

#### Universität Potsdam

#### Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät







Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ)

#### Bachelorarbeit

# Inverse Modellierungen zur Korrektur von Bohrlochtemperaturprofilen

Zur Erlangung des akademischen Grades "Bachelor of Science (B.Sc.)" im Fach Geowissenschaften

Vorgelegt von:

Alexander Prinz

Matrikelnummer: 777284

Erstgutachter: PROF. DR.-ING. HABIL. DR. RER. NAT. MICHAEL KÜHN

Universität Potsdam, Institut für Erd- und Umweltwissenschaften

Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ), Sektion 3.4 Fluidsystemmodellierung

Zweitgutachter: Dr.-Ing. Thomas Kempka

Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ), Sektion 3.4 Fluidsystemmodellierung

# Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich eidesstattlich, diese Arbeit selbstständig verfasst und nur die in der Arbeit kenntlich gemachten Quellen und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Des Weiteren versichere ich eidesstattlich, dass diese Arbeit nicht im Rahmen eines anderen Prüfungsverfahrens eingereicht wurde.

Potsdam, 16.04.2017	

# Danksagung

# "Science is a differential equation. Religion is a boundary condition."

~ ALAN M. TURING ~

#### Zusammenfassung

Bei einer Kampagne zur Messung von Bohrlochtemperaturprofilen in einem hydrothermalen Reservoir in Waiwera (Neuseeland) wurden fehlerhafte Messergebnisse generiert. Es stellte sich bei der Auswertung der Messdaten heraus, dass der dafür eingesetzte Temperatursensor verantwortlich war, weil er konstruktionsbedingt nicht für diese Art von Messung geeignet ist. Da der Thermistor im Sensor von einem Kunststoffgehäuse umgeben ist, kommt es zu einer verzögerten Wärmediffusion Bohrlochumgebung und Thermistor. Auf Grundlage der Wärmediffusionsgleichung wurde für jedes Bohrloch das Temperaturmessgerät modelliert und der gesamte Messvorgang durch eine Vorwärtssimulation reproduziert. Durch Modellinversionen konnte die fehlerhaft gemessene Umgebungstemperatur für jeden Beprobungsfall angepasst werden. Die erzielten Simulationsergebnisse der Arbeit wurden teilweise mit Messungen sowie Simulationsergebnissen anderer Autoren verglichen. Es konnte gezeigt werden, dass durch dieses Verfahren eine Korrektur der fehlerhaften Messergebnisse möglich ist.

# Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1  (a) Lage des Untersuchungsgebietes auf der Nordinsel Neuseelands und (b. Ausschnitt der Nordinsel mit Lagepunkt der Stadt Waiwera (verändert aus Oper Streetmap)
Abbildung 2 Satellitenbild von Waiwera mit den sechs beprobten Bohrlöchern B34, B47, B66, B74 BUN1, Wenderholm DW (verändert aus Digital Globe)
Abbildung 3  (a) zeigt den Temperatursensor. Das Bild wurde dem Produktdatenblatt des Herstellers entnommen. (b) zeigt eine grobe Skizze des Temperatursensors mi seinen Bemaßungen. Die Skizze wurde ebenfalls dem originalen Datenblat entnommen und um die Bemaßung erweitert
Abbildung 4 Schema des 1D-Modells vom Temperatursensor mit den Materialeigenschaften Anfangs- und Randwerten. Auf die genauen Werte der Materialeigenschaften und de Modellgeometrie wird in Kapitel 2.4.4 eingegangen. Die vertikalen Linier repräsentieren die Gitterzellen. Die Dreiecke stellen den Temperaturgradienten fü jede Bewegungsphase des Temperatursensors dar. Der linke Rand repräsentiert die Umgebungstemperatur, modelliert als Dirichlet-Randbedingung. Der rechte Modellrand ist als Null-Gradienten-Bedingung (Neumann-Bedingung) modelliert und repräsentiert die Beobachtungstemperaturwerte (gemessene Temperaturwerte) S
Abbildung 5 Der PEST ++-MUFITS-Arbeitsfluss als Flussdiagramm12
<b>Abbildung 6</b> Die thermische Diffusivität aufgetragen gegen ihre induzierte Oszillationsintensität de angepassten Temperaturwerte für Bohrloch B34. An der Stelle $\alpha = 2.5 \times 10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ existiert das globale Minimum der Funktion. Demnach ist dieser $\alpha$ -Wert optimal.
Abbildung 7 Temperaturprofil B34 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie der angepassten Temperaturwerten und Referenzwerten (Kühn & Stöfen, 2005 (gemessen im November 2001), ARWB, 1980; Gonzalez,1986)
Abbildung 8 Temperaturprofil BUN1 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie der angepassten Temperaturwerten und Referenzwerten von Kühn & Stöfen (2005) gemessen im November 2001

Abbildung 9 Temperaturprofil B66 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie Simulationsdaten (Kühn & Stöfen, 2004) und alten Messdaten (Kühn, 2001) 19
Abbildung 10 Temperaturprofil B47 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie der angepassten Temperaturwerten
Abbildung 11 Temperaturprofil B74 (tiefe Messung) mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie den korrigierten Temperaturwerten und einigen Referenzwerter (Kühn, 2001; ARWB, 1980; Gonzalez,1986; Kühn & Stöfen 2004)21
Abbildung 12 Temperaturprofil B74 (flache Messung) mit den aktuellen Messungen (Mai, 2017) sowie den korrigierten Temperaturwerten und einigen Referenzwerter (Kühn, 2001; ARWB, 1980; Gonzalez,1986, Kühn & Stöfen 2004)
Abbildung 13  Temperaturprofil Wenderholm DW mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie alten Messdaten von Kühn (2001)
Abbildung 14  (a, b) zeigen die beiden Seiten des originalen Produktdatenblattes des Temperatursensors von der Firma Geminiii
Abbildung 15  (a, b, c, d) zeigen die angepassten Temperaturwerte unter verschiedenen α-Werten (a) und (b) weisen eine deutlich erhöhte Intensität der Oszillation auf, wobei die vor (b) geringer zu (a) ist. (c) zeigt die Temperaturwerte für den optimalen α-Wert. Dies zeigt sich durch einen sehr glatten Funktionsverlauf. (d) weist wieder eine stärkere Intensität der Oszillation auf.
Abbildung 16 Für den Bohrlochfall B66 sind die Funktionswerte der Oszillationsmaßfunktion geger die thermische Diffusivität aufgetragen. Der Funktionsverlauf zeigt kein eindeutig erkennbares Minimum. An der Stelle $\alpha = 3.1 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ ist ein mögliches Maximum erkennbar (siehe Detailausschnitt in der Abbildung). Demzufolge könnte das potentielle Minimum an der Stelle $\alpha = 3.0 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ liegen

#### **Tabellenverzeichnis**

#### Tabelle 1:

#### Tabelle 2:

## Abkürzungsverzeichnis

ASCII American Standard Code for Information Interchange

(amerikanischer Standard-Code zum Informationsaustausch)

CSV Comma separated values

(Komma getrennte Werte)

equil equilibriert

gem gemessen

MUFITS Multiphase Filtration Transport Simulator

(Mehrphasen-Filtrations-Transport-Simulator)

m ü.N.N. Meter über Normalnull

NTC Negative Coefficient Thermistor

(Negativ-Koeffizient-Thermistor)

PEST++ Parameter Estimation

(Parameterschätzung)

VTK Visualization Toolkit

(Visualisierungswerkzeugkasten)

1D eindimensional

# Symbolverzeichnis

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	Bedeutung
A		Matrix A
$A^{-1}$		Inverse der Matrix A
α	$[m^2s^{-1}]$	thermische Diffusivität
$\overline{\alpha}$	$[m^2s^{-1}]$	arithmetischer Mittelwert aller $\alpha$ – Werte
$\vec{a}$		Vektor a
$c_p$	$[kJ\cdot(kg\cdot K)^{-1}]$	spezifische Wärmekapazität
$\mathrm{d}_{\overline{lpha}}$		mittlere absolute Abweichung zum arithmetischen Mittelwert aller α – Werte
Δα	$[m^2s^{-1}]$	Schrittweite der α – Werte
Ψ		Temperaturwert der Temperaturfunktion $\Psi\left(\alpha,z\right)$ (Temperaturfeld der angepassten Temperaturen)
grad		Gradient
i		Index
λ	$[W \cdot (m \cdot K)^{-1}]$	spezifische Wärmeleitfähigkeit
L	[m]	Länge
μ̂		Wahrscheinlichster Wert des angepassten Parameters
N		Anzahl
Ω	[K·m <sup>-1</sup> ]	Oszillationsintensität der angepassten Temperaturprofile
$\vec{q}$	[W·m <sup>-2</sup> ]	Wärmestromdichte
Q	[kg·m <sup>-3</sup> ]	Dichte
σ		Standardabweichung
t	[s, h]	Zeitpunkt
T	[°C; K]	Temperatur
$T_0$	[°C]	Initialtemperatur
$T_{\text{gem}}$	[°C]	gemessene Temperaturwerte
$T_U$	[°C]	Umgebungstemperatur des Temperatursensors
$T_T$	[°C]	Temperatur am Thermistor
Tequil	[°C]	Temperaturwert des Temperatursensors vor Beginn der Messung

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	Bedeutung
X	[m]	Stelle/Punkt im Temperatursensormodell
Z	[m]	Stelle/Punkt der Tiefe im Bohrloch
\		Mengenoperator für die Beziehung "ohne"
U		Mengenoperator für die Beziehung "mit"
	[°C]	Grad Celsius
	[h]	Stunde
	[K]	Kelvin
	[kJ]	Kilojoule
	[kg	Kilogramm
	[m]	Meter
	[s]	Sekunde
	[W]	Watt

# Inhaltsverzeichnis

	4
1.1 Problemstellung	1
1.2 Motivation	1
1.3 Methodik	2
2 Material und Methoden	3
2.1 Lage und Geologie des Untersuchungsgebiets	
2.2 Eingesetzter Temperatursensor	
2.3 Numerisches Vorwärtsmodell	
2.3.1 Fourier'sches Gesetz und konduktiver Wärmetransport	
2.3.2 Numerischer Simulator	7
2.3.3 Modell des Temperatursensors	8
2.4 Inverses Modell	
2.4.1 Konzept eines inversen Modells	9
2.4.2 Parameterschätzung mithilfe des Programmpaketes PEST++	. 10
2.4.3 PEST++ - MUFITS - Arbeitsfluss	. 10
2.4.4 Anpassung der thermischen Diffusivität	. 13
2.4.5 Auswertung der Oszillationsintensitätsfunktion am Beispiel des Bohrlochs B34	. 14
2.4.6 Statistische Betrachtung der angepassten thermischen Diffusivität	. 15
3 Ergebnisse	. 16
3.1 Angepasste Temperaturprofile	. 16
3.2 Diskussion	
3.2.1 Unsicherheitsanalyseergebnisse durch PEST++	. 24
3.2.2 Bohrloch B34	. 24
3.2.3 Bohrloch BUN1	. 25
3.2.4 Bohrloch B66	. 25
3.2.5 Bohrloch B47	. 25
3.2.6 Bohrloch B74 (tief)	. 26
3.2.7 Bohrloch B74 (flach)	. 26
3.2.6 Bohrloch Wenderholm DW	
4 Zusammenfassung und Ausblick	. 27

Literaturverzeichnis	. İ
Anhang A: Produktdatenblatt des Temperatursensors	iii
Anhang B: Angepasste Temperaturprofile für B34 unter verschiedenen alpha-Werten.	iv
Anhang C: Omega-alpha-Plot zu Bohrloch B66	٧

#### 1 Einleitung

#### 1.1 Problemstellung

Zum Verständnis komplexer hydrothermaler Vorgänge in einem Reservoir durch Prozesssimulationen wurden im Mai 2017 am Standort Waiwera (Neuseeland) in einer Messkampagne Temperaturprofile von diesem Reservoir gemessen. Zu diesem Zweck wurde ein Temperatursensor mit einer Aufzeichnungsfunktion verwendet und mit gleichmäßiger Geschwindigkeit in sechs verschiedene Bohrlöcher hinabgelassen. Somit existiert ein Ort-Zeit-Temperaturprofil für jedes vermessene Bohrloch. Der verwendete Temperatursensor ist jedoch nicht für solche Temperaturmessungen geeignet, da er konstruktionsbedingt mindestens 20 min an jedem Messpunkt equilibrieren muss. Der Grund dafür ist, dass sich zwischen dem Thermistor und der zu messenden Umgebung ein Schutzgehäuse befindet, welches die Wärmediffusion zwischen der Umgebung und dem Thermistor (Messfühler im Temperatursensor) verzögert. Die so gemessenen Temperaturen entsprechen deshalb nicht den tatsächlichen Temperaturen der Bohrlochumgebung.

#### 1.2 Motivation

Messkampagnen dieser Art sind durch einen personellen sowie organisatorischen Aufwand mit hohen Kosten verbunden. Im Rahmen dieser Arbeit galt es deshalb ein Verfahren zu entwickeln, welches die gewonnenen Daten dennoch nutzbar macht und somit eine Wiederholung der Messkampagne möglichst vermeidet.

Die dem Verfahren zu Grunde liegende Hypothese beruht auf der Quantifizierbarkeit des thermodynamischen Prozesses im Temperatursensor, der Wärmediffusion. Durch numerische Simulationen der Wärmediffusion im Temperatursensor bzw. des gesamten Messvorgangs werden die Temperaturen der Bohrlochumgebung durch einen inversen Modellierungsansatz aus den gemessenen Temperaturen ermittelt.

#### 1.3 Methodik

Um die Umgebungstemperatur am Temperatursensor zu ermitteln, wird der Wärmediffusionsprozess im Sensor durch eine Rechner-gestützte Vorwärtssimulation modelliert. Dabei wird der Prozess näherungsweise durch das numerische Lösen der Wärmediffusionsgleichung quantifiziert. Kapitel 2.3.1 beschreibt den physikalischen sowie mathematischen Hintergrund der Wärmediffusionsgleichung. Die Kapitel 2.3.2 und 2.3.3 gehen auf das eingesetzte Programm zur Simulation sowie auf das Modellschema des modellierten Temperatursensors ein.

Zum Annähern der Umgebungstemperaturen werden sowohl der Proportionalitätskoeffizient der Wärmediffusionsgleichung sowie auch die Randwerte der Wärmediffusionsgleichung für eine Modellseite angepasst. Die Randwerte entsprechen dabei den gesuchten Bohrlochumgebungstemperaturen. Die Randwerte der anderen Modellseite entsprechen den bekannten Messwerten, welche als bekannte Parameter in den Lösungsprozess eingehen. Durch Invertierung des Modells werden aufgrund der gemessenen Temperaturwerte über eine Parameteranpassung die tatsächlichen Temperaturwerte angenähert. Der Proportionalitätskoeffizient der diffusionsgleichung wird ebenfalls, jedoch indirekt durch die Modellinversion und ein zusätzliches heuristisch-numerisches Verfahren bestimmt (siehe dazu Kapitel 2.4.4). Die Modellinversion erfolgt ebenfalls Rechner-gestützt über ein Programm, welches mit dem Vorwärtssimulator gekoppelt wird. Das Programm und der Kopplungsprozess werden in den Kapiteln 2.4.2 und 2.4.3 näher beschrieben.

Die gemessenen Temperaturwerte fließen in den Simulationsprozess als Beobachtungsbzw. Zielwerte ein. Dazu wurde eine Rechner-Routine geschrieben, welche die Temperatur-Zeit-Daten aus den digitalisierten Messprotokollen der Messkampagne ausliest und in die Eingabedatei des Vorwärtssimulators in Form vorgegebener Randwerte implementiert. Die Erstellung sämtlicher notwendiger Eingabedateien sowie das Auslesen der Ausgabedateien zu Nachprozessierungszwecken (Unsicherheitsanalyseauswertung, Ergebnisvisualisierung etc.) wurde über diverse Rechner-Routinen nahezu vollständig automatisiert.

#### 2 Material und Methoden

#### 2.1. Lage und Geologie des Untersuchungsgebiets

Waiwera ist ein Küstenort, welcher ca. 40 km nördlich von Auckland auf der Nordinsel Neuseelands liegt. Abbildung 1 zeigt Waiwera in seiner geographischen Lage.

Unter der Stadt existiert ein oberflächennahes Grundwasserreservoir, in dem es zu einem Warmwassereintrag aus einem tiefergelegenen hydrothermalen Reservoir kommt. Das oberflächennahe Reservoir besteht aus Sandstein und Silt und wird der Waitemata-Gruppe zugeordnet. Die Mächtigkeit der Formation beträgt 400 – 425 m. Sie ist durch tektonische Aktivitäten zerklüftet und bietet dadurch Fließwege für Fluide. Unterhalb der Waitemata-Gruppe befindet sich eine impermeable Grauwacke-Formation, welche der Waiheke-Gruppe zuzuordnen ist. Durch Störungen der Grauwacke-Formation strömt ca. 50 °C warmes Thermalwasser aus einem tiefergelegenen hydrothermalen Reservoir in die Waitemata-Gruppe (Kühn & Stöfen, 2005). In Abbildung 2 sind die relevanten Bohrlochorte mit ihren Bezeichnungen, wie sie in dieser Arbeit geführt werden, zu sehen.



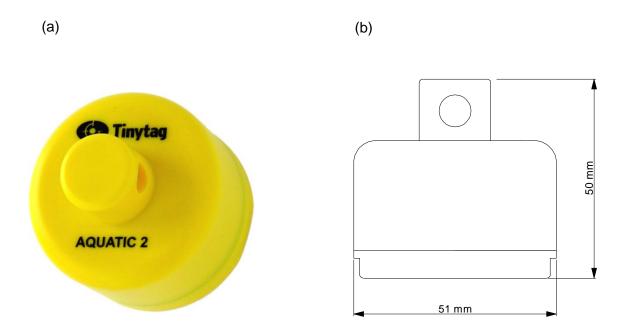
**Abb. 1:** (a) Lage des Untersuchungsgebietes auf der Nordinsel Neuselands und (b) Ausschnitt der Nordinsel mit Lagepunkt der Stadt Waiwera (verändert aus Open Streetmap).



Abb. 2: Satellitenbild von Waiwera mit den sechs beprobten Bohrlöchern B34, B47, B66, B74, BUN1, Wenderholm DW (verändert aus Digital Globe)

#### 2.2 Eingesetzter Temperatursensor

Bei dem eingesetzten Temperatursensor handelt es sich um das Modell "Tinytag Aquatic 2" der Firma Gemini (siehe Abbildung 3 (a)). Der Temperatursensor basiert auf einem Heißleiter-Thermistor (NTC-Prinzip) und deckt einen Temperaturmessbereich von -40 °C bis 70 °C ab. Laut Hersteller liegt die Messgenauigkeit im relevanten Temperaturbereich bei ± 0.01 °C. Die Aufnahmerate des Gerätes ist variierbar von einer Aufnahme pro Sekunde bis einer Aufnahme pro 10 Tage. Die für die Messung eingestellte Rate betrug eine Aufnahme pro Sekunde. Maximal sind bei dieser eingestellten Rate 32000 Aufnahmen möglich, was einer maximalen Aufnahmezeit von ca. 8,89 h entspricht. Abbildung 3 (b) zeigt den Sensor skizzenhaft mit einer groben Bemaßung. Alle verfügbaren Maße sowie die genannten Daten wurden dem Produktdatenblatt entnommen (siehe Seite iii, Anhang A).



**Abb. 3:** (a) zeigt den Temperatursensor. Das Bild wurde dem Produktdatenblatt des Herstellers entnommen. (b) zeigt eine grobe Skizze des Temperatursensors mit seinen Bemaßungen. Die Skizze wurde ebenfalls dem originalen Datenblatt entnommen und um die Bemaßung erweitert.

#### 2.3 Numerisches Vorwärtsmodell

#### 2.3.1 Fourier'sches Gesetz und konduktiver Wärmetransport

Das Fourier'sche Gesetz beschreibt den konduktiven Transport von Wärme in Feststoffen und wurde 1807 von Baptiste Joseph Fourier (1768-1830) formuliert (Fourier,1822). Es beruht auf dem proportionalen Zusammenhang zwischen der Wärmestromdichte  $\vec{q}$  und dem Temperaturgradienten grad T zwischen zwei Orten (siehe Gleichung 1). Der Wärmeleitkoeffizient  $\lambda$  bestimmt das Maß dieser Proportionalität.

$$\vec{q} = -\lambda \ grad(T) \tag{1}$$

Damit Wärme konduktiv zwischen mehreren Orten übertragen werden kann, muss ein Temperaturunterschied zwischen diesen Orten vorhanden sein (Temperaturgradient). Gemäß dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik breitet sich Wärme vom Ort mit höherer Temperatur entgegengesetzt orientiert entlang des Temperaturgradienten zum Ort mit geringerer Temperatur aus (Lienhard & Lienhard, 2001). Das allgemeine Fourier'sche Gesetz beschreibt den konduktiven Wärmetransport bezüglich des Temperaturgradienten jedoch nur stationär. Es berücksichtigt also keine zeitliche Veränderung des Temperaturgradienten.

Aus dem Fourier'schen Gesetz leitet sich die Wärmediffusionsgleichung ab. Sie beschreibt den proportionalen Zusammenhang zwischen der zeitlichen Temperaturänderung zu einem Zeitpunkt t und der Änderung des Temperaturgradienten an einem Ortspunkt x (Divergenz des Gradienten). Das Maß der Proportionalität wird durch die thermische Diffusivität α bestimmt. Mathematisch ist die Wärmediffusionsgleichung den partiellen Differentialgleichungen 2. Ordnung mit parabolischem Charakter zuzuordnen. Parabolische partielle Differentialgleichungen beschreiben viele physikalische Prozesse wie Diffusion von Stoffen in Fluiden, Wärmediffusion, Schallausbreitung etc., welche nicht nur vom Ort, sondern auch von der Zeit abhängen (Instationarität). Gleichung 2 zeigt die Wärmdiffusionsgleichung für den eindimensionalen Fall.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \, \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{2}$$

Die thermische Diffusivität ist eine materialspezifische Größe und setzt sich aus der Dichte  $\varrho$ , der spezifischen Wärmekapazität  $c_p$  sowie der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  zusammen. Gleichung 3 stellt den physikalisch-mathematischen Zusammenhang der genannten Größen dar.

$$\alpha = \frac{\lambda}{c_p \ \varrho} \tag{3}$$

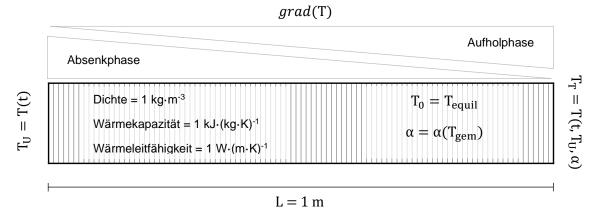
#### 2.3.2 Numerischer Simulator

Zur Umsetzung der numerischen Simulationen wurde der Mehrphasenfluss-Simulator MUFITS (MUltiphase FIltration Transport Simulator) (Afanasyev, 2018) verwendet. Zwar liegt das Hauptaugenmerk dieses Simulators auf der Modellierung gekoppelter hydrodynamischer Prozesse auf großen Skalen, jedoch können auch kleinskalige Modelle simuliert werden. Die Validität der von MUFITS gerechneten Ergebnisse konnte bereits mehrfach in diversen Vergleichsrechnungen (Benchmarks) gegenüber etablierten kommerziellen Simulatoren gezeigt werden (Afanasyev et al., 2013; De Lucia et al., 2016).

Der Entwickler hat auf eine grafische Benutzeroberfläche verzichtet. Die Eingabe aller relevanten Daten zur Erstellung eines Modells wird durch eine ASCII-Textdatei getätigt. Diese Daten sind unter anderem Simulationsmodi, Modellgeometrieparameter, physikalische Parameter sowie eventuelle Verknüpfungen zu externen Parameter-Dateien. Die Ausgabe der Ergebnisse kann über verschiedene Dateiarten erfolgen. Neben speziellen Formaten, welche auch andere Simulatoren nutzen, und dem allgemeinen CSV-Format ist auch die Ausgabe als VTK-Datei möglich. Das VTK-Format bietet eine flexible Möglichkeit zur Datenvisualisierung, zum Beispiel mit dem Programm ParaView (Ahrens et al., 2005). Speziell für den vorliegenden Fall der Wärmetransportgleichung nutzt MUFITS einen impliziten Finite-Differenzen-Ansatz mit dem Newton-Verfahren als Lösungsprinzip (Andrey Afanasyev, persönliche Email-Korrespondenz vom 26.03.2018)

#### 2.3.3 Modell des Temperatursensors

Um den Wärmetransport innerhalb des Temperatursensors zu simulieren, muss er geometrisch und thermodynamisch sinnvoll abgebildet werden. Das bedeutet jedoch nicht zwangsläufig, dass seine geometrisch-thermodynamische Gestalt realitätsnah modelliert werden muss. Oftmals können reale dreidimensionale Probleme um eine oder zwei Dimensionen reduziert werden. Daher wird der Temperatursensor als 1D-Problem modelliert und verlangt deshalb als einzigen Geometrieparameter nur eine Länge L. Diese Länge wurde in 100 äquidistante Teillängen (Gitterzellen) der Länge Δx diskretisiert, wobei die Anzahl durch einen vorhergehenden Konvergenztest bestimmt wurde. Dadurch ist das Modell genügend fein, um eine Konvergenz und optimale Recheneffizienz zu gewährleisten. Der ganze Temperatursensor wurde als homogene Einheit betrachtet und besteht im Modell deshalb nur aus einem Material. Die Datenaufnahmerate des Temperatursensors betrug bei der Messung eine Aufnahme pro Sekunde. Um Rechenressourcen zu sparen, wurde eine gröbere zeitliche Diskretisierung von etwa 10 Sekunden bestimmt. Die in das Modell eingebrachte Wärme bildet die Bohrloch-Umgebungstemperatur ab. Sie wurde als Dirichlet-Randbedingung modelliert und repräsentiert die Temperatur T<sub>II</sub> am Modellrand, welche angepasst werden soll. Der andere Modellrand wurde durch eine Nullgradienten-Bedingung (Neumann-Randbedingung) definiert und repräsentiert den Thermistor bzw. die gemessene Temperatur T<sub>T</sub>. Unter der Voraussetzung, dass sich der Temperatursensor vor Messbeginn lange genug in einer temperaturstabilen Umgebung aufhielt und equilibriert war, wurde die Initialtemperatur T<sub>0</sub> aller Gitterzellen auf den erstgemessenen Wert T<sub>equil</sub> gesetzt. Der im Modell vorherrschende Temperaturgradient grad T resultiert aus beiden Randwerten sowie den geometrisch-thermodynamischen Parametern. Seine Richtung ist abhängig davon, ob der Temperatursensor abwärtsgefahren oder aufgeholt wird. Beide Fälle wurden im Modell in einem Simulationsgang berücksichtigt. Die thermische Diffusivität α(T<sub>gem</sub>) wird als Funktion der gemessenen Temperaturen gesehen und musste zusätzlich angepasst werden (siehe dazu Kapitel 2.4.4). Abbildung 5 zeigt den schematischen Modellaufbau des 1D-Modells. In Kapitel 2.4.4 werden die genauen Materialwerte und Geometrieparameterwerte erläutert.



**Abb. 4:** Schema des 1D-Models vom Temperatursensor mit den Materialeigenschaften, Anfangs- und Randwerten. Auf die genauen Werte der Materialeigenschaften und der Modellgeometrie wird in Kapitel 2.4.4 eingegangen.

Die vertikalen Linien repräsentieren die Gitterzellen. Die Dreiecke stellen den Temperaturgradienten für jede Bewegungsphase des Temperatursensors dar. Der Linke Rand repräsentiert die Umgebungstemperatur, modelliert als Dirichlet-Randbedingung. Der rechte Modellrand ist als Null-Gradienten-Bedingung (Neumann-Bedingung) modelliert und repräsentiert die Beobachtungstemperaturwerte (gemessene Temperaturwerte).

#### 2.4 Inverses Modell

#### 2.4.1 Konzept eines inversen Modells

Bei einem Vorwärtsmodell werden an diskreten Stellen die Funktionswerte der Lösungsfunktion einer partiellen Differentialgleichung anhand gegebener Initial- und Randwerte sowie bekannter Proportionalitätskoeffizienten bestimmt. Bei einem inversen Modell bestimmt man dagegen Parameter, z.B. den Proportionalitätskoeffizienten, die Randwerte etc. anhand bekannter Lösungsfunktionswerte. Im Fall der Modelle dieser Arbeit sind die gesuchten Parameter die Temperaturwerte auf einem der beiden Modellränder, welche der Sensorumgebung zum Zeitpunkt t zugeordnet werden, sowie die Proportionalitätskonstante in Form der thermischen Diffusivität. Letztere wird jedoch indirekt durch das inverse Modell und einen weiteren numerischen Ansatz ermittelt (siehe dazu Kapitel 2.4.4). Gleichung 6 stellt ein solches Gleichungssystem dar. Bei einem inversen Modell wird das Gleichungssystem invertiert (Gleichung 7).

$$\mathbf{A}\vec{b} = \vec{c} \tag{6}$$

$$\mathbf{A}^{-1}\vec{c} = \vec{b} \tag{7}$$

Der im Vorwärtsmodell gegebene Parametervektor  $\vec{b}$  ist dabei die gesuchte Lösung, wobei der im Vorwärtsmodell gesuchte Funktionswertevektor  $\vec{c}$  gegeben sein muss. Die Matrix **A**, welche die Ableitungen der Lösungsfunktion nach Ort und Zeit abbildet (Jacobi-Matrix), muss im inversen Gleichungssystem invertiert werden.

#### 2.4.2 Parameterschätzung mithilfe des Programmpaketes PEST++

PEST++ (Welter et al., 2015) ist eine Weiterführung des Programmpaketes PEST (Doherty, 2016) ("Parameter EST imation") und erlaubt modellunabhängige Parameterschätzungen sowie Unsicherheitsanalysen. Es funktioniert nach dem im Kapitel 2.4.1 erläuterten Prinzip der Inversion eines Gleichungssystems. Die Daten des zu invertierenden Gleichungssystems erhält PEST++ durch eine Eingabedatei sowie die Simulationsergebnisse eines mit PEST++ gekoppelten Simulators. Zum Invertieren und Lösen des Gleichungssystems nutzt PEST++ das Jacobi-Verfahren. Für die optimierte Annäherung wird das Prinzip der kleinsten Fehlerquadrate durch die Gauss-Marquard-Levenberg-Methode genutzt (Welter et al., 2015).

PEST++ basiert wie auch MUFITS auf einem Konzept ohne grafische Benutzeroberfläche. Dadurch ist eine flexible und einfache Kommunikation mit dem gekoppelten Vorwärtssimulator möglich, sofern seine Ausgabedateien kompatiblen Formaten entsprechen. Die Dateneingabe sowie -ausgabe geschieht über ASCII-Text-Dateien. PEST++ ist unter der GNU GPL3 Lizenz frei erhältlich.

#### 2.4.3 PEST++-MUFITS-Arbeitsfluss

Die Modellinversion erfolgt über einen iterativen Lösungsprozess, in dem die beiden Programme PEST++ und MUFITS miteinander gekoppelt sind. Durch die hohe Flexibilität durch die jeweiligen Eingabe- und Ausgabedateien in Form von ASCII-Dateien kommunizieren beide Programme ideal miteinander.

Eine Kopplung beider Programme wurde schon in anderen Arbeiten erfolgreich realisiert (Kempka & Norden, 2017; Kempka et al., 2017).

Alle Parameter, die MUFITS zum Lösen der Wärmediffusionsgleichung benötigt, werden über die MUFITS-Eingabedatei an MUFITS übergeben. PEST++ variiert in jedem Iterationsschritt die anzupassenden Parameter in der MUFITS-Eingabedatei. Nach dem Variieren der Parameter initiiert PEST++ eine neue Simulation durch MUFITS. Eine PEST++-Vorlagedatei dient PEST++ als Formatierungsvorlage für die MUFITS-Eingabedatei. In einer PEST++-Eingangsdatei stehen die Beobachtungswerte mit den korrespondierenden Variablenbezeichnungen. Mit diesen werden nach jedem Iterationsschritt die Simulationsergebnisse mit den Zielwerten verglichen und evaluiert. PEST++ verwendet verschiedene Kriterien zum Bestimmen des Iterationsendes. Das Ziel ist das Auffinden bzw. Annähern des Minimums einer Zielfunktion. Die Konvergenz des Modells wird dann angenommen, wenn entweder das Minimum dieser Zielfunktion genügend angenähert oder erreicht wurde oder sich der Wert der Zielfunktion nicht bzw. nur noch geringfügig durch weitere Iterationsschritte ändert (Gradientenverfahren) (Doherty, 2005). Nach Beendigung des Iterationsprozesses werden von PEST++ die optimierten Parameterwerte in eine PEST++-Ausgabedatei geschrieben. In ihr stehen des Weiteren Unsicherheitsanalyse-Parameter wie Residuen, Bestimmtheitsmaß und die zweifachen Standardabweichungen zu jedem angepassten Parameter. Abbildung 5 zeigt schematisch den PEST++-MUFITS-Arbeitsfluss.

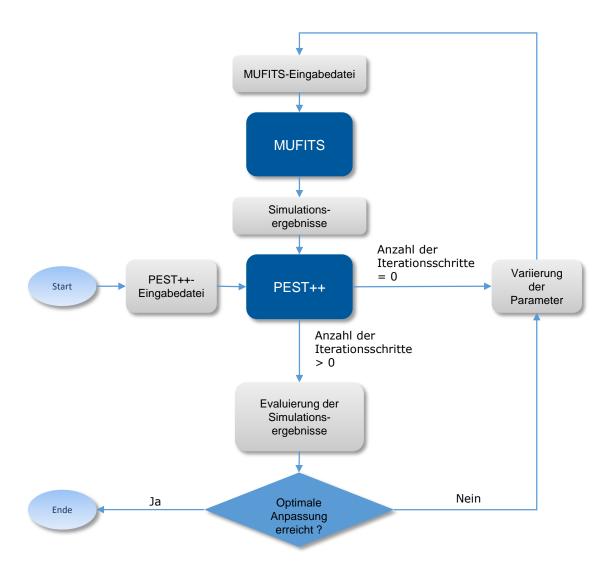


Abb. 5: Der PEST ++-MUFITS-Arbeitsfluss als Flussdiagramm

#### 2.4.4 Anpassung der thermischen Diffusivität

Um die Bohrlochtemperaturen anpassen zu können, muss auch die thermische Diffusivität angepasst werden. Da keine geometrischen und materialspezifischen Parameter des Temperatursensors vorliegen, musste ein Verfahren entwickelt werden, das unabhängig davon funktioniert. Dazu wurden alle spezifischen Parameter auf konstante Werte normiert. Die Länge des Modells wurde auf 1 m und die Dichte des Materials 1 kg·m³ gesetzt. Die spezifische Wärmekapazität wurde auf den Wert 1 kJ·(kg·K)³ gesetzt. Somit ist der Wert der thermischen Diffusivität gleich dem Wert der Wärmeleitfähigkeit multipliziert mit  $10^3$ . Der Faktor  $10^3$  resultiert daraus, dass der Simulator die spezifische Wärmekapazität in kJ·(kg·K)³ und nicht in J·(kg·K)³ erhält. Alle Werte bis auf die Temperaturleitfähigkeit werden unverändert an den Simulator übergeben. Lediglich die Wärmeleitfähigkeit wird verändert, wodurch indirekt die thermische Diffusion verändert wird. Jedes Modell wurde mit verschiedenen Werten für die thermische Diffusivität gerechnet. Dabei wurde ein Wertebereich von  $10^{-3}$ m²s¹ bis  $7 \times 10^{-3}$ m²s¹ mit einer Schrittweite  $\Delta \alpha = 0.1 \times 10^{-3}$ m²s¹¹ durchlaufen.

Das Modell simuliert in einem Lauf sowohl die Ab- als auch die Auffahrt. Da beide Messkurven, also Abwärts- und Aufwärtsphase des Temperatursensors, in einem Simulationslauf angenähert werden müssen, reagiert das System sehr sensibel bezüglich der thermischen Diffusivität. Diese Sensibilität zeigt sich durch Oszillation der angepassten Temperaturwerte. Auf Seite iv im Anhang B sind beispielhaft für Bohrloch B34 vier Anpassungen der Temperaturen für unterschiedliche Werte der thermischen Diffusivität und deren induzierte Oszillation dargestellt.

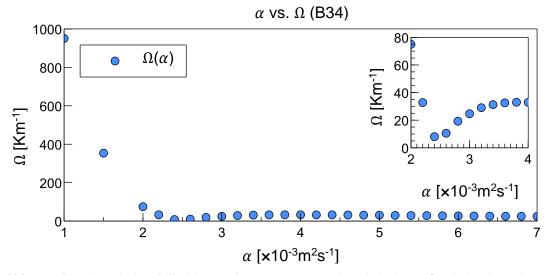
Über die Funktion  $\Omega(\alpha,\psi(\alpha,z))$  (Gleichung 8) kann über die Intensität der Oszillation der angepassten Temperaturwerte ( $\psi$ ) heuristisch der optimale Wert der thermischen Diffusivität bestimmt werden. Die Funktion wertet dabei den linksseitigen sowie rechtsseitigen Differenzenquotienten der Temperaturfunktion  $\psi(\alpha,z)$  an jeder Stelle  $z_i$  der Tiefe des Bohrlochs aus. z(i=0) und z(i=N-1) werden entsprechend ausgelassen, da an diesen Stellen nicht beide Differenzenquotienten existieren. N ist die Anzahl aller bekannten Stellen der Temperaturfunktion  $\psi(\alpha,z)$ . Dabei gilt, dass die absolute Differenzenzender Differenzenquotienten umso kleiner ist, je glatter der Funktionsverlauf ist.

Um die globale Oszillation, also die Oszillation über den gesamten Verlauf von  $\psi(\alpha,z)$ , auszuwerten, werden die Werte der absoluten Differenzen beider Differenzenqotienten über alle Stellen  $z_i$  summiert. Die Summe muss für einen optimalen Wert der thermischen Diffusivität minimal sein.

$$\Omega(\alpha, \Psi(\alpha, z)) = \sum_{i=1}^{N-2} \left| \frac{\Psi(\alpha, z_{i+1}) - \Psi(\alpha, z_i)}{z_{i+1} - z_i} - \frac{\Psi(\alpha, z_i) - \Psi(\alpha, z_{i-1})}{z_i - z_{i-1}} \right|$$
(8)

# 2.4.5 Auswertung der Oszillationsintensitätsfunktion am Beispiel des Bohrlochs B34

Abbildung 6 zeigt den Funktionsgraphen der Oszillationsintensitätsfunktion für die Simulation zu Bohrloch 34.



**Abb. 6:** Die thermische Diffusivität aufgetragen gegen ihre induzierte Oszillationsintensität der angepassten Temperaturwerte für Bohrloch B34. An der Stelle  $\alpha = 2,5 \times 10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$  existiert das globale Minimum der Funktion. Demnach ist dieser  $\alpha$ -Wert optimal.

Der Funktionsverlauf zeigt nahe dem Wert 2,5×10<sup>-3</sup>m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup> das globale Minimum. Mit abnehmenden Werten der thermischen Diffusivität nimmt die Oszillation ab dem globalen Minimum stark zu. Bei einer Erhöhung des Wertes ab dem Minimum nimmt die Oszillation ebenfalls, jedoch im weitaus geringerem Maße zu. Nahe dem Wert 4×10<sup>-3</sup>m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup> erreicht die Funktion ihr globales Maximum. Anschließend nimmt die Oszillation mit zunehmenden Werten wieder stetig mit asymptotisch gegen Null strebenden Verlauf ab.

Ab diesen Stellen verschiebt sich mit steigendem  $\alpha$  der gesamte Graph der Bohrlochtemperaturen gleichmäßig nach links, wobei die angepasste Maximaltemperatur ab Überschreiten eines bestimmtem  $\alpha$  sogar geringer ist als die gemessene Maximaltemperatur.

Bis Bohrloch B66 konnten alle Temperaturleitkoeffizienten sehr gut durch die Oszillationsintensitätsfunktion angepasst werden. Der Graph der Oszillationsintensitätsfunktion im Fall des Bohrlochs B66 zeigt allerdings kein eindeutig erkennbares Minimum. Er weist, wie für alle anderen Fälle auch, einen sehr glatten Verlauf auf. An der Stelle  $\alpha = 3.1 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  ist jedoch ein Funktionswert erkennbar, welcher dem sonst glatten Verlauf nicht folgt und als potenzieller Maximalwert vermutet werden kann (siehe Seite v Anhang C). An der Stelle  $\alpha = 3.0 \times 10^{-3} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  könnte demnach das Minimum der Funktion liegen und wird für die Modellierung zu diesem Bohrloch als  $\alpha$ -Wert benutzt. Im folgenden Kapitel wird diese Annahme statistisch überprüft.

### 2.4.6 Statistische Betrachtung der angepassten thermischen Diffusivität

Tabelle 1 zeigt die Ergebnisse der Anpassung der thermischen Diffusivität. Unter allen Werten sind Unterschiede zu erkennen. Der für das Bohrloch B66 angenommene Wert für die thermische Diffusion gilt unter Vorbehalt und wird im weiteren Verlauf auf seine Validität statistisch untersucht.

**Tab. 1:** Bohrlochabhängige Werte der thermischen Diffusivität für alle Bohrlöcher. Der für das Bohrloch B66 gilt als angenommener Wert (siehe Kapitel 2.4.5).

Bohrloch	$\alpha$ - Wert [×10 <sup>-3</sup> m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
B34	2,50
B47	3,28
B66	3,00*
BUN1	2,70
B74 (tief)	3,00
B74 (flach)	2,45
Wenderholm DW	2,60
BUN1 B74 (tief) B74 (flach)	2,70 3,00 2,45

<sup>\*</sup>angenommener Wert (siehe Kapitel 2.4.5)

Die Tabelle 2 enthält die relevanten statistischen Auswertungen wie den arithmetischen Mittelwert  $\overline{\alpha}$  sowie die mittlere absolute Abweichung vom arithmetischen Mittelwert d $\overline{\alpha}$ . Dabei wurde zwischen zwei Fällen unterschieden. Alle Größen wurden für den ersten Fall ohne B66 betrachtet (deklariert durch ,\B66'). Im zweiten Fall wurden alle genannten Größen noch einmal zusammen mit dem Ergebnis für B66 ermittelt (deklariert durch ,\B66'). Der für B66 angenommene Wert von  $3\times10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$  liegt im Bereich des arithmetischen Mittelwertes  $\overline{\alpha}_{\backslash B66}$  summiert mit der mittleren absoluten Abweichung  $d_{\overline{\alpha}\backslash B66}=3,02\times10^{-3} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$  und kann demnach als potenziell valider Wert angenommen werden. Für alle Werte, einschließlich des geschätzten Wertes für B66, ergibt sich eine relative mittlere Abweichung von 9,32 % zum arithmetischen Mittelwert aller Werte. Die mittlere relative Reproduzierbarkeit der physikalisch-geometrischen Parameter der Temperatursensormodelle liegt somit bei 90,68 %.

**Tab. 2:** Statistische Auswertung der verschiedenen  $\alpha$ -Werte.  $\bar{\alpha}_{\backslash B66}$  ist der arithmetische Mittelwert aller  $\alpha$ -Werten ohne dem  $\alpha$ -Wert von Bohrlochmodell B 66.  $\bar{\alpha}_{\cup B66}$  ist der arithmetische Mittelwert aller  $\alpha$ -Werte. d $_{\bar{\alpha}\backslash B66}$  ist die mittlere absolute Abweichung aller  $\alpha$ -Werte zum Mittelwert ohne Einbeziehung vom  $\alpha$ -Wert des Bohrlochmodells B66. d $_{\bar{\alpha}\cup B66}$  ist die mittlere absolute Abweichung zum arithmetischen Mittelwert unter Einbeziehung des  $\alpha$ -Wertes vom Bohrlochmodell B 66.

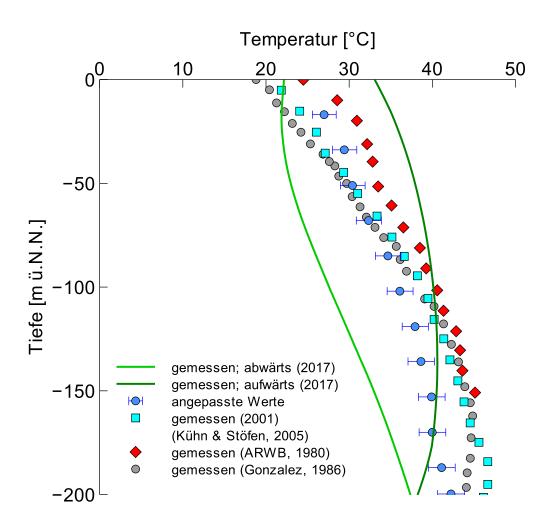
Statistische Größe	Wert [×10 <sup>-3</sup> m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\bar{\alpha}_{\setminus B66}$	2,76
$d_{\overline{lpha}\setminus  ext{B}66}$	0,26
$\bar{\alpha}_{\cup B66}$	2,79
$d_{\overline{lpha} \cup B66}$	0,26

## 3 Ergebnisse

#### 3.1 Temperaturprofile

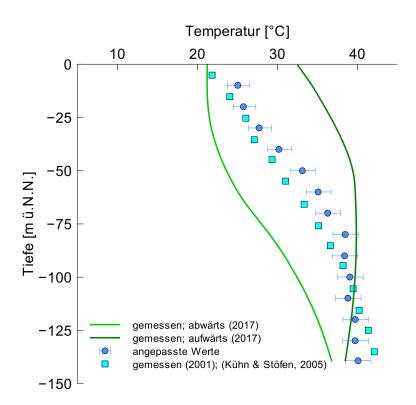
Im Folgenden werden alle sechs Profile der angepassten Temperaturen präsentiert. Sofern Referenzdaten durch alte Messungen oder Simulationsdaten anderer Autoren vorliegen, sind diese zu Vergleichszwecken mit abgebildet. Generell zeigen die beiden grünen Graphen in allen Profilen die fehlerhaft gemessenen Temperatur-Ort-Beziehungen. Dabei wird unterschieden zwischen den Messungen des Profils beim Ablassen sowie beim Aufholen des Sensors.

Alle Graphen in Abbildung 8 weisen einen linearen Verlauf in den ersten 120 m Bohrlochtiefe auf. Ab -120 m Tiefe erfahren alle Graphen einen Knick. Der Anstieg der Graphen ist für die ersten 120 m bei Kühn & Stöfen (2005) und Gonzalez (1986) ähnlich ausgeprägt. Der Graph der angepassten Messung sowie der von ARWB (1980) ist stärker ausgeprägt. Die Unsicherheitsintervalle in Form der Fehlerbalken zeigen kaum erkennbare Veränderungen entlang des gesamten Profils. Bei genauer numerischer Auswertung zeigen sich für alle angepassten Temperaturwerte Unterschiede in den Fehlerabweichungen.



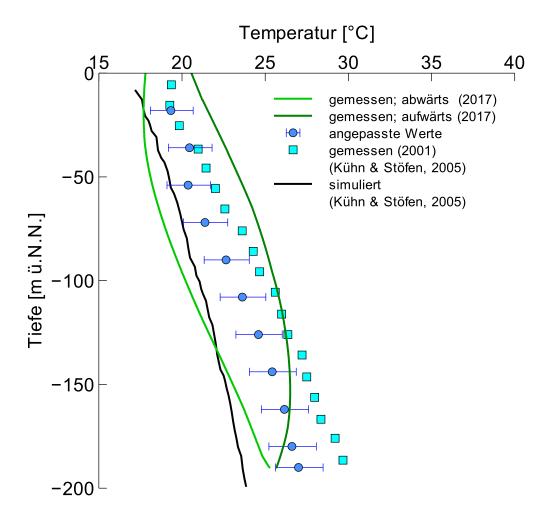
**Abb. 7:** Temperaturprofil B34 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie den angepassten Temperaturwerten und Referenzwerten (Kühn & Stöfen, 2005 (gemessen im November 2001),

Für die Bohrung BUN1 (siehe Abbildung 9) sind als Vergleichswerte nur die Messdaten von Kühn & Stöfen (2005) aus einer Messung vom November 2001 vorhanden. Diese Vergleichsmesswerte wurden nicht in diesem Bohrloch aufgenommen, sondern sind Messwerte vom 20 m entfernten Bohrloch B34. Unter der Annahme, dass dort ähnliche hydrothermale Bedingungen vorherrschen, sollen sie als grobe Vergleichswerte dienen. Es zeigt sich in einem Tiefenintervall von 0 bis -80 m ein gleichermaßen linearer Verlauf der Temperatur sowohl bei den angepassten Temperaturen als auch bei den Vergleichsmesswerten. Beide Graphen liegen nah bei einander, jedoch ist der Anstieg des Graphen der angepassten Temperaturen etwas flacher. Der Temperaturunterschied beträgt im linearen Tiefenintervall im Mittel nur ca. 2 °C. Ab einer Tiefe von -80 m weist das angepasste Temperaturprofil einen Knick auf. Anschließend verläuft der Graph wieder linear, jedoch mit stärkerem Anstieg. Der Graph der Messung von Kühn (2001) weist ebenfalls einen Knick etwa 10 m unterhalb des Knickes der angepassten Temperaturen auf und hat anschließend einen nur geringfügig steileren Anstieg. Die Fehlerintervalle sind gleichmäßig ausgeprägt, zeigen jedoch bei genauer numerischen Betrachtung Unterschiede zueinander.



**Abb. 8** Temperaturprofil BUN1 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie den angepassten Temperaturwerten und Referenzwerten von Kühn & Stöfen (2005), gemessen im November 2001.

Die Abbildung 10 zeigt über die gesamte Tiefe für die angepassten Messwerte einen linearen Verlauf des Graphen. Zusätzlich zu den von Kühn & Stöfen 2001 gemessenen Werten existieren Simulationsergebnisse von Kühn & Stöfen (2005). Beide Graphen zeigen ebenfalls einen sehr linearen Verlauf. Der Graph der angepassten Messung liegt nahezu mittig zwischen den von Kühn & Stöfen (2005) gemessenen und simulierten Werten. Die Unsicherheitsintervalle sind konsistent ähnlich über alle Messwerte.



**Abb. 9**: Temperaturprofil B66 mit den aktuellen Messungen (Mai 2017) sowie Simulationsdaten (Kühn & Stöfen, 2005) und alten Messdaten vom November 2001 (Kühn & Stöfen, 2005) zu Vergleichszwecken.

Für Bohrloch B47 (siehe Abbildung 11) sind keine Referenzwerte vorhanden. Der Verlauf scheint linear zu sein, wobei eine stärkere Oszillation der Temperaturwerte im Vergleich zu anderen Bohrlöchern zu sehen ist. Die Werte der aktuellen Abwärtsmessung zeigen ab ca. -90 m eine sprunghafte Änderung des Verlaufs. Die Aufwärtsmessung weist ebenfalls eine sprunghafte Veränderung an einer Tiefe von ca. -60 m sowie -30 m auf. Die Unsicherheitsintervalle weisen eine konsistente Ähnlichkeit über alle Messwerte auf.

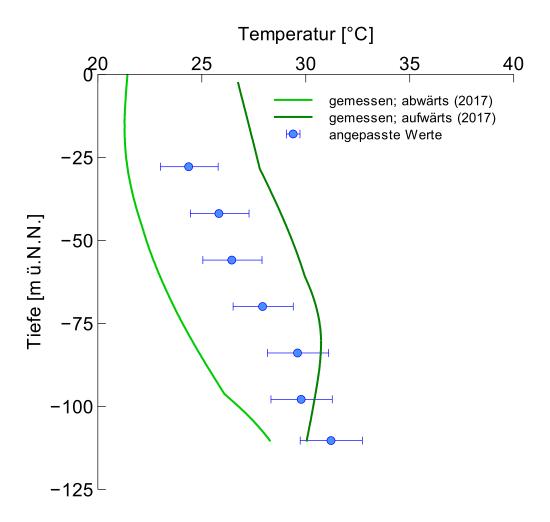
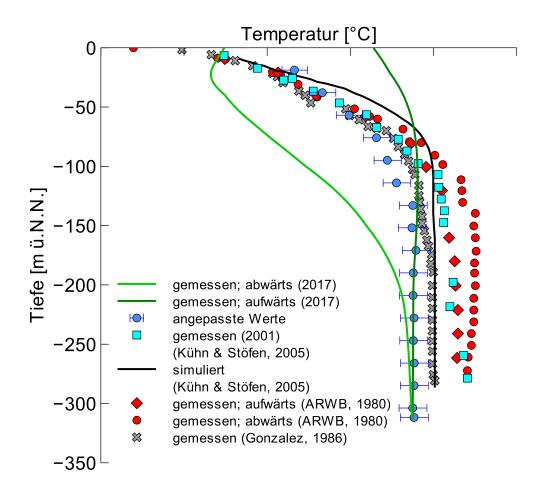


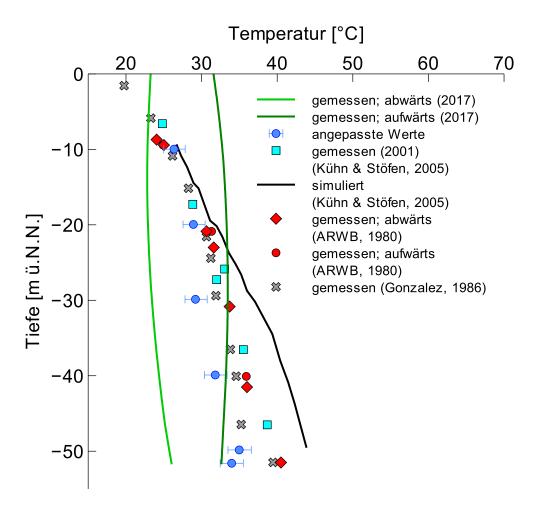
Abb. 10: Temperaturprofil B47 mit den aktuellen Messungen (Mai, 2017) sowie den angepassten Temperaturwerten.

Die Abbildung 12 zeigt das Temperaturprofil von Bohrloch B74. Zu dieser Bohrung gibt es viele Vergleichsdaten. Besonders auffällig sind die beiden Graphen der Messwerte von ARWB (1980). Auch in diesem Fall wird unterschieden zwischen Auf- und Abfahrt des Temperaturmessgerätes. Beide Graphen weisen dabei einen starken Unterschied auf, zeigen aber wie alle anderen Vergleichswertgraphen einen Knick im Verlauf an. Für diesen Fall existiert ebenfalls eine Simulation von Kühn & Stöfen (2005). Für den Tiefenbereich zwischen 0 m und -60 m zeigen alle Graphen einen linearen Verlauf. Ab -60 m zeigen alle Graphen einen Knick. Alle Unsicherheitsintervalle der angepassten Messwerte sind konsistent ähnlich.



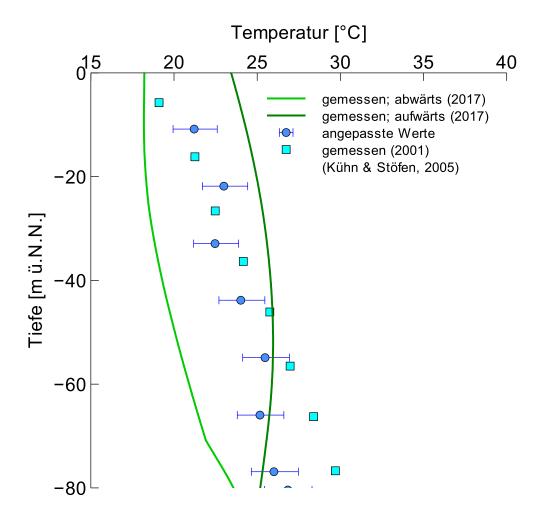
**Abb. 11**: Temperaturprofil B74 (tiefe Messung) mit den aktuellen Messungen (Mai, 2017) sowie den korrigierten Temperaturwerten und einigen Referenzwerten (Kühn & Stöfen, 2005 (gemessen im November); ARWB,1980; Gonzalez,1986; Kühn & Stöfen 2005 (Simulation)).

Die Abbildung 13 zeigt Ergebnisse für das Bohrloch B 74, wobei in diesem Fall nur bis in eine Tiefe von ca. -60 m gemessen wurde. Aus diesem Grund wurden alle Referenzdaten, welche in Abbildung 11 zu sehen sind, auch für diesen Fall benutzt. Alle Graphen weisen den schon in Abbildung 11 diskutierten linearen Verlauf in diesem Tiefenabschnitt auf. Es zeigt sich für alle Graphen ein relativer Unterschied des Anstiegs zueinander, wobei die Temperatur in der Tiefe von -10 m für alle Messungen nahezu gleich ist. Die Unsicherheitsintervalle sind über alle Messwerte betrachtet ähnlich lang.



**Abb. 12**: Temperaturprofil B74 (flache Messung) mit den aktuellen Messungen (Mai, 2017) sowie den korrigierten Temperaturwerten und einigen Referenzwerten (Kühn, 2001; ARWB, 1980; Gonzales, 1986).

Der in Abbildung 13 gezeigte Graph der angepassten Messung weist einen linearen Verlauf auf. Die angepassten Temperaturwerte zeigen eine stärkere Oszillation. Der Graph der 2001 gemessenen Temperaturwerte verläuft ebenfalls linear. Er weist jedoch einen geringeren Anstieg auf. Auffällig ist der sprunghaft veränderte Verlauf der aktuellen Messung ab ca. -75 m für den Abwärtsfall. Die Unsicherheitsintervalle für alle Messwerte sind konsistent ähnlich. Genaue Auswertungen zeigen aber unterschiedliche Fehlerintervalle für jeden angepassten Temperaturwert.



**Abb. 13:** Temperaturprofil Wenderholm DW mit den aktuellen Messungen (Mai, 2017) sowie alten Messdaten von Kühn, & Stöfen (2005) gemessen im November 2001.

#### 3.2 Diskussion

#### 3.2.1 Unsicherheitsanalyseergebnisse durch PEST++

Sämtliche Temperaturprofilschätzungen sind mit einer von PEST++ ausgewerteten Unsicherheitsanalyse visualisiert durch Fehlerbalken versehen. Diese Balken resultieren aus den Abständen der zweifachen Standardabweichungen  $2\sigma_1$  und  $2\sigma_2$  zum angepassten Parameterwert  $\hat{\mu}$ . Da die Parameteranpassung logarithmisch passiert, ist die resultierende Verteilung der weniger wahrscheinlichen Parameterwerte um den optimalen Parameterwert schief. Daraus resultieren zwei Standardabweichungen - jeweils eine für jede Seite zum optimalen Parameterwert. Für alle Temperaturprofile zeigen sich nahezu gleich lange  $[2\sigma_1 - \hat{\mu} + 2\sigma_2]$  Intervalle entlang eines gesamten Profils. Die Unterschiede zueinander sind kaum zu erkennen. Eine numerische Auswertung der Unsicherheitsdaten aus der PEST++-Ausgabedatei zeigt aber, dass es geringe Unterschiede in den Längen gibt. Auffällig ist, dass sich das Unsicherheitsintervall auch dann nicht signifikant ändert, wenn eine stärkere Oszillation der Schätzwerte induziert wurde (siehe Seite iv, Anhang C).

#### 3.2.2 Bohrloch B34

Die angepassten Werte liegen nah bei den Vergleichsdaten. Der Knick bei -120 m, wie ihn alle Vergleichsdaten zeigen, ist durch das Modell reproduzierbar. Dieser Knick repräsentiert vermutlich das Gebiet, an dem die hydrothermale Intrusion mit dem vergleichsweise kälteren oberflächennahen Grundwasser aus der Waitemata-Gruppe in Berührung kommt. Der unterschiedlich ausgeprägte Anstieg kann aus Regimeänderungen durch die historisch unterschiedlichen Wasserentnahmeraten sowie seismischen Aktivitäten resultieren (Kaikoura-Erdbeben am 14.11.2016 auf Neuseeland). Ab diesem Zeitraum gab es Veränderungen des hydrogeologischen Regimes (Kühn & Schöne, 2018)

#### 3.2.3 Bohrloch BUN1

Das Modell weist eine gute Ähnlichkeit zu den Referenzwerten - sowohl hinsichtlich des Anstiegs als auch der Temperaturen auf. Der Knick im Temperaturverlauf wurde ebenfalls errechnet. Dieser Knick deutet auf die Stelle hin, an der das Grundwasser mit dem wärmeren Grundwasser aus dem tiefergelegenen Reservoir in Berührung kommt. Die Verschiebung könnte auf den schon erwähnten Veränderungen des hydrothermalen Regimes basieren.

#### 3.2.4 Bohrloch B66

Der lineare Verlauf des geothermalen Gradienten, welcher auch durch die Referenzmessung und Simulation gezeigt wird, wird im Modell gut reproduziert. Die durch die Simulation ermittelte Veränderung des geothermalen Gradienten wird durch die Modellergebnisse nicht getroffen, jedoch gut angenähert. Auch in diesem Fall könnte eine Regimeveränderung durch das Kaikura-Erdbeben der Grund sein, welche die Simulation durch Kühn & Stöfen (2005) bei der damaligen Modellierung nicht vorgesehen hat.

#### 3.2.5 Bohrloch B47

Zu dieser Bohrung existieren keine Referenzwerte. Es handelt sich um ein Bohrloch für Kaltwasser (Kühn & Stöfen, 2005). Die Bohrlochtemperatur von diesem Bohrloch sollte daher den normalen linearen geothermalen Gradienten über die gesamte Tiefe aufweisen. Der Verlauf der angepassten Messwerte zeigt einen gut erkennbaren linearen Verlauf. Die beiden gemessenen Graphen deuten durch die Knickstellen auf einen lokalen Warmwassereintrag hin. Dieser könnte durch Rissbildung durch das erwähnte Erdbeben hervorgerufen worden sein.

#### 3.2.6 Bohrloch B74 (tief)

Mit drei alten Messungen über einen langen Zeitraum ist eine kontinuierliche Veränderung des hydrogeothermalen Regimes zu vermuten. Diese verläuft einseitig, wobei das Profil insgesamt über den gesamten Zeitraum kälter geworden ist. Die angepassten Messwerte liegen gut in diesem Trend. Die Knickstelle im Verlauf wird auch in diesem Modell reproduziert.

#### 3.2.7 Bohrloch B74 (flach)

Die Graphen aller Messwerte sowie Simulationsergebnisse zeigen die schon in Kapitel 3.2.6 diskutierten Veränderungen für den oberen Bereich der Bohrung. Da es sich um das gleiche Bohrloch handelt und die alten Messwerte verwendet wurden, ist dieser Verlauf zu erwarten. Da in diesem Fall nicht bis in die Warmwasser führende Tiefe beprobt wurde, ist der Gradient linear. Dieser lineare Verlauf wird durch das Modell gut abgebildet.

#### 3.2.8 Bohrloch Wenderholm DW

Für dieses Bohrloch konnte der lineare Verlauf, welcher durch die Referenzwerte bestätigt wird, gut abgebildet werden. Der unterschiedliche Anstieg beider Graphen könnte an einer Veränderung des hydrothermalen Regimes liegen. Wie schon in Kapitel 3.2.5 diskutiert, tritt auch bei diesem Modell eine stärkere Oszillation der Messwerte auf. Auch in diesem Fall ist eine Unstetigkeitsstelle im Verlauf der Messwerte der Abwärtsmessung zu erkennen. Somit könnte die Oszillation durch diese Unstetigkeit hervorgerufen sein.

#### 4. Zusammenfassung und Ausblick

Für alle Bohrlöcher konnten durch die jeweiligen Modelle plausible Ergebnisse aus den gemessenen Temperaturen ermittelt werden. Das zeigen alle angepassten Werte im direkten Vergleich mit Referenzwerten. Sämtliche Parameter über die physikalischen sowie geometrischen Eigenschaften des Temperatursensors waren nicht gegeben. Dennoch konnten auf der Grundlage der Messergebnisse repräsentative Ersatzparameter in Form der thermischen Diffusivität in Relation zu einer normierten Modelllänge ermittelt werden. Dabei ergab sich für alle unabhängig voneinander entwickelten Modelle eine ähnliche thermische Diffusivität von im Mittel 2,79 ×10<sup>-3</sup> m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>. Die relative mittlere Abweichung der einzelnen Werte jedes Modells vom Mittelwert beträgt dabei 9,32 %. Die physikalisch-geometrischen Parameter des Sensormodells konnten so zu 90,68 % für jedes Modell reproduziert werden.

Die für eine Modellvalidierung herangezogenen Vergleichsdaten erlauben zwar eine positive Einschätzung der Modellgüte, dennoch sind für eine eindeutige Validierung aktuelle und genaue Messergebnisse nötig. Dies zeigt sich durch die Abweichung aller Vergleichsmessungen untereinander. Das hydrothermale Regime in dieser Region unterliegt einer starken zeitabhängigen Dynamik. Zusätzlich zeigt eine Studie Auswirkungen eines Erdbebens im letzten Jahr am Standort auf das dort existierende hydrogeologische Regime. Die Modellierung des Temperatursensors bezüglich seiner geometrischen sowie physikalischen Parameter konnte nur durch einen zusätzlichen Parameterabschätzungsprozess vorgenommen werden. Somit ist eine weitere Unsicherheitskomponente in das Modell eingeflossen. Eine Möglichkeit, diese Unsicherheit zu minimieren, wäre die genauere Modellierung des Temperatursensors auf Basis von Daten hinsichtlich der Geometrie und eingesetzten Materialien. So könnte auf Grundlage eines genauen Sprengbildes ein 3D-Modell dieses Sensors erstellt werden und als Gitter für genauere Simulationen dienen. Für weiterführende Arbeiten, wie zum Beispiel einer Masterarbeit, könnte das Thema durch die erwähnte 3D-Modellierung neu aufgegriffen und vertieft werden. Ein Wiederholen der Messkampagne zum Zeitpunkt dieser weiterführenden Arbeit würde aktuelle und genaue Messergebnisse für eine repräsentative Validierung gewährleisten.

#### Literaturverzeichnis

- Afanasyev A. (2018), Internetseite: MUFITS Reservoir SimulationSoftware, URL: http://www.mufits.imec.msu.ru
- Afanasyev A. (2013), Application of the reservoir simulator MUFITS for 3D modeling of CO<sub>2</sub> storage in geological formations, Energy Procedia, 40, (2013), S. 365-374.
- Ahrens J., Geveci B., Law C. (2005), ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization, Visualization Handbook, Elsevier, 2005, ISBN-13: 978-0123875822
- ARWB (1980), Waiwera water resource survey Preliminary water allocation/management plan, Auckland Regional Water Board, Technical Publication No. 17
- De Lucia M., Kempka T., Afanasyev A., Melnik O., Kühn M. (2016), Coupling of Geochemical and Multiphase Flow Processes for Validation of the MUFITS Reservoir Simulator Against TOUGH, Energy Procedia, S. 503-508.
- Doherty J. (2005), PEST Model-Independent Parameter Estimation, Benutzer-handbuch (5. Auflage)
- Doherty J. (2016), PEST Model-Independent Parameter Estimation User Manuel Part I: PEST, SENSAN and Global Optimizers (6. Auflage) Download URL: http://www.pesthomepage.org/Downloads.php
- Fourier J. (1822), THÉORIE ANALITIQUE DE LA CHALEUR, Éditions Jacques Gabay, 1988
- Gonzalez CN (1986), Interpretation of downhole temperature survey at Waiwera thermal area. Geothermal Institute, University of Auckland, Report no. 86.07
- Kempka T., Norden B. (2017), Inverse modelling of hydraulic testing to revise the static reservoir model of the Stuttgart Formation at Ketzin pilot site Energy Procedia 125 S. 640-649
- Kempka T., Norden B., Ivanova A., Lüth S. (2017), Revising the Static geological Reservoir Model of the Upper Triassic Stuttgart Formation at the Ketzin Pilot Site for CO<sub>2</sub> Storage by Integrated Inverse Modelling Energies 2017, Vol. 10, 1559
- Kühn M., Schöne T. (2018), Influence of earthquakes on the water level in the geothermal reservoir of Waiwera (New Zealand), Poster-EGU2018-3468
- Kühn M., Stöfen H. (2004), A reactive flow model of the geothermal reservoir Waiwera, New Zealand, Hydrogeology Journal (2005), 13, S. 606-626

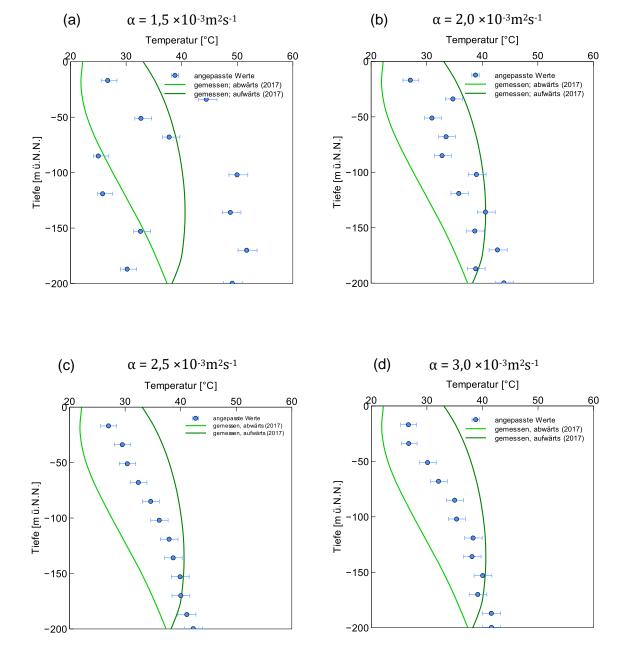
- Lienhard J. IV, Lienhard J. V (2017), A Heat Transfer Textbook, 4. Auflage Phlogiston Press, URL: http://web.mit.edu/lienhard/www/ahttv211.pdf
- Welter D. E., White J. T., Hunt R. J., Doherty J. E. (2015), Approaches in Highly Parameterized Inversion: PEST++ Version 3, A <u>Parameter Estimation and Uncertainly Analysis Software Suite Optimized for Large Environmental Models</u>, U.S. Geological Survey Techniques and Methods, Buch 7, Kapitel C12, S. 54

## Anhang A Produktdatenblatt des Temperatursensors



**Abb. 14:** (a, b) zeigen die beiden Seiten des originalen Produktdatenblattes des Temperatursensors von der Firma Gemini.

# Anhang B Angepasste Temperaturprofile für B 34 unter verschiedenen alpha-Werten



**Abb. 15:** (a, b, c, d) zeigen die angepassten Temperaturwerte unter verschiedenen  $\alpha$ -Werten. (a) und (b) weisen eine deutlich erhöhte Intensität der Oszillation auf, wobei die von (b) geringer zu (a) ist. (c) zeigt die Temperaturwerte für den optimalen  $\alpha$ -Wert. Dies zeigt sich durch einen sehr glatten Funktionsverlauf. (d) weist wieder eine stärkere Intensität der Oszillation auf.

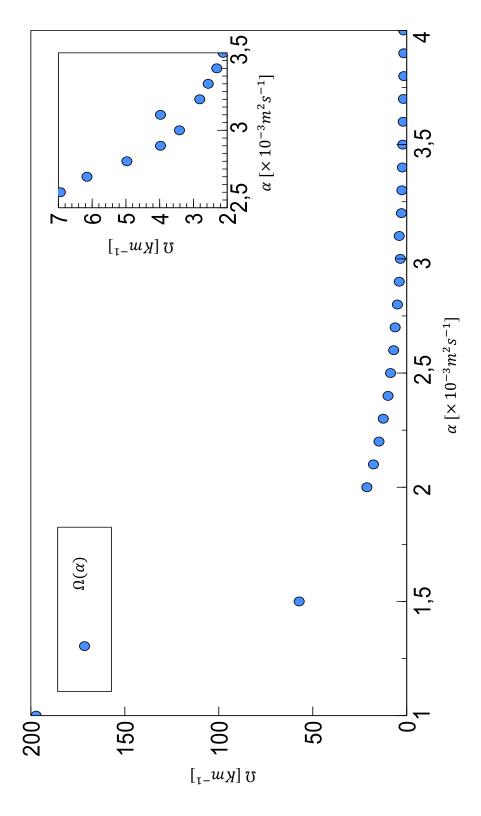


Abb. 16: Für den Bohrlochfall B66 sind die Funktionswerte der Oszillationsmaßfunktion gegen die thermische Diffusivität aufgetragen. Der Funktionsverlauf zeigt kein eindeutig erkennbares Minimum. An der Stelle  $\alpha = 3,1 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$  ist ein mögliches Maximum erkennbar (siehe Detailausschnitt in der Abbildung). Demzufolge könnte das potentielle Minimum an der Stelle  $\alpha = 3,0 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$ liegen.