

УДК 550.341

doi 10.26089/NumMet.v20r440

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЛЮИДА С ГОРНОЙ ПОРОДОЙ

К. А. Гадыльшина<sup>1</sup>, Т. С. Хачкова<sup>2</sup>, В. В. Лисица<sup>3</sup>

Предложен алгоритм численного моделирования процессов химического взаимодействия флюида с породой в масштабе пор. Алгоритм основан на методе расщепления задачи по физическим процессам. Предполагается, что скорость течения флюида мала, а установление потока происходит мгновенно при малых изменениях геометрии порового пространства. Таким образом, поток флюида в поровом пространстве моделируется при помощи уравнения Стокса для стационарного течения жидкости. Перенос химически активного компонента описывается уравнением конвекции–диффузии с граничными условиями третьего рода. Граница порового пространства изменяется со временем и задается неявно функцией уровня. Для численного решения уравнения Стокса и уравнения конвекции–диффузии применяется метод конечных разностей с аппроксимацией краевого условия взаимодействия жидкой и твердой фазы на погруженной границе.

**Ключевые слова:** метод функции уровня, метод погруженных границ, химическое растворение.

**1. Введение.** Среди методов интенсификации добычи трудно извлекаемых запасов углеводородов большое распространение получили подходы, связанные с использованием химически активных флюидов. Можно упомянуть такие технологии, как вытеснение нефти углекислотой [6], в частности из карбонатных коллекторов, кислотная обработка призабойной зоны пласта и кислотный гидроразрыв пласта [38]. В ходе проведения подобных процедур обработки пласта проницаемость коллектора повышается за счет частичного растворения скелета породы и образования каналов растворения и, как следствие, увеличивается приток к добывающей скважине. Наряду с вопросами, связанными с технологиями интенсификации добычи, изучение транспорта химически активных флюидов необходимо для эффективного решения задач улавливания и захоронения CO<sub>2</sub> [16, 35] и техногенных отходов в глубокозалегающие подземные горизонты. Прогностическое моделирование в этой области необходимо для снижения риска утечек диоксида углерода из коллектора-хранилища.

Для организации эффективной разработки месторождений и оптимизации процессов захоронения CO<sub>2</sub> необходимо проведение предсказательного гидродинамического моделирования, учитывающего в том числе и эффекты химического взаимодействия флюида с породой. В настоящее время существует ряд моделей указанных процессов в масштабе резервуара [1, 8, 13, 25, 29]. Однако во всех известных моделях проницаемость и извилистость порового пространства, которые определяют конвективные и диффузионные составляющие процесса соответственно, связаны с пористостью по неким эмпирическим законам, зачастую чрезвычайно далеким от наблюдаемых закономерностей. Более того, в зависимости от специфики процесса взаимодействия флюида с породой в масштабе пор указанные соотношения могут изменяться.

В связи с вышесказанным актуальной является задача моделирования этих процессов именно на масштабе пор. Для решения этой задачи используются модели, сочетающие в себе уравнения, описывающие флюидопоток, перенос химических компонентов (конвекция и диффузия) и реакцию на границе твердой и жидкой фаз с учетом химико-кинетических соотношений [5, 8, 10, 15, 21]. Основным отличием известных подходов друг от друга является аппроксимация граничных условий на движущейся границе. Можно выделить три типа подходов. Первый основан на использовании прямоугольных сеток и соответствующих конечно-разностных аппроксимаций уравнения Стокса или Навье–Стокса и конвекции–диффузии; в этом случае реакция учитывается путем изменения “концентрации” или “относительной массы” твердой фазы в приграничных точках [14, 37]. Достоинством такого подхода является простота реализации. К

<sup>1</sup> Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН, просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск; аспирант, e-mail: GadylshinaKA@ipgg.sbras.ru

<sup>2</sup> Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН, просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск; научный сотрудник, e-mail: KhachkovaTS@ipgg.sbras.ru

<sup>3</sup> Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН, просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск; зав. лабораторией, e-mail: LisitsaVV@ipgg.sbras.ru

недостаткам метода относится полуэмпирическое задание скорости растворения твердой фазы (изменения “концентрации”) на основе некоего осреднения химических свойств среды в окрестности границы с чрезвычайно сложной и неочевидной зависимостью от кинетики изучаемого химического процесса. Для другой группы моделей характерны явный учет положения межфазной границы и прямое моделирование ее смещений. При этом положение границы задается явно с последующим применением метода конечных объемов с усеченными ячейками [23, 24, 30, 33]. Однако подходы такого типа сложны в реализации в случае, когда топология расчетной области изменяется. В третьей группе методов предполагается неявное задание подвижной границы, на которой точно выполняются краевые условия. К таким методам относятся метод функции уровня (от английского level-set) [17, 18, 26] и метод фазового поля (от английского phase-field) [36]. Эти подходы позволяют явно учитывать химическую кинетику процесса на уровне пор и изменение топологии порового пространства. Такие модели для решения уравнений Стокса и конвекции–диффузии позволяют использовать метод конечных разностей на регулярной прямоугольной сетке в комбинации с краевыми условиями на погруженной границе, или immersed boundary conditions [20, 22, 27, 28, 34].

В настоящей статье представлен алгоритм моделирования химического взаимодействия с породой, основанный на методе функции уровня для учета изменения положения границы с применением подхода погруженных границ. В разделе 2 приводится постановка задачи и математическая модель. Численные алгоритмы, применяемые для решения задачи, обсуждаются в разделе 3. Основное внимание уделяется методам построения функции уровня и аппроксимации граничных условия для сложной и меняющейся топологии порового пространства. Численные эксперименты представлены в разделе 4.

**2. Постановка задачи.** Для моделирования химического взаимодействия флюида с породой на масштабе пор традиционно используется метод расщепления задачи по физическим процессам. Предполагается, что скорость изменения геометрии порового пространства низкая и именно она определяет временной масштаб задачи. Кроме того, низкой считается скорость потока флюида в поровом пространстве. Время установления потока при малых изменениях геометрии порового пространства считается пренебрежимо малым. В модели выделяются три физических процесса, каждый из которых протекает в своем временном масштабе.

Рассмотрим ограниченную область  $D \subseteq R^2$ , состоящую из объединения непересекающихся и меняющихся со временем подобластей  $D_p(t)$  и  $D_m(t)$ , соответствующих поровому пространству и матрице породы. Эти подобласти, как правило, многосвязные, однако их топология тоже может меняться со временем. Граница области — это  $\partial D = \Gamma_{outlet} \cup \Gamma_{inlet} \cup \Gamma_{nf}$ . Граница раздела порового пространства и матрицы  $\bar{D}_p(t) \cap \bar{D}_m(t) = \Gamma(t)$  — набор кривых достаточной гладкости. Схематическое представление расчетной области модели приводится на рис. 1.

Флюидопоток определен в поровом пространстве  $D_p(t)$  и описывается уравнением Стокса стационарного течения

$$\begin{aligned} \mu \nabla^2 \vec{u} - \nabla p &= 0, \\ \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \end{aligned} \tag{1}$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \vec{u}(\vec{x}) &= 0, & \vec{x} \in \Gamma(t) \cup \Gamma_{nf}, \\ p(\vec{x}) &= p_{bc}(\vec{x}), & \vec{x} \in \Gamma_{inlet}^p \cup \Gamma_{outlet}, \end{aligned} \tag{2}$$

где  $\vec{u} = (u_1, u_2)^T \in R^2$  — вектор скорости,  $p$  — давление,  $\mu$  — коэффициент динамической вязкости жидкости,  $p_{bc}(\vec{x})$  — давление на границе расчетной области,  $\vec{x} = (x_1, x_2)^T$  — вектор пространственных координат. Как отмечалось выше, установление потока происходит мгновенно при малых изменениях области порового пространства  $D_p(t)$ . Таким образом, фактически рассматривается квазистатическая постановка относительно эволюции области  $D_p(t)$ .

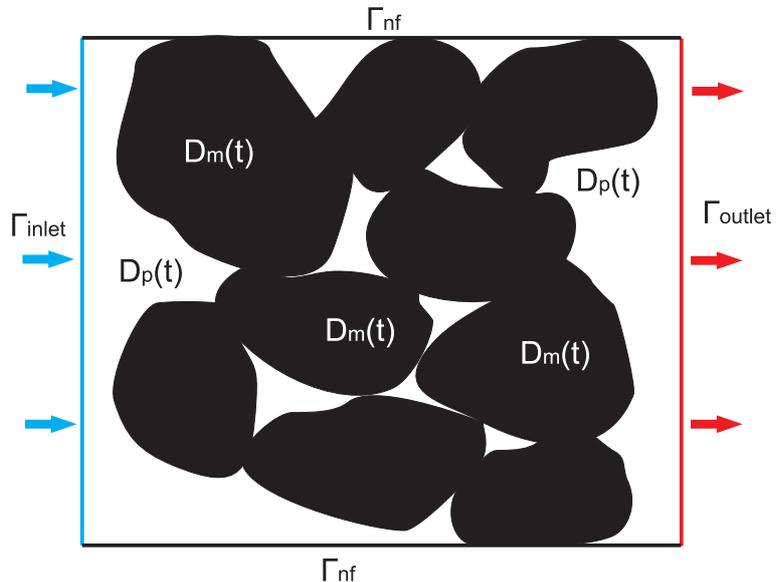


Рис. 1. Схематическое представление расчетной области

Распространение реагента в потоке жидкости удовлетворяет уравнению конвекции–диффузии в области  $D_p(t)$ :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C - D\nabla C) = 0 \tag{3}$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} D \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} &= k_r(C - C_s), & \vec{x} \in \Gamma(t), \\ C &= C_{in}, & \vec{x} \in \Gamma_{inlet}, \\ \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} &= 0, & \vec{x} \in \Gamma_{outlet} \cup \Gamma_{inf}. \end{aligned} \tag{4}$$

В этих обозначениях  $D$  – коэффициент диффузии;  $C$  – концентрация реагента; вектор  $\vec{n}$  – вектор нормали к границе, направленный внутрь области  $D_p$ ;  $k_r$  – коэффициент, определяющий скорость реакции первого порядка;  $\Gamma_{inlet}$  – часть внешней границы, через которую поступает реагент. В нашей работе рассматриваются только линейные законы реакции – линейные граничные условия; система состоит из одного активного компонента, а матрица породы мономинеральная; в системе отсутствуют дополнительные источники реагента, т.е. правая часть уравнения (3) равна нулю.

Изменение границы  $\Gamma(t)$ , вызванное химическим взаимодействием флюида с породой, описывается уравнением

$$v_n(\vec{x}, t) = \frac{K_c k}{\rho} (C - C_s), \quad \vec{x} \in \Gamma(t), \tag{5}$$

где  $v_n$  – нормальная компонента скорости движения границы,  $K_c$  – стехиометрический коэффициент реакции,  $\rho$  – массовая плотность твердой фазы,  $C_s$  – равновесная концентрация реагента.

**2.1. Метод поверхности уровня.** Для численного решения уравнений (1) и (3) в работе предлагается использовать метод конечных разностей на регулярных прямоугольных сетках. Для учета изменения геометрии элементов границы порового пространства, которые не совпадают с линиями сетки, применяется метод функции уровня (level set method). Идея этого подхода состоит в представлении границы  $\Gamma(t)$  как линии постоянного уровня функции  $\varphi(\vec{x}, t)$ :

$$\Gamma(t) = \{ \vec{x} | \varphi(\vec{x}) = 0 \}.$$

Целесообразно определять границу как линию нулевого уровня. Тогда области  $D_p$  и  $D_m$  определяются следующим образом:

$$D_p(\vec{x}, t) = \{ \vec{x} | \varphi(x, t) > 0 \}, \quad D_m(\vec{x}, t) = \{ \vec{x} | \varphi(x, t) < 0 \}.$$

Более того, в качестве функции уровня выбирается функция расстояния со знаком до границы, т.е.  $\| \nabla_x \varphi(\vec{x}, t) \| = 1$ . В этом случае вектор нормали к границе имеет вид

$$\vec{n} = \nabla_x \varphi(\vec{x}, t).$$

В терминах функции уровня изменение положения границы может быть записано в форме [9, 26]

$$\frac{\partial \varphi(\vec{x}, t)}{\partial t} + v_n(\vec{x}, t) = 0, \quad \varphi(\vec{x}, 0) = \varphi_0, \tag{6}$$

где  $v_n$  – нормальная скорость изменения границы, определяемая уравнением (5).

Следует отметить, что именно временной масштаб изменения геометрии границы (т.е. время как переменная в уравнении (6)) является определяющим в задаче химического взаимодействия породы с флюидом.

**3. Численное решение.** Решение задачи (1), (3), (6) проводится методом конечных разностей на одной и той же сетке для всех трех уравнений, на которой определены сеточные функции

$$\begin{aligned} p_{i,j} &= p(ih_1, jh_2), & (u_1)_{i+1/2,j} &= u_1((i+1/2)h_1, jh_2), & (u_2)_{i,j+1/2} &= u_2(ih_1, (j+1/2)h_2), \\ C_{i,j}^n &= C(ih_1, jh_2, n\tau), & \varphi_{i,j}^n &= \varphi(ih_1, jh_2, n\tau), \end{aligned}$$

где  $h_1$  и  $h_2$  – пространственные шаги сетки, а  $\tau$  – шаг по времени (в том числе по модельному нефизическому параметру времени). В этом случае граница, заданная неявно как функция постоянного уровня  $\varphi$ ,

является кусочно-линейной функцией. Специфика решаемой задачи заключается в том, что дискретизация расчетной области определяется моделью, полученной из микротомографических изображений породы [2–4]. В результате сетка достаточно детально описывает как модель, так и моделируемые физические процессы. Таким образом, приемлемая точность решений достигается для конечно-разностной схемы низкого порядка.

**3.1. Решение уравнения Стокса.** Для численного решения Стокса применяется схема второго порядка аппроксимации на разнесенных сетках. При этом давление определяется в узлах с целыми индексами, а компоненты вектора скорости — в узлах с дробным индексом по соответствующему направлению, как определено выше:

$$\begin{aligned} \mu D_1^2[u_1]_{i+1/2,j} + D_2^2[u_1]_{i+1/2,j} - D_1^c[p]_{i+1/2,j} &= 0, & \text{если } \varphi_{i+1/2,j} > 0, \\ \mu D_1^2[u_2]_{i,j+1/2} + D_2^2[u_2]_{i,j+1/2} - D_2^c[p]_{i,j+1/2} &= 0, & \text{если } \varphi_{i,j+1/2} > 0, \\ D_1^c[u_1]_{i,j} + D_2^c[u_2]_{i,j} &= 0, & \text{если } \varphi_{i,j} > 0. \end{aligned} \quad (7)$$

В этих обозначениях  $D_1^c$ ,  $D_2^c$  — операторы центральных разностей, аппроксимирующие первые производные по направлениям  $x_1$  и  $x_2$  соответственно, а  $D_1^2$  и  $D_2^2$  — операторы, аппроксимирующие вторые производные. Рассматриваются операторы второго порядка аппроксимации:

$$\begin{aligned} D_1^2[f]_{I,J} &= \frac{f_{I+1,J} - 2f_{I,J} + f_{I-1,J}}{h_1^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} \Big|_{I,J} + O(h_1^2), \\ D_1^c[f]_{I,J} &= \frac{f_{I+1/2,J} - f_{I-1/2,J}}{h_1} = \frac{\partial f}{\partial x_1} \Big|_{I,J} + O(h_1^2). \end{aligned} \quad (8)$$

В этих обозначениях индексы  $I$  и  $J$  — могут быть как целыми, так и полуцелыми; индексы  $i, j$  принимают только целочисленные значения. Операторы, аппроксимирующие производные по второму пространственному направлению, могут быть получены циклической перестановкой индексов.

Отдельно отметим, что сеточная функция линии уровня  $\varphi_{i,j}$  определена в целых узлах сетки, а ее значения в дробных узлах получены линейной интерполяцией.

Полученная система разрешается с применением итерационного метода установления:

$$\begin{aligned} \frac{(u_1)_{i+1/2,j}^{n+1} - (u_1)_{i+1/2,j}^n}{\tau} + \mu D_1^2[u_1^n]_{i+1/2,j} + D_2^2[u_1^n]_{i+1/2,j} - D_1^c[p^n]_{i+1/2,j} &= 0, & \varphi_{i+1/2,j} > 0, \\ \frac{(u_2)_{i+1/2,j}^{n+1} - (u_2)_{i+1/2,j}^n}{\tau} + \mu D_1^2[u_2^n]_{i,j+1/2} + D_2^2[u_2^n]_{i,j+1/2} - D_2^c[p^n]_{i,j+1/2} &= 0, & \varphi_{i,j+1/2} > 0, \\ \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{\tau} + D_1^c[u_1^{n+1}]_{i,j} + D_2^c[u_2^{n+1}]_{i,j} &= 0, & \varphi_{i,j} > 0, \end{aligned} \quad (9)$$

Для решения системы может быть применен любой другой метод; в нашей работе основное внимание уделяется вычислению действия матрицы на вектор, а не конкретной реализации метода решения.

Для вычисления действия матрицы на вектор необходимо аппроксимировать граничные условия. Аппроксимация условий на внешних границах расчетной области, совпадающих с линиями сетки, не представляет сложности. Для аппроксимации условий прилипания на границе между поровым пространством и матрицей, т.е. на  $\Gamma(t)$ , задаваемой неявно функцией уровня, применяется метод погруженных границ [12, 17, 19, 20, 22, 28, 34].

Идея метода погруженных границ состоит в экстраполяции решения в область  $D_m$  или в точки  $((x_1)_I, (x_2)_J)$ , где  $\varphi_{I,J} < 0$ , так, чтобы уравнения (7) выполнялись всюду в области  $D_p$  вплоть до границы. Поэтому, если в уравнениях (7) или (9) в центральной точке шаблона выполнено условие  $0 < \varphi_{I,J} < \sqrt{h_1^2 + h_2^2}$ , то необходимо проводить проверку условия  $\varphi_{I,J} > 0$  во всех точках шаблона и экстраполировать решение в тех точках, где оно нарушается. Для экстраполяции решения следует воспользоваться граничным условием  $\vec{u} = 0$  на  $\Gamma$ , что позволяет экстраполировать вектор скорости как нечетную функцию относительно границы. Пусть точка, в которой необходимо экстраполировать решение, имеет координаты  $((x_1)_I, (x_2)_J)$ , значение функции уровня в ней (расстояние до границы  $\Gamma$ ) —  $-\sqrt{h_1^2 + h_2^2} \varphi_{I,J} < 0$ , направление нормали к границе  $\vec{n} = \nabla_x \varphi(\vec{x})|_{I,J}$ . В этом случае координаты ортогональной проекции точки  $((x_1)_I, (x_2)_J)$  на границу  $\Gamma$  задаются соотношением

$$((x_1)_c, (x_2)_c) = ((x_1)_I, (x_2)_J) + \varphi_{I,J} \vec{n},$$

а ортогональное отражение имеет координаты

$$((x_1)_n, (x_2)_n) = ((x_1)_I, (x_2)_J) + 2\varphi_{I,J}\vec{n}$$

и верно соотношение

$$\vec{u}_{I,J} = -\vec{u}((x_1)_n, (x_2)_n) + O(\varphi_{I,J}^2).$$

Стандартным подходом к построению  $\vec{u}((x_1)_n, (x_2)_n)$  является билинейная интерполяция по значениям решения в четырех точках сетки, ближайших к  $((x_1)_n, (x_2)_n)$ . Однако в силу сложности топологии порового пространства зачастую не все эти точки принадлежат  $D_p$ . Поэтому в представленном алгоритме используется линейная интерполяция по трем ближайшим точкам сетки, принадлежащим  $D_p$  (рис. 2).

На рис. 2 серая область — матрица породы  $\varphi(\vec{x}) < 0$ , белая — поровое пространство. Черные точки не участвуют в вычислениях, решение в красных точках экстраполируется, решение в зеленых точках вычисляется по конечно-разностной схеме. Синяя точка — вспомогательная с координатами  $((x_1)_n, (x_2)_n)$ . Точки в вершинах заштрихованного треугольника используются для интерполяции.

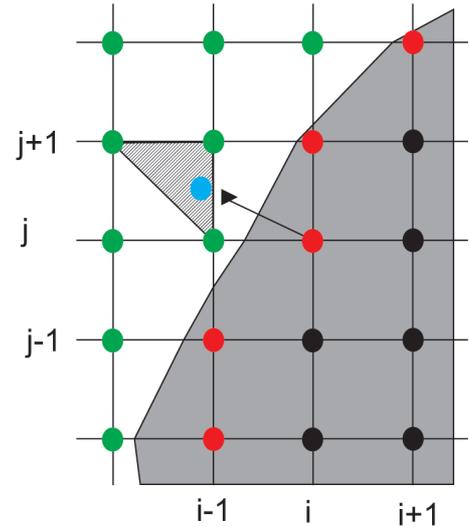


Рис. 2. Схематическое представление процедуры экстраполяции решения

В случае, когда точка  $((x_1)_I, (x_2)_J)$  находится близко к границе, может не существовать треугольника с вершинами в регулярных точках, содержащего внутри точку  $((x_1)_n, (x_2)_n)$ . В этом случае рассматривается треугольник с одной из вершин в точке границы  $((x_1)_c, (x_2)_c)$ , решение в которой задается граничным условием Дирихле (рис. 3). На рис. 3 серая область — матрица породы  $\varphi(\vec{x}) < 0$ , белая — поровое пространство. Черные точки не участвуют в вычислениях, решение в красных точках экстраполируется, решение в зеленых точках вычисляется по конечно-разностной схеме. Синяя точка — вспомогательная с координатами  $((x_1)_n, (x_2)_n)$ , оранжевая точка границы  $((x_1)_c, (x_2)_c)$ . Точки в вершинах заштрихованного треугольника используются для интерполяции.

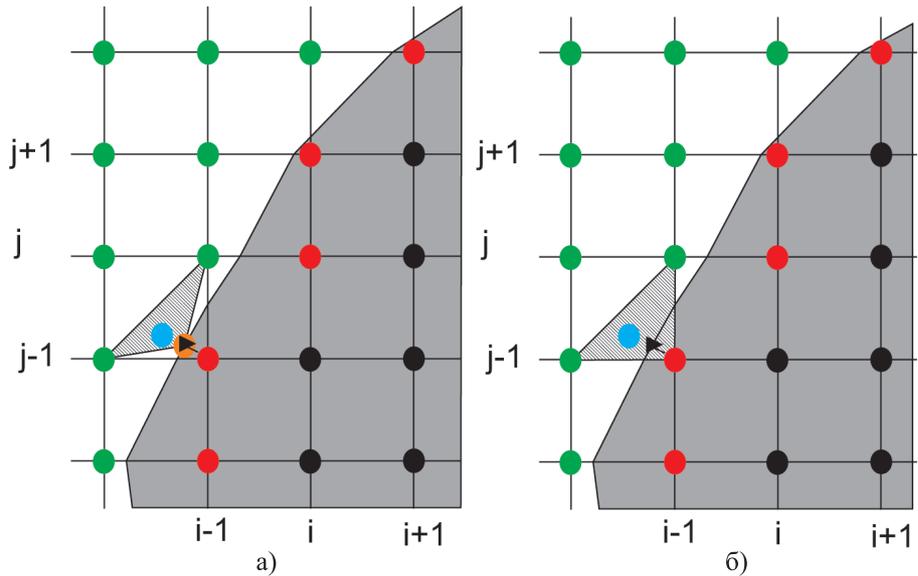


Рис. 3. Схематическое представление процедуры экстраполяции решения для условия Дирихле (а) и условия Неймана (б) в случае, если точка расположена близко к границе

Применение метода погруженных границ для экстраполяции давления основано на следствии граничных условий прилипания —  $\frac{dp}{d\vec{n}} = 0$ . В этой связи давление в точке  $((x_1)_I, (x_2)_J)$  представимо в виде

$$p_{I,J} = p((x_1)_n, (x_2)_n) + O(\varphi_{I,J}^2).$$

Далее проводится линейная интерполяция по трем ближайшим точкам. Если необходимо, в построении используется и сама точка  $((x_1)_I, (x_2)_J)$ , рис. 3.

**3.2. Решение уравнения конвекции–диффузии.** Для численного решения уравнения конвекции–диффузии применяется явная по времени конечно-разностная схема первого порядка аппроксимации:

$$\frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\tau} + D_1^1[u_1 C_{i,j}^n + D_2^1[u_2 C_{i,j}^n - DD_1^2[C_{i,j}^n - DD_2^2[C_{i,j}^n] = 0, \quad \varphi_{i,j} > 0,$$

$$\text{где } D_1^n [u_1 C]_{i,j}^n = \frac{F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}}{h}, \quad F_{i+1/2} = \begin{cases} (u_1)_{i+1/2,j} C_{i+1}, & (u_1)_{i+1/2,j} < 0, \\ (u_1)_{i+1/2,j} C_i, & (u_1)_{i+1/2,j} > 0. \end{cases}$$

Оператор, аппроксимирующий производные по второму пространственному направлению, может быть получен перестановкой индексов. Операторы  $D_1^2$  и  $D_2^2$  введены выше уравнением (8). Следует подчеркнуть, что дискретизация расчетной области в задачах вычислительной физики горных пород чрезвычайно детальная, поэтому применение схем низкого порядка для этих задач оправданно и обеспечивает приемлемую точность решения.

Как и в случае с решением уравнения Стокса, основную сложность представляет аппроксимация граничных условий на  $\Gamma$ , заданной неявно. Концентрация реагента на границе удовлетворяет условию третьего рода. Для аппроксимации граничного условия методом погруженных границ необходимо рассматривать его как линейную комбинацию условий Дирихле и Неймана:

$$D \nabla C \cdot \vec{n} + k_r C = k_r C_s.$$

Предполагается, что точка  $((x_1)_I, (x_2)_J) \in D_m$  принадлежит шаблону с центром в точке из области  $D_p$ , т.е. решение в ней необходимо экстраполировать. Точка  $((x_1)_n, (x_2)_n)$  — ортогональное отражение  $((x_1)_I, (x_2)_J)$  относительно границы  $\Gamma$ . В итоге граничное условие может быть представимо в форме

$$D \frac{C((x_1)_n, (x_2)_n) + C_{I,J}}{2} + k_r \frac{C((x_1)_n, (x_2)_n) - C_{I,J}}{2\varphi_{I,J}} = k_r C_s.$$

Разрешая полученное уравнение относительно  $C_{I,J}$ , можно получить экстраполяционное соотношение, при этом значение в точке  $((x_1)_n, (x_2)_n)$  линейно интерполируется по трем ближайшим, как описано выше.

**3.3. Изменение границы.** Для моделирования изменения геометрии границы достаточно численно решить уравнение (6), описывающее эволюцию функции уровня:

$$\frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\tau} = -(v_n)_{i,j}^n,$$

где  $(v_n)_{i,j}^n$  — скорость движения границы в нормальном направлении.

Уравнение (6) определено во всей расчетной области  $D$ , соответственно его правая часть тоже должна быть определена всюду в  $D$ . Однако функция  $v_n(\vec{x})$  определена только на границе  $\Gamma$ , поэтому ее необходимо продолжить в области  $D_p$  и  $D_m$ . Следуя [7, 26], скорость изменения функции уровня продолжается внутрь областей константой в направлении нормали к границе. Такое продолжение является установившимся решением уравнения

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \text{sign}(\varphi) \left( \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \cdot \nabla q \right) = 0, \quad q(\vec{x}, 0) = \tilde{v}_n(\vec{x}, t_0), \quad (10)$$

где  $\tilde{v}_n$  — начальные условия, совпадающие со скоростью изменения границы на этой границе и равные нулю в остальной части расчетной области.

Для аппроксимации градиента  $\varphi$  используются центральные разности, в то время как для расчета производных функции  $q$  применяется противопоточная схема первого порядка [7]. Важно отметить, что установившееся решение уравнения (10) достаточно построить в некоторой окрестности границы, например в точках  $D_s = \{ \vec{x} : |\varphi(\vec{x})| \leq 2\sqrt{h_1^2 + h_2^2} \}$ . Поскольку уравнение (10) описывает распространение решения от границы в направлении нормали, то за три шага по модельному времени решение в окрестности границы будет получено с достаточной точностью. После экстраполяции скорости проводится пересчет функции уровня. Таким образом, решение в окрестности границы получается с приемлемой точностью, а решение вне этой окрестности может быть скорректировано с использованием процедуры перестроения функции уровня [9, 26, 31, 32].

**4. Численные эксперименты.** Разработанный алгоритм применялся для моделирования различных режимов взаимодействия химически активного флюида с породой. Для построения моделей среды использовалось статистическое моделирование — метод усеченного гауссовского поля [11]. При этом подходе модель среды рассматривается как реализация гауссовского поля  $G(\vec{v}, \vec{l})$  с заданной длиной корреляции  $\vec{l}$ , а точка  $\vec{x}_0$  принадлежит к области  $D_p$ , если значение поля в этой точке выше порогового, т.е.  $G(\vec{x}_0, \vec{l}) > R$ . Иначе точка принадлежит матрице породы или  $D_m$ . Пористость среды, т.е. отношение объема порового

пространства  $D_p$  к объему всей модели  $D$ , однозначно определяется пороговой величиной  $R$ . В данной работе рассматриваются модели с длиной корреляции  $5 \times 10^{-5}$  м, что является характерным размером неоднородностей для карбонатных пород. Пористость фиксировалась на уровне 35%, что является завышенным показателем, однако такой выбор пористости обеспечивает перколяцию порового пространства в двумерном случае. В качестве расчетной области  $D$  рассматривался квадрат  $[0, 50l_1] \times [0, 50l_2]$ , где  $l_1$  и  $l_2$  длины корреляций по направлениям  $x_1$  и  $x_2$  соответственно. Здесь предполагается  $l_1 = l_2$ . В расчетной области вводилась сетка с шагом  $h_1 = h_2 = 10^{-5}$  м.

В качестве минерала матрицы породы рассматривался кальцит с плотностью  $\rho = 2710$  кг/м<sup>3</sup> и стехиометрическим коэффициентом реакции  $K = 1$ . В качестве жидкости выбиралась пластовая вода из предположения, что изменение концентрации активного компонента не влияет на физические свойства жидкости. В этом случае можно зафиксировать динамическую вязкость:  $\mu = 0.00028$  Па·с. Соответственно, для изменения режимов потока в поровом пространстве необходимо варьировать перепад давлений на границах расчетной области, т.е.  $p_{bc}$  в уравнении (2). Используемые в экспериментах значения давлений приведены в таблице. Наряду с изменением давления рассматривались разные значения коэффициента диффузии  $D$  в уравнении (3) и скорости реакции  $k_r$  для граничных условий (4). Значения этих параметров приводятся в таблице. В качестве равновесной концентрации активного компонента (ионов  $H^+$ ) рассматривался  $pH = 7$ . Следуя экспериментам, приведенным в [16], концентрация при закачке компонента составляла  $pH = 2.3$ .

Значения варьируемых параметров

	Re	Pe	Da	$p_{bc}$	$D$	$k_r$
1	$1.2 \times 10^{-6}$	$5.3 \times 10^{-3}$	$8 \times 10^{-2}$	$5 \times 10^{-2}$	$9.3 \times 10^{-8}$	$1.5 \times 10^{-4}$
2	$1.2 \times 10^{-6}$	$5.3 \times 10^{-3}$	$8 \times 10^0$	$5 \times 10^{-2}$	$9.3 \times 10^{-8}$	$1.5 \times 10^{-2}$
3	$1.2 \times 10^{-5}$	$5.3 \times 10^{-3}$	$8 \times 10^{-2}$	$5 \times 10^{-1}$	$9.3 \times 10^{-7}$	$1.5 \times 10^{-3}$
4	$1.2 \times 10^{-5}$	$5.3 \times 10^{-3}$	$8 \times 10^0$	$5 \times 10^{-1}$	$9.3 \times 10^{-7}$	$1.5 \times 10^{-1}$
5	$1.2 \times 10^{-5}$	$5.3 \times 10^{-2}$	$8 \times 10^{-2}$	$5 \times 10^{-1}$	$9.3 \times 10^{-8}$	$1.5 \times 10^{-4}$
6	$1.2 \times 10^{-5}$	$5.3 \times 10^{-2}$	$8 \times 10^0$	$5 \times 10^{-1}$	$9.3 \times 10^{-8}$	$1.5 \times 10^{-2}$

Для анализа результатов и характеристики режимов потока и химического взаимодействия удобно использовать безразмерные переменные: число Рейнольдса  $Re = \frac{LU}{\nu}$ ; число Пекле  $Pe = \frac{UL}{D}$ , характеризующее соотношение между конвективным транспортом реагента и диффузией; число Дамкелера  $Da = \frac{k_r L}{D}$ , определяющее, чем лимитирована скорость гетерогенной реакции: скоростью доставки вещества к поверхности или непосредственно кинетикой реакции на этой поверхности. В этих обозначениях  $U$  — характерная скорость потока,  $L$  — характерный размер неоднородностей,  $L$  предполагается равной длине корреляции гауссовского поля, определяющего модель. В процессе химического взаимодействия флюида с породой геометрия порового пространства изменяется, т.е. изменяется, во-первых,  $L$ , а во-вторых, увеличение характерного размера пор приводит к повышению скорости потока. Для дальнейшего описания результатов будут использоваться начальные значения скоростей и длин корреляции.

Для иллюстрации работы алгоритма проводилось моделирование для шести различных комбинаций чисел Рейнольдса, Пекле и Дамкелера согласно таблице.

На рис. 4–6 приведены значения  $pH$  растворов в разные моменты времени для шести численных экспериментов. Локализованные темные пятна — части матрицы породы (прослеживаются, если концентрация вещества в окрестности отлична от нуля). Попарное сравнение результатов моделирования для моделей 1 и 2; 3 и 4; 5 и 6, отличающихся только значениями числа Дамкелера, отчетливо показывают, что реакции, контролируемые диффузией и характеризующиеся низкими значениями чисел Дамкелера, протекают относительно равномерно в образце. Иными словами, происходит перенос активного вещества потоком флюида в образец. С повышением числа Рейнольдса проникновение усиливается (эксперимент 6). Однако в случае реакций, контролируемых кинетикой (эксперименты 2, 4, 6), доставку вещества обеспечить не удается при рассматриваемом диапазоне значений  $Re$  и  $Pe$ . В результате происходит интенсивное падение концентрации непосредственно вблизи границы, через которую поступает реагент.

Фронт выщелачивания практически параллелен границе расчетной области. В этом случае скорость растворения породы спадает почти до нуля в силу недостатка активного компонента вблизи зерен породы.

**5. Заключение.** В настоящей статье предложен алгоритм численного моделирования процессов хи-

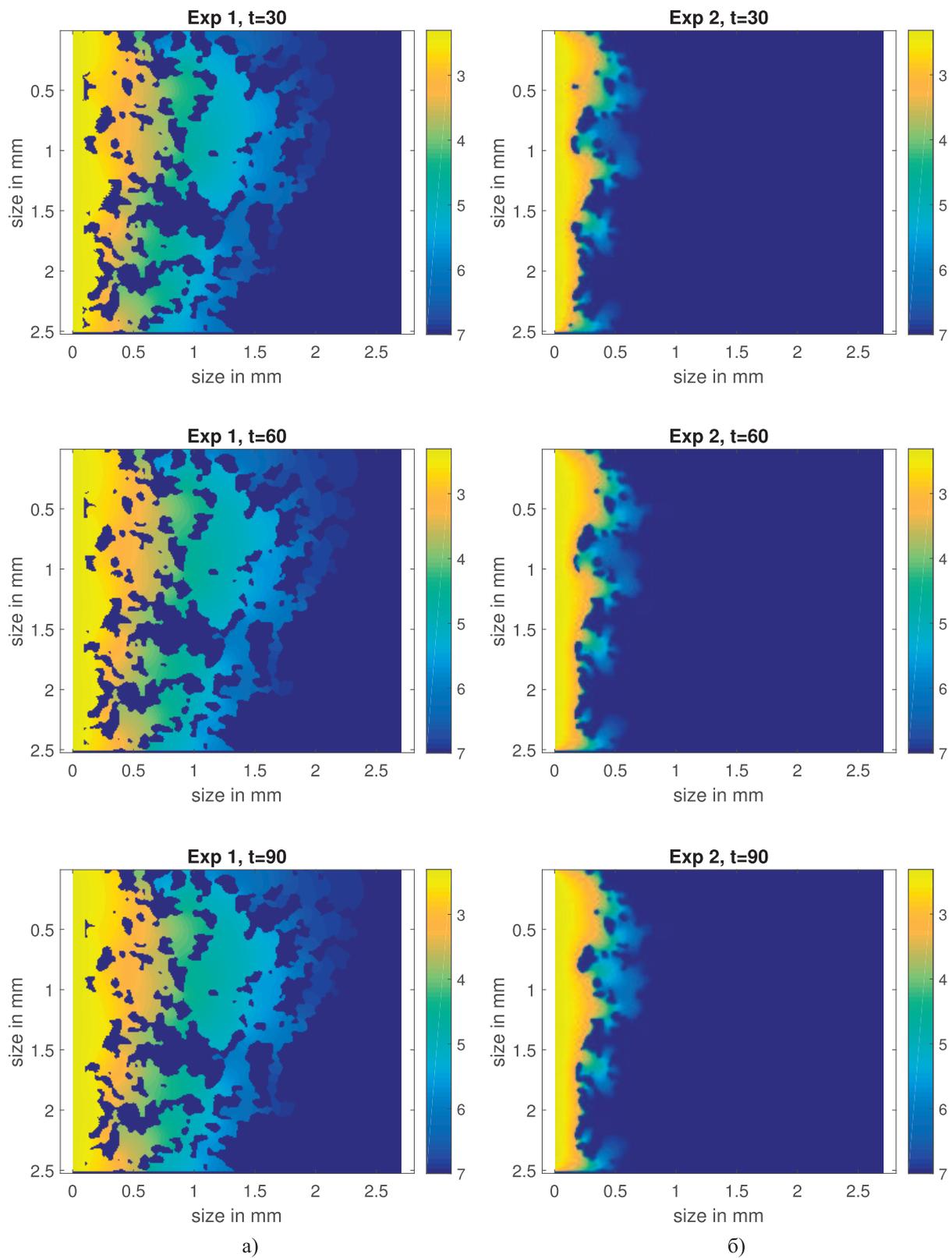


Рис. 4.  $pH$  раствора в поровом пространстве для экспериментов 1 (а) и 2 (б) в разные моменты времени

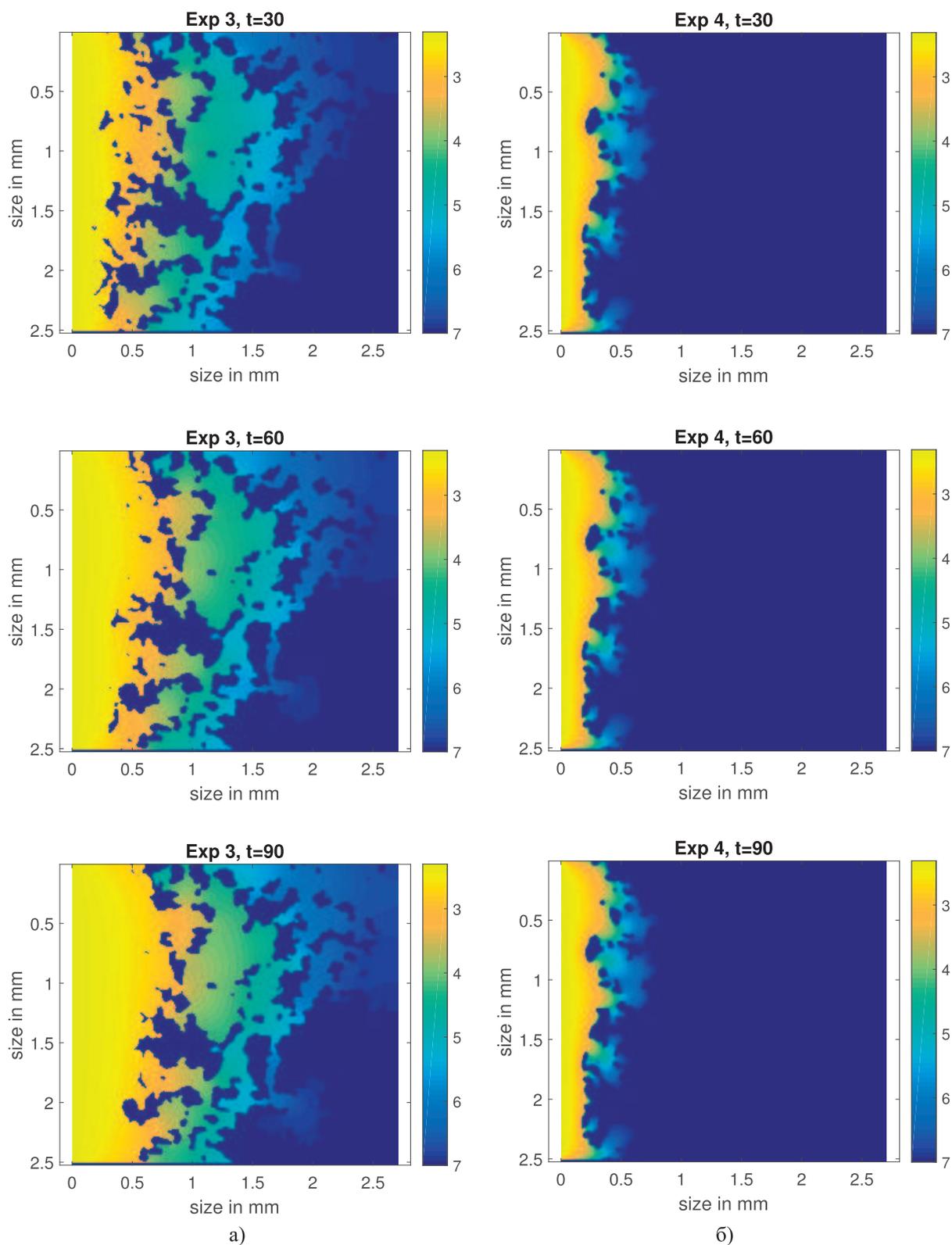


Рис. 5.  $pH$  раствора в поровом пространстве для экспериментов 3 (а) и 4 (б) в разные моменты времени

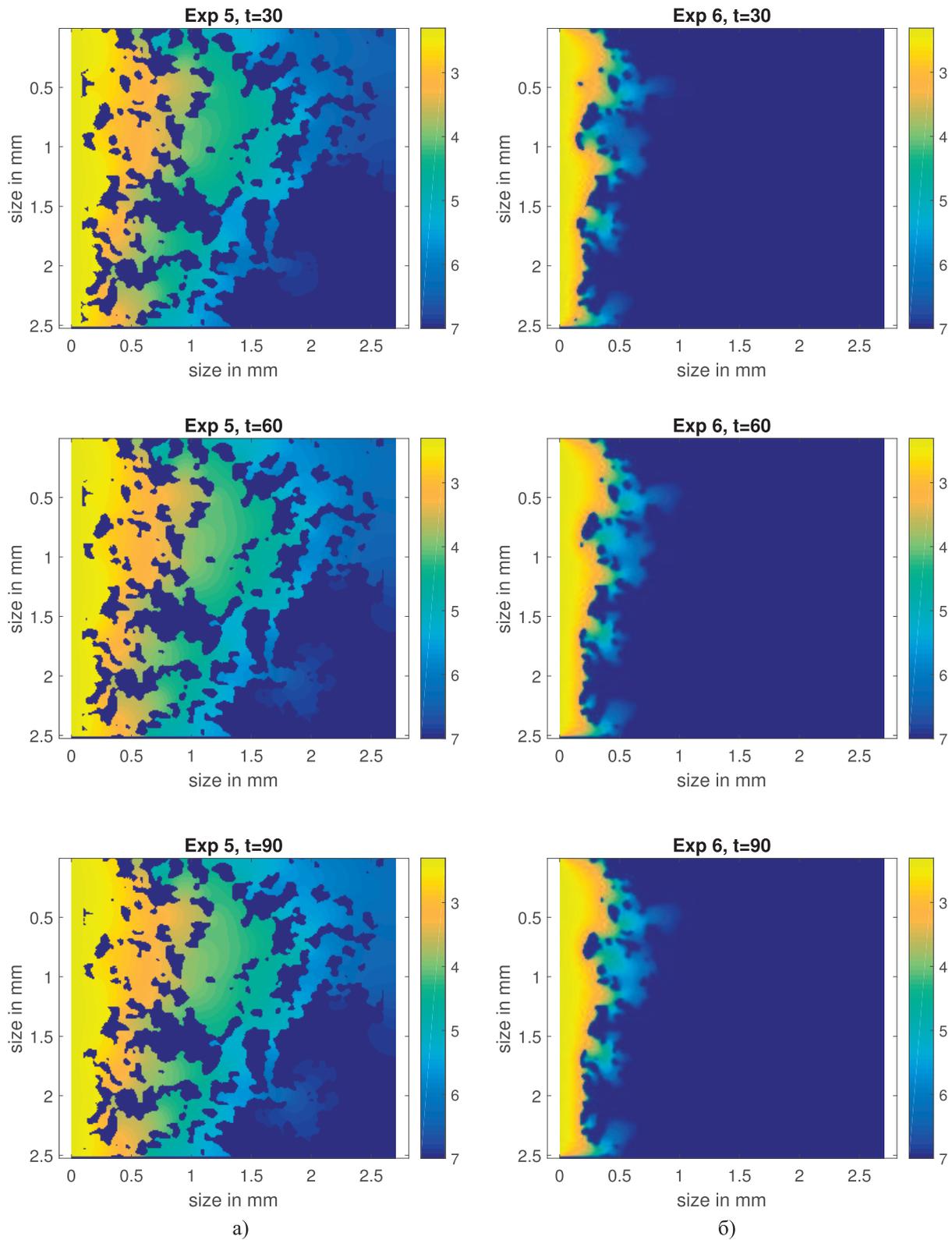


Рис. 6.  $pH$  раствора в поровом пространстве для экспериментов 5 (а) и 6 (б) в разные моменты времени

мического взаимодействия флюида с породой на масштабе пор. Алгоритм основан на методе расщепления по физическим процессам. Предполагается, что при малых изменениях геометрии порового пространства установление потока флюида происходит мгновенно, а скорость потока мала. В результате флюидопоток в поровом пространстве моделируется на основе решения стационарного уравнения Стокса. Для описания переноса химически активного компонента используется уравнение конвекции–диффузии с граничными условиями третьего рода. Граница порового пространства, зависящая от времени, задается неявно функцией уровня. В результате для численного решения уравнения Стокса и уравнения конвекции–диффузии применяется метод конечных разностей с аппроксимацией граничных условий методом погруженных границ. Численные эксперименты иллюстрируют применимость алгоритма для моделирования химического взаимодействия флюида с породой для разных типов гетерогенных реакций и разных режимов закачки флюида.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18–05–00031) и поддержана грантом Президента РФ для молодых ученых–докторов наук (МД-20.2019.5). Расчеты проводились на суперкомпьютере “Ломоносов” Московского государственного университета и кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Amikiya A.E., Banda M.K.* Modelling and simulation of reactive transport phenomena // *Journal of Computational Science*. 2018. **28**. 155–167.
2. *Andrä H., Combaret N., Dvorkin J., Glatt E., Han J., Kabel M., Keehm Y., Krzikalla F., Lee M., Madonna C., Marsh M., Mukerji T., Saenger E., Sain R., Saxena N., Ricker S., Wiegmann A., Zhan X.* Digital rock physics benchmarks — Part I: imaging and segmentation // *Computers and Geosciences*. 2013. **50**. 25–32.
3. *Andrä H., Combaret N., Dvorkin J., Glatt E., Han J., Kabel M., Keehm Y., Krzikalla F., Lee M., Madonna C., Marsh M., Mukerji T., Saenger E., Sain R., Saxena N., Ricker S., Wiegmann A., Zhan X.* Digital rock physics benchmarks — Part II: computing effective properties // *Computers and Geosciences*. 2013. **50**. 33–43.
4. *Bazaikin Y., Gurevich B., Iglauer S., Khachkova T., Kolyukhin D., Lebedev M., Lisitsa V., Reshetova G.* Effect of CT image size and resolution on the accuracy of rock property estimates // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 2017. **122**, N 5. 3635–3647.
5. *Bouchelaghem F.* A numerical and analytical study on calcite dissolution and gypsum precipitation // *Applied Mathematical Modelling*. 2010. **34**, N 2. 467–480.
6. *Emberley S., Hutcheon I., Shevalier M., Durocher K., Gunter W.D., Perkins E.H.* Geochemical monitoring of fluid-rock interaction and CO<sub>2</sub> storage at the Weyburn CO<sub>2</sub>-injection enhanced oil recovery site, Saskatchewan, Canada // *Energy*. 2004. **29**, N 9–10. 1393–1401.
7. *Fedkiw R.P., Aslam T., Merriman B., Osher S.* A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method) // *Journal of Computational Physics*. 1999. **152**, N 2. 457–492.
8. *Ghommem M., Zhao W., Dyer S., Qiu X., Brady D.* Carbonate acidizing: Modeling, analysis, and characterization of wormhole formation and propagation // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2015. **131**. 18–33.
9. *Gibou F., Fedkiw R., Osher S.* A review of level-set methods and some recent applications // *Journal of Computational Physics*. 2018. **353**. 82–109.
10. *Hao Y., Smith M., Sholokhova Y., Carroll S.* CO<sub>2</sub>-induced dissolution of low permeability carbonates. Part II: Numerical modeling of experiments // *Advances in Water Resources*. 2013. **62**. Part C. 388–408.
11. *Hyman J.D., Winter C.L.* Stochastic generation of explicit pore structures by thresholding Gaussian random fields // *Journal of Computational Physics*. 2014. **277**. 16–31.
12. *Johansen H., Colella P.* A cartesian grid embedded boundary method for Poisson’s equation on irregular domains // *Journal of Computational Physics*. 1998. **147**, N 1. 60–85.
13. *Kalia N., Balakotaiah V.* Effect of medium heterogeneities on reactive dissolution of carbonates // *Chemical Engineering Science*. 2009. **64**, N 2. 376–390.
14. *Kang Q., Chen L., Valocchi A.J., Viswanathan H.S.* Pore-scale study of dissolution-induced changes in permeability and porosity of porous media // *Journal of Hydrology*. 2014. **517**. 1049–1055.
15. *Leal A.M.M., Blunt M.J., LaForce T.C.* A robust and efficient numerical method for multiphase equilibrium calculations: Application to CO<sub>2</sub>-brine-rock systems at high temperatures, pressures and salinities // *Advances in Water Resources*. 2013. **62**. Part C. 409–430.
16. *Lebedev M., Zhang Y., Sarmadivaleh M., Barifcani A., Al-Khdheawi A., Iglauer S.* Carbon geosequestration in limestone: pore-scale dissolution and geomechanical weakening // *International Journal of Greenhouse Gas Control*. 2017. **66**. 106–119.
17. *Li X., Huang H., Meakin P.* Level set simulation of coupled advection-diffusion and pore structure evolution due to mineral precipitation in porous media // *Water Resources Research*. 2008. **44**, N 12. doi 10.1029/2007WR006742.
18. *Li X., Huang H., Meakin P.* A three-dimensional level set simulation of coupled reactive transport and precipitation/dissolution // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2010. **53**, N 13–14. 2908–2923.

19. Luo K., Zhuang Z., Fan J., Haugen N.E.L. A ghost-cell immersed boundary method for simulations of heat transfer in compressible flows under different boundary conditions // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016. **92**. 708–717.
20. Marella S., Krishnan S., Liu H., Udaykumar H.S. Sharp interface Cartesian grid method I: an easily implemented technique for 3D moving boundary computations // *Journal of Computational Physics*. 2005. **210**, N 1. 1–31.
21. Meirmanov A., Omarov N., Tcheverda V., Zhumaly A. Mesoscopic dynamics of solid-liquid interfaces. A general mathematical model // *Сиб. электрон. матем. изв.* 2015. **12**, 884–900.
22. Mittal R., Iaccarino G. Immersed boundary methods // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2005. **37**, N 1. 239–261.
23. Molins S., Trebotich D., Steefel C., Shen C. An investigation of the effect of pore scale flow on average geochemical reaction rates using direct numerical simulation // *Water Resources Research*. 2012. **48**, N 3. doi 10.1029/2011WR011404.
24. Molins S., Trebotich D., Yang L., Ajo-Franklin J., Ligoeki T., Shen C., Steefel C. Pore-scale controls on calcite dissolution rates from flow-through laboratory and numerical experiments // *Environmental Science and Technology*. 2014. **48**, N 13. 7453–7460.
25. Mou J., Zhang S. Modeling acid leakoff during multistage alternate injection of pad and acid in acid fracturing // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2015. **26**. 1161–1173.
26. Osher S., Fedkiw R. Level set methods: an overview and some recent results // *Journal of Computational Physics*. 2001. **169**, N 2. 463–502.
27. Peskin C.S. Flow patterns around heart valves: A numerical method // *Journal of Computational Physics*. 1972. **10**, N 2. 252–271.
28. Sotiropoulos F., Yang X. Immersed boundary methods for simulating fluid-structure interaction // *Progress in Aerospace Sciences*. 2014. **65**. 1–21.
29. Steefel C.I., Appelo C.A.J., Arora B., Jacques D., Kalbacher T., Kolditz O., Lagneau V., Lichtner P.C., Mayer K.U., Meeussen J.C.L., Molins S., Moulton D., Shao H., Simunek J., Spycher N., Yabusaki S.B., Yeh G.T. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation // *Computational Geosciences*. 2015. **19**, N 3. 445–478.
30. Steefel C.I., Lasaga A.C. A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems // *American Journal of Science*. 1994. **294**, N 5. 529–592.
31. Sussman M., Fatemi E. An efficient, interface-preserving level set redistancing algorithm and its application to interfacial incompressible fluid flow // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 1999. **20**, N 4. 1165–1191.
32. Sussman M., Fatemi E., Smereka P., Osher S. An improved level set method for incompressible two-phase flows // *Computers and Fluids*. 1998. **27**, N 5–6. 663–680.
33. Trebotich D., Adams M.F., Molins S., Steefel C., Shen C. High-resolution simulation of pore-scale reactive transport processes associated with carbon sequestration // *Computing in Science and Engineering*. 2014. **16**, N 6. 22–31.
34. Tseng Y.-H., Ferziger J.H. A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry // *Journal of Computational Physics*. 2003. **192**, N 2. 593–623.
35. Vanorio T., Nur A., Ebert Y. Rock physics analysis and time-lapse rock imaging of geochemical effects due to the injection of CO<sub>2</sub> into reservoir rocks // *Geophysics*. 2011. **76**, N 5. doi 10.1190/geo2010-0390.1.
36. Xu Z., Meakin P. Phase-field modeling of solute precipitation and dissolution // *The Journal of Chemical Physics*. 2008. **129**, N 1. doi 10.1063/1.2948949.
37. Yoon H., Valocchi A.J., Werth C.J., Dewers T.A. Pore-scale simulation of mixing-induced calcium carbonate precipitation and dissolution in a microfluidic pore network // *Water Resources Research*. 2012. **48**, N 2. doi 10.1029/2011WR011192.
38. Zimmermann G., Blöcher G., Reinicke A., Brandt W. Rock specific hydraulic fracturing and matrix acidizing to enhance a geothermal system — concepts and field results // *Tectonophysics*. 2011. **503**, N 1–2. 146–154.

Поступила в редакцию  
04.10.2019

---

## Numerical Modeling of Chemical Interaction between a Fluid and Rocks

K. A. Gadylshina<sup>1</sup>, T. S. Khachkova<sup>2</sup>, and V. V. Lisitsa<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Koptyuga 3, Novosibirsk, 630090, Russia; Graduate Student, e-mail: GadylshinaKA@ipgg.sbras.ru

<sup>2</sup> Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Koptyuga 3, Novosibirsk, 630090, Russia; Scientist, e-mail: KhachkovaTS@ipgg.sbras.ru

<sup>3</sup> Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Koptyuga 3, Novosibirsk, 630090, Russia; Dr. Sci., Associate Professor, Head of Laboratory, e-mail: lisitsavu@ipgg.sbras.ru

Received October 4, 2019

**Abstract.** A new algorithm for the numerical modeling of chemical fluid–rock interaction at the pore scale is proposed. The algorithm is based on splitting the problem into physical processes. It is assumed that the fluid rate is low and the fluid flow is stabilized almost instantly in the case of small changes in the pore space geometry. In the pore space, thus, the fluid flow is modeled using the Stokes equation for steady flows. The chemical reactant transport is described by the convection–diffusion equation with Robin boundary conditions at the fluid–rock interface. The pore space boundary changes with time and is implicitly given by a level-set function. We use finite-difference schemes with immersed boundary conditions to solve the Stokes and convection–diffusion equations

**Keywords:** level-set function method, immersed boundary method, chemical dissolution.

### References

1. A. E. Amikiya and M. K. Banda, “Modelling and Simulation of Reactive Transport Phenomena,” *J. Comput. Sci.* **28**, 155–167 (2018).
2. H. Andrä, N. Combaret, J. Dvorkin, et al., “Digital Rock Physics Benchmarks — Part I: Imaging and Segmentation,” *Comput. Geosci.* **50**, 25–32 (2013).
3. H. Andrä, N. Combaret, J. Dvorkin, et al., “Digital Rock Physics Benchmarks — Part II: Computing Effective Properties,” *Comput. Geosci.* **50**, 33–43 (2013).
4. Y. Bazaikin, B. Gurevich, S. Iglauer, et al., “Effect of CT Image Size and Resolution on the Accuracy of Rock Property Estimates,” *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **122** (5), 3635–3647 (2017).
5. F. Bouchelaghem, “A Numerical and Analytical Study on Calcite Dissolution and Gypsum Precipitation,” *Appl. Math. Model.* **34** (2), 467–480 (2010).
6. S. Emberley, I. Hutcheon, M. Shevalier, et al., “Geochemical Monitoring of Fluid-Rock Interaction and CO<sub>2</sub> Storage at the Weyburn CO<sub>2</sub>-Injection Enhanced Oil Recovery Site, Saskatchewan, Canada,” *Energy* **29** (9–10), 1393–1401 (2004).
7. R. P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher, “A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method),” *J. Comput. Phys.* **152** (2), 457–492 (1999).
8. M. Ghommam, W. Zhao, S. Dyer, et al., “Carbonate Acidizing: Modeling, Analysis, and Characterization of Wormhole Formation and Propagation,” *J. Petrol. Sci. Eng.* **131**, 18–33 (2015).
9. F. Gibou, R. Fedkiw, and S. Osher, “A Review of Level-Set Methods and Some Recent Applications,” *J. Comput. Phys.* **353**, 82–109 (2018).
10. Y. Hao, M. Smith, Y. Sholokhova, and S. Carroll, “CO<sub>2</sub>-Induced Dissolution of Low Permeability Carbonates. Part II: Numerical Modeling of Experiments,” *Adv. Water Resour.* **62** (Part C), 388–408 (2013).
11. J. D. Hyman and C. L. Winter, “Stochastic Generation of Explicit Pore Structures by Thresholding Gaussian Random Fields,” *J. Comput. Phys.* **277**, 16–31 (2014).
12. H. Johansen and P. Colella, “A Cartesian Grid Embedded Boundary Method for Poisson’s Equation on Irregular Domains,” *J. Comput. Phys.* **147** (1), 60–85 (1998).
13. N. Kalia and V. Balakotaiah, “Effect of Medium Heterogeneities on Reactive Dissolution of Carbonates,” *Chem. Eng. Sci.* **64** (2), 376–390 (2009).
14. Q. Kang, L. Chen, A. J. Valocchi, and H. S. Viswanathan, “Pore-Scale Study of Dissolution-Induced Changes in Permeability and Porosity of Porous Media,” *J. Hydrol.* **517**, 1049–1055 (2014).
15. A. M. M. Leal, M. J. Blunt, and T. C. LaForce, “A Robust and Efficient Numerical Method for Multiphase Equilibrium Calculations: Application to CO<sub>2</sub>-Brine-Rock Systems at High Temperatures, Pressures and Salinities,” *Adv. Water Resour.* **62** (Part C), 409–430 (2013).
16. M. Lebedev, Y. Zhang, M. Sarmadivaleh, et al., “Carbon Geosequestration in Limestone: Pore-Scale Dissolution and Geomechanical Weakening,” *Int. J. Greenh. Gas Con.* **66**, 106–119 (2017).
17. X. Li, H. Huang, and P. Meakin, “Level Set Simulation of Coupled Advection–Diffusion and Pore Structure Evolution Due to Mineral Precipitation in Porous Media,” *Water Resour. Res.* **44** (2008). doi 10.1029/2007WR006742
18. X. Li, H. Huang, and P. Meakin, “A Three-Dimensional Level Set Simulation of Coupled Reactive Transport and Precipitation/Dissolution,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **53** (13–14), 2908–2923 (2010).
19. K. Luo, Z. Zhuang, J. Fan, and N. E. L. Haugen, “A Ghost-Cell Immersed Boundary Method for Simulations of Heat Transfer in Compressible Flows under Different Boundary Conditions,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **92**, 708–717 (2016).

20. S. Marella, S. Krishnan, H. Liu, and H. S. Udaykumar, “Sharp Interface Cartesian Grid Method I: An Easily Implemented Technique for 3D Moving Boundary Computations,” *J. Comput. Phys.* **210** (1), 1–31 (2005).
21. A. Meirmanov, N. Omarov, V. Tcheverda, and A. Zhumaly, “Mesoscopic Dynamics of Solid-Liquid Interfaces. A General Mathematical Model,” *Sib. Elektron. Mat. Izv.* **12**, 884–900 (2015).
22. R. Mittal and G. Iaccarino, “Immersed Boundary Methods,” *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **37** (1), 239–261 (2005).
23. S. Molins, D. Trebotich, C. I. Steefel, and C. Shen, “An Investigation of the Effect of Pore Scale Flow on Average Geochemical Reaction Rates Using Direct Numerical Simulation,” *Water Resour. Res.* **48** (2012). doi 10.1029/2011WR011404
24. S. Molins, D. Trebotich, L. Yang, et al., “Pore-Scale Controls on Calcite Dissolution Rates from Flow-through Laboratory and Numerical Experiments,” *Environ. Sci. Technol.* **48** (13), 7453–7460 (2014).
25. J. Mou and S. Zhang, “Modeling Acid Leakoff during Multistage Alternate Injection of Pad and Acid in Acid Fracturing,” *J. Nat. Gas Sci. Eng.* **26**, 1161–1173 (2015).
26. S. Osher and R. Fedkiw, “Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results,” *J. Comput. Phys.* **169** (2), 463–502 (2001).
27. C. S. Peskin, “Flow Patterns around Heart Valves: A Numerical Method,” *J. Comput. Phys.* **10** (2), 252–271 (1972).
28. F. Sotiropoulos and X. Yang, “Immersed Boundary Methods for Simulating Fluid–Structure Interaction,” *Prog. Aerosp. Sci.* **65**, 1–21 (2014).
29. C. I. Steefel, C. A. J. Appelo, B. Arora, et al., “Reactive Transport Codes for Subsurface Environmental Simulation,” *Comput. Geosci.* **19** (3), 445–478 (2015).
30. C. I. Steefel and A. C. Lasaga, “A Coupled Model for Transport of Multiple Chemical Species and Kinetic Precipitation/Dissolution Reactions with Application to Reactive Flow in Single Phase Hydrothermal Systems,” *Am. J. Sci.* **294** (5), 529–592 (1994).
31. M. Sussman and E. Fatemi, “An Efficient, Interface-Preserving Level Set Redistancing Algorithm and Its Application to Interfacial Incompressible Fluid Flow,” *SIAM J. Sci. Comput.* **20** (4), 1165–1191 (1999).
32. M. Sussman, E. Fatemi, P. Smereka, and S. Osher, “An Improved Level Set Method for Incompressible Two-Phase Flows,” *Comput. Fluids* **27** (5–6), 663–680 (1998).
33. D. Trebotich, M. F. Adams, S. Molins, et al., “High-Resolution Simulation of Pore-Scale Reactive Transport Processes Associated with Carbon Sequestration,” *Comput. Sci. Eng.* **16** (6), 22–31 (2014).
34. Y.-H. Tseng and J. H. Ferziger, “A Ghost-Cell Immersed Boundary Method for Flow in Complex Geometry,” *J. Comput. Phys.* **192** (2), 593–623 (2003).
35. T. Vanorio, A. Nur, and Y. Ebert, “Rock Physics Analysis and Time-Lapse Rock Imaging of Geochemical Effects Due to the Injection of CO<sub>2</sub> into Reservoir Rocks,” *Geophysics.* **76** (2011). doi 10.1190/geo2010-0390.1
36. Z. Xu and P. Meakin, “Phase-Field Modeling of Solute Precipitation and Dissolution,” *J. Chem. Phys.* **129** (2008). doi 10.1063/1.2948949
37. H. Yoon, A. J. Valocchi, C. J. Werth, and T. A. Dewers, “Pore-scale Simulation of Mixing-Induced Calcium Carbonate Precipitation and Dissolution in a Microfluidic Pore Network,” *Water Resour. Res.* **48** (2012). doi 10.1029/2011WR011192
38. G. Zimmermann, G. Blöcher, A. Reinicke, and W. Brandt, “Rock Specific Hydraulic Fracturing and Matrix Acidizing to Enhance a Geothermal System — Concepts and Field Results,” *Tectonophysics* **503** (1–2), 146–154 (2011).