

УДК 550.341

doi 10.26089/NumMet.v21r104

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТОПОЛОГИИ ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗМЕНЕНИЯ ПОРОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПОРОДЫ В ПРОЦЕССЕ ХИМИЧЕСКОГО РАСТВОРЕНИЯ

Т. С. Хачкова¹, Я. В. Базайкин², В. В. Лисица³

Представлен алгоритм построения персистентных диаграмм для оценки изменения топологии матрицы породы при взаимодействии с химически активным флюидом. В пространстве персистентных диаграмм вводится метрика, которая позволяет выполнять их кластеризацию для количественной оценки “схожести” изменений топологии порового пространства в процессе растворения матрицы породы. На основе такой кластеризации показано, что одним из доминирующих параметров в процессе химического взаимодействия флюида с породой в пластовых условиях являются скорость реакции и коэффициент диффузии, в то время как скорость потока оказывает существенно меньшее влияние.

Ключевые слова: персистентные гомологии, химическое воздействие на горную породу.

1. Введение. Задача транспорта химически активного вещества в пористой среде возникает в ряде приложений, например при интенсификации добычи углеводородов — кислотная обработка пласта [17, 28], при захоронении углекислого газа в карбонатных пластах [22, 41], при биологически-активированной кальцитизации сыпучих материалов [14] и др. В перечисленных задачах основной интерес представляют не гомогенные реакции взаимодействия реагентов, растворенных во флюиде, а гетерогенные — взаимодействие флюида с матрицей или скелетом пористого материала. В результате такого взаимодействия происходит либо частичное растворение матрицы, как в случае кислотной обработки пласта или взаимодействия CO_2 с кальцитом, либо, наоборот, осаждение твердой фазы, как в случае биологически активной кальцитизации. Подобные изменения в микроструктуре пористого материала оказывают существенное влияние на его физические свойства на макромасштабе. В частности, растворение матрицы приводит к увеличению пористости и проницаемости среды, к возможному снижению механической прочности и к изменению скорости самой химической реакции на макроуровне (за счет изменения площади реакционной поверхности). При этом численное моделирование транспорта химически активного вещества и пороупругое моделирование проводятся на макромасштабном уровне, где скорость изменения пористости, связь пористости с проницаемостью, с извилистостью и с механическими свойствами материала в ячейке сетки (достаточно большой в сравнении с размером пор, т.е. являющейся репрезентативным объемом) определяется на основе уравнений состояния [6, 20, 40]. Сами эти соотношения получены либо по результатам лабораторных экспериментов [7, 19, 25, 35], либо с применением методов “осреднения” и построения “эффективных” моделей [13, 34, 44]. В первом случае возникает проблема малого количества экспериментов — для одного образца возможно проведение только одного эксперимента. Во втором случае построение аналитических соотношений возможно только для чрезвычайно простых моделей среды — периодические упаковки шаров, регулярные системы трубок и др. Поэтому численное моделирование химического взаимодействия флюида с породой на масштабе пор с дальнейшим построением зависимостей между ключевыми макроскопическими параметрами среды позволит существенно уточнить уравнения состояния [2, 27, 32, 33].

В моделях реактивного транспорта на масштабе пласта пористость является одним из искомых параметров и ее изменение описывается соответствующим эволюционным уравнением. Коэффициенты системы уравнений, такие как проницаемость, извилистость порового пространства, эффективный коэффициент диффузии и прочие, вычисляются по значению пористости [17, 37, 40]. Однако в настоящее время существует ряд как экспериментальных [5, 25, 30], так и численных исследований [43, 46], которые показывают, что в зависимости от кинетики реакции на микроуровне, от скорости переноса вещества и иных

¹ Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН, просп. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск; научный сотрудник, e-mail: KhachkovaTS@ipgg.sbras.ru

² Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, просп. Коптюга, 4, 630090, г. Новосибирск; зав. лабораторией, e-mail: bazaikin@math.nsc.ru

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

факторов изменение топологии и геометрии порового пространства может варьироваться. В свою очередь, геометрия и топология порового пространства оказывают больший эффект на значения “эффективных” параметров среды, чем пористость как таковая. Однако представленные в работах описания изменений являются качественными и не могут быть использованы для формальной классификации процесса. Поэтому в настоящей статье предлагается использовать методы вычислительной топологии для формализации изменений порового пространства и установления их влияния на макроскопические свойства породы.

В нашей работе предложены численные алгоритмы построения персистентных диаграмм, которые позволяют не только оценить топологию порового пространства, но и представить в сжатом виде информацию об изменении топологии порового пространства в динамике. Спецификой используемых алгоритмов является то, что поровое пространство реализовано цифровым изображением [1, 24], а не симплицальным пространством, как это делается обычно [16]. Основной особенностью при этом является необходимость выбора типа связности пространства, что должно обеспечивать согласованность с топологической двойственностью в смысле Александера. Для нахождения компонент связности на каждом уровне фильтрации и построения персистентной диаграммы мы используем систему непересекающихся множеств. Для оценки близости топологий поровых пространств нами рассматривается метрика “бутылочного горлышка” в пространстве персистентных диаграмм, основанная на выборе наилучшего взаимно однозначного соответствия между диаграммами. Другие способы задания метрики, такие как метрика Хаусдорфа, обладают рядом недостатков. В частности, метрика Хаусдорфа не учитывает (или учитывает плохо) большой вес кластеров точек на персистентной диаграмме, а они оказались отражением существенных особенностей изменения топологии порового пространства. В дальнейшем мы использовали метрику бутылочного горлышка для кластеризации результатов моделирования по схожести изменения топологии порового пространства при различных условиях эксперимента — скорость потока жидкости, значения молекулярной диффузии и скорость химического взаимодействия.

2. Моделирование химического взаимодействия флюида с породой.

2.1. Математическая модель. Математические модели, описывающие химическое взаимодействие флюида с породой, включают в себя три основных компонента: уравнения движения жидкости, уравнения конвекции–диффузии для учета переноса активного компонента и математическое описание движения самой границы. В зависимости от характерных масштабов каждого из описанных процессов и связи между ними модель может быть как полностью связанной [29], так и допускать расщепление по физическим процессам [2, 23, 26, 27, 33]. В геологических приложениях скорость фильтрационного потока и скорость изменения положения границы — низкие с быстрым установлением потока при малом изменении геометрии, что позволяет проводить расщепление по физическим процессам. В этом случае поток описывается стационарным уравнением Стокса. В результате полная система уравнений имеет следующий вид: уравнение Стокса

$$\mu \nabla^2 \vec{u} - \nabla p = 0, \quad \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

с граничными условиями:

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

уравнение конвекции–диффузии

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

с граничными условиями

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

и уравнение, описывающее скорость изменения границы в нормальном направлении:

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

В этих обозначениях расчетная область $D \subseteq R^2$ состоит из объединения непересекающихся подобластей $D_p(t)$ и $D_m(t)$, соответствующих поровому пространству и матрице породы.

Граница области $\partial D = \Gamma_{\text{outlet}} \cup \Gamma_{\text{inlet}} \cup \Gamma_{\text{nf}}$. Граница раздела порового пространства и матрицы $\bar{D}_p(t) \cap \bar{D}_m(t) = \Gamma(t)$ — набор кривых достаточной гладкости. Переменными в уравнении Стокса являются:

$\vec{u} = (u_1, u_2)^T \in R^2$ — вектор скорости; p — давление; μ — коэффициент динамической вязкости жидкости; $p_{bc}(\vec{x})$ — давление на границе расчетной области. Переменные в уравнении конвекции–диффузии: D — коэффициент диффузии; C — концентрация реагента; \vec{n} — вектор нормали к границе, направленный внутрь порового пространства; k_r — коэффициент, определяющий скорость реакции первого порядка; Γ_{inlet} — часть внешней границы, через которую поступает реагент. В последнем уравнении v_n — нормальная компонента скорости движения границы, K_c — стехиометрический коэффициент реакции, ρ — массовая плотность твердой фазы, C_s — равновесная концентрация реагента.

2.2. Численные методы решения. Детальное описание численных методов, используемых при решении задачи (1)–(5), приведено в [2, 26, 27]. Поровое пространство $D_p(t)$ определяется неявно — точки, в которых значение функции уровня (или level-set) положительно, что позволяет моделировать сложную геометрию границы раздела, не совпадающую с линиями сетки. В терминах функции уровня изменение положения границы может быть записано в виде [18, 36]

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

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

Для решения уравнений Стокса и конвекции–диффузии применяется метод конечных разностей низкого порядка аппроксимации. Такой выбор обоснован, с одной стороны, повышенной детальностью дискретизации — сетка определяется разрешением микротомографических изображений и существенно превосходит требования на дискретизацию моделируемого физического процесса. С другой стороны, сложность геометрии и топологии порового пространства $D_p(t)$ не позволяет использовать схемы с большим шаблоном. Аппроксимация граничных условий на нерегулярной границе $\Gamma(t)$, не совпадающей с линиями сетки, основана на методе погруженных границ, или Immersed Boundary Method [31, 39].

3. Топологические методы анализа порового пространства. Цель этого раздела статьи — изложить необходимые сведения из теории персистентных гомологий [15, 42, 45] и описать их применение для анализа порового пространства. При этом мы следуем работе [16].

Пусть X — связное топологическое пространство и $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная функция. Для $a \in \mathbb{R}$ определим множество экскурсии $X_a = \{x \in X | f(x) \leq a\}$. Таким образом, пространство X “собирается” из непрерывного семейства множеств экскурсии X_a при a , пробегающем от $-\infty$ до $+\infty$. При этом топология пространств X_a меняется только при прохождении критических значений a_i , между которыми изменения топологического типа не происходит. Идея применения персистентных гомологий заключается в вычислении топологической сложности X в терминах относительной топологической сложности X_{a_i} в сравнении с $X_{a_{i-1}}$.

В классическом подходе к определению персистентных гомологий обычно предполагают, что X гомеоморфно $|K|$ — носителю некоторого конечного симплициального комплекса K [16]. Однако в приложениях часто X не несет структуры симплициального комплекса, но является цифровым изображением, т.е., грубо говоря, разбито на воксели, а не на симплексы [1, 24] (в нашем случае — пиксели). Основные определения и результаты могут быть перенесены на этот случай, для полноты изложения мы приводим их ниже.

Вокселем размерности n в евклидовом пространстве \mathbb{R}^d ($n \leq d$) мы будем называть n -мерный куб $Q \subset \mathbb{R}^d$ с единичной стороной, с вершинами, расположенными в точках с целочисленными координатами, и со сторонами, параллельными координатным осям. Очевидным образом для вокселя Q определяются воксели, являющиеся его гранями коразмерности от 1 до n . Цифровым изображением размерности d называют совокупность $K = \{Q_1, \dots, Q_N, Q_{N+1}, \dots, Q_M\}$ вокселей Q_1, \dots, Q_N размерности d вместе с набором всех их граней Q_{N+1}, \dots, Q_M всех коразмерностей (заметим, что для задания цифрового изображения достаточно задать лишь d -мерные воксели). Для того чтобы превратить цифровое пространство K в топологическое пространство $|K|$, необходимо задать тип связности. А именно, фиксировав некоторое целое k , $0 \leq k \leq d-1$, мы объявляем, что d -мерные воксели могут быть связаны между собой в точности через общие грани размерности k или выше. Таким образом, в качестве $|K|$ мы рассматриваем несвязную сумму всех вокселей размерности d из K и отождествляем их по общим граням размерности $\geq k$. Поскольку в данной статье рассматривается случай двумерных цифровых изображений, то речь может идти только о двух типах связности, которые принято обозначать как 4- и 8-связности (по максимальному числу соседей, связанных с данным пикселем), рис. 1.

Мы предполагаем, что поровое пространство обладает 4-связностью, а матрица (скелет) — 8-связностью. Поровое пространство и скелет дополняют друг друга, что согласуется с двойственностью для цифровых изображений, при которой 4- и 8-связности дополняют друг друга [1]. Имеются три топологические инварианта в размерности 2: числа Бетти β_0, β_1 и эйлерова характеристика $\chi = \beta_0 - \beta_1$. Если

\bar{K} — дополнение до K с двойственным типом связанности, то $\beta_0(K) = \beta_1(\bar{K})$ и $\beta_1(K) = \beta_0(\bar{K}) - 1$ в силу указанной выше двойственности [1]. Таким образом, при вычислении топологических характеристик двумерных изображений можно работать только с поровым пространством или только со скелетом. С другой стороны, все вычисления можно свести только к вычислению нулевых чисел Бетти скелета и порового пространства. При вычислении β_0 мы пользовались алгоритмом, основанным на системе непересекающихся множеств.

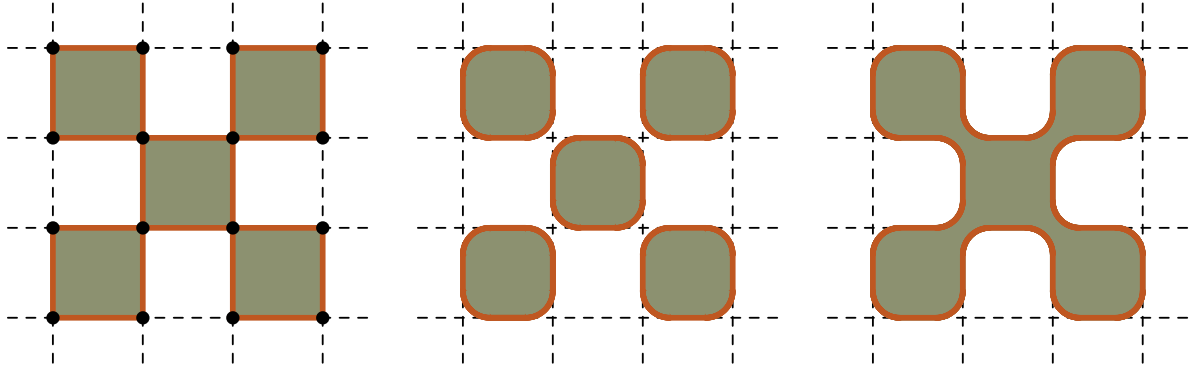


Рис. 1. Фрагмент цифрового изображения и его топологическая реализация для случаев 4- и 8-связанности

Вернемся к построению персистентных гомологий на цифровых пространствах. Пусть K — цифровое изображение; предположим, что функция $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ определена на вокселях K и удовлетворяет следующему свойству монотонности: если воксель σ содержит воксель τ в качестве грани, то $f(\sigma) \geq f(\tau)$. Из условия монотонности следует, что множество экскурсии K_a при всех $a \in \mathbb{R}$ является цифровым изображением, лежащим в K (в частности, K_a является клеточным подкомплексом в K). В силу конечности K и пробега по всем значениям f , мы получим *фильтрацию* пространства K :

$$K_0 = \emptyset \subset K_1 \subset \dots \subset K_n = K$$

(мы обозначили $K_i = K_{a_i}$, где $a_1 < a_2 < \dots < a_n$ — набор значений функции f).

Для каждой пары индексов $0 \leq i < j \leq n$ вложение $K_i \subset K_j$ индуцирует гомоморфизм p -мерных групп гомологий (здесь и далее рассматриваются группы клеточных гомологий с коэффициентами в \mathbb{Z}_2):

$$f_p^{i,j} : H_p(K_i) \rightarrow H_p(K_j).$$

Персистентной группой размерности p называется образ рассмотренного выше гомоморфизма: $H_p^{i,j} = \text{Im}(f_p^{i,j})$. Соответственно, ранг этой группы $\beta_p^{i,j}$ называется *p -мерным персистентным числом Бетти*. Положим

$$\mu_p^{i,j} = (\beta_p^{i,j-1} - \beta_p^{i,j}) - (\beta_p^{i-1,j-1} - \beta_p^{i-1,j}), \quad 0 \leq i < j \leq n. \quad (6)$$

Из (6) следует, что $\mu_p^{i,j}$ равно максимальному числу независимых p -мерных гомологических классов, которые появляются впервые в K_i (т.е. не являются образами классов из K_{i-1}) и умирают при входе в K_j . Рассмотрим расширенную плоскость $\bar{\mathbb{R}}^2 = (\mathbb{R} \cup \{\pm\infty\})^2$. *Персистентной диаграммой размерности p* функции f называется множество $PD_p(f)$ точек расширенной плоскости $\bar{\mathbb{R}}^2$ вида (a_i, a_j) , $0 \leq i < j \leq n$, каждая взятая с кратностью $\mu_p^{i,j}$. Кроме того, добавим к $PD_p(f)$ все точки диагонали (a, a) , $a \in \mathbb{R}$ с бесконечной кратностью. На рис. 2 приведен иллюстративный пример 0-мерной персистентной диаграммы для функции f , определенной на отрезке числовой прямой.

Общий алгоритм вычисления персистентных гомологий детально описан в [16]. В нашем случае, как было сказано выше, мы можем вычислять только 0-мерные персистентные диаграммы для двумерных цифровых пространств, что позволяет упростить общий алгоритм. Система непересекающихся множеств очень хорошо ложится на структуру фильтрации: двигаясь по подпространствам K_0, K_1 и выше, мы строим систему деревьев, описывающих компоненты связности очередного K_i , добавляя указатель с каждого дерева на уровне $(i-1)$ на соответствующее дерево на уровне i , в котором лежит предыдущая компонента связности. Представляя каждую компоненту связности на каждом уровне фильтрации вершиной, а добавленный указатель — направленным ребром, мы получаем дерево, которое называется деревом

поглощений (Merge Tree), содержащее всю информацию о структуре нульмерных персистентных гомологий. Разделив дерево на отдельные ветки по правилу сохранения старшего (в англоязычной литературе — elder survives) [16], мы получаем персистентную диаграмму, в которой каждой ветке, идущей от уровня i к уровню j , отвечает точка с координатами (i, j) .

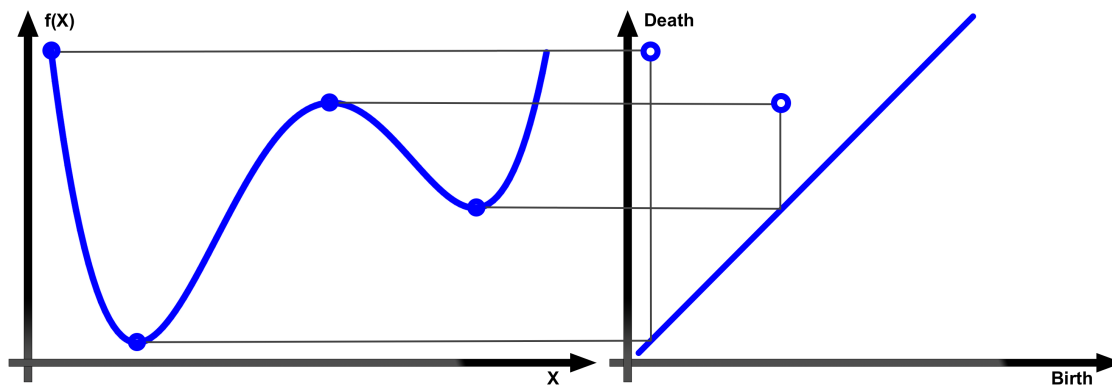


Рис. 2. Персистентная диаграмма функции, определенной на отрезке

Для приложений важно иметь меру близости двух персистентных диаграмм. Пусть PD_1 и PD_2 — две персистентные диаграммы. Чтобы определить расстояние между ними, сначала рассмотрим естественную метрику на расширенной плоскости: расстояние между двумя точками $a = (a_1, a_2)$ и $b = (b_1, b_2) \in \mathbb{R}^2$ положим равным L_∞ -норме

$$\|a - b\|_\infty = \max\{|a_1 - b_1|, |a_2 - b_2|\}.$$

Далее, для любой биекции $\varphi : PD_1 \rightarrow PD_2$ рассмотрим ее диаметр

$$D(\varphi) = \sup_{a \in PD_1} \|a - \varphi(a)\|_\infty.$$

Теперь определим расстояние “бутылочного горлышка” (bottleneck distance) между диаграммами PD_1 и PD_2 следующим образом:

$$W_\infty(PD_1, PD_2) = \inf_{\varphi : PD_1 \rightarrow PD_2} D(\varphi),$$

где нижний предел берется по всем биекциям φ . Заметим, что биекции существуют всегда, поскольку персистентные диаграммы содержат диагональные точки бесконечной кратности. Кроме того, легко видеть, что чем ближе точка персистентной диаграммы лежит к диагонали, тем меньше она вносит вклад в расстояние до другой диаграммы.

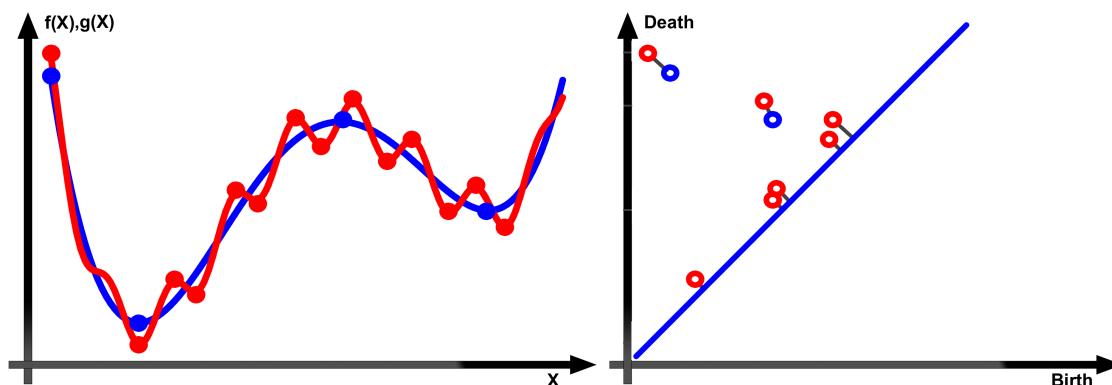


Рис. 3. Устойчивость персистентных диаграмм относительно возмущений в норме L_∞

В [12] доказана устойчивость персистентных диаграмм по отношению к возмущению функции f в норме L_∞ (см. иллюстрацию этого явления на рис. 3). А именно, пусть K — цифровое изображение и $f, g : K \rightarrow \mathbb{R}$ — две монотонные функции. Тогда в каждой размерности p имеет место неравенство

$$W_\infty(PD(f), PD(g)) \leq \|f - g\|_\infty.$$

Этот результат обосновывает использование персистентных диаграмм для топологического анализа результатов экспериментов.

4. Численные эксперименты.

4.1. Фиксированная модель порового пространства. Первая серия экспериментов проводилась для фиксированной модели поровой среды, приведенной на рис. 4, при достаточно высокой концентрации химически активного вещества на границе Γ_{inlet} . Концентрация катионов H^+ соответствовала pH , равному 3 — минимальному pH при закачке CO_2 в пласт [11, 25, 38]. Модель порового пространства получена методом усеченного гауссова поля с длиной корреляции 5×10^{-5} м и пористостью 67%. Такая пористость нефизична, однако в двумерной постановке меньшие значения пористости не обеспечивают перколяции образца, а значит, и флюидопотока через него. Шаг сетки выбирался равным 10^{-5} м по обоим пространственным направлениям.

В качестве минерала матрицы породы рассматривался кальцит с плотностью $\rho = 2710$ кг/м³ 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). В приведенных экспериментах значение давления на границе, коэффициент диффузии D в уравнении (3) и скорость реакции k_r для граничных условий (4) выбирались случайно. При этом использовались равномерные взаимно независимые распределения параметров внутри следующих диапазонов: $p_{bc} \in [5 \times 10^{-2}; 5]$ Па, $D \in [9.3 \times 10^{-9}, 9.3 \times 10^{-7}]$ и $k_r \in [1.5 \times 10^{-4}, 1.5 \times 10^{-2}]$. Расчеты проводились вплоть до времени 300 с. Для иллюстрации результатов концентрации реагента в конечный момент времени для четырех разных режимов закачки приведены на рис. 5.

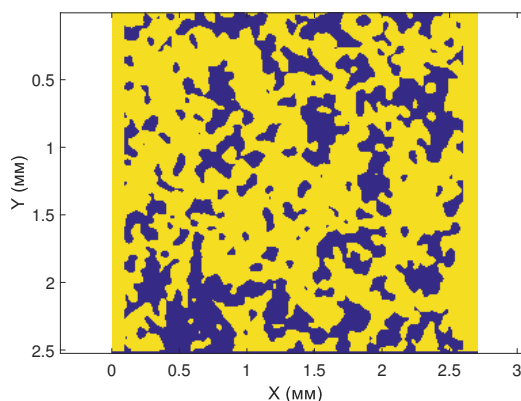


Рис. 4. Модель порового пространства, используемая в экспериментах. Светлый фон — поровое пространство, темный цвет соответствует матрице породы

Всего было проведено 475 экспериментов с различными наборами параметров. В процессе моделирования проводился анализ топологии порового пространства и построение персистентных диаграмм, как описано выше. После этого для набора 475 диаграмм были рассчитаны попарные расстояния и проведена кластеризация методом k-means относительно введенной метрики в пространстве диаграмм, а сами диаграммы перегруппированы в соответствии с их принадлежностью к определенному классу. На рис. 6 приведена матрица расстояний, соответствующая разбиению на четыре кластера. Видно, что два кластера выделяются устойчиво, в то время как два других достаточно близки друг к другу.

Для анализа связи изменения топологии порового пространства с режимом воздействия была построена диаграмма, на которой точками обозначены значения триплета $[dP, D, k_{\text{chem}}]$ в пространстве параметров (рис. 7). Здесь и далее кодировка цветов: первый кластер синий, второй — красный, третий — зеленый, четвертый — черный. Видно, что второй (красный) кластер уверенно выделяется. При этом для моделей из этого кластера характерны низкие скорости реакции и независимость от коэффициента диффузии и перепада давлений. В результате активный компонент проникает достаточно далеко в поровое пространство и наблюдается относительно равномерное растворение матрицы породы (рис. 5). Первый (синий) и третий (зеленый) кластеры слабо разделяются на диаграмме. Для них характерна высокая скорость реакции при широком диапазоне значений коэффициента диффузии и перепада давления. В результате наблюдается формирование червоточин и расширение основных каналов, обеспечивающих флюидопоток. При этом высокие значения коэффициента диффузии обеспечивают быструю доставку активного компонента непосредственно к поверхности матрицы, что приводит к формированию “воронкообразных” контуров червоточин вплоть до формирования фронта растворения. Последний кластер (черный) содержит меньше всего реализаций, для них характерны высокие значения скорости реакции при низких значениях коэффициента диффузии и перепада давлений. В результате реагент достаточно свободно распространяется потоком флюида при слабой доставке реагента к границе между поровым пространством и матрицей. При таком сочетании параметров происходит формирование удлиненных червоточин с расширением основных

каналов по всей их длине.

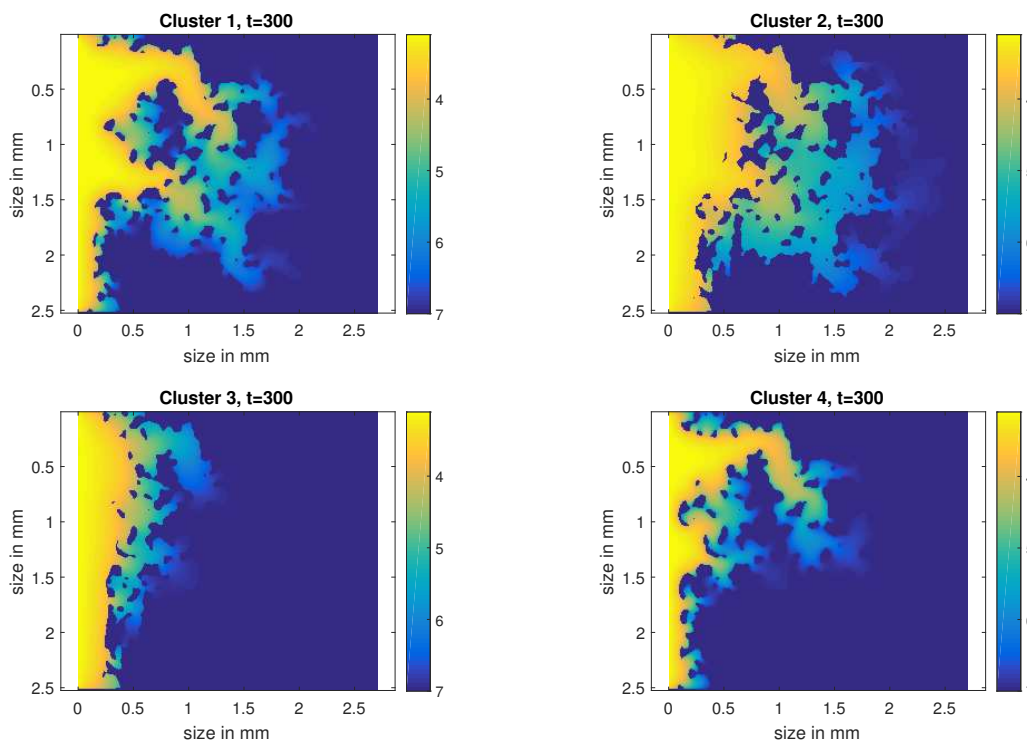


Рис. 5. Значения pH флюида в конечный момент времени для разных режимов воздействия. Модели принадлежат разным кластерам, построенным в метрике персистентных диаграмм

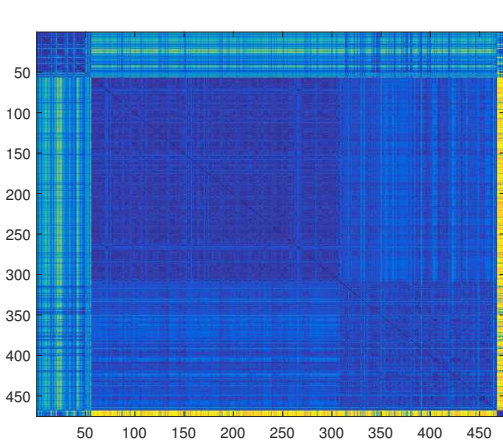


Рис. 6. Матрица расстояний между персистентными диаграммами при кластеризации на четыре кластера

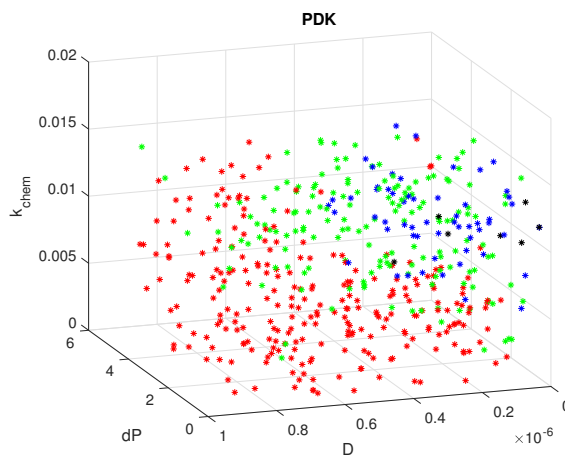


Рис. 7. Соответствие между входными параметрами (dP, D, k_{chem}) и полученными кластерами. Положение точек — координаты триплета в пространстве параметров, цвет — принадлежность к кластеру

Важными интегральными характеристиками породы являются пористость, проницаемость и извилистость порового пространства, которые используются как в фильтрационных моделях [6, 21], так и в моделях поропругих сред [3, 4, 9, 10]. Для анализа взаимной зависимости изменения этих параметров в процессе взаимодействия флюида с породой были построены графики попарной зависимости (рис. 8–10) с выделением кривых, отвечающих средним значениям внутри кластеров (жирные линии на графиках). Видно, что взаимное поведение извилистости порового пространства и проницаемости не зависит от кластера, к которому принадлежит реализация. При этом для второго (красного) кластера наблюдается самое медленное уменьшение извилистости порового пространства с ростом пористости (рис. 10), что связано с

равномерностью растворения матрицы породы без формирования выделенных каналов. В остальных случаях появление червоточин в поровом пространстве снижает его извилистость, повышая проницаемость (рис. 9).

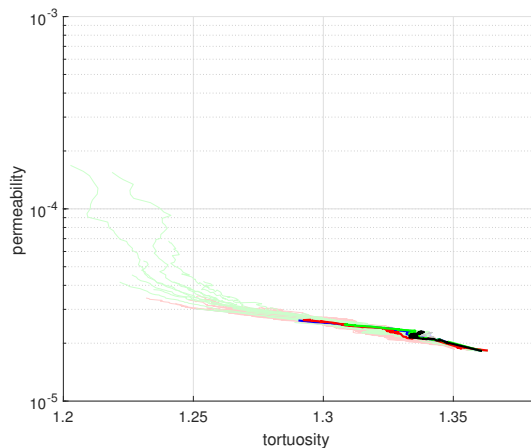


Рис. 8. Зависимость проницаемости от извилистости порового пространства

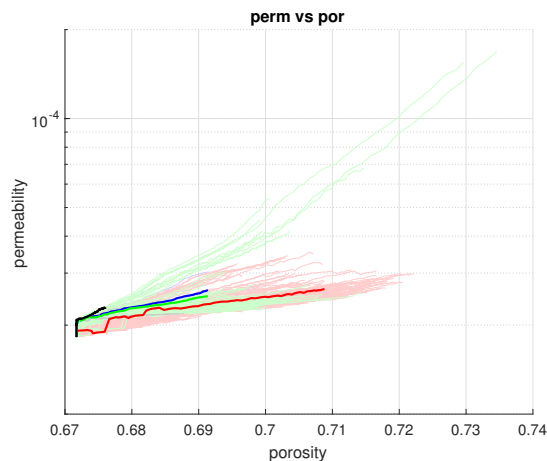


Рис. 9. Зависимость проницаемости от пористости

4.2. Разные статистические реализации модели. Вторым набором экспериментов был проведен для моделей, полученных как реализации изотропного гауссовского поля с длиной корреляции 5×10^{-5} м и пористостью 65%. При этом наборы входных параметров — триплеты (dP, D, k_{chem}) — выбирались на регулярной сетке, их значения приводятся в таблице. Для каждого триплета рассматривалось до 10 случайных реализаций модели порового пространства. Концентрация активного компонента при закачке компонента соответствовала $pH = 2.3$. Все остальные параметры совпадают с используемыми в предыдущем разделе. Всего было проведено 579 экспериментов.

Особенностью этого эксперимента является высокая концентрация катионов при закачке флюида и широкий диапазон значений скорости реакции. В результате наблюдаются как полное растворение минеральной фазы, так и практически полное отсутствие изменения структуры порового пространства — реакция практически не идет. При этом и в первом, и во втором случае изменение топологии с течением времени чрезвычайно низкое. Иными словами, если реакция проходит быстро, то все компоненты связности матрицы пропадают в первые моменты времени, после чего поровое пространство не меняется. В случае, если реакция не идет, поровое пространство и матрица породы не меняются в принципе. Поэтому расстояния между соответствующими диаграммами мало. Если же происходит неполное растворение скелета, то на диаграммах фиксируются появления и исчезновения новых компонент связности, т.е. диаграммы достаточно богатые. На рис. 11 приведены шесть персистентных диаграмм, соответствующих разной скорости растворения матрицы породы. Видно, что в случае высокой скорости растворения породы все компоненты связности образуются и пропадают в течение первых 20 шагов для эксперимента 172 (черные маркеры), 40 шагов — для эксперимента 108 (красные маркеры), 80 — для эксперимента 115 (зеленые маркеры).

Для эксперимента 143 (розовые маркеры) изменение происходит в течение всего эксперимента, поскольку за это время полного растворения не происходит. Отдельно выделены два случая — эксперименты 26 и 11, в которых растворения породы практически не происходит. При этом в эксперименте 11 (голубые маркеры) исчезает всего одна компонента связности за все время эксперимента. Диаграмма для экспе-

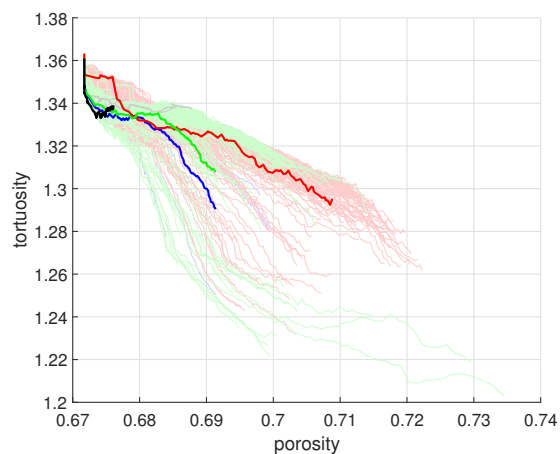


Рис. 10. Зависимость извилистости порового пространства от пористости

Значения варьируемых параметров

p_{bc}	5×10^{-2}	5×10^{-1}	5×10^0	
D	9.3×10^{-9}	9.3×10^{-8}	9.3×10^{-7}	
k_{chem}	1.5×10^{-4}	1.5×10^{-3}	1.5×10^{-2}	1.5×10^{-1}

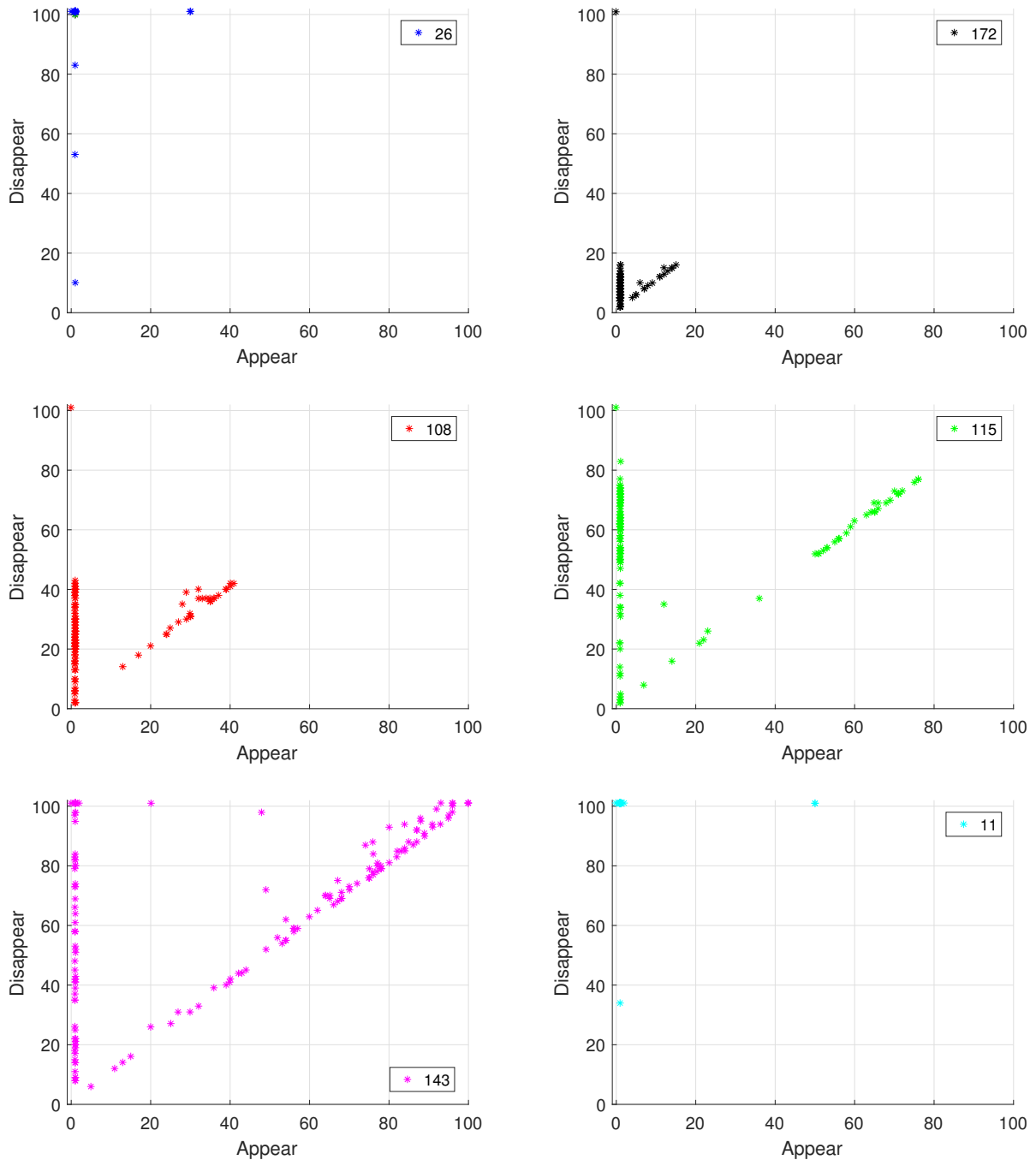


Рис. 11. Персистентные диаграммы для пяти разных экспериментов.
 В экспериментах 26 (синие маркеры) и 11 (голубые маркеры) матрица практически не менялась.
 В экспериментах 172, 108, 115, 143 скорость изменения снижается от 172 к 143

римента 26 (синяя) иллюстрирует, что небольшое количество компонент исчезло, т.е. слабое растворение происходило возле границы, через которую закачивался реагент. Эти выводы подтверждаются и графиками зависимости пористости от времени (рис. 12).

При этом разбиение на два кластера группирует эксперименты 26, 108, 172 в один кластер, а 115, 143 и 11 — в другой. Иными словами, достаточно устойчиво разделяются персистентные диаграммы по скорости изменения порового пространства, если оно существенно меняется, в то время как для экспериментов со слабым изменением пространства расстояние между диаграммами определяется неустойчиво, в результате кластеризация относит их к разным группам. Увеличение числа кластеров позволяет выделить модели, для которых происходит частичное и полное растворение, однако отделить случаи быстрого (менее 20 отсчетов) полного растворения от его отсутствия не удастся. На рис. 13 представлены диаграммы, связывающие входные параметры экспериментов и разбиение на кластеры для 2 и 4 кластеров. Зависимости пористости от времени для этих разбиений приведены на рис. 14. Видно, что достаточно устойчиво выделяется кластер, соответствующий высокой скорости реакции (синий кластер при разбиении на два, красный — при разбиении на четыре кластера). Эти эксперименты характеризуются быстрым полным растворением матрицы. Однако в этот же кластер в обоих случаях входят и эксперименты, соответствующие низким значениям коэффициента диффузии, для которых растворение не происходит. При разбиении на два кластера все остальные эксперименты попадают во второй кластер. При разбиении на большее число кластеров происходит выделение групп экспериментов с разной скоростью изменения порового пространства (синий и черный кластеры на правых рис. 13 и 14). В результате персистентные диаграммы по компонентам связности матрицы породы уверенно разделяются по скорости изменения топологии, однако вырожденные случаи (отсутствие реакции и чрезвычайно быстрое растворение) практически не различимы в метрике персистентных диаграмм.

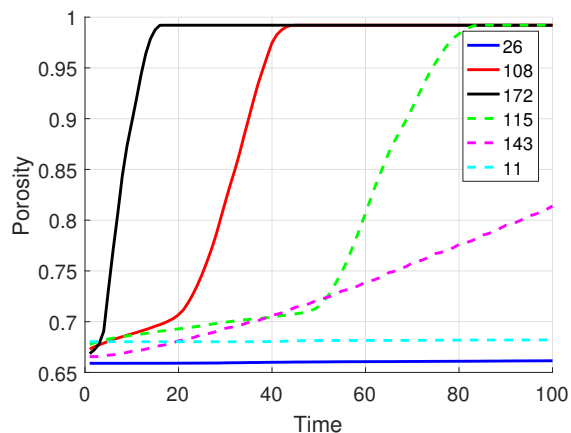


Рис. 12. Изменение пористости со временем для разных экспериментов

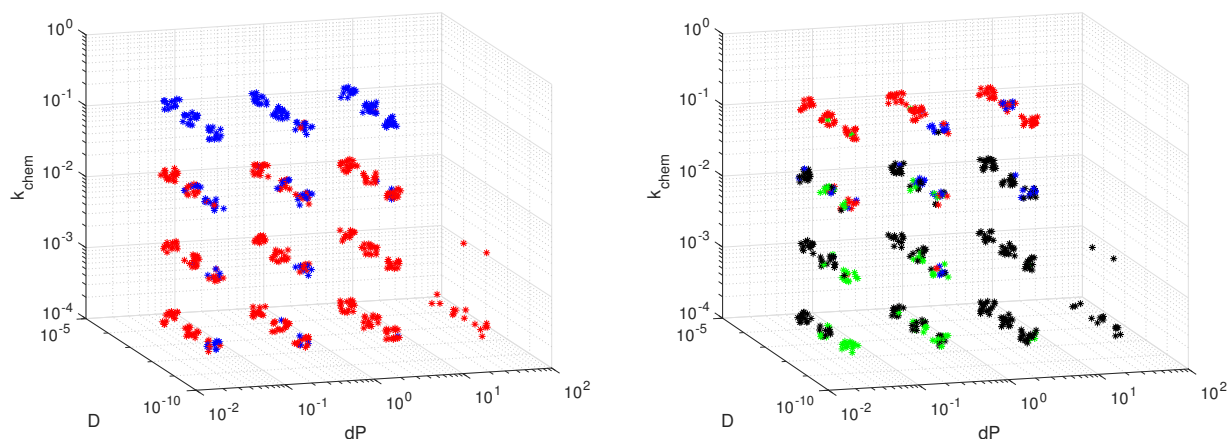


Рис. 13. Разбиение экспериментов для разных входных параметров на кластеры в метрике персистентных диаграмм (2 кластера — слева, 4 — справа)

Важно отметить, что выбранный размер образцов 250 на 250 точек при длине корреляции 5 точек является репрезентативным объемом по отношению к исследуемому процессу и изменению топологии матрицы породы. Во-первых, потому что отличия в замеренных значениях пористости, проницаемости и извилистости, по крайней мере в начальный момент времени, не превосходят 10% от среднего значения [8]. Во-вторых, при разделении на кластеры в метрике персистентных диаграмм разные кластеры соответствуют разным значениям входных параметров. Редко эксперименты для разных реализаций с одним набором параметров относятся к разным кластерам.

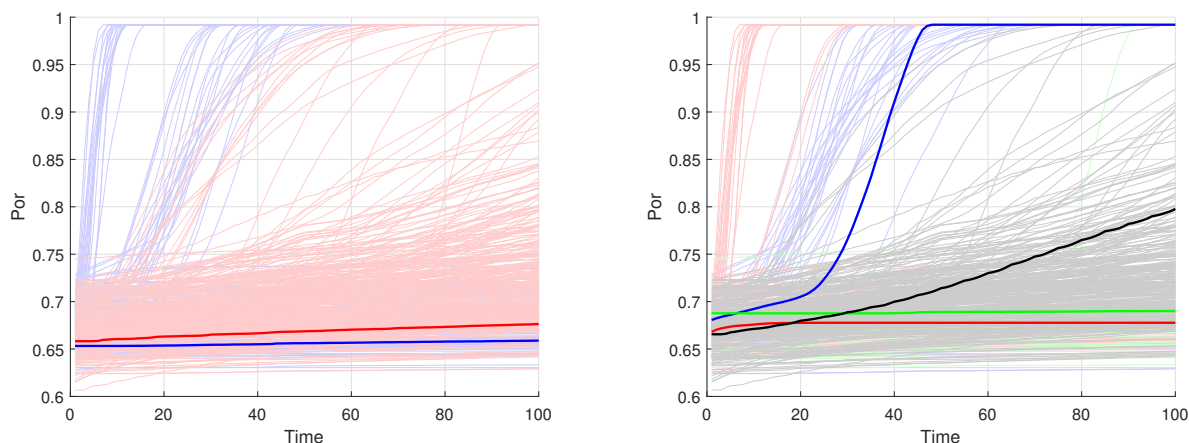


Рис. 14. Изменение пористости со временем для разбиения на 2 (слева) и на 4 (справа) кластера

5. Заключение. В настоящей статье представлен алгоритм построения персистентных диаграмм для оценки изменения топологии матрицы породы при воздействии химически активного флюида. В пространстве персистентных диаграмм введена метрика, которая позволила выполнять их кластеризацию, т.е. количественно оценивать “схожесть” изменений в топологии порового пространства. На основе такой кластеризации показано, что доминирующими параметрами в процессе химического взаимодействия флюида с породой в пластовых условиях являются скорость реакции и коэффициент диффузии, в то время как скорость потока оказывает существенно меньшее влияние. Отдельно следует отметить, что персистентные диаграммы позволяют дифференцировать не только типы изменения порового пространства (фронт растворения и образование червоточин), но и скорость растворения матрицы породы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 18-05-00031, 18-01-00579) и поддержана грантом Президента РФ для молодых ученых — докторов наук МД-20.2019.5. Расчеты проводились на суперкомпьютере “Ломоносов” Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова и кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Базайкин Я.В.* Лекции по вычислительной топологии. Новосибирск: Изд-во НГУ, 2017.
2. *Гадьяльшина К.А., Хачкова Т.С., Лисица В.В.* Численное моделирование химического взаимодействия флюида с горной породой // Вычислительные методы и программирование. 2019. **20**. 457–470.
3. *Новиков М.А., Базайкин Я.В., Лисица В.В., Козяев А.А.* Моделирование волновых процессов в трещиновато-пористых средах: влияние связности трещин на поглощение сейсмической энергии // Вычислительные методы и программирование. 2018. **19**. 235–252.
4. *Новиков М.А., Лисица В.В., Козяев А.А.* Численное моделирование волновых процессов в трещиновато-пористых флюидонаполненных средах // Вычислительные методы и программирование. 2018. **19**. 130–149.
5. *Al-Khulafi Y., Lin Q., Blunt M.J., Bijeljic B.* Pore-scale dissolution by CO₂ saturated brine in a multimineral carbonate at reservoir conditions: impact of physical and chemical heterogeneity // Water Resources Research. 2019. **55**, N 4. 3171–3193.
6. *Amikiya A.E., Banda M.K.* Modelling and simulation of reactive transport phenomena // Journal of Computational Science. 2018. **28**. 155–167.
7. *Arson C., Vanorio T.* Chemomechanical evolution of pore space in carbonate microstructures upon dissolution: linking pore geometry to bulk elasticity // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 2015. **120**, N 10. 6878–6894.
8. *Bazaiкин 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.
9. *Biot M.A.* Theory of propagation of elastic waves in fluid-saturated porous solid. I. Low-frequency range // Journal of the Acoustical Society of America. 1956. **28**, N 2. 168–178.
10. *Biot M.A.* Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid. II. Higher frequency range // Journal of the Acoustical Society of America. 1956. **28**, N 2. 179–191.
11. *Carroll S., Hao Y., Smith M., Sholokhova Y.* Development of scaling parameters to describe CO₂-rock interactions within Weyburn–Midale carbonate flow units // International Journal of Greenhouse Gas Control. 2013. **16**, Suppl. 1. S185–S193.

12. *Cohen-Steiner D., Edelsbrunner H., Harer J.* Stability of persistence diagrams // *Discrete Comput. Geom.* 2007. **37**. 103–120.
13. *Costa T.B., Kennedy K., Peszynska M.* Hybrid three-scale model for evolving pore-scale geometries // *Computational Geosciences*. 2018. **22**, N 3. 925–950.
14. *Cui M.-J., Zheng J.-J., Zhang R.-J., Lai H.-J., Zhang J.* Influence of cementation level on the strength behaviour of bio-cemented sand // *Acta Geotechnica*. 2017. **12**, N 5. 971–986.
15. *Edelsbrunner H., Letscher D., Zomorodian A.* Topological persistence and simplification // *Discrete Comput. Geom.* 2002. **28**. 511–533.
16. *Edelsbrunner H., Harer J.L.* *Computational topology: an introduction*. Providence: AMS Press, 2010.
17. *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.
18. *Gibou F., Fedkiw R., Osher S.* A review of level-set methods and some recent applications // *Journal of Computational Physics*. 2018. **353**. 82–109.
19. *Gouze P., Luquot L.* X-ray microtomography characterization of porosity, permeability and reactive surface changes during dissolution // *Journal of Contaminant Hydrology*. 2011. **120–121**. 45–55.
20. *Guérrillot D., Bruyelle J.* Compositional dual mesh method for single phase flow in heterogeneous porous media — application to CO₂ storage // *Computational Geosciences*. 2017. **21**, N 5–6. 949–961.
21. *Hao Y., Smith M., Sholokhova Y., Carroll S.* CO₂-induced dissolution of low permeability carbonates. Part II: numerical modeling of experiments // *Advances in Water Resources*. 2013. **62**. Part C. 388–408.
22. *Huang F., Bergmann P., Juhlin C., Ivandic M., Luth S., Ivanova A., Kempka T., Henningses J., Sopher D., Zhang F.* The first post-injection seismic monitor survey at the Ketzin pilot CO₂ storage site: results from time-lapse analysis // *Geophysical Prospecting*. 2018. **66**, N 1. 62–84.
23. *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.
24. *Kong T.Y., Rosenfeld A.* *Digital topology: introduction and survey* // *Computer Vision, Graphics and Image Processing*. 1989. **48**, N 3. 357–393.
25. *Lebedev M., Zhang Y., Sarmadivaleh M., Barifcani A., Al-Khdheawi E., Iglaue S.* Carbon geosequestration in limestone: pore-scale dissolution and geomechanical weakening // *International Journal of Greenhouse Gas Control*. 2017. **66**. 106–119.
26. *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**. doi 10.1029/2007WR006742.
27. *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.
28. *McLeod H.O.* Matrix acidizing // *Journal of Petroleum Technology*. 1984. **36**, N 12. 2055–2069.
29. *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.
30. *Menke H.P., Reynolds C.A., Andrew M.G., Pereira Nunes J.P., Bijeljic B., Blunt M.J.* 4D multi-scale imaging of reactive flow in carbonates: assessing the impact of heterogeneity on dissolution regimes using streamlines at multiple length scales // *Chemical Geology*. 2018. **481**. 27–37.
31. *Mittal R., Iaccarino G.* Immersed boundary methods // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2005. **37**, N 1. 239–261.
32. *Molins S., Trebotich D., Steefel C.I., 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**. doi 10.1029/2011WR011404.
33. *Molins S., Trebotich D., Yang L., Ajo-Franklin J.B., Ligocki T.J., Shen C., Steefel C.I.* Pore-scale controls on calcite dissolution rates from flow-through laboratory and numerical experiments // *Environmental Science and Technology*. 2014. **48**, N 13. 7453–7460.
34. *Nishiyama N., Yokoyama T.* Permeability of porous media: role of the critical pore size // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 2017. **122**, N 9. 6955–6971.
35. *Noiriel C., Luquot L., Madé B., Raimbault L., Gouze P., van der Lee J.* Changes in reactive surface area during limestone dissolution: an experimental and modelling study // *Chemical Geology*. 2009. **265**, N 1–2. 160–170.
36. *Osher S., Fedkiw R.P.* Level set methods: an overview and some recent results // *Journal of Computational Physics*. 2001. **169**, N 2. 463–502.
37. *Safari A., Dowlatabad M.M., Hassani A., Rashidi F.* Numerical simulation and X-ray imaging validation of wormhole propagation during acid core-flood experiments in a carbonate gas reservoir // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2016. **30**. 539–547.
38. *Smith M.M., Hao Y., Mason H.E., Carroll S.A.* Experiments and modeling of variably permeable carbonate reservoir samples in contact with CO₂-acidified brines // *Energy Procedia*. 2014. **63**. 3126–3137.
39. *Sotiropoulos F., Yang X.* Immersed boundary methods for simulating fluid-structure interaction // *Progress in Aerospace Sciences*. 2014. **65**. 1–21.
40. *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.

41. Vanorio T., Mavko G., Vialle S., Spratt K. The rock physics basis for 4D seismic monitoring of CO₂ fate: are we there yet? // *The Leading Edge*. 2010. **29**, N 2. 113–240.
42. Verri A., Uras C., Frosini P., Ferri M. On the use of size functions for shape analysis // *Biological Cybernetics*. 1993. **70**, N 2. 99–107.
43. Yang G., Li Y., Atrons A., Liu D., Wang Y., Jia L., Lu Y. Reactive transport modeling of long-term CO₂ sequestration mechanisms at the Shenhua CCS Demonstration Project, China // *Journal of Earth Science*. 2017. **28**, N 3. 457–472.
44. Zhu W., Hirth G. A network model for permeability in partially molten rocks // *Earth and Planetary Science Letters*. 2003. **212**, N 3–4. 407–416.
45. Zomorodian A., Carlsson G. Computing persistence homology // *Discrete Comput. Geom.* 2005. **33**, N 2. 249–274.
46. Zuo L., Ajo-Franklin J.B., Voltolini M., Geller J.T., Benson S.M. Pore-scale multiphase flow modeling and imaging of CO₂ exsolution in sandstone // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2017. **155**, 63–77.

Поступила в редакцию
24.12.2019

Use of the Computational Topology to Analyze the Pore Space Changes during Chemical Dissolution

T. S. Khachkova¹, Ya. V. Bazaikin², and V. V. Lisitsa³

¹ *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*

² *Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; prospekt Koptyuga 4, Novosibirsk, 630090, Russia; Dr. Sci., Associate Professor, Head of Laboratory, e-mail: bazaikin@math.nsc.ru*

³ *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: lisitsavv@ipgg.sbras.ru*

Received December 24, 2019

Abstract. A new algorithm for constructing the persistence diagrams to estimate the changes in the rock matrix topology during the chemical fluid–solid interaction. In the space of the persistence diagrams, a metric is introduced, which allows one to clusterize the diagrams in order to estimate their dissimilarities in the topology changes. This clusterization shows that the main parameters affecting the topology of the rock matrix are the reaction rate and the diffusion coefficient, whereas the fluid flow rate makes a smaller effect on the topology.

Keywords: persistence homology, chemical dissolution.

References

1. Ya. V. Bazaikin, *Lectures on Computational Topology* (Novosib. Gos. Univ., Novosibirsk, 2017) [in Russian].
2. K. A. Gadylyshina, T. S. Khachkova, and V. V. Lisitsa, “Numerical Modeling of Chemical Interaction between a Fluid and Rocks,” *Vychisl. Metody Programm.* **20**, 457–470 (2019).
3. M. A. Novikov, Ya. V. Bazaikin, V. V. Lisitsa, and A. A. Kozyaev, “Numerical Modeling of Wave Propagation in Fractured Porous Fluid-Saturated Media,” *Vychisl. Metody Programm.* **19**, 235–252 (2018).
4. M. A. Novikov, V. V. Lisitsa, and A. A. Kozyaev, “Numerical Modeling of Wave Processes in Fractured Porous Fluid-Saturated Media,” *Vychisl. Metody Programm.* **19**, 130–149 (2018).
5. Y. Al-Khulaifi, Q. Lin, M. J. Blunt, and B. Bijeljic, “Pore-Scale Dissolution by CO₂ Saturated Brine in a Multimineral Carbonate at Reservoir Conditions: Impact of Physical and Chemical Heterogeneity,” *Water Resour. Res.* **55** (4), 3171–3193 (2019).
6. A. E. Amikiya and M. K. Banda, “Modelling and Simulation of Reactive Transport Phenomena,” *J. Comput. Sci.* **28**, 155–167 (2018).
7. C. Arson and T. Vanorio, “Chemomechanical Evolution of Pore Space in Carbonate Microstructures upon Dissolution: Linking Pore Geometry to Bulk Elasticity,” *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **120** (10), 6878–6894 (2015).

8. 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).
9. M. A. Biot, “Theory of Propagation of Elastic Waves in a Fluid-Saturated Porous Solid. I. Low-Frequency Range,” *J. Acoust. Soc. Am.* **28** (2), 168–178 (1956).
10. M. A. Biot, “Theory of Propagation of Elastic Waves in a Fluid-Saturated Porous Solid. II. Higher Frequency Range,” *J. Acoust. Soc. Am.* **28** (2), 179–191 (1956).
11. S. Carroll, Y. Hao, M. Smith, and Y. Sholokhova, “Development of Scaling Parameters to Describe CO₂-rock Interactions within Weyburn–Midale Carbonate Flow Units,” *Int. J. Greenh. Gas Con.* **16** (Suppl. 1), S185–S193 (2013).
12. D. Cohen-Steiner, H. Edelsbrunner, and J. Harer, “Stability of Persistence Diagrams,” *Discrete Comput. Geom.* **37**, 103–120 (2007).
13. T. B. Costa, K. Kennedy, and M. Peszynska, “Hybrid Three-Scale Model for Evolving Pore-Scale Geometries,” *Comput. Geosci.* **22** (3), 925–950 (2018).
14. M.-J. Cui, J.-J. Zheng, R.-J. Zhang, et al., “Influence of Cementation Level on the Strength Behaviour of Bio-Cemented Sand,” *Acta Geotech.* **12** (5), 971–986 (2017).
15. H. Edelsbrunner, D. Letscher, and A. Zomorodian, “Topological Persistence and Simplification,” *Discrete Comput. Geom.* **28**, 511–533 (2002).
16. H. Edelsbrunner and J. L. Harer, *Computational Topology: An Introduction* (AMS Press, Providence, 2010).
17. M. Ghommem, 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).
18. F. Gibou, R. Fedkiw, and S. Osher, “A Review of Level-Set Methods and Some Recent Applications,” *J. Comput. Phys.* **353**, 82–109 (2018).
19. P. Gouze and L. Luquot, “X-ray Microtomography Characterization of Porosity, Permeability and Reactive Surface Changes during Dissolution,” *J. Contam. Hydrol.* **120–121**, 45–55 (2011).
20. D. Guérillot and J. Bruyelle, “Compositional Dual Mesh Method for Single Phase Flow in Heterogeneous Porous Media — Application to CO₂ Storage,” *Comput. Geosci.* **21** (5–6), 949–961 (2017).
21. Y. Hao, M. Smith, Y. Sholokhova, and S. Carroll, “CO₂-Induced Dissolution of Low Permeability Carbonates. Part II: Numerical Modeling of Experiments,” *Adv. Water Resour.* **62** (Part C), 388–408 (2013).
22. F. Huang, P. Bergmann, C. Juhlin, et al., “The First Post-Injection Seismic Monitor Survey at the Ketzin Pilot CO₂ Storage Site: Results from Time-Lapse Analysis,” *Geophys. Prospect.* **66** (1), 62–84 (2018).
23. 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).
24. T. Y. Kong and A. Rosenfeld, “Digital Topology: Introduction and Survey,” *Comput. Vision Gr. Image Process.* **48** (3), 357–393 (1989).
25. 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).
26. 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
27. 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).
28. H. O. McLeod, “Matrix Acidizing,” *J. Petroleum Technol.* **36** (12), 2055–2069 (1984)
29. 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).
30. H. P. Menke, C. A. Reynolds, M. G. Andrew, et al., “4D Multi-Scale Imaging of Reactive Flow in Carbonates: Assessing the Impact of Heterogeneity on Dissolution Regimes Using Streamlines at Multiple Length Scales,” *Chem. Geol.* **481**, 27–37 (2018).
31. R. Mittal and G. Iaccarino, “Immersed Boundary Methods,” *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **37** (1), 239–261 (2005).
32. 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
33. 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).
34. N. Nishiyama and T. Yokoyama, “Permeability of Porous Media: Role of the Critical Pore Size,” *J.*

Geophys. Res.: Solid Earth **122** (9), 6955–6971 (2017).

35. C. Noiriél, L. Luquot, B. Madé, et al., “Changes in Reactive Surface Area during Limestone Dissolution: An Experimental and Modelling Study,” *Chem. Geol.* **265** (1–2), 160–170 (2009).

36. S. Osher and R. Fedkiw, “Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results,” *J. Comput. Phys.* **169** (2), 463–502 (2001).

37. A. Safari, M. M. Dowlatabad, A. Hassani, and F. Rashidi, “Numerical Simulation and X-ray Imaging Validation of Wormhole Propagation during Acid Core-Flood Experiments in a Carbonate Gas Reservoir,” *J. Nat. Gas Sci. Eng.* **30**, 539–547 (2016).

38. M. M. Smith, Y. Hao, H. E. Mason, and S. A. Carroll, “Experiments and Modeling of Variably Permeable Carbonate Reservoir Samples in Contact with CO₂-Acidified Brines,” *Energy Procedia* **63**, 3126–3137 (2014).

39. F. Sotiropoulos and X. Yang, “Immersed Boundary Methods for Simulating Fluid–Structure Interaction,” *Prog. Aerosp. Sci.* **65**, 1–21 (2014).

40. 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).

41. T. Vanorio, G. Mavko, S. Vialle, and K. Spratt, “The Rock Physics Basis for 4D Seismic Monitoring of CO₂ Fate: Are We There Yet?,” *Lead. Edge* **29** (2), 113–240 (2010).

42. A. Verri, C. Uras, P. Frosini, and M. Ferri, “On the Use of Size Functions for Shape Analysis,” *Biol. Cybern.* **70** (2), 99–107 (1993).

43. G. Yang, Y. Li, A. Atrens, et al., “Reactive Transport Modeling of Long-Term CO₂ Sequestration Mechanisms at the Shenhua CCS Demonstration Project, China,” *J. Earth Sci.* **28** (3), 457–472 (2017).

44. W. Zhu and G. Hirth, “A Network Model for Permeability in Partially Molten Rocks,” *Earth Planet. Sci. Lett.* **212** (3–4), 407–416 (2003).

45. A. Zomorodian and G. Carlsson, “Computing Persistent Homology,” *Discrete Comput. Geom.* **33** (2), 249–274 (2005).

46. L. Zuo, J. B. Ajo-Franklin, M. Voltolini, et al., “Pore-Scale Multiphase Flow Modeling and Imaging of CO₂ Exsolution in Sandstone,” *J. Petrol. Sci. Eng.* **155**, 63–77 (2017).