhängig. Der Vorteil des gewählten Szenarioansatzes ist dabei, dass dieser Schwellenwert variabel gehalten und für eine Reihe von Werten betrachtet werden kann. Mit einem geringen  $\Delta T$  von 1°C ergeben sich thermischen Auswirkungsräume im ATES- und BTES-Szenario, die ca. eine Größenordnung größer sind als die direkt für die Speicherung genutzten Bereiche. Unter Annahme eines Temperaturschwellenwerts von 5°C ergeben sich temperaturbeeinflusste Bereiche, die nur drei- bis viermal größer als die direkt genutzten Bereiche sind. In AP 1.4 wurden Konzepte und Methoden zur Bestimmung der temperaturbeeinflussten Bereiche im Untergrund entwickelt, sodass die hier numerisch ermittelten Räume auch am realen Standort überprüft werden können.

Während für das BTES-Szenario hydraulische Stauschichten betrachtet wurden, sind für das ATES-Szenario neben den thermischen auch die hydraulischen Auswirkungen zu betrachten. Der halbjährlich alternierende Betrieb des Speichers von sommerlicher Heißwasserinjektion und Kaltwasserextraktion zu winterlicher Heißwasserextraktion und Kaltwasserinjektion über Grundwasserbrunnen-Doubletten führt zu einer Beeinflussung der natürlichen Grundwasserfließrichtung und Geschwindigkeit im weiteren Brunnumfeld. Zudem kommt es durch Abnahme der Grundwasserdichte und -viskosität in der Wärmefahne des Speichers zu konvektiven Strömungseffekten. Aus den Szenariensimulationen konnte ermittelt werden, dass die so hydraulisch beeinflussten Räume gegenüber den thermisch beeinflussten Räumen um etwa den Faktor 20 größer sind, wenn als Schwellwert eine Änderung der Fließrichtung oder -geschwindigkeit von 5% gegenüber dem Ausgangszustand angenommen wird. Bei einem fünffach größeren Schwellwert ergeben sich um den Faktor fünf geringere hydraulisch beeinflusste Räume. Im Nahbereich von Wärmeinjektionen ergeben sich Strömungsfokussierungen, die zu lokalen Erhöhungen der Grundwasserfließgeschwindigkeit um bis zu 100% führen können (Beyer et al. 2016), von allerdings geringen Referenzwerten ausgehend. Die hydraulischen Änderungen sind dabei durch die Struktur und das Ausmaß der Heterogenität der hydraulischen Permeabilität beeinflusst, bleiben aber im Grunde erhalten (Popp et al. 2015b).

Anhand von Wärmebilanzen über die simulierten Nutzungszeiträume konnten die Leistungscharakteristika (Speicherkapazitäten und -raten, Rückgewinnungsgrade etc.) der Wärmespeicher für AP 4.1 abgeleitet werden. Anhand von Sensitivitätsstudien wurden die Einflüsse von Untergrundeigenschaften (Permeabilität, Porosität, Wärmeleitfähigkeit und -kapazität, Grundwasserfließgeschwindigkeit etc.) und Systemparametern (Brunnen- bzw. Sondenanzahl und -abstände etc.) auf die Speicherauswirkungen und -leistungen untersucht. Für eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse dieser Untersuchungen sei auf die Anlage „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“ zur oberflächennahen Wärmespeicherung verwiesen.

Hinsichtlich der geomechanischen Auswirkungen des Betriebs von Wärmespeichern wurden linear-elastische Prozessmodelle für die ATES- und BTES-Szenarien betrachtet, um die prinzipielle Durchführbarkeit gekoppelter thermisch-hydraulisch-geomechanischer Auswirkungsanalysen zu demonstrieren und die Effekte der Größenordnung nach abzuschätzen. Anhand von 2D-Schnitten durch die in den Szenariensimulationen berechneten Temperatur- und Druckfelder wurde die geomechanische Reaktion auf diese Zustandsänderung berechnet. Die in den Wärmefahnen thermisch bedingte Expansion und die daraus resultierenden Druck- und Schubspannungen führen zu insgesamt nur geringen Volumendehnungen und Verschiebungen und so zu Hebungen von einigen Millimetern an den Sonden des BTES-Szenarios. Im ATES-Szenario kommt es durch zusätzliche Druckänderungen in Folge des Pumpenbetriebs zu etwa doppelt bis dreifach so großen Hebungen im Nahbereich des warmen Injektionsbrunnens und zu Senkungen in ähnlicher Größenordnung im Bereich des kalten Extraktionsbrunnens (siehe Anlage „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“).

Hinsichtlich der geochemischen und mikrobiologischen Auswirkungen von Temperaturerhöhungen im Grundwasser sollten die in den Laborexperimenten von AP 1.8 und AP 1.9 zu ermittelnden Prozess-Parametrisierungen in die Szenariensimulationen integriert und

räumlich-zeitlich ausgewertet werden. Diese Arbeiten konnten letztendlich nicht durchgeführt werden, da aus den experimentellen Untersuchungen keine generalisiert parametrisierten quantitativen geochemischen Reaktionsmodelle für typische Speicherhorizonte im oberflächennahen Untergrund abgeleitet werden konnten, da sich die geochemische Heterogenität als zu groß herausstellte.

Der zweite Schwerpunkt dieses APs sind Szenariensimulationen zur möglichen Interaktion von Grundwasserschadensfällen mit geothermischen Wärmespeichern. Untersucht werden sollte dabei insbesondere, ob die thermisch-hydraulische Interaktion zu einem verstärkten Austrag von Schadstoffen aus einer NAPL-Quellzone und somit zu einer geänderten Fahnenentwicklung und zu zusätzlichen Risiken für das Grundwasser führen kann und ob sich eine zeitlich veränderliche mikrobielle Aktivität aufgrund erhöhter bzw. zeitlich variierender Temperaturfelder auf die Abbaueffizienz in den Schadstofffahnen auswirkt. In diesem thematischen Kontext stehen auch Zuarbeiten zu den in AP 1.8 durchgeführten Versuchen zur temperaturbeeinflussten Freisetzung von Schadstoffen aus NAPL-Quellzonen. So sollten die in AP 2.4 entwickelten Modellerweiterungen zur a-priori-Optimierung des Designs der Gerinneversuche durch numerische Simulation eingesetzt werden, während die experimentellen Versuchsergebnisse wiederum eine Datengrundlage für die Verifikation der entwickelten Modellansätze darstellen. Diese Projektziele für diesen zweiten Schwerpunkt wurden alle vollumfänglich erreicht.

Anhand detaillierter Vorabsimulationen wurden sehr relevante Erkenntnisse zur Planung des experimentellen Setups hinsichtlich der zu erwartenden Versuchsdauer und der notwendigen räumlichen Auflösung der Beprobung des Gerinnesystems gewonnen. Die Nachsimulation der Experimente erforderte die Entwicklung eines Ansatzes zur Darstellung der Lösungskinetik aus unterschiedlichen NAPL-Blobklassen unter dem Einfluss der Grundwassertemperatur, mit dessen Hilfe eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und der numerischen Simulation sowohl für die reaktiven und temperaturbeeinflussten Stoffe als auch für konservative Tracer erzielt werden konnte (Popp et al. 2016).

Das so verifizierte NAPL-Lösungsmodell wurde anschließend in Szenariensimulationen zur Darstellung der Einflüsse von Wärmespeichern auf die Freisetzung von TCE aus residualen NAPL-Quellzonen (Popp et al. 2015b; Beyer et al. 2016) und dessen Abbau (Popp et al. 2015a; Beyer et al. 2016) angewendet. Hinsichtlich der Schadstofffreisetzungen zeigte sich, dass durch die viskositätsbedingte Zunahme der hydraulischen Durchlässigkeit in den von Wärmespeichern ausgehenden Wärmefahnen eine lokale Zunahme der Durchströmung grundsätzlich zu einem erhöhtem Schadstoffaustrag aus NAPL-Quellzonen führen kann. Dieser hydraulische Effekt wird jedoch von der stoffspezifischen Änderung der Schadstofflöslichkeit mit der Temperatur überlagert, was im Falle von TCE, welches ein Löslichkeitsminimum bei ca. 40°C zeigt (Koproch et al. in prep.; Popp et al. 2016), insgesamt zu einer weitgehenden Kompensation des hydraulischen Effekts führt. Daher wurde, entgegen der allgemeinen Hypothese, effektiv nur eine geringe Zunahme des Schadstoffaustrags im Bereich weniger Prozent beobachtet (Popp et al. 2015b; Anlage „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“).

In der entstehenden Schadstofffahne wurde der temperaturbeeinflusste Abbau von chlorierten Kohlenwasserstoffen wie TCE durch reduktive Dechlorierung untersucht. Neben dem Temperatureinfluss auf die Wachstums- und Abbauraten der dechlorierenden Mikro-

organismen war dabei die temperaturabhängige Freisetzung von organischem Kohlenstoff und dessen fermentativer Umsatz zur Produktion von  $H_2$  als Elektronendonator für die reduktive Dechlorierung sowie um diesen konkurrierende Redoxprozesse zu berücksichtigen. Die Szenariensimulationen zeigten, dass in diesem sehr komplexen System interagierender reaktiver Prozesse die Verfügbarkeit von  $H_2$  aus der Fermentation von organischem Kohlenstoff der maßgeblich limitierende Faktor ist und erst bei sehr hohen Grundwassertemperaturen  $>40^\circ C$  eine erhebliche Freisetzung erfolgt. Diese hohen Temperaturen treten in den simulierten Wärmespeichern jedoch nur temporär und in einem räumlich sehr begrenzten Raum wenige Meter um eine Erdwärmesonde auf, sodass nur geringe Zunahmen des mikrobiellen TCE-Abbaus ermittelt wurden. Diese wiederum kompensierten weitgehend die leicht verstärkte Freisetzung durch verstärkte temperaturinduzierte Lösung aus der Quellzone, sodass sich insgesamt kein nennenswerter Netto-Effekt auf den Schadstoffeintrag ins Grundwasser durch die Hochtemperatur-Wärmespeicherung ergab (Popp et al. 2015b).

Insgesamt sind die Ziele dieses APs mit den oben genannten geringen Einschränkungen erreicht worden. Die simulierten geothermischen Wärmespeicher dienen als Datengrundlage für die Analyse und Dimensionierung von Speicherkapazitäten in AP 4.1 und für die Bestimmung der räumlichen Auswirkungen und des Raumbedarfs einzelner Speicheroptionen, und können somit in AP 4.2 Verwendung finden. Der hier gewählte Szenarioansatz zur numerischen Dimensionierung und Auswirkungsprognose hat sich vollumfänglich bewährt. Für die betrachteten Wärmespeicheroptionen ATES und BTES konnte beispielhaft gezeigt werden, dass sowohl die Speichercharakteristiken als auch die ablaufenden Speicherprozesse und Auswirkungen abgebildet und prognostiziert werden können. Dies gilt mit der Einschränkung, dass das Materialverhalten parametrisiert ist, damit es in den Simulationscode implementiert werden kann. Dies ist für zyklische geomechanische Effekte sowie für die geochemischen Auswirkungen noch nicht im selben Ausmaß erfolgt wie für thermische und hydraulische Effekte. Die grundsätzliche Herangehensweise und Simulationsmethodik steht prinzipiell zur Verfügung und konnte auch experimentell durch Laborversuche bestätigt werden.

(5) AP 3.5 Auswirkung der Kopplung der untersuchten geologischen Speicheroptionen auf die oberirdische Raumplanung unter Berücksichtigung des Aspektes der Energieversorgungsinfrastruktur

Ziel dieses Arbeitspaketes war es, die Ergebnisse der in den AP 3.1 bis 3.4 simulierten Speicherfunktionen und -wirkungen mit dem oberirdischen Planungsraum in Beziehung zu setzen und hinsichtlich ihrer Verträglichkeit mit der bestehenden Raumplanung zu bewerten. Es sollte zusätzlich eine teilprojektübergreifende Methodik zur Abschätzung der energiewirtschaftlichen Potenziale und Eignung der Speicheroptionen in Abhängigkeit von der gegebenen Energieversorgungsinfrastruktur entwickelt werden. Schlussendlich sollten „Präferenzräume mit energiewirtschaftlich nutzbarem Potenzial“ ausgewiesen werden. Hierunter wurden im Projektantrag solche Gebiete verstanden, welche eine Nutzung der entsprechenden unterirdischen Speicheroptionen sowohl aufgrund der vorhandenen (bzw. zukünftig zu entwickelnden) infrastrukturellen Ausstattung als auch aufgrund ihrer Umweltverträglichkeit zulassen. Die hierfür erforderlichen Daten der Speicher-

eigenschaften unterschiedlicher Formationen, wie z. B. Größe, Ausdehnung, Lage, Tiefe, Speicherkapazität etc. sollten aus dem AP 1.1 bereitgestellt werden. Abschließend sollten die Bewertungsergebnisse kartographisch in 2D und 3D visualisiert werden.

Zur Identifikation und Verortung der „Präferenzräume für die energiewirtschaftliche Nutzung“ von Speichern wurden im Rahmen des AP Abschätzungen zur räumlich differenzierten jährlichen Stromerzeugung aus Windkraftanlagen durchgeführt und in einem Raster mit einer räumlichen Auflösung von 1 km<sup>2</sup> in die Voxel-Struktur des ANGUS RIS überführt (Abbildung 1.3.5-1). Dieser Datensatz ermöglicht, in Kombination mit weiteren oberirdischen Energieinfrastruktur- und Raumordnungsdaten, sowie geologischen Informationen, die Eingrenzung von Potenzialräumen für die Speicherung von Strom aus erneuerbaren Energiequellen im Modellgebiet. Für die Identifikation von Präferenzräumen zur Speicherung von Wärme (vgl. AP 3.4), wurde weiterhin ein Geodatensatz zum jährlichen Wärmebedarf des heutigen Gebäudebestands (Raumwärme und Warmwasser) in Schleswig-Holstein erzeugt. Diese räumlich differenzierte Abschätzung basiert auf einem 3D-Gebäudemodell (LoD1) des LVermGeo S-H und quantifiziert Wärmebedarfe und Wärmebedarfsdichten von Wohn- und Nichtwohngebäuden mittels landestypischer Endenergieverbrauchskennwerte je beheizter Nutzfläche (kWh/m<sup>2</sup>) für alle als „beheizt“ klassifizierten Gebäude in Schleswig-Holstein.

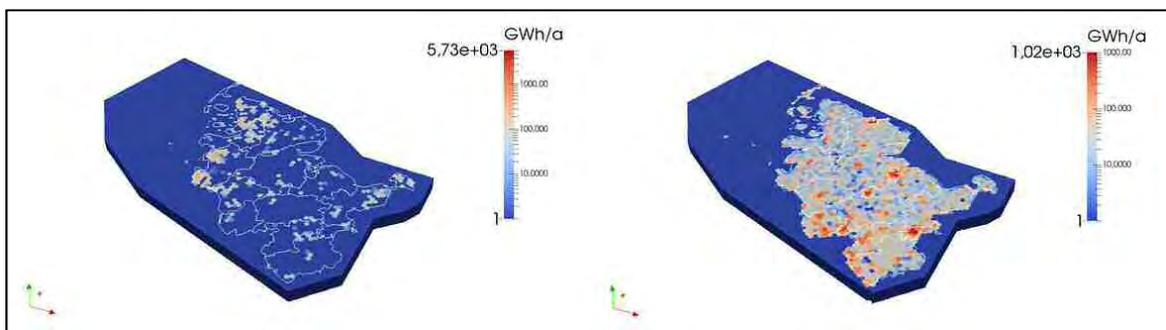


Abbildung 1.3.5-1: Voxelmodelle der verorteten jährlichen Stromerzeugung aus Windkraftanlagen (links) und des räumlich differenzierten Wärmebedarfs von Gebäuden (rechts) im Modellgebiet Schleswig-Holstein.

Im Laufe des Projekts kam es zu der Erkenntnis, dass sich die, in anderen Arbeitspaketen (AP 3) mittels lokalen geologischen Settings und Parametern modellierten, Nutzungs-, Auswirkungs- und Monitoring-Räume einzelner Speicherarten (Bauer et al. 2015) nicht einfach generalisieren und auf Speicher derselben Art in anderen Lokationen im geologischen Untergrund von Schleswig-Holstein übertragen lassen. Zusätzlich waren für Schleswig-Holstein keine landesweit flächenhaft parametrisierten Daten zu Speichereigenschaften von porösen Speichergesteinen (Sandstein) öffentlich verfügbar. Für das Arbeitspaket standen somit nur bereitgestellte Informationen zur Tiefenlage von geologischen Schichtgrenzen und zu den äußeren Geometrien von Salzstöcken zur Verfügung. Es konnte damit keine Prüfung und Bewertung der Umweltverträglichkeit bestimmter Speicherarten vorgenommen werden. Aus diesem Grunde war auch die Realisierung eines UVP-Entscheidungsunterstützungssystems nicht möglich (siehe AP 2.5 / 4.2), da zudem auch rechtlich noch nicht abschließend geklärt ist, bis in welche Tiefen bestimmte Schutzgebietskategorien (Bodenschutz, Naturschutz) wirksam sind (Schulze et al. 2015).

Das im AP 2.5 entwickelte 3D webGIS ermöglicht jedoch eine räumliche Verschneidung der im AP 1.5 zusammengetragenen und im AP 3.5 erzeugten Geodaten zur Energieinfrastruktur, Raumordnung und Geologie unter Beachtung von Grenzwerten bezüglich

Abständen und Entfernungen sowie bezüglich Energieerzeugungs- und Bedarfsdichten in Schleswig-Holstein. Die entsprechenden Grenz- oder Schwellenwerte können dabei von den potenziellen Anwendern des ANGUS RIS mittels Schieberegler selbst festgelegt werden (vgl. AP 2.5).

Es erfolgte so schließlich eine beispielhafte Ausweisung von sogenannten „Potenzialräumen“ für die Speicherung von Druckluft in Kavernen (compressed air energy storage, CAES) innerhalb von (geometrisch) geeigneten Salzstöcken mittels einer selbst gewählten Abfragelogik und mittels recherchierter und selbst definierter Grenzwerte. Die Bewertung der Verträglichkeit der so ermittelten Potenzialräume mit der bestehenden oberirdischen Raumplanung laut Landesentwicklungsplan 2010 und den vier aktuell gültigen Regionalplänen Schleswig-Holsteins, könnte nach einem Export der Abfrageergebnisse durch die zuständigen Mitarbeiter der Planungsbehörde in einem regulären 2D GIS durchgeführt werden (siehe Abbildung 1.3.5-2, sowie Nolde et al. 2016a, Nolde et al. 2016b, ANGUS+ 2017 und Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“).

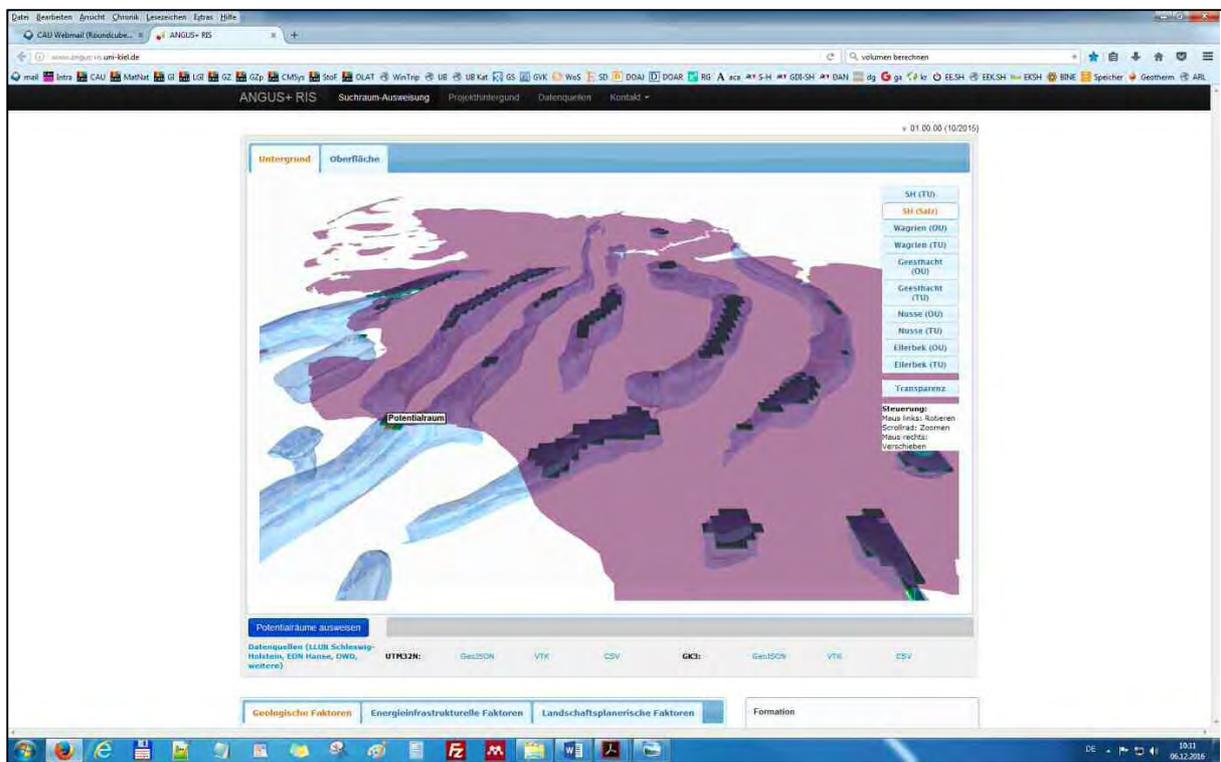


Abbildung 1.3.5-2: Potenzialräume visualisiert im 3D webGIS (dunkel grüne Bereiche), basierend auf einer ersten rein geometrischen Abfrage im Anwendungsfall „Druckluftspeicherung (CAES) in Salzkaavernen“ im Modellgebiet.

#### **II.1.4. AP 4 GROßSKALIGE RAUMPLANUNG DES UNTERGRUNDES MIT MULTIPLEN SPEICHERSZENARIEN**

##### **(1) AP 4.1 Analyse und Dimensionierung der maximalen und optimalen Speicherkapazitäten für Energiestoffe und/oder Wärme anhand der Szenarienanalysen**

Die übergeordnete Zielsetzung des AP 4.1 „Analyse und Dimensionierung der maximalen und optimalen Speicherkapazitäten für Energiestoffe und/oder Wärme anhand der Szenarien-

rienanalysen“ ist die Abschätzung von potenziellen Speicherkapazitäten geologischer Energiespeicher als Synthese aus den im Projekt durchgeführten Szenariensimulationen. Des Weiteren sollen mögliche Beeinflussungen zwischen Energiespeichern abgeschätzt werden sowie geophysikalische Überwachungsmethoden der Speicheroptionen untersucht werden.

Für die Quantifizierung von Speicherkapazitäten von Porengasspeichern wurden Druckluft- und H<sub>2</sub>-Speicher berücksichtigt, CH<sub>4</sub>-Speicher wurden im Rahmen von Vergleichsberechnungen bearbeitet. Für H<sub>2</sub>-Porenspeicher wurden realistisch parametrisierte hypothetische Speicher in einer realen geologischen Antiklinalstruktur betrachtet. Die betrachteten Szenarien unterscheiden sich dabei jeweils in der Speicherkapazität, den Speicherraten und der Anzahl der notwendigen Speicherbrunnen und beruhen auf dem in AP 3.2 beschriebenen Szenario einer einwöchigen Ausspeicherung von etwa 228 GWh.

Die Simulationen zeigen, dass unter Verwendung von 5 Vertikalbrunnen mit einer Filterstrecke von je mindestens 12 m ein H<sub>2</sub>-Speicher eine Kapazität von etwa 41-56 GWh und eine garantierte Ausspeicherleistung von 162-300 MW bereitstellen kann (Pfeiffer et al. 2017). Die Spannbreiten der Speicherkapazität und -leistung ergeben sich dabei aus der geostatistischen Betrachtung der räumlichen Variabilität der hydraulischen Permeabilität. Der so errichtete H<sub>2</sub>-Speicher stellt also nur ca. 18% bis 25% des notwendigen Speicherbedarfs. Der für die Speicherung direkt genutzte unterirdische Raumbedarf beträgt ca. 5 km x 700 m x 20 m (Länge x Breite x Mächtigkeit). Die hydraulischen Auswirkungen (Druckunterschied >5 bar) reichen etwa 2 km von den Speicherbrunnen und stellen die weitreichendsten Auswirkungen dar, da thermische und geochemische Beeinflussungen des unterirdischen Raumes auf den direkt genutzten Speicherbereich sowie dortigen hangenden und liegenden Schichten beschränkt bleiben. Durch die Anordnung der Brunnen ergibt sich somit ein hydraulisch beeinflusster Bereich von näherungsweise etwa 3 km im Radius um den mittleren Speicherbrunnen. Um die Speicherkapazität zu erhöhen, kann sowohl die verfügbare Gasmenge als auch die Anzahl der Speicherbrunnen bzw. der Filterlänge erhöht werden. Wird der Speicher mit 11 Horizontalbrunnen mit einer Filterstrecke von je 300 bis 425 m in derselben Formation errichtet, können eine Kapazität von 205-233 GWh und eine garantierte Ausspeicherleistung von 744-1.147 MW während der einwöchigen Ausspeicherperiode bereitgestellt werden (siehe Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“). Damit werden 90% bis 102% des notwendigen Speicherbedarfs gedeckt. Der im Speicherbetrieb direkt genutzte Raum ist für diesen Ausbau bei ca. 7 km x 750 m x 20 m. Hydraulische Auswirkungen gemessen an einer Druckänderung von mindestens 5 bar reichen maximal 2,5 km ausgehend von den Speicherbrunnen. Durch die Anordnung der Speicherbrunnen ergibt sich hierdurch ein hydraulisch beeinflusster Bereich mit einem Radius von maximal 4 km um den mittleren Speicherbrunnen. Somit wird durch eine veränderte Speichererrichtung mit mehr und längeren Speicherbrunnen in derselben geologischen Formation das Vierfache der Speicherkapazität und der Speicherraten erreicht. Die räumliche Vergrößerung des Speichers sowie des Raumbedarfs für die induzierten hydraulischen Auswirkungen beträgt dabei nur ca. 50%. Werden anderen Drucklimits definiert verändert sich folglich auch der betrachtete hydraulisch beeinflusste Raum, wobei im Falle des großen H<sub>2</sub>-Speichers beispielsweise Druckänderungen größer 1 bar in Entfernungen von bis zu 12 km erreicht werden.

Die mögliche Beeinträchtigung des H<sub>2</sub>-Speichers bei einer kombinierten Nutzung der Speicherformation wurde anhand einer zusätzlichen Sole-Verpressung in derselben Speicherschicht auf der gegenüberliegenden Seite der für die Gasspeicherung genutzten Antiklinale in ca. 10 km Entfernung untersucht. Das Sole-Injektionsvolumen und die Injektionsdauer wurden dabei aus den publizierten Daten der Solung des Kavernenspeichers in Huntorf entnommen (Crotogino et al. 2001). Es zeigt sich, dass selbst die großräumigen Druckauswirkungen des Speichers und der Soleinjektion sich im getesteten Szenario nur geringfügig durch wenige bar Druckanstieg im Bereich zwischen dem Speicher und der Soleinjektion überlagern. An den jeweiligen Injektionsbrunnen ist der Druckanstieg als Auswirkung der anderen Nutzung jeweils so gering, dass sich keine gegenseitigen Beeinträchtigungen und Limitierungen ergeben.

Für die Druckluftspeicherung wurde eine synthetische Antiklinale mit typischen hydraulischen Eigenschaften der Rhät-Sandsteine als potenzielle Speicherformation parametrisiert (Wang & Bauer 2017; siehe auch AP 3.2). Der simulierte Speicherbetrieb wurde an das Druckluftspeicherwerk Huntorf angepasst. Aus den Betriebsbedingungen ergeben sich zwei Ausspeicherperioden von je 6 Stunden pro Tag, während deren Druckluft mit einer Rate von 417 kg/s zur Verfügung gestellt werden muss um eine Leistung von 321 MW zu erzeugen. Zunächst wurde mit Hilfe einer Designstudie die notwendige Anzahl der Speicherbrunnen ermittelt, welche abhängig von der genauen Parametrisierung der Speicherformation zwischen 3 und 20 liegt. Im regulären Speicherbetrieb liegt die Kapazität des Druckluftspeichers bei 1.926 MWh. Über kurze Zeiträume kann der simulierte Druckluftspeicher eine höhere Leistung zur Verfügung stellen, wobei beispielsweise eine durchschnittliche Leistung von 458 MW in den ersten 30 Minuten der Ausspeicherung abgerufen werden kann, welche bei längerem Betrieb aufgrund des Druckabfalls im Speicher sinkt.

Um Nutzungskonkurrenzen an einem Standort durch verschiedene Formen der geologischen Energiespeicherung zu untersuchen, wurden zusätzlich eine H<sub>2</sub>- sowie eine CH<sub>4</sub>-Speicherung für dieselbe Antiklinalstruktur simuliert. In den Fällen der chemischen Energiespeicher wurde auf das bereits im Abschnitt zu den H<sub>2</sub>-Speichern beschriebene Szenario mit Extraktionsperioden von 7 Tagen zurückgegriffen wobei der Speicherbetrieb durch jeweils 5 Vertikalbrunnen mit einer individuellen Zielextraktionsrate von 1 mio. sm<sup>3</sup>/d erfolgte. Die in derselben Antiklinalstruktur erreichbaren Speicherkapazitäten durch H<sub>2</sub>- oder CH<sub>4</sub>-Speicher sind aufgrund des höheren Energieinhalts des Speichergases deutlich größer und ergeben sich zu ca. 61 GWh bzw. ca. 203 GWh, im Vergleich zu ca. 1,9 GWh des Druckluftspeichers. Im direkten Vergleich zeigt sich darüber hinaus, dass die Druckluftspeicherung einen größeren direkt genutzten Raum aufgrund der notwendigen hohen Extraktionsrate und dem damit einhergehenden großen Kissengasvolumen verursacht. So ergibt sich der direkt genutzte Raum des Druckluftspeichers näherungsweise aus einem Zylinder mit einem Radius von etwa 500 m und einer Mächtigkeit von 20 m (siehe auch AP 3.2). Im Vergleich dazu liegen die Radien der Gasphase im H<sub>2</sub>- und CH<sub>4</sub>-Speicher bei nur ca. 380 m bzw. 360 m. Bezogen auf das direkt genutzte Reservoirvolumen weisen die simulierten chemischen Speicher daher eine um mehr als 30-fach größere Energiedichte auf als der Druckluftspeicher. Der CH<sub>4</sub>-Speicher liegt dabei bei etwa dem dreifachen des H<sub>2</sub>-Speichers. Bei einer Bewertung der Speicheroptionen sollte allerdings nicht nur die hohe Speicherkapazität der chemischen Energiespeicherung durch H<sub>2</sub> oder CH<sub>4</sub> berücksichtigt werden, sondern auch der benötigte Speicherbetrieb und das Speicherszenario, da sich für kurzfristige Zyklen Druckluftspeicher dennoch eignen können.

Im Rahmen des ANGUS+ Projektes wurden Kavernenspeicher für Gase primär in Bezug auf das auftretende Konvergenzverhalten und nicht im Sinne einer Quantifizierung von Speicherkapazitäten untersucht. Dies ist auch eine Reaktion auf das gleichzeitig durchgeführte Projekt InSpee, in dem diese Kapazitäten unter Federführung der BGR spezifisch untersucht wurden, sodass sich hier keine direkte Notwendigkeit mehr ergab. Die im Zuge dieser Untersuchungen durchgeführten Szenariensimulationen geben dabei Aufschluss über Konvergenzraten von Salzkavernen in Abhängigkeit von den gefahrenen Betriebsbedingungen. Als Resultat der Konvergenz der Kavernen ergibt sich eine Reduktion des nutzbaren Hohlraumvolumens mit direkter Rückwirkung auf die jeweilige Speicherkapazität. In den durchgeführten Simulationen zeigt sich lediglich eine geringe Reduktion der Kavernenkapazität auf etwa 96% nach 10 Jahren Betriebsdauer (siehe Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“).

Für die Quantifizierung von Speicherkapazitäten für Wärme wurden die auf den Szenariensimulationen von AP 3.4 basierenden Varianten saisonaler Aquifer-Hochtemperaturwärmespeicherung (ATES) und Erdsonden-Hochtemperaturwärmespeicherung (BTES) betrachtet. Die Simulationen wurden bezüglich der pro Speicherzyklus maximal be- und entladbaren Wärmemengen, die die Speicherkapazität pro Zyklus darstellen, sowie den daraus resultierenden Rückgewinnungsgraden und den erzielbaren Speicherleistungen ausgewertet.

Für das BTES-Szenario wurden über den simulierten Nutzungszeitraum von 20 Betriebsjahren kumulativ insgesamt 37.000 MWh Wärme beladen und 29.000 MWh entladen, wodurch sich ein Wärmeverlust von rund 22% ergibt. Dieser verbleibt als thermische Auswirkung im Untergrund und wird über den Raumbedarf mit quantifiziert. Pro Sommer- bzw. Winterhalbjahr sind ca. 1.735 MWh Beladungs- und ca. 1.423 MWh Entladungskapazität erreichbar, was zyklengemittelten Speicherleistungen von rund 0,4 bzw. 0,33 MW entspricht. Der Wärmerückgewinnungsgrad liegt langfristig bei ca. 82%. Diese Speicherkapazitäten ermöglichen überschlägig die Wärmeversorgung von rund 90 bzw. 131 Wohneinheiten in typischen Ein- bzw. Mehrfamilienhäusern in Schleswig-Holstein mit gutem Sanierungsstand.

Auf Grundlage der Quantifizierung der durch den Speicherbetrieb thermisch genutzten Untergrundvolumina (d. h. der Nutzungsräume; siehe AP 3.4) wurde basierend auf den Quantifizierungen des Wärmebedarfs städtischer Quartiere am Beispiel Kiels (AP 3.5; siehe Schwanebeck 2016) zudem eine einfache Abschätzung des Raumbedarfs zur Versorgung von städtischen Quartieren mit Wärme aus Wärmespeichern vorgenommen. Für einen Stadtteil mit mittlerem jährlichem Wärmebedarf in Höhe von ca. 40.000 MWh/km<sup>2</sup> (Einfamilienhausbebauung) ergab sich unter der Annahme eines Deckungsanteils durch Wärmebereitstellung über saisonale Wärmespeicher von 25% aus Solarthermie eine Anzahl von insgesamt sieben benötigten BTES-Systemen, jeweils mit der in AP 3.4 dargestellten Raumbeanspruchung. Dieser Raumbedarf beträgt ca. 1,1% der obersten 100 m des „oberflächennahen“ städtischen Untergrundes in diesem Quartier.

Für das ATES-Szenario wurden innerhalb der simulierten Nutzung über 20 Jahre kumulativ insgesamt 74.850 MWh Wärme beladen und 56.400 MWh entladen (ca. 25% Wärmeverlust). Die Beladungs- und Entladungskapazitäten entsprechen ca. 3.763 bzw. 2.850 MWh (76% Rückgewinnungsgrad), die zyklengemittelten Be- und Entladungslei-

stungen betragen somit 0,86 bzw. 0,65 MW. Diese Speicherkapazitäten ermöglichen überschlägig die Wärmeversorgung von rund 181 bzw. 270 Wohneinheiten in Ein- bzw. Mehrfamilienhäusern. Der unterirdische Raumbedarf zur anteiligen Wärmeverorgung eines städtischen Quartiers ergibt sich unter den oben genannten Rahmenbedingungen zu 3,2% des oberflächennahen Untergrunds. Die ATES-Speicher weisen aufgrund der weiterreichenden hydraulischen Beeinflussungen also einen etwas größeren Raumbedarf auf als die BTES-Systeme.

Die übergeordneten Ziele von AP 4.1 sind damit im Wesentlichen erreicht worden. Anhand der Beispiele der Druckluft- und H<sub>2</sub>-Speicher für Porengasspeicher sowie für BTES- und ATES-Wärmespeicher konnte die Anwendbarkeit der entwickelten Simulationethodik erfolgreich gezeigt werden. Die im Projekt entwickelte Methodik kann Speicherkapazitäten, Speicherraten, Speicherverluste und Auswirkungen der Speicher ortskonkret und unter jeweils realistischen Nutzungsszenarien und Betriebsführungen quantifizieren. Auch können der sich daraus ergebende Raumbedarf und die beeinflussten unterirdischen Räume konkret für einzelne Szenarien, sowohl für Einzelspeicher als auch bei Konkurrenz von zwei Optionen, bestimmt werden. Die vorgestellte Methodik eignet sich auch zur Abschätzung von Speicherpotenzialen verschiedener Speicheroptionen an einem Standort und ermöglicht somit den Vergleich zwischen den einzelnen Nutzungsoptionen und der Nutzungskonkurrenz. Es zeigt sich, dass die konkreten Potenziale stark vom betrachteten Betriebsszenario, der Art der Speichernutzung und den ortskonkreten Gegebenheiten, wie beispielsweise den am Standort vorherrschenden geologischen Bedingungen und der Energienachfrage, abhängen. Für die hier untersuchten Szenarien der Speicherung für den Stromsektor sowie den urbanen Wärmesektor konnte der Anteil des jeweils benötigten Untergrundes quantifiziert werden. Es zeigt sich, dass in diesen Fällen jeweils der unterirdische Raum genügend Potenzial für die Nutzung geologische Energiespeicher im großen Maßstab bietet. Die Untersuchungen zur Anwendung geophysikalischer Untersuchungsmethoden wurden im Rahmen der Analyse induzierter Effekte durchgeführt und somit in den entsprechenden Berichtsteilen bereits dargelegt. Die hier beschriebenen Arbeiten sind in den genannten Publikationen sowie in den Anlagen „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“ und „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“ näher ausgeführt.

(2) AP 4.2 Kopplung der untersuchten geologischen Speicheroptionen unter Berücksichtigung der bestehenden und geplanten oberirdischen Raumordnung, insbesondere bestehender Schutzgebiete

Das Ziel dieses Arbeitspaketes war es, die Ergebnisse der Modellberechnungen zu den Nutzungs-, Auswirkungs-, und Monitoring-Räumen der einzelnen Speicherarten (AP 3.1 bis 3.4 und AP 4.1) mittels räumlicher Optimierungsverfahren in einem Entscheidungsunterstützungssystem (AP 2.5) in Verbindung mit den vorhandenen ober- und unterirdischen Schutzgütern und der oberirdischen Raumplanung zu bringen und mögliche Auswirkungen auf diese zu bewerten. Es sollten so energiewirtschaftlich nutzbare und im Einklang mit den Zielen des Natur- und Umweltschutzes sowie denen der Raumplanung stehende, unterirdische Energiespeichergebiete ausgewiesen werden.

Im Laufe des Projekts kam es zu der Erkenntnis, dass sich die, in den anderen Arbeitspaketen (AP 3) mittels lokalen geologischen Settings und Parametern modellierten, Nutzungs-, Auswirkungs- und Monitoring-Räume einzelner Speicherarten (Bauer et al. 2015) nicht einfach generalisieren und auf Speicher derselben Art in anderen Lokationen im geologischen Untergrund von Schleswig-Holstein übertragen lassen. Es konnte somit keine Prüfung und Bewertung der Umweltverträglichkeit bestimmter Speicherarten an bestimmten Orten im Modellgebiet vorgenommen werden. Aus diesem Grunde war auch die Realisierung eines UVP-Entscheidungsunterstützungssystems nicht möglich (siehe AP 2.5 und 3.5), da zudem auch rechtlich noch nicht abschließend geklärt ist, bis in welche Tiefen bestimmte Schutzgebietskategorien (Bodenschutz, Naturschutz) wirksam sind (Schulze et al. 2015).

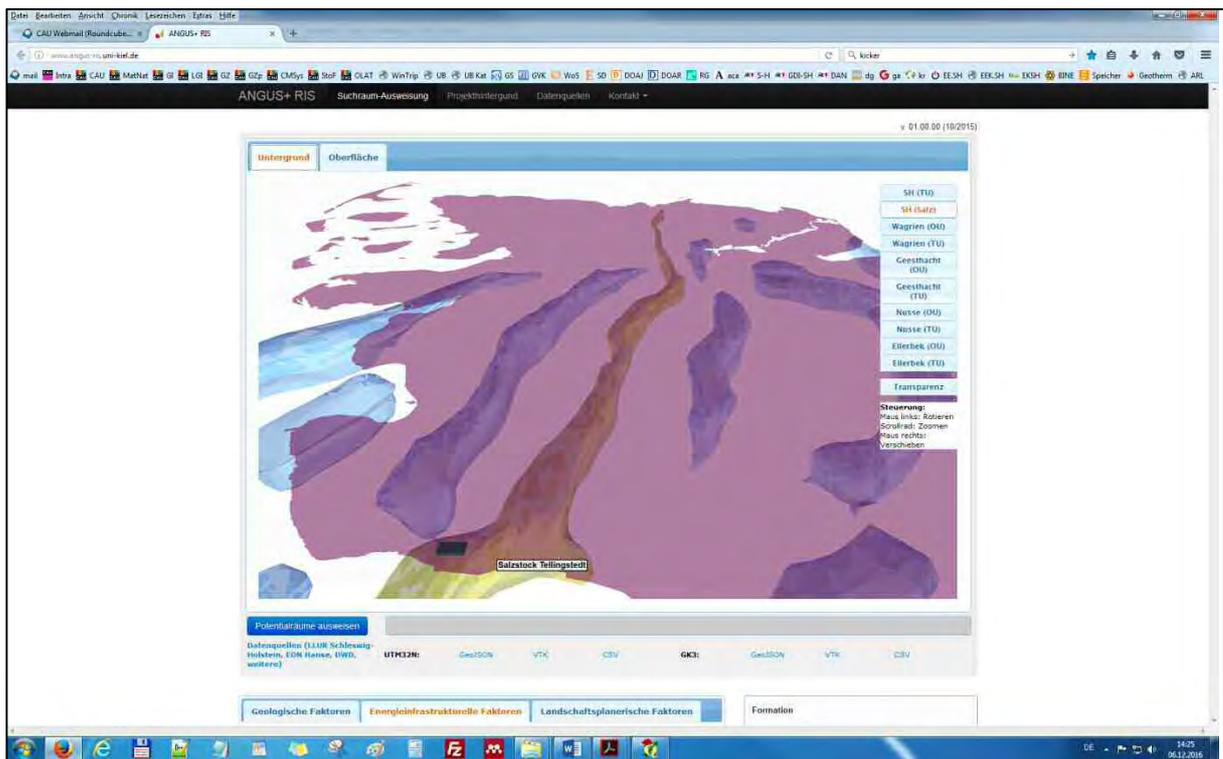


Abbildung 1.4.2-1: Potenzialräume für Druckluftspeicherung (CAES) in Salzkavernen (dunkelgrüne Voxel) im Südwesten von Schleswig-Holstein als Ergebnis bei zusätzlicher Berücksichtigung von Geodaten zur Raumplanung und Energieinfrastruktur bei der Abfrage im 3D webGIS.

Die verfügbaren Geodaten aus dem Landesentwicklungsplan 2010 und zu den relevanten Gebietskategorien aus den Regionalplänen Schleswig-Holsteins (Vorrang- und Vorbehaltsgebiete für Grundwasser und Naturschutz) konnten zusammen mit weiteren Geodaten zu Nationalparks sowie Naturschutz- und Landschaftsschutzgebieten der EU (vgl. AP 1.5) in das ANGUS RIS integriert werden. Am Beispiel des Anwendungsfalls „Druckluftspeicherung (CAES) in Salzkavernen“ wurden die Informationen zur Lage und Ausdehnung der Gebiete bei der Abfrage von Potenzialräumen berücksichtigt (siehe Nolde et al. 2016a, Nolde 2016b und ANGUS+ 2017).

Neben der direkten Auswertung und Visualisierung im ANGUS RIS erlaubt die Exportfunktion des 3D webGIS, die Abfrageergebnisse als GeoJSON-Datei direkt in proprietäre oder frei verfügbare Desktop-GIS-System einzubinden (vgl. AP 2.5 und ANGUS+ 2017). Dies ermöglicht potenziell den räumlichen und inhaltlichen Abgleich von ermittelten Potenzialräumen für Energiespeicher mit der vorhandenen Raumordnung und deren Ziele

und Grundsätze durch die Mitarbeiter der Planungsbehörde, sowie die Integration der Potenzialräume in die in Schleswig-Holstein anstehende, regelmäßige Überarbeitung und Aktualisierung der Raumpläne.

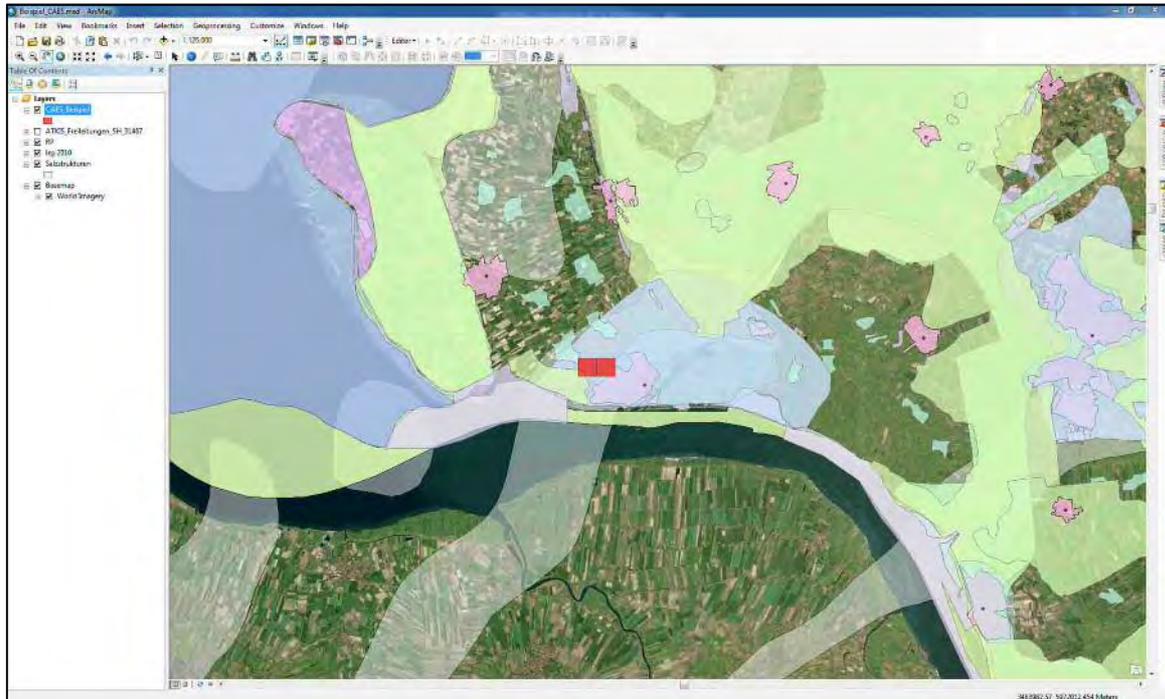


Abbildung 1.4.2-2: Einbindung der exportierten Potenzialräume (rote Rasterzellen) in das proprietären GIS „ArcMap“ in Kombination mit Geodatenätze zur Geologie (Salzstrukturen) und Raumplanung (Landesentwicklungsplan, Regionalpläne) über einem Satellitenbild im Südwesten von Schleswig-Holstein.

### (3) AP 4.3 Entwicklung von Methoden zur Datenintegration und Datenvisualisierung (Virtuelle Realitäten) für die Raumplanung des Untergrundes

Ein wesentliches Ziel dieses Arbeitspaketes war es, Standards bezüglich der Attributierung und der Metadaten für die datenmäßige Abbildung der räumlichen Objekte und des Planungsraumes in dem im AP 2.5 zu entwickelnden Server-GIS-System festzulegen, sowie für den Datenaustausch, die kartographische Abbildung und die Visualisierung der im Server-GIS vorgehaltenen Daten sogenannte Geodatendienste oder WMS (Web Map Services) in entsprechender ISO-Konformität bereitzustellen. Für die Beschreibung der Attribute der erfassten Datensätze zur Energieinfrastruktur und zur Raumplanung siehe AP 1.5. Die verfügbaren Geodatenätze wurden zur Integration in das Server-GIS aus ihren unterschiedlichen Ausgangsformaten in eine einheitliche, dreidimensionale Datenstruktur (Voxelmodelle) überführt. Da die angedachten Geodatendienste für die Bereitstellung der Ergebnisse im 3D webGIS durchgeführter Auswertungen den folgenden planerischen Workflow und die Zugänglichkeit der Ergebnisse unnötig komplex gestaltet hätten, wurde eine einfachere Datenexport-Funktion zum Download der Auswertungsergebnisse aus dem 3D webGIS implementiert. Ein Export bzw. Download ist in den gängigen Visualisierungs- und GIS-Formaten VTK, GeoJSON und CSV in zwei, für Schleswig-Holstein üblichen, Koordinatensystemen (UTM32N und Gauß-Krüger GK3)

möglich (siehe Abbildung 1.4.3-1). Zur detaillierten Beschreibung der Umsetzung des 3D webGIS und dessen Anwendung siehe Schlussberichte zu AP 2.5 und AP 3.5, sowie Nolde et al. (2016a; 2016b), ANGUS+ 2017 und Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“.

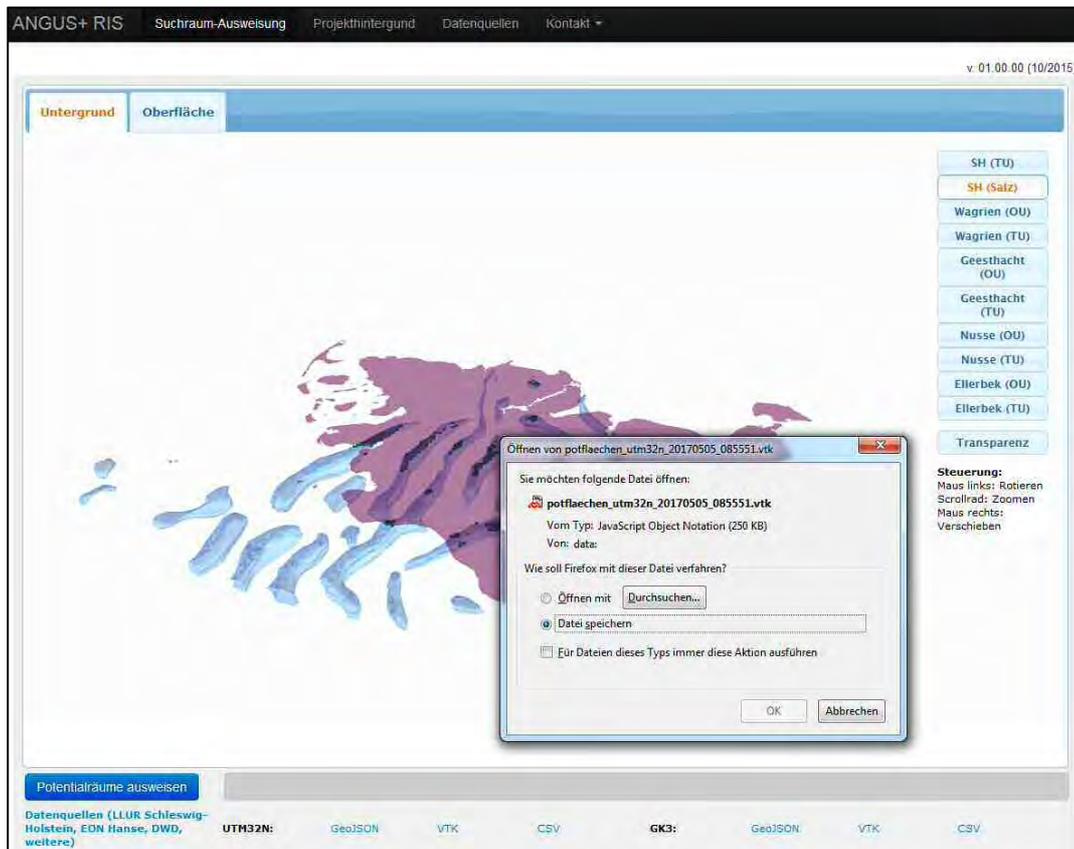


Abbildung 1.4.3-1: Nutzung der Datenexport-Funktion im 3D webGIS am Beispiel des Formats VTK im Koordinatensystem UTM32N.

Die generierten 3D webGIS-Daten können in aufwändigere Visualisierungsanwendungen und virtuelle Realitäten konvertiert werden, die ein nützliches Instrumentarium zur Erhebung sowie Analyse heterogener und komplexer Daten darstellen. Dieses dient sowohl einem besseren Prozessverständnis als auch der Kommunikation wissenschaftlicher Erkenntnisse an andere Wissenschaftler und an die Öffentlichkeit (Wissenstransfer; Akzeptanzvermittlung). Es wurden synoptische 3D-Visualisierungen von Strukturen und Ergebnissen von in ANGUS+ untersuchten geotechnologischen Anwendungen entwickelt, die auf eine Vielzahl unterschiedlicher Quellen zurückgreifen. Ein Fokus lag dabei auf dem Strukturmodell von Schleswig-Holstein, das die geologischen Schichten sowie die Salzformationen (aus geophysikalischen Erkundungen) ebenso darstellt, wie mögliche Salzkavernenstandorte (stochastisch generiert) und die numerischen Ergebnisse (Temperatur, Spannungsfelder) zyklischer Be- und Entladeszenarien bei der Speicherung gasförmiger Energieträger in diesen Salzkavernen.

Nutzer können interaktiv in den Visualisierungen navigieren, sich zu interessierenden Orten bewegen, zwischen zahlreichen Speicherszenarien wechseln und die Darstellung zeitabhängiger Datenreihen steuern. Die im Rahmen von ANGUS+ entwickelten Workflows, Algorithmen und Softwarekomponenten gestatten synoptische 3-D Visualisierungen in stationären Systemen, wie dem TESSIN VISLab des UFZ, die Nutzung mobiler

Projektoren (z. B. für die Präsentation auf Konferenzen, Workshops oder Arbeitstreffen von Projektpartnern) sowie mit Datenhelmen (head-mounted display – HMD). Details sind in der Anlage „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“ dargestellt.

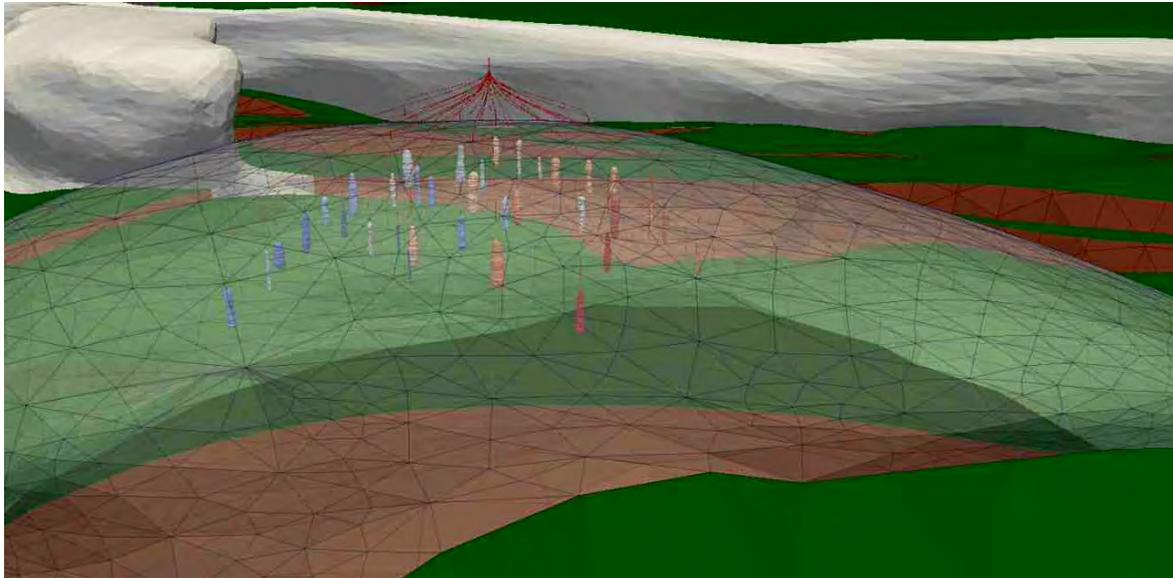


Abbildung 1.4.3-2: Ausschnitt aus der 3D-Visualisierung eines hypothetischen Kavernenfeldes in einem Salzstock in Schleswig-Holstein (Grafik: Lars Bilke, Visualisierungszentrum des UFZ).

Mit der Definition von Standards für die Aufbereitung, Speicherung und Verarbeitung heterogener Daten aus unterschiedlichen Quellen für den unterirdischen Raum und darin enthaltener Objekte im Rahmen eines Server-GIS-Systems sowie der Entwicklung von Workflows und Softwarekomponenten für eine 3D-Visualisierung dieser Daten wurden die Projektziele in diesem Arbeitspaket vollständig erreicht. Die aufgestellten Regeln für die Attributierung einzelner Objekte im unterirdischen Raum und die Beschreibung von Metadaten sowie die Systematisierung von Geodatendiensten für Datentransfer und Abbildung der im Server-GIS vorgehaltenen Daten schaffen die Grundlage für die effiziente und nutzerfreundliche Gestaltung von GIS-basierten Instrumentarien zur Raumplanung des Untergrundes. Mit der Möglichkeit der flexiblen 3D-Visualisierung auf einer Reihe unterschiedlicher Plattformen wird die Zugänglichkeit für eine zielgruppenorientierte Problem-, Prozess- sowie Ergebnisdarstellung und -diskussion entscheidend verbessert. GIS-basierte Planungsworkflows und 3D-Datenvisualisierung für die unterirdische Raumplanung wurden mit den Projektergebnissen für einen großen Nutzerkreis aus den Bereichen Forschung, Industrie und Behörden anwendungsfreundlich aufbereitet.

(4) AP 4.4 Erstellung von Leitfäden zur optimierten Raumplanung des tiefen geologischen Untergrundes einschließlich seiner Überwachung, und zur Nutzung des oberflächennahen geologischen Untergrundes im Hinblick auf die Energiespeicherung

Das Ziel des Arbeitspaketes war zum einen die Erstellung eines „Leitfadens zur Optimierte Raumplanung des tiefen geologischen Untergrundes“, wie dies im Meilenstein M 4.4.1 des Verbundantrags ANGUS+ definiert war. Da sich im Zuge der Bearbeitung des Projekts und im Austausch mit anderen Projekten, wie beispielsweise einem UBA-Projekt zur unterirdischen Raumplanung, sowie mit Vertretern der Industrie, der Landesämter und von Raumplanern verdeutlichte, dass aus dem ANGUS+-Forschungsprojekt und den darin enthaltenen Arbeiten heraus kein Leitfaden im eigentlichen Sinne entstehen kann, der auf eine Unterstützung bei der Schritt-für-Schritt-Bearbeitung abzielt und diese anleitet, wurde von dem Begriff „Leitfaden“ Abstand genommen. Stattdessen wurde der zutreffendere Arbeitstitel „Konzepte und Methoden zur quantitativen Ableitung des Raumbedarfs untertägiger Energiespeicher“ gewählt. Als Hauptadressaten des Kompendiums wurden Vertreter von Ministerien und insbesondere deren Landesentwicklungs- und Raumplanungsabteilungen, geologischen Landesämtern und anderen Fachbehörden sowie auch Nichtregierungsorganisationen und Industrieunternehmen mit einschlägiger Ausrichtung identifiziert. Eine Gliederung des Kompendiums wurde wie folgt festgelegt:

1. Einleitung
2. Möglichkeiten der Energiespeicherung und weitere Nutzungen im geologischen Untergrund
3. Quantifizierung von Auswirkungen im geologischen Untergrund
4. Methodik zur Simulation der Energiespeicherung im geologischen Untergrund
5. Geo-Datenlage und technische Randbedingungen im Kontext der Energiewende
6. 3D-Geoinformationssysteme und VR-Visualisierung
7. Typszenarien zur Energiespeicherung
8. Gegenseitige Beeinflussung von Nutzungsarten
9. Leckage von Gasen oder Sole in oberflächennahe Aquifere
10. Monitoring
11. Empfehlung für eine Raumplanung des Untergrundes

Die Erarbeitung eines solchen Leitfadens bzw. Kompendiums erwies sich darüber hinaus als deutlich zeitaufwändiger und mit deutlich mehr Koordinationsbedarf und Abstimmungsbedarf verbunden, als dies bei der Antragstellung vorhergesehen wurde. Das zunächst gesteckte Ziel zur Fertigstellung der Erstentwürfe der einzelnen Kapitel im Frühjahr 2016 konnte daher nicht eingehalten werden, woraufhin u. a. die Projektlaufzeit um sechs Monate (bis zum 30.06.2017) kostenneutral verlängert werden konnte. Bis zum Jahresende 2016 wurden Entwürfe zu den Kapiteln 2, 4, 5, 6, 9 und 10 bei der Projektkoordination eingereicht. Insbesondere der Abschluss der Kapitel zur Ergebnisverwertung der numerischen Simulationen (siehe AP 3.2), in welchen Typszenarien zur Energiespeicherung (Kap. 7) sowie eine gegenseitige Beeinflussung von Speichermaßnahmen (Kap. 8) untersucht wurde, verzögerte sich jedoch weiter erheblich. Daher konnte kein druckreifes Kompendium zum Abschluss des ANGUS+ Vorhabens am 30.06.2017 vor-

bereitet werden. Statt dessen wird diesem Bericht eine vorläufige Version als Anlage beigelegt, welche die wesentlichen inhaltlichen Kapitel 2-7 und 9-10 enthält, die sowohl die entwickelte Methodik darstellt, die Erkenntnisse zur Datenlage beschreibt und auswertet die wesentlichen Typszenarien zur Energiespeicherung enthält. Im Verlauf des nächsten halben Jahres wird dieses Kompendium fertiggestellt werden, da dann auch der Projektpartner Christian-Albrechts-Universität zu Kiel zum Jahresende 2017 abschließend berichtspflichtig ist. Als wesentliche Erkenntnisse lassen sich folgende Kernaussagen festhalten:

- Anhand von synthetischen Szenariensimulationen konnte eine Methodik zur quantitativen Bestimmung der Raumbeanspruchung von geologischen Energiespeichern (Massen- als auch Wärmespeicher) entwickelt und als anwendbar gezeigt werden.
- Geologische Parameter sind in der Regel nicht eindeutig ortsspezifisch definierbar, so dass Unsicherheiten in Wertebereichen und räumlichen Variabilitäten der Parameterwerte bestehen und bei der Modellparametrisierung, beispielsweise in Form von Sensitivitätsstudien und geostatistischen Ansätzen, zu berücksichtigen sind, wobei jedoch signifikante Unterschiede zwischen den der Datenverfügbarkeit in einzelnen Parametergruppen bestehen.
- Geo-Daten zur Landoberfläche mit Bezug zur Energiespeicherung, Energieinfrastruktur und Raumplanung ist oft räumlich exakt, aber teilweise auch inhaltlich inkonsistent. Diese Vielfalt an Akteuren (Ministerien, Landesämter, private Unternehmen, gemeinnützige Vereinigungen) und Datenformaten erschwert dabei eine rasche und einheitliche Zusammenstellung der benötigten Geo-Daten.
- Technische Parameter, die maßgeblich die Dimensionierung und auch die generelle Anwendbarkeit einzelner Speicheroptionen an gegebenen Standorten beeinflussen, sind durch das Anlagendesign vorgegeben, aber oft nur eingeschränkt bekannt bzw. definiert.
- Ein 3D-GIS Planungswerkzeug kann selbst mit den momentan oft nur begrenzt öffentlich zugänglichen Geo-Datensätzen zur Geologie und zur Energieinfrastruktur erste Auswertungsergebnisse bezüglich potenziell geeigneter Räume für die unterirdische Energiespeicherung im Rahmen der Energiewende liefern. Potenziell als geeignet angesehene Räume können auch mit Hilfe von VR-Applikationen unterstützend visualisiert werden.
- Die für die Prognose der thermischen und hydraulischen Auswirkungen notwendigen numerischen Simulationsprogramme sind für viele der zu betrachtenden Prozesse vorhanden, und Szenarien zur Berechnung von Wirkungsanalysen der unterirdischen Energiespeicherung sind rechenbar. Für mechanische, mehrphasenhydraulische und geochemische Simulationen fehlen teilweise sowohl die Simulationsmethoden als auch die benötigten Eingangsdaten für die Modelle
- Geophysikalische Monitoringmethoden, beispielsweise das seismische Verfahren mit Wellenforminversion, erscheinen geeignet zur Überwachung von unterirdischen Gasspeichern.

Als zweites Ziel des Arbeitspaketes sollte ein „Kompendium wissenschaftlich-technischer und juristischer Aspekte zur Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund“ erarbeitet werden. In diesem sind die wesentlichen innerhalb von ANGUS+ erarbeiteten und zusammengestellten Inhalte zu diesem Thema mit Fokussierung auf eine Hochtemperaturwärmespeicherung in urbanen Ballungsräumen mit den folgenden Schwerpunkten zusammengefasst: (1) Überblick zu bestehenden unterirdischen Wärmespeichern in

Deutschland und Nachbarländern, (2) Juristisches Gutachten „Vereinbarkeit von Klima- und Grundwasserschutz am Beispiel der oberflächennahen Wärmespeicherung“, (3) Thermische, Hydraulische, chemische, mikrobiologische und mechanische Auswirkungen, (4) Wechselwirkungen mit anderen Nutzungen des Untergrundes wie z. B. Altlastensanierung oder Trinkwasserversorgung, (5) Erkundungs- und Monitoringempfehlungen, (6) Parametersammlung für Prognosesimulationen (hydraulische, chemische, mineralogisch-petrochemische, thermische und mechanische Parameter). Als Fazit lassen sich u. a. folgende Kernaussagen festhalten:

- Es existieren keine wissenschaftlich hinreichend begründete standortübergreifende Ausschlusskriterien für Wärmespeicherung in Ballungsräumen
- THMC-Prozesse (Therm., Hydr., Mechan., Chem. Auswirkungen) sind innerhalb der Planung eines oberflächennahen Wärmespeichers standortspezifisch zu bewerten und in ein erforderliches Wärme-/ Kühlungsmanagement zu integrieren
- Nur ein relativ geringer Anteil des urbanen Untergrunds wäre erforderlich, um größere Mengen des städtischen Wärmebedarfs (z. B. 25%) durch Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund abzudecken.
- Selbst für den Fall, dass im Untergrund kritische Änderungen (THMC) durch eine Wärmespeicherung auftreten, würden diese sich auf räumlich begrenzte Bereiche und zeitlich auf die Betriebsdauer zuzüglich einer Abkühlungsphase von einigen Jahren beschränken.
- Auswirkungen auf das Grundwasser/Umwelt müssen in Relation zu den Auswirkungen anderer Technologien (Braunkohle, Biogas, Erdgas, Öl etc.) bewertet werden. Hierfür ist eine Abkehr von Monoperspektivischen Bewertungen erforderlich.
- Zur standortkonkreten modellbasierten Prognose geochemischer und geomechanischer Auswirkungen besteht teilweise noch weiterer Bedarf an Prozessverständnis und Parametrisierungen. Eine räumliche Einordnung der Erkenntnisse aus Laboruntersuchungen ist jedoch durch Verknüpfung mit den prognostizierten TH-Auswirkungsräumen möglich.
- Insbesondere bei einer Raumplanung des städtischen Untergrunds ist die Quantifizierung der Nutzungs-, Auswirkungs- und Monitoringräume von Speichern (sowie anderer Nutzungen) zur Vermeidung nachteiliger Veränderungen oder Wechselwirkungen hilfreich.
- Eine differenzierte Prozess- und Anwendungsbewertung und Genehmigungspraxis ermöglicht die Verbindung von erforderlichem Grundwasserschutz, Ressourcenschutz, stärkerer Reduzierung fossiler Energieträger und CO<sub>2</sub>-Emissionen, Einsparung von Entschädigungszahlungen (für nicht produzierten EE-Strom) und eröffnet ein Optimierungspotenzial für GW-Sanierungsverfahren.

Auch dieses Kompendium besteht nur in einer vorläufigen Version, die diesem Bericht als Anlage beiliegt, und wird im Verlauf des nächsten halben Jahres fertiggestellt werden, da dann auch der Projektpartner Christian-Albrechts-Universität zu Kiel zum Jahresende 2017 abschließend berichtspflichtig ist.

*Zitierte Literatur*

- Agster G (1996) Untersuchungsprogramm zur Ermittlung des nutzbaren Grundwasserdargebotes im schleswig-holsteinischen Nachbarräum zu Hamburg (Südost-Holstein). Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein, Flintbek
- Agster G (2010) Untersuchungsprogramm zur Ermittlung des nutzbaren Grundwasserdargebotes im Raum Lübeck / Bad Segeberg. Landesamt für Landwirtschaft, Umwelt und ländliche Räume Schleswig-Holstein, Flintbek
- al Hagrey SA, Köhn D, Rabbel W (2014a) Geophysical assessments of renewable gas energy compressed in geologic pore storage reservoirs. SpringerPlus, 3(1), 1–16 doi: 10.1186/2193-1801-3-267
- al Hagrey SA, Köhn D, Wiegers CE, Schäfer D, Rabbel W (2014b) Feasibility Study for Geophysical Monitoring Renewable Gas Energy Compressed in Pore Storages. Journal of Geology and Geosciences, 3: 169. doi:10.4172/2329-6755.1000169
- al Hagrey SA, Köhn D, Wiegers CE, Schäfer D, Rabbel W (2014c) Geophysical monitoring of leakages simulated in groundwater from deep energy storages. In SEG Technical Program Expanded Abstracts 2014, p. 2088–2093, doi: 10.1190/segam2014–1191.1
- al Hagrey SA, Schäfer D, Köhn D, Wiegers CE, Chung D, Dahmke A, Rabbel W (2016). Monitoring gas leakages simulated in a near surface aquifer of the Ellerbek paleo-channel. Environmental Earth Sciences, 75(14): 1083. doi:10.1007/s12665-016-5784-1
- ANGUS+ (2014) Zwischenbericht zum Verbundvorhaben Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungenprognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes ANGUS+ Zwischenbericht 2013
- ANGUS+ (2015) Zwischenbericht zum Verbundvorhaben Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungenprognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes ANGUS+ Zwischenbericht 2014
- ANGUS+ (2016) Zwischenbericht zum Verbundvorhaben Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungenprognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes ANGUS+ Zwischenbericht 2015
- ANGUS+ (2017) Zwischenbericht zum Verbundvorhaben Auswirkungen der Nutzung des geologischen Untergrundes als thermischer, elektrischer oder stofflicher Speicher im Kontext der Energiewende Dimensionierung, Risikoanalysen und Auswirkungenprognosen als Grundlagen einer zukünftigen Raumplanung des Untergrundes ANGUS+ Zwischenbericht 2016
- Archie GE (1942) The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. Transactions of the American Institute of Mining Engineers 146:54–62
- Bauer D, Heidemann W, Marx R, Nußbicker-Lux J, Ochs F, Panthaloökaran V, Raab S. (2009) Solar unterstützte Nahwärme- und Langzeit-Wärmespeicher (Juni 2005 bis Juli 2008). Forschungsbericht zum BMBF-Vorhaben 0329607 J, Universität Stuttgart
- Bauer D, Marx R, Nußbicker-Lux J, Ochs F, Drück H, Heidemann W (2013) Solarthermie2000plus: Wissenschaftlich-technische Begleitung des Förderprogramms Solarthermie2000plus zu solar unterstützter Nahwärme und Langzeit-Wärmespeicherung. Forschungsbericht zum BMU-Vorhaben 0329607P, Universität Stuttgart
- Bauer D, Marx R, Nußbicker-Lux J, Ochs F, Heidemann W, Müller-Steinhagen H (2010) German central solar heating plants with seasonal heat storage. Solar Energy 84, 612–623 doi: 10.1016/j.solener.2009.05.013

- Bauer S, Pfeiffer T, Boockmeyer A, Dahmke A, Beyer C (2015) Quantifying Induced Effects of Subsurface Renewable Energy Storage. *Energy Procedia* 76 633–641 doi:10.1016/j.egypro.2015.07.885.
- Becker A (2014) Fortführung von Langzeitsäulenversuchen zur Untersuchung geochemischer Folgereaktionen infolge von Methanintrusionen in oberflächennahe Aquifere. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Beier RA, Smith MD, Spitler JD (2011) Reference data sets for vertical borehole ground heat exchanger models and thermal response test analysis. *Geothermics* 40:79–85
- Benisch, K, Graupner B, Bauer S (2013). The Coupled OpenGeoSys-eclipse Simulator for Simulation of CO<sub>2</sub> Storage – code Comparison for Fluid Flow and Geomechanical Processes. *Energy Procedia*, 37, 3663–3671 doi: 10.1016/j.egypro.2013.06.260
- Berger S (2015) Laborversuche zur Quantifizierung von Wasserstoff-Oxidationsreaktionen in Aquifer-Sedimenten. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Bergmark L, Poulsen PH, Al-Soud WA, Norman A, Hansen LH, Sørensen SJ (2012) Assessment of the specificity of Burkholderia and Pseudomonas qPCR assays for detection of these genera in soil using 454 pyrosequencing. *FEMS Microbiology Letters* 333(1):77-84 doi: 10.1111/j.1574-6968.2012.02601.x
- Berta M (2017) Experimental investigation of hydrogeochemical consequences of gas leakages into shallow aquifers. Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Christian-Albrechts-Universität, Kiel
- Berta M, Becker A, Dethlefsen F, Ebert M, Koch S, Dahmke A (2015) Experiments showed no reactions coupled to methane leaked into shallow aquifers. *First Break* 33 (12):93-95
- Berta M, Dethlefsen F, Ebert M, Berger S, Dahmke A (submitted) Geochemical effects of millimolar hydrogen concentrations in groundwater - an experimental study in the context of hydrogen energy storage. *Environmental Science and Technology*
- Berta M, Dethlefsen F, Ebert M, Dahmke A (2016) Surface passivation model explains pyrite oxidation kinetics in column experiments with up to 11 bars p(O<sub>2</sub>). *Environmental Science and Technology* 75:1175. doi:10.1007/s12665-016-5985-7
- Berta M, Ebert M, Schäfer D, Dethlefsen F (2017) Experimental process parameterization of a 3D site-scale model on effects of a compressed air intrusion into a shallow aquifer. *Energy Procedia*
- Beyer C, Popp, S., Bauer S (2016) Simulation of temperature effects on groundwater flow, contaminant dissolution, transport and biodegradation due to shallow geothermal use. *Environmental Earth Sciences* 75:1244 doi: 10.1007/s12665-016-5976-8
- BMJV (2001) Bundesministerium für Justiz und Verbraucherschutz. Verordnung über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch - Trinkwasserverordnung vom 21.05.2001.
- Bonte M, Röling WFM, Zaura E, Van Der Wielen PWJJ, Stuyfzand PJ, Van Breukelen BM (2013a) Impacts of shallow geothermal energy production on redox processes and microbial communities. *Environmental Science and Technology* 47:14476–14484. doi: 10.1021/es4030244
- Bonte M, van Breukelen BM, Stuyfzand PJ (2013b) Temperature-induced impacts on groundwater quality and arsenic mobility in anoxic aquifer sediments used for both drinking water and shallow geothermal energy production. *Water Research* 47:5088–100. doi: 10.1016/j.watres.2013.05.049
- Boockmeyer A, Bauer S (2014) High-temperature heat storage in geological media: high-resolution simulation of near-borehole processes. *Geotechnique Letters* 4:151–156 doi: 10.1680/geolett.13.00060
- Boockmeyer A, Bauer S (2016) Efficient simulation of multiple borehole heat exchanger storage sites. *Environmental Earth Sciences* 75:1–13. doi: 10.1007/s12665-016-5773-4

- Böttcher N, Görke U-J, Kolditz O et al (2017) Thermo-mechanical investigation of salt caverns for short-term hydrogen storage. *Environmental Earth Sciences* 76(3):art.98 doi: 10.1007/s12665-017-6414-2
- Carnegie D, Ramsay JA (2009) Anaerobic ethylene glycol degradation by microorganisms in poplar and willow rhizospheres. *Biodegradation*, 20, 551-558 (2009). doi: 10.1007/s10532-008-9244-9
- Chapman PJ, Duggleby RG (1967) Dicarboxylic acid catabolism by bacteria. *Biochemical Journal* 103:7contd-9c.
- Chua H, Yu PHF, Lo W, Sin SN (2001) The degradation of xenobiotic branched carboxylic acids in anaerobic sediment of the Pearl River in Southern China. *Science of The Total Environment* 266 (1–3):221-228.
- Crotogino F, Mohmeyer KU, Scharf R (2001) Huntorf CAES: More than 20 years of successful operation. In: *Proceedings of the Solution Mining Research Institute (SMRI) Spring Meeting, Orlando, FL, USA, 15<sup>th</sup>–18<sup>th</sup> April 2001*. Solution Mining Research Institute (SMRI), Clarks Summit, PA, USA, 351–357.
- Cussler EL (2009) *Diffusion: mass transfer in fluid systems*, 3. Auflage. Cambridge University Press, New York
- Delfs J-O, Nordbeck J, Bauer S (2016) Upward brine migration resulting from pressure increases in a layered subsurface system. *Environmental Earth Sciences*, 75(22): 1441. doi:10.1007/s12665-016-6245-6
- Dessauer R (2015) Charakterisierung eines pleistozänen Sediments auf Basis einer Aufschlussbohrung aus Dithmarschen. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Dethlefsen F, Beyer C, Feeser V, Köber R (2016) Parameterizability of processes in subsurface energy and mass storage. *Environmental Earth Sciences* 75:855 doi: 10.1007/s12665-016-5626-1
- Dethlefsen F, Ebert M, Dahmke A (2012) Geochemische Modellierung: Datenrecherche, -haltung, -validierung und Modellbenchmarking. In: Dahmke A, Bauer S (Hrsg.) *CO<sub>2</sub>-MoPa - Modellierung und Parametrisierung von CO<sub>2</sub>-Speicherung in tiefen, salinen Speichergesteinen für Dimensionierungs- und Risikoanalysen*. Institut für Geowissenschaften der Christian-Albrechts-Universität, Kiel, pp 237-276
- Dethlefsen F, Ebert M, Dahmke A (2014) A geological database for parameterization in numerical modeling of subsurface storage in Northern Germany. *Environmental Earth Sciences* 71:2227-2244 doi: 10.1007/s12665-013-2627-1
- Dethlefsen F, Lagmöller L, Dahmke A (in prep.) Basic parameterization of Schleswig-Holstein's shallow geological formations for numerical reactive transport simulations: mineralogical and geochemical parameters.
- Dethlefsen F, Nolde M, Schäfer D, Dahmke A (2017) Basic parameterization of Schleswig-Holstein's shallow geological formations for numerical reactive transport simulations: representative groundwater compositions. *Environmental Earth Sciences* 76:59. doi:10.1007/s12665-016-6343-5
- Dokter E (2015) 2D time domain waveform inversion of a near surface SH wave data set from Čachtice, Slovakia. Diplom-Arbeit, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Dörr C, Köber R, Schäfer D, Dahmke A (in prep.) Transportverhalten von Wärmeträgerfluidsubstanzen aus Erdwärmesonden im Grundwasser unter Berücksichtigung von Abbau- und Sorptionsprozessen.
- Dutil S, Veillette M, Mériaux A, Lazure L, Barbeau J, Duchaine C (2007) Aerosolization of mycobacteria and legionellae during dental treatment: low exposure despite dental unit contamination. *Environmental Microbiology* 9(11):2836-2843 doi: 10.1111/j.1462-2920.2007.01396.x
- Ebert M (in prep.) Arsenate sorption on Goethite at variable temperatures.

- Esposito A, Benson SM (2012) Evaluation and development of options for remediation of CO<sub>2</sub> leakage into groundwater aquifers from geologic carbon storage. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 7 (0):62-73. doi:10.1016/j.ijggc.2011.12.002
- Evans DJ (2007a) An appraisal of Underground Gas Storage technologies and incidents, for the development of risk assessment methodology vol 1. British Geological Survey,
- Evans DJ (2007b) An appraisal of Underground Gas Storage technologies and incidents, for the development of risk assessment methodology vol 2. British Geological Survey
- FEFLOW (2011) FEFLOW user manual. [www.feflow.info](http://www.feflow.info)
- Fernández-Prini R, Alvarez JL, Harvey AH (2003) Henry's constants and vapor-liquid distribution constants for gaseous solutes in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O at high temperatures. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 32, 903-916 doi: 10.1063/1.1564818
- Gajewski D, Tessmer E (2005) Reverse modelling for seismic event characterization. *Geophysical Journal International* 163(1):276-284. doi: 10.1111/j.1365-246X.2005.02732.x
- Gaupp R (1991) Zur Fazies und Diagenese des Mittelrhät-Sandsteins im Gasfeld Thönse. *Veröffentlichungen der Niedersächsischen Akademie der Geowissenschaften* 6:34-55
- Gibson SA, Sulfito JM (1986) Extrapolation of biodegradation results to ground water aquifers: Reductive dehalogenation of aromatic compounds. *Applied and Environmental Microbiology* 52:681-682
- Goldschagg B (2014) Rekonstruktion der in-situ Zusammensetzung und Temperatur norddeutscher Tiefenwässer. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Götz J (2014) Geochemische Folgereaktionen einer H<sub>2</sub>-Speicherung im porösen Medium. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Guth C (2014) Einsatz und Bewertung von nicht-invasiven und gering-invasiven Verfahren zur geothermischen Vorerkundung im oberflächennahen Untergrund am Fallbeispiel Taucha, Wohngebiet Wurzner Straße. MSc Thesis, Universität Leipzig
- Haase C, Dahmke A, Ebert M, Schäfer D, Dethlefsen F (2014) Suitability of existing numerical model codes and thermodynamic databases for the prognosis of calcite dissolution processes in near-surface sediments due to a CO<sub>2</sub> leakage investigated by column experiments. *Aquatic Geochemistry* 20:639-661 doi: 10.1007/s10498-014-9240-0
- Heesel V (2010) Biodegradation of benzotriazoles. MSc Thesis, Eberhardt Karls Universität, Tübingen
- Herzog B, Huber B, Lemmer H, Horn H, Müller E (2013) Analysis and in situ characterization of activated sludge communities capable of benzotriazole biodegradation. *Environmental Sciences Europe* 25 (1):31 doi: 10.1186/2190-4715-25-31
- Hese F (2012) 3D Modellierung und Visualisierung von Untergrundstrukturen für die Nutzung des unterirdischen Raumes in Schleswig-Holstein. Dissertation, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Hese F, Liebsch-Dörschner T, Offermann P, Rheinländer J, Thomsen C, Rosenbaum S (2012) Geologische Modelle der Deck- und Speichergesteine Schlesig-Holsteins (Strukturgeologie, Petrographie, Hydraulische Parameter) - Geologisches Basismodell Schleswig-Holstein - Teilgebietsmodelle tiefer Untergrund - Teilgebietsmodelle oberflächennaher Untergrund. Final Report: Modellierung und Parametrisierung von CO<sub>2</sub>-Speicherung in tiefen, salinen Speichergesteinen für Dimensionierungs- und Risikoanalysen CO<sub>2</sub>-MoPa.
- Hintze M (2015) Numerische Simulation thermo-hydraulischer Auswirkungen von Aquifer-Wärmespeicherung. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Hölter R, Mahmoudi E, Schanz T (2015) Optimal sensor location for parameter identification in soft clay. In: *AIP Conference Proceedings* 1684

- Holocher J, Peeters F, Aeschbach-Hertig W, Kinzelbach W, Kipfer R (2003) Kinetic model of gas bubble dissolution in groundwater and its implications for the dissolved gas composition. *Environmental Science and Technology* 37, 1337-1343 doi: 10.1021/es025712z
- Hoppe M (2014) Untersuchung der Temperaturabhängigkeit von Sediment-Wasser-Wechselwirkungen anhand von Elutionsversuchen. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Ilieva D, Morasch B, Haderlein S (2012) Risikominimierung beim Einsatz von Additiven in Wärmeträgerflüssigkeiten. Abschlussbericht.
- Inselmann R (1985) Dichte-Messungen in der Bundesrepublik Deutschland. *Erdöl-Erdgas* 101 (3):76-78
- Jesußek A, Grandel S, Dahmke A (2013a) Impacts of subsurface heat storage on aquifer hydrogeochemistry. *Environmental Earth Sciences* 69:1999–2012. doi: 10.1007/s12665-012-2037-9
- Jesußek A, Köber R, Grandel S, Dahmke A (2013b) Aquifer heat storage: sulphate reduction with acetate at increased temperatures. *Environmental Earth Sciences* 69:1763–1771 doi: 10.1007/s12665-012-2009-0
- Jin Q, Bethke CM (2003) A new rate law describing microbial respiration. *Applied and Environmental Microbiology*, 69(4), 2340-2348 doi: 10.1128/AEM.69.4.2340-2003
- Kazumi J, Haggblom MM, Young LY (1995) Degradation of monochlorinated and nonchlorinated aromatic compounds under iron-reducing conditions. *Applied and Environmental Microbiology* 61 (11):4069-4073
- Khaledi K, Mahmoudi E, Datcheva M, Schanz T (2016a) Analysis of compressed air storage caverns in rock salt considering thermo-mechanical cyclic loading. *Environmental Earth Sciences* 75(15):art.1149 doi: 10.1007/s12665-016-5970-1
- Khaledi K, Mahmoudi E, König D, Schanz T (2016b) Effect of temperature and pressure on mechanical behavior of rock salt in underground storage caverns. In: *Energy Geotechnics: Proceedings of the 1st International Conference on Energy Geotechnics, ICEGT 2016*, Kiel, August 2016. CRC Press, p 293 doi: 10.1201/b21938-47
- Knauss KG, Copenhaver S (1995) The solubility of p-xylene in water as a function of temperature and pressure and calculated thermodynamic quantities. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59-2, 2443-2448 doi: 10.1016/0016-7037(95)00138-7
- Knauss KG, Dibley MJ, Leif RN, Mew DA, Aines RD (2000) The aqueous solubility of trichloroethene (TCE) and tetrachloroethene (PCE) as a function of temperature. *Applied Geochemistry* 15:501–512 doi: 10.1016/S0883-2927(99)00058-X
- Koch S (2014) Geochemical effects of a methane leakage into near surface aquifers based on column studies. Institute for Geosciences, Christian-Albrechts-University, Kiel
- Köhn D, al Hagrey SA, Rabbel W (2014) Monitoring of elastic and petrophysical material parameters of a synthetic CAES storage site by 2D waveform inversion. In *76th EAGE Conference and Exhibition 2014 Extended Abstracts* doi: 10.3997/2214-4609.20141217
- Köhn D, De Nil D, al Hagrey SA, Rabbel W, Khaledi K, König D, Schanz T (2016a) Monitoring elastic parameter changes in the vicinity of salt caverns due to cyclic loading by seismic waveform inversion. *Energy Geotechnics*, Aug 2016, 45-51 doi: 10.1201/b21938-9
- Köhn D, Dokter E, Wilken D, De Nil D, Rabbel W (2015a) Near-surface 2D SH-waveform Inversion - A Case Study from Slovakia. *77th EAGE Conference and Exhibition – Workshops* doi: 10.3997/2214-4609.201413538
- Köhn D, Hellwig O, De Nil D, Rabbel W (2015b) Waveform inversion in triclinic anisotropic media-a resolution study. *Geophysical Journal International*, 201(3), 1642–1656 doi: 10.1093/gji/ggv097
- Köhn D, Meier T, Fehr M, De Nil D, Auras M (2016b) Application of 2D elastic Rayleigh waveform inversion to ultrasonic laboratory and field data. *Near Surface Geophysics*, 14(5), 461–476 doi: 10.3997/1873-0604.2016027

- Köhn D, De Nil D, al Hagrey SA, Rabbel W (2016c) A combination of waveform inversion and reverse-time modelling for microseismic event characterization in complex salt structures. *Environmental Earth Sciences* 75:1235. doi: 10.1007/s12665-016-6032-4
- Kolditz O, Bauer S, Bilke L, Böttcher N, Delfs JO, Fischer T, Görke UJ, Kalbacher T, Kosakowski G, McDermott CI, Park CH, Radu CH, Rink K, Shao H, Shao HB, Sun F, Sun YY, Singh AK, Taron J, Walther M, Wang W, Watanabe N, Wu Y, Xie M, Xu W, Zehner B (2012) OpenGeoSys: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Environmental Earth Science*, 67:589. doi: 10.1007/s12665-012-1546-x
- Kolditz O, Shao H, Wang W, Bauer S (Hrsg.) (2015) Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractures porous media: modelling and benchmarking, closed-form solutions. Springer, Heidelberg. doi:10.1007/978-3-319-11894-9
- Koproch N, Dahmke A, Köber R (in prep.) The aqueous solubility of common organic groundwater contaminants as a function of temperature between 5 and 70°C.
- Kurzmann A, Przebindowska A, Köhn D, Bohlen T (2013) Acoustic full waveform tomography in the presence of attenuation: a sensitivity analysis. *Geophysical Journal International*, 195(2), 985–1000 doi: 10.1093/gji/ggt305
- Lagmöller L (2015) Methodenvergleich zur Bestimmung der Anionenaustauschkapazität (AAK) anhand oberflächennaher Sedimente. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- LaRowe DE, Dale AW, Amend JP, Van Cappellen P (2012) Thermodynamic limitations on microbially catalyzed reaction rates. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 90, 96-109 doi: 10.1016/j.gca.2012.05.011
- LAWA (2016) Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser. Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser - Aktualisierte und überarbeitete Fassung; Nach Utermann (2016): Sachstand Gesetzgebung: Mantelverordnung und Altlastenbearbeitung, Vortrag beim Symposium „Strategien zur Boden- und Grundwasseruntersuchung“; 23.-24.11.2016, DECHEMA Frankfurt.
- Lemppenau B (2015) Parametrisierung der Stratigraphie hinsichtlich des geomechanischen Bodenverhaltens als Basis für die Simulation von Energiespeicherszenarien im Bereich des Norddeutschen Beckens. Lehrstuhl für Grundbau, Boden- und Felsmechanik - Ruhr-Universität Bochum, unveröffentlicht
- Lienen T, Lüders K, Halm H, Westphal A, Köber R, Würdemann H (2017) Effects of thermal energy storage on shallow aerobic aquifer systems - temporary increase in abundance and activity of sulfate reducing and sulfur oxidizing bacteria. *Environmental Earth Sciences* 76:261 doi: 10.1007/s12665-017-6575-z
- Lindner M (2015) Modellstudie zur Untersuchung induzierter Temperaturvariationen in Boden und Grundwasser durch die intensive Nutzung oberflächennaher Geothermie. Msc Thesis, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- Liu YS, Ying GG, Shareef A, Kookana RS (2011) Biodegradation of three selected benzotriazoles under aerobic and anaerobic conditions. *Water Research* 45 (16):5005-5014 doi: 10.1016/j.watres.2011.07.001
- Liu YS, Ying GG, Shareef A, Kookana RS (2013) Biodegradation of three selected benzotriazoles in aquifer materials under aerobic and anaerobic conditions. *Journal of Contaminant Hydrology* 151:131-139 doi: 10.1016/j.jconhyd.2013.05.006
- Lüders K, Ebert M, Dahmke A, Köber R (in prep.) Trace element- and heavy metal mobilisation and fixation in aquifers upon anthropogenically induced temperature increases.
- Lüders K, Firmbach L, Ebert M, Dahmke A, Dietrich P, Köber R (2016) Gas-phase formation during thermal energy storage in near-surface aquifers – experimental and modelling results. *Environmental Earth Sciences* 75:1404. doi: 10.1007/s12665-016-6181-5

- Magri F, Maßmann J, Wang W, Benisch K (2015) Coupled THM Processes. In O Kolditz, H Shao, W Wang, S Bauer (Hrsg.) Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking (pp. 221–245). Springer International Publishing.
- Mahmoudi E, Khaledi K, Miro S, König D, Schanz T (2017) Probabilistic analysis of a rock salt cavern with application to energy storage systems. *Rock Mechanics and Rock Engineering* 50(1):139-157 doi: 10.1007/s00603-016-1105-y
- Mahmoudi E, Khaledi K, von Blumenthal A, König D, Schanz T (2016) Concept for an integral approach to explore the behavior of rock salt caverns under thermo-mechanical cyclic loading in energy storage systems. *Environmental Earth Sciences* 75(14), 1-19 doi: 10.1007/s12665-016-5850-8
- Mascus C (2012) Bestimmung der Kationenaustauschkapazität eines natürlichen Sedimentes bei unterschiedlichen Temperaturen. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Mascus C (2015) The effect of hydrogen intrusion into near surface aquifers based on laboratory experiments. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Matthies C, Schink B (1993) Anaerobic degradation of long-chain dicarboxylic acids by methanogenic enrichment cultures. *FEMS Microbiology Letters* 111 (2-3):177-182 doi: 10.1111/j.1574-6968.1993.tb06382.x
- McGahey C, Bouwer E (1992) Biodegradation of ethylene glycol in simulated subsurface environments. *Water Science and Technology* Jul 1992, 26 41-49
- Meier zu Beerentrop K (2016) Numerische Simulation der Wärmespeicherung im Untergrund anhand der Erdwärmesonden-Pilotanlage Brædstrup. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Metzgen A (2016) Einfluss des pH-Wertes auf die Reduktion gelöster Grundwasserinhaltsstoffe durch Wasserstoff in Hochdruck-Laborversuchen. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Nagel T, Böttcher N (2015) Mechanical Processes. In: Kolditz O, Shao H, Wang W et al (Hrsg.) Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media: modelling and benchmarking – closed-form solutions, Springer, p 185-201
- Nagel T, Minkley W, Böttcher N et al (2017) Implicit numerical integration and consistent linearization of inelastic constitutive models of rock salt. *Computers and Structures* 182:87-103 doi: 10.1016/j.compstruc.2016.11.010
- Nolde M, Schwanebeck M, Biniyaz E, Duttmann R (2016a) Entwicklung eines 3D-Online-Planungswerkzeugs zur Identifikation untertägiger Potenzial-Suchräume für die Energiespeicherung an Beispielen aus Schleswig-Holstein. *gis.Science* 3/2016:98-105
- Nolde M, Schwanebeck M, Dethlefsen F, Duttmann R, Dahmke A (2016b) Utilization of a 3D webGIS to support spatial planning regarding underground energy storage in the context of the German energy system transition at the example of the federal state of Schleswig-Holstein. *Environmental Earth Sciences* 75:1284 doi:10.1007/s12665-016-6089-0
- Nöthlich C (2016) Chemische Charakterisierung eines pliozänen Aquifersediments aus Dithmarschen, SH. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Otto R (2012) Zur Abschätzung von Wärmeleitfähigkeiten der oberflächennahen Lockergesteinsfolge in Norddeutschland. *Grundwasser* 17:219-229
- Otto R, Reum R, Scheer W, Angermann H, Wolters W (2004) Untersuchungsprogramm zur Ermittlung des nutzbaren Grundwasserangebotes im schleswig-holsteinischen Nachbarraum zu Hamburg, Südwest-Holstein. Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein, Flintbek
- Pfeiffer WT (2017) Hydrogen energy storage in porous geological formations – Investigation of storage dimensioning, induced effects and monitoring methods. Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät, Christian-Albrechts-Universität, Kiel

- Pfeiffer WT, al Hagrey SA, Köhn D, Rabbel W, Bauer S (2016a) Porous media hydrogen storage at a synthetic, heterogeneous field site: numerical simulation of storage operation and geophysical monitoring. *Environmental Earth Sciences*, 75(16), 1177 doi: 10.1007/s12665-016-5958-x
- Pfeiffer WT, Beyer C, Bauer S (2017) Hydrogen storage in a heterogeneous sandstone formation: dimensioning and induced hydraulic effects. *Petroleum Geoscience*, first published on March 09, 2017. doi: 10.1144/petgeo2016-050
- Pfeiffer WT, Beyer C, Graupner B, Bauer S (2015) Multiphase Flow and Transport with OGS-ECLIPSE. In O Kolditz, H Shao, W Wang, S Bauer (Hrsg.), *Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking* (pp. 213–219). Springer International Publishing.
- Pfeiffer WT, Graupner B, Bauer S (2016b) The coupled non-isothermal, multiphase-multicomponent flow and reactive transport simulator OpenGeoSys–ECLIPSE for porous media gas storage. *Environmental Earth Sciences*, 75, 1347 doi: 10.1007/s12665-016-6168-2
- PlanEnergi (2013) Boreholes in Brædstrup. Final report
- Popp S, Beyer C, Dahmke A, Bauer S (2015a) Model Development and Numerical Simulation of a Seasonal Heat Storage in a Contaminated Shallow Aquifer. *Energy Procedia* 76:361–370. doi: 10.1016/j.egypro.2015.07.842
- Popp S, Beyer C, Köber R, Koproch N, Dahmke A, Bauer S (2015b) Untersuchung der Auswirkungen von unterirdischen, saisonal betriebenen Wärmespeichern auf das Verhalten einer TCE-Grundwasserkontamination durch numerische Szenariensimulationen. *bbr Leitungsbau Brunnenbau Geothermie*, 3, 54–61
- Popp S, Beyer C, Dahmke A, Koproch N, Köber R, Bauer S (2016) Temperature dependent dissolution of residual non-aqueous phase liquids: model development and verification. *Environmental Earth Sciences*, 75:953 doi: 10.1007/s12665-016-5743-x
- PTB (1990) PTB-Mitteilungen. 100(3). Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig
- Rimstidt JD, Vaughan DJ (2003) Pyrite oxidation: A state-of-the-art assessment of the reaction mechanism. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 67:873-880 doi: 10.1016/S0016-7037(02)01165-1
- Robador A, Brüchert V, Steen AD, Arnosti C (2010) Temperature induced decoupling of enzymatic hydrolysis and carbon remineralization in long-term incubations of Arctic and temperate sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 74, 2316–2326. doi:10.1016/j.gca.2010.01.022
- Rosso L, Lobry JR, Bajard S, Flandrois JP (1995) Convenient model to describe the combined effects of temperature and pH on microbial growth. *Applied and Environmental Microbiology* 61:610–616
- Salem H (2001) Determination of Porosity, Formation Resistivity Factor, Archie Cementation Factor, and Pore Geometry Factor for a Glacial Aquifer. *Energy Sources* 23:589-596 doi: 10.1080/00908310152125238
- Scheer W, Kröger J, Kirsch R (2007) Geologische 3D-Modellierung des Untergrundes - Ergebnisse aus dem INTERREG IIIB Projekt BurVal. In: *Jahresbericht des Landesamt für Natur und Umwelt des Landes Schleswig-Holstein*. Flintbek, pp 159-170
- Schelenz S (2017) Untersuchung des Einflusses ausgewählter Untergrundparameter auf die nachhaltige thermische Nutzung des oberflächennahen Untergrundes im urbanen Raum. Dissertation, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Schelenz S, Vienken T, Shao H et al (2017) On the importance of a coordinated site characterization for the sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface in urban areas: a case study. *Environmental Earth Sciences* 76(2):art.73 doi: 10.1007/s12665-016-6331-9

- Schlund M (2014) Verteilung organischen und anorganischen Kohlenstoffs in einer Auswahl schleswig-holsteinischer Grundwasserleiter. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Schön J (1983) *Petrophysik: physikalische Eigenschaften von Gesteinen und Mineralen*. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart
- Schulte DO, Welsch B, Boockmeyer A, Rühaak W, Bär K, Bauer S, Sass I (2016) Modeling insulated borehole heat exchangers. *Environmental Earth Sciences*, 75(10), 1–12 doi: 10.1007/s12665-016-5638-x
- Schulze F, Keimeyer F, Schöne R, Westphal I, Janssen G, Bartel S, Seiffert S (2015) *Unterirdische Raumplanung. Vorschläge des Umweltschutzes zur Verbesserung der über- und untertägigen Informationsgrundlagen, zur Ausgestaltung des Planungsinstrumentariums und zur nachhaltigen Lösung von Nutzungskonflikten. Teilvorhaben 2. Planerische und rechtliche Aspekte*. In: Umweltbundesamt (ed) *Texte 57/2015*, Dessau-Roßlau
- Schwanebeck M (2016) GIS-basierte Abschätzung der regional differenzierten Wärmebedarfe in Schleswig-Holstein - Überlegungen zur Berücksichtigung von Wärmebedarfsanalysen in der Raumplanung. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Schwerdtfeger BC (1985) *Geologisch-hydrogeologische Untersuchungen im Raum Nordheide (Lüneburger Heide)*. Geologisches Jahrbuch C 39, vol 39. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Hannover
- Seibertz K, Chirila M, Bumberger J et al (2016) Development of in-aquifer heat testing for high resolution subsurface thermal-storage capability characterization. *Journal of Hydrology* 534:113-123 doi: 10.1016/j.jhydrol.2015.12.013
- Senseny P, Lindberg H, Schwer L (1989) Elastic-plastic response of a circular hole to repeated loading. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 13(5):459-476 doi: 10.1002/nag.1610130502
- Shapiro S (2015) *Fluid-Induced Seismicity*. 1st edn. Cambridge University Press
- Siotto M, Sezenna E, Saponaro S, Innocenti FD, Tosin M, Bonomo L, Mezzanotte V (2012) Kinetics of monomer biodegradation in soil. *Journal of Environmental Management* 93 (1):31-37 doi: 10.1016/j.jenvman.2011.08.018
- Spaar H (2016) *Modellierung von geochemischen Prozessen in Folge einer H<sub>2</sub>-Speicherung*. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Spahr S, Huntscha S, Bolotin J, Maier MP, Elsner M, Hollender J, Hofstetter TB (2013) Compound-specific isotope analysis of benzotriazole and its derivatives. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 405 (9):2843-2856 doi: 10.1007/s00216-012-6526-1
- Struß J (2015) *Statistische Untersuchung der Hydrochemie norddeutscher Tiefenwässer*. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Struß J, Köber R, Schäfer D, Dahmke A (in prep.) *Numerische Simulationen des Ausbreitungsverhaltens von Wärmeträgerfluidinhaltsstoffen im Grundwasser*
- Tiehm A, Schmidt K, Augenstein T, Betting D (2012) *Aktuelle Themen im Grundwasserschutz, Wärmeträgerfluide in der Geothermie: Exemplarische Gefährdungsabschätzung anhand von Strukturaufklärung, Abbaubarkeit und Toxizität*, DVGW-Technologiezentrum Wasser. *Technologiezentrum Wasser*, 52, 127-191
- TOXNET: Toxicology Data Network (2016) <https://toxnet.nlm.nih.gov>
- van Geffen T (2016) *Bestimmung virtueller kf-Wert Profile einiger schleswig-holsteinischer Aquifere unter Verwendung von PetroKf mit anschließender Berechnung vertikaler Korrelationslängen*. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Vienken T, Schelenz S, Rink K et al (2015) Sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface - A critical view on the status quo. *Groundwater* 53(3):356-361 doi: 10.1111/qwat.12206

- von Oelsen R (2013) Durchlässigkeit von pleistozänen Sanden in Abhängigkeit des Bohrprobenahme- und Analyseverfahrens. BSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Wang B, Bauer S (2016) Converting heterogeneous complex geological models to consistent finite element models: methods, development, and application to deep geothermal reservoir operation. *Environmental Earth Sciences*, 75(20), 1349 doi: 10.1007/s12665-016-6138-8
- Wang B, Bauer S (2017) Compressed air energy storage in porous formations: a feasibility and deliveryability study. *Petroleum Geoscience*, first published on April 27, 2017. doi: 10.1144/petgeo2016-049
- Wang B, Pfeiffer WT, Bauer S (2015) Pressure Response of Compressed Air Energy Storage in Porous Formations - Design of Underground Storage Operation. The Third Sustainable Earth Sciences Conference and Exhibition, Celle, DE doi:10.3997/2214-4609.201414260.
- Ward TE (1985) Characterizing the aerobic and anaerobic microbial activities in surface and subsurface soils. *Environmental Toxicology and Chemistry* 4 (6):727-737 doi: 10.1002/etc.5620040603
- Wehner D (2015) A combined elastic waveform and gravity inversion applied to the Marmousi-II model. MSc Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
- Wehner D, Köhn D, De Nil D, Schmidt S, al Hagrey SA, Rabbel W (2015) A Combined Elastic Waveform and Gravity Inversion for Improved Density Model Resolution Applied to the Marmousi-II Model. 77th EAGE Conference and Exhibition doi: 10.3997/2214-4609.201413407
- Weiss S (2006) Discharge of three benzotriazole corrosion inhibitors with municipal wastewater and improvements by membrane bioreactor treatment and ozonation. *Environmental Science and Technology* 40:7193-7199 doi: 10.1021/es061434i
- Westphal A, Kleyböcker A, Jesušek A, Lienen T, Köber R, Würdemann H (2017) Aquifer heat storage: abundance and diversity of the microbial community with acetate at increased temperatures. *Environmental Earth Sciences*, 76:66 doi: 10.1007/s12665-016-6356-0
- Wieggers CE, Schäfer D (2015) Numerische Szenariosimulationen zur Ausbreitung von hochmineralisiertem Wasser in oberflächennahen Süßwasseraquiferen. *Grundwasser* 20:85-95 doi:10.1007/s00767-015-0282-z
- Wieggers CE, Schäfer D, Köber R, Dahmke A (2012) Expansion and migration of gaseous and dissolved CO<sub>2</sub> in a site specific shallow aquifer. In: Finsterle S (ed) *Proceedings of the TOUGH Symposium 2012*, Berkley, CA, USA, 2012. pp 789-796
- Wilke CR, Chang P (1955) Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 1(2):264–270 doi: 10.1002/aic.690010222
- Williams RJ, Evans WC (1975) The metabolism of benzoate by moraxella species through anaerobic nitrate respiration. *Biochemical Journal* 148:1-10
- Williamson MA, Rimstidt JD (1994) The kinetics and electrochemical rate-determining step of aqueous pyrite oxidation. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 58 (24):5443-5454. doi:10.1016/0016-7037(94)90241-0
- Wolfgramm M, Thorwart K, Raupach K, Brandes J (2011) Zusammensetzung, Herkunft und Genese geothermaler Tiefenwässer im Norddeutschen Becken (NDB) und deren Relevanz für die geothermische Nutzung. *Zeitschrift für Geologische Wissenschaften* 39 (3/4):173-193
- Worch E (1993) Eine neue Gleichung zur Berechnung von Diffusionskoeffizienten gelöster Stoffe. *Vom Wasser* 81:289–297
- Wunderlich T, Petersen H, al Hagrey SA, Rabbel W (2013) Pedophysical models for conductivity and permittivity of partially water saturated soils. *Vadose Zone Journal* 12 (4). doi:10.2136/vzj2013.01.0023

- Wüstenhagen K, Baermann A, Bruns J, Busse R, Geyh M, Schneider W, Wienberg R (1990) Glazial geprägter Glimmerton als Schadstoffbarriere im Elbtal des Hamburger Raumes. Geologisches Jahrbuch C 55. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Hannover
- Yaws CL (2009) Transport properties of chemicals and hydrocarbons - viscosity, thermal conductivity, and diffusivity of C1 to C100 organics and Ac to Zr inorganics. William Andrew Inc., Norwich
- Zwietering MH, de Koos JT, Hasenack BE, de Witt JC, van't Riet K (1991) Modeling of bacterial growth as a function of temperature. Applied and Environmental Microbiology 57:1094–1101.

## II.2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die Zuwendungen der Ministerien flossen beim Verbundpartner UFZ im Wesentlichen in Personalmittel. Darüber hinaus nahmen Mittel für ein Grundwasser- und Bodentemperaturmonitoring an einem geothermisch intensiv genutzten Feldstandort in Köln-Junkersdorf und entsprechende Reisemittel für die Feldarbeiten sowie Mittel für die Erweiterung eines Monitoringtestfeldes auf dem Gelände des UFZ (u. a. durch eine instrumentierte Erdwärmesonde) eine größere Position ein. Die anteiligen Budgetbeträge der wichtigsten Positionen für das UFZ können der nachfolgenden Tabelle entnommen werden.

AZK	Positionen wie AZK	Kosten (% von Gesamtausgaben)
Personalkosten	831+832	81,43
Sach- und Verwaltungskosten <u>ohne</u> Dienstreisen	813+823+847+848+850+858+860	14,09
Reisekosten	838	4,48
	<b>SUMME:</b>	100,00

## II.3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Entwicklung, numerische Realisierung, Validierung und Nutzung integrativer Modellierungsinstrumentarien für die Simulation problemspezifischer, gekoppelter Prozesse leistet einen wesentlichen methodischen Beitrag zur systematischen Analyse und Prognose von Vorgängen bei der Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen unter besonderer Berücksichtigung zyklischer Vorgänge mit minimalen Zyklenlängen im Bereich von einem Tag. In dem inhaltlich übergreifenden, konzeptionellen und methodischen Ansatz zur Modell- und Softwareentwicklung nehmen die vom Department Umweltinformatik des Verbundpartners UFZ erzielten Projektergebnisse eine führende wissenschaftliche Rolle bei der effizienten und nachhaltigen Planung und Bewirtschaftung der untersuchten geotechnischen Systeme ein.

Arbeiten zur Weiterentwicklung der Softwareplattform OpenGeoSys waren notwendig, um die Simulationen thermo-mechanisch gekoppelter Prozesse in Salzgestein bei der Kavernenspeicherung im Reservoirmaßstab zuverlässig und effizient ausführen zu können. Damit konnte der Nachweis erbracht werden, dass OpenGeoSys für die Modellierung von geowissenschaftlichen Prozessen an realen Standorten in Salzformationen geeignet ist. In diesem Zusammenhang sind besonders auch die Forschungsarbeiten zur Parallelisierung der Software als notwendig und angemessen zu erwähnen. Bezüglich der wissenschaftlichen 3D-Visualisierung konnten mit den durchgeführten Arbeiten zur Entwicklung von Workflows, numerischen Algorithmen und Softwarekomponenten für die synoptische Darstellung heterogener Modelldaten aus konzeptionell unterschiedlichen Quellen Grundlagen für die integrierte Betrachtung von Strukturinformationen, Ergebnissen aus Messkampagnen und Resultaten der numerischen Simulation geschaffen werden, die so zu Beginn der Projektbearbeitung nicht vorhanden waren.

Die genaue Kenntnis über den Untergrundaufbau ist eine wesentliche Voraussetzung für das Verständnis der bei der Wärmespeicherung im oberflächennahen Untergrund ablaufenden Prozesse. Eine entsprechende Untergrunderkundung und die damit einhergehen-

de Entwicklung angepasster Erkundungsstrategien ist daher von zentraler Bedeutung für die Beurteilung der Effizienz und der ökologischen sowie ökonomischen Nachhaltigkeit bei der Nutzung oberflächennaher geothermischer Ressourcen. Die im Rahmen des Vorhabens ANGUS+ vom Department Monitoring- und Erkundungstechnologien des Verbundpartners UFZ durchgeführten Arbeiten lieferten einen wesentlichen Baustein für die Überwachung geologischer Wärmespeicher in urbanen Räumen. Die durchgeführten Studien, Labor- und Feldarbeiten zur Nutzung oberflächengeophysikalischer und vertikal hochauflösender Erkundungsverfahren sind dabei eine unverzichtbare Grundlage für die Parametrisierung und Validierung numerischer Modelle. Neben der Identifizierung der relevanten Untersuchungsparameter und Evaluierung verschiedener Monitoring- und Erkundungstechniken besteht ein weiteres, sehr relevantes Arbeitsergebnis in der Bereitstellung eines praktikablen Planungs- und Erkundungsablaufs im Vorfeld einer intensiven thermischen Nutzung des oberflächennahen Untergrundes.

Die Demonstrationsprojekte in Köln-Junkersdorf und Taucha boten hierbei, u. a. auch durch die enge Zusammenarbeit mit den lokalen Entscheidungsträgern, außergewöhnlich gute Möglichkeiten zur Überführung der Ergebnisse in die Praxis. Dabei konnte das Transferpotenzial der untersuchten Methoden gezeigt werden. Durch die vorgenommenen Messungen und die Erhebung umfangreicher Parameterdatensätze konnten näher an die Realität angelehnte Modelle erstellt und Aussagen zur potenziellen Ausbreitung von Wärme- bzw. Kältefahnen im Untergrund verbessert werden. Dies trägt maßgeblich zum Verständnis der Wechselwirkungsprozesse in den geologischen Schichten und vor allem in Grundwasserleitern bei. Insofern sind auch die Bemühungen um die Durchführung der Feldmessungen als notwendig und darüber hinaus als essenziell für das Projekt zu betrachten.

Mit den Arbeiten im Verbundprojekt ANGUS+ inklusive der spezifischen Beiträge des Verbundpartners UFZ konnte gezeigt werden, dass eine geologische Speicherung gasförmiger Energieträger sowie thermischer Energie sicher, zuverlässig und nachhaltig erfolgen kann. Aufgrund der Tatsache, dass die entwickelten Modellierungskonzepte für Salzkavernen Ausgangspunkt für nachfolgende Forschungsarbeiten mit großem Verwertungspotenzial bilden und die untersuchten Erkundungs- sowie Monitoringansätze bereits in die Analyse weiterer Demonstrationsprojekte einfließen, können die am UFZ im Rahmen von ANGUS+ durchgeführten Arbeiten als wissenschaftlich erfolgreich und essenziell eingeschätzt werden. Dafür spricht auch deren gute Übertragbarkeit auf andere Standorte und weitere Anwendungsbereiche. Die Arbeiten sind damit als notwendig und angemessen zu beurteilen, zumal sie durch zusätzliche Eigenmittel des UFZ insbesondere personell und infrastrukturell unterstützt wurden.

#### **II.4. Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere der Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans**

Die Entwicklung, numerische Realisierung und Anwendung eines integrativen Modellierungsinstrumentariums für die Simulation der Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen leistet einen wesentlichen methodischen Beitrag zur systematischen Analyse von Vorgängen bei der Errichtung und dem Betrieb geologischer Großspeicher. Damit wird die Prognostizierbarkeit von thermo-mechanischen Prozessen, die für die Realisierung derartiger Speicherprojekte relevant sind, auf verschiedenen Zeit- und Längenskalen verbessert. Die hier dargelegten Arbeiten des Departments Umweltinformatik des Ver-

bundpartners UFZ sind wesentlicher Bestandteil des komplexen wissenschaftlichen Ansatzes zur Modell- und Softwareentwicklung im F&E-Vorhaben ANGUS+. Dieser nimmt mit seinen inhaltlich übergreifenden konzeptionellen und methodischen Aspekten der Betrachtung der wesentlichen, miteinander gekoppelten Teilprozesse bei der geologischen Speicherung gasförmiger Energieträger eine führende wissenschaftliche Rolle bei der effizienten Planung und Bewirtschaftung der untersuchten geotechnischen Systeme ein und lässt praxisrelevante Ergebnisse der Prozesssimulation für industrielle Zwecke erwarten. Von besonderem Interesse sind dabei die Erkenntnisse die aus den Ergebnissen des Vorhabens ANGUS+ für das zyklische Verhalten geologischer Speicher gewonnen werden können. Dabei stehen vor allem Zyklen mit vergleichsweise kurzen Ein- und Ausspeicherzeiten im Mittelpunkt, die für die Nutzung volatiler erneuerbarer Energieformen, verknüpft beispielsweise mit einem Power-to-Gas(-to-Power)-Ansatz, typisch sind und für die ein gegenüber der bisher praktizierten saisonalen Speicherung weiterführendes Prozessverständnis erarbeitet wurde.

Das entwickelte Modellierungsinstrumentarium für die unterschiedlichen physikalischen Prozesse wurde im Rahmen der internationalen, wissenschaftlichen Softwareplattform OpenGeoSys numerisch realisiert. Diese Plattform nutzt ein Open-Source-Konzept, was einem großen Nutzerkreis den flexiblen Zugang zum Quellcode ermöglicht sowie die langfristige Integration weiterer Modelle und Methoden im Rahmen nachfolgender Forschungsvorhaben unterstützt. Wesentlicher Bestandteil des Plattformkonzepts von OpenGeoSys ist die Integration von Verfahren, Algorithmen und Softwarekomponenten zum Management (auch großer) Datenmengen von der Datenerhebung bis hin zur synoptischen 3D-Ergebnisdarstellung heterogener Daten.

Die vom Department Monitoring- und Erkundungstechnologien des Verbundpartners UFZ vorrangig im Rahmen des Arbeitspakets AP 1.4 des Vorhabens ANGUS+ entwickelten Konzepte zur hochaufgelösten Standorterkundung sowie zum Temperaturmonitoring geologischer Wärmespeicher sind sowohl in der Auslegungspraxis, als auch im Rahmen weiterer Forschungsvorhaben direkt anwendbar. Hinsichtlich der technischen Bewertung konnte gezeigt werden, dass die geelektrische Widerstandsmessung aufgrund der Sensitivitäten gegenüber Temperaturänderungen und Abschirmung gegenüber störenden Einflüssen als die am besten geeignete Methode für das oberflächennahe geophysikalische Temperaturmonitoring im urbanen Raum anzusehen ist. Das Verständnis des Langzeitverhaltens geologischer Wärmespeicher und zyklisch genutzter geothermischer Ressourcen im oberflächennahen Untergrund ist von zentraler Bedeutung für einen ökologisch und ökonomisch nachhaltigen Bau und Betrieb entsprechender Anlagen. Bislang wurden Aussagen über das Langzeitverhalten aber häufig nur auf Grundlage von Laborexperimenten oder Fallstudien mit deutlich vereinfachter Modellparametrisierung getroffen. Da diese Ansätze die Realität mit ihren tatsächlichen zeitlichen und räumlichen Skalen nur bedingt widerspiegeln, müssen allein daraus abgeleitete Prognosen kritisch betrachtet werden. Als eines der Ergebnisse des Vorhabens konnte deutlich gezeigt werden, wie groß die Unsicherheiten einer Modellparametrisierung auf Grundlage von Literaturwerten in Bezug auf die Dimensionierung von Anlagen zur thermischen Nutzung des Untergrunds und der Abschätzung der Umweltauswirkungen in der Praxis tatsächlich sein können. Dies belegt deutlich, wie notwendig eine detaillierte, standortspezifische Vorerkundung sowie ein sorgfältiges Prozessmonitoring für eine Verbesserung der Modellqualität im Rahmen standort- und datenbasierter Modellparametrisierung und -validierung sind. Dazu wurden u. a. umfangreiche Parameterdatensätze im Rahmen inten-

siver Geländearbeiten erhoben. Die damit verbundene Verbesserung der Zuverlässigkeit von Prognosesimulationen ist Grundvoraussetzung für eine realitätsnahe Abschätzung des Speicherpotenzials, der Speichereffizienz sowie der potenziellen Umweltauswirkungen des Speicherbetriebs. In diesem Sinne können die hier dargestellten Projektergebnisse wirtschaftliche Bedeutung erlangen, wenn die entwickelten Methoden Eingang in die Auslegungspraxis finden und die gewonnenen Erkenntnisse bei der Überarbeitung regulativer Rahmenbedingungen berücksichtigt werden. Hier ist zu erwarten, dass die grundlegende methodische Herangehensweise ausgebaut und vervielfältigt genutzt werden wird.

Neben dem unmittelbaren Nutzen für Forschungs- und Industriepartner sind die verallgemeinerbaren, vom Standort unabhängigen Ergebnisse und Lösungen des Projekts auch für öffentliche Behörden, Netzwerke und Transferstellen von Interesse, da sie die Möglichkeit bieten, Standortanalysen, Szenarienstudien sowie Sicherheitseinschätzungen mit großer Praxisrelevanz für die Speicherbeurteilung und Genehmigungsverfahren durchzuführen. Weiterhin können Projektergebnisse (Methoden, Modelle, Softwarekomponenten) als Grundlage für standardisierte Abläufe bei der Charakterisierung, Dimensionierung und Genehmigung der betrachteten sowie verwandter geotechnischer Problemstellungen dienen (z. B. geothermische Nutzung des Untergrunds, geologische CO<sub>2</sub>-Speicherung, Endlagerung radioaktiver Abfälle), da die grundlegenden kontinuumsmechanischen und konstitutiven Modelle sowie die notwendige Softwarearchitektur ähnlich sind.

Der wissenschaftliche Erfolg des Projekts wurde maßgeblich durch die erfolgte und weiterhin geplante Veröffentlichung von Projektansätzen und -ergebnissen in anerkannten, internationalen Fachzeitschriften und die Präsentation auf nationalen und internationalen Konferenzen bestimmt (siehe Unterabschnitt II.6 dieses Berichts). Ein Teil dieser Aktivitäten konnte gemeinsam mit anderen Partnern des F&E-Vorhabens ANGUS+ realisiert werden. Mit der Publikation und Präsentation von Projektergebnissen wurde der wissenschaftliche Kenntnisstand zur allgemeinen Methodik und zu spezifischen Fragestellungen der Modellierung zyklischer, gekoppelter Prozesse im geologischen Raum bei dessen Nutzung zu Speicherzwecken und in anderen geotechnischen Anwendungen erweitert. Neben der Veröffentlichung in wissenschaftlichen Publikationen sind die Projektergebnisse geeignet, Grundlage für das Erstellen standardisierter Leitfäden und Handlungsempfehlungen sowie von spezifischen Nachweisregelungen im Rahmen der Gesetzgebung zur Errichtung geologischer Großspeicher für gasförmige Energieträger zu bilden (vgl. die im Rahmen des Verbundvorhabens ANGUS+ erstellten Leitfäden).

Vom Verbundpartner UFZ wurden keine fremden Schutzrechtsanmeldungen in Anspruch genommen. Eine Anmeldung eigener Schutzrechte für die entwickelten Modelle, Strategien, Methoden und Verfahren wurde nicht vorgenommen und ist auch weiterhin nicht geplant.

## **II.5. Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen**

Die Thematik der Modellierung und numerischen Simulation gekoppelter Prozesse bei der Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen, die am Department Umweltinformatik des Verbundpartners UFZ vorrangig in den Arbeitspaketen AP 2.1 und AP 3.1 von ANGUS+ bearbeitet wurde, ist von großer Aktualität. Eine zunehmende Anzahl von

wissenschaftlichen Publikationen und spezialisierten Symposien auf Fachkonferenzen (z. B. Jahrestagungen der European Geosciences Union (EGU) und der American Geophysical Union (AGU), verschiedene Konferenzaktivitäten der European Community on Computational Methods in Applied Sciences (ECCOMAS)) legen Zeugnis davon ab. Für einen repräsentativen Literaturquerschnitt siehe z. B. Bérest et al (2014), Brouard et al (2013), Deng et al (2015), Du et al (2012), Roberts et al (2015), Rutqvist et al (2012), Serbin et al (2015), Simona et al (2015), Wang et al (2015) und Zhang et al (2015).

Korrespondierend mit der Modellentwicklung verbessern sich auch die Möglichkeiten kommerzieller und wissenschaftlicher Software geomechanische Deformationen einschließlich von Schädigungsereignissen sowie nichtisotherme Effekte, die im Zusammenhang mit der Speicherung gasförmiger Energieträger in Salzkavernen relevant sind, numerisch zu simulieren. Entsprechende Modellstudien nutzen gegenwärtig meist kommerzielle Simulationsprogramme, die ursprünglich für den Bereich der Erdöl- und Erdgasförderung entwickelt wurden (z. B. FLAC-Softwarefamilie, UDEC (beide Itasca Consulting Group) oder TOUGH (Lawrence Berkeley National Laboratory - LBNL)). Diese Softwareprojekte sind in der Regel auf die Modellierung einer Untermenge des Gesamtkomplexes der gekoppelten physikalischen und chemischen Prozesse fokussiert, die bei geotechnischen Anwendungen im Untergrund ablaufen. Möglichkeiten zur Programmerweiterung für die umfassende Behandlung unterschiedlicher, miteinander interagierender Phänomene sind dabei stark eingeschränkt. Diese sind meist nur den Entwicklern, nicht aber den Nutzern zugänglich und in der Regel wird die Simulation gekoppelter Prozesse durch Kopplung unterschiedlicher Programme einschließlich des ineffizienten Datenaustauschs über Dateien realisiert. Das im hier dargelegten Projekt verfolgte Konzept einer integrativen Softwareentwicklung gewährleistet im Gegensatz dazu von vornherein eine deutlich verbesserte Effizienz und Flexibilität. Trotz eingeschränkter Erweiterungspotenziale stellen die oben genannten Simulatoren bewährte, praktikable und anerkannte Instrumentarien zur Simulation von relevanten Prozessen bei der Kavernenspeicherung dar.

Die Entwicklung von Konzepten zur Standorterkundung und von Monitoringstrategien, speziell für oberflächennahe geologische Wärmespeicher, ist ein Thema, das derzeit umfangreich bearbeitet wird. Dabei wurden u. a. Studien zum Monitoring von Grundwassermarkierungsversuchen mittels Wärmeinjektion untersucht. Hierbei wurden auch Ergebnisse erzielt, die für die Arbeiten des hier dargelegten Verbundvorhabens von Interesse sind. Dies betrifft z. B. methodische Entwicklungen, die zum Teil auch in die Gewinnung geophysikalischer Daten im Rahmen von ANGUS+ einbezogen wurden.

Zur synoptischen, wissenschaftlichen 3D-Datenvisualisierung gibt es nach Kenntnis der UFZ-Bearbeiter von AP 4.3 aktuell keine zu ANGUS+ vergleichbaren Veröffentlichungen von anderen Stellen.

Durch Auswertung der einschlägigen Fachliteratur und Diskussionen mit anerkannten Wissenschaftlern z. B. bei Konferenzbesuchen floss der aktuelle internationale Stand von Methoden und Ergebnissen der betrachteten Arbeitsgebiete permanent in die eigenen Analysen beim Verbundpartner UFZ ein. Die partnerspezifischen Ziele und der entsprechende Ablauf des Forschungsvorhabens ANGUS+ wurden durch Veröffentlichungen dritter Seite insgesamt nicht berührt. Vielmehr zeigte sich, dass die im hier dargelegten Teil des Verbundvorhabens erarbeiteten Strategien, Verfahren, Modelle, Algorithmen und Softwareprodukte dem wissenschaftlichen Standard in vollem Umfang entsprechen und ihn in wesentlichen Teilen mit bestimmen (z. B. numerische Verfahren für die Simulation

von thermisch-mechanisch gekoppelten Prozessen in Salzgestein, integrative Softwarekonzepte für gekoppelte Problemstellungen, nicht- und minimal-invasive Erkundungs- und Monitoringtechniken im oberflächennahen Untergrundbereich, Verfahren der synoptischen 3D-Visualisierung).

*Zitierte Literatur (Abschnitte II.2 bis II.5)*

Bérest, P, Brouard B, Djakeun-Djizanne H et al (2014) Thermomechanical effects of a rapid depressurization in a gas cavern. *Acta Geotech* 9:181-186

Brouard B, Bérest P, degree V et al (2013) Creep closure rate of a shallow salt cavern at Gellenoncourt, France. *Int J Rock Mech Min Sci* 62:42-50

Deng JQ, Yang Q, Liu YR et al (2015) Stability evaluation and failure analysis of rock salt gas storage caverns based on deformation reinforcement theory. *Comput Geotech* 68:147-160

Du C, Yang C, Yao Y et al (2012) Mechanical behaviour of deep rock salt under the operational conditions of gas storage. *Int J Earth Sci Eng* 5(6):1670-1676

Roberts LA, Buchholz SA, Mellegard KD et al (2015) Cyclic loading effects on the creep and dilation of salt rock. *Rock Mech Rock Eng* 48:2581-2590

Rutqvist J, Kim H-M, Ryu D-W et al (2012) Modeling of coupled thermodynamic and geomechanical performance of underground compressed air energy storage in lined rock caverns. *Int J Rock Mech Min Sci* 52:71-81

Serbin K, Ślizowski J, Urbańczyk K et al (2015) The influence of thermodynamic effects on gas storage cavern convergence. *Int J Rock Mech Min Sci* 79:166-171

Simona J, Ferriza AM, Correias LC (2015) HyUnder – Hydrogen underground storage at large scale: case study Spain. *Energy Procedia* 73:136-144

Wang L, Bérest, P, Brouard B (2015) Mechanical behavior of salt caverns: closed-form solutions vs numerical computations. *Rock Mech Rock Eng* 48:2369-2382

Zhang G, Wu Y, Wang L et al (2015) Time-dependent subsidence prediction model and influence factor analysis for underground gas storages in bedded salt formations. *Eng Geol* 187:156-169

## II.6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse des Zuwendungs-empfängers

### Publikationen in Fachzeitschriften

Bauer S, Beyer C, Dethlefsen F et al (2013) Impacts of the use of the geological subsurface for energy storage: an investigation concept. *Environ Earth Sci* 70(8):3935-3943

Böttcher N, Görke U-J, Kolditz O et al (2017) Thermo-mechanical investigation of salt caverns for short-term hydrogen storage. *Environ Earth Sci* 76(3):art.98

Lüders K, Firmbach L, Ebert M et al (2016) Gas-phase formation during thermal energy storage in near-surface aquifers: experimental and modelling results. *Environ Earth Sci* 75(21):art.1404

Nagel T, Görke U-J, Moermann KM et al (2016) On advantages of the Kelvin mapping in finite element implementations of deformation processes. *Environ Earth Sci* 75:art.937

Nagel T, Minkley W, Böttcher N et al (2017) Implicit numerical integration and consistent linearization of inelastic constitutive models of rock salt. *Comput Struct* 182:87-103

Schelenz S, Vienken T, Shao H et al (2017) On the importance of a coordinated site characterization for the sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface in urban areas: a case study. *Environ Earth Sci* 76(2):art.73

Seibertz K, Chirila M, Bumberger J et al (2016) Development of in-aquifer heat testing for high resolution subsurface thermal-storage capability characterization. *J Hydrol* 534:113-123

Vienken T, Händel F, Epting J et al (2016) Energiewende braucht Wärmewende – Chancen und Limitierungen der intensiven thermischen Nutzung des oberflächennahen Untergrundes in urbanen Gebieten vor dem Hintergrund der aktuellen Energiedebatte in Deutschland. *Grundwasser* 21(1):69-73

Vienken T, Reboulet E, Leven C et al (2013) Field comparison of selected methods for vertical soil water content profiling. *J Hydrol* 501:205-212

Vienken T, Schelenz S, Rink K et al (2015) Sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface - A critical view on the status quo. *Groundwater* 53(3):356-361

Wang W, Fischer T, Zehner B et al (2015) A parallel finite element method for modeling two-phase flow processes in porous media: OpenGeoSys with PETSc. *Environ Earth Sci* 73:2269-2285

Zheng T, Shao H, Schelenz S et al (2016) Efficiency and economic analysis of utilizing latent heat from groundwater freezing in the context of borehole heat exchanger coupled ground source heat pump systems. *Appl Therm Eng* 105:314-326

### Bücher / Buchkapitel

Böttcher N, Massmann J, Vogel P et al (2016) Deformation processes. In: Kolditz O, Görke U-J, Shao H et al (eds) *Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media: modelling and benchmarking – benchmarking initiatives*, Springer, p 41-94

Nagel T, Böttcher N (2015) Mechanical Processes. In: Kolditz O, Shao H, Wang W et al (eds) Thermo-hydro-mechanical-chemical processes in fractured porous media: modelling and benchmarking – closed-form solutions, Springer, p 185-201

Nagel T, Böttcher N, Görke UJ, Kolditz O (eds) (2017) Computational geotechnics: storage of energy carriers. Series: Computational modeling of energy systems. Springer-Briefs in Energy. Springer International Publishing

#### Tagungsbeiträge mit Abstracts

Bilke L, Böttcher N, Nolde M et al (2016) Data integration workflow and interactive visualization of potential salt cavern regions. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2016, UFZ, Leipzig, 22-23 March 2016

Böttcher N (2015) Short-term energy storage in artificial salt caverns. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2015, Leipzig, 24-25 February 2015

Böttcher N, Nagel T, Görke U-J et al (2016) Influence of the temperature on gas storage cavern convergence due to cyclic loading. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2016, UFZ, Leipzig, 22-23 March 2016

Böttcher N, Nagel T, Görke U-J et al (2015) Thermo-mechanical modelling of gas storage applications in salt caverns. Browser of the VI. International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering – COUPLED PROBLEMS 2015.  
<http://congress.cimne.com/coupled2015/frontal/ProgSesion.asp?id=26>. Accessed 8 May 2017

Böttcher N, Nagel T, Görke U-J et al. (2014) Numerische Untersuchungen zum Deformationsverhalten von Salzkavernen bei fluktuierenden Betriebsdrücken. In: Holzheu S, Kaufmann-Knoke R, Thies B (eds) Tagungsband FH-DGG: Grundwasser trifft Boden und Energie, Bayreuth, 2014

Böttcher N, Nagel T, Khaledi K et al (2013) Modeling deformation processes of salt caverns for gas storage due to fluctuating operation pressures. AGU Abstract Browser.  
<http://abstractsearch.agu.org/meetings/2013/FM/GC21B-0839>. Accessed 5 May 2017

Böttcher N, Schelenz S, Watanabe N et al (2013) Geophysikalische und numerische Aspekte der Charakterisierung flacher Geothermiesysteme. In: Tagungsband zum Sächsischen Geothermietag, Leipzig, 04. Dezember 2013

Böttcher N, Walther M, Nagel T et al (2014) Assessment of energy and gas storage in deep subsurface: storage in salt caverns. Browser of the XX. International Conference on Computational Methods in Water Resources 2014. <http://www.hydrosys.uni-stuttgart.de/institut/hydrosys/sonstiges/cmwr2014/default>. Accessed 8 May 2017

Böttcher N, Watanabe N, Nagel T et al (2016) Thermo-mechanical modeling of cyclic gas storage applications in salt caverns. Meeting Organizer Copernicus Office Browser,  
<http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-17733.pdf>. Accessed 8 May 2017

Chirla MA, Vienken T, Dietrich P et al (2016) Development of a direct push based in-situ thermal conductivity measurement system. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-7347.pdf>. Accessed 8 May 2017

Dietrich P, Schelenz S, Vienken T (2016) Towards a sustainable intensive thermal use of the shallow subsurface. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2016, UFZ, Leipzig, 22-23 March 2016

Firnbach L, Dietrich P, Vienken T (2014) Laboruntersuchungen zur Bestimmung verschiedener Einflussgrößen auf den elektrischen Widerstand und die Wärmeleitfähigkeit von Lockersedimenten. Browser der 74. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft 2014. <http://www.dgg-2014.de/56.php>. Accessed 8 May 2017

Firnbach L, Giordano N, Comina N et al (2013) Experimental heat flow propagation within porous media using electrical resistivity tomography (ERT). In: Proceedings of the European Geothermal Energy Congress, Pisa 3-7 June 2013

Firnbach L, Schelenz S, Vienken T et al (2013) Geoelectric measurements as an efficient monitoring strategy for shallow geothermic reservoirs. 2nd International Workshop on Geoelectrical Monitoring GELMON, Wien, December 2013. Berichte Geol. B.-A. 104

Firnbach L, Seiberts K, Dietrich P et al (2014) Bestimmung des Verhältnisses zwischen elektrischem und thermischem Widerstand homogener Sedimente in Abhängigkeit von verschiedenen Bodenparametern. In: Holzheu S, Kaufmann-Knoke R, Thies B (eds) Tagungsband FH-DGG: Grundwasser trifft Boden und Energie, Bayreuth, 2014

Firnbach L, Vienken T, Dietrich P (2015) Entwicklung eines Laborexperiments zur Bestimmung des Verhältnisses zwischen thermischer und elektrischer Leitfähigkeit von Böden. Browser der 75. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft 2015. <http://dgg-2015.de>. Accessed 8 May 2017

Firnbach L, Vienken T, Dietrich P (2014) Development of a laboratory experiment to derive the thermal conductivity based on electrical resistivity measurements. AGU Abstract Browser. <http://abstractsearch.agu.org/meetings/2014/FM/H43A-0947>. Accessed 5 May 2017

Lindner M, Schelenz S, Stollberg R et al (2015) Analysis of induced temperature anomalies along borehole heat exchangers. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2015/EGU2015-2552.pdf>. Accessed 8 May 2017

Nagel T, Böttcher N, Görke U-J et al (2017) Thermo-mechanical investigation of salt caverns for short-term hydrogen storage. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2016, UFZ, Leipzig, 15-16 March 2017

Nagel T, Böttcher N, Görke U-J et al (2014) Comparison and tensorial formulation of inelastic constitutive models of salt rock behavior and efficient numerical implementation. AGU Abstract Browser. <http://abstractsearch.agu.org/meetings/2014/FM/MR23C-4378>. Accessed 5 May 2017

Naumov D, Watanabe N, Bilke L et al (2016) Implementation of a modular software system for multiphysical processes in porous media. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-7345.pdf>. Accessed 8 May 2017

Schelenz S, Dietrich P, Vienken T (2016) Investigation of the influence of groundwater advection on energy extraction rates for sustainable borehole heat exchanger operations. Meeting Organizer Copernicus Office Browser,

<http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-3485.pdf>. Accessed 8 May 2017

Schelenz S, Firmbach L, Kalbacher T et al (2013) Strategies towards an optimized use of the shallow geothermal potential. AGU Abstract Browser.

<http://abstractsearch.agu.org/meetings/2013/FM/H51D-1214>. Accessed 5 May 2017

Schelenz S, Firmbach L, Shao H et al (2015) Novel approaches for an enhanced geothermal development of residential sites. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2015/EGU2015-2551.pdf>. Accessed 8 May 2017

Schelenz S, Firmbach L, Shao H et al (2014) Ansatz zur optimieren Bewirtschaftung intensiv geothermisch genutzter Flächen - Vorerkundung und Szenarienanalyse. In: Holzheu S, Kaufmann-Knoke R, Thies B (eds) Tagungsband FH-DGG: Grundwasser trifft Boden und Energie, Bayreuth, 2014

Schelenz S, Shao H, Firmbach L et al (2014) Benefit einer standortspezifischen Vorerkundung zur Nutzung flacher Geothermie in urbanen Wohngebieten. In: Bundesverband Geothermie e.V. (ed) Tagungsband „Der Geothermiekongress“, Essen, 2014

Seibertz KSO, Händel F, Dietrich P et al (2016) On the use of hydration heat for quality management of borehole heat exchanger grouting. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-12711.pdf>. Accessed 8 May 2017

Shao H, Hein P, Görke U-J et al (2016) Impact factors on the long-term sustainability of Borehole Heat Exchanger coupled Ground Source Heat Pump System. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2016/EGU2016-5730.pdf>. Accessed 8 May 2017

Shao H, Hein P, Schelenz S et al (2016) Impact factors on the long-term economic efficiency and environmental sustainability of borehole heat exchanger systems for the use of shallow geothermal resources. In: Abstracts of the UFZ EnergyDays 2016, UFZ, Leipzig, 22-23 March 2016

Vienken T, Reboulet E, Leven C et al (2015) Field evaluation of a direct push deployed sensor probe for vertical soil water content profiling. Meeting Organizer Copernicus Office Browser, <http://meetingorganizer.copernicus.org/EGU2015/EGU2015-5507.pdf>. Accessed 8 May 2017

Vienken T, Schelenz S, Firmbach L et al (2013) Monitoring von Untergrundtemperaturen in einem Wohngebiet mit intensiver geothermischer Nutzung. In: Bundesverband Geothermie e.V. (ed) Tagungsband „Der Geothermiekongress“, Essen, 2013

#### Abschlussarbeiten mit Projektbezug

Guth C (2014) Einsatz und Bewertung von nicht-invasiven und gering-invasiven Verfahren zur geothermischen Vorerkundung im oberflächennahen Untergrund am Fallbeispiel Taucha, Wohngebiet Wurzner Straße. Masterarbeit, Universität Leipzig

Lindner M (2015) Modellstudie zur Untersuchung induzierter Temperaturvariationen in Boden und Grundwasser durch die intensive Nutzung oberflächennaher Geothermie. Masterarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

Schelenz S (2017) Untersuchung des Einflusses ausgewählter Untergrundparameter auf die nachhaltige thermische Nutzung des oberflächennahen Untergrundes im urbanen Raum. Dissertation, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel





Helmholtz-Zentrum  
für Umweltforschung GmbH – UFZ  
Permoserstraße 15, 04318 Leipzig  
[www.ufz.de](http://www.ufz.de)

NICHT ZUM VERKAUF BESTIMMT.

---