张雨佳,杨 蕴,龚绪龙,等.油水混合层 CO_2 地质封存与利用数值模拟及参数全局敏感性分析 [J]. 中国环境科学, 2025,45(8):4667-4676.
Zhang Y J, Yang Y, Gong X L, et al. Numerical simulation and parameter global sensitivity analysis of CO_2 geological storage and utilization in oil-water mixed layers [J]. China Environmental Science, 2025,45(8):4667-4676.

油水混合层 CO_2 地质封存与利用数值模拟及参数全局敏感性分析

张雨佳[1],杨 蕴[1*],龚绪龙[2],朱慧星[3],崔龙玉[2],吴公益[4],宋 健[1],朱 淳[1],吴吉春[5](1.河海大学地球科学与工程学院,地下水保护与利用国家级重点实验室培育建设点,江苏 南京 211100；2.江苏省地质调查研究院,江苏 南京 210002；3.吉林大学新能源与环境学院,吉林 长春 130021；4.中国石油化工股份有限公司华东油气分公司,江苏 泰州 225300；5.南京大学地球科学与工程学院,江苏 南京 210023)

摘要：选择苏北某油田为研究对象,构建了 CO_2 驱油与封存多相流反应运移模型 CO_2-DSMRT 刻画超临界态/气相、溶水相、溶油相和矿物相 CO_2 在百年尺度上的转化和归趋,利用 Sobol 方法识别了影响模型预测结果的敏感参数.进一步采用 PSO-LSSVM 方法建立替代模型以表征敏感参数输入和 CO_2 多相态输出结果之间的映射关系,并开展蒙特卡洛随机模拟量化模型的不确定性.结果表明,CO_2 注入油水混合层 100a 后,气相 CO_2 占比 61.2%,溶油相 CO_2 占比 17.8%,溶水相 CO_2 占比 11.2%,矿物相 CO_2 占比 9.8%,CO_2-DSMRT 模型对开采油量最敏感的参数为渗透率,对储层 CO_2 封存量最敏感的参数为孔隙度.不同置信水平下 CO_2 封存量和产油量的产投比差异明显,P10 情境适用于封存优先策略,P50 情境下可实现封存与经济效益平衡,P90 情境下更适合增产优化策略.

关键词：CO_2 地质封存与利用；多相流；反应运移；全局敏感性分析；不确定性分析
中图分类号：X144 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)08-4667-10

Numerical simulation and parameter global sensitivity analysis of CO_2 geological storage and utilization in oil-water mixed layers.

ZHANG Yu-jia[1], YANG Yun[1], GONG Xu-long[2], ZHU Hui-xing[3], CUI Long-yu[2], WU Gong-yi[4], SONG Jian[1], ZHU Chun[1], WU Ji-chun[5] (1.Key Laboratory of Groundwater Protection and Utilization—National Key Laboratory Cultivation and Development Site, School of Earth Science and Engineering,Hohai University, Nanjing 211100, China；2.Jiangsu Geological Survey and Research Institute, Nanjing 210002, China；3.College of New Energy and Environment, Jilin University, Changchun 130021, China；4.China Petroleum & Chemical Corporation East China Oil&Gas Branch, Taizhou 225300, China；5.School of Earth Science and Engineering, Nanjing University,Nanjing 210023, China). *China Environmental Science*, 2025,45(8)：4667~4676

Abstract：In this paper, an oil field in Northern Jiangsu Province is selected as the research object, and a multiphase flow reaction migration model CO_2-DSMRT for CO_2 displacement and storage is constructed to describe the transformation and fate of supercritical state/gas phase, dissolved water phase, dissolved oil phase and mineral phase CO_2 on a century scale. The sensitive parameters affecting the prediction results of the model are identified by Sobol method. Furthermore, PSO-LSSVM method was used to establish an alternative model to characterize the mapping relationship between sensitive parameter input and CO_2 multiphase output results, and Monte Carlo stochastic simulation was carried out to quantify the uncertainty of the model. The results show that after 100 years of CO_2 injection into the oil-water mixed layer, the gas phase CO_2 accounts for 61.2%, the oil-soluble phase CO_2 accounts for 17.8%, the water-soluble phase CO_2 accounts for 11.2%, and the mineral phase CO_2 accounts for 9.8%. The most sensitive parameter of co_2-dsmrt model to oil production is permeability, and the most sensitive parameter to reservoir CO_2 storage is porosity. The production investment ratio of CO_2 storage capacity and oil production under different confidence levels is significantly different. P10scenario is suitable for storage priority strategy, P50 scenario can achieve the balance between storage and economic benefits, and P90 scenario is more suitable for production optimization strategy.

Key words：CO_2 geological storage and utilization；multiphase flow；reactive transport；global sensitivity analysis；uncertainty analysis

应对全球气候变化碳捕集、利用和封存(CCUS)技术既能减缓温室效应,又能提高油藏资源的采收率[1-4].美国 Terrell 的 CO_2 增强石油开采(CO_2-EOR)是国外最早报道的 CCUS 项目,推动了欧美等国家

收稿日期：2025-01-03
基金项目：国家自然科学基金-核技术创新联合基金资助项目(U2167212)
* 责任作者，教授, yy_hhu@hhu.edu.cn

CO_2 捕集利用项目的工业化[5-6].国内 CCUS 项目起步较晚,2007 年吉林油田首次建立 CO_2 驱油与封存示范区,随后鄂尔多斯开展了国内首个咸水层地质封存实验项目.CCUS 技术已经实现了从室内试验到示范工程到商业项目的推广应用,现有封存体主要为深部咸水层、枯竭油气藏以及不可开采的煤层等[7].然而在油藏-咸水层(油水)混合层的应用研究尚处于起步阶段.油水混合储层 CO_2-EOR 涉及 CO_2 超临界态、溶油相态、溶水相态和矿物态 4 种封存形态,构造圈闭/水动力封存、残余气封存/毛细力封存、溶解封存和矿物封存 4 种封存机制,CO_2-水-油三相体系进一步增强了多相态、多组分、多过程、多反应的非线性动力学系统的复杂性[8].数值模拟是研究和预测原油、CO_2、地层水和矿物间相互作用和动力学过程的重要方法,研发相应的多相流反应运移模型是精细刻画油水混合层 CO_2 封存与驱油过程,精准制定封存设计方案的量化工具.

国内外常用于模拟 CO_2 在不同类型储层中封存和运移规律的工具有 CMG、Eclipse、TOUGH 系列软件和程序等[9-10].Eclipse 和 CMG 可定量刻画 CO_2 超临界态/气态、溶水相态和溶油相态多相动力学过程,可通过有限的用户自定义方程式刻画 CO_2-水-岩反应,难以模拟考虑地层内复杂矿物组分和多路径反应网络的 CO_2 矿化过程[11-13].TOUGH 系列程序采用模块化设计和有限积分差网格剖分方法模拟,如 ECO_2N 模块能够模拟 CO_2 在地质体中的多相流动和封存过程,TOUGHREACT 模块能够模拟地下水与岩石之间的相互作用溶水相 CO_2-水-岩反应过程,但不能同时模拟考虑 CO_2 驱油的多相流过程[14-15].因此,当前对标求解油水混合层 CO_2-EOR 多相流反应运移模拟尚存在技术空白,油水混合层中 CO_2-EOR 涉及气-水-油-岩多相流动和多相流体系中溶解-沉淀-矿化等地球化学反应的耦合过程,亟需在现有多相流模拟程序的基础上耦合地球化学反应网络,以实现 CO_2 封存和驱油过程中各相态分布和归趋,油水混合层 CO_2-EOR 的碳封存量和采油量的评价和计算[16].

模型中涉及到的储层的渗透性、孔隙度、岩石弹性、化学组成以及流体的粘度和相行为等关键参数和变量决定了 CO_2 在储层中的迁移和分布模式,由于油水混合层地质条件复杂且地质信息相对缺乏,对储层 CO_2 封存量和开采油量评估的准确性影响大,需进一步考虑到关键参数的敏感性以及对模型输出目标值的不确定性[17-18].本文以江苏泰州某油田为研究区,研发 CO_2 驱油与封存多相流反应运移 CO_2-DSMRT(驱替储能多相流反应运输模型)数值模型,采用全局敏感性分析方法和蒙特卡洛随机模拟技术开展模型参数全局敏感性和模型不确定性分析[19],可为油水混合层 CO_2-EOR 实现封存效率和驱油效率的工程方案优化提供技术支撑.

1 研究方法

1.1 CO_2-DSMRT 模型

在 TOUGH 系列程序的[20]基础上,研发多相流反应运移模型 CO_2-DSMRT,实现油水混合层 CO_2-EOR 过程中气相、溶解相、固相及油相 CO_2 分布的定量计算.

CO_2 注入油水混合层中多组分多相流体渗流过程的控制方程:

$$\frac{\partial M^k}{\partial t} = -\nabla \cdot F^k + q^k \tag{1}$$

式中:M^k 表示组分 κ 的质量(或能量)累积项;F^k 表示组分 k(或能量)的流入、流出量;q^k 表示组分 k(或能量)的源汇项;∇ 为向量微分算子.

多相体系中 CO_2-水及 CO_2-油均为互溶的流体,因此需要考虑互溶流体的溶质运移,主要包括对流-弥散,组分 j 和水中离子组分溶质运移的综合表达式为:

$$\begin{aligned} f^j &= \sum_{\beta=g,l,o} (u_\beta C_\beta^j - -\Phi\tau_o\tau_\beta S_\beta d_\beta^j \nabla C_\beta^j - -d\nabla C_\beta^j) \\ &= \sum_{\beta=g,l,o} \left(u_\beta C_\beta^j - \left(\tau\phi S_\beta d_\beta^j\right)\nabla C_\beta^j\right) \end{aligned} \tag{2}$$

式中:u_β 为 β 相的流动速率;C_β^j 为组分 j 在 β 相中的浓度变量;$\tau_o\tau_\beta$ 为曲率参数,包括孔隙介质相关参数 τ_o,以及相态饱和度相关的参数 τ_β;S_β 为相态饱和度;d_β^j 为组分 j 在单 β 相中的扩散系数,d 是有效扩散系数.

多相体系中主要的地球化学反应包括离子络合反应和矿物溶解/沉淀.对于离子络合反应,假定反应处于局部平衡,根据质量作用定律求解次级离子组分 i,次级离子组分 i 的浓度可表示为初级离子组分 j 浓度的函数:

$$c_i = K_i^{-1}\gamma_i^{-1}\prod_{j=1}^{N_C} c_j^{v_{ij}}\gamma_j^{v_{ij}},$$

$$K_i = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 \tag{3}$$

式中:c_i 为次级组分 i 的摩尔浓度;c_j 为初级始组分 j 的摩尔浓度;γ_i 和 γ_j 为组分 i、j 的热力学活度系数;K_i 为平衡常数,a_0、a_1、a_2 及 a_3 为经验公式拟合常数.

对于矿物的溶解/沉淀反应,通过判断反应平衡常数与矿物饱和指数 SI_m 的大小确定矿物反应的方向(溶解或沉淀),矿物的饱和指数计算表达式如下:

$$\mathrm{SI}_m = \log_{10}^{\Omega_m},\ \Omega_m = K_m^{-1}\prod_{j=1}^{N_c} c_j^{v_{mj}}\gamma_j^{v_{mj}}\ m = 1\cdots N_p \tag{4}$$

式中:Ω_m 为平衡矿物 m 的饱和比;m 为平衡矿物指针数;γ_j 为组分 i 的热力学活度系数;c_j 为组分 i 的摩尔浓度;v_{mj} 为组分 j 在矿物 m 反应式中的化学计量数;K_m 为平衡常数.

CO_2−DSMRT 程序具体流程如图 1 所示.

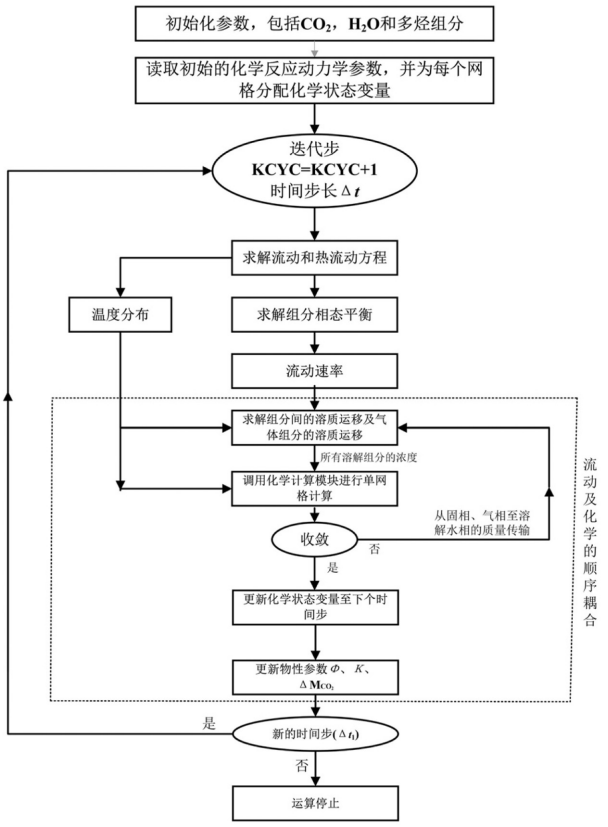


图 1　CO_2−DSMRT 模型计算流程图

Fig.1　CO_2−DSMRT model calculation flowchart

1.2　Sobol 全局敏感性分析方法

Sobol 方法可以将模型分解为多个函数,函数中的每个参数互相组合,当参数表现为正交时,该模型就会存在唯一的分解形式,通过多重积分可以求得所有的分解[21].假设 $f(x)$ 可积,且 x_i 在[0,1]服从均匀分布,则 $f(x)$ 可表达为:

$$\begin{aligned} f(x_1,x_2,\cdots,x_k) &= f_o + \sum_{i=1}^{k} f_i(x_i) + \\ &\sum_{1<i<j<k} f_i,j(x_i,x_j) + \cdots + yf_{1,2,\cdots,k}(x_1,x_2,\cdots,x_k) \end{aligned} \tag{5}$$

各阶偏方差 $D_{i_1,i_2,\cdots,i_n}$ 可以通过分解式计算得到:

$$D_{i_1,i_2,\cdots i_n} = \int_0^1\cdots\int_0^1 f_{i_1,i_2,\cdots,i_k}(x_1,x_2,\cdots,x_k)dx_{i_1}\cdots dx_{i_n} \tag{6}$$

式中:$1\leqslant i_1<\cdots<i_n\leqslant k$ 且 n=1,2,⋯,k,总方差 D 为各阶偏方差之和,即

$$D = \sum_{i=1}^{n} D_i + \sum_{1<i<j<k} D_{ij} + \cdots + D_{1,2,\cdots,n} \tag{7}$$

将式(7)两边同除以总方差 D 得到:

$$1 = \sum_{i=1}^{n} S_i + \sum_{1<i<j<n} S_{ij} + \cdots + S_{1,2,\cdots,n} \tag{8}$$

分解偏方差与总方差的比值即为敏感度:

$$S_{i_1,i_2,\cdots,i_n} = \frac{D_{i_1,i_2,\cdots,i_n}}{D} \tag{9}$$

式中:$S_{i_1,i_2,\cdots,i_n}$ 为因素 $x_{i_1},x_{i_2},\cdots,x_{i_s}$ 的 s 阶敏感性指数,用于定量描述 s 个参数共同作用对函数 $f(x)$ 的影响;S_i 为 x_i 一阶敏感性指数,描述单个参数 x_i 在函数 $f(x)$ 中所造成的影响.

变量 x_{i_1} 总敏感性指数 TS_{i_1} 可以表示为:

$$TS_{i_1} = S_{i_1} + S_{i_1,i_2} + \cdots + S_{i_1,i_2,\cdots,i_s} \tag{10}$$

1.3　替代模型方法

CO_2−DSMRT 数值模型在求解场地尺度问题时面临巨大的模型计算挑战,难以识别模型关键参数的敏感性和量化目标变量的不确定性.本文提出基于最小二乘支持向量机方法(LSSVM)构建 CO_2−DSMRT 替代模型,能够以平方损失函数简化优化问题,为线性方程组的求解,大幅提高了计算速度和效率,同时提高了模型在处理质量参差不齐的地质数据时的鲁棒性.LSSVM 在优化正则化参数 γ 和核参数 σ 时采用网格搜索方法可能导致较长的计算时间,通过引入粒子群优化算法(PSO)增强其全局搜索能力可以有效地寻优预测模型的惩罚系数和核函数宽度,从而减少最优参数搜索所需的时间并增强模型的整体精度[22].PSO−LSSVM 替代模拟方法可实现模型输入参数(最小混相压力 MMP、气体中烃类所占摩尔分数 Xi、界面张力 σ、孔隙度 φ、渗透率 K 和岩石压缩系数 C)与输出变量(CO_2 累积封存量和开采油量)之间的数据映射.

2 应用研究

2.1 研究区概况

研究区位于江苏省泰州某油田,位置和范围如图 2 所示.封存层位于溱潼凹陷内斜坡带中段,顶部埋深 2000m 以上,属于中、高孔中、高渗透油藏,原油密度低、黏度低,油品较好.根据各个井取样的高压物性分析该油藏属于未饱和油藏,含油主力及生产层位为戴一段 III 油组,戴南组一段地层具有明显的上细下粗的正旋回沉积特征,砂岩型咸水含水层平均孔隙度为 26.9%,平均渗透率为 $633.26\times10^{-15}m^2$.本储层适用于 CO_2 地质封存,且可充分利用 CO_2 驱替作用实现油藏高效开采.戴一段上部的泥岩段夹层厚而稳定,有效阻止 CO_2 向上逃逸,可确保 CO_2 地质封存的安全性[23].

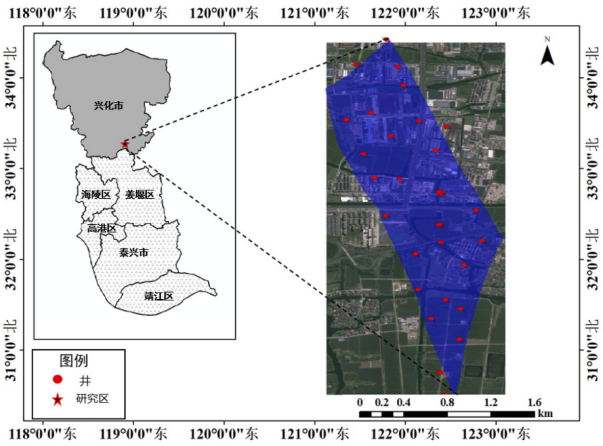


图 2 区域位置及井分布

Fig.2 Regional location and well distribution

2.2 数值模型

2.2.1 模型结构 以戴南组一段油水混合层作为注入层,构建三维 CO_2 驱油与封存多相流反应运移模型.模型范围长 1800m,宽 600m.采用三维角点网格系统进行剖分网格,平面上采用均匀网格剖分,步长为 50m,共剖分 1056 个网格;纵向网格尺寸由实际地层决定,目的层自上而下共划分 6 个模拟层,根据存在的从东南到西北向的压力梯度画出离散模型网格,如图 3 所示.模型四周取阻水构造,设为隔水边界.

选用典型的四注一采五点井网模型,即注入井 4 口,生产井 1 口.为了保持较好的地层压力水平,储层在气体突破前进行保压注采,通过连续注气的方式,定速率注入定压,可以使注入井和开发井在储层整个厚度上完全射开.持续以 3.17kg/s 的速率将 CO_2 注入,5a 后封井,总模拟时间为 100a,时间离散采用自动时间步长.

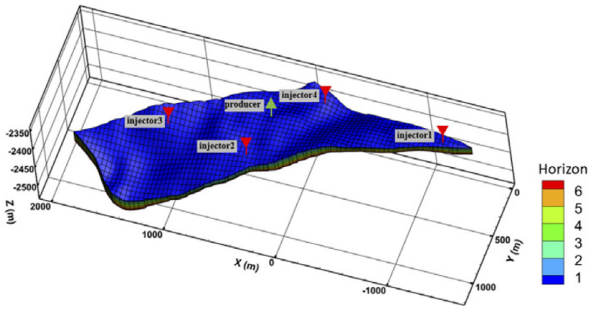


图 3 研究区注采井位置及剖分

Fig.3 Location and subdivision of injection and production wells in the research area

2.2.2 参数设置 模型中储层的孔隙度和渗透率设置为非均质,其余相关物理参数设置为均质,详见表 1.

根据实验测得岩石矿物成分资料获得研究区戴南组砂岩储层的矿物成分数据,其主要的矿物成分是钾长石、石英、奥长石和钠长石,其次是方解石和绿泥石[24].矿物溶解及沉淀反应所使用的动力学参数见表 2.

初始地层水化学组分依据初始矿物与盐度为 2%的盐水模拟 100a 的结果,同时以地层资料显示的 $NaHCO_3$ 型水为约束进行设定[25],初始水化学组成具体参数如表 3 所示.

表 1 相关物理学参数设置

Table 1 Related physics parameter settings

岩石密度 (kg/m^3)	岩石比热容 (J/(kg·℃))	热传导系数 (W/(m·℃))	压缩系数 (Pa^{-1})	扩散系数 (m^2/s)	含油饱和度	S_{lr}	S_{gr}	P_0 (kPa)
2600	920	2.51	4.5×10^{-10}	1.0×10^{-9}	0.3-0.6	0.2	0.05	0.28

注:S_{lr}为残余水饱和度;S_{gr}为残余气饱和度;P_0为毛管进气压力.

表 2　原生矿物、次生矿物及反应动力学参数值

Table 2　Primary minerals, secondary minerals, and reaction kinetics parameter values

	矿物名称	体积分数(%)	比表面积 A (cm^2/g)	中性机制		酸性机制			碱性机制		
				k_{25} [$mol/(m^2 \cdot s)$]	活化能 Ea (kJ/mol)	k_{25} [$mol/(m^2 \cdot s)$]	活化能 Ea (kJ/mol)	$n(H^+)$	k_{25} [$mol/(m^2 \cdot s)$]	活化能 Ea (kJ/mol)	$n(H^+)$
原生矿物	石英	26	9.8	1.14×10^{-8}	87.7						
	钠长石	17	483	2.75×10^{-13}	69.8	6.92×10^{-11}	65.0	0.457	2.51×10^{-16}	71.0	−0.572
	钾长石	25	9.8	3.891×10^{-13}	38	8.710×10^{-11}	51.7	0.5	6.310×10^{-2}	94.1	−0.823
	方解石	7	9.8			受控于瞬时平衡					
	奥长石	2	151.6	6.918×10^{-14}	2.2	4.898×10^{-12}	65.9	0.777	8.913×10^{-18}	17.9	−0.472
	绿泥石	3	151.6	3.02×10^{-13}	88	7.762×10^{-12}	88	0.5			
	菱铁矿	0	9.8	1.260×10^{-9}	62.76	1.590×10^{4}	45	0.9			
次生矿物	钠蒙脱石	0	151.6	1.660×10^{-13}	35	1.047×10^{-11}	23.6	0.34	3.020×10^{-17}	58.9	−0.4
	钙蒙脱石	0	151.6	1.660×10^{-13}	35	1.047×10^{-11}	23.6	0.34	3.020×10^{-17}	58.9	−0.4
	奥长石	0	19.795	1.445×10^{-12}	69.8	2.138×10^{-10}	65	0.457			
	菱镁矿	0	9.8	4.571×10^{-10}	23.5	4.169×10^{-7}	14.4	1			
	片钠铝石	0	9.8	1.260×10^{-9}	62.76	1.590×10^{4}	45	0.9			
	白云石	0	9.8	2.951×10^{-8}	52.2	6.457×10^{4}	36.1	0.5			
	铁白云石	0	9.8	1.260×10^{-9}	62.76	1.590×10^{4}	45	0.9			
	赤铁矿	0	12.9	2.512×10^{-15}	66.2	4.074×10^{10}	66.2	1			
	伊利石	0	151.6	1.660×10^{-13}	35	1.047×10^{-11}	23.6	0.34	3.020×10^{-17}	58.9	−0.4

表 3　模型平衡时计算所得的初始水化学组成参数

Table 3　Initial hydro chemical composition parameters calculated during model equilibrium

离子类型	Ca^{2+}	Mg^{2+}	Na^{+}	Fe^{2+}	K^{+}
浓度 C_{TOT}(mol/kg)	0.87×10^{-1}	0.71×10^{-16}	0.26	0.24×10^{-9}	0.13×10^{-2}
离子类型	HCO^{3-}	SO_4^{2-}	AlO^{2-}	Cl^{-}	$SiO_2(aq)$
浓度 C_{TOT}(mol/kg)	0.44×10^{-1}	0.1×10^{-7}	0.13×10^{-1}	0.3	0.2×10^{-2}

2.2.3　模拟结果　超临界态 CO_2 注入油水混合层后,改变了石油黏度而降低油水流度比,提高了原油流动性,原油从多孔介质中流出.模拟结果显示,注入井附近含油饱和度随着原油的开采而降低(图 4).注气 5a 后储层内 CO_2 羽流的波及范围扩大,原油进一步向开采井方向驱动,模拟产出油量约为 69 万 t(图 5(a)).由于气相 CO_2 密度比水小,会在浮力、水压等作用下向上和向外迁移扩散,孔隙中气相饱和度逐渐增大运移至盖层底部,开始向盖层底部聚集并沿着底部侧向扩散迁移,4 口注气井注入 CO_2 均向开采井方向运移,5a 后 CO_2 在储层内模拟累计封存总量约为 114 万 t,气相羽流的迁移最远距离约为 1156m(图 5(b)).

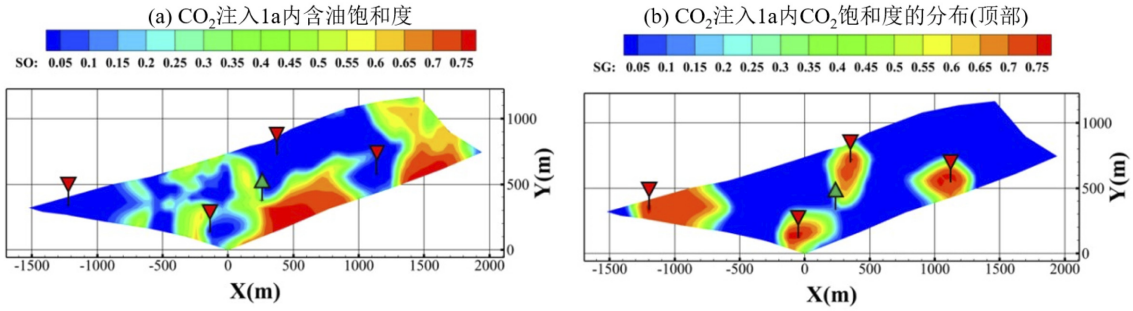


图 4　CO_2 注入 1a 内含油饱和度和 CO_2 饱和度的分布(顶部)

Fig.4　Distribution of oil saturation and CO_2 saturation within 1 year of CO_2 injection (Top)

为探究长时间尺度 CO_2 封存形态演化规律,在上述模拟 CO_2 注入 5a 停注后,进一步在 100a 尺度上模拟 CO_2−水−岩地球化学反应过程,定量评价长期封存期 CO_2 相态转化行为.模拟结果表明,停注后 CO_2 逐渐由气相溶解于水相和油相,溶水相 CO_2 进一步通过地球化学反应与金属离子结合形成固碳矿物.随着时间

的推移,气相 CO_2 的含量逐渐降低,而溶水相、溶油相和矿物相 CO_2 占比逐渐升高.100a 后气相 CO_2 占比 61.2%;溶油相 CO_2 次之,占比 17.8%;溶水相 CO_2 占比 11.2%;矿物相 CO_2 含量最低,占比 9.8%(图 6).

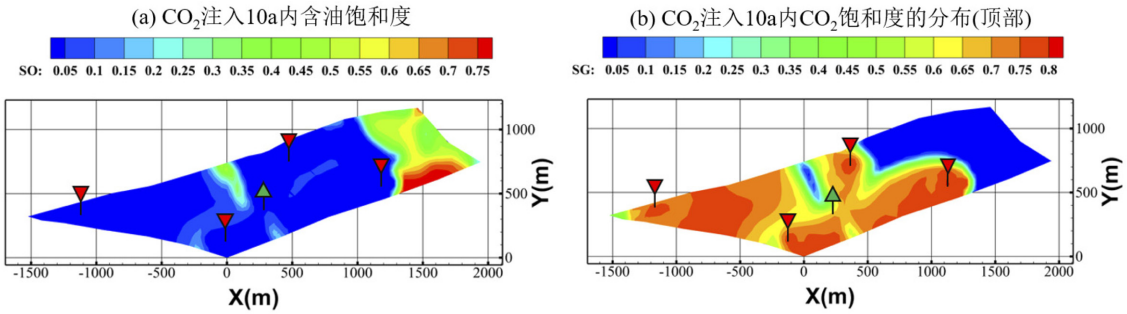


图 5 CO_2 注入 10a 内含油饱和度和 CO_2 饱和度的分布(顶部)

Fig.5 Distribution of oil saturation and CO_2 saturation within 10 years of CO_2 injection (Top)

注入 CO_2 打破了储层酸碱平衡体系,使原生矿物和次生矿物分别发生了溶解和沉淀.已有研究表明,在 CO_2 酸化条件下,长石类矿物(如奥长石、钠长石、钾长石)易发生溶解,释放出 Ca^{2+}、Mg^{2+}和 Fe^{2+} 阳离子[26-27].图 7 为封存 100a 后地层矿物体积含量百分比变化,主要的溶解矿物为长石类矿物,奥长石溶解量达 1.4%,钾长石溶解量为 0.15%.此外,绿泥石也发生了一定程度的溶解,并向溶液中释放出 Fe^{2+},进一步与 HCO_3^-结合,形成铁白云石和菱铁矿等固碳矿物.模拟结果显示 100a 后的固碳矿物主要为铁白云石,沉淀量达 0.45%,菱铁矿在储层内零星生成,最大沉淀量为 0.065%.铁白云石的形成区域与 CO_2 羽分布区域基本一致,而菱铁矿主要分布于 CO_2 羽之间,呈条带状分布.这一趋势与 Liu 等[28]的研究结果相吻合,表明铁白云石更易形成,其沉淀受 pH 值、Fe^{2+}浓度及 CO_2 羽流分布的显著影响.

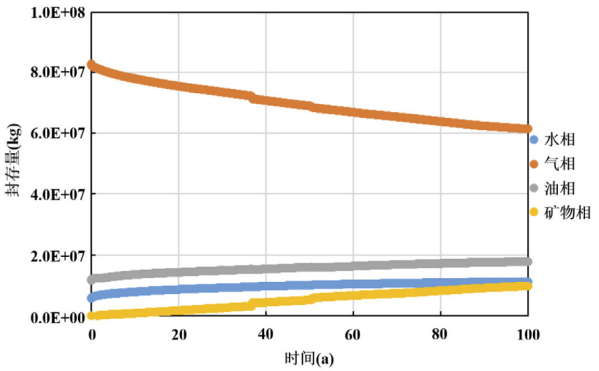


图 6 停注后长时间尺度 CO_2 封存形式演化

Fig.6 Long term evolution of CO_2 sequestration forms after injection cessation

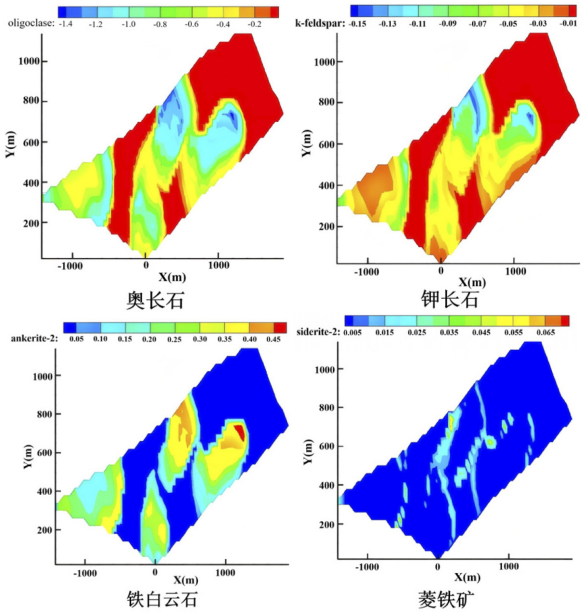


图 7 地层矿物体积含量百分比在封存 100a 后的变化

Fig.7 Changes in the percentage of mineral volume content in geological strata after 100 years of storage

3 参数敏感性和不确定性分析

3.1 数据准备

3.1.1 参数选取 为深入研究流体性质和储层岩性对 CO_2-DSMRT 模型的影响,结合以往研究成果,筛选出关键的流体和地质因素参数,进行全局敏感性分析,以量化各参数对 CO_2 封存量和开采油量的影响[29-31].

流体因素关键参数包括最小混相压力 MMP、气体中烃类所占摩尔分数 Xi 和界面张力σ;地质因素参数:孔隙度 φ、渗透率 K 和岩石压缩系数 C,各参

数不确定性取值范围见表 4.

表 4　全局敏感性分析的参数范围

Table 4　The parameter range for global sensitivity analysis

项目	孔隙度 φ(%)	渗透率 $K(10^{-13}$ $m^2)$	岩石压缩系数 C $(10^{-10}Pa^{-1})$	界面张力 σ(mN/m)	最小混相压力 MMP (MPa)	所占摩尔分数 Xi (%)
取值范围	17~30	0.1~4	0.1~10	22.8~34.2	19.8~29.1	0.18~0.26

3.1.2　替代模型　建立在使用蒙特卡洛法进行模拟时,由于涉及大量的统计试验,直接调用数值模拟模型会导致极高的计算负荷,增加计算成本和时间复杂度.

为解决这一问题,可采用替代模型以较低的计算成本实现与原数值模型相近的精度.鉴于多相流数值模拟具有较高的复杂性、较长的计算时长,以及对地质封存安全性要求的考量,模型设置了 CO_2 突破生产井浓度为 0.1 的停止条件,以确保模拟的安全性和有效性.为此,本文采用基于粒子群优化(POS)与最小二乘支持向量机(LSSVM)相结合的方法,构建了 CO_2-DSMRT 的替代模型.在不确定性分析过程中,该替代模型能够高效地被直接调用,显著降低了计算成本,同时保证模拟精度,为复杂系统的不确定性量化提供了有效的解决方案.

基于拉丁超立方抽样原理,利用 MATLAB 中 rand()函数在自变量的可行域内进行抽样,参数的抽样区间如表 4 所示.上述的过程在输入数据集中共抽取了 1000 组,然后将这些参数输入到模拟模型中得到相应的 CO_2 累积封存量和开采井产出油量作为输出数据集,组合形成输入-输出数据样本集.

选用确定性系数 R^2、均方误差根(RMSE)和平均绝对误差(MAE)检验替代模型的精度.利用支持最小二乘支持向量机粒子群方法建立的替代模型,根据测试组的输入输出,得到替代模型的评估指标,如表 5 所示.由此可知基于粒子群优化的最小二乘支持向量机替代模型对于 DSMRT 模型的 2 个输出结果 R^2 的值均大于 0.9,表明均有较好的近似精度.

以表 4 中 6 个模型参数作为自变量函数,用蒙特卡洛法对自变量进行抽样,每个参数得到 50 组样本值,根据 Sobol 参数敏感性分析方法产生 3000 个参数组合,将这些参数分别带入 CO_2 替代模型中,对整个模拟区域 CO_2 注入过程进行模拟.分别以开采井中累积产出油量和储层内 CO_2 累积封存量作为目标函数,用一阶敏感性指数(S_i)和全局敏感性指数(S_{Ti})来对各个参数对输出结果的敏感度高低进行量化,用二阶敏感性指数反应模拟参数俩俩之间相互作用,更好地揭示不确定参数对输出结果不确定的影响.

表 5　POS-LSSVM 替代模型精度分析

Table 5　Accuracy Analysis of POS-LSSVM Alternative Model

参数	评价指标		
	R^2	RMSE	MAE
输出参数 1	0.9116	2.5102	1.7082
输出参数 2	0.9232	2.5026	1.7513

注:R^2的值越接近1则代表替代模型越精准;MAE值越接近0,说明模型拟合效果越好.

3.2　Sobol 方法结果分析

图 8 中的敏感性分析结果通过基于 Sobol 方法的全局敏感性分析明确揭示了 6 个关键参数对目标函数的影响程度.针对以开采井累积产出油量($Y1$)为目标函数的敏感性分析(图 8(a)),研究表明渗透率(K)为最敏感的参数.这是由于渗透率不仅决定了多相流动过程中的相对渗透率曲线,还直接调控油、水、气三相的动态平衡和流动路径.高渗透率储层意味着流体流动阻力降低,从而使得 CO_2 驱动油从储层中流出的效率显著提高.作为次敏感参数,最小混相压力(MMP)在目标函数中同样起到了关键作用.当储层压力低于 MMP 时,CO_2 从原油中析出形成二相状态,显著改变了流动性;而当压力达到或超过 MMP 时,CO_2 与原油形成单一高流动性相态,这对提高采油效率具有重要意义.

相对而言,以储层内累积封存 CO_2 储量($Y2$)为目标函数的敏感性分析(图 8(b))结果表明孔隙度(φ)为最敏感参数.这是因为孔隙度直接决定了储层的 CO_2 存储空间.压力变化会引发储层孔隙体积的显著变化,从而调控 CO_2 的封存能力.此外,岩石压缩系数(C)作为次敏感参数,通过影响孔隙体积对压力的响应进一步控制储层的封存容量.这些结果清晰地表明,不同目标函数下参数的敏感性存在显著差异,这为参数优化与储层设计提供了科学依据.

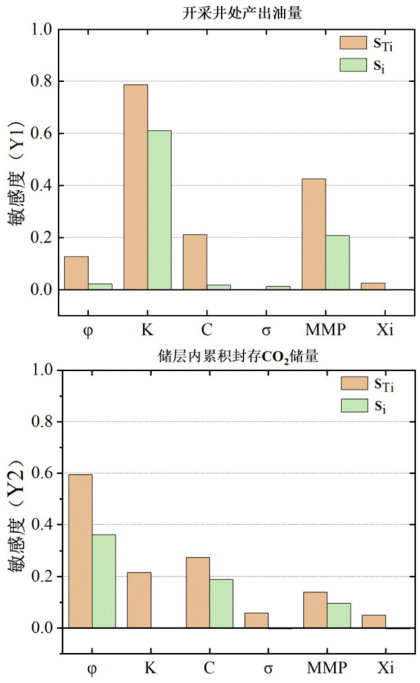


图 8 敏感度分析结果

Fig.8 Sensitivity analysis results

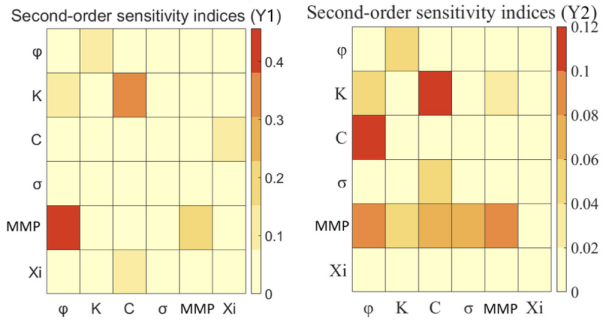


图 9 Sobol 二阶敏感度分析结果

Fig.9 Results of sobol second-order sensitivity analysis

图 9 中的二阶敏感性分析进一步揭示了关键参数间的交互作用对目标函数的影响程度和复杂性.图 9(a)以开采井中产出油量($Y1$)为目标函数时,孔隙度(φ)和最小混相压力(MMP)二阶敏感性系数($S_{\varphi,MMP}$)达到 0.417.该系数接近 MMP 的一阶敏感度系数,表明这两个参数的相互作用对模拟产出油量有决定性影响.这种显著的交互作用可能引入非线性效应,导致在单独考量各参数时无法预见的复杂结果,这表明在 CO_2 驱油过程中,需综合考虑参数间的协同效应,以避免模型结果因忽略非线性影响而产生偏差.图 9(b)以储层内累积封存 CO_2 储量为目标函数时,孔隙度和岩石压缩系数的组合 $S_{\varphi,C}$ 影响最强,可达 0.118.这表明二者的联合作用在决定储层可用存储空间方面起到了关键性调控作用.通过对二阶敏感性分析的深入理解,可以优化储层设计与压力管理策略,从而更有效地提升 CO_2 封存能力.这一结果进一步强调了在构建地质封存模型时,需全面考虑参数的交互作用,以提高模型预测的准确性和工程设计的科学性.

3.3 蒙特卡洛模拟分析

在 CO_2 地质封存与利用工程中,对储层 CO_2 累积封存量和累计开采油量的准确预测是实现科学开发决策的基础和前提.利用多相流数值模拟技术,将敏感性分析与蒙特卡洛抽样方法相结合,对储层内 CO_2 封存量和累计产油量的不确定性进行量化模拟,为油气田开发提供可靠的决策依据.具体来说,通过分析储层关键参数的不确定性对开发效果的影响,能够深入揭示地质条件和流体条件对储层性能的制约作用.

基于敏感性分析结果,选取孔隙度、岩石压缩系数和储层渗透率三个主要敏感参数进行 CO_2 累积封存量和生产井累计开采油量的不确定性分析.研究采用蒙特卡洛方法,并结合拉丁超立方和正交列阵采样技术,设计并模拟了 5000 个预测方案.这些方案通过对多参数不同组合的计算模拟,系统性地描绘了储层内 CO_2 封存量和累计产油量的概率分布特性,并量化了地质不确定性对储层性能的影响.

图 10 展示了 CO_2 封存量和累积产油量的不确定性分析结果,包括其概率密度分布和累积概率分布函数.结果表明,储层 CO_2 封存量和产油量呈现出显著的分布范围,并在此基础上提取了关键概率指标 P10、P50 和 P90,其中,P10 代表封存量或产油量达到或超过该值的概率为 90%;P50 是最可能值,表示概率分布的中位值;P90 则为达到或超过该值的概率为 10%.研究区 CO_2 累积封存量分布范围为:P10 为 58.98 万 t、P50 为 69.50 万 t、P90 为 85.33 万 t;累积产出油量分布范围为:P10 为 25.28 万 t、P50 为 36.21 万 t、P90 为 51.74 万 t.通过对这 3 个值的量化,能够为储层开发提供科学的预测区间.从图 10 中可以看出,储层 CO_2 封存量的分布范围更宽,且其概率密度曲线较为对称,表明封存量对关键地质参数的敏感性相对较低.相比之下,累计产油量的分布偏态更显著,P10 和 P90 之间的范围较窄,反映出产油量更受关键参数的不确定性的影响.

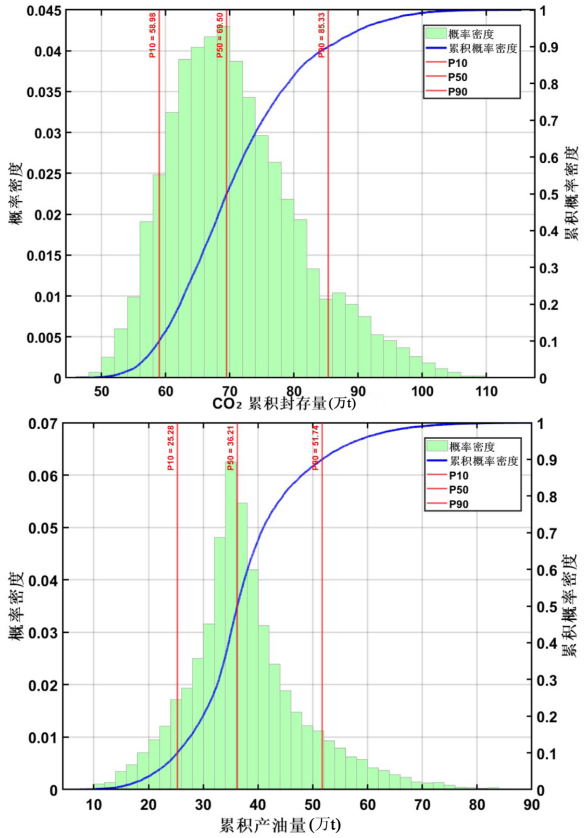


图 10　CO_2 累积封存量与累积产油量的不确定性评估

Fig.10　Uncertainty assessment of CO_2 cumulative storage capacity and Cumulative oil production

表 6　CO_2 封存量与累积产油量产投比

Table 6　The ratio of CO_2 sequestration volume to cumulative oil production investment

概率	CO_2 封存量(万 t)	累计产油量(万 t)	产投比
P10	58.98	25.28	2.33
P50	69.50	36.21	1.92
P90	85.33	51.74	1.62

通过进一步计算不同不确定性情境下的产投比(CO_2 累积封存量与产油量的比值)来评估 CO_2 封存与利用的经济可行性和环境效益.如表 6 所示,P10 产投比为 2.33,CO_2 封存量远高于原油开采量,适用于以封存优选为开发策略;P50 产投比为 1.92,接近 CO_2-EOR 工程封存-采油平衡,适用于封存与经济效益兼顾的混合策略;P90 投产比为 1.62,CO_2 封存量与原油开采量较为接近,CO_2 驱油效率更高,适用于增强采收率为核心的开发方案.

建议在以封存量为主导的需求下,应优化储层条件以提高 CO_2 吸附与溶解能力,而在以增产为导向的 EOR 开发模式中,则需提高 CO_2 与原油相互作用,最大化提升采收率.

4　结论

4.1　CO_2-DSMRM 模型结果表明,在超临界 CO_2 注入后,储层中的奥长石、钾长石和绿泥石溶解,促进 CO_2 的矿物封存.CO_2 注入 100 年后,气相 CO_2 占比 61.2%,溶油相 CO_2 占比 17.8%,溶水相 CO_2 占比 11.2%,矿物相 CO_2 占比 9.8%.

4.2　全局敏感性分析表明,CO_2-DSMRM 模型中的参数众多且各参数对模型的敏感性差异显著.以开采井中产出油量作为目标函数时,渗透率 K 为高敏感参数;而以储层内 CO_2 的累积封存量为目标函数时,储层孔隙度 φ 为高敏感参数.本次研究的 6 个控制因子中,主控因子单独作用对不同目标函数贡献率比主控因子与其他因子的交互作用贡献大.就二阶敏感性而言,产出油量为目标函数时 $S_{\varphi,MMP}$ 最大,可达 0.417;储层内累积封存 CO_2 储量为目标函数时 $S_{\varphi,C}$ 最大,可达 0.118.

4.3　研究采用蒙特卡洛方法对 CO_2-DSMRM 模型中的参数进行了不确定性分析,并根据随机模拟的结果预测了研究区 CO_2 封存储量和储层内累积开采油量,为 CO_2 地质封存与利用的工程管理提供了更加合理的依据.

参考文献:

[1]　王光付,李　阳,王　锐,等.二氧化碳地质封存与利用新进展 [J]. 石油与天然气地质, 2024,45(4):1168-1179.
Wang G F, Li Y, Wang R, et al. Recent advances in geological carbon dioxide storage and utilization [J]. Petroleum and Natural Gas Geology, 2024,45(4):1168-1179.

[2]　Bashir A, Ali M, Patil S, et al. Comprehensive review of CO_2 geological storage: Exploring principles,mechanisms,and prospects [J]. Earth-Science Reviews, 2024:104672.

[3]　Gao X, Yang S, Shen B, et al. Influence of reservoir spatial heterogeneity on a multicoupling process of CO_2 geological storage [J]. Energy & Fuels, 2023,37(19):14991-15005.

[4]　陈富瑜,周　勇,杨栋吉,等.基于分形理论的致密砂岩储层孔隙结构研究——以鄂尔多斯盆地庆城地区延长组长 7 段为例 [J]. 中国矿业大学学报, 2022,51(5):941-955.
Chen F Y, Zhou Y, Yang D J, et al. Research on pore structure of tight sandstone reservoirs based on fractal theory: A case study of Chang-7 member of yanchang formation in Qingcheng Area, Ordos Basin [J]. Journal of China University of Mining and Technology, 2022,51(5): 941-955.

[5]　Herzog H. Lessons learned from CCS demonstration and large pilot projects [J]. An MIT Energy Initiative Working Paper, 2016,432.

[6] Glasø Ø. Generalized minimum miscibility pressure correlation [J]. Society of Petroleum Engineers Journal, 1985,25(6):927−934.

[7] Rock L, O'Brien S, Tessarolo S, et al. The Quest CCS project: 1st year review post start of injection [J]. Energy Procedia, 2017,114:5320−5328.

[8] 杨 勇,张世明,曹小朋,等.胜利油田 CO_2 高压混相驱油与封存理论技术及矿场实践 [J]. 石油勘探与开发, 2024,51(5):1080−1091.
Yang Y, Zhang S M, Cao X P, et al.CO_2 high−pressure miscible flooding and storage technology and its application in Shengli Oilfield, East China [J]. Petroleum Exploration and Development, 2024,51(5):1080−1091.

[9] Agarwal, Ramesh K. Modeling, simulation, and optimization of geological sequestration of CO_2 [J]. Fluids Engineering, 141.10(2019):100801.

[10] 廖志伟,羊俊敏,钟翔宇,等.二氧化碳地质封存技术研究进展综述 [J]. 地下空间与工程学报, 2024,20(S1):497−507.
Liao Z W, Yang J M, Zhong X Y, et al. Review on research progress of carbon dioxide geological sequestration technology [J]. Journal of Underground Space and Engineering, 2024,20(S1):497−507.

[11] 李 阳,王 锐,赵清民,等.含油气盆地咸水层二氧化碳封存潜力评价方法 [J]. 石油勘探与开发, 2023(2):204−210.
Li Y, Wang R, Zhao Q M, et al. A CO_2 storage potential evaluation method for saline aquifers in a petroliferous basin [J]. Petroleum Exploration and Development, 2023,(2):204−210.

[12] Pan I, Babaei M, Korre A, et al. Artificial neural network based surrogate modelling for multi−objective optimisation of geological CO_2 storage operations [J]. Energy Procedia, 2014,63:3483−3491.

[13] Cui G, Zhu L, Zhou Q, et al. Geochemical reactions and their effect on CO_2 storage efficiency during the whole process of CO_2 EOR and subsequent storage [J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2021,108:103335.

[14] 刘 廷,马 鑫,刁玉杰,等.国内外 CO_2 地质封存潜力评价方法研究现状 [J]. 中国地质调查, 2021,8(4):101−108.
Liu T, Ma X, Diao Y J, et al. Research status of CO_2 geological storage potential evaluation methods at home and abroad [J]. China Geological Survey, 2021,8(4):101−108.

[15] Page B, Turan G, Zapantis A, et al. The global status of CCS 2020: vital to achieve net zero [J]. Global CSS Institute, 2020.

[16] Raza A, Rezaee R, Bing C H, et al. Carbon dioxide storage in subsurface geologic medium: A review on capillary trapping mechanism [J]. Egyptian Journal of Petroleum, 2016,25(3):367−373.

[17] Thanh H V, Sugai Y, Nguele R, et al. Robust optimization of CO_2 sequestration through a water alternating gas process under geological uncertainties in Cuu Long Basin, Vietnam [J]. Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2020,76:103208.

[18] Tang B, Sun L, Xie Y. Comprehensive performance evaluation and optimization of a liquid carbon dioxide energy storage system with heat source [J]. Applied Thermal Engineering, 2022,215:118957.

[19] 徐亚宁,卢文喜,王梓博,等.考虑参数和边界条件不确定性的地下水污染随机模拟 [J]. 中国环境科学, 2022,42(7):3244−3253.
Xu Y N, Lu W X, Wang Z B, et al. Stochastic simulation of groundwater pollution considering uncertainty in parameters and boundary conditions [J]. China Environmental Sciences, 2022,42(7): 3244−3253.

[20] 胡 婷.二氧化碳在增强石油开采系统中的迁移转化过程与模型研究 [D]. 吉林大学, 2022.
HU Ting. Study on the process model of CO_2 migration and phase transformation in enhanced oil recovery system [D]. Jilin University, 2022.

[21] 董广齐,卢文喜,范 越,等.不确定性条件下地下水污染监测井网优化设计——基于 XGBoost 替代模型 [J]. 中国环境科学, 2022,42(5):2144−2152.
Dong G Q, Lu W X, Fan Y, et al. Optimal design of groundwater pollution monitoring network under uncertainty [J]. China Environmental Science, 2022,42(5):2144−2152.

[22] 刘殿广,杨 蕴,章 勇,等.基于 cDC−GAN 替代模型的物理−化学非均质矿层 CO_2+O_2 地浸采铀过程模拟 [J]. 中国环境科学, 2024, 44(8):4547−4556.
Liu D G, Yang Y, Zhang Y, et al. Predicting CO_2+O_2 in−situ leaching process in physio−chemical heterogeneous sandstone−type uranium ore using a cDC−GAN−based proxy model [J]. China Environmental Science, 2024,44(8):4547−4556.

[23] Wu P, Wei S, Wang H, et al. Optimizing a monitoring scheme for CO_2 geological sequestration: An environmentally sustainable and cost−efficient approach [J]. Sustainable Production and Consumption, 2023,41:187−200.

[24] Yoshida N, Levine J S, Stauffer P H. Investigation of uncertainty in CO_2 reservoir models: A sensitivity analysis of relative permeability parameter values [J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016,49:161−178.

[25] 王长权.油藏中 CO_2 驱油与地质埋存机理 [D]. 成都:西南石油大学, 2013.
WANG Changquan.CO_2 flooding and geological storage mechanism in oil reservoir [D]. Chengdu: Southwest Petroleum University, 2013.

[26] Cui G, Zhu L, Zhou Q, et al. Geochemical reactions and their effect on CO_2 storage efficiency during the whole process of CO_2 EOR and subsequent storage [J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2021,108:103335.

[27] Agarwal R K. Modeling, simulation, and optimization of geological sequestration of CO_2 [J]. Journal of Fluids Engineering, 2019,141(10): 100801.

[28] Liu T, Ma X, Diao Y, et al. Research status of CO_2 geological storage potential evaluation methods at home and abroad [J]. Geol. Surv. China, 2021,8(4):101−108.

[29] Yoshida N, Levine J S, Stauffer P H. Investigation of uncertainty in CO_2 reservoir models: A sensitivity analysis of relative permeability parameter values [J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016,49:161−178.

[30] Afagwu C C. Sensitivity analysis of CO_2−migration paths in geological carbon−dioxide sequestration: Case study of the Gorgon GCS Project [J]. SSRN,2024.https://doi.org/10.2139/ssrn.4985775.

[31] Pan I, Indranil M, Korre A, et al. Artificial neural network based surrogate modelling for multi−objective optimisation of geological CO_2 storage operations [J]. Energy Procedia, 2014,63:3483−3491.

作者简介: 张雨佳(1999−),女,山东青岛人,硕士研究生,主要从事地下水数值模拟研究.221309080039@hhu.edu.cn.