



RESKIN – VORHERSAGE VON AUFLÖSUNGSRATEN IM RESERVOIRGESTEIN

1 Konzentrationen von CO_2 (a), H^+ (b), Ca^{2+} (c) und HO^- (d) während einer reaktiven Transportsimulation in Gesteinsporen

2 Lösung eines Zellproblems für die Berechnung effektiver Transportgrößen für die Bohrkern-Skala

3 Auflösung von Calcitkristallen (gelb) und Konzentration von H^+ -Ionen in Gesteinsporen

Gesteine sind aus verschiedenen Mineralien aufgebaut. Da Lösungs- und Fällungsreaktionen die hydrodynamische Durchlässigkeit und damit den Transport von Chemikalien in Gesteinen verändern, ist die Vorhersage der Auflösraten dieser Mineralien für viele geologische Anwendungen von Bedeutung – z. B. für die Ölgewinnung oder die Kohlendioxidspeicherung im Gestein. Im Projekt ResKin (Reaktionskinetik in Reservoirgesteinen) untersuchen wir gemeinsam mit unseren Verbundpartnern die Lösungskinetik von Mineralien und deren Wechselwirkung mit Transportprozessen im Gestein.

Die gemessenen Auflösraten, selbst für das selbe Mineral, variieren in Experimenten über bis zu zwei Größenordnungen, selbst unter identischen Bedingungen. Dafür werden vier Effekte als Ursachen angenommen:

- der Einfluss der Hydrodynamik der Lösungsflüssigkeiten
- die chemische Variabilität der gelösten Mineralien
- die intrinsische kinetische Variabilität des Lösungsprozesses
- die mechanischen Spannungen im Gestein

Skalenübergreifendes Verständnis der Reaktionskinetik erarbeiten

Das Projekt ResKin hat das Ziel, diese Effekte zu untersuchen und ein Modell zu entwickeln, dass die Kinetik der chemischen Reaktionen im Gestein vorhersagt. Dafür wenden wir verschiedene Modellierungs- und Simulationstechniken auf den jeweiligen Längenskalen an. Auf der atomaren Skala (nm) kommen Monte-Carlo-Simulationen zur Untersuchung der Variabilität des Auflösungsprozesses zum Einsatz. Auf der Porenskala (μm) führen wir reaktive Transportsimulationen durch (Abb. 1). Auf der Bohrkernskala (cm) nutzen wir makroskopische Transportmodelle, die sich mit Experimenten vergleichen lassen. Letztendlich koppeln wir durch Mehrskalenmodellierung die Simulationstechniken miteinander.

Simulationen mit PoreChem machen Vorhersagen möglich

Für das Projekt gilt es, die komplexen chemischen Reaktionen im porösen Gestein zu berechnen – und zwar einschließlich der Auflösungsvorgänge (Abb. 3), bei denen sich die Gesteinsgeometrie während der Simulation ändert. Außerdem müssen Zellprobleme auf der Porenskala zur Berechnung von Transportparametern für die Modelle auf der Bohrkernskala gelöst werden (Abb. 2). Unsere Software PoreChem wurde dafür entsprechend erweitert. Damit ermöglichen unsere Simulationen prädiktive Vorhersagen für Auflösungsprozesse in Reservoirgesteinen.