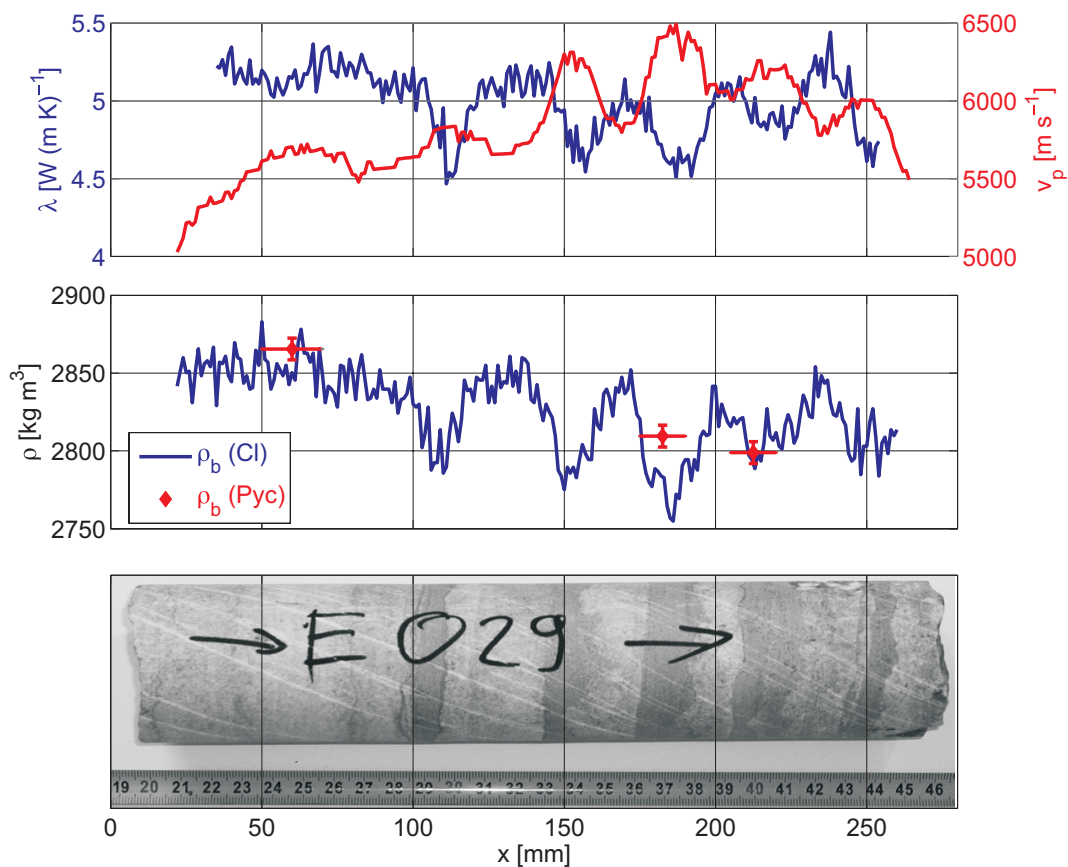

Erstellung statistisch abgesicherter thermischer und hydraulischer Gesteinseigenschaften für den flachen und tiefen Untergrund in Deutschland
Phase 1 – Westliche Molasse und nördlich angrenzendes Süddeutsches Schichtstufenland



BMU-Projekt FKZ 0329985
Endbericht 01.01.2005 - 31.10.2006

Projektleiter: Prof. Dr. C. Clauser (RWTH Aachen)

Berichterstatter: Dr. A. Koch, Prof. Dr. C. Clauser (RWTH Aachen)

Beiträge: Dipl.-Geophys. A. Hartmann, Dr. R. Jorand,
Dr. V. Rath, Dipl.-Inform. A. Wolf (RWTH Aachen)
Dr. D. Mottaghy, Dr. R. Pechnig (Geophysica Beratungsgesellschaft mbH)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Hintergrund und Voraussetzungen	1
1.2	Aufgabenstellung	2
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens	3
1.4	Stand der Wissenschaft und Technik	5
1.5	Zusammenarbeit mit Dritten	5
2	Untersuchungsmethoden	7
2.1	Labormessverfahren	7
2.1.1	Wärmeleitfähigkeit	7
2.1.2	Wärmeleitfähigkeit, Druck und Temperatur	9
2.1.3	Dichte und Porosität	12
2.1.4	Core-Logger	13
2.1.5	Wärmekapazität	14
2.1.6	Permeabilität	15
2.1.7	Halbach NMR-Messung	16
2.1.8	SIP-Messung	19
2.2	Bohrlochgeophysikalische Methoden und Interpretationsverfahren	24
2.2.1	Vorgehensweise	24
2.2.2	Qualitätskontrolle bohrlochgeophysikalischer Messdaten	24
2.2.3	Faziesanalyse der Bohrlochmessdaten	25
2.2.4	Theorie zur lithologischen Interpretation	26
2.2.5	Unsicherheit in der Methodik	27
2.2.6	Thermophysikalische Parameterschätzung mit Hilfe inverser Methoden	29
3	Probenahme und Auswahl von Bohrlochmessdaten	32
3.1	Probennahmeprogramm	32
3.1.1	Geologische Einheiten	32
3.1.2	Hydrogeologie	34
3.1.3	Durchgeführte Arbeiten	37
3.2	Recherche und Kompilation von Bohrlochmessdaten	40
4	Petrophysikalisches Untersuchungsprogramm	44
4.1	Übersicht zu den petrophysikalischen Eigenschaften der Hauptgesteinsarten	45
4.1.1	Vergleich zwischen den gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten	48

4.1.2	Modifikation des theoretischen Modells	53
4.1.3	Spezifische Wärmekapazität	55
4.2	Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeitsmessungen	58
4.2.1	Qualitätskontrolle	58
4.2.2	Ergebnisse der Druck- und Temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen	58
4.2.3	Übertragung auf die Hauptgesteinsarten	64
4.3	Druckabhängige Permeabilitätsmessungen	65
5	Ableitung der thermischen und hydraulischen Gesteinseigenschaften	66
5.1	Tertiär	67
5.1.1	Geologische Übersicht des Tertiärs	67
5.1.2	Gesteinsphysikalische Labormessungen	72
5.1.3	Geothermische Eigenschaften des Tertiärs in Abhängigkeit der Versenkungstiefe	73
5.2	Oberjura (Malm)	78
5.2.1	Geologische Übersicht des Oberjura (Malm)	78
5.2.2	Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen	79
5.2.3	Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten	80
5.2.4	Geothermische Eigenschaften des Oberjura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen	83
5.3	Mitteljura (Dogger)	91
5.3.1	Geologische Übersicht des Mitteljura (Dogger)	91
5.3.2	Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen	92
5.3.3	Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten	94
5.3.4	Geothermische Eigenschaften des Mitteljura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen	98
5.4	Unterjura (Lias)	104
5.4.1	Geologische Übersicht des Unterjura (Lias)	104
5.4.2	Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen	105
5.4.3	Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten	106
5.4.4	Geothermische Eigenschaften des Unterjura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen	108
5.5	Keuper	113
5.5.1	Geologische Übersicht des Keupers	113
5.5.2	Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen und Fazieswechsel .	117
5.6	Muschelkalk	121
5.6.1	Geologische Übersicht des Muschelkalks	121
5.6.2	Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen	124
5.6.3	Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten	125
5.6.4	Geothermische Eigenschaften des Muschelkalks in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen	128
5.7	Buntsandstein	134
5.7.1	Geologische Übersicht des Buntsandsteins	134

5.7.2	Gesteinsphysikalische Labormessungen	137
5.7.3	Geothermische Eigenschaften des Buntsandsteins in Abhängigkeit der Ver- senkungstiefe	138
6	Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse	140
6.1	Erzielte Ergebnisse	140
6.2	Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse	144
6.3	Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	144
6.4	Erfolgte Veröffentlichungen im Rahmen des Projektes	144
	Literatur	146
	Anhang	152
A	Labormessungen	153
B	Stratigraphischer Schlüssel	167
C	Druck- und Temperaturabhängigkeit sowie Tensorkomponenten der Wärmeleitfähigkeit	169
D	Log-Profile	175
E	Übersichtskarte der Probenahmepunkte	181
F	Auszug Dissertation A. Hartmann, 2007	183
F.1	Forward model	183
F.1.1	Sonic tool	184
F.1.2	Density and natural gamma-ray tools	186
F.1.3	Resistivity tool	186
F.1.4	Temperature tool	187
F.2	Bayesian Inversion procedure	188
F.2.1	Implementation of the minimising scheme	189
F.2.2	Computing the Jacobian	190
F.3	Analysis of the algorithm	195
F.3.1	Comparison of AD and FD	195
F.3.2	A-posteriori variance using temperature data	196
F.3.3	Synthetic example	196
F.3.4	Comparison with “Joint”	199
F.3.5	Comparison with “ELANPlus TM ”	201
F.4	Case studies	201
F.4.1	Inversion of borehole data from the Molasse Basin	201
F.4.2	Characterising laboratory samples by high resolution core scanning	209
F.5	Conclusions	214

Abbildungsverzeichnis

1.1	Geologische Übersicht Deutschlands mit dem Umriss des Arbeitsgebiets.	2
2.1	Messanordnung des Thermal Conductivity Scanners	7
2.2	Beispiel von Standmessungen an einem Kernstück aus dem Unteren Keuper.	8
2.3	Schematischer Aufbau einer Halbraumlinienquelle (HLQ).	9
2.4	Schema der Apparatur zur druck- und temperaturabhängigen Messung der Wärmeleitfähigkeit.	10
2.5	Anordnung der Dichte- und Porositätsmessung	12
2.6	Schematischer Aufbau des Core-Loggers.	13
2.7	Messanordnung und Messprinzip des Wärmestromdifferenz-Kalorimeters	14
2.8	Beispielmessungen der spezifischen Wärmekapazität c_p	15
2.9	Halbach-Magnet mit einem Kern aus dem Buntsandstein.	16
2.10	Schematischer Aufbau des Halbach-Magnet Scanners.	17
2.11	T_2 -Verteilung in einem wassergesättigten Sandstein.	18
2.12	Schematisches Modell einer Pore.	19
2.13	Schematischer Aufbau des Halbach-Magnet Scanners.	20
2.14	Phasenverschiebung bei der SIP-Messung	20
2.15	SIP-Anlage.	22
2.16	Formationsfaktor versus Porosität.	23
2.17	Synthetisches Litho-Log und Log-Antworten	28
3.1	Schematische Darstellung der Schichtstufen im schwäbischen Jura.	33
3.2	Geologisches Querprofil durch das Schwäbische Schichtstufenland und das südwestdeutsche Molassebecken.	34
3.3	Hydrogeologie der Schichtenfolgen in Baden-Württemberg I.	35
3.4	Hydrogeologie der Schichtenfolgen in Baden-Württemberg II.	36
3.5	Darstellung des Wärmestroms im Westteil des Süddeutschen Molassebeckens.	37
3.6	Übersicht zu den bearbeiteten Bohrungen mit Profillinien.	43
4.1	Häufigkeitsverteilung petrophysikalischer Eigenschaften für drei Hauptgesteinstypen und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen. 46	46
4.2	Chemische Zusammensetzung der Hauptgesteinstypen Sandstein, Kalkstein und Dolomit nach RFA-Analysen.	47
4.3	Mineralogische Zusammensetzung der Hauptgesteinstypen Sandstein, Kalkstein und Dolomit nach RDA-Analysen.	47
4.4	Änderung der Wärmeleitfähigkeit mit der Porosität, berechnet nach dem arithmetischen, harmonischen und geometrischen Mittel.	49

4.5	Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten für die Sandsteinproben.	50
4.6	Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten für die Dolomitproben.	51
4.7	Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten für die Kalksteinproben.	52
4.8	Ergebnisse der Monte Carlo-Simulationen zur Bestimmung der Matrix-Wärmeleitfähigkeit und des f -Faktors im Asaad-Modell.	54
4.9	Wärmeleitfähigkeiten für vier Hauptgesteinsarten nach dem Asaad-Modell und dem geometrischen Mittel.	55
4.10	Korrelation zwischen Wärmeleitfähigkeit und Porosität verschiedener Kalksteine. . .	56
4.11	Beispiel einer c_P -Messung.	57
4.12	Häufigkeitsverteilung der volumetrischen Wärmekapazität für die drei Hauptgesteinstypen und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen.	57
4.13	Vergleich der horizontalen und vertikalen Komponente der Wärmeleitfähigkeit trockener Proben vor und nach der Druck-/Temperatur-Messung.	59
4.14	Vergleich der horizontalen und vertikalen Komponente der Wärmeleitfähigkeit wassergesättigter Proben vor und nach der Druck-/Temperatur-Messung.	60
4.15	Vergleich der Porosität vor und nach der Druck-/Temperatur-Messung.	60
4.16	Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für alle Proben.	61
4.17	Ergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für feldspatreiche Typ-I-Sandsteine, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen. . . .	61
4.18	Ergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für quarzbetonte Typ-II-Sandsteine, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen.	62
4.19	Ergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für Sulfate, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen.	62
4.20	Ergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für Karbonate, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen.	63
4.21	Korrelation des Koeffizienten k mit der Wärmeleitfähigkeit unter Normalbedingungen. . .	63
4.22	Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ nach Gleichung 4.10 für die Hauptgesteinsarten.	64
4.23	Druckabhängiger Verlauf der Permeabilität ausgewählter Proben unterschiedlicher Lithologien.	65
5.1	Verbreitung der Unteren Meeresmolasse sowie Mächtigkeit und Verbreitung der Unteren Süßwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands.	68
5.2	Mächtigkeit und Verbreitung der Oberen Meeresmolasse sowie Verbreitung der Brackwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands.	69
5.3	Mächtigkeit und Verbreitung der heute erhaltenen Oberen Süßwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands.	70
5.4	Musterprofil der Schichtenfolge des Tertiärs und Quartärs in Baden-Württemberg. . .	71
5.5	Bohrungen im westlichen Molassebecken mit Kernmaterial	72
5.6	Temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit, Molasse.	75
5.7	Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit für Molassesedimente.	76
5.8	Musterprofil der Schichtenfolge des Oberjuras (Malm) in Baden-Württemberg	78

5.9	Bohrlochmessungen im Bereich des Oberjura der Bohrung B-06.	81
5.10	Streudiagramm der im Bohrloch gemessenen Dichte gegen die Laufzeit der Kompressionswelle im Oberjura.	82
5.11	Gammalogs aus Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens im Vergleich zum Standardprofil des Oberjura.	83
5.12	Statistische Verteilung der Wärmeleitfähigkeitsmessdaten für Untereinheiten des Oberjuras.	84
5.13	Streudiagramm der Wärmeleitfähigkeit gegen die spezifische Laufzeit akustischer Wellen, gemessen an Gesteinsproben aus dem Oberjura.	84
5.14	Berechnung der Wärmeleitfähigkeit aus Bohrlochmessungen für den Malm γ bis Malm ζ	85
5.15	Berechnete Wärmeleitfähigkeitsprofile für den Oberjura.	87
5.16	Mittelwert und Standardabweichung der spezifischen akustischen Laufzeiten im Oberjura, berechnet für Bohrungen mit verschiedenen Tiefenlagen.	89
5.17	Mittelwert und Standardabweichung der Gammaaktivität im Oberjura, berechnet für Bohrungen mit verschiedenen Tiefenlagen.	89
5.18	Wärmeleitfähigkeiten der Karbonate des Malms für verschiedene Tiefenstufen.	90
5.19	Musterprofil der Schichtenfolge des Mitteljuras (Dogger) in Baden-Württemberg	91
5.20	Bohrlochmessungen im Bereich des Mitteljura der Bohrung B-06.	93
5.21	Berechnung der Wärmeleitfähigkeit aus Bohrlochmessungen für den Mitteljura der Bohrung B-06.	96
5.22	Vergleich der berechneten Porositäten und Wärmeleitfähigkeiten mit Messwerten an Kernmaterial der Bohrung B-11.	97
5.23	Abhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit der Tonsteine von der Versenkungstiefe.	99
5.24	Abhängigkeit der berechneten Porosität des Opalinustons von der Versenkungstiefe.	99
5.25	Abhängigkeit der berechneten Wärmeleitfähigkeiten des Opalinustons von der Versenkungstiefe.	100
5.26	Stratigraphische Abfolgen des Mitteljuras in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens.	101
5.27	Aus den Logs berechnete Wärmeleitfähigkeiten für die Bohrungen in Abbildung 5.26.	102
5.28	Musterprofil der Schichtenfolge des Unterjuras (Lias) in Baden-Württemberg	104
5.29	Mächtigkeit und Verbreitung des Lias α	105
5.30	Bohrlochmessungen im Bereich des Unterjura der Bohrung B-06.	107
5.31	p-Wellengeschwindigkeiten wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität für Sandsteine und Kalksandsteine des Unterjura.	108
5.32	Berechnung der Wärmeleitfähigkeit aus Bohrlochmessungen für den Unterjura der Bohrung B-06.	109
5.33	Abhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit der Lias-Tonsteine von der Versenkungstiefe.	110
5.34	Stratigraphische Abfolgen des Unterjuras in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens.	111
5.35	Musterprofil der Schichtenfolge des Keupers in Baden-Württemberg	113
5.36	Mächtigkeit und Verbreitung des Unteren Keupers in Südwestdeutschland	114
5.37	Mächtigkeit und Verbreitung des Mittleren Keupers in Südwestdeutschland	115
5.38	Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Keupers in Südwestdeutschland	116
5.39	Bohrlochmessungen im Bereich des Keupers der Bohrung B-06.	118

5.40	Stratigraphische Abfolgen des Keupers in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens.	119
5.41	Musterprofil der Schichtenfolge des Muschelkalks in Baden-Württemberg	121
5.42	Mächtigkeit und Verbreitung des Unteren Muschelkalks in Südwestdeutschland	122
5.43	Mächtigkeit und Verbreitung des Mittleren Muschelkalks in Südwestdeutschland	123
5.44	Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Muschelkalks in Südwestdeutschland	124
5.45	Bohrlochmessungen im Bereich des Muschelkalks der Bohrung B-06.	126
5.46	Streudiagramm der im Bohrloch gemessenen Dichte gegen die Laufzeit der Kompressionswelle im Muschelkalk für mergel- und tonfreie Horizonte.	127
5.47	Wärmeleitfähigkeit wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität für Kalksteine und Dolomite des Muschelkalks.	128
5.48	p-Wellengeschwindigkeit wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität für Kalksteine und Dolomite des Muschelkalks.	129
5.49	Berechnung der Wärmeleitfähigkeit Bohrlochmessungen für den Muschelkalk der Bohrung B-06.	130
5.50	Korrelationen im Muschelkalk für Bohrungen auf einem Ost-West-Profil südlich der Donau.	131
5.51	Häufigkeitsverteilung und Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeiten für drei verschiedene Stratigraphien (Bohrung B-06) und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen.	133
5.52	Musterprofil der Schichtenfolge des Buntsandsteins in Baden-Württemberg	134
5.53	Mächtigkeit und Verbreitung des Buntsandsteins in Südwestdeutschland	135
5.54	Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Buntsandsteins in Südwestdeutschland	136
5.55	Messungen der Wärmeleitfähigkeiten an Sandsteinproben aus dem Buntsandstein.	138
5.56	Häufigkeitsverteilung petrophysikalischer Eigenschaften von Sandsteinproben aus dem Buntsandstein.	139
D.1	Übersicht zu den Bohrungen und den abgegrenzten Hauptserien.	176
E.1	Übersichtskarte der Probenahmepunkte.	182
F.1	Geometry of the lithologic model.	184
F.2	Schematic of the tool response geometry used in the forward model.	185
F.3	Structure of the Jacobian matrix used for the inversion of volumetric composition.	192
F.4	Structure of the Jacobian with problem size 6000×1203 and an overall density of 0.013.	193
F.5	Structure of the Jacobian with problem size 8004×1236 and an overall density of 0.14.	193
F.6	Comparison of resulting Jacobian for finite differences and automatic differentiation.	195
F.7	A-posteriori variance for model volume fractions using different log types and varying q_0	197
F.8	Synthetic lithological model and inversion results.	198
F.9	Comparison of Bayesian inversion of LogInv to dampened least-squares solution of "Joint" for varying values of ϵ	200
F.10	Comparison of "Joint" and LogInv when a layered medium is used to compute the steady-state temperature.	200
F.11	Comparison of LogInv with ELANPlus TM	202
F.12	Composite log, 100 m to 1960 m, 1:10 000.	203
F.13	Inversion results.	206

F.14	L-Curve for the inverse problem.	207
F.15	Panel of GSTH realisations for varying ϵ	208
F.16	Measurements taken on a layered anhydrite/dolomite sample.	209
F.17	M-O plot of the analysed sample.	211
F.18	Results of the inversion of high resolution measurements for the anhydrite/dolomite sample.	215

Tabellenverzeichnis

2.1	Zusammenstellung von Log-Antworten für wichtige gesteinsbildende Minerale. . . .	26
2.2	Fehlerquellen für die Loginterpretation.	28
3.1	Übersicht der gewonnenen Kernproben.	39
3.2	Messgeräte mit ihren jeweiligen Logs und deren Abkürzungen.	41
3.3	Übersicht zu den bearbeiteten Bohrungen und der Verfügbarkeit von Bohrlochmessdaten.	42
4.1	Wärmeleitfähigkeit der beteiligten Minerale zur Berechnung der verschiedenen Mittel.	48
4.2	Ergebnisse der Monte Carlo-Untersuchung von Matrix-Wärmeleitfähigkeit und f -Faktor der Hauptgesteinsarten nach dem Asaad-Modell.	55
4.3	Koeffizienten k und b der Gleichung 4.10 für die Hauptgesteinsarten.	64
5.1	Schlüssel zu den Bohrungen in der westlichen Molasse	72
5.2	Messungen der Wärmeleitfähigkeit und Porosität in der Molasse nach Stratigraphien.	73
5.3	Messungen der Wärmeleitfähigkeit und Porosität in der Molasse nach Einzelbohrungen.	74
5.4	Koeffizienten der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit des Tertiärs.	76
5.5	Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit für tertiäre Molassesedimente.	76
5.6	Durchschnittswerte und Standardabweichungen der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Oberjura.	80
5.7	Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten im Oberjura.	88
5.8	Durchschnittswerte und Standardabweichungen der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Mitteljura.	94
5.9	Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten für den gesamten Mitteljura.	103
5.10	Durchschnittswerte und Standardabweichungen der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Unterjura.	106
5.11	Petrophysikalische Messwerte für die Gesteinstypen des Unterjura.	108
5.12	Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten für den erbohrten Unterjura.	112
5.13	Petrophysikalische Messwerte aus Untereinheiten des Keupers.	120
5.14	Durchschnittswerte und Standardabweichungen der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Muschelkalks.	125
5.15	Petrophysikalische Messwerte für Dolomite und Kalksteine des Muschelkalks.	127
5.16	Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten im Muschelkalk	132
5.17	Übersicht der gewonnenen Kernproben im Buntsandstein.	137
5.18	Petrophysikalische Messwerte für die Sandsteine des Buntsandsteins.	138

6.1	Übersicht zu den thermischen und hydraulischen Eigenschaften der wichtigsten stratigraphischen Einheiten im Untersuchungsgebiet.	141
A.1	Labormessungen der Wärmeleitfähigkeit, der Reindichte und der Porosität.	154
A.2	Wärmeleitfähigkeitsmessungen mit der Halbraumlinienquelle TK04.	159
A.3	RDA-Analysen der untersuchten Laborproben.	160
A.4	RFA-Analysen (Hauptelemente) der untersuchten Laborproben.	162
A.5	RFA-Analysen (Nebenelemente) der untersuchten Laborproben.	164
A.6	Ergebnisse der Wärmekapazitätsmessungen.	166
B.1	Benutzer Stratigraphieschlüssel.	168
C.1	Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten der Kalk- und Sulfatgesteine.	170
C.2	Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten der Sandsteine.	171
C.3	Koeffizienten der Regression für die Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten.	172
C.4	Tensorkomponenten der Wärmeleitfähigkeiten und Porositäten aller Proben.	173
F.1	Evaluation trace.	191
F.2	Reproducibility of the algorithm.	196
F.3	Range of normal noise added to the data of figure F.8.	197
F.4	Zoning of geological units used in the inversion.	201
F.5	Summary of inversion results for the three models.	205
F.6	Results of the mineralogical analysis and pycnometer measurements.	210
F.7	Summary of the results and parameters for the inversion runs for the sample.	212

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Hintergrund und Voraussetzungen

Das Fehlen belastbarer gesteinsphysikalischer Basisdaten des tiefen Untergrunds in Deutschland erschwert bislang die Abschätzung der zu erwartenden Energieausbeute bei der Planung geothermischer Installationen.

Der vorliegende Bericht beschreibt die Ergebnisse der abgeschlossenen ersten Phase eines Projekts, dessen Ziel es ist, die für eine zuverlässige Aufsuchung und Nutzung geothermischer Energie als Wärme und Strom erforderlichen gesteinsphysikalischen Grunddaten in Form einer statistisch repräsentativen Datenbasis bereit zu stellen. Die angestrebte Datenbasis soll Informationen zu jenen Gesteinseigenschaften enthalten, die den Transport von Wärme und Fluiden im Untergrund bestimmen. Sie soll dazu beitragen, dass geologische Fündigkeitsrisiko für geothermische Projekte zu vermindern. Planern solcher Anlagen wird ein Hilfsmittel zur optimalen Auslegung des Projektes an die Hand gegeben.

Zur Erstellung der Datenbasis ist ein mehrjähriges Arbeitsprogramm anvisiert. Die Bearbeitung soll schrittweise entsprechend der großräumigen Gliederung Deutschlands erfolgen. Hier ist vorgesehen, sich zunächst auf die großen Sedimentbecken und Grabenstrukturen zu konzentrieren (Abbildung 1.1). Der vorliegende Bericht stellt die Arbeiten und Ergebnisse aus der ersten Projektphase vor. Das Untersuchungsgebiet umfasst den westlichen Teil des Süddeutschen Molassebeckens und das nördlich angrenzende Süddeutsche Schichtstufenland.

Die Grundidee dieses Projektes ist die Aufbereitung und Nutzung bereits vorhandener Datenquellen, die gegenüber einer explorativen Erkundung mit relativ geringem Aufwand durchgeführt werden kann. Die Qualität und Vollständigkeit der gewonnenen Daten hängt sehr stark von der räumlichen Verteilung, Auswahl, Zugänglichkeit und Qualität der insgesamt existierenden Laborproben und Bohrlochmessungen ab. Es kann daher nicht das Ziel sein, einen vollständigen und flächendeckenden Katalog thermischer und hydraulischer Gesteinseigenschaften oder eine Art Geothermieatlas zu erarbeiten. Dieser Bericht soll vielmehr dazu beitragen, eine große Lücke im Informationsbedarf zum tiefen Untergrund in Deutschland zu schließen und die bestehenden Datenquellen aus dem Kohlenwasserstoffsektor und der Hydrologie synergetisch zu nutzen.

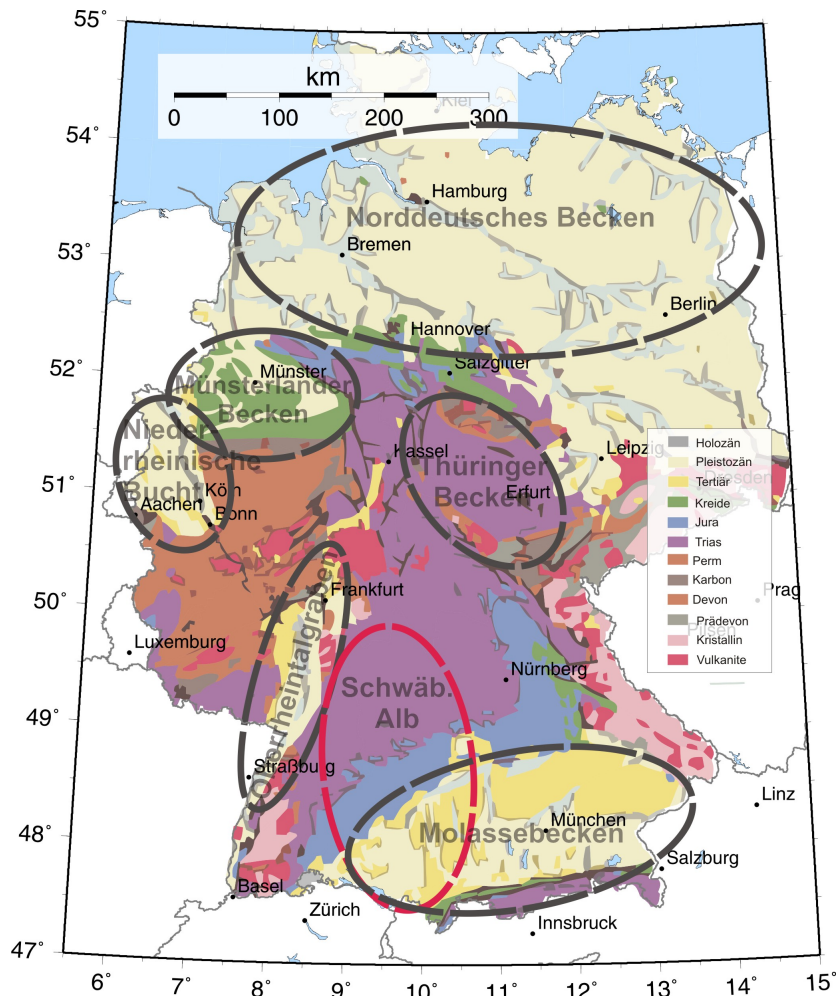


Abbildung 1.1: Geologische Übersicht Deutschlands mit dem Arbeitsgebiet der ersten Projektphase (rot), welches das westliche Süddeutsche Molassebecken und das nördlich angrenzende Süddeutsche Schichtstufenland umfasst, und möglichen Arbeitsgebieten für nachfolgende Projektphasen (grau).

1.2 Aufgabenstellung

Die angestrebten wissenschaftlichen und technischen Arbeitsziele der hier beschriebenen ersten Phase umfassen unterschiedliche Fachdisziplinen der Geothermik, Petrophysik und numerischen Methodenentwicklung. Die Aufgabenstellung des Projektes kann mit folgenden Punkten zusammengefasst werden:

1. Ableitung thermophysikalischer und hydraulischer Daten aus bereits existierenden Daten, eigenen Laboruntersuchungen und der Analyse von bohrlochgeophysikalischen Messungen;
2. Verknüpfung der petrophysikalischen Daten mit lithologischen Informationen mit dem Ziel einer einheitlichen Klassifizierung und dem Aufbau einer statistisch repräsentativen Datenbasis;
3. Exemplarische Untersuchungen zur Abhängigkeit der thermophysikalischen und hydraulischen Eigenschaften von lateralen Fazieswechseln, Kompaktion, Zementation, Diagenese sowie Druck und Temperatur;

4. Extrapolation thermophysikalischer und hydraulischer Kennwerte auf tiefer liegende Krustenbereiche (max. 7 km) unter Berücksichtigung von Sensitivitätsanalysen.

In der ersten hier beschriebenen Phase beschränkten sich die Untersuchungen geographisch auf das westliche Molassebecken und das nördlich angrenzende Süddeutsche Schichtstufenland. In dieser Region kann auf Vorarbeiten zurückgegriffen werden, die im Rahmen eines Forschungsvorhabens zur Detektion von tiefen Grundwasserströmungen gewonnen wurden (Rath und Clauser, 2002; Hartmann et al., 2005b). Mit den hier vorgestellten Arbeiten war es möglich, diese Basis erheblich zu erweitern und statistisch abgesicherte Daten für einen großen Teil von Süddeutschland zu erarbeiten.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Der generelle Ablauf des Gesamtprojektes kann in die zeitlich aufeinander folgenden Abschnitte Probenahme - Labormessungen - Auswertung - Erstellung einer Datenbasis unterteilt werden. Parallel dazu erfolgte über eine Auftragsvergabe an die Geophysica Beratungsgesellschaft mbH die Akquisition und Aufbereitung von bohrlochgeophysikalischen Messungen. Die methodischen Entwicklungen zur Charakterisierung des Porenraums und zur Inversion von Bohrlochmessdaten (siehe unten Punkt 1) dauerten über die gesamte Laufzeit der hier berichteten ersten Projektphase an.

Der Bewilligungszeitraum umfasste ursprünglich die Periode vom 01.01.2005 bis 31.12.2005. Der späte Zuwendungsbescheid am 18.04.2005 und die damit verbundene späte Bereitstellung von Mitteln führte auch zu einer Verzögerung der Auftragsvergabe an Dritte. Infolge dessen lief die Probenahme durch die mit der Durchführung der Geländebeprobung beauftragten Firma ECOS Umwelt GmbH verspätet an, so dass die nachfolgenden Projektabschnitte ebenfalls verzögert bearbeitet wurden. Der Zuwendungsgeber trug diesem Sachverhalt Rechnung und bewilligte eine kostenneutrale Verlängerung bis zum 28.02.2006. Um die zeitliche Lücke bis zum Beginn des Anschlussprojektes (Phase 2; FKZ 0327563) zu überbrücken, wurde eine Aufstockung und Verlängerung bis zum 31.08.2006 gewährt. Diese Periode wurde für vertiefende Analysen und zur Vorbereitung des Folgeprojektes genutzt. Aufgrund der einmonatigen Vakanz der Wissenschaftlerstelle im Projekt im März 2006 und der darauf folgenden Einarbeitungszeit des Nachfolgers wurde die Aufstockungsphase am Ende um weitere zwei Monate kostenneutral verlängert, so dass die gesamte Projektphase letztendlich eine Laufzeit vom 01.01.2005 bis zum 30.10.2006 umspannt.

Das Vorgehen in diesem Projekt kann wie folgt näher beschrieben werden:

1. **Methodische Weiterentwicklungen zur Unterstützung der Projektaufgaben.** Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens wurden verschiedene Analyse- und Auswerteverfahren weiterentwickelt, indem bestehende Methoden ergänzt und speziell für die Bedürfnisse des Projektes optimiert wurden:

- *NMR-Methode:* Ein mobiler NMR-Scanner wurde, angepasst an die Erfordernisse des Projektes, weiter entwickelt und gebaut. Der Scanner kann insbesondere die Porenraumeigenschaften wenig poröser Gesteine erfassen.
- *SIP-Methode:* Die Methode der spektralen induzierten Polarisation (SIP) wurde ergänzend mit der NMR-Methode zur Charakterisierung des Porenraums von Gesteinen eingesetzt. Die Kombination beider Methoden (NMR und SIP) soll gegenüber den Einzelmessungen zu besseren Ergebnissen der Porenradialverteilung und damit der Permeabilität führen.

- *Weiterentwicklung von Software zur Inversion von Bohrlochmessdaten:* In Ergänzung zu bestehenden Auswertemethoden wurde ein Programm fortentwickelt, welches Temperatur- und andere Bohrlochmessungen gemeinsam invertiert. Da herkömmliche Programme zur lithologischen Analyse die Temperatur nicht behandeln können, diese aber ein entscheidende Größe für die Ableitung thermischer Eigenschaften ist, stellt diese Entwicklung einen wichtigen Fortschritt in der geothermischen Analyse von Bohrlochmessungen dar.
2. **Auswahl der relevanten Gesteinsserien im Untergrund des jeweils betrachteten Gebietes und deren repräsentative Beprobung sowie lithologische Klassifizierung.** In Zusammenarbeit mit geologischen Diensten und der Industrie, die über Bohrkerne und Gesteinsproben verfügen, wurde das Süddeutsche Molassebecken und das Süddeutsche Schichtstufenland systematisch beprobt, so dass die unterschiedlichen faziellen Ausprägungen jeder Gesteinsart hinreichend repräsentiert sind. Fehlendes Probenmaterial wurde durch eine ergänzende Oberflächenbeprobung ergänzt. Die Probenahme konzentrierte sich auf die stratigraphischen Haupteinheiten vom Buntsandstein bis zum Tertiär. Exemplarisch für jede Gesteinsart wurde eine repräsentative Probenzahl von knapp 80 Proben für chemisch-mineralogische Analysen sowie petrographische Untersuchung ausgewählt.
 3. **Messung gesteinsphysikalischer Eigenschaften an Proben im Labor.** An den selektierten Gesteinsproben wurden die Eigenschaften Wärmeleitfähigkeit, spezifische Wärmekapazität, radiogene Wärmeproduktion, Dichte, Porosität und Permeabilität im Labor bestimmt. Auf dieser Datengrundlage ist es möglich, statistisch abgesicherte Mittelwerte und Standardabweichungen für die in Frage stehenden thermischen Gesteinseigenschaften anzugeben. An ausgewählten Proben wurde die Druckabhängigkeit der Permeabilität sowie die Temperatur- und Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit analysiert.
 4. **Kompilation, Qualitätskontrolle und faziesbezogene Auswertung bohrlochgeophysikalischer Messdaten.** Parallel zum Laborprogramm wurden bohrlochgeophysikalische Messdaten gesichtet, aufbereitet und ausgewertet, um hieraus die thermophysikalischen Eigenschaften abzuleiten. Hierzu wurden Messdaten aus Bohrungen der Kohlenwasserstoffindustrie genutzt. Neben den bereits vorhandenen Datensätzen aus der Molasse wurden Logs aus weiteren relevanten Bohrungen digitalisiert.
 5. **Erstellung statistisch abgesicherter thermischer und hydraulischer Kenngrößen aus Labordaten und bohrlochgeophysikalischen Messungen** Eine Auswertung der gesammelten Daten lieferte zum einen statistische Maßzahlen für repräsentative Gesteinstypen, wobei im Gegensatz zu bislang üblichen Tabellenwerken neben qualitativen Gesteinsbeschreibungen auch quantitative Informationen zur Chemie und zum Mineralbestand berücksichtigt wurden. Zum anderen erfolgte eine Auswertung nach stratigraphischen Einheiten unter Berücksichtigung von Faziesveränderungen und Diagenese, sodass die lokal gewonnenen Daten in einen räumlichen Zusammenhang gestellt werden konnten.
 6. **Exemplarische Untersuchungen zur Abhängigkeit gesteinsphysikalischer Eigenschaften von Genese, Druck und Temperatur.** An exemplarisch ausgewählten Proben wurden Laboruntersuchungen durchgeführt, um damit den geothermisch interessanten Tiefenbereich bis 7 km zu erschließen. Es wurden in erster Linie Daten zur Wärmeleitfähigkeit, Porosität und zur Permeabilität erzeugt, wobei Proben aus Oberflächenaufschlüssen und Bohrungen verwendet wurden. Für die einzelnen Gesteinstypen sind Modelle der Druck- und Temperaturabhängigkeit aufgestellt worden, die eine Vorhersage der thermischen und hydraulischen Eigenschaften

für verschiedene Tiefenniveaus ermöglichten und die im Labor gewonnenen Daten mit in-situ-Messungen in Tiefbohrungen in Beziehung setzten.

1.4 Stand der Wissenschaft und Technik

Informationen zu den thermophysikalischen Eigenschaften der Gesteine im Untergrund Deutschlands waren zu Beginn des Projektes insgesamt nur spärlich vorhanden. Es existierten Tabellenwerke (Cermak und Rybach, 1982; Clauser und Huenges, 1995; Clauser, 2006; Haenel et al., 1988) und Literaturquellen, die sich jedoch entweder auf einzelne Lokationen beschränkten oder Mittelwerte für gängige Gesteinstypen lieferten, die aus überregionalen, z. T. weltweiten, Einzeldaten kompiliert wurden. Die Übertragbarkeit auf einzelne Regionen Deutschlands war hieraus nicht möglich.

Neben den thermischen Eigenschaften der Gesteine war für die Berechnung des Energiepotenzials die Kenntnis der Porosität und Permeabilität von grundlegender Bedeutung. In Abhängigkeit von der großräumigen geologischen Gliederung und der Rohstoffverteilung in Deutschland lagen Porositäts- und Permeabilitätsdaten in sehr unterschiedlicher Qualität und Quantität vor. Die beste Datenlage war hier für die großen Sedimentbecken gegeben, die im Zuge der Erdöl- und Erdgasexploration in den letzten Dekaden durch Bohrungen erschlossen wurden. Hier allerdings konzentrierten sich die Untersuchungen vorwiegend auf potentielle Speichergesteine für Kohlenwasserstoffe. Direkt verwertbare Daten für die gesamte erbohrte Abfolge lagen nicht vor.

Insgesamt war für hydraulischen Parameter der Informationsstand besser zu bewerten, was auf eine Vielzahl von Untersuchungen zur Rohstoffexploration und Grundwassererkundung zurück zu führen war. Allerdings konzentrierten sich die Informationen entweder auf einzelne Rohstoffregionen Deutschlands bzw. nur auf den flachen, wasserwirtschaftlich interessanten Untergrund. Auch war aufgrund der Datenstruktur (Skaleneffekte, Einzeldaten an Laborproben oder Mittelwerte über hydraulische Einheiten) eine direkte Zuordnung zu thermophysikalischen Datensätzen nicht möglich. Es kann somit zusammengefasst werden, dass zu Projektbeginn für den Untergrund Deutschlands keine statistisch belastbaren Informationen existierten, die ausgereicht hätten, das thermische Potenzial im lokalen bzw. regionalen Maßstab zu beschreiben.

Demgegenüber existierte umfangreiches Proben- und Datenmaterial, welches in Hinblick auf eine Ableitung thermischer und hydraulischer Eigenschaften noch ein großes, bislang weitgehend ungenutztes Potenzial aufwies. Zu nennen sind hier vor allem petrophysikalische Bohrlochmessdaten sowie Probenmaterial aus Bohrungen und Aufschlüssen, welches in Landesämtern und Bohrkernarchiven der Erdölindustrie gelagert ist. Während an Probenmaterial Untersuchungen zu den thermisch-hydraulischen Eigenschaften direkt durchgeführt werden konnten, lieferten Bohrlochmessdaten die Möglichkeit, die gewünschten Informationen aus ihnen abzuleiten.

1.5 Zusammenarbeit mit Dritten

Die Untersuchungen sind in einem Verbund aus Hochschulinstituten und Ingenieurgesellschaften realisiert worden. Die einzelnen Kooperationspartner verfügen über umfangreiche Erfahrungen in verschiedenen geowissenschaftlichen Disziplinen sowie Bereichen der Angewandten Mathematik. Sie trugen entsprechend ihrer Kernkompetenzen zu den verschiedenen Teildisziplinen bei. Neben dem Lehrstuhl Angewandte Geophysik und Geothermische Energie der RWTH Aachen als Projektdurchführender sind nachfolgend alle Institutionen mit Ihrem jeweiligen Aufgabenfeld genannt, die

entweder als direkter Kooperationspartner oder als Projektbeteiligte zum Gesamtergebnis beigetragen haben:

RWTH Aachen, Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen; Prof. Dr. C. Bischof);

Weiterentwicklung von Software zur der Methode des automatischen Differenzierens auf numerische Gesteinsmodelle, die in der Inversion von petrophysikalischen Daten verwendet werden.

Geophysica Beratungsgesellschaft mbH, Aachen; verantwortlich für die Auswertung bohrloch-

geophysikalischer Messungen; Planung und Auswertung druckabhängiger Messungen in Kooperation mit dem Mineralogisch-Petrologischen Institut der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität, Bonn, und der Moscow State Geological Prospecting Academy; Integrierte Auswertung von Labormessungen und bohrlochgeophysikalischen Daten zur Untersuchung der thermischen Eigenschaften in Abhängigkeit vom Gesteinstyp, der Fazies, der Versenkungstiefe und der Temperatur.

ECOS Umwelt GmbH, Aachen; Bereitstellung von Grundlagendaten und Durchführung der Geländebeprobung; lithologische Klassifizierung und makroskopische Beschreibung.

RWTH Aachen, Lehrstuhl für Makromolekulare Chemie (Prof. Dr. B. Blümich); Weiterentwicklung und Bau eines mobilen NMR Scanners zur zerstörungsfreien Bestimmung von Porosität und Permeabilität.

Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Mineralogisch-Petrologisches Institut (Dr.

G. Nover); Durchführung druckabhängiger Permeabilitätsmessungen in Kooperation mit der Geophysica Beratungsgesellschaft mbH, Aachen.

Moscow State Geological Prospecting Academy (Prof. Dr. Y. Popov); Durchführung druck- und

temperaturabhängiger Wärmeleitfähigkeitsmessungen in Kooperation mit der Geophysica Beratungsgesellschaft mbH, Aachen.

RMC Rock and Mineral Consulting GbR, Herzogenrath; Durchführung und Auswertung der

geochemischen Analytik.

Kapitel 2

Daten und Methoden

Im folgenden Kapitel werden die Methoden zusammengefasst, welche zur Untersuchung des Untergrundes der Arbeitsgebiete (vgl. Abbildung 1.1 beigetragen haben. Die Ergebnisse der Anwendung der Methoden werden in den entsprechenden Kapiteln 4 und 5 beschrieben bzw. im Anhang zusammengestellt.

2.1 Labormessverfahren

2.1.1 Wärmeleitfähigkeit

Der Thermal Conductivity Scanner (TCS) der Firma Lippmann & Rauen GbR arbeitet nach dem von Popov (1997); Popov et al. (1999) beschriebenen Prinzip der berührungslosen Messung der Wärmeleitfähigkeit. Außerdem können Angaben über die Homogenität und Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit gemacht werden. Abbildung 2.1 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 Temperatur-

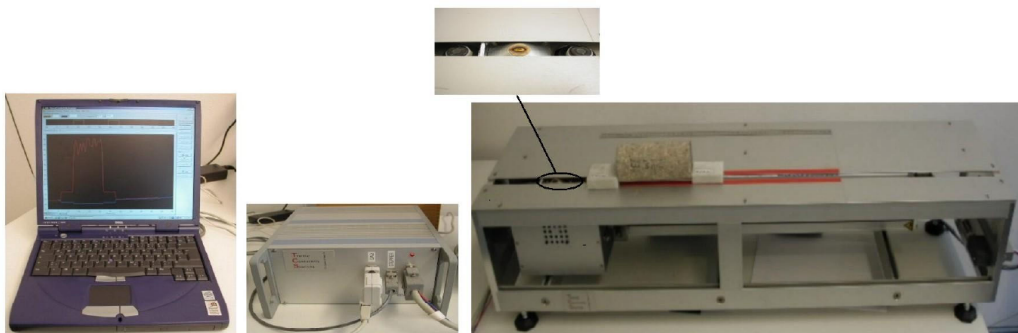


Abbildung 2.1: Messanordnung des Thermal Conductivity Scanners. Von links nach rechts sind der Auswertungsrechner, die Steuereinheit und das eigentliche Messgerät zu sehen. Der kleine Ausschnitt lässt die beiden beweglichen Sensoren („kalt“ und „heiß“) mit der dazwischen liegenden Wärmequelle erkennen.

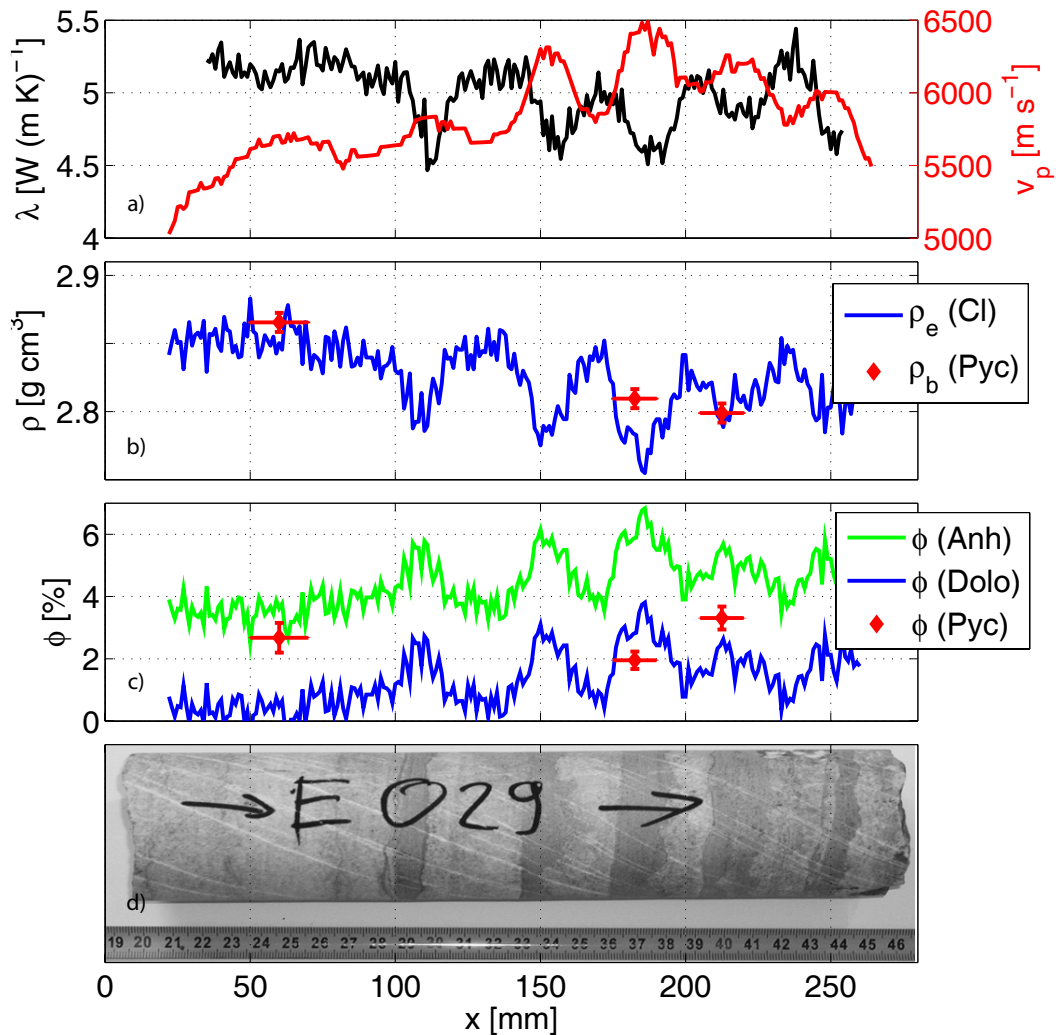


Abbildung 2.2: Beispiel von Standardmessungen an einem Kernstück aus dem Unteren Keuper. a) Messungen der Wärmeleitfähigkeit (λ) mit dem TCS-Gerät (schwarz) und der p -Wellengeschwindigkeit (V_p) mit dem Corelogger. b) Scannende Dichtemessung des Coreloggers (ρ_e) im Vergleich zu Punktmessungen mit dem Feststoff-Pyknometer (ρ_b). c) Berechnete Porosität (ϕ) aus der kontinuierlichen Messung, berechnet für unterschiedliche Matrixdichten von Dolomit und Anhydrit ($\phi(\text{Anh})$ und $\phi(\text{Dolo})$). Diese werden mit Punktmessungen der Porosität, abgeleitet aus Pyknometermessungen verglichen. d) Kernfoto mit Maßstab. Es handelt sich um eine Wechselfolge von Anhydrit (hell) und Dolomit (dunkel).

differenz der beiden Sensoren lässt sich die Wärmeleitfähigkeit der Probe berechnen.

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. Ein Beispiel dieser Messung ist in Abbildung 2.2a zusammen mit anderen scannenden Standardmessungen zu sehen.

Wenn Bohrkerne im schlechten Erhaltungszustand waren und sich somit für die Messung mit dem

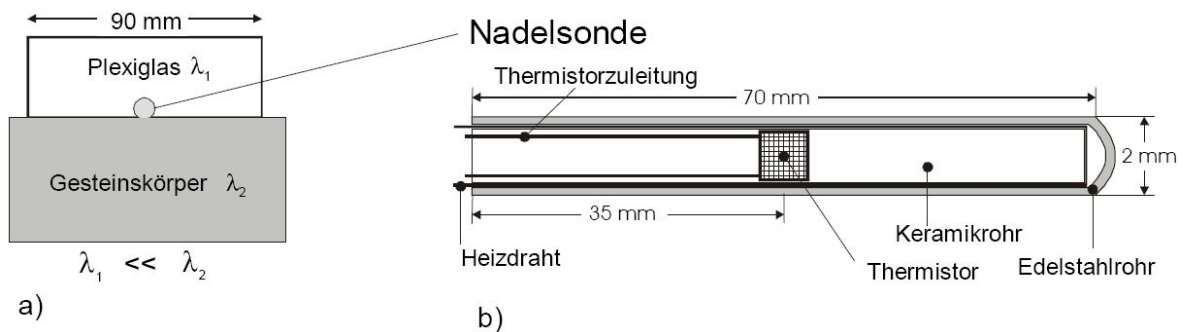


Abbildung 2.3: Schematischer Aufbau einer Halbraumlinienquelle (HLQ) und ein Querschnitt durch die in die Oberfläche des Sondenhalbraums eingelassene Nadelsonde (aus Erbas, 2001).

TC-Scanner nicht geeigneten, was häufig bei tonigen Proben der Fall war, wurden die Probe zermahlen und die Matrix-Wärmeleitfähigkeit mit der TK04-Apparatur am Mahlgut bestimmt. Die TK04 hat den Vorteil, die Wärmeleitfähigkeit von Bohrklein oder Mahlgut, dessen Dimension direkte Messungen nicht zulässt, bestimmen zu können. Hierzu wird das Mahlgut mit Wasser gemischt. Die Messung im TK04 erfolgt mit einer Halbraumlinienquelle (HLQ; siehe Abbildung 2.3) an einem Zwei-Phasen-System aus Gesteinsmatrix (Mahlgut) und Saturand (Wasser). Volumenanteile von Wasser und Gesteinspulver werden bestimmt und hieraus die Wärmeleitfähigkeit der Matrix mit dem geometrischen Mittel berechnet. Die Details des Messprinzips sind in Erbas (2001) beschrieben.

2.1.2 Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeitsmessungen

An ausgewählten Gesteinsproben wurden druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeitsmessungen in Kooperation mit dem Institute of Geological-Economic Problems of Russian Academy of Natural Sciences, unter Leitung von Prof. Dr. Yuri Popov durchgeführt. Hier wurden 50 Gesteinsproben aus dem Untersuchungsgebiet auf ihre thermischen Eigenschaften bei erhöhtem Druck und erhöhter Temperatur hin untersucht. Bei der beprobten mesozoischen Schichtenfolge handelt es sich um Kalksteine, Dolomite, verschiedene Sandsteine, Mergel, Anhydrit und Gips. Zur Beurteilung des Mineralbestandes wurden an einigen Proben ergänzende röntgendiffraktometrische Analysen sowie Dünnschliffuntersuchungen durchgeführt.

Basierend auf der Methode der Linienquelle zur Erfassung thermischer Eigenschaften wurde von der Moscow State Geological Prospecting University (MSGPU) ein Gerät bzw. ein Verfahren zur Messung der Wärmeleitfähigkeit von Gesteinen bei erhöhtem Druck und Temperatur entwickelt (Abbildung 2.4). Die Einbringung von Proben in eine Druckkammer erlaubt Messungen der Wärmeleitfähigkeit unter gleichzeitiger Veränderung der Temperatur, des Umschließungsdruckes und des Porendruckes. Zur Untersuchung werden zylindrische Proben präpariert (Durchmesser 50 mm, Länge 25 mm), die in zwei planparallele Hälften zersägt werden. Zwischen beiden Hälften wird eine linienförmige Wärmequelle installiert, die zusätzlich als Temperaturfühler dient. Der Messbereich umfasst für die Wärmeleitfähigkeit: $0,2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ - $10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und für die Temperatur: $20 \text{ }^\circ\text{C}$ - $200 \text{ }^\circ\text{C}$. Der Axial- und Umschließungsdruck kann bis 250 MPa aufgebracht werden, der Porendruck bis 200 MPa. Dieses Verfahren hat entscheidende Vorteile gegenüber konventionellen Messungen (Birch, 1948; Moiseenko et al., 1967; Seipold und Engler, 1981; Seipold, 1990; Petrunin und Yurchak, 1973), die die Druck- bzw. Temperaturabhängigkeit separat erfassen. Im Gegensatz zu dem gewählten Verfahren können hierbei Fehlmessungen auftreten, die durch irreversible Veränderung der

Probe auftreten können. Zu nennen ist hier zum Beispiel das Auftreten von thermischen Rissen, bei Temperaturen $> 100\text{ °C}$ (Pribnow und Sass, 1995) oder die Entstehung neuer Risse durch hohe Axialdrücke. Das eingesetzte Verfahren hat zudem den entscheidenden Vorteil, dass der Porendruck kontrolliert eingestellt werden kann. Das ist notwendig, um bei den untersuchten Sedimentgesteinen eine bestmögliche Anpassung an die in-situ Verhältnisse zu bekommen.

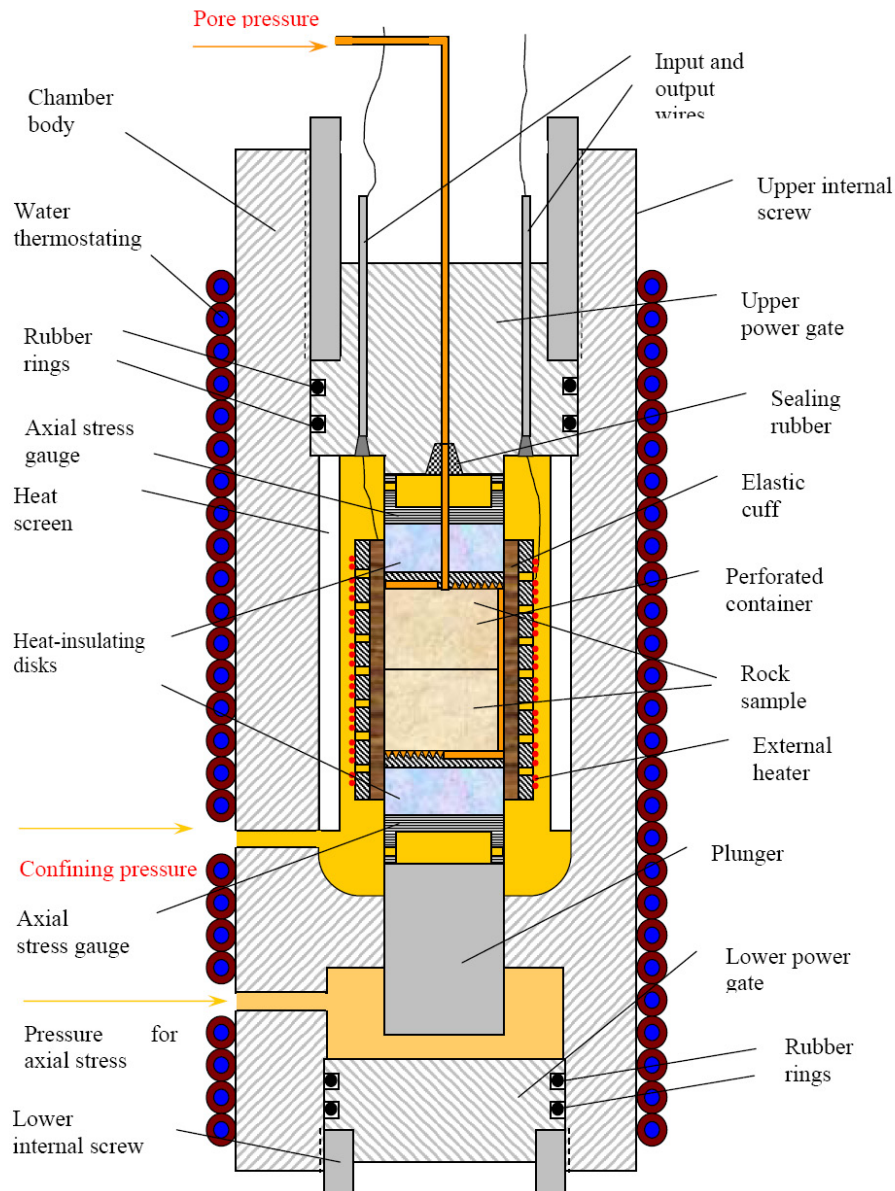


Abbildung 2.4: Schema der Apparatur zur druck- und temperaturabhängigen Messung der Wärmeleitfähigkeit.

Die Durchführung der Arbeiten erfolgte nach folgendem Schema:

1. Trocknung der Proben in einem Ofen
2. Messung der Wärme- und Temperaturleitfähigkeit trockener Proben bei Normalbedingungen

mit einem Wärmeleitfähigkeitsscanner

3. Wassersättigung der Proben im Vakuum
4. Bestimmung der Porosität der Proben
5. Messung der Wärme- und Temperaturleitfähigkeiten der gesättigten Proben mittels eines Wärmeleitfähigkeitsscanners.
6. Abschätzung der Wärmeleitfähigkeit der Matrix
7. Messung der jeweiligen Wärmeleitfähigkeit bei Umschließungsdrücken von 0,1, 50, 100 und 180 MPa bei einem Verhältnis von jeweiligem Umschließungsdruck zum Porendruck von 2,5. Simultan zur Erhöhung des Umschließungsdruckes wurde die Temperatur auf folgende Werte erhöht : 25 °C bei 0,1 MPa ; 75 °C bei 50 MPa ; 125 °C bei 100 MPa ; 180 °C bei 180 MPa. Zur Erhöhung der Genauigkeit wurden bei jedem Messpunkt mindestens 15 Messwerte aufgenommen.
8. Trocknen der Proben im Ofen
9. Messen der Wärme- und Temperaturleitfähigkeit der trockenen Proben bei Normalbedingungen mittels des Wärmeleitfähigkeitsscanners.
10. Wassersättigung der Proben im Vakuum
11. Bestimmung der Porosität
12. Messung der Wärme- und Temperaturleitfähigkeiten der gesättigten Proben mittels eines Wärmeleitfähigkeitsscanners
13. Vergleich und Interpretation der experimentell gewonnenen Daten

Erzeugte Daten

Für jede gemessene Probe wurden folgende Daten ermittelt:

1. Druck P in MPa (Umschließungsdruck)
2. Temperatur in °C
3. Wärmeleitfähigkeit λ in $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ (TC) bei entsprechenden Drücken
4. Standardabweichung (STD)
5. relativer Fehler (Berechnet als $(\text{STD } 100) / \lambda$)
6. Normierte Wärmeleitfähigkeit λ_n , normiert auf den Wert der Wärmeleitfähigkeitsmessung unter Normalbedingungen
7. Porosität ϕ in %

Die Messergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessung sowie der Messungen unter Laborbedingungen sind in tabellarischer Form aufgeführt und dem Anhang zu entnehmen.



Abbildung 2.5: Anordnung der Dichte- und Porositätsmessung. Links: Helium-Pyknometer zur Bestimmung der Reindichte der Probe. Rechts: Feststoff-Pyknometer zur Bestimmung der Rohdichte der Probe.

2.1.3 Dichte und Porosität

Dichte und Porosität werden generell mittels Auftriebswägung nach dem Archimedes-Prinzip bestimmt. Es wird das Trockengewicht m_t nach Trocknung der Probe bei 60 °C bis zur Gewichtskonstanz sowie das Sättigungsgewicht m_s und das Probenvolumen aus der Verdrängung im Wasser V_{gesamt} nach Sättigung der trockenen Probe unter Vakuum ermittelt. Daraus ergibt sich die Porosität ϕ und die Matrixdichte ρ_m über die Beziehungen

$$\phi = \frac{(m_s - m_t)}{\rho_w V_{gesamt}} \quad (2.1)$$

und

$$\rho_m = \frac{m_t}{V_{gesamt}(1 - \phi)} \quad (2.2)$$

Bei tonigen Proben kann das Gefüge durch den Trocknungs- und Sättigungszyklus beeinträchtigt werden. Diese Fälle sind in der Regel bereits bei der Probenauswahl zu erkennen und werden mit einer modifizierten Prozedur bearbeitet. Hierbei werden die zu ermittelnden Kennwerte durch zwei Dichtemessungen an der trockenen Probe bestimmt. Die Rohdichte ρ_b ist das Trockengewicht der Probe dividiert durch das Gesamtvolumen. Die Reindichte oder Matrixdichte ρ_m ist das Trockengewicht der Probe dividiert durch das Volumen des Gesteinsanteils der Probe. Die drei Größen Porosität ϕ , Reindichte ρ_m und Rohdichte ρ_b stehen über die Beziehung

$$\phi = 1 - \frac{\rho_b}{\rho_m} \quad (2.3)$$

im Zusammenhang. Um ρ_b und ρ_m zu bestimmen, sind zwei Dichtemessungen nötig. Das *Feststoff-pyknometer* dient zur Messung der Rohdichte. Dazu wird das Volumen einer definierten Menge eines Pulvers und der Probe bestimmt. Da das Pulver nicht in die Probe eindringt, wird das von der Probe umschlossene Volumen gemessen. Zusammen mit der Masse der Probe ergibt sich die Rohdichte. Im *Gaspyknometer* befindet sich die Probe in einer abgeschlossenen Kammer bekannten Volumens, die unter Druck (150 kPa-170 kPa) mit Heliumgas gefüllt wird. Dabei werden Temperatur und Druck kontinuierlich gemessen. Ist die Probe vollständig mit Helium gesättigt, bleibt der Druck konstant. Dann wird eine zweite Kammer geöffnet. Die Differenz der Drücke vor und nach dem Verbinden der Kammern ist ein Maß für das Volumen des Heliums. Da das Helium in die Poren des Gesteins eindringt,

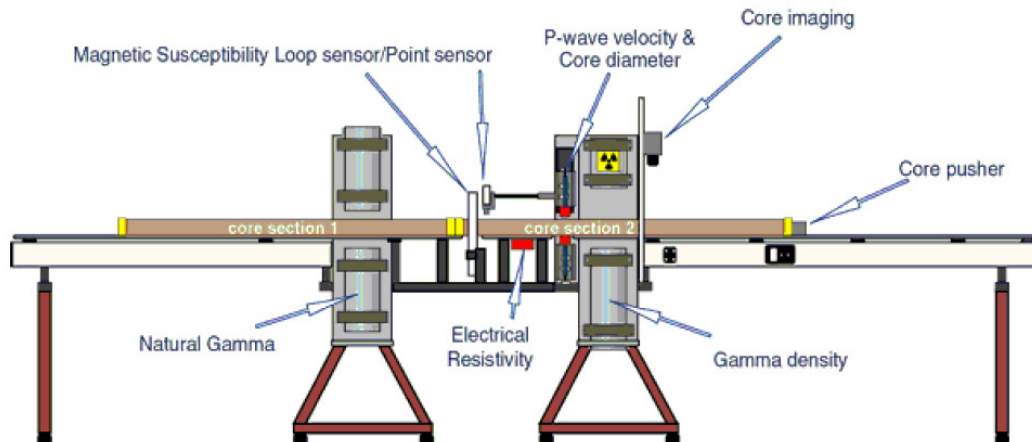


Abbildung 2.6: Schematischer Aufbau des Core-Loggers (Geotek Ltd.).

wird mit dieser Messung nur das Volumen der Gesteinsmatrix bestimmt. Über die Masse der Probe erhält man schließlich die Reindichte. Der Wert der Rohdichte wird mit Gleichung 2.3 in eine Porosität umgerechnet. In Abbildung 2.2 b) und c) ist ein Messbeispiel im Vergleich zur Dichtemessung des Core-Loggers dargestellt.

2.1.4 Kompressionswellengeschwindigkeit V_p , γ -Dichte, spektrale natürliche Radioaktivität

Beim Core-Logger der Firma Geotek Ltd. handelt es sich um eine Messstrecke, auf der Kerne in einem Trägerschlitten horizontal durch mehrere Messstationen geführt werden. Dabei werden die petrophysikalischen Eigenschaften zerstörungsfrei kontinuierlich aufgezeichnet (Abbildung 2.6). Neben der Geometrie (Länge und Durchmesser) jeder Kernprobe können folgende Eigenschaften gemessen werden:

- Kompressionswellengeschwindigkeit V_p ,
- γ -Dichte ρ_e ,
- spektrale, natürliche Radioaktivität in Form der Konzentrationen von Uran, Thorium und Kalium (c_u , c_T und c_K).

Die Kompressionswellengeschwindigkeit wird aus einer Laufzeitmessung und der Dicke des Kernes bestimmt. Für die Messung der γ -Dichte wird die Absorption der radioaktiven γ -Strahlung einer Cäsiumquelle durch die Probe gemessen. Zusammen mit der Dickemessung ergibt sich hieraus die Dichte der Probe inklusive Porenfüllung. Die Absorption beruht hauptsächlich auf der Comptonstreuung der γ -Quanten. Diese ist proportional zur Anzahl der Elektronen in der Atomschale. Daher misst diese Anordnung die Elektronendichte ρ_e , die aber für die meisten gesteinsbildenden Minerale etwa gleich der Rohdichte (bulk density) ρ_b ist. Messbeispiele für V_p und ρ_e sind in der Abbildung 2.2 dargestellt. Die Messungen korrelieren deutlich mit der Geologie, insbesondere ist auch eine gute Übereinstimmung der verschiedenen Methoden der Dichtemessung zu sehen. Die γ -Dichte hat den Vorteil der

kontinuierlichen Messung. Allerdings ist bei der Porositätsbestimmung die Annahme einer Matrixdichte notwendig, um mit Gleichung 2.3 die Porosität zu berechnen. Dies ist in dem Beispiel für eine Anhydrit- und eine Dolomitmatrix dargestellt.

Die Messung von V_p und ρ_b erfolgt gleichzeitig. Für die Messung der radioaktiven Elementkonzentrationen ist ein größerer Zeitaufwand erforderlich. Daher erfolgt sie nicht parallel zu den anderen Messungen und wird üblicherweise auch nicht kontinuierlich, sondern an ausgewählten Kernproben durchgeführt.

2.1.5 Wärmekapazität



Abbildung 2.7: Messanordnung und Messprinzip des Wärmestromdifferenz-Kalorimeters. Die Messapparatur besteht aus vier Komponenten: Rechner, Kalorimeter sowie dem Controller auf dem Netzteil (von links nach rechts).

Zur Messung der spezifischen Wärmekapazität c_p dient das dynamische Wärmestrom-Differenz-Kalorimeter C80 der Firma SETARAM, welches im dynamischen Betrieb als Zwillings-Kalorimeter arbeitet. Für die Messung können sowohl zylindrisch ausgebohrte Gesteinsproben als auch Bohrklein oder zermahlene Kernmaterial verwendet werden. Je nach Probenzustand werden die Proben ausgebohrt oder zermahlen vermessen.

Das Kalorimeter besitzt einen Probenbehälter und einen Referenzbehälter. Während der Messung wird die Temperatur in beiden Behältern gleichmäßig erhöht und die Steigung des Temperaturverlaufs dT/dt registriert. Außerdem werden die Wärmeströme q_r und q_p aufgezeichnet, die in dem leeren Referenzbehälter und dem mit der Probenmasse gefüllten Probenbehälter fließen. Die Differenz beider Wärmeströme ist proportional zur spezifischen Wärmekapazität c_p des Probenmaterials

$$c_p(T) = \frac{q_p - q_r}{S(T) \cdot m \cdot \frac{dT}{dt}}. \quad (2.4)$$

Hier ist $S(T)$ eine geräteabhängige Kalibrationsfunktion. Nach der Auswertung der Messung erhält man eine Kurve der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität. Abbildung 2.8 zeigt einige Beispiele aus der Molasse. An die Daten wird ein Polynom zweiten Grades angepasst, mit dem die Wärmekapazität beschrieben werden kann (Kelley, 1960):

$$c_p(T) = A_0 + A_1T + A_2T^2 \quad (T \text{ in } ^\circ\text{C}). \quad (2.5)$$

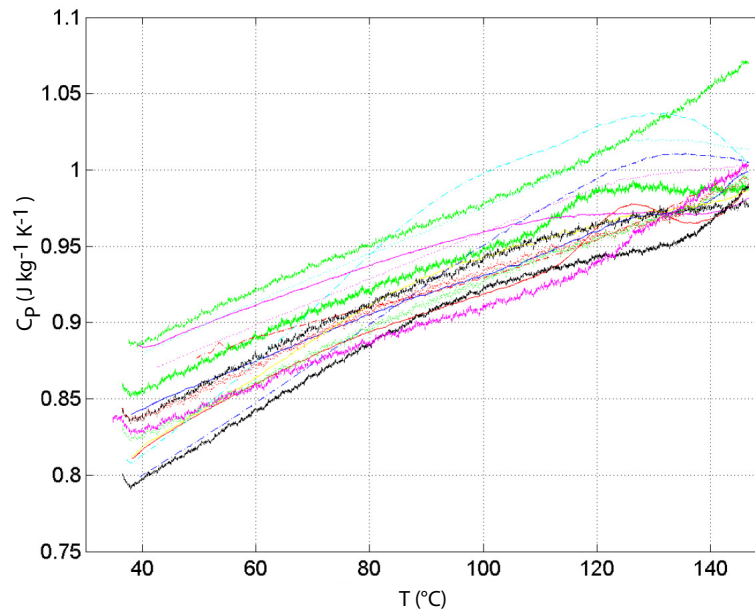


Abbildung 2.8: Beispielmessungen der Wärmekapazität c_p . Die Kurven stellen die temperaturabhängige spezifische Wärmekapazität verschiedener Gesteinsproben dar. Ausbuchtungen der Kurvenverläufe nach oben können von freiwerdendem Wasser oder Phasenwechsel herrühren. Unter diesen Reaktionspeaks ist gegebenenfalls zu extrapolieren.

2.1.6 Permeabilität

In Zusammenarbeit mit der Geophysica Beratungsgesellschaft mbH und dem Mineralogisch-Petrologischen Institut der Universität Bonn wurde die Luftpermeabilität an einer Auswahl der Proben sowohl unter Atmosphärendruck als auch druckabhängig gemessen. Insgesamt wurden an 73 ausgewählten Proben 125 Permeabilitäten erfasst. Die repräsentative Auswahl umfasst 17 verschiedene Lokationen, davon zwölf Bohrungen und fünf Oberflächenaufschlüsse. Die Messungen wurden an Probenzylindern von 30 mm Durchmesser und 30 mm bis 50 mm Länge ausgeführt.

In Anhängigkeit von der Permeabilität der jeweiligen Probe wurden unterschiedliche Verfahren angewandt. Proben mit relativ hoher Durchlässigkeit wurden mit dem Durchflussverfahren gemessen, das auf der Berechnung des Gesetzes von Darcy basiert:

$$k = \frac{\eta \cdot Q \cdot l}{A \cdot \Delta P} \quad (2.6)$$

In der Apparatur wird ein Druckgefälle ΔP in der Probe aufgebaut. Die Durchlässigkeit des Gesteins (Permeabilität k) wird durch das Volumen eines flüssigen oder gasförmigen Mediums mit der dynamischen Viskosität η bestimmt, das pro Zeiteinheit (Durchflussrate Q) durch eine (zylindrische) Gesteinsprobe mit der Länge l und dem Querschnitt A bei einer gegebenen Druckdifferenz ΔP zwischen Eintritts- und Austrittsstelle fließt. Als durchströmendes Medium wurde das Edelgas Argon verwendet, um chemische Reaktionen im Porenraum zu vermeiden.

Proben mit relativ geringer Durchlässigkeit sowie Proben, deren Permeabilität druckabhängig mit unterschiedlichem Manteldruck erfasst wurde, werden mit dem Gradientenverfahren vermessen. Hierbei wird bei abgedichteter Mantelfläche auf der einen Seite ein konstanter Druck angelegt und auf der an-

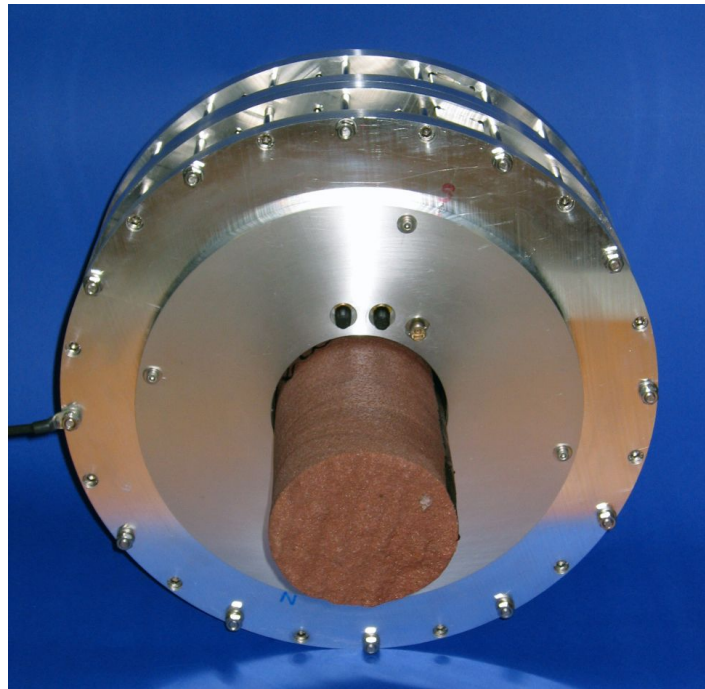


Abbildung 2.9: Halbach-Magnet (Durchmesser 350 mm) mit einem Kern aus dem Buntsandstein. Der Kerndurchmesser beträgt 100 mm.

deren Seite der Druckanstieg in einem kleinen Volumen hinter der Stirnfläche der Probe erfasst. Die Permeabilität errechnet sich aus der zeitlichen Änderung des Drucks mit Hilfe eines nichtlinearen Gleichungssystems.

2.1.7 Halbach NMR-Messung

Auf dem Gebiet der gerätetechnischen Neuentwicklung wurde in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Chemie und Makromolekulare Chemie der RWTH Aachen ein mobiles NMR („Nuclear Magnetic Resonance“) Instrument zur Bestimmung von Porosität und Porengrößen an intakten Bohrkernen entwickelt. Dieser so genannte Halbach-Magnet (Abbildung 2.9) basiert auf der Entwicklung von einer speziellen kreisförmigen Anordnung von Permanentmagneten (Halbach, 1985). Eine genaue Beschreibung dieses Messinstrumentes findet sich in Anferova et al. (2004). Die Vorteile dieses Gerätes gegenüber anderen Methoden sind die kleine Größe, das geringe Gewicht und die Möglichkeit, das Instrument mobil einzusetzen. Dadurch können die bergfeuchten Bohrkern vor Ort bzw. im Labor untersucht werden; ohne weitere Präparationsmaßnahmen. Mit anderen, üblicherweise verwendeten Geräten sind nur Messungen an Bohrkern bzw. aus Kernen herausgebohrten Plugs möglich (Mirotnik et al., 2004).

Abbildung 2.10 zeigt den prinzipiellen Aufbau des Halbach-Magneten. Der Bohrkern wird von Magnetringen umgeben. Bei dem Prototypen besteht jeder Ring aus 16 Stabmagneten ($18 \text{ mm} \times 18 \text{ mm} \times 27 \text{ mm}$), wodurch ein innerer Durchmesser von 70 mm und ein äußerer Durchmesser von 155 mm festgelegt wird. Die Länge des gesamten Systems ist 165 mm, bei einem Gewicht von weniger als 8 kg. Durch die Permanentmagneten entsteht ein statisches Magnetfeld B_0 von 0.3 T, welches die Protonenspins zur Präzession mit einer Resonanzfrequenz von 12.74 MHz anregt. Die Messung setzt

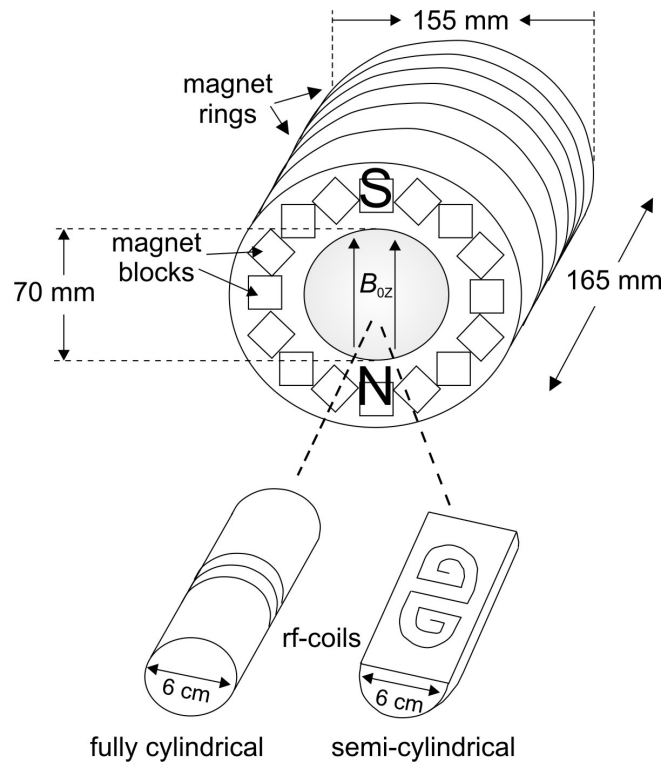


Abbildung 2.10: Schematischer Aufbau des Prototypen des Halbach-Magnet Scanners mit zwei verschiedenen Spulen zur Untersuchung von zylindrischen bzw. halbierten Bohrkernen mit einem Durchmesser bis 60 mm (aus Arnold et al., 2006).

ein homogenes Magnetfeld voraus. Ein weiterer Vorteil dieses Messgeräts ist das geringe magnetische Streufeld in der Umgebung des Scanners, so dass Motoren oder andere ferromagnetische Bauteile in der Umgebung nicht beeinflusst werden.

Der Halbach-Magnet kann für verschiedene Probengeometrien konfiguriert werden. Hierfür können die Spulen zur Erzeugung der Radiofrequenzen (r_f , siehe Abbildung 2.10) ausgetauscht werden, um einerseits sowohl halbierte, als auch intakte zylindrische Bohrkern mit einem Durchmesser bis zu 60 mm untersuchen zu können. Der im Rahmen dieses Projekts entwickelte Halbach-Magnet (Abbildung 2.9) ist für größere Kerne bis zu 100 mm Durchmesser geeignet, wie sie häufig in den Kernarchiven der Landesämter vorliegen. Er erzeugt im Innern eine Feldstärke von 0,1 T, was einer Protonenresonanzfrequenz von 3,9 MHz entspricht. Der Durchmesser dieses Magneten ist 350 mm bei einer Höhe von 150 mm. Er wiegt etwa 25 kg.

Messprinzip

Im Folgenden wird kurz auf die Prinzipien der NMR Messung eingegangen. Für eine genaue Beschreibung sei auf Arnold et al. (2006) verwiesen.

Die bei NMR gemessenen transversen Relaxationszeiten T_2 können direkt mit der Porosität in Zusammenhang gebracht werden. Bei Sandsteinen wird üblicherweise die gesamte NMR-Porosität in drei Komponenten aufgeteilt: (1) Die „free-fluid“ Porosität mit langen T_2 -Zeiten ($T_2 > 33$ ms), (2) in Kapillaren gebundenes Fluid (3 ms $< T_2 < 33$ ms) und (3) das schnell relaxierende, tongebundene Fluid

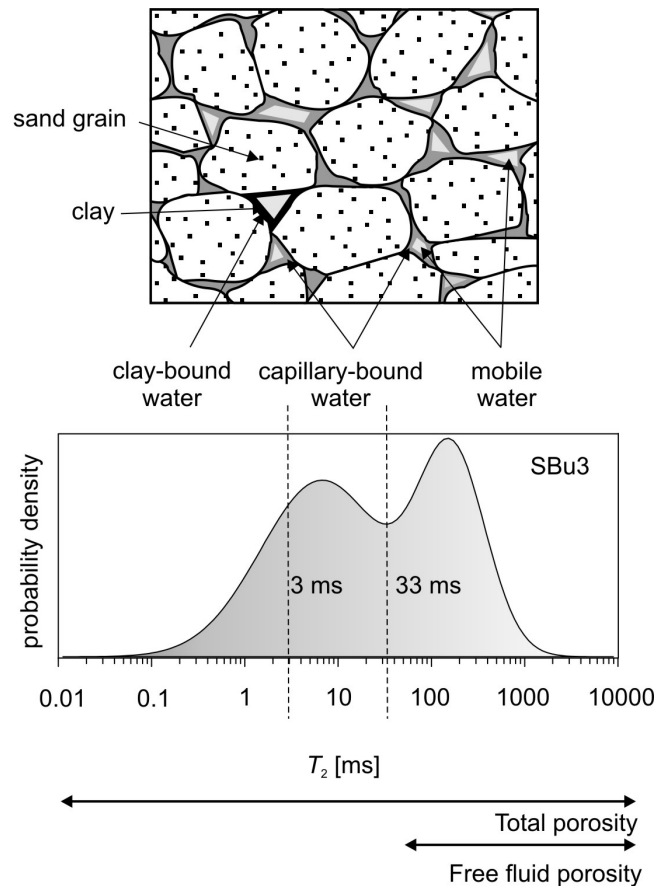


Abbildung 2.11: T_2 -Verteilung in einem wassergesättigten Sandstein zur Identifizierung von Fluidkomponenten. Mobiles Wasser (hellgrau) verursacht größere T_2 -Werte, während die kleinere T_2 -Werte kapillar- und tongebundenes Wasser anzeigen (nach Allen et al., 2000).

mit Werten unter 3 ms (Allen et al., 2000). Abbildung 2.11 zeigt als Beispiel eine T_2 -Messung für eine Sandstein-Probe. Die bimodale Verteilung von T_2 kann in kapillar- und tongebundenes (kleine Poren) auf der einen Seite und in eine bewegliche Komponente auf der anderen Seite (größere Poren) aufgeteilt werden.

Bestimmung der Permeabilität

Zusätzlich kann die Porengrößenverteilung in einer Gesteinsprobe ermittelt werden. Dies geschieht ebenfalls über die die so genannte Relaxationszeit T_2 . Nach Dunn et al. (2002) ist der Porenradius

$$r_{pore} = 2T_2\rho \quad (\text{in } \mu\text{m}), \quad (2.7)$$

wobei hier ρ die Oberflächenrelaxivität ist. Sie ist ein Maß dafür, wie schnell die Protonen die Orientierung oder Phasenkoherenz aufgrund von magnetischen Wechselwirkungen an den Oberflächen verlieren.

Für typische Reservoir-Gesteine mit höheren Porositäten kann die Permeabilität k_{NMR} nach Kenyon

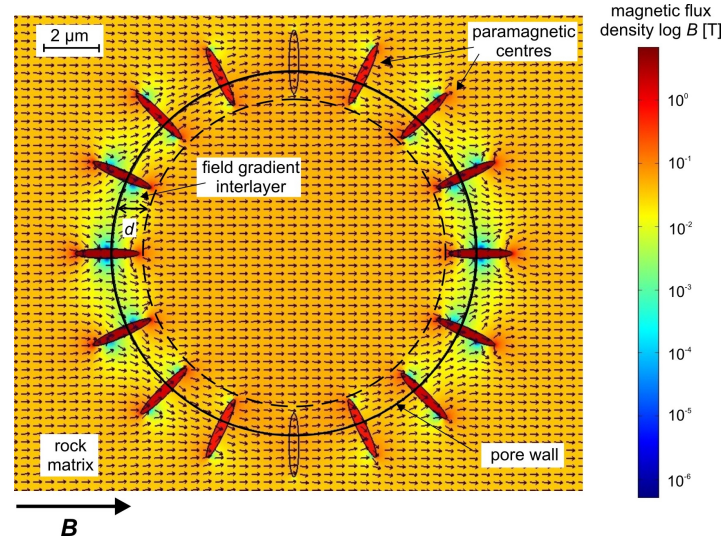


Abbildung 2.12: Modell einer Pore, welche einem konstanten homogenen Magnetfeld von $B=0.2$ T ausgesetzt ist. Starke, lokale Feldgradienten, verursacht durch paramagnetische Zentren an der Porenwand, beeinflussen eine Schicht der Dicke d (Arnold, 2007).

et al. (1988) berechnet werden:

$$k_{NMR} = aT_{2lm}^2\phi^4, \quad (2.8)$$

dabei ist T_{2lm} das logarithmische Mittel der T_2 -Verteilung. Die Konstante a hängt von der Oberflächenrelaxivität ab und wird empirisch bestimmt.

Bei kleineren Porositäten und kleineren Porenradien nehmen Diffusionseffekte aufgrund von internen Gradienten des Magnetfeldes zu, so dass die Permeabilitäten nach Gleichung 2.8 unterschätzt werden. Hierfür müssen die T_{2lm} -Werte korrigiert werden, um dann die Permeabilität nach Kozeny-Carman zu bestimmen (Abbildung 2.12 und 2.13). Diese Vorgehensweise wurde aus Arnold (2007) übernommen und für dieses Projekt modifiziert.

2.1.8 SIP-Messung

Für die Bestimmung der hydraulischen Gesteinseigenschaften wurden auch ergänzende Messungen der spektralen induzierten Polarisation (SIP) durchgeführt. Im Gegensatz zu NMR wird bei der SIP der frequenzabhängige komplexe elektrische Widerstand bestimmt. IP-Effekte haben einen elektrochemischen Ursprung und werden entweder durch metallische Minerale oder durch Unterschiede in der Ionenkonzentration im Porenraum (oder an der Grenzschicht zwischen Matrix und Porenraum) (Sumner, 1976) verursacht. Eine mikroskopische Theorie der in Gesteinen ablaufenden physikalischen und elektrochemischen Prozesse stellt zwar nach wie vor eine Herausforderung für die petrophysikalische Forschung dar, jedoch sind die den Prozessen zugrunde liegenden Mechanismen bekannt und es existieren Modelle, die die elektrischen Gesteinseigenschaften beschreiben.

Der NMR- und SIP-Methode ist gemeinsam, dass sie von der inneren Porenstruktur der Gesteine abhängen, die auch die Permeabilität bestimmt. Deshalb wird versucht, aus dieser Abhängigkeit die hydraulische Permeabilität abzuleiten. Allerdings werden sowohl das NMR-Signal als auch das SIP-Signal von weiteren Größen wie z.B. den elektrochemischen Eigenschaften der inneren Oberfläche beeinflusst, sodass eine Ableitung der Permeabilität aus einer Methode allein nicht allgemeingültig

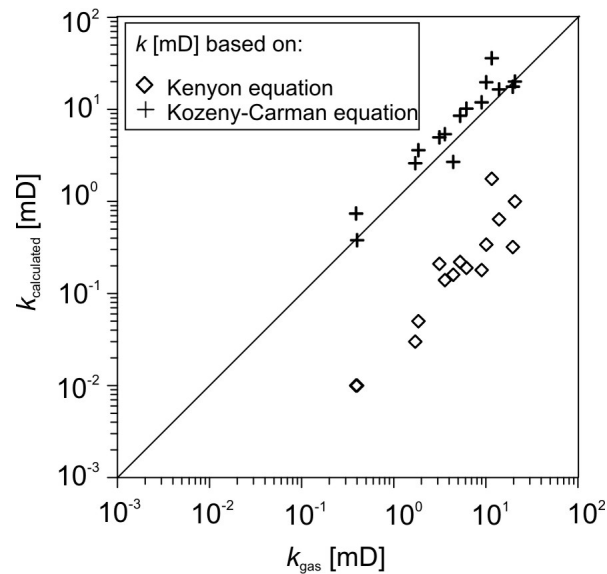


Abbildung 2.13: Korrelationen der verschiedenartig bestimmten Permeabilitäten an einer gering porösen Sandstein-Probe, (1) nach der Standardmethode (Kenyon et al., 1988) und (2) nach Kozeny-Carman, mit korrigierten T_{2lm} -Werten. Dabei wird die Dicke der Schicht d in Abbildung .2.12 berücksichtigt, in der paramagnetische Minerale hohe Magnetfeldgradienten erzeugen.

möglich ist. Deshalb wurde eine gemeinsame Interpretation der beiden Verfahren angestrebt. Im Folgenden wird kurz das Messprinzip sowie die Interpretation der Daten in Hinblick auf die Permeabilität erläutert. Für eine detaillierte Beschreibung sei auf Fehr (2007) verwiesen.

Messprinzip

Bei IP-Messungen wird im Gegensatz zur Gleichstromgeoelektrik ein Wechselstrom mit einer Frequenz ν (oft 1 mHz bis 1 kHz) eingespeist. Zwischen eingespeistem Strom I und der gemessenen Spannung U kann man eine Phasenverschiebung φ beobachten (Abbildung 2.14).

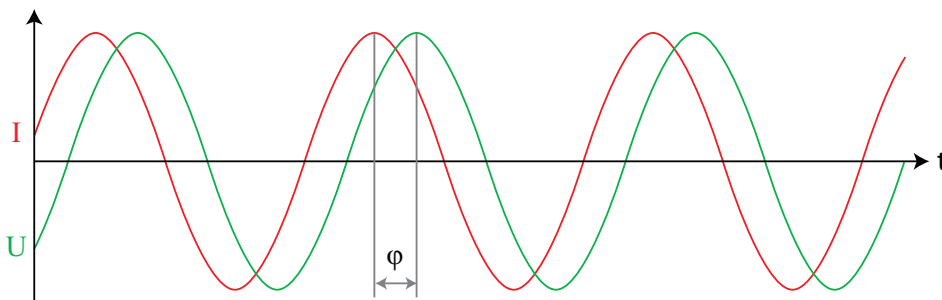


Abbildung 2.14: Phasenverschiebung bei der SIP-Messung.

Legt man ein zeitlich periodisches elektrisches Feld E ($E \sim e^{i \cdot \omega \cdot t}$) mit der Kreisfrequenz ω an,

werden die elektrischen Eigenschaften der frequenzabhängigen Messung komplex (Jonscher, 1983):

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\rho(\omega)} = i \cdot \omega \cdot \varepsilon(\omega) \quad (2.9)$$

$\sigma(\omega)$ = elektrische Leitfähigkeit
 $\rho(\omega)$ = spezifischer elektrischer Widerstand
 $\varepsilon(\omega)$ = Dielektrizitätskonstante
 $\omega = 2 \cdot \pi \cdot \nu$ = Kreisfrequenz
 $i = \sqrt{-1}$ = komplexe Einheit

Dabei beschreibt σ den Ladungstransport auf Grund von Ohmschen oder Faradayschen Diffusionsmechanismen, während ε die dielektrische Relaxation (bzw. Polarisation) beschreibt. Als elektrische Spektroskopie oder SIP wird die Messung von elektrischer Leitfähigkeit σ , spezifischem Widerstand ρ oder Dielektrizitätskonstante ε über einen großen Frequenzbereich bezeichnet. Bei der SIP-Messung wird für jede Frequenz der Betrag des scheinbaren spezifischen Widerstandes $|\rho|$ und die Phase φ gemessen. Die komplexe elektrische Leitfähigkeit lässt sich in Real- (σ') und Imaginärteil (σ'') zerlegen:

$$\sigma = \sigma' + \sigma'' = |\sigma| \cdot e^{i \cdot \varphi} \quad (2.10)$$

$$\sigma' = |\sigma| \cdot \cos(\varphi) \quad (2.11)$$

$$\sigma'' = |\sigma| \cdot \sin(\varphi) \quad (2.12)$$

$$|\sigma| = \sqrt{(\sigma')^2 + (\sigma'')^2} \quad (2.13)$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{\sigma''}{\sigma'}\right) \quad (2.14)$$

wobei der Phasenwinkel φ der durch Polarisation verursachten Phasenverschiebung zwischen eingespeistem Strom I und gemessener Spannung U entspricht. Bei höheren Frequenzen kann eine zusätzliche Phasenverschiebung durch elektromagnetische Kopplung entstehen. Wie bei elektromagnetischen Verfahren kann bei elektrischen Verfahren im Zeit- und im Frequenzbereich gemessen werden. Da beide Messungen die gleichen physikalischen Phänomene erfassen, sind die Ergebnisse durch eine Fouriertransformation ineinander überführbar.

Bei der SIP wird der komplexe elektrische Widerstand über einen weiten Frequenzbereich (oft 1 mHz bis 1 kHz) bestimmt. Als Maß für die Polarisation wird hierbei die imaginäre Leitfähigkeit oder die Phase angesehen.

Die SIP-Messungen wurden mit einer SIP Mini der Firma Radic Research (Radic, 2004) durchgeführt. Das Gerät besteht aus einer Base Unit sowie zwei Remote Units und einer Messzelle für Festgesteine (Abbildung 2.15). Die kleinste Messfrequenz betrug 1,2 mHz, die maximale Frequenz 1 kHz. Während der Messung werden die aufgezeichneten Spektren direkt auf dem Bildschirm dargestellt. Detaillierte Informationen zum Messgerät findet man im Handbuch (Radic, 2004).

Formationsfaktor und Porosität

Aus den gemessenen Leitfähigkeiten des Porenfluids σ_W und der Grenzflächenleitfähigkeit (Grenzfläche zwischen Gesteinsmatrix und Porenfluid) σ_{int} kann der so genannte Formationsfaktor F be-

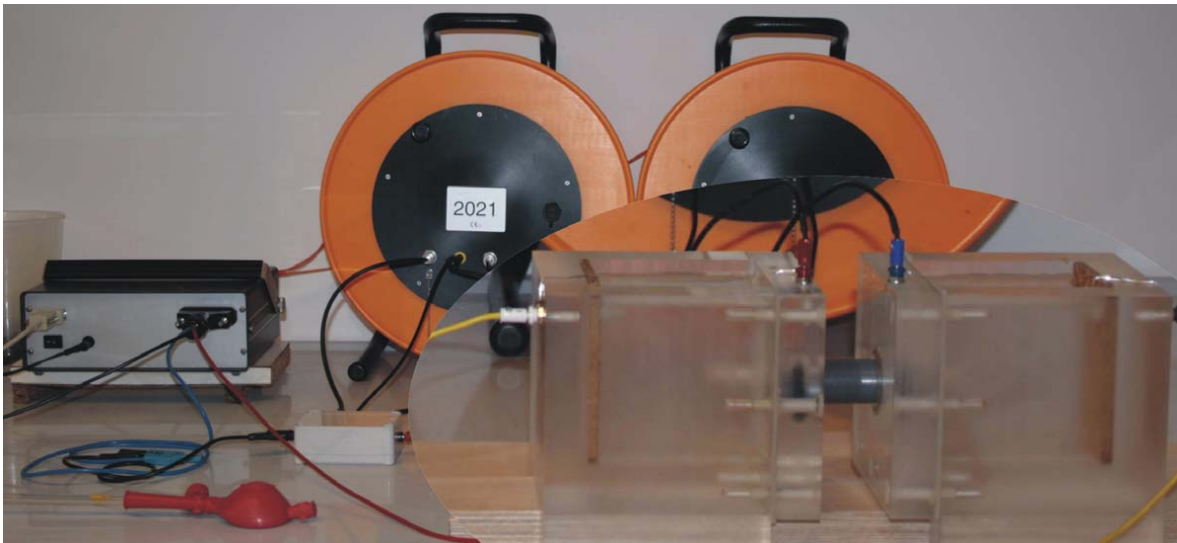


Abbildung 2.15: SIP-Anlage mit Messzelle (vergrößerter Ausschnitt im Vordergrund).

stimmt werden. Dieser wiederum steht in Zusammenhang mit der Porosität ϕ , wie das 1. Archie Gesetz zeigt:

$$\sigma = \frac{1}{F} \cdot \sigma_W + \sigma_{int} \quad (2.15)$$

$$F = \frac{a}{\phi^m} \quad (2.16)$$

Dabei sind a und m empirisch zu bestimmende Parameter. Bei hinreichend kleiner Grenzflächenleitfähigkeit kann über

$$F = \frac{\sigma_W}{\sigma} + \sigma_{int} \approx \frac{\sigma_W}{\sigma} \quad (2.17)$$

der Formationsfaktor angenähert werden. Die umgekehrte Proportionalität (Gleichung 2.15) zeigt Abbildung 2.16, bei welcher beider Parameter für eine Fluidleitfähigkeit von $1000 \mu S / cm$ für für verschiedene Sandsteinproben gegenübergestellt sind.

Mit Hilfe von Gesteinsmodellen kann man auch den Zusammenhang zwischen F und der Porenraumgeometrie zeigen. Laut Kapillarröhrenmodell (Kozeny-Carman) bestimmt neben der Porosität die Tortuosität T den Formationsfaktor:

$$F = \frac{T}{\phi} \quad (2.18)$$

Die Tortuosität T hängt von der Wegverlängerung (Porenlänge/Gesteinslänge), von der Konstriktivität der Pore und einem Netzwerkparameter ab (Klitzsch, 2004).

Permeabilität und Vergleich mit NMR

Zum Zeitpunkt der Berichtserstellung konnte keine zufriedenstellende Korrelation zwischen der mit einem Gaspermeameter gemessenen Permeabilität und den Ergebnissen der SIP-Messung erreicht

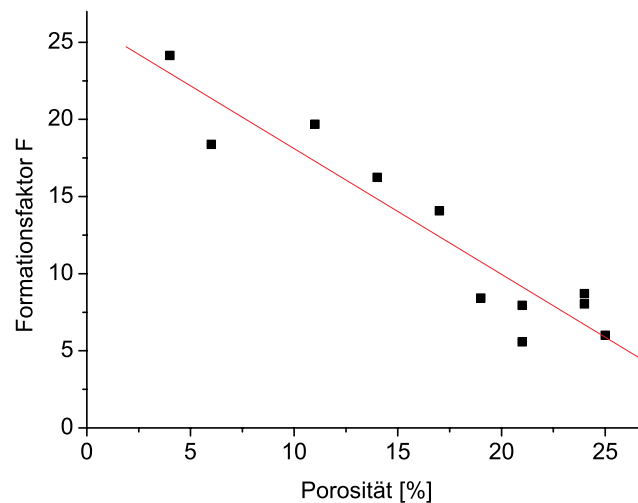


Abbildung 2.16: Formationsfaktor versus Porosität am Beispiel verschiedener Sandsteinproben.

werden. Weder die von Börner et al. (1996) aufgestellte Beziehung zwischen der imaginären Leitfähigkeit und der Permeabilität, noch die von Binley et al. (2005) gezeigte Abhängigkeit zwischen der Relaxationszeit aus dem Cole-Cole Modell und der Permeabilität haben sich bei den untersuchten Proben bestätigt. Ebenso konnte auch keine Relation zwischen der Relaxationszeit der NMR-Messung und der Relaxationszeit der SIP-Messung Phasenspektrum gefunden werden. Die Ursache liegt wahrscheinlich in den Proben begründet, die aus unterschiedlichen Formationen stammen und unterschiedliche Eigenschaften haben. So variieren nicht nur die Permeabilitäten stark zwischen 10^{-19} m^2 und $2 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$. Auch die Oberflächenrelaxivitäten liegen in einem weiten Bereich zwischen $9,46 \mu\text{m}/\text{s}$ und $53,69 \mu\text{m}/\text{s}$. Die elektrischen Oberflächeneigenschaften variieren wahrscheinlich ebenfalls. Die empirischen Beziehungen $r \sim T_2$ und $r \sim \tau$ wurden für Gesteine aus einer Formation gefunden, bei denen die NMR- und die elektrischen Oberflächeneigenschaften als konstant angenommen werden können. Dies ist jedoch bei den hier untersuchten Proben nicht der Fall. Bei SIP wirkt sich das stärker aus. Die unterschiedlichen elektrochemischen Parameter könnten erklären, wieso keine Korrelation zwischen NMR und SIP gefunden wurde.

Aus diesen Gründen sind weitere Arbeiten nötig. Zum Beispiel würden sich weitere SIP-Messungen in einem größeren Frequenzbereich anbieten, da bei den hier vorgestellten Ergebnissen die höchste, messbare Frequenz 1 kHz betrug. Zudem müsste ein modellbasierter Ansatz gesucht werden, der die elektrochemischen Parameter der einzelnen Proben berücksichtigt. In anderen Arbeiten wurden Beziehungen zwischen der Permeabilität und der Relaxationszeit oder der imaginären Leitfähigkeit gefunden; allerdings für Proben, die aus der gleichen Formation stammten. Mit einem modellbasierten Ansatz zur gemeinsamen Interpretation der Messungen soll eine verbesserte Bestimmung der Porenradienverteilung und der Permeabilität möglich werden, die unabhängig von weiteren Labormessungen ist. Somit könnten beispielsweise bei Bohrlochmessungen beide Methoden gemeinsam verwendet werden, um einen Permeabilitäts-Log abzuleiten.

2.2 Bohrlochgeophysikalische Methoden und Interpretationsverfahren

2.2.1 Vorgehensweise

Der Teilbereich zur Auswertung bohrlochgeophysikalischer Messungen gliedert sich in folgende Arbeitsschritte:

- Recherche und Zusammenstellung der vorhandenen Daten
 - Sichtung des Datenbestandes (Log- und Kerndaten) aus verschiedenen Bohrungen.
 - Auswahl der Bohrungen in Absprache mit dem Auftraggeber.
- Datenkompilation und Qualitätskontrolle
 - Einscannen und Digitalisierung (LAS-Format) von analog vorliegenden Daten.
 - Überführung der digitalen Datensätze in Auswerteprogramme zur Bohrlochmessdaten
 - Qualitätskontrolle der Bohrlochmessdaten mit Teufenkontrolle/Teufenkorrektur zwischen den einzelnen geloggtten Abschnitten sowie den jeweiligen Messdurchgängen.
 - Überprüfung der Messungen auf fehlerhafte Daten und Artefakte (z.B. durch Bohrlocherweiterungen) und Bereinigung des Datensatzes.
 - Zusammenführung der einzelnen Messserien zu Composite-Logs (spleißen).
- Faziesanalyse der Bohrlochmessdaten.
 - Petrophysikalische Charakterisierung der auftretenden Hauptgesteinstypen
 - Klassifizierung der auftretenden lithologischen Einheiten in ausgewählten Eichstrecken durch Zuordnung von spezifischen Merkmalskombinationen der Log-Antwortsignale
 - Rekonstruktion der erbohrten Lithologie anhand der Logging-Daten.
 - Geologische Bewertung der Ergebnisse, Korrelationen zwischen Bohrprofilen und Abgrenzung lithostratigraphischer Einheiten.

2.2.2 Qualitätskontrolle bohrlochgeophysikalischer Messdaten

Bei der Zusammenstellung der Messdaten wurde nach folgendem Schema vorgegangen:

Von allen relevanten Bohrungen werden vorhandenen Papierakten mit einem Endlosscanner eingelesen. Hierzu zählen sowohl Bohrlochmessungen als auch Bohrakten mit Kernansprachen und geologischen Profilen. Die Bohrakten werden als pdf-Datei abgelegt. Die digitalisierten Messdaten werden auf ihre Relevanz geprüft und zur weiteren Verarbeitung markiert. Die relevanten Bilddateien werden mit der NeuraLog-Software in ASCII-Dateien überführt. Die Ergebnisse werden nochmals überprüft, um Flüchtigkeitsfehler zu eliminieren.

Die digitalisierten Bohrlochmessdaten werden in ein Logauswertesystem (Geoframe, Geobase, Interactive Petrophysics) importiert und dort zu einem Composite-Log zusammengestellt. Dabei findet eine allgemeine Qualitätskontrolle der Logs sowie eine Überprüfung der Messdaten auf Teufenversätze zwischen einzelnen Messfahrten statt.

Einige Bohrlochmessungen werden durch den Einfluss der Bohrlochumgebung (Temperatur, Bohrl Lochdurchmesser, Dichte und Typ der Spülung) beeinflusst, wobei in der Regel die bohrungsbedingten Korrekturen direkt nach der Messung von der Servicefirma vorgenommen werden. Die im Rahmen der Beauftragung vorgenommene Qualitätskontrolle konzentriert sich auf das Auffinden und Eliminieren von fehlerhaften Messwerten, wie sie zum Beispiel durch elektronische Störungen und Bohrlochrandausbrüche auftreten können. Weiterhin werden die Logging-Daten auf systematische Abweichungen im Messbereich zwischen einzelnen Messfahrten hin kontrolliert. Solche Abweichungen können z.B. auftreten, wenn die Korrektur auf den Bohrl Lochdurchmesser nicht korrekt durchgeführt wurde oder Logs aus verrohrten Bohrabschnitten vorliegen. Zudem werden die Daten auf Teufenversätze kontrolliert, die zwischen einzelnen Messeinfahrten auftreten können. Zur weiteren Bearbeitung werden alle Kurven auf eine gemeinsame Bezugskurve korrigiert.

Die Explorationsbohrungen in der westlichen Molasse wurden in der Regel in mehreren Bohrabschnitten niedergebracht. Nach jeder Bohrphase wurde standardmäßig ein Bohrl Lochmessprogramm in der offenen Bohrung durchgeführt, bevor die Verrohrung für diesen Abschnitt eingebracht und mit einem kleineren Bohrdurchmesser weiter gebohrt wurde. In der westlichen Molasse liegen die Bohrabschnitte meist an der Basis der Oberen Süßwassermolasse und an der Tertiärbasis. Um ein durchgängiges Messprofil zu erhalten, werden die Logs aus den verschiedenen Bohrabschnitten am Schluss zusammengeführt (gespleißt). Die Daten liegen dann als Composite-Log vor und können weiter ausgewertet und interpretiert werden.

2.2.3 Faziesanalyse der Bohrlochmessdaten

Ziel der Untersuchungen war die lithologische Differenzierung der ausgewählten Bohrprofile in Hinblick auf die auftretenden Hauptgesteinstypen sowie die Abgrenzung und Korrelation stratigraphischer Einheiten zwischen den Bohrungen. Hierzu wurde nach folgendem Schema verfahren:

Zusammenstellung geologischer Informationen

Zunächst wurden die Bohrberichte recherchiert und alle verfügbaren Informationen zu den auftretenden Gesteinstypen und der stratigraphischen Abfolge zusammengetragen. Hier ist zu erwähnen, dass die Bohrsprache im Wesentlichen auf Bohrkleinuntersuchungen beruht, da in den Bohrungen nur vereinzelt Kerne gezogen wurden. In Abhängigkeit von Alter und Bearbeiter wurden die Gesteinsbeschreibungen und stratigraphischen Abgrenzungen unterschiedlich detailliert vorgenommen. In den meisten Bohrungen wurde das Bohrprofil nur gemäß der stratigraphischen Haupteinheiten (Serien) untergliedert. In einigen Bohrungen erfolgte zudem eine Differenzierung nach stratigraphischen Stufen und Unterstufen. Sehr detaillierte Informationen liegen für die Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6 und Anhang E) vor, die auch aufgrund ihres relativ hohen Kerngewinns als Referenzbohrung herangezogen wurde. Die gesamte Kernstrecke wurde für das Projekt angefordert und stand für Untersuchungen und Beprobung vor Ort zur Verfügung. Stratigraphische Einheiten, die in der Bohrung B-06 nicht erbohrt wurden, wurden durch Kernmaterial anderer Flach- und Tiefbohrungen sowie durch die Beprobung von Oberflächenaufschlüssen ergänzt. Danach erfolgte die Sichtung der Kerne, die Auswahl der Proben für Laboruntersuchungen und die makroskopische Beschreibung der ausgewählten Gesteinsproben.

Lithologische Klassifizierung der Logs

Im zweiten Schritt wurden die geologischen Informationen mit den bohrlochgeophysikalischen Messungen verknüpft. Die stratigraphische Untergliederung wurde vereinheitlicht, die stratigraphischen

Grenzen den Logs zugeordnet und als Datensatz in die Logauswerteprogramme eingespeichert. Die geologischen Bohrbereiche wurden mit den Bohrlochmessdaten korreliert. Anhand von Cross-Plots und statistischen Analysen erfolgte eine Klassifizierung der auftretenden Hauptgesteinstypen.

Lithologierekonstruktionen und stratigraphische Korrelation

Aufbauend auf der vorgenommenen Klassifizierung wurden für die betrachteten Bohrungen die Gesteinstypen abgegrenzt und eine Rekonstruktion der Bohrprofile vorgenommen. Die verschiedenen Bohrprofile wurden miteinander verglichen und eine detaillierte Korrelation zwischen den Bohrungen im Hinblick auf stratigraphische Stufen und Unterstufen vorgenommen. Dies bildet die Basis für die Erfassung fazieller Veränderungen innerhalb der stratigraphischen Einheiten. Eine Übersicht zu den Bohrungen und den abgegrenzten Hauptserien finden sich in den Abbildungen D.1 - D.5 im Anhang.

2.2.4 Theorie zur lithologischen Interpretation

Tabelle 2.1: Zusammenstellung von Log-Antworten für wichtige gesteinsbildende Minerale.

Mineral	RHOB (kg m^{-3})	DT ($\mu\text{s m}^{-1}$)	U (-)	NPHI (-)	GR (gAPI)
Albit	2600	161	5,60	-0,010	8
Anhydrit	2980	164	14,95	-0,020	5
Biotit	3040	197	21,60	0,134	127
Calcit	2710	157	14,10	0,000	11
Dolomit	2847	143	91,00	0,018	8
Chlorit	2810	262	21,70	0,583	74
Halit	2040	220	9,70	-0,030	0
Gips	2350	171	9,46	0,540	0
Glaukonit	2650	295	16,50	0,410	150
Illit	2610	295	9,90	0,352	150
Kaolinit	2550	262	5,10	0,507	150
Orthoklas	2570	197	8,70	-0,010	170
Muskovit	2850	174	11,50	0,240	130
Montmorillonit	2020	394	4,40	0,650	97
Quarz	2650	182	5,00	-0,060	30
Pyrit	4990	128	82,06	0,080	0
Siderit	3880	44	71,60	0,184	0

Mit Hilfe der Interpretation geophysikalischer Bohrlochmessungen ist es möglich, verschiedene Gesteine durch ihre unterschiedlichen Log-Antworten zu charakterisieren. Dies kann qualitativ geschehen, indem Änderungen in der Log-Antwort als lithologische bzw. stratigraphische Wechsel aufgefasst werden. Darüber hinaus ist aber auch eine quantitative Analyse möglich. Zum Beispiel lassen sich durch eine statistische Analyse verschiedene Fazies unterscheiden, und man erhält ein Elektrofazies-Log (Serra, 1986). Da die Korrelation zwischen Fazies und physikalischen Gesteinseigenschaften nicht eindeutig ist, wurde hier die lithologische Interpretation von Logging-Daten benutzt. Diese beruht darauf, dass jeder Gesteinstyp und jedes Porenfluid einen charakteristischen Antwortwert im Log besitzt. Man nimmt an, dass jedes Gestein aus N Komponenten (Gesteine oder Fluide) mit Volumenanteil V_i ($i=1, \dots, N$) besteht. Jeder Gesteins- oder Fluidtyp i besitzt für die Messung j eine charakteristische Antwort R_i^j . Diese verschiedenen Antworten lassen sich zum Beispiel durch Labormessungen bestimmen oder der Literatur entnehmen. Eine Zusammenstellung der Log-Antworten für

einige Messungen und Minerale ist in Tabelle 2.1 gegeben. Ein Messwert im Bohrloch resultiert dann aus der linearen Superposition dieser Log-Antworten, gewichtet mit ihrem jeweiligen Volumenanteil. Es ergibt sich für die Messung R^j

$$R^j = \sum_i V_i R_i^j \quad 1 = \sum_i V_i; \quad (2.19)$$

in Matrix-Schreibweise:

$$\mathbf{R} = \mathbf{A}\mathbf{V}; \quad (2.20)$$

mit

$$\mathbf{V} = [V_1, \dots, V_n]^T \quad \mathbf{R} = [R^1, \dots, R^J]^T \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} R_1^1 & \dots & R_I^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ R_1^J & \dots & R_I^J \end{bmatrix}. \quad (2.21)$$

Für jeden Tiefenpunkt lässt sich eine Log-Antwort aus Gleichung 2.20 berechnen. Umgekehrt kann man aber auch die Volumenanteile berechnen, indem man diese Gleichung invertiert. Sind mehr Logs als Komponenten vorhanden, ist das Problem überbestimmt und kann nur im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate gelöst werden. Abbildung 2.17 zeigt ein synthetisches Beispiel eines Tiefenprofils. Rechts sind vier Messungen dargestellt. Auf der linken Seite ist das darauf basierende lithologische Modell dargestellt. In diesem Fall wurden die drei Komponenten, Sand, Ton und wassergefüllter Porenraum benutzt. Da die Summe der relativen Volumenanteile immer eins ergeben muss, ist die Anzahl der unabhängigen Komponenten in diesem Fall jedoch nur gleich zwei. Das Beispiel zeigt, dass DT und GR tendenziell eher die Sand/Ton-Variationen widerspiegeln, NPHI und RHOB dafür empfindlicher auf die Porosität reagieren. In der Praxis hängen Log-Antworten tatsächlich auch noch von anderen Parametern ab, zum Beispiel der Temperatur oder dem Spülungswiderstand. Außerdem sind Log-Antworten in der Realität nicht immer linear.

2.2.5 Unsicherheit in der Methodik

Im Folgenden werden mögliche Fehlerquellen diskutiert, die bei der Berechnung thermischer Eigenschaften aus Logging-Daten auftreten können: Sie können zunächst bei der Berechnung der mineralogischen Zusammensetzung des Gesteins aus Logging-Daten entstehen, aber auch bei der darauf folgenden Berechnung der Wärmeleitfähigkeit aus der lithologischen Zusammensetzung. Tabelle 2.2 fasst die unterschiedlichen Fehlerquellen und -typen zusammen.

Messfehler der Sonden. Angaben zu Messfehlern von Loggingsonden sind in der Literatur nur schwer zu finden. Außerdem hängt die tatsächliche Genauigkeit auch immer von Parametern wie Bohrlochumgebung und Logginggeschwindigkeit ab. Für Temperaturlogs werden bei einem Vergleichsexperiment verschiedener Sonden (Wisian et al., 1998) absolute Fehler von 0.4 K in der Temperatur und 1 K km^{-1} – 10 K km^{-1} für den Temperaturgradienten berichtet. Vergleiche mit Kerndichten ergeben für Dichtetools durchschnittliche Abweichungen von 30 kg m^{-3} (Pickell und Heacock, 1960). Genaue Angaben sind also schwierig, aber es ist anzunehmen, dass Einzelwerte von Loggingsonden mit Messfehlern von 5 % bis 10 % behaftet sind.

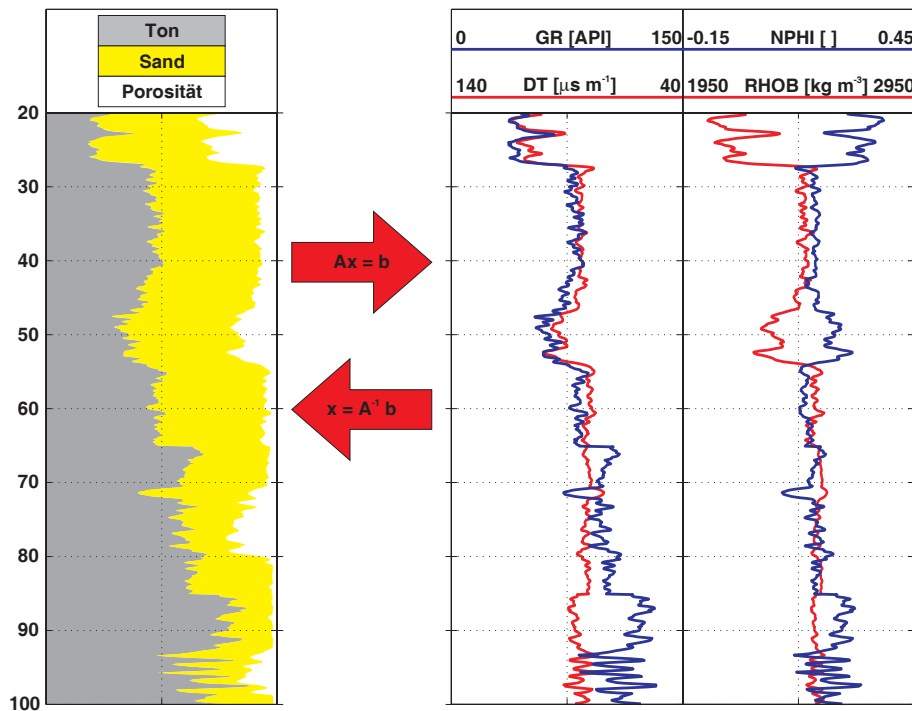


Abbildung 2.17: Synthetisches Litho-Log und Log-Antworten für Messungen der akustischen Wellenlaufzeit DT , natürlichen Gammastrahlung GR , Neutronenporosität $NPHI$ und gesättigten Gesamtdichte $RHOB$. Die Lösung des Vorwärtsproblems erfolgt durch Matrix-Multiplikation der Antwortfunktion A mit den relativen Volumenanteilen, der Umkehraufgabe durch Multiplikation von Gleichung 2.20 mit der Inversion der Antwort-Matrix A .

Tabelle 2.2: Fehlerquellen für die Loginterpretation.

Fehler	Typ	Ursache
Sondenmessfehler	statistisch	Messungenauigkeit der verwendeten Sonden.
Umgebungskorrektur	systematisch	Unvollständige Korrektur der Umgebungsbedingungen, z.B. Bohrlochdurchmesser, Temperatur, Salinität, Einfluss der gespülten Zone.
Schultereffekt	systematisch	Die Sonde integriert über einen gewissen Teufenbereich. Messwerte sind über diesen Bereich verschmiert.
Fehler im Sondenmodell	systematisch	Das Modell, mit dem die Log-Antwort einer Sonde aus den effektiven Gesteinseigenschaften berechnet wird, spiegelt die Wirklichkeit nicht genau wider.
Fehler im Mischungsmodell	systematisch	Das Modell, mit dem die effektiven Gesteinseigenschaften aus der Gesteinszusammensetzung berechnet werden, spiegelt die Realität nicht genau wider.
Fehler in der Matrix-Wärmeleitfähigkeit	systematisch	Die Matrix-Werte mit der die effektiven Gesteinseigenschaften aus der Gesteinszusammensetzung berechnet werden, spiegelt die Realität nicht genau wider.

Umgebungskorrektur. Werte für die Umgebungskorrektur können Tabellenwerken der Sondenhersteller entnommen werden (z. B. Anonym, 1989). Hauptsächlich relevant sind in unserem Fall die

Korrektur des Bohrlochdurchmessers für Gamma-Ray- und Dichte-Sonden. Der häufigste Fall ist ein tatsächlich zu großer Durchmesser der Bohrung. Dies führt zu einer Absenkung der real gemessenen Werte. Für die Gamma-Ray-Sonde waren Korrekturen von maximal 15 gAPI nötig, für die Dichte-Sonde maximal 30 kg m^{-3} . Unter der Annahme, dass 30 % dieser Korrektur fehlerhaft angebracht worden sind, bleibt maximal ein systematischer Fehler von 10 gAPI bzw. 10 kg m^{-3} .

Schultereffekt. Dieser Effekt erzeugt eine systematische Variation der Loggingwerte beim Durchfahren einer Schichtgrenze. Bei dünnen Schichten führt dieser Effekt dazu, dass die tatsächliche Log-Antwort der Schicht nicht erreicht wird. Bei der Korrelation von Kern- mit Logmessungen muss diese unterschiedliche räumliche Auflösung betrachtet werden. Da in dieser Studie jedoch Integrale über größere Tiefenintervalle gebildet werden, kann diese Fehlerquelle vernachlässigt werden.

Fehler des Mischungsmodells. Für manche Sonden, zum Beispiel der Dichtesonde, ist die Antwort einer Mischung aus Mineralen über ein Mischungsmodell exakt zu berechnen. Insbesondere für die spezifische akustische Laufzeit und die Wärmeleitfähigkeit existieren nur empirische Gleichungen. Eine genaue Abschätzung dieses Fehlers ist nicht möglich, da man das in Wirklichkeit zutreffende Mischungsgesetz nicht kennt. Normalerweise stellt das benutzte Modell bereits die beste, die Messdaten optimal anpassende Approximation der Wirklichkeit dar. Es gibt zwar theoretische obere und untere Grenzen (Hashin und Shtrikman, 1962), diese sind aber in der Praxis meist nicht genau genug um als Schätzung der effektiven Eigenschaften zu dienen. Für die Wärmeleitfähigkeit wird das geometrische Mischungsgesetz verwendet. Dieses hat sich als tauglich für die Berechnung effektiver Wärmeleitfähigkeiten an gesättigten Gesteinen erwiesen (z. B. Hartmann et al., 2005a).

Matrixwärmeleitfähigkeit Die exakte Matrixwärmeleitfähigkeit ist auch mit Unsicherheit behaftet. Zum einen müssen die Werte auf 0 % Porosität extrapoliert werden, zu anderen besteht kein Gestein zu 100 % aus einem Mineral, dessen Wärmeleitfähigkeit bekannt ist. Auch wenn dies annähernd der Fall ist, hat die unterschiedliche Kornverteilung einen Einfluss auf die Wärmeleitfähigkeit.

2.2.6 Thermophysikalische Parameterschätzung mit Hilfe inverser Methoden

Die üblicherweise in der Analyse von Bohrlochlogs eingesetzten Auswertungsprogramme weisen für die Gewinnung thermischer Gesteinsparameter deutliche Defizite auf, da sie nicht in erster Linie für die hier relevanten Gesteinseigenschaften ausgelegt sind. Aus diesem Grund wurde im Rahmen des hier beschriebenen Projekts neuartige Verfahren entwickelt, die einen wichtigen Fortschritt in der optimalen Informationsgewinnung aus Logging-Daten darstellen. Details dieser Methoden können der eingereichten Dissertation Hartmann (2007) (siehe Anhang F) entnommen werden.

Die thermophysikalische Parameterschätzung beruht auf der Anwendung der Bayesschen Methode. Diese Sichtweise zeichnet sich durch eine einheitliche Behandlung der optimalen Parameterschätzung und der dazugehörigen Fehlerbestimmung aus. Die Behandlung linearer und nichtlinearer inverser Probleme in der Geophysik wurde zunächst in Tarantola und Valette (1982a) und Tarantola und Valette (1982b) beschrieben. Eine zusammenfassende Darstellung ist in Tarantola (2004) zu finden. In der hier gewählten Methodologie wird das Funktional

$$\phi_B(\mathbf{m}) = [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m})]^T \mathbf{C}_d^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m})] + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_p)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_p) \quad (2.22)$$

minimiert. Es bezeichnet \mathbf{m} den Vektor der zu bestimmenden Parameter, \mathbf{m}_p seinen a priori angenommenen Wert. \mathbf{d} ist der Vektor der Messdaten, $\mathbf{g}(\mathbf{m})$ sind die durch ein nichtlineares Modell berechneten Werte. \mathbf{C}_d und \mathbf{C}_p sind die Kovarianzmatrizen der Daten bzw. Parameter. Sie erlauben, a-priori-Informationen, etwa über Fehlerbereiche der einzelnen Parameter, aber auch beispielsweise über ihre räumliche Korrelationslänge in den Inversionsprozess einzubringen.

Das Minimum des Funktionals wird durch ein iteratives Gauss-Newton-Verfahren (Nocedal und Wright, 1999; Kelley, 2003) bestimmt, welches die formale Ableitung von Gleichung 2.22 (vgl. Abschnitt F.2 im Anhang) nach den Parametern erfordert. Die jeweilige Parameteränderung bei der k -ten Iteration ergibt sich aus

$$\Delta \mathbf{m}^k = (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1} \left(\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m}^k)] - \mathbf{C}_p^{-1} [\mathbf{m}^k - \mathbf{m}_p] \right), \quad (2.23)$$

wobei die Matrix der Ableitungen

$$J_{ij} = \frac{\partial g_i(\mathbf{m})}{\partial m_j} \quad (2.24)$$

Jacobimatrix oder Sensitivitätsmatrix genannt wird. In der hier gewählten Implementierung kann die Jacobimatrix aus vorgegebenen MATLAB-Funktionen für die numerische Berechnung der Log-Antwort durch die Methode des Automatischen Differenzierens (AD) (Bischof et al., 2002, 2003) unmittelbar berechnet werden. Der Parametervektor der neuen Iteration $k + 1$ wird dann durch eine Liniensuche gefunden:

$$\mathbf{m}^{k+1} = \mathbf{m}^k + \gamma^k \Delta \mathbf{m}^k. \quad (2.25)$$

In der Nähe des Minimums kann eine a posteriori Parameterkovarianz

$$\mathbf{C}_p^a = (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1} = \mathbf{C}_p - \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T (\mathbf{J} \mathbf{C}_p \mathbf{J}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} \mathbf{J} \mathbf{C}_p \quad (2.26)$$

berechnet werden, die nicht nur erlaubt, die Parameterfehler, sondern auch ihre Korrelationen zu bestimmen. Aus ihr lassen sich auch weitere Parameter berechnen, welche besonders zur Charakterisierung von Parameterunsicherheit, -sensitivität und -auflösung geeignet sind.

Die durch die Neuentwicklung erreichten Fortschritte gegenüber dem Einsatz kommerzieller Werkzeuge können wie folgt zusammengefasst werden:

1. Freiheit in der Wahl der numerischen Berechnung der Log-Antworten. Es ist nicht nur möglich, lineare und nichtlineare Eigenschaften und Mischungsgesetze zu verwenden, sondern es können auch angepasste numerische Modellierungsverfahren wie Finite Differenzen oder Elemente eingesetzt werden. Eine praktisch wichtige Möglichkeit ist die Emulation von in-situ-Bedingungen.
2. Automatische Berechnung der Sensitivitäten durch AD. Diese Technik ermöglicht die nahezu automatische Erzeugung vom Quellcode zur Berechnung der Jacobimatrix. Die derart berechneten Sensitivitäten sind zudem - anders als die durch Differenzenquotienten angenäherten - exakt.
3. Integration von a priori-Informationen durch die entsprechenden Kovarianzmatrizen. Beispielsweise kann dem unterschiedlichen Integrationsvolumen der verschiedenen Messverfahren durch entsprechende räumliche Korrelationslängen Rechnung getragen werden.
4. Verwendung von bekannten oder neu bestimmten petrophysikalischen Abhängigkeiten für geothermisch relevante Parameter.

5. Integration von Temperaturmessungen. Falls Temperaturmessungen vorliegen, können sie einerseits als Daten in den Schätzprozess eingehen, andererseits ist die Berücksichtigung temperaturabhängiger Gesteinseigenschaften möglich. Dies kann besonders im Fall tiefer Bohrungen erstrebenswert sein.
6. Zugang zum Quellcode. Dieser offene Charakter ermöglicht eine einfache Implementierung neuer anwendungsspezifischer Gesteinsmodelle und Berechnungsverfahren.

Kapitel 3

Probenahme und Auswahl von Bohrlochmessdaten

Voraussetzung für die Ableitung thermischer und hydraulischer Kenngrößen ist die repräsentative Beprobung des Arbeitsgebietes und die Kompilation von bohrlochgeophysikalischen Messdaten. Dieses Kapitel beschreibt das Probenahmeprogramm und die Rahmenbedingungen, unter denen Kernproben aus den Archiven der Landesämter und der Industrie und aus Steinbrüchen für gesteinsphysikalische Laboruntersuchungen gesammelt wurden. Weiter wird die Kompilation von Bohrlochmessdaten beschrieben, die für eine Datenbasis geothermisch relevanter Gesteinseigenschaften herangezogen wurden.

3.1 Probennahmeprogramm

Die Firma ECOS Umwelt GmbH in Aachen wurde mit der repräsentativen Entnahme von Proben aus allen relevanten Gesteinsformationen beauftragt. Zunächst erfolgt eine Übersicht zur Geologie und Hydrogeologie des Molassebeckens und des nördlich angrenzenden Süddeutschen Schichtstufenlandes, bevor die eigentliche Probenahme dargestellt wird.

3.1.1 Geologische Einheiten

Das in dieser Projektphase bearbeitete Gebiet umfasst die Gesteine der Süddeutschen Molasse und des Süddeutschen Schichtstufenlandes. Das Basement der untersuchten Schichtenfolge in der Region wird vom kristallinen **Grundgebirge** gebildet. Es besteht überwiegend aus mehr oder weniger metamorphen Gesteinen sowie Magmatiten, die paläozoisches oder sogar vorpaläozoisches Alter aufweisen.

Darüber folgt das jüngere **Deckgebirge**. Die Sedimentgesteine des Deckgebirges in Südwestdeutschland sind in der Reihenfolge ihrer Ablagerung übereinander anzutreffen. Dabei sind zwei landschaftliche Einheiten zu unterscheiden: die Stufenlandschaft der Schwäbischen Alb sowie deren Vorland und die Sedimentationsbecken des Molassetroges als nördliche Vortiefe der Alpen.

Für die Bildung des **Schichtstufen-Reliefs** ist eine wesentliche Voraussetzung das Vorhandensein der tektonisch mäßig nach Südosten geneigten Schichtentafel mit einer etwa planparallel angeordneten Schichtenfolge. Die Schichten weisen dabei unterschiedliche Verwitterungs- und Abtragungseigen-

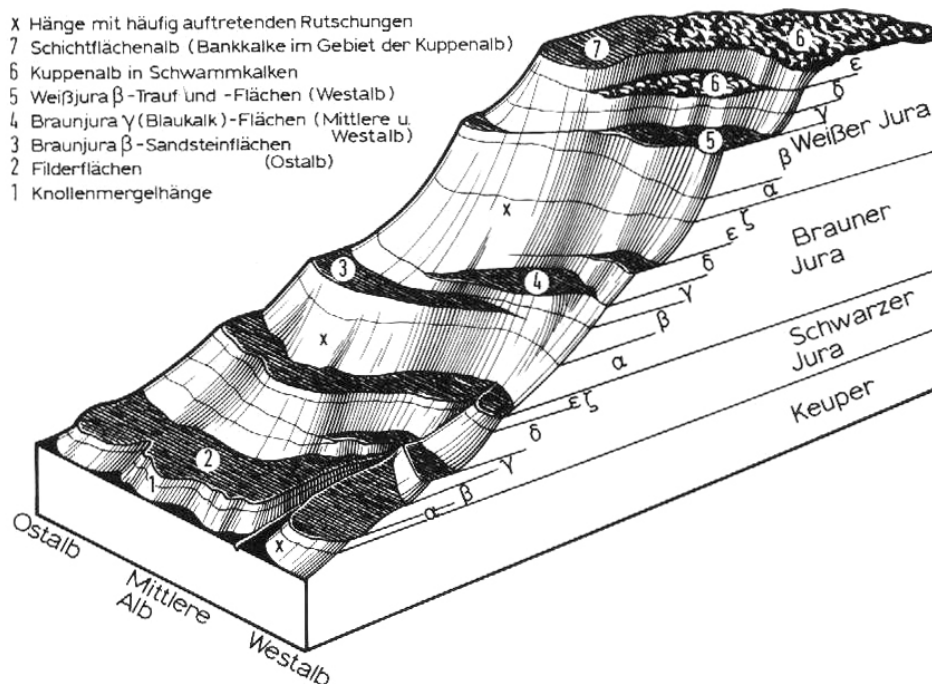


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Schichtstufen im schwäbischen Jura (aus Geyer und Gwinner (1991)).

schaften auf. Dies hängt nicht allein von der mechanischen Härte, sondern auch von der Durchlässigkeit der Gesteine für Wasser (Porosität, Zerklüftung) ab.

In Südwestdeutschland sind die Stufenflächen (Verebnungen) teilweise als Schnittfläche ausgebildet, d. h. sie schneiden die Schichtflächen der Gesteine spitzwinklig. Manche Stufenflächen verlaufen aber auch den Schichtflächen ausgesprochen parallel wie im schwäbischen Jura (vgl. Abbildung 3.1).

Aus dem Querprofil des **Molassebeckens** (Abbildung 3.2) geht hervor, dass die Mächtigkeiten der tertiären Gesteine im Süden maximale Werte erreichen und nach Norden allmählich ausdünnen. Die Struktur dieser asymmetrischen Großmulde kommt dadurch zustande, dass die Subsidenz des Untergrundes im Süden am größten war. Die Absenkung wurde aber immer soweit durch Sedimentation kompensiert, dass die Ablagerung auf einer sehr flachen Unterlage erfolgte, welche die Bezeichnung „Molassebecken“ nur bedingt verdient.

Als Sedimentfüllung dienten die terrestrischen Abtragungsprodukte der Alpen, die aus klastischen Gesteinen bestehen. Die Mächtigkeitsverteilung der einzelnen Molasse-Glieder ist sehr unsymmetrisch. Bei den marinen Schichtkomplexen sind die Mächtigkeiten etwa gleichmäßig. Die limno-fluviatilen bis fluvio-terrestrischen Ablagerungen der „Süßwassermolasse“ beispielsweise (vgl. Abschnitt 5.1.1) wurden von Flüssen im Becken verteilt und treten dementsprechend in sehr unregelmäßigen Mächtigkeiten auf.

Das nordalpine Molassebecken ist eine vielfältige Akkumulationslandschaft. Sie wird durch die Moränenwälle und die dazwischen liegenden Bereiche mit Grundmoränen gegliedert, wobei erhebliche morphologische Unterschiede zwischen Alt- und Jungmoränenlandschaft bestehen. Im Gebiet außerhalb der Moränen ist eine Terrassenlandschaft mit lang gestreckten Schotter- und Molasse-Riedeln entwickelt. Die unterschiedlichen Mächtigkeiten der mesozoischen und känozoischen Schichtglieder werden

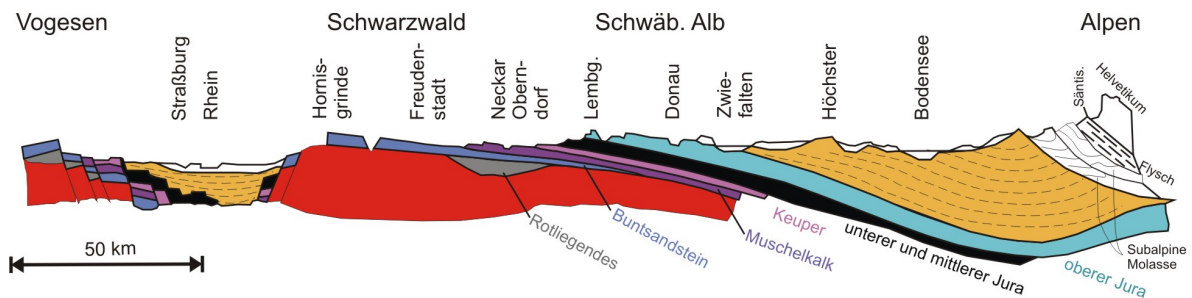


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung eines geologischen Querprofils (stark überhöht) durch das Schwäbische Schichtstufenland und das südwestdeutsche Molassebecken (aus Geyer und Gwinner (1991)).

durch die Profile einiger Tiefbohrungen in Südwestdeutschland dargestellt (vgl. Anhang D).

3.1.2 Hydrogeologie

Für die Nutzung geothermischer Reservoirs spielen Grundwasserleiter eine wichtige Rolle. Die größten zusammenhängenden Grundwasserkörper findet man in den sandig-kiesigen Ablagerungen der Täler, die im Pleistozän und Holozän entstanden sind. Im Deckgebirge kommen als Grundwasserleiter in erster Linie Sandsteine und poröse oder klüftige Kalke in Betracht. Auch dichte Sandsteine mit weniger Porenraum können bei genügender Klüftigkeit Grundwasser führen. Wenig durchlässig sind die tonigen Gesteine, sofern sie nicht von klaffenden Spalten durchzogen werden, was öfters in der Nähe der Oberfläche der Fall ist.

Die Abfolge von Grundwasserleitern und Grundwassergeringleitern bewirkt allgemein in der Schichtstufenlandschaft eine ausgeprägte hydrogeologische Stockwerksgliederung. Die grundwasserleitenden Stockwerke weisen unterschiedliche hydrogeologische Eigenschaften, geohydraulische Verhältnisse und jeweils charakteristische Grundwasserbeschaffenheiten auf. Entlang tektonischer Störungszonen und im Bereich der Schichtausstriche mit Verwitterung und Auflockerung kommt es zu Stockwerkverbindungen und Grundwasserübertritten.

Je nach Raum- und Höhenlage, Überdeckung und hydrogeologischen Eigenschaften der Grundwasserleiter sind diese in Abhängigkeit der jahreszeitlichen Grundwasserschwankungen von Grundwasser erfüllt.

In den Abbildungen 3.3 und 3.4 sind die Grundwasserleiter verzeichnet und die Ergiebigkeit der ihnen entspringenden Quellen (Geyer und Gwinner, 1991). Die Art der Quellen (Kluftquellen, Schichtquellen usw.) lässt erkennen, auf welchen Wegen sich das Wasser in der betreffenden Schicht bewegt. Wichtig ist die Größe der Einzugsgebiete. Im Schichtstufenland haben die stufenbildenden Schichten, die stets aus durchlässigen Gesteinen bestehen, große Einzugsgebiete. Je durchlässiger und je mächtiger solche Schichten sind, um so breiter sind auch ihre Schichtstufen. Dies wird besonders in den verkarsteten Kalkformationen des Muschelkalks und Malm deutlich.

Eine weit verbreitete Erscheinung ist der in den Karbonatgesteinen des Muschelkalks und des Oberjuras (Malm) sowie im Gips des Keupers entwickelte Karst. Der oberirdische Abfluss ist in Karstgebieten äußerst gering; das Wasser versickert zum größten Teil und wird in Karsthohlräumen unterirdisch abgeführt. Der Grundwasserspiegel in den Hohlräumen liegt meist sehr tief und richtet sich nach der Vorflut in den Tälern, die am tiefsten in das Karstgebirge eingeschnitten sind.

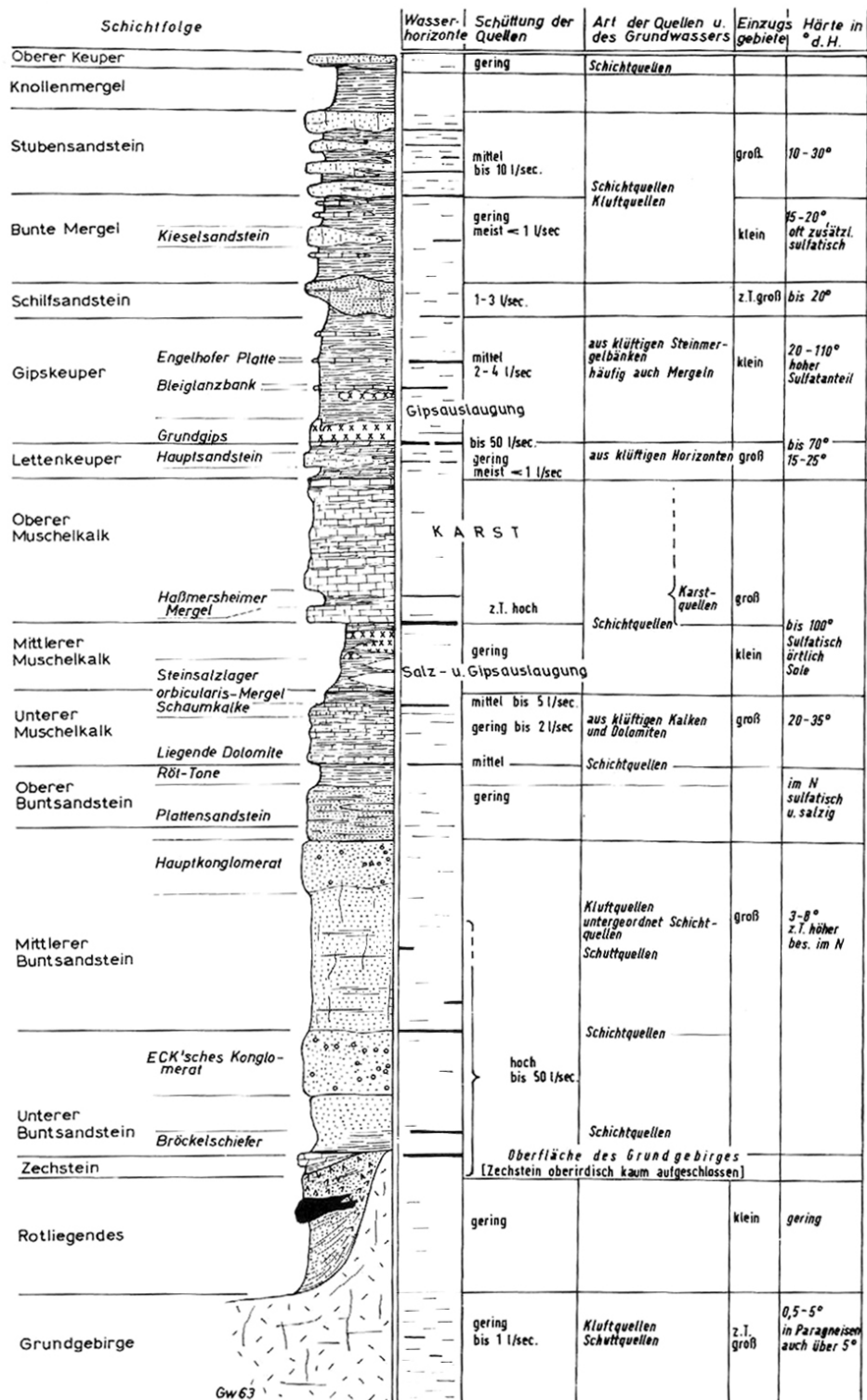


Abbildung 3.3: Hydrogeologie der Schichtenfolgen in Baden-Württemberg vom Grundgebirge bis zum Keuper (aus Geyer und Gwinner (1991)). Bei den angegebenen Schüttungen handelt es sich um Mittelwerte. Durchgehende Striche zeigen Quellhorizonte an, die im ganzen Verbreitungsbereich der betreffenden Schicht anzutreffen sind. Kleine Striche markieren solche, die nur lokal auftreten.

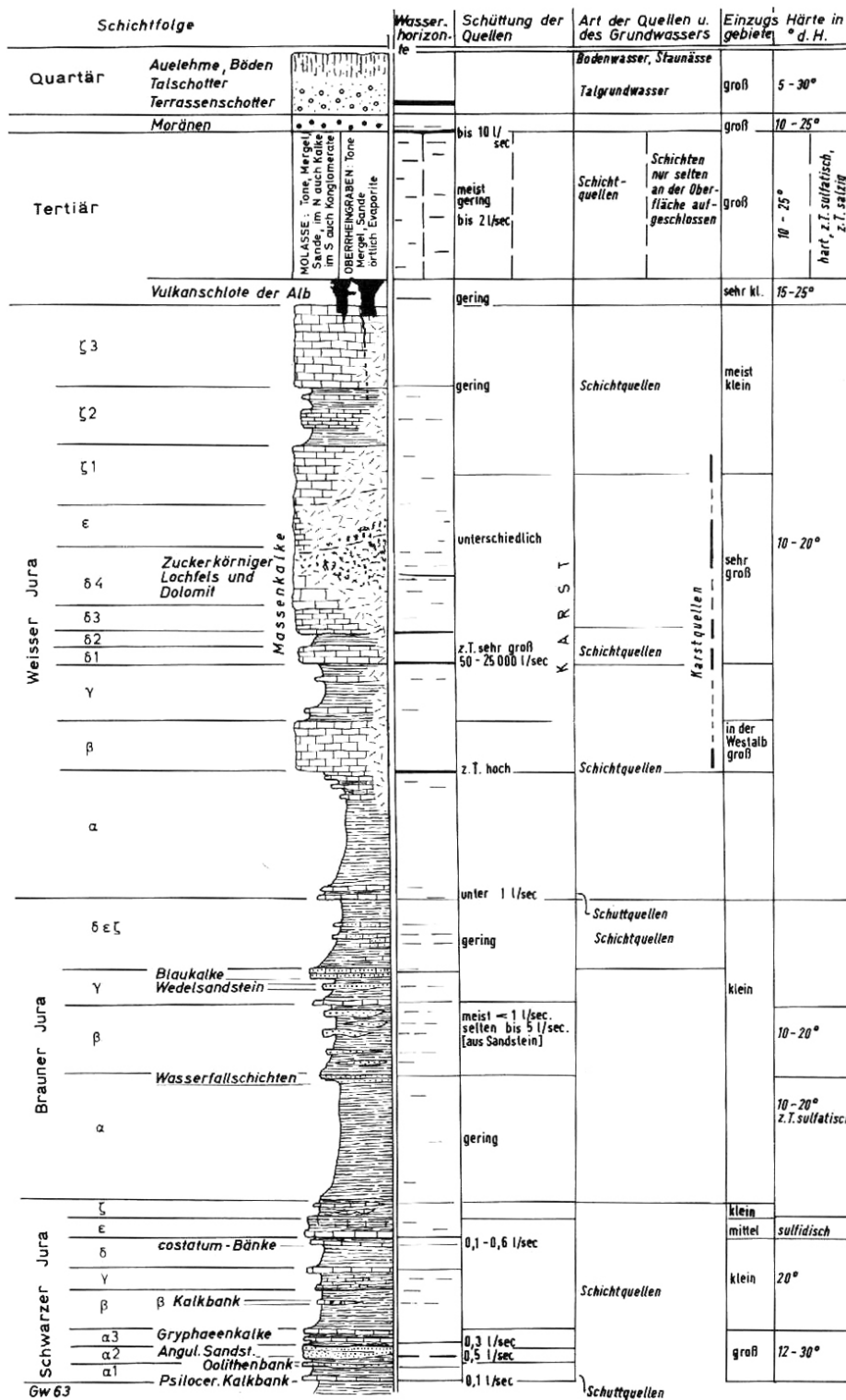


Abbildung 3.4: Hydrogeologie der Schichtenfolgen in Baden-Württemberg vom Jura bis zum Quartär (aus Geyer und Gwinner (1991)). Bei den angegebenen Schüttungen handelt es sich um Mittelwerte. Durchgehende Striche zeigen Quellhorizonte an, die im ganzen Verbreitungsbereich der betreffenden Schicht anzutreffen sind. Kleine Striche markieren solche, die nur lokal auftreten.

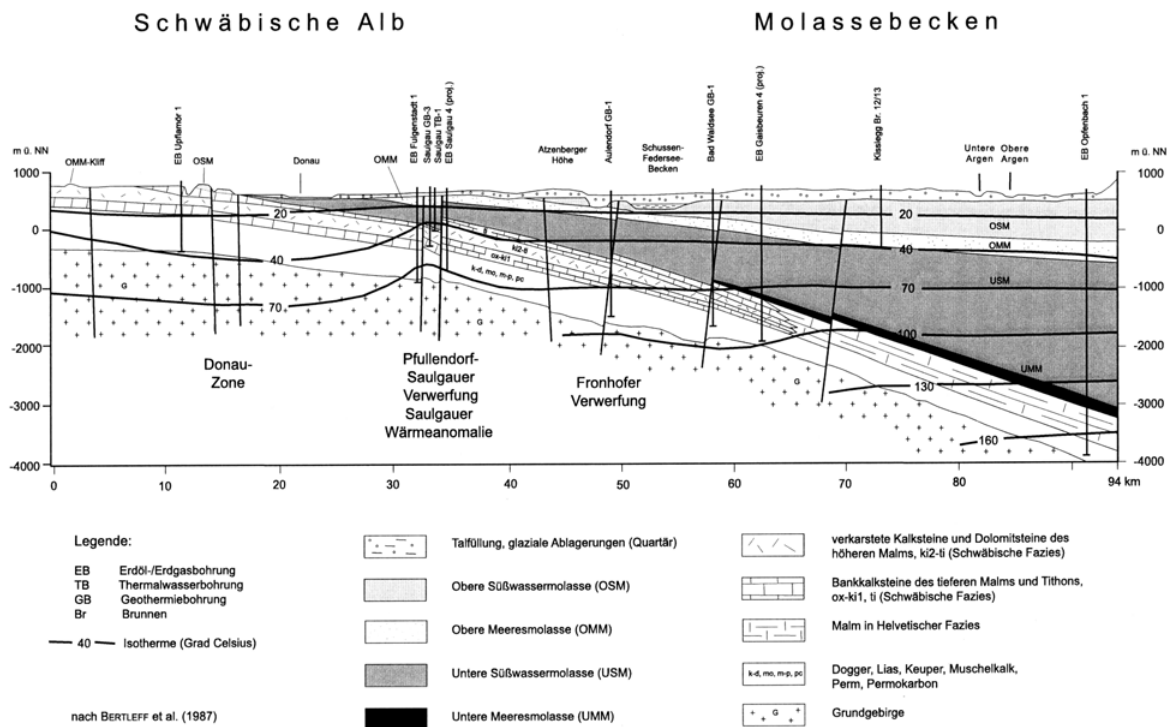


Abbildung 3.5: Darstellung des Wärmestroms im Westteil des Süddeutschen Molassebeckens (aus Anonym, 1999-2007).

Die zahlreichen Tiefbohrungen für die Prospektion auf Erdöl, Erdgas und Thermalwässer im Alpenvorland erbrachten, dass vom Südrand der Schwäbischen Alb der Oberjura unter die Molassesedimente abtaucht. Die Hauptströmungsbahn der thermalen Karstwässer liegt innerhalb einer 20 m bis 50 m mächtigen, stark verkarsteten Zone mit Dolomitsteinen und kavernen, zuckerartigen Kalksteinen im Oberjura. Die Abbildung 3.5 zeigt, dass im Bereich der Störungsstaffeln im Gebiet Bad Saulgau der Wärmestrom erhöht ist, was in der graphischen Darstellung zu einer Aufwölbung der Isothermen führt.

Im Bereich des südwestdeutschen Molassebeckens existieren folgende thermale Grundwasserstockwerke, deren Erschließung in der Regel erfolgreich wird:

- Obere Meeresmolasse,
- Oberjura und
- Obere Muschelkalk.

3.1.3 Durchgeführte Arbeiten

Zur Festlegung der zu beprobenden Profile durch die Gesteinsformationen des Untersuchungsgebietes wurden vorab die detaillierten Schichtenverzeichnisse von sieben Explorationsbohrungen im südwestdeutschen Molassebecken ausgewertet. Anhand dieser Referenzbohrungen und der ausgesuchten geologischen Literatur (Anonym, 2004, 1998b,a; Geyer und Gwinner, 1984; Brinkmann, 1986; Anonym,

1999-2007; Geyer und Gwinner, 1991) wurde ein Normalprofil erstellt und die Schichtenglieder für die Probenahme von Gesteinkernen in Zusammenarbeit mit den Mitarbeitern der Angewandte Geophysik der RWTH Aachen ausgewählt sowie die Anzahl der Gesteinskernproben festgelegt. Folgende Referenzbohrungen wurden ausgewertet:

1. Bohrung B-03 im Landkreis Unterallgäu, Bayern
2. Bohrung B-06 im Landkreis Sigmaringen, Baden-Württemberg
3. Bohrung B-10 im Landkreis Ravensburg, Baden-Württemberg
4. Bohrung B-11 im Landkreis Biberach/Riß, Baden-Württemberg
5. Bohrung B-12 im Landkreis Überlingen, Baden-Württemberg
6. Bohrung B-13 im Landkreis Überlingen, Baden-Württemberg
7. Bohrung B-23 im Landkreis Günzburg, Bayern

Die Lage der Bohrungen ist der Übersichtskarte der Probenahmepunkte in Anlage E zu entnehmen. In Tabelle 3.1 ist eine tabellarische Darstellung aller im Untersuchungsgebiet vorhandenen Schichten sowie der Anzahl der gewonnenen Bohrkernproben pro stratigraphischer Einheit dargestellt. Insgesamt wurden 308 Gesteinskernproben aus 43 unterschiedlichen stratigraphischen Einheiten des Zechsteins, des Trias, des Juras sowie der Oberen Meeresmolasse gewonnen.

Für die Erfassung der gesteinsphysikalischen Eigenschaften mit der innovativen Technik eines mobilen NMR-Scanners (vgl. Abschnitt 2.1.7) war die Gewinnung von Gesteinskernproben mit einem Mindestdurchmesser von 75 mm und einer Länge zwischen 10 cm und 50 cm erforderlich. Schichten mit geringer Mächtigkeit oder mit ungünstigen lithologischen Eigenschaften (hoher Verwitterungsgrad, bröckeliger Zustand, intensive Schieferung) waren für die Messungen nicht geeignet und wurden daher nicht beprobt.

Bei der Gewinnung von Gesteinsproben an der Oberfläche können Verwitterung und Auflockerung der Schichtverbände eine Beeinträchtigung der gesteinsphysikalischen Eigenschaften der Kerne bewirken. Aus diesem Grund wurde zuerst die Gewinnung von Gesteinskernen aus tiefen Bohrungen angestrebt.

Die Universität Tübingen und das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg in Freiburg (LGBR) stellten freundlicherweise das Bohrmaterial aus ihren Bohrkernarchiven zur Verfügung. Nach Sichtung und Auswertung der vorhandenen Bohrdaten konnten insgesamt 211 Bohrkernproben aus den Bohrkernarchiven ausgeliehen werden (siehe unten). Die Proben wurden in 1 m-Kernkisten der RWTH Aachen übergeben und nach der Vermessung dem LGBR und der Universität Tübingen wieder zurück übermittelt.

Für stratigraphische Einheiten, die nicht oder nur in ungenügender Anzahl in den Bohrkernarchiven zur Verfügung standen, wurden insgesamt 87 Bohrkernproben aus Oberflächenaufschlüssen gewonnen.

Vom Forschungsbereich für Angewandte Sedimentgeologie an der Geowissenschaftlichen Fakultät der Universität Tübingen wurden Bohrkernproben aus den Malm-Bohrungen Ro 7324 / B3 Türkheim (12 Proben) und Ro 7324 / B2 Auendorf (8 Proben) überlassen (vgl. Anhang E).

Tabelle 3.1: Zusammenfassung der gewonnenen Kernproben mit Angabe der stratigraphischen Einheiten und der Lithologie. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind Anonym (2007) entnommen.

Stratigr. Einheit	Kürzel	Untereinheit	Hauptgesteinstyp	Probenanzahl	Probenart
Tertiär/Untermiozän	omm	Ob. Meeresmolasse	Ton, Schluff, Sand	2	Tiefbohrung
Jura/Malm/Kimmeridg.	ki5	Zementmergel	Bankkalke	9	Oberflächenproben
Jura/Malm/Kimmeridg.	ki4	Liegende Bankkalke	Bankkalke	11	Oberflächenproben
Jura/Malm/Kimmeridg.	joMo	Oberer Massenkalk	Massenkalk	9	Oberflächenproben
Jura/Malm/Kimmeridg.	joMu	Unterer Massenkalk	Massenkalk	8	Tiefbohrung
Jura/Malm/Kimmeridg.	ki3	obere Felsenkalke	Kalke	8	Oberflächenproben
Jura/Malm/Kimmeridg.	ki2	untere Felsenkalke	Kalke	8	Tiefbohrung
Jura/Malm/Kimmeridg.	ki1	Lacunosa-Mergel	Mergelstein	14	Tiefbohrung
Jura/Malm/Oxford	ox2	Wohlgebankte Kalke	Bankkalke	14	Tiefbohrung
Jura/Malm/Oxford	ox1	Impressa-Schichten	Kalke	8	Tiefbohrung
Jura/Dogger/Bajoc	bj1	Wedelsandsteine	Sand- u. Tonstein	6	Tiefbohrung
Jura/Dogger/Aalen	al2 (al2E)	Sandflasserschichten	Sandsteine	8	Tiefbohrung
Jura/Dogger/Aalen	al1	Opalinuston	Tonstein	12	Tiefbohrung
Jura/Lias/Toarc	tc2	Jurensismergel	Mergelstein	8	Tiefbohrung
Jura/Lias/Pliensbach	pb2	Amaltheenschichten	Kalk-Mergelstein	8	Tiefbohrung
Jura/Lias/Sinemur	si2	Obtustuston	Tonstein	4	Tiefbohrung
Jura/Lias/Sinemur	si1	Arietenkalk	Kalksteine	8	Tiefbohrung u. Oberflächenproben
Jura/Lias/Hettang	he2	Angulaten Schichten	Kalk-Sandstein	4	Tiefbohrung
Jura/Lias/Hettang	he1	Psilonoten Ton	Tonstein	4	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Keuper	km5	Knollenmergel	Kieselknollen	12	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Keuper	km4	Stubensandstein	Sandsteine	12	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Keuper	km3	Kieselsandstein	Sandsteine	3	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Keuper	km3u	Bunter Mergel	Mergelstein	4	Oberflächenproben
Trias/Mittl. Keuper	km2	Schilfsandstein	Sandsteine	8	Oberflächenproben
Trias/Mittl. Keuper	km1	Grundgipsschichten	Ton- Sandsteine	9	Tiefbohrung u. Oberflächenproben
Trias/Unt. Keuper	ku	Lettenkeuper	Ton- u. Kalkstein	14	Tiefbohrung
Trias/Unt. Keuper	ku (kmL)	Werksandstein	Sandsteine	4	Tiefbohrung
Trias/Ob. Muschelkalk	mo3	Dickbankzone	Kalksteine	6	Oberflächenproben
Trias/Ob. Muschelkalk	mo2	Plattenkalk	Kalksteine	13	Tiefbohrung u. Oberflächenproben
Trias/Ob. Muschelkalk	mo1	Wulstkalkstein	Kalksteine	4	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Muschelk.	mm2 (mmDo)	Mittl. Dolomit	Dolomit	6	Oberflächenproben
Trias/Mittl. Muschelk.	mm1	Unter. Dolomit	Dolomit	7	Oberflächenproben
Trias/Unt. Muschelkalk	mu3 (mmG)	Terebratelbank/Schaumkalk	Kalksteine	6	Tiefbohrung
Trias/Unt. Muschelkalk	mu1 (muW)	Wellenkalkfolge	Kalksteine	6	Tiefbohrung
Trias/Ob. Buntsandstein	so2/sos	Plattensandstein	Sandsteine	4	Tiefbohrung u. Oberflächenproben
Trias/Ob. Buntsandstein	vh2	Carneol-Dolomit-Horizont	Dolomit	2	Tiefbohrung
Trias/Mittl. Buntsdst.	smH/sms	Fels-/Grob-/Kristallsdst.	Sandsteine	7	Tiefbohrung u. Oberflächenproben
Trias/Mittl. Buntsdst.	smD/smg	Geröllsandstein	Sandsteine	6	Tiefbohrung
Trias/Unt. Buntsdst.	suB/sus	Basis-Bausdst./Tonlagensdst.	Sandsteine	6	Tiefbohrung
Trias/Unt. Buntsdst.	suC/sus	Bausandstein/Dickbanksdst.	Sandsteine	6	Tiefbohrung
Trias/Unt. Buntsdst.	suC/suE	Eck-Geröllsandst.	Sandsteine	4	Tiefbohrung
Perm/Zechstein	zt	Zechsteinsdst. (Tiger-Sdst.-Form.)	Sandsteine	2	Tiefbohrung
Perm/Zechstein	zd	Zechsteindolomit	Dolomit	4	Tiefbohrung

Nach Auswertung der Daten aus dem Bohrkernarchiv des LGBR Freiburg wurden Bohrkernkerne aus 18 Bohrungen ausgewählt (vgl. Anhang E). Insgesamt wurden 201 Kernproben aus dem Bohrkernarchiv in Freiburg zur Verfügung gestellt.

Aus der Datenbank für Lagerstättenpotentiale des LGBR in Freiburg sowie aus den Karten der mineralischen Rohstoffe von Baden-Württemberg 1 : 50.000 wurden geeignete Aufschlüsse für geologische Schichten ausgesucht, die in den Bohrkernarchiven nicht aufgeschlossen waren. Vor Ort wurden die geologischen Aufschlüsse (verlassene oder aktive Steinbrüche zur Gewinnung mineralischer Rohstoffe) gesichtet und auf ihren Verwitterungsgrad geprüft. War eine Beprobung möglich, wurden die Gesteinskerne mittels Kernbohrer mit einer Diamantkrone von 75 mm Innendurchmesser und einer Länge von 500 mm gewonnen. Insgesamt wurden aus 15 unterschiedlich großen Steinbrüchen 87 Kernproben entnommen. Die Proben wurden fortlaufend nummeriert. Die Lage der Aufschlüsse ist in der Anlage E zu entnehmen.

3.2 Recherche und Kompilation von Bohrlochmessdaten

Das Untersuchungsgebiet war Zielgebiet umfangreicher Explorationstätigkeit für die Aufsuchung von Kohlenwasserstoffen. Die in den Explorationsbohrungen gewonnenen Daten wurden seitens der beteiligten Erdölfirmer für dieses Forschungsvorhaben freigegeben. Für den Bereich der Südwestdeutschen Molasse liegen Datensätze aus über 100 Bohrungen vor. Der Großteil der Bohrungen wurde zwischen 1950 und 1980 abgeteuft und zum jeweiligen Stand der Technik bohrlochgeophysikalisch vermessen. Entsprechend unterschiedlich ist die Verfügbarkeit und Qualität der Bohrlochmessdaten. Für die Untersuchungen wurden vorwiegend Bohrungen jüngerer Datums ausgesucht, in denen durchweg Gammaloge, Sonic-Logs und moderne elektrische Widerstandslogs zum Einsatz kamen. Für einige Bohrungen stehen weiterhin Eigenpotenzial-Logs, Gamma-Dichte-Logs und Neutronenporositäts-Logs zur Verfügung. Die Bohrlochmessungen wurden überwiegend von der Servicefirma Schlumberger durchgeführt. In Tabelle 3.2 findet sich eine Übersicht zu den Bohrlochmessverfahren und den gebräuchlichsten Abkürzungen für die verschiedenen Messungen. Beschreibung bohrlochgeophysikalischer Messgeräte und ihrer Funktionsweise finden sich in Serra (1984, 1986); Ellis (1987); Rider (1996); Luthi (2001). Die Bohrungen wurden so ausgewählt, dass für die stratigraphischen Einheiten eine möglichst gute Abdeckung im Untersuchungsgebiet gewährleistet ist. Insgesamt wurden 22 Bohrungen für eine detaillierte Bearbeitung selektiert (Tabelle 3.3). Abbildung 3.6 zeigt die räumliche Abdeckung der Bohrlochlokationen am Beispiel von jenen Bohrungen, die zur Darstellung von Querprofilen durch das Molassebecken und das nördlich angrenzende Schichtstufenland in Anhang D herangezogen werden.

Tabelle 3.2: Messgeräte mit ihren jeweiligen Logs und deren Abkürzungen (nach Anonym, 1989).

Sonde	Abkürzung	Log	Messgröße	
Natural - Gamma - Spectrometry - Tool	NGT	SGR	(API)	Summen-Gamma-Ray Kalium Thorium Uran
		POTA	(%)	
		THOR	(ppm)	
		URAN	(ppm)	
Litho - Density - Tool	LDT	RHOB	(g/cm)	Gesamtdichte (bulk density) Photoelektrischer Effekt Differenzdichte
		PEF	(barns/el)	
		DRHO	(g/cm)	
Compensated - Neutron - Tool	CNT	NPHI	(%), (p.u.)	Neutronenporosität
Sonic-	SDT / DSI	DTCO	(ms/m)	Laufzeit der Kompressionswelle Laufzeit der Scherwelle
		DTSM	(ms/m)	
Dual Latero Log- Inductionlog	DLL	LLD	(m)	elektr. Widerstand Laterolog Deep Laterolog Shallow Inductionlog Deep Inductionlog Medium
		LLS	(m)	
	IL	ILD	(m)	
		ILM	(m)	
Borehole- Geometry- Tool	BGT	CALI	(mm)	Bohrlochdurchmesser
		SP	(mV)	

Tabelle 3.3: Übersicht zu den bearbeiteten Bohrungen und der Verfügbarkeit von Bohrlochmessdaten;
x = Log vorhanden, (*x*) Log nicht über gesamte Teufe vorhanden.

Bohrung	Endteufe (m)	GR	Widerst.	Sonic	Density	Neutron	SP	K,Th,U	Cali
B-01	1879	(x)	x	x	x		x		x
B-02	840	x							x
B-03	3155	x	x	x	x	x	x		
B-04	2083	(x)		x	(x)		x		
B-05	1404		x	x			x		x
B-06	1442	x	x	x	x				x
B-07	2097	x	x	x	(x)	(x)	x		x
B-08	1501	x	x	x	x				
B-09	2613	x	x	x	x			(x)	
B-10	2634	x	x	x	x		x		x
B-11	2375	x	x	x	(x)		x		
B-13	2175	x	x	x	(x)		x	(x)	x
B-14	810	x							x
B-15	2074	x	x	x	x			(x)	
B-16	2545	x	x	x	x				x
B-17	1863	x	x	x	x		x		x
B-18	2304	x	x	x	x		x		x
B-19	1541	x	x	x	x		x	(x)	x
B-20	1615	x	x	x	x		x	(x)	
B-21	1457	x	x	x	x		x		
B-22	1100	x	x	x	x		x		
B-23	1840	(x)	x	x	x		x		x

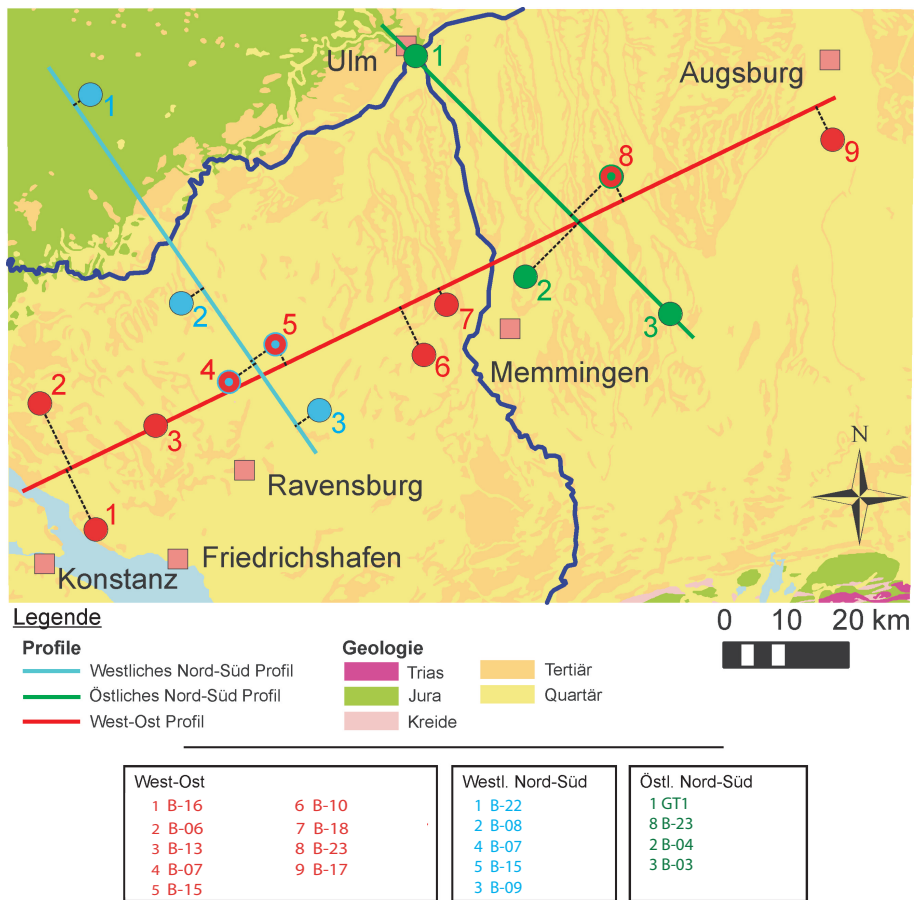


Abbildung 3.6: Übersicht zu ausgewählten Bohrungen, die für die Darstellung von Querprofilen durch das Molassebecken herangezogen wurden (vgl. Anhang D).

Kapitel 4

Ergebnisse des petrophysikalischen Untersuchungsprogramms

Im Rahmen des Forschungsprojektes wurden an insgesamt 270 Proben aus dem gesamten Arbeitsgebiet petrophysikalische Messungen durchgeführt. Es wurden folgende Gesteinseigenschaften bestimmt: Wärmeleitfähigkeit λ , Reindichte (Dichte der Gesteinsmatrix) ρ_m , Rohdichte (Dichte der Probe mit Porenraum) ρ_b , Porosität ϕ und Geschwindigkeit der Kompressionswelle V_p . In Ergänzung wurde an ausgewählten Proben die spezifische Wärmekapazität c_P bestimmt.

Ausgewählte Proben wurden chemisch und mineralogisch analysiert. Insgesamt wurden an 78 Proben mittels Röntgendiffraktometrie (RDA) der Mineralgehalt quantifiziert und mit Hilfe von Röntgenfluoreszenz-Analysen (RFA) die Anteile der Haupt- und Spurenelemente bestimmt. In Ergänzung dazu wurden Dünnschliffe angefertigt und analysiert. Die Ergebnisse sind tabellarisch im Anhang in den Tabellen A.3 bis A.5 gegeben. Die chemische und mineralogische Gesteinszusammensetzung ist wie im Abschnitt 2.2 aufgeführt eng mit den petrophysikalischen Eigenschaften verknüpft. Die Eigenschaften des Gesamtgesteins $P_{Gestein}$ resultieren aus den Volumenanteilen V_i der Gesteinskomponenten i und den physikalischen Eigenschaften der Einzelkomponenten $P_{Komp,i}$. Im einfachsten Fall wie beispielsweise der Gesamtdichte lässt sich $P_{Gestein}$ nach der Koppischen Regel als gewichtetes Mittel berechnen:

$$P_{Gestein} = \sum_{i=1}^n P_{Komp,i} V_i \quad (4.1)$$

Insofern liefern die erhobenen Daten im Hinblick auf die Interpretation thermischer und hydraulischer Kennwerte wertvolle ergänzende Informationen zu den Gesteinsarten und den stratigraphischen Einheiten mit ihren jeweils unterschiedlichen faziellen Ausprägungen.

Der erzeugte petrophysikalische Datensatz wurde einer Qualitätskontrolle unterzogen und mit den lithologischen und geologischen Informationen zu den Proben verknüpft. Dies ermöglicht eine statistische Analyse des erzeugten Datensatzes im Hinblick auf die vorhanden Gesteinstypen, ihre stratigraphische Zuordnung und ihre mineralogisch-chemische Zusammensetzung.

4.1 Übersicht zu den petrophysikalischen Eigenschaften der Hauptgesteinsarten

Abbildung 4.1a-d zeigt die Verteilung der Wärmeleitfähigkeiten der wassergesättigten Proben, der Reindichte und der Porosität für die drei Hauptgesteinstypen Kalkstein, Sandstein und Dolomit. Kalksteine sind durch eine geringe Variationsbreite der petrophysikalischen Eigenschaften gekennzeichnet, obgleich die Proben unterschiedlichen stratigraphischen Zeitaltern entstammen (Oberjura und Muschelkalk) und aus unterschiedlichen Bildungen hervorgegangen sind (Riffkalke, Plattenkalke, biogene Kalke). Alle betrachteten Kalksteine sind durch geringe Porositäten (<15 %) und durch einen eng begrenzten Wertebereich mit einem ausgeprägten Maximum in der gemessenen Wärmeleitfähigkeit und der Reindichte gekennzeichnet. Die Messdaten liefern somit repräsentative Kennzahlen für die Kalksteine des betrachteten Arbeitsgebietes. Dolomite sind von Kalksteinen deutlich durch ihre höheren Reindichten getrennt ($\rho_{calcit} = 2703 \text{ kg/m}^3$; $\rho_{dolomit} \approx 2770 \text{ kg/m}^3$, siehe Abbildung 4.1) und zeigen tendenziell höhere Wärmeleitfähigkeits- und Porositätswerte. Die größere Variationsbreite der Dolomitdaten und ihre Überlagerung mit den Wertebereichen für Kalksteine kann durch die Genese der Dolomite erklärt werden. In der Regel handelt es sich bei den untersuchten Dolomiten um sekundäre Bildungen, die aus Kalksteinen diagenetisch entstanden sind. Im Zuge der Dolomitisierung werden im Gestein Ca-Ionen durch Mg-Ionen substituiert (Abbildung 4.2), was eine Erhöhung der Reindichte zur Folge hat. Dieser chemische Umwandlungsprozess geht gleichzeitig mit einer Erhöhung der Porosität einher - im Gestein in der Regel durch deutlich sichtbare Lösungslöcher und Vesikel dokumentiert. Die Erhöhung der Reindichte, Porosität und der Wärmeleitfähigkeit gegenüber dem Ausgangsgestein hängt somit vom Grad der Dolomitisierung ab.

Die untersuchten Sandsteine zeigen im Vergleich zu den Karbonatgesteinen eine starke Streuung der Messdaten. Dies wird speziell für die gemessenen Wärmeleitfähigkeiten deutlich, die für wassergesättigten Proben einen Wertebereich von $2,3 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ - $5,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ umfassen. Im Gegensatz zu den Kalksteinen wird die Wärmeleitfähigkeit durch die stratigraphische Stellung und die Genese der Sandsteine stark beeinflusst. Als Beispiel sind hier Sandsteine aus dem Keuper (Schilfsandstein) und dem Buntsandstein (Kristallsandstein) genannt, die aufgrund ihres Ablagerungsmilieus und diagenetischer Prozesse eine sehr unterschiedliche mineralogische Zusammensetzung aufweisen. Beim Schilfsandstein handelt es sich um fluviatile Rinnenfüllungen, die heterogen aus Quarz, Feldspäten, Hellglimmern und Schieferaggregaten zusammengesetzt sind, während der Kristallsandstein ein gut sortierter, nahezu reiner, quarzitischer Sandstein ist. Da Quarz mit $\approx 6,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ eine hohe Wärmeleitfähigkeit besitzt, während Feldspäte geringere Werte von weniger als $2,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ aufweisen, ist die Wärmeleitfähigkeit der Sandsteine eng an ihr Quarz-Feldspat-Verhältnis geknüpft. Für die Schilfsandsteinproben (Quarz $\approx 57 \%$, Feldspat $\approx 35 \%$) wurde dementsprechend eine geringe Wärmeleitfähigkeit von nur durchschnittlich $2,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ gemessen, während der Kristallsandstein (Quarz $\approx 90 \%$, Feldspat $\approx 6 \%$) mit $= 4,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ die höchsten Messwerte der Sandsteine aufweist.

An den 50 Proben, an welchen die Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit gemessen wurde (siehe Abschnitt 4.2), wurde auch die Richtungsabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit bestimmt. Die meisten Proben weisen Anisotropiekoeffizienten (definiert als Quotient aus den Wärmeleitfähigkeiten parallel und senkrecht zur Schichtung) von 1 bzw. weniger als 1,1 auf. Nur bei einigen Sandsteinen beträgt er zwischen 1,2 und 1,3.

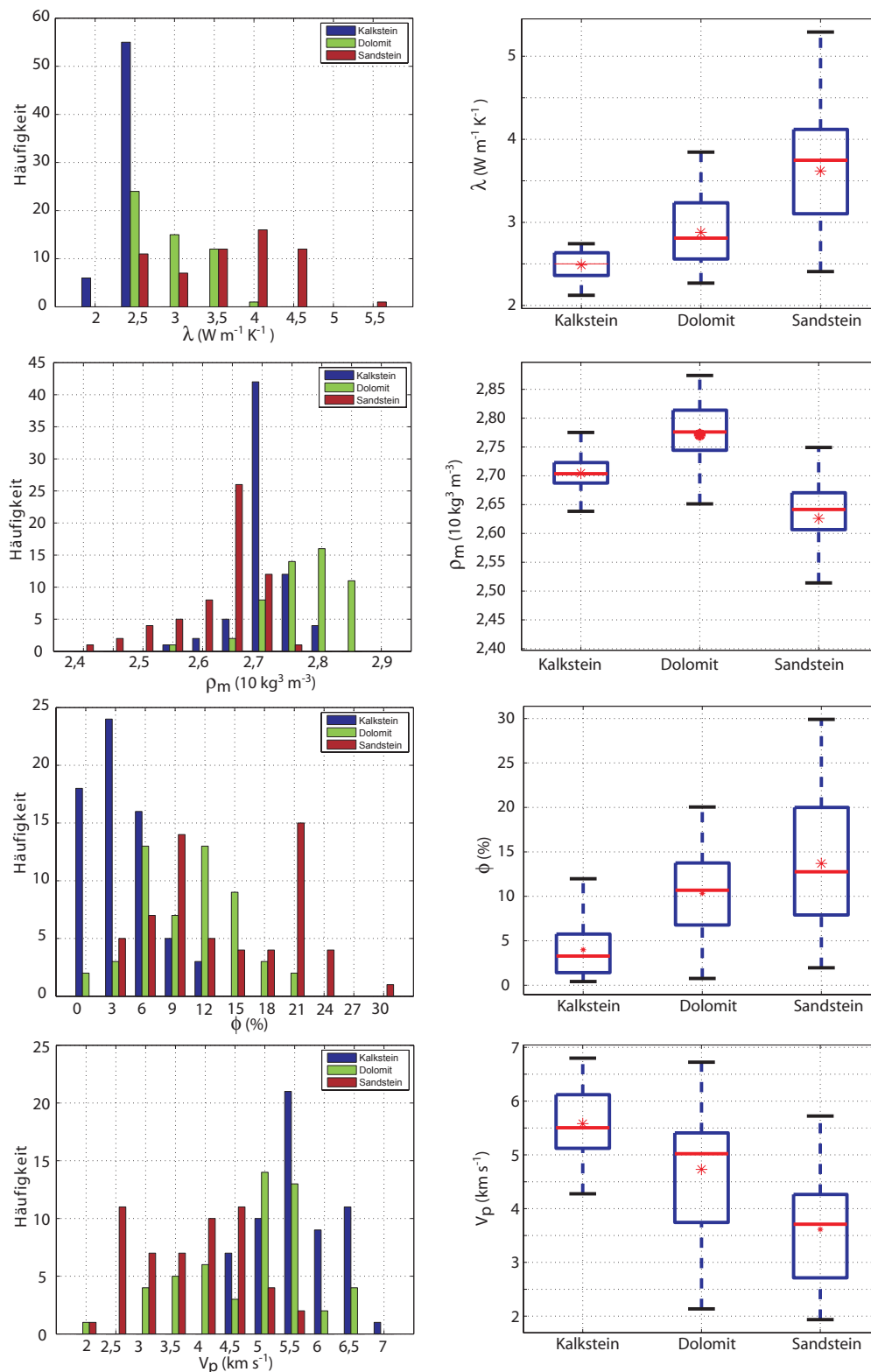


Abbildung 4.1: Häufigkeitsverteilung petrophysikalischer Eigenschaften für drei Hauptgesteinstypen und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen (roter Strich: Medianwert; roter Stern: Mittelwert; blaue Box: 25%- und 75%-Quartil; schwarze Begrenzungsstriche: 5%- und 95%-Perzentil; $N_{\text{Kalkstein}} = 95$; $N_{\text{Dolomit}} = 55$; $N_{\text{Sandstein}} = 81$): a) Wärmeleitfähigkeit λ gesättigter Proben, b) Reindichte ρ_m , c) Porosität ϕ und d) Kompressionswellengeschwindigkeit V_p .

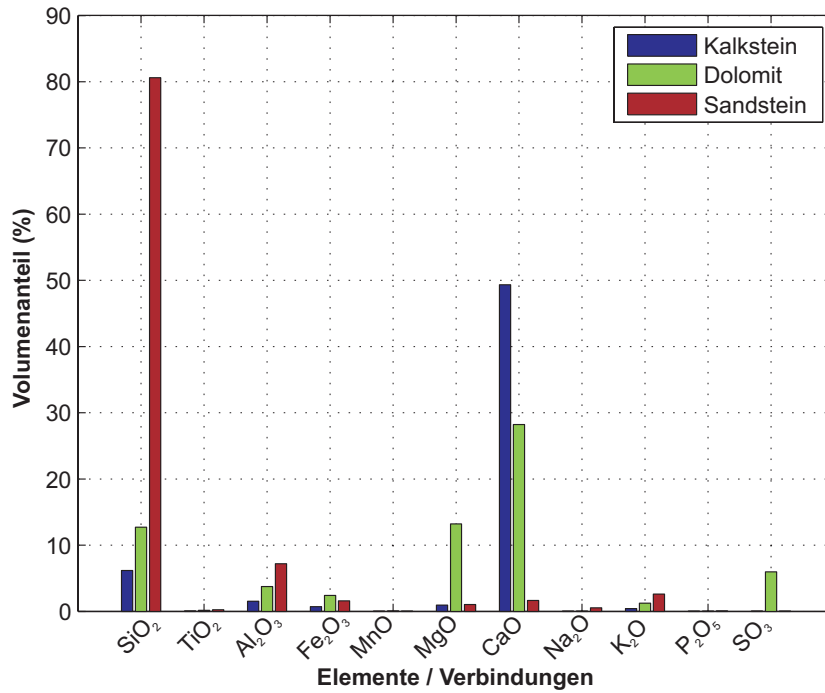


Abbildung 4.2: Chemische Zusammensetzung der Hauptgesteinstypen Sandstein, Kalkstein und Dolomit nach RFA-Analysen.

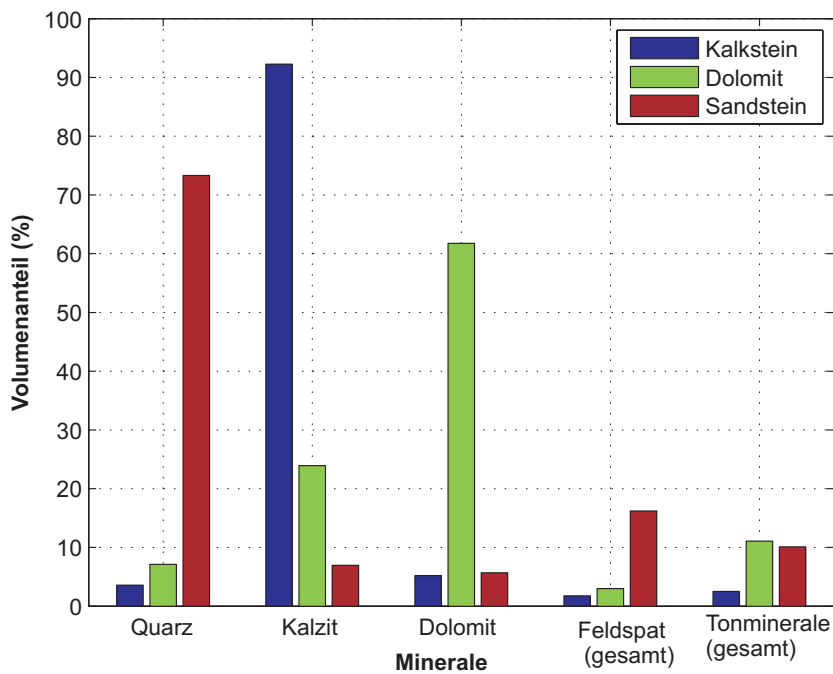


Abbildung 4.3: Mineralogische Zusammensetzung der Hauptgesteinstypen Sandstein, Kalkstein und Dolomit nach RDA-Analysen.

Tabelle 4.1: Wärmeleitfähigkeit λ der beteiligten Minerale zur Berechnung der verschiedenen Mittel.

Gestein/Mineral	λ (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Quelle
Quarz	6,5	Clauser (2006)
Dolomit	3,9	diese Studie
Kalkstein	2,8	diese Studie
Feldspat	2,0	Clauser (2006)
Tonminerale	1,7	Clauser (2006)
Anhydrit	5,4	Clauser (2006)

4.1.1 Vergleich zwischen den gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten

Um die einzelnen Messergebnisse an den Proben in ein allgemeingültigeres Gesteinsmodell zu überführen und sie somit generell für geologische Schichten zu verwenden, wird auf die in dieser Studie einmalige Datenbasis zurückgegriffen. Es existieren für rund 50 Proben sowohl Messungen der Wärmeleitfähigkeit als auch die detaillierte mineralogische Zusammensetzung aus der Röntgendiffraktometrie (RDA). Daher ist es möglich, die gemessenen Werte mit theoretischen Modellen zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeiten zu vergleichen. Hierfür wurden Literaturdaten zu den jeweiligen Mineralen verwendet (Clauser, 2006) und deren Volumenanteile den RDA-Messungen (siehe Abbildung 4.3) entnommen. Da jedoch die Daten für Kalzit und Dolomit in der Literatur an Einzelkristallen bestimmt wurden, liegen die Werte höher als jene, welche in dieser Studie an reinen Kalk- und Dolomitproben (Kalzit- bzw. Dolomitanteil ca. 99 %) bestimmt wurden. Aus diesem Grund wurde für diese Minerale auf letztere Werte zurückgegriffen. Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über die gewählten Wärmeleitfähigkeiten.

Abbildung 4.4 zeigt zunächst allgemeine Lage der aus den unterschiedlichen Mischungsgesetzen resultierenden Kurven. Während das arithmetische und harmonische Mittel die obere bzw. untere Grenze bilden, liegt das geometrische Mittel in der Mitte. Die verschiedenen Mittel werden nach folgenden Formeln berechnet:

$$\lambda_{arith}(\phi) = (1 - \phi)\lambda_m + \phi\lambda_{a,w} \quad (4.2)$$

$$\lambda_{geo}(\phi) = \lambda_m^{(1-\phi)} \cdot \lambda_{a,w}^\phi \quad (4.3)$$

$$\lambda_{har}(\phi) = 1 / \left\{ (1 - \phi) / \lambda_m + \phi / \lambda_{a,w} \right\} \quad (4.4)$$

Dabei ist λ_m die Wärmeleitfähigkeit der Matrix und λ_w diejenige des luftgefüllten (Index a) bzw. wassergesättigten (Index w) Porenraums.

Abbildung 4.5 zeigt den Vergleich für den Sandstein. Die theoretisch berechneten Werte basieren auf den Wärmeleitfähigkeiten von Quarz, Feldspat und Tonminerale aus Clauser (2006), sowie von Kalkstein und Dolomit aus dieser Studie.

Das geometrische Mittel, auch Lichtenecker Modell genannt (Lichtenecker und Rother, 1931), beschreibt die Messwerte am besten. Dies trifft in vielen Fällen zu (Clauser, 2006), daher wird dieses Modell am häufigsten verwendet (z.B. Pribnow und Sass, 1995; Schön, 1996). Abbildung 4.5 bestätigt dies. Da der Kontrast zwischen der Wärmeleitfähigkeit von Luft ($\lambda_a=0.026$ W m⁻¹K⁻¹) und Matrix

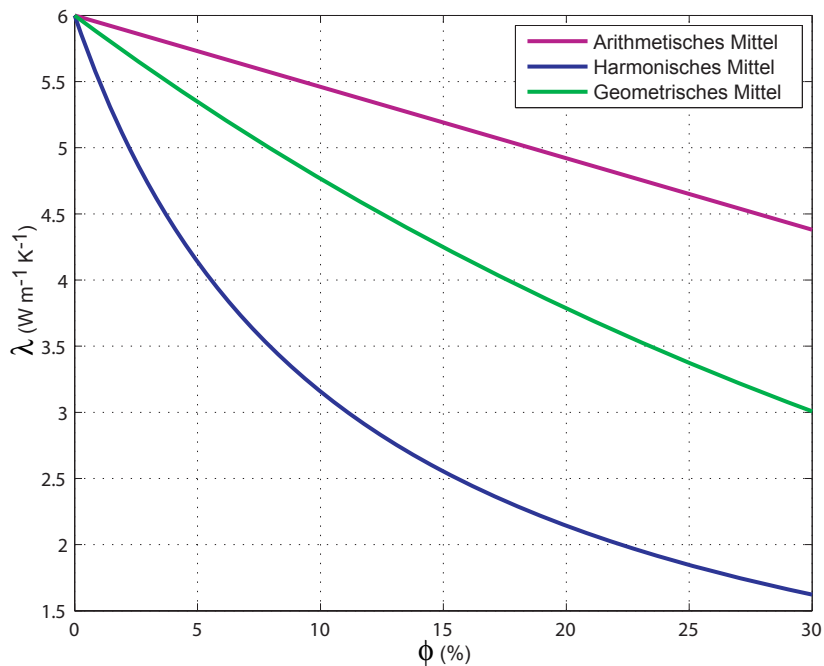


Abbildung 4.4: Änderung der Wärmeleitfähigkeit λ (gesättigt) mit der Porosität ϕ , berechnet nach dem arithmetischen, harmonischen und geometrischen Mittel. Das geometrische Mittel liegt zwischen den Extremen des arithmetischen und harmonischen Mittels. Für die Matrixwärmeleitfähigkeit wurde $6 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ angenommen.

größer als derjenige im gesättigten Zustand ($\lambda_w = 0.6 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$), weichen die verschiedenen Mittel im Fall der Trockenmessungen stärker voneinander ab. Zusätzlich ist zu erkennen, dass im Falle der Messungen an den gesättigten Proben die Messwerte systematisch unter dem geometrischen Mittel liegen, während bei den trockenen Proben die Daten um das geometrische Mittel streuen. Ursache ist vermutlich die auch bei Anwendung des Standardverfahrens nicht vollständige Sättigung bzw. der nicht bestimmbare Grad der Sättigung der Proben. Daher liegen in Abbildung 4.5a die Messwerte systematisch unter dem geometrischen Mittel.

Für die Dolomit- und Kalksteinproben (Abbildung 4.6 und Abbildung 4.7) ergibt sich ein ähnliches Bild. Auch hier zeigt sich eine bessere Anpassung bei den trockenen Proben. In Abbildung 4.7 sind zusätzlich die Werte eingetragen, welche aus den Literaturdaten über Kalkstein und Dolomit resultieren. Durch diese etwas größeren Werte (siehe oben), liegen die zugehörigen Mittel systematisch höher, und damit die Messwerte noch sogar teilweise unter dem so bestimmten harmonischen Mittel (im Fall der gesättigten Proben). Dies bestätigt die Wahl, für diese beiden Minerale auf die hier gemessenen Wärmeleitfähigkeiten zurückzugreifen.

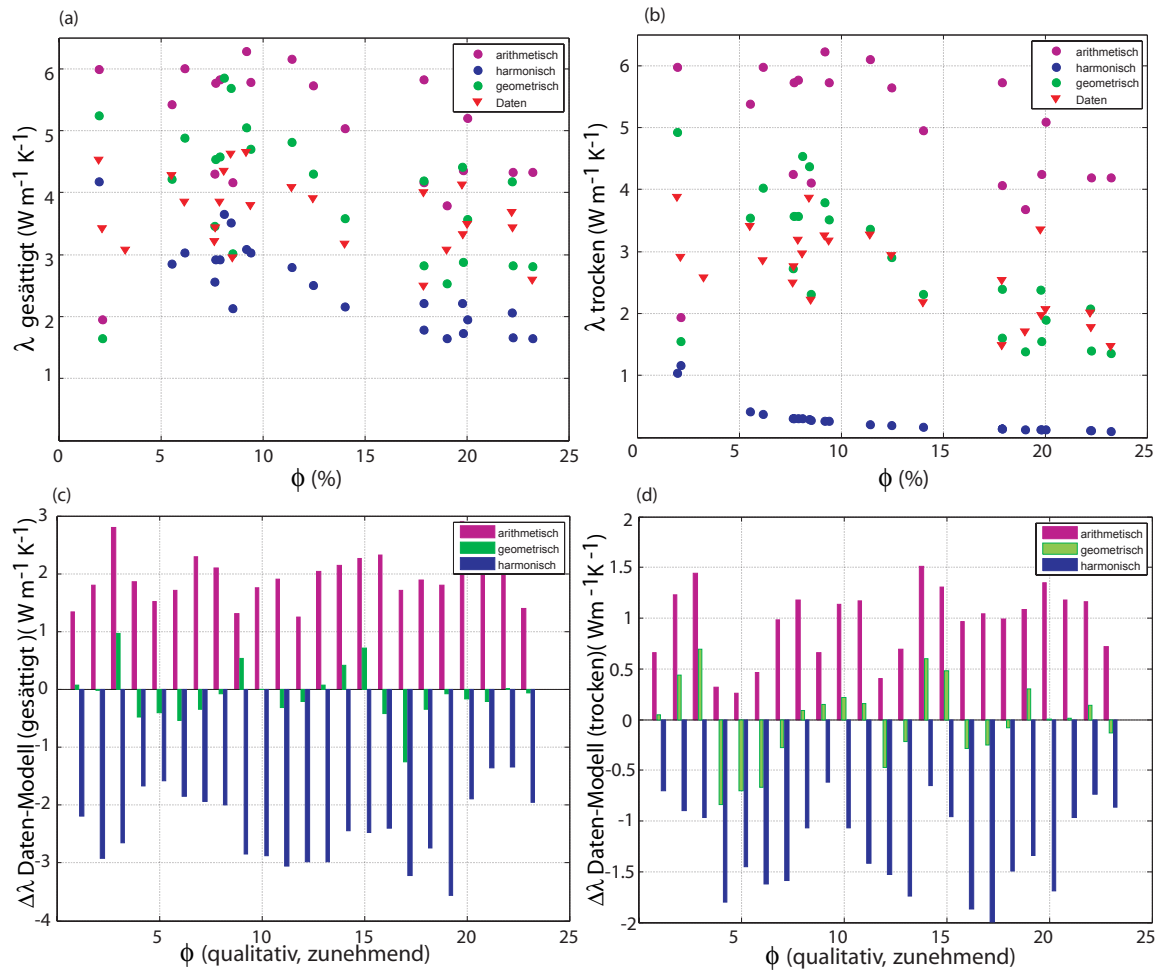


Abbildung 4.5: Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten λ in Abhängigkeit der Porosität ϕ (a) für die gesättigten Sandsteinproben und (b) für die trockenen Proben. Die zugehörigen Wärmeleitfähigkeiten der beteiligten Minerale sind in Tabelle 4.1 angegeben. In (c) und (d) sind die Abweichungen der gemessenen Werte von den jeweilig theoretische berechneten dargestellt.

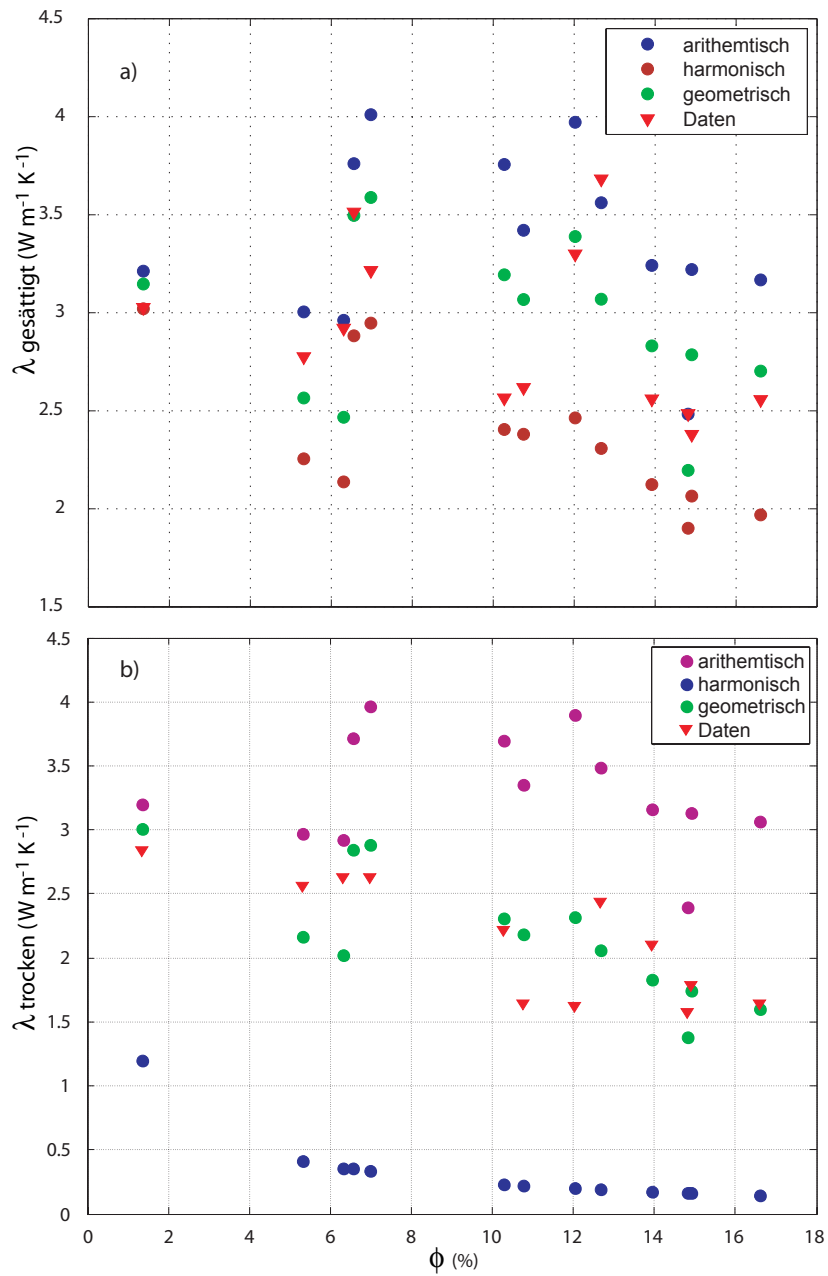


Abbildung 4.6: Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten λ in Abhängigkeit der Porosität ϕ (a) für die gesättigten Dolomitproben und (b) für die trockenen Proben.

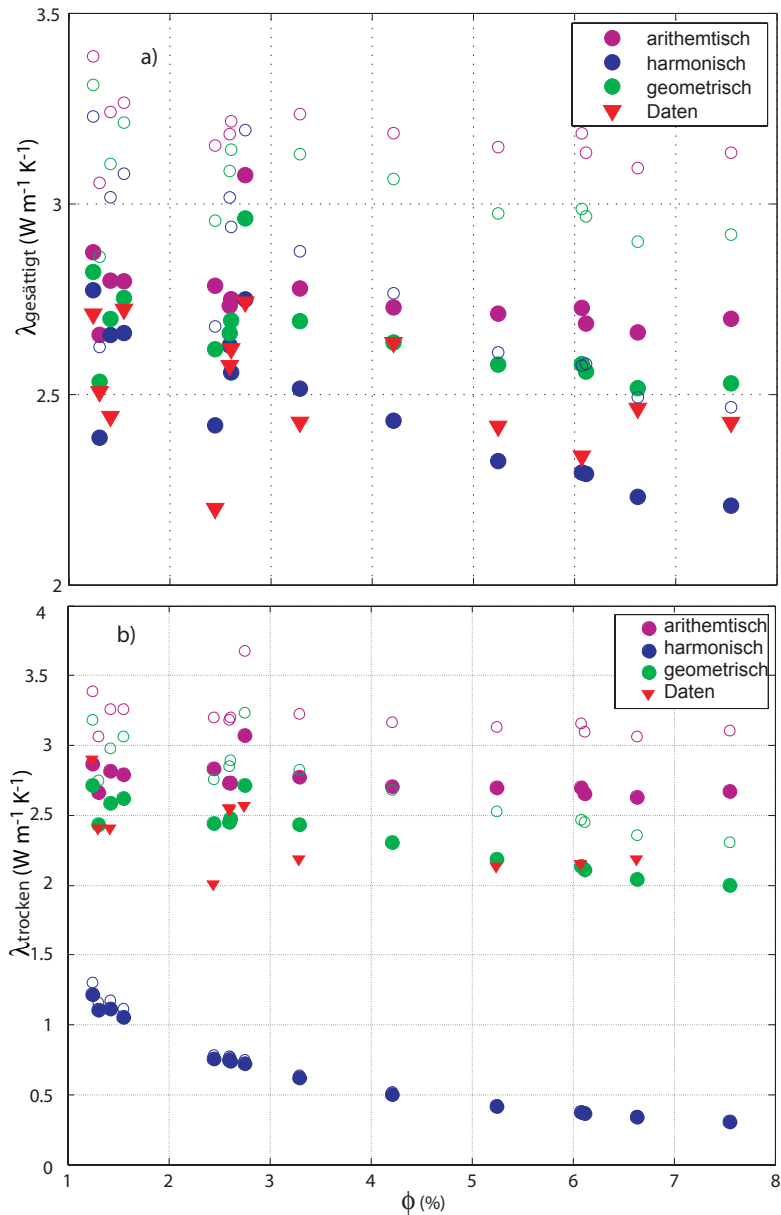


Abbildung 4.7: Vergleich der gemessenen und theoretisch berechneten Wärmeleitfähigkeiten λ in Abhängigkeit der Porosität ϕ (a) für die gesättigten Kalksteinproben und (b) für die trockenen Proben. Die zugehörigen Wärmeleitfähigkeiten der beteiligten Minerale sind in Tabelle 4.1 angegeben. Werden entgegengesetzt der Tabelle 4.1 alle Wärmeleitfähigkeiten der Minerale aus der Literatur entnommen (Clauser, 2006), resultieren die nicht gefüllten Kreise.

4.1.2 Modifikation des theoretischen Modells

Um der unterschiedlichen Porengeometrie Rechnung zu tragen, gibt Asaad (1955) eine Modifikation des Lichtenecker Modells (4.3) an:

$$\lambda(\phi) = \lambda_m^{(1-f\phi)} \cdot \lambda_a^{f\phi} \quad (4.5)$$

Hier ist f ein Korrelationsfaktor, welcher den Grad der Lithifikation des Sedimentgesteins beschreibt für die jeweilige Porenstruktur des Gesteins charakteristisch ist. Um diesen Faktor zu bestimmen, muss die Beziehung (4.5) gleichzeitig hinsichtlich der Unbekannten λ_m und f ausgewertet werden. Es wird die trocken gemessene Wärmeleitfähigkeit betrachtet. Zur Anpassung der beiden unbekannt Parameter an die gemessenen Werte λ_d und ϕ wird eine Monte Carlo-Simulation eingesetzt. Dabei werden zunächst sowohl der f -Faktor als auch die Matrixwärmeleitfähigkeit λ_m per Zufall aus einem vorgegebenen Intervall ausgewählt. Die aus dieser Parameterkombination p resultierende Wärmeleitfähigkeit wird nun mit den Daten d verglichen und die Abweichung S berechnet (Mosegaard und Tarantola, 1995):

$$S(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\lambda(p_i) - \lambda(d_i))^2, \quad (4.6)$$

wobei der Index über die Anzahl der Messungen läuft. Danach werden wiederum zufällig die unbekannt Parameter bestimmt und wieder die Abweichung S berechnet. Wenn die neue Abweichung S_{neu} kleiner als die vorherige Abweichung S_{alt} ist, dann werden die Parameter in die a posteriori-Verteilung mit aufgenommen. Wenn jedoch die neue Abweichung größer ist, wird die neue Parameterkombination mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ebenfalls akzeptiert. Insgesamt folgt daher für die Wahrscheinlichkeit, dass eine bestimmte Kombination angenommen wird zu

$$P_{akz} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } S(\mathbf{p}_{neu}) \leq S(\mathbf{p}_{alt}) \\ \exp\left(-\frac{S(\mathbf{p}_{neu}) - S(\mathbf{p}_{alt})}{s^2}\right) & \text{wenn } S(\mathbf{p}_{neu}) > S(\mathbf{p}_{alt}) \end{cases}, \quad (4.7)$$

wobei s die Standardabweichung in den Daten ist, entsprechend der Messgenauigkeit der TCS-Messapparatur von 5 %. (siehe Abschnitt 2.1.1). Abbildung 4.8 zeigt die Ergebnisse nach der Auswertung von einer Million Zufalls-Kombinationen. Im Gegensatz zu den Messungen an den Kalkstein- und Dolomitproben ist die Zusammenlegung aller Sandsteinproben nicht sinnvoll, da die Daten keine vernünftige Anpassung an Gleichung 4.5 erlauben. Daher wurden die Sandsteine in die beiden am häufigsten vorkommenden Stratigraphien, den Keuper und den Buntsandstein, aufgeteilt. Zusätzlich gibt Tabelle 4.2 die zugehörigen Ergebnisse (Mittel und Standardabweichung) für die jeweiligen Matrix-Wärmeleitfähigkeiten und f -Faktoren an. Für die Kalkstein- und Dolomitproben können die Ergebnisse direkt mit den gemessenen Werten aus Tabelle 4.1 verglichen werden, wobei sich innerhalb der Standardabweichungen eine gute Übereinstimmung zeigt.

In Abbildung 4.9 sind die Daten für alle 4 Gesteinsarten aus Tabelle 4.2 dargestellt. Die gestrichelten Linien zeigen zusätzlich das geometrische Modell. Die Wärmeleitfähigkeit der Matrix wurde für beide Fälle der Tabelle 4.2 entnommen. Wegen des niedrigen Wertes, ist der Einfluss des f -Faktors besonders deutlich beim Buntsandstein zu sehen.

Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse, dass das Lichtenecker-Modell eine schnelle und robuste Abschätzung der Wärmeleitfähigkeit liefert. Dies gilt insbesondere für die Kalk- und Dolomitgesteine, unabhängig von deren stratigraphischem Alter und Genese. Eine Modifizierung nach Asaad (1955) erlaubt eine Kalibrierung des theoretischen Modells an die Daten. Dies geschieht über ge-

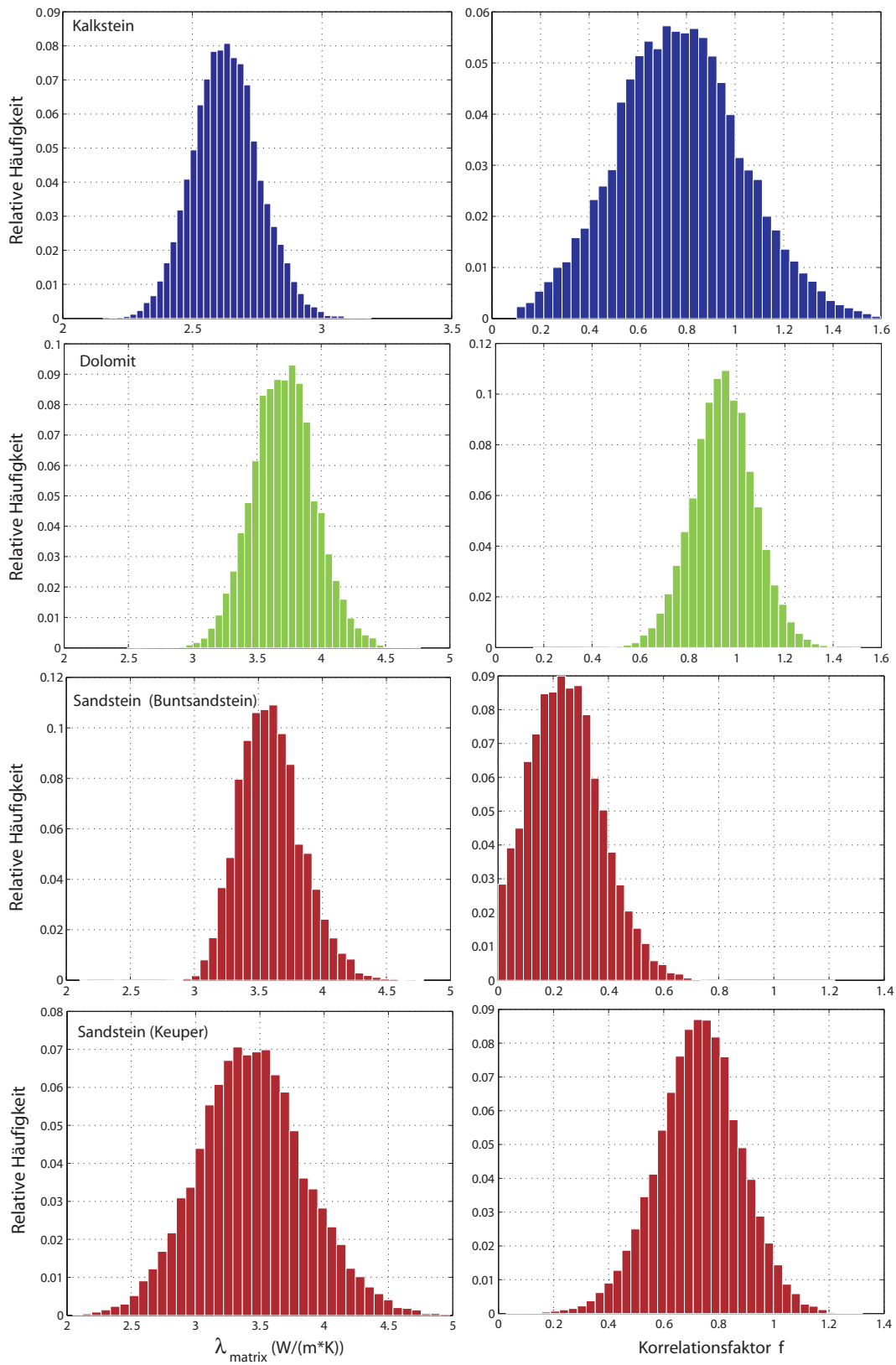


Abbildung 4.8: Ergebnisse von jeweils einer Million Monte Carlo-Simulationen zur Bestimmung der Matrix-Wärmeleitfähigkeit λ_{matrix} und des f -Faktors im Asaad-Modell für Kalkstein, Dolomit, Sandstein aus dem Keuper und Buntsandstein (Gleichung 4.5).

Tabelle 4.2: Ergebnisse der Monte Carlo-Untersuchung von Matrix-Wärmeleitfähigkeit und f -Faktor (Mittel und Standardabweichung) der Hauptgesteinsarten nach dem Asaad-Modell (Gleichung 4.5).

Gestein	Matrix-Wärmeleitfähigkeit ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)	f -Faktor
Kalkstein	$2,63 \pm 0,13$	$0,77 \pm 0,26$
Dolomit	$3,71 \pm 0,25$	$0,95 \pm 0,13$
Buntsandstein	$3,6 \pm 0,25$	$0,25 \pm 0,13$
Sandstein (Keuper)	$3,44 \pm 0,42$	$0,73 \pm 0,15$

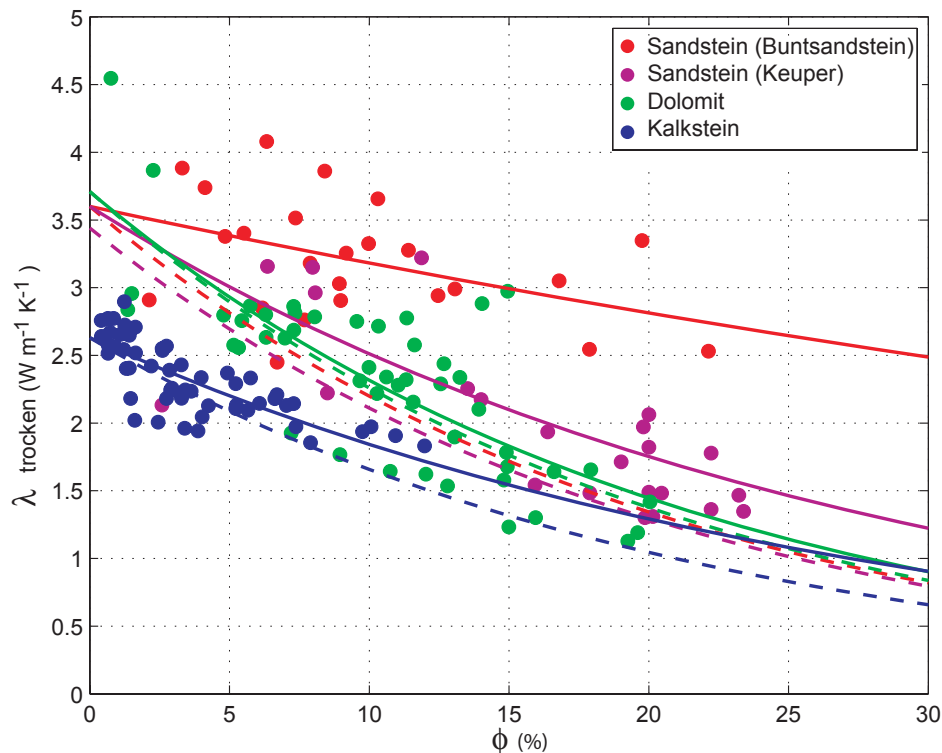


Abbildung 4.9: Wärmeleitfähigkeiten λ für vier Hauptgesteinsarten nach dem Asaad-Modell (Gleichung 4.5) und dem geometrischen Mittel (gestrichelte Linien).

steinsspezifische Parameter, welche die Beziehung zwischen Matrix, porenspezifischer Struktur und Wärmeleitfähigkeit der Hauptgesteinsarten beschreibt. Die gute Korrelation von Wärmeleitfähigkeit und Porosität der Kalksteine im allgemeinen zeigt die Abbildung 4.10. Hier werden die Ergebnisse dieser Studie mit Daten der Moscow State Geological Prospecting University (MSGPU, siehe Abschnitt 4.2) verglichen.

4.1.3 Spezifische Wärmekapazität

In der instationären Wärmetransportgleichung (ohne Wärmeproduktion)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \quad (4.8)$$

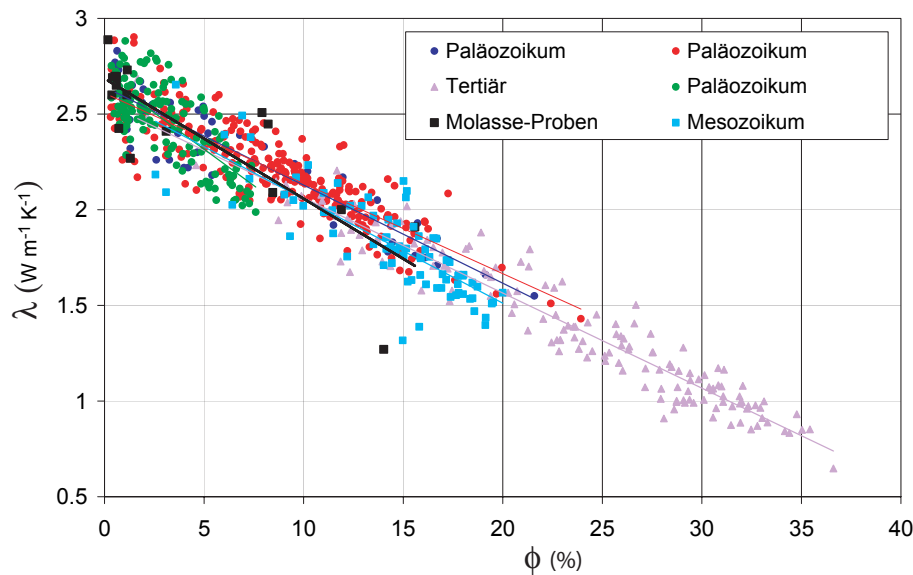


Abbildung 4.10: Korrelation zwischen Wärmeleitfähigkeit (λ) und Porosität (ϕ) der Kalksteine aus dieser Studie (schwarze Quadrate) im Vergleich mit Daten von der Moscow State Geological Prospecting University. Die Linien stellen die Regressionsgeraden der Punktgruppe mit der jeweils gleiche Farbe dar.

bestimmt die Temperaturleitfähigkeit κ das thermische Verhalten des Untergrundes. Sie ist wiederum eine Funktion der Wärmeleitfähigkeit λ , Dichte ρ_m und der spezifischen Wärmekapazität c_P :

$$\kappa = \frac{\lambda}{\rho_m c_P}. \quad (4.9)$$

Für die vollständige Parametrisierung des Wärmetransports mit zeitlich veränderlichen Randbedingungen ist daher die Kenntnis der Wärmekapazität erforderlich. Da die Messprozedur zeitaufwändiger ist als jene zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit (siehe Abschnitt 2.1.5), wurde sie nur an 52 ausgewählten Proben bestimmt. Die Ergebnisse für die einzelnen Proben sind im Anhang (Tabelle A.6) gegeben. Abbildung 4.11 zeigt als Beispiel das Resultat der c_P -Messung an einer Sandstein-Probe. Nach einer Anlaufzeit beginnt die stabile Messung bei etwa 40 °C (grüner Bereich). Im Gegensatz zur Wärmeleitfähigkeit (siehe Abschnitt 4.2) steigt die Wärmekapazität mit der Temperatur an (Gleichung 2.5). Dieses konträre Verhalten führt zu einer signifikanten Temperaturabhängigkeit der Temperaturleitfähigkeit (Gleichung 4.9).

Meist wird das Produkt $\rho_m c_P$ betrachtet, die so genannte volumetrische Wärmekapazität oder thermische Kapazität. Abbildung 4.12 zeigt deren Verteilung für die drei Hauptgesteinstypen Kalkstein, Sandstein und Dolomit. Deutlich zu erkennen sind die höheren Werte bei 100 °C. Nach Beck (1988) variiert die volumetrische Wärmekapazität für die meisten Gesteine innerhalb $\pm 20\%$ von $2.3 \times 10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ bei Zimmertemperatur. Dieser Bereich ist in der Abbildung durch die grauen gestrichelten Linien angedeutet. Die hier gewonnenen Daten bestätigen diese Aussage.

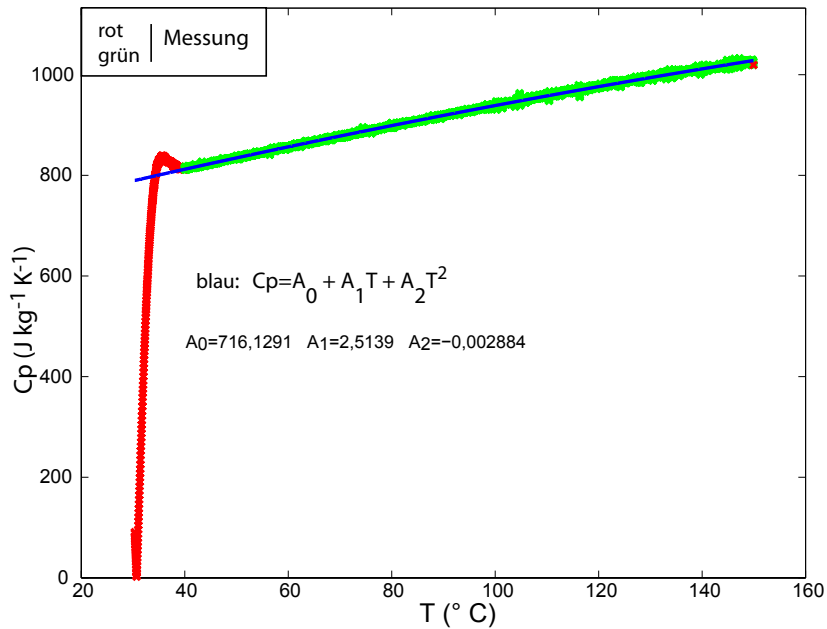


Abbildung 4.11: Beispiel einer c_P -Messung. Nur der grün markierte Bereich wird zur Bestimmung der Koeffizienten A_0 - A_2 herangezogen. Die blaue Linie ist eine Anpassung durch ein Polynom 2. Ordnung.

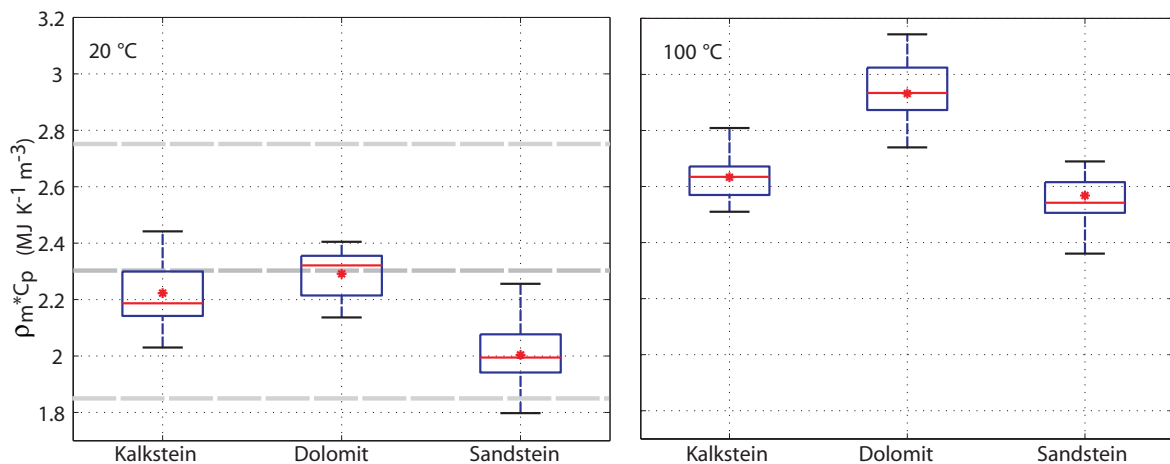


Abbildung 4.12: Häufigkeitsverteilung der volumetrischen Wärmekapazität ($\rho_m \cdot c_p$) bei 20 °C (links) und bei 100 °C (rechts) für die drei Hauptgesteinstypen und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen (roter Strich: Medianwert; roter Stern: Mittelwert; blaue Box: 25%- und 75%-Quartil; schwarze Begrenzungsstriche: 5%- und 95 %-Perzentil).

4.2 Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeitsmessungen

4.2.1 Qualitätskontrolle

Zur Qualitätskontrolle wurden die druck- und temperaturabhängigen Ergebnisse bei Laborbedingungen erzielten mit den Ergebnissen des Wärmeleitfähigkeitsscanners verglichen. Der Vergleich wurde unter Einbeziehung der Porositätsmessungen für die trockenen und gesättigten Proben vor und nach der Druckbelastung durchgeführt.

Für die trockenen Proben wurden keine systematischen Veränderungen in den Richtungskomponenten der Wärmeleitfähigkeit sowie der Porosität vor und nach der Druck-/Temperaturmessung beobachtet (siehe Abbildung 4.13). Hieraus ist zu schließen, dass es bei der Druck- und Temperaturbelastung nicht zu irreversiblen Veränderungen der Gesteinsprobe gekommen ist. Diese Erkenntnis ist wertvoll, da Proben in vorherigen Experimenten, in denen Druck und Temperatur nicht simultan erhöht wurden, oft zerstört wurden, sodass die Messergebnisse unbrauchbar wurden. Für die wassergesättigten Proben hingegen zeigt sich ein systematischer Abfall in den Richtungskomponenten der Wärmeleitfähigkeit um 5 % - 6 % (Abbildung 4.14). Da ein solcher Effekt bei den trockenen Proben nicht beobachtet wurde, wird angenommen, dass es erst bei dem zweiten Sättigungsprozess nach der Druckbelastung zu irreversiblen Veränderungen der Proben gekommen ist.

Betrachtet man die Porositätsmessungen, die vor- und nach der Druckbelastung durchgeführt wurden, ergeben sich für unterschiedliche Porositätsbereiche systematische Unterschiede (Abbildung 4.15). Bis zu einer Gesteinsporosität von bis zu 10 % sind diese Unterschiede kaum nennenswert. Im Bereich zwischen 10 % und 25 % wurden nach der Druckbelastung geringere (3 %) Porositäten gemessen, während bei Proben mit Porositäten von mehr als 25 % deutlich höhere Werte auftreten. Auch hier ist anzunehmen, dass die Veränderungen in der Gesteinsstruktur auf den zweiten Sättigungsprozess zurückzuführen sind.

4.2.2 Ergebnisse der Druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen

Die Messergebnisse der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessung sowie der Messungen unter Laborbedingungen sind in tabellarischer Form aufgeführt und dem Anhang (Tabellen C.2–C.4) zu entnehmen.

Entsprechend ihrem Mineralbestand wurden die untersuchten 50 Gesteinsproben in vier Gruppen eingeteilt: Karbonate, Sulfate (Anhydrit und Gips), Sandsteine Typ I und Sandsteine Typ 2. Für die Sandsteine wurde eine Untergliederung im Hinblick auf das Quarz-Feldspat-Verhältnis vorgenommen. Bei Typ I-Sandsteinen handelt es sich um feldspatreiche Sandsteine bis Arkosen, in denen Quarz und Feldspat zu etwa gleichen Anteilen auftritt (Quarz: 40-65 %; Feldspat: 30-55 %). Diese Sandsteine enthalten zudem Anteile von Kalzit, Glimmern und Tonmineralen. Bei den Typ II-Sandsteinen handelt es sich um quarzbetonte Sandsteine mit relativ geringen Feldspatgehalten (Quarz: 80-90 %; Feldspat: 10-20 %). Auch hier treten Kalzit und Glimmer in einigen Proben auf. Stratigraphisch entstammt der Großteil der Typ-II-Sandsteine dem Buntsandstein, während es sich bei den Typ-I-Sandsteinen vorwiegend um Proben aus dem Keuper (Schilfsandstein, Stubensandstein) und Unterjura (Angulatussandstein) handelt.

Die Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen sind in der Abbildung 4.16 dargestellt. Die größten Variationen zeigen die Sandsteine, was auf ihr breites Porositäts-

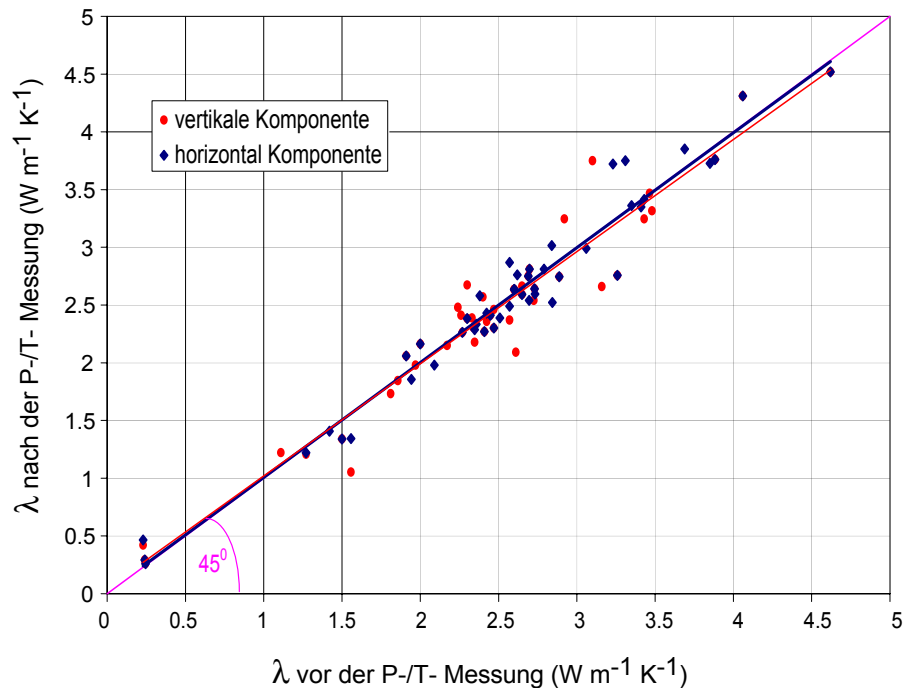


Abbildung 4.13: Vergleich der horizontalen (blaue Punkte) und vertikalen (rote Punkte) Komponente der Wärmeleitfähigkeit λ trockener Proben vor und nach der Druck-/Temperatur-(P-/T-)Messung.

spektrum und auf ihre stark variierende Matrixzusammensetzung zurückzuführen ist. Mit Ausnahme von zwei Proben wurden für die Karbonate deutlich geringere Variationen ermittelt. Unter Laborbedingungen schwanken die Messwerte zwischen $2,25 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ und $3,25 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$; bei maximal aufgebrachtem Umschließungsdruck von 180 MPa und Temperaturen von $180 \text{ }^\circ\text{C}$ variieren die Messwerte zwischen $2 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ und $2,75 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$. Diese geringe Variabilität ist auf die einheitliche Matrixleitfähigkeit der Karbonate zurückzuführen. Zudem ist im Vergleich zu den Sandsteinen die Porosität mit maximal 15,6 % deutlich kleiner. In Sandsteinen wurden Porositäten von bis zu 25 % gemessen. Wie erwartet zeigen alle Proben eine Verringerung der Wärmeleitfähigkeit mit der Zunahme von Temperatur und Druck. Zur besseren Verdeutlichung dieses Effektes sind in den Abbildungen 4.17 – 4.20 die Wärmeleitfähigkeitsmessungen normiert auf Normalbedingungen dargestellt. Die stärkste Verringerung der Wärmeleitfähigkeit wird für die quarzbetonten Sandsteine Typ II beobachtet, bei denen eine Erniedrigung der Wärmeleitfähigkeit um fast 50 % auftreten kann. Die feldspatreichen Sandsteine Typ I zeigen nur eine Reduzierung um maximal 25 % und liegen damit in einem ähnlichen Bereich wie die Karbonate.

Insgesamt können die Ergebnisse der experimentellen Daten wie folgt zusammengefasst werden.

Die Wärmeleitfähigkeit der Gesteine sinkt bei maximal eingestellten Druck- und Temperaturbedingungen um 9 % bis 46 % im Vergleich zu dem Messungen unter Normalbedingungen. Die stärksten Druck-/Temperatureffekte werden für die quarzreichen Sandsteine Typ II beobachtet. Mit Ausnahme weniger Proben besteht für die untersuchten Gesteine ein linearer Zusammenhang zwischen der Wärmeleitfähigkeit und der Druck- und Temperaturerhöhung, was mit

$$\lambda(\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}) = k \cdot P(\text{MPa}) + b \quad (4.10)$$

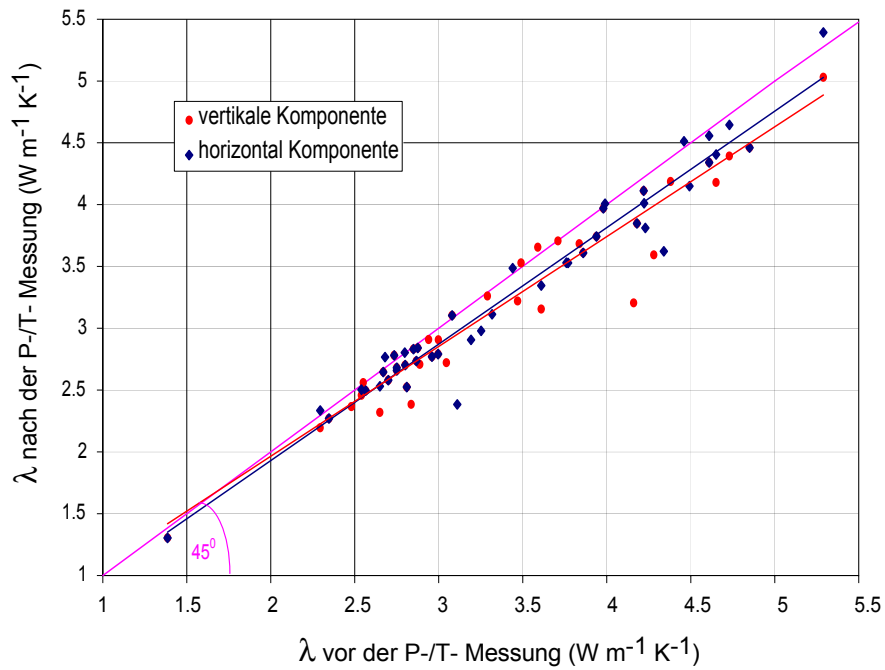


Abbildung 4.14: Vergleich der horizontalen (blaue Punkte) und vertikalen (rote Punkte) Komponente der Wärmeleitfähigkeit λ wassergesättigter Proben vor und nach der Druck-/Temperatur-(P-/T-)Messung.

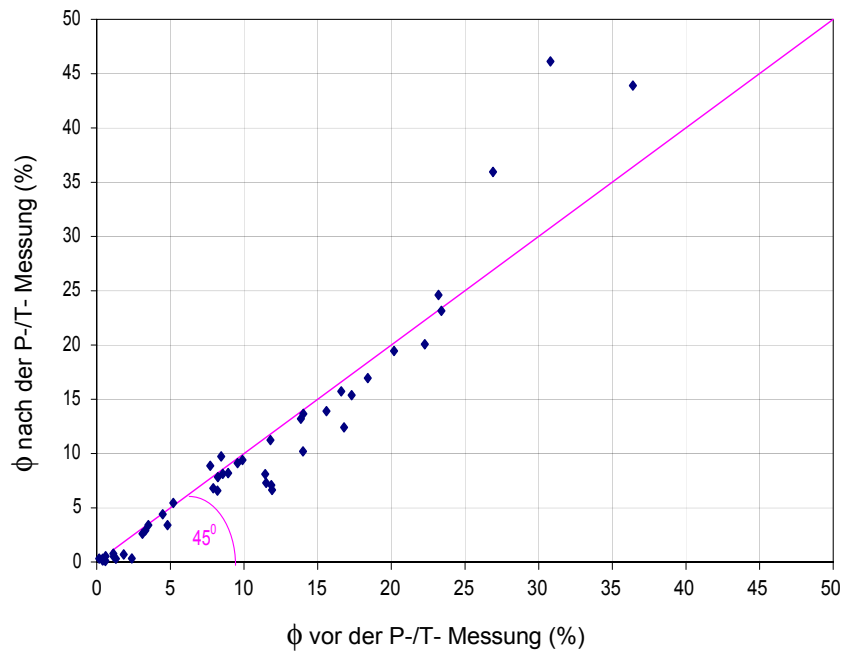


Abbildung 4.15: Vergleich der Porosität ϕ vor und nach der Druck-/Temperatur-(P-/T-)Messung.

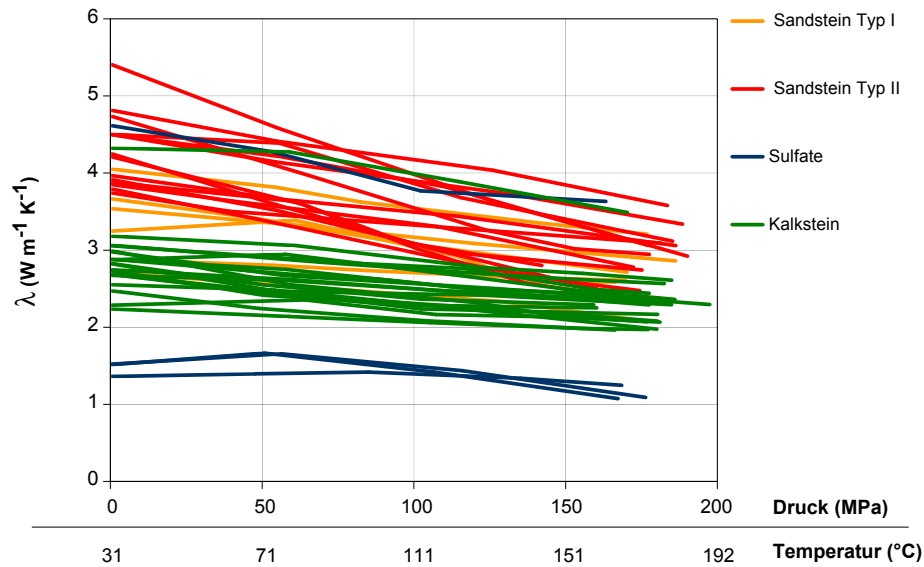


Abbildung 4.16: Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen (λ) für alle Proben.

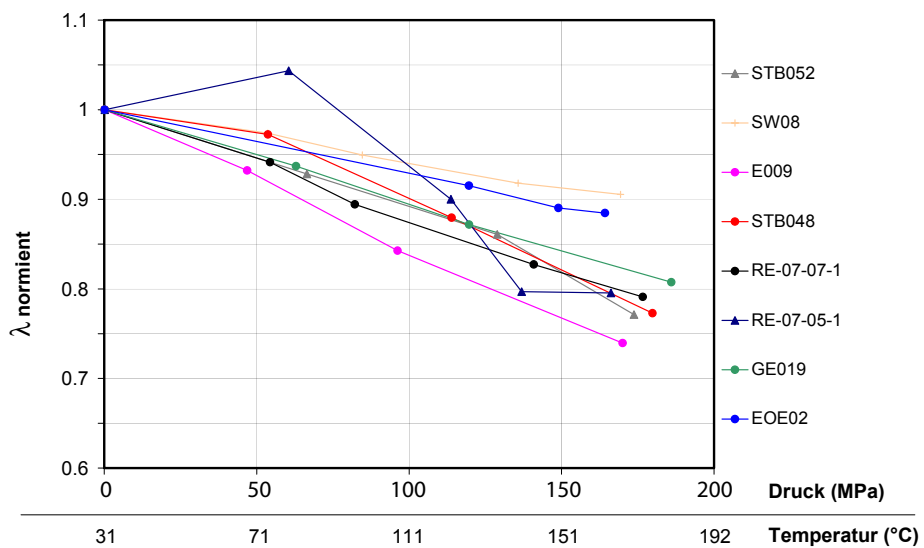


Abbildung 4.17: Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für feldspatreiche Typ-I-Sandsteine, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen (Probenkürzel siehe Tabelle A.1). $\lambda_{normiert}$: Verhältnis der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit zur Wärmeleitfähigkeit unter Normalbedingungen.

beschrieben werden kann. Eine Übersicht zu den Koeffizienten k und b findet sich in der Tabelle C.3 im Anhang. Für alle betrachteten Gesteine ist der arithmetische Mittelwert für $k = -0,0045$; für $b = 3,35$. Die Steigungen der linearen Regressionen korrelieren mit dem Wert der Wärmeleitfähigkeit, der unter Normalbedingungen gemessen wurde. Der Zusammenhang zwischen der Steigung und dem Startwert der jeweiligen Messreihe ist in der Abbildung 4.21. dargestellt. Für den Zusammenhang

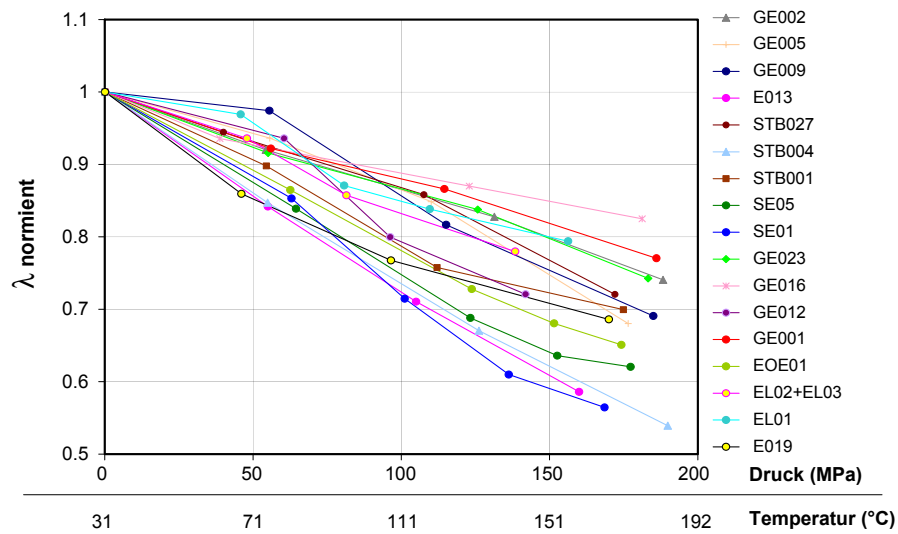


Abbildung 4.18: Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für quarzbetonte Typ-II-Sandsteine, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen (Probenkürzel siehe Tabelle A.1). $\lambda_{normiert}$: Verhältnis der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit zur Wärmeleitfähigkeit unter Normalbedingungen.

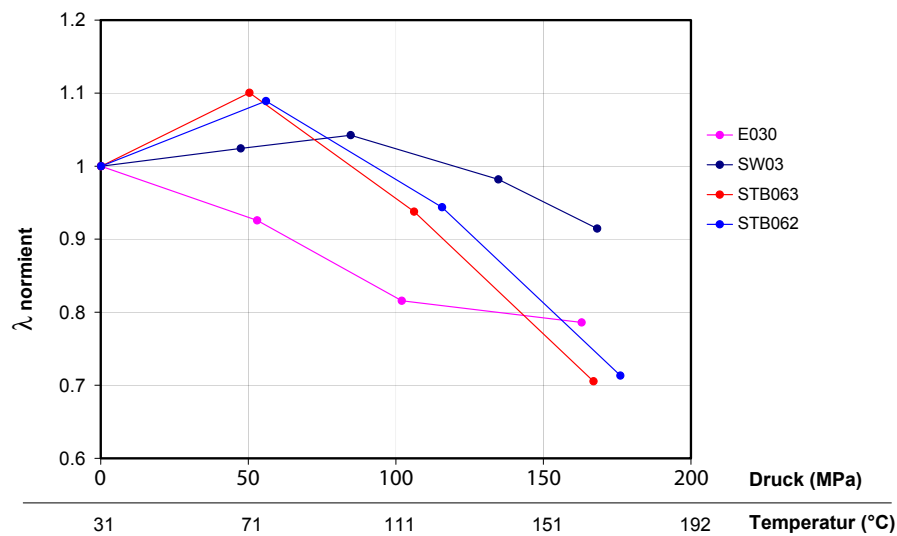


Abbildung 4.19: Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für Sulfate, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen (Probenkürzel siehe Tabelle A.1). $\lambda_{normiert}$: Verhältnis der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit zur Wärmeleitfähigkeit unter Normalbedingungen.

von k mit λ_n wurden Korrelationskoeffizienten von $R^2=0,66$ für die Sandsteine, bzw. $R^2=0,81$ für die Karbonate ermittelt. Der kleinere Korrelationskoeffizient für die Sandsteine im Vergleich zu den Karbonaten ergibt sich aus ihrer Heterogenität im Hinblick auf ihre Mineralzusammensetzung und Porosität. Die derart gewonnenen Zusammenhänge ermöglichen somit unter Berücksichtigung der

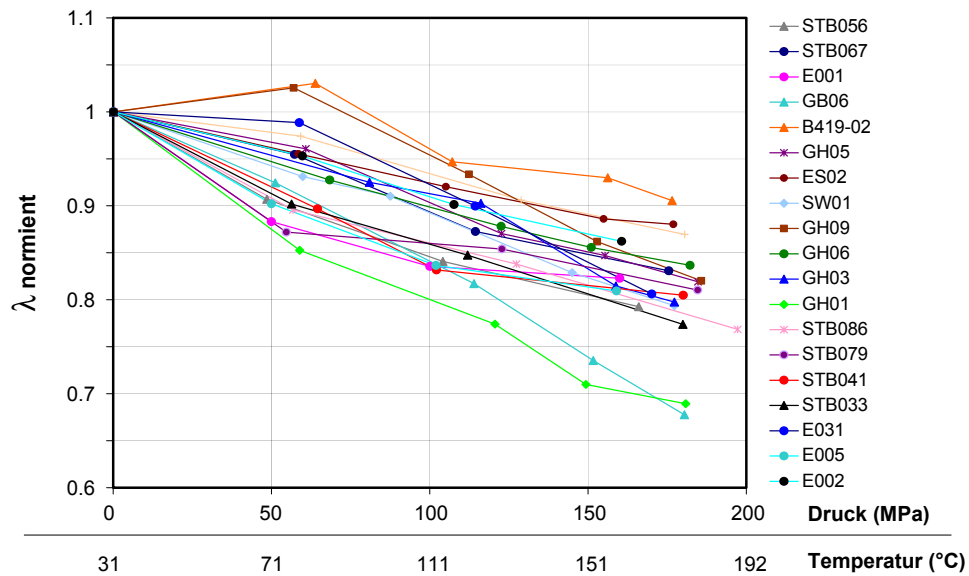


Abbildung 4.20: Ergebnisse der druck- und temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeitsmessungen für Karbonate, normiert auf die Messung bei Normalbedingungen (Probenkürzel siehe Tabelle A.1). $\lambda_{normiert}$: Verhältnis der druck-/temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit zur Wärmeleitfähigkeit unter Normalbedingungen.

Unsicherheit der Korrelation eine Vorhersage der Wärmeleitfähigkeit für die untersuchten Gesteinstypen bei erhöhten Druck- und Temperaturbedingungen.

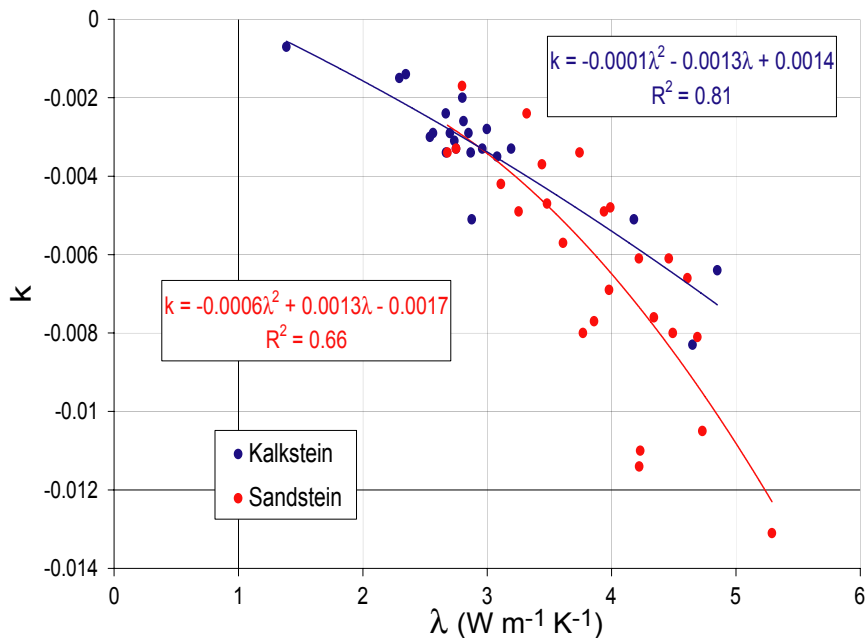


Abbildung 4.21: Korrelation von k (Gleichung 4.10) mit der Wärmeleitfähigkeit λ unter Normalbedingungen.

4.2.3 Übertragung auf die Hauptgesteinsarten

Bestimmt man die Koeffizienten k und b aus Gleichung 4.10 für die im vorherigen Abschnitt eingeführten Hauptgesteinsarten, so ergeben sich die in Tabelle 4.3 dargestellten Werte. Abbildung 4.22 zeigt die resultierenden Abhängigkeiten von Druck- und Temperatur, in Vergleich mit der entsprechenden Tiefe. Hierfür wurde ein lithostatischer Druckgradient bei einer Dichte von 2700 kg m^{-3} , sowie ein thermischer Gradient von 25 K km^{-1} angenommen.

Tabelle 4.3: Koeffizienten k und b der Gleichung 4.10 für die Hauptgesteinsarten.

Gestein	k	b
Kalkstein	-0,0031	2,7367
Dolomit	-0,0034	3,2258
Buntsandstein	-0,0044	3,1426
Sandstein (Keuper)	-0,008	4,3355

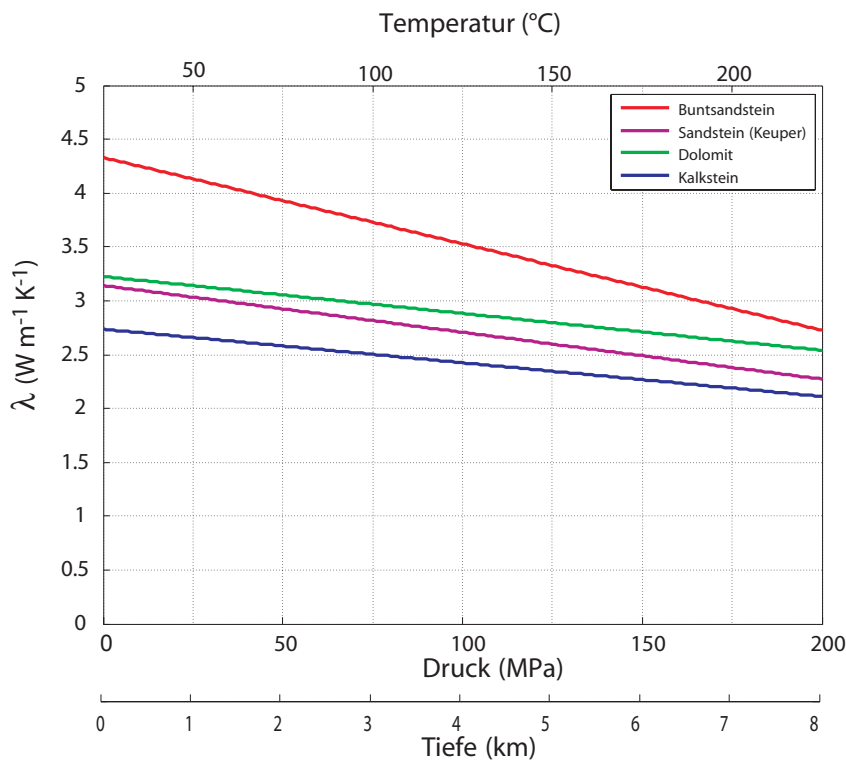


Abbildung 4.22: Druck- und Temperaturabhängigkeit nach Gleichung 4.10 für die Hauptgesteinsarten.

4.3 Druckabhängige Permeabilitätsmessungen

Abbildung 4.23 zeigt die Permeabilität ausgewählter Proben in Abhängigkeit vom Manteldruck. Die Farbe der Kurven kennzeichnet unterschiedliche Lithologien, welche sich erkennbar auf den Verlauf der Kurven auswirken. Generell ist zu erwarten, dass Entlastungsrisse, die bei der Hebung aus großer Tiefe in der Probe entstanden sind, wieder geschlossen werden und bei hohem Manteldruck der intrinsische Zustand der Permeabilität erfasst wird, wie er auch in situ anzutreffen wäre.

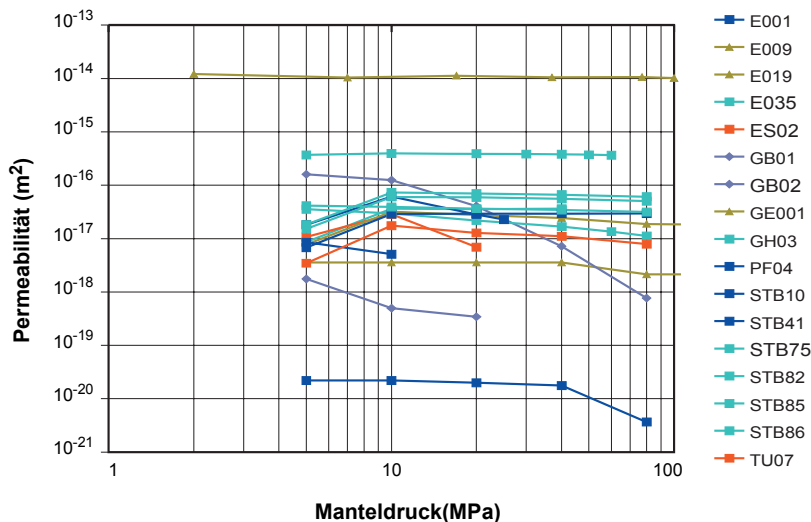


Abbildung 4.23: Druckabhängiger Verlauf der Permeabilität ausgewählter Proben unterschiedlicher Lithologien (blau: Kalkstein; hellblau: Dolomit; blaugrau: Tonstein; oliv: Sandstein; rot: Kalkmergel).

Der Kurvenverlauf oberflächennaher Proben ist in dieser Hinsicht kritisch zu betrachten. Da diese Proben nie größerem Belastungsdruck ausgesetzt waren und entsprechend weniger diagenetisch verfestigt sind, kann ihr Gefüge unter Belastung nach innen kollabieren, was die druckabhängige Permeabilitätsmessung verfälscht. Zudem ist aufgrund der unterschiedlichen diagenetischen Verfestigung die Übertragbarkeit der Permeabilität oberflächennaher Proben auf tiefe Bereiche der Erdkruste fragwürdig, da sich das Gefüge von vornherein unterscheidet. Die Auswahl der druckabhängig gemessenen Proben konzentrierte sich daher bevorzugt auf Bohrlochproben. Darüber hinaus wurden stratigraphische Einheiten mit einer gewissen Mindestporosität ausgewählt, in denen sich die Permeabilität überhaupt in einem geothermisch relevanten Bereich bewegt.

Durch die zur Verfügung stehenden Messeinrichtungen bedingt (vgl. Abschnitt 2.1.6) konnten von den insgesamt 73 ausgewählten Proben nur 17 mit der Gradientenmethode druckabhängig vermessen werden, so dass einschränkend nur die relativ schwach durchlässigen Gesteine erfasst werden konnten. Die Ergebnisse in Abbildung 4.23 zeigen lediglich bei der Tonprobe GB01 eine Abnahme der Durchlässigkeit, wie sie durch die Kompaktion des Gesteins zu erwarten wäre. Die meisten Proben reagieren nur wenig oder gar nicht auf die Erhöhung des Manteldrucks, der bei einem angenommenen lithostatischen Druckgradienten von 25 MPa km^{-1} einer Überlagerungstiefe von bis zu 4 km entspricht. Zusammengefasst führten die Untersuchungen zur druckabhängigen Permeabilitätsänderung hier zu keinem verwertbaren Ergebnis.

Kapitel 5

Ableitung der thermischen und hydraulischen Gesteinseigenschaften

In Abschnitt 4.1 wurden die petrophysikalischen Eigenschaften der Hauptgesteinstypen aus den Labordaten dargestellt. Die Laborergebnisse wurden mit den Informationen zur mineralogischen Zusammensetzung der Gesteine verknüpft und in allgemeinere Gesteinsmodelle überführt. Im nachfolgenden Kapitel werden mit Hilfe dieser Gesteinsmodelle thermische und hydraulische Gesteinseigenschaften der stratigraphischen Einheiten aus bohrlochgeophysikalischen Messungen abgeleitet. Hier kam folgende Vorgehensweise zum Einsatz:

Für jede stratigraphische Einheit wurden die Laborergebnisse analysiert. Mit Hilfe von Streudiagrammen wurden die gemessenen Parameter zueinander in Beziehung gesetzt und Korrelationen zwischen ihnen identifiziert. Aufbauend auf diesen Analysen wurden Mehrstoffmodelle entwickelt. Die Eingangsparmeter für die Mehrstoffmodelle (Matrix-Wärmeleitfähigkeit, Ultraschallgeschwindigkeit) wurden aus den Laborergebnissen der jeweiligen stratigraphischen Einheiten ermittelt. Anhand der Mehrstoffmodelle wurden aus den Logging-Daten die volumetrischen Gesteinskomponenten abgeleitet und mittels der festgelegten Eingangsparmeter die effektive Wärmeleitfähigkeit berechnet. Als Referenz- und Kalibrierbohrung wurde die Bohrung B-06 gewählt (vgl. Abbildung 3.6). Die hier ermittelten Ergebnisse wurden auf die anderen Bohrungen übertragen. Bei diesem Schritt wurde berücksichtigt, dass die verschiedenen stratigraphischen Einheiten in unterschiedlichen Tiefenniveaus zwischen 0 m und 3000 m Tiefe angetroffen wurden. Die porositätssensitiven Logs (insbesondere Sonic-Log) wurden hierzu auf ihre Tiefenabhängigkeit hin untersucht und die Startwerte entsprechend angepasst. Als Ergebnis wurden für alle untersuchten Bohrungen kontinuierliche Wärmeleitfähigkeitsprofile erstellt, aus denen Durchschnittswerte der Wärmeleitfähigkeit für die jeweiligen stratigraphischen Einheiten berechnet werden konnten. Es ist zu bemerken, dass die Güte der berechneten Parameter von der Verteilung, Zugänglichkeit und Qualität von Bohrlochdaten und Kernmaterial aus den jeweiligen stratigraphischen Einheiten abhing. Auf dieser Basis war es möglich, die Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit von Faziesveränderungen und Versenkungstiefen zu untersuchen.

Die nachfolgenden Unterkapitel geben die Übersichten zu den im Arbeitsgebiet angetroffenen stratigraphischen Einheiten. Sie beginnen einleitend jeweils mit einem Überblick zur Geologie und Lithologie, gefolgt von der Ableitung geothermisch relevanter Gesteinseigenschaften und deren faziesbedingten und tiefenabhängigen Veränderungen.

5.1 Tertiär

5.1.1 Geologische Übersicht des Tertiärs

In der alpidischen Vortiefe des Molassebeckens gelangten die terrestrischen Abtragungsprodukte der Alpen in Form von klastischen Sedimentserien (Molasse) zur Ablagerung (Abbildung 5.4). Das Molassebecken als Ablagerungsraum ist im Querschnitt eine Mulde mit einem langen und flach nach Süden geneigten Nordschenkel und einem kurzen und steilen Südschenkel (vgl. Abbildung 3.2). Während der Ablagerungszeit wurde die Subsidenz der Mulde permanent ausgeglichen, so dass der Ablagerungsraum entweder eine schwach geneigte fluviatile Aufschüttungsebene mit Überschwemmungsseen oder in den marinen Zwischenperioden ein sehr flaches Meer darstellte. Die marinen Schichtkomplexe sind insgesamt gleichmäßiger verteilt, wobei die Mächtigkeitsverteilung der einzelnen Molasseglieder durch den asymmetrischen Muldenbau sehr ungleichmäßig ist. Die Subsidenz erreichte am Alpenrand ihr Maximum mit einer Mächtigkeit der tertiären Molasseschichten von 5000 m. In diesem Bereich am Ausgang der damaligen Alpentäler lagen die Mündungen großer Flüsse, die in Form großer Aufschüttungsfächer aus mächtigen Konglomeratserien ihre Sedimentfracht hinterlassen haben, was möglicherweise wiederum die Subsidenz durch die Auflast auf den Untergrund noch verstärkt hat.

Je nach paläogeographischer Lage werden die grobklastischen Sedimente am Alpenrand als subalpin und die unter dem sedimentären Einfluss des Jurameers stehende Molasse am nördlichen Beckenrand als subjurassisch bezeichnet. Die feinkörnigeren Ablagerungen im Zentrum werden Beckenmolasse genannt.

Die ältesten Sedimente des Molassebeckens im Tertiär stellen die *Bohnerze* dar. Es handelt sich hierbei um bis zu mehrere zehner Meter mächtige Brauneisenkonkretionen, entstanden im Grundwasserschwankungsbereich von flachen Mulden oder Talauen, die die Hochflächen der oberjurassischen Karstgebiete durchzogen. Sie sind in der Regel in den kalkarmen Rückstandszonen anzutreffen, die bei der Kalkverwitterung zurückbleiben.

Die *Untere Meeresmolasse* ist lediglich in der subalpinen Molassezone am Alpenrand über Tage aufgeschlossen. Ansonsten ist sie nur aus Bohrprofilen bekannt und ihre Verbreitung und Schichtenfolge im tieferen Molassebecken entsprechend lückenhaft (Abbildung 5.1). Den ältesten Abschnitt bilden hier Tonmergelschichten. In der Vorlandmolasse im Bereich Schwabens sind das älteste Schichtglied als Fischschiefer bezeichnete feinschichtige siltige und sandige Mergel, deren größte bekannte Mächtigkeit 15 m in einer Bohrung bei Legau erreicht wird. Nordwärts gehen die Fischschiefer bei Memmingen in mergelige Kalke über. Bei den darüber folgenden Bausteinschichten handelt es sich im Wesentlichen um Sandsteine mit Detritus aus Quarz, Feldspat und Dolomit und tonig-kalkigem Bindemittel. Der Grad der Diagenese und der damit einhergehenden Porenzementation nimmt mit der Überlagerungstiefe gegen den Alpenrand hin zu. An der Basis der Bausandsteine sowie in einzelnen Lagen treten auch tonige Gesteine (Sand- und Tonmergel) auf. Die größte bekannte Mächtigkeit der Bausandsteine ist mit 170 m aus der Bohrung Legau bekannt. Ihre Verbreitung reicht bis über die Linie Lindau-Memmingen hinaus (Abbildung 5.1). Den Abschluss der Unteren Meeresmolasse stellen die Unteren Cyrenenschichten als brackisches Bindeglied zur auflagernden Unteren Süßwassermolasse dar. Sie bestehen aus feinschichtigen Tonmergeln mit Pechkohleflözchen und Sandlagen. Ihre Verbreitung beschränkt sich auf einen über 20 km breiten Korridor, der südöstlich des Bodensees bis nach Memmingen und darüber hinaus reicht (Abbildung 5.1), wo maximale Mächtigkeiten von 25 m erreicht werden. Nach Süden und Westen hin findet ein fazieller Übergang in die Untere Süßwassermolasse statt.

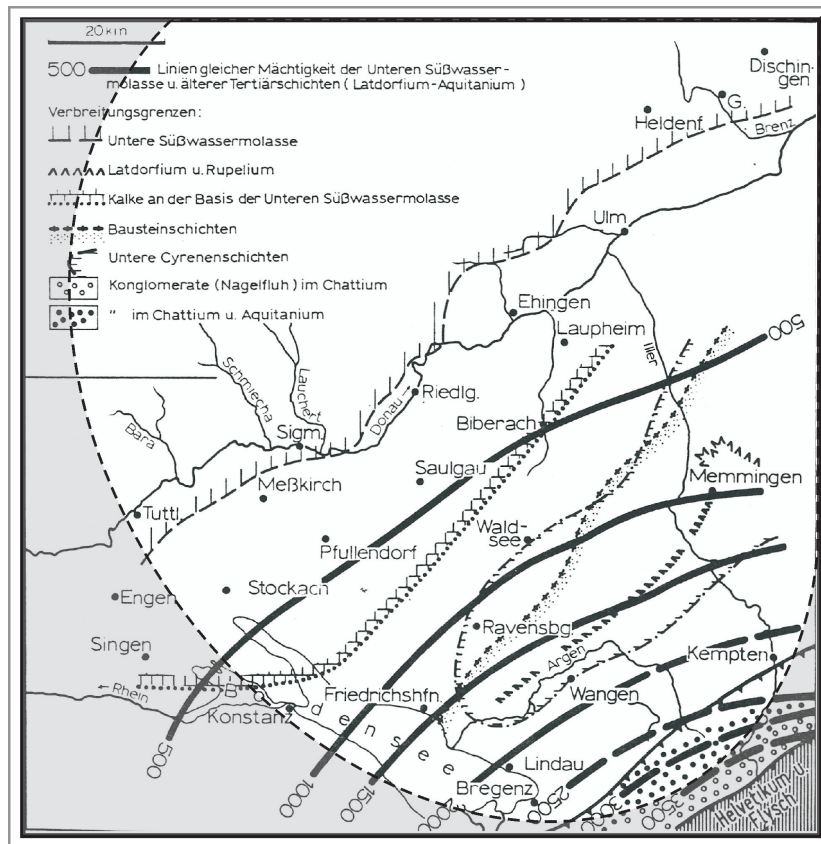


Abbildung 5.1: Verbreitung der Unteren Meeresmolasse sowie Mächtigkeit und Verbreitung der Unteren Süßwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands und des Arbeitsgebietes (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

Die *Untere Süßwassermolasse* stellt mit Mächtigkeiten von über 2500 m das mächtigste Schichtglied des Molassebeckens dar. Ihre Verbreitung reicht über die der älteren Molassegesteine nach Norden hinaus (Abbildung 5.1). Der liegende Anteil wird nach der Reichweite seiner Verbreitung als Ehringer Schichten bezeichnet. Der bis auf den Jura im Norden übergreifende hangende Anteil wird Ulmer Schichten genannt. Im Becken selbst besteht die Untere Süßwassermolasse aus einer extrem wechselnden Folge von bunten Mergeln und Sandsteinen, die eine Parallelisierung von Bohrprofilen nahezu unmöglich macht. Im Beckenzentrum ist eine über 100 m mächtige Mergelserie mit knotigen Konkretionen aus Gips und Anhydrit anzutreffen, die sich zum nördlichen Beckenrand hin mit Süßwasserkalken verzahnen. Über der gipsführenden Mergelserie folgt meist ein mehrere zehner Meter mächtiges Sandsteinpaket und darüber eine lebhaftere Wechsellagerung aus Sandstein, siltigen Mergeln und Tonen.

Die *Obere Meeresmolasse* ist eine Folge aus glaukonitischen Sanden und Mergeln. Der Wechsel der Korngrößenverteilung ermöglicht die Unterscheidung von zwei Sedimentationszyklen, die jeweils mit grobkörnigen Sanden an der Basis beginnen. Die Mächtigkeitsverteilung zeigt gegenüber den fluviatilerrestrischen Molasseserien eine gleichmäßigeres Bild. Die Obere Meeresmolasse reicht über das Verbreitungsgebiet der Unteren Süßwassermolasse hinaus bis zur Schwäbischen Alb, wo sie allerdings aufgrund der Verwitterung nur rudimentär erhalten geblieben ist. Sie erreicht am Alpenrand Mächtigkeiten von über 350 m (Abbildung 5.2).

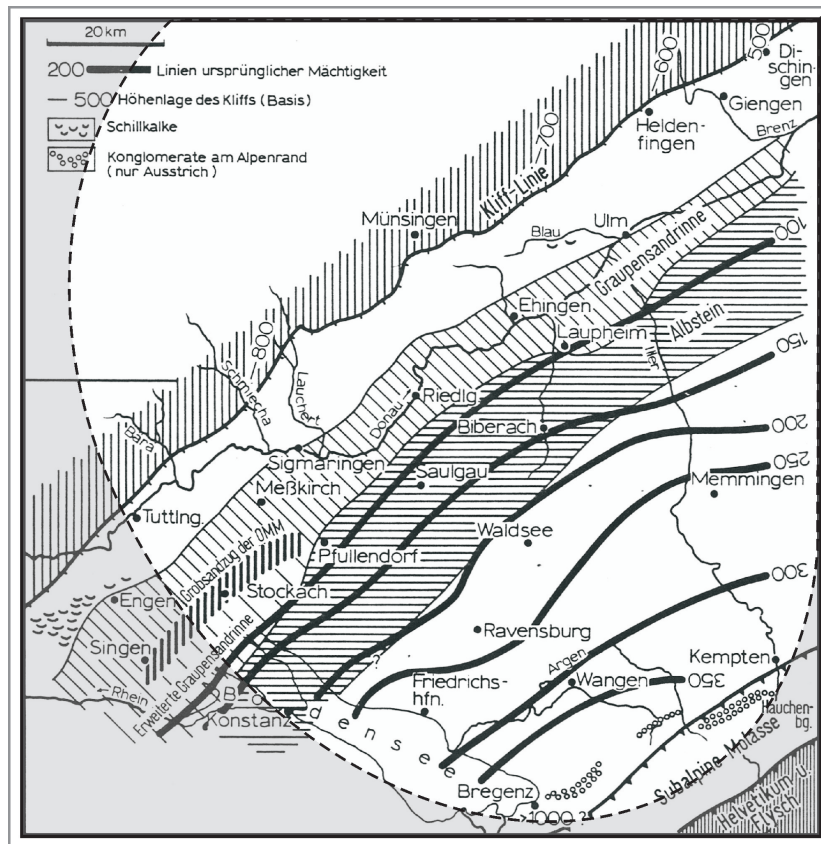


Abbildung 5.2: Mächtigkeit und Verbreitung der Oberen Meeresschicht sowie Verbreitung der Brackwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands und des Arbeitsgebietes (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

Während des Rückzugs des Meeres der Oberen Meeresschicht gelangte die Sedimentfolge der *Brackwassermolasse* zur Ablagerung. Sie ist nur innerhalb der Graupensandrinne ausgebildet, einem etwa 10 km breiten Streifen, der entlang der Donau bis Sigmaringen und darüber hinaus nach Südwesten bis Singen führt (Abbildung 5.2). In der späten Sedimentationsphase der Brackwassermolasse stellte sie die Verbindung zwischen dem Meer auf heutigem Schweizer Gebiet und dem brackischen Meer im bayrischen Molassebecken dar. In der Graupensandrinne wurden zunächst die älteren Molassesedimente teilweise bis in die oberjurassischen Schichten hinab erodiert, bevor die fluviatilen Grimmelfinger Schichten und die brackischen Kirchberger Schichten abgelagert wurden. Die älteren Grimmelfinger Schichten bestehen überwiegend aus kalkfreien Sanden und Feinkiesen. Die aufliegenden Kirchberger Schichten setzen sich über weite Strecken aus Tonmergeln und glimmerreichen Sanden zusammen. Die Mächtigkeit der Rinnenfüllung erreicht insgesamt bis 40 m.

Nach der Regression des Meeres kehrten mit der *Oberen Süßwassermolasse* limnisch-fluviatile Ablagerungsbedingungen zurück. Im Beckenzentrum wurden Sandsteine, Sandmergel und überwiegend siltige Mergel und Tone abgelagert, deren Abfolge räumlich sehr variiert. Die ursprüngliche Mächtigkeit ist nicht mehr rekonstruierbar, so dass in Abbildung 5.3 nur die heute noch erhaltenen Mächtigkeiten dargestellt sind. Sie erreichen am Südostrand des Molassebeckens einen Maximalbetrag von bis zu 1000 m. Nach Nordwesten hin endet die Verbreitung am Kliff der Oberen Süßwassermolasse (Abbildung 5.3).

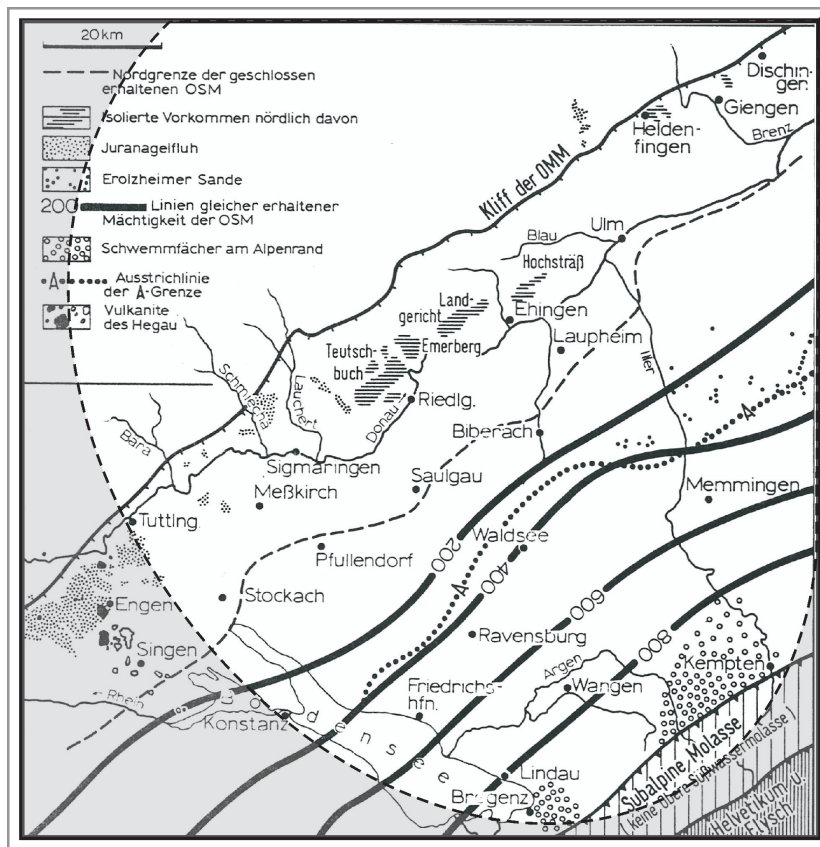


Abbildung 5.3: Mächtigkeit und Verbreitung der heute erhaltenen Oberen Süßwassermolasse im Tertiär Südwestdeutschlands und des Arbeitsgebietes (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

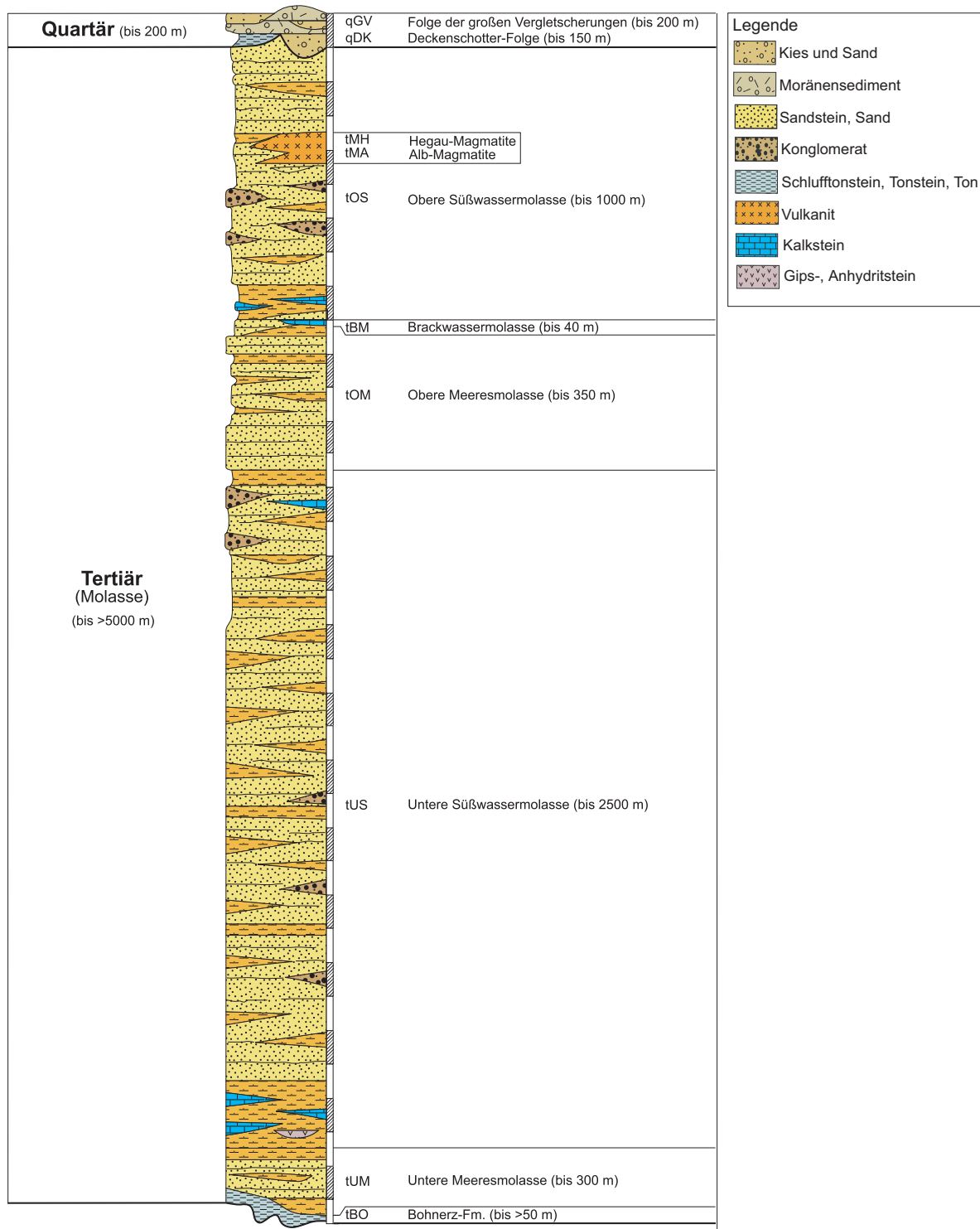


Abbildung 5.4: Musterprofil der Schichtenfolge des Tertiärs und Quartärs in Baden-Württemberg (nach Villinger und Fischer, 2005). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind Anonym (2007) entnommen. Fm.: Formation.

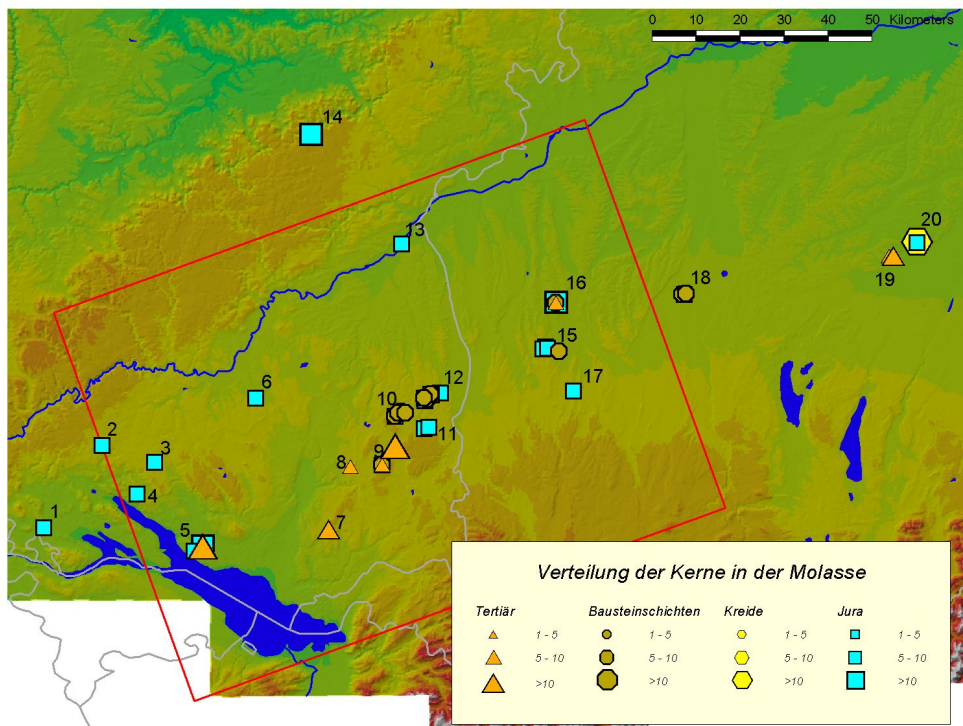


Abbildung 5.5: Bohrungen im Molassebecken, an denen petrophysikalische Eigenschaften an Kernmaterial gemessen wurden. Die eingetragenen Zahlen sind in Tabelle 5.1 erklärt. Die in der Legende angegebenen Zahlen entsprechen den vermessenen Kernmetern (aus Rath und Clauser (2004)).

Tabelle 5.1: Schlüssel zu den Bohrungen in der westlichen Molasse in Abbildung 5.5 (aus Rath und Clauser (2004)).

Nr.	Lokation	Nr.	Lokation	Nr.	Lokation
1	Singen	8	Gaisbeuren	15	Arlesried
2	Mühlingen	9	Wurzach	16	Winzer
3	Ebratsweiler	10	Oberschwarzach	17	Erisried
4	Nesselwangen	11	Hauerz	18	Aitingen
5	Baitenhausen	12	Mönchsrot	19	Hebertshausen
6	Saulgau	13	Donaustetten	20	Haimhausen
7	Waldburg	14	DB B419		

5.1.2 Gesteinsphysikalische Labormessungen

Bei der Darstellung gesteinsphysikalischer Eigenschaften des Tertiärs konnte auf Vorarbeiten zurückgegriffen werden, die bereits im Rahmen eines Forschungsvorhabens zur Detektion von tiefen Grundwasserströmungen gewonnen wurden (Rath und Clauser, 2004). Hierbei sind im Molassebecken hauptsächlich Bohrungen der Wintershall AG und des Geologischen Landesamtes Bayern (jetzt Bayerisches Landesamt für Umwelt) bearbeitet worden. Die Messstrategie war im Wesentlichen durch die Verteilung der Kerndaten bestimmt (Abbildung 5.5). Die Wintershall AG beprobte nur ökonomisch relevante Horizonte, diese allerdings sehr detailliert in vielen Bohrungen. Zielhorizonte waren hier vorrangig die Bausteinschichten. Eine Ausnahme bildet die Bohrung Baitenhausen, die als Referenz-

bohrung von der Oberen Süßwassermolasse bis zum Malm gekernt wurde. Insgesamt wurden aus diesen 20 Bohrungen thermische Eigenschaften, Dichte und Porosität an etwa 700 Kernproben gemessen.

In dem vorgenannten Projekt wurden in der Regel an den Kernproben wie in der vorliegenden Studie auch die Wärmeleitfähigkeit im trockenen und wassergesättigten Zustand sowie die Dichte und Porosität der Proben nach dem Prinzip von Archimedes oder mit einem Pyknometer bestimmt (vgl. Abschnitt 2.1). Die Werte der Wärmeleitfähigkeit im trockenen und gesättigten Zustand, λ_d und λ_s , wurden benutzt, um den Wärmeleitfähigkeitswert der Gesteinsmatrix nach dem geometrischen Mischungsgesetz nach Formel 4.3 zu berechnen. Daraus ergibt sich für Porosität ϕ und Matrixwärmeleitfähigkeit λ_m

$$\phi = \frac{\ln(\lambda_d/\lambda_s)}{\ln(\lambda_a/\lambda_w)} \quad (5.1)$$

$$\lambda_m = \left(\frac{\lambda_s}{\lambda_w^\phi} \right)^{\frac{1}{1-\phi}}.$$

Die verwendeten Indizes bedeuten: a = Luft; m = Matrix; w = Wasser; d = trocken; s = gesättigt. In der Tabelle 5.3 sind die Messungen der Wärmeleitfähigkeit in der Molasse dargestellt, sortiert nach Bohrungen und Formation. Zur weiteren Zusammenfassung zeigt Tabelle 5.2 die Mittelwerte nur nach geologischen Untereinheiten für das Tertiär der westlichen Molasse sortiert. Es ist ersichtlich, dass die Varianz der Eigenschaften groß ist.

5.1.3 Geothermische Eigenschaften des Tertiärs in Abhängigkeit der Versenkungstiefe

Bei den Untersuchungen zur Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Versenkungstiefe konnte auf die Vorarbeiten im vorbezeichneten Projekt zurückgegriffen werden (vgl. Abschnitt 5.1.2). Die Ergebnisse sind dem Endbericht Rath und Clauser (2004) entnommen.

Tabelle 5.2: Zusammenfassung der Messungen der Wärmeleitfähigkeit, Dichte und Porosität in der westlichen Molasse nach der Stratigraphie. Bei der Wärmeleitfähigkeit ist der gemessene Wert im gesättigten Zustand λ_s angegeben. In Klammern sind jeweils die Minimal- und Maximalwerte gegeben (Stratigraphie siehe Tabelle B.1).

Formation	λ_s [W (m K) ⁻¹]	ϕ [-]	ρ_m [kg m ⁻³]
T,USM	3.05 (1.80–3.46)	0.10 (0.01–0.30)	2706 (2618–2887)
TM,BA	3.06 (2.89–3.67)	0.22 (0.05–0.33)	2717 (2620–2855)
TM,OMM	3.06 (2.98–3.17)	0.03 (0.01–0.05)	2622 (2595–2666)
TM,SA	2.89 (2.34–3.71)	0.19 (0.03–0.26)	2666 (2493–2785)
TM,SS	3.10 (2.79–3.43)	0.21 (0.11–0.28)	2667 (2487–2973)
TO,BN	2.88 (1.57–3.81)	0.15 (0.00–0.33)	2670 (2429–2939)
TO,CY	2.44 (1.81–2.92)	0.10 (0.02–0.23)	2758 (2690–2950)

Tabelle 5.3: Zusammenfassung der Messungen der Wärmeleitfähigkeit, Dichte und Porosität im westlichen Molassebecken nach Einzelbohrungen. Bei der Wärmeleitfähigkeit ist der gemessene, wasser-gesättigte Wert λ_s und der nach Gleichung 5.1 berechnete Wert für die Gesteinsmatrix λ_m angegeben. In Klammern sind die Minimal- und Maximalwerte genannt (Stratigraphie siehe Tabelle B.1).

Bohrung	Formation	Teufe [m]	Anzahl	λ_s [W (m K) ⁻¹]	λ_m	ϕ [-]	ρ_m [kg m ⁻³]
Altdorf	T,UBM	311 – 322	4	1.89 (1.48–2.31)	2.64	0.23 (0.21–0.25)	1996 (1875–2060)
Altdorf	T,UMM	324 – 402	4	2.88 (2.49–3.25)	3.76	0.15 (0.05–0.26)	2253 (2020–2438)
Hebertshausen 2	T,UMM	1504–1513	34	2.56 (2.18–3.11)	3.20	0.13 (0.06–0.15)	2183 (2101–2472)
Bad Wurzach	T,USM	815 – 822	14	3.18 (2.94–3.43)	3.93	0.15 (0.03–0.23)	2717 (2627–2757)
Baitenhausen 1	T,USM	1000–1258	20	3.04 (2.38–3.46)	3.35	0.03 (0.01–0.05)	2670 (2618–2695)
Hebertshausen 3a	T,USM	1415–1418	10	2.78 (2.01–3.35)	3.07	0.06 (0.04–0.08)	2490 (2449–2537)
Oberschwarzach 6	T,USM	1533–1534	2	2.62 (1.80–3.44)	2.98	0.18 (0.07–0.30)	2785 (2682–2887)
Bad Wurzach	TM,BA	568 – 579	54	3.06 (2.89–3.67)	6.54	0.22 (0.05–0.33)	2717 (2620–2855)
Altdorf	TM,OMM	187 – 267	12	1.76 (1.66–1.92)	1.89	0.06 (0.00–0.19)	2089 (2060–2145)
Baitenhausen 1	TM,OMM	316 – 317	6	3.06 (2.98–3.17)	3.25	0.03 (0.01–0.05)	2622 (2595–2666)
Bad Wurzach	TM,SA	586 – 726	267	2.89 (2.34–3.71)	3.96	0.19 (0.03–0.26)	2666 (2493–2785)
Bad Wurzach	TM,SS	725 – 811	62	3.10 (2.79–3.43)	5.20	0.21 (0.11–0.28)	2667 (2487–2973)
Aitingen 2	TO,BN	1232–1242	13	2.56 (2.30–3.07)	3.14	0.20 (0.09–0.25)	2692 (2625–2829)
Aitingen 3	TO,BN	1241–1253	15	2.82 (2.44–3.57)	3.30	0.21 (0.03–0.27)	2639 (2553–2725)
Aitingen 4a	TO,BN	1287–1290	16	2.58 (1.57–2.82)	3.30	0.23 (0.21–0.33)	2615 (2481–2755)
Mönchsrot 12	TO,BN	1449–1452	7	2.88 (2.68–3.07)	3.52	0.10 (0.00–0.26)	2673 (2429–2939)
Mönchsrot 2	TO,BN	1457–1460	8	2.73 (2.48–3.06)	3.25	0.14 (0.04–0.16)	2647 (2614–2667)
Mönchsrot 20	TO,BN	1465–1467	19	3.10 (2.77–3.64)	3.99	0.11 (0.02–0.16)	2667 (2625–2716)
Mönchsrot 31	TO,BN	1507–1510	15	3.42 (3.04–3.81)	5.41	0.17 (0.06–0.22)	2700 (2656–2733)
Oberschwarzach 1	TO,BN	1560–1562	17	2.56 (1.66–3.36)	2.84	0.12 (0.05–0.16)	2659 (2624–2695)
Oberschwarzach 5	TO,BN	1595–1598	15	2.69 (2.51–3.13)	3.25	0.17 (0.02–0.22)	2704 (2612–2814)
Oberschwarzach 6	TO,BN	1534–1536	11	3.43 (3.09–3.75)	4.51	0.13 (0.03–0.19)	2662 (2621–2694)
Oberschwarzach H1	TO,BN	1622–1624	13	2.72 (2.47–2.98)	2.95	0.11 (0.02–0.24)	2710 (2637–2791)
Rieden 3	TO,BN	1431–1433	8	3.10 (2.91–3.42)	3.86	0.12 (0.04–0.15)	2650 (2635–2693)
Winzer 1	TO,BN	1090–1092	8	2.52 (2.35–2.70)	3.53	0.19 (0.04–0.29)	2638 (2560–2690)
Wurzach 3	TO,BN	2041–2061	16	3.19 (2.71–3.76)	3.34	0.03 (0.01–0.04)	2691 (2669–2715)
Winzer 1	TO,CY	1082–1084	8	2.22 (1.66–2.50)	2.59	0.10 (0.05–0.15)	2638 (2430–2950)
Wurzach 3	TO,CY	2023–2025	4	3.24 (2.80–3.66)	3.47	0.04 (0.04–0.04)	2695 (2693–2695)

Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit

Die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur wurde mit Hilfe von Divided Bar-Messungen am GGA-Institut bestimmt (Rath und Clauser, 2002; Beck, 1988). Die Messungen wurden im Temperaturbereich von 5 °C bis 150 °C ausgeführt. Insgesamt wurden 22 Proben vermessen. Hier-von musste eine Messung wegen schlechter Qualität verworfen werden. Die Proben stammen aus den Bohrungen Bad Wurzach, Baitenhausen, Donaustetten, Erding, Gaisbeuren, Saulgau und Singen. Sie umfassen im Tertiär die Mergel und Sandsteine der Oberen Meeresmolasse und der Unteren Süßwas-sermolasse sowie die Kalke der Unteren Süßwassermolasse.

Abbildung 5.6 zeigt die Rohdaten dieser Messungen. Zur Auswertung dieser Messungen wurde eine empirische Funktion an die Daten angepasst. Häufig verwendete Funktionen sind die folgenden nach

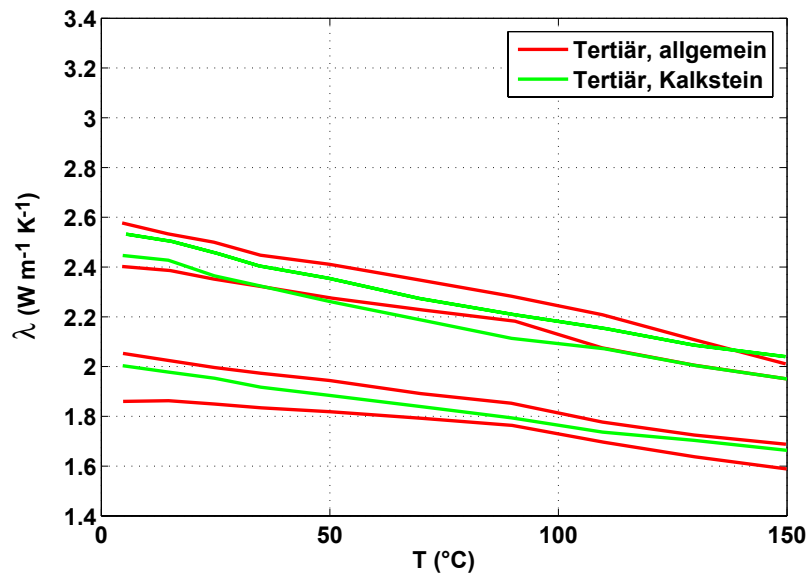


Abbildung 5.6: Messungen der Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ für Kernproben aus der Molasse.

Haenel et al. (1988) und Sass et al. (1992):

$$\lambda_{\text{Haenel}}(T) = a + \frac{b}{350 + T} \quad (5.2)$$

$$\lambda_{\text{Sass}}(T) = \frac{\lambda_0}{a + T(b - c/\lambda_0)}. \quad (5.3)$$

In den Gleichungen sind a, b, c empirische Koeffizienten, T die Temperatur und λ_0 die Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur (25 °C). Beide Gleichungen implementieren eine $1/T$ -Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit, die theoretisch durch Phononen-Wärmeleitung erklärt werden kann (Beardsmore und Cull, 2001; Clauser und Huenges, 1995). Es wurde für beide Funktionen eine Auswertung durchgeführt, um die Beziehungen miteinander zu vergleichen. Es zeigte sich, dass Gleichung 5.2 nicht in der Lage ist, die große Spannweite der Wärmeleitfähigkeiten korrekt wiederzugeben. Bei Benutzung von Gleichung 5.3 reicht dagegen ein Parametersatz aus, um die Temperaturabhängigkeit der Proben aus *allen* geologischen Formationen des Tertiärs korrekt darzustellen. Tabelle 5.4 zeigt die Ergebnisse dieser Anpassung. Vosteen und Schellschmidt (2003) haben diese Proben zusammen mit Gesteinen aus den Alpen analysiert und kommen zu ähnlichen Ergebnissen. Die auf diese Weise gewonnenen Parameter können benutzt werden, um in den Modellen die Wärmeleitfähigkeit auf in situ-Temperaturen zu korrigieren.

Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit

Die Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ist im Prinzip bekannt (Clauser und Huenges, 1995; Cermak und Rybach, 1982). Am Geoforschungszentrum Potsdam wurden Proben aus der Bohrung Bad Wurzach untersucht, um diesen Effekt für die tertiären Molassesedimente abzuschätzen. Auf Grund technischer Probleme konnte allerdings nur eine Probe im trockenen Zustand erfolgreich gemessen werden. Die Ergebnisse dieser Messung sind in Tabelle 5.5 dargestellt. Obwohl eine Pro-

Tabelle 5.4: Koeffizienten der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit des Tertiärs für Gleichung 5.3. Für jede der 21 Einzelmessungen wurden die Koeffizienten a, b, c berechnet. Hier sind die statistischen Kennwerte zusammengefasst.

Koeffizient	Mittelwert	Median	Standardabweichung	Minimum	Maximum
a	0.960	0.961	0.011	0.938	0.986
b	0.007	0.007	0.001	0.004	0.008
c	0.014	0.014	0.003	0.006	0.018

Tabelle 5.5: Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit. Links: Messungen der Wärmeleitfähigkeit für die getrocknete Probe (λ_t) in Abhängigkeit von der effektiven Spannung ($\sigma_{e,t}$) und exponentielle Anpassung ($\lambda_{m,t}$). Rechts: Versenkungstiefe (z_v), abgeleitet aus dem lithostatischen Druckgradienten; Effektive Spannung für die gesättigte Probe $\sigma_{e,s}$; Sättigte Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{m,s}$ nach Gleichung 5.4.

$\sigma_{e,t}$ [MPa]	λ_t [W (m K) ⁻¹]	$\lambda_{m,t}$ [W (m K) ⁻¹]	z_v [km]	$\sigma_{e,s}$ [MPa]	$\lambda_{m,s}$ [W (m K) ⁻¹]
0	1.76	1.76	0.0	0	3.26
25	1.98	1.99	1.0	15	3.41
50	2.20	2.18	2.0	30	3.53
75	2.33	2.33	3.0	45	3.65
100	2.45	2.45	4.0	60	3.74
150	2.63	2.62	6.0	90	3.90
200	2.69	2.72	8.0	120	4.02
300	2.75	2.83	12.0	180	4.19
400	2.85	2.88	16.0	240	4.28
500	2.90	2.90	20.0	300	4.33

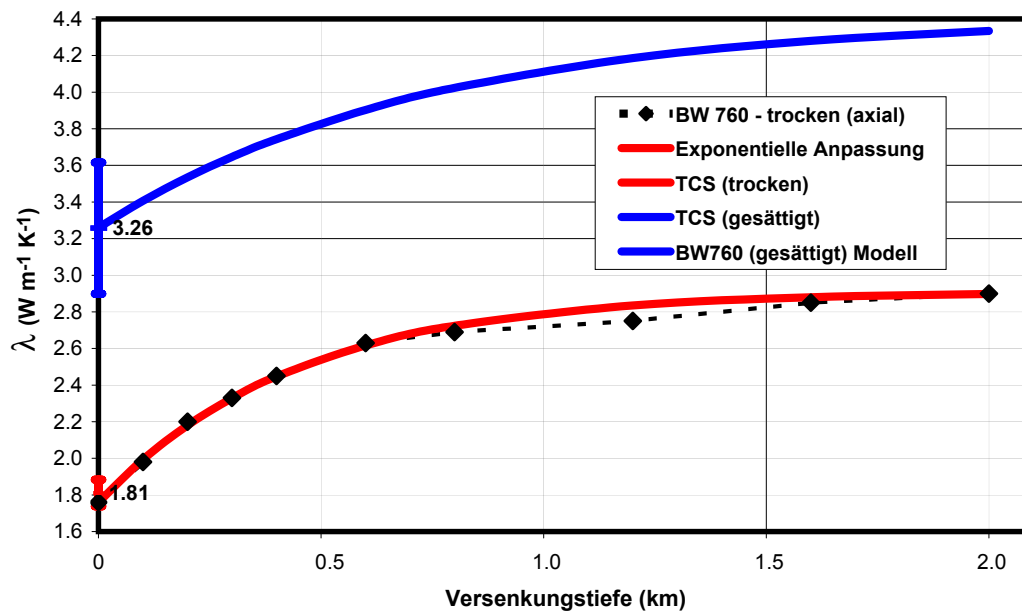


Abbildung 5.7: Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ für Molassesedimente. Messungen der Wärmeleitfähigkeit für die getrocknete Probe (schwarz); exponentielle Anpassung an die Messung (rot); trockene und wassergesättigte Wärmeleitfähigkeit mit Standardabweichung nach TCS; berechnete wassergesättigte Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit von der Versenkungstiefe (blau).

be nicht für eine systematische Untersuchung dieses Phänomens ausreicht, bietet sie dennoch die Möglichkeit, einige qualitative Schlussfolgerungen zu ziehen. Die Messung wurde im Druckbereich von 0 MPa bis 500 MPa durchgeführt. Eine exponentielle Anpassung

$$\lambda = 2.91 - 1.15 \exp^{P/110} \quad (5.4)$$

beschreibt die Daten gut (Abbildung 5.7). Außerdem stimmt die Messung bei Atmosphärendruck sehr gut mit der Messung des TC-Scanners der Angewandten Geophysik der RWTH Aachen (vgl. Abschnitt 2.1.1) überein. Die trockene Wärmeleitfähigkeit ändert sich stark um mehr als 50% bei einer Zunahme des Druckes auf 500 MPa. Da man für den lithostatischen Druckgradienten generell von 25 MPa km^{-1} ausgeht (Ingebritsen und Sanford, 1998), entspräche dies einer unrealistischen Versenkungstiefe von 20 km. Für einen realistischeren Wert von 2 km Tiefe ändert sich die Wärmeleitfähigkeit immerhin noch um 20%. Allerdings handelt es sich um eine „drainierte“ Messung. Bei dieser bleibt der Porendruck konstant auf atmosphärischem Druckniveau. Um den Einfluss auf die wassergesättigte Wärmeleitfähigkeit abzuschätzen, muss beachtet werden, dass ein Teil des lithostatischen Druckes durch den Druck des Porenfluids ausgeglichen wird.

Der Gesamtdruck P_g (lithostatischer Druck), welcher in einer Tiefe auf Grund der Auflast wirkt, ist verursacht durch die Summe des Gewichts der überlagernden Gesteinsmatrix und der Porenfluide. Ein Teil dieses Druckes wird vom Porenfluid P_f ausgeglichen. Der Rest muss vom Korngerüst getragen werden und ist die wirksame effektive Spannung σ_e (Ingebritsen und Sanford, 1998; von Terzaghi, 1925):

$$\sigma_e = P_g - P_f. \quad (5.5)$$

Die Zunahme des Porendrucks in den oberen Kilometern entspricht dem hydrostatischen Druckgradienten von 10 MPa km^{-1} . In tieferen Bereichen nähert er sich dem lithostatischen Gradienten an (zum Beispiel Bethke, 1986). Für eine trockene Probe kann der Einfluss von P_f vernachlässigt werden, sodass der effektive Druck dem lithostatischen Druck entspricht. Für gesättigte Proben gilt ein geringerer Gradient von $25 \text{ MPa km}^{-1} - 10 \text{ MPa km}^{-1} \approx 15 \text{ MPa km}^{-1}$. Im rechten Teil von Tabelle 5.5 ist unter diesen Annahmen eine Versenkungstiefe der trockenen Probe und die effektive Spannung für die wassergesättigte Probe ermittelt worden. Mit Gleichung 5.4 und dem wassergesättigten Wert für die Wärmeleitfähigkeit kann die Druckabhängigkeit der wassergesättigten Probe berechnet werden. Für die wassergesättigte Wärmeleitfähigkeit (Abbildung 5.7, blaue Linie) ist der Anstieg weniger steil als für die trockene Probe. Für eine Versenkungstiefe von 2 km ergibt sich eine Änderung der Wärmeleitfähigkeit um 10%. Für größere Tiefen kann die Annahme eines hydrostatischen Druckgradienten nicht mehr angenommen werden, sodass Abschätzungen dort schwierig sind. Außerdem findet man in der Realität in diesen Tiefen andere Gesteine, für die andere Gesetzmäßigkeiten gelten.

Abschließend lässt sich sagen, dass die Korrektur, zumindest für die tertiären Gesteine der westlichen Molasse, in der Größenordnung der Standardabweichung liegt, die man für eine Einzelmessung annehmen muss. Allerdings handelt es sich um einen systematischen Fehler und für Gesteine größerer Tiefe muss auch eine größere Korrektur angenommen werden. Daher ist eine druckabhängige Betrachtung der Wärmeleitfähigkeit, insbesondere mit der Berücksichtigung von differentiellen Drücken (Umschließungsdruck minus Porendruck) erstrebenswert.

5.2 Oberjura (Malm)

5.2.1 Geologische Übersicht des Oberjura (Malm)

Lithologisch besteht der Oberjura vornehmlich aus Folgen gebankter Kalksteine mit Einschaltungen von mergeligen Lagen (Abbildung 5.8). Im mittleren und oberen Oberjura kommt es zur Ausbildung massiger Schwammkalke, die von Korallenkalcken, Kalkoolithen und Dolomit begleitet werden. Die Mergel und Kalke des Oberjura sind Sedimente eines flachen warmen Schelfmeeres, das zum Ende des Oberjuras mit fortschreitender Verschwammung und Korallenbildung Tiefen von weniger als 100 m aufwies. Diese „Schwäbische Fazies“ geht nach Süden in die „Helvetische Fazies“ der Quaternkalke über.

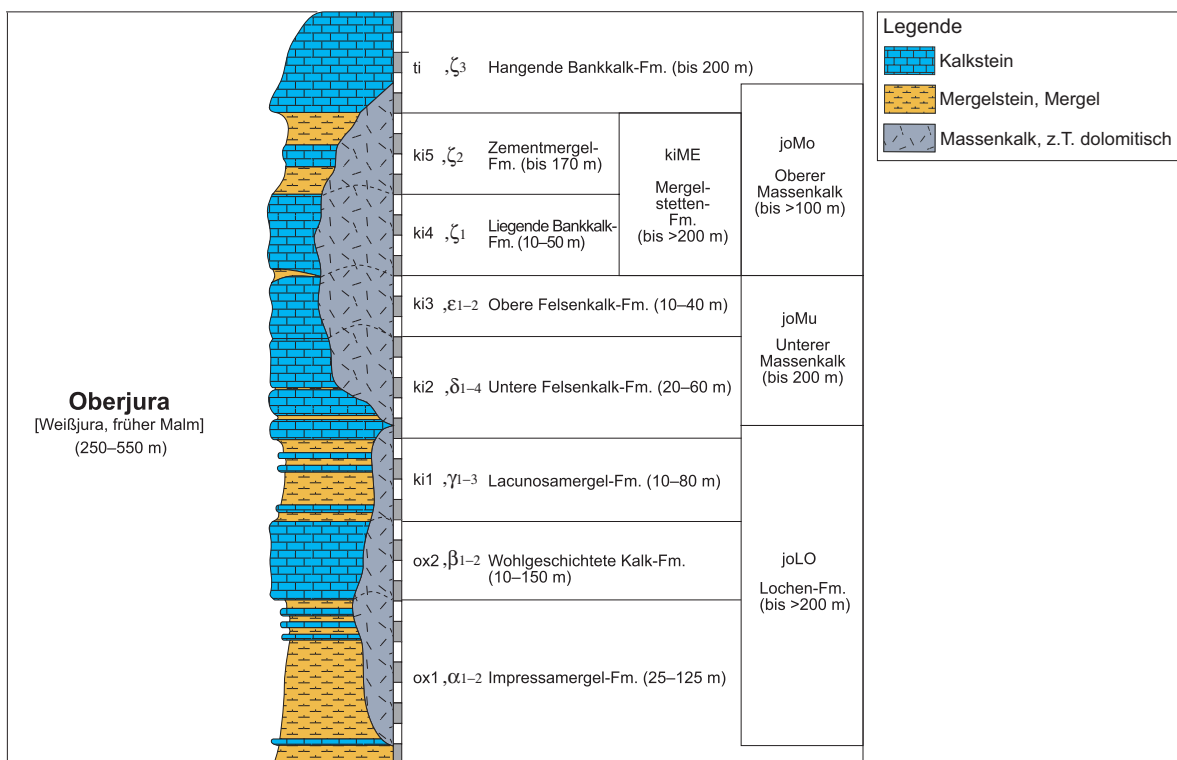


Abbildung 5.8: Musterprofil der Schichtenfolge des Oberjuras (Malm) in Baden-Württemberg (nach Villinger und Fischer, 2005). Die Abkürzungen (lateinische Buchstaben) beziehen sich auf die international gültige Stufengliederung (vgl. Villinger und Fischer, 2005) bzw. auf die historische Stufengliederung nach Friedrich August Quenstedt (griechische Buchstaben). Fm.: Formation.

Im Bereich der Schwäbischen Alb wird der Oberjura in die Stufen des Oxfordiums (ox1) bis Tithoniums (ti) gegliedert, die der lithostratigraphischen Abfolge des Oberjura α bis ζ entspricht (Abbildung 5.8). Die Unterteilung erfolgt innerhalb der gebankten Folge nach lithologischen Kriterien und markiert Wechsel von mergel- und kalkbetonten Bereichen. Im Bereich der Schwammfazies kann diese lithostratigraphische Unterteilung nicht vollzogen werden, da aufgrund des homogenen Aufbaus entsprechende Leithorizonte nicht verfügbar sind. Die Unterteilung der Schwammkalke ist dreigeteilt und grenzt die mergelige Lochensformation an der Basis von den auflagernden unteren und oberen Massenkalken ab. Aus den Massenkalken und gelegentlich auch aus den Bankkalken sind durch diagenetische Vorgänge Dolomite und aus diesen durch Recalcitisierung wiederum „zuckerkörnige“

Kalke hervorgegangen. Letztere sind als grobkristalline Massenkalken ausgebildet mit charakteristisch löchrigem Aussehen (Lochfels). Ihre Hauptverbreitung haben diese Gesteine im den Felsenkalken des Oberjura δ bis ϵ , treten zum Teil aber auch höher und tiefer im Profil auf. Die Felsenkalken zeigen bereichsweise eine starke Verkarstung und bilden neben den „Wohlgeschichteten Kalken“ und den „Liegenden“ und „Hangenden Bankkalken“ ein Hauptkarststockwerk aus. Im Bereich der Schwäbischen Alb stellen die Verkarstungen den Hauptgrundwasserleiter dar.

Im Bereich des südlichen Molassebeckens geht der Oberjura von der Schwäbischen in die Helvetische Fazies über. Die Grenze verläuft etwa an der Linie Meersburg - Ravensburg - Leutkirch. Während im Nordteil des Molassebeckens der Oberjura in Analogie zur Schwäbischen Alb ausgebildet ist mit Mächtigkeiten zwischen 420 m (Ehingen 1) und 580 m (Scherstetten 1), ist die Helvetische Fazies im Süden durch das Fehlen von größeren Mergelkomplexen und der Schwammfazies gekennzeichnet. Der helvetische Oberjura, der vorwiegend durch ausnahmslos gebankte Kalke mit hohen Bitumengehalten gekennzeichnet ist, weist im südlichen Molassebecken Mächtigkeiten von 400 m bis 470 m auf.

5.2.2 Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen

Zur Logauswertung wurde im Oberjura die Bohrung B-06 als Referenzbohrung herangezogen. Die Logging-Daten lassen sich sehr gut mit der im Bohrbericht (Anonym, 1985) dargestellten Lithologie in Verbindung bringen. Die lithologische Abfolge entspricht weitgehend dem Standardprofil (Abbildung 5.8). Entsprechend der Gesteinsbeschreibung wurden fünf Hauptgesteinstypen mit den Logs identifiziert (Abbildung 5.9): Kalksteine, Dolomite (dolomitische Kalksteine), Mergel, mergelhaltige Tonsteine und Tonsteine.

Der Oberjura beginnt nach dem Bohrbericht an der Basis mit mergelhaltigen Tonsteinen, die innerhalb des Oberjuras durch die höchsten Gammawerte gekennzeichnet sind. Charakteristisch sind GR-Werte von > 80 API, geringe Dichten von $< 2300 \text{ kg m}^{-3}$ und geringe Werte im V_p -Log $< 3000 \text{ m s}^{-1}$. Tonsteine finden sich im Oberjura nur an der Basis der Abfolge und leiten zu den Tonsteinen des Mitteljuras über. Die darüber folgenden Schichten sind durch Abfolgen von mergelhaltigen Tonsteinen, Mergeln und Kalksteinen/Dolomiten geprägt. Die Abnahme des Tongehalts im Gestein spiegelt sich im Gammalog wieder, das in den tonfreien massiven Kalksteinen und Dolomiten die niedrigsten Werte mit < 25 API einnimmt. Antikorrelierend zum Gammalog steigen mit abnehmendem Tongehalt die Werte im elektrischen Widerstand, im V_p -Log und im Dichte-Log (Tab. 5.6). Dolomite wurden in Bohrkleinproben im Bereich der oberen Felsenkalke des Malm ϵ identifiziert und können anhand der Logs durch ihre höheren V_p -Werte ($> 6500 \text{ m s}^{-1}$) und Dichten ($> 2730 \text{ kg m}^{-3}$) von den Kalksteinen abgegrenzt werden. Die Dolomite weisen in der Regel auch sehr hohe Widerstände auf. Deutlich höhere Widerstände werden nur in den darüber folgenden „Unteren Bankkalken“ aufgezeichnet.

Neben der lithologischen Unterscheidung wurden die Logs auf Indikatoren für Klüfte und Störungszonen hin betrachtet. Innerhalb der Kalksteine und Dolomite fallen Klüfte und Störungen durch diskrete Zonen mit geringen V_p - und Dichtewerten auf. Weiterhin zeigt das Kaliberlog Bohrlochunregelmäßigkeiten an. Im gezeigten Beispiel treten Klüftzonen im Teufenbereich 650 m bis 660 m und vereinzelt zwischen 720 m und 800 m auf.

Auffällig sind zudem auftretende Differenzen zwischen der flach und tief eindringenden Widerstandskurve innerhalb der „Liegenden Bankkalke“ zwischen 600 und 650 m. Diese Separation findet sich in nahezu allen betrachteten Bohrungen in der gleicher stratigraphischer Position. In porösen Medien ist eine solche Separation der Widerstände ein Indikator für permeable Zonen und wird durch die Infil-

Table 5.6: Durchschnittswerte (AVG) und Standardabweichungen (STD) der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Oberjura. GR: Gammaaktivität; DT: Laufzeit der Longitudinalwelle; VP: Geschwindigkeit der Longitudinalwelle; RHOB: Gesamtdichte.

	GR (API)		DT (ms m ⁻¹)		VP (km s ⁻¹)		RHOB (g cm ⁻³)	
	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD
Kalkstein	16,60	3,54	181,14	27,25	5,61	0,65	2,65	0,09
Dolomit	13,91	1,55	159,80	8,17	6,27	0,29	2,76	0,02
Mergel	36,22	8,63	189,85	49,62	3,99	0,55	2,51	0,18
Mergel (tonig)	71,80	5,98	331,04	21,85	3,03	0,21	2,26	0,11
Tonstein	83,38	3,25	341,22	8,07	2,93	0,07	2,16	0,11

tration von Bohrspülung in die Formation verursacht. Auch die Auslenkung der Eigenpotenzial(SP)-Kurve kann als Hinweise für eine erhöhte Permeabilität gedeutet werden. Das negative Eigenpotential und der niedrigere Widerstand im Nahbereich der Bohrung weisen auf ein Formationsfluid hin, das geringere Salzkonzentrationen aufweist als die Bohrspülung. Die Indikationen für erhöhte Permeabilität in diesem Bereich stehen jedoch nicht im Einklang mit dem Dichte- und V_p -Log, die in diesem Bereich sehr hohe Werte zeigen und keinen Hinweise für erhöhte Porositäten liefern. Nach Auswertung des Dichte- und Sonic-Logs sind die Porositäten deutlich kleiner 5% (Abbildung 5.10). Eine weitere mögliche Erklärung für die Auslenkung des Eigenpotentials könnte die Pyritführung des Kalksteins sein. Im Bohrbericht (Anonym, 1985) wird für die Spülproben zwischen 595 m und 675 m das Auftreten von Pyritkristallen beschrieben, die möglicherweise den Aufbau eines Redoxpotentials verursachen.

Stratigraphische Korrelationen

Im Vergleich mit dem Standardprofil des Oberjura wird deutlich, dass die stratigraphische Abfolge im zentralen Bereich des Molassebeckens mit der der Schwäbischen Alb weitgehend übereinstimmt (Abbildung 5.11). Anhand des Gammalogs können die Untereinheiten des Oberjura α bis δ eindeutig abgegrenzt und korreliert werden. Die liegenden Impressamergel und zwischengeschaltete Lacunosamergelformation treten in allen betrachteten Bohrungen auf, wobei zum Teil sehr detaillierte Korrelationen zwischen einzelnen Sedimentbänken hergestellt werden können. Die Untereinheiten α bis γ zeigen nur geringe Variationen in Mächtigkeit und Faziesausprägung. Mit dem Oberjura und dem Einsetzen der Schwammfazies sind Korrelationen zwischen den Bohrungen nur bedingt möglich, da lokale Fazieswechseln zwischen Plattenkalken und Riffkalken auftreten.

5.2.3 Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten

Abbildung 5.12 zeigt die statistische Verteilung von Wärmeleitfähigkeitsdaten, die im Oberjura an wassergesättigten Kernproben erhoben wurden. Je nach beprobter Untereinheit zeigen die Daten eine unterschiedliche Variationsbreite. Die höchsten durchschnittlichen Wärmeleitfähigkeiten wurden im Malm ζ gemessen, der vorwiegend aus Kalksteinen besteht. Hier ist anzumerken, dass der geometrisch gemittelte Durchschnittswert für reine Kalksteine bei $2,8 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ liegt, also deutlich niedriger ist als die in der Literatur angegebenen Werte für Calciumcarbonat. Eine größere Varianz und insgesamt niedrigere Werte wurden im Malm γ gemessen. Dies ist auf den höheren Mergelgehalt dieser

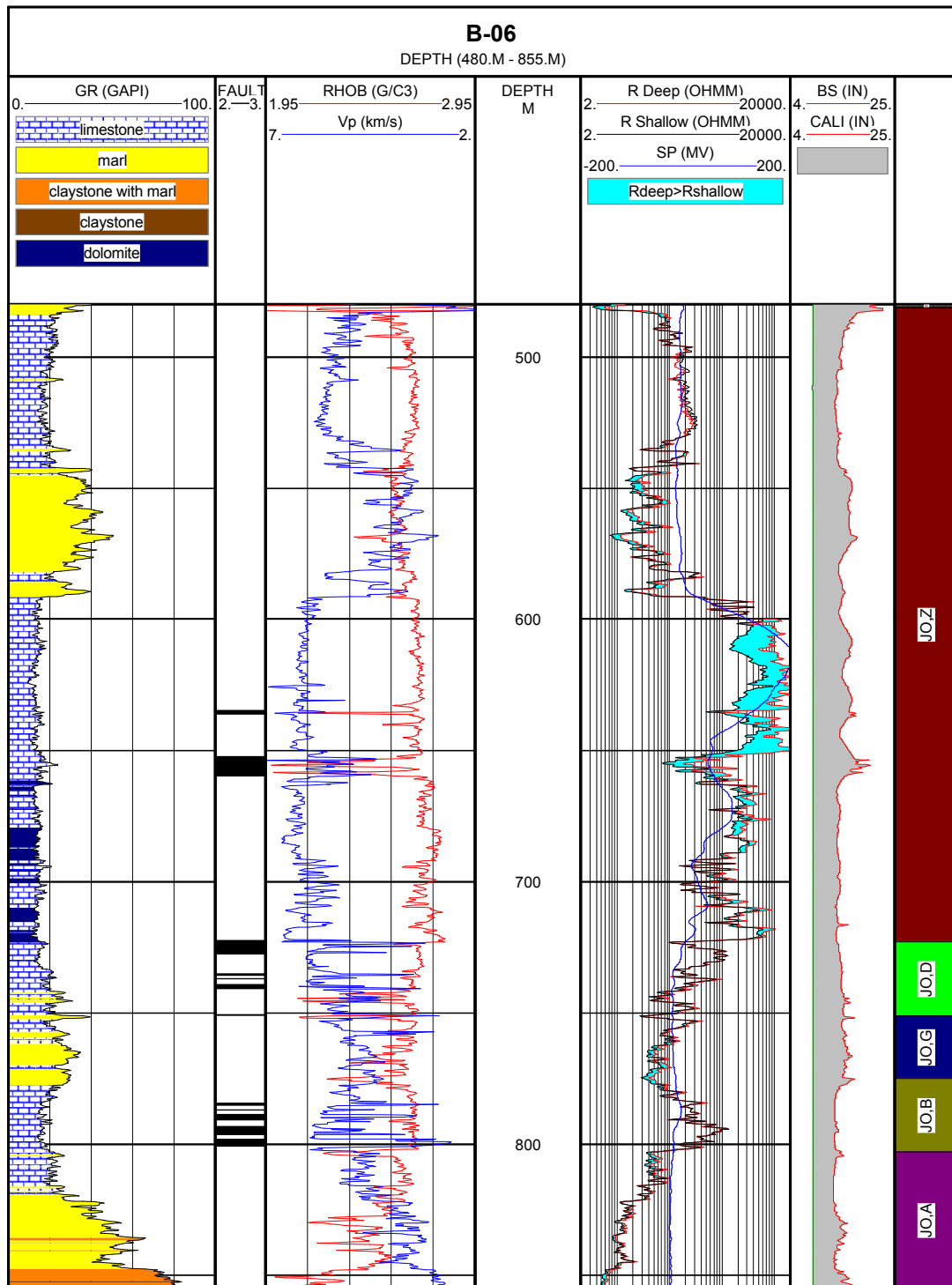


Abbildung 5.9: Bohrlochmessungen im Bereich des Oberjura der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Dargestellt sind die abgegrenzten stratigraphischen Stufen (Abkürzungen siehe Tabelle B.1) in Anlehnung an das Standardprofil, die Hauptgesteinstypen und Bereiche mit Kluftzonen (Spalte „FAULT“). GR: Gammaaktivität; RHOB: Gesamtdichte; Vp: Geschwindigkeit der Kompressionswelle; DEPTH: Bohrlochtiefe; R Deep: spezifischer elektrischer Widerstand (deep); R Shallow: spezifischer elektrischer Widerstand (shallow); SP: Eigenpotential; BS: Sollkaliber; Cali: Kaliber.

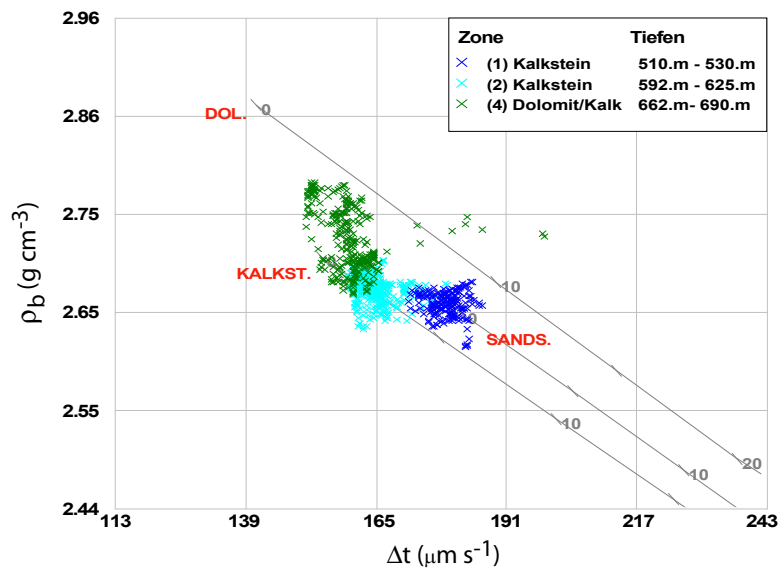


Abbildung 5.10: Streudiagramm der im Bohrloch gemessenen Dichte ρ_b gegen die Laufzeit der Kompressionswelle Δt im Oberjura. Eingetragen sind für Kalksteine (LS), Dolomite (DOL) und Sandsteine (SS) die aus den Logs ableitbaren Porositäten (graue Linien). Dargestellt sind ungestörte Abfolgen der „Hangenden Bankkalk“ = Zone 1, der „Liegenden Bankkalk“ = Zone 2 und der dolomitisierten „Oberren Felsenkalk“ = Zone 4.

Untereinheit zurückzuführen, der im Vergleich zum Kalk eine deutlich geringere Wärmeleitfähigkeit besitzt.

Die Laborergebnisse belegen, dass die Variation der Wärmeleitfähigkeit im Oberjura vorrangig an den Mergel-/Kalkanteil geknüpft ist. Mit steigendem Mergelgehalt sinkt die Wärmeleitfähigkeit. Ein gegenteiliger Effekt ist auf die Dolomitisierung zurückzuführen. Hier steigt die Wärmeleitfähigkeit der Matrix mit dem Grad der Dolomitisierung. Da die Dolomitbildung auf einige Horizonte beschränkt ist und zudem durch den diagenetischen Prozess alle Übergangsformen zwischen Kalkstein und Dolomit auftreten können, ist dieser Effekt weniger ausgeprägt als der variierende Mergelanteil.

Neben diesen matrixabhängigen Effekten wird die Wärmeleitfähigkeit im Oberjura zudem durch die Gesteinsporosität beeinflusst. Dies wird in Abbildung 5.13 deutlich, in der im Labor gemessene Wärmeleitfähigkeiten gegen die spezifischen Laufzeiten akustischer Wellen (Δt) aufgetragen sind. Das Streudiagramm zeigt eine negative Korrelation zwischen der Wärmeleitfähigkeit und der Laufzeit, wobei die Streuung der Messdaten durch die Überlagerung des Mergelanteiles und der Porosität erklärt werden kann. Durch Festlegung von Matrixpunkten für die Endkomponenten Karbonat, Ton/Mergel und Wasser (Porosität) kann ein Dreipunkt-Diagramm aufgespannt werden, aus dem die drei Komponenten bestimmt werden können. Da Dolomit und Kalkstein in Übergangsformen auftreten und eine zweifelsfreie Trennung der Komponenten mit den verfügbaren Logs nicht immer gegeben ist, wurde für die Karbonate ein gemeinsamer Matrixwert von $3,1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ festgelegt.

Über die im Labor gefundenen Zusammenhänge kann im Gegenzug die Wärmeleitfähigkeit aus den Bohrlochmessdaten abgeleitet werden. Die drei Komponenten Karbonat, Mergel/Ton und Wasser (freie Porosität) werden zunächst anhand des Gammalogs (Mergel- und Tonindikator) und Sonic-Logs berechnet. Über ein Mischungsgesetz wird dann die Wärmeleitfähigkeit bestimmt. In Abbildung 5.14 ist das Ergebnis dieser Berechnung für den Malm γ bis Malm ζ am Ostrand des Untersuchungsgebietes

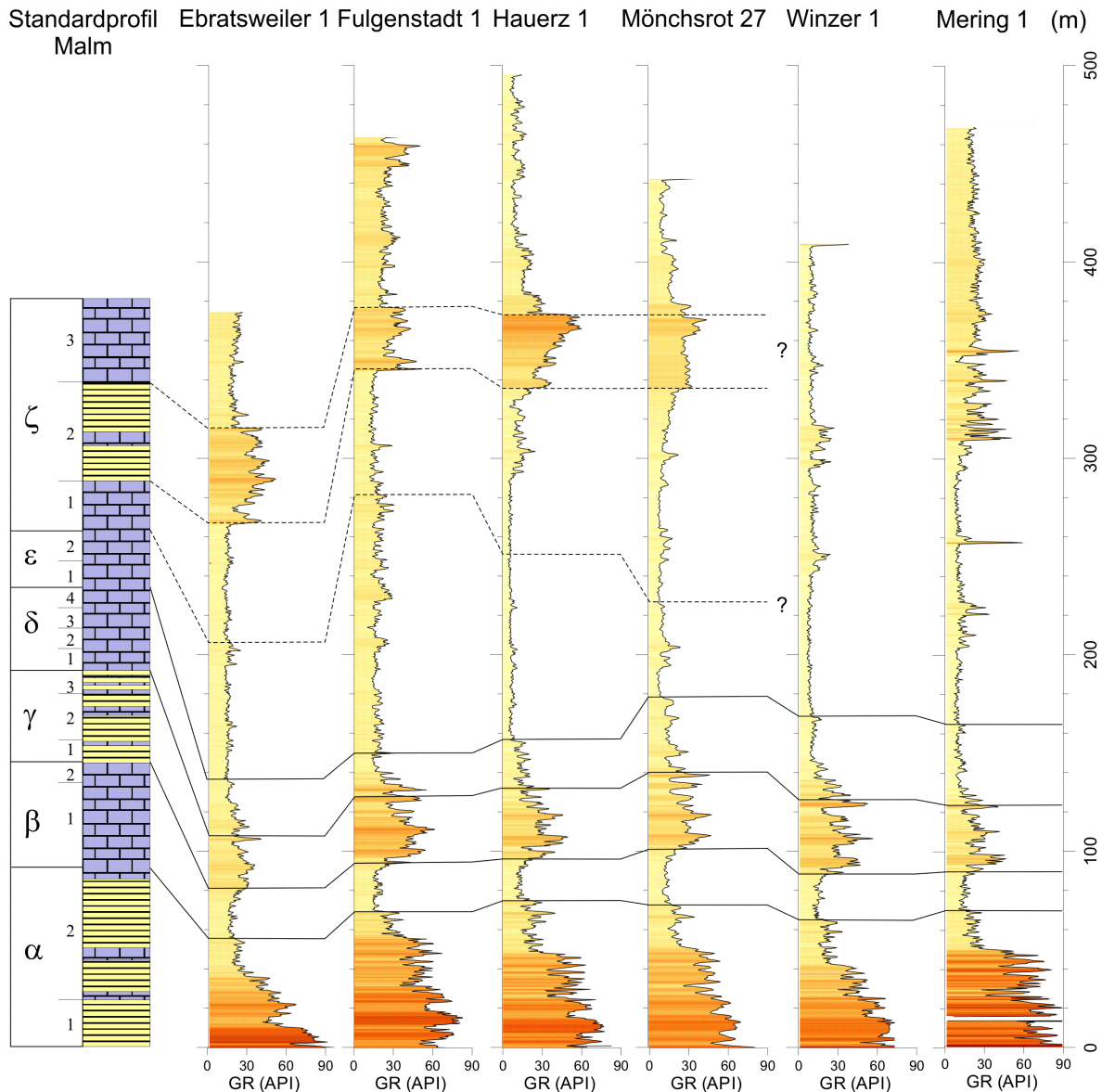


Abbildung 5.11: Gammalogs (GR) aus Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens im Vergleich zum Standardprofil des Oberjura. Die Bohrungen sind auf einer West-Ost-Profillinie angeordnet (vgl. Abbildung 3.6).

tes dargestellt. Die berechnete Wärmeleitfähigkeit variiert zwischen $2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Abweichungen treten in Kluftezonen auf, wie sie z.B. bei 1500 m im Sonic-Log detektiert werden können.

5.2.4 Geothermische Eigenschaften des Oberjura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen

Abbildung 5.15 zeigt die berechneten Wärmeleitfähigkeitsprofile für den Oberjura einiger ausgewählter Bohrungen auf einem Ost-West-Profil. Die Werte zeigen nur geringe Variationen, was auf die re-

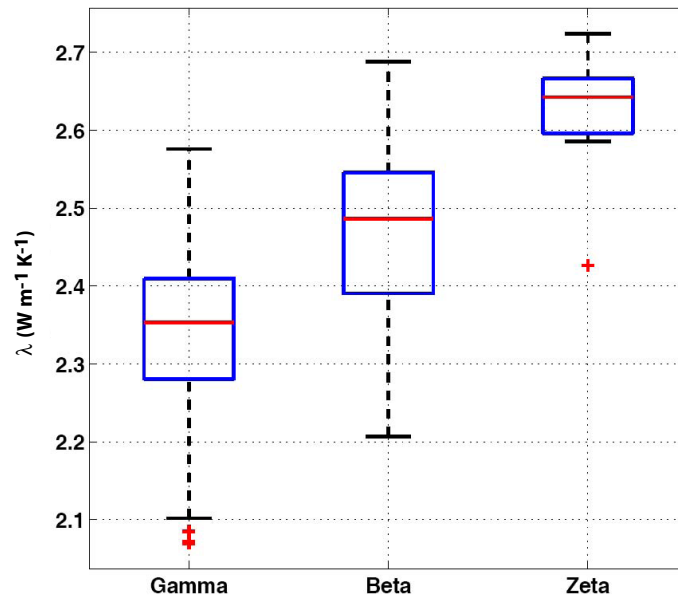


Abbildung 5.12: Statistische Verteilung der Wärmeleitfähigkeitsmessdaten λ wassergesättigter Kernproben für Untereinheiten des Oberjuras. Rote Linie: Mittelwert; blaue Box: 25%- und 75%-Quartil; schwarze Begrenzungsstriche: 5%- und 95%-Perzentil.

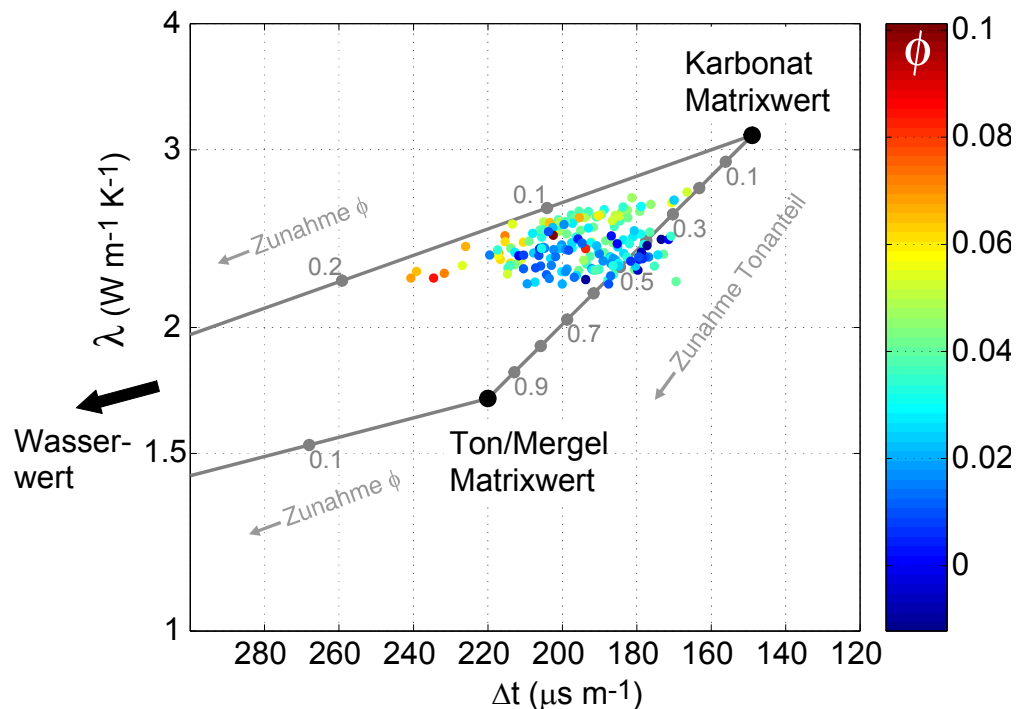


Abbildung 5.13: Streudiagramm der Wärmeleitfähigkeit λ gegen die spezifische Laufzeit akustischer Wellen Δt , gemessen an Gesteinsproben aus dem Oberjura. Die Farbcodierungen geben die Porosität Φ der Proben wieder.

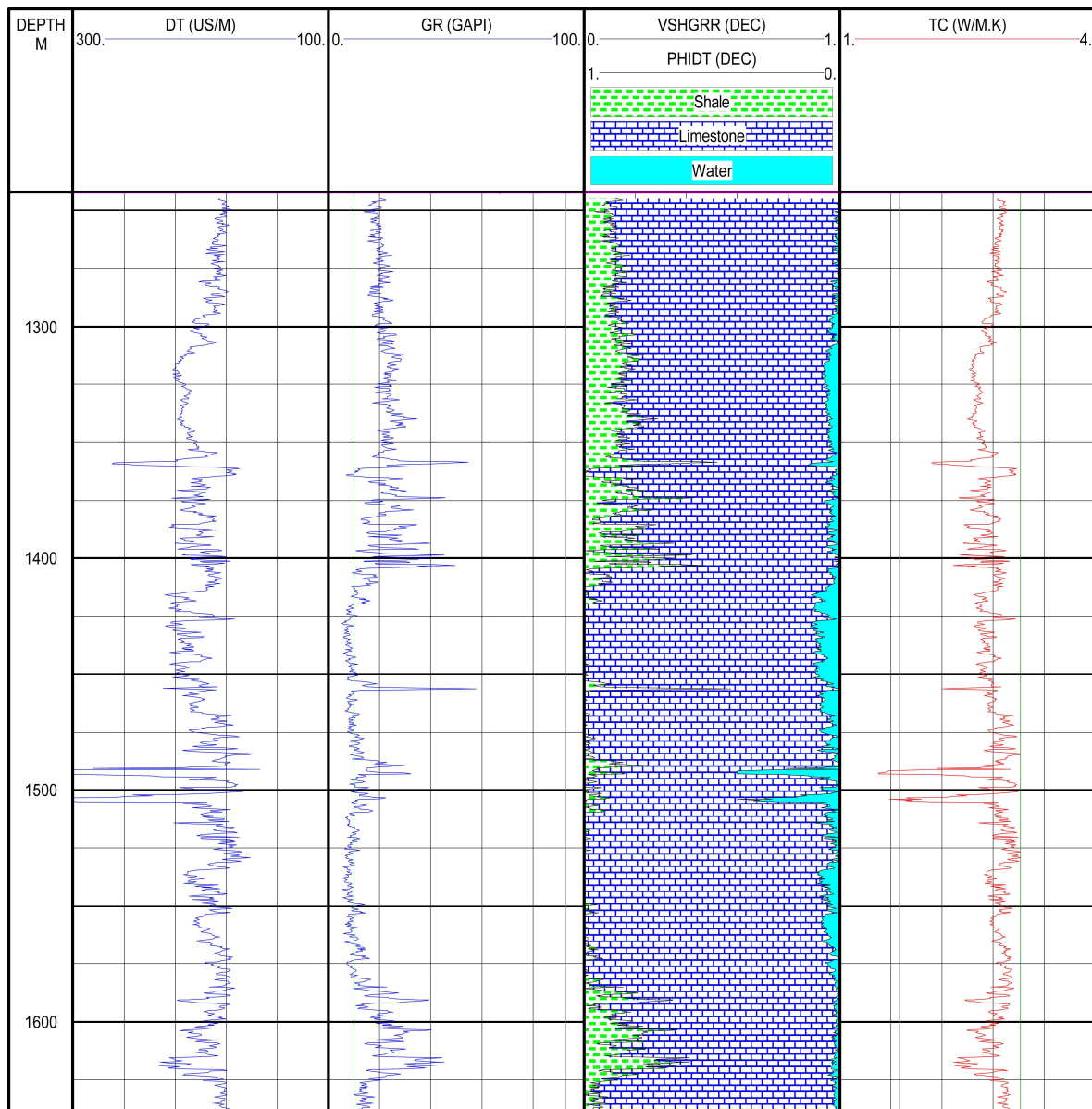


Abbildung 5.14: Berechnung der Wärmeleitfähigkeit (TC) aus den Bohrlochmessungen DT (spezifische Laufzeit akustischer Wellen) und GR (Gamma-Ray) für den Malm γ bis Malm ζ . Dargestellt ist eine Bohrung aus dem östlichen Randbereich des Untersuchungsgebietes. VSHGRR: Tonvolumen, berechnet aus Gammalog; PHIDT: Porosität, berechnet aus Laufzeit.

lativ gleich bleibenden lithologischen Verhältnisse zurückzuführen ist. Die durchschnittliche Wärmeleitfähigkeit für die gesamte Formation beträgt $2,74 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Die Formationen Malm α - γ lassen sich in betrachteten Bohrungen gut korrelieren und zeigen eine ähnliche Ausprägung. Lediglich in der Bohrung B-16 im westlichsten Bereich des Untersuchungsgebietes (vgl. Abbildung 3.6) ist der Malm etwas kalkiger ausgeprägt als in den östlicheren Bohrungen. Für den oberen Malm δ - ζ konnte anhand der Logs keine eindeutige Unterteilung vorgenommen werden. Hier treten im Gebiet Fazieswechsel zwischen Plattenkalken und Riffkalken auf, die aber nur geringen Einfluss auf die durchschnittlichen

Wärmeleitfähigkeiten der Formation haben (siehe Tabelle 5.7).

Einen größeren Einfluss hat das Auftreten von Klufthzonen, die in den Profilen durch geringmächtige Zonen geringerer Wärmeleitfähigkeit auffallen. Hier ist anzumerken, dass die berechneten Werte für den rein konduktiven Fall gelten. Die Gesamtwärmeleitfähigkeit des Gesteins wird durch den höheren Wassergehalt in den Klufthzonen erniedrigt. Für die Betrachtung im Sinne der geothermischen Nutzung ist davon auszugehen, dass der effektiv mögliche Wärmeentzug in geklüfteten, wasserführenden Zonen deutlich größer ist. Der Oberjura der Schwäbischen Alb ist durch erhebliche Verkarstungserscheinungen geprägt. In den betrachteten Bohrungen, die den Oberjura im Untergrund des Molassebeckens erschließen, zeichnet sich keine ähnlich ausgeprägte Verkarstung der Kalke ab. Auftretende Klufthzonen sind meist kleinräumig begrenzt. Die mittleren Porositäten (abgeleitet aus dem Sonic-Log) der gesamten Formation sind kleiner 5 %. Der Malm δ - ζ kann im betrachteten Gebiet als mäßig durchlässiger regionaler Aquifer betrachtet werden mit lokal stark variierenden Durchlässigkeiten. Nach Bertleff et al. (1988) werden für die Abfolgen des Malm δ - ζ Permeabilitätswerte von $6,7 \cdot 10^{-13}$ bis $6,7 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2$ genannt. Hydraulische Wegsamkeiten konzentrieren sich hier nur auf Klufth- und auf Karstzonen, wohingegen die Gesteinsmatrix als undurchlässig betrachtet wird. Die Auswertung von Permeabilitätsdaten, die an Bohrkernproben erzeugt wurden, ergab hiermit übereinstimmend für die Malmkalke durchschnittliche Permeabilitäten von $3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$. Insgesamt zeigt der obere Malm im Untersuchungsgebiet eine stetig nach Südosten zum Beckentiefsten abnehmende Permeabilität (Stober und Villinger, 1997). Dieser Trend hängt mit dem Übergang vom offenen zum bedeckten Karst und mit regionalen Faziesänderungen zusammen. Die darunter folgenden Mergelschichten des unteren Malms bilden insgesamt einen großräumig geschichteten Grundwasserstauer.

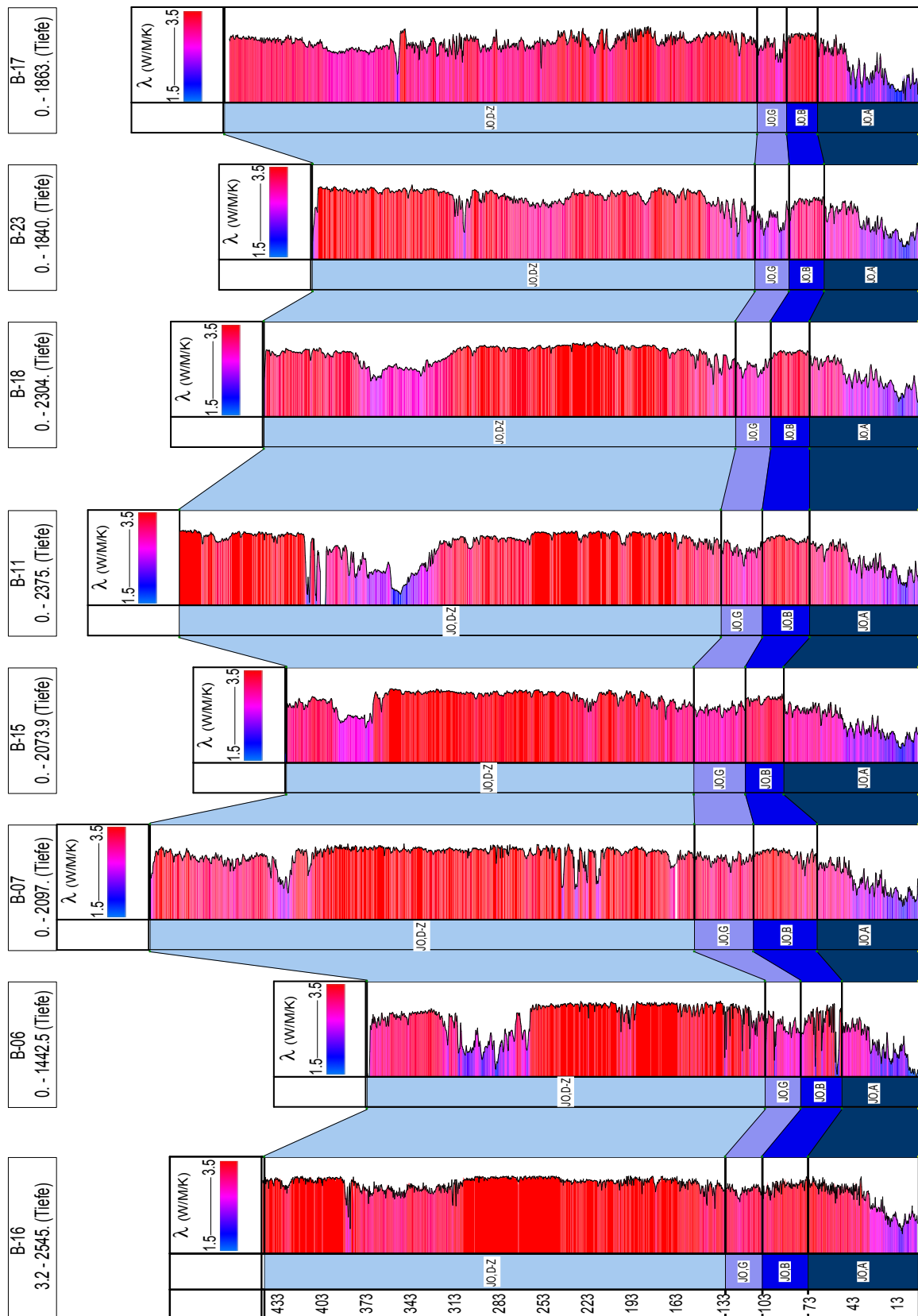


Abbildung 5.15: Berechnete Wärmeleitfähigkeitsprofile für den Oberjura. Die dargestellten Bohrungen liegen auf einem Ost-West-Profil (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. λ : Wärmeleitfähigkeit.

Tabelle 5.7: Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten im Oberjura.

Well	Top (m)	Bottom (m)	Net (m)	Min (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Max (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Mean (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Std Dev (W m ⁻¹ K ⁻¹)
B-03	2436,50	2929,00	492,62	1,99	3,10	2,94	0,20
B-04	1607,20	2031,90	424,82	1,76	3,07	2,70	0,31
B-06	481,00	855,00	374,11	1,43	3,10	2,74	0,35
B-09	1812,00	2249,90	438,02	1,15	3,03	2,67	0,27
B-10	1817,00	2318,00	501,12	1,42	3,11	2,80	0,34
B-13	1358,50	1704,90	346,51	1,45	3,11	2,72	0,27
B-15	1059,00	1486,90	428,02	1,80	3,05	2,72	0,28
B-16	1548,50	1992,00	443,62	1,91	3,10	2,88	0,22
B-17	1245,00	1712,40	467,52	1,55	3,09	2,68	0,27
B-18	1513,00	1956,90	444,02	1,80	3,07	2,73	0,26
B-22	55,20	281,40	224,40	1,51	3,11	2,42	0,33
B-23	1142,00	1552,90	411,02	1,76	3,07	2,70	0,29

In einem weiteren Schritt wurden die Logging-Daten auf Unterschiede im Hinblick auf die Tiefenlage der jeweiligen stratigraphischen Einheit untersucht. Der Oberjura tritt in den untersuchten Explorationsbohrungen in Tiefelagen zwischen 150 m und 2200 m auf. Abbildung 5.16 zeigt die berechneten statistischen Maßzahlen für die spezifische Laufzeit der Kompressionwelle im Oberjura. Hier zeigt sich eine Tendenz zu geringeren Laufzeiten mit der Tiefe. In den flachen Tiefenniveaus zeigt die Laufzeit zudem eine deutliche größere Variationsbreite als in tiefer liegenden Niveaus. Unterhalb von 1200 m zeigen die Messwerte geringere Variationen. Es ist davon auszugehen, dass in mit zunehmender Versenkungstiefe Risse und Klüfte geschlossen wurden. Für das Gammalog (Abbildung 5.17 kann innerhalb der Standardabweichung keine Tiefenabhängigkeit beobachtet werden. Lithologisch ist der Malm in allen Tiefenstufen gleich ausgebildet.

Für die Wärmeleitfähigkeiten ergeben sich nach Anwendung der Druck- und Temperaturkorrektur (siehe Abschnitt 4.2) geringfügige Veränderungen mit der Tiefe. Abbildung 5.18 zeigt die durchschnittliche Wärmeleitfähigkeit vor und nach Anwendung der Tiefenkorrektur.

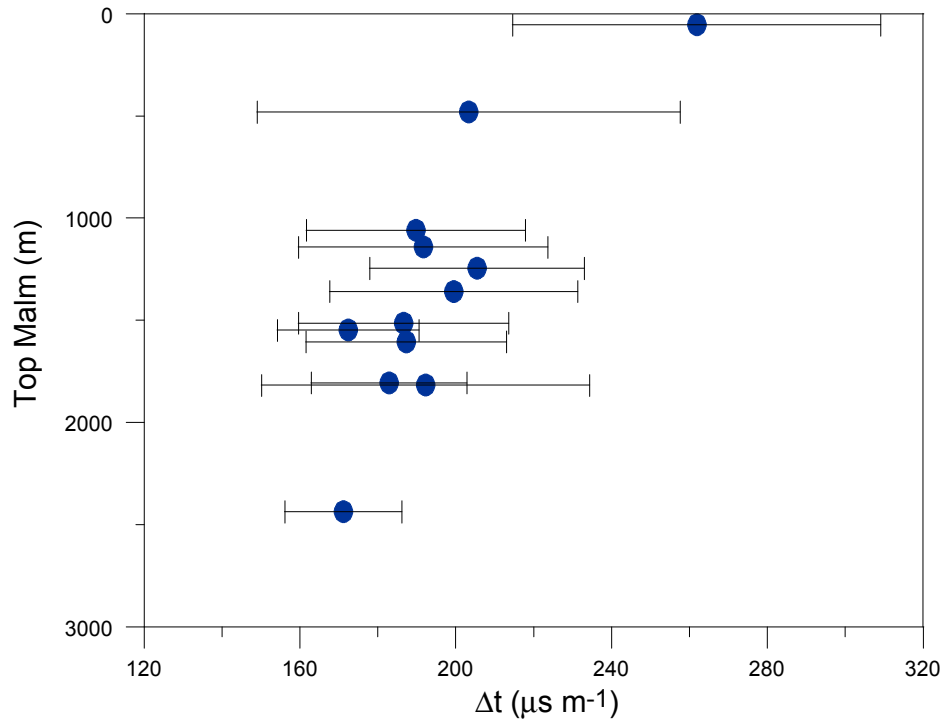


Abbildung 5.16: Mittelwert und Standardabweichung der spezifischen akustischen Laufzeiten Δt im Oberjura, berechnet für Bohrungen mit verschiedenen Tiefenlagen.

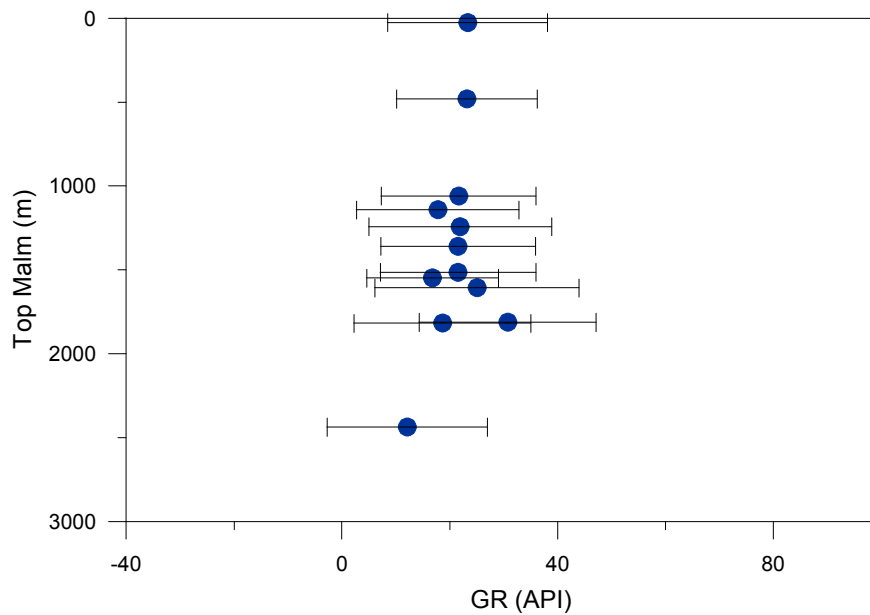


Abbildung 5.17: Mittelwert und Standardabweichung der Gammaaktivität (GR) im Oberjura berechnet für Bohrungen mit verschiedenen Tiefenlagen.

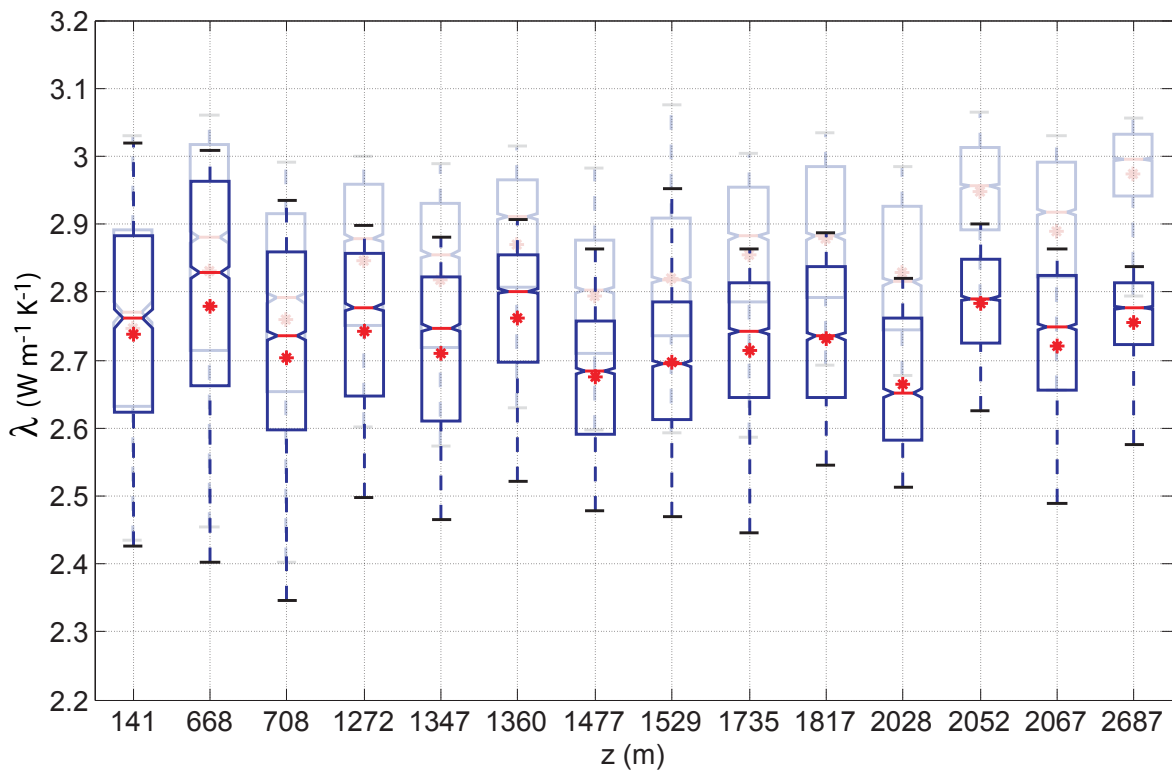


Abbildung 5.18: Wärmeleitfähigkeiten λ der Karbonate des Malms für verschiedene Tiefenstufen z unter Berücksichtigung der Druck- und Temperaturabhängigkeit und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen (roter Strich: Medianwert; roter Stern: Mittelwert; blaue Box: 25%- und 75%-Quartil; schwarze Begrenzungsstriche: 5%- und 95%-Perzentil). In Hintergrund sind die Werte ohne Berücksichtigung der Druck- und Temperaturabhängigkeit angedeutet.

5.3 Mitteljura (Dogger)

5.3.1 Geologische Übersicht des Mitteljura (Dogger)

Die Ablagerungsbedingungen im Mitteljura (Brauner Jura; Dogger) sind marin geprägt und charakterisiert durch häufige Fazieswechsel und eine unruhige und wechselhafte Sedimentation (Abbildung 5.19). Das Süddeutsche Becken verliert seine Verbindung zum norddeutschen Becken und wandelt sich zum Randmeer des tethyschen Mittelmeeres.

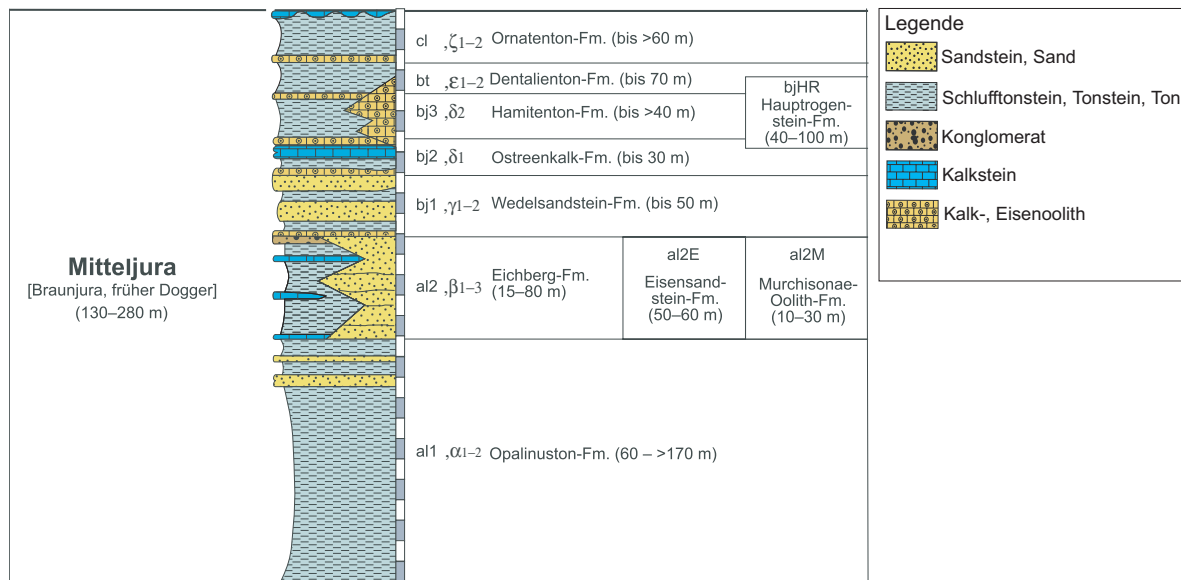


Abbildung 5.19: Musterprofil der Schichtenfolge des Mitteljuras (Dogger) in Baden-Württemberg (nach Villinger und Fischer, 2005). Die Abkürzungen (lateinische Buchstaben) beziehen sich auf die international gültige Stufengliederung (vgl. Tabelle 3.1) bzw. auf die historische Stufengliederung nach Friedrich August Quenstedt (griechische Buchstaben). Fm.: Formation.

Die *Opalinuston-Formation* an der Basis stellt eine monotone Schichtfolge aus dunklen Tonen und Tonmergeln mit Einschaltungen von Schwefelkies- und Mergelkalkkonkretionen dar. Ihr Sand- und Kalkgehalt nimmt zum Hangenden hin zu. Sie schließt oben mit einer nahezu geschlossenen Folge von Sandmergelbänken („Wasserfallschichten“) ab. Die Mächtigkeit der Opalinustone ist verhältnismäßig gleichbleibend und schwankt überwiegend im Bereich zwischen 80 m und 130 m. Die aufliegende *Eisensandstein-Formation* besteht aus Tonstein mit Sandfasern und zwischengeschalteten Sandsteinkomplexen sowie Eisenoolithflözen aus Brauneisen mit wechselndem Quarz- und Kalkgehalt. Die Sandsteinkörper bestehen im Wesentlichen aus feinkörnigen, eisenhaltigen Quarzsandsteinen. Die Mächtigkeit der Eisensandsteine erreicht mit bis zu 80 m ihr Maximum im Bereich der mittleren Schwäbischen Alb. Darüber folgt im Unterbajocium die *Wedelsandstein-Formation*, deren Basis von einem eisenoolithhaltigen Mergelkalkhorizont eingeleitet wird. Den Horizont der Wedelsandsteine stellen sandige Komplexe in der Mitte und im Westen der Schwäbischen Alb dar, deren Sandgehalt tendenziell nach Südwesten hin zunimmt. Im Bereich Ostwürttemberg bis Balingen schließt die Wedelsandstein-Formation mit dem harten Kalksandstein des Blaukalks ab. Die Formation zeigt Mächtigkeiten von wenigen Metern in der Ostalb bis zu maximal 50 m in der Westalb. Die Schichtfolge der *Ostreenkalk-Formation* im Mittelbajocium ist in der westlichen Schwäbischen

Alb als ein eisenoolithischer Kalkmergelkomplex ausgebildet, der durch Einschaltungen von Eisenoolithhorizonten gegliedert ist. In anderen Bereichen dominieren dunkle Tone und Tonmergel. Zwei solcher Eisenoolith-Horizonte markieren die Basis und den Abschluss der *Hamitenton-Formation*, die das gesamte Oberbajocium umfasst. Die Mächtigkeit des Mittel- und Oberbajociums beträgt in der westlichen Schwäbischen Alb um die bis zu 50 m und nimmt nach Nordosten hin ab, wo stellenweise nur wenige Meter erreicht werden. Es folgen die *Dentalienton-Formation* im Bathonium sowie die *Ornatenton-Formation* im Callovium, die zusammen die Oberen Braunjuratone darstellen. Sie bestehen aus dunklen Tönen und Tonmergeln, die mit eisenoolithischen Horizonten durchsetzt sind. Im Ornatenton sind Pyritkonkretionen angereichert. An der Grenze zum Oberjura häufen sich das Auftreten von Phosphoritknollen und Glaukonitführung. Die Mächtigkeiten der beiden Oberen Braunjuraton-Formationen schwanken über das gesamte Arbeitsgebiet sehr stark zwischen wenigen Metern und bis zu 70 m für die Dentalienton-Formation bei Blumberg und bis zu über 60 m für die Ornatenton-Formation.

5.3.2 Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen

Zur Logauswertung wurde im Mitteljura die Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6) als Referenzbohrung herangezogen. Die lithologische Abfolge entspricht weitgehend dem Standardprofil (Abbildung 5.19). Entsprechend der Gesteinsbeschreibung wurden vier Hauptgesteinstypen mit den Logs identifiziert (Abbildung 5.20): Tonsteine, siltige/mergelige Tonsteine, Sandsteine und Kalksteine/Kalksandsteine.

In allen betrachteten Bohrungen befinden sich an der Basis des Mitteljuras die mächtigen Opalinustone, die sehr homogen ausgebildet sind. Der Gammalog als wichtiger Lithologieindikator zeigt kaum Variationen innerhalb der Tone. Der Mittelwert des Gammalogs beträgt 95 ± 6 API für den Opalinuston in der Bohrung B-06. Charakteristisch für die Tonsteine im Dogger sind zudem lange Schalllaufzeiten von $t > 300$ s/m ($V_p < 3,3$ km/s) und sehr geringe Widerstände von $R_t < 10$ ohm m. Das Dichtelog zeigt nur selten größere Werte als $2,4$ g cm⁻³. Die kalkigen Einschaltungen (Kalksteine, Kalksandsteine) sind meist nur geringmächtig und treten durch ihre höheren Dichten, V_p -Werte und Widerstandswerte hervor.

Die Sandsteine des Dogger sind im Gegensatz zu den kalkigen Einschaltungen vielfach porös ausgebildet. Neben ihrem geringen Gammawert, fallen sie durch niedrige Widerstandswerte und negative Anomalien im SP-Log auf. Letzteres zeigt in den Sandsteinen den Aufbau von negativen Diffusionspotenzialen an, wie sie typischerweise beim Kontakt salinärer Formationswässer mit der Bohrspülung in permeablen Horizonten auftreten. Die Wässer des Dogger $\beta - \zeta$ sind im Bereich der Westmolasse als mehr oder weniger stagnierende Wässer vom stark mineralisierten Na-Cl-(SO₄)-Typ zu bezeichnen, welche mit zunehmenden Chloridkonzentrationen in die Opalinuston-Porenwässer des Dogger α übergehen. Für Porenwässer des Opalinuston werden in der Literatur Mineralisationen von 13-14 g L⁻¹ und höher genannt (Bertleff und Watzel, 2002; Anonym, 2002).

Über dem Dogger β folgen Tonsteinserien, die im Vergleich zum liegenden Opalinuston eine deutlich sandige, mergelige Komponente aufweisen und von vereinzelt Kalkstein- bzw. Kalksandsteinbänken durchsetzt sind. Hinweise auf effektive Porositäten, wie sie im Dogger β beobachtet wurden, ergeben sich für diese Formationen nicht.

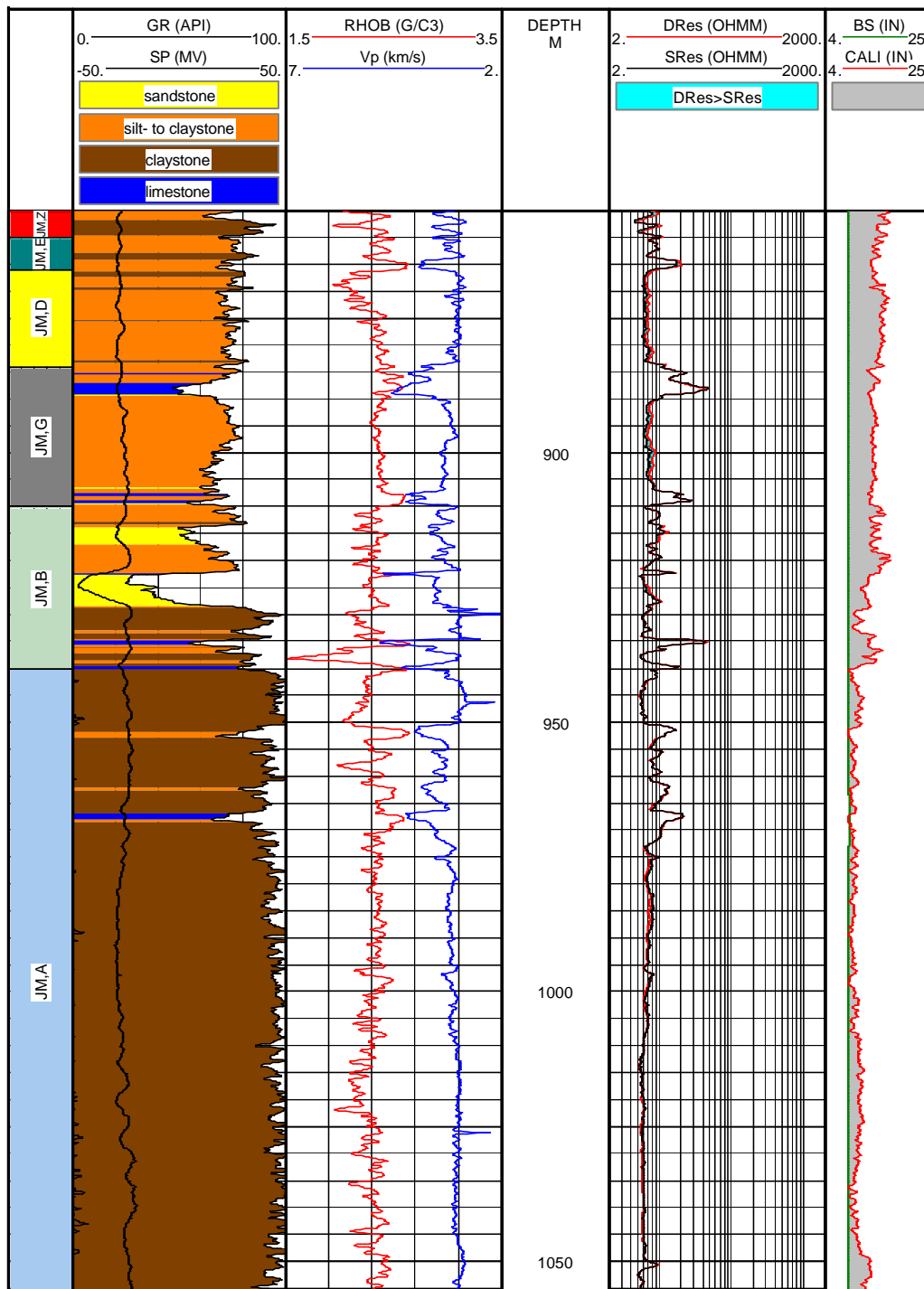


Abbildung 5.20: Bohrlochmessungen im Bereich des Mitteljura der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Dargestellt sind die nach den Logs abgegrenzten Hauptgesteinstypen. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität; SP: Eigenpotential; RHOB: Gesamtdichte; DT: Laufzeit der Kompressionswelle; DEPTH: Bohrlochtiefe; DRes: spezifischer elektrischer Widerstand (deep); SRes: spezifischer elektrischer Widerstand (shallow); BS: Sollkaliber; Cali: Kaliber.

Table 5.8: Durchschnittswerte (AVG) und Standardabweichungen (STD) der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Mitteljura. GR: Gammaaktivität; RHOB: Gesamtdichte; VP: Geschwindigkeit der Longitudinalwelle; PEF: photoelektrischer Effekt.

	GR (API)		RHOB (g cm ⁻³)		VP (km/s)		PEF (barns/el)	
	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD
Sandstein	43,88	11,38	2,33	0,08	3,51	0,16	2,30	0,37
Silt- Tonstein	71,87	4,65	2,35	0,13	3,30	0,26	2,95	0,67
Tonstein	94,02	5,19	2,28	0,12	3,12	0,22	2,47	0,32
Kalk-(sand)stein	61,21	11,94	2,51	0,09	4,28	0,21	3,81	0,71

5.3.3 Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten

Im Vergleich zum Oberjura liegen für den Mitteljura deutlich weniger Messwerte vor. Kernmaterial aus den Explorationsbohrungen der Kohlenwassertoffindustrie entstammt nahezu ausschließlich Sandsteinen des Dogger β . Bedingt durch die vorwiegend tonige Ausbildung der anderen Formation sind die Aufschlussverhältnisse schlecht und Oberflächenbeprobungen konnten nur eingeschränkt durchgeführt werden. Aus diesen Formationen stand nur wenig Probenmaterial aus Flachbohrungen zur Verfügung.

Im Rahmen der durchgeführten petrophysikalischen Untersuchungen wurden Sandsteine des mittleren Doggers vermessen sowie Tonsteine des Opalinus- und Ornatentons. Die quarzreichen Sandsteine sind durch hohe Wärmeleitfähigkeiten gekennzeichnet. Für sie wurde ein geometrisches Mittel für die Matrixwärmeleitfähigkeit von $\lambda = 4,76 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ bestimmt. Messwerte für gesättigte Proben variieren zwischen $2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Die Tonsteine hingegen sind durch sehr niedrige Wärmeleitfähigkeiten gekennzeichnet. Hier beträgt der Mittelwert für die Matrixleitfähigkeit $1,66 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Es ist davon auszugehen, dass die Variation der Wärmeleitfähigkeit im Mitteljura vorrangig an den wechselnden Anteil der sandigen und tonigen Komponenten geknüpft ist. Die kalkigen Anteile wurden aufgrund ihres untergeordneten Auftretens als vernachlässigbar betrachtet. Neben diesen matrixabhängigen Effekten wird die Wärmeleitfähigkeit in den Sandsteinen und Tonsteinen durch die Gesteinsporosität beeinflusst. Die im Labor gemessenen Porositäten erreichen in den Sandsteinen Werte bis zu 25 %. Auch für die Tonsteine des Dogger α (Opalinuston) werden in der Literatur (Heitzmann und Bossart, 2001) Porositäten von bis zu 18 % erwähnt, wobei es sich hierbei jedoch nicht um effektive Porositäten handelt. Die Wasserwegsamkeiten des Opalinustons sind extrem gering. Nach Laborexperimenten und Bohrlochtests ergeben sich für den Opalinuston im ungestörten Zustand Permeabilitäten von 10^{-17} m^2 bis 10^{-21} m^2 . Die niedrigeren Werte gelten für den Wasserfluss senkrecht, die höheren parallel zur Schichtung. Diese Anisotropie erklärt sich aus den siltigen und mergeligen Einschaltungen (Hufschmied, 2005).

In Analogie zur Vorgehensweise im Oberjura wurde für die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit ein Dreikomponentensystem (Sandstein, Ton, Wasser) gewählt, wobei die an Probenmaterial ermittelten durchschnittlichen Matrixwärmeleitfähigkeiten (s.o.) als Startwerte festgesetzt wurden. Abbildung 5.21 zeigt die berechnete Wärmeleitfähigkeit für den Mitteljura der Bohrung B-06. Die Wärmeleitfähigkeit wurde aus den Komponenten Sandstein, Ton und Wasser als geometrisches Mittel berechnet. Die Bestimmung der Porosität erfolgte über das Sonic-Log. Hier ist anzumerken, dass die Bestimmung der Porositäten in den sandigen Formationen mit einigen Unsicherheiten belegt ist. Bedingt durch die bereichsweise hohen Eisengehalte der Dogger Sandsteine variieren die Reindichten

erheblich. Aus Labormessungen sind Reindichten von bis $3,2 \text{ g cm}^{-3}$ für die eisen-reichen Lagen dokumentiert. Es ist anzunehmen, dass die Veränderungen im Mineralbestand auch Auswirkungen auf die Matrixlaufzeiten haben. Bei der Berechnung der Porosität konnte dies jedoch nicht im Detail berücksichtigt werden, da eine Abgrenzung der eisenreichen Lagen allein aus den Logging-Daten nicht möglich ist. Für die Sandsteine wurden einheitlich Matrixlaufzeiten von $165 \mu\text{s m}^{-1}$ ($V_p = 6,06 \text{ km s}^{-1}$) angesetzt. Die errechneten Porositäten erreichen mit diesem Ansatz in den sandigen Lagen der Bohrung B-06 Maximalwerte von 15 %, wobei davon auszugehen ist, dass in den eisenreichen Lagen tendenziell zu geringe Werte und in eisenarmen Lagen tendenziell zu hohe Werte angezeigt werden. Geht man nach Literaturwerten (Schön 2004) von einer möglichen Variation der Laufzeit Δt für Sandsteine von $142 \mu\text{s m}^{-1}$ - $182 \mu\text{s m}^{-1}$ (V_p 5,5 - 7 km s^{-1}) aus, ergeben sich Abweichungen der berechneten Porositäten hin zu 12,0 % bzw. 18,5 %. Diese möglichen Abweichungen wirken sich bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit nur geringfügig aus und können als vernachlässigbar betrachtet werden. Als Matrixlaufzeit für die Tone wurde zunächst die in den homogenen Abfolgen des Opalinuston ermittelte Laufzeit von $348 \mu\text{s m}^{-1}$ gewählt. Bei dieser Vorgehensweise werden die Wassergehalte der Tone nicht berücksichtigt und nur die effektiven Porositäten für die Sandsteineinschaltungen berechnet. Die abgeleiteten Wärmeleitfähigkeiten variieren nach dieser Berechnungsmethode im gesamten Mitteljura der Bohrung B-06 zwischen $1,18 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $3,75 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Aufgrund des hohen Tonanteiles ergibt sich ein geringer Durchschnittswert für λ von $1,97 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

Um die Zuverlässigkeit der oben gewählten Eingangsparameter zu testen, zeigt Abbildung 5.22 beispielhaft einen Vergleich zwischen gemessenen und abgeleiteten Porositäten und Wärmeleitfähigkeiten für die Bohrung B-11 (siehe Anhang E). Die Kernmessungen wurden an einem eisenreichen Sandstein aus dem Dogger β von einem unabhängigen Institut (GGA Hannover) durchgeführt. Die Abweichungen zwischen den Kernmessungen und aus den Logs abgeleiteten Werten lassen sich hier durch die geringe Mächtigkeit des Sandsteinlager und der daraus resultierenden Schultereffekten erklären. Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Integrationsvolumina ist die Übereinstimmung zwischen beiden Ergebnissen sehr gut.

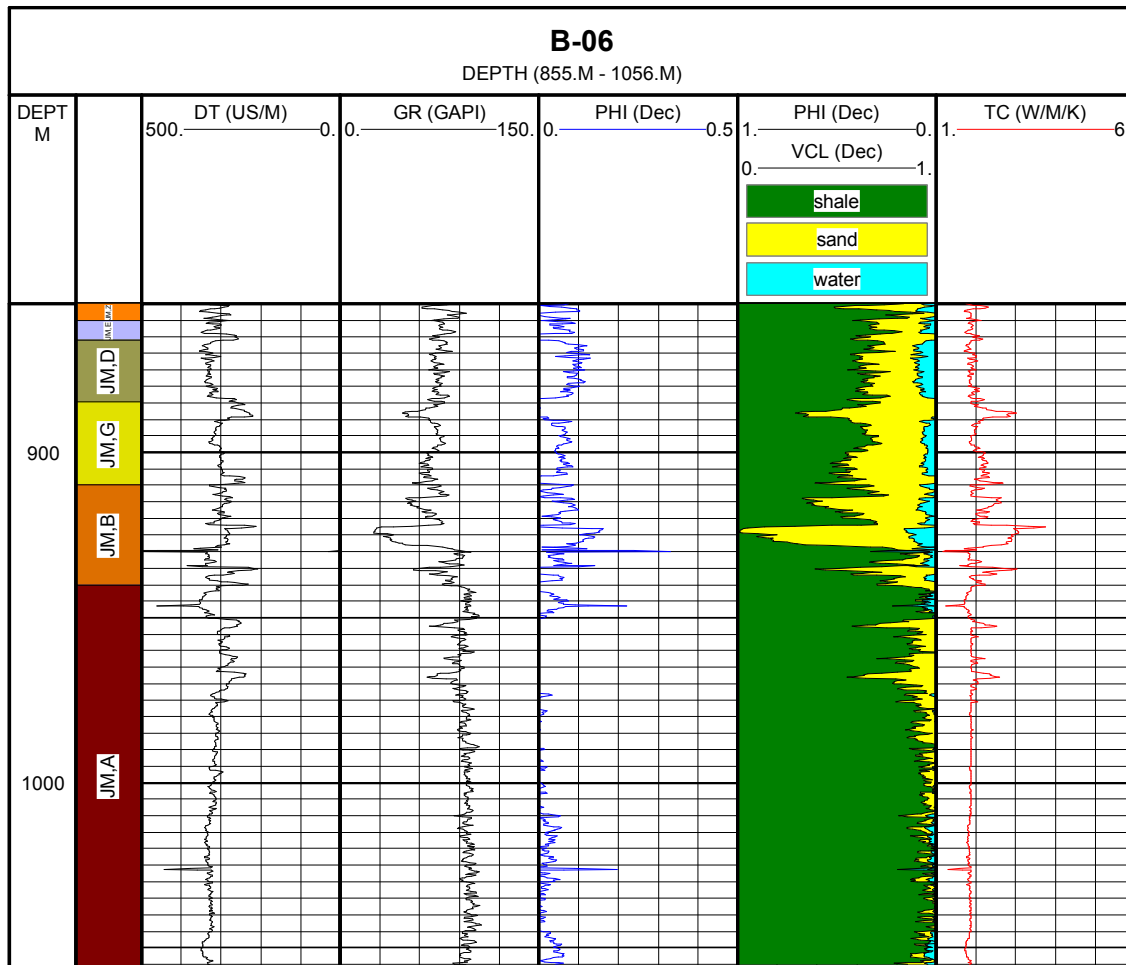


Abbildung 5.21: Berechnung der Wärmeleitfähigkeit (TC) aus den Bohrlochmessungen DT (spezifische Laufzeit akustischer Wellen) und GR (Gamma-Ray) für den Mitteljura der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. DEPTH: Bohrlochtiefe; PHI: Porosität; VCL: Tonvolumen.

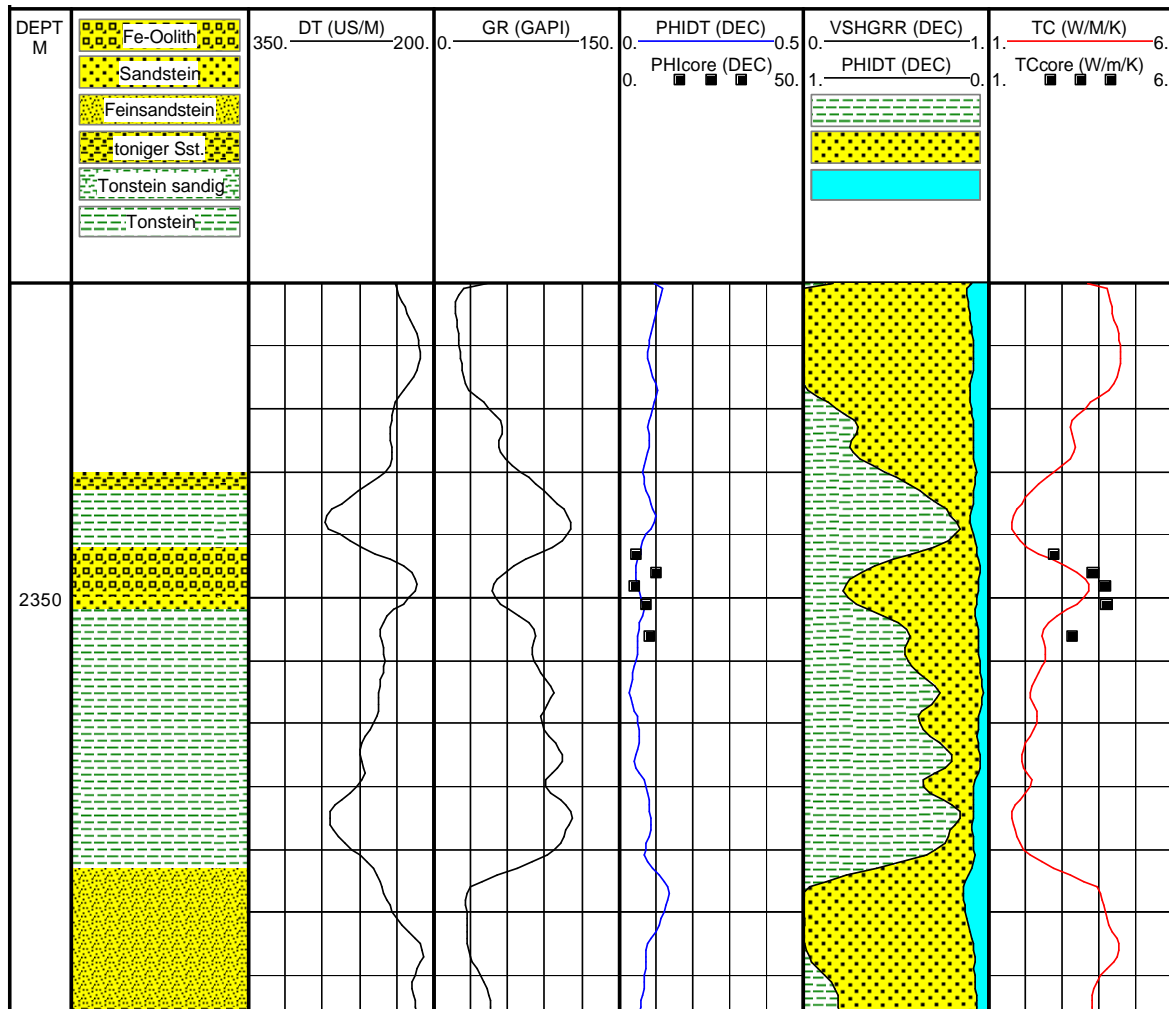


Abbildung 5.22: Vergleich der berechneten Porositäten und Wärmeleitfähigkeiten mit Messwerten (schwarze Quadrate) an Kernmaterial der Bohrung B-11 (vgl. Anhang E). DEPTH: Bohrlochtiefe; DT: Laufzeit der Kompressionswelle; GR: Gammaaktivität; PHIDT: Porosität, berechnet aus Laufzeit; PHICore: Porosität aus der Bohrkernmessung; VSHGRR: Tonvolumen, berechnet aus Gammalog; TC: Wärmeleitfähigkeit; TCcore: Wärmeleitfähigkeit aus der Bohrkernmessung.

5.3.4 Geothermische Eigenschaften des Mitteljura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen

Versenkungstiefe

Im Untersuchungsgebiet wurde der Mitteljura in sehr unterschiedlichen Tiefenstufen (300 m bis 3000 m) angetroffen. Speziell für die Tone stellte sich hier die Frage, inwiefern die Versenkungstiefe Auswirkung auf den Wassergehalt und somit auch auf die berechnete Wärmeleitfähigkeit der Formation hat. Abbildung 5.23 zeigt die Abhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit des Opalinuston von der Versenkungstiefe. Die signifikante Abnahme der durchschnittlichen akustischen Laufzeit von $320 \mu\text{s m}^{-1}$ auf $250 \mu\text{s m}^{-1}$ mit der Tiefe kann eindeutig auf den Auflastdruck zurückgeführt werden. In Anbetracht der homogenen Ausbildung des Opalinustones können lithologische Effekte weitgehend vernachlässigt werden. Nach Abbildung 5.23 scheint die maximale Verdichtung der Tonsteine schon bei einer Tiefe von 2,2 km erreicht zu werden. Wenn man davon ausgeht, dass in dieser Tiefe eine maximale Verdichtung erreicht ist und der Wert von $250 \mu\text{s m}^{-1}$ die durchschnittliche Matrixlaufzeit für einen kompakten porenfreien Tonstein darstellt, ergeben sich erhebliche Differenzen für die Porositäten und somit den Wassergehalt der Tonsteine in höheren Tiefenlagen. In der nordwestlich gelegenen Bohrung B-22 (vgl. Abbildung 3.6) werden für eine Tiefenlage 400 m bis 550 m durchschnittliche Porositäten von 18 % berechnet, was gut mit den angegebenen Literaturwerten übereinstimmt. Durch lineare Anpassung ergibt sich eine Reduzierung der Porositäten im Opalinuston bis 2 km Tiefe (z) nach:

$$\phi_{shale}(-) = 0.21 - 6.94 \cdot 10^{-5} \cdot z(m) \quad (5.6)$$

Extrapoliert an die Erdoberfläche ergeben sich hieraus Porositäten von 21 % und eine durchschnittliche Reduzierung der Porosität um etwa 0,7 % pro 100 m (Abbildung 5.24). Diese Veränderung in der Porosität und dem Wassergehalt wirken sich auf die Wärmeleitfähigkeit aus. Abbildung 5.25 zeigt eine Erhöhung der durchschnittlichen Wärmeleitfähigkeit des Dogger α mit der Tiefe um ca. 20 %. Hier ist zu beachten, dass diese Abbildung lediglich die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Porosität beschreibt.

Faziesveränderungen

Die berechneten Wärmeleitfähigkeiten wurden im Hinblick auf laterale Veränderungen der Fazies untersucht. Hierzu wurden stratigraphische Vergleiche durchgeführt. Anhand des Gammalogs können die größeren Untereinheiten des Mitteljura eindeutig abgegrenzt und korreliert werden. Dies gilt speziell für die auf einem West-Ost-Profil befindlichen Bohrungen, die in Abbildung 5.26 dargestellt sind. Die Mächtigkeit des Mitteljura variiert in diesem Profil zwischen 180 m im westlichen Bereich und 120 m im östlichen Profilabschnitt. Dies folgt der Verbreitungsgrenze des Mitteljura, dessen Mächtigkeiten nach Südosten hin abnehmen. Die größten Mächtigkeiten mit > 270 m wurden in der Bohrung B-22 erbohrt (siehe Abbildung 3.6). Der Opalinuston ist in den betrachteten Bohrungen bezüglich seiner Lithologie sehr einheitlich ausgebildet. Eine faziesabhängige Variation der Wärmeleitfähigkeit kann für den Dogger α somit weitestgehend ausgeschlossen werden. Mit Übergang zum Dogger β ist der Ablagerungsraum durch unruhigere, oftmals wechselnde Sedimentationsbedingungen gekennzeichnet. Dies zeigt sich im Gammalog, das kleinräumige Sand- und Tonsteinwechsel anzeigt, die nur bedingt zwischen den Bohrungen korreliert werden können. Insgesamt kann in den Bohrungen aber keine systematische Veränderung der Fazies beobachtet werden (vgl. Anhang D). Dementsprechend zeigen die berechneten durchschnittlichen Wärmeleitfähigkeiten für den Mitteljura nur relativ geringe

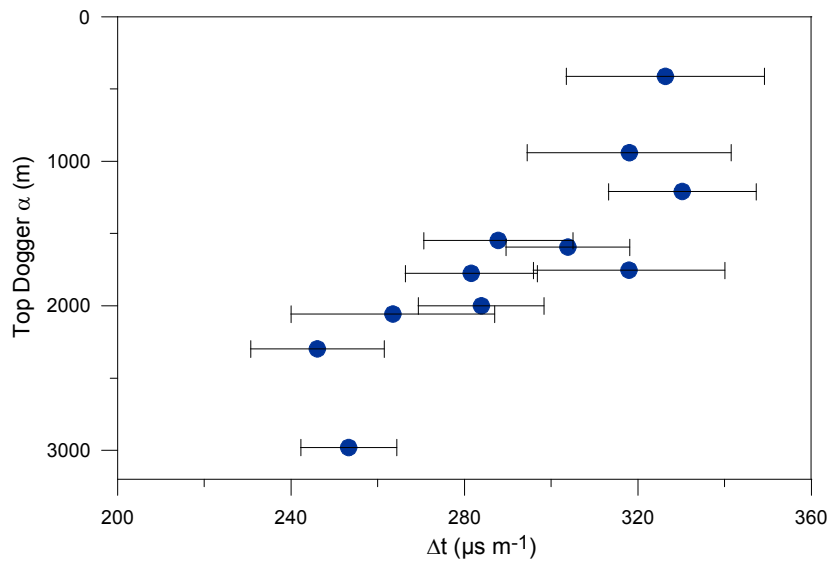


Abbildung 5.23: Abhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit Δt der Tonsteine von der Versenkungstiefe. Dargestellt sind Mittelwerte und Standardabweichung der akustischen Laufzeit im Dogger α (Opalinuston) berechnet für die betrachteten Bohrungen im Untersuchungsgebiet.

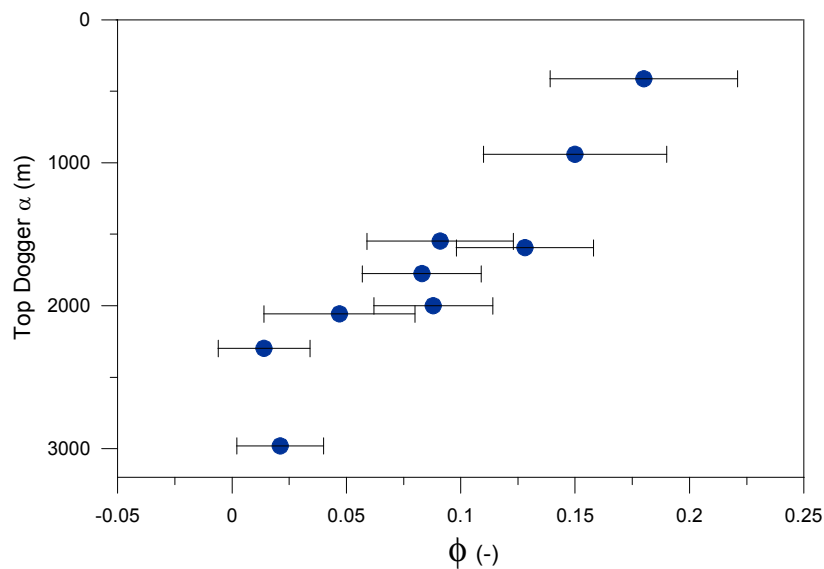


Abbildung 5.24: Abhängigkeit der Porosität ϕ der Tonsteine von der Versenkungstiefe. Dargestellt sind Mittelwerte und Standardabweichung der Porosität im Dogger α (Opalinuston) berechnet für die betrachteten Bohrungen im Untersuchungsgebiet.

Unterschiede (Tab. 5.9). Die aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten für die ausgewählten Explorationsbohrungen sind in Abbildung 5.27 dargestellt.

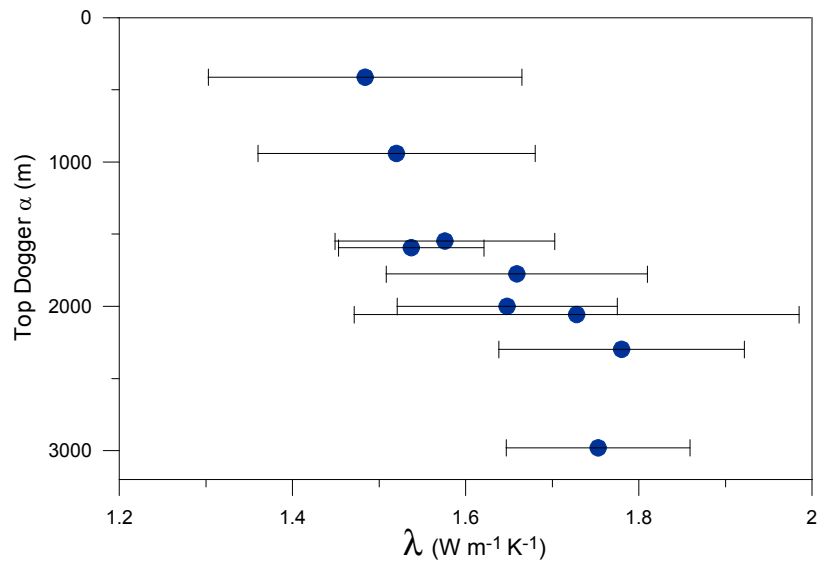


Abbildung 5.25: Abhängigkeit der berechneten Wärmeleitfähigkeiten λ des Opalinustons von der Versenkungstiefe. Dargestellt sind Mittelwerte und Standardabweichung berechnet für Bohrungen in verschiedenen Tiefenlagen.

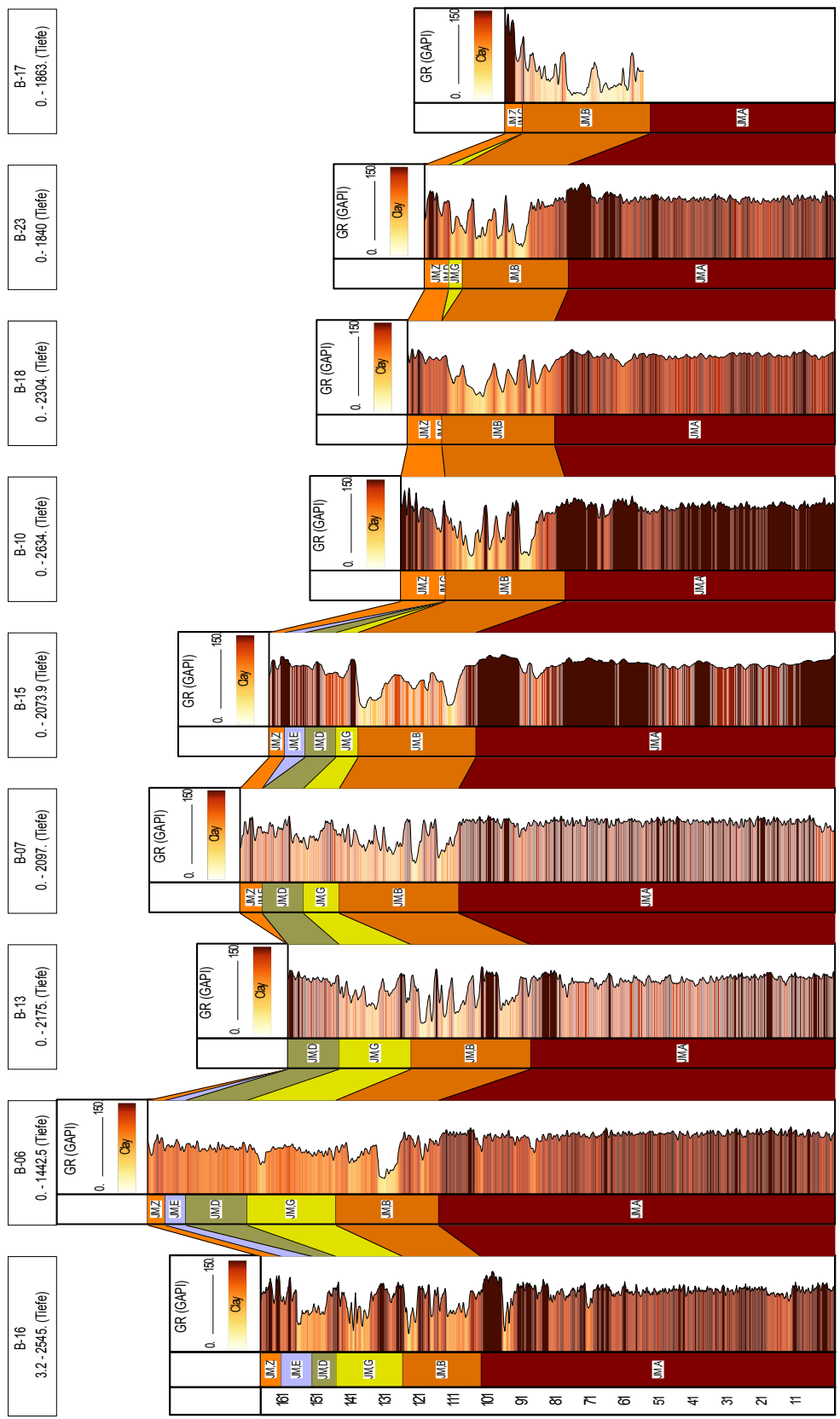


Abbildung 5.26: Stratigraphische Abfolgen des Mitteljuras in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens. Die Bohrungen sind auf einer West-Ost-Profilinie angeordnet (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität.

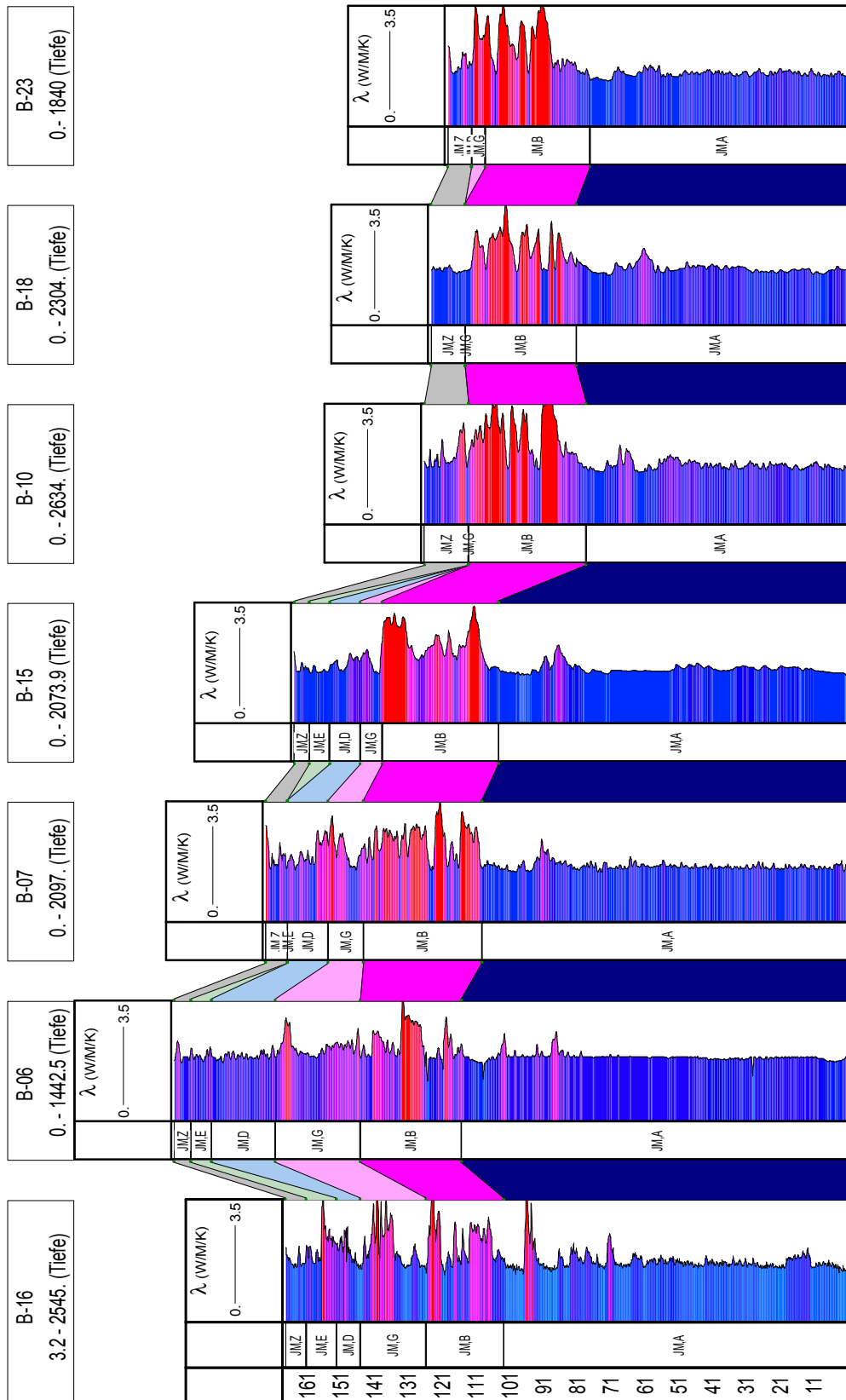


Abbildung 5.27: Aus den Logs berechnete Wärmeleitfähigkeiten (λ) für die Bohrungen in Abbildung 5.26. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben.

Tabelle 5.9: Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten für den gesamten Mitteljura.

Well	Top (m)	Bottom (m)	Net (m)	Min $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Max $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Mean $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	Std Dev $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
B-03	2938,5	3051	113	1,57	4,33	2,20	0,78
B-06	855	1056	201	1,19	3,56	1,81	0,35
B-07	1621	1795	174	1,44	3,47	1,85	0,40
B-09	2250,5	2397	147	1,55	3,60	1,93	0,38
B-10	2302	2429	127	1,52	4,57	1,99	0,53
B-13	1710,9	1865	154	1,44	4,07	1,87	0,46
B-15	1487,5	1653	166	1,38	3,41	1,76	0,40
B-16	1993	2161	168	1,34	3,96	1,89	0,43
B-18	1957	2082	125	1,44	3,73	1,80	0,37
B-22	281,5	560	279	1,16	3,08	1,52	0,25
B-23	1553	1673	120	1,33	3,87	1,80	0,52

5.4 Unterjura (Lias)

5.4.1 Geologische Übersicht des Unterjura (Lias)

Die im Oberen Keuper eingeleitete marine Transgression setzte sich im Unterjura (Schwarzer Jura; Lias) fort. Das Jurameer wurde zu dieser Zeit begrenzt vom Böhmischem Land im Osten und vom Vindelizischen Land im Süden. Der Schwarze Jura setzt sich vorwiegend aus dunklen Tonen und grauen Mergeln zusammen (Abbildung 5.28). Lagenweise sind auch sandige (Lias α) und kalkige Schichtpakete (Lias α und δ) zwischengeschaltet.

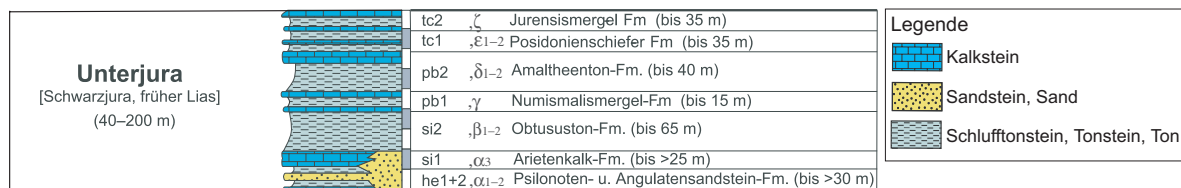


Abbildung 5.28: Musterprofil der Schichtenfolge des Unterjuras (Lias) in Baden-Württemberg (nach Villinger und Fischer, 2005). Die Abkürzungen (lateinische Buchstaben) beziehen sich auf die international gültige Stufengliederung (vgl. Tabelle 3.1) bzw. auf die historische Stufengliederung nach Friedrich August Quenstedt (griechische Buchstaben). Fm.: Formation.

Der Unterjura beginnt im Liegenden mit den *Pylonotenton*en (Lias α 1) und den *Angulatenton*en bzw. *-sandsteinen* (Lias α 2), angefangen mit einer harten, dunkelgrauen Kalkbank („Pylonotenbank“), gefolgt von Tonen und Tonmergeln mit wechselndem Sandgehalt, die im Übergang zum Hangenden nach einer sandigen Kalkbank dunkel gefärbt sind und eingeschaltete Kalksandsteinbänke aufweisen. Im Bereich Württembergs sind in dieser Serie die feinkörnigen, grauen und kalkigen Angulatensandsteine ausgebildet. Die darüber folgenden *Arietenschichten* (Lias α 3) stellen eine Sequenz aus Kalkbänken und zwischengeschalteten Schiefer-tonlagen dar. Der gesamte Lias α ist im Bereich der Donau südwestlich von Ulm am mächtigsten ausgebildet und erreicht dort teilweise Mächtigkeiten bis über 40 m (Abbildung 5.29).

Die anschließende *Obtususton-Formation* beinhaltet vorwiegend dunkelgraue Tone und Tonmergel mit häufig auftretenden Toneisensteinkonkretionen, deren Feinsand- und Glimmergehalt zum Hangenden hin zunimmt. Die aufliegende *Numismalmergel-Formation* mit maximal über 10 m Mächtigkeit stellt eine graue Mergelfolge mit zwischengeschalteten Mergelkalkbänken dar. Darauf folgt die *Amaltheenton-Formation* mit dunkelgrauen Tonen und Tonmergeln, in die vereinzelt Mergelkalkbänke eingeschaltet sind. Die Formation wird nach oben hin von einer nahezu geschlossenen Folge von Mergel- und Mergelkalkbänken abgeschlossen. Ihre Mächtigkeit variiert stark und erreicht selten über 20 m. Die *Posidonienschiefer* darüber (Lias Epsilon) sind schwarzgraue, schiefrige, bituminöse Tonmergel, in deren Mittelteil einzelne Mergelkalkbänke eingeschaltet und die mit kalkreicheren, feinstschichtigen Zwischenlagen durchsetzt sind. Sie sind sowohl mit dispers verteiltem als auch konkretionärem Schwefelkies angereichert. Darüber hinaus enthalten sie organischen Kohlenstoff von bis zu knapp 10 %. Ihre Mächtigkeit liegt in der vollständig erhaltenen Sequenz um die 10 m. Der Unterjura endet mit der *Jurensismergel-Formation*. Sie umfasst eine Wechselfolge von grauen Mergeln und vorwiegend knollig ausgebildeten Mergelkalkbänken. Nur vereinzelt wird hier eine Mächtigkeit von über 10 m beobachtet.

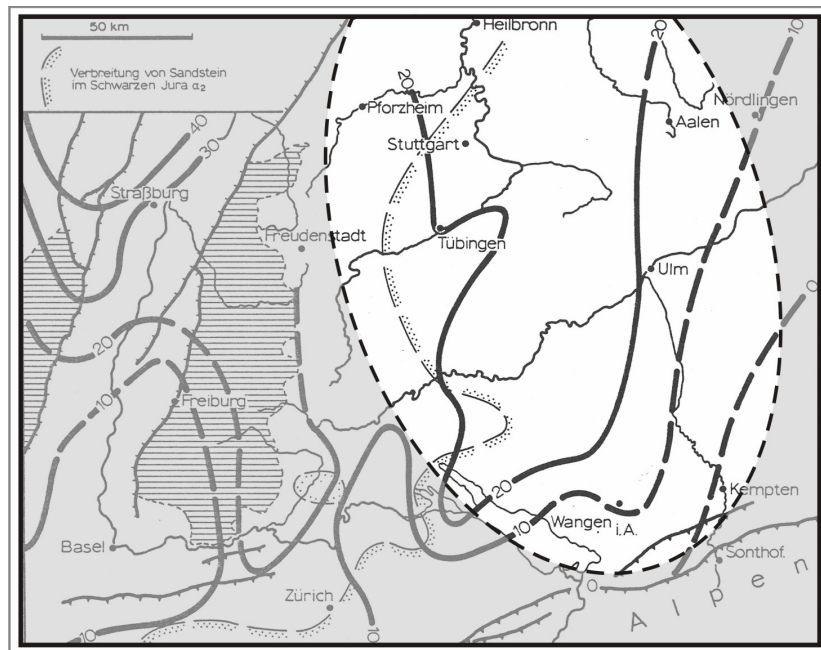


Abbildung 5.29: Mächtigkeit und Verbreitung des Unterjuras (hier: Lias α) in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert (nach Villinger und Fischer, 2005).

5.4.2 Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen

Die Bohrlochmessungen aus der Referenzbohrung B-06 (Abbildung 5.30) spiegeln die Abfolge des Standardprofils weitgehend wieder (vgl. Abbildung 5.28). Bedingt durch die südliche Position der Bohrung ist der Lias α hier betont sandig ausgebildet. Nach Kernbeschreibungen handelt es sich um Feinsandsteine, die bereichsweise Porositäten von bis zu 10 % aufweisen können. Darüber folgen Serien von Tonsteinen und Tonmergeln mit wechselnden Kalkanteilen.

Entsprechend der Kern- und Bohrkleinbeschreibungen wurden vier Hauptgesteinstypen mit den Logs abgegrenzt (Abbildung 5.30): Tonsteine, Tonmergel, Kalkmergel/Kalksteine und Sandsteine. Die Tonsteine lassen sich wie erwartet durch ihr hohes Gammalog (> 80 API) von den kalkigen und sandigen Formationen abgrenzen. Insgesamt ist die natürliche Radioaktivität der Tonsteine hier etwas höher als in den Doggertonsteinen. Dies kann auf den höheren Anteil an organischem Material zurückgeführt werden. Schwarzschiefer, die unter anoxischen Bedingungen gebildet werden, sind für ihre höhere Radioaktivität bekannt und oftmals durch starke Anomalien gekennzeichnet. Verursacht wird das sowohl durch die sekundären Anreicherungen von Uran in organischen Tönen als auch durch die Akkumulation von Uranionen unter reduzierenden Bedingungen, wie sie in pyritführenden Sedimenten vorliegen.

Sandsteine treten in der Bohrung B-06 nur im Lias α der Angulaten und Arietenschichten auf. Nach Kernbeschreibungen handelt es sich um fein- bis mittelkörnige, gut sortierte Sandsteine, die in der Regel ein karbonatisches Bindemittel aufweisen. Die Sandsteine treten oftmals im engräumigen Wechsel mit Muschelschilllagen auf. Die Wechsel liegen zum Teil unter der Auflösungsgrenze der Bohrlochmessungen. Die Sandsteine bzw. Kalksandsteine des Lias sind in der Bohrung B-06 porös ausgebildet. Neben ihrem geringen Gammalog fallen sie durch negative Anomalien im SP-Log auf, was einen Hinweis auf stark mineralisierte Formationswässer liefert. Ebenso wie die Wässer des Mitteljuras sind die Formationswässer des Lias im Bereich der Westmolasse als mehr oder weniger stagnierende Wässer

Tabelle 5.10: Durchschnittswerte (AVG) und Standardabweichungen (STD) der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Unterjura. GR: Gammaaktivität; RHOB: Gesamtdichte; VP: Geschwindigkeit der Longitudinalwelle; PEF: photoelektrischer Effekt.

	GR (API)		RHOB (g cm ⁻³)		VP (km s ⁻¹)		PEF (barns/el)	
	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD
Sandstein	44,53	6,63	2,49	0,11	4,18	0,69	3,12	0,26
Kalkstein bis Kalkmergel	64,40	5,55	2,58	0,08	4,21	0,48	4,49	0,27
Tonmergel	74,26	4,71	2,52	0,01	3,99	0,49	3,64	0,49
Tonstein	95,94	8,80	2,44	0,09	3,39	0,39	3,05	0,67

vom stark mineralisierten Na-Cl-(SO₄)-Typ zu bezeichnen (Pfeifer, 2005).

Über den Arieten- und Angulatenschichten des Lias α folgen Tonsteinserien, die von Kalkstein- bzw. Kalkmergelbänken durchsetzt sind. Hinweise auf effektive Porositäten ergeben sich für diese Formationen nicht. Zur Abgrenzung der karbonatischen Einschaltungen eignet sich der photoelektrische Effekt. In Bereichen mit höheren Karbonatgehalten werden Werte über 4 barns/el erreicht. Dies ist zum Beispiel im Tiefenbereich um 1082 m der Fall. Hier wird das Bohrklein als Tonmergel mit bis zu 20 % Kalksteinanteil beschrieben. Vereinzelt werden im PEF-Log auch innerhalb der Tonsteine erhöhte Messwerte registriert. Dies korreliert mit Zonen leichter Gamma-Anomalien und kann auf die in diesen „black-shales“ erhöhten Pyritgehalte zurückgeführt werden.

5.4.3 Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten

Im Unterjura wurden Gesteinsproben aus allen Formationen entnommen. Es liegen petrophysikalische Messdaten für Tonsteine, Mergel/Kalkmergel, Kalksandsteine und Sandsteine vor. Die Durchschnittswerte sind in Tabelle 5.11 dargestellt. Die Sandsteine sind durch hohe Wärmeleitfähigkeiten gekennzeichnet. Für sie wurde ein geometrisches Mittel für die Matrixwärmeleitfähigkeit von $\lambda = 4,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ bestimmt. Messwerte für gesättigte Proben variieren zwischen $2,6 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $5,7 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Die Matrixwärmeleitfähigkeit der Kalksandsteine ist mit $\lambda = 3,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ geringer und leitet zu den niedrigen Werten der Mergel und Tonsteine über. Die Porositäten variieren in den Gesteinen zwischen 3 % und 30 %, wobei die höchsten Porositäten in den Sandsteinen des Lias auftreten. Für die Sandsteine und Kalksandsteine des Unterjura lässt sich eine eindeutige lineare Beziehung zwischen der archimedisch bestimmten Porosität und der ermittelten akustischen Wellengeschwindigkeit gesättigter Proben herstellen (Abbildung 5.31). Durch lineare Anpassung lässt sich für Sandsteine des Lias eine Matrixgeschwindigkeit von $V_{p \text{ matrix}} = 5,73 \text{ km s}^{-1}$ bestimmen. Für Kalksandsteine liegt die Geschwindigkeit mit $V_{p \text{ matrix}} = 5,89 \text{ km s}^{-1}$ etwas höher.

Zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit wurden wieder einfache Dreikomponentensysteme gewählt, wobei die an Probenmaterial ermittelten durchschnittlichen Matrixwärmeleitfähigkeiten (Tab. 5.11) als Startwerte festgesetzt wurden. Im Hinblick auf diese Berechnung wurde der Unterjura in Zonen aufgeteilt: Eine untere Zone, in dem vorwiegende sandige Komponenten im Wechsel mit Tonen auftreten und den darüber liegenden Folgen, in denen die sandigen Anteile untergeordnet in Erscheinung treten und Wechsel von kalkigen und tonigen Komponenten dominieren. Für die beiden Zonen wurden unterschiedliche Startwerte für die sandbetonte ($4,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) bzw. sandig/karbonatische Matrix ($3,5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) gewählt. Abbildung 5.32 zeigt die berechnete Wärmeleitfähigkeit für den Unterjura der Bohrung B-06. Die Wärmeleitfähigkeit wurde aus den Komponenten des Dreistoffdiagramms als

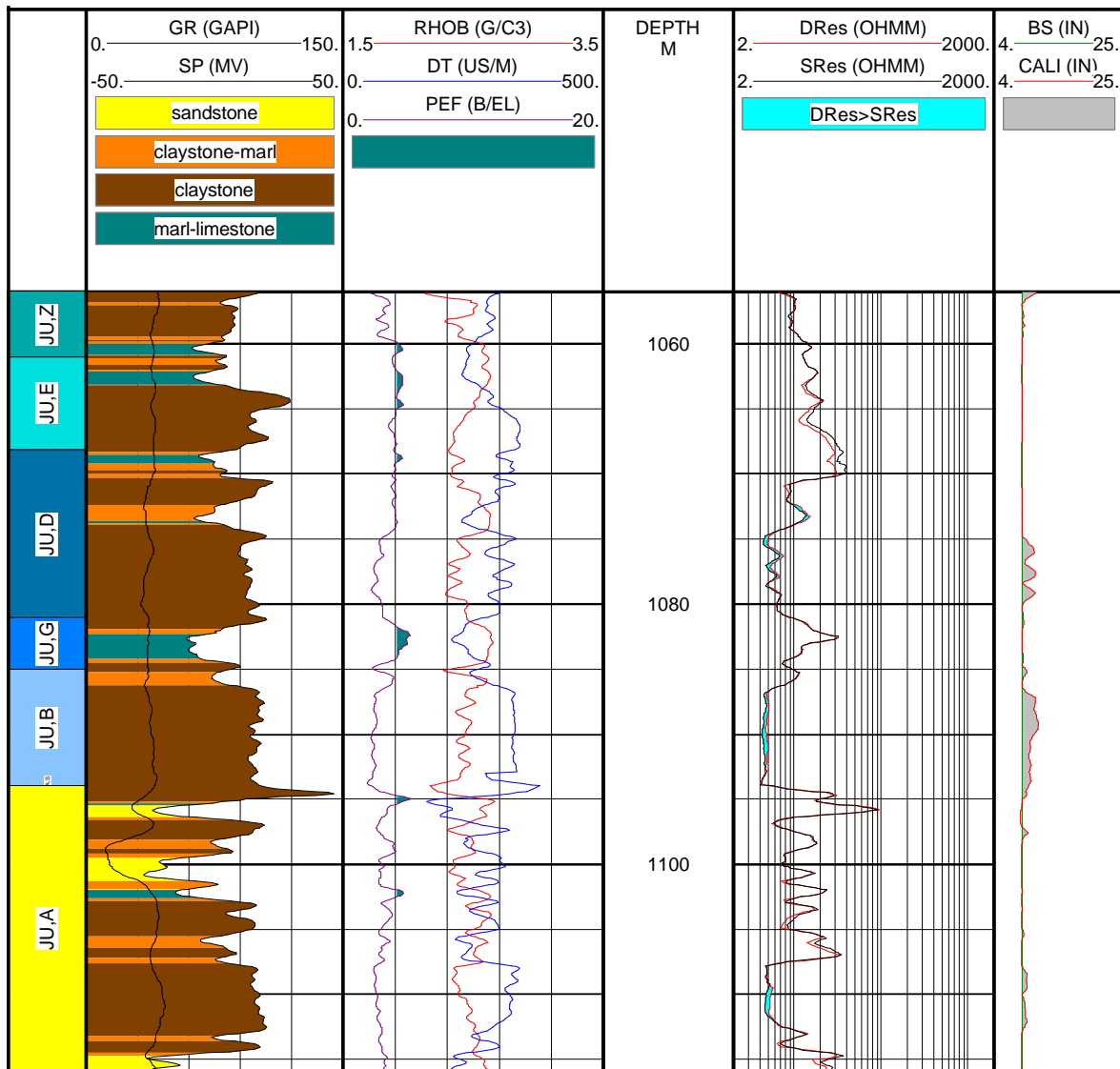


Abbildung 5.30: Bohrlochmessungen im Bereich des Unterjura der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Dargestellt sind die nach den Logs abgegrenzten Hauptgesteinstypen. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität; SP: Eigenpotential; RHOB: Gesamtdichte; DT: Laufzeit der Kompressionswelle; PEF: photoelektrischer Effekt; DEPTH: Bohrlochtiefe; DRes: spezifischer elektrischer Widerstand (deep); SRes: spezifischer elektrischer Widerstand (shallow); BS: Sollkaliber; Cali: Kaliber.

geometrisches Mittel berechnet. Die Bestimmung der Porosität erfolgte über das Sonic-Log, wobei die hierzu erforderliche Beziehung zwischen Porosität und akustischer Wellengeschwindigkeit der sandigen und kalkigen Komponenten über die Kernmessungen sehr gut erfasst ist. Als spezifische Matrixlaufzeit für die Tone wurde zunächst wie im darüber liegenden Opalinuston eine Laufzeit von $348 \mu\text{s m}^{-1}$ gewählt. Bei dieser Vorgehensweise werden die Wassergehalte der Tone nicht berücksichtigt und nur die effektiven Porositäten für die Sandstein- bzw. Kalksteineinschaltungen berechnet. Demnach ergeben sich in der Bohrung B-06 signifikante effektive Porositäten im den Arieten-schichten (Lias α) sowie im Übergang des Lias δ zu ϵ . Diese Zone kann mit den im Standardprofil

Tabelle 5.11: Petrophysikalische Messwerte für die Gesteinstypen des Unterjura (λ_{matrix} : Wärmeleitfähigkeit; ρ_{rein} : Reindichte; ϕ : Porosität; V_p : akustische Wellengeschwindigkeit). An den entfestigten Mergel- und Tonsteine konnten im Labor keine p -Wellengeschwindigkeiten ermittelt werden.

	λ_{matrix} ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)		ρ_{rein} (g cm^{-3})		ϕ (-)		V_p (km s^{-1})	
	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max
Sandstein	4,5	2,6 - 5,7	2,66	2,58 - 2,74	0,15	0,04 - 0,30	3,71	2,30 - 5,72
Kalksandstein	3,5	2,6 - 4,7	2,74	2,67 - 2,81	0,09	0,03 - 0,17	4,76	3,47 - 5,90
Mergel	2,1	1,2 - 2,3	2,63	2,48 - 2,76	0,10	0,07 - 0,17	-	-
Tonstein	1,9	1,6 - 2,1	2,75	2,71 - 2,83	0,10	0,07 - 0,17	-	-

erwähnten Mergelkalken der oberen Amaltheenschichten korreliert werden. Die durchschnittlichen Wärmeleitfähigkeiten für den Unterjura liegen bei λ von $2,21 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ bei einer Variationsbreite von $1,66 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ und $3,95 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$. Die Ergebnisse zeigen nur geringe Unterschiede zu den Berechnungen, die für den Mitteljura durchgeführt wurden.

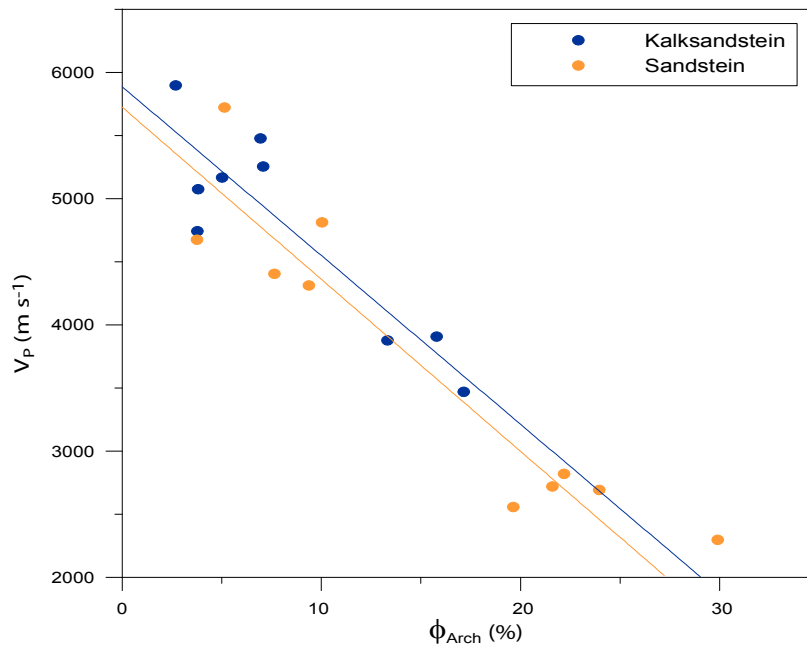


Abbildung 5.31: p -Wellengeschwindigkeiten wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität, dargestellt für Sandsteine und Kalksandsteine des Unterjura.

5.4.4 Geothermische Eigenschaften des Unterjura in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen

Der Unterjura wurde in den betrachteten Bohrungen in Tiefen von 300 m bis über 2500 m erbohrt. Entsprechend den Verhältnissen im Mitteljura ist davon auszugehen, dass der Auflastdruck sich auf die Porosität und den Wassergehalt der Tonsteine auswirkt. Abbildung 5.33 zeigt die Tiefenabhängigkeit der im Unterjura auftretenden Tonsteine. Im Vergleich zum Opalinuston ergeben sich für gleiche Tiefenniveaus etwas geringere Laufzeiten. Hier ist zu beachten, dass die betrachteten Tonsteine im

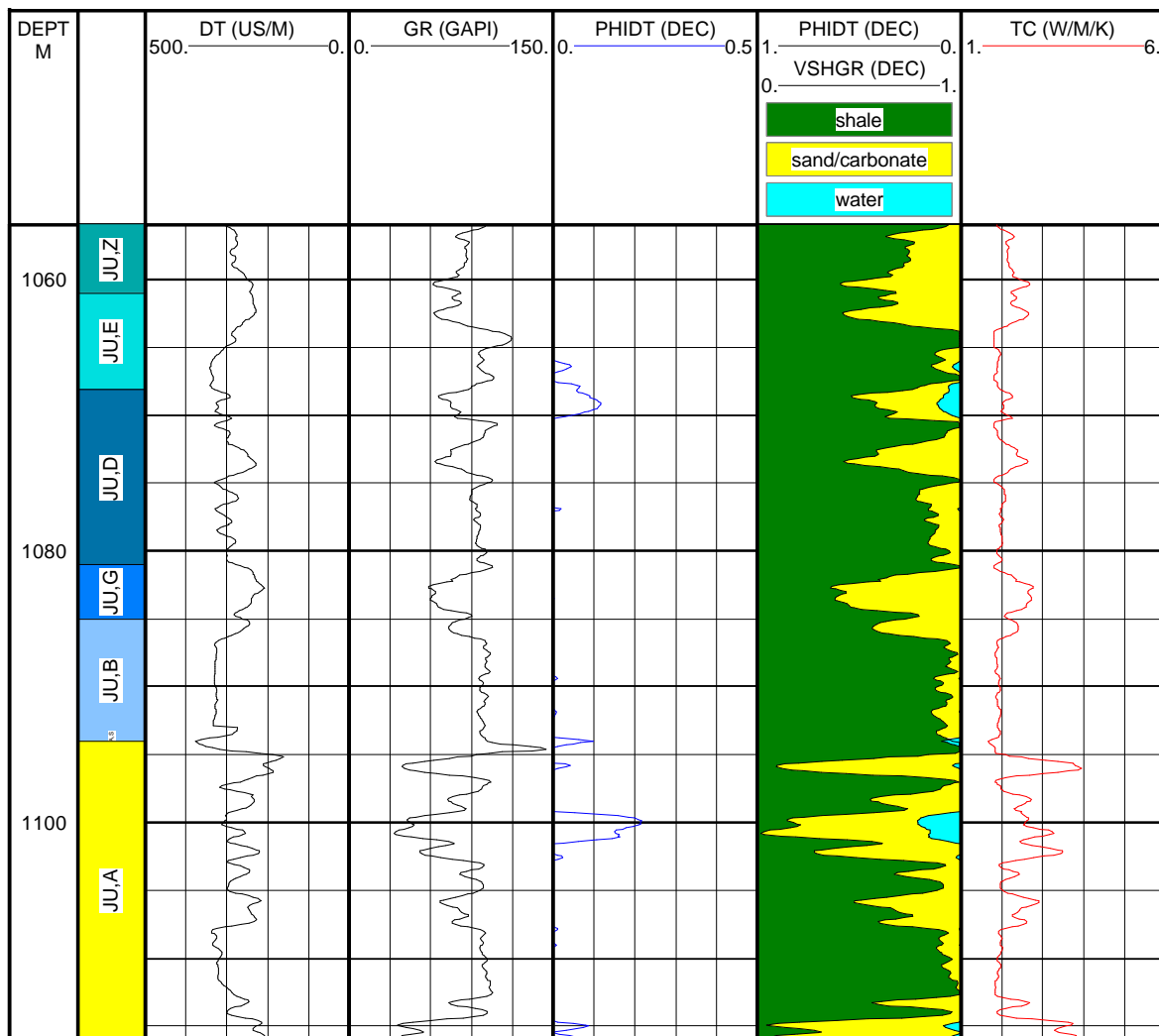


Abbildung 5.32: Berechnung der Wärmeleitfähigkeit (TC) aus den Bohrlochmessungen DT (spezi- fische Laufzeit akustischer Wellen) und GR (Gammalog) für den Unterjura der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Die Berechnung erfolgte getrennt für sandbetonten Lias α und die darüber folgenden karbonatischen/tonigen Schichten. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabel- le B.1 gegeben. DEPTH: Bohrlochtiefe; PHIDT: Porosität, berechnet aus Laufzeit; VSHGR: Tonvolu- men, berechnet aus Gammalog.

Unterjura nicht in Form eines einheitlichen Horizontes vorliegen, sondern im engen Wechsel mit Mer- geln und Kalkmergeln auftreten. Es ist anzunehmen, dass an den Schichtgrenzen auftretende Schulter- effekte die tendenziell geringeren Schalllaufzeiten verursachen. Insofern wurden die im Opalinuston ermittelte Tiefenabhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit auch auf die darunter folgenden Tonsteine des Unterjura übertragen. Als Matrixlaufzeit wurde entsprechend ein Wert von $250 \mu\text{s m}^{-1}$ gewählt.

Die berechneten Wärmeleitfähigkeiten wurden im Hinblick auf laterale Veränderungen der Fazies untersucht. Im Vergleich zum Oberjura und Mitteljura kann im Unterjura eine Korrelation zwischen den einzelnen Stufen nur bedingt durchgeführt werden. Die erbohrten Mächtigkeiten schwanken be- trächtlich und die Abfolge ist in einigen Bohrungen lückenhaft (Abbildung 5.34). Generell nimmt

die Mächtigkeit des Unterjura von Nordwest nach Südost ab und variiert zwischen 10 m und 100 m (Tab. 5.12). Dies entspricht der paläogeographischen Situation im Unterjura mit der Böhmisches Landmasse im Osten und dem Vindelizischen Land im Süden. Der Ablagerungsraum war durch unruhigere, oftmals wechselnde Sedimentationsbedingungen gekennzeichnet. Starke laterale Wechsel sind besonders für den Lias charakteristisch. Hier treten lokal begrenzt Sandsteinbänke im Wechsel mit Tonsteinlagen bzw. Linsen auf. Auffällig sind Aufarbeitungshorizonte, die im Gammalog starke Anomalien erzeugen. Die berechneten durchschnittlichen Wärmeleitfähigkeiten des Lias α zeigen mit Werten zwischen $1,66 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ und $2,99 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ eine größere Bandbreite als die darüber folgenden Schichten. Letztere sind im Vergleich zum Lias α im Gebiet einheitlicher ausgebildet. Für die Tonstein und Kalkmergelwechselfolgen des Lias α - ζ wurden für die Bohrungen Durchschnittswerte von $1,64 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ – $2,01 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ermittelt. Eine Übersicht für die gesamte Liasabfolge findet sich in Tabelle 5.12.

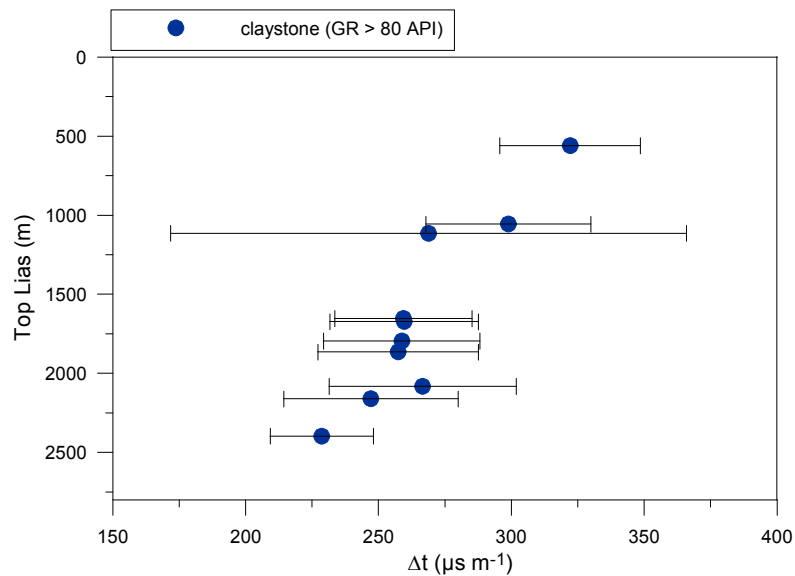


Abbildung 5.33: Abhängigkeit der spezifischen akustischen Laufzeit Δt der Lias-Tonsteine von der Versenkungstiefe. Dargestellt sind Mittelwerte und Standardabweichung der akustischen Laufzeit für Tonsteine, die anhand des Gamma-Rays ($GR > 80 \text{ API}$) differenziert wurden.

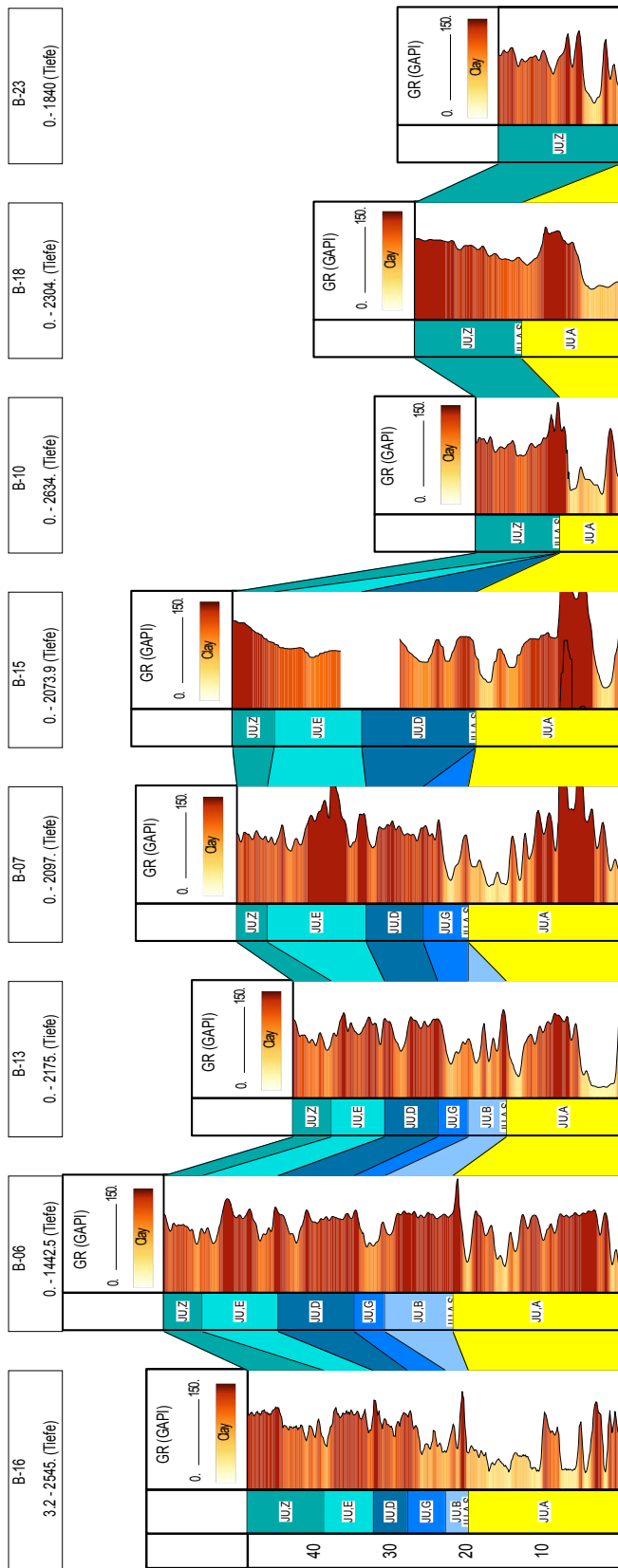


Abbildung 5.34: Stratigraphische Abfolgen des Unterjuras in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens. Die Bohrungen sind auf einer West-Ost-Profilinie angeordnet (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität.

Tabelle 5.12: Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten für den erbohrten Unterjura.

Well	Top (m)	Bottom (m)	Net (m)	Min (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Max (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Mean (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Std Dev (W m ⁻¹ K ⁻¹)
B-03	3051	3061	10	1,81	3,34	2,66	0,44
B-06	1056	1116	60	1,37	4,83	2,06	0,68
B-07	1795	1845,4	51	1,49	4,00	2,12	0,56
B-08	1114	1169	55	1,16	2,98	1,82	0,34
B-09	2397	2417	20	1,71	2,78	2,01	0,22
B-13	1865	1908	43	1,43	3,91	2,23	0,57
B-15	1653	1667,2	14	1,61	2,19	1,94	0,18
B-16	2161	2210	49	1,57	4,01	2,43	0,65
B-18	2082	2109	27	1,58	3,35	2,10	0,56
B-22	560	666	106	1,33	3,33	1,71	0,32
B-23	1673	1689	16	1,64	2,88	2,05	0,37

5.5 Keuper

5.5.1 Geologische Übersicht des Keupers

Der Ablagerungsraum des Keupers im Germanischen Becken dehnte sich weiter in Richtung des Pariser Beckens aus, war aber nach wie vor nur durch schmale und flache Zugänge mit dem Weltmeer verbunden. Das Klima war insgesamt kontinental geprägt und arid, was saline Ablagerungen und rote Gesteinsfarben belegen. Der Keuper besteht überwiegend aus klastischen und oftmals bunt gefärbten Gesteinen (Abbildung 5.35). Die Sedimentationsbedingungen waren sehr wechselhaft und vielfältig. Der Untere Keuper ist insgesamt marin geprägt, wobei zeitweise sowohl brackische als auch salinar- evaporitische Ablagerungsbedingungen gegeben waren. Der Mittlere Keuper als mächtigste Einheit des gesamten Keupers beginnt marin-evaporitisch, gefolgt von einer terrestrischen (in den Randbereichen der Vindelizischen Schwelle) oder fluviatilen Großfazies, je nach Einzugsgebiet. Der Obere Keuper hingegen ist wieder normal marin geprägt.

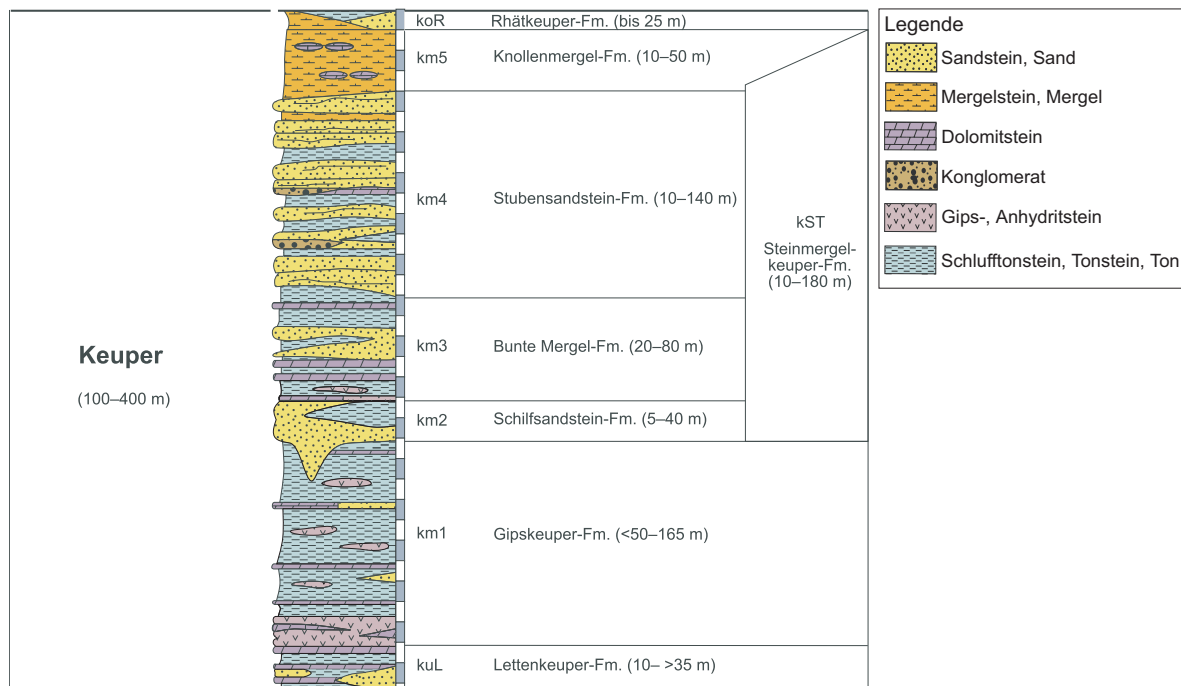


Abbildung 5.35: Musterprofil der Schichtenfolge des Keupers in Baden-Württemberg (nach Villinger und Fischer, 2005). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind Anonym (2007) entnommen. Fm.: Formation.

Den **Unteren Keuper** oder *Lettenkeuper* stellt eine Abfolge von überwiegend grauen oder grünlichen, gelblich bis bräunlich verwitternden Tonen im Wechsel mit karbonatischen, überwiegend dolomitischen Bänken dar. Darüber hinaus gelangten Sandsteine zur Ablagerung, die nicht flächenhaft und in wechselnder Mächtigkeit und stratigraphischer Stellung anzutreffen sind. Die Schichtmächtigkeit des Unteren Keupers ist im Wesentlichen gleichmäßig ausgebildet und steigt nach Norden hin gegen das nördliche Neckargebiet und Unterfranken an (Abbildung 5.36), wo bis zu über 30 m erreicht werden. Nach Süden in Richtung Alpen keilt der Untere Keuper aus.

Der **Mittlere Keuper** nimmt von Süd nach Nord in seiner Mächtigkeit zu und erreicht in der Heilbron-

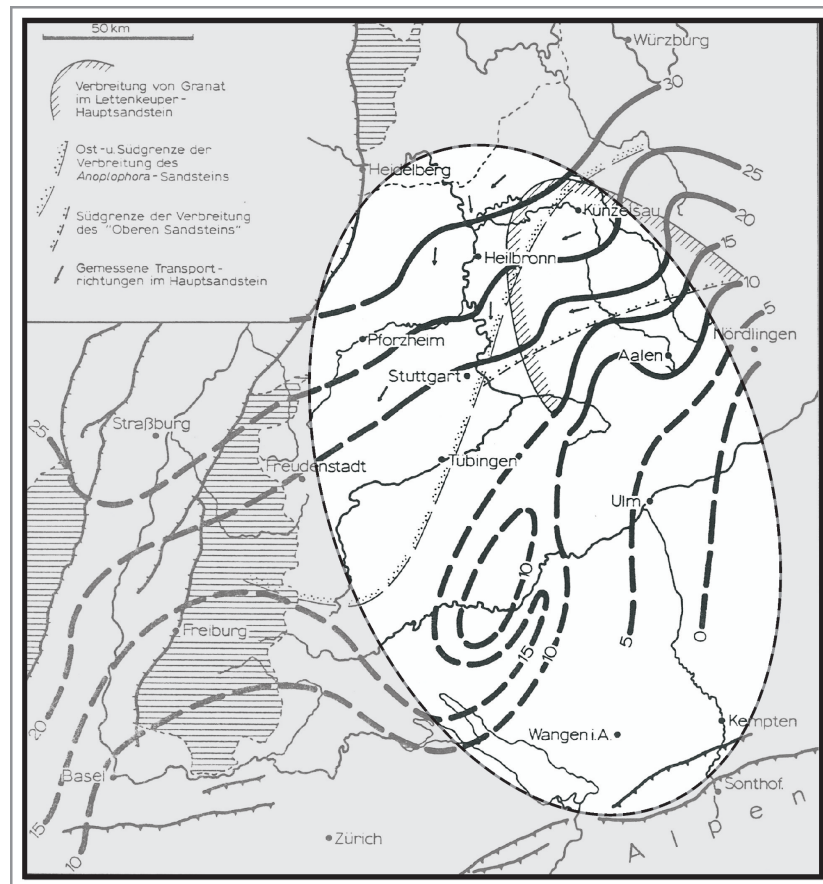


Abbildung 5.36: Mächtigkeit und Verbreitung des Unteren Keupers in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

ner Gegend eine Schichtmächtigkeit von über 400 m (Abbildung 5.37). Er besteht aus einer Abfolge von Tonstein, Silttonstein und dolomitisch-siltigen Mergelsteinen. Seine weitläufige und gleichmäßige Verbreitung lässt auf ein ruhiges Ablagerungsmilieu schließen. In die Sequenz eingeschaltet sind gröberklastische Sandsteine, die sich vom Liefergebiet im Süden wegbewegten und nach Norden und Nordwesten ausbreiteten. Im terrestrisch-aquatischen Grenzbereich sind sie mit den tonigen Keuper-sedimenten verzahnt. Durchgehende Lagen, Linsen und Konkretionen aus Gips belegen die Eindampfung des salinaren Meeres. Vielfältige Fazieswechsel im Profil und über die Erstreckung hinweg lassen nur eine lithostratigraphische Gliederung des Mittleren Keupers zu. Dabei sind einzelne geringmächtige karbonatische Leitbänke, die sich über mehr als 100 km erstrecken können, durchaus für eine zeitliche Parallelisierung geeignet.

Das vollständige Profil beginnt an der Basis mit der *Gipskeuper-Formation*. Entlang der Keuperschichtstufe tritt der Gipskeuper mit einer verhältnismäßig gleichbleibenden Mächtigkeit von 100 m bis 150 m zutage. Nach Südosten hin keilt der Gipskeuper aus. Er lässt sich wiederum unterteilen in die ältesten Grundgipsschichten von 10 m – 12 m Mächtigkeit mit reinem massigem Gips an der Basis und einer Wechselfolge von unreinen Gipsbänken und reinen Ton-Dolomit-Zwischenlagen. Darüber folgt der 6 m – 8 m mächtige Bochinger Horizont aus meist graugrünen Tonsteinen mit gelegentlichen Gipseinschaltungen, gefolgt von einem Übergang in die Dunkelroten Mergel, einer eintönigen Folge von Silttonsteinen, mit einer Mächtigkeit zwischen 20 m und 25 m. Getrennt vom Leithorizont

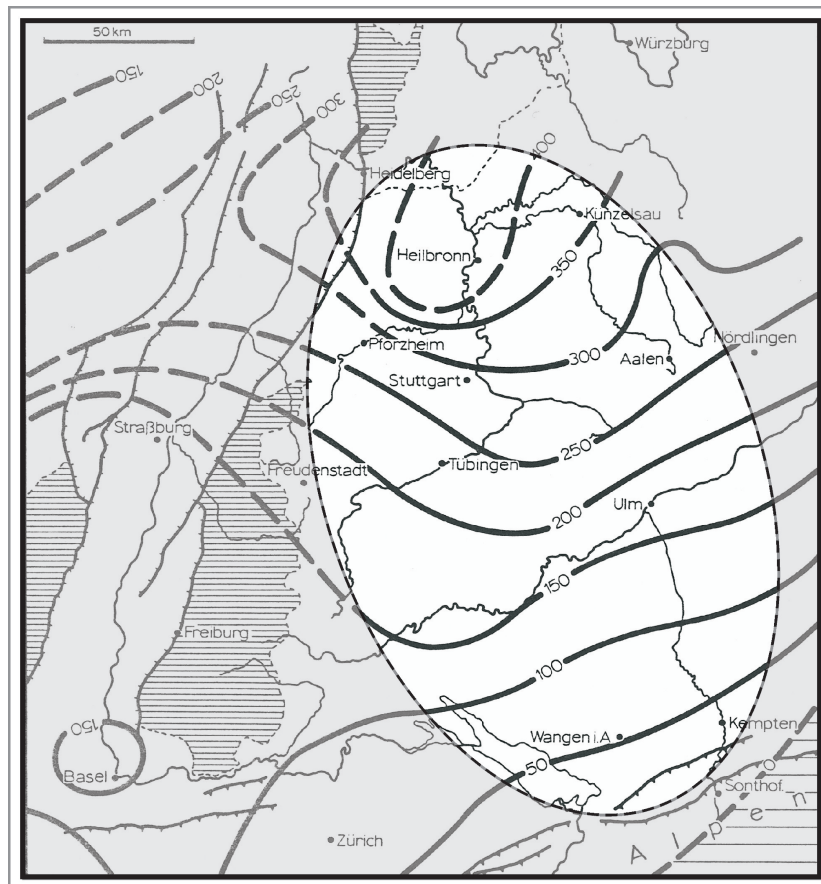


Abbildung 5.37: Mächtigkeit und Verbreitung des Mittleren Keupers in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

der Bleiglanzbank liegt darauf der Mittlere Gipschizont 25 m – 30 m mächtig auf, der sich aus einer tonig-siltigen Schichtenfolge mit gelegentlichen Einschaltungen von Gipslinsen zusammensetzt. Den Abschluss im Hangenden des Gipskeupers bildet die insgesamt tonige Gesteinsfolge der Estherien-schichten mit wechselnder Gesteinsfarbe im Profil.

Über dem Gipskeuper folgt der *Schilfsandstein*. Er ist charakterisiert durch seine dunkelrotbraune bis teilweise graugrüne Farbe und seine gute Sortierung im Feinsandbereich. In seiner Form und Anordnung ist der meist dickbankige Schilfsandstein in Sandsteinsträngen anzutreffen, welche langgestreckte Körper mit einer Querausdehnung im km-Bereich darstellen. Dazwischen gelangten braunrote, dünnsschichtige sandig-siltige Tonsteine mit einzelnen Dolomitbänken oder Gipslagen zur Ablagerung.

Die anschließende Formation der *Bunten Mergel* beinhaltet die höchstens 5 m mächtigen „Dunklen Mergel“ aus dunklem Siltonstein, den etwa 5 m mächtigen „Hauptsteinmergel“ aus dolomitischen Steinmergelbänken, die roten Siltonsteine der „Roten Wand“ und der „Lehrberg-Schichten“ und zuoberst die „Kieselsandsteinschichten“, welche Sandsteinschüttungen vom Vindelizischen Land im Südosten nach Norden darstellen. In der Nähe des Liefergebietes sind die Sandsteine des Kieselsandsteins grobkörnig und schlecht sortiert und gerundet mit hohem Gehalt an Feldspat oder dessen Zersetzungsprodukt Kaolinit. Mit größerer Distanz zum Liefergebiet werden die Sandsteine feinkörniger und besser sortiert bei höherem Quarzgehalt.

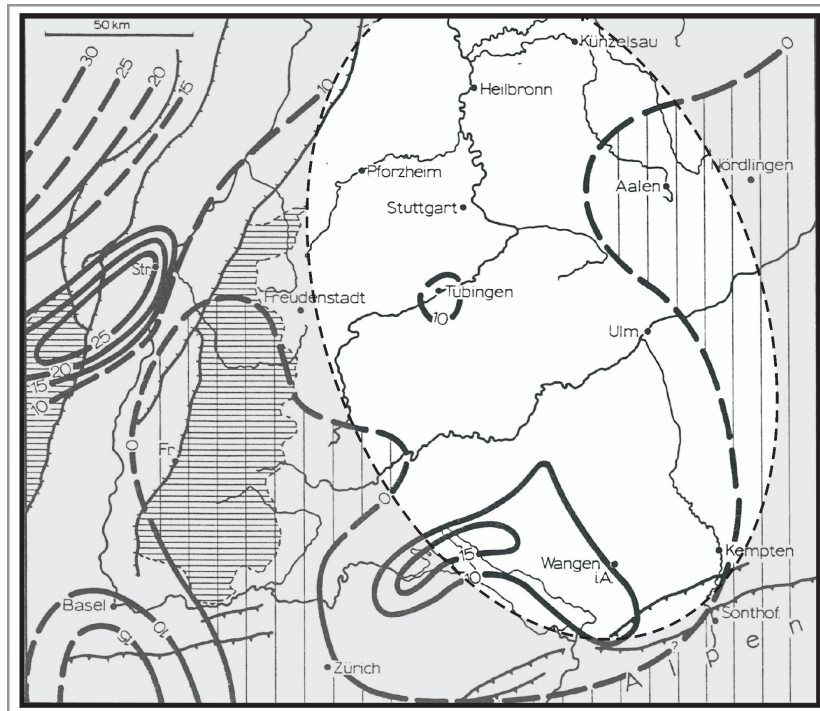


Abbildung 5.38: Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Keupers in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

Auf den Kieselsandsteinschichten folgt die Formation der *Stubensandstein-Schichten*, deren Sedimentmaterial ebenfalls vom Vindelizischen Land im Südosten und darüber hinaus von der Böhmisches Masse im Osten stammt. Die Mächtigkeit der Stubensandstein-Formation nimmt nach Norden hin zu und erreicht ihr Maximum im nördlichen Württemberg mit über 120 m in der Gegend um Heilbronn. Der Sandsteinkomplex setzt sich aus vier übergeordneten Schichtgliedern zusammen, die Schüttungsvorstöße aus dem Liefergebiet darstellen. Sie sind unterteilt durch pelitische Horizonte („Hangendletten“ bzw. „Basisletten“ im Liegenden der ersten Stubensandstein-Schicht), bestehend überwiegend aus bunten Tongesteinen, die teilweise mit Steinmergelbänken angereichert sind. Der Stubensandstein selbst ist ein tonig und quarzitisches gebundener Quarzsandstein, der vor allem in der untersten Schicht auch karbonatisch zementiert sein kann („Fleins“).

Den Abschluss des Mittleren Keupers bilden die *Knollenmergel*. Sie erscheinen als monotone violettrote karbonatische Tone, die ein Mächtigkeitsmaximum im Bereich der Schwäbischen Alb von ca. 50 m erreichen. Die Bezeichnung rührt von stellenweise auftretenden knolligen Karbonatkonkretionen her, welche nach Norden hin bis maximal etwa 2 dm groß sind.

Die erneute Transgression des Meeres ließ im **Oberen Keuper** einen deltaähnlichen Ablagerungsraum entstehen, in dem sich eine geringmächtige, nicht flächenhafte Sedimentdecke herausbildete (Abbildung 5.38). Diese besteht im Wesentlichen aus meist in Nord-Süd-Richtung streichenden, langgestreckten Sandsteinkörpern. Sie setzen sich zum Großteil aus hellen, feinkörnigen, kieselig oder tonig gebundenen Sandsteinen zusammen, die seitlich in tonflaserige Sandsteine bis zu dunklen, teilweise sandigen Tonen übergehen. Stellenweise folgt über diesen Sedimentkörpern ein in Grautönen gebänderter Tonstein.

5.5.2 Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen und Fazieswechsel

Die Referenzbohrung B-06 spiegelt die komplexen und variationsreichen Ablagerungsverhältnisse wieder. Entsprechend der Kernbeschreibungen konnten fünf Hauptgesteinstypen mit den Log identifiziert werden (Abbildung 5.39): Sandsteine, siltige/mergelige Tonsteine, Tonsteine, Kalkstein/Dolomit und Gips/Anhydrit. Die Lithologien wechseln extrem schnell. In Übereinstimmung mit dem Musterprofil befindet sich an der Basis eine etwa 10 m mächtigen Gipsschicht, gefolgt von einer engständigen Wechsellagerung von Tonstein, Siltstein und Mergellagen, in die karbonatische und sandige Lagen zwischengeschaltet sind. Sandsteine dominieren in der Bohrung B-06 in der Stubensandstein-Formation („KM,STS“ in Abbildung 5.39) und im Oberen Keuper („KO,S“).

Bedingt durch die vielfältigen Sedimentationsbedingungen im Keuper fanden nicht nur häufige Lithologiewechsel statt, sondern auch sehr schnelle laterale Fazieswechsel (Abbildung 5.40). Dies gilt speziell für die Erscheinung des Gipskeupers („KM,G“), aber auch für andere Formationen. Es stellte sich daher im Keuper als sehr schwierig heraus, Zonen herauszuarbeiten und dafür Mehrstoffmodelle aufzubauen und Wärmeleitfähigkeiten zu errechnen. Um die vielfältigen Gesteinsvariationen zu hinreichend zu erfassen, war die Menge der zu Verfügung stehenden Messdaten noch nicht ausreichend. Alternativ ist zu überlegen, ob eine andere Methode unter den gegebenen Bedingungen erfolgreicher wäre.

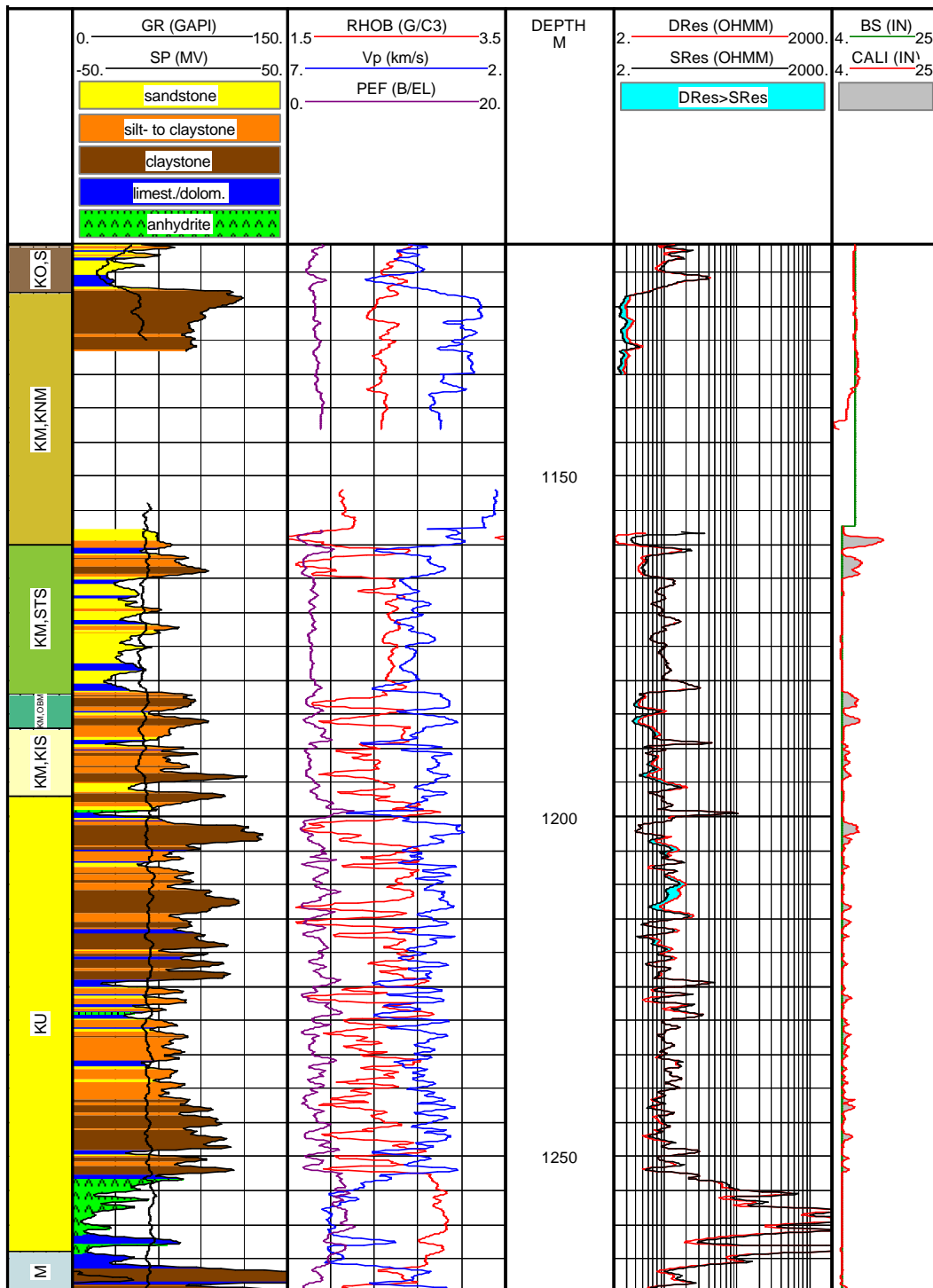


Abbildung 5.39: Bohrlochmessungen im Bereich des Keupers der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Dargestellt sind die stratigraphischen Stufen in Anlehnung an das Standardprofil sowie die anhand der Logs abgegrenzten Hauptgesteinstypen. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität; SP: Eigenpotential; RHOB: Gesamtdichte; Vp: Geschwindigkeit der Kompressionswelle; PEF: photoelektrischer Effekt; DEPTH: Bohrlochtiefe; DRes: spezifischer elektrischer Widerstand (deep); SRes: spezifischer elektrischer Widerstand (shallow); BS: Sollkaliber; Cali: Kaliber.

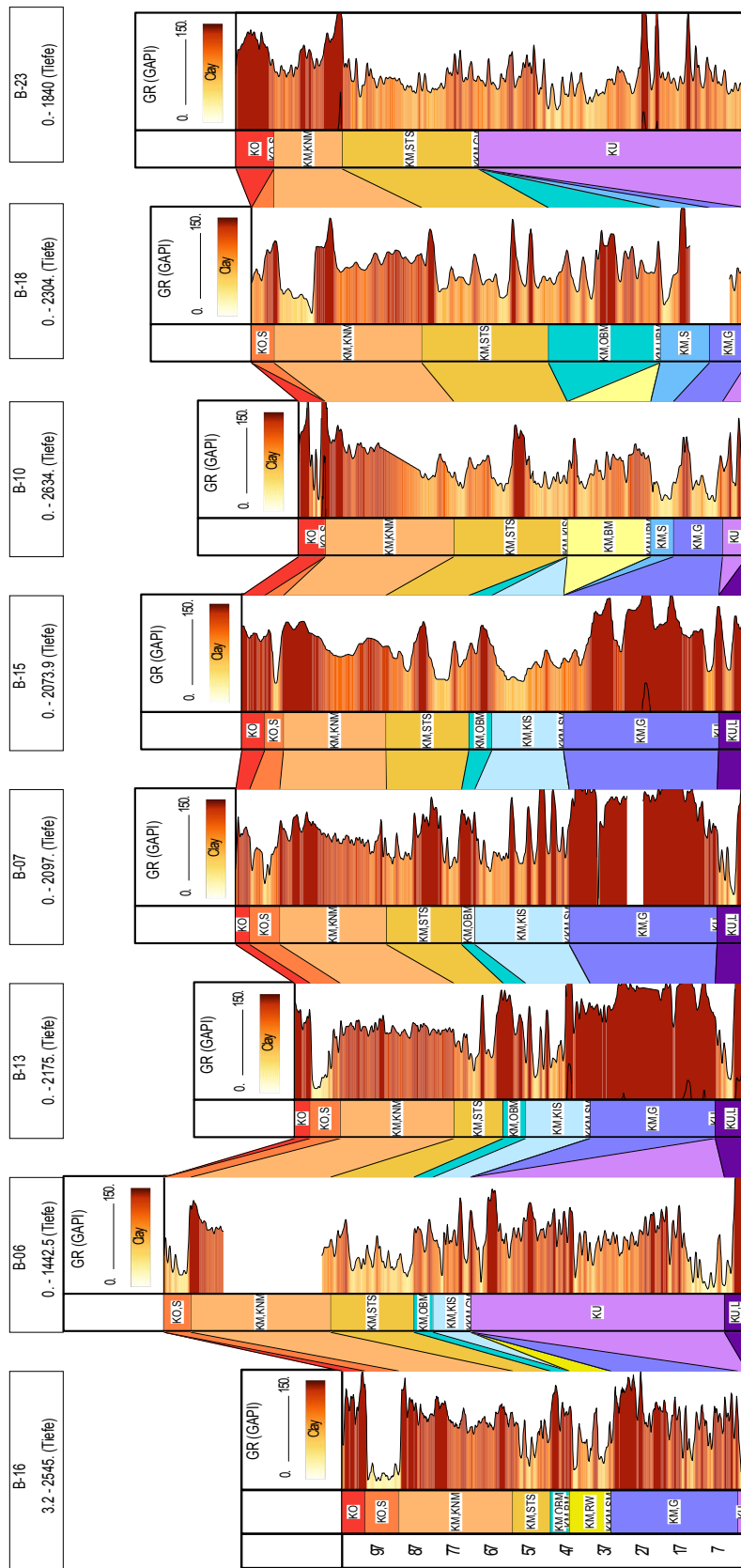


Abbildung 5.40: Stratigraphische Abfolgen des Keupers in ausgewählten Explorationsbohrungen des zentralen Molassebeckens. Die Bohrungen sind auf einer West-Ost-Profilinie angeordnet (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität.

Tabelle 5.13: Petrophysikalische Messwerte aus Untereinheiten des Keupers (vgl. Abschnitt 5.5).

	Messung	n	Mittelwert	Standardabweichung	Median
Schilfsandstein					
	λ ($WK^{-1}m^{-1}$)	9	2,47	0,05	2,46
	ρ (kgm^{-3})	9	2615	50	2637
	ϕ (%)	9	20,3	2,43	20,15
	V_p (ms^{-1})	6	2429	332	2434
Stubensandstein					
	λ ($WK^{-1}m^{-1}$)	10	3,34	0,22	3,35
	ρ (kgm^{-3})	10	2607	88	2636
	ϕ (%)	10	16,5	4,52	17,7
	V_p (ms^{-1})	7	3296	1110	2549

Im aktuellen Anschlussprojekt kann im Zuge der Bearbeitung der Ostmolasse der Datensatz zum Keuper ergänzt werden. Die Ergebnisse für den Westteil des Molassebeckens werden dann in überarbeiteter Form mit der Ostmolasse am Ende des laufenden Projektabschnittes dargelegt. Nach Abschluss der hier berichteten Projektphase können keine zuverlässigen thermophysikalischen Eigenschaften für die Gesteine des Keupers zusammengestellt werden. In Tabelle 5.13 sind daher lediglich die petrophysikalischen Messdaten aus den Laboruntersuchungen des Stubensandsteins und des Schilfsandsteins zusammengestellt. Die Proben stammen aus den Bohrungen B-06, Ellenberg und Einöd sowie den Steinbrüchen 6924-116 und 6924-300 (vgl. Anhang E). Sie repräsentieren die typisch feldspatreichen Keupersandsteine mit einem Gesamtfeldspatgehalt zwischen 15 % und 30 % und einem Tonmineraleanteil zwischen 10 % und 30 %. Die Probenanzahl ist jedoch zu gering, so dass auch hier noch weitere Messungen vorgenommen werden müssen.

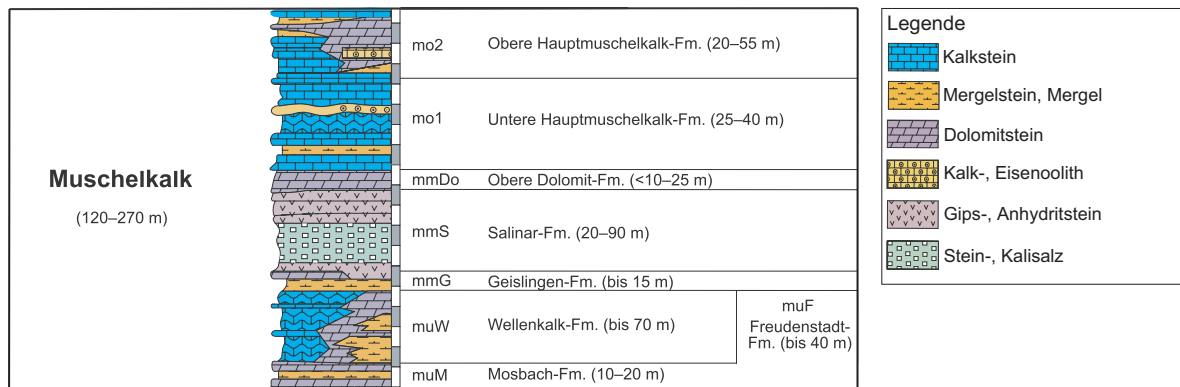


Abbildung 5.41: Musterprofil der Schichtenfolge des Muschelkalks in Baden-Württemberg (nach Villing und Fischer, 2005). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind Anonym (2007) entnommen. Fm.: Formation.

5.6 Muschelkalk

5.6.1 Geologische Übersicht des Muschelkalks

Das Muschelkalkmeer stellte einen relativ zu seiner Erstreckung ebenen und flachen Ablagerungsraum mit nur eingeschränktem Zugang zur Tethys dar. Begünstigt durch die ariden Klimaverhältnisse jener Zeit gelangten im Muschelkalk aufgrund des zeitweise behinderten Wasseraustauschs mit dem offenen Ozean überwiegend chemische Sedimente (Kalke, Dolomite, Evaporite) zusammen mit terrigenen Tonen (Tonsteine, Mergel) zur Ablagerung (Abbildung 5.41). Gröber klastische Gesteine sind im Bereich Baden-Württembergs nur aus Bohrungen bekannt. Durch die Ebenheit des Sedimentbeckens sind auch geringmächtige Schichten über weite Flächen in gleich bleibender Fazies und Mächtigkeit entwickelt.

Die Untergliederung des Muschelkalks basiert zum einen auf dem Vorkommen salinärer Evaporitgesteine, das sich auf den Mittleren Muschelkalk beschränkt. Die weitere Unterteilung orientiert sich an Leitbänke, die mit dem Auftreten bestimmter Fossilien in Verbindung stehen und die in die sonst monotone Abfolge der Karbonatgesteine eingeschaltet sind. Zu erwähnen ist hier insbesondere die Trochitenkalk-Formation im unteren Teil des Oberen Muschelkalks, in der Seelilien-Stielglieder (Trochiten) gesteinsbildend auftreten und die sich an der Oberfläche als markante Schichtstufe abzeichnet.

Der **Untere Muschelkalk** besteht aus einer Abfolge überwiegend dünnbankiger Mergel, Kalke und Dolomite mit Einschaltungen von bioklastischen Kalksteinen, die sich teilweise als Leithorizonte eignen. Die Schichtenfolge enthält westlich der Linie Nördlingen - Ostseite Bodensee auch Sandsteine, die sich auf den Untergrund des Molassebeckens und der Schwäbischen Alb beschränken (Abbildung 5.42). Die Mächtigkeit des Unteren Muschelkalks nimmt im Nordteil des Arbeitsgebietes nach Süden hin ständig ab. Im Südteil verdünnt er sich in südöstliche Richtung, bis er jenseits der Linie Nördlingen - Bodensee im Bereich der Vindelizischen Schwelle gar nicht mehr anzutreffen ist (Abbildung 5.42). Die stratigraphische Untergliederung des Unteren Muschelkalks erfolgt durch die Umgrenzung lithostratigraphischer Einheiten, die jedoch nicht unbedingt homochron sein müssen, da sich die Faziesareale räumlich verlagerten.

Die *Mosbacher Grenzschichten* an der Basis beginnen mit geringmächtigen dolomitischen Mergelagen mit Gipsresiduen. Es folgen als Basis die ebenschichtigen, dünnplattigen Lagen der Platten-

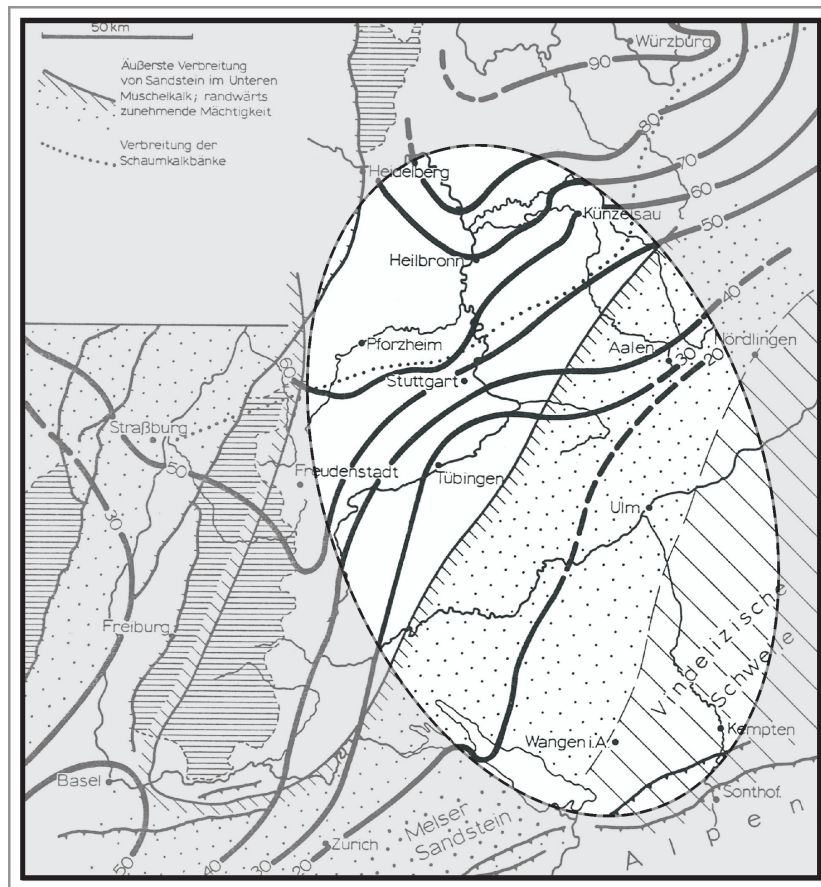


Abbildung 5.42: Mächtigkeit und Verbreitung des Unteren Muschelkalks in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

dolomite. Darüber befinden sich die Liegenden Deckbänke, bestehend aus grobdetritischen Dolomitbänken bioklastischen Ursprungs. Im Würzburger Raum im nordöstlichen Teil des Arbeitsgebietes sind die Deckbänke kalkig ausgebildet. Die im Anschluss folgende, grobflaserig geschichtete Mergelfolge der Unteren Mergel ist im nordwestlichen Teil des Arbeitsgebietes südlich des Odenwaldes dolomitisch. Schillbänke („Konglomeratbänke“) mit Geröllen treten im Profil nur lokal auf. Darüber folgen mit bis zu 5 m Mächtigkeit die ebenschichtigen buchi-Mergel und die bis zu 10 m mächtige Mergellage der Wurstelbänke, welche sich auf den Nordbereich des Arbeitsgebietes beschränkt und in die Dolomitbänke eingeschaltet sind. Die Mittleren Mergel bestehen aus einer Wechellagerung von Karbonatbänken mit Mergel- und Tonlagen. Als markanter Leithorizont sind nahe der Basis der Mittleren Mergel im Gebiet zwischen Unterem Neckar und Oberrhein die Schwarzen Schiefertone zwischengeschaltet. Der aufliegende *Wellenkalk* ist gekennzeichnet durch eine ebenlagige bis flaserige Wechselschichtung von dünnen Kalkbänkchen mit feinen tonigen bis mergeligen Lagen. Der in sich einheitlich ausgebildete Gesteinskörper ist oftmals gestört durch zahlreiche Sedimentstrukturen wie Gezeitenrinnen, Rutschungen oder Schrägschichtungen. Den oberen Abschluss des Unteren Muschelkalks bilden die orbicularis-Schichten aus einer feingeschichteten, teils flaserigen Wechselfolge aus Karbonat und Ton.

Im **Mittleren Muschelkalk** treten die Evaporitgesteine Dolomit, Anhydrit bzw. Gips und Steinsalz oder deren Auslaugungsprodukte in Form von Zellendolomit oder Salzton auf. Die ungestörte Pro-

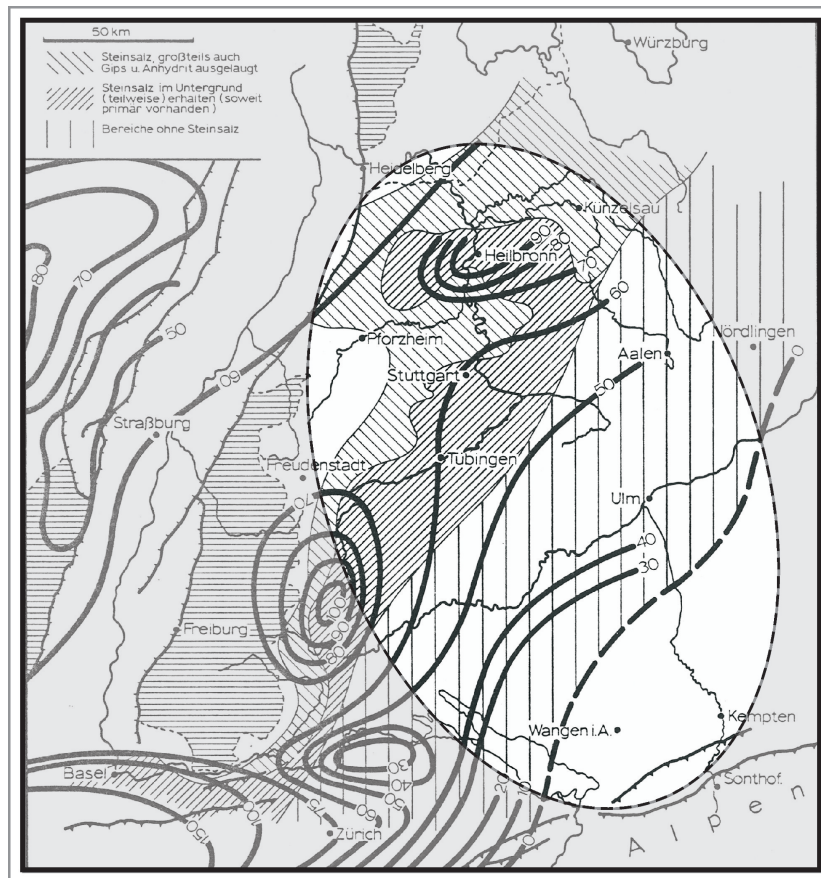


Abbildung 5.43: Mächtigkeit und Verbreitung des Mittleren Muschelkalks in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), wobei die eingetragenen Linien die ursprüngliche Mächtigkeit darstellen sollen, welche infolge von Auslaugung der salinaren Gesteine stark reduziert sein kann. Modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

folgt ist nur dort erhalten geblieben, wo der Mittlere Muschelkalk von ausreichend Deckgebirge überlagert wird und nicht im Bereich bewegten Grundwassers liegt. Die Schichtenfolge (vgl. Abbildung 5.41) beginnt an der Basis mit der wenige Meter mächtigen *Geislingen-Formation* aus Dolomit. Sofern vorhanden, schließt sich darüber der Grundanhydrit an. Es folgt die *Salinar-Formation*, die sich in das Steinsalzlager und die Obere Sulfatregion unterteilen lässt. Eine Wechsellagerung von Steinsalz und Anhydritlagen (Bändersalz) in der Mitte des Steinsalzlagers trennt dieses in das Untere und Obere Steinsalz. Das Salz ist durch mehrfache Umkristallisation in der Regel grobkristallin ausgebildet. Die Obere Sulfatregion, bestehend aus anhydritischen Gesteinen mit Einschaltungen von tonigen und dolomitischen Lagen, weist im Gegensatz zum Steinsalzlager eine gleichbleibende Mächtigkeit im ganzen Bereich von Südwestdeutschland von ca. 40 m auf. Ähnlich konstant verläuft die *Obere Dolomit-Formation* mit einer Mächtigkeit von ca. 10 m. Bereiche mit hoher Salzmächtigkeit und damit auch hoher Gesamtmächtigkeit des Oberen Muschelkalks von bis zu 100 m befinden sich im Bereich des oberen Neckars am Westrand des Arbeitsgebietes sowie in der Gegend um Heilbronn im Norden (Abbildung 5.43). Über Tage ist der Mittlere Muschelkalk durch die Auslaugung des Salzgesteins lediglich ca. 30 m mächtig.

Der **Obere Muschelkalk** bzw. Hauptmuschelkalk setzt sich aus einer Abfolge von feinkörnigen, mi-

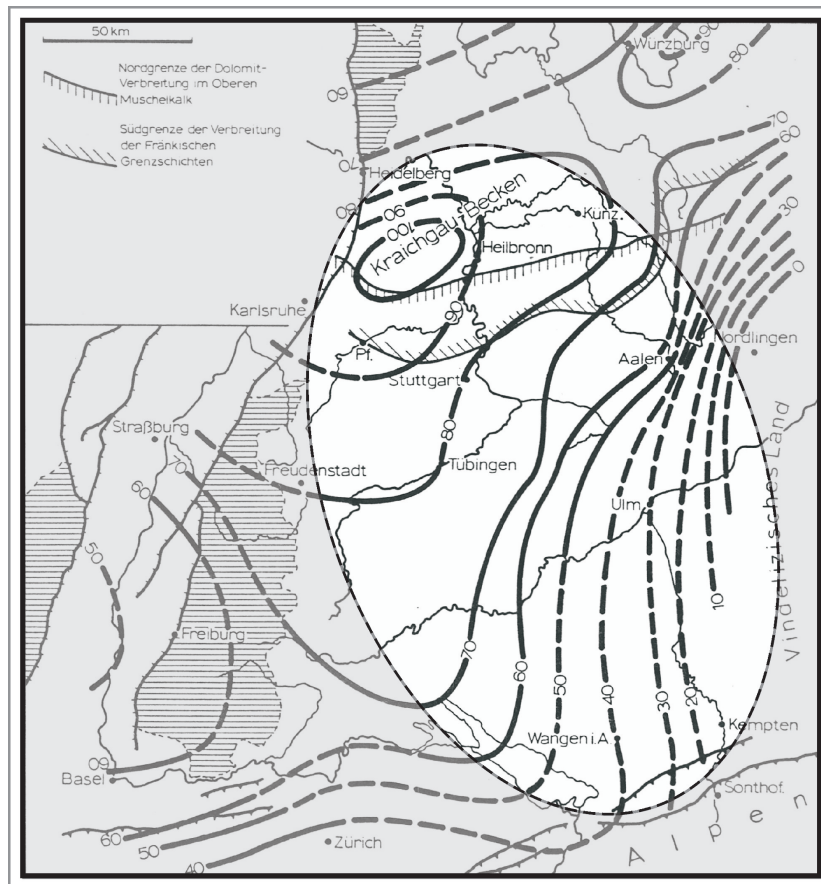


Abbildung 5.44: Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Muschelkalks in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

kritischen Kalksteinbänken im unregelmäßigen Wechsel mit bioklastischen Kalken zusammen. Die einzelnen Kalkbänke sind oftmals durch dünne Mergellagen und -fugen voneinander getrennt, wobei einzelne Mergellagen Mächtigkeiten von mehreren dm erreichen können. Im Bereich des oberen Neckars sowie unter dem Molassebecken ist der Obere Muschelkalk im Wesentlichen dolomitisch ausgebildet. Er lässt sich unterteilen in die Untere und Obere Hauptmuschelkalk-Formation. Der *Untere Hauptmuschelkalk* ist wie bereits oben erwähnt charakterisiert durch die Anreicherung von See-lilienstielglieder (Trochiten). Im *Oberen Hauptmuschelkalk* erfolgt eine Untergliederung durch markante Tonhorizonte, die im Hangenden durch gelbliche dolomitische Mergel substituiert werden. Der Sedimentationsraum des Oberen Muschelkalks stellte eine seichte Plattform dar. Die stärkste Subsidenz dieser Platte im Norden wurde durch kontinuierliche Sedimentation kompensiert, so dass die stärksten Mächtigkeiten von über 100 m im Bereich des Kraichgauer Beckens anzutreffen sind (Abbildung 5.44). Der Obere Muschelkalk ist im Arbeitsgebiet nach Süden und Osten hin abnehmend mächtig.

5.6.2 Auswertung der bohrlochgeophysikalischen Messungen

Der Muschelkalk wurde nur von einigen Explorationsbohrungen in der Molasse erbohrt. Hierzu gehört die Bohrung B-06, in der ein vollständiges Profil des Muschelkalks bohrlochgeophysikalisch vermes-

Tabelle 5.14: Durchschnittswerte und Standardabweichungen der Logging-Daten für die in der Bohrung B-06 abgegrenzten Gesteinstypen des Muschelkalks.

	GR (API)		RHOB (g cm^{-3})		VP (km s^{-1})		PEF (barns/el)	
	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD	AVG	STD
Kalkstein	23,49	3,81	2,72	0,03	6,07	0,18	4,62	0,38
Dolomit	23,77	3,54	2,66	0,07	5,51	0,47	3,22	0,28
Anhydrit	14,49	8,04	2,94	0,03	5,91	0,18	5,05	0,41
Mergel	39,71	7,88	2,78	0,09	5,68	0,35	4,47	0,77
Tonmergel	69,44	5,62	2,77	0,05	4,93	0,30	4,03	0,05
Tonstein	116,36	19,38	2,67	0,08	4,10	0,45	3,47	0,65

sen wurde. Im Gegensatz zum Standardprofil ist die Salinarformation in der Bohrung B-06 nicht erbohrt worden. Dies entspricht der geographischen Position der Bohrung im südlichen Bereich des Untersuchungsgebietes. Anhand der Bohrlochmessdaten können sechs Hauptgesteinstypen identifiziert werden (Abbildung 5.45): Kalksteine, Dolomite, Anhydrit, Mergel, Tonmergel und Tonstein. Sandstein wurde nur in einer vier Meter mächtigen Schicht an der Basis des Muschelkalks angetroffen. Nach den Bohrberichten handelt es sich hierbei um den Melser Sandstein, der als schlecht sortierter Grobsandstein beschrieben ist. Die Bohrlochmessungen zeigen hier ein entsprechend geringes Gammalog. Im darüber liegenden Unteren Muschelkalk dominieren mergelhaltige Tonsteine, die innerhalb des Muschelkalks durch die höchsten Gamma-Ray-Werte gekennzeichnet sind. Charakteristisch sind Gamma-Ray-Werte von durchschnittlich 116 API. Damit liegt die natürliche Radioaktivität dieser Tonsteine deutlich über den im Jura auftretenden Tonsteinen. Die darüber folgenden Schichten des Mittleren Muschelkalks sind durch Wechselfolgen von massiven Anhydritlagen und Tonmergelsteinen charakterisiert. Die Anhydrite lassen sich anhand der Bohrlochmessungen eindeutig identifizieren (siehe Tabelle 5.14). Sie sind durch ein sehr geringes Gammalog ($\text{GR} < 20 \text{ API}$), sehr hohe Dichten ($\text{RHOB} > 2,9 \text{ g cm}^{-3}$) und hohe Messwerte im Photoelektrischen Effekt ($\text{PEF} > 4,5 \text{ barns/el}$) gekennzeichnet. Weiterhin erreichen die elektrischen Widerstände in den massigen, sehr dichten Gesteinen Maximalwerte. Über den Anhydritserien finden sich kalksteindominierte Abfolgen. Die hier auftretenden Kalksteine sind als massige, teils dolomitisierte Bankkalke ausgebildet und treten im Wechsel mit Mergellagen auf. Der Obere Muschelkalk schließt mit den Dolomiten der Trigonodus-Formation ab. Nur anhand des PEF-Logs kann im Oberen Muschelkalk eine eindeutige Unterscheidung zwischen Dolomiten ($\text{PEF} < 4 \text{ barns/el}$) und Kalksteinen ($\text{PEF} > 4 \text{ barns/el}$) getroffen werden. Die im Oberen Muschelkalk auftretenden Dolomite zeigen vielfach eine zellige bis kavernöse Ausbildung und weisen entsprechend hohe Porositäten auf. In der Bohrung B-06 finden sich die höchsten Porositäten mit bis zu 15 % (Abbildung 5.46 im unteren Teil des Trigonodusdolomits (1285 m – 1295 m), der durch seine niedrigen Widerstandswerte, niedrige Dichten und längeren Schalllaufzeiten auffällt. Ein weiterer poröser Dolomithorizont findet sich bei ca. 1327 m im unteren Bereich des Oberen Muschelkalks. Für alle anderen Horizonte des Muschelkalks liefern die Bohrlochmessdaten keine Hinweise für erhöhte Gesteins- oder auch Kluftporositäten.

5.6.3 Gesteinsphysikalische Labormessungen und Ableitung von Wärmeleitfähigkeiten aus Logging-Daten

Für den Muschelkalk liegen Messwerte aus dem gesamten Untersuchungsgebiet vor. Bedingt durch die Aufschlussverhältnisse handelt es sich bei den meisten Proben um Dolomite und Kalksteine. An-

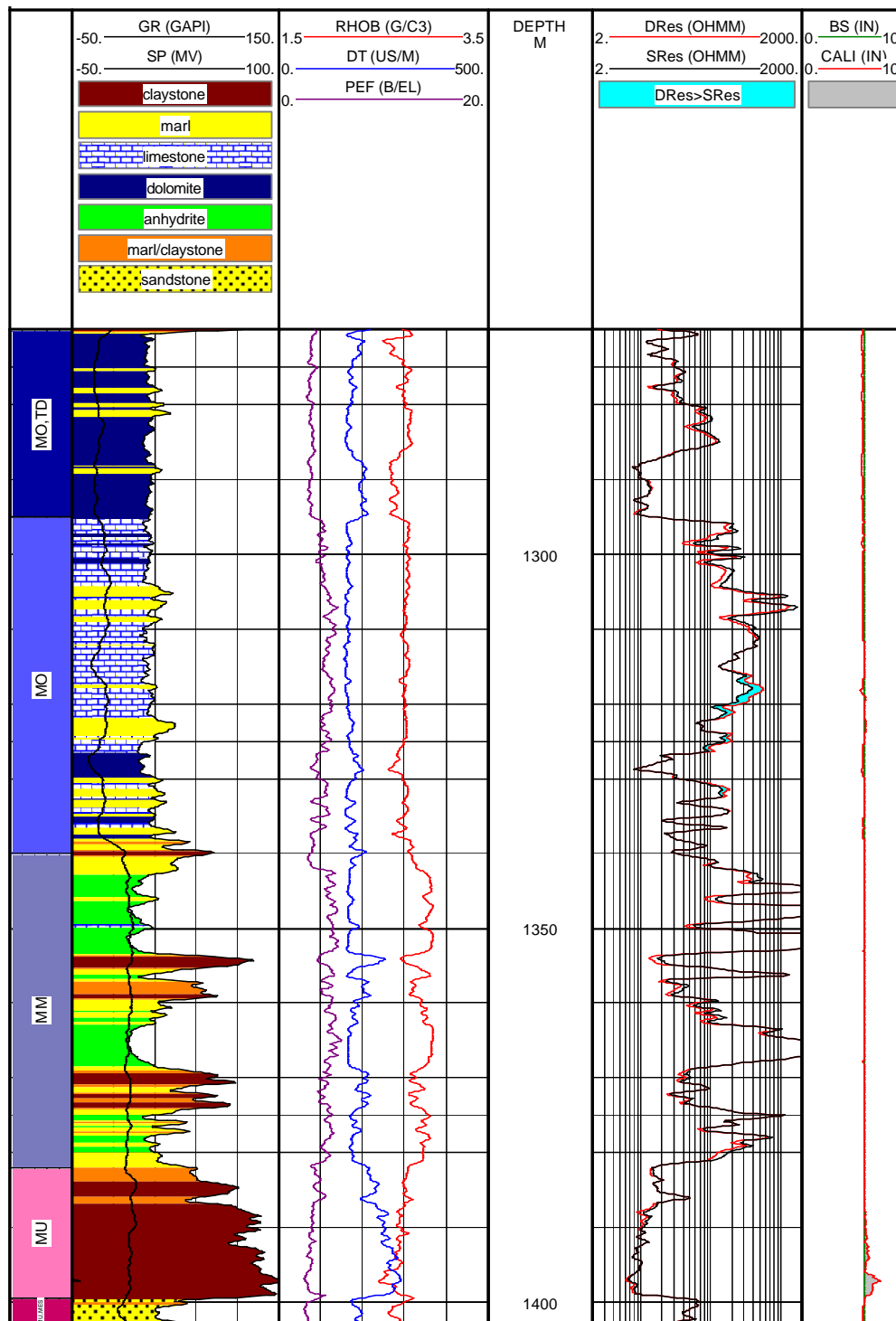


Abbildung 5.45: Bohrlochmessungen im Bereich des Muschelkalks der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Dargestellt sind die stratigraphischen Stufen sowie die anhand der Logs abgegrenzten Hauptgesteinstypen. Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle 3.1 gegeben. GR: Gammaaktivität; SP: Eigenpotential; RHOB: Gesamtdichte; DT: Laufzeit der Kompressionswelle; PEF: photoelektrischer Effekt; DEPTH: Bohrlochtiefe; DRes: spezifischer elektrischer Widerstand (deep); SRes: spezifischer elektrischer Widerstand (shallow); BS: Sollkaliber; Cali: Kaliber.

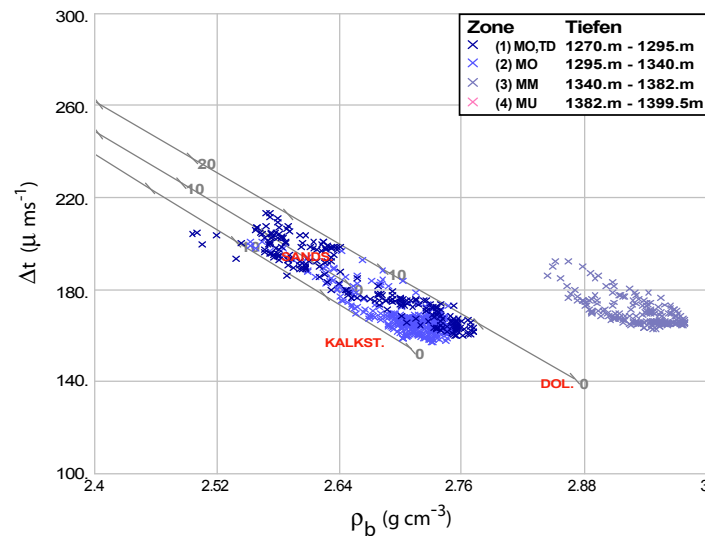


Abbildung 5.46: Streudiagramm der im Bohrloch gemessenen Dichte (ρ_b) gegen die Laufzeit der Kompressionswelle Δt im Muschelkalk für mergel- und tonfreie Horizonte (GR < 30 API). Die Karbonate des Oberen Muschelkalks und Trigonodus-Dolomits erreichen nach dem Overlay-Plot Porositäten von bis zu 15 %. Die nur im Mittleren Muschelkalk auftretenden Anhydrite sind durch ihre hohen Dichten klar von den Karbonaten abgegrenzt.

Tabelle 5.15: Petrophysikalische Messwerte für Dolomite und Kalksteine des Muschelkalks.

	λ_{matrix} (W m ⁻¹ K ⁻¹)		ρ_{rein} (g cm ⁻³)		ϕ (-)		V_p (km s ⁻¹)	
	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max	Mittel	Min-Max
Dolomit (n=28)	3,4	2,6 - 5,7	2,80	2,65 - 2,87	0,12	0,01 - 0,20	4,17	2,14 - 6,60
Kalkstein (n=20)	2,6	2,4 - 2,8	2,71	2,64 - 2,77	0,04	0,00 - 0,10	4,76	5,85 - 6,80

hydrite wurden nur untergeordnet vermessen. Aus den Salinarfolgen konnten bedingt durch mangelnde Aufschlussverhältnisse keine Proben gewonnen werden.

Die petrophysikalischen Messwerte für Kalksteine, Dolomite und Mergel zeigen weitgehende Übereinstimmung mit den Messergebnissen aus den Karbonatfolgen des Oberjuras. Durchschnittswerte für Kalksteine und Dolomite des Muschelkalks sind in Tabelle 5.15 zu finden. Während für die Kalksteine relativ einheitliche Matrixwärmeleitfähigkeiten ermittelt wurden, ist dies für die Dolomite nicht der Fall. Hier ist anzumerken, dass nur wenige der vermessenen Dolomitproben aus dem homogen ausgebildeten Trigonodusdolomit stammen. Die meisten Messungen wurden an Dolomiten aus tieferen stratigraphischen Niveaus des Muschelkalks durchgeführt. Die hier angetroffenen Dolomite zeigen bedingt durch ihre sekundäre Bildung fließende Übergänge zu Kalksteinen, was die Variation in den Matrixwärmeleitfähigkeiten erklärt. Diese Übergänge werden auch in Abbildung 5.47 deutlich, in der die an gesättigten Proben gemessene Wärmeleitfähigkeit gegen die archimedisch bestimmte Porosität dargestellt ist. Für die weiteren Berechnungen wurde deshalb auf die in Abschnitt 4.1 ermittelte Matrixwärmeleitfähigkeit von 3,9 W m⁻¹ K⁻¹ für Dolomite zurückgegriffen.

Zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeiten aus den Bohrlochmessdaten wurde der Muschelkalk in vier Zonen unterteilt, die sich lithologisch deutlich voneinander unterscheiden. Durch diese Zonierung war es möglich, Dreikomponentensysteme anzuwenden, wobei neben Ton und Wasser als dritte Kompo-

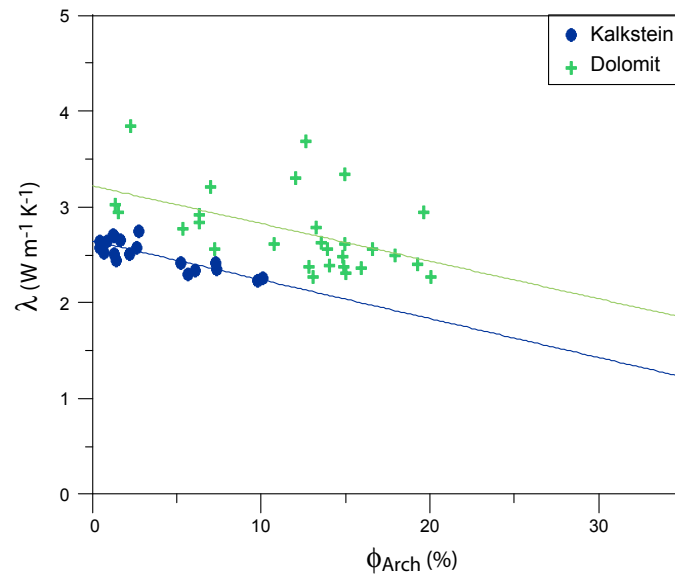


Abbildung 5.47: Wärmeleitfähigkeit λ wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität ϕ_{Arch} , dargestellt für Kalksteine und Dolomite des Muschelkalks.

nente entweder Dolomit (Zone 1 = Trigonodusdolomit), Kalkstein (Zone 2 = Oberer Muschelkalk, Zone 4 = Unterer Muschelkalk) oder Anhydrit (Zone 3 = Mittlerer Muschelkalk) gewählt wurde. Für die Dolomite in Zone 1 wurde entsprechend den Ergebnissen aus Abschnitt 4.1 eine Matrixwärmeleitfähigkeit von $3,9 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ als Startwert genommen. Da die Kalkstein in Zone 2 teilweise Übergänge zu Dolomiten zeigen, wurde in Anlehnung an die Berechnung im Oberjura ein gemeinsamer Matrixwert von $3,1 \text{ m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ festgelegt. Für die Anhydrite in Zone 3 wurde auf Literaturwerte zurückgegriffen und eine Matrixwärmeleitfähigkeit von $5,0 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ gewählt. Für Tonsteine wurde einheitlich für alle Zonen ein Matrixwert von $1,7 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ genommen. Aus den Bohrlochmessungen wurden dann für jede Zone getrennt die volumetrischen Anteile der Komponenten bestimmt. Die Bestimmung der Porosität erfolgte über das Sonic-Log, wobei die hierzu erforderliche Beziehung zwischen Porosität und p-Wellengeschwindigkeit über die Kernmessungen gut erfasst ist. Für die Karbonate des Muschelkalks lässt sich eine lineare Beziehung zwischen der archimedisch bestimmten Porosität und der ermittelten p-Wellengeschwindigkeit der gesättigten Proben herstellen (Abbildung 5.48). Durch lineare Anpassung ergeben sich für die Dolomite und Kalksteine einheitliche Matrixgeschwindigkeiten von $V_{pmatrix} = 6,4 \text{ km s}^{-1}$ ($t = 156 \mu\text{s}^{-1}$). Als Matrixlaufzeit für die Tone wurde in Anlehnung an die Untersuchungen im Jura ein Wert von $250 \mu\text{s}^{-1}$ gewählt. Abbildung 5.49 zeigt die berechnete Wärmeleitfähigkeit für den Muschelkalk der Bohrung B-06.

5.6.4 Geothermische Eigenschaften des Muschelkalks in Bezug zu Faziesveränderungen und Versenkungstiefen

Die betrachteten Bohrungen im Molassebecken zeigen zum Teil eine sehr einheitliche stratigraphische Abfolge. Das gilt besonders für die westlich gelegenen Bohrungen B-16 bis B-15 (Abbildung 5.50). Hier sind die Abfolgen des Unteren Muschelkalks bis zum Top des Trogonodusdolomits sehr einheitlich ausgebildet. Entsprechende geringe Variationen finden sich in den berechneten Wärmeleitfähigkeiten (Tabelle 5.16). Signifikante lithologische Unterschiede finden sich im „Melser Sandstein“. Hier

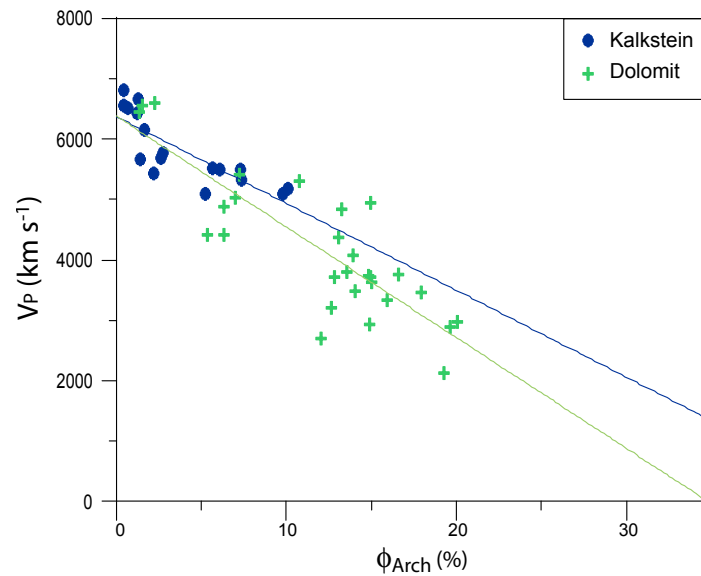


Abbildung 5.48: p -Wellengeschwindigkeit V_P wassergesättigter Proben gegen die archimedisch bestimmte Porosität ϕ_{Arch} , dargestellt für Kalksteine und Dolomite des Muschelkalks. Gegeben sind für jede Punktgruppe die Korrelationsgeraden in der entsprechenden Farbe.

wurde in den Bohrberichten zum Teil keine Trennung zwischen den eigentlichen Melser Sandsteinen und lithologisch ähnlichen permotriassischen Sedimenten getroffen. Die in den östlichen Bohrungen auftretenden hohen Gamma-Ray-Werte an der Basis des Muschelkalks sind auf umgelagertes Kristallin des Süddeutschen Basements zurückzuführen. Entsprechend der paläogeographischen Situation sind im östlichen Profilabschnitt die Abfolgen des Muschelkalks nicht bzw. nur in geringen Mächtigkeiten vorhanden. Generell nehmen die Mächtigkeiten der einzelnen Schichtglieder des Muschelkalks von Südosten nach Nordwesten zu. Vergleicht man die Gesteinsabfolge der Bohrung B-06 mit dem Standardprofil, ist anzunehmen, dass für den Unteren und Oberen Muschelkalk keine großen lithologischen Unterschiede nördlich und südlich der Donau vorliegen. Somit sollten die nachfolgenden Ergebnisse auf den nördlichen Bereich des Untersuchungsgebietes übertragbar sein. Dies gilt nicht für den Mittleren Muschelkalk, der im Bereich der untersuchten Explorationsbohrungen ohne Salinarformation ausgebildet ist. Direkte Informationen zu den thermischen Eigenschaften der Salinarformation liegen nicht vor

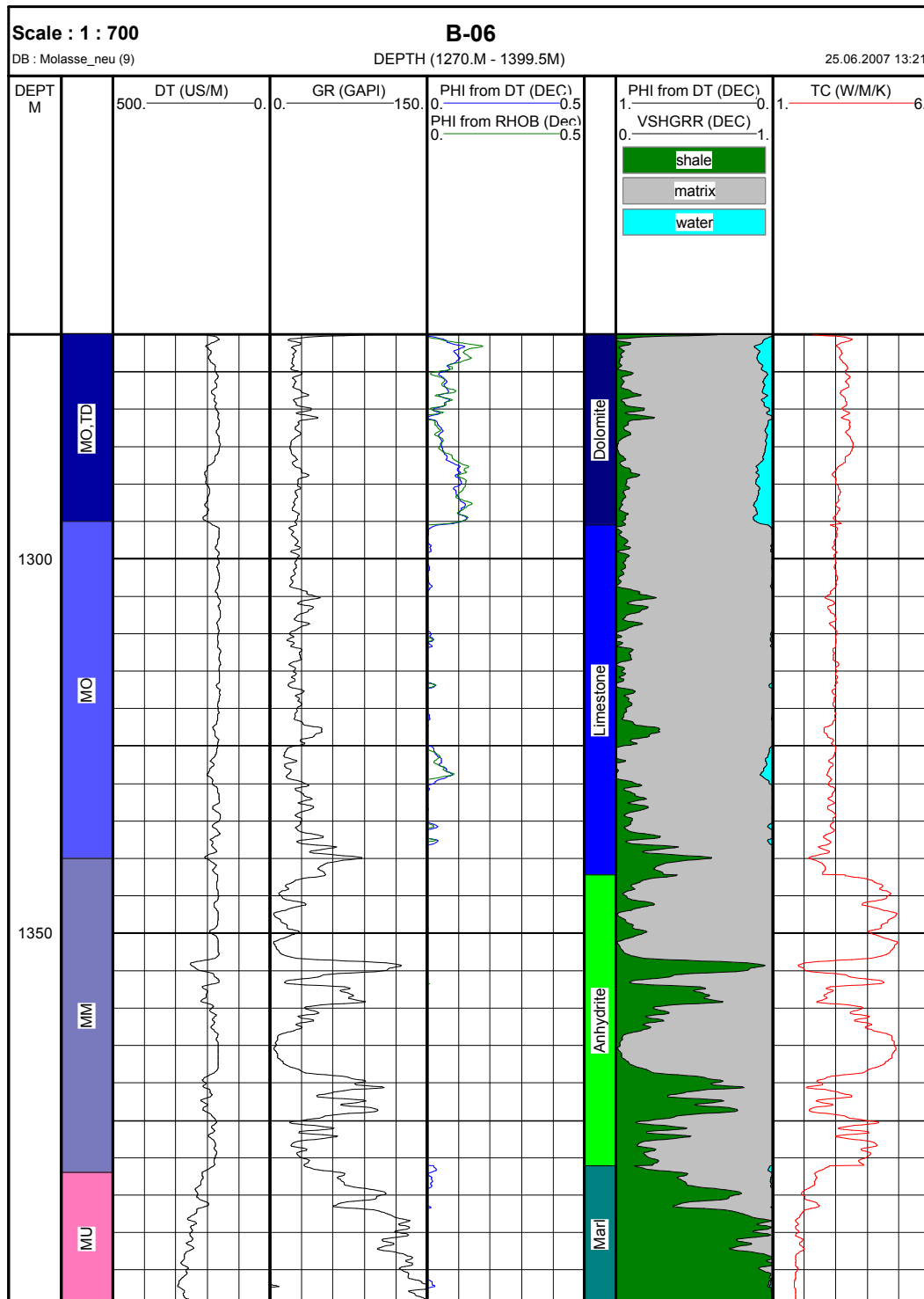


Abbildung 5.49: Berechnung der Wärmeleitfähigkeit (TC) aus den Bohrlochmessungen DT (spezifische Laufzeit akustischer Wellen) und GR (Gamma-Ray) für den Muschelkalk der Bohrung B-06 (vgl. Abbildung 3.6). Die Berechnung erfolgte über Dreistoffdiagramme für die vier unterschiedenen Zonen (vgl. Text). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. DEPTH: Bohrlochtiefe; PHI from DT; Porosität, berechnet aus Laufzeit; PHI from RHOB: Porosität, berechnet aus der Gesamtdichte.

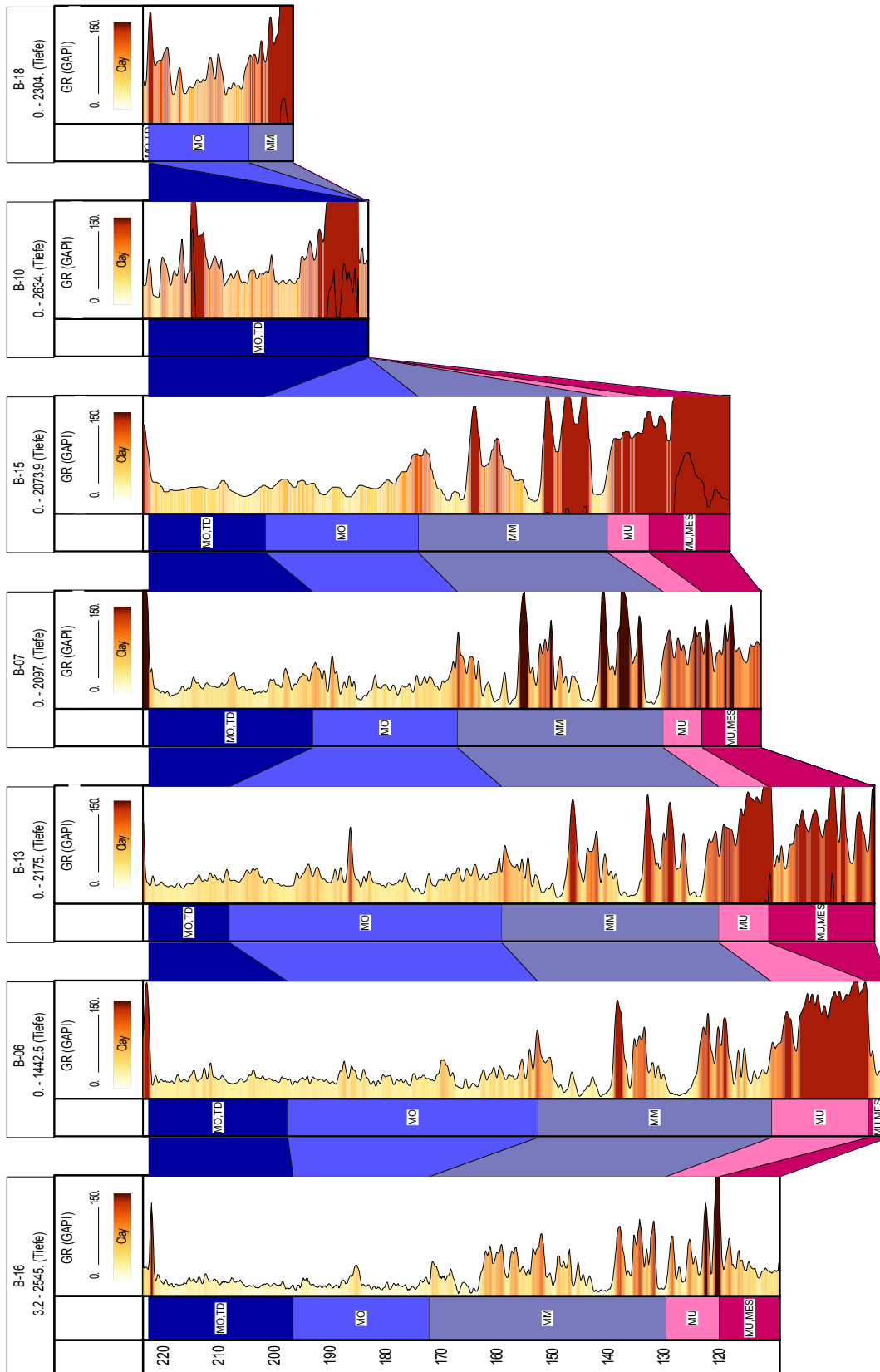


Abbildung 5.50: Korrelationen im Muschelkalk für Bohrungen auf einem Ost-West-Profil südlich der Donau (vgl. Abbildung 3.6). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind in Tabelle B.1 gegeben. GR: Gammaaktivität.

Tabelle 5.16: Statistik der aus den Logs berechneten Wärmeleitfähigkeiten im Muschelkalk (berechnet ohne Melser Sandstein).

Well	Top (m)	Bottom (m)	Net (m)	Min (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Max (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Mean (W m ⁻¹ K ⁻¹)	Std Dev (W m ⁻¹ K ⁻¹)
B-06	1270,3	1381,8	101	2,45	4,96	3,37	0,63
B-07	1980,7	2077,6	78	2,49	4,83	3,35	0,57
B-08	1329,2	1440,4	96	2,49	4,92	3,46	0,56
B-13	2028,0	2130,1	89	2,46	4,76	3,25	0,57
B-15	1837,7	1920,1	63	2,42	4,45	3,25	0,49

Aufgrund der nur geringen Anzahl an Bohrungen, die den Muschelkalk erbohrt haben, kann eine tiefenabhängige Betrachtung nur eingeschränkt vorgenommen werden. Es ist anzunehmen, dass für die Tonsteine dieselben Gesetzmäßigkeiten gelten, wie sie für die Tonsteine der Juraabfolgen beobachtet wurden. Die tiefenabhängige Abnahme der Porositäten und damit der Wassergehalte von Tonsteinen wurde bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeiten durch die gewählte Matrixlaufzeit von $250 \mu\text{s}^{-1}$ berücksichtigt. Zur Abschätzung der Druck- und Temperaturabhängigkeit wurden auf die Karbonat- und Anhydritfolgen die Ergebnisse der druckabhängigen Laboruntersuchungen angewandt. Abbildung 5.51 zeigt eine statistische Auswertung der Druckabhängigkeit für die Messdaten der Bohrung B-06, angewandt auf drei verschiedene Stratigraphien (vgl. Abbildung 5.49).

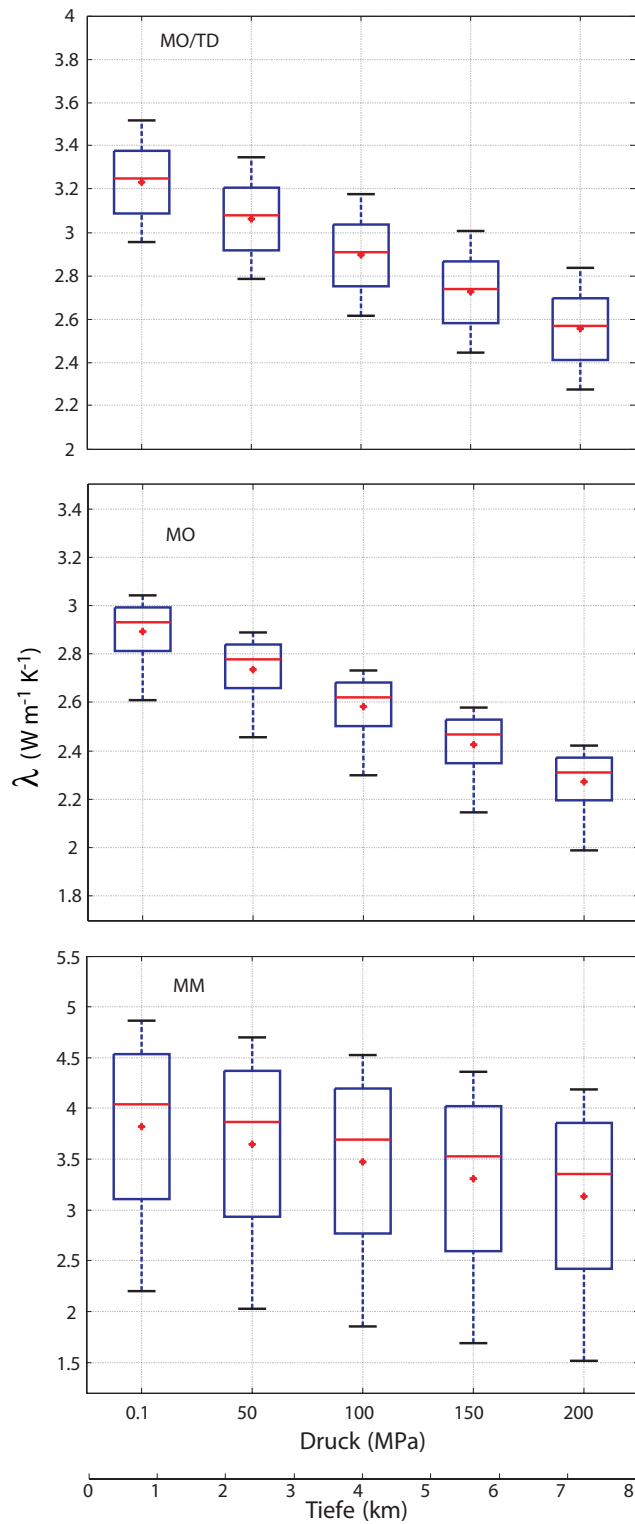


Abbildung 5.51: Häufigkeitsverteilung und Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeiten (λ) für drei verschiedene Stratigraphien (Bohrung B-06, Abbildung 5.49) und die dazugehörigen statistischen Maßzahlen in Form von Box-Whisker-Diagrammen (roter Strich: Medianwert; roter Stern: Mittelwert; blaue Box: 25%- und 75%-Quartil; schwarze Begrenzungsstriche: 5 %- und 95 %-Perzentil).

5.7 Buntsandstein

5.7.1 Geologische Übersicht des Buntsandsteins

Im Buntsandstein Süddeutschlands gelangten überwiegend fluviatile klastische Sedimente unter terrestrischen Bedingungen bei relativ aridem Klima zur Ablagerung, wobei Sandsteine von roter Farbe den größten Anteil ausmachen. Der Ablagerungsraum des Buntsandsteins stellte eine ebene Ablagerungsfläche dar, so dass Gesteinswechsel in der Buntsandstein-Abfolge aufgrund der regional einheitlichen Ablagerungsbedingungen über weite Entfernungen zu verfolgen sind und in lithostratigraphische Einheiten gegliedert werden (Abbildung 5.52). Die nach Norden hin zunehmenden Mächtigkeiten des Buntsandsteins von mehreren 100 m entstanden durch eine lang andauernde Subsidenz des Untergrundes, die kontinuierlich durch entsprechende Sedimentzufuhr kompensiert wurde und in Richtung Norddeutschland am stärksten ausgeprägt war (Abbildung 5.53).

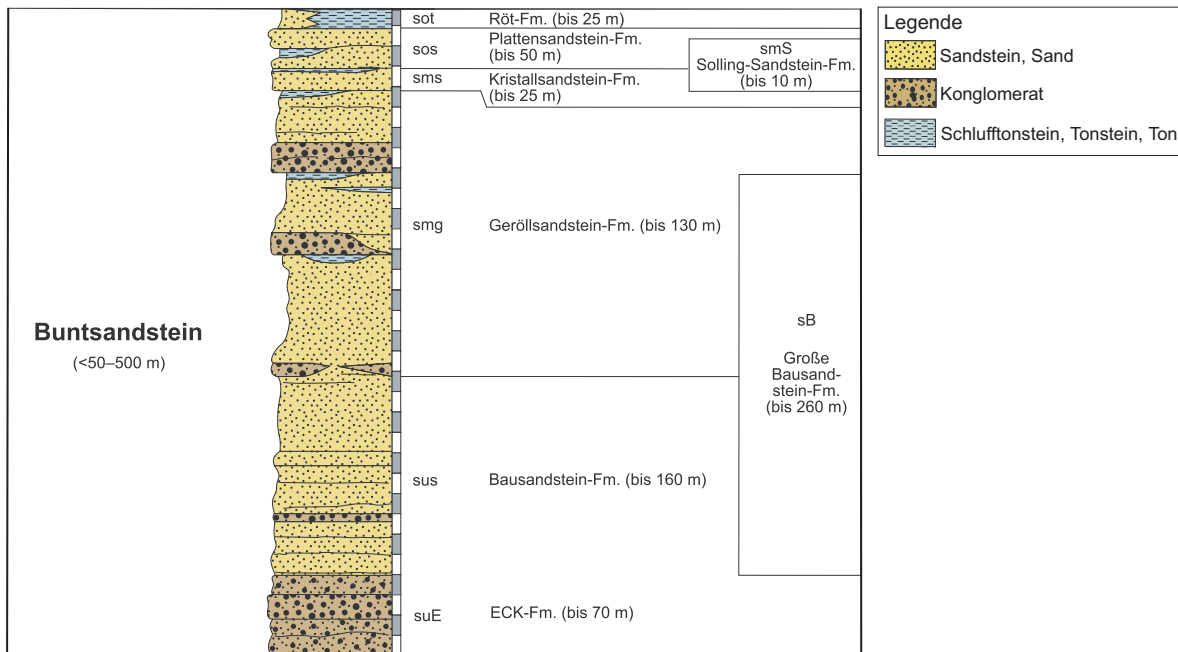


Abbildung 5.52: Musterprofil der Schichtenfolge des Buntsandsteins in Baden-Württemberg (nach Villing und Fischer, 2005). Die Abkürzungen zu den stratigraphischen Einheiten sind Anonym (2007) entnommen. Fm.: Formation.

Im **Unteren Buntsandstein** stellt die Bröckelschiefer-Folge aus dunkelrotbraunen, teilweise schluffigen oder sandigen Tonen das älteste Schichtglied dar, welche aber lediglich im Norden des Arbeitsgebietes im Bereich des Odenwaldes und des Kraichgauer Beckens anzutreffen ist (vgl. Abbildung 5.53). Darüber folgen Grobsande des oft nur wenig verfestigten *ECKschen Konglomerats*.

Die aufliegende geröllfreie Einheit des karbonatisch und teils auch kieselig gebundenen *Bausandsteins* befindet sich bereits im Übergang zum **Mittleren Buntsandstein**. Vom Odenwald im Norden bis zur Mitte des Arbeitsgebietes lässt sich der „Geröllfreie Hauptbuntsandstein“ verfolgen, der etwa bei Schramberg nach Süden hin auskeilt. Es folgt die *Geröllsandstein-Formation* bzw. das Hauptkonglomerat, welches vornehmlich aus grobkörnigen, geröllführenden und kieselig gebundenen Sandsteinen besteht und im Süden auf Höhe der Süddeutschen Hauptschwelle ausdünnert. Der darüber im südlichen

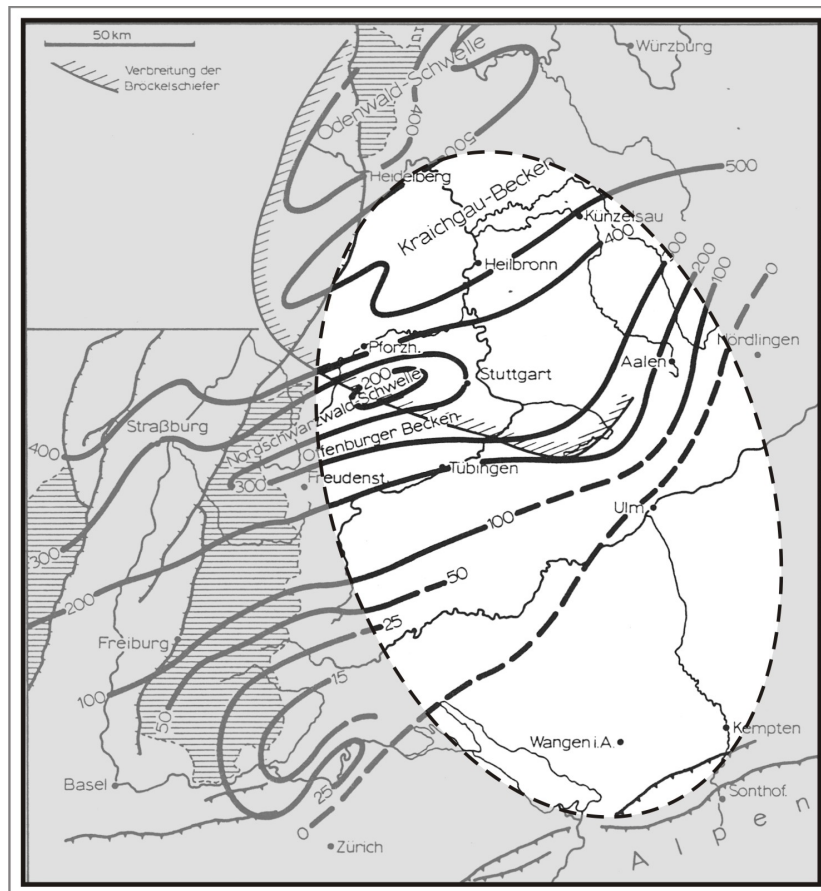


Abbildung 5.53: Mächtigkeit und Verbreitung des Buntsandsteins in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

Arbeitsgebiet folgende *Kristallsandstein-Horizont* tritt weiter nördlich in Richtung Odenwald als teils weißlicher „Felssandstein“ in Erscheinung.

Im **Oberen Buntsandstein** trat die fluviatile Sedimentation zugunsten einer Sedimentation im ruhigen, flachen marin-brackischen Gewässer zurück, was zu einer deutlich unterschiedlichen Ausbildung gegenüber älteren Schichten führte (Abbildung 5.54). Es gelangten die dünnbankigen *Plattensandsteine* mit glimmerreichen Schichtflächen zur Ablagerung. Die Buntsandsteinschichtfolge schließt mit den *Röt-Tonen* von dunkelroter Farbe ab, die gleichsam eine flächenhafte Verbreitung aufweisen.

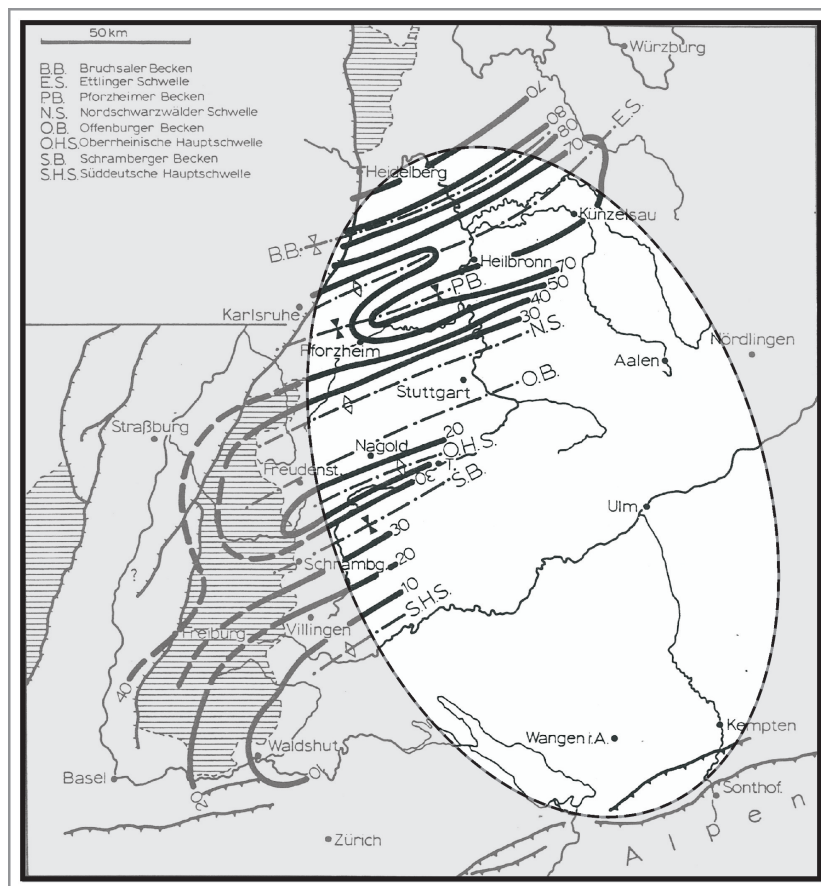


Abbildung 5.54: Mächtigkeit und Verbreitung des Oberen Buntsandsteins in Südwestdeutschland und im Arbeitsgebiet (Ellipse), modifiziert nach Geyer und Gwinner (1991).

Tabelle 5.17: Übersicht der gewonnenen Kernproben im Buntsandstein.

Probenanzahl	Strat. Einheit	Kürzel	Untereinheit
5	Oberer Bundsst.	sos	Plattensandstein
2	Mittl. Bundsst.	sms	Fels-/Grob-/Kristallsdst.
8		smg	Geröllsandstein
6	Unt. Bundsst.	sus	Basis-Bausdst./Tonlagensdst.
1		suE	Eck-Geröllsandst.

5.7.2 Gesteinsphysikalische Labormessungen

Der Buntsandstein stellt im Arbeitsgebiet oberhalb des Basements neben lokal auftretenden präkambrischen Sedimenten die tiefste stratigraphische Einheit dar. Im Bereich des Molassebeckens, in welchem Bohrlochmessdaten zur Verfügung standen (vgl. Tabelle 3.3 und Abbildung 3.6), beträgt die Mächtigkeit des Buntsandsteins selten mehr als 10 m. In den Bohrakten wird er zudem nur undifferenziert als „sandige Permtrias“ beschrieben. Eine Ableitung von gesteinsphysikalischen Eigenschaften aus bohrlochgeophysikalischen Messungen war deshalb nicht möglich. Die gesuchten Eigenschaften lassen sich aus Kerndaten hinreichend ableiten. Von den 35 ausgewählten Proben aus dem Buntsandstein sind 26 Proben im Labor messtechnisch nach der Standardprozedur (vgl. Abschnitt 2.1) erfasst worden. Die Proben stammen aus den Bohrungen Gemmingen und Sexau aus Tiefen zwischen 75 m und 664 m und dem Steinbruch 7018-334 (vgl. Anhang E). Da Tone in der Buntsandsteinschichtenfolge nur eine untergeordnete Rolle spielen (vgl. Musterprofil in Abbildung 5.52), konzentrierte sich die Auswertung auf die insgesamt 22 Sandsteinproben aus verschiedenen Untereinheiten (Tabelle 5.17).

Abbildung 5.55 zeigt die Variation der Einzelmessungen mit dem TC-Scanner (vgl. Abschnitt 2.1.1) an Proben aus der Bohrung Gemmingen im wassergesättigten und trockenen Zustand. Wie in Abschnitt 4.1 dargestellt, ist die Wärmeleitfähigkeit der Sandsteine in erster Linie mit ihrem Quarz-Feldspat-Verhältnis verknüpft. Die Wärmeleitfähigkeit des Quarzes beträgt $\approx 6,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, die von Feldspat dagegen nur $< 2,5 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$, so dass je nach mineralogischer Zusammensetzung die Messwerte variieren. Diese schwankt beim Buntsandstein meist zwischen 80 % und 90 % für Quarz und 10 % bis 20 % für Feldspat. Entsprechend streuen die Einzelwerte bereits innerhalb einer Probe wie beispielsweise GE02, GE03 oder GE012, bedingt durch die Heterogenität des Materials aufgrund der fluviatilen Ablagerungsbedingungen (vgl. Abschnitt 5.7.1). Es wurde daher darauf verzichtet, die Laborergebnisse verschiedenen Untereinheiten des Buntsandsteins zuzuordnen, die sich hinsichtlich ihrer petrophysikalischen Eigenschaften nicht so stark unterscheiden, als dass die Unterschiede mit der gegebenen Probenanzahl statistisch auflösbar wären.

Die Wärmeleitfähigkeit ist als nahezu reiner Quarzsandstein gegenüber anderen Sandsteinen wie zum Beispiel dem Keupersandstein insgesamt relativ hoch (vgl. Abschnitt 4.1 und beträgt durchschnittlich $4,32 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ (Abbildung 5.56; Tabelle 5.18). Der Mittelwert der Matrixdichte von 2662 kg m^3 liegt wie zu erwarten im Bereich der Mineraleichte von Quarz als Hauptkomponente. Die Summe der Messwerte (23) resultiert aus den einzelnen Pyknometer-Messungen (vgl. Abschnitt 2.1.3) und ist hier ausreichend. Für die Häufigkeitsverteilung der Porosität wurden ebenfalls nur Messungen an den einzelnen Proben mittels Archimedesverfahren durchgeführt und nicht die Scandaten des Coreloggers verwendet. Aus der Scanlinie der γ -Dichte ließe sich in guter Näherung mit Hilfe von Gleichung 2.1 entsprechend der gewählten Scandichte ein Wert je cm Mantelfläche des Probenstücks berechnen, so dass man mehr Datenpunkte zur Verfügung hätte. Dafür bräuchte man jedoch die punktgenauen

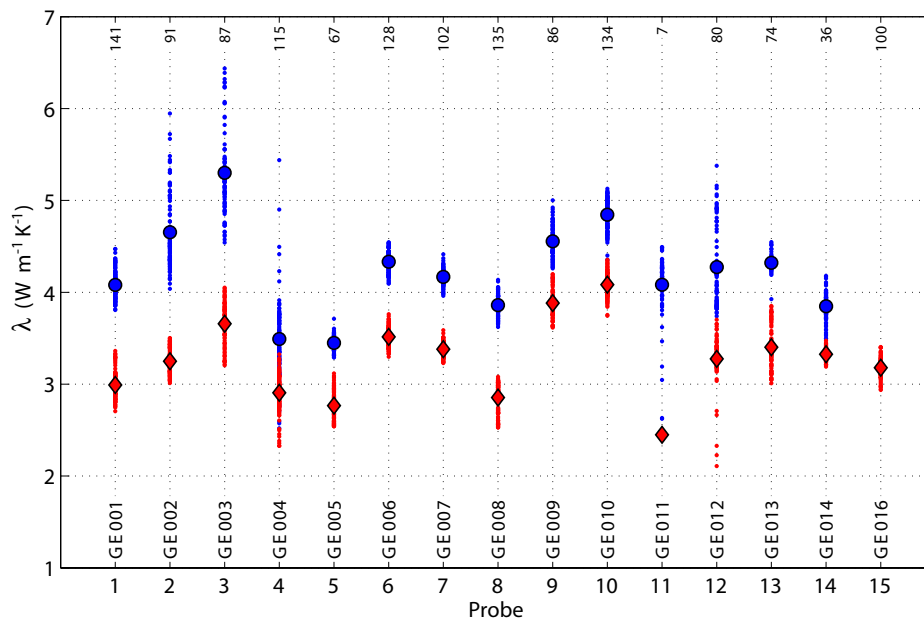


Abbildung 5.55: Messergebnisse zur Wärmeleitfähigkeit λ an gesättigten (blaue Punkte) und trockenen Proben (rote Punkte) aus der Bohrung Gemmingen. Die kleinen Punkte stellen Einzelmessungen dar; die großen die Mittelwerte aus dem jeweiligen Sättigungszustand. Die Anzahl der Einzelwerte ist jeweils oben angegeben.

Tabelle 5.18: Petrophysikalische Messwerte für die Sandsteine des Buntsandsteins. λ : Wärmeleitfähigkeit, gemessen an wassergesättigten Proben mittels TC-Scanner (vgl. Abschnitt 2.1.1); ρ_{rein} : Matrixdichte; ϕ : Porosität mittels Archimedesverfahren; V_p : Kompressionswellengeschwindigkeit mittels Core-Logger (vgl. Abschnitt 2.1.4).

Messung	N	Mittelwert	Standardabweichung	Median
λ ($W K^{-1} m^{-1}$)	1685	4,32	0,4	4,26
ρ ($kg m^{-3}$)	23	2662	104	2642
ϕ (%)	23	9,8	4,96	8,98
V_p ($m s^{-1}$)	453	3992	369	3988

Matrixdichten, so dass man sich hier auf die 23 Einzelmessungen beschränkt hat. Die Messwerte ergaben eine mittlere Porosität von 9,8 %. Die Kompressionswellengeschwindigkeit V_p beträgt im Durchschnitt 3992 km s^{-1} .

5.7.3 Geothermische Eigenschaften des Buntsandsteins in Abhängigkeit der Versenkungstiefe

Für die Ableitung der Druck- und Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit kann auf die in Abschnitt 4.2 dargestellten Resultate verwiesen werden. Dort ist am Beispiel der Hauptgesteinsarten die Tiefenabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ermittelt worden. Da die Wärmeleitfähigkeit generell bei den Sandsteinen in Abhängigkeit des Quarz-Feldspat-Verhältnisses stark variiert, wurde eine entsprechende Gliederung vorgenommen. Der quarzreiche Typ wird dabei von Sandsteinen des Bunt-

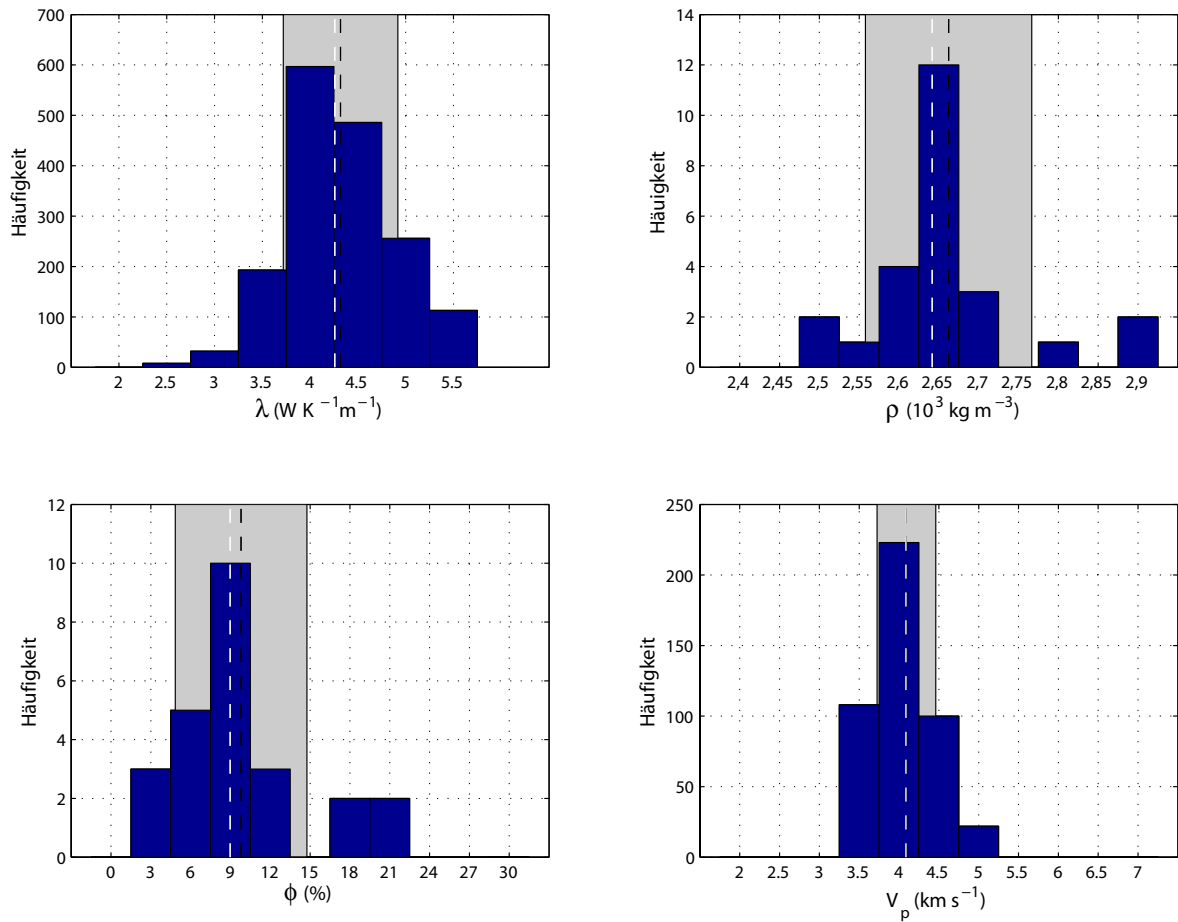


Abbildung 5.56: Häufigkeitsverteilung petrophysikalischer Eigenschaften von Sandsteinproben aus dem Buntsandstein (schwarze gestrichelte Linie: Mittelwert; weiße gestrichelte Linie: Median; graues Feld: Standardabweichung): λ : Wärmeleitfähigkeit gesättigter Proben (alle Einzelwerte aus den Scanlinien; vgl. Text); ρ : Reindichte (eine Einzelmessung je Probe; vgl. Text); ϕ : Porosität (eine Einzelmessung je Probe; vgl. Text); V_p : Kompressionswellengeschwindigkeit gesättigter Proben (alle Einzelwerte aus den Scanlinien; vgl. Text).

sandsteins repräsentiert, so dass die in Abschnitt 4.2.3 gefundenen Zusammenhänge übernommen werden können. Die Tiefenabhängigkeit kann demnach bei einem lithostatischen Druckgradienten von 25 MPa km^{-1} in Anlehnung an Gleichung 4.10 wie folgt beschrieben werden:

$$\lambda(\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}) = -0,0044 \cdot P(\text{MPa}) + 3,1426 \quad (5.7)$$

Kapitel 6

Zusammenfassung und Bewertung der Ergebnisse

6.1 Erzielte Ergebnisse

Die bereitgestellten thermischen und hydraulischen Gesteinseigenschaften wurden in diesem Projekt durch direkte Labormessungen und eine indirekte Ableitung aus einer Kombination unabhängiger geophysikalischer Bohrlochmessungen bestimmt. Eine zusammenfassende Übersicht zu den stratigraphischen Einheiten ist in Tabelle 6.1 dargestellt. Fehlende Werte sind hier durch Angaben aus der Literatur ergänzt worden. Vor allem die Gesteinseigenschaften aus dem Tertiär des Süddeutschen Molassebeckens stützen sich auf Vorarbeiten von Rath und Clauser (2004) (vgl. Abschnitt 5.1.2). Im Folgenden werden die Hauptergebnisse dieser Projektphase entsprechend den in der Einleitung vorgegebenen Aufgaben (Abschnitt 1.3) zusammengefasst.

Tabelle 6.1: Zusammenfassende Übersicht zu den thermischen und hydraulischen Eigenschaften der wichtigsten stratigraphischen Einheiten im Untersuchungsgebiet: Wärmeleitfähigkeit λ_s des wassergesättigten Gesteins, volumetrische Wärmekapazität $\rho_m c_p$ (vgl. Abschnitt 4.1.3), Porosität ϕ (aus Labormessungen) und hydraulische Permeabilität k . (1) Nach Bohrmeter gewichteter Mittelwert der aus den Logs jeder Einzelbohrung berechneten Wärmeleitfähigkeiten bzw. Mittelwert der Labormessungen (kursiv); (2) Extrema der Einzelwerte aus allen Logs bzw. aus allen Labormessungen (kursiv); (3) Oberflächenproben aus Steinbrüchen; (4) aus Rath und Clauser (2004); (5) aus Preusche (1996); (6) Messung Gesteinslabor Dr. Jahns (aus Rath und Clauser, 2004); (7) Labormessungen der Wintershall AG (nur Bausteinschichten und Cyrenenschichten; aus Rath und Clauser, 2004); (8) aus Pikulski (1991); (9) ohne Melsler Sandstein.

Stratigraphische Einheit	λ_s ($W m^{-1} K^{-1}$)				Thermische Parameter $\rho_m c_p$ ($MI m^{-3} K^{-1}$)				Hydraulische Parameter					
	(1) Mittelwert	(2) Min.	(2) Max.	n (Bohrungen)	Logmeter/ n (Proben)	Mittelwert	Min.	Max.	n (Proben)	ϕ (-)	Min.	Max.	n (Proben)	k (m^2)
O. Meeresmolasse allg.	(4) 3,06	2,98	3,17	1	6	(4) 3,15								(4) $9,4 \cdot 10^{-14}$
Baltringer Schichten	(4) 3,06	2,89	3,67	1	54	(4) 3,15								(6) $1,6 \cdot 10^{-12}$ (4) $6,0 \cdot 10^{-13}$
Sandschiefer	(4) 2,89	2,34	3,71	1	267									
Basissandstein	(4) 3,10	2,79	3,43	1	62									
U. Süßwassermolasse	(4) 3,05	1,80	3,46	4	46	(4) 2,90								(5) $1,8 \cdot 10^{-15}$
U. Cyrenenschichten	(4) 2,44	1,81	2,92	2	12									
Bausteinschichten	(4) 2,88	1,57	3,81	14	181	(4) 3,15								(5) $8,4 \cdot 10^{-14}$ (7) $4,1 \cdot 10^{-11}$
Oberjura (Malm)	2,74	1,15	3,11	12	4995	2,23	2,03	2,56	14		Kalkstein: 0,04 Dolomit: 0,09 Mergel: 0,05	0,13 0,13 0,08	44 20 9	(4) $6,7 \cdot 10^{-13}$ – $6,7 \cdot 10^{-11}$
Mitteljura (Dogger)	1,82	1,16	4,57	11	1774							0,13 0,20	8	
Untejura (Lias)	2,02	1,16	4,83	11	451	1,95	1,93	1,98	4			0,15 0,17	14 11	(8) $2 \cdot 10^{-16}$ – $9,6 \cdot 10^{-14}$
Keuper-Schilfsandstein	2,47	2,41	2,59	(3) 2	9	1,99	1,94	2,03	2			0,20 0,16	9	(8) $1 \cdot 10^{-16}$ – $9,4 \cdot 10^{-13}$
Keuper-Stubensandstein	3,34	3,03	3,67	3	10	2,09	2,08	2,10	2			0,16 0,08	10	(gesamter Keuper)
Muschelkalk	(9) 3,34	2,42	4,96	5	427	2,27	1,95	2,41	11			0,04 0,20	20 28	
Buntsandstein	4,32	3,02	5,29	2 + (3) 1	23	2,00	1,80	2,26	7			0,10 0,02	23	

Methodische Arbeiten

In dieser ersten Projektphase wurde eine Reihe von methodischen Arbeiten durchgeführt, die zwar naturgemäß nur exemplarisch in die hier präsentierten Ergebnisse einfließen konnten, jedoch im laufenden Folgeprojekt relevant werden. Durch die in den Abschnitten 2.1.7 (NMR) und 2.1.8 (SIP) beschriebenen experimentellen Entwicklungen konnten erste Erfahrungen der Bestimmung hydraulischer Eigenschaften gewonnen werden, die für die Entwicklung einer gemeinsamen Interpretationsmethodik (z. B. bei der Aufstellung petrophysikalischer Gesteinsmodelle) entscheidend sind.

Auf dem Gebiet der Loginterpretation wurden durch die Entwicklung eines neuartigen, auf dem Bayes'schen Ansatz beruhenden Inversionsprogramms wesentliche Schritte auf dem Weg hin zu einer der geothermischen Fragestellung angepassten Methode getan (Abschnitt 2.2.6). Der verwendete Ansatz ermöglicht es, theoretische wie auch (semi)empirische Gesteinsmodelle, die neben den lithologisch kontrollierten und somit lokalen Eigenschaften auch globale Zusammenhänge (z.B. Temperatur- und Druckabhängigkeiten) adäquat in die Interpretation einzubeziehen. Dieser Ansatz ist damit besonders geeignet für eine Zusammenführung der Logging-Daten mit den Ergebnissen der Laboruntersuchungen. Die entwickelte Methode geht damit weit über die kommerziell erhältlichen und im Wesentlichen auf die Bedürfnisse der Kohlenwasserstoff-Industrie zugeschnittenen Softwarepakete hinaus. Durch den offenen Charakter dieser Entwicklung kann sie als Grundlage weiterführender Untersuchungen dienen.

Gewinnung, Qualitätskontrolle und faziesbezogene Auswertung von Logging-Daten und Labormessungen

Aus dem Bereich des westlichen Süddeutschen Molassebeckens und der nördlich angrenzenden Schwäbischen Alb wurden insgesamt 270 Einzelproben aus 15 verschiedenen Bohrlochlokalationen und 12 verschiedenen Oberflächenaufschlüssen im Labor untersucht. Die hier vorkommenden Gesteinstypen werden als repräsentativ für die 41 stratigraphischen Untereinheiten zwischen Buntsandstein und Tertiär angesehen. An diesen Proben wurden ca. 25000 Einzeldaten der Wärmeleitfähigkeit und jeweils ca. 5000 Einzeldaten der akustischen Wellengeschwindigkeit und der Rohdichte gewonnen. Für die räumliche Abdeckung flossen Bohrlochmessdaten aus 22 überwiegend im westlichen Molassebecken befindlichen Bohrungen in die Auswertung ein, die zusammen über 40000 Tiefenmeter ergeben.

Bislang erstmalig wurden in dieser Studie an einer repräsentativen Auswahl der Laborproben neben einer Datenerhebung auch eine qualitative Gesteinsbeschreibung sowie eine quantitative Bestimmung der mineralogischen und chemischen Gesteinszusammensetzung durchgeführt. Das ermöglicht die Zuordnung gesteinsphysikalischer Daten zu den jeweiligen Gesteinstypen und deren Komponenten. Diese Verbindung zwischen Petrophysik und Lithologie erlaubt es, die lokal gewonnenen Daten in eine räumliche Dimension zu überführen und eine weitgehende Übertragbarkeit auf andere Gebiete zu gewährleisten.

Darüber hinaus wurden auch die petrophysikalischen Eigenschaften der Hauptgesteinsarten ermittelt (Abschnitt 4.1). Zum Beispiel sind die Kalksteine trotz unterschiedlichen Alters und Genese durch eine sehr geringe Variationsbreite der petrophysikalischen Eigenschaften gekennzeichnet. Die Messdaten liefern hier somit repräsentative Kennzahlen für die Kalksteine des betrachteten Arbeitsgebietes. Die Dolomite zeigen hingegen größere Variationsbreiten ihrer Kennwerte. Diese hängt vom Grad der Dolomitisierung ab, die mit einer Erhöhung der Reindichte, der Porosität und der Wärmeleitfähigkeit einher geht. Sandsteine weisen in Abhängigkeit der Stratigraphie und der Genese eine starke Streuung der Messdaten auf. Das Ablagerungsmilieu und diagenetische Prozesse bedingen hier Unterschiede in

der mineralogischen Zusammensetzung, die sich wiederum beispielsweise auf die Wärmeleitfähigkeit auswirken.

Modellbasierte Erstellung thermischer und hydraulischer Kenngrößen aus Labordaten und bohrlochgeophysikalischen Messungen

Mit Hilfe der mineralogischen Untersuchungen konnte in vielen Fällen ein verbessertes Gesteinsmodell gewonnen oder ein gegebenes Modell kalibriert werden, indem die jeweils am Gesamtgestein ermittelten Werte mit theoretischen Modellen zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit abgeglichen wurden. Für die schon erwähnten Kalk- und Dolomitgesteine liefert beispielsweise das Lichtenecker-Modell die beste Abschätzung der Wärmeleitfähigkeit (Abschnitt 4.1.2). Eine Modifikation dieses Modells berücksichtigt die Beziehung zwischen Matrix, Porenraumstruktur und Wärmeleitfähigkeit der Hauptgesteinsarten und erlaubt eine Kalibrierung des bestehenden Modells. Aufbauend auf der hier entwickelten Methodologie konnte die Vorhersagefähigkeit bezüglich der thermischen Gesteinseigenschaften deutlich verbessert werden.

Für die Ableitung thermischer und hydraulischer Kennwerte aus Bohrlochmessungen wurden für jede stratigraphische Einheit zunächst Mehrstoffmodelle auf Basis der Laboruntersuchungen entwickelt. Die Eingangsparameter für die Mehrstoffmodelle (Matrix-Wärmeleitfähigkeit, Kompressionswellengeschwindigkeit) wurden aus den Laborergebnissen der jeweiligen stratigraphischen Einheiten ermittelt. Mittels der Mehrstoffmodelle wurden dann aus den Logging-Daten die volumetrischen Gesteinskomponenten berechnet, aus denen wiederum die effektive Wärmeleitfähigkeit abgeleitet wurde (Kapitel 5). Es zeigte sich, dass die zu Grunde liegenden Eingangsparameter für jede stratigraphische Einheit immer wieder neu festgelegt werden müssen. Beispielsweise erreicht selbst die Matrix-Wärmeleitfähigkeit reiner Kalksteine nie den Wert, den man für das Einzelmineral erhalten würde. Es ist deshalb sinnvoll, einzelne stratigraphische Systeme auf genetische Aspekte hin zu analysieren und entsprechend zusammenzufassen. Die Einteilung in lithostratigraphische Einheiten entspricht demnach genetischen Einheiten, ausgehend von den terrestrischen Sequenzen des Buntsandsteins bis hin zu den evaporitischen Sequenzen des Malms.

Übertragung der Gesteinseigenschaften auf in-situ Bedingungen

An etwa 50 ausgewählten Gesteinsproben wurde die Druck- und Temperaturabhängigkeit von Wärmeleitfähigkeit und hydraulischen Eigenschaften bestimmt. Die Untersuchungen zur Abhängigkeit von thermischen und hydraulischen Eigenschaften von Druck und Temperatur ergeben in den meisten Gesteinen des Süddeutschen Molassebeckens einen linearen Zusammenhang zwischen der Wärmeleitfähigkeit und der Versenkungstiefe. Wie zu erwarten zeigen die untersuchten Sandsteine den deutlichsten Effekt. Demgegenüber weisen die Karbonate nur eine geringe Druck- und Temperaturabhängigkeit auf, sodass die hierdurch hervorgerufene Variation bis zu einer Tiefe von 3000 m bei Berücksichtigung der Messunsicherheit vermutlich vernachlässigbar ist. Für die Tonsteine ist der Tiefeneffekt nicht konsistent beschreibbar. Hier konkurrieren zwei gegenläufige Prozesse: Die Wärmeleitfähigkeit der Matrix sinkt mit gleichzeitig steigender Temperatur und steigendem Druck. Die Druckzunahme führt aber durch Kompaktion zu einem geringeren Wassergehalt in den Tonmineralen und damit zu einem Anstieg der Gesamtleitfähigkeit. Es sind daher weitere Messungen notwendig, um Druck- und Temperaturabhängigkeiten auch für die tonführenden Lithologien in der nötigen Genauigkeit erfassen zu können.

Bewertung der erzielten wissenschaftlichen Ergebnisse

Dieses Projekt wurde mit der Motivation begonnen, die spärliche Datengrundlage thermophysikalischer Gesteinseigenschaften zu erweitern. Mit den hier dargestellten Arbeitsergebnissen wurde erstmalig eine systematische Untersuchung vorgenommen und ein Datensatz von bisher unbekannter Qualität und Quantität erzielt. Die bisher schon gewonnenen Daten werden in der zweiten Projektphase noch ergänzt und mit den jetzigen Projektergebnissen zusammengeführt und der Öffentlichkeit zugänglich gemacht werden.

6.2 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Durch die im Forschungsvorhaben erarbeiteten Resultate vorgesehenen Entwicklungen wird es möglich, das geothermische Potenzial besser abzuschätzen und somit die Planungssicherheit für geothermische Anlagen zu erhöhen. Zum Beispiel können die ermittelten thermischen Eigenschaften als Eingangsparameter für Simulationen zur Auslegung und zum Langzeitverhalten von Erdwärmesonden und hydrothermalen Anlagen zur Wärme- und Stromerzeugung genutzt werden. Die Arbeiten zur Erstellung einer statistisch repräsentativen Datenbasis für die verschiedenen Regionen Deutschlands werden wesentlich dazu beitragen, die Aufsuchung und Standortwahl für geothermische Energiegewinnung zu optimieren und stützen somit die förderpolitischen Bestrebungen eines Ausbaus regenerativer Energien in Deutschland. Die Verbesserung der Datenbasis im Bereich der Geothermie sollte positive Impulse auf den Ausbau geothermischer Energiegewinnung in Deutschland ausüben.

Weiter kann erwartet werden, dass die Verbesserung der Datengrundlage im Bereich der Geothermie positive Impulse auf die deutsche Bohr- und Maschinenindustrie gibt. Neben wirtschaftlichen Aspekten werden durch die kombinierte Auswertung von Labordaten, bohrlochgeophysikalischen Daten und geologischem Umfeld neue Erkenntnisse auf dem Gebiet der Gesteinsphysik erworben.

6.3 Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Parallel zum abgeschlossenen Vorhaben und der gegenwärtig laufenden zweiten Projektphase soll das BMU-Projekt „Aufbau eines geothermischen Informationssystems (GeotIS) für Deutschland“ unter dem Förderkennzeichen 0327542 unter Beteiligung mehrerer Landesämter die Qualität bei der Projektierung von geothermischen Anlagen verbessern und das Fündigkeitsrisiko minimieren. Es soll im Wesentlichen Daten über tiefe, für geothermische Nutzung geeignete Aquifere beinhalten. Die Ergebnisse aus beiden Projektphasen sollen in geeigneter Form in das Informationssystem einfließen.

6.4 Erfolgte Veröffentlichungen im Rahmen des Projektes

Zeitschriften

- Hartmann, A.; Pechnig, R.; Koch, A.; Clauser, C.: Ermittlung thermischer und hydraulischer Gesteinseigenschaften für den flachen und tiefen Untergrund in Deutschland. *Geothermische Energie*, 2006, 51, 4-8.
- Hartmann, A.; Pechnig, R.; Clauser, C.: Petrophysical analysis of regional-scale thermal properties for improved simulations of geothermal installations and basin-scale heat and fluid flow.

International Journal of Earth Sciences, 2007, submitted.

Poster und Vorträge

- Hartmann, A.; Clauser, C.; Pechnig, R.: Erstellung statistisch abgesicherter thermischer und hydraulischer Gesteinseigenschaften für den flachen und tiefen Untergrund in Deutschland; Phase 1: Westliche Molasse, Schwäbische Alb und Franken. Geothermische Jahrestagung 2005, Geothermie: Synergie und Effizienz, 16.-17. November 2005 in Unterschleißheim, 2005.
- Hartmann, A.; Pechnig, R.; Clauser, C.: Rock Property Mapping for Improved Planning of Geothermal Installations. Thirty-First Workshop on Geothermal Reservoir Engineering, Stanford University, Stanford, California, January 30-February 1, 2006, SGP-TR-179, 2006.
- Koch, A.; Jorand, R.; Pechnig, R.; Mottaghy, D.; Clauser, C.: Use of Exploration Wells to Improve Geothermal Reservoir Models. Tagungsband der 67. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, 26. - 29. März 2007 in Aachen, 2007.
- Pechnig, R.; Mottaghy, D.; Koch, A.; Jorand, R.; Clauser, C.: Prediction of Thermal Properties for Mesozoic Rocks of Southern Germany. Tagungsband der 67. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, 26. - 29. März 2007 in Aachen, 2007.
- Jorand, R.; Pechnig, R.; Mottaghy, D.; Koch, A.; Clauser, C.: Determination of thermal and hydraulic Properties for different Lithologies of Southern Germany. European Geosciences Union, General Assembly, Vienna, 15 - 20 April 2007, 2007.
- Koch, A.; Jorand, R.; Pechnig, R.; Mottaghy, D.; Clauser, C.: Use of Exploration Wells to Improve Geothermal Reservoir Models. Proceedings European Geothermal Congress 2007, Unterhaching, Germany, 30 May-1 June 2007, 2007.
- Pechnig, R.; Mottaghy, D.; Koch, A.; Jorand, R.; Clauser, C.: Prediction of Thermal Properties for Mesozoic Rocks of Southern Germany. Proceedings European Geothermal Congress 2007, Unterhaching, Germany, 30 May-1 June 2007, 2007.

Diplomarbeiten und Dissertationen

Folgende Abschlussarbeiten an der RWTH Aachen tragen in Teilen zu den Ergebnissen der abgeschlossenen Projektphase bei:

- Fehr, A.: NMR- und SIP-Messungen an Gesteinsproben. Diplomarbeit. RWTH Aachen, eingereicht, 2007.
- Hartmann, A.: Inversion of geothermal parameters using borehole and core data. Dissertation RWTH Aachen, eingereicht, 2007.

Angewandte Geophysik und Geothermische Energie
E.ON Forschungszentrum für Energie
RWTH Aachen

Projektleiter
(Prof. Dr. C. Clauser)

Literaturverzeichnis

- Allen, D., Flaum, C., Ramakrishnan, T., Bedford, J., Castelijns, K., Fairhurst, D., Gubelin, G., Heaton, N., Minh, C., Norville, M., Seim, M., Pritchard, T., und Ramamoorthy, R., Trends in NMR Logging, *Oilfield Review*, 12 (3), 2–19, 2000.
- Anferova, S., Anferov, V., Rata, D. G., Blümich, B., Arnold, J., C., C., Blümmler, P., und Raich, H., Mobile NMR device for measurements of porosity and pore size distributions of drill core samples, *Concepts in Magnetic Resonance. Part B, Magnetic Resonance Engineering*, 23(B), 26–32, 2004.
- Anonym, Geologischer Bericht über die Aufschlussbohrung Ebratsweiler 1, Bericht, Wintershall AG, 1985.
- Anonym, *Log Interpretation Charts*, Schlumberger, Houston, TX, 1989.
- Anonym, *Kristallin im süddeutschen Molasseuntergrund, Geologie im bayerischen Schichtstufenland*, Bd. 108 von *Geologica Bavarica*, Bayerisches Geologisches Landesamt, München, 1998a.
- Anonym, *Geowissenschaftliche Übersichtskarten von Baden-Württemberg 1 : 350.000, Karte und CD*, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, Freiburg, 1998b.
- Anonym, *Karten der mineralischen Rohstoffe von Baden-Württemberg 1 : 50.000*, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, 1999-2007.
- Anonym, Projekt Opalinuston: Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebnisse. Entsorgungsnachweis für abgebrannte Brennelemente, verglaste hochaktive sowie langlebige mittelaktive Abfälle, Nagra Technischer Bericht (NTB) 02-03, NAGRA, 2002.
- Anonym, *Geologische Karte von Bayern 1 : 500.000, 4. Auflage; Erläuterungen und CD*, Bayerisches Geologisches Landesamt, München, 2004.
- Anonym, Symbolschlüssel Geologie Baden-Württemberg - Verzeichnis Geologischer Einheiten - Stand: Mai 2005. Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg., 2007.
- Arnold, J., *Mobile NMR for rock porosity and permeability*, Dissertation, RWTH Aachen University, 2007.
- Arnold, J., Clauser, C., Pechinig, R., Anferova, S., Anferov, V., und Blümich, B., Porosity and permeability from mobile NMR core-scanning, *Petrophysics*, 47, 306–314, 2006.
- Asaad, Y., *A study of the thermal conductivity of fluid-bearing porous rocks*, Dissertation, University of California – Berkeley, 1955.

- Beardsmore, G. R. und Cull, J. P., *Crustal Heat Flow*, Cambridge University Press, 2001.
- Beck, A. E., Methods for determining thermal conductivity and thermal diffusivity, in *Handbook of Terrestrial Heat-Flow Density Determination*, herausgegeben von R. Haenel, L. Rybach, und L. Stegena, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1988.
- Bertleff, B. und Watzel, R., Tiefe Aquifersysteme im südwestdeutschen Molassebecken. eine umfassende hydrogeo-logische Analyse als Grundlage eines künftigen Quantitäts- und Qualitätsmanagement, *Abh. L.-Amt Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg*, 15, 75–90, 2002.
- Bertleff, B., Joachim, H., Kozirowski, G., Leiber, J., Ohmert, W., Prestel, R., Stober, I., Strayle, G., Villinger, E., und Werner, J., *Ergebnisse der Hydrogeothermiebohrungen in Baden-Württemberg*, Bd. 30 von *Abhandlungen des geologischen Landesamt Baden-Württemberg*, LGRB, Freiburg, 1988.
- Bethke, C. M., Inverse hydrologic analysis of the distribution and origin of Gulf Coast-type geopressed zones, *Journal of Geophysical Research*, 91, 6535–6545, 1986.
- Binley, A., Slater, L. D., Fukes, M., und Cassiani, G., Relationship between spectral induced polarization and hydraulic properties of saturated and unsaturated sandstone, *Water Resources Research*, 41, 2005.
- Birch, F., The effects of pleistocene climatic variations upon geothermal gradients, *American Journal of Science*, 246, 729–760, 1948.
- Bischof, C., Lang, B., und Vehreschild, A., Automatic differentiation for MATLAB programs, *Proc. Appl. Math. Mech.*, 2, 50–53, 2003.
- Bischof, C. H., Bücker, H. M., Lang, B., Rasch, A., und Vehreschild, A., Combining source transformation and operator overloading techniques to compute derivatives for matlab programs, in *Proceedings of the Second IEEE International Workshop on Source Code Analysis and Manipulation (SCAM 2002)*, S. 65–72, IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, 2002.
- Börner, F. D., Schopper, J., und Weller, A., Evaluation of transport and storage properties in the soil and groundwater zone from induced polarization measurements, *Geophysical Prospecting*, 44, 583–601, 1996.
- Brinkmann, R., *Abriss der Geologie*, Bd. II. Historische Geologie, Erd- und Lebensgeschichte, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 13. Ausgabe, 1986.
- Cermak und Rybach, L., Thermal conductivity and specific heat of minerals and rocks, in *Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, herausgegeben von G. Angenheister, Bd. V/1a, S. 305–343, Springer, Berlin, 1982.
- Clauser, C., Geothermal energy, in *Landolt-Börnstein, Group VIII: Advanced Materials and Technologies, Vol. 3: Energy Technologies, Subvol. C: Renewable Energies*, herausgegeben von K. Heinloth, S. 493–604, Springer Verlag, Heidelberg-Berlin, 2006.
- Clauser, C. und Huenges, E., Thermal conductivity of rocks and minerals, in *Rock Physics and Phase Relations – a Handbook of Physical Constants, AGU Reference Shelf*, herausgegeben von T. J. Ahrens, Bd. 3, S. 105–126, American Geophysical Union, Washington, 1995.

- Dunn, K., Bergman, D. J., und Latorraca, G., *Handbook of geophysical exploration. Seismic exploration*, Pergamon, Elsevier Science, Oxford, 2002.
- Ellis, D. V., *Well logging for earth scientists*, Elsevier, Amsterdam, 1987.
- Erbas, K., *Eine universelle Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit aus Aufheizkurven konstant geheizter Zylinderquellen*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2001.
- Fehr, A., *NMR- und SIP-Messungen an Gesteinsproben*, Dipl.-Arbeit, Angewandte Geophysik und Geothermische Energie RWTH Aachen, 2007.
- Geyer, O. F. und Gwinner, M. P., *Die Schwäbische Alb und ihr Vorland*, In: *Sammlung Geologischer Führer 67, 3. Auflage*, Gebrüder Bornträger, Stuttgart, 1984.
- Geyer, O. F. und Gwinner, M. P., *Geologie von Baden-Württemberg*, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, Germany, 4th Ausgabe, 1991.
- Haenel, R., Rybach, L., und Stegena, L., *Handbook of terrestrial heat-flow density determination*, Kluwer, Dordrecht, Holland, 1988.
- Halbach, K., Permanent magnets for production and use of high-energy particle beams, in *Proceedings of the Eighth International Workshop on Rare Earth Cobalt Permanent Magnets and their Applications*, S. 103, Dayton, Ohio, 1985.
- Hartmann, A., *Inversion of geothermal parameters using borehole and core data*, Dissertation, RWTH Aachen University, 2007.
- Hartmann, A., Rath, V., und Clauser, C., Thermal conductivity from core and well log data, *International Journal of Rock Mechanics & Mining Sciences*, 42, 1042–1055, 2005a.
- Hartmann, A., Rath, V., und Clauser, C., Uncertainties and shortcomings of ground surface temperature histories derived from inversion of temperature logs, *J. Geophys. Eng.*, 2, 299–311, doi:10.1088/1742–2140/2/4/S02, 2005b.
- Hashin, Z. und Shtrikman, S., A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials, *J. Appl. Phys.*, 33, 3125–3131, 1962.
- Heitzmann, P. und Bossart, P., Das Mont-Terri-Projekt - Untersuchungen über den Opalinuston im internationalen Felslabor, *Bull. Angew. Geol.*, 6, Nr. 2, 183–197, 2001.
- Hufschmied, P., Beurteilung der hydraulischen und felsmechanischen Datensätze, der thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Prozesse, der bautechnischen Konzepte und der Umsetzung des EKRA-Konzeptes, in *Projekt Opalinuston Zürcher Weinland der Nagra, Beurteilung der erdwissenschaftlichen Datengrundlagen und der bautechnischen Machbarkeit, Expertenbericht zuhanden der Hauptabteilung für die Sicherheit der Kernanlagen (HSK)*, NAGRA, 2005.
- Ingebritsen, S. E. und Sanford, W. E., *Groundwater in geologic processes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- Jonscher, A. K., *Dielectric relaxation in solids*, Chelsea Dielectrics Press, London, 1983.
- Kelley, C. T., *Solving nonlinear equations with Newton's method*, Frontiers in Applied Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, 2003.

- Kelley, K., *Contributions to the data on theoretical metallurgy: XIII High-Temperature Heat-Content, Heat-Capacity, and Entropy data for the Elements and Inorganic Compounds*, U.S. Bureau of Mines Bull. 584, U.S. Government Printing Office, Washington D.C., 1960.
- Kenyon, W., Day, P., Straley, C., und Willemsen, J., A three-part study of NMR longitudinal relaxation properties of water-saturated sandstones, *Society of Petroleum Engineers SPE Formation Evaluation*, 3, 622–636, 1988.
- Klitzsch, N., *Ableitung von Gesteinseigenschaften aus Messungen der spektralen induzierten Polarisation (SIP) an Sedimentgesteinen*, Dissertation, Fakultät für Physik und Geowissenschaften der Universität Leipzig, 2004.
- Lichtenecker, K. und Rother, K., Herleitung des logarithmischen Mischungsgesetzes aus allgemeinen Prinzipien der stationären Strömung, *Phys. Z.*, 32, 255–260, 1931.
- Luthi, S., *Geological well logs*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 2001.
- Mirotnik, K., Kryuchkov, S., und Strack, K., A novel method to determine NMR petrophysical parameters from drill cuttings, paper MM, in *45th Annual Logging Symposium Transactions: Society of Professional Well-Log Analysts.*, 2004.
- Moiseenko, U., Sokolova, L., und Kutolin, V., Thermal conductivity of eclogite and dolerite at high temperature, *Doklady AN SSSR*, 173, No. 3, 669–671, 1967.
- Mosegaard, K. und Tarantola, A., Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems, *Journal of Geophysical Research*, 100, 12 431–12 447, 1995.
- Nocedal, J. und Wright, S. J., *Numerical Optimization*, Springer, New York, 1999.
- Petrinin, G. und Yurchak, R., On rocks thermal diffusivity measurements., *Izvestiya AN SSSR. Fizika Zemli*, 11, 92–95, 1973.
- Pfeifer, H. R., Beurteilung der hydrogeologischen-hydrochemischen Untersuchungen und Datengrundlagen, in *Projekt Opalinuston Zürcher Weinland der Nagra, Beurteilung der erdwissenschaftlichen Datengrundlagen und der bautechnischen Machbarkeit, Expertenbericht zuhanden der Hauptabteilung für die Sicherheit der Kernanlagen (HSK)*, Nagra, 2005.
- Pickell, J. J. und Heacock, J. G., Density logging, *Geophysics*, 25, 891–904, 1960.
- Pikulski, A., Untersuchungen über extremes Durchlässigkeitsverhalten des Opalinustons und der Unteren Süßwassermolasse im Tiefenbereich mit mehr als 200 m Felsüberdeckung, 2. Teilbericht "Zwischen-Aquifere", Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, Freiburg, Freiburg im Breisgau, 1991.
- Popov, Y., Optical scanning technology for non-destructive contactless measurements of thermal conductivity and diffusivity of solid matters, *Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics*, 1, 09–117, proceedings of the 4th World Conference Brussels, Belgium, 1997.
- Popov, Y., Pribnow, D., Sass, J., Williams, C., und Burkhardt, H., Characterization of rock thermal conductivity by high-resolution optical scanning, *Geothermics*, 28, 253–276, 1999.

- Preusche, C., Zwischenbericht zum Forschungsvorhaben „Bewegung salinärer Porenwässer in der tertiären Füllung des süddeutschen Molassebeckens“, DFG Zwischenbericht, Universität Freiburg, 1996.
- Pribnow, D. und Sass, J., Determination of thermal conductivity from deep boreholes, *J. Geophys. Res.*, 100, 9981–9994, 1995.
- Radic, T., *Bedienungsanleitung SIP256C*, Radic Research, 41 S., 2004.
- Rath, V. und Clauser, C., 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, RWTH Aachen, 2002.
- Rath, V. und Clauser, C., Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe - Fortsetzung, Endbericht zum Auftrag nr. 9x0009-8497-2, 2004, bundesamt für strahlenschutz, Bericht, RWTH Aachen, Angewandte Geophysik, 2004.
- Rider, M., *The geological interpretation of well logs*, Whittles Publishing, Caithness, 1996.
- Sass, J. H., Lachenbruch, A. H., Moses, T. H., und Morgan, T., Heat flow from a scientific research well at Cajon Pass, California, *Journal of Geophysical Research*, 97, 5017–5030, 1992.
- Schön, R., *Physical properties of rocks: Fundamentals and principles of geophysics*, Pergamon, 1996.
- Seipold, U., Pressure and temperature dependence of thermal transport properties of granites, *High Temperatures High Pressures*, 22, 541–548, 1990.
- Seipold, U. und Engler, R., Investigation of the thermal diffusivity of jointed granodiorites under uniaxial load and hydrostatic pressure, *Gerlands Beitr. Geophysik, Leipzig*, 90, 1, 65–71, 1981.
- Serra, O., *Fundamentals of Well-Log Interpretation-1*, Elsevier, 1984.
- Serra, O., *Fundamentals of Well-Log Interpretation-2*, Elsevier, New York, 1986.
- Stober, I. und Villinger, E., Hydraulisches Potential und Durchlässigkeit des höheren Oberjuras und des Oberen Muschelkalks unter dem baden-württembergischen Molassebecken, *Jh. Geol. Landesamt Baden-Württemberg*, 37, 77–96, 1997.
- Sumner, J. S., *Principles of Induced Polarization for Geophysical Exploration*, Elsevier, Amsterdam-Oxford-New York, 1976.
- Tarantola, A., *Inverse Problem Theory. Methods for model parameter estimation*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, 2004.
- Tarantola, A. und Valette, B., Inverse problems = quest for information, *Journal of Geophysics*, 50, 159–170, 1982a.
- Tarantola, A. und Valette, B., Inverse problems = quest for information, *Journal of Geophysics*, 50, 159–170, 1982b.
- Villinger, E. und Fischer, G., *Geologische Übersicht der Schichtenfolge in Baden-Württemberg*, URL http://www.lgrb.uni-freiburg.de/lgrb/home/index_html, 2005.

von Terzaghi, K., *Erdbaumechnik auf bodenphysikalischer Grundlage*, Franz Deuticke, Wien, 1925.

Vosteen, H.-D. und Schellschmidt, R., Influence of temperature on thermal conductivity, thermal capacity and thermal diffusivity for different types of rock, *Phys. Chem. Earth*, 28, 499–509, 2003.

Wisian, K. W., Blackwell, D. D., Bellani, S., Henfling, J. A., Normann, R. A., Lysne, P. C., Förster, A., und Schrötter, J., Field comparison of conventional and new technology temperature logging systems, *Geothermics*, 27, 131–141, 1998.

Anhang A

Labormessungen

Tabelle A.1: Übersicht der Einzelergebnisse zu den Labormessungen der Wärmeleitfähigkeit im trockenen und gesättigten Zustand (TC-Scanner), der Reindichte und der Porosität (vgl. Abschnitt 2.1). HLQ: Halbraumlinienquelle (vgl. Abschnitt 2.1); n.b.: nicht bestimmt.

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ trocken [W/mK]	λ saturiert [W/mK]	Rein- dichte [kg/m ³]	ϕ [-]
Ro7324/B2 Auendorf	19	AU01	Kalkstein	2,43	2,48	2677	0,03
Ro7324/B2 Auendorf	20	AU02	Kalkstein	2,39	2,56	2704	0,03
Ro7324/B2 Auendorf	20	AU03	Kalkstein	HLQ	HLQ	2805	0,13
Ro7324/B2 Auendorf	90	AU04	Kalkstein	1,91	2,34	2727	0,11
Ro7324/B2 Auendorf	91	AU05	Kalkstein	HLQ	HLQ	2737	0,06
Ro7324/B2 Auendorf	92	AU06	Kalkstein	2,24	2,41	2582	0,03
B419-Eselhöfe	164	B419-01	Tonmergel	1,77	2,02	2560	0,04
B419-Eselhöfe	165	B419-02	Kalkstein	2,01	2,20	2696	0,02
B419-Eselhöfe	156	B419-03	Kalkstein	2,02	2,20	2661	0,02
B419-Eselhöfe	155	B419-04	Kalkmergel	1,89	2,08	2690	0,07
B419-Eselhöfe	155	B419-05	Kalkstein	HLQ	HLQ	2622	0,03
B419-Eselhöfe	155	B419-06	Kalkstein	1,96	2,12	2679	0,03
B424-Hohenstadt	166	B424-01	Kalkstein	2,33	2,79	2712	0,06
B424-Hohenstadt	167	B424-02	Kalkstein	2,21	n.b.	n.b.	n.b.
B424-Hohenstadt	168	B424-03	Kalkstein	2,21	2,72	2718	0,07
B424-Hohenstadt	176	B424-04	Kalkstein	2,13	n.b.	n.b.	n.b.
B424-Hohenstadt	178	B424-05	Kalkstein	2,13	2,65	2720	0,07
B424-Hohenstadt	53	B424-06	Kalkstein	3,72	4,40	2805	0,05
B424-Hohenstadt	85	B424-07	Kalkstein	2,35	n.b.	n.b.	n.b.
B424-Hohenstadt	92	B424-08	Tonmergel	n.b.	n.b.	2623	0,08
B424-Hohenstadt	91	B424-09	Tonmergel	HLQ	HLQ	2775	0,07
Ebratsweiler 1	489	E001	Kalkstein	n.b.	2,43	2713	0,08
Ebratsweiler 1	493	E002	Kalkstein	n.b.	2,64	2720	0,04
Ebratsweiler 1	505	E003	Kalkstein	n.b.	2,67	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	509	E004	Kalkstein	n.b.	2,61	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	511	E005	Kalkstein	n.b.	2,72	2702	0,02
Ebratsweiler 1	513	E006	Kalkstein	n.b.	2,65	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	513	E007	Kalkstein	HLQ	2,59	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	516	E008	Kalkstein	n.b.	2,66	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1097	E009	Kalksandstein	2,50	3,22	2640	0,08
Ebratsweiler 1	1097	E010	Sandstein	3,18	3,91	2706	0,10
Ebratsweiler 1	1099	E011	Kalksandstein	2,20	2,48	2731	0,03
Ebratsweiler 1	1100	E012	Tonstein	2,94	3,81	2796	0,08
Ebratsweiler 1	1103	E013	Sandstein	3,18	3,80	2676	0,09
Ebratsweiler 1	1105	E014	Tonstein	1,63	2,10	2752	0,08
Ebratsweiler 1	1107	E015	Tonstein	HLQ	HLQ	2743	0,07
Ebratsweiler 1	1109	E016	Tonstein	n.b.	n.b.	2706	0,08
Ebratsweiler 1	1112	E017	Sandstein	3,18	3,77	2579	0,04
Ebratsweiler 1	1115	E018	Sandstein	2,34	2,52	2713	0,05
Ebratsweiler 1	1117	E019	Sandstein	2,96	4,36	2420	0,08
Ebratsweiler 1	1120	E020	Sandstein	3,16	3,81	2675	0,06
Ebratsweiler 1	1162	E021	Tonstein	1,91	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1165	E022	Sandstein	3,15	3,60	2658	0,08
Ebratsweiler 1	1165	E023	Sandstein	3,22	3,67	2703	0,12
Ebratsweiler 1	1167	E024	Tonstein	HLQ	HLQ	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1169	E025	Sandstein	1,33	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1173	E026	Sandstein	1,72	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1174	E027	Sandstein	1,94	3,37	2653	0,16
Ebratsweiler 1	1177	E028	Sandstein	2,26	3,03	2706	0,14
Ebratsweiler 1	1263	E029	Anhydrit	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1263	E029a	Anhydrit	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1263	E029b	Anh. + Dol.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Ebratsweiler 1	1264	E030	Anhydrit	n.b.	4,56	2948	0,04
Ebratsweiler 1	1265	E031	Dolomit	n.b.	3,51	2866	0,07
Ebratsweiler 1	1263	E032	Tonstein	n.b.	3,52	2820	0,03

Tabelle A.1 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ trocken [W/mK]	λ saturiert [W/mK]	Rein- dichte [kg/m ³]	ϕ [-]
Ebratsweiler 1	1268	E033	Tonstein	2,06	2,44	2581	0,05
Ebratsweiler 1	1269	E034	Dolomit	4,55	3,26	2866	0,01
Ebratsweiler 1	1271	E035	Dolomit	3,87	3,85	2835	0,02
Ebratsweiler 1	1272	E036	Dolomit	2,97	3,33	2864	0,15
Ro6927/B6 Ellenberg	22	EL01	Sandstein	1,78	3,44	2514	0,22
Ro6927/B6 Ellenberg	97	EL02	Sandstein	1,71	3,08	2478	0,19
Ro6927/B6 Ellenberg	97	EL03	Sandstein	1,97	3,33	2471	0,20
Einöd	46	EOE01	Sandstein	2,06	3,49	2654	0,20
Einöd	44	EOE02	Sandstein	2,17	3,17	2620	0,14
Einöd	48	EOE03	Sandstein	1,82	3,17	2612	0,20
Ro8217/B1 Espel	22	ES01	Kalkmergel	2,23	2,58	2698	0,06
Ro8217/B1 Espel	97	ES02	Kalkstein	1,95	2,36	2570	0,05
Ro8217/B1 Espel	157	ES03	Kalkstein	1,86	2,24	2700	0,08
B404 Gruibingen	173	GB01	Tonstein	HLQ	HLQ	2693	0,15
B404 Gruibingen	189	GB02	Tonstein	HLQ	HLQ	2733	0,12
B404 Gruibingen	201	GB03	Sandstein	2,44	3,77	2688	0,21
B404 Gruibingen	214	GB04	Sandstein	3,28	4,46	2689	0,13
B404 Gruibingen	222	GB05	Sandstein	1,92	3,64	2681	0,23
B404 Gruibingen	223	GB06	Kalksandstein	3,87	4,53	2619	0,02
Gemmingen 1002	253	GE001	Sandstein	3,18	3,85	2641	0,08
Gemmingen 1002	294	GE002	Sandstein	3,88	4,54	2622	0,03
Gemmingen 1002	299	GE003	Sandstein	4,08	4,59	2707	0,06
Gemmingen 1002	300	GE004	Sandstein	2,45	3,02	2903	0,07
Gemmingen 1002	311	GE005	Sandstein	3,28	4,08	2655	0,11
Gemmingen 1002	322	GE006	Sandstein	3,40	4,28	2673	0,06
Gemmingen 1002	323	GE007	Sandstein	3,33	4,32	2690	0,10
Gemmingen 1002	348	GE008	Sandstein	2,99	4,08	2632	0,13
Gemmingen 1002	426	GE009	Sandstein	3,26	4,66	2643	0,09
Gemmingen 1002	426	GE010	Sandstein	3,66	5,29	2648	0,10
Gemmingen 1002	530	GE011	Tonstein	2,91	3,42	2600	0,02
Gemmingen 1002	530	GE012	Sandstein	2,76	3,44	2575	0,08
Gemmingen 1002	564	GE013	Sandstein	3,52	4,33	2640	0,07
Gemmingen 1002	588	GE014	Sandstein	3,38	4,17	2572	0,05
Gemmingen 1002	627	GE015	Tonstein	HLQ	HLQ	2990	0,09
Gemmingen 1002	663	GE016	Sandstein	2,85	3,85	2501	0,06
Gemmingen 1002	663	GE017	Tonstein	HLQ	HLQ	n.b.	n.b.
Gemmingen 1002	733	GE018	Sandstein	2,58	3,07	2458	0,03
Gemmingen 1002	760	GE019	Sandstein (dol.)	3,11	3,68	2637	0,04
Gemmingen 1002	761	GE020	Sandstein (dol.)	2,89	3,18	2674	0,05
Gemmingen 1002	761	GE021	Tonstein	HLQ	HLQ	n.b.	n.b.
Gemmingen 1002	798	GE022	Sandstein (dol.)	3,71	3,95	2595	0,05
Gemmingen 1002	798	GE023	Sandstein (dol.)	4,05	4,01	2624	0,03
Gemmingen 1002	798	GE024	Sandstein (dol.)	2,81	3,41	n.b.	n.b.
Gondelsheim	27	GH01	Kalkstein	2,90	2,71	2714	0,01
Gondelsheim	38	GH02	Kalkstein	2,42	2,50	2677	0,02
Gondelsheim	47	GH03	Dolomit	1,62	3,30	2525	0,12
Gondelsheim	48	GH04	Dolomit	1,13	2,40	2747	0,19
Gondelsheim	49	GH05	Dolomit	2,44	3,68	2830	0,13
Gondelsheim	50	GH06	Dolomit	2,63	3,22	2777	0,07
Gondelsheim	51	GH07	Dolomit	2,34	2,79	2651	0,13
Gondelsheim	53	GH08	Dolomit	1,19	2,94	2799	0,20
Gondelsheim	26	GH09	Kalkstein	2,55	2,58	2686	0,03
PF1 Wilferdingen/Etzold	44	PF01	Kalkstein	2,63	2,92	2839	0,06
PF1 Wilferdingen/Etzold	45	PF02	Dolomitmergel	2,56	2,78	2767	0,05
PF1 Wilferdingen/Etzold		PF02a	Dolomit	2,80	2,83	2831	0,06

Tabelle A.1 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ trocken [W/mK]	λ saturiert [W/mK]	Rein- dichte [kg/m ³]	ϕ [-]
PF1 Wilferdingen/Etzold	13	PF03	Kalkstein	HLQ	HLQ	2703	0,06
PF1 Wilferdingen/Etzold	11	PF04	Kalkstein	2,41	2,44	2713	0,01
Reutehau 97/1	88	RE01	Tonstein	HLQ	HLQ	2710	0,07
Reutehau 97/1	87	RE02	Siltstein	2,39	3,67	2745	0,14
Reutehau 97/1	87	RE03	Siltstein	2,41	3,10	2772	0,15
Reutehau 97/1	86	RE04	Sandstein	1,48	2,94	2749	0,30
Reutehau 97/1	85	RE05	Siltstein	2,67	3,47	2745	0,06
Reutehau 97/1	84	RE06	Siltstein	HLQ	HLQ	2825	0,18
Reutehau 97/1	81	RE07-1	Kalksandstein	2,41	2,55	2718	0,05
Reutehau 97/1	81	RE07-2	Kalksandstein	2,23	2,37	2725	0,07
Reutehau 97/1	81	RE07-3	Kalksandstein	2,49	3,24	2765	0,16
Reutehau 97/1	81	RE07-4-1	Kalksandstein	2,26	3,27	2746	0,17
Reutehau 97/1	81	RE07-4-2	Kalksandstein	2,43	2,74	2670	0,07
Reutehau 97/1	81	RE07-4-3	Kalksandstein	2,70	3,34	2760	0,13
Reutehau 97/1	81	RE07-5	Kalksandstein	2,29	2,91	2807	0,17
Reutehau 97/1	81	RE07-5-1	Kalksandstein	3,03	3,26	2710	0,05
Reutehau 97/1	81	RE07-6	Kalksandstein	3,56	4,20	2749	0,04
Reutehau 97/1	81	RE07-7	Kalksandstein	3,58	4,04	2780	0,04
Reutehau 97/1	77	RE08	Tonstein	HLQ	HLQ	2729	0,13
Reutehau 97/1	76	RE09-1	Kalkmergel	1,82	2,13	2664	0,07
Reutehau 97/1	76	RE09-2	Kalkmergel	1,92	n.b.	n.b.	n.b.
Reutehau 97/1	46	RE10	Tonstein	1,87	n.b.	n.b.	n.b.
Reutehau 97/1	38	RE11	Tonstein	HLQ	HLQ	2813	0,17
Reutehau 97/1	36	RE12	Mergel	1,56	2,04	2475	0,09
Reutehau 97/1	33	RE13	Mergel	0,85	1,43	2761	0,17
Reutehau 97/1	28	RE14	Tonstein	HLQ	HLQ	2674	0,14
Reutehau 97/1	30	RE15	Tonstein	HLQ	HLQ	2563	0,20
Reutehau 97/1	21	RE16	Tonstein	HLQ	HLQ	2601	0,13
Reutehau 97/1	22	RE17	Tonstein	HLQ	HLQ	2674	0,15
Reutehau 97/1	13	RE18	Tonstein	HLQ	HLQ	2538	0,09
Reutehau 97/1	14	RE19	Tonstein	HLQ	HLQ	2622	0,03
Sexau	75	SE01	Sandstein	2,54	4,00	2662	0,18
Sexau	76	SE02	Sandstein	2,53	3,98	2673	0,22
Sexau	84	SE03	Sandstein	3,05	4,58	2640	0,17
Sexau	89	SE04	Tonstein	HLQ	HLQ	2777	0,09
Sexau	89	SE05	Sandstein	3,35	4,13	2713	0,20
Steinbruch 7018-344	0	STB01	Sandstein	2,94	3,91	2642	0,12
Steinbruch 7018-344	0	STB02	Sandstein	3,03	3,76	2549	0,09
Steinbruch 7018-344	0	STB03	Sandstein	2,91	3,94	2640	0,09
Steinbruch 7018-344	0	STB04	Sandstein	3,86	4,63	2619	0,08
Steinbruch 7018-344	0	STB05	Sandstein	3,74	4,40	2521	0,04
Steinbruch 7325-1	0	STB06	Dolomit	2,31	2,60	2677	0,10
Steinbruch 7325-1	0	STB07	Dolomit	2,32	2,69	2699	0,11
Steinbruch 7325-1	0	STB08	Dolomit	2,41	2,62	2691	0,10
Steinbruch 7325-1	0	STB09	Dolomit	2,28	2,64	2678	0,11
Steinbruch 7325-1	0	STB10	Kalkstein	2,22	2,57	2662	0,10
Steinbruch 7325-1	0	STB11	Dolomit	2,29	2,54	2705	0,13
Steinbruch 7325-1	0	STB12	Dolomit	2,16	2,54	2699	0,12
Steinbruch 7325-1	0	STB13	Dolomit	2,34	2,61	2706	0,11
Steinbruch 7325-1	0	STB14	Dolomit	2,72	3,17	2771	0,10
Steinbruch 7325-1	0	STB14a	Dolomit	2,58	3,00	2749	0,12
Steinbruch 7325-1	0	STB14b	Dolomit	2,78	3,26	2769	0,08
Steinbruch 7325-1	0	STB15	Dolomit	2,81	3,26	2767	0,07
Steinbruch 7325-1	0	STB16	Dolomit	2,86	3,38	2774	0,07
Steinbruch 7325-1	0	STB17	Dolomit	2,87	3,38	2763	0,06

Tabelle A.1 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ trocken [W/mK]	λ saturiert [W/mK]	Rein- dichte [kg/m ³]	ϕ [-]
Steinbruch 7325-1	0	STB18	Dolomit	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Steinbruch 7325-1	0	STB19	Dolomit	3,10	3,53	2814	0,05
Steinbruch 7325-1	0	STB20	Dolomit	2,80	2,98	2785	0,07
Steinbruch 7325-1	0	STB21	Dolomit	2,69	3,20	2764	0,10
Steinbruch 7325-1	0	STB22	Dolomit	2,75	3,46	2792	0,05
Steinbruch 7325-1	0	STB23	Dolomit	2,58	3,15	2740	0,11
Steinbruch 7325-1	0	STB24	Dolomit	2,78	3,21	2788	0,09
Steinbruch 7124-101	0	STB25	Sandstein	2,40	3,75	2642	0,22
Steinbruch 7124-101	0	STB26	Sandstein	1,96	3,62	2656	0,24
Steinbruch 7124-101	0	STB27	Sandstein	2,01	3,69	2650	0,22
Steinbruch 7124-101	0	STB28	Sandstein	2,26	3,71	2605	0,20
Steinbruch 7525-9	0	STB29	Kalkstein	n.b.	2,71	2696	0,00
Steinbruch 7525-9	0	STB30	Kalkstein	2,77	2,65	2687	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB30a	Kalkstein	2,76	2,68	2681	0,00
Steinbruch 7525-9	0	STB31	Kalkstein	2,65	2,62	2710	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB31a	Kalkstein	2,67	2,66	2699	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB32	Kalkstein	2,57	2,52	2687	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB33	Kalkstein	2,54	2,62	2767	0,03
Steinbruch 7525-9	0	STB34	Kalkstein	2,66	2,56	2695	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB35	Kalkstein	2,52	2,56	2692	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB36	Kalkstein	2,54	2,55	2697	0,01
Steinbruch 7525-9	0	STB37	Kalkstein	2,71	2,64	2723	0,02
Steinbruch 7525-9	0	STB38	Kalkstein	2,22	2,35	2700	0,03
Steinbruch 7525-9	0	STB39	Kalkstein	2,26	2,30	2704	0,03
Steinbruch 7525-9	0	STB39a	Kalkstein	2,13	2,35	2685	0,04
Steinbruch 7427-308	0	STB41	Kalkstein	2,18	2,43	2699	0,03
Steinbruch 7427-308	0	STB42	Kalkstein	2,05	2,31	2713	0,04
Steinbruch 7427-308	0	STB43	Kalkstein	2,23	2,36	2703	0,04
Steinbruch 7427-308	0	STB44	Kalkstein	2,24	2,42	2713	0,03
Steinbruch 7427-308	0	STB45	Kalkstein	2,11	2,38	2700	0,05
Steinbruch 7427-308	0	STB46	Kalkstein	2,34	2,47	2692	0,04
Steinbruch 6924-116	0	STB47	Sandstein	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Steinbruch 6924-116	0	STB48	Sandstein	1,47	2,59	2644	0,23
Steinbruch 6924-116	0	STB48a	Sandstein	1,35	2,41	2637	0,23
Steinbruch 6924-116	0	STB49	Sandstein	1,36	2,46	2633	0,22
Steinbruch 6924-116	0	STB50	Sandstein	1,31	2,48	2542	0,20
Steinbruch 6924-300	0	STB51	Sandstein	1,54	2,50	2571	0,16
Steinbruch 6924-300	0	STB51a	Sandstein	1,30	2,41	2538	0,20
Steinbruch 6924-300	0	STB52	Sandstein	1,48	2,49	2650	0,18
Steinbruch 6924-300	0	STB53	Sandstein	1,49	2,45	2664	0,20
Steinbruch 6924-300	0	STB54	Sandstein	1,48	2,45	2659	0,20
Steinbruch 6824-1	0	STB55	Kalkstein	1,94	2,23	2693	0,10
Steinbruch 6824-1	0	STB56	Kalkstein	2,13	2,42	2640	0,05
Steinbruch 6824-1	0	STB57	Kalkstein	2,14	2,42	2638	0,07
Steinbruch 6824-1	0	STB58	Kalkstein	1,97	2,35	2699	0,07
Steinbruch 6824-1	0	STB59	Kalkstein	2,10	2,30	2704	0,06
Steinbruch 6824-1	0	STB59a	Kalkstein	1,97	2,26	2711	0,10
Steinbruch 6825-4	0	STB60	Kalkstein	2,15	2,34	2642	0,06
Steinbruch 6825-4	0	STB61	Gips	1,31	1,39	2321	0,03
Steinbruch 6825-4	0	STB62	Gips	1,28	1,37	2336	0,05
Steinbruch 6825-4	0	STB63	Gips	1,30	1,44	2287	0,02
Steinbruch 6825-4	0	STB64	Gips	1,36	1,38	2317	0,04
Steinbruch 6722-2	0	STB65	Kalkstein	2,40	2,51	2756	0,01
Steinbruch 6722-2	0	STB66	Kalkstein	2,52	2,65	2767	0,02
Steinbruch 6722-2	0	STB67	Kalkstein	2,57	2,74	2727	0,03

Tabelle A.1 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ trocken [W/mK]	λ saturiert [W/mK]	Rein- dichte [kg/m ³]	ϕ [-]
Steinbruch 6722-2	0	STB68	Kalkstein	2,63	2,63	2762	0,00
Steinbruch 6722-2	0	STB69	Kalkstein	2,57	2,52	2743	0,01
Steinbruch 6722-2	0	STB70	Kalkstein	2,64	2,57	2742	0,00
Steinbruch 7019-5	0	STB71	Tonstein	0,75	HLQ	n.b.	n.b.
Steinbruch 7019-5	0	STB72	Tonstein	0,81	HLQ	n.b.	n.b.
Steinbruch 7019-5	0	STB73	Tonstein	0,91	HLQ	n.b.	n.b.
Steinbruch 7019-5	0	STB74	Tonstein	0,73	HLQ	n.b.	n.b.
Steinbruch 6522-2	0	STB75	Kalkstein	1,77	2,49	2801	0,15
Steinbruch 6522-2	0	STB76	Dolomit	1,58	2,49	2841	0,18
Steinbruch 6522-2	0	STB77	Dolomit	1,66	2,27	2783	0,13
Steinbruch 6522-2	0	STB78	Dolomit	1,90	2,57	2708	0,07
Steinbruch 6522-2	0	STB78a	Dolomit	1,93	2,62	2874	0,15
Steinbruch 6522-2	0	STB79	Dolomit	1,68	2,56	2829	0,17
Steinbruch 6522-2	0	STB80	Dolomit	1,64	2,36	2775	0,16
Steinbruch 6522-2	0	STB81	Dolomit	1,30	2,31	2767	0,15
Steinbruch 6522-2	0	STB81a	Dolomit	1,23	2,27	2785	0,20
Steinbruch 6522-2	0	STB82	Dolomit	1,42	2,38	2796	0,15
Steinbruch 6522-2	0	STB83	Dolomit	1,78	2,62	2793	0,14
Steinbruch 6522-2	0	STB84	Dolomit	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Steinbruch 6522-2	0	STB85	Dolomit	1,90	2,56	2813	0,14
Steinbruch 6522-2	0	STB86	Dolomit	2,10	2,62	2825	0,11
Steinbruch 6522-2	0	STB86a	Dolomit	1,64	2,38	2814	0,13
Steinbruch 6522-2	0	STB87	Dolomit	1,54	2,38	2828	0,14
TB4 Schlupfert-West	142	SW01	Kalkstein	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
TB4 Schlupfert-West	142	SW01-1	Kalkstein	2,72	2,70	2747	0,01
TB4 Schlupfert-West	142	SW01-2	Kalkstein	2,77	2,64	2731	0,01
TB4 Schlupfert-West	144	SW02-1	Kalkstein	2,88	3,03	2757	0,01
TB4 Schlupfert-West	144	SW02-2	Dolomit	2,84	2,94	2762	0,02
TB4 Schlupfert-West	106	SW03	Gips	1,55	1,54	2328	0,01
TB4 Schlupfert-West	106	SW04	Gips	1,61	1,64	2341	0,00
TB4 Schlupfert-West	136	SW05	Kalkstein	1,94	2,22	2539	0,04
TB4 Schlupfert-West	136	SW06	Tonstein	HLQ	HLQ	n.b.	n.b.
TB4 Schlupfert-West	120	SW07	Tonstein	2,01	2,38	2818	0,05
TB4 Schlupfert-West	127	SW08	Sandstein	2,22	2,95	2625	0,09
TB4 Schlupfert-West	127	SW09	Sandstein	2,13	2,63	2455	0,03
TB4 Schlupfert-West	118	SW10	Dolomit	2,96	3,31	2742	0,05
TB4 Schlupfert-West	114	SW11	Kalkstein	n.b.	n.b.	2818	0,06
TB4 Schlupfert-West	118	SW12	Dolomit	2,76	3,03	2813	0,03
Ro7324/B3 Türkheim	48	TU01	Kalkstein	2,18	2,51	2684	0,03
Ro7324/B3 Türkheim	49	TU02	Kalkstein	2,29	2,48	2708	0,05
Ro7324/B3 Türkheim	50	TU03	Kalkstein	2,37	2,49	2706	0,05
Ro7324/B3 Türkheim	50	TU04	Kalkstein	n.b.	n.b.	2775	0,09
Ro7324/B3 Türkheim	100	TU05	Kalkmergel	1,82	2,25	2406	0,03
Ro7324/B3 Türkheim	101	TU06	Kalkmergel	n.b.	n.b.	2693	0,23
Ro7324/B3 Türkheim	101	TU07	Kalkmergel	1,86	2,25	2426	0,04
Ro7324/B3 Türkheim	102	TU08	Kalkmergel	1,93	2,35	2527	0,05
Ro7324/B3 Türkheim	148	TU09	Kalkstein	1,83	2,66	2739	0,12
Ro7324/B3 Türkheim	149	TU10	Kalkstein	2,18	2,37	2585	0,01
Ro7324/B3 Türkheim	150	TU11	Kalkstein	2,18	2,46	2641	0,07

Tabelle A.2: Übersicht zu den Wärmeleitfähigkeitsmessungen mit der Halbraumlinienquelle (TK04; vgl. Abschnitt 2.1).

Bohrung / Steinbruch	Tiefe [m]	Probe	Hauptgesteinstyp	λ Matrix (TK04) [W/mK]
Ro7324/B2 Auendorf	20	AU03	Kalkstein	2,25
Ro7324/B2 Auendorf	91	AU05	Kalkstein	2,48
B419-Eselhöfe	155	B419-05	Kalkstein	1,85
B424-Hohenstadt	91	B424-09	Tonmergel	1,87
Ebratsweiler 1	513	E007	Kalkstein	2,50
Ebratsweiler 1	1107	E015	Tonstein	2,05
Ebratsweiler 1	1167	E024	Tonstein	2,76
B404 Gruibingen	173	GB01	Tonstein	1,62
B404 Gruibingen	189	GB02	Tonstein	2,73
Gemmingen 1002	627	GE015	Tonstein	2,00
Gemmingen 1002	663	GE017	Tonstein	1,46
Gemmingen 1002	761	GE021	Tonstein	2,16
PF1 Wilferdingen/Etzold	13	PF03	Kalkstein	2,96
Reutehau 97/1	88	RE01	Tonstein	2,01
Reutehau 97/1	84	RE06	Siltstein	4,34
Reutehau 97/1	77	RE08	Tonstein	2,03
Reutehau 97/1	28	RE14	Tonstein	2,12
Reutehau 97/1	30	RE15	Tonstein	1,49
Reutehau 97/1	21	RE16	Tonstein	1,26
Reutehau 97/1	22	RE17	Tonstein	0,45
Reutehau 97/1	13	RE18	Tonstein	2,51
Reutehau 97/1	14	RE19	Tonstein	1,38
Sexau	89	SE04	Tonstein	2,40
Steinbruch 7018-344	0	STB01	Sandstein	4,72
Steinbruch 6824-1	0	STB56	Kalkstein	2,42
Steinbruch 7019-5	0	STB71	Tonstein	1,28
Steinbruch 7019-5	0	STB72	Tonstein	1,97
Steinbruch 7019-5	0	STB73	Tonstein	1,81
Steinbruch 7019-5	0	STB74	Tonstein	2,15
TB4 Schlupfert-West	136	SW06	Tonstein	1,65

Tabelle A.4: Chemische Zusammensetzung (Hauptelemente) der untersuchten Laborproben nach RFA-Analysen (vgl. Kapitel 4).

Bohrung / Steinbruch	Probe	Formation	Haupt- gesteinstyp	SiO ₂ (%)	Al ₂ O ₃ (%)	MgO (%)	CaO (%)	Na ₂ O (%)	K ₂ O (%)	FE ₂ O ₃ (%)	MnO (%)	TiO ₂ (%)	P ₂ O ₅ (%)	(SO ₃) (%)	(Cl) (%)	(F) (%)	LOI (%)	SUM (%)
Ro7324/B2 Auendorf	AU05	ki1	Kalkstein	0,7	0,47	0,54	54,18	<0,01	0,10	0,37	0,02	0,02	0,04	<0,01	0,09	<0,01	42,95	99,50
B419-Eselhöfe	B419-02	ox1	Kalkstein	16,4	6,59	1,41	37,64	0,05	1,30	1,92	0,03	0,32	0,17	<0,01	0,06	<0,01	33,85	99,70
B419-Eselhöfe	B419-05	ox1	Kalkstein	4,8	2,11	1,21	49,15	0,03	0,42	1,17	0,03	0,09	0,04	<0,01	0,08	<0,01	40,73	99,90
Ebratsweiler 1	E001	ti	Kalkstein	3,0	1,33	0,65	51,89	<0,01	0,34	0,65	0,02	0,06	0,05	0,01	0,09	<0,01	41,36	99,40
Ebratsweiler 1	E002	ti	Kalkstein	1,2	0,62	0,61	53,56	<0,01	0,17	0,41	0,01	0,03	0,03	<0,01	0,09	<0,01	42,13	98,90
Ebratsweiler 1	E005	ti	Kalkstein	1,3	0,58	0,64	53,74	<0,01	0,16	0,25	0,01	0,03	0,03	0,01	0,09	<0,01	42,86	99,70
Ebratsweiler 1	E009	he2	Kalksandstein	40,8	1,25	0,66	28,14	<0,01	0,08	4,20	0,14	0,39	0,10	0,20	0,05	<0,01	23,60	99,50
Ebratsweiler 1	E013	he2	Sandstein	63,2	2,32	1,68	11,94	0,06	0,13	4,90	0,25	0,27	0,09	0,23	0,02	<0,01	12,43	97,50
Ebratsweiler 1	E019	koR	Sandstein	92,2	2,82	0,39	0,54	0,19	0,40	0,74	0,01	0,23	0,02	0,03	<0,01	<0,01	1,69	99,20
Ro6927/B6 Ellenberg	EL01	km4	Sandstein	81,7	8,73	0,92	0,59	1,34	1,83	0,60	0,01	0,13	0,04	<0,01	<0,01	<0,01	2,34	98,30
Ro6927/B6 Ellenberg	EL02	km4	Sandstein	75,4	10,94	2,10	0,27	0,95	3,22	0,61	0,01	0,10	0,04	<0,01	<0,01	<0,01	2,98	96,60
Ro6927/B6 Ellenberg	EL03	km4	Sandstein	81,1	8,31	1,96	0,17	0,69	2,34	0,32	0,01	0,06	0,03	0,02	<0,01	<0,01	4,14	99,10
Einöd	EOE01	km4	Sandstein	86,9	6,78	0,85	0,11	1,13	1,63	0,22	0,01	0,06	0,03	<0,01	<0,01	<0,01	1,55	99,20
Einöd	EOE02	km4	Sandstein	78,5	10,83	2,05	0,18	1,62	1,39	1,03	0,01	0,33	0,05	<0,01	<0,01	<0,01	3,19	99,20
Ro8217/B1 Espel	ES02	ki1	Kalkstein	8,4	2,48	1,41	46,93	<0,01	1,00	0,73	0,04	0,12	0,07	<0,01	0,07	<0,01	38,70	99,90
B404 Gruibingen	GB01	bj1	Tonstein	52,3	9,06	0,94	5,46	0,11	1,83	14,29	0,03	0,75	0,07	0,05	0,01	<0,01	14,70	99,60
B404 Gruibingen	GB02	bj1	Tonstein	51,8	9,88	1,31	12,96	0,18	2,33	4,04	0,08	0,66	0,05	0,10	0,02	<0,01	15,54	98,90
B404 Gruibingen	GB06	al2E	Kalksandstein	66,0	1,11	0,14	16,44	<0,01	0,27	0,69	0,25	0,11	0,01	<0,01	0,02	<0,01	13,55	98,50
Gemmingen 1002	GE001	sos	Sandstein	83,4	6,40	0,54	0,75	0,31	3,51	1,22	0,02	0,34	0,05	0,01	<0,01	<0,01	2,50	99,00
Gemmingen 1002	GE002	sos	Sandstein	78,7	9,18	1,18	0,39	0,16	4,25	1,76	0,03	0,43	0,06	<0,01	<0,01	<0,01	2,35	98,50
Gemmingen 1002	GE005	sng	Sandstein	88,3	3,65	0,38	0,15	0,06	1,86	0,92	0,02	0,18	0,07	<0,01	<0,01	<0,01	3,03	98,70
Gemmingen 1002	GE006	sng	Sandstein	78,6	8,48	1,56	0,93	0,14	3,39	2,45	0,03	0,39	0,11	<0,01	<0,01	<0,01	3,11	99,10
Gemmingen 1002	GE009	sng	Sandstein	88,8	3,73	0,20	0,06	0,11	2,21	0,87	0,01	0,06	0,07	<0,01	<0,01	<0,01	2,65	98,70
Gemmingen 1002	GE011	sus	Tonstein	57,1	19,32	2,69	0,14	0,57	6,10	6,27	0,04	0,84	0,17	<0,01	<0,01	<0,01	5,38	98,60
Gemmingen 1002	GE012	sus	Sandstein	84,9	6,21	0,39	0,44	0,19	3,64	0,57	0,01	0,09	0,08	<0,01	<0,01	<0,01	1,52	98,00
Gemmingen 1002	GE015	suE	Tonstein	54,7	19,62	2,80	0,22	0,62	6,73	6,59	0,04	0,74	0,25	<0,01	<0,01	<0,01	6,33	98,70
Gemmingen 1002	GE016	suE	Sandstein	84,7	7,33	0,48	0,17	0,26	4,02	0,76	0,01	0,12	0,07	<0,01	<0,01	<0,01	1,63	99,50
Gemmingen 1002	GE018	zT	Sandstein	72,8	11,67	2,30	0,51	0,33	5,59	2,00	0,01	0,35	0,10	0,02	<0,01	<0,01	3,36	99,10
Gemmingen 1002	GE019	zD	Sandstein (dol.)	64,6	9,76	5,79	4,02	0,22	3,59	1,48	0,05	0,29	0,11	0,01	0,01	<0,01	9,09	99,10
Gemmingen 1002	GE023	zD	Sandstein (dol.)	66,5	4,88	5,73	6,94	0,15	2,74	0,40	0,11	0,06	0,04	<0,01	0,02	<0,01	11,71	99,30
Gondelsheim	GH01	mo	Kalkstein	0,9	0,17	2,11	52,05	<0,01	0,10	0,49	0,03	<0,01	0,03	0,01	0,10	<0,01	43,37	99,40
Gondelsheim	GH03	mo	Dolomit	23,2	1,62	15,52	22,99	<0,01	0,82	1,21	0,06	0,06	0,04	<0,01	0,05	0,03	34,77	100,40
Gondelsheim	GH05	mmDo	Dolomit	13,7	3,22	16,62	25,22	<0,01	1,39	1,73	0,09	0,14	0,08	0,17	0,05	0,03	37,90	100,40

Tabelle A.4 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Probe	Formation	Hauptgestein	SiO ₂ (%)	Al ₂ O ₃ (%)	MgO (%)	CaO (%)	Na ₂ O (%)	K ₂ O (%)	FE ₂ O ₃ (%)	MnO (%)	TiO ₂ (%)	P ₂ O ₅ (%)	(SO ₃) (%)	(Cl) (%)	(F) (%)	LOI (%)	SUM (%)
Gondelsheim	GH06	mmDo	Dolomit	23,1	3,97	13,26	23,00	0,04	1,26	1,59	0,07	0,19	0,08	0,19	0,04	0,02	33,14	99,90
Gondelsheim	GH09	mmDo	Kalkstein	3,8	1,41	0,81	51,30	0,01	0,69	0,64	0,09	0,04	0,09	<0,01	0,10	<0,01	41,05	100,00
PF1 Wilferdingen/Etzold	PF01	muW	Dolomitmergel	36,1	13,12	9,30	11,62	0,08	4,15	3,77	0,07	0,58	0,10	<0,01	0,02	<0,01	20,59	99,50
PF1 Wilferdingen/Etzold	PF04	muW	Kalkstein	6,6	2,41	2,45	46,69	<0,01	0,91	1,32	0,04	0,10	0,03	<0,01	0,08	<0,01	39,40	100,10
Reutheu 97/1	RE07-7-1	si1	Kalksandstein	59,5	1,78	4,36	11,26	<0,01	0,30	5,11	0,27	0,11	0,09	0,13	0,02	<0,01	15,47	98,40
Reutheu 97/1	RE09-2	si2	Kalkmergel	7,0	2,16	1,02	47,57	0,08	0,56	1,80	0,23	0,10	0,03	0,15	0,08	<0,01	39,10	99,80
Reutheu 97/1	RE10	pb2	Tonstein	51,3	21,30	2,18	2,43	0,52	2,91	5,75	0,09	1,03	0,10	0,03	<0,01	<0,01	10,92	98,60
Reutheu 97/1	RE12	tc2	Mergel	18,4	8,40	1,41	33,55	0,16	1,53	2,61	0,45	0,38	0,59	0,23	0,05	<0,01	31,27	99,00
Reutheu 97/1	RE14	ai1	Mergel	28,7	11,81	1,38	24,46	0,16	1,74	4,57	0,23	0,59	0,23	<0,01	0,03	<0,01	25,45	99,40
Reutheu 97/1	RE19	ai1	Tonstein	50,7	21,17	2,04	2,65	0,17	2,88	4,94	0,22	1,01	0,23	0,02	<0,01	<0,01	12,27	98,30
Sexau	SE01	sus	Sandstein	88,3	5,96	0,22	0,30	<0,01	1,35	0,60	0,02	0,10	0,12	<0,01	<0,01	<0,01	1,74	98,70
Sexau	SE05	sus	Sandstein	94,4	2,62	0,09	<0,01	<0,01	0,44	0,40	0,03	0,04	0,04	0,04	<0,01	<0,01	0,89	99,00
Steinbruch 7018-344	STB01	sos	Sandstein	87,5	5,88	0,27	0,03	0,09	3,65	0,75	0,02	0,16	0,04	<0,01	<0,01	<0,01	0,66	99,10
Steinbruch 7018-344	STB04	sms	Sandstein	95,4	2,04	0,05	<0,01	0,03	1,37	0,28	0,01	0,03	0,02	<0,01	<0,01	<0,01	0,20	99,40
Steinbruch 7325-1	STB10	ki3	Kalkstein	29,3	0,19	0,20	38,75	<0,01	0,04	0,11	0,01	<0,01	0,03	<0,01	0,06	<0,01	30,68	99,40
Steinbruch 7124-101	STB27	si1	Sandstein	87,9	1,72	0,20	2,91	0,05	0,37	2,02	0,17	0,28	0,01	<0,01	<0,01	<0,01	3,33	98,90
Steinbruch 7525-9	STB33	joMo	Kalkstein	0,4	0,33	0,51	54,68	<0,01	0,10	0,23	0,02	0,01	0,02	<0,01	0,09	<0,01	43,38	99,80
Steinbruch 7427-308	STB41	ki5	Kalkstein	3,2	1,30	0,76	51,75	<0,01	0,35	0,44	0,03	0,06	0,04	<0,01	0,08	<0,01	41,83	99,90
Steinbruch 6924-116	STB48	km2	Sandstein	76,2	9,74	1,40	0,25	1,57	3,77	2,13	0,02	0,32	0,08	<0,01	<0,01	<0,01	3,19	98,70
Steinbruch 6924-300	STB52	km2	Sandstein	73,9	10,51	1,80	0,50	1,69	3,79	3,13	0,03	0,42	0,09	<0,01	<0,01	<0,01	3,35	99,20
Steinbruch 6824-1	STB56	mo2	Kalkstein	1,2	0,16	1,43	52,05	<0,01	0,10	0,59	0,05	<0,01	0,03	0,20	0,09	<0,01	42,31	98,20
Steinbruch 6825-4	STB60	mo2	Kalkstein	1,5	0,29	1,49	52,16	<0,01	0,15	0,60	0,04	0,01	0,04	0,01	0,09	<0,01	42,06	98,50
Steinbruch 6722-2	STB67	mo2	Kalkstein	1,3	0,35	5,74	47,34	<0,01	0,16	1,02	0,07	0,01	0,05	0,06	0,10	<0,01	43,55	99,80
Steinbruch 7019-5	STB72	km3	Tonstein	40,9	16,02	10,03	7,91	0,29	3,94	7,09	0,06	0,69	0,16	<0,01	0,01	0,01	13,75	100,90
Steinbruch 6522-2	STB75	mmS	Kalkstein	2,4	0,92	1,61	46,13	<0,01	0,31	9,86	0,06	0,04	0,09	<0,01	0,08	<0,01	38,72	100,10
Steinbruch 6522-2	STB79	mmS	Dolomit	3,0	1,08	12,78	36,77	0,01	0,39	2,71	0,06	0,05	0,03	0,05	0,08	0,02	43,27	100,30
Steinbruch 6522-2	STB82	mmG	Dolomit	2,9	1,07	12,70	36,60	<0,01	0,39	3,05	0,05	0,06	0,03	0,03	0,08	0,02	43,16	100,10
Steinbruch 6522-2	STB85	mmG	Dolomit	2,1	0,82	12,60	37,90	<0,01	0,30	2,41	0,05	0,04	0,02	<0,01	0,08	0,02	43,84	100,20
Steinbruch 6522-2	STB86	mmG	Dolomit	2,6	0,96	15,15	34,43	0,02	0,34	2,54	0,05	0,05	0,02	<0,01	0,07	0,02	43,98	100,20
Schlupfert W	SW01	mo2	Kalkstein	3,6	0,53	4,37	47,84	0,02	0,27	0,75	0,07	0,02	0,09	0,10	0,09	<0,01	42,30	100,00
Schlupfert W	SW02-1	mo2	Kalkstein	3,0	0,60	2,79	49,98	<0,01	0,33	0,52	0,04	0,02	0,06	0,02	0,09	<0,01	42,15	99,50
Schlupfert W	SW08	kuL	Sandstein	69,1	13,33	2,32	0,35	0,65	4,76	4,19	0,03	0,71	0,06	<0,01	<0,01	<0,01	3,90	99,40
Türkheim B3 (Ro 7324)	TU07	ki1	Kalkmergel	2,9	1,28	0,64	51,53	<0,01	0,27	0,67	0,02	0,05	0,06	0,08	0,08	<0,01	42,08	99,60
Türkheim B3 (Ro 7324)	TU11	ox2	Kalkstein	11,8	4,40	0,98	43,02	<0,01	1,17	1,75	0,05	0,21	0,09	0,01	0,07	<0,01	35,81	99,40

Tabelle A.5: Chemische Zusammensetzung (Spurenelemente) der untersuchten Laborproben nach RFA-Analysen (vgl. Kapitel 4).

Bohrung / Steinbruch	Probe	Formation	Hauptgesteinestyp	As (ppm)	Ba (ppm)	Bi (ppm)	Ce (ppm)	Co (ppm)	Cr (ppm)	Cu (ppm)	Ga (ppm)	Hf (ppm)	La (ppm)	Mo (ppm)	Nb (ppm)	Ni (ppm)	Pb (ppm)	Rb (ppm)	Sr (ppm)	Ta (ppm)	Th (ppm)	U (ppm)	V (ppm)	W (ppm)	Y (ppm)	Zn (ppm)	Zr (ppm)	
Ror324/B2 Auvendorf	AU05	ki1	Kalkstein	3	4	2	18	1	<1	2	<1	<1	3	10	2	<1	<1	<1	366	<1	6	<1	13	<1	13	<1	24	26
B419-Esehöfe	B419-02	ox1	Kalkstein	1	35	<1	24	7	24	<1	11	1	13	<1	8	7	7	58	472	<1	7	4	83	<1	20	67	75	
B419-Esehöfe	B419-05	ox1	Kalkstein	8	21	<1	29	7	4	1	4	<1	7	6	3	<1	5	16	497	<1	4	6	20	<1	14	32	42	
Ebratsweiler 1	E001	ti	Kalkstein	<1	4	2	21	5	4	1	5	<1	<1	6	2	<1	9	15	423	<1	4	9	14	<1	8	29	33	
Ebratsweiler 1	E002	ti	Kalkstein	2	5	1	21	2	<1	3	2	<1	6	11	1	<1	<1	6	490	<1	4	<1	8	<1	7	12	34	
Ebratsweiler 1	E005	ti	Kalkstein	<1	14	1	35	1	3	2	2	<1	4	14	<1	<1	3	4	324	<1	5	<1	14	<1	7	10	24	
Ebratsweiler 1	E009	he2	Kalksandstein	8	23	5	120	13	44	<1	4	<1	3	<1	8	<1	27	116	3	19	6	127	<1	27	17	423		
Ebratsweiler 1	E013	he2	Sandstein	3	460	6	96	12	27	6	5	<1	<1	<1	3	9	5	4	128	<1	16	5	44	<1	33	15	329	
Ebratsweiler 1	E019	koR	Sandstein	<1	503	9	39	3	35	<1	5	<1	<1	<1	4	<1	9	12	47	<1	8	4	22	<1	9	11	247	
Ro6927/B6 Ellenberg	EL01	km4	Sandstein	<1	350	4	68	6	12	<1	9	2	16	2	5	<1	13	69	84	<1	5	5	12	<1	19	34	75	
Ro6927/B6 Ellenberg	EL02	km4	Sandstein	6	628	2	38	9	7	4	10	3	15	3	4	3	17	107	114	1	<1	4	14	<1	12	56	91	
Ro6927/B6 Ellenberg	EL03	km4	Sandstein	<1	507	4	27	11	14	11	9	2	8	2	4	1	15	74	92	<1	3	2	5	<1	11	50	70	
Einöd	EOE01	km4	Sandstein	<1	500	6	21	3	19	<1	7	<1	6	2	3	<1	9	52	73	<1	2	6	27	<1	10	19	57	
Einöd	EOE02	km4	Sandstein	<1	270	4	134	2	28	<1	11	5	26	<1	9	1	10	49	79	2	35	6	21	2	31	43	513	
Ro8217/B1 Espel	ES02	ki1	Kalkstein	2	45	<1	24	4	8	2	5	<1	10	1	5	<1	<1	33	389	<1	4	6	15	<1	11	32	42	
B404 Grubbingen	GB01	bj1	Tonstein	179	830	2	64	53	55	13	9	5	32	<1	9	191	32	64	280	<1	15	5	86	4	23	45	322	
B404 Grubbingen	GB02	bj1	Tonstein	8	237	2	100	15	61	<1	13	3	29	2	13	22	15	92	287	<1	10	5	94	<1	23	78	230	
B404 Grubbingen	GB06	al2E	Kalksandstein	<1	52	7	29	5	12	<1	4	<1	<1	9	2	<1	6	6	102	<1	6	3	19	<1	14	8	81	
Gemmingen 1002	GE001	sos	Sandstein	2	479	5	33	5	28	<1	7	2	12	5	5	6	10	85	84	<1	4	6	29	<1	18	35	178	
Gemmingen 1002	GE002	sos	Sandstein	8	571	4	86	5	44	5	11	4	34	3	8	13	16	139	117	2	2	6	51	<1	24	38	249	
Gemmingen 1002	GE005	sng	Sandstein	<1	233	8	25	<1	29	<1	6	<1	3	<1	4	1	14	55	44	<1	4	2	18	<1	13	24	88	
Gemmingen 1002	GE006	sng	Sandstein	18	376	4	104	6	32	3	11	3	37	4	8	14	12	113	105	1	7	4	48	1	23	30	256	
Gemmingen 1002	GE009	sng	Sandstein	2	365	8	32	2	21	<1	4	<1	8	<1	2	<1	11	56	65	<1	4	5	4	<1	11	25	51	
Gemmingen 1002	GE011	sus	Tonstein	54	459	<1	131	15	81	6	27	10	161	2	17	43	21	226	160	2	8	5	110	4	40	78	249	
Gemmingen 1002	GE012	sus	Sandstein	<1	658	5	<1	3	51	<1	6	2	4	4	3	21	19	102	73	<1	4	6	11	<1	14	10	93	
Gemmingen 1002	GE015	suE	Tonstein	187	303	<1	201	10	63	5	29	9	283	2	18	29	18	239	245	3	5	5	89	7	48	66	194	
Gemmingen 1002	GE016	suE	Sandstein	4	577	5	11	3	19	2	6	2	7	4	5	<1	19	103	70	2	4	6	12	<1	19	18	187	
Gemmingen 1002	GE018	zT	Sandstein	4	481	1	50	5	26	3	12	6	24	4	9	3	20	146	63	<1	7	4	46	<1	32	26	253	
Gemmingen 1002	GE019	zD	Sandstein (dol.)	2	433	1	109	4	33	2	10	4	40	1	8	12	11	105	58	2	9	8	29	<1	40	19	341	
Gemmingen 1002	GE023	zD	Sandstein (dol.)	1	539	4	14	<1	20	<1	5	<1	8	5	3	<1	12	90	64	<1	2	9	12	<1	17	9	48	
Gondelsheim	GH01	mo	Kalkstein	2	11	2	6	<1	10	2	3	<1	4	9	1	<1	<1	<1	231	<1	6	2	22	<1	5	20	25	
Gondelsheim	GH03	mo	Dolomit	5	46	2	2	2	22	<1	4	1	<1	2	<1	1	9	30	62	<1	5	<1	6	<1	7	2	17	
Gondelsheim	GH05	mmDo	Dolomit	9	43	2	21	8	38	3	6	2	8	<1	<1	10	17	80	59	3	5	5	17	<1	6	21	12	
Gondelsheim	GH06	mmDo	Dolomit	15	47	3	19	7	36	2	7	2	6	2	<1	8	15	82	140	<1	4	9	35	<1	5	33	17	
Gondelsheim	GH09	mmDo	Kalkstein	1	76	2	2	3	12	2	4	<1	<1	7	<1	<1	<1	22	325	<1	5	9	51	<1	7	34	43	

Tabelle A.5 fortgesetzt.

Bohrung / Steinbruch	Probe	Formation	Haupt- gesteinestyp	As (ppm)	Ba (ppm)	Bi (ppm)	Ce (ppm)	Co (ppm)	Cr (ppm)	Cu (ppm)	Ga (ppm)	Hf (ppm)	La (ppm)	Mo (ppm)	Nb (ppm)	Ni (ppm)	Pb (ppm)	Rb (ppm)	Sr (ppm)	Ta (ppm)	Th (ppm)	U (ppm)	V (ppm)	W (ppm)	Y (ppm)	Zn (ppm)	Zr (ppm)	
PF1 Wilfridingen/Etzold	PF01	muW	Dolomitmergel	4	307	<1	56	14	65	3	21	7	54	3	10	13	12	193	83	4	3	8	111	1	17	64	105	
PF1 Wilfridingen/Etzold	PF04	muW	Kalkstein	<1	38	1	30	6	7	3	7	<1	7	<1	3	<1	3	40	316	<1	4	3	20	<1	12	28	33	
Reutehau 97/1	RE07-7-1	si1	Kalksandstein	29	123	7	30	15	105	<1	4	<1	2	1	<1	24	25	12	61	2	9	6	85	<1	15	12	35	
Reutehau 97/1	RE09-2	si2	Kalkmergel	4	37	<1	50	22	7	4	6	<1	6	4	2	20	4	21	641	<1	5	<1	31	<1	16	124	52	
Reutehau 97/1	RE10	pb2	Tonstein	11	327	<1	82	24	101	7	26	7	43	4	21	60	27	121	176	1	15	4	188	2	23	105	173	
Reutehau 97/1	RE12	tc2	Mergel	3	100	<1	109	60	34	10	14	<1	14	<1	12	81	17	63	860	1	4	12	156	<1	34	146	79	
Reutehau 97/1	RE14	ai1	Mergel	2	150	<1	108	17	50	<1	18	1	27	<1	14	12	15	80	468	<1	11	2	102	<1	28	42	105	
Reutehau 97/1	RE19	ai1	Tonstein	11	300	<1	95	33	108	4	29	6	48	8	25	57	25	131	185	<1	13	6	164	5	34	61	169	
Sexau	SE01	sus	Sandstein	3	815	7	13	3	23	<1	6	<1	<1	2	3	2	14	47	527	1	4	4	11	<1	15	9	133	
Sexau	SE05	sus	Sandstein	<1	2674	10	<1	1	22	<1	4	<1	<1	<1	1	3	<1	7	14	237	<1	1	4	<1	<1	11	9	52
Steinbruch 7018-344	STB01	sos	Sandstein	<1	378	6	15	4	30	<1	6	1	14	1	4	1	11	98	53	<1	3	5	23	<1	13	11	94	
Steinbruch 7018-344	STB04	sms	Sandstein	<1	734	9	<1	<1	23	<1	2	<1	2	2	2	<1	9	35	38	<1	4	3	5	<1	7	5	38	
Steinbruch 7325-1	STB10	ki3	Kalkstein	1	<1	4	8	1	<1	2	1	6	6	<1	<1	<1	<1	42	<1	6	5	7	<1	<1	7	5	6	
Steinbruch 7124-101	STB27	si1	Sandstein	<1	284	8	31	3	53	<1	4	<1	<1	3	6	<1	4	9	16	<1	11	<1	52	<1	17	12	200	
Steinbruch 7525-9	STB33	joMo	Kalkstein	3	3	2	9	<1	14	<1	<1	<1	3	12	<1	<1	3	132	<1	5	5	7	<1	<1	8	6	13	
Steinbruch 7427-308	STB41	ki5	Kalkstein	<1	<1	3	13	<1	17	1	3	<1	3	8	2	<1	<1	12	145	<1	5	1	16	<1	11	11	18	
Steinbruch 6924-116	STB48	km2	Sandstein	<1	426	3	42	9	57	<1	10	4	33	1	7	15	10	72	107	<1	6	6	40	<1	25	32	115	
Steinbruch 6924-300	STB52	km2	Sandstein	3	434	3	36	11	74	5	11	5	20	<1	8	19	9	76	117	<1	4	4	59	2	25	37	166	
Steinbruch 6824-1	STB56	mo2	Kalkstein	1	83	3	10	<1	13	2	2	<1	<1	11	2	<1	<1	<1	1018	<1	6	<1	6	<1	8	1	66	
Steinbruch 6825-4	STB60	mo2	Kalkstein	<1	128	2	24	<1	<1	<1	<1	<1	2	13	2	<1	<1	<1	1028	4	4	<1	7	<1	6	6	63	
Steinbruch 6722-2	STB67	mo2	Kalkstein	1	304	2	3	4	16	4	1	<1	6	<1	1	<1	4	<1	393	<1	4	<1	13	<1	8	3	28	
Steinbruch 7019-5	STB72	km3	Tonstein	10	360	<1	66	18	82	4	23	5	63	<1	12	34	15	152	120	3	5	6	114	3	29	102	141	
Steinbruch 6522-2	STB75	mmS	Kalkstein	36	81	3	22	18	2	3	3	<1	13	<1	2	<1	27	10	339	<1	4	<1	12	<1	7	77	33	
Steinbruch 6522-2	STB79	mmS	Dolomit	3	49	2	<1	7	23	4	4	1	1	<1	2	<1	7	12	249	<1	2	<1	16	<1	7	9	25	
Steinbruch 6522-2	STB82	mmG	Dolomit	<1	42	1	10	9	4	2	3	1	14	<1	2	<1	12	11	485	<1	4	<1	15	<1	6	10	41	
Steinbruch 6522-2	STB85	mmG	Dolomit	<1	28	1	18	3	3	<1	3	1	2	<1	2	<1	40	8	387	<1	4	9	9	<1	7	7	32	
Steinbruch 6522-2	STB86	mmG	Dolomit	4	38	2	3	5	23	4	4	1	7	<1	<1	<1	11	9	229	2	3	4	12	<1	7	4	24	
Schlupfert W	SW01	mo2	Kalkstein	<1	314	3	<1	5	16	2	2	<1	6	<1	1	<1	1	3	601	<1	5	1	6	<1	8	7	42	
Schlupfert W	SW02-1	mo2	Kalkstein	3	65	2	31	3	3	2	1	<1	4	5	2	<1	<1	715	<1	4	4	<1	14	<1	6	22	47	
Schlupfert W	SW08	kuL	Sandstein	5	376	1	44	13	151	2	14	8	31	2	9	80	12	103	71	<1	2	4	100	3	21	51	213	
Türkheim B3 (Ro 7324)	TU07	ki1	Kalkmergel	<1	18	2	29	3	2	<1	2	<1	5	9	3	<1	1	12	249	3	3	6	24	<1	14	26	22	
Türkheim B3 (Ro 7324)	TU11	ox2	Kalkstein	3	63	<1	29	10	13	3	8	<1	11	2	5	14	<1	52	233	<1	5	6	41	<1	13	50	41	

Tabelle A.6: Ergebnisse der Einzelmessungen der spezifischen Wärmekapazität, sortiert nach Gesteinsarten (vgl. Abschnitt 4.1.3). A_0 , A_1 und A_2 sind die Koeffizienten der Anpassung (vgl. Gleichung 2.5).

Probe		A_0 ($J kg^{-1} K^{-1}$)	A_1 ($J kg^{-1} K^{-2}$)	A_2 ($J kg^{-1} K^{-3}$)	$c_p(20^\circ C)$ ($J kg^{-1} K^{-1}$)	$c_p(100^\circ C)$ ($J kg^{-1} K^{-1}$)
Gh03	Dolomit	704,88	3,367	-0,00439	770,464	1037,19
Gh05	Dolomit	769,319	2,815	-0,003	824,419	1047,819
Gh06	Dolomit	736,52	2,745	-0,00249	790,424	1008,53
Pf01	Dolomit	795,67	2,618	-0,00244	847,054	1055,03
Pf02	Dolomit	787,46	2,618	-0,0023	838,9	1046,96
Pf02a	Dolomit	724,79	3,045	-0,0024	784,73	1026,89
Stb75	Dolomit	752,12	3,668	-0,00812	822,232	1110,8
Stb79	Dolomit	781,26	2,567	-0,00146	832,016	1036,5
Stb82	Dolomit	746,18	3,781	-0,00819	818,524	1116,09
Stb85	Dolomit	786,92	2,636	-0,0023	838,72	1048,22
Stb86	Dolomit	763,73	3,566	-0,0075	832,05	1112,83
Sw02	Dolomit	720,93	2,75	-0,00203	775,118	993,9
SW11	Dolomit	884,84	1,618	-0,00546	915,016	1041,18
TU06	Kalkmergel	743,54	2,089	-0,00295	784,14	949,49
E011	Kalksandstein	707,78	2,878	-0,00893	761,768	986,65
B419-02	Kalkstein	875,99	1,596	-0,00538	905,758	1030,21
B424-01	Kalkstein	809,5	1,78	-0,004	843,5	983,5
B424-03	Kalkstein	769,27	1,818	-0,00248	804,638	948,59
B424-05	Kalkstein	771,2	2,01	-0,00361	809,956	968,59
B424-06	Kalkstein	890,37	1,12	-0,00106	912,346	1001,31
E001	Kalkstein	703,78	2,275	-0,00202	748,472	929,26
E002	Kalkstein	709,78	2,293	-0,00338	754,288	935,7
E005	Kalkstein	767,94	1,907	-0,0034	804,72	955,24
TU02	Kalkstein	758,14	1,684	-0,00161	791,176	924,93
TU09	Kalkstein	734,7	2,484	-0,00643	781,808	976,67
AU01	Kalkstein	736,4	2,46	-0,00611	783,156	976,29
AU03	Kalkstein	744,3	1,994	-0,00313	782,928	940,57
AU05	Kalkstein	828,48	1,33	-0,00262	854,032	958,86
E010	Sandstein	665,82	2,766	-0,00652	718,532	935,9
E013	Sandstein	666,169	3,078	-0,00799	724,533	965,979
E017	Sandstein	719,42	2,613	-0,007	768,88	973,72
Eoe01	Sandstein	745,24	1,967	-0,00285	783,44	939,09
GE004	Sandstein	741,929	1,91	-0,0054	777,969	927,529
Eoe02	Sandstein	753,2	2,428	-0,000998	801,3608	995,002
Gb06	Sandstein	708,7	2,701	-0,00271	761,636	976,09
Ge001	Sandstein	715,84	2,493	-0,00244	764,724	962,7
Ge012	Sandstein	719,08	2,462	-0,00206	767,496	963,22
Ge016	Sandstein	663,1	2,829	-0,0021	718,84	943,9
Se05	Sandstein	713,55	2,64	-0,00289	765,194	974,66
Stb01	Sandstein	661,94	2,828	-0,00224	717,604	942,5
Stb04	Sandstein	716,13	2,514	-0,00288	765,258	964,65
Stb27	Sandstein	671,87	2,77	-0,00146	726,686	947,41
Stb48	Sandstein	649,42	4,49	-0,0107	734,94	1087,72
Stb52	Sandstein	716,03	2,555	-0,001153	766,6688	970,377
Sw08	Sandstein	746,002	2,789	-0,00335	800,442	1021,552
B149-05	Tonmergel	841,07	2,028	-0,00697	878,842	1036,9
E015	Tonstein	692,8	2,893	-0,00649	748,064	975,61
GE15	Tonstein	706,46	2,589	-0,00481	756,316	960,55
GE17	Tonstein	955,453	0,854	-0,00338	971,181	1037,473
SW06	Tonstein	833,59	2,069	-0,00655	872,35	1033,94
GE17	Tonstein	550,5	5,376	-0,0148	652,1	1073,3
GE21	Tonstein	766,23	2,151	-0,00234	808,314	978,99

Anhang B

Stratigraphischer Schlüssel

Tabelle B.1: Übersicht der Stratigraphie im Molassebecken. Zusätzlich zu den Namen sind die Abkürzungen für die Einheiten nach dem Austauschschlüssel des Landesamtes für Bergbau, Energie und Geologie (LBEG) angegeben.

Periode	Epoche	Stratigraphische Einheit	Symbol
Quartär			Q
Tertiär			T
		O. Süßwassermolasse	T,OSM
		Baltringer Schichten	TM,BA
		O. Meeresmolasse allg.	TM,OMM
		U. Süßwassermolasse	T,USM
		U. Meeresmolasse allg.	T,UMM
		U. Cyrenenschichten Bausteinschichten	TO,CY TO,BN
Kreide			KR
	O. Kreide		KRO
	U. Kreide	Purbeck	KRU
Jura			J
	Malm		JO
		Malm- ζ bis ϵ	JO,Z – JO,E
		Malm- γ	JO,G
	Dogger	Malm- β bis α	JO,B–JO,A
			JM
	Lias	Dogger- ζ bis α	JM,Z–JM,A
		JU	
	Lias- ζ bis α	JU,Z–JU,A	
Trias	Keuper		TR
			K
		O. Keuper (Rhät)	KO
		Rhätsandstein	KO,S
		Mittlerer Keuper	KM
		Knollenmergel	KM,KNM
		Stubensandstein	KM,STS
		O. Bunte Mergel	KM,OBM
		Kieselsandstein	KM,KIS
		Schilfsandstein	KM,S
	Gipskeuper	KM,G	
	U. Keuper	KU	
	Lettenkeuper	KU,L	
	Muschelkalk		M
		O. Muschelkalk	MO
		Trigonodusdolomit	MO,TD
		M. Muschelkalk	MM
	U. Muschelkalk	MU	
Buntsandstein		S	
Permokarbon		PEC	
Restl. Paläozoikum		PL	
Präkambrium		PC	
Basement		BS	

Anhang C

Druck- und Temperaturabhängigkeit sowie Tensorkomponenten der Wärmeleitfähigkeit

Tabelle C.1: Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten (λ) der Kalk- und Sulfatgesteine (vgl. Abschnitt 4.2.2). ϕ : Porosität.

Druck (MPa)	Temperatur (° C)	λ ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)	STD	rel.Fehler (%)
E001, $\phi = 1.8\%$				
0.1	27	2.72	0.075	2.8
50	75	2.40	0.029	1.2
100	122	2.27	0.034	1.5
160	166	2.24	0.074	3.3
E002, $\phi = 0.4\%$				
0.1	25	2.73	0.064	2.4
60	75	2.60	0.029	1.1
108	126	2.46	0.046	1.9
161	155	2.35	0.034	1.4
E005, $\phi = 0.6\%$				
0.1	30	2.81	0.050	1.8
50	76	2.54	0.013	0.5
102	118	2.35	0.035	1.5
159	155	2.28	0.043	1.9
E030, $\phi = 0.5\%$				
0.1	26	4.60	0.105	2.3
53	78	4.26	0.120	2.8
102	127	3.75	0.097	2.6
163	159	3.62	0.075	2.1
E031, $\phi = 2.4\%$				
0.1	32	4.31	0.112	2.6
59	73	4.26	0.049	1.2
114	117	3.88	0.152	3.9
170	156	3.47	0.140	4.0
STB027, $\phi = 18.4\%$				
0.1	28	3.84	0.029	0.8
40	82	3.62	0.066	1.8
108	139	3.29	0.056	1.7
172	189	2.76	0.049	1.8
STB033, $\phi = 1.2\%$				
0.1	26	2.67	0.017	0.7
56	71	2.41	0.026	1.1
112	126	2.26	0.020	0.9
180	179	2.07	0.036	1.8
STB041, $\phi = 3.1\%$				
0.1	27	2.67	0.033	1.2
65	73	2.40	0.014	0.6
102	120	2.22	0.015	0.7
180	172	2.15	0.028	1.3
STB056, $\phi = 8.5\%$				
0.1	27	2.46	0.017	0.7
49	74	2.23	0.041	1.8
104	118	2.07	0.011	0.5

Tabelle C.2: Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten (λ) der Sandsteine (vgl. Abschnitt 4.2.2). ϕ : Porosität.

Druck (MPa)	Temperatur (° C)	λ ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)	STD	rel. Fehler (%)
E009, $\phi = 11.8\%$				
0.1	27	3.65	0.092	2.5
47	79	3.40	0.080	2.4
96	131	3.08	0.073	2.4
170	160	2.70	0.079	2.9
E013, $\phi = 11.4\%$				
0.1	30	4.24	0.096	2.3
55	83	3.57	0.131	3.7
105	131	3.01	0.089	2.9
160	159	2.48	0.098	3.9
E019, $\phi = 16.8\%$				
0.1	29	4.25	0.052	1.2
46	88	3.65	0.048	1.3
97	145	3.26	0.052	1.6
170	170	2.92	0.039	1.3
GE001, $\phi = 8.9\%$				
0.1	23	3.95	0.032	0.8
56	78	3.64	0.085	2.3
115	132	3.42	0.049	1.4
186	185	3.05	0.054	1.8
GE002, $\phi = 5.2\%$				
0	26	4.49	0.046	1.0
54	67	4.13	0.049	1.2
131	113	3.71	0.057	1.5
188	159	3.32	0.052	1.6
GE005, $\phi = 11.5\%$				
0.1	31	4.49	0.069	1.5
56	75	4.20	0.131	3.1
110	138	3.81	0.079	2.1
177	208	3.05	0.070	2.3
GE009, $\phi = 11.8\%$				
0.1	25	4.49	0.034	0.8
56	72	4.37	0.027	0.6
115	116	3.67	0.061	1.7
185	157	3.10	0.077	2.5
GE012, $\phi = 14.0\%$				
0.1	25	3.87	0.045	1.2
60	76	3.62	0.030	0.8
96	130	3.09	0.032	1.0
142	173	2.79	0.041	1.5
GE016, $\phi = 9.9\%$				
0.1	24	3.73	0.034	0.9
39	80	3.49	0.058	1.7
123	113	3.24	0.017	0.5

Tabelle C.3: Koeffizienten k und b der Regression für die Druck- und temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeiten (λ) der einzelnen Proben nach Gleichung 4.10 (vgl. Abschnitt 4.2.2).

Probe	Gesteinstyp	λ ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$) = $k \cdot P$ (MPa) + b	
		k	b
E001	Kalkstein	-0,0029	2,63
E002	Kalkstein	-0,0024	2,73
E005	Kalkstein	-0,0034	2,76
E009	Sandstein (Hettang)	-0,0057	3,65
E013	Sandstein (Hettang)	-0,011	4,20
E019	Sandstein (Keuper)	-0,0076	4,12
E030	Dolomit/Dolomit	-0,0064	4,56
E031	Dolomit	-0,0051	4,42
GE001	Buntsandstein	-0,0048	3,94
GE002	Buntsandstein	-0,0061	4,48
GE005	Buntsandstein	-0,0081	4,58
GE009	Buntsandstein	-0,008	4,62
GE012	Buntsandstein	-0,008	3,94
GE016	Buntsandstein	-0,0034	3,68
GE019	Sandstein (dolomitisch)	-0,0037	3,52
GE023	Sandstein (dolomitisch)	-0,0066	4,79
STB001	Buntsandstein	-0,0069	3,86
STB004	Buntsandstein	-0,0131	5,34
STB027	Sandstein (Sinemur)	-0,0061	3,87
STB033	Kalkstein	-0,0033	2,64
STB041	Kalkstein	-0,0029	2,61
STB048	Sandstein (Keuper)	-0,0033	2,59
STB052	Sandstein (Keuper)	-0,0034	2,71
STB056	Kalkstein	-0,003	2,42
STB062	Gips	-0,0026	1,64
STB063	Gips	-0,0029	1,64
STB065	Kalkstein	-0,002	2,68
STB067	Kalkstein	-0,0029	2,87
STB079	Dolomit	-0,0026	2,72
STB086	Dolomit	-0,0033	2,91
B419-02	Kalkstein	-0,0014	2,33
EL01	Sandstein (Keuper)	-0,0047	3,29
EL02+EL03	Sandstein (Keuper)	-0,0042	2,81
EOE01	Sandstein (Keuper)	-0,0077	3,76
EOE02	Sandstein (Keuper)	-0,0024	3,32
ES02	Kalkmergel	-0,0015	2,22
GB06	Sandstein (Dogger)	-0,0083	4,70
GH01	Kalkstein	-0,0051	2,92
GH03	Kalkstein	-0,0035	3,08
GH05	Dolomit	-0,0033	3,19
GH06	Dolomit	-0,0028	3,03
GH09	Kalkstein	-0,0031	2,97
RE-07-05-1	Kalksandstein	-0,0049	3,40
RE-07-07-1	Kalksandstein	-0,0049	4,04
SE01	Buntsandstein	-0,0114	4,21
SE05	Buntsandstein	-0,0105	4,67
SW01	Kalkstein	-0,0034	2,88
SW03	Gips	-0,0007	1,40
SW08	Sandstein (Keuper)	-0,0017	2,87

Tabelle C.4: Tensorkomponenten der Wärmeleitfähigkeiten (λ), Temperaturleitfähigkeiten (φ) und Porositäten aller Proben, jeweils vor und nach den druck- und temperaturabhängigen Messungen.

Probe No.	λ ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)		φ ($10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$)	Porosität (%)	λ ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)		φ ($10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}$)	Porosität (%)
	par	per			par	per		
	vor P-/T- Messung				nach P-/T- Messung			
E001	2.42	2.42	1.20	1.8	2.43	2.36	1.05	0.7
	2.57	2.57	1.21		2.50	2.50	1.08	
E002	2.57	2.57	1.26	0.4	2.49	2.37	1.16	0.3
	2.65	2.65	1.25		2.53	2.32	1.14	
E005	2.65	2.65	1.18	0.6	2.59	2.59	1.16	0.1
	2.67	2.67	1.18		2.65	2.65	1.14	
E009	2.57	2.24	1.41	11.8	2.87	2.48	1.55	11.2
	3.61	3.61	1.50		3.35	3.16	1.50	
E013	3.35	3.16	1.93	11.4	3.36	2.66	1.79	8.1
	4.23	3.59	2.01		3.81	3.65	1.85	
E019	2.38	2.34	1.42	16.8	2.58	2.31	1.27	12.4
	4.34	4.16	1.75		3.62	3.20	1.72	
E030	4.62	4.62	2.05	0.5	4.52	4.52	1.96	0.2
	4.85	4.85	2.10		4.46	4.46	2.06	
E031	3.88	3.88	1.67	2.4	3.76	3.76	1.59	0.3
	4.18	4.18	1.67		3.85	3.85	1.62	
GE001	2.84	2.26	1.54	8.9	3.02	2.41	1.63	8.2
	3.99	3.29	1.85		4.01	3.26	1.79	
GE002	3.41	2.65	1.74	5.2	3.35	2.66	1.76	5.4
	4.46	3.71	2.35		4.51	3.71	2.13	
GE005	3.31	3.10	1.89	11.5	3.75	3.75	2.09	7.3
	4.61	4.61	2.08		4.34	4.34	2.11	
GE009	3.23	2.92	1.87	11.8	3.72	3.25	2.06	7.1
	4.49	4.28	2.15		4.15	3.59	2.14	
GE012	2.62	2.30	1.49	14.0	2.76	2.67	1.48	10.2
	3.77	3.49	1.71		3.53	3.53	1.67	
GE016	2.79	2.40	1.51	9.9	2.81	2.57	1.48	9.4
	3.76	3.47	1.72		3.53	3.22	1.59	
GE019	3.06	2.47	1.45	4.5	2.99	2.46	1.49	4.4
	3.44	2.94	1.60		3.49	2.91	1.54	
GE023	3.85	3.48	1.93	3.5	3.73	3.32	1.89	3.4
	4.61	4.38	2.33		4.56	4.19	2.29	
STB01	2.60	2.60	1.73	13.9	2.63	2.63	1.79	13.2
	3.98	3.98	2.00		3.97	3.97	1.85	
STB04	4.06	4.06	2.38	8.6	4.31	4.31	2.65	8.1
	5.29	5.29	2.62		5.39	5.03	2.63	
STB27	2.47	2.47	1.50	18.4	2.30	2.30	1.41	16.9
	4.22	4.22	1.87		4.11	4.11	1.74	
STB33	2.73	2.73	1.17	1.2	2.64	2.64	1.17	0.5
	2.75	2.75	1.25		2.68	2.68	1.19	
STB41	2.41	2.41	1.09	3.1	2.27	2.27	1.03	2.6
	2.70	2.70	1.16		2.58	2.58	1.10	
STB48	1.50	1.50	0.91	23.4	1.34	1.34	0.81	23.1
	2.75	2.75	1.07		2.66	2.66	1.08	
STB52	1.42	1.27	0.87	22.3	1.41	1.21	0.86	20.1
	2.68	2.54	1.04		2.77	2.46	1.03	
STB56	2.09	1.97	0.98	8.5	1.98	1.98	1.00	9.7
	2.54	2.48	1.01		2.50	2.37	1.03	
STB62	0.24	0.24	0.12	30.8	0.29	0.29	0.19	46.1
					1.35	1.14	0.51	
STB63	0.23	0.23	0.11	26.9	0.47	0.42	0.30	35.9
					1.17	0.97	0.47	
STB65	2.69	2.69	1.24	0.4	2.75	2.75	1.21	0.1
	2.80	2.80	1.24		2.70	2.70	1.24	
STB67	2.60	2.60	1.09	1.1	2.64	2.64	1.18	0.8
	2.85	2.85	1.29		2.83	2.83	1.26	
STB79	2.00	2.00	0.95	11.9	2.16	2.16	0.94	6.6
	2.81	2.81	1.14		2.52	2.52	1.04	
STB86	1.91	1.91	0.89	15.6	2.06	2.06	1.02	13.9
	2.96	2.96	1.13		2.77	2.77	1.10	

- trockene Messung
 - gesättigte Messung

Tabelle C.4 fortgesetzt.

Probe No.	λ (Wm ⁻¹ K ⁻¹)		ϕ (10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹)	Porosität (%)	λ (Wm ⁻¹ K ⁻¹)		ϕ (10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹)	Porosität (%)
	par	per			par	per		
B419-02	2.27	2.27	1.01	1.3	2.26	2.26	0.97	0.3
	2.35	2.35	1.09		2.27	2.27	1.03	
C(G)B06	3.69	3.46	1.89	4.8	3.85	3.47	2.09	3.4
	4.65	4.65	2.43		4.41	4.18	2.15	
EL01	2.75	2.60	1.44	21.4				
	3.48	3.48	1.38					
EOE01	2.30	2.30	1.43	20.2	2.38	2.38	1.35	19.4
	3.86	3.86	1.61		3.61	3.61	1.53	
EOE02	2.35	1.86	1.22	12.6	2.29	1.85	1.18	
	3.32	2.89	1.43		3.11	2.71	1.31	
ES02	1.94	1.81	0.84	7.7	1.86	1.73	0.89	8.9
	2.29	2.29	0.93		2.34	2.19	0.98	
GH01	2.89	2.89	1.30	0.2	2.74	2.74	1.28	0.3
	2.88	2.88	1.27		2.84	2.84	1.26	
GH03	1.27	1.11	0.65	14.0	1.22	1.22	0.61	13.7
	3.08	3.08	1.22		3.10	3.10	1.17	
GH05	2.51	2.33	1.16	7.9	2.39	2.39	1.15	6.8
	3.19	3.00	1.33		2.91	2.91	1.25	
GH06	2.45	2.45	1.20	8.2	2.41	2.41	1.06	7.8
	3.00	3.00	1.18		2.79	2.79	1.17	
GH09	2.70	2.70	1.26	0.5	2.81	2.81	1.19	0.2
	2.74	2.74	1.31		2.78	2.78	1.25	
RE07-5-1	2.84	2.61	1.30	8.2	2.52	2.09	1.21	6.6
	3.25	3.05	1.32		2.98	2.72	1.34	
RE07-7-1	3.26	3.26	1.44	3.3	2.76	2.76	1.24	2.9
	3.94	3.94	1.71		3.74	3.74	1.64	
SE01	2.73	2.35	1.63	17.3	2.59	2.18	1.55	15.4
	4.22	3.84	1.87		4.01	3.68	1.70	
SE05	3.43	3.43	2.18	16.6	3.42	3.25	2.08	15.7
	4.73	4.73	2.13		4.64	4.39	1.97	
SW01	2.70	2.73	1.26	0.6	2.54	2.54	1.16	0.5
	2.87	2.87	1.30		2.73	2.73	1.19	
SW03	0.24	0.24	0.16	36.4	0.26	0.26	0.19	43.9
	1.39	1.39	0.57		1.30	1.30	0.45	
SW08	2.36	2.17	1.21	9.6	2.33	2.15	1.17	9.1
	2.80	2.55	1.30		2.80	2.56	1.18	
EL02+EL03	1.56	1.56	0.92	23.2	1.34	1.05	0.87	24.6
	3.11	2.84	1.33		2.38	2.38	0.91	

Anhang D

Log-Profile

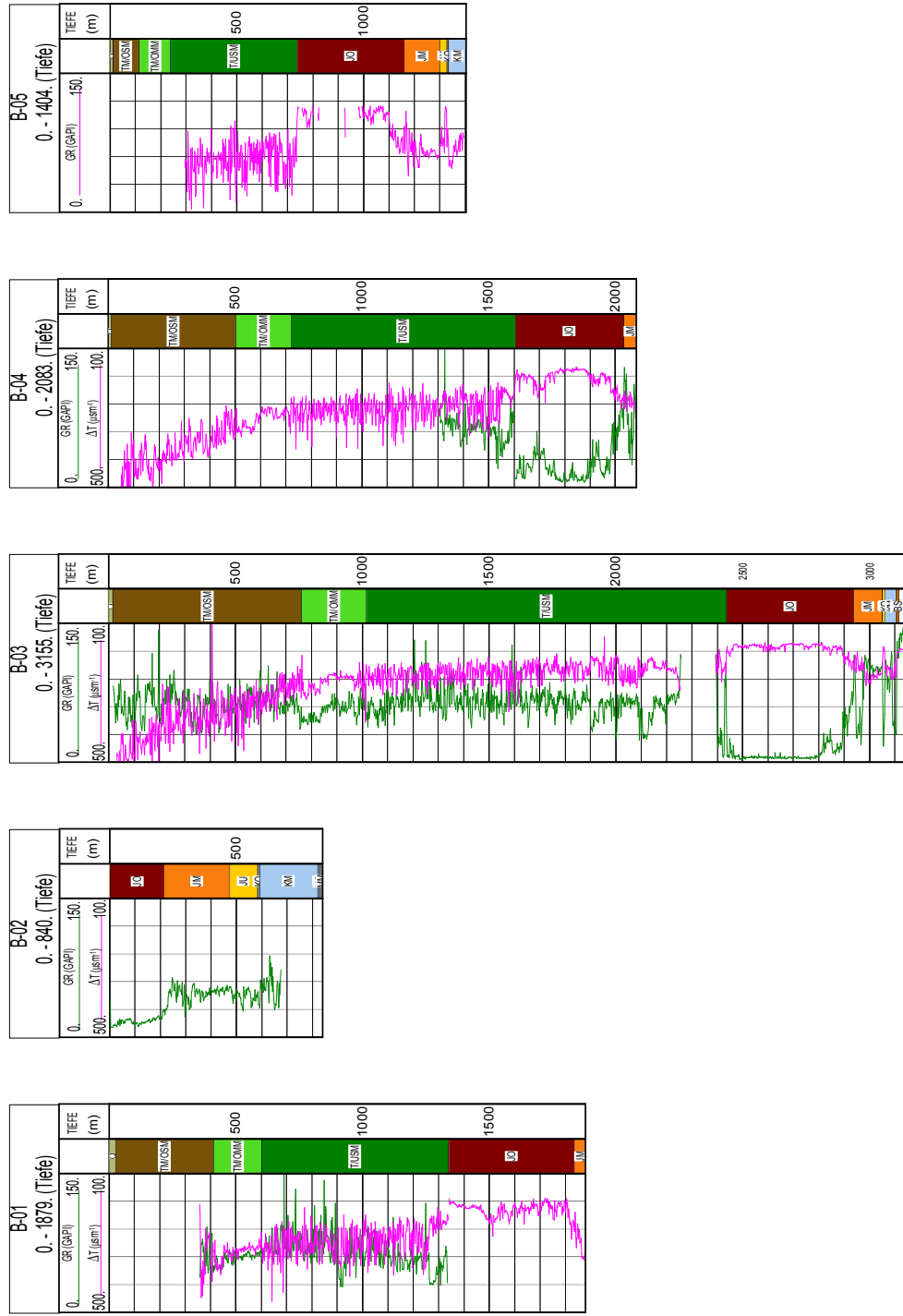


Abbildung D.1: Übersicht zu den Bohrungen und den abgegrenzten Hauptserien (vgl. Abschnitt 3.2). Gegeben ist jeweils der Gammalog (GR in gAPI) und der Sonic-Log als Laufzeit der Kompressionswelle (DT in μsm^{-1}). Die Abkürzungen zu den Hauptserien sind in Tabelle B.1 aufgeführt.

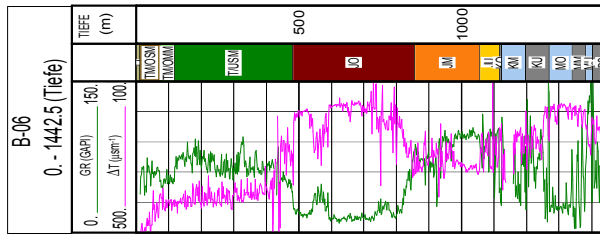
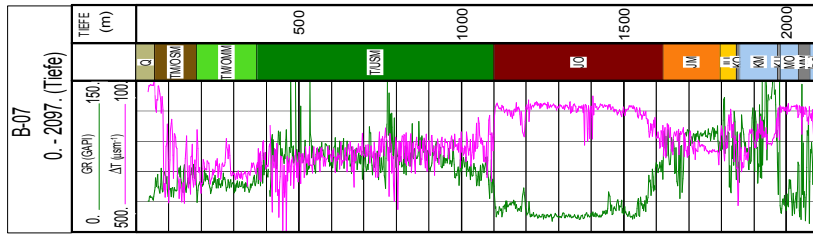
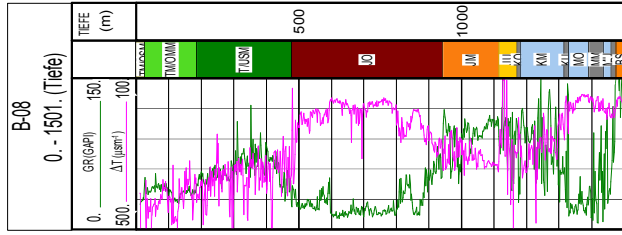
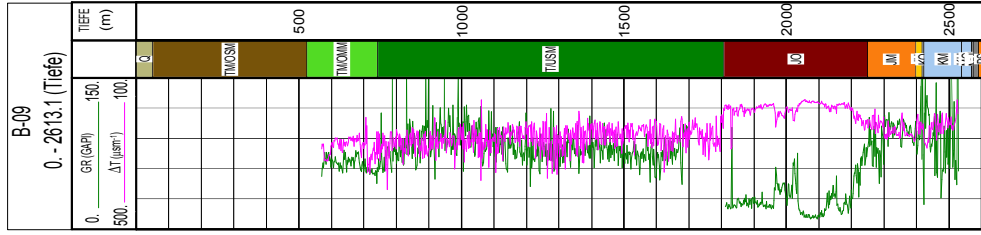
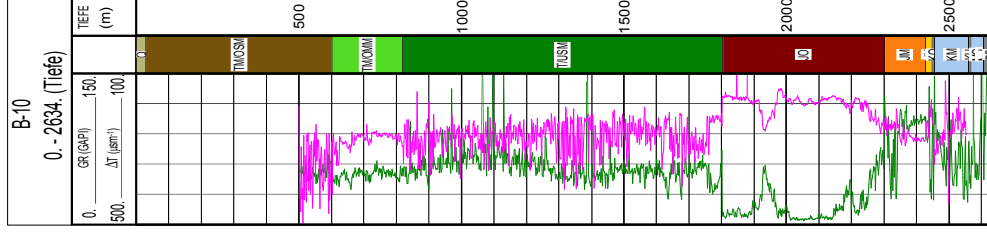


Abbildung D.2

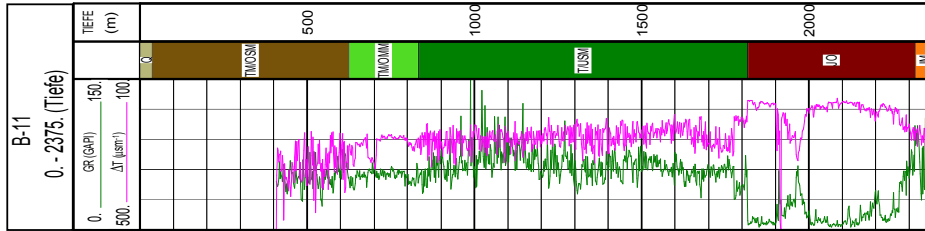
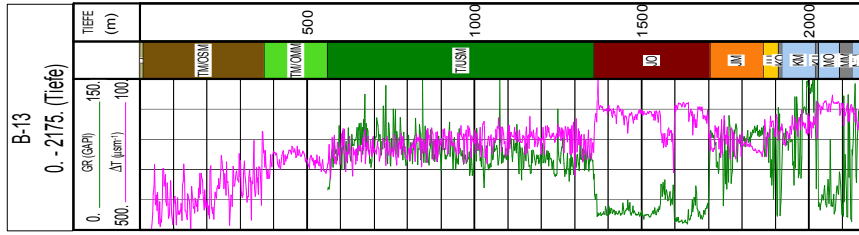
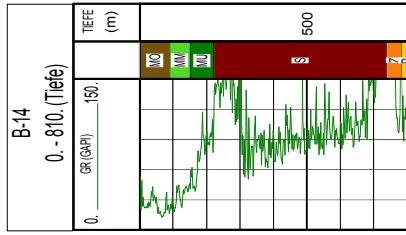
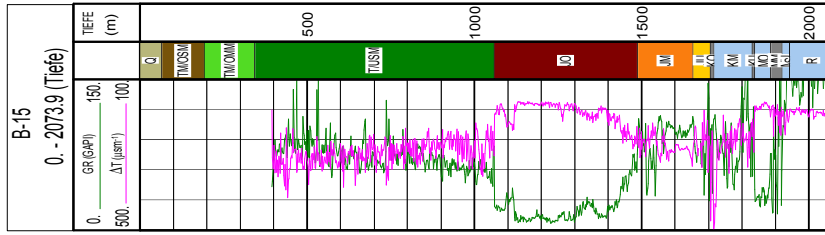
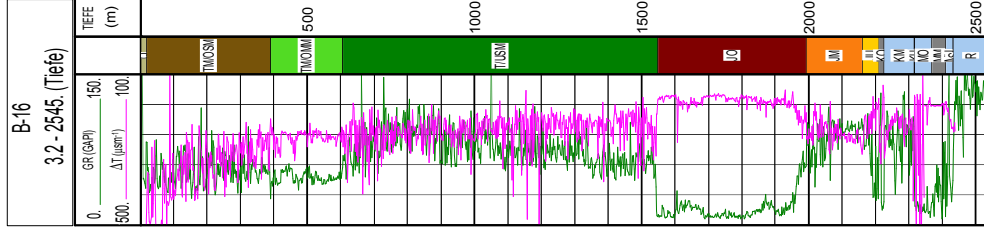


Abbildung D.3

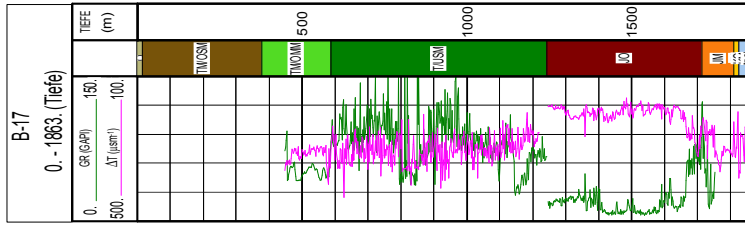
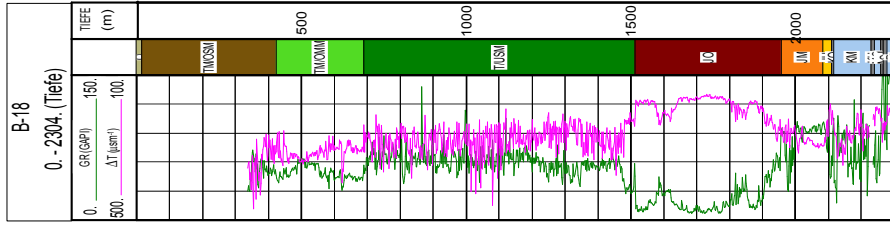
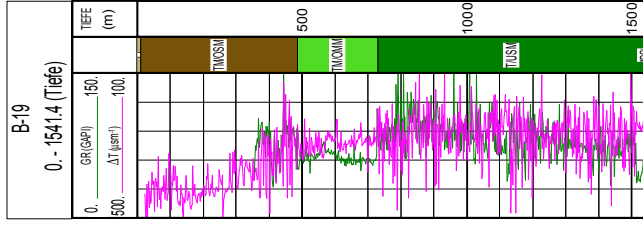
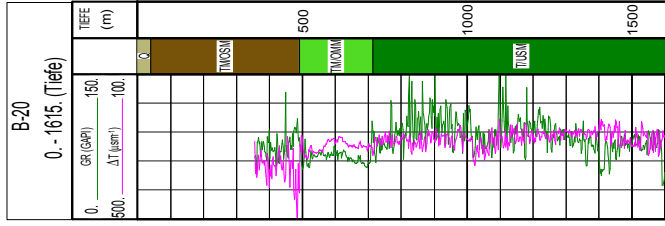
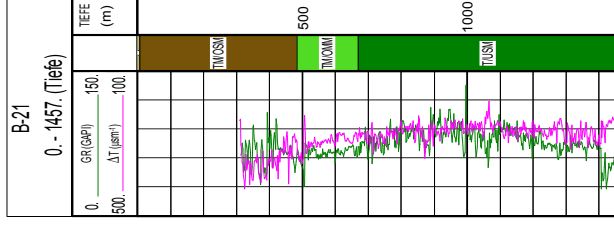


Abbildung D.4

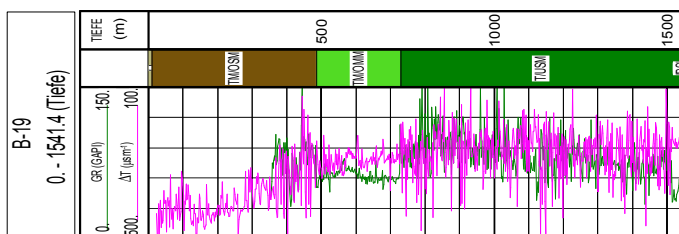
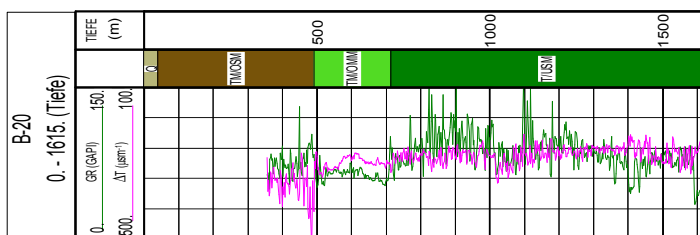
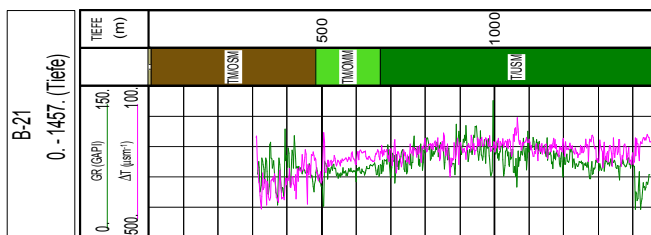
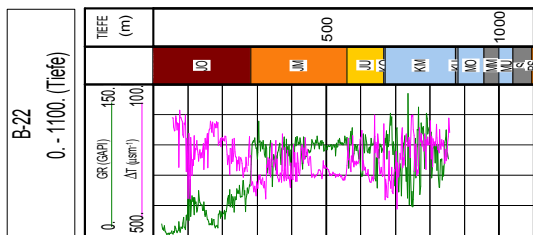
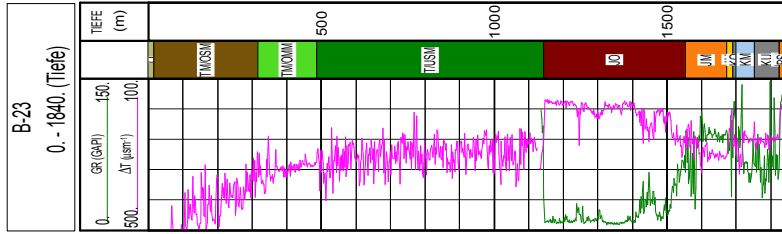
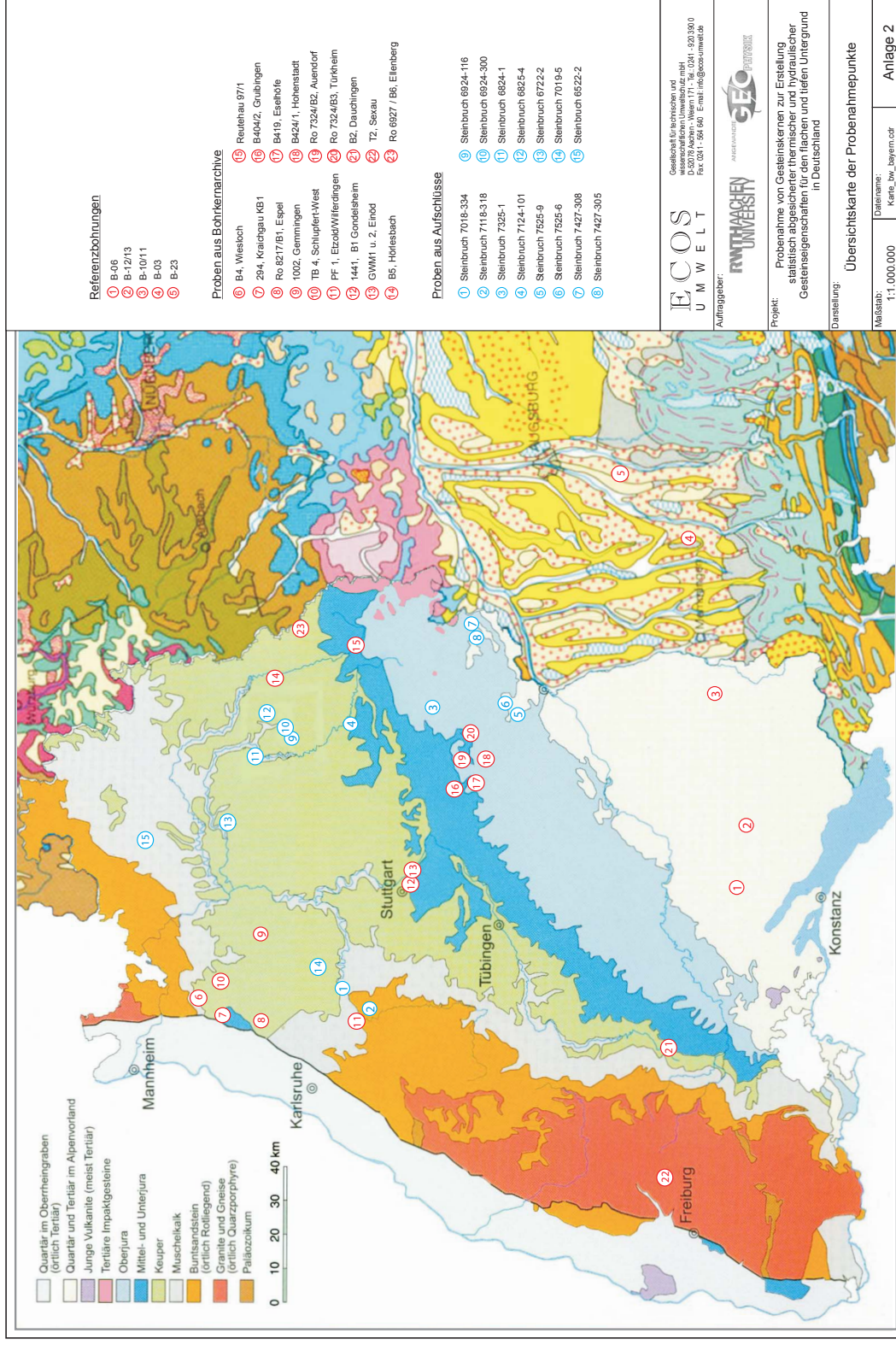


Abbildung D.5

Anhang E

Übersichtskarte der Probenahmepunkte



E.C.O.S.
U M W E L T

Geologische Fachschulen und
wissenschaftlichen Umweltstudien
D-70372 Kachhof - Weimer 171, Tel. 07141 - 230 390 0
Fax: 07141 - 366 060 E-Mail: info@ecosumwelt.de

Auftraggeber:
RWTH AACHEN
UNIVERSITY
AMBIENTAL
E.C.O.S. PARTNER

Projekt:
Probekerns von Gesteinskernen zur Erstellung
statistisch abgesicherter thermischer und hydraulischer
Gesteinsigenschaften für den flachen und tiefen Untergrund
in Deutschland

Darstellung:
Übersichtskarte der Probenahmepunkte

Maßstab:
1:1.000.000

Datensatzname:
Karte_bw_bayern.cdr

Anlage 2

Abbildung E.1: Übersichtskarte mit den Positionen der Probenahmepunkte aus Bohrungen (rote Kreise) und Oberflächenaufschlüssen (blaue Kreise). Eingetragen sind weiterhin die Positionen von sieben Referenzbohrungen, die für die Erarbeitung eines Normalprofils herangezogen wurden, auf dessen Basis die Probenahme geplant wurde (vgl. Kapitel 3.1.3).

Anhang F

Auszug Dissertation A. Hartmann, 2007, Kapitel 4:

Joint inversion for thermal and petrophysical properties from wireline and temperature data

In the petrophysical inversion from logging data the tool response is modelled by a system of equations linking the volumetric composition of the rock to its physical properties. This technique has been successfully applied in reservoir evaluation using nuclear, acoustic, and electrical log data. Temperature logging has played only a minor role in this scheme so far, mainly in the correction of temperature dependent properties, such as the electric conductivity of fluids. The difficulties to obtain undisturbed formation temperatures after drilling can explain this disregard. However, measurements of the undisturbed temperature gradient constrain thermal conductivity and thus petrophysical properties of the rock. This can be particularly useful in geothermal applications where a model is needed that consistently explains wireline data and temperature data together.

An inversion algorithm, in the following named LogInv, will be presented that is able to invert simultaneously temperature logs and other wireline logs. The forward model incorporates variable layering and inclusion of shoulder effects for various tools. A Bayesian approach is used with a Tikhonov regularisation to solve the inverse problem. The algorithm is then tested against current algorithms and applications of the model are presented in two case studies.

F.1 Forward model

The proposed algorithm has a modular structure. All forward models have the same interface and can be combined to yield composite log responses. New models can easily be added if they conform the common interface and existing models can be modified to accommodate specific applications without the necessity to modify the inverse code.

A number of tool responses is already implemented in the project. Common to all tool equations

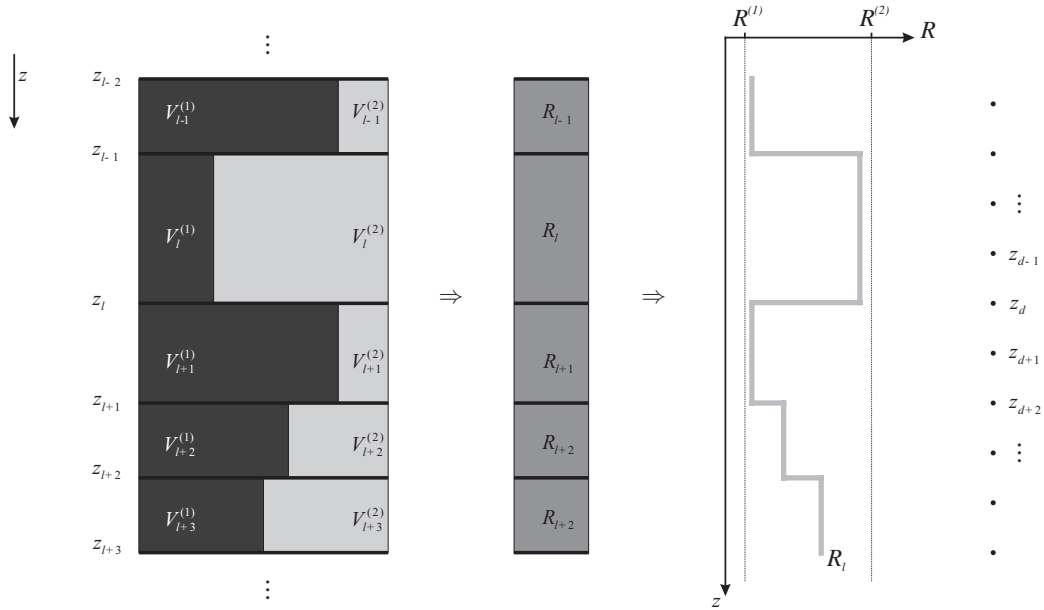


Abbildung F.1: Geometry of the lithologic model. For each layer l an effective log response R_l is computed from the volumetric contents $V_l^{(n)}$ of the mineral/fluid n .

is the model geometry (figure F.1). The subsurface is divided into a number of model layers with possibly varying thickness. The depth of a layer l is given by z_l . A natural choice for the thickness is the sampling interval of the wireline logs, or a multiple of it for noise suppression. For every layer a number of volumetric components $V_l^{(n)}$ is defined with the sum of the fractional volumes equal to one. Additionally, the theoretical responses $R_l^{(n)}$ of the components are defined for each layer such as the densities of the water and the rock matrix. Tool specific global parameters define properties of the various tools, such as penetration depth for nuclear tools or heat flow for the temperature tool.

This geometry serves as a base to compute the value of the forward model at the data depths z_d . The internals of this computation are entirely up to the forward model. However, in general the computation is a two-step procedure where the computation of an effective layer property and/or layer response is followed by spatial averaging to account for the finite resolution of the tool. The following sections present a number of examples for relevant tool equations.

F.1.1 Sonic tool

The first step in computing the tool response is to arrive at the effective slowness Δt_l of the layer l . A number of relationships have been proposed for this purpose (Mavko et al., 1998). The most widely used is the travel-time average (Wyllie et al., 1956), equivalent to arithmetic averaging. Here, the Raymer-Hunt-Gardner model (Raymer et al., 1980) is used for porosity values less than 37 %:

$$\frac{1}{\Delta t} = \frac{\phi}{\Delta t_f} + \frac{(1 - \phi)^2}{\Delta t_m}, \text{ for } \phi < 0.37. \quad (\text{F.1})$$

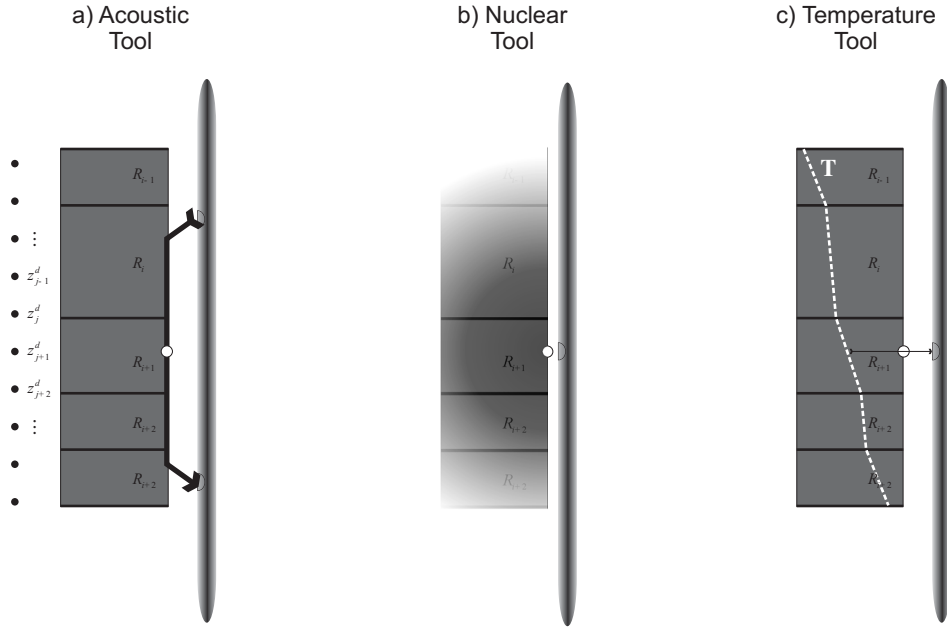


Abbildung F.2: Schematic of the tool response geometry used in the forward model. a) sonic tool, b) density and γ -ray tools, c) temperature tool.

The indices p and m denote pore and matrix, respectively. In principle the equation is only valid for a homogeneous rock matrix. As an approximation the slowness of the solid is computed using the Wyllie time average.

Once the effective layer slowness is calculated, the geometry of the tool needs to be considered (figure F.2a). In principle the arrival time difference of two or more receivers is measured and divided by the spacing of the receivers. The value is assigned to the midpoint between the receivers. Borehole compensated (BHC) tools have a more complicated ray path but essentially they too have the receiver spacing d_r as a characteristic tool parameter. A simple approximation to the tool response can be computed as a weighted average of the slowness values of the layers that are probed by the tool:

$$\Delta t = \sum_l f_l \Delta t_l. \quad (\text{F.2})$$

For a layer l to be used in the averaging for data depth z_d , z_l must be in the interval $(z_d - d_r/2, z_d + d_r/2]$. The relative weight f_l of a layer is given by its thickness divided by the characteristic length:

$$f_l = c \frac{z_l - z_{l-1}}{d_r}. \quad (\text{F.3})$$

The correction factor c is equal to one for layers that are completely within the interval d_r . If not, c corresponds to the ratio between the part of the layer within $(z_d - d_r/2, z_d + d_r/2]$ and the total thickness of the layer

$$c = \begin{cases} \frac{z_l - z_d - d_r/2}{z_l - z_{l-1}} & (z_l < z_d), \\ \frac{z_d + d_r/2 - z_{l-1}}{z_l - z_{l-1}} & (z_l > z_d). \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

F.1.2 Density and natural gamma-ray tools

The same model is used for the passive γ -ray tool and the $\gamma - \gamma$ density tool. The effective density and γ -ray value for each layer is computed as the weighted arithmetic average (Hartmann (2007), equation 3.6) of the components.

The averaging process will be derived for the γ -ray tool. For the density tool it is equivalent. The impulse response $I(z)$ of a γ -ray tool to an infinitely thin radioactive layer with unit strength located at depth z' is modelled by an exponential decay function (Hearst et al., 2000):

$$I(z', z_d) = \frac{1}{2\alpha} e^{-|z-z'|/\alpha} \quad (\text{F.5})$$

In this equation α is the characteristic length after which the impulse response has decreased to $1/e$. It is a property of the formation, with typical values of about 30 cm for natural γ -ray tools (Ellis, 1987). For example, 75 % of a monoenergetic source with an energy of 1.76 MeV come from a volume of 14 cm radius and 25 cm vertical extent (Hearst et al., 2000). The total γ -ray value at a particular depth point $GR(z_d)$ is then given as the integral

$$GR(z_d) = \int_{-\infty}^{+\infty} GR_f(z') I(z', z_d) dz'. \quad (\text{F.6})$$

$GR_f(z')$ is the continuous γ -ray value of the formation that varies with depth. In the layered case it is piecewise constant and equal to the effective layer GR_l computed in the first step. Thus, equation F.6 becomes

$$GR(z_d) = \sum_l GR_l \int_{z_{l-1}}^{z_l} I(z', z_d) dz'. \quad (\text{F.7})$$

The solution of the sum of these integrals is given in Appendix F.5. In practise only a finite number of layers has to be used for the computation. As a default only the layers within $\pm 5\alpha$ of z_d are chosen which amount to 99 % of the expected signal. To ensure that the computed value corresponds to the complete infinite integral, a small correction factor $c(z_d)$ is applied

$$c(z_d) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} I(z', z_d) dz'}{\int_{z_b}^{z_t} I(z', z_d) dz'} = 2 \left(2 - e^{-\frac{z_b-z_d}{\alpha}} - e^{-\frac{z_t-z_d}{\alpha}} \right)^{-1} \quad (\text{F.8})$$

where z_b and z_t are the bottom depth and top depth of the actually used integration interval.

F.1.3 Resistivity tool

Many rock-forming minerals are isolators so that resistivity of rocks is due to the electrical properties of the pore fluid. This is generally expressed by Archie's equation (Archie, 1942),

$$\frac{R_0}{R_w} = \phi^{-m}, \quad (\text{F.9})$$

where m is the so called cementation exponent, R_w is the brine resistivity, and R_0 is the resistivity of the brine saturated rock. This equation was further modified to give the empirical relationship

$$\frac{R_0}{R_w} = a\phi^{-m}. \quad (\text{F.10})$$

The coefficients a and m are empirical constants and depend on the rock type considered. For a discussion see for instance Hearst et al. (2000).

In addition to the properties and geometry of the pore fluid, electrical properties of shales are important for resistivity logging. Shale consists of clay- to silt-sized particles, usually with large amounts of clay minerals responsible for the electrical properties. The effective electrical resistivity of the shale fraction depends on the amount and structure of the shale. Three types can be distinguished: 1) Laminar shale; 2) Structural shale; 3) Dispersed shale (Schlumberger, 1989). All three forms require slightly different petrophysical models, however, often the so called “total shale relationship” can be used (Schlumberger, 1989) without considering the structural properties of shale,

$$\frac{1}{R_t} = \frac{\phi^m S_w^2}{a R_w (1 - V_{sh})} + \frac{V_{sh} S_w}{R_{sh}}. \quad (\text{F.11})$$

Here, R_t is the resistivity of the rock saturated with hydrocarbon and water, S_w is the water saturation, V_{sh} is the shale volume fraction and R_{sh} is the shale resistivity. With no shales and hydrocarbons present, equation F.11 reduces to Archie’s equation. In the case studied here, no hydrocarbon bearing formations are examined, thus $S_w = 1$ and $R_t = R_0$ (R_0 is the resistivity of the water saturated rock):

$$\frac{1}{R_0} = \frac{\phi^m}{a R_w (1 - V_{sh})} + \frac{V_{sh}}{R_{sh}}. \quad (\text{F.12})$$

F.1.4 Temperature tool

The temperature tool differs from other tools because the preexisting temperature field is recorded instead of the relevant petrophysical property, thermal conductivity. A discussion of the appropriate mixing laws for thermal conductivity was already given in Hartmann (2007)(section 3.2). As long as experimental data do not suggest otherwise, it is most appropriate to use the geometric mixing model ((Hartmann, 2007), equation 3.10) generalised to N components:

$$\lambda_l = \prod_n^N \lambda_n^{V_n}. \quad (\text{F.13})$$

The second petrophysical parameter is the heat production A . Depending on the available logging data, this parameter can be computed using Uranium, Thorium, and Potassium concentrations from the spectral γ -ray log (Rybach, 1988) or from the total γ -ray log (Bücker und Rybach, 1996).

$$A(SGR) = 10^{-5} \rho_b (9.52 c_{ura} + 2.56 c_{tho} + 3.48 c_{pot}), \quad (\text{F.14})$$

$$A(GR) = 0.0158 (GR - 0.8). \quad (\text{F.15})$$

Computing the spectral or total γ -ray value is achieved by calling the appropriate tool model from within the temperature function. Neglecting advective heat transport and assuming a 1D problem the heat transport equation can be solved for a homogeneous half space (Hartmann (2007), equation 2.1) or a layered earth:

$$T(z) = T_0 + q_0 \sum_l \frac{\Delta z_l}{\lambda_l} + \frac{1}{2} \sum_l \frac{A_l \Delta z_l^2}{\lambda_l} + T_t(z) \quad (\text{F.16})$$

The representation of the conduction term and the heat production term for the layered case is straightforward. The transient part is more difficult. An analytic expression of a series of step changes in ground surface temperature was given by (Nielsen und Balling, 1985) but the model has restrictions regarding the layer width. Using a finite difference algorithm (Mottaghy und Rath, 2007) for the problem is straightforward but can be time-consuming as the temperature-depth profile needs to be computed for every time step with high spatial resolution. Based on the results of Hartmann (2007) (chapter 2.), another viable method is to use the assumption of a homogeneous subsurface for the transient term using the effective diffusivity of the profile. Both methods are available and the decision which one to use can be based on the accuracy needed and the complexity of the geological profile.

It should be noted that equation F.16 does not include a shoulder effect for the temperature as it is a point measurement (see also figure F.2), implying a very high vertical resolution. In reality the temperature reading is affected by several processes that decrease spatial resolution. Gretener (1967) states that “most oil wells must be thermally unstable”. He found fluctuations on the order of 10^{-2} K on continuous temperature recordings taken at one depth. Another problem is that the finite logging speed of the probe in conjunction with the response time of the sensor produces a depth lag of the temperature readings (Reiter et al., 1980). This lag can be roughly computed as the product of logging speed and response time. A speed of 5 m min^{-1} and a response time of 2 s produce a lag of 17 cm, roughly the sampling interval of wireline logs. Because this error is on the same order as the random fluctuations, it is not necessary to include it in the forward model. However, very high resolution measurements need to take this effect into account.

F.2 Bayesian Inversion procedure

After defining the forward model, as demonstrated in the last section, one can now proceed to solve the inverse problem. The forward problem can be written as (Tarantola, 2005)

$$\mathbf{g}(\mathbf{m}) = \mathbf{d}, \quad (\text{F.17})$$

that is, the forward operator $\mathbf{g}(\cdot)$ maps a model \mathbf{m} onto the data \mathbf{d} . Inverting this equation means to find an inverse operator \mathbf{g}^{-i} so that

$$\mathbf{m} = \mathbf{g}^{-i}(\mathbf{d}). \quad (\text{F.18})$$

Generally, this equation cannot be solved exactly. Rather, a solution \mathbf{m} must be sought that is in some sense optimal. This is usually done by a least-squares fit, i. e. finding the model \mathbf{m} that minimises the quadratic misfit between model prediction and data

$$\phi_{LS}(\mathbf{m}) = \|\mathbf{g}(\mathbf{m}) - \mathbf{d}\|_2.$$

This equation has to be modified to take into account varying data errors and correlations by introducing the data covariance matrix \mathbf{C}_d . Another modification is introduced by using prior knowledge about the model. In the Bayesian framework this is done by using an a-priori parameter vector \mathbf{m}_p and its associated covariance matrix \mathbf{C}_p^{-1} . These two modifications lead to the general formulation of the nonlinear Bayesian functional (Tarantola, 2005)

$$\phi_B(\mathbf{m}) = [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m})]^T \mathbf{C}_d^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m})] + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_p)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_p). \quad (\text{F.19})$$

¹Standard wireline speed is about 10 m min^{-1}

Minimising this functional yields a solution to the inverse problem posed in equation F.17.

For the problem of inverting wireline logs, the forward operator \mathbf{g} is given by the equations relating lithology to a tool response. The model itself consists of the volumetric composition for each depth level, the properties of the components for each depth level and possibly global parameters. “Global” means here that the parameter is not related to a particular depth but to all data, such as structural parameters or heat flux density. The solution will then be a model that minimises the misfit between recorded and modelled wireline data constrained by a-priori knowledge. For instance, this could be laboratory measurements of mineral properties or porosity. Each particular application might use only a subset of the possibilities offered by this formulation. For instance, an inversion purely for volumetric composition, as is often done in the hydrocarbon industry, would require no global inversion parameters. In contrast, inversion for paleoclimate requires additional global parameters.

The non-linear equation F.19 will be solved iteratively by a Gauß-Newton scheme described in the following section. For this scheme the Jacobian matrix needs to be calculated, i. e. the derivative of the data with respect to the model. Because it is paramount to compute the Jacobian efficiently and accurately, a separate section (F.2.2) is devoted to this problem, where the technique of automatic differentiation is introduced.

F.2.1 Implementation of the minimising scheme

An iterative algorithm must be used to find the minimum of the non-linear equation F.19. Here, the standard technique of Gauß-Newton iteration (Tarantola und Valette, 1982; Tarantola, 2005) is used:

$$\mathbf{m}^{k+1} = \mathbf{m}^k + \gamma^k \Delta \mathbf{m}^k. \quad (\text{F.20})$$

Starting with an initial guess \mathbf{m}^0 , the model \mathbf{m}^{k+1} at iteration k is updated from the model at the previous iteration k using the vector $\Delta \mathbf{m}^k$, given by

$$\Delta \mathbf{m}^k = (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1} \left(\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} [\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m}^k)] - \mathbf{C}_p^{-1} [\mathbf{m}^k - \mathbf{m}_p] \right). \quad (\text{F.21})$$

Here, \mathbf{J} is the Jacobian matrix, containing the partial derivatives of the forward model output with respect to the model parameters. The normalised *RMS*-error e of the model is computed after each iteration k :

$$e = \left(\frac{1}{N} \sum_i \frac{(d_i - g_i(\mathbf{m}))^2}{\sigma_d^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{F.22})$$

If the model can be fitted consistently to the data, the *RMS* value of the final model should be close to one. The iteration stops if the change in *RMS*-error falls below a predefined threshold or if the change in *RMS*-error is small.

The multiplier γ^k is part of a simplified line search scheme following each iteration k to ensure a monotonically decreasing *RMS*-error e^k . If

$$e^k < e^{k-1} \quad \Rightarrow \quad \gamma^k = 1.$$

If this condition is not met, a new trial γ_t^k is computed:

$$e^k \geq e^{k-1} \quad \Rightarrow \quad \gamma_t^k = 0.5 \cdot \gamma^k.$$

The multiplier is bisected repeatedly until $e^k < e^{k-1}$ or until a predefined maximum number of iterations is reached. The reasoning in this scheme is that, in the case of non-linearity, the vector $\Delta \mathbf{m}^k$ might point into the right direction, but possibly with a wrong magnitude.

The parameter vector \mathbf{m} always contains the volume fractions V_i of the components i . These parameters are constrained by

$$V_i \in [0, 1], \quad (\text{F.23})$$

$$\sum_i V_i = 1. \quad (\text{F.24})$$

Two methods have been tested to deal with this issue. The first involves transforming the affected parameters. The summation constraint is turned into an implicit constraint by internally reducing the number of V_i 's per depth level by one. These are then mapped from the interval $(0, 1) \rightarrow (-\infty, \infty)$ using the logarithmic transform

$$V'_i = \log \frac{V_i}{1 - V_i}. \quad (\text{F.25})$$

However, this solution does not produce good results because 0 and 1 are not within the mapped interval. Components with zero volume, or for practical purposes with very low volumes, cannot be modelled accurately. The second alternative implements the summation constraint as an additional determining equation for the volume fractions, with a large multiplier to enforce the constraint. The bounds for every layer are checked after each iteration and all values outside the bounds are set to 0 or 1.

An a-posteriori covariance matrix can be computed by

$$\mathbf{C}_p^{apo} = (\mathbf{J}^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{C}_p^{-1})^{-1}, \quad (\text{F.26})$$

allowing computation of parameter uncertainties. This equation is strictly correct only for linear inverse problems but can also be used for nonlinear problems if it can be linearly approximated in the vicinity of the solution (Menke, 1989).

F.2.2 Computing the Jacobian

Equation F.21 requires computing the Jacobian matrix \mathbf{J} . This matrix essentially contains the derivatives of all data R_i^j with respect to all model parameters m_n^m . Here, subscripts i and j correspond to the data depths and the different logging tools. Similarly, n identifies the model layer depth and m the type of volume component.

The algorithm can use two alternative methods for computing \mathbf{J} , finite differences and automatic differentiation. For the finite differences, a one-sided representation is written as follows:

$$\frac{\partial R_i^j}{\partial m_n^m} = \frac{R_i^j(\mathbf{m}') - R_i^j(\mathbf{m})}{h}. \quad (\text{F.27})$$

\mathbf{m}' is the modified parameter vector where one entry is modified by the finite step h :

$$m_k^l = \begin{cases} m_k^l & \text{for } n \neq k \text{ or } m \neq l \\ m_k^l(1 + h) & \text{for } n = k, m = l \end{cases}. \quad (\text{F.28})$$

s_{-1}	$=$	x_1	\dot{s}_{-1}	$=$	\dot{x}_1
s_0	$=$	x_2	\dot{s}_0	$=$	\dot{x}_2
s_1	$=$	s_{-1}/s_0	\dot{s}_1	$=$	$1/s_0\dot{s}_{-1} - s_{-1}/s_0^2\dot{s}_0$
s_2	$=$	$\sin s_1$	\dot{s}_2	$=$	$\dot{s}_1 \cos s_1$
s_3	$=$	$s_1 + s_2$	\dot{s}_3	$=$	$\dot{s}_1 + \dot{s}_2$
s_4	$=$	s_3^2	\dot{s}_4	$=$	$2s_3\dot{s}_3$
y	$=$	s_4	\dot{y}	$=$	\dot{s}_4

Tabelle F.1: Evaluation trace for equation F.29 as it could be implemented in a computer program. Left: Evaluation trace for the original code. Right: Evaluation trace for the derived code.

In addition to the conventional method, automatic differentiation (AD) (Rall und Corliss, 1996; Griewank, 2000) was implemented in the inversion algorithm. The functionality of AD is implemented in a compiler that takes one or more functions as inputs and creates the according functions for the computation of the derivative. The compiler needs to be designed specifically for the programming language used. For MATLAB, this can be achieved using the software package ADiMat² (Bischof et al., 2002, 2003).

The basic idea of automatic differentiation is the application of differentiation rules to the statements of a computer program. Consider, for example, the computation of the following statement (after Griewank, 2000):

$$y = (\sin(x_1/x_2) + x_1/x_2)^2. \quad (\text{F.29})$$

In a computer program this computation is represented by a specific *evaluation trace*, shown in table F.1 (left). The computation is subdivided into smaller computations with inputs s_{-1} , s_0 and intermediate variables s_i , $i > 0$. In the forward mode of automatic differentiation, all statements in the evaluation trace are modified by adding the corresponding derived statements to compute the derivatives of the intermediate variables \dot{s}_i (table F.1, right). This modified program is called “augmented”. The augmented code is able to compute simultaneously a function value y and its derivative \dot{y} . A derivative with respect to a variable can then be computed at the cost of a small multiple of the original computing time.

Note that, to compute the derivative with respect to an input with index j , the following must hold for all inputs:

$$\dot{x}_i = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

This means that one augmented function call can be used to compute the derivative with respect to one parameter. This can be compared to the case of finite differences, where the cost of one central difference is two forward computations. Thus, both methods require similar amounts of computing time.

Figure F.3 shows the sorting of the entries in a Jacobian matrix as implemented in the proposed algorithm. Only the part relevant for the computation of volumes is shown, but for the mineral properties a similar structure would arise. Most of the entries of the matrix \mathbf{J} are zero because of the localised

²ADiMat Homepage: <http://www.sc.rwth-aachen.de/vehreschild/adimat/index.html>. Implementation of ADiMat in the program was done in cooperation with the Institute for High-Performance Computing at RWTH Aachen University.

$$\mathbf{m} = \left[(V_1^1 \ \dots \ V_1^M) \ (V_2^1 \ \dots \ V_2^M) \ \dots \ (V_L^1 \ \dots \ V_L^M) \right]^T$$

$$\mathbf{d} = \left[(R_1^1 \ \dots \ R_1^N) \ (R_2^1 \ \dots \ R_2^N) \ \dots \ (R_D^1 \ \dots \ R_D^N) \right]^T$$

$$\begin{array}{c}
\text{Layer depth} \quad \longrightarrow \\
\text{Component type} \quad \longrightarrow \\
\begin{array}{c}
\text{Data point depth} \downarrow \\
\text{Data type} \downarrow \\
\text{Data type} \downarrow \\
\text{Data point depth} \downarrow
\end{array}
\end{array}
\left(\begin{array}{ccc}
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^1}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_1^1}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^1}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_1^1}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^1}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_1^1}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) \\
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^N}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_1^N}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^N}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_1^N}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_1^N}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_1^N}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) \\
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^1}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_2^1}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^1}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_2^1}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^1}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_2^1}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) \\
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^N}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_2^N}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^N}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_2^N}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_2^N}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_2^N}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^1}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_D^1}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^1}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_D^1}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^1}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_D^1}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) \\
\left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^N}{\partial V_1^1} & \dots & \frac{\partial R_D^N}{\partial V_1^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^N}{\partial V_2^1} & \dots & \frac{\partial R_D^N}{\partial V_2^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right) & \dots & \dots & \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial R_D^N}{\partial V_L^1} & \dots & \frac{\partial R_D^N}{\partial V_L^M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \end{array} \right)
\end{array} \right) = \mathbf{J}$$

Abbildung F.3: Structure of the Jacobian matrix used for the inversion of volumetric composition from wireline data.

nature of the forward functions: The tool response at a depth level i will only depend on the parameters of layer n if the depths are close together. Thus, the sorting results in a banded structure of the matrix. Consider a typical problem: Three types of measurements with a vertical resolution of 0.1 m over an interval of 200 m are used, resulting in 6000 data values. The lithologic model consists of three components and is discretised at 0.5 m, yielding 1203 parameters. The full Jacobian matrix, containing all partial derivatives, is thus of size 6000×1203 . If the response of a particular tool is influenced by a rock volume within 3 m of its sensor midpoint, only 5 to 6 layers will contribute to the tool reading at any depth level. This equates to about $6000 \times 3 \times 5$ non-zero partial derivatives. The structure of the resulting sparse matrix (figure F.4) has 95760 non-zero elements, corresponding to a density of 0.013. The density of a sparse matrix is defined as the ratio of non-zero elements to the total number of elements.

Two problems arise from this configuration: (1) A large amount of memory for storage and computation is necessary; (2) Most of the CPU time is spent to compute the zero elements of \mathbf{J} . The first problem is solved by representing \mathbf{J} and all other matrices in equation F.21 as sparse matrices (Gilbert et al., 1992). Routines for handling sparse matrices are readily available within MATLABTM, reducing considerably the memory requirements. The second problem is solved by optimising the number of derivatives to be computed using the Curtis-Powell-Reid (CPR) approach (Curtis et al., 1974). In this

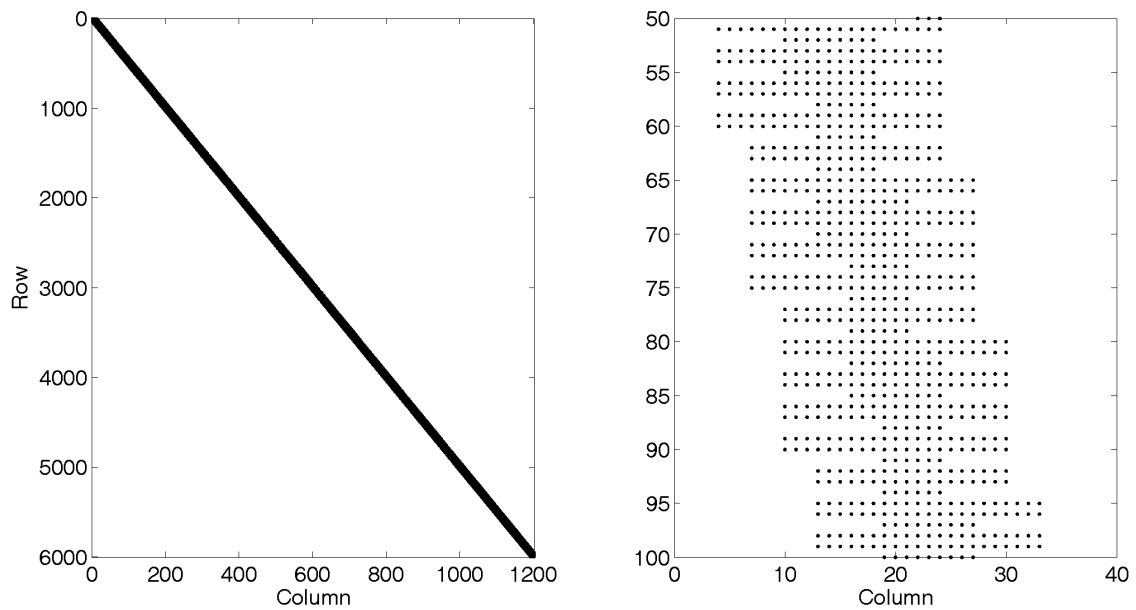


Abbildung F.4: Structure of the Jacobian with problem size 6000×1203 and an overall density of 0.013. The plots show the non-zero elements. Left: Overview of the structure. Right: Zoom of the matrix diagonal. The sorting corresponds to figure F.3. Each row contains $3N$ non-zero elements, corresponding to 3 components and N contributing layers. N varies for tools with different sensitive volumes.

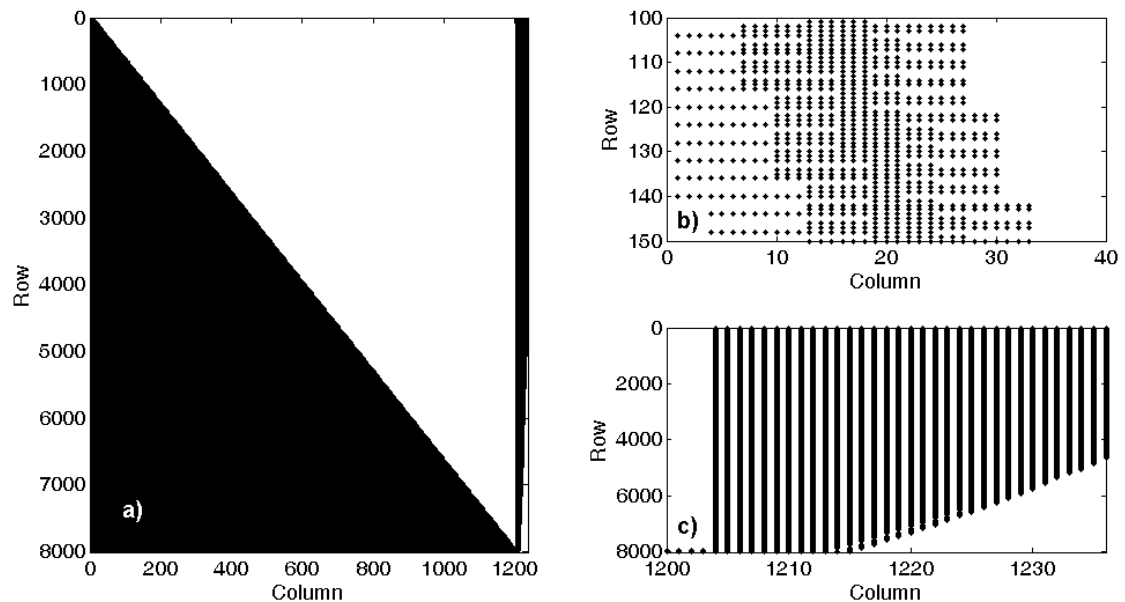


Abbildung F.5: Structure of the Jacobian with problem size 8004×1236 and an overall density of 0.14. The plots show the non-zero elements. The matrix contains derivatives with respect to temperature, heat flow, and GSTH. a) Overview. b) Main diagonal. Every fourth row holds the temperature derivatives. These are sensitive to all volumes above (i. e. left) of the reading. c) Zoom into the transient part. Time before present increases to the left, thus influencing the deeper parts of the temperature profile.

approach a *seed matrix* is used that maps the $n \times m$ Jacobian matrix into a compressed matrix of size $n \times p$, effectively reducing the number of columns and thus the number of function evaluations. This is demonstrated on an example matrix \mathbf{J} with the structure

$$\begin{array}{cc} \text{in} & 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \\ \\ \mathbf{J} = & \begin{bmatrix} 0 & 0 & a & 0 & b \\ c & d & 0 & 0 & 0 \\ e & 0 & 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{array} \quad \text{out} \end{array}$$

The non-zero elements of \mathbf{J} are ordered alphabetically to distinguish them from each other. Each column lists the output variables that depend on the respective input variable. For instance, input parameter 1 (column 1) influences output variables 2 and 3 (rows 2 and 3). Since output 2 also depends on input 2, the derivative with respect to input parameters 1 and 2 cannot be computed simultaneously. However, inputs 1 and 3 influence only mutually exclusive outputs and can be computed simultaneously. Further analysing the matrix yields the seed matrix \mathbf{S} and the compressed Jacobian \mathbf{J}_c

$$\mathbf{J}_c = \begin{bmatrix} b & a \\ d & d \\ e & f \\ 0 & g \\ 0 & h \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

related to the full matrix via the relationship

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}\mathbf{S}.$$

This compressed Jacobian can be evaluated using just two instead of five forward calculations. Every derivative can be uniquely identified within the compressed matrix and the full Jacobian \mathbf{J} can be obtained afterwards by re-indexing of the elements of \mathbf{J}_c . The main task involved in the compression is to find an appropriate seed matrix with as small as possible a number of columns. This is equivalent to finding the *chromatic number* in graph theory. Heuristic methods can be used that achieve an almost optimal compression (Griewank, 2000)³.

The compression ratio of the hand example given above is not very large. In reality compression can be much more efficient. For the first example given (figure F.4), compression reduces the problem from 1203 columns to only 21 columns. The density of matrix increases from 0.013 to 0.76 and the number of function evaluations reduces by a factor of 60.

The effectiveness of the scheme varies considerably with the structure of the matrix. In the second example (figure F.5), the 8004×1236 matrix is reduced to 1213 columns, resulting in a negligible performance increase. It is known (Griewank, 2000) that, depending on the matrix structure, other methods of compression may yield better results than CPR seeding. However, in this case, due to the dense lower triangle of the matrix these will also fail. One way to improve performance for this particular problem is to cast the heat conduction equation in terms of temperature gradient rather than

³Here, a modified version of the MATLABTM-function COLOR is used.

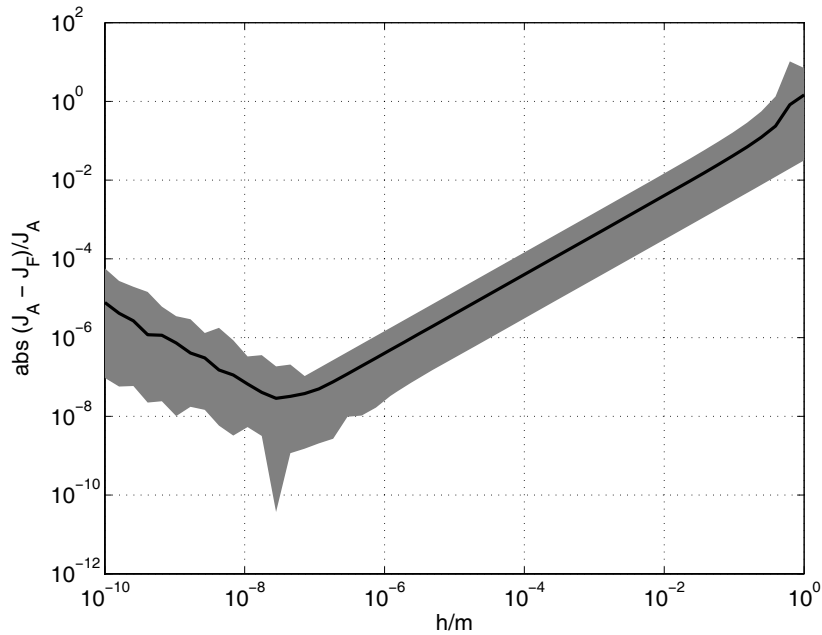


Abbildung F.6: Comparison of resulting Jacobian for finite differences and automatic differentiation. The relative differences between the AD and the FD result are plotted versus the relative step width $h/m_{i,j}$ of the finite difference algorithm. Black line is the mean difference, the shaded area denotes the minimum-maximum range.

temperature itself. If heat production is assumed to be known, for instance from equation F.14, the derivative of the temperature gradient at a specific depth depends only on the local value of λ and the global parameter q_0 (see equation F.16 for comparison). This would set most of the off-diagonal elements in figure F.5 to zero. In terms of performance it is therefore important to consider the most efficient way to represent a particular forward function.

F.3 Analysis of the algorithm

The proposed algorithm is subjected to a number of tests to secure its proper function. First, a comparison of the AD and FD method will be given, followed by an error analysis for a problem using temperature data. This will be augmented by a synthetic example. The code is then verified using two established programs, both providing a subset of the functionality presented here. Correct functioning of the conventional tool-functions is tested against the output of the commercial inversion program ELANPlusTM (Schlumberger, 1999). Inversion results of the transient temperature tool are tested using the algorithm “Joint”, already introduced in (Hartmann, 2007) (chapter 2).

F.3.1 Comparison of AD and FD

In general, both methods for differentiation lead to similar results. This is shown in figure F.6, where the difference between the two methods is plotted versus the relative step width of the finite difference algorithm (equation F.27). The sonic tool (section F.1.1), differentiated with respect to the volumetric composition has been used here as an example. As expected, the differences between both methods

become smaller until the step size is decreased down to about 10^{-7} . Below that value numerical limitations in computing the small finite differences become more and more important and the error increases again. Assuming the correctness of the AD method, the minimum value of that curve would be the optimum step size to use for the finite difference method. In the proposed algorithm the user can use the FD method with a predefined value, with the default being set to 10^{-7} . It is one advantage of the AD method, that this choice does not have to be made, as the results are exact to machine precision.

F.3.2 A-posteriori variance using temperature data

Using a particular model, an a-priori model covariance matrix, and a data covariance matrix, the a-posteriori covariance matrix can be computed. It needs to be stressed that uncertainties are only applicable to the model studied here. Because any permutation of data types and volume types is possible, the uncertainties for any particular model are hard to predict.

The model used in this section consists of quartz, illite, calcite, and water with known petrophysical properties. Logging data used for computing the volume fractions comprises γ -ray, bulk density, and sonic slowness. In addition, one of the following logs is used: Temperature, photoelectric effect, or neutron porosity. This way, the resolving power of temperature relative to other log types can be compared. Layer thickness Δz_l and data sampling Δz_d are equidistant, with the former being a multiple of the latter. This ‘‘oversampling quotient’’ $q_o = \frac{\Delta z_l}{\Delta z_d}$ can be used for noise suppression. A higher value will decrease both, a-posteriori variance and resolution of the inverted volume fractions.

The results (figure F.7) indicate that usage of a temperature log for computing volumes is of similar value to using a neutron porosity log. Even better results can be achieved using data of a photoelectric logging tool because of the vastly different PEF responses of calcite and quartz. It is also apparent that the variance of the result is unacceptably high for quartz and calcite if temperature or neutron porosity are considered as fourth data source. This can be partly remedied by increasing the layer spacing. However, best results are achieved with a data selection that is most appropriate to discriminate the expected volume fractions.

With the same model, reproducibility was tested by repeated inversion using a randomised initial guess (50 times) and increasing regularisation weights. Table F.2 shows that the uncertainty is small compared to other error sources and that regularisation has no significant influence on the results.

ϵ	ΔDT	ΔGR	$\Delta RHOB$
10^0	0.29	0.20	0.016
10^1	0.02	0.08	0.006
10^2	0.01	0.03	0.002

Table F.2: Reproducibility of the algorithm. Numbers represent the standard deviation of all solutions in percent.

F.3.3 Synthetic example

As an example for a synthetic data set, a model is considered that consists of sand (quartz), shale (illite), and carbonate (calcite). The model consists mainly of shale, with sandy and carbonaceous layers. Data types are sonic log, bulk density, and γ -ray. The forward model (shown in figure F.8, track a) is used to compute a synthetic data set for a 100 m long section, using theoretical log responses

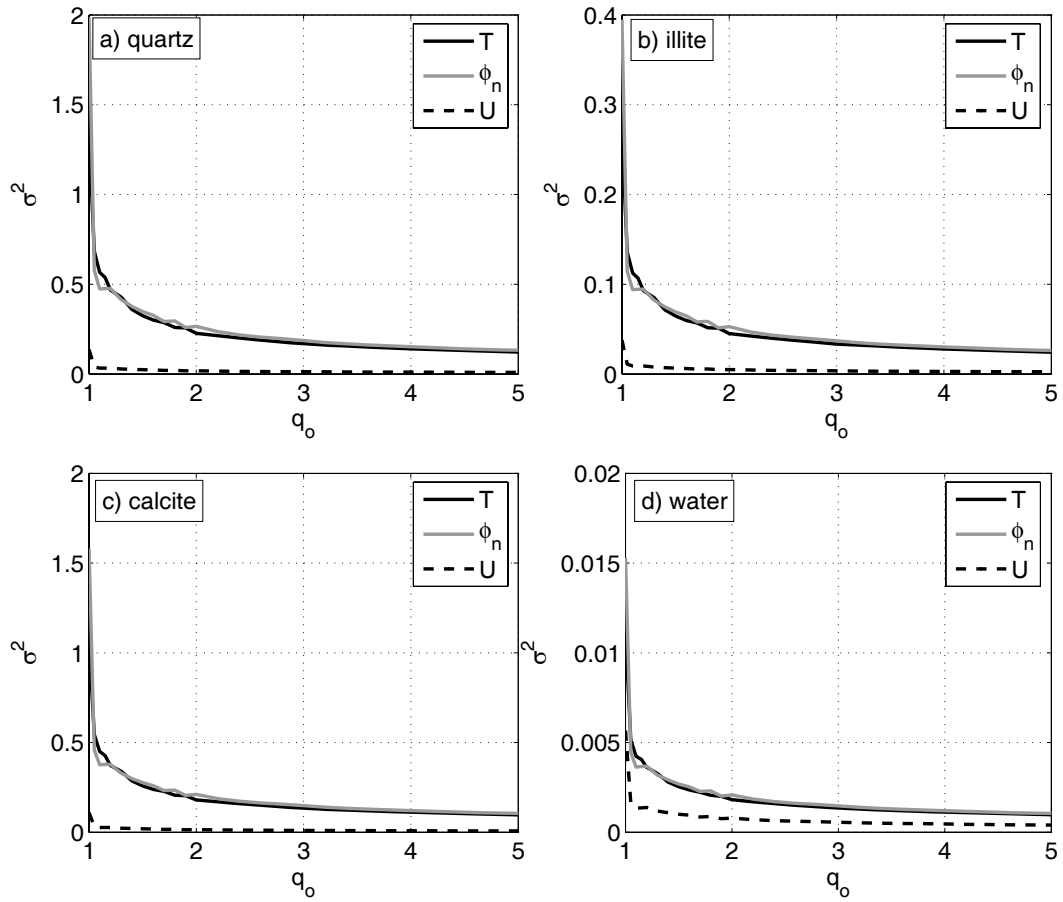


Abbildung F.7: A-posteriori variance for model volume fractions using different log types and varying q_0 .

Logcurve	Error
GR (API)	7.5 - 60
Δt ($\mu\text{s m}^{-1}$)	5 - 40
ρ_b (kg m^{-3})	25 - 200

Tabelle F.3: Range of normal noise added to the data of figure F.8. The value is linearly increasing with depth between the two extreme values.

of table 2.1. Normal noise is then added to the data, with increasing noise levels from top to bottom. While the top part represents high quality data, the bottom part stands for poor quality data. Noise parameters are summarised in table F.3. The ratio of layer thickness to data spacing equals two.

The noisy data is then fed into the inversion scheme to compute a volumetric composition. The comparison between model and inverted dataset is shown in figure F.8. The general features of the model are reproduced for all noise levels, the number of outliers in the inverted model increases strongly with the noise magnitude. Data are smoothed out by the lower sampling of the layers and thus reproduces rather the noiseless original data than the noisy data input to the inversion. The computed standard deviations for this particular example are below 5 volume percent. As discussed in the previous section, a reduction of the model error can be achieved by reducing the resolution, i.e. increasing the layer

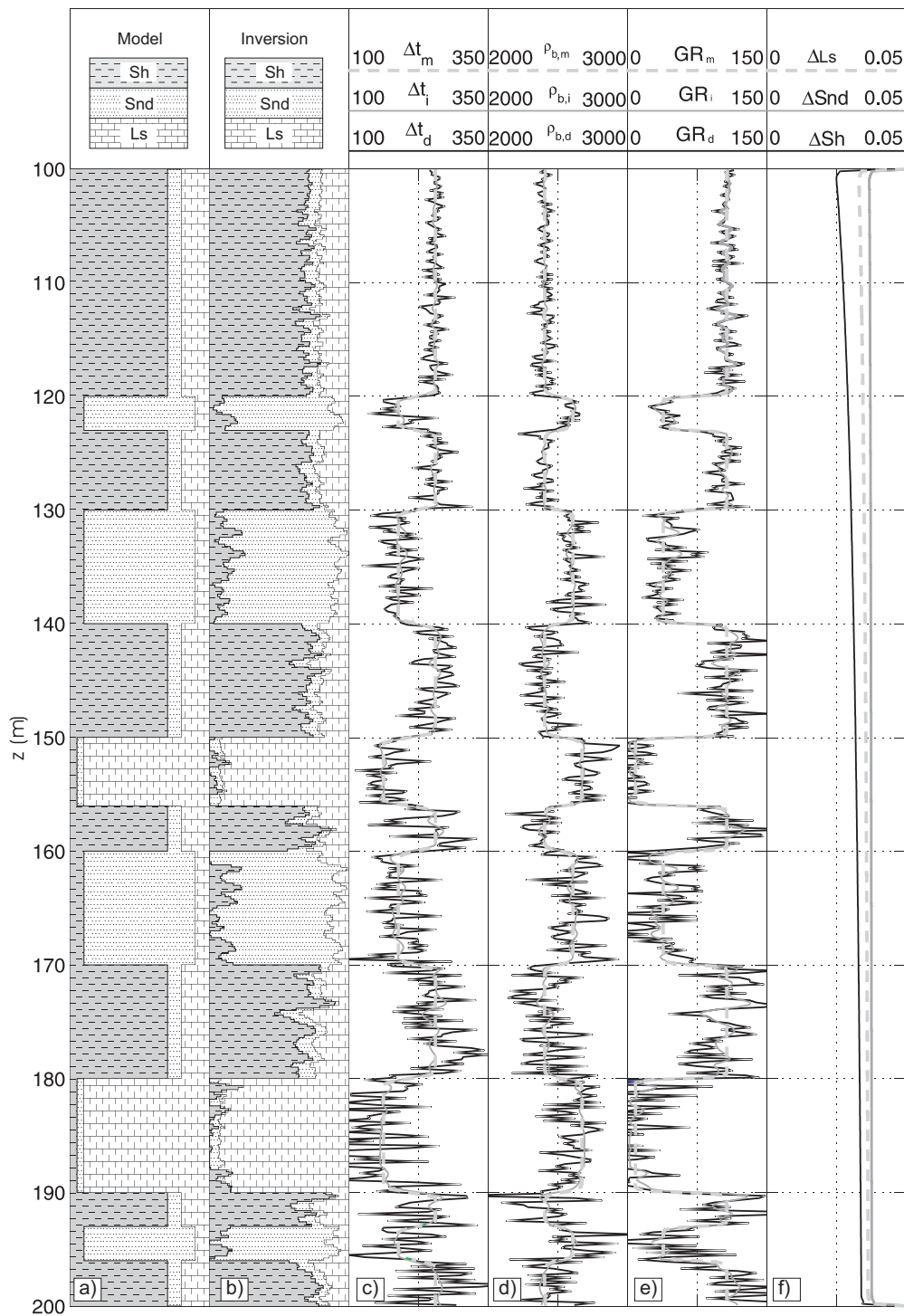


Abbildung F.8: Synthetic lithological model and inversion results. a) Input model. Snd – Sand; Sh – Shale; Ls – Limestone. b) Inverted model. c) – e) light grey, dashed line – Data computed from synthetic model; black line – Synthetic data with noise added; dark grey line – Data computed from inversion result. GR – gamma ray; Δt – acoustic slowness; T – temperature. f) Computed standard deviation for the volumetric components of the inverted model.

thickness or smoothing of layers. The increasing data noise is mainly reflected in the model error for the shale fraction. The shale fraction is almost entirely determined by the single GR -equation, leading to a direct correlation between model and data error. This is somewhat subdued for the other volume fractions.

F.3.4 Comparison with “Joint”

To verify the transient temperature equations implemented in LogInv, it is compared to the results of the “Joint” algorithm. A 500 m deep synthetic temperature log, sampled at 5 m intervals, is used. Steady state surface heat flow is 60 W m^{-2} ; thermal conductivity is 2.5 W (m K)^{-1} and heat capacity is $2.3 \text{ MJ m}^{-3} \text{ K}^{-1}$. The transient signal is created from a step increase in ground surface temperature 20 years before present. The inversion for composition is switched off for this experiment.

The two approaches differ with respect to regularisation. For LogInv, a Bayesian approach using data and a-priori model covariance is used. This is somewhat different from “Joint”, where an ad-hoc regularisation parameter ϵ in a dampened least-squares procedure is implemented. To compare both algorithms, a special form of the covariance matrices must be found that is equivalent to the dampened least-squares solution. This is possible if the data and parameter covariance matrices can be written as $\mathbf{C}_d = \sigma_d^2 \mathbf{I}$ and $\mathbf{C}_p = \sigma_m^2 \mathbf{I}$. The functional F.19 can then be written as (Aster et al., 2004)

$$\phi(\mathbf{m}) = \frac{1}{\sigma_d^2} \|\mathbf{G}(\mathbf{m}) - \mathbf{d}\| + \frac{1}{\sigma_m^2} \|\mathbf{m} - \mathbf{m}_p\|. \quad (\text{F.30})$$

$\phi(\mathbf{m})$ has obviously the same minimal \mathbf{m} as the functional $\phi'(\mathbf{m})$, given by

$$\phi'(\mathbf{m}) = \|\mathbf{G}(\mathbf{m}) - \mathbf{d}\| + \frac{\sigma_d^2}{\sigma_m^2} \|\mathbf{m} - \mathbf{m}_p\|. \quad (\text{F.31})$$

By identifying this equation with equation 2.4 in Hartmann (2007) and setting $\mathbf{m}_p = 0$ we obtain the relation between the damping parameter and the variances

$$\epsilon^2 = \frac{\sigma_d^2}{\sigma_m^2}. \quad (\text{F.32})$$

Thus, assuming uncorrelated and constant data and model variance the value of ϵ can be calculated. In the example a variance $\sigma_d = 0.001 \text{ K}^2$ is assumed for the temperature data. Two different values are used for the a-priori variance of the GSTH: $\sigma_m = 0.5 \text{ K}^2$ and $\sigma_m = 2 \text{ K}^2$, corresponding to $\epsilon = 0.2$ and $\epsilon = 0.05$, respectively. Both algorithms arrive at essentially the same solution (figure F.9). Slight differences in the data misfit are apparent for the larger value of ϵ . The reason is that in LogInv the Bayes criterion is selectively applied to the amplitude of the ground surface temperature changes. Steady state heat flow and ground surface temperature are not regularised, in contrast to “Joint”, where the dampening is applied to all parameters. This leads to small differences in the solution when a stronger regularisation is applied.

In this particular case the results of the two algorithms are similar. In general this will not be the case. The most striking differences can be seen, when the underlying assumptions of “Joint” are violated, namely the homogeneous half-space assumption. Figure F.10 demonstrates this for the case of layer of $\lambda = 2.5 \text{ W (m K)}^{-1}$ between 200 m and 400 m depth, embedded in an otherwise better conducting medium of $\lambda = 3.3 \text{ W (m K)}^{-1}$. The other parameters are unchanged from the previous experiment.

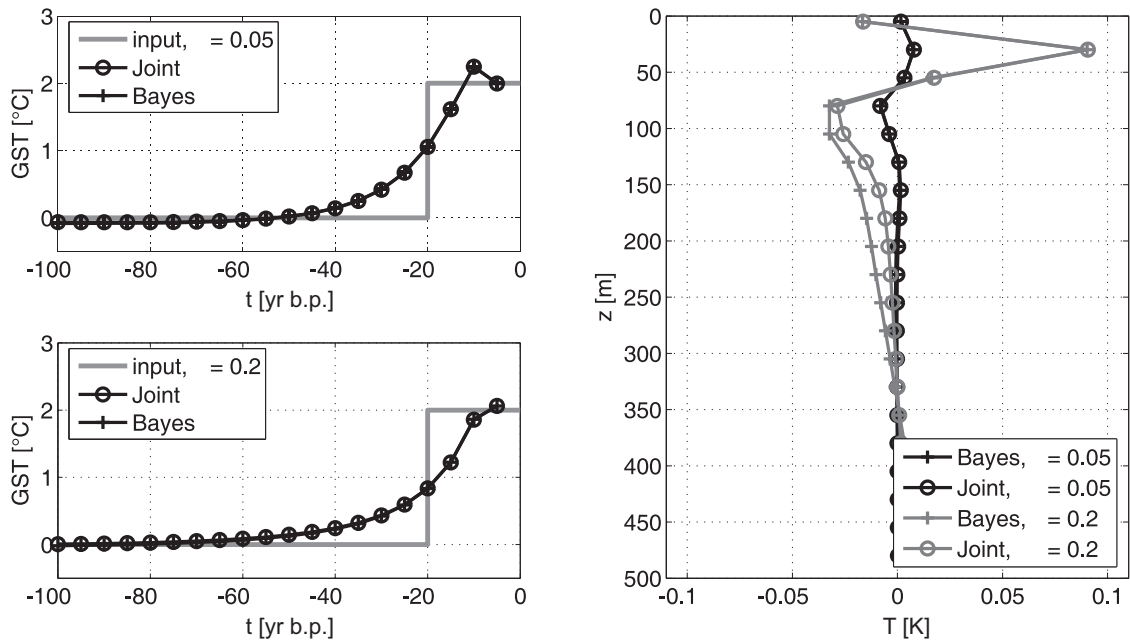


Abbildung F.9: Comparison of Bayesian inversion of LogInv to damped least-squares solution of “Joint” for varying values of ϵ . a) Input GSTH and inverted GSTH for $\epsilon = 0.05$. b) Input GSTH and inverted GSTH for $\epsilon = 0.2$. c) Data misfit for LogInv and “Joint”, for both values of ϵ .

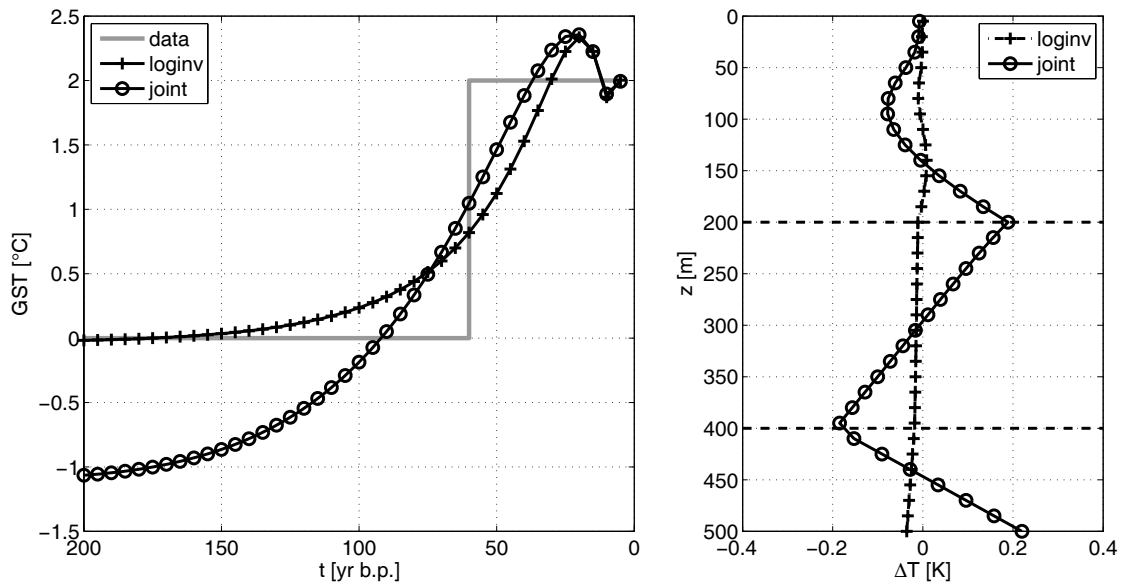


Abbildung F.10: Comparison of “Joint” and LogInv when a layered medium is used to compute the steady-state temperature. Left: Input GSTH and inverted GSTH. Right: Data misfit of the two algorithms.

It can be seen that the misfit of “Joint” degrades since the anomalous conductivity section cannot be fitted. The inverted GSTH does not reproduce the temperature at early times correctly and the increase comes too late.

Num	Name	Number of data points	Top [m]	Base [m]
1	Upper Freshwater Molasse	34	0	450
2	Upper Marine Molasse	25	450	700
3	Lower Freshwater Molasse	40	700	1103
4	Lower Freshwater Molasse (salty)	43	1103	1525
5	Upper Jurassic	41	1525	1943
6	Middle Jurassic	1	1943	2100 TD

Table F.4: Zoning of geological units used in the inversion. TD is total depth of borehole. Number of data points is the number of measured data per geological zone.

F.3.5 Comparison with “ELANPlus™”

In the special case without any regularisation and no usage of temperature data the algorithm should produce results similar to those commercially available. The program ELANPlus™ (Schlumberger, 1999) is used for this purpose⁴. The test dataset is from a borehole in the Molasse Basin in Southern Germany and consists of a 20 m long section coming from the Baustein beds. This is a tertiary sandstone layer with interspersed bands of marlstones. Available wireline data comprises slowness, bulk density, and spectral γ -ray. From the spectral γ -ray the summed gamma ray and the potassium concentration are used. Data are assumed to be uncorrelated with variance values of $5 (\mu\text{s m}^{-1})^2$ for sonic, $0.001 (\text{kg m}^{-3})^2$ for density, $5 (\text{API})^2$ for gamma, and $0.01 (\%)^2$ for potassium. The lithologic model is built of quartz, calcite, illite, and water. The mineral log responses are taken from table 2.1. For water a density of 1000 kg m^{-3} , a slowness of $620 \mu\text{s m}^{-1}$, and zero values for γ -ray and potassium concentration were used.

Both algorithms compare well and output generally the same volumetrics for this test case (figure F.11). The discrepancies between the synthetic data of the two algorithms and the measured data is due to data errors that cannot be modelled. A particular inconsistency is seen at a depth of 16 m, where no model can be found that is able to satisfy the data. The way this and other inconsistencies are handled by the two algorithms is different because of the way data noise is taken into account. ELANPlus™ uses empirical weighting factors that are used to assign relative importance in the inversion. These would have to be adjusted to give the best possible agreement between the two algorithms. The occurrence of the inconsistencies might be due to measurement noise or failures of the wireline tool, but also due to unaccounted volume fractions.

F.4 Case studies

F.4.1 Inversion of borehole data from the Molasse Basin

The algorithm is tested on a dataset from the Western part of the German Molasse Basin in Southern Germany. This hydrocarbon exploration well has a total depth of 2000 m and was drilled through a Tertiary Flysch sequence of about 1500 m, followed by about 450 m of Upper Jurassic limestones and 50 m of Middle Jurassic shales (figure F.12). In addition to the conventional wireline logging

⁴See also section 3.4.2 in Hartmann (2007) for an application of this program.

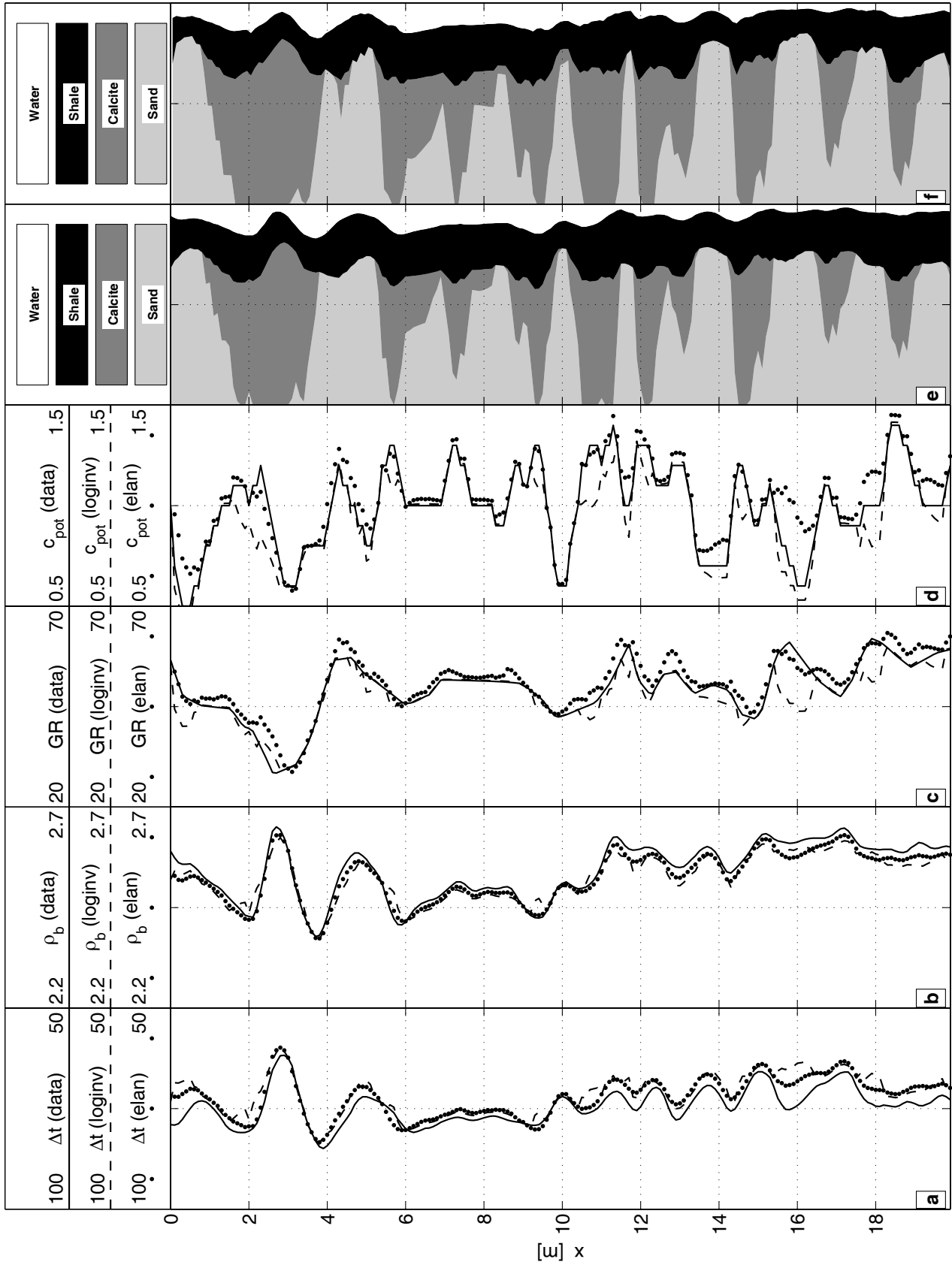


Abbildung F.11: Comparison of LogInv with ELANPlus™. a) – d) Solid line – data; Dotted line – ELANPlus™ solution; Dashed line – LogInv solution. e) Volumetric composition, ELANPlus™. f) Volumetric composition, LogInv.

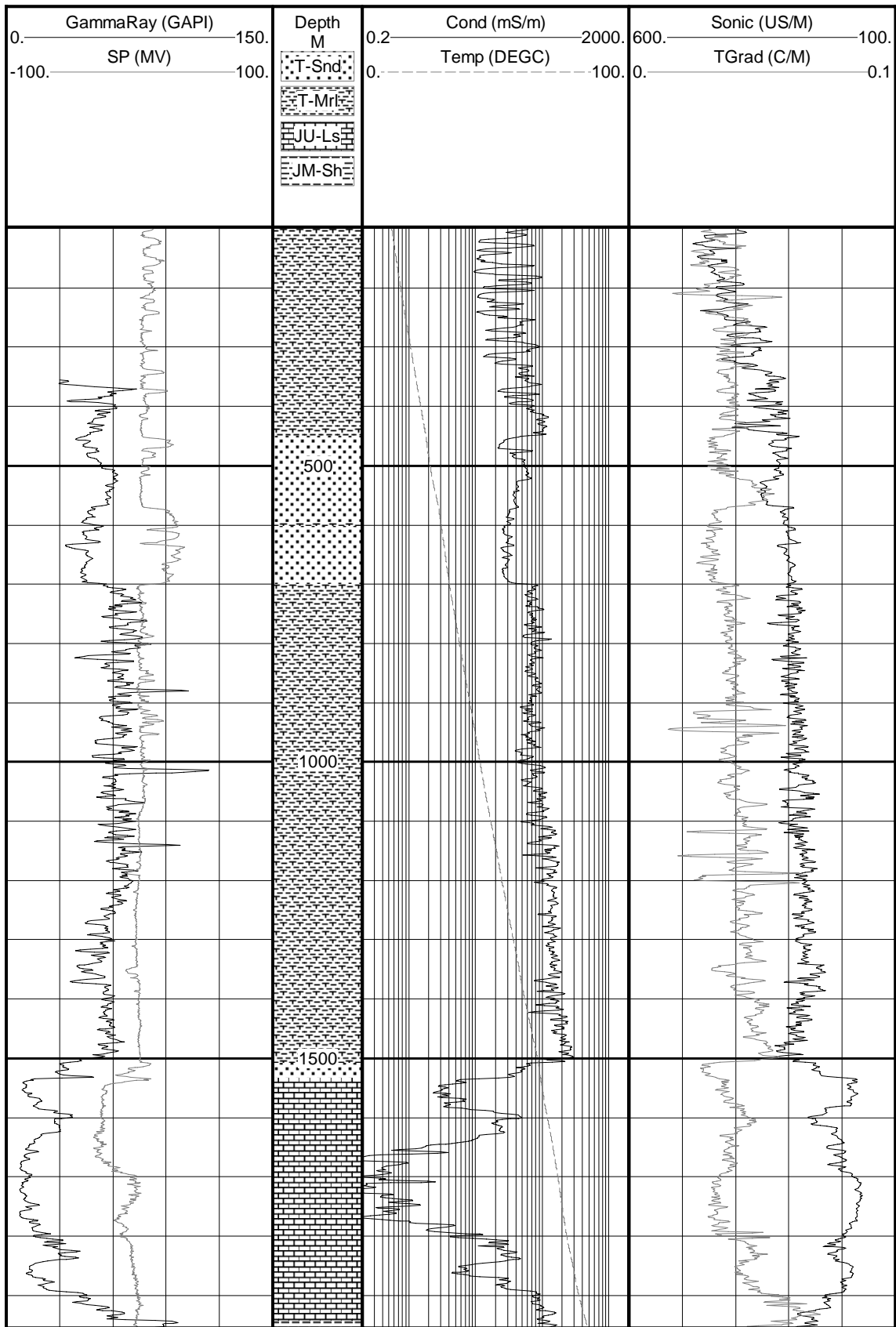


Abbildung F.12: Composite log, 100 m to 1960 m, 1:10 000. Abbreviations: T-Snd – Tertiary Sandstone; T-Mrl – Tertiary Marl; JU-Ls – Upper Jurassic Limestone; JM-Sh – Middle Jurassic Shale; SP – Spontaneous potential; Temp – Temperature; Cond – conductivity; Sonic – acoustic slowness; TGrad – temperature gradient.

(sonic, γ -ray, spontaneous potential, and Dual-Laterolog resistivity), a high resolution temperature log was recorded by the Leibniz Institute for Applied Geoscience, Hannover. The log was recorded several years after shut in of the well. The usable portion starts below the water level from 100 m in the Tertiary down to 1956 m in the Middle Jurassic. This range determines the range of the inversion procedure. The used model has the following features:

- Six zones are defined to capture the varying petrophysical properties (table F.4). Mostly, the zones coincide with geological boundaries, an exception is the subdivision of the Lower Freshwater Molasse, for reasons discussed later in the text.
- The shallow Tertiary sequence is unconsolidated, thus reducing data quality and partly invalidating the empirical relationships. This affects primarily the sonic log. Usually a constant empirical correction is applied to the slowness derived by Wyllie's law (e.g. Schlumberger, 1989). Here, the correction 3.22 in Hartmann (2007) is used, with the overburden pressure estimated from slowness values (Bellotti et al., 1979).
- Thermal conductivity of shale is not well constrained. As a rule of thumb, a value of 2 W (m K)^{-1} is often assigned to shales. This approximation does not hold for many cases. For instance, a study of clay thermal conductivities in Denmark (Waples und Tirsgaard, 2002) found a systematic increase in anisotropy with depth. This was interpreted as a progressing orientation of clay minerals with increasing overburden pressure. Whereas shallow samples had values of thermal conductivity and anisotropy of about 2.5 W (m K)^{-1} and 1, respectively, samples at depth had vertical thermal conductivities of about 1 W (m K)^{-1} with anisotropy factors of around 2. The Opalinus clay, a clay sequence in the Middle Jurassic of Southern Germany and Switzerland was characterised by Mügler et al. (2006) using numerical modelling. They found thermal conductivity values of 1.1 W (m K)^{-1} perpendicular and 1.9 W (m K)^{-1} parallel to the bedding, consistent with the results of Waples und Tirsgaard (2002). In the case studied here, layering is nearly horizontal, making the vertical component of λ most important. For the Tertiary shales, one has to expect much higher values for λ than for the Mesozoic ones. For this reason, shale thermal conductivity is an inverse parameter, with a-priori values based on those quoted above.
- Similar uncertainties are associated with conductivity and sonic velocity of shale. These are also used as inverse parameters with an a-priori variance reflecting the knowledge about these parameters.
- For resistivity interpretation, only *LLD* and *LLS* are available. Most of the profile shows negligible separation between the two curves, indicating very little invasion. Thus *LLD* is assumed to be equal to the true formation resistivity.
- Formation water resistivity R_w is taken to be similar to freshwater down to 1103 m, below that depth brine is assumed (see table F.4). This is in accordance with findings of a well known freshwater/brine boundary within the LFM (Lemcke und Tunn, 1956). This transition can also be observed in the studied well. At approximately 1100 m depth the SP curve excursions from the base line change direction, indicating that $R_w < R_m$ below that depth (figure F.12). Thus, water resistivity is used as an inverse parameter. Water saturation is assumed to be equal to one everywhere because the hydrocarbon bearing zone is only about 20 m thick.
- Data are reduced to 10 m sampling rate to reduce noise and improve computational efficiency.

Name	Model 1 Null GTH						Model 2 KTB GTH						Model 3 GTH INV					
normalised RMS error	1.21						1.16						1.08					
heat flux density	$(116 \pm 5.7) \text{ mW m}^{-2}$						$(120 \pm 5.7) \text{ mW m}^{-2}$						$(115 \pm 5.8) \text{ mW m}^{-2}$					
Ground surface temperature	$(7.1 \pm 1.0) \text{ }^\circ\text{C}$						$(7.1 \pm 1.1) \text{ }^\circ\text{C}$						$(6.2 \pm 1.1) \text{ }^\circ\text{C}$					
Zones	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6
Zoned inversion parameters																		
λ_{shale} [W (m K) ⁻¹] std	2.38	2.24	2.32	2.09	0.33	1.45	2.33	2.22	2.24	2.08	0.39	1.41	2.35	2.23	2.29	2.09	0.34	1.43
$v_{p, \text{shale}}$ [m s ⁻¹] std	0.09	0.1	0.08	0.08	0.04	0.47	0.09	0.1	0.08	0.08	0.05	0.47	0.1	0.1	0.08	0.08	0.05	0.47
σ_{shale} [mS m ⁻¹] std	2061	2697	2669	3081	2853	3361	2149	2798	2772	3102	2852	3365	2098	2743	2710	3095	2855	3363
σ_{water} [mS m ⁻¹] std	69	155	71	93	149	228	73	160	76	95	149	228	74	159	75	95	149	228
	75	97	135	228	189	174	70	93	134	225	190	174	71	95	134	226	190	174
	1.1	1.1	1.0	1.0	1.1	1.3	1.1	1.1	1.0	1.0	1.1	1.3	1.07	1.05	1.03	1	1.06	1.26
	15	71	84	2854	329	2003	14	70	85	2874	345	2003	62	71	84	2910	314	2003
	1.5	1.6	1.6	1.3	1.4	1.6	1.5	1.6	1.6	1.3	1.4	1.6	1.58	1.58	1.58	1.27	1.4	1.58
Average volumes per zone																		
Shale [%] std	43.5	34.3	52.3	46.5	8.1	25.0	45.6	35.8	52.7	46.5	8.1	25.0	44.0	35.0	52.5	46.5	8.1	25.0
Calcite [%] std	8.7	8.4	6.1	7.7	9.6	25.7	9.3	8.0	6.3	7.7	9.6	25.7	10.1	8.2	6.2	7.7	9.6	25.7
Quartz [%] std	30.3	14.1	37.7	40.9	85.7	25.0	35.2	20.4	37.1	40.8	85.6	25.0	34.6	17.0	37.5	40.8	85.6	25.0
Water [%] std	15.7	10.2	6.0	6.3	12.2	25.7	14.2	10.1	5.7	6.1	12.1	25.7	13.1	10.1	5.8	6.3	12.2	25.7
	20.3	39.7	8.3	6.8	2.6	25.0	12.8	31.2	7.4	6.7	2.6	25.0	14.9	35.9	7.9	6.8	2.6	25.0
	15.4	17.1	3.5	4.1	4.5	25.7	13.7	16.0	2.9	4.0	4.4	25.7	13.0	16.8	3.1	4.1	4.5	25.7
	5.9	11.9	1.8	5.8	3.6	25.0	6.3	12.6	2.8	6.0	3.6	25.0	6.4	12.2	2.1	5.9	3.6	25.0
	5.7	2.0	2.1	3.1	2.8	25.7	5.6	2.0	2.3	3.0	2.8	25.7	6.5	2.0	2.2	3.0	2.8	25.7

Table F.5: Summary of inversion results for the three models discussed in the text. Zone numbering corresponds to the definition given in table F.4. std denotes a-posteriori standard deviation of the model parameters.

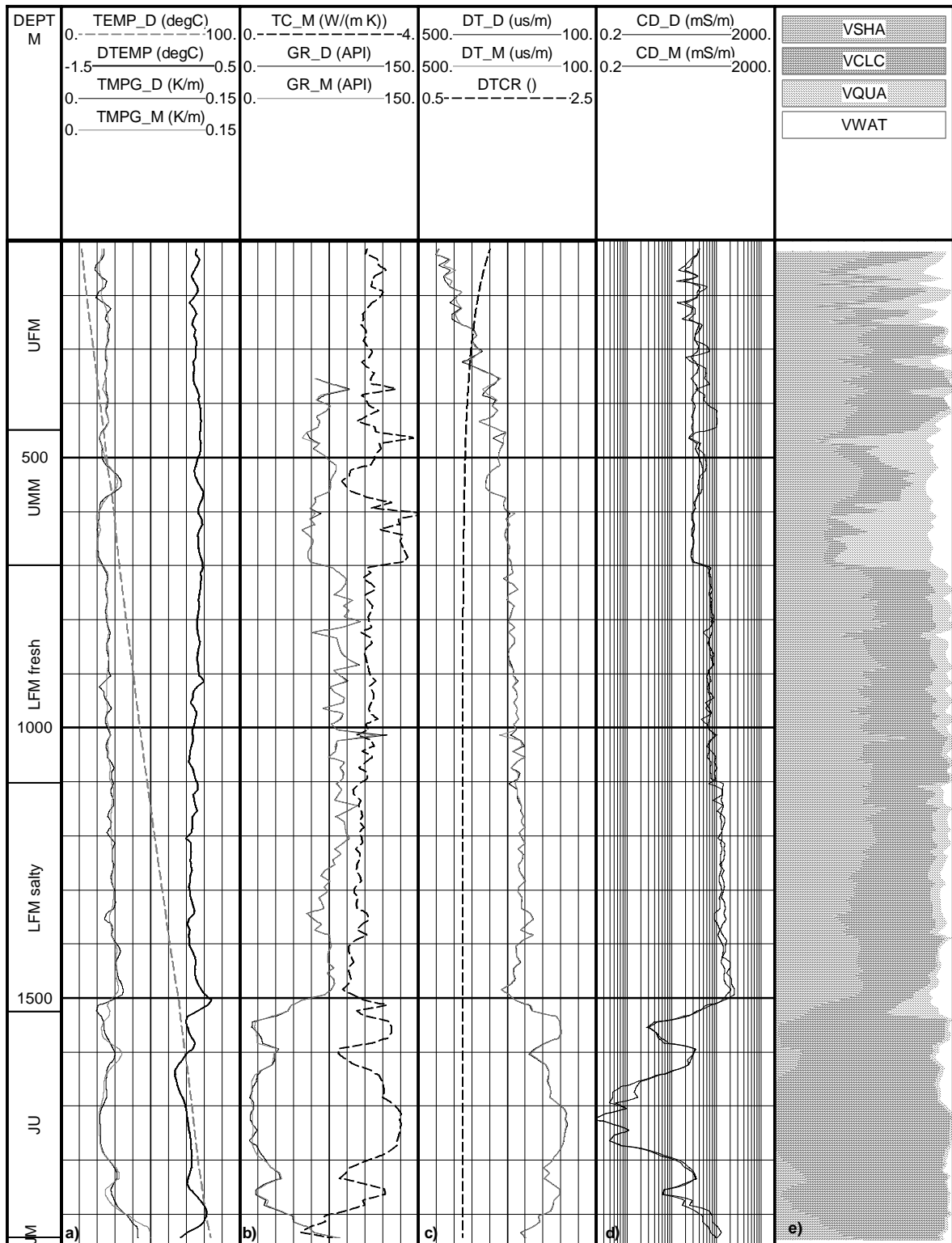


Abbildung F.13: Inversion results. Index D and M denote data and model, respectively. a) TEMP – Temperature, DTEMP – Temperature difference between model and data, TMPG – Temperature gradient. b) TC – Thermal conductivity, GR – γ -ray. c) DT – Slowness, DTCR – Overburden pressure correction factor for DT. d) CD – Conductivity. e) Compositional log from the inversion.

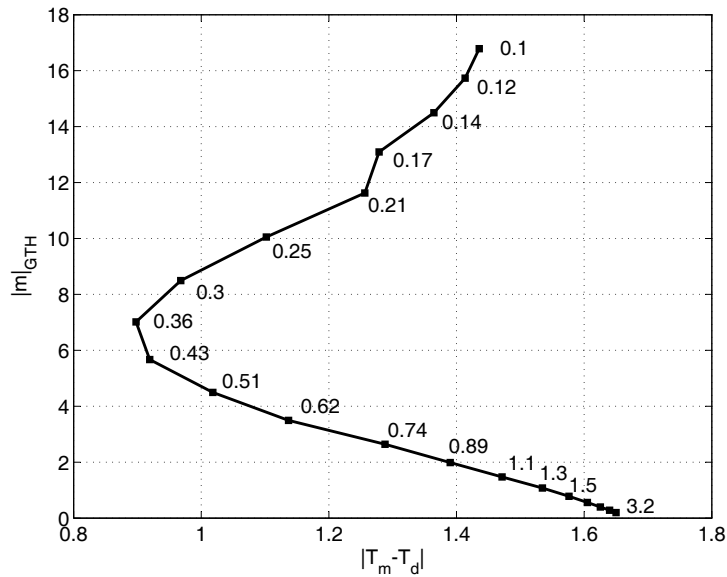


Abbildung F.14: L-Curve for the inverse problem.

In total three different runs are discussed, with a summary of a-posteriori parameters and variances given in table F.5. The petrophysical a-priori parameters are the same for all models, only prior values and variances for the GSTH are varied. The first run fixes the GSTH to remain constant, i.e. no change relative to today. The second run fixes the GSTH to the curve derived from the analysis of the KTB temperature log (see section F.4). These inversions serve to study the influence of transient temperature on the petrophysical inversion. For a third model, the GSTH is inverted as well using a null-prior and a standard deviation of 10 K.

An inspection of the a-posteriori petrophysical properties for all models in table F.5 shows that the influence of the transient part of the temperature on the petrophysics is negligible. Compositional differences between the two models are generally below 10%. This indicates that consideration of the transient part of the temperature profile is unnecessary if one is interested purely in the inversion of petrophysical properties. However, this also depends on the depth range and on the strength of the paleoclimatic signal. Figure F.13 compares data and model prediction for model 3. In general, good agreement can be observed, with some minor exceptions in zones 3 to 6. Zone 1 has a degraded fit and also shows unrealistic variations in the lithology column. This is a result of the lack of a Gamma-Ray log for the shallow part and some large fluctuations of the resistivity-curve. Hence, data quality is poor and results are partly inconsistent and unreliable for the shallow depths. The temperature misfit is generally below 0.1 K. This is better than what could be achieved with an assumption of a homogeneous subsurface. See for instance Hartmann et al. (2001) and Clauser et al. (2002) for such an analysis in the Molasse Basin. It is also apparent that even small-scale variations in the logs are mostly reflected in the temperature gradient data, thus providing further confidence in the use of this approach.

For model 3, the selection of an appropriate regularisation parameter for the GSTH is necessary. An L-curve is computed as described in section 2 in Hartmann (2007), resulting in a very unexpected shape. At low regularisation parameters the data misfit again starts to increase. The root cause of this

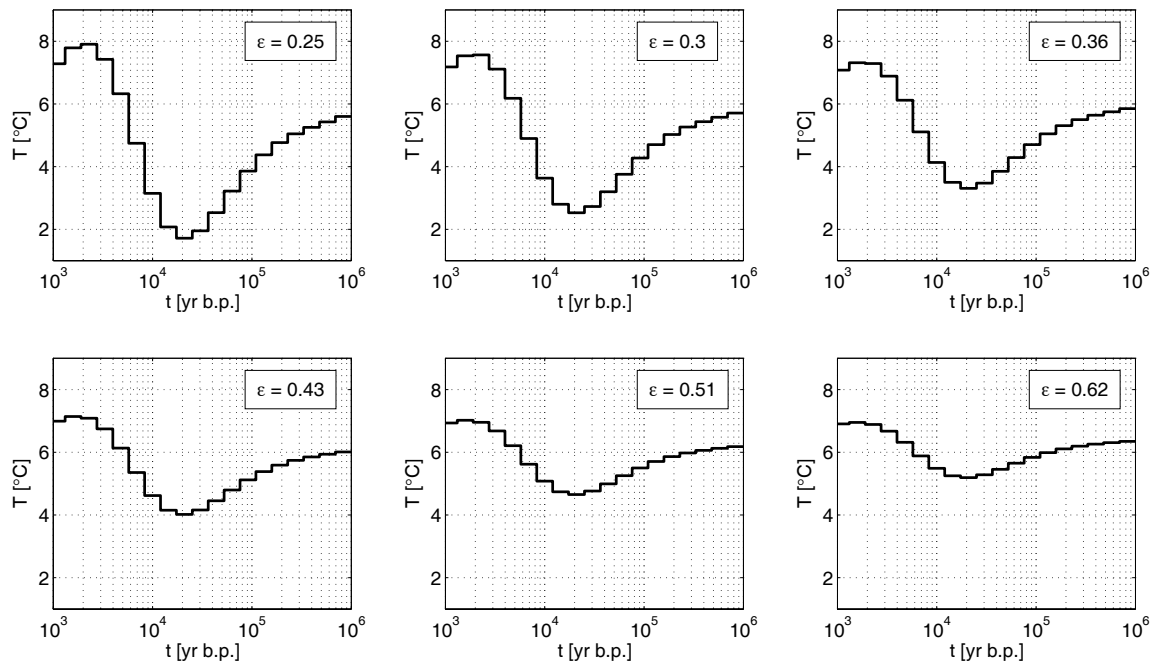


Abbildung F.15: Panel of GSTH realisations for varying ϵ . Optimum $\epsilon \approx 0.4$.

behaviour is not entirely known, but it can be assumed that this is due to stability problems of the nonlinear inversion when ϵ is small. This behaviour was also observed by other researchers working on nonlinear inversion of GSTH from temperature data (V. Rath, pers. comm.). Nevertheless, the lower part of the L-curve appears to be usable and suggests a value of about 0.4 to be optimal.

Ground surface temperature histories with varying ϵ are shown in figure F.15 and can be compared to those from the KTB (figure 2.17 in Hartmann (2007)). The main thing to note is that the GSTH during the last ice-age for the Molasse log depends strongly on the regularisation, in contrast to the GSTH derived from the KTB temperature log. It needs to be remembered that the Molasse log has a depth less than 2000 m, thus the discussion of the insufficient log length in section 2.4.1 in Hartmann (2007) applies. The modelled paleoclimatic change has to be viewed in this light. A temperature decrease of about 3 °C for the last glacial can be inferred from the data. This can be considered a minimum estimate of the actual temperature variation. Consistent with that consideration is also the observation that the maximum GST following the glacial is reached only at 2000 years before present. This shifting is also observed on the synthetic datasets discussed in chapter 2 in Hartmann (2007).

In the Molasse region the task of paleoclimatic reconstruction is further complicated by the fact that part of the area was glaciated in the last ice-age. It is known that the temperature at the base of glaciers often is around 0 °C, thus the subsurface will be insulated from the air temperature and not record the full variation. It is highly desirable to have a temperature log in the Molasse area that runs deep enough to get a robust estimate of the surface temperature during the last glaciation. However, up to now no such data exists.

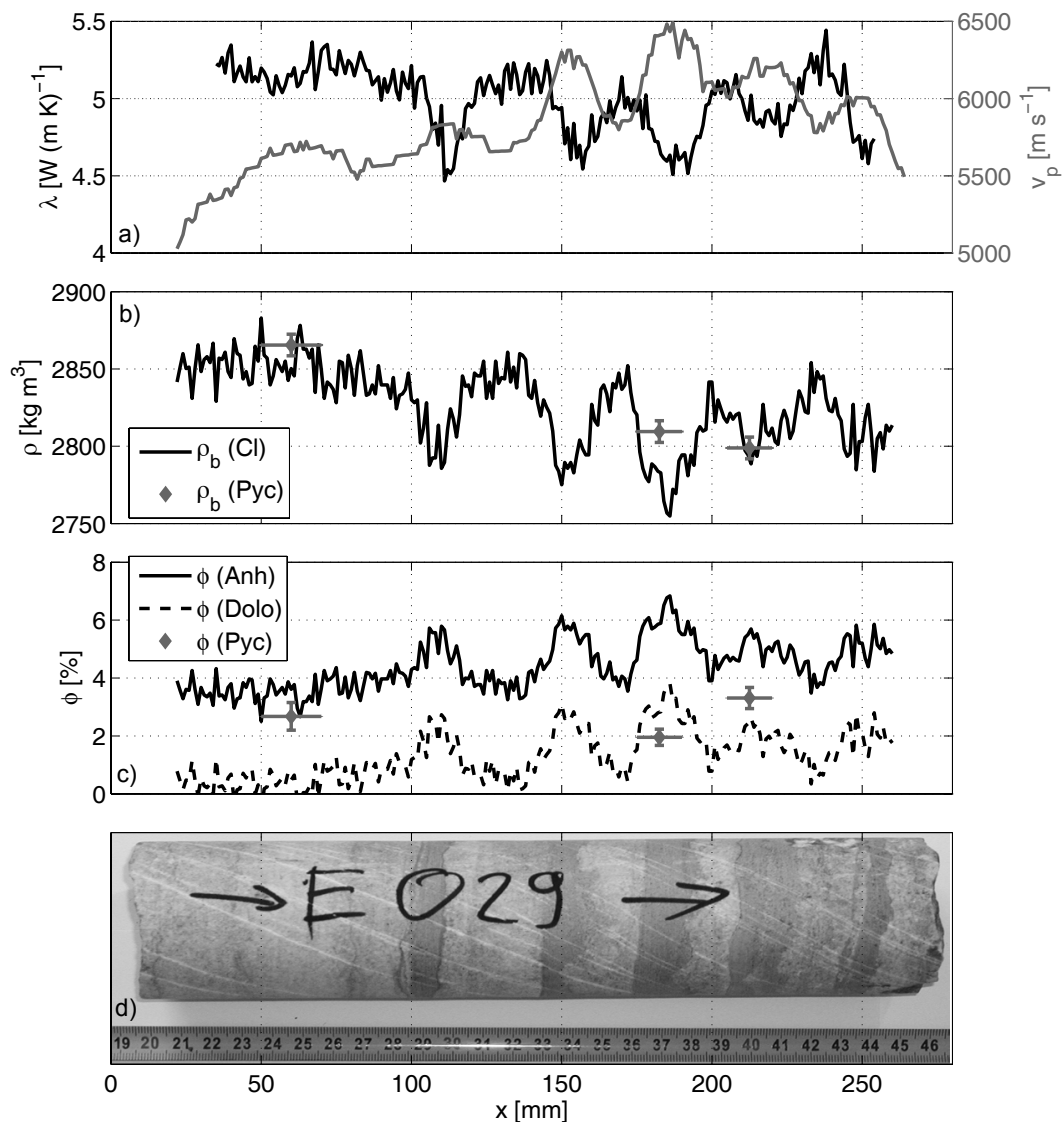


Abbildung F.16: Measurements taken on a layered anhydrite/dolomite sample. a) Thermal conductivity (black) and acoustic velocity (grey); b) bulk density measured by γ absorption (black) and with a powder pycnometer (grey); c) γ porosity assuming anhydrite (solid black) and dolomite (dashed black) as the matrix compared to pycnometer derived porosity; d) Core photograph showing the layering. Bright bands consist mainly of anhydrite, dark bands are composed mainly of dolomite. Arrows denote downward direction in the borehole.

F.4.2 Characterising laboratory samples by high resolution core scanning

The following will illustrate the use of the algorithm by considering the analysis of laboratory measurements taken on a core sample that shows clear visible variations of physical properties. The core serves as a good example to illustrate the application of the algorithm because control over the quality of measurements is very good and detailed analyses are easy to perform and can be compared to the actual geology of the rock.

The core (figure F.16, d) was drilled in a borehole in the South German Molasse Basin and originates

	X	Quartz	Anhydrite	Dolomite	Kaolinite	Ankerite	$\rho_{m,c}$	ρ_m	ϕ
Plug 1	60	0.52	89.84	2.44	5.62	1.58	2942	2944	2.7
Plug 2	175							2866	2.0
Plug 3	215	3.09	43.92	48.83	4.16		2896	2895	3.3

Table F.6: Results of the mineralogical analysis and pycnometer measurements on samples taken from the core. Position X of the plugs along the axis in figure F.16 is given in mm. Composition is reported in weight percent. $\rho_{m,c}$ is the matrix density (kg m^{-3}), computed from the mineral composition and density values in table 2.1. Pycnometer measurements: Matrix density ρ_m (kg m^{-3}) and porosity ϕ (%).

from the middle Triassic period just above the boundary to the lower Triassic, in this borehole encountered at about 1300 m depth. The lowermost part of the middle Triassic in Southern Germany is characterised by massive Anhydrite or Gypsum with a thicknesses of up to 5 m. Thin layers of shaly dolomites are spread throughout this sequence. The structure corresponds to a successive evaporation sequence with temporary decrease of the salt concentration with concurrent enhancement of wave action (Geyer und Gwinner, 1991). This structure is reflected in the sample with its dark bands of dolomite embedded in the brighter anhydrite.

To analyse the sample, thermal conductivity, acoustic velocity, and bulk density were measured on the dry sample along the core axis (figure F.16, a-b). In addition, matrix density and bulk density were determined on three plugs using a pycnometer (figure F.16, b,c). The porosity is computed along the core assuming pure dolomite ($\rho_e = 2870 \text{ kg m}^{-3}$) and pure anhydrite ($\rho_e = 2960 \text{ kg m}^{-3}$) and compared to the pycnometer derived porosity (figure F.16, c). The discrepancy implies that a mixture of the minerals is present in the sample. This is confirmed by a mineralogical analysis of two plugs (table F.6). The bright bands are composed mainly of anhydrite whereas the dark bands contain a mixture of both dolomite and anhydrite.

The mineralogical analysis yields valuable information about the occurrence of the minerals. Using the knowledge of the possible minerals, a modified M-N plot (Burke et al., 1969) can be constructed. The original method uses sonic, neutron porosity, and density logs to compute two parameters M and N that are independent of porosity and can be used to identify the minerals present. Because a neutron porosity measurement is unavailable for the sample, a parameter O is defined instead that uses the logarithm of the thermal conductivity in the same manner. In metric units ($\mu\text{s m}^{-1}$, kg m^{-3} , W (m K)^{-1}) the equations are given by

$$M = 3.28 \cdot \frac{\Delta t_f - \Delta t}{\rho_b - \rho_{b,f}}, \quad (\text{F.33})$$

$$N = \frac{\phi_{n,f} - \phi_n}{\rho_b - \rho_{b,f}}, \quad (\text{F.34})$$

$$O = \frac{\log_{10} \lambda - \log_{10} \lambda_f}{\rho_b - \rho_{b,f}}. \quad (\text{F.35})$$

The parameter O is plotted versus M for the sample in figure F.17 together with the expected (M, O)-pairs for the minerals given in table F.6. Data for the mineral ankerite is sparse. It is a mineral chemically and structurally similar to dolomite. Magnesium is replaced largely by iron causing a higher density of 3000 kg m^{-3} to 3100 kg m^{-3} . In the following analysis ankerite will be added to the volume fraction of dolomite because of its small volume fraction and similarity to dolomite. The physical properties of the other minerals are taken from table 2.1. The value of thermal conductivity of Kaolinite is assumed to be 2.0 W (m K)^{-1} , an assumption commonly made for clay minerals (Brigaud und

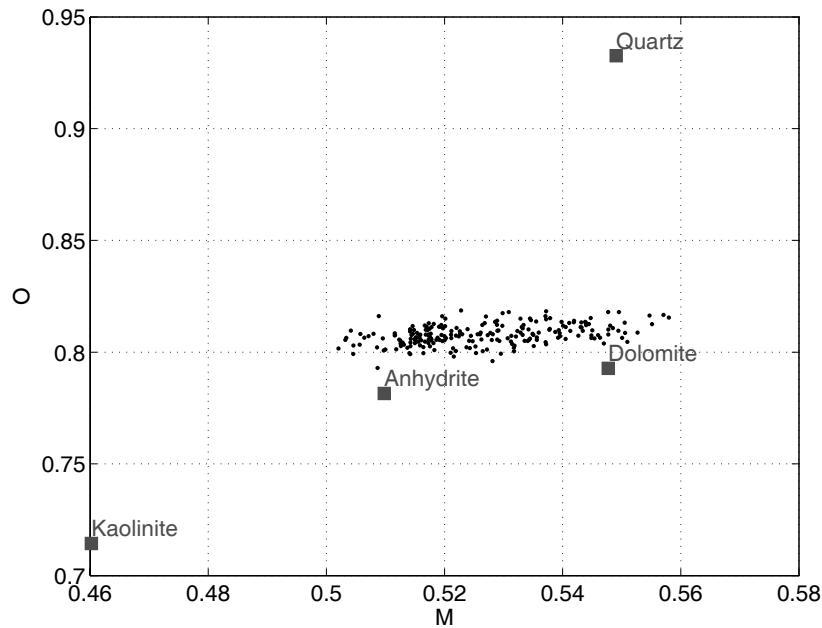


Abbildung F.17: M-O plot of the analysed sample. Black dots denote data computed from the measurements on the sample. Gray squares mark expected points for pure minerals. All mineral properties to compute these are taken from table 2.1 except for Kaolinite, where a thermal conductivity of 2 W (m K)^{-1} was assumed.

Vasseur, 1989). However, one has to keep in mind the considerable uncertainty of this value⁵. The plot shows that the measurements are consistent in a qualitative manner with a mixture composed primarily of anhydrite and dolomite. However, the M-O plot suggests large amounts of dolomite for some measurements, whereas the mineralogical results imply that the grey bands contain only about 50 % dolomite. As well, for the position of the first plug (50 mm to 70 mm) in figure F.16 the mean thermal conductivity is about 5.2 W (m K)^{-1} . Given a matrix value of about 5.1 W (m K)^{-1} estimated from the mineralogical results and a porosity of 3 % one would expect a much lower thermal conductivity of about 4.4 W (m K)^{-1} . There are two possible reasons for these discrepancies: (1) Equations F.33 to F.35 imply particular mixing laws for sonic velocity and thermal conductivity, the arithmetic travel time average and the geometric mean. These might not hold true for low porosity chemical sediments. (2) The uncertainty of mineral thermal conductivities is quite large.

Both effects act to increase the uncertainty about the mineral points in figure F.17. To address these two issues, the inverse method presented here can be used. (1) Uncertainty about the mixing law can be incorporated by using a general mixing law for thermal conductivity that accounts for structural effects. The model of Korvin (1978), already presented in section 3.2 in Hartmann (2007), is used. The model can be applied to both, thermal conductivity and p-wave velocity. Special cases can be compared to empirical relationships. (2) Uncertainty about mineral properties is incorporated by including them as inversion parameters and assigning them a-priori variances. It is assumed in the model that the mineral properties are constant along the core.

The inverse model was set up as follows. It consists of five volume fractions with a-priori values and respective standard deviations derived from the chemical analysis: Quartz (0.02 ± 0.01), anhydrite

⁵See also the discussion on shales in the last section.

	Data	Model 1	Model 2	Model 3	Model 4	Model 5	Model 6
v_p model		Wyllie	joint t th order mean	single t th order mean	Wyllie	joint t th order mean	single t th order mean
λ model		geometric		single t th order mean	geometric		single t th order mean
normalised RMS error		2.29	1.96	1.95	1.62	0.85	0.86
t_λ			0.99 ± 0.38	0.97 ± 0.38		0.90 ± 0.37	0.62 ± 0.36
t_{vp}				0.80 ± 0.36			0.89 ± 0.38
Plug 1 volumes [%]	$V_{\text{anhydrite}}$ V_{dolomite} $V_{\text{kaolinite}}$ ϕ	89.8 4.0 5.6 2.7	86.3 7.1 4.6 0.3	88.5 4.5 2.8 2.4	88.5 4.7 2.8 2.4	85.9 6.7 5.4 0.3	87.2 3.8 4.8 2.6
Plug 3 volumes [%]	$V_{\text{anhydrite}}$ V_{dolomite} $V_{\text{kaolinite}}$ ϕ	43.9 48.8 4.2 3.3	43.8 48.8 5.6 0.1	44.1 48.7 2.8 2.7	44.0 48.8 2.8 2.7	42.9 48.3 7.0 0.1	43.0 48.2 4.4 2.8
Mean volumes [%]	$V_{\text{anhydrite}}$ V_{dolomite} $V_{\text{kaolinite}}$ ϕ	39.0 55.6 3.1 0.5	64.3 29.0 2.1 2.8	62.8 30.7 2.1 2.7	16.9 76.0 4.7 0.7	58.0 33.0 4.7 2.7	58.5 32.4 4.7 2.7
Mean sample values	λ v_p ρ_b	4.99 5864 2826	4.84 5869 2875	4.77 5875 2835	5.04 5802 2846	4.98 5853 2827	4.99 5843 2827
Estimated mineral values	$\lambda_{\text{anhydrite}}$ $\lambda_{\text{dolomite}}$ $\lambda_{\text{kaolinite}}$				6.20 ± 0.22 5.97 ± 0.20 0.29 ± 0.20	6.03 ± 0.17 5.31 ± 0.14 1.21 ± 0.28	6.12 ± 0.20 5.38 ± 0.20 1.23 ± 0.28

Table F.7: Summary of the results and parameters for the inversion runs for the sample. The data column presents measured values. These are compared to inverted parameters for models 1 to 6. See text for a more detailed discussion of the results.

(0.5 ± 1.0), dolomite (0.5 ± 1.0), kaolinite (0.05 ± 0.01), and air filling the pore space (0.03 ± 0.02). As stated before, the mineral ankerite is added to the dolomite fraction. Values for mineral physical properties are taken from table 2.1. The data are assumed to be uncorrelated with standard deviations of the measurements of $0.05 \text{ W (m K)}^{-1}$ for thermal conductivity, 50 m s^{-1} for p-wave velocity, and 5 kg m^{-3} for density.

A set of different models have been run in order to test several hypotheses. Results are summarised in table F.7 and figure F.18. The simplest model (number 1, figure F.18 top) employs the geometric mixing law for thermal conductivity and the time-average formula for p-wave velocity. It can be considered a benchmark as it is closest to the direct transformation shown in the M-O plot and results that could be achieved using a more conventional inversion approach. The result confirms the impression from the M-O plot that the model is inconsistent with the data. No possible volumetric composition within that model is able to fit the measurements. The misfit is concentrated on density and thermal conductivity measurements, particularly in the high anhydrite regions.

To refine the model, the t^{th} -order mean model is introduced for λ with $t = (0 \pm 0.1)$ and for V_p with $t = (-1 \pm 0.1)$ as a-priori values. This corresponds to the geometric mixing law (0) and the travel time average (-1)⁶. To test the hypothesis that a single parameter t can be used to explain the data, two models are designed, one with a single t and one with two independent t -values for λ and V_p .

The best fit values for t are in the range of 0.8 to 1.0 if the mineral properties are fixed at their original values. This is a strong indicator for the invalidity of the standard mixing laws when such well lithified chemical sediments are considered. The models show slightly different values for t if separate values are used for V_p and λ but they are almost equal when considering the error bounds. Compare this also to the aspect ratios derived in chapter 3 in Hartmann (2007) for sandstones with values of $\alpha \approx 0.01$, corresponding to values of $t \approx -0.5$ (see figure 3.3 in Hartmann (2007)).

The misfit is improved for both models (no. 2 and 3), however the fit is still inconsistent with the data, showing that uncertainties about the mixing law cannot be the sole cause of the inconsistency. Therefore, the same set of models is modified to include mineral thermal conductivities in the inversion, yielding models 4 to 6. Thermal conductivity values of the minerals are assigned a-priori standard deviations of 0.1 W (m K)^{-1} . To reduce the ambiguity of the inversion only anhydrite, dolomite, and kaolinite are included in the inversion.

The inversion results using these models are shown in table F.7. Use of the geometric and Wyllie average (model 4) leads to an improved but still high *RMS*-value of 1.62. In addition, the thermal conductivity value for kaolinite is unrealistically low. The situation is improved when the general mixing law is used. Figure F.18 shows the results for model 6. The *RMS*-error is below one, indicating a slight overfitting of the data. The values for t are more strongly separated than for model 3 with $t = 0.6$ for thermal conductivity and $t = 0.9$ for acoustic velocity. Note that the value of 0.6 is close to 0.5 which corresponds to the square root average (equation 3.11 in Hartmann (2007)). It can also be noted that an inverse correlation exists between the value of t and the matrix thermal conductivities for models 4 to 6⁷. The mineral thermal conductivities are rather high for anhydrite and dolomite, but still plausible, given the range of values cited in table 2.1. The clay mineral value is quite low. It is most strongly affected by the choice of model, and due to the generally low content of kaolinite the least trustworthy. The question if the same mixing law is applicable for both thermal conductivity and sonic velocity cannot be answered conclusively. Both, thermal conductivity and sonic velocity, apparently

⁶Wyllie's travel time average is the arithmetic mean for slowness ($t = 1$), in terms of velocity it is the harmonic mean ($t = -1$).

⁷Recall that the geometric mixing law (model 4) corresponds to $t = 0$.

react in the same manner, i. e. an increase in t for the change from granular, high-porosity to chemical, low-porosity sediments. The increase for the sonic velocity (-1 to 0.9) seems to be stronger than for thermal conductivity (0 to 0.6). However, because t decreases when mineral properties are inverted for, it cannot be ruled out that the high t -value for V_p in model 6 stems from underestimated V_p -values of the minerals rather than the structure of the sample. The number of independent measurements was unfortunately not high enough to include the acoustic properties in the inversion as well.

F.5 Conclusions

This chapter describes the development and application of a modular inversion algorithm for well log and petrophysical analysis. A general, common interface is defined, suitable for wireline logging and petrophysical problems. The program allows modification of the forward model without changing the inverse code. The petrophysical models and the temperature model are tested using benchmark models. There is good agreement confirming correctness of the used models and inversion procedure. The remaining differences are explainable in terms of slightly different parametrisation of the problem.

In contrast to conventional inversion techniques for wireline data, that are mostly based on a level by level basis, the proposed algorithm has the possibility to deal with more complex models including shoulder effects and global inversion parameters. In the Gauß-Newton iteration scheme this leads to a large Jacobian matrix, resulting in issues of memory consumption and CPU performance. The implementation of automatic differentiation (AD) and matrix compression are two options that have been evaluated to solve these problems. Although AD is promising, especially when derivatives of strongly nonlinear functions are needed, it is not suitable as a speed increase over finite differences. Automated matrix compression by colouring yields mixed results. It is very effective when models are considered that have only local non-zero derivatives. However, when temperature is considered, the Jacobian matrix becomes densely populated as temperature depends not only on the current depth level, but every level above the current depth as well.

The original reasoning for development, that is including the temperature in the petrophysical inversion and using the petrophysical data in the transient temperature inversion was addressed in a case study and by theoretical error analysis. It appears that the value of the temperature in petrophysical inversion is comparable to conventional logging data. The distinguishing feature of temperature data is its non-locality. The assumption, that this property might improve the results where local errors in the petrophysical data are present, could not be verified.

The example inversion for GSTH using the Molasse dataset is consistent with what would be expected for this region and a well with that restricted depth. The results leave considerable ambiguity as to the real paleoclimatic change in surface temperature. The inversion runs with fixed GSTH for the case study suggest that a transient temperature model has only minor influence on the estimated petrophysical properties. If one is interested purely in a petrophysical inversion, it seems unnecessary to include a transient model. However, this is not only caused by the fact that the transient signal is inherently weak. A larger depth coverage increases the influence of the transient signal on the petrophysical part. Another aspect is the model complexity. Part of the transient signal can be accommodated by minor variations of petrophysical properties. In particular this is true for a zoned model as considered here. Here, the influential property is the shale thermal conductivity. It is the property that varies most between inversion runs. For the different models it is adjusted by the inversion procedure to fit the temperature signal without modifying the volumetric composition significantly. This is of course not desirable, but it is a natural consequence of the poor prior knowledge about this parameter and cannot

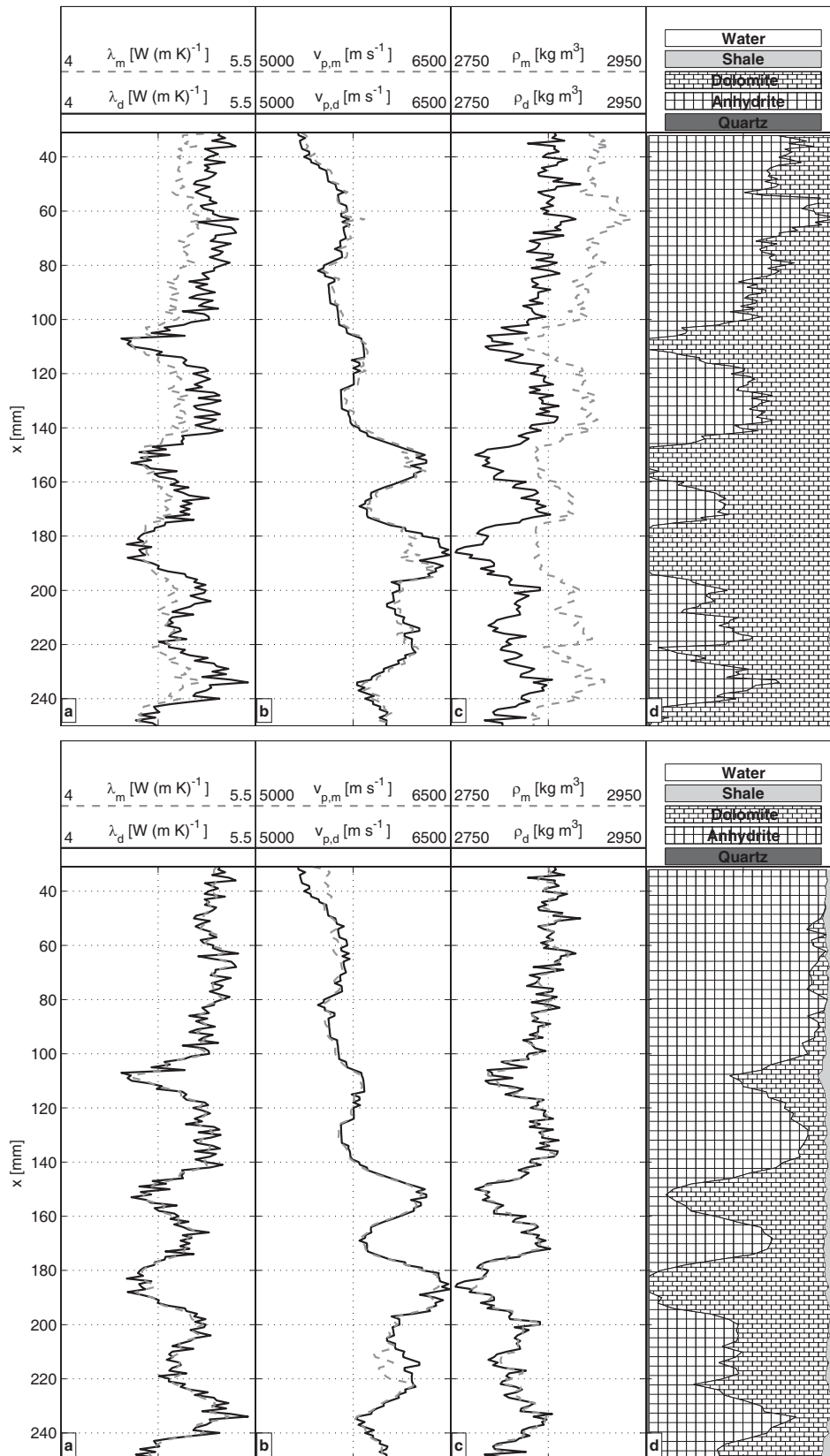


Abbildung F.18: Results of the inversion of high resolution measurements for the anhydrite/dolomite sample. Top: Results for model 1. Bottom: Results for model 6. a) – c) Measured data and computed values for thermal conductivity, acoustic velocity, and bulk density; d) Mineral composition of the sample.

be avoided. In conjunction with the regularisation of the GSTH amplitudes, this will always lead to dampened version.

This seemingly negative quality turns out to be quite useful in order to investigate the actual information content of a set of data. It would of course be very desirable to get an accurate estimate of the GSTH, but the truth is that this information cannot be safely inferred from the data set. A more simple model that doesn't use all information sources available might give a false impression of the actual data quality and the inference possible. This is also demonstrated in the second, purely petrophysical, example. The different models with varying parameters and complexity constrain the range of plausible models and also point to weaknesses in the data set. In general, these are the mineral properties of the petrophysical model. Such values are tabulated but often need to be adjusted in the analysis process to get a result consistent with the input data.

Appendix: Mathematical derivations

Generalised t -th order mean

The generalised t -th order mean λ_t

$$\lambda_t(\phi, \lambda_p, \lambda_m, t) = [\phi\lambda_p^t + (1 - \phi)\lambda_m^t]^{1/t} \quad (\text{F.36})$$

reduces to the harmonic mean, geometric mean, and arithmetic mean for values of $t = -1, 0, 1$, respectively. For $t = -1$ and 1 this can be seen easily by inserting the values into equation F.36. To obtain the geometric mixing law, however, the limit for $t \rightarrow 0$ has to be computed,

$$\lambda_{t=0} = \lim_{t \rightarrow 0} \lambda_t = \lim_{t \rightarrow 0} [\phi\lambda_p^t + (1 - \phi)\lambda_m^t]^{1/t}. \quad (\text{F.37})$$

This equation is transformed by taking the natural logarithm of both sides and using the fact that $\log(\lim_{x \rightarrow 0} f(x)) = \lim_{x \rightarrow 0} \log(f(x))$

$$\log \lambda_{t=0} = \lim_{t \rightarrow 0} \log \lambda_t = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log[\phi\lambda_p^t + (1 - \phi)\lambda_m^t]}{t}. \quad (\text{F.38})$$

Using the rule of de l'Hospital yields:

$$\log \lambda_{t=0} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\phi\lambda_p^t \log \lambda_p + (1 - \phi)\lambda_m^t \log \lambda_m}{\phi\lambda_p^t + (1 - \phi)\lambda_m^t}, \quad (\text{F.39})$$

$$= \phi \log \lambda_p + (1 - \phi) \log \lambda_m. \quad (\text{F.40})$$

Exponentiating both sides of this expression gives the familiar geometric mixing law.

Gamma-ray tool

Inserting the impulse response of the tool (equation F.5) into the integral equation F.7 gives

$$GR(z_d) = \sum_l \frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_{l-1}}^{z_l} e^{-|z' - z_d|/\alpha} dz'. \quad (\text{F.41})$$

The integral in this equation has to be solved separately for the three cases where ($z_d \leq z_{l-1}$), ($z_d \geq z_l$), and ($z_{l-1} < z_d < z_l$). For case 1 we obtain

$$z_d \leq z_{l-1} : \quad \frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_{l-1}}^{z_l} \exp\left(-\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) dz' \quad (\text{F.42})$$

$$= \frac{GR_l}{2\alpha} \left[-\alpha \exp\left(-\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) \right]_{z_{l-1}}^{z_l} \quad (\text{F.43})$$

$$= -\frac{GR_l}{2} \left[\exp\left(-\frac{z_l - z_d}{\alpha}\right) - \exp\left(-\frac{z_{l-1} - z_d}{\alpha}\right) \right] \quad (\text{F.44})$$

$$= \frac{GR_l}{2} \left| \exp\left(-\frac{|z_l - z_d|}{\alpha}\right) - \exp\left(-\frac{|z_{l-1} - z_d|}{\alpha}\right) \right| \quad (\text{F.45})$$

Case 2:

$$z_d \geq z_l : \quad \frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_{l-1}}^{z_l} \exp\left(\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) dz' \quad (\text{F.46})$$

$$= \frac{GR_l}{2\alpha} \left[\alpha \exp\left(\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) \right]_{z_{l-1}}^{z_l} \quad (\text{F.47})$$

$$= \frac{GR_l}{2} \left[\exp\left(\frac{z_l - z_d}{\alpha}\right) - \exp\left(\frac{z_{l-1} - z_d}{\alpha}\right) \right] \quad (\text{F.48})$$

$$= \frac{GR_l}{2} \left| \exp\left(-\frac{|z_l - z_d|}{\alpha}\right) - \exp\left(-\frac{|z_{l-1} - z_d|}{\alpha}\right) \right| \quad (\text{F.49})$$

which is the same result as for case 1. Case 3 gives rise to the following equations:

$$\frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_{l-1}}^{z_l} \exp\left(\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) dz' \quad (\text{F.50})$$

$$= \frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_{l-1}}^{z_d} \exp\left(-\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) + \frac{GR_l}{2\alpha} \int_{z_d}^{z_l} \exp\left(\frac{z' - z_d}{\alpha}\right) \quad (\text{F.51})$$

With the solutions of case 1 and 2 this equations becomes

$$\frac{GR_l}{2} \left| 1 - \exp\left(-\frac{|z_{l-1} - z_d|}{\alpha}\right) \right| + \frac{GR_l}{2} \left| \exp\left(-\frac{|z_l - z_d|}{\alpha}\right) - 1 \right| \quad (\text{F.52})$$

$$= GR_l \left[1 - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{|z_{l-1} - z_d|}{\alpha}\right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{|z_l - z_d|}{\alpha}\right) \right] \quad (\text{F.53})$$

When the layer k is defined by $z_{k-1} < z_d < z_k$ the combined solution is given by:

$$GR(z_d) = \sum_{l, l \neq k} \frac{GR_l}{2} \left| \exp\left(-\frac{|z_l - z_d|}{\alpha}\right) - \exp\left(-\frac{|z_{l-1} - z_d|}{\alpha}\right) \right| + GR_k \left[1 - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{|z_{k-1} - z_d|}{\alpha}\right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{|z_k - z_d|}{\alpha}\right) \right] \quad (\text{F.54})$$

References

- Archie, G. E., The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics, *Transactions of the AIME*, 146, 54–62, 1942.
- Aster, R., Borchers, B., und Thurber, C., *Parameter estimation and inverse problems*, Academic Press, San Diego, 2004.
- Bellotti, P., Di Lorenzo, V., und Giacca, D., Overburden gradient from sonic log, *SPWLA Transactions*, 1979.
- Bischof, C., Lang, B., und Vehreschild, A., Automatic differentiation for MATLAB programs, *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*, 2, 50–53, 2003.
- Bischof, C. H., Bücken, H. M., Lang, B., Rasch, A., und Vehreschild, A., Combining source transformation and operator overloading techniques to compute derivatives for MATLAB programs, in *Proceedings of the Second IEEE International Workshop on Source Code Analysis and Manipulation (SCAM 2002)*, S. 65–72, IEEE Computer Society, Los Alamitos, CA, USA, 2002.
- Brigaud, F. und Vasseur, G., Mineralogy, porosity and fluid control on thermal conductivity of sedimentary rocks, *Geophysical Journal International*, 98, 525–542, 1989.
- Burke, J. A., Schmidt, A. W., und Campbell, Raymond L., J., The litho-porosity cross plot; a method of determining rock characteristics for computation of log data, *The Log Analyst*, 10, 25–43, URL <http://search.epnet.com/login.aspx?direct=true&db=geh&an=1969-035451>, 1969.
- Bücken, C. und Rybach, L., A simple method to determine heat production from gamma-ray logs, *Marine and Petroleum Geology*, 13, 373–375, 1996.
- Clauser, C., Höhne, F., Hartmann, A., Deetjen, V. R., H., Rühaak, W., Schellschmidt, R., und Zschocke, A., Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe, Endbericht, Department of Applied Geophysics, RWTH Aachen University, 2002.
- Curtis, A. R., Powell, M. J. D., und Reid, J. K., On the estimation of sparse Jacobian matrices, *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 13, 117–119, 1974.
- Ellis, D. V., *Well logging for earth scientists*, Elsevier, Amsterdam, 1987.
- Geyer, O. F. und Gwinner, M. P., *Geologie von Baden-Württemberg*, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, Germany, 4th Ausgabe, 1991.

- Gilbert, J. R., Moler, C., und Schreiber, R., Sparse matrices in MATLAB: Design and implementation, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 13, 333–356, 1992.
- Gretener, P. E., On the thermal instability of large diameter wells — an observational report, *Geophysics*, 32, 727–738, 1967.
- Griewank, A., *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*, Nr. 19 in Frontiers in Appl. Math., SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- Hartmann, A., Rath, V., und Clauser, C., Identifying paleoclimatic signals in borehole temperature logs as a step towards isolating advective effects, 5th International Meeting on Heat Flow and Structure of the Lithosphere, Kostelec nad Cernmi Lesy, Czech Republic, 2001.
- Hartmann, A., *Inversion of geothermal parameters using borehole and core data*, Dissertation, RWTH Aachen University, 2007.
- Hearst, J. R., Nelson, P. H., und Paillet, F. L., *Well logging for physical properties*, Wiley, New York, 2000.
- Korvin, G., The hierarchy of velocity formulae: Generalized mean value theorems, *Acta Geodaetica, Geophysica et Montanista, Hungarian Academy of Science*, 13, 211–222, 1978.
- Lemcke, K. und Tunn, W., Tiefenwasser in der süddeutschen Molasse und ihrer verkarsteten Malmunterlage, *Bulletin der Vereinigung Schweizerischer Petroleum-Geologen und -Ingenieure*, 23, 35–56, 1956.
- Mavko, G., Mukerji, T., und Dvorkin, J., *The Rock Physics Handbook*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1998.
- Menke, W., *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*, Nr. 45 in International Geophysics Series, Academic Press, rev. Ausgabe, 1989.
- Mottaghy, D. und Rath, V., Ground surface temperature histories from boreholes at the Kola Peninsula, Russia: Disturbed by subsurface fluid flow?, *Climate of the Past, Submitted*, 2007.
- Mügler, C., Filippi, M., Montarnal, P., Martinez, J.-M., und Wileveau, Y., Determination of the thermal conductivity of opalinus clay via simulations of experiments performed at the Mont Terri underground laboratory, *Journal of Applied Geophysics*, 58, 112–129, 2006.
- Nielsen, S. B. und Balling, N., Transient heat flow in a stratified medium, *Tectonophysics*, 121, 1–10, 1985.
- Rall, L. B. und Corliss, G. F., An introduction to automatic differentiation, in *Computational Differentiation: Techniques, Applications, and Tools*, herausgegeben von M. Berz, C. H. Bischof, G. F. Corliss, und A. Griewank, S. 1–17, SIAM, Philadelphia, PA, 1996.
- Raymer, L. L., Hunt, E. R., und Gardner, J. S., An improved sonic transit time-to-porosity transform, in *Transactions of the SPWLA Annual Logging Symposium*, Bd. 21, Paper P, Society of Professional Well Log Analysts, 1980.
- Reiter, M., Mansure, A. J., und Peterson, B. K., Precision continuous temperature logging and comparison with other types of logs, *Geophysics*, 45, 1857–1868, URL <http://link.aip.org/link/?GPY/45/1857/1>, 1980.

- Rybach, L., Determination of heat production rate, in *Handbook of Terrestrial Heat-Flow Density Determination*, herausgegeben von R. Haenel, L. Rybach, und L. Stegena, S. 125–142, Kluwer, 1988.
- Schlumberger, *Log Interpretation Principles/Application*, Schlumberger Wireline & Testing, Sugar Land, Texas, 7th Ausgabe, 1989.
- Schlumberger, *ELANPlus Theory*, Austin, TX, 1999.
- Tarantola, A., *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*, SIAM, Philadelphia, 2005.
- Tarantola, A. und Valette, B., Generalized nonlinear inverse problems solved using the least squares criterion, *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 20, 219–232, 1982.
- Waples, D. W. und Tirsgaard, H., Changes in matrix thermal conductivity of clays and claystones as a function of compaction, *Petroleum Geoscience*, 8, 365–370, 2002.
- Wyllie, M. R. J., Gregory, A. R., und Gardner, G. H. F., Elastic wave velocities in heterogenous and porous media, *Geophysics*, 21, 41–70, 1956.