

## 第 102 期：GEM-GHG 算例剖析

GEM 2022.10

编写人：吴晓云

自 2001 年起，CMG 开始进行 GEM 咸水层 CO<sub>2</sub> 封存相关功能研发，目前已成为欧洲 CCS 模拟标准，业内普及程度最高的 CO<sub>2</sub> 封存数值模拟软件。

GEM 模拟 CO<sub>2</sub> 封存，不管是在咸水层、废弃油气藏、煤层 ECBM、CO<sub>2</sub>-EOR 等方面，在机理表征、流程操作等方面均具有独特优势：

- GEM 是基于 EoS 状态方程的组分计算
- 具备完备的地球化学数据库，可扩展
- 自带全耦合的地质力学模块，无需对其他软件进行数据交互传输
- 自带埋存建模向导，界面化操作流程，轻松添加相关机理表征
- 多精度盖层泄露模拟，满足所需
- 断层活化功能已在 2022 版中添加
- 新一代仪表盘可视化分析技术，让结果分析更容易
- 已形成 CoFlow/CoFlow-X 储层-地面一体化模拟，CMOST AI 敏感性分析、优化及不确定性分析模拟联动，更适合多个储层采油/气、地面分离、注气等全面化综合管理

GEM 自带 GHG (GreenHouse Gas) 文件夹，位置：D:\Program Files (x86)\CMG\GEM\2022.10\TPL\ghg，提供了不同机理的关键字实现方式，本期将对现有模型进行简要介绍，方便大家学习和使用。

算例	模型介绍
<b>GMGHG001.DAT</b>	<b>CO2 封存，无地球化学</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。
<b>GMGHG002.DAT</b>	<b>CO2 封存，低温储层</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 地层温度、压力低于 GMGHG001.DAT。
<b>GMGHG003.DAT</b>	<b>CO2 封存，使用 Li-Nghiem 计算 Henry 常数</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用内置的 Li and Nghiem 相关式计算 Henry 常数，自定义组分无法使用该相关式计算。 未模拟矿化反应。
<b>GMGHG004.DAT</b>	<b>CO2 封存，使用 Harvey 计算 Henry 常数</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用内置 Harvey 相关式计算 Henry 常数。 未模拟矿化反应。
<b>GMGHG005.DAT</b>	<b>CO2 封存，气相滞后</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用内置 Harvey 相关式计算 Henry 常数。 模拟气相滞后，并可输出捕集气饱和度视图和曲线。
<b>GMGHG006.DAT</b>	<b>CO2 封存地球化学模拟</b>  咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。

算例	模型介绍
GMGHG007.DAT	<p><b>CO2 封存的水相浓度误差控制</b></p> <p>CO2 埋存一维模型，一注一采分别位于两端。            注入井：恒速注 CO2，持续注入 100 年。            生产井：恒定 BHP            *NORM *AQUEOUS 控制物质平衡误差</p>
GMGHG008.DAT	<p><b>CO2 封存，输出 CO2 封存信息</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。            使用与温度无关的化学平衡常数。            模拟示踪气。            模拟 CO2 在水相中的分子扩散。            CO2 封存信息输出到 out 文件和 SR3 文件。</p>
GMGHG009.DAT	<p><b>CO2 封存，Rx'ns 的解析微分法 (Analytical Derivatives)</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。            Field 单位制。            使用与温度无关的化学平衡常数。            模拟示踪气。            CO2 封存信息输出到 OUT 文件和 SR3 文件。            使用反应项的解析微分法。            GHG009.DAT 和 GHG010.DAT 分别为反应项的解析微分法和数值微分法，可进行对比。</p>
GMGHG010.DAT	<p><b>CO2 封存，Rx'ns 的数值微分法 (Numerical Derivatives)</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。            Field 单位制。            使用与温度无关的化学平衡常数。            模拟示踪气。            CO2 封存信息输出到 out 文件和 SR3 文件。            使用反应项的数值微分法。            GHG009.DAT 和 GHG010.DAT 分别为反应项的解析微分法和数值微分法，可进行对比。</p>
GMGHG011.DAT	<p><b>CO2 封存，定义 Primary 水相质量摩尔浓度</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。            使用与温度相关的化学平衡常数。</p>

算例	模型介绍
	<p>模拟示踪气。 模拟 CO<sub>2</sub> 在水相中的分子扩散。 仅设置了 Primary 水层的初始摩尔质量浓度（MOLALITY-AQUEOUS-PRIMARY）。</p>
<b>GMGHG012.DAT</b>	<p><b>CO<sub>2</sub> 封存，无示踪气组分</b></p> <p>咸水层 CO<sub>2</sub> 封存模型，CO<sub>2</sub> 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO<sub>2</sub> 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 未模拟示踪气 (AQFILL ON)。 CO<sub>2</sub> 封存信息输出到 SR3 文件。</p>
<b>GMGHG013.DAT</b>	<p><b>CO<sub>2</sub> 封存-两个初始化分区</b></p> <p>咸水层 CO<sub>2</sub> 封存模型，CO<sub>2</sub> 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO<sub>2</sub> 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO<sub>2</sub> 封存信息，可绘制曲线。 模拟 CO<sub>2</sub> 在水相中的分子扩散。 设置两个初始化区域。</p>
<b>GMGHG014.DAT</b>	<p><b>CO<sub>2</sub> 封存，地球化学和滞后模拟</b></p> <p>咸水层 CO<sub>2</sub> 封存模型，CO<sub>2</sub> 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO<sub>2</sub> 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 模拟 CO<sub>2</sub> 在水相中的分子扩散。 使用 HENRY-CORR (Harvey)模拟 CO<sub>2</sub> 在水相中溶解。 模拟气相滞后。</p>
<b>GMGHG015.DAT</b>	<p><b>CO<sub>2</sub> 封存，注海水 (Brine)</b></p> <p>咸水层 CO<sub>2</sub> 封存模型，CO<sub>2</sub> 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水 (Brine) 1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO<sub>2</sub> 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO<sub>2</sub> 封存信息，可绘制曲线。 模拟 CO<sub>2</sub> 在水相中的分子扩散。 初始 NaCl 浓度为 0.05M。</p>

算例	模型介绍
GMGHG016.DAT	<p><b>CO2 封存，盖层泄漏井模拟</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。 使用井模拟盖层泄露。 GMGHG016 是 GMGHG017 的基础文件。</p>
GMGHG017.DAT	<p><b>CO2 封存，盖层泄漏井模拟（重启动计算）</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。 使用井模拟盖层泄露。 GMGHG017 是 GMGHG016 的重启文件。</p>
GMGHG018.DAT	<p><b>CO2 封存，水蒸发</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。 使用 Field 单位制。 使用与温度无关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。 设置 H2O 组分。 模拟水蒸发（CO2 可存在于气相中）。</p>
GMGHG019.DAT	<p><b>CO2 封存——3D 非均质模型</b></p> <p>第十三届SPE油藏模拟研讨会，1995 (SPE 29110)，Killough, J.E., "Ninth SPE Comparative Solution Project: A Reexamination of Black-Oil Simulation"，第九次比较解决方案项目后修改。</p> <p>本模型为 24×25×15 的非均质笛卡尔网格模型，倾斜油藏，包含 1 口注气井，和位于底部的 6 口注水井，以及 25 口生产井。 注入水矿化度不同。</p>
GMGHG020.DAT	<p><b>CO2 封存-使用体积倍数模拟大体积水体</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。 在模型的边缘使用体积倍数关键字来模拟一个水体。 使用 C1 模拟示踪气。 使用*AQFILL *ON 设置初始模型中不含 CO2。 检查残差平方，重复迭代，直到*CONVERGE *CEQAQU 指定的公差满足检查迭代(*NCHECK-CEQ)，否则在日志文件中输出不收敛信息。 使用关键字*DIARY *CHANGES-UNCONV 用于输出收敛情况。</p>

算例	模型介绍
GMGHG021.DAT	<p><b>CO2 封存，吸附</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>模拟气体在矿物表面的吸附。</p> <p>定义关键字 ADS_WATERZONE 确保 Langmuir 吸附模型计算的吸附量乘以网格块含气饱和度。</p>
GMGHG022.DAT	<p><b>CO2 封存，地球化学，热模拟</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>模拟 CO2 在水相中的扩散。</p> <p>模拟注入 50C 的 CO2 的热效应。</p>
GMGHG023.DAT	<p><b>注海水，3D 非均质模拟，热模拟</b></p> <p>第十三届SPE油藏模拟研讨会，1995 (SPE 29110)，Killough, J.E., "Ninth SPE Comparative Solution Project: A Reexamination of Black-Oil Simulation"，第九次比较解决方案项目后修改。</p> <p>本模型为 24×25×15 的非均质笛卡尔网格模型，倾斜油藏，包含 1 口注气井，和位于底部的 6 口注水井，以及 25 口生产井。</p> <p>6 口注水井的注水温度不同。</p>
GMGHG024.DAT	<p><b>CO2 封存，矿物的生成</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>模拟 CO2 在水相中的扩散。</p> <p>使用最小反应表面积和过饱和度指数模拟初始时不存在的矿物的形成。(GMGHG006.dat 之后)</p>
GMGHG025.DAT	<p><b>油藏注 CO2，地球化学</b></p> <p>测试活度系数 (activity coefficients) 的输入，使用关键字 *EQUIL-REACT-RATE *ON 和 *CHEM-EQUIL-SET *ON 定义平衡条件。</p> <p>展示关键词的使用：</p> <p>* ACTIVCOEF</p> <p>* EQUIL-REACT-RATE *ON</p>

算例	模型介绍
	* CHEM-EQUIL-SET *ON * CONV-RESONLY *ON
<b>GMGHG026.DAT</b>	<b>油藏注 CO<sub>2</sub>，地球化学</b>  测试使用关键字*EQUIL-REACT-RATE *ON 和*CHEM-EQUIL-SET *ON 定义平衡条件。输入所有水相质量摩尔浓度。 展示关键词的使用： *ACTIVCOEF-SOL *ON *EQUIL-REACT-RATE *ON *CHEM-EQUIL-SET *ON *CALC-MOLALITYAQ-SECONDARY *OFF *CONV-RESONLY *ON
<b>GMGHG027.DAT</b>	<b>使用*NORM *AQUEOUS 控制物质平衡误差</b>  CO <sub>2</sub> 埋存一维模型，一注一采分别位于两端。 注入井：恒速注 CO <sub>2</sub> ，持续注入 100 年。 生产井：恒定 BHP 使用关键字*NORM *AQUEOUS 表明对物质平衡误差的控制。 通过关键字*REACTION-CHEM and *REACTION-RATE 输入化学平衡反应和矿物质反应数据。
<b>GMGHG028.DAT</b>	<b>注聚，地球化学模拟</b>  模拟四分之一的五点井网普通稠油油藏中注聚。 油相由 8 个组分组成，其中包括可溶于水相的 CO <sub>2</sub> 。水相由 4 个组分组成，其中包括 2 个聚合物组分。 循环注入聚合物段塞和水段塞。考虑速率反应方式的聚合物降解。 此外，使用地球化学 V2 输入格式模拟化学平衡和矿物反应。 注意，聚合物和水表面活性剂组分不能参与反应。
<b>GMGHG029.DAT</b>	<b>经验泡沫模型，地球化学</b>  该算例展示了在经验泡沫模型中关键字语法。泡沫是在水相中存在至少一种表面活性剂成分的情况下产生的，可存在气相中。 在本例中，表面活性剂组分是通过组分属性部分中的*COMPNAME-SURFACTANT 定义的。注意，必须通过*COMPNAME-AQUEOUS 定义水相组分，*MW_AQUOUS 定义水组分的分子量。 泡沫的特征是由许多经验确定的参数，如*FMMOB， *FMSURF 等，这些参数在岩石流体部分设置。如有必要，也可在同时输入表面活性剂的吸附数据。 通过*INTCOMP *AQUEOUS 'surf_name'进行相渗插值，内插相渗曲线通过

算例	模型介绍
	<p>*KRINTRP 定义, 通过*DTRAPW, *DTRAPN 或*INTCOMP_VAL 给出的插值参数。</p> <p>表面活性剂可与水一起注入, 使用*INCOMP *AQUEOUS 定义。</p> <p>最后, 通过关键字 FMC1~FMC6、*FMCD 输出不同因素对相渗插值的影响。相渗插值可以通过关键字*KRINTER 进行输出。</p> <p>-----</p> <p>在这个简化的算例中, 水相中定义了一个表面活性剂组分。几乎所有与泡沫相关的关键词都在 Rock-Fluid 部分进行设置。</p> <p>该油藏衰竭开采 2 年, 然后同时注水和注气。表面活性剂随水一起注入。通过观察网格块中的相渗插值, 可以直观地看出泡沫的存在。数值为 1 表示没有泡沫, 接近 0 表示泡沫最强。</p> <p>注意, 本算例使用的泡沫参数仅用于说明目的, 实际应用中, 需要参考的实验数据并进行判断。</p> <p>聚合物和水相表活剂组分不参与反应。</p>
<p><b>GMGHG030.DAT</b></p>	<p><b>CO2 封存—水相分子扩散</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。</p> <p>Field 单位制。</p> <p>EOS 列表中引入 H2O 组分。</p> <p>使用*OGW_FLASH *ON 模拟水蒸发。</p> <p>使用*DIFCOR-AQU 模拟分子扩散。</p> <p>水相中指定组分的分子扩散使用 Wilke-Chang and Stokes-Einstein 相关式定义。</p> <p>Wilke-Chang 用于可溶的烃组分</p> <p>Stokes-Einstein 用于气体水组分</p>
<p><b>GMGHG031.DAT</b></p>	<p><b>CO2 和 H2S 咸水层封存</b></p> <p>咸水层 CO2 和 H2S 封存模型, 持续注入 25 年, 然后关井, 模拟接下来的 225 年 CO2 和 H2S 羽流情况。</p> <p>使用 GEM 内置 Harvey (*HENRY-MOD1-)计算 CO2 和 H2S 的 Henry 定律常数。</p> <p>CO2-H2O 使用温度相关的 BINs, H2S-H2O 通过关键字*BIN-TDEP-CO2 和 *BIN-TDEP-H2S 使用初始时间的平均储层温度下 BINs。</p>
<p><b>GMGHG032.DAT</b></p>	<p><b>CO2 封存—使用*TRACE-INTERNAL-OFF</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。在模型的边缘使用网格体积倍数模拟大的含水层。</p> <p>C1 为示踪气组分。</p> <p>使用*AQFILL *ON 确保在运行开始时系统中没有二氧化碳。</p> <p>检查残差平方, 重复迭代, 直到*CONVERGE *CEQAQU 指定的公差满足检查迭代(*NCHECK-CEQ), 否则在日志文件中输出不收敛信息。</p>

算例	模型介绍
	使用关键字*DIARY *CHANGES-UNCONV 用于输出收敛情况。
<b>GMGHG033.DAT</b>	<p><b>使用地球化学模拟 CO2 封存，使用*CRDAMP-ALL and *CRDAMP 抑制化学反应</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>模拟 CO2 在水中的分子扩散。</p> <p>本算例展示了使用*CRDAMP-ALL and *CRDAMP 抑制化学反应以达到平衡。</p>
<b>GMGHG034.DAT</b>	<p><b>使用地球化学模拟 CO2 封存，使用*MRDAMP-ALL 和*MRDAMP 抑制矿化反应</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>模拟 CO2 在水中的分子扩散。</p> <p>本算例展示了使用*CRDAMP-ALL and *CRDAMP 抑制化学反应以达到平衡。关键字*MRDAMP-ALL 用于抑制矿化反应。</p>
<b>GMGHG035.DAT</b>	<p><b>使用*MINERAL-ERA 和*NORM *MINERAL-VFR</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟 CO2 在水中的分子扩散。</p> <p>-----</p> <p>使用*MINERAL-ERA *ON（缺省）降低矿物组分的物质平衡误差，*NORM *MINERAL-VFR 和*MAXCHANGE *MINERAL-VFR 用于控制基于矿物质变化的时间步大小。</p>
<b>GMGHG036.DAT</b>	<p><b>关闭水蒸发</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>模拟 CO2 在水中的分子扩散。</p> <p>在 H2O_INCLUDED 模型中使用*OGW_FLASH *NO_H2OVAP 关闭水蒸发。</p>

算例	模型介绍
GMGHG037.DAT	<p><b>CO2 封存，注入海水 (Brine)</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水 (Brine) 1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用与温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。</p> <p>模拟 CO2 在水相中的分子扩散。</p> <p>初始 NaCl 浓度为 0.05M。</p> <p>通过关键字*ACTIVITY-MODEL *PITZER 使用 PITZER 活度模型，该模型完全依赖于 GEM 内部数据库的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。</p> <p>GEM 将弹出离子对和三元组不可用系数的警告消息。通过关键字 *CATION-ANION 等提供相关信息，如配套算例 gmghg038。</p>
GMGHG038.DAT	<p><b>CO2 封存，注入海水 (Brine)</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水 (Brine) 1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用与温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。</p> <p>模拟 CO2 在水相中的分子扩散。</p> <p>初始 NaCl 浓度为 0.05M。</p> <p>通过关键字*ACTIVITY-MODEL *PITZER2 调用 PITZER 活度模型。该模型部分依赖于 GEM 内置数据库可用的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。</p> <p>Pitzer 系数由关键字提供：</p> <p>*CATION-ANION-COEF</p> <p>*CATION-CATION-ANION-COEF, 等</p> <p>离子对或离子三元组后定义空白将促使 GEM 在内置数据库中搜索该离子对或离子三元组。如果设置，则使用这些值，否则，假定输入为 0。</p> <p>这些关键字提供了从 GEM 内部库覆盖 Pitzer 系数的机会。</p>
GMGHG039.DAT	<p><b>CO2 封存，注入海水 (Brine)</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水 (Brine) 1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。</p> <p>使用与温度相关的化学平衡常数。</p> <p>模拟示踪气。</p> <p>输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。</p> <p>模拟 CO2 在水相中的分子扩散。</p> <p>初始 NaCl 浓度为 0.05M。</p> <p>通过关键字*ACTIVITY-MODEL *PITZER2 调用 PITZER 活度模型。该模型部分依赖于 GEM 内置数据库可用的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。</p>

算例	模型介绍
	<p>与 gmghg038 相似，不同的是使用了 *PITZER2。 其计算成本更高，需谨慎使用，特别是在大模型中。</p>
<b>GMGHG040.DAT</b>	<p><b>CO2 封存，注入海水（Brine）</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 10M 海水（Brine）1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。 模拟 CO2 在水相中的分子扩散。 初始 NaCl 浓度为 0.05M。 通过关键字 *ACTIVITY-MODEL *PITZER2 调用 PITZER 活度模型。该模型部分依赖于 GEM 内置数据库可用的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。 与 gmghg039 相似，不同的是注入高矿化度海水（brine）。矿物溶解和沉淀的差异比 gmghg038 更明显。</p>
<b>GMGHG041.DAT</b>	<p><b>CO2 封存，注入海水（Brine）</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水（Brine）1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。 模拟 CO2 在水相中的分子扩散。 初始 NaCl 浓度为 0.05M。 通过关键字 *ACTIVITY-MODEL *PITZER2 调用 PITZER 活度模型。该模型部分依赖于 GEM 内置数据库可用的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。 与 gmghg040 相似，但是 *PITZER2 替代 *PITZER，尽管 gmghg041 与 gmghg040 的结果相当，但大大减少了运行时间。</p>
<b>GMGHG042.DAT</b>	<p><b>使用 *PORMNR 计算阻力系数</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水（Brine）1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。 使用与温度相关的化学平衡常数。 模拟示踪气。 输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。 模拟 CO2 在水相中的分子扩散。 初始 NaCl 浓度为 0.05M。</p> <p>-----</p> <p>通过关键字 *ACTIVITY-MODEL *PITZER 调用 PITZER 活度模型。该模型部分依赖于 GEM 内置数据库可用的 Wolery 和 Parkhurst 的 Pitzer 系数。</p>

算例	模型介绍
	<p>Pitzer 系数通过关键字：            *CATION-ANION-COEF            *CATION-CATION-ANION-COEF, 等            离子对或离子三元组后定义空白将促使 GEM 在内置数据库中搜索该离子对或离子三元组。如果设置，则使用这些值，否则，假定输入为 0。            这些关键字提供了从 GEM 内部库覆盖 Pitzer 系数的机会。</p> <p>-----</p> <p>使用可选关键字 *PORMNR 计算 *RFCALC，确保阻力系数计算时考虑矿物质引起的仅孔隙度变化。            耦合地球化学和地质力学模型。</p>
GMGHG043.DAT	<p><b>CO2 咸水层封存中的水蒸发和矿物沉淀</b></p> <p>在 USER_INPUT 初始化中使用 *SWOC 关键字，将输入 SW 的最大值限制为 SWOC 值。模拟水蒸气蒸发和矿物沉淀过程。</p>
GMGHG044.DAT	<p><b>使用 K 值方式表征气体在水相的溶解</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型，CO2 持续注入 25 年，再注 0.5M 海水（Brine）1 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 羽流情况。            使用与温度相关的化学平衡常数。            输出 CO2 封存信息，可绘制曲线。            模拟 CO2 在水相中的分子扩散。            初始 NaCl 浓度为 0.05M。            由 gmghg015 修改。</p> <p>-----</p> <p>由 WinProp 生成的 GW K 值表，用于水相溶解的计算，考虑矿化度的影响。可与 gmghg015 做结果对比。</p>
GMGHG045.DAT	<p><b>通过 *SOLUBILITY-MODEL 对 CO2 and H2S 使用不同的溶解模型</b></p> <p>咸水层 CO2 和 H2S 封存模型，持续注入 25 年，然后关井，模拟接下来的 225 年 CO2 和 H2S 羽流情况。            使用预生成的 K 值关键字 *SOLUBILITY-MODEL 用于 CO2 溶解的模拟，H2S 的 Henry 定律常数使用 *ENI 模型。            CO2-H2O 使用基于温度的 BINs，通过关键字 *BIN-TDEP-CO2 和 *BIN-TDEP-H2S，使用初始时平均储层温度下取值。</p>
GMGHG046.DAT	<p><b>使用预生成的 K 值表模拟 CO2 封存中的水蒸发</b></p> <p>咸水层 CO2 封存模型。            使用与温度无关的化学平衡常数。            EOS 列表中引入 H2O 组分。</p>

算例	模型介绍
	<p>使用*OGW_FLASH *ON 模拟水蒸发。</p> <p>-----</p> <p>使用气水系统的 K 值表模拟 CO2 溶解和水蒸发。</p>
<b>GMGHG047.DAT</b>	<p><b>CO2 封存模拟中矿物平衡反应</b></p> <p>使用一维模型模拟 CO2 封存，注采井分别位于两端。            注入井：恒定注气速度（CO2），持续注入 100 年。            生产井：恒定 BHP            方解石反应使用关键字*REACTION_EQUIL-MNR 模拟为矿物的拟平衡反应。</p>
<b>GMGHG048.DAT</b>	<p><b>使用矿物平衡反应模拟沉淀</b></p> <p>在 USER_INPUT 初始化中使用*SWOC 关键字，将输入 SW 的最大值设置为 SWOC 值。模拟水蒸气蒸发和矿物沉淀过程。            使用矿物平衡反应。</p>
<b>GMGHG049.DAT</b>	<p><b>模拟 H2 和 CO2 咸水层封存中甲烷化反应</b></p> <p>模拟 H2 和 CO2 咸水层封存。注采井分别位于两端。            注入井：恒定注气速度（CO2 和 H2）            生产井：恒定 BHP            注入的 H2 通过与 CO2 的阿伦尼乌斯甲烷化反应转化为 CH4。H2, CO2 和 CH4 可溶于水相。调整指前因子和活化可控制反应速率。</p>
<b>GMGHG050.DAT</b>	<p><b>溶解选项及优先级</b></p> <p>咸水层封存。使用不同的溶解选项。            在没有*SOLUBILITY-MODEL 关键字的情况下，根据优先级计算溶解度。            优先级：K-value &gt; ENI &gt; HARVEY &gt; HENRYCST</p>
<b>GMGHG051.DAT</b>	<p><b>溶解选项及*SOLUBILITY-MODEL 关键字的使用</b></p> <p>咸水层封存。使用不同的溶解选项。            在定义*SOLUBILITY-MODEL 关键字的情况下，选择对应的溶解度计算模型。</p>