

ANALIZA WRAŻLIWOŚCI W MODELOWANIU HYDROGEOCHEMICZNYM NA PRZYKŁADZIE SYSTEMÓW WODA–SKAŁA–GAZ

SENSITIVITY ANALYSIS IN HYDROGEOCHEMICAL MODELLING ON THE EXAMPLE OF WATER–ROCK–GAS SYSTEMS

KRZYSZTOF LABUS¹, KATARZYNA SUCHODOLSKA¹

Abstrakt. Przedstawiono przykład analizy wrażliwości rezultatów otrzymywanych w modelowaniu systemów woda–skała–gaz do celów sekwestracji gazów kwaśnych (CO₂ i H₂S) na zmiany parametrów kinetyki reakcji. Z rezultatami stanowiącymi poziom odniesienia porównywano wyniki uzyskane po uwzględnieniu stałych tempa reakcji dla skalenia potasowego i klinochloru, podwyższonych lub pomniejszonych o jeden rząd wielkości. Różnice w zidentyfikowanych efektach petroteksturalnych i fizykochemicznych są pozornie niewielkie, gdyż wynikają z modyfikacji pojedynczego tylko parametru. W rzeczywistości, przy występowaniu wielu parametrów opisujących modelowany system, efekty z nimi związane mogą ze sobą interferować.

Słowa kluczowe: analiza wrażliwości, modelowanie hydrogeochemiczne, interakcje woda–skała–gaz, sekwestracja geologiczna.

Abstract. The paper presents an example of sensitivity analysis of results obtained in modelling of water–rock–gas systems, for the purpose of acid gas sequestration (CO₂ and H₂S), for changes in reaction kinetics parameters. The reference level was compared to the results, including the elevated or reduced reaction rate constants of K-feldspar and clinocllore. Differences in the identified petrotextural and physicochemical effects are seemingly insignificant, as they result from the modification of a single parameter only. In fact, when there are many parameters describing the modelled system, the associated effects may interfere with each other.

Key words: sensitivity analysis, hydrogeochemical modelling, water–rock–gas interactions, geological sequestration.

WSTĘP

W przypadku stosowania modelowania komputerowego do symulacji złożonych procesów, jakimi są interakcje w systemach hydrogeochemicznych, analiza wrażliwości okazuje się odpowiednim narzędziem dla oceny wpływu zróżnicowania wielkości parametrów na uzyskiwane rezultaty. Jest ona zatem istotna z punktu widzenia weryfikacji wyników modelu i pozwala ponadto na określenie przydatności oprogramowania zastosowanego do danego celu obliczeniowego.

Pod pojęciem analiza wrażliwości zwykle rozumie się badanie zmian rezultatu pod wpływem zmiany danych wejściowych. Działania takie mogą przynieść kilka następujących korzyści:

- możliwa jest weryfikacja poprawności wykonanych wcześniej prognoz eksperckich;
- istnieje możliwość ujawnienia mało istotnych zmiennych lub niepotrzebnych komplikacji modelu;
- dane wejściowe mogą zostać uszeregowane pod względem znaczenia ich wpływu na wynik.

¹ Politechnika Śląska, Wydział Górnictwa, Inżynierii Bezpieczeństwa i Automatyki Przemysłowej, ul. Akademicka 2; 44-100 Gliwice; e-mail: krzysztof.labus@polsl.pl, katarzyna.suchodolska@polsl.pl.

W ostatnich dwóch przypadkach liczba zmiennych może zostać znacznie zmniejszona, dzięki czemu, zwłaszcza dla złożonych kodów, skrócony zostaje czas obliczeń a ponadto ewentualna analiza niepewności może być przeprowadzona prościej i szybciej (Ekberg, 1999). Z drugiej strony istnieją sytuacje, w których ten rodzaj przesiewu parametrów może spowodować, że niektóre ważne procesy, np. efekty sprzężone, mogą pozostać niewykryte podczas prowadzonych symulacji.

W modelowaniu hydrogeochemicznym dróg reakcji w układach woda–skała–gaz najczęściej uwzględniane są parametry opisujące każdy z elementów takiego systemu (fig. 1).

Objętość wód porowych w modelowanym systemie może być określona na podstawie pomiaru porowatości efektywnej skały, np. metodą porozymetryczną, przy założeniu pełnego lub częściowego nasycenia porów; parametry fizykochemiczne i temperatura przyjmowane są na podstawie bezpośrednich oznaczeń i analiz (często są to dane archiwalne).

W przypadku mieszanin gazów najczęściej zakłada się ich skład, wyrażony w postaci ciśnień parcjalnych.

Skała opisywana jest przez skład fazowy szkieletu ziarnowego, określanej metodami mikroskopowymi lub za pomocą dyfraktometrii rentgenowskiej. Powierzchnia właściwa skały może zostać zmierzona metodami adsorpcyjnymi, zaś reaktywna powierzchnia właściwa minerałów może być oszacowana na podstawie określenia wymiarów, kształtu i morfologii ziaren przy pomocy technik mikroskopowych.

Tempo (stała szybkości reakcji) rozpuszczania i krystalizacji dla poszczególnych faz mineralnych jest na ogół przyjmowana na podstawie danych literaturowych, które najczęściej różnią się od siebie, w zależności od zastosowanej metody badawczej i nie zawsze uwzględniają zróżnicowanie warunków pH środowiska, w którym reakcje te przebiegają.

Szybkość rozpuszczania i krystalizacji minerałów jest iloczynem ich reaktywnej powierzchni właściwej i stałej kinetyki reakcji. Pośród wymienionych wcześniej parametrów

zwłaszcza te właśnie wielkości obarczone są wysoką niepewnością i obejmują szeroki zakres wartości. W związku z tym, na potrzeby niniejszej pracy, przeprowadzono szereg symulacji (analiz) wrażliwości, skupiając się na wpływie zróżnicowania stałych kinetyki reakcji dla analizowanych faz mineralnych.

DANE WEJŚCIOWE I METODYKA MODELOWANIA

W niniejszej pracy zaprezentowano przykład analizy wrażliwości na zmiany parametrów kinetyki reakcji, w odniesieniu do rezultatów otrzymywanych w modelowaniu hydrogeochemicznym systemów woda–skała–gaz w celu sekwestracji gazów kwaśnych (mieszaniny dwutlenku węgla i siarkowodoru) w poziomach wodonośnych. Badania prowadzone nad zagadnieniami interakcji gazów kwaśnych ze skałami wynikają z przekonania o konieczności ograniczenia efektu cieplarnianego (np. Holloway, 2005; Xu i in., 2007), oraz lokowania gazów odpadowych po odsiarczeniu gazu ziemnego (Lubaś, Szott, 2010). Wynikają one także z konieczności intensyfikacji wydobywania ropy naftowej i gazu lub zastosowaniem szczelinujących cieczy energetyzujących (Sinal, Lancaster, 1987; Labus i in., 2016).

Obliczenia przedstawiono na podstawie próbki skały o znacznej przepuszczalności, reprezentującej formację dębowiecką (miocen) z rejonu Górnośląskiego Zagłębia Węglowego (GZW). Charakteryzuje się ona strukturą psefitową i słabym wysortowaniem. W składzie obecne są różnie obtoczone okruchy drobnokrystalicznych skał krzemionkowych, węglanowych i krzemionkowo-ilastych. Spoiwo węglanowo-ilaste stanowi około 15% objętości skały. Skład mineralogiczny próbki skał określono metodą dyfraktometryczną (tab. 1); do identyfikacji faz mineralnych wykorzystano także mikroskop elektronowy z analizatorem EDX. Parametry przestrzeni porowej badanej próbki scharakteryzowano metodą porozymetrii rtęciowej.

Modele interakcji w systemie woda–skała–gaz zostały wykonane w dwóch etapach, zgodnie z metodyką opisaną w poprzednich pracach (m.in. Labus i in., 2015; Labus, Suchodolska, 2015). Etap pierwszy pozwalał na analizę zmian zachodzących w poziomach wodonośnych pod wpływem iniekcji CO₂ i/lub H₂S. Etap drugi umożliwił prześledzenie długotrwałych efektów sekwestracji, w tym zmian porowatości skał oraz sekwestracji mineralnej C i/lub S. W niniejszym artykule omówiono wyłącznie przykład dotyczący tego właśnie etapu.

Zastosowany w symulacjach skład wód porowych ustalono na podstawie modelowania równowagowego solanki złożowej o składzie podanym w tabeli 2, z minerałami budującymi szkielet ziarnowy modelowanej skały. Ciśnienie zatłaczania mieszaniny CO₂ i H₂S zadano wg reżimu hydrostatycznego i a jego wartości wprowadzono jako aktywność ciśnieniową, zgodnie z wymaganiami oprogramowania zastosowanego w modelu – Geochemist's Workbench 9.0 (GWB) (Bethke, 2008; Bethke, Yeakel, 2013). Temperaturę

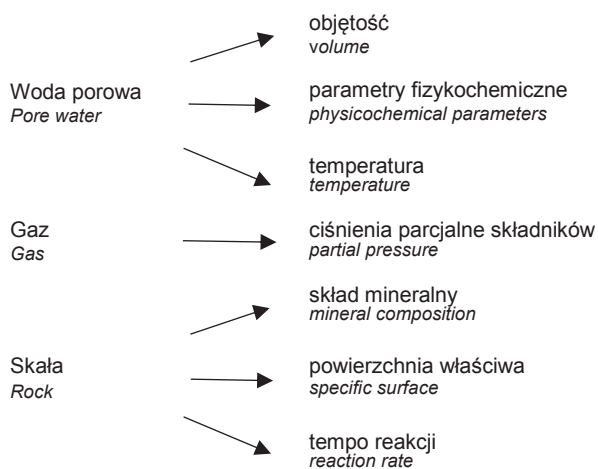


Fig. 1. Najczęściej stosowane parametry opisujące systemy woda–skała–gaz w modelach hydrogeochemicznych

The most commonly used parameters describing water–rock–gas systems in hydrogeochemical models

rę oszacowano na podstawie bezpośrednich pomiarów i danych archiwalnych (tab. 2). W obliczeniach wykorzystano uproszczone równanie kinetyki rozpuszczania/kryształizacji (Lasaga, 1984), zgodnie z którym minerały krystalizują w momencie, gdy roztwór jest nimi przesycony, a ulegają rozpuszczaniu, gdy jest niedosycony:

$$r_k = A_s k_T \left(1 - \frac{Q}{K}\right) \quad [1]$$

gdzie:

r_k – szybkość reakcji [$\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$],

$r_k > 0$ – rozpuszczanie,

$r_k < 0$ – krystalizacja,

A_s – reaktywna powierzchnia minerału [cm^2],

k_T – stała reakcji [$\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$],

Q – iloczyn aktywności,

K – stała równowagi reakcji rozpuszczania.

Powierzchnię właściwą ziaren minerałów obliczono przy założeniu kulistości ziaren o określonej średnicy na podstawie modelu sferycznego, dla znanych mas cząsteczkowych oraz objętości molowych każdego z minerałów:

$$SSM = \frac{A \cdot v}{V \cdot MW} \quad [2]$$

gdzie:

A – powierzchnia sfery o danej średnicy,

v – objętość molowa minerału,

V – objętość sfery o danej średnicy,

MW – masa molowa minerału.

Wykorzystane w modelowaniu stałe szybkości reakcji minerałów (k_p) przyjęto na podstawie danych literaturowych (Palandri, Kharaka, 2004) – tabela 1.

W celu przeprowadzenia analizy wrażliwości rezultatów modelowania systemu woda–skała–gaz na zmiany parametrów kinetyki reakcji, w przykładowym poziomie wodonośnym, podczas symulowanej sekwestracji gazów, wykonano odpowiednie obliczenia. Uwzględniły one wpływ zróżnicowania stałej szybkości reakcji dla skalenia potasowego oraz klinochloru na przebieg reakcji rozkładu i krystalizacji faz mineralnych w trakcie modelowanego okresu składowania gazów kwaśnych oraz efekty petroteksturalne (zmiany porowatości) i wielkość mineralnej sekwestracji pierwiastka węgla w formacji skalnej. Przyjęto założenie, że rezultaty stanowiące poziom odniesienia (scenariusz bazowy) wynikają z wykorzystania w modelowaniu wielkości stałych szybkości reakcji zaczerpniętych z literatury. Z tymi rezultatami porównywano wyniki uzyskane dla pozostałych dwóch scenariuszy, odpowiadających uwzględnieniu stałych szybkości reakcji podwyższonych lub pomniejszonych o jeden rząd wielkości.

W przeprowadzonej analizie wrażliwości uwzględniono klinochlor (o udziale w matrycy skały na poziomie 10%), którego rozkład powoduje uwolnienie znacznej ilości jonów Mg^{2+} , umożliwiając mineralną sekwestrację CO_2 w krystalizującym, wtórnym dolomicie. Z drugiej strony, aby wykazać, że istotne zmiany hydrochemiczne nie zależą wyłącznie od udziału obję-

Tabela 1

Parametry modelu, skład mineralogiczny matrycy skalnej oraz powierzchnia właściwa minerałów i logarytm stałej szybkości reakcji uwzględnione w modelowaniu

Model parameters, mineral composition of the rock matrix: specific surface and logarithm of the reaction rate constant of minerals, applied in modelling

Porowatość [-]	0,224			
Przepuszczalność [mD]	205			
Objętość modelu [cm^3]	10000			
Minerały	Skład	Udział [% vol.]	Pow. właś. [cm^2/g]	log k_T
Kwarc	SiO_2	34,0	22,66	-13,99
Muskowit	$\text{KA}_1\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	22,0	105,98	-11,85
Syderyt	FeCO_3	0,2	14,83	-3,76
Albit	$\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$	6,8	22,94	-9,87
Klinochlor	$\text{Mg}_5\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	10,0	1117,91	-9,79
K-Skaleń	KAlSi_3O_8	2,0	23,47	-10,06
Kalcyt	CaCO_3	9,0	22,14	-0,3
Ankeryt Fe 0,55	$\text{Ca Fe}(\text{CO}_3)_2$	5,0	20,94	-3,76
Flogopit	$\text{KAlMg}_3\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	11,0	1076,02	-12,40

k_T – stała szybkości reakcji / reaction rate constant [$\text{mol}/\text{m}^2/\text{s}$]

Tabela 2

Pierwotny skład wód porowych oraz skład mieszaniny gazów

Primary composition of pore water and composition of the gas mixture

Parametr	Wartość	
Temperatura [$^{\circ}\text{C}$]	30	
pH	7,8	
Cl^- [mol/kg]	2,831	
SO_4^{2-} [mol/kg]	$7,8 \cdot 10^{-4}$	
HCO_3^- [mol/kg]	0,002	
Ca^{2+} [mol/kg]	0,939	
Mg^{2+} [mol/kg]	0,053	
Na^+ [mol/kg]	0,842	
K^+ [mol/kg]	0,005	
Ciśnienie [bar]	75	
Aktywność ciśnieniowa [bar]	CO_2	H_2S
	41,8	14,5

tościowego danego składnika w matrycy skalnej analizowano także skałen potasowy, mimo że jest go w analizowanym systemie względnie niewiele – 2%. W przypadku wyższych proporcji H₂S do CO₂ w mieszaninie gazów, wśród minerałów wtórnych powstających w analizowanym systemie można byłoby spodziewać się powstawania minerałów siarczkowych.

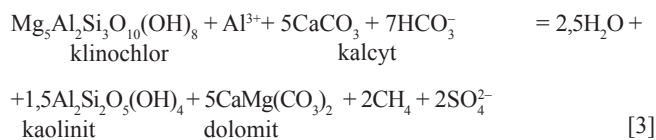
WYNIKI MODELOWANIA

Na figurze 2A przedstawiono zróżnicowanie zmian porowatości próbki na etapie składowania CO₂, w zależności od stałej szybkości reakcji przyjętej do modelowania dla skalenia potasowego. O ile w okresie do około 1000 lat tendencja zmian jest dla wszystkich scenariuszy podobna – gwałtowny wzrost porowatości, po którym następuje jej intensywny spadek a następnie szybki wzrost, to w miarę upływu modelowanego czasu zaznaczają się wyraźne różnice. Porowatość obliczona dla przypadku bazowego przejawia stabilny, powolny trend wzrostowy do wartości niemal 0,247. Dla przypadku powiększonego tempa reakcji widoczny jest niewielki spadek (z minimum około 1500 lat na skali czasu), a następnie wzrost i stabilizacja od około 4000 do 5500 lat, po której następuje spadek porowatości do wartości 0,247. Przy obniżonym tempie reakcji wzrost porowatości trwa nadal, do czasu około 4200 lat, a następnie zaznacza się liniowy spadek do wartości poniżej 0,246. Końcowe porowatości obliczone dla modelowanego etapu składowania CO₂ dla wszystkich scenariuszy są do siebie zbliżone, różnice pomiędzy nimi nie przekraczają 0,1 punktu procentowego (fig. 2A).

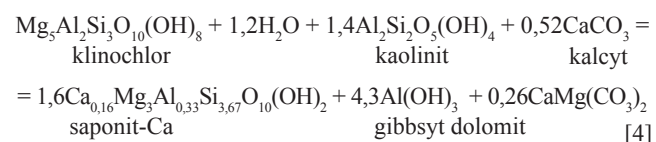
W przypadku klinochloru, w okresie do około 1800 lat modelowanego etapu, tendencje zmian porowatości dla wszystkich scenariuszy są do siebie zbliżone – fig. 2B. Na początku modelowanego etapu zachodzi gwałtowny wzrost porowatości (najintensywniejszy dla scenariusza powiększonej stałej reakcji), po nim następuje spadek, a następnie wzrost porowatości. Dalej, w miarę upływu modelowanego czasu, zaznaczają się pewne różnice. Porowatość obliczona dla przypadku bazowego przejawia stabilny, powolny trend wzrostowy do wartości około 0,2465. Dla przypadku powiększonej stałej szybkości reakcji zauważalny jest spadek (z minimum około 6000 lat na skali czasu), a następnie niewielki wzrost porowatości do wartości nieco powyżej 0,25. Przy obniżonej stałej szybkości reakcji porowatość wzrasta nieznacznie i w konsekwencji nie przekracza wartości 0,245. Różnice pomiędzy skrajnymi, końcowymi wartościami porowatości obliczonymi dla kolejnych scenariuszy modelowanego etapu składowania CO₂ sięgają 0,5 punktu procentowego (fig. 2B).

Dla wyjaśnienia przyczyn różnic pomiędzy efektami opisanych powyżej zjawisk w analizowanych systemach, porównano przebieg reakcji dla scenariusza bazowego oraz pozostałych dwóch scenariuszy, w których uwzględniono stałe szybkości reakcji skalenia potasowego i klinochloru podwyższone lub pomniejszone o jeden rząd wielkości. Przykładowe wyniki symulacji przedstawiono na figurze 3.

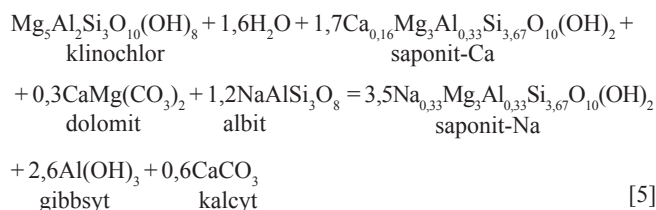
Dla scenariusza bazowego (fig. 3A, 3B), w początkowym okresie, trwającym do około 1 roku, zmiany porowatości próbki, w warunkach symulowanej sekwestracji CO₂, są związane z rozkładem klinochloru i kalcytu oraz powstawaniem dolomitu i kaolinitu, przy czym jony glinu pobierane są z roztworu wód porowych, który został w nie wzbogacony na etapie iniekcji gazów:



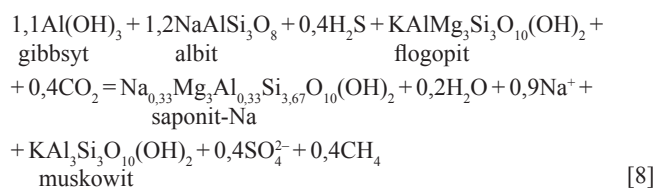
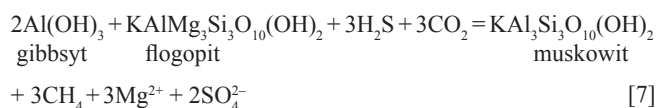
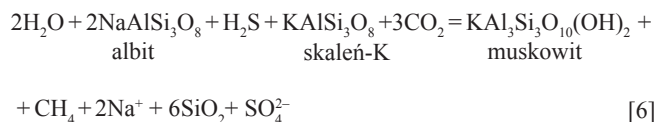
Następnie, do około 2 roku, zauważalny jest rozkład nowopowstałego kaolinitu, co sprzyja krystalizacji gibbsytu oraz saponitu-Ca, a krystalizacja dolomitu zostaje wyhamowana:



Kolejny etap, trwający do czasu około 100 lat, obejmuje rozkład klinochloru, albitu oraz degradację saponitu-Ca i niewielkich ilości dolomitu, co pozwala na kontynuację krystalizacji gibbsytu, wytrącanie się saponitu-Na oraz krystalizację kalcytu:



Etap końcowy obejmuje kilka głównych reakcji przebiegających z różną intensywnością, w efekcie których notowany jest rozkład gibbsytu, flogopitu, skalenia potasowego i albitu oraz krystalizacja muskowitu i saponitu-Na:



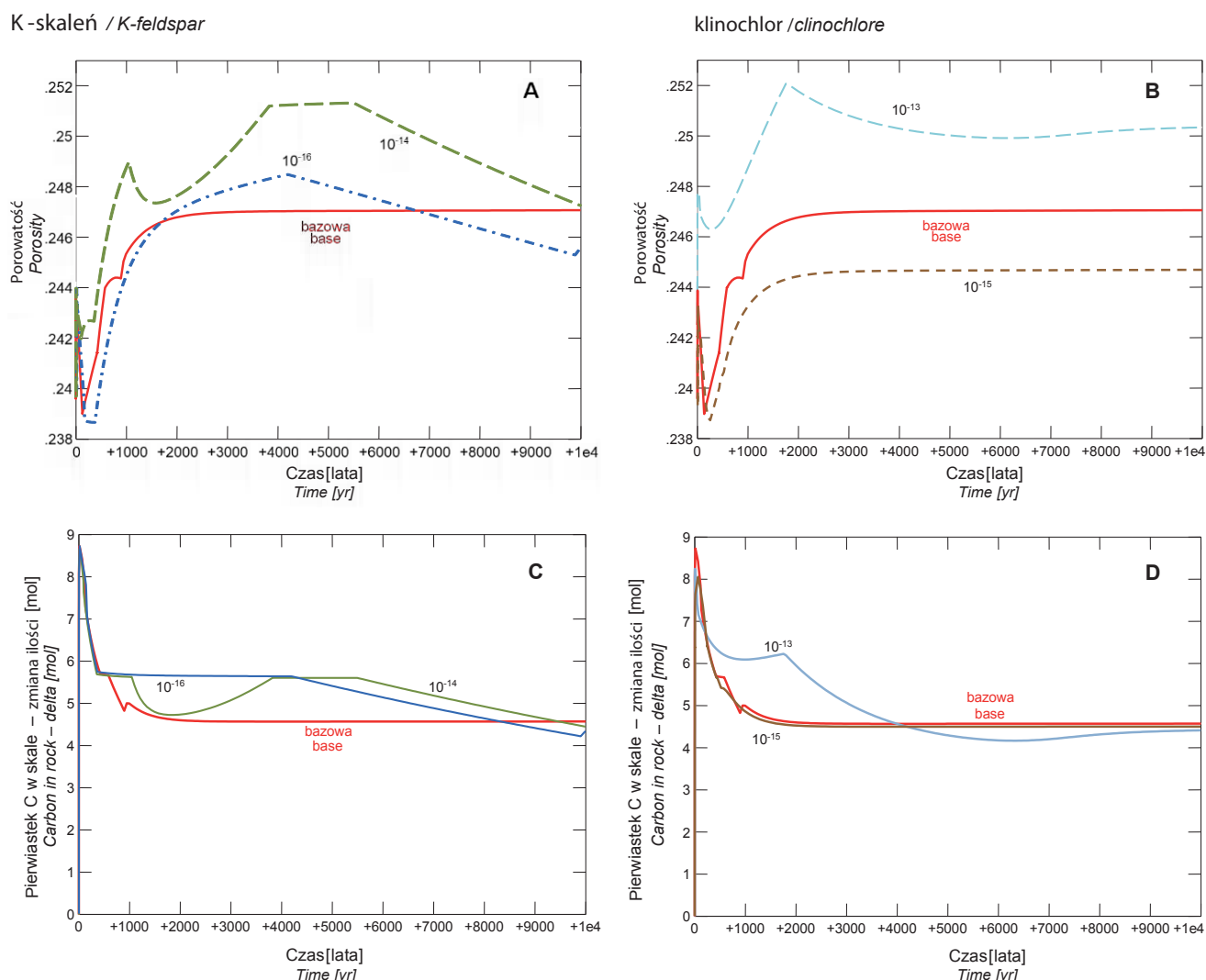


Fig. 2. Zróżnicowanie zmian porowatości próbki i wielkości mineralnej sekwestracji pierwiastka węgla na etapie składowania CO₂, w zależności od stałej szybkości reakcji [mol/cm²/s] dla skalenia potasowego i klinochloru

Differences in sample porosity and mineral carbon sequestration at the CO₂ storage stage, depending on the reaction rate constants [mol/cm²/s] for K-feldspar and clinocllore

Dla przyspieszonego tempa reakcji skalenia potasowego zmiany objętości matrycy skały wynikają z bilansu objętości pomiędzy ulegającymi rozkładowi minerałami pierwotnymi (fig. 3C), głównie klinochloru, albitu, skalenia potasowego i kalcytu, oraz minerałami krystalizującymi w systemie, takimi jak: saponit-Na i saponit-Ca, muskowit, kaolinit, gibbsyt, paragonit i dolomit.

Całkowity rozkład skalenia potasowego następuje już po około 200 latach modelowanego etapu, co widoczne jest na wykresie jako poziomy przebieg linii zmian objętości lub ilości minerału (fig. 3D). Zauważalne są także i inne różnice w stosunku do scenariusza bazowego, polegające między innymi na:

- szybszym zakończeniu rozkładu klinochloru (czas około 80 lat);

- kontynuowanym rozkładzie flogopitu i paragonitu oraz trwającej krystalizacji saponitu-Na i muskowitu.

Z punktu widzenia wielkości mineralnej sekwestracji pierwiastka węgla podczas modelowanego składowania CO₂ (fig. 2C) znaczenie mają zjawiska, które nie były obserwowane w scenariuszu bazowym. Są to rekrystalizacja kalcytu, powiązana z degradacją dolomitu, widoczne na figurze 3C i 3D, jako wygięcia odpowiednich krzywych w kierunku osi X, w czasie około 1500 lat oraz w końcowym okresie modelowanego etapu (około 6000 lat).

W przypadku scenariusza uwzględniającego przyspieszone tempo reakcji klinochloru zmiany objętości matrycy skały są efektem bilansu pomiędzy ulegającymi rozkładowi minerałami pierwotnymi, głównie flogopitu, albitu, klinochloru, kalcytu i skalenia potasowego, oraz minerałami kry-

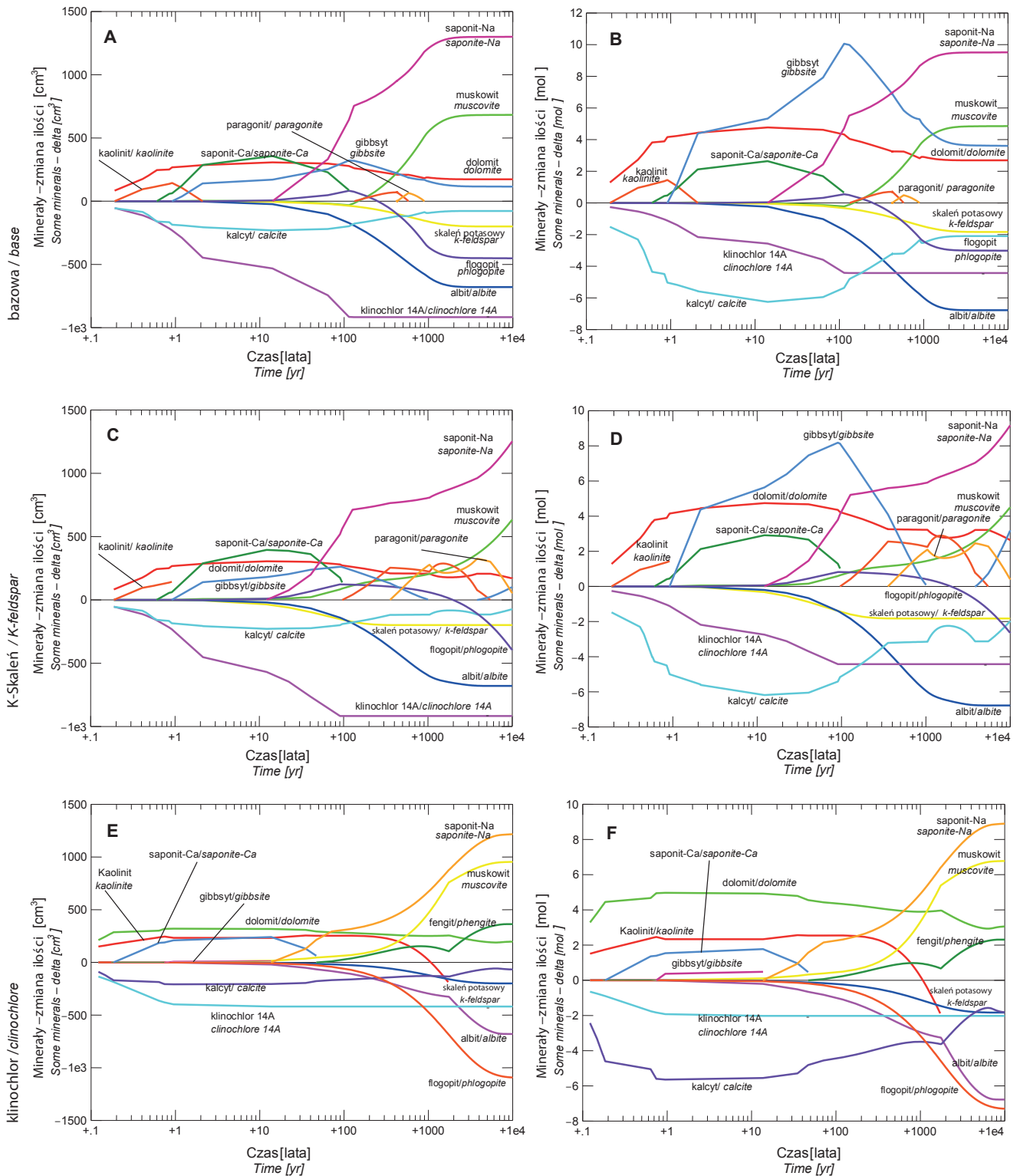


Fig. 3. Zmiany objętości i ilości faz mineralnych podczas realizacji scenariusza bazowego oraz scenariuszy, w których stałe szybkości reakcji skalenia potasowego i klinochloru podwyższono o jeden rząd wielkości

Changes in the volume and quantity of mineral phases during the baseline scenario, and the scenarios in which the K-feldspar and clinochlore reaction rate constants were increased by one order of magnitude

LITERATURA

- BETHKE C.M., 2008 – Geochemical and biogeochemical reaction modeling. Cambridge Univ. Press., Cambridge.
- BETHKE C.M., YEAKEL S., 2013 – The Geochemist's Workbench Release 9.0. Reactive Transport Modeling Guide. Aqueous Solutions, Illinois.
- EKBERG C., 1999 – Sensitivity analysis and simulation uncertainties in predictive geochemical modelling. *Freiberg Online Geoscience*, **2**: 1–109.
- HOLLOWAY S., 2005 – Underground sequestration of carbon dioxide a viable greenhouse gas mitigation option. *Energy*, **30**: 2318–2333.
- LASAGA A.C., 1984 – Chemical kinetics of water–rock interactions. *J. Geoph. Res.*, **89**: 4009–4025.
- LABUS K., SUCHODOLSKA K., 2015 – Rezultaty badań eksperymentalnych i hydrogeochemicznego modelowania efektów interakcji między gazami kwaśnymi (CO₂ i H₂S) a środowiskiem geologicznym wybranych skał GZW. *Prz. Geol.*, **63**, 10/2: 887–832.
- LABUS K., TARKOWSKI R., WDOWNIN M., 2015 – Modeling gas–rock–water interactions in carbon dioxide storage capacity assessment: a case study of Jurassic sandstones in Poland. *Int. J. Env. Sci. Tech.*, **12**, 8: 2493–2502.
- LABUS K., KASZAP, TUREK M., DYDOP., JAKÓBIK-KOLONA., WILK K., LEŚNIAK G., 2016 – Laboratory experiments on forming the chemical composition of flowback from hydraulic fracturing with energized fluid. *Procedia Earth Planet. Sci.*, **17**: 582–585.
- LUBAŚ J., SZOTT W., 2010 – 15-year experience of acid gas storage in the natural gas structure of Borzęcin – Poland. *Nafta-Gaz*, **66**, 5: 333–338.
- PALANDRI J.L., KHARAKA Y.K., 2004 – A compilation of rate parameters of water–mineral interaction kinetics for application to geochemical modeling. *W: US Geological Survey Open File Report 2004–1068*: 1–64.
- SINAL M.L., LANCASTER G., 1987 – Liquid CO₂ Fracturing: Advantages And Limitations. *J. Can. Petrol. Techn.*, **26**, 5: 26–30.
- XU T., APPS J.A., PRUESS K., YAMAMOTO H., 2007 – Numerical modeling of injection and mineral trapping of CO₂ with H₂S and SO₂ in a sandstone formation. *Chem. Geol.*, **242**: 319–346.

SUMMARY

In the case of using computer modelling to simulate complex processes, such as interactions in hydrogeochemical systems, the sensitivity analysis proves to be a suitable tool for assessing the impact of varying parameter sizes on the obtained results.

This paper presents an example of sensitivity analysis for changes in reaction kinetics parameters in relation to the results obtained in hydrogeochemical modelling of water–rock–gas systems, for the purpose of sequestering acidic gases (mixtures of carbon dioxide and hydrogen sulphide) in water–rock–gas systems.

The calculations were made to take into account the influence of differentiation of reaction rate for K-feldspar and clinocllore on the reactions of decomposition and crystallization of mineral phases during the modelled storage of acidic gases, and petrotectural effects (changes in porosity),

as well as the amount of mineral sequestration of carbon in the rock formation. These baseline scenario results were compared to the results obtained for the other two scenarios, corresponding to the constant reaction rates increased or decreased by one order of magnitude.

The differences result from the diversity of reactions, affecting the amount of water in the system and the volume balances of the minerals crystallizing or decomposing during each of the modelled scenarios.

Differences in the described petrotectural and physicochemical effects seem to be small. However, it should be taken into account that they result from the modification of a single parameter only – the rate of reaction for selected mineral phases. In fact, when there are many parameters to describe the modelled system, the associated effects may interfere with each other.