

含喉部裂隙介质 CO₂ 反应迁移的格子 Boltzmann 模拟研究

田智威^{1,2}, 谭云亮³

(1. 重庆大学 煤矿灾害动力学与控制国家重点实验室, 重庆 400044; 2. 中国地质大学(武汉) 资源学院, 湖北 武汉 430074;
3. 山东科技大学 矿山灾害预防控制省部共建国家重点实验室培育基地, 山东 青岛 266590)

摘 要: CO₂ 地质封存是目前最经济、最可靠的 CO₂ 减排技术之一, 对 CO₂ 反应迁移规律的研究具有重要的理论价值。采用 Dardis 多孔介质模型与已有的 CO₂ 反应迁移模型耦合, 对含喉部裂隙的复杂介质中反应迁移规律进行模拟研究。速度场的模拟结果表明, 裂隙内的速度明显高于基质速度, 在喉部中心线位置处速度达到最大值。溶解反应主要集中于入口段及裂隙的上、下边缘附近; 受喉部的影响, 喉部下游的裂隙边缘几乎不发生溶解反应。反应物 H⁺ 在裂隙及喉部中的浓度明显高于在基质中的浓度; 而生成物 Ca²⁺ 的高浓度区则出现在下游基质区中。针对不同喉部位置的情况进行对比, 分析其对反应率及组分浓度的影响规律。最后对含突扩孔的裂隙介质进行了模拟, 发现其提高了裂隙内的速度及组分迁移, 这与喉部裂隙介质内的规律正好相反。上述结果较好地说明了本模型具有模拟研究复杂裂隙介质内的 CO₂ 反应迁移规律的能力。

关 键 词: 格子 Boltzmann 方法 (LBM); CO₂ 反应迁移; 喉部裂隙介质

中图分类号: O 552.3+2

文献标识码: A

文章编号: 1000-7598 (2017) 03-0663-09

Lattice Boltzmann simulation of CO₂ reactive transport in throat fractured media

TIAN Zhi-wei^{1,2}, TAN Yun-liang³

(1. State Key Laboratory of Coal Mine Disaster Dynamics and Control, Chongqing University, Chongqing 400044, China; 2. Faculty of Earth Resources, China University of Geosciences (Wuhan), Wuhan, Hubei 430074, China; 3. State Key Laboratory of Mining Disaster Prevention and Control Co-founded by Shandong Province and the Ministry of Science and Technology, Shandong University of Science and Technology, Qingdao, Shandong 266590, China)

Abstract: CO₂ geological storage is one of the most economical and reliable techniques for reducing CO₂ emission, and the understanding of CO₂ reactive transport in reservoirs is critical for that. Dardis's porous model, coupled with our previous CO₂ reactive model, is presented to investigate the reactive transport in throat fractured media. According to the velocity field results, the velocity in fracture is much higher than that in matrix and it reaches the maximum value at centerline in throat. The main dissolution reaction occurs near the inlet region, and along the upper and bottom edges of the fracture. There is nearly no dissolution along the edges after downstream throat, which is mainly affected by the throat. The concentration of H⁺ ion in fracture and throat is higher than that in the matrix; while the higher concentration of Ca²⁺ ion occurs in the region of downstream matrix. And then, the comparisons among different throat positions are also made to analyze the effects of the throat position on the distribution of dissolution rate and species concentration. Finally, the fractured media with sudden reaming is simulated, and it is found that the velocity and component migration in the fracture are enhanced, which is totally contrary to the case with throat fracture. All the above results show the capability of the present model in simulating CO₂ reactive transport in complex fractured media.

Keywords: lattice Boltzmann method (LBM); CO₂ reactive transport; throat fractured media

1 引 言

CO₂ 地质封存是目前最经济、最可靠的 CO₂ 捕

集与封存 (CCS) 技术之一, 具有广泛的应用前景^[1-2]。因此, 探索 CO₂ 在地质封存过程中与水岩之间的相互作用及其迁移转化机制具有非常重要的

收稿日期: 2016-07-28

基金项目: 国家自然科学基金 (No.51104133, No.51474137); 煤矿灾害动力学与控制国家重点实验室开放课题 (No.2011DA105287-KF201304)。

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (51104133, 51474137) and the Scientific Research Foundation of State Key Laboratory of Coal Mine Disaster Dynamics and Control (2011DA105287-KF201304).

第一作者简介: 田智威, 男, 1980 年生, 博士, 副教授, 主要从事 LBM 模型及模拟应用方面的研究工作。E-mail: zwtian@cug.edu.cn

理论价值和实际意义^[2-7]。

目前已有的研究 CO₂ 地质封存的数学模型通常可分为 3 类^[2]：水动力学模型、批式地化反应模型、反应迁移模型。其中反应迁移模型是前两类模型的结合，可以较好地同时模拟化学反应及流动规律，但也是最有难度的和最具挑战性的模型。

格子 Boltzmann 方法 (LBM)^[8-10] 作为一种新兴的数值计算介观方法，具有一系列传统数值方法所不具备的优点，自 20 世纪 90 年代初提出至今取得了迅速的发展和广泛的应用^[9-14]。Kang 等^[15-17] 采用孔隙 LBM 模型对多孔介质内 CO₂ 注入的反应迁移规律进行了模拟研究，并考虑了基质溶解所导致的孔隙度及渗透率变化；但模型中仅关注基质的表面化学反应，而将基质也处理为不可渗透的。

在笔者已完成的前续工作中^[18-19]，将 Guo 等^[20] 的多孔介质 LBM 模型扩展到了 CO₂ 反应迁移过程的模拟中，成功地模拟了基质溶解、组分迁移及其与流动的耦合过程，并且考虑了孔隙度、渗透率变化对速度场的影响。此外，还对含简单裂隙介质内的反应迁移也进行了相应的模拟，初步研究了裂隙的存在对于反应迁移的影响^[19]。

在 Guo 的模型^[20] 中虽然可以考虑孔隙度的变化，对简单裂隙介质进行模拟，但在全流场中外力项中驱动力 G 的数值始终保持为常数，影响了其对复杂裂隙介质的模拟能力。因此，在本文中将 Dardis^[21-22] 多孔介质模型与已有的 CO₂ 反应迁移模型相耦合，以进一步对含喉部裂隙的复杂介质中的反应迁移过程进行相应的模拟研究。

2 多孔介质 LBM 渗流模型

为了对多孔介质内的流动规律进行模拟研究，Dardis 等^[21-22] 于 1998 年提出了多孔介质渗流的 LBM 模型，该模型采用进出口压力差驱动，可对非均匀介质内渗流规律进行有效的模拟，其演化方程为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \Delta f_i^{\text{PM}}(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

式中： f_i 和 f_i^{eq} 分别为分布函数和平衡态分布函数； \mathbf{x} 和 t 分别为空间位置和时间； \mathbf{c} 和 \mathbf{e}_i 分别为流体颗粒速度及其离散方向； τ 为模型的松弛时间。

而附加项 $\Delta f_i^{\text{PM}}(\mathbf{x}, t)$ 代表了多孔介质骨架颗粒对流动的阻碍影响效应

$$\Delta f_i^{\text{PM}}(\mathbf{x}, t) = n_s(\mathbf{x}) [f_{-i}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i, t)] \quad (2)$$

式中： $-i$ 为 i 的相对方向。 $n_s(\mathbf{x})$ 定义为多孔介质中固体颗粒的分布密度，其取值范围为 $0 \leq n_s(\mathbf{x}) \leq 1$ ，与孔隙度 ε 的关系为： $n_s(\mathbf{x}) = 1 - \varepsilon(\mathbf{x})$ 。当 $n_s(\mathbf{x}) = 0$ 时，式 (2) 中附加项 $\Delta f_i^{\text{PM}}(\mathbf{x}, t) = 0$ ，式 (1) 退化为标准 LBM 模型演化方程，即为无介质的自由流动；当 $n_s(\mathbf{x}) = 1$ 时，则对应固壁面，无流体流过。

流体的密度和渗流速度分别定义为

$$\rho = \sum_i f_i \quad (3)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_i \mathbf{c}_i f_i \quad (4)$$

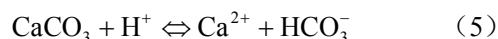
与 Guo^[20] 的模型相比，该模型的优势在于未采用统一的外力驱动，外力项直接与孔隙度相关，可适用于复杂介质中流动规律的模拟研究，因此，在本文中采用该模型对渗流速度场进行模拟，更多模型的细节可以参考文献^[21-22]。

3 CO₂ 反应迁移模型

为了对 CO₂ 注入地质储层中的过程进行模拟研究，必须在渗流 LBM 模型的基础上加入地化反应迁移模型，并进行相应的耦合。

3.1 CO₂ 地化反应动力学

在 CO₂ 地质封存的过程中，与地下水接触生成碳酸对基岩将产生酸袭作用。假设基岩基质中可反应的矿物为纯 CaCO₃，相应的地化反应可表示为



在对 CO₂ 注入中反应迁移过程的模型化描述中，反应动力学及其参数是获得可靠结果的重要基础，在已有的文献中有不同形式的表达^[23-25]，其中应用最广的反应率计算模型为

$$R = (k_1 \alpha_{\text{H}^+} + k_2 \alpha_{\text{H}_2\text{CO}_3^*} + k_3) \left(1 - \frac{Q}{K_{\text{eq}}} \right) \quad (6)$$

式中： k_i 为反应率常数； α_{H^+} 和 $\alpha_{\text{H}_2\text{CO}_3^*}$ 分别为 H^+ 和 H_2CO_3^* 的反应活性； K_{eq} 为平衡反应常数； Q 为生成物离子活性 (IAP)。

3.2 反应组分计算模型

本小节中将介绍在 LBM 模型的框架下如何求解各反应组分 (离子) 的分布及演化规律。对各个参与化学反应的组分 (离子)，其演化方程可以表示为

$$g_{Y_j,i}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_{Y_j,i}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_j} [g_{Y_j,i}(\mathbf{x}, t) - g_{Y_j,i}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \omega_i R_j \Delta t \quad (7)$$

式中： Y_j 分别代表了第 j 组分 (H^+ 、 Ca^{2+} 和 HCO_3^-)

的组分浓度； $g_{y,j,i}$ 为各组分沿 i 方向的分布函数； $g_{y,j,i}^{\text{eq}}$ 为各组分的平衡态分布函数； τ_j 为各组分的无量纲松弛时间； R_j 为各组分的反应率源项。

各组分的浓度 Y_j 可以按以下公式直接求得：

$$Y_j = \sum_i g_{y,j,i}(\mathbf{x}, t) \quad (8)$$

在化学反应式 (5) 中所有的组分离子浓度均可以按如上进行求解得到，除了固相的基质 CaCO_3 。随后将进一步深入探讨固相基质的溶解反应计算，以及其与孔隙度和渗透率的变化关系。

3.3 固相基质溶解及孔隙度变化

固相 CaCO_3 的溶解率方程可表达为^[26]

$$\frac{\partial Y_c}{\partial t} = M_c R_c \quad (9)$$

式中： Y_c 为 CaCO_3 含量，在所有的计算网格点上其数值在每步计算后均进行如下的更新

$$Y_c(\mathbf{x}, t + \Delta t) = Y_c(\mathbf{x}, t) + \Delta t M_c R_c \quad (10)$$

式中： $t + \Delta t$ 代表了一个时间步长 Δt 化学反应后的时刻； M_c 为 CaCO_3 的分子量； R_c 为该网格点上固相 CaCO_3 的溶解率。

随着固相 CaCO_3 的溶解反应，其固相基质的体积分数将减少，而孔隙度随之增加，溶解反应后的孔隙度可以通过固相介质的体积分数由如下的关系求得

$$\varepsilon = 1.0 - (1.0 - \varepsilon_0) \frac{Y_c}{Y_{c0}} \quad (11)$$

每个网格点上的孔隙度值在每个时间步后均进行更新。

孔隙度和渗透率的变化会影响到流动特性，在本模型中该影响将通过演化方程中的碰撞附加项 Δf_i^{PM} 影响渗流速度场的分布规律。因此，本模型具有可以描述地化反应迁移过程中的耦合规律：包括了组分的地化反应、固相介质的溶解、孔隙度变化、以及渗流速度场变化等。

4 结果分析讨论

在本部分中将采用上述模型进行相应的数值模拟研究。假设 CO_2 与水从左向右注入到含喉部裂隙碳酸盐岩储层中，发生相应的地化反应迁移（见图1）。储层基质由纯的均质 CaCO_3 组成，初始孔隙度为 0.3，并采用 121×121 的网格完成相关的模拟研究。各反应参数值均取自典型的试验数据，参见文献 [23–25]： k_1 、 k_2 及 k_3 的值分别为 8.9×10^{-5} 、 5.0×10^{-8} 和 6.5×10^{-11} ($\text{mol}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$)， K_{eq} 为 3.47×10^{-9} 。同时，由于 CaCO_3 的溶解非常缓慢，在本模拟的算例中仅

有部分的 CaCO_3 基质将溶解，而不会全部溶解完。

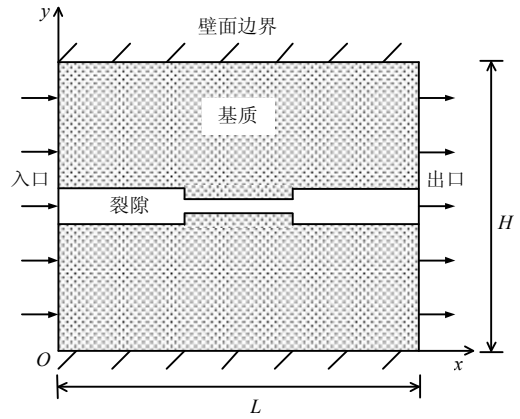


图1 含喉部裂隙介质计算域示意图
Fig.1 Schematic of the computational domain with throat fracture

4.1 速度场分布

如图1所示，裂隙宽度为 $H/10$ ，而喉部宽度为 $H/20$ ，长度为 $L/3$ ，位于中部位置（即 $L/3$ 至 $2L/3$ 处）。图2为模拟得到的 U 速度场分布图，裂隙中的速度明显高于基质中的速度，在喉部中心线位置速度达到最高值。图3则分别为 $X=L/6$ （实线）和 $L/2$ （虚线）处的速度对比图，在 $X=L/6$ 处，裂隙中

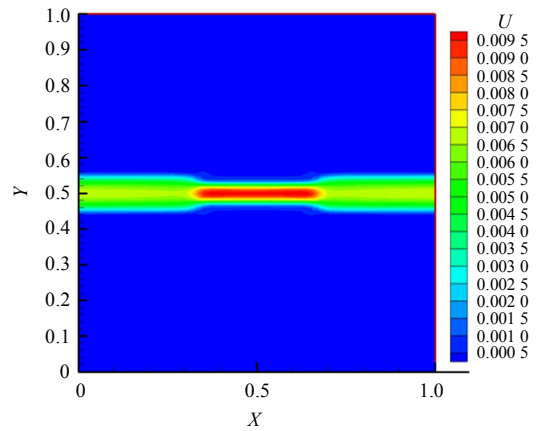


图2 U 速度场分布图
Fig.2 Contours of U velocity field

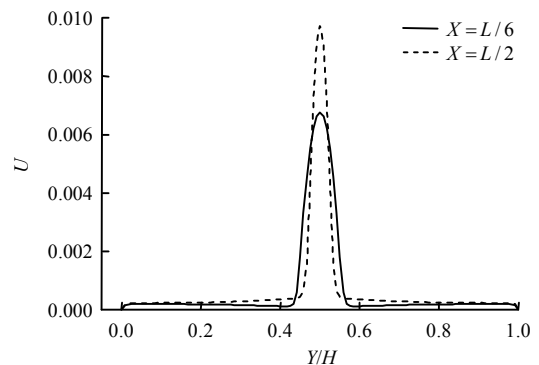
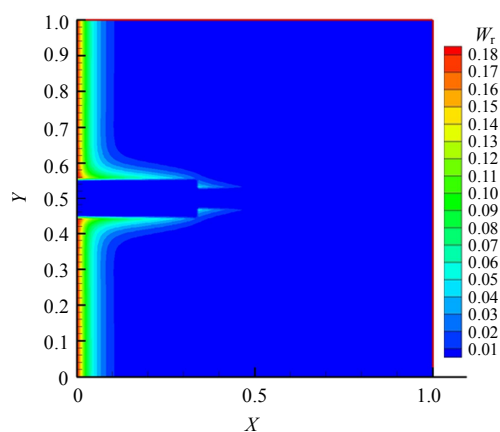


图3 $X=L/6, X=L/2$ 处 U 速度分布
Fig.3 U velocity profiles at $X=L/6$ and $X=L/2$

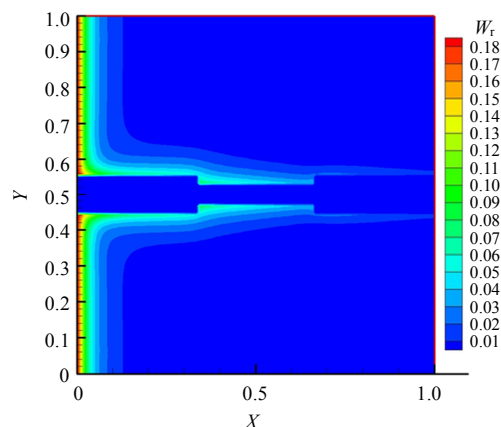
线最高速度 $U_f = 0.00677$; 而在 $X=L/2$ 喉部中心处, 其速度梯度更大且中线最高速度 $U_h = 0.00973$, 为裂隙中 U_f 的 1.44 倍。

4.2 反应率及孔隙度分布

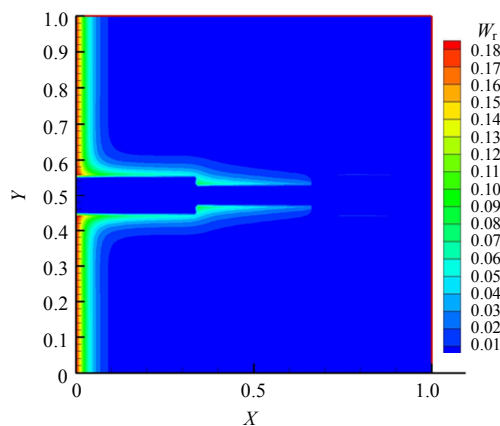
图 4(a)~(c)所示为不同时间步时的无量纲反应率分布演化图。在注入的初期 (见图 4(a)), 由于 H^+ 的扩散迁移所限, 溶解反应主要集中在入口附近的介质区以及上游的裂隙上、下边缘附近区域。随



(a) 3×10^4 步



(b) 1×10^5 步



(c) 1×10^6 步

图 4 无量纲反应率分布图

Fig.4 Contours of non-dimensional reaction rate

着反应地进行, 喉部裂隙的上、下边缘逐步开始反应, 并向下游迁移直至出口 (见图 4(b)). 而当反应达到基本稳定时 (见图 4(c)), 溶解反应集中于喉部裂隙及其上游区域, 而喉部下游的裂隙上、下边缘几乎不再发生溶解反应。

从孔隙度的分布图中也可以发现, 相应的规律 (见图 5), 孔隙度的变化主要集中在入口附近的介质区域以及喉部上游的裂隙上、下边缘, 喉部下游的边缘附近孔隙度几乎没有变化。

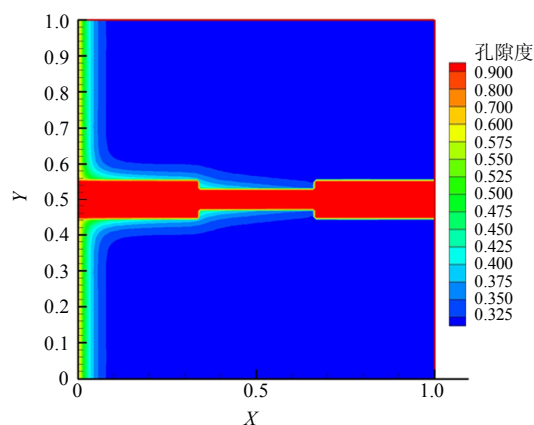


图 5 孔隙度分布图(2×10^6 步)

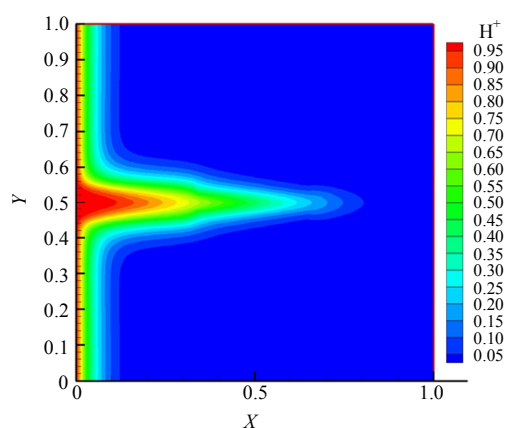
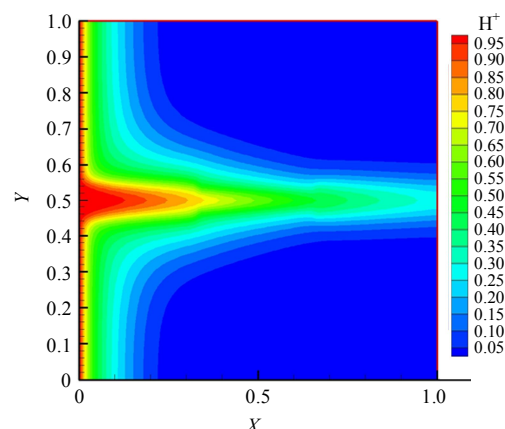
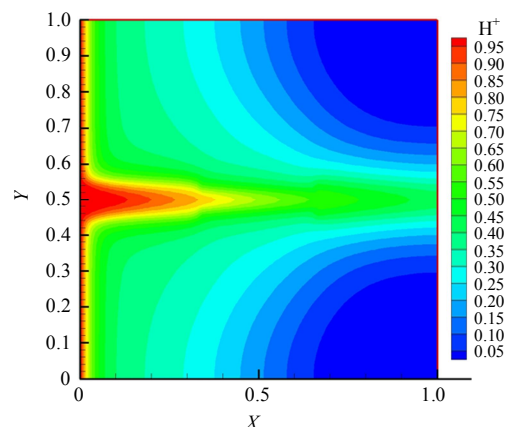
Fig.5 Contours of porosity at 2×10^6 time steps

4.3 各组分浓度分布

反应物组分 H^+ 浓度随时间步的演化规律, 如图 6(a)~(c)所示。在反应初期, H^+ 主要沿裂隙迁移, 在 5×10^4 步时其中线迁移前锋到达约 $X=0.8L$ 处; 而基质内其前锋仅迁移到约 $X=0.15L$ 处。随着时间步的增加, H^+ 向下游逐渐迁移, 其浓度分布也越来越高, 尤其是在裂隙通道中的浓度明显高于在基质中的, 也充分说明了裂隙是其主要的运移通道。

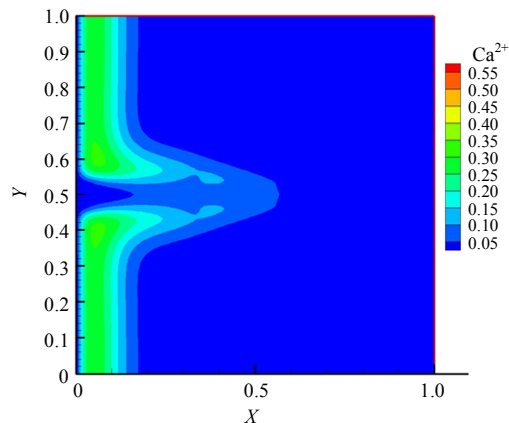
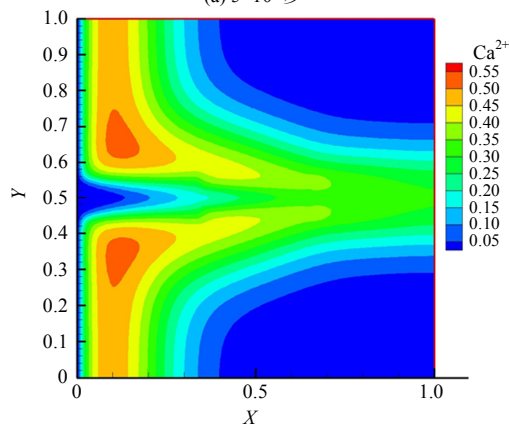
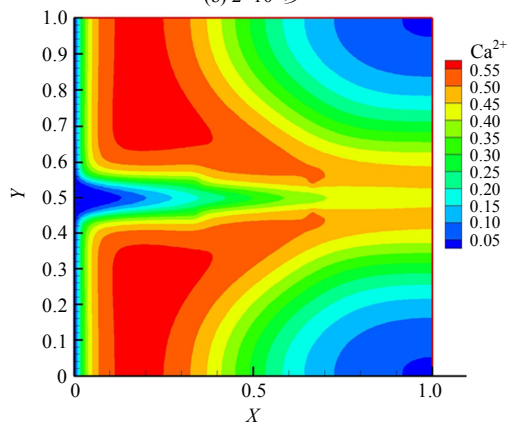
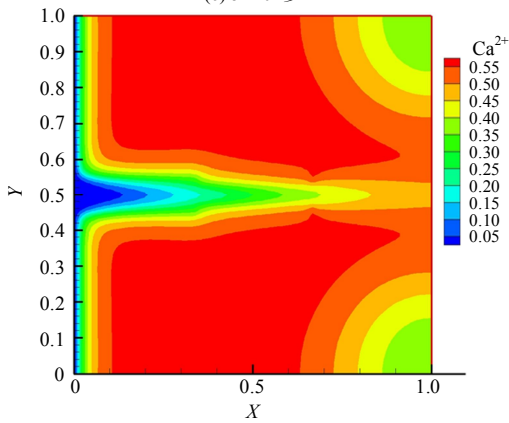
作为生成物组分 Ca^{2+} 的浓度分布则显示出完全不同的规律 (见图 7(a)~(d))。在反应初期, Ca^{2+} 主要集中于入口附近的基质区域, 在裂隙中的浓度分布要低于基质中的浓度。 Ca^{2+} 浓度随着反应地进行逐渐升高并向下游迁移, 高浓度区域出现在介质中, 低浓度区域出现在裂隙入口段附近, 与 H^+ 的高浓度区正好对应; 同时还可以清楚地发现, 喉部裂隙的存在对其浓度分布有一定的影响。

图 8 所示为 Ca^{2+} 浓度最高值随时间步的演化分布图, 在反应初期生成的 Ca^{2+} 浓度较低, 随着反应的进行 Ca^{2+} 浓度最高值也逐渐升高, 在 5×10^5 时间步后其最高值几乎不发生变化, 即反应已经趋于平衡。

(a) 5×10^4 步(b) 3×10^5 步(c) 1×10^6 步图6 H^+ 浓度分布图Fig.6 Contours of H^+ concentration

4.4 不同喉部位置的对比分析

再分别对喉部位于不同位置时进行对比研究。如图9所示,实线A为喉部位置 $L/6 \sim L/2$ 的反应率曲线,虚线B则对应喉部位于中部,点画线C对应喉部位置 $L/2 \sim 5L/6$ 时。发现在上游段 ($X=0.15L$ 之前) 以及下游出口附近,反应率的分布曲线几乎重合,说明不同的喉部位置对于上游段以及出口附近区域的反应率分布几乎没有影响。而中游段由

(a) 5×10^4 步(b) 2×10^5 步(c) 5×10^5 步(d) 1×10^6 步图7 Ca^{2+} 浓度分布图Fig.7 Contours of Ca^{2+} concentration

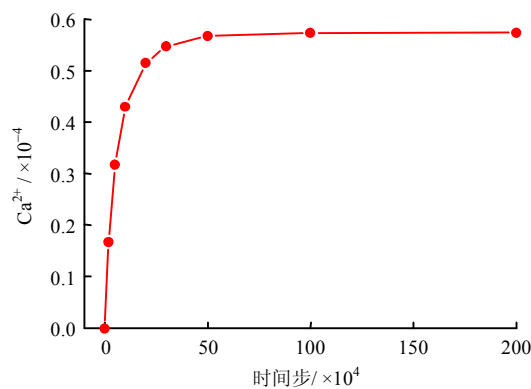


图 8 Ca^{2+} 浓度最高值分布图
Fig.8 Maximum concentration of Ca^{2+}

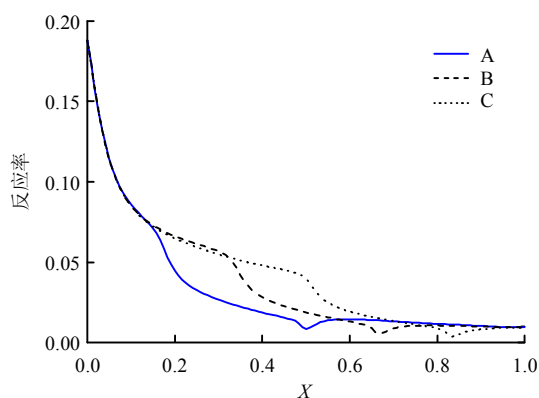


图 9 不同喉部位置的裂隙边缘($Y=0.45H$)反应率对比图
Fig.9 Comparison of reaction rate of fracture edge ($Y=0.45H$) for different throat position

于喉部位置的不同, 曲线呈现不同的分布, 但可以看出喉部段的开始处和结束处反应率曲线均有明显的下降。而从裂隙边缘 H^+ 浓度的分布图 10 中也可以看出类似的规律: 在 1×10^6 步时, 入口段和出口段附近的分布几乎相同, 而在喉部位置 H^+ 浓度出现了较明显的下降, 可以区别出不同的喉部位置。

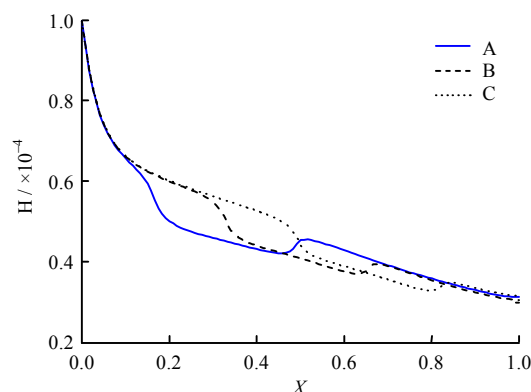


图 10 不同喉部位置的裂隙边缘($Y=0.45H$) H^+ 浓度对比图
Fig.10 Comparison of H^+ concentration along fracture edge ($Y=0.45H$) for different throat position

4.5 含突扩孔裂隙的反应迁移规律

在实际多孔介质中, 除了喉部裂隙外, 还有含

突扩孔的裂隙 (如图 11 所示), 再对此类裂隙内的反应迁移规律进行对比模拟研究。

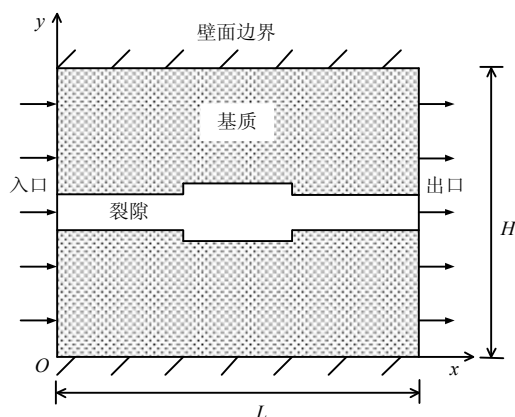


图 11 含突扩孔裂隙介质计算域示意图
Fig.11 Schematic of the computational domain with expanding pore fracture

图 12 所示为其 U 速度场的分布图, 可以看到, 在裂隙中的速度明显高于基质中的速度, 而在中间突扩孔的部分, 速度则有所下降, 这与喉部裂隙的速度场图 2 形成明显的对比。表 1 中分别列出了在喉部裂隙和含突扩孔裂隙介质内中线上不同位置的 U 速度, 可以发现, 与喉部裂隙中趋势相反, 含突扩孔裂隙的速度至突扩孔附近开始下降, 突扩孔后速度又恢复。总体而言, 含突扩孔裂隙内的速度值均高于喉部裂隙内的速度, 这说明了突扩孔的存在提高了裂隙内的迁移速度。

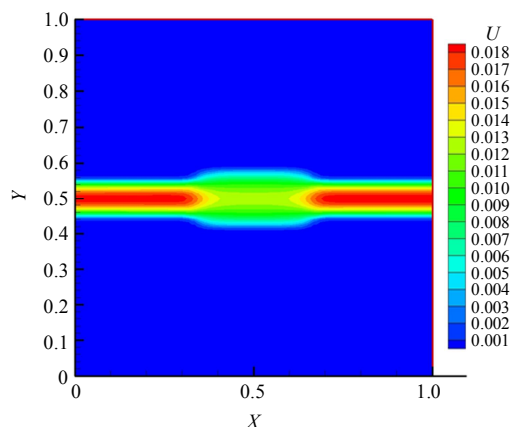


图 12 含突扩孔裂隙的 U 速度场分布图
Fig.12 Contours of U velocity field for expanding pore fracture

表 1 中心线不同 X 位置 U 速度对比
Table 1 Comparison of centerline U velocity at different X position

中线 U 速度	$X=0$	$X=L/3$	$X=L/2$	$X=L$
喉部裂隙介质	0.006 87	0.008 49	0.009 73	0.006 94
含突扩孔裂隙介质	0.018 69	0.016 76	0.012 53	0.018 87

同时, 反应率的分布也表现出不同的规律 (见图 13), 突扩孔后的裂隙边缘依然有明显的溶解反应, 而图 4(c)中喉部裂隙下游的裂隙边缘则几乎没有反应, 这说明了突扩孔裂隙提高了溶解反应的速率。图 14 则将其在 $Y=0.45H$ 处裂隙边缘的反应率进行了对比, 除了在 $L/3$ 至 $2L/3$ 为孔隙区域 (反应率为 0) 之外, 含突扩孔裂隙中的反应率均明显高于喉部裂隙的反应率, 尤其是在突扩孔 (或喉部) 之后的下游区域更为显著。

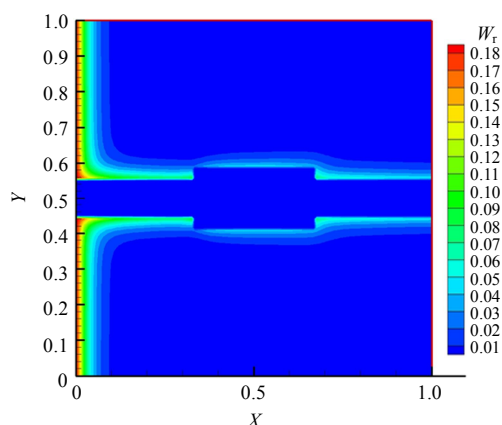


图 13 含突扩孔裂隙的反应率分布图(1×10^6 步)
Fig.13 Contours of reaction rate for expanding pore fracture (1×10^6 timesteps)

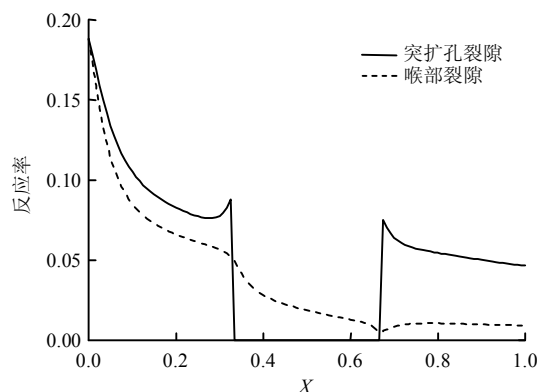


图 14 含突扩孔裂隙与喉部裂隙在 $Y=0.45H$ 裂隙边缘处反应率对比图
Fig.14 Comparison of reaction rate of fracture edge ($Y=0.45H$) for throat and expanding hole

图 15 所示为裂隙边缘处的 H^+ 浓度对比, 可以发现, 突扩孔裂隙中 H^+ 浓度总体均高于喉部裂隙介质内的浓度, 而在突扩孔段和喉部裂隙段内, 其浓度的变化也呈现截然相反的规律: 突扩孔段内 H^+ 浓度明显增加, 而喉部裂隙段内其浓度则有所下降。这些都说明了突扩孔裂隙提高了反应组分的迁移, 也进一步验证了突扩孔裂隙内溶解反应速率更高的原因。

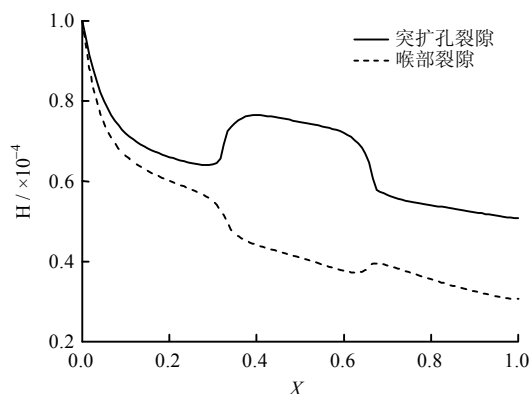


图 15 含突扩孔裂隙与喉部裂隙在 $Y=0.45H$ 裂隙边缘处 H^+ 浓度对比图
Fig.15 Comparison of H^+ concentration along fracture edge ($Y=0.45H$) for throat and expanding hole

5 结 论

(1) 采用 Dardis 模型与 CO₂ 反应迁移模型相耦合, 对含喉部裂隙介质中反应迁移过程进行模拟研究。裂隙中的速度明显高于基质中的速度, 在喉部中线位置速度达到最高值, 在 $X=L/2$ 喉部中心处速度值为裂隙中线速度值的 1.44 倍。

(2) 通过分析反应率和孔隙度的分布及演化规律, 发现溶解反应及孔隙度的变化主要集中于入口附近的介质区以及喉部及其上游的裂隙边缘, 而喉部下游的裂隙边缘几乎不再发生溶解反应。

(3) 在裂隙通道中反应物 H^+ 浓度明显高于在基质中的, 说明了裂隙是其主要的运移通道; 而生成物 Ca^{2+} 的高浓度区则出现在基质区中, 低浓度区出现在裂隙中。

(4) 对不同喉部位置的对比研究发现, 其对入口段和出口段附近的分布几乎没有影响, 在中游段则呈现不同的分布规律。

(5) 与喉部裂隙相反, 突扩孔裂隙提高了裂隙内的速度及组分迁移, 在突扩孔后的下游区域, 裂隙边缘也出现了明显的溶解反应及孔隙度增加, 突扩孔裂隙中 H^+ 浓度也明显提高。

参 考 文 献

- [1] METZ B, DAVIDSON O, DECONINCK H C, et al. IPCC special report on carbon dioxide capture and storage[R]. Cambridge & New York: Cambridge University Press, 2005.
- [2] GAUS I, AUDIGANE P, ANDRE L, et al. Geochemical modelling and solute transport modelling for CO₂ storage, what to expect from it[J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2008, 2: 605—625.

- [3] LI Q. Coupled reactive transport model for heat and density driven flow in CO₂ storage in saline aquifers[J]. **Journal of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste**, 2011, 15: 251–258.
- [4] 李小春, 袁维, 白冰. CO₂ 地质封存力学问题的数值模拟方法综述[J]. 岩土力学, 2016, 37(6): 1762–1772.
LI Xiao-chun, YUAN Wei, BAI Bing. A review of numerical simulation methods for geomechanical problems induced by CO₂ geological storage[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2016, 37(6): 1762–1772.
- [5] 谢和平, 熊伦, 谢凌志, 等. 中国 CO₂ 地质封存及增强地热开采一体化的初步探讨[J]. 岩石力学与工程学报, 2014, 33(增刊 1): 3077–3086.
XIE He-ping, XIONG Lun, XIE Ling-zhi, et al. Preliminary study of CO₂ geological sequestration and enhancement of geothermal exploitation integration in China[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2014, 33(Supp.1): 3077–3086.
- [6] 匡冬琴, 李琦, 王永胜, 等. 神华碳封存示范项目中 CO₂ 注入分布模拟[J]. 岩土力学, 2014, 35(9): 2623–2633.
KUANG Dong-qin, LI Qi, WANG Yong-sheng, et al. Numerical simulation of distribution of migration of CO₂ in Shenhua carbon capture and storage demonstration project[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2014, 35(9): 2623–2633.
- [7] 张帆, 周辉, 吕涛, 等. 二氧化碳注入下岩层变形和流体运移分析(II): 实例分析[J]. 岩土力学, 2014, 35(10): 2888–2893.
ZHANG Fan, ZHOU Hui, LÜ Tao, et al. Analysis of reservoir deformation and fluid transportation induced by injection of CO₂ into saline aquifer (II): Case study[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2014, 35(10): 2888–2893.
- [8] CHEN S, DOOLEN G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. **Annual Review of Fluid Mechanics**, 1998, 30: 329–364.
- [9] 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009.
GUO Zhao-li, ZHENG Chu-guang. Theory and applications of lattice Boltzmann method[M]. Beijing: Science Press, 2009.
- [10] 何雅玲, 王勇, 李庆. 格子 Boltzmann 方法的理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009.
HE Ya-lin, WANG Yong, LI Qing. Lattice Boltzmann method: Theory and applications[M]. Beijing: Science Press, 2009.
- [11] 田智威, 谭云亮, 刘兆霞. 含裂隙煤体瓦斯渗流规律的 LBM 数值模拟[J]. 煤炭学报, 2013, 38(8): 1376–1380.
TIAN Zhi-wei, TAN Yun-liang, LIU Zhao-xia. Numerical simulation of coal gas seepage in fractured coal by LBM[J]. **Journal of China Coal Society**, 2013, 38(8): 1376–1380.
- [12] 谭云亮, 尹延春, 滕桂荣, 等. 基于 Lattice Boltzmann 方法的瓦斯渗流模拟研究[J]. 煤炭学报, 2014, 39(8): 1446–1454.
TAN Yun-liang, YIN Yan-chun, TENG Gui-rong, et al. Simulation research of gas seepage based on lattice Boltzmann method[J]. **Journal of China Coal Society**, 2014, 39(8): 1446–1454.
- [13] 申林方, 王志良, 李邵军. 基于格子博尔兹曼方法表征体元尺度土体细观渗流场的数值模拟[J]. 岩土力学, 2015, 36(增刊 2): 689–694.
SHEN Lin-fang, WANG Zhi-liang, LI Shao-jun. Numerical simulation for mesoscopic seepage field of soil based on lattice Boltzmann method at REV scale[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2015, 36(Supp.2): 689–694.
- [14] 崔冠哲, 申林方, 王志良, 等. 基于格子 Boltzmann 方法土体 CT 扫描切片细观渗流场的数值模拟[J]. 岩土力学, 2016, 37(5): 1497–1502.
CUI Guan-zhe, SHEN Lin-fang, WANG Zhi-liang, et al. Numerical simulation of mesoscopic seepage field of soil CT scanned slice based on lattice Boltzmann method[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2016, 37(5): 1497–1502.
- [15] KANG Q, LICHTNER P C, ZHANG D. Lattice Boltzmann pore-scale model for multicomponent reactive transport in porous media[J]. **Journal of Geophysical Research**, 2006, 111(12): B05203.
- [16] KANG Q, 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: 197–213.
- [17] KANG Q, CHEN L, VALOCCHI A J, et al. Pore-scale study of dissolution-induced changes in permeability and porosity of porous media[J]. **Journal of Hydrology**, 2014, 517: 1049–1055.
- [18] TIAN Z W, XING H L, TAN Y L, et al. A coupled lattice Boltzmann model for simulating geochemical reaction transport in CO₂ injection[J]. **Physica A**, 2014, 403: 155–164.
- [19] TIAN Z W, XING H L, TAN Y L, et al. Reactive transport

- LBM model for CO₂ injection in fractured reservoirs[J]. **Computers & Geosciences**, 2016, 86: 15–22.
- [20] GUO Z L, ZHAO T S. Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media[J]. **Physical Review E**, 2002, 66(3): 036304(9).
- [21] DARDIS O, MCCLOSKEY J. Lattice Boltzmann scheme with real numbered solid density for the simulation of flow in porous media[J]. **Physical Review E**, 1998, 57(4): 4834–4837.
- [22] DARDIS O, MCCLOSKEY J. Permeability porosity relationships from numerical simulations of fluid flow[J]. **Geophysical Research Letter**, 1998, 25(9): 1471–1474.
- [23] CHOU L, GARRELS R M, WOLLAST R. Comparative study of the kinetics and mechanisms of dissolution of carbonate minerals[J]. **Chemical Geology**, 1989, 78: 269–282.
- [24] PLUMMER L N, PARKHURST D L, WIGLEY T M L. The kinetics of calcite dissolution in CO₂-water systems at 5~65 °C and 0.0~1.0 atm CO₂[J]. **American Journal of Science**, 1978, 278: 176–216.
- [25] POKROVSKY O S, GOLUBEV S V, SCHOTT J. Dissolution kinetics of calcite, dolomite and magnesite at 25 °C and 0 to 50 atm pCO₂[J]. **Chemical Geology**, 2005, 217: 239–255.
- [26] YIN S, DUSSEAU M B, ROTHENBURG L. Coupled THMC modeling of CO₂ injection by finite element methods[J]. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, 2012, 80(1): 53–60.

上接第 622 页

- [9] 刘侠. 重力墙式堆石坝及墙背堆石压力的有限元分析[D]. 成都: 四川大学, 2006.
- LIU Xia. The finite element analysis of the gravity type rockfill dam and the rockfill pressure on the back of gravity wall[D]. Chengdu: Sichuan University, 2006.
- [10] 顾慰慈. 挡土墙土压力计算手册[M]. 北京: 中国建材工业出版社, 2005.
- GU Wei-ci. Handbook for calculation of earth pressure on retaining wall[M]. Beijing: China Building Materials Press, 2005.
- [11] EM1110-2-2502 Retaining and flood walls[S]. Washington: [s. n.], 1989.
- [12] 卢国胜. 考虑位移的土压力计算方法[J]. 岩土力学, 2004, 25(4): 586–589.
- LU Guo-sheng. A calculation method of earth pressure considering displacement[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2004, 25(4): 586–689.
- [13] 梅国雄, 宰金珉. 考虑位移影响的土压力近似计算方法[J]. 岩土力学, 2001, 22(4): 83–85.
- MEI Guo-xiong, ZAI Jin-min. Earth pressure calculating method considering displacement[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2001, 22(4): 83–85.
- [14] 卢坤林, 杨扬. 考虑位移影响的主动土压力近似计算方法[J]. 岩土力学, 2009, 30(2): 553–557.
- LU Kun-lin, YANG Yang. Approximate calculation method of active earth pressure considering displacement[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2009, 30(2): 553–557.
- [15] 张文慧, 田军, 王保田, 等. 基坑围护结构上的土压力与土体位移关系分析[J]. 河海大学学报(自然科学版), 2005, 33(5): 575–579.
- ZHANG Wen-hui, TIAN Jun, WANG Bao-tian, et al. Relationship between earth pressure on support structure of foundation pits and displacement of earth mass[J]. **Journal of Hohai University(Natural Science)**, 2005, 33(5): 575–579.
- [16] 姚国圣. 考虑位移的土压力计算方法在基坑工程中的应用[J]. 岩土工程学报, 2013, 35(增刊 2): 693–696.
- YAO Guo-sheng. Application of earth pressure calculation method considering displacement in excavation engineering[J]. **Chinese Journal of Geotechnical Engineering**, 2013, 35(Supp.2): 693–696.