

碳酸盐岩有水气藏 CO₂-水-岩动态溶解的孔隙尺度模拟

张涛¹, 范云婷¹, 赵玉龙¹, 汪永朝¹, 文绍牧², 赵子涵³, Aliakbar Hassanpouryouzband⁴, 张烈辉¹

(1. 西南石油大学 油气藏地质与开发工程全国重点实验室, 四川 成都 610500; 2. 中国石油 西南油气田公司, 四川 成都 610051; 3. 中国石油 西南油气田公司 勘探开发研究院, 四川 成都 610041; 4. 英国爱丁堡大学 地球科学学院, 英国 爱丁堡, EH93FE)

摘要: 将 CO₂ 注入碳酸盐岩储层是实现天然气增产与碳封存的关键技术。CO₂ 注入储层后溶于地层水, 形成酸性流体, 并溶解部分矿物, 进而引起多孔介质孔渗参数的变化。构建耦合反应输运模型的格子玻尔兹曼方法 (LBM), 结合高温、高压条件下微计算机断层扫描技术 (Micro-CT) 驱替实验验证, 揭示了碳酸盐岩储层中 CO₂ 注入后的孔隙尺度溶解机制。通过模拟不同驱替压差 (0.5 ~ 2.0 MPa)、回压 (10.0 ~ 50.0 MPa) 和温度 (40 ~ 140 °C) 条件下的溶解反应, 明确了对应条件下的反应动力学特征与孔隙演化规律。研究结果表明: ①增大压差扩大了流体波及范围、增加了孔隙中氢离子浓度, 进而提升了溶解效率, 碳酸盐岩溶解量由 10.6% 增至 17.9%。②升高回压增强了 CO₂ 溶解度, 进而提高了氢离子浓度和溶液酸性, 促进了溶解反应, 碳酸盐岩溶解量由 10.6% 增至 19.0%。③高温条件下, 尽管 CO₂ 溶解度降低导致溶液中氢离子浓度下降, 对溶解反应产生了一定的抑制作用, 但反应速率增大的影响仍占主导, 碳酸盐岩溶解量持续增大, 最终由 10.6% 增至 42.7%。此外, 各工况下均观察到明显的非均匀溶解特征, 证实孔隙结构对溶解反应形态具有控制作用。

关键词: 格子玻尔兹曼方法 (LBM); 反应动力学; 矿物溶解; 孔隙尺度模拟; CO₂-水-岩体系; 碳捕集、利用与封存 (CCUS)

中图分类号: TE319

文献标识码: A

Pore-scale simulation of dynamic CO₂-brine-rock dissolution in carbonate gas reservoirs with water

ZHANG Tao¹, FAN Yunting¹, ZHAO Yulong¹, WANG Yongchao¹, WEN Shaomu², ZHAO Zihan³,
ALIAKBAR Hassanpouryouzband⁴, ZHANG Liehui¹

(1. State Key Laboratory of Oil and Gas Reservoir Geology and Exploitation, Southwest Petroleum University, Chengdu, Sichuan 610500, China; 2. Southwest Oil & Gasfield Company, PetroChina, Chengdu, Sichuan 610051, China; 3. Exploration and Development Research Institute, Southwest Oil & Gasfield Company, PetroChina, Chengdu, Sichuan 610041, China; 4. School of Geosciences, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FE, UK)

Abstract: CO₂ injection into carbonate reservoirs is a key technology for enhancing natural gas recovery and achieving carbon sequestration. After injection, CO₂ reacts with formation water to form acidic fluids, which dissolve certain minerals and consequently alter the porosity and permeability of porous media. A Lattice Boltzmann Method (LBM) coupled with a reactive transport model was developed and validated against high-temperature and high-pressure micro-computed tomography (micro-CT) displacement experiments to reveal pore-scale dissolution mechanisms after CO₂ injection into carbonate reservoirs. Dissolution reaction simulations under different displacement pressure differentials (0.5 ~ 2.0 MPa), back pressures (10.0 ~ 50.0 MPa), and temperatures (40 ~ 140 °C) were conducted to determine the corresponding reaction kinetic characteristics and pore evolution patterns. As indicated by the research results, (1) increasing the displacement pressure differential expands the fluid swept area and elevates hydrogen ion concentrations in pores, thereby improving dissolution efficiency. The carbonate dissolution amount increases from 10.6% to 17.9%. (2) Elevating back pressure enhances CO₂ solubility, thereby increasing hydrogen ion concentrations

收稿日期: 2026-05-09; 修回日期: 2026-09-29。

第一作者简介: 张涛 (1992—), 男, 博士、副研究员, 微观渗流理论及模拟、气藏工程理论和油气藏数值模拟。E-mail: tobiascheuing@163.com。

通信作者简介: 赵玉龙 (1986—), 男, 博士、研究员, 非常规油气藏开发、复杂油气渗流理论和 CCUS。E-mail: 373104686@qq.com。

基金项目: 国家自然科学基金青年项目 (52304044); 国家自然科学基金联合基金重点项目 (U23A2022); 国家自然科学基金面上项目 (52474047); 四川省教育科学联合基金面上项目 (2025LHJJ0071)。

and solution acidity and promoting dissolution reactions. Carbonate dissolution increases from 10.6% to 19.0%. (3) Under high-temperature conditions, although reduced CO_2 solubility decreases hydrogen ion concentrations and partially inhibits dissolution reactions, the effect of increased reaction rates dominates, resulting in continuous enhancement of carbonate dissolution from 10.6% to 42.7%. Pronounced heterogeneous dissolution characteristics were observed under all working conditions, confirming that pore structures control the morphological evolution of mineral dissolution.

Key words: Lattice Boltzmann Method (LBM), reaction kinetics, mineral dissolution, pore-scale simulation, CO_2 -brine-rock system, carbon capture, utilization and storage (CCUS)

引用格式:张涛,范云婷,赵玉龙等. 碳酸盐岩有水气藏 CO_2 -水-岩动态溶解的孔隙尺度模拟[J]. 石油与天然气地质, DOI:10.11743/oggXXXXX01.

ZHANG Tao, FAN Yunting, ZHAO Yulong, et al. Pore-scale simulation of dynamic CO_2 -brine-rock dissolution in carbonate gas reservoirs with water[J]. Oil & Gas Geology, DOI:10.11743/oggXXXXX01.

在“双碳”战略目标背景下, CO_2 捕集、利用与封存(CCUS)技术作为关键减排路径,不仅能够减少 CO_2 排放,还能保障能源安全、促进可持续发展^[1-3]。在众多地质封存体中,碳酸盐岩储层约占全球油气总储量的40%,成为 CO_2 地质封存和提高天然气采收率(CO_2 -EGR)技术应用的重要场所^[4-9]。在 CO_2 注入碳酸盐岩储层过程中,会引发一系列物理化学反应^[10]:部分 CO_2 会溶于地层水形成碳酸(H_2CO_3),碳酸电离释放氢离子(H^+)导致地层水pH值降低^[11]。酸性环境下,碳酸盐岩中白云石 $[\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2]$ 和方解石(CaCO_3)等矿物会发生溶解反应^[12-13],显著改变储层微观孔隙结构特征,进而引起宏观尺度上孔隙度和渗透率参数的动态演化^[14-15]。因此,系统研究 CO_2 -水-岩相互作用下的碳酸盐岩溶解动力学机制,定量表征储层物性参数的演化规律,对于优化CCUS技术参数、实现安全高效碳封存与气藏开发具有重要的理论和实践意义^[16-17]。

近年来,国内外学者通过岩心驱替反应实验对 CO_2 -水-岩体系的作用机理开展了研究,利用核磁共振、扫描电镜(SEM)和CT扫描等定量表征技术^[18-22],观察到超临界 CO_2 (Sc- CO_2)注入对岩石孔喉结构的显著影响,证实了Sc- CO_2 在强化裂缝网络和提高储层渗透率等方面的独特优势^[23-24]。汤勇等^[25]利用X射线衍射分析(XRD)和扫描电镜(SEM)等手段,对 CO_2 -水-岩相互作用前后的岩石矿物组成、地层水离子浓度以及矿物微观结构变化进行了深入分析。在碳酸盐岩储层方面,Eyitayo等^[26]开展了不同注入策略下的岩心驱替实验,发现持续注入 CO_2 会引发强烈的矿物溶解反应,最终导致孔隙度和渗透率增加。部分学者通过数值模拟方法进一步揭示了 CO_2 注入储层后发生的水-岩反应及其对储层物性的影响机制^[27]。Li等^[28]对富碳酸盐岩页岩的研究表明,在 CO_2 压裂和关井过程中,随反应时间延长,岩石孔隙度和渗透率逐渐增大。

Zhang等^[29]定量表征了 CO_2 饱和盐水注入后石灰岩样品微观结构的动态演化,发现孔隙度和渗透率均有所增加。Dai等^[30]发现 CO_2 溶液浸泡会溶解致密砂岩中的方解石和白云石,形成次生孔隙,导致孔喉平均半径扩大。丁茜等^[31]通过实验与数值模拟结合,考察了不同温度和压力等因素对 CO_2 饱和盐水与碳酸盐岩相互作用的影响。现有研究表明, CO_2 注入储层会引发复杂的 CO_2 -水-岩相互作用,但这些研究主要集中在岩心尺度,对孔隙尺度上的微观结构演化机制认识尚不充分,尤其是溶解过程中流-固界面动态变化的精细表征仍有待深入。

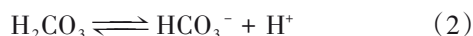
为深入揭示 CO_2 -水-岩相互作用的孔隙尺度微观机理,数值模拟手段因具有可重复性好、灵活性高和成本低等优势,已成为重要的研究工具。其中,格子玻尔兹曼方法(LBM)凭借其在复杂多孔介质适应性好、无需显性捕捉相界面和并行简单等优势^[32-33],成为研究多孔介质中流动与反应耦合过程的重要工具。近年来,LBM在 CO_2 -水-岩系统研究中取得了一些重要进展。An等^[34]开发了耦合地球化学模拟器PhreeqcRM的LBM模型,用于研究碳酸盐岩中的孔隙尺度反应输运过程,发现随流速增大,岩石溶解趋于均匀化。Xie等^[35]基于LBM方法开展了孔隙尺度数值模拟研究,发现高温储层配合高注入速率是促进 CO_2 封存效率的有利工况。Gao等^[36]通过自主开发的LBM程序实现了碳酸溶液与砂岩反应过程中孔隙演化的动态模拟。陈黎等^[37]改进了LBM反应边界条件,并从孔隙尺度研究了 CO_2 非均相与均相的溶解埋存机理。Fazeli等^[38]开发了耦合LBM与IPHREEQC的三维孔隙尺度反应输运模型,探究非均质碳酸盐盖层中反应性矿物与非反应性矿物的裂缝演化规律。Gray等^[39]通过数值模拟与实验对比,揭示了 CO_2 饱和溶液-方解石体系中碳酸主导的溶解机制,发现传统非线性饱和模型会高估溶解

速率,而耦合离子输运效应对溶解速率的影响较小。

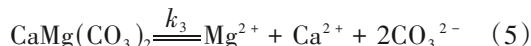
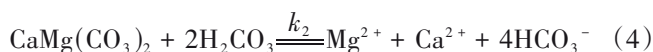
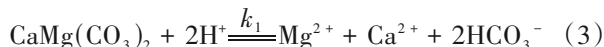
现有基于 LBM 方法的研究多集中于均质机理模型,对真实岩石复杂孔隙结构特征的考虑不足,缺乏对矿物反应动力学的系统表征,且数值模拟结果与实验验证之间的对比尚不充分。本文拟结合室内试验和 LBM 模拟,从孔隙尺度上探讨 CO₂-水-岩反应导致的动态溶解过程:①搭建高温、高压微计算机断层扫描技术(Micro-CT)在线驱替实验平台开展岩心驱替实验,实现储层条件下岩心驱替过程的原位动态观测;②基于实验数据构建溶解反应 LBM 模型,通过与实验结果对比,确保模型在相同边界条件、物性参数和反应动力学参数下的计算结果与实验观测结果高度吻合,从而建立具有严格物理意义的 LBM 数值模型;③利用所建 LBM 模型模拟碳酸盐岩在不同压差、回压和温度等条件下的孔隙结构演化,定量揭示其溶解规律。研究成果将为碳封存相关工业应用的注采参数优化及安全评估提供重要的理论依据和技术支撑。

1 矿物溶解动力学模型构建

将 Sc-CO₂注入地下储层后,其会与地层水反应生成碳酸(H₂CO₃)[反应式(1)]。H₂CO₃解离会释放 H⁺从而导致地层酸度的增加[反应式(2)],其波及范围为注入点到近井筒区域:



在酸性条件下,白云石会发生溶解反应。一般认为,和方解石一样,白云石的溶解可以用发生在固-液界面的 3 个平行反应来描述^[40]:



考虑到以上 3 个反应步骤的化学计量学和热力学限制,本研究仅关注白云石的溶解反应,白云石总溶解速率为^[41]:

$$I_m = k_1 a_{\text{H}^+}^n + k_2 a_{\text{H}_2\text{CO}_3}^n + k_3 \quad (6)$$

如前所述,白云石的溶解过程仅在近井筒区域予以考虑。为简化计算,根据化学计量关系,本文采用单一不可逆非均相反应^[42]进行模拟研究[反应式(3)]。

因此,本研究中白云石的溶解速率通过以下简化

公式进行描述:

$$I_{\text{H}^+} = k_{\text{H}^+} a_{\text{H}^+}^n \quad (7)$$

由公式(7)可知,溶解速率只与 H⁺的活度有关,因此,只需要考虑 H⁺的消耗。

采用 Arrhenius 方程来分析温度对反应速率常数的影响^[43]。

$$k(T) = k_0 \exp \left[-\frac{\Delta E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (8)$$

其中, $R = 8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$, $\Delta E = 34 \text{ kJ}/\text{mol}$ ^[44]。

与速率常数相似,扩散系数也依赖于温度,其关系式如下^[43]:

$$D(T) = D_0 \exp \left[-\frac{\Delta E_D}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right] \quad (9)$$

其中, $\Delta E_D = 14 \text{ kJ}/\text{mol}$, 根据公式(8)和公式(9),速率常数和扩散系数与温度成正比。在 25 °C 时,组分的扩散系数设定为 $4.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ ^[45]。

2 矿物溶解 LBM 模型构建

2.1 数值模型

本研究使用单松弛格子玻尔兹曼方程建立描述流体流动[公式(10)]和质量传递[公式(11)]的耦合计算模型。D2Q9 模型具有较好的各向同性和数值稳定性,适用于二维不可压流动模拟。D2Q5 模型能够满足二维对流-扩散方程求解需求,并可在保证计算精度的同时提高计算效率^[46]。因此,本研究采用 D2Q9 和 D2Q5 两种离散速度模型分别描述速度场和浓度场的演化过程,具体演化方程如下:

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} \left[f_i(x, t) - f_i^{\text{eq}}(x, t) \right] \quad (10)$$

$$g_{k,i}(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) - g_{k,i}(x, t) = -\frac{1}{\tau_{k,g}} \left[g_{k,i}(x, t) - g_{k,i}^{\text{eq}}(x, t) \right] \quad (11)$$

上述控制方程由两个主要部分构成:左侧表征粒子迁移过程,右侧描述粒子碰撞效应。

流体流动模型中松弛时间(τ)的具体表达式如下:

$$\tau = \frac{\nu}{c_s^2 \Delta t} + 0.5 \quad (12)$$

在 D2Q9 模型中, $c_s^2 = 1/3$ 。

质量传递模型中扩散系数(D_k)与松弛时间($\tau_{k,g}$)之间的关系可由下式表示:

$$D_k = C_Q(1 - J_{k,0})(\tau_{k,g} - 0.5) \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (13)$$

其中,在二维模拟中 $C_Q = 1/2^{[46]}$ 。

格子离散速度(e_i)与特定的格子模型相关,D2Q9模型的格子离散速度为:

$$e_i = \begin{cases} 0, & i = 0 \\ \left(\cos\left[\frac{(i-1)\pi}{2}\right], \sin\left[\frac{(i-1)\pi}{2}\right] \right), & i = 1, 2, 3, 4 \\ \sqrt{2} \left(\cos\left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right], \sin\left[\frac{(i-5)\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right] \right), & i = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (14)$$

式中:外侧大括号表示分段函数定义规则,根据方向编号 i 的取值选取对应方向的矢量表达式。

而D2Q5模型仅保留 $i = 0 \sim 4$ 这5个速度方向。

公式(15)表示流体流动模型的平衡分布函数,公式(16)表示质量传递模型的平衡分布函数:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[1 + \frac{1}{c_s^2} e_i u + \frac{1}{2c_s^4} (e_i u)^2 - \frac{1}{2c_s^4} u^2 \right] \quad (15)$$

$$g_{k,i}^{\text{eq}} = C_k \left(J_{k,i} + \frac{1}{2} e_i u \right) \quad (16)$$

其中, $w_0 = 4/9$, $w_{1-4} = 1/9$, $w_{5-8} = 1/36$ 。

$J_{k,i}$ 表示为:

$$J_{k,i} = \begin{cases} J_{k,0}, & i = 0 \\ (1 - J_{k,0})/4, & i = 1, 2, 3, 4 \end{cases} \quad (17)$$

其中, $i = 0$ 方向上的传质平衡权重系数($J_{k,0}$)数值范围介于 $0 \sim 1^{[46]}$ 。

宏观流体密度(ρ)、流体速度(u)以及组分 k 的宏观浓度(C_k)由下述公式求得:

$$\rho = \sum_i f_i \quad (18)$$

$$\rho u = \sum_i f_i e_i \quad (19)$$

$$C_k = \sum_i g_{k,i} \quad (20)$$

2.2 固相更新

在孔隙尺度多孔介质反应输运模拟中,精确表征流体相与固体相的空间分布是关键。传统计算流体力学方法需要复杂的界面追踪或网格重构技术来捕捉溶解过程中的流-固界面演化,这在实际应用中面临计算效率低、处理复杂几何困难等挑战。本研究采用LBM模拟溶解,结合像素体积法(volume of pixel, VOP)对反应界面进行更新。该方法可以避免传统方法中的网格重构过程,在保证质量守恒的同时显著提高计算

效率,为多孔介质内复杂反应输运过程的模拟提供了有效的数值解决方案。

在VOP方法中,整个域被划分为像素节点,每个节点被分配一个代表固相体积的数值。在每个时间步,对于处于反应性固-液界面的固相节点,固相体积(V_s)通过以下公式进行更新^[37]:

$$\frac{\partial V_s}{\partial t} = -V_m I_H A \quad (21)$$

对上述公式进行求导得出下式,在每一时间步长内对固相体积(V_s)进行显式更新:

$$V_s(t + \Delta t) = V_s(t) - V_m I_H A \Delta t \quad (22)$$

本研究中格子单位下的 Δt 和 A 取值均为1。

当流体-固体界面处某一固体节点的固相体积(V_s)因溶解反应达到0,该节点将从固体节点转化为流体节点,同时,这一新流体节点中的流体流动和传质信息需进行初始化,而其相邻的固体节点可能会根据特定的孔隙几何结构转变为界面节点,单个时间步长内允许多个液体节点生成。

2.3 边界条件

1) 非平衡态外推边界条件

为了更好地处理速度边界和压力边界等流动边界条件,研究采用郭照立^[47]等人提出的非平衡态外推边界条件来处理左右边界,该方法具有二阶精度高、稳定性好的优点,其表达式如下:

$$f_i(x, t) = f_i^{\text{eq}}[\rho(x, t), u] + [f_i(x', t) - f_i^{\text{eq}}(x', t)] \quad (23)$$

$$g_{k,i}(x, t) = g_{k,i}^{\text{eq}}[C(x, t), u] + [g_{k,i}(x', t) - g_{k,i}^{\text{eq}}(x', t)] \quad (24)$$

2) 无滑移、无通量边界条件

采用无滑移边界条件处理速度场的上、下边界,该条件认为流体在边界处的速度为0,在LBM框架中,通过标准反弹格式对分布函数进行处理,其表达式如公式(25)所示。采用无通量边界条件处理浓度场的上、下边界(即边界处溶质通量为0),可通过将边界处未知的分布函数设置为相反方向的已知分布函数值,从而实现边界处的通量守恒,表达式为公式(26)。

$$f_i(x, t + \Delta t) = f_{-i}(x, t) \quad (25)$$

$$g_i(x, t + \Delta t) = g_{-i}(x, t) \quad (26)$$

3) 通用浓度边界条件

当采用宏观浓度边界条件时,需对浓度分布函数 $g_{k,i}(x, t)$ 的未知方向进行特殊处理以确定其值。Chen等^[37]提出了一种通用的浓度边界条件,能够处理多孔介质中包括反应边界和移动边界在内的不同浓度边界。与以往研究^[48-49]相比,该边界条件的优势在于能够捕捉液-气界面之间伴随相变的移动边界。在本研

究中,采用这种浓度边界条件来处理非均相反应,以求解 CO₂ 饱和盐水与 CaMg(CO₃)₂ 之间的反应。白云石溶解反应中的静态液-固浓度边界条件可通过以下计算实现:

$$D \frac{C_R - C_F}{c} = I_H \quad (27)$$

3 模型验证

3.1 对流扩散

为了验证建立的质量运输 LB 模型,对二维通道内的对流-扩散问题进行分析^[50],矩形计算域长度(L)为 120 μm ,高度(H)为 100 μm ,流体以恒定水平速度(u)从左侧注入计算域,边界条件设定为 $x = 0$ 处组分 k 以浓度 $C_{\text{in}} = 1$ 流入计算域, $x = L$ 处以 $C_{\text{out}} = 0$ 流出(图 1a),整个过程为一个均相系统中的反应传输问题^[51],在不考虑体相反应的情况下,该问题的宏观控制方程可简化为:

$$u \frac{dC}{dx} = D \frac{d^2C}{dx^2} \quad (28)$$

式中: $u \frac{dC}{dx}$ 表示对流作用运输的溶质物质的量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$; $D \frac{d^2C}{dx^2}$ 表示扩散作用运输的溶质物质的量, $\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。

公式(28)中扩散系数 $D = 1 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$, 公式(17)

中 $J_0 = 0.2$, 基于微分方程理论, 公式(28)的解析解可表示为:

$$C = A_1 \exp(B_1 x) + A_2 \exp(B_2 x) \quad (29)$$

$$B_1 = 0, B_2 = \frac{u}{D}, A_1 = \frac{C_{\text{out}} - C_{\text{in}} \exp(B_2 L)}{\exp(B_1 L) - \exp(B_2 L)}, A_2 = C_{\text{in}} - A_1 \quad (30)$$

图 1 为不同 Pe 值下的模拟结果(Pe 表示对流与扩散的相对强度), Pe 的取值范围为 $-10 \sim 10$ 。从图 1b 中可以看出, 模拟结果在所有情况下均与解析解高度一致。

$$Pe = \frac{uL}{D} \quad (31)$$

3.2 反应运输

为验证所采用的浓度边界条件求解方法, 复现了 Molins 等人^[42]的经典基准案例。此案例在一个二维矩形区域内模拟了白云石溶解的反应传输和流体流动过程。区域中心放置了一个圆形颗粒, 其表面发生非均相反应(图 2a)。所采用的单一不可逆非均相反应与公式(3)相同, 且不考虑固相演化, 反应速率由公式(7)表示, 浓度边界条件[公式(27)]则应用于流-固界面。此外, 本验证中使用的物理和数值参数严格遵循原文设置。当 H^+ 浓度达到稳态后(图 2b), 将水平和垂直中心线($y = 0.025 \text{ cm}$, $x = 0.050 \text{ cm}$)上的 pH 值分布与 Molins 等人^[42]的结果进行对比, 发现二者高度吻合(图 3)。需要说明的是, 此模拟中的低 pH 值等参数旨

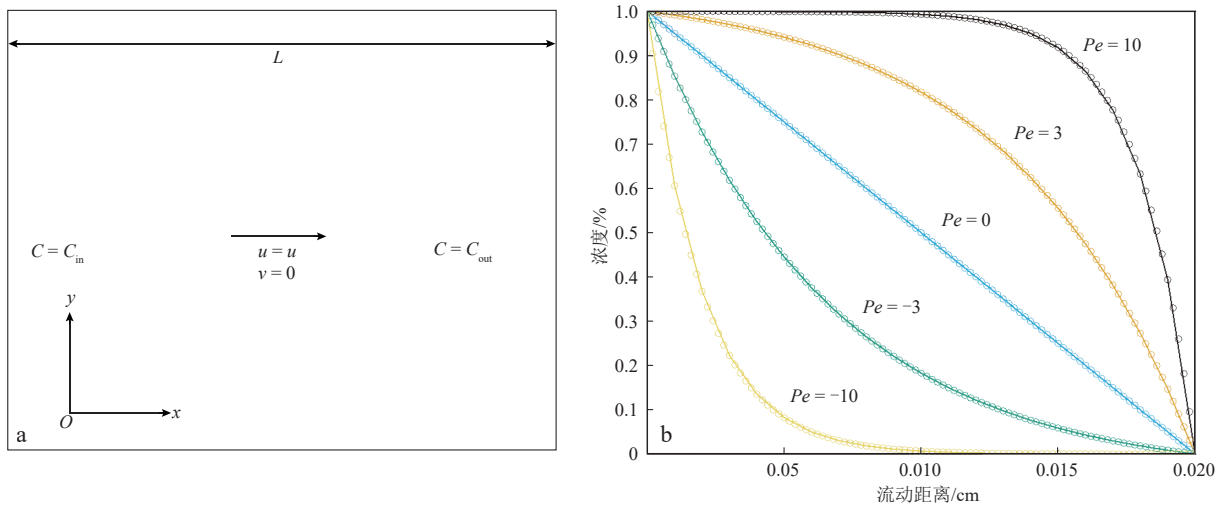


图 1 对流扩散模拟域及不同佩克莱特数(Pe)数值下解析解与格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟结果对比

Fig. 1 Schematic of convection-diffusion simulation domain and comparison between analytical solutions and Lattice Boltzmann Method (LBM) simulation results under different Péclet numbers (Pe)

a. 模拟域示意图; b. 不同 Pe 数值下解析解(线)与 LBM 模拟结果(点)对比

C . 晶格单位下组分 k 的浓度, 无量纲; C_{in} . 晶格单位下入口浓度, 无量纲; C_{out} . 晶格单位下出口浓度, 无量纲; L . 计算域长度, μm ; u . 水平方向速度, cm/s ; v . 垂直方向速度, cm/s ; Pe . 佩克莱特数, 表示对流作用与扩散作用的相对强弱, 无量纲

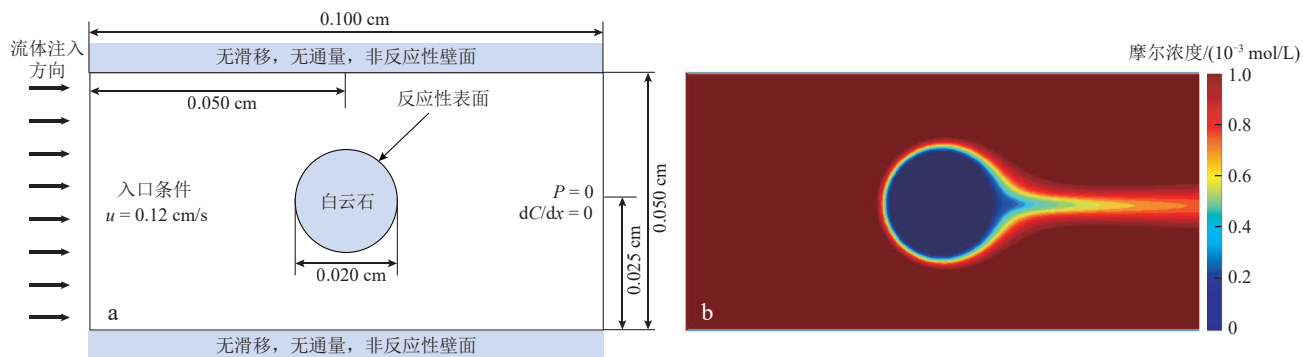


图2 格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟中含白云石反应颗粒的对流扩散模拟域及稳态氢离子浓度分布云图

Fig. 2 Schematic of convection-diffusion simulation domain with reactive dolomite particles and contour distribution of steady-state hydrogen ion concentration obtained by LBM simulation

a. 含白云石反应颗粒的模拟计算域与边界条件示意图;b. 稳定状态下的氢离子浓度分布云图

u. 水平方向速度, cm/s; P. 出口处流体相对压强, 无量纲; dC/dx. 出口处水平方向流体浓度梯度, mol/(L·cm)

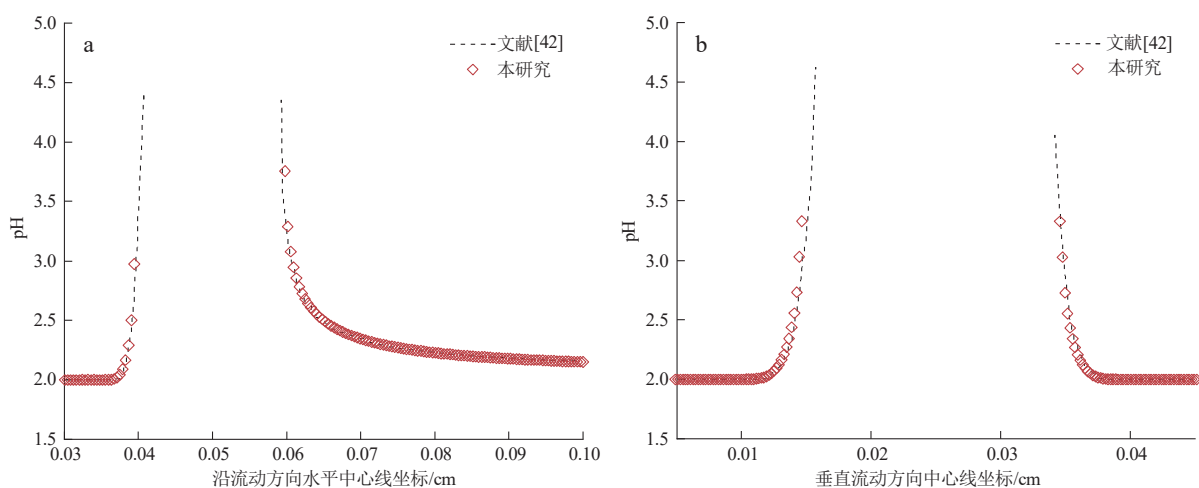


图3 稳定状态下模拟域内pH值分布

Fig. 3 Distribution of Ph values in the convection-diffusion simulation domain under steady state

a. pH值沿模拟域水平中心线的分布;b. pH值沿模拟域垂直中心线的分布

在验证算法在广域工况范围的可靠性,并非本文 CO_2 -水-岩模拟真实物理条件。该结果充分验证了本研究中采用的浓度边界条件的准确性,同时证实了所建立模型反应性输运过程的可靠性。

3.3 与实验对比

本研究所用岩心样品为四川盆地长兴组碳酸盐岩气藏储层岩石,为直径10 mm、长20 mm的柱塞样岩心。孔隙连通性较好,均质性较好,渗透率为 $250.99 \times 10^{-3} \mu\text{m}^2$,孔隙度为15.59%。X射线衍射(XRD)测定发现,样品主要由白云石(含量97.56%)组成,其次为方解石(含量1.80%),并含有极少量斜长石(含量0.28%)、石英(含量0.16%)和黏土矿物(含量0.20%)。使用高纯度 CO_2 (纯度达99.50%)制备碳酸水溶液用于驱替碳酸盐岩岩心。储层埋深为6 500 m,

地温梯度为 $2.03^\circ\text{C}/(100\text{ m})$,其中 CO_2 处于超临界状态。由于夹持器温压条件限制,为在实验室内开展基础研究,选取了温度 40°C 和压力10 MPa作为实验条件,以确保 CO_2 处于超临界状态。为量化孔隙结构在驱替过程中的演化,本研究采用高温高压Micro-CT在线驱替实验平台,通过分辨率为 $8 \mu\text{m}$ 的显微CT(Xradia 510 Versa)对反应前、后的岩心进行扫描,具体实验步骤见本团队之前的研究^[52]。选取反应前的代表性二维CT切片为后续 CO_2 -水-岩体系溶解模拟提供几何与物性参数基础(图4),模型物理尺寸为长度 $1\,280 \mu\text{m}$ 、宽度 $1\,608 \mu\text{m}$,同时利用反应后相同位置的CT切片验证模拟结果的可靠性。为聚焦溶解机制,本研究暂不考虑沉淀现象,主要分析矿物溶解导致的孔隙结构演化。

模拟使用图4中的孔隙几何模型,模拟实验条件

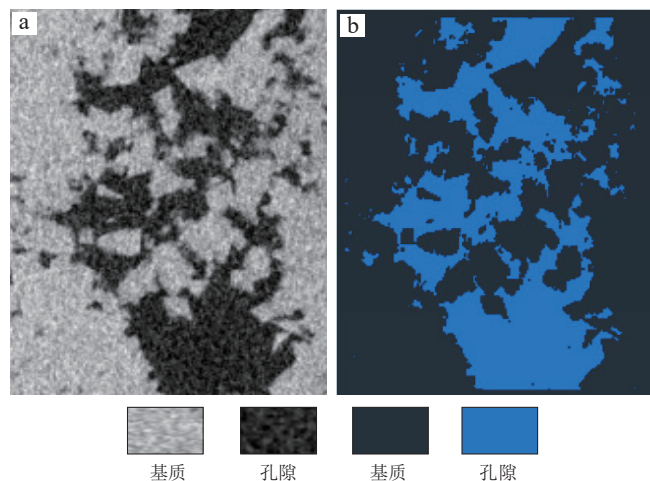


图4 四川盆地长兴组碳酸盐岩气藏岩心CT扫描切片图像
Fig. 4 CT slice of a carbonate core from the Changxing Formation gas reservoir, Sichuan Basin

a. 岩心原始CT切片孔隙分布图像,埋深6 500 m;b. 阈值分割后孔隙抽提结果图像

下(温度为40 ℃,压差为0.5 MPa,回压为10.0 MPa)的白云石溶解过程。模拟中主要参数如表1所示。

图5a和图5b分别展示了实验中驱替反应前、后的结果,图5c和图5d则为对应的数值模拟结果。图5a中标示的视域1,2和3,分别对应图5c中的视域Ⅰ,Ⅱ和Ⅲ。随着驱替反应的进行,岩石基质逐渐发生溶解,孔隙空间显著扩大,尤其在视域1和视域3位置,孔隙实现了连通。这一现象在模拟结果中同样得以体现(图5d中的视域Ⅰ和视域Ⅲ)。实验结果(图5b)与模拟结果(图5d)在溶解模式和溶解特征方面高度吻合,验证了模型在表征CO₂-盐水-碳酸盐岩溶解过程方面的可靠性。综上所述,基于LBM方法建立的驱替溶解

表1 格子玻尔兹曼方法(LBM)溶解模拟中使用的物理参数

Table 1 Physical parameters used in LBM dissolution simulations

参数	物理单位下的值	晶格单位下的值
$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	1	1
$\nu/(\text{cm}^2/\text{s})$	0.01	1/6
$D/(\text{cm}^2/\text{s})$	0.004 5	0.075 0
L/cm	0.128 0	160
W/cm	0.160 8	201
$k_{\text{H}^+}/[\text{mol}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})]$	2.60×10^{-7}	4.17×10^{-9}
$C_{\text{H}^+}/(\text{mol}/\text{cm}^3)$	$10^{-0.08}$	1
$V_{\text{m}}/(\text{cm}^3/\text{mol})$	64.70	53.82

注: ρ . 流体密度; ν . 运动黏度; D . 扩散系数; L . 模拟域长度; W . 模拟域宽度; k_{H^+} . 反应速率常数; C_{H^+} . 氢离子浓度; V_{m} . 白云石摩尔体积。

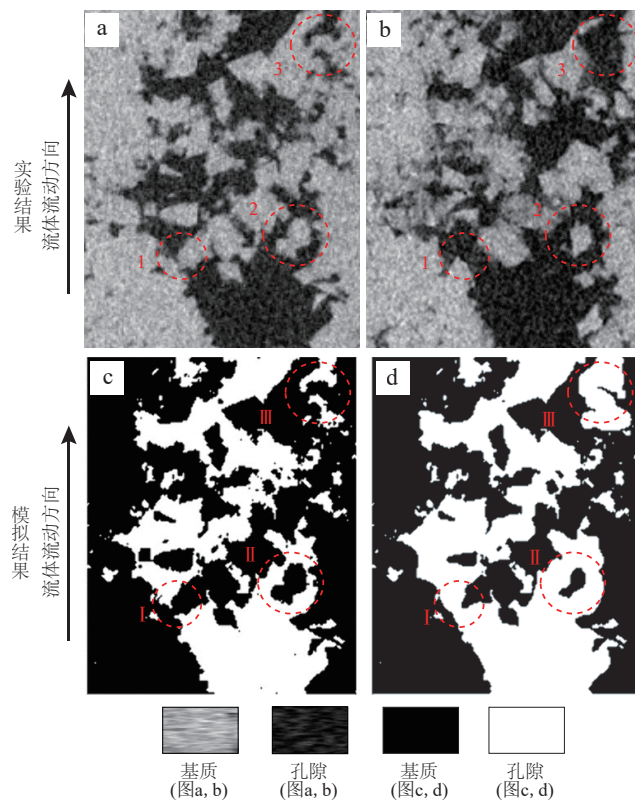


图5 CO₂-盐水-碳酸盐岩溶解反应实验CT扫描切片与格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟结果对比

Fig. 5 Comparison between CT slices from CO₂-brine-carbonate dissolution experiments and LBM simulation results

a. 溶解反应实验前岩心CT扫描图像;b. 溶解反应实验后岩心CT扫描图像;c. LBM模拟反应前二值化图像;d. LBM模拟反应后二值化图像(a图和b图中的1,2和3表示实验反应前、后图像特征孔隙位置;c图和d图中的Ⅰ,Ⅱ和Ⅲ表示模拟反应前、后图像对应特征孔隙位置。)

反应模型具有较高的可靠性,弥补了实验的局限性,为后续模拟不同参数对溶解的影响奠定基础。需要说明的是,本文采用CT切片构建孔隙尺度LBM模型,主要用于揭示局部孔隙尺度下CO₂-水-岩反应输运过程中的溶解机制和参数敏感性规律,不直接等同于完整三维岩心尺度下的渗流与溶解结果。

4 结果和讨论

4.1 压差的影响

在温度为40 ℃、回压为10 MPa的条件下,本研究模拟了不同压差(0.5, 1.0, 1.5和2.0 MPa)对驱替溶解反应的影响(图6)。图6a为不同压差条件下溶解反应的孔隙结构变化图,可以发现,在相同反应时间内,溶解效果随驱替压差的增大显著增强。这一规律与

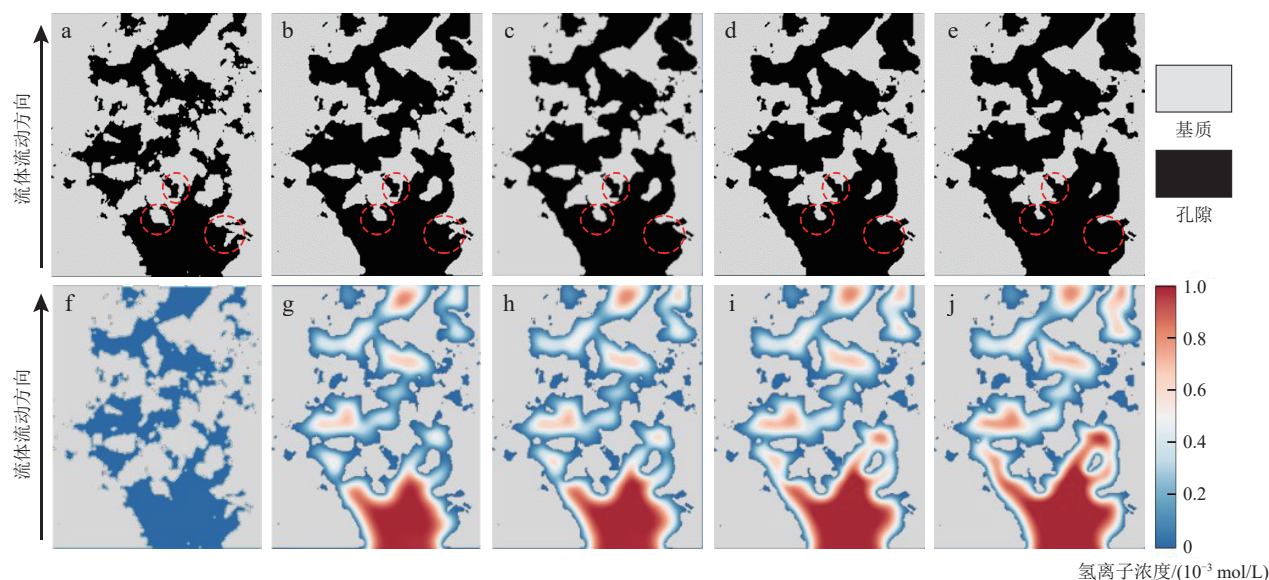


图6 不同驱替压差下碳酸盐岩孔隙结构演化与 H^+ 浓度分布格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟结果

Fig. 6 LBM simulation results of carbonate pore structure evolution and H^+ concentration distribution under different displacement pressure differentials

a. 原始岩心二维孔隙几何模型; b. 0.5 MPa压差下LBM模拟反应后孔隙结构图像; c. 1.0 MPa压差下LBM模拟反应后孔隙结构图像; d. 1.5 MPa压差下LBM模拟反应后孔隙结构图像; e. 2.0 MPa压差下LBM模拟反应后孔隙结构图像; f. 原始岩心初始 H^+ 浓度分布云图; g. 0.5 MPa压差下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; h. 1.0 MPa压差下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; i. 1.5 MPa压差下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; j. 2.0 MPa压差下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图

(a—e图中的红色圆圈为优势溶解孔道,用于对比不同压差下孔隙溶解扩径演化特征。)

Xie等人^[35]的研究结论一致,证实了增大驱替压差能够有效强化溶解反应。图6b展示的氢离子浓度分布图进一步解释了这一现象:在大孔隙中,氢离子浓度始终保持在较高水平,且对压差变化不敏感;而在小孔隙中,氢离子浓度则随着压差增大而明显升高。这种差异主要是由于压差增大能够有效扩大流体波及范围,提升孔隙压力,从而促进小孔隙中的氢离子富集。相比之下,大孔隙中的氢离子浓度已接近饱和状态,因此表现出相对稳定的特征。

如图7所示,沿驱替方向的溶解特征分析表明,岩心入口区域的溶解程度相对较低,这主要归因于该区域以大孔隙为主的单一孔隙结构导致固液接触面积有限。相比之下,中段和出口区域由于孔隙结构复杂且非均质性强,为流体-岩石相互作用提供了更大的接触面积,表现出更为显著的溶解特征(图7a)。定量分析结果表明,随着驱替压差的增大,白云石溶解量从10.6%增至17.9%(图7b)。进一步分析白云石含量变化(以节点数表征;图7c)和溶解量变化(图7d)发现,白云石溶解程度随驱替压差的增大而显著提升。这种正相关关系源于两个关键机制:①压差的增大扩展了流体波及范围,从而增加了有效溶解面积;②高压差条件下流体流速加快,促进了氢离子的快速补充,维持了

持续的溶解能力。这些发现为认识不同驱替压差条件下多孔介质中的溶解动力学提供了重要依据。

4.2 回压的影响

Zhang等人^[53]的实验结果表明,增大压力会扩大 CO_2 -水-岩体系中的固液接触面积,并提高 CO_2 在水中的溶解度,从而加速矿物溶解反应。本文在温度为40℃、驱替压差为0.5 MPa的条件下,研究了不同回压(10, 20, 40和50 MPa)对碳酸盐岩溶解反应的影响机制。模拟结果与Zhang等人^[53]的实验结论一致(图8)。随着回压的增加,在相同反应时间内,岩石孔隙空间扩大,喉道结构明显增长和增宽(图8a)。这一现象表明,压力升高增强了白云石的溶解反应效果。机理分析发现,尽管在高压条件下氢离子浓度整体提升幅度有限,但在靠近入口处的主流通区域内,氢离子浓度分布随压力升高表现出一定增强趋势(图8b)。这表明压力升高会促进 CO_2 在地层水中的溶解,增大氢离子浓度,从而增强矿物溶解反应。需要注意的是,由于驱替压差保持不变,流体波及范围变化不大。这表明压力主要通过影响溶液的化学性质而非扩展流体波及范围来促进溶解过程。

定量分析结果显示,随着回压增加,白云石溶解量

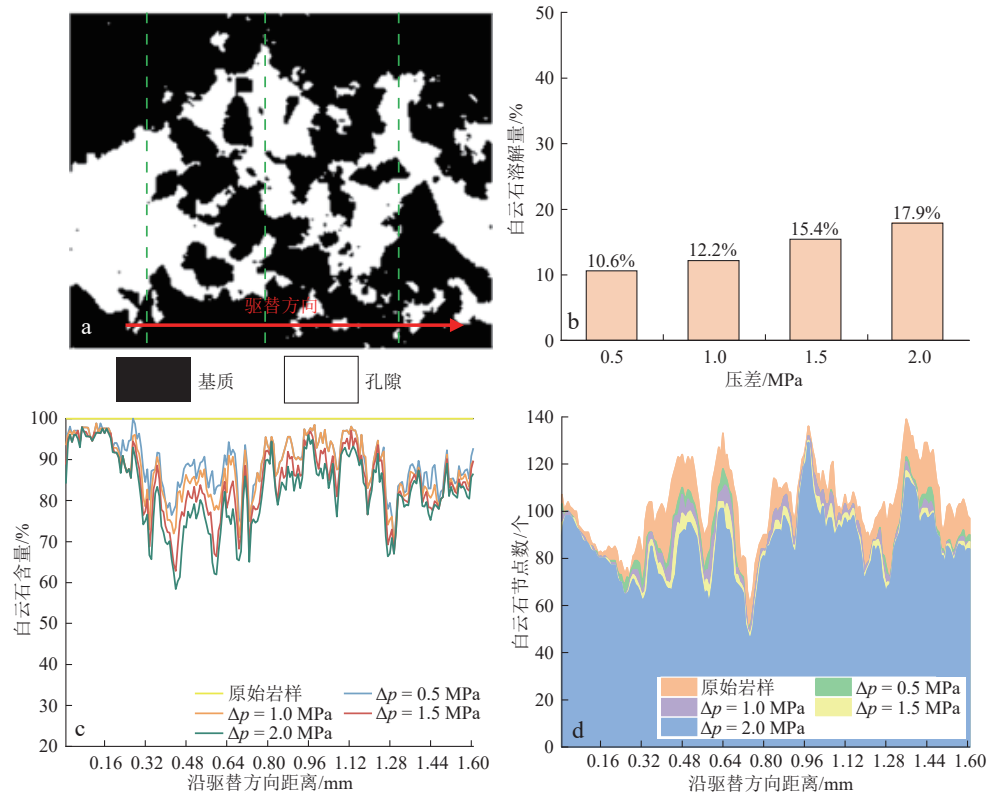
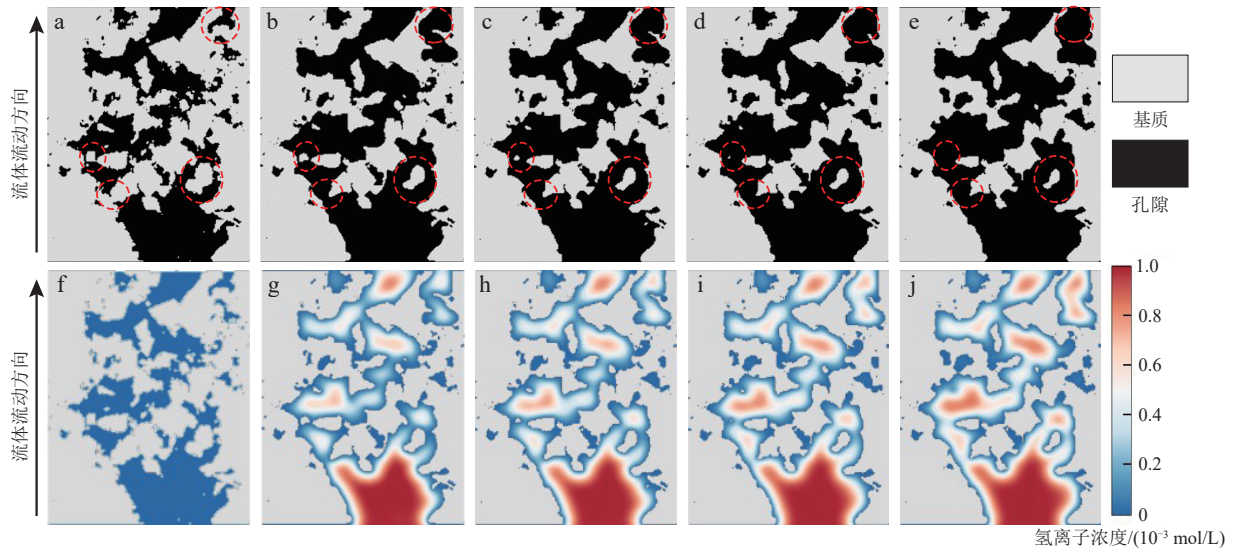


图7 格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟不同压差下沿驱替方向的白云石溶解特征

Fig. 7 LBM simulation of dolomite dissolution along the displacement direction under different pressure differentials

a. 碳酸盐岩孔隙几何模型及沿流动方向监测截面示意图; b. 不同驱替压差下白云石总溶解量LBM模拟结果; c. 沿驱替方向白云石含量分布曲线; d. 沿驱替方向白云石节点数量分布曲线
 Δp . LBM模拟反应设置的进、出口压差

(a图中3条绿色虚线表示沿岩心驱替方向划分4段特征观测区间,涵盖入口、中部两段和出口区域。)

图8 不同回压下碳酸盐岩孔隙结构演化与 H^+ 浓度分布格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟结果Fig. 8 LBM simulation results of carbonate pore structure evolution and H^+ concentration distribution under different back pressures

a. 原始岩心二维孔隙几何模型; b. 10 MPa回压下LBM模拟反应后孔隙结构图像; c. 20 MPa回压下LBM模拟反应后孔隙结构图像; d. 40 MPa回压下LBM模拟反应后孔隙结构图像; e. 50 MPa回压下LBM模拟反应后孔隙结构图像; f. 原始岩心初始 H^+ 浓度分布云图; g. 10 MPa回压下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; h. 20 MPa回压下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; i. 40 MPa回压下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图; j. 50 MPa回压下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图

(a—e图中的红色圆圈为优势溶解孔道,用于对比不同回压下孔隙溶解扩径演化特征。)

从10.6%增至19.0%(图9a)。这主要是因为 CO_2 溶解度增大,进而使得氢离子浓度升高、pH值降低。不同回压下的白云石溶解反应沿驱替方向呈现明显的非均质特征(图9b,c)。在孔隙结构单一的大孔隙区域,由于流体流动路径简单、固-液接触面积有限,溶解效果相对较弱;而在孔隙结构复杂的非均质区域,由于更大的孔隙比表面积和更复杂的流动路径,溶解效果显著增强。

4.3 温度的影响

温度是影响 CO_2 、水和岩石溶解反应的重要参数。温度升高会加速矿物溶解动力学进程,降低 CO_2 在地层水中的溶解度^[54],从而对岩石的溶解产生影响(图10)。因此,在回压为10.0 MPa、压差为0.5 MPa的条件下开展不同温度(40, 80, 120和140 $^{\circ}\text{C}$)驱替溶解反应研究。在高温环境下,随着温度的升高,一方面会导致 CO_2 在

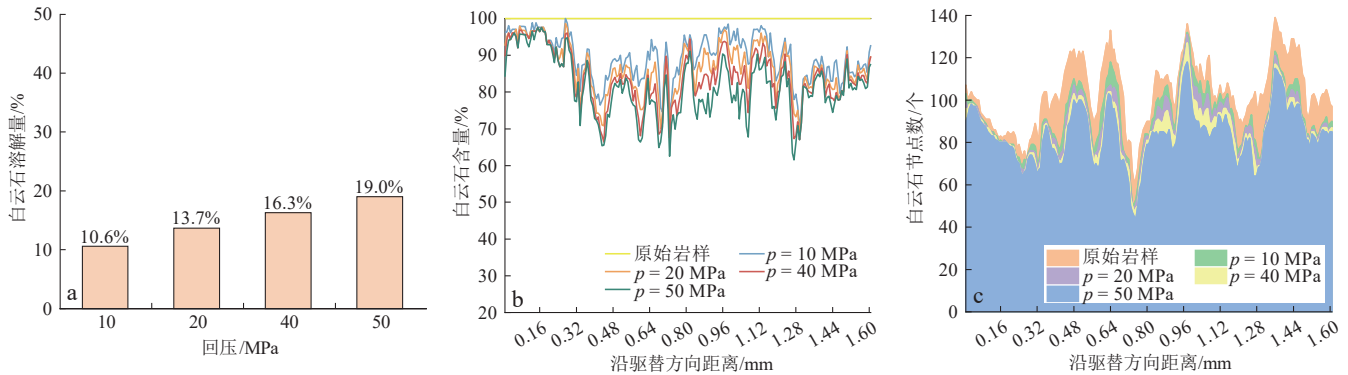


图9 格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟不同回压下沿流动方向的白云石溶解特征

Fig. 9 LBM simulation of dolomite dissolution along the flow direction under different back pressures

a. 不同回压下白云石总溶解量LBM模拟结果;b. 沿驱替方向白云石含量分布曲线;c. 沿驱替方向白云石节点数量分布曲线
p. LBM模拟反应设置的回压

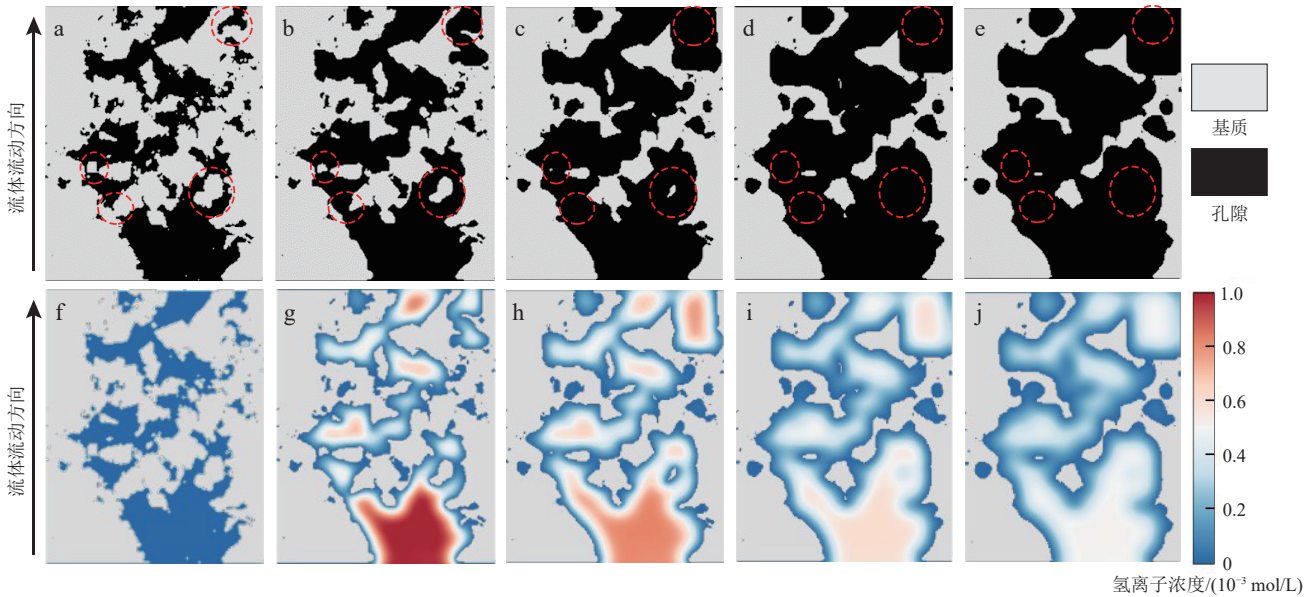


图10 不同温度下碳酸盐岩孔隙结构演化与 H^+ 浓度分布格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟结果

Fig. 10 LBM simulation results of carbonate pore structure evolution and H^+ concentration distribution under different temperatures

a. 原始岩心二维孔隙几何模型;b. 40 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后孔隙结构图像;c. 80 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后孔隙结构图像;d. 120 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后孔隙结构图像;e. 140 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后孔隙结构图像;f. 原始岩心初始 H^+ 浓度分布云图;g. 40 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图;h. 80 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图;i. 120 $^{\circ}\text{C}$ 温度下回压下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图;j. 140 $^{\circ}\text{C}$ 温度下LBM模拟反应后 H^+ 浓度分布云图

(a—e图中的红色圆圈为优势溶解孔道,用于对比不同温度下孔隙溶解扩径演化特征。)

地层水中溶解度降低,氢离子浓度随之降低(图10b),进而导致pH值增大,溶液酸性减弱,对溶解反应有一定抑制作用;另一方面,根据 Arrhenius 方程[公式(9)],温度升高显著提升了分子扩散速率和白云石反应速率常数,促进了矿物的溶解。模拟结果显示,在CO₂-水-岩动态驱替反应过程中,虽然高温条件下氢离子浓度降低,对溶解反应有一定抑制作用,但由于反应速率常数的显著提升,整体溶解量仍呈现增长趋势。

随着温度升高,白云石溶解量从10.6%增至42.7%(图11a)。这说明,虽然氢离子浓度降低会对溶解产生抑制作用,但反应速率常数升高仍占据主导地位,最终使得溶解量表现出持续增长的趋势。这一现象表明,在高温条件下,温度对反应动力学的促进作用显著超过了其对CO₂溶解度的负面影响,使得整体溶解效率保持上升趋势。与原始岩样相比,不同温度下,沿驱替方向上的白云石溶解反应分布特征与不同压差和回压溶解反应分布特征相同(图11b,c):在较为均质单一较大孔隙中溶解效果较差,在较复杂的非均质性较强的孔隙中溶解效果较好。研究结果揭示了高温条件下碳酸盐岩溶解反应的特殊动力学机制,为深层高温储层改造提供了理论依据。

4.4 工程应用启示

基于上述模拟结果,压差、回压和温度均会显著影响CO₂-水-岩反应过程中的孔隙结构演化,可为碳酸盐岩气藏CO₂-EGR与CO₂地质封存参数优化提供参考。在本文模拟范围内,随着压差由0.5 MPa增至2.0 MPa、回压由10 MPa增至50 MPa、温度由40℃增至140℃,白云石溶解量总体呈增加趋势,这说明在安

全约束下优化注入压差和储层压力条件,有利于增强CO₂-水-岩反应和孔隙结构改造作用。同时,高温储层中反应动力学作用更强,应将温度作为目标层段优选和溶蚀风险评价的重要因素。

在注采参数设计方面,适当提高压差有助于扩大流体波及范围、增强小孔隙中H⁺补给能力,并改善近井地带孔隙连通性和注入能力。但是,现场压差并非越高越好,应结合储层破裂压力、盖层封闭能力和井筒完整性合理确定注入压差,避免优势通道快速发育、局部非均匀溶蚀增强或CO₂提前突破。在地层压力较高的储层中,CO₂溶解度较高,这有利于提高溶解捕集能力并增强酸性流体对碳酸盐矿物的反应作用,但同时也需关注近井区域和高渗通道内的局部溶蚀风险。对于深层高温碳酸盐岩储层,虽然CO₂溶解度降低会削弱溶液酸性,但反应速率常数升高对溶解反应的促进作用更为明显,因此温度可作为甜点层筛选和溶蚀风险评价的重要参数。

在现场应用中,可结合储层矿物组成、温压条件、孔渗特征和裂缝发育程度,优选碳酸盐矿物含量较高、孔隙连通性较好且封盖条件可靠的目标层段。同时,根据储层破裂压力、盖层安全压力和井筒完整性约束确定合理注入压差范围,并结合数值模拟预测不同注入制度下近井地带孔隙结构演化和优势通道发育特征。此外,可通过产出流体Ca²⁺和Mg²⁺等离子浓度监测、井筒压力动态分析和时移测井等手段,对CO₂-水-岩反应强度和封存安全性进行动态评价。本文结果主要揭示孔隙尺度下参数变化对溶解反应的相对影响趋势,不直接给出适用于所有储层的普适最优参数阈值,实际工程应用中需结合具体储层条件和现场安全约束进一步优化。

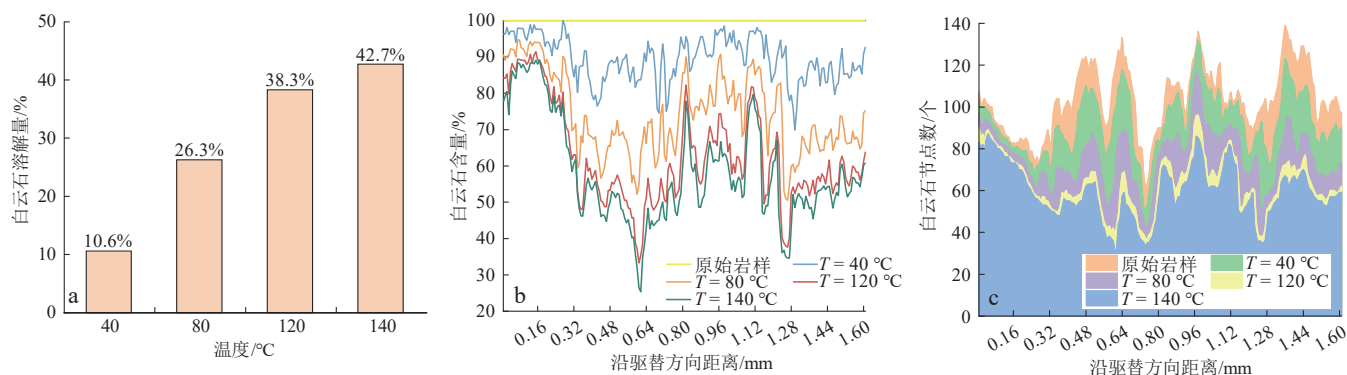


图11 格子玻尔兹曼方法(LBM)模拟不同温度下沿流动方向的白云石溶解特征

Fig. 11 LBM simulation of dolomite dissolution along the flow direction under different temperatures

a. 不同温度下白云石总溶解量LBM模拟结果;b. 沿驱替方向白云石含量分布曲线;c. 沿驱替方向白云石节点数量分布曲线

T. LBM模拟反应设置的温度

5 结论

1) 在温度为 40 °C 和回压为 10 MPa 的条件下, 驱替压差从 0.5 MPa 增至 2.0 MPa, 溶解效率显著提升, 白云石溶解量从 10.6% 增至 17.9%。这是由于压差增大不仅扩大了流体波及范围, 还通过提升小孔隙中的氢离子浓度和加速流体更新共同促进了溶解反应。

2) 在温度为 40 °C 和压差为 0.5 MPa 的条件下, 回压从 10 MPa 增至 50 MPa, 溶液中 CO₂ 溶解度提升, 进而导致氢离子浓度增加, pH 值降低。这种化学效应使得溶解效果增强, 白云石溶解量从 10.6% 增至 19.0%, 孔隙喉道宽度扩大, 但对流体波及范围的影响有限, 也即压力主要通过改变溶液化学性质而非流体动力学来影响溶解过程。

3) 在压差为 0.5 MPa 和回压为 10 MPa 的条件下, 温度从 40 °C 增至 140 °C, CO₂ 溶解度降低, 导致氢离子浓度下降, 在一定程度上会抑制溶解反应, 但影响程度有限, 而反应速率常数的增大占主导地位, 最终使得白云石溶解量从 10.6% 增至 42.7%。

4) 所有工况下的模拟结果均表现出明显的非均匀溶解特征, 非均质孔隙区域的白云石溶解量明显较均质区域大, 这种差异说明了孔隙结构非均质性对溶解反应空间分布具有控制作用。

符号注释

a_{H^+} —H⁺活度, 无量纲;
 $a_{\text{H}_2\text{CO}_3}$ —H₂CO₃活度, 无量纲;
 A —孔隙比表面积, 无量纲;
 c_s —声速, 无量纲;
 c —法向格子步长, 无量纲;
 C_R —界面节点 R 处的浓度, 无量纲;
 C_F —相邻流体节点 F 处的浓度, 无量纲;
 C_k —溶质 k 的浓度, 无量纲;
 C_Q —晶格相关系数, 无量纲;
 D —扩散系数, cm²/s;
 D_0 —基准温度 T_0 对应的基准扩散系数, cm²/s;
 D_k —溶质 k 的扩散系数, cm²/s;
 e_i —LBM 中第 i 个方向的离散速度, 无量纲;
 $f_i(x, t)$ —流体密度分布函数, 无量纲;
 $f_i^{\text{eq}}(x, t)$ —系统达到平衡状态时的流体密度分布函数, 无量纲;
 $g_{k,i}(x, t)$ —溶质 k 的浓度分布函数, 无量纲;

$g_{k,i}^{\text{eq}}(x, t)$ —系统达到平衡状态时溶质 k 的浓度分布函数, 无量纲;

i —离散速度方向索引, 无量纲;

I_{H^+} —H⁺溶解反应速率, mol/(cm²·s);

I_m —矿物溶解反应速率, mol/(cm²·s);

$J_{k,0}$ —溶质 k 在 $i = 0$ 方向上的传质平衡权重系数, 无量纲;

$J_{k,i}$ —溶质 k 在 i 方向上的传质平衡权重系数, 无量纲;

k —反应速率常数, mol/(cm²·s);

k_0 —基准温度 T_0 对应的基准反应速率常数, mol/(cm²·s);

k_1 —H⁺反应速率常数, mol/(cm²·s);

k_2 —H₂CO₃反应速率常数, mol/(cm²·s);

k_3 —白云石直接解离溶解的反应速率常数, mol/(cm²·s);

n —白云石溶解过程反应级数, 无量纲;

R —通用气体常数, J/(mol·K);

t —LBM 模拟时间步, 无量纲;

T —热力学温度, K;

T_0 —基准热力学温度, K;

u —宏观速度, 无量纲;

vV_m —摩尔体积, 无量纲;

V_s —网格节点中固相矿物体积分数, 无量纲;

x —流场空间位置坐标, 无量纲;

ΔE —反应矿物活化能, kJ/mol;

ΔE_D —扩散过程活化能, kJ/mol;

ρ —宏观密度, 无量纲;

Δt —时间步长, 无量纲;

τ —流体松弛时间, 无量纲;

$\tau_{k,g}$ —溶质 k 的松弛时间, 无量纲;

v —运动黏度, 无量纲;

ω_i — i 方向权重因子, 无量纲;

Δx —格子步长, 无量纲。

参考文献

- [1] 张贤, 李阳, 马乔, 等. 我国碳捕集利用与封存技术发展研究[J]. 中国工程科学, 2021, 23(6): 70-80.
Zhang Xian, Li Yang, Ma Qiao, et al. Development of carbon capture, utilization and storage technology in China[J]. Strategic Study of CAE, 2021, 23(6): 70-80.
- [2] 张烈辉, 曹成, 文绍牧, 等. 碳达峰碳中和背景下发展 CO₂-EGR 的思考[J]. 天然气工业, 2023, 43(1): 13-22.
Zhang Liehui, Cao Cheng, Wen Shaomu, et al. Thoughts on the development of CO₂-EGR under the background of carbon peak

- and carbon neutrality[J]. *Natural Gas Industry*, 2023, 43(1): 13–22.
- [3] 杨勇. 中国碳捕集、驱油与封存技术进展及发展方向[J]. *石油学报*, 2024, 45(1): 325–338.
- Yang Yong. Technology progress and development direction of carbon capture, oil-flooding and storage in China [J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2024, 45(1): 325–338.
- [4] 王敬霞, 雷磊, 于青春. 我国碳酸盐岩储层CO₂地质储存潜力与适宜性[J]. *中国岩溶*, 2015, 34(2): 101–108.
- Wang Jingxia, Lei Lei, Yu Qingchun. Evaluation of capacity and suitability of CO₂ geological storage in carbonate formations in basins of China mainland [J]. *Carsologica Sinica*, 2015, 34(2): 101–108.
- [5] Wang Jun, Zhao Yue, An Zhengzhen, et al. CO₂ storage in carbonate rocks: an experimental and geochemical modeling study [J]. *Journal of Geochemical Exploration*, 2022, 234: 106942.
- [6] 罗瑀峰, 黄涵宇, 舒红林, 等. 川南大安地区二叠系-三叠系海相碳酸盐岩断裂构造变形与缝洞型气藏特征[J]. *石油与天然气地质*, 2026, 47(2): 505–521.
- Luo Yufeng, Huang Hanyu, Shu Honglin, et al. Fault-related deformations and fractured-vuggy gas reservoirs in the Permian-Triassic marine carbonate strata in the Da'an area, southern Sichuan Basin [J]. *Oil & Gas Geology*, 2026, 47(2): 505–521.
- [7] 伍尚嘉, 吴俊, 樊太亮, 等. 深层碳酸盐岩岩相与力学性质相关性特征及成因机制[J]. *石油实验地质*, 2025, 47(6): 1224–1240.
- Wu Shangjia, Wu Jun, Fan Tailiang, et al. Correlation characteristics and genetic mechanisms between lithofacies and mechanical properties of deep carbonate rocks [J]. *Petroleum Geology & Experiment*, 2025, 47(6): 1224–1240.
- [8] 赵梓寒, 彭先, 王梦雨, 等. 碳酸盐岩气藏注CO₂提高采收率与埋存潜力评价指标研究[J]. *油气藏评价与开发*, 2026, 16(1): 74–83.
- Zhao Zihan, Peng Xian, Wang Mengyu, et al. Research on evaluation indicators for CO₂-enhanced gas recovery and storage potential in carbonate gas reservoirs [J]. *Petroleum Reservoir Evaluation and Development*, 2026, 16(1): 74–83.
- [9] 曹鹏, 赵振丞, 庞雄奇, 等. 塔里木盆地台盆区下古生界全油气系统碳酸盐岩油气藏改造特征与成因模式[J]. *石油与天然气地质*, 2025, 46(4): 1299–1315.
- Cao Peng, Zhao Zhencheng, Pang Xiongqi, et al. Transformations and genetic models of the Lower Paleozoic carbonate reservoirs interpreted by the whole petroleum system in the platform-basin area, Tarim Basin [J]. *Oil & Gas Geology*, 2025, 46(4): 1299–1315.
- [10] 王焰新, 毛绪美, DePaolo D. CO₂地质储存的纳米尺度流体-岩石相互作用研究[J]. *地球科学*, 2011, 36(1): 163–171.
- Wang Yanxin, Mao Xumei, DePaolo D. Nanoscale fluid-rock interaction in CO₂ geological storage [J]. *Earth Science*, 2011, 36(1): 163–171.
- [11] 姜艺, 杨胜来, 白浩言, 等. 致密砂岩气藏CO₂封存及提高CH₄采收率[J]. *新疆石油地质*, 2025, 46(5): 591–599.
- Jiang Yi, Yang Shenglai, Bai Haoyan, et al. Study on CO₂ storage and CH₄ recovery enhancement in tight sandstone gas reservoirs [J]. *Xinjiang Petroleum Geology*, 2025, 46(5): 591–599.
- [12] 文龙, 罗冰, 张本健, 等. 深层灰岩孔隙发育与保持机理——以四川盆地中部上二叠统长兴组为例[J]. *石油勘探与开发*, 2025, 52(2): 292–305.
- Wen Long, Luo Bing, Zhang Benjian, et al. Formation and preservation of pores in deep limestone reservoirs: a case study of Upper Permian Changxing Formation, central Sichuan Basin, SW China [J]. *Petroleum Exploration and Development*, 2025, 52(2): 292–305.
- [13] 杨俊超, 程远方, 韩忠英, 等. 考虑温度效应的裂缝型碳酸盐岩酸化数值模拟[J]. *特种油气藏*, 2025, 32(4): 149–157.
- Yang Junchao, Cheng Yuanfang, Han Zhongying, et al. Numerical simulation of acidizing in fractured carbonate rocks considering temperature effects [J]. *Special Oil & Gas Reservoirs*, 2025, 32(4): 149–157.
- [14] 李颖, 马寒松, 李海涛, 等. 超临界CO₂对碳酸盐岩储层的溶蚀作用研究[J]. *油气藏评价与开发*, 2023, 13(3): 288–295, 357.
- Li Ying, Ma Hansong, Li Haitao, et al. Dissolution of supercritical CO₂ on carbonate reservoirs [J]. *Petroleum Reservoir Evaluation and Development*, 2023, 13(3): 288–295, 357.
- [15] 张钰祥, 闫海军, 位云生, 等. 不同岩性气藏注CO₂渗流机理[J]. *华南师范大学学报(自然科学版)*, 2025, 57(1): 60–69.
- Zhang Yuxiang, Yan Haijun, Wei Yunsheng, et al. Seepage mechanism of CO₂ injection in different lithological gas reservoirs [J]. *Journal of South China Normal University (Natural Science Edition)*, 2025, 57(1): 60–69.
- [16] 王铭瑶, 王全荣. 莺-琼盆地咸水层CO₂封存潜力评价[J/OL]. *大庆石油地质与开发*, 2025–09–24. <https://doi.org/10.19597/J. ISSN.1000-3754.202501041>.
- Wang Mingyao, Wang Quanrong. CO₂ sequestration potential evaluation of saline aquifers in Ying-Qiong Basin [J/OL]. *Petroleum Geology & Oilfield Development in Daqing*, 2025–09–24. <https://doi.org/10.19597/J. ISSN.1000-3754.202501041>.
- [17] 蔡振忠, 赵海涛, 王彭, 等. 考虑流固耦合作用的超深缝洞型碳酸盐岩储层连通性表征: 以塔里木盆地富满油田满深区块为例[J]. *地学前缘*, 2024, 31(5): 301–312.
- Cai Zhenzhong, Zhao Haitao, Wang Peng, et al. Characterization of connectivity in ultra-deep fractured-caveate reservoirs considering fluid-solid coupling: a case study of the manfen block in the Fuman oil field of the Tarim Basin [J]. *Earth Science Frontiers*, 2024, 31(5): 301–312.
- [18] 刘静怡, 陈守民, 申战勇, 等. 致密储层微观孔隙结构特征及其对渗流特征的影响——以鄂尔多斯盆地姬塬地区长6储层为例[J]. *吉林大学学报(地球科学版)*, 2025, 55(5): 1434–

- 1444.
- Liu Jingyi, Chen Shoumin, Shen Zhanyong, et al. Types of microscopic pore structures in tight reservoirs and effects on seepage characteristics: taking chang 6 reservoir of Jiuyan area in Ordos Basin as an example[J]. *Journal of Jilin University (Earth Science Edition)*, 2025, 55(5): 1434–1444.
- [19] Martyushev D A, Ponomareva I N, Chernykh V I, et al. Impacts of interactions with low-mineralized water on permeability and pore behavior of carbonate reservoirs[J]. *Energy Geoscience*, 2024, 5(4): 100340.
- [20] 吴煜宇, 赖强, 李勇, 等. 沥青质碳酸盐岩储层孔隙结构及导电特征——以四川盆地蓬莱气区震旦系灯影组为例[J]. *石油与天然气地质*, 2026, 47(1): 287–298.
- Wu Yuyu, Lai Qiang, Li Yong, et al. Pore structures and conductivity of asphaltic carbonate reservoirs: a case study of the Sinian Dengying Formation in the Penglai gas area, Sichuan Basin [J]. *Oil & Gas Geology*, 2026, 47(1): 287–298.
- [21] 邹瑞, 王璐, 罗瑞兰, 等. 深层碳酸盐岩气藏不同类型储层全尺寸孔径分布及其分形特征——以四川盆地高磨地区震旦系灯四段为例[J]. *中国矿业大学学报*, 2024, 53(6): 1218–1236.
- Zou Rui, Wang Lu, Luo Ruilan, et al. Full-range pore throat radius distribution and fractal characteristics of different types of reservoirs in deep carbonate gas reservoirs: a case study of Deng-4 Member in Gaoshiti-Moxi Area, Sichuan Basin [J]. *Journal of China University of Mining & Technology*, 2024, 53(6): 1218–1236.
- [22] 吴浩, 张春林, 纪友亮, 等. 致密砂岩孔喉大小表征及对储层物性的控制——以鄂尔多斯盆地陇东地区延长组为例[J]. *石油学报*, 2017, 38(8): 876–887.
- Wu Hao, Zhang Chunlin, Ji Youliang, et al. Pore-throat size characterization of tight sandstone and its control on reservoir physical properties: a case study of Yanchang Formation, eastern Gansu, Ordos Basin [J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2017, 38(8): 876–887.
- [23] Lin Shuangshuang, Chang Xin, Yang Chunhe, et al. Integrated supercritical CO₂ injection for shale reservoir enhancement: Mechanisms, experimental insights, and implications for energy and carbon storage[J]. *Energy*, 2025, 324: 135908.
- [24] Peng Huan, Yang Jian, Peng Junliang, et al. Influence of supercritical CO₂ on the physical property of tight sandstone[J]. *Petroleum*, 2024, 10(3): 520–526.
- [25] 汤勇, 邹建梅, 段胜才, 等. CO₂-水交替互驱过程中 CO₂-水-岩相互作用实验[J/OL]. *断块油气田*, 2026–07–07. <https://link.cnki.net/urlid/41.1219.TE.20260706.1921.004>.
- Tang Yong, Zou Jianmei, Duan Shengcai, et al. Experiments on CO₂-water-rock interaction during the CO₂-water alternating displacement [J/OL]. *Fault-Block Oil and Gas Field*, 2026–07–07. <https://link.cnki.net/urlid/41.1219.TE.20260706.1921.004>.
- [26] Eyitayo S I, Gamadi T, Kolawole O, et al. Experimental study of seCO₂ injection strategies: effects on geochemical reactions and reservoir properties in sandstone and carbonate formations [J]. *Gas Science and Engineering*, 2025, 140: 205660.
- [27] 李凤昱, 许天福, 杨磊磊, 等. 不同碎屑矿物 CO₂ 参与的水-岩作用效应数值模拟[J]. *石油学报*, 2016, 37(9): 1116–1128.
- Li Fengyu, Xu Tianfu, Yang Leilei, et al. Numerical simulation for the water-rock interaction with the participation of CO₂ in different clastic minerals[J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2016, 37(9): 1116–1128.
- [28] Li Sihai, Zhang Shicheng, Xing Huilin, et al. CO₂-brine-rock interactions altering the mineralogical, physical, and mechanical properties of carbonate-rich shale oil reservoirs [J]. *Energy*, 2022, 256: 124608.
- [29] Zhang Yihuai, Zhou Yingfang, Lebedev M, et al. Pore scale analysis the formation dissolution with capillary trapping change for CO₂ injected into carbonate reservoir[C]//SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference and Exhibition, 2018: SPE-192082-MS.
- [30] Dai Yuting, Lai Fengpeng, Ni Jun, et al. Evaluation of the impact of CO₂ geological storage on tight oil reservoir properties [J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2022, 212: 110307.
- [31] 丁茜, 王静彬, 杨磊磊, 等. 基于模拟实验探讨断裂-流体-岩石体系中的矿物溶解-沉淀过程[J]. *石油与天然气地质*, 2023, 44(1): 164–177.
- Ding Qian, Wang Jingbin, Yang Leilei, et al. Exploring the mineral dissolution-precipitation processes in fracture-fluid-rock systems based on simulation experiments[J]. *Oil & Gas Geology*, 2023, 44(1): 164–177.
- [32] 张磊, 姚军, 孙海, 等. 基于数字岩心技术的气体解析/扩散格子 Boltzmann 模拟[J]. *石油学报*, 2015, 36(3): 361–365.
- Zhang Lei, Yao Jun, Sun Hai, et al. Lattice Boltzmann simulation of gas desorption and diffusion based on digital core technology[J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2015, 36(3): 361–365.
- [33] 王瀚, 苏玉亮, 王文东, 等. 基于格子 Boltzmann 方法的页岩纳米多孔介质流体流动模拟[J]. *石油学报*, 2023, 44(3): 534–544.
- Wang Han, Su Yuliang, Wang Wendong, et al. Simulation on liquid flow in shale nanoporous media based on lattice Boltzmann method[J]. *Acta Petrolei Sinica*, 2023, 44(3): 534–544.
- [34] An Senyou, Erfani H, Hellevang H, et al. Lattice-Boltzmann simulation of dissolution of carbonate rock during CO₂-saturated brine injection [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2021, 408: 127235.
- [35] Xie Qiuheng, Wang Wendong, Su Yuliang, et al. Pore-scale study of calcite dissolution during CO₂-saturated brine injection for sequestration in carbonate aquifers [J]. *Gas Science and Engineering*, 2023, 114: 204978.
- [36] Gao Jinfang, Xing Huilin, Tian Zhiwei, et al. Reactive transport in porous media for CO₂ sequestration: pore scale modeling using the lattice Boltzmann method [J]. *Computers & Geosciences*, 2017, 98: 9–20.

- [37] Chen Li, Kang Qinjun, Robinson B A, et al. Pore-scale modeling of multiphase reactive transport with phase transitions and dissolution-precipitation processes in closed systems[J]. *Physical Review E*, 2013, 87(4): 043306.
- [38] Fazeli H, Patel R A, Ellis B R, et al. Three-dimensional pore-scale modeling of fracture evolution in heterogeneous carbonate caprock subjected to CO₂-enriched brine [J]. *Environmental Science & Technology*, 2019, 53(8): 4630–4639.
- [39] Gray F, Anabaraonye B U, Crawshaw J P, et al. Pore-scale dissolution mechanisms in calcite-CO₂-brine systems: The impact of non-linear reaction kinetics and coupled ion transport [J]. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2021, 305: 323–338.
- [40] Pokrovsky O S, Schott J. Kinetics and mechanism of dolomite dissolution in neutral to alkaline solutions revisited[J]. *American Journal of Science*, 2001, 301(7): 597–626.
- [41] Chou Lei, Garrels R M, Wollast R. Comparative study of the kinetics and mechanisms of dissolution of carbonate minerals[J]. *Chemical Geology*, 1989, 78(3/4): 269–282.
- [42] Molins S, Soulaire C, Prasianakis N I, et al. Simulation of mineral dissolution at the pore scale with evolving fluid-solid interfaces: review of approaches and benchmark problem set[J]. *Computational Geosciences*, 2021, 25(4): 1285–1318.
- [43] Kang Qinjun, Lichtner P C, Viswanathan H S, et al. Pore scale modeling of reactive transport involved in geologic CO₂ sequestration [J]. *Transport in Porous Media*, 2010, 82(1): 197–213.
- [44] Pokrovsky O S, Golubev S V, Schott J, et al. Calcite, dolomite and magnesite dissolution kinetics in aqueous solutions at acid to circumneutral pH, 25 to 150 °C and 1 to 55 atm pCO₂: new constraints on CO₂ sequestration in sedimentary basins [J]. *Chemical Geology*, 2009, 265(1): 20–32.
- [45] Zhou Xiao, Xu Zhiguo, Xia Yulei, et al. Pore-scale investigation on reactive flow in porous media with immiscible phase using lattice Boltzmann method [J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2020, 191: 107224.
- [46] Sullivan S P, Sani F M, Johns M L, et al. Simulation of packed bed reactors using lattice Boltzmann methods [J]. *Chemical Engineering Science*, 2005, 60(12): 3405–3418.
- [47] Guo Zhaoli, Zheng Chuguang, Shi Baochang. Non-equilibrium extrapolation method for velocity and pressure boundary conditions in the lattice Boltzmann method [J]. *Chinese Physics*, 2002, 11(4): 366–374.
- [48] Kang Qinjun, Lichtner P C, Zhang Dongxiao. An improved lattice Boltzmann model for multicomponent reactive transport in porous media at the pore scale[J]. *Water Resources Research*, 2007, 43(12): W12S14.
- [49] Zhang Ting, Shi Baochang, Guo Zhaoli, et al. General bounce-back scheme for concentration boundary condition in the lattice-Boltzmann method [J]. *Physical Review E*, 2012, 85(1): 016701.
- [50] Chen Li, Luan Huibao, He Yaling, et al. Pore-scale flow and mass transport in gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cell with interdigitated flow fields[J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2012, 51: 132–144.
- [51] Chen Li, Luan Huibao, Feng Yongliang, et al. Coupling between finite volume method and lattice Boltzmann method and its application to fluid flow and mass transport in proton exchange membrane fuel cell [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2012, 55(13/14): 3834–3848.
- [52] Zhao Yulong, Wang Yongchao, Wen Shaomu, et al. In-situ experiments of dynamic microscopic reaction for CO₂-brine-carbonate system[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, 506: 160251.
- [53] Zhang Lewen, Zhang Qingsong, Zhang Xiao, et al. Kinetics mechanism of pore pressure effect on CO₂-water-rock interactions: an experimental study[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2024, 489: 151361.
- [54] Poletti A, Pomi R, Stramazzo A. CO₂ sequestration through aqueous accelerated carbonation of BOF slag: a factorial study of parameters effects [J]. *Journal of Environmental Management*, 2016, 167: 185–195.

(编辑 王 迪)