

# Visualisierung und Quantifizierung der Fluiddynamik in Bohrkernen aus dem Salinar und Deckgebirge des Raumes Staßfurt mittels Positronen-Emissions-Tomographie

Von der Fakultät für Physik und Geowissenschaften  
der Universität Leipzig  
genehmigte

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium

Dr. rer. nat.

vorgelegt

von Dipl.-Geol., Martin Heinz Wolf

geboren am 16. Februar 1980 in Kronstadt

Gutachter: Prof. Dr. Walter Gläßer,  
*Universität Leipzig*  
Prof. Dr. Hans-Jörg Vogel,  
*Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung UFZ, Halle*

Tag der Verleihung 19. September 2011



# Bibliographische Beschreibung

Wolf, Martin

*Visualisierung und Quantifizierung der Fluidynamik in Bohrkernen aus dem Salinar und Deckgebirge des Raumes Staßfurt mittels Positronen-Emissions-Tomographie*

Universität Leipzig, Dissertation

116 Seiten, 71 Abbildungen, 15 Tabellen, 3 Gleichungen, 141 Literaturstellen, 5 Anlagen (23 Seiten)

Referat:

Der ehemalige Salzbergbau im Raum Staßfurt führt seit dem 19. Jahrhundert zu Subrosion und teils bruchhaften Deformationen und damit verbundenen Senkungen und Vernässungen im Stadtgebiet. Im Rahmen eines Forschungsverbundvorhabens unter Federführung der BGR sollen in dieser Arbeit die grundlegenden strömungsdynamischen Prozesse im Salinar und Deckgebirge der betroffenen geologischen Formationen aufgeklärt werden. An Bohrkernen aus den entsprechenden Bereichen werden Durchflusseexperimente durchgeführt und die Fluidynamik im Inneren der Proben mittels Positronen-Emissions-Tomographie dreidimensional dargestellt. In Kooperation mit der Bundesanstalt für Materialforschung- und prüfung Berlin und dem Geologischen Institut der Johannes-Gutenberg Universität Mainz werden diese PET-Messungen der Fluidynamik mit hochauflösenden computertomographischen Messungen der internen Struktur der Proben in Übereinstimmung gebracht. Die beobachteten Fließmuster sollen mittels einer Lattice-Boltzmann-Simulation nachvollzogen und dadurch das grundlegende Verständnis der Strömungsdynamik in diesen Gesteinen erweitert werden. Langfristig soll dies zu einer Verbesserung des Verständnisses der Grundwasersedynamik auf regionaler Ebene führen.

## Veröffentlichungen und Vorträge

Paper, Tagungsbände, Manuskripte

Wolf, M., Kulenkampff, J., Enzmann, F., Gründig, M., Richter, M., Lippmann-Pipke, J., Mittmann, H. (2010): 3D-Visualisierung und Quantifizierung von Fluidströmungen in Salinargestein mittels Positronen-Emissions-Tomographie. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG, Heft 244, S. 200-212.

Kulenkampff, J., Enzmann, F., Gründig, M., Mittmann, H., Wolf, M. (2010): Spatiotemporal observation of transport in fractured rocks. Geophysical Research Abstracts, Vol. 12, EGU2010-1937.

Kulenkampff, J., Wolf, M., Gründig, M., Mittmann, H., Richter, M. (2009): Tomographische Radionucliduntersuchungen zu Transportprozessen im Salinar und seinem Deckgestein in Staßfurt. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG, Heft 242, S. 97-99.

Kulenkampff, J., Gajewski, C., Gründig, M., Lippmann-Pipke, J., Mittmann, H., Richter, M., Wolf, M. (2009): Visualisation and Quantification of Transport in Barrier Rocks with Positron Emission Tomography.- Geophysical Research Abstracts, Vol. 11, EGU2009-4382, Wien.

Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M., Wolf, M., Lippmann-Pipke, J. (2008): Direct transport process observation in geomaterials: High potential for the GeoPET-method. Geophysical Research Abstracts, Vol. 10, EGU2008-A-03919.

Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M., Wolf, M., Dietzel, O. (2008): First applications of a small-animal-PET scanner for process monitoring in rocks and soils. Geophysical Research Abstracts, Vol. 10, EGU2008-A-03727.

Wolf, M. (2006): Environmental signals recorded in the Pliocene Trubi Formation (Sicily).- Diplomarbeit, Universität Erlangen-Nürnberg.

### Vorträge

3D-Visualisierung und Quantifizierung von Fluidströmungen in Salinalgestein mittels Positronen-Emissions-Tomographie. Staßfurt2010 - Erkennen, Analysieren, Bewerten und Prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden. Abschlusstagung des Forschungsverbundvorhabens «Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks», Salzland-Center, Staßfurt, 18.11.-20.11.2010.

Fluid flow in geological material: GeoPET observation in comparison with Lattice-Boltzmann simulation. Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung UFZ, Bodenphysik-Seminar, Halle, 14.10.2010.

3D-observation of heterogeneous transport and comparison to Lattice-Boltzmann modelling, 5. Doktorandenseminar des FZD, Krögis bei Meißen, 22.09.-24.09.2010.

Fellmer, F. & Wolf, M.: Stofftransport bei Bergbaufolgeschäden und Altastensanierung. Geo Leipzig e.V., GeoForum 2010, Leipzig, 08.06.2010.

TV 8: Positronen-Emissions-Tomographie. 3. Workshop des Forschungsverbundvorhabens, Kelbra, 03.11.-04.11.2009.

3D-Visualisation and Quantification of Material Transport in Drilling Cores of the Staßfurt Salinar by means of Positron-Emission-Tomography. Doktorandentreffen 2009 der BGR, Hannover, 04.06.-06.06.2009.

Transportuntersuchungen an Salinalgestein aus Staßfurt mittels tomographischer Verfahren (PET / CT). 5. Fachgespräch Geophysik und Barrieresysteme, Leipzig, 02.10.2008.

Fluid Dynamik im Salzgestein - Tomographische Radiotracer und Fluoreszenztraceruntersuchungen. Doktorandenseminar Geologisches Institut der Universität Leipzig, 2007.

Fluid Dynamics in Rock Salt - Tomographic Radiotracer and Fluorescencetracer Analyses. 1st European SEG Student Chapter Conference 2007 (ESSCCO), Freiberg, 02.09.-08.09.2007.

### Poster

Wolf, M., Kulenkampff, J., Enzmann, F., Gründig, M., Richter, M., Lippmann-Pipke, J. (2011): Combined 3D high-resolution PET and CT measurements with lattice Boltzmann simulations of

fluid flow in heterogeneous material. EGU General Assembly 2011, Wien, 03.04.-08.04.2011.

Kulenkampff, J., Wolf, M., Enzmann, F., Gründig, M., Richter, M., Lippmann-Pipke, J. (2010): Matching of fluid flow observations in geological material (GeoPET, mm<sup>3</sup> resolution) with lattice Boltzmann simulations in  $\mu\text{m}$  resolved structures. AGU 2010 Fall Meeting, San Francisco, 13.12.-17.12.2010.

Wolf, M., Enzmann, F., Kulenkampff, J., Gründig, M., Lippmann-Pipke, J., Mittmann, H., Richter, M., Kersten, M., Gerardi, J. (2009): 3D-Visualisierung und Quantifizierung von Struktur und Stofftransport in Bohrkernen aus dem Staßfurter Salinar und Deckgebirge mittels optischem Kernscan,  $\mu\text{XCT}$  und PET. GeoDresden 2009, Dresden, 30.09.-02.10.2009.

Wolf, M., Kulenkampff, J., Lippmann-Pipke, J., Gründig, M., Enzmann, F., Richter, M. (2009): 3D-Visualisation and Modelling of Transport Processes in Heterogeneous Structures. TRePro II 2009, Karlsruhe, 18.03.-19.03.2009.

Westphal, H., Munnecke, A., Brandano, M., Wolf, M., Corda, L. (2005): Neogene rhythmic sediment successions (Italy) - detecting environmental signals.- Annual Meeting of the GV and DGG «System Earth - Biosphere Coupling», Erlangen, 2005.



# Eidesstattliche Erklärung


Hiermit erkläre ich, Martin Wolf, dass die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt und dass die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken in der Arbeit als solche kenntlich gemacht wurden.

Ich versichere hiermit, dass ich außer den in Anhang E aufgeführten Kooperationspartnern von weiteren Personen oder Institutionen bei der Auswahl und Auswertung des Materials keine Unterstützungsleistungen erhalten habe. Bei der Herstellung des Manuskripts habe ich von keiner Person Unterstützungsleistungen erhalten.

Ich versichere hiermit, dass außer den oben genannten, weitere Personen bei der geistigen Herstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt waren, insbesondere nicht die Hilfe eines Promotionsberaters in Anspruch genommen wurde und weitere Personen von mir oder in meinem Auftrag weder unmittelbar noch mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten haben, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Ich versichere hiermit, dass die vorgelegte Arbeit weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder in ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde zum Zwecke einer Promotion oder eines anderen Prüfungsverfahrens vorgelegt und in ihrer Gesamtheit noch nicht veröffentlicht wurde.

Ich versichere hiermit, dass noch keine früheren erfolglosen Promotionsversuche stattgefunden haben.



Leipzig, 22. September 2011

Martin Wolf





# Vorwort

An dieser Stelle möchte ich mich bei zahlreichen Personen für das Zustandekommen und das Gelingen dieser Arbeit herzlich bedanken.

Prof. Dr. Walter Gläßer möchte ich hier herzlichst dafür danken, dass er sich trotz seines Austritts aus der aktiven Wissenschaft dennoch bereit erklärte, die Betreuung dieser Arbeit zu übernehmen. Ohne sein Engagement wäre es mir sehr schwer gefallen, einen passenden Betreuer zu finden und diese Arbeit an der Universität Leipzig durchzuführen. Dr. Johannes Kulenkampff möchte ich für seine sehr gute, stete und umfangreiche Betreuung vielmals danken, die mich nicht nur dem Thema auf vielfältige Weise näher gebracht hat, sondern auch zahlreicher zielführender Methoden und der nötigen Software dazu. Ferner gebührt ihm auch großer Dank für seine aufwändige Arbeit an den Rekonstruktionscodes, ohne die dieses Projekt kaum brauchbare Daten hätte liefern können.

Dr. Johanna Lippmann-Pipke danke ich herzlich für die zahlreichen intensiven Gespräche, in denen sie äußerst hilfreiche Anregungen, Ideen und so manche wichtige Erweiterung für die Arbeit angestoßen hat.

Helmut Mittmann gebührt ein großer Dank für die maßgeschneiderten Konstruktionen der Mimik und für seine Expertise in so manchen technischen Fragen und Marion Gründig gebührt ein Dankeschön dafür, dass sie mir immer mit nicht nur experimentellem Rat und Tat zur Seite stand.

Bei Christine Crustewitz und Claudia Schößler möchte ich mich für die geduldige Aufbereitung und Messung der Laugenproben bedanken. Der chemische Teil dieser Arbeit wäre anders ausgefallen, hätte ich selbst die heiklen Verdünnungen vornehmen müssen.

Dr. Frieder Enzmann möchte ich für eine sehr gute und ergebnisreiche Zusammenarbeit bei der Visualisierung, Auswertung und Modellierung der Daten danken, aber auch bei den Präsentationen auf diversen Meetings und Tagungen.

Und schließlich möchte ich noch Irina und meinen Eltern vielmals für die moralische und seelische Unterstützung danken, vor allem zu den Zeiten, in denen die guten Ergebnisse im Labor auf sich warten ließen.

Diese Arbeit ist im Rahmen des Teilvorhabens VIII des Forschungsverbundprojektes *Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks* (Förderkennzeichen 02 C 1536) entstanden. Das Projekt ist dem FuE-Programm *Forschung für Nachhaltigkeit (FONA): «Nachhaltige Nutzungskonzepte für Regionen» und «Flächenmanagement»* zugeordnet und wurde aus Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) finanziert. Der Positronen-Emissions-Tomograph wurde aus EFRE-Mitteln (Europäischer Fonds für regionale Entwicklung) des sächsischen Staatsministeriums für Wissenschaft und Kunst (SMWK) bezahlt.

Die Arbeit wurde in der Abteilung Georadiochemie des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. (IIF) begonnen. Nach der Integration des IIF in das Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD) zum 01. Januar 2010 war die Arbeit in der Abteilung Reaktiver Transport des Instituts für Radiochemie des FZD angesiedelt. Nach dem Übergang des FZD aus der Leibniz-Gemeinschaft in die Helmholtz-Gemeinschaft zum 01. Januar 2011 wird diese Arbeit nun am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR), Insti-

tut für Radiochemie (IRC), Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Abteilung Reaktiver Transport beendet.

Finanzierung  
Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)



Finanzierung  
sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst (SMWK)



Projektträgerschaft  
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)



Forschungsverbundprojekt  
Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks



Projektkoordination  
Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)



Arbeit beendet im  
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. (HZDR)



weiter geführt im  
ehemaligen Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD)



begonnen im  
ehemaligen Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. (IIF)



# Zusammenfassung

Der ehemalige Kali- und Steinsalzbergbau im Raum Staßfurt (Sachsen-Anhalt) führt seit dem 19. Jahrhundert zu stellenweise erheblichen Bergschäden im Stadtgebiet, die auf Subrosion und Konvergenz untertägiger Hohlräume zurück gehen. Gebäude und Infrastruktur sind von großflächigen Absenkungen, Vernässungen und lokalen Tagesbrüchen in Mitleidenschaft gezogen worden.

Da man ähnliche Bergbaufolgeschäden in vielen Regionen des Salzbergbaus antrifft, hat sich das aus mehreren Forschungseinrichtungen, Universitäten und Unternehmen bestehende Forschungsverbundvorhaben *Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks* unter Federführung der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und unter Projektträgerschaft des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) zum Ziel gesetzt, Ursachen, Prozesse und Auswirkungen der Bergschäden exemplarisch und allumfassend zu untersuchen.

Um ein möglichst umfassendes Bild der im Untergrund ablaufenden Prozesse und deren Ursachen und Folgen zu erhalten, sind Untersuchungen der kleinräumigen Strukturen und Prozesse im Labormaßstab erforderlich. Die großräumige Abschätzung der Grundwaserdynamik im Salinar und im Deckgebirge, also der Ursachen und Folgen der Subrosion, bedarf der Charakterisierung von Wegsamkeiten und der Fluidodynamik bis in den Milli- und Mikrometerbereich, da sich die grundlegenden Prozesse auf der molekularen Ebene in der Mikroskala abspielen und somit die Dynamik in der regionalen Größenordnung beeinflussen.

Wie auf der Feldskala, so wird auch auf der Laborskala die Verteilung von hydrologischen Parametern, wie z.B. Permeabilitäten, Abstandsgeschwindigkeiten und Dispersionsraten von der heterogenen Struktur des Gesteins kontrolliert, weswegen diese Parameter nicht nur im regionalen sondern auch im Labormaßstab strukturbezogen, also räumlich differenziert, erhoben werden sollten.

Daher wurde in enger Zusammenarbeit mit dem Geologischen Institut der Johannes-Gutenberg Universität Mainz (JGU) eine Methode zur direkten, räumlich aufgelösten und quantitativen Prozessbeobachtung entwickelt und an Bohrkernproben aus dem Salinar und Deckgebirge Staßfurts angewendet. Hierfür wurde die Methode der Positronen-Emissions-Tomographie (PET) eingesetzt, ein ursprünglich medizinisches, bildgebendes Verfahren. Dieses Verfahren erlaubt es, zerstörungsfrei, mit höchstmöglicher Empfindlichkeit und geeignetem Auflösungsvermögen die Bewegung einer mit einem radioaktiven Tracerisotop (hier  $^{18}\text{F}$ ,  $^{124}\text{I}$ ) markierten Wassermenge in Raum und Zeit zu beobachten. Die Menge des eingesetzten Radiotracers kann im Bereich weniger Nanogramm gehalten werden, wodurch das System somit durch den Tracer auf geringst mögliche Weise beeinflusst und ein sehr realistisches Bild des Fließverhaltens mit einer räumlichen Auflösung von 1 mm und einer zeitlichen Auflösung von 60 s erzeugt wird.

Bislang wird in der Literatur nur von wenigen Ansätzen berichtet, die das Ziel verfolgen, die realistischen Verhältnisse strömender Fluide in heterogen strukturierten Gesteinen dreidimensional abzubilden. Solche Strömungsmuster werden statt dessen in der Regel mittels stochastischer Modelle durch Computersimulationen erzeugt. Doch erst ein Abgleich solcher Daten mit gemessenen Strömungsmustern kann zur Validierung dieser

Simulationen führen, was auch erst ein valides Upscaling auf die Feldskala ermöglichen könnte.

In Kooperation mit dem Geologischen Institut der JGU Mainz und der Bundesanstalt für Materialforschung- und prüfung Berlin (BAM) werden daher die PET-Messungen der Fluidodynamik mit Lattice-Boltzmann-Simulationen dieser Fließprozesse verglichen, die auf hochauflösenden computertomographischen Messungen ( $\mu$ XCT) der internen Struktur der Bohrkerne beruhen. Das zum Teil hoch komplexe Fließverhalten des Tracers in einer heterogen strukturierten Umgebung kann die Ermittlung raumbezogener Parameter wie etwa orts aufgelöste Fließgeschwindigkeiten stark erschweren. Sofern Simulationen und Messungen hinreichend überein stimmen, können solche Parameter jedoch flächendeckend über die gesamte Probe aus den Simulationsdaten abgeleitet werden. Hierzu wurden Möglichkeiten erprobt, wie solch komplexe, dreidimensionale Muster am effektivsten mit einander verglichen werden können.

Auf Grund des unterschiedlich hohen Auflösungsvermögens von PET und  $\mu$ XCT bedeutet der Vergleich von PET-Messdaten mit Lattice-Boltzmann-Simulationsdaten eine Skalenübertragung um etwa drei Größenordnungen ( $\mu\text{m}$  - mm). Daher erfolgt der Abgleich zwischen gemessenen und simulierten Daten sowohl mittels räumlich differenzierter Durchbruchkurven und Histogrammen, als auch auf statistischem Wege. Gemessene und simulierte Strömungsmuster werden mittels Variographie mit einander abgeglichen, da diese Methode Skalen übergreifend die Korrelationen zwischen den Fließmustern wieder gibt. Zudem erlaubt die Variographie nicht nur einen simplen 1:1 Vergleich der Strömungsmuster, sondern deckt Gemeinsamkeiten der Daten auf, die statistischer Natur sind und durch einfache Differenzbetrachtungen nicht auffallen würden. Gerade diese statistischen Gemeinsamkeiten sind wichtig für eine zukünftige Übertragung der Prozesse und Erkenntnisse von der Labor- auf die Feldskala. Diesem Ansatz liegt das Bestreben zugrunde, zu einer Erweiterung des generellen Prozessverständnisses und der Vorhersagbarkeit über das Verhalten von Fluiden in porösen und klüftigen Gesteinen beizutragen.

Die untersuchten Bohrkerne weisen teils sehr heterogene Strukturen und Fließmuster auf, teils zeichnen sie sich durch große Homogenität aus. Die Voraussetzungen für die Annahme von Fluid-Flow - Prozessen basierend auf dem Darcy-Gesetz - laminare Strömung in einem homogen porösen Medium - sind jedoch nur bei den homogen strukturierten Kernen und dort auch nur bedingt gegeben. Bei konventionellen «Black-Box» - Säulenversuchen wird ohne Kenntnis der inneren Struktur in den meisten Fällen von Darcy-Bedingungen ausgegangen, auch die resultierenden Durchbruchkurven der hier durchgeführten Experimente würden nicht zwangsläufig zu anderen Schlüssen führen. «Black-Box» - Experimente können im Allgemeinen eventuelle apparative und vom Probenmaterial bedingte abweichende Randbedingungen bezüglich der «klassischen» Advektions-Dispersions-Theorie nicht aufdecken. Erst eine dreidimensionale Visualisierung des Geschehens im Inneren der Säule vermag solche Einflüsse zu offenbaren.

Aus diesen Gründen werden durch Computersegmentierungen der CT-Datensätze und der sich darauf aufbauenden Lattice-Boltzmann-Simulationen teilweise andere hydrodynamische Parameter ermittelt als über die Durchbruchkurven. In die Berechnungen der Parameter aus den Simulationen geht dabei die komplexe Struktur der Fließwege ein und Fließgeschwindigkeiten und Permeabilitäten werden tensoriell ausgegeben, was der natürlichen tatsächlichen Situation wohl eher entspricht.

Es zeigt sich, dass die PET vor allem für die Abbildung heterogener Fließmuster sehr gut geeignet und von großem Wert für das Prozessverständnis ist. Speziell bei heterogenen Fließmustern ist die Ermittlung struktur- oder raumbezogener hydrodynamischer

Parameter entscheidend für das allgemeine Prozessverständnis und die Übertragung der Ergebnisse auf die Feldskala. In einigen Proben ergaben sich «Channeling»- und «Fingering»-Strukturen der Fließmuster, die so aus dem CT nicht erwartet worden wären. Im  $\mu$ XCT-Datensatz als durchgehend offene, zusammenhängende und flächig ausgeprägte Strukturen wurden teilweise nur partiell durchflossen, an einigen Stellen vom strömenden Fluid sogar ganz umgangen. Durch diese stark lokalisierten Transportmuster wird somit nur ein geringer Teil des Gesamtvolumens effektiv vom Strömungsprozess erfasst, was große Auswirkungen auf sorptions- und lösungskinetische Prozesse hat. Die den Reaktionen des Fluids effektiv ausgesetzte innere Oberfläche ist zwar erheblich kleiner als die prinzipiell zu Verfügung stehende, doch gerade bei Lösungsvorgängen, die ein Lösungspotential der Fluide voraussetzen, bewirkt dieser präferentielle Transport einen selbstverstärkenden Effekt, weil sich die Durchlässigkeit und somit auch Fließgeschwindigkeiten und Durchflussraten der präferentiellen Bahnen durch Lösung erhöht. Das Auftreten lokalisierter Fließpfade, die in der Hydrologie auch auf großer Skala zu beobachten sind, ist vermutlich ein grundlegendes Muster jeden Strömungsvorganges. Hier konnten sie im eher dichten und geklüfteten Gestein nachgewiesen werden. Möglicherweise können solche Mechanismen auch auf größerer Skala wirksam werden und letztlich katastrophale Lösungseinbrüche wie beim Absaufen der Bergwerke auslösen.

Die untersuchten Bohrkerne weisen teils sehr heterogene Strukturen und Fließmuster auf, teils zeichnen sie sich durch große Homogenität aus. Während in stark heterogenen, klüftig-porösen Materialien gewöhnlich mit PET und  $\mu$ XCT räumlich stark differenzierte präferentielle Fließwege im Kluftsystem gefunden wurden, konnte in eher mikrostrukturell und homogen ausgeprägten Materialien trotz messbarer Permeabilität gelegentlich kein verbundener Porenraum aus den CT-Bildern segmentiert und somit keine Lattice-Boltzmann-Simulation durchgeführt werden. In diesem Fall zeigte die PET-Untersuchung ein diffuses Ausbreitungsverhalten des Tracers.

Große Einschränkungen der PET-Methode offenbarten sich daher bei der Darstellung von schnellen Strömungen in vielen, sehr kleinen Transportpfaden. Diese konnten räumlich nicht aufgelöst und somit nicht nachgewiesen werden, weil die Bahnen deutlich geringere Abmessungen als das Auflösungsvermögen hatten und die gemittelte Tracerkonzentration im Voxel im Bereich des Rauschpegels lag. Auch mit dem wesentlich höher auflösenden  $\mu$ XCT-Verfahren ließ sich hier keine offene Porosität nachweisen, obwohl sie aufgrund der Durchlässigkeit vorhanden ist. Die PET stellt diese subskaligen schnellen Transportprozesse zwar nur als diffuses Ausbreitungsverhalten dar, zeigt somit jedoch, dass die nach klassischer Vorstellung theoretisch angenommene - und durch die klassische Durchbruchkurve implizierte - Tracerwolke mit klarer Front und differenzierbarem Volumen in solch strukturierten Proben so nicht vorkommt.

Der Abgleich von PET- und CT-Messung und Lattice-Boltzmann-Simulation mittels Variographie zeigt, dass der Tracer, ob real oder simuliert, die durchflusswirksame Struktur innerhalb der Probe nur in Bereichen hoher Konzentrationen so vollständig abzeichnet, dass sich in den PET-Messungen und den Lattice-Boltzmann-Simulationen ähnlich ausgeprägte Datensätze und damit ähnliche Variogramme ergeben. Wo Tracerkonzentrationen hoch genug sind und Fließpfade genau genug erfasst werden können, ergeben sich jedoch hohe Übereinstimmungen zwischen PET und LBM-Simulation und den aus ihnen ermittelten resultierenden hydrodynamischen Parametern.

Die Erfassung aller Störungen in der Region Staßfurt und die exakte Bewertung ihres Einflusses auf das regionale Grundwasserströmungsfeld ist unrealistisch. Die Implementierung zumindest aller größerer Störungen, sowie die Rahmenbedingungen eines von prä-

ferentiellen Fließwegen dominierten Strömungsfeldes - was die lokale hohe Varianz der Fließgeschwindigkeiten, Permeabilitäten und Dispersionsraten betrifft - können das regionale Grundwassermodell jedoch verbessern. Ein möglicher Weg, diese Daten zu erhalten, wird in dieser Arbeit aufgezeigt. Die Kombination aus PET- und  $\mu$ XCT-Messung und Lattice-Boltzmann-Simulation des Fließgeschehens in heterogenem Material und der Abgleich zwischen den Datensätzen und die damit verbundene Validierung der Simulation mittels dreidimensionaler Variographie stellen effektive Techniken für die strukturabhängige Erfassung dieser Parameter und ihrer Streubreite dar.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Die Stadt Staßfurt . . . . .	1
1.2	Problemstellung . . . . .	2
1.3	Bildgebende tomographische Verfahren . . . . .	3
1.4	Die PET in den Geowissenschaften . . . . .	5
1.5	Ziel der Arbeit . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Geologische Übersicht</b>	<b>9</b>
2.1	Allgemein . . . . .	9
2.1.1	Das Zechsteinmeer . . . . .	9
2.1.2	Das Subherzyne Becken . . . . .	9
2.1.3	Der Staßfurt-Egelter Salzattel . . . . .	10
2.2	Stratigraphie und Hydrologie . . . . .	11
2.2.1	Stratigraphische Einheiten . . . . .	11
2.2.2	Anstehende Wässer und deren Migration . . . . .	15
<b>3</b>	<b>Die Positronen-Emissions-Tomographie</b>	<b>19</b>
3.1	Entstehung des Bildes . . . . .	19
3.2	Die Auflösung des Bildes . . . . .	21
3.2.1	Die Grenzen der Ortsauflösung . . . . .	21
3.2.2	Messfehler und Bildrekonstruktion . . . . .	24
3.2.3	Konsequenzen für die Interpretation . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Material und Methoden</b>	<b>27</b>
4.1	Die Bohrkerne . . . . .	27
4.2	Die Injektionslösungen . . . . .	27
4.3	Probenvorbereitung und Experimentverlauf . . . . .	28
4.4	Auswertemethoden . . . . .	33
4.4.1	Visualisierung und Datenverarbeitung . . . . .	33
4.4.2	Bestimmung hydrodynamischer Kenngrößen . . . . .	34
4.4.3	Variographie . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>47</b>
5.1	Chemische Analysen der Lösungen . . . . .	47
5.2	PET- und CT-Daten und resultierende Durchbruchkurven . . . . .	50
5.2.1	Hauptanhydrit . . . . .	50
5.2.2	Unterer Buntsandstein . . . . .	52
5.2.3	Mechanisch belastetes Steinsalz . . . . .	57
5.2.4	Hohlraumversatz . . . . .	63
5.3	Ermittlung raumbezogener Parameter in der Literatur und mit den vorhandenen Daten . . . . .	65
5.4	Variographischer Abgleich verschiedener Datensätze . . . . .	72
5.4.1	Aussagekraft von Variogrammen . . . . .	72

5.4.2	Vergleich von Messung und Modellierung mittels 3D-Variographie . . . . .	79
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>93</b>
6.1	Diskussion der PET-Daten und Durchbruchkurven . . . . .	93
6.2	Diskussion der Ermittlung raumbezogener Parameter . . . . .	100
6.3	Diskussion des variographischen Abgleichs verschiedener Datensätze . . . . .	101
6.4	Auswirkungen auf das hydrologische Modell Staßfurts . . . . .	102
<b>7</b>	<b>Ausblick</b>	<b>105</b>
	<b>Literatur</b>	<b>109</b>
	<b>Anhang</b>	<b>xi</b>
<b>A</b>	<b>Bohrpunkte und Lösungen</b>	<b>xiii</b>
<b>B</b>	<b>3D-Variographie des mechanisch belasteten Salzkerns</b>	<b>xv</b>
<b>C</b>	<b>Hydrodynamische Parameter</b>	<b>xvii</b>
C.1	Bohrkern aus der Leine Formation z3A3 - Hauptanhydrit . . . . .	xvii
C.2	Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein . . . . .	xviii
C.3	Mechanisch belasteter Bohrkern aus dem z2Na Staßfurt-Steinsalz . . . . .	xix
C.4	Bohrkern aus dem Hohlraumversatz des Grubenbaus <i>Leopoldshall I/II</i> . . . . .	xx
C.5	Probe aus gepresstem Kaolinit . . . . .	xxi
<b>D</b>	<b>Quelltext wichtiger Funktionen</b>	<b>xxiii</b>
D.1	Datenreduktion - Ausschneiden des Bohrkerns . . . . .	xxiv
D.2	Vergrößerung der Auflösung eines PET-Bildes . . . . .	xxiv
D.3	Verteilung der Maximalwerte und deren Histogramme . . . . .	xxv
D.4	Empirische Variogramme . . . . .	xxv
D.5	Richtungsabhängige Variogramme . . . . .	xxvi
D.6	Dreidimensionale Variogramme . . . . .	xxix
D.7	Ebenenweise Variogramme . . . . .	xxxii
<b>E</b>	<b>Liste der Kooperationspartner</b>	<b>xxxiii</b>



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Übersicht über die Lage der Grubenbaue. . . . .	2
1.2	Das Geo-PET des ehemaligen IIF. . . . .	7
1.3	Das MiniPET des IIF. . . . .	7
2.1	Das Zechsteinmeer. . . . .	10
2.2	Geologische Übersicht des Subherzynen Beckens. . . . .	11
2.3	Gleichgewichtsdiagramm der ozeanischen Hauptkomponenten. . . . .	12
2.4	Profil des Staßfurt-Egelner Sattels. . . . .	14
3.1	Funktionsweise eines PET. . . . .	20
3.2	Das Voxel. . . . .	22
3.3	Gestreute Koinzidenz durch Comptonstreuung. . . . .	22
3.4	Zufällige Koinzidenz. . . . .	23
3.5	Artefakte. . . . .	26
4.1	Versuchsaufbau eines Durchflussexperimentes. . . . .	30
4.2	$^{22}\text{Na}$ -Marker mit CT-Marker. . . . .	31
4.3	Stabilität und Nachweisbarkeit von Eosin in Sole. . . . .	33
4.4	Koordinatensystem und Datenblock. . . . .	34
4.5	Ermittlung von Durchbruchkurven. . . . .	35
4.6	Erzeugung von Variogrammen aus 2D- und 3D-Matrices. . . . .	38
4.7	Verschiedene Ausprägungen bei Variogrammen. . . . .	39
4.8	Korrelationen von Variogrammen und Wertebereichen. . . . .	43
4.9	Korrelationen der Tomogramme. . . . .	44
4.10	Anzahl der Wertepaare im Variogramm. . . . .	45
5.1	Modellierte und analysierte Zusammensetzungen der verwendeten Lösungen. . . . .	48
5.2	Anhydrit, absolute und relative Konzentrationen. . . . .	49
5.3	Sandstein, absolute und relative Konzentrationen. . . . .	49
5.4	belastetes Salz, absolute und relative Konzentrationen. . . . .	49
5.5	Hauptanhydrit. Foto und PET-Daten. . . . .	50
5.6	Durchbruchkurve des Hauptanhydrits. . . . .	51
5.7	Maxima der Datenebenen des Hauptanhydrits. . . . .	52
5.8	Buntsandstein. . . . .	53
5.9	Vergleich der vier PET Messungen des Sandsteinkerns. . . . .	54
5.10	PET Bild des Buntsandsteins. . . . .	55
5.11	Kombination PET-CT des Buntsandsteins. . . . .	56
5.12	Durchbruchkurven Buntsandstein Juni/Dezember '08. . . . .	56
5.13	Umgehung von Klüften. . . . .	57
5.14	Mechanisch belastetes Steinsalz. . . . .	58
5.15	Partikel in Rissen des belasteten Salzkerns. . . . .	59
5.16	Durchbruchkurven belastetes Steinsalz. . . . .	60
5.17	Mehrfachpeaks der Durchbruchkurven des belasteten Steinsalzes. . . . .	60

5.18	Abfolge PET-Aufnahme des mechanisch belasteten Steinsalzes. . . . .	61
5.19	PET-CT-Aufnahme mechanisch belastetes Steinsalz. . . . .	62
5.20	Foto und PET-Aufnahme des Hohlraumversatzes. . . . .	63
5.21	Durchbruchkurve Hohlraumversatz. . . . .	64
5.22	Histogramme der PET-Daten. . . . .	67
5.23	Ausgewählte Zonen im Kaolinit und im Buntsandstein. . . . .	68
5.24	Teildurchbruchkurven in den vier Zonen im Sandstein und Kaolinit. . . . .	70
5.25	Parameter der Zonen. . . . .	70
5.26	$D_L$ im Buntsandstein aus der Mai- und Juni-Messung. . . . .	71
5.27	Variogramme und Heterogenität. . . . .	72
5.28	Lage des Ausgangstomogramms. . . . .	73
5.29	Ausgangstomogramm und dessen Variogramme. . . . .	74
5.30	Auf 10 Werteklassen vereinfachtes Modelltomogramm und dessen Variogramme. . . . .	75
5.31	Modelltomogramm mit Spalt und Fading und dessen Variogramme. . . . .	76
5.32	Auf den Spalt reduziertes Modelltomogramm und dessen Variogramme. . . . .	77
5.33	Zwei Methoden der 3D-Variographie. . . . .	79
5.34	Vergleich von PET, CT und Simulation. . . . .	80
5.35	3D-Variogramme der PET-, CT- und Simulationsdaten. . . . .	82
5.36	Transversale ebenenweise Variogramme des belasteten Salzkerns und der Lattice-Boltzmann-Simulation. . . . .	84
5.37	Transversale ebenenweise Gesamtvariogramme der CT-Daten. . . . .	85
5.38	Korrelationen der PET-, Simulations- und CT-Daten. . . . .	86
5.39	Sagittale und coronale ebenenweise Variogramme des belasteten Salzkerns und der Simulation. . . . .	88
5.40	Vergleich der Anisotropie zwischen horizontalen und vertikalen Teilvariogrammen. . . . .	89
5.41	Horizontale und vertikale Teilvariogramme der transversalen ebenenweisen Teilvariogramme des belasteten Salzkerns. . . . .	90
5.42	Korrelation der PET- und Simulations-Daten in 5 Zeitschritten. . . . .	91
6.1	Vergleich von Struktur, Strömung und PET. . . . .	95
6.2	Maxima der Datenebenen des Kaolinit. . . . .	97
6.3	Probe aus Kaolinit zur Veranschaulichung der Nachweisbarkeit einer Tracerwolke. . . . .	98
6.4	Tagesbruch Strandsolbad 1899. . . . .	103
7.1	Pressemitteilung über die Staßfurt-Abschlussstagung. . . . .	107
A.1	Lage der Bohrungen im Stadtgebiet. . . . .	xiii
B.1	3D-Variogramme des untersuchten Teilvolumens des belasteten Salzes. . . . .	xv

# Tabellenverzeichnis

2.1	Stratigraphie und Lithologie des Prätertiärs im Raum Staßfurt. . . . .	13
4.1	Stratigraphie und Lithologie der untersuchten Bohrkerne. . . . .	29
5.1	Abstände der Zonen zur Stirnfläche und $D_L$ . . . . .	69
5.2	Korrelationen der Variogramme. . . . .	78
5.3	Korrelationen der 3D-Variogramme der PET-, Modell- und CT-Daten. . . .	83
6.1	Unterschiede in gemessenen und simulierten hydrodynamischen Parametern.	99
A.1	Koordinaten der Bohrpunkte. . . . .	xiii
A.2	Zusammensetzung der verwendeten Laugen. . . . .	xiv
B.1	Korrelationen der 3D-Variogramme der einzelnen PET- und Modell-Daten mit den CT-Daten. . . . .	xvi
C.1	Hydrodynamische Daten des Hauptanhydrits. . . . .	xvii
C.2	Hydrodynamische Daten des Buntsandsteins. . . . .	xix
C.3	Hydrodynamische Daten des mech. belasteten Salzes. . . . .	xx
C.4	Hydrodynamische Daten des Hohlraumversatzes. . . . .	xxi
C.5	Hydrodynamische Daten der Kaolinitprobe. . . . .	xxii
D.1	Die Zuordnung der Blickrichtungen in der Matrix und den jeweiligen To- mogrammen. . . . .	xxiv



# Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

A	Fläche	$[m^2]$
$\beta^+$	Positron, Antiteilchen des Elektrons	
C	Konzentration	[ppm, etc.]
$C(x_i)$	Konzentration am Punkt $x_i$	
$\partial$	partiell Differential	
$D_L$	longitudinaler Dispersionskoeffizient	$[\frac{m^2}{s}]$
$\frac{D}{v_x}$	Dispersionsparameter	[ ]
$e^-$	Elektron	
$\eta$	dynamische Fluidviskosität	$[\frac{kgm}{s}]$ bzw Pas]
eV	Elektronenvolt	
g	Erdbeschleunigung (für 50° N)	9,81 $[\frac{m}{s^2}]$
$h\nu$	Energie eines Lichtquants (hier Gammaquant)	[J]
$\gamma(h)$	empirische Varianz	$[Bq^2]$
h	Schrittweite im Variogramm	
i	hydraulischer Gradient	[ ]
K	Permeabilität	[mDarcy bzw $m^2$ ]
$K_f$	Durchlässigkeitsbeiwert	$[\frac{m}{s}]$
LF	Leitfähigkeit	$[\frac{mS}{cm}]$
N	Anzahl der Messwerte oder Probenpaare	
$\nu$	kinematische Fluidviskosität	$[\frac{m^2}{s}]$
P	Druck	[Pa]
$\varphi_{eff}$	geschätztes effektives Hohlraumvolumen	[ ]
Q	Fließrate	$[\frac{m^3}{s}]$ bzw $\frac{ml}{min}$ ]
$\rho$	Dichte	$[\frac{kg}{m^3}]$
r	empirischer Korrelationskoeffizient (nach Pearson)	[ ]
S	elektrischer Leitwert («Siemens»)	$[\frac{1}{\Omega}]$
t	Zeit	[s]
$\bar{t}$	mittlere Fließzeit	[s]
v	Fließgeschwindigkeit, allgemein	$[\frac{m}{s}]$
$\bar{v}$	mittlere Fließgeschwindigkeit/Abstandsgeschwindigkeit	$[\frac{m}{s}]$
$v_f$	Filtergeschwindigkeit	$[\frac{m}{s}]$
V	Volumen	$[m^3]$
x	Fließdistanz	[m]
$x_i$	Position eines Messwertes	
BGO	Wismutgermanat $Bi_4Ge_3O_{12}$	
CT	Computer-Tomographie	

$\mu$ XCT	Micro-X-Ray-Computer-Tomography (hochauflösende CT im $\mu\text{m}$ - Bereich)
ERT	Electric-Resistivity-Tomography (Elektrischer-Widerstands-Tomographie)
FOV	Field of View (Gesichtsfeld eines Scanners)
LBM	Lattice-Boltzmann - Simulation
LOR	Line of Response (Linie koinzidenter Ereignisse)
LuYAP	Cer-dotiertes Lutetiumyttriumorthoaluminat ( $\text{Lu}_{0,7}\text{Y}_{0,3}\text{AlO}_3:\text{Ce}$ )
LYSO	Cer-dotiertes Lutetiumyttriumoxoorthosilikat ( $\text{Lu}_{0,9}\text{Y}_{0,1}\text{SiO}_5:\text{Ce}$ )
MRT	Magnet-Resonanz-Tomographie
PET	Positronen-Emissions-Tomographie
SPECT	Single-Photon-Emission-Computer-Tomography (Einzel-Photonen-Emissions-Computer-Tomographie)

Ich selber, [...], ermüde beim Wiederlesen meines Werkes mit den Kräften des Gehirns, indem ich den Sinn der Beweise, den ich doch selber ursprünglich mit meinem Verstand in die Figuren und den Text hineingelegt habe, aus den Figuren heraus mir in meinem Verstand wieder vergegenwärtigen will.

---

*(Johannes Kepler, Astronomia Nova 1609)*





# 1 Einleitung

## 1.1 Die Stadt Staßfurt

An einigen Stellen des Bodeufers treten natürliche Solequellen durch ein Kluftsystem aus dem liegenden Salzstock zu Tage. Bereits im 12. Jahrhundert begann man dort mit der Produktion von Siedesalz, mit der aufkommenden industriellen Revolution und der dadurch gestiegenen Rohstoffnachfrage wurde auf untertägige Förderung umgestellt.

Die ersten Salzbergwerke wurden ab 1852 an der Südwestflanke des Salzsattels im Stadtgebiet Staßfurts aufgefahren, unter ihnen die weltweit ersten Kalisalzbergwerke *von der Heydt* und *von Manteuffel*<sup>1</sup> (Abb. 1.1). Mangelnde technische Erfahrung führte jedoch zu einer aus heutiger Sicht riskanten Abbauführung, bei welcher Sicherheitspfeiler und Schweben zu schwach dimensioniert und Abbaukammern zunächst nicht wieder versetzt wurden. Die Fehleinschätzung der Risiken des Gipskarstes im Hangenden der Grubenbaue verleitete weiterhin zu gewagten Streckenführungen, wie dem Abbau von kalisalzerfüllten Schloten im Anhydrit. In der Schachtanlage *Leopoldshall I/II* führten ab 1878 einsetzende Brucherscheinungen und Gebirgsschläge zu starkem und stetig zunehmendem Wasserzutritt, welcher auch mit immer leistungsfähigeren Pumpen nicht beherrschbar wurde und schließlich im Jahr 1900 die Aufgabe der Anlage erzwang. Über die Sicherheitspfeiler drang das Wasser auch in die benachbarten Grubenbaue *von der Heydt* und *von Manteuffel* ein, worauf diese 1901 verloren gingen. Bis 1912 waren auch die Schächte *Achenbach* und *Neustaßfurt I bis V* ersoffen. Um diesen Verlust auszugleichen, wurden an der Nordostflanke des Sattels weitere Schächte abgeteuft, welche nach Beendigung der Abbautätigkeiten 1972 gezielt geflutet wurden (Quelle: *150 Jahre Salzbergbau Staßfurt: Wiege des Kalibergbaus/Bergmannsverein Staßfurt* 2002).

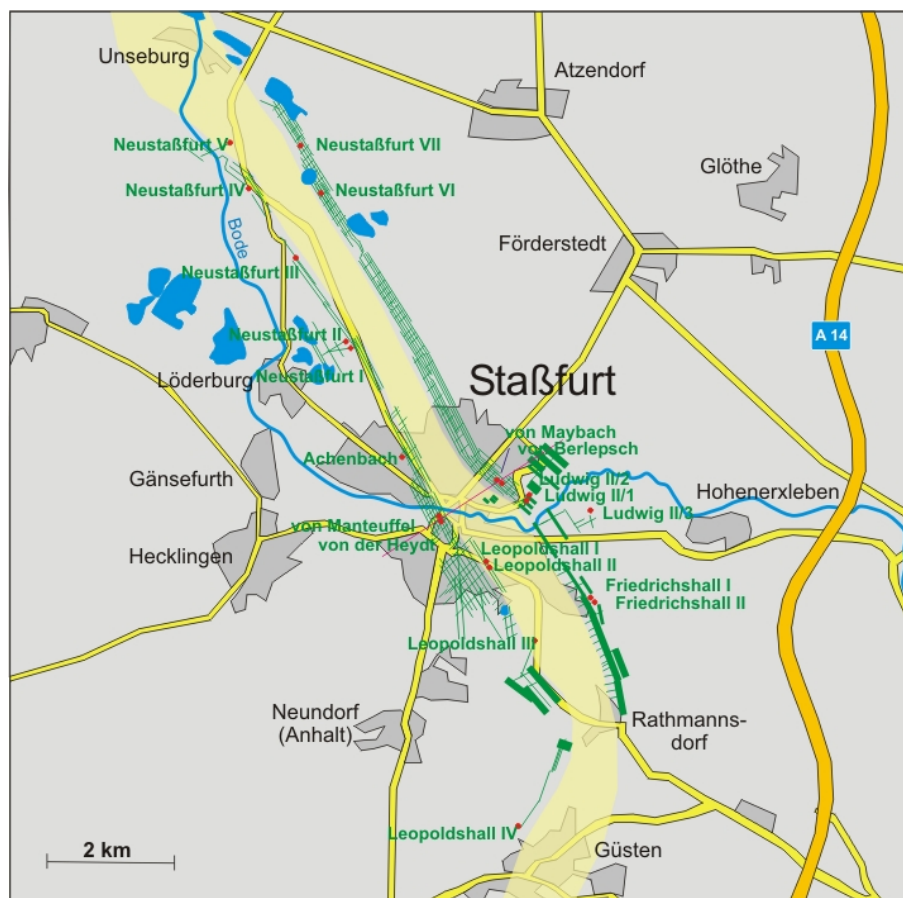
Die durch die unkontrollierte Flutung mit Süßwasser verursachten Subrosionsprozesse, sowie die teils bruchhaften Deformationen der Hohlräume führten bereits im 19. Jahrhundert zu Absenkungen und Tagesbrüchen an der Oberfläche. Der größte Tagesbruch, das heutige Strandsolbad im Südosten Staßfurts mit 140 m Durchmesser und 40 m Tiefe, entstand 1899 im Bereich der Grubenfelder *Leopoldshall I/II*. Der letzte große Tagesbruch ereignete sich 1998 im Bereich der Grubenfelder *Neustaßfurt VI* und *VII*, neben einem 1,4 ha großen Tagesbruch aus dem Jahr 1975.

Das Senkungsgeschehen wird im Stadtgebiet seit 1883 überwacht. Heute ist eine Fläche von 200 ha über den Grubenfeldern der Südwestflanke des Salzsattels betroffen, welche sich

---

<sup>1</sup>Benannt nach dem damaligen preußischen Minister für Handel und Gewerbe August von der Heydt und dem preußischen Ministerpräsidenten Otto Freiherr von Manteuffel.

in NW-SE-verlaufender Richtung durch die Stadt zieht. Teile der Innenstadt haben sich in diesem Zeitraum um bis zu sieben Meter gesenkt und sind daher bereits mehrere Meter unter den Grundwasserspiegel gesunken. An der Stelle der Stadtkirche, des Rathauses, des Marktes und zahlreicher Wohnhäuser wurde 2006 ein ca. 4500 m<sup>2</sup> großer See geschaffen und große Teile der ehemaligen Altstadt im Rahmen der Internationalen Bauausstellung (IBA 2010) zu einem Naherholungsgebiet umgewandelt. Andere Teile der Stadt drohen ebenfalls zu vernässen und werden durch aufwändige Drainagemaßnahmen vorerst trocken gehalten. Es wird aber davon ausgegangen, dass in den folgenden Jahrzehnten weitere Flächen durch Absenkung und Vernässung verloren gehen werden (KNÖDEL *et al.* 2002), da die aktuellen Senkungsgeschwindigkeiten noch stellenweise bei >6,5 mm/a liegen (SCHICHT & ALLENDORF 2010; SEIDEL & SERFLING 2010).



**Abb. 1.1:** Schematische Übersicht über das Stadtgebiet von Staßfurt (grau), die Lage der Grubenbaue (grün) mit den entsprechenden Schächten (rote Punkte) entlang des Gipshutes (beige). Weiterhin ist die Profillinie (rote Linie) des geologischen Profils der Abb. 2.4 zwischen den Schächten Heydt/Manteuffel und Berlepsch/Maybach dargestellt. Verändert nach KNÖDEL *et al.* (2002).

## 1.2 Problemstellung

Da man ähnliche Bergbaufolgeschäden in vielen Regionen des Salzbergbaus antrifft, hat sich das aus mehreren Forschungseinrichtungen, Universitäten und Unternehmen bestehen-

de Forschungsverbundvorhaben *Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks* unter Federführung der Bundesanstalt Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) zum Ziel gesetzt, Ursachen, Prozesse und Auswirkungen der Bergschäden möglichst allumfassend zu untersuchen (GERARDI 2006a; GERARDI 2006b). Staßfurt steht hier einerseits exemplarisch für viele Regionen, die unter Bergbaufolgeschäden leiden und es wird beabsichtigt, die hier erzielten Erkenntnisse auch anderenorts anwenden zu können. Andererseits soll das Verbundvorhaben auch dazu beitragen, der Stadt Staßfurt Hilfsmittel für Prognosen für die weitere Entwicklung der Schadensflächen im Stadtgebiet zur Verfügung zu stellen, um der Stadt so ein gewisses Maß an Planungssicherheit für die Zukunft zu geben.

Neben großräumigen Lidar-Messungen, seismischen, gravimetrischen, hydrologischen, geochemischen und geoelektrischen Untersuchungen und Modellierungen der alten Grubenbaue und der Grundwasserdynamik, sind auch die Untersuchung der kleinräumigen Strukturen und Prozesse im Labormaßstab im Verbundvorhaben vorgesehen, um ein möglichst umfassendes Bild der im Untergrund ablaufenden Prozesse und deren Ursachen und Folgen zu erhalten. Die großräumige Abschätzung der Grundwasserdynamik im Salinar und im Deckgebirge, also der Ursachen und Folgen der Subrosion, bedarf der Charakterisierung von Wegsamkeiten und der Fluidodynamik bis in den Milli- und Mikrometerbereich, da sich die Mechanismen der Fluidodynamik in dieser Größenordnung direkt auf die Dynamik in der regionalen Größenordnung auswirken können (z.B. MADDINELLI & BRANCOLINI 1996; ATTINGER *et al.* 1999; IRWIN *et al.* 1999; CIRPKA *et al.* 2008; KLISE *et al.* 2008; MICHAEL *et al.* 2010).

Wie auf der Feldskala, so wird auch auf der Laborskala die Verteilung von hydrologischen Parametern, wie z.B. Permeabilitäten, Abstandsgeschwindigkeiten und Dispersionsraten von der heterogenen Struktur des Gesteins kontrolliert, weswegen diese Parameter nicht nur im regionalen sondern auch im Labormaßstab strukturbezogen, also räumlich differenziert, erhoben werden müssen. Das Zechsteinsalinar selbst, die Salztektone und bergbaubedingte Beeinflussung im Salinar und im Deckgebirge haben sehr heterogene Strukturen im Gestein geschaffen, was das Verständnis und die Vorhersage der Fluidynamik erschweren. Gerade aber bei heterogenen Gesteinen können mit konventionellen Säulenversuchen kaum eindeutige Ergebnisse erzielt werden, da die Gesteinsprobe hier als «Black-Box» behandelt wird und die sich ergebende Durchbruchkurve lediglich ein Integral der heterogenen, fließwirksamen Struktur darstellt und nicht, wie erforderlich, eine räumlich differenzierte Verteilung der Parameter zulässt.

### 1.3 Bildgebende tomographische Verfahren

Um Parameter, wie Permeabilitäten und Dispersivitäten orts aufgelöst zu ermitteln, muss die Konzentrationsverteilung eines gelösten Markierungsstoffes (Tracer) im Gestein dreidimensional und in zeitlicher Folge abgebildet werden. Wenn dies zerstörungsfrei und in

situ erfolgen soll, eignen sich dafür nur tomographische Verfahren<sup>2</sup>. Tomographische Verfahren bilden ein Objekt - genauer gesagt die räumliche Verteilung bestimmter Messwerte in ihm - mittels eines Schichtaufnahmeverfahrens ab. Ist die Position des Tracers eine messbare Größe, lässt sich für jeden Raumpunkt in der Probe die zeitliche Entwicklung der Konzentration des Tracers im Verlauf des Experiments erfassen. Dies ermöglicht die Darstellung der Strömungsverteilung und diese wiederum die orts aufgelöste Berechnung der hydrodynamischen Parameter.

Aus der medizinischen Diagnostik sind verschiedene tomographische Verfahren bekannt, etwa die Computertomographie (CT), die Magnetresonanztomographie (MRT), die Einzelphotonen-Emissions-Tomographie (SPECT) und die Positronen-Emissions-Tomographie (PET).

Die CT und die MRT werden vor allem zur Abbildung von Strukturen anhand unterschiedlicher Dichte (CT) oder unterschiedlichem Wassergehalt (MRT) verwendet. Die PET dagegen stellt ein sogenanntes funktionelles bildgebendes Verfahren dar, da nicht die Eigenschaften des untersuchten Objekts selbst, sondern die Verteilung eines ihm injizierten radioaktiven Isotops abgebildet wird. In der medizinischen Diagnostik und der pharmazeutischen Forschung wird die Funktionalität bestimmter Organe, Stoffwechselprozesse oder Medikamente im lebenden Organismus dargestellt, indem pharmazeutische Wirkstoffe mit radioaktiven Tracerisotopen markiert werden. Die Menge solch eines eingesetzten *Radiotracers* kann dabei in der Größenordnung von wenigen Nanogramm gehalten werden, womit das zu untersuchende System geringst möglich beeinflusst wird. Aus dem Verteilungsmuster des Tracers lassen sich somit Rückschlüsse auf funktionelle und strömungsdynamische Prozesse innerhalb des untersuchten Systems ableiten. Da die Tracerkonzentration als zeitlich veränderliche Prozessgröße dargestellt wird, spricht man von Prozesstomographie (PARKER *et al.* 1994; RUUSKANEN *et al.* 2006).

Die SPECT funktioniert in ähnlicher Weise wie die PET auf dem Szintigraphieprinzip und wird in ähnlichen Aufgabenfeldern angewendet, erreicht aber die räumliche Auflösung und Sensitivität der PET nicht. Mittels CT lassen sich zwar auch Strömungsprozesse darstellen, jedoch benötigt man eine verglichen zur PET erheblich größere Menge eines Tracers, welcher obendrein zum umgebenden Material eine signifikant unterschiedliche Dichte aufweisen muss. Die MRT bildet den Wassergehalt innerhalb einer Struktur ab, jedoch muss auch hier mit großen Mengen eines Tracers, welcher ferromagnetische Eigenschaften aufweisen muss, gearbeitet werden, um die Fluidodynamik sichtbar zu machen. In der Geologie wird weiterhin die elektrische Widerstandstomographie (ERT) eingesetzt, welche aber im speziellen Fall von Salinargestein und der es durchströmenden hochsalinaren Lösungen keine eindeutigen Ergebnisse liefern kann. Im Vergleich erweist sich die PET somit als beste Methode, die Strömungsverteilung innerhalb einer Gesteinsprobe aus dem Salinar oder dem Deckgebirge sowohl hochauflösend als auch mit nur geringer Beeinflussung des untersuchten Systems abzubilden.

---

<sup>2</sup>Von altgr. *tome* «Schnitt» und *graphein* «schreiben».

Mit der Konzentrationsverteilung allein kann jedoch nur in einfachen Fällen die Fluid-dynamik im System eindeutig parametrisiert werden, etwa wenn die Gesteinsstrukturen annähernd homogen sind oder nur sehr wenige deutlich ausgeprägte Klüfte vorhanden sind. Sind die Strukturen im Gestein komplizierter, muss zusätzlich auch die Struktur tomographisch erfasst werden und Konzentrations- und Strukturdaten zusammen ausgewertet werden.

## 1.4 Die PET in den Geowissenschaften

Seit den späten 1980er Jahren werden zunehmend nicht-invasive bildgebende Verfahren aus der medizinischen Diagnostik in den Geowissenschaften eingesetzt. So verwenden z.B. HUANG & GRYTE (1988) die SPECT, um die Verdrängung von Öl durch Wasser in einem gesinterten porösen Glasblock abzubilden, BALDWIN & YAMANASHI (1988) bilden die Öl-Wasser-Verdrängung in einem Sandstein-Bohrkern mittels MRT ab, EKWERE & HARDHAM (1990) verwenden die CT, ebenfalls für Enhanced-Oil-Recovery Studien an Erdöl-speichergesteinen und VOGEL *et al.* (2005) vergleichen verschiedene auf CT-Messungen von gesinterten Glaskugeln basierende Modellierungsansätze zur Parameterermittlung. Auch die PET wird verwendet, so etwa bei DEGUELDRE *et al.* (1996) für die Visualisierung von Fließpfaden in kristallinem Gestein.

Für klinische Anwendungen war die PET bereits seit den frühen 1980er Jahren weit verbreitet (siehe in WERNICK & AARSVOLD 2004), frühe Entwicklungen gehen auf ANGER & ROSENTHAL (1959) zurück. Die hohen Anschaffungskosten eines PET, die aufwendige strahlenschutztechnische Infrastruktur sowie die Kosten<sup>3</sup> für geeignete Radiotracer verhindern jedoch die breite Anwendung dieser Methode im nichtmedizinischen Bereich. Geowissenschaftliche Messungen werden daher meist in nuklearmedizinischen Fakultäten mit entsprechender Infrastruktur durchgeführt. Die dortigen Geräte stehen aber in der Regel nur für eng begrenzte Messzeiten zur Verfügung und lassen sich kaum an geowissenschaftliche Erfordernisse - etwa Probengröße, Langzeitversuche und hohe Materialdichte - anpassen. Daher stellen CT- und MRT-Untersuchungen immer noch den Löwenanteil unter den verwendeten nichtinvasiven bildgebenden Verfahren in den Geowissenschaften dar. Studien, welche PET verwenden, sind in ihrer Anzahl überschaubar und behandeln bis heute vornehmlich nur die Möglichkeiten, welche diese Technologie bietet, gehen aber über bloße Machbarkeitsstudien kaum hinaus (URSIN 1992; KHALILI *et al.* 1998).

Die Abteilung Georadiochemie des ehemaligen Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig (IIF)<sup>4</sup> hat daher Ende der 1990er Jahre mit der Entwicklung eines eigenen, speziell für geowissenschaftliche Fragestellungen konzipierten PET - dem sogenannten Geo-PET - begonnen (Abb. 1.2) (RICHTER & GRÜNDIG 2000). Bauliche Besonderheiten

---

<sup>3</sup>Vom Universitätsklinikum Leipzig kann <sup>18</sup>F zwar kostenlos bezogen werden, doch für 350 MBq <sup>124</sup>I, was etwa 38 ng Iod entspricht, fallen etwa 2000 € an. Bezogen auf einen Goldpreis von 975 € pro Feinunze ist <sup>124</sup>I somit etwa 1,7 Milliarden mal sein Gewicht in Gold wert.

<sup>4</sup>Heute HZDR, Institut für Radiochemie, Forschungsstelle Leipzig, Abteilung Reaktiver Transport.

des Geo-PET-Scanners sind zwei stationäre, sich gegenüberstehende, mit BGO-Kristallen<sup>5</sup> bestückte Detektoren, zwischen denen die senkrecht stehende Probe auf einem Drehtisch gelagert wird. Für die geowissenschaftlichen Erfordernisse wurden Bildrekonstruktionsverfahren (ZIEGLER & RICHTER 2000) und Software (ZIEGLER 2003) eigens entwickelt, das Spektrum einsetzbarer PET-Radiotracer wurde speziell für geowissenschaftliche Zwecke erweitert (GRÜNDIG *et al.* 2000). Der Tomograph des ehemaligen IIF ermöglichte erstmals Langzeituntersuchungen an Gesteinsproben, jedoch konnte im Rahmen dieser Eigenentwicklung die bis dato technisch mögliche Bildaufnahmegeschwindigkeit nicht verwirklicht werden<sup>6</sup>. Dies wurde mit Parallelmessungen der Proben am Human-Scanner der Nuklearmedizinischen Fakultät der Universität Leipzig ausgeglichen (RICHTER *et al.* 2005). Bereits in der Frühphase wurden erste konkrete Messungen von heterogenem Stofftransport- und Sorptionsvorgängen in Sedimentproben aus Braunkohletagebauen durchgeführt (RICHTER *et al.* 2000; GRÜNDIG *et al.* 2001). Der Zunahme des Drucks mit der Tiefe und der damit verbundenen Änderung diverser Parameter wurde mit der apparativen Erweiterung um eine Hochdruckzelle Rechnung getragen (RICHTER & MITTMANN 2001). Die Daten aus den Geo-PET und Human-PET Messungen wurden in Modellrechnungen zu Prozessen der Geochemie und des reaktiven Transports im Grundwasser implementiert (RICHTER & GRÜNDIG 2002; RICHTER 2002), was wiederum für weitere Migrations- und Sorptionsmessungen in Aufgabenfeldern wie der Endlagerforschung von großer Bedeutung war (GRÜNDIG *et al.* 2003; RICHTER *et al.* 2003; GRÜNDIG *et al.* 2004; GRÜNDIG *et al.* 2006). Um die Methode der PET in den Geowissenschaften weiter zu entwickeln, wurde im Jahr 2007 am ehemaligen IIF ein sogenanntes MiniPET angeschafft, das ClearPET<sup>TM</sup> der Firma Raytest GmbH (Abb. 1.3). Dieser Scanner, der ursprünglich speziell für Kleintiere ausgelegt ist, ist auch für Proben im Bohrkern- und Sedimentsäulenmaßstab geeignet und vereint eine räumliche Auflösung an der physikalischen Grenze dieser Methode (etwa 1 mm), eine Bildaufnahmegeschwindigkeit im Sekundenbereich und die notwendige Möglichkeit der individuellen Adaption von Software und Hardware an geowissenschaftliche Bedürfnisse (KULENKAMPFF *et al.* 2008).

### 1.5 Ziel der Arbeit

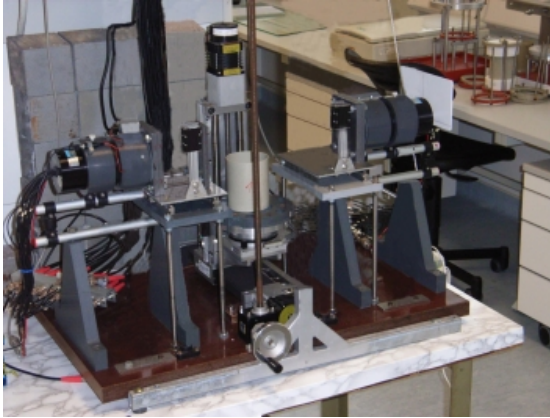
Die vorliegende Arbeit behandelt im Rahmen des Teilvorhabens VIII «Tomographische Radiotracer- und Fluoreszenztraceruntersuchungen» des oben genannten Forschungsverbundprojektes die Dynamik und räumliche Verteilung von Transport- und Lösungsprozessen in den für die Bergschäden relevanten geologischen Einheiten.

Hierzu werden an Bohrkernen aus den entsprechenden Lithologien stationäre Durchströmungsexperimente unter transientem Einsatz chemisch inerter Radiotracer durchgeführt und die raumzeitliche Verteilung der Tracerkonzentration während des Experimentes mit

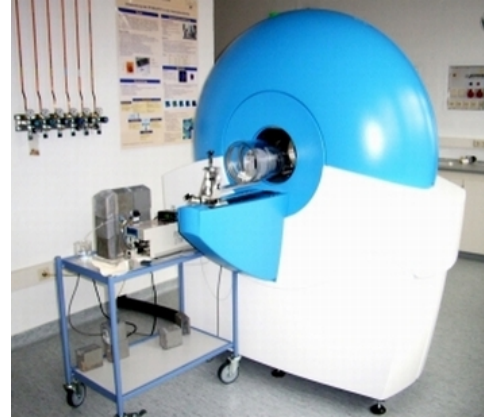
---

<sup>5</sup>Wismutgermanat ( $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ).

<sup>6</sup>Das Geo-PET braucht mehrere Stunden für einen vollständigen Scan einer Probe.



**Abb. 1.2:** Das Geo-PET, eine Eigenentwicklung des ehemaligen IIF. Mit den zwei Detektoren (rechts und links) können in Langzeitmessungen langsame Prozesse dargestellt werden.



**Abb. 1.3:** Das MiniPET des HZDR erreicht mit 20 ringförmig angeordneten Detektorkassetten eine räumliche Auflösung an der physikalischen Grenze der Positronen-Emissions-Tomographie von etwa 1 mm.

einer hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung - also vierdimensional - mit dem MiniPET des HZDR aufgezeichnet.

In Kombination mit CT-Aufnahmen der Bohrkerne mit einer räumlichen Auflösung von einigen Mikrometern, welche durch die Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung Berlin und durch das Institut für Geowissenschaften der Johannes Gutenberg Universität Mainz durchgeführt werden, sollen die PET-Daten der Strömungsprozesse eindeutig mit den heterogenen Strukturen der Bohrkerne (Klüfte, Materialwechsel, Porenräume etc.) in Verbindung gebracht werden und somit diverse hydrologische Parameter strukturabhängig quantifiziert werden.

Es wird erwartet, dass durch die bergbaubedinge Bruchtektonik die strömungsmechanischen Eigenschaften in Bereichen des Deckgebirges, aber auch der Grubenbaue (Hohlraumversatz) verändert sind. Insofern wird die Strömungsdynamik in Bohrkernen bestimmt, welche gezielten mechanischen Belastungen (Triaxialversuchen) ausgesetzt waren. Diese Studien werden in Kooperation mit dem Institut für Aufbereitung und Deponietechnik der Technischen Universität Clausthal durchgeführt.

Bislang wird in der Literatur nur von wenigen Ansätzen berichtet, die das Ziel verfolgen, die realistischen Verhältnisse strömender Fluide in heterogen strukturierten Gesteinen dreidimensional darzustellen. Solche Strömungsmuster werden statt dessen in der Regel mittels stochastischer Modelle durch Computersimulationen erzeugt. Diese Arbeit soll zu einer Erweiterung des generellen Prozessverständnisses über das Verhalten von Fluiden in porösen und klüftigen Gesteinen beitragen, indem die tatsächlichen Verhältnisse des Strömungs- und Stofftransportes und der Fluidodynamik in heterogen strukturierten Gesteinen abgebildet werden. Weiterhin soll der Abgleich mit Strömungsmustern aus Simulationsrechnungen in Gesteinsproben durchgeführt werden. Da es sich bei den Simulations-

rechnungen um Lattice-Boltzmann-Simulationen des Transportgeschehens handelt, die auf  $\mu$ XCT-Strukturinformationen derselben Proben basieren, impliziert dieser Vergleich aus PET-Messdaten und Lattice-Boltzmann-Simulationsdaten eine Skalenübertragung um etwa drei Größenordnungen ( $\mu\text{m} \rightarrow \text{cm}$ ). Diesem Ansatz liegt das Bestreben zugrunde, die beobachteten Phänomene von der Labor- auf die Feldskala zu übertragen. In der Entwicklung der Methoden zum Abgleich gemessener und simulierter Datensätze und somit in der Vorbereitung zum Upscaling wird der Schwerpunkt dieser Arbeit liegen. Der wesentliche Beitrag dieses Teilprojektes zum Verbundprojekt wird in der sich daraus in der Zukunft ergebenden Präzisierung der Eingangsparameter und Randbedingungen für die Grundwassermodellierungen der Region Staßfurt liegen und somit helfen, die Planungssicherheit für Bergschadensgebiete wie Staßfurt zu erhöhen.



## 2 Geologische Übersicht

### 2.1 Allgemein

#### 2.1.1 Das Zechsteinmeer

Im Oberkarbon bilden sich im Gebiet des heutigen Norddeutsch-Polnischen Tieflandes, Dänemarks, Ostenglands, der Nord- und Teilen der Ostsee durch die ausklingende Variszische Orogenese diverse Subsidenzbecken aus (WEDEPOHL 1964; van WEES *et al.* 2000). Diese werden ab dem Unteren Perm mit Rotliegend-Sedimenten gefüllt, welche aus dem Abtragungsschutt des Variszischen Orogens stammen. Diese Intrakontinentalbecken werden während des Oberperms vom südwärts vorstoßenden Zechsteinmeer transgrediert (GLENNIE 1990; BECHTEL & PÜTTMANN 1997). Es bilden sich das Südliche und Nördliche Permische Becken aus (Abb. 2.1), welche Tiefen von bis zu 700 m aufweisen und nur über Schwellen mit dem Panthalassa Ozean verbunden sind (BORCHERT 1959; van WEES *et al.* 2000). Der Kupferschiefer repräsentiert die erste vollmarine Einheit im Oberen Perm, gefolgt von Tonsteinen, Karbonaten und vor allem Evaporiten, deren Bildung durch die Paläogeographie und das heiß-aride Klima in diesem Teil Pangäas stark begünstigt wird. Gesteuert durch glazieostatische Meeresspiegelschwankungen (SCHNEIDER *et al.* 2006) transgrediert das Zechsteinmeer wiederholt in die Becken und sedimentiert bis in den Unteren Buntsandstein bis zu 1000 m mächtige evaporitische Gesteinspackete aus Anhydrit, Stein- und Kalisalzen. Diese mehrphasige Transgression des Zechsteinmeeres führt zur Ausbildung von bis zu sieben Salinarzyklen, welche heute im norddeutschen Raum zu finden sind (HENNINGSEN & KATZUNG 2002).

#### 2.1.2 Das Subherzyne Becken

Die permischen und frühmesozoischen Evaporite werden von mesozoischen und känozoischen Sedimenten überdeckt. Evaporite und Deckgebirge werden während der alpidischen Orogenese durch die nordwärts verlaufende Aufschiebung der variszischen Gebirgsrumpfe stark beansprucht.

Im Subherzynen Becken, das im SW von der Harzscholle und der Halle-Hettstedter Gebirgsbrücke und im NE von der Flechtingen-Roßlauer Scholle begrenzt wird, werden diese Sedimentpackete durch die Aufschiebung des Harzes und den nach SSW einkippenden subsalinaren Untergrund in herzynisch streichende Leistenschollen gegliedert bzw. zu Sattel- und Muldenstrukturen deformiert (HENNINGSEN & KATZUNG 2002). Gravitative Zusammenschubbewegungen zur Mitte des Beckens hin verursachen ein kompliziertes



**Abb. 2.1:** Das Zechsteinmeer (dunkelblau). Die Ausdehnung der Evaporitgesteine im Nördlichen und Südlichen Permischen Becken ist hervorgehoben (hellblau). AM = Armorikanisches Massiv, BM = Böhmisches Massiv, LBM = London-Brabanter Massiv, RFH = Rinköbing-Fühnen Hoch, RM = Rheinisches Massiv. Verändert nach Van WEES *et al.* (2000).

Zusammenwirken der Bewegungen der Sedimentschollen gegeneinander, was isostatische Auftriebsbewegungen des Salzes entlang der Bewegungsflächen induziert, was wiederum auf die Bewegungen der Schollen Einfluss hat (PATZELT 2003). EBERHARDT (1969) charakterisiert das Subherzynie Becken als «Schollenmosaik» und BEST (1996) erweitert die Vorstellung dieser gravitativ und isostatisch bewegten Schollen zum Konzept der «Floßtektonik».

### 2.1.3 Der Staßfurt-Egelner Salzsattel

Durch eine Reihe von Kippbewegungen der Aschersleben-Staßfurter Schrägscholle (KIRSTEN 1928) steigt entlang von geophysikalisch belegten Tiefenstörungen (HÄNING *et al.* 1996) der Staßfurt-Egelner Salzsattel auf, der nach Nordwesten in den Oscherslebener Sattel mündet (Abb. 2.2). Der Salzaufstieg beginnt am Übergang von Oberer Kreide zum Paläogen und erfährt einen zusätzlichen Schub durch eine weitere Kippbewegung, die mit der Hebung des Subherzynie Beckens über den Meeresspiegel im Obermiozän/Pliozän in Zusammenhang gebracht wird (THORMEIER & BENOX 2002). Salzspiegel und Gipshut des Staßfurt-Egelner Sattels liegen daher verglichen zu anderen Salzstöcken, deren Aufstieg nicht durch ein solches weiteres tektonisches Ereignis unterstützt wurde, auf einem deutlich höheren hypsometrischen Niveau (BALASKE 1999)<sup>1</sup>. Man trifft den Gipshut im Stadtgebiet Staßfurts daher bereits stellenweise in 10 bis 15 m Teufe an (GLA SACHSEN-ANHALT 1995).

Für die hydrogeologische Situation auf dem Sattel (Abb. 2.4) hat diese exponierte Lage des Gipshutes weitreichende Folgen. So werden etwa Subrosionsprozesse im Hutgestein

<sup>1</sup>Nach der Begutachtung korrigiert.

und damit verbundene Senkungen an der Oberfläche begünstigt. Der Gipshut des Salzstockes ist bereits durch mesozoische Subrosionsprozesse und durch die Ausbildung von pleistozänen Schmelzwasserrinnen partiell stark verkarstet (DREBACH *et al.* 2010; SEIDEL & SERFLING 2010). Die fortschreitende Subrosion würde daher nach Beendigung der Aufstiegsbewegung des Salzstocks das heutige Niveau des Salzspiegels um ca. 100 m absenken. Der Aufstieg des Salzstocks ist jedoch vermutlich noch nicht völlig abgeschlossen (THORMEIER & BENOX 2002).

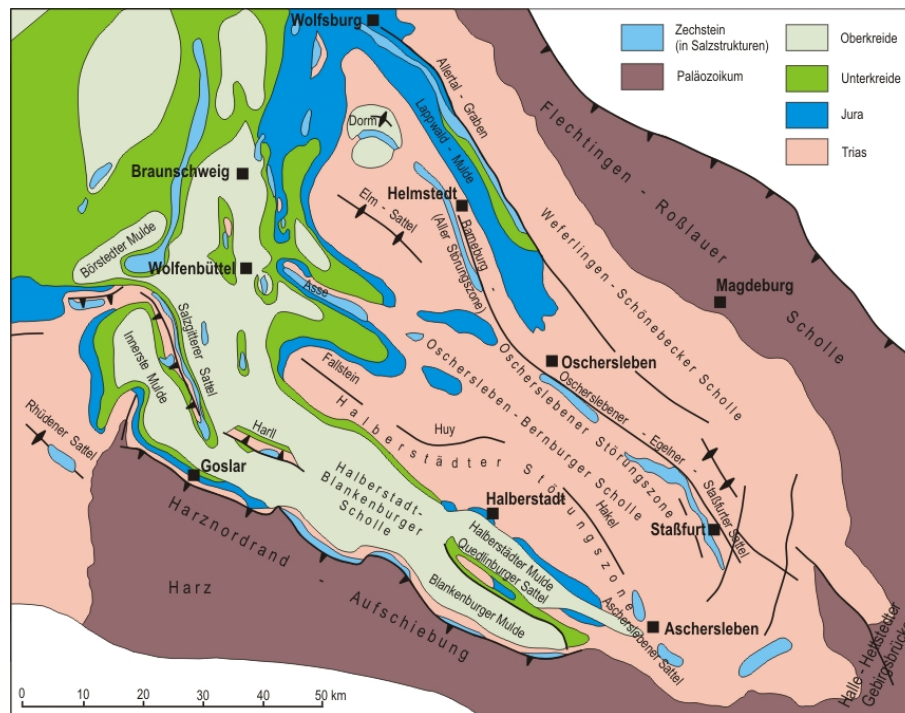


Abb. 2.2: Geologische Übersicht des Subherzynen Beckens. Kombiniert aus EHMKE & KATZUNG (1993) und ROTHE (2005).

## 2.2 Stratigraphie und Hydrologie

Im Staßfurter Raum lassen sich ein oberflächennaher und verschiedene tiefe Grundwasserleiter von einander anhand der chemischen Zusammensetzung und der Salzkonzentration unterscheiden. Diese Grundwasserleiter werden aus verschiedenen stratigraphischen Einheiten<sup>2</sup> gebildet (Tab. 2.1 und Abb. 2.4), welche stellenweise als Barrieren aber auch als hydrologische Kontaktstellen fungieren.

### 2.2.1 Stratigraphische Einheiten

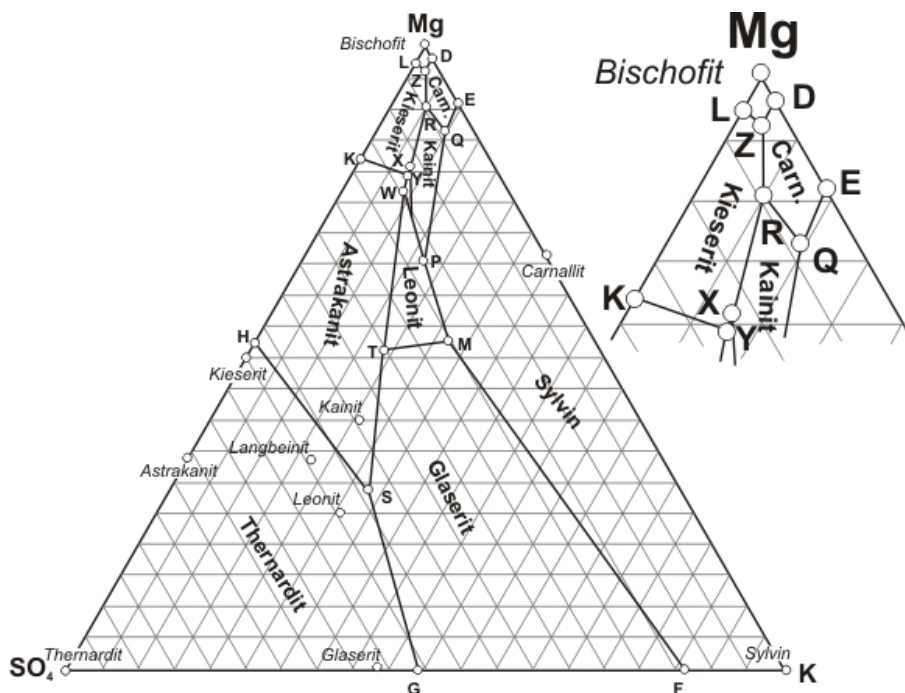
Das Staßfurt Steinsalz<sup>3</sup> ist die älteste relevante Einheit für den ehemaligen Bergbau, sowie für die in dieser Arbeit betrachtete hydrologische und gebirgsmechanische Situation, die

<sup>2</sup>Nomenklatur der Formationen gegenüber der eingereichten Textversion teilweise geändert.

<sup>3</sup>Zusammenfassender Begriff für das Basis-, Haupt-, Hangend-, Speise-, Polyhalitbänkchen- und Tonlinsalz, sowie die Kieseritischen Übergangsschichten der Staßfurt-Folge.

unter dem Stadtgebiet Staßfurt ansteht. Es hat eine ursprüngliche Schichtmächtigkeit von 100 m und wird im Salzsattel, der zum größten Teil aus dem Staßfurt Steinsalz gebildet wird, bis zu 1000 m mächtig. Hydrologisch leitend tritt es nur in den Bereichen der Sicherheitspfeiler zwischen den Gruben *Leopoldshall I/II* und *von der Heydt/von Manteuffel/Achenbach*, sowie zwischen den Gruben *von der Heydt/von Manteuffel/Achenbach* und *Neustaßfurt I/II/III* als Poren- und Kluftwasserleiter auf (SEIFERT & BODE 2002).

Das Kaliflöz Staßfurt (z2SF) schließt unmittelbar an das Staßfurt Steinsalz an. Das überwiegend carnallitisch ausgebildete Kaliflöz dient als Hauptlieferant für die Mineralisation der Wässer in den Grubenbauen, Subrosionshöhlräumen und dem Staßfurt Steinsalz. Diese Lösungen sind für Halit, Carnallit, Kainit, Sylvin und Anhydrit gesättigt, sind also näherungsweise Q-Lösungen. Q-Lösungen weisen eine solche Zusammensetzung auf, wie man sie im quinären Lösungsgleichgewichtssystem der ozeanischen Hauptkomponenten Kalium, Magnesium, Sulfat, Natrium und Chlorid im Punkt Q findet, also im Tripelpunkt zwischen den chemischen Gleichgewichtsfeldern von Carnallit, Sylvin und Kainit (Abb. 2.3) (D'ANS 1933; BORCHERT 1959).



**Abb. 2.3:** Dreiphasen-Gleichgewichtssystem des quinären Systems der ozeanischen Hauptkomponenten Kalium, Magnesium, Sulfat, Natrium und Chlorid bei 40°C. Die chemische Zusammensetzung der Q-Lösung befindet sich am Tripelpunkt zwischen den chemischen Gleichgewichtsfeldern von Carnallit, Sylvin und Kainit. Aus BORCHERT (1959).

Der als Ton-, Schluff- und Feinsandstein ausgebildete Graue Salzton (z3GT), sowie der Hauptanhydrit (z3HA) schließen an das Kaliflöz an und sind durch ihre geomechanischen Eigenschaften und den tektonischen und bergbaubedingten Belastungen an der Sattelflanke weitgehend klüftig, porös und permeabel ausgebildet (SEIFERT & BODE 2002). Nach LOTZE (1957) ist der Graue Salzton «*das am stärksten zur Bruchtektonik neigende Glied*

Abteilung	Kurz- zeichen	Lithologie/ Formation	Mächtigkeit (m)
<i>Mittlerer Buntsandstein</i>			
Solling-Folge	s6	Mittel- bis Feinsandstein, Tonsteineinlagerungen - Hardegsen-Diskordanz -	55
Detfurth-Folge	s4	Tonstein, Schluffstein, an der Basis Sandstein	31
Volpriehausen-Folge	s3	Wechselfolge von Sandstein, Schluffstein, Tonstein, an der Basis Sandstein	125
<i>Unterer Buntsandstein</i>			
Bernburg-Folge	s2	Feinsandstein-Schluffstein - Wechsellaagerungen, oolithische Kalksteine (Rogenstein)	104
Calvörde-Folge	s1	Schluffstein-Tonstein - Wechsellaagerung, Rogensteine	196
<i>Zechstein</i>			
<i>Gipshut</i>		Gips, untergeordnet Schluff, Ton, Sand, Auslaugungsbrekzien	max. 100
Ohre-Folge	z5TO	Oberer Ohre-Ton	3-7
(incl. Friesland-F.)	z6FA	Friesland-Anhydrit	
Aller-Folge	z4GA	Aller-Grenzanhydrit	0,5-3
		Aller Steinsalz	25-50
	z4PA	Pegmatitanhydrit	1,5-3
	z4RT	Roter Salzton	4-10
Leine-Folge		Leine Steinsalz	bis 115
	z3HA	Hauptanhydrit	25 (Klippen 90)
	z3GT	Grauer Salzton	4-8
Staßfurt-Folge	z2SF	Kaliflöz Staßfurt	15-40
		Staßfurt Steinsalz	100 (Sattel 1000)
	z2BA	Basalanhydrit	2,3
	z2SK	Staßfurt-Karbonat	5-10
	Werra-Folge	z1WAO	Oberer Werra-Anhydrit
z1WSO		Oberes Werra-Steinsalz	6-15
z1WA		Unterer Werra-Anhydrit	30
z1ZK		Zechsteinkalk	4-10
z1KS		Kupferschiefer	0,1-0,3
	Z1WK	Werra-Konglomerat	2

**Tab. 2.1:** Stratigraphie und Lithologie des Prätertiärs im Raum Staßfurt. Nach BORNEMANN (1991), Mächtigkeiten aus MEIER (1969).

der Schichtenfolge». Der Hauptanhydrit ist in ähnlicher Weise von intrakrustaler Tektonik beeinflusst. Die gewellt oder getreppert erscheinenden Formen der Grenzfläche zum Leine Steinsalz, die Mächtigkeiten bis 90 m erreichen, werden von BORCHERT (1959) als «Anhydrit-Klippen» bezeichnet. Grauer Salzton und Hauptanhydrit stehen mit dem ebenfalls hydrologisch leitfähigen Gipshut in direktem Kontakt. An der Südwestflanke ist der Hauptanhydrit in solchem Maße alteriert, dass er oberhalb von ca. -150 m NN zum Gipshut gerechnet werden kann (SEIFERT & BODE 2002).

Das Leine Steinsalz<sup>4</sup> dünnt sich in Richtung der Südwestflanke des Sattels stark aus. Während es hier nur bis in etwa -200 m NN nachweisbar ist, reicht es an der Nordostflanke etwa 100 m höher bis zum Hutgestein. Die Mächtigkeitsabnahme ist zwar subrosionsbedingt, ein zwingender Zusammenhang mit rezenten anthropogenen Lösungsprozessen besteht jedoch nach SEIFERT & BODE (2002) nicht.

Dem Leine Steinsalz folgt der Rote Salzton (z4RT), welcher trotz seiner Geringmächtigkeit durch seine Impermeabilität und Plastizität das Leine Steinsalz vor eindringenden Wässern aus dem Nebengestein abschirmen kann. Diese Schutzfunktion kann jedoch partiell durch die Bergbautätigkeit und durch Subrosionsprozesse beeinträchtigt sein.

Der Pegmatitanhydrit (z4PA) und das Aller Steinsalz<sup>5</sup> bilden im Untersuchungsgebiet vielerorts schon die Grenze zum Nebengestein.

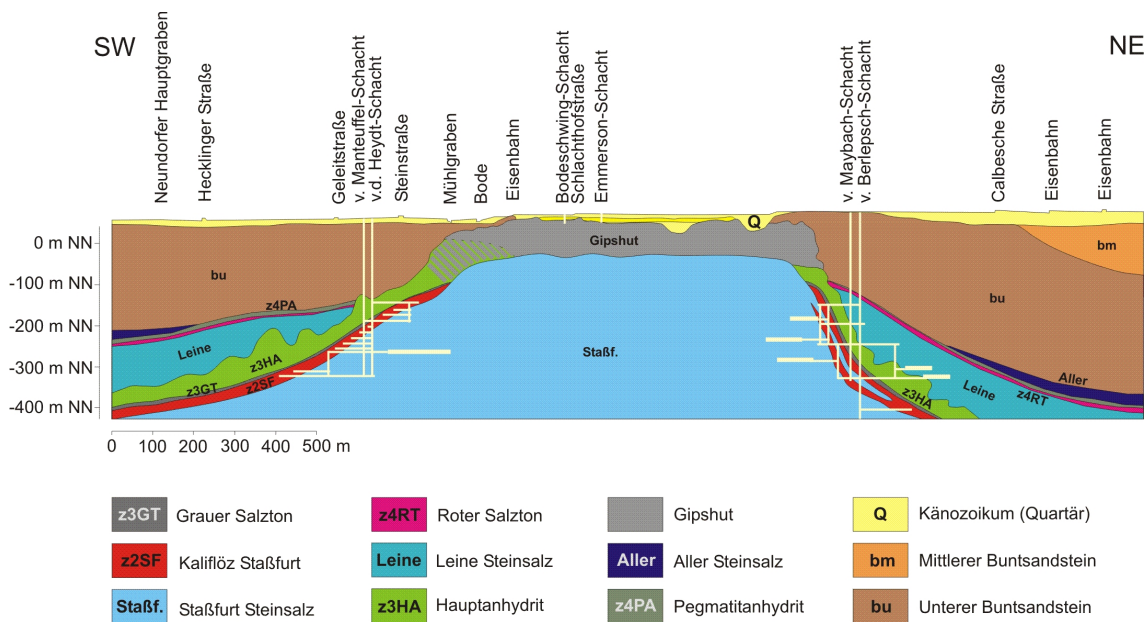


Abb. 2.4: Profil des Staßfurt-Egeln Sattels mit den hydrologisch und gebirgsmechanisch relevanten Einheiten. Profillinie siehe Abb. 1.1. Nach SEIFERT & BODE (2002).

Der Untere Buntsandstein setzt sich aus der Calvörde-Folge und der Bernburg-Folge zusammen. Die Calvörde-Folge ist durch eine Wechselfolge von Tonsteinen und Schluffsteinen

<sup>4</sup>Zusammenfassender Begriff für das Basis-, Linien-, Orange-, Bank-, Bänder-, Buntes -, Anhydritmittel-, Schwaden-, Tonmittel- und Grenzsatz, sowie die Kaliflöze Ronneberg, Bergmannsseggen und Riedel der Leine-Folge.

<sup>5</sup>Zusammenfassender Begriff für das Basis-, Schnee-, Rosen-, Tonbrocken- und Tonbanksalz der Aller-Folge.

mit tonigen feinsandigen Bereichen, sowie von etwa 12 m mächtigen basalen Rogensteinhorizonten gekennzeichnet. Die Bernburg-Folge besteht ebenfalls aus einer Wechselfolge aus Feinsandsteinen, Schluffsteinen und Tonsteinen mit etwa 10 m mächtigen Rogensteinhorizonten an der Basis. Der Mittlere Buntsandstein setzt sich aus der Volpriehausen-, der Detfurth- und der Solling-Folge zusammen. Diese Folgen bestehen ebenfalls aus Wechselfolgen von Tonsteinen, Schluffen und fein- bis grobkörnigen Sandsteinen, sowie geringmächtigen Rogensteinhorizonten.

Der Untere Buntsandstein weist im Vergleich zum Mittleren Buntsandstein aufgrund eines höheren Ton-, Schluff- und Feinsandanteils deutlich geringere Durchlässigkeiten auf. Der Mittlere Buntsandstein ist aufgrund der Korngrößenverteilung seiner Lithologie und zahlreicher Störungen als Poren- und Kluftgrundwasserleiter anzusehen (SEIFERT & BODE 2002). Die Wegsamkeiten im gesamten Buntsandstein werden als anisotrop und primär schichtgebunden entlang permeabler Horizonte wie den Rogensteinbänken angenommen; erhöhte Wegsamkeiten an Störungen spielen beispielsweise im Bereich der Gänsefurth-Hecklinger Störungszone westlich von Staßfurt eine wesentliche Rolle.

Als Residuat und Verkarstungsprodukt des in den Bereich des Grundwassers aufgestiegenen Salzsattels weist der bis zu 100 m mächtige und 400 - 1100 m breite Gipshut einen direkten Kontakt sowohl mit dem känozoischen Grundwasserleiter als auch mit dem Buntsandstein auf (SEIFERT & BODE 2002). Der Gipshut wird partiell von bis zu 50 m tiefen störungsgebundenen Rinnen und Mulden durchzogen, welche mit känozoischem Lockermaterial gefüllt sind. Der Gipshut wird daher von THORMEIER & BENOX (2002) als Kluftgrundwasserleiter bezeichnet.

Den Buntsandstein sowie den Gipshut überzieht eine zwischen 5 und 50 m mächtige Lockergesteinsdecke, meist quartären Alters. Im Stadtgebiet werden 20 m Mächtigkeit kaum überschritten (GLA SACHSEN-ANHALT 1995). Diese Decke wird aus Wechsellaagerungen von Sanden, Kiesen und Schottern, sowie stellenweise auftretenden Auelehmen, Geschiebemergeln und Löß aufgebaut. Hydraulisch hiermit verbunden ist der Gipshut und permeable Bereiche des Unteren und Mittleren Buntsandsteins. Zwar befindet sich zwischen dem Buntsandstein und dem känozoischen Lockermaterial eine zwischen 5 und 20 m mächtige tonige Zersatzzone, welche durch prä- bis frühtertiäre Verwitterung des Buntsandsteins entstand und eine hydrologische Barriere zwischen den beiden Einheiten darstellt, jedoch ist diese Barriere durch halokinetische Bewegungen, quartäre Erosionsprozesse, Senkungen und Tagesbrüche vielerorts beeinträchtigt (RUTTER *et al.* 2002).

### 2.2.2 Anstehende Wässer und deren Migration

Im Zechsteinsalinar, hier hauptsächlich im Hauptanhydrit, im Grauen Salzton, sowie in den ehemaligen Grubenbauen, Subrosionshöhlräumen und dem Bereich der Sicherheitspfeiler im Staßfurt Steinsalz, trifft man die am höchsten mineralisierten Wässer an, nahezu gesättigte  $\text{MgCl}_2$ -dominierte Lösungen («Q-Laugen»), mit Dichten um  $1,3 \text{ g/cm}^3$  (SEIFERT & BODE 2002). Die Wässer im Bereich des Buntsandsteins unterscheiden sich von denen im

Bereich des Zechsteinsalinars durch einen geringeren Mineralisationsgrad und eine andere chemische Zusammensetzung. Die Wässer mit Dichten um  $1,15 \text{ g/cm}^3$  weisen eine annähernde Sättigung gegenüber Sulfaten auf, sind NaCl-dominiert, aber gegenüber Kalium- und Magnesiumsalzen deutlich untersättigt. Die in Bohrungen im Gipshut angetroffenen Wässer weisen eine Sättigung bezüglich Sulfaten auf, sowie eine deutlich höhere Sättigung gegenüber Halit und den Bittersalzen, verglichen mit den Lösungen im Buntsandstein (BOHN *et al.* 2002). Im känozoischen Grundwasserleiter trifft man sehr unterschiedliche Mineralisationsgrade an. Diese steigen mit zunehmender Teufe von unter  $1 \text{ g/l}$  auf etwa  $50 \text{ g/l}$  in der Nähe des Gipshutes. Die Auelehme unterteilen zwar den känozoischen Grundwasserleiter stellenweise in Stockwerke, sie fungieren jedoch nur bedingt als Aquiclude, da sie oft durch Rinnen zerschnitten sind.

Migrationsprozesse der verschiedenen Fluide lassen sich am Kontakt Gipshut - Zechsteinsalinar, Zechsteinsalinar - Buntsandstein und Buntsandstein/Gipshut - Känozoikum nachweisen. Zahlreiche Wegsamkeiten zwischen den Einheiten wurden hauptsächlich durch die Bergbautätigkeiten geschaffen. Das gesamte System ist demnach als offen zu betrachten (BOHN *et al.* 2002; BUSCH *et al.* 2002; SEIFERT & BODE 2002; THORMEIER & BENOX 2002). JAHNKE *et al.* (2010) konnten über Pegelmessungen durch Hochwassereffekte der Bode, Rutschungsereignisse in den ehemaligen Grubenbauen und Verfüllmaßnahmen in den Schächten *Leopoldshall I* und *II* induzierte schnelle hydrodynamische Kommunikationen der Grubenwässer im Bereich von *Leopoldshall I/II* bis *Achenbach* nachweisen; STADLER (2010) konnte mittels diverser Isotopen-Tracersysteme partielle Vermischungen der verschiedenen Grundwasserstockwerke nachweisen. Daraus ergeben sich sowohl deszendierende als auch ascendierende Laugenströme mit einem entsprechend hohen Materialverlust des Salinars.

Die an der Sattelflanke durch Dichteunterschiede in den Buntsandstein absinkenden Laugen verursachen einen Rückstrom geringmineralisierter Wässer in das Salinar, die anderenorts aufsteigenden Laugen ziehen ebenfalls Süß- und Brackwasser in den Bereich des Gipshutes und des Salinars nach.

Ascendierende Migrationsbewegungen vom Buntsandstein bzw. Gipshut ins Känozoikum haben sowohl geogene als auch anthropogene Ursachen. Als bedeutendste anthropogene Beeinflussung sind die Wasserhaltungsmaßnahmen in der Stadt zu nennen, durch welche laufend oberflächennahes Wasser in die Bode geleitet und damit höher mineralisiertes Wasser aus tieferen Bereichen nach oben gezogen wird. Zwar wurde eine zentrale Wasserhaltung, durch welche bis zu  $26 \text{ t}$  Salz pro Tag aus dem Untergrund ausgewaschen wurden, vor wenigen Jahren durch eine dezentrale Anlage ersetzt und somit gehobene Wassermenge und Salzaustrag verringert, dem städtischen Untergrund gehen aber weiterhin etwa  $10 \text{ t}$  Salz pro Tag verloren (LAUTERBACH & KOCH 2008). Teils geogene und teils anthropogene Ursachen haben Konvergenzprozesse mesozoischer Subrosions Hohlräume und bergbaubedingter Hohlräume, welche hochmineralisierte Wässer nach oben pressen. Hochwassergesteuerte Schwankungen des Grundwasserpegels sind ebenfalls eine Quelle für den Eintrag höher mineralisierter Wässer aus dem Buntsandstein und dem Gipshut (RUTTER



*et al.* 2002). Diese permanente Dynamik verhindert die Einstellung eines stabilen Gleichgewichtszustandes (BOHN *et al.* 2002), welcher sich bei einem geschlossenen System laut BACH (2010) längst hätte einstellen können und befördert den Massenverlust des Salinars.



## 3 Die Positronen-Emissions-Tomographie

Die PET ist in den Geowissenschaften zwar keine neue, aber eine sehr selten verwendete Methode. Das HZDR verfügt als weltweit einzige Einrichtung über einen Tomographen, der speziell für geowissenschaftliche Fragestellungen angeschafft und modifiziert wurde. Darum sollen, auch im Hinblick auf Möglichkeiten und Grenzen dieser Technologie, die Funktionsweise des Gerätes und die Bilderzeugung kurz erläutert werden. Für einen ausführlichen Überblick über die zu Grunde liegende Physik, die technische Umsetzung, die Möglichkeiten und Limitationen dieser Methode seien die Arbeiten von ANGER & ROSENTHAL (1959), BENDRIEM & TOWNSEND (1998), HEINRICHS (2003), WERNICK & AARSVOLD (2004), PHELPS (2006), DEGENHARDT & THON (2007) und GOETHALS *et al.* (2009) empfohlen.

### 3.1 Entstehung des Bildes

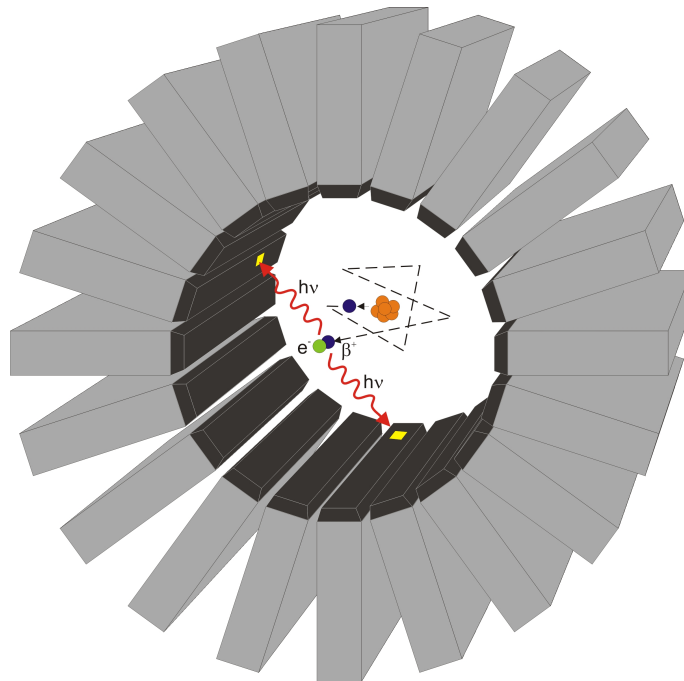
Ein Positronen-Emissions-Tomograph besteht aus einer Vielzahl kleiner Szintillationszähler, die in Kassetten zusammen gefasst und in einem Ring angeordnet sind. Ein Szintillationszähler besteht aus einem Kristall, der auf eintreffende ionisierende Strahlung mit der Emission von Licht reagiert. Dieses Lichtsignal wird in einem Photomultiplier verstärkt und anschließend detektiert. Für die verschiedenen Arten und Energiespektren von radioaktiver Strahlung werden individuell angepasste Kristalle verwendet. Im Fall der Positronen-Emissions-Tomographie<sup>1</sup> sind sie speziell für die Detektion von Gammastrahlung ausgelegt, die bei der Reaktion von Elektronen mit Positronen entsteht. Die Aussendung von Positronenstrahlung ( $\beta^+$ -Strahlung) wiederum geschieht nur beim Zerfall bestimmter radioaktiver Isotope; diese werden auf Grund ihrer Verwendbarkeit für diese Messmethode auch als *PET-Isotope*, oder *PET-Tracer* bezeichnet.

Die  $\beta^+$ - und  $\beta^-$ -Strahlung gehen auf ein Ungleichgewicht von Neutronen und Protonen im Atomkern zurück. Beim  $\beta^+$ -Zerfall veranlasst ein Überschuss an Protonen im Kern die Umwandlung eines Protons in ein Neutron. Dabei werden ein Positron ( $\beta^+$ ) und ein Neutrino emittiert. Der  $\beta^+$ -Zerfall wird so bezeichnet, weil das entstandene Positron die gleichen Eigenschaften wie ein Elektron ( $e^-$ ) hat, aber eine positive Ladung trägt. Das emittierte Positron verliert im Anschluss durch zahlreiche Kollisionen mit Elektronen des umgebenden Materials so viel kinetische Energie, bis es fast nur noch seine Ruheenergie besitzt. Trifft es nun auf ein Elektron, ist es langsam genug, damit zwischen diesen Teilchen

<sup>1</sup>Das MiniPET des HZDR beinhaltet 10 240 dieser Szintillationskristalle mit einer Dimension von je  $2 \times 2 \times 10$  mm in einer Doppelschichtanordnung. Eingebaut sind LuYAP ( $\text{Lu}_{0,7}\text{Y}_{0,3}\text{AlO}_3:\text{Ce}$ ) und LYSO ( $(\text{Lu}_{0,9}\text{Y}_{0,1})_2\text{SiO}_5:\text{Ce}$ ) Kristalle.

eine Annihilationsreaktion stattfinden kann, wobei sich Elektron und Positron gegenseitig auslöschen. Als Folge entstehen zwei Photonen mit einer Wellenlänge im Gammastrahlenbereich, die jeweils der Ruheenergie von Elektron und Positron (je  $511 \text{ keV}^2$ ) entsprechen. Diese beiden Photonen bewegen sich annähernd diametral auseinander.

Treffen beide Photonen auf Szintillationskristalle im Detektorring, wird dies von der Datenerfassung des Gerätes als ein koinzidentes Ereignis eingeordnet. Auf der Verbindungslinie zwischen diesen beiden Kristallen liegt - in erster Näherung - die Position der Annihilation von Positron und Elektron und damit etwa die Position des zerfallenen Isotops. Zerfallen an jenem Ort mehrere PET-Isotope, werden weitere Detektorpaare weitere Photonenpaare aufzeichnen und aus der Kreuzung der verschiedenen Verbindungslinien kann der Ort der Zerfälle im Raum und über die Anzahl der Zerfälle die Konzentration des Tracers dreidimensional ermittelt werden (Abb. 3.1).



**Abb. 3.1:** Funktionsweise eines PET. Dargestellt ist der Detektorring mit den 20 Detektorkassetten, die die Photomultiplier enthalten (grau) und den Szintillationskristallen (schwarz), sowie das zerfallende Isotop (orange), das emittierte Positron ( $\beta^+$ , blau) und seine chaotische, durch zahlreiche Kollisionen mit Elektronen geprägte Flugbahn und ein Elektron ( $e^-$ , grün), mit welchem es zu zwei Gammaquanten ( $h\nu$ , rot) annihiliert. Zwischen den koinzident ansprechenden Kristallen im Ring (gelb) wird die Verbindungslinie (Line of Response, LOR) gebildet und somit ein Zerfallsereignis detektiert.

Der zu untersuchende Raum innerhalb des Detektorringes, das «Field of View», wird in Volumenelemente eingeteilt, die in Anlehnung an den Begriff *Pixel* als «*Voxel*»<sup>3</sup> bezeichnet werden und einem Würfel von 1,15 mm Kantenlänge entsprechen (Abb. 3.2). Die gemessenen Koinzidenzereignisse werden als Funktion des Zeitpunktes ihrer Detektion, den

<sup>2</sup>1 eV (Elektronenvolt) ist die Energie, die ein Elektron bei der Beschleunigung durch eine Potentialdifferenz von 1 Volt erhält.  $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$ .

<sup>3</sup>Kombination aus den Wörtern *volumetric* und *pixel*.

Positionen des sie registrierenden Detektor-Paares, dem aktuellen Drehwinkel des Ringes und der Neigung zur Rotationsachse zu einer Art Histogramm sortiert, den sogenannten «Sinogrammen»<sup>4</sup>, aus welchen im Rekonstruktionsprozess ein dreidimensionaler Datensatz errechnet wird (BENDRIEM & TOWNSEND 1998). Dieser Datensatz enthält für jedes Voxel innerhalb des Field of View den dortigen gemessenen Wert der Zerfälle.

Für die Erzeugung eines Bildes müsste sich der Detektorring nicht drehen, durch die Drehung werden jedoch die Lücken zwischen den Kassetten und eventuelle Unterschiede in der Qualität und Sensitivität der Kristalle kompensiert, was die Bildqualität erheblich verbessert. Eine 360°-Rotation dauert 60s und gibt auch die Mindestzeitspanne an, die ein PET-Datensatz beinhaltet. Alle koinzidenten Ereignisse, die in dieser «Belichtungszeit» in der Probe gemessen werden, werden integrativ in dem Datensatz zusammen gefasst. Softwareveränderungen würden eine Reduzierung auf bis zu 6s erlauben, die geringe, in dieser Zeitspanne erfasste Information macht dies jedoch nicht empfehlenswert. Bei den hier durchgeführten Messungen betragen die Messzeiten zu Beginn der Experimente oft 5 bis 10 min, mit fortschreitendem Abklingen des Tracers vergrößert sich diese Zeit proportional auf bis zu 60 min.

## 3.2 Die Auflösung des Bildes

Da die Genauigkeit, mit der man sich ein Objekt oder Prozess ansehen kann, entscheidend die Art und die Qualität der Ergebnisse beeinflusst, soll hier kurz erläutert werden, wovon die Auflösung der Tomogramme abhängig ist und welche Konsequenzen dies bezüglich der Belastbarkeit und der Interpretation der Daten hat.

### 3.2.1 Die Grenzen der Ortsauflösung

Da bei dem hier verwendeten MiniPET die technische Umsetzung so weit fort geschritten ist, dass die limitierenden Faktoren der Bildauflösung zum überwiegenden Teil von der Physik bestimmt werden und kaum noch von konstruktionsbedingten Gegebenheiten wie z.B. der Größe der Kristalle und des Ringdurchmessers, sollen auch nur die physikalischen Faktoren diskutiert werden.

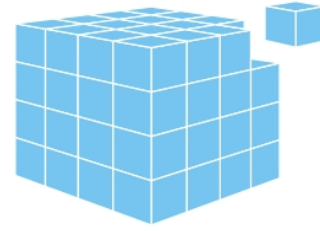
Wie oben erwähnt, legen die emittierten Positronen eine gewisse Distanz zurück, bei der sie ihre kinetische Energie durch elastische Stöße mit umliegenden Elektronen verlieren, ehe ihr Energiegehalt fast nur noch aus der Ruheenergie besteht und sie mit einem der umliegenden Elektronen die Annihilationsreaktion vollziehen können. Die Positronen beschreiben vor der Annihilation chaotische Bahnen, weswegen sich die Orte der Annihilationen statistisch über einen Bereich von etwa einem Millimeter um den Ursprungskern verteilen, womit die theoretische Untergrenze der Bildauflösung dieser Methode festgelegt ist. Diese sog. «mittlere effektive Weglänge» des Positrons vor der Annihilation hängt

---

<sup>4</sup>Der Name Sinogramm leitet sich aus der sinusförmig erscheinenden Darstellung einer Punktquelle im Detektor ab, da ihre Aktivität als Funktion des Drehwinkels und der Zeit dargestellt wird.

umgekehrt proportional von der Dichte - genauer der Elektronendichte - des umgebenden Materials ab.

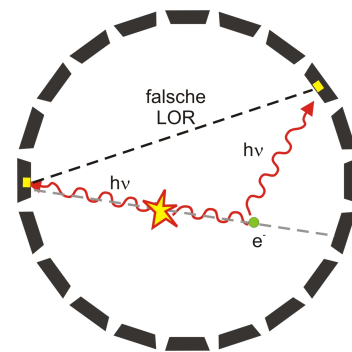
Ein weiterer wenn auch weniger bedeutend limitierender Faktor für die Ortsauflösung ergibt sich aus der Tatsache, dass die Positronen oft noch über einen Rest kinetischer Energie verfügen, wenn sie sich mit den Elektronen vereinen. Aus Impulserhaltungsgründen bewirkt dies, dass der Winkel zwischen den beiden entstehenden Photonen etwas kleiner als  $180^\circ$  ist. Bei großen Ringdurchmessern von einem Meter, wie sie in der Nuklearmedizin für Human-Scanner üblich sind, wirkt sich das deutlich auf die Ortsauflösung aus, denn es wird eine falsche Verbindungslinie zwischen den angesprochenen Detektorkristallen angenommen. Beim MiniPET, das als Kleintierscanner konzipiert ist und einen Durchmesser von nur 22 cm hat, wirkt sich dieser Effekt hingegen kaum aus.



**Abb. 3.2:** Das Voxel ist das dreidimensionale Pendant des Pixels.

Als eine erhebliche Beeinträchtigung für die Bildqualität stellt sich die Dichte des untersuchten Materials heraus. Zwar hat eine hohe Materialdichte den Vorteil einer geringeren mittleren effektiven Weglänge des Positrons und damit einer im Prinzip höheren räumlichen Auflösung, dies wird jedoch durch eine deutlich gestiegene Absorptions- und Streuungsrate bei den Photonen erkauft.

Wird eines der beiden Photonen vom Material der Probe absorbiert, kann das andere zwar immer noch vom Detektor registriert werden, da aber sein Gegenstück fehlt, kann keine Verbindungslinie ermittelt werden und das eingetroffene Signal wird als Hintergrundrauschen aussortiert. Eine hohe Materialdichte verstärkt diesen Effekt, senkt die Anzahl der detektierten Koinzidenzen und führt auch dazu, dass die Kristalle öfter für echte Koinzidenzsignale blockiert sind, da sie für die Verarbeitung eines eintreffenden Photons eine gewisse Zeit benötigen<sup>5</sup>. Der Informationsinhalt der Bilder wird geringer.



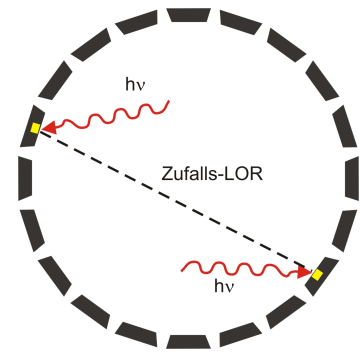
**Abb. 3.3:** Die Compton-Streuung eines Photons verursacht eine gestreute Koinzidenz und eine falsche Verbindungslinie (LOR).

Zudem steigt bei erhöhter Dichte die Häufigkeit der Compton-Streuung (Abb. 3.3), also die Ablenkung eines Photons durch Kollision mit einem Elektron, welche einen gravierenden Einfluss auf die Bildqualität hat. Durch diese Streuung verändert sich der Winkel der Flugbahnen der beiden Photonen und es wird, falls beide einen Detektor erreichen, eine falsche Verbindungslinie errechnet; das Zerfallsereignis wird einem falschen Ort zugewiesen. Dies wird als «gestreute Koinzidenz» bezeichnet. Die Folge sind wieder eine Ab-

<sup>5</sup>Die Reaktionszeit der Kristalle und der nachgeschalteten Photomultiplier (PMT) des MiniPET liegt bei etwa 12 Nanosekunden. Während dieser Zeit können keine weiteren eintreffenden Photonen vom Kristall und vom PMT erfasst werden.

nahme des Informationsinhaltes und wolkige Artefakte im Bild. Die Compton-Streuung ist für einen Großteil der Bildartefakte verantwortlich, jedoch konnte bisher noch keine befriedigende Bildkorrektur der Compton-Streuung durchgeführt werden, obwohl Modellrechnungen zeigen, dass ein Großteil der Photonen (bis zu 80 %) in der Probe mindestens einmal gestreut wird.

Es können auch zwei Photonen, die zufällig nahezu gleichzeitig (innerhalb von 12 ns) an zwei verschiedenen Kristallen gemessen werden, versehentlich als Koinzidenzereignis eingestuft werden (Abb. 3.4). Eine falsche LOR wird berechnet und somit künstlich Aktivität - «Phantomaktivität» - im FOV erzeugt, das Bild erscheint verrauscht. Mit zunehmender Dichte und zunehmender Anzahl gestreuter Photonen gewinnt dieser Effekt der «zufälligen Koinzidenzen» an Bedeutung.



**Abb. 3.4:** Erzeugung einer falschen Verbindungslinie (LOR) durch zufällige Koinzidenz.

Daneben gibt es noch störende Effekte, die mit der Zerfallscharakteristik der Isotope zusammen hängen. Je schwerer ein Atomkern ist, desto seltener neigt er bei einem Protonenüberschuss zum  $\beta^+$ -Zerfall (PHELPS 2006). Mit steigender Kernladungszahl gewinnt der Elektroneneinfang gegenüber der Positronenemission an Bedeutung. Im Fall von  $^{124}\text{I}$  zerfallen nur 25,6 % der Kerne unter Abgabe eines Positrons, 74,4 % der Kerne gleichen das Nukleonenungleichgewicht durch Elektroneneinfang aus. Hierbei werden auch Photonen im Wellenlängenbereich von Gammastrahlen frei, da diese aber nicht als Photonenpaar auftreten, erhöhen sie lediglich das Hintergrundrauschen, zufällige Koinzidenzen treten vermehrt auf. Zudem enthält eine Charge  $^{124}\text{I}$  produktionsbedingt immer etwa 5 bis 10 %  $^{125}\text{I}$ , welches vollständig durch Elektroneneinfang zerfällt<sup>6</sup>. Wesentlich günstigere Eigenschaften besitzt hier  $^{18}\text{F}$ , mit einem  $\beta^+$ -Zerfallsanteil von 97 %. Weiterhin besitzen die aus den  $^{124}\text{I}$ -Kernen emittierten Positronen verglichen zu denen, die aus  $^{18}\text{F}$ -Kernen emittiert werden, eine höhere kinetische Energie, was häufigere Kollisionen mit Elektronen zum Abbau dieser Energie erfordert, bis die Annihilationsreaktion vollzogen werden kann. Somit vergrößert sich mittlere effektive Weglänge der Positronen. Als untergeordneten Effekt kann man die seltene Aufteilung der Energie von Positron und Elektron auf mehr als zwei Photonen erwähnen. Hier entstehen drei oder mehr Photonen mit einem kontinuierlichen Energiespektrum, die im Detektor als Rauschen registriert werden.

Eine wichtige Kenngröße für Auflösung und Bildqualität ist das «Signal-zu-Rauschen-Verhältnis», welches definiert ist als der Quotient aus den wahren Koinzidenzen zur Wurzel aus wahren, gestreuten und zufälligen Koinzidenzen. Eine weitere wichtige Kenngröße ist die Sensitivität des Detektors, welche definiert ist als der Quotient aus den wahren Koinzidenzen pro Sekunde (coincidences per second cps), ohne gestreute und zufällige Koinziden-

<sup>6</sup>Zudem verfälscht  $^{125}\text{I}$  ein wenig die Quantifizierung und die Korrektur der Zerfallszeit durch seine Halbwertszeit von 59,4 Tagen, verglichen zur Halbwertszeit von  $^{124}\text{I}$  mit 4,2 Tagen.

zen, zur injizierten Gesamtaktivität in Megabecquerel (MBq)<sup>7</sup>. Eine sehr hohe Sensitivität liegt im Bereich  $>30.000$  cps/MBq, also bei  $>3\%$ . Dieser Wert wird vom MiniPET erreicht, er bedeutet aber auch, dass von allen prinzipiell brauchbaren Zerfallsereignissen, die während der Messung stattfinden, nur  $3\%$  zum endgültigen Bild beitragen. Der Rest wird von den Detektoren auf Grund ihrer Totzeit oder ihrer Ansprechwahrscheinlichkeit<sup>8</sup> nicht registriert, oder kommt auf Grund der ringförmigen Anordnung der Kristalle erst gar nicht am Detektor an; das ideale PET würde das FOV kugelförmig umschließen.

### 3.2.2 Messfehler und Bildrekonstruktion

Der Messfehler in einem PET-Datensatz hängt vom Strahlungshintergrund ab. Der Fehler ist umso kleiner, je mehr sich die Werte des Hintergrunds von den gemessenen Aktivitäten unterscheiden. Eine Verringerung des Fehlers durch die Verwendung hoher Traceraktivitäten ist jedoch durch die Totzeit der Detektoren limitiert. Über <sup>22</sup>Na-Punktquellen an der Außenseite einer Probe (siehe auch S. 31) kann der relative mittlere Fehler eines PET-Datensatzes bestimmt werden, da die Aktivität dieser Punktquellen über die Dauer eines Experiments wegen der Halbwertszeit von <sup>22</sup>Na von ca. 2,6 a als nahezu konstant angesehen werden kann. Der relative mittlere Fehler lag vor dem Vollausbau des Detektors im Juli 2008 bei über  $40\%$ , bis Oktober 2009 bei etwa  $30\%$  und aktuell bei etwa  $10\%$ .

Die Bildrekonstruktionsalgorithmen beinhalten zahlreiche Korrekturen der Rohdatensätze. In einem ersten Schritt werden alle Koinzidenzen, die sich innerhalb eines Zeitfensters von 12 und 24 ns<sup>9</sup> finden lassen, erfasst und die Koinzidenzen des 24 ns - Fensters von denen des 12 ns - Fensters subtrahiert, womit die zufälligen Koinzidenzen erfasst werden. Anschließend erfolgt die Totzeitkorrektur über Energiefenster und zeitliche Abstände der Koinzidenzereignisse, wobei diese Korrektur jedoch bei höher werdenden Aktivitäten zunehmend ungenauer arbeitet. In die anschließende Absorptionskorrektur geht die Annahme ein, dass die Probe einem homogenen Zylinder mit isotropen Absorptionseigenschaften gegenüber Gammastrahlung entspricht. Die empirisch bestimmten Absorptionsraten verschiedener Materialien werden aus entsprechenden Datenbanken gelesen und eine Gauß-Normalverteilung der Schwächung über den Probenquerschnitt angenommen. Zum Schluss werden Messzeit- und Halbwertszeitkorrekturen der Daten vorgenommen, jedoch erhöht die Halbwertszeitkorrektur den Strahlungshintergrund ab 7 bis 8 verstrichenen Halbwertszeiten nach Tracerinjektion künstlich so sehr, dass der Messfehler exponentiell ansteigt. Ähnliches gilt bei Aufnahmen zu beachten, in denen ein Großteil des Tracers bereits aus der Probe ausgetreten ist. Die Streukorrektur stellt die anspruchsvollste und momentan noch fehlerhafteste Korrektur dar, da die Streuraten mit der Tracerverteilung und heterogen verteilten Materialeigenschaften zusammen hängt und daher nur schwer in vollem Umfang berücksichtigt werden kann.

---

<sup>7</sup>Ein Becquerel (Bq) entspricht einem Zerfallsereignis pro Sekunde.

<sup>8</sup>Wahrscheinlichkeit, mit der ein Teilchen in einem Detektor registriert wird.

<sup>9</sup>Vom Hersteller empirisch bestimmte Werte.

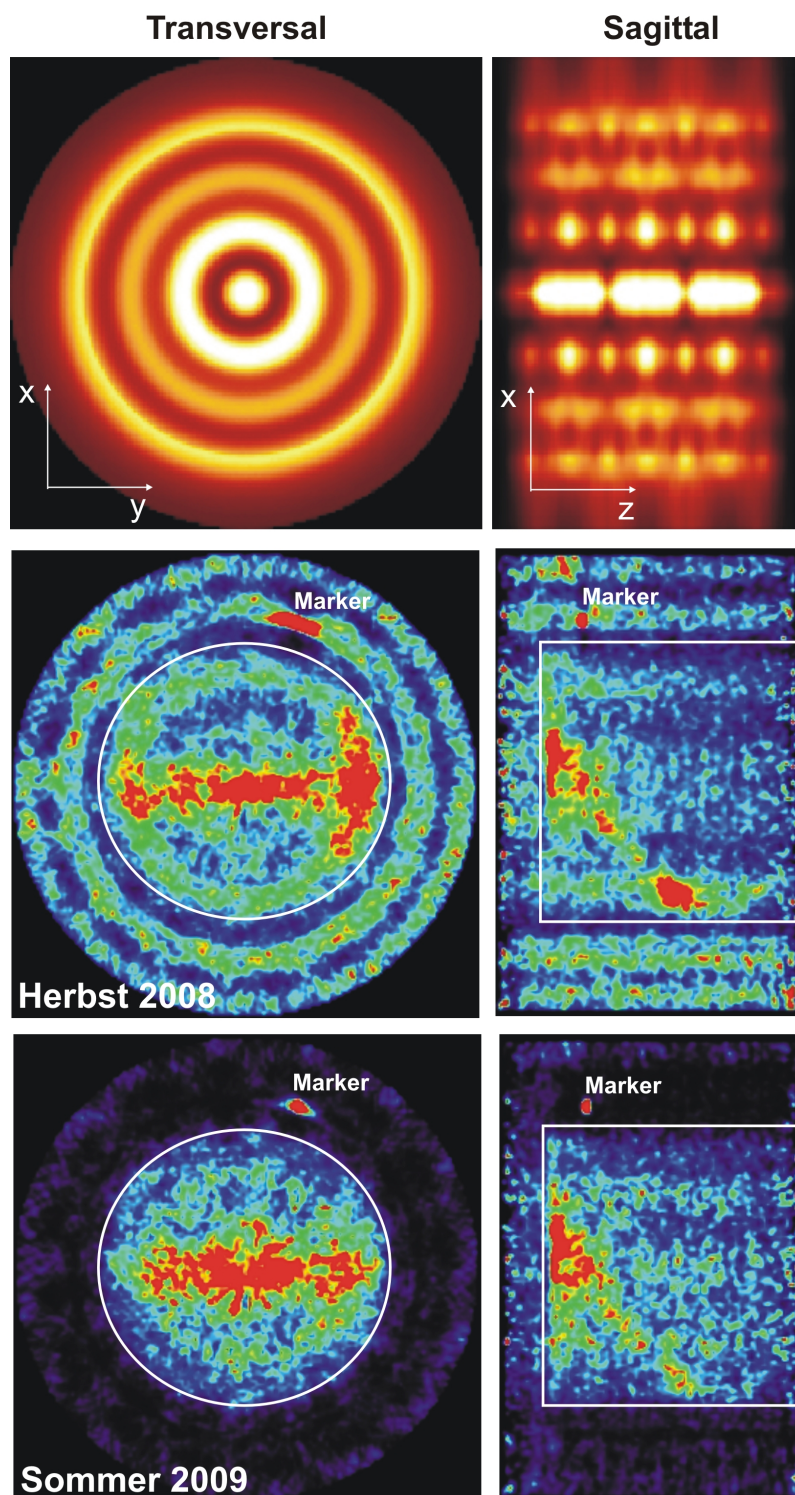


### 3.2.3 Konsequenzen für die Interpretation

Mit einer Auflösung von etwa 1 mm lassen sich die zu untersuchenden Prozesse Advektion, und Dispersion, sowie Fließmuster wie Fingering, kanalisiertes Fließen in Rissen, Verformung von Tracerwolken und Diffusion sehr gut beobachten. Allerdings liegt die Dimension von Poren und Haarrissen in der Regel um mehrere Größenordnungen unter der Auflösung des PET. Somit können die Fließwege entlang dieser Strukturen nur integrativ über ein Voxel erfasst werden und es kann prinzipiell nicht unterschieden werden, ob sich in einem Voxel wenig Aktivität auf großem Raum oder viel Aktivität auf kleinem Raum befindet. PHELPS (2006) und SORET *et al.* (2007) beschreiben diesen «partial-volume effect», durch welchen die Intensitätswerte im Bild von den tatsächlichen abweichen. Die endlich große - gepixelte - Bildauflösung verwischt die in einem Bereich enthaltene Aktivität, sodass eine kleine und hohe Konzentrationsansammlung in der gepixelten Darstellung verschmiert und als breiter und schwächer abgebildet wird. Zudem können in einem Voxel Bereiche mit hoher und niedriger Aktivität zugleich enthalten sein, welche aber in diesem Volumenelement als pauschaler Mittelwert dargestellt werden. Dies alles limitiert die Möglichkeit, einer gemessenen Aktivität eine exakte Konzentration des Tracers zuzuordnen.

Absorption und Streuung der Gammastrahlen lassen sich nur bis zu einem gewissen Maß rechnerisch bei der Bildrekonstruktion beseitigen, ohne zu sehr die eigentliche Bildinformation zu beeinflussen. Lokale hohe Tracerkonzentrationen - vor allem die initiale Ansammlung des Tracers auf der Stirnfläche, welche bei ungünstiger Probengeometrie von außerhalb des FOV seitlich auf die Detektoren einstrahlt - stellen dabei ein Hauptproblem bei der Entstehung von Bildartefakten und Unschärfen dar. Es entstehen zum Teil periodische, axialsymmetrische, artifizielle Muster in den Bildern (Abb. 3.5), die auch noch bei starker Reduktion die Aussagekraft geostatistischer Auswertungen, wie sie in Kapitel 4.4.3 ausgeführt werden, beeinflussen können.

Die Ortsauflösung der Tomogramme von etwa 1 mm und der aktuelle Stand der Bildrekonstruktion (Abb. 3.5) sind für die beobachteten Prozesse und für eine Vielzahl prinzipieller Fragestellungen der Hydrodynamik jedoch mehr als ausreichend. Die Vielzahl an Information, welche bereits bei der aktuellen Auflösung in den Bildern vorhanden ist, ist für einen Abgleich von gemessenen PET-Daten mit computersimulierten Strömungsmustern eher zu groß und eine Reduktion der Detailfülle der Datensätze durch abstrahierende geostatistische Verfahren notwendig. Die Möglichkeiten der korrekten Quantifizierbarkeit der Daten sind lokal verschieden, auf Grund lokal unterschiedlicher Streu- und Absorptionseffekte. Die Unsicherheiten in den Quantifizierungen der Messdaten werden sich in Zukunft voraussichtlich jedoch erheblich verringern, da diese lokal variierenden Streu- und Absorptionsphänomene mittels auf dem Monte-Carlo-Verfahren basierenden Simulationen beschrieben und in die Bildrekonstruktionsalgorithmen aufgenommen werden sollen.



**Abb. 3.5:** Oben: Artefakte in einem zylindrischen Wasserbehälter mit homogener verteilter Aktivität. Mitte und unten: Dieselbe Messung eines Bohrkerns, einmal mit dem Stand der Bildrekonstruktion vom Herbst 2008, ein andermal mit dem vom Sommer 2009 dargestellt. Die Artefakte, die anfangs noch das gesamte FOV ausfüllen, treten mit verbessertem Algorithmus deutlich in den Hintergrund, die Bildinformation verändert sich und die  $^{22}\text{Na}$ -Marker werden schärfer abgebildet. Der weiße Rand stellt die Probe dar.

# 4 Material und Methoden

## 4.1 Die Bohrkerne

Die untersuchten Bohrkerne stammen aus den Bohrungen B und G4 (siehe Tab. A.1, S. xiii), die im Bereich der Grubenhohlräume und Sicherheitspfeiler der Schachtanlagen *Leopoldshall I* und *II* im Jahr 2007 abgeteuft wurden. Aus den insgesamt gezogenen Kernen wurden in Absprache mit dem Geologischen Institut der JGU Mainz und dem Institut für Aufbereitung und Deponietechnik der TU Clausthal vier Bohrkerne aus dem Bereich des Unteren Buntsandsteins, des Hauptanhydrits, des Hohlraumversatzes und des Staßfurt-Steinsalzes ausgewählt (Tab. 4.1), die augenscheinlich typisch für die jeweiligen Formationen sind. Die Kerne sollten zwischen 10 und 20 cm lang, dabei weitgehend intakt sein und äußerlich keine Belastungsspuren durch die Bohrung aufweisen, damit sowohl CT- und PET-Messungen, als auch mechanische Belastungstests an ihnen durchgeführt werden können. Sowohl homogen als auch heterogen aufgebaute Kerne und auch solche mit deutlichen, teils verheilten geogenen Klüften wurden ausgewählt.

## 4.2 Die Injektionslösungen

Da die Bohrkerne aus unterschiedlichen Bereichen des Salinars und des Deckgebirges stammen, muss für jeden Kern eine individuelle, an seine chemische Zusammensetzung angepasste Lösung hergestellt werden (siehe Anhang A, S. xiv). Hierzu wurden die Formationswässer der jeweiligen Lithologien mittels Wasserproben aus den Bohrungen B, B305 und G1 (Tab. A.1) von der K-UTEK AG Salt Technologies Sondershausen und dem Institut für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik der BTU Cottbus ermittelt. Die Daten der Bohrung G1 können für die fehlenden Analysen der Bohrung G4 auf Grund der räumlichen Nähe der Bohrungen zueinander verwendet werden. Die Zusammensetzungen dieser Formationswässer geben die Zusammensetzungen der während der Experimente verwendeten Lösungen vor. Die Bezeichnungen der Proben der Formationswässer, die auf ihren Probenahmeort zurückgeht und von der K-UTEK AG festgelegt ist, werden für die in den Experimenten verwendeten Lösungen übernommen. Das «L» in der Bezeichnung bezieht sich auf die Schachtanlagen *Leopoldshall I* und *II*. Die jeweiligen Lösungen werden aus Salzen mit dem Reinheitsgrad «zur Analyse» und deionisiertem Wasser angesetzt, unter Wärmezufuhr in Lösung gebracht und vor Versuchsbeginn durch Erhitzen bis kurz vor den Siedepunkt entgast.

Die meisten Lösungen weisen eine ähnliche Zusammensetzung auf wie eine Q-Lauge (siehe Abb. 2.3, S. 12 und Tab. A.2, S. xiv), welche ein Sättigungsgleichgewicht einer Lösung mit einem Bodenkörper bestehend aus den Salzen Carnallit, Kainit, Sylvit, Halit und Anhydrit darstellt. Jedoch fehlt in den meisten Lösungen die Anhydrit-Komponente. Für die Herstellung der Lösungen werden anstatt der Doppelsalze Carnallit ( $\text{KClMgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) und Kainit ( $\text{KClMgSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ) die Salze Epsomit (Reichardt) ( $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ) und Bischoffit ( $\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) aufgrund ihrer industriell definierten und hochreinen Zusammensetzung verwendet.

Eventuellen Reaktionen der verwendeten Radioisotope  $^{124}\text{I}$  und  $^{18}\text{F}$  mit dem Gestein wird dadurch vorgebeugt, dass den Lösungen zusätzlich etwa  $0,01 \text{ mol/l}$  inaktives Kaliumiodid bzw. -fluorid als Träger für die Tracer zugesetzt wird. Da diese Menge an inaktivem Tracermaterial etwa dem Milliardenfachen der Menge an aktivem Tracer im Versuch entspricht, kann davon ausgegangen werden, dass der aktive Tracer durch Absorptions- oder Retardationseffekte nur noch minimal beeinflusst wird. Mit diesen Lösungen werden die Kerne geflutet, gesättigt und vorkonditioniert.

Um den Grad der Lösungssättigung zu ermitteln und um eventuelle Reaktionen mit den Bohrkernen oder den Radiotracer absehen zu können, wird die chemische Zusammensetzung der Formationswässer sowie der Ein- und Ausgangslösungen mit dem Programm PHRQPITZ<sup>1</sup>, einem Programm zur Berechnung von diversen geochemischen Reaktionen in hochsalinaren Laugen (PLUMMER *et al.* 1988), vor Beginn der Experimente modelliert.

### 4.3 Probenvorbereitung und Experimentverlauf

**Einbau der Kerne** Die Bohrkern werden mit Epoxidharz (Breddermann Kunstharz E 45 GB + Systemlüfter BEL 51) in einer Röhre aus Plexiglas eingegossen. Dies soll unkontrolliertes Austreten von Radioaktivität aus der Probe und Randfluss verhindern, zudem kann dieses Gebinde einem gewissen Gegendruck standhalten, was bei Einstellung einer definierten Fließrate bei Proben mit geringer Permeabilität notwendig ist. Die Stirnfläche, an der später die Injektion des Tracers erfolgt, bleibt offen. Bei einigen Kernen wird auf der Austrittsfläche ein Drainagevlies mit Kanüle für den Abfluss befestigt und im Harz eingegossen. Zwei Deckel aus Kunststoff werden auf die Stirn- und Austrittsflächen gesetzt und mit Gewindestangen miteinander verbunden. Zwischen der offenen Stirnseite des Kerns und dem Kunststoffdeckel befindet sich ein wenige  $\mu\text{m}$  breiter Spalt, der eine homogene Verteilung der Lösungen und des Tracers über die gesamte Fläche ermöglichen soll. Eine Spritzenpumpe (Pump 33 von Harvard Apparatus) sorgt für eine konstante Fließrate (zwischen  $0,0001$  und  $20 \text{ ml/min}$ ,  $\pm 0,35\%$ ), ein digitaler Miniatur-Titan-Druckaufnehmer (XPM5 M 905 von FGP Sensors and Instruments,  $P_{max} = 2 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ ,  $\pm 0,35\%$ ) über-

---

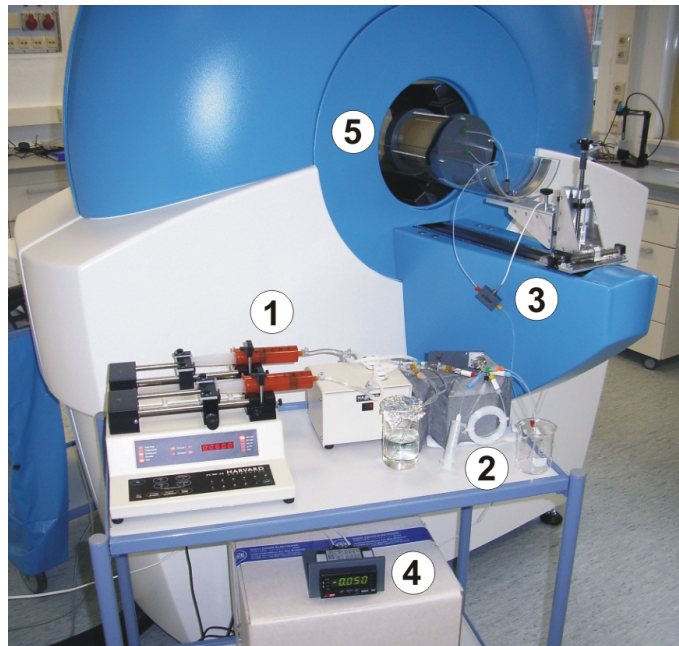
<sup>1</sup>PHRQPITZ bedeutet «**pH** - redox - equilibrium equations incorporating the **Pitzer** equations». Ab einer Ionenstärke von  $> 1 \text{ mol/kg}$  greift die Ioneninteraktionstheorie, die durch die Pitzer-Gleichungen (Debye-Hückel Gleichungen + Virialgleichungen) beschrieben wird. Der Programmkern sowie die Datenbanken von PHRQPITZ sind auch in dem bekannteren und weiter verbreiteten Programm PHREEQC von PARKHURST & APPELO (1999) implementiert.

Stratigraphie	Teufe [m]	Lithologie
<i>aus Bohrung B</i>		
Unterer Buntsandstein	91,00 - 91,25	Tonstein/Feinsandstein, beige bis rotbraun, klüftig, teils geschichtet, teils laminiert, deutliche Materialwechsel zwischen sandigen und linsig flaserig tonigen Bereichen, Schichtung fällt etwa mit 50° zur Längsachse ein, tiefe Risse an der Außenseite etwa parallel zur Schichtung, feine Querklüfte erkennbar, oberflächennahe Klüfte vor dem Eingießen mit Klebeband verschlossen um Randfluss zu vermeiden
Hohlraumversatz des Grubenbaus	234,49 - 234,69	Salzgruß aus Steinsalz, dunkelgrau mit hellen glasig-rötlich-braunen Bereichen, Mélange aus fein- bis grobkörnigen Steinsalzkristallen, keine Klüfte oder Risse erkennbar
Staßfurt-Steinsalz	279,00 - 280,00	von der TUC mechanisch belastete Steinsalzprobe, gelblichweiß bis hellgrau, grobkörnig, einzelne Risse an der Oberfläche und leichte bräunliche Lamination oder Bänderung erkennbar, oberflächennahe Risse vor dem Eingießen mit Kunstharz versiegelt
<i>aus Bohrung G4</i>		
Hauptanhydrit d. Leine-F.	149,75 - 149,85	Anhydrit, hellgrau, mit markanter verheilte Längskluft, Matrix fleckig, von dunkelgrau bis wenigen rötlichen Bereichen, mittel- bis grobkörnig, netzförmige hellgraue Strukturen an der Oberfläche, beginnende Umwandlung zu Gips

**Tab. 4.1:** Stratigraphie und Lithologie der untersuchten Bohrkerne.

wacht den Druck (Abb. 4.1). Aufgrund der hochkorrosiven Eigenschaften der Salzlauge wurde auf die Verwendung von Metallteilen bei Pumpen, Schläuchen, Verbindungen etc. verzichtet und auf Kunststoff zurück gegriffen.

**Sättigung** Um eine möglichst vollständige Sättigung von Sedimentsäulen oder Gesteinsproben zu erreichen, werden diese in der Regel getrocknet, mit dem Vielfachen ihres Porenvolumens an CO<sub>2</sub> gespült und anschließend mit entgaster Lösung gesättigt. Da bei evaporitischem oder auch nur salzhaltigem Gesteinsmaterial eine Trocknung zu Kristallisationen im Inneren und schlimmstenfalls zu Salzsprengung führen würde, müssen die Bohrkerne samt der enthaltenen Bergfeuchte direkt mit der Spüllösung geflutet werden. Eine Porositätsmessung, welche man mit der Sättigung des Materials in der Regel verbin-



**Abb. 4.1:** Versuchsaufbau eines Durchflussexperimentes. 1) Zwei-Wege-Spritzenpumpe, 2) Dosierschleife, 3) Druckaufnehmer an der Zuleitung zum Bohrkern, 4) Druckanzeige, 5) in Gehäuse eingebauter Bohrkern im PET liegend.

det, kann somit auch nicht durchgeführt werden. Weiterhin ist die Temperatur von etwa  $35^{\circ}\text{C}$  im Inneren des Scanners zumindest theoretisch problematisch, da auch die Probe und die durchströmende Flüssigkeit warm werden und es so zu Auflösungsprozessen kommen könnte.

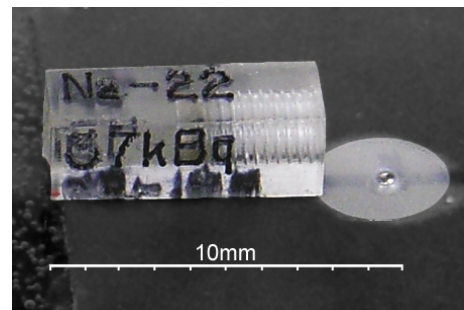
**Tracerimpuls** Bei Durchströmungsexperimenten wird als Tracerimpuls in der Regel ein Dirac-Impuls, also eine instantane Tracereingabe, angestrebt, da dies die Auswertung des Versuchs und damit die Berechnung und Modellierung der hydraulischen Parameter stark vereinfacht. Die Injektionen erfolgen im Rahmen dieser Arbeit jedoch als Stufenimpuls über eine Dosierschleife, da der aufzubringende Injektionsdruck von bis zu drei Bar bei einigen Proben auf Grund ihrer geringen Permeabilität für konventionelle Kunststoffspritzen zu hoch wäre. Zudem ist eine möglichst gleichmäßige Verteilung des Tracers über die gesamte Stirnfläche der Kerne angestrebt, was mit der langsamen Injektion über eine Dosierschleife weitaus besser gelingt. Und auch aus strahlenschutztechnischen Gründen erweist sich diese Form der Eingabe als vorteilhaft, da die radioaktive Flüssigkeit nicht per Hand gegen den Druck im System injiziert werden muss. Durch die Verwendung einer Dosierschleife ist die Länge des Eingabeimpulses genau bestimmt und kann in die Berechnung der hydraulischen Parameter einfließen.

An den Kunststoffschläuchen der Zu- und Ableitungen, sowie der Dosierschleife wird während eines Durchflussexperiments ein kleiner Teil des Tracers adsorbiert, was zu einer leichten Verzerrung des Stufenimpulses führt. Dies führt weiterhin dazu, dass die Schläuche eine kleine Menge Streustrahlung über die ganze Dauer des Experiments in den Scanner

und an den Durchflussszintillator abgeben, was die Quantifizierung der im Scanner und in der Probe befindlichen Aktivität negativ beeinflusst.

**Lage im PET** Um gravitativ bedingte Trennungseffekte innerhalb des Strömungsfeldes und die Ansammlung von Luftblasen in der Säule während des Durchflussexperiments zu vermeiden, werden Säulenversuche in der Regel mit senkrecht stehender Säule und einem Fluss von unten nach oben durchgeführt. Konstruktionsbedingt können beim MiniPET Bohrkern jedoch nur liegend gemessen werden. Da man einen eventuellen Randfluss oder von der Strömung ausgelassene Bereiche innerhalb der Säule mit dem PET jedoch sehen kann, wird dieser Nachteil durch die Messtechnik selbst weitgehend kompensiert.

**Marker** Um die CT- und die PET-Bilder zur Deckung bringen zu können, sind in das Plexiglas des Bohrkerngebundes kleine Stahlkugeln als Markierungen eingelassen, die auf den CT-Bildern als deutliche Punkte erkennbar sind. Während der PET-Messungen werden auf diese CT-Marker in Kunststoff eingelassene Punktquellen gesetzt, die eine kleine Menge des Isotops  $^{22}\text{Na}$  enthalten (Abb. 4.2). Dieses Isotop hat eine Halbwertszeit von 950 Tagen (2,6 Jahre), die Marker hatten zu Beginn des Projekts 2007 eine Aktivität von je  $37\text{ kBq}^2$ . Diese PET-Marker erscheinen als deutliche Punkte auf den PET-Bildern. Die Anordnung der Marker orientiert sich am kartesischen Koordinatensystem. Zudem tragen die PET-Marker mit ihren bekannten Aktivitäten bei, die gemessenen Aktivitäten im Bohrkern quantifizieren zu können.



**Abb. 4.2:** PET-Marker ( $^{22}\text{Na}$ -Quelle in einem Kunststoffquader) neben einem in die Plexiglashülle eines Bohrkerns eingelassenen Stahlkugeln, welches als CT-Marker dient.

**Radiotracer** Als Radiotracer werden die Isotope  $^{18}\text{F}$  und  $^{124}\text{I}$  in Form von Kaliumfluorid und Kaliumiodid verwendet.  $^{18}\text{F}$  hat eine Halbwertszeit von 109,77 Minuten und eignet sich daher sehr gut für Kurzzeitexperimente. Allerdings kann es nicht für Proben eingesetzt werden, deren Lösungen signifikante Mengen Calcium enthalten, da es als Calciumfluorid ausfallen würde. Die Halbwertszeit von  $^{124}\text{I}$  ist mit 4,176 Tagen ideal für die hier untersuchten Gesteine, da sich einige der Durchflussexperimente über mehrere Wochen erstrecken. Obwohl Fluor sehr reaktionsfreudig ist und die zahlreichen Spezies des Iods äußerst unterschiedliche Sorptions- und Transporteigenschaften aufweisen (HU *et al.* 2005), werden Kaliumfluorid und Kaliumiodid in Kombination mit Salinargestein jedoch als überwiegend konservativ angenommen.

<sup>2</sup>37 kBq entsprechen  $1 \cdot 10^{-6}$  Curie.

**Inaktiver Tracer** Als Vorbereitung zu den PET-Messungen werden Durchflusseexperimente mit Eosin (Tetrabromfluorescein) durchgeführt, um Anhaltspunkte für die mittleren Fließgeschwindigkeiten in den Kernen und für die Planung der Messintervalle des PET zu erhalten. Die Eosinhalte in den Proben der austretenden Lauge werden mit einem Fluorometer (Model 10-AU-005 Field Fluorometer von Turner Designs) gemessen. Die Langzeitstabilität von Eosin in gesättigten Laugen wurde im Rahmen dieser Arbeit nachgewiesen (Abb. 4.3 oben). MAGAL *et al.* (2008) empfehlen zwar Eosin in hochsalinaren Wässern nicht einzusetzen, da dessen Fluoreszenz mit steigender Salinität absorbiert wird, jedoch ist dieser Effekt mit entsprechender Verdünnung der Lösung reversibel (Abb. 4.3 mittig und unten). Die Probenmengen von meist ein bis zwei Millilitern müssen ohnehin technisch bedingt mit destilliertem Wasser auf 20 ml aufgefüllt werden, da dies die Mindestwassermenge für eine Messung im Fluorometer ist. Bei dieser Verdünnung wird die volle Fluoreszenz des Eosins wieder wirksam.

Der relative mittlere Fehler des Fluorometers wurde zu 1,67 % bestimmt, der relative Fehler bei der Verdünnung liegt bei  $\geq 1,4$  %, durch Verdunstung treten  $\sim 10$  % Fehler auf, daraus ergibt sich ein gesamter relativer mittlerer Fehler von  $\sim 10$  %.

**Aktivitätsmessungen und chemische Analysen der Lösungen** Die Durchbruchkurve der Aktivität in der austretenden Lösung eines Durchflusseperiments wird mit einem Durchflussszintillator (GABI von Raytest GmbH) ermittelt, um eine Referenz der ausgetretenen Aktivität zu der vom PET registrierten Aktivität zu erhalten, die somit besser quantifiziert werden kann.

Die chemische Zusammensetzung der injizierten und der ausgetretenen Lauge wird ionenchromatographisch (mittels Dionex DX 100) untersucht, um Umlösungsprozesse während des Durchströmungsversuchs nachweisen zu können. Die Analysen beschränken sich dabei auf die Hauptkationen und -anionen der enthaltenen Salze.

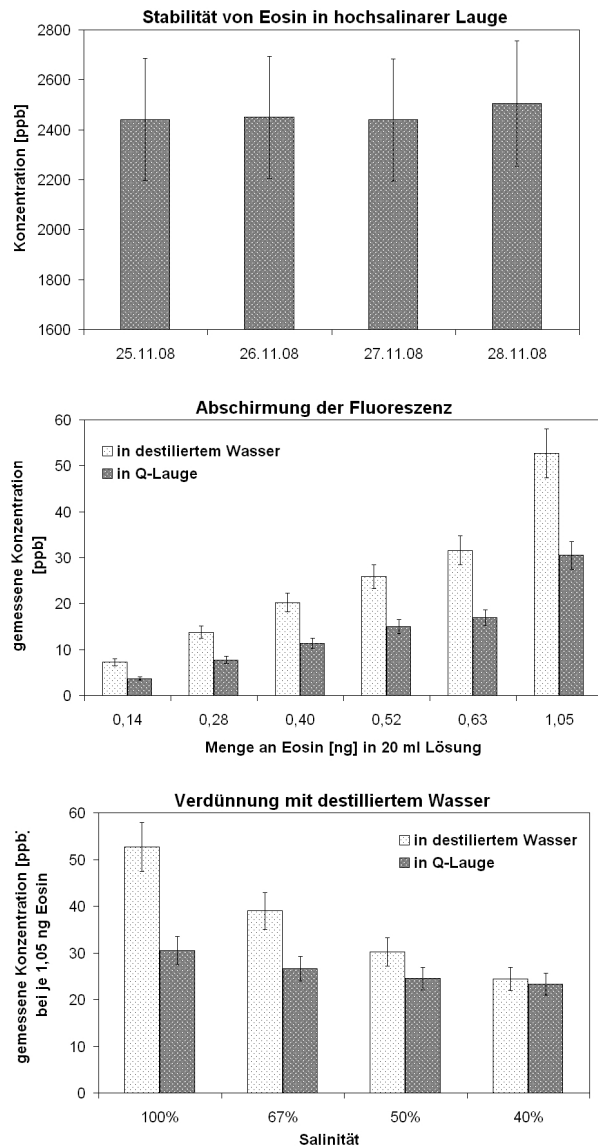
Die Proben müssen je nach Ionenkonzentration vor der Messung um den Faktor 1:10 000, 1:20 000 oder 1:40 000 mit deionisiertem Wasser verdünnt werden. Die Verdünnung wirkt sich mit einem mittleren relativen Fehler von  $\geq 1,4$  % auf das Gesamtergebnis aus. Für Kalibrierungszwecke durchgeführte Mehrfachmessungen einer Salzlauge ergaben einen mittleren relativen Fehler des Gerätes von 1,8 %, wobei der mittlere relative Fehler der jeweiligen Ionen zwischen 0,2 % und 5,38 % variieren kann. Der Fehler der durch die Verdunstung entsteht<sup>3</sup>, lässt sich nur schätzen, da die Nähe der Probennahmestelle zum PET und dessen Betriebstemperatur je nach Versuchsaufbau variieren und die Dauer der Probennahme, die von der Fließrate abhängt, ebenfalls zur Verdunstung beiträgt. Der mittlere relative Fehler wird hier ausgehend von der Differenz von Soll- und Istwerten der Probenmenge zu 5 bis 10 % geschätzt. Schwankungen in der Fließrate der Pumpe gehen ebenfalls mit 0,35 % relativem Fehler in den Gesamtfehler mit ein. Der gesamte mittlere relative Fehler der Bestimmung der Ionenkonzentrationen ergibt sich demnach zu  $\sim 10$  %.

---

<sup>3</sup>Aus dem Drainageschlauch tropft die Lösung in Auffanggläschen, eine feste und geschlossene Anordnung beeinträchtigt die Zugänglichkeit der Probe im PET.



**Abb. 4.3:** Oben: Messung von Eosin in Q-Lauge über vier Tage. Die Eosinkonzentration bleibt stabil.  
 Mitte: Verwendung von Eosin in hochsalinaren Laugen. Die jeweils selbe Menge Eosin in destilliertem Wasser und Q-Lauge bewirkt in der Q-Lauge eine um etwa 45 % verringerte Fluoreszenz gegenüber dest. Wasser. Entsprechend wird eine abweichende Konzentration ermittelt.  
 Unten: Zwei mit Eosin versetzte Proben von je 20 ml Q-Lauge und destilliertem Wasser werden stufenweise mit je 10 ml dest. Wasser verdünnt. In der Q-Lauge bewirken zunehmende Verdünnung und damit sinkende Fluoreszenzabsorption ein langsames Abfallen der gemessenen Konzentration als in dest. Wasser, bis der Effekt der Abschirmung der Fluoreszenz bei etwa 40 %iger Verdünnung der Q-Lauge verschwindet.

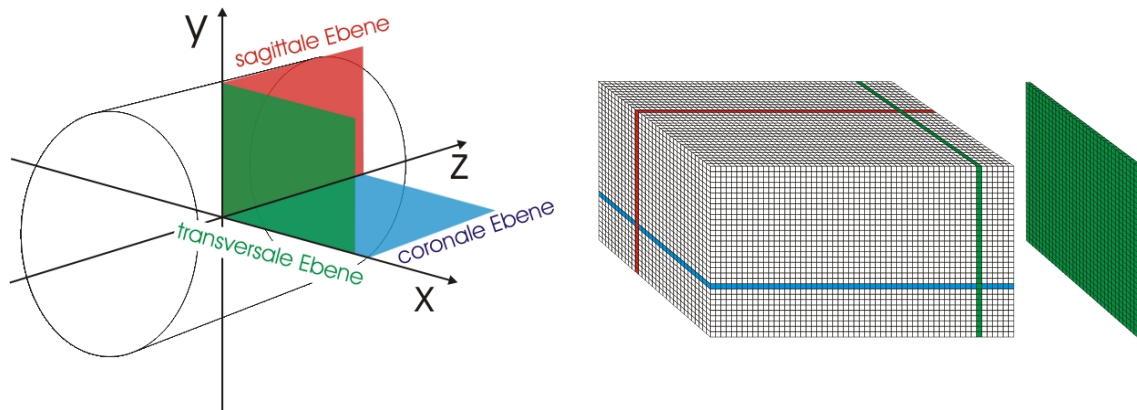


## 4.4 Auswertemethoden

### 4.4.1 Visualisierung und Datenverarbeitung

Die Datensätze der PET-Messungen liegen im Interfile-Format vor und bestehen aus einer dreidimensionalen Matrix, die für jedes Voxel im FOV des Scanners den jeweiligen Wert der gemessenen Aktivität beinhaltet. Abhängig vom Probendurchmesser und damit vom gewählten Ringdurchmesser des PET sind die Datensätze verschieden groß. Sie beinhalten zwischen  $81 \times 81 \times 95$  und  $161 \times 161 \times 95$  Voxel<sup>4</sup>. Bohrkerne und Tomogramme werden mit der Rotationsachse des Kerns (entspricht der Hauptfließrichtung) parallel zur z-Achse orientiert (Abb. 4.4). Da die Kerne bei der Messung liegen, ist in y-Richtung «oben» definiert.

<sup>4</sup>Die Anzahl der Voxel in z-Richtung, nämlich 95, ist durch die Breite des Detektorringes fest gelegt.



**Abb. 4.4:** Links: Lage des Koordinatensystems und der Schnittebenen in einem Bohrkern bzw. einem PET-Datensatz. Rechts: Schematische Darstellung eines PET-Datensatzes mit den farblich gekennzeichneten Schnittebenen transversal (grün), sagittal (rot) und coronal (blau). Ein Datensatz deckt das gesamte FOV des Scanners ab und beinhaltet zwischen  $\sim 620\,000$  und  $\sim 2\,400\,000$  Voxel. Eine Ebene in transversaler Blickrichtung ist frei gestellt.

Die Daten werden für eine vorab - Auswertung mit dem Programm Amide<sup>5</sup> (LOEHNING & GAMBHIR 2003) dargestellt. Amide erlaubt die Betrachtung zweidimensionaler Schnittebenen, für eine umfassende dreidimensionale Darstellung und Analyse der Datensätze werden diese mit dem kommerziellen Programm Avizo Fire<sup>®6</sup> dargestellt. Avizo Fire<sup>®</sup> ermöglicht ergänzend eine umfangreiche Datenverarbeitung. Durchbruchkurven (siehe Abb. 4.5), Parameterbestimmung und geostatistische Analysen werden an diesen Datensätzen mit Hilfe der freien Softwareumgebung R (R DEVELOPING CORE TEAM 2007) durchgeführt. Die entsprechenden Funktionen für Datenverarbeitung und Analysen werden in der gleichnamigen Programmiersprache verfasst und sind in Anhang D aufgeführt.

#### 4.4.2 Bestimmung hydrodynamischer Kenngrößen

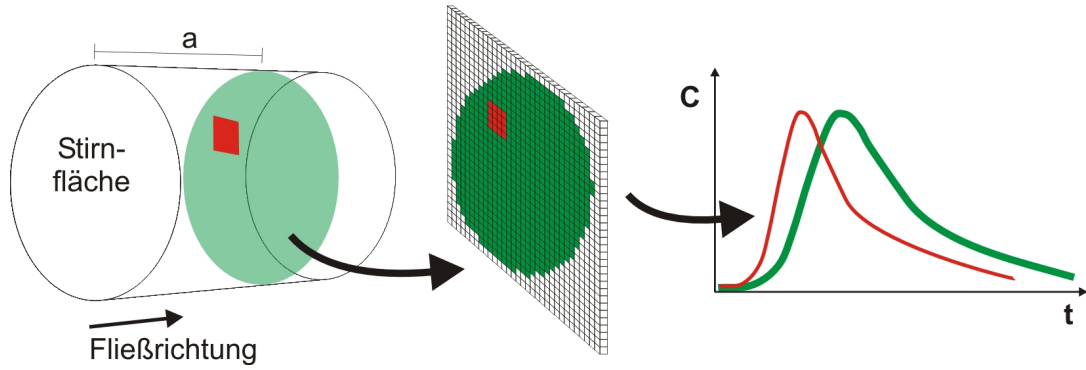
Für den einfachen Fall eines kanalisierten Fließens oder eines Säulenversuchs, bei dem ein konservativer Tracer gleichmäßig über die gesamte Aquifermächtigkeit in ein homogenes, isotropes, poröses Medium eingebracht wird, lautet die eindimensionale Advektions-Dispersions-Gleichung

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (4.1)$$

wobei  $C$  die Konzentration,  $D_L$  der longitudinaler Dispersionskoeffizient,  $t$  die Zeit,  $v$  die Fließgeschwindigkeit und  $x$  die Fließdistanz ist. Unter der Voraussetzung, dass das System geschlossen ist, d.h. die gesamte eingebrachte Tracermenge am Ausgang aufgefangen wird, die Wassermenge im System konstant bleibt und der Tracer instantan eingegeben wird,

<sup>5</sup>Eine freie Software aus der medizinischen Anwendung zum betrachten und analysieren dreidimensionaler Datensätze.

<sup>6</sup>«The 3D visualization Software for Scientific and Industrial data» der VSG Visualisation Science Group, [www.vsg3d.com](http://www.vsg3d.com).



**Abb. 4.5:** Ermittlung von Gesamtdurchbruchkurven (grün) und Teildurchbruchkurven (rot). Dargestellt ist eine aus einem 3D-Datensatz ausgewählte transversale Schnittebene zur Erfassung einer Gesamtdurchbruchkurve über den gesamten Probenquerschnitt im Abstand  $a$  von der Stirnfläche. Teildurchbruchkurven werden entsprechend nur aus einem Teil des Probenquerschnitts gebildet. Werte außerhalb des Probenumfangs werden nicht berücksichtigt.

lautet die Lösung der Gleichung nach KREFT & ZUBER (1978) (siehe auch SCHUDEL *et al.* (2002) und WERNLI (2003) für anwendungsbezogene Details)

$$C_t = \frac{M}{Qt} \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D}{\bar{v}x} \left(\frac{t}{\bar{t}}\right)^3}} \exp\left[-\frac{\left(1 - \frac{t}{\bar{t}}\right)^2}{4 \frac{D}{\bar{v}x} \frac{t}{\bar{t}}}\right], \quad (4.2)$$

wobei  $C_t$  die Konzentration zum Zeitpunkt  $t$ ,  $M$  die Eingabemasse des Tracers,  $Q$  die Fließrate,  $t$  der Zeitpunkt,  $\bar{t}$  die mittlere Fließzeit,  $\bar{v}$  die mittlere Fließgeschwindigkeit,  $\frac{D}{\bar{v}x}$  der Dispersionsparameter und  $x$  die Fließdistanz ist. Da bei den hier beschriebenen Experimenten aus oben erwähnten Gründen jedoch keine instantane Tracereingabe erfolgt, muss diese in der Literatur oft anzutreffende Gleichung 4.1 um den Term eines Stufenimpulses erweitert werden. Erweiterungen um Terme für molekulare Diffusion und Ad- oder Absorption werden auf Grund der hohen Fließgeschwindigkeiten<sup>7</sup> und der angenommenen Konservativität des Tracers nicht durchgeführt. Der radioaktive Zerfall wird bereits während der Bildrekonstruktion der Datensätze korrigiert. Das Fitting der mittleren Fließzeiten und der jeweiligen Dispersionsparameter erfolgt mit dem Programm VisualCXTFIT (TORIDE *et al.* 1999).

### 4.4.3 Variographie

Die Variographie dient dazu, einen statistischen Zusammenhang zwischen punktförmig verteilten Messdaten bezüglich ihrer Entfernung zu einander zu ermitteln. Das sich in der Praxis anschließende Krige-Verfahren erstellt auf dieser Grundlage eine flächendeckende Interpolation der Messdaten im untersuchten Gebiet. Ihren Ursprung hat diese Methode in der Rohstoffprospektion (KRIGE 1951; MATHERON 1963), wurde aber schon früh auch auf diversen anderen Gebieten wie Hydrologie (SOLOW & GORELICK 1986), Landwirt-

<sup>7</sup>Die Peclet-Zahl nimmt Werte bis 5 an.

schaft (FONTEH & PODMORE 1994) und Meteorologie (GANDIN 1963) angewendet, wo ein räumlicher Bezug aus punktuell verteilten Messdaten hergestellt werden soll.

In der vorliegenden Arbeit wird die Variographie nicht wie sonst in der Geostatistik üblich als Vorstufe eines Interpolationsverfahrens eingesetzt, sondern als Hauptmittel um anisotrope, heterogene, räumlich und zeitlich veränderliche Strukturen statistisch zu beschreiben und Korrelationen aufzuzeigen. Eine anschließende Interpolation der Messwerte durch das Krige-Verfahren ist bei den vorhandenen Daten überflüssig, da ein Tomograph bereits flächendeckende Datensätze der Strukturen liefert.

Ein Ziel dieser Arbeit ist es, einen Beitrag zu leisten für regionalmaßstäbliche numerische Simulationen der Wasserbewegungen. Die PET-Messungen sollen hierzu als Referenzbasis für die Validierung der modellierten Ergebnisse dienen. Von der numerischen Simulation der Fluidodynamik in einer heterogen strukturierten Formation kann aber nicht erwartet werden, dass die berechneten Fließmuster auf Pore und Voxel genau den gemessenen Mustern entsprechen. Dasselbe gilt für die aus ihnen ermittelten Parametern wie Fließgeschwindigkeiten und Dispersivitäten. Ohnehin ist das Ziel einer Simulation nicht das exakte Reproduzieren der Laborergebnisse, vielmehr soll sie es ermöglichen, die Laborergebnisse auf Kilometerskala und große Zeiträume zu extrapolieren. Insofern wird hier der Ansatz verfolgt, dass die errechneten Muster also «nur» eine charakteristische, geostatistische Ähnlichkeit zu den PET-Messungen - d.h. was ihre Varianz in Raum und Zeit betrifft - aufweisen sollten. Um Ähnlichkeiten und Zusammenhänge zwischen gemessenen und simulierten Fließmustern und hydrodynamischen Parametern erkennen zu können, werden PET-Messungen und Simulationen nicht nur direkt mit einander verglichen, sondern auch die jeweiligen Ergebnisse geostatistischer Analysen (Variographie) dieser Datensätze.

In Bereichen der Signal- und Bildverarbeitung und der Mustererkennung wird zwar oft die Methode der Kreuzkorrelation verwendet, um Ähnlichkeiten zwischen zwei Signalen zu ermitteln. Die Variographie hat allerdings gegenüber der Kreuzkorrelation den entscheidenden Vorteil, dass sie nicht nur einen simplen 1:1 Vergleich der Strömungsmuster vornimmt, sondern Unterschiede bzw. Gemeinsamkeiten der Daten aufdeckt, die grundlegenderer Natur sind, was bei komplexen Fließmustern in heterogenen Strukturen von Vorteil ist.

Darüber hinaus ist eine direkte Korrelation von Messdaten und simulierten Ergebnissen kaum zielführend, da die  $\mu$ XCT-Daten durch die Auflösung des CT von  $150\ \mu\text{m}$  bei Proben mit 10 cm Durchmesser (ENZMANN *et al.* 2010) eine Dimension von  $745 \times 749 \times 773$  Voxeln und damit eine gänzlich andere Skalierung als die PET-Datensätze haben. Die Lattice-Boltzmann-Simulationen (ENZMANN *et al.* 2004; ENZMANN *et al.* 2010) weisen dieselben Dimensionen auf. Da das Problem der Angleichung der Skalierung auf Rücksicht auf die zur Verfügung stehende Rechnerleistung bis dato nur in Teilen gelöst werden konnte - ein «Herunterrechnen» der CT-Daten auf PET-Datengröße ist zwar mit Detailverlust der Daten verbunden, aber praktikabel; ein «Heraufrechnen» der PET-Daten auf CT-Datengröße ist mit der vorhandenen Hardware jedoch nicht möglich - erweist sich auch unter diesem

Gesichtspunkt die Variographie als probates Mittel, da unterschiedliche Skalierungen der Datensätze für sie keine Rolle spielen<sup>8</sup>.

Die Variographie stellt ein notwendiges Mittel dar, um Aussagen über Ähnlichkeit und Vergleichbarkeit von zwei- und dreidimensionalen Datensätzen von Strömungsmustern machen zu können. Für eine umfassende Aussage müssen jedoch auch Durchbruchkurven, Varianzen, Standardabweichungen und Histogramme der Daten berücksichtigt werden, ganz zu schweigen vom Betrachten der Muster mit bloßem Auge.

Zur statistischen Beschreibung der Fließmuster wird in dieser Arbeit ausschließlich das *experimentelle Variogramm* verwendet<sup>9</sup>. Ein Variogramm ist ein Diagramm, das die Abhängigkeit der Varianz einer Menge an Messpunkten bezogen auf ihre Entfernung zueinander darstellt. Es sagt also aus, ob bei einem gewissen Abstand zueinander, unabhängig von der Raumrichtung, die Messpunkte noch miteinander korreliert sind oder nicht. Aus der Form des Variogramms lassen sich weiterhin Rückschlüsse über die Art der Korrelation unter den Messpunkten ziehen. Die zu vergleichenden Strömungs- oder Strukturmuster müssen dabei weder dieselbe räumliche Verteilung der Messwerte, noch dieselben absoluten Zahlenwerte, noch dieselbe räumliche Auflösung haben, damit ihre Variogramme miteinander vergleichbar sind, sogar unterschiedliche Bildartefakte und kleinskalige Details spielen nur bedingt eine Rolle (siehe Unterkapitel 5.4.1). Ist die räumliche Verteilung der Messwerte in einem statistischen Sinn ähnlich und liegen die Messwerte in einer ähnlichen Bandbreite vor, ergeben sich auch ähnliche Variogramme. Auf Grund ihres hohen Grades an Abstraktion bei der Beschreibung von Bildinformationen und der damit einhergehenden Reduzierung dieser Informationen, stellen Variogramme gerade bei vergleichenden Analysen von komplexen zwei- oder dreidimensionalen Strukturen ein wichtiges Hilfsmittel dar. Die statistischen Grundlagen sowie die Herleitung der Variogrammformel (Gleichung 4.3) lassen sich detailliert in AKIN & SIEMES (1988), sowie in CRESSIE (1993) und ARMSTRONG (1998) nachlesen<sup>10</sup>. Ein empirisches Variogramm berechnet sich nach der Formel

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N_h} \sum_{i=1}^{N_h} [C(x_i) - C(x_i + h)]^2, \quad (4.3)$$

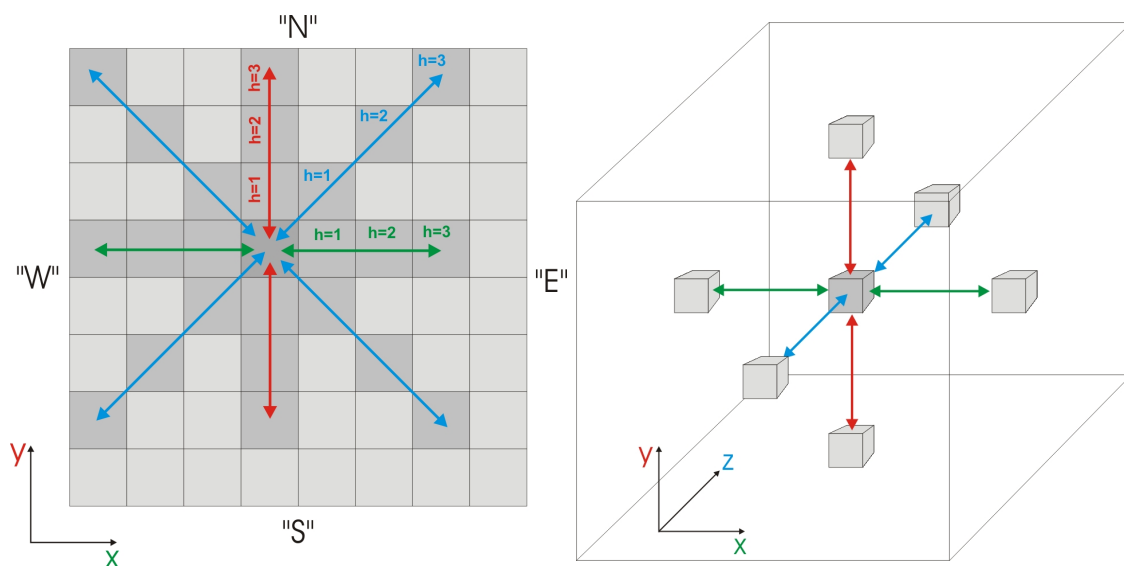
wobei  $\gamma(h)$  die empirische Varianz für alle Datenpaare im Abstand  $h$ ,  $h$  der Abstand (Schrittweite) zwischen den Punkten  $x_i$  und  $x_i + h$ ,  $N_h$  die Anzahl der Datenpaare im Ab-

<sup>8</sup>Die kleinskaligen CT- Datensätze sind ihrerseits wiederum das reskalierte Ergebnis der Rohdaten mit  $1711 \times 1719 \times 1774$  Voxeln und einer Auflösung von  $65,3 \mu\text{m}$  pro Voxel.

<sup>9</sup>In WEBSTER & OLIVER (2007) wird zwischen theoretischem, regionalem und experimentellem V. unterschieden (S. 60). Allgemein ist ein V. die Funktion eines zu Grunde liegenden statistischen Prozesses, dies entspräche dem theoretischen V., das einen Mittelwert aller V. aus allen möglichen Realisierungen darstellt. Ein regionales V. ist das V. einer bestimmten Realisierung, wenn man einen vollständigen Datensatz einer Region hat. Im vorliegenden Fall wäre das ein PET-Datensatz. Ein experimentelles V. ist nach WEBSTER & OLIVER (2007) das V., welches sich aus der Beprobung (aus den im Feld genommenen Proben) einer Realisierung/Region ergibt. Um Verwirrungen vorzubeugen, wird hier dennoch der Begriff *experimentelles Variogramm* verwendet, da es sich bei den PET-Daten um Messdaten handelt.

<sup>10</sup>Dort werden auch weitere Variographiemethoden wie Kovariogramme, Kreuzvariogramme und Korrelogramme vorgestellt, sie dienen jedoch hauptsächlich der Validierung und Auswahl der Fittingmodelle für die Variogramme und für die Art des anschließenden Krigings.

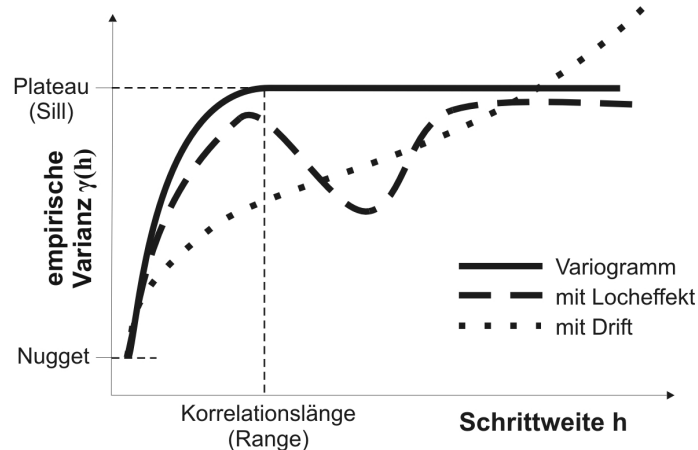
stand  $h$ ,  $C(x_i)$  und  $C(x_i + h)$  die Werte (hier die Tracerkonzentrationen) an den Punkten  $x_i$  und  $x_i + h$  ist. In einem Datensatz aus raumbezogenen Messpunkten werden also alle Zahlen, zwischen denen ein bestimmter Abstand  $h$  liegt, paarweise verglichen, indem die Differenzen zwischen ihnen gebildet werden (Abb. 4.6). Aus allen Differenzen, die sich für alle Wertepaare im Abstand  $h$  ergeben, wird die Varianz errechnet. Dies wiederholt sich für jede mögliche Schrittweite  $h$  in dem Datensatz. In einem Variogramm werden nun die Varianzen gegen die Schrittweiten aufgetragen. Auf Grund der hohen Dichte von Messpunkten, die ein Tomogramm bereit stellt, werden in den sich aus den Tomogrammen ergebenden Zahlenmatrixes die jeweiligen Voxel nur mit ihren Nachbarn in den orthogonalen Blickrichtungen und bei zweidimensionalen Matrixes zusätzlich parallel zu den diagonalen Blickrichtungen verglichen und nicht, wie bei Datensätzen aus Feldmessungen üblich, mit sämtlichen Nachbarwerten in einem bestimmten Radius. Werden nur die Differenzen ausgewertet, die in einer bestimmten Raumrichtung erhoben werden, ergeben sich richtungsabhängige Teilvariogramme. Sind diese in den verschiedenen Raumrichtungen unterschiedlich, können Aussagen über die Anisotropie der Struktur getroffen werden.



**Abb. 4.6:** Links: Erzeugung eines Variogramms aus einer zweidimensionalen Datenmatrix, die in der transversalen ( $x$ - $y$ ) Ebene eines PET-Datensatzes liegt. Der Messwert jedes Voxels wird mit den Werten seiner Nachbarn parallel zur  $x$ - (grün),  $y$ - (rot) und den diagonalen Richtungen (jeweils blau) für die jeweiligen Schrittweiten  $h$  verglichen. Die Bezeichnung der Richtungen der Teilvariogramme orientiert sich an den Himmelsrichtungen. Rechts: Erzeugung eines Variogramms aus einer dreidimensionalen Datenmatrix. Hier werden nur die Werte der Nachbarn in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung zum Ausgangsvoxel verglichen. Auf Grund der jetzt schon benötigten Rechenzeit von über 24 Stunden wird auf die Berechnung der Teilvariogramme in den 10 möglichen diagonalen Blickrichtungen im Raum verzichtet.

In den Geowissenschaften werden meist nur zweidimensionale Datensätze ausgewertet, dreidimensionale Daten werden oft in schichtgebundene Ebenen zerlegt. Die Analyse dreidimensionaler Daten durch Variographie ist nur auf ein dreidimensionales Kriging ausgelegt, generell bietet die dreidimensionale Geostatistik noch viel Potential für Ent-

wicklungen (siehe z.B. CHOI & PARK 2006). Eine Charakterisierung der Daten geschieht nur in Bezug auf die Interpolations- und Darstellungsmöglichkeiten der Datenpunkte (z.B. HOULDING *et al.* 1992). Eine Charakterisierung dreidimensionaler Datensätze mittels Variographie findet bisher jedoch nicht statt. Ebenso wenig werden verschiedene dreidimensionale Datensätze mit einander verglichen bzw. ihre Unterschiede charakterisiert.



**Abb. 4.7:** Empirisches Variogramm und seine verschiedenen Ausprägungen, wie Locheffekt und Drift. Der Nugget bezeichnet den durch statistisches Hintergrundrauschen (geogene, natürliche Variabilität und Messungenauigkeit) bedingten Effekt, dass das Variogramm auch bei kleinsten Schrittweiten eine signifikante Unähnlichkeit der Messpunkte zeigt.

Die Form eines Variogramms (siehe Abb. 4.7) wird vom Wertebereich und der Variabilität der Messwerte und von ihrer räumlichen Verteilung bestimmt. Bei unterschiedlichen Schrittweiten - und damit unterschiedlichen Paaren von Messwerten, die mit einander verglichen werden - werden auch entsprechend unterschiedliche Varianzen ermittelt. Ändern sich ab einer bestimmten Schrittweite die Varianzen zwischen den Messwerten nicht mehr, so bildet sich ab dieser Schrittweite ein Plateau aus. Diese Schrittweite wird in der Literatur auch als «Range» und der Wert der Varianz dieses Plateaus wird als «Sill» bezeichnet (MATHERON 1963).

Da die Varianz zwischen den verglichenen Messwertpaaren ein Maß für die Ähnlichkeit zwischen ihnen ist (steigende Varianz bedeutet abnehmende Ähnlichkeit), bedeutet das Erreichen eines Plateaus, dass ab dieser Schrittweite keine Orts- oder Entfernungsabhängigkeit zwischen den Messwerten mehr gegeben ist. Unabhängig von ihrer Entfernung zueinander bleibt die Varianz zwischen den Messwerten stabil, d.h. es gibt keine räumliche Korrelation mehr zwischen ihnen (AKIN & SIEMES 1988; CRESSIE 1993; ARMSTRONG 1998). Daher wird diese Schrittweite auch als Korrelationslänge bezeichnet. Ist die Verteilung der Messwerte jedoch nicht statistisch, also nicht orts-, entfernungs- oder richtungsunabhängig, etwa bei periodischen Mustern oder graduellen Veränderungen (Fading), bilden sich Plateau und Korrelationslänge nur undeutlich oder gar nicht aus und es tauchen - etwa bei periodischen Schwankungen - Locheffekte im Variogramm oder - wie bei graduellen Übergängen der Werte - eine Drift auf. Position und Ausmaß dieser Effekte im Variogramm liefern Aussagen über den Grad dieser ortsabhängigen Verteilungen.

Ein Locheffekt stellt sich im Variogramm als lokales Minimum dar. Ist der Tracer im Tomogramm clusterhaft angeordnet und die Abstände zwischen diesen Clustern nicht willkürlich, so werden bei diesen bestimmten Abständen die verglichenen Messpunkte wieder ähnlicher, die Varianz nimmt ab. Bilden diese Cluster ein regelmäßiges Muster, treten die Locheffekte als periodische Schwankungen im Variogramm auf. Ein Variogramm «driftet», wenn mit zunehmender Schrittweite der verglichenen Messpunkte die Varianz kontinuierlich zunimmt, ohne ein Minimum oder ein Plateau zu erreichen. Dies passiert, wenn sich in einem Tomogramm die Messwerte in eine Richtung graduell verändern, etwa wenn von einem Bereich mit hoher Aktivität ein Abklingen der Konzentration zum Rand des Bildes beobachtet wird. Da mit jeder neuen Schrittweite zwischen den Bildpunkten eine neue Varianz und ein neues Maß an Ähnlichkeit errechnet werden, stellt sich kein Plateau ein und das Variogramm steigt kontinuierlich bis zum Erreichen der höchsten Schrittweite.

**Signifikanzschwellen von Variogrammen** Um belastbare Aussagen über die Signifikanzschwellen der Unterschiedlichkeit zweier PET-Datensätze bzw. zwischen gemessenen und simulierten Datensätzen zu erhalten, wäre die bloße Betrachtung von Mittelwerten, Standardabweichungen oder Histogrammen der Datensätze zu kurz gegriffen. Der Vergleich der Variogramme dieser Datensätze erlaubt einen tiefer gehenden Vergleich, da sowohl Änderungen der Wertebereiche der Datensätze, als auch Veränderungen der abgebildeten Strukturen erfasst werden. Im Folgenden soll nun geklärt werden, wie am Wertebereich der Daten und ihrer Variogramme ein signifikanter Unterschied der Datensätze abgeschätzt werden kann.

Die Form von Variogrammen wird vom Wertebereich der Messwerte und der Verteilung der Werte im Raum, also der abgebildeten Struktur, bestimmt. Obwohl Variogramme eine stark vereinfachende und abstrakte Darstellungsform der Bildinformation sind, reagieren sie zum Teil auch auf kleine Veränderungen im Bild. Eine Veränderung im Wertebereich bei gleich bleibender Struktur schlägt sich in den Variogrammen fast nur in veränderten  $\gamma(h)$ -Werten nieder, die Schrittweitenpositionen von Korrelationslängen, Locheffekten und Umkehrpunkten etc. bleiben meist nahezu unverändert. Umgekehrt beeinflusst eine veränderte Struktur und ein ansonsten gleicher Wertebereich fast nur die Schrittweitenpositionen, aber kaum die  $\gamma(h)$ -Werte.

Eine Definition, ab wann sich zwei Bilder signifikant unterscheiden, existiert nicht. Es müssen die Veränderungen von einzelnen Parametern der Bilder betrachtet werden. Da bei PET-Bildern und simulierten Daten vor allem die Wertebereiche und abgebildeten Strukturen interessieren, müssen also Parameter für Wertebereiche und Struktur für die Abschätzung der Signifikanzschwelle heran gezogen werden. Für die Parameter der Wertebereiche bieten sich ihre Standardabweichungen, Mittelwerte und Mediane an. Ein Strukturparameter ist im Grunde bereits durch die Form des Variogramms selbst gegeben. Für alle markanten Punkte des Variogramms könnten z.B. die entsprechenden Schrittweiten ermittelt und diese mit den entsprechenden Schrittweiten des zu vergleichenden Variogramms abgeglichen werden. Da dies aber nur dann funktioniert, wenn beide zu ver-



gleichenden Variogramme etwa die gleiche Form haben - beide müssten in ähnlich guter Ausprägung z.B. ein Plateau, einen Locheffekt, Umkehrpunkte oder eine beginnende Drift etc. aufweisen - ist es oft praktikabler, die kompletten Graphen miteinander zu korrelieren. Dies geschieht mittels des empirischen Korrelationskoeffizienten  $r$  nach Pearson.

Die Korrelation der Datensätze selbst würde nur Aussagen darüber erlauben, ob in beiden Datensätzen die jeweils an der selben Stelle sitzenden Voxel auch ähnliche Werte beinhalten. Da die Simulation einer PET-Messung - vor allem wenn es um Phänomene wie präferentielles Fließen geht - jedoch nur das prinzipielle Geschehen nachbilden soll, ist es wenig ziel führend zu überprüfen, ob die Simulation den präferentiellen Fließkanal auch an derselben Stelle wieder gibt. Wichtiger ist, dass er sich in der Simulation in ähnlicher Ausprägung wieder findet. Die Simulation soll nur die zu Grunde liegenden Prozesse und Mechanismen der Fluidodynamik korrekt verarbeiten; ohnehin treten durch Bildartefakte und experimentelle Beschränkungen (siehe Kapitel 3), sowie den in der Simulation benutzen Konzeptualisierungen (und Vereinfachungen) der realen Vorgänge eine Reihe von Abweichungen zwischen den Daten auf. Somit ist es wesentlich effektiver, die Variogramme dieser Daten mit einander zu korrelieren, da diese die statistisch relevante, kondensierte, abstrakte Information der Bilder darstellen.

Um daraus abschätzen zu können, bis zu welcher Korrelation zwei Variogramme - und damit die Datensätze - noch als gleich oder ähnlich zu bewerten sind bzw. welcher  $r$  noch als sehr hoch eingestuft werden kann, werden zwei Messungen durchgeführt. Dabei wird die Fluidverteilung in einem Bohrkern während dieser Messungen unter leicht veränderten Ausgangsbedingungen bestimmt. Die Veränderung der Ausgangsbedingungen soll dabei absichtlich einen leichten Unterschied zwischen den beiden Datensätzen erzeugen, der auch beim Vergleich zwischen einer Messung und einer Simulation zu erwarten wäre. Diese leichte Veränderung der Ausgangsbedingungen ist so gewählt, dass diese Differenz noch als akzeptable Differenz zwischen einer Messung und einer hypothetischen Simulation dieses Experiments angesehen werden kann. Dieses Vorgehen entspricht in etwa der Vorgabe einer Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha$ .

Für die beiden Messungen werden die Daten zweier Messungen des Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein, die im Mai und Juni 2009 durchgeführt wurden, mit einander verglichen. Der Versuchsaufbau und die Auswertelgorithmen für die Bildrekonstruktion waren bei beiden Messungen bis auf die Fließrate identisch. Bei der Messung im Mai war eine Fließrate von  $0,02 \text{ ml/min}$  und bei der Messung im Juni eine Fließrate von  $0,04 \text{ ml/min}$  eingestellt. Als Tracer wurde jeweils  $^{18}\text{F}$  verwendet. Somit entstehen zwei unterschiedliche Werteverteilungen und Fließmuster in derselben Gesteinsstruktur. Es muss allerdings angemerkt werden, dass die Quantifizierung der gemessenen Intensitäten in den Voxeln zu diesem Zeitpunkt noch relativ ungenau ist, womit Änderungen der Wertebereiche der Tomogramme nur bedingt erfasst werden.

Für die beiden Experimente werden auf Grund der unterschiedlichen Fließraten nicht die Datensätze miteinander verglichen, die zur selben Zeit aufgenommen wurden, sondern diejenigen Datensätze, bei denen bereits etwa 11 % des effektiven Hohlraumvolumens in

den Kern injiziert wurde. Das entspricht bei der Messung im Mai der Aufnahme nach 555 Min nach Injektion und bei der Messung im Juni derjenigen nach 264 Min nach Injektion. Die Ausbreitungsmuster des Tracers auf der Stirnfläche und in den Spalten des Kerns weisen zwar auf Grund des durch den offenen Spalt vorgegebenen Fließwegs große Ähnlichkeiten auf, sind aber verschieden genug, um zwei unterschiedliche Tomogramme derselben Prozesse in derselben Gesteinsstruktur entstehen zu lassen.

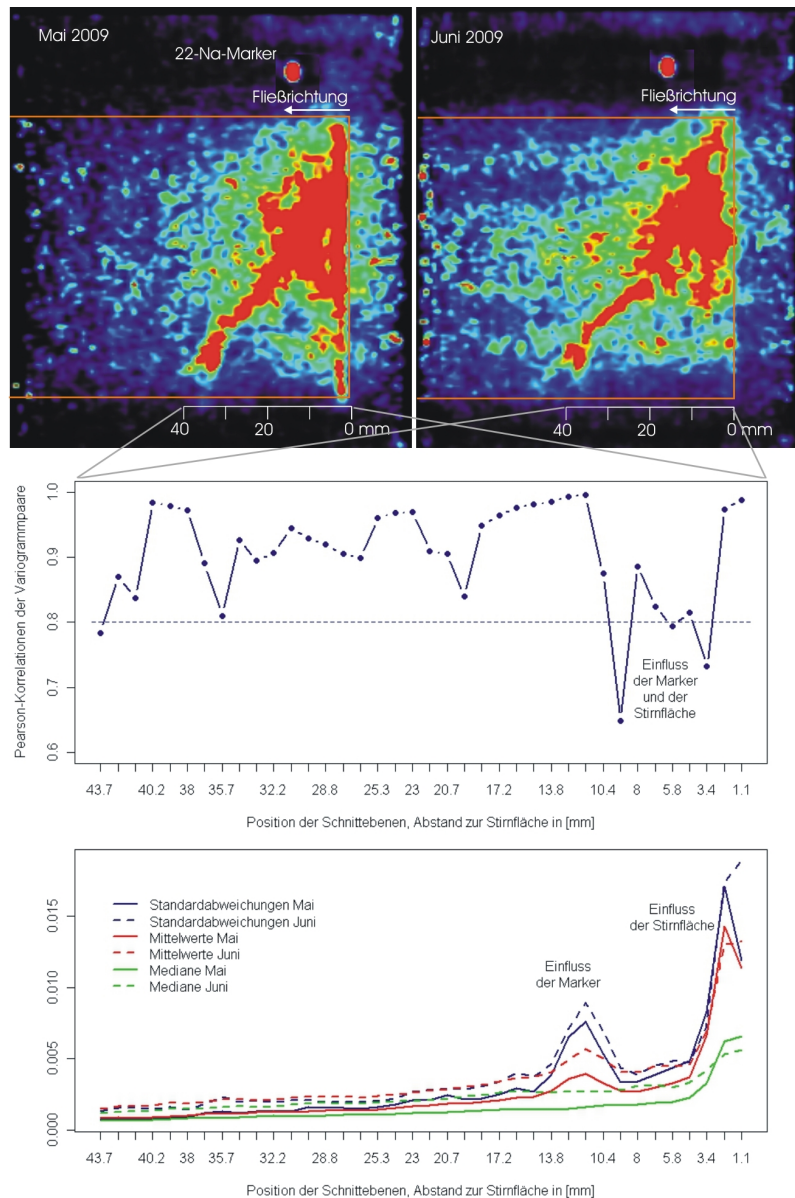
Es werden die Variogramme der Schnittebenen in transversaler Blickrichtung betrachtet, die Variogramme der Schnittebenen in sagittaler oder coronaler Blickrichtung würden sich jedoch für eine Abschätzung der Signifikanzschwelle genau so eignen. In transversaler Blickrichtung werden nun 38 Schnittebenen betrachtet, die zwischen 1,15 mm und 43,7 mm hinter der Stirnfläche liegen. Dieser Bereich umfasst die Ausbreitung des Tracers von einer Stelle knapp hinter der Stirnfläche bis zur Tracerfront, hinter welcher nur noch Hintergrundrauschen auftritt.

Von allen Schnittebenen aus diesem Bereich werden bei beiden Messungen die empirischen Variogramme erzeugt. Von diesen Schnittebenen werden weiterhin auch jeweils die Standardabweichungen, Mittelwerte und Mediane aller Voxel bestimmt. Miteinander verglichen und verrechnet werden im Folgenden nur Variogramme und Werte, die aus Tomogrammen mit jeweils demselben Abstand zur Stirnfläche stammen, also auf gleicher Höhe liegen.

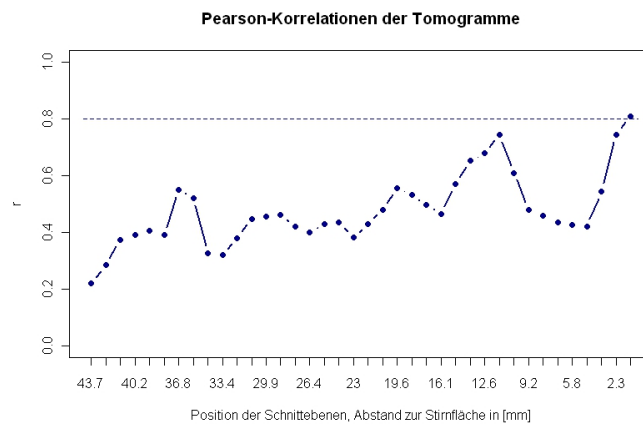
In Abb. 4.8 sind sagittale Querschnitte der Messungen von Mai und Juni 2009 des Bohrkerns dargestellt. Die Stirnfläche befindet sich jeweils am rechten Rand der durch eine orangene Linie begrenzten Probe, die Fließrichtung verläuft von rechts nach links. Weiterhin ist an der Oberseite einer der beiden  $^{22}\text{Na}$ -Marker zu sehen, die 12 mm hinter der Stirnfläche platziert sind, der zweite Marker befindet sich auf gleicher Höhe an der Seite des Bohrkerns. Die hohe Aktivität an der Stirnfläche verursacht Bildartefakte und täuscht das Vorhandensein von Aktivität vor der Probe, außerhalb der Probe und z.T. innerhalb der Probe vor der eigentlichen Tracerfront vor. Im mittleren Diagramm in Abb. 4.8 dargestellt sind die Korrelationskoeffizienten  $r$  der Variogramme, im unteren die Parameter Standardabweichung, Mittelwert und Median der Werteverteilungen der jeweiligen Tomogramme beider Daten, die auf selber Höhe zur Stirnfläche liegen.

Auf der Stirnfläche befindet sich während der gesamten Dauer der Messungen stets so viel Aktivität, dass ein bedeutendes Maß an Streustrahlung von ihr bis auf die Höhe der Marker ausgeht, weswegen in diesem Bereich die Erhebung der Korrelationen  $r$  und der Werteverteilungsparameter kaum ziel führend ist.

In Abb. 4.8 mittig und unten verlaufen  $r$  und die Wertebereichsparameter im Bereich hinter der Einflusszone von Stirnfläche und Marker sehr stabil,  $r$  liegt hier im Bereich von  $\geq 0,8$ . Die Standardabweichungen der Mai- und der Juni-Messung korrelieren mit 0,96, die Mittelwerte mit 0,98 und die Mediane mit 0,94. Dieser Bereich kann von störendem Rauschen und Streustrahlung als weitgehend unbeeinflusst und die Unterschiede somit maßgeblich als von den unterschiedlichen Strömungsmustern verursacht angesehen werden. Da die Muster als sehr ähnlich angesehen werden, kann daraus abgeschätzt werden, dass



**Abb. 4.8:** Oben: Sagittale Tomogramme des Bohrkerns, etwa in der Mitte des Kerns gelegen. Die Begrenzung des Kerns ist orange dargestellt. Jeweils oben auf den Kernen ist ein  $^{22}\text{Na}$ -Marker zu sehen, der zweite befindet sich in gleichem Abstand von der Stirnfläche auf der Seite des Bohrkerns. Hohe Aktivität ist rot, geringe dunkelblau dargestellt, Farben sind nicht skaliert. Von der Stirnfläche ausgehende Streustrahlung täuscht vorhandene Aktivität vor, um und in der Probe vor. Die Tracerverteilung zeichnet den von der Stirnfläche nach unten verlaufenden Spalt deutlich nach. Mitte: Korrelationskoeffizienten der Variogramme der jeweiligen Tomogramme beider Daten, die auf selber Höhe zur Stirnfläche liegen. Unten: Standardabweichungen, Mittelwerte und Mediane der jeweiligen Tomogramme beider Daten, die auf selber Höhe zur Stirnfläche liegen. Sowohl bei den Korrelationen der Variogramme als auch bei den Parametern der Werteverteilungen macht sich der Einfluss der Bildartefakte an der Stirnseite deutlich bemerkbar. Die von den  $^{22}\text{Na}$ -Markern verursachte Streustrahlung schlägt sich vor allem bei den Standardabweichungen der Tomogramme nieder, die Mediane sind gegen diesen Einfluss am robustesten.



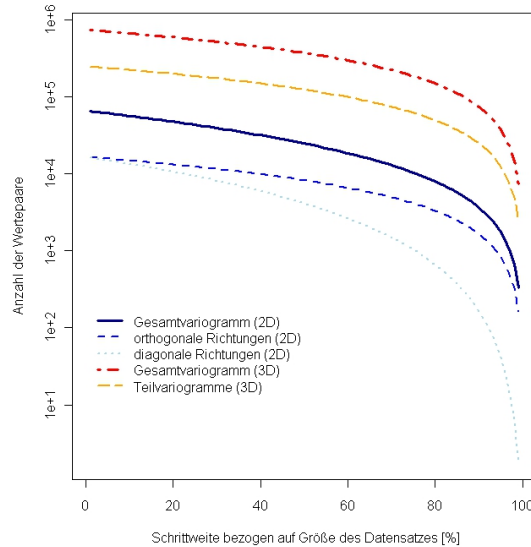
**Abb. 4.9:** Die Korrelationen der Tomogramme fallen deutlich niedriger aus als die der Variogramme. Die Einflüsse von Stirnfläche und Marker bei etwa 12 mm sind aber zu erkennen.

Korrelationen zwischen Variogrammen von  $\geq 0,8$  eine hohe bis sehr hohe Gemeinsamkeit zwischen den verglichenen Strukturen der Datensätze darstellen, liegen die Werte darunter, werden die Unterschiede signifikant. Dass die Korrelationen der Wertebereichsparameter gegen 1 tendieren, kann nicht nur mit tatsächlichen Gemeinsamkeiten der Daten, sondern vor allem mit der ungenauen Quantifizierung der Messdaten erklärt werden, obwohl die Einflüsse der Streustrahlung von Markern und Bildartefakten an der Stirnfläche deutlich abgebildet werden, wohingegen die Korrelationen der Variogramme hier vergleichsweise unempfindlich reagieren.

In Abb. 4.9 sind die Korrelationen der Messwerte aus den miteinander verglichenen Tomogrammen dargestellt. Sie korrelieren im Durchschnitt mit 0,477 deutlich niedriger als die Variogramme dieser Daten. Die Einflüsse von Stirnfläche und Marker bei etwa 12 mm sind zu erkennen, jedoch wird deutlich, dass über den direkten Abgleich der Messwerte die Gemeinsamkeiten der Daten kaum wieder gegeben werden können.

**Signifikanzschwellen in der Literatur** Um Verwechslungen mit den in der Literatur erwähnten Vertrauensbereichen der Variographie zu vermeiden, soll hier der Unterschied zwischen den dort erwähnten und den in dieser Arbeit behandelten Schwellen verdeutlicht werden, zudem wird der Begriff des in der Literatur gebräuchlicheren Vertrauensbereichs hier durch den Begriff der Signifikanzschwelle ersetzt. In der Literatur lassen sich zahlreiche Arbeiten finden, die sich mit der Ermittlung des Vertrauensbereichs (oft auch Signifikanzschwelle, Konfidenzintervall oder Unschärfe genannt) der Parameter beschäftigen, die aus Variogrammen abgeleitet werden (z.B. DELHOMME 1979; RUSSO & JURY 1987; SHAFER & VARLJEN 1990; LIN & CHEN 2005). Da Variogramme in den Geowissenschaften fast ausschließlich von im Feld gewonnenen Daten erhoben werden, um eine Interpolation punktförmiger Daten zu erstellen (Kriging), beziehen sich diese Ermittlungen oder Abschätzungen des Vertrauensbereichs in der Regel auf die Mindestanzahl der Messpunkte, die für ein verlässliches Variogramm bzw. für ein verlässliches Kriging notwendig sind (z.B.

CHANG *et al.* 1998). Da die Anzahl der Messpunkte im Feld - und damit die Anzahl der verglichenen Wertepaare bei der Berechnung der Variogramme - starken Limitierungen unterzogen ist, ist die Anzahl der Messpunkte auch der entscheidende limitierende Faktor für die statistische Verlässlichkeit der erhaltenen Parameter und der Ergebnisse des Kriging.



**Abb. 4.10:** Anzahl der Wertepaare, die bei steigender Schrittweite für die Berechnung der Varianzen noch zur Verfügung stehen. Bei einem Tomogramm, das aus hier z.B.  $91 \times 91$  Voxeln besteht (blaue Kurven), wird das geforderte Limit von 30 Wertepaaren pro Schrittweite für nahezu alle Schrittweiten deutlich überboten. Bei 3D - Datensätzen, hier z.B. aus  $50 \times 50 \times 50$  Voxeln bestehend (rote und orangene Kurve), herrscht bis zum Erreichen der maximal möglichen Schrittweite sehr hohe Konfidenz der Varianzen. (Siehe Funktion D.5).

Ein Verfahren, um den Vertrauensbereich von Variogrammen zu ermitteln, basiert auf der Verwendung eines sogenannten «random field generator», also eines Algorithmus, der virtuelle Datensätze erzeugt (z.B. RUSSO & JURY 1987; SHAFER & VARLJEN 1990; BELLIN & RUBIN 1996; DAGAN 1998; LIN & CHEN 2005; CIRPKA *et al.* 2008). Solche Modelldatensätze simulieren echte Gegebenheiten im Gelände und weichen in ihren statistischen Verteilungen in definierten Grenzen von einander ab. Die wiederum virtuellen Messwerte dieser Modelle stellen Zufallsrealisierungen echter Messungen dar, von denen wiederum Variogramme erstellt werden. Der Vorteil liegt in der kostenneutralen (nahezu beliebigen) Veränderung der Beprobungsdichte. Die relativen Standardabweichungen der Variogramme dieser Zufallsrealisierungen werden abhängig von der (virtuellen) Beprobungsdichte der Zufallsrealisierungen ermittelt und sinken erwartungsgemäß mit steigender Beprobungsdichte (LIN & CHEN 2005). Somit können Messpunktraster ermittelt werden, die in einem Kosten-Nutzen-Gleichgewicht stehen.

Die räumliche Auflösung des PET und die Größe seines FOV erzeugen Datenmengen, die diese Probleme jedoch obsolet machen. Die Anzahl der Wertepaare sinkt zwar hier auch mit steigender Schrittweite (Abb. 4.10), für die Berechnung der Varianzen von zweidimensionalen Datensätzen bleibt sie aber auch für große Schrittweiten, die sich der maximal

möglichen Schrittweite - dem Durchmesser des Tomogramms - nähern, deutlich über der von JOURNAL & HUIJBREGTS (1978) oder CHANG *et al.* (1998) geforderten Untergrenze von 28 bis 30 Wertepaaren pro Schrittweite; nach WEBSTER & OLIVER (1992) könnten 150 bis 200 Messungen für ein vollständiges Variogramm schon ausreichend sein. Für Variogramme dreidimensionaler Datensätze besteht auch bis zur maximal möglichen Schrittweite, der Kantenlänge des Datensatzes, sehr hohe Konfidenz. Der Vertrauensbereich der Variogramme selbst ist durch die hohe Zahl an Wertepaaren von bis zu 1 000 000 bereits ausreichend groß.

# 5 Ergebnisse

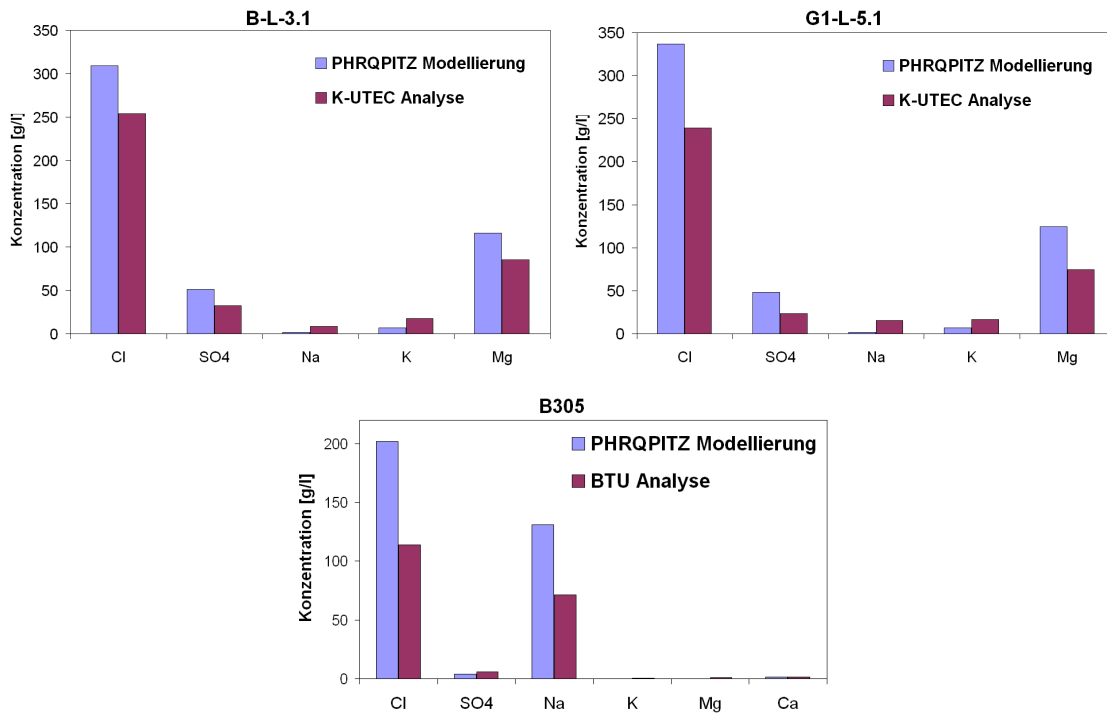
## 5.1 Chemische Analysen der Lösungen

Das in das Staßfurter Salinar eindringende Oberflächenwasser verändert sich und das umgebende Material durch mannigfaltige Lösungs- und Fällungsreaktionen. Die Analyse solcher komplexer Reaktionen in Kombination mit der Analyse komplexer heterogener Fließmuster würde den Rahmen dieser Arbeit jedoch weit übersteigen. Die Spüllösungen für die Bohrkernbohrungen sind daher so eingestellt, dass sie sich weitgehend in einem chemischen Gleichgewicht zum Gestein befinden. Doch können eventuelle Lösungs- und Fällungsreaktionen nicht ausgeschlossen werden. Die Modellierung der von der K-UITEC und der BTU Cottbus vorgegebenen Zusammensetzungen der Injektionslösungen mit PHRQPITZ ergibt, dass die Lösungen bezüglich ihrer Hauptsalze in verschiedenem Maß untersättigt sind (Abb. 5.1). Dazu kommt die erhöhte Temperatur im PET-Scanner während der Messungen, wodurch Bohrkern und Lösung wärmer werden, was wiederum Umlösungsprozesse begünstigen kann und die Fließwege im Kern verändert. Angestrebt ist jedoch eine chemisch weitgehend inerte, rein auf Advektion und Dispersion basierende Fluidodynamik.

Um dies zu überprüfen, werden daher während der Durchströmungsversuche am Anhydrit, am Buntsandstein und am belasteten Steinsalz die injizierten und die aus den Kernen austretenden Lösungen ionenchromatographisch untersucht. Durch wiederholte Messungen der Injektionslösungen (Spüllösungen) werden die Salzkonzentrationen in den angesetzten Lösungen kontrolliert und der Gerätefehler bestimmt. Die Proben der Austrittslösungen werden teilweise schon während der Phasen der Flutung und Vorkonditionierung genommen und über den gesamten Zeitraum der jeweiligen Durchströmungsexperimente.

Die Analysen der absoluten Konzentrationen der Austrittslösungen zeigen stellenweise deutliche Schwankungen, etwa beim Hauptanhydrit (Abb. 5.2, links). Hier fallen vor allem die Chlorid- und Magnesiumkonzentrationen, die Hauptkomponenten der G1-L-5.1-Lösung, aber auch in der Tendenz die Konzentrationen aller anderer Ionen während des Messverlaufs stark ab, um danach wieder anzusteigen. Deutliche Schwankungen finden sich auch bei den absoluten Konzentrationen der Lauge im Sandstein (Abb. 5.3, links). Hier schwanken vor allem die Hauptkomponenten der B305-Lösung Chlorid und Natrium. Die absoluten Konzentrationen der Ionen beim belasteten Salz weisen nur geringe Schwankungen auf (Abb. 5.4, links). Durch die unvollständige Sättigung der Laugen und den tagelangen Kontakt mit den Bohrkernen wäre aber eher eine graduelle Veränderung der Zusammensetzung als eine zyklische zu erwarten gewesen.

Durch eine Normierung der absoluten Konzentrationen an der Gesamtmasse der Ionen lassen sich die Einflüsse durch unterschiedliche Verdünnung und Verdunstung auf die Konzentrationen kompensieren. Betrachtet man nun diese relativen Konzentrationen, ergibt sich eine nahezu unveränderte chemische Zusammensetzung über den gesamten Verlauf aller Experimente (Abb. 5.2, rechts, 5.3, rechts und 5.4, rechts). Es zeichnen sich im Rahmen der Messgenauigkeit und der Dauer der Experimente keine signifikanten Änderungen in der chemischen Zusammensetzung ab, demnach lassen sich diese Schwankungen ausschließlich auf unterschiedliche Verdunstung und Verdünnung der einzelnen Proben zurückführen.



**Abb. 5.1:** Die mittels PHRQPITZ modellierten Sättigungszusammensetzungen und von der K-UTEC AG Salt Technologies und der BTU Cottbus analysierten Zusammensetzungen der Formationswässer. Die Lösungen B-L-3.1 und G1-L-5.1 sind bezüglich ihrer enthaltenen Salze Epsomit, Bischoffit, Halit und Sylvit teilweise deutlich von einem gesättigten Zustand entfernt, ebenso die Lösung B305 bezüglich Halit.



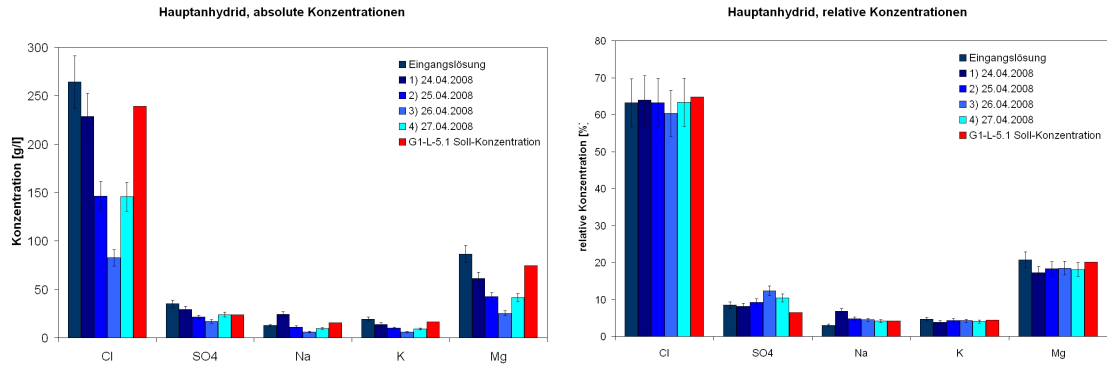


Abb. 5.2: Absolute (links) und auf die Gesamtmasse der Ionen normierte Konzentrationen (rechts) der Lösungen aus dem Bohrkern des Anhydrits.

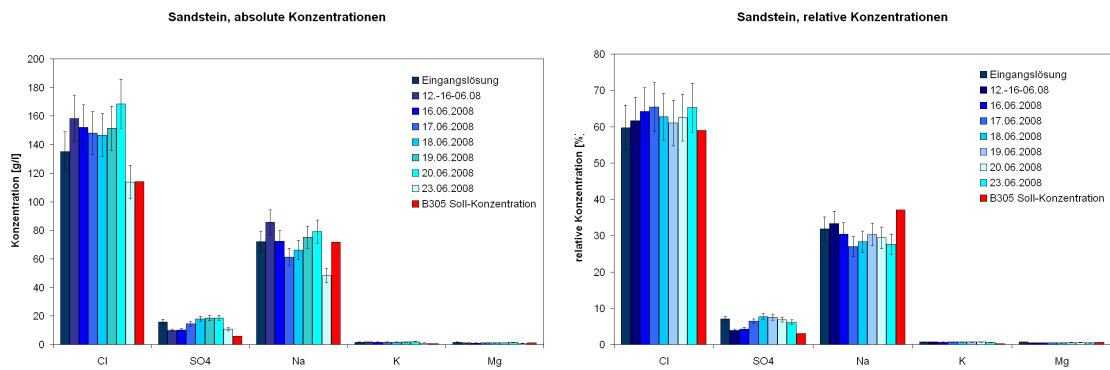


Abb. 5.3: Absolute (links) und auf die Gesamtmasse der Ionen normierte Konzentrationen (rechts) der Lösungen aus dem Bohrkern des Sandsteins.

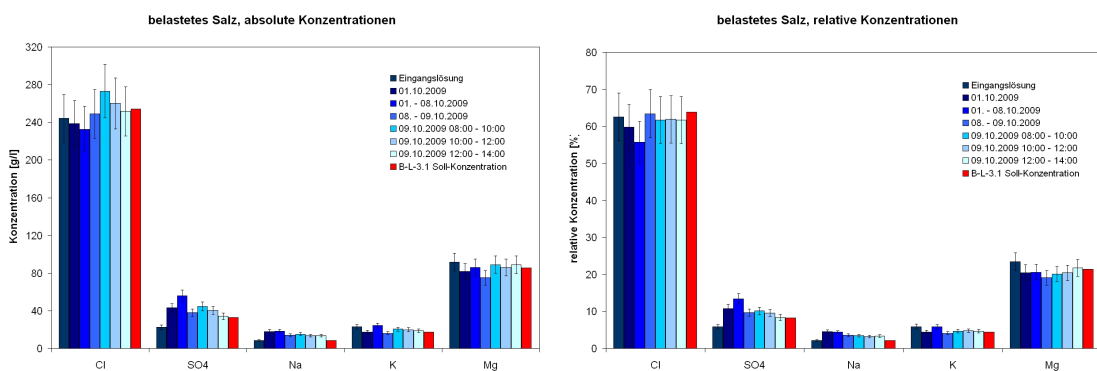
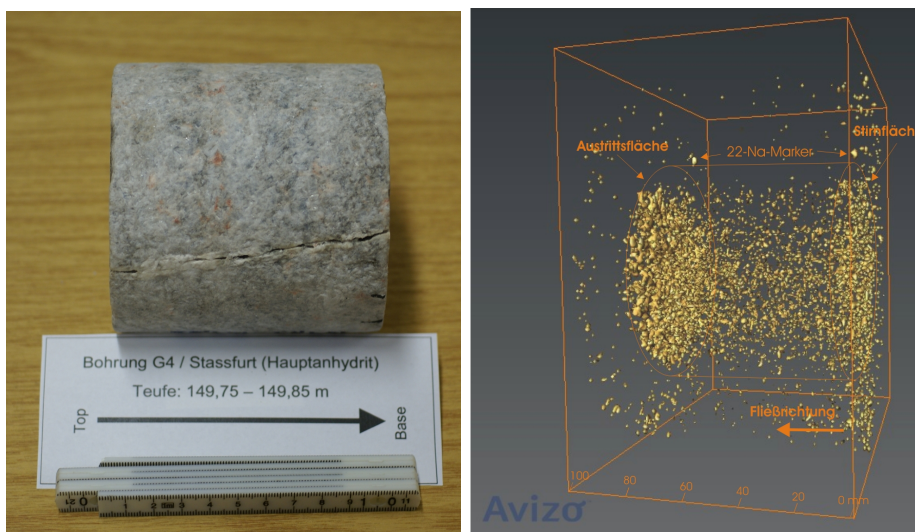


Abb. 5.4: Absolute (links) und auf die Gesamtmasse der Ionen normierte Konzentrationen (rechts) der Lösungen aus dem Bohrkern des belasteten Salzes.

## 5.2 PET- und CT-Daten und resultierende Durchbruchkurven

In den nächsten Abschnitten werden Ergebnisse über Struktur und Fließmuster präsentiert, welche direkt aus Tomogrammen bzw. über Teildurchbruchkurven abgelesen werden können, auch in Bezug auf die unterschiedlichen Charakteristika der verwendeten Bohrkern.

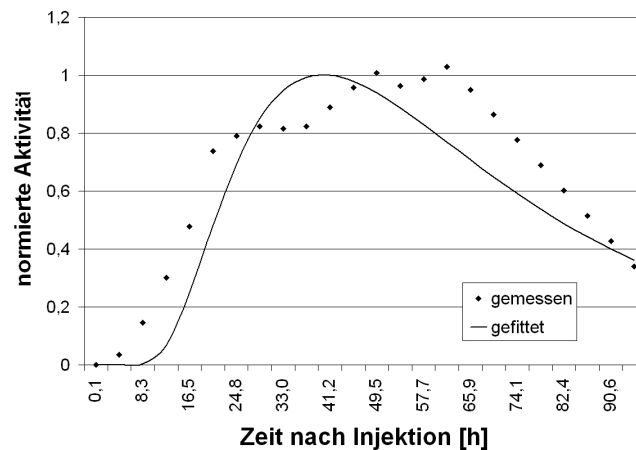
### 5.2.1 Hauptanhydrit



**Abb. 5.5:** Links: Ein Bohrkern aus dem Hauptanhydrit der Leine Formation, der von einem markanten Riss durchzogen ist. Der Riss erweist sich jedoch als verheilt, da er hydraulisch nicht wirksam ist. Rechts: Dreidimensionale PET-Aufnahme des Bohrkerns, dargestellt ist eine Isofläche von Voxeln gleicher Konzentration. Der Tracer verteilt sich diffus und ohne erkennbare Hauptfließwege zwischen der Stirnfläche (rechts) und der Austrittsfläche (links). Die Aufnahme entstand 48,75 h nach einer Stufeninjektion. Berechnete 82,1 % des gesamten effektiven Hohlraumvolumens sind vom Tracer erfasst.

Der Bohrkern aus der Bohrung G4 des Hauptanhydrits der Leine Formation (siehe Tab. 4.1 Seite 29) mit einem Durchmesser und einer Länge von je 10 cm weist äußerlich einen durchgehenden, längs verlaufenden Riss auf (Abb. 5.5, links). Der Hauptanhydrit gilt als halotektonisch und bergbaubedingt stark belastet und klüftig und daher im Allgemeinen hydraulisch gut leitend.

Es wurde ein Durchflussexperiment mit einer Dauer von fünf Tagen durchgeführt (24.04. bis 28.04.2008), 70 MBq  $^{124}\text{I}$  wurden als Tracer verwendet und mit einem Tracerimpuls von 3,3 h Länge injiziert. Die eingestellte Fließrate betrug 0,08 ml/min, der gemessene Druck an der Stirnfläche stellte sich zu 40 kPa ein. Die detaillierten Ausgangsbedingungen des Experiments und alle resultierenden hydrodynamischen Parameter sind in Tab. C.1 auf Seite xvii aufgeführt.



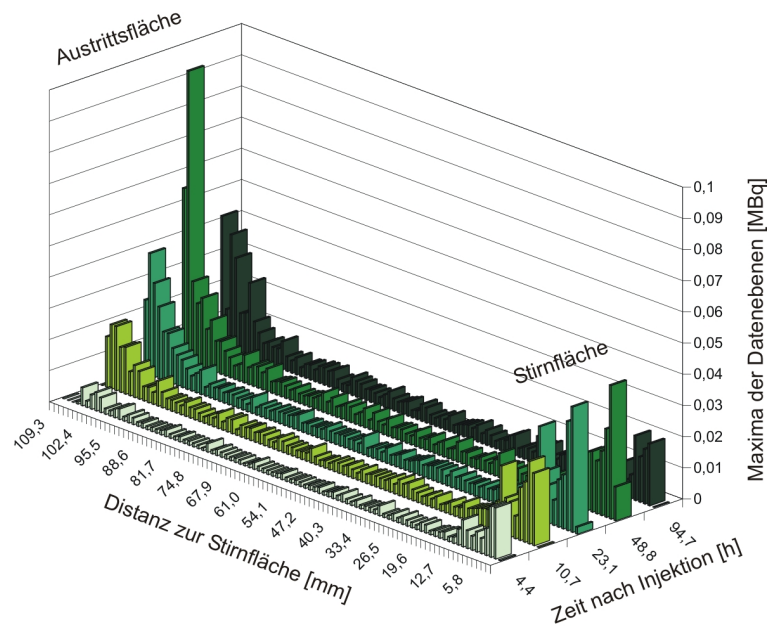
**Abb. 5.6:** Durchbruchkurve des Hauptanhydrits. Sie wird aus den summierten Werten der Voxel einer transversalen Ebene 92,00 mm hinter der Stirnfläche gebildet.

Wie man auf der PET-Aufnahme (Abb. 5.5, rechts) erkennen kann, verteilt sich der Tracer diffus und ohne erkennbare präferentielle Fließwege in der Probe. Stirn- und Austrittsfläche treten markant in Erscheinung. Der Riss in der Probe erweist sich als verheilt und hydraulisch daher nicht aktiv. An der Stirnfläche wirkt die dichte Gesteinsmatrix retardierend auf den Fluid Transport, sodass im Zwischenraum zwischen Stirnfläche und Abschlussdeckel eine große Menge Tracer verweilt, ebenso sammelt sich an der Austrittsfläche eine große Menge Tracer im Totvolumen des Drainagevlieses. Die Permeabilität dieser Probe ist mit 0,6 mDarcy gering, der  $K_f$ -Wert liegt im sehr schwach durchlässigen Bereich bei  $5 \cdot 10^{-9}$  m/s. Die Messung fand im April 2008 vor dem Vollausbau des PET statt, sodass diese Messung mit nur 8 der heute 20 Detektorkassetten durchgeführt wurde. Dies und der damalige Stand der Bildrekonstruktionsalgorithmen tragen auch maßgeblich zum Erscheinungsbild der PET-Daten bei.

Die PET-Aufnahme entstand 48,75 h nach Injektion, als etwa 82 % des effektiven Hohlraumvolumens mit Tracer beaufschlagt waren. Die Durchbruchkurve (Abb. 5.6) wurde kurz vor der Austrittsfläche, 92 mm vor der Stirnfläche aus den PET-Daten gewonnen, in dem die Aktivitäten aus den Voxeln dieser transversalen Ebene summarisch, messzeit- und halbwegszeitkorrigiert erfasst wurden. Aus der eingestellten Fließrate, dem sich aufbauenden Druckgradienten und den Parametern der gefitteten Durchbruchkurve lassen sich die hydraulischen Parameter der Tabelle C.1 ermitteln.

Nach der klassischen Vorstellung der Fluidodynamik bei Säulenversuchen sollte sich, wenn keine hydraulisch leitenden Klüfte vorhanden sind, eine in ihrer Form wohl definierte Tracerwolke durch den Kern bewegen. Dies legt die Durchbruchkurve (Abb. 5.6) auch nahe. Die PET Aufnahmen zeigen jedoch, dass sich innerhalb der Probe der Tracer nicht clusterhaft sondern diffus fortbewegt und vor allem die Aktivitätsansammlungen und die Retardation an Stirn- und Austrittsfläche zur Form der Durchbruchkurve beitragen. In Abb. 5.7 wurden exemplarisch für den gesamten Verlauf des Durchströmungsexperiments

fünf der 24 PET-Datensätze ausgewählt; dargestellt sind die jeweiligen Maxima der 95 transversalen Ebenen (Tomogramme) dieser Datensätze. Sie zeigen nur an Stirn- und Austrittsfläche deutlich erhöhte Werte, innerhalb der Probe ist die Aktivität während des gesamten Verlaufs des Experimentes sehr homogen verteilt und überschreitet zu keiner Zeit und an keinem Ort 0,01 MBq. Bei einer Eingabemenge von 70 MBq wäre - trotz der Verteilung über ca. 95 Stunden und über 623 295 Voxel (81·81·95) - ein deutlich höherer Wert zu erwarten.



**Abb. 5.7:** Maxima der transversalen Datenebenen (Tomogramme) von fünf Aufnahmen des Experiments zu verschiedenen Zeitpunkten des Durchströmungsexperiments.

### 5.2.2 Unterer Buntsandstein

Der knapp 10 cm starke und zwischen 10 und 20 cm lange Bohrkern aus der Bohrung B des Bereichs des Unteren Buntsandsteins (Abb. 5.8, siehe auch Tab. 4.1, Seite 29) ist nur auf der Stirnfläche geglättet, die mit etwa 50° geneigte Austrittsfläche ist auf Grund der hohen Brüchigkeit des Materials nicht gesägt, sondern nur leicht gebnet worden. Auf die Austrittsfläche des Kerns wird ein Drainagefließ mit eingelassenem Drainageschlauch angebracht. Der Schlauch sitzt in der Mitte der Fläche. Die an der Außenseite sichtbaren Klüfte werden mit Klebeband gegen das Gießharz geschützt, um ein zu tiefes Eindringen des Harzes und eine Versiegelung der Klüfte zu vermeiden.

Da der Bohrkern aus einer Teufe stammt, in der hochsalinare Laugen angetroffen werden, muss der Kern beim Fluten wie die Kerne aus dem Salinar behandelt werden. Auf Grund der Materialwechsel zwischen tonig-linsigen und feinsandig-schräg geschichteten Bereichen ist daher von einer unvollständigen Sättigung des Kerns auszugehen.

Es wurden vier Durchflussexperimente durchgeführt, zwei im Juni und Dezember 2008 mit  $^{124}\text{I}$  als Tracer und einer Dauer von fünf und sechzehn Tagen und zwei im Mai und Juni

2009 mit  $^{18}\text{F}$  und einer Dauer von je einem Tag (Abb. 5.9), sowie einige inaktive Vorversuche mit Eosin. Die verwendeten Aktivitäten reichten von 70 MBq bis 250 MBq, die Tracerimpulse variierten von 125 min bis 5,55 h Länge. Die eingestellten Fließraten betragen zwischen  $0,008 \text{ ml/min}$  und  $0,04 \text{ ml/min}$ , der gemessene Druck an der Stirnfläche stellte sich zu 50 000 Pa bis 100 kPa ein. Die detaillierten Ausgangsbedingungen der Experimente und alle resultierenden hydrodynamischen Parameter sind in Tab. C.2 auf Seite xix aufgeführt.

Der Tracer bewegt sich im vorderen Abschnitt hauptsächlich entlang einer um  $50^\circ$  zur z-Achse geneigten Kluft, die auch an der Außenfläche des Bohrkerns sichtbar ist. Die tonig-feinsandigen Bereiche im Kern, die man an der Außenseite erkennen kann, werden vom Tracer weitgehend umgangen, von einem Teil der Tracerwolke ist jedoch auch eine Migrationsbewegung durch den Kern zu beobachten, welche einen diffusiven Charakter aufweist. Dies wird in den Aufnahmen allerdings durch Bildartefakte gestört, die

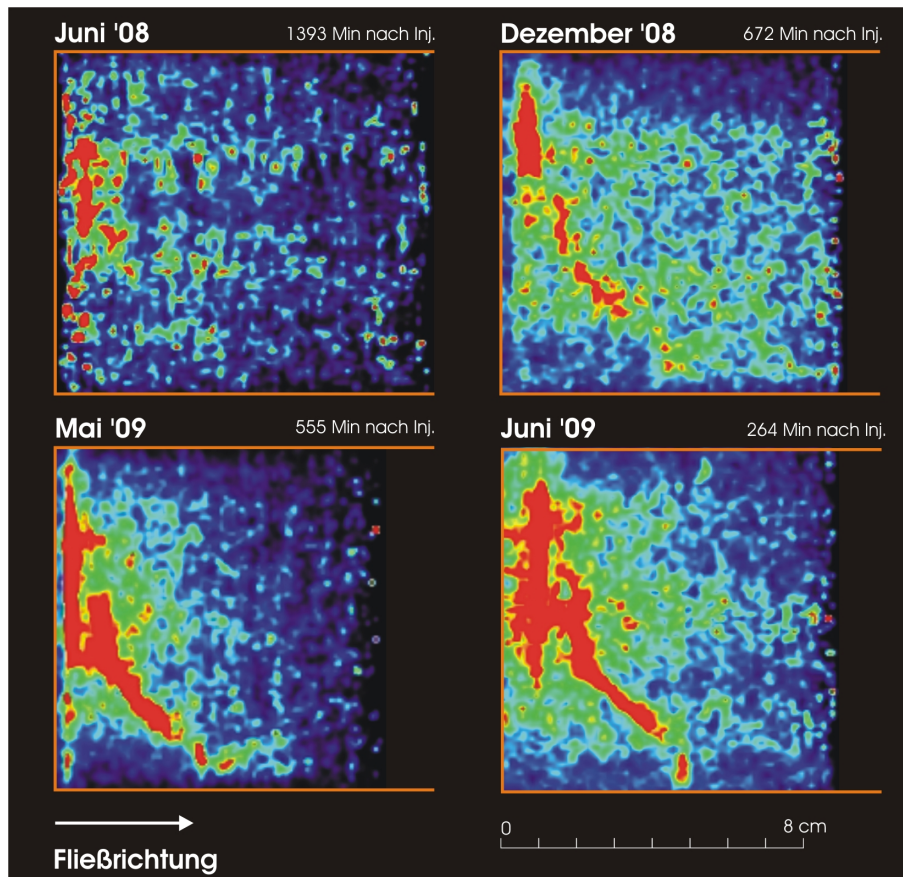
**Abb. 5.8:** In Plexiglas eingegossener Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein. Am oberen Ende ist der Drainageschlauch der Ausgangsfläche zu sehen, die Eingabefläche befindet sich im Bild an der Unterseite. Vor dem Eingießen wurden die offenen Klüfte mit schwarzem Klebeband abgedeckt, um eine Versiegelung der Klüfte mit Epoxidharz zu vermeiden.



von der sich während der gesamten Messzeit auf der Stirnfläche befindlichen großen Tracermenge ausgehen (Abb. 5.10). Hinter diesem Bereich ist bis zur Austrittsfläche nur noch eine diffuse und undeutliche Migrationsbewegung auszumachen.

In Abbildung 5.10 wird die Heterogenität der Fließpfade deutlich. Zu sehen ist erstens die hohe Aktivität an der Stirnfläche und zweitens ein großer Teil des Tracers, der sich entlang einer flächigen Struktur davon weg bewegt. Die Kombination von CT- und PET-Daten ermöglicht eine eindeutige Zuordnung zu einer bestimmten Kluft (Abb. 5.11). Die Tracerwolke teilt sich auf dieser Kluftfläche in mehrere Teilwolken auf, was auf unterschiedliche Oberflächenbeschaffenheiten der Kluft, im CT nicht erkennbare Partikel bzw. Fällungsrückstände auf der Fläche oder auf eingeschlossene Luftbläschen zurück zu führen ist.

Je nachdem wie die Schwellenwerte für die Darstellung der Tracerwolke gesetzt werden und je nach Betrachtungswinkel sind drei (Abb. 5.10) oder vier (Abb. 5.11) Finger auf der Kluftfläche zu erkennen. In Abb. 5.11 ist keine Isofläche sondern die gesamte Verteilung der Aktivität dargestellt, was eine höhere Detailfülle aber auch eine partiell geringere Deutlichkeit des Bildes bewirkt. Das Bild zeigt das Fingerring in der Kluft von der Unterseite der durchflossenen Kluft aus gesehen, die Stirnfläche liegt horizontal. Der wahren Verteilung der Aktivität kommt man ohnehin nur mit räumlichen Betrachtungstechniken

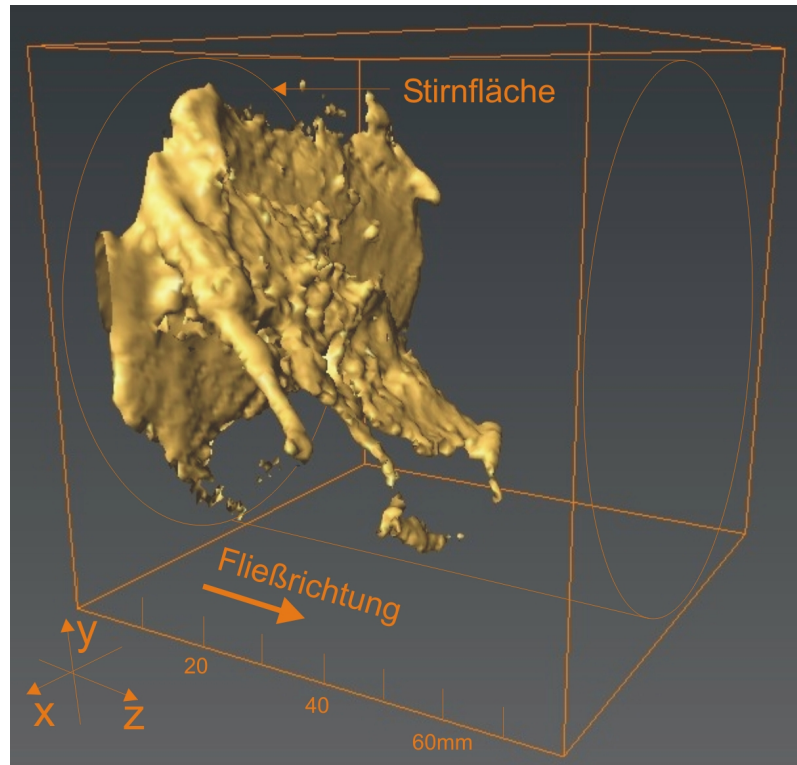


**Abb. 5.9:** Sagittale Tomogramme der vier aktiven Messungen des vorderen Teils des Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein. Dargestellt sind jeweils dieselben Schnittebenen zu den Messzeiten nach Injektion, in denen dasselbe Volumen an Lösung injiziert war (ca. 10 bis 11 ml oder ca. 13 % des Hohlraumvolumens). Kontinuierlich verbesserte Bildrekonstruktionsalgorithmen lassen zusehends weniger Artefakte und mehr Information in den PET-Bildern erkennen. Diese Algorithmen werden durch Monte-Carlo-Simulationen der Streu- und Absorptionskorrektur stetig weiter entwickelt.

nahe, die auch beliebige Drehung und Neigung des Datensatzes zulassen. Zweidimensionale gedruckte Darstellungen hingegen können letztlich nur ein eingeschränktes Bild vermitteln.

Im Gegensatz zum Bohrkern aus dem Hauptanhydrit (siehe oben) ist der Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein derart heterogen strukturiert, dass es nicht sinnvoll erscheint, hydrodynamische Parameter aus der an der Austrittsfläche erhobenen Gesamtdurchbruchkurve abzuleiten bzw. sich eine Aufklärung über die innere Struktur zu erwarten. Die Strukturen sind bezüglich der Bohrkerndimensionen zu groß und zu dominant. Brauchbare Parameter lassen sich jedoch mittels Gesamtdurchbruchkurven am Ende des von der oben erwähnten Kluft dominierten Bereichs 73,21 mm von der Stirnfläche entfernt erheben (Abb. 5.12). Teildurchbruchkurven an markanten Strukturen innerhalb des Kerns sind auf Grund der Heterogenität von Struktur und Fluidynamik ebenfalls eher zielführend (Abb. 5.24, links).

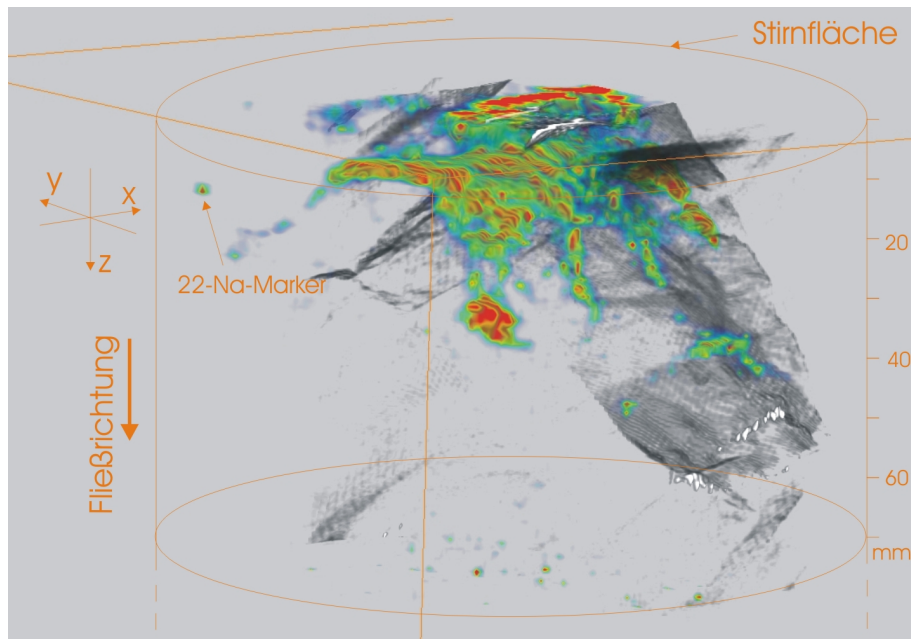
Um den gesamten Kern zu erfassen, wurden im Juni und Dezember 2008 Langzeitmessungen mit Fließraten von 0,008 und 0,02 ml/min und dem Tracer  $^{124}\text{I}$  durchgeführt.



**Abb. 5.10:** PET-Aufnahme des Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein. Dargestellt ist eine Isofläche mit gleicher Konzentration. Fließrichtung von links hinten nach rechts vorne, der Tracer fließt von der Stirnfläche in einem schräg zu dieser Fläche orientierten Spalt. Im Spalt teilt sich die Tracerwolke dabei in verschiedene Fließfinger auf. Die Aufnahme stammt von Mai 2009, 9,25 h nach Injektion, bzw nach ca. 14 % injiziertem Hohlraumvolumen.

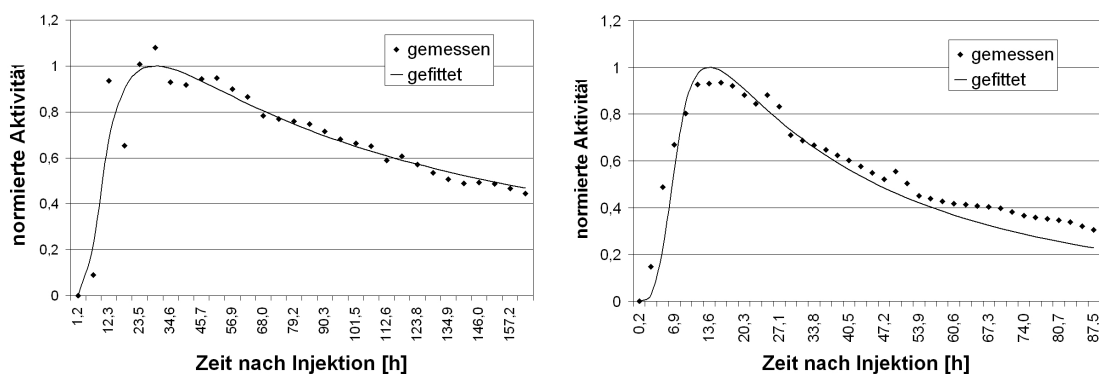
Diese Langzeitmessungen von ca. 162 und ca. 97 h ermöglichen die Erhebung der Gesamtdurchbruchkurven über eine Querschnittsfläche am Ende der Kluft (Abb. 5.12). Der vordere Bereich mit der Kluft wurde im Mai und Juni 2009 mit Fließraten von 0,04 und 0,02 ml/min und dem Tracer  $^{18}\text{F}$  innerhalb von 10 und 20 h zeitlich deutlich hochauflösender erfasst, diese Daten erlauben die Erhebung von Teildurchbruchkurven entlang der Kluft (Abb. 5.24).

Die Gesamtdurchbruchkurven über eine Querschnittsfläche am Ende der Kluft (Abb. 5.12) weisen Unterschiede in ihren Peakzeiten auf, die den Unterschieden der Fließgeschwindigkeiten entsprechen. Die Peakzeit der Dezember '08 Messung liegt mit 15,9 h etwa bei 40% der Peakzeit der Juni '08 Messung mit 34,6 h. Trotz von der Fließgeschwindigkeit teilweise unabhängig variierender Druckverhältnisse in der Probe sind weitere signifikante Unterschiede im Anstieg, Peak und Tailing nicht auszumachen, was somit keinen Hinweis gibt auf eine mögliche Veränderung der Fließraten durch die Experimente, verursacht durch Auflösung oder Auf- oder Zusammengehen von Klüften im Kern. Auch die Peakzeiten der Mai '09 und Juni '09 Messungen unterscheiden sich mit etwa 6 und etwa 3 h in dem Maß wie ihre Fließraten, was einen direkten Vergleich sowohl der PET-Daten als auch der sich ergebenden Teil- und Gesamtdurchbruchkurven und der resultierenden Parameter ermöglicht.



**Abb. 5.11:** Kombinierte PET-CT-Aufnahme des Bohrkerns. Dargestellt ist die Verteilung der Klüfte und Hohlräume, die sich mittels CT ermitteln lassen (grau) und die Verteilung des Tracers (bunt). Die Farben sind nicht skaliert, rot bedeutet hohe, blau bedeutet geringe Aktivität. Deutlich zu erkennen ist das Fingerring des Tracers auf der Kluftfläche. Die Aufnahme stammt von der Messung von Juni 2009, 252 min nach Injektion, bzw. nach 12,3 % durchflossenem Hohlraumvolumen. Quelle CT-Daten: BAM Berlin/JGU Mainz.

Abbildung 5.13 zeigt einerseits ein weiteres Phänomen der Fluidodynamik, andererseits auch die Grenzen bezüglich der Interpretierbarkeit der Ergebnisse aus Überlagerung von CT- und PET-Datensätzen. In den grau gehaltenen CT-Daten sind Bereiche mit sehr geringer Dichte weiß dargestellt, sodass hier von weitgehend offenen Wegsamkeiten ausgegangen werden kann. Über den CT-Daten sind farbig die PET-Daten gelegt. Entgegen der Erwartung bewegt sich der Tracer allerdings nur in der Nähe der Stirnfläche entlang

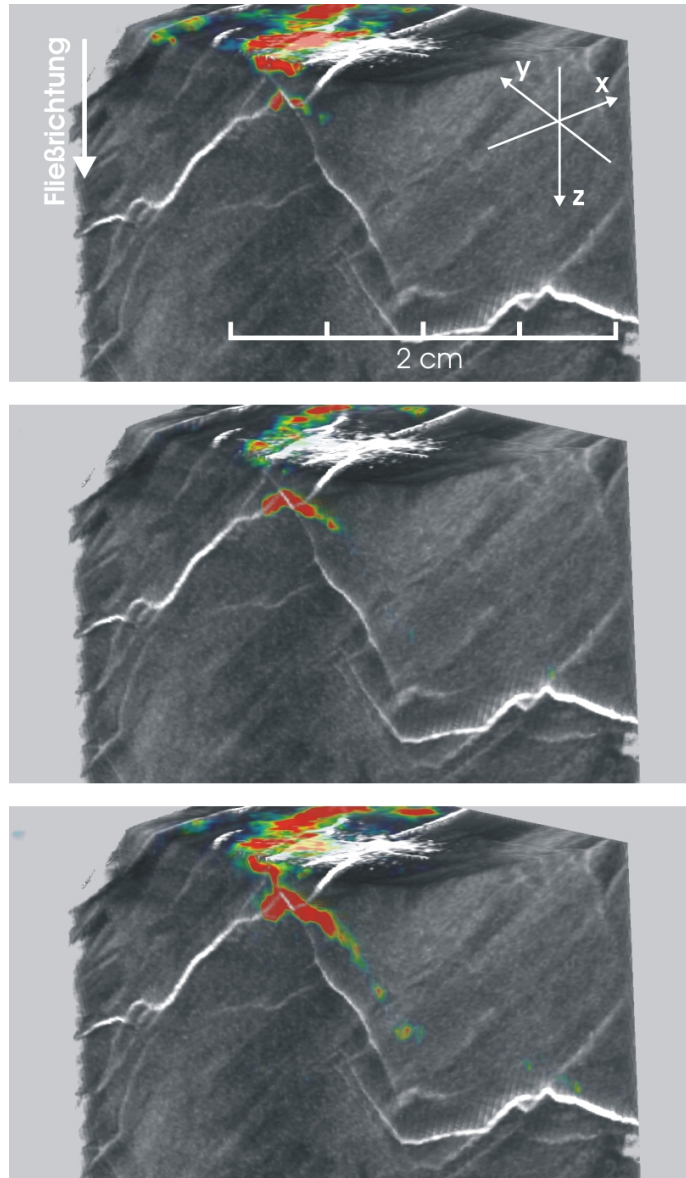


**Abb. 5.12:** Durchbruchkurve der Messung von Juni 2008 (links) und Dezember 2008 (rechts). Sie werden jeweils aus den summierten Werten der Voxel einer transversalen Ebene 73,21 mm hinter der Stirnfläche gebildet. Die Peakzeiten unterscheiden sich in dem Maß, in dem sich auch die Fließraten unterscheiden.



der offensichtlichen Bahnen. Tiefer im Bohrkern verlässt die Wolke die Kluft und fließt parallel zur Kluft. Ob kleinste, auf dem CT nicht ersichtliche Verstopfungen der offenen Klüfte und feine, ebenfalls auf dem CT nicht ersichtliche, aber gut wegsame Haarrisse die Ursache hierfür sein können, ist abschließend nicht zu klären. Ein Fehler in der Überlagerung der beiden Datensätze kann jedoch auf Grund der passenden Positionen der CT- und PET-Marker ausgeschlossen werden.

**Abb. 5.13:** Ein Ausschnitt des grau dargestellten CT-Datensatzes des Bohrkerns in Form eines Blockbildes mit überlagerten farbigen PET-Daten der Messung von Juni 2009. Die PET-Aufnahmen wurden 71 (oben), 167 (mittig) und 233 min (unten) nach Injektion gemacht (bei 3,5 %, 8,1 % und 11,3 % durchflossenem Hohlraumvolumen). In der CT-Aufnahme sind die als offene Strukturen interpretierten Bereiche weiß dargestellt. Die Farben der PET-Daten sind nicht skaliert, blau sind geringe, rot hohe Aktivitäten. Der Tracer bewegt sich anfangs entlang dieser als offene Klüfte interpretierten Strukturen, fließt aber im weiteren Verlauf deutlich oberhalb davon. Ob kleinste, auf dem CT nicht ersichtliche Verstopfungen der offenen Klüfte und feine, ebenfalls auf dem CT nicht ersichtliche, aber gut wegsame Haarrisse die Ursache hierfür sein können, ist nicht zu erkennen. Ein Fehler in der Überlagerung der beiden Datensätze kann auf Grund der passenden Positionen der CT- und PET-Marker ausgeschlossen werden. Quelle CT-Daten: BAM Berlin/JGU Mainz.



### 5.2.3 Mechanisch belastetes Steinsalz

Der 9 cm starke und etwa 18 cm lange Bohrkern aus dem Staßfurt Steinsalz (Abb. 5.14, siehe auch Tab. 4.1, Seite 29) wurde vor CT- und PET-Messungen von der TU Clausthal mit etwa 50 MPa in einem Triaxialversuch über etwa 3 bis 4 Stunden belastet. Ein charakteristisches Muster aus Belastungsrissen - zwei aufeinander stehende, etwa kegelförmige Strukturen - ist dadurch im Kern entstanden. Die Kraft hat aus Richtung der späteren

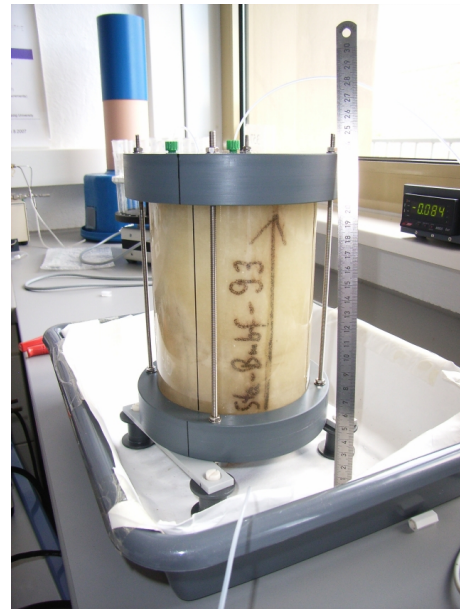
Stirnfläche auf die Probe eingewirkt, was die Probe sich im Mittelteil hat auswölben lassen (Abb. 5.15) und dort im «Treffpunkt» der beiden Kegel ein Netzwerk feiner Risse verursacht hat. In der PET-Aufnahme in Abb. 5.19 unten wirkt sich dies in einer verglichen zum restlichen Kern stark erhöhten Tracerkonzentration aus (Abb. 5.19, oben und unten).

Es wurden drei Durchflusseperimente durchgeführt, zwei mit Eosin als Tracer und einer Dauer von einem und zwei Tagen (24.-25.09. und 16.10.2009) und ein Experiment mit  $^{18}\text{F}$  und einer Dauer von einem Tag (01.10.2009). Die verwendeten Eosin-Konzentrationen lagen bei je 10 ppm, die Aktivität des  $^{18}\text{F}$  bei 70 MBq, die Tracerimpulse variierten von 25 min bis 125 min Länge. Die eingestellte Fließrate betrug je  $0,04 \text{ ml/min}$ , der gemessene Druck an der Stirnfläche stellte sich zu 1 kPa ein. Die detaillierten Ausgangsbedingungen der Experimente und alle resultierenden hydrodynamischen Parameter sind in Tab. C.3 auf Seite xx aufgeführt.

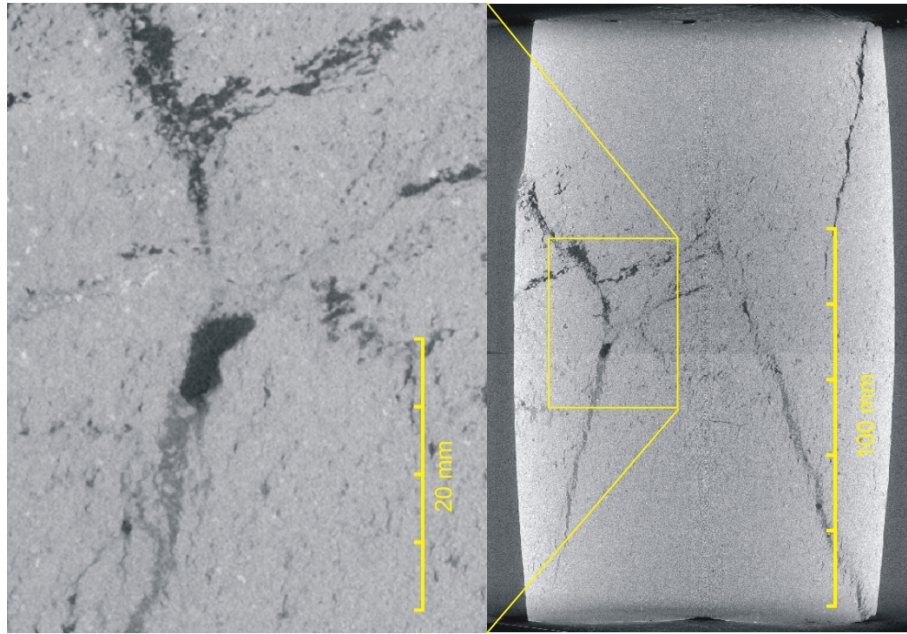
Die  $^{18}\text{F}$ -Durchbruchkurven wurden mit einem Durchflussszintillator am Ende des Drainageschlauchs an derselben Stelle erhoben, wie die Eosin-Durchbruchkurven, somit entfällt eine Korrektur durch unterschiedliche Totvolumina. Da der Transport ausschließlich über künstliche Kluftflächen erfolgt, kann über die Permeabilität des Steinsalzes selbst nichts ausgesagt werden, die PET-Aufnahmen legen nahe, dass das Salz in keiner Weise - weder advektiv noch diffusiv - am Transport beteiligt ist.

Am «Treffpunkt» der kegelförmigen Rissstrukturen scheinen große Tracermengen aus dem Nichts aufzutauchen. Eine Verbindung zu den Tracerwolken, die von der Stirnfläche kommen, ist nur schwer auszumachen. Ähnliches lässt sich auch in den Bohrkernen des Hohlraumversatzes und des Hauptanhydrits beobachten, allerdings in wesentlich kleinerem Maßstab.

Bei der Öffnung der Belastungsriss sind zahlreiche feine Partikel auf diesen Rissflächen entstanden, welche die Risse wieder partiell auffüllen, sich während der Durchströmungsversuche lösen und advektiv transportiert werden (Abb. 5.15). Die Wegsamkeiten erhöhen sich dadurch mit jedem Experiment, was sich in der Verschiebung der Peakzeiten der Durchbruchkurven (Abb. 5.16) wider spiegelt. Die ausgespülten Partikel, welche zu wiederholten Verstopfungen des Ausgangsschlauchs und einem Bodensatz in den Auffangbehältern der Spüllösung führen, entstehen nicht durch Fällungsreaktionen der Spüllösung



**Abb. 5.14:** Ein von der TUC mechanisch belasteter Bohrkern aus dem Staßfurt-Steinsalz. Der Kern ist eingegossen, die Mimik ist installiert. Er ist orientiert und wird vom Top zur Basis - entgegen der eingezeichneten Pfeilrichtung - durchspült, die Eingabefläche ist auf dem Bild oben. Die Bezeichnung Sta-Bmbf-93 geht auf die TUC zurück.

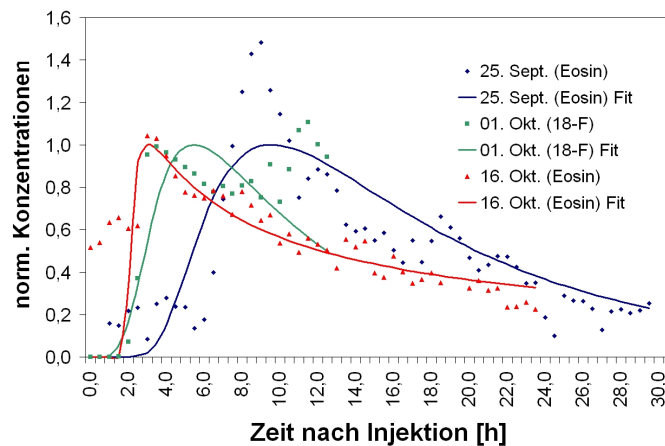


**Abb. 5.15:** CT-Aufnahme und Detailvergrößerung der Risse im mechanisch belasteten Salzbohrkern. In der Vergrößerung sind offene Risse und Klüfte (Hohlraum ohne nennenswerte Dichte) schwarz dargestellt, das Salz (deutlich höhere Dichte) erscheint hellgrau. In einigen Rissen ist Material mit geringerer Dichte als Salz (dunkelgrau) zu erkennen. Dieses Material besteht aus feinkörnigen Partikeln, die eine hochporöse und mobilisierbare Fraktion bilden. Quelle: BAM Berlin/JGU Mainz.

mit dem Kern, oder Fällung des Tracers  $^{18}\text{F}$  mit Ca-Verbindungen des Kernmaterials entstehen, was die unverändert gebliebene chemische Zusammensetzung der Spüllösung (siehe Unterkapitel 5.1) zeigt. Ferner würde auch durch immobilisierte Teile der Tracerwolke in den PET-Aufnahmen ersichtlich, wenn Teile des Tracers sich chemisch mit dem Probenmaterial verbunden hätten. Die in den Experimenten unerwünschte teilweise abdichtende Wirkung der Partikel tritt ausschließlich am Übergang von den flächigen Transportpfaden der Belastungsrisse zum eng kanalisiertem Pfad des Drainageschlauchs auf und verändert innerhalb der Probe die Fließwege nur in ihrem Durchmesser, neue Fließwege ergeben sich nicht.

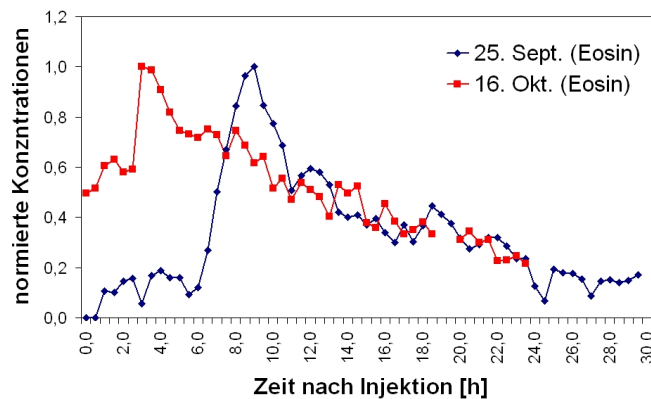
Die auf klassische Weise aus angelegter Fließrate und aus sich an der Stirnfläche einstellendem Druck ermittelten Permeabilitäten von ca. 28 mDarcy und  $K_f$ -Werten von  $2,3 \cdot 10^{-7}$  m/s der gesamten Probe (Tab. C.3) sind wenig aussagekräftig, da der sich einstellende Druck hauptsächlich von der Mimik und ihrer sporadischen Verstopfungen erzeugt wird. Die Risse innerhalb der Probe lassen durch ihre Weite keinen nennenswerten Druckaufbau zu.

Zudem offenbaren die Eosin-Durchbruchkurven in Abb. 5.17 ein vielschichtiges Fließverhalten, die zahlreichen Nebenpeaks spiegeln die durch die komplexe Rissstruktur gegebenen, verschiedenen Strömungsregime wider. Dass sich in der Probe der Tracer in Teilwolken aufspaltet, die unterschiedlich schnell und auf unterschiedlichen Pfaden die Probe durchqueren, erklärt auch, dass über die Dauer des Experiments im Drainageschlauch halbwegs-



**Abb. 5.16:** Ergebnisse dreier Durchflußexperimente des mechanisch belasteten Salzbohrkerns. Die Peakzeiten verringern sich, da sich im Verlauf der Experimente auf Grund frei gespülter Partikel die Wegsamkeiten erhöhen. Die Daten sind auf die Peaks der gefitteten Kurven normiert.

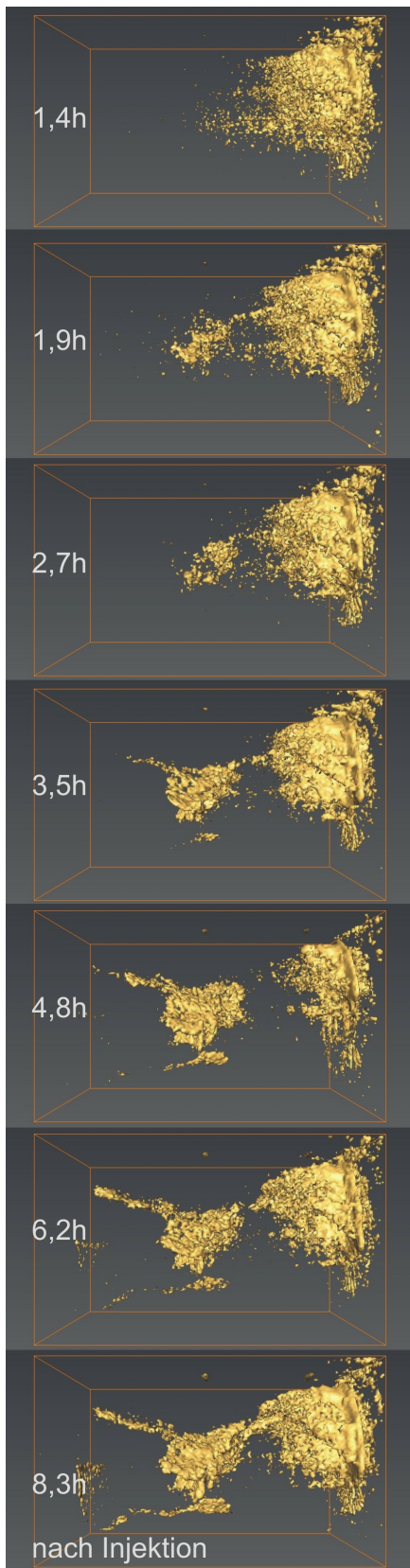
zeitkorrigiert nur 0,07 % der injizierten Aktivität registriert wurden und der überwiegende Anteil des Tracers auf sehr langsamen Bahnen in der Probe verbleibt.



**Abb. 5.17:** Mehrfachpeaks in den Durchbruchkurven, die mit Eosin als Tracer ermittelt wurden. Die zahlreichen Nebenpeaks spiegeln die durch die komplexe Rissstruktur gegebenen, verschiedenen Strömungsregime wider. Die Daten sind auf die Peaks der Kurven normiert.

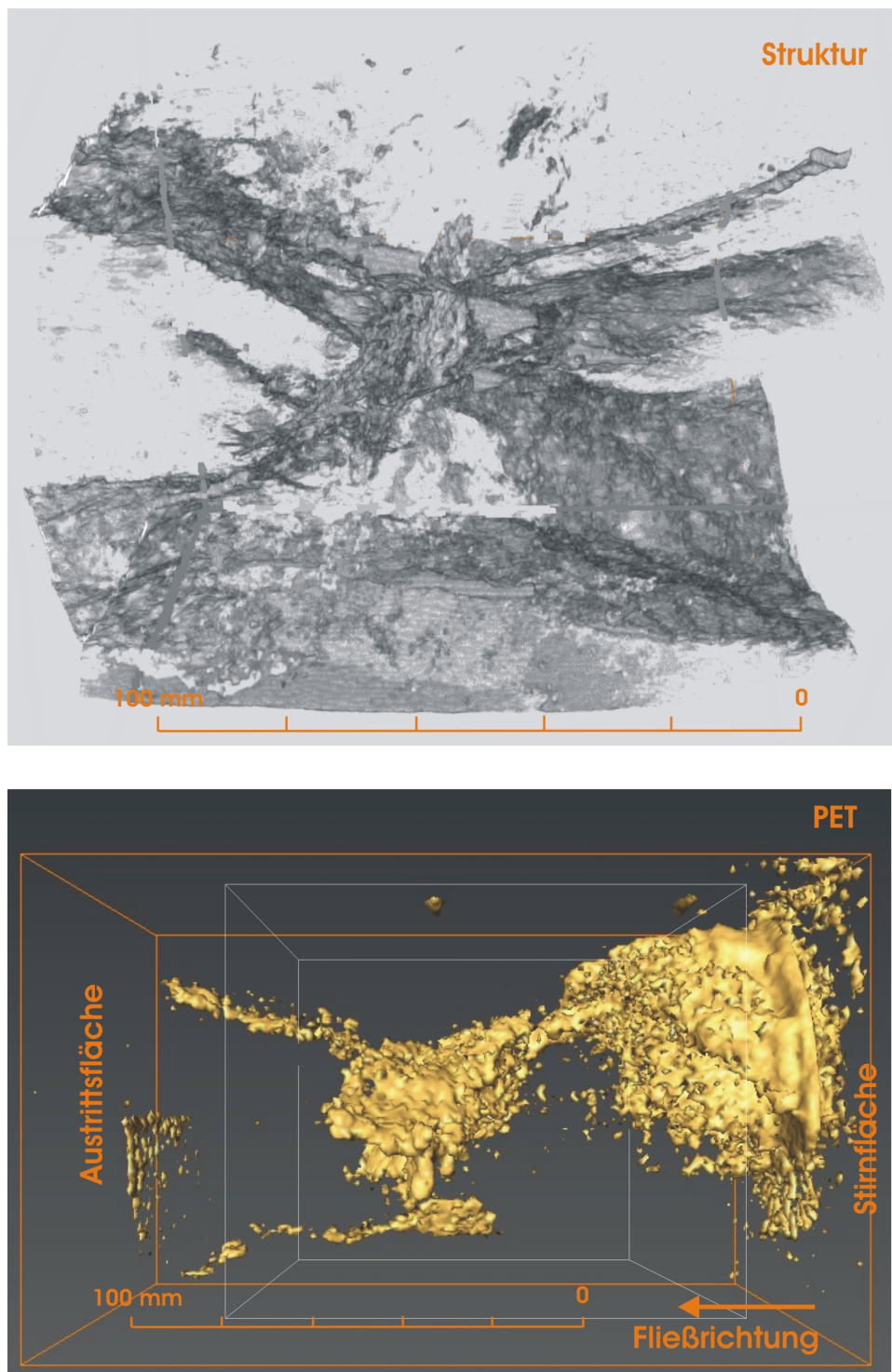
In Abb. 5.18 ist die Ausbreitung der Tracerwolke im mechanisch belasteten Salzkern dargestellt. Die Aufnahmen wurden 1,4 h, 1,9 h, 2,7 h, 3,5 h, 4,8 h, 6,2 h und 8,3 h nach Injektion getätigt. Die Fließrichtung läuft jeweils von rechts nach links. Zu erkennen ist der Eingangsbereich, der schon sehr früh große Mengen Tracer zu beinhalten scheint, was aber auf durch Streuung bedingte Bildartefakte zurück geht. Etwa im 2. Drittel des Kerns ist, als sich vom Anfangsbereich deutlich absondernde Struktur, der Bereich zu sehen, in dem sich die durch den Triaxialversuch kreuzenden Rissmuster finden. Dies ist auch der Bereich des Teilvolumens, aus welchem die Variogramme in Abschnitt 5.4.2 erzeugt wurden. In den CT- und Simulations-Daten wurde ein identisch dimensioniertes

und platziertes Teilvolumen extrahiert und ebenfalls variographiert. Die Verwendung der kompletten Datensätze scheitert an den exponentiell steigenden Rechenzeiten.



**Abb. 5.18:** Abfolge von PET-Aufnahmen des Durchflußexperimentes im mechanisch belasteten Steinsalz Kern. Fließrichtung verläuft von rechts nach links. Der orangene Rahmen umfasst die vollständige Probe von 9 cm Durchmesser und 18 cm Länge. Der von zahlreichen Bildartefakten und von der Stirnfläche ausgehende Streustrahlung dominierte Eingangsbereich (etwa im ersten Drittel) unterscheidet sich deutlich vom klar abgebildeten Bereich der sich kreuzenden Rissstrukturen (etwa mittig). Das weitgehende Fehlen von Artefakten in diesem Bereich ermöglicht hier eine geostatistische Auswertung der Messdaten.

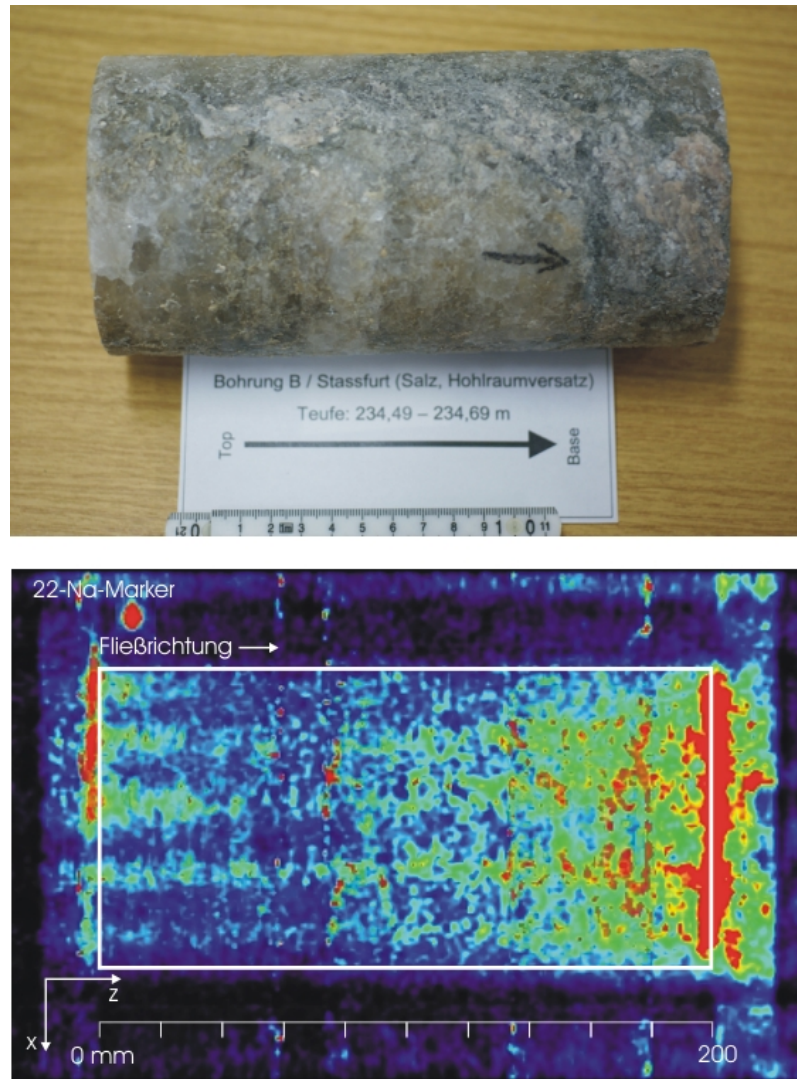
Die hier verwendete Darstellungsform der PET-Daten - eine Isoflächendarstellung - unterschlägt zwar eine große Menge an Information im Bild. Alle gemessenen Tracerkonzentrationen unterhalb eines gesetzten Schwellenwerts werden nicht angezeigt und höhere Aktivitäten im Inneren der Tracerwolke werden verdeckt. Allerdings eignet sich diese Darstellung besonders für gedruckte Bilder, da eine vollständige, detaillierte und realistische Verteilungsdarstellung nur Sinn macht, wenn die Möglichkeit zur dreidimensionalen und interaktiven Betrachtung der Daten besteht. Druckte man die vollständig dargestellten Daten auf Papier, wäre nur ein diffuser Nebel zu erkennen.



**Abb. 5.19:** Oben: CT-Aufnahme des von der TU Clausthal mechanisch belasteten Bohrkerns. Quelle: BAM Berlin/JGU Mainz. Unten: PET-Aufnahme des Bohrkerns. Dargestellt ist eine Isofläche von Voxeln gleicher Konzentration. Fließrichtung verläuft im Bild von rechts nach links, die Aufnahme entstand zwischen 5,8 und 6,2 h nach Injektion, bei ca. 79 bis 83 % durchströmtem Hohlraumvolumen. Der weiß umrahmte Bereich in der PET-Aufnahme zeigt den Umfang der Strukturdaten.

### 5.2.4 Hohlraumversatz

Der 10 cm starke und 20 cm lange Bohrkern aus dem Bereich des Hohlraumversatzes des Schachts *Leopoldshall I/II* (Abb. 5.20 (oben) und Tab. 4.1, Seite 29) ähnelt in seinen hydrodynamischen Eigenschaften dem Bohrkern aus dem Hauptanhydrit (Abb. 5.5).



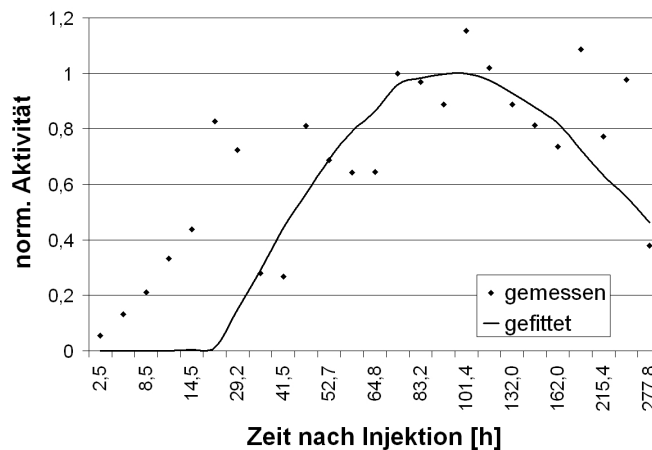
**Abb. 5.20:** Oben: Ein Bohrkern des Hohlraumversatzes aus dem Bereich des Schachts Leopoldshall I/II. Unten: Tomogramm in coronaler Schnittebene, ein aus vier Einzelaufnahmen zusammengesetzter PET-Datensatz. Bildrekonstruktionsartefakte, die zylinderförmig entlang der z-Achse auftreten, dominieren das Bild. Die vier Aufnahmen stammen zwischen 214 und 217h nach Injektion bzw. nach ca. 61 % durchflossenem Hohlraumvolumen. Die Zeitdifferenz ergibt sich durch die Dauer der Einzelaufnahmen von je 1 h.

Es wurde ein Durchflussexperiment mit einer Dauer von sechzehn Tagen durchgeführt (22.09. bis 07.10.2008), 65 MBq  $^{124}\text{I}$  wurden als Tracer verwendet und mit einem Tracerimpuls von 16,7 h Länge injiziert. Die eingestellte Fließrate betrug 0,005 ml/min, der gemessene Druck an der Stirnfläche stellte sich zu 50 kPa ein. Die Permeabilität ergab sich zu 0,065 mDarcy, der  $K_f$ -Wert zu  $5,3 \cdot 10^{-10}$  m/s. Die detaillierten Ausgangsbedingungen

des Experiments und alle resultierenden hydrodynamischen Parameter sind in Tab. C.4 auf Seite xxi aufgeführt.

Der Tracer ist im Verlauf des Durchflußexperiments hauptsächlich an der Stirn- und der Austrittsfläche zu sehen, im Inneren der Probe befindet sich scheinbar zu keiner Zeit eine sich bewegende und clusterhafte Traceransammlung (Abb. 5.20, unten), sowie scheinbar zu wenig Aktivität. Der Tracer erzeugt lediglich ein diffuses Hintergrundrauschen, das zudem durch sehr dominante Bildartefakte überlagert wird. Absorptions- und Streueffekte (siehe Kapitel 3.2.1) verursachen hier zahlreiche radialstrahlig und zylindrisch geformte Bildartefakte, welche im Tomogramm periodische Verteilungen der Aktivität vortäuschen.

Die Durchbruchkurve in Abb. 5.21 wurde aus den summierten Werten der Voxel einer transversalen Ebene 100 mm hinter der Stirnfläche aufgenommen. Eine Aufnahme näher an oder gar auf der Austrittsfläche verhindern die von dieser Fläche ausgehenden Bildartefakte.



**Abb. 5.21:** Gesamtdurchbruchkurve des Hohlraumversatzes, aus den summierten Werten der Voxel einer transversalen Ebene 100 mm hinter der Stirnfläche aufgenommen.



## 5.3 Ermittlung raumbezogener Parameter in der Literatur und mit den vorhandenen Daten

Im Folgenden werden Methoden zur Ermittlung strukturgebundener hydrodynamischer Parameter erläutert, wie sie in der Literatur zu finden sind und deren Anwendbarkeit auf die PET-Daten der untersuchten Bohrkerns betrachtet.

**Modellierte Datensätze** Wenn das Verhalten von Fluiden in heterogenen porösen Medien dreidimensional simuliert wird, dann oft auf der Grundlage ein- oder zweidimensionaler Durchflusseexperimente, da dreidimensionale nicht-invasive Echtzeit-Messmethoden für den Stofftransport in der Regel nicht zur Verfügung stehen (LUO *et al.* 2006; BISWAL *et al.* 2007; BISWAL *et al.* 2009b). Für die Simulation des dreidimensionalen Transports werden Rahmenbedingungen des Aquifers, wie die heterogene Verteilung von Porositäten und Permeabilitäten, die Verteilung der Klüfte und Oberflächeneigenschaften etc., oft mittels stochastischer Modelle erzeugt (LANG *et al.* 2001; VOGEL *et al.* 2008; BISWAL *et al.* 2009a; HILFER 2009; HILFER *et al.* 2009). Mit den so erzeugten Strukturmodellen, die einen virtuellen Gesteins- oder Bodenkörper darstellen, werden zahlreiche Durchströmungsversuche simuliert, aus welchen strukturbezogene und dreidimensionale Verteilungen der hydrodynamischen Parameter abgeleitet werden können. Die zahlreichen Wiederholungen der Simulation ermöglichen eine Fehlerabschätzung der Parameter; zusammen mit Variationen im Strukturmodell lassen sich generalisierte Aussagen über die Parameter erhalten und ermöglichen somit theoretisch ein Upscaling der Prozesse. Das Ziel ist, ein System zu erzeugen, mit dem Fließ- und Transportprozesse auf der Feldskala verstanden und vorhergesagt werden können (MICHAEL *et al.* 2010).

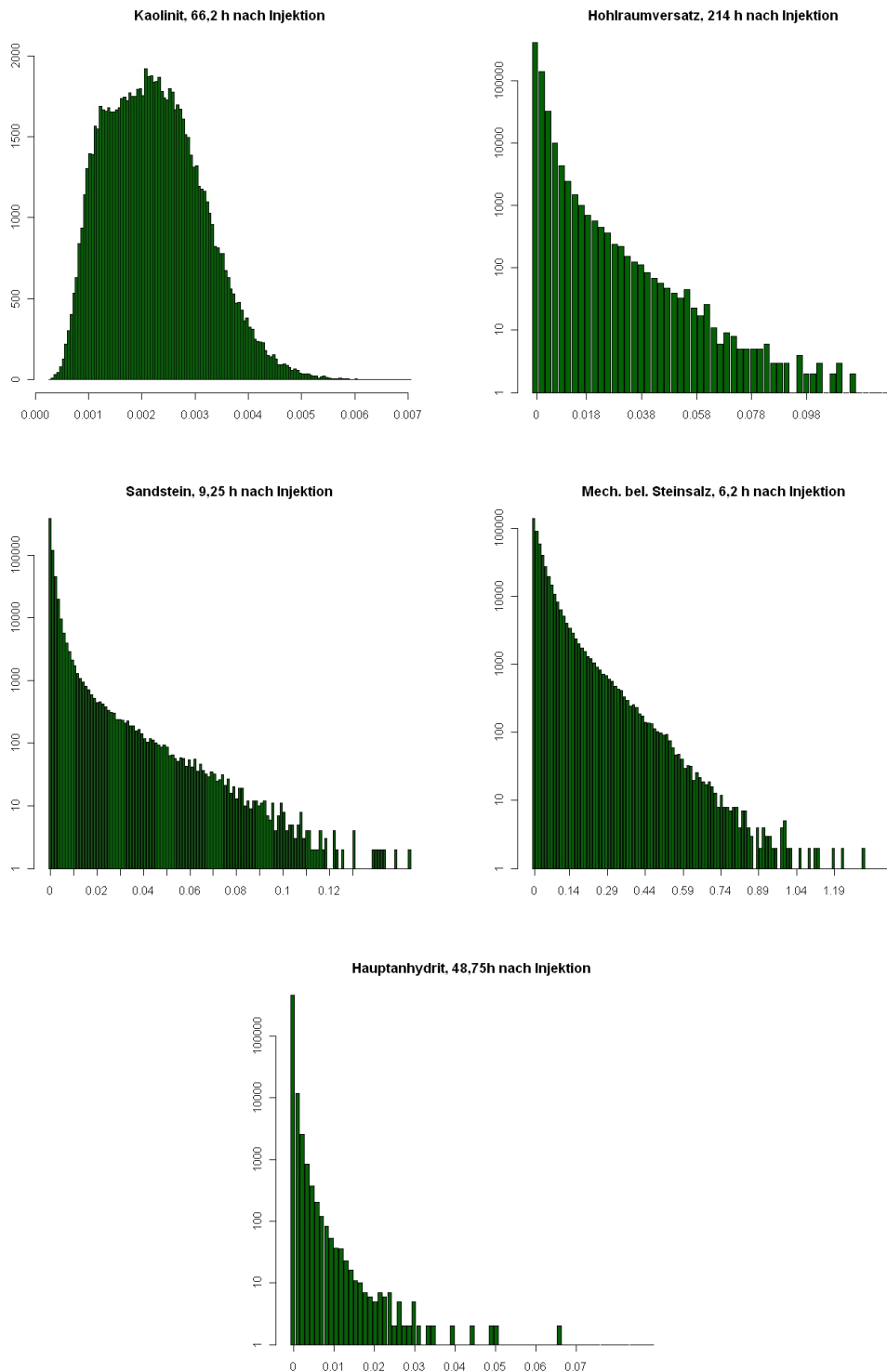
Die Ergebnisse hängen aber maßgeblich von der Art des zu Grunde gelegten stochastischen Modells ab, welches das «virtuelle Gestein» erzeugt. Zudem wird in der Regel von einer kompakten, clusterhaften Tracerwolke ausgegangen, die sich während des Experiments nicht aufteilt - und wenn, dann nur in sehr eng definierten Grenzen. Ein Vorteil dieser Vereinfachung ist, dass die Tracerwolke immer über einen oder mehrere gut definierte Massenschwerpunkte und relativ klare Grenzflächen verfügt. Dies macht die Ermittlung von räumlich differenzierten Geschwindigkeits- und Dispersivitätsverteilungen erheblich einfacher. Der Nachteil ist jedoch ein in vielen Fällen, eben auf Grund der stochastisch erzeugten Struktur und der angenommenen kompakten Tracerwolke, ein unrealistisches Bewegungsmuster des Tracers, wie z.B. in MICHAEL *et al.* (2010) angemerkt wird.

Die räumliche Verteilung von Geschwindigkeiten und Dispersivitäten in heterogenen Materialien wird z.B. bei DAGAN (1989), GELHAR (1993) oder ATTINGER *et al.* (1999) über die ersten beiden Momente der Verteilungsfunktion der räumlichen Konzentrationsverteilung des Tracers ermittelt, wobei das erste Moment die Geschwindigkeit des Massenschwerpunktes der Tracerwolke und damit die mittlere Fließgeschwindigkeit darstellt und das zweite Moment die Varianz der Tracerkonzentration und somit den mittleren Dispersionskoeffizienten. Eine ausführliche Beschreibung der «Methode der Momente» zu Ermittlung dieser

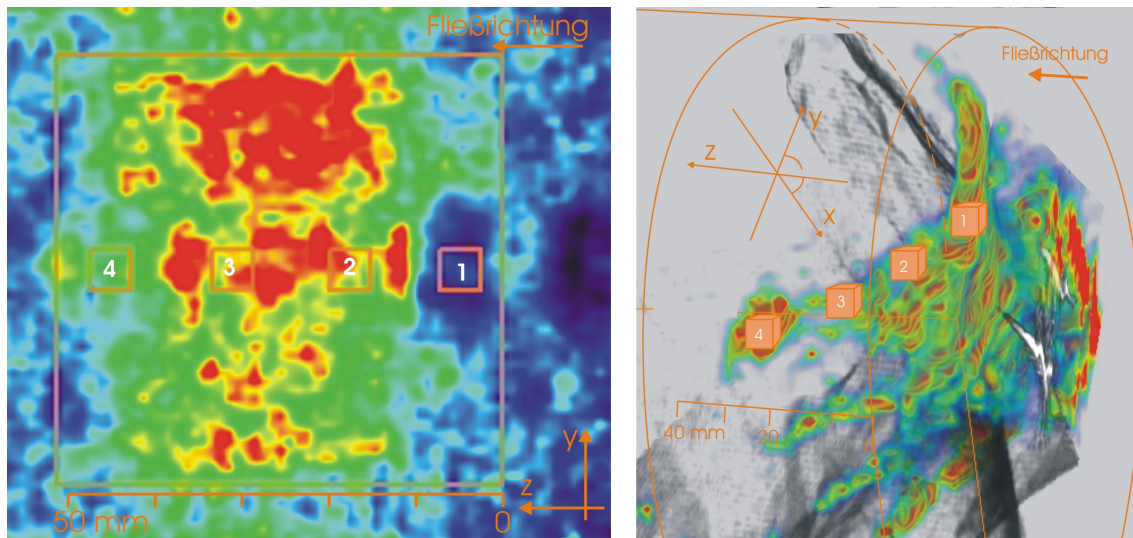
Parameter kann bei KREFT & ZUBER (1978) und MALOSZEWSKI & ZUBER (1985) nachgelesen werden. Um die Variationen dieser Parameter mathematisch zu beschreiben und daraus ein genaueres Verhalten des Tracers im Aquifer ableiten zu können, betrachten z.B. FIOROTTO & CARONI (2002), BELLIN & TONINA (2007) oder CIRPKA *et al.* (2008) die Variationen der Wahrscheinlichkeitsverteilungen (probability density function, PDF) und der kumulativen Verteilungsfunktionen (cumulative distribution function, CDF) einer Reihe von variierenden Simulationen der Tracerausbreitung in einem heterogenen Medium. Die PDF entspricht dabei dem Histogramm einer Messung, die CDF entspricht vereinfacht gesagt der Schwankung der Messwerte für das einzelne Voxel über alle durchgeführten Simulationen.

**Gemessene Datensätze** Betrachtet man jedoch mittels PET gemessene Tracerverteilungen in homogenen und heterogenen Medien, so lässt sich eine Tracerwolke mit definierbarer Oberfläche und Massenschwerpunkt lediglich in sehr homogenen, isotropen, porösen Medien, sowie weit geöffneten und einfach strukturierten Klüften beobachten. In heterogenen, anisotropen, porösen Medien lässt sich, wie im voran gegangenen Abschnitt gezeigt, oftmals nur eine teils zerteilte, teils diffuse, teils schlierenhafte Tracerverteilung beobachten. Die «Methode der Momente» ist bei diesen Daten folglich nur bedingt anwendbar. Abgesehen davon, dass eine PET-Messung nur einer einzigen Realisierung einer Abfolge von Simulationen entspricht und Messungen nicht ohne zu große Einflussnahme auf die Probe beliebig oft wiederholt werden können und daher die Variationen der Histogramme von PET-Messungen kaum ermittelt werden können, können Histogramme die Diversität der Tracerverteilungen in den verschieden strukturierten Gesteinen nur bedingt widergeben. Wie in Abb. 5.22 zu sehen ist, weichen die Histogramme des homogen strukturierten Hohlraumversatzes und des Hauptanhydrits prinzipiell nicht viel von denen des heterogen strukturierten Sandsteins und des mechanisch belasteten Steinsalzbohrkerns ab, lediglich die artifiziell erzeugte, homogene Probe aus gepresstem Kaolinit zeigt eine gänzlich andere Verteilung.

Bei den heterogen strukturierten, klüftigen Proben wäre eine Art Zweiteilung der Werteverteilung zu erwarten gewesen - viele hohe Werte in den Klüften, viele geringe Werte in der Matrix, wohingegen die homogenen Proben eine der Gauß-Verteilung ähnliches Histogramm haben sollten. Zwar ist im Histogramm der Sandstein-Probe bei etwa 0,02 Bq ein leichter Knick erkennbar und im Histogramm des mechanisch belasteten Steinsalzes bei etwa 0,04 Bq ein leichter Bauch; der fein verteilte Tracer in den Haarrissen dieser heterogenen Proben, sowie das große Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis der verzweigten und schlierenhaften Tracerverteilung mit den entsprechend zahlreichen Übergangsbereichen lassen die Histogramme jedoch ähnliche Formen annehmen wie bei homogenen Proben. Da nur in der Kaolinit-Probe eine Tracerwolke mit definierter, kompakter Form voran geschritten ist, ist auch nur hier die zu erwartende Gauß-ähnliche Verteilung zu sehen, in allen anderen Proben finden sich sehr viele kleine Werte aus den Rand- und Übergangsbereichen und eine rasch abnehmende Zahl höherer Werte.



**Abb. 5.22:** Histogramme der abgebildeten PET-Daten aus Abschnitt 5.2. Die Histogramme des homogen strukturierten Hohlraumversatzes und des Hauptanhydrits weichen prinzipiell nicht viel von denen des heterogen strukturierten Sandsteins und des mechanisch belasteten Steinsalzbohrkerns ab, lediglich die artifiziiell erzeugte, homogene Probe aus gepresstem Kaolinit zeigt eine gänzlich andere Verteilung. (Siehe Funktion D.3).



**Abb. 5.23:** Links: Sagittales Tomogramm der Kaolinit-Probe am Zeitpunkt 66,2h nach Injektion mit den vier Zonen, innerhalb welcher vier Teildurchbruchkurven ermittelt werden. Rechts: Position der vier Zonen innerhalb eines Fließfingers entlang der Kluft im Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein am Zeitpunkt 9,25h nach Injektion. Die Zonen beinhalten je 125 Voxel, über deren Mittelwerte sich im Verlauf der Experimentes je vier Teildurchbruchkurven ergeben.

Gemessene dreidimensionale Datensätze von sich in heterogen strukturierten Umgebungen bewegendem Fluiden sind bis dato selten. Mit dem Geo-PET des ehemaligen IIF<sup>1</sup> gelangen GRÜNDIG *et al.* (2006) Messungen lokaler Geschwindigkeits- und Dispersivitätsverteilungen in einer Granitprobe, die auf die Geometrie einer weit geöffneten Kluft in dieser Probe bezogen waren und GRÜNDIG *et al.* (2007) ermittelten Fließgeschwindigkeiten und Dispersivitäten in einer heterogen strukturierten Sedimentsäule mittels der «Momenten-Methode». Dies gelang jedoch nur, indem sie die komplexe Geometrie der Tracerwolke in einzelne Segmente parallel zur Hauptfließrichtung zerlegten und die Tracerverteilung innerhalb der Segmente integrativ betrachteten.

**Teildurchbruchkurven** Die vorliegenden PET-Daten und die Kombination dieser mit den CT-Daten ermöglichen es jedoch, gezielt einzelne Teildurchbruchkurven an ausgewählten Strukturen zu erheben, mit deren Hilfe strukturabhängige hydrodynamische Parameter gezielt ermittelt werden können. Vor allem bei heterogenen, sich verzweigenden Tracerverteilungen ist diese Vorgehensweise erfolgversprechender als die «Momenten-Methode».

Innerhalb der Probe aus dem Unteren Buntsandstein (Abb. 5.8, S. 53) werden hierzu entlang der Kluft, in welcher das Hauptgeschehen des Transports statt findet, vier Zonen definiert, welche jeweils  $5 \times 5 \times 5$  Voxel beinhalten<sup>2</sup> (Abb. 5.23, rechts; Tab. 5.1). Die gemittelten Messwerte der Voxel der jeweiligen Zonen im Verlauf des Durchströmungsexperi-

<sup>1</sup>In Kombination mit dem Human-Scanner der Nuklearmedizin Leipzig.

<sup>2</sup>Die Erfassung jeweils nur eines einzigen Voxels oder einer deutlich geringeren Anzahl pro Zone würde zu große Schwankungen der Teildurchbruchkurven auf Grund von Ausreißereffekten verursachen.

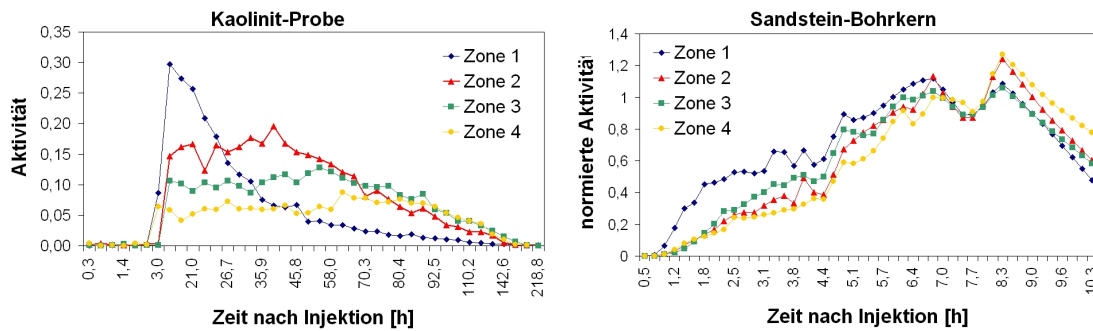
	Abstand zur Stirnfläche [mm]	$D_L$ Sandstein [ $\frac{m^2}{s}$ ]	$\frac{D_L}{x}$ Sandstein [ $\frac{m}{s}$ ]	$D_L$ Kaolinit [ $\frac{m^2}{s}$ ]	$\frac{D_L}{x}$ Kaolinit [ $\frac{m}{s}$ ]
Zone 1	5,0	$9,7 \cdot 10^{-10}$	$1,9 \cdot 10^{-7}$	$8,4 \cdot 10^{-10}$	$1,7 \cdot 10^{-7}$
Zone 2	17,8	$3,4 \cdot 10^{-9}$	$2,2 \cdot 10^{-7}$	$9,8 \cdot 10^{-10}$	$5,5 \cdot 10^{-8}$
Zone 3	31,3	$1,2 \cdot 10^{-8}$	$3,8 \cdot 10^{-7}$	$2,8 \cdot 10^{-9}$	$9,1 \cdot 10^{-8}$
Zone 4	45,5	$3,0 \cdot 10^{-8}$	$6,5 \cdot 10^{-7}$	$6,0 \cdot 10^{-9}$	$1,3 \cdot 10^{-7}$
Gesamtdurchbruchkurve		$3,4 \cdot 10^{-8}$	$3,7 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{-9}$	$3,0 \cdot 10^{-8}$

**Tab. 5.1:** Abstände der Zonen zur Stirnfläche in der Kaolinit-Probe und im Sandsteinbohrkern, die für die Ermittlung und das Fitting der Teildurchbruchkurven in den vier Zonen erhoben wurden. Im Sandsteinbohrkern werden die Abstände zur Stirnfläche entlang der Kluft gemessen, in der Kaolinit-Probe entlang der z-Achse. Die sich ergebenden  $D_L$  und der Quotient  $\frac{D_L}{x}$  in den Zonen liegen in denselben Größenordnungen wie in den Gesamtdurchbruchkurven, wachsen aber im Falle des Sandsteins mit zunehmendem Abstand zur Stirnfläche.

ments ergeben die Teildurchbruchkurven an den vier ausgesuchten Stellen der Kluft. Sind die entsprechenden Rahmenbedingungen gegeben, können die Durchbruchkurven durch die eindimensionale Advektions-Dispersions-Gleichung (Gl. 4.1, S. 34) beschrieben werden. Können die Rahmenbedingungen für den eindimensionalen Fall nicht eingehalten werden, muss das Fließgeschehen mit zwei- oder gar dreidimensionalen Transportgleichungen beschrieben werden, was ab einer gewissen Anzahl an über die Probe verteilter Durchbruchkurven jedoch zu einem erheblichen Mehraufwand führt.

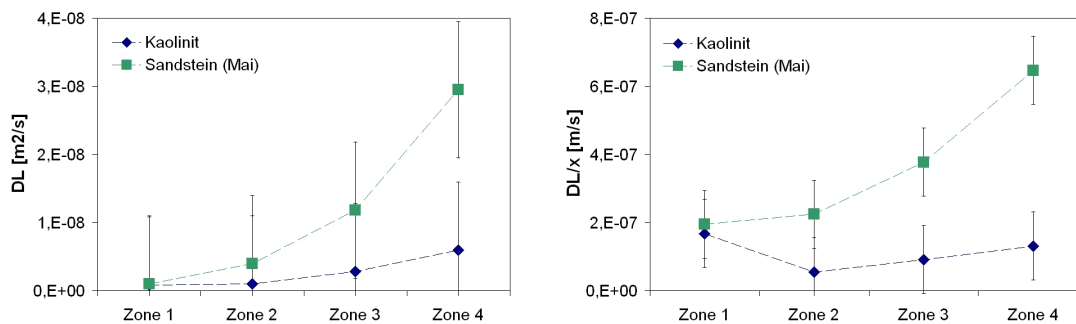
Wenn die Teildurchbruchkurven durch die eindimensionale Advektions-Dispersions-Gleichung beschrieben werden sollen, muss davon auszugehen sein, dass sich der initiale Eingabeimpuls an der Stirnfläche auch in den ausgewählten Teilbereichen direkt auswirkt und sich die Masse des Tracers nicht durch Zu- oder Abstrom verändert. In der Kluft des Sandsteinbohrkerns, welche von der Stirnfläche ausgeht und in welcher sich der überwiegende Teil des Tracers bewegt, bilden sich im Lauf der Durchströmungsexperimente mehrere deutlich von einander getrennte Fließfinger aus. Der Finger am von der Stirnseite aus gesehen linken Rand der Kluft (Abb. 5.23, rechts) ist auf lange Distanz deutlich von anderen Bereichen der Tracerwolke getrennt und tauscht somit auch keine nennenswerte Tracermasse mit ihnen aus. Der Eingabeimpuls lässt sich in den Teildurchbruchkurven der ausgewählten Bereiche sowohl mengenmäßig als auch zeitlich proportional zur Entfernung der Bereiche zur Stirnfläche erkennen (Abb. 5.24, links).

Um die resultierenden Parameter der Teildurchbruchkurven aus der Sandsteinprobe mit solchen zu vergleichen, welche aus einer Probe stammen, deren Transportverhalten zweifelsohne mit dem eindimensionalen Fall der Stofftransportgleichung beschrieben werden kann, werden Teildurchbruchkurven in identisch dimensionierten und zur Stirnfläche positionierten Zonen in der Probe aus gepresstem Kaolinit erhoben. Kaolinit-Probe siehe Abb. 6.3 auf S. 98, Verteilung der Zonen in der Probe siehe Abb 5.23 links, S. 68, Teildurchbruchkurven in den Zonen siehe Tab. 5.1, hydrodynamische Parameter des Kaolinites siehe C.5 auf S. xxii.



**Abb. 5.24:** Teildurchbruchkurven in den vier Zonen in der Kaolinit-Probe (links) und im Sandsteinbohrkern (rechts). Bei der Sandsteinprobe wurden die Daten der Messung von Mai 2009 verwendet. Die Teildurchbruchkurven im Sandstein weisen eine sehr ähnliche Form auf, bei der die sich aus der heterogenen und klüftigen Struktur ergebenden Nebenpeaks jeweils zur selben Zeit nach Injektion auftreten. Im Gegensatz dazu zeigen die Kurven aus der Kaolinit-Probe den zu erwartenden Verlauf eines sich mit zunehmender Distanz zur Stirnfläche abschwächenden und retardierenden Peaks.

Die Teildurchbruchkurven im Sandsteinbohrkern in Abb. 5.24 rechts weisen eine sehr ähnliche Form auf, bei der die sich aus der heterogenen und klüftigen Struktur ergebenden Nebenpeaks jeweils zur selben Zeit nach Injektion auftreten. Die die Form der Tracerwolke beeinflussenden klüftigen Strukturen zeichnen sich demnach in allen vier Zonen in der Kluft auf dieselbe Weise ab. Die Kurven sind aufeinander normiert dargestellt, da hier im Gegensatz zum Kaolinit große Tracermengen an der Stirnfläche und der hohe Konzentrationskontrast zwischen Kluft und Matrix absolute Angaben zu den gemessenen Aktivitäten erschwert haben. Die Teildurchbruchkurven im Kaolinit in Abb. 5.24 links dagegen weisen charakteristische Verzögerungen und Abnahmen der jeweiligen Peaks auf, was auch bei einer kompakten Tracerwolke in einem homogenen, porösen und isotropen Umfeld bei «klassischen» Advektions-Dispersions-Bedingungen zu erwarten ist.

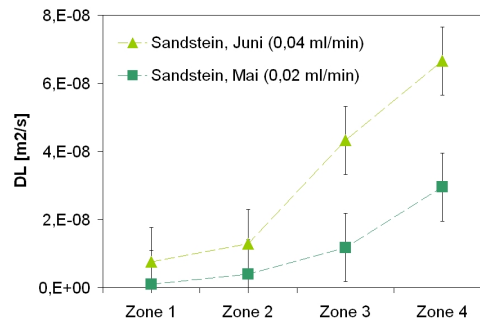


**Abb. 5.25:** Entwicklung des longitudinalen Dispersionskoeffizienten  $D_L$  (links) und des Quotienten aus  $D_L$  und der jeweiligen Fließstrecke  $x$  der Zonen (rechts).  $D_L$  und  $\frac{D_L}{x}$  steigen im Sandstein deutlich an, im Kaolinit bleiben beide Parameter im Rahmen der Messgenauigkeit in etwa konstant. Die Fehler ergeben sich aus Wiederholungsmessungen der Aktivitäten der  $^{22}\text{Na}$ -Marker.

Abb. 5.25 und Tab. 5.1 stellen die ermittelten  $D_L$  sowie die Quotienten  $\frac{D_L}{x}$  dar. Dieser Quotient gibt die Geschwindigkeit der Dispersion wieder. Die ermittelten  $D_L$  in den

vier Zonen liegen sowohl bei der Sandstein- als auch der Kaolinit-Probe in derselben Größenordnung wie diejenigen, die über die Gesamtdurchbruchkurven erhalten wurden (siehe auch Tab. C.2, S. xix).

Die Messungen an den vier Punkten zeigen eine Zunahme des  $D_L$  mit zunehmender Fließdistanz in der Sandsteinprobe, wobei im Kaolinit ein ähnlicher Trend nicht zu sehen ist (Abb. 5.25, links). Mit steigender Fließrate potenziert sich dieser Effekt in der Sandsteinprobe, wie Abb. 5.26 zeigt. Der Quotient  $\frac{D_L}{x}$  (Abb. 5.25, rechts) steigt im Falle des Sandsteinbohrkerns signifikant mit zunehmender Fließstrecke an, während dieser Quotient für den Kaolinit im Rahmen der Messgenauigkeit in etwa konstant ist.

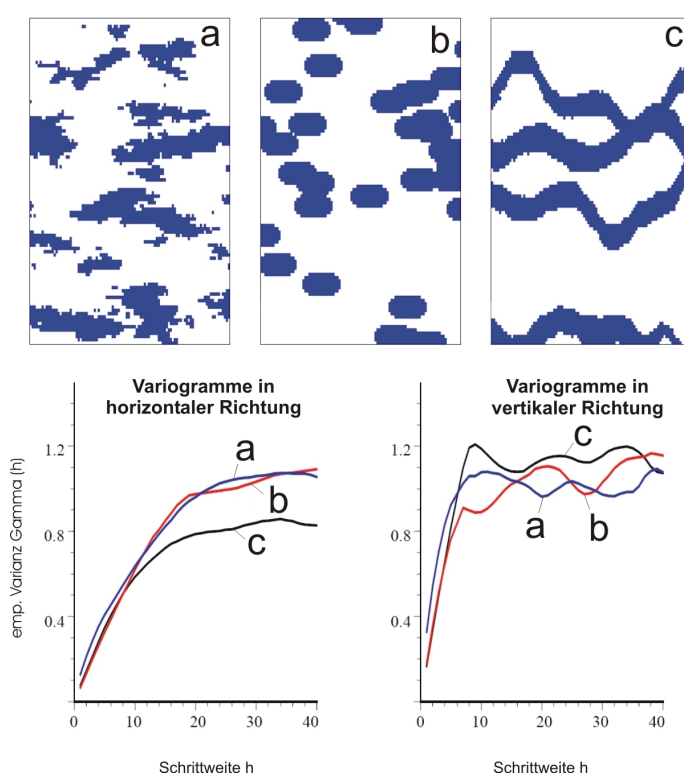


**Abb. 5.26:** Aus den Teildurchbruchkurven der Zonen in der Sandsteinprobe ermittelte  $D_L$  der Messungen von Mai 2009 und Juni 2009. Mit steigender Fließrate (von  $0,02 \text{ ml/min}$  im Mai auf  $0,04 \text{ ml/min}$  im Juni) steigt der  $D_L$  stark an.

## 5.4 Variographischer Abgleich verschiedener Datensätze

In dieser Arbeit wird der Abgleich von gemessenen und simulierten Datensätzen geostatistisch über den Ansatz der Variographie angegangen. Im Folgenden soll die Aussagekraft von Variogrammen bei verschiedenen Graden der Unterschiedlichkeit zweier mit einander verglichener Datensätze geklärt werden. Hierzu werden die Grade der Unterschiedlichkeit zwischen den Datensätzen auf definierte Weise herbei geführt. Ferner werden dreidimensionale Variographiemethoden zum Abgleich der Datensätze bezüglich ihrer Leistungsfähigkeit mit einander verglichen.

### 5.4.1 Aussagekraft von Variogrammen



**Abb. 5.27:** Variogramme werden undifferenziert, wenn sowohl Heterogenitäten als auch der Habitus der Muster mit ihnen beschrieben werden soll. Aus CAERS & ZHANG (2004).

Variogramme stellen räumliche Informationen auf eine sehr abstrahierte Weise dar, so dass ihre Aussagekraft bezüglich des gegebenen Datensatzes und der aufgeworfenen Fragestellungen genau betrachtet werden muss. CAERS & ZHANG (2004) weisen darauf hin, dass Variogramme bei der Charakterisierung von Bildinhalten unter Umständen undifferenziert sein können, wie in Abb. 5.27 gezeigt wird. Hier sind drei verschiedene künstliche Werteverteilungen dargestellt, welche zwar einen unterschiedlichen Habitus der Muster aufweisen, bezüglich ihrer heterogenen Verteilung jedoch sehr ähnlich sind. Der direkte Vergleich der Variogramme dieser Werteverteilungen in horizontaler und vertikaler Blickrichtung offenbart, dass sie zwar in der Lage, die Heterogenität und auch die Anisotropie der Muster

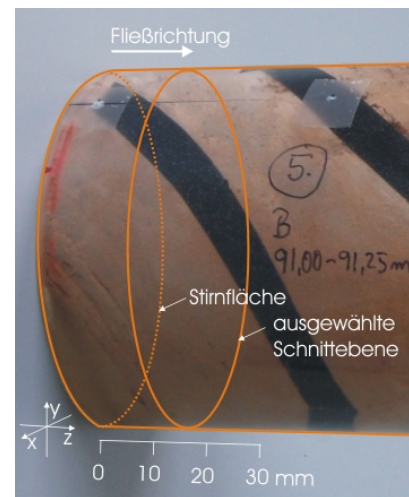


zu erfassen, jedoch nicht ihren unterschiedlichen Habitus. Heterogenität und Anisotropie sind somit die entscheidenden Merkmale, die mittels der Variographie zu betrachten sind.

Die Abbildung von heterogenen und anisotropen Strukturen wird von der Auflösung und der Bildqualität massiv beeinflusst. Dies ist hinsichtlich der verschiedenen räumlichen Auflösungen von PET-,  $\mu$ XCT- und LBM-Datensätzen von großer Bedeutung. In wie weit Variogramme bei zunehmenden Unterschieden zwischen zwei Bildern noch in der Lage sind, die statistischen Gemeinsamkeiten dieser Bilder wieder zu geben, soll durch den Vergleich von Variogrammen eines gemessenen Tomogramms mit den Variogrammen von künstlichen Modelltomogrammen gezeigt werden. Diese Modelltomogramme (vgl. generierte «random fields» weiter oben, aber auch die künstlichen Werteverteilungen bei CAERS & ZHANG (2004) in Abb. 5.27) werden hier auf der Grundlage eines gemessenen Tomogramms (Ausgangstomogramm) erzeugt, indem die Bildinformation dieses Tomogramms schrittweise zu einfacheren Formen reduziert wird. Dies soll dem vereinfachenden Ergebnis einer Simulation entsprechen, bei welcher Details wie Haarrisse, Diffusion oder Streuung der Aktivität nicht abgebildet werden.

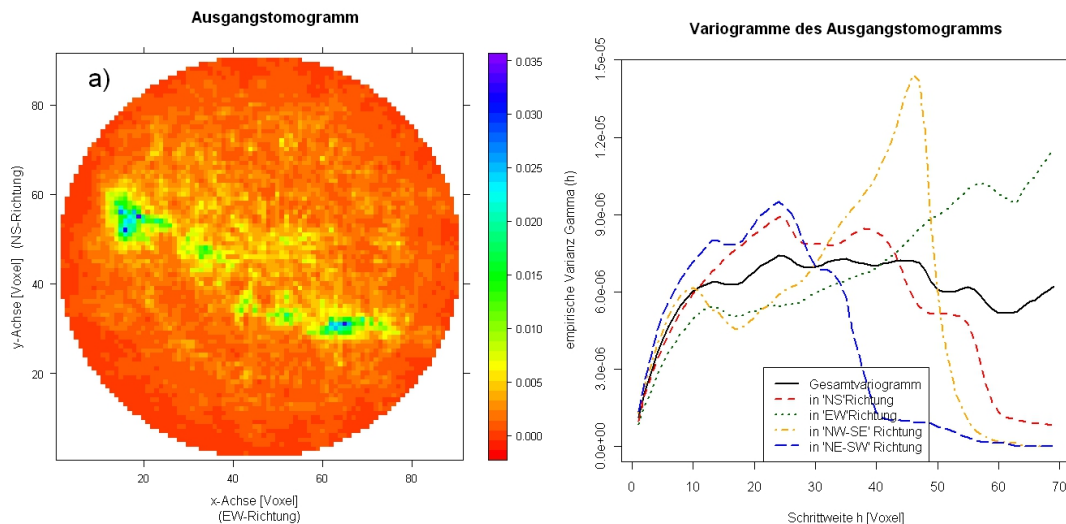
Die Gesamt- und richtungsabhängigen Teilvariogramme der Modelltomogramme werden mit denen dieses Ausgangstomogramms verglichen und ermöglichen somit qualitative Aussagen über den möglichen Grad der Unterschiedlichkeit zweier Bilder, deren geostatistische Gemeinsamkeiten durch Variogramme noch aufgedeckt werden können.

Grundlage der im Folgenden gezeigten Modelltomogramme ist ein Tomogramm aus einem Datensatz eines Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein, der im Mai 2009 mit  $^{18}\text{F}$  untersucht wurde. Die Schnittebene des Tomogramms befindet sich 17,25 mm hinter der Stirnfläche (65. transversale Ebene des Datensatzes, Abb. 5.28). Das Tomogramm schneidet einen durchströmten Spalt, der den Kern diagonal durchzieht. Dieses Tomogramm (Abb. 5.29, links) eignet sich besonders als Ausgangstomogramm für die Modelltomogramme, da hier sowohl ein Fading der Messwerte, periodische Strukturen als auch geostatistisches Rauschen in der Gesteinsmatrix enthalten sind. In einer dreidimensionalen Ansicht desselben Datensatzes (vgl. Abb. 5.10 und 5.11) ist ein Fingering auf der Spaltfläche zu erkennen, welches sich im Tomogramm als clusterhafte Verteilung der Aktivität entlang einer im Bild etwa NW-SE verlaufenden Struktur darstellt. Die Messdaten dieser Ebene werden als Zahlenmatrix in Excel<sup>®</sup> überführt, wo sie editiert und anschließend in R ausgewertet werden.



**Abb. 5.28:** Lage der 65. transversalen Ebene im Bohrkern des Unteren Buntsandsteins. Das Tomogramm dieser Ebene ist das Ausgangstomogramm für die Modelltomogramme.

Im Gesamtvariogramm des Ausgangstomogramms (Gesamt- und Teilvariogramme siehe Abb. 5.29, rechts) liegt der Plateauwert bei einer Varianz<sup>3</sup> von  $\gamma(h) \approx 7 \cdot 10^{-6}$  und die entsprechende Korrelationslänge bei etwa 10 Voxeln, was einer Länge von 11,5 mm entspricht. Plateau und Korrelationslänge sind hier im Vergleich mit den vier Teilvariogrammen am deutlichsten ausgebildet. Das ergibt sich aus der Tatsache, dass im Gesamtvariogramm die Varianzen aus allen vier Blickrichtungen (horizontal, vertikal und die beiden diagonalen) vereint werden, eventuelle ortsabhängige Verteilungen der Messwerte wie Periodizitäten oder Fading also nicht ins Gewicht fallen.



**Abb. 5.29:** Links: Tomogramm einer Schnittebene des Sandsteinbohrkerns 17,25 mm hinter der Stirnfläche aufgenommen, welches als Ausgangstomogramm für Modelltomogramme dient, mit deren Hilfe die Aussagekraft der Variographie gezeigt werden soll. Da die Darstellung der Aktivität in den Tomogrammen nicht quantitativ ist, sind die Werte der Farbskala als einheitenlose Relativwerte zu verstehen. Rechts: Gesamt- und Teilvariogramme dieses Ausgangstomogramms.

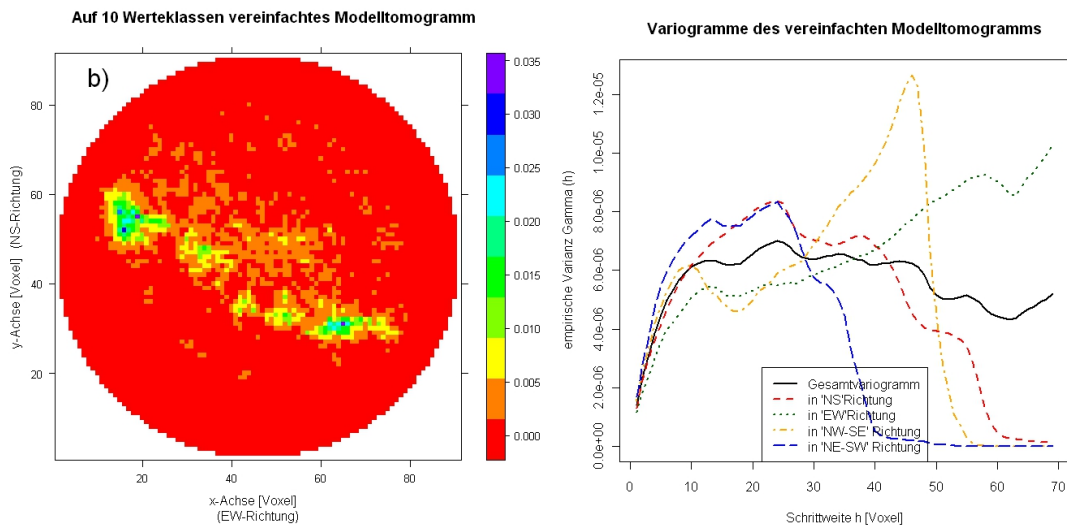
Das Teilvariogramm, das entlang einer ungefähr parallelen Blickrichtung zum Spalt im Bild in NW-SE-Richtung erzeugt wurde, zeigt ein lokales Maximum bei den selben Werten für Plateau und Korrelationslänge, jedoch weist es bei einer Schrittweite von etwa 20 Voxeln (23 mm) einen deutlichen Locheffekt auf wegen der in dieser Blickrichtung zyklisch schwankenden Aktivitätsverteilung im Spalt. Da sich ein Teil der Aktivität entlang sehr feiner Kanäle im Umfeld des Hauptspaltes bewegt - und auch auf Grund von Streueffekten und anderen Bildartefakten - nimmt die Aktivität neben dem Spalt nicht plötzlich, sondern eher graduell ab. Da dies mehr oder weniger parallel zum Spalt erfolgt, liegen in einigen Blickrichtungen von Teilvariogrammen nicht rein statistisch verteilte Aktivitätswerte vor, sondern ortsabhängige graduelle Verteilungen. Daher schließt sich an den Locheffekt des NW-SE-Teilvariogramms unmittelbar eine Drift des Variogramms an. Im Variogramm in EW-Richtung ist diese Drift ebenso deutlich ausgeprägt, ein Locheffekt

<sup>3</sup>Die Varianz  $\gamma(h)$  hat die Einheit  $Bq^2$ , wird aber wegen besserer Übersichtlichkeit ohne Einheit dargestellt.

bei einer Schrittweite von etwa 20 Voxeln (23 mm) wird hier nur durch ein lokales Plateau angedeutet.

Das senkrecht zum Spalt stehende NE-SW - Teilvariogramm , sowie das NS - Teilvariogramm - und in gewissem Maß auch das Gesamtvariogramm - zeichnen sich durch periodische Schwankungen ihrer Plateaus aus, das NE-SW - und das NS - Teilvariogramm weisen zudem höhere Werte für den Plateauwert ( $\gamma(h) \approx 8,5 \cdot 10^{-6}$ ) und die Korrelationslänge (etwa 18 - 20 Voxel) auf, das Plateau ist aber eher undeutlich ausgebildet. Die größere Korrelationslänge ist dadurch bedingt, dass in diesen Blickrichtungen der Spalt «überquert» werden muss und dadurch erst bei höheren Schrittweiten die Korrelation zwischen den Messwerten verschwindet, das höhere Plateau ergibt sich ebenfalls durch die Kreuzung mit dem Spalt und den dadurch auftretenden höheren Differenzen zwischen den einzelnen Messwerten.

Dass in vielen Variogrammen die Varianzen mit sehr hohen Schrittweiten wieder gegen Null tendieren, liegt daran, dass bei sehr hohen Schrittweiten nur noch die Voxel in Randnähe mit einander verglichen werden können, welche in der Regel sehr ähnliche Werte aufweisen. Die Schrittweiten für die Variogramme werden aus diesem Grund auch nicht bis auf die maximal mögliche Distanz - nämlich der gesamten Länge der Datenmatrix von 91 Voxeln - ausgedehnt, sondern enden bei 3/4 der maximalen Schrittweite.

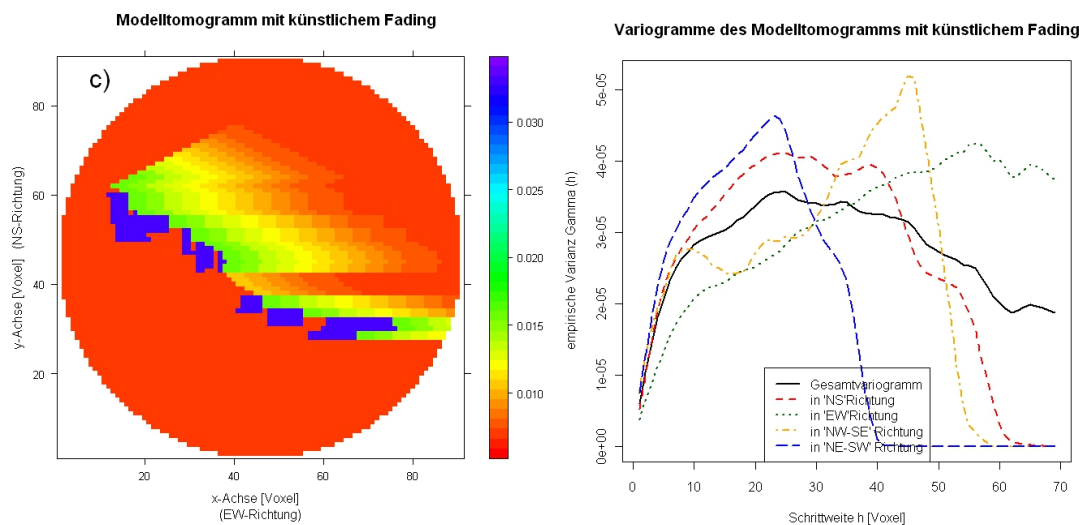


**Abb. 5.30:** Links: Ein Modelltomogramm, in dem der Wertebereich des Ausgangstomogramms auf 10 Werteklassen reduziert wurde. Rechts: Gesamt- und Teilvariogramme dieses Modelltomogramms.

Nun wird in einem ersten Abstraktionsschritt das Ausgangstomogramm a) dahingehend vereinfacht, dass die Werteverteilung vom niedrigsten bis zum höchsten Messwert in 10 Klassen unterteilt wird und jeder Messwert einer dieser 10 Klassen zugeordnet wird<sup>4</sup> (Abb. 5.30, links). Auf diese Weise wird das vom Spalt ausgehende Fading der Werte stark reduziert, ebenso wie alle Bildartefakte und die Detailfülle. Die clusterhafte Verteilung der

<sup>4</sup>Siehe Anhang D.2 für die verwendete Funktion.

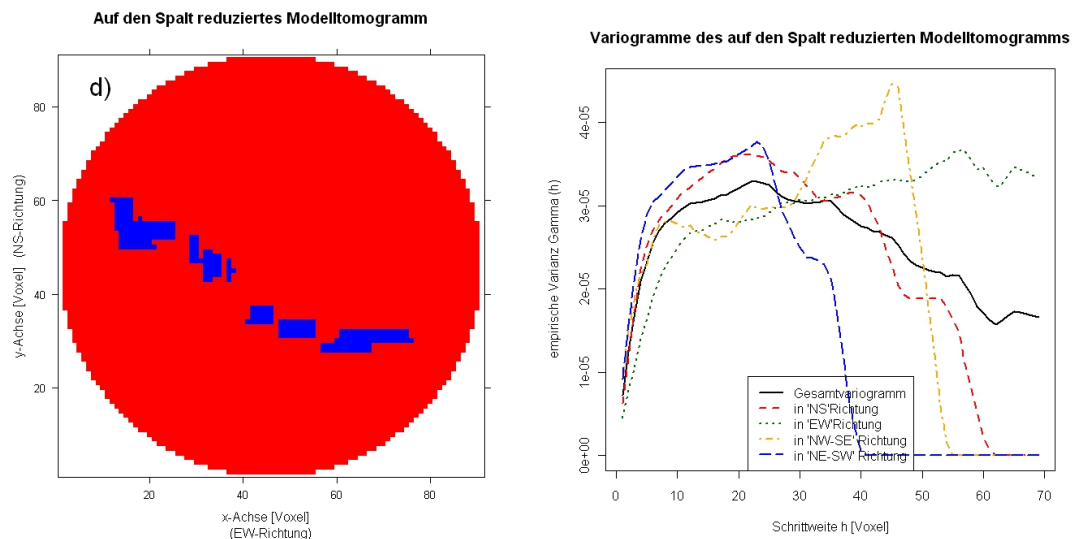
Aktivität entlang des Spalts wird hingegen hervorgehoben. Die Gesamt- und richtungsabhängigen Variogramme dieses Modelltomogramms b) weisen trotz der deutlichen Vereinfachung des Bildinhaltes große Ähnlichkeiten zu denen des Ausgangstomogramms auf. Die charakteristischen Eigenschaften der einzelnen Variogramme (Abb. 5.30, rechts) sind ähnlich bezüglich der Locheffekte und der Drift, allerdings ist das Plateau des Gesamtvariogramms mit  $\gamma(h) \approx 5 \cdot 10^{-6}$  etwas kleiner, sämtliche Plateaus und Korrelationslängen der Teilvariogramme liegen näher bei einander und die Steigung zu Beginn der Variogramme ist etwas größer, da bereits bei kürzeren Schrittweiten als beim Ausgangstomogramm ein höherer Wertekontrast erreicht wird. Obwohl das Fading der Werte fast nicht mehr vorhanden ist, weist sowohl das NW-SE- als auch das EW- Teilvariogramm eine verglichen zum Ausgangstomogramm ähnliche Drift auf. Die maximal erreichten  $\gamma(h)$  sind allerdings um bis zu 30 % geringer. Da kein Teilvariogramm exakt parallel zum Spalt verläuft, sondern ihn bestenfalls in einem flachen Winkel schneidet (NW-SE- Teilvariogramm), entsteht so entlang der Blickrichtungen der Teilvariogramme der Effekt eines graduellen Übergangs von den hohen Werten im Spalt über die intermediären Werte am Rand des Spalts bis zu den geringen Werten in der Gesteinsmatrix. Dieser Anschnitteffekt wirkt sich auf die Form eines Variogramms somit in ähnlichem Maß aus, wie ein tatsächlich vorhandenes Fading der Werte und trägt maßgeblich zur Form des Variogramms bei.



**Abb. 5.31:** Links: Ein Modelltomogramm, das den Spalt und das von ihm ausgehende Fading stark stilisiert darstellt. Rechts: Gesamt- und Teilvariogramme dieses Modelltomogramms.

In einem weiteren Abstraktionsschritt (Abb. 5.31, links) wird im Modelltomogramm c) der Wertebereich der Zahlenmatrix zunächst auf zwei Werte reduziert, nämlich auf den Minimal- (0,0, rot) und den Maximalwert (0,035, blau) des Ausgangsbildes. Der Minimalwert bildet die Gesteinsmatrix ab und eine Aneinanderreihung von kleinen orthogonalen Feldern, die den Maximalwert enthalten, stellt die unregelmäßige Tracerverteilung im Spalt dar. Das im Ausgangstomogramm vom Spalt ausgehende Fading der Messwerte wird nun hier als ein Bereich dargestellt (grün bis orange), in welchem die Werte ausgehend vom

halben Wert des Spaltes (0,018) logarithmisch zum Wert der Gesteinsmatrix auf 0,0 abfallen. Bildartefakte und letzte Details der Strömungsmuster in der Gesteinsmatrix sind beseitigt, jedoch sind die Cluster und das Phänomen des Fadings erhalten geblieben. In ihrer Form zeigen die Variogramme (Abb. 5.31, rechts) noch große Ähnlichkeit zu denen des Ausgangstomogrammes, Korrelationslängen, Drift und Locheffekte liegen bei ähnlichen Schrittweiten. Die jeweiligen Plateaus und die Spannbreite zwischen ihnen ist allerdings deutlich erhöht, die Plateaus liegen zwischen  $\gamma(h) \approx 2,5 \cdot 10^{-5}$  und  $4 \cdot 10^{-5}$ . Hier macht sich der höhere Wertekontrast zwischen den unterschiedlichen Bereichen des Modelltomogramms bemerkbar. Die periodischen Schwankungen im NS-Teilvariogramm und im Gesamtvariogramm sind allerdings kaum noch zu sehen, im EW-Teilvariogramm fehlt das Plateau bei Schrittweite 20, stattdessen besteht es aus zwei Teilstrecken unterschiedlicher Steigung mit einem Wendepunkt etwa bei Schrittweite 10 Voxel. Nach ARMSTRONG (1998) kann man die zweigeteilte Form dieses Variogramms auf eine «nested structure» zurück führen, also auf die Anwesenheit von Prozessen oder Strukturen, die auf verschiedenen Skalen wirksam sind. Das wäre zum einen die clusterhafte Verteilung der hohen Werte des Spaltes, die sich auf Schrittweiten von maximal 10 Voxel erstreckt, und zum anderen das vom Spalt ausgehende Fading, das sich vom Spalt bis zum Rand der Datenmatrix etwa 40 - 50 Voxel weit erstreckt (46 bis 57,5 mm). Das EW-Teilvariogramm liegt in einer Blickrichtung, welche besonders auf diese zwei unterschiedlichen Strukturen reagiert. Im Ausgangstomogramm und dessen EW-Teilvariogramm wird diese Bimodalität durch die höhere Detailfülle im Spalt und der Gesteinsmatrix und den weicheren Wertekontrasten zwischen Spalt und Gesteinsmatrix verwischt.



**Abb. 5.32:** Links: Ein Modelltomogramm, das durch den Minimal- und den Maximalwert des Ausgangsbildes auf die Darstellung von Spalt und Gesteinsmatrix reduziert wurde. Rechts: Gesamt- und Teilvariogramme dieses Modelltomogramms.

In einem letzten Abstraktionsschritt wird schließlich im Modelltomogramm d) der Wertebereich der Zahlenmatrix nur noch auf den Minimal- (0,0) und den Maximalwert (0,035)

Ausgangstomogramm a)	Gesamt- vario.	NS Teil- vario.	EW Teil- vario.	NW-SE Teil- vario.	NE-SW Teil- vario.	Messdaten der Tomogramme
Ausgangstomogramm a)	1	1	1	1	1	1
Modelltomogramm b)	0,932	0,976	0,998	0,991	0,989	0,940
Modelltomogramm c)	0,898	0,990	0,924	0,977	0,991	0,758
Modelltomogramm d)	0,732	0,947	0,861	0,937	0,974	0,686

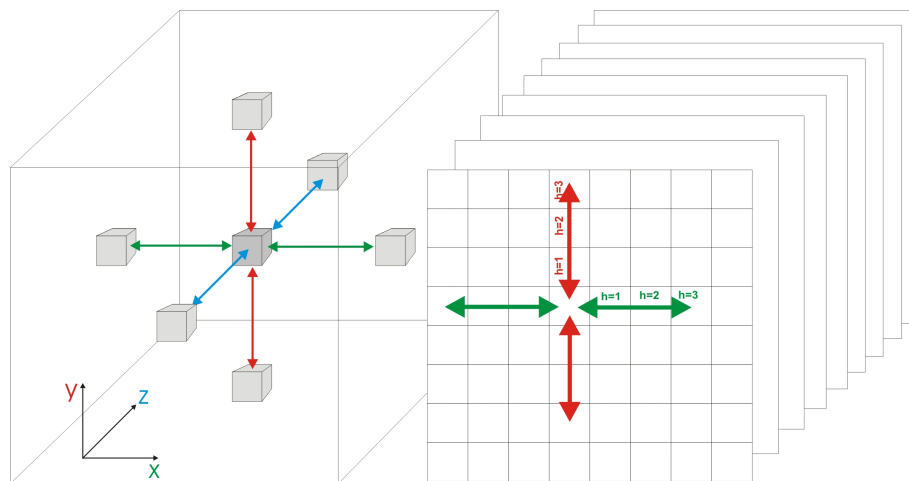
**Tab. 5.2:** Korrelationen der Variogramme der Modelltomogramme mit denen des Ausgangstomogramms. Im Vergleich dazu die Korrelationen der Messdaten aus den Tomogrammen selbst. Die Messdaten selbst korrelieren generell schlechter als die Variogramme der Daten.

des Ausgangsbildes reduziert (Abb. 5.32, links). Die Darstellung des Spaltes entspricht der im vorhergehenden Modellvariogramm, einer Aneinanderreihung kleiner orthogonaler Felder, jedoch gänzlich ohne Fading. Die Variogramme (Abb. 5.32, rechts) weisen hier deutliche Unterschiede zu denen des Ausgangstomogramms und dem ersten Modelltomogramm auf, zeigen aber in der Tendenz noch ähnliche Verläufe. Da der Wertebereich nur zwei Zahlen umfasst, ist der Wertekontrast bei den jeweils verglichenen Messwerten hoch, was zu einer Erhöhung der Plateaus von  $\gamma(h) \approx 2,5 \cdot 10^{-5} - 3,5 \cdot 10^{-5}$  und zu einer Reduzierung der Korrelationslängen von etwa 5 bis 8 Voxeln führt (5,75 bis 9,2 mm). Obwohl weit schwächer ausgeprägt, lassen sich Drift und Locheffekte der Teilvariogramme - vor allem das der NW-SE-Richtung - mit denen des Ausgangstomogramms auch bei diesem Grad der Abstraktion noch eindeutig zuordnen. Das EW-Teilvariogramm weist immer noch zwei deutlich von einander zu unterscheidende Teilstücke auf, allerdings kann der Bereich  $\gamma(h)$  für  $h \geq 30$  eher als Plateau denn als Effekt einer «nested structure» gedeutet werden. Das NS- und das NE-SW-Teilvariogramm zeigen hier eine etwas deutlichere Periodizität verglichen zum vorherigen Modelltomogramm c), welche derjenigen der entsprechenden Teilvariogramme des Ausgangstomogramms nahe kommt.

In Tab. 5.2 sind die Korrelationen der Gesamt- und der jeweiligen Teilvariogramme der Modelltomogramme mit denen des Ausgangstomogramms dargestellt. Während bei den Gesamtvariogrammen eine deutliche Verringerung der Korrelation mit zunehmendem Abstraktionsgrad zu beobachten ist, fällt dieser Trend bei den Teilvariogrammen deutlich weniger ins Gewicht. Hier wirken nur die Veränderungen der jeweiligen Blickrichtungen auf den Variogrammgraphen ein, bei den Gesamtvariogrammen spielen alle Bildveränderungen eine Rolle. Zu beachten ist, dass noch bis zu einer Abstrahierung des Tomogramms, wie sie im Modelltomogramm c) geschehen ist, die Variogramme dieses Tomogramms durch ihre teils sehr hohen Korrelationen mit denen des Ausgangstomogramms die statistisch relevanten Gemeinsamkeiten dieser Datensätze sicher wieder geben. Erst bei der Entfernung des Fadings und somit sämtlicher material- und messtechnisch bedingter Details werden die Unterschiede signifikant. Im Vergleich dazu sind auch die Korrelationen der Messdaten aus den Tomogrammen dargestellt. Die Messdaten selbst korrelieren viel schlechter als die Variogramme der Daten.

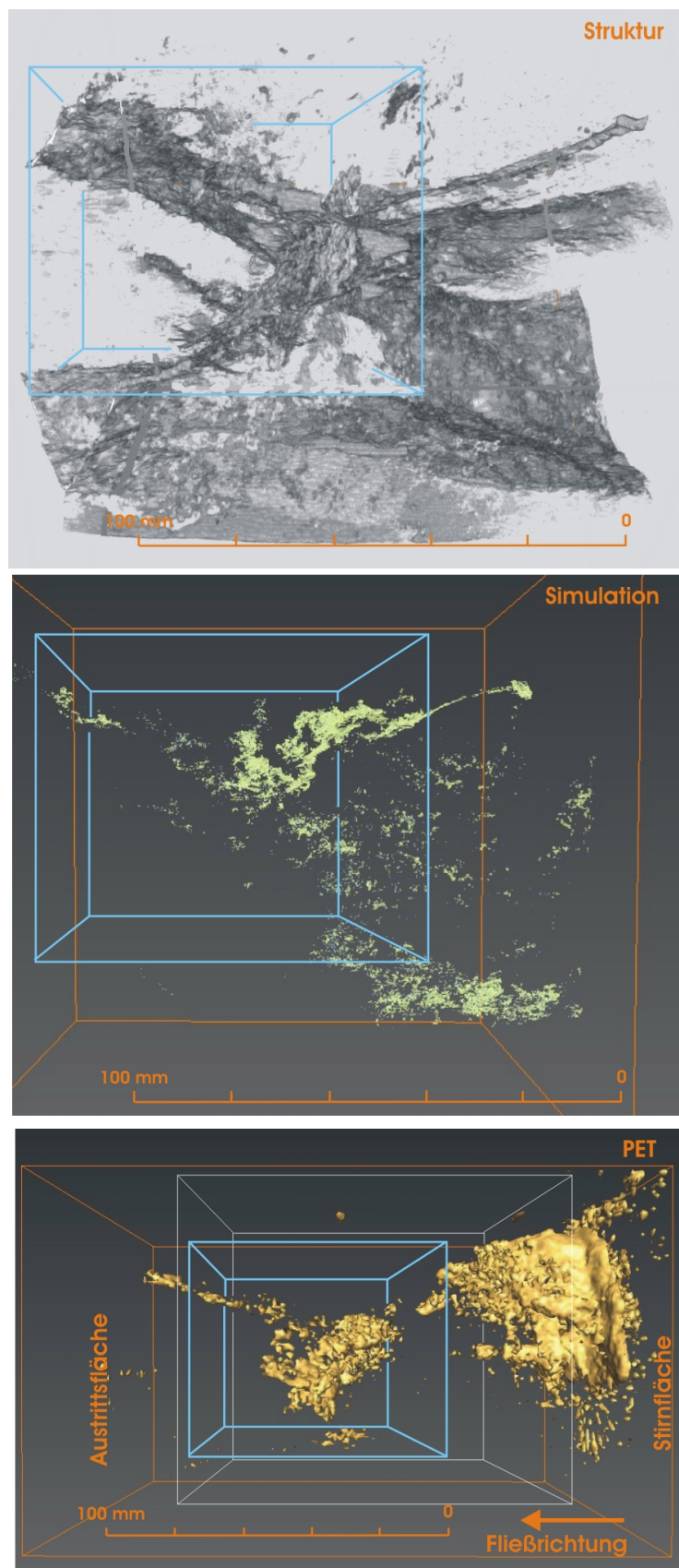
### 5.4.2 Vergleich von Messung und Modellierung mittels 3D-Variographie

Die dreidimensionale Variographie wird bei AKIN & SIEMES (1988) und ARMSTRONG (1998) erläutert und findet in unterschiedlichsten Gebieten Anwendung, z.B. bei HOULDING *et al.* (1992), die irregulär geformte Erzkörper modellieren, oder bei PRISSANG (2002), der damit Paläoströmungsrichtungen in Kalksteinen charakterisiert. Ein dreidimensionaler Datensatz kann dabei auf zwei Weisen variographiert werden, einerseits indem die Wertepaare aus allen Raumrichtungen des Datensatzes gleichzeitig berücksichtigt werden (im Folgenden «blockweise Methode» genannt), andererseits indem die einzelnen Ebenen des Datensatzes getrennt von einander variographiert und die Einzelvariogramme im Nachhinein kombiniert dargestellt werden (im Folgenden «ebenenweise Methode» genannt) (Abb. 5.33). Bei der «ebenenweisen Methode» werden die Datensätze systematisch jeweils parallel zur transversalen, coronalen oder sagittalen Schnittebene bearbeitet.



**Abb. 5.33:** Zwei Methoden der dreidimensionalen Variographie. Links: Die «blockweise Methode». Die Variogrammfunktion (Gl. 4.3, S. 37, siehe auch die entsprechende Funktion D.6 auf S. xxix) berücksichtigt die Wertepaare aus allen Raumrichtungen des Datensatzes gleichzeitig. Rechts: die «ebenenweise Methode». Die einzelnen Ebenen des Datensatzes (in transversaler, sagittaler oder coronaler Richtung) werden getrennt von einander variographiert (siehe Funktion D.7, S. xxxi) und die einzelnen Variogramme im Nachhinein kombiniert dargestellt.

Basierend auf den  $\mu$ XCT-Daten des mechanisch belasteten Steinsalzbohrkerns (Bohrkern, siehe Abb. 5.14, Abbildung der  $\mu$ XCT-Daten siehe Abb. 6.1, oben) wurde von der JGU Mainz das Strömungs- bzw. Geschwindigkeitsfeld des Fluids entlang der durchflusswirksamen Hohlraumstruktur berechnet (Abb. 6.1, mitte) und eine vorläufige Simulation eines Tracerexperiments mit  $2 \cdot 10^6$  virtuellen Tracerpartikeln in diesem Feld mittels eines Lattice-Boltzmann-Modells durchgeführt (Abb. 5.34, mitte). Simulationen mit einer Partikelanzahl von  $1 \cdot 10^8$  wären statistisch verlässlicher und kämen auch den realen Tracerverteilungen im Bohrkern mit  $\cdot 10^8$  bis  $\cdot 10^9$  erfassten Zerfallsereignissen pro PET-Datei deutlich näher, jedoch sind solche Simulationen bis dato noch nicht verfügbar. Sowohl am PET-, als auch am CT- und am simulierten Datensatz werden beide Verfahren der dreidimensionalen Variographie angewendet und die Ergebnisse miteinander verglichen.



**Abb. 5.34:** Vergleich von Kluftstruktur (oben), Tracersimulation (mittig) und PET-Aufnahme (unten) des mechanisch belasteten Salzbohrkerns. Der weiß umrahmte Bereich in der PET-Aufnahme zeigt den Ausschnitt, der von den Struktur- und Simulationsdaten abgedeckt wird, der blau umrahmte Bereich das simulierte und mittels Variographie untersuchte Teilvolumen. Die PET-Aufnahme entspricht derjenigen in Abb. 5.19 unten, PET- und Simulations-Daten wurden je 6,2 h nach Injektion des Tracers aufgenommen. Da die Simulation nur aus  $2 \cdot 10^6$  Tracerpartikeln besteht, wirken PET- und Modell-Datensatz sehr unterschiedlich, der markante Unterschied ergibt sich jedoch auch aus der Art der Darstellung der dreidimensionalen Information. Der statistische Abgleich beider Datensätze offenbart mehr Gemeinsamkeiten, als es der direkte Vergleich vermag. (Quelle Strukturdaten BAM Berlin und Simulationsdaten JGU Mainz.)



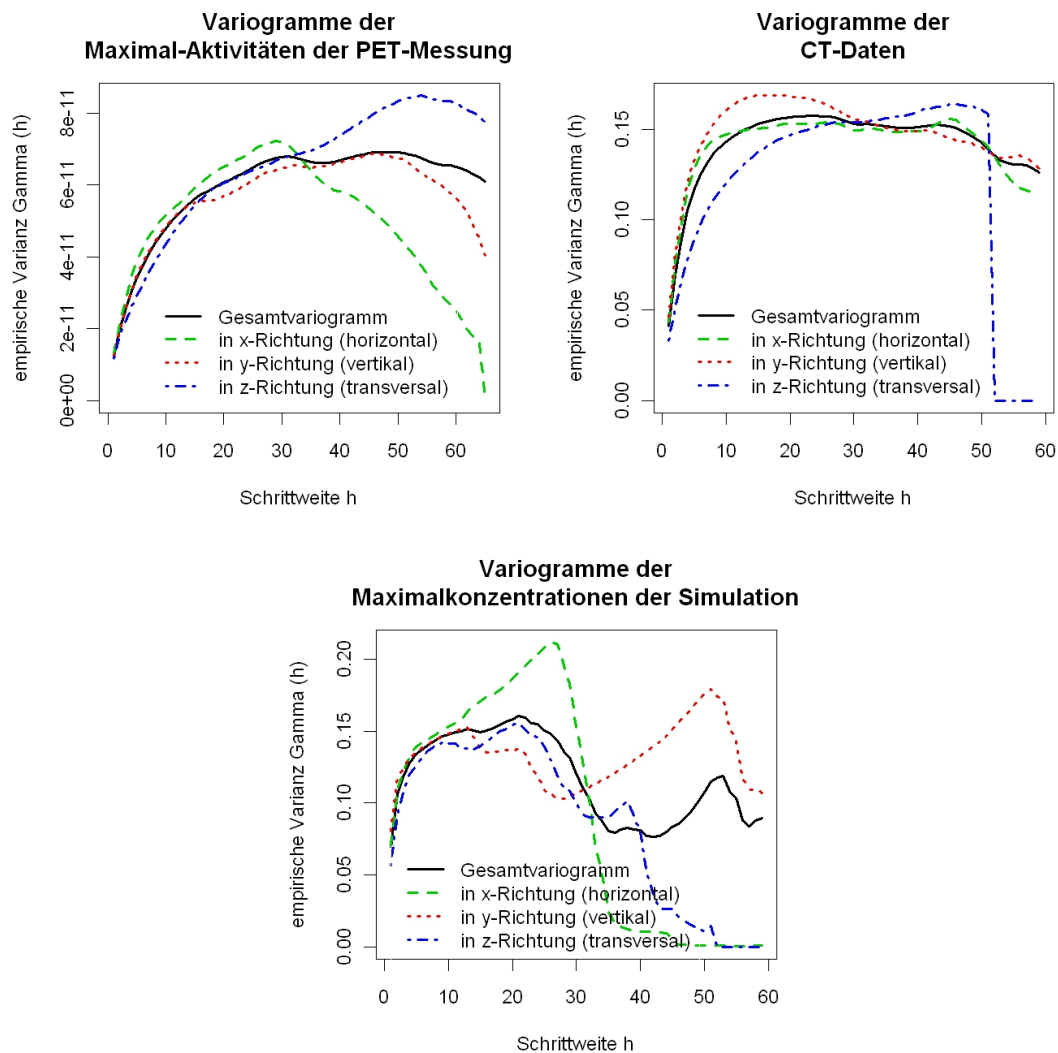
Auf Grund der benötigten hohen Rechenzeit für die dreidimensionale Variographie der vollständigen Datensätze wird nur ein Teilvolumen daraus betrachtet (Abb. 5.34, blauer Rahmen). Dieses Volumen umfasst den Bereich im Bohrkern, in dem sich die artifiziel- len Risse kreuzen. Das ausgesuchte Volumen befindet sich zwischen 57,50 und 155,25 mm hinter der Stirnfläche, etwa im hinteren Drittel des Kerns und umfasst etwa  $93 \times 75 \times 99$  mm ( $81 \times 65 \times 86$  Voxel) (siehe auch Anhang B, S. xv). Die Kreuzung der Rissstruk- turen ist nicht nur ein fluiddynamisch interessanter Bereich, er befindet sich auch weit genug entfernt von der Stirnfläche und den dort im PET-Datensatz sehr deutlich auftre- tenden Bildartefakten. Die Rechenzeit für die Variographie dieses Teilvolumens mit der «blockweisen Methode» beträgt etwa 48 h, während die Rechenzeit mit der «ebenenweisen Methode» zwischen 2 und 4 h pro Raumrichtung liegt, je nach Anzahl und Größe der Ebe- nen in der Raumrichtung. Die Rechenzeiten ergeben sich auf einen PC mit einem 2,8 GHz Intel Pentium D Dual Core Prozessor. Mit zunehmender Größe des untersuchten Bereichs steigt die Rechenzeit exponentiell an, die Variographie einer vollständigen Datei würde weit mehr als eine Woche benötigen<sup>5</sup>.

Mittels der «blockweisen» und der «ebenenweisen Methode» werden sieben PET-Daten- sätze betrachtet, die jeweils 1,4 h, 1,9 h, 2,7 h, 3,5 h, 4,8 h, 6,2 h und 8,3 h nach Injektion aufgenommen wurden (bei je 12 %, 20 %, 30 %, 47 %, 65 %, 83 % und 112 % injiziertem Hohlraumvolumen) (siehe Anhang B). Diese Daten werden mit Variogrammen aus Daten- sätzen des simulierten Tracerexperiments verglichen, deren Aufnahmezeitpunkte denen der PET-Datensätze entsprechen.

Die CT-Daten stellen den maximal möglichen, verbundenen, durchflusswirksamen Hohl- raum in der Probe dar, von dem jedoch nur ein Teil vom strömenden Fluid auch durch- flossen wird. Ob dieser Anteil - und die eingeschlagenen Fließwege - sowohl in der Messung als auch in der Simulation der gleiche ist, wird durch den Abgleich der beiden Datensätze mit den CT-Daten geklärt. Um diesen Abgleich durchzuführen, werden von den PET- und Simulations-Daten die Maximalwerte der Aktivitäten bzw. Partikelkonzentrationen in allen Voxeln bestimmt, die während der gesamten Messung bzw. Simulation in ihnen auftreten (Siehe Funktion D.3). Da sich der Tracer - PET und virtuell - im Lauf des Expe- riments bewegen, wird in jeder Aufnahme nur der tracererfüllte Teil der durchflusswirksa- men Strukturen abgebildet. Erst die Kombination der Maximalwerte aus allen Aufnahmen eines Experiments gibt die vollständige, je vom Tracer durchflossene Struktur wieder. Aus diesen Maximalwerten werden wiederum 3D-PET- bzw. Simulations-Datensätze erzeugt (im Folgenden  $PET_{max}$  und  $Simulation_{max}$  genannt), die somit die tatsächlich durchflos- sene Hohlraumstruktur der Probe abbilden. Diese werden sowohl miteinander, als auch mit dem CT-Datensatz verglichen.

Da die Anzahl der Tracerpartikel in der zur Verfügung stehenden Simulation aus Grün- den der Rechenzeit relativ klein gehalten werden musste, gibt es augenscheinlich zwischen

<sup>5</sup>Im Prinzip ließe sich die Rechenzeit stark verkürzen, da R verglichen mit anderen Sprachen wie z.B. C für solche Rechenoperationen sehr ineffektiv ist. R erlaubt jedoch schnelle und einfache Änderungen des Codes, die für die hier erzeugten Datensätze maßgeschneidert sind.



**Abb. 5.35:** Mit der «blockweisen Methode» erstellte 3D-Variogramme der CT-Daten, sowie der Datensätze  $PET_{max}$ - und  $Simulation_{max}$ , die die in allen Messzeiten erreichten maximalen Werte dieser Daten darstellen. Die Maximalverteilungen der Messwerte kommen den durchflusswirksamen Strukturen der CT-Daten noch am nächsten, die simulierten Daten weichen signifikant ab. Der plötzliche Abfall des transversalen Teilvariogramms der Variogramme des CT-Datensatzes und der Simulation ist durch die rechenzeitbedingt gekürzte transversale Länge dieser Datensätze von 52 Voxeln Schrittlänge zu erklären.

den PET-Aufnahmen und der Simulation deutliche Unterschiede (Abb. 5.34, mitte und unten). Die virtuellen Partikel können den ihnen zur Verfügung stehenden durchflusswirksamen Hohlraum weniger gut ausfüllen, als dies der PET-Tracer vermag. Die in den Abb. 5.35 (siehe auch Abb. B.1, S. xv) dargestellten, mit der «blockweisen Methode» erzeugten Variogramme der Datensätze ergeben ein ähnliches Bild. Sieht man von der absoluten empirischen Varianz  $\gamma(h)$  ab, die sich aus der Verschiedenartigkeit<sup>6</sup> der Datensätze ergibt,

<sup>6</sup>Die PET-Dateien enthalten gemessene Aktivitäten von  $10^{-11}$  bis  $10^{-4}$  kBq, die CT- und Simulationsdaten bestehen aus Werten zwischen 0 und 1.

gleichens sich die Variogramme der PET- und der CT-Daten, diejenigen der simulierten Daten weichen von den CT- Datensätzen deutlich ab.

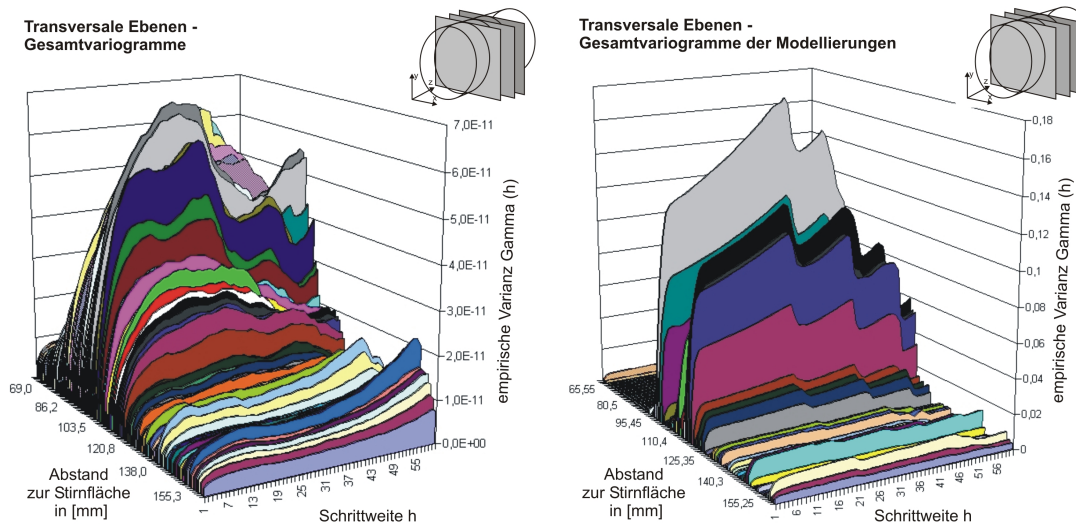
verglichene Datensätze	Gesamt-vario.	horizontale Teilvario.	vertikale Teilvario.	transversale Teilvario.	Messdaten der Tomogramme
PET <sub>max</sub> - CT	0,179	0,754	0,424	0,454	0,050
Simulation <sub>max</sub> - CT	0,171	0,221	0,280	0,225	0,017
PET <sub>max</sub> - Simulation <sub>max</sub>	0,474	0,162	-0,052	0,871	0,012

**Tab. 5.3:** Korrelationen der Variogramme, die mittels der «blockweisen Methode» aus den Simulations-, PET- und CT-Daten erzeugt wurden. Zudem werden für alle Voxel der PET- und Simulations-Daten die Maximalwerte der Aktivitäten bzw. Partikelkonzentrationen bestimmt, die während der gesamten Messung bzw. Simulation in ihnen auftreten. Aus diesen Maximalwerten werden wiederum 3D-PET- bzw. Simulations-Datensätze erzeugt, die die tatsächlich durchflossene Hohlraumstruktur der Probe abbilden (PET<sub>max</sub>, Simulation<sub>max</sub>). Der Unterschied dieser Daten mit den CT-Daten, die den maximal möglichen durchflusswirksamen Hohlraum darstellen, weist darauf hin, dass in der PET-Messung vor allem in horizontaler Blickrichtung eine hohe Übereinstimmung von vorhandenem und vom Radiotracer durchflossenem Hohlraum herrscht. Diese Wegsamkeiten werden von den virtuellen Tracerpartikeln in deutlich geringerem Maße benutzt. Die Messdaten selber korrelieren nicht miteinander.

Entsprechend korrelieren die PET-Variogramme mit denen der CT-Daten deutlich besser mit einander, als die Variogramme der simulierten Daten mit der CT-Struktur, wie Tab. 5.3 zu entnehmen ist. Die Gesamtvariogramme korrelieren zwar jeweils ähnlich niedrig mit denen der CT-Daten, die PET-Variogramme bei den Teilvariogrammen jedoch durchgehend deutlich höhere Korrelationen mit den CT-Variogrammen auf, als die Variogramme der Simulation. Außerordentlich hoch ist die Übereinstimmung zwischen PET und CT in der horizontalen Blickrichtung, jedoch halten sich die Korrelationen ansonsten auf niedrigem Niveau, bedingt durch die Abweichung von insgesamt vorhandenen und durch das Fluid tatsächlich benutzten Wegsamkeiten. Hier wird nicht nur deutlich, dass der PET-Tracer auf mehr möglichen Wegsamkeiten als der simulierte durch den Kern fließt, sondern auch, dass vor allem horizontal angelegte Wegsamkeiten vom PET-Tracer besser ausgenutzt werden. Ein sehr ähnliches Bild ergibt sich aus dem Vergleich der Variogramme der einzelnen Datensätze zu den oben genannten Zeitpunkten (siehe Anhang, Tab. B.1, S. xvi). Dass gemessener und simulierter Tracer in der transversalen Richtung so hoch korrelieren, liegt daran, dass sie entlang der Hauptströmungsrichtung auf Grund des Kluftsystems sehr ähnliche Wege einschlagen müssen. Die Messdaten selber, gemessene Aktivitäten und simulierte Konzentrationen, korrelieren vor allem auf Grund unterschiedlicher Skalierung nicht miteinander.

In Abb. 5.36 links sind die Variogramme dargestellt, welche mit der «ebenenweisen Methode» aus den transversalen Ebenen des Teilvolumens des PET-Datensatzes gewonnen wurden. Diese Methode der Variographie erzeugt erheblich größere Datenmengen als die «blockweise Methode», liefert aber auch ein deutlich differenzierteres Bild. Vergleicht man die Variogramme der gemessenen Daten mit denen des simulierten Experiments in Abb. 5.36 rechts, ergeben sich gewisse Gemeinsamkeiten was die grobe Form der Variogramme betrifft. Im Bereich der Kreuzung der Rissstrukturen treten bei beiden Datensätzen deut-

lich periodische Strukturen auf, die Variogramme in diesen Bereichen - etwa zwischen 90 und 110 mm - weisen in etwa übereinstimmende Locheffekte auf. Die Variogramme der simulierten Daten spiegeln aber auch die artifizielle Natur dieser Daten wider, Fading und Locheffekte in den Graphen deuten auf eine regelmäßige, musterhafte Verteilung der Tracerpartikel hin, die durch die Komprimierung<sup>7</sup> der Originaldatensätze von  $745 \times 749 \times 773$  Voxel auf  $98 \times 98 \times 101$  Voxel erheblich verstärkt wird und auf die vergleichsweise geringe Zahl der Partikel zurück geht. Die gemessenen Daten weisen erheblich mehr fluiddynamische Details auf als die simulierten.

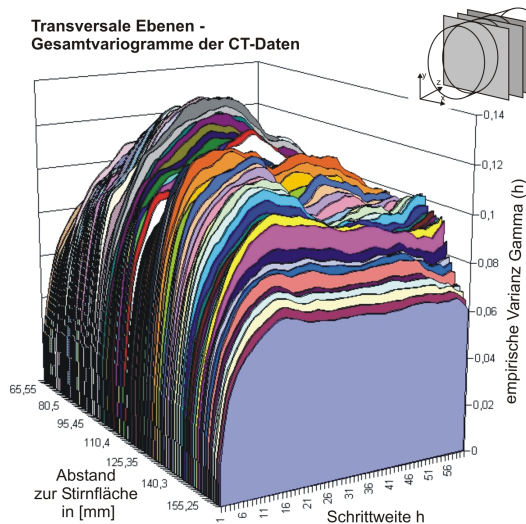


**Abb. 5.36:** Variogramme in transversaler Blickrichtung des untersuchten Teilvolumens mit der «ebenenweisen Methode» erstellt. Links: Variogramme der PET-Messung, Aufnahmezeitpunkt 6,2h nach Injektion. Rechts: Variogramme der mittels der Lattice-Boltzmann-Methode modellierten Tracerausbreitung (Aufnahmezeitpunkt entspricht demjenigen der PET-Messung). Die Stirnfläche ist jeweils im Bild hinten. In beiden Datensätzen werden im Bereich der Kreuzungen der Risse, etwa zwischen 90 und 110 mm hinter der Stirnfläche, deutlich periodische Strukturen sichtbar, die mit zunehmendem Abstand zur Stirnfläche, etwa ab 138 mm, in statistisch verteilte Aktivitätsmuster mit deutlichem Plateau und Korrelationslängen um 15 Voxel (etwa 17,3 mm) übergehen. Die Variogramme der simulierten Daten spiegeln aber auch die artifizielle Natur dieser Daten wider, Fading und Locheffekte in den Graphen deuten auf eine regelmäßige, musterhafte Verteilung der Tracerpartikel hin, die auf die Komprimierung der Originaldatensätze zurück geht. Das kleine Diagramm rechts oben verdeutlicht die Lage der transversalen Schnittebenen bezogen auf die Probengeometrie.

Fading und Locheffekte der Variogramme beider Tracer-Datensätze gehen auf die dicht an einander liegenden präferentiellen Fließwege im Bereich der Kreuzungen der Risse des Bohrkerns zurück. Wie in Abschnitt 5.2.3 bereits erwähnt wurde, verlassen nur 0,07 % des injizierten Tracers den Bohrkern wieder, der überwiegende Teil verbleibt in der Probe. In der Simulation wird ein ähnlicher Wert von etwa 0,03 % erreicht. In beiden Fällen - Messung und Simulation - bildet der Tracer den Bereich der Kreuzung der Rissstrukturen recht deutlich ab, wo gegen Ende des Experiments ein Großteil des Tracers zu finden ist.

<sup>7</sup>Die Anzahl der Voxel in den simulierten Datensätzen wird durch Zusammenfassen und Mittelung einer entsprechenden Anzahl von Voxeln erreicht. Die Komprimierung wird wegen der ansonsten nicht zu bewältigenden Rechenzeiten nötig.

In Abb. 5.4.2 ist der ebenenweise variographierte CT-Datensatz dargestellt. Auch hier zeigen die Variogramme im entsprechenden Bereich zwischen 90 und 110 mm hinter der Stirnfläche Periodizitäten, die auf die dichte Anordnung deutlich von einander getrennter, offener Wegsamkeiten zurück geht. Die Variogramme der Bereiche davor und dahinter weichen von denen der PET- und Simulations-Daten ab, da in den PET- und Simulations-Daten dort kaum Tracer vorhanden ist, der die Strukturen ausfüllen und abbilden könnte. In dieser Darstellung zeigt sich sehr deutlich, dass hinter dem Bereich der Kreuzungen der Risse mit zunehmendem Abstand zur Stirnfläche die lokal deutlich differenzierten und periodischen Risse in feiner und regelmäßiger verteilte Strukturen übergehen. Dies zeichnet sich in den Variogrammen der drei Datensätze in einem Wechsel von periodischen Graphen hin zu Graphen mit deutlichem Plateau und Korrelationslängen von etwa 15 bis 20 Voxeln (17,3 bis 23,0 mm) ab. Allerdings wird dieser Bereich weder in der Messung noch in der Simulation vom Tracer deutlich erfasst, da der Großteil der Tracermasse in den Haarrissen der sich kreuzenden Risse verbleibt.



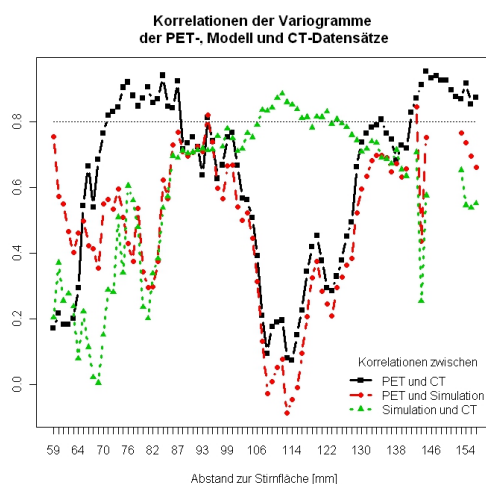
**Abb. 5.37:** Variogramme in der transversalen Blickrichtung eines  $\mu$ XCT-Datensatzes. Der Datensatz beinhaltet die perkolierenden Hohlraumstrukturen. Der Bereich der CT-Messung deckt sich mit dem untersuchten Teilvolumen aus den PET-Messungen. Hier zeigt sich, dass hinter dem Bereich der Kreuzungen der Risse mit zunehmendem Abstand zur Stirnfläche die lokal deutlich differenzierten und periodischen Risse in feiner und regelmäßiger verteilte Strukturen übergehen. Dies zeichnet sich in den Variogrammen der drei Datensätze in einem Wechsel von periodischen Graphen hin zu Graphen mit deutlichem Plateau und Korrelationslängen von etwa 15 bis 20 Voxeln (17,3 bis 23,0 mm) ab. Das Diagramm rechts oben verdeutlicht die Lage der transversalen Schnittebenen bezogen auf die Probengeometrie.

In Abb. 5.4.2 ist dargestellt, wie die Variogramme der einzelnen transversalen Tomogramme der verschiedenen Datensätze im ausgesuchten Teilvolumen mit einander korrelieren. Hier werden die PET- und CT-Daten, die PET- und Simulations-Daten und die Simulations- und CT-Daten gegenüber gestellt. Bereiche mit hoher Korrelation wechseln sich mit solchen geringerer Korrelation ab. Im Bereich zwischen 90 und 100 mm hinter der Stirnfläche korrelieren alle miteinander verglichenen Datensätze um 0,70 - 0,80. Dahinter zeigt sich eine rapide abnehmende Korrelation der PET- von den CT-Daten, die Variogramme der Simulations-Daten stimmen hier zwischen etwa 100 und 130 mm gut mit denen der CT-Daten überein.

Aus den Abbildungen 5.35 und 5.36, sowie der Tabelle 5.3 sind Unterschiede in den Fließwegen des PET- und des virtuellen Tracers, vor allem in horizontaler Ebene ersicht-

lich. Dass die PET-CT-Korrelationen in Abb. 5.4.2 ab 110 mm hinter der Stirnfläche abnehmen und nicht die Simulations-CT-Korrelationen, kann auf die begrenzte Auflösung des CT zurück geführt werden. In Abb. 5.13, S. 57 ist ersichtlich, dass auch Wegsamkeiten, die dem CT auf Grund ihrer geringen Weite von deutlich unter  $65 \mu\text{m}$  entgehen, das Fließgeschehen lokal dennoch dominieren können. Diese Strukturinformationen fehlen nun in den CT-Daten, die Lattice-Boltzmann-Simulation baut sich jedoch ausschließlich auf diesen Daten auf und somit kann die hohe Korrelation zwischen Simulation und CT in diesem Bereich erklärt werden, obwohl das tatsächliche Fließgeschehen von diesen beiden Datensätzen abweicht. Diese Diskrepanzen zeigen, dass die virtuellen Tracerpartikel der Simulation versuchen, gemäß dem errechneten Strömungsfeld, alle zur Verfügung stehenden durchflusswirksamen und im CT enthaltenen Hohlräume gleichermaßen zu benutzen, ebenso wie der Radiotracer versucht alle tatsächlich vorhandenen möglichen Fließwege benutzt; fehlen aber in den CT-Daten zu viele subskalige Wegsamkeiten - eben in dem Bereich 90 bis 110 mm - nimmt der PET-Tracer mehr Wegsamkeiten (hier vor allem horizontal gelegene) als der virtuelle in Beschlag. Entsprechend erklären sich die Abweichungen zwischen den Variogrammen der PET-Messung und der CT-Daten. In diesem Bereich der Probe lassen sich somit signifikante Unterschiede zwischen Messung und Simulation finden, die aber auf die Auflösung der CT zurück gehen.

Ab 130 mm hinter der Stirnfläche treten sowohl durch Artefakte in den PET-Bildern, als auch durch große Ansammlungen fein verteilter Haarrisse in der Probe ähnliche Effekte auf, wie im Bereich von 57,50 bis 90 mm, wo stellenweise hohe Korrelationen bis 0,88 auftreten, die Korrelationen aber generell sehr starken Schwankungen unterliegen.



**Abb. 5.38:** Korrelationen der transversalen Gesamtvariogramme der PET-, Simulations- und CT-Daten. Im Bereich zwischen 90 und 110 mm hinter der Stirnfläche korrelieren alle miteinander verglichenen Datensätze um 0,70 - 0,80. Dass die PET-CT-Korrelationen ab 110 mm hinter der Stirnfläche abnehmen und nicht die Simulations-CT-Korrelationen, kann auf die begrenzte Auflösung des CT zurück geführt werden. Wegsamkeiten, die unterhalb der Auflösung des CT liegen, können das Fließgeschehen lokal stark dominieren. Diese Strukturinformationen fehlen in den CT-Daten, auf denen sich die Simulation jedoch ausschließlich aufbaut. Somit kann die hohe Korrelation zwischen Simulation und CT in diesem Bereich erklärt werden, obwohl das tatsächliche Fließgeschehen vom simulierten abweicht.

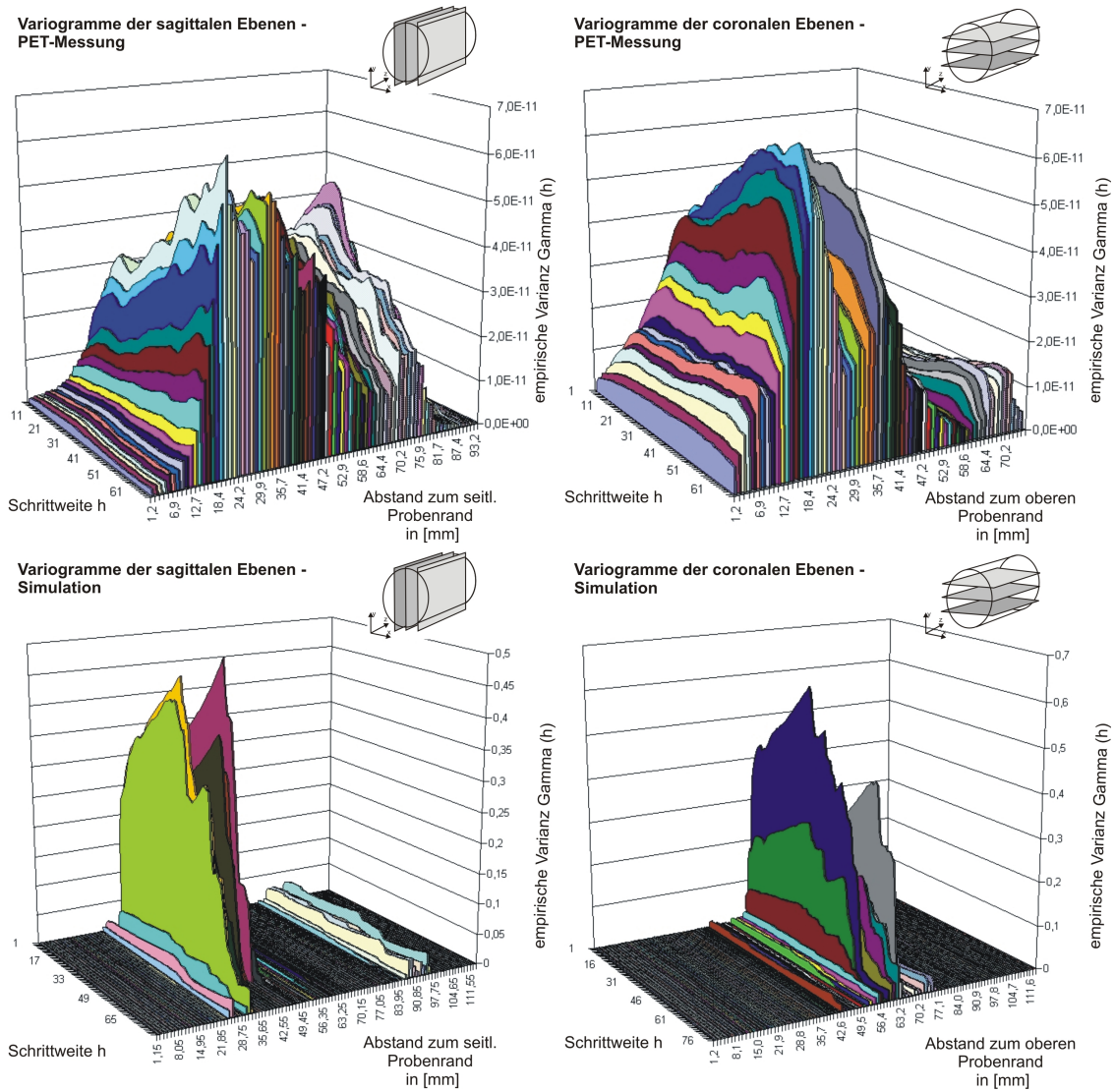
Dass in der PET-Messung vor allem in horizontaler Blickrichtung Hohlraumstrukturen vom Radiotracer durchflossen werden, die vom virtuellen Tracer in der Simulation nicht oder nur in deutlich geringerem Maße benutzt werden, zeigt auch Abb. 5.39, in wel-

cher die Variogramme der PET-Messung (oben) und der Simulation (unten) in sagittaler (links) und coronaler (rechts) Blickrichtung dargestellt sind. Sie verlaufen somit parallel zur Fließrichtung, nicht senkrecht wie bei der transversalen Blickrichtung. Die Variogramme zeigen stellenweise deutliche Locheffekte und teils sehr ausgeprägte Driftkomponenten, im Mittelteil der Probe meist ohne deutliches Plateau oder Korrelationslänge. Die Form der Variogramme ist sowohl durch die periodisch angeordneten und durchströmten Fließkanäle als auch durch das Fading der großen Ansammlung an Aktivität in den Kreuzungen der Risse zum Ende der Probe hin beeinflusst. In den Variogrammen der coronalen Blickrichtung (rechts) erkennt man die sich in dieser Ebene befindenden, horizontal angelegten Fließwege des PET-Tracers, die von den Tracerpartikeln der Simulation in deutlich weniger differenzierter Form nachgezeichnet wurden. Eine gewisse Zweiteilung lässt sich jedoch bei beiden Datensätzen erkennen, obgleich sie an verschiedenen Positionen in der Probe auftaucht (bei den PET-Variogrammen zwischen ca. 20 und 40 mm vom oberen Probenrand, bei der Simulation zwischen ca. 50 und 70 mm). Die Variogramme dieser beiden Bereiche weisen Korrelationen von durchschnittlich 0,41 auf - stellenweise bis 0,66 - und deuten somit eine zumindest prinzipiell hohe Übereinstimmung der Fließmuster an, auch wenn diese räumlich nicht deckungsgleich sind. Es zeigt sich somit, dass der virtuelle Tracer nicht nur weniger Fließwege in horizontaler Richtung benutzt, sondern auch noch in der Tendenz andere, als die Masse des PET-Tracers.

Die sagittale Blickrichtung (links) offenbart sogar weit größere Abweichungen zwischen Modellierung und Messung, jedoch ergeben sich im Bereich von 20 bis 30 mm vom linken Rand entfernt in beiden Datensätzen ähnliche Variogramme, der simulierte Tracer konzentriert sich hier in noch größerem Maße als in der coronalen Blickrichtung auf wenige einzelne Fließpfade. Die geringe Anzahl der Tracerpartikel zeichnet die Verästelungen und Haarrisse kaum ab.

Werden von einem Tomogramm nicht nur das Gesamtvariogramm, sondern auch die Teilvariogramme in verschiedenen Blickrichtungen ermittelt, kann über die Abweichung dieser Teilvariogramme die Anisotropie der Messdaten im Tomogramm bestimmt werden. Diese ist eine wichtige statistische Größe beim Abgleich verschiedener Datensätze.

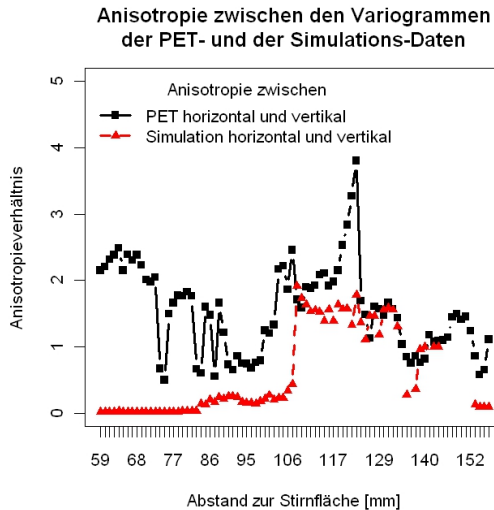
An den Teilvariogrammen in horizontaler (links) und vertikaler Richtung (rechts) der transversalen Ebenen der PET- (oben) und der simulierten Datensätze (unten) in Abb. 5.41 wird die Anisotropie der Tracerverteilung deutlich, welche sich stellenweise in ähnlichem Maß in beiden Datensätzen wieder findet. Nach ARMSTRONG (1998) kann die Anisotropie zweier Variogramme entweder bei etwa gleichem Plateauwert aus dem Quotienten der beiden Korrelationslängen oder bei etwa gleichen Korrelationslängen aus dem Quotienten der beiden Plateauwerte ermittelt werden. Da bei den Variogrammen in Abb. 5.41 Plateauwerte und Korrelationslängen in sehr unterschiedlichem Maße - und stellenweise gar nicht - ausgeprägt sind, empfiehlt es sich hier die Maximalwerte und ihre Schrittweiten zu betrachten. Dazu werden die Quotienten aus den Maximalwerten der horizontalen Variogrammgraphen und deren Schrittweiten  $h$  gebildet und mit den Quotienten von Maximalwerten und entsprechenden Schrittweiten der vertikalen Teilvariogramme ins Verhältnis



**Abb. 5.39:** Variogramme in der sagittalen (links) und coronalen (rechts) Blickrichtung des untersuchten Teilvolumens der PET- (oben) und der Simulations-Daten (unten), mit der «ebenenweisen Methode» erstellt. Die Stirnfläche ist im Bild hinten, die Fließrichtung verläuft auf den Leser zu. Hier verlaufen die variographierten Ebenen parallel zur Fließrichtung, nicht senkrecht wie bei der transversalen Blickrichtung. Die Variogramme zeigen teils sehr ausgeprägte Driftkomponenten, ohne deutliches Plateau oder Korrelationslänge. Die Form der Variogramme ist hauptsächlich durch das Fading der großen Ansammlung an Aktivität in den Kreuzungen der Risse zum Ende der Probe hin beeinflusst. In einzelnen Bereichen korrelieren die Variogramme der Simulations-Daten mit denen der PET-Messung, in der Simulation werden jedoch weit weniger Fließwege benutzt.



gesetzt. Dieses in Abb. 5.40 für alle Variogramme, die auf selber Höhe liegen, dargestellte Verhältnis zeigt, dass erst ab etwa 110 mm hinter der Stirnfläche diese Verhältnisse in etwa synchron laufen.

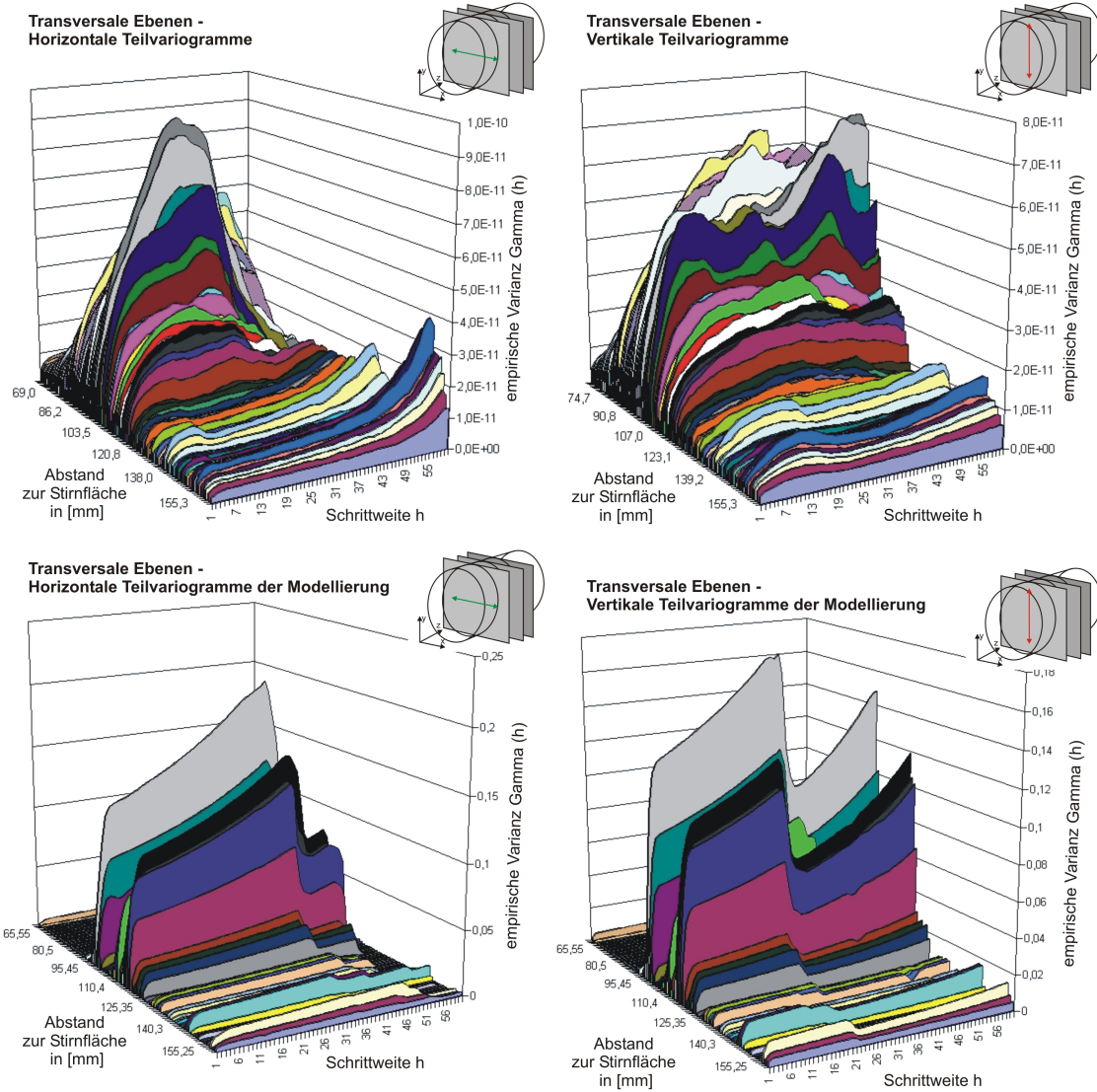


**Abb. 5.40:** Vergleich der Anisotropie zwischen horizontalen und vertikalen Teilvariogrammen der PET-Messungen und der Simulationen. Die Anisotropie ergibt sich aus dem Verhältnis zwischen den Quotienten von Maximalwert und entsprechender Schrittweite der jeweiligen horizontalen und vertikalen Variogrammgraphen. Erst ab etwa 110 mm hinter der Stirnfläche laufen diese Verhältnisse in etwa synchron, davor machen sich die von PET- und virtuellem Tracer unterschiedlich durchströmten horizontalen Fließwege bemerkbar.

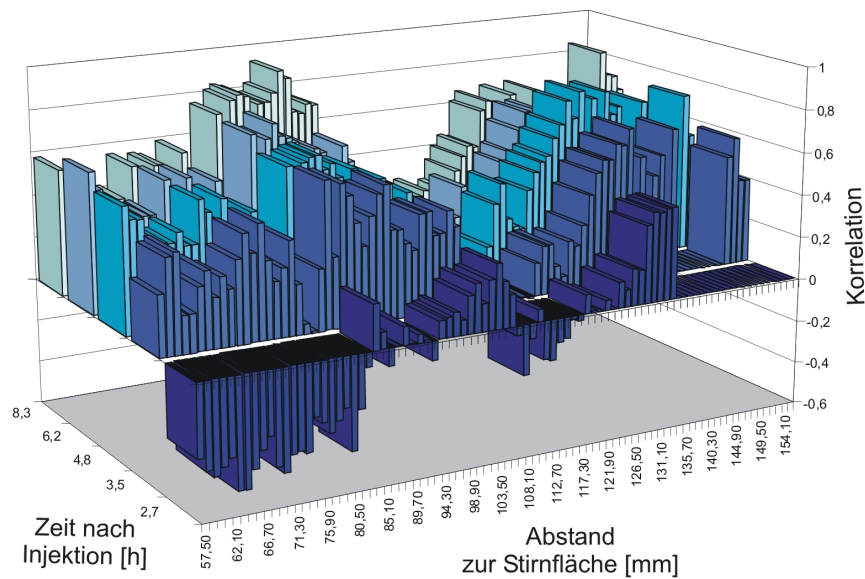
Die Anisotropie zwischen Variogrammen in horizontalen und vertikalen Blickrichtungen ist eine Folge von in diesen Blickrichtungen unterschiedlich ausgeprägten Fließmustern und verändert sich in dem Maß, in dem sich die Muster in den Blickrichtungen verändern. Der geringere Anteil an vom virtuellen Tracer durchströmten horizontalen Fließwegen im Bereich zwischen 90 und 110 mm hinter der Stirnfläche der Probe verglichen zu demjenigen des PET-Tracers schlägt sich somit auf die Anisotropie der Teilvariogramme nieder und lässt die ermittelten Anisotropien in den jeweiligen Tomogrammen erst ab 110 mm synchron laufen. Die beiden in Abb. 5.40 dargestellten Kurven der Anisotropien der einzelnen Tomogramme zwischen 57,50 und 155,25 mm hinter der Stirnfläche des Kerns korrelieren ab 110 mm mit 0,70, was auf die weniger werdenden, fein verteilten Haarrisse in diesem Bereich und auf die jeweils gute Abbildung dieser durch den PET- und den virtuellen Tracer schließen lässt.

Trotz einiger Unterschiede sind sich die gemessenen und die simulierte Fließmuster in weiten Teilen sehr ähnlich. Dass dies auch für einen Großteil der Dauer des Experiments zutrifft, veranschaulicht Abb. 5.42. Hier wurden für fünf Aufnahmen (2,7 h, 3,5 h, 4,8 h, 6,2 h und 8,3 h nach Injektion) die Korrelationen der Variogramme aller Tomogramme der gemessenen und simulierten Datensätze dargestellt.

Im Bereich von etwa 90 bis 110 mm hinter der Stirnfläche korrelieren die Variogramme relativ gut, da sich sowohl in der PET-Messung als auch in der Simulation hier im Bereich der sich überkreuzenden, zahlreichen Risse viel Tracer angesammelt hat, welcher die innere Struktur der Probe gut abbildet. Die «Korrelations-Lücke» ab 110 mm ist durch die bei Abb. 5.4.2 beschriebenen Phänomene zu erklären. Die Korrelationen steigen gegen Ende der Probe wieder sehr stark an, da sich im Experiment und der Simulation dort ein kleiner Teil des Tracers in die feiner und regelmäßiger verteilten Strukturen fließt, was zu sehr



**Abb. 5.41:** Horizontale und vertikale Teilvariogramme der transversalen Blickrichtung des untersuchten Teilvolumens der PET- und der Simulations-Daten, mit der «ebenenweisen Methode» erstellt. Die Stirnfläche ist im Bild hinten. Wie in Abb. 5.36 zeigen sich bei den vertikalen Teilvariogrammen beider Datensätze deutliche Periodizitäten, die weiter Richtung Probenende in statistische Strukturen über gehen. In den horizontalen Teilvariogrammen sind Drifteffekte und nested Structures dominierender. Das Diagramm rechts oben verdeutlicht jeweils die Lage der transversalen Schnittebenen bezogen auf die Probengeometrie, sowie die Blickrichtungen der Teilvariogramme innerhalb dieser Ebenen durch einen grünen (horizontal) bzw. roten Pfeil (vertikal) gekennzeichnet.



**Abb. 5.42:** Korrelation der transversalen Gesamtvariogramme der PET- und Simulations-Daten über fünf Messzeitpunkte 2,7 bis 8,3 h nach Injektion. Im Bereich von etwa 90 bis 110 mm hinter der Stirnfläche korrelieren die Variogramme mit 0,6 bis 0,8, da sich sowohl in der PET-Messung als auch in der Simulation hier im Bereich der sich überkreuzenden, zahlreichen Risse viel Tracer angesammelt hat, welcher die innere Struktur der Probe sehr vollständig abbildet. Die Korrelationen steigen gegen Ende der Probe wieder sehr stark an, da sich im Experiment und der Simulation dort ein kleiner Teil des Tracers in die feiner und regelmäßiger verteilten Strukturen fließt, was zu sehr ähnlichen Variogrammen führt. Allerdings sind in der Messung von 2,7 h nach Injektion sehr deutliche Unterschiede zwischen Messung und Simulation auszumachen, die auf von der Messung leicht abweichenden Rahmenbedingungen in der Simulation zurück zu führen sind.

ähnlichen Variogrammen führt. Allerdings sind in der Messung von 2,7 h nach Injektion sehr deutliche Unterschiede zwischen Messung und Simulation auszumachen, die auf von der Messung leicht abweichenden Rahmenbedingungen in der Simulation zurück zu führen sind. Die Daten vor 2,7 h nach Injektion wurden nicht berücksichtigt, da sich in diesem Teilvolumen in den PET-Daten noch zu wenig und in den simulierten Daten überhaupt kein Tracer befindet.



## 6 Diskussion

### 6.1 Diskussion der PET-Daten und Durchbruchkurven

**Hauptanhydrit, mechanisch belasteter Salzbohrkern & Hohlraumversatz** Die zum Zeitpunkt der Messung des Anhydrit-Bohrkerns geringe Anzahl an Detektoren (8 von heute 20) und der damals aktuelle Stand der Bildrekonstruktion allein können das Fehlen einer sich bewegenden Tracerwolke und das Fehlen großer Mengen der Aktivität nicht erklären. Randfluss ist auf Basis der PET-Daten auch auszuschließen. Selbiges gilt für die PET-Daten des Hohlraumversatzes, welche zwar nach dem Vollausbau des Scanners (Juli 2008) gemessen, aber noch mit dem damaligen Bildrekonstruktionsverfahren (Stand Frühling 2008) erstellt wurden.

Das vom Institut für Geowissenschaften der JGU Mainz modellierte Strömungsfeld des mechanisch belasteten Salzbohrkerns (Abb. 6.1 Mitte), welches die Geschwindigkeitsverteilung eines konstanten Flusses im Kern wider gibt, zeigt an den Stellen geringe Geschwindigkeiten, an denen in den PET-Aufnahmen die höchsten Aktivitäten zu sehen sind. Anders herum sind an Stellen, an denen kaum oder kein Tracer im PET-Bild ersichtlich ist, die höchsten Geschwindigkeiten im Strömungsfeld zu sehen. Tatsächlich sind hohe Geschwindigkeiten auch nicht notwendigerweise in weit geöffneten Klüften zu erwarten. Auf Grund des Kontinuitätsgesetzes der Fluidodynamik und bei hinter einander abfolgenden Strukturen aus großen Klüften und feinen Haarrissen ist in den großen Klüften mit kleineren Geschwindigkeiten, in den Haarrissen dagegen mit großen Geschwindigkeiten zu rechnen. An diesen Haarrissen sind folglich die Verweilzeiten des Tracers klein und die Aktivität pro Voxel anscheinend zu gering, um vom PET-Scanner erfasst zu werden. An Stellen mit größeren Verweilzeiten existiert anscheinend ausreichend Hohlraum, indem entsprechend mehr Aktivität akkumulieren kann, was folglich das scheinbare Auftauchen größerer Traceransammlungen aus dem Nichts erklärt.

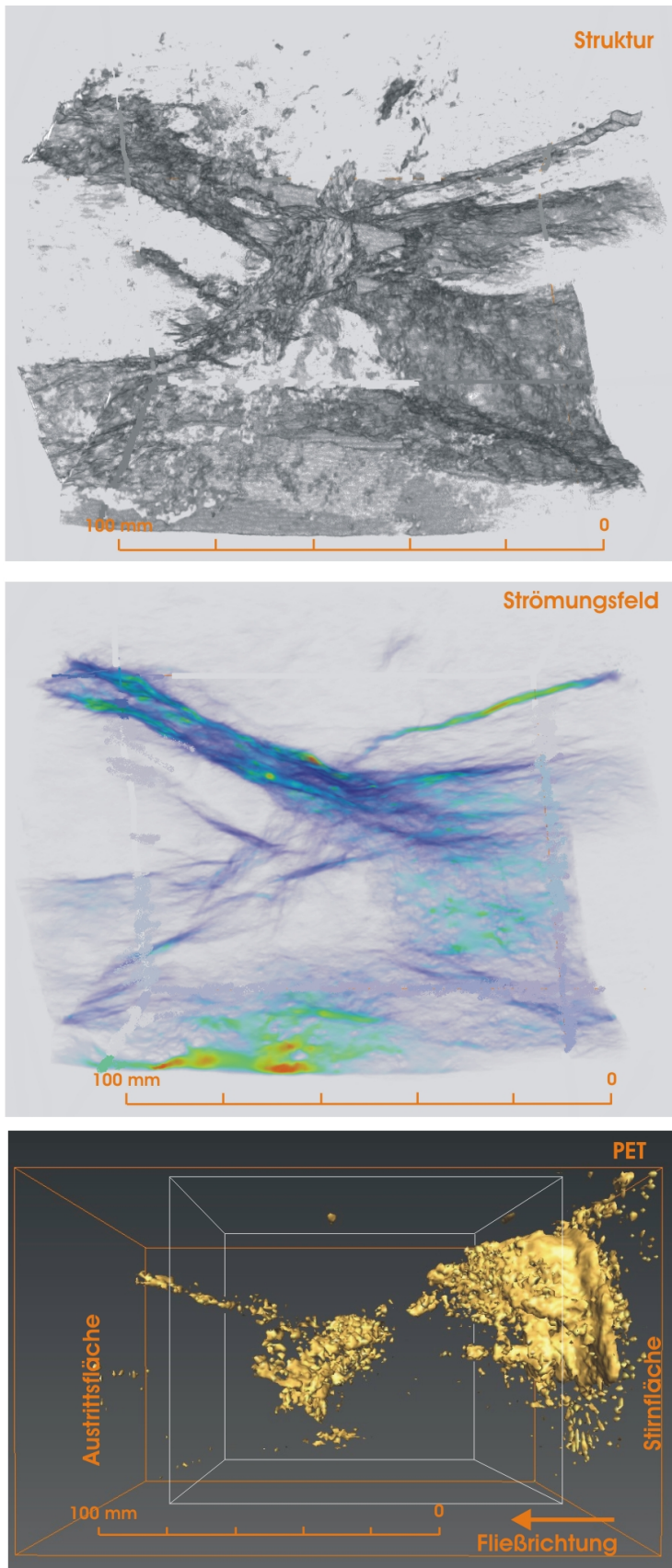
Die fehlende Tracerwolke und die fehlende Masse in den PET-Aufnahmen des Anhydrits und des Hohlraumversatzes können nun damit erklärt werden, dass sich das injizierte Fluid und damit der Tracer in der Probe entlang von Haarrissen bewegt, die weit unterhalb des räumlichen Auflösungsvermögens des PET liegen; die Fließgeschwindigkeiten in diesen Transportpfaden übersteigen die aus den Durchbruchkurven ermittelten mittleren Geschwindigkeiten (Abstandsgeschwindigkeit)  $\bar{v}$  um stellen- und zeitweise mehr als zwei Größenordnungen und liegen auch deutlich über den Filtergeschwindigkeiten  $v_f$ . Da das Fluid samt Tracer mit hoher Geschwindigkeit entlang dieser kleinen Fließpfade durch die Probe gedrückt wird, ist zu keinem Zeitpunkt diejenige Menge an Tracer in der Probe, die

man bei klassischer Betrachtung erwarten würde, da der Tracer sich nicht in Form einer kompakten Wolke bewegt. Weder aus den PET-Daten noch den Durchbruchkurven wären Messungen der wahren  $\bar{v}$  möglich. Der Tracer wird bezüglich der Messdauer der jeweiligen Aufnahmen «instantan» durch die Probe befördert. Somit entgeht dem PET zwangsläufig ein Großteil der vorhandenen Aktivität.

Interpretiert man die Durchbruchkurve des Hohlraumversatzes (Abb. 5.21) und die sich aus ihr ergebenden hydrodynamischen Parameter auf der Grundlage des klassischen Modells, so beträgt die Permeabilität im Vergleich zum Hauptanhydrit mit 0,065 mDarcy nur ein Zehntel und der  $K_f$ -Wert liegt mit  $5,33 \cdot 10^{-10}$  m/s (siehe Tab. C.4 Seite xxi) eine Größenordnung niedriger. Davon ausgehend, dass sich das Fluid im Bohrkern des Hohlraumversatzes analog zu dem des Hauptanhydrits schnell entlang schmaler Fließpfade - in diesem Fall eher Korngrenzen als Haarrisse - bewegt, die eine Ausdehnung weit unterhalb der räumlichen Auflösung des PET haben, kann ein zwar prinzipiell ähnlicher, aber in seiner Ausprägung weniger effizienter Transportmechanismus als beim Hauptanhydrit angenommen werden. Rekristallisationsprozesse während der Komprimierung des Versatzes haben die Wegsamkeiten weitgehend unterbrochen und bedingen die heutige geringe Permeabilität. Über die Methode der Einbringung des Versatzes im späten 19. Jahrhundert liegen kaum gesicherte Fakten vor. Es ist wohl davon auszugehen, dass der Versatz nur als loses Haufwerk vorlag, welches erst beim Zusammengehen der Hohlräume komprimiert wurde. Sollte dieser Zustand inzwischen den Regelfall in den versetzten Hohlräumen darstellen, wären diese vor weiterer Subrosion weitgehend geschützt. Allerdings kann für den Anhydrit auf Grund seiner spröderen Materialeigenschaften solch ein Selbstabdichtungsprozess nicht angenommen werden, auch wenn mit lokaler Versiegelung offener Klüfte durch Ausfällungen zu rechnen ist.

Die von VisualCXTFIT verwendeten partiellen Differentialgleichungen zum Fitten der Durchbruchkurven gehen von idealen Advektions-Dispersions-Bedingungen aus. Damit legt der Vergleich der Messdaten der Durchbruchkurven mit den gefitteten Kurven ohne die Kenntnis der tatsächlichen Abläufe in den Kernen den wohl irreführenden Schluss nahe, dass ein konventioneller advektiv-dispersiver Transport bei diesen Proben gegeben wäre. Die CT- und PET-Aufnahmen zeigen allerdings, dass «Darcy-Bedingungen» kaum gegeben sind und Permeabilität und  $K_f$ -Wert folglich so zu verstehen sind, dass sie sich aus der Probe und der gesamten Mimik (Zu- und Ableitungen, Stirnfläche, Drainagefließ) ergeben. Die sich aus den Rahmenbedingungen des Experimentes und der Durchbruchkurve nach der klassischen Vorstellung ergebenden hydrodynamischen Parameter des Hauptanhydrits, des mechanisch belasteten Salzes und des Hohlraumversatzes (Tab. C.1, C.3 und C.4) sind damit nur eingeschränkt brauchbar.

**Unterer Buntsandstein** Die hohe zeitliche Auflösung der Messungen von Mai und Juni 2009 des Eingangsbereiches des Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein ermöglicht eine detaillierte Betrachtung des Spaltes, der sich direkt an die Eingabefläche anschließt. Ein so ausgeprägtes Fingering auf einer Kluffläche, welches auch bei den zeitlich gröber



**Abb. 6.1:** Vergleich von Kluftstruktur (oben), Strömungs-, bzw. Geschwindigkeitsfeld (mittig) und PET-Aufnahme (unten) des mechanisch belasteten Salzbohrkerns. Der weiß umrahmte Bereich in der PET-Aufnahme zeigt den Umfang der Struktur- und Strömungsdaten. Im Strömungsfeld sind niedrige Geschwindigkeiten blau und hohe rot dargestellt. In der PET-Aufnahme sind vorwiegend an Stellen mit niedriger Geschwindigkeit große Tracermengen zu beobachten. Dies geht auf die längeren Verweilzeiten des Fluids und des Tracers an diesen Stellen zurück auf Grund der starken Verästelung der Strukturen (Fließwege) in diesen Bereichen. Die PET-Aufnahme entspricht derjenigen in Abb. 5.19 unten. (Quelle Strukturdaten BAM Berlin und Strömungsfelddaten JGU Mainz.)

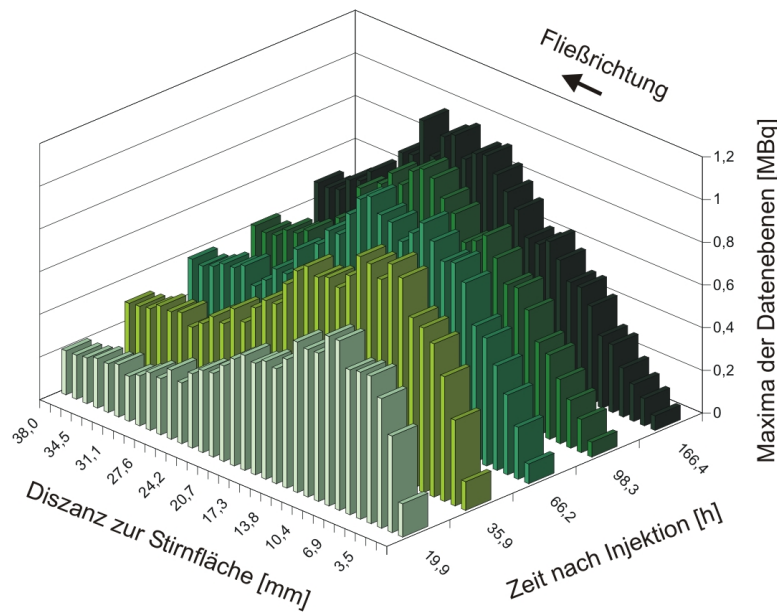
aufgelösten Messungen von Juni und Dezember 2008 auftritt, allerdings wesentlich undeutlicher zu sehen, verringert die vom strömenden Fluid berührte innere Oberfläche des Gesteins erheblich. Und damit die möglichen Austauschflächen für Lösungs- und Fällungsprozesse; deutlich höhere lokale Fließgeschwindigkeiten sind eine weitere Folge. Ähnliche Fließmuster sind auch auf den Rissflächen des mechanisch belasteten Salzes zu beobachten. Nicht alle zur Verfügung stehenden Wegsamkeiten werden zum Transport verwendet, teilweise werden sie sogar anscheinend umgangen, wie in Abb. 5.13 zu sehen ist. Dabei ist jedoch nicht davon auszugehen, dass die Kluft flächig mit Luft erfüllt ist, obwohl eine totale Sättigung des Kerns unwahrscheinlich ist.

Abb. 5.13 offenbart ferner die Grenzen der Interpretierbarkeit der Ergebnisse aus Überlagerung von CT- und PET-Datensätzen. Die im CT durchgängig erscheinenden Klüfte müssen kleinste, auf dem CT jedoch nicht ersichtliche Verstopfungen aufweisen und feine, ebenfalls auf dem CT nicht ersichtliche, aber offensichtlich gut wegsame Haarrisse verlaufen parallel zu den großen Klüften. Transport und Austrocknung der Probe zwischen den CT- und den PET-Messungen, sowie die Durchströmungsexperimente selbst können bereits angelegte Wegsamkeiten geöffnet und bereits vorhandene Wegsamkeiten verschlossen haben. Im CT - trotz seiner hohen Auflösung - nicht oder nur schwer sichtbare Salzausblühungen auf den Kluftflächen können das Fluid in die Haarrisse der Matrix umleiten.

**Einfluss des Teilausbaus des PET auf die Messungen** Dass der Teilausbau des PET und der damalige Stand der Bildrekonstruktion eine Tracerwolke im Bohrkern des Hauptanhydrits und des Hohlraumversatzes hätten abbilden können, zeigt ein Durchflußexperiment, das mit einer zylindrischen Probe aus gepresstem Kaolinit durchgeführt wurde (Abb. 6.3 a). Die PET-Messung dieser Tonprobe (Abb. 6.3 b) fand im Rahmen erster bildgebender Tests mit dem teilausgebauten Scanner im September 2007 statt. Als Vorversuch wurde ein Durchströmungsexperiment mit Eosin durchgeführt, nach welchem die Aufnahmezeiten des Scanners festgelegt wurden. Dargestellt sind sechs Aufnahmen, die zu den jeweiligen Zeiten nach Injektionsbeginn (in Stunden) entstanden. Um die Probe herum sind große Mengen an «Phantomaktivität» zu erkennen, weiterhin findet man viele Bildartefakte innerhalb der Probe, das Voranschreiten der Wolke und ihre Front lassen sich jedoch trotzdem sehr gut beobachten. Weiterhin sind die Durchbruchkurven des Vorversuchs mit Eosin und des Hauptversuchs mit  $^{124}\text{I}$  dargestellt (Abb. 6.3 c). Die Eosinkurve wurde am Ende des Abflussschlauchs aufgenommen, die  $^{124}\text{I}$ -Kurve entstand aus den summierten, messzeit- und halbwertszeitkorrigierten Werten der Voxel einer transversalen Ebene ca. 50 mm von der Stirnfläche entfernt. Die gute Übereinstimmung von gemessenen und gefitteten Daten legt im Fall der Kaolinit-Probe im Hinblick auf die PET-Bilder wohl zu Recht klassische advektiv-dispersive Strömungsverhältnisse nahe. Die auffällige Differenz im Tailing beider Kurven erklärt sich erstens aus den unterschiedlichen Messpunkten (großes Totvolumen bei Eosin) und zweitens aus der Tendenz von Eosin an Kaolinit teilweise zu adsorbieren (CARRERA 1993; HARRIS *et al.* 2001). In Anlehnung an Abb. 5.7 S. 52 sind in Abb. 6.2 die Maxima aller transversalen Ebenen im zeitlichen Verlauf des Durch-



flußexperimente dargestellt. Im Gegensatz zu Abb. 5.7 ist hier jedoch das Voranschreiten einer Tracerwolke durch die Probe sehr gut auszumachen.

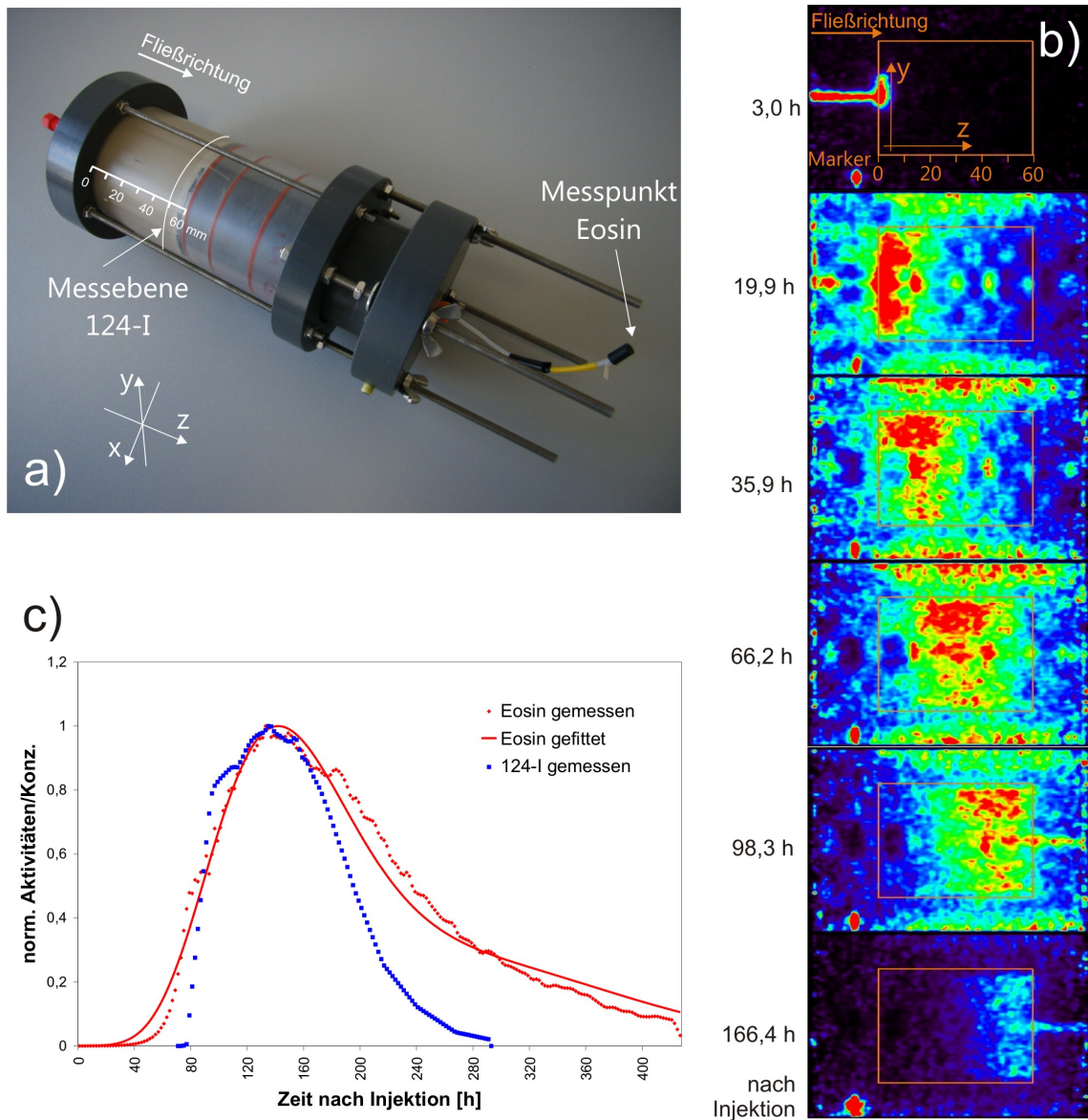


**Abb. 6.2:** In Anlehnung an Abb. 5.7 auf S. 52 dargestellte Maxima aller transversalen Datenebenen (Tomogramme) von fünf verschiedenen Aufnahmen der Kaolinit-Probe. Die jeweiligen Aufnahmen/Datensätze decken den zeitlichen Verlauf des Durchströmungsexperiments ab. Das Voranschreiten einer Tracerwolke ist deutlich ersichtlich.

Die untersuchten Bohrkernze weisen teils sehr heterogene Strukturen und Fließmuster auf, teils zeichnen sie sich durch große Homogenität aus. Die Voraussetzungen für die Annahme von Fluid-Flow-Prozessen basierend auf dem Darcy-Gesetz - laminare Strömung in einem homogen porösen Medium - sind jedoch nur bei den homogen strukturierten Kernen und dort auch nur bedingt gegeben. Bei konventionellen «Black-Box» - Säulenversuchen wird ohne Kenntnis der inneren Struktur in den meisten Fällen von «Darcy-Bedingungen» ausgegangen, auch die resultierenden Durchbruchkurven der hier durchgeführten Experimente würden nicht zwangsläufig zu anderen Schlüssen führen. «Black-Box» - Experimente können im Allgemeinen eventuelle apparative und vom Probenmaterial bedingte abweichende Randbedingungen bezüglich der «klassischen» Advektions-Dispersions-Theorie nicht aufdecken.

Aus diesen Gründen werden durch Computersegmentierungen der CT-Datensätze<sup>1</sup> und der sich darauf aufbauenden Lattice-Boltzmann-Simulationen teilweise andere hydrodynamische Parameter ermittelt (ENZMANN *et al.* 2009; ENZMANN *et al.* 2010) als in den hier vorgestellten Experimenten. In die Berechnungen der Parameter aus den Simulationen geht dabei die komplexe Struktur der Fließwege ein und Fließgeschwindigkeiten und Permeabilitäten werden tensoriell ausgegeben. Für die genaue Vorgehensweise von der Segmentierung der CT-Daten, über die Ermittlung von Porenradienverteilungen, Si-

<sup>1</sup>Aus den Rohdaten wird die perkolierende Struktur segmentiert, also alle vom Beginn bis zum Ende der Probe miteinander verbundene Hohlräume.



**Abb. 6.3:** a) Pressling aus Kaolinit in Mimik eingebaut. b) Sechs sagittale Aufnahmen mit Messzeiten in [h] nach Injektionsbeginn. Farben sind nicht skaliert, rot bedeutet hohe Aktivität, blau bedeutet geringe Aktivität. Im ersten und sechsten Bild ist der Zufluss- bzw. der Abflussschlauch zu erkennen c) Durchbruchkurven von Eosin und  $^{124}\text{I}$ . Die Eosinkurve ist am Ende des Abflussschlauchs aufgenommen, die  $^{124}\text{I}$ -Kurve entstand aus den summarischen Werten der Voxel am Ende der Probe. Dieser Unterschied und die unvollständige Konservativität von Eosin in Kontakt mit Kaolinit erklären das abweichende Tailing. Die beiden Kurven sind bezüglich ihrer  $x$ -Werte an die vom Totvolumen bedingten Zeitunterschiede angepasst, der Eosinpeak trüfe ohne Totvolumenkorrektur 178 h später ein.

	Unterer Buntsandstein	mechanisch belasteter Salzkern
<b>Hohlraumvolumen/Porosität [%]</b>		
$\varphi_{eff}$ aus Durchbruchkurven	7,8*	3,1*
$\varphi_{perkolierend}$ aus Simulation	4,62	32,4
$\varphi_{transportwirksam}$ aus Simulation	0,56	2,50
<b>Permeabilität [mDarcy]</b>		
aus Durchbruchkurven	0,144*	28,67
aus Simulation	180	194
<b>Abstandsgeschwindigkeit** [<math>\frac{m}{s}</math>]</b>		
aus Durchbruchkurven	$8,16 \cdot 10^{-7}*$	$4,15 \cdot 10^{-6}*$
aus Simulation	-	$1,05 \cdot 10^{-7}$

\*gemittelte Werte aus jeweils allen in Anhang C aufgeführten Experimenten  
 \*\*bei den aus der LBM berechneten Daten handelt es sich um mittlere Porengeschwindigkeiten

**Tab. 6.1:** Unterschiede in den durch die PET-Messungen und konventionellen Durchbruchkurven ermittelten und den mittels Lattice-Boltzmann-Simulation erhaltenen hydrodynamischen Parametern. Mit «perkolierend» ist die gesamte miteinander verbundene und damit theoretisch maximale durchflusswirksame Hohlraumstruktur gemeint, mit «transportwirksam» ist die dem strömenden Fluid in der Simulation tatsächlich ausgesetzte perkolierende Hohlraumstruktur gemeint. Simulierte Daten aus (ENZMANN *et al.* 2009; ENZMANN *et al.* 2010).

mulationen des Druck- und Strömungsgeschwindigkeitsfeldes in diesen Segmentierungen und der Bestimmung der Permeabilitätstensenoren siehe ENZMANN *et al.* (2004); ENZMANN *et al.* (2009); ENZMANN *et al.* (2010) und dortige weiterführende Literaturstellen. Bis dato wurden hydrodynamische Parameter mittels LBM nur vom Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein und vom mechanisch belasteten Steinsalzbohrkern errechnet.

Da sich das Transportgeschehen bei diesen beiden Kernen maßgeblich in den Klüften und nur in geringem Maß in den Poren abspielt, bei anderen Kernen wiederum maßgeblich in den Poren, wird in dieser Arbeit allgemein von Hohlraumvolumen gesprochen. Liegen die mittels Durchbruchkurven und LBM ermittelten effektiven Hohlraumvolumina (bzw. durchflusswirksamen Porositäten bei ENZMANN *et al.* (2010)) in den Proben in Tab. 6.1 noch etwa in der gleichen Größenordnung, weichen die mittels LBM ermittelten Permeabilitäten auf Grund ihrer dreidimensionalen Berechnung und Berücksichtigung der komplex strukturierten, durchflusswirksamen Hohlraumstruktur teilweise deutlich von den mittels Durchbruchkurven ermittelten ab (Tab. 6.1, siehe auch Anhang C.2 und C.3). Beim Sandstein-Kern entspricht das mittels Durchbruchkurven ermittelte effektive Hohlraumvolumen  $\varphi_{eff}$  eher dem mittels LBM bestimmten perkolierenden (gesamten zusammenhängenden) Hohlraumvolumen, beim Salzkern eher dem transportwirksamen Hohlraumvolu-

men. Da bei der Sandsteinprobe Porentransport und Matrixdiffusion eine weitaus größere Rolle spielen als beim grob geklüfteten Salzkern und das Fittingprogramm für Durchbruchkurven VisualCXTFIT prinzipiell von «Darcy-Bedingungen» ausgeht, liefern die mittels Durchbruchkurven ermittelten Parameter hier ein stellenweise realistischeres Bild als die Simulations-Daten, da diese auf den CT-Daten des Sandstein-Kerns beruhen und in diesen wiederum nicht alle für den Transport entscheidenden Fließwege - vor allem nicht die unter  $60\ \mu\text{m}$  - erfasst werden, was in Abb. 5.13 verdeutlicht wird. Anders verhält es sich bei der mechanisch belasteten Salzprobe, bei der der Lattice-Boltzmann - Ansatz dem klassischen Darcy-Ansatz wegen der geklüfteten Natur der Haupttransportwege im Material deutlich überlegen ist. Somit ergibt sich analog, dass auch den mittels Durchbruchkurven ermittelten Permeabilitäten für den Sandstein mehr zu trauen ist, doch für den Salzkern liefert die LBM die glaubhafteren Permeabilitätswerte. Die Abstandsgeschwindigkeiten, soweit ermittelt, liegen alle in der gleichen Größenordnung.

Es zeigt sich, dass die PET vor allem für die Abbildung heterogener Fließmuster sehr gut geeignet und von großem Wert für das Prozessverständnis ist, wie man an den Beispielen in Abb. 5.10 und 5.19 sehen kann. Speziell bei heterogenen Fließmustern ist die Ermittlung struktur- oder raumbezogener hydrodynamischer Parameter entscheidend für das allgemeine Prozessverständnis und die Übertragung der Ergebnisse auf die Feldskala. Aber auch für die Überprüfung der für die Darcy-Gleichung vorausgesetzten Rahmenbedingungen kann sie wertvolle Informationen liefern, wie z.B. in Abb. 6.3.

## 6.2 Diskussion der Ermittlung raumbezogener Parameter

Die Dispersivität hängt mit der Variabilität der Geschwindigkeitsverteilung zusammen (FRIPPIAT & HOLEYMAN 2008). Mit zunehmender Länge des Fließweges kann eine Tracerwolke mit unterschiedlichen, heterogenen Strukturen in Kontakt kommen, was auf die Wolke den Effekt einer Zunahme der Variabilität im Geschwindigkeitsfeld hat und damit zum sogenannten Skalen-Effekt der Dispersivität führt (FRIED 1975; FETTER 1999). Diverse Upscaling-Methoden für die Variabilität des Fluidtransports, die Struktur des Untergrundes und seiner hydraulischen Eigenschaften, sowie das Upscaling der Transportgleichungen selbst, welche auf diversen Skalen funktionieren müssen, werden bei CUSHMAN *et al.* (2002), TREFRY *et al.* (2003), ZHOU & SELIM (2003) und FRIPPIAT & HOLEYMAN (2008) ausführlich behandelt.

Dass die Dispersionskoeffizienten auf der Feldskala mit zunehmender Zeit und Fließstrecke zunehmen, ist bekannt (SAUTY 1978; SILLIMAN & SIMPSON 1987; GELHAR *et al.* 1992; ZHOU & SELIM 2003), ähnliches kann für die Laborskala vor allem bei heterogen strukturiertem Material jedoch auch angenommen werden, wenn auch in kleinerem Maßstab.

Dass die Geschwindigkeit der Dispersion in einem homogenen, isotropen, porösen Medium, wie dem Kaolinitpressling, in etwa konstant bleibt, ist zu erwarten. Dass diese Geschwindigkeit in der Kluft des Sandsteins deutlich ansteigt, lässt darauf schließen, dass bereits auf Distanzen von 0,5 bis 4,5 cm unterschiedliche Kluftgeometrien oder Variatio-

nen in den Rauigkeiten der Kluftoberflächen zu signifikanten Variationen in den Fließgeschwindigkeiten führen und damit zu einer messbaren fließstreckenabhängigen Zunahme des Dispersionskoeffizienten und der Dispersionsgeschwindigkeit. Um die Durchbruchkurven korrekt zu beschreiben, müsste demnach die genaue Kluftgeometrie bekannt sein, sowie die Dispersion der Tracerwolken in mindestens 3 Dimensionen berücksichtigt werden.

Da strukturbezogene hydraulische Parameter bei heterogenen Strukturen auf Grund ihrer teils hohen räumlichen Variabilität aus statistischen Gründen an einer Vielzahl von Stellen innerhalb der Probe ermittelt werden müssen, ist es zweckmäßiger, für die gesamte Probe eine dreidimensionale, mathematische Beschreibung des Fließverhaltens basierend auf den hydraulisch leitfähigen Strukturen zu berechnen, anstatt nur für einzelne Punkte innerhalb der Probe. Eventuelle Interaktionen verschiedener Teile der Tracerwolke, die sich auf verschiedenen schnellen und sich teilenden und vereinigenden Bahnen bewegen, kann nur durch eine räumliche Simulation Rechnung getragen werden. Auf diese Weise können diese Parameter dann an beliebig vielen Stellen und somit mit einer hohen statistischen Repräsentativität erhoben werden. Ein Lattice-Boltzmann-Ansatz bietet sich hierzu an, da die durchströmten Strukturen in den Größenordnungen von  $\mu\text{m}$  bis mm liegen. Um die Validität solcher Modellrechnungen und den ermittelten Parametern zu gewährleisten, können die Strömungsmuster solcher Datensätze mit denen gemessener Datensätze abgeglichen werden. Die simulierten Daten könnten somit analog zu konventionellen Durchbruchkurven an die gemessenen Fließmuster «gefittet» und somit die dreidimensionale Verteilung der Parameter erhalten werden.

### 6.3 Diskussion des variographischen Abgleichs verschiedener Datensätze

Der Abgleich von PET- und CT-Messung und LBM-Simulation mittels Variographie zeigt, dass der Tracer, ob real oder simuliert, die durchflusswirksame Struktur innerhalb der Probe nur in Bereichen hoher Konzentrationen so vollständig abzeichnet, dass sich in den PET-Messungen und den LBM-Simulationen ähnlich ausgeprägte Datensätze und damit ähnliche Variogramme ergeben. Eine Verbesserung dieser Situation lässt sich mit der Verwendung der Maximalwerte der Datensätze erzielen, die in jedem Voxel über die Dauer des Experiments oder der Simulation erreicht wurden. Die Abweichungen zwischen Messung und Simulation lassen sich stellenweise auf Beschränkungen und Rahmenbedingungen der Simulation zurückführen (zu geringe Partikelanzahl, vom Experiment abweichender Injektionsimpuls), stellenweise auf die Auflösung der  $\mu\text{XCT}$ , die nicht alle relevanten Fließpfade erfassen kann und diese somit nicht in die Simulation einfließen können. Wo Tracerkonzentrationen hoch genug sind und Fließpfade genau genug erfasst werden können, ergeben sich hohe Übereinstimmungen zwischen PET und LBM-Simulation und den aus ihnen ermittelten resultierenden hydrodynamischen Parametern.

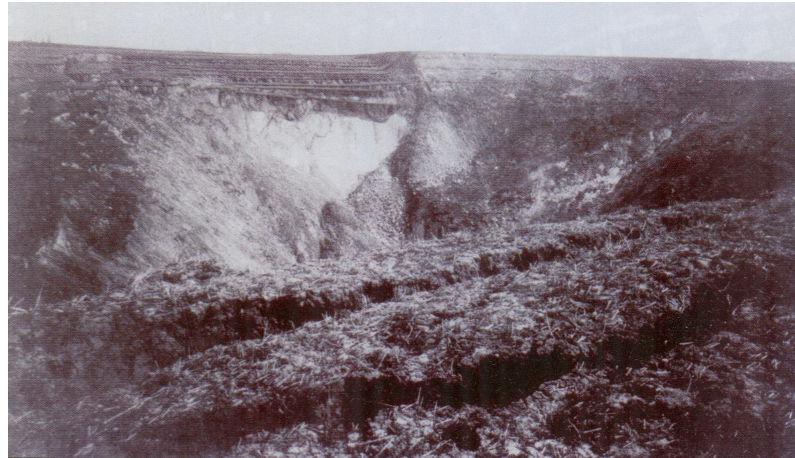
Die «blockweise Methode» der dreidimensionalen Variographie vermittelt einen generellen Überblick über die Abweichungen der Datensätze, sie differenziert jedoch nicht zwischen Teilbereichen und zeigt nur ein integrales Bild. Die «ebenenweise Methode» erlaubt hingegen räumlich hoch differenzierte Aussagen über Art, Signifikanz und eventuelle Ursachen der Abweichungen der Fließmuster der beiden Datensätze. Dieser Erkenntnisgewinn kompensiert den deutlich höheren Aufwand der Auswertung gegenüber den Ergebnissen der «blockweisen Methode» bei weitem.

Es zeigt sich, dass die Korrelationen der Variogramme der Messdaten tendenziell deutlich höher ausfallen als die Korrelationen der Messdaten selbst. Die stark unterschiedlichen räumlichen Auflösungen von PET-Daten gegenüber CT- und LBM-Daten bedingen eine Reskalierung letzterer. Zwar haben alle Datensätze danach dieselben Dimensionen, ein Vergleich «Voxel für Voxel» ergibt dennoch eine deutlich schlechtere Korrelation als der Vergleich der durch die Variographie abstrahierten Bildinformationen. Wie in Abschnitt 5.4.1 und dort im Besonderen in Tab. 5.2 gezeigt wurde, sind Variogramme in der Lage auch bei deutlichen Unterschieden der Datensätze die prinzipiellen - also relevanten - Gemeinsamkeiten darzustellen, im Gegensatz zu den Messdaten selbst.

## 6.4 Auswirkungen auf das hydrologische Modell Staßfurts

Wie bei der Probe aus dem Unteren Buntsandstein in Abb. 5.10 auf S. 55 und auch bei der mechanisch belasteten Probe in Abb. 5.19 auf S. 62 zu sehen ist, müssen die prinzipiell zur Verfügung stehenden Fließwege (Poren und Klüfte) nicht automatisch vollständig am Fließgeschehen beteiligt sein, auch wenn dies nach Betrachtung der mittels  $\mu$ XCT gewonnenen Daten über die perkolierenden Strukturen im Inneren der Proben zu erwarten wäre. Durch präferentielles Fließen wird beim Transport nur ein bestimmter Teil der inneren Oberfläche in Anspruch genommen. Für einen eventuellen reaktiven Stofftransport hätte dies einen lokal stark variierenden Umsatz der Reaktionen zur Folge. Die Quantität von z.B. Lösungsprozessen oder Adsorptionsreaktionen würde nur auf Basis von CT-Messungen falsch eingeschätzt werden.

Zwar wird bei SEIFERT & BODE (2002) die Bedeutung von Störungen, etwa der Gänsefurth-Hecklinger Störungszone, für die hydrologischen Verhältnisse in der Staßfurter Region hervorgehoben, JAHNKE *et al.* (2010) verzeichnen auch sehr hohe, klufftbedingte Transmissivitäten zwischen den Grubenbauen und über verschiedene Grundwasserstockwerke hinweg und die von SCHÖTTLER (2010) gemessenen Grundwasserfließrichtungen zeigen massive klufftstrukturbedingte Variabilitäten; im 3D-Modell der Grubenbaue und des geologischen Untergrundes (DREBACH *et al.* 2010), aber auch im regionalen hydrologischen Modell (DIERSCH *et al.* 2010) konnten Störungen auf Grund von mangelndem Datenmaterial bis dato nur teilweise implementiert werden. Diese Daten könnten in Zukunft u. A. aus reflexionsseismischen Profilen gewonnen werden, in denen POLOM & HEINZE (2010) an manchen Stellen deutliche Störungszonen ausmachen können.



**Abb. 6.4:** Der Tagesbruch «Strandsolbad» über dem Grubenfeld Leopoldshall I/II kurz nach seiner Entstehung im Jahr 1899. Blick nach Nordosten. Eine markante Störung schneidet den Tagesbruch in NE-SW Richtung (senkrecht zum Salzsattel), kleinteilige Staffelbrüche kennzeichnen die nördliche Seite des Bruches.

Der Aufstieg des Staßfurt-Egelter Salzsattels wurde durch zahlreiche Kippbewegungen der Aschersleben-Staßfurter Schrägscholle (KIRSTEN 1928) induziert und die weiteren halokinetischen Prozesse verursachten wiederum tektonische Spannungen in der Region (siehe EBERHARDT (1969) («Schollenmosaik») und BEST (1996) («Floßtektonik») in Abschnitt 2.1.2). Daher kann von einem ausgeprägten Störungsnetzwerk in der Region um Staßfurt ausgegangen werden. Die Entstehung und Lage der historischen Solequellen und Salzwasseraufstiegszonen (KERNER *et al.* 2010), das Fallen von Tagesbrüchen im Gipskarst - z.B. das Strandsolbad (Abb. 6.4) (DÜSTERLOH & TEDEVA 2010) - und deren Lage bezüglich angenommener und nachgewiesener Störungen, sowie die Vermischung, Deszendenz- und Aszendenzbewegungen verschieden hoch mineralisierter Wässer (siehe Abschnitt 2.2.2, S. 15) und die Chronik des Absaufens der Bergwerke (ALLENDORF 2010) könnten durch die Erfassung - z.B. durch geologische Kartierungen (FRENZ *et al.* 2010) - und Einbindung der Störungen in der Region umfassender geklärt werden.

Überträgt man die Beobachtungen aus den PET-Messungen auf die Feldskala, ist zu bedenken, dass die Ausbildung präferentieller Fließwege in heterogenen Materialien - der Staßfurter Untergrund kann auf Grund der geogenen und anthropogenen Geschichte als solcher bezeichnet werden - die Regel ist. Diese präferentiellen Wegsamkeiten sind kluft- und störungsgebunden und belegen innerhalb des Kluft- und Störungsnetzwerks wiederum nur Teilbereiche. Ein Großteil der für das Deformations- und Bruchgeschehen verantwortlichen Störungen wird im Anhydrit und im Gipskarst zu finden sein. Verstärkt oder gar erst ausgelöst durch den Bergbau und die mit ihm verbundenen umfassenden Wasserhaltungsmaßnahmen kann es hier somit zu lokal stark variierenden Strömungsgeschwindigkeiten kommen, was starke partielle Subrosion des löslichen Materials und eine lokale Destabilisierung des Gipskarstes zur Folge haben kann.

Die Erfassung aller Störungen in der Region und die exakte Bewertung ihres Einflusses auf das Grundwasserströmungsfeld sind unrealistisch. Die Implementierung zumindest aller größerer Störungen, sowie die Rahmenbedingungen eines von präferentiellen Fließwegen dominierten Strömungsfeldes - was die lokale hohe Varianz der Fließgeschwindigkeiten, Permeabilitäten und Dispersionsraten betrifft - können das regionale Grundwassermodell jedoch verbessern. Ein möglicher Weg, diese Daten zu erhalten, ist in dieser Arbeit, speziell in den Abschnitten 5.3 und 5.4 aufgezeigt worden. Die Kombination aus PET- und  $\mu$ XCT-Messung und Lattice-Boltzmann-Simulation des Fließgeschehens in heterogenem Material und der Abgleich zwischen den Datensätzen und die damit verbundene Validierung der Simulation mittels dreidimensionaler Variographie stellen effektive Techniken für die strukturabhängige Erfassung dieser Parameter und ihrer Streubreite dar.



## 7 Ausblick

Geologische Formationen stellen in Bezug auf ihre chemischen und physikalischen Eigenschaften oft hochkomplexe Multiphasensysteme dar. Der Weg von der Betrachtung isolierter und stark vereinfachter Teilaspekte dieser Systeme bis zu immer höher gradiger Komplexität bleibt eine asymptotische Annäherung an die Natur, die immer höhere Ansprüche an die mathematische Beschreibung der Systeme, aber auch an den Aufwand bezüglich der Rechenzeit und der Auswertung der stark steigenden Datenmengen stellt.

Die Positronen-Emissions-Tomographie ermöglicht einen Vergleich von gemessenen und berechneten Daten und kann somit einen wertvollen Beitrag als Korrektiv für die Modellierungen liefern. In dem Maß wie in Zukunft Streuungs- und Absorptionskorrekturen besser und Bildartefakte weniger werden, wird die PET diese Aufgabe zusehends besser erfüllen.

Für die vorliegende Arbeit ermöglicht der aktuelle Stand der Bildrekonstruktion und die Anzahl bis dato gemessener Bohrkerne, sowie der modellierten Strömungsdynamik in diesen Kernen eine Übersicht über die Techniken der Auswertung und des Abgleichs gemessener und modellierter Datensätze. Zukünftige PET-, CT- und Modellierungsdatensätze werden verbesserte Möglichkeiten des Abgleichs über die Variographie hinaus aufzeigen. Denkbar wäre etwa eine Implementierung einiger Kriging-Techniken, welche die statistischen Verteilungen der Messwerte unabhängig von der tatsächlichen Position im Raum wider geben. Diese ließen sich mit entsprechender Rechenleistung z.B. aus einer Vielzahl von Punkten innerhalb der Proben und der simulierten Datensätze aus zahlreichen Durchbruchkurven und daraus abgeleiteten Parametern ermitteln. Ferner wäre es sehr interessant, die gemessenen Strukturdaten der Bohrkerne durch unterschiedliche statistische Verfahren zu generalisieren, an diesen generalisierten Datensätzen Stofftransportsimulationen zu rechnen und diese Ergebnisse mit den PET-Daten zu vergleichen. Denn für die Übertragung auf die Feldskala ist eine an das prinzipielle Prozessverständnis und an generalisierende statistische Betrachtungen angelehnte Vorgehensweise eher Ziel führend, als eine an tatsächliche Strukturen und Fließmuster angelehnte Betrachtungsweise. Diese Detailbetrachtung in Bohrkerne wird einen erweiternden Beitrag zum Prozessverständnis und zu verlässlicheren Parametern liefern, die in die großskalige Grundwassermodellierung eingehen.

Als ein sehr langfristiges Ziel der verbesserten Grundwassermodellierung kann im Fall von Staßfurt und anderen Bergschadensgebieten eine verbesserte Vorhersage des Senkungsgeschehens im Stadtgebiet gesehen werden, was möglicherweise auch in eine Strategie zur Sanierung der Region mündet. Bei der Abschlusstagung des Forschungsverbundprojekts

in Staßfurt vom 18. bis 20. November 2010 war in der «Volksstimme» zwar zu lesen, dass von den bergmännisch aufgefahrenen Hohlräumen höchstwahrscheinlich keine Bruchgefahr mehr ausgeht (Abb. 7.1), doch bleiben noch viele offene Fragen über das Zusammenspiel von Gipskarst und den ihn prägenden Störungen, quartären Rinnenfüllungen und geogenen Subrosions Hohlräumen, den Bereichen der ehemaligen Grubenbaue und der städtischen Wasserhaltung, was entscheidend ist für die Senkungsprozesse in der Stadt.

Bergbauexperten blicken interessiert auf Ergebnis vierjähriger Forschungen an der Wiege des Weltkallbergbaus

# Bruchgefahr für Staßfurt kein Thema mehr

Wild abgessenen oder geplant gedaut. Der Kali- und Steinsalzabbau hat dem Staßfurter Untergrund Hohlräume beschert, mit denen die Stadt seit Anfang des vergangenen Jahrhunderts zu kämpfen hat. Jetzt der letzten Tagebaubruch ist nunmehr vorbei. So lautet das Fazit eines vier Jahre währenden Forschungsprojektes, das gestern an der Wiege des Weltkallbergbaus den 180 Teilnehmern einer Fachtagung in Staßfurt wurde und zummindest ein Ergebnis mit Beachtung finden dürfte.

Von Falk Rockmann

Staßfurt. „Bis 1992 galt für das Stadtzentrum von Staßfurt ein absolutes Bauverbot. Und nicht nur das. Jede Investition in Neubauwerke wurde als „geotechnisches Risiko verbunden“, erklärt Martin Kriesel, Unso glücklicher nahm der ehemalige Bürgermeister der Salzstadt, der sich in seiner Amtszeit stark für das Forschungsverbundprojekt einsetzte, gestern zur Kenntnis. „Die geotechnische Sicherheit gegeben ist für künftige Investitionen.“

Wir haben alle Prozesse untersucht, die zu den Senkungen oder Tagesbrüchen im Bereich der ehemaligen Salzbergwerke am Staßfurter Sattel führten“, fasst Johannes Genau die vierjährigen Untersuchungen zusammen.

## „Hohlräume sind verschlossen, verbaut oder voll schwerer Lauge“

Der Koordinator des Forschungsverbundes, an dem sich Experten von zehn Universitäten, Instituten und Firmen aus ganz Deutschland beteiligen, besichtigte die Stadt: „Staßfurt ist im Grunde ein Gegenstandsgebiet mehr. Die Hohlräume sind



Hier im Staßfurter Stadtzentrum, wo sich der Boden um bis zu sieben Meter gesenkt hat, ist mit Mitteln der IBA der Stadtsee entstanden. Archivfoto: Falk Rockmann

ben. Mit Hilfe von verschiedenen Messtechniken, die von den Messern bis zu Präzisionsmessern bis zu elektronischen Erkundungssensoren reichen, wurde festgestellt, wie sich das Deckgebirge über den alten Grubenbauen verhält. Sechs Tiefbohrungen bis in 400 Meter und mehr als 60 Flachbohrungen wurden gebohrt.

Ein komplexes 3-D-Modell ist nun das Ergebnis des Forschungsverbundvorhabens namens „Dynamik abgeöffneter oder gedauter Salzbergwerke“. Auch alte Daten vom Fraunhofer-Institut

erschlossen, entweder durch Salzstoffsaltzugänge oder durch Wasser. Auch die Senkungen im Deckgebirge bewegen sich auf den Normalzustand zu, die nach unserer Einschätzung nicht mit einer zukünftigen Bruchgefahr gleichzusetzen sind.

Ein Wehmutstropfen dabei ist, dass die Pläne für ein Kompetenzzentrum am Staßfurter Sattel nicht umsetzen konnten. Das sollte die IBA-Projekte sein, wo Salz abgebaut wurde. Hier sollten die Ergebnisse des Forschungsverbundes erhalten, Thüringen, Niedersachsen und Nordrhein-Westfalen. So-

Oberflächenmodelle“, bedauert Johannes Gerardi. „Staßfurt ist die Wiege des Weltkallbergbaus – ein Phund, mit dem man was erreichen kann.“ Ex-Bürgermeister Martin Kriesel: „Staßfurt ist noch ein drauf“. Staßfurt ist auch die Wiege aller Erkenntnisse und die Stadt wäre gut beraten, Nektar aus dieser heiligen Tagung zu ziehen.“

Staßfurter Forschungen für alle. Die Ergebnisse sind wo Salz abgebaut wurde. Hier sollten die Ergebnisse des Forschungsverbundes erhalten, Thüringen, Niedersachsen und Nordrhein-Westfalen. So-



Die Skulptur eines Bergmannes steht in der Innenstadt von Staßfurt im Salzlandkreis. Die ehemaligen Salzbergwerke unter der Stadt stellen aus Sicht von Experten eine deutlich geringere Gefahr dar als bislang angenommen. Foto: ZB

## Das Forschungsprojekt mit sechs Tiefenbohrungen

- Zehn Universitäten, Institute und Firmen waren seit 2006 unter Federführung der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, die Staßfurt, Graben-Hohlräume und Bewegungen im Deckgebirge zu untersuchen.
- Sechs Tiefbohrungen (bis zu 400 Meter) und über 60 Flachbohrungen wurden gesetzt. Sie werden teilweise in Grubenbauelementen wiederholt.
- Entlang des Staßfurter Salzbergwerks wurden auch per Hubschrauber elektromagnetische und laseroptische Messungen durchgeführt als Grundlage für weiterführende geophysikalische, hydrogeologische und hydrochemische Untersuchungen.
- Die Kosten trugen das Bundesministerium für Bildung und Forschung (6,7 Millionen Euro), das Landesamt für Geologie und Bergwesen (2,5 Millionen Euro) und die Firmen (0,5 Millionen Euro).
- 180 Bergbauexperten aus ganz Deutschland waren nach bis morgen in Staßfurt zur Fachtagung, um sich über die Ergebnisse des Forschungsverbundprojektes „Dynamik abgeöffneter oder gedauter Salzbergwerke“ zu informieren.
- Die Ergebnisse von Staßfurt sollen übertragbar auf andere Regionen sein. Allen in Sachsen-Anhalt, Thüringen, Niedersachsen und Nordrhein-Westfalen betrieben wurde bzw. wird.

Abb. 7.1: Pressemitteilung in der «Volksstimme» über die Staßfurt-Abschlussstagung vom 18. bis 20. November 2010.



# Literatur

- 150 Jahre Salzbergbau Staßfurt: Wiege des Kalibergbaus/Bergmannsverein Staßfurt (2002). Gesammelte Festschriften anlässlich der Hundertfünfzigjahrfeier des Kaliwerks Staßfurt. 1852-1952 - 100 Jahre Staßfurter Salzbergbau. 1952-2002 - Geschichte des Staßfurter Salzbergbaus und der Staßfurter Kaliindustrie in der Zeit von 1952-2002. Salzland Druck. 152/206 S.
- Akin, H. & Siemes, H.** (1988): *Praktische Geostatistik – Eine Einführung für den Bergbau und die Geowissenschaften*. Berlin, Heidelberg: Springer. 304 S.
- Allendorf, A.** (2010): «Montanhistorie der Kali-gruben am Staßfurter Sattel - Grundlagen». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 19–31.
- Anger, H. O. & Rosenthal, D. J.** (1959): «Scintillation camera and positron camera». *Medical Radioisotope Scanning. International Atomic Energy Agency, Wien*, S. 59–75.
- Armstrong, M.** (1998): *Basic Linear Geostatistics*. Berlin, Heidelberg: Springer. 153 S.
- Attinger, S., Dentz, M., Kinzelbach, H. & Kinzelbach, W.** (1999): «Temporal behaviour of a solute cloud in a chemically heterogeneous porous medium». *Journal of Fluid Mechanics* 386, S. 77–104.
- Bach, J.** (2010): «Untersuchung der Isekinetischen Vorgänge beim Ersaufen der Staßfurter Kaligruben». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 161–172.
- Balaska, P.** (1999): «Die marin beeinflussten Sande im Tertiär von Nachterstedt-Schadeleben in der östlichen Subherzynen Senke – Sedimentologie, Fazies und stratigraphische Bewertung». Dissertation. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Baldwin, B. A. & Yamanashi, W. S.** (1988): «NMR imaging of fluid dynamics in reservoir core». *Magnetic Resonance Imaging* 6, S. 493–500.
- Bechtel, A. & Püttmann, W.** (1997): «Paleoceanography of the early Zechstein Sea during Kupferschiefer deposition in the Lower Rhine Basin (Germany): A reappraisal from stable isotope and organic geochemical investigations». *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 136, S. 331–358.
- Bellin, A. & Rubin, Y.** (1996): «HYDRO GEN: A spatially distributed random field generator for correlated properties». *Stochastic Hydrology and Hydraulics* 10, S. 253–278.
- Bellin, A. & Tonina, D.** (2007): «Probability density function of non-reactive solute concentration in heterogeneous porous formations». *Journal of Contaminant Hydrology* 94, S. 109–125.
- Bendriem, B. & Townsend, D. W.** (1998): *The Theory and Practice of 3D PET*. Dordrecht, Boston, London: Kluwer Academic Publishers. 167 S.
- Best, G.** (1996): «Floßtektonik in Nordwestdeutschland: Erste Ergebnisse reflexionsseismischer Untersuchungen an der Salzstruktur Oberes Allertal». *Zeitschrift der Deutschen Geologischen Gesellschaft* 147.4, S. 455–464.
- Biswal, B., Øren, P. E., Held, R.J., Bakke, S. & Hilfer, R.** (2007): «Stochastic multiscale model for carbonate rocks». *Physical Reviews of the Earth* 75, S. 061303. URL: <http://www.icp.uni-stuttgart.de/publications/2007/BOHBH07>.
- (2009a): «Modeling of Multiscale Porous Media». *Image Analysis and Stereology* 28, S. 23–34. URL: <http://www.icp.uni-stuttgart.de/publications/2009/BOHBH09>.
- Biswal, B., Held, R.J., Khanna, V., Wang, J.-S. & Hilfer, R.** (2009b): «Towards precise prediction of transport properties from synthetic computer tomography of reconstructed porous media». *Physical Reviews of the Earth* 80, S. 041301. URL: <http://www.icp.uni-stuttgart.de/publications/2009/BHKWH09>.
- Bohn, A., Jahnke, C., Baron, U. & Voigt, H.-J.** (2002): «Thermodynamik der Lösungsvorgänge im Salz- und Deckgebirge». In: *Verbundvorhaben: Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt. Abschlußbericht*. Hrsg. von **K. Knödel, K.-H. Lux, G. Seifert, H.-J. Voigt, M. Lauterbach & A. Schuck**. Hannover: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, S. 74–79.
- Borchert, H.** (1959): *Ozeane Salzlagerstätten*. Berlin: Gebrüder Borntraeger. 237 S.
- Bornemann, O.** (1991): *Zur Geologie des Salzstocks Gorleben nach den Bohrerergebnissen*. BfS-Schriften. Salzgitter: Bundesamt für Strahlenschutz. 67 S.
- Busch, W., Hanusch, C., Knospe, S. & Maas, K.** (2002): «Altbergbau – Gefahr für Mensch und Umwelt? Neue Ansätze für die dynamische Modellierung untertägiger Salzlösungsprozesse im Kalialtbergbaugebiet Staßfurt». *TUC Contact Forschung* 11, S. 35–38.

- Caers, J. & Zhang, T.** (2004): «Multiple-point Geostatistics: A Quantitative Vehicle for Integrating Geologic Analogs into Multiple Reservoir Models». In: *Integration of outcrop and modern analog data in reservoir models*. Hrsg. von **M. Gramer, P.M. Harris & G.P. Eberli**. AAPG Memoir 80. AAPG, S. 383–394.
- Carrera, J.** (1993): «An overview of uncertainties in modelling groundwater solute transport». *Journal of Contaminant Hydrology* 13, S. 23–48.
- Chang, Y.H., Scrimshaw, M.D., Emmerson, R.H.C. & Lester, J.N.** (1998): «Geostatistical analysis of sampling uncertainty at the Tollesbury Managed Retreat site in Blackwater Estuary, Essex, UK: Kriging and cokriging approach to minimise sampling density». *The Science of the Total Environment* 221, S. 43–57.
- Choi, Y. & Park, H.-D.** (2006): «Integrating GIS and 3D geostatistical methods for geotechnical characterization of soil properties». In: *IAEG, 10th International Congress 06.–10. Sept. 2006*. Nottingham, UK.
- Cirpka, O.A., Schwede, R., Luo, J. & Dentz, M.** (2008): «Concentration statistics for mixing-controlled reactive transport in random heterogeneous media». *Journal of Contaminant Hydrology* 98, S. 61–74.
- Cressie, N.** (1993): *Statistics for Spatial Data*. New York: Wiley. 900 S.
- Cushman, J.H., Bennethum, L.S. & Hu, B.X.** (2002): «A primer on upscaling tools for porous media». *Advances in Water Resources* 25, S. 1043–1067.
- D’Ans, J.** (1933): *Die Lösungsgleichgewichte der Systeme der Salze ozeanischer Salzablagerungen*. Hrsg. von **Kali-Forschungs-Anstalt GmbH**. Berlin: Verlagsgesellschaft für Ackerbau mbH. 254 S.
- Dagan, G.** (1989): *Flow and transport in porous formations*. Springer.
- (1998): «Solute concentration fluctuations in aquifer transport: theory, simulation and field experiments». In: *Groundwater Quality: Remediation and Protection*. Hrsg. von **M. Herbert & K. Kovar**. IAHS Publication no. 250. Tübingen: International Association of Hydrological Sciences, S. 575–578.
- Degenhardt, C. & Thon, A.** (2007): «Blitzschnelle Einblicke – Funktionale Bildgebung mit der Positronen-Emissions-Tomographie entlarvt Krebs im Frühstadium». *Physik Journal* 7, S. 23–29.
- Deguedre, C., Pleinert, A., Maguire, P., Lehmann, E., Missimer, J., Hammer, J., Leenders, K., Böck, H. & Townsend, D.** (1996): «Porosity and pathway determination in crystalline rock by positron emission tomography and neutron radiography». *Earth and Planetary Science Letters* 140, S. 213–225.
- Delhomme, J.P.** (1979): «Spatial variability and uncertainty in groundwater flow patterns: a geostatistical approach». *Water Resources Research* 15.2, S. 269–280.
- Diersch, H.J., Luo, J. & Rühaak, W.** (2010): «Numerische Strömungs- und Massentransportmodellierung im Bereich des ehemaligen Kalibergbaus Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 179–188.
- Dresbach, C., Pusch, M., Mingerzahn, G., Fleig, S., Hammer, J. & Behlau, J.** (2010): «3D-Modelle der Kali- und Steinsalzbergwerke des Staßfurter Sattels und geologisches 3D-Modell der Region Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 46–62.
- Düsterloh, U. & Tedeeva, S.** (2010): «Geomechanische Berechnungen zur Interpretation von Tagesbrüchen und Oberflächenabsenkungen im Bergschadensgebiet Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 189–199.
- Eberhardt, F.** (1969): *Geologischer Bau und Erdgasführung des Subherzypen Beckens*. Dissertation. Bergakademie Freiberg. 161 S.
- Ehmke, G. & Katzung, G.** (1993): *Das Prätertiär in Ostdeutschland*. Köln: Sven von Loga. 139 S.
- Ekwere, J. P. & Hardham, W. D.** (1990): «Visualization of fluid displacements in porous media using computed tomography imaging». *Journal of Petroleum Science and Engineering* 4, S. 155–168.
- Enzmann, F., Kersten, M. & Kienzler, B.** (2004): «Microscale modeling of fluid transport in fractured granite using a lattice Boltzmann method with X-ray tomography data». In: *Proceedings of the 2nd international symposium: Dynamics of Fluids in Fractured Rock*. Hrsg. von **B. Faybishenko & P.A. Witherspoon**. LBNL Report 54275. Lawrence Berkeley National Laboratory. Berkeley, CA, USA, S. 300–304.
- Enzmann, F., Meier, T., Janz, M., Jovanovic, Z., Rheingans, K., Schwarz, J.O., Göbbels, J. & Kersten, M.** (2009): «Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität an Bohrkerne mittels Computer-Tomographie». In: *Forschungsverbundvorhaben "Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks"*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen

- Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 242. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 90–96.
- Enzmann, F., Jovanovic, Z., Schwarz, J.O., Tuckermann, J., Göbbels, J. & Kersten, M.** (2010): «Hochauflösende Computertomographie und Computersimulation an Bohrkernen der Staßfurt-Forschungsbohrungen». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 213–224.
- Fetter, C.W.** (1999): *Contaminant Hydrology*. 2. Aufl. Engelwood Cliffs, New Jersey: Prentice Hall. 500 S.
- Fiorotto, V. & Caroni, E.** (2002): «Solute concentration statistics in heterogeneous aquifers for finite Peclet values». *Transport in Porous Media* 48.3, S. 331–351.
- Fonteh, M.F. & Podmore, T.** (1994): «Application of geostatistics to characterize spatial variability of infiltration in furrow irrigation». *Agricultural Water Management* 25, S. 153–165.
- Frenz, S., Gattinger, J., Enzmann, F. & Gerardi, J.** (2010): «Ergebnisse einer geologischen Kartierung westlich der Stadt Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 238–239.
- Fried, J.J.** (1975): *Groundwater Pollution*. Amsterdam: Elsevier. 330 S.
- Frippiat, C.C. & Holeyman, A.E.** (2008): «A comparative review of upscaling methods for solute transport in heterogeneous porous media». *Journal of Hydrology* 362, S. 150–176.
- GLA Sachsen-Anhalt** (1995): *Ingenieurgeologische Stellungnahme zur Subrosionsgefährdung des Gipshutes im Bereich B-Plan "Jahnplatz"*. Bericht. Geologisches Landesamt Sachsen-Anhalt.
- Gandin, L. S.** (1963): «Objective Analysis of Meteorological Fields». Übers. von **Israel Program for Scientific Translation Jerusalem 1965**. *Gidrometeorologicheskoe Izdatel'stvo (GIMIZ), Leningrad*.
- Gelhar, L.W.** (1993): *Stochastic Subsurface Hydrology*. Prentice Hall. 390 S.
- Gelhar, L.W., Welty, C. & Rehfeldt, K.R.** (1992): «A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers». *Water Resources Research* 28.7, S. 1955–1974.
- Gerardi, J.** (2006a): *BGR koordiniert Untersuchungen von Bergbauschäden in Staßfurt*. URL: [http://www.bgr.bund.de/nm\\_324940/DE/Themen/Geotechnik/Aktuelles/bergbauschaden-stassfurt.html](http://www.bgr.bund.de/nm_324940/DE/Themen/Geotechnik/Aktuelles/bergbauschaden-stassfurt.html).
- (2006b): *Forschungsverbundvorhaben: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks – Gesamtvorhabensbeschreibung*. Projektbeschreibung. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. 79 S.
- Glennie, K.W.** (1990): *Introduction to the petroleum geology of the North Sea*. 3. Aufl. Oxford: Blackwell. 402 S.
- Goethals, P., Volkaert, A., Jacobs, P., Røels, S. & Carmeliet, J.** (2009): «Comparison of Positron Emission Tomography and X-Ray radiography for studies of physical processes in sandstone». *Engineering Geology* 103, S. 134–138.
- Gründig, M., Franke, K. & Richter, M.** (2000): *Co-58-Hexacyano-Komplex – ein Radiotracer für PET-Untersuchungen an geologischen Proben*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 73–76.
- Gründig, M., Richter, M. & Seese, A.** (2001): *PET Investigation of Heterogeneous Transport Processes in a Drill Core of a Lignite Mining Dump*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 34–38.
- (2003): «Positron emission tomography for investigation of water flow in soil columns». In: *Geochemical processes in soil and groundwater*. Hrsg. von **H. D. Schulz & A. Haderler**. Weinheim: Wiley-VCH, S. 550.
- Gründig, M., Richter, M., Seese, A. & Sabri, O.** (2004): *PET Investigation of Transport of Geochemical Solutions in Salt Formations*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 59–62.
- Gründig, M., Richter, M., Kulenkampff, J. & Seese, A.** (2006): «Studies of the spatial water flow distribution and colloid transport in a crystalline rock core from Äspö with positron emission tomography». In: *2nd annual workshop proceedings*. 6th EC FP - FUNMIG IP. Stockholm.
- Gründig, M., Richter, M., Seese, A. & Sabri, O.** (2007): «Tomographic radiotracer studies of the spatial distribution of heterogeneous geochemical transport processes». *Applied Geochemistry* 22, S. 2334–2343.
- Harris, R.G., Wells, J.D. & Johnson, B.B.** (2001): «Selective adsorption of dyes and other organic molecules to kaolinite and oxide surfaces». *Colloids and Surfaces* 180, S. 131–140.
- Heinrichs, U.** (2003): *Auslegung des Detektorsystems für einen hochauflösenden Positronen-Emissions-Tomographen mit hoher Sensitivität*. Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Lebenswissenschaften/Life Sciences 6. 253 S.
- Henningsen, D. & Katzung, G.** (2002): *Einführung in die Geologie Deutschlands*. 6. Aufl. Berlin: Spektrum Akademischer Verlag. 214 S.
- Hilfer, R.** (2009): «Modeling and simulation of macrocapillarity». In: *CP1091, Modeling and Simulation of Materials*. Hrsg. von **P. Garrido, P. Hurtado & J. Marro**. New York: American Institute of Physics, S. 141. URL: <http://www.icp.uni-stuttgart.de/publications/2009/Hil109>.

- Hilfer, R., Luchko, Y. & Tomovski, Ž.** (2009): «Operational Method for the Solution of Fractional Differential Equations with Generalized Riemann-Liouville Fractional Derivatives». *Fractional Calculus and Applied Analysis* 12, S. 299. URL: <http://www.icp.uni-stuttgart.de/publications/2009/HLT09>.
- Häning, D., Lange, W. & Zenk, D.** (1996): *Gravimetrische Übersichtskarte von Sachsen-Anhalt mit geologischen Strukturen 1:400.000*. Geologisches Landesamt Sachsen-Anhalt.
- Houlding, S.W., Stoakes, M.A. & Clark, I.** (1992): «Direct geostatistical estimation of irregular 3D volumes». In: *Lecture Notes in Earth Science – Computer Graphics in Geology*. Berlin: Springer, S. 199–212.
- Hu, Q., Zhao, P., Moran, J.E. & Seaman, J.C.** (2005): «Sorption and transport of iodine species in sediments from the Savannah River and Hanford Sites». *Journal of Contaminant Hydrology* 78, S. 185–205.
- Huang, Y. B. & Gryte, C. C.** (1988): «Gamma-camera imaging of oil displacement in thin slabs of porous media». *Journal of Petrological Technology* 40.10, S. 1355–1360.
- Irwin, N. C., Altobelli, S. A. & Greenkorn, R. A.** (1999): «Concentration and velocity field measurements by magnetic resonance imaging in aperiodic heterogeneous porous media». *Magnetic Resonance Imaging* 17.6, S. 909–917.
- Jahnke, C., Bohn, A., Walter, N. & Voigt, H.J.** (2010): «Hydrogeologische und hydrochemische Verhältnisse der ehemaligen Staßfurter Kalisalzgruben an der Westflanke des Staßfurter Sattels und des Deckgebirges». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von J. Gerardi. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 144–154.
- Journel, A.G. & Huijbregts, C.J.** (1978): *Mining Geostatistics*. New York: Academic Press. 600 S.
- Kerner, T., Siemon, B., Noell, U. & Pielawa, J.** (2010): «Hubschrauberelektromagnetik zur Erkundung von geologischen und hydrogeologischen Strukturen am Staßfurt-Egelner Sattel». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von J. Gerardi. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 230–233.
- Khalili, A., Basu, A. J. & Pietrzyk, U.** (1998): «Flow visualization in porous media via Positron Emission Tomography». *Physics of Fluids* 10.4, S. 1031–1033.
- Kirsten, E.** (1928): «Der geologische Bau des Gebietes zwischen Eine und Hakel. (Eine Monographie der Aschersleben-Staßfurter Schrägscholle)». *Jahrbuch des Halleschen Verbandes zur Erforschung der mitteldeutschen Bodenschätze und ihrer Verwertung, Neue Folge* 7, S. 30–67.
- Klise, K. A., Tidwell, V. C. & McKenna, S. A.** (2008): «Comparison of laboratory-scale solute transport visualisation experiments with numerical simulation using cross-bedded sandstone». *Advances in Water Resources* 31, S. 1731–1741.
- Knödel, K., Lux, K.-H., Seifert, G., Voigt, H.-J., Lauterbach, M. & Schuck, A.** (2002): *Verbundvorhaben: Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt*. Abschlußbericht. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe. 132 S.
- Kreft, A. & Zuber, A.** (1978): «On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for the different initial and boundary conditions». *Chemical Engineering Science* 33, S. 1471–1480.
- Krige, D.G.** (1951): «A statistical approach to some mine valuations and allied problems at the Witwatersrand». *The journal of the Chemical, Metallurgical & Mining Society of South Africa* 52.6, S. 119–139.
- Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M. & Enzmann, F.** (2008): «Evaluation of Positron Emission-Tomography for Visualisation of Migration Processes in Geomaterials». *Physics and Chemistry of the Earth* 33, S. 937–942.
- Lang, C., Ohser, J. & Hilfer, R.** (2001): «On the Analysis of Spatial Binary Images». *Journal of Microscopy* 203.3, S. 303–313.
- Lauterbach, M. & Koch, R.** (2008): *Stadt Staßfurt. Dezentrale Wasserhaltung - Fachliche Begleitung. Abschließender Bericht zur Umstellung von der zentralen auf die dezentrale Wasserhaltung*. Jahresbericht 2007. IHU Geologie und Analytik Stendal.
- Lin, G.F. & Chen, G.R.** (2005): «Quantifying uncertainty of the semivariogram of transmissivity of an existing groundwater monitoring network». *Hydrological Processes* 19, S. 2023–2034.
- Loehning, A.M. & Gambhir, S.S.** (2003): «AMIDE: A Free Software Tool for Multimodality Medical Image Analysis». *Molecular Imaging* 2.3, S. 131–137.
- Lotze, F.** (1957): *Steinsalz und Kalisalze, I. Teil (Allgemein-geologischer Teil)*. 2. Aufl. Berlin: Gebrüder Borntraeger. 465 S.
- Luo, J., Cirpka, O.A. & Kitanidis, P.K.** (2006): «Temporal-moment matching for truncated breakthrough curves for step or step-pulse injection». *Advances in water resources* 29, S. 1306–1313.
- Maddinelli, G. & Brancolini, A.** (1996): «MRI as tool for the study of waterflooding processes in heterogeneous cores». *Magnetic Resonance Imaging* 14.7/8, S. 915–917.



- Magal, E., Weisbrod, N., Yakirevich, A. & Yechieli, Y.** (2008): «The use of fluorescent dyes as tracers in highly saline groundwater». *Journal of Hydrology* 358, S. 124–133.
- Maloszewski, P. & Zuber, A.** (1985): «On the theory of tracer experiments in fissured rocks with a porous matrix». *Journal of Hydrology* 79.3-4, S. 333–358.
- Matheron, G.** (1963): «Principles of Geostatistics». *Economic Geology* 58, S. 1246–1266.
- Meier, R.** (1969): «Beitrag zur Geologie des Kalkifözes Staßfurt (Zechstein 2)». *Geologie (Beiheft)* 65, S. 1–99.
- Michael, H.A., Li, H., Boucher, A., Sun, T., Caers, J. & Gorelick, S.M.** (2010): «Combining geologic-process models of 3D subsurface heterogeneity». *Water Resources Research* 46. DOI: 10.1029/2009WR008414.
- Parker, D. J., Hawkesworth, M. R., Broadbent, C. J., Fowlers, P. & McNeil, P. A.** (1994): «Industrial positron-based imaging: principles and applications». *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 348, S. 583–592.
- Parkhurst, D.L. & Appelo, C.A.J.** (1999): *User's guide to PHREEQC (Version 2) – A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport and inverse geochemical calculations*. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 99-4259.
- Patzelt, G.** (2003): *Nördliches Harzvorland (Subherzyn), östlicher Teil*. Sammlung Geologischer Führer 96. Berlin, Stuttgart: Gebrüder Bornträger. 182 S.
- Phelps, M. E.** (2006): *PET – Physics, Instrumentation and Scanners*. New York: Springer. 130 S.
- Plummer, L.N., Parkhurst, D.L., Fleming, G.W. & Dunkle, S.A.** (1988): *A computer program incorporating Pitzer's equations for calculation of geochemical reactions in brines*. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 88-4153.
- Polom, U. & Heinze, B.** (2010): «Ergebnisse des reflexionsseismischen Untersuchungsprogramms im Raum Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von J. Gerardi. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 92–111.
- Prissang, R.** (2002): «3D Variography as a tool to recognise transport processes and associated paleo-directions in limestones and limestone-hosted deposits». *Terra Nova* 4, S. 431–436.
- R Developing Core Team** (2007): *R: A language and environment for statistical computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0. URL: <http://www.R-project.org> (besucht am 02.09.2009).
- Richter, M.** (2002): «Concepts for modeling of heterogeneous flow processes in soil columns on the basis of tomographic radiotracer experiments». In: *Geochemical Processes: Conceptual models for reactive transport in soil and groundwater*. Hrsg. von H. D. Schulz & G. Teutsch. Weinheim: Wiley-VCH, S. 20–38.
- Richter, M. & Gründig, M.** (2000): *Entwicklung eines PET-Scanners (GEO-PET) zur Untersuchung von Transfer- und Sorptionsprozessen in geologischen Proben*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 36–39.
- (2002): *Evaluation of PET Studies in Context with the Modelling of Geochemical Transport Processes*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 27–30.
- Richter, M. & Mittmann, H.** (2001): *Design of a High-pressure Device for Radio Tracer Studies of Migration Processes in Rocks*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 56–57.
- Richter, M., Gründig, M. & Butz, T.** (2000): «Tomographische Radiotracerverfahren zur Untersuchung von Transport- und Sorptionsprozessen in geologischen Schichten». *Zeitschrift für angewandte Geologie* 46, S. 101–109.
- Richter, M., Gründig, M. & Seese, A.** (2003): *Transport Modelling of Aqueous Solutions in Clay and Clay Rock Using the Data of PET Studies*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 97–102.
- Richter, M., Gründig, M., Ziegler, K., Seese, A. & Sabri, O.** (2005): «Positron emission tomography for modelling of geochemical transport processes in clay». *Radiochimica Acta* 93, S. 643–651.
- Rothe, P.** (2005): *Die Geologie Deutschlands – 48 Landschaften im Portrait*. Darmstadt: Primus Verlag. 240 S.
- Russo, D. & Jury, W.A.** (1987): «A theoretical study of the estimation of the correlation scale in spatial variable fields. 1. Stationary fields». *Water Resources Research* 23.7, S. 1257–1268.
- Rutter, S., Lauterbach, M., Koch, R. & Schröder, W.** (2002): «Hydrologische Analyse der oberflächennahen Strömungsvorgänge». In: *Verbundvorhaben: Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt. Abschlußbericht*. Hrsg. von K. Knödel, K-H. Lux, G. Seifert, H-J. Voigt, M. Lauterbach & A. Schuck. Hannover: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, S. 37–42.
- Ruuskanen, A.R., Seppänen, A., Duncan, S., Somersalo, E. & Kaipio, J.P.** (2006): «Using process tomography as a sensor for optimal control». *Applied Numerical Mathematics* 56, S. 37–54.

- Sauty, J.** (1978): «Mise au point et utilisation d'abaques pour l'interprétation des expériences de tracedilcages dans les nappes d'eau souterraine». *Bulletin du BRGM (Bureau De Recherches Geologiques Et Minières) - 2e série-section III.4*, S. 285–291.
- Schicht, T. & Allendorf, A.** (2010): «Auswertung von LIDAR-Messungen zur Erkennung möglicher altbergbaubedingter Senkungs- und Bruchvorgänge im Untersuchungsraum Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 63–72.
- Schneider, J.W., Körner, F., Roscher, M. & Kroner, U.** (2006): «Permian climate development in the northern peri-Tethys area – The Lodève basin, French Massif Central, compared in a European and global context». *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology* 240, S. 161–183.
- Schöttler, M.** (2010): «In-situ Grundwasser-Fließmessungen im Deckgebirge und an den Grubenbauwerken des Staßfurter Sattels». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 173–179.
- Schudel, B., Biaggi, D., Derevey, T., Kotzel, R., Müller, I., Ross, J.H. & Schindler, U.** (2002): *Einsatz künstlicher Tracer in der Hydrogeologie – Praxishilfe*. Berichte des BWG, Serie Geologie Nr. 3. Bundesamt für Wasser und Geologie, Bern.
- Seidel, K. & Serfling, U.** (2010): «Beitrag der Gravimetrie zur strukturellen Erkundung und zum Monitoring in Senkungsgebieten». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 112–124.
- Seifert, G. & Bode, B.** (2002): «Geohydraulische Beurteilung der tiefen Grundwasserleiter». In: *Verbundvorhaben: Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt. Abschlußbericht*. Hrsg. von **K. Knödel, K.-H. Lux, G. Seifert, H.-J. Voigt, M. Lauterbach & A. Schuck**. Hannover: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, S. 43–48.
- Shafer, J.M. & Varljen, M.D.** (1990): «Approximation of confidence limits on sample semivariograms from single realizations of spatially correlated random fields». *Water Resources Research* 26.8, S. 1787–1802.
- Silliman, S.E. & Simpson, E.S.** (1987): «Laboratory evidence of the scale effect in dispersion of solutes in porous media». *Water Resources Research* 23.8, S. 1667–1673.
- Solow, A. R. & Gorelick, S. M.** (1986): «Estimating monthly streamflow by cokriging». *Mathematical Geology* 18, S. 785–809.
- Soret, M., Bacharach, S.L. & Buvat, I.** (2007): «Partial-Volume Effect in PET Tumor Imaging». *The Journal of Nuclear Medicine* 48.6, S. 923–945.
- Stadler, S.** (2010): «Isotopen- und Umwelttracersysteme zur Charakterisierung verschiedener Aquifereinheiten in Staßfurt». In: *Staßfurt 2010 - Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden*. Hrsg. von **J. Gerardi**. Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften EDGG 244. Hannover/Duderstadt: DGG, S. 155–160.
- Thormeier, H.-D. & Benox, D.** (2002): «Strukturgeologische Analyse des für die Gefahrenabwehr relevanten Gebietes und quartärgeologische Bearbeitung». In: *Verbundvorhaben: Maßnahmen der nachhaltigen Gefahrenabwehr für Altlasten in Gebieten mit bergbaubedingten Destabilisierungsvorgängen am Beispiel der Stadt Staßfurt. Abschlußbericht*. Hrsg. von **K. Knödel, K.-H. Lux, G. Seifert, H.-J. Voigt, M. Lauterbach & A. Schuck**. Hannover: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, S. 18–27.
- Toride, N., Leij, F.J. & van Genuchten, M.Th.** (1999): *The CXTFIT Code for Estimating Transport Parameters from Laboratory or Field Tracer Experiments – Version 2.1*. Research Report No. 137, U.S. Salinity Laboratory Agricultural Research Service, U.S. Department of Agriculture, Riverside, California.
- Trefry, M.G., Ruan, F.P. & McLaughlin, D.** (2003): «Numerical simulations of preasymptotic transport in heterogeneous porous media: Departures from the Gaussian limit». *Water Resources Research* 39.3. DOI: 10.1029/2001WR001101.
- Ursin, J. R.** (1992): «Detection of fluid saturation levels in porous media using gamma-ray tomography». *Journal of Petroleum Science and Engineering* 7.3/4, S. 297–308.
- Van Wees, J.-D., Stephenson, R.A., Ziegler, P.A., Bayer, U., McCann, T., Dadlez, R., Gaupp, R., Narkiewicz, M., Bitzer, F. & Scheck, M.** (2000): «On the origin of Southern Permian Basin, Central Europe». *Marine and Petroleum Geology* 17, S. 43–59.
- Vogel, H.-J., Tölke, J., Schulz, V.P., Krafczyk, M. & Roth, K.** (2005): «Comparison of a Lattice-Boltzmann Model, a Full-Morphology Model, and a Pore Network Model for Determining Capillary Pressure-Saturation Relationships». *Vadose Zone Journal* 4.2, S. 380–388.

- Vogel, H.-J., Samouëlian, A. & Ippisch, O.** (2008): «Multi-step and two-step experiments in heterogeneous porous media to evaluate the relevance of dynamic effects». *Advances in Water Research* 31.1, S. 181–188.
- Webster, R. & Oliver, M.A.** (1992): «Sample adequately to estimate variograms of soil properties.- Journal of Soil Science». *Journal of Soil Science* 43, S. 177–192.
- (2007): *Geostatistics for Environmental Scientists. Statistics in Practice*. 2. Aufl. Wiley.
- Wedepohl, K.H.** (1964): «Untersuchungen am Kupferschiefer in Nordwestdeutschland: Ein Beitrag zur Deutung der Genese bituminöser Sedimente». *Geochimica et Cosmochimica Acta* 28, S. 305–364.
- Wernick, M. N. & Aarsvold, J. N.** (2004): *Emission Tomography – The Fundamentals of PET and SPECT*. Amsterdam: Elsevier Academic Press. 576 S.
- Wernli, H.R.** (2003): *Einführung in die Tracerhydrologie*. Vorlesungsskript (Praktikum). Geographisches Institut der Universität Bern. URL: <http://www.geography.unibe.ch/lenya/giub/liv e/labor/tracerlab/Tracerhydrologieweb.pdf> (besucht am 08.04.2010).
- Zhou, L. & Selim, H.M.** (2003): «Scale-dependent dispersion in soils: an overview». *Advances in Agronomy* 80, S. 223–263.
- Ziegler, K.** (2003): *Software Development for a Mini-PET-Scanner: The Basic Program BI-REKO for Image Reconstruction*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 103–105.
- Ziegler, K. & Richter, M.** (2000): *Entwicklung eines Bildrekonstruktionsverfahrens auf Basis der speziellen Konfiguration des GEO-PET-Scanners*. Jahresbericht. Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung (IIF) Leipzig, S. 77–81.



# Anhang



# A Bohrpunkte und Lösungen

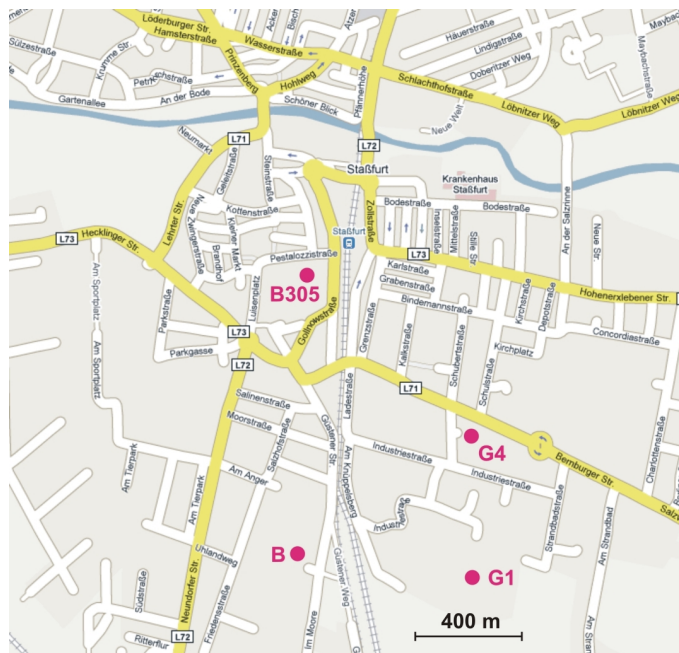


Abb. A.1: Lage der Bohrungen im Stadtgebiet

Bohrung	Gauß-Krüger	geogr. Koord.	Ort
B	R: 4471528,477 H: 5746472,543	11° 35' 07,21" E 51° 50' 33,53" N	Parkplatz Im Moore
G4	R: 4472050,667 H: 5745831,975	11° 35' 34,37" E 51° 50' 45,24" N	zwischen Industriestraße und Bernburger Straße
B305	R: 4471572,464 H: 5746326,087	11° 35' 09,25" E 51° 51' 01,17" N	Parkplatz Pestalozzistraße
G1	R: 4472013,753 H: 5745871,169	11° 35' 32,44" E 51° 50' 45,23" N	Firmengelände Industriestraße

Tab. A.1: Koordinaten der Bohrpunkte.

Lösung	B305	B-L-3.1	G1-L-5.1	Q-Lauge	rel. Fehler
aus Bohrung	B305	B	G1		
Teufe [m]	64-90	300	141-158		
verwendet für Bohrkern aus	Untere Buntsandstein	Hohlraum- versatz, Staßfurt- Steinsalz	Hauptanhydrit		
<b>aus den angesetzten Eingangslösungen gemessene Werte</b>					
Dichte [ $\text{g}/\text{cm}^3$ ]	1,132	1,298	1,259	1,299	$\pm 0,1\%$
LF [ $\text{mS}/\text{cm}$ ]	187	125	151	210	$\pm 1,0\%$
pH	7,44	5,48	5,84	6,00	$\pm 1,0\%$
Na <sup>+</sup>	71,6	8,59	15,5	9,4	$\pm 1,2\%$
K <sup>+</sup>	0,6	17,4	16,4	17,0	$\pm 1,0\%$
Mg <sup>2+</sup>	1,1	85,4	74,4	90,0	$\pm 0,9\%$
Ca <sup>2+</sup>	1,6	-	0,1	-	$\pm 3,2\%$
Cl <sup>-</sup>	114	254	239	272,6	$\pm 0,2\%$
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3,8	32,7	23,7	27,4	$\pm 5,4\%$
CaSO <sub>4</sub>	5,5	-	0,36	-	$\pm 6,3\%$
MgSO <sub>4</sub>	-	40,9	29,3	34,4	$\pm 5,4\%$
MgCl <sub>2</sub>	4,3	302	268	325,8	$\pm 0,9\%$
KCl	1,1	33,2	31,3	32,5	$\pm 1,1\%$
NaCl	182	21,8	39,4	27,0	$\pm 1,2\%$
<b>mit PHRQPITZ modellierte Sättigungszusammensetzungen der jeweils enthaltenen Salze</b>					
Na <sup>+</sup>	131,1	1,9	1,9		
K <sup>+</sup>	-	7,7	6,8		
Mg <sup>2+</sup>	-	133,6	124,4		
Ca <sup>2+</sup>	1,7	-	-		
Cl <sup>-</sup>	202,1	355,9	336,5		
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	4,0	59,0	48,2		

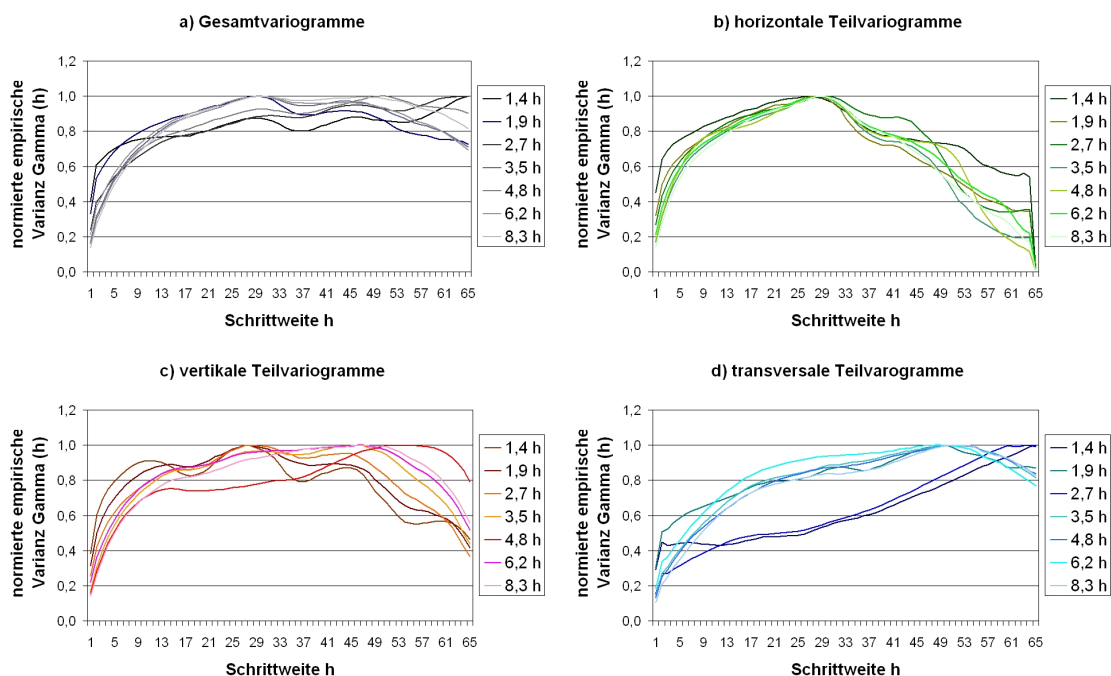
**Tab. A.2:** Dichte, Leitfähigkeit, pH und Zusammensetzung der von der K-UTEC und der BTU vorgegebenen Injektionslösungen [9/i], sowie stöchiometrische Ermittlung der enthaltenen Salze (ohne Kristallwasser) [9/i].



## B 3D-Variographie des mechanisch belasteten Salzkerns

Abb. B.1 zeigt die normierten Variogramme des Teilvolumens der PET-Datensätze von 1,4 bis 8,3 h nach Injektion, die mit der «blockweise Methode» erstellt wurden. Die Gesamtvariogramme und die jeweiligen Teilvariogramme sind getrennt dargestellt und zeigen im Verlauf des Experiments kaum signifikante Unterschiede. Diese weitgehende Ähnlichkeit der Variogramme lässt darauf schließen, dass sich im Experimentverlauf kaum neue Fließwege bilden oder alte aufgegeben werden. Lediglich die absolute Konzentration verändert sich, was die Normierung der Variogramme bedingt. Der Tracer dringt durch die offenen Klüfte schon zu Anfang des Experiments in alle ihm zugänglichen Bereiche vor. Durch den Verbleib von 99,93 % des Tracers in der Probe wird bis zum Ende des Experiments die durchflusswirksame Hohlraumstruktur durch den Tracer nahezu unverändert abgebildet.

Ähnlich wie bei den Variogrammen der «ebenenweisen Methode» lassen sich hier auch in den Gesamtvariogrammen deutliche Plateaus und - etwas kürzere - Korrelationslängen von 5 bis 15 Voxeln ausmachen; die horizontalen Teilvariogramme zeigen auch hier eine maximale Unterschiedlichkeit bei einer Schrittweite von etwa 25 bis 30 Voxeln; die vertikalen Teilvariogramme bilden eine periodische Konzentrationsverteilung im Teilvolumen ab und die transversalen Teilvariogramme zeigen eine ausgeprägte Driftkomponente.



**Abb. B.1:** Normierte Gesamt- und Teilvariogramme des untersuchten Teilvolumens des mechanisch belasteten Salzbohrkerns, mit der «blockweisen Methode» erstellt. Die PET-Datensätze von 1,4 bis 8,3 h nach Injektion des Durchflussexperiments wurden untersucht.

	Gesamt- vario.	horizontale Teilvario.	vertikale Teilvario.	transversale Teilvario.
PET - CT				
2,7 h nach Injektion	0,050	0,769	0,651	0,151
3,5 h nach Injektion	0,367	0,738	0,551	0,567
4,8 h nach Injektion	0,121	0,820	0,124	0,540
6,2 h nach Injektion	0,369	0,721	0,493	0,657
8,3 h nach Injektion	0,239	0,723	0,423	0,540
Simulation - CT				
2,7 h nach Injektion	0,201	0,202	0,134	0,381
3,5 h nach Injektion	0,150	0,191	0,021	0,355
4,8 h nach Injektion	0,146	0,190	0,016	0,355
6,2 h nach Injektion	0,146	0,190	0,014	0,357
8,3 h nach Injektion	0,147	0,190	0,017	0,360
PET - Simulation				
2,7 h nach Injektion	0,504	0,078	-0,051	0,776
3,5 h nach Injektion	0,252	-0,038	-0,246	0,857
4,8 h nach Injektion	0,357	0,054	-0,140	0,868
6,2 h nach Injektion	0,229	0,026	-0,281	0,828
8,3 h nach Injektion	0,294	0,033	-0,316	0,846

**Tab. B.1:** Korrelationen der Variogramme, die mittels der «blockweisen Methode» aus den PET-, CT- und Simulations-Daten erzeugt wurden. Die Datensätze, die 1,4 und 1,9 h nach Injektion aufgenommen wurden, werden nicht aufgeführt, da zu diesen Zeiten in den PET-Bildern zu wenig (siehe Abb. 5.18) und in der Simulation noch kein Tracer vorhanden ist.

# C Hydrodynamische Parameter

Bis Ende 2008 wurden Fließrate und Druck an einer HPLC-Pumpe abgelesen. Der mittlere Fehler der Fließrate beträgt  $\pm 2\%$ , der mittlere Fehler der Druckanzeige  $\pm 10\%$ . Ab 2009 wurden die Fließrate an einer Spritzenpumpe und der Druck an einem Druckaufnehmer abgelesen. Der mittlere Fehler der Fließrate der Spritzenpumpe beträgt  $\pm 0,35\%$ , der mittlere Fehler des Druckaufnehmers beträgt  $\pm 0,35\%$ . (Angaben der Herstellerfirmen)

## C.1 Bohrkern aus der Leine Formation z3A3 - Hauptanhydrit

<b>Rahmenbedingungen</b>			
Experiment vom		24.04.-28.04.2008	
Tracer		$^{124}\text{I}$ [KI]-Lösung	
Aktivität	[MBq]	70	
Tracermasse	[ng]	7,5	
Länge des Eingabeimpulses	[min]	200	
Injektionsvolumen		5 ml ü. Dosierschleife	
Fließdistanz x	[m]	0,1	$\pm 0,001$
Probenmächtigkeit H	[m]	0,1	$\pm 0,0001$
Probenfläche A	[m <sup>2</sup> ]	$7,85 \cdot 10^{-3}$	$\pm 8,66 \cdot 10^{-5}$
Probenvolumen V	[m <sup>3</sup> ]	$7,85 \cdot 10^{-4}$	$\pm 1,65 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q	$[\frac{\text{ml}}{\text{min}}]$	0,08	$\pm 0,0016$
Druck P an Stirnfläche	[Pa]	40 000	$\pm 140$
Dichte des Fluids $\rho$	$[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$	1 259	$\pm 1,210$
dynamische Viskosität des Fluids $\eta$	$[\frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}]$	$1,50 \cdot 10^{-3}$	$\pm 1,50 \cdot 10^{-5}$
kinematische Viskosität $\nu$	$[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}]$	$1,24 \cdot 10^{-6}$	$\pm 1,24 \cdot 10^{-8}$
<b>erhaltene Parameter</b>			
Permeabilität K	[mDarcy]	0,65	$\pm 0,067$
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$	$[\frac{\text{m}}{\text{s}}]$	$5,04 \cdot 10^{-9}$	$\pm 1,27 \cdot 10^{-10}$
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$	[%]	36,3	$\pm 1$
Hydraulischer Gradient i	[ ]	33,7	$\pm 1,15$
mittlere Fließzeit $\bar{t}$	[h]	59,46	$\pm 0,06$
Filtergeschwindigkeit $v_f$	$[\frac{\text{m}}{\text{s}}]$	$1,70 \cdot 10^{-7}$	$\pm 3,88 \cdot 10^{-9}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$	$[\frac{\text{m}}{\text{s}}]$	$4,67 \cdot 10^{-7}$	$\pm 4,67 \cdot 10^{-9}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$	$[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}]$	$9,21 \cdot 10^{-9}$	$\pm 1,30 \cdot 10^{-10}$
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_a x}$	[ ]	0,20	$\pm 0,003$

**Tab. C.1:** Hydrodynamische Daten des Bohrkerns aus dem Hauptanhydrit.

## C.2 Bohrkern aus dem Unteren Buntsandstein

### Rahmenbedingungen

1. Experiment vom		09.06.-24.06.2008	
2. Experiment vom		08.12.-12.12.2008	
3. Experiment vom		27.05.2009	
4. Experiment vom		11.06.2009	
Tracer 1. & 2. Exp		$^{124}\text{I}$ [KI]-Lösung	
Tracer 3. & 4. Exp		$^{18}\text{F}$ [KF]-Lösung	
Aktivität 1. Exp	[MBq]	90	
Aktivität 2. Exp	[MBq]	70	
Aktivität 3. Exp	[MBq]	150	
Aktivität 4. Exp	[MBq]	250	
Tracermasse 1. Exp	[ng]	9,65	
Tracermasse 2. Exp	[ng]	7,5	
Tracermasse 3. Exp	[ng]	0,04	
Tracermasse 4. Exp	[ng]	0,07	
Länge des Eingabeimpulses 1. Exp	[min]	125	
Länge des Eingabeimpulses 2. Exp	[min]	333,3	
Länge des Eingabeimpulses 3. Exp	[min]	250	
Länge des Eingabeimpulses 4. Exp	[min]	125	
Injektionsvolumen je		5 ml ü. Dosierschleife	
Messdistanz $x_m$ d. DBK <sup>1</sup> 1. & 2. Exp.	[m]	0,092	± 0,001
Messdistanz $x_m$ d. DBK 3. & 4. Exp.	[m]	0,00178	± 0,001
Fließdistanz x	[m]	0,15	± 0,001
Probenmächtigkeit H	[m]	0,095	± 0,0001
Probenfläche A	[m <sup>2</sup> ]	$7,09 \cdot 10^{-3}$	± $5,47 \cdot 10^{-5}$
Probenvolumen V	[m <sup>3</sup> ]	$1,06 \cdot 10^{-3}$	± $1,53 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q 1. Exp	$[\frac{\text{ml}}{\text{min}}]$	0,008	± $1,60 \cdot 10^{-4}$
Fließrate Q 2. Exp	$[\frac{\text{ml}}{\text{min}}]$	0,015	± $5,25 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q 3. Exp	$[\frac{\text{ml}}{\text{min}}]$	0,02	± $7 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q 4. Exp	$[\frac{\text{ml}}{\text{min}}]$	0,04	± $1,4 \cdot 10^{-4}$
Druck P an Stirnfläche 1. Exp	[Pa]	50 000	± 5 050
Druck P an Stirnfläche 2. Exp	[Pa]	45 200	± 158
Druck P an Stirnfläche 3. Exp	[Pa]	57 200	± 200
Druck P an Stirnfläche 4. Exp	[Pa]	100 000	± 350
Dichte des Fluids $\rho$	$[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}]$	1 132	± 1,120
dynamische Viskosität des Fluids $\eta$	$[\frac{\text{kg}}{\text{m}\cdot\text{s}}]$	$1,30 \cdot 10^{-3}$	± $1,30 \cdot 10^{-5}$
kinematische Viskosität $\nu$	$[\frac{\text{m}^2}{\text{s}}]$	$1,16 \cdot 10^{-6}$	± $1,16 \cdot 10^{-8}$
<b>erhaltene Parameter</b>			
Permeabilität K 1. Exp	[mDarcy]	0,074	± 0,0076
Permeabilität K 2. Exp	[mDarcy]	0,154	± 0,0665
Permeabilität K 3. Exp	[mDarcy]	0,162	± 0,0022
Permeabilität K 4. Exp	[mDarcy]	0,186	± 0,0025
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$ 1. Exp	$[\frac{\text{m}}{\text{s}}]$	$6,20 \cdot 10^{-10}$	± $6,35 \cdot 10^{-11}$

<sup>1</sup>Durchbruchkurve

Durchlässigkeitbeiwert $K_f$ 2. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,29 \cdot 10^{-9}$	$\pm$	$1,27 \cdot 10^{-10}$
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$ 3. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,36 \cdot 10^{-9}$	$\pm$	$1,54 \cdot 10^{-11}$
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$ 4. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,55 \cdot 10^{-9}$	$\pm$	$1,76 \cdot 10^{-11}$
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 1. Exp	[%]	10,9	$\pm$	0,02
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 2. Exp	[%]	4,9	$\pm$	0,11
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 3. Exp	[%]	7,7	$\pm$	0,001
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 4. Exp	[%]	7,5	$\pm$	0,001
Hydraulischer Gradient i 1. Exp	[ ]	30,34	$\pm$	3,18
Hydraulischer Gradient i 2. Exp	[ ]	27,43	$\pm$	0,39
Hydraulischer Gradient i 3. Exp	[ ]	34,71	$\pm$	0,49
Hydraulischer Gradient i 4. Exp	[ ]	60,68	$\pm$	0,86
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 1. Exp	[h]	148,5	$\pm$	1,5
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 2. Exp	[h]	20,84	$\pm$	0,2
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 3. Exp	[h]	8,05	$\pm$	0,08
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 4. Exp	[h]	3,96	$\pm$	0,04
Filtergeschwindigkeit $v_f$ 1. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,88 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$4,03 \cdot 10^{-10}$
Filtergeschwindigkeit $v_f$ 2. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$3,53 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$2,99 \cdot 10^{-10}$
Filtergeschwindigkeit $v_f$ 3. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$4,70 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$3,99 \cdot 10^{-10}$
Filtergeschwindigkeit $v_f$ 4. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$9,41 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$7,97 \cdot 10^{-10}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 1. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,72 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$2,50 \cdot 10^{-8}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 2. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,23 \cdot 10^{-6}$	$\pm$	$1,97 \cdot 10^{-8}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 3. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$6,15 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$9,87 \cdot 10^{-9}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 4. Exp	$[\frac{m}{s}]$	$1,25 \cdot 10^{-6}$	$\pm$	$2,01 \cdot 10^{-8}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 1. Exp	$[\frac{m^2}{s}]$	$3,41 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$3,21 \cdot 10^{-10}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 2. Exp	$[\frac{m^2}{s}]$	$2,07 \cdot 10^{-7}$	$\pm$	$1,95 \cdot 10^{-9}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 3. Exp	$[\frac{m^2}{s}]$	$3,99 \cdot 10^{-9}$	$\pm$	$3,76 \cdot 10^{-11}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 4. Exp	$[\frac{m^2}{s}]$	$1,29 \cdot 10^{-8}$	$\pm$	$1,22 \cdot 10^{-10}$
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{\bar{v}x}$ 1. Exp	[ ]	2,15	$\pm$	0,02
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{\bar{v}x}$ 2. Exp	[ ]	1,83	$\pm$	0,04
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{\bar{v}x}$ 3. Exp	[ ]	0,37	$\pm$	0,004
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{\bar{v}x}$ 4. Exp	[ ]	0,58	$\pm$	0,006

Tab. C.2: Hydrodynamische Daten des Bohrkerns aus dem Unteren Buntsandstein.

## C.3 Mechanisch belasteter Bohrkern aus dem $z^{2}\text{Na}$ Staßfurt-Steinsalz

Rahmenbedingungen	
1. Experiment vom	24.09.-25.09.2009
2. Experiment vom	01.10.2009
3. Experiment vom	16.10.2009
Tracer 1. & 3. Exp	Eosin
Tracer 2. Exp	$^{18}\text{F}$ [KF]-Lösung
Konzentration 1. & 3. Exp	[ppm] 10
Aktivität 2. Exp	[MBq] 70
Tracermasse 1. & 3. Exp	[mg] 50

Tracermasse 2. Exp	[ng]	0,02	
Länge des Eingabeimpulses 1. & 2. Exp	[min]	125	
Länge des Eingabeimpulses 3. Exp	[min]	25	
Injektionsvolumen 1. & 2. Exp		5 ml ü. Dosierschleife	
Injektionsvolumen 3. Exp		1 ml ü. Dosierschleife	
Messdistanz $x_m$ d. DBK	[m]	0,18	± 0,001
Fließdistanz x	[m]	0,18	± 0,001
Probenmächtigkeit H	[m]	0,09	± 0,0001
Probenfläche A	[m <sup>2</sup> ]	$6,36 \cdot 10^{-3}$	± $4,24 \cdot 10^{-5}$
Probenvolumen V	[m <sup>3</sup> ]	$1,15 \cdot 10^{-3}$	± $1,53 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q je	[ $\frac{ml}{min}$ ]	0,04	± $1,4010^{-4}$
Druck P an Stirnfläche je	[Pa]	< 1 000	± 3,5
Dichte des Fluids $\rho$	[ $\frac{kg}{m^3}$ ]	1 298	± 1,252
dynamische Viskosität des Fluids $\eta$	[ $\frac{kg}{m \cdot s}$ ]	$1,50 \cdot 10^{-3}$	± $1,50 \cdot 10^{-5}$
kinematische Viskosität $\nu$	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	$1,198 \cdot 10^{-6}$	± $1,198 \cdot 10^{-8}$
<b>erhaltene Parameter</b>			
Permeabilität K je	[mDarcy]	28,67	± 0,372
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$ je	[ $\frac{m}{s}$ ]	$2,32 \cdot 10^{-7}$	± $2,33 \cdot 10^{-9}$
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 1. Exp	[%]	2,6	± 0,0002
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 2. Exp	[%]	1,6	± 0,0002
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$ 3. Exp	[%]	5,1	± 0,0005
Hydraulischer Gradient i je	[ ]	0,45	± 0,01
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 1.Exp	[h]	12,5	
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 2.Exp	[h]	7,8	
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 3.Exp	[h]	4,5	
Filtergeschwindigkeit $v_f$ je	[ $\frac{m}{s}$ ]	$1,05 \cdot 10^{-7}$	± $7,89 \cdot 10^{-10}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 1. Exp	[ $\frac{m}{s}$ ]	$4,00 \cdot 10^{-6}$	± $5,67 \cdot 10^{-8}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 2. Exp	[ $\frac{m}{s}$ ]	$6,42 \cdot 10^{-6}$	± $9,10 \cdot 10^{-8}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 3. Exp	[ $\frac{m}{s}$ ]	$2,04 \cdot 10^{-6}$	± $2,89 \cdot 10^{-8}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 1. Exp	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	$2,44 \cdot 10^{-7}$	± $1,92 \cdot 10^{-9}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 2. Exp	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	$4,74 \cdot 10^{-7}$	± $3,72 \cdot 10^{-9}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 3. Exp	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	$3,25 \cdot 10^{-6}$	± $2,55 \cdot 10^{-8}$
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_x}$ 1. Exp	[ ]	0,34	± 0,003
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_x}$ 2. Exp	[ ]	0,41	± 0,004
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_x}$ 3. Exp	[ ]	8,85	± 0,09

Tab. C.3: Hydrodynamische Daten des Bohrkerns aus dem Staßfurt-Steinsalz.

## C.4 Bohrkern aus dem Hohlraumversatz des Grubenbaus *Leopoldshall I/II*

### Rahmenbedingungen

Experiment vom	22.09.-07.10.2008
Tracer	<sup>124</sup> I [KI]-Lösung
Aktivität	[MBq] 65

Tracermasse	[ng]	6,97	
Länge des Eingabeimpulses	[h]	16,7	
Injektionsvolumen		5 ml ü. Dosierschleife	
Messdistanz $x_m$ d. DBK	[m]	0,1	± 0,001
Fließdistanz x	[m]	0,2	± 0,001
Probenmächtigkeit H	[m]	0,1	± 0,0001
Probenfläche A	[m <sup>2</sup> ]	$7,85 \cdot 10^{-3}$	± $4,72 \cdot 10^{-5}$
Probenvolumen V	[m <sup>3</sup> ]	$1,57 \cdot 10^{-3}$	± $1,73 \cdot 10^{-5}$
Fließrate Q	$[\frac{ml}{min}]$	0,005	± $1,75 \cdot 10^{-5}$
Druck P an Stirnfläche	[Pa]	50 000	± 173
Dichte des Fluids $\rho$	$[\frac{kg}{m^3}]$	1 298	± 1,28
dynamische Viskosität des Fluids $\eta$	$[\frac{kg}{m \cdot s}]$	$1,50 \cdot 10^{-3}$	± $1,50 \cdot 10^{-5}$
kinematische Viskosität $\nu$	$[\frac{m^2}{s}]$	$1,172 \cdot 10^{-6}$	± $1,172 \cdot 10^{-8}$
<b>erhaltene Parameter</b>			
Permeabilität K	[mDarcy]	0,065	± $8,0 \cdot 10^{-4}$
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$	$[\frac{m}{s}]$	$5,33 \cdot 10^{-10}$	± $4,96 \cdot 10^{-12}$
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$	[%]	6,8	± 0,001
Hydraulischer Gradient i	[ ]	19,91	± 0,23
mittlere Fließzeit $\bar{t}$	[h]	177,5	± 0,2
Filtergeschwindigkeit $v_f$	$[\frac{m}{s}]$	$1,06 \cdot 10^{-8}$	± $7,37 \cdot 10^{-11}$
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$	$[\frac{m}{s}]$	$1,57 \cdot 10^{-7}$	± $2,05 \cdot 10^{-9}$
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$	$[\frac{m^2}{s}]$	$8,04 \cdot 10^{-8}$	± $5,68 \cdot 10^{-10}$
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_a}$	[ ]	5,13	± 0,4

**Tab. C.4:** Hydrodynamische Daten des Bohrkerns aus dem Hohlraumversatz des Grubenbaus Leopoldshall I/II.

## C.5 Probe aus gepresstem Kaolinit

### Rahmenbedingungen

1. Experiment vom		11.09.-20.09.2007	
2. Experiment vom		14.01.-05.02.2008	
Tracer 1. Exp		<sup>124</sup> I [KI]-Lösung	
Tracer 2. Exp		Eosin	
Aktivität 1. Exp	[MBq]	66	
Konzentration 2. Exp	[ppm]	10	
Tracermasse 1. Exp	[ng]	7,03	
Tracermasse 2. Exp	[mg]	50	
Länge des Eingabeimpulses 1. Exp	[h]	16,6	
Länge des Eingabeimpulses 1. Exp	[h]	17,45	
Injektionsvolumen je		5 ml ü. Dosierschleife	
Fließdistanz x	[m]	0,055	± 0,001
Messdistanz $x_m$ d. DBK 1. Exp	[m]	0,053	± 0,001
Messdistanz $x_m$ d. DBK 2. Exp <sup>2</sup>	[m]	0,055	± 0,001
Probenmächtigkeit H	[m]	0,054	± 0,0001

<sup>2</sup>Nach Korrektur des Totvolumens.

*C Hydrodynamische Parameter*

Probenfläche A	[m <sup>2</sup> ]	2,29·10 <sup>-3</sup>	± 4,59·10 <sup>-5</sup>
Probenvolumen V	[m <sup>3</sup> ]	1,26·10 <sup>-4</sup>	± 4,81·10 <sup>-6</sup>
Fließrate Q je	[ $\frac{ml}{min}$ ]	0,005	± 0,0001
Druck P an Stirnfläche je	[Pa]	550 000	± 55 000
Dichte des Fluids $\rho$	[ $\frac{kg}{m^3}$ ]	1 000	± 1,000
dynamische Viskosität des Fluids $\eta$	[ $\frac{kg}{m \cdot s}$ ]	1,0·10 <sup>-3</sup>	± 1,0·10 <sup>-5</sup>
kinematische Viskosität $\nu$	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	1,0·10 <sup>-6</sup>	± 1,0·10 <sup>-8</sup>
<b>erhaltene Parameter</b>			
Permeabilität K	[mDarcy]	0,0037	± 0,0004
Durchlässigkeitbeiwert $K_f$	[ $\frac{m}{s}$ ]	3,57·10 <sup>-11</sup>	± 3,77·10 <sup>-12</sup>
effektives Hohlraumvolumen $\varphi_{eff}$	[%]	21,5	± 1
Hydraulischer Gradient i	[ ]	1 019	± 111
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 1. Exp	[h]	87,17	± 0,9
mittlere Fließzeit $\bar{t}$ 2. Exp	[h]	80,73	± 1,8
Filtergeschwindigkeit $v_f$	[ $\frac{m}{s}$ ]	3,64·10 <sup>-8</sup>	± 1,03·10 <sup>-9</sup>
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 1. Exp	[ $\frac{m}{s}$ ]	1,69·10 <sup>-7</sup>	± 2,52·10 <sup>-9</sup>
Abstandsgeschwindigkeit $v_a$ 2. Exp	[ $\frac{m}{s}$ ]	5,90·10 <sup>-8</sup>	± 8,81·10 <sup>-9</sup>
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 1. Exp	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	1,59·10 <sup>-9</sup>	± 4,09·10 <sup>-11</sup>
longitudinaler Dispersionskoeff. $D_L$ 2. Exp	[ $\frac{m^2}{s}$ ]	1,81·10 <sup>-10</sup>	± 4,66·10 <sup>-12</sup>
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_a}$ 1. Exp	[ ]	0,178	± 0,003
Dispersionsparameter $\frac{D_L}{v_a}$ 2. Exp	[ ]	0,056	± 0,001

**Tab. C.5:** *Hydrodynamische Daten der Probe aus gepresstem Kaolinit.*



## D Quelltext wichtiger Funktionen

- Achsen und Richtungsangaben der Funktionen gehen von zylindrischen Probengeometrien aus
- die Proben liegen horizontal, der Tracerinput erfolgt über eine der beiden Stirnflächen
- die x-Achse liegt horizontal senkrecht zur Rotationsachse ( $[100]$  Richtung)
- die y-Achse liegt vertikal senkrecht zur Rotationsachse ( $[010]$  Richtung) und
- die z-Achse liegt parallel zur Rotationsachse und zur Hauptfließrichtung ( $[001]$  Richtung)

In Tabelle D.1 sind für alle verwendeten Raumrichtungen der Gesamt- und Teilvariogramme die relativen Blickrichtungen der jeweiligen Schnittebenen aufgelistet, die von den Variogrammfunktionen in den Matrizen verwendet werden und deren entsprechende absolute Blickrichtungen, deren Indizierung sich an das kristallographische System zur Richtungsindizierung anlehnt (linkshändiges Koordinatensystem).

Blickrichtung in der Matrix	Blickrichtung im Bild
-----------------------------	-----------------------

für die transversale Schnittebene

rechts - links	parallel zur y-Richtung
oben - unten	parallel zur x-Richtung
links oben - rechts unten	parallel zur $[\bar{1}10]$ Richtung
rechts oben - links unten	parallel zur $[110]$ Richtung
rechter Nachbar	parallel zur $[0\bar{1}0]$ Richtung
linker Nachbar	parallel zur $[010]$ Richtung
oberer Nachbar	parallel zur $[\bar{1}00]$ Richtung
unterer Nachbar	parallel zur $[100]$ Richtung
Nachbar links oben	parallel zur $[\bar{1}10]$ Richtung
Nachbar rechts oben	parallel zur $[\bar{1}\bar{1}0]$ Richtung
Nachbar links unten	parallel zur $[110]$ Richtung
Nachbar rechts unten	parallel zur $[1\bar{1}0]$ Richtung

für die coronale Schnittebene

rechts - links	parallel zur z-Richtung
oben - unten	parallel zur x-Richtung
links oben - rechts unten	parallel zur $[10\bar{1}]$ Richtung
rechts oben - links unten	parallel zur $[101]$ Richtung
rechter Nachbar	parallel zur $[001]$ Richtung
linker Nachbar	parallel zur $[00\bar{1}]$ Richtung
oberer Nachbar	parallel zur $[100]$ Richtung

unterer Nachbar	parallel zur $[\bar{1} 0 0]$ Richtung
Nachbar links oben	parallel zur $[1 0 \bar{1}]$ Richtung
Nachbar rechts oben	parallel zur $[1 0 1]$ Richtung
Nachbar links unten	parallel zur $[\bar{1} 0 \bar{1}]$ Richtung
Nachbar rechts unten	parallel zur $[\bar{1} 0 1]$ Richtung

für die sagittale Schnittebene

rechts - links	parallel zur z-Richtung
oben - unten	parallel zur y-Richtung
links oben - rechts unten	parallel zur $[0 1 \bar{1}]$ Richtung
rechts oben - links unten	parallel zur $[0 1 1]$ Richtung
rechter Nachbar	parallel zur $[0 0 1]$ Richtung
linker Nachbar	parallel zur $[0 0 \bar{1}]$ Richtung
oberer Nachbar	parallel zur $[0 1 0]$ Richtung
unterer Nachbar	parallel zur $[0 \bar{1} 0]$ Richtung
Nachbar links oben	parallel zur $[0 1 \bar{1}]$ Richtung
Nachbar rechts oben	parallel zur $[0 1 1]$ Richtung
Nachbar links unten	parallel zur $[0 \bar{1} \bar{1}]$ Richtung
Nachbar rechts unten	parallel zur $[0 \bar{1} 1]$ Richtung

**Tab. D.1:** Die Zuordnung der Blickrichtungen in der Matrix und den jeweiligen Tomogrammen.

## D.1 Datenreduktion - Ausschneiden des Bohrkerns

Die Funktion «filter3Dcut» dient der Entfernung des überflüssigen Datenvolumens außerhalb der Probe. In einem dreidimensionalen PET-Tomogramm «x» werden in der transversalen Ansicht mit «xmt» und «ymt» der Mittelpunkt und mit «r» der Radius des Objektes definiert, alles außerhalb des Kreisumfangs des Objektes wird auf «NA» (not available) gesetzt. Der Kreisumfang definiert ferner den Inkreis eines Quadrates, außerhalb dessen alle Voxel entfernt werden. Übrig bleibt ein für das Objekt passgenauer Datensatz mit deutlich verringerten Dimensionen.

```
filter3Dcut <- function(x,xmt,ymt,r){
xmax <- dim(x)[1]
ymax <- dim(x)[2]
filter <- array(x,c(xmax,ymax,dim(x)[3]))
for (i in (xmt-r):(xmt+r)){
for (j in (ymt-r):(ymt+r))
if (((i-xmt)^2+(j-ymt)^2) >= r^2) filter[i,j,] <- NA}
filter <- filter[(xmt-r):(xmt+r),(ymt-r):(ymt+r),]
return(filter)}
```

## D.2 Vergrößerung der Auflösung eines PET-Bildes

Die Funktion «Raster» reduziert die Anzahl der unterschiedlichen Werte der Voxel in einem zweidimensionalen Datensatz «data» auf eine durch «step» gegebene Anzahl von Rasterstufen. Ein vereinfachtes und gröberes Bild wird übergeben. Vgl. hierzu Abb. 5.30 links, S. 75.

```

Raster <- function(data,step){
x <- dim(data)[1]
y <- dim(data)[2]
min <- range(data,na.rm=TRUE)[1]
max <- range(data,na.rm=TRUE)[2]
sequenz <- seq(from=min,to=max,length.out=step+1)
for (s in (1:(step-1))){
for (i in (1:x)){
for (j in (1:y)){
if (is.na(data[i,j]) == FALSE){
if (data[i,j] >= sequenz[s] && data[i,j] <= sequenz[s+1])
data[i,j] <- mean(sequenz[s]:sequenz[s+1])
}}}}
return(data)}

```

### D.3 Verteilung der Maximalwerte und deren Histogramme

Die Funktion «MaxDistrib» nimmt aus dem vierdimensionalen Datensatz «data» für jedes Voxel den Maximalwert, der im Verlauf der gesamten Messung erreicht wird und schreibt diesen in einen dreidimensionalen Datensatz (vgl. Abschnitt 5.4.2). Von diesem Datensatz kann ein Histogramm erstellt werden. Vgl hierzu Abb. 5.22, S. 67.

```

MaxDistrib <- function(data){
x <- dim(data)[1]
y <- dim(data)[2]
z <- dim(data)[3]
Maxima <- array(NA,c(x,y,z))
for (i in (1:x)){
for (j in (1:y)){
for (k in (1:z)){
Maxima[i,j,k] <- max(data[i,j,k,],na.rm=TRUE)
}}}}
Maxima[is.infinite(Maxima)] <- NA
#return(Maxima)
Bild <- hist(Maxima,100,col="darkgreen",
xlab="Werte der maximalen erreichten Aktivitäten",ylab="Häufigkeit")
return(Bild)}

```

### D.4 Empirische Variogramme

Die Funktion «empvario» erzeugt ein empirisches Variogramm aus einem zweidimensionalen Datensatz «x». Für R ist zwar das Paket «GStat» verfügbar, das umfangreiche geostatistische Anwendungen erlaubt, der hier verfasste Code ist jedoch speziell für Art und Größe der hier verwendeten Datensätze konzipiert und erlaubt schnelle, einfache Anpassungen.

```

empvario<-function(x){
n <- dim(x)[1]
m <- dim(x)[2]
table <- array(0,c(n*m,9))

```

```
table[,1] <- x
hmax <- ceiling(0.75*max(dim(x)[1], dim(x)[2]))
result <- array(NA,c(hmax,2),dimnames=list(c(1:hmax),
c("Schrittweite h","empirische Varianz Gamma (h)")))
for (h in (1:hmax)){
  rechter <- 1
  for (j in (1:m)){
    for (i in (1:n)){
      if (j+h <= m) rechter[i+(j-1)*n] <- x[i,j+h]
      else rechter[i+(j-1)*n] <- NA}}
  linker <- 1
  for (j in (1:m)){
    for (i in (1:n)){
      if (j-h > 0) linker[i+(j-1)*n] <- x[i,j-h]
      else linker[i+(j-1)*n] <- NA}}
  unterer <- 1
  for (j in (1:m)){
    for (i in (1:n)){
      if (i+h <= n) unterer[i+(j-1)*n] <- x[i+h,j]
      else unterer[i+(j-1)*n] <- NA}}
  oberer <- 1
  for (j in (1:m)){
    for (i in (1:n)){
      if (i-h > 0) oberer[i+(j-1)*n] <- x[i-h,j]
      else oberer[i+(j-1)*n] <- NA}}
  table[,2] <- rechter
  table[,3] <- linker
  table[,4] <- unterer
  table[,5] <- oberer
  k<-1:(n*m)
  table[k,6] <- (table[k,1]-table[k,2])^2
  table[k,7] <- (table[k,1]-table[k,3])^2
  table[k,8] <- (table[k,1]-table[k,4])^2
  table[k,9] <- (table[k,1]-table[k,5])^2
  b <- c(table[,6:9])
  empirische_varianz <- mean(b,na.rm=TRUE)/2
  empirische_varianz[is.na(empirische_varianz)] <- 0
  result[h,1] <- h
  result[h,2] <- empirische_varianz
  matplot(result[,2],type="l",xlab="Schrittweite h",
  ylab="empirische Varianz Gamma (h)",
  main="hier entsteht ein Variogramm")
  return(result)}
```

## D.5 Richtungsabhängige Variogramme

Die Funktion «`empvario_dir_diag`» basiert auf «`empvario`» und übergibt zusätzlich zum Gesamtvariogramm die Teilvariogramme in horizontaler, vertikaler und diagonaler Richtung (siehe Abschnitt 5.4). Die Richtungsangaben für die Teilvariogramme innerhalb der

Variogrammfunktionen (also «oberer», «unterer», «rechter» und «linker» Nachbar etc.) beziehen sich auf die Blickrichtungen in der Matrix und nicht auf die tatsächlichen Raumrichtungen! Diese müssen daher entsprechend der Raumlage des Tomogramms angepasst werden. Zusätzlich kann die Anzahl der Wertepaare ausgegeben werden (siehe. Abb. 4.10, S. 45).

```
empvario_dir_diag<-function(x){
n <- dim(x)[1]
m <- dim(x)[2]
hmax <- ceiling(0.75*max(dim(x)[1], dim(x)[2]))
AnzahlPaare <- array(NA,c(hmax,5),
dimnames=list(c(1:hmax),c("empirische Varianz Gamma (h)",
"Gamma (h) in rechts-links", "Gamma (h) oben-unten",
"Gamma (h) linksoben-rechtsunten", "Gamma (h) rechtsoben-linksunten")))
table <- array(0,c(n*m,17))
table[,1] <- x
result <- array(NA,c(hmax,5),
dimnames=list(c(1:hmax),c("empirische Varianz Gamma (h)",
"Gamma (h) in rechts-links", "Gamma (h) oben-unten",
"Gamma (h) linksoben-rechtsunten", "Gamma (h) rechtsoben-linksunten")))
for (h in (1:hmax)){
rechter <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)) {
ifelse (j+h <= m, rechter[i+(j-1)*n] <- x[i,j+h],
rechter[i+(j-1)*n] <- NA)}}
linker <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j-h > 0, linker[i+(j-1)*n] <- x[i,j-h],
linker[i+(j-1)*n] <- NA)}}
unterer <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (i+h <= n, unterer[i+(j-1)*n] <- x[i+h,j],
unterer[i+(j-1)*n] <- NA)}}
oberer <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (i-h > 0, oberer[i+(j-1)*n] <- x[i-h,j],
oberer[i+(j-1)*n] <- NA)}}
linksoben <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j-h > 0 && i-h>0, linksoben[i+(j-1)*n] <- x[i-h,j-h],
linksoben[i+(j-1)*n] <- NA)}}
rechtsoben <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j+h <= m && i-h>0, rechtsoben[i+(j-1)*n] <- x[i-h,j+h],
```

```
rechtsoben[i+(j-1)*n] <- NA)}}
linksunten <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j-h > 0 && i+h<=n, linksunten[i+(j-1)*n] <- x[i+h,j-h],
linksunten[i+(j-1)*n] <- NA)}}
rechtsunten <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j+h <= m && i+h<=n, rechtsunten[i+(j-1)*n] <- x[i+h,j+h],
rechtsunten[i+(j-1)*n] <- NA)}}
table[,2] <- rechter
table[,3] <- linker
table[,4] <- unterer
table[,5] <- oberer
table[,6] <- linksoben
table[,7] <- rechtsoben
table[,8] <- linksunten
table[,9] <- rechtsunten
k<-1:(n*m)
table[k,10] <- (table[k,1]-table[k,2])^2
table[k,11] <- (table[k,1]-table[k,3])^2
table[k,12] <- (table[k,1]-table[k,4])^2
table[k,13] <- (table[k,1]-table[k,5])^2
table[k,14] <- (table[k,1]-table[k,6])^2
table[k,15] <- (table[k,1]-table[k,7])^2
table[k,16] <- (table[k,1]-table[k,8])^2
table[k,17] <- (table[k,1]-table[k,9])^2
gesamt<-c(table[,10:17])
rechts_links <- c(table[,10:11])
oben_unten <- c(table[,12:13])
linksoben_rechtsunten <- c(table[,c(14,17)])
rechtsoben_linksunten <- c(table[,15:16])
AnzahlPaare[h,1] <- length(na.omit(gesamt))
AnzahlPaare[h,2] <- length(na.omit(rechts_links))
AnzahlPaare[h,3] <- length(na.omit(oben_unten))
AnzahlPaare[h,4] <- length(na.omit(linksoben_rechtsunten))
AnzahlPaare[h,5] <- length(na.omit(rechtsoben_linksunten))
empirische_varianz <- mean(gesamt,na.rm=TRUE)/2
evar_rechts_links <- mean(rechts_links,na.rm=TRUE)/2
evar_oben_unten <- mean(oben_unten,na.rm=TRUE)/2
evar_linksoben_rechtsunten <- mean(linksoben_rechtsunten, na.rm=TRUE)/2
evar_rechtsoben_linksunten <- mean(rechtsoben_linksunten, na.rm=TRUE)/2
result[h,1] <- empirische_varianz
result[h,2] <- evar_rechts_links
result[h,3] <- evar_oben_unten
result[h,4] <- evar_linksoben_rechtsunten
result[h,5] <- evar_rechtsoben_linksunten
result[is.na(result)] <- 0
```

```

matplot(result,type="l",lwd=2,lty=1:1,
col=c("black","red","green3","darkblue","lightblue"),
xlab="Schrittweite h",ylab="empirische Varianz Gamma (h)",
main="hier entsteht ein richtungsabhängiges Variogramm")
legend("bottom",c("Gesamtvariogramm","rechts-links","oben-unten",
"links oben - rechts unten","rechts oben - links unten"),
lwd=2,lty=1:1,col=c("black","red","green3","darkblue","lightblue"))}
return(result)
# return(AnzahlPaare)}

```

## D.6 Dreidimensionale Variogramme

Die Funktion «empvario\_dir3D» basiert auf «empvario» erzeugt ein empirisches Variogramm eines dreidimensionalen Datendatsets «data» und übergibt zusätzlich die Teilvariogramme in horizontaler, vertikaler und transversaler Richtung. Sie erstellt somit Variogramme nach der «blockweisen Methode», vgl. Abschnitt 5.4.2. Zusätzlich kann die Anzahl der Wertepaare ausgegeben werden (siehe. Abb. 4.10, S. 45).

```

empvario_dir3D <- function(data){
x <- dim(data)[1]
y <- dim(data)[2]
z <- dim(data)[3]
hmax <- ceiling(0.75*max(x,y,z))
AnzahlPaare <- array(NA,c(hmax,4),dimnames=list(c(1:hmax),
c("Gesamtvariogramm","in y-Richtung","in x-Richtung","in z-Richtung")))
table <- array(0,c(x*y*z,13))
table[,1] <- data
result <- array(NA,c(hmax,4),dimnames=list(c(1:hmax),
c("empirische Varianz Gamma (h)","Gamma (h) horizontal",
"Gamma (h) vertikal","Gamma (h) transversal")))
for (h in (1:hmax)){
rechter <- 1
for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (j+h <= y, rechter[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i,j+h,k], rechter[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
linker <- 1
for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (j-h > 0, linker[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i,j-h,k], linker[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
unterer <- 1
for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (i+h <= x, unterer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i+h,j,k], unterer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
oberer <- 1

```

```

for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (i-h > 0, oberer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i-h,j,k], oberer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
vorderer <- 1
for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (k-h > 0, vorderer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i,j,k-h], vorderer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
hinterer <- 1
for (k in (1:z)){
for (j in (1:y)){
for (i in (1:x)){
ifelse (k+h <= z, hinterer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))]
<- data[i,j,k+h], hinterer[i+(j-1)*x+((k-1)*(x*y))] <- NA)}}}
table[,2] <- rechter
table[,3] <- linker
table[,4] <- unterer
table[,5] <- oberer
table[,6] <- vorderer
table[,7] <- hinterer
k<-1:(x*y*z)
table[k,8] <- (table[k,1]-table[k,2])^2
table[k,9] <- (table[k,1]-table[k,3])^2
table[k,10] <- (table[k,1]-table[k,4])^2
table[k,11] <- (table[k,1]-table[k,5])^2
table[k,12] <- (table[k,1]-table[k,6])^2
table[k,13] <- (table[k,1]-table[k,7])^2
gesamt <- c(table[,8:13])
jRichtung <- c(table[,8:9])
iRichtung <- c(table[,10:11])
kRichtung <- c(table[,12:13])
AnzahlPaare[h,1] <- length(na.omit(gesamt))
AnzahlPaare[h,2] <- length(na.omit(jRichtung))
AnzahlPaare[h,3] <- length(na.omit(iRichtung))
AnzahlPaare[h,4] <- length(na.omit(kRichtung))
empirische_varianz <- mean(gesamt,na.rm=TRUE)/2
evar_jRichtung <- mean(jRichtung,na.rm=TRUE)/2
evar_iRichtung <- mean(iRichtung,na.rm=TRUE)/2
evar_kRichtung <- mean(kRichtung,na.rm=TRUE)/2
result[h,1] <- empirische_varianz
result[h,2] <- evar_jRichtung
result[h,3] <- evar_iRichtung
result[h,4] <- evar_kRichtung
result[is.na(result)] <- 0
matplot(result,type="l",lwd=2,lty=1:1,
col=c("black","red","green3","darkblue"),

```



```

xlab="Schrittweite h",ylab="empirische Varianz Gamma (h)",
main="hier entsteht ein richtungsabhängiges Variogramm")
legend("topleft",
c("Gesamtvariogramm","in y-Richtung","in x-Richtung","in z-Richtung"),
lwd=2,lty=1:1,col=c("black","red","green3","darkblue"))}
return(result)
# return(AnzahlPaare)}

```

## D.7 Ebenenweise Variogramme

Die Funktion «empvario\_dir\_raster» basiert auf «empvario» und übergibt für jede mit «start, stop» ausgewählte Ebene eines dreidimensionalen Datensatzes «data» ein empirisches Gesamtvariogramm und die Teilvariogramme in horizontaler und vertikaler Richtung der jeweiligen Ebene. Es ist mittels «Ebene=» auszuwählen, ob entlang der transversalen, sagittalen oder coronalen Blickrichtung prozessiert werden soll. Sie erstellt somit Variogramme nach der «ebenenweisen Methode», vgl. Abschnitt 5.4.2.

```

empvario_dir_raster<-function(data,start,stop,Ebene=""){
if (Ebene == "trans") hmax <- ceiling(0.75*max(dim(data)[1],dim(data)[2]))
if (Ebene == "sag") hmax <- ceiling(0.75*max(dim(data)[2], dim(data)[3]))
if (Ebene == "cor") hmax <- ceiling(0.75*max(dim(data)[1], dim(data)[3]))
gesamt <- array(0,c(hmax,(stop-(start-1))))
rechts_links <- array(0,c(hmax,(stop-(start-1))))
oben_unten <- array(0,c(hmax,(stop-(start-1))))
for (L in (start:stop)) {
if (Ebene == "trans") x <- data[, ,L]
if (Ebene == "sag") x <- data[L, ,]
if (Ebene == "cor") x <- data[,L,]
n <- dim(x)[1]
m <- dim(x)[2]
table <- array(0,c(n*m,9))
table[,1] <- x
result <- array(NA,c(hmax,3))
for (h in (1:hmax)){
rechter <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j+h <= m, rechter[i+(j-1)*n] <- x[i,j+h],
rechter[i+(j-1)*n] <- NA)}}
linker <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (j-h > 0, linker[i+(j-1)*n] <- x[i,j-h],
linker[i+(j-1)*n] <- NA)}}
unterer <- 1
for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (i+h <= n, unterer[i+(j-1)*n] <- x[i+h,j],
unterer[i+(j-1)*n] <- NA)}}
oberer <- 1

```

```

for (j in (1:m)){
for (i in (1:n)){
ifelse (i-h > 0, oberer[i+(j-1)*n] <- x[i-h,j],
oberer[i+(j-1)*n] <- NA)}}
table[,2] <- rechter
table[,3] <- linker
table[,4] <- unterer
table[,5] <- oberer
k<-1:(n*m)
table[k,6] <- (table[k,1]-table[k,2])^2
table[k,7] <- (table[k,1]-table[k,3])^2
table[k,8] <- (table[k,1]-table[k,4])^2
table[k,9] <- (table[k,1]-table[k,5])^2
b<-c(table[,6:9])
rechtslinks <- c(table[,6:7])
obenunten <- c(table[,8:9])
empirische_varianz <- mean(b,na.rm=TRUE)/2
evar_rechts_links <- mean(rechtslinks,na.rm=TRUE)/2
evar_oben_unten <- mean(obenunten,na.rm=TRUE)/2
result[h,1] <- empirische_varianz
result[h,2] <- evar_rechts_links
result[h,3] <- evar_oben_unten
matplot(result,type="l",lwd=2,lty=1:1,
col=c("black","red","green3"),xlab="Schrittweite h",
ylab="empirische Varianz Gamma (h)",
main="hier entsteht ein richtungsabhängiges Variogramm")
legend("bottom",
c("Gesamtvariogramm","rechts-links","oben_unten"),
lwd=2,lty=1:1,col=c(1,3,2))
gesamt [,L-(start-1)] <- result[,1]
rechts_links [,L-(start-1)] <- result[,2]
oben_unten [,L-(start-1)] <- result[,3]}}
gesamt[is.na(gesamt)] <- 0
rechts_links[is.na(rechts_links)] <- 0
oben_unten[is.na(oben_unten)] <- 0
matplot(1:hmax,gesamt,type="l",xlab="Schrittweite h",
ylab="empirische Varianzen Gamma (h)",
main="Richtungsabhängige Variogramme",pch=c(1:(stop-(start-1))))
return(list(gesamt,rechts_links,oben_unten))}

```

# E Liste der Kooperationspartner

Mit den folgenden der insgesamt zehn Teilvorhaben des Forschungsverbundvorhabens *Dynamik abgeöffneter oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks* fanden teilweise intensive Kooperationen statt in Bezug auf Probenmaterial- und Datenaustausch, sowie gemeinsame Auswertungen:



Johannes Gutenberg-Universität Mainz  
Institut für Geowissenschaften  
Umweltgeochemie  
Johann-Joachim-Becher-Weg 21  
55099 Mainz

Auswahl und Messung der Bohrkerne mit  $\mu$ XCT (ProCon CT Alpha 160); Modellierung der Druck- und Strömungsfelder und der Tracerwolken (LBM particle tracking); Verschneidung von PET-, CT und Modelldatensätzen



K-UTEC AG Salt Technologies  
Am Petersenschacht 7  
99706 Sondershausen

Lösungszusammensetzungen der Formationswässer aus den Bohrungen B und G1



Brandenburgische Technische Universität  
Cottbus  
Fakultät 4  
(Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik)  
Lehrstuhl für Umweltgeologie  
Erich-Weinert-Str. 1  
03046 Cottbus

Lösungszusammensetzungen der Formationswässer aus der Bohrung B305



Technische Universität Clausthal  
Institut für Aufbereitung und Deponietechnik  
Erzstr. 20  
38678 Clausthal-Zellerfeld

Auswahl der Bohrkerne und Erhalt eines durch einen Triaxialversuch artifizial geklüfteten Bohrkerns aus dem Staßfurt-Steinsalz



Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR)  
Geozentrum Hannover  
Stilleweg 2  
30655 Hannover

Koordination des Verbundprojektes; Datenbank «SaltCoreBase» zum projektinternen Austausch von Daten

Kooperationspartner außerhalb des Forschungsverbundes



Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)  
Unter den Eichen 87  
12205 Berlin  
Postanschrift: 12200 Berlin

Messung der Bohrkerne mit Durchmessern von 10 cm mittels  $\mu$ XCT (225 kV Mikrofokusröntgenröhre)