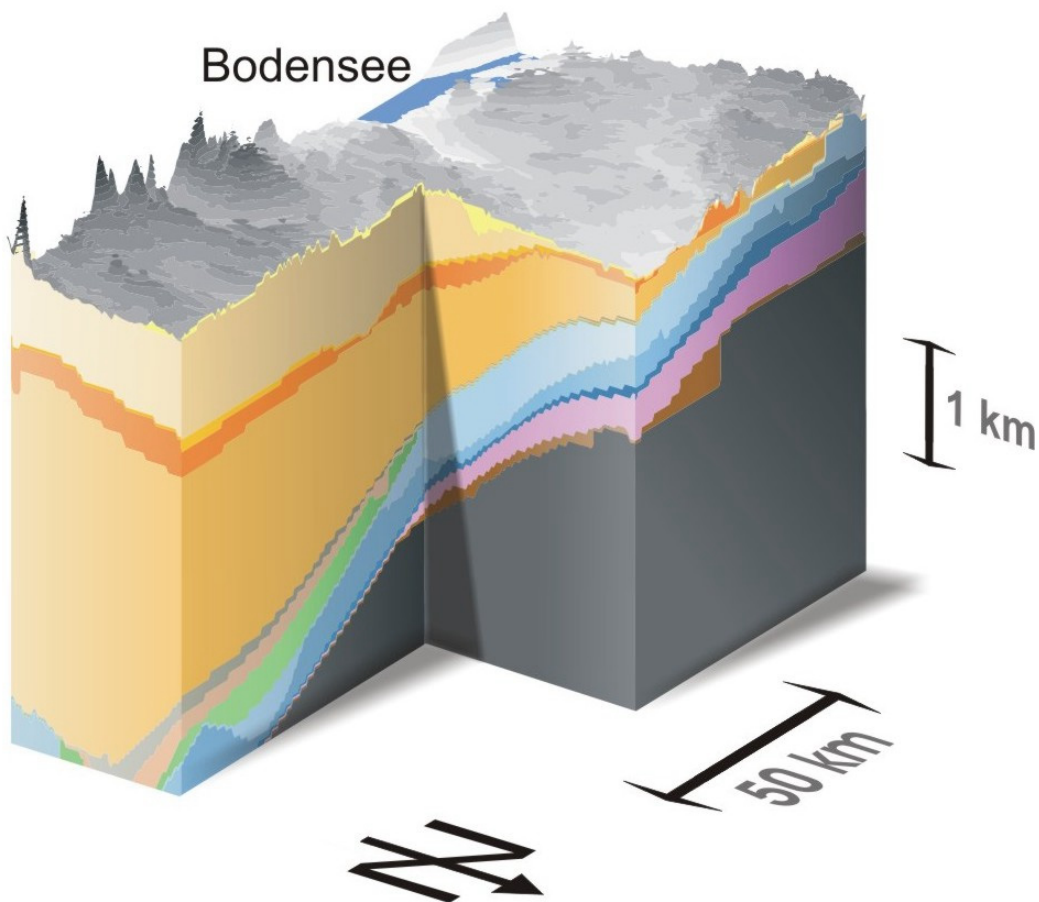


Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe

Endbericht zum Auftrag 9X0009-8390-0



6. Juni 2002

C. Clauser
F. Höhne
A. Hartmann
V. Rath

H. Deetjen
W. Rühaak
R. Schellschmidt
A. Zschocke

Auftrag Nr.: 9X0009-8390-0

**Erkennen und Quantifizieren von Strömung:
Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des
tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner
Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe**

Auftragnehmer: Prof. Dr. C. Clauser, RWTH Aachen

Verfasser: Dr. V. Rath, RWTH Aachen
Prof. Dr. C. Clauser

Bearbeiter RWTH: Dipl.-Ing. F. Höhne
Dipl.-Geophys. A. Hartmann
Dr. V. Rath

Bearbeiter GGA: Dipl.-Ing. H. Deetjen
Dipl.-Geol. W. Rühaak
Dipl.-Geophys. R. Schellschmidt
Dipl.-Ing. A. Zschocke

Die Studie wurde im Auftrag des Bundesamtes für Strahlenschutz (BfS) erstellt. Das BfS behält sich alle Rechte vor. Insbesondere darf die Studie nur mit Zustimmung des BfS zitiert, ganz oder teilweise vervielfältigt bzw. Dritten zugänglich gemacht werden.

Aachen, 6. Juni 2002

Prof. Dr. C. Clauser

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS.....	5
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	6
TABELLENVERZEICHNIS	10
ZUSAMMENFASSUNG	11
EINLEITUNG	13
1. DETAILKONZEPT DER UNTERSUCHUNGEN	15
2. AUSWAHL DES GEBIETS FÜR EINE DETAILUNTERSUCHUNG.....	19
2.1 KRITISCHE BEWERTUNG DER VORHANDENEN TEMPERATURDATEN	19
2.2 TEMPERATURSCHNITTE UND KONDUKTIVE REDUKTION	30
2.3 PÉCLETZahl-ANALYSE FÜR GESAMTDEUTSCHLAND	37
2.4 ZUSAMMENFASSUNG DER ZUR AUSWAHL DES UNTERSUCHUNGSGEBIETS DURCHGEFÜHRTEN UNTERSUCHUNGEN	39
3. DETAILUNTERSUCHUNG IM GEBIET DER WESTLICHEN MOLASSE	43
3.1 STRUKTURDATEN UND GEOLOGISCHE MODELLE.....	45
3.2 TEMPERATURDATEN	50
3.3 REKONSTRUKTION DER GESTEINSEIGENSCHAFTEN	53
3.4 PALÄOKLIMA.....	72
3.5 VEREINFACHTE ANALYSEMETHODEN: PÉCLETZahl-ANALYSE UND SCHICHTFOLGENDE STRÖMUNGSANALYSE	87
3.6 DREIDIMENSIONALE MODELLIERUNG DES KONDUKTIVEN WÄRMETRANSPORTS.....	100
4. BEWERTUNG DES ERFOLGS DES GESAMTPROJEKTS UND SCHWERPUNKTE DER ZUKÜNFTIGEN ARBEITEN	117
ANHANG	119
A. PÉCLETZahl-ANALYSEN SÄMTLICHER UNGESTÖRTER BOHRUNGEN	119
B. HORIZONTALE SCHNITTE DURCH DAS RESIDUALE TEMPERATURFELD	129
C. MESSGERÄTE	144
D. PETROPHYSIK-DATENBANK	150
E. PUBLIKATIONEN.....	152
F. VERWENDETE LITERATUR	153

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1: Strategie der in diesem Projekt durchgeführten Untersuchungen.	16
Abb. 2.1: Schematische Darstellung der Oberflächengeologie Deutschlands	20
Abb. 2.2: Lage der Bohrungen in der Temperaturdatenbank des GGA-Instituts.....	23
Abb. 2.3: Experimentelles Variogramm	25
Abb. 2.4: Dichte der Bohrlochtemperaturwerte	28
Abb. 2.5: Durch Kriging interpolierte Bohrlochtemperatur	29
Abb. 2.6: Schematische Darstellung der Standardisierung.	31
Abb. 2.7: Temperaturen in Deutschland im Tiefenintervall 500 – 1200 m.....	31
Abb. 2.8: Interpolierte Bohrlochtemperatur in 600 m Tiefe	33
Abb. 2.9: Standardisierte Schnitte der Residualtemperaturen	34
Abb. 2.10: Grundlagen der konduktiven Reduktion der Temperaturen	35
Abb. 2.11: Normalisierte Temperaturschnitte in einer Tiefe von 900 m.	36
Abb. 2.12: Vertikale Pécletzahl-Analyse.....	39
Abb. 3.1: Geographische Lage des Messgebietes	43
Abb. 3.2: Flussdiagramm der Projektarbeiten.	44
Abb. 3.3: Geologische Gesamtsituation im Untersuchungsgebiet	46
Abb. 3.4: Bekannte Störungen und Nordgrenze der helv. Fazies des Malm	48
Abb. 3.5: Stratigraphie des Molassebeckens	49
Abb. 3.6: Verteilung der verwendeten Temperaturdaten.....	50
Abb. 3.7: Datenbehandlung zur Qualitätssicherung	51
Abb. 3.8: Die dieser Studie ausgewerteten Temperaturlogs	52
Abb. 3.9: Karte des Arbeitsgebiets mit verwendeten Datenlokalationen.....	53
Abb. 3.10: Wärmeleitfähigkeitsmessungen am Kern Bad Wurzach	56
Abb. 3.11: Wärmeleitfähigkeiten: Kern Bad Wurzach und Schweizer Molasse	57
Abb. 3.12: Korrelation der Wärmeleitfähigkeit mit der Schallgeschwindigkeit.....	58
Abb. 3.13: Histogramm der Anpassungsresiduen für die Ausgleichsgerade	58
Abb. 3.14: Schema der Auswertung der kalorimetrischen Messungen	61

Abb. 3.15: Kalorimetrische Analyse der Proben aus Bad Wurzach	63
Abb. 3.16: Tiefenprofil der Temperaturleitfähigkeit.....	65
Abb. 3.17: Schematische Darstellung der Monte-Carlo-Inversion.....	69
Abb. 3.18: Zwei Beispiele der petrophysikalischen Inversion.....	70
Abb. 3.19: Wärmeleitfähigkeiten für vier GröÙeinheiten.....	71
Abb. 3.20: Beispiel für die Korrektur des Paläoklimas.....	72
Abb. 3.21: Typische Signalformen für Veränderungen des Paläoklimas	73
Abb. 3.22: Sensitivität des Paläoklimas bei Änderung der Parameter	77
Abb. 3.23: Ergebnisse für das KTB-Log bei einem Kürzen des Logs	77
Abb. 3.24: Bsp. für eine falsche Schätzung des ungestörten Gradienten	78
Abb. 3.25: Vgl. der Inversionsergebnisse mit verschiedenen Klima-Proxies	79
Abb. 3.26: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit	80
Abb. 3.27: Abhängigkeit der thermischen Eigenschaften von der Tiefe.....	81
Abb. 3.28: Ergebnisse der Paläoklimainversion	83
Abb. 3.29: Verbesselter Geltungsbereich der Paläoklimarekonstruktion	84
Abb. 3.30: Alternierendes Schema für die gekoppelte Inversion.....	86
Abb. 3.31: Prinzip einer vertikalen Pécletzahl-Analyse.	88
Abb. 3.32: Prinzipskizze zum Mehrschichtfall.	89
Abb. 3.33: Vertikale Darcy-Geschwindigkeit in der Unteren Süßwassermolasse	90
Abb. 3.34: Numerisches Modell für die schichtfolgende Strömungsanalyse	92
Abb. 3.35: Synthetische vertikale Temperatur- und Wärmestromprofile	92
Abb. 3.36: Auswertung von korrelierten Sprüngen des Wärmestroms.....	93
Abb. 3.37: Isoliniendarstellung der Temperatur und Geometrie der Projektion.....	94
Abb. 3.38: Schichtfolgende Analyse für die Bausteinschichten.....	95
Abb. 3.39: Geologischer Schnitt durch das Feld Mönchsrot	96
Abb. 3.40: Schichtfolgende Analyse der Bohrungen Bad Waldsee, Mönchsrot, Arlesried....	97
Abb. 3.41: Temperatur im Bereich Baltringer Schichten und Sandschiefern	99
Abb. 3.42: Das für die Pilotstudie gewählte Gebiet	101
Abb. 3.43: Flussdiagramm des Programms „geogrid“	102
Abb. 3.44: Finite-Differenzen-Modells des Untersuchungsgebiets.....	104
Abb. 3.45: Residual-Logs für die in Tab. 3.6 aufgeführten Lokationen.	109
Abb. 3.46: Residuen des Modells.....	109

Abb. 3.47: Histogrammdarstellung der Qualitätsklassen der Messdaten	110
Abb. 3.48: Beispiel des Einflusses der qualitätsabhängigen Wichtung	112
Abb. 3.49: Temperaturresiduen in 250 m Tiefe	113
Abb. 3.50: Residualtemperaturen in den Tiefen von 100 bis 500 m u.NN	114
Abb. 3.51: Schema der Grundwasserbewegung im Untersuchungsgebiet	115
Abb. A.1: Pécletzahl-Analyse Bohrung Alemania 1.	119
Abb. A.2: Pécletzahl-Analyse Bohrung Alemania 2.	120
Abb. A.3: Pécletzahl-Analyse Bohrung Arlesried 24.	120
Abb. A.4: Pécletzahl-Analyse Bohrung Arlesried 26a.	121
Abb. A.5: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Endorf III.	121
Abb. A.6: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Buchau 1a.	122
Abb. A.7: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Waldsee GB 2.	122
Abb. A.8: Pécletzahl-Analyse Bohrung Gaisbeuren 4.	123
Abb. A.9: Pécletzahl-Analyse Bohrung Haimhausen 2a.	123
Abb. A.10: Pécletzahl-Analyse Bohrung Hebertshausen 3.	124
Abb. A.11: Pécletzahl-Analyse Bohrung Laimbach-Aulendorf.	124
Abb. A.12: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 20.	125
Abb. A.13: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 31.	125
Abb. A.14: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 32.	126
Abb. A.15: Pécletzahl-Analyse Bohrung Oberschwarzach 6.	126
Abb. A.16: Pécletzahl-Analyse Bohrung Reichersberg.	127
Abb. A.17: Pécletzahl-Analyse Bohrung Saulgau GB3.	127
Abb. A.18: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Überkingen.	128
Abb. A.19: Pécletzahl-Analyse Bohrung Jordanbad-Biberach	128
Abb. B.1: Temperaturresiduen 1000 m unter NN.	129
Abb. B.2: Temperaturresiduen 950 m unter NN.	129
Abb. B.3: Temperaturresiduen 900 m unter NN.	130
Abb. B.4: Temperaturresiduen 850 m unter NN.	130
Abb. B.5: Temperaturresiduen 800 m unter NN.	131
Abb. B.6: Temperaturresiduen 750 m unter NN.	131
Abb. B.7: Temperaturresiduen 700 m unter NN.	132
Abb. B.8: Temperaturresiduen 650 m unter NN.	132

Abb. B.9: Temperaturresiduen 600 m unter NN.....	133
Abb. B.10: Temperaturresiduen 550 m unter NN.....	133
Abb. B.11: Temperaturresiduen 500 m unter NN.....	134
Abb. B.12: Temperaturresiduen 450 m unter NN.....	134
Abb. B.13: Temperaturresiduen 400 m unter NN.....	135
Abb. B.14: Temperaturresiduen 350 m unter NN.....	135
Abb. B.15: Temperaturresiduen 300 m unter NN.....	136
Abb. B.16: Temperaturresiduen 250 m unter NN.....	136
Abb. B.17: Temperaturresiduen 200 m unter NN.....	137
Abb. B.18: Temperaturresiduen 150 m unter NN.....	137
Abb. B.19: Temperaturresiduen 100 m unter NN.....	138
Abb. B.20: Temperaturresiduen 50 m unter NN.....	138
Abb. B.21: Temperaturresiduen bei NN.....	139
Abb. B.22: Temperaturresiduen 50 m über NN.....	139
Abb. B.23: Temperaturresiduen 100 m über NN.....	140
Abb. B.24: Temperaturresiduen 150 m über NN.....	140
Abb. B.25: Temperaturresiduen 200 m über NN.....	141
Abb. B.26: Temperaturresiduen 250 m über NN.....	141
Abb. B.27: Temperaturresiduen 300 m über NN.....	142
Abb. B.28: Temperaturresiduen 350 m über NN.....	142
Abb. B.29: Temperaturresiduen 400 m über NN.....	143
Abb. B.30: Temperaturresiduen 450 m über NN.....	143
Abb. C.1: Messanordnung des Thermal Conductivity Scanners	144
Abb. C.2: Messanordnung des Wärmestromdifferenz-Kalorimeters	145
Abb. C.3: Schematischer Aufbau des Core Loggers (Geotek Ltd).....	146
Abb. C.4: Messanordnung der Divided-Bar-Apparatur HOLOMETRIX	147
Abb. C.5: RFA-Gerät Philips RW 2400.....	148
Abb. D.1: Bachmann-Diagramm der Petrophysik-Datenbank	151

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1: Statistik der Temperaturdaten, nach Gebieten und Messmethoden.....	21
Tab. 2.2: Regionalisierte Geostatistik	27
Tab. 2.3: Entscheidungsmatrix	40
Tab. 3.1: Koeffizienten der in Abb. 3.12 gezeigten Ausgleichsgeraden	59
Tab. 3.2: Messungen der Wärmeleitfähigkeit, Dichte und Porosität	60
Tab. 3.3: Logs, die für die paläoklimatische Korrektur verwendet wurden	75
Tab. 3.4: Thermischen Gesteinseigenschaften aus eigenen Messungen	105
Tab. 3.5: Werte für Wärmeleitfähigkeit im konduktiven 3D-Modell	106
Tab. 3.6: Ungestörte Bohrlochtemperaturen in der Modellierung	107
Tab. 3.7: Qualitätsklassen der Temperaturmessungen und ihre Wichtung	111

Zusammenfassung

*C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt,
A. Zschocke*

Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe

Stichworte: Advektion, Bohrlochtemperatur, Grundwasserströmung, Petrophysik, Modellierung, Parameterschätzung

Die im Rahmen dieses Projekts erzielten Ergebnisse demonstrieren beeindruckend das große Potenzial der geothermischen Methode (1) für die Ausweisung von Gebieten mit signifikanter Durchströmung tiefer Gesteinsschichten sowie (2) für die Quantifizierung des Betrags und der Richtung solcher Strömungen.

Die in diesem Projekt verfolgte Methode beruht auf der Identifikation strömungsbedingter Anomalien im Temperaturfeld des Untergrundes, welche nicht durch Wärmeleitung oder paläoklimatische Variationen hervorgerufen sind. Es war möglich, sowohl die paläoklimatischen Effekte korrekt zu erfassen, wie auch die durch Wärmeleitung bedingte Verteilung der Temperatur mit ausreichender Genauigkeit zu bestimmen.

Zu diesem Zweck wurde für das auf Grund von Anzahl, Qualität und Verteilung von Daten als geeignet qualifizierte Untersuchungsgebiet „Westliche Molasse“ ein ausschließlich auf Wärmeleitung beruhendes Referenzmodell auf Basis der bekannten geologischen Strukturinformation aufgebaut. Die Zuordnung thermophysikalischer Parameter wurde auf Grundlage eigener Messungen an Bohrkernen, Rekonstruktionen aus geophysikalischen Logs und publizierter Daten vorgenommen. Die Ergebnisse belegen zwei deutlich voneinander abgrenzbare Gebiete positiver und negativer Temperaturanomalien, welche durch Strömungssysteme im Untergrund bedingt sind und mit bekannten geologischen Strukturen korrelieren.

Quantitative Aussagen über die vorhandenen Strömungen wurden durch eine Abschätzung der vertikalen Filtrationsgeschwindigkeit mit Hilfe einer Pécletzahl-Analyse erzielt. Unter günstigen Bedingungen können mit dieser Methode Strömungen ab einer vertikalen Filtrationsgeschwindigkeit von 1 mm/a nachgewiesen werden. Die thermische Wirkung horizontaler Strömungen ist deutlich geringer. Dennoch konnten für zwei der wichtigsten bekannten Aquifere des Untersuchungsgebiets horizontale Filtrationsgeschwindigkeiten von einigen 10 m/a ermittelt werden, die auch mit direkten hydraulischen Testergebnissen im Einklang stehen.

Selbst bei nichtoptimalen Bedingungen hinsichtlich Anzahl, Verteilung und Qualität der verwendeten Daten wurden die Projektziele erreicht. Die Laufzeit des Projekts von 1½ Jahren

setzte eine harte Randbedingung für die Realisierung möglicher und wünschenswerter methodischer Fortentwicklungen und Verfeinerungen. Trotzdem wurden auch in dieser Hinsicht bei der Inversion des Paläoklimas deutliche Fortschritte erzielt. Es ist heute bereits deutlich erkennbar, welche Verbesserungen in der Trennschärfe und Genauigkeit der Aussagen zum Strömungsfeld durch eine konsequente Fortführung des begonnenen Forschungsprogramms erzielt werden können. Im Lichte der konkreten Zielstellung handelt es sich hierbei um angewandte Grundlagenforschung im besten Sinne des Wortes.

Einleitung

Im Jahr 1999 wurde im Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) der Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte (AkEnd) eingerichtet. Der Arbeitskreis hat die Aufgabe Kriterien zu entwickeln, die geeignet sind potentielle Standorte für die Errichtung eines Endlagers für radioaktive Abfälle im geologischen Untergrund auszuwählen. Derartige Kriterien müssen auf ihre Anwendbarkeit in der Praxis überprüft werden. Auswahlkriterien, für die keine geeigneten Suchmethoden existieren sind ungeeignet. Aus diesem Grunde ist es notwendig Kriterien durch spezielle Untersuchungen auf ihre Tauglichkeit zu überprüfen.

Mit den hier beschriebenen Untersuchungen sollen im Auftrag des Bundesamts für Strahlenschutz Regionen mit solchen thermischen Anomalien identifiziert werden, die durch Wasserströmung im Untergrund verursacht und somit nicht geeignet für Endlagerstandorte sind. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen finden Eingang in die Arbeiten des Arbeitskreises Auswahlverfahren Endlagerstandorte.

Im Rahmen des hier behandelten Projekts wurden seit dem 1. Juli 2000 zwei Berichte vorgelegt. Der 1. Zwischenbericht (Detailkonzept, Oktober 2000) stellte die ursprüngliche Konzeption der Arbeiten vor. Die umfassende Untersuchung der vorhandenen Temperaturdaten in Hinsicht auf Qualität und räumliche Dichte, welche zu einem Vorschlag geeigneter Testgebiete geführt haben, wurde durch die Vorlage des 2. Zwischenberichts (Auswahl des Gebiets für die Detailstudie, 5. März 2001) abgeschlossen. Auf Wunsch des Auftraggebers wurde die vorgesehene Detailuntersuchung im westlichen Molassebecken durchgeführt.

Der hiermit vorgelegte vorläufige Endbericht beschreibt den Stand der Arbeiten zum 31. Dezember 2001. In den folgenden Abschnitten 1 und 2 werden die Resultate der jeweiligen Zwischenberichte zusammengefasst und im Licht der Projekterfahrung neu bewertet. Abschnitt 3 gibt den aktuellen Stand der Detailuntersuchung in der westlichen Molasse wieder und endet mit einem Ausblick auf die notwendigen Arbeiten in einem Folgeprojekt.

1. Detailkonzept der Untersuchungen

Die zentrale Aufgabenstellung der in diesem Projekt entwickelten Methode ist die Bestimmung von Grundwassergeschwindigkeiten im tiefen Untergrund mit der geothermischen Methode. Dies erfordert die genaue und robuste Bestimmung und Quantifizierung der physikalischen Effekte, welche die Temperaturverteilung im Untergrund bestimmen. Dies sind die normalerweise dominante stationäre Wärmeleitung, das Eindringen von zeitabhängigen Änderungen der Oberflächentemperatur (Paläoklima) und der Transport von Wärme durch Strömung, welche das eigentliche Ziel unserer Untersuchungen ist. Dabei muss ausgeschlossen werden, dass einer dieser Effekte fälschlich als Wirkung eines der anderen interpretiert wird.

Im einfachsten thermischen Modell besteht die obere Erdkruste aus einem homogenen Material, welches einem konstanten Wärmestrom an der Unterkante ausgesetzt ist und eine konstante Temperatur an der Erdoberfläche besitzt. In diesem Falle ergibt sich eine lineare Zunahme der Temperatur mit der Tiefe. In der Praxis wird tatsächlich eine Temperaturzunahme in Bohrungen gemessen, die dieses einfache Modell generell bestätigt. Allerdings werden die Messungen durch verschiedene Einflüsse modifiziert, deren Trennung eines der Hauptprobleme der geothermischen Modellbildung ist und die in Abb. 1.1 von unten nach oben skizziert sind:

Inhomogenitäten/Anisotropie/Wärmeproduktion. Eine horizontale Schichtung mit Gesteinen unterschiedlicher Wärmeleitfähigkeiten ist ein Beispiel für eine eindimensionale Inhomogenität. Diese führt dazu, dass die gemessenen Temperaturlogs nur noch stückweise linear sind. Der Wärmefluss ändert sich dadurch jedoch nicht. Zwei- und dreidimensionale Inhomogenitäten werden zum Beispiel durch topographische Effekte oder Klüfte erzeugt. Diese können zu einer Brechung des ansonsten vertikalen Wärmestroms führen. Ähnliche verzerrende Effekte bewirken das Vorhandensein von Gesteinen mit anisotroper Wärmeleitfähigkeit (Šafanda, 1996) und eine Variation der radioaktiven Wärmeproduktion.

Instationäre Diffusion. Änderungen der mittleren Temperatur an der Erdoberfläche diffundieren als instationäres Temperatursignal in den Untergrund. Solche „pleistozänen finger prints“ können zum Beispiel im Zusammenhang mit der letzten Eiszeit nachgewiesen werden (Clauser et al., 1997). Aber auch rezentere Klimaänderungen werden in flacheren Bohrungen beobachtet.

Advektion von Wärme. Schließlich wird das gemessene Temperatursignal ebenfalls durch tiefe Grundwasserströmungen modifiziert. Die thermische Signatur dieses Effekts hängt dabei von der Art der Advektion ab (großräumig oder entlang von Schwächezonen, vertikal oder lateral). Dieser in der konventionellen Geothermik als Störsignal aufgefasste advective Effekt ist in diesem Projekt das primäre Ziel der Untersuchungen.

Die Datenbasis für die Untersuchungen bilden in Bohrungen gemessene Temperaturdaten und Messungen thermischer Gesteinseigenschaften an Bohrkernen. Prinzipiell bestehen abhängig von Art und Zahl der vorhandenen Messdaten zwei Möglichkeiten:

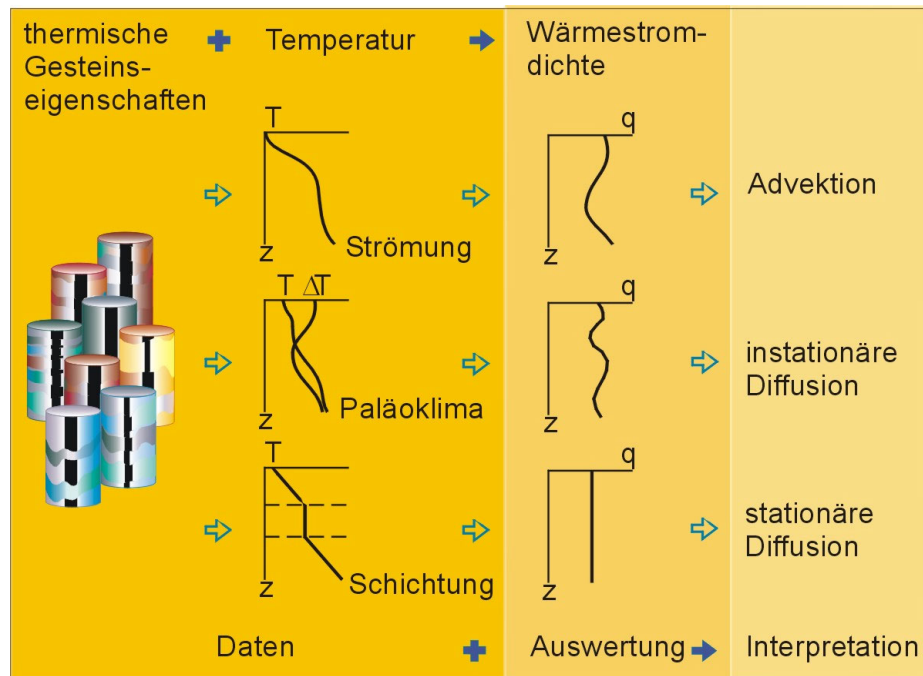


Abb. 1.1: Strategie der in diesem Projekt durchgeführten Untersuchungen.

Sind die physikalischen Parameter (Eigenschaften des Gesteins, Wärmequellen) und Randbedingungen bekannt, kann durch eine Modellierung die Temperaturantwort berechnet und mit den Daten verglichen werden (Vorwärtsrechnung). Diese Möglichkeit wird jedoch dadurch eingeschränkt, dass oft nicht alle nötigen Parameter bekannt sind.

Ein möglicher Ausweg besteht darin, zumindest eine Teilmenge der Parameter aus den Daten durch Inversion (d. h. durch iterative optimale Anpassung) zu erschließen. Üblicherweise wird hier das meist nichtlineare Problem lokal durch eine Linearisierung angenähert, die nur in einer kleinen Umgebung des Modells gilt. Für diesen Ansatz existiert eine ausgearbeitete Fehlertheorie (z. B. Tarantola, 1987). Eine derartige Inversion hat gegenüber einer wiederholten Vorwärtsrechnung den Vorteil einer wesentlich höheren Effizienz, der Reproduzierbarkeit und der Möglichkeit einer Schätzung der Modellfehler. Insbesondere können auch im nichtlinearen Bereich mit Hilfe sog. Monte-Carlo-Verfahren a posteriori Fehler, d.h. nach der Inversion der ermittelten Größen bestimmt werden (z. B. Mosegaard & Tarantola, 1995; Sambridge, 1999a,b; Jokinen & Kukkonen, 2000).

Daher sollen - wo immer möglich – inverse Verfahren eingesetzt werden. In Hinsicht auf thermische Probleme existieren verschiedene Inversionsverfahren, die sich durch Parameterwahl und Modellannahmen unterscheiden (z. B. Vasseur et al., 1985; Lehmann et al. 1998, Woodbury & Ulrych, 2000).

Aber nicht immer ist eine Inversion einsetzbar: Bei komplexen Problemen, insbesondere in multidimensionalen, zeitabhängigen Modellen ist es aber oft nur möglich, wiederholt das Vorwärtsproblem zu lösen. Dabei werden die relevanten Modellparameter vom Interpreten festgelegt und synthetische Daten berechnet. Anschließend werden reale und synthetische Werte verglichen, und das Modell unter Berücksichtigung der vorhandenen Randinformationen verbessert.

Die Diffusion paläoklimatischer Signale auf der Basis bekannter Temperaturdaten in den Untergrund wurde zum Beispiel von Mundry (1974) und Clauser (1984) behandelt. Hierbei handelt es sich um eindimensionale, lineare Modelle, die im folgenden durch Inversions-schemata ergänzt wurden (Mareschal & Beltrami, 1991; Beck et al., 1992; Shen & Beck, 1992). Weiterentwicklungen dieser Methode beinhalten die gemeinsame Auswertung von Messungen, die in zeitlichen Abständen gewonnen wurden (Beltrami, 1995). Da die Korrelationslänge des regionalen Klimas größer als 500 km angenommen werden kann (Hansen & Lebedeff, 1987), können unter Umständen auch mehrere Bohrungen aus dem gleichen Gebiet gemeinsam ausgewertet werden (Clauser & Mareschal, 1995). Paläoklimatische Signaturen sind in zahlreichen regionalen Studien aus Bohrlochtemperaturen extrahiert worden (z. B. Beck, 1992, Correia & Šafanda, 1999). In den Temperatur-Logs der Kontinentalen Tiefbohrung wurde das Ende der letzten Eiszeit in 1200 Metern Tiefe nachgewiesen (Clauser et al., 1997).

Zur Modellierung des advektiven Wärmetransports existieren viele numerische Modelle, welche sowohl Konduktion als auch Advektion berücksichtigen. Dazu zählt zum Beispiel das an der RWTH und dem GGA-Institut verfügbare Programm SHEMAT (Clauser, 1988), welches in der aktuellen Version instationäre, dreidimensionale Temperaturfelder mit Hilfe des Finite Differenzen-Verfahrens (FD) berechnen kann. Veröffentlichte zweidimensionale Fallstudien hierfür sind zum Beispiel der Rheingraben (Clauser & Villinger, 1990), die Kola-Bohrung (Kukkonen & Clauser, 1994) und die Frankenwald-Querzone (Kosakowski et al., 1999). Ein zweidimensionales Modell für rein konduktiven Wärmetransport findet sich zum Beispiel bei Jokinen & Kukkonen (2000). Alternativ dazu existieren Finite Elemente-Methoden (FE) mit ähnlichen Funktionsumfang, z.B. ROCKFLOW (Wollrath und Zielke, 1990), das auch Fluidbewegung in Klüften (Kolditz, 1999) berücksichtigen kann und unter anderem für Untersuchungen in einem Hot-Dry-Rock -Versuchsfeld eingesetzt wurde (Kolditz & Clauser, 1998).

Wegen der kurzen Laufzeit des Projekts sollten zunächst in einem Testgebiet die wesentlichen Verfahren in Hinsicht auf ihre Durchführbarkeit, ihre Ergebnisse und deren Genauigkeit demonstriert werden. Gleichzeitig sollten Erfahrungen mit den verwendeten Techniken gewonnen werden, die eine möglicherweise nachfolgende Untersuchung im größeren Rahmen erleichtern würde.

Daher gliedert sich die Arbeit in diesem Projekt in zwei Phasen: (1) Auswahl eines geeigneten Gebiets exemplarischen Charakters (2) regionale Detailuntersuchung dieses Gebiets in Hinsicht auf das Erkennen und Quantifizieren von Strömung im tiefen Untergrund. Aus diesen Aspekten ergaben sich die Arbeiten, die in diesem Projekt durchgeführt wurden und in den Abschnitten 2 und 3 dieses Berichts detailliert beschrieben werden.

2. Auswahl des Gebiets für eine Detailuntersuchung

Zu Beginn des Projektes wurden für die Auswahl des Testgebiets die folgenden Kriterien angegeben:

1. Es müssen **ausreichende Temperaturdaten** hoher Qualität vorhanden bzw. zugänglich sein, da sie die Basis der vorgeschlagenen Methodologie darstellen.
2. Es sollten möglichst umfassende **geowissenschaftliche Randinformationen** wie Bohrlochlogs, Oberflächengeophysik, Geochemie oder geologische Strukturinformation vorliegen, die entweder zur Verringerung der Mehrdeutigkeit beitragen und eine partielle Verifikation der thermischen Modelle ermöglichen können.
3. Es sollten **deutliche Effekte** vorhanden oder zumindest wahrscheinlich sein, die durch advective Transportvorgänge bedingt sind.
4. Aus Gründen der **Relevanz** für die zu Grunde liegende Fragestellung der alternativen Standortsuche sollten die Effekte in ihrer Größenordnung nicht allzu weit von realistischen Gegebenheiten entfernt sein und das Testgebiet nicht schon aus anderen Gründen ausgeschlossen sein.

Im folgenden Kapitel werden die genannten Kriterien in Hinblick auf die in Frage kommenden Gebiete diskutiert. Hierfür werden jeweils charakteristische Beispiele gezeigt.

2.1 Kritische Bewertung der vorhandenen Temperaturdaten

Bei der Auswahl der in Frage kommenden Testgebiete wurden zunächst auf Basis der in Abb. 2.1 gezeigten geologischen Karte Deutschlands die Häufungsgebiete von Messpunkten aufgesucht, die mit definierten geologischen Strukturen in Verbindung stehen. Dabei handelt es sich um folgende Gebiete, die sich von ihrer geologischen Struktur und Bedeutung stark unterscheiden:

- **Westliches Molassebecken (WM),**
- **Östliche Molassebecken (OM),**
- **Oberrhingraben (OG),**
- **Münsterländer Kreidebucht (MB),**
- **Thüringer Becken (TB),**
- **Süd-niedersächsisches Becken (NB),**
- **Gifhorner Trog (GT).**

Basis der folgenden Untersuchungen sind Temperaturdaten für den Untergrund Deutschlands, welche in einer Datenbank bereitstehen, die seit 1977 beim Projektpartner GGA-

Institut in Hannover aufgebaut und erweitert wurde. Sie enthält gegenwärtig Daten aus rund 10.000 Bohrungen in ganz Deutschland. Die regionale Verteilung der Bohrungen sowie die Verteilung der Daten mit der Tiefe sind nicht einheitlich. Aufgrund der Bohraktivitäten der Kohlenwasserstoffindustrie entstammen die Daten mehrheitlich den großen Sedimentbecken, namentlich dem Norddeutschen Becken, dem Molassebecken sowie dem Rheingraben und eher wenige den deutschen Mittelgebirgsregionen.

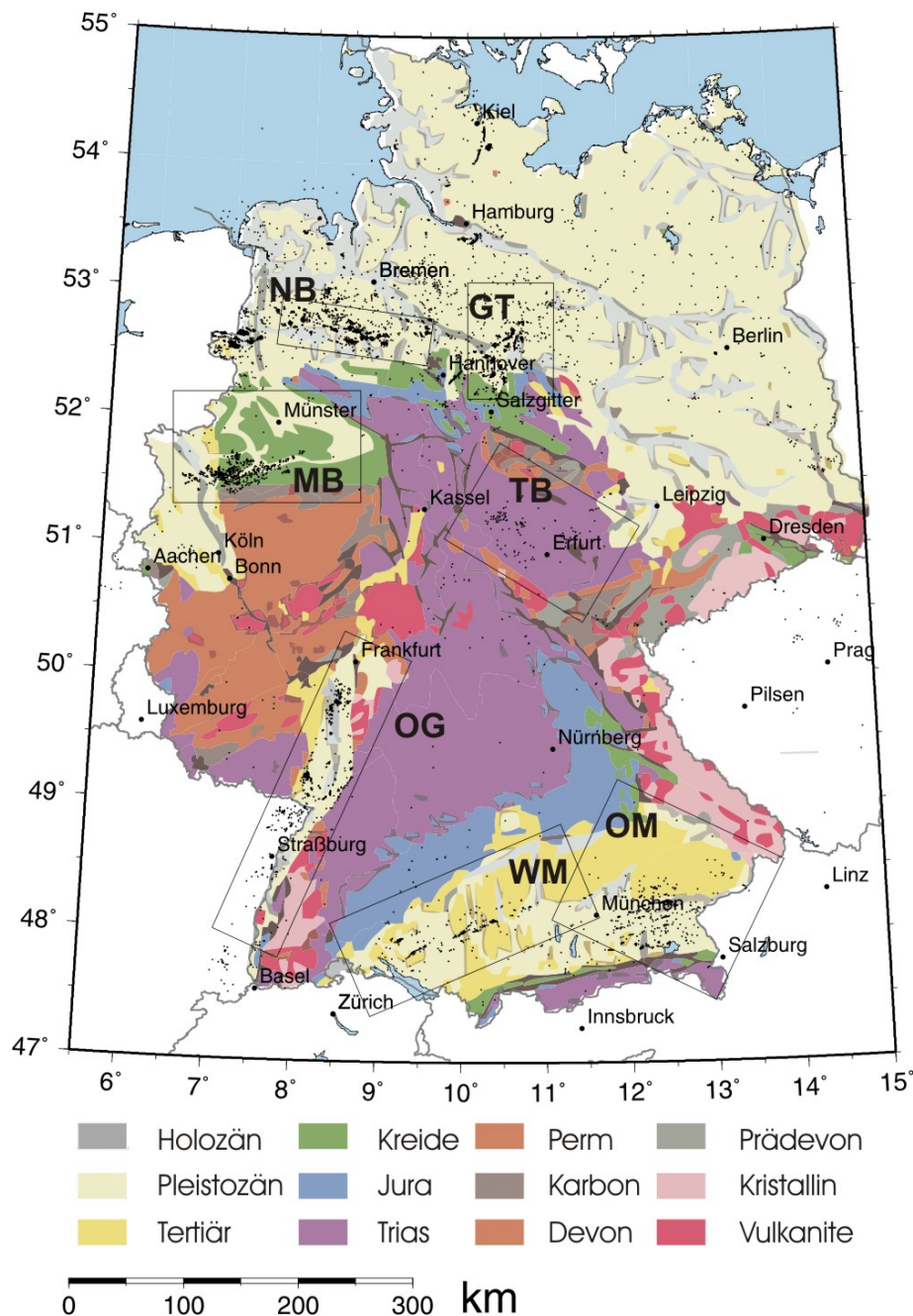


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der Oberflächengeologie Deutschlands (Henningsen & Katzung, 1998) und der Gebietsvorschläge. Die eingezeichneten Punkte stellen Orte mit Temperaturmessungen in Tiefen > 500 m dar.

Gebiet	Tiefe	Mittelwert	Standardabweichung	Minimal-Temperatur	Maximal-Temperatur	Messpunkte	Ungestörte Logs	Gestörte Logs	Sonstige Messungen	BHT
	[m]	[°C]	[°C]	[°C]	[°C]					
Gifhorner Trog	500	27,8	3,3	17,9	45,3	1063	6	53	260	744
	700	34,8	4,3	21,8	58,7	1027	6	52	252	717
	900	41,5	5,2	25,2	62,6	927	4	52	223	648
	1100	48,3	6,3	28,2	74,4	829	4	49	204	572
Münsterländer Kreidebucht	500	26,1	2,6	7,1	39,0	795	3	0	772	20
	700	32,8	3,4	7,3	44,4	583	3	0	562	18
	900	40,1	3,3	32,6	54,3	276	1	0	258	17
	1100	48,6	4,3	39,0	62,3	54	1	0	37	16
Südnie-ders. Becken	500	29,0	4,2	18,3	47,8	1342	0	10	4	1328
	700	36,1	5,3	21,8	63,1	1259	0	10	3	1246
	900	43,2	6,6	25,3	78,4	1092	0	10	2	1080
	1100	50,3	7,7	28,9	77,2	908	0	9	1	898
Oberrhein-graben	500	39,5	9,3	21,3	73,6	764	63	33	67	601
	700	51,8	12,7	25,6	93,6	649	60	31	56	502
	900	63,7	14,8	31,6	115,1	560	56	20	40	444
	1100	73,9	16,2	39,4	125,6	449	43	18	35	353
Östliche Molasse	500	24,8	5,1	15,5	46,5	430	13	4	10	403
	700	30,9	6,5	18,2	48,2	424	10	2	9	403
	900	36,8	7,9	20,7	58,8	415	8	2	7	398
	1100	42,4	9,2	24,1	70,0	388	7	1	4	376
Thüringer Becken	500	22,4	2,0	16,4	28,1	110	24	85	0	1
	700	27,5	2,5	21,4	35,8	106	23	82	0	1
	900	32,3	3,1	24,0	42,4	86	17	68	0	1
	1100	35,9	4,0	26,0	46,4	39	9	29	0	1
Westliche Molasse	500	28,3	4,0	17,6	46,3	324	20	11	3	290
	700	35,7	4,9	22,0	51,8	316	15	11	3	287
	900	43,0	5,7	27,8	60,8	305	14	10	3	278
	1100	50,1	6,7	32,0	72,4	289	11	9	2	267

Tab. 2.1: Statistik der Bohrlochtemperaturen, aufgeschlüsselt nach Untersuchungsgebieten und Messmethoden.

2.1.1 Datendichte

Tabelle 2.1 zeigt eine statistische Übersicht der vorhandenen Temperaturdaten. Dabei wurde nach den vorgeschlagenen Messgebieten und Zieltiefen unterschieden. Für die Entscheidung von besonderer Bedeutung ist jedoch die Qualität der Temperaturdaten. Wie schon im Detailkonzept angedeutet, muss zwischen Messungen verschiedenen Typs unterschieden werden, die mit unterschiedlichen Fehlern statistischer wie systematischer Art behaftet sind:

Ungestörte Temperaturlogs: Diese kontinuierlichen Logs wurden überwiegend in Bohrungen hinreichend lange nach Abklingen der bohrtechnisch bedingten Temperaturstörungen gemessen. Sie sind wegen ihrer Genauigkeit für dieses Vorhaben besonders wichtig. Die Messunsicherheit ungestörter Temperaturlogs liegt in der Regel bei $\pm 0,1$ K oder besser. Ihr

Absolutfehler liegt daher weit unter dem durch kleinräumige Heterogenitäten hervorgerufenem Schwankungsniveau („geologisches Rauschen“).

Gestörte Temperaturlogs: Weisen Bohrlochlogs die Effekte interner Zirkulation oder andersgeartete technische Störungen auf, sind sie nicht ohne Weiteres brauchbar. Die auftretenden Fehler sind systematischer Natur. Dieser Typ ist besonders in ostdeutschen Bohrungen verbreitet, da diese Logs hier früher anstatt von BHT-Werten (s. u.) aufgezeichnet wurden.

Sonstige Messungen: Dies ist eine Gruppe, welche eine Reihe unterschiedlicher Messungen umfasst: Bergwerksmessungen, Fördertests, Auslauf- und Lagerstättentemperaturen. Es handelt sich im Wesentlichen um Einzelmessungen im Gegensatz zu den oben genannten Temperaturlogs. Einen relevanten Beitrag zu der untersuchten Datenbasis liefern sie lediglich im Ruhrgebiet, am Südrand der **Münsterländer Kreidebucht**.

Bottom-Hole-Temperaturen (BHT-Werte). Diese Messungen werden in fast allen westdeutschen Bohrungen der Kohlenwasserstoffindustrie durchgeführt. Da sie während oder kurz nach Abschluss der Bohrarbeiten aufgezeichnet werden, sind sie stark gestört. Auch hier handelt es sich um Punktmessungen in bestimmten Tiefen, die mehr oder weniger oft ausgeführt werden. Sie können unter bestimmten Voraussetzungen durch direkte Berücksichtigung der Temperaturstörung oder auch durch die Verwendung räumlicher Statistik korrigiert werden (z. B. Förster & Merriam, 1999). Dennoch sind sie deutlich ungenauer ($\Delta T < 10 \text{ K}$) und häufig systematisch verzerrt und sind daher für die vorliegende Untersuchung nur bedingt brauchbar. Obwohl bereits Korrekturverfahren existieren (Hänel, 1988; Kutasov, 1999), besteht bei ihnen im Hinblick auf ihre große Zahl in allen Gebieten ein besonderer Forschungsbedarf. Die räumliche Verteilung der Daten ist in Tab. 2.1 dargestellt. Die regionale Verteilung der Bohrungen sowie die Verteilung der Daten mit der Tiefe sind nicht einheitlich. Auf Grund der Bohraktivitäten der Kohlenwasserstoff-Industrie entstammen die Daten mehrheitlich den großen Sedimentbecken. Artefakte in den Temperaturdaten können darin begründet sein, dass eine derartige Tiefbohrung stets auf eine bestimmte Formation abzielt. Hierdurch spiegeln die erfassten Bohrprofile die für die jeweilige Exploration interessanten Gebiete und Tiefenhorizonte wieder. Zum Teil kann es sich dabei aber um Sonderlokalisationen (Erdölfallen, geothermische Anomalien) handeln, die nicht für das gesamte Gebiet charakteristisch sind. Die einzelnen Gebiete unterscheiden sich stark in ihrer Datendichte und besonders in der Homogenität der Datensätze. Abb. 2.2 zeigt deutlich, dass die gute Überdeckung des Norddeutschen Beckens in erster Linie auf die große Zahl von BHT-Messungen zurückgeht (Abb. 2.2, links), während es nur wenige ungestörte Logs gibt (Abb. 2.2, rechts). Umgekehrt existieren im östlichen Deutschland keine BHT-Werte, dafür aber viele gestörte Logs.

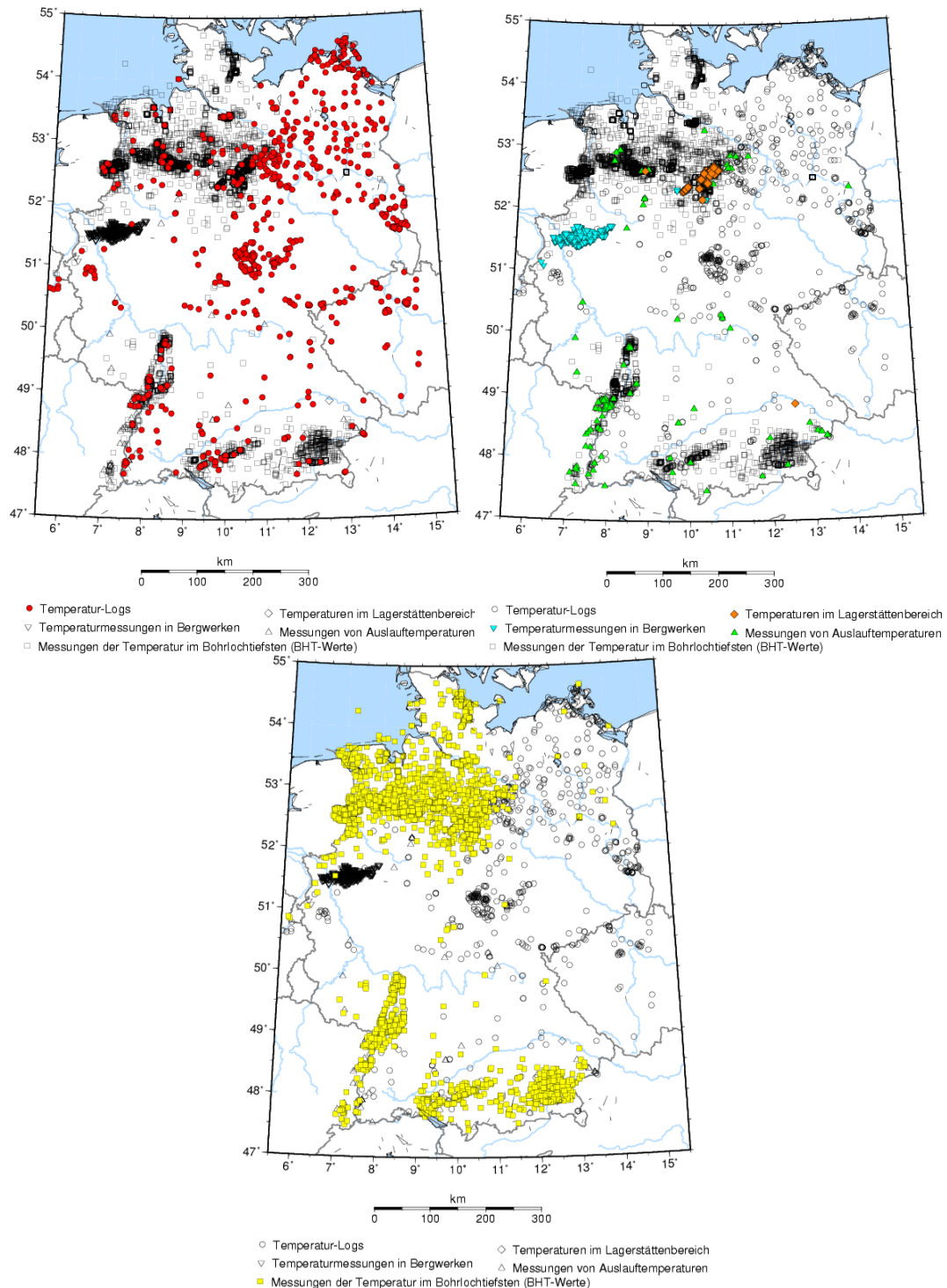


Abb. 2.2: Lage der in der Temperaturdatenbank des GGA-Instituts enthaltenen Bohrungen mit Daten von mindestens 500 m unter Gelände. Die Datensätze sind nach folgenden Qualitäten sortiert. Oben links: Temperatur-Logs; Oben rechts: Temperaturen im Lagerstättenbereich und Temperaturmessungen in Bergwerken sowie Messungen von Auslauftemperaturen; Unten: Messungen der Temperatur im Bohrlochtiefsten (BHT-Werte).

Für die geplanten Untersuchungen werden insbesondere ungestörte Logs benötigt, da sie einerseits eine ausreichende Genauigkeit für die Identifizierung der gesuchten Effekte haben, andererseits aber auch für die Korrektur der anderen Datentypen unerlässlich sind. Auf Basis der räumlichen Verteilung von ungestörten Logs sind daher lediglich 3 Gebiete für die geplanten Untersuchungen geeignet: Thüringer Becken, Oberrheingraben und Westliche Molasse. Von diesen weist der Oberrheingraben die bei weitem größte Zahl ungestörter Temperaturlogs auf. Besonders hervorzuheben ist dabei, dass hier auch für große Tiefen noch ungestörte Logs vorhanden sind. Um die Analyse auf andere Gebiete ausdehnen zu können, ist eine Benutzung der anderen Datenquellen jedoch unerlässlich. Daher werden auch für die Regionalstudie BHT-Werte und gestörten Logs nicht vernachlässigt.

2.1.2 Geostatistische Untersuchungen

Im Vordergrund bei der Anwendung stand die Frage nicht nur nach einer verlässlichen Interpolation der räumlich unregelmäßig und anisotrop verteilten Daten, sondern auch nach einem Maß der Güte dieser Interpolation. Die Geostatistik und insbesondere das im folgenden Abschnitt beschriebene Kriging-Verfahren sind für diesen Zweck besonders geeignet.

Geostatistik

Geostatistik befasst sich mit der Statistik räumlich verteilter Variablen, in unserem Fall die Temperatur (Cressie, 1993; Schafmeister, 1999). Für unsere Untersuchungen ergeben sich zwei Aufgaben, die mit Hilfe geostatistischer Methoden erreicht werden können:

1. Analyse der statistischen Korrelationen für die Teilgebietsvorschläge. Aus dieser Analyse können Informationen über die Datenstruktur in diesen Gebieten gewonnen werden.
2. Erzeugung von Temperaturschnitten mit dem Kriging-Verfahren. Die unterschiedlichen Qualitäten der Daten können hier berücksichtigt werden. Außerdem ist eine Angabe der Genauigkeit der interpolierten Temperatur möglich.

Als Maß der Korrelation räumlich verteilter Variablen wird das Variogramm benutzt, in dem der quadratische Zuwachs einer Variablen in Abhängigkeit vom Abstand zweier Messungen aufgetragen wird. Um die Korrelation zu modellieren, wird ein Modell an die experimentellen Daten angepasst. Hierfür existieren unterschiedliche theoretische Modelle.

In Abb. 2.3 ist ein Beispiel eines experimentellen Variogramms und des theoretischen Modells aus dem Niedersächsischen Becken dargestellt. Die verschiedenen Parameter des Modells haben folgende Bedeutung:

Nugget-Effekt: In diesem Parameter sind Messfehler und die kleinräumige Variation der Variablen zusammengefasst.

Reichweite (range): Die Reichweite ist ein Maß für den maximalen Abstand zweier Messpunkte, die noch miteinander korreliert sind

Schwellwert (sill): Die Gesamt-Variabilität der Variablen im betrachteten Gebiet bestimmt im Wesentlichen diesen Parameter.

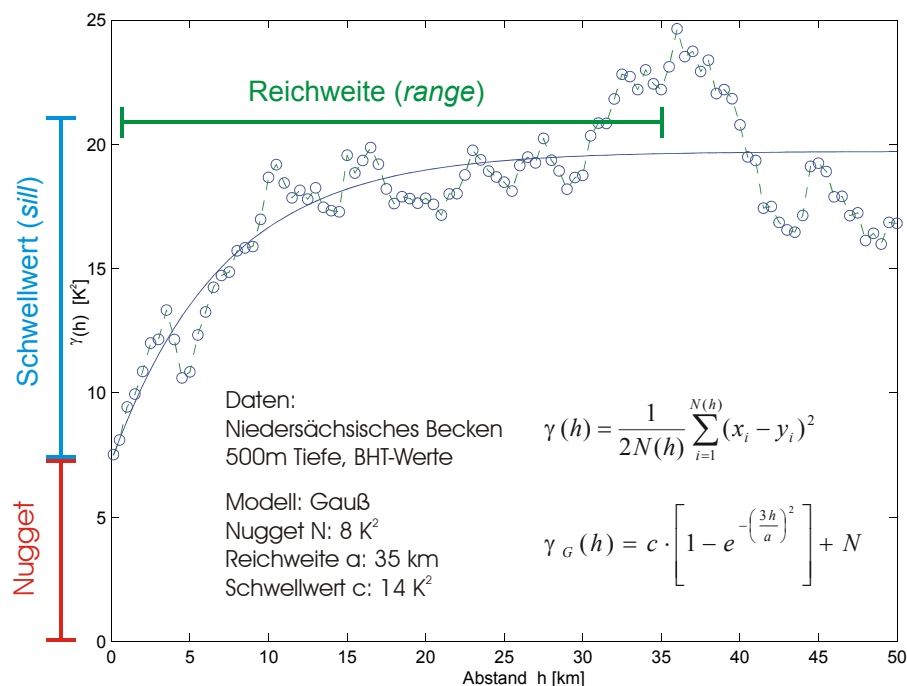


Abb. 2.3: Experimentelles Variogramm (NB) zur Erläuterung der im Text erwähnten Parameter.

Wellenlänge: Dieser Parameter tritt nur bei sogenannten Loch-Effekt-Modellen auf. Hier hat das Variogramm einen räumlich periodischen Anteil, der mit der Entfernung exponentiell abklingt.

Ergebnisse der geostatistischen Untersuchungen

In Tab. 2.2. sind die Modellparameter für die einzelnen Teilgebiete und Gesamt-Deutschland zusammengefasst und nach Qualitätsklassen aufgeschlüsselt angegeben. Nugget-Effekt und Schwellwert (sill) sind in K² angegeben, die Reichweite (range) in km. Für Einträge die mit „nicht anwendbar“ (N/A) gezeichnet sind, existieren keine Daten, geklammerte Werte basieren auf schlechter Datenlage.

Für die ungestörten Logs wurde meist ein Loch-Effekt-Modell benutzt, das eine Überlagerung eines Exponentialansatzes mit harmonischen Anteilen darstellt. Die räumliche Wellenlänge ist jeweils mit der Reichweite zusammengefasst (Wellenlänge / Reichweite). Die BHT zeigen häufig auch einen schwachen Loch-Effekt, der aber durch die größere Ungenauigkeit der Messungen verdeckt wird und daher nicht modelliert wurde. Vergleicht man die verschiedenen Güteklassen, findet man, dass sich BHT und gestörte Logs von den ungestörten hauptsächlich durch einen erhöhten Schwellwert und Nugget unterscheiden, beides erwartungsgemäß Indikatoren für eine geringere Genauigkeit dieser Messungen.

Der Oberrheingraben zeichnet sich gegenüber den anderen Gebieten durch einen erhöhten Nugget-Effekt und Schwellwert aus. Dies heißt zum einen, dass interpolierte Temperaturen

in diesem Gebiet nicht die Genauigkeit erreichen können, wie in anderen Gebieten. Zum anderen mögen diese Variationen aber genau durch die gesuchten Effekte – Wärmeadvektion durch Strömung - erzeugt werden. Ein periodischer Anteil von 15-20 km Länge ist in den Variogrammen sichtbar, was etwa der halben Breite des Oberrheintales entspricht. Zum anderen folgen in Längsrichtung des Grabens Hochs und Tiefs des Grundgebirges aufeinander. Auch diese Strukturen können für die beobachtete scheinbare Periodizität verantwortlich sein.

Die Westliche Molasse hat den kleinsten Nugget-Effekt und einen moderaten Schwellwert. Damit ist die Modellierung des Temperaturfeldes für dieses Gebiet am genauesten. Die Abdeckung mit ungestörten Logs ist allerdings nur im Kerngebiet der Westlichen Molasse gegeben (vgl. Abb. 2.4, rechts, Verteilung der ungestörten Logs). Auch hier ist ein periodischer Anteil erkennbar, der durch die Asymmetrie des Beckens und das entsprechende Einfallen der Schichten verursacht sein kann.

Die Variogramm-Modelle aus Tab. 2.2 für ganz Deutschland bilden die Grundlage für die Interpolation der Temperatur. Die Tabelle zeigt, dass die Daten verschiedener Güteklassen auch verschiedene Variogramm-Strukturen aufweisen. Zur Interpolation wurde ein Kriging Algorithmus benutzt, welcher es erlaubt, diese verschiedenen Qualitäten in die Interpolation einfließen zu lassen, indem ungestörte Logs stärker berücksichtigt werden als gestörte Logs oder BHT. Dieser Formalismus ermöglicht eine gemeinsame Interpolation verschiedener Variablen unter der Annahme, dass der zugrunde liegende räumliche Trend für alle Variablen gleich ist. Es wurden wiederum die drei Typen von Variablen benutzt, die auch in Tabelle 2.2 dargestellt sind: Ungestörte Logs, gestörte Logs und BHT-Werte. Der Algorithmus ist symmetrisch in den Variablentypen, d.h. keine Variable geht bevorzugt ein. Die unterschiedlichen Wichtungen der Variablentypen werden durch deren Variogramme bestimmt, insbesondere durch die unterschiedlich hohen Nugget-Werte. Die räumlichen Beziehungen zwischen den Variablentypen, also z. B. ungestörte und gestörte Logs, werden über Kreuzvariogramme realisiert. Als Beispiel ist in Abb. 2.5 der Temperaturschnitt für 900 m Tiefe dargestellt.

Außerdem ist die Standardabweichung dieser Schätzung abgebildet. In den Gebieten mit ungestörten Logs ist die Genauigkeit im Wesentlichen durch den Nugget-Effekt der ungestörten Logs gegeben. Dies trifft auf Oberrheingraben, Westliche Molasse, Thüringer Becken und Östliche Molasse zu, mit Standardabweichungen von 2-3 K. Das Südniedersächsische Becken zum Beispiel ist hauptsächlich durch BHT-Werten abgedeckt und hat eine höhere Standardabweichung um 5,5 K. Bemerkenswert ist hier, dass für die Karte in Abb. 2.5 ein globales Variogramm-Modell benutzt wurde. Tab. 2.2 zeigt aber, dass die Teilgebiete durchaus unterschiedliche Eigenschaften haben. So ist z. B. zu erwarten, dass die Standardabweichung für die Westliche Molasse eher konservativ abgeschätzt wurde. Umgekehrt dürfte die Genauigkeit im Oberrheingraben zu optimistisch geschätzt sein.

Teilgebiets- vorschläge	Ungestörte Logs			BHT- und andere Messungen			Gestörte Logs		
	Sill (Schwell- wert)	Nugget	Range (Reich- weite)	Sill (Schwell- wert)	Nugget	Range (Reich- weite)	Sill (Schwell- wert)	Nugget	Range (Reich- weite)
Gifhorner Trog	N/A	N/A	N/A	11,7	8,9	29	12	8	15/35
Südniedersächs. Becken	N/A	N/A	N/A	12,5	16,5	10	40	8	15/25
Münsterländer Kreidebucht	N/A	N/A	N/A	5,3	4,2	8	N/A	N/A	N/A
Thüringer Becken	15	0,2	15	N/A	N/A	N/A	7	2,8	10
Ober rheingraben	110	26	18/30	230	40	15	(100)	(20)	(15/20)
Westliche Molasse	25	0,1	7/35	15	25	30	50	3	7/20
Östliche Molasse	(60)	?	20/?	0,006	33	10	N/A	N/A	N/A
Gesamt- Deutschland	100	5	10/25	12,9	16,2	33	20	15	60



Loch-Effekt Modell
Lineares Modell



Gauß-Modell
Exponential-Modell

Tab. 2.2: Regionalisierte Geostatistik.

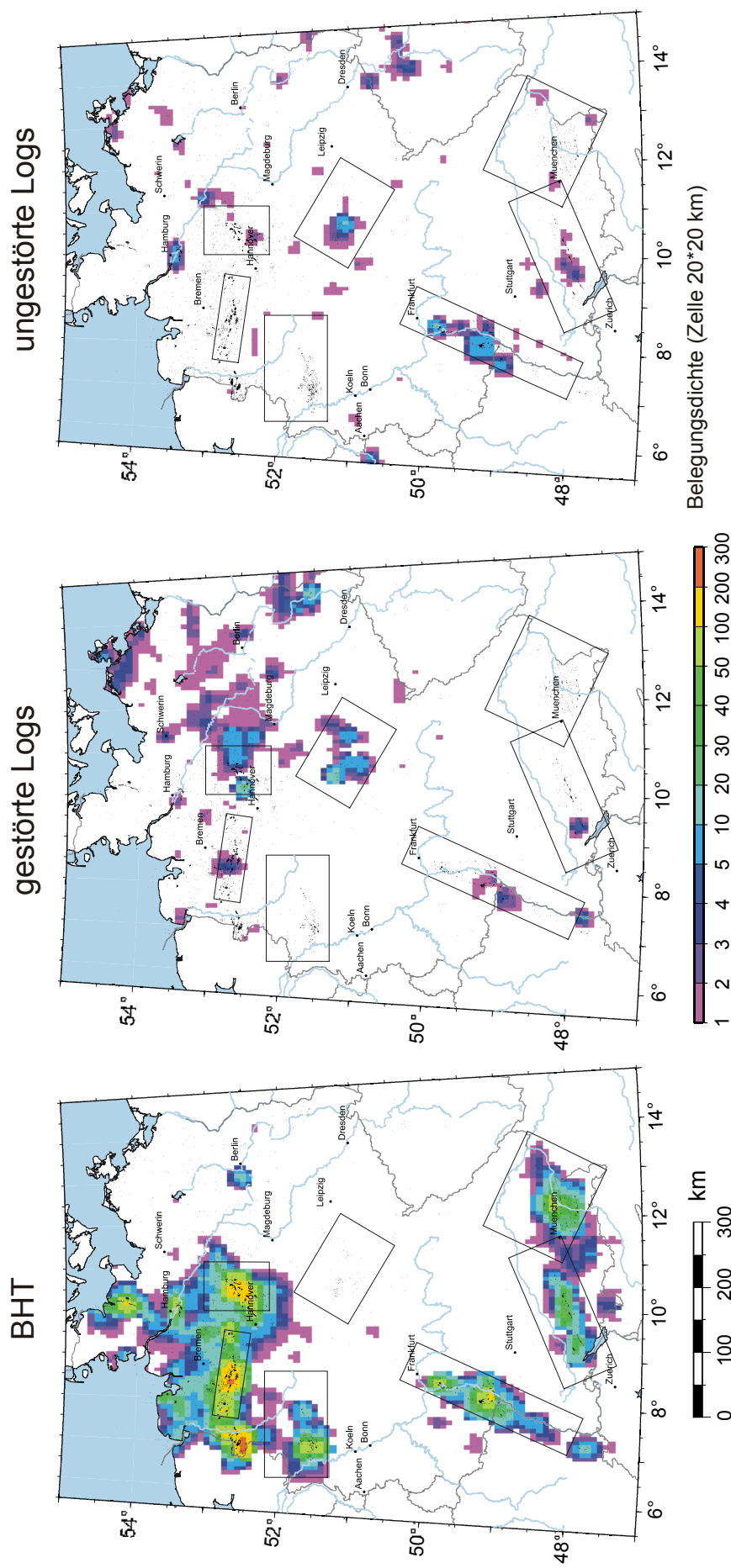


Abb. 2.4: Dichte der Bohrlochtemperaturwerte (basierend auf einer Zelle von 20*20 km, logarithmische Farbcodierung) in einer Tiefe von mehr als 900 m, aufgeschlüsselt nach Messmethoden. Bei den besonders wichtigen, ungestörten Logs bleiben nur noch 3 relevante Gebiete übrig: Der Oberrheingraben, die Westliche Molasse, und das Thüringer Becken. Falls die im östlichen Deutschland reichlich vorhandenen gestörten Logs befriedigend korrigiert werden können, besteht auch hier ein Potential für weitere Untersuchungen.

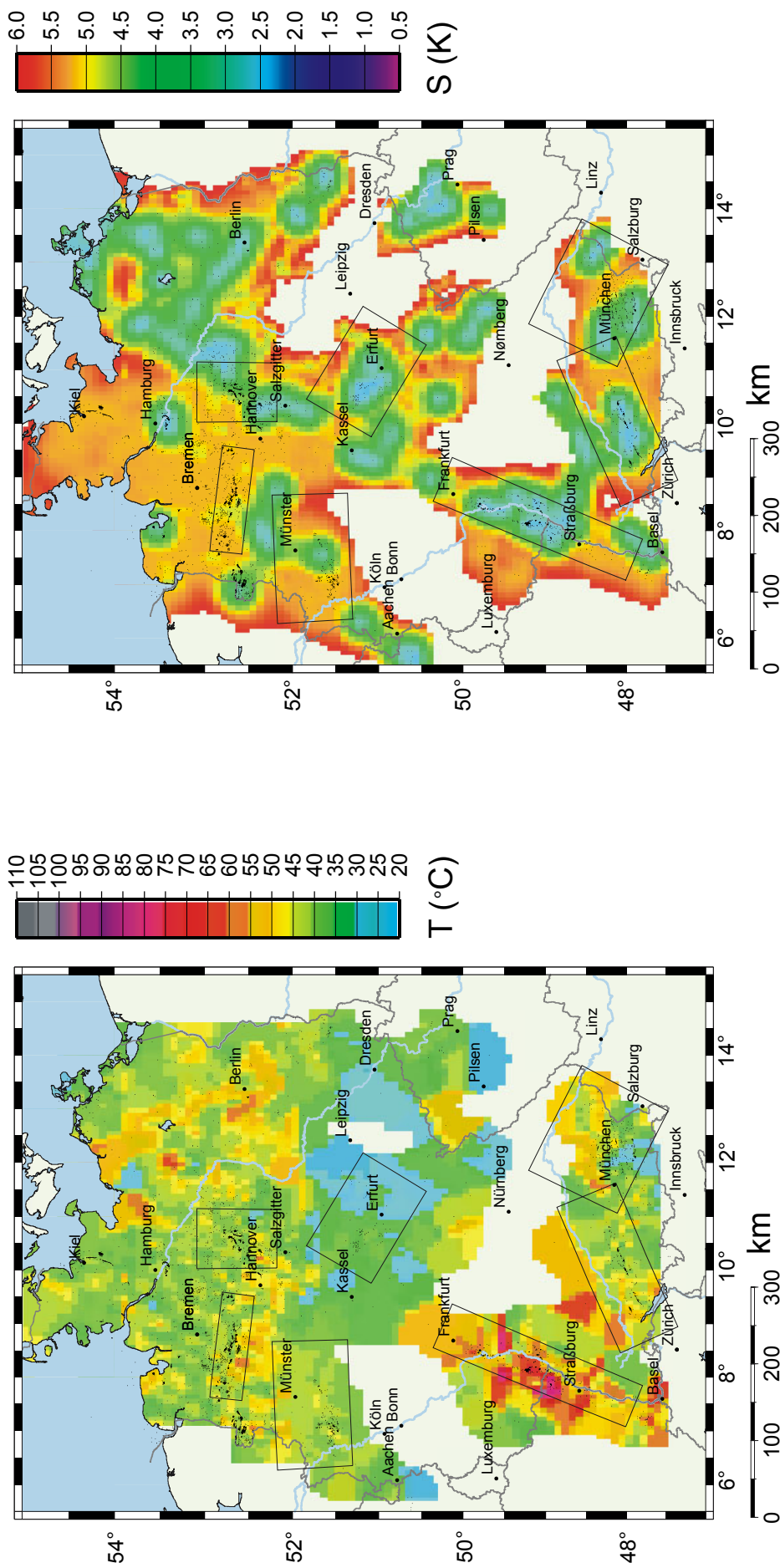


Abb. 2.5: Durch Kriging interpolierte Bohrlochtemperatur einer Tiefe von 900 m in $^{\circ}\text{C}$. Die auf der linken Seite dieser Darstellung gezeigten Temperaturschätzwerte wurden mit dem Krige-Verfahren berechnet. Rechts sind die aus diesem Schätzprozess hervorgehenden Fehler (Standardabweichung S in K) dargestellt. Von den Messgebieten zeichnen sich Oberheingraben und Westliche Molasse durch signifikante Temperaturanomalien aus, während die übrigen nur geringe Effekte zeigen. Der Fehler in den anomalen Gebieten liegt bei $<3 \text{ K}$. Im Nord-deutschen Becken sind die Fehler wegen der Dominanz der BHT-Messungen deutlich größer.

2.2 Temperaturschnitte und konduktive Reduktion

Parallel zu den geostatistischen Verfahren wurden Temperaturschnitte durch eine regularisierte Spline-Interpolation („continuous curvature splines in tension“, Smith & Wessel 1990; Wessel & Smith 1995) erzeugt, die auf eine besondere Hervorhebung potentiell advektiv gestörter Bereiche abzielten. Um Residualplots zu erzeugen, wurden zwei unterschiedliche Methoden angewendet:

Standardisierung: Von den lokalen Messungen wird zunächst der Mittelwert subtrahiert und das Ergebnis mit der Standardabweichung normiert (Abb. 2.6 und 2.7).

Konduktive Reduktion: Auf Grundlage einer stark geglätteten Interpolation der Oberflächenwärmestromdichte und der Annahme einer lokal homogenen Wärmeleitfähigkeit kann ein Schätzwert für die Temperatur bestimmt werden, welcher die Rolle des Mittelwertes bei der Standardisierung einnimmt.

2.2.1 Temperaturkarten

Für die großräumige Identifizierung thermischer Anomalien müssen zunächst Temperaturkarten in unterschiedlichen Tiefenniveaus erstellt, untersucht und interpretiert werden. Solche Karten wurden in einem vertikalen Abstand von 50 m für den interessierenden Tiefenbereich von 500 - 1200 m unter Geländeoberkante erstellt (CDROM, Anlage zum 2. Zwischenbericht Auswahl des Gebiets für die Detailstudie, 5. März 2001). In die vertikale Interpolation auf die jeweilige Schnittebene sind Daten aller Güteklassen und Korrekturverfahren eingeflossen (Abb. 2.8, links). Zum Vergleich wurde eine Interpolation der Temperaturen ohne BHT-Werte gegenübergestellt (Abb. 2.8, rechts).

Bei einer abstands- und güteabhängigen Glättung der Daten (Schellschmidt et al., 1999) müssen die Glättungsparameter auf die regional variierende Datendichte und Güte angepasst werden. Da Datendichte und Datengüte in Deutschland räumlich unregelmäßig verteilt sind, wurde auf eine einheitliche Glättung der Daten in der großmaßstäblichen Betrachtung verzichtet. Sie wurde jedoch bei den späteren Untersuchungen im Detailgebiet eingesetzt.

Es ist bei der Interpretation der Temperaturschnitte zu berücksichtigen, dass die Auflösung des Temperaturbildes (Abb. 2.7) mit der Datendichte (Abb. 2.4) zusammenhängen kann, jedoch nicht zwingend muss. Die intensive Salztektonik im Norddeutschen Becken (Baldschuhn et al., 1999) bewirkt hohe Kontraste bezüglich der Wärmeleitfähigkeit und Durchlässigkeit. Diese Verhältnisse werden deutlich durch die kleinräumigen Temperaturanomalien wiedergegeben (Abb. 2.8, links). Diese ist allerdings ohne die hohe Datendichte nicht zu erkennen, die zumeist auf BHT-Werten beruht (Abb. 2.8, rechts). Die Grabenstruktur des Rheintals (z. B. Pflug, 1982) und die sedimentären Schichten der Molasse (Bertleff et al. 1988) zeigen ein ähnliches Bild in den kleinräumigen Temperaturvariationen. Eine Ausnahme bildet das Thüringer Becken, das trotz seiner hohen Datendichte eine gleichförmige Temperaturverteilung zeigt (vgl. Abb. 2.8), da hier keine BHT-Werte vorhanden sind. Die höchsten Temperaturanomalien konzentrieren sich auf das Gebiet des Oberrheingrabens. Anomalien in dieser Größenordnung können nur durch eine konvektive Umverteilung der Wärme erklärt werden (vgl. Clauser & Villinger, 1990).

2.2.2 Standardisierte Temperaturkarten

Um die Entwicklung des Temperaturfeldes in Abhängigkeit von der Tiefe darstellen zu können, ist eine Standardisierung der Temperaturdaten hilfreich. Aus den auf die horizontalen Schnittebenen interpolierten Daten wurde die standardisierte Temperatur T_s nach der Formel $T_s = (T - T_m) / S$ berechnet. Dabei bezeichnet T_m den Mittelwert und S die Standardabweichung aller Daten des jeweiligen Schnitthorizontes (Abb. 2.7). Die Anwendung dieser Standardisierung auf die Temperaturdaten ergibt für alle Schnittebenen eine Verteilung mit der Standardabweichung 1 und einem Mittelwert von 0. Somit werden die Anomalien durch die Standardisierung unabhängig von Datenmittelwert und –varianz und damit vergleichbar. Die Prinzipskizze (Abb. 2.6) veranschaulicht die Standardisierung an einer Normalverteilung.

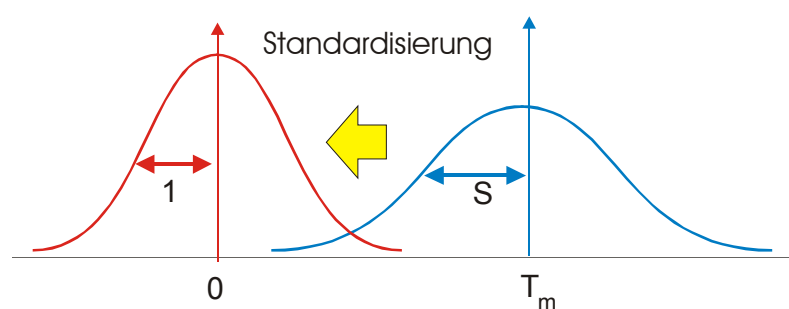


Abb. 2.6: Schematische Darstellung der Standardisierung.

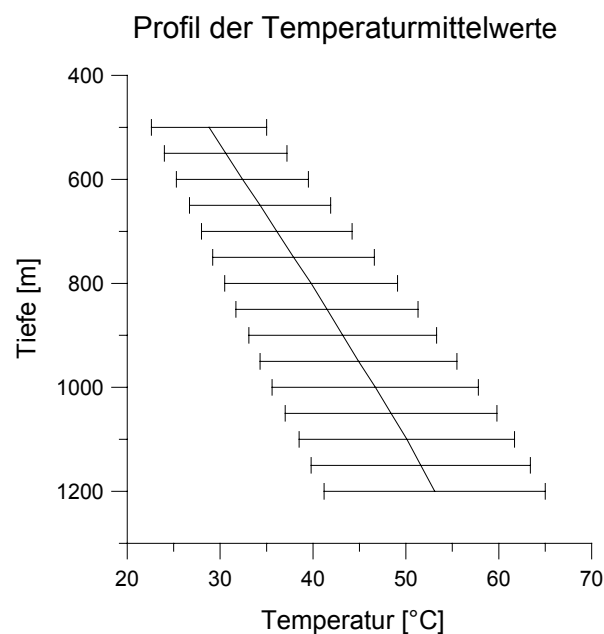


Abb. 2.7: Temperaturmittelwerte in Gesamt-Deutschland im interessierenden Tiefenintervall 500 – 1200 m in einem vertikalen Abstand von 50 m, sowie die berechneten Standardabweichungen, die durch die Balken repräsentiert werden. Die Hier gezeigten Werte gehen in die Standardisierung der Temperaturen ein.

In Abb. 2.9 sind exemplarisch für die Tiefen 600 m, 900 m und 1200 m die standardisierten Schnitte dargestellt. Die Westliche Molasse, die Östliche Molasse, Oberrheingraben, Südniedersächsisches Becken und Gifhorner Trog zeichnen sich durch Temperaturminima und -maxima in kleinräumigen Wechsel aus. Laterale Temperaturgradienten lassen sich neben advektiven Einflüssen auch durch rein konduktive Prozesse erklären. Hierfür können Effekte wie zwei- oder dreidimensionale Inhomogenitäten (Klüfte, Salzstöcke, etc.), das Vorhandensein von Gesteinen mit anisotroper Wärmeleitfähigkeit oder eine Variation der natürlichen radiogenen Wärmeproduktion verantwortlich sein. Jedoch sind laterale Temperaturgradienten, wie sie im Oberrheingraben auftreten, nicht mehr mit rein konduktiven Prozessen zu erklären. Sowohl die Größe der Anomalien als auch ihre geringe Wellenlänge sind ein deutliches Indiz für eine Umverteilung der Wärme durch Advektion. Bemerkenswert ist, dass die Lage der Temperaturminima und -maxima über alle Teufen erhalten bleibt. Eine Abnahme der Auflösung ist auf die geringer werdende Datendichte mit zunehmender Tiefe zurückzuführen (Tabelle 2.1).

2.2.3 Konduktiv reduzierte Temperaturkarten

Um angesichts der meist dominanten Rolle des konduktiven Wärmetransports die potentiellen Anomalien besser herausarbeiten zu können, wurde versucht, diesen Effekt in erster Näherung aus den Daten zu entfernen. Dazu wurde zunächst eine stark geglättete Verteilung der Wärmestromdichte an der Erdoberfläche (Abb. 2.10, links, nach Schellschmidt et al., 2001) erstellt. Diese Werte wurden als Wärmestromdichte an der Basis (1200 m Teufe) des betrachteten Tiefenintervalls vorgegeben. Die Größenordnungen stimmen mit Trendflächenberechnungen der basalen Wärmestromdichte für Westdeutschland (Hänel, 1988) gut überein.

Die Annahme einer solchen „basalen“ Wärmestromdichte ist nur dann sinnvoll, wenn in den hangenden Schichten lediglich eine räumliche Umverteilung der Wärmestromdichte stattfindet, und somit die Wärmeproduktionsrate nicht berücksichtigt werden muss. Dies ist für die hier bearbeitete Fragestellung der Fall: Granit – ein Gestein von überdurchschnittlich hoher Wärmeproduktion – hat eine mittlere Wärmeproduktionsrate von $2.45 \mu\text{W m}^{-3}$ (Hänel, 1988). Auf eine Mächtigkeit von 1200 m (unteres Niveau des betrachteten Tiefenintervalls) entspricht das einer zusätzlichen Wärmestromdichte von 2.9 mW/m^2 . Mit weniger als 5% der mittleren basalen Wärmestromdichte für Deutschland ($q_B = 65 \text{ mW m}^{-2}$), welche aus den hier benutzten Daten berechnet wurde, ist dieser Wert vernachlässigbar klein.

Um die konduktive Referenztemperatur in einer bestimmten Tiefe berechnen zu können, benötigt man eine Verteilung der Wärmeleitfähigkeit, die dann in jedem Bohrloch als konstant angesetzt wird. Vertikale Inhomogenitäten sowie die Temperaturabhängigkeit werden dabei vernachlässigt. Diese Karte (Abb. 2.10, rechts) wurde vereinfacht aus der Geologischen Karte von Deutschland 1:1000000 (BGR, 1993), sowie aus der genaueren Erfassung der Salztektonik Norddeutschlands in Baldschuhn et al. (1999) entnommen.

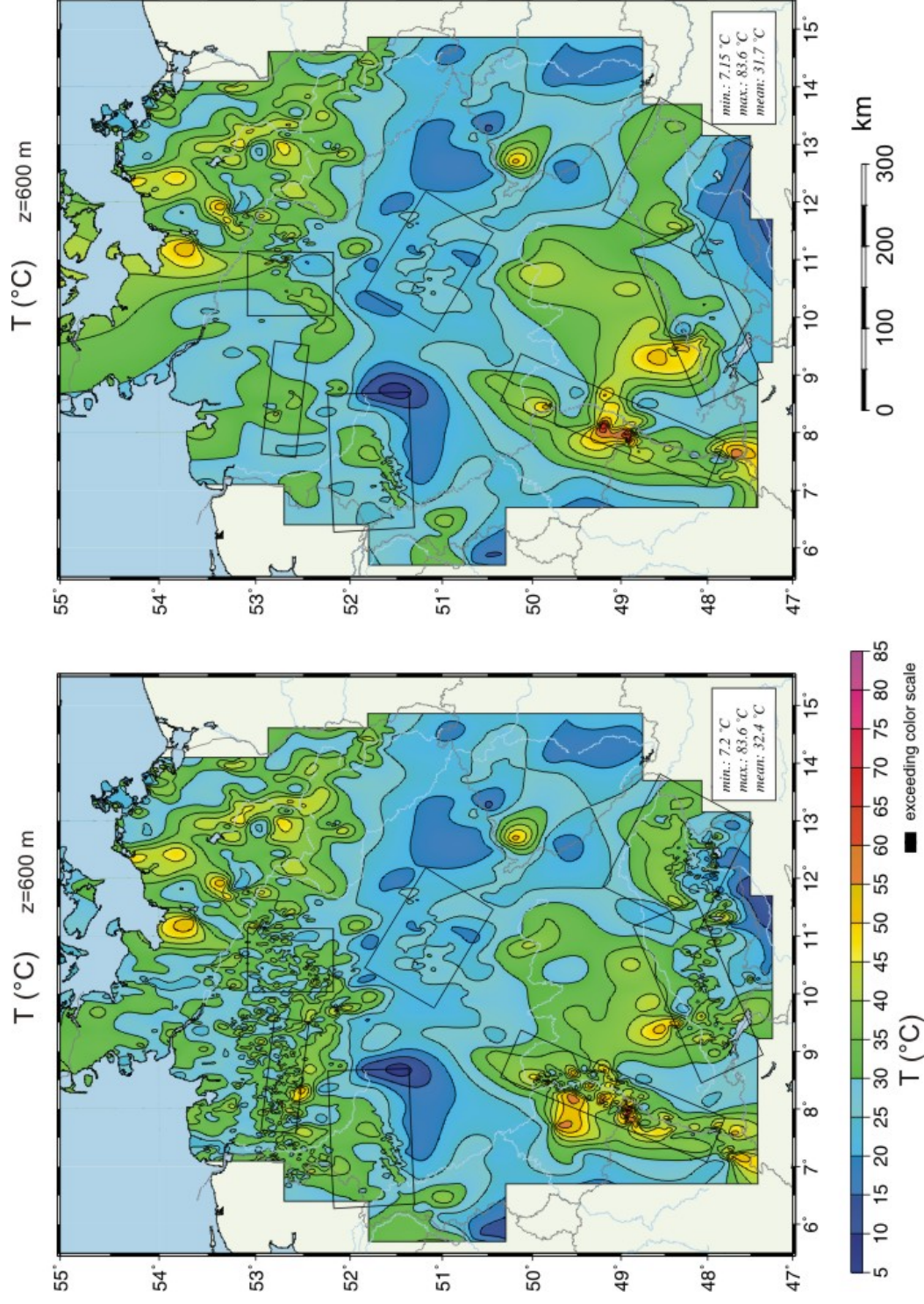


Abb. 2.8: Interpolierte Bohrlochtemperatur in 600 m Tiefe. Die linke Seite der Darstellung zeigt eine Interpolation der Temperaturen, in die alle verfügbaren Daten aller Güte- und Korrekturverfahren eingeflossen sind. Die insgesamt 6095 Temperaturdaten enthalten 4910 BHT-Werte. Zum Vergleich ist auf der rechten Seite eine Interpolation der Temperaturen ohne BHT-Werte dargestellt (mean: Mittelwert).

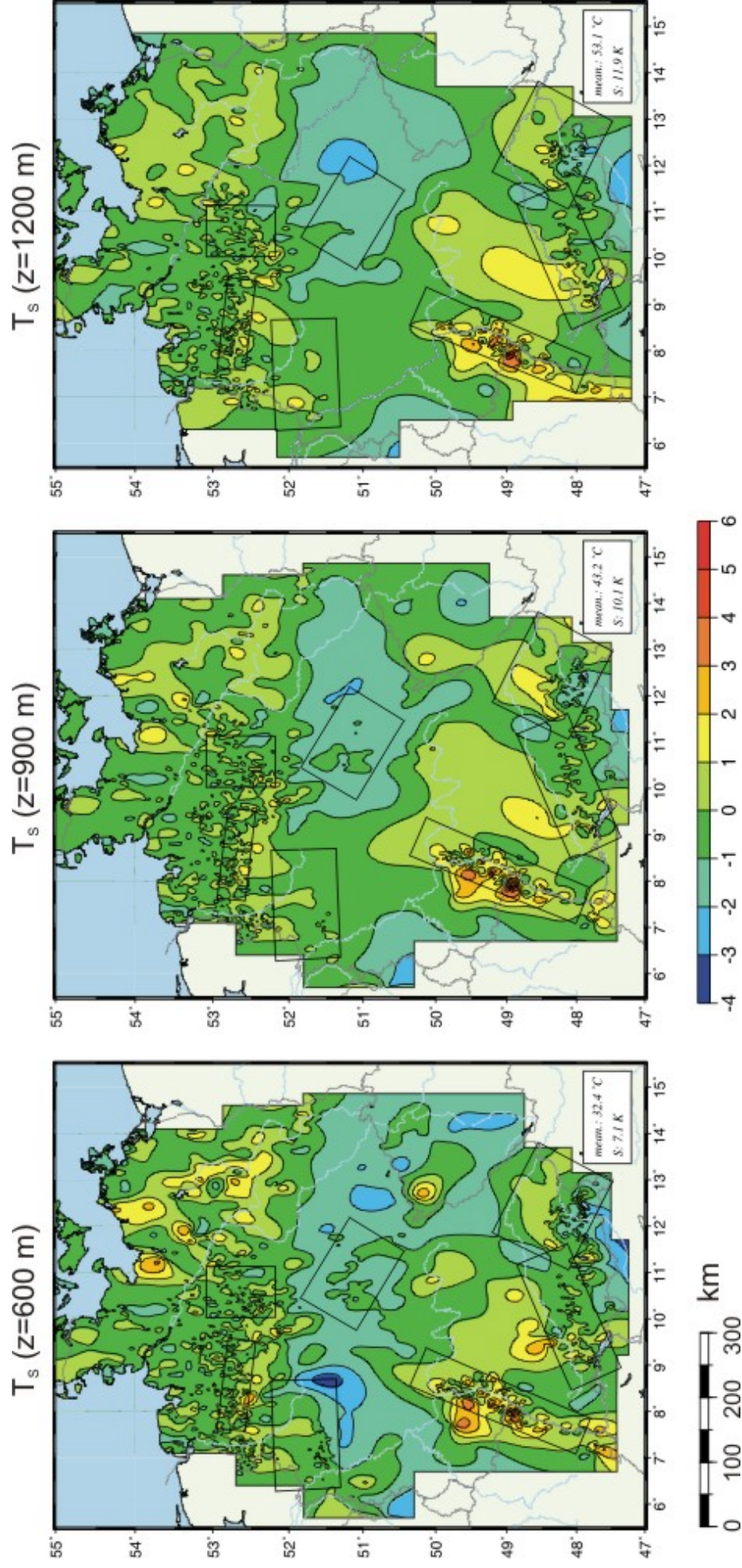


Abb. 2.9: Standardisierte Schnitte der Residualtemperaturen für die Tiefen 600, 900 und 1200 m. Westliche Molasse, Östliche Molasse, Oberrheingraben, Südniederrheinisches Becken und Gifhorner Trog zeichnen sich durch einen kleinräumigen Wechsel von Temperaturumminima und -maxima aus. Dabei treten die Magnitude der Anomalien wie auch die geringe Wellenlänge im Oberrheingraben am deutlichsten hervor. (mean: Mittelwert; S: Standardabweichung)

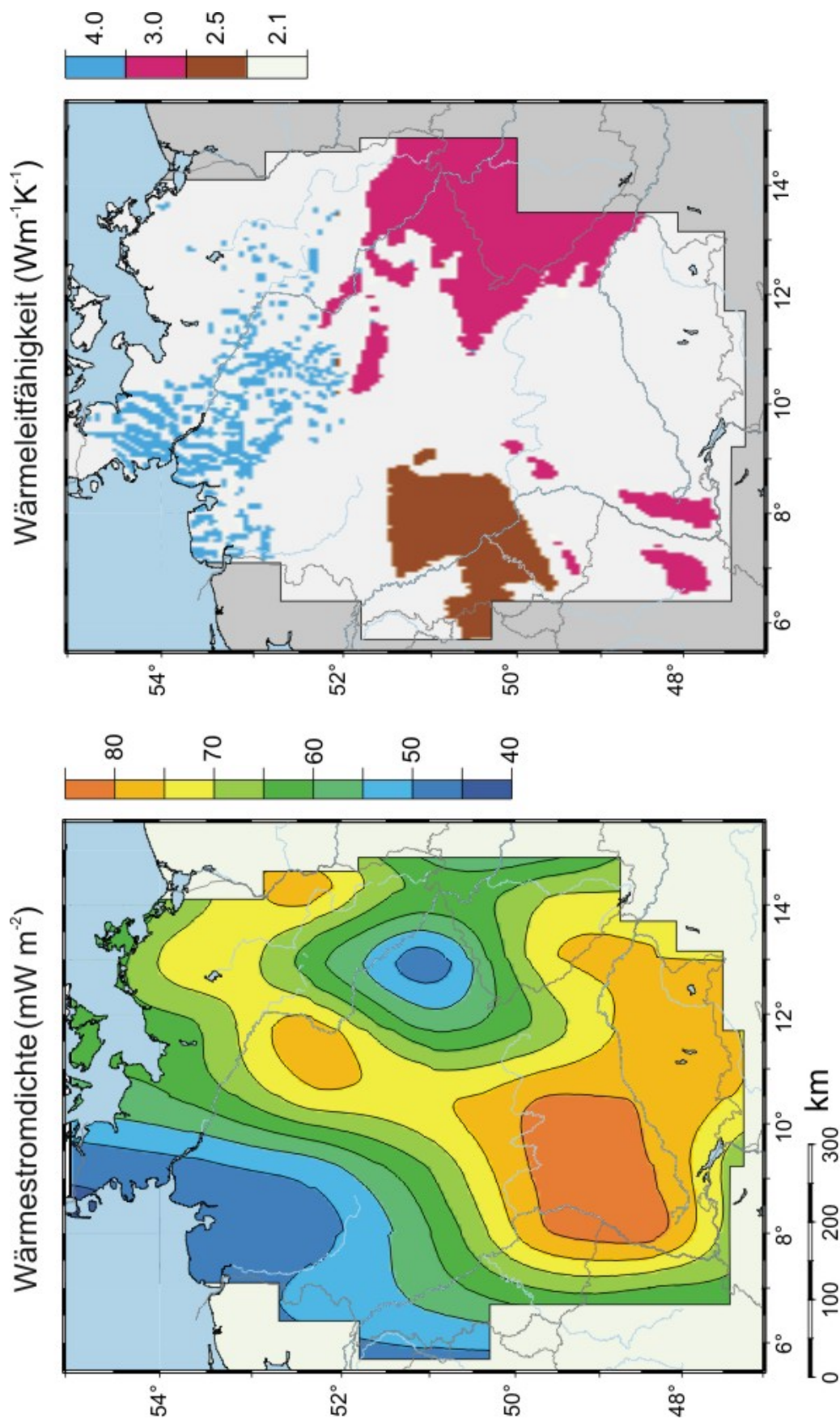


Abb. 2.10: Grundlagen der konduktiven Reduktion der Temperaturen. Links: Karte der Wärmestromdichte in 10^{-3} Wm^{-2} an der Erdoberfläche, stark geglättet (nach Schellschmidt et al., 2001). Rechts: Karte der Wärmeleitfähigkeiten für Deutschland, erstellt nach BGR (1993) und Baldschuhn et al. (1999). Die den unterschiedlichen geologischen Einheiten zugeordneten Werte wurden der einschlägigen Literatur entnommen (z. B. Clauser & Huenges, 1995).

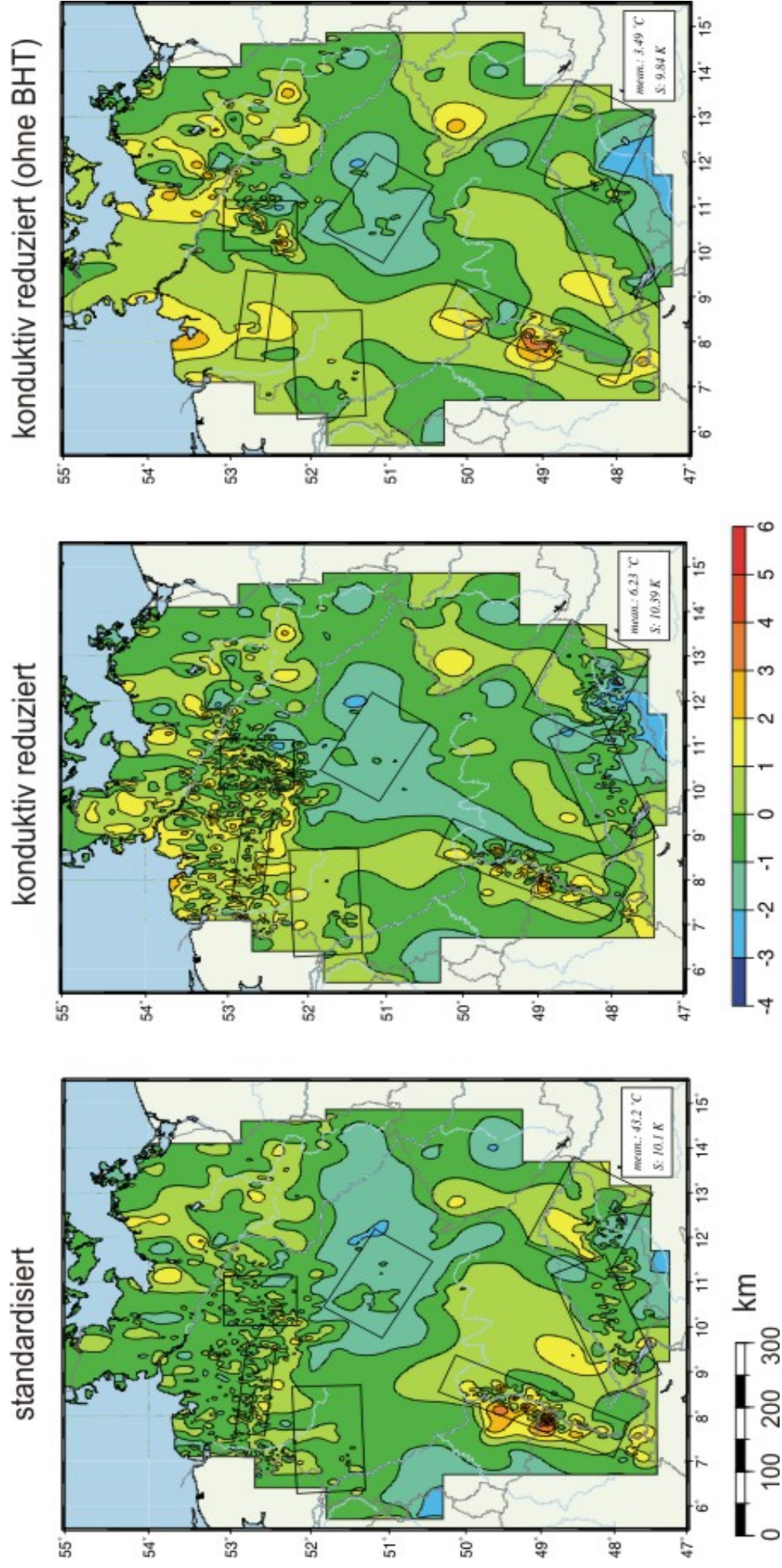


Abb. 2.11: Normalisierte Temperaturschnitte in einer Tiefe von 900 m. Links: Standardisiert. Mitte: Konduktiv reduziert. Rechts: Konduktiv reduziert ohne BHT. Auch hier wird die oft destruktive Rolle der BHT bei der Interpolation deutlich. (mean: Mittelwert; S: Standardabweichung)

Von den gemessenen Temperaturdaten wurde sodann die Temperatur subtrahiert, welche sich bei den angenommenen Werten der Wärmeleitfähigkeit und basalen Wärmestromdichte unter rein konduktiven Bedingungen einstellen würde. Die Wärmeleitung erfolgt nur vertikal und schließt somit mehrdimensionale Effekte nicht ein. Ein Ergebnis dieser konduktiven Reduktion im Vergleich zu einer Standardisierung ist in Abb. 2.11 zu sehen. Die Farbskala in der Darstellung dieser Residualtemperaturen unterscheidet farblich zwischen den Bereichen mit negativen (blau) und positiven Werten (grün, gelb, rot). Starke positive Temperaturanomalien, wie sie im Oberrheingraben auftreten, können nicht durch reinen konduktiven Wärmetransport entstehen. Hier wirkt zusätzlich ein vertikal nach oben gerichteter Grundwasserfluss, der signifikant das Temperaturfeld „verschiebt“. Diese Anomalien sind als deutlich positive Bereiche nach der konduktiven Reduktion erkennbar. Dunkelblaue Bereiche hingegen deuten tendenziell auf einen nach unten gerichteten Grundwasserfluss. Werte um Null zeigen an, dass diese Temperaturen bei der angesetzten Wärmeleitfähigkeit und basalen Wärmestromdichte durch rein konduktive Prozesse erklärt werden können. Oberrheingraben, Molasse und Nordostdeutschland sind nach dieser Theorie möglicherweise konvektiv beeinflusst, wobei in Nordostdeutschland das Überwiegen der gestörten Temperaturlogs diese Aussage in Frage stellt. Rein konduktive Modellstudien (Ondrak et al., 1999) zeigen außerdem, dass diese Hypothese nicht notwendig ist, da vermutlich tektonische Effekte (Variabilität von Schichtmächtigkeiten und Tiefenlage, vgl. Scheck & Bayer, 1999; Bayer et al., 1999) Anomalien dieser Größenordnung erklären können. Auch der Nordwesten weist durchschnittlich erhöhte Werte auf, welche vermutlich auf eine zu niedrige basale Wärmestromdichte oder eine falsch angenommene Wärmeleitfähigkeit in diesem Bereich hindeuten, zumal es keine weiteren Anhaltspunkte für flächenhafte Aufstiegsbewegungen des Fluids in diesem Gebiet gibt (Petmecky, 1998; Leischner, 1994).

Es wird – besonders im norddeutschen Bereich - deutlich, dass diese Korrektur nur wenig Informationsgewinn bringt. Dies ist vermutlich auf das zu stark vereinfachte Basismodel zurückzuführen.

2.3 Pécletzahl-Analyse für Gesamtdeutschland

Sind Temperaturlogs vorhanden und die Wärmeleitfähigkeit bekannt, kann mit den Gleichungen

$$\ln(q) = \ln(q_0) + z \frac{Pe}{L} \quad 2.1$$

und

$$q(z) = -\lambda \frac{dT}{dz} \quad 2.2$$

durch lineare Regression ein Wert von Pe/L aus der Vertikalableitung der gemessenen Temperaturen geschätzt werden. L ist hier als vertikale Längenskala des Systems definiert. Die Pécletzahl Pe gibt durch ihren Betrag das Verhältnis des advektiven zum konduktiven Wärmefluss an, während ihr Vorzeichen die Richtung der angenommenen Fluidbewegung bestimmt. Es wurde versucht, auf Basis der vorhandenen Temperaturkarten und des oben schon erwähnten Leitfähigkeitsmodells eine Abschätzung dieses Parameters zu geben. Dieser Versuch war nur begrenzt erfolgreich.

Bei diesem Verfahren treten eine Reihe von Schwierigkeiten auf, die mit den in diesem Maßstab zugänglichen Mitteln nicht vollständig ausgeräumt werden konnten:

Die vertikale Skalenlänge ist nicht bekannt und kann im Sinne einer Maximalabschätzung mit der Gesamtausdehnung des Systems angesetzt werden. Ist nur eine Indikator gewünscht, kann auf eine derartige Abschätzung verzichtet und lediglich das Vorzeichen $sign(Pe)$ ausgewertet werden.

Entsprechend der starken Vereinfachung des Modells musste eine vertikal konstante Wärmeleitfähigkeit angesetzt werden, die einem linearen konduktiven Anteil entspricht. Dies ist sicher nicht überall im Untersuchungsgebiet der Fall und kann bei großen Änderungen (z. B. bei Salzstrukturen oder ausgeprägten Wechsellagerungen quarzreicher Sandsteine mit Tonen oder Kalken, vgl. Hänel, 1988) zu deutlich falschen Ergebnissen führen. Bei vertikalen Pécletzahl-Analysen von Temperaturlogs im Oberrheingraben erwies sich die Berücksichtigung der vertikalen Variation der Wärmeleitfähigkeit als entscheidend für konsistente Aussagen über das Strömungsregime (Clauser, 1988; Clauser & Villinger, 1990).

Eine direkte Berechnung der für die Berechnung der Pécletzahl benötigten Funktionsableitung durch Differenzbildung ist in diesem Fall numerisch problematisch (z. B. Hofmann, 1999) und führt im Rahmen des verwendeten automatisierten Analyseverfahrens zu einer Verstärkung des ohnehin vorhandenen Rauschens und somit zu erhöhten Fehlern im Ergebnis.

Die vorliegende grobe, auf großräumigen Annahmen beruhende Analyse ist daher in der jetzt vorliegenden Form nicht verlässlich und zeigt nur in wenigen Gebieten plausible Ergebnisse (vgl. Abb. 2.11). Es ist nach diesen Erfahrungen unerlässlich, die Pécletzahl-Analyse im einzelnen an jedem Bohrloch vorzunehmen. Insbesondere muss die Wärmeleitfähigkeit und ihre Tiefenvariation ausreichend bekannt sein. Dies konnte allerdings wegen des hohen Zeitaufwands und besonders der dazu nötigen gesteinsphysikalischen Bohrkernmessungen nur im regionalen Maßstab des Pilotgebiets geschehen. Die im folgenden Projektabschnitt vorgenommenen individuellen Pécletzahl-Analysen erbrachten einen zentralen Beitrag zur Identifizierung und Quantifizierung von Strömung im Untersuchungsgebiet der westlichen Molasse.

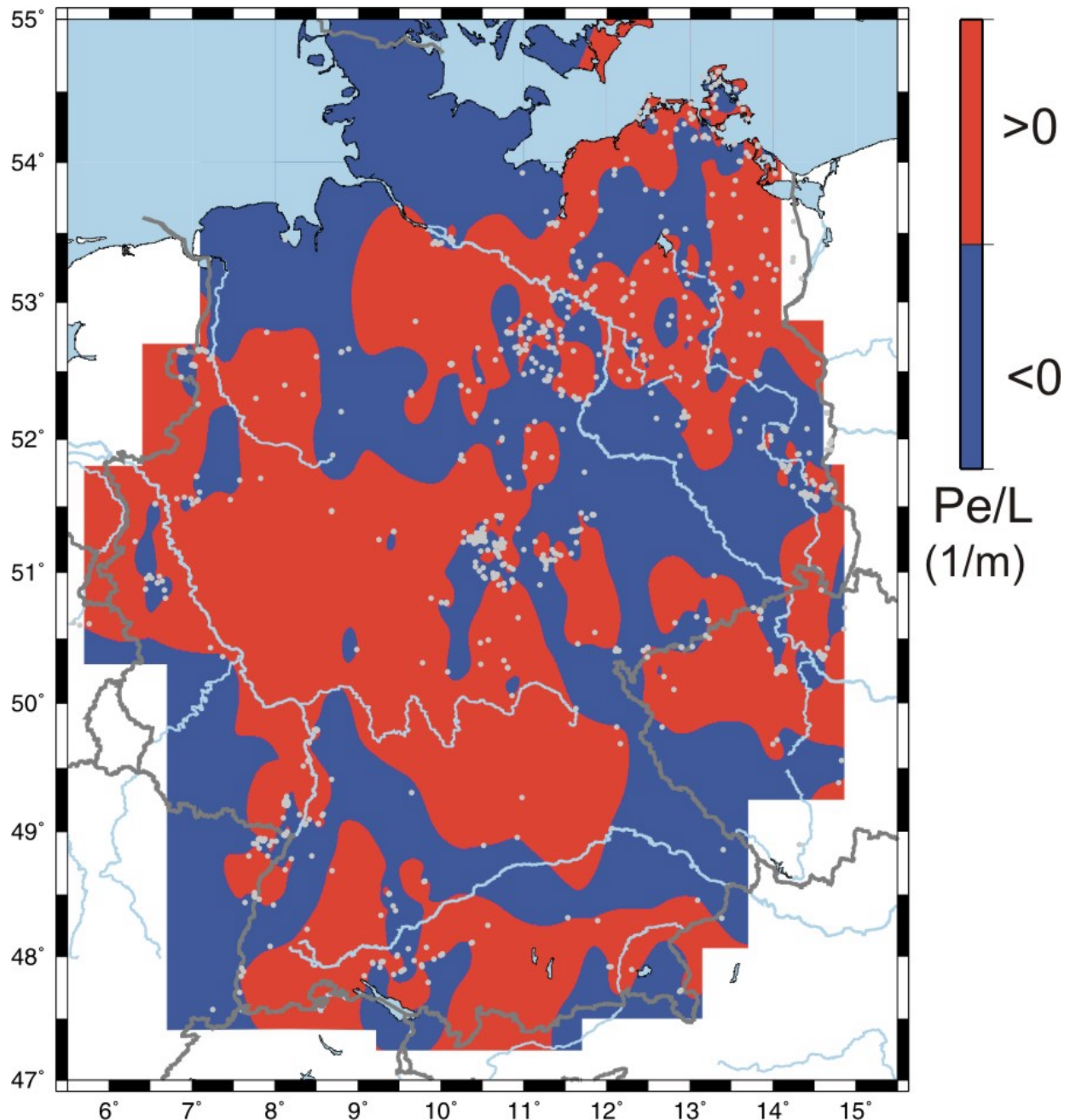


Abb. 2.12: Vertikale Pécletzahl-Analyse. Wegen der im Text beschriebenen Schwierigkeiten wurden lediglich Bereiche von Pécletzahlen gekennzeichnet, die aufwärtsgerichtete (blau) oder abwärtsgerichtete (rot) Advektionsbewegungen vermuten lassen.

2.4 Zusammenfassung der zur Auswahl des Untersuchungsgebiets durchgeführten Untersuchungen

Die verschiedenartigen Untersuchungen des letzten Abschnitts wurden zu einer Entscheidungsmatrix (Tab. 2.3) zusammengefasst. Da sich die Ergebnisse nicht direkt quantifizieren lassen, wurde eine semiquantitative Darstellung durch Symbole unterschiedlicher Größe

gewählt. Nach den Ergebnissen der vorangegangenen Abschnitte ergibt sich der Oberrheingraben als insgesamt am besten geeignetes Gebiet. Die Westliche Molasse ist nach den Ergebnissen der vorläufigen Untersuchungen ebenfalls geeignet, jedoch in Bezug auf Datendichte und Qualität schon deutlich ungünstiger. Das Thüringer Becken ist ebenfalls ein mögliches Zielgebiet, jedoch wegen fehlenden Indizien für nennenswerte advective Wärmetransportprozesse von geringerer Bedeutung.

Teilgebiete	Datendichte	Datenqualität	Geostatistik	konduktives Modell	Pecletzahl	Bewertung
Gifhorner Trog	●	●	N/A	●	●	
Südiedersächs. Becken	●	●	N/A	●	●	
Münsterländer Kreidebucht	●	●	N/A	●	●	
Thüringer Becken	●	●	●	●	●	3.
Oberrheingraben	●	●	●	●	●	1.
Westliche Molasse	●	●	●	●	●	2.
Östliche Molasse	●	●	●	●	●	

Tab. 2.3: Entscheidungsmatrix.

In die Entscheidungsmatrix (Tab. 2.3) gehen eine Reihe von Aspekten auf Grund der Problematik ihrer mangelnden Quantifizierbarkeit nicht ein, welche dennoch für den Erfolg des Projekts von großer Bedeutung sind. Wie schon bei der Diskussion der Einzelgebiete angedeutet wurde, stellt sich der geologisch-tektonische Rahmen in den Gebieten völlig unterschiedlich dar. Dementsprechend bestehen für eine geothermische Analyse verschiedenartige Aufgabenstellungen und Probleme:

Die norddeutschen Beckenstrukturen (Süd-niedersächsisches Becken, Gifhorner Trog) weisen eine große Zahl von Salzstrukturen auf, die auf Grund der besonders hohen Wärmeleitfähigkeit einen deutlichen Einfluss auf die Temperatur ausüben. Zusätzlich begünstigen sie die Herausbildung von eher lokalen Strömungssystemen, da regionale Bewegungen durch diese Strukturen behindert werden. Eine Analyse der möglicherweise vorhandenen advectiven Anteile am Wärmetransport erfordert eine genaue und kleinräumige Kenntnis der Salzstrukturen, insbesondere, weil die Auswahl der Bohrpunkte vermutlich salzstocknahe Lokationen bevorzugt.

Die Molasse (Westliche und Östliche Molasse) stellt wegen der vermuteten großräumigen Transportbewegungen ein hervorragendes Untersuchungsgebiet dar. Die Fluidsysteme sind hier an die stratigraphischen Schichten der Oberen Meeresmolasse, des Höheren Malm und

des Muschelkalks gebunden, die geothermisch relevante Lagerstätten beherbergen, sich jedoch in ihren hydrogeologischen Eigenschaften (Einzugsgebiet, Strömungssysteme, Salinität) stark unterscheiden (Bertleff et al., 1988). Ein Problem stellt die hier möglicherweise tiefreichende Verkarstung dar, die bei einer Modellierung besondere Vorkehrungen erfordert. Im Verhältnis zur Ausdehnung der Gesamtstruktur stehen zudem nur in kleinen Bereichen ausreichend Bohrungen hoher Datenqualität zur Verfügung. Kernmaterial ist nur für wenige Bohrungen in den geologischen Landesämtern vorhanden und stammt wegen der industriellen Herkunft in erster Linie aus den Zielhorizonten der Kohlenwasserstoffproduktion. Die Gesteine der Molasse im engeren Sinn sind kaum vertreten. Der Strömungsverlauf in den unterschiedlichen Stockwerken ist zudem schon im reduzierten Zielgebiet dreidimensional und bisher nicht befriedigend modelliert.

Im Gegensatz dazu stellt sich die Situation für den Oberrheingraben in allen Bereichen günstig dar. Die Datenlage ist nicht nur bei den - für uns wichtigsten - Bohrlochtemperaturen hervorragend, auch die dringend benötigten geologischen und geophysikalischen Randinformationen sind durch die vorhandene wissenschaftliche Infrastruktur (EUCOR-URGENT¹, SOCOMINE²) und bestehende Kooperationen der Projektpartner gut zugänglich. Es sind ausgeprägte thermische Anomalien sichtbar, die nach dem heutigen Stand der Forschung auf advektiven Wärmetransport zurückgehen. Modelle für advektive Fluidbewegungen in diesem Bereich der Grabenstruktur sind unter unterschiedlichen Gesichtspunkten mehrfach veröffentlicht worden (Clauser & Villinger 1990; Person & Garven, 1992; Le Carlier de Veslud et al., 1994; Pribnow & Schellschmidt, 2000), obwohl auch hier eine ausreichende dreidimensionale Erfassung des Grabens fehlt.

Zusammenfassend sind daher im **Oberrheingraben**, der **westlichen Molasse** und dem **Thüringer Becken** die besten Bedingungen gegeben, um die geplanten Untersuchungen durchzuführen.

1 <http://comp1.geol.unibas.ch/index.htm>

2 <http://www.brgm.fr/socomine>

3. Detailuntersuchung im Gebiet der westlichen Molasse

Seit April 2001 wurde auf Wunsch des Auftraggebers die geplante detaillierte Untersuchung im Gebiet der Westlichen Molasse durchgeführt. Das Arbeitsgebiet erstreckt sich etwa vom Bodensee im Südwesten bis zur Donau im Norden und dem Lech im Osten (Abb. 3.1).

Die vorhandenen Messdaten stammen entweder aus den zahlreichen Hydrothermalbohrungen und Quellerschließungen in den Oberschwäbischen Bädern, oder aber aus den zahlreichen kommerziellen Bohrungen der Erdöl- und Erdgasindustrie in diesem Gebiet. Aus dieser speziellen Konstellation ergaben sich für unsere Arbeit besondere Randbedingungen. Die Bäderbohrungen sind nur wenig geologisch-geophysikalisch erfasst worden, sodass nur wenige Kerne gewonnen und ebenso wenige geophysikalische Logs vorliegen. Die Erdöl- und Erdgasbohrungen sind vergleichsweise alt. In ihrer Mehrzahl wurden sie zwischen 1950 und 1970 erschlossen (Geyer & Gwinner, 1984). Leider wurden in diesen Jahren noch nicht so umfangreich und in zugänglicher Weise (digitale) Daten gewonnen, die eine schnelle Bearbeitung ermöglichen. Andererseits sind die Konzessionen der Industrie in diesem Gebiet in der Regel seit Anfang der 90er Jahre erloschen.

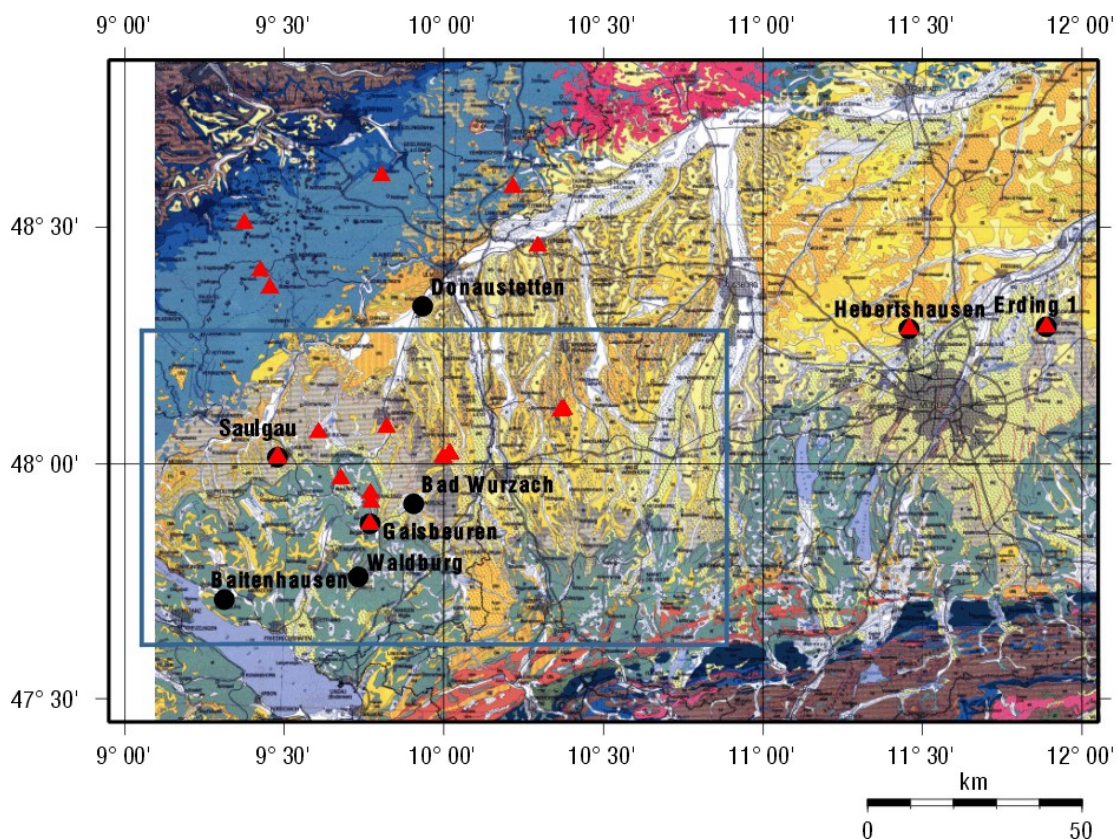


Abb. 3.1: Geographische Lage des Messgebietes. Hinterlegt ist der entsprechende Ausschnitt der Geologischen Karte von Bayern, 1:500000. Ebenfalls eingetragen sind die wichtigsten ungestörten Logs (rote Dreiecke), sowie die Herkunftsbohrungen der vermessenen Bohrkerne (schwarze Punkte).

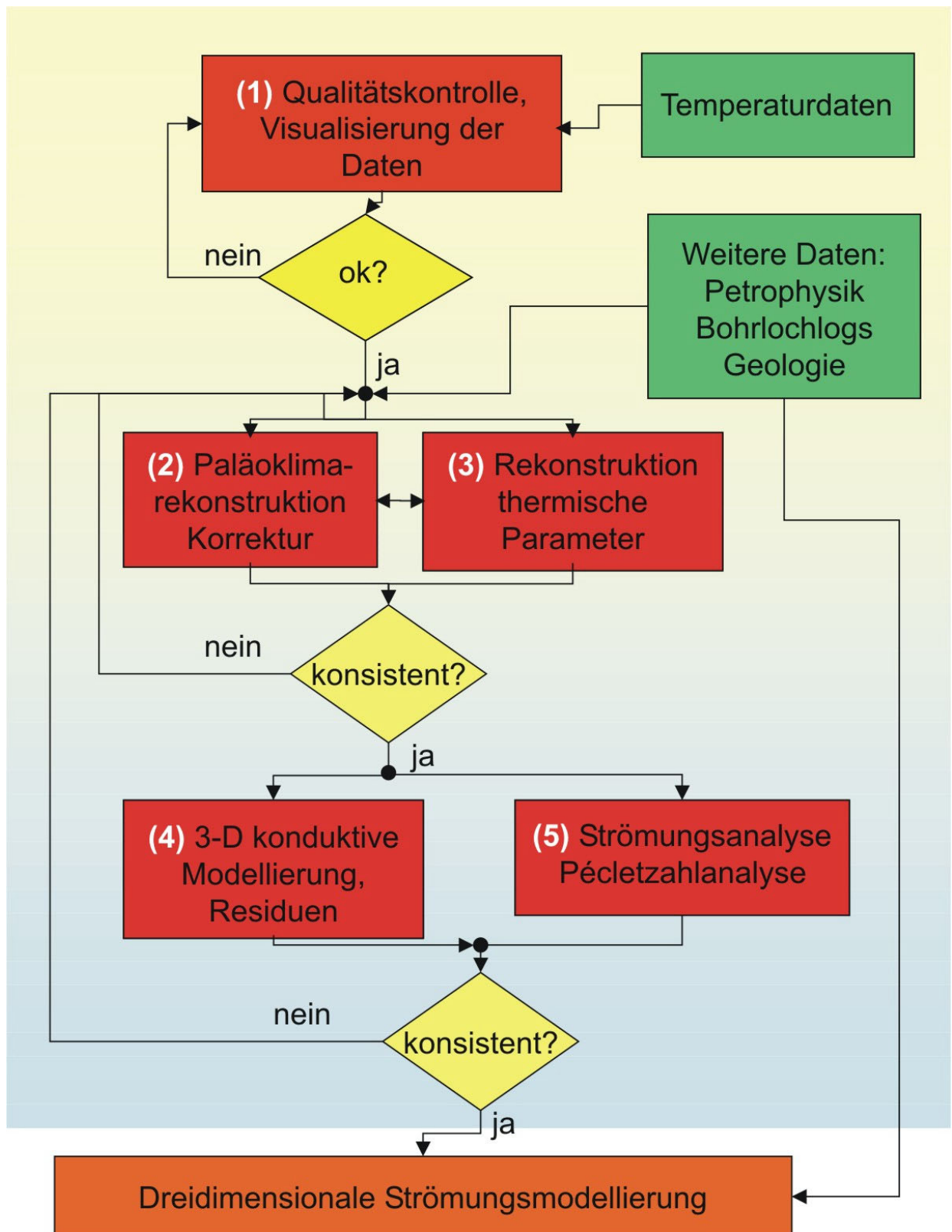


Abb. 3.2: Flussdiagramm der Projektarbeiten.

Wir waren daher in erster Linie auf das Material angewiesen, welches schon in den Geologischen Landesämtern Baden-Württemberg (Freiburg) und Bayern (München) sowie in der Bundesanstalt für Geowissenschaften (Hannover) vorhanden, jedoch nicht öffentlich zugänglich ist. Auf Anfrage bei der Wirtschaftsvereinigung Erdöl und Erdgasgewinnung (WEG) wurde uns jedoch gestattet, Material aus dem Untersuchungsgebiet zu nutzen, insofern es schon in den genannten Ämtern vorliegt. Weiterhin werden wir vermutlich noch dieses Jahr Gelegenheit haben, mehrere noch nicht verfüllte tiefe Erdölbohrungen im Raum Ravensburg neu zu vermessen. Die WEG steht diesem Projekt grundsätzlich positiv gegenüber. In Bezug auf weiteres Kernmaterial und geophysikalische Logs ist jedoch eine längere Vorlaufzeit nötig, da diese auch bei den ehemaligen Betreiberfirmen erst mobilisiert werden müssen.

Wie aus dem vorgestellten Detailkonzept hervorgeht, ist die Kontrolle über die thermophysikalischen Eigenschaften der beteiligten Gesteine eine zentrale Voraussetzung der Untersuchungen. Aufgrund des nur spärlichen Kernmaterials wurde daher ein leicht verändertes Konzept entwickelt, welches die direkten eigenen Messungen an Bohrkernen durch eine Rekonstruktion der fehlenden Parameterwerte aus geophysikalischen Logs ergänzt. Dies hat zusätzlich noch den Vorteil, dass damit eine sehr viel dichtere und auch repräsentativere Erfassung dieser Parameter möglich ist. Das in dieser Hinsicht geänderte Untersuchungskonzept ist in Abb. 3.2 skizziert. Es untergliedert sich in drei Ebenen: Die Bearbeitung der Temperaturdaten (1), die Gewinnung der Informationen, die zur Entfernung des paläoklimatischen Signals und zur Berechnung der konduktiven Wärmeleitung nötig sind (2, 3), sowie die Identifikation und nähere Untersuchung der advektiven Effekte (4, 5). Alle diese Teilaufgaben müssen miteinander rückgekoppelt werden, da eine korrekte Trennung der Effekte sicherlich mehrfache Iterationen erfordert. Im Ergebnis werden die Informationen vorhanden sein, die eine wirklich quantitative Modellierung der Effekte und eine Kalibrierung des Modells ermöglichen. Dieses veränderte und verfeinerte Konzept kann jedoch vollständig erst in einem möglichen Folgeprojekt realisiert werden.

3.1 Strukturdaten und geologische Modelle

Die Molasse als nördliche Vortiefe der Alpen zeigt heute das Bild eines asymmetrischen Beckens, welches sich auf mehr als 1000 km von der Westschweiz bis nach Österreich erstreckt. Im Norden wird das Becken vom Schweizer Jura, Schwäbischer und Fränkischer Alp und dem Böhmischem Massiv begrenzt. Im Süden bilden die Gebirgsketten der West- und Ostalpen und die westlichen Karpaten seine Begrenzung. Das Molassebecken enthält die tertiären Sedimentserien, die in der Zeit vom Mittleren Oligozän bis ins Obere Miozän abgelagert wurden.

Im Wesentlichen lassen sich zwei Stockwerke mit unterschiedlicher Lithologie und tektonischer Entwicklung unterscheiden. Zum einen das variszische Fundament mit Deckgebirgsschichten der Trias, des Jura und der Kreide. Zum anderen die tertiären Molassesedimente, welche nach einer Schichtlücke und Diskordanz auf die älteren Einheiten folgen.

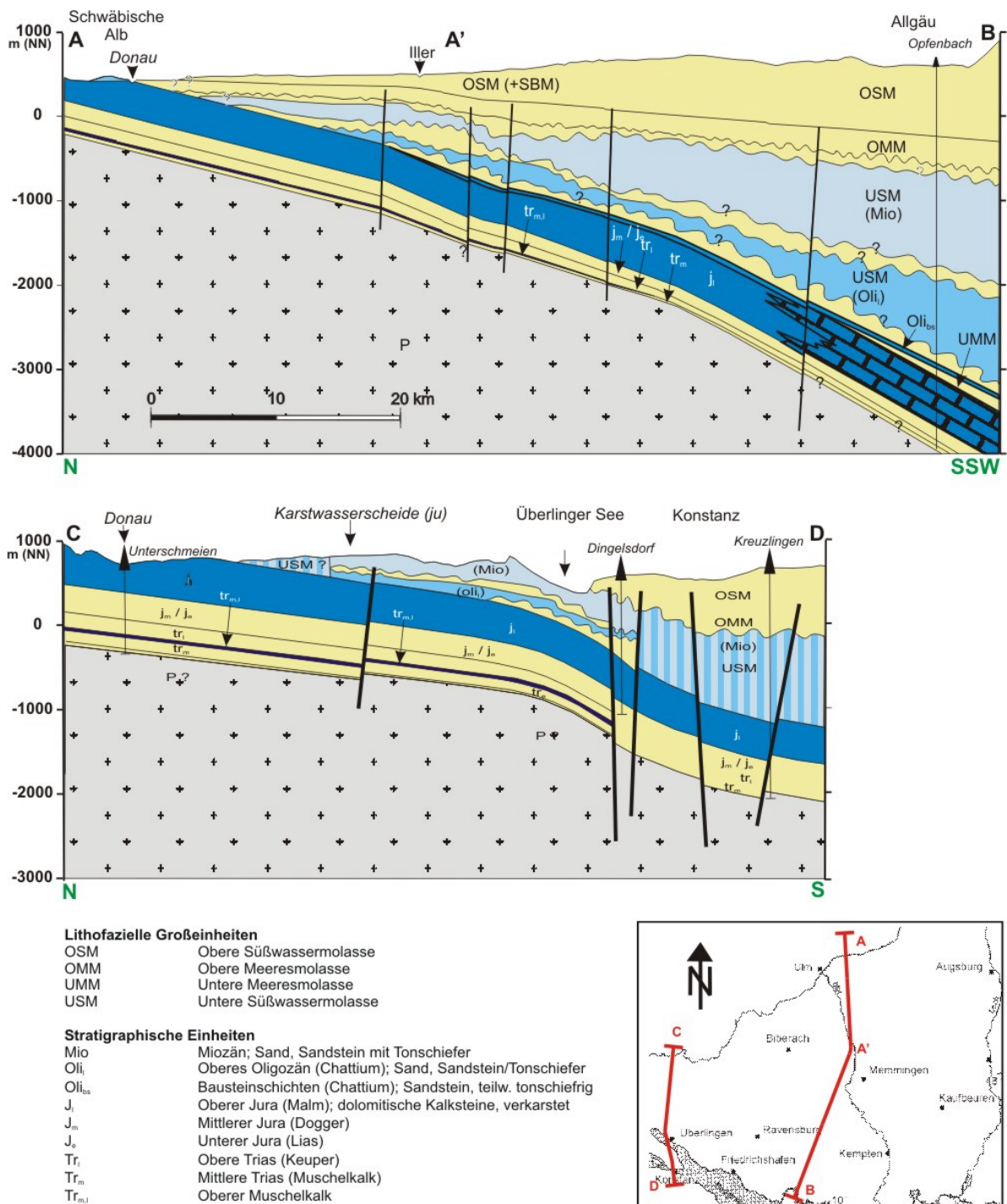


Abb. 3.3: Geologische Gesamtsituation im Untersuchungsgebiet, neu erstellt auf Basis von Hänel & Staroste (1988). Deutlich zu erkennen sind die blauen Strukturen des Jura. Die im Text mehrfach erwähnten Bausteinschichten direkt oberhalb des Malm sind nur im östlichen Teil des Beckens ausgeprägt. Bestimmte Untergliederungen des Malm stellen den im Norden des Beckens wichtigsten Thermalwasserleiter im Gebiet dar, während die Durchlässigkeit im Bereich der helvetischen Fazies (vgl. Abb. 3.4) gering ist (Bertleff et al., 1988).

Die Sedimentation im Jura ist räumlich sehr variabel. Im Unter- und Mitteljura (Lias und Dogger) wurden hauptsächlich dunkle Tonsteine mit gelegentlichen Einschaltungen von Sandsteinen und oolithischen Kalksteinen abgelagert. Im Oberjura (Malm) war die Region großflächig von Meer bedeckt. Die Abfolgen bestehen hauptsächlich aus Kalksteinen und Mergeln. Nach einem Rückzug des Meeres am Ende des Jura bestand die Region in der Kreide als Festland mit den verkarsteten Kalken des Jura als Deckgebirge.

Die Sedimentation der eigentlichen Molassesedimente begann im Obereozän im Zusammenhang mit der Alpenen Orogenese. Das Molassebecken nahm im Wesentlichen den Abtragungsschutt der sich heraushebenden Alpen auf. Die Sedimente lassen sich in zwei große Regressions/Transgressionszyklen unterscheiden: Die Untere Meeres- und Süßwassermolasse und die Obere Meeres- und Süßwassermolasse. Heute sind die tertiären Ablagerungen größtenteils unter glazialen Ablagerungen des Pleistozäns verborgen.

Generell nimmt die Mächtigkeit der Molassesedimente von Norden nach Süden zu, um am Alpennordrand Tiefen von mehr als 4000 m zu erreichen. Die meisten Schichten fallen daher schwach in diese Richtung ein. Neben dieser generellen Struktur sind jedoch auch in Richtung des Streichens des Beckens deutliche Unterschiede in der Mächtigkeit der Sedimente festzustellen. Abb. 3.3 gibt die Geometrie des Beckens in zwei geologischen Schnitten wieder.

Tektonisch wird die westliche Molasse durch mindestens zwei Störungszonen gegliedert, die im Großen und Ganzen in südwest-nordöstlicher Richtung streichen (Abb. 3.4, oben). Sie können vom Bodensee bis in die Nähe von Memmingen verfolgt werden. Die wichtigsten Störungssysteme sind die Saulgau-Pfullendorfer Verwerfung im Norden und die Fronhofen-Störung etwa 40 km südlich. Beide Störungssysteme sind als thermisch aktiv anzusehen. Die Störungszonen dienen als wichtige stratigraphische Fallen (vgl. Abb. 3.39), daher ist auch eine Häufung von Erdölbohrungen entlang dieser Zonen zu erkennen.

Hydrogeologisch lassen sich im Wesentlichen drei Grundwasserstockwerke unterscheiden (Bertleff et al., 1988):

- Obere Meeresmolasse (OMM)
- Höherer Malm
- Oberer Muschelkalk

Die OMM bildet durch ihre heterogene Struktur keinen einheitlichen Grundwasserleiter. Weit verbreitet sind jedoch zwei Sedimentationszyklen, die als Aquifer dienen können: Dies sind der Basissandstein und die Baltringer Schichten. Bei den letzteren sind Porositäten von bis zu 26% gemessen worden (Bertleff et al., 1988). Im Malm sind die wichtigen Grundwasserleiter in den Schichten des Mittleren und Oberen Kimmeridge (Malm δ, ϵ) sowie des Unteren Tithons (Malm ζ) zu finden. Die kretazischen, oberflächennahen Verkarstungen der obersten Schichten des Malms sind durch Verwitterungsmaterial verfüllt worden und bilden keinen Aquifer. In Abb. 3.4 (oben) sind die Grundwasser-Potentiallinien des Malm-Aquifers dargestellt (rot). Außerdem ist im Süden die Grenze zur Helvetischen (nicht verkarsteten) Fazies (gelb) eingezeichnet. Diese kann in erster Näherung auch als Grenze des Grundwasserlei-

ters angesehen werden. Der Obere Muschelkalk ist das tiefste Grundwasserstockwerk und wird durch klüftige Dolomite und Kalksteine gebildet. In den Temperaturlogs wurde diese Schicht jedoch nicht angetroffen. Des Weiteren sind für unsere Betrachtungen auch noch andere, nur regional vorhandene Aquifere wichtig. Insbesondere sind dies die Bausteinschichten in der Unteren Meeresmolasse. Die Verbreitung dieser Schichten ist in Abb. 3.4 (unten) zusammen mit einigen anderen wichtigen hydrogeologisch wichtigen Grenzen dargestellt

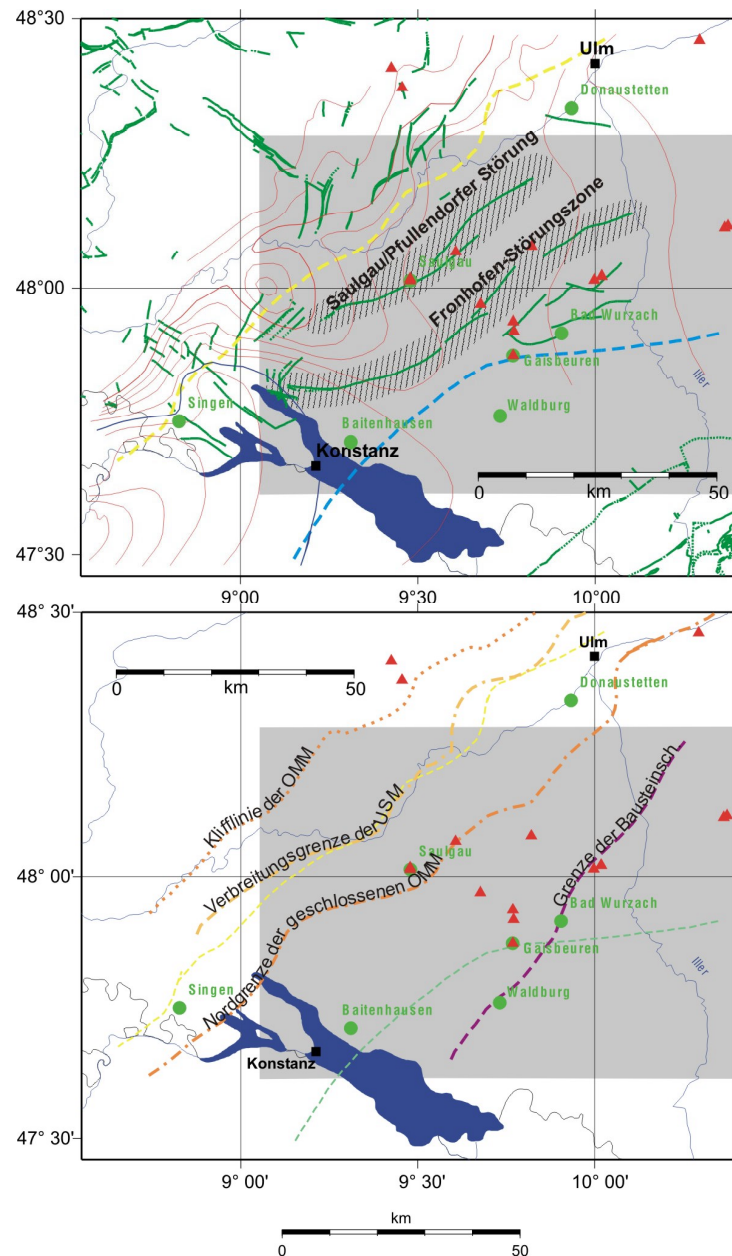


Abb. 3.4: Oben: Verteilung bekannter tektonischer Störungen (grün) (Geol. Karte von Baden-Württemberg, 1998). Blau: Vermutete Nordgrenze der helvetischen Fazies des Malm (Details s. Text). Gelb: Nordgrenze des gespannten Grundwasserleiters. Unten: Verbreitungsgebiet hydrogeologisch relevanter Schichten im Gebiet des Molassebeckens.

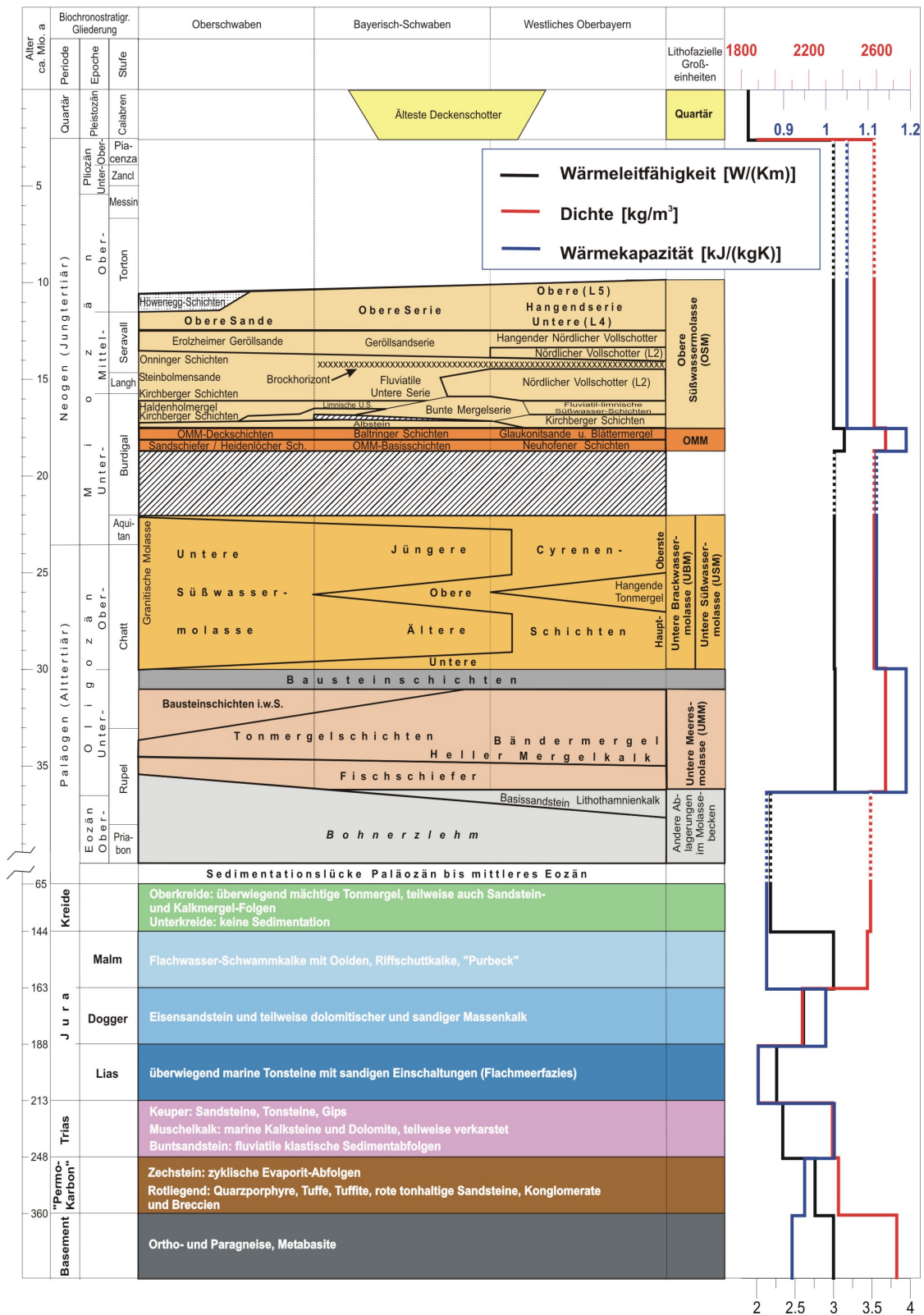


Abb. 3.5: Stratigraphie des Molassebeckens. Die hier hinterlegten Farbcodierungen entsprechen denjenigen in den Péclétzahlanalysen in Anhang A. Rechts sind in einem Tiefenprofil typische Werte für die für uns relevanten Parameter Wärmeleitfähigkeit, Dichte und spez. Wärmekapazität eingetragen.

3.2 Temperaturdaten

Die in der Temperaturdatenbank des GGA-Instituts für das Messgebiet vorliegenden Temperaturdaten sind in Abb. 3.6 zusammengetragen. Wie aus dieser Darstellung hervorgeht, sind die Messpunkte unregelmäßig verteilt und konzentrieren sich im Bereich der oben schon genannten Störungszonen (vgl. Abb. 3.4) .

Bei der Zusammenstellung und Qualitätskontrolle der Daten stellte sich heraus, dass in der Datenbank bei älteren Messungen nur Temperaturdaten in einem Punktabstand von 50 m vorhanden waren. Dies reicht für die im Projekt angestrebten Ziele nicht aus. Es war daher nötig, auf die Originaldaten zurückzugreifen, die auf unterschiedlichen digitalen Speichermedien vorlagen. Es war jedoch möglich, fast alle Daten mit der nötigen Genauigkeit (Abtastrate < 10 m) wiederherzustellen.

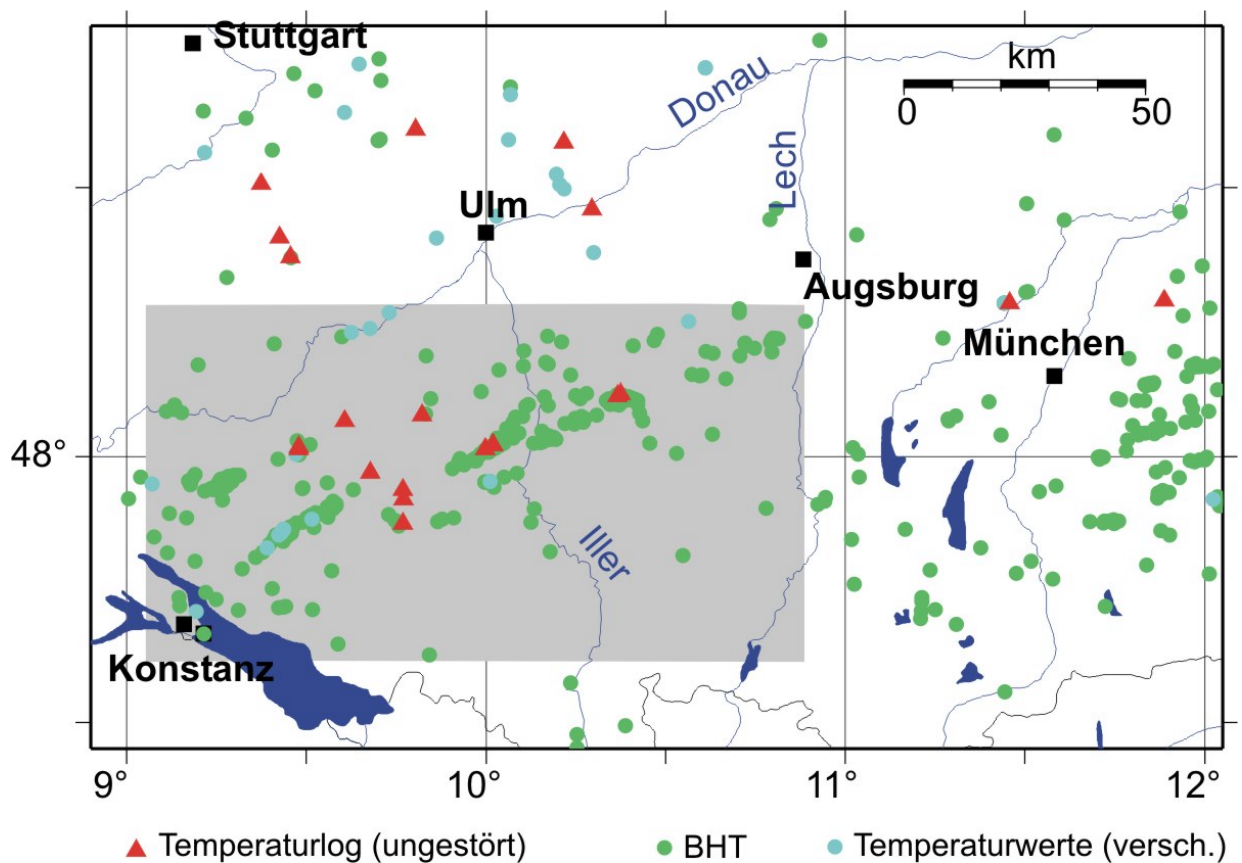


Abb. 3.6: Verteilung der verwendeten Temperaturdaten im Messgebiet. Rot sind hierbei die ungestörten Bohrungen, blau die übrigen als verlässlich qualifizierten Messdaten und grün die BHT-Werte eingetragen.

Die benutzten Bohrlochtemperaturen wurden einer einheitlichen Behandlung unterzogen. Diese umfasste zunächst eine optische Qualitätskontrolle zur Entfernung von Artefakten der Messungen (vgl. Abb. 3.7). Bei der Aufbereitung von Temperaturmessungen in Bohrungen ist auch zu beachten, dass in Bohrungen ggf. ebenfalls Konvektionsströmungen stattfinden können (Hänel et al., 1988). Anschließend wurden die Daten auf die für die einzelnen Verfahren geeignete Abtastraten dezimiert (zwischen 1 m und 20 m).

Die BHT-Werte werden schon prozessiert aus der Temperaturdatenbank ausgegeben. Verschiedene Verfahren zur Korrektur der BHT-Werte sind als Werkzeuge in dieser Datenbank integriert (Hermanrud, 1990; Förster, 1999).

Sämtliche in dieser Studie benutzten Temperaturlogs sind in Abb. 3.8 (oben) zu sehen. Unterhalb der Logs wurden die entsprechenden reduzierten Temperaturen dargestellt. Hierbei wird die für eine konstante mittlere Wärmeleitfähigkeit und einen mittleren Wärmestrom berechnete Temperaturverteilung von den Messwerten abgezogen, um die Variationen deutlicher hervortreten zu lassen.

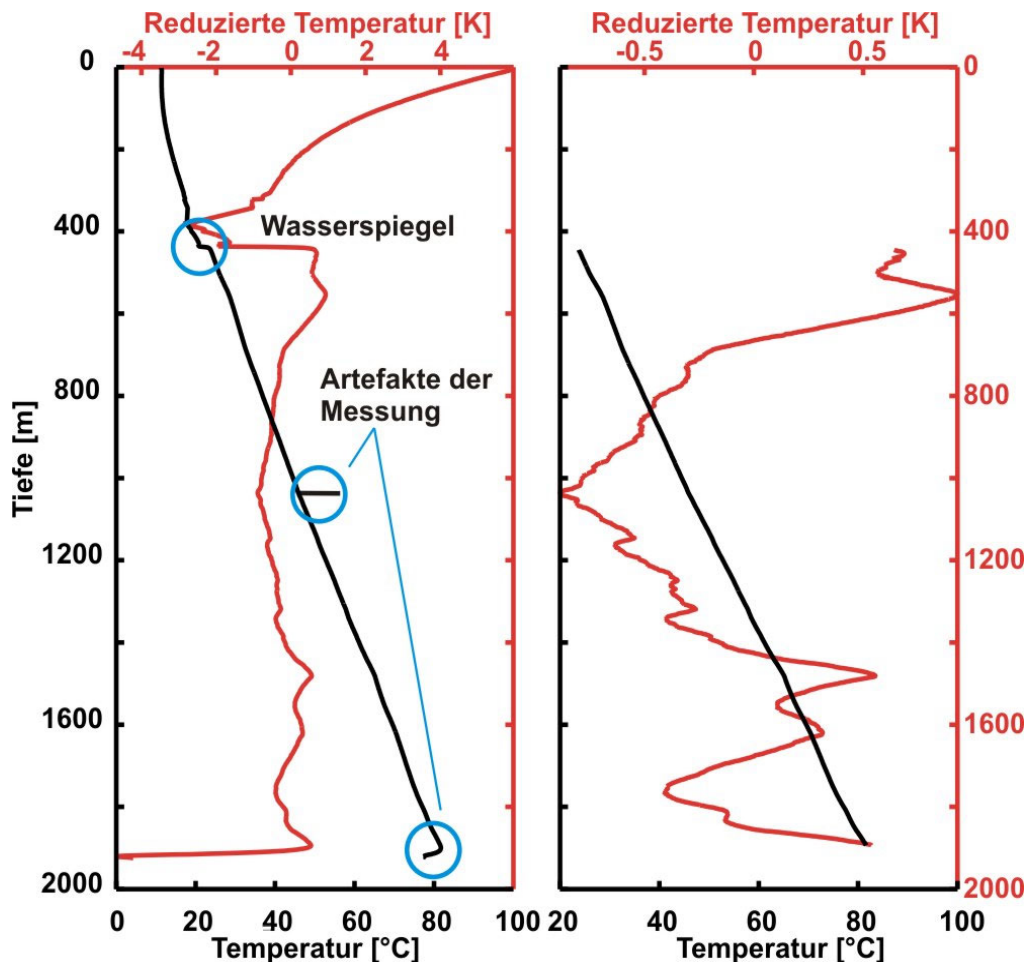


Abb. 3.7: Datenbehandlung zur Qualitätssicherung. Typische Effekte in den Rohdaten (links, blaue Kreise) müssen auf Basis einer visuellen Untersuchung unter Zuhilfenahme der Bohrakten und Messunterlagen entfernt oder korrigiert werden (rechts).

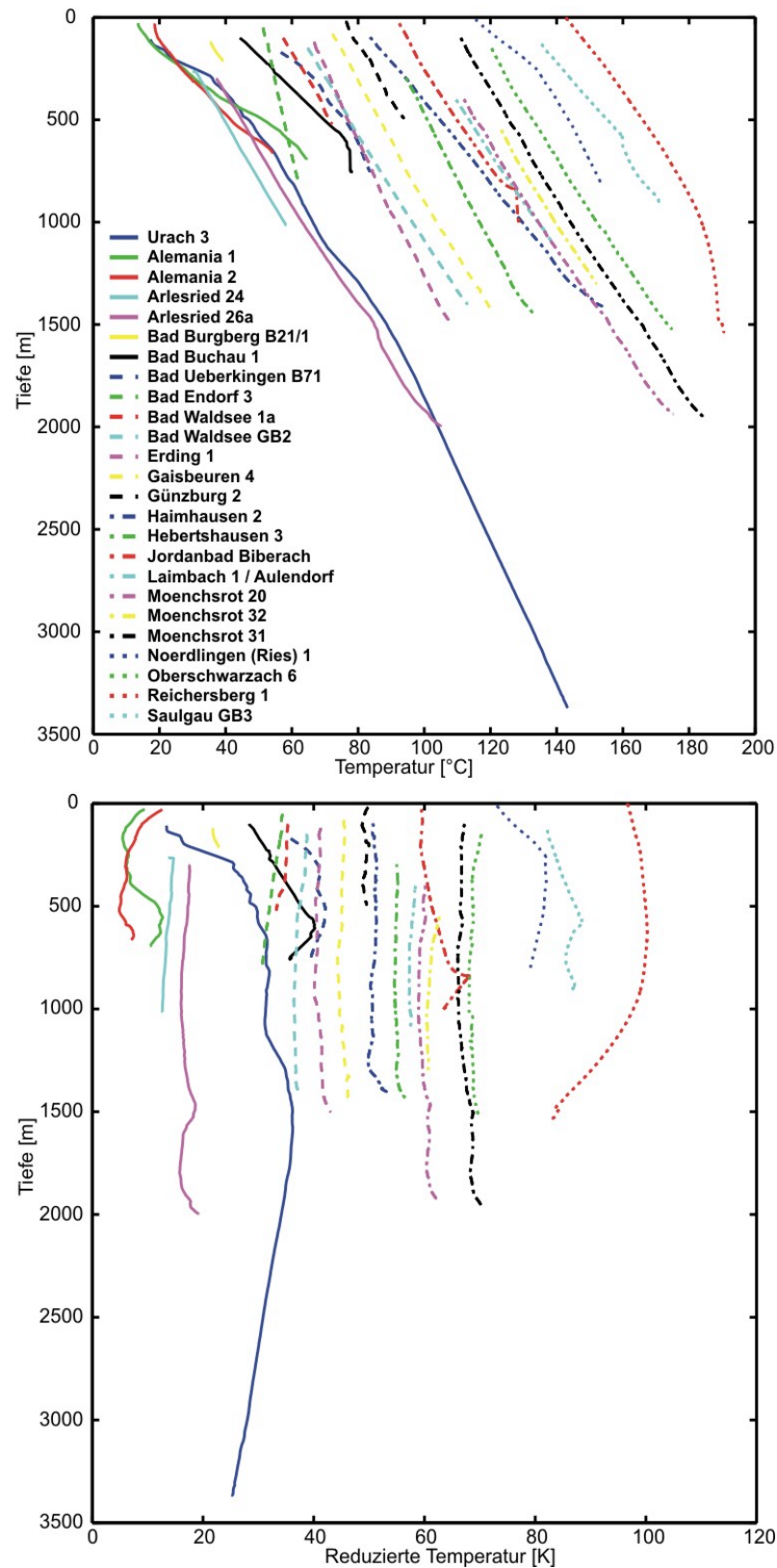


Abb. 3.8: Oben: Die dieser Studie ausgewerteten Temperaturlogs. Die einzelnen Logs sind zur besseren Übersichtlichkeit jeweils um +5 K verschoben. Unten: Reduzierte Temperaturen. Die Verschiebung beträgt hier 3 K.

3.3 Rekonstruktion der Gesteinseigenschaften

Die in der Westlichen Molasse zugänglichen Bohrungen wurden weniger häufig gekernt als angenommen. Es wurden daher neben laufenden Messungen neuartige Verfahren getestet, auch das weitaus häufiger vorhandene Bohrklein in synthetische Gesteinsproben zu überführen, welche mit der eingesetzten optischen Methode vermessen werden können. Diese Verfahren sind allerdings deutlich aufwändiger als die bisher verwendeten Standardmethoden.

Darüber hinaus wurde die vielversprechende Strategie verfolgt, diese Punktmessungen der thermischen Eigenschaften durch Interpretation geophysikalischer Logs zu ergänzen. Auch dieses Vorgehen wurde in seiner Leistungsfähigkeit untersucht, jedoch wegen der z. Zt. noch geringen Zahl zugänglicher Logs noch nicht in der Fläche angewendet. Die deutsche Erdöl- und Erdgasindustrie hat jedoch mittlerweile ihre Bereitschaft bekundet, unserem Projekt die erforderlichen Daten zur Verfügung zu stellen.

Die neu entwickelten mathematischen Umkehrverfahren erlauben es, aus vorgegebenen Randinformationen (Parametermessungen und –schätzwerten) gleichzeitig optimale Klimageschichten und Parameterverteilungen zu bestimmen. Linearisierte Fehlergrenzen für beide Komponenten können ebenfalls angegeben werden. Ergänzend werden Zufallsverfahren verwendet, um die nichtlinearen Systemverknüpfungen in der Fehleranalyse berücksichtigen zu können.

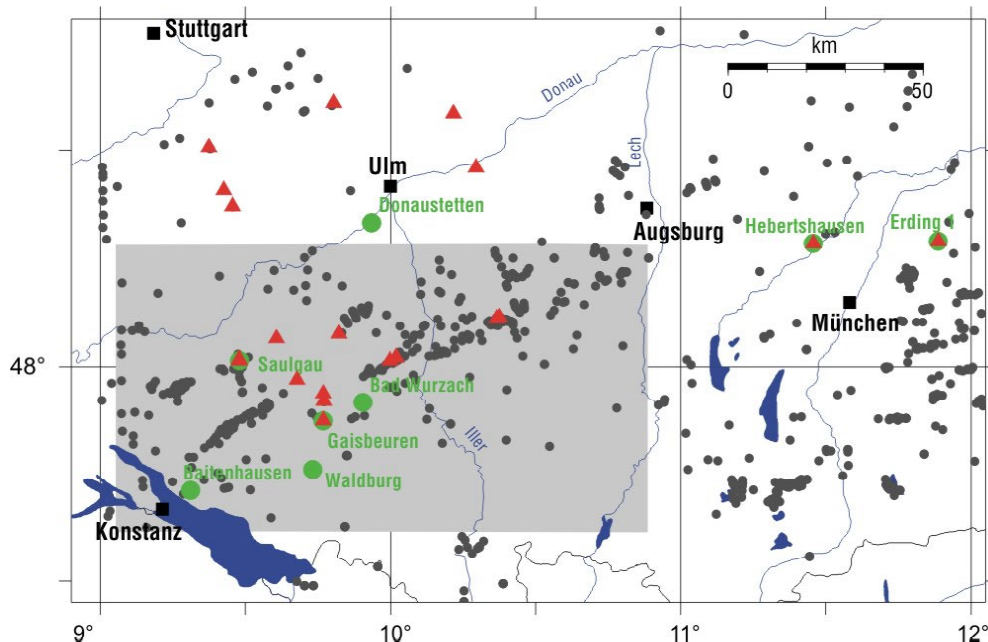


Abb. 3.9: Karte des Arbeitsgebiets in weiteren Sinn. Grüne Punkte geben die Herkunft von Kernmaterial an, während die Roten Dreiecke die ungestörten Bohrungen anzeigen. Graue Punkte markieren Lage von Bohrungen, die stratigraphische Information für die Modellkonstruktion lieferten.

3.3.1 Messungen an Kernmaterial.

Die Bohrkerne zur Bestimmung verschiedener physikalischer Gesteinseigenschaften entstammen größtenteils dem Bohrkernlager des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau (LGRB) in Baden-Württemberg. Weiterhin stammt ein kleiner Anteil der Proben aus der Probensammlung des GGA-Institutes. Folgende Bohrungen lieferten Proben: Bad Wurzach (92 m Kerne), Waldburg (6 m Kerne), Baitenhausen (1 m Kerne), Saulgau (Einzelproben), Erding (Einzelproben), Singen (Einzelproben), Donaustetten (Einzelproben) und Gaisbeuren (Einzelproben). Abb. 3.9 zeigt die Lage der erwähnten Bohrungen.

An den Gesteinsproben für das Testgebiet Westliche Molasse wurden einheitlich die folgenden petrophysikalischen Eigenschaften bestimmt: Dichte (ρ), Wärmeleitfähigkeit (λ) in trockenem und gesättigtem Zustand sowie spezifische Wärmekapazität (c_p). Einige ausgewählte Probenstücke wurden bei der RWTH in Aachen oder am GGA-Institut in Hannover weiterführenden petrophysikalischen Messungen unterzogen. So wurde in einem geringeren Umfang an der RWTH die Kompressionswellengeschwindigkeit gemessen, während im GGA-Institut in Hannover die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit bestimmt, sowie eine Röntgen-Fluoreszenz-Analyse (RFA) vorgenommen wurde. Die RFA wurde durchgeführt, um damit eine Aussage über die Wärmeproduktionsrate zu treffen. Alle diese zusätzlichen Untersuchungen wurden mit Blick auf eine Verwertbarkeit zur Korrektur (Porosität) oder zur Rekonstruktion der für uns wichtigen thermophysikalischen Parameter unternommen. Eine Beschreibung der Messprinzipien und der Messgeräte finden sich in Anhang C dieses Berichts.

Wärmeleitfähigkeit

Die Ergebnisse der Wärmeleitfähigkeitsmessungen des längsten uns zur Verfügung stehenden Kernstücks (Bad Wurzach) sind in Abb. 3.10 dargestellt. Jedes der etwa einen Meter langen Kernsegmente ist in vier bis acht Fragmente zerbrochen. Diese wurden kontinuierlich abgetastet und eine mittlere Wärmeleitfähigkeit bestimmt, sodass für jeden untersuchten Kernmeter zwischen 4 und 8 Messwerte erzeugt wurden (Links dargestellt). Diese wurden jeweils zu Mittelwerten zusammengefasst (Mitte und rechts). Es ist zu sehen, dass die Wärmeleitfähigkeit der gesättigten Kerne über den ganzen Bereich sehr konstant bleibt. Man kann für den Bereich der OMM und Baltringer Schichten vermutlich ohne großen Fehler eine konstante Wärmeleitfähigkeit ansetzen.

Interessant ist auch die an trockenen Proben gemessene Wärmeleitfähigkeit. In der mittleren Abbildung ist ein Gamma-Ray Log (GR-Log) der Wärmeleitfähigkeit unterlegt. Die gesättigte Wärmeleitfähigkeit korreliert im Gegensatz zur ungesättigten nicht mit dem GR-Log. Natürliche Radioaktivität ist in Sedimentgesteinen hauptsächlich durch die Lithologie (Tongehalt) bestimmt. Da Luft im Vergleich zu Wasser eine sehr viel geringere Wärmeleitfähigkeit besitzt³ und als thermischer Isolator wirkt, sind die Änderungen aufgrund der Lithologie sehr gut zu sehen. Die gesättigte Wärmeleitfähigkeit dagegen ist im Wesentlichen porositätsgesteuert. Diese schwankt zwischen 15 und 30 % (siehe Abschnitt Wärmekapazität und Tempera-

³ Wärmeleitfähigkeiten: Luft: $0.026 \text{ W (m K)}^{-1}$, Wasser: $0.58 \text{ W (m K)}^{-1}$

turleitfähigkeit) zeigt aber keine systematischen Trends. Eine schwächere, umgekehrte Korrelation der trockenen Wärmeleitfähigkeit zeigt sich mit dem spezifischen elektrischen Widerstand (rechts). Auch dieser wird durch Porosität und Tongehalt bestimmt. Leitfähige Tonminerale senken den Widerstand und führen zu der beobachteten negativen Korrelation.

In Abb. 3.11 sind die Messwerte aus der Schweizer Molasse (Leu et al., 1999) im Vergleich zu unseren dargestellt. In der tiefenabhängigen Darstellung (links) zeigt sich eine schwache Zunahme der Wärmeleitfähigkeit mit der Tiefe, unabhängig von Lithologie und Geologie. Dies ist auf die zunehmende Kompaktion und somit Reduktion der Porosität der Sedimente zurückzuführen. Rechts ist ein Vergleich von Häufigkeitsverteilungen unserer Messungen mit den Schweizer Werten dargestellt. Für die Obere Süßwassermolasse liegen im Moment keine Messungen vor. Für die anderen Einheiten ergeben sich vergleichbare Werte, wobei zwei Unterschiede deutlich werden. Zum einen ist die Verteilung unserer Messwerte enger, hauptsächlich ein Effekt der kleineren Stichprobe. Zum anderen liegen die Werte etwas höher. Da unsere Proben dem Tiefenintervall 600 – 800 m entstammen, ist eine leichte Erhöhung gegenüber den Schweizer Messwerten plausibel, die aus dem Tiefenintervall 0 – 700 m stammen.

An der RWTH Aachen besteht zusätzlich zu den Standardmethoden die Möglichkeit, die seismische Geschwindigkeit und die Gamma-Dichte mit einem Core-Logger zu bestimmen (Messprinzip siehe Anhang). In Abb. 3.12 ist die Wärmeleitfähigkeit gegen die seismische Primärwellengeschwindigkeit v_p aufgetragen. Eine deutliche positive Korrelation ist sichtbar. Diese ist im wesentlichen auf die Abhängigkeit der beiden Parameter von der Porosität zurückzuführen. Für die seismische Geschwindigkeit wird häufig eine Beziehung nach Wyllie et al. (1956) angenommen:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{\phi}{v_f} + \frac{1-\phi}{v_m} \quad 3.1$$

Für die Wärmeleitfähigkeit kann üblicherweise das geometrische Mittel der Matrix- und Fluideigenschaften benutzt werden:

$$\lambda_g = \lambda_f^\phi \cdot \lambda_m^{1-\phi} \quad 3.2$$

Hier bezeichnen die Indizes g , f und m jeweils die Gesamt-, Porenfluid- und Matrix-Eigenschaften. Aus den Beziehungen wird ersichtlich, dass bei abnehmender Porosität die Gesteinseigenschaften stärker durch die Matriceigenschaften bestimmt sind und umgekehrt.

Für unseren Wertebereich ist die Annahme einer linearen Korrelation der beiden Parameter sinnvoll. Um die Beziehungen zu quantifizieren, wurden für den Gesamtdatensatz zwei Ausgleichsgeraden mit einem Ansatz von $\lambda = a v_p + b$ bestimmt. Die eine folgt Leu et al. (1999), die $b=0$ setzen, d. h. die Gerade verläuft durch den Koordinatenursprung. Unter dieser Voraussetzung ergibt sich aus dem vorliegenden Datensatz eine Steigung von $0.76 \pm 0.02 \text{ W (m K)}^{-1} / (\text{km s}^{-1})$. Aus der geologischen Ansprache der Bohrung ist ersichtlich, dass es sich hauptsächlich um Fein- bis Mittelsandsteine mit Siltmergeln handelt. Für diese Gesteine in der OMM geben Leu et al. (1999) Steigungswerte von 0.70 (Siltsteine), 0.72 (Feinsandsteine) und 0.8 (Mittelsandsteine) an. Diese sind in guter Übereinstimmung mit den von uns gefundenen Ergebnissen. Dies ist insbesondere wichtig, da es die Vermutung bestätigt, das

fundenen Ergebnissen. Dies ist insbesondere wichtig, da es die Vermutung bestätigt, dass die Korrelationen zwischen diesen physikalischen Parametern regionale Gültigkeit haben und auch auf andere Lokationen im Arbeitsgebiet übertragen werden können.

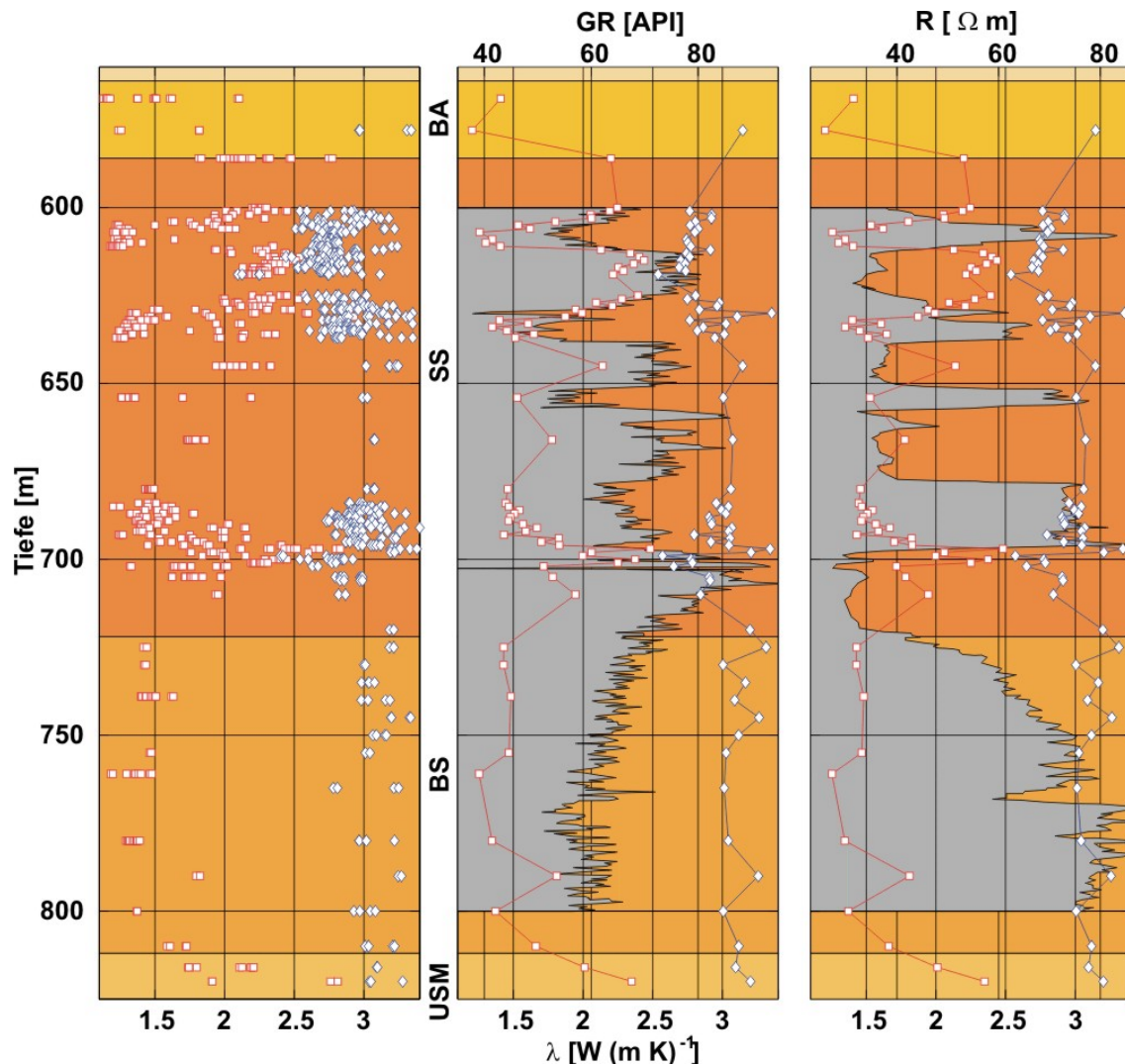


Abb. 3.10: Ergebnisse der Wärmeleitfähigkeitsmessungen am Kern Bad Wurzach. Unterlegt ist die Stratigraphie der Bohrung. Links sind die Einzelmessungen als Symbole für trockene (rot) und saturierte (blau) Proben dargestellt. In der Mitte und rechts sind die Mittelwerte für jeweils einen Meter gezeigt. Ein Gamma-Ray Log (mitte) und ein Log des spezifischen elektrischen Widerstandes (rechts) sind diesen Kurven jeweils als grau gefüllte schwarze Kurven unterlegt. Die geologischen Einheiten sind wie folgt abgekürzt: OMM – Baltringer Schichten (BA), OMM – Sandschiefer (SS), OMM – Basissandstein (BS), Untere Süßwassermolasse (USM).

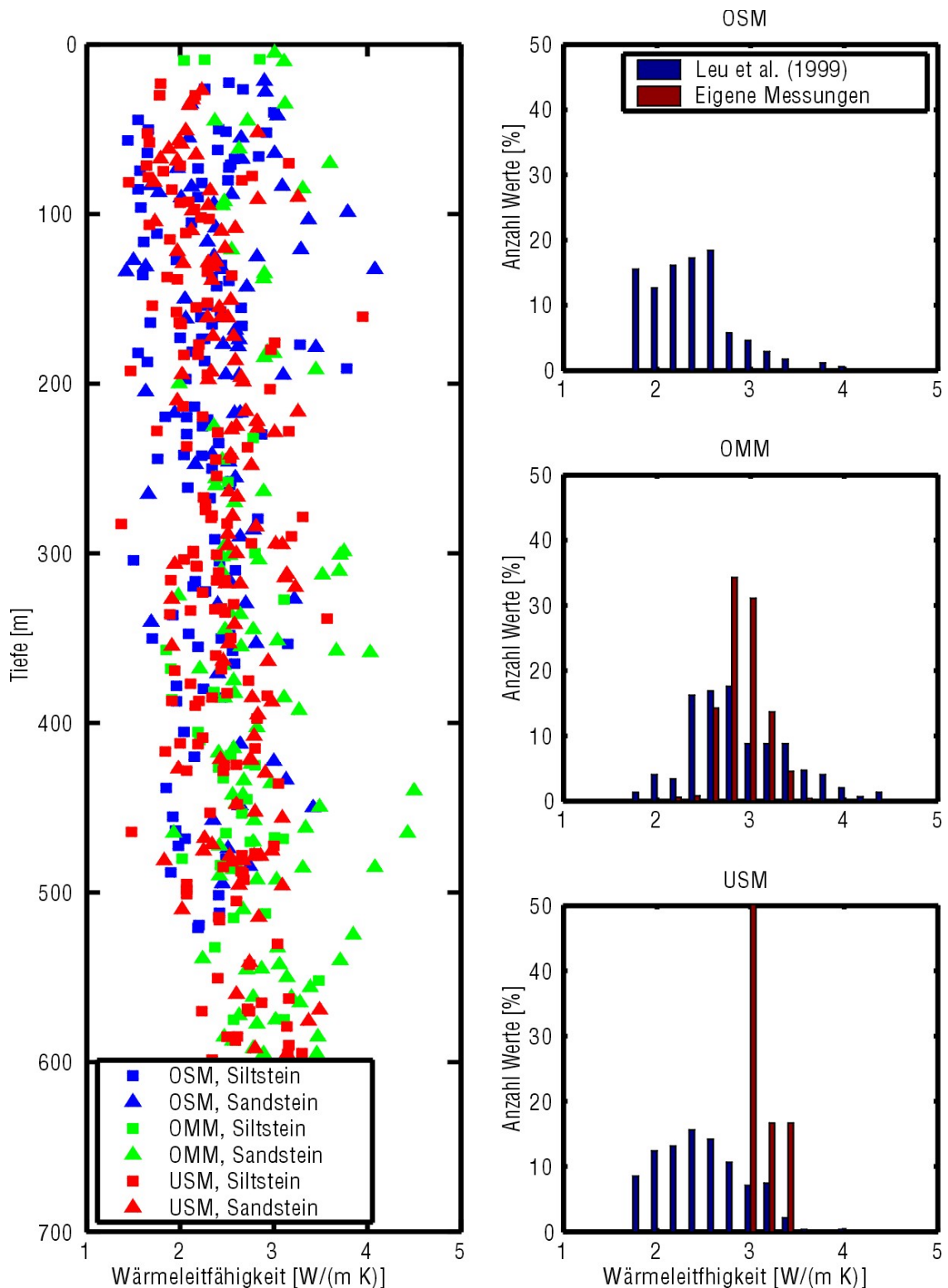


Abb. 3.11: Vergleich der Wärmeleitfähigkeiten, gemessen am Kern Bad Wurzach und aus der Schweizer Molasse (Leu et al., 1999). Links ist die Wärmeleitfähigkeit aller Proben aus Leu et al. (1999) gegen die Tiefe aufgetragen, aufgeschlüsselt nach Stratigraphie und Lithologie. Rechts ist die Häufigkeitsverteilung für verschiedene geologische Einheiten gezeigt. (Rot: Eigene Messungen; Blau: Leu et al., 1999)

Korrelation $v_p - \lambda$ (trocken)

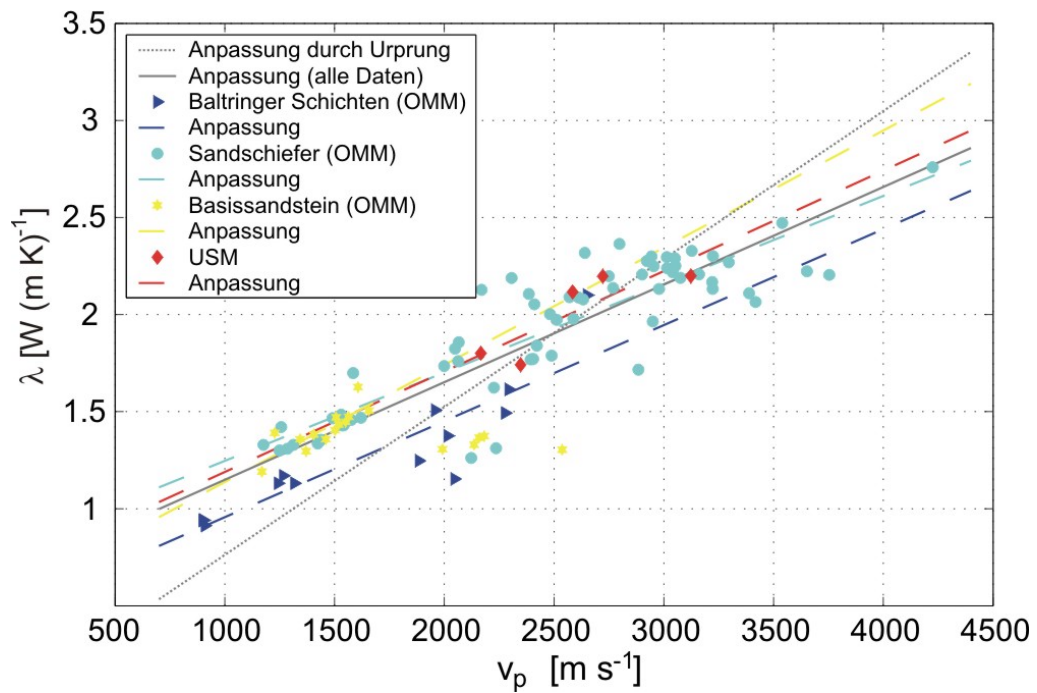


Abb. 3.12: Korrelation der Wärmeleitfähigkeit λ mit der seismischen Longitudinalwellengeschwindigkeit v_p , basierend auf den eigenen Messungen aus Bad Wurzach (durchgezogene Linie: Gesamtanpassung; gestrichelt: Anpassung für verschiedene Gesteinseinheiten; gepunktet: Anpassung durch den Ursprung, d. h. $b=0$).

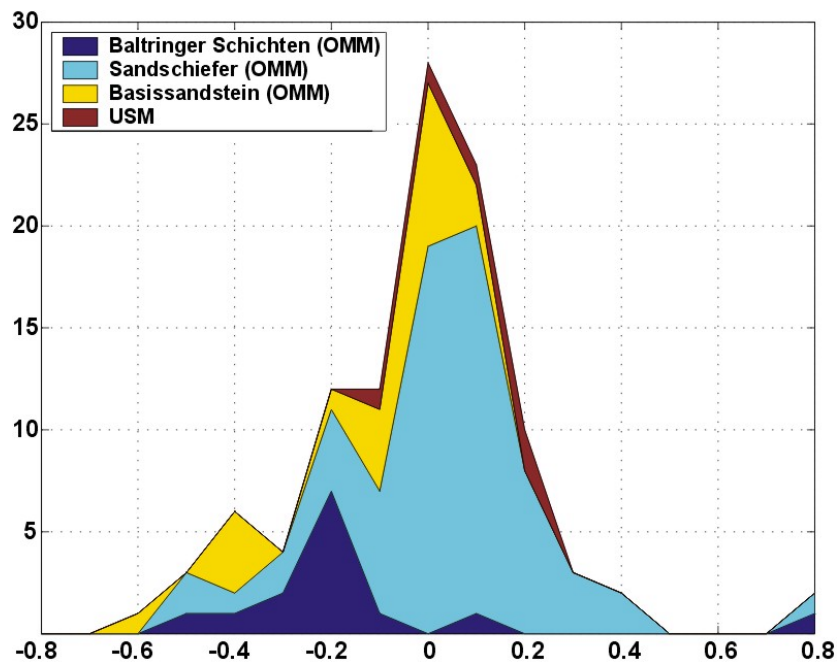


Abb. 3.13: Histogramm der Anpassungsresiduen für die Ausgleichsgerade aller Messwerte mit $b \neq 0$ in Abb. 3.12.

Allerdings ergibt die Anpassung einer Gerade durch den Ursprung kein befriedigendes Ergebnis. Die Annahme eines nicht verschwindenden Achsenabschnitts b führt zu einer deutlich besseren Anpassung. Diese Ausgleichsgerade besitzt die Steigung $a = 0.47 \pm 0.07 \text{ W (m K)}^{-1} / (\text{km s}^{-1})$ und den Achsenabschnitt $b = (0.72 \pm 0.16) \text{ W (m K)}^{-1}$.

Für die einzelnen geologischen Einheiten sind ebenfalls Regressionen durchgeführt worden. Hierbei werden die Beziehungen jeweils durch eine Funktion der schon beschriebenen Form angepasst. Die Ergebnisse sind in Tab. 3.1 zusammengefasst. Die Fehlergrenzen der Anpassungen sind hier recht groß. Zum einen liegt dies daran, dass die Anzahl der Messpunkte noch vergrößert werden muss. Zum anderen geht die Anpassung nach der Methode der kleinsten Quadrate von normalverteilten Fehlern aus, die bei petrophysikalischen Fehlern üblicherweise nicht gegeben sind. Daher wird in der Zukunft ein „robuster“ Anpassungsalgorithmus (Huber, 1984) verwendet werden. Für eine korrekte Abschätzung ist auch die Betrachtung der Fehler in beiden Messgrößen nötig. Momentan wird aber nur der Fehler in der Wärmeleitfähigkeitsmessung betrachtet.






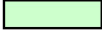


Dennoch ist ersichtlich, dass die Zunahme der Wärmeleitfähigkeit bei einem Anwachsen der seismischen Geschwindigkeit für alle Einheiten in etwa gleich ist. Unterschiede zeichnen sich hauptsächlich im Achsenabschnitt ab. So kann man z.B. sagen, dass die Werte der Baltringer Schichten generell niedriger liegen als die des Sandschiefer. Das Histogramm der Residuen für die Anpassung aller Datenpunkte in (Abb. 3.13) zeigt eine Streuung der Wärmeleitfähigkeitswerte von etwa $\pm 0.2 \text{ W (m K)}^{-1}$. Die Verteilung ist leicht schief, was im Wesentlichen auf die Werte in den Baltringer Schichten zurückzuführen ist.

Der Basissandstein hat eine Gruppe anomaler Werte bei 2000 – 2500 m/s, die nicht in die Auswertung einbezogen wurden. Alle Messwerte dieser Gruppe stammen aus dem Kernabschnitt bei 780 – 781 m Tiefe. Aus der Ansprache des Kernes ist ersichtlich, dass in dieser Tiefe ein Übergang von Feinsandstein mit Siltmergeln zu Mittelsandstein mit Siltmergeln erfolgt. Ebenfalls in dieser Tiefe ist ein Einbruch im Widerstands-Log zu beobachten. Der Kern selbst hat rötliche Verfärbungen, die von Ausfällungen zu stammen scheinen. Die Vermutung liegt nahe, dass an dieser Grenze eisenhaltige Minerale ausgefällt wurden.

Einheit	a [W (m K) ⁻¹ / (km s ⁻¹)]	b [W (m K) ⁻¹]
Baltringer Schichten (OMM)	0.49 ± 0.32	0.46 ± 0.56
Sandschiefer (OMM)	0.46 ± 0.09	0.79 ± 0.23
Basissandstein (OMM)	0.60 ± 0.78	0.53 ± 1.15
USM	0.52 ± 0.60	0.67 ± 1.56
Alle	0.47 ± 0.07	0.72 ± 0.16

Tab. 3.1: Werte der Koeffizienten der in Abb. 3.12 gezeigten Ausgleichsgeraden.

Bohrung	Teufenintervall		λ	ρ	Φ	Stratigraphie	Lithologie
	m	m	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	kg m^{-3}	%		
Singen	315		1.75			tDt	Deckentuff, rötlich
Saulgau TB-1	502	506	2.12	2590	3.7	tUSM, Süßwasserkalkzone	Kalkstein
Baitenhausen 1	1332	1339	2.92	2670	5.7	tUSM	Sandstein, Siltmergelstein
Singen	402		2.70	2670	2.6	jo, Malm Portlandium, ζ	Kalkstein mit Massenkalkkomp.
Donaustetten	383		2.40	2670	1.8	jo, Malm Kimmeridgium, δ	Kalkstein schwach gebant
Donaustetten	412		2.10	2630	1.8	jo, Malm Kimmeridgium, γ	Mergel- und Kalkstein wechselnd
Singen	604		2.13	2670	3.6	jo, Malm Kimmeridgium, γ	Mergelstein, Mergelkalkstein
Erding 1	1879	1883	3.10	2760	3.2	jo, Malm ζ bis γ	Dolomit, grobkristallin, hellbraun
Donaustetten	448		2.70	2680	1.9	jo, Malm Oxfordium, β	Kalkstein gebant mit Mergelfugen
Erding 1	2200	2202	3.11	2810	2.7	jo, Malm Oxfordium, β	Dolomit, hart, dunkelgrau
Erding 1	2200	2202	2.75	2730		jo, Malm Oxfordium, β	Kalkstein, Massenkalk
Erding 1	2219	2224	2.80	2700	3.3	jo, Malm Oxfordium, β	Kalkstein, harter Massenkalk
Donaustetten	457	460	2.20	2650	2.4	jo, Malm Oxfordium, α	Mergelstein und Kalksteinbänke
Saulgau TB-1	618	625	2.99	2710	1.8	jo, Malm	Zementmergel
Hebertshausen 1	1451	1483	3.73		10.4	jo, Malm	Kalkstein
Erding 1	2239	2243	2.12	2720	3.2	jo, Malm Oxfordium, α	Kalkstein, Riffschutt
Erding 1	2239	2243	2.18	2730	3.1	jo, Malm Oxfordium, α	Schwamm- Mergelfaserkalk
Gaisbeuren 2	2539		2.71	2690	5.3	Grundgebirge	Gneis

	Vulkanite		Karbonate
	Klastite		Karbonate
	Klastite		Karbonate
	Metamorphite		

λ : wassergesättigt, T = 20 °C

Tab. 3.2: Messungen der Wärmeleitfähigkeit (λ), Dichte (ρ) und Porosität (Φ) an einzelnen Kernproben.

Es ist z.B. aus junger ozeanischer Kruste bekannt, dass Ausfällungen die seismische Geschwindigkeit drastisch erhöhen, ohne die Gesamtporosität signifikant zu beeinflussen. Diese ist jedoch relevant für die Wärmeleitfähigkeit. Damit werden hohe seismische Geschwindigkeiten bei relativ kleinen Wärmeleitfähigkeiten erzielt. Dies stellt nach unseren bisherigen Kenntnissen in unserem Arbeitsgebiet einen Sonderfall dar, der das Temperaturfeld nicht signifikant beeinflusst. Daher wurden diese Messwerte für die Regression verworfen.

Zusätzlich zu dieser hochauflösenden Messung wurden Proben aus anderen Bohrungen vermessen. In der Hauptsache handelt es sich um Proben aus dem Malm. Die Werte sind in der Tab. 3.2 zusammengefasst. Die Messwerte schwanken zwischen 1.7 und $3.7 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Die hohe Variabilität ist auf die sehr heterogenen Ablagerungsbedingungen des Malm zurückzuführen, die sich auch in den Logs widerspiegelt. Sandige, tonige und kalkige Schichten wechseln sich ab und führen zu einem sehr inhomogenen Bild. In weiteren Studien muss dies durch weitere Messungen und Einbeziehung zusätzlicher Informationen berücksichtigt werden.

Wärmekapazität und Temperaturleitfähigkeit

An den Proben des Bad Wurzach Kernes wurde die Wärmekapazität c_p gemessen. Das Messprinzip ist das eines dynamischen Wärmestrom-Differenz Kalorimeters (Höhne et al., 1996). Hierbei wird eine kontinuierliche Messkurve der Wärmekapazität als Funktion der Temperatur bestimmt. Die Messungen für das Tiefenprofil sind in der Abb. 3.15 links als durchgezogene Linien dargestellt. Die theoretische Kurve der Wärmekapazität für Festkörper sollte im betrachteten Temperaturbereich etwa linear sein. England (1978) gibt zum Beispiel folgende Funktion an:

$$c_p = 0.75 + 4.63 \cdot 10^{-4} T - 1.45 \cdot 10^{-4} T^{-2} \text{ [J (kg K)}^{-1}\text{]} \quad 3.3$$

Hier ist die Temperatur in Kelvin angegeben. Daher trägt der invers-quadratische Term bei Raumtemperatur nur wenig zum Kurvenverlauf bei.

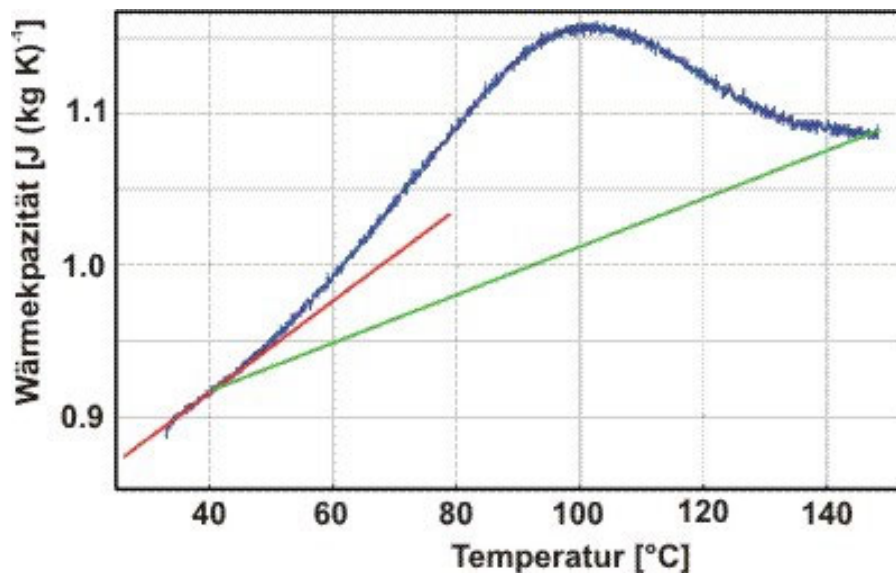


Abb. 3.14: Schema der Auswertung der kalorimetrischen Bestimmung der Wärmekapazität. An den ungestörten Teil der Kurve wird eine Gerade (rot) angepasst, mit der die temperaturabhängige Wärmekapazität berechnet werden kann. In grün ist die Basislinie dargestellt. Integriert man die Fläche über der Basislinie, ergibt sich die latente Wärme der Reaktion, welche die Anomalie erzeugt.

Die Messkurven zeichnen sich allerdings durch einen etwa linearen Anstieg im unteren Bereich und eine mehr oder weniger ausgeprägte Anomalie im Bereich zwischen 60 und 140

°C aus. Da sie positiv ist, muss der verursachende Prozess endotherm, d.h. energieverbrauchend sein. Die Proben enthalten Tonminerale und Haftwasser kann an diese gebunden sein. Außerdem kann sogenanntes Kristallwasser in die Strukturen der Minerale eingebaut sein. Beide Prozesse können den beobachteten Kurvenverlauf erklären. Eine Erwärmung der Probe führt zu einer Freisetzung dieser Wässer. Hier benötigt zum einen das Aufbrechen der Bindung und zum anderen auch die Verdunstung des Wassers Energie, die als endotherme Reaktionswärme in der c_p -Kurve sichtbar ist. Ein Beispiel für die Auswertung der c_p -Kurven ist in Abb. 3.14 gezeigt. Im unteren, linearen Bereich wird eine Gerade der Form

$$c_p(T) = a_1 \cdot T + a_0 \quad (T \text{ in } ^\circ\text{C}) \quad 3.4$$

an die Messwerte (blau) angepasst (rote Linie). Diese gibt die temperaturabhängige Wärmekapazität wieder, welche in den Modellen benutzt wird. Die Koeffizienten der Regressionsgerade sind in Abb. 3.15 Mitte dargestellt. Es ergibt sich nur eine mäßige Korrelation mit der Geologie. Der Koeffizient a_0 bleibt generell konstant. Für den Basissandstein ist der Anstieg der Wärmekapazität pro Temperaturanstieg (a_1) generell um etwa 20% niedriger.

Weiter wurde versucht, das Kurvenmaximum auszuwerten. Dazu zieht man eine Basislinie, welche die linearen Abschnitte beiderseits des Maximums verbindet. Bei den betrachteten Proben ist man leider bei 150 °C noch nicht vollständig wieder im ungestörten Bereich. Daher wurde die Basislinie zwischen den ungestörten Werten unterhalb des Kurvenmaximums und dem c_p -Wert bei 145 °C interpoliert. Integriert man die Fläche über der Basislinie, erhält man die latente Wärme des betrachteten Prozesses. Die Werte für die Proben aus Bad Wurzach sind in Abb. 3.15 rechts dargestellt. Die Werte korrelieren schwach mit dem GR-Log (vgl. Abb. 3.10). Insbesondere die graduelle Abnahme im Basissandstein wird von den Werten gut nachvollzogen. Die Verbindung entsteht hier über den Tongehalt der Proben, der einerseits die natürliche Gamma-Strahlung und andererseits die Menge gebundenen Haftwassers steuert. Diese Auswertung ist allerdings rein qualitativ. Eine Umrechnung auf das Tonvolumen ist vermutlich nicht möglich.

Die in-situ Temperaturen für die betrachteten Proben liegen zwischen 10 und 30 °C. Damit ist der Umwandlungsprozess unter in-situ Bedingungen nicht relevant. In den Gebieten weiter südlich liegt die OMM allerdings tiefer und die betrachteten Prozesse werden die Wärmekapazität modifizieren. Insbesondere sind die Messwerte, die wir bisher gemessen haben, nicht unbedingt für Gesteine höherer Temperaturen anwendbar, denn das veränderte Temperatur-/Druckregime wird auch die Art der Bindung von Wasser in den Mineralen verändern. Für die Messreihen des Folgeprojekts wird die Maximaltemperatur der Messung daher niedriger sein, da die Messung sehr lange (48 Stunden) dauert und relevante Informationen für höhere Temperaturen aus dem Kurvenverlauf nach den jetzigen Kenntnissen nicht zu extrahieren sind. Außerdem sollten die gleichen Einheiten in größeren Tiefen beprobt werden, um auch für diese Bedingungen aussagekräftige Messwerte zu erhalten.

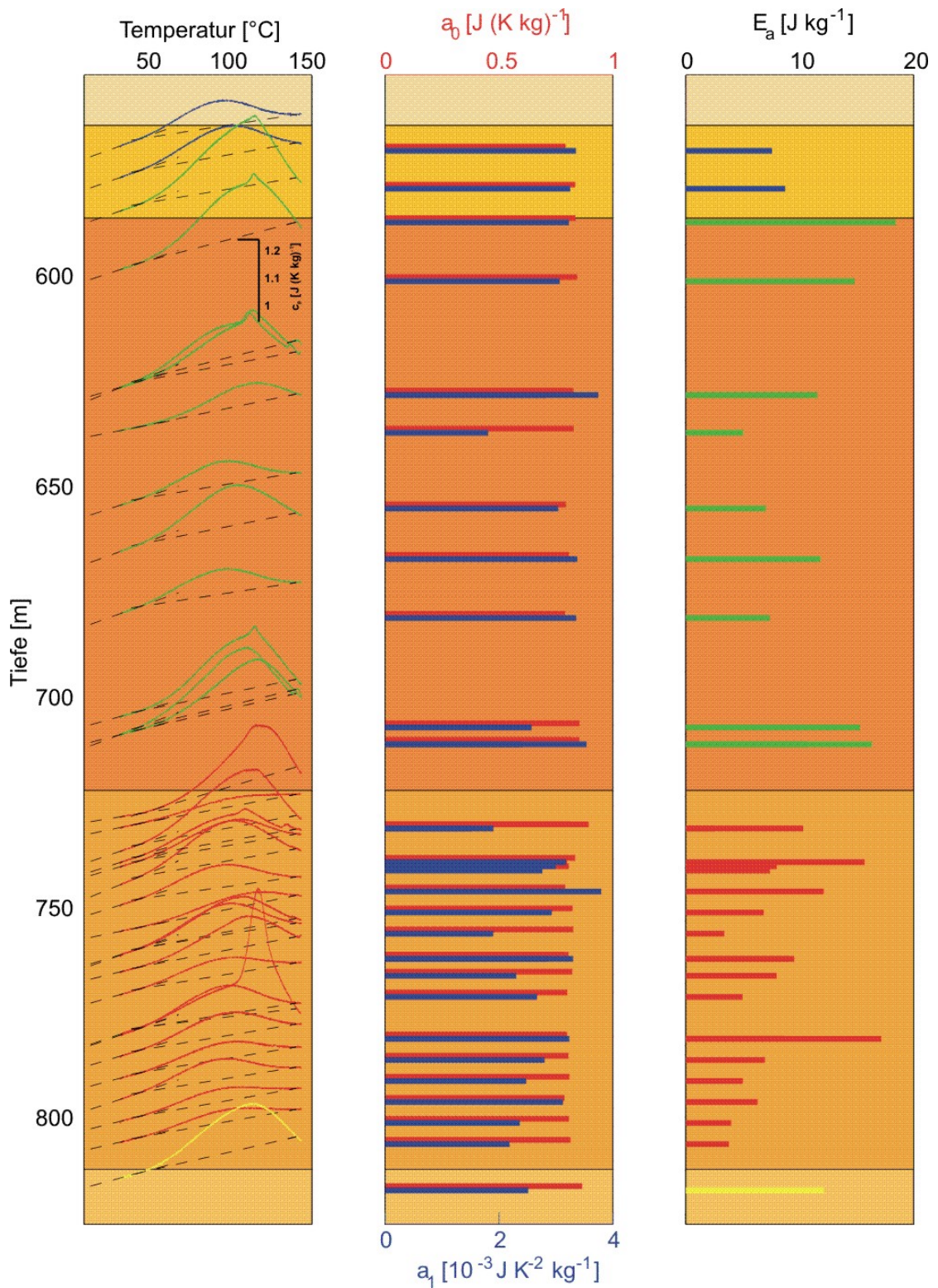


Abb. 3.15: Kalorimetrische Analyse der Proben aus Bad Wurzach. Links: Messkurven mit Anpassung des ungestörten Niedrigtemperaturbereichs und Basislinie. Mitte: Koeffizienten der linearen Anpassung. Rechts: Berechnete Aktivierungsenergie E_a des vermuteten Umwandlungsprozesses.

Die Messung der Wärmekapazität kann benutzt werden, um von der Wärmeleitfähigkeit auf die Temperaturleitfähigkeit κ zu schließen, welche die instationäre Wärmeleitung beschreibt:

$$\kappa = \frac{\lambda}{\rho \cdot c_p} \quad 3.5$$

Hier ist ρ die Dichte der Probe, die entweder nach dem Archimedes-Prinzip oder mit dem Core-Logger bestimmt wurde.

In der Bohrung Bad Wurzach selber wurde kein ungestörtes Temperaturprofil gemessen. Die petrophysikalischen Eigenschaften des Gesteins variieren aber mit dieser, sodass ein Tiefenprofil der Temperatur notwendig ist. Der Fehler, der durch die Benutzung eines regionalen Temperaturfeldes statt der echten in-situ Temperatur gemacht wird, ist dabei vernachlässigbar. Wir haben daher das ungestörte Log der benachbarten Bohrung Gaisbeuren 4 für diesen Zweck benutzt. Die Temperatur und die daraus berechneten in-situ c_p -Werte der Gesteinsmatrix sind in der Abb. 3.16 links außen dargestellt. Die gemessenen Wärmeleitfähigkeiten an saturierten Proben sind rechts dargestellt (blau). Da auch λ von der Temperatur abhängt (vgl. Abb. 3.26), wurden die Messwerte mit dem Temperaturlog korrigiert (blau gestrichelt, rechts außen). Wärmekapazität und Dichte des Gesteins werden als arithmetisches Mittel der Werte für Matrix und Porenfluid berechnet:

$$c_{p,g} = \phi \cdot c_{p,f} + (1 - \phi) \cdot c_{p,m} \quad 3.6$$

$$\rho_g = \phi \cdot \rho_f + (1 - \phi) \cdot \rho_m \quad 3.7$$

Hierbei bezeichnen die Indizes f , m und g wiederum die Eigenschaften des Fluids, der Matrix und des Gesteinsverbandes.

Die thermischen Eigenschaften von Wasser als Porenfluid in Abhängigkeit der Tiefe bzw. Temperatur sind Mitte rechts dargestellt (nach Wagner & Pruß, 2001). Porositäten und Matrix-Dichten der Proben wurden nach dem Archimedes-Prinzip oder mit der Gamma-Dichte Messung des Core-Loggers bestimmt. Da nicht für alle Proben diese Messwerte vorliegen, wurden die Werte der Porosität und der Dichte interpoliert. Die Messpunkte sind in der Abb. 3.16 b) dargestellt, mit den interpolierten Funktionen als gestrichelte Linien. Die Interpolation ist für die Matrix-Dichte unproblematisch, da sie nicht sehr stark schwankt. Die Porosität ist dagegen problematischer. Die Schwankungen in den Messwerten sind sehr hoch. Außerdem liegen auch die absoluten Porositätswerte mit 15 – 30 % sehr hoch. Vermutlich ist dies auf zwei sekundäre Effekte zurückzuführen. (1) Die Ausbildung von Mikrorissen nach der Kernentnahme und Druckentlastung. (2) Häufig wurde bei der Messung der Proben ein Verlust der Festigkeit des Kerns nach dem Trocknen und Saturieren beobachtet. Dabei quellen die vorher getrockneten Tonminerale, vergrößern ihr Volumen und sprengen den Gesteinsverband. Diese Effekte führen dazu, dass die Porosität gegenüber den in-situ Bedingungen vermutlich erhöht ist. In den Baltringer Schichten wurden zwar Porositäten von bis zu 26 % gemessen (Bertleff et al., 1988), die anderen Einheiten dürften aber wesentlich geringere Werte aufweisen.

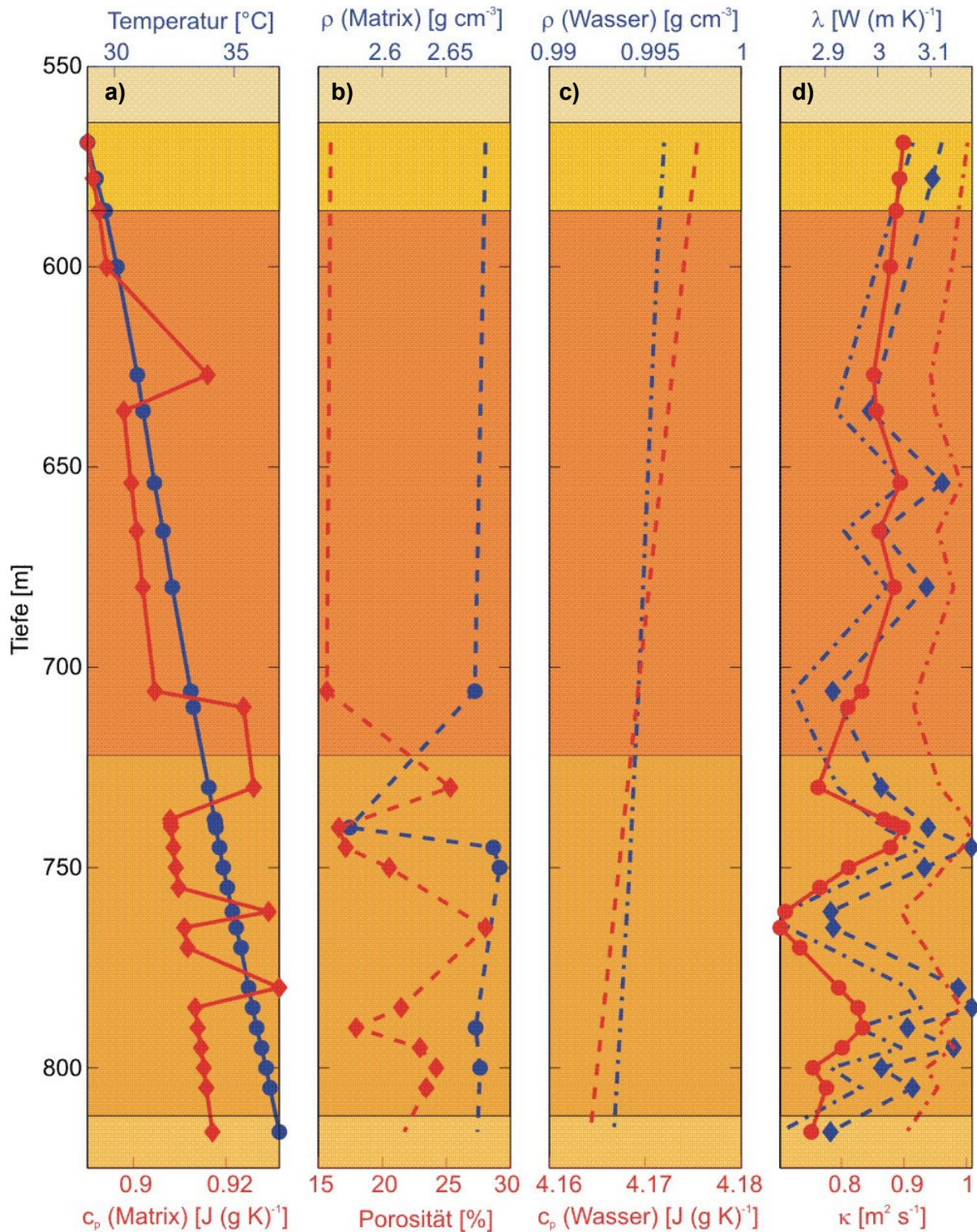


Abb. 3.16: Tiefenprofil der Temperaturleitfähigkeit (rechts außen). Eigene Messwerte der Wärmekapazität, Porosität, Dichte und Wärmeleitfähigkeit wurden für in-situ Temperaturen korrigiert. Zusammen mit Literaturwerten für Wasser ergibt sich die Temperaturleitfähigkeit. Rote durchgezogene Linie: Eigene gemessene Porositätswerte. Rote gestrichelte Linie: κ für eine konstante Porosität von 10 %. (Weitere Erläuterungen im Text).

Um den Effekt der Porosität auf κ abzuschätzen, wurde neben den gemessenen Werten auch eine konstante Porosität von 10 % benutzt. Die Ergebnisse sind rechts außen (rot, gestrichelt) zu sehen. Für die gemessenen Werte (rote Kurve, durchgezogen) liegt die Temperaturleitfähigkeit um 10 – 15 % niedriger, wobei die Spanne durch die Zunahme der Wärmekapazität mit der Tiefe größer wird. Die Ergebnisse zeigen den großen Einfluss der Porosität auf die Temperaturleitfähigkeit, die in Sedimentgesteinen nicht vernachlässigt werden darf. In den weiteren Arbeiten muss daher die Abschätzung der Porositäten verbessert werden.

3.3.2 Rekonstruktion aus geophysikalischen Logs

Da viele der Bohrungen in unserem Arbeitsgebiet nicht oder unvollständig gekernt wurden, ist eine flächenhafte Messung der Parameter an Gesteinsproben sehr schwierig. Als Lösung bietet sich hier die Nutzung geophysikalischer Bohrlochlogs an. Diese Messungen liegen weit verbreitet sowohl in Erdöl- als auch Thermalbohrungen vor.

Gegenüber Kernmessungen besitzen sie außerdem mehrere zusätzliche Vorteile: (a) Sie sind unter in-situ Bedingungen gemessen worden. (b) Sie erfassen ein größeres Gesteinsvolumen als die Kernmessungen. (c) Sie sind, wo vorhanden, quasi kontinuierlich und erlauben (d) zumindest in vertikaler Richtung Aussagen über die räumliche Variabilität der Parameter.

Bohrlochlogs messen in der Regel nicht direkt die gewünschten physikalischen Eigenschaften. Daher ist das Hauptproblem in der Loganalyse, von den Messungen auf die gesuchten Parameter zu schließen. Für kristalline Gesteine kann man diese Verbindung über den sogenannten Kationen-Packungsindex erreichen (Rybach & Buntebarth, 1982; Rybach & Buntebarth, 1984). Dieser Parameter beschreibt alle Gesteinseigenschaften und korreliert linear mit der Wärmeleitfähigkeit und seismischen Geschwindigkeit sowie logarithmisch mit der Wärmeproduktionsrate. Hieraus resultiert ein lineares Gleichungssystem mit dem die gesuchten Parameter berechnet werden können.

Für Sedimente sind die größten Einflussfaktoren auf die physikalischen Eigenschaften die Porosität und die Lithologie. In der Lithologie wird zum Beispiel zwischen sandigen und tonigen Sedimenten unterschieden (Brigaud et al., 1990), oder zwischen sandigen, tonigen und kalkigen Sedimenten (Vacquier et al., 1988). Die Logs, mit denen eine Korrelation erzielt werden kann, sind ebenfalls porositätsgesteuert. In Frage kommen die natürliche Gamma-Strahlung (GR-Log), Gamma-Dichte (GD-Log), seismische Geschwindigkeit (Sonic-Log) und Neutronen-Porositätsindex (NPI-Log). Wiederum ergeben sich lineare Korrelationen, die durch Messungen an Kernproben kalibriert werden.

Seismische Geschwindigkeit: Für die Schweizer Molasse haben Leu et al. (1999) einen Katalog von Wärmeleitfähigkeiten veröffentlicht, um die Entnahmeleistung von Erdwärmesonden abzuschätzen. Diese Messwerte sind auch in unser 3D-Modell eingegangen. Ein Teil dieser Messwerte wurde indirekt über die seismische Geschwindigkeit bestimmt. Die Autoren fanden einen einfachen linearen Zusammenhang zwischen den beiden Parametern, mit einem Proportionalitätsfaktor, der mit Lithologie und Geologie variiert. Die Studie gilt allerdings nur für Tiefen bis 500 m. Vergleiche mit unseren Daten (siehe vorhergehender Abschnitt) ergaben, dass dieser Zusammenhang nicht unmittelbar in größere Tiefen übertragen werden kann und dass eine Beziehung mit einem Achsenabschnitt $b \neq 0$ eine bessere Anpassung

schaft. Die Ergebnisse sind aber konsistent, sodass ein großräumiger regionaler Zusammenhang angenommen werden kann.

Wärmeproduktionsrate: Zwischen der Wärmeproduktionsrate und der natürlichen Gammastrahlung besteht ein direkter Zusammenhang. Optimal ist eine spektrale Messung, aus der die prozentualen Anteile radioaktiven Materials (Kalium, Thorium und Uran) berechnet werden (Rybach, 1988). Aber auch aus älteren integrierenden Messungen kann die Wärmeproduktion bestimmt werden (Bücker & Rybach, 1996). Hier kann die Wärmeproduktionsrate H durch zwei Methoden geschätzt werden. Existieren Angaben über die Konzentration der radioaktiven Elemente, kann die Formel $H [\mu\text{W m}^{-3}] = 10^{-5} \rho (9.52c_U + 2.56c_{Th} + 3.48c_K)$ benutzt werden. Aus dem fast überall vorhandenen GR-Log kann nach entsprechender Vorbehandlung ebenfalls ein Schätzwert durch $H [\mu\text{W m}^{-3}] = 0.0158 (\text{GR}[\text{API}] - 0.8)$ ermittelt werden.

Für die Bohrungen Bad Wurzach, Arlesried und Mönchsrot liegen GR-Logs vor. Aus diesen wurden Wärmeproduktionsraten berechnet. Die Raten sind für die verschiedenen Gesteine sehr unterschiedlich. Zwischen Malm α und Malm β schwankt die Rate zwischen 0.2 und 0.6 $\mu\text{W m}^{-3}$, im Dogger liegt sie über 1 $\mu\text{W m}^{-3}$. Für die Molasse-Sedimente zeichnet sich ein ähnlich inhomogenes Bild ab. Insgesamt lässt sich für die Bohrungen ein Mittelwert von etwa 1.0 $\mu\text{W m}^{-3}$ ansetzen. Aus der Literatur (Rybach & Čermak, 1982; Hänel, 1988,) kann man für Sandsteine 0.32 $\mu\text{W m}^{-3}$ und Tone 1.8 $\mu\text{W m}^{-3}$ ansetzen. Die berechneten Werte passen für mergelige Gesteine somit gut ins Bild.

Wir schließen aus den bisherigen Ergebnissen, dass die benötigte flächenhafte Information über die thermophysikalischen Parameter aus Korrelationen mit Bohrlochlogs extrahiert werden kann. Die Ergebnisse können auch als a-priori Information in die petrophysikalische Inversion eingehen. Damit kann die Abschätzung der Parameter weiter verbessert werden, bzw. die Beziehung zwischen Wärmeleitfähigkeit und seismischer Geschwindigkeit kalibriert werden. Die in diesem Zusammenhang in der Literatur beschriebenen Verfahren wurden von Williams & Anderson (1990) und Demongodin et al. (1991) zusammengetragen.

3.3.3 Stochastische Inversion petrophysikalischer Parameter

Ziel dieser Untersuchung ist es, die Schätzungen der Wärmeleitfähigkeit für die eindimensionale Modellbildung zu verbessern. Da die Messungen thermophysikalischer Gesteinseigenschaften auf Grund des Mangels an Proben immer unvollständig sein werden, ist eine Methode erforderlich, um die Werte der Parameter für die fehlenden Einheiten mit Fehlerangabe abschätzen zu können. Ein Vorteil der Methode ist es, dass Information aus anderen Quellen über die gesuchten Parameter auf einfache Weise in die Inversion eingebracht werden kann. Gemessene Werte der Wärmeleitfähigkeit, zum Beispiel, können als a-priori Information benutzt werden und somit die Schätzung der Wärmeleitfähigkeit für die anderen geologischen Einheiten verbessern. Neben der eindimensionalen Modellbildung ist auch die Einschätzung der räumlichen Variabilität der Wärmeleitfähigkeit wichtig. Diese wird zum Beispiel benötigt, um in einem dreidimensionalen Modell die Parameter in einer geologisch sinnvollen Weise zu variieren. Die daraus resultierenden unterschiedlichen Modellantworten lassen Aussagen über die mögliche Genauigkeit eines Modells zu.

Das eingesetzte Vorwärtsmodell ist eindimensional, stationär und rein konduktiv. Es wird jedoch die schon erwähnte Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit berücksichtigt. Außerdem geht die Wärmeproduktionsrate in die Temperaturberechnung ein. Die Lösung wird nach der Methode der finiten Differenzen berechnet. Um die nichtstationären Effekte zu eliminieren, wurde die Temperaturstörung durch das Paläoklima von den Daten abgezogen. Advective Effekte werden aufgrund ihrer Komplexität in diesem Modell noch nicht berücksichtigt.

Das Vorwärtsmodell beruht auf folgenden Vereinfachungen: (1) Die Erdbodentemperatur am oberen Rand ist konstant. (2) Es herrscht ein konstanter Wärmefluss in das Modell am unteren Rand. (3) Es wird ein eindimensionaler vertikaler Wärmetransport angenommen, wobei die Diskretisierung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit und Wärmeproduktionsrate durch Schichten konstanter Eigenschaften erfolgte.

Diese Schichten wurden als jene 14 geologischen Einheiten parametrisiert, die auch im 3D-Modell benutzt werden (Tabelle 3.5). Dies ist ein Kompromiss, da auch innerhalb dieser Einheiten noch eine Feinstruktur der Wärmeleitfähigkeit vorhanden ist. Allerdings müssen die Schichten eine gewisse Mächtigkeit besitzen, um gut mit dieser Methode aufgelöst werden zu können. Zu der bisher eingesetzten Parametrisierung ist kritisch anzumerken, dass zumindest einige der einbezogenen Schichten einer weiteren Unterteilung bedürfen, da sie durchaus signifikante Variationen in ihrer Petrographie aufweisen (Malm). Dies ist bei der Pécletzahl-Analyse bereits berücksichtigt, und wird in der Zukunft zu einer revidierten Definition der in der Inversion verwendeten zusammengefassten geologischen Einheiten führen.

In vielen Bereichen der Geowissenschaften werden heute Methoden der stochastischen Inversion benutzt. Eine gute Zusammenfassung der gebräuchlichen Methoden findet sich bei Sen & Stoffa (1995). Wir verwendeten zur Inversion eine einfache Monte-Carlo-Technik. Alle Parameter besitzen ein vorgegebenes Intervall, in dem sie zufällig mit einer Gleichverteilung variiert werden. Zusätzliche Information durch Wärmeleitfähigkeitsmessungen wird in den Algorithmus durch eine Einengung des Suchintervalls eingebracht. Alternativ kann zu diesem Zweck auch eine weicher definierte Eingangsverteilung (z. B. Gaußverteilung) angenommen werden.

Abbildung 3.17 veranschaulicht das Vorgehen. Ein Vorwärtsmodell wird zufällig generiert und seine Modellantwort berechnet. Aus Modell und Daten wird dann die Güte der Anpassung berechnet. Ist diese besser als ein Akzeptanzkriterium, wird der Parametersatz akzeptiert, ansonsten verworfen. Die Güte der Anpassung ist in unserem Fall die Maximum-Norm der Differenz zwischen gemessenen und berechneten Temperaturen:

$$q = \max_{i=1..n} \left(\left| T_i^{Modell} - T_i^{Daten} \right| \right) \quad 3.8$$

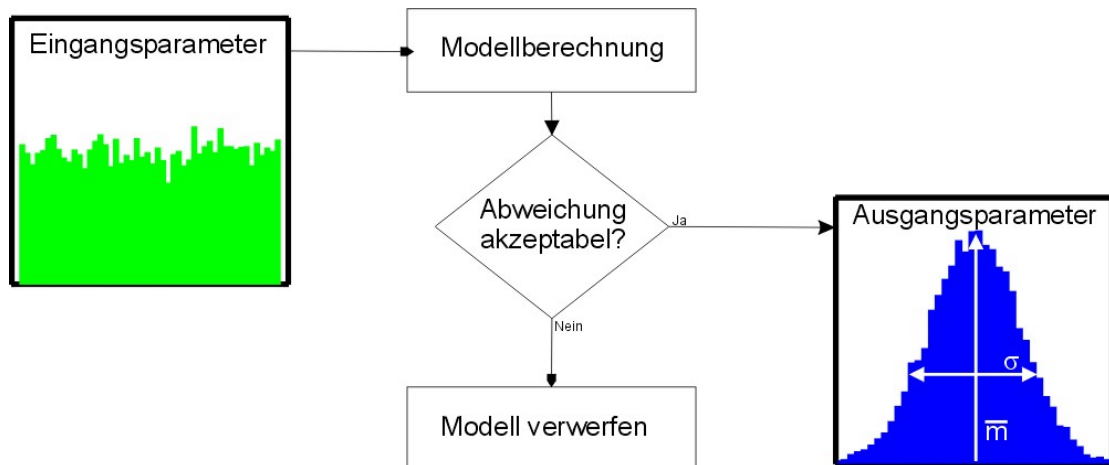


Abb. 3.17: Schematische Darstellung der Monte-Carlo-Inversion der thermophysikalischen Parameter. Im Idealfall ist die Ausgangsverteilung normal und kann durch Mittelwert \bar{m} und Standardabweichung σ beschrieben werden. Dies ist jedoch nicht immer der Fall.

Im Rahmen der Fortführung des Projekts ist geplant, diese einfache Implementation durch effektivere Verfahren zu ersetzen (z. B. Sambridge 99a,b), die dennoch eine Bestimmung der Ausgangsverteilung der akzeptablen Parameter erlauben. Weiter sollte möglicherweise die harte Annahme identischer Schichtparameter in allen Bohrungen durch die Annahme einer räumlichen Kovarianz ersetzt werden.

Ergebnisse

Insgesamt wurden bisher fünf Lokationen mit dieser Methode untersucht: Gaisbeuren (1 Bohrung), Bad Waldsee (2 Bohrungen), Laimbach / Aulendorf (1 Bohrung), Mönchsrot (3 Bohrungen) und Arlesried (2 Bohrungen). Die Bohrung Bad Wurzach liegt 10 km von Bad Waldsee entfernt. Daher wurde der gemessene Wert der Oberen Meeresmolasse (OMM) als a-priori Information in dieser Inversion benutzt.

In Abb. 3.18 sind zwei Anpassungen dargestellt, die mit der stochastischen Inversion erzielt wurden. Die Anpassung für die Bohrung Gaisbeuren ist deutlich besser als jene für Mönchsrot. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im Feld Mönchsrot drei Bohrungen gleichzeitig invertiert wurden und daher weniger Modelle in den Raum der akzeptablen Parameter fallen. In beiden Anpassungen ist zu sehen, dass die Annahme von geologischen Einheiten mit konstanten thermophysikalischen Parametern nur eine erste Näherung sein kann. Besonders die Bohrung Gaisbeuren zeigt eine deutliche Feinstruktur.

Die Werte der Wärmeleitfähigkeit für die Obere Süßwassermolasse (Einheit 2) sind durchaus vergleichbar. Für die Untere Süßwassermolasse (Einheit 5) sind deutliche Unterschiede zu sehen, die sich auch in den anderen Bohrungen widerspiegeln.

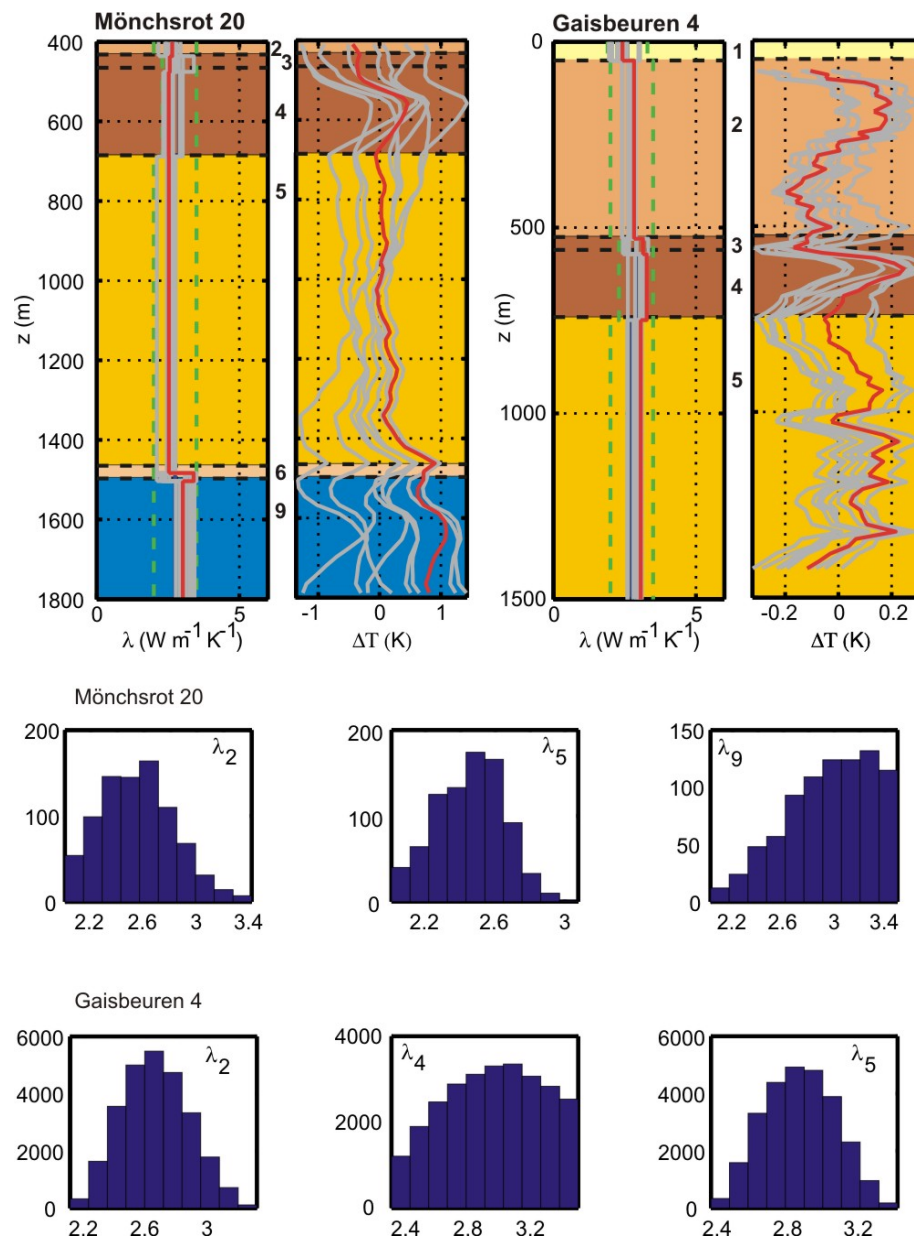


Abb. 3.18: Zwei Beispiele der petrophysikalischen Inversion, Mönchsrot 20 und Gaisbeuren 4. Oben sind die Wärmeleitfähigkeitsverteilung und die Anpassung an die Daten dargestellt. Die Farben und die Nummern der geologischen Einheiten entsprechen denen der geologischen Übersicht (Abb.3.5 und Tab. 3.6). Unten sind Wärmeleitfähigkeitsverteilungen für ausgewählte Schichten dargestellt. Dabei ist in rot das bestangepasste Modell eingetragen, graue Kurven sind akzeptable Modelle. Links sind zusätzlich jeweils die vorgegebenen Grenzwerte der Parameter zu sehen. Die Berechnung wird bis zu 3 Millionen mal durchgeführt, um aus dem gleichverteilten Raum der Eingangsparameter eine Verteilung akzeptierter Parameter zu erhalten. Für diese können dann Mittelwerte und Standardabweichungen angegeben werden, wenn die Ergebnisse die Annahme einer Normalverteilung rechtfertigen.

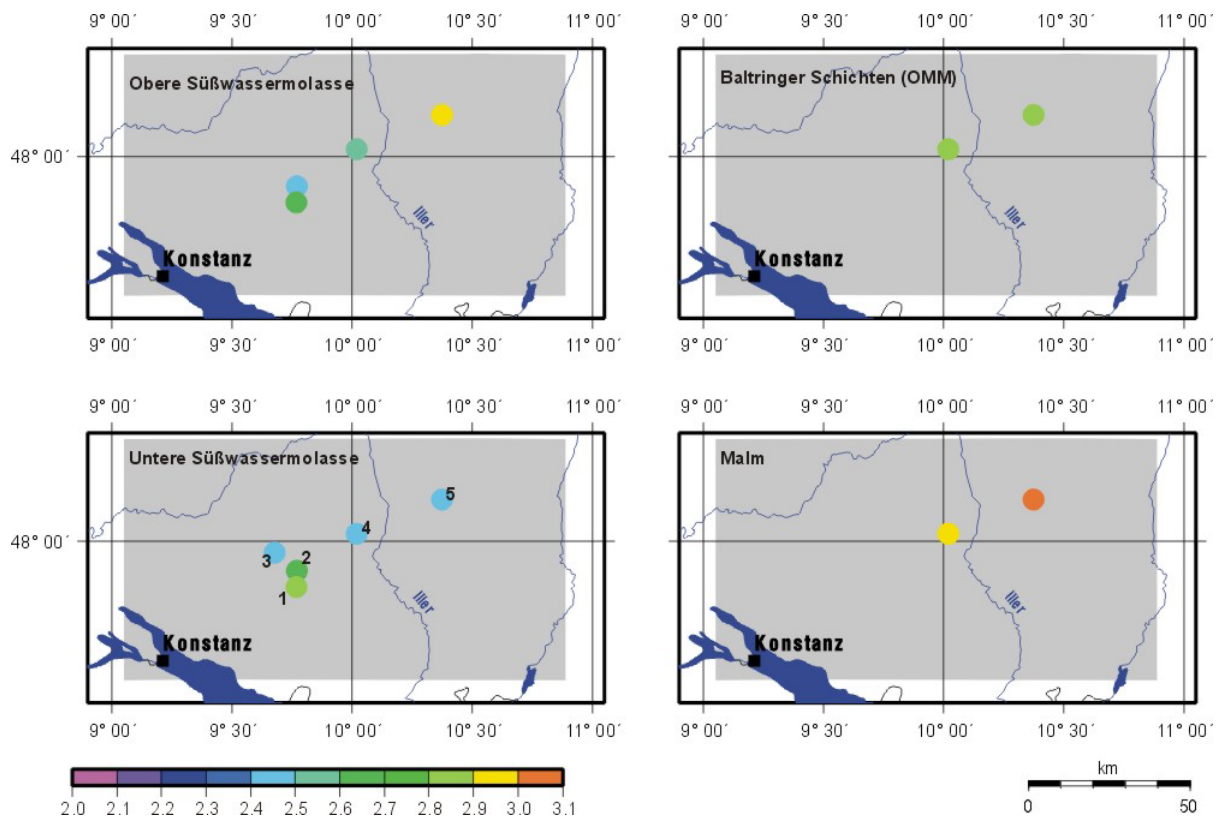


Abb. 3.19: Ergebnisse für vier Großeinheiten, deren Wärmeleitfähigkeit in der Inversion gut aufgelöst ist. Die markierten Lokationen sind die (zusammengefassten) Bohrungen Gaisbeuren 4 (1), Bad Waldsee (2 Bohrungen)(2) Laimbach 1 (3) Mönchsrot (3 Bohrungen)(4) und Arlesried (2 Bohrungen)(5).

Nicht alle Einheiten können aufgelöst werden, da nicht alle in der nötigen Mächtigkeit in allen Bohrungen vorkommen. In Abbildung 3.19 sind die Ergebnisse für die vier am besten aufgelösten Einheiten dargestellt. Die Werte für die Oberen Meeresmolasse (OMM) sind in guter Übereinstimmung mit den Werten, die am Bad Wurzacher Kern gemessen wurden. Die Werte für die Obere Süßwassermolasse sind generell sehr variabel, ohne dass ein Trend zu erkennen ist. Für die Untere Süßwassermolasse (USM) scheint sich eine Zunahme der Wärmeleitfähigkeit in Richtung des Einfallens des Molassebeckens abzuzeichnen. Die Lokationen 3, 4 und 5 liegen alle auf der Fronhofen-Störungszone. Diese ist generell in Richtung des Streichens des Molassebeckens gerichtet. Augenscheinlich ist die Variation in dieser Richtung nicht sehr groß. Die Bohrung Gaisbeuren (4) liegt auf der Grenze zur helvetischen Fazies des Malm (vgl. Abb. 3.4). Auch für andere Einheiten sind Änderungen der Parameter auf Grund der zunehmenden Versenkungstiefe in beckennormaler Richtung zu erwarten. Die Ergebnisse für den Malm sind in guter Übereinstimmung mit Messungen anderer Autoren (siehe Tabelle 3.4).

3.4 Paläoklima

Für unser Projekt ist es von zentraler Bedeutung, den Effekt des Paläoklimas in den gemessenen Daten sicher und robust von den übrigen Signalen zu trennen. In erster Näherung kann dies durch eine Reduktion des Paläoklimas erfolgen, indem man ein vorher berechnetes Paläoklimasignal von den Messdaten abzieht. Höhere Genauigkeit kann mit einer gemeinsamen Berücksichtigung sowohl der thermophysikalischen Parameter wie auch des Paläoklimas im Rahmen eines Parameterschätzverfahrens erzielt werden. Die dazu notwendige Software befindet sich zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch in der Entwicklung. Ein Beispiel der z. Zt. verwendeten Reduktion ist in Abb. 3.20 dargestellt. Das Ergebnis ist durchaus befriedigend, da die so berechneten reduzierten Temperaturen mit kleinen Werten stationär um den Nullwert streuen und keine Trends mehr aufweisen.

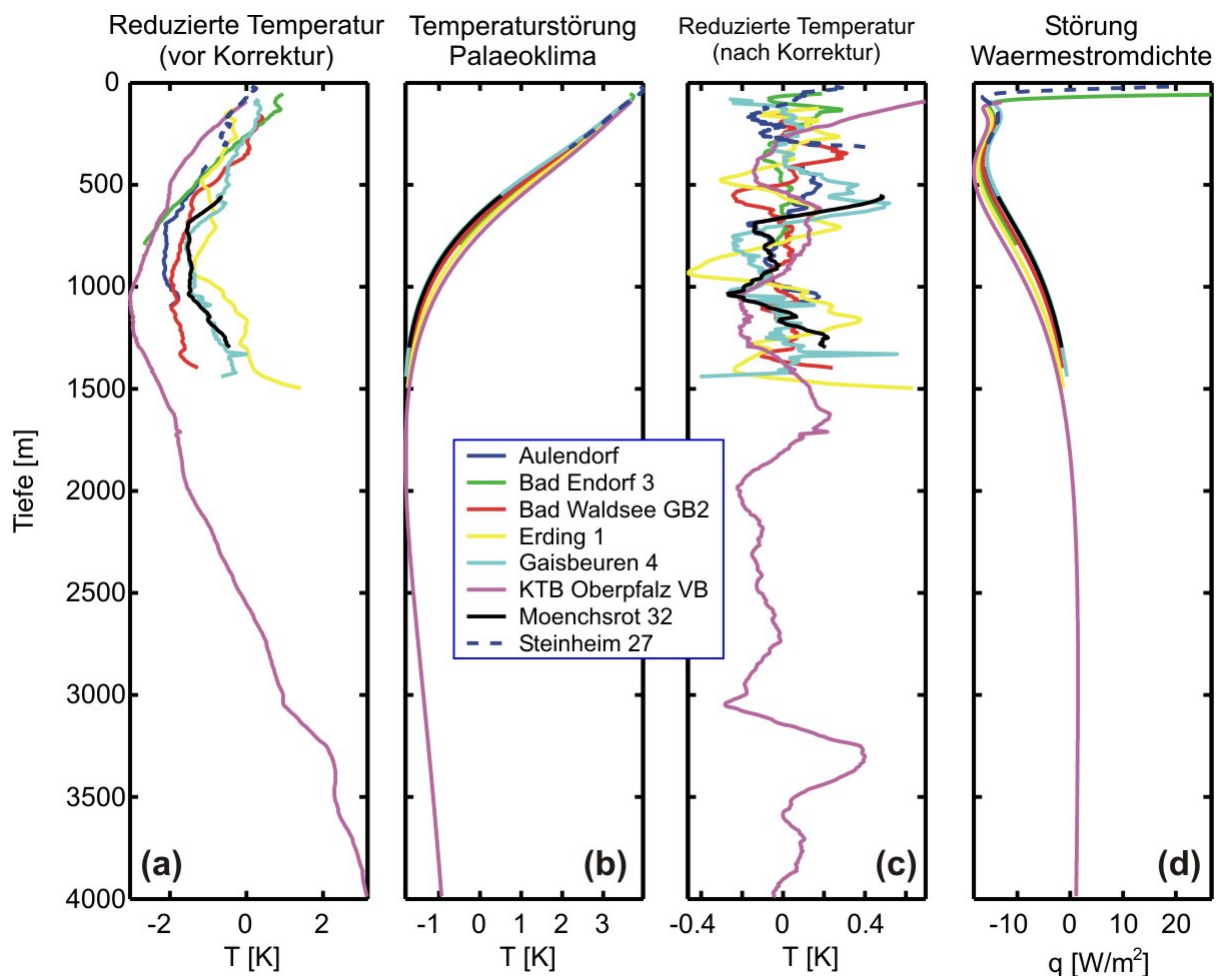


Abb. 3.20: Beispiel für die Korrektur des Paläoklimas. **(a)** Reduzierte Temperaturen, Originaldaten **(b)** Extrahierte Temperaturstörung. **(c)** Korrigierte Daten. Wie angestrebt, streuen diese reduzierten Temperaturen statistisch und stationär um den Nullwert. **(d)** Störung in der Wärmestromdichte, berechnet aus (b).

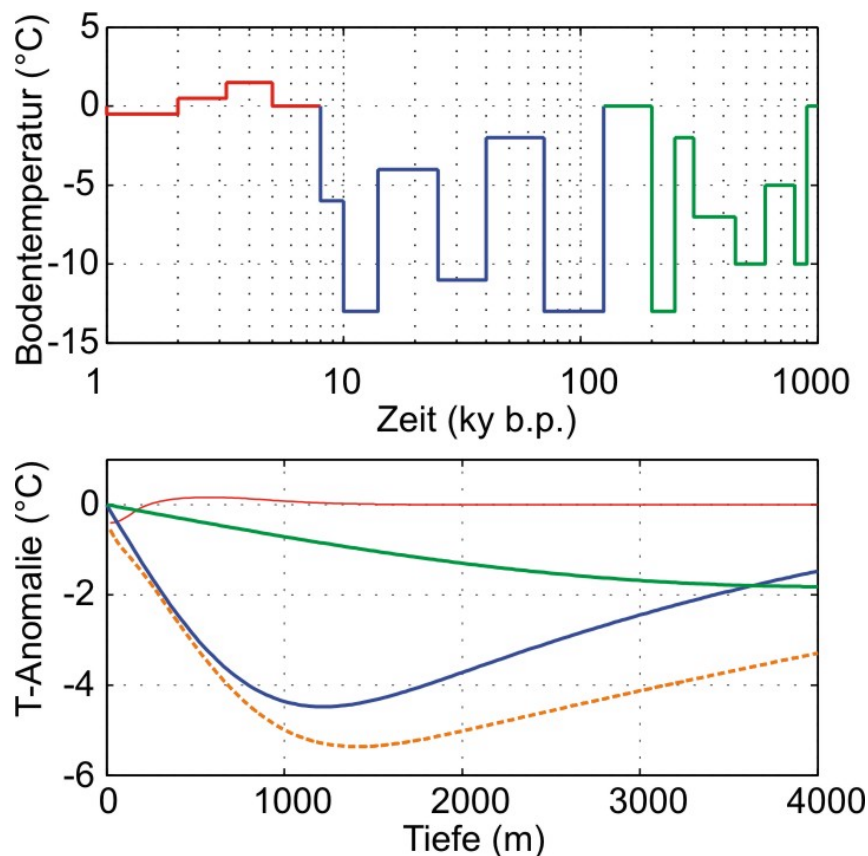


Abb. 3.21: Typische Signalformen für Veränderungen des Paläoklimas auf unterschiedlichen Zeitskalen. Durch die unterschiedlichen Farben werden langperiodische ($t > 100000$ Jahre, grün), mittlere ($10000 > t > 100000$ Jahre, blau) und rezente ($t < 10000$ Jahre, rot) unterschieden. Die gestrichelte Kurve gibt die tatsächlich registrierte Anomalie wieder, die durch die Summe aller Beiträge entsteht.

Der Einfluss des Paläoklimas auf die gemessene Temperatur im Untergrund beruht auf der Diffusion eines zeitabhängigen Temperatursignals in den Untergrund. Da wir in diesem Projekt das Tiefenintervall 500 – 1200 m betrachten, ist das Signal der Erwärmung nach Ende der letzten Eiszeit vor 10000 Jahren die entscheidende Größe. Das maximale Signal kann heute in etwa 1200 – 1500 m Tiefe nachgewiesen werden (Clauser et al., 1997). Eine Darstellung der für bestimmte Paläosignale typischen Anomalieformen ist in Abb. 3.21 gegeben. Es wird deutlich, dass bei einer typischen Loglänge von 500-2000 m selbst unter günstigen Umständen Signale aus dem Zeitintervall von bis vor 20000 Jahren bis heute aufgelöst werden können.

Der Effekt der zeitlichen Änderung der Erdbodentemperatur wurde zuerst von Lane (1923) erkannt. Um ungestörte Messungen der Wärmestromdichte zu erhalten, wurde in folgenden Studien versucht, mit Hilfe bekannter postglazialer Klimageschichten Korrekturen für die Temperaturmessungen zu bestimmen (zum Beispiel: Birch, 1948; Benfield, 1939; Jessop, 1971; Zoth & Hänel, 1988). Nicht zuletzt im Zusammenhang mit der Debatte über die Klimaerwärmung hat sich aber auch die Notwendigkeit ergeben, das vergangene Klima zu studieren. Daher wurden Studien veröffentlicht, die sich mit der Ableitung, also Inversion, des Kli-

mas aus Temperaturlogs beschäftigen. Eine Übersicht und Vergleich der Methoden wird in Beck et al. (1992) gegeben.

Der generelle Klimaverlauf aus Bohrungen ist heute recht gut bekannt. Aktuelle Studien befassen sich mit der Rekonstruktion regionaler Klimaverhältnisse und der Verbindung mit anderen Proxy-Daten, um die geringe zeitliche Auflösung des Temperatursignals zu verbessern. Weiterhin untersuchen Forscher die Verbindung von Erdbodentemperatur und Lufttemperatur. Die Kopplung ist sehr komplex, da sie von vielen, unbekannten Parametern abhängt, wie zum Beispiel Vegetation, Bodentyp, Wolkenbedeckung und der Länge der Monate mit Schneebedeckung. Um die Kopplung unter kontrollierten Bedingungen zu erforschen, werden geothermische Observatorien installiert, in denen Luft- und Bodentemperatur gleichzeitig erfasst werden (Chapman, 2001; Cermak, 2001).

Für unser Projekt ist die Verbindung zwischen Luft- und Bodentemperatur wichtig, da zur Validierung der Rekonstruktion Zeitreihen der Paläo-Lufttemperatur herangezogen werden. Für die Schweiz wurde eine empirische Korrelation zwischen Luft- und Bodentemperatur festgestellt, die eine konstante und höhenunabhängige Differenz zwischen beiden Größen beinhaltet (Signorelli, 2001). Dies rechtfertigt einen simplen und direkten Vergleich der beiden Zeitreihen für unsere Zwecke.

3.4.1 Theorie

Das Verhältnis von paläoklimatischem Signal zum Rauschen ist im Allgemeinen schlecht. Eine Verbesserung ist zu erwarten, wenn man mehrere Bohrungen gleichzeitig invertiert. Die dazu nötige Annahme, dass alle Bohrungen das gleiche Paläoklima erfahren haben, ist in Anbetracht der Größe unseres Bezugsgebiets und des langen betrachteten Zeitraum eine plausible Arbeitshypothese. Hansen & Lebedeff (1987) oder Schönwiese et al. (1993) geben für das Klima eine Korrelationslänge von 500 km an. Es ist hier jedoch dann Vorsicht geboten, wenn der Verlauf der Oberflächentemperatur beispielsweise durch starke Höhenvariationen moduliert oder durch regionale Vergletscherungen verändert ist. Es ist daher anzustreben, auch diese regionalen Effekte in die Modellierung und Inversion des Paläoklimas zu berücksichtigen.

Auf Basis der Annahme einer gemeinsamen Klimageschichte werden zwei Ansätze zur Inversion verfolgt. Zum einen kann aus einer Vielzahl von Logs ein mittlerer Temperaturlog gewonnen (Pollack & Huang, 2000) und zur Inversion benutzt werden. Dieser Ansatz wird zum Beispiel in einer Datenbank zur Klimarekonstruktion der letzten 500 Jahre benutzt (<http://www.geo.lsa.umich.edu/~climate>). Nachteilig hierbei ist, dass die unterschiedlichen thermophysikalischen Parameter der Bohrungen nicht berücksichtigt werden können. Für solche kurzen Inversionen ist der Einfluss der thermophysikalischen Parameter nicht sehr groß (vgl. Abschnitt Sensitivitäten). Für Rekonstruktionen über mehrere 10000 Jahre wird der Fehler dieser Annahme allerdings zu groß.

Eine andere Möglichkeit ist es, die eindimensionale, zeitabhängige Wärmeleitungsgleichung

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \lambda \frac{\partial}{\partial z} T + H \quad 3.9$$

unter der Annahme eines homogenen Halbraumes zu lösen. Dabei ist λ die Wärmeleitfähigkeit ($\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$), ρ die Dichte (kg m^{-3}), c die spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) und H die Wärmeproduktionsrate (W m^{-3}).

Länge [°]	Breite [°]	Bohrung	Endteufe [m]	Höhe über NN [m]	Wasserspiegel unter GOK [m]	Oberflächentemperatur [°C]	Datum der Messung	Wärmeleitfähigkeit [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]	Wärmeproduktion [$\mu\text{W m}^{-3}$]	Wärmestromdichte [mW m^{-2}]	Temperaturgradient [mK m^{-1}]
12.30	47.90	Bad Endorf 3	2047	500	50	9.4	13.12.95	2.50	1.0	60	19
9.77	47.94	Bad Waldsee GB2	1937	604	150	8.4	27.11.91	2.38	1.0	95	40
11.89	48.29	Erding 1	2200	471	120	8.5	17.01.90	2.66	1.0	77	29
9.77	47.87	Gaisbeuren 4	2500	646	75	8.0	20.03.80	2.15	1.0	75	35
12.12	49.82	KTB Oberpfalz VB	3989	514	90	7.5	12.02.96	2.92	1.0	65	29
9.68	47.97	Laimbach 1	1265	564	400	8.4	17.03.83	2.21	1.0	95	43
10.02	48.02	Mönchsrot 32	1920	638	550	7.6	15.11.89	2.20	1.0	90	41
10.07	48.68	Steinheim 27	318		17		23.05.84	2.30	1.0	85	37

Tab. 3.3: Temperaturlogs, die für die paläoklimatische Korrektur verwendet wurden. Außer den Temperaturlogs in der Molasse ist noch eine Messung der Temperatur in der KTB-Vorbohrung aufgeführt.

Das Paläoklima wird als eine Abfolge von Temperaturstufenfunktionen parametrisiert. In diesem Fall ist die Lösung von Gleichung 3.9 durch:

$$T(z) = T_0 + q_0 R(z) - M(z) + T_t(z) \quad 3.10$$

gegeben. Dabei sind

$$R(z) = \int_0^z \frac{dz'}{\lambda(z)}, \quad M(z) = \int_0^z \frac{dz'}{\lambda(z)} \int_0^{z'} H(z'') dz'' \quad \text{und} \quad T_t = \sum_{n=1}^N T_n^G \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{z}{2\sqrt{\kappa t_n}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z}{2\sqrt{\kappa t_{n-1}}} \right) \right).$$

Diese Gleichung ist linear in den Amplituden der Paläotemperaturen T_n^G . Damit kann die lineare Inversionstheorie (z. B. Menke, 1989) angewendet werden, um das Paläoklima zu berechnen. Beltrami & Mareschal (1992) entwickelten ein Inversionsprogramm, welches diese Methode implementiert und in einigen Studien Anwendung gefunden hat (Beltrami & Mareschal, 1997; Clauser & Mareschal, 1995). Wir haben dieses Programm für die Inversion der Temperaturlogs in der Molasse verwendet.

Eine großer Teil der hochaufgelösten, ungestörten Temperaturlogs in der Molasseregion befindet sich in unmittelbarer Nähe der Fröhofen-Störungszone (vgl. Abb. 3.4, oben). Die gemeinsame Inversion beruht darauf, dass in den Logs ein identisches Signal des Paläoklimas vorhanden ist, jedoch unkorreliertes „geologisches Rauschen“ vorliegt. Daher ist unsere

Situation nicht optimal: Viele der Logs zeigen im Tiefenbereich 1300 bis 1800 m starke Temperaturanomalien, welche mit der Störungszone und dem Malm-Aquifer zusammenhängen. Um dieses Problem zumindest etwas zu entschärfen, wurde aus den Erdölfeldern, welche mitunter mehrere dicht beieinander liegende Logs enthalten, nur ein Log zur Inversion benutzt. In Tab. 3.3 sind die benutzten Logs angegeben.

3.4.2 Sensitivitätsstudien

Als wichtiger thermophysikalischer Parameter muss die Temperaturleitfähigkeit in der Inversion bekannt sein. Dieser Parameter ist recht schwer zu messen, variiert aber in der Praxis nicht sehr stark, sodass vereinfachende Annahmen gerechtfertigt sind. Eine einfache Methode bietet sich über den Umweg der Wärmeleitfähigkeit. Diese ist entweder aus Kernmessungen oder über den Temperaturgradienten und die regionale Wärmestromdichte bekannt. Über die Beziehung $\kappa = \lambda/(\rho c)$ kann nun die Temperaturleitfähigkeit berechnet werden, (ρc) ist hierbei die spezifische Wärme pro Volumen des Gesteins und kann mit $2.3 \text{ MJ m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ mit einer Schwankungsbreite von $\pm 20 \%$ angegeben werden. Durch diese Abschätzung wird ein Fehler von 10 – 15% in der Temperaturleitfähigkeit erzeugt (Abb. 3.22, oben). Änderungen der Leitfähigkeit in dieser Größe produzieren zwar eine paläoklimatische signifikante Phasenverschiebung, wirken sich jedoch in dem im Bohrloch registrierten Signal kaum aus.

Im Rahmen des Projekts werden Wärmeproduktionsraten mit Hilfe der RFA bestimmt. Diese Ergebnisse liegen aber momentan noch nicht vor. Aus GR-Logs lässt sich allerdings die Wärmeproduktion nach der oben schon erwähnten Methode bestimmen (Bücker & Rybach, 1996). Für alle Lokationen wurde eine mittlere Rate von $1 \mu\text{W m}^{-3}$ angesetzt (Tab 3.3), da noch nicht genügend Informationen vorliegen, um eine räumlich variable Rate zu rechtfertigen. Der Einfluss einer falschen Wärmeproduktion ist in Abb. 3.22 (unten) dargestellt. Hier wird das paläoklimatische Signal bis etwa 10000 Jvh korrekt ermittelt, die Amplitude wird erst falsch bei früheren Zeiten. Dies bewirkt jedoch eine signifikante Änderung des Bohrlochsignals um bis zu 0.5 K.

Es hat sich gezeigt, dass die Länge der verwendeten Temperaturlogs, nicht ausreichend ist, um die komplette Klimageschichte der letzten 30.000 – 50.000 Jahre zu rekonstruieren. Ein Beispiel hierfür ist in Abb. 3.23 dargestellt. Bei diesem Experiment wurde das Temperaturlog der KTB-Vorbohrung systematisch von 4000 m bis auf 1500 m gekürzt. Der daraus invertierte Temperaturverlauf wird umso schlechter, je kürzer das Log ist. Insbesondere wird die Amplitude der Erwärmung nicht mehr richtig wiedergegeben, wenn das Log kürzer als 2000 m ist. Eine Verschiebung des Minimums und eine Verkleinerung der Amplitude ist zu sehen.

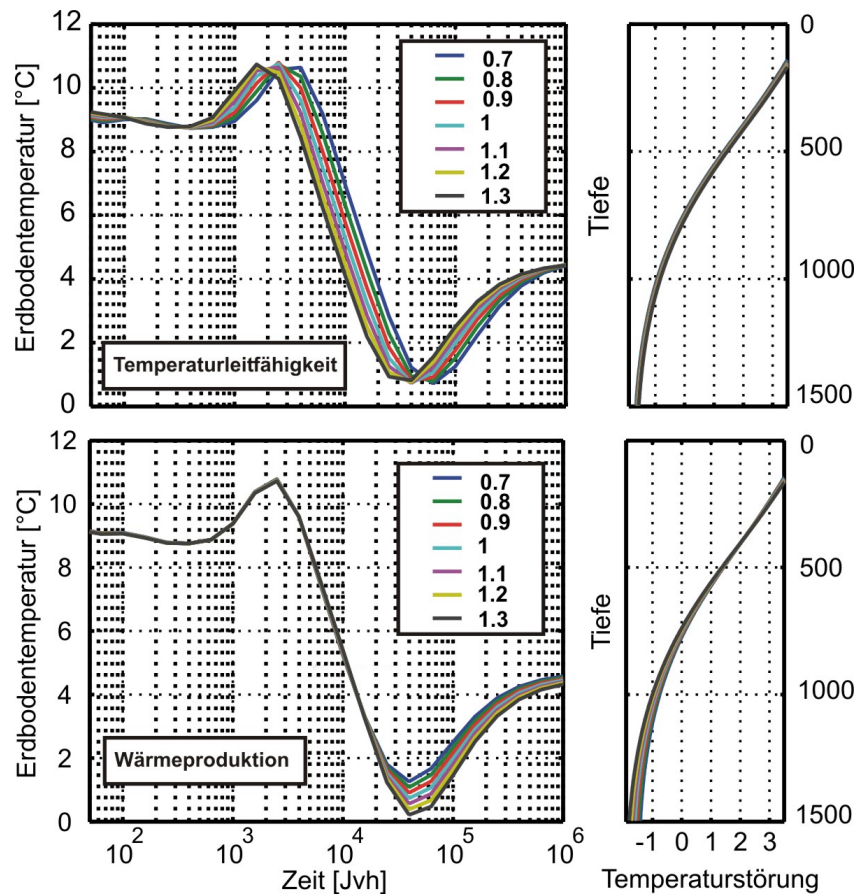


Abb. 3.22: Inversionsergebnisse für ein synthetisches Temperaturlog bei einer Variation der Temperaturleitfähigkeit (oben, in $\text{mm}^2 \text{s}^{-1}$) und der Wärmeproduktionsrate (unten, in $\mu\text{W m}^{-3}$).

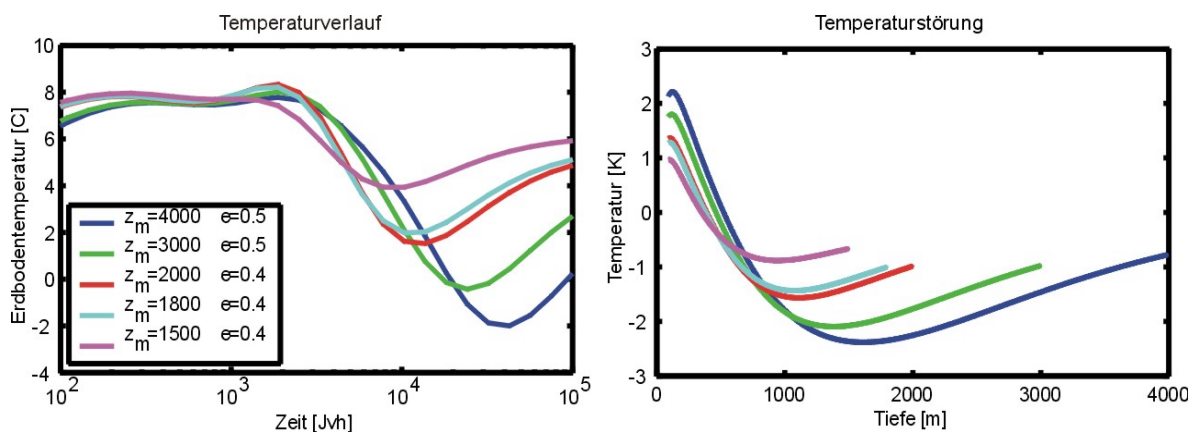


Abb. 3.23: Inversionsergebnisse für das KTB-Log bei einem Beschneiden des unteren Endes. Die Phasen und die Amplitude des rekonstruierten Klimasignals ändern sich. Neben der Länge des verwendeten Logs musste in der Inversion der Dämpfungsparameter e leicht verringert werden, da auch die Zahl der Datenfreiheitsgrade vermindert wird und daher zu glatte Resultate erzielt werden.

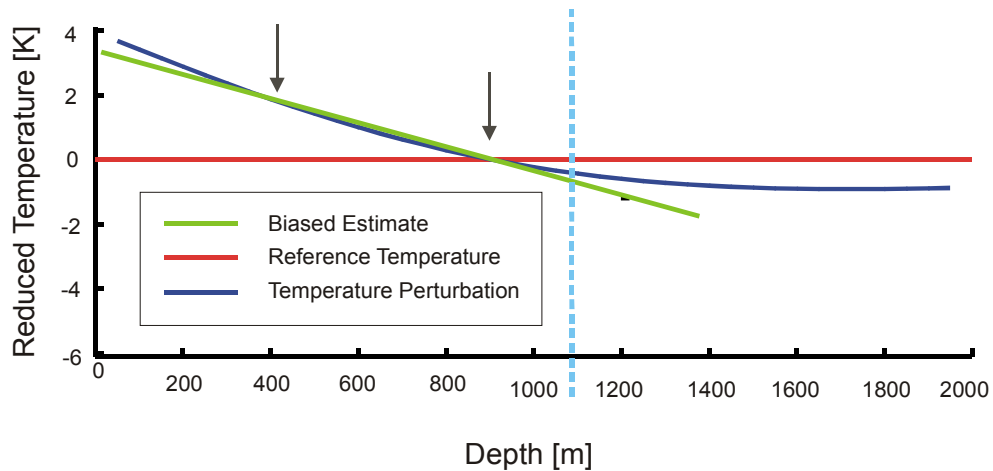


Abb. 3.24: Beispiel für eine falsche Schätzung des ungestörten Temperaturgradienten durch ein Temperaturlog, das bei 1100 m abgeschnitten ist (hellblaue Linie).

Eine Erklärung für dieses Phänomen ist in Abb. 3.24 zu sehen. Die rote Linie stellt die reduzierte Temperatur eines ungestörten Logs dar. Sie ist daher konstant gleich Null. Die blaue Kurve ist eine paläoklimatische Störung. Bei der Inversion eines Logs wird die ungestörte Temperatur an den unteren Teil des Logs angepasst. Bei einem Log, welches in einer Tiefe endet, in der das gesuchte Signal immer noch vorhanden ist, wird somit einen falscher ungestörter Gradienten ermittelt. Insbesondere ist der Nulldurchgang des Paläoklimasignals bezogen auf die grün eingezeichnete falsche Referenztemperatur („biased estimate“) zu kleineren Tiefen, das heißt zu späteren Zeiten verschoben. Das stimmt mit der Beobachtung überein, dass die Phase des Temperaturmaximums in der Inversion für die Logs mit kleineren Tiefen zu späteren Zeiten hin wandert.

Um das Problem der Länge der Logs zu umgehen, wurde eine gemeinsame Inversion der Logs in der Molasse und des Logs der 4000 m tiefen KTB-Vorbohrung versucht. Der Grundgedanke in dieser gemeinsamen Inversion ist, dass die Oberpfalz und die Molasse zwar durchaus unterschiedliche Klimate besitzen, insbesondere wenn man kürzere Zeitskalen betrachtet, aber das Signal der letzten Eiszeit in beiden Lokationen in etwa derselben Stärke vorhanden sein sollte. Eine Analyse des Paläoklimas für die KTB findet sich bei Clauser et al. (1997).

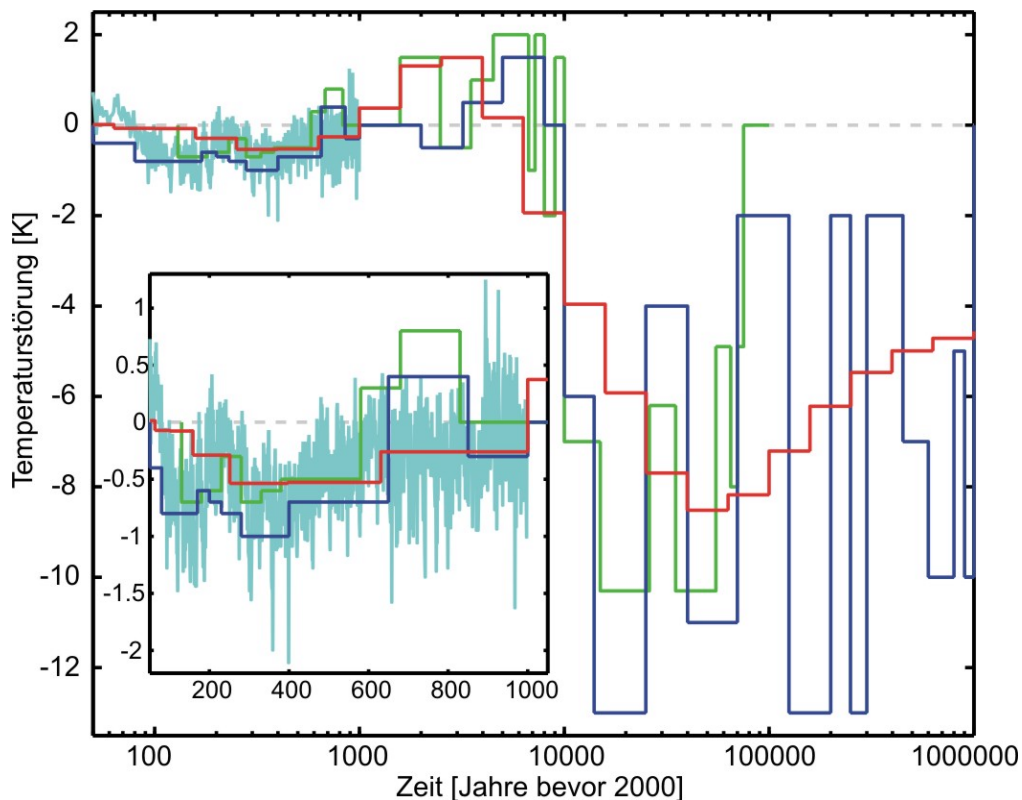


Abb. 3.25: Vergleich der Inversionsergebnisse (rot) mit verschiedenen Klima-Proxies: Generell spiegelt der invertierte Temperaturverlauf die Proxies gut wieder. Die heftigen Klimaschwünge im Zeitraum 20000 – 100000 Jahre können allerdings nicht mehr gut aufgelöst werden. Die Anpassung an eine Zeitreihe aus Deutschland (grün, Hänel, 1988) ist zum Zeitpunkt vor 100000 Jahren sehr schlecht. Ein Vergleich mit der Schweizer Klimakurve (blau, Hänel, 1988) zeigt allerdings, dass die mittlere Temperatur im Zeitraum 100 – 1000 ka wesentlich niedriger war. Für den Zeitraum heute-1000 Jahre zeigt die Bodentemperatur eine gute Korrelation mit der Kurve von Jones et al. (1999, hellblau), wiederum ist eine starke Glättung zu erkennen.

Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 3.20 und 3.25 dargestellt. Im Vergleich zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit anderen Klima-Proxies. Die hochfrequenten Schwankungen des Klimas vor einigen tausend Jahren werden zwar nicht mehr aufgelöst, sind aber auch nicht relevant für die zu berechnende Temperaturstörung. Die reduzierten Temperaturen zeigen einen Knick in den Verläufen bei etwa 1200 m. Nach Abzug der Temperaturstörung ist kein Trend in der generellen Anpassung mehr zu sehen. Die berechnete Temperaturstörung hat eine Amplitude von +3.5 bis –2.0 K. Als berechneten Störung der Wärmestromdichte werden bis zu -18 mW m^{-2} berechnet. Die Anpassung der gemessenen Daten zeigt immer noch deutliche Trends, die durch die unberücksichtigte Schichtung der Wärmeleitfähigkeiten oder Grundwasserströmungen erzeugt werden können.

3.4.3 Inversionsergebnisse

Der direkte Vergleich mit der Inversion ohne das KTB-Log (hier nicht dargestellt) zeigt, dass die Inversion mit KTB-Log eine stärkere Erwärmung zur Folge hat. Außerdem sind Minima und Maxima der Klimakurven zur früheren Zeiten hin verschoben. Dies ist konsistent mit den numerischen Tests zur Verkürzung der Loglänge und rechtfertigt die Benutzung dieser Methode. Unklar muss allerdings bleiben, in wieweit die Vereisung sich auf das Temperatursignal auswirkt. Es ist bekannt, dass die Vereisung einen isolierenden Einfluss hat und das Paläosignal in Bohrungen schwächen kann. Bei den unterschiedlichen Vereisungsverhältnissen des letzten Glazials im Molassebecken kann dies zu einer örtlich variablen Störung führen. Die Verteilung der Temperaturlogs ist im Prinzip günstig genug, um eine solche Untersuchung durchzuführen. Allerdings lässt dies der Algorithmus, den wir im Moment benutzen auf Grund der Beschränkungen bezüglich der Loglänge nicht zu. Dieser Aspekt muss daher in einem Folgeprojekt untersucht werden.

3.4.4 Neuentwicklung eines Inversionsverfahrens

Die Entwicklung eines neuen Inversionsverfahrens ist einerseits aus den spezifischen Schwierigkeiten motiviert, die aus der Rekonstruktion des Paläoklimasignals aus Bohrungen unterschiedlicher Tiefe und Lithologie herrühren, andererseits aus dem Bestreben, die oft geringe Datendichte bezüglich der thermophysikalischen Parameter durch Parameterschätzverfahren zu bewältigen. Zu diesem Zweck sind die bisher verwendeten Methoden in ihren Annahmen zu einschränkend (fehlende Berücksichtigung der Inhomogenität der Parameter und ihrer Abhängigkeit von der Temperatur, Abb 3.26 und 3.27).

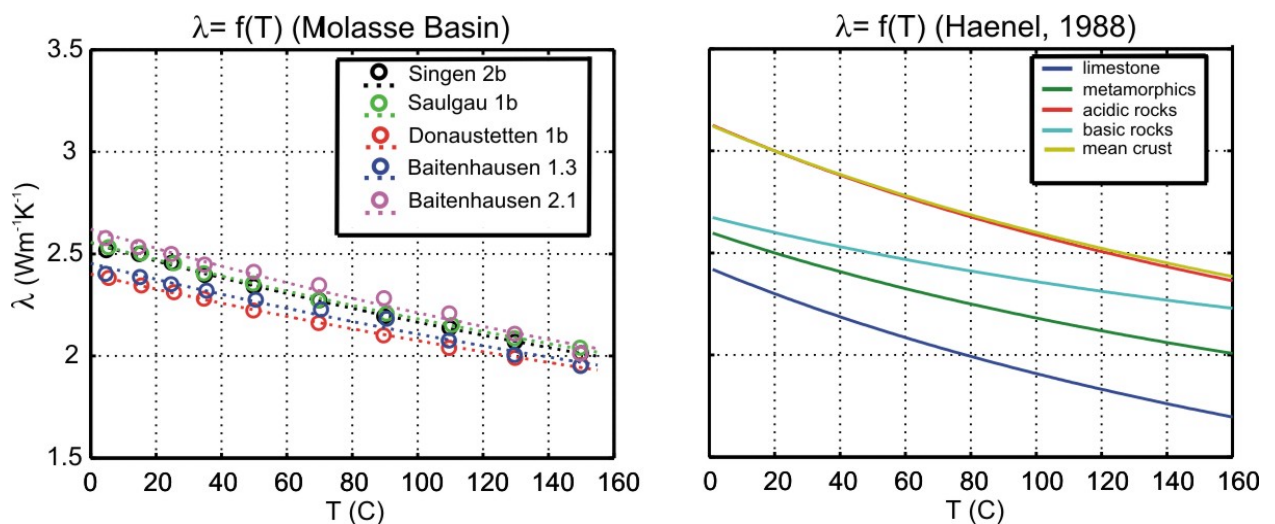


Abb. 3.26: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ . Links: Ergebnisse eigener Messungen an Gesteinen der Molasse. Die Messwerte (Kreise) wurden jeweils durch die Funktion $\lambda(T)=A/(B+T)$ angepasst. Rechts: Abhängigkeiten wichtiger Krustengesteine (Hänel, 1988).

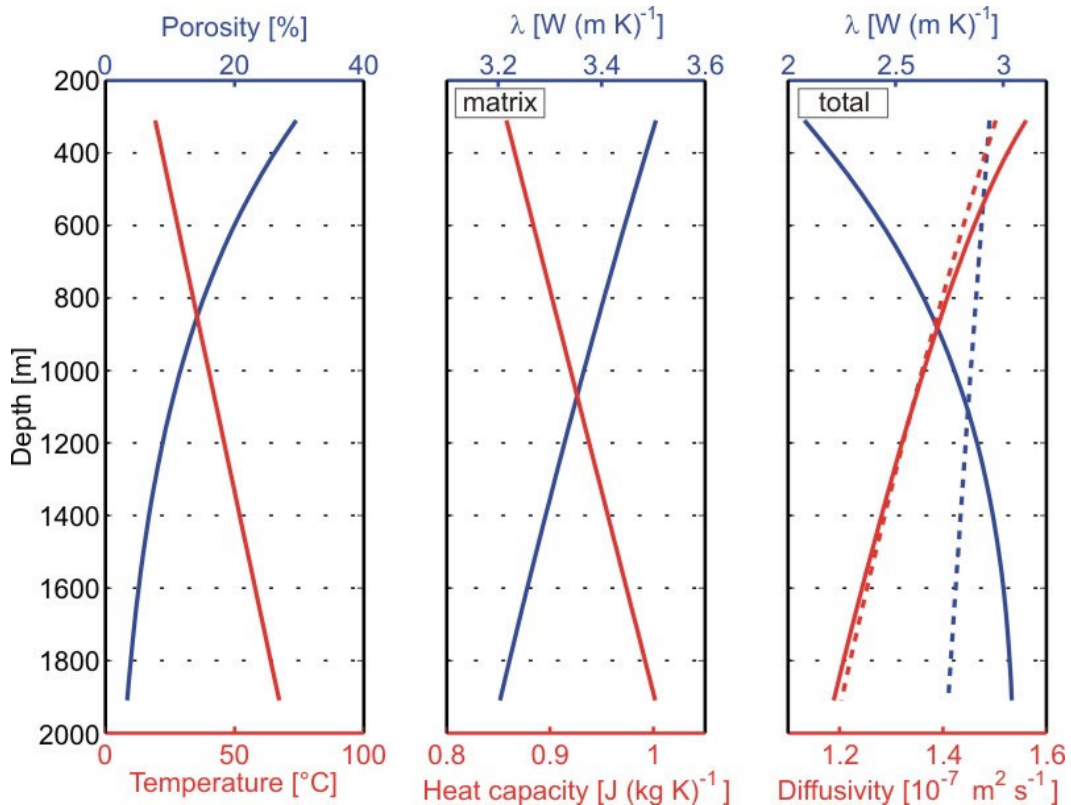


Abb. 3.27: Abhängigkeit der thermischen Eigenschaften im untersuchten Tiefenbereich von der Tiefe. Die wesentlichen Effekte beruhen einerseits auf der Abnahme der Porosität (links, blau), sowie der steigenden Temperatur, die das Verhalten von Fluid und Matrix bestimmt. Es wurde hier eine „typische“ exponentielle Abnahme der Porosität angenommen, die in der Literatur als Athy-Gesetz (z.B.: Allen & Allen, 1990) bezeichnet wird.

Kern des entwickelten Verfahrens ist ein flexibles Rechenprogramm auf Basis der Methode der Finiten Differenzen zur Berechnung von Bohrlochtemperaturen in horizontal geschichteten Medien, welches eine Temperaturabhängigkeit aller Parameter sowie zeitabhängige Randbedingungen und Quellterme zulässt. Die eingehenden Parameter und Randbedingungen können nichtlinear von der Temperatur abhängen. Für typische Verhältnisse in der Molasse ergeben sich allein durch die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit Maximalabweichungen in der Temperatur von bis zu 5 K. Die verwendeten funktionalen Abhängigkeiten sowie die Ergebnisse eigener Messungen am Kernmaterial aus der Molasse sind in Abb. 3.26 wiedergegeben.

Bei der Inversion (Umkehrrechnung) wird eine Variante des Verfahrens angewendet, welches als Bayes-Inversion (Tarantola, 1987) bezeichnet wird. Hierbei werden die gesuchten Parameter derart bestimmt, dass eine Zielfunktion

$$\Theta = \Theta_d + \Theta_p = (\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p}))^T \mathbf{C}_{dd}^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{p})) + (\mathbf{p} - \mathbf{p}_a)^T \mathbf{C}_{pp}^{-1} (\mathbf{p} - \mathbf{p}_a) \quad 3.11$$

minimiert wird. Die Indizes d und p sollen sich hier auf gut bekannte Daten und weniger bekannte Parameter beziehen. Es ist $\mathbf{d} = [T_i]$ der Vektor der Daten. Der Index i läuft dabei über alle N in einem Bohrloch gemessenen Temperaturen, und $\mathbf{g}(\mathbf{p})$ stellt die Lösung des Vorwärtsproblems bei gegebenem Parametervektor \mathbf{p} dar. Im Falle der petrophysikalischen In-

version setzt er sich aus den Vektoren der Schichteigenschaften λ , \mathbf{H} , der Oberflächentemperatur und dem basalen Wärmefluss q_B zusammen. \mathbf{p}^{apr} enthält die a priori-Werte dieser Parameter, die z. B. aus den oben genannten direkten petrophysikalischen Messungen oder Abschätzungen stammen. \mathbf{C}_{dd} ist die Datenkovarianz (a priori) die hier einfach eine Diagonalmatrix mit den Varianzen der Daten ist, d. h. die auf diese Weise standardisierten Daten werden als normalverteilt und unabhängig angesehen. Im einfachsten Fall ist \mathbf{C}_{pp} wie \mathbf{C}_{dd} strukturiert, d. h. enthält lediglich Parametervarianzen aus den obigen Schätzungen oder, im Falle multipler Bohrungen, räumlich strukturierte Kovarianzen wie z. B.:

$$C_{ij} \propto e^{-\frac{|r_{ij}|}{2L}} \quad 3.12$$

(Korrelationslänge L , lateraler Bohrungsabstand Abstand r_{ij})

Eine iterative Minimierung ergibt dann a posteriori-Parameter und -Kovarianzen. Dies kann durch die von Tarantola & Valette (1982) alternativ gegebenen Iterationsformeln

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k + (\mathbf{S}^T \mathbf{C}_{dd}^{-1} \mathbf{S} + \mathbf{C}_{pp}^{-1})^{-1} \cdot \{\mathbf{S}^T \mathbf{C}_{dd}^{-1} [\mathbf{d} - g(\mathbf{p}^k)] - \mathbf{C}_{pp}^{-1} [\mathbf{p}^k - \mathbf{p}^{apr}]\} \quad 3.13$$

und

$$\mathbf{p}^{k+1} = \mathbf{p}^k + \mathbf{C}_{pp} \mathbf{S}^T (\mathbf{S} \mathbf{C}_{pp} \mathbf{S}^T + \mathbf{C}_{dd})^{-1} \cdot \{[\mathbf{d} - g(\mathbf{p}^k)] - \mathbf{S}[\mathbf{p}^k - \mathbf{p}^{apr}]\} \quad 3.14$$

geschehen. \mathbf{S} ist hier die Matrix der Ableitungen,

$$S_{ij} = \frac{\partial g_i(\mathbf{p})}{\partial p_j} \quad 3.15$$

der berechneten Daten nach den Parametern des entsprechenden Vorwärtsproblems. Abhängig von dem quantitativen Verhältnis von gemessenen Daten zu gesuchten Parametern und je nach Verfügbarkeit und Eigenschaften der Kovarianzmatrizen kann die Anwendung von 3.13 oder 3.14 wichtige Vorteile haben. In der vorliegenden Inversion kann die in jeder nichtlinearen Iteration nötige Lösung durch ein abgebrochenes CGLS-Verfahren (Hanke, 1995; Hansen, 1998; Björk, 1998) realisiert werden.

Die aus dem Verfahren resultierenden Parameterfehler und weitere Informationen über das Auflösungsvermögen des Verfahrens können aus den Diagonalelementen der Kovarianzmatrizen a posteriori \mathbf{C}_{pp}^{apo}

$$\mathbf{C}_{pp}^{apo} = (\mathbf{S}^T \mathbf{C}_{dd}^{-1} \mathbf{S} + \mathbf{C}_{pp}^{-1})^{-1} \quad 3.16$$

bzw.

$$\mathbf{C}_{pp}^{apo} = \mathbf{C}_{pp} - \mathbf{C}_{pp} \mathbf{S}^T (\mathbf{S} \mathbf{C}_{pp} \mathbf{S}^T + \mathbf{C}_{dd})^{-1} \mathbf{S} \mathbf{C}_{pp} \quad 3.17$$

entsprechend 3.13 bzw. 3.14 gewonnen werden. Ein derartiges Ergebnis ist in Abb.3.28 zusammen mit ergänzenden Monte-Carlo-Simulationen dargestellt.

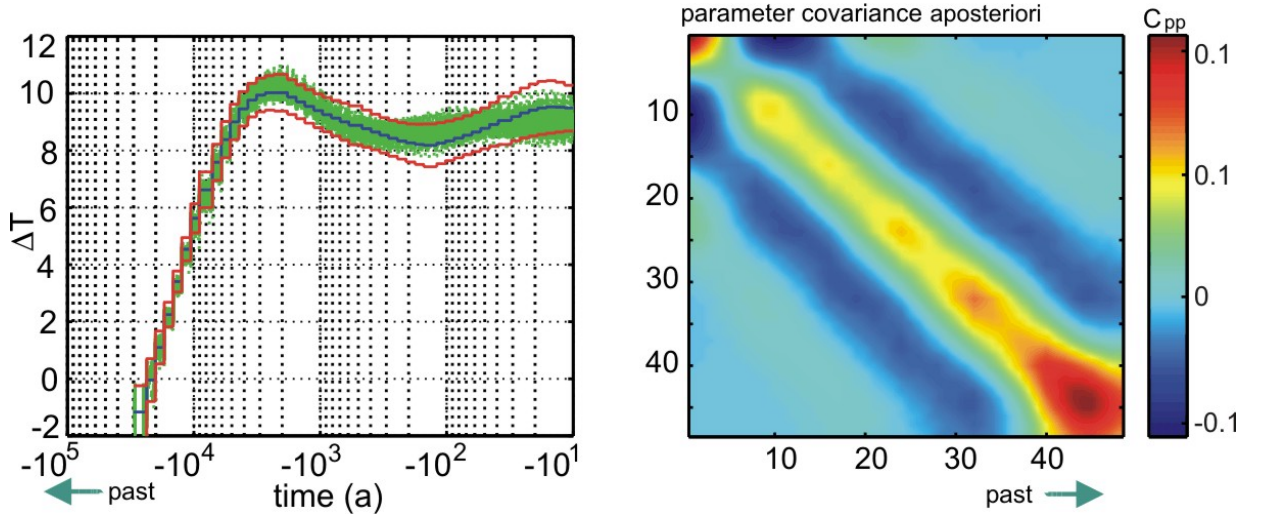


Abb. 3.28: Paläoklimainversion. Links: Ergebnis einer Rekonstruktion aus einem Log von 2000 m Tiefe. Rot sind 95%-Vertrauensbereiche für diese Einzelinversion eingetragen. Grün sind die Rekonstruktionen aus 300 Inversionsersuchen mit einer Zufallsstörung von einer Standardabweichung von 0.25 K gekennzeichnet. Sie liegen gut innerhalb der berechneten Fehlerbereiche. Rechts: Kovarianzmatrix *a posteriori*, die aus dieser Inversion berechnet wurde. Sie liefert mit ihren Diagonalwerten die Fehlerbalken der Inversion, und durch die Spreizung der Diagonale ein Maß für die zeitliche Auflösung (Menke, 1984).

Im Falle der Paläoklimainversion setzt sich der Parametervektor \mathbf{p} aus den diskreten Oberflächentemperaturen in Abhängigkeit von der Zeit (Stufenfunktion) zusammen. Hier kann die stabile Lösung des Problems durch die Wahl einer vorgegebenen Kovarianzmatrix

$$\mathbf{C}_{TT} \propto e^{-\frac{|\Delta t|}{2L}} \quad 3.18$$

für dieses \mathbf{p} mit einer zeitlich variablen Korrelationszeit L erreicht werden. Alternativ kann die Inverse dieser Matrix durch $\tau \mathbf{L}^T \mathbf{L}$ ersetzt werden (z. B. Rodgers, 2001). Es handelt sich dabei um ein Produkt von Differenzmatrizen

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & L & 0 \\ M-1 & 1 & M \\ 0 & L & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad 3.19$$

wobei τ ein frei bestimmbarer Regularisierungsparameter ist. Er wird in einem Kompromiss zwischen Anpassungsfehler und Modellrauhigkeit gewählt (Hansen, 1999). Dies Verfahren wird im Gegensatz zur Wahl einer *a-priori* festgesetzten Kovarianzmatrix in der Bayes-Inversion als Tikhonov-Verfahren bezeichnet (Tikhonov & Arsenin, 1979).

Die Verwendung dieses Verfahrens zur Rekonstruktion des Paläoklimas erhöht nicht nur die Verwendbarkeit bei zu kurzen Bohrungen, sondern ist auch robust gegenüber unkorrelierten Störungen in den verwendeten Temperatursignalen. Dieses Verhalten ist in Abb. 3.29 im Vergleich zu dem bisher benutzten Verfahren dargestellt.

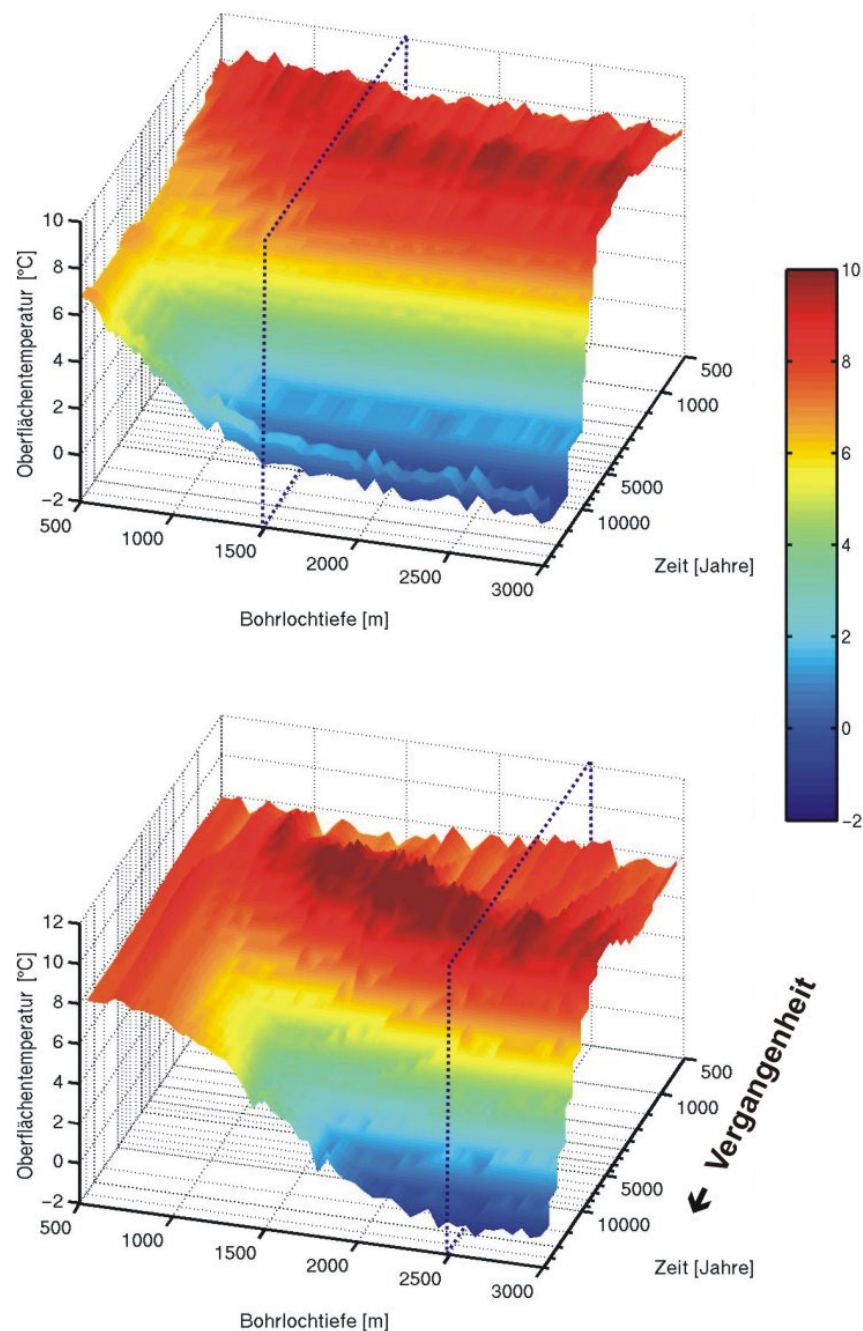


Abb. 3.29: Verbesserter Geltungsbereich der Paläoklimarekonstruktion: Rekonstruktion des Paläoklimas der letzten 30000 Jahre aus einem synthetischen Temperaturlog in Bohrlöchern verschiedener Tiefe. In diesem Zusammenhang wichtigstes Merkmal ist der steile Anstieg am Ende der letzten Eiszeit vor ca. 10000 Jahren. **Unten:** Ergebnisse der Rekonstruktion des Paläoklimas durch einen eingeführten Inversionsalgorithmus (TSVD, Beltrami et al., 1997) **Oben:** Ergebnisse des neu entwickelten numerischen Verfahrens. Dieser Algorithmus benötigt deutlich geringere Bohrlochtiefen und verhält sich stabiler gegenüber Fehlern in den Daten.

Wie schon aus dem Flussdiagramm der Projektarbeiten hervorgeht, sind die beiden Prozesse der Rekonstruktion und anschließenden Reduktion des Klimasignale einerseits und die Rekonstruktion der thermophysikalischen Parameter andererseits eng miteinander verknüpft und erfordern ein iteratives Vorgehen.

Die gemeinsame Inversion von Bohrlochtemperaturen in Hinsicht auf Paläoklima (zeitabhängige Temperatur an der Erdoberfläche) und petrophysikalische Parameter (Diffusivität κ , Wärmeproduktionsrate H für jede Schicht, sowie basaler Wärmefluss) wurde in einem alternierenden Schema realisiert, da die Teilprobleme unterschiedliche methodische Ansätze erfordern. Im Fall des Paläoklimas handelt es sich bei den Parametern um einen Vektor gleichartiger Parameter, deren Regularisierung durch eine altersabhängige zeitliche Korrelationslänge (Gleichung 3.18, vgl. Şerban et al., 2001) bzw. durch eine Tikhonov-Regularisierung 1. Ordnung (s. Gleichung 3.19) sehr effektiv erfolgen kann. Bei den schichtweise zugeordneten Größen (petrophysikalischen Parametern) ist dies keine sinnvolle Annahme, es sei denn, eine räumliche Korrelation unterschiedlicher Bohrlochlogs wird untersucht. Es ist daher effektiver, den in Abb.3.30 vereinfacht dargestellten Algorithmus zu verwenden. Die in diesem Diagramm beschriebenen Teilalgorithmen sind zum gegenwärtigen Zeitpunkt fertiggestellt und befinden sich im Stadium der numerischen Erprobung.

Für die Realisierung und Weiterentwicklung der beschriebenen Methodologie ergeben sich die folgenden zukünftigen Aufgaben:

Die Kopplung der beiden Blöcke der Paläoklimainversion (orange) und Petrophysikinversion (gelb) kann durch mehrere Methoden erfolgen: Einerseits kann das in der aktuellen Iteration ermittelte Paläoklima T_{i+1}^g zur Korrektur der vorhandenen Daten verwendet werden, um die anschließende Petrophysikinversion stationär durchzuführen. Andererseits kann diese direkt instationär erfolgen. Wegen den auftretenden instationären Rechnungen über lange Zeiträume ist dies aufwendig und nach den bisherigen Erfahrungen möglicherweise nicht effizient.

Die Sensitivitäten S_{ij} (Gl. 3.15) werden im vorhandenen Rechenprogramm durch Differenzenquotienten angenähert. Dies erfordert eine hohe Zahl von Vorwärtsrechnungen. In der Zukunft soll dies durch adjungierte Verfahren (Marchuk, 1995; Sun, 1994) geschehen, die lediglich ein zusätzliches Vorwärtsproblem erfordern. Dies wird vor allem für die Anwendung für die Inversion vieler Bohrungen nach einer größeren Anzahl von Parametern wichtig werden.

Es sind eine Reihe von physikalischen Modellerweiterungen geplant. Um den Einfluss der gesuchten Fluidbewegung auf das Paläoklima („Auswaschung“) genauer untersuchen zu können, wird die Fluidgeschwindigkeiten als zusätzlicher Inversionsparameter eingeführt werden. Dies erfordert möglicherweise eine lokale mehrdimensionale Erweiterung des Modells und seiner Inversen, da sich Strömungen hier zwangloser und physikalisch sinnvoller integrieren lassen als im Falle einer Beschränkung auf schichtweisen Aufbau mit „Pseudoquellen“, welche die Massenerhaltung des Fluids garantieren. Gleichzeitig besteht damit eine Möglichkeit, Methoden der Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeiten durch die Anpassung stationärer oder instationärer analytischer Modelle (z. B. Vasseur & Demongodin, 1995)

näher in Bezug auf Genauigkeit und mögliche Fehlerquellen zu untersuchen und sie gegebenenfalls in das vorhandene lokale Inversionschema zu integrieren.

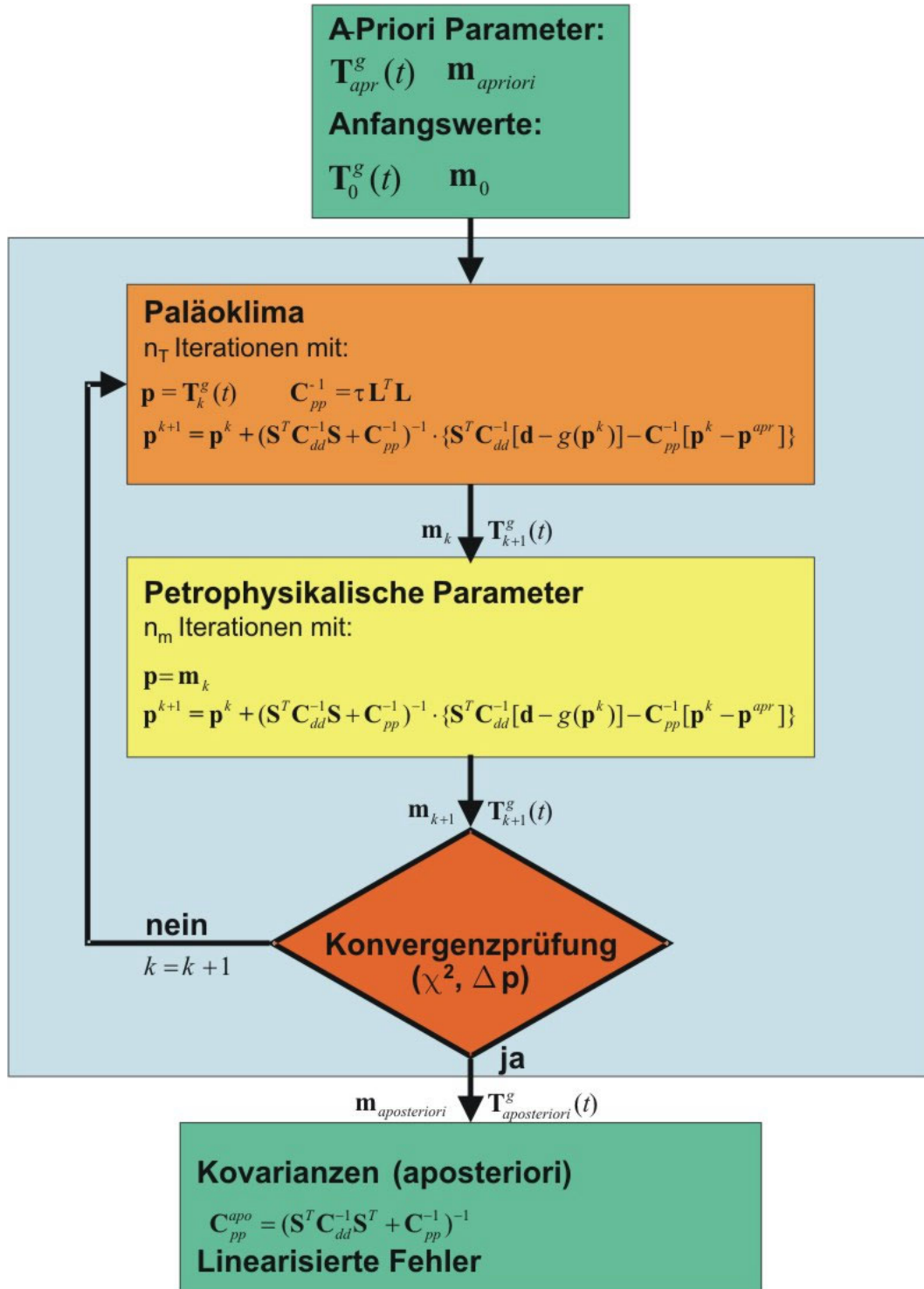


Abb. 3.30: Alternierendes Schema für die gekoppelte Inversion zur gleichzeitigen Bestimmung von paläoklimatischem Signal und thermischen Gesteinseigenschaften.

3.5 Vereinfachte Analysemethoden: Pécletzahl-Analyse und schichtfolgende Strömungsanalyse

Im Messgebiet wurden, wie im Detailkonzept vorgeschlagen, zunächst klassische Pécletzahl-Untersuchungen durchgeführt. Diese ermöglichen unter der Voraussetzung bekannter thermophysikalischer Eigenschaften eine quantitative Bestimmung eines vertikalen Strömungsanteils. Ein derartiges Vorgehen ist jedoch für eine subhorizontale (schichtfolgende) Untersuchung nicht ohne Weiteres anwendbar, da der Anteil der horizontalen Wärmeleitung gering ist. Daher wurde ein Verfahren für die Auswertung korrelierter Sprünge des Wärmestroms entwickelt, die i. A. mit einer subhorizontalen Strömung verknüpft sind. Auch hier lassen sich im Geltungsbereich dieses Verfahrens bei ausreichender Bohrungsdichte quantitative Aussagen über Strömungsrichtung und ihre Flussintensität treffen.

3.5.1 Vertikale Pécletzahl-Analyse

Die Wärmetransportgleichung in einem porösen Medium lautet:

$$\frac{\partial(\rho c)_e T}{\partial t} = \nabla \cdot \lambda_e \nabla T - v(\rho c)_f \nabla T + H \quad 3.20$$

Dabei ist λ die Wärmeleitfähigkeit ($\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$), ρ die Dichte (kg m^{-3}), c die spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) und v die Filtrations- oder Darcygeschwindigkeit (m s^{-1}). Die Indices f und e geben an, ob sich die indizierte Größe auf das Fluid oder als effektiver Wert auf das System Fluid-Matrix bezieht. Die Terme auf der rechten Seite der Gleichung geben der Reihe nach die Beiträge der Wärmeleitung, des Transports durch Strömung und der Wärmeproduktion an.

Ist der Wärmetransport stationär und rein konduktiv, ist die Lösung von 3.20 in einer homogenen, isotropen Schicht (Wärmeleitfähigkeit λ) bei einer konstanten Wärmestromdichte q eine Gerade konstanter Steigung. Die Temperatur in einer beliebigen Tiefe kann bei Vernachlässigung der Wärmeproduktionsrate H aus der Oberflächen-Wärmestromdichte durch die Formel

$$T(z) = T(z_0) + \frac{q}{\lambda} z \quad 3.21$$

berechnet werden (z positiv nach unten). Diese Formel ist auch die Grundlage der im Text vorgestellten konduktiv reduzierten Temperaturschnitte.

Nimmt man über ein Tiefenintervall der Länge $L = z_1 - z_0$ eine konstante vertikale Strömung an, kann aus 3.20 folgende stationäre Wärmetransportgleichung für dieses System formuliert werden (Bredehoeft & Papadopoulos, 1965):

$$0 = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - (\rho \cdot c)_f v \frac{\partial T}{\partial z} \quad 3.22$$

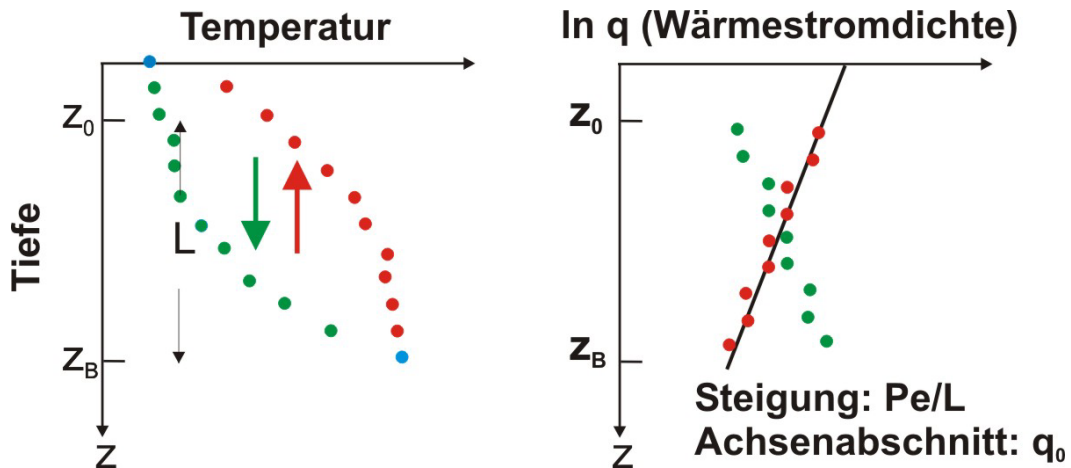


Abb. 3.31: Prinzip einer vertikalen Pécletzahl-Analyse.

Normiert man die Temperatur durch $\Delta T = T_1 - T_0$, erhält man eine vereinfachte Bilanzgleichung in den dimensionslosen Variablen $\Theta = (T - T_0)/(T_1 - T_0)$ und $\xi = z/L$:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} = Pe \cdot \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \quad 3.23$$

mit der dimensionslosen Pécletzahl:

$$\text{Pe} = \frac{q_A}{q_D} = \frac{(\rho c)_f v L}{\lambda} \quad 3.24$$

Es handelt sich dabei um eine dimensionslose Zahl, die das Verhältnis zwischen dem Wärmetransport durch Advektion und dem durch Wärmeleitung angibt.

Auf Basis der Lösung von 3.23 kann die Pécletzahl mit dem folgenden vereinfachten Ansatz abgeschätzt werden (Clauser, 1988): Es gilt

$$\ln(q) = \ln(q_0) + z \frac{Pe}{L} \quad 3.25$$

mit q_0 als Wärmestromdichte bei z_0 . Eine lineare Regression von $\ln(q) = az + b$ ergibt die Steigung der Regressionsgeraden Pe/L und den Achsenabschnitt $\ln q_0$. $q(z)$ kann dabei numerisch durch Auswertung von

$$q(z) = -\lambda \frac{dT}{dz} \quad 3.26$$

bestimmt werden (vgl. Abb. 3.31).

Für den Mehrschichtfall (Abb. 3.32), d.h. wenn verschiedene Schichten mit unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeiten aufeinander folgen, kann für jede Schicht die Temperatur in Abhängigkeit von der Tiefe durch die Formel

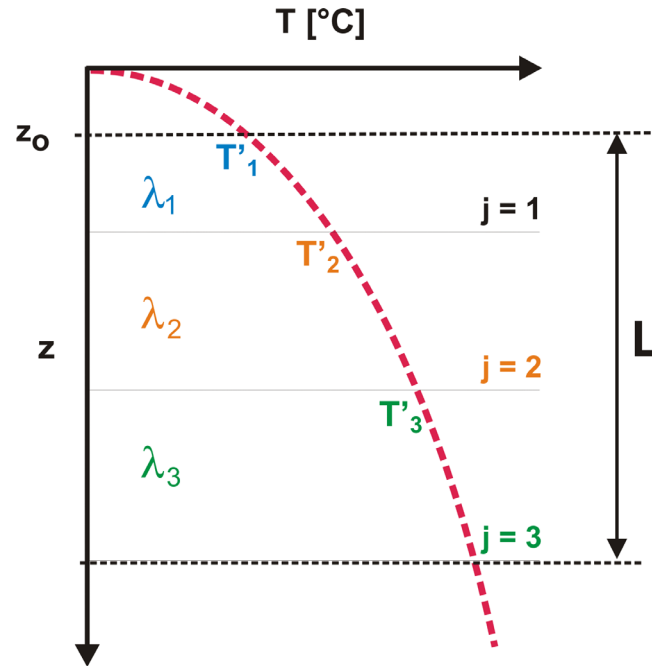


Abb. 3.32: Prinzipskizze zum Mehrschichtfall.

$$T_j(z) = \left[\left(\frac{q_0}{\lambda_j} \right) / \left(\frac{P_e}{L} \right) \right] \cdot \left\{ e^{-(z-z_0) \cdot P_e/L} - e^{-(z_j-z_0) \cdot P_e/L} \right\} + T'_j \quad 3.27$$

berechnet werden, wobei q_0 Wärmestromdichte bei z_0 ist.

Durch Rückrechnung auf die Temperatur sollte eine möglichst genaue Übereinstimmung mit der Eingangstemperatur erzielt werden. Abweichungen sind auf eine ungenaue Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit zurückzuführen. Die gemessenen Wärmeleitfähigkeiten werden dann interaktiv optimiert. Auf diese Weise erhält man ein verbessertes Modell des Untergrundes.

Vertikale Pécletzahl-Analysen sämtlicher untersuchter ungestörter Temperaturlogs sind in Anhang A, Abb. A1-A23 zusammengestellt. Es sind jeweils nebeneinander Temperatur, Wärmeleitfähigkeit und der natürliche Logarithmus der Wärmestromdichte dargestellt, wobei letztere mit der vereinfachten Lithologie aus Abb. 3.5 hinterlegt ist. Die roten Linien in dieser Graphik sind die stückweise linearen Anpassungen, aus deren Steigung die Pécletzahl gewonnen wird (Gl. 3.25). Die daraus gefolgerte Fließrichtung ist jeweils durch Pfeile markiert.

Obwohl die vertikale Pécletzahl ein sehr empfindlicher Indikator für advektiven Wärmetransport ist, sind diejenigen der eingetragenen Strömungsgeschwindigkeiten, welche kleiner als 1 mm/a betragen, vermutlich nicht signifikant. Sie wurden jedoch der Vollständigkeit halber ebenfalls eingetragen.

In den meisten Bohrungen konnten oberhalb des Malms nur geringe vertikale Strömungsgeschwindigkeiten von wenigen mm/a gefunden werden (s. Abb. 3.33). Die in der Unteren Süßwassermolasse gefundenen Geschwindigkeiten liegen durchaus im Bereich der für kompaktionsbedingte Aufstiegsbewegungen typischen Werte (Garven & Raffensperger, 1997,

Cathles, 1997). Die USM ist mit Ausnahme der Bausteinschichten als wenig permeabel anzusehen.

Erst im Malm ist das Temperaturfeld deutlicher durch Advektion gestört, etwa in der Bohrung Saulgau im Westen, die sich durch eine positive Temperaturanomalie auszeichnet. Hier wurde eine deutliche Abwärtsströmung zwischen etwa 50 und 480 m Tiefe festgestellt, die sich allerdings auf den Malm beschränkt oder möglicherweise tiefer reicht. Diese Strömung wird im Hangenden durch eine horizontale Strömung ersetzt. Dass die Abwärtsströmung in der Bohrung Saulgau nicht zu einer negativen Temperaturanomalie führt, ist mit ein Indiz dafür, dass schichtfolgende Strömung ein wesentlicher Mechanismus ist, durch den in der westlichen Molasse Wärme umverteilt und Anomalien erzeugt werden, welche sich konduktiv bis in flache Schichten „durchpausen“. Das geschieht vorrangig in den Bausteinschichten (siehe schichtfolgende Strömungsanalyse) und in den Grundwasserleitern des Malms. Das Schichteinfallen ist tendenziell in Richtung Südosten, sodass die oben genannten Grundwasserleiter im Nordwesten bis in flache Teufen Wegsamkeiten zum Aufstieg von thermalem Grundwasser bieten.

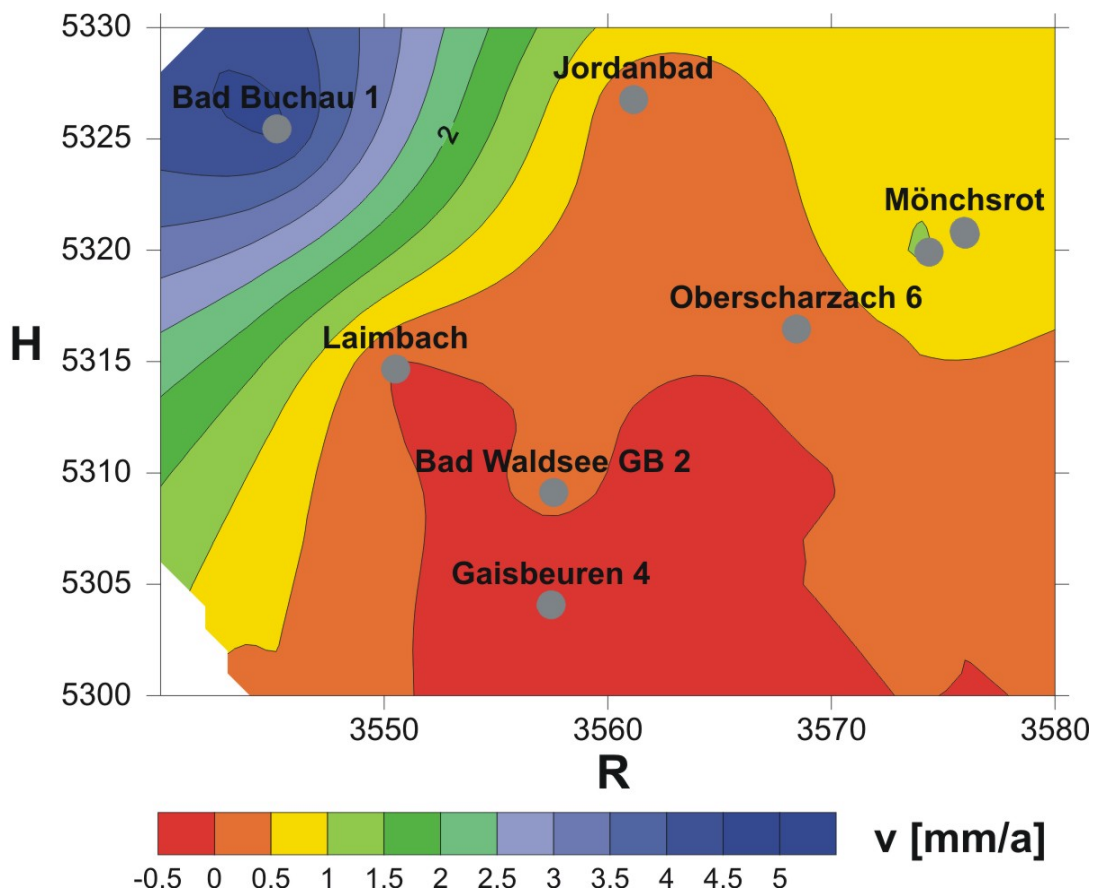


Abb. 3.33: Flächenhafte Darstellung der vertikalen Darcy-Geschwindigkeiten in der Unteren Süßwassermolasse (USM).

3.5.2 Schichtfolgende Strömungsanalyse

Da die klassische Pécletzahl-Analyse nicht unmittelbar auf horizontale Strömungen anzuwenden sind, kann folgendes vereinfachte, auf Stallmann (1963) und Reiter (2001, mit Erweiterungen) zurückgehende Verfahren angewendet werden. Ausgehend von Gl. 3.22 gilt bei geringer Vertikalströmung (z. B. in Schichten geringer Vertikalausdehnung) die Gleichung:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{(\rho c)_f}{\lambda_s} v_x \frac{\partial T}{\partial x} \quad 3.28$$

Im Falle subhorizontaler Schichten wird diese Gleichung ausgewertet, indem man die Richtung x durch ein schichtparalleles l ersetzt und 3.28 nach v_l auflöst:

$$v_l = \frac{\lambda_s}{(\rho c)_f} \left[\frac{\partial T}{\partial l} \right]^{-1} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad 3.29$$

Ein derartiger Grundwasserleiter lässt sich in einer Darstellung des Wärmestroms über der Tiefe als Sprung Δq bzw. als enge Zone mit unphysikalischem Gradienten erkennen (Abb. 3.28).

Mit der Definition der Wärmestromdichte aus 3.26 kann für eine dünne Schicht der Mächtigkeit h die zweite Ableitung auf der rechten Seite von 3.29 angenähert werden:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \approx \frac{\Delta q}{h \lambda_s} \quad 3.30$$

Ist der regionale oder lokale schichtfolgende Temperaturgradient bekannt – beispielsweise aus geglätteten Temperaturinterpolationen – kann die zum Temperaturgradienten parallele bzw. antiparallele Komponente der Strömungsgeschwindigkeit v_l aus T an der Bohrung zu

$$v_l = \frac{1}{(\rho c)_f} \left[\frac{\partial T}{\partial l} \right]^{-1} \frac{\Delta q}{h} \quad 3.31$$

bestimmt werden.

Die folgenden Abb. 3.34 - 3.37 zeigen Ergebnisse für ein stationäres synthetisches Modell, welches den hier ausgewerteten Effekt erläutert. In dieser Modellrechnung wurde eine dünne permeable Schicht (Permeabilität $k = 10^{-12} \text{ m}^2 = 1 \text{ D}$) in einen sonst homogenen Halbraum ($k = 10^{-17} \text{ m}^2 = 10 \text{ } \mu\text{D}$) eingebettet. Die thermophysikalischen Eigenschaften sind konstant im ganzen Bereich mit $\lambda = 3$ und $H = 0$ angesetzt. Die Schicht hat eine konkave Geometrie, so dass sich auch bei konstanten Temperaturrandbedingungen ($T_0 = 10^\circ\text{C}$ an der Erdoberfläche, konstanter basaler Wärmefluss q_B von 60 mW m^{-2}) ein räumlich variabler Temperaturgradient mit unterschiedlicher Richtung ausbildet. Durch einen geringen hydraulische Potentialgradienten von 2×10^{-5} , der durch die Randbedingen bei $x = -5$ und 5 km aufgeprägt ist, werden Filtrationsgeschwindigkeiten von etwa $1\text{-}2 \text{ m/a}$ in der permeablen Schicht erzwungen. Der Grundwasserfluss transportiert advektiv Wärme entlang der Schicht von unten nach

oben. Dies geschieht unterschiedlich effektiv, da das Schichteinfallen unterschiedlich stark ist und somit die Richtung des Temperaturgradienten in der Schicht wechselt.

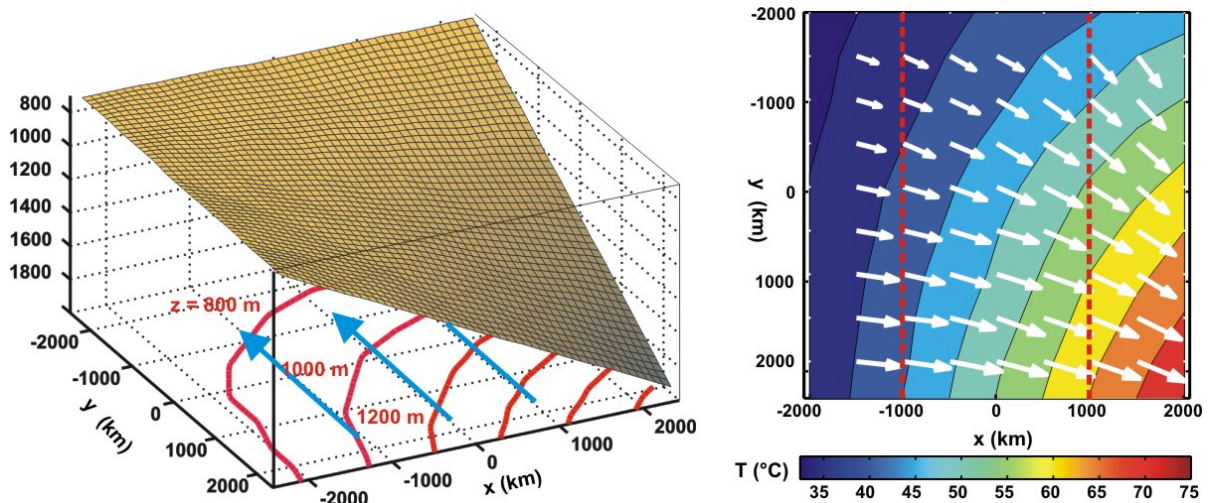


Abb. 3.34: Modell für die Berechnung synthetischer Temperaturdaten zur Demonstration der schichtfolgenden Strömungsanalyse. Näheres im Text. **Links:** Gelb: Oberfläche der im Modell realisierten permeablen Schicht. Rot: Projektionen einiger Tiefenlinien auf die Grundfläche. Blau: Richtung des hydraulischen Potentialgradienten. **Rechts:** Die Temperaturisolinien in dieser Schicht wurden in eine horizontale Fläche projiziert und (weiß) die daraus berechneten Temperaturgradienten eingetragen. Rot: Profilinien aus Abb. 3.35 bei $x = \pm 1000$ m.

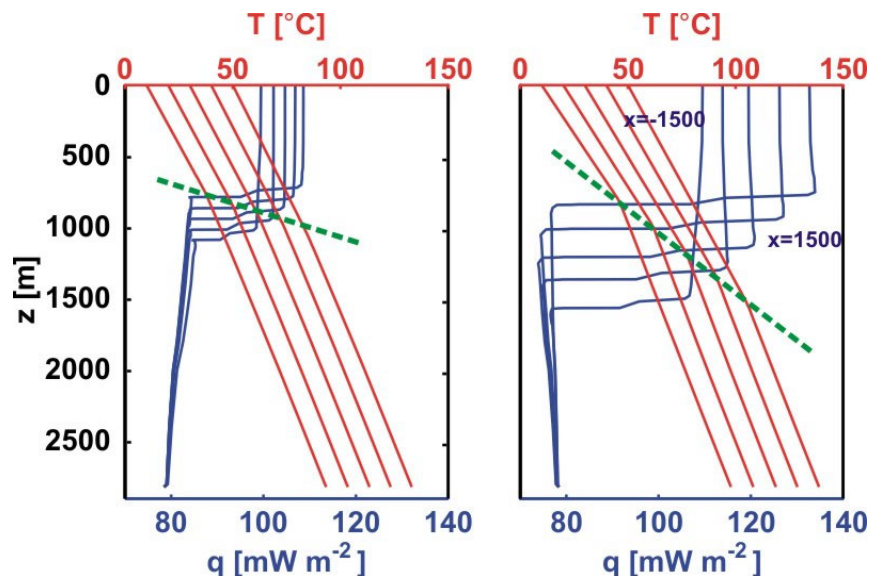


Abb. 3.35: Schar von synthetischen vertikalen Temperatur- (rot) und Wärmestromprofilen (blau) entlang der in Abb. 3.34 markierten Linien bei $x = \pm 1000$ m. Grün: Tiefenlage der angeschnittenen durchströmten Schicht. Die Temperaturlogs sind zur größeren Übersichtlichkeit jeweils um 10°C verschoben.

Entlang der in Abb. 3.34 markierten Linien bei $x = \pm 1000$ m erhalten wir die in Abb. 3.35 dargestellten Scharen von synthetischen Temperaturlogs und die daraus abgeleiteten verti-

kalen Profile des Wärmeflusses. Es ist deutlich zu erkennen, dass in y-Richtung der durch das Durchteufen der permeablen Schicht (markiert durch die dicken grünen Linien) erzeugte Sprung abnimmt. Dies rührt von dem abnehmenden Winkel zwischen Strömungsrichtung und Temperaturgradient her, welcher unmittelbar die Effektivität des advektiven Wärmetransports bestimmt.

Durch die schichtfolgende Strömungsanalyse können unterschiedliche Projektionen des als räumlich konstant angenommen Strömungsvektors bestimmt werden. Die Richtung dieser Projektionen ergibt sich aus der Richtung des Temperaturgradienten am jeweiligen Punkt, während der Betrag proportional von der Sprungweite des Wärmestroms ist. Dies ist schematisch in den Abb. 3.36 und 3.37 dargestellt.

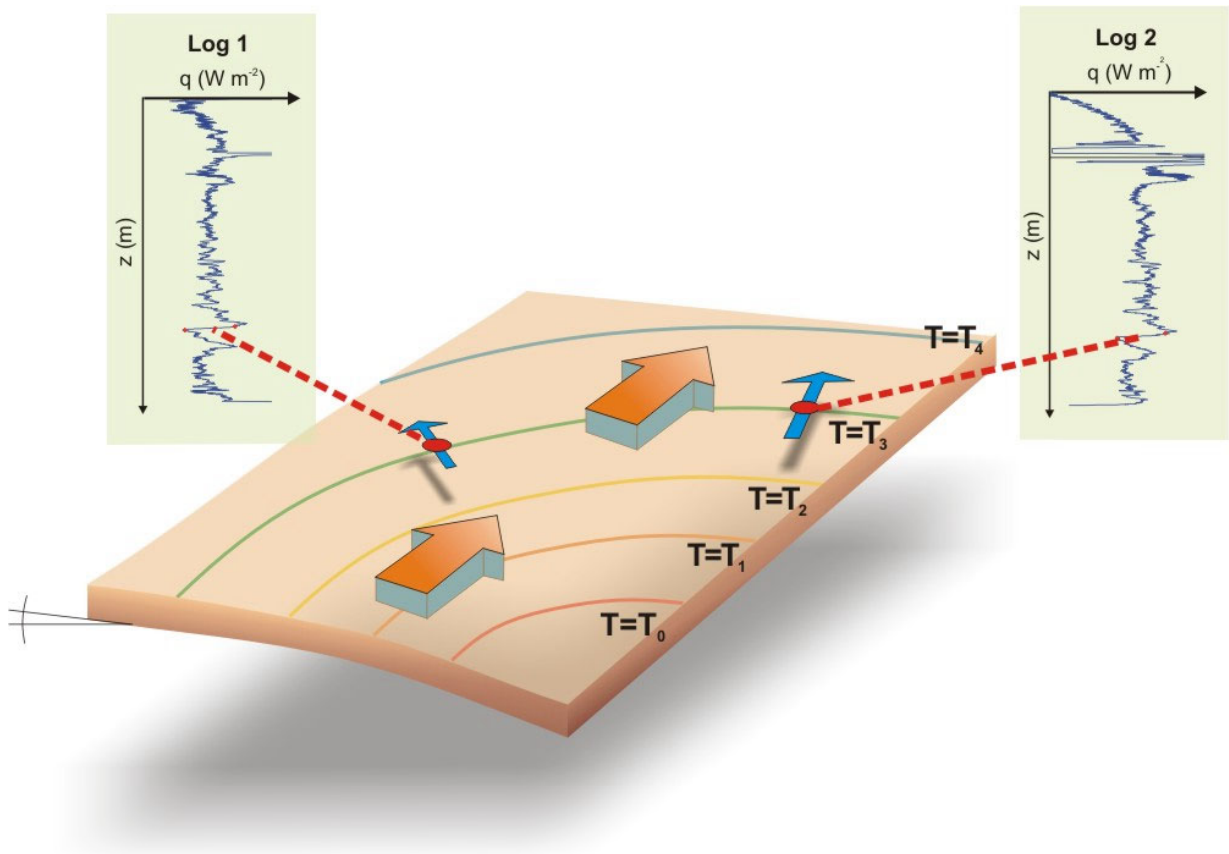


Abb. 3.36: Auswertung von korrelierten Sprüngen des Wärmestroms zur Bestimmung schichtfolgender Strömung. Die mittlere Darcygeschwindigkeit \bar{v} der Umgebung der Bohrungen (hier als rote Pfeile symbolisiert) kann unter günstigen Umständen aus den gemessenen Sprüngen im Wärmefluss $\Delta q_i = q_1 - q_2$ und den Temperaturgradienten ∇T_i geschätzt werden. Jedoch liefern auch bereits die blauen, parallel oder antiparallel zum Temperaturgradienten ausgerichteten Geschwindigkeitskomponenten wertvolle Informationen zum Strömungsfeld, insbesondere eine Angabe über minimale zu erwartende Strömungsgeschwindigkeit. Sie tragen wesentlich zur Kalibrierung eines Strömungsmodells bei.

Korrelieren derartige Zonen in mehreren Bohrlöchern, kann die obige Analyse bei vereinfachenden Annahmen (z. B. homogener Strömung) erweitert werden: Mit den jeweiligen Dis-

kontinuitäten Δq_i und den Komponenten des schichtparallelen Temperaturgradienten an den betreffenden Orten kann das folgende lineare Gleichungssystem für die Komponenten der im Untersuchungsbereich konstant angenommenen Geschwindigkeit v aufgestellt werden:

$$\frac{\Delta q_i}{(\rho c)_f h_i} = \nabla_x T_i \cdot v_x + \nabla_y T_i \cdot v_y \quad 3.32$$

Hier sollen die Komponenten als Projektionen in die Schichtfläche verstanden werden. Das entstehende Gleichungssystem ist überbestimmt, sodass es durch eine Generalisierte Inverse gelöst werden muss (im einfachsten Fall kleinste Quadrate, z. B. Menke, 1984). Dies ermöglicht die Bestimmung von Betrag und Richtung der Strömung einschließlich ihrer Fehler.

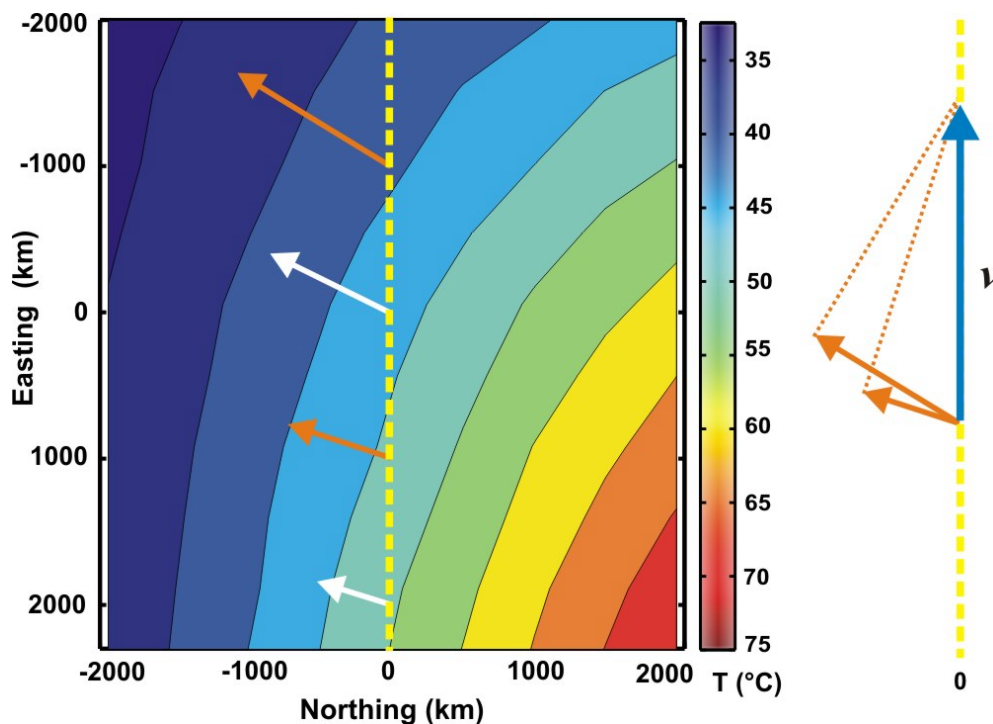


Abb. 3.37: Links: Über einer Isolinien­darstellung der Temperatur sind aus den synthetischen Daten berechnete Geschwindigkeitskomponenten nach Gl. 3.31 (weiß und orange eingetragen). Rechts: Geometrie der Projektion der Fließgeschwindigkeit auf die jeweiligen Temperaturgradienten.

Bei dieser Schätzmethode wird ein bekannter lokaler Temperaturgradient an den einzelnen Bohrungen vorausgesetzt. Dieser kann durch ein geeignetes Interpolationsverfahren aus der in der untersuchten Schicht bekannten Temperatur berechnet werden. Es ist hier jedoch Vorsicht geboten, da bei einem konstanten Gradienten – wie er zum Beispiel bei einer lokalen Flächenanpassung durch 3 Punkte bestimmt wird – das Gleichungssystem 3.32 vom Rang 1 ist. Es wird daher wiederum lediglich die Strömungskomponente (anti)parallel zum Temperaturgradienten bestimmt. Dieser Wert ist eine Minimalabschätzung des Geschwindigkeitsbetrags und kann daher eine wichtige Grundlage für den Nachweis von Strömungen bilden.

Im Unterschied zu den vertikalen Pécletzahl-Analysen, die unter günstigen Bedingungen eine Nachweisgrenze von ca. 1 mm a^{-1} erreichen können, hängt die Möglichkeit des Nach-

weises bei schichtfolgenden Analysen in erster Linie vom Winkel ab, den das Strömungsfeld mit dem Gradientenfeld der Temperatur bildet. Strömungen machen sich nur dann in der Wärmebilanz bemerkbar, wenn ihre Richtung nicht stark von der des Temperaturgradienten abweicht. Dies folgt unmittelbar aus der Form des Transportterms in Gl. 3.20. Dieser Winkel ist in der Regel stark durch das Einfallen dieser Strukturen bestimmt, kann jedoch auch durch laterale Inhomogenitäten der hydraulischen Permeabilität oder der thermischen Eigenschaften der Gesteine beeinflusst werden. Verläuft die Strömung mehr oder weniger vertikal, ist der Transporteffekt maximal. Der Temperaturgradient in subhorizontal verlaufenden Schichten in Sedimentbecken ist im Allgemeinen nur wenige Prozent des normalen Vertikalgradienten, sodass die Empfindlichkeit hier deutlich geringer ist und typische nachgewiesene Strömungsgeschwindigkeiten eher in der Größenordnung von mehreren m/a liegen (Reiter, 2001). Um Strömungen in der Größenordnung von m/a unter ungünstigen Bedingungen (subhorizontale Lagerung der Schichten) zu erkennen, muss daher bei der Behandlung der Temperaturlogs große Sorgfalt aufgewendet werden.

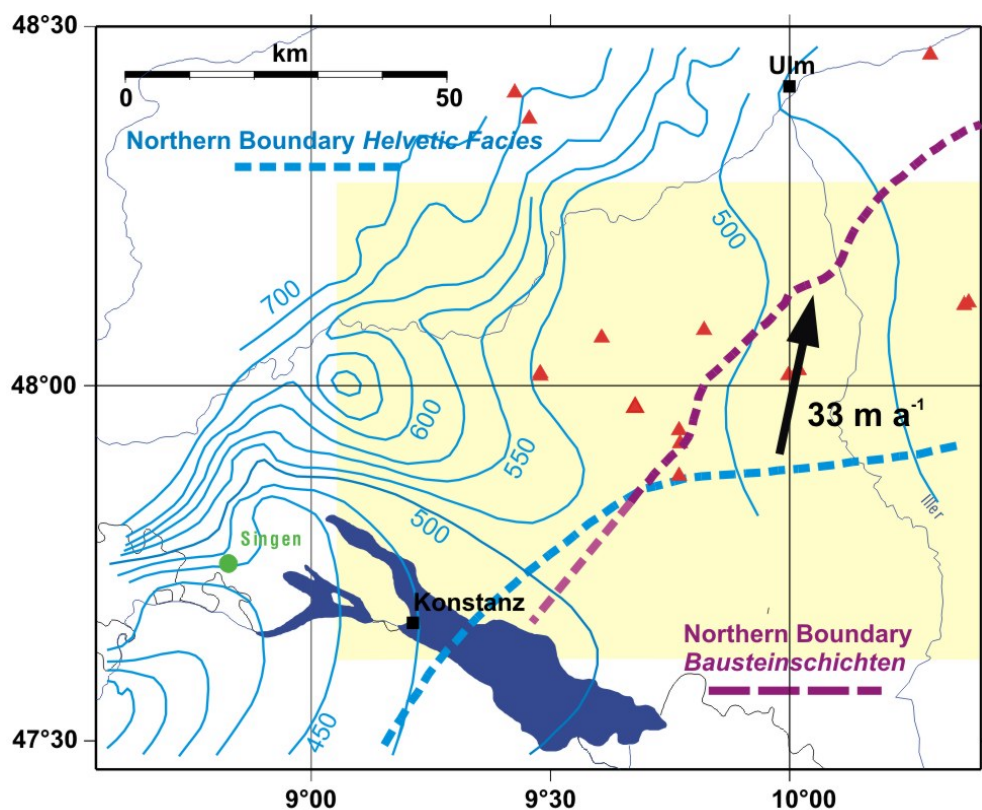


Abb. 3.38: Darstellung der schichtfolgenden Analyse für die Bausteinschichten. Die Geschwindigkeit bezieht sich auf das Zentrum des Pfeils. Hinterlegt sind einige geologische Elemente des Untersuchungsgebietes. Die Nordgrenze des Vorkommens der Bausteinschichten ist durch die violette gestrichelte Linie markiert.

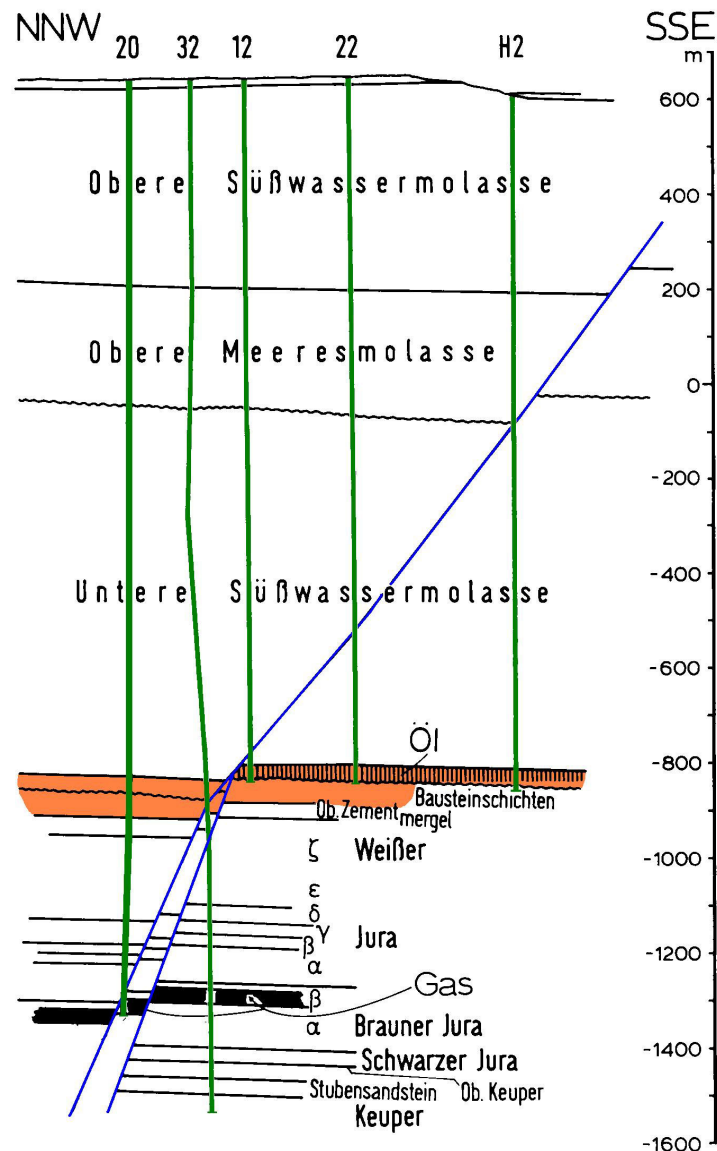


Abb. 3.39: Geologischer Schnitt durch das Feld Mönchsrot nach Geyer & Gwinner (1986) mit den im Text erwähnten Bohrungen 20 und 32. Wie unschwer zu erkennen ist, sind die advektiv bedingten Störungen nicht – wie anfänglich vermutet – durch die durchteufte Störungszone bedingt, sondern wurden wahrscheinlich durch schichtfolgende Fluidbewegung in den Bausteinschichten hervorgerufen.

Die Verwendung der beschriebenen Schätzmethode liefert Hinweise zur quantitativen Bestimmung der Strömungsgeschwindigkeiten, kann jedoch eine kalibrierte Modellierung keinesfalls ersetzen. Dies ist in erster Linie auf die zu Grunde liegende Physik zurückzuführen. Weiterhin sind die vereinfachten Annahmen des analytischen Ansatzes (z. B. bezüglich der Normalkomponente des Wärmeflusses und der räumlichen Homogenität der beteiligten Größen) in Betracht zu ziehen. Insbesondere ist es nicht sinnvoll eine derartige Analyse im regionalen Maßstab durchzuführen, wenn eine Zirkulation zu erwarten ist, die durch hochpermeable Störungszonen oder Karstaquifere geprägt ist.

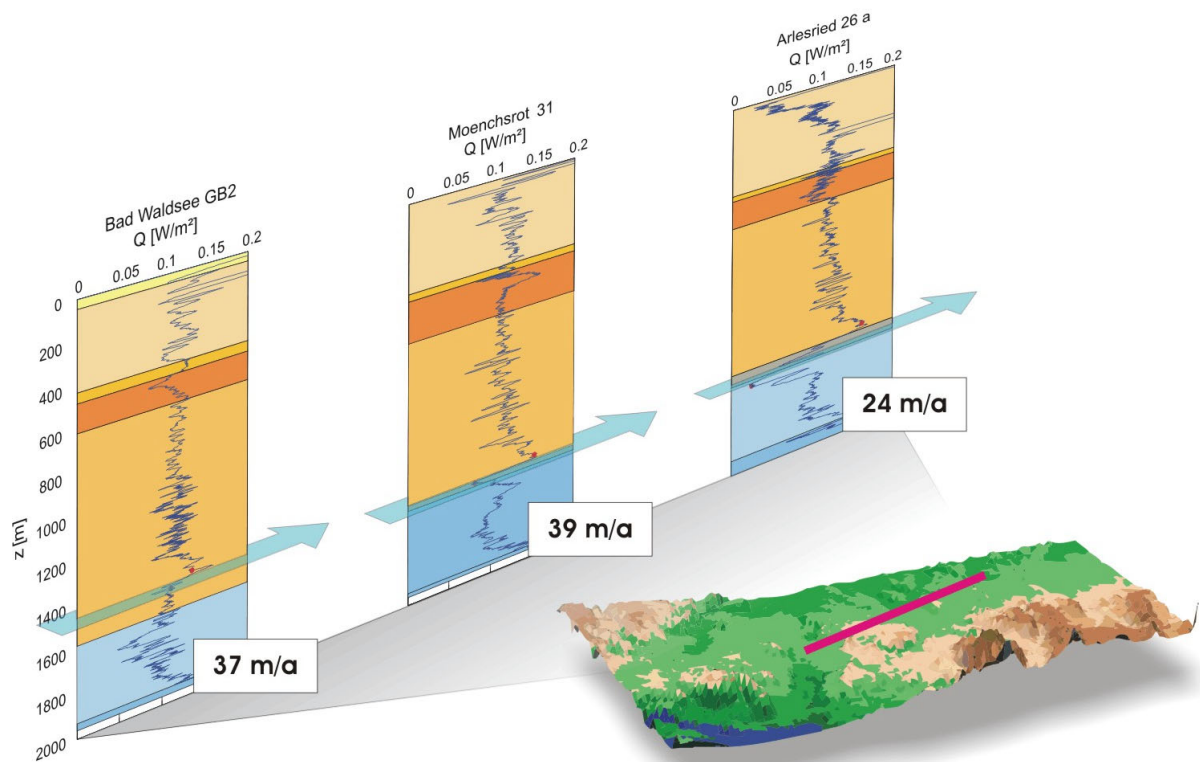


Abb. 3.40: Regionale schichtfolgende Analyse des Strömungsverhältnisse in den Bausteinschichten zwischen den Bohrungen Bad Waldsee, Mönchsrot 32 und Arlesried 26a.

In den drei ungestörten Bohrungen des Feldes Mönchsrot (20, 31, und 32) können Sprünge im vertikalen Wärmestrom im Tiefenbereich der Bausteinschichten korreliert werden. In diesem Falle liegen die Bohrungen in Abständen von weniger als 1 km, sodass die Annahme eines inhomogenen Temperaturgradienten nicht plausibel ist. Es wurde daher eine lokale Schätzung des Temperaturgradienten durch eine Flächenanpassung an die in den Bohrlöchern angetroffenen Temperaturen vorgenommen. Mit Formel 3.32 wurde sodann die gradientenparallele Geschwindigkeitskomponente im Flächenmittelpunkt bestimmt. Eine Anwendung der Gaußschen Fehlerfortpflanzung erlaubte zusätzlich ein Fehlerintervall zu bestimmen. Die zunächst naheliegende Vermutung, die Temperaturstörung sei auf die durchteufte Störungszone zurückzuführen, kann mit Blick auf die in Abb. 3.39 gezeigte lokale Geologie ausgeschlossen werden, da sie in den Bohrungen in sehr unterschiedlichen Tiefen angeschnitten wird und nicht mit identifizierbaren Sprüngen korreliert ist.

Die mit dieser Methode geschätzte schichtfolgende Darcygeschwindigkeit von $v=20\pm12 \text{ m a}^{-1}$ erscheint sehr hoch. In der Literatur sind die Bausteinschichten jedoch als Grundwasserleiter bekannt (Bertleff et al., 1988), sind einer der wesentlichen Kohlenwasserstoff führenden Schichten im westlichen Molassebecken und weisen hohe Porosität und Permeabilität auf. Preusche (1996) gibt bisher unveröffentlichte Ergebnisse von verschiedenen hydraulischen Tests der Kohlenwasserstoffindustrie an: Die Porosität liegt meist deutlich über 10 % (bis zu

25 %), und es wurden Permeabilitäten zwischen 1 mD (10^{-15} m^2) und 1.5 D (10^{-12} m^2) geschätzt. Ähnliche Werte wurden von Kronmüller (1987a) und Kronmüller (1987b) veröffentlicht. Diese Permeabilitäten sind für die Tiefenlage von 1500 m hoch, lassen die von uns ermittelten Geschwindigkeiten jedoch als vorstellbar erscheinen.

In Abb. 3.40 sind Ergebnisse einer regionalen Konfiguration gezeigt. Die berechneten Werte von $24 - 39 \text{ m a}^{-1}$ sind völlig konsistent mit den Ergebnissen im Feld Mönchsrot. Zur Bestimmung der Strömungsrichtung wurde Formel 3.29 entlang der Verbindungslinie ausgewertet die in etwa dem interpolierten Temperaturgradienten entspricht. Wegen der fast kolinearen Lage der Bohrungen ist die Anwendung einer aufwändigeren Methode nicht sinnvoll. Wir erhalten dabei lediglich eine Projektion der Strömungsrichtung.

Eine Untersuchung des beschriebenen Typs war nur für den Grundwasserleiter der Bausteinschichten möglich. Der Thermalwasserleiter im Malm (hauptsächlich Malm δ bis ζ_3 , vgl. Geologische Karte von Bayern, 1998) wurde von den Bohrungen nicht oft erreicht und noch seltener durchteuft. Nach eingehender Analyse sowohl der vorhandenen Temperaturlogs als auch der bisher bekannten hydrogeologischen Verhältnisse muss angenommen werden, dass die Voraussetzungen der Analyse nicht erfüllt sind (deutliche vertikalstörungsbedingte Anomalien in Saulgau und Bad Buchau, lokalisierte Karstaquifere). Zusätzlich erschweren die nur spärlichen petrophysikalischen Daten für diesen Bereich eine verlässliche Interpretation. Bei einer zukünftigen Projektfortsetzung wird gezielt versucht werden, bessere Informationen (petrophysikalische Logs und Kernmaterial) aus diesem Bereich von der Kohlenwasserstoffindustrie zu beschaffen.

Untersuchungen im Bereich des dritten bekannten Grundwasserleiters innerhalb der Oberen Meeresmolasse (Baltringer Schichten) führten bisher zu keinem Ergebnis, da dieser Bereich in allen untersuchten Bohrungen mit einer Zone regelmäßiger, kurzweiliger Temperaturanomalien kurzer (Wellenlänge im Dezimeterbereich) über ein Tiefenintervall von 20 – 30 m einhergeht. Dies ist plausibel auf das Vorhandensein von Konvektionszellen im Bohrloch selbst zurückzuführen (siehe z. B. von Beardmore & Cull, 2001). Die unmittelbaren Gründe dieses Verhaltens müssen in der Zukunft noch genauer untersucht werden. Ein Beispiel für die Temperaturlogs in diesem Bereich ist in Abb. 3.34 gegeben. Nach Bertleff et al. (1988) ist der untere Bereich der Baltringer Schichten durch Mittel- bis Grobsandsteine hoher Porosität dominiert.

Schichtfolgende Strömungen scheinen ein wichtiger Mechanismus zu sein, um in der westlichen Molasse Wärme umzuverteilen und Anomalien zu erzeugen, die sich konduktiv bis in flache Schichten „durchpausen“. Das geschieht vorrangig in den Bausteinschichten und im Malmkarst. Das Schichteinfallen ist tendenziell in Richtung Südosten, sodass die oben genannten Grundwasserleiter im Nordwesten bis in flache Teufen Wegsamkeiten zum Aufstieg von thermalem Grundwasser bieten.

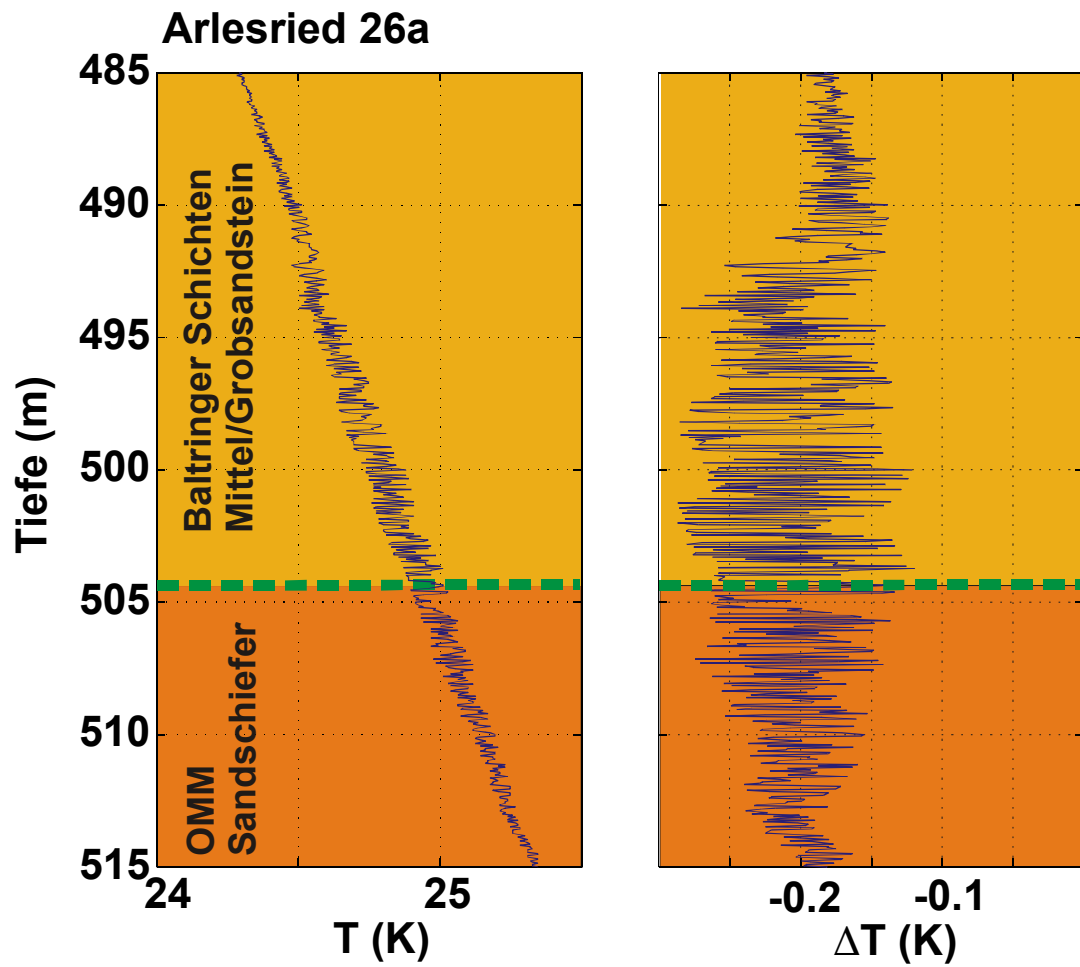


Abb. 3.41: Verlauf von Temperatur und reduzierter Temperatur im Bereich des Übergangs von Baltringer Schichten (UMM, 2. Zyklus, Bertleff et al., 1988) und den Sandschiefern der UMM (1. Zyklus).

3.6 Dreidimensionale Modellierung des konduktiven Wärmetransports

Auf Basis eigener petrophysikalischer Messungen und Parameterschätzungen wurde unter Zuhilfenahme geologischer Strukturinformation ein dreidimensionales Rechenmodell des Untersuchungsgebiets (Abb. 3.42) erstellt. Dieses berücksichtigt als Transportprozess nur die Wärmeleitung im Gestein, da es als Referenzmodell zur Berechnung von möglicherweise strömungsbedingten Temperaturabweichungen dient. An den Bohrungen wird die aus dem Referenzmodell berechnete Temperatur von den gemessenen Daten abgezogen.

Die Modellierung wurde mit dem Rechenprogramm SHEMAT (Bartels et al., 2001) durchgeführt, welches geeignet ist, dreidimensional den gekoppelten Transport von Grundwasser, Wärme und reaktiven Lösungen zu simulieren. Obwohl im Rahmen dieses Projekts nur eine konduktive Referenzlösung angestrebt ist, ist mit der Verwendung dieses Softwarepakets ein problemloser Übergang zu einer Strömungsmodellierung gewährleistet.

Bei der hier vorgestellten Modellierung wurde die stationäre, nichtlineare Wärmeleitungsgleichung

$$\nabla \cdot \lambda_e \nabla T + H = 0 \quad 3.33$$

in drei Dimensionen mit vorgegebener Temperatur an der Oberfläche und vorgegebenem Wärmefluss an der Basis gelöst. Dabei ist λ die Wärmeleitfähigkeit ($\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$), ρ die Dichte (kg m^{-3}) und c die spez. Wärmekapazität bei konstantem Druck ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$). Der Index e gibt an, dass sich die indizierte Größe als effektiver Wert auf das System Fluid-Matrix bezieht. H ist die volumenbezogene Wärmeproduktionsrate ($\text{W K}^{-1} \text{m}^{-3}$).

3.6.1 Aufbau des Modells

Da die Nachbildung der physikalischen Bedingungen - also die eigentliche Modellbildung - der kritischste Punkt bei der numerischen Simulation ist, wurde große Sorgfalt in eine möglichst akkurate Nachbildung der geologischen Verhältnisse als Parametrisierung der räumlichen Lage der petrophysikalischen und thermischen Variablen investiert. Dabei wurde im Großen und Ganzen der von der Fachsektion Hydrogeologie der Deutschen Geologischen Gesellschaft (FH-DGG) empfohlenen Vorgehensweise gefolgt.

Das Modellgebiet hat in Gauß-Krüger-Koordinaten eine Ausdehnung von $35^{\circ}04' - 36^{\circ}40'$ im Rechtswert und $52^{\circ}75' - 53^{\circ}51'$ im Hochwert. Die horizontale Gitterweite beträgt 1 km (137×77 Knoten) und die vertikalen Gitterweite 50 m (80 Knoten). Die basale Wärmestromdichte q_{bas} wird konstant mit 88 mW m^{-2} angesetzt (siehe Inversionsergebnisse). Die mittlere Temperatur an der Erdoberfläche wird mit Hilfe einer linearen Regression aus den Bohrlochtemperaturen ermittelt und in der Fläche interpoliert.

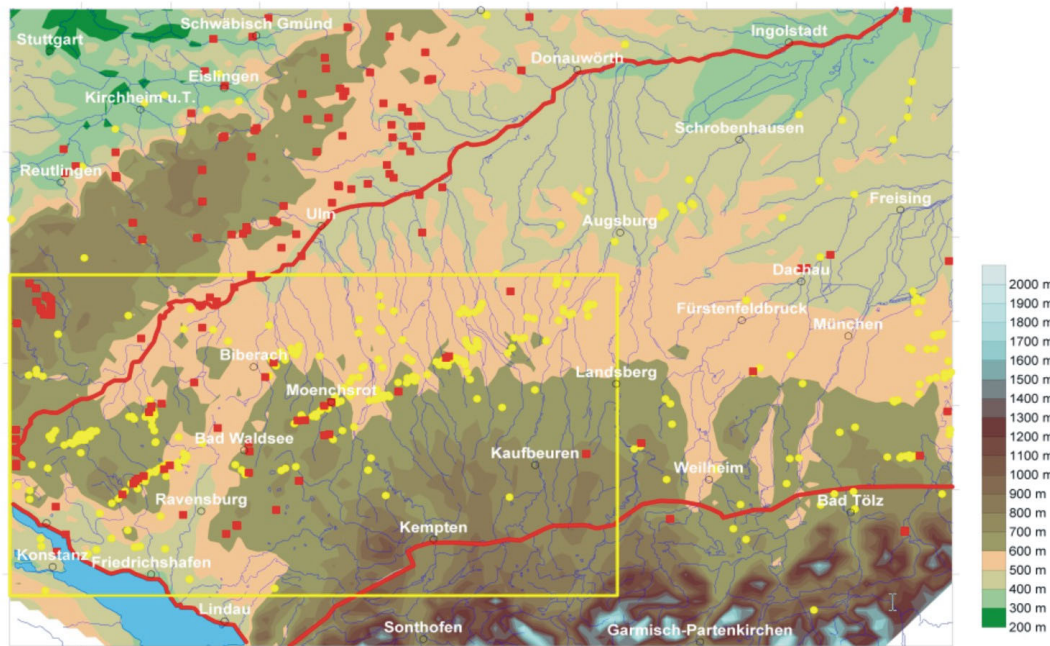


Abb. 3.42: Das für die Pilotstudie gewählte Gebiet. Zu sehen ist die Topographie, die gelben Kreise markieren Bohrlöcher von denen stratigraphische Angaben vorliegen, die roten Kreuze markieren Bohrlöcher in denen Temperaturmessungen (keine BHT) durchgeführt wurden. Die obere rote Linie markiert die Donau, die untere den Beginn der subalpinen Störungszone, die rote Linie unten links stellt den östlichen Rand des Bodensees dar. Das gelbe Rechteck zeigt das für die Modellrechnungen ausgewählte Gebiet.

Die wesentlichen Eingangsdaten für die Struktur des Modells entstammen den geologischen Schichtansprachen der Kohlenwasserstoff-Geologie. Leider liegen nur geringe Informationen über die Petrographie vor. Um aus diesen Informationen ein - für ein konduktives Modell ausreichend akkurates - dreidimensionales Abbild der Geologie zu erstellen, wurde im Rahmen dieses Projekts ein spezielles Rechenprogramm entwickelt, welches aus diesen Daten eine Eingabedatei für das Simulationsprogramm SHEMAT erstellt. Hierbei wird auch die Topographie mit einbezogen. Zunächst werden hierfür die bekannten stratigraphischen Einheiten zu Modellierungseinheiten zusammengefasst, welchen homogene Parameter zugewiesen werden.

Die Grundlage der geometrischen Modellierung bilden hierbei die Tiefenangaben für die Basis der jeweiligen (ggf. zusammengefassten) stratigraphischen Einheiten aus der am GGA-Institut geführten Datenbank der Kohlenwasserstoffbohrungen (KW-DB). In Abb. 3.42 sind die Orte der hier verwerteten Bohrungen eingetragen (gelb). Anschließend wird die Lage der Tiefenbasis der interessierenden stratigraphischen Einheit im Raum interpoliert. Hierzu stehen entweder eine Kriging-Methode (basierend auf GSLIB, Deutsch & Journel, 1998) oder eine skriptbasierte Interpolation mit dem kommerziellen Programm Surfer (Ver. 7, Golden Software) zur Verfügung.

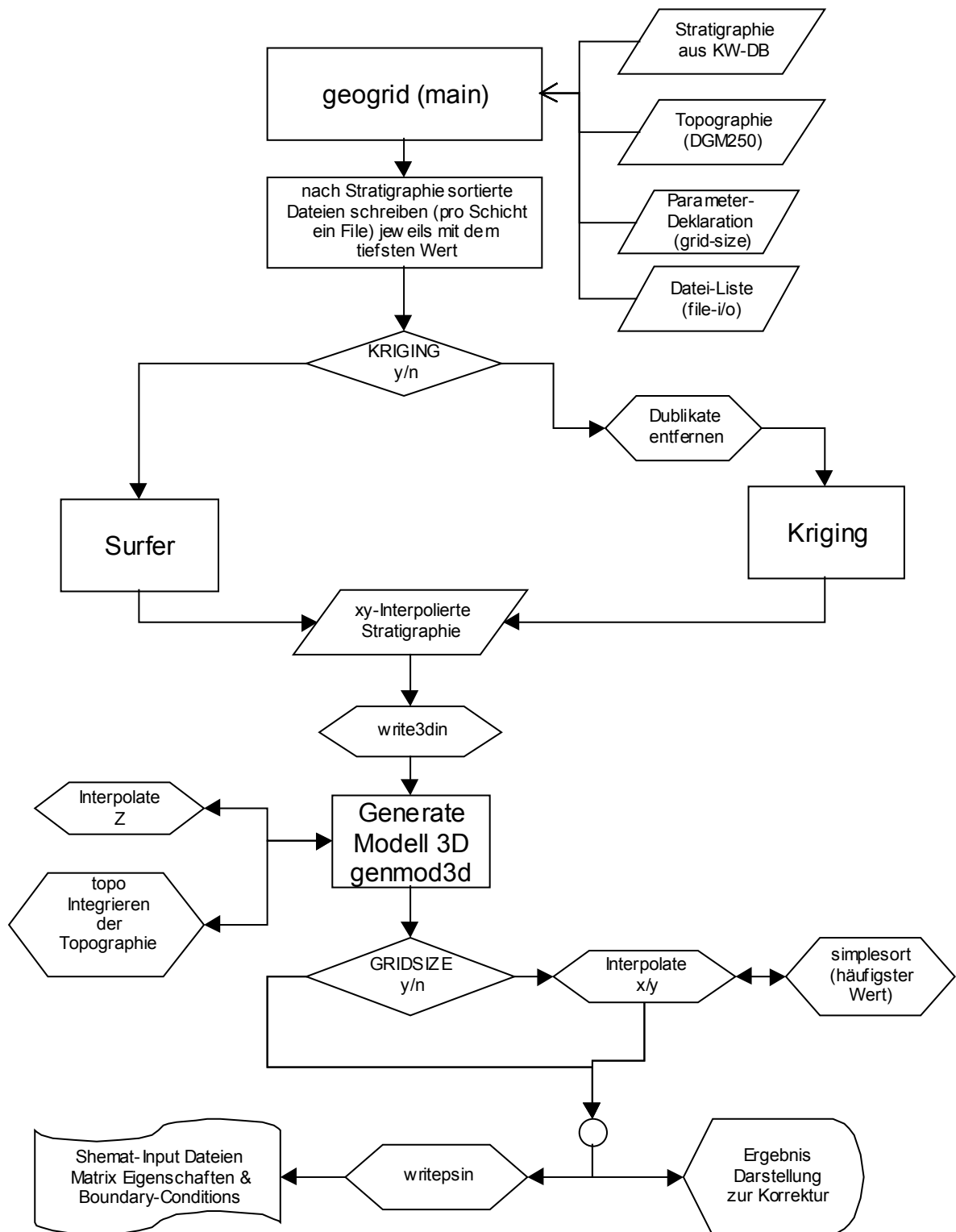


Abb. 3.43: Flussdiagramm für den Aufbau und die Funktionsweise des Programms „geogrid“ zur Erstellung eines dreidimensionalen Finite-Differenzen-Modells.

Diese zweite Variante bietet den Vorteil, dass verschiedene Interpolations-Algorithmen zur Verfügung stehen, die teilweise auch Diskontinuitäten (Störungszonen) zulassen. Beide Optionen ermöglichen eine flexible Anpassung an die Datencharakteristik durch die Wahl von Steuerparametern. Die so in der Fläche interpolierten Daten werden anschließend zu einem dreidimensionalen Datensatz zusammengefasst. In einem abschließenden Schritt werden die einzelnen Gitterzellen (Unterprogramm `genmod3d` und angegliederte Routinen) durch eine Interpolation in z-Richtung mit Werten belegt. Die Verfahrensweise und ein Ausschnitt des Modells sind in den Abb. 3.43 und 3.44 dargestellt.

Da sich wegen der unregelmäßigen und in einigen Gebieten geringer Datendichte immer noch Datenlücken und Überschneidungen ergeben können, müssen noch Plausibilitätsprüfungen und ein Abgleich mit weiteren, zum Teil außerhalb des eigentlichen Messgebiets vorhandenen Informationen erfolgen. Im Speziellen waren dies:

- die Geologische Karte von Bayern 1:500 000;
- die aus seismischen und magnetischen Daten kompilierte Tiefenbasis des Malm und Grundgebirges, die uns freundlicherweise von Herrn Dr. E. Geiss (Bayerisches Geologisches Landesamt, München) zur Verfügung gestellt wurde;
- seismische Profile aus dem Gebiet von Schrobenhausen (TK7333 und TK7433), auf die uns H. Wiederholt (GGA-Institut) aufmerksam machte;
- die Ergebnisse des geothermalen Projekts in Bad Urach (Hänel, 1982);
- weitere Monographien aus unterschiedlichen geowissenschaftlichen Disziplinen (z. B. Bertleff et al., 1988, Zweigel, 1998, Preusche, 1996);
- unveröffentlichte Informationen aus den geologischen Landesämtern.

Die den Modelleinheiten zugeordneten thermischen Parameter sind in den Tabellen 3.4 und 3.5 zusammengefasst. Diese Werte entstammen eigenen Messungen und Parameterrekonstruktionen. Bereiche, die weder durch Kernmessungen, noch durch geophysikalische Logs oder Temperaturdaten belegt werden konnten, wurden aus der Literatur ergänzt. Insbesondere die von Schweizer Kollegen erstellte Datenbank der thermophysikalischen Eigenschaften der Molassegesteine (Leu et al., 1999) lieferte für die wenig konsolidierten Gesteine der oberen Molassestockwerke wichtige Daten. Weiter konnten wir auf Messungen an Kernen des NLfB (Schulz & Jobmann, 1989) und der GGA (Vosteen, pers. Mitt. 2001) zurückgreifen.

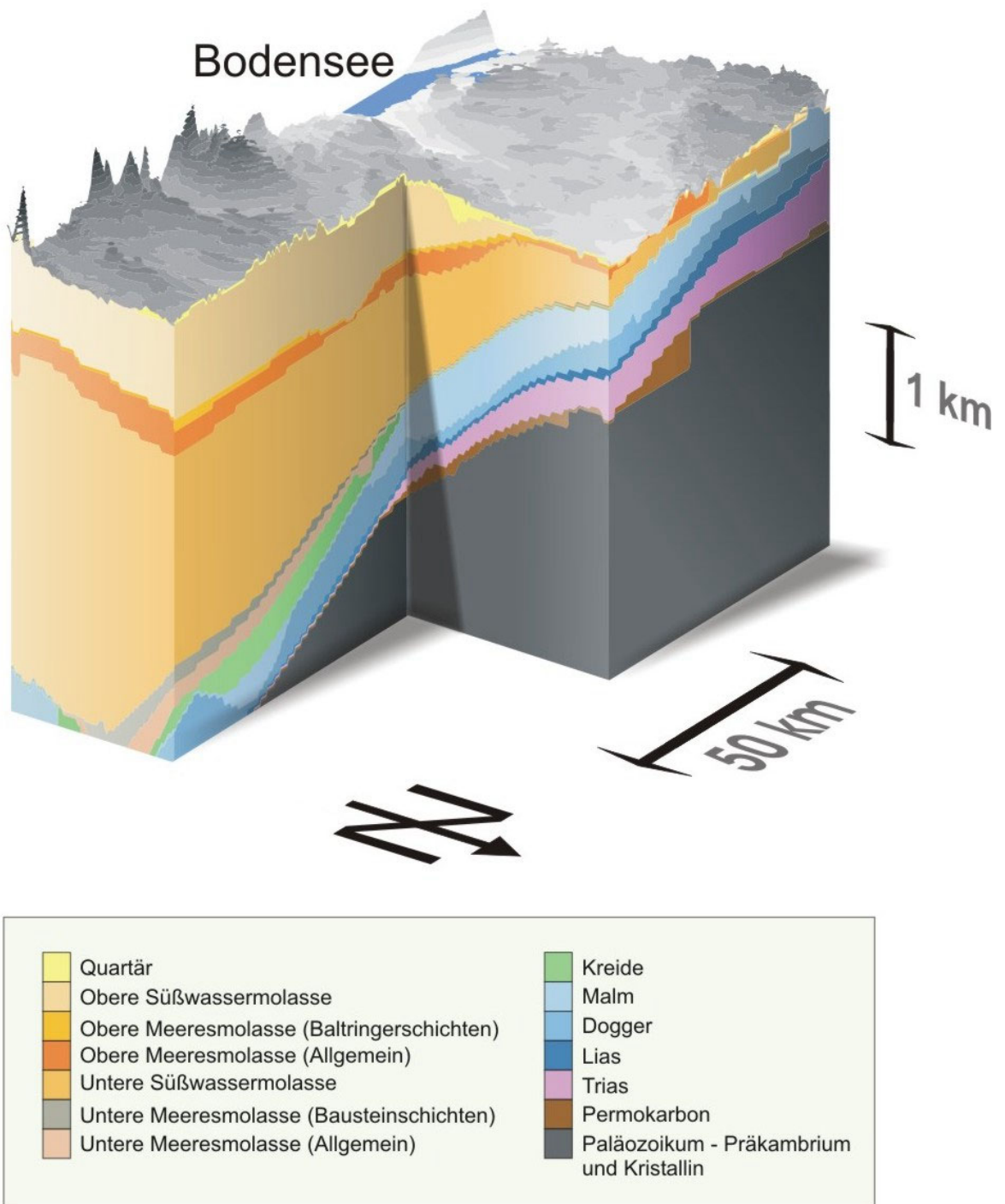


Abb. 3.44: Struktur des Finite-Differenzen-Modells des Untersuchungsgebiets. Die horizontale Gitterweite beträgt 1 km (137×77 Knoten) die vertikale 50 m (80 Knoten).

	Stratigraphische Einheiten	$\lambda \text{ (W m}^{-1} \text{K}^{-1})$			$\rho \text{ (kg m}^{-3})$			$c \text{ (kJ m}^{-1} \text{K}^{-1})$			$\rho c \text{ (MJ m}^{-3} \text{K}^{-1})$		
		min	max	mean	min ^I	max ^{II}	mean	min ^I	max ^{II}	mean	min ^I	max ^{II}	mean
1	Quartär ^{III}	1.72	1.89	1.8	1710	1890	1800	0.95	1.05	1.00	1.62	1.98	1.80
2	Obere Süßwassermolasse ^{IV/H}	2.67	3.0	2.83	2340	2587	2463	0.95	1.05	1.00	2.22	2.72	2.46
3	Obere Meeresmolasse (Baltringer-Schichten) ^{III}	2.87	3.141	3.0	2401	2654	2527	1.07	1.19	1.13	2.58	3.15	2.86
4	Obere Meeresmolasse (allgemein) ^{III A}	2.87	3.141	3.0	2401	2654	2527	1.07	1.19	1.13	2.58	3.15	2.86
5	Untere Süßwassermolasse ^{IV/G}	2.88	3.01	2.92	2339	2586	2676	1.02	1.12	978	2.38	2.90	2.61
6	Untere Meeresmolasse (Baustein-Schichten) ^{III}	2.76	3.02	2.88	2401	2654	2527	1.07	1.19	1.13	2.58	3.15	2.86
7	Untere Meeresmolasse (allgemein) ^{III A}	2.76	3.02	2.88	2401	2654	2527	1.07	1.19	1.13	2.58	3.15	2.86
8	Kreide ^{V B}	2.18	2.4	2.29	2565	2835	2700	0.86	0.95	0.90	2.19	2.68	2.43
9	Malm ^{VI D}	3.0	4.76	3.91	2546	2814	2680	0.86	0.96	0.91	2.20	2.69	2.44
10	Dogger (als Sandstein parametrisiert) ^{V E}	2.61	2.89	2.75	2161	2389	2275	1.00	1.11	1.06	2.17	2.65	2.40
11	Lias (als Tonstein parametrisiert) ^{V B}	2.26	2.5	2.38	1900	2100	2000	0.84	0.92	0.88	1.59	1.94	1.76
12	Trias (i.w. Keuper und Muschelkalk, als Kalk parametrisiert) ^{V B}	2.34	2.58	2.46	2339	2586	2462	1.02	1.12	1.07	2.38	2.90	2.63
13	Permokarbon ^{V B}	2.76	3.05	2.9	2375	2625	2500	0.95	1.05	1.00	2.26	2.76	2.50
14	Paläozoikum – Präkambrium / Kristallin ^C	2.5	4	3.0	2584	2856	2720	0.87	0.97	0.92	2.26	2.76	2.50

I: Mean – 5%; II: Mean + 5%; III: (Min – 4.2%/Max + 4.7%); IV: (Min = 1. Quartile / Max = 3. Quartile); V: (Min – 5% / Max + 5%); VI: (Mittelwert von sechs auf 20°C bezogenen Polynomen 2. Ord.), *: als Kalk parametrisiert; A: nach Leu, et al., 1999; B: nach Cermak & Rybach, 1982; C: nach H.-D. Vosteen, pers. Mitteilung, 2001; D: nach R. Schulz & M. Jobmann, 1989, NLF-Bericht; E: Häfner et al., 1992; G: GGA-Messung, Baitenhausen-1; H: GGA/RWTH-Messungen: Bad-Wurzach-1, 601-607 m.

Tab. 3.4: Werte der thermischen Gesteinseigenschaften aus eigenen Messungen und fremden Quellen (Wärmeleitfähigkeit λ , Dichte ρ , und spez. Wärmekapazität c_p sowie der sich hieraus ergebende Wert für das Produkt aus ρ und c). Es werden jeweils neben dem Mittelwert auch Minimal- und Maximalwert angegeben. λ jeweils bei 20°C und mit Wasser gesättigt.

	Stratigraphische Einheiten	$\lambda \left(\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1} \right)$	$\rho \left(\text{kg m}^{-3} \right)$	$c \left(\text{kJ m}^{-1} \text{K}^{-1} \right)$	$\rho c \left(\text{MJ m}^{-3} \text{K}^{-1} \right)$
1	Quartär ^{III}	1.89	1890.00	1.05	1.98
2	Obere Süßwassermolasse ^{IV H}	3.0	2586.42	1.05	2.72
3	Obere Meeresmolasse (Baltringer-Schichten) ^{III}	3.141	2653.47	1.19	3.15
4	Obere Meeresmolasse (allgemein) ^{III A}	3.141	2653.47	1.19	3.15
5	Untere Süßwassermolasse ^{IV G}	3.01	2585.49	1.12	2.90
6	Untere Meeresmolasse (Baustein-Schichten) ^{III}	3.02	2653.47	1.19	3.15
7	Untere Meeresmolasse (allgemein) ^{III A}	3.02	2653.47	1.19	3.15
8	Kreide ^{* V B}	2.18	2565.00	0.86	2.19
9	Malm ^{VI D}	3.0	2546.00	0.86	2.20
10	Dogger (als Sandstein parametrisiert) ^{V E}	2.61	2161.25	1.00	2.17
11	Lias (als Tonstein parametrisiert) ^{V B}	2.26	1900.00	0.84	1.59
12	Trias (i.w. Keuper und Muschelkalk, als Kalk parametrisiert) ^{V B}	2.34	2339.25	1.02	2.38
13	Permokarbon ^{V B}	2.76	2375.00	0.95	2.26
14	Paläozoikum – Präkambrium / Kristallin ^C	3.0	2720.00	0.92	2.50

Tab. 3.5: Die im konduktiven 3D-Modell verwendeten Werte für Wärmeleitfähigkeit λ , Dichte ρ , und spez. Wärmekapazität (bei konstantem Druck) c , sowie der sich hieraus ergebende Wert für das Produkt aus ρ und c , welches in Gl. 3.33 eingeht. λ jeweils bei 20°C und mit Wasser gesättigt. Hellblaue Werte wurden für die gezeigte Modellierung auf ihr Minimum (vgl. Tabelle 3.4) gesetzt. Gelb markierte Werte sind maximal, während grüne einen Mittelwert repräsentieren.

Nr.	Bohrung	Rechts (m)	Hoch (m)	Höhe (m NN)	Max. Tiefe (m)	Max. Temp. (°C)
1.	Alemania 1	3533720	5359335	681	694.69	59.607
2.	Alemania 2	3531500	5363300	705	663.01	44.316
3.	Arlesried 24	3602320	5331700	618	1016.58	43.347
4.	Arlesried 26a	3601680	5331290	631	1997.3	85
5.	Bad Buchau 1a	3545220	5325460	582	759.19	48.085
6.	Bad Burgberg B21/1	3589706	5383549	453	213.03	23.101
7.	Bad Endorf III Gt	3746775	5311983	530	2047.06	50.03
8.	Bad Überkingen 1	3558820	5385200	443	1293.51	79.362
9.	Bad Überkingen B71	3559280	5385770	465	753.84	48.544
10.	Bad Waldsee 1a	3557600	5309140	620	519.15	26.972
11.	Bad Waldsee GB2	3557460	5311220	613	1936.86	85.516
12.	Erding 1	3714243	5354238	470	2197.55	66.344
13.	Gaisbeuren 4	3557484	5304084	641	1440	60.28
14.	Günzburg 2	3595725	5369880	469	493.58	28.773
15.	Haimhausen 2a	3687680	5355705	463	1414.02	83.692
16.	Hebertshausen 3	3682356	5352642	478	1442.41	57.804
17.	Jordanbad/Biberach	3561175	5326775	538	1005.9	48.519
18.	Laimbach/Aulendorf	3550530	5314675	564	1260.41	58.419
19.	Mönchsrot 20	3575960	5320855	635	1936.91	85.317
20.	Mönchsrot 31	3574385	5319925	660	1959.02	84.76
21.	Mönchsrot 32	3576000	5320730	632	1924.47	81.751
22.	Nördlingen 1	3610845	5418034	425	810	48.46
23.	Oberschwarzach 6	3568455	5316470	696	1521.43	64.746
24.	Reichersberg 1	3822885	5364449	320	1539.14	75.512
25.	Saulgau Gb3a	3535700	5319860	619	907.15	50.869
26.	Urach 1	3527885	5374013	437	757.57	57.945
27.	Urach 3	3527652	5374430	431	3376.13	142.349

Tab. 3.6: Ungestörte Bohrlochtemperaturen, die in der Modellierung verwendet wurden.

3.6.2 Berechnung von Temperaturresiduen

Temperaturresiduen, die als Differenz zwischen den gemessenen Temperaturen und den aus dem Modell berechneten Werten definiert sind, geben einen Hinweis auf advektiven Wärmetransport in der jeweiligen Modellregion.

Um die Anpassung zu demonstrieren, wurden für die nachfolgende Abbildung 3.45 die Residuen aller im Modellgebiet vorhandenen ungestörten Logs ausreichender Tiefe dargestellt (Tab. 3.6). Die kontinuierlich gemessenen und anschließend in Bezug auf das Paläoklima korrigierten Temperaturmesswerte wurden auf die im Modell verwendete vertikale Gitterweite (50 m) mit einem kubischen Spline-Algorithmus interpoliert. Um mit diesen Werten eine Anpassung zu erreichen musste gegenüber den anfangs verwendeten unkorrigierten Temperaturen das Modell unter Beibehaltung der Wärmeleitfähigkeitswerte in mehreren Aspekten korrigiert werden: So musste der basale Wärmefluss signifikant von 88 mW/m² auf 94 mW/m² angehoben werden. Ebenfalls wurde Temperaturen zur Konstruktion der oberen Randbedingung T_0 neu aus einer linearen Regression der korrigierten 13 Logs berechnet. Dies war wegen den offensichtlich inkonsistenten Oberflächentemperaturen erforderlich, die aus den nur spärlich vorhandenen Langzeittemperaturen des Deutschen Wetterdiensts interpoliert und höhenkorrigiert worden waren.

Bei den meisten Bohrungen wurde eine befriedigende Anpassung erzielt. Weitere Modellverfeinerungen würden in einigen Bereichen sicher noch bessere Ergebnisse erbringen. Wie zu erwarten, erscheinen die (fündigen) geothermischen Bohrungen Bad Buchau, Saulgau und Jordanbad als positive Ausreißer, bei denen die gemessenen Temperaturen wesentlich größer sind als die konduktiv modellierten. Mönchsrot-20/31/32 und die nahe gelegene Bohrung Oberschwarzach haben einen sehr ähnlichen Verlauf. Hier ist das Modell wärmer als die Messwerte (ab ca. 800 m unter NN). Bei Bad Waldsee GB2, Mönchsrot 31/32/20 sowie Arlesried 26a tritt im unteren Bereich (Bausteinschichten und Malm) eine positive Anomalie auf, welche nicht konduktiv erklärt werden kann. Dies stützt die Ergebnisse der Pécletzahl-Analyse.

Abb. 3.46 ist ein Histogramm der gesamten Temperaturwerte im Untersuchungsgebiet, wobei zwischen Logmessungen und BHT-Werten unterschieden wird. Die gute Anpassung der kontinuierlichen Logs (rechts) im Vergleich zu den BHT (links) fällt unmittelbar ins Auge. Das schlechte Abschneiden der letzteren ist vermutlich überwiegend den großen Fehlern (mehrere K) anzulasten, die aus prinzipiellen Gründen bei der Korrektur von BHT-Werten auftreten (z. B. Förster, 1999, 2001). Ein weiterer Grund liegt in dem weitaus größeren Gebiet, welches die BHT-Werte überdecken.

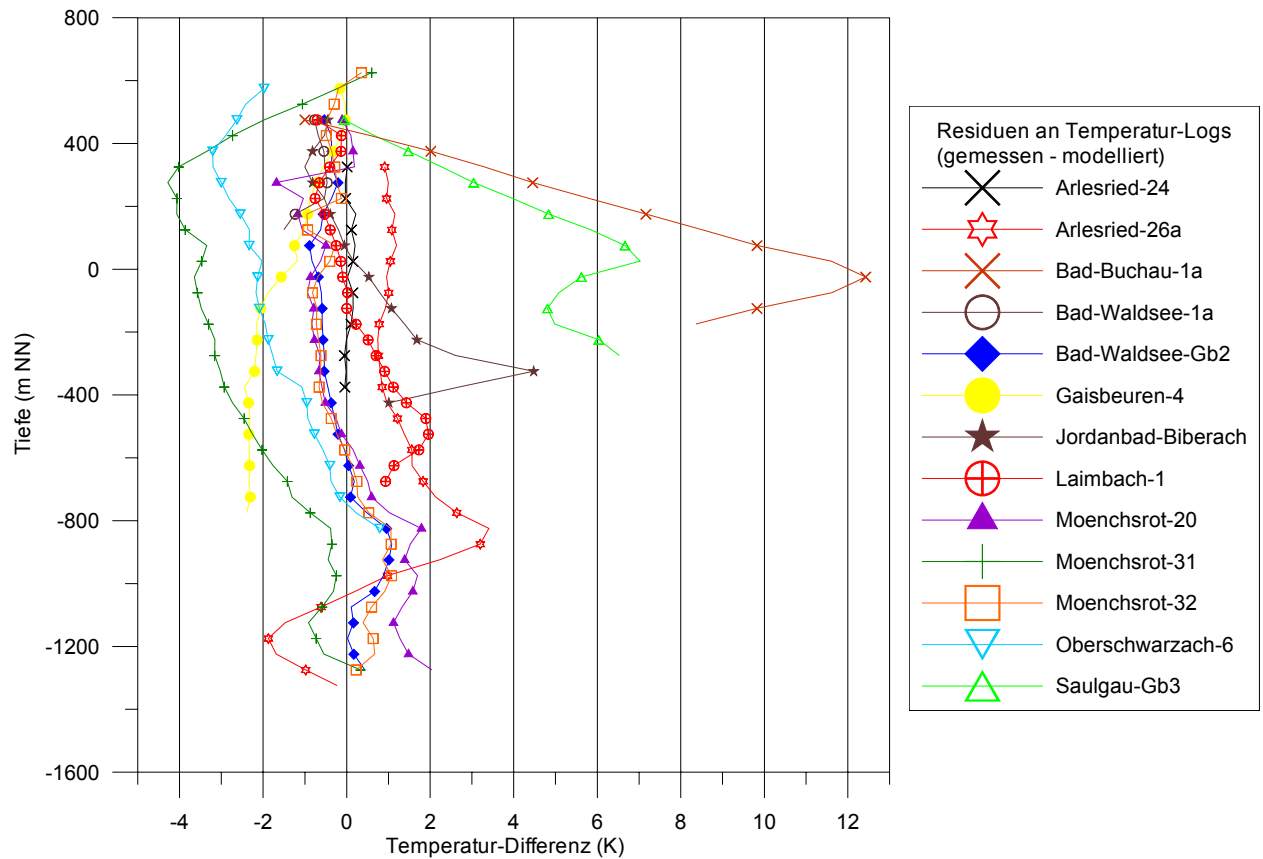


Abb. 3.45: Residual-Logs für die in Tab. 3.6 aufgeführten Lokationen.

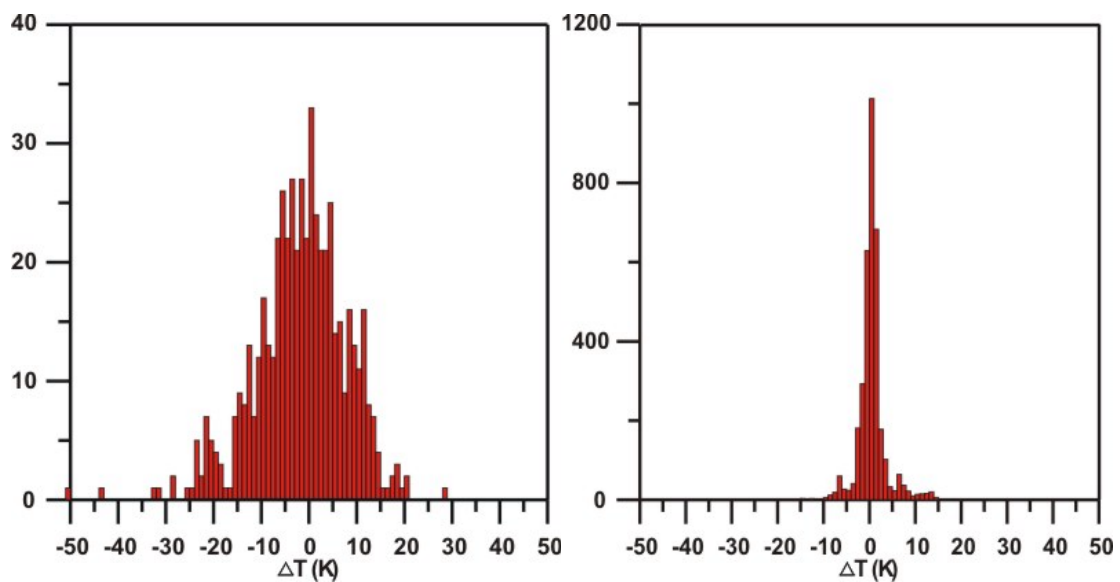


Abb. 3.46: Vergleich der Residuen. **Links:** BHT-Werte **Rechts:** Temperaturlogs. Die BHT zeigen eine deutlich größere Streuung als die Logs auf.

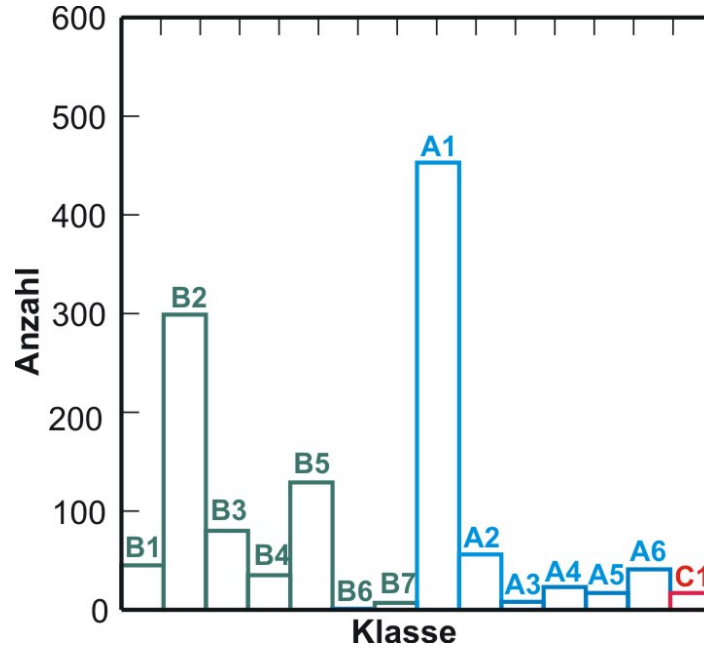


Abb. 3.47: Histogrammdarstellung der in Tab. 3.7 beschriebenen Qualitätsklassen der Messdaten. Grün sind hier die unterschiedlichen Typen der BHT-Werte, blau Logmessungen und rot Produktionstests gekennzeichnet.

Da die BHT-Werte sehr viel zahlreicher sind als die Daten hoher Qualität und viele Gebiete nur durch Daten dieses Typs überdeckt sind, wurde eine nähere Untersuchung zu diesen Daten durchgeführt. Wie schon betont, sind sie meist signifikant gestört und bilden daher das reale Temperaturfeld oftmals nur ungenügend ab (z.B. Förster & Merriam, 1999). Sie unterscheiden sich jedoch intern zusätzlich durch die Information, die am jeweiligen Messpunkt zur Verfügung steht und die Qualität der möglichen Korrekturen bestimmt. In Abb. 3.47 ist ihre Häufigkeit im Modellgebiet dargestellt, wobei Tab. 3.7 die einzelnen Qualitätsklassen dokumentiert.

Aufgrund der ungünstigen räumlichen Verteilung der Daten (sehr hohe Anzahl von Messungen in vertikaler und große Datenlücken in lateraler Richtung) sind viele Algorithmen zur räumlichen Interpolation ungeeignet. Einen stabilen und robusten Algorithmus in diesem Fall liefert der folgende Ansatz: Sei $T_{x,y,z}$ der aus den unregelmäßig verteilten T_i zu interpolierende Funktionswert auf dem regulären x, y, z - Gitter. Er kann durch eine normierte gewichtete Mittelung

$$T_{x,y,z} = \frac{\sum_{i=1}^n (a_i T_i)}{\sum_{i=1}^n a_i} \quad 3.34$$

mit $a_i = h_i^{-b}$, $h_i = \sqrt{r_i^2 + \varepsilon^2}$ und $r_i = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$ berechnet werden. In diesem Fall ergibt sich der gebräuchliche Algorithmus der Inversen Distanzen (z.B. Bartier & Keller, 1996).

Zwei Steuerparameter bestimmen das Verhalten des Interpolators: der Exponent b (üblicherweise ≥ 2) beeinflusst Form und effektiven Einflussradius des zu interpolierenden Punktes. Der Parameter ε beseitigt die potentielle Singularität bei $r_i=0$ und regelt die Glätte der Interpolation in der Nähe der Datenpunkte.

Symbol	Wichtung	Beschreibung der Messung
A1	1	undisturbed logs (GGA-S4)
A2	1	undisturbed logs (GGA / NLfB / BGR)
A3	1	undisturbed logs (others)
A4	0.2	disturbed logs (GGA-S4)
A5	0.2	disturbed logs (GGA / NLfB / BGR)
A6	0.2	disturbed logs (unknown)
B1	0.7	BHT with at least 3 temperature measurements $T=T(t)$ in one depth; corrected with a cylinder-source ansatz
B2	0.63	BHT with at least 3 temperature measurements $T=T(t)$ in one depth; corrected using the Horner-plot method
B3	0.63	BHT with at least 2 temperature measurements $T=T(t)$ in one depth; corrected with an explosion line-source ansatz
B4	0.35	BHT with one temperature measurement, known radius and time since circulation (TSC)
B5	0.35	BHT with one temperature measurement, known TSC
B6	0.14	BHT with one temperature measurement, known radius
B7	0.14	BHT with one temperature measurement, unknown radius and unknown TSC
C1	0.7	Production test (DST)

Tab. 3.7: Die verschiedenen Qualitätsklassen der Temperaturmessungen und ihre jeweilige Wichtung. Ein einfacher Ansatz um die BHT's bei der Berechnung von Temperatur-Residuen doch mit in eine Betrachtung einfließen zu lassen, ist sie bei einer räumlichen Interpolation qualitätsgewichtet zu berücksichtigen.

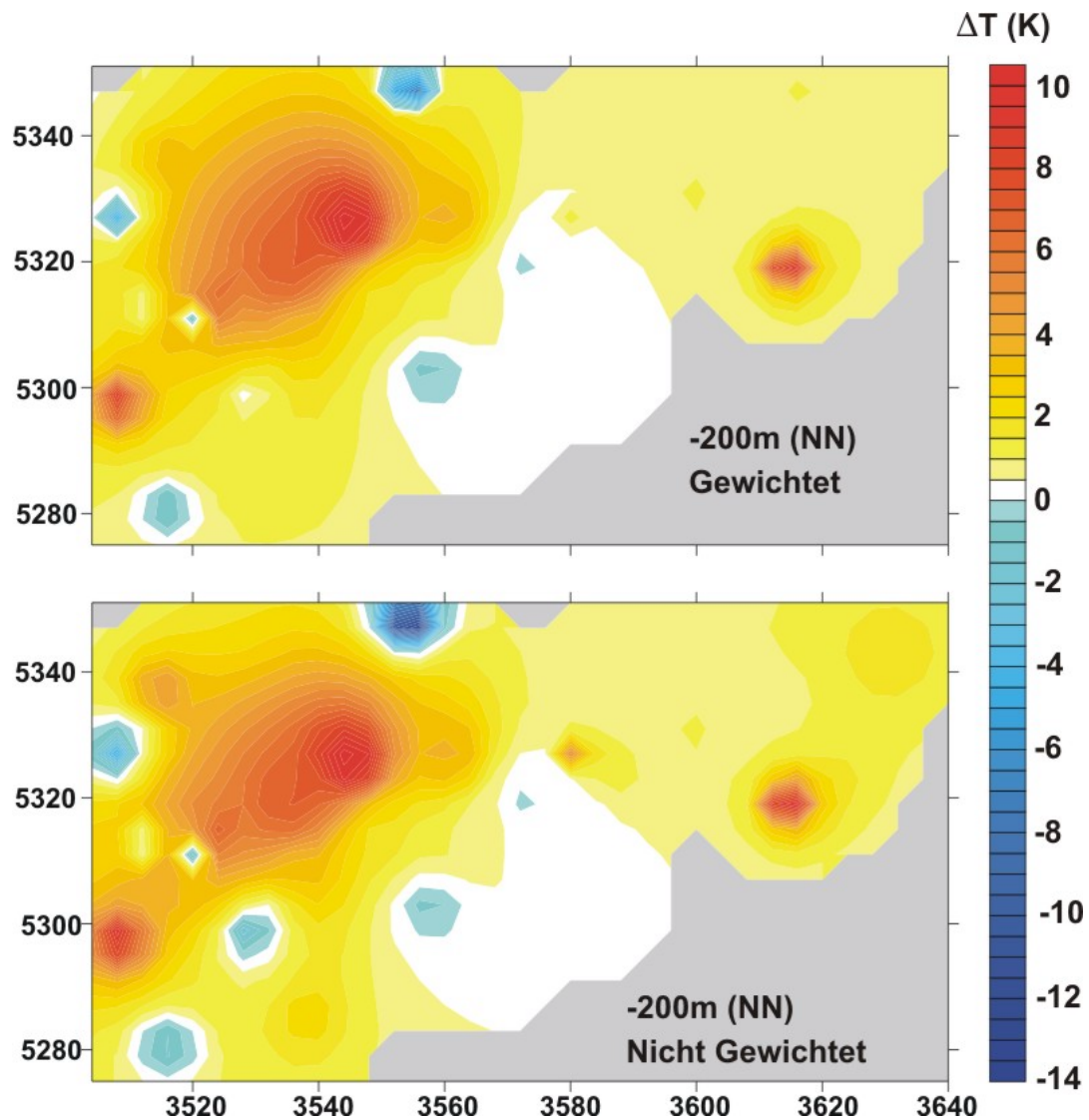


Abb. 3.48: Beispiel des Einflusses der qualitätsabhängigen Wichtung auf die Interpolation durch die Methode der Inversen Distanzen. Details s. Text.

Führt man eine qualitätsabhängige Gewichtung φ_i ein, ergeben sich die Gewichte zu $a_i = \varphi_i h_i^{-b}$. Abb. 3.48 gibt die Wirkung der qualitätskontrollierten Berücksichtigung von BHT Werten auf das interpolierte Bild des Temperaturfeldes in einer bestimmten Tiefe wieder. Die hierzu notwendigen Berechnungen wurden mit einem hierfür in Java geschriebenen Programm (InvDist3D) erstellt. Bereiche bei denen der nächste Datenpunkt weiter als die mittlere laterale und/oder vertikale durchschnittliche Datenpunktdistanz beträgt werden nicht dargestellt (graue Fläche). Die Wichtung φ_i entspricht den in Tab. 3.7 angegebenen Werten.

Zur Berechnung dreidimensionaler Temperaturresiduen wurden zunächst alle Logs und alle Temperaturmesswerte aus der Datenbank mit Ausnahme der BHT verwendet. Es handelt sich dabei um insgesamt 3539 einzelne Werte aus ungestörten und gestörten Logs, sowie anderen Messungen. Die neueren ungestörten Logs (mit einer Abtastrate im Zentimeterbereich) wurden auf einen Abstand von 5 m dezimiert. Für jeden dieser Messwerte werden die umliegenden modellierten Werte an die Position des gemessenen Wertes interpoliert. Die hieraus berechneten Residuen wurden mit der Methode der Inversen Distanzen räumlich

interpoliert und dann die gewünschten Tiefenschnitte graphisch dargestellt. Die Ergebnisse dieser Methode sind in den Abb. B1–B23 im Anhang B dargestellt. Die schwarzen Punkte markieren die Messpunkte. Die Größe der Punkte charakterisiert ihre Entfernung zur aktuellen Ebene. Es ist zu beachten, dass die Tiefenangaben auf NN bezogen sind, d. h. bei einer mittleren Geländehöhe im Modellgebiet von ca. 640 m über NN liegt die –250 m (NN) Ebene ungefähr 890 m unter der Geländeoberfläche.

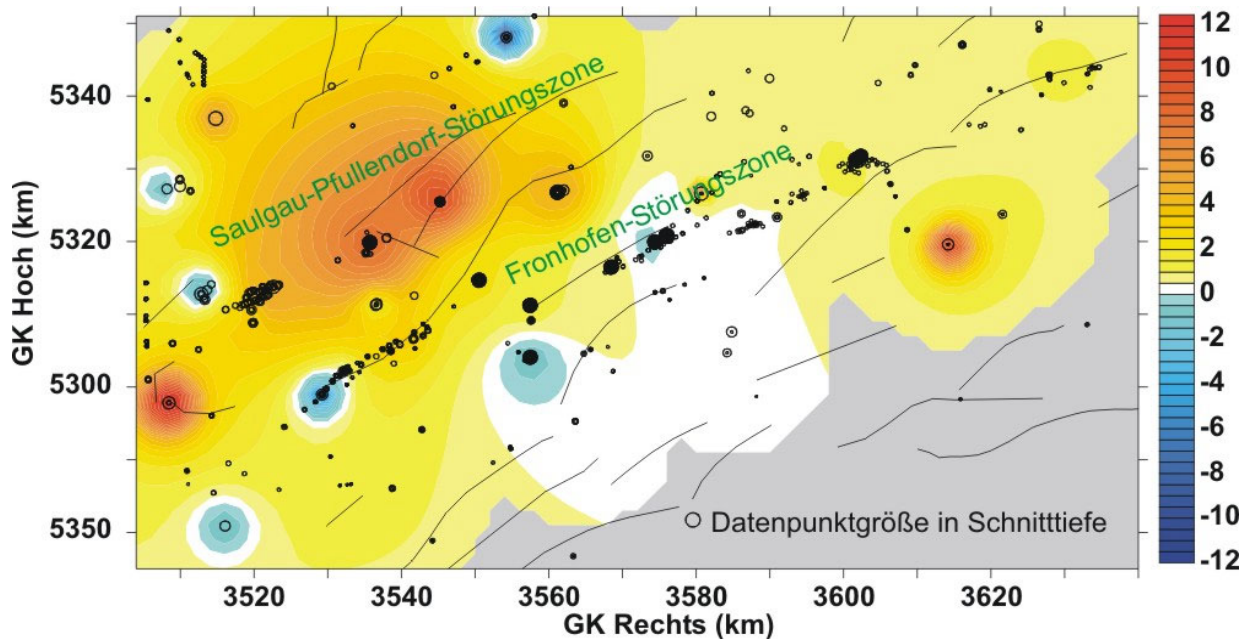


Abb. 3.49: Temperaturresiduen in 250 m Tiefe, zusätzlich dargestellt sind die Störungen und alle ungestörten Logs im Modellgebiet. Durchgezogene Linien sind der Geologischen Karte von Baden-Württemberg entnommen, die gepunkteten Strukturen entstammen ihrem bayerischen Gegenstück.

In Abb. 3.49 ist ein solcher Schnitt mit den aus der Literatur bekannten tektonischen Elementen unterlegt. Von +200 m bis –250 m Tiefe tritt im nordwestlichen Sektor des Modells eine positive Anomalie auf. Sie ist an die Pfullendorf-Saulgauer Verwerfung gebunden, und ist durch - hier nicht dargestellte - BHT Messwerte noch einige Kilometer weiter nach Südwesten im Streichen der Störungszone belegt (Entlang der Störung: Saulgau, Bad Buchau, an eine weiter östlich parallel streichende Störung gebunden: Jordanbad/Biberach). Auf der südöstlichen Seite dieser Störungszone erscheint spiegelbildlich eine ähnlich streichende negative Anomalie (Gaisbeuren, Bad Waldsee, Oberschwarzach, Mönchsrot). Die thermal durchströmten Bereiche scheinen an Störungen gebunden zu sein. Trennungslinie zwischen den Bereichen positiver und negativer Residuen ist die Saulgau-Fronhofen-Verwerfung. Kritisch anzumerken ist, dass es sich bei einem Teil der hier einbezogenen Bohrungen um Geothermie-Bohrungen handelt, also so thermische Anomalien überrepräsentiert sind. Daher verwundert auch nicht, dass die Modell-Temperaturen generell etwas zu niedrig liegen.

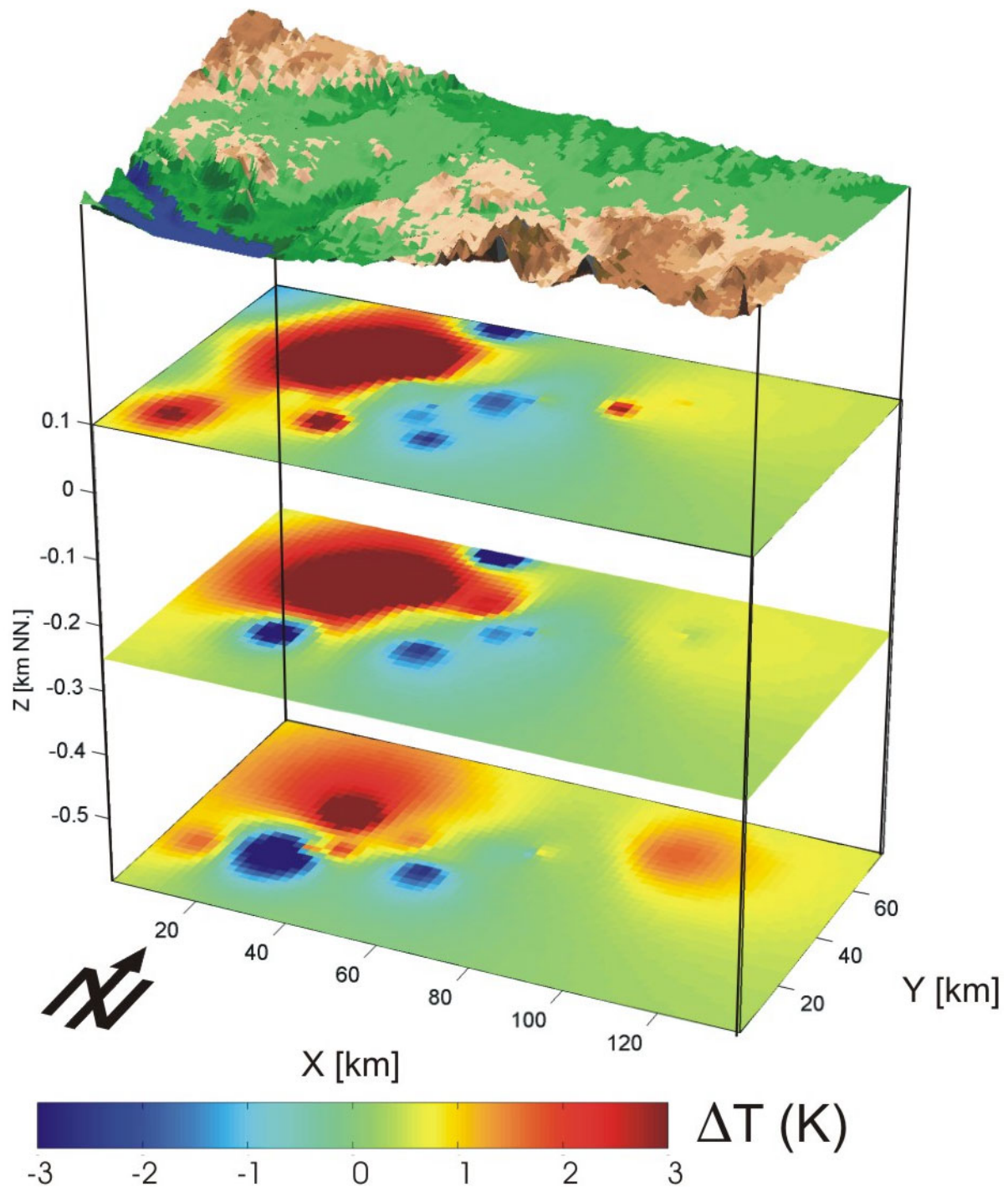


Abb. 3.50: Montage der Residualtemperaturen in den Tiefen von 100, -250 und -500 m bezogen auf NN, entsprechend etwa 500, 850 und 1100 unter GOK.

Abb. 3.50ß stellt zur besseren Orientierung einige der Residualschnitte in den Tiefen von 100, -250 und -500 m bezogen auf NN (etwa 500, 850 und 1100 unter GOK) zusammen mit der Geländeoberfläche dar. Insgesamt ergibt sich das in Abb. 3.38 wiedergegebene schematische Bild: Während im südlichen Teil des Untersuchungsgebiets negative Residuen („ge-

gemessene Temperaturen zu niedrig“) überwiegen, sind im Norden positive Werte („gemessene Temperaturen zu hoch“) die Regel.

Die in den Abb. 3.49-3.51 (und im Anhang B) dargestellten Temperaturresiduen weisen auf eine abwärtsgerichtete Strömung im Südosten und eine Aufwärtsbewegung im Nordwesten des Messgebiets hin (schematische Pfeile in Abb. 3.51). Es kann jedoch aus diesem Muster nicht bereits auf ein Modell, etwa das einer Konvektionszelle, geschlossen werden. Ein konzeptionelles Modell der Strömungssysteme kann erst durch eine dreidimensionale Grundwassermodellierung abgeleitet werden, die einer Projektfortsetzung vorbehalten bleiben muss.

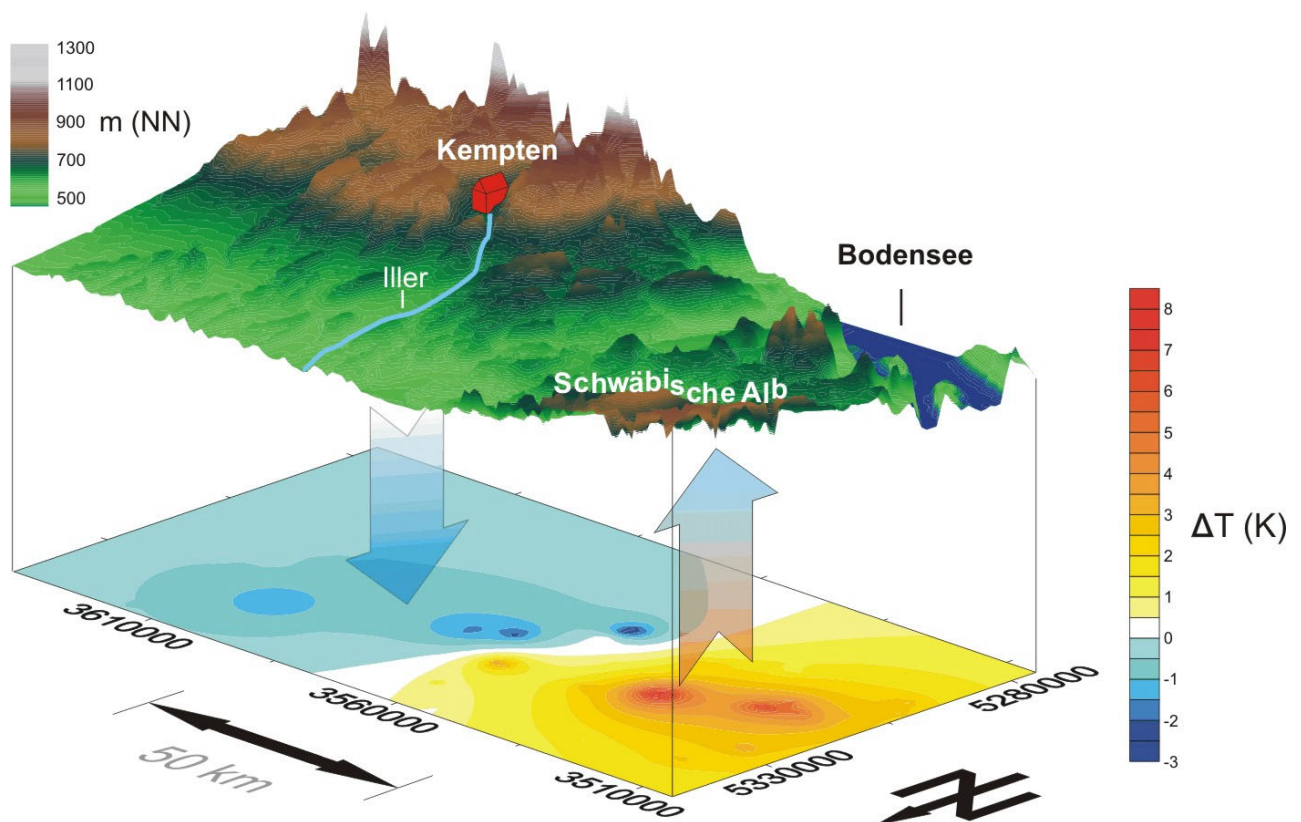


Abb. 3.51: Schema der Grundwasserbewegung im Untersuchungsgebiet. Oben: Topographie Unten: Residualtemperaturen in einer Tiefe von -250 m bezogen auf NN; das entspricht einer Tiefe von ca. 900 m unter der Geländeoberfläche

4. Bewertung des Erfolgs des Gesamtprojekts und Schwerpunkte der zukünftigen Arbeiten

Die im Rahmen dieses Projekts erzielten Ergebnisse demonstrieren beeindruckend das große Potenzial der geothermischen Methode (1) für die Ausweisung von Gebieten mit signifikanter Durchströmung tiefer Gesteinsschichten sowie (2) für die Quantifizierung des Betrags und der Richtung solcher Strömungen. Selbst unter nicht-optimalen Bedingungen hinsichtlich Anzahl, Verteilung und Qualität der verwendeten Daten konnten diese Projektziele erreicht werden. Die Laufzeit des Projekts von 1½ Jahren setzte zwar eine harte Randbedingung für die Realisierung möglicher und wünschenswerter methodischer Fortentwicklungen und Verfeinerungen. Trotzdem wurden auch in dieser Hinsicht bei der Inversion des Paläoklimas deutliche Fortschritte erzielt. Es ist heute bereits deutlich erkennbar, welche Verbesserungen in der Trennschärfe und Genauigkeit der Aussagen zum Strömungsfeld durch eine konsequente Fortführung des begonnenen Forschungsprogramms erzielt werden können. Im Lichte der konkreten Zielstellung handelt es sich hierbei um angewandte Grundlagenforschung im besten Sinne des Wortes.

In Zukunft muss die Untersuchung des Beitrags der Grundwasserströmung zum Wärmetransport außer der Modellierung der relevanten gekoppelten Prozesse eine Validierung des gefundenen Modells beinhalten. Dies kann nur geschehen, wenn unabhängige Daten (wie z. B. die Isotopengeochemie) zur Verfügung stehen, die nicht schon in die Modellentwicklung eingegangen sind. Darüber hinaus ermöglicht eine Integration dieser Daten in den Modellierungs- und Schätzprozess eindeutige und genauere Aussagen über die Strömungssysteme im Untergrund. Bei einer Fortsetzung des Projekts werden daher die Vernetzung und Integration der geothermischen Untersuchungen mit anderen Verfahren eine besondere Rolle spielen.

1. Entwicklung eines dreidimensionalen Strömungsmodells für die westliche Molasse

Auf Grundlage der im laufenden Projekt gewonnenen Daten und Parameter muss zur Entwicklung eines konzeptionellen Modells und Validierung der Ergebnisse eine dreidimensionale Modellierung der Grundwasserströmung erfolgen. Dies erfordert im Vergleich zum vorhandenen, auf reiner Wärmeleitung beruhenden Referenzmodell eine deutlich gesteigerte Genauigkeit und Auflösung, insbesondere da in der Strömungsmodellierung kleinräumige tektonische Strukturen (wie Störungszonen) eine wichtige Rolle spielen.

Hierbei ist die Berücksichtigung von neuen unabhängigen Daten für die nach der Modellkonstruktion notwendige Validierung des Modells von zentraler Bedeutung. Die entsprechenden Zerfalls- und Austauschprozesse müssen zum Teil noch in das vorhandene Rechenmodell eingeführt werden. Auch die chemophysikalischen Basisdatensätze müssen entsprechend ergänzt werden. In diesem Zusammenhang ist zudem der Übergang zu einer zeitabhängigen Modellierung des Systems erforderlich.

2. Datenassimilation und Petrophysik

Die im Rahmen des Projekts entwickelten Messverfahren und Auswertungsmethoden für die Bohrlochlogs müssen deutlich effizienter gemacht werden sowie – im Zusammenhang dieses Projekts besonders wichtig – geeicht und auf ihre systematischen Fehlerquellen untersucht werden.

In diesem Projekt wurde deutlich, dass eigene direkte Messungen, so wichtig sie sind, in der Regel nicht ausreichen, um die thermischen Gesteinseigenschaften für die Belange dieses Projekts hinreichend zu charakterisieren. Es ist bei den von uns angestrebten regionalen Untersuchungen nötig, die gesamte vorhandene Vorinformation im statistischen Sinn in ein gemeinsames Parameterschätzverfahren einzubringen. Ein derartiges Vorgehen ermöglicht nicht nur eine Interpolation der fehlenden Daten, sondern auch Angaben über Fehlerintervalle. Es liegen zwar erste Ergebnisse dieser Methodik vor, trotzdem besteht hier ein erheblicher Bedarf an weiterführender Methodenentwicklung.

Bisher sind diese Verfahren wegen der im Vergleich geringeren Computeranforderungen nur für eine eindimensionale Modellgeometrie implementiert. Die ist eine gute Näherung, solange – wie für ein Referenzmodell sinnvoll – nur die Wärmeleitung berücksichtigt wird. Wird auch eine Strömung in die Umkehrrechnung einbezogen, sind wegen der großen Variabilität der Gesteinsdurchlässigkeit deutliche dreidimensionale Effekte zu erwarten. Dies erfordert von vornherein ein aufwendigeres Rechenverfahren für eine gekoppelte Modellierung.

Eine Inversion mit den bisherigen Rechenmethoden ist in diesem Fall nicht mehr effizient. Daher müssen weitergehende Methoden eingesetzt werden. Wir wollen hier zwei sich hervorragend ergänzende Wege beschreiten:

Die Modellfindung (Parameterschätzung) soll mit effizienten deterministischen Verfahren geschehen, deren kritischer Schritt die schnelle Berechnung der Ableitungsmatrizen ist. Dies soll durch Einsatz von Verfahren des Automatischen Differenzierens geschehen, welches z. B. in der ozeanographischen und meteorologischen Simulation zum Einsatz kommt und maßgeblich von Prof. C. Bischoff (RWTH Aachen) am Argonne National Laboratory entwickelt wurde, der eine Mitarbeit in unserem Projekt zugesagt hat.

Die Modellbewertung (Fehleranalyse) soll für kritische (d. h. möglicherweise durchströmte) Zonen mit Zufallsmethoden erfolgen, da diese eine bessere Kontrolle des Fehler- und Äquivalenzverhaltens ermöglichen.

Insbesondere sollen im Fortgang des Projekts weitere physikalische und chemische Prozesse einbezogen werden, da diese die Zahl der möglichen Strömungsmodelle weiter einschränken. Messdaten, die aus diesen Prozessen resultieren (Geochemie des Grundwassers, Isotopengeochemie) sind in allen potentiellen Arbeitsgebieten vorhanden.

3. Untersuchung der Übertragbarkeit durch eine Detailstudie in einem weiteren Messgebiet

Das Arbeitsgebiet der westlichen Molasse weist – wie jede in Frage kommende Region – neben verallgemeinerbaren Eigenschaften auch spezifische Charakteristika auf. Dies gilt sowohl für die Geologie, als auch für die Unterschiede in Charakter, Qualität und Dichte der Daten. Es ist daher wichtig, die für die Untersuchung der westlichen Molasse entwickelten Verfahren und die dort gemachten Erfahrungen in einem weiteren Zielgebiet anzuwenden und ihre Übertragbarkeit kritisch zu bewerten. Wir schlagen daher auf Grundlage unserer im 2. Zwischenbericht vom 5. März 2001 beschriebenen Untersuchungen das Thüringer Becken als weiteres Untersuchungsgebiet vor.

Anhang

A. Pécletzahl-Analysen sämtlicher ungestörter Bohrungen

Bei den hier präsentierten Darstellungen sind nebeneinander die Bohrlochtemperatur, die Wärmeleitfähigkeit und der natürliche Logarithmus der Wärmeflussdichte dargestellt. Die Darstellung der Wärmeflussdichte zeigt zusätzlich die zur Analyse verwendete Regressionsgerade und ist jeweils mit einer schematischen Stratigraphie hinterlegt. Die Farbkodierung entspricht derjenigen in Abb. 3.5.

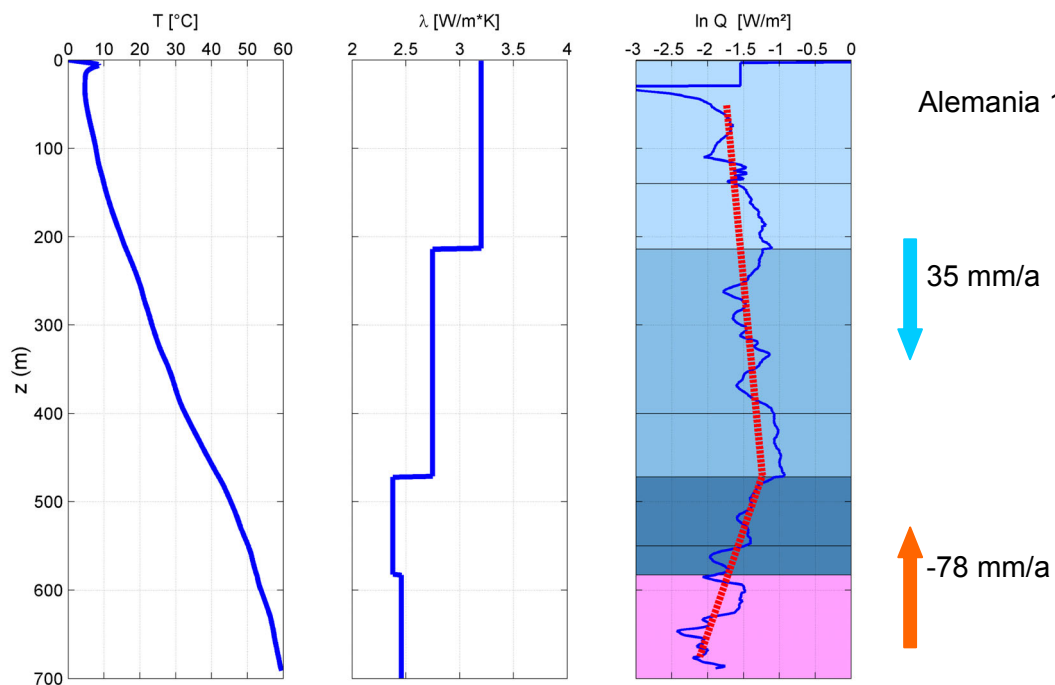


Abb. A.1: Pécletzahl-Analyse Bohrung Alemania 1.

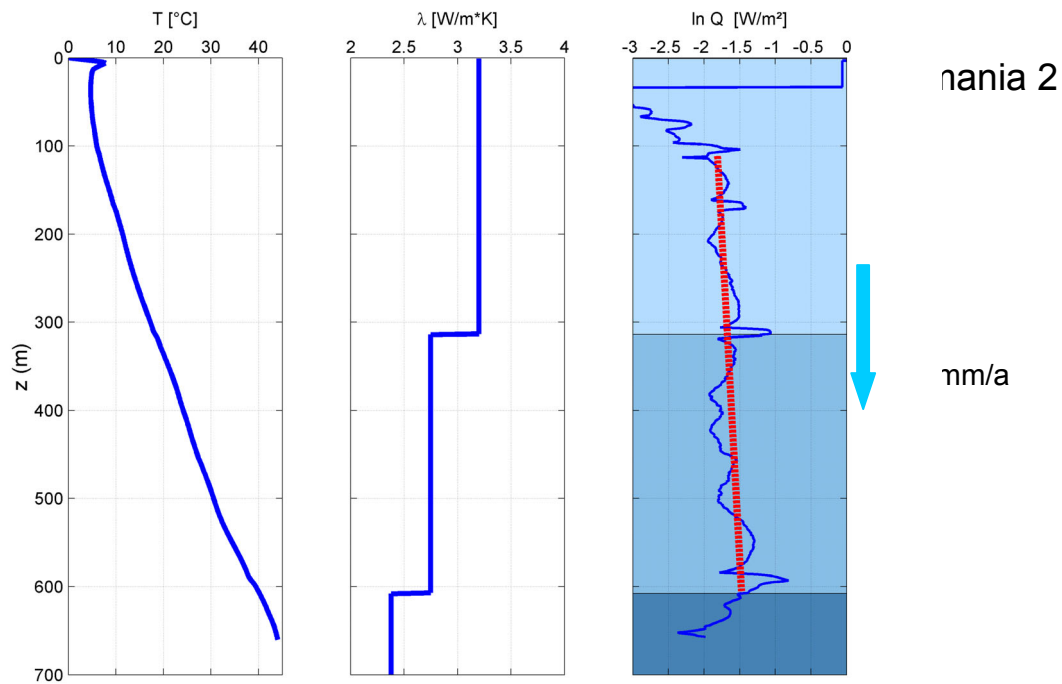


Abb. A.2: Pécletzahl-Analyse Bohrung Alemania 2.

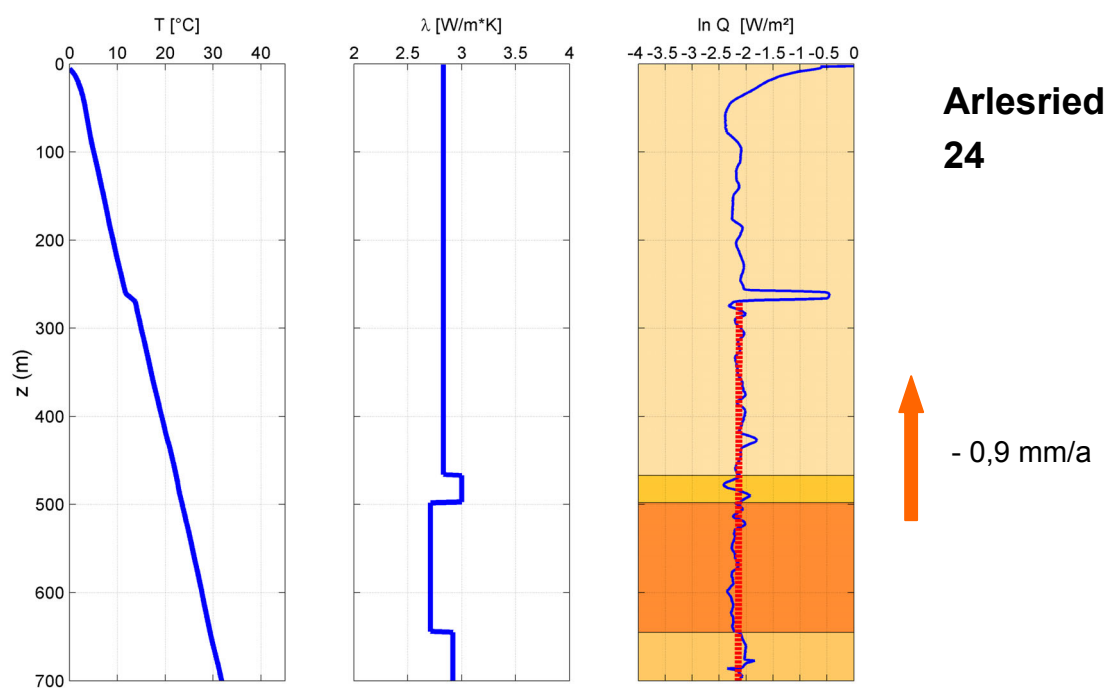


Abb. A.3: Pécletzahl-Analyse Bohrung Arlesried 24.

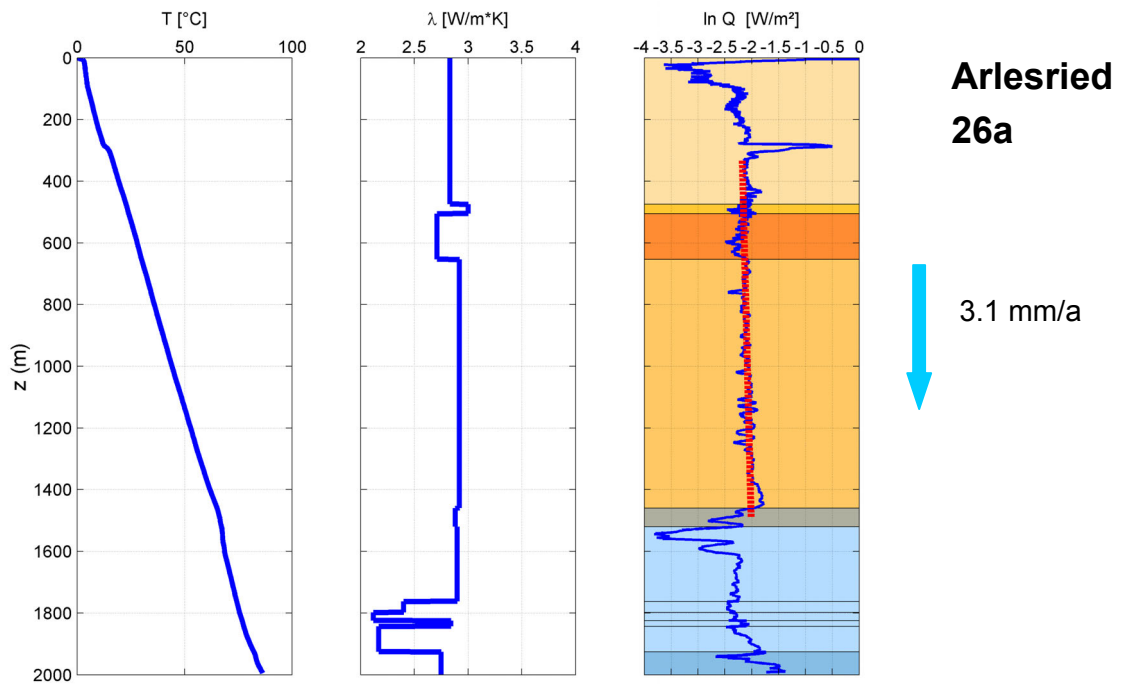


Abb. A.4: Pécletzahl-Analyse Bohrung Arlesried 26a.

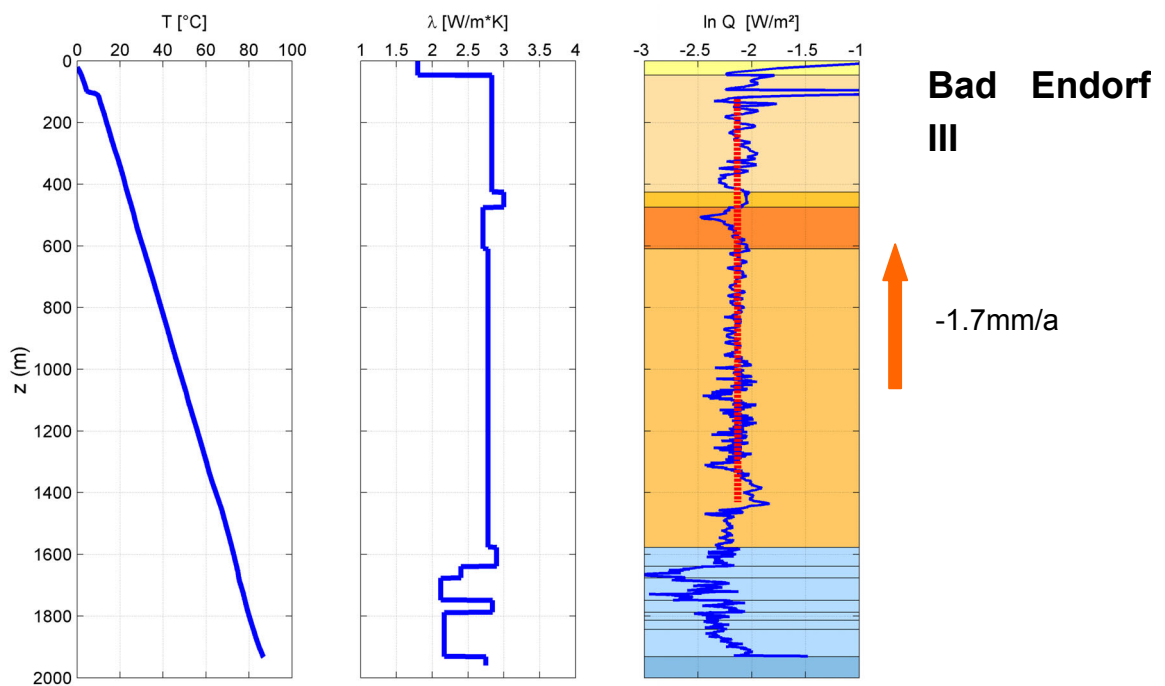


Abb. A.5: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Endorf III.

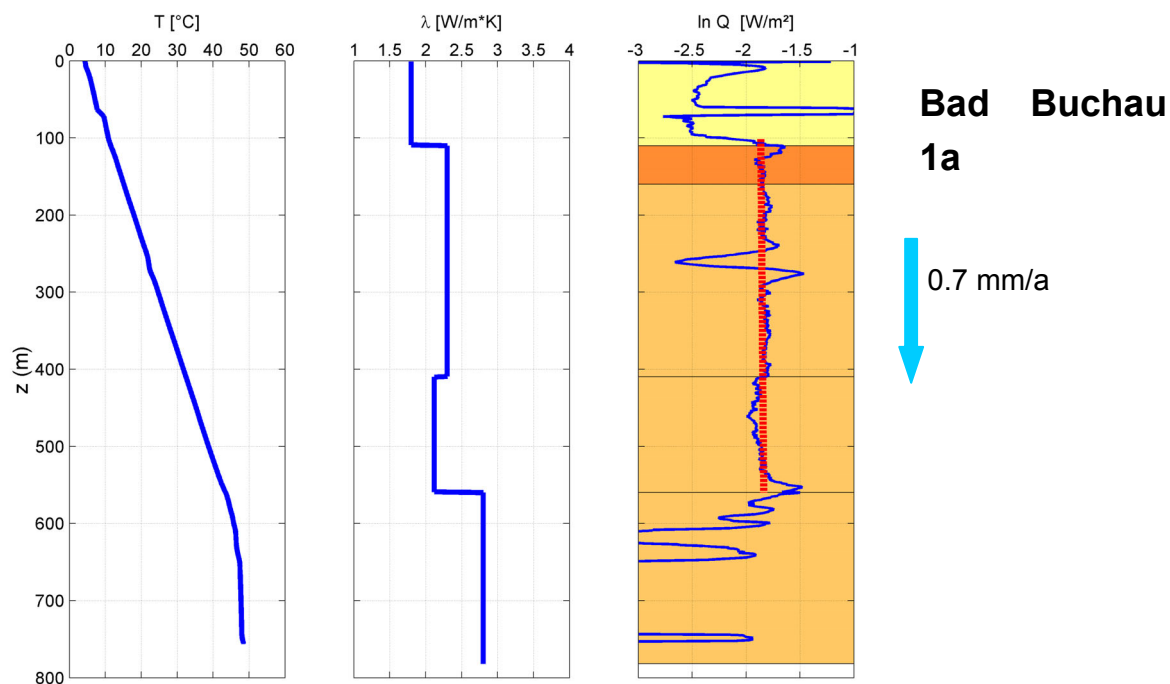


Abb. A.6: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Buchau 1a.

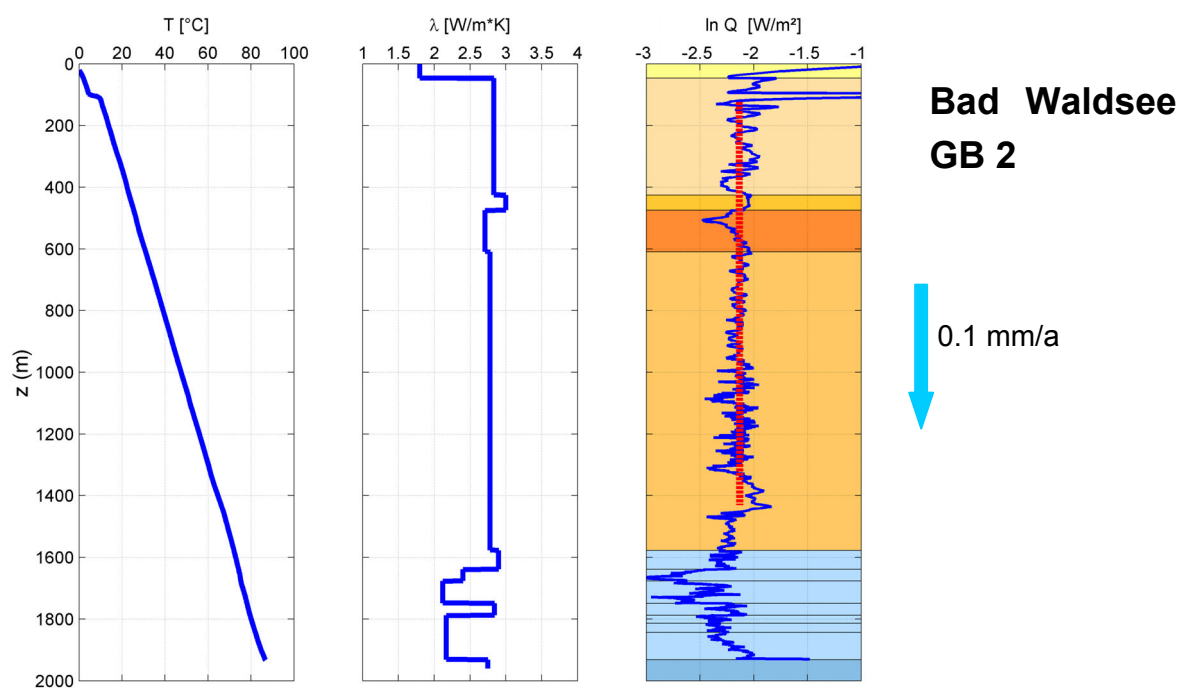


Abb. A.7: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Waldsee GB 2.

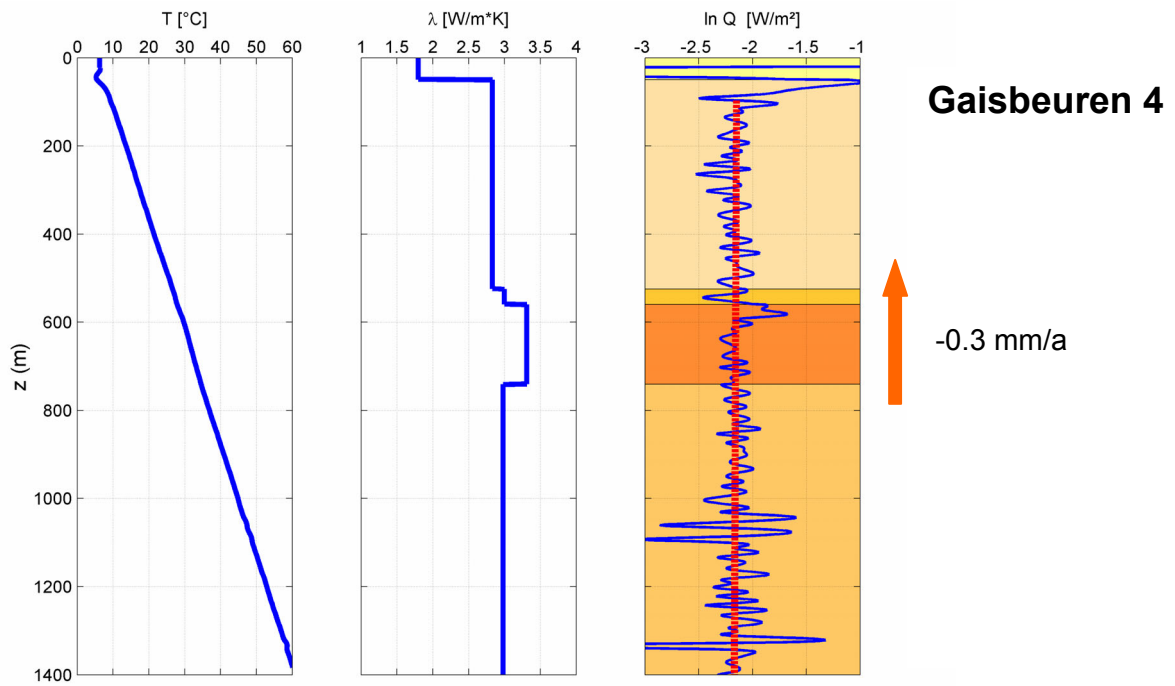


Abb. A.8: Pécletzahl-Analyse Bohrung Gaisbeuren 4.

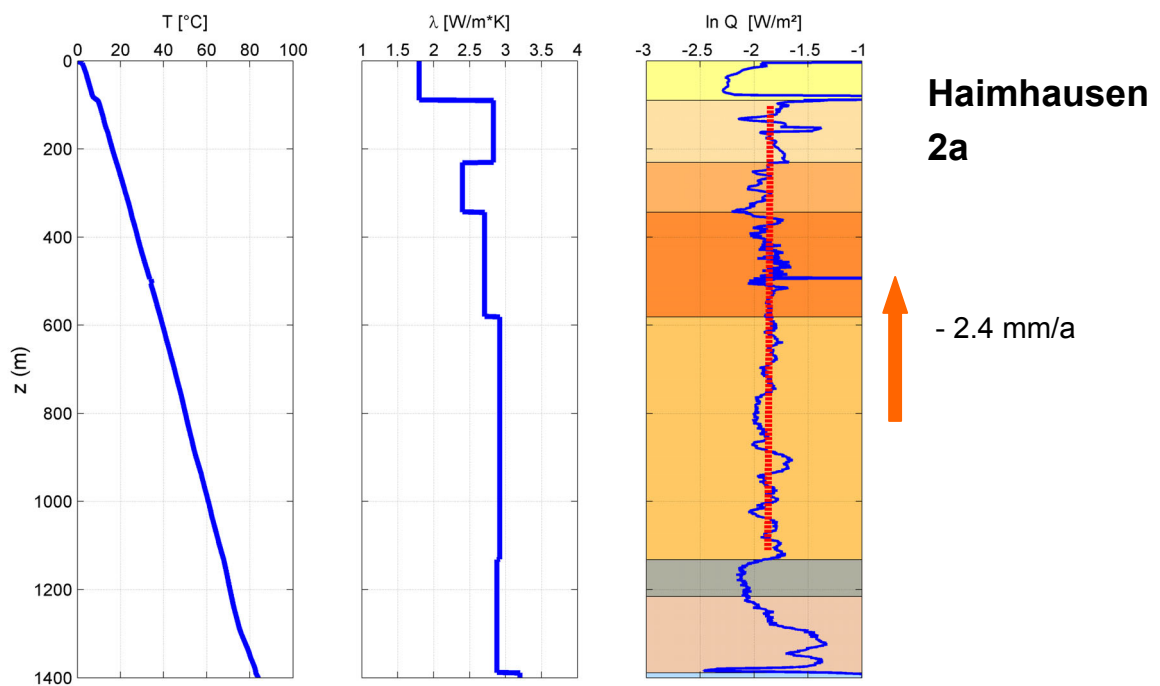


Abb. A.9: Pécletzahl-Analyse Bohrung Haimhausen 2a.

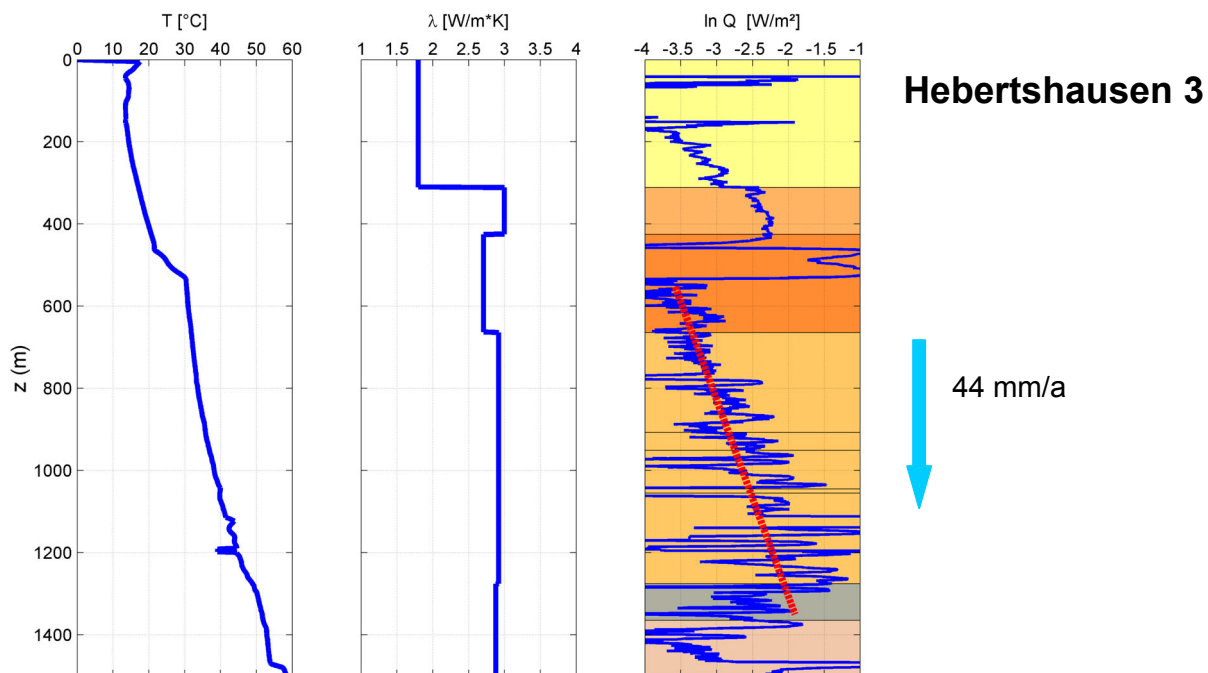


Abb. A.10: Pécletzahl-Analyse Bohrung Hebertshausen 3.

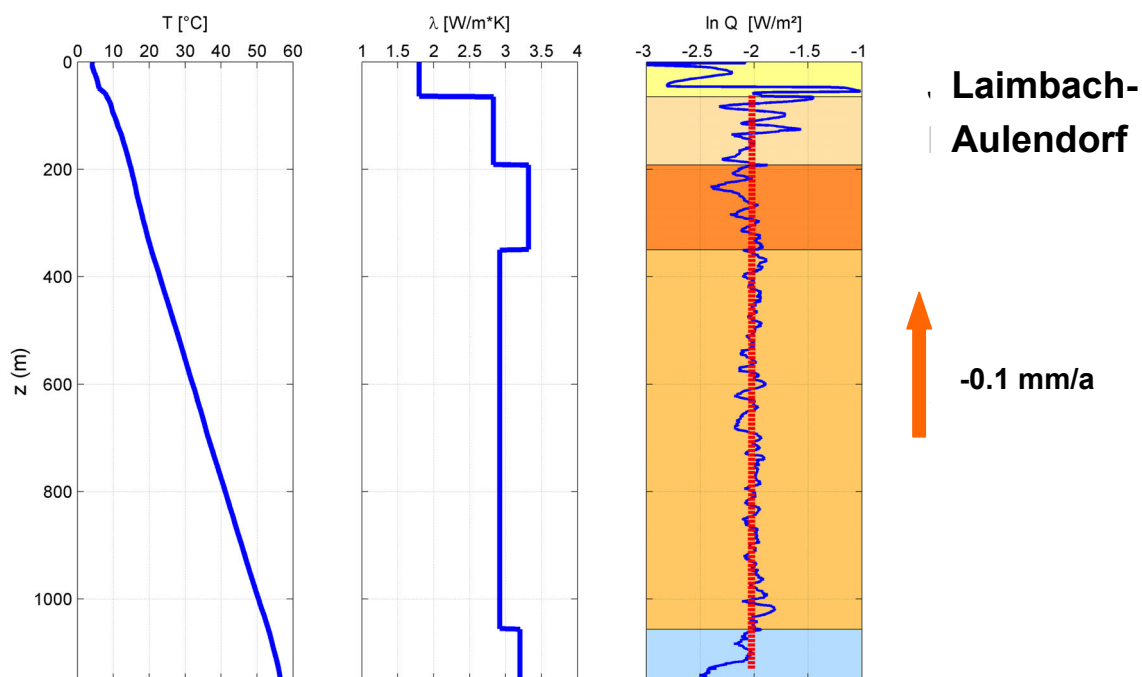


Abb. A.11: Pécletzahl-Analyse Bohrung Laimbach-Aulendorf.

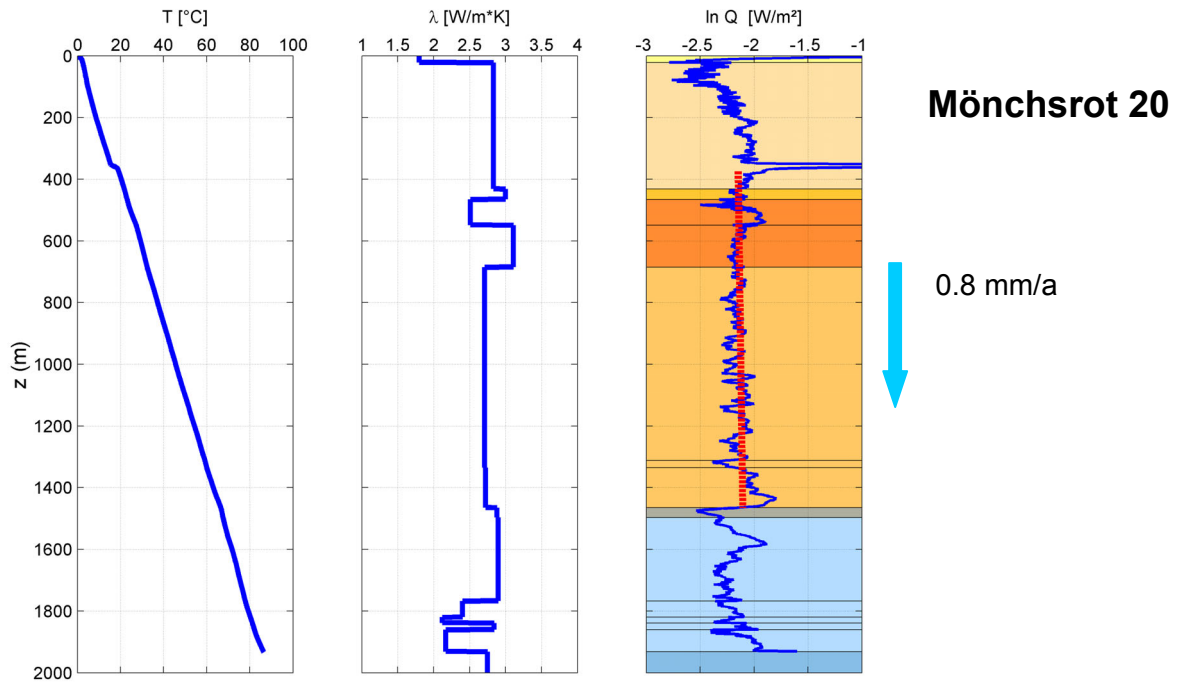


Abb. A.12: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 20.

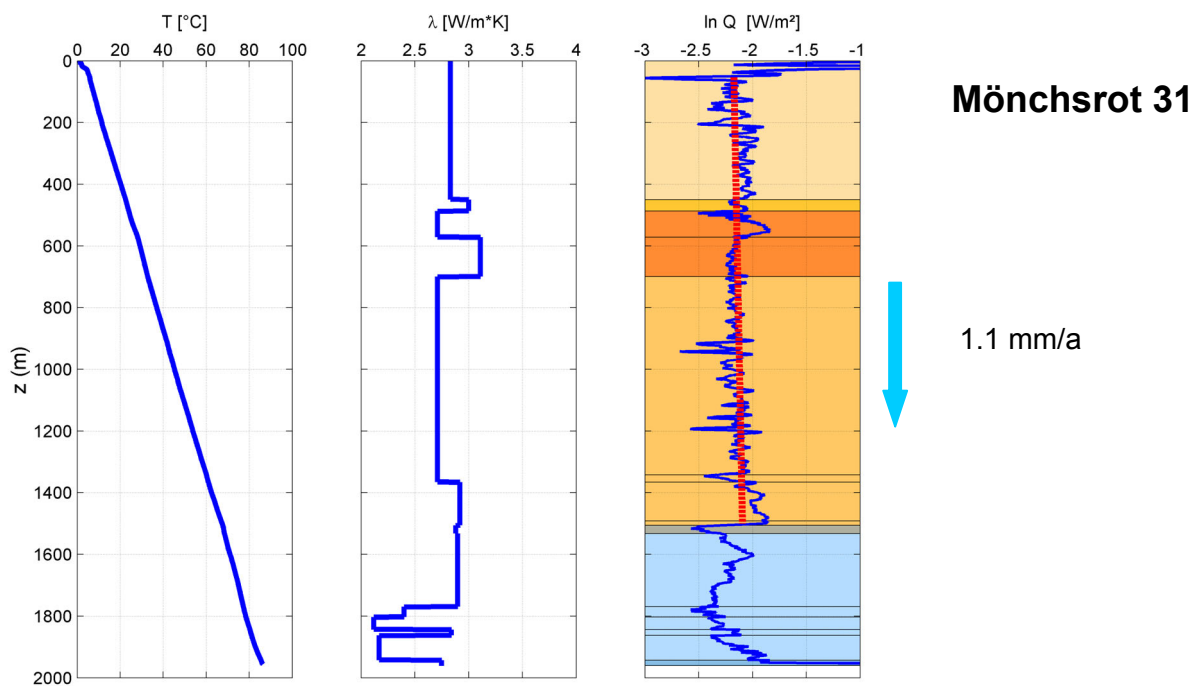


Abb. A.13: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 31.

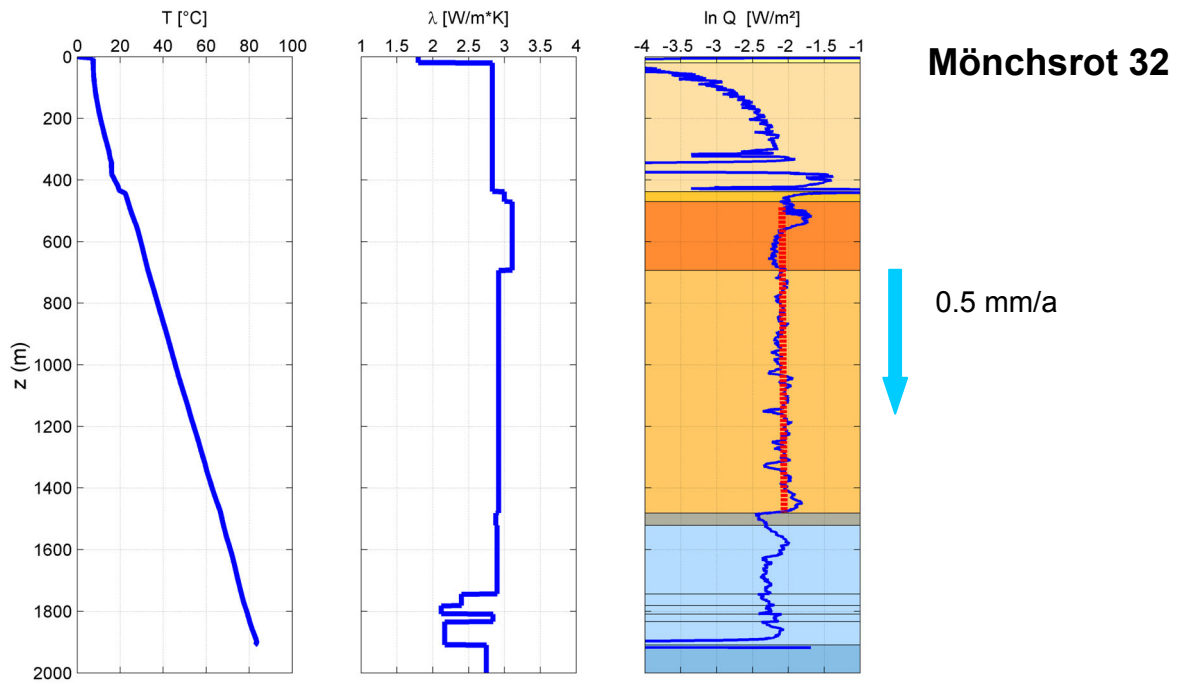


Abb. A.14: Pécletzahl-Analyse Bohrung Mönchsrot 32.

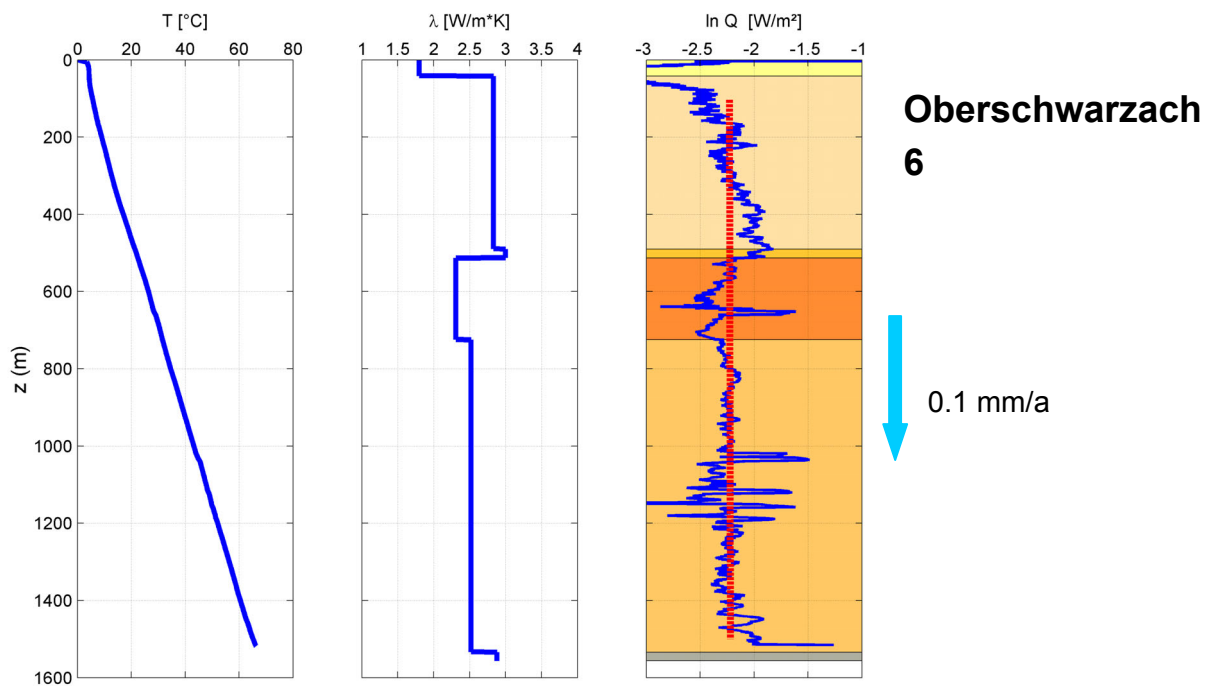


Abb. A.15: Pécletzahl-Analyse Bohrung Oberschwarzach 6.

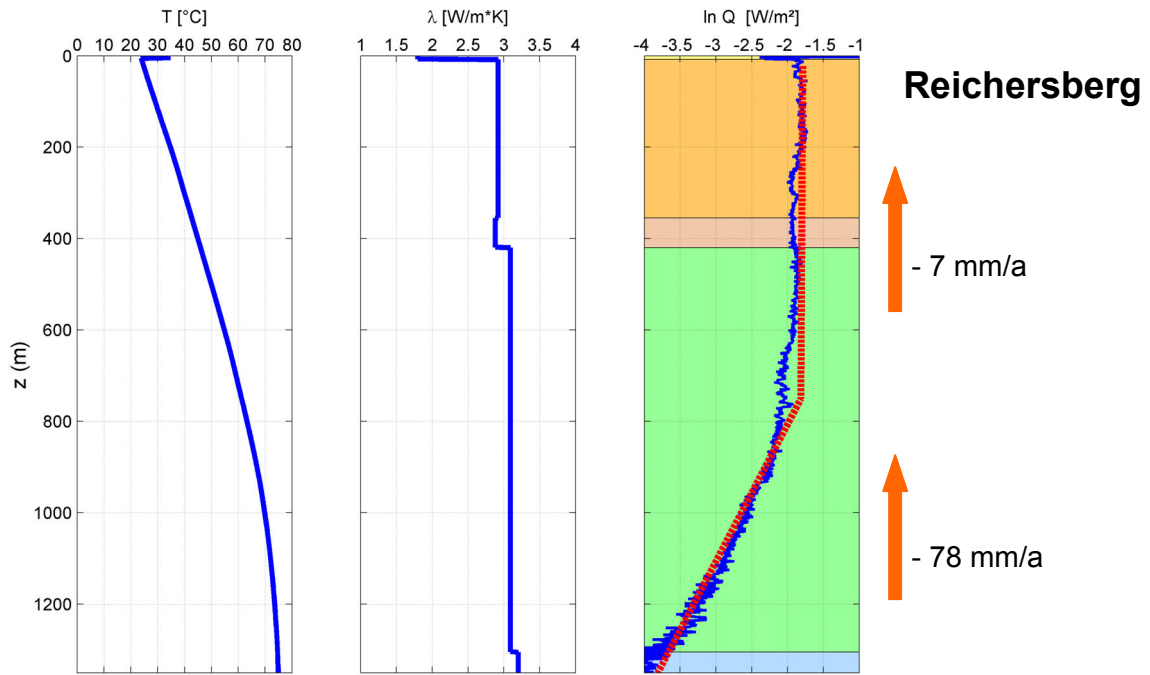


Abb. A.16: Pécletzahl-Analyse Bohrung Reichersberg.

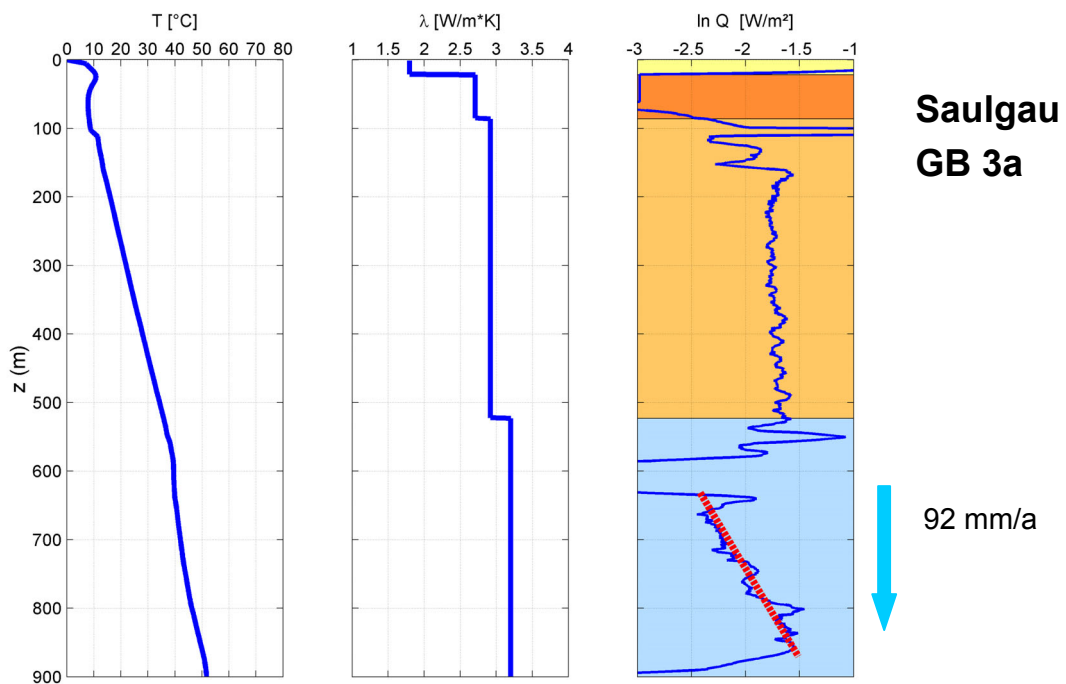


Abb. A.17: Pécletzahl-Analyse Bohrung Saulgau GB3.

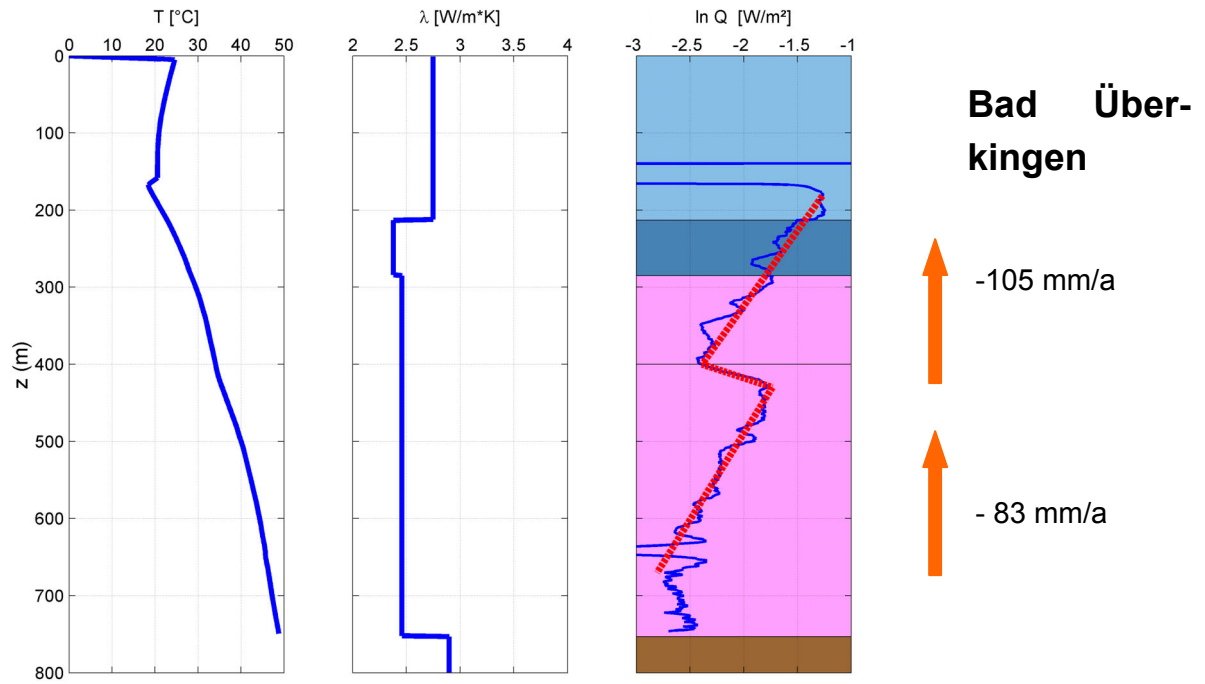


Abb. A.18: Pécletzahl-Analyse Bohrung Bad Überkingen.

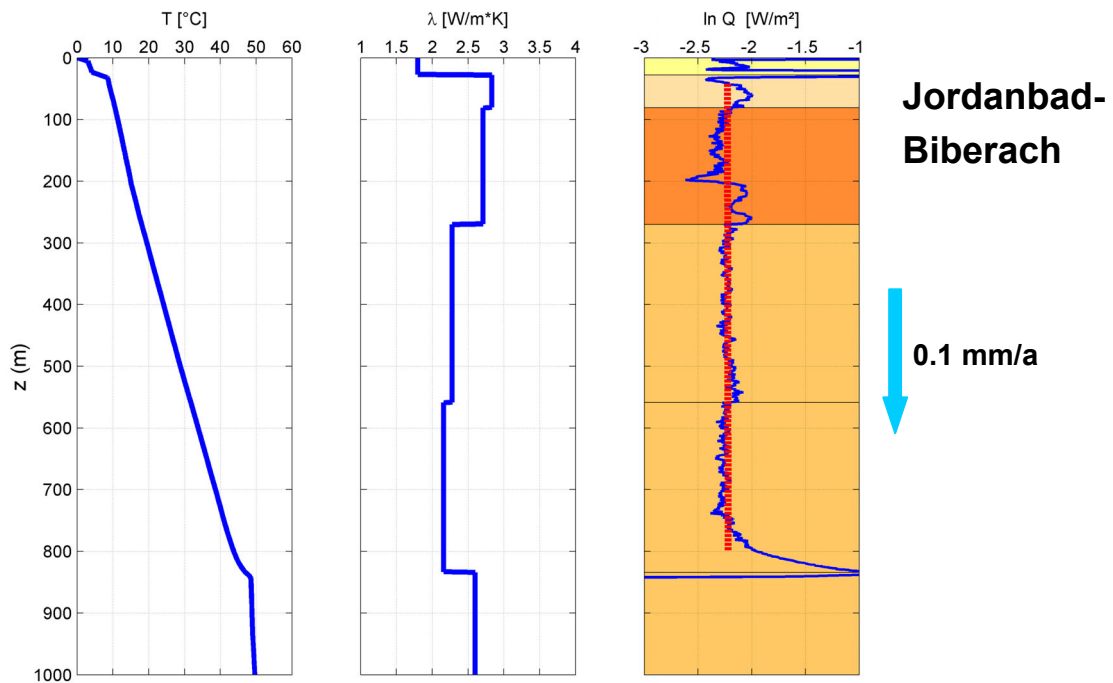


Abb. A.19: Pécletzahl-Analyse Bohrung Jordanbad-Biberach

B. Horizontale Schnitte durch das residuale Temperaturfeld

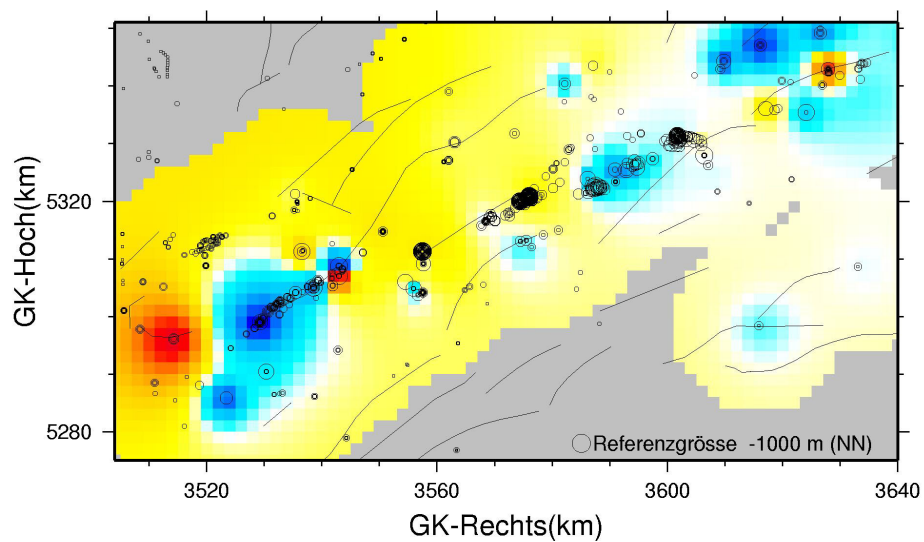


Abb. B.1: Temperaturresiduen 1000 m unter NN.

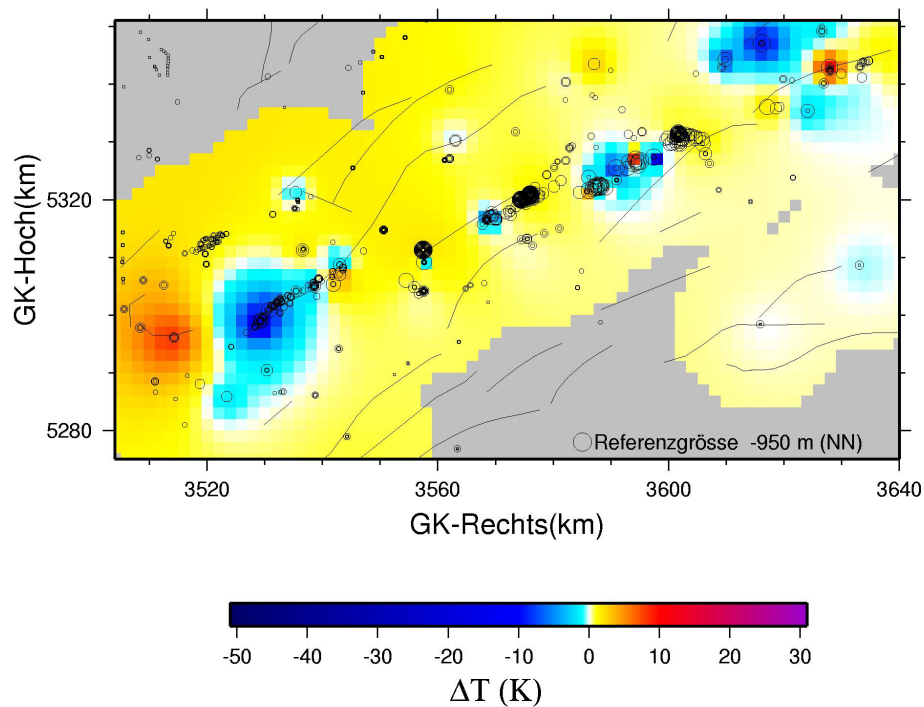


Abb. B.2: Temperaturresiduen 950 m unter NN.

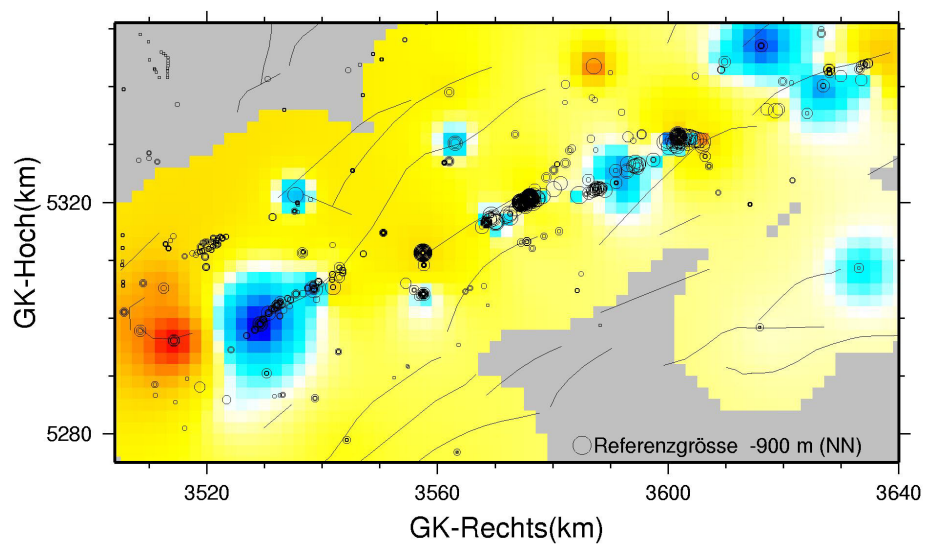


Abb. B.3: Temperaturresiduen 900 m unter NN.

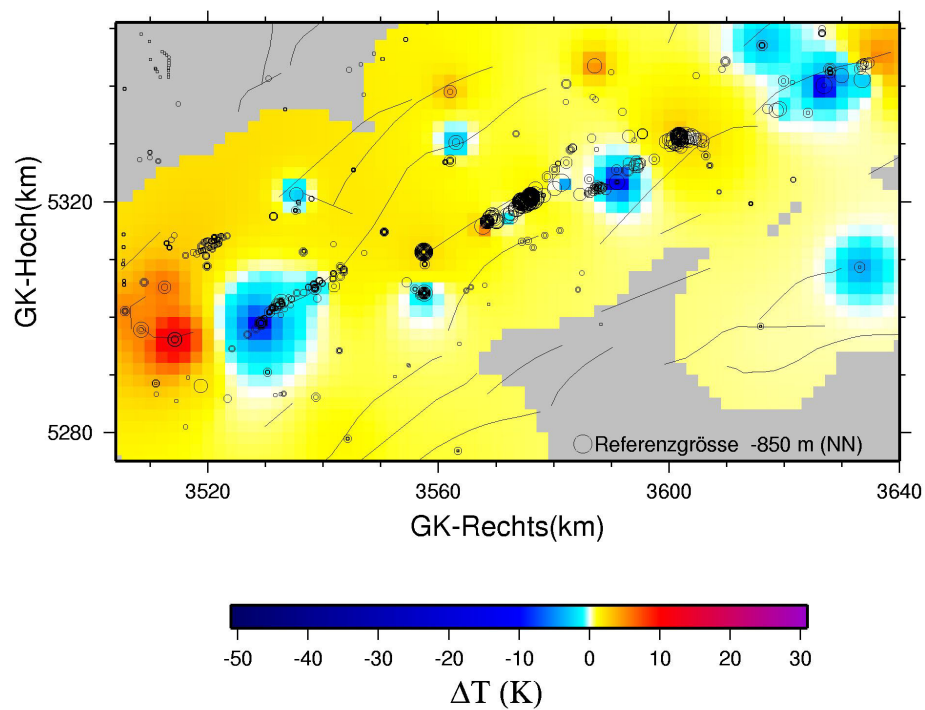


Abb. B.4: Temperaturresiduen 850 m unter NN.

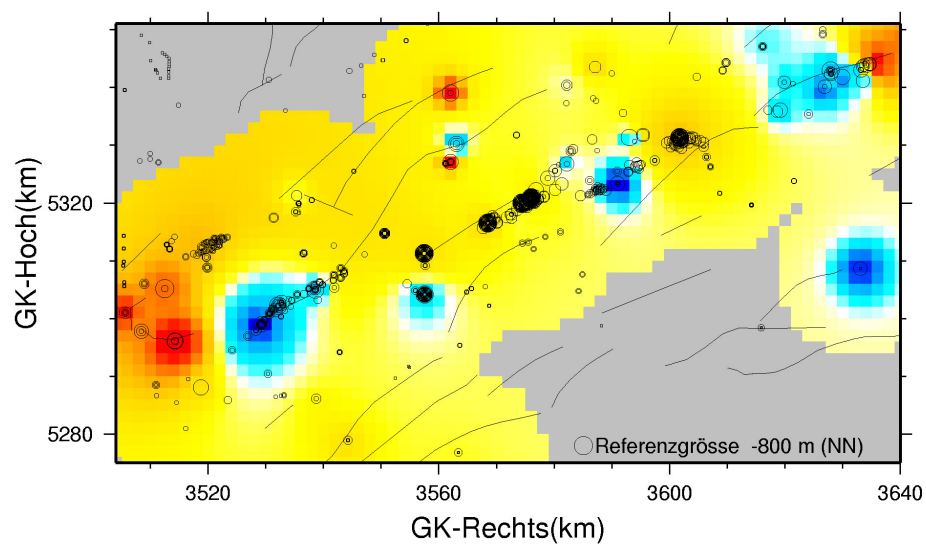


Abb. B.5: Temperaturresiduen 800 m unter NN.

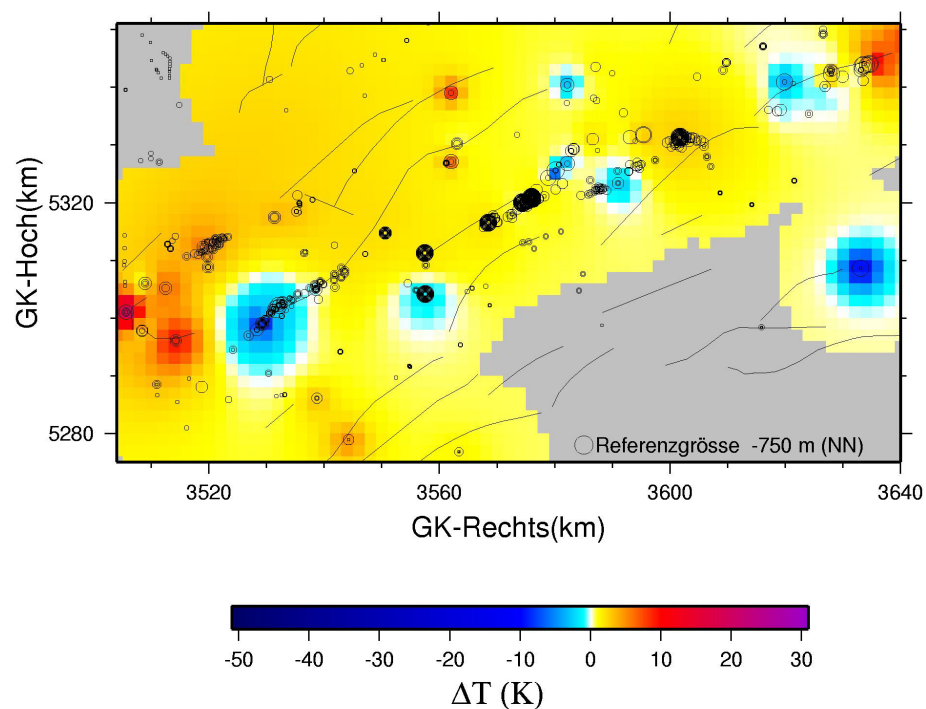


Abb. B.6: Temperaturresiduen 750 m unter NN.

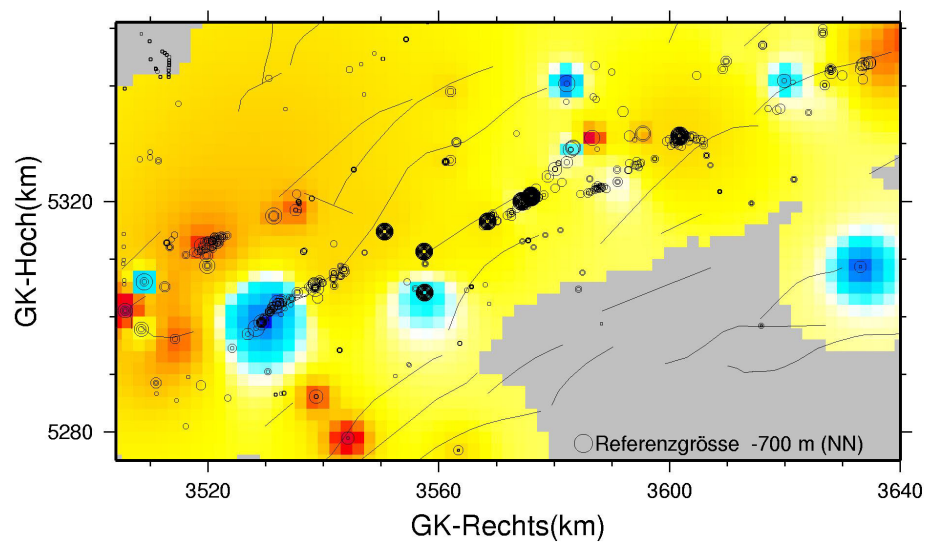


Abb. B.7: Temperaturresiduen 700 m unter NN.

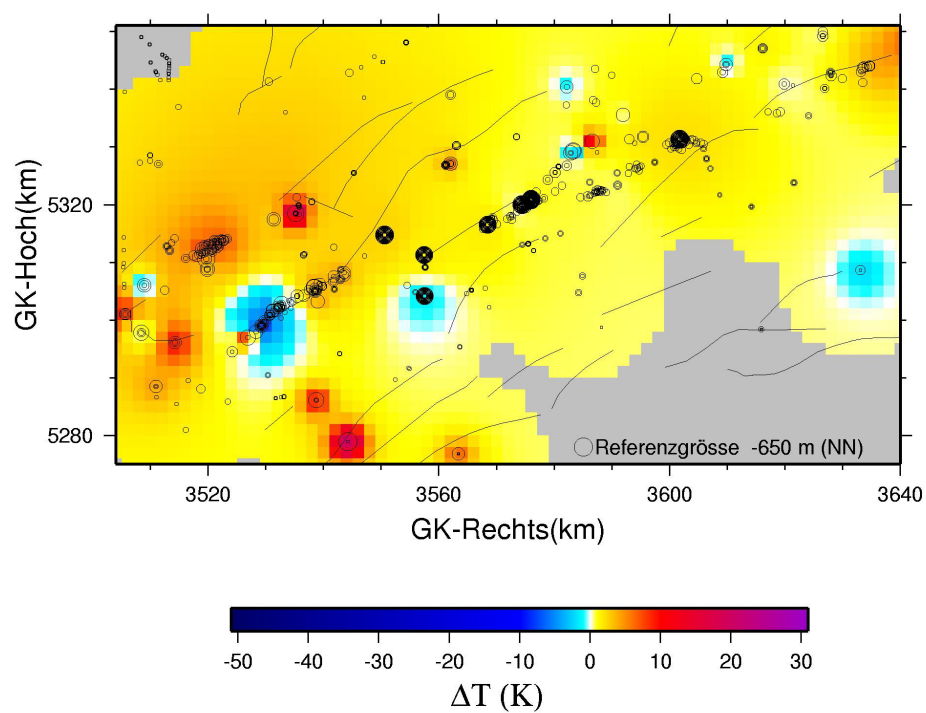


Abb. B.8: Temperaturresiduen 650 m unter NN.

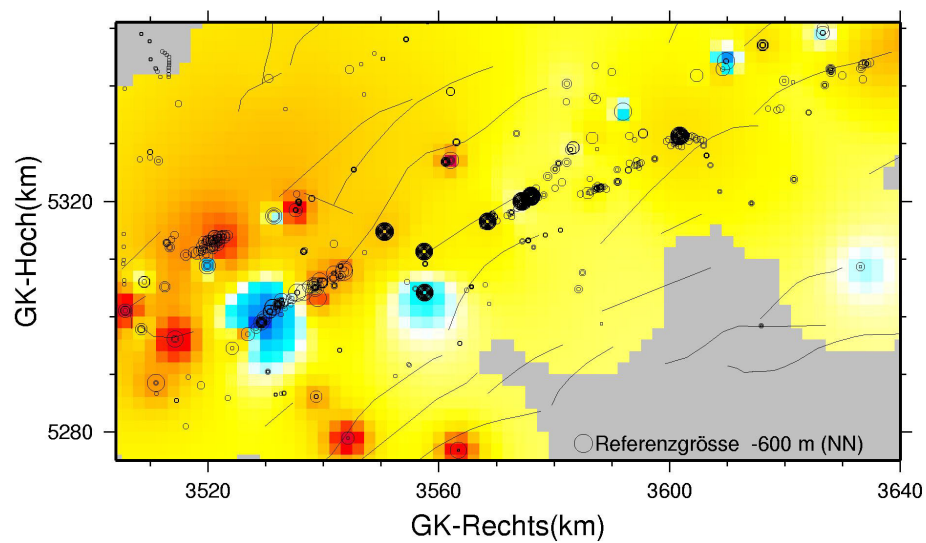


Abb. B.9: Temperaturresiduen 600 m unter NN.

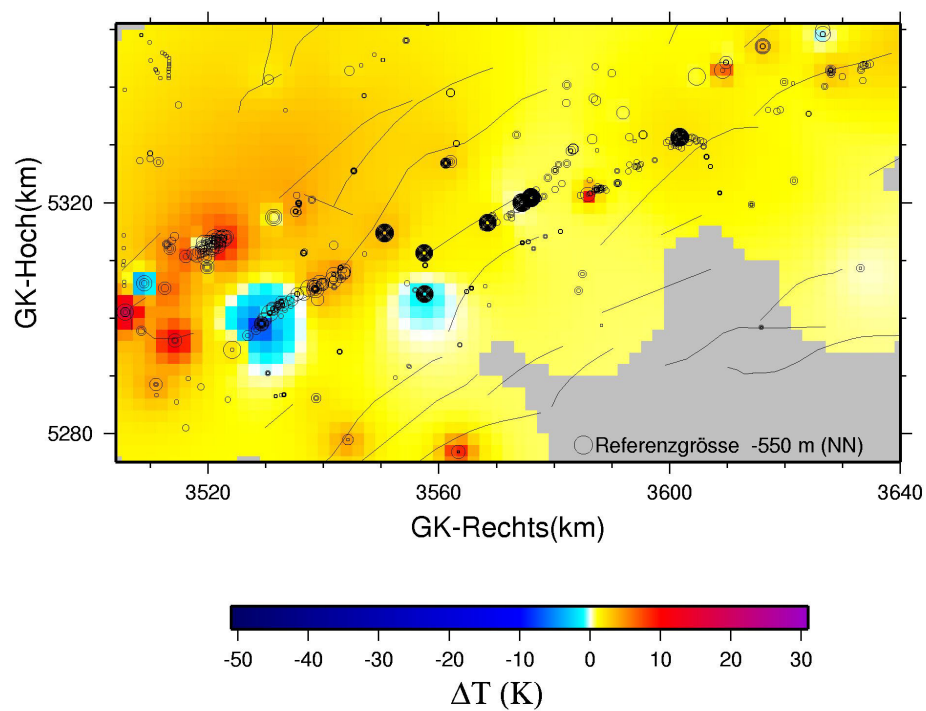


Abb. B.10: Temperaturresiduen 550 m unter NN.

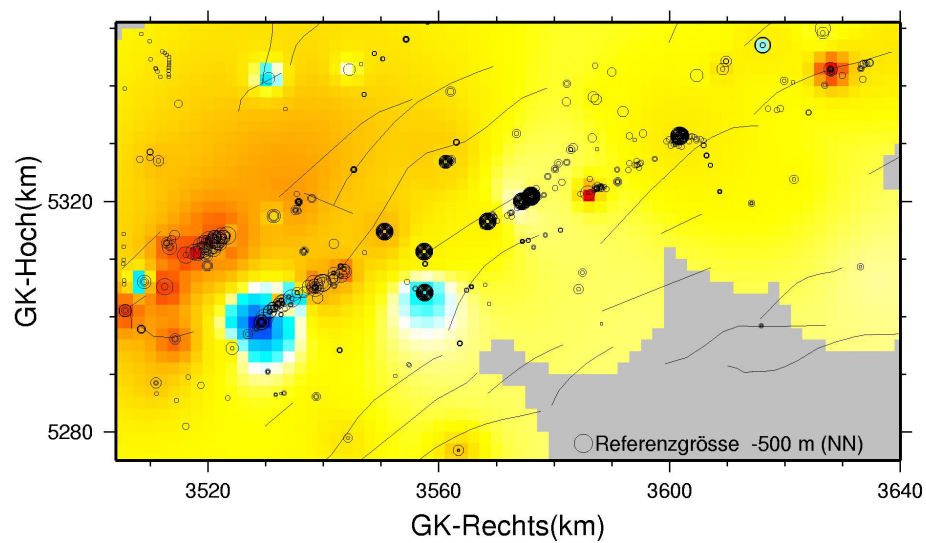


Abb. B.11: Temperaturresiduen 500 m unter NN.

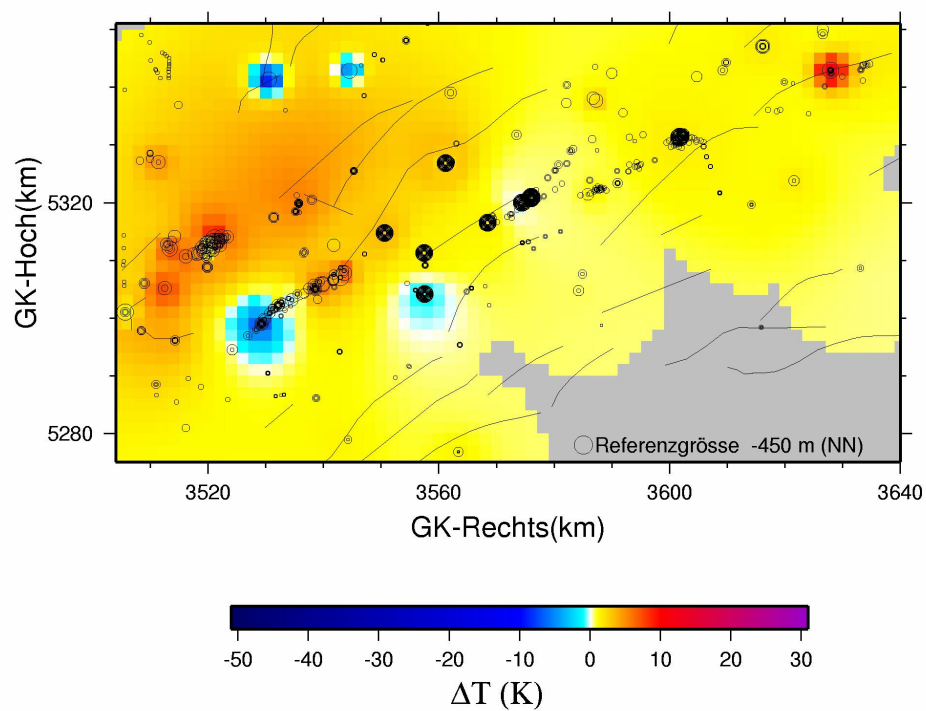


Abb. B.12: Temperaturresiduen 450 m unter NN.

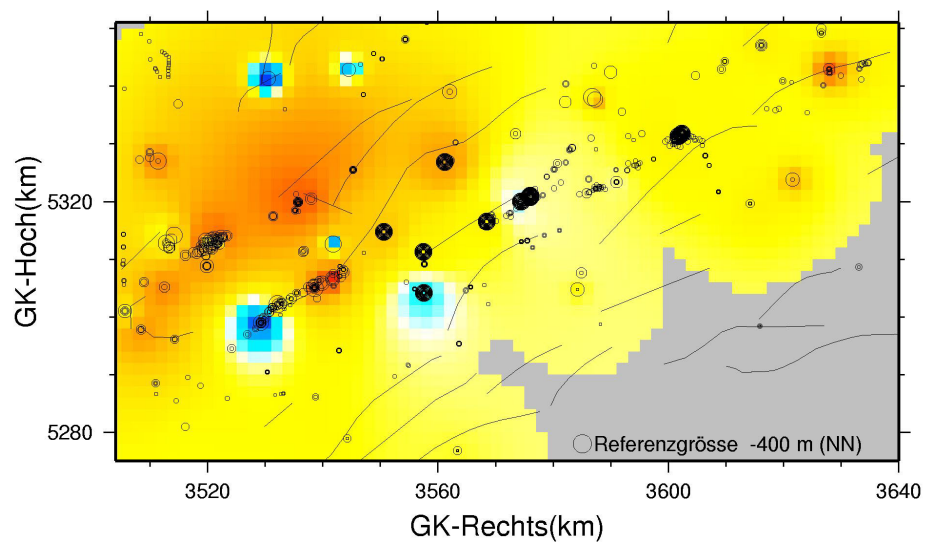


Abb. B.13: Temperaturresiduen 400 m unter NN.

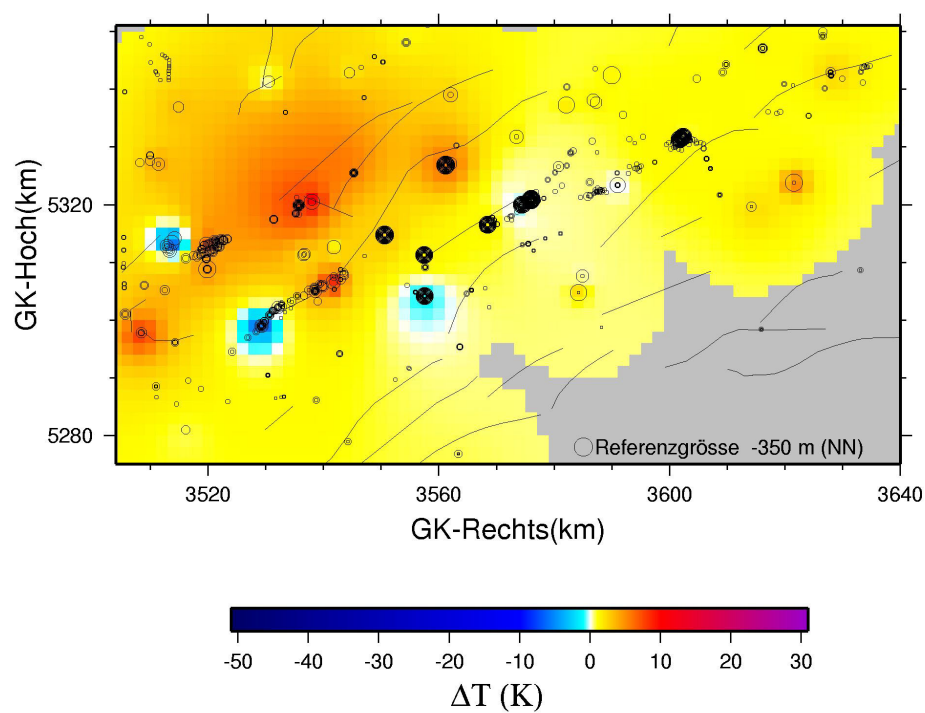


Abb. B.14: Temperaturresiduen 350 m unter NN.

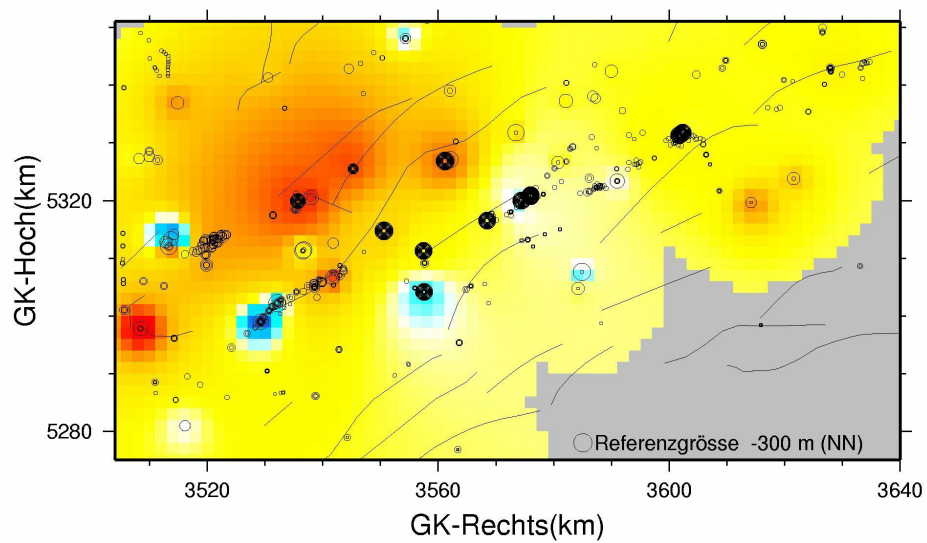


Abb. B.15: Temperaturresiduen 300 m unter NN.

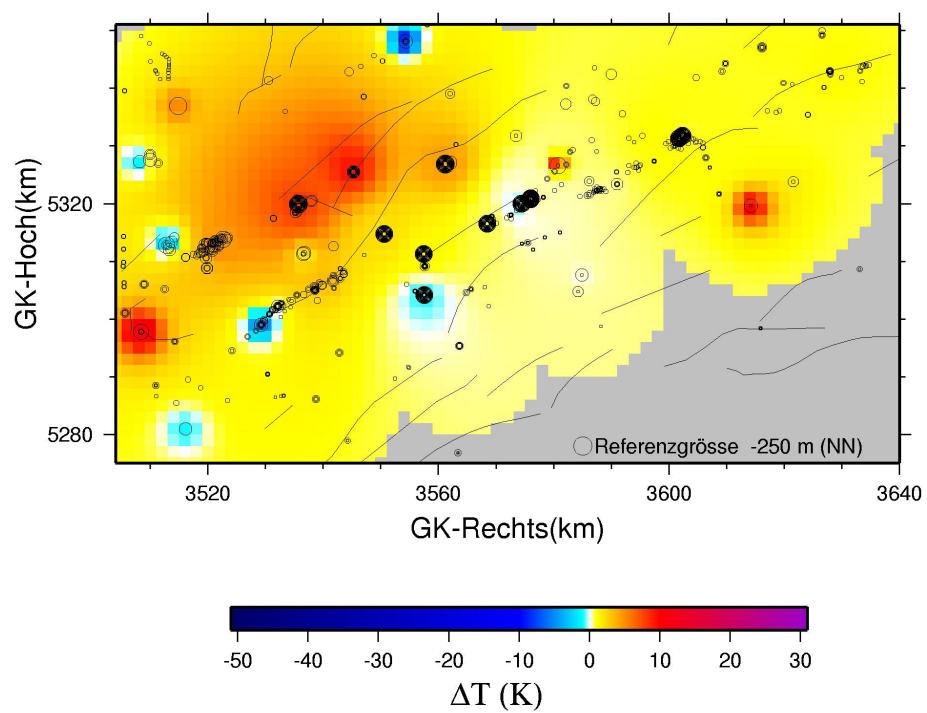


Abb. B.16: Temperaturresiduen 250 m unter NN.

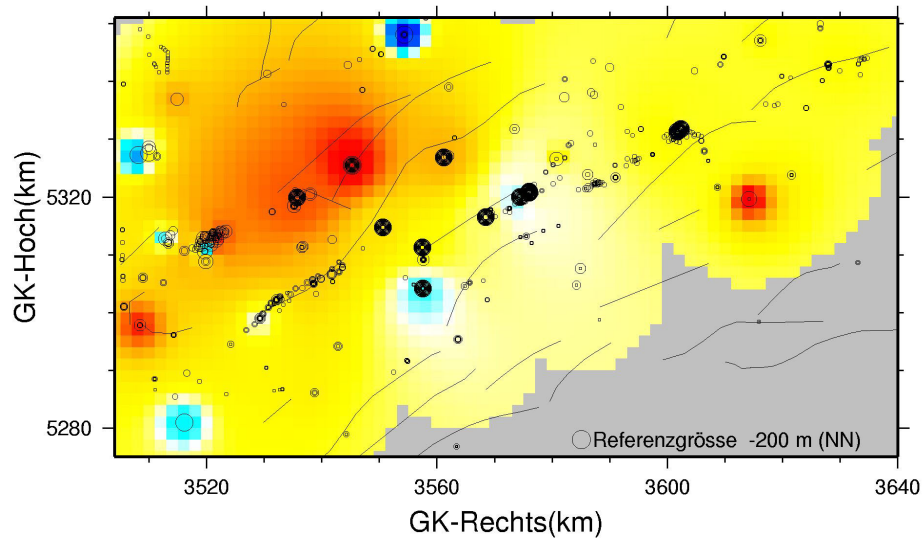


Abb. B.17: Temperaturresiduen 200 m unter NN.

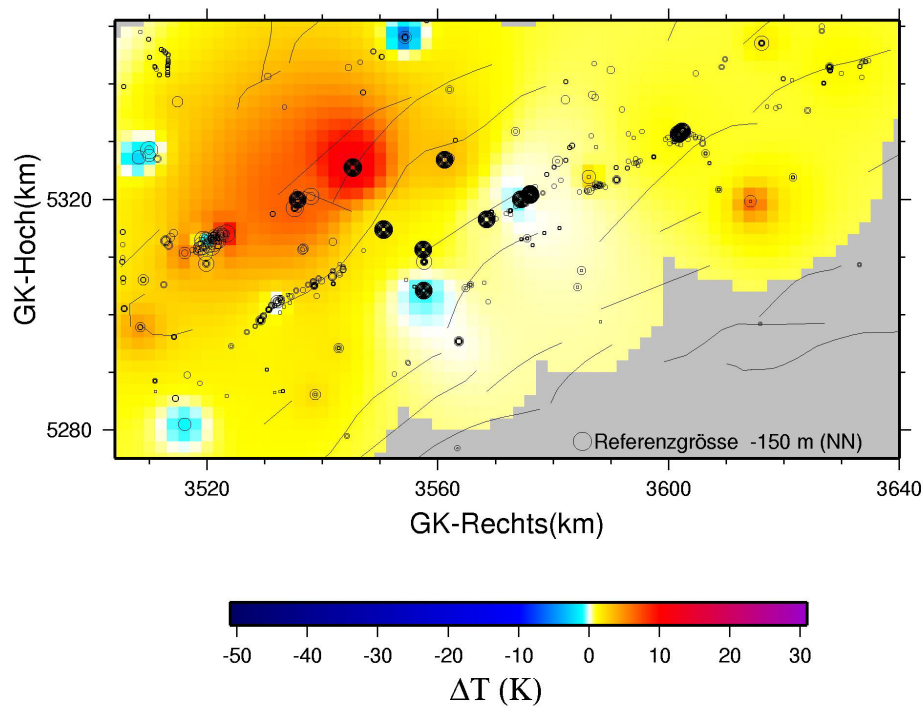


Abb. B.18: Temperaturresiduen 150 m unter NN.

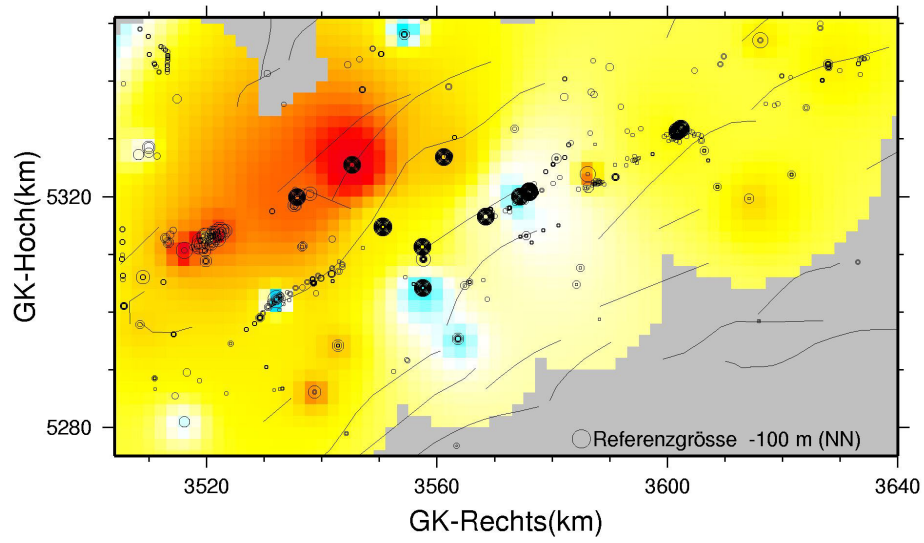


Abb. B.19: Temperaturresiduen 100 m unter NN.

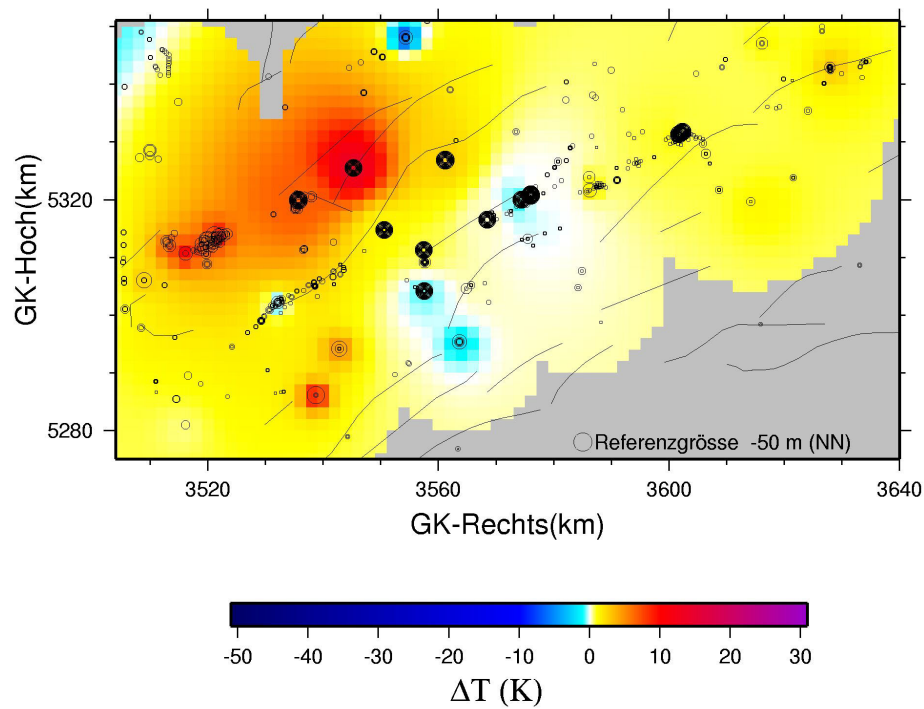


Abb. B.20: Temperaturresiduen 50 m unter NN.

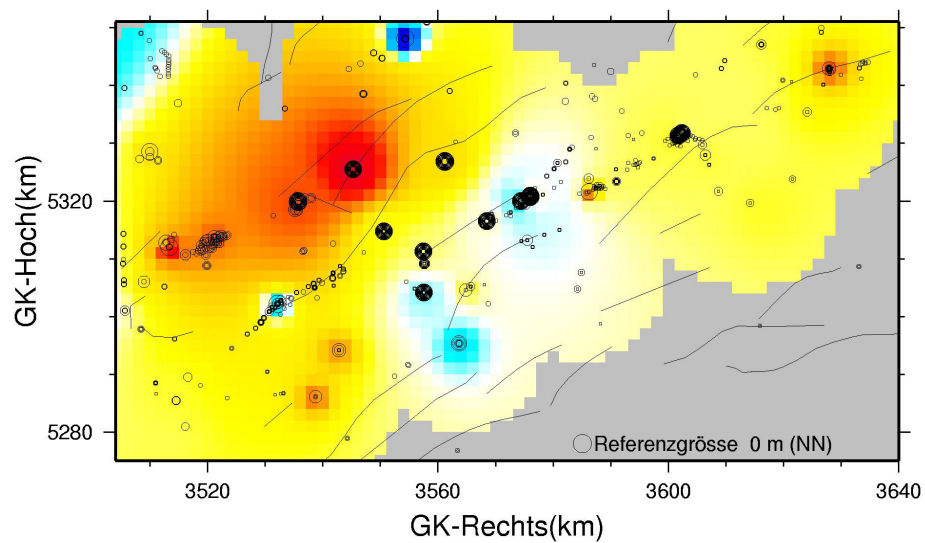


Abb. B.21: Temperaturresiduen bei NN.

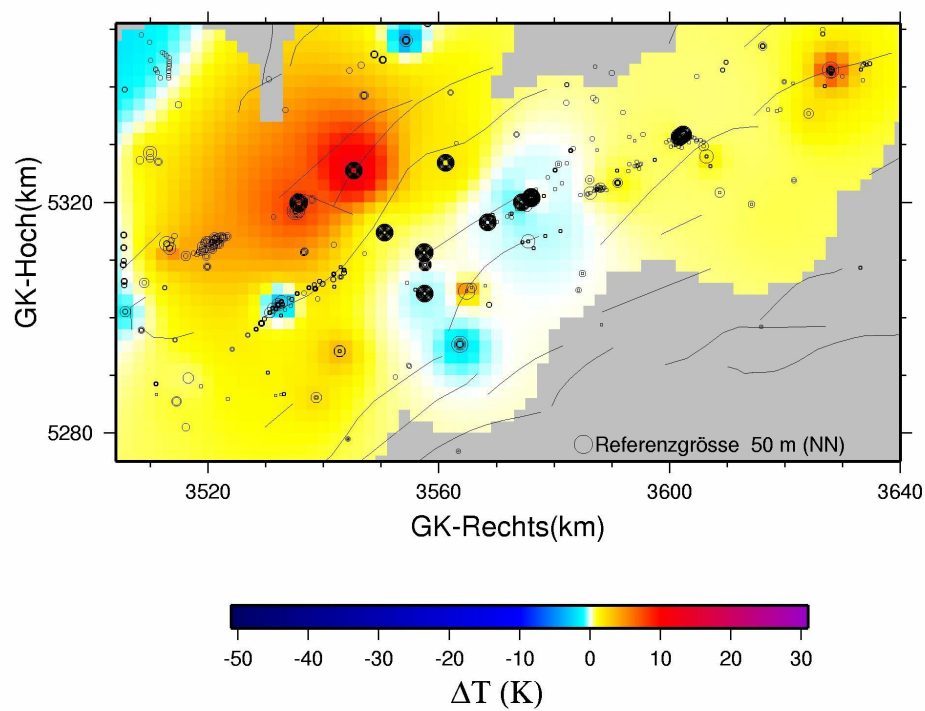


Abb. B.22: Temperaturresiduen 50 m über NN.

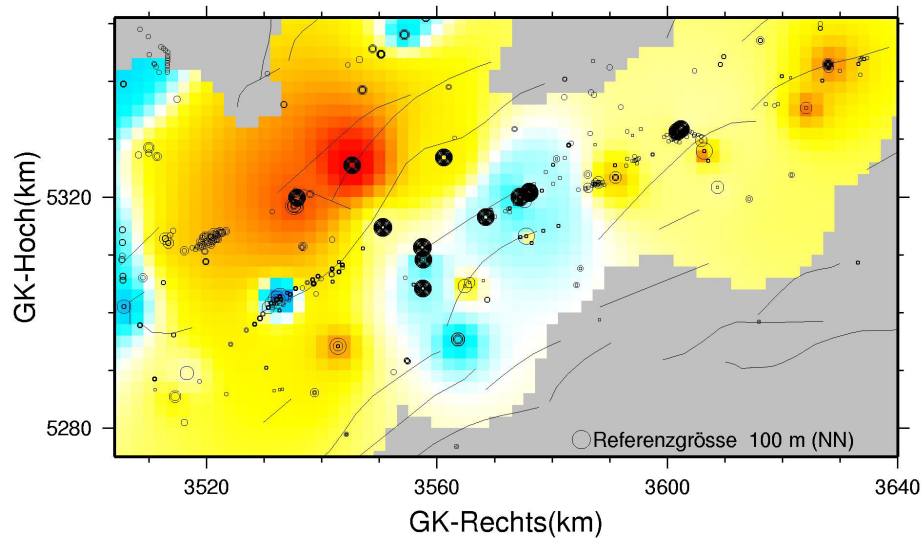


Abb. B.23: Temperaturresiduen 100 m über NN.

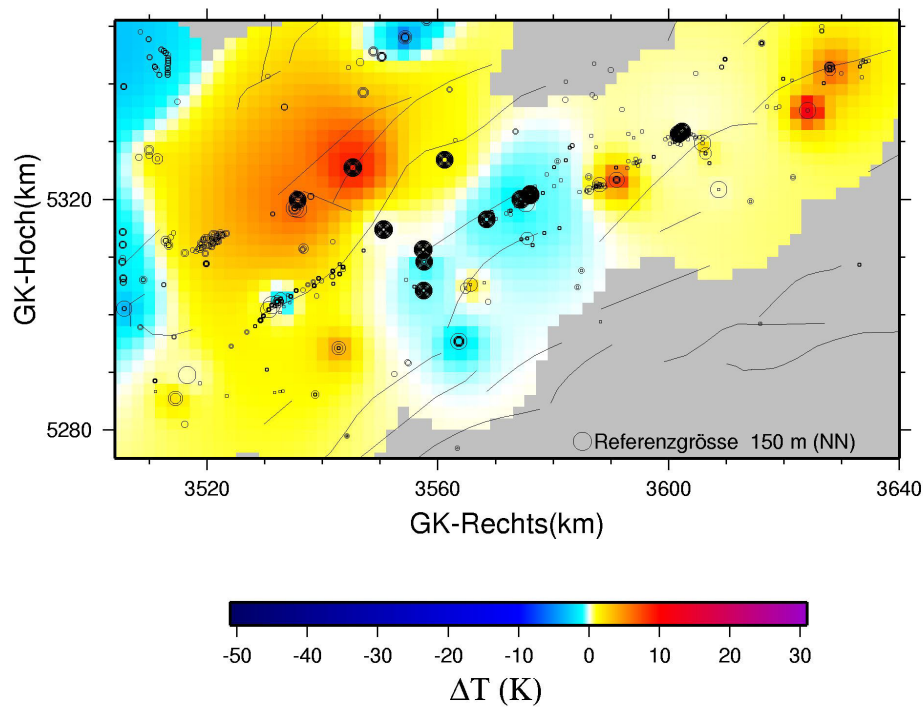


Abb. B.24: Temperaturresiduen 150 m über NN.

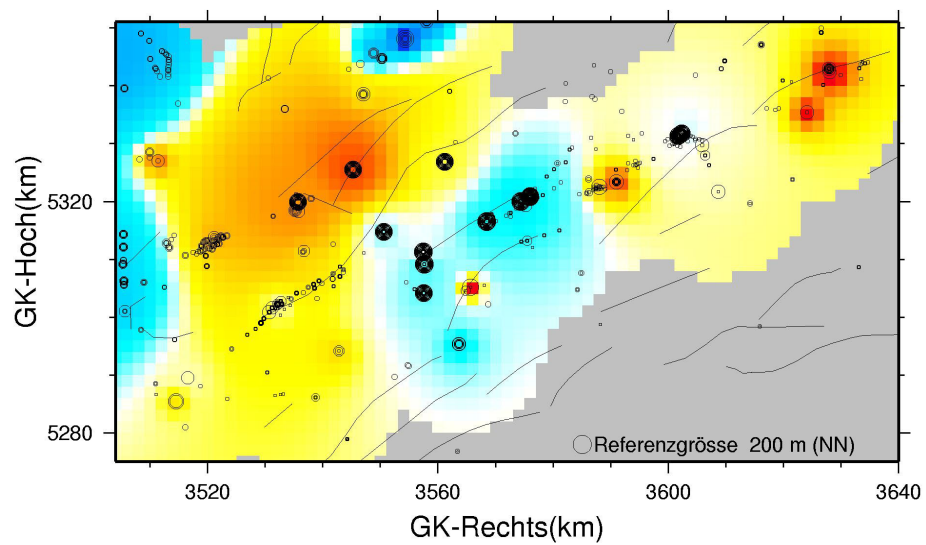


Abb. B.25: Temperaturresiduen 200 m über NN.

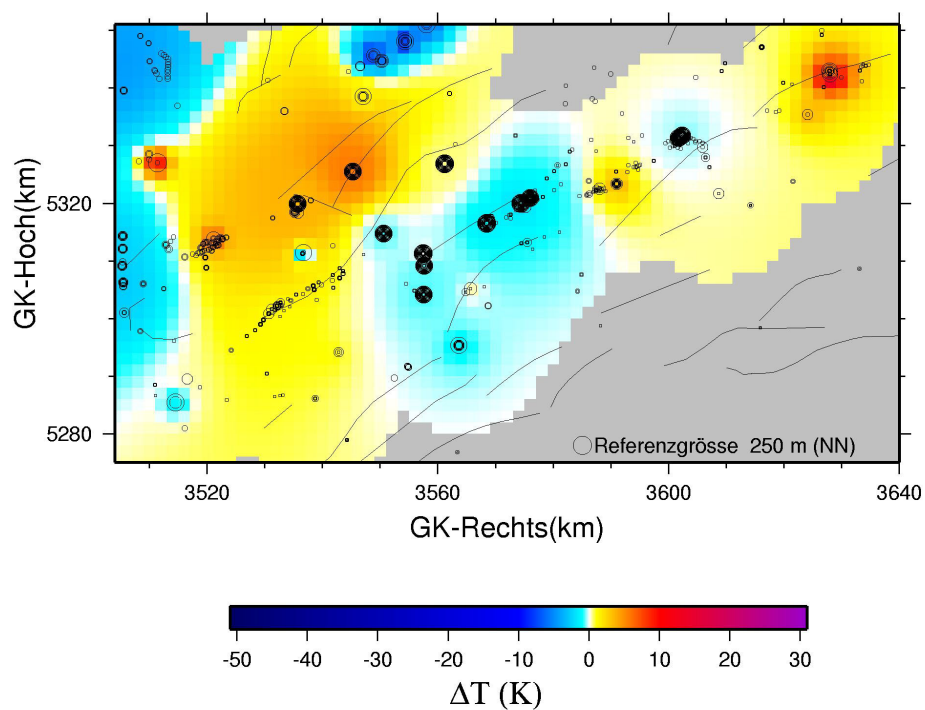


Abb. B.26: Temperaturresiduen 250 m über NN.

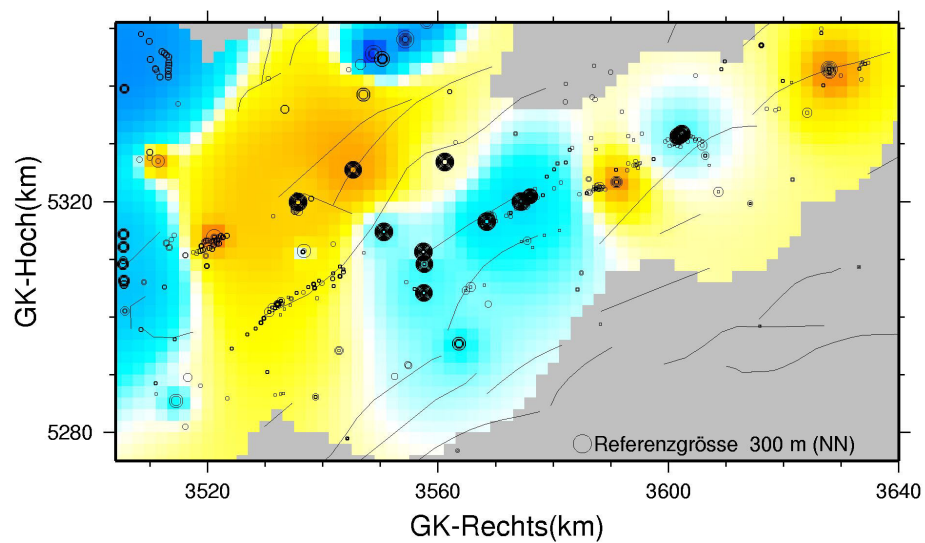


Abb. B.27: Temperaturresiduen 300 m über NN.

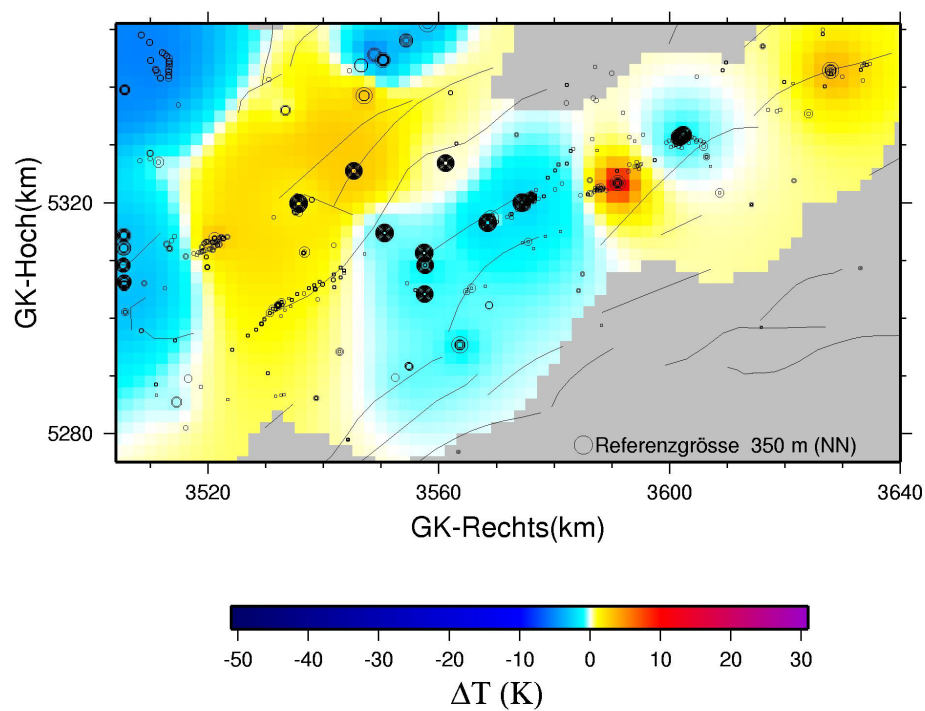


Abb. B.28: Temperaturresiduen 350 m über NN.

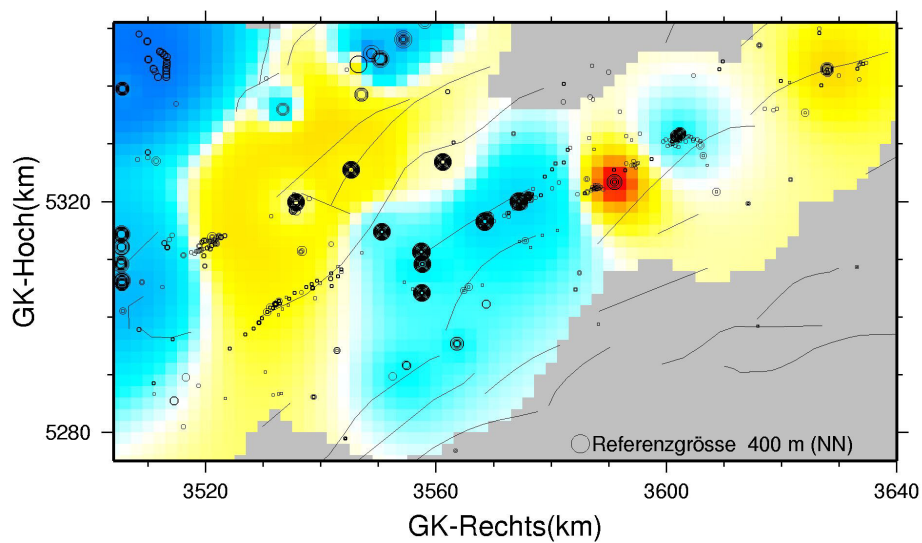


Abb. B.29: Temperaturresiduen 400 m über NN.

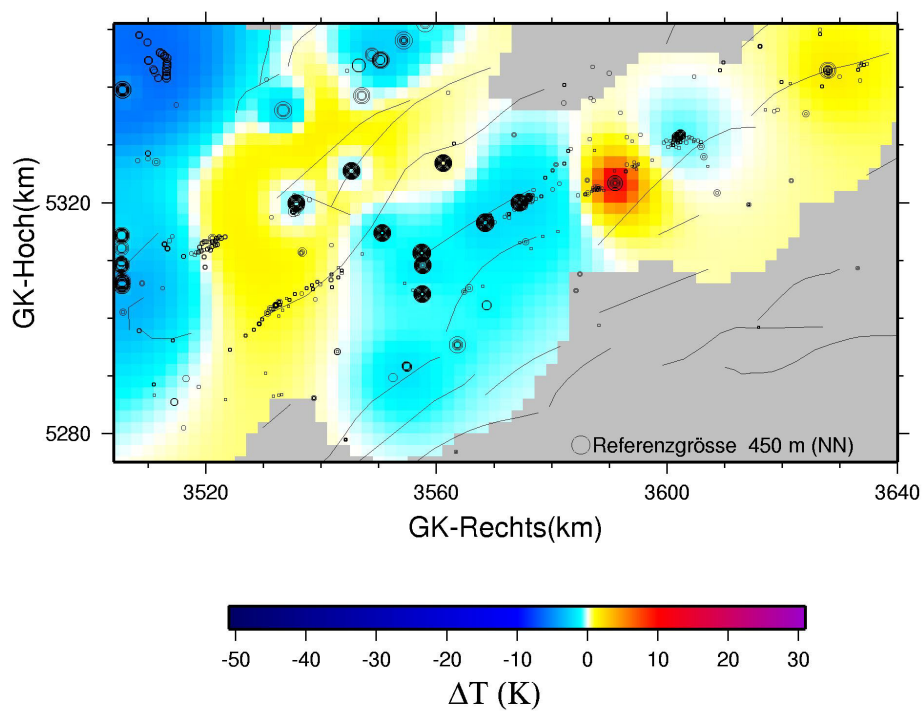


Abb. B.30: Temperaturresiduen 450 m über NN.

C. Messgeräte

An den für das Testgebiet Westliche Molasse verfügbaren Gesteinsproben wurden einheitlich die folgenden petrophysikalische Eigenschaften gemessen: Dichte ρ , Wärmeleitfähigkeit λ in trockenem und gesättigtem Zustand sowie spezifische Wärmekapazität c_p .

Einige ausgewählte Probenstücke wurden je nach Ausstattung der Labors an der RWTH in Aachen oder am GGA-Institut in Hannover weiterführenden petrophysikalischen Messungen unterzogen. So wurde in einem geringeren Umfang bei der RWTH in Aachen die Kompressionswellengeschwindigkeit gemessen, während im GGA-Institut in Hannover die Möglichkeit zur Messung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit und Röntgen-Fluoreszenz-Analyse (RFA) bestand. Die RFA wurde durchgeführt, damit eine Aussage über die Wärmeproduktionsrate getroffen werden kann.

Als Messgerät diente bei der Wärmeleitfähigkeit der Thermal Conductivity Scanner und bei der spezifischen Wärmekapazität ein Kalorimeter. Die Bestimmung der Kompressionswellengeschwindigkeit sowie der Dichte und Porosität erfolgte mit Hilfe eines Core Loggers. Mittels einer Divided-Bar-Apparatur wurde die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit bestimmt. Im folgenden Abschnitt werden die Messapparaturen kurz vorgestellt.

Thermal Conductivity Scanner

Der Thermal Conductivity Scanner (TCS) der Firma Lippmann & Rauhen arbeitet nach dem von Popov (1997, 1999) beschriebenen Prinzip und dient zur berührungslosen Messung der Wärmeleitfähigkeit. Außerdem können Angaben über die Homogenität und Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit gemacht werden. Abbildung C1 zeigt die komplette Messanordnung. Das Verfahren basiert auf dem thermischen Abtasten der Probenoberfläche mit einer fokussierten Wärmequelle, die sichtbares Licht und Wärmestrahlung (Infrarotstrahlung) emittiert. Vor und hinter der Wärmequelle erfolgt eine „kalte“ und eine „heiße“ Temperaturmessung mittels Infrarot-Thermosensoren. Aus der Temperaturdifferenz der beiden Sensoren lässt sich die Wärmeleitfähigkeit der Probe berechnen.



Abb. C.1: Messanordnung des Thermal Conductivity Scanners. Von links nach rechts sind der Auswertungsrechner, die Steuereinheit und das eigentliche Messgerät zu sehen. Der kleine Ausschnitt lässt die beiden beweglichen Sensoren („kalt“ und „heiß“) mit der dazwischen liegenden Wärmequelle erkennen.

Durch das optische Abtasten der Probenoberfläche ist Aufwand der Probenvorbereitung sehr gering. Vor dem Abfahren der gewünschten Flächen wird ein tiefschwarzer Acryl-Lackanstrich aufgetragen, um eine einheitliche Reflektivität zu erhalten. Die Auswertesoftware liefert als Messergebnis ein Profil der Wärmeleitfähigkeit der Probe. Zusätzlich werden Mittelwert, Minimum und Maximum der Wärmeleitfähigkeit, die prozentuale Standardabweichung und ein Inhomogenitätskoeffizient angegeben.

Kalorimeter

Zur Messung der spezifischen Wärmekapazität c_p dient das dynamisches Wärmestrom-Differenz-Kalorimeter C80 der Firma SETARAM, welches im dynamischen Betrieb als Zwillings-Kalorimeter arbeitet. Für die Messung können sowohl zylindrisch ausgebohrte Gesteinsproben, Bohrklein, wie auch zermahlene Kernmaterial verwendet werden. Je nach Probenzustand wurden die Proben ausgebohrt oder zermahlen vermessen. Das Kalorimeter des GGA-Institutes wurde zudem noch in eine handelsübliche Kühltruhe gestellt, in welche kontinuierlich verdunstendes Gas von Flüssig-Stickstoff zur Kühlung geleitet wurde. Hierdurch wurde erreicht, dass die Messungen schon bei einer tieferen Temperatur beginnen können.

Das Kalorimeter besitzt zwei Messbehälter: Einen Probenbehälter und einen Referenzbehälter. Bei der Messung werden die Wärmeströme Φ_R und Φ_P aufgezeichnet, die in Referenz- und Probenbehälter fließen. Die Differenz beider Wärmeströme ist proportional zur spezifischen Wärmekapazität des Probenmaterials.



Abb. C.2: Messanordnung und Messprinzip des Wärmestromdifferenz-Kalorimeters. Die Messapparatur besteht aus vier Komponenten: Rechner, Kalorimeter sowie dem Controller und dem Netzteil (von links nach rechts).

Core Logger

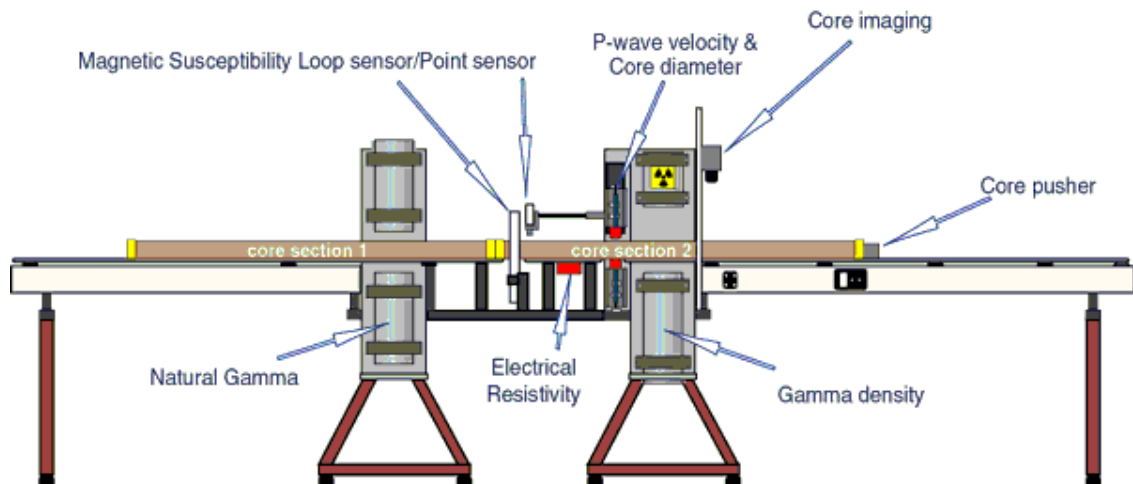


Abb. C.3: Schematischer Aufbau des Core Loggers (Geotek Ltd.).

Beim Core Logger der Firma Geotek Ltd. handelt es sich um eine Messstraße, auf der Kerne in einem Trägerschlitten horizontal durch mehrere Messstationen geführt werden. Dabei werden die petrophysikalischen Eigenschaften zerstörungsfrei in Intervallen oder kontinuierlich aufgezeichnet (Abbildung C3). Ein entscheidender Vorteil besteht darin, dass sowohl ganze Kerne als auch Kernbruchstücke, horizontal geteilte Kerne und Lockersedimente vermessen werden können.

Neben der Geometrie (Länge und Durchmesser) einer jeden "Probe" wurden üblicherweise mit dem Core Logger die Kompressionswellengeschwindigkeit v_p und die Gammadichte bestimmt. Zur Messung der Kompressionswellengeschwindigkeit v_p befindet sich der Kern zwischen zwei Ultraschallsensoren, die als Sender und Empfänger fungieren. Erzeugt wird ein Puls ($\Delta t = 0.5 \mu s$), der das Gestein durchläuft und am Empfänger aufgezeichnet wird. Gemessen wird dabei die totale Laufzeit des Pulses T_{tot} . Seit Mitte Oktober ist eine Gamma-Gamma-Messung mit dem Core Logger möglich. Hierbei induziert eine Gamma-Quelle rückgestreute Gamma-Strahlung. Die Stärke dieser Strahlung beruht auf der Absorptionsfähigkeit der Matrix und hängt von der Gesteinsdichte ab. Daher ermöglicht diese Messung eine Bestimmung der Gesteinsdichte.

Divided Bar

Die Divided-Bar-Apparatur COM-800 TCFCM-N20 der Firma HOLOMETRIX (Abb. C4, links) wird zur Messung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit eingesetzt. Das erfordert eine lange Messzeit. Nur so kann allerdings die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit bestimmt werden.

Die Apparatur misst nach der Methode der vergleichenden Wärmeleitfähigkeit. Ein Probenstapel (Abb. C4, rechts), bestehend aus der zu messenden Probe, Stahlplatten und Ver-

gleichsstandards wird auf der Mitte des Sockels auf der Arbeitsplatte aufgebaut. Zwei Heizelemente erzeugen einen Temperaturgradienten. Dieser wird an mehreren Positionen im Stapel gemessen. Aus dem Vergleich der Temperaturgradienten an Probe und Standards kann die Wärmeleitfähigkeit der Probe gemessen werden (z. B. Beck, 1988).

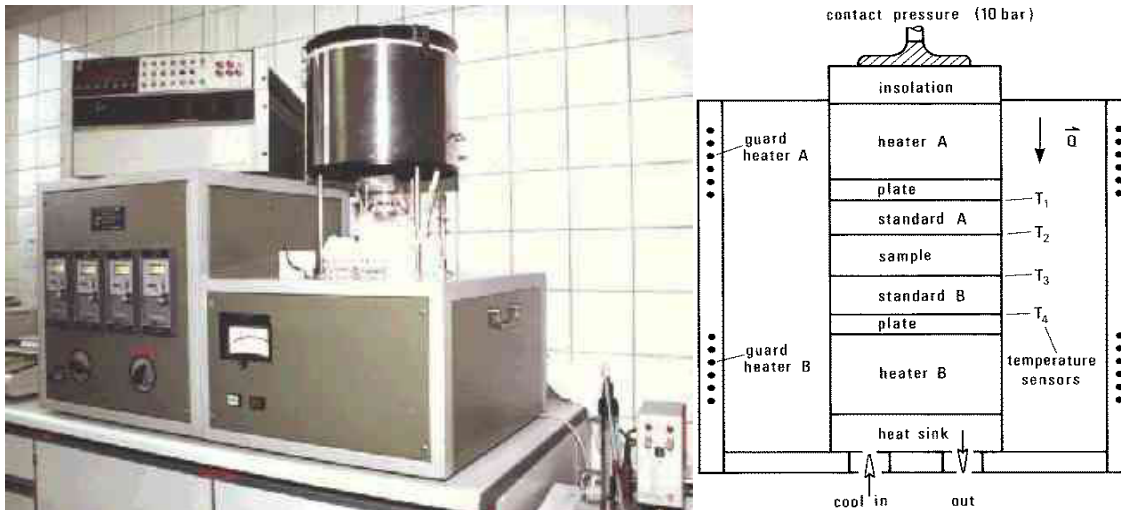


Abb. C.4: Messanordnung der Divided-Bar-Apparatur HOLOMETRIX.

Reindichtebestimmung und Porosität

Die Reindichte der Probe wird als Quotient aus Probenmasse und Probenvolumen bestimmt. Hierfür wird die Probe im trockenen Zustand gewogen. Anschließend erfolgt eine Aufsättigung der Probe. In einem Exsikkator wird der Probe zuerst unter Vakuum ein hoher Anteil der Luft entzogen bevor sie mit Leitungswasser gesättigt wird, welches über die evakuierten Porenräume in die Probe eindringt. Anschließend wird die Probe erneut gewogen. Mit Hilfe der sogenannten „Wasserwägung“ wird der Auftrieb des Kerns bestimmt, aus dem sich das Kernvolumen berechnen lässt (Archimedisches Prinzip). Aus gewogener Kernmasse und berechnetem Kernvolumen ergibt sich die Reindichte.

Die Porosität Φ ist ein entscheidender Parameter für die Speicher- und Transporteigenschaften von Gesteinen. Sie ist definiert als das Verhältnis von Porenvolumen zu Gesamtvolumen:

$$\Phi = \frac{V_{\text{Poren}}}{V_{\text{gesamt}}} = \frac{V_{\text{gesamt}} - V_{\text{Matrix}}}{V_{\text{gesamt}}}$$

Kennt man die Gesamt- und die Matrixdichte eines Gesteines sowie die Dichte des Porenmediums, so kann man durch Umformen die Porosität aus den Dichten ableiten.



Abb. C.5: RFA-Gerät Philips RW 2400.

Wellenlängendispersive Röntgenfluoreszenz

Die Röntgenfluoreszenz-Analyse (RFA) ermittelt die quantitative und qualitative chemische Zusammensetzung von Feststoffen wie zum Beispiel Gesteinen, Sedimenten und Erzen. Sie wird zur Bestimmung der Wärmeproduktionsraten eingesetzt. Es wird das wellenlängendispersive RFA-Gerät PW 2400 der Firma Philips (Abbildung C5) eingesetzt.

Bei Bestrahlung der Atome einer Probe mit energiereichen, primären Röntgenphotonen werden Elektronen in Form von Photoelektronen aus den inneren Elektronenschalen herausgebrochen und die Atome in einen angeregten Zustand versetzt. Beim Übergang in den Grundzustand wird Energie in Form von sekundärer Röntgenstrahlung ("Röntgenfluoreszenz") frei. Da die Elektronenkonfiguration für jedes Element unterschiedlich ist, ist die entstehende Röntgenstrahlung charakteristisch für die chemische Zusammensetzung (Hahn-Weinheimer, 1995; Pavicevic et al., 2000).

Die fein zermahlenen Proben werden entweder in Tablettenform gepresst oder zu einer glasartigen Tablette aufgeschmolzen. Mit der wellenlängendispersiven RFA können nun die Elementgehalte gemessen werden. Aus den Anteilen der radioaktiven Elemente Uran, Thorium und Kalium und deren bekannter Wärmeproduktionsrate kann nun die Wärmeproduktionsrate der Probe bestimmt werden.

Technische Daten der Messgeräte

Optical Scanner	
Messprinzip	Optisch (Popov, 1997, 1999)
Messbereich	0.2 bis 25 W m ⁻¹ K ⁻¹)
Messgenauigkeit	3 %
Probenmaterial	30 – 600 mm (mit beliebiger Geometrie)
Kalorimeter	
Messprinzip	Dynamisches Wärmestrom-Differenz-Kalorimeter (Hemminger & Cammenga, 1989)
Messgenauigkeit	± 1% (laut Herstellerangabe)
Probenmaterial	Bohrkerne (D < 14 mm), Bohrklein und Fluide
Messbereich	Umgebungstemperatur bis 300°C
Divided Bar	
Messprinzip	Vergleichmessung, stationär (Beck, 1988)
Messbereich	0.2 - 100 W/mK für WLF, -150 – 800 °C für T
Messgenauigkeit	± 3 %
Probenmaterial	Tabletten oder Proben: Durchmesser 5 cm, Dicke 1 cm
Röntgenfluoreszenz-Analyse	
Messprinzip	Wellenlängendispersive RFA, (Hahn-Weinheimer, 1995; Pavicevic et al., 2000)
Messbereich	Wärmeproduktion > 1 µWm ⁻³
Messgenauigkeit	0.1 - 0.2 µWm ⁻³
Probenmaterial	Höhe max. 5,2 cm, Dicke max. 4,0 cm, Gewicht max. 400 g inkl. Probenhalter

Tab. C.1: Technische Parameter der Messgeräte.

D. Petrophysik-Datenbank

Für die Messungen petrophysikalischer Gesteinseigenschaften und geophysikalischer Daten stehen in der RWTH Aachen und dem GGA-Institut in Hannover mehrere Apparaturen zur Verfügung. Da einige der Geräte mit einem hohen Messfortschritt arbeiten, sind in den Petrophysik-Labors eine große Zahl von Kernmessungen durchgeführt worden. Die so produzierten Daten müssen schließlich sinnvoll zusammengeführt und zur Verfügung gestellt werden. Hierzu wurde ein Konzept für eine Datenbank entwickelt und realisiert. Mit dieser Datenbank ist gewährleistet, dass die in dieser Phase gemessenen Daten sinnvoll verarbeitet werden können und die Untersuchungsmethoden in einer späteren Projektphase auch auf andere Regionen ausgedehnt werden können.

Aufgrund des zeitlich beschränkten Rahmens für den Aufbau der Datenbank wurde mit der Arbeitsgruppe „Datenbanken und Fachinformationssysteme“ des GGA-Instituts in Hannover eng zusammengearbeitet. Diese Arbeitsgruppe hat langjährige Erfahrung auf dem Gebiet der Erstellung von Datenmodellen und Datenbanken. Die Arbeitsgruppe hat ein „Fachinformationssystem (FIS) Geophysik“ mit einem übergreifenden Überbau und mehreren Subsystemen, z. B. für die Bereiche Bohrlochgeophysik, Gravimetrie, Geoelektrik aufgebaut. Die Datenbank wird kontinuierlich mit neuen Subsystemen erweitert. Um die Erfahrungen der Arbeitsgruppe und den damit verbundenen Synergieeffekt zu nutzen, wurde die Petrophysik-Datenbank als ein weiteres Subsystem der FIS Geophysik Datenbank konzipiert und eingefügt.

Abb. D1 zeigt das Bachmann-Diagramm des Subsystems Petrophysik (PP, in gelb). Weiterhin konnten Referenztabelle petrophysikalischer Einheiten für die geologische Schichtbeschreibung integriert werden (PET, in gelb). Dies ist wichtig, damit alle Benutzer der Datenbank mit einem einheitlichen Symbolschlüssel arbeiten. Hierdurch wird garantiert, dass durch eine Abfrage alle zur Verfügung stehenden Informationen der Datenbank erhalten werden. Die Tabellen, welche die direkte Verknüpfung mit dem Überbau und somit auch zu den weiteren Subsystemen herstellen, sind im Bachmann-Diagramm in weiß dargestellt.

Die Datenbank enthält die Ergebnistabellen der Messverfahren, die an der RWTH Aachen und am GGA-Institut eingesetzt werden. Darüber hinaus sind Messverfahren berücksichtigt, die von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) im GEOZENTRUM Hannover als Service angeboten werden, z. B. die Röntgenfluoreszenz-Analyse für die Berechnung der Wärmeproduktionsrate. Jedes Messverfahren besitzt eine eigene getrennte Ergebnistabelle. Dieser modulare Aufbau ermöglicht es, die Datenbank nachträglich leicht um neue Messverfahren zu erweitern.

Das verwendete Datenbanksystem (Server) ist ein Microsoft SQL Server verbunden mit einer Microsoft Access-Oberfläche. Es wird zur Zeit angedacht, die in Abb. D1 dargestellte Datenbank, auch als eigenständige aus dem FIS Geophysik ausgekoppelte Version zur Verfügung zu stellen und an der RWTH Aachen zu installieren. Für die Anfangsphase der Erstellung eines Datenmodells und der Datenbank war es jedoch sinnvoll und hilfreich, das Wissen und das vorhandene Datenbanksystem der FIS Geophysik Arbeitsgruppe zu nutzen.

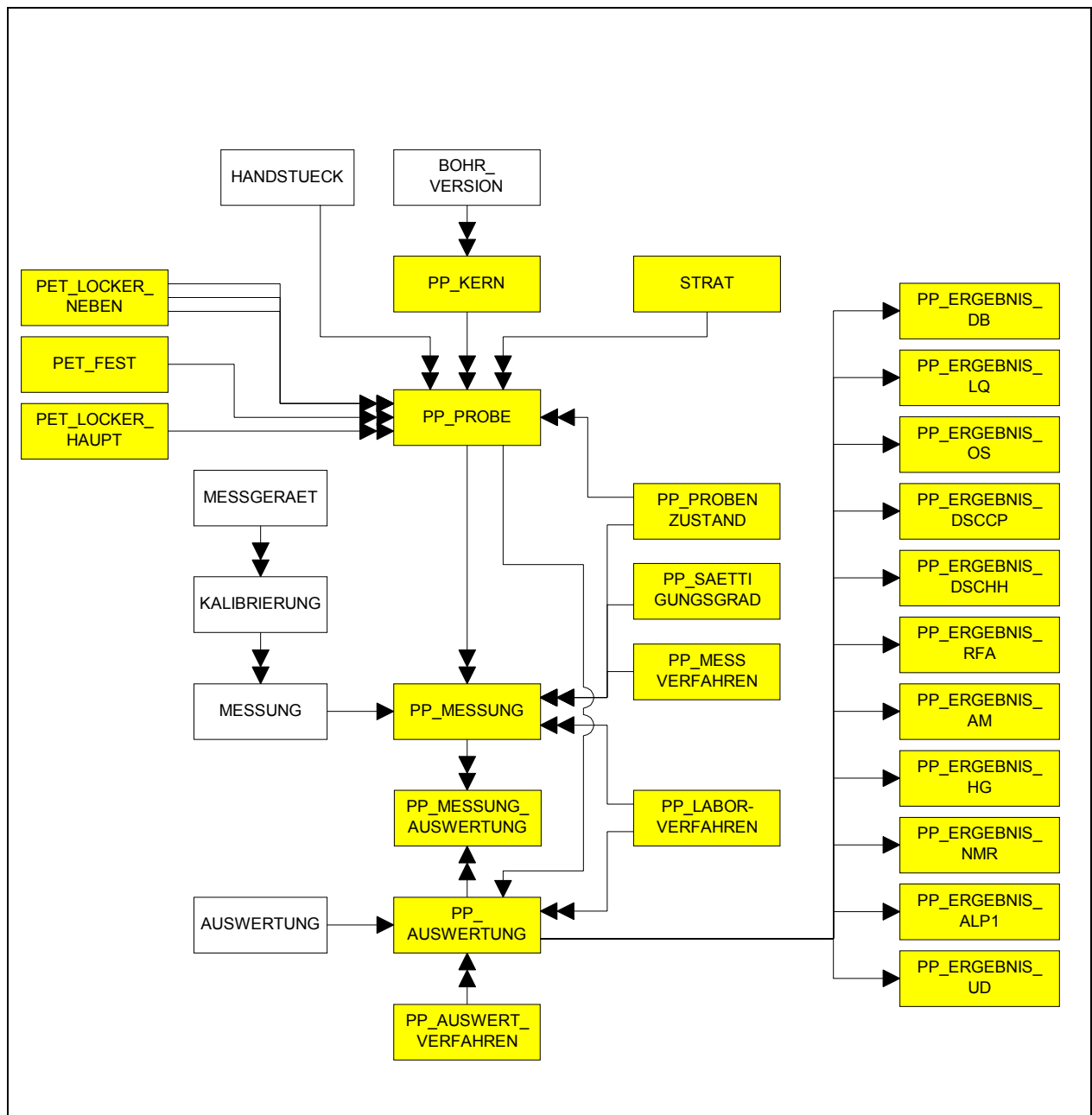


Abb. D.1: Bachmann-Diagramm der Petrophysik-Datenbank.

E. Publikationen

Interne Berichte des Projekts:

- C. Clauser, A. Hartmann, V. Rath & R. Schellschmidt: *Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe - Detailkonzept III/2000-IV/2001*, Zwischenbericht, 4. Oktober 2000
- C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt & A. Zschocke: *Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe - Teilaufgabe: Auswahl des Gebiets für die Detailstudie*, Zwischenbericht, 5. März 2001
- C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt & A. Zschocke: *Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe – Endbericht zum Auftrag 9X0009-8390-0*, 9. November 2001

Tagungsbeiträge von Projektmitglieder (Vortragender unterstrichen):

- C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt & A. Zschocke: *Identifizierung und Quantifizierung von advektiven Transportvorgängen in Temperaturlogs: Eine Pilotstudie*, Oral Presentation, 61. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, Frankfurt am Main, 19-23.3, 2001
- C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt & A. Zschocke: *Detection and quantification of groundwater flow: geothermal scanning of the sub-surface for temperature residuals of advective origin*, Oral Presentation, XI. Meeting European Union of Geosciences, Strasbourg - France, April 8-12, 2001
- C. Clauser, H. Deetjen, A. Hartmann, F. Höhne, V. Rath, W. Rühaak, R. Schellschmidt & A. Zschocke: *Detection and quantification of groundwater flow: geothermal scanning of the sub-surface for temperature residuals of advective origin*, Oral Presentation, 5th International Meeting on Heat Flow and Structure of the Lithosphere, Kostelec nad Černými Lesy, Czech Republic, June 10-16, 2001
- A. Hartmann, V. Rath & C. Clauser: *Identifying paleoclimatic signals in borehole temperature logs as a step towards isolating advective effects*, Oral Presentation, 5th International Meeting on Heat Flow and Structure of the Lithosphere, Kostelec nad Černými Lesy, Czech Republic, June 10-16, 2001
- A. Hartmann, V. Rath & C. Clauser: *Geostatistische Untersuchungen in Deutschland zur Identifizierung advektiver Prozesse*, 61. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, Frankfurt am Main, 19-23.3 2001
- W. Rühaak & A. Zschocke: *Identifizierung von Grundwasserströmung - Methoden und erste Ergebnisse*, Oral Presentation, 61. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, Frankfurt am Main, 19-23.3 2001
- A. Zschocke, R. Schellschmidt & W. Rühaak: *Identification and Quantification of Convective Heat Transport in the western Molasse (Germany)*, Oral Presentation, 5th International Meeting on Heat Flow and Structure of the Lithosphere, Kostelec nad Černými Lesy, Czech Republic, June 10-16, 2001

F. Verwendete Literatur

- Allen, P. A., & Allen, J. R.: *Basin Analysis. Principles and Applications*. Blackwell Scientific, Oxford, 1990
- Baldschuhn, R., Frisch, U. & Kockel, F.: *Die Strukturen im Untergrund NW-Deutschlands 1:500 000*. BGR, Hannover, 1999 .
- Bartels, J., Kühn, M. & Clauser, C.: *SHEMAT Reference Manual*, Aachen, 2001
- Bartier, P.M. and Keller, P.: *Multivariate interpolation to incorporate thematic surface data using inverse distance weighting (IDW)*., Comp. and Geosc., 22, 795-799,1996
- Bayer, U., Scheck, M., Rabbel, W., Crawczyk, C. M., Götze H.-J., Stiller, M., Beilecke, Th., Marotte, A.-M., Barrio-Alvers, L. & Kuder, J.: *An integrated study of the NE German Basin*. Tectonophysics, 313, 145-169, 1999.
- Beardmore, G. R. & Cull, J. P.: *Crustal Heat Flow. A guide to Measurement and Modelling*, University Press, Cambridge, 2001
- Beck, A. E.: *Inferring past climate change from subsurface temperature profiles: some problems and methods*, Paleogeography, Paleoclimatology, Paleoecology (Global and Planetary Change Section), 98, 73-80, 1992
- Beck, A. E., Shen, P. Y., Beltrami, H., Mareschal, J.-C., Šafanda, J., Sebagenzi, M. N., Vasseur, G. & Wang, K.: *A comparison of five different analyses in the interpretation of five borehole temperature data sets*, Paleogeography, Paleoclimatology, Paleoecology (Global and Planetary Change Section), 98, 101-112, 1992
- Beck, A. E.: *Thermal Properties*, in: Haenel, R., Rybach, L. & Stegena, L., *Handbook of Terrestrial Heat-Flow Density Determination*, Kluwer, Amsterdam, 1988
- Beltrami, H. & Mareschal, J. C.: *Ground temperature histories for central and eastern Canada from geothermal measurements: Little ice age signature*. Geophysical Research Letters, 19(7), 689–692, 1992.
- Beltrami, H. & Mareschal, J.-C.: *Resolution of ground temperature histories inverted from borehole temperature data*, Global and Planetary Change, 11, 57-70, 1995
- Beltrami, H., Chapman, D. S., Archambault, S. & Bergeron, Y.: *Reconstruction of High Resolution Ground Temperature Histories Combining Dendrochronological and Geothermal Data*. Earth and Planetary Science Letters, 136, 1995.
- Beltrami, H., Taylor, A. E.: *Records of Climatic Change in the Canadian Arctic: Towards Calibrating Oxygen Isotope Data with Geothermal Data*. Global and Planetary Change, 11(3), 1995.
- Beltrami, H., Cheng, L. & Mareschal, J. C.: *Simultaneous Inversion of Borehole Temperature Data for Determination of Ground Surface Temperature History*. Geophysical Journal International, 129, 1997.
- Benfield, A. E.: *Terrestrial heat flow in Great Britain*, Proc. R. Soc. London, A173, 428 – 450, 1939.
- Bertleff, B., Joachim, H., Kozirowski, G., Leiber, J., Ohmert, W., Prestel, R., Stober, I., Strayle, G., Villinger, E., & Werner, J.: *Ergebnisse der Hydrogeothermiebohrungen in Baden-Württemberg*. Jh. Geol. Landesamt Baden-Württemberg, 30, 27-116, 1988.
- Billings, S. D., Beatson, R. K., & Newsam, G. N.: *Interpolation of Geophysical Data Using Continuous Global Surfaces*, Geophysics, submitted, 2002
- Billings, S. D., Newsam, G. N., & Beatson, R. K.: *Smooth Fitting of Geophysical Data Using Continuous Global Surfaces*, Geophysics, submitted, 2002
- Birch, F.: *The Effects of Pleistocene Climatic Variations upon Geothermal Gradients*. American Journal of Science, 246, 729 – 760, 1948.

- Björk, Å, Elfving, T., & and Z. Strakös, Z.: *Stability of conjugate gradient and Lanczos methods for linear least squares problems*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 98, 720-736, 1998
- Brandt, S.: *Data Analysis*, Springer, Berlin, 1999
- Bredehoeft, J.D. & Papadopoulos, I.S.: *Rates of Vertical Groundwater Movement Estimated from the Earth's Thermal Profile*, Water Resour. Res., 1, 325-328, 1965.
- Brigaud, F., Chapman, D. S., & Le Douaran, S.: *Estimating Thermal Conductivity in Sedimentary Basins Using Lithologic Data and Geophysical Well Logs*. AAPG Bulletin, 74, 1459 - 1477, 1990.
- Bücker, C., Rybach, L.: *A simple method to determine heat production from gamma-ray logs*, Marine and Petroleum Geology, 13(4), 373 – 375, 1996.
- Cathles III, L.M.: *Thermal aspects of ore formation*, in: Barnes, H. L.: *Geochemistry of Hydrothermal Ore Deposits*, Third Edition, Wiley, New York, 1997
- Cermak, V., Safanda, J. & Bodri, L.: *Does man contribute to the present-day climate warming? Evidence from the underground*. Vortrag, 5th IHFC meeting, Kostelec, 2001.
- Cermak, V., & Rybach, L.: *Thermal Conductivity and Specific Heat of Minerals and Rocks*, in: Angenheister, G. (Editor): *Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Group V (Geophysics and Space Research). Volume 1a (Physical Properties of Rocks)*, Springer, Berlin, 1992
- Chapman, D. S., Bartlett, M., Putnam, S. N. & Harris, R. N.: *A geothermal observatory for climate change studies – The Utah experience*. Vortrag, 5th IHFC meeting, Kostelec, 2001.
- Clauser, C.: *A Climatic Correction on Temperature Gradients Using Surface Temperature Series of Various Periods*, Tectonophysics, 103, 33-46, 1984
- Clauser, C.: *Untersuchungen zur Trennung der konduktiven und konvektiven Anteile im Wärmetransport in einem Sedimentbecken am Beispiel des Oberrheingraben*, Diss. TU Berlin, Fortschritts-Berichte VDI, 19(28), VDI-Verlag, Düsseldorf, 1988
- Clauser, C.: *Thermal signatures of heat transfer processes in the Earth's crust*, Lecture notes in earth sciences, 85, Springer, Berlin, 1999
- Clauser, C. & Villinger, H.: *Analysis of Conductive and Convective Heat Transfer in a Sedimentary Basin, Demonstrated for the Rheingraben*, Geophys. J. Int., 100, 393-414, 1990
- Clauser, C. & Mareschal, J.-C.: *Ground Temperature History in Central Europe from Borehole Temperature Data*, Geophys. J. Int, 121, 805-817, 1995
- Clauser, C. & Huenges, E.: *Thermal conductivities of rocks and minerals*. In: Ahrens, T. J. (ed.): *AGU Handbook of Physical Constants*, AGU, New York, 1995.
- Clauser, C., Giese, P., Huenges, E., Kohl, T., Lehmann, H., Rybach, L., Safanda, J., Wilhelm, H., Windloff, K., & Zoth, G.: *The thermal regime of the crystalline continental crust: Implications from the KTB*, J. Geophys. Res, B 102, 18417-18441, 1997
- Clauser, C.: *Thermal signatures of heat transfer processes in the Earth's crust*, Lecture Notes in Earth Sciences, 85, Springer, Berlin, 1999.
- Correia, A. & Šafanda, J.: *Preliminary ground surface temperature history in mainland Portugal reconstructed from borehole temperature logs*, Tectonophysics, 306, 269-275, 1999
- Cressie, N. A. C.: *Statistics for spatial data*, Wiley, New York, 1993.
- Demongodin, L., Pinoteau, B., Vasseur, G., & Gable, R.: *Thermal conductivity and well logs : A case study in the Paris Basin*, Geophys. J. Int, 105, 675-691, 1991
- Deutsch, C. V., & Journel, A. G.: *GSLIB. Geostatistical Software Library and User's Guide*, Oxford University Press, New York, 1999
- Duijndam, A. J. W.: *Bayesian estimation in seismic inversion. Part I: Principles*, Geophysical Prospecting, 36, 878-898, 1998
- Duijndam, A. J. W.: *Bayesian estimation in seismic inversion. Part II: Uncertainty analysis*, Geophysical Prospecting, 36, 899-918, 1998

- England, P. C.: *Some thermal considerations of the alpine metamorphism --- past, present and future*, Tectonophysics, 46, 21–40, 1978
- Fieguth, P. W.: *Application of Multiscale Estimation to Large Scale Multidimensional Imaging and Remote Sensing Problems*, PhD Dissertation, MIT, Cambridge MA, 1995
- Förster, A. & Merriam, D. F.: *Problems and potential of industrial temperature data from a cratonic basin environment*. In: Förster, A. & Merriam, D. F. (eds.) : *Geothermics in Basin analysis*. Kluwer, New York, 1999.
- Garven, G., & Raffensperger, J. P.: *Hydrogeology and geochemistry of ore genesis in sedimentary basins*, in: Barnes, H. L.: *Geochemistry of Hydrothermal Ore Deposits*, Third Edition, Wiley, New York, 1997
- Geyer, O. F., & Gwinner, M. P.: *Geologie von Baden-Württemberg*, Schweizerbart, Stuttgart, 1986
- Griesser, J.-J., & Rybach, L.; in: Beck, A. E., Garven, G., & Stegena, L.: *Hydrogeological Regimes and Their Subsurface Thermal Effects*, AGU Monograph 47, American Geophysical Union, Washington, 1989
- Guillou-Frottier, L., Mareschal, J.-C., Jaupart, C., Gariépy, C., Lapointe, R., & Bienfait, G.: *Heat Flow Variations in the Grenville Province, Canada*, Earth and Planetary Science Letters, 136(3-4), 1995.
- Hänel, R., Rybach L., & Stegena, L.: *Handbook of terrestrial heat-flow density determination*, Kluwer, Dordrecht, 1988
- Hänel, R., & Staroste, E. (Editors): *Atlas of Geothermal Resources in the European Community, Austria, and Switzerland*, Directorate-General for Science, Research and Development, Geothermal Research, Brussels, 1988
- Hänel, R.: *The Urach Geothermal Project*, Schweizerbart, Stuttgart, 1982.
- Hahn-Weinheimer, P., Hirner, A., & Weber-Diefenbach, K.: *Röntgenfluoreszenz-analytische Methoden*, Vieweg, Braunschweig, 1995
- Hanke, M.: *Conjugate Gradient type methods for ill-posed problems*, Longmans, New York, 1995
- Hansen, P. C.: *Rank Deficient and discrete ill-posed Problems. Numerical Aspects of Linear Inversion*, SIAM, Philadelphia, 1998
- Hansen, J. & Lebedeff, S.: *Global trends of measured surface air temperature*, J. Geophys. Res., D 92, 13345-13372, 1987
- Hemminger, W.F. & Cammenga, H.K. (1989): *Methoden der Thermischen Analyse*, Springer, Berlin, 1989
- Henningsen, D., & Katzung, G.: *Einführung in die Geologie Deutschlands*, Enke, Stuttgart, 1998
- Hermanrud, C., Cao, S., & Lerche, I. : *Estimates of virgin rock temperature derived from BHT measurements: Bias and error*, Geophysics, 55, 924-931, 1990.
- Höhne, G., Hemminger, W. & Flammersheim, H.-J.: *Differential Scanning Calorimetry - An Introduction for Practitioners*, Springer, Berlin, 1996
- Hofmann B.: *Mathematik inverser Probleme*, Teubner, Stuttgart, 1999.
- Huber, P. J.: *Robust Statistics*, Wiley, New York, 1981.
- Jessop, A. M.: *The distribution of glacial perturbation of heat flow in Canada*. Can. J. Earth Sci., 8, 162 – 142, 1971.
- Jokinen, J., & Kukkonen, I. T.: *Inverse Monte Carlo simulation of the lithospheric thermal regime in the Fennoscandian Shield using xenolith-derived mantle temperatures*, J. Geodynamics, 29, 71-85, 2000
- Jones, P. D., Briffa, K. R., Barnett, T. P., Tett, S. F. B. : *High-resolution Palaeoclimatic Records for the last Millennium: Interpretation, Integration and Comparison with General Circulation Model Control-Run Temperatures*, The Holocene, 8, 455 – 471, 1998.
- Kitanidis, P.K.: *Introduction to Geostatistics, Applications in Hydrogeology*. Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- Kohl, T.: *Transient thermal effects below complex topographies*, Tectonophysics, 306, 311-324, 1999

- Kolditz, O.: *Strömung, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein*, Bornträger, Berlin, 1999
- Kolditz, O & Clauser, C.: *Numerical Simulation of Flow and Heat Transfer in Fractured Crystalline Rocks: Application to the Hot Dry Rock Site in Rosemanowes (UK)*, *Geothermics*, 27, 1-23, 1998
- Kronmüller, K.: *Sedimentologie der Bausteinschichten und der Unteren Cyrenenschichten im westlichen Molassebecken Süddeutschlands (Oberoligozän)*, Clausthaler Geowiss. Diss., 25, Clausthal-Zellerfeld, 1987a
- Kronmüller, R.: *Diagenese der kalzitisch zementierten karbonatreichen Sandsteine der Bausteinschichten (Oberoligozän, Süddeutsche Westmolasse)*, Clausthaler Geowiss. Diss., 26.; Clausthal-Zellerfeld, 1987b
- Kosakowski, G.; Kunert, V.; Clauser, C.; Franke, W., & Neugebauer, H.J.: *Hydrothermal transients in Variscan crust: paleotemperature mapping and hydrothermal models*, *Tectonophysics*, 306, 325-344, 1999
- Kukkonen, I. T. & Clauser, C.: *Simulation of Heat Transfer at the Kola Deep-Hole Site – Implications for Advection, Heat Refraction and Paleoclimatic Effects*, *Geophys. J. Int.*, 116, 409-420, 1994
- Kutasov, I.M.: *Applied geothermics for petroleum engineers*. Elsevier, Amsterdam, 1999.
- Lane, A. C.: *Geotherms of Lake Superior Copper Country*, *Bull. Geol. Soc. Am.*, 34, 703 – 720, 1923.
- Lehmann, H., Wang, K. and Clauser, C.: *Parameter identification and uncertainty analysis for heat transfer at the KTB drill site using a 2-D inverse method*. *Tectonophysics*, 291, 179-194, 1998
- Le Carlier de Veslud, C., Royer, J. J. & Florès, L.: *Convective heat transfer around the Soultz-sous-Forêts geothermal site. implication to oil potential*. *First Break*, 12(11), 553-560, 1994.
- Leischner, K.: *Kalibration simulierter Temperaturgeschichten von Sedimentgesteinen*. Bericht Jü-2909, Forschungszentrum Jülich, 1994.
- Leu, W., Keller, B., Matter, A., Schärli, U., & Rybach, L.: *Geothermische Eigenschaften Schweizer Molassebecken (Tiefenbereich bis 500 m)*, Bundesamt für Energie, Programm Geothermie, Schlussbericht, 1999
- Louis, A. K.: *Inverse und schlecht gestellte Probleme*, Teubner, Stuttgart, 1989
- Lu, N., & Ge, S.: *Effect of horizontal heat and fluid flow on the vertical temperature distribution of a semiconfining layer*, *Water Resources Research*, 32, 1449-1453, 1996
- Majorowicz, J. A., Garven, G. Jessop, A., & Jessop, C.: *Present heat flow along a profile across the Western Canada Sedimentary Basin*. In Förster, A. & Merriam, D. F. (eds.): *Geothermics in Basin analysis*. Kluwer, New York, 1999.
- Marchuk, G. I.: *Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems*, Kluwer, Dordrecht, 1995
- Mareschal, J.-C. & Beltrami, H.: *Evidence for recent warming from perturbed geothermal gradients: examples from eastern Canada*, *Climate Dynamics*, 6, 135-143, 1992
- Menke, W.: *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*, Academic Press, San Diego, 1984
- Mosegaard M. & Tarantola, A.: *Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems*, *J. Geophys. Res.*, B 100, 12431-12447, 1995
- Mundry, E.: *Harmonic temperature waves in a horizontally layered medium*, *Jour. Geoph.*, 40, 767-774, 1974
- Ondrak, R., Scheck, M., Klesper, C., Förster, A., McCann, T. & R. Gerisch, R.: *The modelled conductive temperature field of the NE German Basin in comparison with temperature measurements*. Poster, <http://www.gfz-potsdam.de/pb3/ag-ngb/tempnegb>.
- Pavicevic, M. K., & Amthauer, G.: *Physikalisch-chemische Untersuchungsmethoden in den Geowissenschaften*, Bd. 1, S. 115ff., 2000.
- Person, M., and G. Garven, *Hydrologic constraints on petroleum generation within continental rift basins: theory and application to the Rhine Graben*, *Am. Assoc. Petr. Geol. Bull.*, 76, 468-488, 1992.

- Petmecky, R. S.: *Numerische Simulation der Entwicklungsgeschichte des zentralen Niedersächsischen Beckens unter besonderer Berücksichtigung der Erdgaslagerstättenbildung*. Bericht Jü-3567, Forschungszentrum Jülich, 1998.
- Pflug, R.: *Bau und Entwicklung des Oberrheingrabens*. WBG, Darmstadt, 1982.
- Pollack, H. N., Huang, S.: *Climate Reconstruction from Subsurface Temperatures*. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 28, 339 – 365, 2000.
- Pollack, H. N. & Huang, S.: *Climate Reconstruction from Subsurface Temperatures*. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 28, 339 – 365, 2000.
- Popov, Yu. A.: *Optical Scanning technology for non-destructive contactless measurements of thermal conductivity and diffusivity of solid matters*, in: *Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics*, Proceedings of the 4th World Conference. Brussels, Belgium, 1, 09-117, 1997
- Popov, Yu. A., Pribnow, D., Sass, J., Williams, C. and Burkhardt, H.: *Characterisation of rock thermal conductivity by high-resolution optical scanning*, Geothermics, 28, 253-276, 1999
- Preusche, C.: *Bewegung salinarer Porenwässer in der tertiären Füllung des Süddeutschen Molassebeckens*, Zwischenbericht, DFG AZ II C 6 Pf 65/32-1, 1996
- Pribnow, D. & Schellschmidt, R.: *Thermal tracking of upper crustal fluid flow in the Rhine Graben*, Geoph. Res. Lett., 27, 1957-1960, 2000
- Rauth, M.: *Gridding of Geophysical Potential Fields from Noisy Scattered Data*, PhD Dissertation, Inst. f. Meteorologie und Geophysik der Universität Wien, 1998
- Reiter, M.: *Using precision temperature logs to estimate horizontal and vertical groundwater flow components*, Water Resources Research, 37, 663-674, 2001
- Rodgers, C. D.: *Inverse Methods for atmospheric sounding. Theory and practice*. World Scientific, Singapore, 2001
- Rybach, L., & Buntebarth, G.: *Relationships between the petrophysical properties density, seismic velocity heat generation, and mineralogical constitution*, Earth and Planetary Science Letters, 57, 367 - 376, 1982.
- Rybach, L., & Buntebarth, G.: *The variation of heat generation, density, and seismic velocity with rock type in the continental lithosphere*. Tectonophysics, **103**, 335 - 344, 1984.
- Rybach, L., & Čermak, G.: *Radioactive heat generation in rocks*. In: G. Angenheister (ed.): *Landolt & Börnstein V/1: Physical Properties of Rocks*, 353-371, Springer, Heidelberg, 1982.
- The variation of heat generation, density, and seismic velocity with rock type in the continental lithosphere*. Tectonophysics, **103**, 335 - 344, 1984.
- Rybach, L.: *Determination of heat production rate*, in: Haenel, R., Rybach, L. & Stegena, L., *Handbook of Terrestrial Heat-Flow Density Determination*, Kluwer, Amsterdam, 1988
- Šafanda, J.: *Possible effects of the thermal conductivity heterogeneity and anisotropy on the KTB temperature field*, in 1. DGG-Kolloquium Wärmetransport in der Kruste – Beiträge zur allgemeinen und angewandten Geothermik, Wennigsen, 2.-3. November 1995, Mitteilungen der DGG, Sonderband II, 1996
- Šafanda, J.: *Ground surface temperature as a function of slope angle and slope orientation and its effect on the subsurface temperature field*, Tectonophysics, 306, 367-375, 1999
- Sambridge, M.: *Geophysical inversion with a neighbourhood algorithm – I. Searching a parameter space*, Geophys. J. Int., 138, 479-494, 1999a
- Sambridge, M.: *Geophysical inversion with a neighbourhood algorithm – II. Appraising the ensemble*, Geophys. J. Int., 138, 727-746, 1999b
- Schafmeister, M.-Th.: *Geostatistik für die hydrogeologische Praxis*, Springer, Berlin, 1999.
- Scheck, M. & Bayer, U.: *Evolution of the Northeast German Basin – inferences from a 3D structural model and subsidence analysis*, Tectonophysics, 314, 285-307, 1999.
- Schellschmidt, R., Hurter, S., Förster, A. & Huenges, E.: *Germany*. In: Hurter, S. & Hänel, R. (eds.): *Atlas of Geothermal Resources in Europe*, Oxford, 2001 (in press).

- Schellschmidt, R., Hägedorn, F., & Fesche, H.-W.: *Das Temperaturfeld in Norddeutschland – neue Messungen, neue Karten, neue Interpretationen*, Bericht, BGR/NLFB Archiv-Nr. 119 563; Hannover, 1999.
- Schönwiese, C.-D., Rapp, J., Fuchs, T., & Denhard, M.: *Klimatrend-Atlas Europa 1891-1990*, Bericht des Zentrums für Umweltforschung 20, ZUF, Frankfurt, 1993
- Schulz, R., Hänel, R., & Kockel, F.: *Federal Republic of Germany - West federal states*, in Hurtig, E., Cermak, V., Haenel, R. and Zui, V. (Eds.): *Geothermal Atlas of Europe*, Hermann Haak Verlag, Gotha, 34-37, 1992
- Schulz, R. & Schellschmidt, R.: *Das Temperaturfeld im südlichen Oberrheingraben*, Geol. Jb., E48, 153-165, 1991
- Schulz, R., Hänel, R., & Kockel, F.: *Federal Republic of Germany - Western federal states*. - In: E. Hurtig, V. Cermak, R. Hänel & V. Zui (Eds.), *Geothermal Atlas of Europe*: 34-37, Hermann Haak Verlag, Gotha, 1992.
- Sen, M., & Stoffa, P. L.: *Global optimization methods in geophysical inversion*, Elsevier, 1995.
- Şerban, D. Z., & Jacobsen, B. H.: *The use of broad-band prior covariance for inverse paleoclimate estimation*, Geophys. J. Int., 147, 29-40, 2001
- Shen, P. Y., & Beck, A. E.: *Least Squares Inversion of Borehole Temperature Measurements in Functional Space*, J. Geophys. Res., B 96, 19965-19979, 1991
- Siewers, U.: *Erweiterung der Wärmeleitfähigkeitsmessapparatur TCFCM –N20 durch Einsatz eines Computers*, Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung NLfB – Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben Hannover (1987), S. 5ff., 8ff., 2000.
- Signorelli, S., & Kohl, T.: *Determination of ground surface temperature by meteorological data*. Poster, 5th IHFC meeting, Kostelec, 2001.
- Smith, W.H.F. & Wessel, P. (1990): *Gridding with continuous curvature splines in tension*, Geophysics, 55, 293-305.
- Stallmann, R. W.: *Computation of ground-water velocity from temperature data*, USGS Water Supply Papers, 1544-H, 36-46, 1963
- Sun, N.-Z.: *Inverse Problems in Groundwater Modeling*, Kluwer, Dordrecht, 1994
- Taniguchi, M., Sakura, Y., Uchida, Y.: *Climate reconstructions from borehole temperatures in metropolitan cities, Japan*, Vortrag, 5th IHFC meeting, Kostelec, 2001.
- Taniguchi, M., Shimada, J., Tanaka, T., Kayane, I., Sakura, Y., Shimano, Y. Dapaah-Siakwan, S., Kawashima, S.: *Disturbances of temperature-depth profiles due to surface climate change and subsurface water flow: 1. An effect of linear increase in surface temperature caused by global warming and urbanization in the Tokyo metropolitan area, Japan*, Water Resources Research, 35(5), 1507–1517, 1999.
- Tarantola, A.: *Inverse Problem Theory: methods for data fitting and model parameter estimation*, Elsevier, Amsterdam, 1987
- Tarantola, A., & Valette, B.: *Generalized nonlinear inverse problem solved using the least squares criterion*, Reviews of Geophysics and Space Physics, 20, 219-232, 1982a
- Tarantola, A., & Valette, B.: *Inverse problem=Quest for Information*, Journal of Geophysics, 50, 159-170, 1982b
- Tikhonov, A. N. & Arsenin, V. Y.: *Methods for Solving Ill-Posed Problems*, Nauka, Moscow, 1979
- Török, S.B., Labar, J., Injuk, J. & van Grieken, R.E.: *X-ray Spectrometry*. Anal. Chem., 68: 467 R - 485 R,
- Vacquier, V., Mathieu, Y., Legendre, E. Blondin, E.: *Experiment on Estimating Thermal Conductivity of Sedimentary Rocks from Oil Well Logging*, AAPG Bulletin, 72, 758 - 764, 1988.
- Vasseur, G., Lucazeau, F. & Bayer, R.: *The problem of heat flow density determination from inaccurate data*, Tectonophysics, 121, 25-34, 1985
- Vasseur, G. & Demongodin, L.: *Convective and conductive heat transfer in sedimentary basins*, Basin Res., 7, 67-79, 1995

- Villemin, T., F. Alvarez, and J. Angelier: *The Rhine-Graben: extension, subsidence and shoulder uplift*, Tectonophysics, 128, 47-59, 1986.
- Wagner, W. & Pruß, A.: *The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use*. Submitted to J. Phys. Chem. Ref. Data 30 (2001).
- Walter, R.: *Geologie von Mitteleuropa*, Schweizerbart, Stuttgart, 1995
- Wessel, P. & Smith, W.H.F.: *A new version of the Generic Mapping Tools (GMT)*. – Eos Trans. AGU, 76(33), 329, 1995 .
- Williams C. F. & Anderson R.: Thermophysical Properties of the Earth's Crust: In Situ Measurements From Continental and Ocean Drilling, J. Geophys. Res., 95 (B6), 9209-9236, 1990.
- Wollrath, J. & Zielke, W.: *FE-Simulation von Strömungen im klüftigen Gestein*, Dtsch. Gewässerkd. Mitt., 34, 2-7, 1990
- Woodbury, A. D. & Ulrych, T. J.: *A Full-Bayesian approach to the groundwater inverse problem for steady state flow*, accepted by: Water Resources Research, 2000
- Wyllie, M. R. J., Gregory, A. R. & Gardner, G. H. F.: *Elastic wave velocities in heterogeneous and porous media*, Geophysics, 21, 41–70, 1956.
- Zoth, G. & Hänel, R.: *Appendix*, in Hänel, R., Rybach L., & Stegena (Eds.): *Handbook of terrestrial heat flow density determination*, Kluwer, Dordrecht, 1988
- Zweigel, J.: *Eustatic versus tectonic control on foreland basin fill. Sequence stratigraphy, subsidence analysis, stratigraphic modelling, and reservoir modelling applied to the German Molasse basin*, Schweizerbart, Stuttgart, 1998
- : *Geologie von Bayern. Geologische Karte von Bayern 1:500000 mit Erläuterungen*, Bayerisches Geologischen Landesamt, München, 1998
- : *Geowissenschaftliche Übersichtskarten von Baden Württemberg 1: 350000*, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, Freiburg im Breisgau, 1998