基于蒙特卡洛模拟及模糊评价的 co₂ 封存潜力估算及选址 优化研究

---以中国深层盐水层为例

摘要

全球气候危机加剧背景下,二氧化碳过量排放对可持续发展构成严峻挑战。作为实现"双碳"目标的关键路径,碳捕集、利用与封存(CCUS)技术的规模化应用亟需科学评估地质封存潜力。针对我国沉积盆地地质条件复杂、传统方法适应性不足的问题,本研究提出"复合建模-全局分析-分级决策"的创新框架。通过构建融合体积法与动态修正因子的储层容量估算模型,结合模糊综合评价体系,旨在精准量化我国主要盆地的 CO_2 封存潜力,并筛选优先开发区、制定资金投入与政策规划提供科学依据,助力"双碳"目标的高效推进。

首先,基于地质异质性构建多方法融合的容量估算体系:(1)采用经典体积法测算稳定盆地(如松辽盆地)基础容量;(2)引入压缩系数与安全因子动态修正高压含水层(如渤海湾盆地)的孔隙压缩效应;(3)结合容量系数法量化南海特殊区域的封存潜力。**为解决参数不确定性难题,通过蒙特卡洛模拟对数万组参数(孔隙度、密度等)进行概率采样**。对于能够找到大部分的盆地数据,采用体积法计算结果为: 34238.5*Mt* (3.42385×10¹⁰*t*),95%的置信区间为3.1789×10¹⁰*t*~3.6748×10¹⁰*t*。综合其他特殊盆地的封存量求和,得出我国深层盐水层封存总量达 43315.11*Mt* (4.331511×10¹⁰*t*)。通过查阅大量文献,发现很多学者对其的估算也存在较大的差异,但其数量级已经能够反映出深部盐水层的封存潜力巨大,在未来可以促进"双碳"计划的有利进行。

接着,针对第二小问,打破传统的定性分析,我们**创新思考如何直接量化密度对封存** 量不确定性的贡献比例。因此我们采用 Sobol 全局灵敏度方法量化关键参数影响,其一阶 灵敏度指数表明其独立变化可解释约 74.24% 的输出方差;总效应指数表明,密度几乎主导了所有输出变化。这一结果凸显了精确测量密度对封存量估算的重要性。

最后,结合上述估量估算出了每个盆地的二氧化碳的封存能力,再选取其他指标,**构建**模糊评价模型,对塔里木、鄂尔多斯等 9 大盆地的封存能力进行分级评价。根据模型求解结果,为我国政府筛选优先开发区、制定资金投入与政策规划提供科学依据。

关键词:分类估算; 蒙特卡洛模拟算法; Sobal 灵敏度分析方法; 模糊评价模型

一、问题重述

1.1 问题背景

近年来,全球气候变换,人类家园受到威胁,究其原因是因为二氧化碳等温室效应气体的大量排放。如何控制住这个局面,是全世界的当务之急。我国政府也同样重视,我们希望能够早日达到"碳中和"和"碳达峰"这两个核心目标,我们希望为人类的环境事业献上一份力!

CCUS(Carbon Capture, Utilization and Storage)技术是减少化石能源发电和工业生产过程中 CO_2 排放的关键技术,这同样是我国实现碳中和的兜底技术。其中 CO_2 地质封存是CCUS 技术的核心组成部分, CO_2 地址封存决定了 CCUS 技术发展潜力和发展方向。因此,建立适合我国地质特点的 CO_2 ,封存潜力评价方法,估量 CO_2 的埋藏容量是十分有必要的。

通过阅读题目以及查阅文献资料,我们发现:深部盐水层的对于 CO_2 的封存能力相当可观。深层盐水层主要分布在盆地之下,我国陆地以及大陆框架分布有大量的沉积盆地,可以用来 CO_2 封存的盐水层的体积巨大。我们思考这一定能够作为未来我国封存 CO_2 的主要方式之一。因此本研究将探寻最优的估量模型,帮助我们较为精准地估算 CO_2 的储存容量,接着建立评价模型为我国针对"减碳"规划相应措施以及资金投入决策提供了理论依据和指导。

1.2 问题提出

- (1)针对问题一:我们需要界定好模型覆盖的范围,以及针对不同的实际条件使用不同的估算方法,建立一个针对中国 CO_2 封存量总的估算模型,同时要把我国所有深层盐水层的 CO_2 总储量计算出来。
- (2)针对问题二:在问题一的基础上,我们已经估算出来了中国所有深部盐水层 CO_2 的总储存量。我们知道 CO_2 的密度是取决于环境的温度和压力的,我们需要分析 CO_2 的密度 敏感性,量化 CO_2 密度的变化对 CO_2 总储存量的影响。
- (3)针对问题三:在前两个问题中,在建立了我国 CO_2 封存量模型,以及给出我国深部 盐水层的 CO_2 总储量的估算下,通过这些数学模型和估算,探究其对实现"碳达峰"和"碳

中和"目标的现实意义。基于模型,我们需要分析求解结果,建立评价模型,给出公共的政策建议,这样才能对我国针对"减碳"规划相应措施及资金投入决策提供有力的支撑!

二、问题分析

21 针对问题一:

构建模型之前,我们首先需要明确中国主要的 CO_2 储存方式及其储存地点,如图 1。鉴于不同地质条件对 CO_2 储存量的影响,我们认识到针对不同情况和条件的计算方法也应有所区别(在附录里面有相关展示)。题目中提及,体积法是估算 CO_2 储存容量自然而直接的方法。因此,我们首先需要明确体积法的定义,并给出准确的数学计算公式。

然而,在一些相对较小的含水层中,内部压力可能会升高,导致孔隙和盐水进一步压缩,从而影响 CO_2 的储量。这种情况下,我们需要考虑两种思路:一是量化这种影响,在体积法公式的基础上加入修正因子进行修正;二是采用其他计算储存量的方法,如状态方程法等。我们的目标是确保估算的准确性,并保持方法的灵活性和适应性。

为了实现这一目标,我们需要收集对各个盆地的地质条件,并进行详细分析,包括但不限于孔隙度、渗透率、压力变化等关键参数。此外,我们还需考虑地质构造的稳定性和沉积环境,以确定哪些区域适用于体积法,哪些区域需要采用其他方法。通过这种综合分析,我们可以建立一个既准确又具有较大弹性的 CO_2 封存量估算模型,为中国的碳捕集与封存提供科学依据。考虑到数据的不确定性,我们思考使用蒙特卡洛模拟进行求解计算,估算出中国所有深部盐水层的 CO_2 总储量。

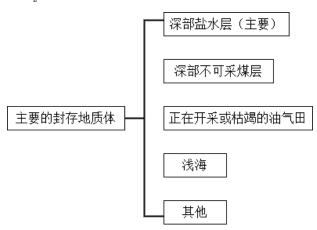


图 1 我国 CO_2 主要封存地质体

2.2 针对问题二:

我们首先思考变量对于模型的相关性,意识到 CO_2 密度是模型中的核心变量,其变化会直接影响储量的计算结果。为了准确评估这种影响,我们首先需要明确 CO_2 密度的计算方式。我们考虑了 CO_2 在超临界状态下的密度计算,这需要利用基于 Span-Wagner 状态方程的 Coolprop 数据库,这些工具能够依据储层的温度和压力条件提供精确的密度值。接下来,我们思考了如何对 CO_2 密度的敏感性进行量化分析。相较于传统的单变量扰动法。我们思考使用 Sobol 方法通过方差分解,直接量化密度对封存量不确定性的贡献比例(如一阶灵敏度指数),而非仅通过离散情景观察趋势。

2.3 针对问题三

基于上述构建的容量估算模型,本研究已定量评估了中国各深层盐水盆地的 CO₂封存潜力。为进一步探究该模型的关键作用,需从以下三方面展开分析:首先,需深刻理解"碳达峰"与"碳中和"目标的实现需求。"双碳"战略的核心在于通过碳封存等技术实现碳排放与吸收的动态平衡,而深层盐水层封存作为关键途径之一,其容量评估的科学性与决策支撑能力直接影响战略落地效果。

我们的模型可以求出每一个盆地的封存量,并且通过查找资料,选取了其他指标,建立一个模糊评价模型,我国的主要的盆地进行一个分级评价,评选出 CO_2 储存优先区域,为我国未来选择优先投入资金以及政策制定提供一个理论支撑。

三、模型假设

本研究中,涉及到很多地理学的专业知识,以及与实际情况的相关性很高,情况的多变性,为了模型的可求性,我们做出以下假设:

假设 1: 所选区域埋藏深度保证 CO₂处于超临界状态

•解释:超临界状态(压力>7.38 MPa,温度>31.1℃)下,CO₂具有高密度与低黏度特性,可有效降低泄漏风险并提升储存稳定性。本假设通过限定地质条件,简化了气液两相迁移行为的复杂性,确保模型聚焦于最优封存场景。需要保证我们储存的*CO₂*不会逃逸返回至大气层,保证储存的稳定性。

假设 2: 地下盐水层具备较大体积、高孔隙度与渗透性

•解释:限定储层体积(如盆地规模)与物性参数,可规避小规模裂隙或非均质储层的 计算难题,保证体积法与溶解度系数法的适用性,同时反映主流文献对典型储层的界定标准。

假设 3: CO₂溶解度随压力与温度线性变化

•解释:在 10~30 MPa 压力与 35~100℃温度范围内,设定压力每增加 1 MPa、溶解度上升 1 kg/m³,温度每降低 1℃、溶解度上升 0.4 kg/m³。此线性关系引自文献[5],旨在简化热力学耦合效应,避免复杂状态方程计算,提升求解效率。

假设 4: 封存量计算结果为理论最大值

•解释:实际封存量要考虑较多的因素,我们计算的指封存地质体 CO_2 中的理论最大封存量,是封存地质体能够提供给 CO_2 的物理空间极限量。该假设明确区分理论潜力与实际可操作性,为后续风险评估与工程修正提供基准参照。

假设 5: 仅考虑公式显式定义的影响因素

•解释:忽略次要因素(如矿物化学反应、微生物活动、局部构造应力场变化),聚焦于 孔隙度、渗透率、压力等主导参数。此简化可降低模型维度,突出核心变量作用机制,同时 通过安全系数(后章有详细提到)间接补偿未建模风险。

假设 6: 盐水层中原始 CO, 气体饱和度不予以考虑

•解释:由于大部分盐水层中不存在 CO_2 ,或只存在非常少量的 CO_2 ,且对于计算结果影响很小。

四、符号说明

符号	说明	单位
M_{CO_2}	有效封存容量	kg
a	可用于封存 CO_2 的盐水层平面分布范围占总盆地的比例,取经验值 0.01	
A	分区面积	m^2
h	盐水层的平均厚度	m
φ	孔隙度,对于没有资料的盆地取值 0.2	
ρ	CO ₂ 的平均密度,在使用处有说明	
$S_{\it eff}$	储层可以被占据的百分比,取欧盟报告的假设值	取值 3%
C_t	总压缩系数	
C_w	盐水压缩系数	
C_p	孔隙度压缩系数	
S	安全系数(通常取 0.2~0.5),不可超压	
ΔΡ	$\Delta P = \Delta P_{\text{注入后}} - \Delta P_{\text{注入前}}$,压力增量(估算)	
$\rho_{co_2}(P,T)$	CO_2 密度,根据 $Span$ – $Wagner$ 状态方程动态计算	
$C_{\it eff}$	盐水层有效容量系数	
$S_g^{ extit{struc}}$	构造圈闭控制的 CO_2 气体饱和度	
S_w^{struc}	构造圈闭控制的残余水饱和度	
α	构造圈闭控制区内体积比例系数	
b	残余饱和度圈闭控制区折算构造圈闭控制区的体积比 例系数	
<u> </u>	溶解圈闭所占体积比例系数	
<i>D</i>	盐水层厚度	m
m	矿物圈闭系数	
$X_w^{{\scriptscriptstyle CO_2}}$	CO_2 在盐水中的溶解度,质量分数	

五、估量模型的建立及灵敏性分析

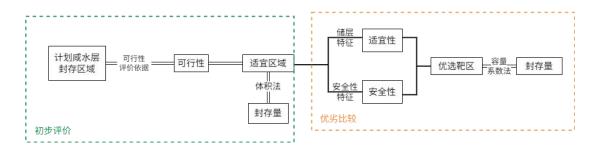


图 2 盐水层封存估算及选址地质评价流程

5.1 估量模型的构建与求解

我们依照盆地的性质的异质性,我们在此采用三种CO,封存量的计算方法。

- (1) 对应于大部分沉积盆地的深部盐水层 CO_2 封存量计算,我们采用体积法。
- (2) 小部分含水层,内部压力也可能会升高,我们采用修正体积法公式。
- (3) 对于非沉积盆地,比如近海领域,我们采用容量系数法进行计算。

5.1.1 体积法公式及修正公式定义

对于大部分的深部咸水层可以利用体积法对 CO_2 进行一个估算,更加直观地展示体积法的含义,我们以分块表格的形式进行展示:

 方面
 量化指标
 解释

 含水层面积
 平均厚度

 平均孔隙度
 平均孔隙度

 CO2在孔隙体积中所占的比例
 受多个因素的影响
 孔隙中的 CO2 比例 | η | < 1</td>

 CO2的密度
 温度
 状态方程进行估算

 (CO2-水密度, CO2-盐水密度)
 压力

表 1 体积法因素分解

通过理解题目,及查阅相关文献,给出我们给出体积法的详细定义。

(1) 体积法公式:

$$M_{CO_2} = a \times A \times h \times \varphi \times \rho_{CO_2}(P, T) \times S_{eff}$$
 (1)

注:公式中涉及到的参数在符号说明中已给出,其中 S_{eff} 是储层可以被占据的百分数,陆地上的 CO_2 应该封存在圈闭中,以保证 CO_2 和其他用于提供饮用水的储层不接触。本研究寻找资料,建议假设 3%的盐水层圈闭,故本参数取 3%。

上述公式适合大多数沉积盆地,但对于一些数据源更多的沉积盆地,考虑到内部压力也可能会升高。其中,对于 CO_2 密度我们采用状态方程进行求解。我们对上述体积法公式进行修正。

(2) 修正后的体积法公式:

$$M_{CO_{2}} = A \times a \times h \times \rho_{CO_{2}}(P,T) \times S_{eff} \times (1 - C_{t}\Delta P) \times S$$
 (2)

其中:

 $C_t = C_w + C_p$: 总压缩系数(盐水+孔隙),查阅文献取典型值 $5 \times 10^{-4} MPa^{-1}$

S:安全系数 (通常取 0.2~0.5), 不可超压

 $\Delta P = P_{\text{対} \lambda E} - P_{\text{Nith}}$: 压力增量,这里我们采用估算

 $ho_{{\it CO}_2}(P,T)$: 基于 ${\it Span-Wagner}$ 状态方程的 ${\it Coolprop}$ 库进行计算

为了更加准确的进行估算,对于非沉积盆地,如近海区域,我们采用一种更为合适的方法对其进行求解。

(3) 容量系数法公式[1]:

$$M_{CO_2} = A \times D \times \varphi \times \rho_{CO_2} \times (C_{eff} + m) \times 10^{-3}$$
(3)

$$C_{eff} = (a+b) \times \left(S_g^{struc} + \frac{S_g^{struc} X_w^{CO_2} \rho_w}{\rho_{CO_2}} \right) + \frac{c X_w^{CO_2} \rho_w}{\rho_{CO_2}}$$
(4)

注: 公式涉及到的参数在符号说明已经给出,在此不再进行阐述。

5.1.2 数据收集及整理

我国的深部盐水层主要分布在盆地,沉积盆地地下深部存在体积巨大的咸水含水层,咸水不宜开发利用,可用来储存大量的 CO_2 。为了选出一些将来可优先利用的储存分区并进行详细研究,我们通过官方网站以及查阅大量文献,将中国的29个主要沉积盆地,作为我们本次估算中国所有深层盐水层的 CO_2 估算所选择的主要范围。由于篇幅限制,在此进行

一个部分展示,其他数据放入附录展示。

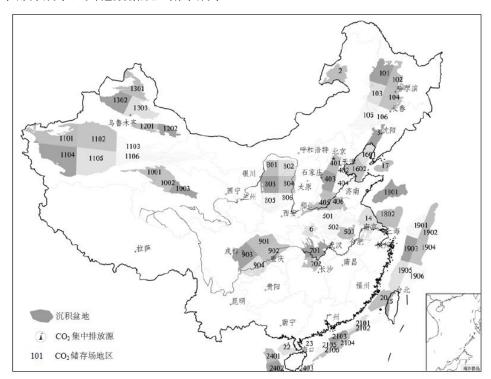


图 3 中国主要沉积盆地及其分区图[12]

盆地		CO、储存容	CO	排放量/(10 ⁶ t)	场地 盆地	盆地		CO ₂ 储存容 量/(10 ⁸ t)	CO ₂ 排放量/(10 ⁶ t)		10 ⁶ t)	场地
编号	盆地名称	CO ₂ 储存容量/(10 ⁸ t)	E ₀	E ₅₀	E_{100}	级别	编号			E ₀	E ₅₀	E ₁₀₀	级别
101		8.78	12.03	27.66	27.66	п	1103		41.35		0.92	3.63	IV
102		6.43		29.29	31.26	п	1104	W 07 1 () 14	48.29	0.11	0.11	1.09	IV
103	Ad 177 Ab Id	6.52	40.76	59.51	59.51	I	1105	塔里木盆地	56.38				IV
104	松辽盆地	7.91	19.88	69.22	70.39	п	1106		30.25		0.19	3.09	IV
105		9.80	6.40	22.76	41.39	п	1201	吐鲁番盆地	7.02			29.66	Ш
106		4.99	15.79	40.15	65.48	IV	1202	哈密盆地	6.40				IV
2	海拉尔盆地	1.50				IV	1301		14.14	7.80	7.80	10.41	IV
3	渤海湾盆地(辽宁)	6.95	14.08	78.86	101.44	II	1302	准葛尔盆地	15.80		3.87	33.53	Ш
401		10.00	30.27	85.85	170.31	I	1303		16.94	30.92	30.92	30.92	I
402		15.11	109.52	153.68	246.92	I	14	苏北盆地	7.30	79.14	284.47	386.44	I
403	NAME AND ADDRESS OF THE APPLICATION	14.17	26.51	106.33	148.93	I	15	台湾西部盆地	3.54				IV
404	渤海湾盆地(华北)	13.32	53.40	153.05	272.03	I	1601	NEW NEW AND ALL AND LESS	35.25		42.68	68.29	II
405		15.69	100.49	161.51	234.35	I	1602	渤海湾盆地(海域)	48.83		114.90	185.80	п
406		12.15	74.23	197.27	311.37	I	17	北黄海盆地	3.46		11.62	16.41	IV
501		11.00	25.34	88.61	248.07	I	1801	南黄海盆地北部	31.65			15.95	IV
502	河淮盆地	10.78	9.06	69.19	195.56	п	1802	南黄海盆地南部	4.98		7.30	90.95	IV
503		6.37	32.87	119.37	252.27	I	1901		24.22				IV
6	南襄盆地	3.54	6.51	6.62	49.64	IV	1902		27.98				IV
701	江汉盆地	8.00	35.47	84.60	103.99	I	1903		22.45				IV
702	洞庭盆地	4.39	1.59	24.29	75.90	IV	1904	东海盆地	24.76				IV
801		10.00		30.77	56.12	п	1905		31.48			9.21	IV
802		12.26	1.26	26.79	26.79	п	1906		43.73				IV
803	my district district	14.14		29.40	45.09	п	1907		10.42				IV
804	鄂尔多斯盆地	12.91	1.69	6.06	13.69	IV	20	台湾西侧盆地	59.45		0.23	24.07	Ш
805		14.44	9.61	20.32	50.62	п	2101		38.70			10.07	IV
806		9.42	2.61	13.19	68.80	Ш	2102		27.54				IV
901		15.72	20.32	35.98	104.77	I	2103	PEAC 111 45-14	46.26			7.79	IV
902	III 111 4 h 14	16.06	4.53	65.46	78.87	п	2104	珠江口盆地	44.98				IV
903	四川盆地	16.57	40.76	60.44	110.16	I	2105		49.10			0.65	IV
904		15.72	57.77	84.31	108.42	I	2106		30.54			0.28	IV
1001		36.64				IV	22	北部湾盆地	29.81		1.03	9.02	IV
1002	柴达木盆地	41.63				IV	23	滷州岛盆地	3.85		3.81	20.71	IV
1003		31.09		1.26	1.26	IV	2401	obbs 2011, Nov. Alb. Ed.	9.65			1.05	IV
1101	49 III -4-40-14	42.57	0.47	0.47	1.56	IV	2402	莺歌海盆地	12.41			1.23	IV
1102	塔里木盆地	59.86	1.20	1.67	2.06	IV	2403	琼东盆地	3.70			0.18	IV

注:(1) E_0 为分区内 CO_2 大规模集中排放源的年排放总量:(2) E_0 为分区内及周边 20 km 范围内的 CO_2 大大规模集中排放源的年排放总量:(3) E_{100} 为分区内及周边 100 km 范围内的 CO_2 大规模集中排放源的年排放总量:

图 4 中国主要沉积盆地含水层储存场地评价[12]

表 2 部分陆上盆地

盆地名称	盆地面积	平均储层厚度	平均孔隙度	压力范围	温度范围
	(万 平方千米)	(米)		(MPa)	(°C)
塔里木盆地	53	300	0.1~0.234	30~60	80~160
鄂尔多斯盆地	37	300	0.12~0.2	20~40	60~120
松辽盆地	26	200	0.15~0.2	15~35	45~105
准格尔盆地	38	300	0.15~0.169	20~45	60~135
河淮盆地	27	300	0.2	15~30	45~90
苏北盆地	18	300	0.2	15~30	50~100
四川盆地	26	300	0.05	30~60	75~150
柴达木盆地	25.7768	50	50	25~50	70~140

表 3部分海上盆地

盆地名称	盆地面积	平均储层厚度	平均孔隙度	压力范围	温度范围
血地石物	(万 平方千米)	(米)	1 均16家/文	(MPa)	(°C)
东海盆地	46	300	0.15	30–60	80–160
南黄海盆地	8.5	300	0.15	20–40	60–120
渤海湾盆地	6.7	300	0.2	25–50	70–175
珠江口盆地	15	200	0.15	25–50	70–150
莺歌海盆地	6	300	0.15	40–80	100–200
北黄海盆地	7.13	300	0.2	15–30	40–90
北部湾盆地	3.98	300	0.15	20–40	60–120

(注:上述展示的是我们选取 29 个盆地中的部分数据展示,由于篇幅限制我们在此不展开) ①渤海湾盆地有一部分属于陆上盆地,一部分属于海上盆地,对其分开两部分使用不同的方 法进行计算。

②有五个盆地的数据有较大的缺失,为了保证估算的准确性,我们找到相关论文的数据,因此采用论文原数据与上面的数据进行统计计算。

下面我们将展示求解过程。

5.1.3 模型阐述

针对模型中参数来源冗杂、数值不确定性问题(如孔隙度范围值、压力梯度波动等), 本文基于**大数定律与蒙特卡洛模拟算法**,构建概率化求解框架,具体步骤如下:

(1) 参数分布建模:对与上述涉及到的不确定的参数,我们根据文献数据以及工程经验设定其统计分布:

参数	分布设定
CO ₂ 密度	正态分布
温度变化	正态分布
压强变化	正态分布
孔隙度	均匀分布

- (2) 蒙特卡洛随机抽样:采用拉丁超立方抽样(LHS)技术,对每个参数独立生成 $N=10^6$ 组随机样本,确保低偏差覆盖参数空间。
- (3) 模型迭代求解与收敛验证,将每组参数带入存量计算公式:

$$M_{CO_2} = A \times a \times h \times \rho_{CO_2}(P, T) \times S_{eff} \times (1 - C_t \Delta P) \times S$$
 (5)

通过监测结果均值的标准差随迭代次数的变化、验证大数定律下的收敛性。

- (4) 对输出封存量数据集进行统计分析,计算均值 μ_{M} 与 95%置信区间 $\left[\mu_{M} 1.96\sigma_{M}, \ \mu_{M} + 1.96\sigma_{M} \right]$ 作为最终潜力评估标准。
- (5) 蒙特卡洛模拟结果

蒙特卡洛模拟(10 万次)纟	吉果 注: $1Mt = 1 \times 10^6 t$
CO_2 总封存量均值	34238.5 <i>Mt</i>
标准差	1280.45 <i>Mt</i>
95%置信区间	31789.43 <i>Mt</i> ~36748.43 <i>Mt</i>

这个是对于能够找到数据范围的盆地进行计算求解的结果,并不是总结果,我们还需要加上使用容量系数法计算的结果。

对于缺少相关数据的盆地,为了保证估算的准确性,我们找到相关论文的数据,因此采 用论文原数据与上面的数据进行统计计算。故这些盆地的封存量值我们将加入到上述统计之 中。

蒙特卡洛模拟(10万次)结	善果 注: 1 <i>Mt</i> =1×10 ⁶ <i>t</i>
CO_2 总封存量均值	43315.11 <i>Mt</i>

由于查找文献可能不够全面,对某些因素的考虑不够全面等等,最后输出的结果也只是 我们的估算值,但是其数量级已经能够反映出深部盐水层的封存潜力巨大,在未来可以促进 双碳计划的有利进行。

5.2 基于 Sobol 的二氧化碳密度变化的灵敏性分析

相较于传统的密度情景模拟(如±5%、±10%离散变化),我们创新思考如何直接量化密度对封存量不确定性的贡献比例,而不是仅仅通过离散情形观察趋势,打破定性推测的局限性。Sobol 方法是一种基于方差分解的全局灵敏度分析技术,旨在量化输入参数对模型输出不确定性的贡献。其核心是通过数学分解,将模型输出的总方差分配至单个参数及其相互作用,从而明确各参数的重要性。

5.2.1 相关性检验

我们首先思考变量对于模型的相关性,如下图参数相关性检验,意识到密度是模型中的核心变量,其变化会直接影响储量的计算结果。

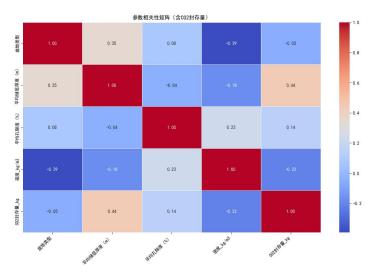


图 5参数相关性矩阵图

我们发现二氧化碳的密度于封存量之间的相关性相较于其他变量是极强的,因此我们是

有必要使用 Sobol 方法直接量化密度对封存量不确定性的贡献比例。下面就是 Solbol 灵敏性分析方法的具体过程。

5.2.2 Sobol 灵敏度分析方法

- (1)我们采用基于方差 Sobol 方法量化 CO_2 密度对封存量 M_{CO_2} 的灵敏度。输入参数仅密度,范围设定为 $630\sim770$ kg/m3。孔隙度按正态分布生成,视为固定噪声。其余参数均为固定值。
- (2) 样本生成:使用 Saltelli 序列生成样本,确保低偏差覆盖参数空间,样本基础量设为 5000,总样本数按公式计算得到的结果为 20000。
- (3)灵敏度计算:此算法为基于方差分解的 Sobol 指数计算。输出一阶指数(S_i)和总效应指数(S_T)。
 - 一阶灵敏度指数 (S_i) : 输入参数的独立贡献

$$S_{i} = \frac{VarX_{i}(E[YX_{i}])}{Var(Y)}$$
(6)

总效应指数 (S_t): 包含参数与其他变量的交互作用

$$S_{T_i} = 1 - \frac{Var_{X \sim i} \left(E \left[Y | X_{\sim i} \right] \right)}{Var(Y)} \tag{7}$$

5.2.3 灵敏性分析结果展示

Sobol i	十算结果
一阶灵敏度指数(S_1)	0.7424
。 总效应指数(S_T)	0.9978

通过 Sobol 灵敏度分析发现,密度是封存量计算结果的主导因素,其一阶灵敏度指数 表明其独立变化可解释约 74.24%的输出方差;总效应指数表明,密度几乎主导了所有输出 变化,这一结果凸显了精确测量密度对封存量估算的重要性。

六、基于模糊评价的 CO₂ 封存选址模型的建立

针对上述求解,我们首先建立模糊评价模型,将复杂的地质与环境参数转化为可量化的优先级排序,将各个盆地进行评价分级,既满足"双碳"目标对精准封存规划的需求,又为多维度的决策提供了理论支撑。

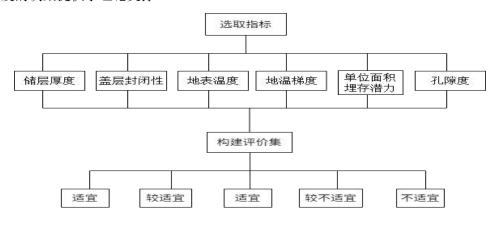


图 6 模糊评价框架图

6.1 模型框架构建

基于文献与数据,考虑到数据的全面性,我们选取储层厚度、盖层封闭性、地表温度、地温梯度、单位面积埋存潜力、孔隙度共6个关键指标,并通过归一化处理确定权重集。评价指标:

 $U = \{$ 储层厚度,盖层封闭性,地表温度,地温梯度,单位面积埋存潜力,孔隙度 $\}$ 评价集: $V = \{$ 适宜,较适宜,一般,较不适宜,不适宜 $\}$

指标	文献权重	归一化权重
储层厚度	0.2774	0.1355
盖层封闭性	0.3514	0.1716
地表温度	0.143	0.0698
地温梯度	0.4286	0.2093
单位面积埋存潜力	0.6667	0.3256
孔隙度	0.1804	0.0881

表 4 模糊评价指标权重

得到权重向量A:

A = (0.1355, 0.1716, 0.0698, 0.2093, 0.3256, 0.0881)

指标	权重	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0. 1355	>500	300-500	100-300	50-100	<50
孔隙度	0.0881	>20	15-20	10-15	5-10	<5
单位面积埋存 潜力	0. 3256	>500	100-500	50-100	5-50	<5
地表温度	0.0698	<2	2-3	3-10	10-25	>25
地温梯度	0. 2093	<1.5	1. 5-1. 8	1.8-2.0	2. 0-2. 5	>2.5
盖层封闭性	0. 1716	好	较好	中等-较好	中等	较差

表 5 评价指标等级表

6.2 隶属度计算

6.2.1 隶属函数设计:

- (1) 对于连续型指标(如储层厚度、孔隙度): 使用梯形或三角形隶属函数,根据区间划分隶属度(如储层厚度>500m为"适宜",隶属度为1)。
- (2) 对于离散型指标(如盖层封闭性):直接通过专家经验或文献定义等级隶属度。

6.2.2 模糊矩阵生成:

针对每个盆地,根据实际数据计算各指标在不同评价等级的隶属度,形成模糊关系矩阵 *R*。在此我们选取塔里木盆地、鄂尔多斯盆地、渤海湾盆地、松辽盆地、准噶尔盆地、沁水盆地、三江盆地、四川盆地、南襄盆地。这九个有详细数据的盆地进行一个模糊评价打分,最终给出地质埋存适宜性评价。由于篇幅限制,在正文部分演示塔里木盆地的评价过程,其余八个盆地在附录进行展示。

表 6 塔里木盆地的评价矩阵

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0	0	0.5	0.5	0
地温梯度	0.5	0.3	0.2	0	0
单位面积埋存潜力	1	0	0	0	0
孔隙度	0.2	0.4	0.4	0	0

6.3 模糊合成与评价

根据上述我们的权重集

A = (0.1355, 0.1716, 0.0698, 0.2093, 0.3256, 0.0881)

塔里木盆地的模糊矩阵 B1

$$B_1 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0.6 & 0.4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 0.3 & 0.2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.4 & 0.4 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_1 = A \times B_1 = (0.619, 0.234, 0.112, 0.035, 0)$$

 S_1 为塔里木盆地的综合评价向量。

6.4 优先级排序与验证

步骤同上,我们得出八个盆地对应的综合评价向量 S ,指出最大数对应的位置,相应对应到评价集 V 。 $V=\{$ 适宜,较适宜,一般,较不适宜,不适宜 $\}$

表 7 本研究选取的 9 个代表性盆地的综合评价汇总

盆地名称	综合评价向量	评价等级
塔里木盆地	$S_1 = A \times B_1 = (0.619, 0.234, 0.112, 0.035, 0)$	适宜
鄂尔多斯盆地	$S_2 = A \times B_2 = (0.499, 0.234, 0.100, 0.084, 0.084)$	适宜
渤海湾盆地	$S_3 = A \times B_3 = (0.035, 0.265, 0.117, 0.091, 0.167)$	较适宜
松辽盆地	$S_4 = A \times B_4 = (0.128, 0.254, 0.104, 0.042, 0.147)$	较适宜
准噶尔盆地	$S_5 = A \times B_5 = (0.110, 0.248, 0.170, 0.126, 0.021)$	较适宜
沁水盆地	$S_6 = A \times B_6 = (0.178, 0.196, 0.098, 0.119, 0.084)$	较适宜
三江盆地	$S_7 = A \times B_7 = (0.028, 0.214, 0.336, 0.097, 0)$	一般
四川盆地	$S_8 = A \times B_8 = (0.205, 0.102, 0.035, 0.169, 0.163)$	适宜
南襄盆地	$S_9 = A \times B_9 = (0,0.070,0.258,0.263,0.084)$	较不适宜

七、结果分析与检验

7.1 针对估量模型的结果分析与验证

对于估量模型的建立,我们针对模型中参数来源冗杂、数值不确定性问题(如孔隙度范围值、压力梯度波动等),基于大数定律与蒙特卡洛模拟算法,构建概率化求解框架,并最终求得了中国深部盐水层的 CO_2 封存量的理论值。

对于能够找到数据的盆地 29 个盆地,通过蒙特卡洛模拟算法可得如下结果:

蒙特卡洛模拟(10万次)组	吉果 注: 1 <i>Mt</i> = 1×10 ⁶ <i>t</i>
CO_2 总封存量均值	34238.5 <i>Mt</i>
标准差	1280.45 <i>Mt</i>
95%置信区间	31789.43 <i>Mt</i> ~ 36748.43 <i>Mt</i>

对于个别找不到具体数据的盆地,为了保证计算结果的准确性,我们借用文献所求值。

表 8 罕见盆地封存量数据

盆地名称	CO_2 封存量(Mt)
台湾西部盆地	3.54
台湾西侧盆地	59.45
湳州岛盆地	3.85
琼东盆地	3.7
南海西部海域	9006.07

最终求和可以得到我国深部盐水层的 CO, 封存总量:

蒙特卡洛模拟(10万次)结	告果 注: 1 <i>Mt</i> =1×10 ⁶ <i>t</i>
CO_2 总封存量均值	$4.3315 \times 10^{10} t$

这里可以对比我们的结果与研究人的结果:

- 1.文献[12]: 根据溶解度法计算中国盐水含水层存储容量为 $1435 \times 10^8 t$
- 2.文献[8]: 中国 25 个主要沉积盆地深部盐水层封存容量约为 $1191.15 \times 10^8 t$
- 3.文献[5]和文献[13]的中的封存量比上面两个大了一个数量级

可见目前学者对 CO_2 封存量的估算还是有较大的差异,可能是因为 CO_2 的封存潜力的估算与自然界的很多因素有较强的相关性,使用的方法以及考量的维度不同,都会导致较大的差异性。但是其数量级已经能够反映出深部盐水层的 CO_2 封存潜力巨大,在未来可以促进双碳计划的有利进行。

7.2 采用 Sobol 方法量化 CO₂ 密度对封存量的灵敏度结果与验证

本次灵敏性分析,我们创新使用 Sobol 方法直接量化密度对封存量不确定性的贡献比例,最终得到结果为:

Sobol 计算结果					
一阶灵敏度指数(S_1) 0.7424					
总效应指数($S_{\scriptscriptstyle T}$)	0.9978				

通过 Sobol 灵敏度分析发现, CO_2 密度是封存量计算结果的主导因素,这与我们起初的相关性分析结果相互印证。其一阶灵敏度指数表明其独立变化可解释约 74.24%的输出方差,总效应指数表明,密度几乎主导了所有输出变化,这一结果凸显了精确测量 CO_2 密度对封存量估算的重要性。

7.3 基于模糊评价模型对各个盆地进行评价分级结果分析与验证

基于上述模糊评价,我们随机选取了9个盆地进行评价打分,最终的评价结果如表5 所示。通过阅读文献,我们发现目前的选址评价主体思路就是在对各个评价因素根据研究尺 度分级之后,通过层次分析法确定权重,之后进行分级打分评价[2]。也有其他研究者通过 三级模糊综合评价等方法进行评估。我们得到的结论与评价结果重合性较好。

7.3.1 模型对"双碳"目标的战略意义

(1) 精准定位封存潜力区域

通过模糊评价模型,明确塔里木、鄂尔多斯、四川盆地为"适宜"封存区(评价向量中"适宜"隶属度>0.5),其储层厚度、孔隙度等关键指标显著优于其他区域。

意义: 优先开发高潜力区域可大幅提升封存效率,加速实现碳排放与封存的动态平衡,助力"碳达峰"目标提前达成。

(2) 资源优化配置与成本控制

南襄盆地等低评分区域(如"较不适宜")封存成本高、风险大,模型建议暂缓投入,避免资源浪费。

意义:聚焦高效益区域,降低单位封存成本,为"碳中和"提供经济可行的技术路径。

(3) 多维度科学决策支撑

模型融合地质参数(孔隙度、盖层封闭性)与环境参数(地表温度、地温梯度),全面评估封存安全性。

意义: 避免单一指标片面性,减少因地质泄漏或环境风险导致的二次碳排放,保障碳中和成果的可持续性。

7.3.2 公共政策

(1) 分级施策,优先发展高潜力区域

①优先封存区(如塔里木盆地):设立国家级封存示范区,配套专项财政补贴与税收优惠,吸引企业投资;建立跨区域 CO₂运输管网,打通"排放源-封存地"链路。

- ②较适宜区域(如松辽盆地): 开展小规模试点,验证技术可行性后逐步推广。
- ③低潜力区域(如南襄盆地): 暂停大规模封存项目,转向生态修复或碳汇补偿。

(2) 强化技术研发与风险管控

针对高灵敏度参数(如孔隙度、盖层封闭性),设立地质监测专项基金,研发实时动态监测技术;制定《CO2封存风险管理条例》,明确泄漏应急响应机制与责任主体。

(3) 构建市场化激励机制

推行"碳封存配额交易",允许企业通过封存抵消部分排放配额,激发市场参与积极性;对封存技术研发企业给予绿色信贷支持,降低融资成本。

(4) 动态评估与模型迭代

每5年更新一次盆地评价数据,结合气候变化与技术进步调整模型权重(如提升地温梯度权重以应对全球变暖);建立"政府-科研机构-企业"数据共享平台,提升模型预测精度。

八、模型评价与改进

8.1 估量模型的评价与改进

体积法**结合蒙特卡洛模拟的模型体系,在快速估算与风险量化上具有显著优势**,但如下图所示, CO_2 的封存量包括:理论封存量、有效封存量、实际封存量、匹配封存量。我们的公式计算的是理论封存量,理论与实际之间还有很多动态因素的影响,因此需通过动态扩展、数据增强与算法优化,克服其静态假设与计算效率的局限性,最终为"双碳"目标提供更精准的封存潜力评估工具。

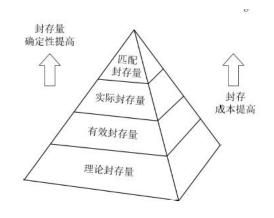


图 7 封存量关系图

8.2 Sobol 灵敏性分析的评价与改进

Sobol 方法从"定性推测"升级为"定量+全局"分析,为"双碳"目标下高精度封存规划提供 核心工具,未来需融合智能算法与动态地质模型,进一步提升工程适用性。

其优势在于: 1)全局量化,通过方差分解直接计算密度对封存量的独立贡献,避免传统离散扰动法的定性局限。 2)连续覆盖:结合 Span-Wagner 方程动态计算超临界 CO2密度 (630~770 kg/m³),全面捕捉参数全范围影响。3)噪声分离:将次要参数(如孔隙度)设为固定噪声,聚焦核心变量,简化模型复杂度。

改进方向:量化密度与孔隙度的协同效应,基于实际数据校准密度区间,扩展非正态分布(如 Beta 分布)提升采样真实性。

8.3 模糊评价模型的评价与改进

本模型通过科学量化封存潜力,为"双碳"目标提供了从技术到政策的闭环解决方案。 未来需在动态性、多维性上持续优化,以实现碳封存与经济社会发展的协同共赢。

1.模糊评价依赖主观权重分配(盖层封闭性权重 0.1716),忽略区域特异性风险(如四川盆地地震活动性)。

2.未纳入社会经济因素(人口密度、基础设施覆盖度),可能影响政策落地可行性。

改进方向:引入机器学习算法,基于历史封存数据动态优化权重与隶属函数;增加"社会接受度""运输成本"等二级指标,构建更全面的评价体系。

九、参考文献

- [1] 张 亮 , 任 韶 然 , 王 瑞 和 , 等 . 南 海 西 部 盐 水 层 CO2 埋 存 潜 力 评 估 [J]. 岩 土 力 学,2010,31(04):1238-1242.DOI:10.16285/j.rsm.2010.04.005.
- [2] 曹默雷,陈建平.CO2 深部咸水层封存选址的地质评价[J].地质学报,2022,96(05):1868-1882.DOI:10.19762/j.cnki.dizhixuebao.2022034.
- [3] 金将伟,杨国栋,刘思雨,等.CO2-咸水-岩石相互作用对储层孔隙度的影响: 以准噶尔盆地东 沟 组 砂 岩 层 为 例 [J]. 有 色 金 属 (冶 炼 部分),2025,(02):204-216.DOI:10.20237/j.issn.1007-7545.2025.02.023.
- [4] 胡冉,陈益峰,万嘉敏,等.超临界 CO2-水两相流与 CO2 毛细捕获:微观孔隙模型实验与数值模拟研究[J].力学学报,2017,49(03):638-648.
- [5]潘志彦,郦林军,郑佳祎,等.超临界二氧化碳在深部盐水中溶解封存及影响因素[J].应用科技,2025,52(01):77-83+97.
- [6] 赵丰年,辛翠平.储层 CO2 封存能力研究[J].非常规油气,2020,7(03):72-76+54.
- [7] 孙腾民,刘世奇,汪涛.中国二氧化碳地质封存潜力评价研究进展[J].煤炭科学技术,2021,49(11):10-20.DOI:10.13199/j.cnki.cst.2021.11.002.
- [8] 李琦,魏亚妮,刘桂臻.中国沉积盆地深部 CO2 地质封存联合咸水开采容量评估[J].南水北调与水利科技,2013,11(04):93-96.
- [9] 叶斌, 叶为民. 地下咸水层封存 CO2 的研究现状及展望[J]. 科技资讯,2012,(36):66-69+71.DOI:10.16661/j.cnki.1672-3791.2012.36.132.
- [10] 谢和平,王昱飞,鞠杨,等.地球自然钾长石矿化 CO2 联产可溶性钾盐[J].科学通报,2012,57(26):2501-2506.
- [11] 李义连,房琦,柯怡兵,等.高盐度卤水对 CO2 地质封存的影响:以江汉盆地潜江凹陷为例[J]. 地球科学(中国地质大学学报),2012,37(02):283-288.
- [12] 李小春,刘延锋,白冰,等.中国深部咸水含水层 CO2 储存优先区域选择[J].岩石力学与工程学报,2006,(05):963-968.
- [13] 张洪涛,文冬光,李义连,等.中国 CO2 地质埋存条件分析及有关建议[J].地质通报,2005,(12):1107-1110.

[14] LI X, WEI N, LIU Y, et al. CO2 point emission and geological storage capacity in China [J]. Energy Procedia, 2009, 1(1): 2793-800

十、附录

本次附录包括两个部分:

- (1) 求解上述模型的 Python 语言的编程代码
- (2)本次题目考量到很多地理学知识,上述中涉及到的计算公式以及适配性,我们查阅到 大量的专业资料以及专业文献。由于正文的篇幅限制,我们无法在正文详细地展示理论支持, 我们在此进行一个详细的说明。

10.1 代码展示

Question1:Monte Carlo 代码

import numpy as np

np.random.seed(42) # 确保结果可重复

定义盆地数据(根据表格输入)

basins = [

陆上盆地

{'name': '塔里木盆地', 'area': 53, 'h': 300, 'porosity': '0.1~0.234'},

{'name': '鄂尔多斯盆地', 'area': 37, 'h': 300, 'porosity': '0.12~0.2'},

{'name': '渤海湾盆地(陆上)', 'area': 13.3, 'h': 200, 'porosity': '0.1~0.2'},

{'name': '松辽盆地', 'area': 26, 'h': 200, 'porosity': '0.15~0.2'},

{'name': '准噶尔盆地', 'area': 38, 'h': 300, 'porosity': '0.15~0.169'},

{'name': '河淮盆地', 'area': 27, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},

{'name': '苏北盆地', 'area': 18, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},

```
{'name': '二连盆地', 'area': 10, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '四川盆地', 'area': 26, 'h': 300, 'porosity': '0.05'},
    {'name': '吐鲁番盆地', 'area': 5.35, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '哈密盆地', 'area': 5.35, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '江汉盆地', 'area': 1.9, 'h': 150, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '洞庭盆地', 'area': 1.9, 'h': 150, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '三江盆地', 'area': 3.373, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '沁水盆地', 'area': 2.3923, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '柴达木盆地', 'area': 25.7768, 'h': 50, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '海拉尔盆地', 'area': 7.048, 'h': 100, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '南襄盆地', 'area': 4.6, 'h': 100, 'porosity': '0.15'},
    #海上盆地
    {'name': '东海盆地', 'area': 46, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '南黄海盆地', 'area': 8.5, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '渤海湾盆地(海上)', 'area': 6.7, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '珠江口盆地', 'area': 15, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '莺歌海盆地', 'area': 6, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '北黄海盆地', 'area': 7.13, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '北部湾盆地', 'area': 3.98, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
]
# 预处理孔隙度: 计算均值和标准差 (假设范围覆盖均值±2σ)
for basin in basins:
    porosity_str = basin['porosity']
    if '~' in porosity str:
         phi_min, phi_max = map(float, porosity_str.split('~'))
         basin['phi_mean'] = (phi_min + phi_max) / 2
         basin['phi_std'] = (phi_max - phi_min) / 4 # 标准差 = 范围/4
    else:
```

```
phi_val = float(porosity_str)
        basin['phi_mean'] = phi_val
        basin['phi_std'] = 0.0 # 固定值,标准差为 0
# 密度参数 (假设均值为 700, 标准差= (770-630)/4=35)
rho_mean = 700
rho_std = 35
# 蒙特卡洛模拟
num_simulations = 100000
total_co2 = []
for _ in range(num_simulations):
   total mt = 0.0
    for basin in basins:
        # 单位转换
        A = basin['area'] * 1e10 # 转换为平方米
        h = basin['h']
        # 生成正态分布随机值(孔隙度)
        phi = np.random.normal(basin['phi_mean'], basin['phi_std'])
        phi = np.clip(phi, basin['phi_mean'] - 2*basin['phi_std'], basin['phi_mean'] +
2*basin['phi_std']) # 截断
        # 生成正态分布随机值(密度)
        rho = np.random.normal(rho_mean, rho_std)
        rho = np.clip(rho, 630, 770) # 截断
        # 计算封存量
```

```
M_kg = 0.01 * A * h * phi * rho * 0.03 # S_eff=3%
total_mt += M_kg / 1e9 # 转换为百万吨

total_co2.append(total_mt)

# 计算结果统计
mean = np.mean(total_co2)
std = np.std(total_co2)
confidence_95 = np.percentile(total_co2, [2.5, 97.5])

# 输出结果
print(f"蒙特卡洛模拟(正态分布,{num_simulations}次)结果: ")
print(f"CO2总封存量均值: {mean:.2f} Mt")
print(f"标准差: {std:.2f} Mt")
print(f"将基三 {std:.2f} Mt")
```

Question2:Sobol 分析

```
import numpy as np
from SALib import ProblemSpec
from SALib.sample import saltelli
from SALib.analyze import sobol

# 定义盆地数据
basins = [
# 陆上盆地
{'name': '塔里木盆地', 'area': 53, 'h': 300, 'porosity': '0.1~0.234'},
{'name': '鄂尔多斯盆地', 'area': 37, 'h': 300, 'porosity': '0.12~0.2'},
{'name': '渤海湾盆地(陆上)', 'area': 13.3, 'h': 200, 'porosity': '0.1~0.2'},
```

```
{'name': '松辽盆地', 'area': 26, 'h': 200, 'porosity': '0.15~0.2'},
    {'name': '准噶尔盆地', 'area': 38, 'h': 300, 'porosity': '0.15~0.169'},
    {'name': '河淮盆地', 'area': 27, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '苏北盆地', 'area': 18, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '二连盆地', 'area': 10, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '四川盆地', 'area': 26, 'h': 300, 'porosity': '0.05'},
    {'name': '吐鲁番盆地', 'area': 5.35, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '哈密盆地', 'area': 5.35, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '江汉盆地', 'area': 1.9, 'h': 150, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '洞庭盆地', 'area': 1.9, 'h': 150, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '三江盆地', 'area': 3.373, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '沁水盆地', 'area': 2.3923, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '柴达木盆地', 'area': 25.7768, 'h': 50, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '海拉尔盆地', 'area': 7.048, 'h': 100, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '南襄盆地', 'area': 4.6, 'h': 100, 'porosity': '0.15'},
     #海上盆地
    {'name': '东海盆地', 'area': 46, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '南黄海盆地', 'area': 8.5, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '渤海湾盆地(海上)', 'area': 6.7, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '珠江口盆地', 'area': 15, 'h': 200, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '莺歌海盆地', 'area': 6, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
    {'name': '北黄海盆地', 'area': 7.13, 'h': 300, 'porosity': '0.2'},
    {'name': '北部湾盆地', 'area': 3.98, 'h': 300, 'porosity': '0.15'},
]
# 预处理孔隙度参数
for basin in basins:
     porosity_str = basin['porosity']
    if '~' in porosity str:
```

```
phi_min, phi_max = map(float, porosity_str.split('~'))
         basin['phi_mean'] = (phi_min + phi_max) / 2
         basin['phi_std'] = (phi_max - phi_min) / 4
    else:
         phi_val = float(porosity_str)
         basin['phi_mean'] = phi_val
         basin['phi_std'] = 0.0
# 定义 Sobol 分析问题
problem = {
    'num_vars': 1,
    'names': ['rho'],
    'bounds': [[630, 770]] # 密度范围
}
# 生成 Sobol 样本(自动满足样本数要求)
n_samples = 5000
param_values = saltelli.sample(problem, n_samples)
# 模型计算函数
def model(param_values):
    Y = np.zeros(param_values.shape[0])
    for i, rho in enumerate(param_values):
         total mt = 0.0
         for basin in basins:
             A = basin['area'] * 1e10
             h = basin['h']
             phi = np.random.normal(basin['phi_mean'], basin['phi_std'])
             phi = np.clip(phi, basin['phi_mean'] - 2*basin['phi_std'],
```

```
basin['phi_mean'] + 2*basin['phi_std'])
            # 提取 rho 的标量值 (rho[0])
            M_{kg} = 0.01 * A * h * phi * rho[0] * 0.03
            total_mt += M_kg / 1e9
        Y[i] = total_mt
    return Y
# 运行模型
Y = model(param_values)
print(param_values.shape)
print(Y.shape)
# 执行 Sobol 分析
Si = sobol.analyze(problem, Y, print_to_console=False)
# 输出灵敏度结果
print(f"一阶灵敏度指数 (S1): {Si['S1'][0]:.4f}")
print(f"总效应指数 (ST): {Si['ST'][0]:.4f}")
```

Person 相关性分析

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import CoolProp.CoolProp as CP

# 设置中文显示
```

```
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei'] # 用来正常显示中文标签
plt.rcParams['axes.unicode_minus'] = False # 用来正常显示负号
# 读取 Excel 文件
file_path = 'data/深部盐水层相关参数 - 副本.xlsx'
df = pd.read_excel(file_path, sheet_name='Sheet1')
# 删除安全系数列
df = df.drop(columns=['安全系数(不可超压)'])
# 处理范围值,提取上下限(不转换为均值)
def split_range(value):
    if isinstance(value, str):
        value = value.replace('-', '-').replace('~', '-').replace('~', '-').strip()
        parts = value.split('-')
        parts = [float(p.strip()) for p in parts]
        return parts
    elif isinstance(value, (int, float)):
        return [float(value), float(value)]
    else:
        return [np.nan, np.nan]
# 提取原始范围数据
df['压力范围_MPa'] = df['压力范围 (MPa)'].apply(split_range)
df['温度范围_C'] = df['温度范围 (°C)'].apply(split_range)
# 处理其他需要均值的列(孔隙度)
def range_to_mean(value):
    if isinstance(value, str):
```

```
value = value.replace('-', '-').replace('\sim', '-').replace('\sim', '-').strip()
        parts = value.split('-')
        parts = [float(p.strip()) for p in parts]
        return np.mean(parts)
   elif isinstance(value, (int, float)):
        return float(value)
   else:
        return np.nan
df['平均孔隙度(%)'] = df['平均孔隙度(%)'].apply(range_to_mean)
# 转换盆地类型为数值(陆上=0,海上=1)
df['盆地类型'] = df['盆地类型'].map({'陆上盆地': 0, '海上盆地': 1})
# 删除固定密度列
df = df.drop(columns=['密度典型值(kg/m³)', '密度范围(假设)', '压力范围 (MPa)', '温度
范围 (°C)'])
# 转换盆地面积为平方米 (1万平方千米 = 1e10 m²)
df['盆地面积_m2'] = df['盆地面积(万平方千米)'].astype(float) * 1e10
# 定义函数模拟计算密度(使用盐水物性,假设为 NaCl 溶液)
def calculate_density(pressure_range, temp_range, num_samples=100):
   try:
        p_min, p_max = pressure_range
        t_min, t_max = temp_range
        pressures = np.random.uniform(p_min, p_max, num_samples)
        temps = np.random.uniform(t_min, t_max, num_samples)
        densities = \Pi
```

```
for p, t in zip(pressures, temps):
           #压力单位转换为 Pa,温度转换为 K
           density = CP.PropsSI('D', 'P', p*1e6, 'T', t + 273.15, 'water')
           densities.append(density)
       return np.nanmean(densities)
   except Exception as e:
       print(f"计算失败: {e}, 压力范围: {pressure_range}, 温度范围: {temp_range}")
       return np.nan
# 计算每个盆地的平均密度
df['密度_kg/m3'] = df.apply(
   lambda row: calculate_density(row['压力范围_MPa'], row['温度范围_C']), axis=1
)
# 填充 NaN 值 (使用所有盆地密度的均值)
mean_density = df['密度_kg/m3'].mean()
df['密度_kg/m3'] = df['密度_kg/m3'].fillna(mean_density)
# 计算 CO2封存量(孔隙度单位转换为小数)
df['CO2 封存量 kg'] = (
   df['盆地面积_m2'] *
   df['平均储层厚度(m)'].astype(float)*
   (df['平均孔隙度(%)'].astype(float))* # 转换为小数
   df['密度_kg/m3'] *
   df['S_eff'].astype(float)
)
# 删除冗余列
df = df.drop(columns=['盆地名称', '盆地面积(万平方千米)', '盆地面积 m2', '压力范围 MPa',
```

```
'温度范围_C', 'S_eff'])
# 计算相关系数矩阵并删除全空列(如果有)
corr_matrix = df.corr()
# 绘制热力图 (调整标签角度)
plt.figure(figsize=(12, 8))
sns.heatmap(
   corr_matrix,
   annot=True, cmap='coolwarm', fmt=".2f", linewidths=0.5,
   )
plt.xticks(rotation=45, ha='right')
plt.title('参数相关性矩阵(含CO2封存量)')
plt.tight_layout()
plt.show()
# 输出相关系数
print("相关系数矩阵:")
print(corr_matrix)
```

10.2 专业理论支持

10.2.1 估算封存量的解释

目前,常使用 BOND 提出的技术—经济资源金字塔模型来表征 CO_2 地质封存潜力[11]。 该模型根据评估目的和封存地质体认识程度将 CO_2 地质封存潜力划分为:理论封存量、有效封存量、实际封存量、匹配封存量[2][11]。

1.理论封存量:指封存地质体中 CO_2 的理论最大封存量,是封存地质体能够提供给 CO_2 的物理空间极限量。

2.有效封存量:是理论封存量的子集,考虑了地质条件与工程条件对封存量的影响。

3.实际封存量:是有效存封存量的子集,进一步考虑了技术、法律、基础设施和经济条件对封存潜力的影响。

4.匹配封存量:是实际封存量的子集,是通过 CO_2 排放源和封存场地详细匹配得到的。 我们通过模型估算得到的是理论封存量,是一种粗略的、比较理想的估值。

10.2.2 CO, 封存机理简略

 CO_2 在地层水中的封存主要通过扩散与对流作用溶解于地层水中,溶解度收到地层温度、压力和地层水矿化度的影响[6]。

在纯地层水的储集空间空间中, CO2在地层水中的封存量公式为

$$H_{CO_2} = V_w \times R$$

其中,

 H_{CO_2} : CO_2 在地层水中的封存量

 $V_{...}$: 地层水总量 (m^3)

R: 地层水温压条件下CO, 的溶解度 (t/m^3)

此公式仅研究纯地层水,没有考虑到复杂的地质机理,仅为理想情况。

10.2.3 对于深部不可采煤层的 CO, 计算方法

对于深部不可采煤层,主要的封存方式有以下四种:吸附封存、构造圈闭封存、溶解封存、矿物封存。其中,吸附封存为主要封存形式。多数研究者的数据表明,深部不可采煤层的封存量相比于深部盐水层来说不多,故计算方法在这里简略说明,不做过多探讨。

1.CSLF(Carbon Sequestration Leaders Forum,碳封存领导人论坛)计算方法

$$M_{CO_2} = P_{PGI} \rho_g R_E$$

其中,

 $M_{CO_2}: CO_2$ 封存量

 ho_g : CO_2 密度

 R_E : CO_2 与 CH_4 体积置换比

 P_{PGI} :煤层可产气量=煤储层体积×煤密度×甲烷容量×完成率×采出率

2.DOE(United States Department of Energy, 美国能源部)计算方法

$$M_{CO_2} = \rho_g A_{coal} h \left(V_a + V_f \right) E$$

其中,

 A_{coal} : 目标煤层面积

h: 目标煤层厚度

 V_a : 单位体积煤的 CO_2 吸附量

 V_f : 单位体积煤中 CO_2 游离量

E: CO,储层的有效因子

3. 采用不可存储类型总和的计算方法

$$M_{CO_2} = M_v + M_w + M_{ads} + M_a$$

其中,

 M_{v} : 煤层中游离态 CO_{v} 质量

 M_w : 煤层中溶解总CO,质量

 M_{ads} : 目标区煤的剩余探明地质储量中总的 CO_2 吸附量

 M_a : 目标区煤的新增探明地质储量中总的 CO_2 吸附量

4. 简化版的 CSLF 方法

$$M_{CO_2} = 0.1 \rho_g G R_f R_E$$

其中,

G: 煤层气资源量

 R_f : 煤层气产出率

10.2.4 对于深部盐水层 CO_2 封存量计算方法

 CO_2 在盐水层的圈闭机制主要有四种[\Box]:构造圈闭、残余饱和度圈闭、溶解圈闭、矿物圈闭。其中,构造圈闭为最主要的圈闭方法。

(1) 国际通用的方法,参数较为简单

1. CSLF 方法

$$M_{CO_2} = M_s + M_r + M_d$$

 M_s : 构造圈闭封存的质量

 M_r : 残留封存的质量

 M_d : 溶解封存的质量

2. DOE 方法

$$M_{CO_2} = \rho_g A H \varphi$$

A: 目标盐水层面积

H: 目标盐水层厚度

 φ : 目标盐水层孔隙度

3. 欧盟计算法

$$M_{CO_2} = AF_{AC}S_FH$$

 F_{4C} : 深部盐水层覆盖系数

 S_F : 埋存系数

4. ECOFYS 和 TNO-TING 方法

$$M_{CO_2} = \rho_g AH \times 0.01 \times 0.02 \varphi$$

- 0.01: 深部盐水层的 1%体积为构造地层圈闭
- 0.02: 2%都构造地层圈闭可用于封存
- (2) 国内学者常用的方法,多研究构造盆地
 - 1.面积法

$$M_{CO_2} = A \times ACF \times SF$$

A: 盆地面积(m^3)

ACF: 盐水层覆盖系数

SF: 储存系数 (kg/m^3)

2.容积法

$$M_{CO_2} = A \times h \times \varphi \times (1 - S_{wi})$$

 S_{wi} : 束缚水饱和度

A: 盐水层面积 (m3)

h: 盐水层厚度 (m)

 φ : 孔隙度

3.容量系数法

在正文部分以及进行展示, 在此不进行详细展示

$$M_{CO_2} = A \times D \times \varphi \times \rho_{CO_2} \times (C_{eff} + m) \times 10^{-3}$$

4.溶解度法,对于不同的研究者,有两种计算公式

第一种:

$$M_{CO_2} = A \times D \times \varphi \times \rho_{CO_2} \times X_W^{CO_2} \rho_w / \rho_{CO_2}$$

(参量解释与正文中的容量系数法一致)

第二种:

$$M_{CO_2} = a \times A \times H \times \eta \times \varphi \times R \times \rho_{w} \times M$$

其中,

a: 可用于封存 CO_2 的盐水层平面分布范围占总盆地的比例,取 0.01

 η : 含水层厚度占总沉积层的比例,取经验值 0.1

R: 地层水总CO2溶解度

 ρ_{w} : 封存条件下饱和 CO, 的盐水密度

M: CO, 的摩尔质量

6.体积法

$$M_{CO_2} = a \times A \times h \times \varphi \times \rho \times S_{eff}$$

我们本次研究主要使用该方法对深部盐水层进行一个估算,在正文部分有详细的展示,在此 不再次进行详细阐述

注意,以上各公式计算均为理论封存量,即假设储层中所有孔隙都能够被自由相态的 CO_2 占据用于封存,或者所有的地层水都以最大的饱和度溶解 CO_2 情况下的封存量。

10.2.5 选址评价的数学方法

目前的选址评价主体思路就是在对各个评价因素根据研究尺度分级之后,通过层次分析法确定权重,之后进行分级打分评价 $^{[2]}$ 。也有其他研究者通过三级模糊综合评价等方法进行评估。总之,对一个地区CO,盐水层封存的地质评价可以分为两个步骤:

1.大范围的可行性评价:运用可行性评价依据在一个地区筛选出适宜盐水层封存的区块。

2.对于第一步筛选出的区块根据以封存适宜性和安全性为基准进行优劣比较,得到优质 靶区。其中,封存适宜性可通过更细致的储层特征,安全性评价主要集中在盖层、水文、地 震、场地地质安全、储层盖层分布和构造六个方面。

10.2.6 封存潜力计算的不确定性

1.研究发现,有些地质依据 CO_2 注入、封存量和封存安全性会产生不同的影响,这就导致了选址评价中有些依据选择的不确定性。

2.研究中也可能存在特殊现象,储层矿物质的组成、 CO_2 一水一岩反应对储级物性的影响^[2]等等,同时,有些论文也提到, CO_2 注入后产生储层孔隙度变化的原因或者主要原因目前仍然难以定论^[2]。

3.对于计算公式,公式中用以表征不同封存机制影响的存储效率因子和容量系数也存在 不确定性,各类地层参数也存在不确定性,往往取平均值进行计算。

10.2.7 隶属度矩阵:

鄂尔多斯盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0.5	0.2	0.3	0	0
地温梯度	0	0.2	0	0.4	0.4
单位面积埋 存潜力	0.9	0.1	0	0	0
孔隙度	0	0.1	0.9	0	0

渤海湾盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0.5	0.2	0.3	0	0
地温梯度	0	0.2	0	0.4	0.4
单位面积埋 存潜力	0.9	0.1	0	0	0
孔隙度	0	0.1	0.9	0	0

松辽盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0.5	0.2	0.3	0	0
地温梯度	0	0.2	0	0.4	0.4
单位面积埋 存潜力	0.9	0.1	0	0	0
孔隙度	0	0.1	0.9	0	0

准格尔盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0.5	0.2	0.3	0	0
地温梯度	0	0.2	0	0.4	0.4
单位面积埋 存潜力	0.9	0.1	0	0	0
孔隙度	0	0.1	0.9	0	0

沁水盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.6	0.4	0	0	0
地表温度	0.1	0.1	0.6	0.2	0
地温梯度	0	0	0.1	0.5	0.4
单位面积埋 存潜力	0	0	0	0	0
孔隙度	0	0.6	0.4	0	0

三江盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0	0.7	0.3	0	0
盖层封闭性	0	0.1	0.7	0.2	0
地表温度	0.4	0.4	0.2	0	0
地温梯度	0	0.1	0.6	0.3	0
单位面积埋 存潜力	0	0	0	0	0
孔隙度	0	0.6	0.4	0	0

四川盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0.5	0.5	0	0	0
盖层封闭性	0.8	0.2	0	0	0
地表温度	0	0	0.2	0.8	0
地温梯度	0	0	0.1	0.5	0.4
单位面积埋 存潜力	0	0	0	0	0
孔隙度	0	0	0	0.1	0.9

南襄盆地

	适宜	较适宜	一般	较不适宜	不适宜
储层厚度	0	0	0.5	0.5	0
盖层封闭性	0	0.1	0.7	0.2	0
地表温度	0	0	0.2	0.8	0
地温梯度	0	0	0.1	0.5	0.4
单位面积埋 存潜力	0	0	0	0	0
孔隙度	0	0.6	0.4	0	0