

Główny Instytut Górnictwa – Państwowy Instytut Badawczy
Zakład Geologii, Geofizyki i Ochrony Powierzchni
Laboratorium Geologii Złożowej i Składowania CO₂

Rozprawa doktorska

**BADANIA MODELOWE
SKŁADOWANIA DITLENKU WĘGLA
W GŁĘBOKICH POZIOMACH SOLANKOWYCH
Z WYKORZYSTANIEM METOD
SZTUCZNEJ INTELIGENCJI**

Tomasz Urych

Promotor:
prof. dr hab. inż. Adam Smoliński

Promotor pomocniczy:
dr inż. Jarosław Chećko

Katowice, 2025

*Serdeczne podziękowania składam promotorom pracy:
Panu prof. dr hab. inż. Adamowi Smolińskiemu
oraz Panu dr inż. Jarosławowi Chećko, za opiekę
naukową i zaangażowanie oraz cenne uwagi
i wskazówki udzielone podczas realizacji niniejszej
rozprawy.*

Streszczenie

Scenariusze Zrównoważonego Rozwoju opracowane przez Międzynarodową Agencję Energii (IEA), wyznaczające drogę do osiągnięcia długoterminowych celów klimatycznych zakładają, że technologie wychwytu, wykorzystania i składowania ditlenku węgla (CCUS) będą odgrywać ważną rolę w ograniczaniu emisji CO₂ w sektorze przemysłowym i energetycznym. Zgodnie z tzw. Dyrektywą CCS dotyczącą geologicznego składowania ditlenku węgla w krajach UE, wybór odpowiedniej podziemnej formacji geologicznej w celu trwałego składowania CO₂ musi być poprzedzony opracowaniem szczegółowej charakterystyki i oceną potencjalnego zbiornika składowania oraz otaczającego go górotworu. Charakterystyka dynamicznego zachowania ditlenku węgla składowanego w górotworze stanowi istotny etap w procesie oceny potencjalnego zbiornika CO₂. Modelowanie dynamiczne obejmuje szereg symulacji procesu zatłaczania CO₂ do składowiska z wykorzystaniem trójwymiarowego statycznego modelu geologicznego górotworu. Wyniki symulacji numerycznych, określające szacunkowe pojemności składowania CO₂ w strukturach geologicznych, stanowią kluczowy element w procesie decyzyjnym podczas rozważania wdrożenia projektów CCS na skalę przemysłową.

Modelowanie numeryczne znajduje szerokie zastosowanie w inżynierii złożowej i jest wykorzystywane m. in. do optymalizacji produkcji i prognozowania wydajności złoża, korygowania i kalibracji modelu złoża w oparciu o dane rzeczywiste, a także przy opracowaniu analizy niepewności, czy też oceny ryzyka. Zarządzanie złożami i rozwiązywanie zagadnień dotyczących inżynierii naftowej i gazowniczej wymagają często ogromnego nakładu czasu pracy, znacznej mocy obliczeniowej komputerów i związanych z tym kosztów. Symulacje numeryczne są to złożone i czasochłonne procesy, wykorzystujące procedury iteracyjne służące do odwzorowania warunków złożowych panujących w analizowanej strukturze geologicznej oraz modelowania zakładanych procesów technologicznych. Dlatego coraz częściej wykorzystywanym podejściem jest modelowanie zastępcze wykorzystujące elementy sztucznej inteligencji, które umożliwia uzyskanie przybliżonych parametrów eksploatacyjnych złóż przy znacznie mniejszych nakładach pracy.

Możliwości zastosowań algorytmów uczenia maszynowego (ang. *machine learning*, ML) w technologiach CCUS są zróżnicowane i obejmują niemal wszystkie etapy procesów dotyczących rozwoju CCUS. Jednym z takich wyzwań jest szerokie zastosowanie metod uczenia maszynowego we wspomaganiu prowadzenia złożonych i czasochłonnych symulacji numerycznych procesów projektowania i optymalizacji składowania ditlenku węgla w strukturach geologicznych.

Proces badawczy niniejszej pracy obejmował następujące etapy:

- analizę literatury naukowej i technicznej w zakresie aktualnego stanu wiedzy na temat technologii CCUS oraz rozwoju i klasyfikacji systemów sztucznej inteligencji, w tym podstaw budowy sztucznych sieci neuronowych stanowiących jeden z głównych kierunków badań nad rozwojem sztucznej inteligencji;
- budowę numerycznych modeli złożowych w rejonie trzech wybranych struktur Górnośląskiego Zagłębia Węglowego (GZW);
- analizę wrażliwości modelu symulacyjnego wraz z określeniem wpływu kluczowych parametrów modelu na przebieg procesu składowania CO₂;
- opracowanie modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych.

Dynamiczne modele symulacyjne opracowałem w oparciu o regionalne modele statyczne rzeczywistych struktur złożowych wytypowanych rejonów GZW. Na podstawie wielokrotnych symulacji złożowych w modelu numerycznym warstw dębowieckich wygenerowałem dane wyjściowe niezbędne do opracowania modelu zastępczego. W wyniku przeprowadzonej analizy wrażliwości modelu symulacyjnego warstw dębowieckich, mającej na celu zmniejszenie wymiarowości zbioru danych, określiłem dane wejściowe modelu warstw dębowieckich mające największy wpływ na wyniki symulacji dla wybranej funkcji celu.

Opracowanie odpowiednio reprezentatywnej bazy danych stanowi jeden z najważniejszych etapów budowy zastępczego modelu złożowego opartego na metodach sztucznej inteligencji. W tym celu wygenerowany został zbiór poszczególnych wariantów modelu numerycznego o liczebności 150 symulacji obejmujących prognozy 25 lat zatłaczania ditlenku węgla do górotworu. Pełny zestaw wyników symulacji, przeznaczonych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej, opracowałem w oprogramowaniu Petrel (Schlumberger). Do opracowania zbioru 150 modeli aproksymacyjnych analizowanego złoża, reprezentatywnych dla założonych parametrów modelu, zastosowałem próbkowanie statystyczne przestrzeni danych wejściowych z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (ang. *Latin hypercube sampling*, LHS).

W wyniku wykonanych analiz dotyczących wyboru i optymalizacji struktury sztucznej sieci neuronowej (ang. *artificial neural networks*, ANN) w ostatecznej wersji modelu predykcyjnego opartego na ANN zastosowałem dwuwarstwową jednokierunkową sieć neuronową z warstwą ukrytą zawierającą 5 neuronów, które wykorzystują funkcję aktywacji tangens hiperboliczny. W warstwie wyjściowej zastosowałem liniową funkcję aktywacji. Analizowałem różne warianty uczenia sieci przy wykorzystaniu dostępnych algorytmów wstecznej propagacji błędu. Najlepsze wyniki uzyskałem przy wykorzystaniu algorytmu Bayesian Regularization stanowiącego modyfikację algorytmu Lavenberga-Marquardta.

W ramach testowania zastępczego modelu złożowego porównałem wyniki zatłaczania CO₂ wygenerowane za pomocą sztucznej sieci neuronowej z wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w numerycznym modelu złożowym. Wyniki przeprowadzonych testów potwierdziły wiarygodność zastępczego modelu złożowego zbudowanego w oparciu o sztuczną sieć neuronową. Uzyskana wartość współczynnika determinacji dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 wynosi $R^2 = 0,9995$. Maksymalna wartość błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących nie przekracza 2,89%, natomiast w dodatkowym pakiecie danych testujących (*blind testing samples*) wartość ta jest równa 2,09%.

W ramach niniejszej pracy doktorskiej określiłem efektywność procesu geologicznego składowania CO₂ w głębokich solankowych poziomach wodonośnych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji. Wykazałem, że wykorzystanie modelu zastępczego, poddanego wcześniej procesowi trenowania, testowania i walidacji, może znacznie zmniejszyć nakład prac poświęconych opracowaniu czasochłonnych numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂ w początkowym etapie projektu CCS.

Abstract

NUMERICAL MODELLING STUDIES OF CO₂ STORAGE IN DEEP SALINE AQUIFERS USING ARTIFICIAL INTELLIGENCE METHODS

Sustainable Development Scenarios developed by the International Energy Agency (IEA), which outline the path to achieving long-term climate goals, assumes that carbon capture, utilization and storage (CCUS) technologies will play an important role in reducing CO₂ emissions in the industrial and energy sectors. In accordance with the so-called CCS Directive on the geological storage of carbon dioxide in the European Union within the territory of the EU member states, the selection of a suitable underground geological formation for permanent CO₂ storage must be preceded by a detailed characterisation and assessment of the potential storage reservoir and the surrounding rock formation. The characterisation of the dynamic behaviour of carbon dioxide stored in the geological formation is a crucial step in the assessment of a potential CO₂ reservoir. Dynamic modelling involves a series of simulations of the CO₂ injection process into the storage site using a three-dimensional static geological model of the rock formation. The results of numerical simulations, determining the estimated CO₂ storage capacities in geological structures, are a key element in the decision-making process when considering the implementation of CCS projects on an industrial scale. Numerical modelling is widely used in reservoir engineering and is used, among others, for optimizing production and forecasting reservoir efficiency, adjusting and calibrating the reservoir model based on actual data, as well as for developing uncertainty analysis and risk assessment. Managing reservoirs and solving issues related to oil and gas engineering often require significant time investment, substantial computational power and associated costs. Numerical simulations are complex and time-consuming processes that utilize iterative procedures to replicate the reservoir conditions present in the analysed geological structure and to model the anticipated technological processes. Therefore, an increasingly common approach is surrogate modelling that employs elements of artificial intelligence, which allows for obtaining approximate operational parameters of reservoirs with significantly reduced labour input.

The possibilities for applying machine learning (ML) algorithms in CCUS technologies are diverse and encompass nearly all stages of CCUS development processes. One such challenge is the widespread use of machine learning methods to assist in conducting complex and time-consuming numerical simulations of the design and optimization processes for carbon dioxide storage in geological structures.

The research process of this work included the following stages:

- analysis of scientific and technical literature regarding the current state of knowledge on CCUS technologies and the development and classification of artificial intelligence systems, including the fundamentals of constructing artificial neural networks, which represent one of the main research directions in artificial intelligence development;
- construction of numerical reservoir models in the region of three selected structures of the Upper Silesian Coal Basin (USCB);
- sensitivity analysis of the simulation model along with determining the impact of key model parameters on the CO₂ storage process;
- development of a surrogate model based on artificial neural networks.

I developed dynamic simulation models based on regional static models of actual reservoir structures from selected areas of the Upper Silesian Coal Basin (USCB). Based on multiple reservoir simulations in the numerical model of Dębowiec layers, I generated output data necessary for developing the surrogate model. As a result of the sensitivity analysis of the simulation model of Dębowiec layers, aimed at reducing the dimensionality of the dataset, I identified the input data of the Dębowiec layers model that had the greatest impact on the simulation results for the selected objective function.

The development of an appropriately representative database is one of the most important stages in the construction of a surrogate reservoir model based on artificial intelligence methods. For this purpose, a dataset of individual variants of the numerical model was generated, consisting of 150 simulations covering forecasts for 25 years of carbon dioxide injection into the rock mass. I prepared the complete set of simulation results, intended for training, validation, and testing of the neural network, using Petrel software (Schlumberger). To create a set of 150 approximation models of the analysed reservoir representative of the assumed model parameters, I employed statistical sampling of the input data space using the Latin Hypercube Sampling (LHS) method.

As a result of the analyses performed regarding the selection and optimization of the artificial neural network (ANN) structure, in the final version of the ANN-based predictive model, I applied a two-layer feedforward neural network with a hidden layer containing 5 neurons that utilize the hyperbolic tangent activation function. In the output layer, I used a linear activation function. I analysed various training variants of the network using available error backpropagation algorithms. The best results were obtained using the Bayesian Regularization algorithm, which is a modification of the Levenberg-Marquardt algorithm.

As part of testing the surrogate reservoir model, I compared the CO₂ injection results generated using the artificial neural network with the values defining the total amount of carbon dioxide injected into the rock mass in the numerical reservoir model. The results of the tests confirmed the reliability of the surrogate reservoir model built based on the artificial neural network. The obtained value of the coefficient of determination for the basic training data set in variant no. 1 is $R^2 = 0.9995$. The maximum value of relative error for the basic training data set does not exceed 2.89%, while in the additional testing data set (blind testing samples), this value is equal to 2.09%.

In this doctoral thesis, I determined the effectiveness of the geological CO₂ storage process in deep saline aquifers using artificial intelligence methods. I showed that the use of a surrogate model, which has previously undergone training, testing, and validation, can significantly reduce the effort involved in developing time-consuming numerical simulations of geological CO₂ storage at the initial stage of the CCS project.

Spis treści

Streszczenie	3
Abstract	5
Spis skrótów	9
Spis symboli	11
1. Wstęp	12
1.1. Sformułowanie problemu badawczego	13
1.2. Cel pracy i koncepcja badań	15
2. Aktualny stan wiedzy - przegląd literatury	18
2.1. Rozwój technologii wychwytu, wykorzystania i składowania ditlenku węgla (CCUS) skutecznym sposobem na zmniejszenie emisji CO₂	18
2.1.1. Przegląd technologii wychwytu, wykorzystania i składowania CO ₂	18
2.1.2. Metody składowania CO ₂ w strukturach geologicznych i oceanach.....	21
2.1.2.1. Podziemne składowanie CO ₂ w strukturach geologicznych.....	21
2.1.2.1.1. Składowanie CO ₂ w solankowych warstwach wodonośnych.....	23
2.1.2.1.2. Składowanie CO ₂ w wyeksploatowanych złożach węglowodorów.....	28
2.1.2.1.3. Składowanie CO ₂ w głębokich nieeksploatowanych pokładach węgla (CO ₂ -ECBM).....	29
2.1.2.1.4. Składowanie CO ₂ w skałach bazaltowych i ultramaficznych.....	31
2.1.2.1.5. Geologiczne składowanie ditlenku węgla w formie hydratów CO ₂	32
2.1.2.1.6. Systemy geotermalne CO ₂ -EGS.....	33
2.1.2.2. Składowanie CO ₂ w oceanach.....	34
2.1.3. Aktualny status rozwoju technologii CCUS na świecie.....	36
2.2. Możliwości wykorzystania metod sztucznej inteligencji w obszarze technologii wychwytu, wykorzystania i składowania CO₂ (CCUS)	43
2.2.1. Sztuczna inteligencja w przeciwdziałaniu zmianom klimatycznym.....	43
2.2.2. Rozwój i klasyfikacja systemów sztucznej inteligencji.....	44
2.2.3. Podstawy budowy sztucznych sieci neuronowych.....	48
3. Numeryczne modele złożowe poziomów solankowych GZW	54
3.1. Założenia modelu symulacyjnego	54
3.1.1. Lokalizacja obszaru badań.....	54
3.2. Statyczne modele regionalne	56
3.2.1. Model numeryczny w obrębie krakowskiej serii piaskowcowej.....	56
3.2.2. Model numeryczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej.....	57
3.2.3. Model numeryczny w obrębie warstw dębowieckich.....	58

3.3. Parametry płynów złożowych	60
3.4. Wyniki symulacji zatłaczania CO₂ do poziomów wodonośnych	67
3.4.1. Model numeryczny w obrębie krakowskiej serii piaskowcowej.....	67
3.4.2. Model numeryczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej	71
3.4.3. Model numeryczny w obrębie warstw dębowieckich	75
3.5. Podsumowanie wyników symulacji numerycznych.....	80
4. Analiza wrażliwości modelu symulacyjnego	82
4.1. Opracowanie bazowego modelu symulacyjnego.....	82
4.2. Analiza wrażliwości modelu na kluczowe parametry złożowe.....	85
4.2.1. Wpływ porowatości efektywnej warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO ₂	86
4.2.2. Wpływ przepuszczalności warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO ₂	87
4.2.3. Wpływ proporcji miąższości efektywnej do całkowitej złoża na pojemność składowania CO ₂	88
4.2.4. Wpływ głębokości zalegania powierzchni stropu warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO ₂	89
4.2.5. Wpływ rezydualnego nasycenia ditlenkiem węgla warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO ₂	90
4.3. Kompleksowa analiza wrażliwości modelu symulacyjnego	92
4.4. Podsumowanie analizy wrażliwości modelu symulacyjnego.....	95
5. Opracowanie modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych	96
5.1. Opracowanie bazy danych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej..	96
5.2. Optymalizacja bazy danych	97
5.2.1. Metody Monte Carlo	97
5.2.2. Próbkowanie z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (Latin Hypercube Sampling - LHS)	98
5.3. Struktura sztucznej sieci neuronowej.....	98
5.4. Walidacja zastępczego modelu złożowego.....	101
6. Wnioski.....	117
Spis literatury	120
Załączniki.....	133
Załącznik 1: Podstawowy pakiet danych (ciąg uczący)	133
Załącznik 2: Dodatkowy pakiet danych testujących.....	137
Spis rysunków	139
Spis tabel	142

Spis skrótów

AG - algorytm genetyczny

AGI - *Artificial General Intelligence* - ogólna sztuczna inteligencja zwana także silną sztuczną inteligencją (*Strong AI*)

AI - *Artificial Intelligence* (sztuczna inteligencja)

ANI - *Artificial Narrow Intelligence* - wąska sztuczna inteligencja, zwana też słabą AI (*Weak Artificial Intelligence*)

ANN – *Artificial Neural Networks* (sztuczne sieci neuronowe)

ARP - Agencja Rozwoju Przemysłu

ASI - *Artificial Super Intelligence* (sztuczna nadinteligencja)

BECCS - *Bioenergy with Carbon Capture and Storage* (połączenie pozyskiwania energii z biomasy z jednoczesnym wychwytywaniem i składowaniem CO₂)

BECCU - *Bioenergy with Carbon Capture and Utilization* (połączenie pozyskiwania energii z biomasy z jednoczesnym wychwytywaniem i utylizacją CO₂)

CCMC - *Carbon Capture and Mineral Carbonation*

CCS - *Carbon Capture and Storage* (technologia wychwytu i składowania CO₂)

CCU - *Carbon Capture and Utilization* (technologia wychwytu i wykorzystania CO₂)

CCUS - *Carbon Capture, Utilization and Storage* (technologia wychwytu, wykorzystania i składowania CO₂)

CO2RE - *Greenhouse Gas Removal Hub* – the UK's national research hub on Greenhouse Gas Removal (GGR)

CTW - Czyste Technologie Węglowe

DAC - *Direct Air Capture* (technologia usuwania dwutlenku węgla bezpośrednio z atmosfery)

DACCS - *Direct Air Capture with Carbon Storage* (technologia DAC w powiązaniu z geologicznym składowaniem CO₂)

DACCU - *Direct Air Capture and Utilization* (technologia DAC w powiązaniu z utylizacją CO₂)

DEB - warstwy dębowieckie

DL - *Deep Learning* - głębokie uczenie (typ uczenia maszynowego)

DOE - *The US Department of Energy* - Departament Energii USA

E300 - kompozycyjna wersja symulatora Schlumberger Eclipse (Eclipse 300)

ECBM (CO₂-ECBM) - *Enhanced Coal Bed Methane* (składowanie CO₂ w głębokich nieeksploatowanych pokładach węgla, technologia intensyfikacji wydobycia metanu z pokładów węgla)

EGR (CO₂-EGR) - *Enhanced Gas Recovery* (składowanie CO₂ w złożach węglowodorów połączone ze wspomaganiem wydobycia gazu ziemnego)

EGS (CO₂-EGS) - *Enhanced Geothermal Systems* (niekonwencjonalne systemy geotermalne)

EOR (CO₂-EOR) - *Enhanced Oil Recovery* (składowanie CO₂ w złożach węglowodorów połączone ze wspomaganiem wydobycia ropy naftowej)

FIW - Forum Innowacyjnego Węgla

GRNN - sieci uogólnionej regresji (rodzaj jednokierunkowych sieci neuronowych)

GSP - Górnośląska Seria Piaskowcowa

GZW - Górnośląskie Zagłębie Węglowe

IEA - *International Energy Agency* (Międzynarodowa Agencja Energii)

IEAGHG - *IEA Greenhouse Gas Research & Development Programme*

IPCC - *Intergovernmental Panel on Climate Change* (Międzyrządowy Zespół ds. Zmian Klimatu)

KSP - Krakowska Seria Piaskowcowa

LHS - *Latin hypercube sampling* (próbkiowanie z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego)

MC - *Monte Carlo*

MCMC - *Markov Chain Monte Carlo* – metody pseudolosowego próbkiowania zbiorów danych; metody te są rezultatem połączenia symulacji metodami Monte Carlo z teorią łańcuchów Markowa

ML - *Machine Learning* (uczenie maszynowe)

MLMC - *Multi-Level Monte Carlo* (modyfikacja metod MC mające na celu poprawę parametrów symulacji związanych z konwergencją klasycznych metod MC)

MLP - wielowarstwowe perceptrony (rodzaj jednokierunkowych sieci neuronowych)

NTG - *Net-to-Gross* (stosunek miąższości efektywnej do całkowitej modelu złoża, który określa proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu)

OECD - *Organisation for Economic Co-operation and Development* (Organizacja Współpracy Gospodarczej i Rozwoju)

ONZ - Organizacja Narodów Zjednoczonych

PNN - probabilistyczne sieci neuronowe (rodzaj jednokierunkowych sieci neuronowych)

RBF - sieci radialne (rodzaj jednokierunkowych sieci neuronowych)

SAP - *System Analysis Program Development*

SIM - numeryczny model złoża

SIS - *Schlumberger Information Solutions*

SSN - Sztuczna Sieć Neuronowa

TRL - *Technology Readiness Level* (poziomem gotowości technologicznej)

WCI - *World Coal Institute*

WEF - *World Economic Forum* (Światowe Forum Ekonomiczne)

Spis symboli

P_o - minimalne ciśnienie progowe [Pa];

λ - indeks dystrybucji wielkości porów [-];

d_w - gęstość [kg/m³];

μ_w - lepkość [cP];

c_w - ściśliwość [1/Pa];

B_w - współczynnik objętościowy [m³/m³];

$\emptyset$ - porowatość efektywna [%];

k_h - przepuszczalność pozioma [mD];

k_v - przepuszczalność pionowa [mD];

S_{wirr} - nasycenie wodą nieredukowalną [%];

S_g - rezydualne nasycenie gazem [%];

P_{BHP} - maksymalne ciśnienie denne w otworze iniekcyjnym [bar];

k_{rw} - przepuszczalność względna fazy zwilżającej (ang. *wetting phase*);

k_{rn} - przepuszczalność względna fazy niezwilżającej (ang. *non-wetting phase*);

k_{r^o} - przepuszczalność względna fazy niezwilżającej przy nieredukowalnym nasyceniu fazy zwilżającej;

S_w^* - znormalizowane nasycenie fazą zwilżającą;

λ - indeks dystrybucji wielkości porów;

S_m - rezydualne nasycenie fazą niezwilżającą;

S_w - nasycenie wodą;

S_{iw} - początkowe nasycenie wodą;

p_i - sygnały wejściowe neuronu, $i = 1, \dots, R$;

w_i - wagi synaptyczne sygnałów wejściowych, $i = 1, \dots, R$;

b - bias neuronu (wyraz wolny);

n - sumator iloczynów sygnałów wejściowych i wag, $n = \sum_{i=1}^R w_i p_i + b$;

a - sygnał wyjściowy neuronu, $a = f(n)$;

y_t - i -ta obserwacja zmiennej y ;

$\hat{y}_t$ - wartość teoretyczna zmiennej objaśnianej (na podstawie modelu);

$\bar{y}$ - średnia arytmetyczna empirycznych wartości zmiennej objaśnianej;

V_{SIM_t} - sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego w czasie t uzyskana w symulacji numerycznej;

V_{SSN_t} - odpowiadająca sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego w czasie t uzyskana w modelu zastępczym.

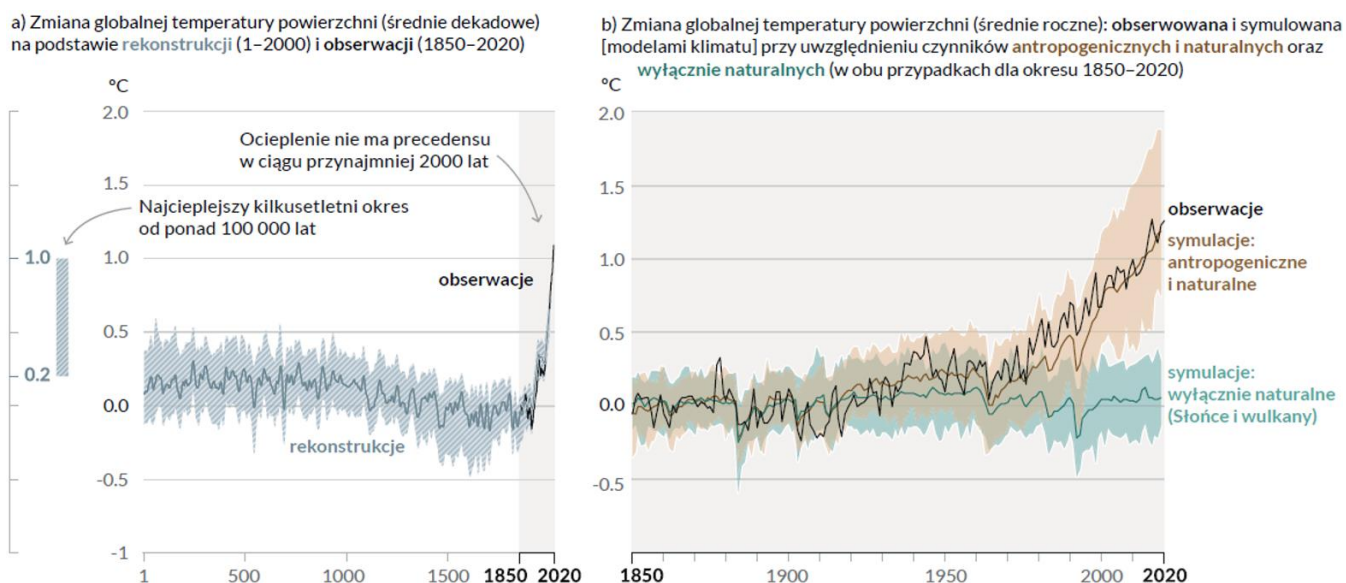
1. Wstęp

Globalna emisja CO₂ związana z produkcją energii stale wzrasta. W 2022 roku zaobserwowano wzrost emisji CO₂ o 0,9 % w stosunku do roku 2021, co stanowi wzrost o 321 mln Mg i została osiągnięta największa jak do tej pory roczna wielkość emisji CO₂ na świecie wynosząca 36,8 mld Mg (IEA, 2023). Wzrost wielkości emisji ditlenku węgla związany z wytwarzaniem energii stanowi poważne ostrzeżenie dla ogólnoswiatowych wysiłków na rzecz walki ze zmianami klimatu i pokazuje, że dotychczasowe tempo i skala działań są niewystarczające, by zrealizować zakładane cele klimatyczne, w tym m.in. ograniczenia ocieplenia klimatu do 1,5°C.

Z podsumowania Raportu Międzyrządowego Zespołu ds. Zmian Klimatu - „Climate Change 2023: Synthesis Report” (IPCC, 2023) wynika jednoznacznie, że działalność człowieka, głównie poprzez emisje gazów cieplarnianych oraz brak zrównoważonego wykorzystania energii i gruntów, doprowadziła do globalnego ocieplenia klimatu, przy czym przeciętna temperatura powierzchni Ziemi w latach 2011-2020 wzrosła o około 1,1°C względem poziomu temperatury sprzed epoki przemysłowej (1850-1900).

We wcześniejszym raporcie IPCC pt. „Zmiana Klimatu 2021: Fizyczne Podstawy Naukowe” (IPCC, 2021) stwierdzono, że działania człowieka w ostatnich latach doprowadziły do ocieplenia klimatu w tempie bezprecedensowym w okresie co najmniej ostatnich 2000 lat. Na rys. 1.1a) przedstawiono zmiany globalnej temperatury powierzchni względem okresu 1850–1900 opracowane na podstawie źródeł danych paleoklimatycznych (ciągła linia szara, lata 1–2000) i obserwacji bezpośrednich (ciągła linia czarna, lata 1850–2020). Szare cieniowanie z białymi liniami ukośnymi na rys. 1.1a przedstawia bardzo prawdopodobne zakresy rekonstrukcji temperatury powierzchni Ziemi, czyli zmiany globalnej temperatury powierzchni na podstawie źródeł danych paleoklimatycznych (IPCC, 2021).

Ponadto oszacowano zmianę temperatury najcieplejszego, kilkusetletniego okresu od co najmniej 100 000 lat, który miał miejsce około 6500 lat temu podczas obecnego interglacjału – holocenu (rys. 1.1a). Kolejnym okresem czasu, który można wskazać jako przedział czasowy z najwyższymi temperaturami jest poprzedni interglacjał, który miał miejsce około 125 000 lat temu (IPCC, 2021).



Rys. 1.1. Zmiany temperatury powierzchni Ziemi względem okresu 1850-1900 (IPCC, 2021)

Te ocieplenia w przeszłości były skutkiem naturalnej zmienności klimatu występującej bez wpływu oddziaływań antropogenicznych. Badania cykli zlodowaceń i interglacjalów pokazują, że ocieplenia kończące epoki lodowcowe były powodowane przez powolne, zachodzące na przestrzeni wielu tysięcy lat zmiany orbitalne Ziemi oraz występowanie zjawisk tektoniki płyt litosfery. Wzrost temperatury, spowodowany zmianami w ruchu orbitalnym Ziemi, w obszarach polarnych prowadzi do uwalniania CO₂ z oceanów, co skutkuje wzrostem temperatury na całej planecie. Przebieg procesu cyklicznych zmian temperatury w okresach ociepleń kończących epoki lodowcowe nazywamy cyklami Milankovica. Te periodyczne zmiany parametrów orbity ziemskiej, obejmujące zmiany kształtu orbity Ziemi, zmiany nachylenia i kierunku osi Ziemi, są uważane za dominujący mechanizm paleoklimatyczny mający znaczny wpływ na ilość promieniowania słonecznego docierającego do powierzchni Ziemi (Drzewiecki, 2015; Hrynowiecka, 2016).

Na rys. 1.1b) przedstawiono zmiany globalnej temperatury powierzchni w ostatnich 170 latach (czarna linia - średnie roczne) względem okresu 1850–1900. Zmiany temperatury spowodowane są oddziaływaniami czynników antropogenicznych i naturalnych łącznie (*kolor brązowy*) oraz wyłącznie naturalnych (erupcje wulkaniczne i zmiany aktywności Słońca, *kolor zielony*). Kolorowe linie ciągłe obrazują średnią z wielu modeli, a kolorowe pola - wynikający z nich bardzo prawdopodobny zakres zmienności (IPCC, 2021).

Autorzy raportu IPCC (IPCC, 2023) stwierdzają, że ponad stuletni okres spalania paliw kopalnych oraz nierównego i niezrównoważonego wykorzystania energii i gruntów doprowadziły do globalnego ocieplenia o 1,1°C względem poziomu sprzed epoki przemysłowej. To z kolei może być przyczyną występowania coraz częstszych i intensywniejszych ekstremalnych zjawisk pogodowych, które mają coraz bardziej niebezpieczny wpływ na ludzi i ekosystemy w każdym regionie świata. Oczekuje się, że wraz z postępującym ociepleniem klimatu pojawią się pewne zagrożenia dla bezpieczeństwa żywnościowego i wodnego, w tym problemy z zapewnieniem dostępu ludności do źródeł wody pitnej w wielu krajach świata. Znaczna część ludności świata (od około 3,3 do 3,6 miliarda ludzi) żyje w regionach szczególnie narażonych na negatywne konsekwencje zmian klimatu, a w ostatnim dziesięcioleciu liczba zgonów, spowodowanych powodzią, suszami i burzami w tych regionach świata, wzrosła 15-krotnie (IPCC, 2022).

W związku z tym, autorzy raportu wskazują, że istnieją skuteczne możliwości ograniczenia emisji gazów cieplarnianych, a także dostosowania się do zmian klimatu spowodowanych przez człowieka. Jeśli ocieplenie klimatu ma zostać ograniczone do 1,5°C, wymagane jest, aby globalne emisje gazów cieplarnianych osiągnęły najwyższy poziom najpóźniej przed rokiem 2025 i zostały zmniejszone o 43% do roku 2030, 60% do roku 2035 oraz 69% do roku 2040 (IPCC, 2023).

1.1. Sformułowanie problemu badawczego

Scenariusze Zrównoważonego Rozwoju opracowane przez Międzynarodową Agencję Energii (IEA), wyznaczające drogę do osiągnięcia długoterminowych celów klimatycznych zakładają, że technologie wychwytu, wykorzystania i składowania ditlenku węgla (ang. *Carbon Capture, Utilization and Storage, CCUS*) będą odgrywać ważną rolę w ograniczaniu emisji CO₂ w sektorze przemysłowym i energetycznym (IEA, 2018). Wdrażanie CCS napotyka obecnie bariery technologiczne, ekonomiczne, instytucjonalne, ekologiczno-środowiskowe i społeczno-kulturowe. Globalne tempo wdrażania CCS jest

znacznie niższe niż w modelowanych scenariuszach dotyczących ograniczenia globalnego ocieplenia klimatu, niemniej jednak sprzyjające warunki rozwoju technologii, takie jak instrumenty polityczne, większe wsparcie publiczne oraz innowacje technologiczne, mogą zmniejszyć te bariery (IPCC, 2023). Jednak kluczowym czynnikiem ograniczającym możliwość wykorzystania technologii CCS w planach klimatycznych jest regionalna dostępność i rozpoznanie odpowiednich formacji i struktur geologicznych przydatnych do podziemnego składowania CO₂.

Liczne badania wskazują, że istnieje ogromny światowy potencjał dla efektywnego składowania dużych ilości CO₂ w formacjach i strukturach geologicznych, takich jak głębokie poziomy solankowe oraz wyczerpane złoża ropy i gazu. Międzyrządowy Zespół ds. Zmian Klimatu (IPCC) oszacował potencjalną pojemność geologicznego składowania CO₂ na świecie wynoszącą co najmniej 1678 mld Mg CO₂, z czego około 60% stanowią głębokie poziomy solankowe (IEAGHG, 2008). Natomiast techniczna pojemność geologicznego składowania ditlenku węgla w skali światowej szacowana jest na około 1000 mld Mg CO₂, czyli więcej niż zapotrzebowanie na pojemność składowania CO₂ do roku 2100, umożliwiającego ograniczenie globalnego ocieplenia do 1,5 °C (IPCC, 2023). W porównaniu ze złożami ropy naftowej i gazu, głębokie poziomy solankowe są mniej rozpoznane i dlatego ich charakterystyka w skali regionalnej stanowi główny cel w poszukiwaniach odpowiednich miejsc do geologicznego składowania CO₂ (Bachu i in., 2014).

Zgodnie z tzw. Dyrektywą CCS (Dyrektywa, 2009) dotyczącą geologicznego składowania ditlenku węgla, wybór odpowiedniej podziemnej formacji geologicznej w celu trwałego składowania CO₂ musi być poprzedzony opracowaniem szczegółowej charakterystyki i oceną potencjalnego zbiornika składowania oraz otaczającego górotworu.

Charakterystyka dynamicznego zachowania ditlenku węgla składowanego w górotworze stanowi istotny etap oceny potencjalnego kompleksu składowania CO₂ (Dyrektywa, 2009). Modelowanie dynamiczne obejmuje szereg symulacji procesu zatłaczania CO₂ do składowiska z wykorzystaniem trójwymiarowego statycznego modelu geologicznego górotworu. Obliczenia szacunkowe dotyczące pojemności składowania CO₂ w strukturach geologicznych są kluczowym elementem procesu decyzyjnego, gdy rozważa się wdrożenie projektów CCS w skali przemysłowej.

Modelowanie numeryczne znajduje szerokie zastosowanie w inżynierii złożowej i jest wykorzystywane m. in. do optymalizacji produkcji i prognozowania wydajności złoża, korygowania i kalibracji modelu złoża w oparciu o dane rzeczywiste, a także przy opracowaniu analizy niepewności, czy też oceny ryzyka. Zarządzanie złożami i rozwiązywanie zagadnień dotyczących inżynierii naftowej i gazowniczej wymagają często ogromnego nakładu czasu pracy, znacznej mocy obliczeniowej komputerów i związanych z tym kosztów. Symulacje numeryczne są to złożone i czasochłonne procesy, wykorzystujące procedury iteracyjne służące do odwzorowania warunków złożowych panujących w analizowanej strukturze geologicznej oraz modelowania zakładanych procesów technologicznych. Dlatego coraz częściej wykorzystywanym podejściem jest modelowanie zastępcze wykorzystujące elementy sztucznej inteligencji, które umożliwia uzyskanie przybliżonych parametrów eksploatacyjnych złóż przy znacznie mniejszych nakładach pracy.

Modele zastępcze cieszą się w ostatnich latach coraz większym zainteresowaniem i uważane są za niezwykle przydatne narzędzie zarówno do celów optymalizacji, jak i analizy niepewności. Następujące terminy są stosowane jako alternatywne określenia modelu zastępczego: „surrogate model”, „proxy model”, „response surface

model” oraz „meta-model”. Termin „model proxy” jest szeroko stosowany w przemyśle naftowym (Jaber i Awang, 2016; Zubarev, 2009), natomiast najczęściej stosowanym terminem w literaturze jest określenie „surrogate model” (Bahrami, 2022).

W opublikowanych w ostatnim czasie artykułach i przeglądach literatury (m. in. Cao, 2021; Gupta i Li, 2022; Priya i in., 2023; Rahimi i in., 2021; Yan i in. in., 2021; Yao i in., 2023; Al-Sakkari i in., 2024) opisano próby zastosowań algorytmów uczenia maszynowego (ang. *Machine Learning*, ML) w obszarze technologii CCUS. Możliwości zastosowań algorytmów ML w technologiach CCUS są zróżnicowane i obejmują niemal wszystkie etapy procesów dotyczących rozwoju CCUS. Jednym z takich wyzwań jest szerokie zastosowanie metod uczenia maszynowego we wspomaganiu prowadzenia złożonych i czasochłonnych symulacji numerycznych procesów projektowania i optymalizacji składowania ditlenku węgla w strukturach geologicznych.

W związku z powyższym, uzasadnione jest określenie możliwości wykorzystania zastępczego modelu złożowego umożliwiającego zmniejszenie czasochłonności numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂. Wyniki modelowania zastępczego stosowanego w inżynierii złożowej, skłoniły mnie do podjęcia badań w zakresie wykorzystania elementów sztucznej inteligencji do opracowania modelu symulacyjnego procesu geologicznego składowania CO₂ opartego na sztucznych sieciach neuronowych, który może być wykorzystany jako przydatne narzędzie do oceny efektywności procesu składowania CO₂ bez skomplikowanej i czasochłonnej symulacji złoża we wczesnej fazie opracowania projektów CCS.

Problem badawczy pracy jest następujący:

Analiza możliwości wykorzystania sztucznych sieci neuronowych w modelowaniu dynamicznym zachowania ditlenku węgla składowanego w górotworze, mającego na celu znaczne zmniejszenie czasochłonności numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂.

1.2. Cel pracy i koncepcja badań

Celem naukowym pracy jest określenie efektywności procesu geologicznego składowania CO₂ w głębokich solankowych poziomach wodonośnych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji.

Celem utylitarnym jest wykazanie możliwości wykorzystania modelu zastępczego w początkowym etapie projektu CCS umożliwiającego znaczne zmniejszenie czasochłonności numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂.

Do **zmiennych** eksperymentalnych zaliczam:

- parametry strukturalne, geologiczne i złożowe potencjalnego zbiornika CO₂;
- zróżnicowane warianty technologiczne, w tym m. in. wydajność i czas trwania fazy zatłaczania CO₂, temperatura, stopień hydrodynamicznej otwartości struktury, szczelinowanie hydrauliczne.

Natomiast mierzone parametry (**wskaźniki**) są następujące:

- efektywność składowania CO₂, rozkład nasycenia swobodnego CO₂, rozkład CO₂ rozpuszczonego w solance, wartość ciśnienia złożowego w strefie zatłaczania CO₂;
- pojemność składowania CO₂.

Proces badawczy obejmował następujące etapy pracy:

- analiza literatury naukowej i technicznej w zakresie aktualnego stanu wiedzy na temat technologii CCUS oraz rozwoju i klasyfikacji systemów sztucznej inteligencji, w tym podstaw budowy sztucznych sieci neuronowych stanowiących jeden z głównych kierunków badań nad rozwojem sztucznej inteligencji;
- budowa numerycznych modeli złożowych w rejonie trzech wybranych struktur Górnośląskiego Zagłębia Węglowego (GZW);
- analiza wrażliwości modelu symulacyjnego wraz z określeniem wpływu kluczowych parametrów modelu na przebieg procesu składowania CO₂;
- opracowanie modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych.

Założenia dotyczące poszczególnych etapów procesu badawczego przedstawiono w tab. 1.1.

Tab. 1.1. Struktura procesu badawczego (opracowanie własne)

Etapy pracy	Metody badawcze	Zmienne	Wskaźniki	Wyniki etapu
1. Analiza literatury naukowej i technicznej w zakresie wiedzy na temat technologii CCUS				
2. Budowa numerycznych modeli złożowych w poziomach solankowych GZW	Modelowanie numeryczne (Petrel/ Eclipse)	Zróznicowane warianty technologiczne (w tym m. in. wydajność i czas trwania fazy zatłaczania CO ₂ , temperatura, stopień hydrodynamicznej otwartości struktury, szczelinowanie hydrauliczne)	Efektywność składowania CO ₂ , rozkład nasycenia swobodnego CO ₂ , rozkład CO ₂ rozpuszczonego w solance, ciśnienia w strefie zatłaczania	Modele numeryczne trzech wybranych struktur GZW jako potencjalne miejsca składowania CO ₂
3. Analiza wrażliwości i ocena ryzyka modelowanego procesu				Wytypowanie najbardziej perspektywicznej struktury do składowania CO ₂
4. Szczegółowa analiza wrażliwości modelu symulacyjnego – określenie wpływu kluczowych parametrów modelu na przebieg procesu składowania CO ₂			Parametry strukturalne, geologiczne, złożowe potencjalnego zbiornika CO ₂	Pojemność składowania CO ₂
5. Przygotowanie bazy danych do trenowania, walidacji i testowania	MATLAB, Neural Network Toolbox	Opracowanie zestawów parametrów wejściowych modelu symulacyjnego		
6. Opracowanie (testowanie) modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych		Porównanie wyników symulacji modelem zastępczym z wynikami symulacji numerycznych (model złożowy)		Ocena możliwości wykorzystania sztucznych sieci neuronowych do oceny wydajności procesu składowania CO ₂
7. Analiza wyników, sformułowanie wniosków i propozycje dalszych badań				

Poniżej przedstawiłem **metody i narzędzia badawcze**, które wykorzystałem do realizacji założonego programu badawczego:

- **Metody numeryczne:** modelowanie numeryczne i symulacje złożowe procesu geologicznego składowania CO₂ przy wykorzystaniu następującego oprogramowania:
 - Schlumberger Petrel (Geoscience Core, Reservoir Engineering Core),
 - Schlumberger Eclipse (E300 - Compositional);
- **Metody obliczeniowe i statystyczne:** oprogramowanie MATLAB R2018b (MATLAB 9.5) z modułem Neural Network Toolbox dedykowanym sztucznym sieciom neuronowym.

W **rozdziale 1** przedstawiłem wprowadzenie do rozprawy, sformułowanie problemu badawczego, a także przedstawienie celów realizacji pracy oraz koncepcji prowadzonych badań.

W **rozdziale 2** przedstawiłem przegląd literatury naświetlający aktualny stan wiedzy dotyczącej rozwoju technologii CCUS, a w szczególności metod składowania CO₂ w strukturach geologicznych i oceanach. Omówiłem przykłady wykorzystania technik sztucznej inteligencji w przedsięwzięciach mających na celu przeciwdziałanie zmianom klimatycznym; przedstawiłem ogólną klasyfikację systemów sztucznej inteligencji, a także omówiłem podstawy budowy sztucznych sieci neuronowych stanowiących jeden z głównych kierunków badań nad rozwojem sztucznej inteligencji.

W **rozdziale 3** omówiłem podstawowe założenia wykonanych badań własnych, w tym przedstawiłem etapy budowy numerycznego modelu symulacyjnego. Zakres badań obejmował określenie warunków początkowych panujących w górotworze w obrębie potencjalnego składowiska CO₂. Określiłem parametry zatłaczania i lokalizacji otworów iniekcyjnych. Przeprowadziłem szereg symulacji procesu zatłaczania, co umożliwiło mi uzyskanie informacji dotyczących wydajności zatłaczania i właściwości strumienia CO₂, powierzchniowego i pionowego zasięgu CO₂ w funkcji czasu, charakteru przepływu CO₂ w zbiorniku (w tym zachowania fazowego), szczelności utworów nadkładu, pojemności składowania i gradientów ciśnienia w składowisku.

W kolejnym etapie prac dokonałem oceny wrażliwości modelu na niektóre parametry początkowe (temperatura, stopień hydrodynamicznej otwartości struktury). W ramach oceny ryzyka modelowanego procesu określiłem parametry krytyczne wpływające na potencjalny wyciek CO₂, tym m. in. maksymalne ciśnienie w zbiorniku, maksymalna wydajność zatłaczania.

W **rozdziale 4** pracy opracowałem założenia budowy bazowego (referencyjnego) modelu symulacyjnego. Przeanalizowałem wpływ parametrów modelu na przebieg procesu geologicznego składowania CO₂. Przyjąłem zakresy zmienności wybranych pięciu kluczowych parametrów modelu i dla każdego z nich wykonałem po pięć symulacji numerycznych zatłaczania CO₂ uwzględniających zróżnicowane wartości analizowanych parametrów.

W następnym etapie prac wykonałem kompleksową analizę wrażliwości modelu. W tym celu zaprojektowałem eksperyment symulacyjny obejmujący 150 modeli aproksymacyjnych zawierający po 30 próbek dla każdego z pięciu analizowanych parametrów modelu. Wyniki analizy wrażliwości zaprezentowałem na tzw. wykresie tornado, przedstawiającym w sposób graficzny wielkość wpływu zmian wartości wszystkich kluczowych parametrów modelu na wyniki symulacji złożowych.

Rozdział 5 zawiera omówienie poszczególnych etapów budowy modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych. W tym rozdziale przedstawiłem metodykę opracowania bazy danych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej, a także optymalizacji bazy danych przy wykorzystaniu metod typu Monte Carlo (MC) z wykorzystaniem metody próbkowania statystycznego przestrzeni danych wejściowych z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łącińskiego. Ponadto omówiłem strukturę opracowanej sztucznej sieci neuronowej. W ramach testowania zastępczego modelu złożowego porównałem wyniki zatłaczania CO₂ wygenerowane za pomocą sztucznej sieci neuronowej z wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w numerycznym modelu złożowym.

Rozdział 6 zawiera wnioski z przeprowadzonych badań.

2. Aktualny stan wiedzy - przegląd literatury

2.1. Rozwój technologii wychwytu, wykorzystania i składowania ditlenku węgla (CCUS) skutecznym sposobem na zmniejszenie emisji CO₂

2.1.1. Przegląd technologii wychwytu, wykorzystania i składowania CO₂

Skutki globalnego ocieplenia są już widoczne w postaci coraz częstszych i intensywniejszych ekstremalnych zjawisk pogodowych jak i globalnych zmian, tj. fal upałów, susz, intensywnych opadów, nawałnic, bezśnieżnych zim, podnoszenia się poziomu mórz i oceanów, zakwaszania oceanów czy topnienia lodowców. Wymogiem zatrzymania wzrostu globalnej temperatury powierzchni Ziemi, powodowanego przez CO₂, jest osiągnięcie globalnych zerowych emisji CO₂ netto, czyli zrównoważenia antropogenicznych emisji CO₂ przez antropogeniczne procesy pochłaniania CO₂ (IPCC, 2021).

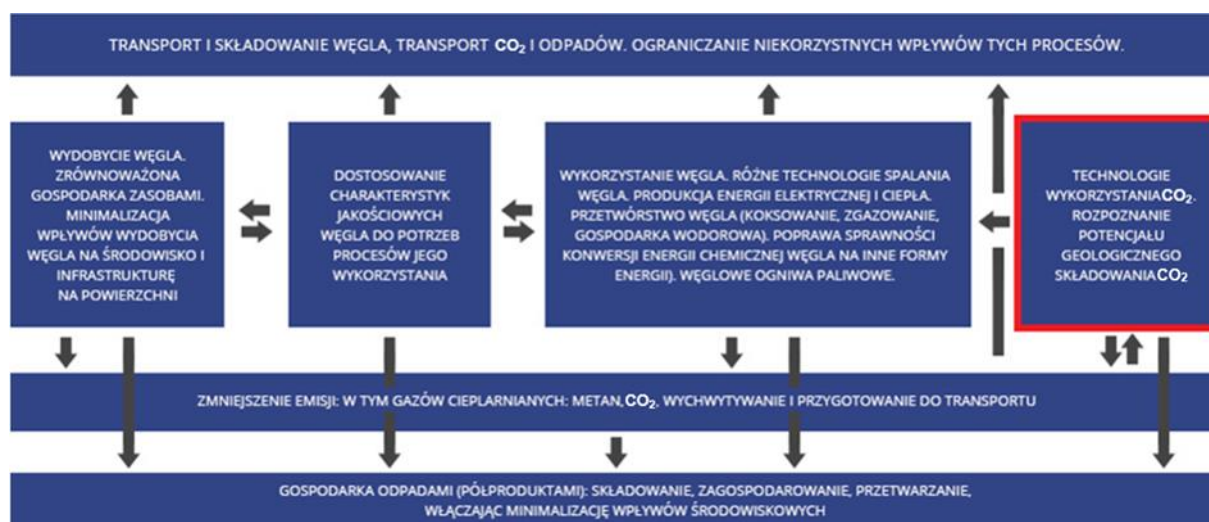
Jednak biorąc pod uwagę przewidywany wzrost światowego zużycia energii, zawartość CO₂ w atmosferze będzie prawdopodobnie w nadchodzących dziesięcioleciach znacząco wzrastać. Dlatego rozwijane są technologie, które umożliwiają minimalizację tego zjawiska. Jednym ze sposobów na ograniczenie emisji CO₂ jest rozwój czystych technologii węglowych (CTW), które mają na celu poprawę efektywności wydobywania, przeróbki, przetwarzania oraz utylizacji węgla, a także zwiększenia akceptowalności tych procesów z punktu widzenia wpływu na środowisko (OECD/IEA, 1993; WCI, 2000; Miller, 2017).

Pełny cykl życia czystych technologii węglowych (CTW) uwzględnia eko-innowacyjne technologie związane z wydobywaniem węgla, wykorzystaniem węgla oraz sekwestracją ditlenku węgla. Czyste technologie węglowe umożliwiają energooszczędne oraz przyjazne dla środowiska wykorzystanie węgla i obejmują między innymi technologie wytwarzania energii, w tym innowacyjną produkcję energii ze zgazowania węgla, a także technologie wychwytywania, wykorzystania i składowania ditlenku węgla (Burchart-Korol, 2015).

W ostatnim czasie, gdy zaobserwowano występowanie zjawiska zmian klimatu na Ziemi oraz powiązано je z emisją antropogenicznego CO₂ i innych gazów cieplarnianych do atmosfery, kwestie dotyczące zmniejszenia emisji CO₂ stały się kluczowymi w całym łańcuchu CTW, a technologie CCUS stały się odrębnym,

wydzielonym z CTW zagadnieniem. Jednak z redukcją emisji gazów cieplarnianych mamy do czynienia zarówno na etapie wydobywania węgla (ujęcie i wykorzystanie metanu z pokładów węgla), jak również na etapie wykorzystania węgla (redukcja emisji CO₂) oraz zagospodarowania produktów odpadowych z produkcji i wykorzystania węgla (np. redukcja emisji z aktywnych termicznie składowisk odpadów). Ponadto poprawa sprawności procesów konwersji energii chemicznej węgla na inne użyteczne formy energii, czyli rozwój technik i technologii w procesach wykorzystania węgla, ma znaczny wpływ na zmniejszenie emisji gazów cieplarnianych (FIF-ARP, 2023). Na rys. 2.1. przedstawiono różnorodność tematyczną pojęcia CTW oraz współzależności różnych obszarów badawczych stanowiących elementy CTW, w tym zagadnień CCUS.

Technologie CCUS (ang. *Carbon Capture, Utilization and Storage*) są powszechnie uznawanym elementem w całym łańcuchu CTW i stanowią grupę metod, które mogą na różne sposoby spełniać cele klimatyczne i stać się kluczową alternatywą dla dekarbonizacji światowych gałęzi przemysłu. Wychwyt ditlenku węgla, a następnie jego transport i wykorzystanie (utyliczacja) w gospodarce lub też trwałe składowanie geologiczne są rozwiązaniami komplementarnymi do działań mających na celu eliminację emisji CO₂ lub wzrost naturalnego pochłaniania tego gazu z atmosfery. W związku z tym, technologie CCUS stanowią wsparcie dla niskoemisyjnych rozwiązań przemysłowych, umożliwiając przy tym pogodzenie wykorzystania paliw kopalnych i występowania nieuchronnych emisji procesowych razem z budową gospodarki neutralnej klimatycznie (Wilberforce i in., 2021).



Rys. 2.1. Różnorodność tematyczna pojęcia CTW oraz współzależności różnych obszarów badawczych stanowiących elementy CTW, w tym zagadnień CCUS (opracowanie własne na podstawie: FIW-ARP, 2023)

Jednym z elementów pełnego łańcucha czystych technologii węglowych (CTW) jest technologia CCS, czyli proces polegający na wychwytywaniu CO₂ z instalacji przemysłowych, jego transporcie do składowiska i zatłoczeniu do odpowiedniej podziemnej formacji geologicznej w celu trwałego składowania. Wybór odpowiedniego składowiska ma kluczowe znaczenie, aby zapewnić, że zatłaczany CO₂ będzie w sposób trwały składowany w górotworze. Potencjalna formacja geologiczna może być wybrana jako składowisko, tylko jeżeli nie istnieje znaczące ryzyko wycieku i jeżeli w żadnym przypadku nie odnotowuje się znaczącego wpływu na środowisko lub zdrowie ludzi. Należy to ustalić poprzez szczegółową charakterystykę i dokonanie oceny potencjalnego kompleksu składowania zgodnie z określonymi wymogami. Ponadto konieczne jest

monitorowanie kompleksu składowania i instalacji zatłaczania w sposób umożliwiający ocenę zachowania się zatłoczonego CO₂ w górotworze oraz obserwację ewentualnych wycieków (Dyrektywa CCS, 2009). Metody składowania CO₂ w strukturach geologicznych i oceanach opisano szerzej w rozdziale 2.1.2.

Istnieje technologia pokrewna do CCS dotycząca wychwyty i składowania CO₂ w górotworze poprzez mineralną karbonatyzację (ang. *Carbon Capture and Mineral Carbonation*, CCMC) (Doucet i in., 2011; Kolawole i in., 2022; Fauth i in., 2000; Pan i in., 2020; Kojima i in., 1997; Liu i in., 2021; Woodall i in., 2019). W tym przypadku wychwycony CO₂ można magazynować poprzez zatłaczanie do skał reaktywnych, takich jak skały magmowe zasadowe lub ultrazasadowe, co powoduje mineralizację CO₂, a tym samym trwałe wiązanie ditlenku węgla przy znikomym ryzyku powrotu do atmosfery. Mineralizacja CO₂ w ramach procesu CCMC oferuje dużą potencjalną objętość składowania ditlenku węgla w formacjach takich jak bazalty i perydotyty (zarówno na lądzie, jak i na morzu) i jest nadal intensywnie badana i rozwijana (Mao i in., 2023; Snæbjörnsdóttir i in., 2020; Thonemann i in., 2022).

Kolejną równie wartościową strategią stanowiącą pewną modyfikację technologii CCS jest połączenie pozyskiwania energii z biomasy z jednoczesnym wychwytywaniem i składowaniem CO₂ (ang. *Bioenergy with Carbon Capture and Storage*, BECCS) (Babin i in., 2021; Kemper, 2015; Gough i Upham, 2010; Hanssen i in., 2020). Technologia BECCS polega na wychwytywaniu i trwałym składowaniu CO₂ pochodzącym z procesów, w których biomasa jest przetwarzana na paliwa lub bezpośrednio spalana w celu wytworzenia energii. Energia wytwarzana z biomasy (bioenergia) pozyskiwana w sposób zrównoważony może być neutralna pod względem emisji ditlenku węgla, ponieważ rośliny absorbują CO₂ z atmosfery w trakcie wzrostu, a to z kolei może równoważyć emisję CO₂ powstającą podczas spalania biomasy jako paliwa (Ganeshan i in., 2023). Z raportu *IPCC Climate Change and Land* wynika, że BECCS jest jednym z najskuteczniejszych działań związanych z użytkowaniem gruntów, które mogą obniżyć emisję ditlenku węgla o 0,4-11,3 mld Mg CO₂ rocznie w latach 2020-2050 (Shukla i in., 2019).

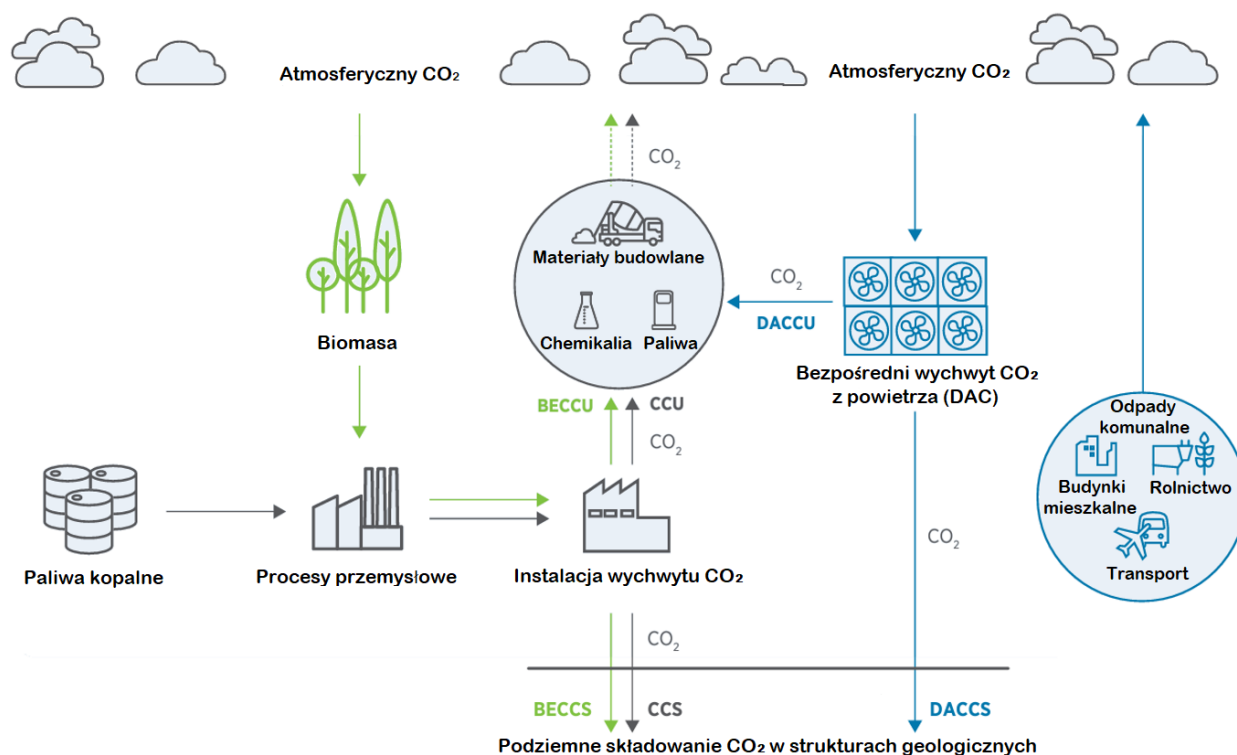
Z drugiej strony istnieje konkurencyjna technologia dla CCS, w której zamiast geologicznego składowania ditlenku węgla, może go ponownie wykorzystać jako surowiec w procesach przemysłowych (ang. *Carbon Capture and Utilization*, CCU) (IEA, 2019; Baena-Moreno i in., 2019; Nocito i Dibenedetto, 2020; Ross i in., 2019; Zhaurova i in., 2021; Al-Mamoori i in., 2017; Wilson i in., 2016; Chauvy i Weireld, 2020).

Cykl obiegu ditlenku węgla z wykorzystaniem technologii CCS/CCU, BECCS/BECCU i DACCS/DACCU przedstawiono schematycznie na rys. 2.2.

Wychwycony CO₂ można wykorzystać do produkcji nowych wartościowych produktów takich jak np. metanol, paliwa (Bonura i in., 2021; De Falco i in., 2022; Okoye-Chine i in., 2022), tworzywa sztuczne i polimery (Bachmann i in., 2021), komponenty budowlane (Monteiro i Roussanally, 2022; Batuecas i in., 2021) i reagenty do różnych syntez chemicznych (Dibenedetto i in., 2014; Osman i in., 2021, Alper i Yuksel Orhan, 2017; Koytsoumpa i in., 2018; Cordero-Lanzac i in., 2021; Chehraz i Moghadas, 2022).

Ponadto należy wspomnieć, że ditlenku węgla emitowanego z niektórych źródeł nie da się wychwycić - są to przede wszystkim odpady rolnicze, sektor mieszkalno-usługowy, leśnictwo, odpady komunalne, a przede wszystkim transport (Dzierański i in., 2023). Dlatego opracowano także technologię usuwania ditlenku węgla bezpośrednio z atmosfery (ang. *Direct Air Capture*, DAC) (IEA, 2021). Technologia DAC w powiązaniu z geologicznym składowaniem lub utylizacją CO₂ jest określana odpowiednio jako DACS (ang. *Direct Air Capture and Storage*) lub DACU (ang. *Direct Air Capture and Utilization*).

Obecnie stosowane są techniki wychwytywania CO₂ z powietrza w oparciu o adsorbenty stałe lub też wodne roztwory zasadowe, takie jak np. wodorotlenek potasu. Na całym świecie działa 19 instalacji do bezpośredniego wychwytywania powietrza, które wychwytyują z atmosfery sumarycznie nieco powyżej 10 tys. Mg CO₂ rocznie (IEA, 2021).



Rys. 2.2. Cykl obiegu ditlenku węgla z wykorzystaniem technologii CCS/CCU, BECCS/BECCU i DACCS/DACCU (opracowanie własne na podstawie: Lyons i in., 2021)

2.1.2. Metody składowania CO₂ w strukturach geologicznych i oceanach

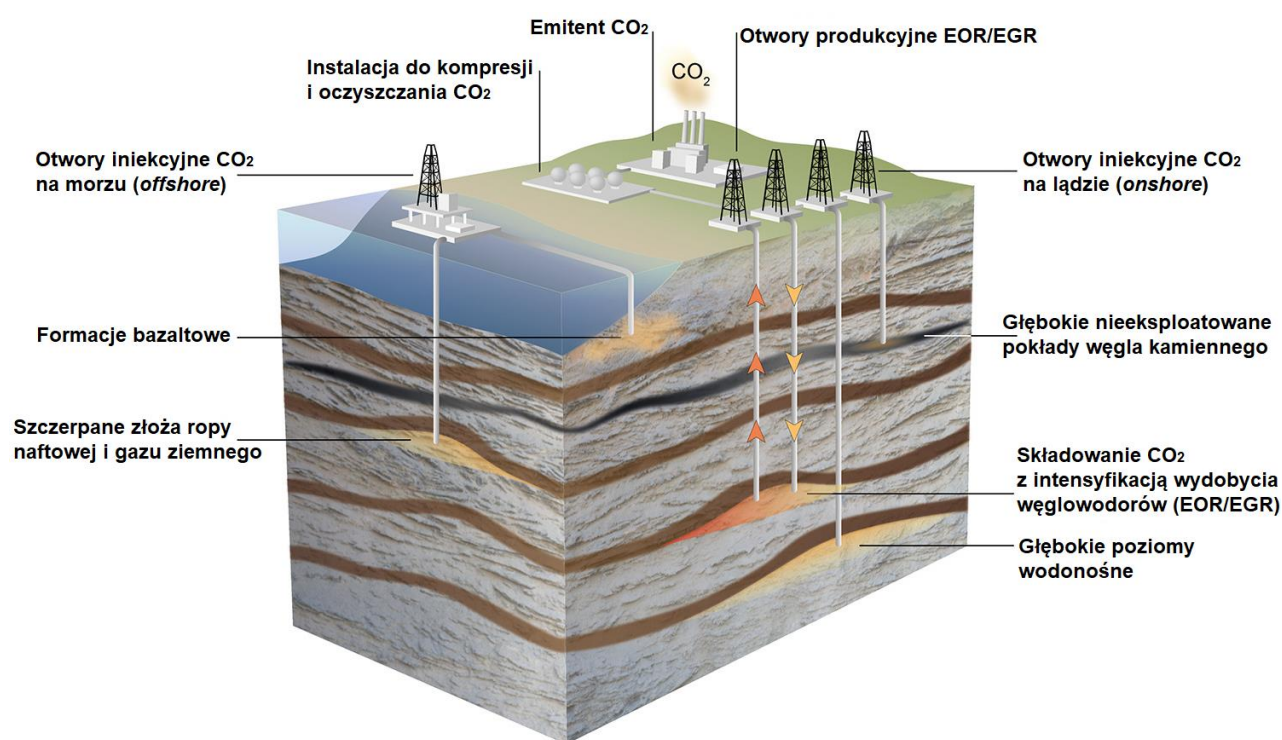
2.1.2.1. Podziemne składowanie CO₂ w strukturach geologicznych

Za najbardziej rozwiniętą i zaawansowaną metodę procesu sekwestracji ditlenku węgla uważa się podziemne składowanie w strukturach geologicznych. Istnieje kilka czynników, które sprawiają, że składowanie geologiczne stanowi lepszą strategię sekwestracji w porównaniu z mineralną karbonatyzacją, czy składowaniem oceanicznym. Są to przede wszystkim aspekty ekonomiczne, zagrożenia dotyczące bezpieczeństwa procesu składowania, a także obawy dotyczące negatywnego wpływu na środowisko, wynikające z zastosowania technologii mineralnej karbonatyzacji i składowania CO₂ w oceanach (Aminu i in., 2017). Wyróżnić można kilka potencjalnych struktur geologicznych przydatnych do podziemnego składowania CO₂ (rys. 2.3):

- głębokie poziomy wodonośne,
- wyeksploatowane złoża ropy naftowej i gazu ziemnego,
- głębokie nieeksploatowane pokłady węgla,
- skały bazaltowe,
- łupki bogate w substancje organiczne.

Głęboko zalegające solankowe poziomy wodonośne oraz wyeksploatowane i częściowo sczerpane złoża węglowodorów są uważane za główne potencjalne struktury geologiczne przydatne do podziemnego składowania CO₂.

Struktury antyklinalne zlokalizowane w głęboko zalegających solankowych poziomach wodonośnych występują na obszarach dużych basenów sedymentacyjnych i charakteryzują się dużą przydatnością do celów podziemnego składowania ditlenku węgla. W porównaniu do złóż węglowodorów cechują się mniejszym stopniem rozpoznania geologicznego, jednak z drugiej strony charakteryzuje je znacznie większa potencjalna pojemność składowania (Ali, Aftab, 2020; Ji i Zhu, 2015). Z informacji Międzyrządowego Zespołu ds. Zmian Klimatu (IPCC) wynika, że w skali globalnej złoża węglowodorów mogą pomieścić od 675 do 900 miliardów Mg CO₂, natomiast solankowe poziomy wodonośne charakteryzują się szacunkową pojemnością magazynowania CO₂ wynoszącą od 1000 do 100 000 miliardów Mg (Durand, 2011; Metz i in., 2005).



Rys. 2.3. Podstawowe możliwości geologicznego składowania ditlenku węgla (opracowanie własne na podstawie: Ali i in., 2022)

Wyeksploatowane złoża ropy naftowej i gazu ziemnego stanowią niezwykle przydatne zbiorniki do składowania CO₂, gdyż są one naturalnymi pułapkami dla węglowodorów i posiadają ustaloną szczelność oraz charakterystykę złoża potwierdzoną w trakcie jego eksploatacji. W przypadku złóż ropy i gazu, istniejącą infrastrukturę naziemną i podziemną służącą do eksploatacji węglowodorów, po niewielkich modyfikacjach można ponownie wykorzystać do składowania CO₂ (Cao i in., 2020). Ponadto składowanie CO₂ w złożach węglowodorów może być połączone z dodatkowym odzyskiem ropy naftowej (ang. *Enhanced Oil Recovery*, EOR) i wspomaganie wydobywania gazu ziemnego (ang. *Enhanced Gas Recovery*, EGR) (Blunt i in., 1993; Metz i in., 2005).

Oprócz tego skały bazaltowe wykazują ogromny potencjał magazynowania CO₂ w formie zmineralizowanej w procesie opracowanym w ramach projektu CarbFix (Abdulelah i in., 2021; Gíslason i in., 2018; Gíslason i in., 2010). W tym procesie ditlenek węgla zmieszany z wodą są zatłaczane do skalnych formacji bazaltowych, wywołując

szybką reakcję chemiczną polegającą na magazynowaniu CO₂ w postaci skarbonizowanej (Gislason i Oelkers, 2014). Zaletą tego procesu jest brak wymagań dotyczących dużego stężenia CO₂ w trakcie zatłaczania, a także duża wydajność tej technologii, w ramach której możliwe jest trwałe składowanie do 100 kg CO₂ w metrze sześciennym bazaltu (Gislason i in., 2018; Al-Yaseri i Jha, 2021; Matter i in., 2007).

Ponadto, łupki bogate w substancje organiczne są kolejną formacją skalną przydatną do trwałego składowania CO₂ w strukturach geologicznych. Skały łupkowe są to niskoporowate, nieprzepuszczalne skały osadowe, które mogą magazynować znaczne ilości zatłoczonego CO₂ (Kang i in., 2011). W tych formacjach skalnych CO₂ jest trwale uwieczony w stanie zaadsorbowanym w rozproszonej w skale materii organicznej (Arif i in., 2017; Kang i in., 2011; Lutyński, Gonzalez, 2016; Waszczuk-Zellner i in., 2022).

Ditlenek węgla może być składowany również w głębokich nieeksploatowanych pokładach węgla kamiennego, w których CO₂ może być uwieczony pod trzema różnymi postaciami: 1) pory matrycy węglowej wypełnione wolnym CO₂, 2) ditlenek węgla rozpuszczony w cieczy znajdującej się w porach matrycy węgla oraz 3) CO₂ uwieczony jako adsorbat na powierzchni węgla (Awan i in., 2020). Ponadto, zatłaczanie CO₂ do pokładów węgla zawierających metan może być wykorzystywane w procesie wspomagania odzyskiwania metanu z pokładów węgla (ang. *Enhanced Coal Bed Methane*, ECBM), w którym ditlenek węgla jest sorbowany przez węgiel preferencyjnie w stosunku do metanu (Su i in., 2019; Viete i Ranjith, 2006).

2.1.2.1.1. Składowanie CO₂ w solankowych warstwach wodonośnych

Składowanie CO₂ w solankowych warstwach wodonośnych jest uważane za jeden z najbardziej realnych scenariuszy wdrożenia technologii CCUS (Burnol i in., 2015; Frerichs i in., 2014; Yang i in., 2013; Javaheri i Jessen, 2011; Urych i in., 2022). Ten rodzaj składowania CO₂ charakteryzuje się wysokim poziomem gotowości technologicznej – TRL 9 (ang. *Technology Readiness Level*, TRL) i zapewnia potencjalnie największą w skali globu pojemność składowania (od 1000 do 10 000 mld Mg CO₂) (Bachu, 2000).

Na całym świecie przeprowadzono wiele badań nad potencjałem składowania CO₂ w solankowych warstwach wodonośnych, głównie w powiązaniu z technologią EOR (Bachu i Adams, 2003). Jednakże z ekonomicznego punktu widzenia wiele solankowych warstw wodonośnych jest obecnie mniej konkurencyjna jako opcja składowania CO₂ w porównaniu z EOR ze względu na brak niezbędnej infrastruktury naziemnej, takiej jak otwory zatłaczające, urządzenia powierzchniowe i rurociągi, a także koszty inwestycyjne związane z rozwojem takiej infrastruktury (Li i in., 2006; Wang i in., 2016).

Większość solankowych poziomów wodonośnych, położonych na głębokościach większych niż 1 km, znajduje się w basenach sedymentacyjnych. Takie baseny posiadają ogromny potencjał składowania CO₂ ze względu na dobre parametry zbiornikowe, w tym dużą porowatość i wysoką przepuszczalność, co decyduje o braku wymagań dotyczących znacznej ilości niezbędnych otworów iniekcyjnych i ułatwia rozpraszanie ciśnienia powstałego w górotworze wskutek zatłaczania CO₂ (Shukla i in., 2010).

Gęstość nadkrytycznego CO₂ w poziomach solankowych wynosi około 0,6–0,7 g/cm³ i jest niższa od gęstości solanki w warstwach wodonośnych, co powoduje unoszenie się CO₂ w kierunku nadkładu pod wpływem siły wyporu (Lee i in., 2010; Han i in., 2009). Aby zapewnić długoterminowe składowanie CO₂, warstwy zbiornikowe muszą być znacznych rozmiarów, a nadkład skalny musi stanowić dobre uszczelnienie (Armitage i in., 2013). Fleury i in. (Fleury i in., 2010) zdefiniowali nadkład jako formację o niskiej lub bardzo niskiej przepuszczalności znajdującą się ponad formacją zbiornikową CO₂

i w której nie powinno występować przemieszczanie się zatłoczonego CO₂. Ten nadkład o niskiej przepuszczalności jest niezbędny, aby zapobiec migracji CO₂ z warstw zbiornikowych i zminimalizować ewentualny wyciek składowanego CO₂.

Głównym problemem związanym ze składowaniem CO₂ w formacjach solankowych jest wzrost ciśnienia górotworu spowodowany zatłaczaniem CO₂ oraz migracja CO₂ w kierunku skał nadkładu, które mogą powodować spękania skał zbiornikowych i uszkodzenie warstw uszczelnienia. Ponadto istnieje ryzyko reaktywacji już istniejących uskoków i spękań górotworu, które mogą stanowić drogi migracji CO₂ przez nadkład skalny do powierzchni terenu (Orlic, 2016). Obecność nierozpoznanych uskoków lub spękań górotworu to jeden z głównych czynników, który może skutkować utratą integralności nadkładu skalnego i wyciekami składowanego CO₂ (Buttinelli i in., 2011).

W trakcie zatłaczania CO₂ do warstwy zbiornikowej nadkrytyczny gaz wypiera płyny złożowe (wody solankowe) wypełniające pory skalne i otwarte szczeliny, a następnie zaczyna reagować z gazami, wodą i skałami w formacji zbiornikowej (Mito i in., 2013; Le Gallo i in., 2002), co ostatecznie prowadzi do wytrącenia nowych minerałów i/lub rozpuszczenia już istniejących minerałów (Cantucci i in., 2009). Tworzenie się i rozpuszczanie minerałów może powodować zmiany pierwotnej porowatości skał, co w konsekwencji może prowadzić do zmiany pojemności zbiornika (Wdowin i in., 2013).

Podczas zatłaczania ditlenku węgla do głębokich solankowych warstw wodonośnych występuje kilka kluczowych mechanizmów „pułapkowania” CO₂, które są istotne z punktu widzenia skuteczności i bezpieczeństwa procesu składowania CO₂ (Bradshaw i in., 2007; Metz i in., 2005; Uliasz-Misiak, 2008; IEAGHG, 2014; Shukla i in., 2010; De Silva i Ranjith, 2012; Luboń, 2020; Global CCUS Report, 2022) i są one następujące (rys. 2.4):

- „pułapkowanie” strukturalne i stratygraficzne,
- „pułapkowanie” gazu rezydualnego,
- „pułapkowanie” przez rozpuszczanie,
- „pułapkowanie” mineralne,
- „pułapkowanie” hydrodynamiczne.

Mechanizmy „pułapkowania” **strukturalnego i stratygraficznego** występują, gdy cechy budowy geologicznej górotworu w miejscu składowania CO₂ tworzą barierę (pułapkę) dla ditlenku węgla, uniemożliwiając tym samym jego migrację, podobnie jak w przypadku pułapki złożowej dla węglowodorów. Zatłoczony CO₂ może migrować i gromadzić się w stropowej części warstwy zbiornikowej, a następnie pomimo działania sił grawitacji i wyporu zostaje uwięziony pod nadkładem skalnym o bardzo niskiej przepuszczalności (Kim i in., 2017). Ten typ pułapek (barier) fizycznych to głównie antyklinalnie ułożone warstwy skał zbiornikowych przykryte uszczelniającym nadkładem skalnym (rys. 2.4a). W pewnych warunkach geologicznych także możemy mieć do czynienia z „pułapkowaniem” fizycznym, gdy warstwy zbiornikowe stopniowo zmniejszają swój zasięg i miąższość, aż do całkowitego zaniku (wyklinowania), albo też w przypadku, gdy warstwy zbiornikowe są ograniczone przez nieprzepuszczalny uskok. Mechanizmy „pułapkowania” strukturalnego i stratygraficznego dominują w pierwszych kilku dziesięcioleciach procesu składowania CO₂. Część zatłoczonego CO₂ może pozostać uwięziona fizycznie w fazie wolnej, ale składowanie ditlenku węgla uwięzionego wskutek działania tych mechanizmów można uznać za trwałe, tylko jeśli warunki geologiczne

górotworu są stabilne, a składowany CO₂ zachowuje się w warstwach zbiornikowych zgodnie z przewidywaniami (Global CCUS Report, 2022).

Z mechanizmem „pułapkowania” **gazu rezydualnego (resztkowego)** mamy do czynienia, gdy zatłoczony CO₂ wypiera płyny złożowe i migruje w warstwach zbiornikowych, a część ditlenku węgla zostaje uwięziona w przestrzeni porowej i niejednorodnościach skały w skali mikro, w wyniku działania sił napięcia powierzchniowego (rys. 2.4b). Proces ten jest kontrolowany przez połączenia między porami, litologię skał zbiornikowych oraz skład chemiczny płynów złożowych wypełniających pory skalne. Pory w skałach zbiornikowych mają zazwyczaj wielkość mniejszą niż 1 mm, są ze sobą połączone i często stanowią 10–30% objętości skały. Chociaż „pułapkowanie” gazu rezydualnego zachodzi w skali mikro, to całkowita objętość CO₂ uwięziona przez ten mechanizm jest znacząca w odniesieniu do całego zbiornika o miąższości kilkudziesięciu metrów i szerokości tysięcy metrów. „Pułapkowanie” rezydualne rozwija się około 10 lat od rozpoczęcia zatłaczania CO₂ i ma kluczowe znaczenie w pierwszych dziesięcioleciach projektu składowania. Proces ten zachodzi łącznie z rozpuszczaniem CO₂ w płynach złożowych.

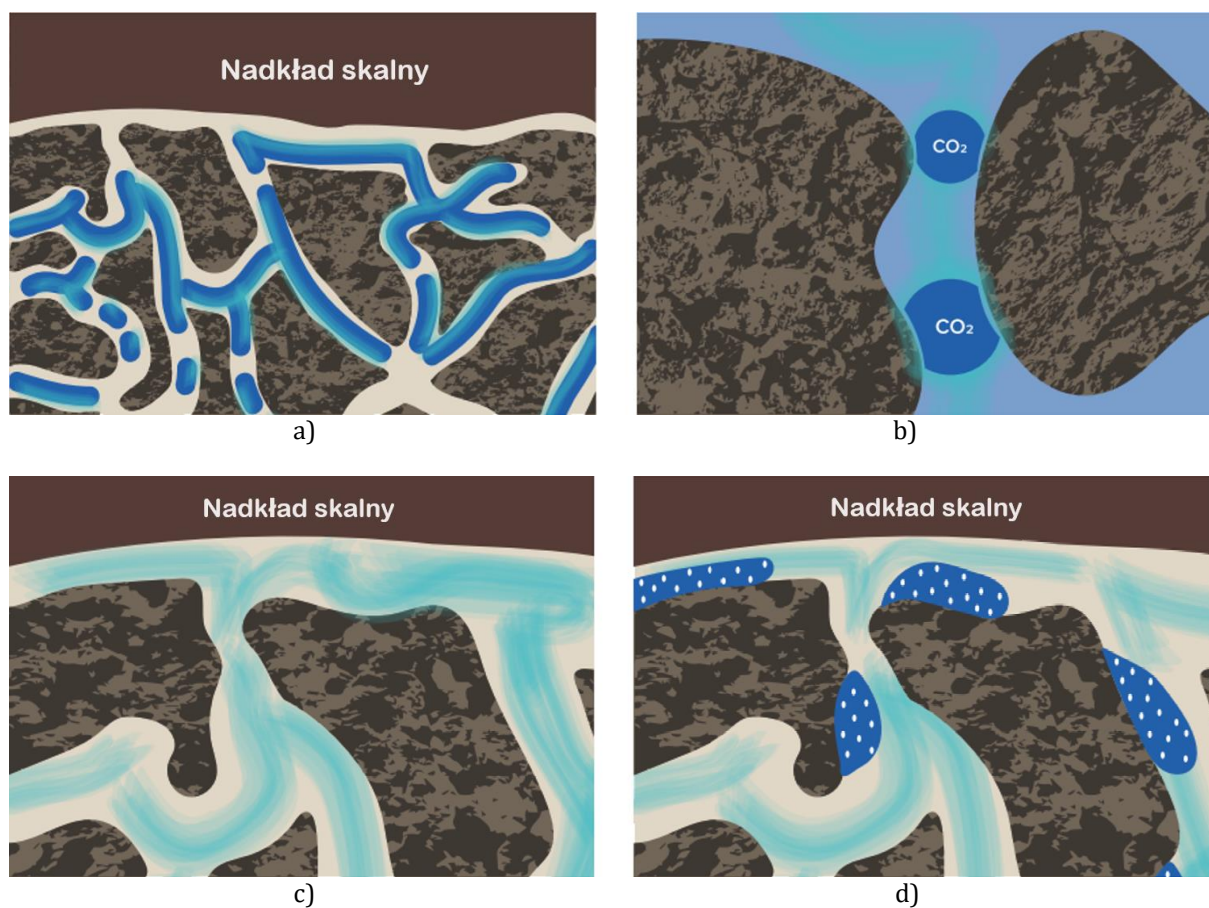
Kolejnym mechanizmem „pułapkowania” jest **rozpuszczanie CO₂ w płynach złożowych** (woda, ropa naftowa) wypełniających przestrzenie porowe w skałach zbiornikowych o dużej miąższości i przepuszczalności (zwłaszcza pionowej). Ditlenek węgla rozpuszcza się w wodach solankowych równocześnie redukując objętość CO₂ w fazie wolnej (rys. 2.4c).

Rozpuszczalność CO₂ zależy od chemizmu, temperatury płynu złożowego oraz ciśnienia panującego w zbiorniku. Roztwór solanki nasyconej CO₂ ma większą gęstość od solanki nienasyconej i opada na dno warstwy zbiornikowej wskutek działania sił grawitacji. Wraz z upływem czasu solanka nasycona CO₂ ulega procesowi dyfuzji i rozprasza się w regionalnym systemie hydrogeologicznym, aż do całkowitego rozpuszczenia CO₂ w solance i osiągnięcia stanu równowagi, co może zająć kilka tysięcy lat ze względu na bardzo mały współczynnik dyfuzji molekularnej.

Mechanizm „pułapkowania” mineralnego zachodzi, gdy CO₂ reaguje chemicznie z minerałami skalnymi i płynami złożowymi w warstwie zbiornikowej powodując powstawanie minerałów węglanowych (rys. 2.4d). Proces ten powoduje trwałe uwięzienie CO₂ w postaci węglanów i nazywany jest mineralną karbonatyzacją (Bachu i in., 1994). Zależy od ciśnienia i temperatury złożowej, a także od składu mineralnego skał, rodzaju płynów złożowych oraz ich wzajemnych oddziaływań. Warstwy zbiornikowe przeznaczone do składowania CO₂ przeważnie charakteryzują się korzystnymi warunkami do „pułapkowania” mineralnego CO₂. Efektywność tego procesu zależy w dużej mierze od rodzaju skał zbiornikowych. W skałach węglanowych reakcje chemiczne będą zachodzić najszybciej, natomiast w piaskowcach kwarcowych wystąpią po upływie bardzo długiego czasu, a w niektórych skałach mogą w ogóle nie zaistnieć (Luboń, 2020). Mineralna karbonatyzacja rozpoczyna się natychmiast po rozpoczęciu zatłaczania CO₂, ale zazwyczaj stanowi niewielką część składowanego CO₂, aż do upływu tysięcy lat. W tej skali czasowej w konwencjonalnym zbiorniku składowania większość CO₂ będzie już trwale zmagazynowana przez trzy opisane powyżej mechanizmy „pułapkowania”. Jednakże zatłaczanie CO₂ do określonego typu skał zbiornikowych (takich jak bazalty), w pewnych warunkach złożowych może skutkować szybką mineralizacją większości CO₂ w całym okresie trwania procesu składowania (Global CCUS Report, 2022). Proces ten charakteryzuje się wolniejszym przebiegiem w porównaniu do rozpuszczania CO₂ w płynach złożowych i zachodzi w dłuższej skali czasu

geologicznego (Hellevang i in., 2017; Sundal i in., 2014; Gunter i in., 2004; Zhang i Song, 2014).

„Pułapkowanie” hydrodynamiczne występuje po rozpoczęciu zatłoczenia CO₂ do górotworu i zachodzi dzięki powolnej infiltracji wód złożowych w głębokich solankowych poziomach wodonośnych. W regionalnych systemach hydrogeologicznych o rozmiarach sięgających setek kilometrów, prędkość przepływu wód wynosi kilka centymetrów na rok (Luboń, 2020). W tego typu systemach, charakteryzujących się brakiem strukturalnych i stratygraficznych pułapek, które lokalnie mogą zatrzymywać horyzontalną migrację CO₂, zatłoczony ditlenek węgla może utrzymywać się poniżej nieprzepuszczalnych skał nadkładu do tysiący lub milionów lat. Zanim CO₂ dotrze do powierzchni ziemi zostanie poddany działaniu wszystkich opisanych wcześniej mechanizmów „pułapkowania” i w efekcie może zostać uwięziony w sposób trwały w strukturach geologicznych. Ta metoda składowania CO₂ jest w dużym stopniu uzależniona od zdolności uszczelniających nadkładu skalnego, co stanowi wyzwanie przy wyborze miejsca składowania.



Rys. 2.4. Kluczowe mechanizmy „pułapkowania” CO₂: a) „pułapkowanie” strukturalne i stratygraficzne, b) „pułapkowanie” gazu rezydualnego (resztkowego), c) rozpuszczanie w płynach złożowych, d) „pułapkowanie” mineralne (opracowanie własne na podstawie: Global CCUS Report, 2022)

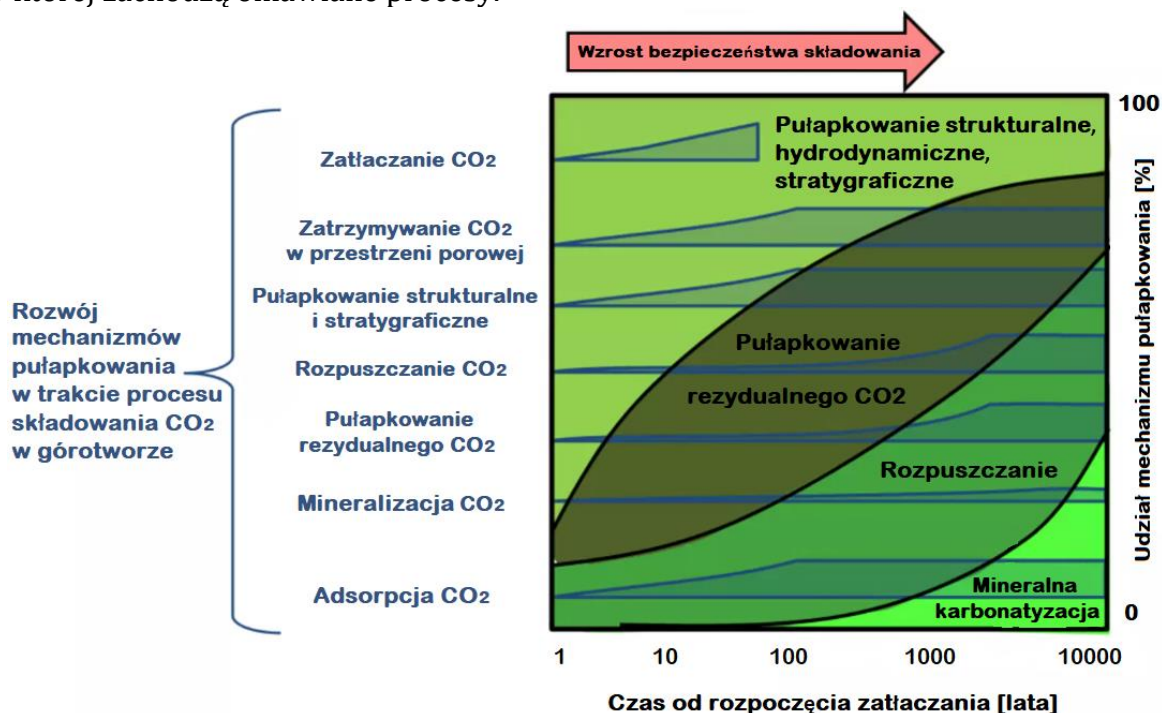
Efektywność geologicznego składowania zależy od połączenia fizycznych i geochemicznych mechanizmów „pułapkowania”. Wraz z upływem czasu składowania CO₂ w górotworze nasilają się procesy fizyczne „pułapkowania” resztkowego CO₂, procesy geochemiczne rozpuszczania CO₂ w płynach złożowych oraz „pułapkowanie” mineralnego (rys. 2.5). Proces trwałego uwięzienia ditlenku węgla w formacji

zbiornikowej jest silnie uzależniony od budowy geologicznej i warunków złożowych (ciśnienie, temperatura, rodzaj płynów złożowych), dlatego pojemność składowania w głębokich solankowych poziomach wodonośnych można określać wyłącznie indywidualnie dla każdej z potencjalnych formacji.

Z trudnością w ocenie pojemności składowania CO₂ w głębokich formacjach solankowych związane jest wzajemne oddziaływanie poszczególnych mechanizmów „pułapkowania” podczas rozprzestrzeniania się w górotworze zatłoczonego ditlenku węgla. Do głównych mechanizmów przepływu i transportu kontrolujących rozprzestrzenianie się CO₂ zaliczamy:

- przepływ (migracja) płynów w odpowiedzi na gradienty ciśnienia powstałe w wyniku zatłaczania CO₂;
- przepływ płynów w odpowiedzi na naturalne gradienty hydrauliczne;
- wyporność spowodowana różnicami gęstości pomiędzy CO₂ i płynami złożowymi;
- dyfuzja;
- dyspersja i tworzenie się języków gazowych (ang. *viscous fingering*) spowodowane niejednorodnością formacji i kontrastem ruchliwości pomiędzy CO₂ i płynem złożowym;
- rozpuszczenie w płynie złożowym;
- mineralizacja;
- zatrzymywanie CO₂ w przestrzeni porowej;
- adsorpcja CO₂ na materiale organicznym.

Na rys. 2.5. przedstawiono udział poszczególnych mechanizmów „pułapkowania” w procesie składowania CO₂, a także rozwój w czasie mechanizmów przepływu i transportu kontrolujących rozprzestrzenianie się CO₂ w górotworze. Ocena pojemności składowania jest skomplikowana ze względu na różną skalę czasową i przestrzenną, w której zachodzą omawiane procesy.



Rys. 2.5. Udział mechanizmów „pułapkowania” [%] oraz ich rozwój w trakcie procesu składowania CO₂ w głębokich solankowych poziomach wodonośnych (opracowanie własne na podstawie: IPCC, 2005; Veloso i in., 2016)

2.1.2.1.2. Składowanie CO₂ w wyeksploatowanych złożach węglowodorów

Wychwycony ditlenek węgla można składować w sposób wydajny i trwały w wyeksploatowanych lub częściowo szcerpanych złożach węglowodorów, które pod względem ekonomicznym nie nadają się do dalszego wydobywania ropy i gazu (Global CCS Institute, 2015).

Składowanie CO₂ w wyeksploatowanych złożach ropy i gazu uważa się za jedną z najskuteczniejszych metod magazynowania ze względu na zalety, do których zaliczamy:

- złoża węglowodorów posiadają określone parametry i charakterystykę złoża ustaloną w trakcie poszukiwań oraz eksploatacji węglowodorów (Cao i in., 2020);
- występowanie infrastruktury naziemnej i podziemnej związanej z zagospodarowaniem złoża (np. otwory eksploatacyjne i rurociągi), która po niewielkich modyfikacjach może zostać wykorzystana w procesie składowania CO₂ i znacznie obniżyć koszty przedsięwzięcia (Voormeij i Simandl, 2004; Bachu i Adams, 2003; Wildgust i in., 2013; Ryerson i in., 2013; Hawkes i Gardner, 2013; Preston i in., 2009);
- zatłaczanie gazów takich jak CO₂ w ramach wykorzystania technologii EOR jest powszechnie znane i stosowane w przemyśle naftowo-gazowym, dlatego też zdobyte doświadczenia można wykorzystać w procesie składowania CO₂ (Li i in., 2006).

Ponadto złoża węglowodorów można uznać jako szczelne zbiorniki ropy i gazu o bardzo dobrych parametrach warstw uszczelnienia nadkładu skalnego, który uniemożliwia migrację i wyciek węglowodorów ze złoża w długim czasie geologicznym (Heinemann i in., 2012). Magazynowanie CO₂ w złożach ropy i gazu ma wiele podobieństw do magazynowania w solankowych warstwach wodonośnych - w obu przypadkach w złożach występuje solanka i podobny rodzaj skał zbiornikowych (Li i in., 2014). Z drugiej strony, składowanie CO₂ w złożach węglowodorów może być bardziej ekonomiczne (Alexander i Augustus, 2014; Zangeneh i in., 2013; Smyth i Meckel, 2021), ze względu na możliwość wykorzystania ditlenku węgla w procesie wspomaganego wydobywania ropy naftowej (ang. *Enhanced Oil Recovery*, EOR) lub gazu ziemnego (ang. *Enhanced Gas Recovery*, EGR). Głównym czynnikiem stymulującym wdrażanie technologii EOR jest niska wartość współczynnika szcerpania złóż ropy naftowej wynosząca w skali globalnej około 40% (SIS, 2017). CO₂-EOR jest technologią dojrzałą (TRL 9) i jest szeroko stosowana w przemyśle naftowo-gazowym od ponad 50 lat (Kearns i in., 2021). W procesie CO₂-EOR nadkrytyczny CO₂ jest zatłaczany do częściowo wyeksploatowanego złoża ropy naftowej, w którym następuje zmieszanie się ditlenku węgla z ropą naftową i zmniejszenie jej lepkości. Dzięki temu ropa łatwiej przepływa przez pory skały do odwiertów produkcyjnych, umożliwiając większe wydobywanie ropy naftowej ze złoża (Global Energy Instytut, 2012).

Wykorzystanie technologii EOR umożliwia zwiększenie wydobywania ropy naftowej z odwiertu o 30% do 60% w stosunku do konwencjonalnego procesu wydobywania (Cuéllar-Franca i Azapagic, 2015). Chociaż wydajność procesu wydobywania zostaje zwiększona, znaczna część rozpuszczonego CO₂ powraca na powierzchnię wraz z ropą wydobywaną ze złoża, a część CO₂ może zostać uwolniona do atmosfery. W celu obniżenia kosztów zakupu CO₂, ditlenek węgla jest oddzielany od wyeksploatowanej ropy, a następnie ponownie zatłaczany do złoża. W efekcie prawie cała ilość wykorzystywanego CO₂ zostaje w sposób trwały uwięziona w złożu po zakończeniu eksploatacji pola naftowego (Hill i in., 2013).

Spośród istniejących opcji stosowania technologii EOR, w tym gazowych, termicznych, chemicznych metod zatłaczania, najczęściej stosowaną techniką jest iniekcja gazu. W tej metodzie wprowadzane są do złoża mieszalne gazy (zwykle CO₂, azot i gaz ziemny) w celu zmniejszenia napięcia międzyfazowego pomiędzy ropą i wodą oraz zwiększenia sił wyporu ropy przy jednoczesnym utrzymaniu ciśnienia w złożu. Zastosowanie ditlenku węgla jest uważane za najbardziej wydajną spośród wymienionych metod, ponieważ umożliwia zmniejszenie lepkości ropy w złożu, a ponadto CO₂ jest tańszy w porównaniu ze skroplonym gazem ziemnym (Jaramillo i in., 2008). Jednakże nadal istnieją wyzwania związane z wdrażaniem technologii CO₂-EOR. Rodzaj i poziom zanieczyszczeń w strumieniu zatłaczanego CO₂ to jeden z ważnych czynników, które należy uwzględnić i scharakteryzować przed rozpoczęciem projektu CO₂-EOR. Zanieczyszczenia w strumieniu CO₂ zależą od źródła pochodzenia CO₂ i odpowiadających mu technologii wychwytywania (Porter i in., 2015). Dopuszczalne zanieczyszczenia i ich stężenie określa się na podstawie kombinacji parametrów gazu związanych z transportem, magazynowaniem i aspektami ekonomicznymi przedsięwzięcia. Zazwyczaj minimalna akceptowalna czystość strumienia CO₂ wynosi około 90% objętości gazu (Jarrell i in., 2002). Wyższe poziomy stężenia zanieczyszczeń mogą spowodować przesunięcie granic na diagramie fazowym CO₂ w kierunku wyższych ciśnień, co oznacza, że potrzebne są wyższe ciśnienia robocze, aby utrzymać CO₂ w fazie nadkrytycznej (IEAGHG, 2011). Ponadto korozja stanowi kolejny problem związany z zanieczyszczeniami gazu. Zawartość gazów korozyjnych, takich jak CO, NO₂, SO₂, H₂S, Cl, może znacząco wpływać na urządzenia transportowe i te związane bezpośrednio z zatłaczaniem gazu. Dlatego istotne jest określenie dopuszczalnego poziomu zanieczyszczeń dla każdego projektu z osobna i ustalenie realnych strategii łagodzenia skutków w odniesieniu do potencjalnych wyzwań (Porter i in., 2015).

W przypadku technologii CO₂-EGR zatłaczany CO₂ tworzy z gazem ziemnym pojedynczą, mieszalną fazę płynną i jest bardziej lepki niż gaz ziemny (Solomon i in., 2008). Głównym problemem składowania CO₂ w wyeksploatowanych złożach gazu jest niskie ciśnienie złożowe po zakończeniu eksploatacji gazu (czasami poniżej 20 barów) oraz duża różnica ciśnień pomiędzy złożem a rurociągiem transportowym na powierzchni, które mogą powodować duży spadek temperatury złoża, zamarzanie pozostałej wody, powstawanie hydratów, pękanie na skutek naprężeń termicznych i negatywny wpływ na proces zatłaczania, szczególnie w przypadku iniekcji ditlenku węgla o niskiej temperaturze (Twerda i in., 2018, Oldenburg, 2007). Oszacowano, że około 70 mld Mg do 140 mld Mg CO₂ można zatłoczyć i zmagazynować w ponad 90% złóż ropy na świecie i w ten sposób wyprodukować około 74,7 mld m³ dodatkowej ropy naftowej (Mac Dowell i in., 2017). Wskaźnik wykorzystania CO₂ dla EOR w 2050 r. oszacowano od około 0,1 mld Mg CO₂/rok do 1,8 mld Mg CO₂/rok. Natomiast globalną pojemność magazynowania wyczerpanych złóż ropy i gazu oszacowano w przedziale wartości od 675 mld Mg CO₂ do 900 mld Mg CO₂ (Hepburn i in., 2019).

2.1.2.1.3. Składowanie CO₂ w głębokich nieeksploatowanych pokładach węgla (CO₂-ECBM)

Składowanie CO₂ w głębokich, nieeksploatowanych pokładach węgla z równoczesnym odzyskiem metanu uważa się za jedną z potencjalnych metod sekwestracji ditlenku węgla (Ridha i in., 2017; Sloss, 2015). Technologia ta jest wciąż na etapie badań (TRL 3). W technologii intensyfikacji wydobywania metanu z pokładów węgla (ang. *Enhanced Coalbed Bed Methane*, ECBM) zatłaczany CO₂ wypiera metan w wyniku

preferencyjnej adsorpcji CO₂ w węglu. Najogólniej technologia polega na desorpcji metanu zaadsorbowanego w matrycy węglowej, a następnie jego dyfuzji przez matrycę węglową do układu szczelin i filtracji zgodnie z gradientem ciśnień w kierunku odwiertów wydobywczych (Bromhal i in., 2005) z równoczesnym przemieszczaniem się zatłoczonego CO₂ w szczelinach węgla (filtracja), dyfuzją w matrycy węglowej i adsorpcją w węglu (Sams i in., 2002). Matryca węglowa zawiera bardzo dużą liczbę mikroporów, co sprawia, że jest w stanie adsorbować znaczne ilości gazu. Dzięki temu zatłaczany CO₂ może zastąpić wcześniej zaadsorbowany metan i być trwale magazynowany, zwiększając jednocześnie produkcję metanu. Daje to możliwość składowania dużych ilości CO₂ przy jednoczesnej poprawie efektywności procesu komercyjnej eksploatacji metanu z pokładów węgla (Kross i in., 2002; Jureczka i in., 2012; Gilliland i in., 2013; Chećko i in., 2020; Wetzel i in., 2023).

Podczas procesu ECBM przepuszczalność w sąsiedztwie odwiertu zatłaczającego stopniowo maleje, natomiast w sąsiedztwie odwiertu produkcyjnego początkowo wzrasta, ale wraz upływem czasu ponownie maleje. Zjawisko to jest związane z procesem zmian przepuszczalności węgla w technologii ECBM (Fang i in., 2019). Transformacja struktur porów i szczelin węgla związanych z nadkrytycznym CO₂ prowadzi do wzrostu przepuszczalności w strefie pokładów węgla, co stanowi kluczowy czynnik procesu składowania CO₂ i efektywności produkcji CH₄ (Du i in., 2019). Punktem wyjścia jest obniżenie ciśnienia płynów złożowych w rejonie odwiertu wydobywczego poprzez usunięcie wody z pokładu węgla. Spadek ciśnienia inicjuje rozpoczęcie procesu desorpcji metanu, który następnie wspomagany jest poprzez zatłaczanie CO₂ do pokładu węgla poprzez odwiert zatłaczający. Zjawisko wypierania metanu przez CO₂ opiera się na założeniu, że ditlenek węgla pod ciśnieniem około 7,38 MPa (tj. poniżej punktu krytycznego) charakteryzuje się większym powinowactwem molekularnym w stosunku do węgla niż metan (najczęściej podawany preferencyjny współczynnik sorpcji wynosi 2:1). Stopień wykorzystania CO₂ zależy od charakteru pokładu węgla, współczynnika składowania (tj. stosunku zaadsorbowanego CO₂ do zdesorbowanego metanu z pokładów węgla) i ciśnienia pokładu węgla. Stosunek przechowywania wynosi około 2:1 dla węgli bitumicznych

o wysokiej lotności pod niskim lub średnim ciśnieniem oraz około 8:1 dla węgli o niższej jakości pod tym samym ciśnieniem. W przypadku węgla brunatnego współczynnik magazynowania wynosi 13:1 (Global CCS Institute, 2011).

Technologia ECBM znajduje się wciąż w fazie badań, w związku z czym pozostaje wiele aspektów, które nie zostały jeszcze w pełni rozpoznane, np. zakres preferencyjnej sorpcji CO₂ w stosunku do CH₄, przebieg procesu po osiągnięciu punktu krytycznego oraz wpływ właściwości fizycznych węgla (Wong i in., 2000; Stanton i in., 2001; Kross i in., 2002; Shi i in., 2002; Ceglarska-Stefańska i in., 2007; Mazzotti i in., 2009; Li i Fang, 2014).

ECBM jest metodą łączącą składowanie CO₂ w pokładach węgla z odzyskiem metanu z pokładów węgla, która może osiągnąć wydajność 72%. Projekty ECBM wykorzystujące CO₂ i N₂ prowadzone są od lat 90-tych w San Juan Basin (USA). Takie eksperymentalne prace ECBM wykazały, że zatłaczanie tych gazów jest wykonalne technicznie i umożliwia wzrost wydobycia metanu o około 17–18% w przypadku zatłaczania CO₂ i o około 10–20% w przypadku zatłaczania N₂ (Reeves, 2002; Reeves, 2005; Dutta i Zoback, 2012). Oszacowano, że w pokładach węgla w Albercie w Kanadzie można składować około 800 mln Mg CO₂ przy progu ekonomicznej zdolności składowania CO₂ wynoszącym 200 tys. Mg CO₂/km² (Bachu, 2007). Pojemność składowania CO₂ w nienadających się do wydobycia formacjach węgla jest niepewna i szacuje się, że na całym świecie wynosi ona od 3 mld Mg CO₂ do 200 mld Mg CO₂, biorąc pod uwagę

odwierty wydobywające metan z pokładów węgla o głębokości mniejszej niż 1 km. CO₂-ECBM może zwiększyć produkcję CH₄ o 90%, podczas gdy konwencjonalny odzysk ze złóż węgla wynosi tylko 50% (Metz i in., 2005). Głównym problemem związanym z technologią ECBM jest zmniejszona przepuszczalność węgla podczas zatłaczania CO₂ powstająca w wyniku pęcznienia węgla. Powoduje to zmniejszenie rozmiaru i łączności spękań i szczelin w węglu, dlatego wymagane są dodatkowe odwierty, co powoduje zwiększenie kosztów przedsięwzięcia (Kearns i in., 2021).

2.1.2.1.4. Składowanie CO₂ w skałach bazaltowych i ultramaficznych

Niekonwencjonalne formacje, takie jak bazalty i skały ultramaficzne, mają potencjał magazynowania CO₂ poprzez proces mineralizacji węgla, w którym ditlenek węgla wchodzi w reakcje chemiczne z minerałami skałotwórczymi. Geologiczne składowanie CO₂ oparta na mineralnej karbonatyzacji jest procesem, w którym ditlenek węgla reaguje z fazami mineralnymi zawierającymi magnez i wapń, a w efekcie tworzą się stabilne minerały węglanowe, w tym kalcyt, magnezyt, dolomit oraz uwodnione węglany magnezu (Kelemen i in., 2019; Van Pham i in., 2012).

W procesie naturalnej mineralizacji węgla mogą być wykorzystywane skały bazaltowe występujące na całym świecie w znacznej większości w rejonie basenów oceanicznych oraz niektórych obszarów lądowych stanowiących około 8% powierzchni kontynentów (w tym m. in. USA, Rosja i Indie), a także skały ultramaficzne występujące na Islandii i w USA. Szacuje się, że sekwestracja mineralna w skali globalnej może umożliwić zmagazynowanie do 60 mln Gt ditlenku węgla (Kelemen i in., 2019; National Petroleum Council, 2019; Matter i Kelemen, 2009; Matter i in., 2016; Pollyea i in., 2014; McGrail i in., 2006; Gislason i in., 2014).

Zakłada się, że około 90% zatłoczonego CO₂ może zostać uwięziona w tego typu formacjach skalnych w postaci stabilnego węglanu powstającego wskutek mineralnej karbonatyzacji zachodzącej w okresie czasu od kilku miesięcy do kilkudziesięciu lat (Hong, 2022). Sekwestracja mineralna obejmuje zatłaczanie ditlenku węgla do górotworu po wcześniejszym rozpuszczeniu go w wodzie. Zatłaczanie pod ciśnieniem roztworu zawierającego CO₂ umożliwia w większości przypadków przeprowadzenie reakcji chemicznych już w pierwszych latach od rozpoczęcia procesu. Natomiast w typowych projektach CCS, w których ditlenek węgla zatłaczany jest w fazie nadkrytycznej, proces „pułapkowania” mineralnego osiąga większe znaczenie dopiero po upływie tysięcy lat od rozpoczęcia zatłaczania.

Sekwestracja mineralna stanowi jedną z najbezpieczniejszych form trwałego składowania CO₂ w górotworze. Znaczna część ryzyka związana z geologicznym składowaniem CO₂ jest związana z migracją ditlenku węgla w fazie gazowej ku szczytowym warstwom struktury, co z kolei w niekorzystnych uwarunkowaniach górotworu może prowadzić do wycieku CO₂. Natomiast w przypadku zatłaczania CO₂ w formie rozpuszczonej roztwór solanki nasyconej CO₂ o dużej gęstości przemieszcza się ku dolnej części struktury. W związku z tym, w przypadku sekwestracji mineralnej „pułapkowanie” CO₂ we wczesnej fazie procesu i brak migracji ku stropowej części struktury wyklucza możliwość ucieczki CO₂ z docelowej formacji zbiornikowej (Wojnicki i in., 2022).

Aktualnie prowadzone są dwa tego typu projekty pilotażowe (projekt Wallula w USA i projekt CarbFix na Islandii) obejmujące geologiczną sekwestrację CO₂ opartą na mineralnej karbonatyzacji w skałach bazaltowych (Matter i in., 2011; Goldberg i in., 2008). Jednakże wydatek zatłaczania CO₂ do tych formacji skalnych jest nadal niski,

a ponadto znaczna część metod monitoringu zachowania się CO₂ w górotworze, stosowanych w konwencjonalnych projektach CCS, nie może być zastosowana w przypadku składowania CO₂ w skałach bazaltowych. Powyższe powody sprawiają, że sekwestracja mineralna znajduje się wciąż w fazie badań (TRL 3) (Kearns i in., 2021).

2.1.2.1.5. Geologiczne składowanie ditlenku węgla w formie hydratów CO₂

Hydraty gazów to naturalnie występujące klatraty powstające w obszarach wysokich ciśnień i niskich temperatur, tj. w osadach wiecznej zmarzliny i głębinowych szelfach kontynentalnych. Hydraty są stabilne tylko przy podwyższonych ciśnieniach i temperaturach poniżej 10°C (Yang i in., 2008; Circone i in., 2003; Rochelle i in., 2009).

Podczas formowania się hydratów, cząsteczki wody otaczają małe cząsteczki gazów (takich jak metan lub ditlenek węgla) w sieci struktur krystalicznych przypominających klatki (Sloan, 1998). Nagromadzenie stałych hydratów w przestrzeni porów skalnych prowadzi do znacznego zmniejszenia przepuszczalności i zablokowania przepływu płynów (Evrenos i in., 1971; Gauteplass i in., 2018; Gauteplass i in., 2020). Tworzenie się tego typu barier przepływu w wyniku powstawania hydratów można wykorzystać jako mechanizm umożliwiający formowanie się warstw uszczelniających w procesie geologicznego składowania ditlenku węgla oraz zmniejszenie prawdopodobieństwa wycieku składowanego CO₂ (Koide i in., 1997).

Mechanizm magazynowania hydratu CO₂ opiera się głównie na tworzeniu nieprzepuszczalnej warstwy hydratu zlokalizowanej w spągowej części warstwy stabilnego hydratu CO₂. Warstwa ta stanowi uszczelnienie dla składowanego ciekłego CO₂ migrującego ku górze pod wpływem sił wyporu. W tej metodzie ciekły ditlenek węgla jest zatłaczany do utworów zalegających poniżej strefy stabilności hydratów CO₂. Migracja unoszącego się ciekłego CO₂ do chłodniejszej strefy stabilności hydratów prowadzi do wytrącania się hydratów CO₂ w przestrzeniach porów skalnych i tworzenia nieprzepuszczalnej warstwy hydratów CO₂, która blokuje dalszą migrację CO₂ ku górze (Rochelle i in., 2009).

Składowanie ciekłego CO₂ w utworach zalegających poniżej strefy stabilności hydratów CO₂ potencjalnie poprawia zdolność magazynowania w porównaniu z konwencjonalnym składowaniem nadkrytycznego CO₂ w głębokich formacjach geologicznych. Decyduje o tym fakt, iż ciekły CO₂ charakteryzuje się większą gęstością niż ditlenek węgla w stanie nadkrytycznym, a rozpuszczalność CO₂ w wodzie wzrasta wraz ze spadkiem temperatury. Ponieważ CO₂ jest zwykle transportowany w stanie ciekłym, można go zatłaczać bez konieczności wykonywania operacji ogrzewania, a dodatkowy ciężar w odwiercie zatłaczającym powoduje, że wymagane jest niższe ciśnienie w głowicy odwiertu w porównaniu z nadkrytycznym CO₂ (Vilarrasa i in., 2013). Kolejną korzyścią jest mniejsza wyporność ciekłego CO₂, co zmniejsza segregację grawitacyjną i ryzyko niepożądanego migracji CO₂ w kierunku warstw stropowych zbiornika (Rochelle i in., 2009). Samouszczelniające składowanie CO₂ zwiększa stabilność i bezpieczeństwo składowania ditlenku węgla oraz może przyspieszyć wdrożenie na pełną skalę wychwytywania i składowania ditlenku węgla (CCS).

Alternatywną metodę proponowaną przez amerykański Departament Energii (DOE) stanowi strategię składowania hydratów CO₂ opartą na technologii CO₂-EGR, czyli wspomagane wydobywanie gazu przy wykorzystaniu CO₂ (ang. *Enhanced Gas Recovery*, EGR). W tym podejściu CO₂ jest zatłaczany do utworów zawierających hydraty metanu w celu uwolnienia z nich metanu i utworzenia w ich miejsce hydratów CO₂ (Burnol i in.,

2015). Jednakże CO₂-EGR jest stosunkowo nową koncepcją i jej wykonalność nie została jeszcze w pełni zbadana.

Magazynowanie hydratu CO₂ nadal znajduje się na stosunkowo niskim poziomie gotowości technologicznej (TRL), dlatego też istnieją pewne niepewności, szczególnie w odniesieniu do technologii CO₂-EGR. Wiercenie w osadach zawierających hydraty może zmienić lokalną temperaturę i ciśnienie, a ostatecznie może zdestabilizować hydrat (Khabibullin i in., 2011). Kluczowe pozostałe kwestie, którymi należy się zająć, aby przyspieszyć ocenę wykonalności składowania hydratów, to wykazanie tworzenia się czapy hydratu oraz zrozumienie mechanizmu wymiany hydratu CO₂-metan i jego wpływu na produkcję metanu.

2.1.2.1.6. Systemy geotermalne CO₂-EGS

Niekonwencjonalne systemy geotermalne CO₂-EGS (ang. *Enhanced Geothermal Systems*, EGS) obejmują pozyskiwanie energii wnętrza Ziemi oraz geologiczne składowanie ditlenku węgla w górotworze. Technologia CO₂-EGS, wykorzystująca CO₂ jako płyn roboczy, ze względu na jego doskonałe właściwości termodynamiczne, stała się przedmiotem zainteresowań naukowców na całym świecie, w tym również w Polsce (Sowiżdżał i in., 2022).

Właściwości termiczne ditlenku węgla w fazie gęstej, podobnie jak wody, sprawiają, że jest on w stanie transportować znaczne ilości ciepła. Jednak charakteryzuje się lepszymi właściwościami fizycznymi, takimi jak znacznie niższa lepkość, większa ściśliwość i rozszerzalność cieplna (Garapati i in., 2015; Pruess, 2008; Zhang i in., 2014; Pruess, 2006). W związku z tym, ditlenek węgla może być wykorzystywany w procesie wydobywania ciepła z wnętrza Ziemi i produkcji energii geotermalnej.

Ze względu na niską lepkość CO₂ może być skutecznie wykorzystywany zamiast wody jako płyn roboczy w systemach geotermalnych CO₂-EGS (Na i in., 2015; Pruess, 2006). Jedną z wad stosowania wody jako płynu przenoszącego ciepło w systemach EGS jest nieunikniona częściowa utrata wody podczas cyrkulacji płynu roboczego. Dlatego też zastąpienie wody poprzez CO₂ zapewnia korzyści ekonomiczne, jak również umożliwia geologiczne składowanie CO₂ w górotworze.

Aby zapewnić skuteczną strategię składowania CO₂ opartą na technologii CO₂-EGS, górotwór wypełniony CO₂ musi pozostać oddzielony od otaczającego go masywu skalnego wypełnionego wodą, a składowany CO₂ powinien być izolowany. Kluczowy mechanizm, który może zapewnić spełnienie wyżej wymienionych kryteriów, opiera się na szybkich reakcjach CO₂-woda-skała, w wyniku których wytrącają się minerały węglanowe na styku „rdzenia EGS” wypełnionego CO₂ i otaczających go obszarów wypełnionych wodą. Pod względem geograficznym podejście to byłoby właściwe jedynie w przypadku krajów, w których występują formacje geologiczne o wystarczająco wysokich temperaturach na głębokościach, które są ekonomicznie opłacalne (Quattrocchi i in., 2013).

Systemy geotermalne CO₂-EGS charakteryzują się obecnie stosunkowo niskim poziomem TRL, a większość przeprowadzonych prac ogranicza się głównie do modelowania teoretycznego (Plaksina i White, 2016) i eksperymentów laboratoryjnych (Ré i in., 2014). Kluczową barierą dalszego rozwoju tej technologii jest niepewność co do skuteczności uszczelnienia strefy górotworu wypełnionej CO₂. Ponadto oddziaływanie CO₂-skała w podwyższonej temperaturze nie jest dokładnie poznane i potrzebne są dalsze badania, aby scharakteryzować wpływ CO₂ na rozpuszczanie

i wytrącanie wskutek reakcji chemicznych, a w konsekwencji na zmienność przepuszczalności szczelin w górotworze i wydajność technologii EGS.

2.1.2.2. Składowanie CO₂ w oceanach

Oprócz opracowanych do tej pory metod wychwytywania CO₂ z elektrowni i procesów chemicznych, pojawiają się nowe podejścia, które obejmują powietrze atmosferyczne, Ziemię i ocean. Ponieważ oceany stanowią największy naturalny pochłaniacz CO₂, rozwijane są technologie, które mogą umożliwić rozwój składowania ditlenku węgla w głębokich wodach oceanicznych. Technologie te mają na celu zwiększenie zasadowości wód w oceanach oraz biologiczną intensyfikację procesu hydratacji CO₂, które mogą zmienić równowagę w wodach oceanicznych i umożliwić zatłaczanie dodatkowych ilości CO₂.

Ponadto prowadzone są badania nad możliwością gromadzenia CO₂ wychwyconego z atmosfery przez ocean i przekształcania na nośniki energii, materiały i tworzywa przy wykorzystaniu morskiej energetyki wiatrowej (Vibbert i Park, 2022). Dzięki tym nowym i innowacyjnym technologiom węgiel organiczny i nieorganiczny pochodzący z rozwiązań oceanicznych może w pewnym stopniu zastąpić węgiel pochodzący z paliw kopalnych i stworzyć nową gospodarkę węglową. Istotne jest opracowanie oceanicznych technologii CCUS charakteryzujących się brakiem negatywnego oddziaływania na środowisko (Vibbert i Park, 2022).

Alternatywną strategią sekwestracji CO₂ pochodzenia antropogenicznego jest zatłaczanie CO₂ do głębokich wód oceanicznych. Oceany zajmują około 70% powierzchni Ziemi, ich średnia głębokość wynosi 3,8 km (Adams i Caldeira, 2008) i pochłoneły już prawie jedną trzecią skumulowanej antropogenicznej emisji CO₂ z atmosfery w okresie przemysłowym (Khaliwala i in., 2013). Szacuje się, że oceany mają zdolność magazynowania wynoszącą około 38 000 mld Mg CO₂ przy rocznym tempie pochłaniania CO₂ z atmosfery na poziomie około 1,7 mld Mg (Leung i in., 2014). Modele matematyczne wykazały, że zatłoczony CO₂ może pozostawać w oceanie przez kilkadziesiąt lat (Adams i Caldeira, 2008). Zimne wody oceaniczne (temp. około 1°C) poruszające się powoli na dużych głębokościach (około 4-5 km) mogą pozostać odizolowane od atmosfery przez tysiące lat.

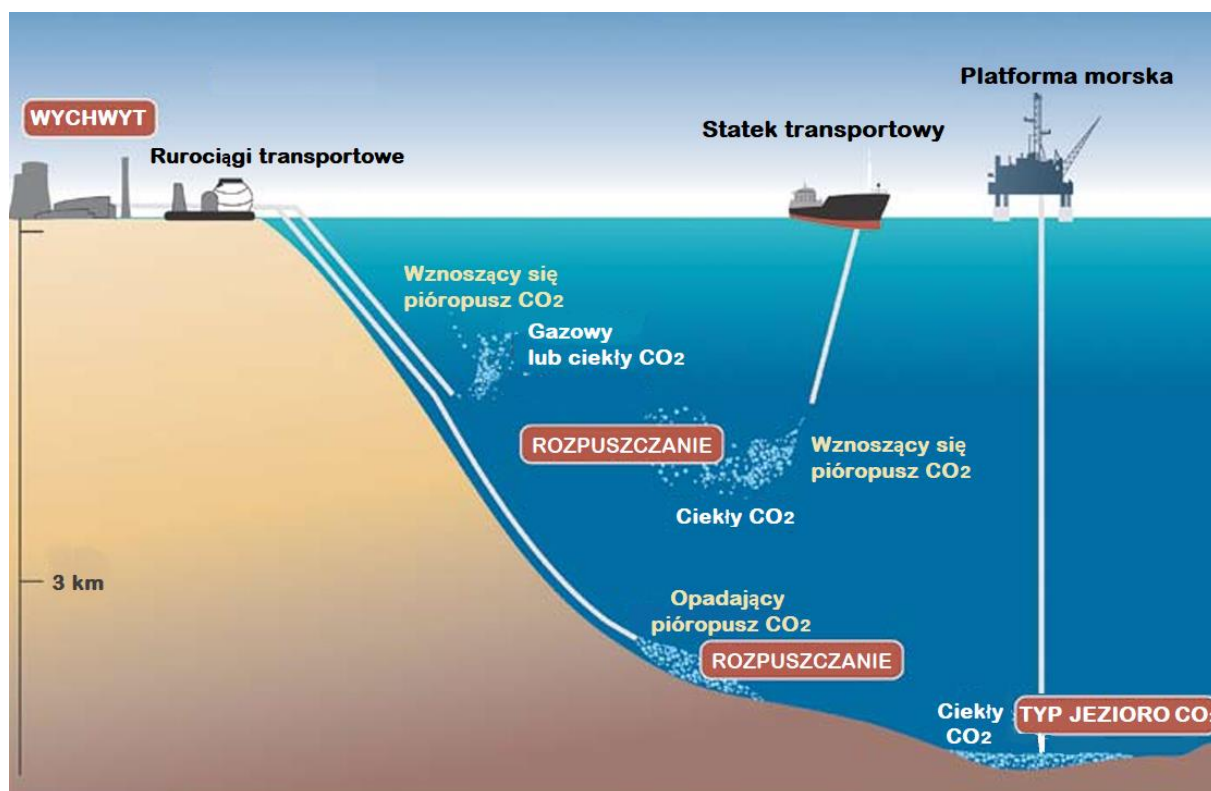
Główne proponowane podejścia do możliwości składowania CO₂ w oceanach opierają się na bezpośrednim rozpuszczaniu ditlenku węgla w wodzie morskiej. Wychwycony CO₂ może być zatłaczany do głębin oceanicznych rurociągami ułożonym na dnie morskim lub transportowany przy użyciu tankowców (rys. 2.6).

W jednej z metod rozcieńczony ditlenek węgla w stanie ciekłym jest transportowany pod ciśnieniem za pomocą rurociągu ułożonego na dnie morskim, a następnie zatłaczany do głębin oceanu przez szereg dyfuzorów w celu zminimalizowania lokalnych zmian w składzie chemicznym wody morskiej (Metz i in., 2005). Jeżeli CO₂ jest zatłaczany na pośrednie głębokości od 1 km do 2 km, pióropusz kropelek ciekłego CO₂ unosi się pod wpływem sił wyporu podczas rozpuszczania w wodzie morskiej. W przypadku zatłaczania ditlenku węgla na głębokość większą niż 3 km, ciekły CO₂ będzie gęstszy od wody morskiej i opadnie na dno oceanu. Jednak pomimo znacznej dostępności technologii składowania oceanicznego CO₂ przy użyciu rurociągów, jej wykonalność techniczna i ekonomiczna oraz wpływ na środowisko morskie nadal nie są dobrze zbadane.

Druga metoda polega na transporcie CO₂ za pomocą tankowca na przybrzeżną platformę morską, gdzie CO₂ jest zatłaczany do głębin oceanu przy użyciu pionowej rury i może reagować z wodą morską z kontrolowaną szybkością (Adams i Caldeira, 2008).

Jak dotąd metoda składowania CO₂ w oceanach przy wykorzystaniu tankowców nie ma komercyjnego zastosowania.

Istnieje sprzeciw dotyczący składowania CO₂ w oceanach ze względu na potencjalną możliwość lokalnego zakwaszenia wody morskiej w pobliżu punktu zatłaczania CO₂ (Hofmann i Schellnhuber, 2010; Jacobson, 2009) oraz potencjalny negatywny wpływ na denne organizmy wodne. Odnotowano wysoki współczynnik śmiertelności organizmów głębinowych w pobliżu miejsc uwalniania CO₂ z dna morskiego na głębokości 3,6 km w Kalifornii w USA z powodu dużych zmian składu chemicznego wody morskiej wraz ze spadkiem pH o około 0,5 do 1 (Barry i in., 2004).



Rys. 2.6. Schemat koncepcji magazynowania CO₂ w oceanach. W przypadku magazynowania oceanicznego typu „rozpuszczanie” CO₂ szybko rozpuszcza się w wodzie, a w przypadku magazynowania oceanicznego typu „jezioro” CO₂ składowany jest początkowo w postaci cieplej na dnie morskim (opracowanie własne na podstawie: IPCC, 2005).

Kluczowymi parametrami, które można wykorzystać do oceny efektywności sekwestracji oceanicznej, są: 1) głębokość zatłaczania, 2) rozkład stężenia CO₂ oraz 3) okres czasu, po upływie którego składowany w oceanie CO₂ powraca do atmosfery. Zbadano potencjał składowania CO₂ na Północnym Pacyfiku, opracowując regionalny model ogólnej cyrkulacji oceanicznej z różnymi parametrami mieszania i zakładając zerową wymianę CO₂ pomiędzy oceanem a powietrzem atmosferycznym (Xu i in., 1999). Wyniki badań wykazały, że głębokość składowania jest jednym z kluczowych parametrów izolowania składowanego CO₂ i minimalizowania możliwości jego powrotu do atmosfery. Ustalono, że aby składować CO₂ w oceanie przez kilkaset lat, konieczne jest zatłaczanie na głębokość większą niż 1000 m. Ponadto wykazano, że po 50 latach ciągłego zatłaczania CO₂ (z uwzględnieniem zróżnicowanych lokalizacji zatłaczania i maksymalnej głębokości równej 5750 m) ponad 10% rozpuszczonego CO₂ wraca do atmosfery.

Hill i in. (Hill i in., 2004) ocenili efektywność magazynowania za pomocą średniego czasu, po upływie którego składowany w oceanie CO₂ powraca do atmosfery,

wykorzystując przy tym model cyrkulacji oceanicznej. Stwierdzono, że północny Atlantyk umożliwia efektywny przebieg procesu sekwestracji CO₂ w perspektywie co najmniej kilkuset lat, podczas gdy składowanie CO₂ w Oceanie Spokojnym jest bardziej wydajne w krótszych ramach czasowych. Jednak należy zauważyć, że badanie to opierało się na stosunkowo małych wielkościach zatłaczanego CO₂ i pominięto wpływ wymiany CO₂ pomiędzy oceanem a powietrzem atmosferycznym.

Wyniki badania rozkładu stężenia CO₂ po zakończeniu zatłaczania można wykorzystać do oceny wyboru najlepszej lokalizacji procesu sekwestracji, w którym CO₂ jest skutecznie rozcieńczany i ma najmniejszy negatywny wpływ na faunę i florę. Masuda i in. (Masuda, 2009) zbadali lokalny rozkład stężenia CO₂ jako funkcję wielkości wydatku zatłaczania i rozkładu aktywności wirów morskich. W tym celu przeprowadzili symulacje zatłaczania CO₂ dla kilku lokalizacji w Japonii, stosując ogólny model cyrkulacji oceanicznej. Stwierdzono, że maksymalne stężenie CO₂ może różnić się 10-krotnie w poszczególnych lokalizacjach, a rozbieżność tę przypisuje się głównie lokalnemu rozkładowi aktywności wirów. Ponadto ustalono, że ograniczenie wydatku zatłaczania CO₂ do 20 mln Mg/rok wyeliminuje ryzyko negatywnego wpływu przedsięwzięcia na oceaniczną faunę i florę.

Zgodnie z powyższymi dyskusjami istnieje kilka zagadnień, które należy uwzględnić w przyszłych badaniach dotyczących oceanicznej sekwestracji CO₂, w tym między innymi: 1) udoskonalenie obecnego modelu numerycznego poprzez uwzględnienie mechanizmu wymiany CO₂ powietrze-woda dla lepszej oceny efektywności składowania, 2) dalsze badania dotyczące określenia kryteriów wyboru lokalizacji zatłaczania, a także 3) prace dotyczące analizy techniczno-ekonomicznej transportu dużych ilości CO₂ przez Ocean Spokojny. Ponadto nie jest jeszcze jasne, czy przepisy międzynarodowe pozwolą na realizację projektów związanych z magazynowaniem CO₂ w oceanach (Li i in., 2013). Należy zatem ocenić niepewność związaną z sekwestracją oceaniczną i jej aspektami środowiskowymi oraz określić możliwe strategie łagodzenia skutków ewentualnego negatywnego wpływu przedsięwzięcia na środowisko.

2.1.3. Aktualny status rozwoju technologii CCUS na świecie

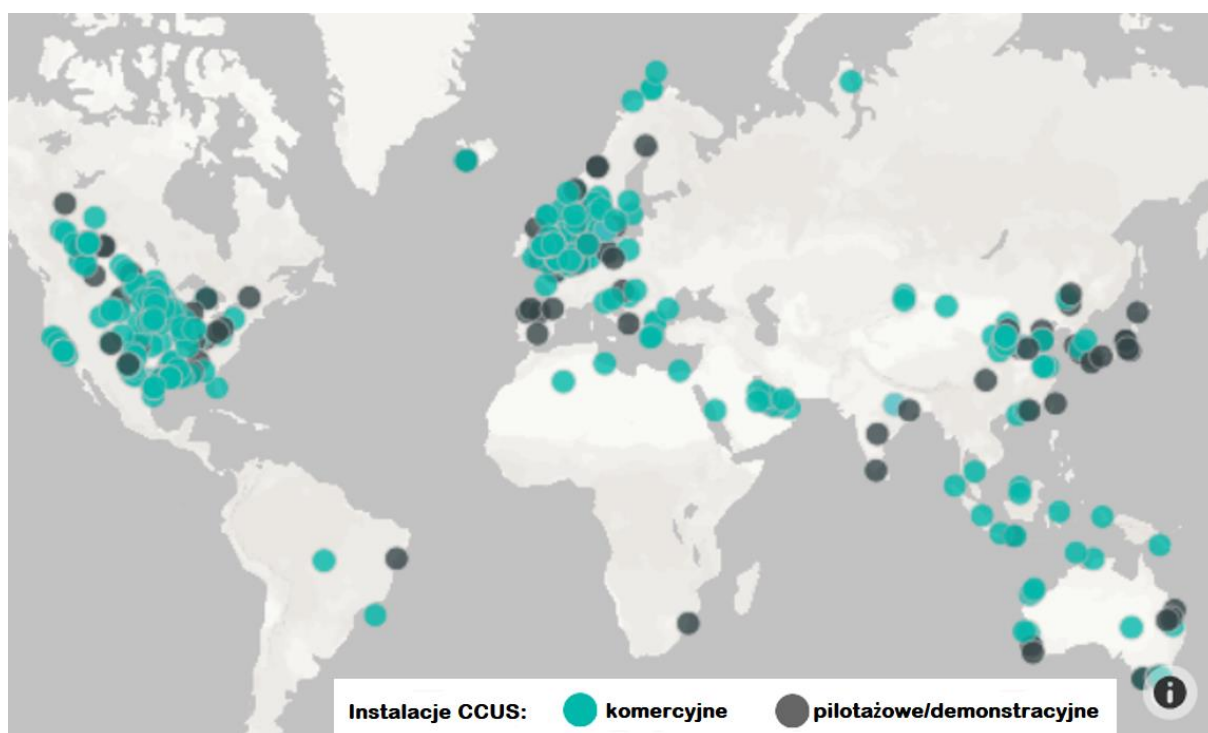
W roku 2023 znacząco wzrosła ilość wszystkich instalacji CCUS na świecie. Jak wynika z danych opublikowanych przez Global CCS Institute w listopadzie 2023 roku (Global CCS Institute, 2023) odnotowano 392 projekty CCUS w fazie realizacji, co stanowi wzrost o 102% względem roku 2022 (Global CCS Institute, 2022). Na łączną ilość wszystkich obiektów CCUS składa się 41 funkcjonujących (*operational*) instalacji komercyjnych, 26 obiektów będących w trakcie budowy (*in construction*), 121 projektów w zaawansowanej fazie rozwoju (*advanced development*) oraz 204 instalacje znajdujących się na wczesnym etapie realizacji (*early development*) - tab. 2.1; rys. 2.7.

Proces wdrażania technologii CCUS poprzez budowę nowych obiektów komercyjnych CCUS, jak również realizację projektów pilotażowych i demonstracyjnych wychwytywania i składowania ditlenku węgla odbywa się w niespotykanej dotychczas skali. Całkowita pojemność wychwytywania CO₂ w ramach prowadzonych w roku 2023 projektów CCS będących w fazie budowy, rozwoju i eksploatacji wyniosła 361 mln Mg rocznie (Global CCS Institute, 2023), co stanowi wzrost o prawie 50% w porównaniu z wartością podaną w raporcie Global Status CCS za rok 2022 (Global CCS Institute, 2022). Wzrost liczby rozwijanych instalacji CCUS na całym świecie wskazuje, że technologia

ta staje się coraz bardziej atrakcyjna, w miarę jak poszczególne kraje pracują nad wypełnieniem swoich zobowiązań klimatycznych dotyczących redukcji emisji CO₂.

Tab. 2.1. Aktualny stan rozwoju instalacji CCUS na świecie wraz z całkowitą pojemnością wychwytywanego CO₂ (opracowanie własne na podstawie: Global CCS Institute, 2023)

Faza realizacji projektu CCUS	Komercyjne	W trakcie budowy	Zaawansowany etap rozwoju	Wczesna faza rozwoju	Łącznie
Liczba instalacji CCUS	41	26	121	204	392
Pojemność wychwytywania CO ₂ , mln Mg/rok	49	32	144	135	361



Rys. 2.7. Mapa rozmieszczenia projektów CCUS na świecie - komercyjne instalacje CCUS oraz pilotażowe/demonstracyjne projekty CCUS na zróżnicowanych etapach rozwoju (opracowanie własne na podstawie: CO2RE - Global CCS Facilities Database, 2023)

W latach 2022–2023 jedenaście kolejnych państw ogłosiło realizację projektów CCUS na różnych etapach rozwoju. Stany Zjednoczone nadal dominują we wdrażaniu technologii CCUS, bowiem w roku 2023 uruchomione tam zostały 73 nowe instalacje. Wielka Brytania, Kanada i Chiny zwiększyły liczbę instalacji CCUS i znajdują się w pierwszej piątce krajów wdrażających technologie CCUS. Także w Australii odnotowano znaczny rozwój tej technologii - w tym kraju znajduje się obecnie 12 instalacji CCUS w fazie rozwoju (Global CCS Institute, 2023).

Mapę aktualnego stanu rozmieszczenia funkcjonujących (*operational*) komercyjnych instalacji CCUS na świecie przedstawiono na rys. 2.8, a zestawienie funkcjonujących komercyjnych instalacji CCUS na świecie w tab. 2.2.



Rys. 2.8. Mapa rozmieszczenia funkcjonujących (*operational*) komercyjnych instalacji CCUS na świecie (opracowanie własne na podstawie: CO2RE - Global CCS Facilities Database, 2023)

Na Bliskim Wschodzie działają trzy obiekty CCS, kolejne trzy są w trakcie budowy, a następne trzy instalacje są w zaawansowanej fazie rozwoju. Sześć obiektów CCS w tym regionie jest związanych z procesami przeróbki gazu ziemnego (Global CCS Institute, 2023).

W USA i Kanadzie występuje 69 instalacji wychwytywania ditlenku węgla związanych z branżą produkcji etanolu znajdujących się na różnych etapach rozwoju, natomiast w przygotowaniu jest kolejne 48 obiektów związanych z transportem i składowaniem CO₂. Ponadto w USA i Kanadzie odnotowano odpowiednio 25 i 28 projektów CCUS będących w przygotowaniu lub w trakcie realizacji, związanych z produkcją amoniaku, wodoru i nawozów sztucznych, a także z wytwarzaniem energii i ciepła. Dodatkowe 16 instalacji CCUS jest powiązanych z procesami przeróbki gazu ziemnego. Ogółem w Ameryce Północnej funkcjonuje 21 instalacji CCUS w skali komercyjnej, dziewięć obiektów jest w trakcie budowy, 80 w fazie zaawansowanej i dodatkowe 92 projekty we wczesnej fazie rozwoju (Global CCS Institute, 2023).

W Ameryce Południowej zlokalizowany jest największa na świecie funkcjonująca instalacja CCS związana z branżą eksploatacji i przeróbki ropy naftowej i gazu ziemnego. Rozwiązanie technologiczne wdrożone w obiekcie Petrobras Santos Basin w Brazylii polega na wydzieleniu CO₂ z eksploatowanego ze złoża gazu ziemnego, następnie na sprężeniu strumienia gazu bogatego w CO₂ i ponownym zatłoczeniu go do złoża na głębokości ponad 2000 m. Aktualnie ta instalacja CCUS umożliwia wychwyt 10,6 mln Mg CO₂ rocznie i pozwala na ponowne zatłaczanie CO₂ do złoża w celu wspomagania wydobycia ropy naftowej (technologia EOR). W 2022 roku ponownie zatłoczono w ten sposób do złoża łącznie ponad 40,8 mln Mg CO₂ (Global CCS Institute, 2023).

W regionie Azji i Pacyfiku zlokalizowanych jest 17 instalacji CCS przeznaczonych do transportu i składowania CO₂, a ponadto 15 instalacji CCUS związanych jest z przeróbką gazu ziemnego oraz 10 obiektów obejmujących procesy produkcji chemicznej. Łącznie w tym regionie świata działa 12 instalacji, w tym pięć komercyjnych projektów CCS rozpoczęło funkcjonowanie w Chinach w latach 2022-2023. Ponadto osiem jest w trakcie budowy, a 34 projekty są na zaawansowanym lub wczesnym etapie rozwoju (Global CCS Institute, 2023).

W Europie powstaje 35 instalacji CCS związanych z transportem i składowaniem CO₂. Ponadto 20 instalacji CCUS powiązanych jest z produkcją wodoru, amoniaku i nawozów sztucznych, 19 obiektów dotyczy wytwarzania energii i ciepła, 17 projektów CCUS jest związanych z przemysłem cementowym, a dodatkowe 15 instalacji dotyczy wykorzystania biomasy do produkcji energii i ciepła. Łącznie w Europie funkcjonują cztery komercyjne instalacje CCUS, sześć obiektów jest w trakcie budowy, a dodatkowe 109 projektów CCUS jest na wczesnym lub zaawansowanym etapie rozwoju (Global CCS Institute, 2023).

Tab. 2.2. Zestawienie funkcjonujących komercyjnych instalacji CCUS na świecie (opracowanie własne na podstawie: Global CCS Institute, 2023)

Nazwa obiektu CCUS	Kraj	Data rozpoczęcia funkcjonowania	Branża przemysłowa	Pojemność wychwytu, transportu i/lub składowania CO ₂ , mln Mg/rok	Rodzaj składowania CO ₂
Occidental Terrell	USA	1972	Natural Gas Processing	0.5	Enhanced Oil Recovery
Enid Fertilizer	USA	1982	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	0.2	Enhanced Oil Recovery
ExxonMobil Shute Creek Gas	USA	1986	Natural Gas Processing	7.0	Enhanced Oil Recovery
MOL Szank Field	Hungary	1992	Natural Gas Processing	0.16	Enhanced Oil Recovery
Equinor Sleipner	Norway	1996	Natural Gas Processing	1.0	Dedicated Geological Storage
Great Plains Synfuels Plant and Weyburn-Midale	USA	2000	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	3.0	Enhanced Oil Recovery
Core Energy CO ₂ -EOR South Chester plant	USA	2003	Natural Gas Processing	0.35	Enhanced Oil Recovery
Equinor Snohvit	Norway	2008	Natural Gas Processing	0.7	Dedicated Geological Storage
Petrobras Santos Basin Pre-Salt Oil Field	Brazil	2008	Natural Gas Processing	10.6	Enhanced Oil Recovery
Arkalon CO ₂ Compression Facility	USA	2009	Ethanol	0.5	Enhanced Oil Recovery
Longfellow WTO Century Plant	USA	2010	Natural Gas Processing	5.0	Enhanced Oil Recovery
Gary Climate Solutions Bonanza BioEnergy	USA	2012	Ethanol	0.1	Enhanced Oil Recovery
Yanchang Integrated Demonstration	China	2012	Chemical	0.05	Enhanced Oil Recovery
Air Products and Chemicals Valero Port Arthur Refinery	USA	2013	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	0.9	Enhanced Oil Recovery

c.d. Tab. 2.2. Zestawienie funkcjonujących komercyjnych instalacji CCUS na świecie (opracowanie własne na podstawie: Global CCS Institute, 2023)

Nazwa obiektu CCUS	Kraj	Data rozpoczęcia funkcjonowania	Branża przemysłowa	Pojemność wychwytu, transportu i/lub składowania CO ₂ , mln Mg/rok	Rodzaj składowania CO ₂
Contango Lost Cabin Gas Plant	USA	2013	Natural Gas Processing	0.9	Enhanced Oil Recovery
Coffeyville Gasification Plant	USA	2013	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	0.9	Enhanced Oil Recovery
PCS Nitrogen Geismar Plant	USA	2013	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	0.3	Enhanced Oil Recovery
SaskPower Boundary Dam	Canada	2014	Power Generation and Heat	1.0	Enhanced Oil Recovery
Saudi Aramco Uthmaniyah	Saudi Arabia	2015	Natural Gas Processing	0.8	Enhanced Oil Recovery
Shell Quest	Canada	2015	Hydrogen / Ammonia / Fertiliser	1.3	Dedicated Geological Storage
Xinjiang Dunhua Karamay	China	2015	Chemical	0.1	Enhanced Oil Recovery
ADNOC Al-Reyadah	United Arab Emirates	2016	Iron and Steel Production	0.8	Enhanced Oil Recovery
ADM Illinois Industrial	USA	2017	Ethanol	1.0	Dedicated Geological Storage
CNPC Jilin Oil Field	China	2018	Natural Gas Processing	0.6	Enhanced Oil Recovery
Chevron Gorgon	Australia	2019	Natural Gas Processing	4.0	Dedicated Geological Storage
Qatargas Qatar LNG	Qatar	2019	Natural Gas Processing	2.2	Dedicated Geological Storage
Enhance Clive Oil Field	Canada	2020	CO ₂ Transport / Storage	1.12	Enhanced Oil Recovery

c.d. Tab. 2.2. Zestawienie funkcjonujących komercyjnych instalacji CCUS na świecie (opracowanie własne na podstawie: Global CCS Institute, 2023)

Nazwa obiektu CCUS	Kraj	Data rozpoczęcia funkcjonowania	Branża przemysłowa	Pojemność wychwytu, transport i/lub składowania CO ₂ , mln Mg/rok	Rodzaj składowania CO ₂
NWR Sturgeon Refinery	Canada	2020	Oil Refining	1.6	Enhanced Oil Recovery
WCS Redwater	Canada	2020	Hydrogen / Ammonia /Fertiliser	0.3	Enhanced Oil Recovery
Wolf Alberta Carbon Trunk Line	Canada	2020	CO ₂ Transport / Storage	14.6	Enhanced Oil Recovery
China National Energy Guohua Jinjie	China	2021	Power Generation and Heat	0.15	Dedicated Geological Storage
Climeworks Orca	Iceland	2021	Direct Air Capture	0.004	Dedicated Geological Storage
Sinopec Nanjing Chemical	China	2021	Chemical	0.2	Enhanced Oil Recovery
Yangchang Yan'an CO ₂ -EOR	China	2021	Chemical	0.1	Enhanced Oil Recovery
Entropy Glacier Gas Plant	Canada	2022	Natural Gas Processing	0.2	Dedicated Geological Storage
Red Trail Energy Richardton Ethanol	USA	2022	Ethanol	0.18	Dedicated Geological Storage
Sinopec Qilu-Shengli	China	2022	Chemical	1.0	Enhanced Oil Recovery
Yangchang Yulin CO ₂ -EOR	China	2022	Chemical	0.3	Dedicated Geological Storage
China National Energy Taizhou	China	2023	Power Generation and Heat	0.5	Enhanced Oil Recovery
CNOOC Enping	China	2023	Natural Gas Processing	0.3	Dedicated Geological Storage
Sinopec Jinling Petrochemical (Nanjing Refinery)	China	2023	Oil Refining	0.3	Enhanced Oil Recovery

2.2. Możliwości wykorzystania metod sztucznej inteligencji w obszarze technologii wychwytu, wykorzystania i składowania CO₂ (CCUS)

2.2.1. Sztuczna inteligencja w przeciwdziałaniu zmianom klimatycznym

Sztuczna inteligencja (ang. *Artificial Intelligence*, AI) to jedna z kluczowych nowych technologii, które zostały omówione w raporcie pt. „10 najlepszych wschodzących technologii roku 2023” („*Top 10 Emerging Technologies of 2023*”) opublikowanym wspólnie przez wydawcę Frontiers i Światowe Forum Ekonomiczne (WEF&Frontiers, 2023). We wspomnianym raporcie wskazano te technologie, które w ciągu najbliższych trzech do pięciu lat mogą wywrzeć największy pozytywny wpływ na społeczeństwo.

Zdolność sztucznej inteligencji do przetwarzania ogromnych ilości danych i wspierania w podejmowaniu decyzji ma wpływ na zmianę trendów w poszczególnych branżach przemysłu, natomiast walka ze zmianami klimatycznymi, stanowiąca jedno z najtrudniejszych wyzwań świata, to kolejny obszar, w którym sztuczna inteligencja posiada potencjał transformacyjny.

Technologie wymienione w raporcie *WEF & Frontiers* można wykorzystać, aby pomóc stawić czoła globalnym wyzwaniom, takim jak kryzys klimatyczny, ale autorzy raportu zauważają równocześnie, że potrzebnych jest więcej innowacji w zakresie rozwoju wymienionych technologii w najbliższej przyszłości.

W ramach wykorzystania technik sztucznej inteligencji do walki ze zmianami klimatycznymi do tej pory opracowano między innymi narzędzia:

- prognozujące zmiany pogodowe i katastrofy klimatyczne, umożliwiające lepsze dostosowanie się m. in. ludności Afryki do zmian klimatycznych i złagodzenia ich skutków;
- do pomiaru zmian wielkości i przemieszczania się gór lodowych;
- do analizy procesu zmniejszania powierzchni terenów leśnych, w tym zdalnego pomiaru wskaźników, takich jak tempo wylesiania czy też ilość ditlenku węgla magazynowanego w lasach i torfowiskach;
- do ponownego zalesiania trudno dostępnych obszarów przy wykorzystaniu dronów (m. in. na wzgórzach wokół Rio de Janeiro w Brazylii);
- zwiększające efektywność gospodarowania odpadami poprzez lepszą identyfikację odpadów, które powinny trafić do recyklingu zamiast na składowiska;
- do wspomagania procesów wykrywania i usuwania zanieczyszczeń z tworzyw sztucznych z oceanów w odległych lokalizacjach;

Z raportów opublikowanych przez Światowe Forum Ekonomiczne wynika, że sztuczną inteligencję można również wykorzystać do identyfikacji zanieczyszczeń powietrza atmosferycznego przy wykorzystaniu zdjęć satelitarnych, a także do wspomagania rozwoju rolnictwa i zmniejszenia jego negatywnego wpływu na środowisko (Masterson, 2024).

Ponadto obserwuje się duże zainteresowanie możliwością wykorzystania metod sztucznej inteligencji, w tym zwłaszcza uczenia maszynowego (ang. *Machine Learning*, ML) w obszarze CCUS. Wynika to z konieczności opracowania skutecznych narzędzi wspierania decyzji w ramach działań w zakresie modelowania, symulacji i optymalizacji

procesów, które uwzględniają wszystkie aspekty techniczno-ekonomiczne i środowiskowe systemów CCUS. Spektakularny sukces sztucznej inteligencji, metod analizy dużej ilości danych (ang. *Big Data Analytics*) i związanych z nimi technologii cyfrowych w postaci aplikacji bazodanowych sprawia, że mogą być one wykorzystywane w szerokim zakresie do opracowania narzędzi wspomagania decyzji w działaniach związanych z technologiami CCUS.

W ostatnich latach opublikowano liczne artykuły i przeglądy literatury mające na celu ocenę stanu wiedzy w tej dziedzinie nauki (Cao, 2021; Gupta i Li, 2022; Priya i in., 2023; Rahimi i in., 2021; Yan i in., 2021; Yao i in., 2023). Niektóre z tych przeglądów skupiały się na zastosowaniu metod AI/ML w obszarze wychwytywania ditlenku węgla (np. Rahimi i in., 2021; Cao, 2021). Opracowano także przegląd literatury (Yao i in., 2023), który dotyczył analizy zastosowania algorytmów AI/ML w procesie sekwestracji ditlenku węgla z punktu widzenia nauk o Ziemi. Natomiast przegląd zastosowań AI/ML we wszystkich częściach łańcucha wartości CCUS, tj. wychwytywaniu, transporcie, wykorzystaniu i składowaniu, omówiono w (Yan i in., 2021) oraz (Gupta i Li, 2022). Poza tym, we wspomnianych artykułach przeglądowych przedstawiono krótką perspektywę przewidywanych zastosowań AI/ML w najbliższej przyszłości.

Ponadto w artykule przeglądowym z roku 2024 (Al-Sakkari i in., 2024) zestawiono poszczególne technologie CCUS i związane z nimi metody i procedury modelowania, symulacji i optymalizacji procesów. Stwierdzono, że istnieje potrzeba udoskonalenia istniejących systemów CCUS mająca na celu zmniejszenie kosztów ich projektowania, budowy i eksploatacji. Ponadto przedstawiono rekomendacje i możliwości nowych zastosowań AI w obszarze CCUS, a także stwierdzono, że zastosowanie tego typu rozwiązań na szeroką skalę z pewnością ułatwi i znacznie przyspieszy wdrożenie systemów CCUS oraz pomoże osiągnąć globalne cele w zakresie redukcji emisji gazów cieplarnianych.

2.2.2. Rozwój i klasyfikacja systemów sztucznej inteligencji

W roku 2022 pojawiła się i rozwinęła w świadomości publicznej generatywna sztuczna inteligencja (ang. *Generative Artificial Intelligence*, GenAI), natomiast w roku 2023 zaczęła się ona zakorzeniać w świecie biznesu. Rok 2024 jest zatem rokiem kluczowym dla przyszłości sztucznej inteligencji, ponieważ naukowcy i badacze starają się ustalić, w jaki sposób ten ewolucyjny skok technologiczny można w najbardziej praktyczny sposób zintegrować z naszym codziennym życiem (IBM, 2024).

Pierwotna definicja sztucznej inteligencji (AI) pochodzi od jednego z jej prekursorów, Marvin'a Minsky'ego, który w 1956 roku w trakcie konferencji naukowej na Uniwersytecie Dartmouth w Hanowerze w stanie New Hampshire (USA), zgromadził najlepszych badaczy z różnych dziedzin w celu otwartej dyskusji na temat sztucznej inteligencji i określił ją jako „*nauka o sprawianiu, że maszyny robią rzeczy, które wymagałyby inteligencji, gdyby były wykonywane przez ludzi*” (Britannica, 2024; Harvard, 2017). Można stwierdzić, że sedno tej definicji nadal pozostaje prawdziwe, jednak aktualnie informatycy idą nieco dalej i definiują sztuczną inteligencję jako „*system, który jest w stanie postrzegać swoje środowisko i podejmować działania, aby zmaksymalizować szansę na pomyślne osiągnięcie swoich celów – a ponadto, że ten system jest w stanie interpretować i analizować dane w taki sposób, że uczy się i dostosowuje w miarę upływu czasu*” (SAP, 2024).

W ostatnich latach dało się zaobserwować pewne problemy z wypracowaniem prawnej definicji sztucznej inteligencji w ustawodawstwach krajowych i konwencjach międzynarodowych. Podejmowano próby opisowego podejścia i tak w dokumencie p.t. *Polityka dla rozwoju sztucznej inteligencji w Polsce od roku 2020* (Polityka AI, 2020) autorzy próbują definiować sztuczną inteligencję jako dziedzinę wiedzy obejmującą m.in. sieci neuronowe, robotykę i tworzenie modeli inteligentnych zachowań oraz programów komputerowych symulujących te zachowania, włączając w to również uczenie maszynowe (*machine learning*), głębokie uczenie (*deep learning*) oraz uczenie wzmocnione (*reinforcement learning*) (Michałowski, 2018).

Natomiast w dniu 13 marca 2024 roku Parlament Europejski uchwalił regulację prawną w postaci rozporządzenia znanego pod nazwą Act AI, stanowiący pierwszy na świecie akt prawny, który w sposób kompleksowy reguluje korzystanie ze sztucznej inteligencji (Act AI, 2024). Do celów wspomnianego rozporządzenia stosuje się dość rozbudowaną i pojemną następującą definicję systemu AI: *„system maszynowy, zaprojektowany do działania z różnym poziomem autonomii, który po wdrożeniu może wykazywać zdolność adaptacji i który wnioskuje jak na podstawie danych wejściowych generować wyniki, takie jak predykcje, treści, zalecenia lub decyzje, które mogą wpływać na środowisko fizyczne lub wirtualne”*. Powyższa regulacja prawna, która ma za zadanie w sposób całościowy uregulować sektor AI, bazuje na podejściu opartym o analizę ryzyka. Rozporządzenie dotyczące sztucznej inteligencji uzależnia obowiązki dostawców i podmiotów wdrażających modele i systemy AI od potencjalnego ryzyka wyrządzenia szkód obywatelom, społeczeństwom i gospodarkom (Act AI, 2024).

Ponadto Zgromadzenie Ogólne ONZ przyjęło w dniu 21 marca 2024 roku zgłoszoną przez USA rezolucję dotyczącą zasad bezpiecznego wykorzystania i rozwoju sztucznej inteligencji. Rezolucja zachęca wszystkie kraje świata do rozwoju *„bezpiecznych i zaufanych systemów AI, by odpowiedzieć na największe światowe wyzwania”* dotyczące m. in. ubóstwa, zdrowia publicznego, klimatu czy energii (ONZ, 2024).

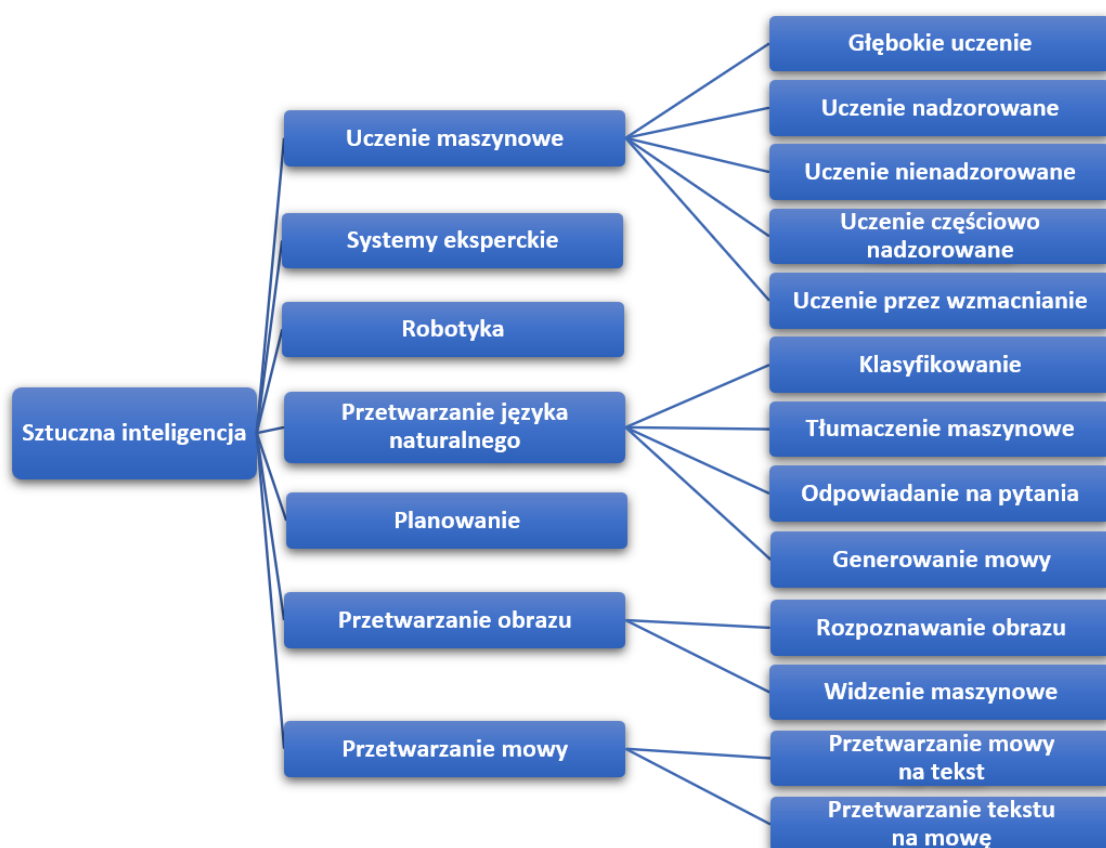
Sztuczna inteligencja jest to system komputerowy, który przy wykorzystaniu złożonych algorytmów i metod matematycznych, symuluje proces ludzkiego rozumowania, aby osiągnąć pomyślną realizację postawionych celów. Ponadto zadaniem sztucznej inteligencji jest taka interpretacja i analiza dostępnych danych, która umożliwi jej ciągłe uczenie się i dostosowywanie do nowych wyzwań w miarę upływu czasu. Sztuczną inteligencję można ogólnie podzielić na kilka typów w zależności od możliwości, funkcjonalności i zastosowanej technologii.

Chociaż sztuczna inteligencja stanowi obecnie jedną z najszybciej rozwijających się technologii, to aktualnie dostępne nawet najbardziej złożone systemy AI wykorzystują jedynie tzw. wąską sztuczną inteligencję (ang. *Artificial Narrow Intelligence, ANI*), zwaną również słabą AI (ang. *Weak AI*), która pod względem możliwości systemu stanowi najbardziej podstawowy z trzech rodzajów AI. Zadania wąskiej sztucznej inteligencji mogą być wykonywane przez bardzo złożone algorytmy lub też wielowarstwowe sieci neuronowe, jednak Narrow AI jest zorientowana na ściśle określony cel i nie wykracza poza jego obszar, np. wirtualni asystenci, wyszukiwarki internetowe, programy do rozpoznawania obrazów, mowy czy też autonomiczne samochody. Narrow AI zaprojektowana jest do wykonywania zdefiniowanych zadań na podstawie analizy danych i jest jeszcze daleka od posiadania ludzkich cech, które przypisujemy prawdziwej inteligencji.

Drugi rodzaj sztucznej inteligencji o znacznie większych możliwościach to tzw. ogólna sztuczna inteligencja (ang. *Artificial General Intelligence*, AGI) zwana także silną sztuczną inteligencją (ang. *Strong AI*). Jest to taki rodzaj sztucznej inteligencji, który wyposażony jest w szerokie możliwości poznawcze podobne do ludzkich, umożliwiające jej samodzielne radzenie sobie z nowymi i nieznanymi zadaniami. Tego typu system obejmujący wszechstronną wiedzę i zdolności poznawcze potrafi rozpoznać postawiony problem, przyswoić wiedzę i wykorzystać swoją inteligencję do rozwiązywania każdego wyzwania bez konieczności korzystania ze wskazówek człowieka. Obecnie nie istnieją żadne przykłady Strong AI, jednak uważa się, że silna sztuczna inteligencja stanowi kolejny etap ewolucji AI i wkrótce mogą powstać systemy i maszyny równie inteligentne jak ludzie.

Sztuczna nadinteligencja (ang. *Artificial Super Intelligence*, ASI) stanowi jedynie koncepcję sztucznej inteligencji, która przewyższa ludzką inteligencję we wszystkich dziedzinach, w tym także w kreatywności, mądrości i umiejętności rozwiązywania problemów. Sztuczna nadinteligencja ma charakter spekulacyjny i nie została jeszcze opracowana. Ze względu na znaczne tempo rozwoju sztucznej inteligencji, ważne jest określenie wytycznych dotyczących etycznego i bezpiecznego wykorzystania i rozwoju sztucznej inteligencji.

Wszystkie aktualnie dostępne systemy AI należą do tzw. wąskiej sztucznej inteligencji (Narrow AI), która wykorzystuje narzędzia uczenia maszynowego i głębokiego uczenia się do wydobywania informacji z ogromnej ilości danych i generowania nowej wartości w oparciu o modele zbudowane na podstawie tych danych. Wąska sztuczna inteligencja posiada wiele obszarów zastosowań (rys. 2.9).



Rys. 2.9. Obszary zastosowań wąskiej sztucznej inteligencji (opracowanie własne na podstawie: Eurofound, 2020; Mills, 2016; gov.pl, 2024)

Jedną z najważniejszych dziedzin sztucznej inteligencji stanowi uczenie maszynowe (ang. *machine learning*, ML), które opiera się na algorytmach zdolnych do automatycznego uczenia się na podstawie surowych danych i zdobytych doświadczeń w celu identyfikowania wzorców i korelacji, a także podejmowania najlepszych decyzji i formułowania prognoz przy minimalnej interwencji człowieka, bez konieczności stosowania dodatkowego programowania.

Najważniejszą dziedziną uczenia maszynowego jest głębokie uczenie (ang. *deep learning*, DL). W tym przypadku system wykorzystuje ogromne ilości złożonych, rozproszonych danych, opiera się na tworzeniu i analizie wielowarstwowych reprezentacji danych, a następnie stopniowo uzyskuje wyniki charakteryzujące się coraz wyższym poziomem dokładności. W umowny sposób przyjęto, że głębokie uczenie występuje w modelu posiadającym więcej niż trzy warstwy. Złożona analiza wielowarstwowych reprezentacji danych prowadzana w ramach głębokiego uczenia maszynowego jest najczęściej związana z modelami numerycznymi określanymi jako sztuczne sieci neuronowe.

Schemat relacji pomiędzy sztuczną inteligencją a uczeniem maszynowym, głębokim uczeniem oraz sztucznymi sieciami neuronowymi przedstawiono na rys. 2.10. Uczenie maszynowe wraz z jego elementami składowymi, czyli uczeniem głębokim oraz sieciami neuronowymi, stanowią podzbiory sztucznej inteligencji.



Rys. 2.10. Schemat relacji pomiędzy sztuczną inteligencją a uczeniem maszynowym, głębokim uczeniem oraz sztucznymi sieciami neuronowymi (opracowanie własne)

2.2.3. Podstawy budowy sztucznych sieci neuronowych

Sztuczne sieci neuronowe stanowią jeden z głównych kierunków badań w dziedzinie sztucznej inteligencji. Sztuczne sieci neuronowe są bardzo wszechstronnym narzędziem, które znajduje zastosowanie w różnych dziedzinach, takich jak rozpoznawanie obrazów, przetwarzanie języka naturalnego, diagnostyka medyczna, kompresja danych, prognozowanie i modelowanie różnego rodzaju zjawisk i procesów, sterowanie robotami, analiza danych finansowych i wiele innych (Abraham, 2005; Krogh, 2008; Krenker i in., 2011; Krizhevsky i in., 2012; Liu i in., 2017; Aggarwal, 2023).

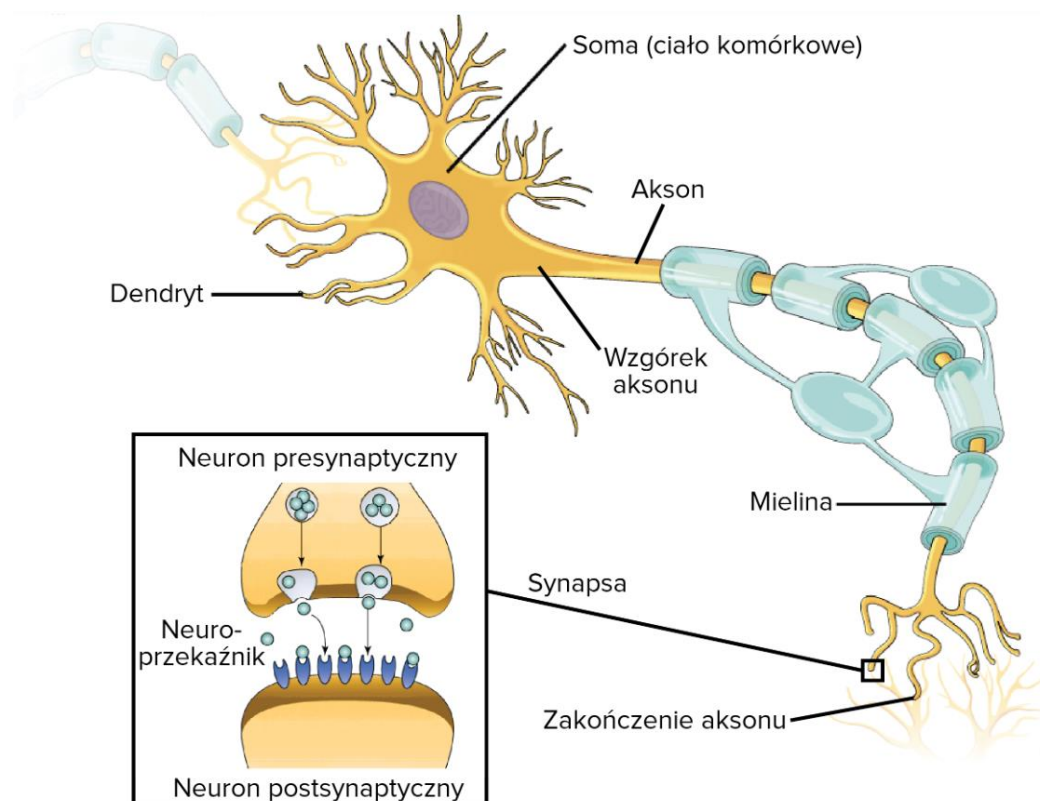
Sztuczna sieć neuronowa stanowi system przeznaczony do przetwarzania danych, którego budowa i zasada działania są w pewnym stopniu wzorowane na funkcjonowaniu fragmentów rzeczywistego (biologicznego) systemu nerwowego (Tadeusiewicz i Szaleniec, 2015). Sztuczna sieć neuronowa jest bardzo uproszczonym modelem mózgu ludzkiego. Składa się ona z połączonych ze sobą elementów przetwarzających informacje zwanych neuronami, które symulują działanie biologicznych neuronów, czyli rzeczywistych komórek nerwowych.

Sztuczne neurony są powiązane w sieć za pomocą połączeń o przypisanych parametrach (tzw. wagach) modyfikowanych w trakcie procesu uczenia. Topologia połączeń oraz ich parametry stanowią program działania sieci, natomiast sygnały pojawiające się na jej wyjściach w odpowiedzi na określne sygnały wejściowe są rozwiązaniami stawianych jej zadań (Tadeusiewicz, 1993). Sposób działania ludzkich komórek nerwowych stał się inspiracją dla osób zajmujących się rozwojem sztucznej inteligencji.

Neurony, czyli komórki nerwowe, stanowią podstawowe jednostki funkcjonalne układu nerwowego i generują sygnały elektryczne (tzw. potencjały czynnościowe), umożliwiające szybkie przekazywanie informacji w organizmie człowieka. Neurony posiadają ciało komórkowe zwane perikarionem lub somą (rys. 2.11). W perikarionie znajduje się jądro neuronu, które przechowuje i powiela informację genetyczną. Wokół ciała komórki występują liczne krótkie, rozgałęzione wypustki zwane dendrytami, które otrzymują sygnały z otoczenia i przekazują je do ciała komórki nerwowej. Akson stanowi jedną oddzielną wypustkę, zwykle dłuższą niż dendryty, i jest odpowiedzialny za przekazywanie sygnału z somy do następnych neuronów lub narządów. Większość aksonów jest pokrytych substancją izolującą (tzw. osłonką mielinową), która umożliwia im szybkie przekazywanie impulsów nerwowych. Zakończenia aksonu (zakończenia nerwowe) tworzą połączenia z komórkami docelowymi. Te miejsca to tzw. synapsy, czyli połączenia pomiędzy zakończeniami aksonu jednego neuronu a dendrytami, ciałem drugiej komórki nerwowej, gruczołem albo mięśniem. Synapsy przekazują sygnał wyjściowy, np. uczucie bólu albo przyływ adrenaliny. W przypadku synapsy łączącej dwa neurony informacja przenoszona jest z neuronu presynaptycznego do neuronu docelowego (neuronu postsynaptycznego). Większość synaps i połączeń realizuje przesyłanie informacji w formie przekaźników chemicznych zwanych neuroprzekaźnikami (rys. 2.11).

W synapsach neuronu zachodzi proces wzmocnienia lub osłabienia dochodzących sygnałów. Jeśli sygnał otrzymany przez kolejny neuron jest wystarczająco silny, to ciało komórki nerwowej generuje impuls wyjściowy. Wzbudzenie potencjału czynnościowego w neuronie presynaptycznym powoduje przekazanie sygnału do następnej komórki (postsynaptycznej). W rezultacie pojedyncze neurony tworzą połączenia z kolejnymi

Sztuczny neuron jest wzorowany na funkcjonowaniu biologicznej komórki nerwowej, ale stanowi jedynie jej bardzo uproszczony model. Neuron, w rozumieniu uczenia maszynowego, otrzymuje określoną liczbę sygnałów wejściowych, p_i , zawartych w pakiecie danych wejściowych podawanych do sieci jako opis zadania, które należy rozwiązać lub stanowiących sygnały pośrednie pochodzące z innych neuronów wchodzących w skład sieci. Za wzmacnianie lub osłabianie sygnałów na poszczególnych wejściach neuronu sztucznego odpowiadają przypisane im wagi synaptyczne, w_i .



Większość wag w sieci neuronowej ma związek z sygnałami pojawiającymi się na wejściach poszczególnych neuronów, ale czasami przy uczeniu sieci przydatne okazują się wagi, które nie są związane z żadnym z sygnałów. Tego typu wyrazy wolne w równaniach opisujących neurony oraz całe sieci pozwalają lepiej reprezentować zadania, które sieć powinna rozwiązywać. Dla ujednolicenia opisu neuronów korzystających z takich *wyrazów wolnych* i tych, które z nich nie korzystają, wprowadza się często do struktury sieci neuronowej generatory sztucznego pseudo-sygnału, które określa się mianem *biasu*. Sygnał ten jest podawany na dodatkowe wejście neuronu (Tadeusiewicz i Szaleniec, 2015).

49

wyjściowy neuronu powstaje poprzez przekształcenie potencjału postsynaptycznego przez określoną funkcję aktywacji neuronu.

Zadaniem sztucznego neuronu jest sumowanie iloczynów sygnałów wejściowych, p_i , oraz odpowiadających im wag synaptycznych, w_i , a następnie konwersja zsumowanego sygnału, n , przez nieliniową funkcję aktywacji (pobudzenia) neuronu, f , a także podanie sygnału, a , na wyjście neuronu. Wartość sygnału wyjściowego, zapisanego jako $a=f(n)$, stanowi wyjście sztucznego neuronu i przekazywana jest do kolejnych neuronów lub na wyjście sieci neuronowej (Tadeusiewicz, 1993; Tadeusiewicz i Szaleniec, 2015; Sharma i in., 2020; Dubey i in., 2022). Schemat budowy i działania sztucznego neuronu przedstawiono na rys. 2.12 (Matlab, 2011).

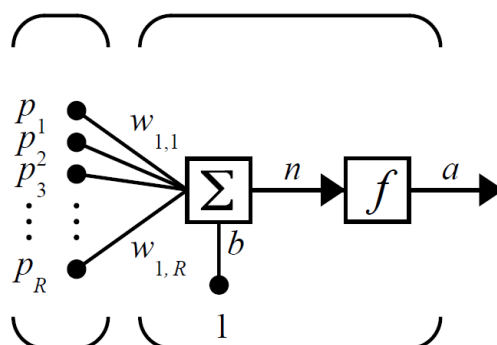
p_i – sygnały wejściowe neuronu, $i = 1, \dots, R$;

w_i – wagi synaptyczne sygnałów wejściowych, $i = 1, \dots, R$;

b – bias neuronu (wyraz wolny);

n – sumator iloczynów sygnałów wejściowych i wag, $n = \sum_{i=1}^R w_i p_i + b$;

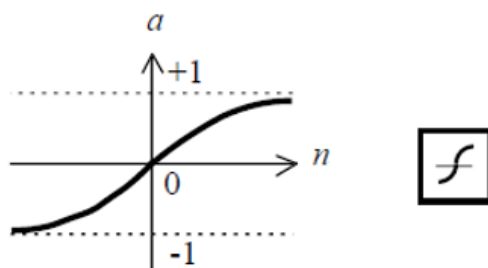
a – sygnał wyjściowy neuronu, $a = f(n)$.



Rys. 2.12. Schemat działania sztucznego neuronu (Matlab, 2011)

Funkcja transferu, f , ma na celu wyznaczenie wartości sygnału wyjściowego z neuronu na podstawie sumy ważonej sygnałów wejściowych do neuronu. Istnieje wiele rodzajów funkcji aktywujących neurony tworzące sztuczne sieci neuronowe. W ostatecznej wersji modelu predykcyjnego opartego na ANN, opracowanego w ramach niniejszej pracy, zastosowałem sieć neuronową wykorzystującą sigmoidalną funkcję aktywacji - tangens hiperboliczny o równaniu $a = \tanh(n)$ (rys. 2.13), której wartości zawierają się w przedziale $[-1,1]$ i zapisywana jest w środowisku MATLAB następująco:

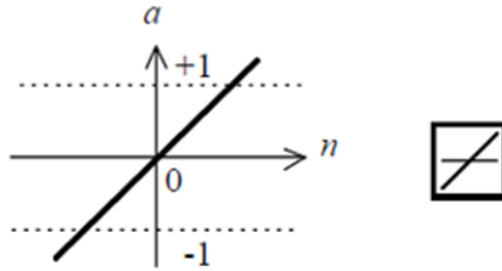
$$a = \text{tansig}(n) = 2/(1+\exp(-2*N))-1 \quad (2.1)$$



Rys. 2.13. Sigmoidalna funkcja transferu - tangens hiperboliczny (Matlab, 2011)

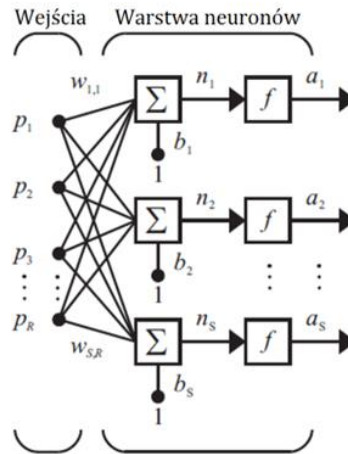
Drugą z wykorzystanych w symulacjach funkcji transferu jest funkcja liniowa $f(n) = n$ (rys. 2.14), zapisywana w środowisku MATLAB następująco:

$$a = \text{purelin}(n) = n \quad (2.2)$$



Rys. 2.14. Liniowa funkcja transferu (Matlab, 2011)

Sztuczna sieć neuronowa zbudowana jest z określonej liczby neuronów pogrupowanych w warstwy. Na rys. 2.15. przedstawiono jednowarstwową sieć neuronową, w której R oznacza ilość sygnałów wejściowych, natomiast S to ilość neuronów w warstwie.



Rys. 2.15. Model jednowarstwowej sztucznej sieci neuronowej (Matlab, 2011)

W tej sieci każdy element wektora wejściowego p jest połączony z wejściem każdego neuronu poprzez macierz wag W :

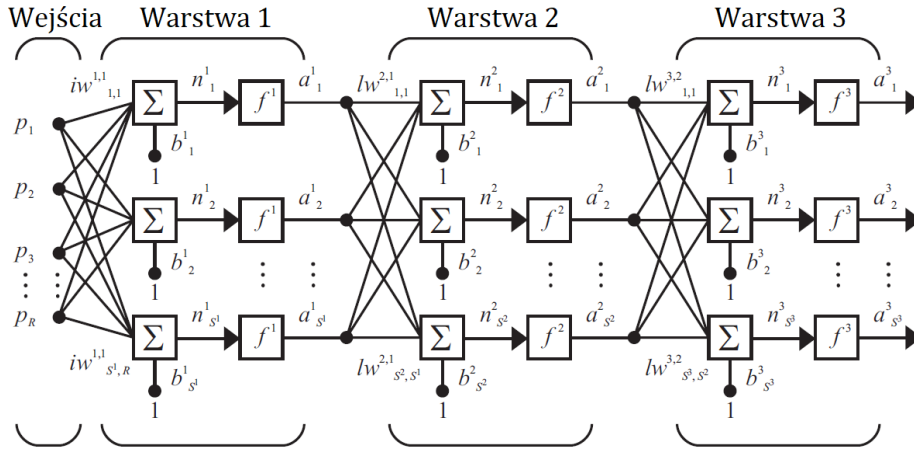
$$W = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \dots & w_{1,R} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \dots & w_{2,R} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{S,1} & w_{S,2} & \dots & w_{S,R} \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

Każdy z poszczególnych neuronów otrzymuje ważone dane wejściowe i bias b , a następnie tworzy na wyjściu skalarny wynik $n(i)$. Poszczególne wartości $n(i)$ razem tworzą wektor wejściowy n elementu S . W fazie końcowej, poszczególne wyjścia warstwy neuronowej tworzą wektory a_{1-S} zdefiniowanym następującym równaniem:

$$a = f(Wp + b) \quad (2.4)$$

Liczba wejść do warstwy może różnić się od liczby neuronów w warstwie, tzn. wartość R niekoniecznie jest równa wartości S . Warstwa nie jest ograniczona w ten sposób, aby liczba jej wejść była równa liczbie jej neuronów.

Sztuczna sieć neuronowa może mieć dowolną liczbę warstw. Każda warstwa posiada macierz wag W , wartość biasu b i wektor wyjściowy a . Aby rozróżnić poszczególne macierze wag, wektory wejściowe i wyjściowe, dla każdej zmiennej w warstwie neuronów dodawany jest indeks górny z kolejnym numerem warstwy sieci. Wyniki zastosowania tej notacji w opisie zmiennych w sieci trójwarstwowej przedstawiono na rys. 2.16.



Rys. 2.16. Model 3-warstwowej sztucznej sieci neuronowej (Matlab, 2011)

Dzięki notacji zastosowanej w środowisku Matlab można prześledzić drogę przepływu sygnału, który pojawia się na wejściu (p_i) i jest kierowany do warstwy wejściowej S^1 , gdzie poszczególnym sygnałom przypisywane są wagi i następuje korygowanie sygnału o wartość biasu b . Wynik obliczeń wykonanych w warstwie S^1 przekazywany jest do warstwy drugiej S^2 stanowiącej warstwę ukrytą. Warstwy S^2 i S^3 wykonują te same operacje co warstwa wejściowa S^1 , a wynik obliczeń a^3 w warstwie wyjściowej S^3 stanowi ostateczną odpowiedź sieci na zadany problem. Matematyczny opis wyników działania sieci, zgodnie z notacją zastosowaną w środowisku Matlab, jest następujący:

$$a^3 = f^3(LW^{3,2} \cdot a^2) + b^3 \quad (2.5)$$

gdzie:

$$a^2 = f^2(LW^{2,1} \cdot a^1) + b^2 \quad (2.6)$$

$$a^1 = f^1(LW^{1,1} \cdot p) + b^1 \quad (2.7)$$

Sztuczne sieci neuronowe, w których przepływ sygnałów odbywa się wyłącznie w kierunku od wejścia i dalej poprzez warstwy ukryte do wyjścia sieci nazywane są sieciami jednokierunkowymi lub sieciami typu *feedforward*. Sieci tego typu przeciwstawiane są sieciom rekurencyjnym, w których sygnał otrzymany na wyjściu sieci trafia powtórnie na jej wejście (obieg sygnału ze sprzężeniem zwrotnym).

Wśród jednokierunkowych sieci neuronowych wyróżnić można różnego rodzaju sieci o odmiennych zasadach działania, w tym między innymi wielowarstwowe perceptrony (sieci MLP), sieci radialne (RBF), sieci uogólnionej regresji (GRNN), probabilistyczne sieci neuronowe (PNN) i inne (Tadeusiewicz i Szaleniec, 2015).

Uczenie sztucznej sieci można zdefiniować jako iteracyjny proces estymacji optymalnych wartości parametrów sieci (najczęściej wag) na podstawie danych zawartych w zbiorze uczącym. Metodę zmiany wag w trakcie procesu uczenia sieci określa zastosowany algorytm uczenia.

W procesie wstecznej propagacji błędów ustalane są wartości błędów dla neuronów należących do warstw ukrytych. Wsteczna propagacja błędów jest wykorzystywana w algorytmie *backpropagation*, który stanowi jeden z najpopularniejszych algorytmów uczenia z nauczycielem.

Dopasowywanie odpowiedzi udzielanych przez sieć do odpowiedzi wzorcowych ze zbioru uczącego odbywa się podczas kolejnych pętli obliczeniowych (tzw. epok). Algorytm ten opiera się na koncepcji poprawiania wartości korekty wag na podstawie oceny błędu popełnianego przez poszczególne neurony w trakcie uczenia sieci. Konieczność zastosowania wstecznej propagacji błędów wynika z tego, że jedynie błędy w neuronach warstwy wyjściowej są wyznaczane bezpośrednio na podstawie danych wyjściowych i odpowiedzi wzorcowych zawartych w zbiorze uczącym. Natomiast w przypadku neuronów zawartych w warstwach ukrytych wartość błędów musi być wyznaczana właśnie poprzez mechanizm wstecznej propagacji.

Jednym ze sposobów klasyfikacji sztucznych sieci neuronowych jest podział sieci ze względu na metodę uczenia, którą sieć wykorzystuje. Wyróżnić można uczenie nadzorowane (ang. *supervised*) oraz nienadzorowane (ang. *unsupervised*).

W celu zastosowania nadzorowanego uczenia sieci neuronowej (uczenie z nauczycielem) należy dokonać podziału dostępnych danych przynajmniej na dwie części: zbiór uczący i walidacyjny. Bardzo często wydzielany jest ze zbioru również trzeci podzbiór przypadków - zbiór testowy, który służy do ostatecznej oceny jakości sieci, czyli zdolności generalizacyjnych sieci (zdolności modelu do przeniesienia nabytej wiedzy na nowe przypadki, do udzielania prawidłowych odpowiedzi dla nieznanych danych). Zagrożeniem dla generalizacji jest przeuczenie sieci (ang. *overfitting*). W takim przypadku następuje nadmierne dopasowanie zachowania sieci w stosunku do drugorzędnych szczegółów konkretnych danych uczących, które nie mają dużego znaczenia z punktu widzenia istotnych cech rozwiązywanego zadania (Tadeusiewicz i Szaleniec, 2015).

W ramach niniejszej pracy w ostatecznej wersji modelu predykcyjnego opartego na sztucznych sieciach neuronowych zastosowałem dwuwarstwową jednokierunkową sieć neuronową (sieć typu *feedforward*) z warstwą ukrytą zawierającą 5 neuronów, które wykorzystują funkcję aktywacji tangens hiperboliczny (*tansig*). W warstwie wyjściowej zastosowałem liniową funkcję aktywacji (*purelin*).

Rozważałem różne warianty uczenia sieci przy wykorzystaniu dostępnych algorytmów wstecznej propagacji błędów (*backpropagation*). W ostatecznej wersji modelu wykorzystałem algorytm Bayesian Regularization (*trainbr*) stanowiący modyfikację algorytmu Lavenberga-Marquardta (*trainlm*) (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963; Demuth i in., 2006). Regularyzacja Bayesa (*trainbr*) to algorytm uczenia sieci, który dokonuje korekty wartości wag zgodnie z optymalizacją Levenberga-Marquardta. Minimalizuje wartości kombinacji kwadratów błędów i wag, a następnie określa poprawną kombinację, aby utworzyć sieć dobrze uogólniającą (Burden i Winkler, 2008; Matlab, 2011).

W celu efektywnego wykorzystania bazy danych na potrzeby treningu i walidacji sieci neuronowej, przygotowany ciąg uczący podzieliłem na część treningową, walidacyjną i testową z wykorzystaniem funkcji *dividerand*. Oprócz podstawowego ciągu uczącego przygotowałem dodatkowy pakiet danych testujących (*blind testing samples*) przeznaczony do pełnej weryfikacji wiarygodności sieci.

3. Numeryczne modele złożowe poziomów solankowych GZW

3.1. Założenia modelu symulacyjnego

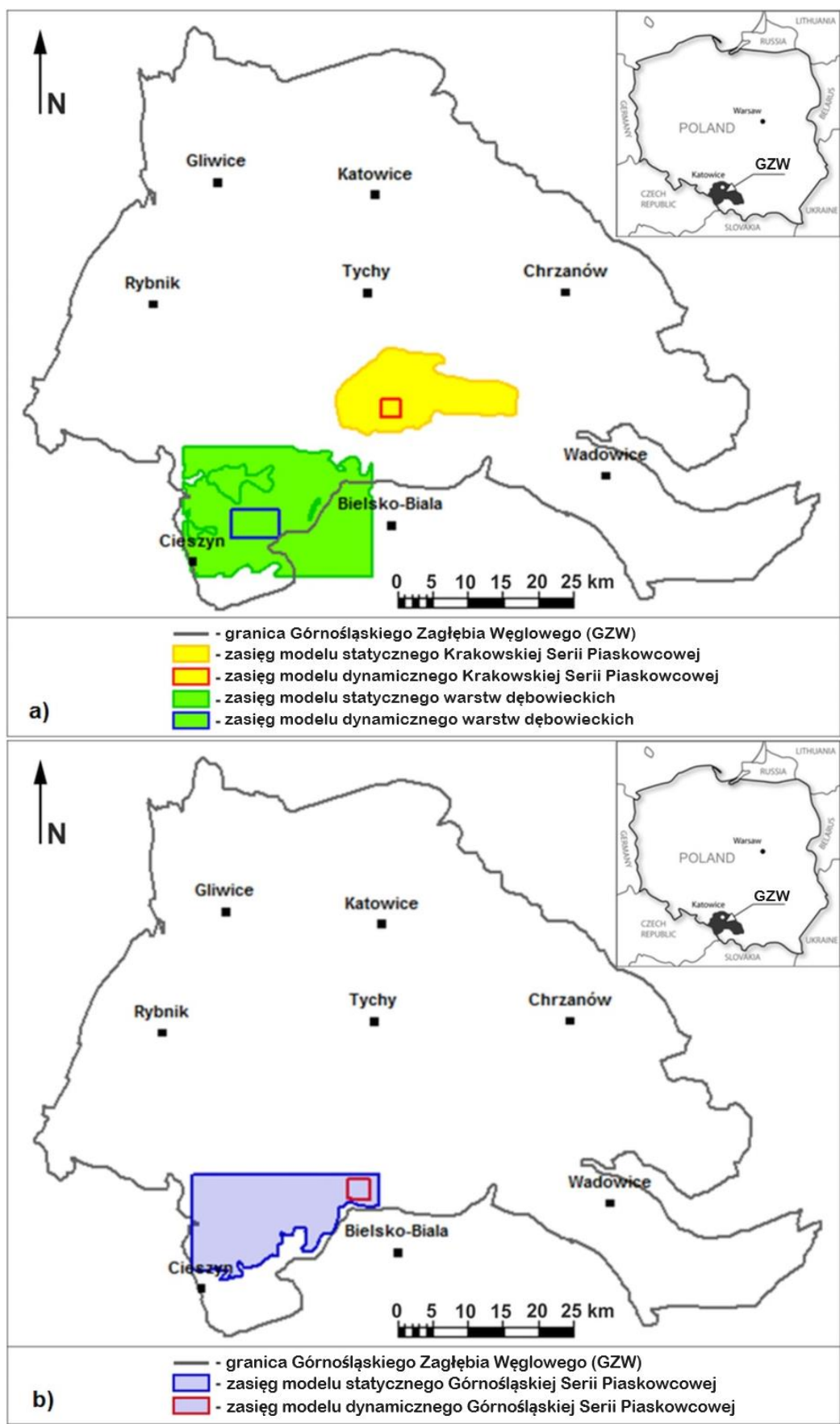
Statyczne modele ośrodków geologicznych potencjalnych składowisk ditlenku węgla zlokalizowanych w krakowskiej serii piaskowcowej, górnośląskiej serii piaskowcowej, a także w warstwach dębowieckich w rejonie Górnośląskiego Zagłębia Węglowego, opracowałem przy wykorzystaniu oprogramowania Petrel 2010.1 (Schlumberger Petrel - Geoscience Core) (Petrel, 2010). Do wykonania symulacji numerycznych wykorzystałem kompozycyjną wersję (E300) symulatora Schlumberger Eclipse (Eclipse, 2011) przeznaczonego do symulacji procesów złożowych. Kompatybilność symulatora ECLIPSE z pakietem oprogramowania Petrel Reservoir Engineering Core zapewniła możliwość wykonania szczegółowych analiz procesu składowania CO₂, jak również wizualizacji otrzymanych wyników.

3.1.1. Lokalizacja obszaru badań

Na podstawie przeprowadzonej wstępnej analizy lito-stratygraficznej i hydrogeologicznej stwierdziłem, że potencjał do składowania ditlenku węgla na obszarze Górnośląskiego Zagłębia Węglowego (GZW) wykazują tylko dwa karbońskie kompleksy litostratygraficzne: górnośląska seria piaskowcowa i krakowska seria piaskowcowa oraz kompleks warstw dębowieckich, który zalega w spągowej części miocenu (Bromek i in. 2009; Urych i Smoliński, 2019; Koterias i in., 2020; Śliwińska i in., 2022).

Do potencjalnych struktur geologicznych w zakresie składowania ditlenku węgla w rejonie GZW należą także utwory stropowej części serii węglanowej (karbon dolny) oraz serii terygenicznego dewonu dolnego i kambry, jednak serie te zalegają na dużych głębokościach (przeważnie znacznie przekraczających 2000 m) i są bardzo słabo rozpoznane (Jureczka i in., 2012).

Wytypowane rejony znajdują się w południowej części GZW. Pierwszy z nich zlokalizowany jest w krakowskiej serii piaskowcowej na północ od Bielska-Białej (rejon miejscowości Ćwiklice), natomiast drugi rejon, wytypowany w warstwach dębowieckich, położony jest na północny-zachód od Bielska-Białej (rys. 3.1a). Trzeci rejon został wytypowany w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej (rys. 3.1b).



Rys. 3.1. Lokalizacja modeli statycznych i dynamicznych w krakowskiej serii piaskowcowej i warstwach dąbrowieckich (a) oraz górnośląskiej serii piaskowcowej (b); opracowanie własne

Z wyjściowego modelu o powierzchni 221,9 km² i rozdzielczości siatki wynoszącej 200x200 m (rys. 3.2a) wyodrębniłem model o powierzchni 7,88 km² i rozdzielczości siatki - 75x75 m (rys. 3.2b). Szczegółową charakterystykę lokalnych modeli numerycznych przedstawiłem w tab. 3.1. Porowatość efektywna w modelu symulacyjnym zawiera się w przedziale wartości od 7,70% do 21,04%, przy czym średnia wartość wynosi 13,44%. Natomiast przepuszczalność w modelu lokalnym zawiera się w przedziale od 6,97 mD do 211,36 mD, przy czym średnia wartość jest równa 57,30 mD (rys. 3.2b).

Tab. 3.1. Szczegółowa charakterystyka modeli numerycznych (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

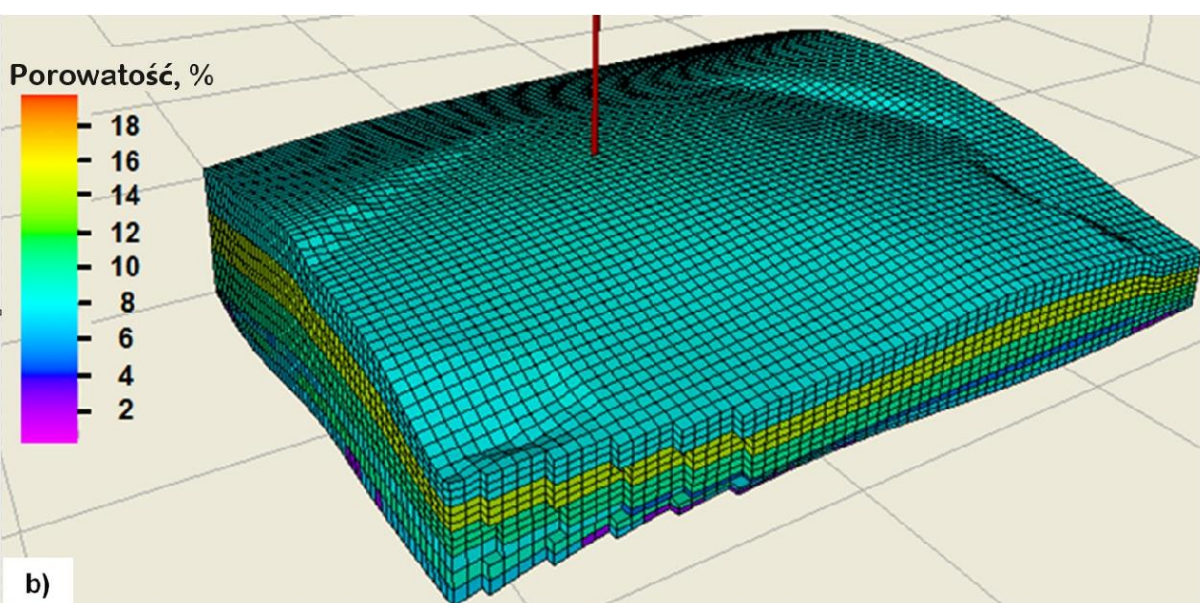
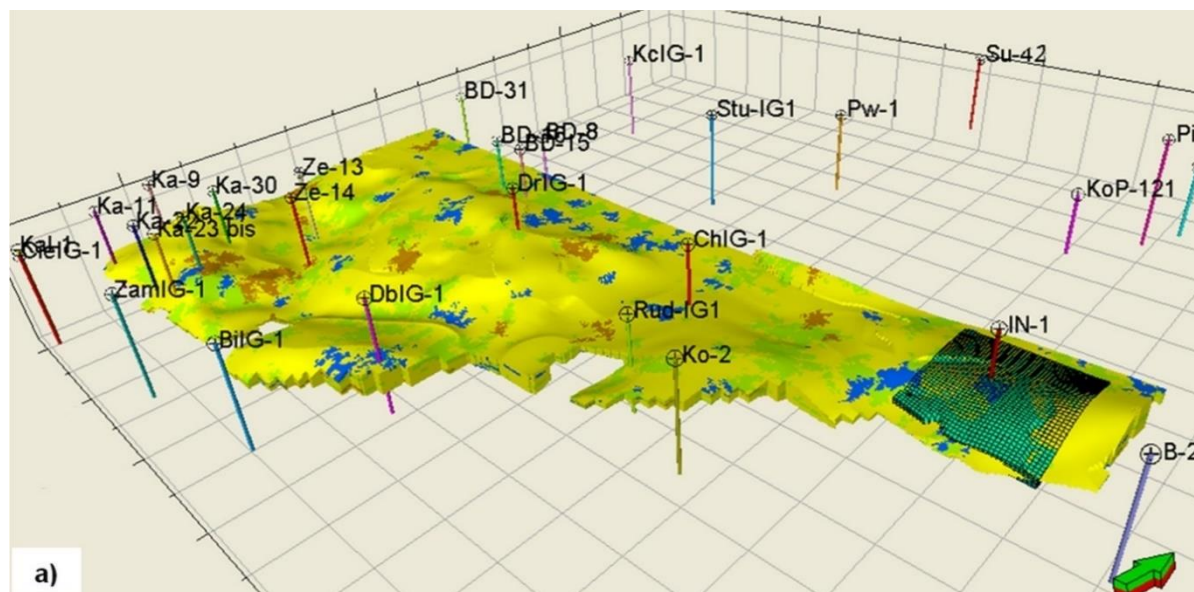
Parametr/Model	Krakowska Seria Piaskowcowa	Górnośląska Seria Piaskowcowa	Formacja dębowiecka
rozdzielczość modelu, m	3000 × 2625	3300 × 3050	7150 × 4500
rozdzielczość siatki 3D, I x J x K	40 × 35 × 30	66 × 61 × 12	140 × 90 × 10
interwał głębokościowy, m n.p.m.	od -1200,00 do 77,60	od -1094,85 do -540,86	od -972,30 do -585,88
porowatość efektywna, %	7,70–21,04	2,48–16,17	6,90–14,91
przepuszczalność, mD	6,97–211,36	0,03–5,10	0,00–49,88
objętość porów modelu, mld m ³	9,49	3,38	63,09

W opracowanym modelu wprowadziłem cztery pionowe otwory iniekcyjne: IN3, IN5, IN6, IN8 wykorzystywane w trakcie symulacji w ilości zależnej od przyjętego wariantu zatłaczania CO₂. Ponadto do prowadzenia symulacji procesu zatłaczania zaprojektowałem pojedynczy odwiert horyzontalny IN-8. W trakcie poszczególnych wariantów symulacji rozpatrywałem także zachowanie się górotworu po zabiegu hydraulicznego szczelinowania górotworu, mającego na celu intensyfikację procesu zatłaczania CO₂.

3.2.2. Model numeryczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej

Na rys. 3.3a przedstawiłem model statyczny zbudowany w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej wraz z lokalnym modelem numerycznym, w którym wykonałem szereg symulacji złożowych procesu składowania CO₂. W oparciu o model opracowany w skali regionalnej o powierzchni 137,8 km² i horyzontalnej rozdzielczości siatki wynoszącej 100x100 m opracowałem model lokalny o powierzchni 9,15 km² i rozdzielczości siatki interpolacyjnej równej 50x50 m (rys. 3.3b). Szczegółową charakterystykę modelu lokalnego przedstawiłem w tab. 3.1.

W modelu zaimplementowałem jeden pionowy otwór iniekcyjny zlokalizowany w centralnej części struktury antyklinalnej, a także pojedynczy odwiert horyzontalny *hor_well*. Wartości porowatości efektywnej, dotyczącej objętości porów, które są ze sobą połączone w strukturze skały, w modelu symulacyjnym zawierają się w przedziale od 2,48% do 16,17%, przy czym w przeważającej części wartość ta wynosi średnio około 10%. Maksymalna wartość przepuszczalności w modelu lokalnym wynosi 5,10 mD.

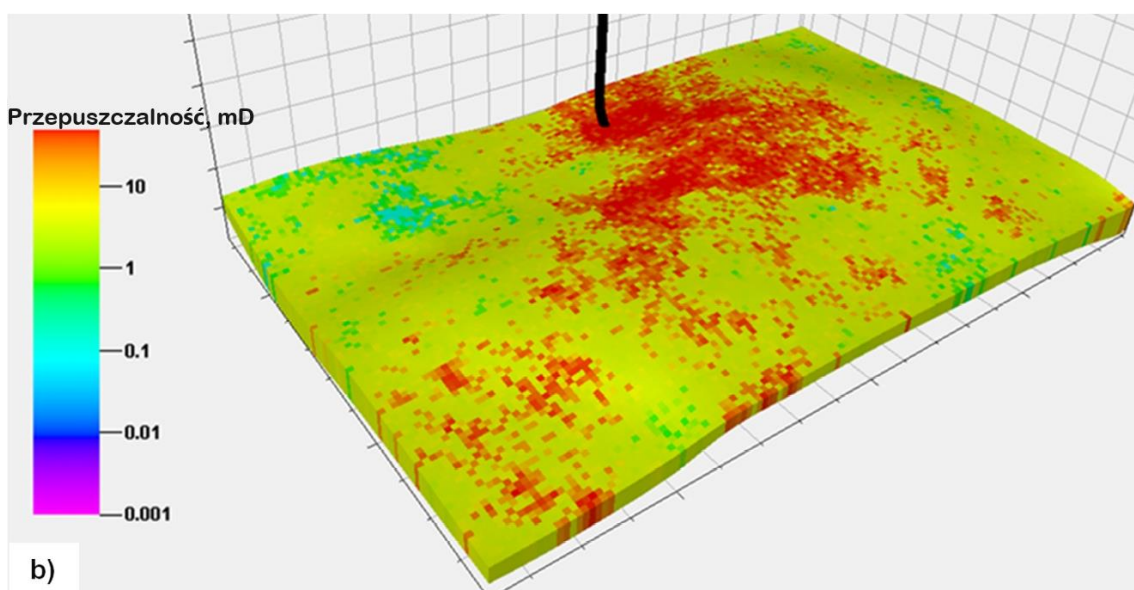
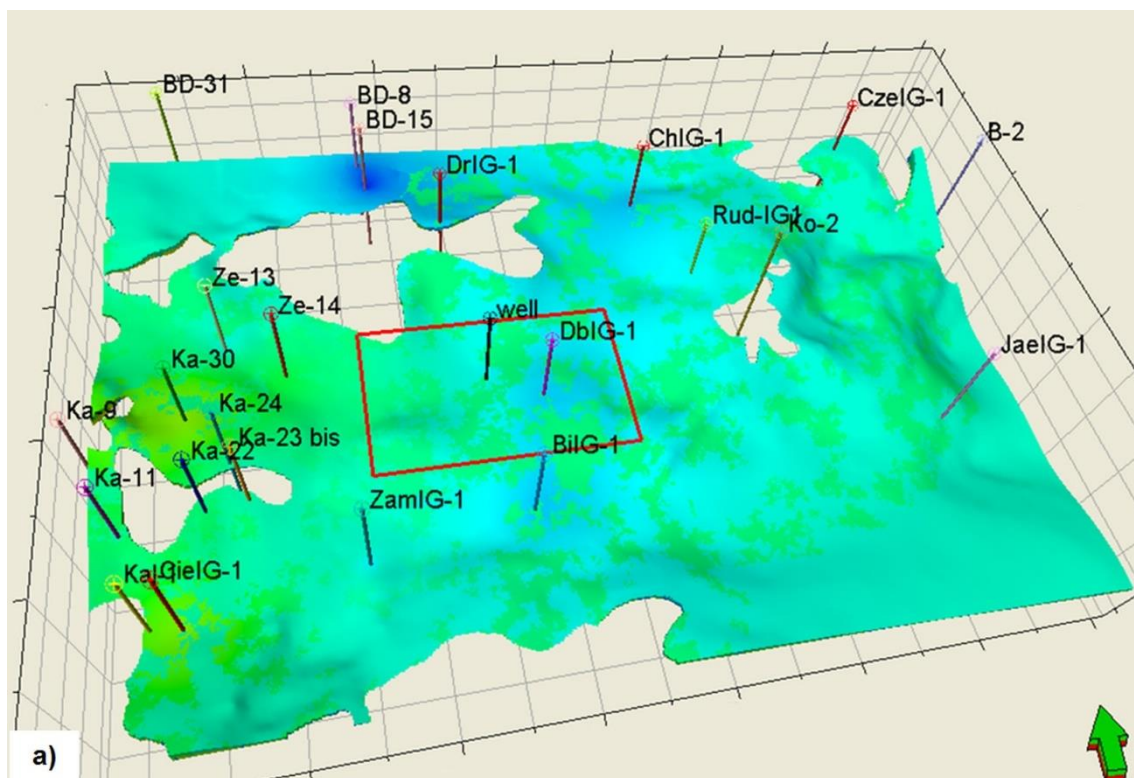


Rys. 3.3. Model litologiczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej (a) wraz z wydzielonym modelem lokalnym do celów symulacji złożowych - model porowatości efektywnej (b);
opracowanie własne

3.2.3. Model numeryczny w obrębie warstw dębowieckich

Spośród trzech analizowanych zbiorników najbardziej perspektywiczne dla potencjalnego składowania CO₂ są warstwy dębowieckie, które charakteryzują się najkorzystniejszymi wartościami parametrów geologicznych i hydrogeologicznych.

W modelu statycznym opracowanym w skali regionalnej w obrębie kompleksu warstw dębowieckich o powierzchni 555,75 km² (rys. 3.4a) wydzieliłem lokalny model numeryczny o powierzchni 32,18 km² (rys. 3.4b), w którym przeprowadziłem szereg symulacji złożowych procesów geologicznego składowania CO₂.



Rys. 3.4. Model statyczny w obrębie warstw dąbowieckich (a) wraz z wydzielonym modelem lokalnym do celów symulacji złożowych - model przepuszczalności (b); opracowanie własne

Porowatość efektywna w skonstruowanym modelu symulacyjnym zawiera się w przedziale od 6,90% do 14,91%. Maksymalna wartość przepuszczalności w modelu lokalnym wynosi 49,88 mD (rys. 3.4b).

Do symulacji procesu zatłaczania CO₂ do górotworu zaprojektowałem otwór kierunkowy *wellhor* o długości odcinka horyzontalnego wynoszącej około 500 m oraz pojedynczy odwiert kierunkowy *well* (odcinek horyzontalny: około 900 m).

3.3. Parametry płynów złożowych

W dalszym etapie prac przeanalizowałem parametry zbiornikowe w modelach statycznych wybranych rejonów GZW i uzupełniłem je o parametry płynów złożowych konieczne do przeprowadzenia symulacji składowania CO₂ w badanych formacjach i strukturach geologicznych. Dobrałem odpowiedni moduł symulatora uwzględniający zjawisko rozpuszczalności CO₂ w fazie wodnej. W tym celu zastosowałem kompozycyjną wersję symulatora Eclipse (E300) z opcją CO2SOL (Eclipse User Manual, 2011).

W celu doboru właściwego równania stanu i wyznaczenia parametrów termodynamicznych procesu wykorzystałem równanie stanu Penga-Robinsona z uwzględnieniem modyfikacji dotyczącej objętości molowej. Umożliwiło to wyznaczenie parametrów termodynamicznych w sposób bardziej zbliżony do warunków rzeczywistych (Eclipse User Manual, 2011). Lepkość CO₂ oszacowałem przy użyciu korelacji Lorentza-Braya-Clarka (Lorentz i in., 1964). Parametry dotyczące rozpuszczalności CO₂ w solance wyznaczyłem z korelacji Changa-Coatsa-Nolena (Chang i in., 1996).

Przepływ ditlenku węgla w warstwach nasyconych wodą (solanką) jest kontrolowany przez krzywe przepuszczalności względnej. W większości opracowań krzywe przepuszczalności względnej są generowane na podstawie korelacji Corey'a (Brooks&Corey, 1964). Relacje Brooksa i Coreya są w rzeczywistości rozszerzeniem równań opracowanych przez Burdine'a (Burdine, 1953) dla znormalizowanej efektywnej przepuszczalności osuszania. Równania 3.1–3.4 to oryginalne równania Burdine'a zmodyfikowane do obliczeń przepuszczalności względnej:

$$k_{rw} = (S_w^*)^{(2+3\lambda)/\lambda} \quad (3.1)$$

$$k_{rn} = k_r^o [(S_m - S_w)/(S_m - S_{iw})]^2 (1 - (S_w^*)^{(2+\lambda)/\lambda}) \quad (3.2)$$

$$S_w^* = (S_w - S_{iw})/(1 - S_{iw}) \quad (3.3)$$

$$k_r^o = 1.31 - 2.62S_{iw} - 1.1(S_{iw})^2 \quad (3.4)$$

gdzie:

- k_{rw} - przepuszczalność względna fazy zwilżającej (ang. *wetting phase*) ;
- k_{rn} - przepuszczalność względna fazy niezwilżającej (ang. *non-wetting phase*);
- k_r^o - przepuszczalność względna fazy niezwilżającej przy nieredukowalnym nasyceniu fazy zwilżającej;
- S_w^* - znormalizowane nasycenie fazą zwilżającą;
- λ - indeks dystrybucji wielkości porów;
- S_m - rezydualne nasycenie fazą niezwilżającą;
- S_w - nasycenie wodą;
- S_{iw} - początkowe nasycenie wodą.

Podstawowe równanie ciśnienia kapilarnego P_c jako funkcji nasycenia cieczą zostało zaadaptowane z formuły van Genuchtena (van Genuchten, 1980) i jest wyrażone następującym równaniem (3.5):

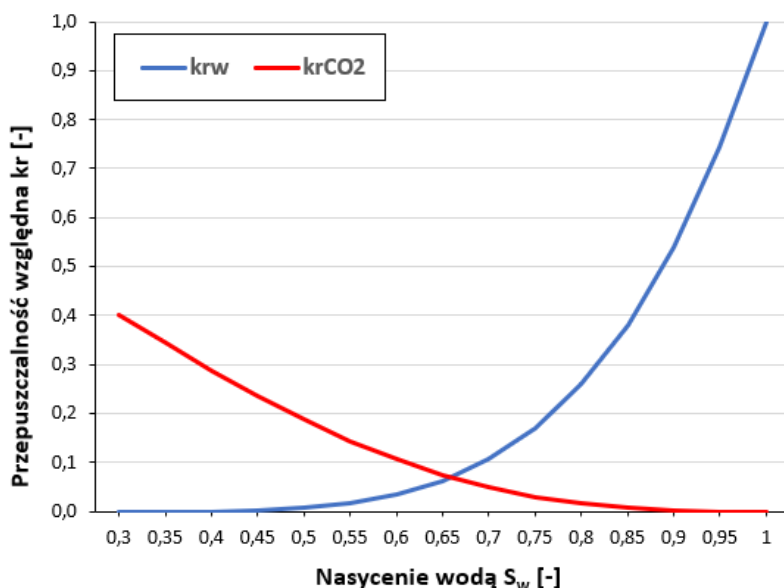
$$P_c = -P_o (S_w^{*-1/\lambda} - 1)^{1-\lambda} \quad (3.5)$$

Wartości parametrów wykorzystanych w obliczeniach przepuszczalności względnej oraz ciśnienia kapilarnego dla modeli symulacyjnych zestawilem w tab. 3.2.

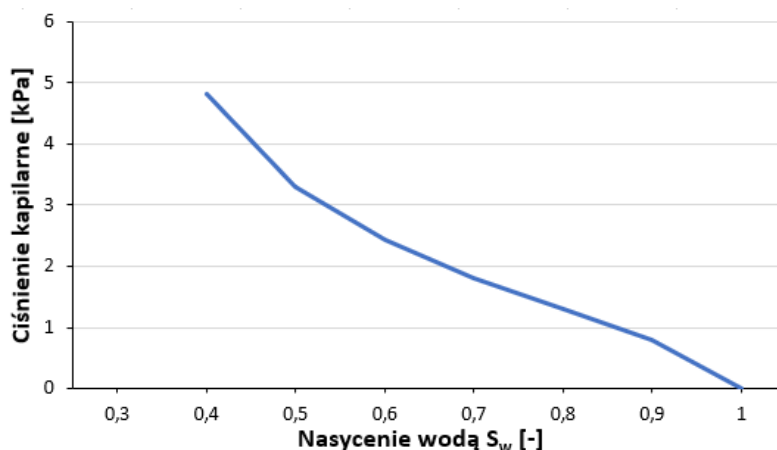
Tab. 3.2. Charakterystyka przepuszczalności względnej i ciśnienia kapilarnego w modelach symulacyjnych (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

Przepuszczalność względna i ciśnienie kapilarne - parametry	Wartość
Indeks dystrybucji wielkości porów, λ	2,0
Początkowe nasycenie wodą, S_{iw}	0,3
Formacja dębowiecka - minimalne ciśnienie progowe P_o , Pa	3 580
Skały nadkładu - minimalne ciśnienie progowe P_o , Pa	62 000

Zależności przepuszczalności względnych w funkcji nasycenia płynami złożowymi są kluczowymi parametrami w klasycznych formułach przepływu wielofazowego w ośrodkach porowatych. Na rys. 3.5 i 3.6 przedstawiłem krzywe przepuszczalności względnej oraz ciśnienia kapilarnego zastosowane w modelach symulacyjnych.



Rys. 3.5. Krzywe przepuszczalności względnej dla wody (k_{rw}) oraz dla ditlenku węgla (k_{rCO_2}) (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)



Rys. 3.6. Krzywa ciśnienia kapilarnego (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

W poszczególnych wariantach symulacji badałem wpływ stopnia hydrodynamicznej otwartości struktury geologicznej na przebieg procesu składowania CO₂. Ze względu na bardzo duży zasięg powierzchniowy występowania analizowanych struktur geologicznych warstwy wodonośne okalające obszar objęty modelem numerycznym symulowałem przy pomocy pół-analitycznych modeli poziomów wodonośnych zdefiniowanych na bazie modelu Cartera i Tracy'ego (Carter, Tracy, 1960).

Zasięg powierzchniowy modeli obszarów wody okalającej (analitycznych poziomów wodonośnych) w poszczególnych wariantach symulacji kilkakrotnie przewyższał wymiary obszarów modelowanych numerycznie. W niektórych symulacjach rozmiar analitycznego poziomu wodonośnego zdefiniowałem jako całkowity zasięg występowania danej formacji geologicznej (np. zasięg występowania górnośląskiej serii piaskowcowej w całym Górnośląskim Zagłębiu Węglowym). Parametry rozważanych modeli analitycznych poziomów wodonośnych zdefiniowałem jako wartości średnie z obszarów modelowanych numerycznie. Szczegółową charakterystykę modeli analitycznych przedstawiłem w tab. 3.3.

Tab. 3.3. Charakterystyka modeli analitycznych w modelach złożowych (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

Parametry modeli analitycznych	Wartość
powierzchnia, km ²	~482
przepuszczalność, mD	200
porowatość, %	25
całkowita ściśliwość (skały i wody), 1/bar	0,00001
promień zewnętrzny, m	5000
miąższość, m	50
typ analitycznego poziomu wodonośnego	Carter-Tracy

Jako warunek początkowy prowadzonych symulacji złożowych przyjąłem położenie głębokości kontaktu gaz-woda zróżnicowanej w każdym z trzech analizowanych modeli (od 100 m do około 170 m). Ponadto na podstawie archiwalnych danych otworowych przyjąłem dane dotyczące temperatury złożowej oraz początkowego ciśnienia złożowego zawierającego się w przedziale wartości od 10 MPa do 11 MPa (w zależności od typu modelowanej formacji geologicznej na głębokości od 1000 do 1150 m). Płyny złożowe, przy założonych wartościach ciśnienia i temperatury złożowej, znajdowały się w warunkach równowagi hydrostatycznej.

W modelach symulacyjnych przyjąłem, że przyrost ciśnienia złożowego w trakcie składowania CO₂ nie powinien przekraczać 20% wartości ciśnienia hydrostatycznego, tak aby ciśnienie porowe było znacznie niższe niż gradient szczelinowania lub ciśnienie wycieku (ang. *leak-off pressure*). Podstawowe parametry początkowe, jakie założyłem poszczególnych modelach symulacyjnych, zebrałem w tab. 3.4.

Jako warunki brzegowe analizowanego procesu przyjąłem stałą wydajność zatłaczania oraz maksymalne ciśnienie denne w otworze iniekcyjnym P_{BHP} . Wielkości te są zróżnicowane w poszczególnych modelach symulacyjnych w zależności od założonego wariantu zatłaczania.

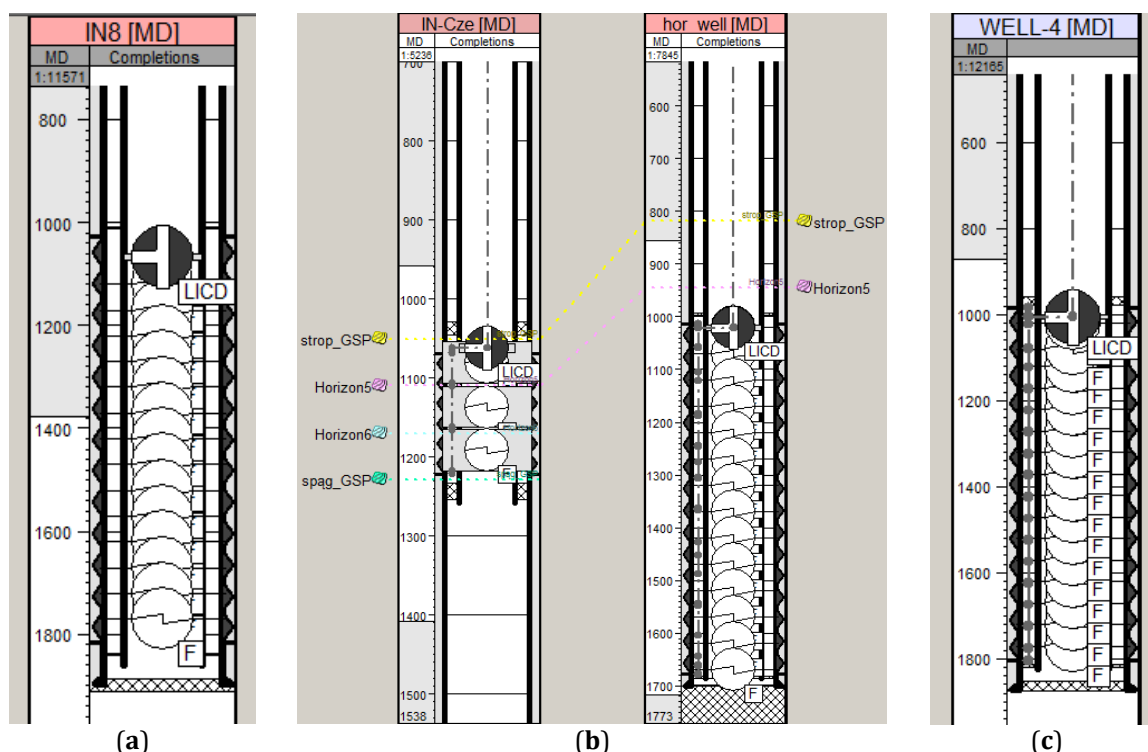
Tab. 3.4. Charakterystyka warunków początkowych w modelach symulacyjnych
(opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

	Parametr	Model symulacyjny		
		Krakowska Seria Piaskowcowa	Górnośląska Seria Piaskowcowa	Formacja dębowiecka
Właściwości wody złożowej	Gęstość d_w , kg/m ³	1137,79	1048,73	1093,93
	Lepkość μ_w , cP	0,9957	0,8144	0,8514
	Ścisłość c_w , 1/Pa	$3,215 \times 10^{-10}$	3.831×10^{-10}	3.495×10^{-10}
	Współczynnik objętościowy B_w , rm ³ /sm ³	1,0330	0,9988	1,0020
Warunki początkowe	Średnia temperatura, K	308,15	308,15	313,15
	Ciśnienie, MPa	11,00	10,37	10,00
	Głębokość, m	1150,00	1100,00	1000,00
	Głębokość kontaktu woda-gaz, m	150,00	169,80	100,00

Szczelinowanie hydrauliczne stosowane w odwiertach kierunkowych jest jednym z podstawowych zabiegów mających na celu poprawę parametrów strefy przyodwiertowej. Głównym celem szczelinowania jest zwiększenie przepuszczalności skał oraz poprawa wymiany gazu między odwiertem a górotworem. Efekt taki jest uzyskiwany poprzez wytworzenie systemu szczelin wokół iniekcyjnego odcinka odwiertu. Promień zasięgu szczelin jest duży i może wynosić do kilkudziesięciu metrów. Powstawanie szczelin w caliznie skał złożowych związane jest z naprężeniami rozrywającymi większymi od granicy wytrzymałości skał, generowanymi w wyniku działania cieczy szczelinującej zatłaczanej do odwiertu.

W modelu krakowskiej serii piaskowcowej symulację zabiegu szczelinowania zastosowałem w przypadku otworu kierunkowego. Zastosowałem symulację szczelinowania w 14-stu interwałach głębokości w odległości co 50 metrów.

W modelu górnośląskiej serii piaskowcowej zabieg szczelinowania zastosowałem zarówno w otworze pionowym, jak i horyzontalnym. W przypadku otworu pionowego mamy do czynienia z zabiegiem szczelinowania w trzech interwałach głębokości oddalonych od siebie o ok. 50 metrów, rozpoczynającym się po 30 dniach od rozpoczęcia iniekcji CO₂. Natomiast w otworze kierunkowym, podobnie jak w krakowskiej serii piaskowcowej, zastosowałem symulację procesu szczelinowania hydraulicznego w 14 interwałach głębokości co 50 metrów. Symulacje efektu szczelinowania hydraulicznego w modelu warstw dębowieckich przeprowadziłem w otworze kierunkowym w 16-stu interwałach głębokości co 50 metrów. Schematyczne rozmieszczenie interwałów szczelinowania w otworach iniekcyjnych przedstawiłem na rys. 3.7. Główne właściwości systemu szczelin przyjęte w modelach symulacyjnych zestawiałem w tab. 3.5.



Rys. 3.7. Rozmieszczenie interwałów szczelinowania w otworach iniekcyjnych:
(a) Krakowska Seria Piaskowcowa, (b) Górnośląska Seria Piaskowcowa, (c) Formacja
dębowiecka (opracowanie własne)

Tab. 3.5. Charakterystyka systemu szczelin w modelach symulacyjnych (opracowanie
własne)

Parametry systemu szczelin	Wartość
Przepuszczalność, mD	10 000
Szerokość, inch	0,20
Długość, m	250
Orientacja pozioma, deg	0
Zasięg pionowy, m	50

Symulacje procesu zatłaczania ditlenku węgla do poziomów wodonośnych w modelach obejmujących poszczególne serie piaskowcowe wykonałem dla odrębnych wariantów technologicznych zróżnicowanych pod względem zastosowanej metodyki procesu zatłaczania. Analizie poddałem efektywność procesu składowania ze względu na rodzaj odwiertów zatłaczających, tzn. rozpatrywałem wykorzystanie zarówno odwiertów pionowych jak również otworu kierunkowego (horyzontalnego) wraz ze wspomaganie procesu poprzez szczelinowanie hydrauliczne górotworu. We wszystkich wariantach symulacji ditlenek węgla zatłaczany był do warstw spagowych zbiornika. Zastosowałem odwierty z perforacją rur okładzinowych. Celem perforacji jest osiągnięcie maksymalnej produktywności otworu w opłacalny sposób i ustanowienie dobrego połączenia pomiędzy otworem wiertniczym a formacją złożową.

Poszczególne warianty symulacji procesu były zróżnicowane pod względem wydajności zatłaczania. Dla każdego z odwiertów założyłem wielkość iniekcji w granicach od 1,00 do 3,24 mln sm³/d w zależności od przyjętego scenariusza symulacji. Dodatkowo

w każdym ze wspomnianych wariantów założyłem różne scenariusze symulacji zróżnicowane pod względem czasu jej trwania.

Symulacje procesu migracji CO₂ w analizowanej strukturze prowadziłem dla interwału czasowego wynoszącego od 15 do 400 lat po zakończeniu zatłaczania (faza relaksacji). Czas trwania fazy zatłaczania CO₂ także był zróżnicowany w zależności od przyjętego scenariusza i wynosił od 6 do 25 lat.

Analizowałem również wpływ stopnia hydrodynamicznej otwartości struktury na przebieg procesu składowania CO₂. Badałem także wpływ szczelinowania hydraulicznego otworów na efektywność zatłaczania. Szczegółową charakterystykę poszczególnych wariantów zatłaczania przedstawiłem w tab. 3.6a i tab. 3.6b.

Tab. 3.6a. Zestawienie rozpatrywanych wariantów symulacji zatłaczania CO₂ do formacji geologicznych Krakowskiej Serii Piaskowcowej (KSP); opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019.

Struktura geologiczna	Rodzaj odwiertu	Założona wydajność zatłaczania CO ₂ , mln sm ³ /d	Czas trwania fazy zatłaczania CO ₂ , lata	Czas trwania fazy relaksacji, lata	Temperatura solanki, K	ID symulacji
KSP	1 otwór pionowy: IN3	1,00	10	100	308,15	S1
	4 otwory pionowe: IN3, IN4, IN5, IN6	4 x 1,00	10	100		S2
	1 otwór pionowy: IN8	1,50	10	100		S3
	1 otwór pionowy: IN8	1,50	25	200		S4
	1 otwór pionowy: IN8	3,24	6	200		S5
	1 otwór pionowy: IN8	3,00	25	400		S6
	4 otwory pionowe: IN3, IN4, IN5, IN6	1,50	25	400		S7
	2 otwory pionowe: IN4, IN6	1,50	25	400		S8
	3 otwory pionowe: IN4, IN5, IN6	1,00	25	400		S9
	1 otwór kierunkowy: IN8 + szczelinowanie	3,00	25	400		S10
	1 otwór kierunkowy: IN8 + szczelinowanie	3,00	25	400	303,15	S11

Tab. 3.6b. Zestawienie rozpatrywanych wariantów symulacji zatłaczania CO₂ do formacji geologicznych Górnośląskiej Serii Piaskowcowej (GSP) i warstw dębowieckich (DEB); opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019.

Struktura geologiczna	Rodzaj odwiertu	Założona wydajność zatłaczania CO ₂ , mln sm ³ /d	Czas trwania fazy zatłaczania CO ₂ , lata	Czas trwania fazy relaksacji, lata	Temperatura solanki, K	ID symulacji
GSP	1 otwór pionowy: IN-Cze	1,00	10	15	308,15	S1
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie	1,00	10	15		S2
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie, bez uwzgl. modelu analitycznego	1,50	25	100		S3
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie, z uwzgl. modelu analitycznego	1,50	25	100		S4
	1 otwór pionowy: IN1 – z uwzgl. modelu analitycznego o zasięgu GSP	1,50	25	100		S5
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie	1,50	25	100		S8
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie	3,00	25	100		S9
	1 otwór pionowy: IN-Cze + szczelinowanie, z uwzgl. modelu analitycznego	3,00	25	100		S10
	1 otwór kierunkowy: <i>hor_well</i> + szczelinowanie	3,00	25	400		S11
	1 otwór kierunkowy: <i>hor_well</i> + szczelinowanie	3,00	25	100	313,15	S12
DEB	1 otwór kierunkowy: <i>wellhor</i> (odcinek horyzonalny = 500 m)	2,50	25	200	313,15	S3A
	1 otwór kierunkowy: <i>wellhor</i> (odcinek horyzonalny = 900 m)	2,50	25	200		S4
	1 otwór kierunkowy: <i>wellhor</i> (odcinek horyzonalny = 900 m) + szczelinowanie	2,50	25	400		S5A

3.4. Wyniki symulacji zatłaczania CO₂ do poziomów wodonośnych

3.4.1. Model numeryczny w obrębie krakowskiej serii piaskowcowej

Symulacje procesu zatłaczania CO₂ do poziomów wodonośnych w modelu obejmującym krakowską serię piaskowcową wykonałem dla odrębnych wariantów technologicznych. W tab. 3.7 przedstawiłem wyniki modelowania dotyczące sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji. Objętości CO₂ podałem dla warunków standardowych* (sm³) i złożowych** (rm³).

Tab. 3.7. Zestawienie uzyskanych wyników dotyczących sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu krakowskiej serii piaskowcowej (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

Wariant	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln sm ³ *	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln rm ³ **	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln Mg
S1	348,23	0,97	0,66
S2	1419,14	3,95	2,68
S3	979,63	2,71	1,85
S4	2919,99	7,82	5,51
S5	872,11	2,43	1,65
S6	2983,54	8,08	5,63
S7	3688,96	10,00	6,97
S8	1762,30	4,81	3,33
S9	3236,67	8,89	6,11
S10	3312,65	8,89	6,26
S11	2096,08	5,22	3,99

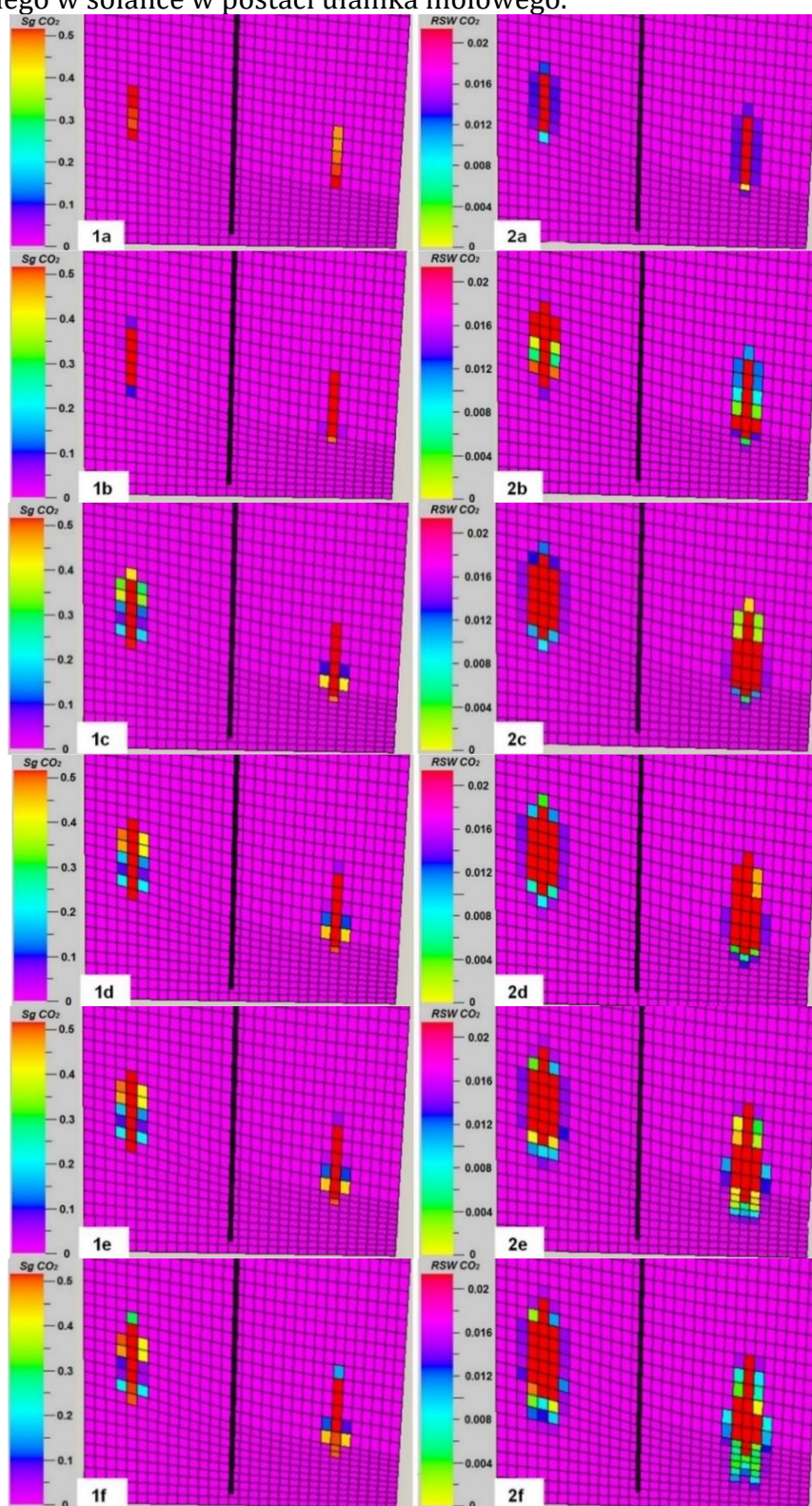
*,** Symulator złożowy Eclipse definiuje jednostkę sm³ jako metr sześcienny gazu przy ciśnieniu 1 atm = 1013,25 hPa i temperaturze 15,56°C (Eclipse Manual, 2011). Natomiast jednostka rm³ oznacza objętość gazu w warunkach złożowych.

Największe sumaryczne ilości zatłoczonego CO₂ odpowiadają wariantowi S7 (cztery otwory pionowe) oraz wariantowi S10 (jeden otwór horyzontalny ze szczelinowaniem).

Na rys. 3.8a i 3.8b przedstawiłem rozkład nasycenia struktury ditlenkiem węgla pozostającym w stanie rezydualnym oraz rozkład rozpuszczonego CO₂ w analizowanej strukturze dla poszczególnych interwałów czasowych symulacji.

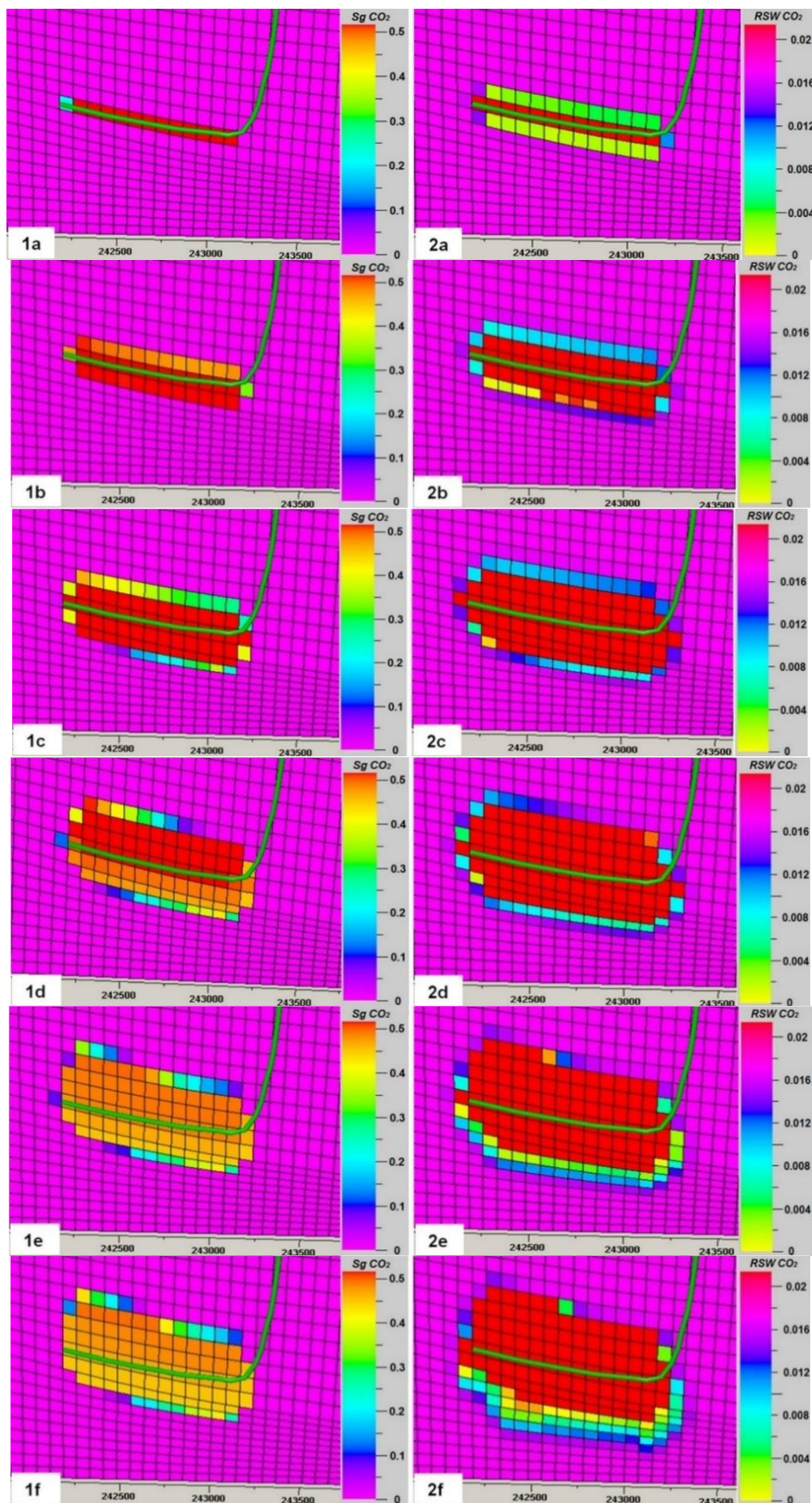
Ditlenek węgla w stanie rezydualnym definiujemy jako swobodny CO₂ (ang. *free-phase CO₂*) pozostający w fazie niezwilżalnej (ang. *non-wetting phase*), który po zatłoczeniu do górotworu zostaje uwieczony dzięki siłom kapilarnym w przestrzeniach porowych skał (Niemi i in., 2017).

Rozkład nasycenia swobodnego CO₂ w warstwach kolektora krakowskiej serii piaskowcowej przedstawiłem w postaci ułamka zwykłego, natomiast rozkład CO₂ rozpuszczonego w solance w postaci ułamka molowego.



(I)

Rys. 3.8. Rozkład nasycenia swobodnego CO₂ [SgCO₂] (1) i rozpuszczonego w solance [RSW CO₂-ułamek molowy] (2) w strefie iniekcyjnych otworów pionowych (warianty S7- I oraz S11-II) po a) 5, b) 15, c) 25 latach od rozpoczęcia zatłaczania oraz po d) 50, e) 200 i f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania (opracowanie własne)



(II)

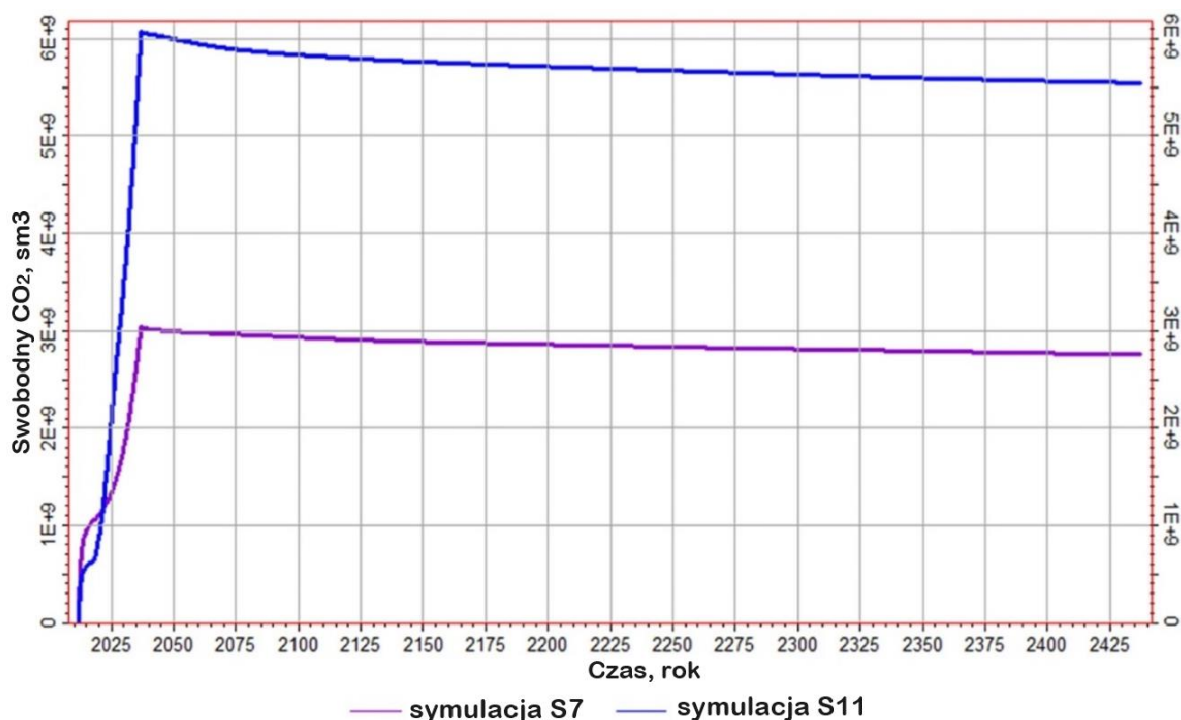
c.d. Rys. 3.8. Rozkład nasycenia swobodnego CO_2 [Sg CO_2] (1) i rozpuszczonego w solance [RSW CO_2 -
ułamek molowy] (2) w strefie iniekcyjnych otworów pionowych (warianty S7- I oraz S11-II) po a) 5, b) 15,
c) 25 latach od rozpoczęcia zatłaczania oraz po d) 50, e) 200 i f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania
(opracowanie własne)

W wariantcie zatłaczania S7 obserwowany jest wzrost ciśnienia w warstwach stropowych kolektora wynosi maksymalnie około 240 kPa po 25 latach zatłaczania. W efekcie przeprowadzenia długoczasowych symulacji przez kolejne 400 lat od zakończenia zatłaczania stwierdziłem, że już po około 30 latach ciśnienie złożowe w stropie struktury jest już zbliżone do pierwotnego ciśnienia przed rozpoczęciem zatłaczania ditlenku węgla.

W początkowej fazie symulacji zatłaczany ditlenek węgla gromadzi się w rejonie otworu iniekcyjnego. Zaobserwowałem jedynie nieznaczne przemieszczanie się swobodnego CO₂ w kierunku stropowych warstw kolektora, prawdopodobnie z powodu słabych własności zbiornikowych analizowanej struktury. Ponadto ma tu miejsce bardzo powolny proces redukcji fazy swobodnej CO₂ wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance, która w efekcie opada ku dolnym warstwom kolektora. Zjawisko konwekcji solanki powstaje w wyniku zmian jej gęstości spowodowanej rozpuszczaniem CO₂.

W wariantcie zatłaczania z wykorzystaniem otworu kierunkowego (S11) również powstają i stopniowo rozwijają się strefy swobodnego CO₂ wokół odwiertu iniekcyjnego. Zauważalne jest także powolne przemieszczanie się CO₂ w kierunku warstw stropowych kolektora wskutek dominujących sił wyporu. Ponadto ma tu miejsce zjawisko rozpuszczania się CO₂ w solance i opadanie rozpuszczonego CO₂ ku dolnym warstwom kolektora. Można zaobserwować, że solanka zawierająca rozpuszczony CO₂ rozprzestrzenia się na znacznie większym obszarze w porównaniu do strefy rezydualnego CO₂.

Na rys. 3.9. przedstawiłem przebieg procesu redukcji fazy swobodnej CO₂ wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance w dwóch analizowanych wcześniej wariantach zatłaczania (S7, S11). W scenariuszu symulacji z otworem kierunkowym (S11) redukcja swobodnego CO₂ w strukturze przebiega szybciej – zaobserwowałem rozpuszczenie około 500 mln sm³ CO₂ w strefie otworu kierunkowego w stosunku do około 300 mln sm³ CO₂ w strefie otworu pionowego (S7).



Rys. 3.9. Porównanie zmian ilości swobodnego CO₂ w strukturze dla wariantów S7 i S11 w czasie (opracowanie własne)

3.4.2. Model numeryczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej

Symulacje procesu zatłaczania CO₂ do poziomów wodonośnych w modelu obejmującym górnośląską serię piaskowcową wykonałem dla odrębnych wariantów technologicznych. Przedstawiłem wyniki ośmiu wariantów symulacji przy wykorzystaniu jednego odwiertu pionowego oraz dwóch wariantów obejmujących zatłaczanie otworem kierunkowym ze wspomaganiem procesu poprzez szczelinowanie hydrauliczne górotworu. W tab. 3.8 przedstawiłem wyniki modelowania dotyczące sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji.

Tab. 3.8. Zestawienie uzyskanych wyników sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu górnośląskiej serii piaskowcowej (opracowanie własne)

Wariant	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln sm ³	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln rm ³	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln Mg
S1	45,91	0,18	0,09
S2	81,08	0,29	0,15
S3	409,68	1,15	0,77
S4	415,43	1,16	0,79
S5	415,43	1,16	0,79
S8	658,04	1,82	1,24
S9	658,04	1,82	1,24
S10	680,39	1,88	1,29
S11	1399,28	4,06	2,64
S12	1446,09	4,51	2,73

W dwóch pierwszych wariantach symulacji założyłem maksymalne ciśnienie denne w otworach iniekcyjnych na poziomie $P_{BHP} = 12$ MPa, natomiast w pozostałych wariantach przyjęto ciśnienie denne równe $P_{BHP} = 15$ MPa.

W dwóch pierwszych wariantach porównywałem zatłaczanie CO₂ przez okres 10 lat badając wpływ szczelinowania w pojedynczym otworze na efektywność zatłaczania. W wariantcie ze szczelinowaniem górotworu (S2) okazało się, że uzyskałem prawie dwukrotnie większą ilość zatłoczonego CO₂ w porównaniu z iniekcją CO₂ bez zabiegu szczelinowania hydraulicznego.

W kolejnych trzech wariantach (S3, S4, S5) badałem wpływ stopnia hydrodynamicznej otwartości struktury na przebieg procesu składowania. Po uwzględnieniu w symulacji warstw wodonośnych okalających obszar struktury objęty modelem (S4) stwierdziłem jedynie nieznaczne zwiększenie sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂. Zwiększenie rozmiarów modelu obszaru wód okalających („akiferów” okalających) do rozmiarów zasięgu górnośląskiej serii piaskowcowej w całym GZW (S5) nie odegrało żadnego wpływu na ilość zatłoczonego CO₂.

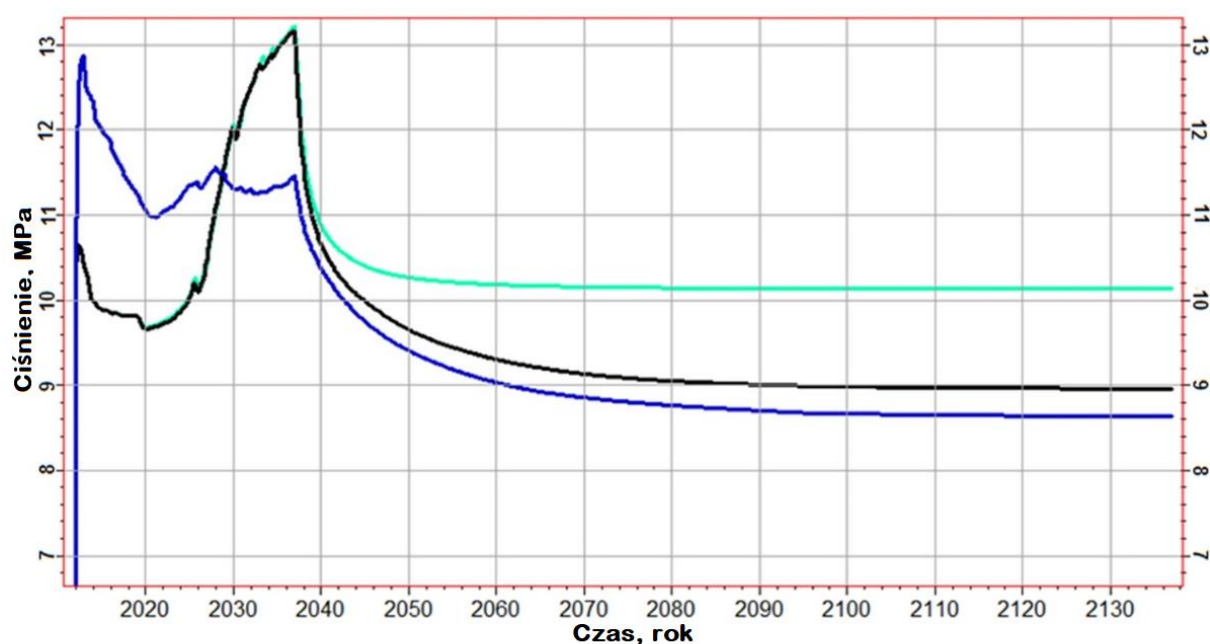
W wariantcie S8 zatłaczanie ditlenku węgla stymulowane było za pomocą szczelinowania hydraulicznego. Uzyskałem w ten sposób wzrost ilości zatłoczonego CO₂ do wartości równej około 1,243 mln Mg CO₂. Zwiększenie założonej wydajności zatłaczania do wartości 3 mln sm³/d w wariantcie S9 wynikało z próby osiągnięcia

maksymalnej produktywności otworów iniekcyjnych. Zmiana ta jednak nie dała oczekiwanych rezultatów i w efekcie uzyskałem podobne wyniki jak w wariancie S8. Natomiast po uwzględnieniu w symulacji występowania warstw wodonośnych okalających obszar struktury objęty modelem (S10), stwierdziłem jedynie nieznaczne zwiększenie sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂.

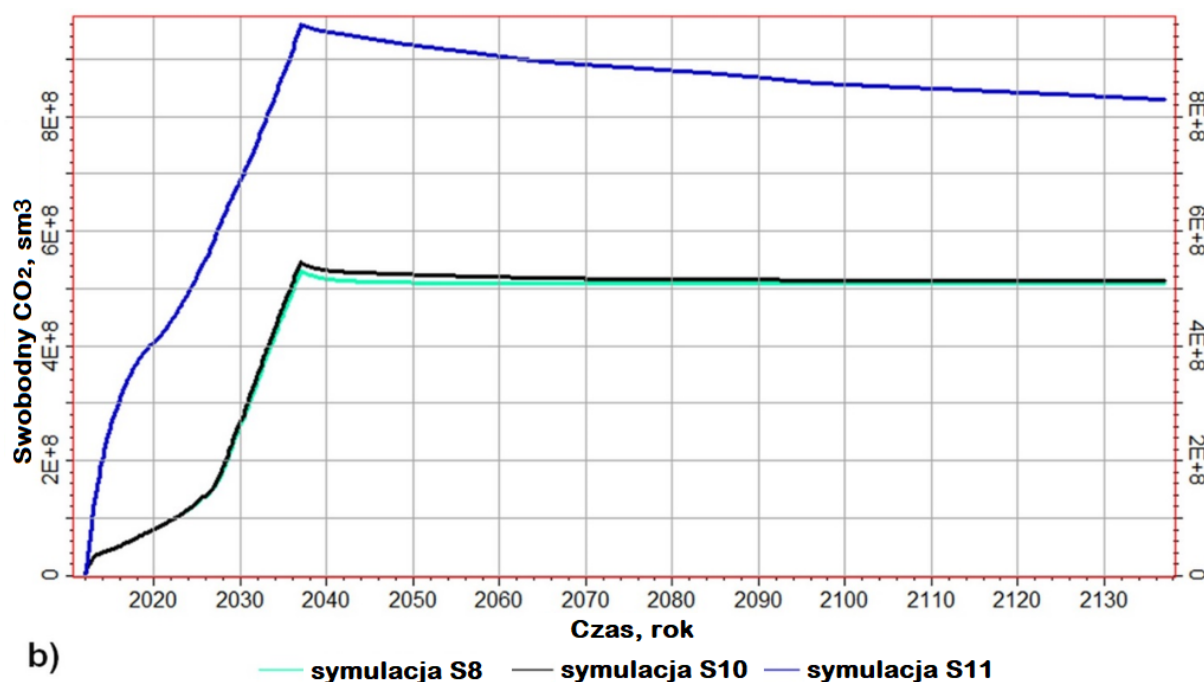
W ostatnim wariancie symulacji (S11) badałem przebieg procesu składowania CO₂ prowadzonego przy wykorzystaniu otworu horyzontalnego ze szczelinowaniem. W trakcie prowadzonych symulacji rejestrowałem ciśnienia charakterystyczne dla procesu składowania. Podobnie jak poprzednim modelu ciśnienie na spodzie otworu iniekcyjnego osiąga w trakcie zatłaczania założoną wartość maksymalną, następnie spada po zakończeniu iniekcji i w dalszym etapie symulacji dąży do osiągnięcia ciśnienia pierwotnego.

Na rys. 3.10a przedstawiłem przebieg zmian średniego ciśnienia w strefie zatłaczania dla trzech wariantów symulacji (S8, S10, S11). W wariancie S10 uzyskałem największą sumaryczną ilość zatłoczonego CO₂ spośród wszystkich symulacji obejmujących zatłaczanie otworem pionowym. Wyniki tej symulacji porównałem z rezultatami symulacji obejmującego zatłaczanie ditlenku węgla za pomocą odwiertu horyzontalnego (S11).

Na rys. 3.10b przedstawiłem szybkość rozpuszczania się zatłaczanego CO₂ w solance dla dwóch omawianych scenariuszy symulacji. Przebieg procesu rozpuszczania się CO₂ w solance w wariancie z otworem pionowym jest znikoma, natomiast symulacja z otworem horyzontalnym charakteryzuje się już dużą dynamiką rozpuszczania się CO₂ w solance.

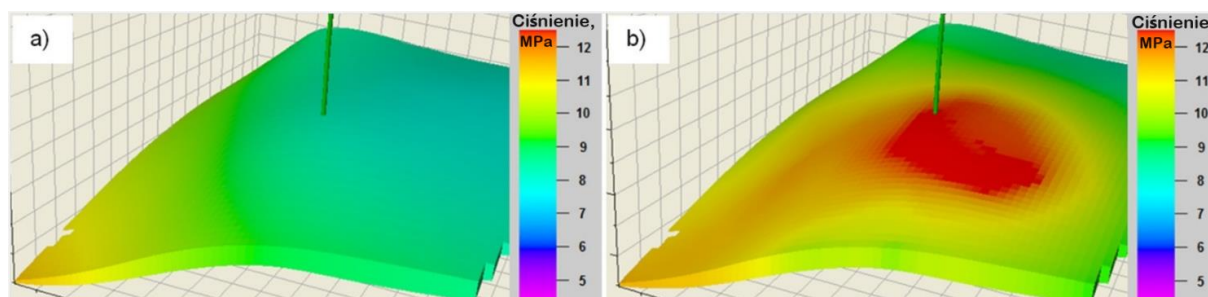


a) — symulacja S8 — symulacja S10 — symulacja S11



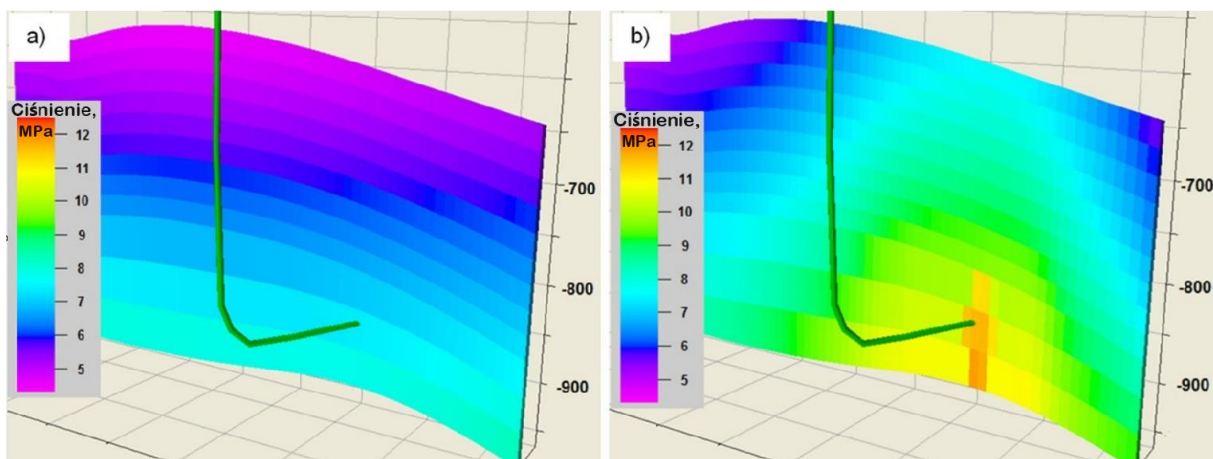
Rys. 3.10. Porównanie zmian w czasie średniego ciśnienia w strefie zatłaczania (a) oraz ilości swobodnego CO₂ w strukturze (b) dla wariantów symulacji S8, S10, S11 (opracowanie własne)

W przeprowadzonej symulacji według scenariusza S11 zaobserwowałem znaczny wzrost ciśnienia w warstwach stropowych kolektora po zakończeniu zatłaczania względem ciśnienia początkowego, wynoszący maksymalnie około 4,7 MPa po 25 latach zatłaczania (rys. 3.11 i 3.12).



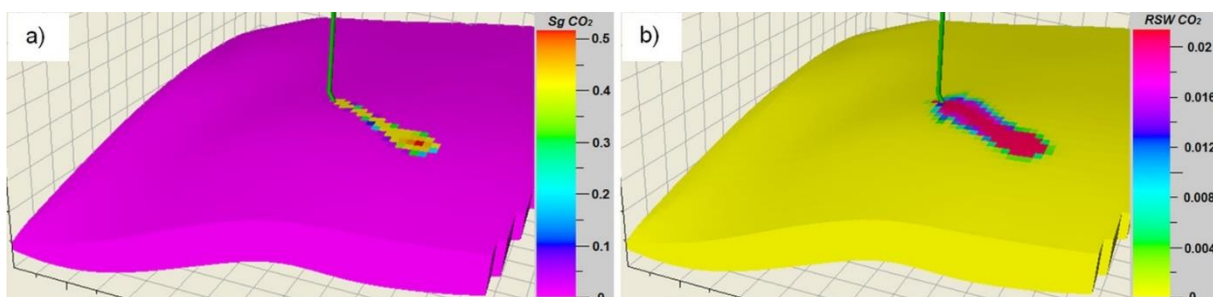
Rys. 3.11. Rozkład ciśnienia w stropowej warstwie kolektora przed rozpoczęciem zatłaczania (a) oraz po 25 latach zatłaczania (b); opracowanie własne

Przewyższenie ciśnienia na stropie, stanowiące wielkość limitującą efektywną pojemność procesu składowania, zdecydowało o rozszczelnieniu skał nadkładu i częściowym przenikaniu CO₂ do warstw nadległych należących do serii mułowcowej. Po zakończeniu iniekcji widoczny jest spadek ciśnienia w warstwach stropowych, jednak w wyniku przeprowadzenia symulacji długoczasowych po upływie nawet 400 lat obserwuje się nadal przewyższenie ciśnienia wynoszące około 1,15 MPa względem pierwotnego ciśnienia w stropie struktury.

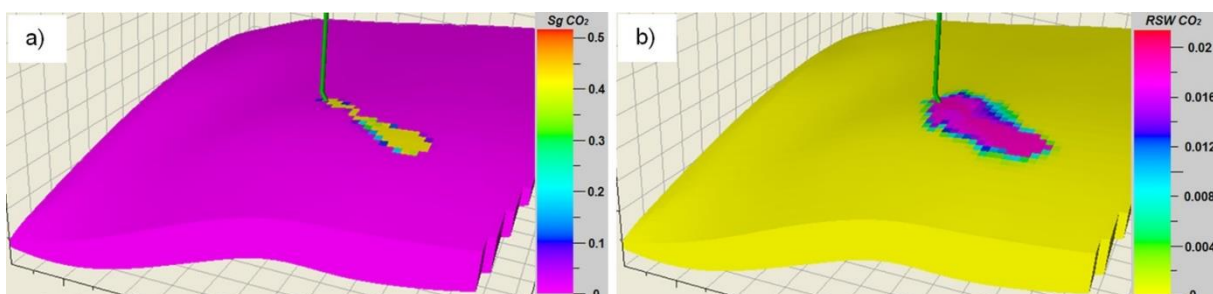


Rys. 3.12. Zmiany ciśnienia na przekroju przez strefę zatłaczania – rozkład ciśnienia przed rozpoczęciem zatłaczania (a) oraz rozkład ciśnienia po 25 latach zatłaczania (b); opracowanie własne

W scenariuszu S12 również mamy do czynienia z powstawaniem i stopniowym rozwojem stref swobodnego CO_2 wokół odwiertu iniekcyjnego. Zauważalne jest przemieszczanie się CO_2 w kierunku warstw stropowych kolektora i dalej w kierunku lokalnego szczytu struktury wskutek dominujących sił wyporu. Ponadto ma tu miejsce zjawisko rozpuszczania się CO_2 w solance. Na rys. 3.13 przedstawiłem zmiany nasycenia swobodnego CO_2 i rozpuszczonego CO_2 w stropowej części warstwy iniekcyjnej po 25 latach zatłaczania, natomiast na rys. 3.14 – zmiany nasycenia CO_2 po 200 latach od zakończenia zatłaczania. Stwierdziłem, że solanka zawierająca rozpuszczony CO_2 rozprzestrzeniła się na znacznie większym obszarze w porównaniu do strefy występowania rezydualnego CO_2 .



Rys. 3.13. Zmiany nasycenia swobodnego CO_2 [$S_g \text{CO}_2$] (a) i rozpuszczonego CO_2 [$RSW \text{CO}_2$] (b) w stropowej części warstwy iniekcyjnej po 25 latach zatłaczania (opracowanie własne)



Rys. 3.14. Zmiany nasycenia swobodnego CO_2 [$S_g \text{CO}_2$] (a) i rozpuszczonego CO_2 [$RSW \text{CO}_2$] (b) w stropowej części warstwy iniekcyjnej po 200 latach od zakończenia zatłaczania (opracowanie własne)

3.4.3. Model numeryczny w obrębie warstw dębowieckich

Do analiz potencjału składowania CO₂ w warstwach dębowieckich wybrałem trzy warianty symulacji charakteryzujące się najlepszą efektywnością geologicznego składowania CO₂ w górotworze przy równoczesnym zachowaniu parametrów zatłaczania zapewniających bezpieczeństwo składowania.

Symulacje procesu zatłaczania CO₂ do poziomów wodonośnych w modelu obejmującym kompleks warstw dębowieckich wykonałem dla trzech wariantów, z czego jeden z nich uwzględniał zatłaczanie CO₂ otworem kierunkowym ze wspomaganiem procesu poprzez szczelinowanie hydrauliczne górotworu. W tab. 3.9 przedstawiłem wyniki modelowania dotyczące sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji. Tak jak w zestawieniach dla poprzednich modeli objętości CO₂ podałem dla warunków normalnych i złożowych.

Tab. 3.9. Zestawienie uzyskanych wyników sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu warstw dębowieckich (opracowanie własne)

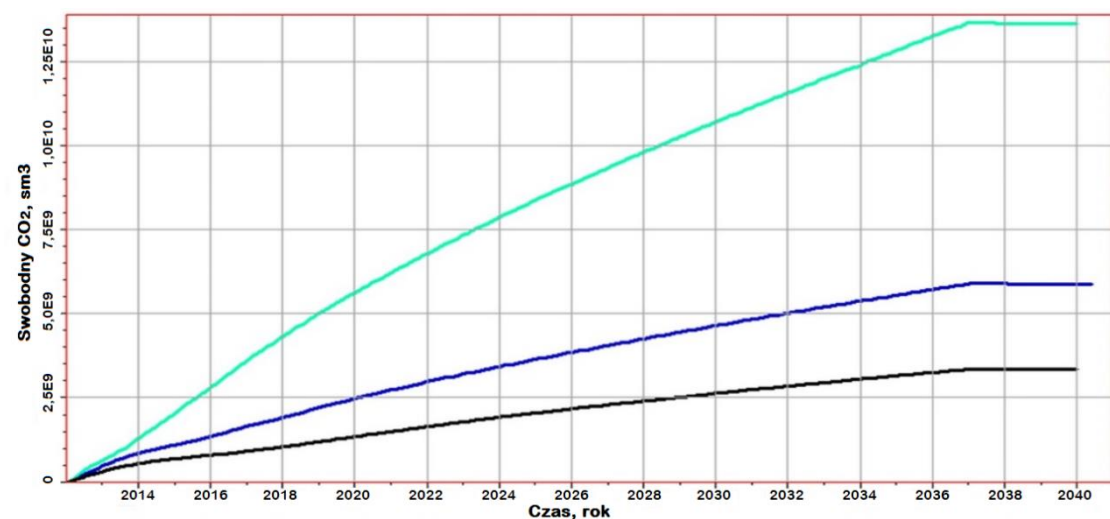
Wariant	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln sm ³	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln rm ³	Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , mln Mg
S3A	4252,99	11,91	8,54
S4	7244,09	19,85	14,23
S5A	16024,45	40,13	28,77

Na podstawie przeprowadzonych symulacji testowych stwierdziłem, że aby umożliwić efektywne zatłaczanie CO₂ przez zakładany okres 25 lat, wartość ciśnienia dennego w otworze iniekcyjnym nie powinna być większa niż $P_{BHP} = 13$ MPa. W pierwszym wariantcie symulacji zatłaczanie CO₂ trwa nieprzerwanie przez 25 lat przy wykorzystaniu otworu kierunkowego o długości odcinka „poziomego” wynoszącej 500 m i założonym maksymalnym ciśnieniu dennym równym $P_{BHP} = 13$ MPa.

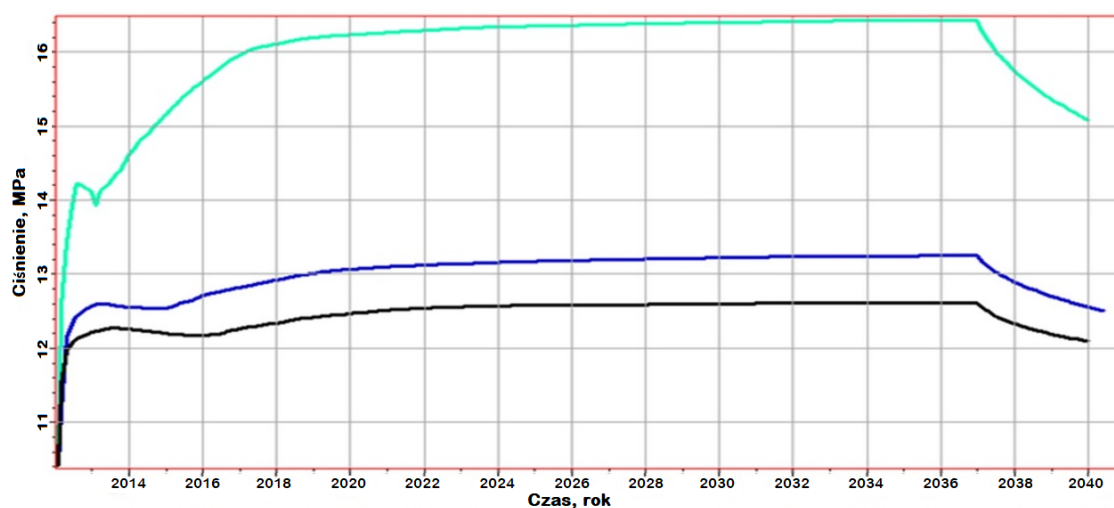
W drugim wariantcie symulacji zatłaczanie CO₂ także trwa nieprzerwanie przez 25 lat przy wykorzystaniu otworu kierunkowego o długości odcinka „poziomego” wynoszącej 900 m i założonym maksymalnym ciśnieniu dennym równym $P_{BHP} = 13$ MPa.

W trzecim scenariuszu symulacji (S5A) procesu składowania CO₂ w warstwach dębowieckich zastosowałem symulację wspomaganie zatłaczania poprzez zabieg szczelinowania hydraulicznego górotworu. W tym wariantcie założyłem iniekcję CO₂ przez 25 lat przy maksymalnym wydatku zataczania wynoszącym 2,5 mln sm³/d i maksymalnym ciśnieniu dennym w otworze równym $P_{BHP} = 13$ MPa.

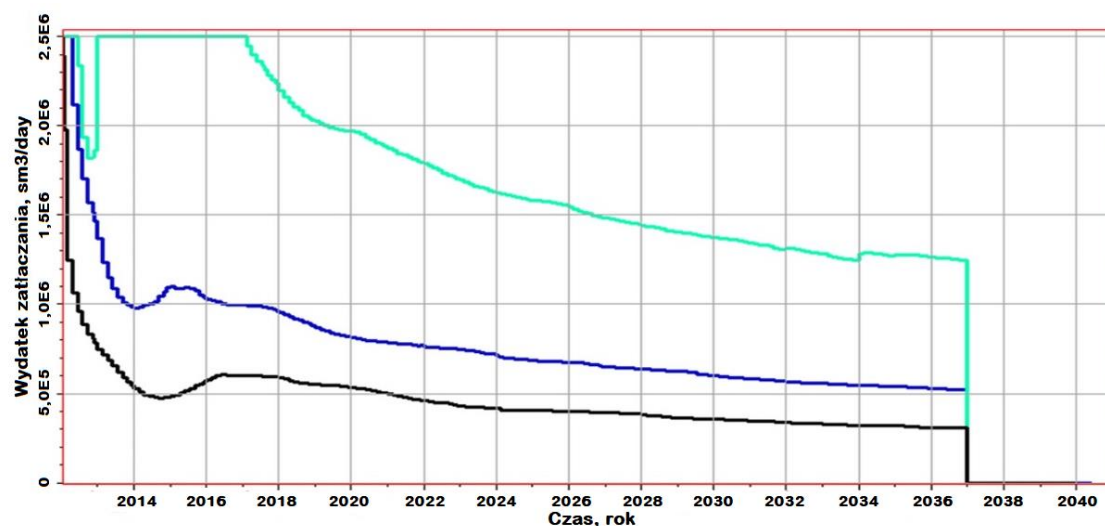
Na rys. 15a przedstawiłem sumaryczne ilości CO₂ zatłoczonego do górotworu w funkcji czasu w poszczególnych wariantach symulacji, zmiany średniego ciśnienia w strefie zatłaczania (rys. 3.15b) oraz zmiany wydajności zatłaczania w poszczególnych wariantach symulacji (rys. 3.15c).



a) symulacja 5A symulacja 4 symulacja 3A



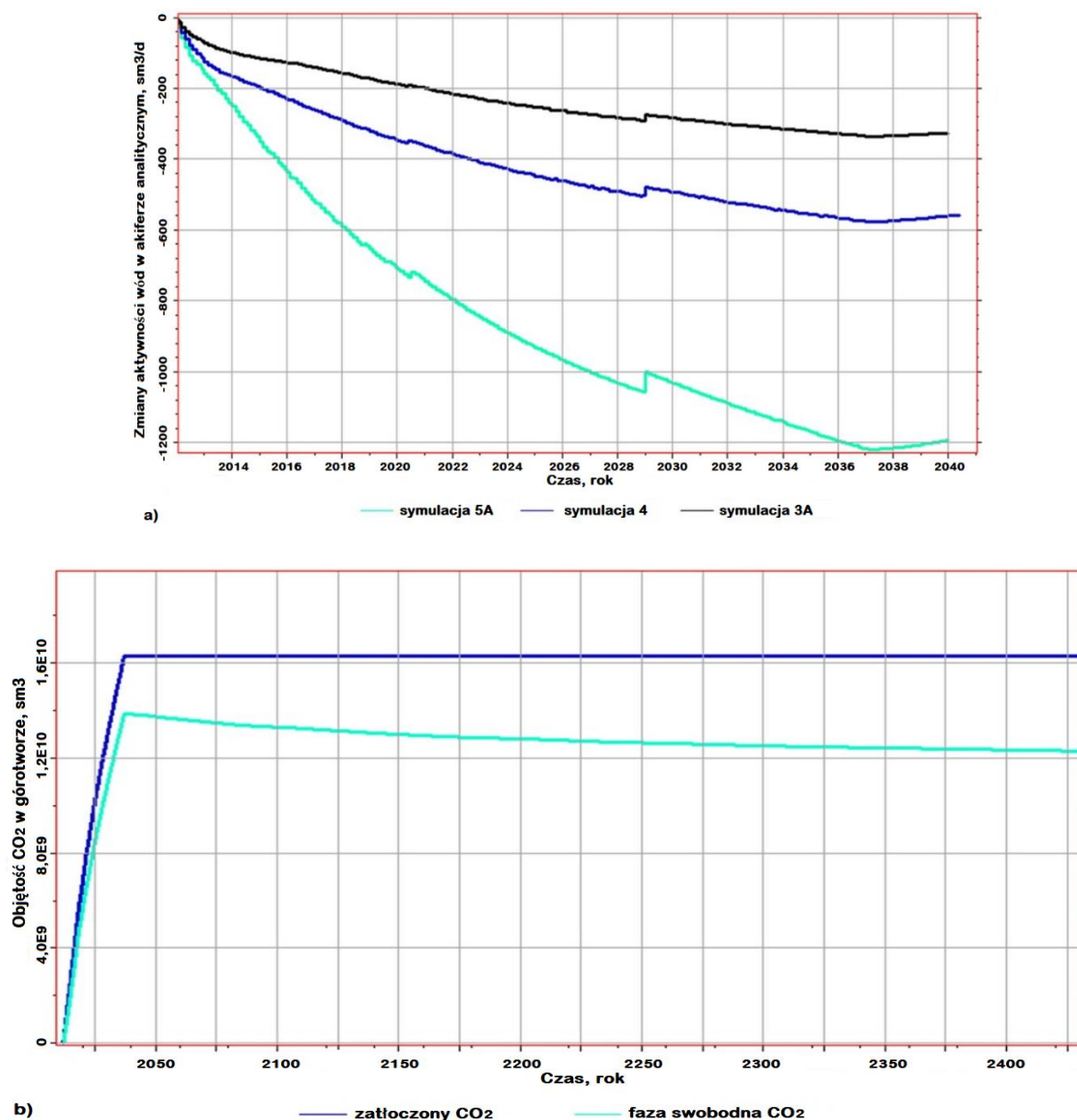
b) symulacja 5A symulacja 4 symulacja 3A



c) symulacja 5A symulacja 4 symulacja 3A

Rys. 3.15. Porównanie zmian w czasie ilości swobodnego CO₂ w strukturze (a), zmian w czasie średniego ciśnienia w strefie zatłaczania (b) oraz zmian wydajności zatłaczania dla trzech wariantów symulacji: S3A, S4, S5A (c); opracowanie własne

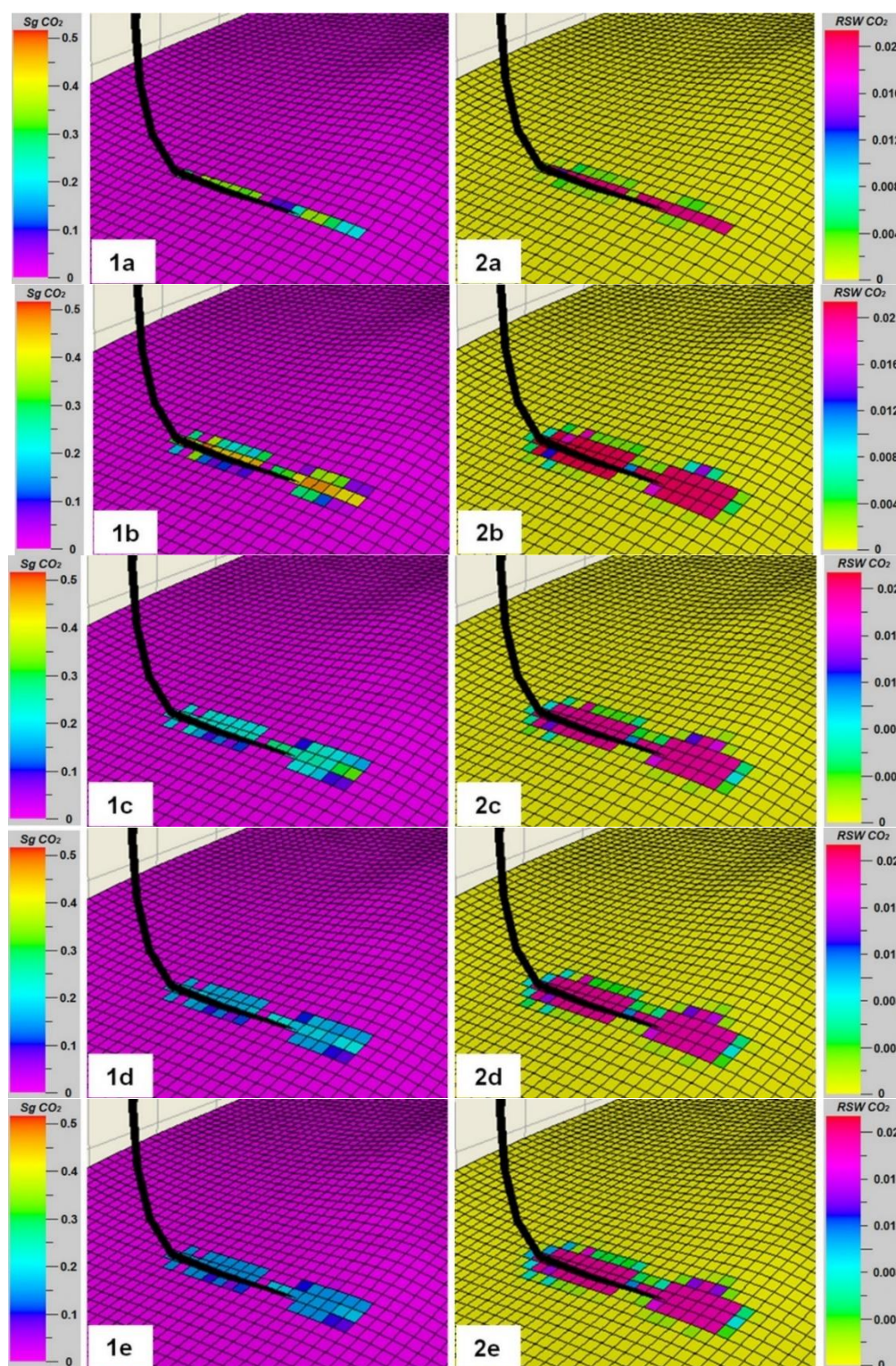
W trakcie procesu zatłaczania zaobserwowałem niewielką aktywność wód okalających zróżnicowaną w zależności od przyjętego wariantu symulacji (rys. 3.16a). Największe przemieszczanie się wód do modelu analitycznego stwierdziłem w wariantcie S5A. W tym wariantcie symulacji zaobserwowałem tendencję do migracji zatłaczanego CO₂ ku szczytowym warstwom struktury złożowej oraz powolny proces redukcji fazy swobodnej ditlenku węgla, wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance (rys. 3.16b).



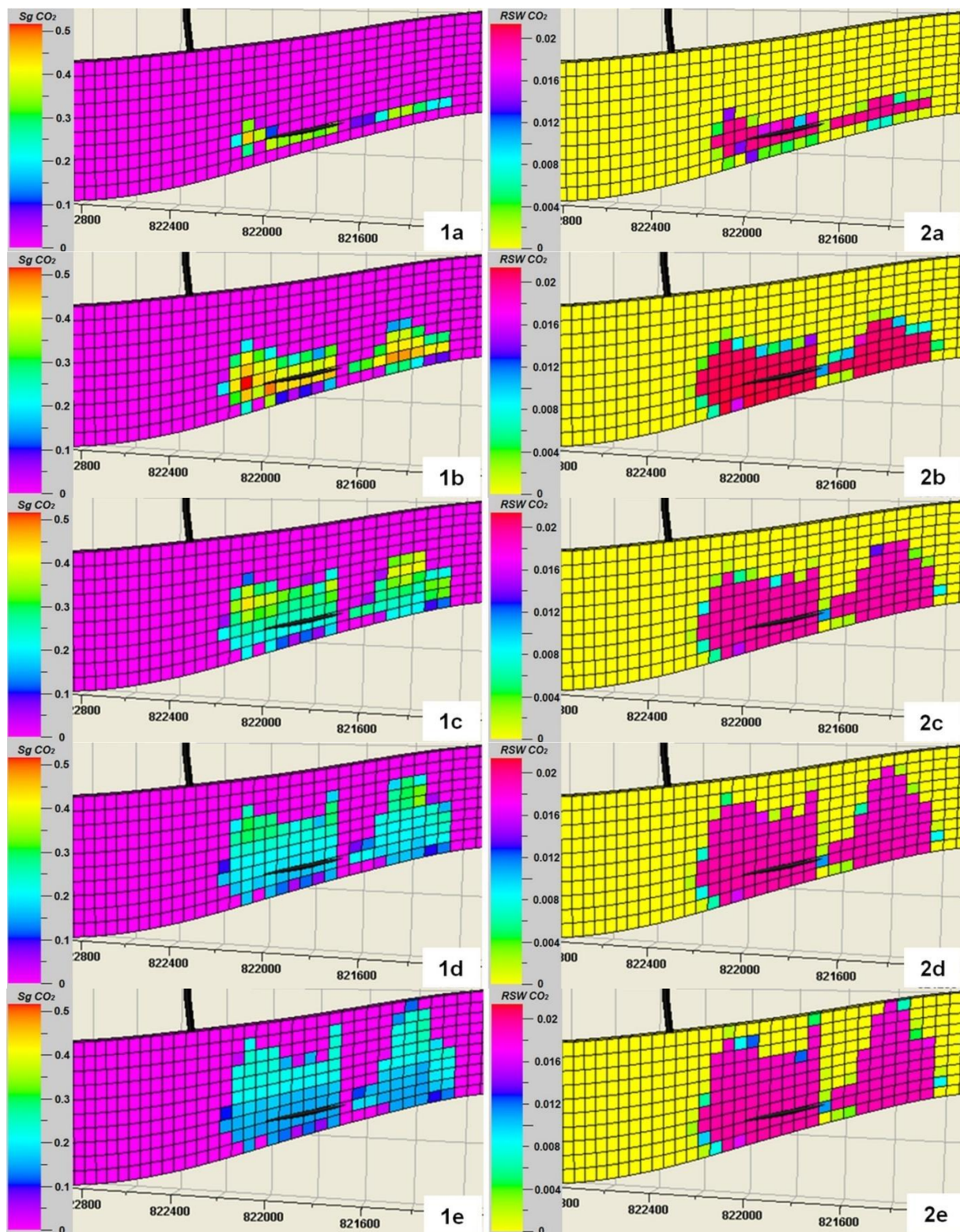
Rys. 3.16. Zmiany aktywności wód okalających w modelu analitycznym w trzech wariantach symulacji (S3A, S4, S5A) (a) oraz proces redukcji fazy swobodnej ditlenku węgla wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance w wariantcie symulacji S5A (b); opracowanie własne

Na rys. 3.17 przedstawiłem rozkład nasycenia zatłaczanego ditlenku węgla w warstwie iniekcyjnej kolektora warstw dębowieckich w poszczególnych interwałach czasowych. Podobnie jak w poprzednich modelach wyraźnie zaznacza się fakt, że solanka zawierająca rozpuszczony CO₂ rozprzestrzenia się na znacznie większym obszarze w porównaniu do strefy występowania rezydualnego CO₂.

Ponadto na przekroju pionowym przez strefę zatłaczania (rys. 3.18) przedstawiłem zmiany nasycenia ditlenkiem węgla zarówno w stanie swobodnym (w postaci ułamka zwykłego), jak i rozpuszczonym (w postaci ułamka molowego) dla poszczególnych interwałów czasowych.



Rys. 3.17. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ (1) i rozpuszczonego CO₂ (2) w warstwie iniekcyjnej kolektora warstw dębowieckich w wariantcie symulacji S3A po (a) 5, (b) 25 latach zatłaczania oraz po (c) 50, (d) 200 oraz f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania (opracowanie własne)



Rys. 3.18. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ (1) i rozpuszczonego CO₂ (2) na przekroju pionowym w modelu warstw dębowieckich w wariancie symulacji S3A po (a) 5, (b) 25 latach zatłaczania oraz po (c) 50, (d) 200 oraz f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania (opracowanie własne)

3.5. Podsumowanie wyników symulacji numerycznych

W tym etapie prac przeanalizowałem przebieg procesu składowania ditlenku węgla w poziomach solankowych wytypowanych rejonów GZW. Charakterystyka dynamicznego zachowania podczas składowania stanowi bowiem bardzo ważny etap w procesie oceny potencjalnego zbiornika CO₂.

Budowę dynamicznych modeli symulacyjnych wykonałem w oparciu o regionalne modele statyczne rzeczywistych struktur złożowych. Dane geologiczne zawarte w tych modelach, dotyczące m. in. parametrów zbiornikowych, uzupełniłem o parametry płynów złożowych konieczne do przeprowadzenia kompozycyjnych symulacji procesu.

Symulacje procesu zatłaczania ditlenku węgla do poziomów wodonośnych w modelach obejmujących krakowską serię piaskowcową, górnośląską serię piaskowcową oraz warstwy dębowieckie wykonałem dla odrębnych wariantów technologicznych zróżnicowanych pod względem zastosowanej metodyki procesu zatłaczania.

Analizie poddałem efektywność procesu składowania ze względu na rodzaj odwiertów zatłaczających - rozpatrywałem wykorzystanie odwiertów pionowych oraz otworu kierunkowego (horyzontalnego). Badałem także wpływ szczelinowania hydraulicznego otworów na efektywność zatłaczania.

Przyjąłem różne scenariusze symulacji procesu zróżnicowane pod względem wydajności zatłaczania oraz czasu trwania poszczególnych faz symulacji. Analizowałem także wpływ stopnia hydrodynamicznej otwartości struktury na przebieg procesu składowania. Po uzyskaniu wyników obliczeń numerycznych przeanalizowałem zmiany ciśnień charakterystycznych dla procesu składowania, a więc maksymalnego przewyższenia ciśnienia na stropie struktury, gradientu ciśnienia z głębokością oraz ciśnień na spodzie odwiertów. W postaci graficznej zaprezentowałem wyniki symulacji w zakresie przestrzennego rozkładu nasycenia swobodnego CO₂ w strukturze oraz ditlenku węgla rozpuszczonego w solance.

Uzyskane wyniki obliczeń numerycznych umożliwiły analizę zmian parametrów charakterystycznych dla procesu geologicznego składowania CO₂, a więc ciśnień na spodzie otworów iniekcyjnych, ciśnienia maksymalnego w górotworze, gradientu ciśnienia (wzrostu ciśnienia wraz z głębokością), a także przewyższenia ciśnienia wywołanego zatłaczaniem CO₂ w stropowych warstwach struktury w stosunku do ciśnienia pierwotnego w górotworze.

Na podstawie uzyskanych wyników symulacji numerycznych sformułowałem następujące wnioski:

- Spośród trzech analizowanych zbiorników najbardziej perspektywiczne dla potencjalnego składowania CO₂ wydają się być warstwy dębowieckie, które charakteryzują się najkorzystniejszymi parametrami geologicznymi i hydrogeologicznymi.
- Optymalnym wariantem symulacji ze względu na zachowanie bezpieczeństwa składowania CO₂ w górotworze, czyli wykluczenie możliwości rozszczelnienia skał nadkładu i niekontrolowanego wycieku zatłoczonego ditlenku węgla, jest wariant z sumaryczną ilością zatłoczonego CO₂ wynoszącą około 8,54 mln Mg CO₂ uzyskaną w trakcie 25 lat zatłaczania.

- Krytyczną wielkością limitującą efektywną pojemność składowania CO₂ jest przewyższenie ciśnień na stropie struktury, które w tym wariancie symulacji stanowiło około 20% pierwotnego ciśnienia na stropie struktury.
- Zakładana w analizowanym wariancie symulacji sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂ obejmuje stosunkowo niewielką objętość struktury wokół odwiertu zatłaczającego. Aby zbadać potencjalne możliwości składowania CO₂ na całym obszarze warstw dębowieckich należałoby przeprowadzić symulacje zatłaczania CO₂ przy równoczesnym wykorzystaniu większej ilości otworów iniekcyjnych z zachowaniem parametrów zatłaczania uzyskanych w wariancie S3A. Wydaje się, że wyniki symulacji numerycznych z wykorzystaniem większej ilości otworów iniekcyjnych mogą być zbliżone do oszacowanej metodą blokową statycznej pojemności składowania CO₂ w poziomach solankowych zbiornika warstw dębowieckich wynoszącej około 44 mln Mg CO₂ (Jureczka i in., 2012; Wójcicki, 2012).
- W przeprowadzonych symulacjach zaobserwowałem proces redukcji fazy swobodnej CO₂ wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance, która w efekcie opada ku dolnym warstwom kolektora. Zjawisko konwekcji solanki powstaje w wyniku zmian jej gęstości spowodowanej rozpuszczaniem CO₂.
- W scenariuszu symulacji z otworem kierunkowym redukcja swobodnego CO₂ w strukturze przebiega szybciej niż w wariancie z otworami pionowymi. Zależy to w dużej mierze od efektywnej powierzchni kontaktu ditlenku węgla z solanką, która w przypadku odwiertu kierunkowego jest dużo większa.
- Zauważyłem, że procesy migracji CO₂ ku szczytowym warstwom struktury złożowej na skutek sił wyporu, powolny proces redukcji fazy swobodnej ditlenku węgla wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance oraz wywołany przez to ruch konwekcyjny solanki wzbogaconej o ditlenek węgla powodują efektywny wzrost pojemności składowania oraz trwałe długoterminowe uwięzienie zatłoczonego ditlenku węgla.
- W opracowanych symulacjach zatłaczania CO₂ maksymalne dopuszczalne przewyższenie pierwotnego ciśnienia złożowego w warstwach stropowych warstwy wodonośnej przyjęto na poziomie 20% powyżej ciśnienia hydrostatycznego. Założyłem, że taki wzrost ciśnienia informuje o ryzyku rozszczelnienia pokrywy skalnej.

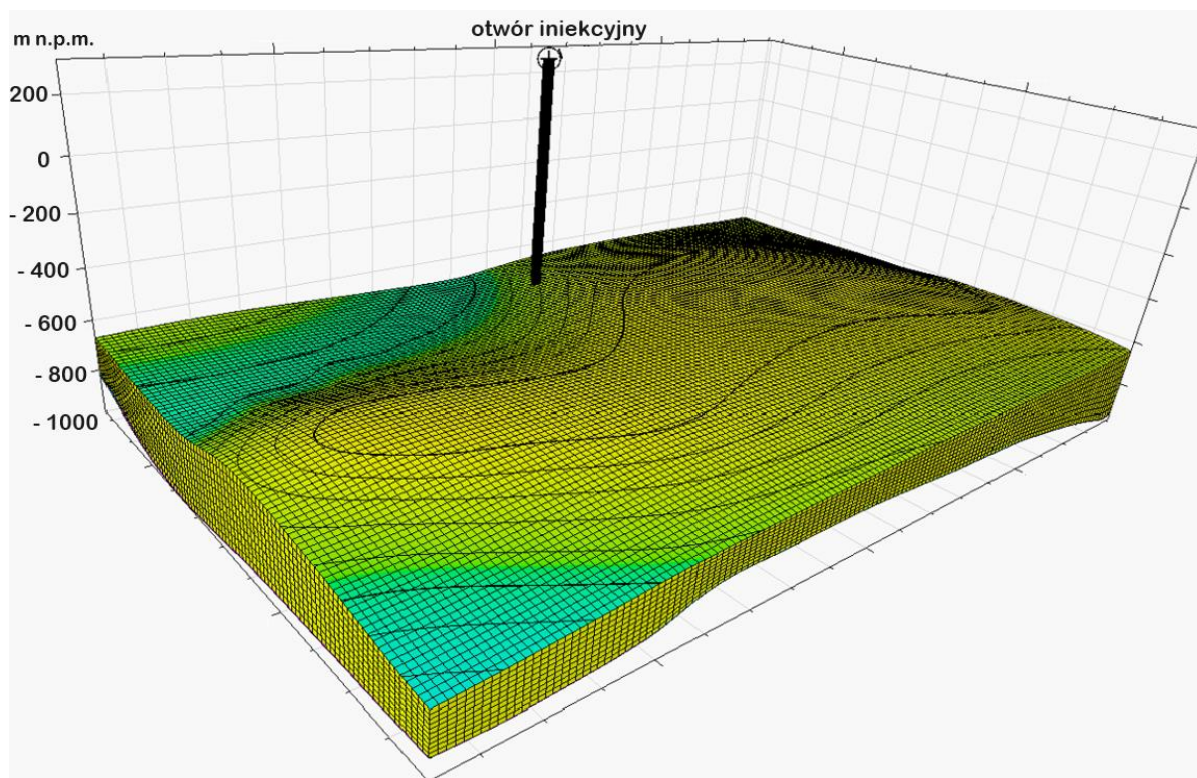
4. Analiza wrażliwości modelu symulacyjnego

4.1. Opracowanie bazowego modelu symulacyjnego

Pierwszym etapem analizy niepewności wyników dynamicznych symulacji złożowych, spowodowanej niepełną informacją dotyczącą danych wejściowych (parametrów) modelu złożowego, było opracowanie bazowego modelu symulacyjnego (tzw. *Base Case*), który posłużył do obliczenia sumarycznej ilości ditlenku węgla możliwej do składowania w analizowanej strukturze geologicznej. Uzyskany wynik wolumetryczny stanowił punkt odniesienia dla całej analizy niepewności wyników symulacji.

Bazowy model numeryczny opracowałem przy wykorzystaniu oprogramowania Schlumberger Petrel 2010.1 - pakiet *Geoscience Core* (Petrel, 2010). Do wykonania symulacji numerycznych wykorzystałem kompozycyjną wersję (E300) symulatora Schlumberger Eclipse (Eclipse, 2011) przeznaczonego do symulacji procesów złożowych. Natomiast analizę wrażliwości modelu numerycznego na poszczególne parametry złożowe opracowałem przy użyciu modułu *Uncertainty and optimization* wchodzącego w skład oprogramowania Petrel.

Bazowy model numeryczny obejmuje obszar o powierzchni 32,175 km². Miąższość kompleksu warstw dębowieckich w modelu zawiera się w przedziale od 97 do 316 m (rys. 4.1).



Rys. 4.1. Model bazowy w obrębie kompleksu warstw dębowieckich wydzielony do celów symulacji złożowych (opracowanie własne)

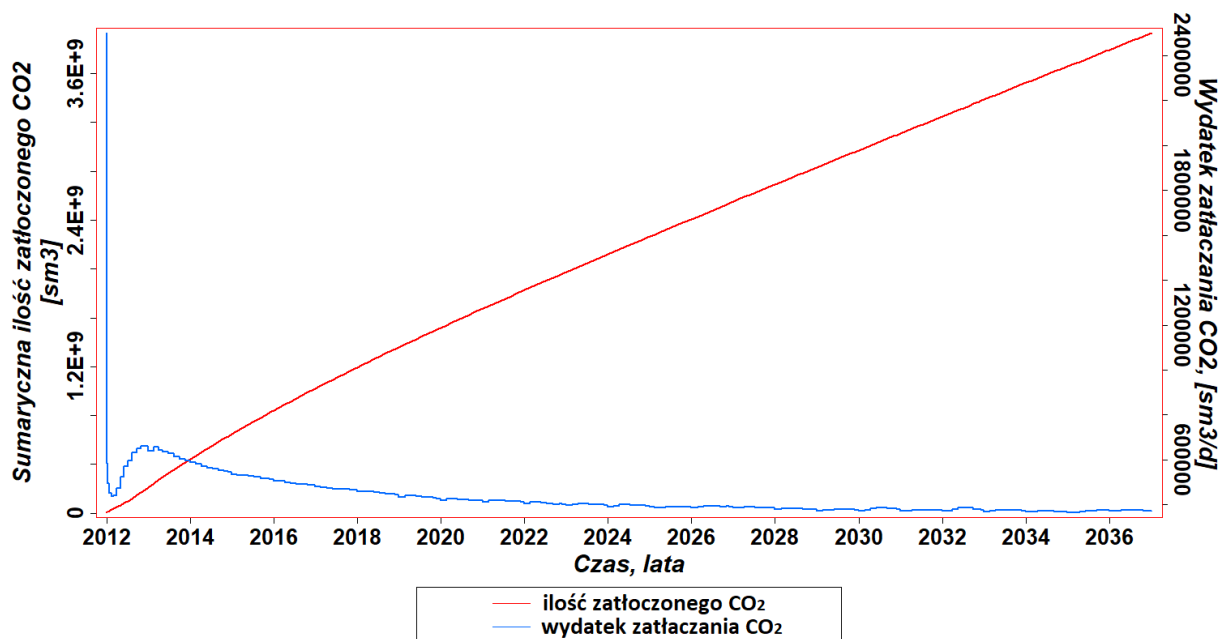
Wartość średnia porowatości efektywnej kompleksu warstw dębowieckich w skonstruowanym modelu symulacyjnym wynosi około 15%. Natomiast wartość średnia przepuszczalności poziomej (horyzontalnej) w modelu bazowym wynosi około 40 mD. Ponadto założyłem, iż przepuszczalność pionowa stanowi 10% przepuszczalności poziomej (horyzontalnej). Przyjąłem, że początkowe ciśnienie złożowe w modelu

jest równe ciśnieniu hydrostatycznemu. Do symulacji procesu zatłaczania CO₂ do górotworu zaprojektowałem otwór kierunkowy o długości odcinka horyzontalnego wynoszącej około 900 m. Zakładany wydatek zatłaczania ditlenku węgla jest równy 2,5 mln sm³/d. Całkowity czas trwania fazy zatłaczania w modelu symulacyjnym wynosi 25 lat. Podstawowe parametry początkowe modelu bazowego zebrałem w tab. 4.1.

Tab. 4.1. Podstawowe parametry bazowego modelu symulacyjnego (opracowanie własne na podstawie: Urych i Smoliński, 2019)

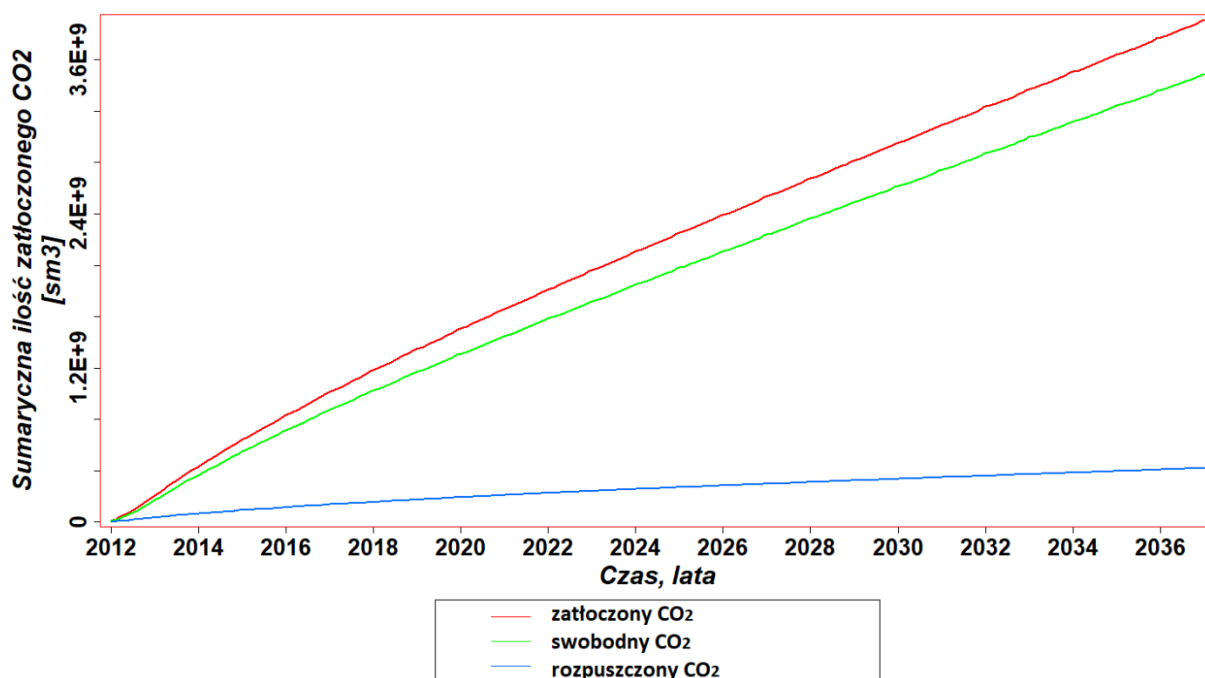
Parametr w modelu bazowym	Jednostka	Wartość parametru
porowatość efektywna, ϕ	%	15
przepuszczalność pozioma, k_h	mD	40
przepuszczalność pionowa, $k_v = 0,1 \cdot k_h$	mD	4
stosunek miąższości efektywnej do całkowitej (<i>Net to Gross - NTG</i>)	%	82,4
nasycenie wodą nieredukowalną, S_{wirr}	%	0,25
głębokość stropu warstw dębowieckich	m	od 867 do 1067
miąższość całkowita	m	od 97 do 316
temperatura złożowa	°C	40
zasolenie	ppm	12 900
długość odcinka horyzontalnego otworu	m	~ 900
maksymalne ciśnienie denne w otworze iniekcyjnym, P_{BHP}	bar	130
wydatek zatłaczania	m ³ /d	2 500 000
powierzchnia modelu	m ²	7 150 x 4 500
Rozdzielczość siatki 3D/ilość komórek modelu 3D, $I \times J \times K$	-	140 x 90 x 10
zasięg głębokościowy modelu	m n.p.m.	od -972 do -585
sumaryczna objętość porów modelu	mld m ³	63,09

Wyniki symulacji numerycznych w modelu referencyjnym dotyczące ilości zatłoczonego CO₂ oraz wydatku zatłaczania CO₂ przedstawiłem na rys. 4.2. Sumaryczna ilość zatłoczonego ditlenku węgla w modelu bazowym wynosi 3,933 mld sm³.



Rys. 4.2. Wydatek zatłaczania CO₂ oraz sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂ w modelu referencyjnym (opracowanie własne)

Na rys. 4.3 przedstawiłem sumaryczną ilość CO₂ w modelu bazowym z uwzględnieniem swobodnego ditlenku węgla w złożu oraz rozpuszczonego CO₂ w fazie wodnej w analizowanej strukturze dla poszczególnych interwałów czasowych symulacji. Na podstawie uzyskanych wyników symulacji stwierdziłem, że swobodny ditlenek węgla w modelu stanowi około 89,2% sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂, natomiast udział ditlenku węgla rozpuszczonego w fazie wodnej wynosi około 10,8%.



Rys. 4.3. Sumaryczna ilość CO₂ w modelu bazowym z uwzględnieniem swobodnego CO₂ w złożu oraz rozpuszczonego CO₂ w analizowanej strukturze w funkcji czasu (opracowanie własne)

4.2. Analiza wrażliwości modelu na kluczowe parametry złożowe

Ważnym krokiem w procedurze określania niepewności wyników symulacji złożowych jest analiza wrażliwości modelu na poszczególne parametry złożowe.

Na tym etapie prac przeanalizowałem wpływ kluczowych parametrów modelu na przebieg procesu geologicznego składowania CO₂. W tym celu opracowałem eksperyment symulacyjny ze zmianą wartości tylko jednego z parametrów modelu przy zachowaniu stałych wartości pozostałych elementów niepewności równych wartościom parametrów w modelu bazowym. Powyższy eksperyment symulacyjny powtórzyłem dla wybranych parametrów modelu złożowego i obserwowałem wpływ zmian ich wartości na wyników symulacji złożowych składowania CO₂ w górotworze.

Analizę wrażliwości modelu numerycznego na poszczególne parametry złożowe opracowałem w oprogramowaniu Petrel przy wykorzystaniu modułu *Uncertainty and optimization* (opcja *Sensitivity by variable*), który umożliwia oszacowanie niepewności wyników dynamicznych symulacji złożowych.

Do parametrów złoża, mających wpływ na pojemność składowania CO₂ w głębokich poziomach solankowych, należą między innymi: zasolenie, kąt upadu poziomu solankowego, głębokość, ściśliwość, ciśnienie kapilarne, porowatość, przepuszczalność, stosunek miąższości efektywnej do całkowitej (*Net to Gross*), rezydualne nasycenie gazem (Jiang, 2011; Kumar i in., 2020). Ze względu na znaczną ilość czynników warunkujących przebieg procesu geologicznego składowania CO₂, bardzo ważna jest identyfikacja kluczowych parametrów złoża mających największy wpływ na pojemność składowania ditlenku węgla.

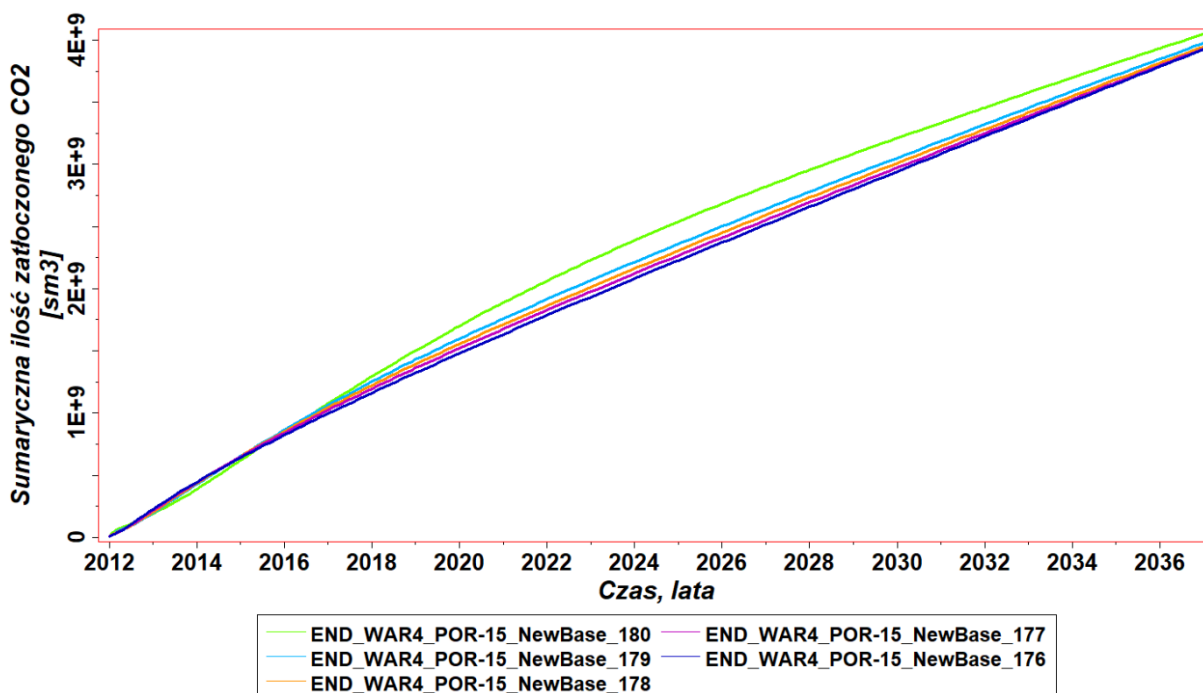
W odniesieniu do wyników dotychczasowych prac badawczych (m.in.: Han i in., 2011; Buscheck i in., 2012; Li i in., 2017) do dalszych analiz wybrałem pięć następujących parametrów modelu, które mają największy wpływ na ilość ditlenku węgla możliwą do zmagazynowania w analizowanej strukturze: porowatość efektywna, przepuszczalność, głębokość zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych, stosunek miąższości efektywnej do całkowitej (*Net to Gross - NTG*), rezydualne nasycenie gazem. Zakresy zmienności wytypowanych najistotniejszych parametrów modelu wykorzystanych w analizie wrażliwości, a także przyjęte wartości parametrów modelu bazowego, czyli najbardziej prawdopodobne wartości parametrów złożowych, przedstawiłem w tab. 4.2.

Tab. 4.2. Zakresy zmienności wartości parametrów złożowych w modelu bazowym wykorzystanych w analizie wrażliwości (opracowanie własne)

Parametr - analiza wrażliwości	Jednostka	Model bazowy	Zakres zmienności - analiza wrażliwości	
		najbardziej prawdopodobna wartość parametru	minimalna wartość parametru	maksymalna wartość parametru
Porowatość efektywna, ϕ	%	15	10	50
Przepuszczalność pozioma, k_h	mD	40	30	50
Stosunek miąższości efektywnej do całkowitej (<i>Net to Gross - NTG</i>)	%	82,4	50	90
Głębokość stropu warstw dębowieckich	m	-700	-900	-550
Rezydualne nasycenie gazem	%	35	25	45

4.2.1. Wpływ porowatości efektywnej warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO₂

W pierwszej kolejności przeprowadziłem analizę wrażliwości modelu bazowego na zmiany porowatości efektywnej kompleksu warstw dębowieckich. W modelu bazowym założyłem wartość porowatości efektywnej równą 15%. Przyjąłem zakres zmienności analizowanego parametru wynoszący od 10 do 50%. Wykonałem pięć symulacji numerycznych dla następujących wartości porowatości efektywnej: 10%, 15%, 20%, 25%, 50%. Wpływ porowatości efektywnej na ilość ditlenku węgla możliwą do zmagazynowania w analizowanej strukturze przedstawiłem na rys. 4.4.



Rys. 4.4. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności porowatości efektywnej od 10 do 50% (opracowanie własne)

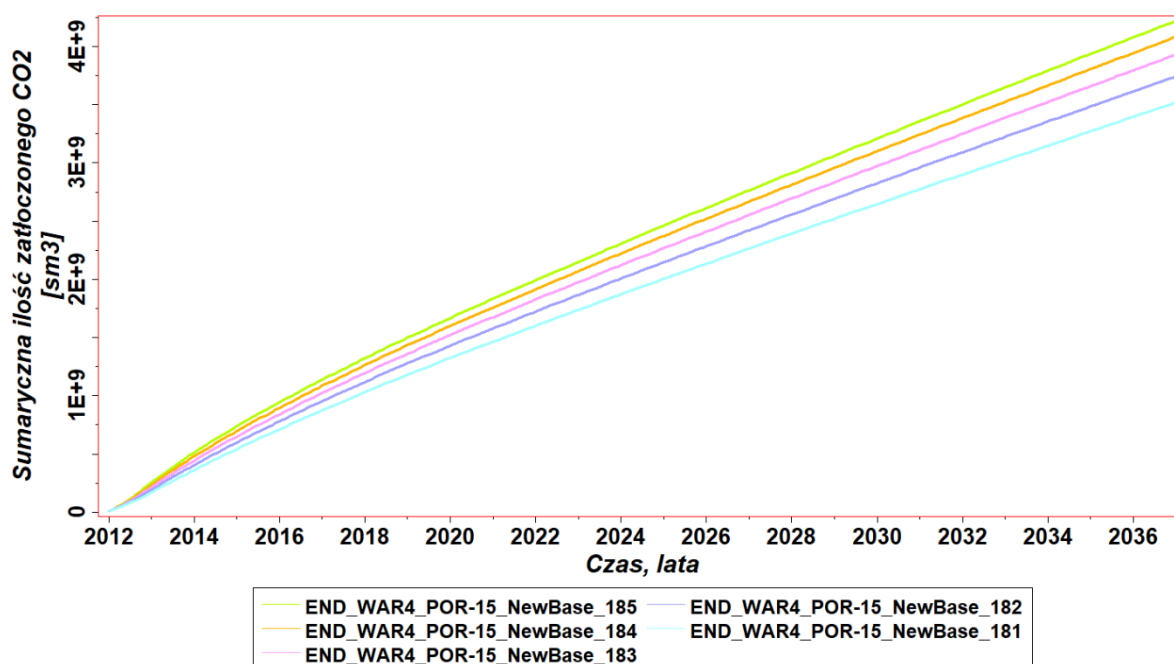
W przypadku symulacji uwzględniającej najmniejszą z zakładanych porowatości sumaryczna ilość zatłoczonego ditlenku węgla wyniosła 3,927 mld sm³, natomiast zastosowanie najwyższej wartości porowatości umożliwiło zatłoczenie 4,048 mld sm³. Różnica ilości ditlenku węgla dla tych dwóch wariantów porowatości wynosi około 0,121 mld sm³. Zmiany sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w odniesieniu do wartości uzyskanej w wariancie minimalnym, a także względem wartości referencyjnej w modelu bazowym przedstawiłem w tab. 4.3.

Tab. 4.3. Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany porowatości efektywnej (opracowanie własne)

Porowatość efektywna	Sumaryczna ilość CO ₂ (25 lat zatłaczania)	Zmiana sumarycznej ilości zatłoczonego CO ₂		
		w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym	w odniesieniu do wartości referencyjnej w modelu bazowym	w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym
%	mld sm ³	mld sm ³	%	%
10	3,926	0,000	-0,16	-
15	3,933	0,006	-	0,16
20	3,947	0,020	0,35	0,52
25	3,978	0,052	1,16	1,32
50	4,048	0,121	2,92	3,09

4.2.2. Wpływ przepuszczalności warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO₂

W modelu bazowym założyłem wartość przepuszczalności równą 40 mD. Przyjąłem zakres przepuszczalności zawierający się w przedziale od 30 do 50 mD, z krokiem 5 mD. Zmiany sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w odniesieniu do wartości uzyskanej w wariancie minimalnym, a także względem wartości referencyjnej w modelu bazowym przedstawiłem na rys. 4.5. i w tab. 4.4. Dla modelu symulacyjnego z najniższą założoną przepuszczalnością uzyskałem sumaryczną ilość zatłoczonego CO₂ wynoszącą 3,522 mld sm³, natomiast w wariancie symulacji z największą przepuszczalnością sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂ jest o 19,87% większa.



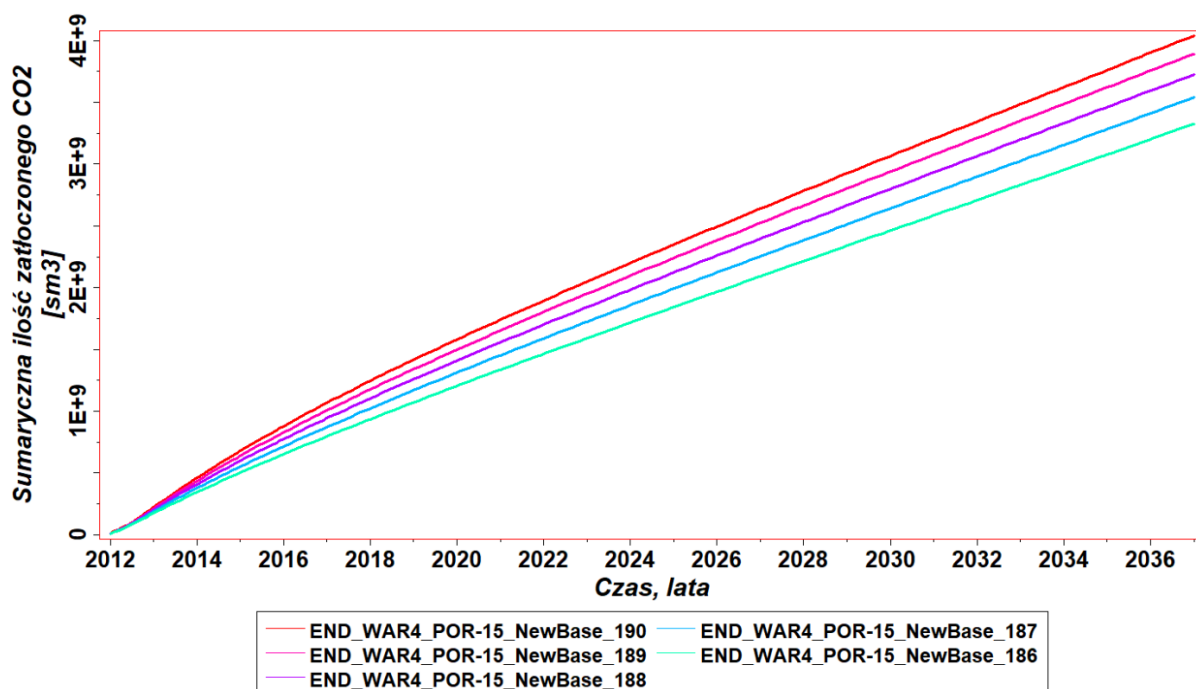
Rys. 4.5. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności przepuszczalności od 30 do 50 mD (opracowanie własne)

Tab. 4.4. Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany przepuszczalności (opracowanie własne)

Przepuszczalność	Sumaryczna ilość CO ₂ (25 lat zatłaczania)	Zmiana sumarycznej ilości zatłoczonego CO ₂		
		w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym	w odniesieniu do wartości referencyjnej w modelu bazowym	w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym
mD	mld sm ³	mld sm ³	%	%
30	3,522	0,000	-10,46	-
35	3,744	0,222	-4,81	6,31
40	3,932	0,410	-	11,65
45	4,084	0,563	3,84	15,98
50	4,221	0,700	7,33	19,87

4.2.3. Wpływ proporcji miąższości efektywnej do całkowitej złoża na pojemność składowania CO₂

Kolejnym analizowanym parametrem jest stosunek miąższości efektywnej do całkowitej modelu złoża, który określa proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu (*Net-to-Gross/NTG*). W modelu założyłem stosunek miąższości efektywnej do całkowitej wynoszący 0,824. Przyjęto zakres zmienności analizowanego parametru wynoszący od 0,5 do 0,9 z krokiem 0,1. Wpływ proporcji skał zbiornikowych do uszczelniających na ilość ditlenku węgla możliwą do zmagazynowania w analizowanej strukturze przedstawiłem na rys. 4.6.



Rys. 4.6. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności parametru Net-to-Gross (NTG) od 0,5 do 0,9 (opracowanie własne)

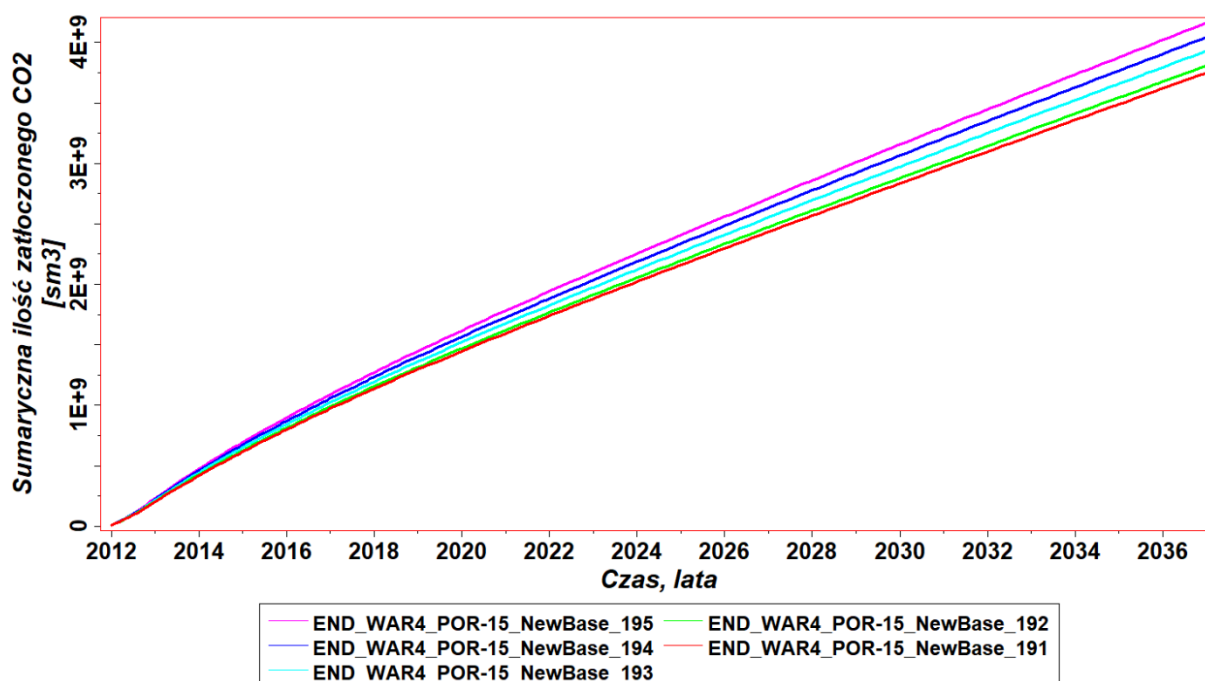
W przypadku symulacji uwzględniającej najmniejszą z zakładanych objętości efektywnej ilość zatłoczonego ditlenku węgla wyniosła 3,325 mld sm³, natomiast zastosowanie najwyższej wartości objętości efektywnej modelu umożliwiło zatłoczenie 4,039 mld sm³. Różnica ilości ditlenku węgla dla tych dwóch wariantów objętości efektywnej wynosi około 0,714 mld sm³, co stanowi przyrost sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w odniesieniu do wartości uzyskanej w wariancie minimalnym o około 21,5%. Zmiany sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w odniesieniu do wartości uzyskanej w wariancie minimalnym, a także względem wartości referencyjnej w modelu bazowym przedstawiłem w tab. 4.5.

Tab. 4.5. Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany parametru *Net-to-Gross* (opracowanie własne)

Stosunek miąższości efektywnej do całkowitej	Sumaryczna ilość CO ₂ (25 lat zatłaczania)	Zmiana sumarycznej ilości zatłoczonego CO ₂		
		w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym	w odniesieniu do wartości referencyjnej w modelu bazowym	w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym
%	mld sm ³	mld sm ³	%	%
50	3,325	-	-15,46	-
60	3,538	0,210	-10,03	6,43
70	3,724	0,400	-5,30	12,02
80	3,891	0,566	-1,07	17,03
90	4,039	0,714	2,69	21,47

4.2.4. Wpływ głębokości zalegania powierzchni stropu warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO₂

Powierzchnia stropu warstw dębowieckich w bazowym modelu symulacyjnym położona jest na głębokości -700 m. W ramach analizy wpływu głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych na zmiany sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ przyjąłem zakres zmienności analizowanego parametru wynoszący od -550 do -900 m. Wykonałem pięć symulacji numerycznych dla następujących wartości głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych: -550 m, -600 m, -700 m, -800 m, -900 m. Wpływ zmienności analizowanego parametru na ilość ditlenku węgla możliwą do zmagazynowania w analizowanej strukturze przedstawiłem na rys. 4.7 i w tab. 4.6. Dla modelu symulacyjnego z uwzględnieniem głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych na poziomie -550 m uzyskałem sumaryczną ilość zatłoczonego CO₂ wynoszącą 3,750 mld sm³, natomiast w wariancie symulacji z głębokością wynoszącą -900 m n.p.m. sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂ jest o około 11% większa.



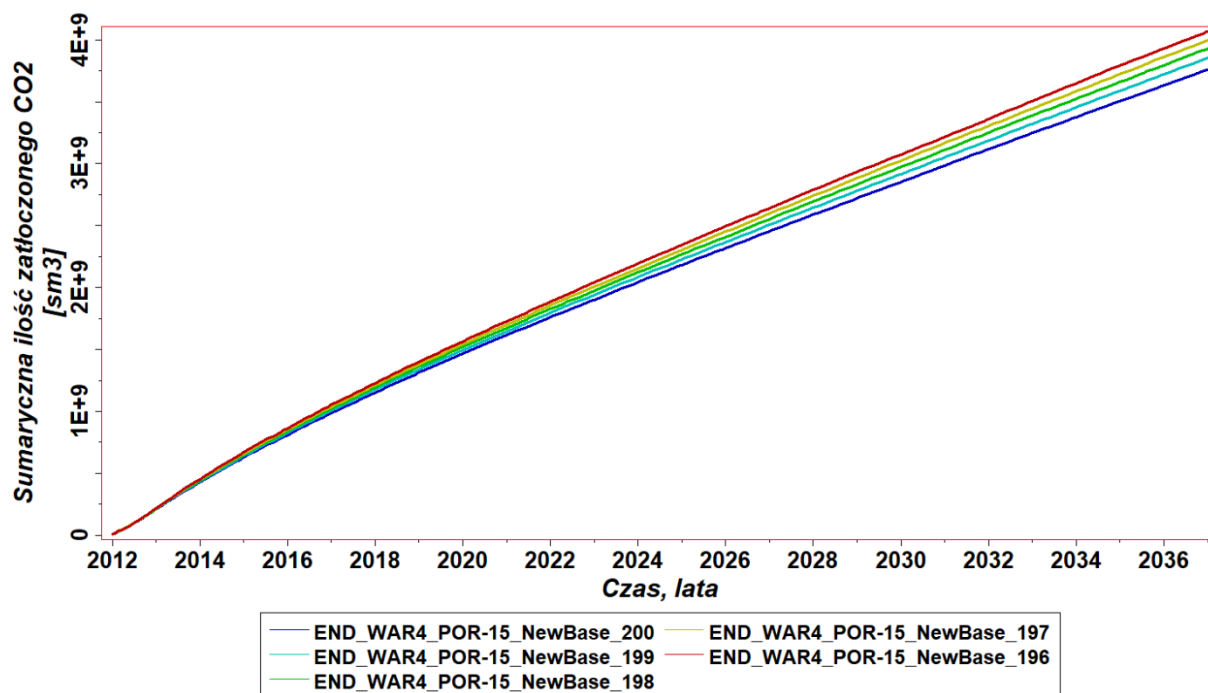
Rys. 4.7. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zmienności głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych od -550 do -900 m (opracowanie własne)

Tab. 4.6. Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych (opracowanie własne)

Głębokość zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych	Sumaryczna ilość CO ₂ (25 lat zatłaczania)	Zmiana sumarycznej ilości zatłoczonego CO ₂		
		w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym	w odniesieniu do wartości referencyjnej w modelu bazowym	w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym
m n.p.m.	mld sm ³	mld sm ³	%	%
-550	3,750	0,000	-4,65	-
-600	3,809	0,595	-3,14	1,59
-700	3,932	0,182	-	4,85
-800	4,045	0,295	2,84	7,86
-900	4,165	0,415	5,89	11,06

4.2.5. Wpływ rezydualnego nasycenia ditlenkiem węgla warstwy zbiornikowej na pojemność składowania CO₂

W modelu bazowym założyłem wartość rezydualnego nasycenia CO₂ równą 35%. W analizie wrażliwości przyjęto zakres zmienności analizowanego parametru wynoszący od 25 do 45% z krokiem 5%. Wpływ rezydualnego nasycenia CO₂ na ilość ditlenku węgla możliwą do zmagazynowania w analizowanej strukturze przedstawiłem na rys. 4.8 oraz w tab. 4.7.



Rys. 4.8. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności rezydualnego nasycenia ditlenkiem węgla od 25 do 45% (opracowanie własne)

Tab. 4.7. Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany rezydualnego nasycenia CO₂ (opracowanie własne)

Rezydualne nasycenie CO ₂	Sumaryczna ilość CO ₂ (25 lat zatłaczania)	Zmiana sumarycznej ilości zatłoczonego CO ₂		
		w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym	w odniesieniu do wartości referencyjnej w modelu bazowym	w odniesieniu do wartości w wariancie minimalnym
%	mld sm ³	mld sm ³	%	%
25	3,760	0,000	-4,39	-
30	3,855	0,095	-1,97	2,53
35	3,932	0,170	-	4,55
40	3,997	0,237	1,64	6,30
45	4,067	0,306	3,40	8,15

W przypadku symulacji uwzględniającej najmniejszą z zakładanych wartości rezydualnego nasycenia CO₂ ilość zatłoczonego ditlenku węgla wyniosła 3,76 mld sm³, natomiast zastosowanie najwyższej wartości rezydualnego nasycenia CO₂ modelu umożliwiło zatłoczenie 4,067 mld sm³. Różnica ilości ditlenku węgla dla tych dwóch wariantów objętości efektywnej wynosi około 0,306 mld sm³, co stanowi przyrost sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w odniesieniu do wartości minimalnej o około 8,15%.

4.3. Kompleksowa analiza wrażliwości modelu symulacyjnego

Po przeprowadzeniu analizy wpływu kluczowych elementów niepewności modelu na wyniki modelowania numerycznego procesu geologicznego składowania CO₂ opracowałem kompleksową analizę wrażliwości modelu. W tym celu zaprojektowałem eksperyment symulacyjny z następującą kolejno po sobie zmianą wartości poszczególnych parametrów modelu przy zachowaniu stałych wartości pozostałych elementów niepewności równych wartościom parametrów w modelu bazowym.

W badaniach założyłem po 30 symulacji numerycznych dla każdego z pięciu analizowanych parametrów modelu (150 modeli aproksymacyjnych). Oznacza to, że w trakcie 30-stu symulacji analizowano zmienność tylko jednego parametru modelu, przy równoczesnym zachowaniu wartości pozostałych parametrów jak w modelu bazowym. Wykonana w ten sposób analiza wrażliwości prezentuje podstawowe zależności liniowe wyników symulacji od wartości wybranych parametrów modelu. Uzyskane wyniki analizy, dotyczące wielkości wpływu zmian wartości kluczowych parametrów modelu na wyniki symulacji złożowych, przedstawiłem na wykresach.

W celu określenia zakresów zmienności analizowanych parametrów złożowych modelu (porowatość, przepuszczalność, wskaźnik określający stosunek miąższości efektywnej do całkowitej złoża, czyli proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu - NTG, głębokość oraz rezydualne nasycenie złoża gazem) zastosowałem czynniki multiplikatywne z zakresem ich zmienności zawierającym się w przedziale wartości od 0,9 do 1,1, a wartość najbardziej prawdopodobna jest równa 1,0. Dla wszystkich analizowanych parametrów złoża przyjęto trójkątny rozkład prawdopodobieństwa. Uzyskane w ten sposób zakresy zmienności wytypowanych parametrów modelu wykorzystane w kompleksowej analizie wrażliwości, a także przyjęte wartości parametrów modelu bazowego, czyli najbardziej prawdopodobne wartości parametrów złożowych zestawilem w tab. 4.8.

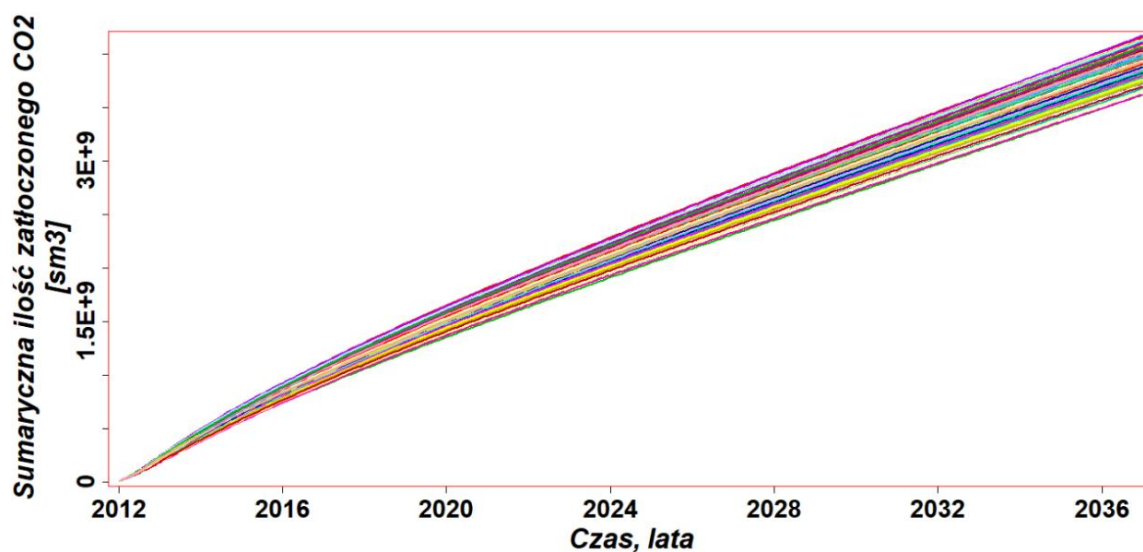
Tab. 4.8. Wartości parametrów modelu bazowego oraz zakres zmienności kluczowych parametrów modelu w kompleksowej analizie wrażliwości (opracowanie własne)

Parametr	Jednostka	Wartość w modelu bazowym	Zakres zmienności - kompleksowa analiza wrażliwości
Porowatość	%	10,3	9,27 – 11,33
Przepuszczalność	mD	39,3	35,37 – 43,23
Stosunek miąższości efektywnej do całkowitej	%	82,4	74,16 – 90,64
Głębokość	m n.p.m.	-700	-630 – (-770)
Rezydualne nasycenie gazem	%	35	28,5 – 41,5

W rezultacie w ramach analizy wpływu parametrów modelu na przebieg procesu geologicznego składowania CO₂ zaprojektowany eksperyment symulacyjny obejmujący 150 symulacji numerycznych (modeli aproksymacyjnych). Podczas badań symulacyjnych założyłem po 30 próbek dla każdego z pięciu analizowanych parametrów modelu. Opracowany eksperyment symulacyjny zaimplementowałem do oprogramowania Petrel,

poszczególne symulacje numeryczne wykonałem przy wykorzystaniu modułu *Uncertainty and optimization (Sensitivity by variable)* umożliwiającego oszacowanie niepewności modelu na podstawie modyfikacji wartości parametrów modelu. Zastosowałem metodę symulacji cyfrowej *Monte Carlo*, a w procesie generowania liczb losowych (schemat losowania) przyjąłem metodę *Latin Hypercube Sampling (LHS)*.

W efekcie wygenerowany został zbiór o liczebności 150 wariantów modelu złoża reprezentatywnych dla 5-wymiarowej przestrzeni kluczowych parametrów złożowych. Symulacje numeryczne obejmują prognozy 25 lat zatłaczania ditlenku węgla do górotworu. Zbiór wszystkich wyników symulacji dla wybranej funkcji celu (sumaryczna ilość zatłoczonego ditlenku węgla) w funkcji czasu przedstawiłem na rys. 4.9. Najmniejsza ilość zatłoczonego ditlenku węgla spośród wszystkich wariantów symulacji wynosi $3,55 \cdot 10^9 \text{ sm}^3$, natomiast wartość maksymalna jest równa $4,16 \cdot 10^9 \text{ sm}^3$.



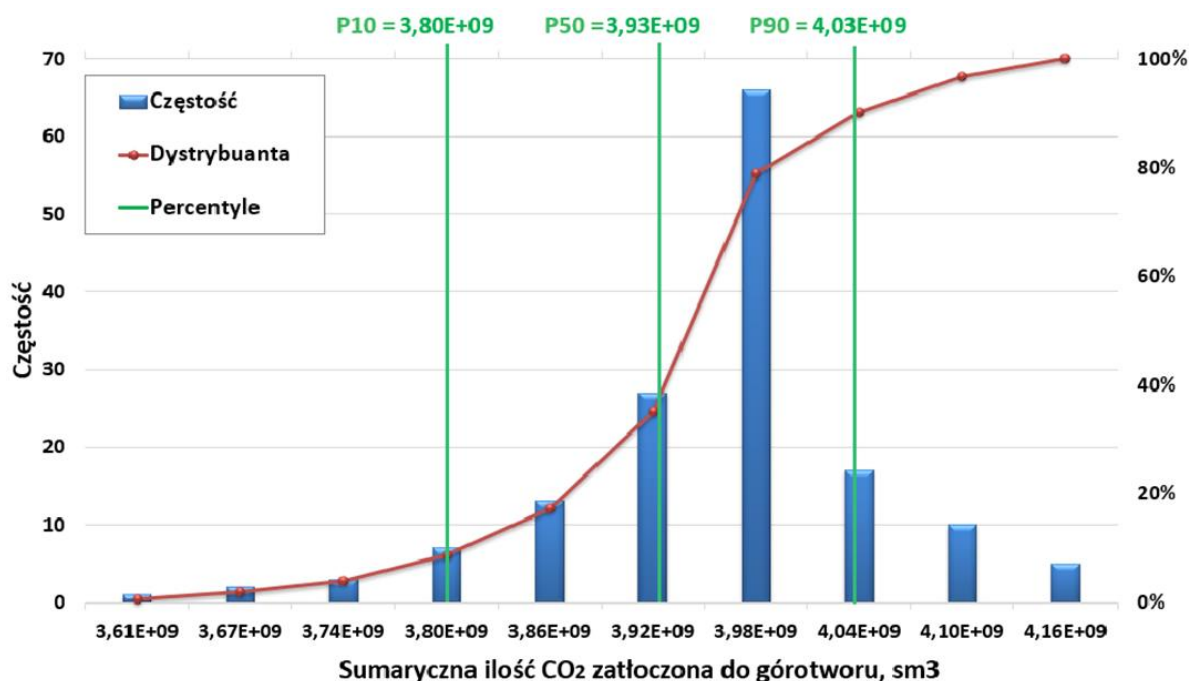
Rys. 4.9. Zbiór 150 wariantów modelu symulacyjnego wygenerowanych w celu opracowania kompleksowej analizy wrażliwości modelu (opracowanie własne)

Wyniki symulacji numerycznych poddałem analizie statystycznej. W tym celu opracowałem histogram i dystrybuantę dla uzyskanego zbioru wyników 150 symulacji zatłaczania ditlenku węgla w poszczególnych wariantach modelu złoża. Na rys. 4.10 przedstawiłem wyniki analizy statystycznej dla 150 modeli symulacyjnych zatłaczania ditlenku węgla do górotworu z zaznaczonymi percentylami P10, P50 i P90 wynoszącymi odpowiednio 3,802 mld sm³, 3,927 mld sm³ i 4,026 mld sm³.

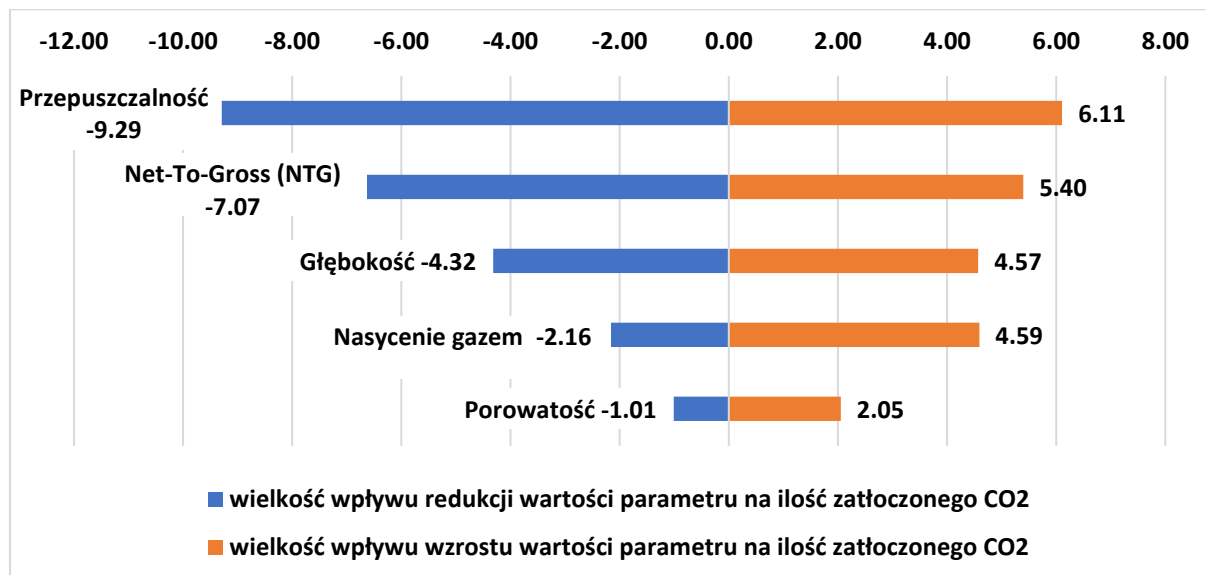
Uzyskane wyniki analizy wrażliwości zaprezentowałem na wykresie tornado (rys. 4.11), który przedstawia w sposób graficzny wielkość wpływu zmian wartości analizowanych parametrów modelu względem odpowiadającym im wartościom w modelu bazowym na wielkość sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂. Wykres tornado to rodzaj wykresu słupkowego, który jest szczególnie użyteczny przy porównywaniu zakresu zmian wartości parametru wyjściowego wynikających ze zmian wartości danych wejściowych. W kontekście analizy wrażliwości ułatwia określenie, która zmienna ma największy wpływ na wynik. Nazwa tego typu wykresu wynika z faktu, że malejąca ku dołowi wykresu długość słupków tworzy kształt przypominający zjawisko tornada.

Wykonana analiza wrażliwości pokazuje podstawowe zależności liniowe wyników symulacji od wartości wybranych parametrów modelu. Kolorem niebieskim oznaczyłem

na wykresie wielkość wpływu redukcji, a kolorem czerwonym wielkość wpływu wzrostu wartości badanego parametru na wielkość sumarycznej ilości zatłoczonego ditlenku węgla po 25 latach zatłaczania.



Rys. 4.10. Histogram i dystrybuanta sumarycznej ilości CO₂ zatłoczonego do górotworu w 150 modelach symulacyjnych (opracowanie własne)



Rys. 4.11. Wyniki analizy czułości funkcji celu przedstawione na wykresie tornado - wielkość wpływu zmian wartości kluczowych parametrów modelu na wielkość sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂, % (opracowanie własne)

Na podstawie analizy rys. 4.11. stwierdziłem, że największy wpływ na ilość ditlenku węgla możliwego do zmagazynowania ma przepuszczalność warstwy wodonośnej. Zwiększenie wartości przepuszczalności o 10% względem modelu bazowego z sumaryczną ilością zatłoczonego CO₂ wynoszącą 3,932 mld sm³ skutkuje

zwiększeniem ilości ditlenku węgla możliwego do zatłoczenia o 6,11%. Natomiast zmniejszenie przepuszczalności o 10% powoduje spadek ilości zatłoczonego CO₂ o 9,11%. Niewiele mniejszy efekt generuje zmiana wartości parametru *Net-To-Gross* o +/- 10%: odpowiednio wzrost o 5,40% i redukcja o 7,07%. Nieco mniejszy wpływ obserwuję się przy zmianie głębokości warstwy wodonośnej – zmiany te wynoszą około +/- 4%. Przy założeniu wzrostu wartości rezydualnego nasycenia gazem obserwuje się zwiększenie ilości ditlenku węgla możliwego do zatłoczenia o około 4,5%, natomiast zmniejszenie nasycenia gazem powoduje spadek ilości CO₂ o 2,16%. Na ostatniej pozycji w klasyfikacji wpływu wybranych parametrów modelu na ilość zatłoczonego CO₂ znalazła się porowatość – zmiany tego parametru o +/- 10% powodują odpowiednio wzrost o około 2% i redukcję około 1% sumarycznej ilości CO₂ względem modelu referencyjnego.

4.4. Podsumowanie analizy wrażliwości modelu symulacyjnego

Analiza wrażliwości modeli symulacyjnych stanowi istotny etap analizy niepewności wyników dynamicznych symulacji złożowych, spowodowanej niepełną albo niedokładną charakterystyką złoża związaną z niepewnością danych wejściowych modelu złożowego. Tego typu analiza umożliwia wykorzystanie modelu numerycznego do dalszych badań techniczno-ekonomicznych i optymalizacyjnych. Ponadto analiza wrażliwości wskazuje na kluczowe parametry złoża wymagające precyzyjnego oszacowania w początkowej fazie budowy modelu numerycznego. Poprawnie zdefiniowane najistotniejszych charakterystyk złoża, mających największy wpływ na przebieg modelowanych procesów, przyczyniają się do znacznego wzrostu wiarygodności numerycznego modelu złoża.

W ramach opracowanej analizy wrażliwości modelu symulacyjnego przeanalizowałem wpływ kluczowych parametrów modelu na przebieg procesu geologicznego składowania CO₂. Przedstawiłem procedurę wykonywania analizy niepewności wyników symulacji złożowych spowodowanej niepewnością danych wejściowych modelu symulacyjnego. Powyższa procedura opiera się wygenerowaniu zbioru wariantów modelu złoża zdefiniowanego przez parametry wejściowe opisane przyjętym zakresem zmienności i typem rozkładu ich wartości. Uzyskane wyniki symulacji złożowych umożliwiają wykonanie analizy statystycznej opisującej w sposób ilościowy wpływ parametrów początkowych modelu na niepewność wyników symulacji.

W wyniku przeprowadzonej analizy wrażliwości modelu symulacyjnego określiłem dane wejściowe modelu mające największy wpływ na wyniki symulacji dla wybranej funkcji celu. Na podstawie uzyskanych wyników sformułowałem następujące wnioski:

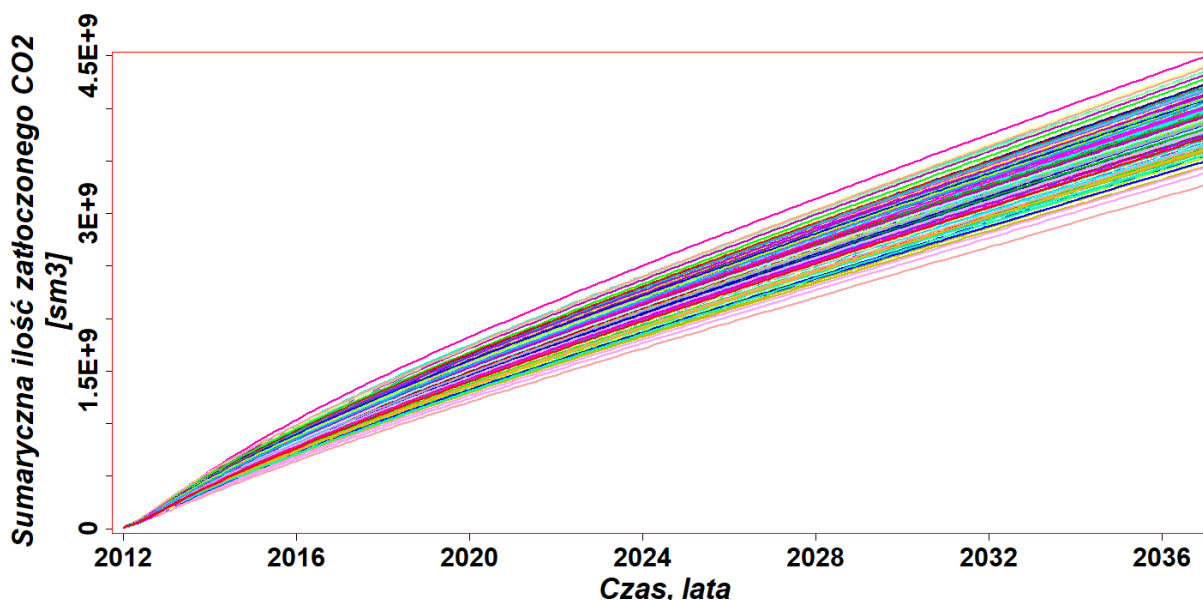
- Spośród analizowanych kluczowych parametrów skał złożowych największy wpływ na ilość ditlenku węgla możliwego do zatłoczenia do górotworu mają:
 - właściwości skał dotyczące ich przepuszczalności;
 - wskaźnik określający stosunek miąższości efektywnej do całkowitej złoża, czyli proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu.
- Wpływ zmian wartości każdego z pozostałych trzech analizowanych parametrów modelu jest mniejszy niż 5% (rys. 4.11), ale parametry te mogą mieć również istotny wpływ na ilość ditlenku węgla możliwego do zatłoczenia do górotworu. W związku z tym, zdecydowałem, że w dalszym etapie prac wszystkie analizowane kluczowe parametry złoża zostaną wykorzystane do opracowania modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych.

5. Opracowanie modelu zastępczego opartego na sztucznych sieciach neuronowych

5.1. Opracowanie bazy danych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej

Model zastępczy to matematycznie lub statystycznie zdefiniowana funkcja, która replikuje lub przybliża odpowiedź wyjścia pełnoskalowego modelu symulacyjnego dla wybranych parametrów wejściowych modelu (Denney, 2010). Na podstawie wielokrotnych symulacji złożowych w modelu numerycznym generowane są dane wyjściowe niezbędne do opracowania modelu zastępczego, który następnie może posłużyć do zadań takich jak analiza niepewności, optymalizacja, prognozowanie itp. W klasycznym podejściu wyniki symulacji złożowych otrzymuje się poprzez dopasowanie wybranych parametrów zbiornika pojedynczo, natomiast najważniejszą cechą modelowania zastępczego jest możliwość określenia łącznego efektu niepewnych parametrów modelu w tym samym czasie.

Jednym z najważniejszych etapów budowy modelu zastępczego opartego na metodach sztucznej inteligencji jest opracowanie odpowiednio reprezentatywnej bazy danych. W tym celu wygenerowany został zbiór poszczególnych wariantów modelu o liczebności 150 symulacji obejmujących prognozy 25 lat zatłaczania ditlenku węgla do górotworu. Pełny zestaw wyników symulacji, przeznaczonych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej, opracowałem w oprogramowaniu Petrel przy wykorzystaniu modułu *Uncertainty and optimization*. Zbiór wszystkich wyników 150 symulacji dla wybranej funkcji celu, czyli sumarycznej ilości ditlenku węgla zatłoczonego do górotworu w funkcji czasu, przedstawiłem na rys. 5.1.



Rys. 5.1. Sumaryczna ilość ditlenku węgla zatłoczonego do górotworu w funkcji czasu w 150 wariantach modelu symulacyjnego (opracowanie własne)

5.2. Optymalizacja bazy danych

W celu opracowania zbioru wyników 150 symulacji numerycznych, a więc 150 modeli aproksymacyjnych analizowanego złoża reprezentatywnych dla założonych parametrów modelu, zastosowałem próbkowanie statystyczne przestrzeni danych wejściowych z użyciem metody Latin Hypercube Sampling (LHS). Próbkowanie z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (Latin Hypercube Sampling) jest używane w symulacjach metodą Monte Carlo (MC) do analizy probabilistycznej ze względu na jej właściwości mające wpływ na redukcję wariancji w porównaniu z próbkowaniem losowym.

5.2.1. Metody Monte Carlo

Grupa metod numerycznych zwana metodami Monte Carlo (MC) została zaproponowana w latach 40-tych dwudziestego wieku przez dwóch matematyków: Stanisława Ulama i Nicholasa Metropolisa (Metropolis, Ulam, 1949). Początkowo metody te zostały wykorzystane w zastosowaniach militarnych przy słynnym projekcie Manhattan dotyczącym rozwoju broni jądrowej, a w ciągu następnych kilkunastu lat zostały zaimplementowane i testowane w symulacjach komputerowych i obliczeniach numerycznych, które znalazły zastosowanie w rozwiązaniach wielu praktycznych i teoretycznych zagadnień (Romaniuk, 2019).

Wraz z rozwojem dostępnych mocy obliczeniowych komputerów, metody MC zaczęto wykorzystywać do symulacji wielu fizycznych i matematycznych zagadnień, w tym do ilościowego określania niepewności w różnego rodzaju zastosowaniach (Kroese i in., 2014) oraz symulacji numerycznych związanych z inżynierią złożową. Analizę potencjału metod MC w inżynierii złożowej przedstawiono już w połowie lat 60. (Stoian i in., 1965) i kontynuowano w kolejnych dziesięcioleciach (Murtha i in., 1997). Większość ostatnich prac nad MC do zastosowań w przemyśle naftowym i gazowym skupiła się na geostatystyce (Caers i in., 1999; Scheidt i in., 2009), optymalizacji (Floris i in., 2001; Peters i in., 2010), analizie wrażliwości (Rotondi i in., 2006), badaniach dotyczących konwergencji metod MC w analizie przepływu płynów złożowych (Ballio and Guadagnini, 2004) oraz konwergencji symulacji Monte Carlo przy ilościowej analizie niepewności geologicznej w symulacjach złożowych (Matthias i in., 2020).

Innym praktycznym przykładem zastosowań metod MC jest wykorzystanie pseudolosowego próbkowania zbiorów danych zwane metodami Markov Chain Monte Carlo (MCMC). Metody MCMC są rezultatem połączenia symulacji metodami Monte Carlo z teorią łańcuchów Markowa i obejmują m. in. algorytm Metropolisa-Hastingsa (Metropolis i in., 1953; Hastings, 1970), próbkowanie Gibbsa (*Gibbs sampling*) (Geman i Geman, 1984) oraz próbkowanie łacińskiego hipersześcianu (*Latin hypercube sampling*) (McKay i in., 1979; McKay, 1992). Ponadto opracowywane są kolejne modyfikacje metod MC, takie jak Multi-Level Monte Carlo (MLMC) (Cliffe i in., 2011; Müller i in., 2013), mające na celu poprawę parametrów symulacji numerycznych związanych z konwergencją klasycznych metod MC.

Metoda Monte Carlo wykorzystuje próbkowanie zmiennych losowych z przestrzeni danych dotyczących podstawowych parametrów zagadnienia i ma na celu oszacowanie szeregu rozwiązań rozpatrywanego problemu. Istotną rolę w metodzie MC odgrywa losowanie wielkości charakteryzujących analizowany proces, przy czym losowanie dokonywane jest zgodnie ze znanym nam rozkładem. W rezultacie otrzymywany jest empiryczny rozkład prawdopodobieństwa dostarczający wielu przydatnych informacji o badanym zjawisku.

5.2.2. Próbkowanie z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (Latin Hypercube Sampling, LHS)

Ze względu na bardzo duży wymiar przestrzeni wejściowych danych modelu niezbędne jest zastosowanie efektywnej metody wyboru zbioru punktów definiujących reprezentatywną bazę danych.

Próbkowanie z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (ang. *Latin Hypercube Sampling, LHS*) jest jedną z technik próbkowania warstwowego (Eglaś i Audze, 1977; McKay i in., 1979; Iman i in., 1981). W tej technice doboru próby rozkład prawdopodobieństwa poszczególnych zmiennych jest dzielony na strefy o równej gęstości prawdopodobieństwa (Iman i Shortencarier, 1984). Pojedyncza próbka jest pobierana losowo z każdej ze stref w kolejnych pętlach obliczeniowych zapewniając tym samym bardziej równomierny rozkład wartości w obrębie każdej zmiennej. Liczba przedziałów dla poszczególnych zmiennych jest równa liczbie próbek w każdej pętli.

Metoda próbkowania Latin Hypercube Sampling (LHS) jest wydajnym obliczeniowo podejściem służącym do opracowywania kowariancji między parametrami wejściowymi modelu niezbędnych do generowania rozkładu prawdopodobieństw zmiennych wyjściowych. Stochastyczne realizacje modeli oparte na tych kowariancjach (lub oczekiwanych zmianach zmiennych sterujących i parametrów przy braku innych informacji) to jeden z najlepszych dostępny sposób określania zachowania modelu wynikającego z niepewności parametrów (Barrett i in., 2013).

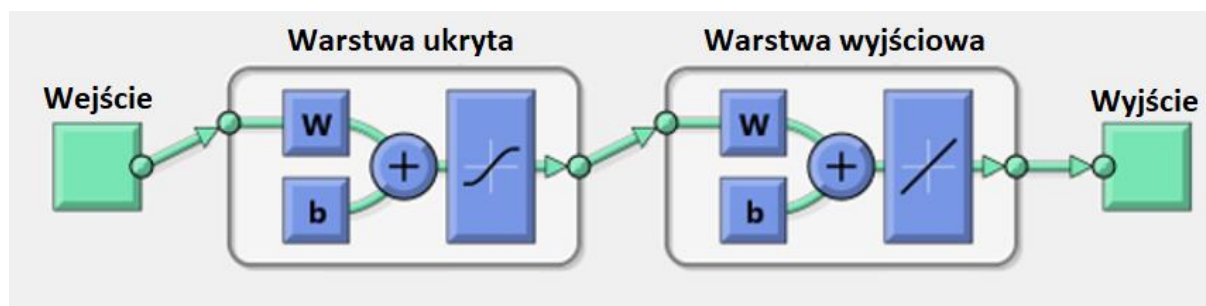
5.3. Struktura sztucznej sieci neuronowej

Sztuczną sieć neuronową (SSN) opracowałem w oprogramowaniu MathWorks MATLAB (wersja R2018a) przy wykorzystaniu modułu Neural Network Toolbox (MathWorks, 2018), aktualna nazwa modułu jest następująca: Deep Learning Toolbox (zmiana nazwy modułu nastąpiła począwszy od wersji R2020a). Przygotowanie ciągów uczących wykonałem w oprogramowaniu Petrel przy wykorzystaniu modułu *Uncertainty and optimization*. Następnie wykonałem prace mające na celu wybór optymalnej wielkości pakietów danych uczących oraz testujących.

W rezultacie przeprowadzonych eksperymentów dotyczących przygotowania bazy danych (w tym wielkości ciągów uczących i podziału pakietu danych wejściowych na dane uczące, walidacyjne i testowe) zaprojektowałem eksperyment składający się ze 150 punktów, czyli zestawów parametrów wejściowych modelu symulacyjnego. W załączniku 1 przedstawiłem wartości parametrów modelu (tab. Z1.1) oraz pakiet danych uczących zawierający wyniki symulacji zatłaczania CO₂ (sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂) dla wszystkich 150 wariantów modelu (tab. Z1.2).

W wyniku wykonanych analiz dotyczących wyboru i optymalizacji struktury sztucznej sieci neuronowej (ANN) w ostatecznej wersji modelu predykcyjnego opartego na ANN zastosowałem dwuwarstwową jednokierunkową sieć neuronową (sieć typu *feedforward*) z warstwą ukrytą zawierającą 5 neuronów, które wykorzystują funkcję aktywacji tangens hiperboliczny (*tansig*). Na wejście sieci podawane są wartości pięciu parametrów modelu, natomiast na wyjściu opracowanej sieci neuronowej generowany jest zestaw 26 wartości tworzących profil zatłaczania CO₂ w funkcji czasu. W warstwie wyjściowej zastosowałem liniową funkcję aktywacji (*purelin*).

Analizowałem różne warianty uczenia sieci przy wykorzystaniu dostępnych algorytmów wstecznej propagacji błędu (*backpropagation*). Najlepsze wyniki uzyskałem przy wykorzystaniu algorytmu Bayesian Regularization (*trainbr*) stanowiącego modyfikację algorytmu Lavenberga-Marquardta (*trainlm*). Struktura opracowanej sieci neuronowej została przedstawiona na rys. 5.2.



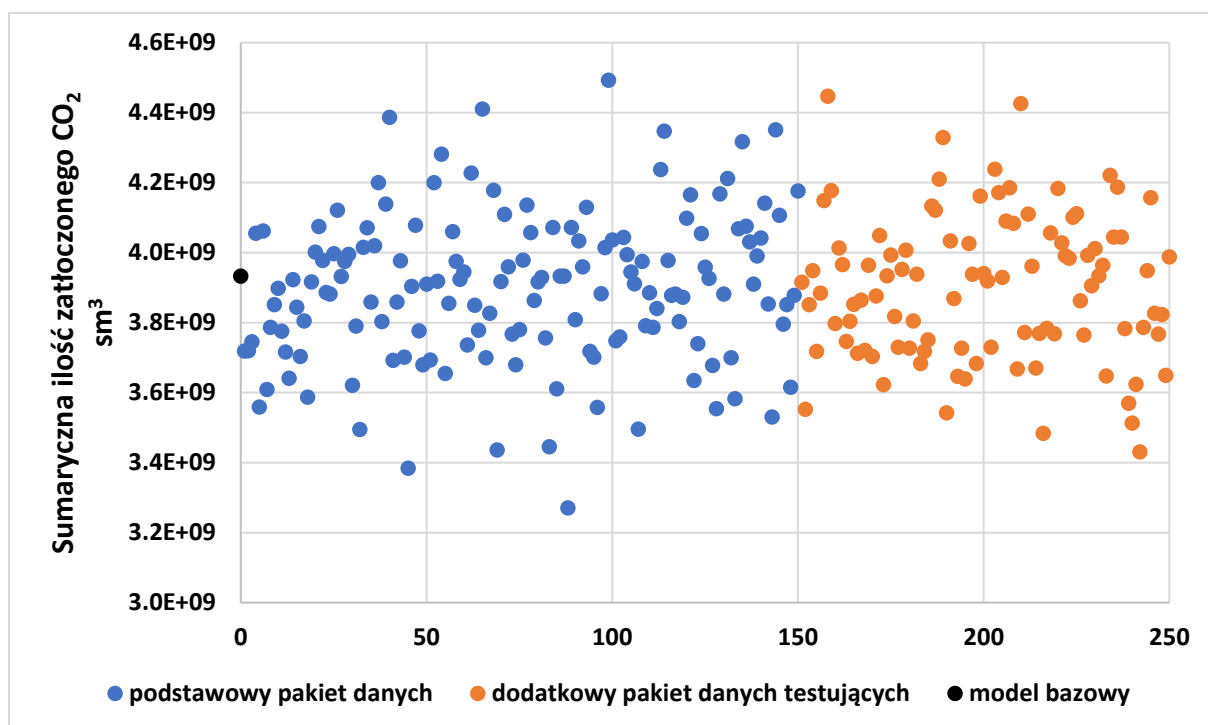
Rys. 5.2. Schemat opracowanej sztucznej sieci neuronowej (opracowanie własne na podstawie: MathWorks, 2018)

Przygotowany ciąg uczący został podzielony na część treningową, walidacyjną i testową z wykorzystaniem funkcji *dividerand*, zgodnie z podziałem odpowiednio 104, 23 i 23 wariantów bazy danych. Powyższy podział punktów przestrzeni zagadnienia zastosowałem w celu efektywnego wykorzystania bazy danych na potrzeby treningu i walidacji sieci neuronowej. Oprócz podstawowego ciągu uczącego przygotowałem dodatkowy pakiet danych testujących (*blind testing samples*) zawierający dane 100 realizacji modelu przeznaczony do pełnej weryfikacji wiarygodności sieci.

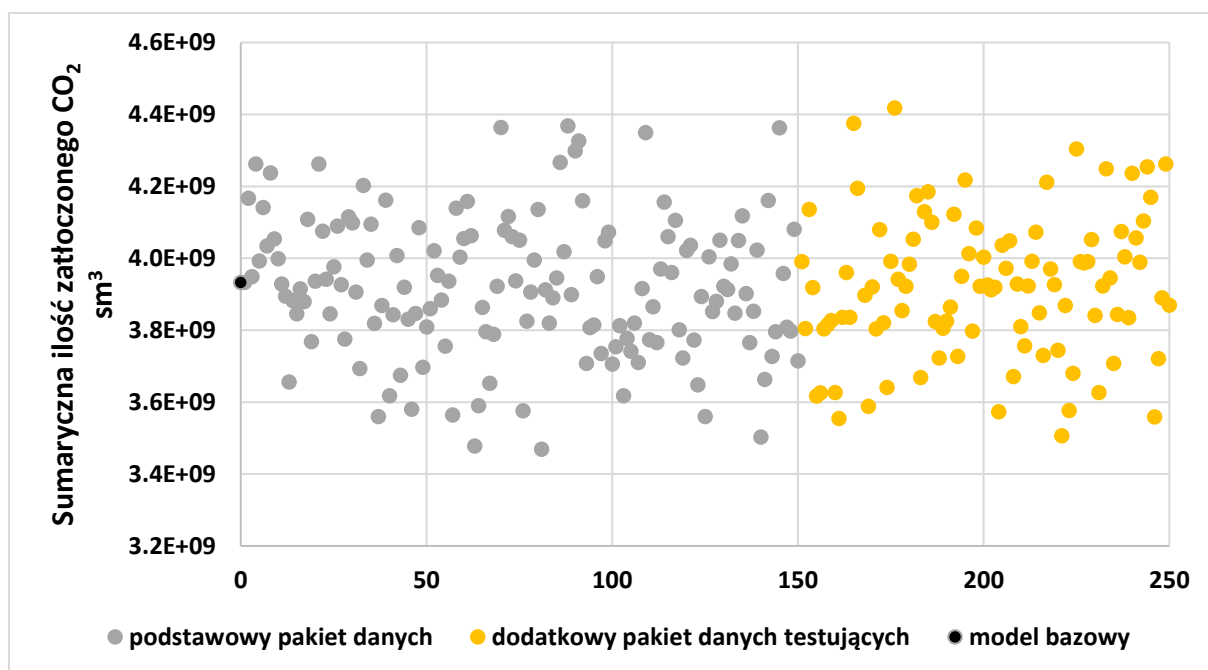
Ponadto w celu weryfikacji efektywności wykorzystania próbkowania z zastosowaniem tzw. hipersześcianu łacińskiego (ang. *Latin Hypercube Sampling*, LHS) jako metody wyboru zbioru punktów definiujących reprezentatywną bazę danych wygenerowałem dodatkowe pakiety danych opracowanych bez zastosowania metody LHS. Charakterystykę poszczególnych pakietów danych wykorzystanych w trakcie uczenia, walidacji i testowania sztucznej sieci neuronowej przedstawiłem w tab. 5.1. Natomiast zbiory wartości funkcji celu, czyli sumarycznej ilości ditlenku węgla załoczonego do górotworu, opracowane w wariantach nr 1 i nr 2 przedstawiłem na rys. 5.3 i 5.4.

Tab. 5.1. Zestawienie wariantów oraz liczebność poszczególnych pakietów danych wykorzystanych w trakcie uczenia, walidacji i testowania sieci (opracowanie własne)

Wariant opracowania pakietów danych	Liczebność pakietów danych			
	Podstawowy pakiet danych (ciąg uczący)			Dodatkowy pakiet danych testujących (<i>blind testing samples</i>)
	trening	walidacja	testowanie	
Wariant nr 1: Monte Carlo z użyciem metody Latin hypercube sampling (LHS)	104	23	23	100
Wariant nr 2: Monte Carlo bez użyciem metody Latin hypercube sampling (LHS)	104	23	23	100



Rys. 5.3. Zbiór wartości funkcji celu (sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego do górotworu) w opracowanych pakietach danych uczących i testujących (wariant 1), wyniki symulacji: model numeryczny Petrel/Eclipse (opracowanie własne)



Rys. 5.4. Zbiór wartości funkcji celu (sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego do górotworu) w opracowanych pakietach danych uczących i testujących (wariant 2), wyniki symulacji: model numeryczny Petrel/Eclipse (opracowanie własne)

5.4. Walidacja zastępczego modelu złożowego

Ocena wiarygodności modelu zastępczego stanowi jeden z głównych etapów opracowania modelu predykcyjnego. Niedokładny model zastępczy może dostarczać wyniki prognoz lub parametry optymalizacyjne o niskiej jakości.

W ramach testowania zastępczego modelu złożowego porównałem wyniki zatłaczania CO₂ wygenerowane za pomocą sztucznej sieci neuronowej z wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w numerycznym modelu złożowym.

Podstawowy pakiet danych stanowiący ciąg uczący wykorzystany do opracowania modelu opartego na sztucznej sieci neuronowej (SSN) składa się ze 150 zestawów danych zawierających zróżnicowane wartości 5 parametrów modelu złożowego. Na podstawie przeprowadzonych symulacji numerycznych, dla każdego zestawu danych wygenerowałem profile zatłaczania CO₂ opisane 25 wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w poszczególnych latach trwania symulacji. Uzyskane wyniki symulacji numerycznych zamieściłem w załączniku 1 (tab. Z1.2).

Pakiet danych zawierający 150 zestawów danych przeznaczonych do uczenia sieci zawiera 23 realizacje modelu wybierane losowo spośród wszystkich 150 wariantów modelu i wykorzystywane do testowania sieci w trakcie procesu uczenia. Wyniki testów prowadzonych na tym etapie prac potwierdzają wiarygodność zastępczego modelu złożowego zbudowanego w oparciu o sztuczną sieć neuronową. Uzyskana wartość współczynnika determinacji dla podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* z użyciem metody LHS wynosi $R^2 = 0,9995$ (rys. 5.5).

Współczynnik determinacji R^2 jest jedną z miar jakości dopasowania modelu do danych uczących i wyrażony jest równaniem 5.1:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \geq 0 \quad (5.1)$$

gdzie:

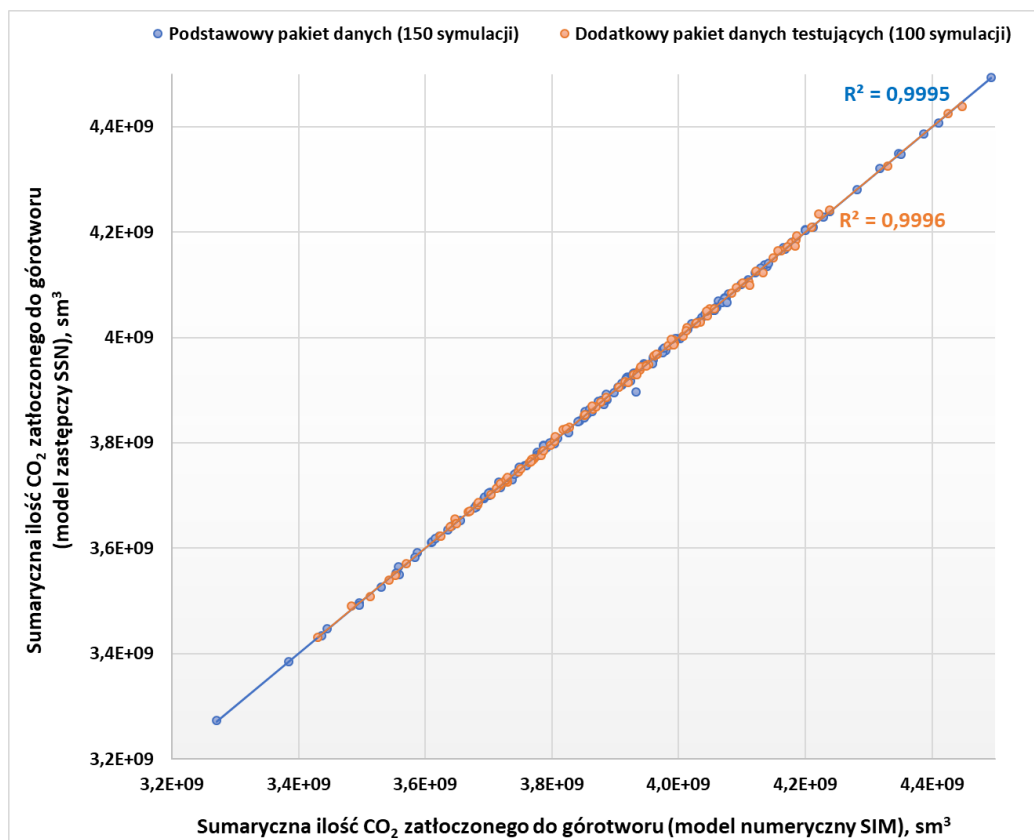
y_i - i-ta obserwacja zmiennej y ,

$\hat{y}_i$ - wartość teoretyczna zmiennej objaśnianej (na podstawie modelu),

$\bar{y}$ - średnia arytmetyczna empirycznych wartości zmiennej objaśnianej.

W celu dodatkowej weryfikacji wiarygodności SSN, oprócz podstawowego ciągu uczącego przygotowałem także dodatkowy pakiet danych testujących (ang. *blind testing samples*) nie biorących udziału w trakcie uczenia, walidacji ani testowaniu sieci. W załączniku 2 przedstawiłem pakiet danych testujących zawierający wyniki symulacji zatłaczania CO₂ (sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂) dla wszystkich 100 wariantów modelu (tab. Z2.1).

Po przeprowadzeniu pełnej weryfikacji wiarygodności sieci uzyskana wartość współczynnika determinacji dla dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* jest porównywalna z wartością otrzymaną dla podstawowego pakietu danych uczących i wynosi $R^2 = 0,9996$ (rys. 5.5).



Rys. 5.5. Diagram dopasowania modelu zastępczego do modelu numerycznego w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)

W ramach oceny wiarygodności wytrenowanej sztucznej sieci neuronowej obliczyłem błędy względne dla wszystkich 26-ciu punktów poszczególnych profili sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w kolejnych 25 latach procesu iniekcji. Wartości błędów sieci w odniesieniu do wyników uzyskanych w numerycznym modelu złożya wyznaczyłem z zależności 5.2:

$$E_t = |V_{SIM_t} - V_{SSN_t}| / V_{SIM_t} \quad (5.2)$$

gdzie:

V_{SIM_t} – sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego w czasie t uzyskana w symulacji numerycznej;

V_{SSN_t} – odpowiadająca sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego w czasie t uzyskana w modelu zastępczym.

Na podstawie wielkości błędów wyznaczonych dla poszczególnych etapów procesu zatłaczania obliczyłem błąd średni wszystkich realizacji modelu symulacyjnego według wzoru 5.3:

$$E_{avg} = (\sum_t^N E_t) / N \quad (5.3)$$

gdzie:

N – liczba wszystkich punktów krzywej sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w kolejnych 25 latach procesu iniekcji ($N = 25$).

Oszacowane wartości błędów średnich i maksymalnych w *wariancie nr 1* zebrałem w tab. 5.2. Maksymalna wartość błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących nie przekracza 2,89%, natomiast w dodatkowym pakiecie danych testujących wartość ta jest równa 2,09%.

Maksymalna wartość błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1*, wynosząca 2,89%, jest zbliżona do wartości w *wariancie nr 2* równej 2,87%, natomiast w dodatkowym pakiecie danych testujących w *wariancie nr 2* uzyskałem wyższą wartość maksymalnego błędu względnego wynoszącą 9,15% w porównaniu z wartością błędu względnego równą 2,09% w *wariancie nr 1* (tab. 5.2, 5.3).

Ponadto wyniki dotyczące weryfikacji modelu w *wariancie 1* za pomocą dodatkowego pakietu danych testujących zaprezentowałem na wykresach przedstawiających empiryczny rozkład maksymalnych wartości błędu względnego (rys. 5.11, rys. 5.12). Natomiast rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego w *wariancie 2* przedstawiłem na rys. 5.17, a wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego przedstawiłem na rys. 5.18.

Zaobserwowane różnice maksymalnych wartości błędu względnego w *wariancie 1* i w *wariancie 2* dowodzą słuszności zastosowania metody próbkowania *Latin hypercube sampling (LHS)* w trakcie tworzenia modelu zastępczego zbudowanego z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych.

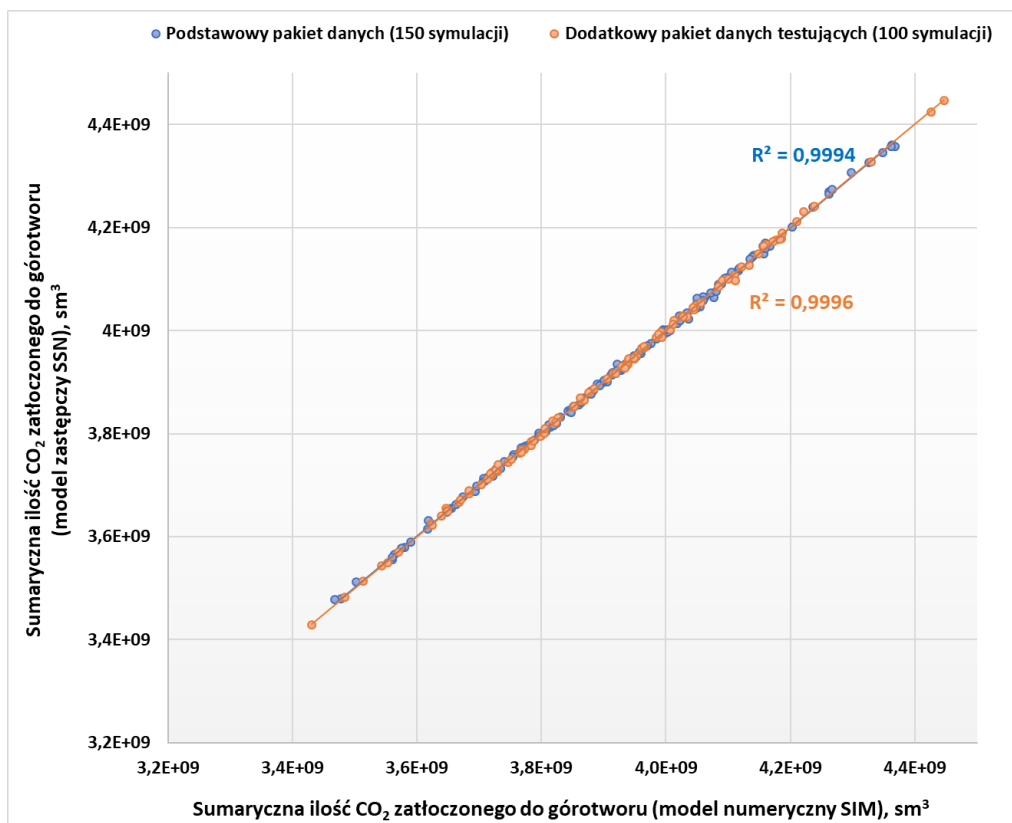
Tab. 5.2. Zestawienie wartości błędów względnych w wariancie nr 1 (opracowanie własne)

Wariant nr 1: Monte Carlo z użyciem metody Latin hypercube sampling (LHS)	Błąd względny, %			
	Podstawowy pakiet danych (ciąg uczący)		Dodatkowy pakiet danych testujących (<i>blind testing samples</i>)	
	wartość średnia błędu dla 150 profilów	wartość maksymalna błędu dla 150 profilów	wartość średnia błędu dla 100 profilów	wartość maksymalna błędu dla 100 profilów
Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	0,08	0,92	0,08	0,31
Błąd średni z okresu 25 lat	0,09	0,75	0,11	0,43
Błąd maksymalny z okresu 25 lat	0,47	2,89	0,52	2,09

Tab. 5.3. Zestawienie wartości błędów względnych w wariancie nr 2 (opracowanie własne)

Wariant nr 2: Monte Carlo bez użycia metody Latin hypercube sampling (LHS)	Błąd względny, %			
	Podstawowy pakiet danych (ciąg uczący)		Dodatkowy pakiet danych testujących (<i>blind testing samples</i>)	
	wartość średnia błędu dla 150 profilów	wartość maksymalna błędu dla 150 profilów	wartość średnia błędu dla 100 profilów	wartość maksymalna błędu dla 100 profilów
Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	0,09	0,37	0,07	0,34
Błąd średni z okresu 25 lat	0,10	0,48	0,47	2,38
Błąd maksymalny z okresu 25 lat	0,48	2,87	2,48	9,15

Diagram dopasowania modelu zastępczego do modelu numerycznego w *wariancie nr 2* opracowany po weryfikacji modelu za pomocą dodatkowego pakietu danych testujących (ang. *blind testing samples*) przedstawiłem na rys. 5.6.



Rys. 5.6. Diagram dopasowania modelu zastępczego do modelu numerycznego w *wariancie nr 2* (opracowanie własne)

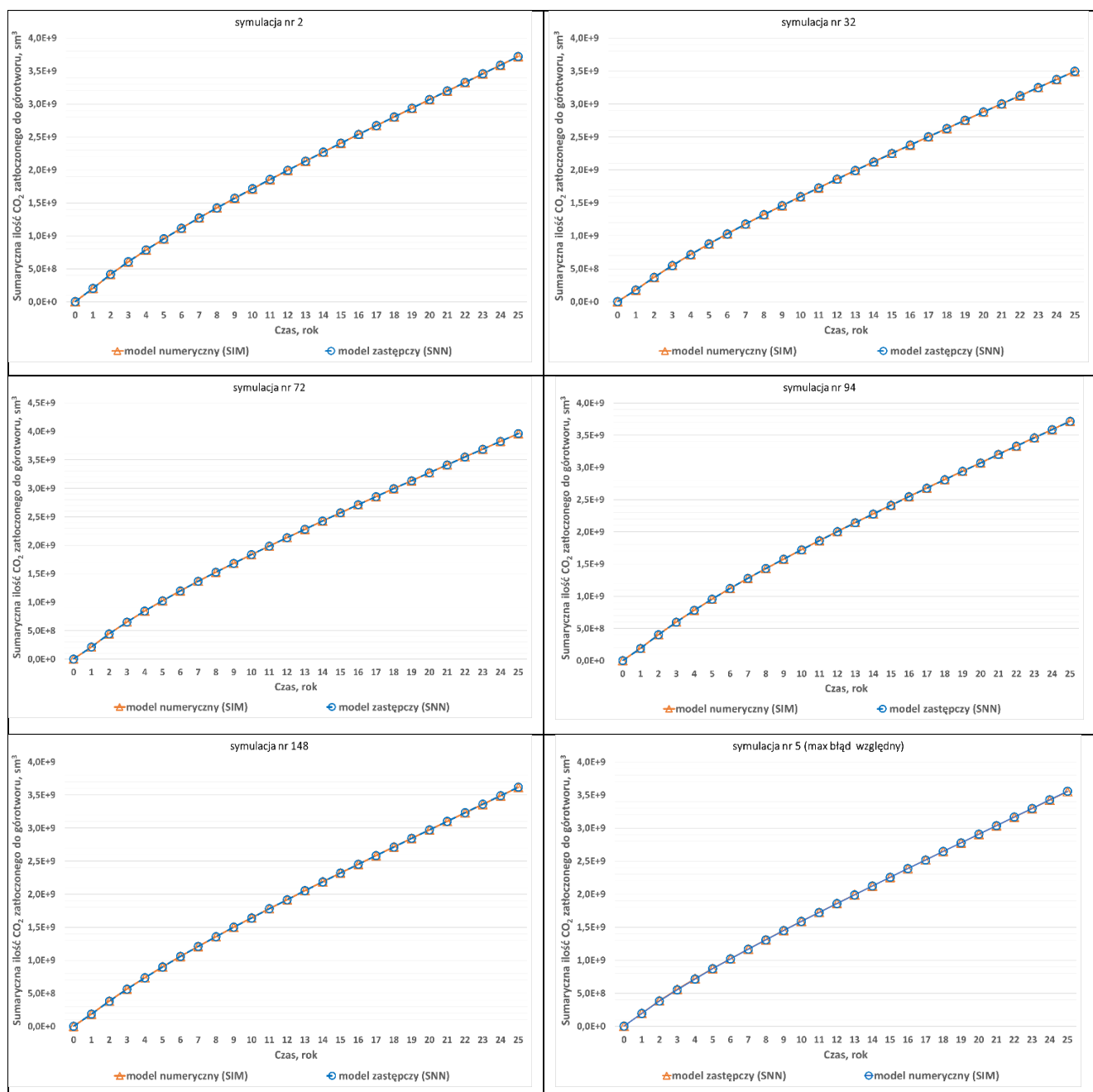
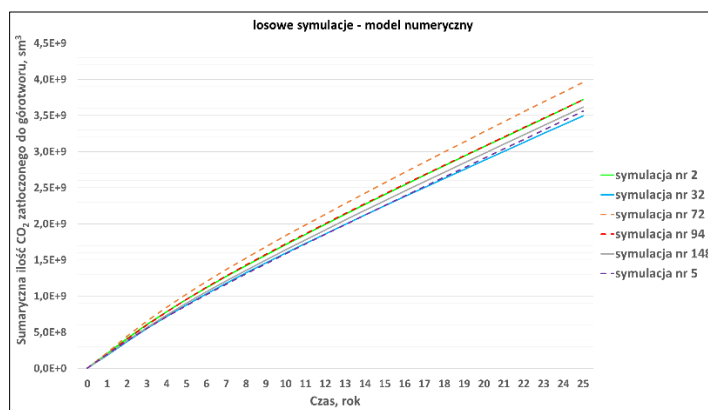
Porównanie profili sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w *wariancie nr 1* dla podstawowego pakietu danych uczących w kolejnych 25 latach procesu iniekcji wygenerowanych za pomocą modelu zastępczego z wynikami uzyskanymi w numerycznym modelu złożowym przedstawiłem na rys. 5.7.

Symulacje o numerach: 2, 32, 72, 94, 148 zostały wylosowane w trakcie procesu trenowania sieci, natomiast wyniki symulacji nr 5 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego.

Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* zawarto w tab. 5.4.

Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* przedstawiłem w tab. 5.5. Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego przedstawiłem na rys. 5.8, natomiast wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego przedstawiłem na rys. 5.9. W podobny sposób zaprezentowałem wyniki dotyczące weryfikacji modelu w *wariancie 1* za pomocą dodatkowego pakietu danych testujących (rys. 5.10, tab. 5.6, tab. 5.7, rys. 5.11, rys. 5.12).

Wyniki dotyczące podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 2* analogiczny sposób przedstawiłem na rys. 5.13, tab. 5.8, tab. 5.9, rys. 5.14, rys. 5.15. Wyniki uzyskane w trakcie testowania modelu w *wariancie nr 2* przedstawiłem na rys. 5.16, tab. 5.10, tab. 5.11, rys. 5.17, rys. 5.18.



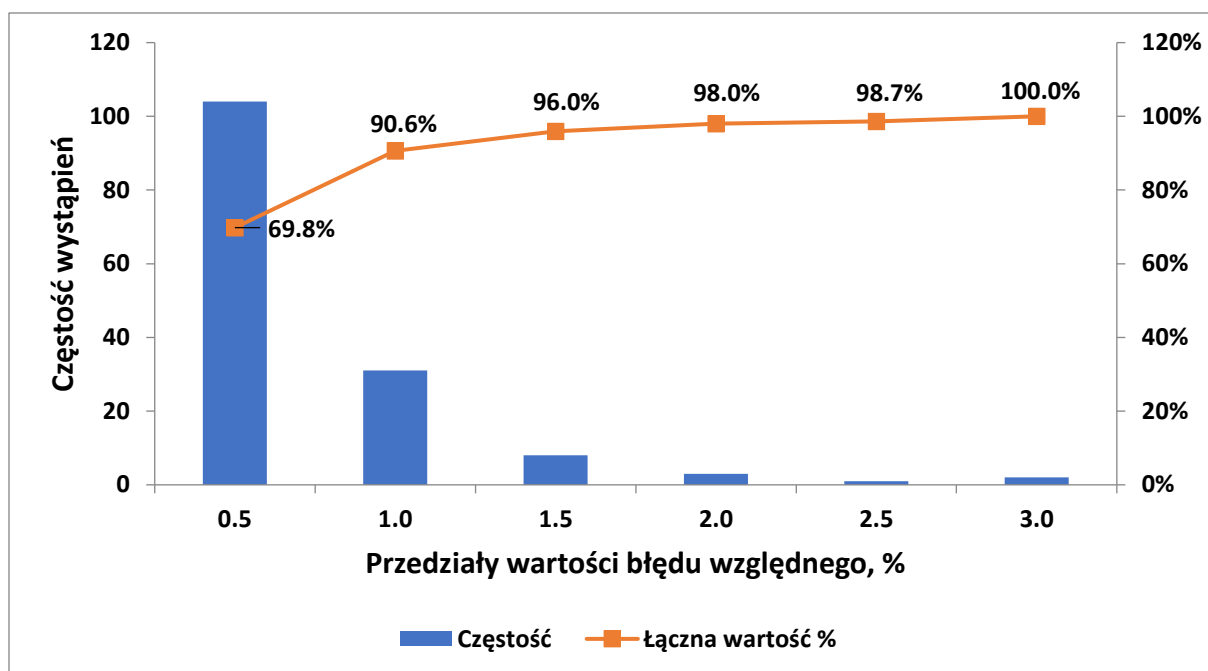
Rys. 5.7. Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* dla losowo wybranych symulacji nr 2, 32, 72, 94, 148 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 5 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego (opracowanie własne)

Tab. 5.4. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 (opracowanie własne)

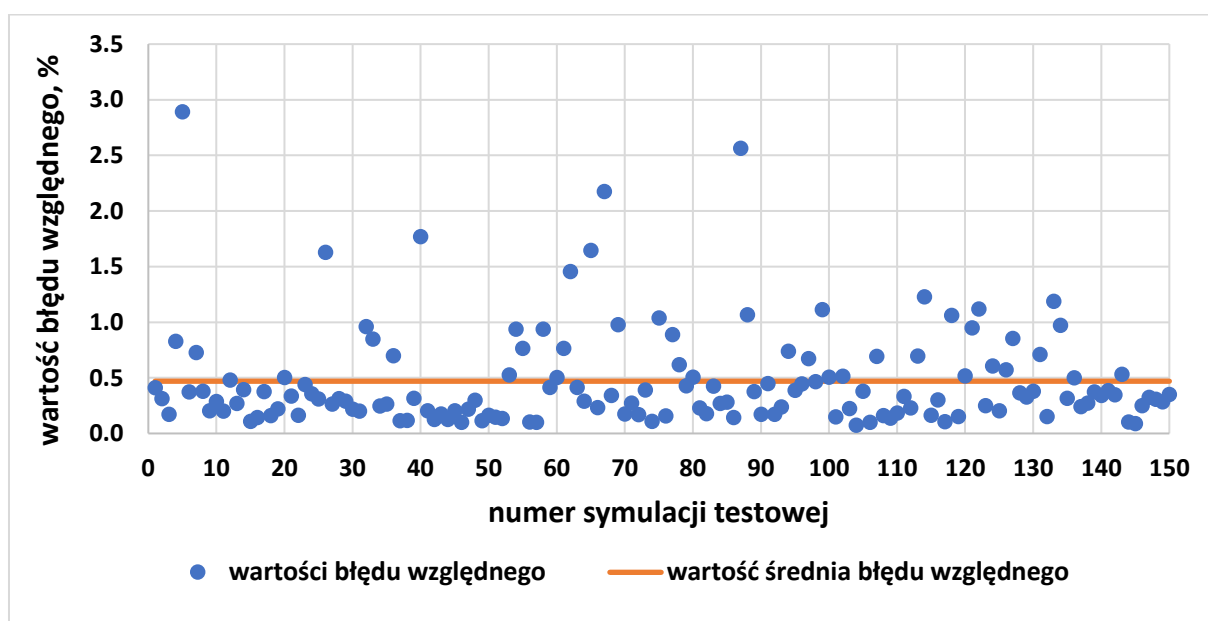
Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		Błąd względny, %		
	Głębo-kość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszcz-alność k _n , mD	Porowa-tość Ø, %	Nasyenie gazem, S _g	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
2	-664,77	0,653333	44,82894	0,172464	0,674246	3719805000	3719320403	0,01	0,09	0,32
32	-691,54	0,729426	34,92096	0,156197	0,707038	3495307000	3496443538	0,03	0,13	0,96
72	-644,76	0,855192	39,91371	0,140795	0,607857	3959880000	3962043564	0,05	0,06	0,17
94	-677,88	0,760676	38,45483	0,173825	0,674989	3718405000	3715286684	0,08	0,10	0,74
148	-753,03	0,694559	35,68676	0,155883	0,644759	3615935000	3617942692	0,06	0,06	0,31
5	-685,90	0,647848	38,53688	0,116935	0,664614	3558700000	3549939126	0,25	0,41	2,89
Wartość średnia błędu względnego dla 150 profiliw zatłaczania CO ₂								0,08	0,09	0,47
Wartość maksymalna błędu względnego dla 150 profiliw zatłaczania CO ₂								0,92	0,75	2,89

Tab. 5.5. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 (opracowanie własne)

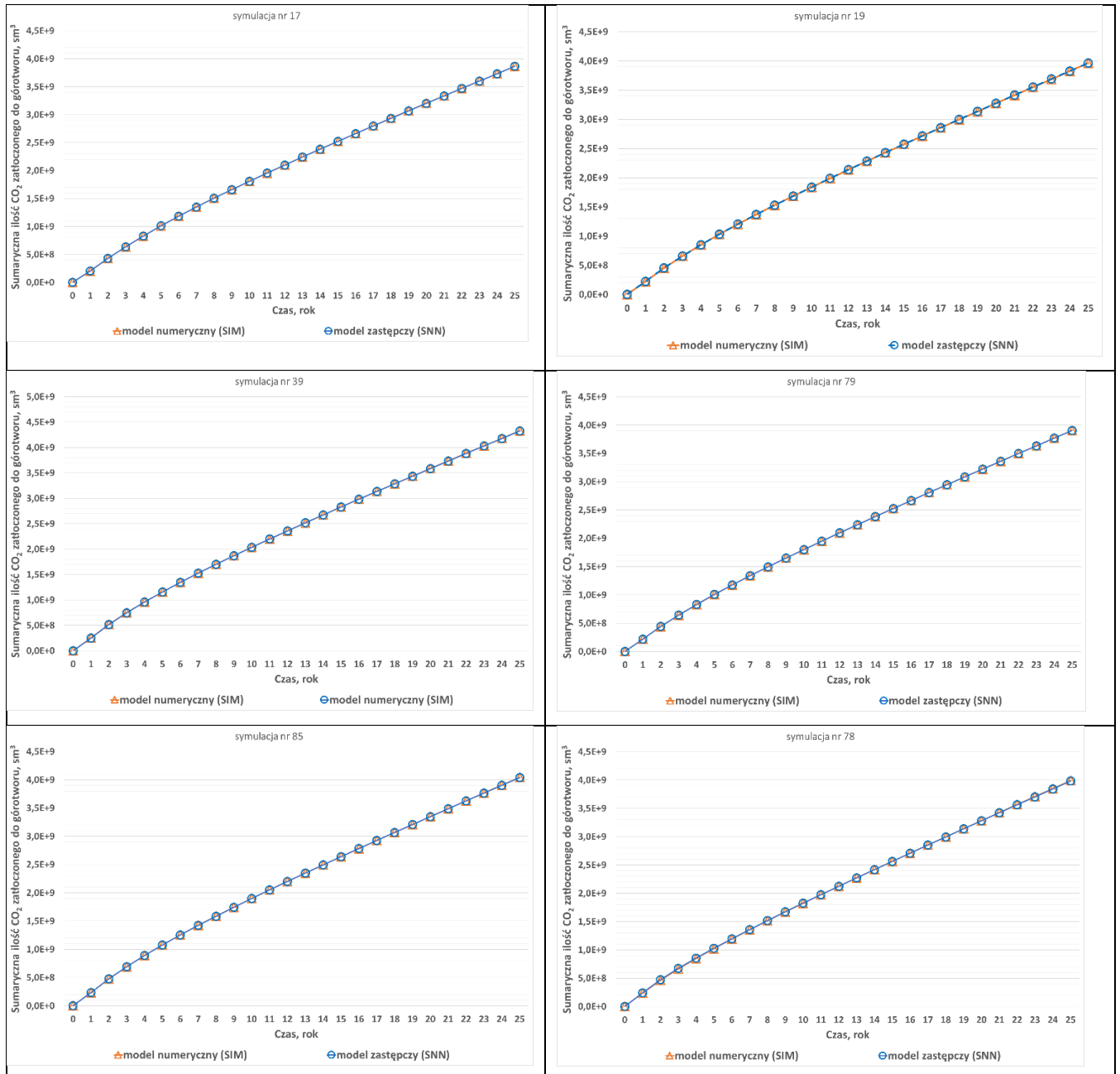
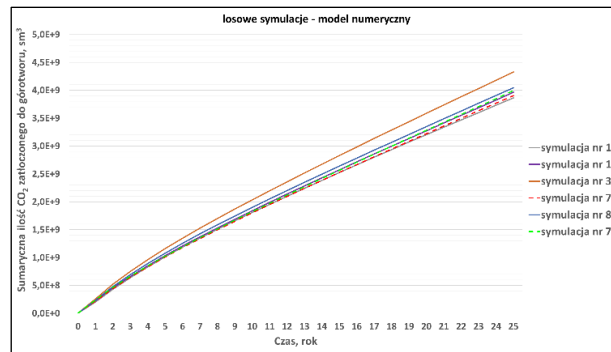
Nr punktu profilu zatłaczania CO ₂	Czas, rok	Błąd względny, %					
		symulacja nr 2	symulacja nr 32	symulacja nr 72	symulacja nr 94	symulacja nr 148	symulacja nr 5
1	0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
2	1	0,247	0,962	0,167	0,741	0,232	2,892
3	2	0,315	0,630	0,165	0,383	0,309	2,172
4	3	0,299	0,371	0,171	0,177	0,201	1,331
5	4	0,251	0,211	0,127	0,038	0,169	0,852
6	5	0,200	0,131	0,062	0,014	0,102	0,501
7	6	0,162	0,121	0,013	0,000	0,054	0,358
8	7	0,129	0,167	0,010	0,032	0,074	0,246
9	8	0,118	0,162	0,025	0,042	0,009	0,213
10	9	0,068	0,092	0,002	0,020	0,013	0,194
11	10	0,031	0,076	0,047	0,042	0,053	0,179
12	11	0,024	0,045	0,078	0,070	0,039	0,184
13	12	0,050	0,069	0,100	0,100	0,024	0,156
14	13	0,027	0,072	0,072	0,108	0,032	0,128
15	14	0,018	0,089	0,060	0,123	0,038	0,122
16	15	0,015	0,066	0,030	0,143	0,055	0,105
17	16	0,007	0,053	0,034	0,118	0,048	0,086
18	17	0,019	0,022	0,026	0,069	0,040	0,064
19	18	0,006	0,018	0,032	0,054	0,027	0,031
20	19	0,002	0,015	0,039	0,045	0,002	0,007
21	20	0,026	0,012	0,013	0,014	0,014	0,044
22	21	0,065	0,022	0,028	0,069	0,010	0,091
23	22	0,093	0,021	0,041	0,090	0,003	0,139
24	23	0,090	0,016	0,031	0,097	0,035	0,181
25	24	0,042	0,016	0,023	0,053	0,023	0,215
26	25	0,013	0,033	0,055	0,084	0,056	0,246
Wartość średnia		0,089	0,134	0,056	0,105	0,064	0,413
Wartość maksymalna		0,315	0,962	0,171	0,741	0,309	2,892



Rys. 5.8. Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)



Rys. 5.9. Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)



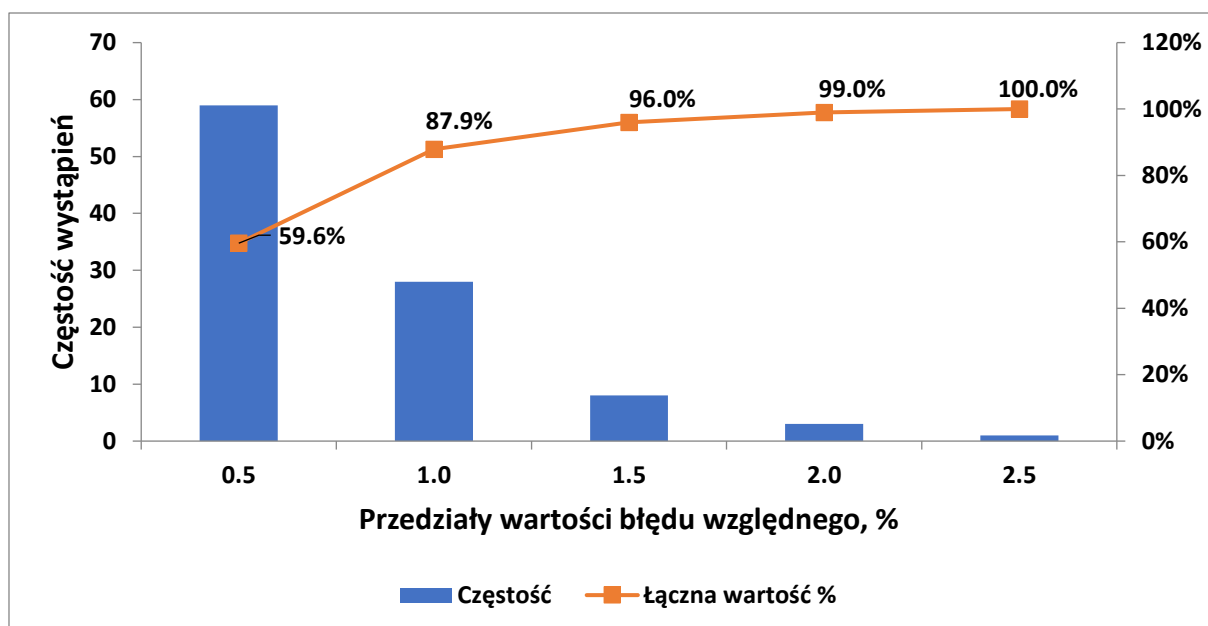
Rys. 5.10. Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* dla losowo wybranych symulacji nr 17, 19, 39, 79, 85 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 78 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego (opracowanie własne)

Tab. 5.6. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 17, 19, 39, 79, 85 i 78 z dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)

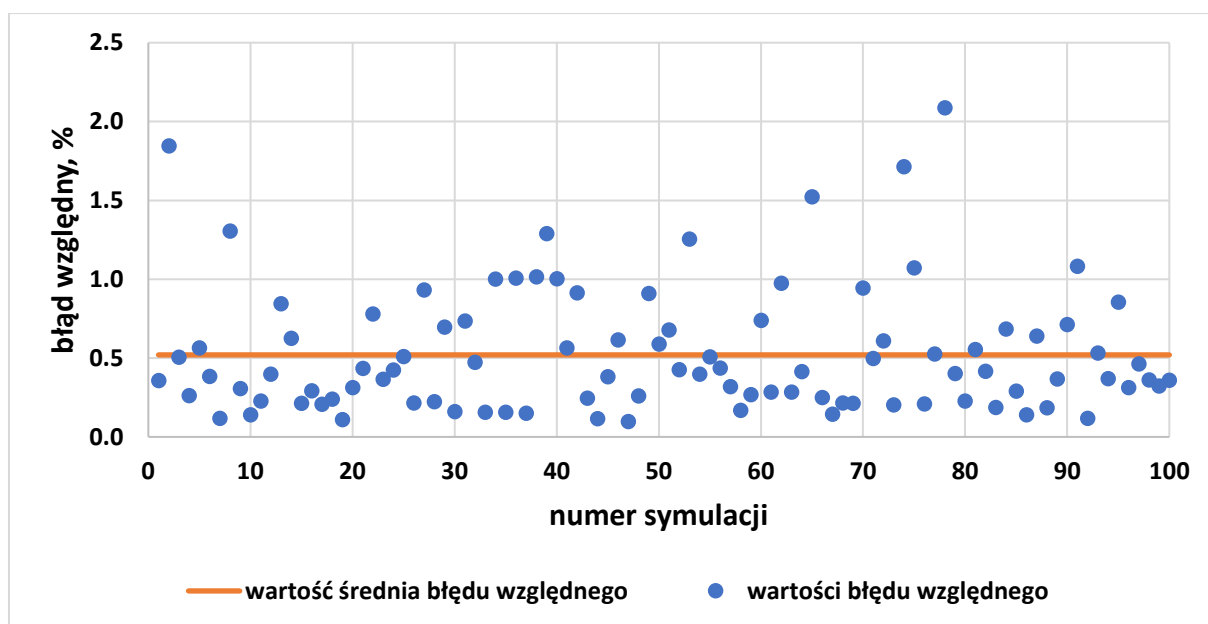
Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		Błąd względny, %		
	Głębo-kość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszcz-alność k _n , mD	Porowa-tość Ø, %	Nasyenie gazem, S _g	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SSN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
17	-672,352	0,882016	37,75304	0,158647	0,67855	3864097000	3864413029	0,01	0,04	0,21
19	-752,755	0,760192	43,40378	0,150535	0,673271	3963812000	3966036674	0,06	0,06	0,11
39	-773,57	0,935979	43,89658	0,128439	0,624655	4329648000	4324845683	0,11	0,14	1,29
79	-696,262	0,715424	44,21532	0,154783	0,635278	3905439000	3906259590	0,02	0,06	0,40
85	-680,963	0,834179	45,58783	0,147986	0,683427	4045164000	4041089289	0,10	0,05	0,29
78	-686,552	0,691112	49,25329	0,121687	0,638893	3992744000	3985716654	0,18	0,37	2,09
Wartość średnia błędu względnego dla 150 profili zatłaczania CO ₂								0,08	0,11	0,52
Wartość maksymalna błędu względnego dla 150 profili zatłaczania CO ₂								0,31	0,43	2,09

Tab. 5.7. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach 17, 19, 39, 79, 85 i 78 z dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)

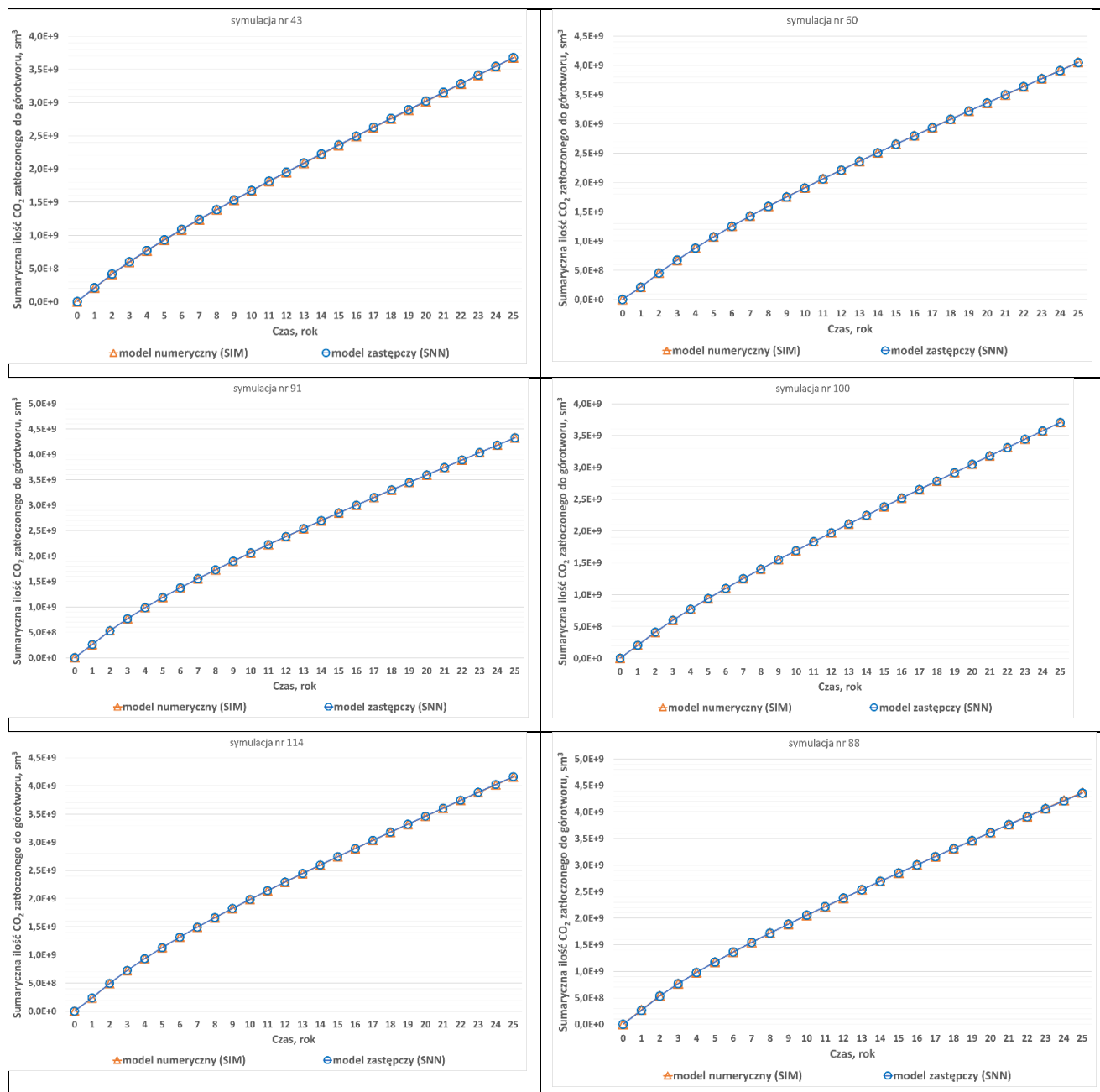
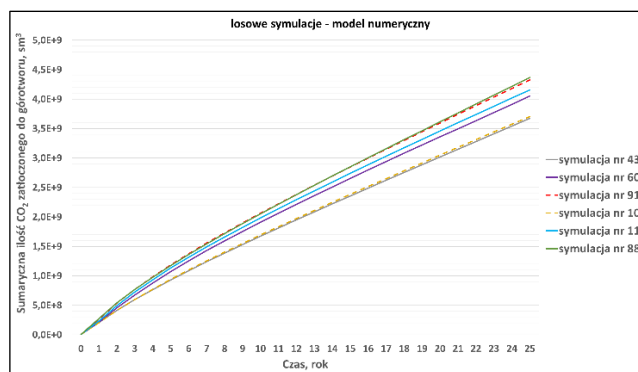
Nr punktu profilu zatłaczania CO ₂	Czas, rok	Błąd względny, %					
		symulacja nr 17	symulacja nr 19	symulacja nr 39	symulacja nr 79	symulacja nr 85	symulacja nr 78
1	0	0	0	0	0	0	0
2	1	0,205	0,049	1,288	0,400	0,289	1,542
3	2	0,057	0,059	0,795	0,322	0,105	2,086
4	3	0,066	0,100	0,358	0,192	0,047	1,563
5	4	0,099	0,102	0,104	0,103	0,055	1,074
6	5	0,069	0,094	0,010	0,113	0,050	0,720
7	6	0,032	0,050	0,038	0,047	0,042	0,459
8	7	0,012	0,051	0,072	0,052	0,029	0,277
9	8	0,042	0,065	0,086	0,039	0,026	0,241
10	9	0,014	0,055	0,095	0,036	0,026	0,209
11	10	0,027	0,030	0,106	0,036	0,044	0,169
12	11	0,039	0,061	0,103	0,012	0,021	0,136
13	12	0,015	0,025	0,106	0,048	0,030	0,097
14	13	0,015	0,037	0,051	0,021	0,003	0,048
15	14	0,013	0,046	0,027	0,006	0,005	0,028
16	15	0,036	0,025	0,009	0,026	0,032	0,005
17	16	0,025	0,007	0,009	0,001	0,041	0,022
18	17	0,078	0,003	0,027	0,002	0,041	0,032
19	18	0,090	0,048	0,005	0,003	0,056	0,033
20	19	0,083	0,062	0,019	0,013	0,045	0,061
21	20	0,044	0,088	0,040	0,011	0,015	0,067
22	21	0,038	0,093	0,053	0,016	0,054	0,104
23	22	0,006	0,098	0,057	0,002	0,037	0,131
24	23	0,030	0,108	0,034	0,014	0,070	0,129
25	24	0,010	0,087	0,063	0,011	0,087	0,127
26	25	0,008	0,056	0,111	0,021	0,101	0,176
Wartość średnia		0,045	0,058	0,141	0,059	0,052	0,367
Wartość maksymalna		0,205	0,108	1,288	0,400	0,289	2,086



Rys. 5.11. Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)



Rys. 5.12. Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 1* (opracowanie własne)



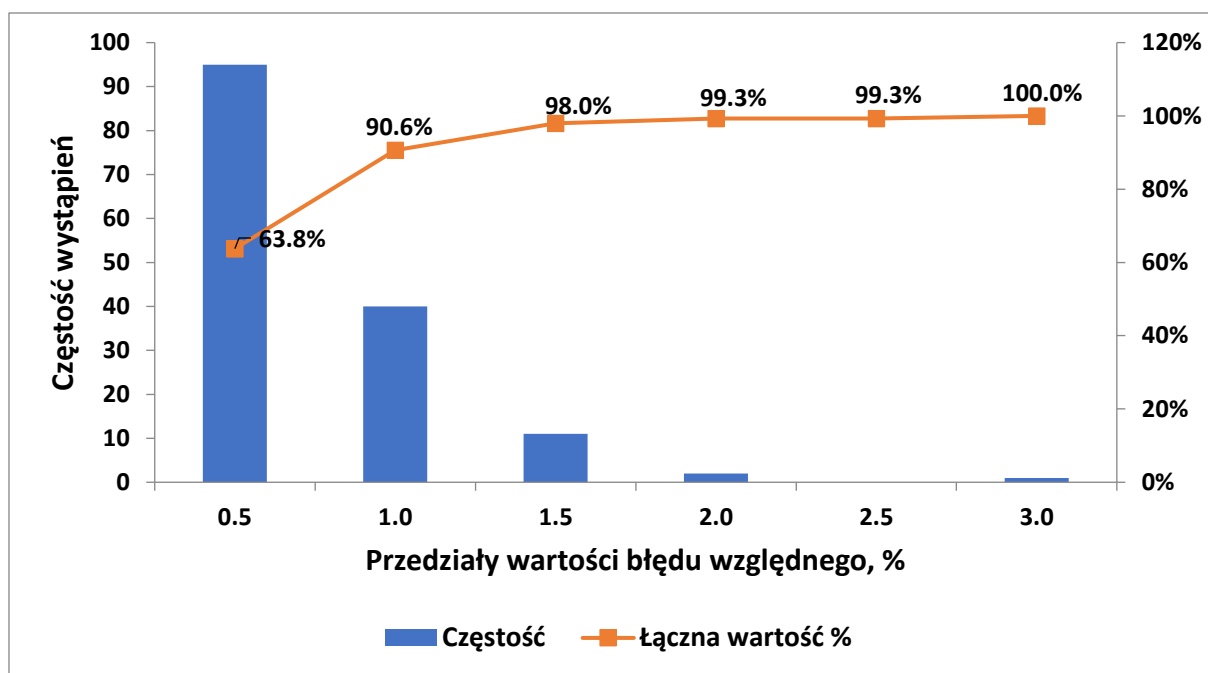
Rys. 5.13. Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie nr 2* dla losowo wybranych symulacji nr 43, 60, 91, 100, 114 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 88 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego (opracowanie własne)

Tab. 5.8. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 43, 60, 91, 100, 114 i 88 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 2 (opracowanie własne)

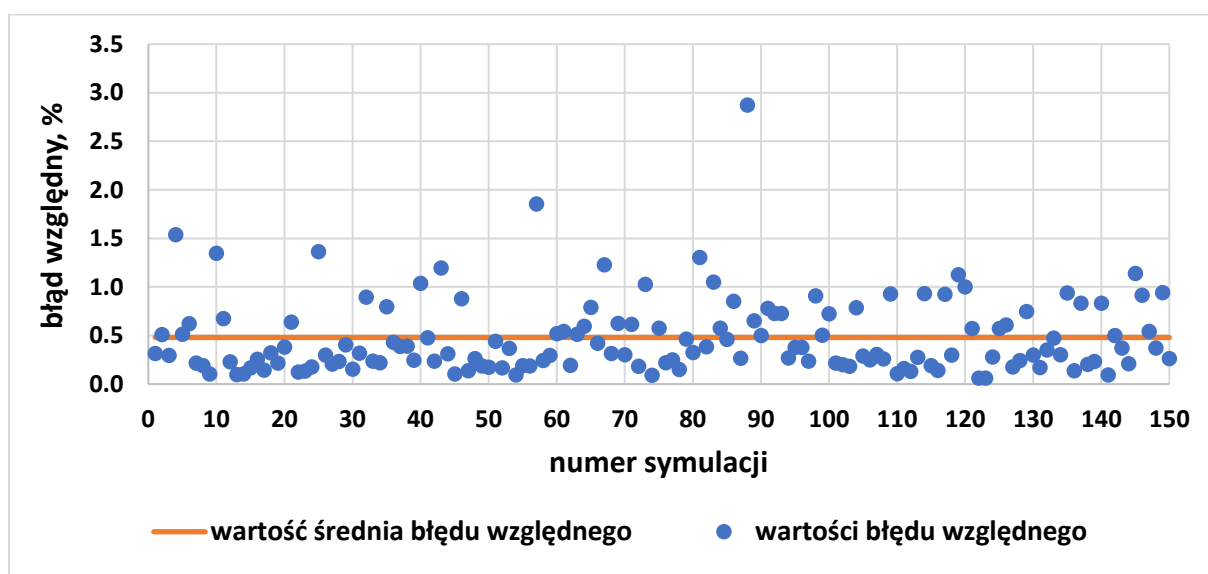
Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		Błąd względny, %		
	Głębo-kość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszcz-alność k _h , mD	Porowa-tość Ø, %	Nasylenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SSN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd maksymalny z okresu 25 lat
43	-566,00	0,67519	45,19826	0,130999	0,663151	3674046000	3677057396	0,08	0,34	1,20
60	-770,22	0,93355	37,28168	0,16046	0,674306	4054443000	4046766228	0,19	0,11	0,52
91	-723,44	0,94085	47,75124	0,141223	0,666564	4326424000	4326440207	0,00	0,13	0,78
100	-583,63	0,69497	42,77829	0,145611	0,62818	3705327000	3705870544	0,01	0,09	0,73
114	-608,84	0,96007	44,3904	0,154633	0,63691	4156393000	4164270448	0,19	0,16	0,93
88	-717,46	0,96267	46,83372	0,112914	0,62402	4367823000	4358067075	0,22	0,25	2,87
Wartość średnia błędu względnego dla 150 profilów zatłaczania CO ₂								0,09	0,10	0,48
Wartość maksymalna błędu względnego dla 150 profilów zatłaczania CO ₂								0,37	0,48	2,87

Tab. 5.9. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 43, 60, 91, 100, 114 i 88 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 2 (opracowanie własne)

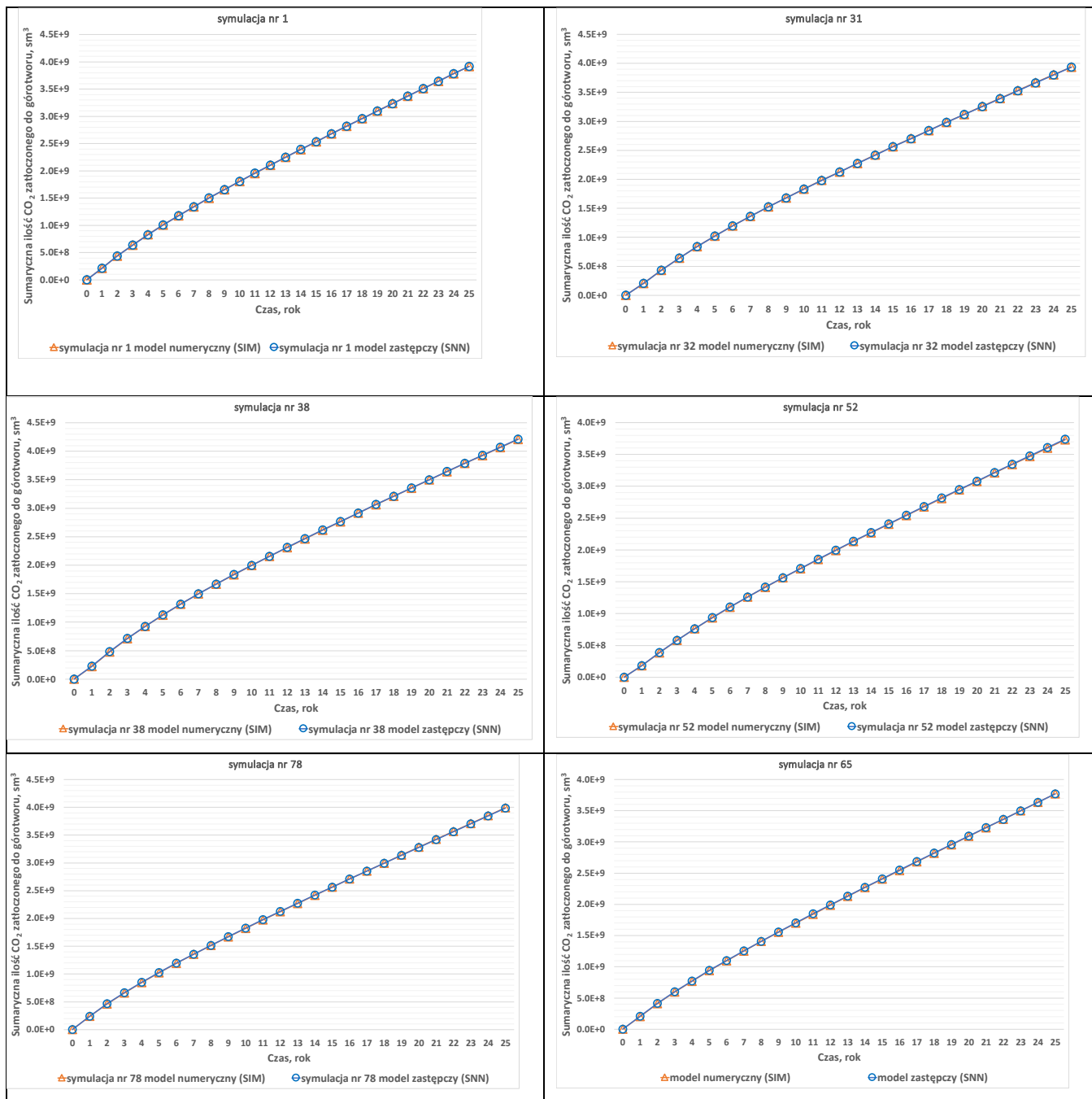
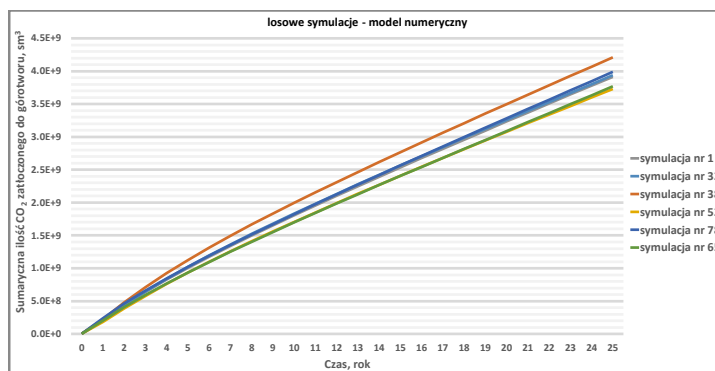
Nr punktu profilu zatłaczania CO ₂	Czas, rok	Błąd względny, %					
		symulacja nr 43	symulacja nr 60	symulacja nr 91	symulacja nr 100	symulacja nr 114	symulacja nr 88
1	0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
2	1	1,025	0,521	0,781	0,725	0,933	2,872
3	2	1,196	0,327	0,323	0,492	0,336	0,975
4	3	0,940	0,238	0,069	0,274	0,063	0,317
5	4	0,682	0,201	0,022	0,137	0,045	0,007
6	5	0,498	0,112	0,109	0,103	0,036	0,155
7	6	0,408	0,026	0,114	0,052	0,041	0,210
8	7	0,331	0,089	0,168	0,067	0,111	0,183
9	8	0,301	0,133	0,167	0,040	0,163	0,131
10	9	0,321	0,103	0,178	0,012	0,114	0,183
11	10	0,301	0,058	0,191	0,010	0,093	0,171
12	11	0,279	0,102	0,197	0,041	0,147	0,134
13	12	0,256	0,094	0,172	0,041	0,163	0,096
14	13	0,243	0,095	0,134	0,004	0,143	0,055
15	14	0,226	0,085	0,117	0,006	0,151	0,017
16	15	0,212	0,055	0,089	0,020	0,135	0,001
17	16	0,211	0,058	0,089	0,009	0,139	0,013
18	17	0,231	0,104	0,114	0,076	0,112	0,037
19	18	0,240	0,093	0,110	0,088	0,139	0,031
20	19	0,242	0,043	0,110	0,032	0,142	0,028
21	20	0,212	0,023	0,088	0,009	0,141	0,042
22	21	0,169	0,022	0,066	0,010	0,162	0,099
23	22	0,142	0,026	0,043	0,013	0,149	0,141
24	23	0,116	0,016	0,017	0,016	0,160	0,171
25	24	0,105	0,074	0,007	0,001	0,147	0,189
26	25	0,082	0,189	0,000	0,015	0,190	0,223
Wartość średnia		0,345	0,111	0,134	0,088	0,160	0,249
Wartość maksymalna		1,196	0,521	0,781	0,725	0,933	2,872



Rys. 5.14. Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *variancie nr 2* (opracowanie własne)



Rys. 5.15. Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *variancie nr 2* (opracowanie własne)



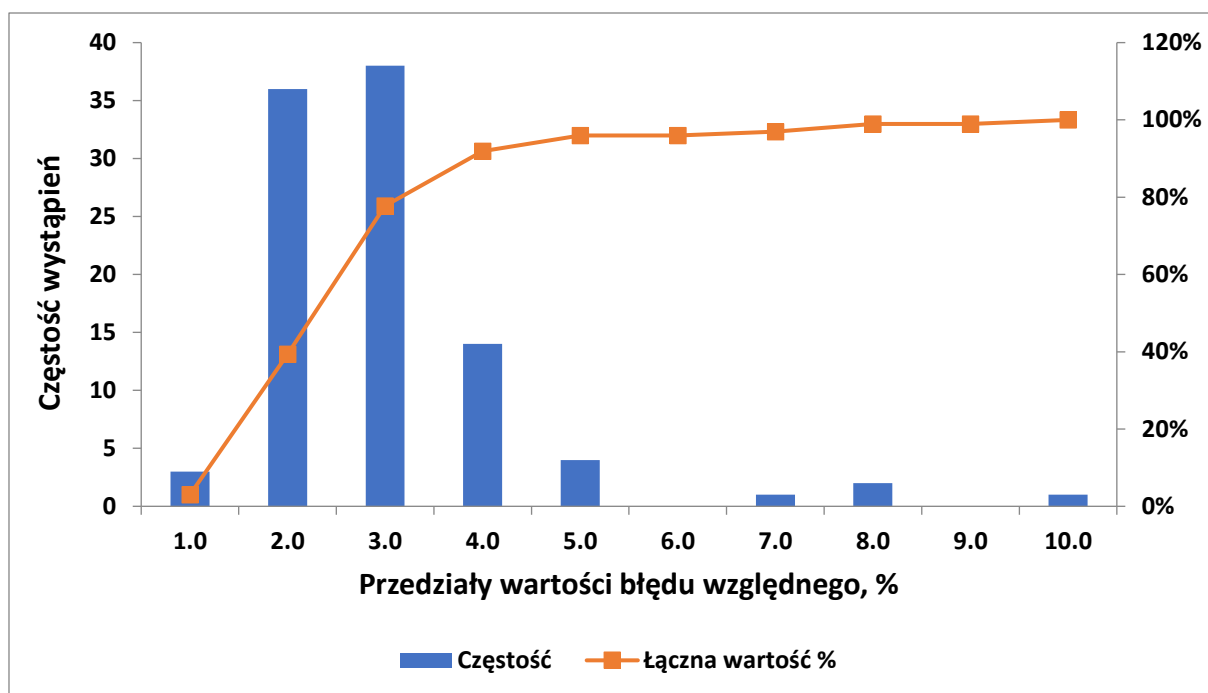
Rys. 5.16. Porównanie profili zatlazania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie* nr 2 dla losowo wybranych symulacji nr 1, 32, 38, 52, 78 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 65 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego (opracowanie własne)

Tab. 5.10. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 1, 32, 38, 52, 78 i 65 z dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 2* (opracowanie własne)

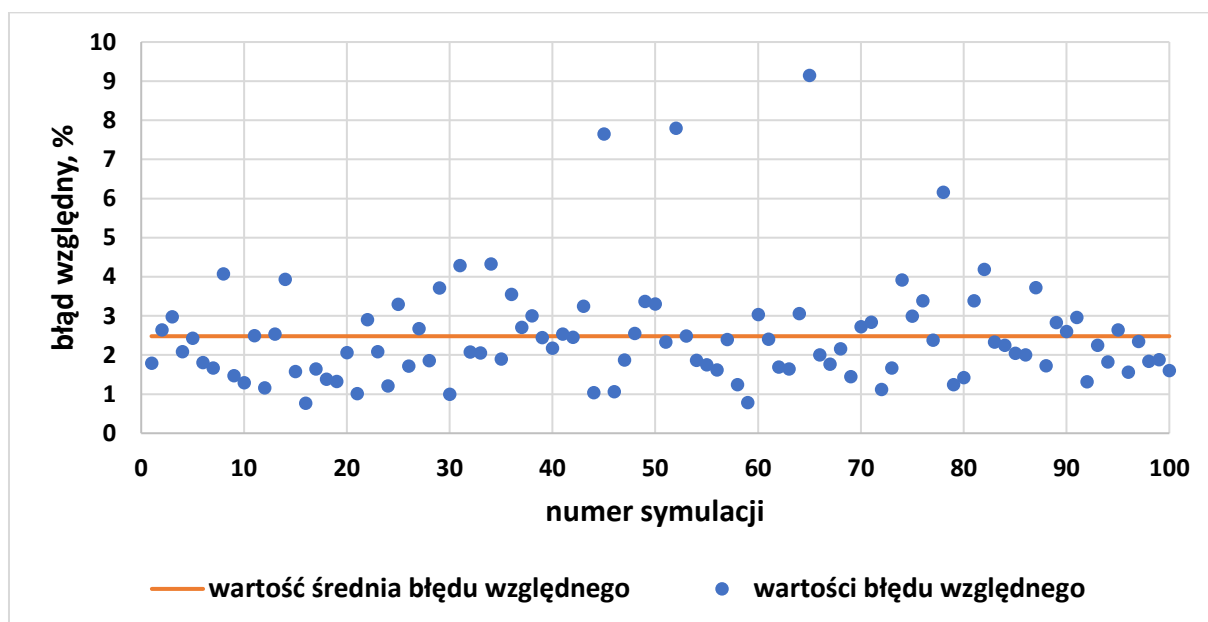
Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		Błąd względny, %		
	Głębokość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Przepuszczalność k _h , mD	Porowatowość Ø, %	Nasylenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SSN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (sumaryczna ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
1	-604,053	0,852561	42,96199	0,141674	0,645452	3915615000	3917007504	0,04	0,50	1,79
32	-581,066	0,854063	38,90606	0,165505	0,640917	3938682000	3934924751	0,10	0,40	2,08
38	-682,32	0,8643	44,38053	0,157828	0,600337	4210408000	4211618470	0,03	0,30	3,00
52	-704,061	0,719379	47,2758	0,17673	0,618295	3729994000	3740502711	0,28	1,14	7,80
78	-593,281	0,921772	48,08899	0,155167	0,657809	3992744000	3986345775	0,16	1,18	6,16
65	-672,352	0,882016	37,75304	0,158647	0,67855	3769153000	3768447267	0,02	1,54	9,15
Wartość średnia błędu względnego dla 100 profili zatłaczania CO ₂								0,07	0,47	2,48
Wartość maksymalna błędu względnego dla 100 profili zatłaczania CO ₂								0,34	2,38	9,15

Tab. 5.11. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 1, 32, 38, 52, 78 i 65 z dodatkowego pakietu danych testujących w *wariancie nr 2* (opracowanie własne)

Nr punktu profilu zatłaczania CO ₂	Czas, rok	Błąd względny, %					
		symulacja nr 1	symulacja nr 32	symulacja nr 38	symulacja nr 52	symulacja nr 78	symulacja nr 65
1	0	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
2	1	0,496	0,399	0,273	1,140	0,311	1,535
3	2	0,021	0,110	0,298	0,874	1,177	1,229
4	3	0,119	0,038	0,267	0,606	0,973	0,847
5	4	0,078	0,100	0,266	0,470	0,699	0,616
6	5	0,024	0,043	0,204	0,357	0,506	0,481
7	6	0,004	0,034	0,124	0,241	0,365	0,426
8	7	0,094	0,053	0,075	0,188	0,261	0,358
9	8	0,102	0,002	0,067	0,152	0,232	0,344
10	9	0,096	0,051	0,105	0,209	0,199	0,323
11	10	0,077	0,069	0,078	0,281	0,193	0,315
12	11	0,116	0,030	0,063	0,234	0,163	0,306
13	12	0,072	0,003	0,085	0,227	0,125	0,291
14	13	0,066	0,066	0,102	0,180	0,085	0,254
15	14	0,066	0,095	0,152	0,210	0,054	0,241
16	15	0,028	0,095	0,178	0,210	0,021	0,232
17	16	0,016	0,095	0,143	0,202	0,006	0,238
18	17	0,003	0,061	0,133	0,242	0,029	0,208
19	18	0,008	0,097	0,067	0,232	0,034	0,204
20	19	0,051	0,103	0,046	0,209	0,069	0,211
21	20	0,082	0,087	0,029	0,162	0,056	0,181
22	21	0,043	0,062	0,036	0,152	0,087	0,132
23	22	0,047	0,093	0,037	0,200	0,120	0,087
24	23	0,030	0,082	0,063	0,264	0,117	0,063
25	24	0,014	0,112	0,082	0,270	0,114	0,010
26	25	0,036	0,095	0,029	0,282	0,160	0,019
Wartość średnia		0,069	0,080	0,115	0,300	0,237	0,352
Wartość maksymalna		0,496	0,399	0,298	1,140	1,177	1,535



Rys. 5.17. Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2 (opracowanie własne)



Rys. 5.18. Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2 (opracowanie własne)

6. Wnioski

- Budowę dynamicznych modeli symulacyjnych wykonałem w oparciu o regionalne modele statyczne rzeczywistych struktur złożowych wytypowanych rejonów GZW. Spośród trzech analizowanych modeli numerycznych poziomów solankowych najbardziej perspektywiczne dla potencjalnego składowania CO₂ wydają się być warstwy dębowieckie, które charakteryzują się najkorzystniejszymi parametrami geologicznymi i hydrogeologicznymi. W związku z tym, numeryczny model warstw dębowieckich posłużył do opracowania odpowiednio reprezentatywnej bazy danych. Na podstawie wielokrotnych symulacji złożowych w modelu numerycznym wygenerowałem dane wyjściowe niezbędne do opracowania modelu zastępczego.
- W wyniku przeprowadzonej analizy wrażliwości modelu symulacyjnego warstw dębowieckich, mającej na celu zmniejszenie wymiarowości zbioru danych, określiłem dane wejściowe modelu mające największy wpływ na wyniki symulacji dla wybranej funkcji celu. Spośród analizowanych kluczowych parametrów skał złożowych największy wpływ na ilość ditlenku węgla możliwego do zatłoczenia do górotworu mają: 1) właściwości skał dotyczące ich przepuszczalności; 2) wskaźnik określający stosunek miąższości efektywnej do całkowitej złoża, czyli proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu.
- Opracowanie odpowiednio reprezentatywnej bazy danych stanowi jeden z najważniejszych etapów budowy modelu zastępczego opartego na metodach sztucznej inteligencji. W tym celu wygenerowany został zbiór poszczególnych wariantów modelu numerycznego o liczebności 150 symulacji obejmujących prognozy 25 lat zatłaczania ditlenku węgla do górotworu. Pełny zestaw wyników symulacji, przeznaczonych do trenowania, walidacji i testowania sieci neuronowej, opracowałem w oprogramowaniu Petrel (Schlumberger).
- W ramach testowania zastępczego modelu złożowego porównałem wyniki zatłaczania CO₂ wygenerowane za pomocą sztucznej sieci neuronowej z wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w numerycznym modelu złożowym. Wyniki przeprowadzonych testów potwierdziły wiarygodność zastępczego modelu złożowego zbudowanego w oparciu o sztuczną sieć neuronową. Uzyskana wartość współczynnika determinacji dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 wynosi $R^2 = 0,9995$. Maksymalna wartość błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących nie przekracza 2,89%, natomiast w dodatkowym pakiecie danych testujących (*blind testing samples*) wartość ta jest równa 2,09%.
- W celu opracowania zbioru 150 modeli aproksymacyjnych analizowanego złoża reprezentatywnych dla założonych parametrów modelu, zastosowałem próbkowanie statystyczne przestrzeni danych wejściowych z użyciem metody tzw. hipersześcianu łańciskowego (ang. *Latin Hypercube Sampling*, LHS) – *wariant 1*. Ponadto w celu weryfikacji efektywności wykorzystania próbkowania LHS jako metody wyboru zbioru punktów definiujących reprezentatywną bazę danych, wygenerowałem dodatkowe pakiety danych opracowanych bez zastosowania metody LHS (*wariant 2*). Maksymalna wartość błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w *wariancie*

nr 1, wynosząca 2,89%, jest zbliżona do wartości w *wariancie nr 2* równej 2,87%, natomiast w dodatkowym pakiecie danych testujących w *wariancie nr 2* uzyskałem wyższą wartość maksymalnego błędu względnego wynoszącą 9,15% w porównaniu z wartością błędu względnego równą 2,09% w *wariancie nr 1*. Zaobserwowane różnice maksymalnych wartości błędu względnego dla dwóch wariantów danych wykorzystanych do trenowania sieci dowodzą słuszności zastosowania metody próbkowania LHS w trakcie tworzenia modelu zastępczego zbudowanego z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych.

- W wyniku wykonanych analiz dotyczących wyboru i optymalizacji struktury sztucznej sieci neuronowej (ANN) w ostatecznej wersji modelu predykcyjnego opartego na ANN zastosowałem dwuwarstwową jednokierunkową sieć neuronową (sieć typu *feedforward*) z warstwą ukrytą zawierającą 5 neuronów, które wykorzystują funkcję aktywacji tangens hiperboliczny (*tansig*). W warstwie wyjściowej zastosowałem liniową funkcję aktywacji (*purelin*). Analizowałem różne warianty uczenia sieci przy wykorzystaniu dostępnych algorytmów wstecznej propagacji błędu (*backpropagation*). Najlepsze wyniki uzyskałem przy wykorzystaniu algorytmu Bayesian Regularization (*trainbr*) stanowiącego modyfikację algorytmu Lavenberga-Marquardta (*trainlm*).
- Przeprowadzone badania wykazały, że połączony proces budowania i trenowania sieci neuronowych oraz optymalizacji Bayesa automatyzuje i ułatwia dopasowanie poszczególnych parametrów procesu zamiast stosowania rozległej metody prób i błędów. Ponadto w klasycznym podejściu wyniki symulacji złożowych otrzymuje się poprzez dopasowanie wybranych parametrów zbiornika pojedynczo, natomiast najważniejszą cechą modelowania zastępczego jest możliwość określenia łącznego efektu niepewnych parametrów modelu w tym samym czasie.
- W ramach niniejszej pracy określono efektywność procesu geologicznego składowania CO₂ w głębokich solankowych poziomach wodonośnych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji. Wykazano, że wykorzystanie modelu zastępczego, poddanego wcześniej procesowi trenowania, testowania i walidacji, może znacznie zmniejszyć nakład prac poświęconym opracowaniu czasochłonnych numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂ w początkowym etapie projektu CCS.
- Ponadto zastosowanie modelowania zastępczego nie wymaga znacznych mocy obliczeniowych, w tym korzystania z dostępu do zdalnych serwerów/klastrów obliczeniowych, wykorzystywanych często w przypadku numerycznych symulacji złożowych i przetwarzania danych.
- Na podstawie uzyskanych wyników badań i sformułowanych na ich podstawie wniosków stwierdzam, że cele niniejszej pracy zostały osiągnięte, a ustalony problem badawczy o poniższym brzmieniu został rozwiązany:

Analiza możliwości wykorzystania sztucznych sieci neuronowych w modelowaniu dynamicznym zachowania ditlenku węgla składowanego w górotworze, mającego na celu znaczne zmniejszenie czasochłonności numerycznych symulacji geologicznego składowania CO₂.

Należy zauważyć, że sztuczne sieci neuronowe pozwalają na opracowanie modeli zastępczych, które przybliżają odpowiedź wyjścia modelu symulacyjnego dla ściśle określonych warunków złożowych. Są one zdefiniowane przedziałami wartości parametrów wejściowych modelu, które tworzą bazę danych wykorzystywaną w trakcie uczenia sieci. W związku z tym, możliwość wykorzystania wytrenowanego modelu zastępczego jest ograniczona przedziałami wartości początkowych modelu.

Zadaniem modelu zastępczego jest odwzorowanie odpowiedzi symulacyjnego modelu złożowego, a także rozszerzenie jego możliwości o działania, które zapewnią zgodność predykatywną modelu, czyli zdolność do prognozowania przyszłego zachowania modelu.

Modele zastępcze wykorzystujące techniki sztucznej inteligencji wykazują zdolność przetwarzania dużych zbiorów danych gromadzonych w trakcie procesów złożowych. W porównaniu z konwencjonalnym podejściem do przetwarzania danych, modele AI mogą skutecznie korelować różnego rodzaju dane złożowe i dostarczać dokładniejszych i bardziej wydajnych rozwiązań skomplikowanych zagadnień złożowych.

Spis literatury

- Abdullelah, H., Al-Yaseri, A., Ali, M., Giwelli, A., Negash, B.M., Sarmadivaleh, M. (2021). CO₂/Basalt's interfacial tension and wettability directly from gas density: Implications for Carbon Geo-sequestration. *J. Pet. Sci. Eng.*, 204, 108683. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.108683>
- Abraham A. (2005). Artificial neural networks. In: *Handbook of measuring system design*. John Wiley & Sons Ltd., London, 901-908.
- Act AI (2024). Akt w sprawie sztucznej inteligencji. Rezolucja ustawodawcza Parlamentu Europejskiego z dnia 13 marca 2024 r. w sprawie wniosku dotyczącego rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady ustanawiającego zharmonizowane przepisy dotyczące sztucznej inteligencji (akt w sprawie sztucznej inteligencji) i zmieniającego niektóre akty ustawodawcze Unii. https://www.europarl.europa.eu/doceo/document/TA-9-2024-0138_PL.pdf [dostęp: 07.06.2024]
- Adams, E. E., Caldeira, K. (2008). Ocean storage of CO₂. *Elements*, 4, 319–24. <http://dx.doi.org/10.2113/gselements.4.5.319>
- Aggarwal, C. C. (2023). *Neural Networks and Deep Learning: A Textbook*, 2nd edition. Cham, Switzerland: Springer International Publishing, 29-71. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-29642-0>
- Al-Mamoori, A., Krishnamurthy, A., Rownaghi, A.A., Rezaei, F. (2017). Carbon capture and utilization update. *Energy Technol.*, 5(6), 834–49. <https://doi.org/10.1002/ente.201600747>
- Al-Sakkari, E. G., Ragab, A., Dagdougui, H., Boffito, D. C., & Amazouz, M. (2024). Carbon capture, utilization and sequestration systems design and operation optimization: Assessment and perspectives of artificial intelligence opportunities. *Science of The Total Environment*, 917, 2024, 170085. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.170085>
- Al-Yaseri, A., & Jha, N. K. (2021). On hydrogen wettability of basaltic rock. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 200, 108387. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.108387>
- Augustus, A. & Alexander, D. (2014). Evaluating the Effects of CO₂ Injection in Faulted Oil Reservoirs. Paper presented at the SPE Energy Resources Conference, Port of Spain, Trinidad and Tobago, <https://doi.org/10.2118/SPE-169933-MS>
- Ali, M., & Aftab, A. (2020). Topic Review Unconventional Reservoirs Subjects. *Energy & Fuel Technology View Times*, 66.
- Ali, M., Jha, N. K., Pal, N., Keshavarz, A., Hoteit, H., & Sarmadivaleh, M. (2022). Recent advances in carbon dioxide geological storage, experimental procedures, influencing parameters, and future outlook. *Earth-Science Reviews*, 225, 103895. <https://doi.org/10.1016/j.earscirev.2021.103895>
- Alper, E., Yuksel Orhan, O. (2017). CO₂ utilization: Developments in conversion processes. *Petroleum* 3, 1, 109–126. <https://doi.org/10.1016/j.petlm.2016.11.003>
- Aminu, M. D., Nabavi, S. A., Rochelle, C. A., & Manovic, V. (2017). A review of developments in carbon dioxide storage. *Applied Energy*, 208, 1389-1419. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.09.015>
- Arif, M., Lebedev, M., Barifcani, A., Iglauer, S. (2017). Influence of shale-total organic content on CO₂ geo-storage potential. *Geophysical Research Letters*, 44 (17), 8769–8775. <https://doi.org/10.1002/2017GL073532>
- Armitage, P. J., Worden, R. H., Faulkner, D. R., Aplin, A. C., Butcher, A. R., & Espie, A. A. (2013). Mercia Mudstone Formation caprock to carbon capture and storage sites: petrology and petrophysical characteristics. *Journal of the Geological Society*, 170 (1), 119-132. <https://doi.org/10.1144/jgs2012-049>
- Awan, F.U.R., Keshavarz, A., Akhondzadeh, H., Al-Anssari, S.F., Al-Yaseri, A.Z., Nosrati, A., Ali, M., Iglauer, S. (2020). Stable dispersion of coal fines during hydraulic fracturing flowback in coal seam gas reservoirs – an experimental study. *Energy Fuel*, 34 (5), 5566–5577. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c00045>
- Babin, A., Vaneeckhaute, C., Iliuta, M.C. (2021). Potential and challenges of bioenergy with carbon capture and storage as a carbon-negative energy source: A review. *Biomass Bioenergy*, 146, 105968. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2021.105968>
- Bachmann, M., Katelhon, A., Winter, B., Meys, R., Müller, L. J., Bardow, A. (2021). Renewable carbon feedstock for polymers: environmental benefits from synergistic use of biomass and CO₂. *Faraday Discussions*, 230, 227–246. <https://doi.org/10.1039/D0FD000134A>
- Bachu, S. (2000). Sequestration of CO₂ in geological media: Criteria and approach for site selection in response to climate change. *Energy Conversion and Management*, 41, 9, 953–970. [http://dx.doi.org/10.1016/S0196-8904\(99\)00149-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0196-8904(99)00149-1)
- Bachu, S. (2007). Carbon dioxide storage capacity in uneconomic coal beds in Alberta, Canada: Methodology, potential and site identification. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1, 3, 374–385. [https://doi.org/10.1016/S1750-5836\(07\)00070-9](https://doi.org/10.1016/S1750-5836(07)00070-9)

- Bachu, S., Adams, J. J. (2003). Sequestration of CO₂ in geological media in response to climate change: Capacity of deep saline aquifers to sequester CO₂ in solution. *Energy Conversion and Management*, 44, 20, 3151–3175. [https://doi.org/10.1016/S0196-8904\(03\)00101-8](https://doi.org/10.1016/S0196-8904(03)00101-8)
- Bachu, S., Gunter, W. D., Perkins, E.H. (1994). Aquifer disposal of CO₂: Hydrodynamic and mineral trapping. *Energy Conversion and Management*, 35, 4, 269–279. [http://dx.doi.org/10.1016/0196-8904\(94\)90060-4](http://dx.doi.org/10.1016/0196-8904(94)90060-4)
- Bachu, S., Melnik, A., Bistran, R. (2014). Approach to Evaluating the CO₂ Storage Capacity in Devonian Deep Saline Aquifers for Emissions from Oil Sands Operations in the Athabasca Area, Canada. *Energy Procedia*, 63, 5093–5102. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.539>
- Baena-Moreno, F. M., Rodríguez-Galán, M., Vega, F., Alonso-Fariñas, B., Vilches Arenas, L. F., & Navarrete, B. (2018). Carbon capture and utilization technologies: a literature review and recent advances. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 41(12), 1403–1433. <https://doi.org/10.1080/15567036.2018.1548518>
- Bahrami, P., Sahari Moghaddam, F., & James, L. A. (2022). A Review of Proxy Modeling Highlighting Applications for Reservoir Engineering. *Energies*, 15 (14), 5247. <https://doi.org/10.3390/en1514524>
- Ballio, F., Guadagnini, A. (2004). Convergence assessment of numerical Monte Carlo simulations in groundwater hydrology. *Water Resources Research*, 40 (4). <https://doi.org/10.1029/2003WR002876>
- Barrett, D.J., Couch, C.A., Metcalfe, D.J., Lytton, L., Adhikary, D.P., Schmidt, R.K. (2013). Methodology for bioregional assessments of the impacts of coal seam gas and coal mining development on water resources. A report prepared for the Independent Expert Scientific Committee on Coal Seam Gas and Large Coal Mining Development through the Department of the Environment.
- Barry, J.P., Buck, K.R., Lovera, C.F., Kuhn, L., Whaling, P.J., Peltzer, E.T., Walz, P., Brewer, P.G. (2004). Effects of direct ocean CO₂ injection on deep-sea meiofauna. *Journal of Oceanography*, 60, 759–766. <https://doi.org/10.1007/s10872-004-5768-8>
- Batuecas, E., Liendo, F., Tommasi, T., Bensaid, S., Deorsola, F.A., Fino, D. (2021). Recycling CO₂ from flue gas for CaCO₃ nanoparticles production as cement filler: a Life Cycle Assessment. *J. CO₂ Util.* 45, 101446 <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2021.101446>
- Blunt, M., Fayers, F.J., Orr Jr., F.M. (1993). Carbon dioxide in enhanced oil recovery. *Energy conversion and management*, 34 (9–11), 1197–1204.
- Bonura, G., Todaro, S., Frusteri, L., Majchrzak-Kuceba, I., Wawrzyńczak, D., Pászti, Z., Tálas, E., Tompos, A., Ferenc, L., Solt, H., Cannilla, C., Frusteri, F. (2021). Inside the reaction mechanism of direct CO₂ conversion to DME over zeolite-based hybrid catalysts. *Applied Catalysis B: Environmental*, 294, 120255. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2021.120255>
- Bradshaw, J.L., Bachu, S., Bonijoly, D., Burruss, R.C., Holloway, S., Christensen, N.P., & Mathiassen, O.M. (2007). CO₂ storage capacity estimation: Issues and development of standards. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1, 62–68. [https://doi.org/10.1016/S1750-5836\(07\)00027-8](https://doi.org/10.1016/S1750-5836(07)00027-8)
- Britannica (2024). Marvin Minsky. <https://www.britannica.com/biography/Marvin-Lee-Minsky> [dostęp: 07.06.2024]
- Bromek, T., Chečko, J., Jureczka, J. (2009). Wstępna ocena możliwości lokalizacji składowisk CO₂ w warstwach solankowych w rejonie GZW. *Mat. konf.: Geologia, hydrogeologia i geofizyka w rozwiązywaniu problemów współczesnego górnictwa i energetyki. Prace Naukowe GIG. Górnictwo i Środowisko*, 4/2009, 55–63.
- Bromhal, G.S., Sams, W.N., Jikich, S., Ertekin, T., Smith, D.H. (2005). Simulation of CO₂ sequestration in coalbeds: The effects of sorption isotherms. *Chemical Geology*, 217, 3–4, 201–211. <https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2004.12.021>
- Brooks, R.H., Corey, A.T. (1964). Hydraulic properties of porous media. *Hydrology Paper*, Vol. 3, Colorado State University, Fort Collins., 27.
- Burchart-Korol, D. (2015). Znaczenie eko-efektywności w zarządzaniu innowacjami na przykładzie czystych technologii węglowych. *Logistyka*, 2/2015, 60–64.
- Burden, F., Winkler, D. (2008). Bayesian Regularization of Neural Networks. In: Livingstone, D.J. (eds) *Artificial Neural Networks. Methods in Molecular Biology*, vol. 458. Humana Press. https://doi.org/10.1007/978-1-60327-101-1_3
- Burnol A., Thinon I., Ruffine L., Herri J-M. Influence of impurities (nitrogen and methane) on the CO₂ storage capacity as sediment-hosted gas hydrates – Application in the area of the Celtic Sea and the Bay of Biscay. *Int J Greenh Gas Control*, 35, 96–109. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2015.01.018>
- Buscheck, T.A., Sun, Y., Chen, M., Hao, Y., Wolery, T.J., Bourcier, W.L., Court, B., Celia, M.A., Friedmann, S.J. and Aines, R.D. (2012). Active CO₂ reservoir management for carbon storage: Analysis of operational strategies to relieve pressure buildup and improve injectivity. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 6, 230–245.

- Buttinelli M., Procesi M., Cantucci B., Quattrocchi F., Boschi E. (2011). The geo-database of caprock quality and deep saline aquifers distribution for geological storage of CO₂ in Italy. *Energy*, 36, 2968–2983. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2011.02.041>
- Burdine, N.T. (1953). Relative permeability calculations from pore size distribution data. *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng.* 1953, 198, 71–78.
- Caers, J.K., Srinivasan, S., Journel, A.G., et al. (1999). Geostatistical quantification of geological information for a fluvial-type North Sea reservoir. In: *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Cantucci, B., Montegrossi, G., Vaselli, O., Tassi, F., Quattrocchi, F., Perkins, E.H. (2009). Geochemical modeling of CO₂ storage in deep reservoirs: The Weyburn Project (Canada) case study. *Chem Geol*, 265, 181–97. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemgeo.2008.12.029>
- Cao, C., Liu, H., Hou, Z., Mehmood, F., Liao, J., & Feng, W. (2020). A Review of CO₂ Storage in View of Safety and Cost-Effectiveness. *Energies*, 13(3), 600. <https://doi.org/10.3390/en13030600>
- Cao, L. (2021). Application of artificial intelligence on the CO₂ capture: a review. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 145, 1751–1768. <https://doi.org/10.1007/s10973-021-10777-4>
- Carter, R.D., Tracy, G.W. (1960). An Improved Method for Calculating Water Influx. *Trans., AIME*, 219. *J. Pet. Technol*, 58–60.
- Ceglarska-Stefańska, G., Nodzeński, A., Hołda, S. (2007). Badania układu węgiel-gaz w aspekcie pozyskiwania metanu i sekwestracji CO₂. *Gospodarka Surowcami Mineralnymi - Mineral Resources Management*, 23, 51-59.
- Chang, Y.B., Coats, B.K., Nolen, J.S. (1996). A Compositional Model for CO₂ Floods Including CO₂ Solubility in Water. In *Proceedings of the Permian Basin Oil and Gas Recovery Conference*, Midland, TX, USA.
- Chauvy, R., De Weireld, G. (2020). CO₂ utilization technologies in Europe: a short review. *Energ Technol*, 8 (12), 2000627. <https://doi.org/10.1002/ente.202000627>
- Chečko, J., Urych, T., Magdziarczyk, M., Smoliński, A. (2020). Research on the Processes of Injecting CO₂ into Coal Seams with CH₄ Recovery Using Horizontal Wells. *Energies*, 13, 416. <https://doi.org/10.3390/en13020416>
- Chehrizi, M., Moghadas, B. K. (2022). A review on CO₂ capture with chilled ammonia and CO₂ utilization in urea plant. *J. CO₂ Util.* 61, 102030. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2022.102030>
- Circone, S., Stern, L. A., Kirby, S. H., Durham, W. B., Chakoumakos, B. C., Rawn, C. J., Rondinone, A. J., Ishii, Y. (2003). CO₂ hydrate: synthesis, composition, structure, dissociation behavior, and a comparison to structure I CH₄ hydrate. *J Phys Chem B*, 107, 5529–39.
- Cliffe, K.A., Giles, M.B., Scheichl, R., Teckentrup, A.L. (2011). Multilevel Monte Carlo methods and applications to elliptic PDEs with random coefficients. *Comput. Vis. Sci.* 14 (1), 3.
- Cordero-Lanzac, T., Ramirez, A., Navajas, A., Gevers, L., Brunialti, S., Gandía, LM, et al. (2021). A techno-economic and life cycle assessment for the production of green methanol from CO₂: catalyst and process bottlenecks. *J. Energy Chem.* <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2021.09.045>
- CO₂RE - GLOBAL CCS FACILITIES DATABASE (2023). Global Carbon Capture and Storage Institute Ltd. <https://co2re.co/FacilityData> [dostęp: 07.06.2024]
- Cremon, M. A., Christie, M. A., Gerritsen, M. A. (2020). Monte Carlo simulation for uncertainty quantification in reservoir simulation: A convergence study, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 190, 107094. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.107094>
- Cuéllar-Franca, R.M., Azapagic, A. (2015). Carbon capture, storage and utilisation technologies: A critical analysis and comparison of their life cycle environmental impacts. *J. CO₂ Util.* 9, 82–102.
- De Falco, M., Natrella, G., Capocelli, M., Popielak, P., Sołtysik, M., Wawrzyńczak, D., et al. (2022). Exergetic analysis of DME synthesis from CO₂ and renewable hydrogen. *Energies* 15, 3516. <https://doi.org/10.3390/en15103516>
- Demuth, H., Beale, M., Hagan, M. (2006), *Neural Network Toolbox For use with MATLAB: User's Guide*, The Mathworks.
- Denney, D. (2010). Pros and cons of applying a proxy model as a substitute for full reservoir simulations. *J Petrol Technol*, 62(07), 41–42.
- De Silva, P.N.K., Ranjith, P.G. (2012). A study of methodologies for CO₂ storage capacity estimation of saline aquifers. *Fuel*, 93, 13–27. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2011.07.004>
- Dibenedetto, A., Angelini, A., Stufano, P. (2014). Use of carbon dioxide as feedstock for chemicals and fuels: homogeneous and heterogeneous catalysis. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 89 (3), 334–353. <https://doi.org/10.1002/jctb.4229>
- Doucet, F.J. (2011). Scoping study on CO₂ mineralization technologies. Contract Report No CGS-2011-007, commissioned by the South African Centre for Carbon Capture and Storage, 88.

- Drzewiecki, D. (2015). Bezpieczeństwo obszarów nadbrzeżnych w południowej części basenu Morza Bałtyckiego w opraciu o najnowszy raport IPCC (AR5). *Przegląd Geopolityczny*, 12, 9–33.
- Du, Y., Snag, S., Pan, Z., Wang, W., Liu, S., Fu, C., Zhao, Y., Zhang, J. (2019). Experimental study of supercritical CO₂-H₂O-coal interactions and the effect on coal permeability. *Fuel* 2019, 253, 369–382. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133888>
- Dutta, P., Zoback, M.D. (2012). CO₂ sequestration into the Wyodak coal seam of Powder River Basin - Preliminary reservoir characterization and simulation. *Int. J. Greenh. Gas Control* 2012, 9, 103–116.
- Dyrektywa CCS (2009). Dyrektywa Parlamentu Europejskiego i Rady 2009/31/WE z dnia 23 kwietnia 2009 roku w sprawie geologicznego składowania dwutlenku węgla oraz zmieniająca dyrektywę Rady 85/337/ EWG, Euratom, dyrektywy Parlamentu Europejskiego i Rady 2000/60/WE, 2001/80/WE, 2004/35/WE, 2006/12/WE, 2008/1/WE i rozporządzenie (WE) nr 1013/2006 (Dz. Urz. UE 2009, L 140/114). Dz. Urz. UE 2009, L 140/136. Parlament Europejski, Rada Unii Europejskiej.
- Durand, B. (2011). Carbon dioxide capture and storage, Captage et stockage du gaz carbonique (CSC). Report Number: INIS-FR-12-0106, France.
- Dziejarski, B., Krzyżyńska, R., Andersson, K. (2023). Current status of carbon capture, utilization, and storage technologies in the global economy: A survey of technical assessment. *Fuel*, 342. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127776>
- Eclipse (2011). Eclipse Reservoir Engineering Software, version 2011.3; Schlumberger: New York, NY, USA.
- Eclipse User Manual (2011). Eclipse Reservoir Simulation Software, Simulation Software Manuals 2011.1, Schlumberger.
- Eglajs V., Audze P. (1977). New approach to the design of multifactor experiments. *Problems of Dynamics and Strengths*, 35, 104–107. Riga, Zinatne Publishing House.
- Esposito, A.; Benson, S. (2011). Remediation of Possible Leakage from Geologic CO₂ Storage Reservoirs into Groundwater Aquifers. *Energy Procedia*, 4, 3216–3223. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2011.02.238>
- Evrenos A.I., Heathman J.K., Ralstin J. (1971). Impermeation of porous media by forming hydrates in situ, *J. Petrol. Technol*, 23(09), 1059-1066. <https://doi.org/10.2118/2881-PA>
- Eurofound (2020). Game-changing technologies: Transforming production and employment in Europe, Publications Office of the European Union, Luxembourg.
- Fang, H., Snag, S., Liu, S. (2019). Establishment of dynamic permeability model of coal reservoir and its numerical simulation during the CO₂-ECBM process. *J. Pet. Sci. Eng.* 2019, 179, 885–898.
- Fauth, D.J., Goldberg, P.M., Knoer, J.P., Soong, Y., O'Connor, W.K., Dahlin, D.C., Chen, Z.Y. (2000). Carbon dioxide storage as mineral carbonates. In Preprints of symposia - American Chemical Society, Division Fuel Chemistry, 45(4), 2000, 708-712. [dostęp: 10.12.2022]: innovationconcepts.eu/res/literatuurGPV/45_4_washingtondc_0800_07081.pdf
- FIW-ARP (2023). Forum Innowacyjnego Węgla - Agencja Rozwoju Przemysłu. <https://fiw.arp.pl/?q=czyste-technologie-weglowe> [dostęp: 14.10.2023]
- Fleury, M., Pironon, J., Le Nindre, Y.M., Bildstein, O., Berne, P., Lagneau, V., et al. (2010). Evaluating sealing efficiency of caprocks for CO₂ storage: An overview of the geocarbone-integrity program and results. *Oil Gas Sci Technol - Rev IFP*, 65, 435-444. <http://dx.doi.org/10.2516/ogst/2010007>
- Floris, F., Bush, M., Cuypers, M., Roggero, F., Syversveen, A.R. (2001). Methods for quantifying the uncertainty of production forecasts: a comparative study. *Pet. Geosci.* 7, 87–96.
- Frerichs, J., Rakoczy, J., Ostertag-Henning, C., Krüger, M. (2014). Viability and adaptation potential of indigenous microorganisms from natural gas field fluids in high pressure incubations with supercritical CO₂. *Environ Sci Technol*, 48, 1306–1314. <http://dx.doi.org/10.1021/es4027985>
- Ganeshan, P., Vigneswaran, V. S., Gowd, S. C., Mishra, R., Singh, E., Kumar, A., Kumar, S., Pugazhendhi, A., Rajendran, K. (2023). Bioenergy with carbon capture, storage and utilization: Potential technologies to mitigate climate change, *Biomass and Bioenergy*, 177, 106941, <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2023.106941>
- Garapati, N., Randolph, J.B., Saar, M.O. (2015). Brine displacement by CO₂, energy extraction rates, and lifespan of a CO₂-limited CO₂-Plume Geothermal (CPG) system with a horizontal production well. *Geothermics*, 55, 182-194. <http://dx.doi.org/10.1016/j.geothermics.2015.02.005>
- Gauteplass J., Almenningen S., Ersland G., Barth T. (2018). Hydrate seal formation during laboratory CO₂ injection in a cold aquifer, *Int. J. Greenhouse Gas Control*, 78, 21–26.
- Gauteplass J., Almenningen S., Ersland G., Barth T., Yang, J., Chapoy, A. (2020). Multiscale investigation of CO₂ hydrate self-sealing potential for carbon geo-sequestration, *Chemical Engineering Journal*, 381, 122646. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122646>
- Geman, S., Geman, D. (1984). Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* (6), 721–741.

- Gilliland, E.S., Ripepi, N., Conrad, M., Miller, M.J., Karmis, M.B. (2013). Selection of monitoring techniques for a carbon storage and enhanced coalbed methane recovery pilot test in the Central Appalachian Basin. *Int J Coal Geol*, 118, 105–112. <http://dx.doi.org/10.1016/j.coal.2013.07.007>
- Gíslason, S.R., Wolff-Boenisch, D., Stefansson, A., Oelkers, E.H., Gunnlaugsson, E., Sigurdardóttir, H., Sigfusson, B., Broecker, W.S., Matter, J.M., Stute, M. (2010). Mineral sequestration of carbon dioxide in basalt: a pre-injection overview of the CarbFix project. *Int. J. Greenhouse Gas Control* 4 (3), 537–545.
- Gíslason, S.R., Sigurdardóttir, H., Aradóttir, E.S., Oelkers, E.H., 2018. A brief history of CarbFix: challenges and victories of the project's pilot phase. *Energy Proc.* 146, 103–114.
- Gíslason, S.R., Oelkers, E.H. (2014). Carbon storage in basalt. *Science*, 344 (6182), 373–374.
- Gíslason, S.R., Broecker, W.S., Gunnlaugsson, E., Snæbjörnsdóttir, S., Mesfin, K.G., Alfredsson, H.A., et al. (2014). Rapid solubility and mineral storage of CO₂ in basalt. *Energy Proc*, 63, 4561–4574. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.489>
- Global CCS Institute (2011). Accelerating the uptake of CCS: Industrial use of captured carbon dioxide. Parsons Brickerhoff, New York, USA.
- Global CCS Institute (2015). Fact sheet: Secure geologic storage of CO₂. <https://www.globalccsinstitute.com/archive/hub/publications/191013/fact-sheet-secure-geologic-storage-co2.pdf> [dostęp: 17.12.2021]
- Global CCS Institute (2022). The Global Status of CCS: 2022. Australia. <https://status22.globalccsinstitute.com>
- Global CCS Institute (2023). The Global Status of CCS: 2023. Australia. <https://status23.globalccsinstitute.com>
- Goldberg, D.S., Takahashi, T., Slagle, A.L. (2008). Carbon dioxide sequestration in deep-sea basalt. *Proc Natl Acad Sci USA*, 105, 9920–9925. <http://dx.doi.org/10.1073/pnas.0804397105>
- Gough, C., Upham, P. (2010). Biomass energy with carbon capture and storage (BECCS): a review. Tyndall Centre for Climate Change Research, Working Paper, 147. <https://doi.org/10.1038/s41558-020-0885-y>
- Gov.pl (2024). Czym jest sztuczna inteligencja? Portal sztucznej inteligencji. <https://www.gov.pl/web/ai/czym-jest-sztuczna-inteligencja2> [dostęp: 10.12.2023]
- Gunter, W.D., Bachu, S., Benson, S. (2004). The role of hydrogeological and geochemical trapping in sedimentary basins for secure geological storage of carbon dioxide. *Geol Soc London, Spec Publ*, 233, 129–145. <http://dx.doi.org/10.1144/GSL.SP.2004.233.01.09>
- Gupta, S., Li, L. (2022). The Potential of Machine Learning for Enhancing CO₂ Sequestration, Storage, Transportation, and Utilization-based Processes: A Brief Perspective. *JOM: the journal of the Minerals, Metals & Materials Society*, 74. <http://dx.doi.org/10.1007/s11837-021-05079-x>
- Han, W.S., Kim, K.Y., Esser, R.P., Park, E., McPherson, B.J. (2011). Sensitivity study of simulation parameters controlling CO₂ trapping mechanisms in saline formations. *Transport in porous media*, 90(3), 807–829.
- Han, W.S., Lee, S.-Y., Lu, C., McPherson, B.J., Esser, R. (2009). Role of correlation structures of permeability field on residual trapping mechanisms and buoyancy-driven CO₂ migration. *Energy Proc*, 1, 3493–3498. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2009.02.141>
- Hanssen, S.V., Daioglou, V., Steinmann, Z.J.N., Doelman, J.C., Van Vuuren, D.P., Huijbregts, M.A.J. (2020). The climate change mitigation potential of bioenergy with carbon capture and storage. *Nat Clim Chang*, 10(11), 1023–1029. <https://doi.org/10.1038/s41558-020-0885-y>
- Harvard (2017). The History of Artificial Intelligence. <https://sitn.hms.harvard.edu/flash/2017/history-artificial-intelligence/> [dostęp: 07.06.2024]
- Hawkes, C.D., Gardner, C. (2013). Pressure transient testing for assessment of wellbore integrity in the IEAGHG Weyburn-Midale CO₂ monitoring and storage project. *Int J Greenh Gas Control*, 16, 50–61. <http://dx.doi.org/10.1016/j.iiggc.2012.12.022>
- Heinemann, N., Wilkinson, M., Pickup, G.E., Haszeldine, R.S., Cutler, N.A. (2012). CO₂ storage in the offshore UK Bunter Sandstone formation. *Int J Greenh Gas Control*, 6, 210–219. <http://dx.doi.org/10.1016/j.iiggc.2011.11.002>
- Hellevang, H., Haile, B.G., Tetteh, A. (2017). Experimental study to better understand factors affecting the CO₂ mineral trapping potential of basalt. *Greenh Gases Sci Technol*, 7, 143–157. <http://dx.doi.org/10.1002/ghg.1619>
- Hepburn, C., Adlen, E., Beddington, J., Carter, E.A., Fuss, S., Dowell, N., Mac, Minx, J.C., Smith, P., Williams, C.K. (2019). The technological and economic prospects for CO₂ utilization and removal. *Nature*, 575, 87–97.

- Hill, C., Bugnion, V., Follows, M., Marshall, J. (2004). Evaluating carbon sequestration efficiency in an ocean circulation model by adjoint sensitivity analysis. *J Geophys Res Ocean*, 109, 11005–11016. <http://dx.doi.org/10.1029/2002JC001598>
- Hill, B., Hovorka, S., Melzer, S. (2013). Geologic carbon storage through enhanced oil recovery. *Energy Procedia*, 37, 6808–6830.
- Hofmann, M., Schellnhuber, H.J. (2010). Ocean acidification: a millennial challenge. *Energy Environ Sci*, 3, 1883–1896. <http://dx.doi.org/10.1039/C000820F>
- Hong, W. Y. (2022). A techno-economic review on carbon capture, utilisation and storage systems for achieving a net-zero CO₂ emissions future, *Carbon Capture Science & Technology*, 3, 100044. <https://doi.org/10.1016/j.ccst.2022.100044>
- Hrynowiecka, A. (2016). Przyczyny i mechanizmy zmian klimatu w plejstocenie – state of art. *Przegląd Geologiczny*, 64, 1, 26–34.
- IBM (2024). The most important AI trends in 2024. <https://www.ibm.com/blog/artificial-intelligence-trends/> [dostęp: 10.12.2023]
- IEA (2018). International Energy Agency. Global Energy and CO₂ Status Report - 2017, IEA, Paris, France.
- IEA (2019). Putting CO₂ to Use, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/putting-co2-to-use> [dostęp: 10.12.2023]
- IEA (2021). Direct Air Capture. IEA. Paris <https://www.iea.org/reports/direct-air-capture> [dostęp: 10.12.2023]
- IEA (2023). CO₂ Emissions in 2022, International Energy Agency, IEA - March 2023, Paris. <https://www.iea.org/reports/co2-emissions-in-2022> [dostęp: 10.12.2023].
- IEAGHG (2008). Carbon Capture and Storage: Meeting the Challenge of Climate Change; IEA Greenhouse Gas R&D Programme: Cheltenham, UK.
- IEAGHG (2011). Effects of impurities on geological storage of CO₂. Cheltenham, UK.
- IEAGHG (2014). CO₂ storage efficiency in deep saline formations: a comparison of volumetric and dynamic storage resource estimation methods, Report: 2014/09. International Energy Agency Greenhouse Gas (IEAGHG), 1–146.
- Iman, R.L., Helton, J.C., Campbell, J.E. (1981). An approach to sensitivity analysis of computer models: Part 1. Introduction, input variable selection and preliminary variable assessment. *Journal of Quality Technology*, 13(3), 174–183.
- Iman, R., Shortencarier, M. (1984). A FORTRAN 77 program and user's guide for the generation of Latin Hypercube and random samples for use with computers models, NUREG/CR-3624, U.S. Nuclear Regulatory Commission; Sandia National Laboratories report SAND83-2365 (RG).
- IPCC (2005). IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Metz, B., O. Davidson, H. C. de Coninck, M. Loos, and L. A. Meyer (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 442.
- IPCC (2021). IPCC AR6 WGI: Podsumowanie dla Decydentów. W: *Zmiana Klimatu 2021: Fizyczne Podstawy Naukowe. Wkład I Grupy Roboczej do Szóstego Raportu Oceny Międzyrządowego Zespołu ds. Zmiany Klimatu*. [V. Masson-Delmotte, P. Zhai, A. Pirani, S. L. Connors, C. Péan, S. Berger, N. Caud, Y. Chen, L. Goldfarb, M. I. Gomis, M. Huang, K. Leitzell, E. Lonnoy, J.B.R. Matthews, T. K. Maycock, T. Waterfield, O. Yelekçi, R. Yu and B. Zhou (red.)]. Cambridge University Press.
- IPCC, 2022: Podsumowanie dla Decydentów. W: *Zmiana klimatu 2022: Zagrożenia, adaptacja i wrażliwość. Wkład II Grupy Roboczej do 6 Raportu Podsumowującego Międzyrządowego Panelu ds. Zmiany Klimatu* [H.-O. Pörtner, D.C. Roberts, M. Tignor, E.S. Poloczanska, K. Mintenbeck, A. Alegría, M. Craig, S. Langsdorf, S. Löschke, V. Möller, A. Okem, B. Rama (red.)]. Cambridge University Press, Cambridge, UK and New York, NY, USA, 3–33.
- IPCC (2023). Summary for Policymakers. In: *Climate Change 2023: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* [Core Writing Team, H. Lee and J. Romero (eds.)]. IPCC, Geneva, Switzerland, 1–34.
- Jaber, A.K., Awang, M. (2016). Field-scale investigation of different miscible CO₂. *J Petrol Explor Prod Technol*, 7 (1), 1–22.
- Jacobson, M.Z. (2009). Review of solutions to global warming, air pollution, and Energy security. *Energy Environ Sci*, 2, 148–173. <http://dx.doi.org/10.1039/B809990C>
- Javaheri M, Jessen K. (2011). Residual trapping in simultaneous injection of CO₂ and brine in saline aquifers. Paper presented at the SPE Western North American Region Meeting, Anchorage, Alaska, USA, May 2011, 603. <http://dx.doi.org/10.2118/144613-MS>

- Jaramillo, P., Griffin, W.M., Matthews, H.S. (2008). Comparative analysis of the production costs and life-cycle GHG emissions of FT liquid fuels from coal and natural gas. *Environ Sci Technol*, 42, 7559–7565. <http://dx.doi.org/10.1021/es8002074>.
- Jarrell, P.M., Fox, C.E., Stein, M.H., Webb, S.L., Johns, R.T., Day, L.A. (2002). *Practical Aspects of CO₂ flooding*. TX, USA: Society of Petroleum Engineers.
- Ji, X., Zhu, C. (2015). CO₂ storage in deep saline aquifers. In: *NOVEL Materials for Carbon Dioxide Mitigation Technology*. Elsevier, 299–332.
- Jiang, X. (2011). A review of physical modelling and numerical simulation of long-term geological storage of CO₂. *Appl. Energy*, 88, 3557–3566.
- Juanes, R., Spiteri, E., Orr, F., Blunt, M.J. (2006). Impact of relative permeability hysteresis on geological CO₂ storage. *Water Resour. Res.*, 42.
- Jureczka, J., Chećko, J., Krieger, W., Kwarciński, J., Urych, T. (2012). Perspektywy geologicznej sekwestracji CO₂ w połączeniu z odzyskiem metanu z pokładów węgla w warunkach Górnośląskiego Zagłębia Węglowego. *Biuletyn Państwowego Instytutu Geologicznego*, 448, 117–132.
- Jureczka, J., Chećko, J., Krieger, W., Warzecha, R. (2012). Formacje i struktury solankowe perspektywiczne dla składowania CO₂ w regionie GZW. *Biul. Państw. Inst. Geol.*, 448, 47–56.
- Kang, S.M., Fathi, E., Ambrose, R.J., Akkutlu, I.Y., Sigal, R.F. (2011). Carbon dioxide storage capacity of organic-rich shales. *SPE J.* 16 (4), 842–855.
- Kearns, D., Liu, H., Consoli, C. (2021). Technology readiness and costs of CCS. Global CCS Institute.
- Kelemen, P., Benson, S.M., Pilorgé, H., Psarras, P., Wilcox, J. (2019). An overview of the status and challenges of CO₂ storage in minerals and geological formations. *Front. Clim.* 1, 9.
- Kemper, J. (2015). Biomass and carbon dioxide capture and storage: A review. *Int J Greenhouse Gas Control*, 40, 401–430. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2015.06.012>
- Khabibullin, T., Falcone, G., Teodoru, C. (2011). Drilling through gas-hydrate sediments: managing wellbore-stability risks. *SPE Drill Complet*, 26, 287–294.
- Khataliwal, S., Tanhua, T., Mikaloff Fletcher, S., Gerber, M., Doney, S. C., Graven, H. D., Gruber, N., McKinley, G. A., Murata, A., Ríos, A. F., Sabine, C. L. (2013). Global ocean storage of anthropogenic carbon, *Biogeosciences*, 10, 2169–2191, <https://doi.org/10.5194/bg-10-2169-2013>
- Kim, Y., Jang, H., Kim, J., Lee, J. (2017). Prediction of storage efficiency on CO₂ sequestration in deep saline aquifers using artificial neural network. *Appl Energy*, 185, 916–928. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.10.012>.
- Koide, H., Takahashi, M., Shindo, Y., Tazaki, Y., Iijima, M., Ito, K., Kimura, N., Omata, K. (1997). Hydrate formation in sediments in the sub-seabed disposal of CO₂. *Energy*, 22 (2) 279–283.
- Kojima, T., Nagamine, A., Ueno, N., Uemiya, S. (1997). Absorption and fixation of carbon dioxide by rock weathering. *Energ Conver Manage*, 38, 461–466. [https://doi.org/10.1016/S0196-8904\(96\)00311-1](https://doi.org/10.1016/S0196-8904(96)00311-1)
- Kolawole, O., Millikan, C., Kumar, M., Ispas, I., Schwartz, B., Weber, J., et al. (2022). Impact of microbial-rock-CO₂ interactions on containment and storage security of supercritical CO₂ in carbonates. *Int J Greenhouse Gas Control*, 120, 103755. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2022.103755>
- Koteras, A., Chećko, J., Urych, T., Magdziarczyk, M., Smoliński A. (2020). An Assessment of the Formations and Structures Suitable for Safe CO₂ Geological Storage in the Upper Silesian Coal Basin in Poland in the Context of the Regulation Relating to the CCS. *Energies*, 13, 195.
- Koytsoumpa, E.I., Bergins, C., Kakaras, E. (2018). The CO₂ economy: review of CO₂ capture and reuse technologies. *J. Supercrit. Fluids*, 132, 3–16. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2017.07.029>
- Krenker, A., Bešter, J., Kos, A. (2011). Introduction to the artificial neural networks. *Artificial Neural Networks: Methodological Advances and Biomedical Applications*. InTech, 1–18.
- Krizhevsky, A., Sutskever, I., & Hinton, G.E. (2012). ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Communications of the ACM*, 60, 84–90.
- Kroese, D.P., Brereton, T., Taimre, T., Botev, Z.I. (2014). Why the Monte Carlo method is so important today. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Stat.* 6 (6), 386–392.
- Krogh, A. (2008). What are artificial neural networks? *Nature biotechnology*, 26(2), 195–197.
- Krooss, B.M., Van Bergen, F., Gensterblum, Y., Siemons, N., Pagnier, H.J.M., David, P. (2002). Highpressure methane and carbon dioxide adsorption on dry and moisture-equilibrated Pennsylvanian coals. *Int J Coal Geol*, 51, 69–92. [http://dx.doi.org/10.1016/S0166-5162\(02\)00078-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0166-5162(02)00078-2)
- Kumar, S., Foroozesh, J., Edlmann, K., Rezk, M.G., Lim, C.Y. (2020). A comprehensive review of value-added CO₂ sequestration in subsurface saline aquifers, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 81, 103437, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jngse.2020.103437>
- Lee, Y., Kim, K., Sung, W., Yoo, I. (2010). Analysis of the leakage possibility of injected CO₂ in a saline aquifer. *Energy Fuels*, 24, 3292–3298. <http://dx.doi.org/10.1021/ef100073m>

- Levenberg, K. (1944). A method for the solution of certain problems in least squares. *The Quarterly of Applied Mathematics*, 2, 164–168.
- Leung, D.Y.C., Caramanna, G., Maroto-Valer, M.M. (2014). A overview of current status of carbon dioxide capture and storage technologies. *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 39, 426–443.
- Le Gallo, Y., Couillens, P., Manai, T. (2002). CO₂ sequestration in depleted oil or gas reservoirs. Paper presented at the SPE International Conference on Health, Safety and Environment in Oil and Gas Exploration and Production, Kuala Lumpur, Malaysia, 1390–92. <http://dx.doi.org/10.2118/74104-MS>
- Li, Z., Dong, M., Li, S., Huang, S. (2006). CO₂ sequestration in depleted oil and gas reservoirs - caprock characterization and storage capacity. *Energy Convers Manage*, 47, 1372–1382. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2005.08.023>
- Li, X., Fang, Z.M. (2014). Current status and technical challenges of CO₂ storage in coal seams and enhanced coalbed methane recovery. *Int. J. Coal Sci. Technol*, 1, 93–102.
- Li, Q., Wei, Y.-N., Liu, G., Lin, Q. (2014). Combination of CO₂ geological storage with deep saline water recovery in western China: Insights from numerical analyses. *Appl Energy*, 116, 101–110. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.11.050>
- Li, Y., Ranjith, P.G., Perera, M.S.A. and Yu, Q. (2017). Residual water formation during the CO₂ storage process in deep saline aquifers and factors influencing it: A review. *Journal of CO₂ Utilization*, 20, 253–262.
- Li, L., Zhao, N., Wei, W., Sun, Y. (2013). A review of research progress on CO₂ capture, storage, and utilization in Chinese Academy of Sciences. *Fuel*, 108, 112–30. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2011.08.022>
- Liu, W., Teng, L., Rohani, S., Qin, Z., Zhao, B., Xu, C.C., et al. (2021). CO₂ mineral carbonation using industrial solid wastes: A review of recent developments. *Chem Eng J*, 416, 129093. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129093>
- Liu, W., Wang, Z., Liu, X., Zeng, N., Liu, Y., Alsaadi, F.E. (2017). A survey of deep neural network architectures and their applications. *Neurocomputing*, 234, 11–26. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2016.12.038>
- Lorentz, J., Bray, B.G., Clark, C.R.J. (1964). Calculating Viscosity of Reservoir Fluids from their Composition. *J. Pet. Technol.*, 1171, 231.
- Luboń, K. (2020). Ocena efektywności geologicznego składowania CO₂ w poziomach wodonośnych jury dolnej Niżu Polskiego, Wyd. Instytutu Gospodarki Surowcami Mineralnymi i Energią PAN, Kraków.
- Lutyński, M., Gonzalez, M. A. (2016). Characteristics of carbon dioxide sorption in coal and gas shale – The effect of particle size. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 28, 558–565. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.12.037>
- Lyons, M., Durrant, P., Kochhar, K. (2021). Reaching Zero with Renewables: Capturing Carbon, International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi.
- Mac Dowell, N., Fennell, P.S., Shah, N., Maitland, G.C. (2017). The role of CO₂ capture and utilization in mitigating climate change. *Nat. Clim. Chang.*, 7, 243–249.
- Manceau, J.C., Hatzignatiou, D., Lary, L., Jensen, N., Réveillère, A. (2014). Mitigation and remediation technologies and practices in case of undesired migration of CO₂ from a geological storage unit - Current status. *Int. J. Greenh. Gas Control.*, 22, 272–290, <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2014.01.007>
- Mao, Y., Yang, X., Gerven, T.V. (2023). Amine-Assisted Simultaneous CO₂ Absorption and Mineral Carbonation: Effect of Different Categories of Amines. *Environ Sci Technol.*, 25, 57(29), 10816–10827. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c01352>
- Masterson, V. (2024). 9 ways AI is helping tackle climate change. *Forum Agenda*, World Economic Forum. <https://www.weforum.org/agenda/2024/02/ai-combat-climate-change/>
- Masuda, Y., Yamanaka, Y., Sasai, Y., Magi, M., Ohsumi, T. (2009). Site selection in CO₂ ocean sequestration: Dependence of CO₂ injection rate on eddy activity distribution. *Int J Greenh Gas Control*, 3, 67–76. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2008.07.002>
- Marquardt, D. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 11, 431–441.
- MathWorks (2018). MATLAB R2018b, version: 9.5. Neural Network Toolbox. <https://nl.mathworks.com/products/matlab.html>
- Matter, J.M., Broecker, W.S., Gislason, S.R., Gunnlaugsson, E., Oelkers, E.H., Stute, M., et al. (2011). The CarbFix Pilot Project - Storing carbon dioxide in basalt. *Energy Proc*, 4, 5579–5585. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2011.02.546>
- Matter, J.M., Kelemen, P.B. (2009). Permanent storage of carbon dioxide in geological reservoirs by mineral carbonation. *Nat Geosci*, 2009, 2, 837–841.
- Matter, J.M., Stute, M., Snæbjörnsdóttir, S.Ó., Oelkers, E.H., Gislason, S.R., Aradóttir, E.S., et al. (2016). Rapid carbon mineralization for permanent disposal of anthropogenic carbon dioxide emissions. *Science*, 80, 352, 1312–1314. <http://dx.doi.org/10.1126/science.aad8132>

- Matter, J.M., Takahashi, T., Goldberg, D. (2007). Experimental evaluation of in situ CO₂-water-rock reactions during CO₂ injection in basaltic rocks: implications for geological CO₂ sequestration. *Geochem. Geophys. Geosyst.* 8 (2).
- Mazzotti, M., Pini, R., Storti, G. (2009). Enhanced coalbed methane recovery. *J. Supercrit. Fluids*, 47, 619–627.
- McGrail, B.P., Schaef, H.T., Ho, A.M., Chien, Y.J., Dooley, J.J., Davidson C.L. (2006). Potential for carbon dioxide sequestration in flood basalts. *J. Geophys. Res. Solid Earth*, 111. <http://dx.doi.org/10.1029/2005JB004169>
- McKay, M.D. (1992). Latin hypercube sampling as a tool in uncertainty analysis of computer models. In: *Proceedings of the 24th Conference on Winter Simulation*, 557–564.
- McKay, M.D., Beckman, R.J., Conover, W.J. (1979). A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. *Technometrics*, 21(2), 239–245. <http://dx.doi.org/10.2307/1268522>
- Metropolis, N., Ulam S. (1949). The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44, 335–341.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 (6), 1087–1092.
- Metz, B., Davidson, O., de Coninck, H.C., Loos, M., Meyer, L.A. (2005). Prepared by Working Group III of the Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) (Eds.). *IPCC Special report on carbon dioxide capture and storage*. IPCC. Cambridge University Press.
- Michałowski, B. (2018). Internet of Things (IoT) i Artificial Intelligence (AI) w Polsce. Jak wykorzystać rewolucję technologiczną Internetu rzeczy i sztucznej inteligencji w rozwoju Polski, Instytut Sobieskiego, Warszawa.
- Miller, B. G. (2017). *Clean coal engineering technology*. Butterworth-Heinemann, Elsevier. <https://doi.org/10.1016/C2009-0-20236-4>
- Mills, N. (2016). Artificial intelligence in law: The state of play. Part 1. [dostęp: 02.20.2019]
- Mito, S., Xue, Z., Sato, T. (2013). Effect of formation water composition on predicting CO₂ behavior: A case study at the Nagaoka post-injection monitoring site. *Appl. Geochem.*, 30, 33–40. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2012.08.020>
- Monteiro, J., Roussanaly, S. (2022). CCUS scenarios for the cement industry: is CO₂ utilization feasible? *J. CO₂ Util.*, 61, 102015. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2022.102015>
- Murtha, J.A., et al. (1997). Monte Carlo simulation: its status and future. *J. Pet. Technol.* 49 (04), 361–373.
- Na, J., Xu, T., Yuan, Y., Feng, B., Tian, H., Bao, X. An integrated study of fluid–rock interaction in a CO₂-based enhanced geothermal system: A case study of Songliao Basin, China. *Appl. Geochem.*, 59, 166–77. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2015.04.018>
- Niemi, A., Bear, J., Bensabat, J. (Eds.) (2017). *Geological Storage of CO₂ in Deep Saline Formations*; Springer: Cham, The Netherlands. <http://dx.doi.org/10.1007/978-94-024-0996-3>
- Nocito, F., Dibenedetto, A. (2020). Atmospheric CO₂ mitigation technologies: carbon capture utilization and storage. *Curr. Opin. Green Sustainable Chem.*, 21, 34–43. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2019.10.002>
- NPC (2019). National Petroleum Council. Chapter 7: CO₂ geological storage. Meeting the dual challenge: Report summary. United States of America, Washington.
- OECD/IEA (1993). *Opracowanie Międzynarodowej Organizacji Energetycznej: Clean Coal technologies. Options for future*.
- Okoye-Chine, C.G., Otun, K., Shiba, N., Rashama, C., Ugwu, S.N., Onyeaka, H., et al. (2022). Conversion of carbon dioxide into fuels - a review. *J. CO₂ Util.*, 62, 102099. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2022.102099>
- Oldenburg, C.M. (2007). Joule-Thomson cooling due to CO₂ injection into natural gas reservoirs. *Energy Convers. Manag.*, 48, 1808–1815.
- ONZ (2024). Zgromadzenie Ogólne przyjęło pierwszą rezolucję ONZ nt. bezpieczeństwa AI. <https://naukawpolsce.pl/aktualnosci/news%2C101254%2Conz-zgromadzenie-ogolne-przyjelo-pierwsza-rezolucje-onz-nt-bezpieczenstwa> [dostęp: 07.06.2024]
- Openstax (2024). *Biology. Neurons and Glial Cells; Biology. Synapse*. Rice University. Licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License. CC BY 4.0 DEED: <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>
- Orlic, B. (2016). Geomechanical effects of CO₂ storage in depleted gas reservoirs in the Netherlands: Inferences from feasibility studies and comparison with aquifer storage. *J. Rock Mech. Geotech. Eng.* 8, 846–859.

- Osman, A.I., Hefny, M., Abdel Maksoud, M.I.A., Elgarahy, A.M., Rooney, D.W. (2021). Recent advances in carbon capture storage and utilisation technologies: a review. *Environ Chem Lett*, 19(2), 797–849. <https://doi.org/10.1007/s10311-020-01133-3>
- Pan, S.Y., Chen, Y.H., Fan, L.S., Kim, H., Gao, X., Ling, T.C., et al. (2020). CO₂ mineralization and utilization by alkaline solid wastes for potential carbon reduction. *Nat Sustainability*, 3(5), 399–405. <https://doi.org/10.1038/s41893-020-0486-9>
- Peters, L., Arts, R., Brouwer, G., Geel, C., Cullick, S., Lorentzen, R.J., Chen, Y., Dunlop, N., Vossepoel, F.C., Xu, R., et al. (2010). Results of the Brugge benchmark study for flooding optimization and history matching. *SPE Reserv. Eval. Eng.*
- Petrel (2010). Petrel Seismic-to-Simulation Software, version 2010.1; Schlumberger: New York, NY, USA.
- Plaksina, T., White, C. (2016). Modeling coupled convection and carbon dioxide injection for improved heat harvesting in geopressed geothermal reservoirs. *Geotherm Energy*, 4, 2. <http://dx.doi.org/10.1186/s40517-016-0044-x>
- Polityka AI (2020). Polityka dla rozwoju sztucznej inteligencji w Polsce od roku 2020. Załącznik do uchwały nr 196 Rady Ministrów z dnia 28 grudnia 2020 r. (poz. 23).
- Pollyea, R.M., Fairley, J.P., Podgorney, R.K., Mcling, T.L. (2014). Physical constraints on geologic CO₂ sequestration in low-volume basalt formations. *Bull Geol Soc Am*, 126, 344–51. <http://dx.doi.org/10.1130/B30874.1>
- Porter, R.T.J., Fairweather, M., Pourkashanian, M., Woolley, R.M. (2015). The range and level of impurities in CO₂ streams from different carbon capture sources. *Int J Greenh Gas Control*, 36, 161–74. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2015.02.016>
- Preston, C., Whittaker, S., Rostron, B., Chalaturnyk, R., White, D., Hawkes, C., et al. (2009). IEA GHG Weyburn-Midale CO₂ monitoring and storage project-moving forward with the Final Phase. *Energy Proc*, 1, 1743–1750. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2009.01.228>
- Priya, A.K., Devarajan, B., Alagumalai, A., Song, H. (2023). Artificial intelligence enabled carbon capture: A review. *Sci Total Environ.*, 15, 886, 163913. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.163913>
- Pruess, K. (2006). Enhanced geothermal systems (EGS) using CO₂ as working fluid - a novel approach for generating renewable energy with simultaneous sequestration of carbon. *Geothermics*, 35, 351–67. <http://dx.doi.org/10.1016/j.geothermics.2006.08.002>
- Pruess, K. On production behavior of enhanced geothermal systems with CO₂ as working fluid. *Energy Convers Manage*, 49, 1446–1454. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2007.12.029>
- Quattrocchi, F., Boschi, E., Spena, A., Buttinelli, M., Cantucci, B., Procesi, M. (2013). Synergic and conflicting issues in planning underground use to produce energy in densely populated countries, as Italy: geological storage of CO₂, natural gas, geothermics and nuclear waste disposal. *Appl Energy*, 101, 393–412. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.04.028>
- Rahimi, M., Moosavi, S. M., Smit, B., Hatton, T. A. (2021). Toward smart carbon capture with machine learning *Cell Reports Physical Science*, 2, 100396. <http://dx.doi.org/10.1016/j.xcrp.2021.100396>
- Reeves, S.R. (2002). Coal-Seq Project Update: Fluid Studies of ECBM recovery/CO₂ sequestration in coal seams. In *Proceedings of the International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT.6)*, Kyoto, Japan, 1–4 October 2002.
- Reeves, S.R., Outinot, A. (2005). The Tiffany unit N2-ECBM Pilot - A reservoir and economic analysis. In *Proceedings of the International Coalbed Methane Symposium*, Tuscaloosa, AL, USA, 16–20 May 2005. Paper 0523.
- Ré, C.L., Kaszuba, J.P., Moore, J.N., McPherson, B.J. (2014). Fluid-rock interactions in CO₂-saturated, granite-hosted geothermal systems: Implications for natural and engineered systems from geochemical experiments and models. *Geochim Cosmochim Acta*, 141, 160–78. <http://dx.doi.org/10.1016/j.gca.2014.06.015>
- Ridha, S.; Pratama, E.; Ismail, S.M. (2017). Performance assessment of CO₂ sequestration in a horizontal well for enhanced coalbed methane recovery in deep unmineable coal seams. *Chem. Eng. Trans.*, 56.
- Rochelle, C.A., Camps, A.P., Long, D., Milodowski, A., Bateman, K., Gunn, D., Jackson, P., Lovell, M.A., Rees, J. (2009). Can CO₂ hydrate assist in the underground storage of carbon dioxide? *Geol Soc Spec Publ.*, 319, 171–83. <http://dx.doi.org/10.1144/SP319.14>
- Romaniuk, M. (2019). *Metody Monte Carlo*, Wyd.: Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej.
- Ross M.B., De Luna, P., Li, Y., Dinh, C.T., Kim, D., Yang, P., et al. (2019). Designing materials for electrochemical carbon dioxide recycling. *Nat Catal*, 2(8), 648–58. <https://doi.org/10.1038/s41929-019-0306-7>
- Rotondi, M., Nicotra, G., Godi, A., Contento, F.M., Blunt, M.J., Christie, M., et al. (2006). Hydrocarbon production forecast and uncertainty quantification: A field application. In: *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.

- Ryerson, F.J., Lake, J., Whittaker, S.D., Johnson, J.W. (2013). Natural CO₂ accumulations in the western Williston Basin: A mineralogical analog for CO₂ injection at the Weyburn site. *Int J Greenh Gas Control*, 16, 25–34. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2012.12.015>
- SAP (2024). Artificial Intelligence Overview. <https://www.sap.com/products/artificial-intelligence/what-is-artificial-intelligence.html> [dostęp: 12.06.2024]
- Sams, W.N., Bromhal, G., Jikich, S.A., Odusote, O., Ertekin, T., Smith, D.H. (2002). Simulation Carbon Dioxide Sequestration/ECBM Production in Coal Seams: Effects of Coal Properties and Operational Parameters; Paper SPE 78691, Society of Petroleum Engineers: Richardson, TX, USA.
- Scheidt, C., Caers, J., et al. (2009). Uncertainty quantification in reservoir performance using distances and kernel methods–application to a West Africa deepwater turbidite reservoir. *SPE J.* 14 (04), 680–692.
- Shi, J.Q., Durcan, S., Sinka, I.C. (2002). Key parameters controlling coalbed methane cavity well performance. *Int. J. Coal Geol.*, 49, 19–31.
- Shukla, R., Ranjith, P., Haque, A., Choi, X. (2010). A review of studies on CO₂ sequestration and caprock integrity. *Fuel*, 89, 2651–64. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2010.05.012>
- Shukla, P.R., Skea, J., Slade, R., van Diemen, R., Haughey, E., Malley, J., Pathak, M., Portugal P. J. (2019). Technical Summary. In: *Climate Change and Land: an IPCC special report on climate change, desertification, land degradation, sustainable land management, food security, and greenhouse gas fluxes in terrestrial ecosystems*. <https://doi.org/10.1017/9781009157988.002>
- SIS (2017). Enhanced Oil Recovery (EOR). Schlumberger Inf Solut Ltd. www.slb.com/services/technical_challenges/enhanced_oil_recovery.aspx [dostęp: 20.04.2017].
- Sloan, E.D. (1998). Gas hydrates: review of physical/chemical properties. *Energy Fuels*, 12 (2), 191–196.
- Sloss, L.L. (2015). Potential for Enhanced Coalbed Methane Recovery, IEA Clean Coal Centre: London, UK.
- Smyth, R.C., Meckel, T.A. (2012). Best management practices for subseabed geologic sequestration of carbon dioxide. *Oceans*, 2012, 1–6. <http://dx.doi.org/10.1109/OCEANS.2012.6404971>
- Snæbjörnsdóttir, S.Ó., Sigfússon, B., Marieni, C. et al. (2020). Carbon dioxide storage through mineral carbonation. *Nat Rev Earth Environ*, 1, 90–102. <https://doi.org/10.1038/s43017-019-0011-8>
- Solomon, S., Carpenter, M., Flach, T.A. (2008). Intermediate storage of carbon dioxide in geological formations: A technical perspective. *Int. J. Greenh. Gas Control*, 2, 502–510.
- Sowiżdżał, A., Machowski, G., Krzyżak, A., Puskarczyk, E., Krakowska-Madejska, P., Chmielowska, A. (2022). Petrophysical evaluation of the Lower Permian formation as a potential reservoir for CO₂-EGS – Case study from NW Poland, *Journal of Cleaner Production*, 379, 2, 134768. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.134768>
- Stanton, R., Froles, R., Warwick, P.D., Gluskoter, H. (2001). Coalbed sequestration of carbon dioxide. In *Proceedings of the 1st National Conference on Carbon Sequestration*, Washington, DC, USA, 14–17 May 2001.
- Stoian, E. (1965). Fundamentals and Applications of the Monte Carlo Method. *J Can Pet Technol*, 4, 120–129. <https://doi.org/10.2118/65-03-02>
- Su, E., Liang, Y., Zou, Q., Niu, F., Li, L. (2019). Analysis of effects of CO₂ injection on coalbed permeability: implications for coal seam CO₂ sequestration. *Energy Fuel*, 33 (7), 6606–6615.
- Sundal, A., Hellevang, H., Miri, R., Dypvik, H., Nystuen, J.P., Aagaard, P. (2014). Variations in mineralization potential for CO₂ related to sedimentary facies and burial depth – a comparative study from the North Sea. *Energy Proc*, 63, 5063–5070. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.536>
- Śliwińska, A., Strugała-Wilczek, A., Krawczyk, P., Leśniak, A., Urych, T., Chečko, J., Stańczyk, K. (2022). Carbon Capture Utilisation and Storage Technology Development in a Region with High CO₂ Emissions and Low Storage Potential - A Case Study of Upper Silesia in Poland. *Energies*, 15, 4495.
- Tadeusiewicz, R. (1993). *Sieci neuronowe*, Akademicka Oficyna Wydawnicza RM, Warszawa.
- Tadeusiewicz, R., Szaleniec, M. (2015). *Leksykon sieci neuronowych*. Wrocław, Fundacja „Projekt Nauka”.
- Thonemann, N., Zacharopoulos, L., Fromme, F., Nühlen, J. (2022). Environmental impacts of carbon capture and utilization by mineral carbonation: A systematic literature review and meta life cycle assessment. *J Clean Prod*, 332, 130067. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.130067>
- Twerda, A., Belfroid, S., Neele, F. (2018). CO₂ injection in low pressure depleted reservoirs. In: *Proceedings of the Fifth CO₂ Geological Storage Workshop*, European Association of Geoscientists and Engineers (EAGE), The Netherlands, Utrecht, 21–23 November 2018.
- Uliasz-Misiak, B. (2008). Pojemność podziemnego składowania CO₂ dla wybranych mezozoicznych poziomów wodonośnych oraz złóż węglowodorów w Polsce. *Studia, Rozprawy, Monografie*, 142. Kraków, Wyd. IGSMiE PAN.
- Urych, T., Chečko, J., Magdziarczyk, M., Smoliński, A. (2022). Numerical Simulations of Carbon Dioxide Storage in Selected Geological Structures in North-Western Poland. *Carbon Capture, Utilization and Storage. Front. Energy Res.*, 10, 827794. <http://dx.doi.org/10.3389/fenrg.2022.827794>

- Urych, T., Smoliński, A. (2019). Numerical Modeling of CO₂ Migration in Saline Aquifers of Selected Areas in the Upper Silesian Coal Basin in Poland. *Energies*, 12, 3093.
- Van Genuchten, M.T. (1980). A Closed Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892–898. <http://dx.doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>
- Van Pham, T.H., Aagaard, P., Hellevang, H. (2012). On the potential for CO₂ mineral storage in continental flood basalts - PHREEQC batch- and 1D diffusion - reaction simulations. *Geochem Trans*, 5. <http://dx.doi.org/10.1186/1467-4866-13-5>
- Veloso, F.M.L., Frykman, P., Nielsen, C.M., Soria, A.R., Meléndez, M.N. (2016). Outcrop scale reservoir characterisation and flow modelling of CO₂ injection in the tsunami and the barrier island - Tidal inlet reservoirs of the Camarillas Fm. (Galve sub-basin, Teruel, NE Spain), *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 55, 60–72. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2016.11.007>
- Vibbert, H.B., Park, A.-H.A. (2022). Harvesting, storing, and converting carbon from the ocean to create a new carbon economy: Challenges and opportunities. *Front. Energy Res.*, 10, 999307. <http://dx.doi.org/10.3389/fenrg.2022.999307>
- Viete, D.R., Ranjith, P.G. (2006). The effect of CO₂ on the geomechanical and permeability behaviour of brown coal: implications for coal seam CO₂ sequestration. *Int. J. Coal Geol.* 66 (3), 204–216.
- Vilarrasa, V., Silva, O., Carrera, J., Olivella, S. (2013). Liquid CO₂ injection for geological storage in deep saline aquifers, *Int. J. Greenhouse Gas Control* 14, Supplement C, 84–96.
- Voormeij, B.D., Simandl, G.J. (2004). Geological and mineral CO₂ sequestration options: A technical review. *Geosci Canada*, 31, 11–22.
- Wang, Z., Wang, J., Lan, C., He, L., Ko, V., Ryan, D., et al. (2016). A study on the impact of SO₂ on CO₂ injectivity for CO₂ storage in a Canadian saline aquifer. *Appl Energy*, 184, 329–36. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.09.067>
- Wasch, L.J., Wollenweber, J., Neele, F., Fleury, M. (2017). Mitigating CO₂ Leakage by Immobilizing CO₂ into Solid Reaction Products. *Energy Procedia*, 114, 4214–4226. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.1562>
- Waszczuk-Zellner, P., Lutyński, M., Koterak, A. (2022). Factors Influencing Potential CO₂ Storage Capacity in Shales, *Arch. Min. Sci.* 67, 1, 143–157. <https://doi.org/10.24425/ams.2022.140707>
- WCI (2000). *Word Coal Institute: Coal – Power for Progress – 4th edition*. Word Coal Institute.
- Wdowin, M., Tarkowski, R., Manecki, M. (2013). Petrographic-mineralogical and textural changes in reservoir and sealing rocks (Zaosie anticline) as a result of a long-term experiment in CO₂-brine-rock interactions. *Gospod Surowcami Miner – Miner Resour Manage.*, 29, 137. <http://dx.doi.org/10.2478/gospo-2013-0044>
- WEF & Frontiers (2023). *Top 10 Emerging Technologies of 2023. Flagship report*, June 2023. World Economic Forum in collaboration with Frontiers Media. [dostęp: 12.06.2024]: https://www3.weforum.org/docs/WEF_Top_10_Emerging_Technologies_of_2023.pdf
- Wetzel, M., Otto, C., Chen, M., Masum, S., Thomas, H., Urych, T., Bezak, B., Kempka, T. (2023). Hydromechanical Impacts of CO₂ Storage in Coal Seams of the Upper Silesian Coal Basin (Poland). *Energies*, 16, 3279. <https://doi.org/10.3390/en16073279>
- Wilberforce, T., Olabi, A.G., Sayed, E.T., Elsaid, K., Abdelkareem, M.A. (2021). Progress in carbon capture technologies. *Sci Total Environ*, 761, 143203. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.143203>
- Woodall, C.M., McQueen, N., Pilorge, H., Wilcox, J. (2019). Utilization of mineral carbonation products: current state and potential. *Greenhouse Gases Sci Technol*, 9(6), 1096–113. <https://doi.org/10.1002/ghg.1940>
- Wildgust, N., Gilboy, C., Tontiwachwuthikul, P. (2013). Introduction to a decade of research by the IEAGHG Weyburn-Midale CO₂ monitoring and storage project. *Int J Greenh Gas Control*, 16, 1–4. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2013.03.014>
- Wilson, G., Travaly, Y., Brun, T., Knipples, H., Armstrong, K., Styring, P. A. (2016). Vision for Smart CO₂ Transformation in Europe: Using CO₂ as a resource.
- Wojnicki, M., Kuśnierczyk, J., Szuflita, S., Warnecki, M. (2022). *Nafta-Gaz*, 6, 435–450. <http://dx.doi.org/10.18668/NG.2022.06.04>
- Wong, S., Gunter, W.D., Mavor, M.J. (2000). Economics of CO₂ sequestration in coalbed methane reservoirs. In *Proceedings of the SPE/CERI Gas Technology Symposium*, Calgary, AB, Canada, 3–5 April 2000, 631–638.
- Wójcicki, A. (2012). Postępy realizacji Krajowego Programu, Rozpoznanie formacji i struktur do bezpiecznego geologicznego składowania CO₂ wraz z ich programem monitorowania. *Biul. PiG*, 442, 9–16.

- Xu, Y., Ishizaka, J., Aoki, S. (1999). Simulations of the distribution of sequestered CO₂ in the North Pacific using a regional general circulation model. *Energy Convers Manage*, 40, 683–691. [http://dx.doi.org/10.1016/S0196-8904\(98\)00138-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0196-8904(98)00138-1)
- Yan, Y., Borhani, T.N., Subraveti, G., Pai, N., Prasad, V., Rajendran, A., Nkulikiyinka, P., Asibor, J.O., Zhang, Z., Shao, D., Wang, L., Zhang, W., Yan, Y., Ampomah, W., You, J., Wang, M., Anthony, E.J., Manović, V., & Clough, P.T. (2021). Harnessing the power of machine learning for carbon capture, utilisation, and storage (CCUS) – A state-of-the-art review. *Energy & Environmental Science*, 14, 6122–6157. <https://doi.org/10.1039/D1EE02395K>
- Yang, F., Pang, Z., Lin, L., Jia, Z., Zhang, F., Duan, Z., et al. (2012). Hydrogeochemical and isotopic evidence for trans-formational flow in a sedimentary basin: Implications for CO₂ storage. *Appl Geochem*, 30, 4–15. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apgeochem.2012.08.024>
- Yang, H., Xu, Z., Fan, M., Gupta, R., Slimane, R.B., Bland, A.E., et al. (2008). Progress in carbon dioxide separation and capture: A review. *J Environ Sci*, 20, 14–27. [http://dx.doi.org/10.1016/S1001-0742\(08\)60002-9](http://dx.doi.org/10.1016/S1001-0742(08)60002-9)
- Yang, Z., Xu, T., Wang, F., Diao, Y., Li, X., Ma, X., Tian, H. (2019). A Study on the CO₂-Enhanced Water Recovery Efficiency and Reservoir Pressure Control Strategies. *Geofluids*, 1–17. <http://dx.doi.org/10.1155/2019/6053756>
- Yao, P., Yu, Z. & Zhang, Y., Xu, T., 2023. Application of machine learning in carbon capture and storage: An in-depth insight from the perspective of geoscience. *Fuel*, 333, 126296. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126296>
- Zangeneh, H., Jamshidi, S., Soltanieh, M. (2013). Coupled optimization of enhanced gas recovery and carbon dioxide sequestration in natural gas reservoirs: case study in a real gas field in the south of Iran. *Int J Greenh Gas Control*, 17, 515–22. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2013.06.007>
- Zhang, L., Ezekiel, J., Li, D., Pei, J., Ren, S. (2014). Potential assessment of CO₂ injection for heat mining and geological storage in geothermal reservoirs of China. *Appl Energy*, 122, 237–246. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.02.027>
- Zhang, D., Song, J. (2014). Mechanisms for Geological Carbon Sequestration, *Procedia IUTAM*, 10, 319–327. <https://doi.org/10.1016/j.piutam.2014.01.027>
- Zhaurova, M., Soukka, R., Horttanainen, M. (2021). Multi-criteria evaluation of CO₂ utilization options for cement plants using the example of Finland. *Int J Greenhouse Gas Control*, 112, 103481. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2021.103481>
- Zubarev, D. I. (2009). Pros and cons of applying proxy-models as a substitute for full reservoir simulations. Paper presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition.

Załączniki

Załącznik 1: Podstawowy pakiet danych (ciąg uczący)

Zakresy zmienności analizowanych parametrów złożowych modelu (porowatość, przepuszczalność, wskaźnik określający stosunek miąższości efektywnej do całkowitej złoża, czyli proporcje skał zbiornikowych do uszczelniających w złożu - NTG, głębokość oraz rezydualne nasycenie złoża gazem) wykorzystanych w kompleksowej analizie wrażliwości, a także przyjęte wartości parametrów modelu bazowego, czyli najbardziej prawdopodobne wartości parametrów złożowych zestawilem w tab. Z1.1.

Tab. Z1.1. Wartości parametrów modelu bazowego oraz zakres zmienności kluczowych parametrów modelu

Parametr	Jednostka	Wartość w modelu bazowym	Zakres zmienności - kompleksowa analiza wrażliwości
Porowatość, ϕ	%	10,3	9,27 – 11,33
Przepuszczalność, k_h	mD	39,3	35,37 – 43,23
Stosunek miąższości efektywnej do całkowitej, NTG	%	82,4	74,16 – 90,64
Głębokość stropu warstwy zbiornikowej, d	m n.p.m.	-700	-630 – (-770)
Rezydualne nasycenie gazem, S_g	%	35	28,5 – 41,5

W tab. Z1.2 przedstawiłem wartości parametrów modelu oraz pakiet danych uczących zawierający wyniki symulacji zatłaczania CO₂ (sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂) dla wszystkich 150 wariantów modelu.

Podstawowy pakiet danych stanowiący ciąg uczący wykorzystany do opracowania modelu opartego na sztucznej sieci neuronowej (SSN) składa się ze 150 zestawów danych zawierających zróżnicowane wartości 5 parametrów modelu złożowego. Na podstawie przeprowadzonych symulacji numerycznych, dla każdego zestawu danych wygenerowałem profile zatłaczania CO₂ opisane 25 wartościami definiującymi sumaryczną wielkość zatłaczania ditlenku węgla do górotworu w poszczególnych latach trwania symulacji.

W tab. Z1.2 zestawilem parametry numerycznego modelu złoża, wyniki symulacji w modelu numerycznym (SIM), wyniki uzyskane w modelu zastępczym (SSN) oraz wartości błędów względnych w poszczególnych symulacjach z podstawowego pakietu danych uczących.

Tab. Z1.2. Zestawienie parametrów i błędów poszczególnych punktów podstawowego pakietu danych uczących

Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		[Błąd względny, %]		
	Głębokość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszczalność k _h , mD	Porowatość Ø, %	Nasylenie gazem, S _g	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (całk. ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
1	-739,76	0,675686	39,50349	0,150055	0,64067	3718993000	3720659621	0,04	0,06	0,41
2	-664,77	0,653333	44,82894	0,172464	0,674246	3719805000	3719320403	0,01	0,09	0,32
3	-587,14	0,966041	32,44039	0,122131	0,615105	3745203000	3743750239	0,04	0,05	0,17
4	-838,03	0,827472	38,0881	0,130442	0,628028	4055947000	4051171470	0,12	0,14	0,83
5	-685,90	0,647848	38,53688	0,116935	0,664614	3558700000	3549939126	0,25	0,41	2,89
6	-834,14	0,76453	44,26649	0,154082	0,694751	4062186000	4068959177	0,17	0,18	0,37
7	-710,09	0,684262	38,31092	0,138242	0,675821	3609402000	3610363177	0,03	0,08	0,73
8	-756,79	0,825634	36,58403	0,119257	0,70098	3786519000	3795201111	0,23	0,24	0,38
9	-754,82	0,82241	37,60685	0,133029	0,679188	3851808000	3859252257	0,19	0,07	0,20
10	-683,60	0,823338	38,97988	0,171034	0,639355	3898697000	3894974284	0,10	0,13	0,29
11	-624,85	0,726299	42,7517	0,152319	0,648252	3775807000	3774881926	0,02	0,06	0,20
12	-618,21	0,803617	36,93027	0,183832	0,630968	3716440000	3725109874	0,23	0,27	0,48
13	-717,40	0,781481	32,70618	0,129274	0,619425	3641709000	3641706756	0,00	0,04	0,27
14	-700,66	0,875086	37,90895	0,160966	0,659232	3922678000	3922820499	0,00	0,06	0,39
15	-675,24	0,892688	34,29618	0,125925	0,605264	3844038000	3841145829	0,08	0,05	0,11
16	-611,54	0,793146	37,28359	0,143089	0,632851	3703946000	3703859526	0,00	0,03	0,15
17	-708,46	0,787382	38,80446	0,168905	0,676997	3805345000	3805048224	0,01	0,07	0,38
18	-560,56	0,773241	36,50414	0,158946	0,629991	3587208000	3591589649	0,12	0,07	0,16
19	-714,94	0,767627	41,95132	0,134121	0,650622	3916465000	3916129938	0,01	0,05	0,22
20	-635,01	0,846327	42,86284	0,125054	0,626073	4002024000	3997553599	0,11	0,12	0,50
21	-597,90	0,890874	44,20481	0,144019	0,617444	4074543000	4074484067	0,00	0,09	0,34
22	-721,18	0,83091	41,12383	0,154863	0,667833	3978217000	3978093728	0,00	0,06	0,16
23	-698,83	0,861874	37,1602	0,181462	0,65946	3886468000	3881397276	0,13	0,13	0,44
24	-741,92	0,8869	35,51185	0,176418	0,682584	3882348000	3872731808	0,25	0,11	0,36
25	-692,89	0,845121	40,53725	0,13652	0,626599	3996990000	3997686357	0,02	0,06	0,31
26	-731,83	0,954535	37,77306	0,174943	0,623231	4121136000	4123054378	0,05	0,21	1,63
27	-656,14	0,843195	39,38452	0,131311	0,613719	3932607000	3928785780	0,10	0,08	0,26
28	-735,85	0,837311	39,74433	0,141097	0,651829	3974771000	3976647461	0,05	0,06	0,31
29	-781,79	0,753899	42,4908	0,163365	0,653369	3994974000	3996152593	0,03	0,03	0,29
30	-608,57	0,805378	35,25999	0,146581	0,648063	3621618000	3622275009	0,02	0,07	0,22
31	-809,68	0,691959	39,62528	0,148511	0,668336	3790679000	3793829064	0,08	0,07	0,20
32	-691,54	0,729426	34,92096	0,156197	0,707038	3495307000	3496443538	0,03	0,13	0,96
33	-604,38	0,922666	42,1515	0,156499	0,654613	4015033000	4016365796	0,03	0,07	0,85
34	-806,46	0,794349	42,28028	0,175848	0,670014	4071412000	4069836402	0,04	0,08	0,25
35	-703,03	0,816861	38,00452	0,147086	0,643955	3858730000	3858159438	0,01	0,07	0,27
36	-646,85	0,900101	40,90481	0,162383	0,639763	4020154000	4025517256	0,13	0,10	0,70
37	-784,44	0,812307	43,25583	0,165296	0,59651	4200058000	4204715925	0,11	0,05	0,12
38	-751,35	0,842546	34,12702	0,151743	0,642386	3803711000	3805670083	0,05	0,03	0,12
39	-680,43	0,810335	45,94834	0,135738	0,600898	4139235000	4134530467	0,11	0,06	0,32
40	-787,35	0,924614	47,09061	0,128722	0,6472	4386973000	4385953493	0,02	0,16	1,77
41	-815,98	0,774872	31,30468	0,165936	0,602638	3692632000	3694424090	0,05	0,06	0,20
42	-733,70	0,709918	43,50286	0,168016	0,673824	3859154000	3863434803	0,11	0,06	0,13
43	-697,52	0,850918	41,42179	0,179485	0,687622	3977324000	3973963757	0,08	0,09	0,18
44	-676,25	0,850069	33,78466	0,146634	0,649274	3702098000	3706673218	0,12	0,05	0,13
45	-726,33	0,619606	33,56234	0,15117	0,630048	3384454000	3384599405	0,00	0,08	0,20
46	-748,14	0,739929	41,0143	0,144891	0,634163	3904236000	3905897048	0,04	0,05	0,10
47	-701,40	0,801593	45,1684	0,161213	0,637856	4078263000	4083078753	0,12	0,06	0,22
48	-674,83	0,869541	35,35874	0,137376	0,656745	3777084000	3782655838	0,15	0,10	0,30
49	-574,63	0,900549	33,91908	0,11552	0,634881	3680184000	3677852605	0,06	0,04	0,11
50	-772,56	0,765318	38,35502	0,147843	0,614978	3910282000	3909964759	0,01	0,04	0,17
51	-712,90	0,74608	38,21798	0,139133	0,689818	3693405000	3696634473	0,09	0,06	0,15
52	-850,05	0,936251	39,29063	0,155481	0,686568	4200617000	4203796676	0,08	0,03	0,14
53	-572,41	0,791396	44,85786	0,154765	0,618488	3918735000	3924269620	0,14	0,08	0,53
54	-762,72	0,833504	48,05205	0,13722	0,633163	4281962000	4281316174	0,02	0,09	0,94
55	-653,53	0,768583	37,08704	0,171771	0,673138	3655050000	3652437760	0,07	0,08	0,77
56	-660,48	0,871431	37,941	0,151392	0,667227	3855251000	3854252093	0,03	0,04	0,10
57	-679,81	0,806536	46,14498	0,161797	0,661023	4059856000	4056847951	0,07	0,05	0,10
58	-614,26	0,907248	41,75953	0,124165	0,655977	3975084000	3974106903	0,02	0,14	0,94
59	-652,34	0,961558	35,6109	0,144209	0,636101	3924461000	3918112073	0,16	0,06	0,42
60	-766,53	0,898217	37,72309	0,14325	0,709513	3945196000	3949936739	0,12	0,13	0,50
61	-582,28	0,93099	34,45367	0,164429	0,658625	3736764000	3730655883	0,16	0,19	0,77
62	-793,70	0,854674	46,31318	0,127	0,677776	4227976000	4228190279	0,01	0,13	1,46
63	-635,92	0,748092	43,6381	0,130133	0,647586	3849716000	3847972574	0,05	0,06	0,41
64	-669,38	0,750181	39,85229	0,166954	0,64575	3778539000	3778142647	0,01	0,07	0,29
65	-828,95	0,848271	49,13483	0,131922	0,634537	4410414000	4406960977	0,08	0,17	1,65

Ciąg dalszy Tab. Z1.2:

Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		[Błąd względny, %]		
	Głębo-kość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszczalność k _h , mD	Porowa-tość Ø, %	Nasylenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (całk. ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
66	-568,33	0,829066	39,22318	0,146231	0,68527	3699957000	3701759543	0,05	0,09	0,23
67	-655,05	0,665723	45,72266	0,127997	0,632348	3826752000	3819961930	0,18	0,35	2,18
68	-711,22	0,904143	42,94894	0,158128	0,636613	4178634000	4180706627	0,05	0,06	0,34
69	-685,01	0,744284	31,68669	0,120703	0,671497	3436294000	3434496934	0,05	0,10	0,98
70	-789,31	0,818617	38,56708	0,136876	0,683738	3917418000	3923491058	0,15	0,09	0,18
71	-704,31	0,830191	46,50636	0,163662	0,678264	4109891000	4109878631	0,00	0,06	0,27
72	-644,76	0,855192	39,91371	0,140795	0,607857	3959880000	3962043564	0,05	0,06	0,17
73	-601,04	0,86053	37,44582	0,177557	0,662782	3767568000	3767384952	0,00	0,10	0,39
74	-644,48	0,873998	33,3766	0,141567	0,65409	3679695000	3680979771	0,03	0,04	0,11
75	-727,62	0,708581	39,07323	0,132444	0,623418	3780466000	3775651031	0,13	0,14	1,04
76	-733,06	0,789245	40,7648	0,133446	0,621328	3979207000	3976063063	0,08	0,04	0,16
77	-628,50	0,929306	46,93927	0,135871	0,681093	4136326000	4137245854	0,02	0,09	0,89
78	-707,77	0,835499	42,65695	0,180353	0,652476	4057551000	4055804404	0,04	0,12	0,62
79	-776,25	0,76184	36,31142	0,154393	0,592023	3863994000	3859218507	0,12	0,12	0,43
80	-597,72	0,85191	40,43294	0,152525	0,60952	3916799000	3920147217	0,09	0,15	0,51
81	-657,92	0,813103	40,21744	0,145039	0,604705	3929505000	3933106914	0,09	0,07	0,23
82	-687,93	0,795882	36,77726	0,159983	0,648733	3757005000	3757493981	0,01	0,04	0,18
83	-682,51	0,705295	34,66175	0,149141	0,697804	3445360000	3447121780	0,05	0,12	0,43
84	-607,25	0,858633	45,35852	0,151012	0,620642	4072355000	4074866068	0,06	0,09	0,27
85	-713,63	0,681084	37,33293	0,150721	0,646289	3611507000	3612847333	0,04	0,03	0,28
86	-797,91	0,856412	36,14761	0,157161	0,666646	3932940000	3931979006	0,02	0,05	0,15
87	-667,28	0,836209	39,99108	0,155148	0,658007	3932940000	3896940385	0,92	0,75	2,57
88	-694,38	0,669576	30,63726	0,153874	0,66174	3270767000	3273537166	0,08	0,19	1,07
89	-631,01	0,865592	43,68145	0,139975	0,61084	4072227000	4074027702	0,04	0,09	0,38
90	-543,76	0,821268	43,01546	0,142416	0,663169	3808939000	3808715848	0,01	0,05	0,17
91	-705,03	0,895316	40,01618	0,159654	0,660382	4033400000	4030061334	0,08	0,05	0,45
92	-728,41	0,838649	40,72698	0,159147	0,688403	3959759000	3957489424	0,06	0,05	0,17
93	-738,40	0,807766	44,49779	0,144323	0,622254	4130027000	4132349462	0,06	0,05	0,24
94	-677,88	0,760676	38,45483	0,173825	0,674989	3718405000	3715286684	0,08	0,10	0,74
95	-672,56	0,687354	40,377	0,149849	0,638405	3701467000	3699663837	0,05	0,05	0,39
96	-548,63	0,757203	36,02215	0,170278	0,607275	3557918000	3565298107	0,21	0,19	0,45
97	-616,74	0,881964	40,28977	0,134924	0,672448	3882924000	3879907981	0,08	0,16	0,67
98	-762,00	0,841213	42,02811	0,147329	0,702921	4014415000	4017292492	0,07	0,09	0,47
99	-759,28	0,974777	47,359	0,1655	0,62511	4492906000	4493761479	0,02	0,11	1,11
100	-858,44	0,759147	40,07395	0,150254	0,631427	4036518000	4037959576	0,04	0,06	0,51
101	-724,36	0,868789	32,91383	0,145325	0,649601	3748027000	3753625611	0,15	0,04	0,15
102	-721,02	0,698778	41,23906	0,139349	0,669884	3759296000	3757382412	0,05	0,08	0,52
103	-824,68	0,775407	39,6955	0,160267	0,611811	4043419000	4042939022	0,01	0,07	0,22
104	-730,03	0,784767	40,68869	0,141344	0,599152	3994620000	3997345492	0,07	0,03	0,08
105	-819,93	0,770183	38,88984	0,141971	0,646505	3945229000	3946997585	0,04	0,05	0,38
106	-691,85	0,736164	43,43125	0,149729	0,635827	3911050000	3909978960	0,03	0,03	0,10
107	-623,25	0,658726	36,70406	0,148791	0,61599	3495532000	3492470875	0,09	0,09	0,69
108	-669,07	0,82428	44,43071	0,169796	0,696368	3975080000	3971180257	0,10	0,07	0,16
109	-665,32	0,714562	43,08532	0,164855	0,663981	3791734000	3791066263	0,02	0,05	0,14
110	-706,09	0,799551	41,73786	0,149258	0,692104	3885587000	3891800826	0,16	0,06	0,18
111	-633,14	0,820103	40,61032	0,135323	0,693737	3786916000	3793318221	0,17	0,09	0,33
112	-698,24	0,732561	41,46438	0,173673	0,644322	3841098000	3840704376	0,01	0,06	0,23
113	-749,30	0,917994	41,6585	0,15844	0,612991	4238095000	4239412875	0,03	0,11	0,70
114	-770,25	0,943905	42,22131	0,161978	0,592824	4347825000	4348358299	0,01	0,14	1,23
115	-795,59	0,814179	39,33139	0,162852	0,671041	3977803000	3979334439	0,04	0,07	0,16
116	-621,76	0,797624	43,91585	0,126451	0,669159	3878508000	3880214696	0,04	0,03	0,30
117	-799,68	0,888414	33,25963	0,1381	0,650002	3882302000	3880730813	0,04	0,04	0,11
118	-689,53	0,723247	41,20531	0,123609	0,645418	3803544000	3797970929	0,15	0,17	1,06
119	-785,09	0,778261	39,12716	0,145786	0,68199	3873219000	3878674020	0,14	0,08	0,15
120	-716,28	0,876447	42,54405	0,142596	0,65301	4098944000	4099843089	0,02	0,09	0,52
121	-594,16	0,950242	46,65278	0,160465	0,656951	4165800000	4170596704	0,12	0,12	0,95
122	-802,64	0,701899	34,77189	0,166293	0,654022	3635184000	3634793319	0,01	0,12	1,12
123	-639,63	0,720365	40,15794	0,153473	0,619281	3740439000	3740479368	0,00	0,04	0,25
124	-642,50	0,782029	48,46887	0,128668	0,640304	4055225000	4051415084	0,09	0,13	0,61
125	-719,00	0,866103	39,57509	0,168614	0,690907	3958380000	3950332984	0,20	0,07	0,20
126	-774,14	0,909482	34,54144	0,167272	0,662282	3926960000	3927275106	0,01	0,14	0,57
127	-745,53	0,752663	35,85591	0,164163	0,676612	3677840000	3676290881	0,04	0,12	0,86
128	-778,74	0,716181	32,26238	0,139805	0,637436	3554576000	3552907255	0,05	0,05	0,37
129	-686,97	0,910842	43,85309	0,145538	0,642666	4168172000	4168029602	0,00	0,07	0,33
130	-747,08	0,731076	41,53556	0,177925	0,657736	3881903000	3879853842	0,05	0,07	0,38
131	-670,97	0,935557	45,05015	0,131523	0,638768	4212304000	4209700653	0,06	0,09	0,71
132	-555,67	0,832264	38,74539	0,147631	0,664972	3699750000	3704544923	0,13	0,07	0,15

Ciąg dalszy Tab. Z1.2:

Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		Błąd względny, %		
	Głębo-kość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Prze-puszczalność k _h , mD	Porowa-tość Ø, %	Nasylenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (całk. ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
133	-661,38	0,720791	36,40242	0,172901	0,651087	3583287000	3582370888	0,03	0,14	1,19
134	-591,88	0,985502	41,9102	0,156691	0,660216	4068712000	4066531509	0,05	0,08	0,97
135	-695,92	0,915895	47,98039	0,140359	0,628544	4317570000	4320305911	0,06	0,09	0,32
136	-758,34	0,912835	37,53856	0,13416	0,624234	4076046000	4066919324	0,22	0,16	0,50
137	-648,80	0,800517	47,663	0,138762	0,666115	4031285000	4030095259	0,03	0,07	0,24
138	-737,48	0,778613	40,94794	0,157464	0,66578	3910711000	3912624878	0,05	0,04	0,27
139	-841,16	0,783585	38,69961	0,122219	0,643305	3990479000	3985446049	0,13	0,06	0,37
140	-663,23	0,808276	45,58685	0,148168	0,641637	4041859000	4044471368	0,06	0,05	0,34
141	-638,78	0,879874	45,5068	0,152834	0,627349	4141900000	4140385069	0,04	0,07	0,39
142	-580,94	0,790028	44,09878	0,151805	0,655639	3853948000	3853056673	0,02	0,07	0,35
143	-627,97	0,738388	35,15967	0,157708	0,651493	3531074000	3526813544	0,12	0,14	0,53
144	-814,28	0,941961	44,58909	0,158624	0,684332	4351600000	4347134936	0,10	0,04	0,10
145	-723,26	0,881881	43,28494	0,153059	0,680428	4106798000	4105286958	0,04	0,04	0,09
146	-650,46	0,743074	41,30662	0,169167	0,641852	3796100000	3799554205	0,09	0,07	0,25
147	-743,73	0,815828	36,87815	0,153392	0,655271	3851597000	3847915882	0,10	0,10	0,33
148	-753,03	0,694559	35,68676	0,155883	0,644759	3615935000	3617942692	0,06	0,06	0,31
149	-765,25	0,885562	35,92391	0,14833	0,699525	3877911000	3879672485	0,05	0,06	0,29
150	-769,40	0,863556	42,34751	0,14346	0,629193	4176236000	4176567189	0,01	0,06	0,35
							Max:	0,92	0,75	2,89
							Średnia:	0,08	0,09	0,47

Załącznik 2: Dodatkowy pakiet danych testujących

W celu dodatkowej weryfikacji wiarygodności SSN, oprócz podstawowego ciągu uczącego przygotowałem także dodatkowy pakiet danych testujących (*blind testing samples*) nie biorących udziału w trakcie uczenia, walidacji ani testowaniu sieci. W tab. Z2.1 przedstawiłem pakiet danych testujących zawierający wyniki symulacji zatłaczania CO₂ (sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂) dla wszystkich 100 wariantów modelu.

Tab. Z2.1. Zestawienie parametrów i błędów poszczególnych punktów dodatkowego pakietu danych testujących

Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		[Błąd względny, %]		
	Głębokość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Przepuszczalność k _h , mD	Porowatość Ø, %	Nasycenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (całk. ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
1	-638,47	0,81546	39,78917	0,14401	0,592202	3915615000	3916757023	0,03	0,36	0,06
2	-724,67	0,735881	32,66478	0,173632	0,632858	3552933000	3548050897	0,14	1,84	0,18
3	-761,37	0,865547	34,01045	0,171226	0,641999	3851429000	3851834863	0,01	0,51	0,11
4	-698,06	0,832999	39,95233	0,152477	0,644213	3948317000	3947359448	0,02	0,26	0,07
5	-692,22	0,78855	35,40021	0,172029	0,632516	3718093000	3719876032	0,05	0,56	0,09
6	-642,95	0,730445	44,88291	0,160105	0,637045	3885115000	3886965185	0,05	0,38	0,05
7	-782,54	0,820597	42,54811	0,159092	0,623699	4149262000	4150928937	0,04	0,12	0,06
8	-863,78	0,997423	41,2356	0,164892	0,639899	4447640000	4439069963	0,19	1,30	0,43
9	-700,46	0,946245	41,74723	0,147059	0,635465	4177616000	4179242784	0,04	0,30	0,08
10	-647,76	0,780766	40,36612	0,166565	0,663499	3797859000	3795197747	0,07	0,14	0,05
11	-601,73	0,877506	46,22267	0,152959	0,686589	4013273000	4018463498	0,13	0,23	0,05
12	-707,42	0,812024	42,79763	0,138831	0,674686	3965865000	3967514477	0,04	0,40	0,06
13	-675,95	0,67326	42,07995	0,149127	0,63174	3746790000	3745176828	0,04	0,84	0,11
14	-684,59	0,966701	33,37252	0,159549	0,697889	3804244000	3802229871	0,05	0,62	0,15
15	-720,02	0,8185	36,75905	0,150813	0,630356	3852397000	3853824086	0,04	0,21	0,06
16	-610,91	0,742052	41,14744	0,137191	0,661899	3712914000	3713185626	0,01	0,29	0,05
17	-672,35	0,882016	37,75304	0,158647	0,67855	3864097000	3864413029	0,01	0,21	0,04
18	-724,17	0,762082	36,58136	0,132421	0,655768	3721152000	3723597600	0,07	0,24	0,04
19	-752,75	0,760192	43,40378	0,150535	0,673271	3963812000	3966036674	0,06	0,11	0,06
20	-666,96	0,813641	35,89603	0,153599	0,666287	3703187000	3701962981	0,03	0,31	0,08
21	-746,53	0,817009	37,55819	0,128268	0,652164	3876445000	3876662366	0,01	0,43	0,06
22	-767,81	0,808966	39,80137	0,177014	0,602998	4049105000	4054413248	0,13	0,78	0,18
23	-707,03	0,748678	35,04798	0,151874	0,654843	3623337000	3623053123	0,01	0,37	0,09
24	-618,21	0,799479	43,20267	0,149549	0,625451	3933955000	3930820951	0,08	0,42	0,05
25	-533,94	0,878484	46,55037	0,130089	0,646977	3993876000	3989001210	0,12	0,51	0,08
26	-755,93	0,726727	41,97553	0,14438	0,700223	3817873000	3825454318	0,20	0,21	0,09
27	-702,37	0,705786	39,11818	0,131988	0,636686	3729649000	3725099424	0,12	0,93	0,12
28	-604,05	0,852561	42,96199	0,141674	0,645452	3952021000	3949443162	0,07	0,22	0,09
29	-766,19	0,861312	36,86036	0,174988	0,616196	4007099000	4002719118	0,11	0,70	0,13
30	-587,82	0,725158	43,22362	0,139974	0,658408	3727412000	3729169884	0,05	0,16	0,04
31	-581,06	0,854063	38,90606	0,165505	0,640917	3805509000	3811225743	0,15	0,73	0,20
32	-651,50	0,873223	38,08149	0,156627	0,606548	3938682000	3939151407	0,01	0,47	0,07
33	-709,06	0,772312	36,07205	0,143402	0,670958	3683078000	3682937640	0,00	0,15	0,07
34	-739,46	0,858716	32,38915	0,181151	0,662872	3718355000	3722478181	0,11	1,00	0,22
35	-627,19	0,712011	42,66023	0,160761	0,648908	3751014000	3750548522	0,01	0,15	0,04
36	-762,57	0,709335	47,97042	0,131031	0,603934	4133716000	4123181431	0,25	1,01	0,23
37	-744,39	0,902981	39,33801	0,152035	0,6147	4121966000	4125171170	0,08	0,15	0,09
38	-810,19	0,938303	39,25432	0,163871	0,651295	4210408000	4209022398	0,03	1,01	0,12
39	-773,57	0,935979	43,89658	0,128439	0,624655	4329648000	4324845683	0,11	1,29	0,14
40	-713,94	0,701648	34,63675	0,163097	0,648262	3542501000	3539039126	0,10	1,00	0,15
41	-737,24	0,887011	38,74945	0,16944	0,653147	4033736000	4028741685	0,12	0,56	0,09
42	-578,92	0,896059	38,21397	0,162589	0,622164	3869133000	3868691988	0,01	0,91	0,18
43	-727,39	0,830217	33,79816	0,133122	0,707099	3647282000	3655464341	0,22	0,24	0,15
44	-645,98	0,794688	38,53213	0,140087	0,67512	3727148000	3729861753	0,07	0,11	0,04
45	-562,46	0,923165	31,75527	0,116393	0,612536	3639594000	3640503662	0,02	0,38	0,13
46	-798,70	0,845994	38,67715	0,134402	0,650462	4026634000	4026406844	0,01	0,61	0,07
47	-669,46	0,777122	45,02353	0,142756	0,672313	3938412000	3938823646	0,01	0,10	0,05
48	-716,32	0,789871	34,27287	0,141057	0,643014	3683524000	3686605062	0,08	0,26	0,08
49	-832,18	0,857021	42,40423	0,138156	0,682533	4161370000	4165248662	0,09	0,91	0,14
50	-779,83	0,680304	45,95758	0,155362	0,670021	3940758000	3943600134	0,07	0,59	0,13

Ciąg dalszy Tab. Z2.1:

Nr sym.	Parametry złożowe modelu					Sumaryczna ilość zatłoczonego CO ₂ , sm ³		[Błąd względny, %]		
	Głębokość, m n.p.m.	Net to Gross (NTG), -	Przepuszczalność k _h , mD	Porowatość Ø, %	Nasylenie gazem, Sg	model numeryczny (SIM)	model zastępczy (SNN)	Błąd po zakończeniu zatłaczania (całk. ilość CO ₂)	Błąd średni z okresu 25 lat	Błąd max. z okresu 25 lat
51	-634,20	0,737294	45,48114	0,129636	0,626209	3919781000	3914508563	0,13	0,68	0,12
52	-848,84	0,800616	31,29017	0,168452	0,633686	3729994000	3734283313	0,11	0,43	0,09
53	-736,99	0,962035	43,64724	0,125972	0,66659	4238895000	4242031879	0,07	1,25	0,17
54	-808,92	0,890961	41,52585	0,147593	0,677423	4171557000	4172083172	0,01	0,40	0,07
55	-668,59	0,837379	42,33383	0,141536	0,68472	3929134000	3929431658	0,01	0,51	0,09
56	-826,05	0,825457	39,63576	0,146084	0,629707	4090703000	4094933112	0,10	0,44	0,06
57	-682,32	0,8643	44,38053	0,157828	0,600337	4185379000	4185073407	0,01	0,32	0,10
58	-796,60	0,912211	37,38996	0,148548	0,646468	4084088000	4083713887	0,01	0,17	0,06
59	-693,54	0,6852	39,56555	0,163531	0,653555	3667658000	3668723552	0,03	0,27	0,05
60	-818,92	0,951447	44,58118	0,165998	0,647683	4425880000	4424758112	0,03	0,74	0,15
61	-632,49	0,763835	40,71503	0,161243	0,656172	3772438000	3770407232	0,05	0,28	0,09
62	-698,67	0,895739	41,40869	0,12667	0,621298	4110521000	4105549376	0,12	0,97	0,15
63	-621,24	0,886545	42,13452	0,153209	0,668086	3961754000	3965552813	0,10	0,28	0,04
64	-729,43	0,651188	40,42596	0,156532	0,657424	3670398000	3670867223	0,01	0,41	0,07
65	-771,85	0,640377	40,53507	0,143613	0,613193	3769153000	3767814691	0,04	1,52	0,28
66	-558,53	0,696846	39,413	0,145195	0,687709	3483890000	3490627140	0,19	0,25	0,19
67	-711,72	0,827015	35,16916	0,135676	0,637881	3783630000	3781834552	0,05	0,14	0,05
68	-688,01	0,869165	43,7502	0,149625	0,679933	4056284000	4054139060	0,05	0,21	0,08
69	-689,19	0,828129	37,28394	0,150212	0,689647	3768233000	3768724264	0,01	0,21	0,05
70	-743,27	0,80195	46,30985	0,123917	0,6194	4183388000	4173744519	0,23	0,94	0,15
71	-722,19	0,872166	40,89796	0,144922	0,668615	4027840000	4026899309	0,02	0,50	0,12
72	-825,40	0,839071	37,66951	0,145622	0,665086	3991652000	3994562507	0,07	0,61	0,11
73	-617,35	0,769855	46,99617	0,139238	0,629036	3984029000	3984641594	0,02	0,20	0,08
74	-678,43	0,990138	41,85477	0,117955	0,691904	4101054000	4103397414	0,06	1,71	0,23
75	-751,06	0,908407	38,95436	0,172652	0,643308	4111597000	4099615630	0,29	1,07	0,15
76	-734,04	0,807835	40,21897	0,137752	0,702468	3863008000	3870065659	0,18	0,21	0,14
77	-637,05	0,75025	41,02862	0,184666	0,661298	3764745000	3762008902	0,07	0,52	0,09
78	-686,55	0,691112	49,25329	0,121687	0,638893	3992744000	3985716654	0,18	2,09	0,37
79	-696,26	0,715424	44,21532	0,154783	0,635278	3905439000	3906259590	0,02	0,40	0,06
80	-663,71	0,93071	40,83331	0,142481	0,680773	4012050000	4012349353	0,01	0,23	0,04
81	-674,22	0,915832	38,43772	0,136526	0,676584	3933899000	3928694454	0,13	0,55	0,13
82	-792,59	0,841667	37,10431	0,179027	0,651407	3964489000	3968066480	0,09	0,41	0,12
83	-661,95	0,796775	34,78596	0,12485	0,649917	3647985000	3647106489	0,02	0,19	0,04
84	-718,25	0,901025	44,14083	0,157253	0,628008	4221247000	4234317102	0,31	0,68	0,17
85	-680,96	0,834179	45,58783	0,147986	0,683427	4045164000	4041089289	0,10	0,29	0,05
86	-777,56	0,78456	45,1524	0,158412	0,607894	4187053000	4192198158	0,12	0,14	0,09
87	-704,06	0,719379	47,2758	0,17673	0,618295	4044400000	4050078307	0,14	0,64	0,27
88	-608,37	0,805229	40,1173	0,162055	0,664253	3783212000	3776507481	0,18	0,18	0,06
89	-655,00	0,746282	35,80674	0,148117	0,669838	3570007000	3570627846	0,02	0,37	0,10
90	-598,44	0,755707	32,89854	0,135576	0,596135	3512922000	3508225744	0,13	0,71	0,10
91	-657,73	0,849608	33,60257	0,170188	0,694733	3624049000	3622715864	0,04	1,08	0,13
92	-569,83	0,657955	38,25451	0,15611	0,65936	3430818000	3430551499	0,01	0,12	0,03
93	-659,35	0,768459	40,06092	0,120327	0,654224	3786853000	3784914756	0,05	0,53	0,09
94	-787,01	0,783475	37,91446	0,151187	0,610892	3948574000	3945814702	0,07	0,37	0,10
95	-593,28	0,921772	48,08899	0,155167	0,657809	4156880000	4164237009	0,18	0,85	0,10
96	-758,25	0,843745	36,25779	0,146507	0,693762	3827151000	3829063413	0,05	0,31	0,07
97	-731,08	0,774803	37,00673	0,15399	0,660172	3767308000	3764511799	0,07	0,46	0,11
98	-650,52	0,846823	36,46113	0,166971	0,617404	3823186000	3826355916	0,08	0,36	0,17
99	-626,58	0,792579	35,65023	0,134136	0,640887	3649249000	3647039346	0,06	0,32	0,06
100	-803,98	0,752994	41,33329	0,167984	0,644873	3987963000	3995765788	0,20	0,36	0,08
							Max:	0,31	2,09	0,43
							Średnia:	0,08	0,52	0,11

Spis rysunków

Rys. 1.1. Zmiany temperatury powierzchni Ziemi względem okresu 1850-1900 (IPCC, 2021)

Rys. 2.1. Różnorodność tematyczna pojęcia CTW oraz współzależności różnych obszarów

Rys. 2.2. Cykl obiegu ditlenku węgla z wykorzystaniem technologii CCS/CCU, BECCS/BECCU i DACCS/DACCU (na podstawie: Lyons i in., 2021)

Rys. 2.3. Podstawowe możliwości geologicznego składowania ditlenku węgla (na podstawie: Ali i in., 2022)

Rys. 2.4. Kluczowe mechanizmy „pułapkowania” CO₂: a) „pułapkowanie” strukturalne i stratygraficzne, b) „pułapkowanie” gazu rezydualnego (resztkowego), c) rozpuszczanie w płynach złożowych, d) „pułapkowanie” mineralne (na podstawie: Global CCUS Report, 2022)

Rys. 2.5. Udział mechanizmów „pułapkowania” [%] oraz ich rozwój w trakcie procesu składowania CO₂ w głębokich solankowych poziomach wodonośnych (oprac. na podstawie: IPCC, 2005; Veloso i in., 2016)

Rys. 2.6. Schemat koncepcji magazynowania CO₂ w oceanach. W przypadku magazynowania oceanicznego typu „rozpuszczanie” CO₂ szybko rozpuszcza się w wodzie, a w przypadku magazynowania oceanicznego typu „jezioro” CO₂ składowany jest początkowo w postaci ciekłej na dnie morskim (oprac. na podstawie: IPCC, 2005).

Rys. 2.7. Mapa rozmieszczenia projektów CCUS na świecie - komercyjne instalacje CCUS oraz pilotażowe/demonstracyjne projekty CCUS na zróżnicowanych etapach rozwoju (oprac. na podstawie: CO2RE - Global CCS Facilities Database, 2023)

Rys. 2.8. Mapa rozmieszczenia funkcjonujących (operational) komercyjnych instalacji CCUS na świecie (oprac. na podstawie: CO2RE - Global CCS Facilities Database, 2023)

Rys. 2.9. Obszary zastosowań wąskiej sztucznej inteligencji (oprac. własne na podstawie: Eurofound, 2020; Mills, 2016; gov.pl, 2024)

Rys. 2.10. Schemat relacji pomiędzy sztuczną inteligencją a uczeniem maszynowym, głębokim uczeniem oraz sztucznymi sieciami neuronowymi (oprac. własne)

Rys. 2.11. Budowa neuronu biologicznego i połączeń synaptycznych (Openstax, 2024)

Rys. 2.12. Schemat działania sztucznego neuronu (Matlab, 2011)

Rys. 2.13. Sigmoidalna funkcja transferu - tangens hiperboliczny (Matlab, 2011)

Rys. 2.14. Liniowa funkcja transferu (Matlab, 2011)

Rys. 2.15. Model jednowarstwowej sztucznej sieci neuronowej (Matlab, 2011)

Rys. 2.16. Model 3-warstwowej sztucznej sieci neuronowej (Matlab, 2011)

Rys. 3.1. Lokalizacja modeli statycznych i dynamicznych w krakowskiej serii piaskowcowej i warstwach dębowieckich (a) oraz górnośląskiej serii piaskowcowej (b)

Rys. 3.2. Model statyczny w obrębie krakowskiej serii piaskowcowej (a) wraz z wydzielonym modelem lokalnym do celów symulacji złożowych - model rozkładu przepuszczalności (b)

Rys. 3.3. Model litologiczny w obrębie górnośląskiej serii piaskowcowej (a) wraz z wydzielonym modelem lokalnym do celów symulacji złożowych - model porowatości efektywnej (b)

Rys. 3.4. Model statyczny w obrębie warstw dębowieckich (a) wraz z wydzielonym modelem lokalnym do celów symulacji złożowych (model przepuszczalności) (b)

Rys. 3.5. Krzywe przepuszczalności względnej dla wody (krw) oraz dla ditlenku węgla (krCO₂)

Rys. 3.6. Krzywa ciśnienia kapilarnego

Rys. 3.7. Rozmieszczenie interwałów szczelinowania w otworach iniekcyjnych: (a) Krakowska Seria Piaskowcowa, (b) Górnośląska Seria Piaskowcowa, (c) Formacja dębowiecka

Rys. 3.8. Rozkład nasycenia swobodnego CO₂ [SgCO₂] (1) i rozpuszczonego w solance [RSW CO₂-ułamek molowy] (2) w strefie iniekcyjnych otworów pionowych (warianty S7- I oraz S11-II) po

a) 5, b) 15, c) 25 latach od rozpoczęcia zatłaczania oraz po d) 50, e) 200 i f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania

Rys. 3.9. Porównanie zmian ilości swobodnego CO₂ w strukturze dla wariantów S7 i S11 w czasie

Rys. 3.10. Porównanie zmian w czasie średniego ciśnienia w strefie zatłaczania (a) oraz ilości swobodnego CO₂ w strukturze (b) dla wariantów symulacji S8, S10, S11

Rys. 3.11. Rozkład ciśnienia w stropowej warstwie kolektora przed rozpoczęciem zatłaczania (a) oraz po 25 latach zatłaczania (b)

Rys. 3.12. Zmiany ciśnienia na przekroju przez strefę zatłaczania – rozkład ciśnienia przed rozpoczęciem zatłaczania (a) oraz rozkład ciśnienia po 25 latach zatłaczania (b)

Rys. 3.13. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ [Sg CO₂] (a) i rozpuszczonego CO₂ [RSW CO₂], (b) w stropowej części warstwy iniekcyjnej po 25 latach zatłaczania

Rys. 3.14. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ [Sg CO₂] (a) i rozpuszczonego CO₂ [RSW CO₂], (b) w stropowej części warstwy iniekcyjnej po 200 latach od zakończenia zatłaczania

Rys. 3.15. Porównanie zmian w czasie ilości swobodnego CO₂ w strukturze (a), zmian w czasie średniego ciśnienia w strefie zatłaczania (b) oraz zmian wydajności zatłaczania dla trzech wariantów symulacji: S3A, S4, S5A (c)

Rys. 3.16. Zmiany aktywności wód okalających w modelu analitycznym w trzech wariantach symulacji (S3A, S4, S5A) (a) oraz proces redukcji fazy swobodnej ditlenku węgla wskutek rozpuszczania się CO₂ w solance w wariantach symulacji S5A (b)

Rys. 3.17. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ (1) i rozpuszczonego CO₂ (2) w warstwie iniekcyjnej kolektora warstw dębowieckich w wariantach symulacji S3A po (a) 5, (b) 25 latach zatłaczania oraz po (c) 50, (d) 200 oraz f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania

Rys. 3.18. Zmiany nasycenia swobodnego CO₂ (1) i rozpuszczonego CO₂ (2) na przekroju pionowym w modelu warstw dębowieckich w wariantach symulacji S3A po (a) 5, (b) 25 latach zatłaczania oraz po (c) 50, (d) 200 oraz f) 400 latach po zakończeniu zatłaczania

Rys. 4.1. Model bazowy w obrębie kompleksu warstw dębowieckich wydzielony do celów symulacji złożowych

Rys. 4.2. Wydatek zatłaczania CO₂ oraz sumaryczna ilość zatłoczonego CO₂ w modelu referencyjnym

Rys. 4.3. Sumaryczna ilość CO₂ w modelu bazowym z uwzględnieniem swobodnego CO₂ w złożu oraz rozpuszczonego CO₂ w analizowanej strukturze w funkcji czasu

Rys. 4.4. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności porowatości efektywnej od 10 do 50%

Rys. 4.5. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności przepuszczalności od 30 do 50 mD

Rys. 4.6. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności parametru Net-to-Gross (NTG) od 0,5 do 0,9

Rys. 4.7. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zmienności głębokości zalegania powierzchni stropu warstw zbiornikowych od -550 do -900 m

Rys. 4.8. Zmiany sumarycznej ilości CO₂ możliwej do zatłoczenia do górotworu przy założeniu zakresu zmienności rezydualnego nasycenia ditlenkiem węgla od 25 do 45%

Rys. 4.9. Zbiór 150 wariantów modelu symulacyjnego wygenerowanych w celu opracowania kompleksowej analizy wrażliwości modelu

Rys. 4.10. Histogram i dystrybuenta sumarycznej ilości CO₂ zatłoczonego do górotworu w 150 modelach symulacyjnych

Rys. 4.11. Wyniki analizy czułości funkcji celu przedstawione na wykresie tornado - wielkość wpływu zmian wartości kluczowych parametrów modelu na wielkość sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂, %

- Rys. 5.1.** Sumaryczna ilość ditlenku węgla zatłoczonego do górotworu w funkcji czasu w 150 wariantach modelu symulacyjnego
- Rys. 5.2.** Schemat opracowanej sztucznej sieci neuronowej
- Rys. 5.3.** Zbiór wartości funkcji celu (sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego do górotworu) w opracowanych pakietach danych uczących i testujących (wariant 1), wyniki symulacji: model numeryczny Petrel/Eclipse
- Rys. 5.4.** Zbiór wartości funkcji celu (sumaryczna ilość CO₂ zatłoczonego do górotworu) w opracowanych pakietach danych uczących i testujących (wariant 2), wyniki symulacji: model numeryczny Petrel/Eclipse
- Rys. 5.5.** Diagram dopasowania modelu zastępczego do modelu numerycznego w wariancie 1
- Rys. 5.6.** Diagram dopasowania modelu zastępczego do modelu numerycznego w wariancie 2
- Rys. 5.7.** Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 dla losowo wybranych symulacji nr 2, 32, 72, 94, 148 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 5 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego.
- Rys. 5.8.** Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1
- Rys. 5.9.** Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1
- Rys. 5.10.** Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 1 dla losowo wybranych symulacji nr 17, 19, 39, 79, 85 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 78 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego.
- Rys. 5.11.** Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2
- Rys. 5.12.** Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 1
- Rys. 5.13.** Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1 dla losowo wybranych symulacji nr 43, 60, 91, 100, 114 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 88 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego.
- Rys. 5.14.** Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 2
- Rys. 5.15.** Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 2
- Rys. 5.16.** Porównanie profili zatłaczania CO₂ wygenerowanych za pomocą sztucznej sieci neuronowej (model zastępczy SSN) z wartościami dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 1 dla losowo wybranych symulacji nr 28, 31, 57, 87, 95 z modelu numerycznego SIM. Wyniki symulacji nr 17 stanowią realizację modelu o największej wartości błędu względnego.
- Rys. 5.17.** Rozkład empiryczny maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2
- Rys. 5.18.** Wykres rozrzutu (rozproszenia) maksymalnych wartości błędu względnego dla dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2

Spis tabel

- Tab. 1.1.** Schemat założeń dotyczących poszczególnych elementów i etapów programu badawczego
- Tab. 2.1.** Aktualny stan rozwoju instalacji CCUS na świecie wraz z całkowitą pojemnością wychwytywanego CO₂ (Global CCS Institute, 2023)
- Tab. 2.2.** Zestawienie funkcjonujących komercyjnych instalacji CCUS na świecie (oprac. na podstawie: Global CCS Institute, 2023)
- Tab. 3.1.** Szczegółowa charakterystyka modeli numerycznych
- Tab. 3.2.** Charakterystyka przepuszczalności względnej i ciśnienia kapilarnego w modelach symulacyjnych
- Tab. 3.3.** Charakterystyka modeli analitycznych w modelach złożowych
- Tab. 3.4.** Charakterystyka warunków początkowych w modelach symulacyjnych
- Tab. 3.5.** Charakterystyka systemu szczelin w modelach symulacyjnych
- Tab. 3.6a.** Zestawienie rozpatrywanych wariantów symulacji zatłaczania CO₂ do formacji geologicznych Krakowskiej Serii Piaskowcowej (KSP)
- Tab. 3.6b.** Zestawienie rozpatrywanych wariantów symulacji zatłaczania CO₂ do formacji geologicznych Górnośląskiej Serii Piaskowcowej (GSP) i warstw dębowieckich (DEB)
- Tab. 3.7.** Zestawienie uzyskanych wyników dotyczących sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu krakowskiej serii piaskowcowej
- Tab. 3.8.** Zestawienie uzyskanych wyników sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu górnośląskiej serii piaskowcowej
- Tab. 3.9.** Zestawienie uzyskanych wyników sumarycznej ilości zatłoczonego CO₂ w poszczególnych wariantach symulacji w modelu warstw dębowieckich
- Tab. 4.1.** Podstawowe parametry bazowego modelu symulacyjnego
- Tab. 4.2.** Zakresy zmienności wartości parametrów złożowych w modelu bazowym wykorzystanych w analizie wrażliwości
- Tab. 4.3.** Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany porowatości efektywnej
- Tab. 4.4.** Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany przepuszczalności
- Tab. 4.5.** Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany parametru Net-to-Gross
- Tab. 4.6.** Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany głębokości zalegania
- Tab. 4.7.** Wyniki analizy wrażliwości modelu bazowego na zmiany rezydualnego nasycenia CO₂
- Tab. 4.8.** Wartości parametrów modelu bazowego oraz zakres zmienności kluczowych parametrów modelu w kompleksowej analizie wrażliwości
- Tab. 5.1.** Zestawienie wariantów oraz liczebność poszczególnych pakietów danych wykorzystanych w trakcie uczenia, walidacji i testowania sieci
- Tab. 5.2.** Zestawienie wartości błędów względnych w wariancie nr 1
- Tab. 5.3.** Zestawienie wartości błędów względnych w wariancie nr 2
- Tab. 5.4.** Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1
- Tab. 5.5.** Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 2, 32, 72, 94, 148 i 5 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 1
- Tab. 5.6.** Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 17, 19, 39, 79, 85 i 78 z dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie 1

Tab. 5.7. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach 17, 19, 39, 79, 85 i 78 z dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 1

Tab. 5.8. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM, wyniki uzyskane w modelu zastępczym SSN oraz wartości błędów względnych w symulacjach nr 43, 60, 91, 100, 114 i 88 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie 2

Tab. 5.9. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 43, 60, 91, 100, 114 i 88 z podstawowego pakietu danych uczących w wariancie nr 2

Tab. 5.10. Zestawienie parametrów numerycznego modelu złoża (SIM), wyniki symulacji w modelu SIM

Tab. 5.11. Zestawienie wartości błędów względnych w poszczególnych punktach profili zatłaczania CO₂ w symulacjach nr 28, 31, 57, 87, 95 i 17 z dodatkowego pakietu danych testujących w wariancie nr 2