

基于有限元数值模拟的地质封存 CO₂ 运移行为预测方法

武晓菲¹, 徐同晖¹, 何畅^{2,3}, 姬泽敏^{2,3}, 贾宁洪^{2,3}, 邢兰昌¹

(1. 中国石油大学(华东)控制科学与工程学院, 山东 青岛 266580;

2. 中国石油勘探开发研究院, 北京 100083;

3. 提高采收率全国重点实验室, 北京 100083)

摘要: 针对注入咸水层 CO₂ 运移特征预测的工程需求, 基于 COMSOL Multiphysics 平台建立了矿藏尺度的咸水层 CO₂ 地质封存有限元数值模型, 探讨了地层孔隙度、温度及 CO₂ 注入流量等因素对咸水层中 CO₂ 运移行为的影响规律, 开发了可移植使用的仿真软件, 最终形成了一种基于有限元数值模拟的地质封存 CO₂ 运移行为预测方法; 以中国神华集团咸水层二氧化碳捕集与地质封存项目中的石千峰地层为例, 开展了有限元数值建模、CO₂ 运移行为影响因素和影响规律研究; 研究结果表明: 1) 在 CO₂ 注入阶段的前期, CO₂ 沿着近似水平方向运移并在注入井周围形成高压区域; 随着 CO₂ 的持续注入, CO₂ 在咸水层中的分布区域逐渐形成上宽下窄的“舌状”, 咸水层压力有所降低; 在 CO₂ 停注后, 咸水层的压力逐渐降低至原地层压力水平, 出现咸水反向驱替 CO₂ 的现象; 2) 随着地层孔隙度的减小, CO₂ 注入咸水层后地层压力呈指数增长趋势, 孔隙度的改变影响 CO₂ 的运移形态; 在 CO₂ 停注后, 随着咸水层孔隙度的增大, 咸水的反向驱替现象愈加明显, 咸水层顶部的 CO₂ 堆积量增加; 3) 地层温度的升高增强了咸水的反向驱替作用, CO₂ 运移时“舌状”区域的边界倾角随之增大, 咸水层顶部的 CO₂ 侧向分布范围逐渐扩大; 4) CO₂ 的扩散范围随注入流量的增加而扩大; 注入流量相同的条件下, CO₂ 的扩散速率随时间的推移而降低; 在 CO₂ 停注后, 注入流量越低反向驱替现象越明显; 5) 所开发的仿真软件具有数值模型建立、仿真数据分析等功能模块, 测试结果表明了软件的可用性; 研究成果可为 CO₂ 地质封存点的选址、注入条件优化、泄漏监测提供理论和模型基础。

关键词: 二氧化碳; 地质封存; 咸水层; 数值模拟; 运移特征; 预测

A Prediction Method for CO₂ Migration Behavior in Geological Storage Based on Finite Element Numerical Simulation

WU Xiaofei¹, XU Tonghui¹, HE Chang^{2,3}, JI Zemin^{2,3}, JIA Ninghong^{2,3}, XING Lanchang¹

(1. College of Control Science and Engineering, China University of Petroleum (East China), Qingdao 266580, China;

2. PetroChina Research Institute of Petroleum Exploration and Development, Beijing 100083, China;

3. State Key Laboratory of Enhanced Oil Recovery, Beijing 100083, China)

Abstract: To meet the engineering requirements for predicting the migration characteristics of CO₂ injected into saline layers, a finite element numerical model for geological storage of CO₂ in saline layers is established based on the COMSOL Multiphysics platform. Explore the influences of factors such as formation porosity, temperature, and CO₂ injection flow rate on CO₂ migration behavior in saline layers, develop the portable simulation software, and achieve the finite element numerical simulation based method for predicting CO₂ migration behavior in geological storage. By taking the Shiqianfeng Formation of China Shenhua Group's Saline Layer Carbon Dioxide Capture and Geological Storage Project as an example, study the finite element numerical modeling, influencing factors and laws of CO₂ migration behavior. The results show that: (1) In the early stage of CO₂ injection, CO₂ migrates in the approximate horizontal direction and forms a high-pressure area around the injection well; With the continuous injection of CO₂, the distribution area of CO₂ in the saline layer gradually forms a tongue shape with a wide top and a narrow bottom, and the pressure in the saline layer decreases to some extent; After the injection of CO₂ is stopped, the pressure of the saline water layer gradually decreases to the original formation pressure level, leading to the phenomenon of reverse displacement of CO₂ by saline water; (2) With the decrease of the porosity of the formation, the formation pressure increases exponentially after CO₂ is injected into the saline water layer, and the change of porosity affects the migration pattern of CO₂; After the injection of CO₂ is stopped, as the porosity of the saline layer in-

收稿日期: 2024-05-21; 修回日期: 2024-06-07。

基金项目: 中国石油科技重大专项(2021ZZ01); 山东省自然科学基金项目(ZR2024ME090); 国家留学基金项目(202106455003)。

作者简介: 武晓菲(1999-), 女, 硕士生。

通讯作者: 邢兰昌(1983-), 男, 博士, 副教授。

引用格式: 武晓菲, 徐同晖, 何畅, 等. 基于有限元数值模拟的地质封存 CO₂ 运移行为预测方法[J]. 计算机测量与控制, 2024, 32(11):

132-139.

creases, the reverse displacement phenomenon of saline water becomes more obvious, and the accumulation of CO₂ at the top of the saline layer increases; (3) The increase in formation temperature enhances the reverse displacement effect of saline water, and the boundary angle of the tongue-shaped area increases during CO₂ migration; the lateral distribution range of CO₂ at the top of the saline layer expands gradually; (4) The diffusion range of CO₂ expands with the increase of the injection flow rate; Under the same injection flow rate, the diffusion rate of CO₂ decreases with time; After the injection of CO₂ is stopped, the lower the injection flow rate, the more obvious the reverse displacement phenomenon; (5) The simulation software developed has functional modules such as numerical model establishment and simulation data analysis, and the test results indicate the usability of the software. The research results can provide a theoretical and model basis for the selection of CO₂ geological storage sites, optimization of injection conditions, and leakage monitoring.

Keywords: carbon dioxide; geological storage; saline aquifers; numerical simulation; migration characteristics; prediction

0 引言

二氧化碳捕集、利用与封存 (CCUS, carbon capture, utilization and storage) 是指从能源利用、工业生产等排放源或大气中捕集和分离 CO₂, 将其输送至合适的场地进行利用或封存的过程^[1-2]。这一技术的目标是实现 CO₂ 的长期封存或转化利用, 是降低 CO₂ 排放的重要手段, 对于保障国家能源安全、实现“双碳”目标具有重要意义^[3-4]。CO₂ 的地质封存, 特别是利用咸水层作为其天然储库, 被认为是最有效且最具发展潜力的途径。随着 CCUS 技术的发展, 世界范围内 CO₂ 咸水层封存项目正处于规划及部分实施过程中^[5-6]。咸水层 CO₂ 封存技术充分利用了 CO₂ 的超临界性质, 使其能够在孔隙度较小的咸水层中大规模地存储 CO₂^[7]。CO₂ 在咸水层中的封存机制可分为物理封存 (地质构造封存、残余气封存) 和化学封存 (溶解封存、矿化封存)^[8]。CO₂ 注入前期主要以物理封存为主, 在千年乃至万年的时间尺度上则以化学封存为主。对注入地层 CO₂ 运移行为进行超前预测能够指导咸水层 CO₂ 分布及其地层压力变化的监测工作^[9-11], 可为保障 CO₂ 咸水层封存的安全性和开展风险评价工作提供重要的依据。

国内外学者在地层中 CO₂ 运移特征预测领域取得了系列研究进展。文献 [12] 利用 TOUGH2 模拟了 CO₂ 注入 Frio 砂岩储层后的运移行为, 得到的突破时间与现场试验结果一致。文献 [13] 利用流体体积函数多相流模型建立了孔隙尺度多孔介质均质模型, 研究了超临界 CO₂ 注入到含水多孔介质中之后的两相运移规律, 数值模拟结果与实验数据吻合良好。文献 [14] 采用机器学习方法预测了深水层中 CO₂ 的封存效率, 其中高斯过程回归模型表现出较高的准确性。文献 [15] 利用深度学习技术开发了一种具有一致性的多任务学习框架, 用于预测 CO₂ 在咸水层中的运移情况。文献 [16] 提出一种深度学习架构 (RU-FNO) 以预测复杂页岩-砂岩储层中 CO₂ 的运移行为, 研究了地层特性对 CO₂ 运移和压力的影响。文献 [17] 基于 COMSOL Multiphysics 建立了二维孔隙结构模型, 模拟了 CO₂ 在咸水层封存过程中的孔隙微观渗流行为, 但难以直接应用于实际矿藏尺度的地层条件。文献 [18] 以 FLAC3D-TOUGHREACT 为平台建立了三维地质模型, 研究了 CO₂ 注入罗家寨嘉陵江组 10 年间的 CO₂ 运移分布、储层物性变化等, 评估了 CO₂ 地质封存的动态过程, 但未研究储层

特性参数 (如孔隙度、温度、压力等) 对储层内流体运移特征的影响。在预测咸水层 CO₂ 的运移行为研究中, 机器学习方法的数据集通常来源于数值模拟器 (如 ECLIPSE、CMG)^[14-16], 可见建立数值模型并获得数值模拟数据是采用机器学习技术的前提。现有相关研究中采用的多相流动模拟软件主要有 TOUGH、COMSOL Multiphysics 等, 其中 COMSOL 能够以动画、图片等形式直观展示流体运移分布、压力分布等数据结果, 此外基于 COMSOL 可以方便地进行多尺度 (如微观孔隙尺度、宏观矿藏尺度等) 建模, 在完成建模的基础上能够形成独立运行的可执行文件, 形成可移植使用的仿真 APP, 满足不同层次的使用需求。

针对注入咸水层 CO₂ 运移特征预测的工程需求, 本文基于 COMSOL Multiphysics 平台建立矿藏尺度的咸水层 CO₂ 地质封存有限元数值模型, 探讨地层孔隙度、温度及 CO₂ 注入流量等因素对咸水层中 CO₂ 运移行为的影响规律, 进一步开发可移植使用的仿真软件, 最终形成一种基于有限元数值模拟的地质封存 CO₂ 运移行为预测方法。研究结果为 CO₂ 地质封存点的选址、注入条件优化、泄漏监测提供理论和模型基础。

1 咸水层 CO₂ 地质封存有限元数值模型建立

1.1 几何结构

在中国神华集团咸水层二氧化碳捕集与地质封存项目 (神华 CCS 项目) 中, 石千峰地层被认为是封存条件最优的层位, 其中咸水层的厚度约为 240 m^[19]。在咸水层的顶部分布有约 50 m 厚的泥岩盖层, 下伏地层的顶部分布有巨厚 (约为 116 m) 的泥岩, 实际的石千峰组地层坡度为 1~3°^[20], CO₂ 注入井距地层两侧 1 000 m, 石千峰组咸水层 CO₂ 地质封存概念模型如图 1 所示。

从图 1 所示的概念模型图出发, 基于 COMSOL Multiphysics 软件平台建立了有限元数值模型的几何结构 (如图 2 所示), 将概念模型中的地质体简化为三层, 其中盖层与下伏层的厚度均为 50 m、中间咸水层的厚度为 240 m, 地质体的尺寸为 2 000 m×2 000 m×340 m。CO₂ 注入井的尺寸相对于地层尺寸很小, 故在模型中采用一条线段代表 CO₂ 注入井。

1.2 材料属性

模型的材料包括地层多孔介质、咸水与 CO₂。石千峰

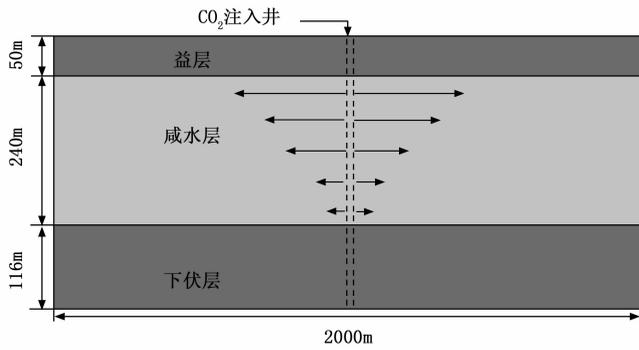


图 1 石千峰组咸水层 CO₂ 地质封存概念模型

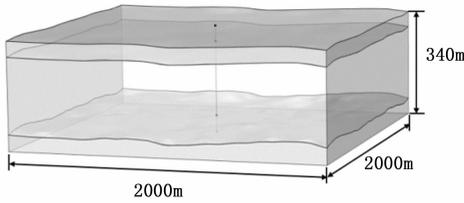


图 2 有限元数值模型的几何结构

组内的咸水层为砂岩，其孔隙度分布范围为 0.05~0.13、渗透率范围为 $0.1 \sim 6.58 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ ^[23]，该层的渗透率与孔隙度的关系见式 (1)^[19]。在模型中，将盖层与下伏层的孔隙度设置为 0.01，设定渗透率为 $8 \times 10^{-18} \text{ m}^2$ 。超临界 CO₂ 的特性参数（此处为密度和黏度）与压力、温度相关，其计算方法见式 (2) 和 (3)^[21-22]，在温度为 333.15 K、压力为 18 MPa 的条件下，咸水的密度与动力黏度分别为 983 kg/m^3 、 $4.71 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 。

$$k = 55748 \varphi^{4.405} \times 0.987 \times 10^{-15} \quad (1)$$

$$\rho_{\text{CO}_2} =$$

$$\begin{cases} 1870 - 36(T - 273.15) + 0.203(T - 273.15)^2, & P < 13 \text{ MPa} \\ 1471 - 19.07(T - 273.15) + 0.0756(T - 273.15)^2, & 13 \text{ MPa} \leq P \leq 16 \text{ MPa} \\ 1118 - 7.2(T - 273.15), & P > 16 \text{ MPa} \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mu_{\text{CO}_2} = & 10^{-3} \times (-1.146067 \times 10^{-1} + 6.978380 \times 10^{-7} \times \\ & (10P) + 3.976765 \times 10^{-10} \times (10P)^2 + 6.336120 \times \\ & 10^{-2} \times (\ln T) - 1.166119 \times 10^{-2} \times (\ln T)^2 + 7.142596 \times \\ & 10^{-4} \times (\ln T)^3) / (1 + 6.51933 \times 10^{-6} \times (10P) - \\ & 3.567559 \times 10^{-1} \times (\ln T) + 3.180473 \times 10^{-2} \times (\ln T)^2) \end{aligned} \quad (3)$$

式中， k 为渗透率 (m^2)； φ 为孔隙度，无量纲； ρ_{CO_2} 为 CO₂ 的密度 (kg/m^3)； T 为温度 (K)； P 为咸水层孔隙压力 (MPa)； μ_{CO_2} 为 CO₂ 的动力黏度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)。

1.3 控制方程与边界条件

考虑到咸水层的空间尺度较大且需要对 CO₂ 的长期 (如 50 年) 运移行为进行预测，故采用多孔介质多相流模

块来计算 CO₂ 在咸水层内的渗流场参数。该模块将多孔介质相传递与达西定律两类控制方程进行耦合数值求解，所建立的数值模型仅考虑 CO₂ 与咸水的驱替作用，即仅考虑地层多孔介质中的两相渗流过程。

式 (4) 为多孔介质相传递物理场的控制方程，用于模拟不相溶的相在多孔介质中的流动，求解的场变量为每相的平均体积分数。达西定律物理场的控制方程如式 (5) 所示，用于描述多孔介质孔隙中的渗流规律。通过式 (6)、(7) 实现了上述两个物理场的耦合，式 (6) 描述了地层多孔介质中水和 CO₂ 两相流的流动行为，式 (7) 描述了注入井的 CO₂ 流量。通过对以上方程进行求解，获得了模拟地层中流体的运移参数。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho_i s_i) + \nabla \cdot [-\rho_i k \frac{k_{r_i}}{\mu_i} (\nabla p_i - \rho_i g)] = 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi \rho) + \nabla \cdot (-\rho \frac{k}{\mu} \nabla p) = Q_m \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} \sum_i \rho_i s_i + \nabla \cdot \sum_i [-\rho_i k \frac{k_{r_i}}{\mu_i} (\nabla p_i - \rho_i g)] = 0 \quad (6)$$

$$\lim_{d_w \rightarrow 0} \int_{\partial s(d_w)} Q_{\text{tot}} ds = M_i \quad (7)$$

式中， ρ_i 为第 i 相的流体密度 (kg/m^3)； s_i 为第 i 相的体积分数； k_{r_i} 为相对渗透率； μ_i 为第 i 相的流体动力黏度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)； p_i 为第 i 相的压力 (Pa)； g 为重力加速度 (m/s^2)； Q_m 为质量源 ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$)； Q_{tot} 为总质量源 ($\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$)； M_i 为单位长度的质量流率 ($\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$)； d_w 为注入井的直径 (m)。

以 CO₂ 注入井为流体入口边界，以 CO₂ 的注入流量作为入口边界条件，咸水层的初始含水饱和度为 1.0，地层压力为 18 MPa。设置流动仿真时间为 50 年，在前 30 年中 CO₂ 以一定的流量注入咸水层，后 20 年中该井为关闭状态。采用高速稀疏矩阵线性方程组直接求解器 (PARDISO, parallel sparse direct solver) 对控制方程进行求解，该求解器求解速度较快且可以核外存储解。

1.4 网格依赖性验证

有限元网格的剖分直接影响结果的准确性以及模型求解所占用的时间与空间，通过分析模型的解与网格数量的关系来检验模型解对网格的依赖性，进而优选合适的网格数量。

在模型中设置温度为 333.15 K、CO₂ 的注入流量为 3.0 kg/s、咸水层孔隙度为 0.1，采用自由四面体网格对计算区域进行离散化。通过对不同网格数量下 (表 1 所示) 的模型进行数值求解，检验咸水层压力对网格的依赖性并获得合适的网格尺寸。图 3 是 CO₂ 持续注入 25 年后咸水层压力的变化曲线。分析可知：当网格数量在 770 475 以下时，咸水层压力随着网格单元数量的增加而持续降低，当网格单元数量高于 770 475，咸水层压力随网格的增加而趋于稳定，此时网格单元数量的变化对模型解的影响可忽略。综上，选定网格数量为 1 419 092，其最大单元尺寸为 25 m，最小单元尺寸为 8 m。

表 1 网格依赖性检验相关参数

网格编号	最大单元尺寸/m	最小单元尺寸/m	单元数量
1	110	8	360 95
2	50	8	167 042
3	30	8	770 475
4	25	8	1 419 092
5	20	8	2 823 298

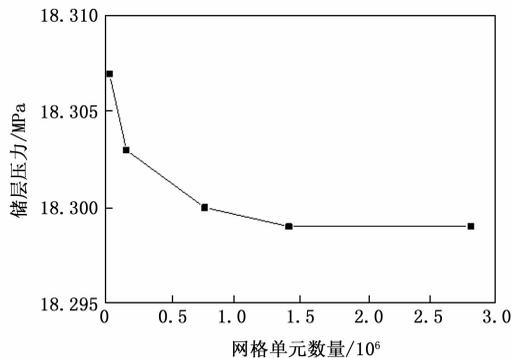


图 3 CO₂ 持续注入 25 年后咸水层压力随网格单元数量的变化曲线

2 咸水层 CO₂ 运移特征及影响因素分析

2.1 CO₂ 在咸水层的运移特征

在 CO₂ 注入后的运移过程主要包括两个方面: (1) 在注入井处产生的侧向压力引起的水平运移; (2) 咸水与 CO₂ 两相密度差引起的垂向运移。以 CO₂ 注入流量为 3.0 kg/s、地层温度为 333.15 K、孔隙度为 0.10 为例探讨 CO₂ 在咸水层内的运移特征。

图 4 是地层压力随时间变化的分布云图, 图 5 为地层内纵向中间截面(垂直于地面且过注入井的截面)压力随时间变化的分布云图。分析两图可知: ①将 CO₂ 注入咸水层后, 井周围形成了高压区域, 随着注入时间的增长, CO₂ 驱替了部分咸水, 导致咸水层的压力有所回落^[21]; ②在停止注入 CO₂ 后的 20 年内, 咸水层的压力逐渐降低至原地层压力水平。

图 6 为 CO₂ 饱和度随时间变化的分布云图, 图 7 为地层内纵向中间截面 CO₂ 随时间变化的分布云图。分析两图可知: ①注入的 CO₂ 先近似水平运移, 随着 CO₂ 的持续注入, CO₂ 饱和度由注入井向外(水平方向)逐渐降低, 且由咸水层底部向盖层底部逐渐增大, 并在咸水层顶部形成了“舌状”区域; ②在停止注入 CO₂ 以后, 由于浮力和毛细管力的作用, 咸水层底部的 CO₂ 侧向扩散基本停止, 出现了底部咸水反向驱替 CO₂、注入的 CO₂ 向顶部聚集的现象, 上部的“舌状”侧向分布范围有所扩大。上述结论与文献 [19] 的结论基本一致, 证明该模型在模拟 CO₂ 在咸水层运移行为的可靠性。

2.2 孔隙度的影响

石千峰组咸水层的平均孔隙度为 0.10, 设置温度为

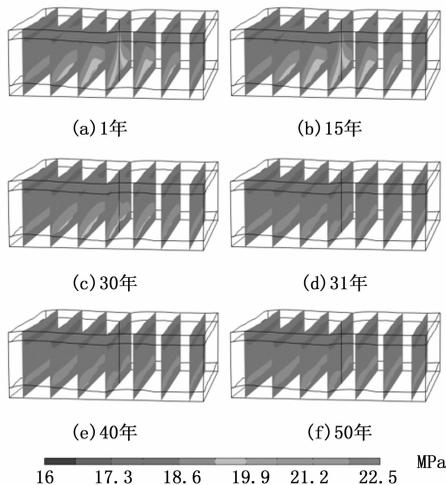


图 4 地层压力随时间变化的分布云图

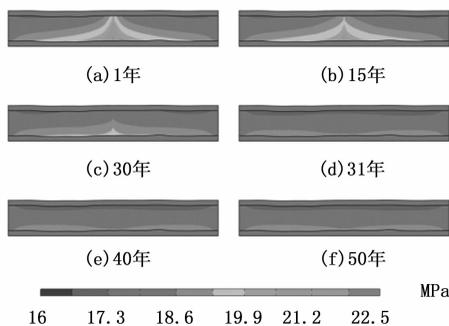


图 5 地层内纵向中间截面压力随时间变化的分布云图

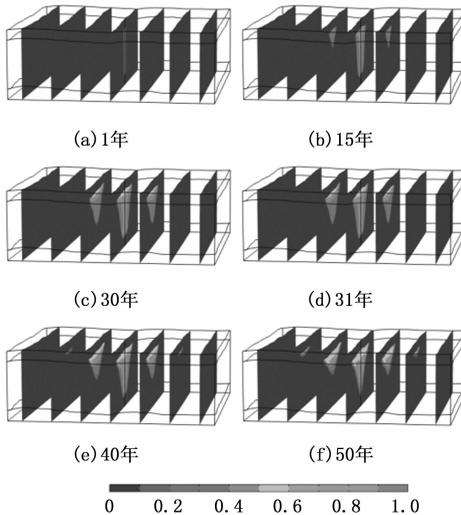


图 6 CO₂ 饱和度随时间变化的分布云图

333.15 K、CO₂ 注入流量为 3.0 kg/s, 分别以孔隙度为 0.05、0.10、0.15、0.20 为例来探讨孔隙度对 CO₂ 在咸水层中运移特征的影响。

图 8 展示了不同孔隙度条件下咸水层压力随时间的变化曲线。分析可知: 孔隙度从 0.05 增加至 0.10 时, 咸水层

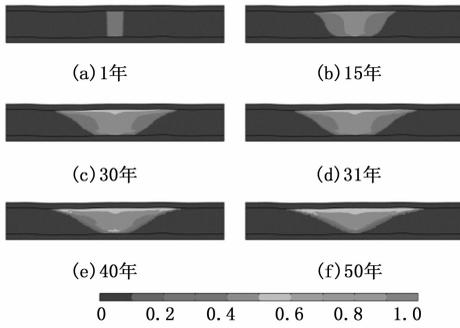


图 7 地层内纵向中间截面 CO₂ 随时间变化的分布云图

压力降低了 5.9 MPa；孔隙度从 0.10 增加至 0.20 时，咸水层压力仅降低 0.2 MPa。分析原因为孔隙度与咸水层的惯性阻力和黏性阻力呈负相关，即孔隙度与阻力呈负相关^[21]，故随咸水层孔隙度的减小，压力出现指数增长的现象。

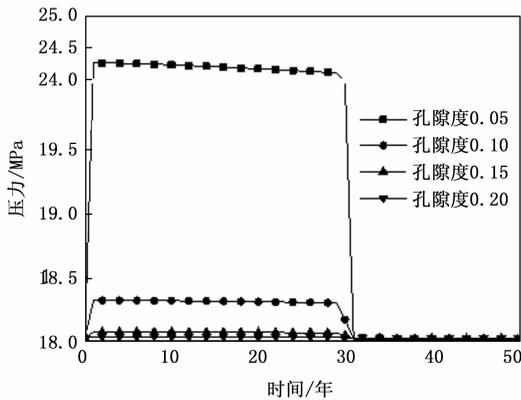


图 8 不同孔隙度条件下咸水层压力随时间的变化曲线

图 9~11 分别是不同孔隙度条件下第 1 年、第 15 年、第 50 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图。分析可知：①②在 CO₂ 注入第 1 年，CO₂ 的侧向运移范围随孔隙度的减小而扩大，表明 CO₂ 注入前期，孔隙度较小的咸水层中 CO₂ 扩散更快^[24-25]；②孔隙度为 0.05 时，CO₂ 近似水平移动，随着咸水层孔隙度的增加，CO₂ 呈舌状运移，且舌状倾斜角度随之增大，表明孔隙度的改变引起了 CO₂ 流动阻力的变化；③在 CO₂ 停注以后，随着咸水层孔隙度的增大，咸水层底部的咸水反向驱替 CO₂ 的现象愈加明显，CO₂ 在咸水层顶部堆积量增加。

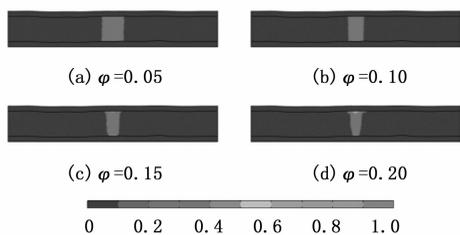


图 9 不同孔隙度条件下第 1 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

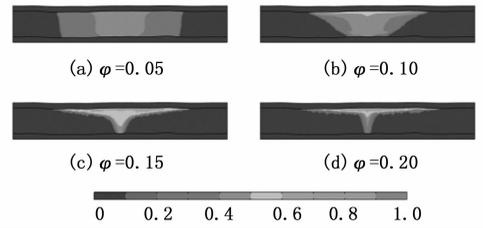


图 10 不同孔隙度条件下第 15 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

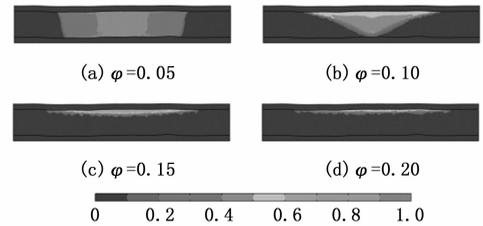


图 11 不同孔隙度条件下第 50 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

2.3 温度的影响

石千峰组的地层温度范围为 329.15~337.15 K，平均温度为 333.15 K。设置 CO₂ 注入流量为 3.0 kg/s、孔隙度为 0.10，分别以温度为 323.15 K、333.15 K、343.15 K、353.15 K 为例来探讨温度对 CO₂ 在咸水层中运移特征的影响。

图 12 和图 13 分别是不同温度条件下第 15 年、第 45 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图。分析可知：①随着温度的升高，咸水层底部咸水反向驱替 CO₂ 的现象愈加明显；② CO₂ 运移时“舌状”区域的倾角随温度的升高而增大，且顶部的 CO₂ 侧向分布范围也扩大。分析原因为：①温度的升高使得 CO₂ 的密度减小，咸水的密度变化较小，两相之间的密度差增大使得反向驱替现象更加显著；②温度的增加使得 CO₂ 黏度降低，其运移速度高，即驱替速率高，CO₂ 侧向分布范围有所扩大。

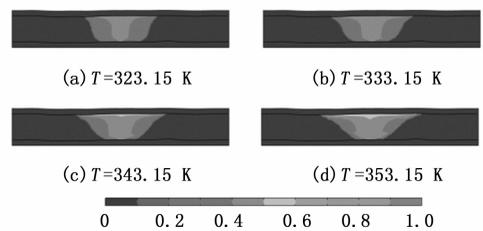


图 12 不同温度条件下第 15 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

2.4 CO₂ 注入流量的影响

按照神华鄂尔多斯盆地 CCS 项目中每年注入 10 万吨 CO₂ 的目标^[23]，CO₂ 注入流量约为 3.0 kg/s。设置温度为 333.15 K、孔隙度为 0.10，分别取注入流量为 2.0 kg/s、

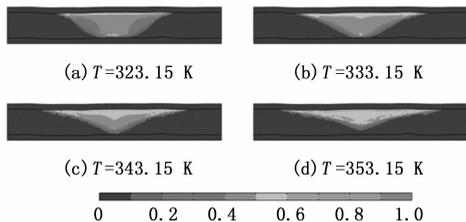


图 13 不同温度条件下第 45 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

2.5 kg/s、3.0 kg/s、3.5 kg/s 来探讨注入流量对 CO₂ 在咸水层中运移特征的影响。

图 14 和图 15 分别是 CO₂ 注入流量不同的条件下第 15 年和第 50 年地层中间截面 CO₂ 饱和度分布图。分析可知: ①随着 CO₂ 注入流量的增大,“舌状”突进区的侧向分布范围有所扩大; ②在停注以后的 20 年中, CO₂ 注入流量较低时反向驱替的现象较为明显。

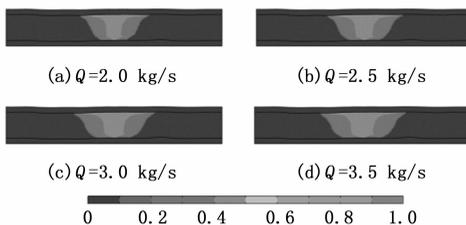


图 14 不同 CO₂ 注入流量条件下第 15 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

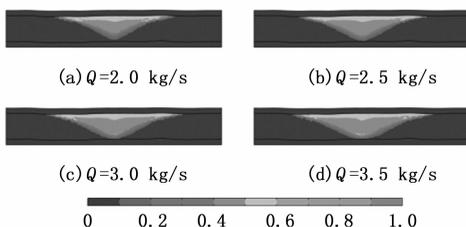


图 15 不同 CO₂ 注入流量条件下第 50 年地层内纵向中间截面 CO₂ 饱和度分布图

图 16 是 CO₂ 扩散距离随注入流量的变化趋势, 分析可知: ①CO₂ 扩散范围随注入流量的增加而扩大; ②在相同的注入流量条件下, CO₂ 持续注入的前 15 年内, 其扩散的距离约为 330 m, 而在持续注入的第 15~30 年间, CO₂ 扩散距离约为 170 m, 即约为前 15 年的一半, 这表明 CO₂ 的扩散速率随时间增加而降低; ③在相同的流量条件下, CO₂ 停注后的 10 年间, 其扩散距离约为 40 m, 而在停注后的 10~20 年间, CO₂ 扩散的距离约为 32 m, 表明在 CO₂ 停注后扩散速率随时间推移而降低。

3 咸水层 CO₂ 运移特征预测软件开发

3.1 软件功能需求分析

以上述有限元数值模型为基础, 基于 COMSOL 平台开发咸水层中 CO₂ 运移行为预测软件。该软件需具有数值模型建立、数据分析功能, 以直观友好的可视化界面实现人

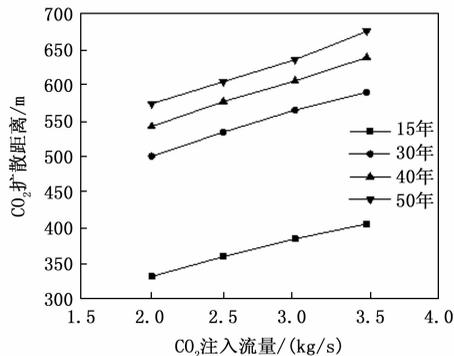


图 16 CO₂ 扩散距离随注入流量的变化趋势

机交互, 且可以打包成为可执行文件, 便于在 windows 平台独立运行。具体的功能需求分析如下。

1) 主界面: 该界面需包含保存和另存为功能栏, 并具有功能模块导航栏, 以便快速执行特定操作, 提高工作效率。

2) 数值模型建立: 该软件需考虑参数设置、网格剖分及计算等关键步骤, 因此需具备地层结构参数、网格单元大小及模拟时间等参数的输入功能, 需提供网格剖分、计算操作等功能。

3) 数据分析与显示: 需具备分析 CO₂ 饱和度及咸水层压力等参数变化的功能, 支持参数计算及数据输出。可动态展示指定时刻的流体运移特征参数, 能够计算 CO₂ 饱和度及咸水层压力随时间的变化并将结果进行输出显示。

4) 数据保存: 需对指定的参数数据进行保存, 如以图片(如 .png)格式保存指定时刻的流体运移特征参数的空间分布数据、以表格(如 .csv)格式保存 CO₂ 饱和度及咸水层压力随时间变化的数据。

3.2 软件设计与开发

依据上述功能需求对软件进行模块化分解, 设计了一个主界面和两个功能模块, 即数值模型建立模块和仿真数据分析模块。前者实现数值模型建立的功能, 后者实现数据分析、显示及保存的功能。图 17 为软件运行时的工作流程图。

主界面: 软件启动后, 用户首先进入主界面, 该界面设置了“文件”菜单, 其中包含“保存”与“另存为”功能, 同时设置了功能模块导航栏便于用户访问“数值模型建立模块”和“仿真数据分析模块”。

数值模型建立模块: 地层相关参数主要包括咸水层厚度、孔隙度、温度、孔隙压力、CO₂ 注入流量, 网格参数主要为网格单元的最大和最小尺寸, 模拟时间主要包括 CO₂ 持续注入时间与总仿真时间。完成参数输入后, 用户即可进行几何结构创建、网格剖分、数值模型求解及参数计算等操作, 同时设置进度条以显示每一步骤的操作进度。另外, 设计了图形可视化界面, 用于显示几何结构、网格剖分结果以及仿真过程中的流体运移过程。

仿真数据分析模块: 该模块提供了仿真数据分析的功

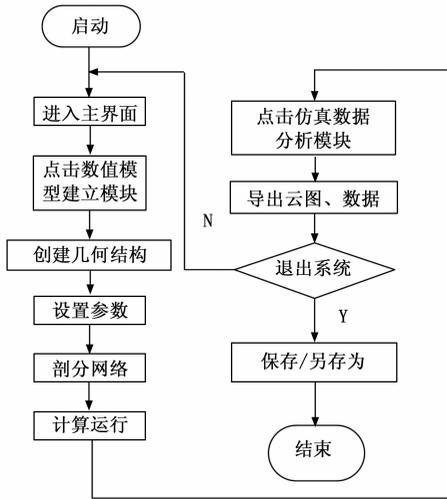


图 17 软件工作流程图

能,可展示指定时刻地层中 CO₂ 饱和度分布及压力分布云图,计算指定时刻咸水层中 CO₂ 平均饱和度及平均压力等参数,可将参数计算结果显示于表格中,同时可将上述图形结果和表格数据输出保存于硬盘指定位置。

3.3 软件测试

用户启用软件后则进入主界面(如图 18),首先点击“数值模型建立模块”按钮,进入模型建立界面(如图 19)。设置咸水层地层孔隙度为 0.10,孔隙压力为 18 MPa,地层温度 333.15 K,CO₂ 注入流量为 3.0 kg/s。设定网格单元的最大和最小尺寸分别为 200 m、8 m,CO₂ 持续注入时间为 30 年,总的仿真时间为 50 年。在完成参数输入的基础上,依次点击“几何”、“网格”、“计算”3 个按钮来展示几何结构、剖分网格以及求解数值模型。仿真过程中流体运移情况可在右侧图形界面显示,仿真结束后点击“播放”按钮可以观察设定的仿真时间范围内的流体运移过程。



图 18 软件主界面

在主界面点击“仿真数据分析模块”按钮,用户可进入数据分析界面(如图 20),主要包括分布云图和数据表格控件。“分布云图”控件可以展示地层中指定截面上的 CO₂

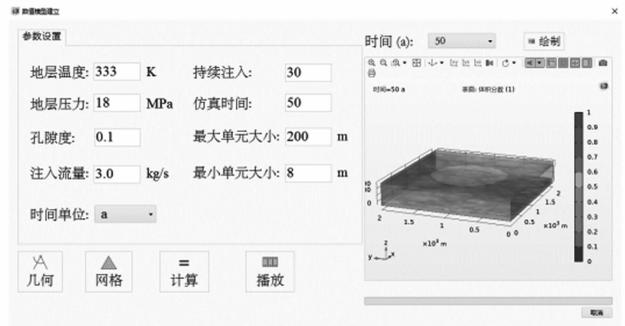


图 19 数值模型建立模块界面

饱和度分布和压力分布,点击“播放”按钮可进行动画演示,点击“绘制”按钮可展示指定时刻的图像,点击界面上的“相机”按钮可将图片保存于硬盘;“数据表格”控件可显示咸水层中 CO₂ 饱和度及压力随时间的变化,点击表格上方的“箭头”按钮可将数据导出到硬盘。图 20 显示了第 50 年时咸水层内纵向中间截面的 CO₂ 饱和度分布图与压力分布图。

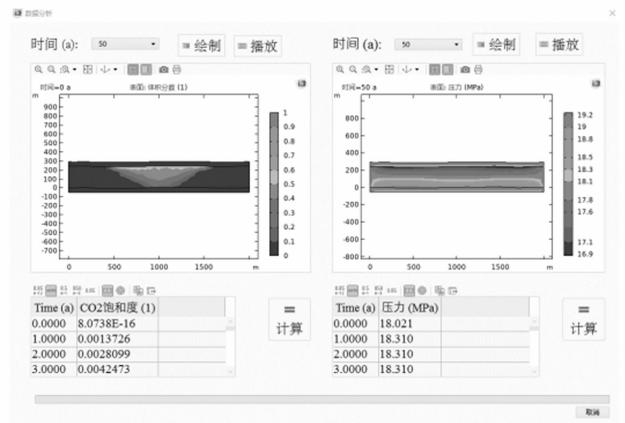


图 20 仿真数据分析模块界面

用户可进入上述“数值模型建立模块”调整模型参数并进行仿真计算,也可选择“文件”菜单中的“保存/另存为”选项,将当前的模型数据进行保存。测试结果表明上述功能模块均可正常运行,从而验证了所开发软件的可用性。

4 结束语

基于 COMSOL Multiphysics 平台建立了矿藏尺度的咸水层 CO₂ 地质封存有限元数值模型,探讨了地层孔隙度、温度及 CO₂ 注入流量等因素对咸水层中 CO₂ 运移行为的影响规律,开发了可移植使用的仿真软件,最终形成了一种基于有限元数值模拟的地质封存 CO₂ 运移行为预测方法。研究成果可为 CO₂ 地质封存点的选址、注入条件优化、泄漏监测提供理论和模型基础。

CO₂ 地质封存是涉及到热一流一固一化多场耦合问题的复杂过程。目前所建立的数值模型仅考虑了 CO₂ 和孔隙水的两相渗流过程,尚未考虑 CO₂ 在孔隙水中的溶解、

CO₂ 与地层骨架的化学反应、注入的 CO₂ 引起的热传递、压力变化引起的地层变形等动态过程。基于 COMSOL 平台可以方便地实现多场耦合数值模拟, 下一步将探索建立热—流—固—化多场耦合数值模型, 实现对注入地层 CO₂ 运移行为更为准确的预测。

参考文献:

- [1] 李 阳, 王 锐, 赵清民, 等. 中国碳捕集利用与封存技术应用现状及展望 [J]. 石油科学通报, 2023, 8 (4): 391-397.
- [2] 宋新民, 王 峰, 马德胜, 等. 中国石油二氧化碳捕集、驱油与埋存技术进展及展望 [J]. 石油勘探与开发, 2023, 50 (1): 206-218.
- [3] 张 贤, 李 阳, 马 乔, 等. 我国碳捕集利用与封存技术发展研究 [J]. 中国工程科学, 2021, 23 (6): 70-80.
- [4] 袁士义, 马德胜, 李军诗, 等. 二氧化碳捕集、驱油与埋存产业化进展及前景展望 [J]. 石油勘探与开发, 2022, 49 (4): 828-834.
- [5] 张琳琳, 赖枫鹏, 董银涛, 等. 盐水层地质参数对 CO₂ 封存效果的评价 [J]. 煤炭学报, 2024, 1-17.
- [6] 窦立荣, 孙龙德, 吕伟峰, 等. 全球二氧化碳捕集、利用与封存产业发展趋势及中国面临的挑战与对策 [J]. 石油勘探与开发, 2023, 50 (5): 1083-1096.
- [7] 刘 廷, 马 鑫, 刁玉杰, 等. 国内外 CO₂ 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.
- [8] 包 琦, 叶 航, 刘 琦, 等. 不同地质体中 CO₂ 封存研究进展 [J]. 低碳化学与化工, 2024, 49 (3): 87-96.
- [9] 吴陈芋潼, 徐同晖, 邢兰昌, 等. 井间 ERT 电极阵列优化及监测实验系统设计与开发 [J]. 计算机测量与控制, 2023, 31 (11): 38-45.
- [10] 徐同晖, 吴陈芋潼, 邢兰昌, 等. 井间 ERT 监测数据远程传输与数据处理平台设计与开发 [J]. 计算机测量与控制, 2023, 31 (11): 273-279+320.
- [11] JIA N H, WU C Y T, HE C, et al. Cross-Borehole ERT monitoring system for CO₂ geological storage: Laboratory development and validation [J]. Energies, 2024, 17 (3): 710.
- [12] HOVORKA S D, BENSON S M, DOUGHTY C, et al. Measuring permanence of CO₂ storage in saline formations: the Frio experiment [J]. Environmental Geosciences, 2006, 13 (2): 105-121.
- [13] 姜水生, 赵万东, 张 莹, 等. 孔隙尺度下超临界 CO₂ 驱水两相流数值模拟 [J]. 化工进展, 2017, 36 (11): 3955-3962.
- [14] VO THANH H, LEE K K. Application of machine learning to predict CO₂ trapping performance in deep saline aquifers [J]. Energy, 2022, 239: 122457.
- [15] ZHAO M J, WANG Y H, GERRITSMA M, et al. Efficient simulation of CO₂ migration dynamics in deep saline aquifers using a multi-task deep learning technique with consistency [J]. Advances in Water Resources, 2023, 178: 104494.
- [16] CHU A K, BENSON S M, WEN G. Deep-learning-based flow prediction for CO₂ storage in shale-sandstone formations [J]. Energies, 2023, 16 (1): 246.
- [17] CUI C Z, LI J, WU Z W. Simulation of the microscopic seepage process of CO₂ storage in saline aquifers at the pore scale [J]. Energy & Fuels, 2024, 38 (3): 2084-2099.
- [18] 罗 瑜, 母若愚, 张婷婷, 等. 罗家寨气田 CO₂ 地质封存数值模拟研究 [J]. 新能源进展, 2024, 12 (2): 201-208.
- [19] 万玉玉. 鄂尔多斯盆地石千峰组咸水层 CO₂ 地质储存中 CO₂ 的迁移转化特征 [D]. 吉林: 吉林大学, 2012.
- [20] 刁玉杰. 神华 CCS 示范工程场地储层表征与 CO₂ 运移规律研究 [D]. 北京: 中国矿业大学 (北京), 2018.
- [21] 舒娇娇. 深部咸水层封存二氧化碳迁移规律研究 [D]. 大连: 大连海事大学, 2021.
- [22] HEIDARYAN E, HATAMI T, RAHIMI M, et al. Viscosity of pure carbon dioxide at supercritical region: Measurement and correlation approach [J]. The Journal of Supercritical Fluids, 2011, 56 (2): 144-151.
- [23] SHI X Q, YU Y, LI Y L, et al. Simulation and analysis of long-term CO₂ trapping for the Shenhua CCS demonstration project in the Ordos Basin [J]. Geofluids, 2017 (3): 1-18.
- [24] 雷 梦, 屈亚光, 万翠蓉, 等. CO₂ 辅助重力驱油开发效果影响因素分析 [J]. 特种油气藏, 2022, 29 (6): 133-140.
- [25] 彭佳龙, 陈广浩, 周 蒂, 等. 珠江口盆地惠州 21-1 构造二氧化碳地质封存数值模拟 [J]. 海洋地质前沿, 2013, 29 (9): 59-70.
- [17] 俞艳波, 杨双龙, 杨立涛, 等. 基于 SCADA-PLC 模型的矿山平巷误差控制系统设计 [J]. 微型电脑应用, 2023, 39 (2): 100-103.
- [18] 山 丹. 铝型材数控加工中心的电气自适应 PID 控制研究 [J]. 自动化应用, 2024, 65 (5): 73-75.
- [19] KUMARASAMY V, RAMASAMY V K T, CHINNARAJ G. Systematic design of multi-objective enhanced genetic algorithm optimized fractional order PID controller for sensorless brushless DC motor drive [J]. Circuit World, 2022, 48 (4): 479-492.
- [20] 杜小刚. 高铁 1 000 t/40 m 梁“昆仑号”架桥机同步驱动控制研究 [J]. 计算机测量与控制, 2022, 30 (10): 140-147.

(上接第 131 页)

- [11] 聂世雄. 集成式液压平衡电磁发射装置的非线性建模及控制 [J]. 电工技术学报, 2023, 38 (4): 852-864.
- [12] 赵 慧, 朱发强, 蒋 林, 等. 双叶片液压关节主被动联合柔顺控制分析 [J]. 吉林大学学报 (工学版), 2024, 54 (1): 86-98.
- [13] 刘 勇, 路 超, 朱登魁, 等. 二维泵试验台测控系统的研制 [J]. 机床与液压, 2021, 49 (14): 119-123.
- [14] 吕怿萌. 基于 PID 控制的防抱死制动系统实现研究 [J]. 微型电脑应用, 2023, 39 (9): 163-166.
- [15] 王玉忠. 马达控制中心空调系统气流组织仿真模拟研究 [J]. 自动化应用, 2024, 65 (6): 133-135.
- [16] 李少年, 梁 涛, 包尚令, 等. 柱塞式能量回收马达配流副锥度角的分析与试验 [J]. 农业工程学报, 2022, 38 (20):