

引用格式: 姜佳彤, 张翊航, 宋兆杰, 等, 2026. 基于因果机器学习的页岩储层注 CO₂ 微观波及机制研究与主控因素分析[J]. 地质力学学报, 32(1): 258–271. DOI: [10.12090/j.issn.1006-6616.2025116](https://doi.org/10.12090/j.issn.1006-6616.2025116)

Citation: JIANG J T, ZHANG Y H, SONG Z J, et al., 2026. Governing factors and mechanisms of CO₂ microscale sweep efficiency in shale reservoirs based on causal machine learning[J]. Journal of Geomechanics, 32(1): 258–271. DOI: [10.12090/j.issn.1006-6616.2025116](https://doi.org/10.12090/j.issn.1006-6616.2025116)

基于因果机器学习的页岩储层注 CO₂ 微观波及机制研究与主控因素分析

姜佳彤^{1,2}, 张翊航², 宋兆杰², 闫瑞升³, 郑力军⁴, 张凯星², 李培宇², 黄圣杰¹,
Tangparitkul Suparit⁵

JIANG Jiatong^{1,2}, ZHANG Yihang², SONG Zhaojie², YAN Ruisheng³, ZHENG Lijun⁴, ZHANG Kaixing²,
LI Peiyu², HUANG Shengjie¹, TANGPARITKUL Suparit⁵

1. 中国石油大学(北京)克拉玛依校区石油学院, 新疆 克拉玛依 834000;
2. 中国石油大学(北京)油气资源与工程全国重点实验室, 北京 102249;
3. 中国石油辽河油田分公司欢喜岭采油厂, 辽宁 盘锦 124114;
4. 中国石油长庆油田分公司油气工艺研究院, 陕西 西安 710018;
5. 清迈大学矿业与石油工程学院, 清迈 50200, 泰国

1. School of Petroleum, Karamay Campus, China University of Petroleum (Beijing), Karamay 834000, Xinjiang, China;
2. National Key Laboratory of Oil and Gas Resources and Engineering, China University of Petroleum (Beijing), Beijing 102249, China;
3. Huanxiling Oil Production Plant, PetroChina Liaohe Oilfield Company, Panjin 124114, Liaoning, China;
4. Research Institute of Oil and Gas Technology of PetroChina Changqing Oilfield Branch, Xi'an 710018, Shanxi, China;
5. Department of Mining and Petroleum Engineering, Chiang Mai University, Chiang Mai 50200, Thailand

Governing factors and mechanisms of CO₂ microscale sweep efficiency in shale reservoirs based on causal machine learning

Abstract: [Objective] During CO₂ fluid injection into oil reservoirs or saline aquifers, CO₂-water-rock interactions can alter porous media properties, thereby influencing the CO₂ microscale sweep efficiency, primarily due to capillary effects. Laboratory experiments and micro/nanoscale numerical simulations often struggle to isolate the specific contributions of individual pore properties, limiting targeted injection optimization for maximizing geological storage potential. [Methods] To investigate the dynamic evolution of pore structures and properties during multi-mineral competitive dissolution-precipitation reactions under CO₂ injection, we developed a lattice Boltzmann method (LBM). This method made it

基金项目: 国家自然科学基金项目(52504050); 国家自然科学基金企业创新发展联合基金集成项目(U24B6002); 新疆维吾尔自治区自然科学基金项目(2024D01B96, 2024B01015); 新疆维吾尔自治区克拉玛依市创新环境建设计划项目(2025DB0150); 中国石油大学(北京)克拉玛依校区科研启动基金项目(XQZX20250035)

This research was financially supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52504050), the Corporate Innovation and Development Joint Fund Integrated Project of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U24B6002), the Natural Science Foundation of Xinjiang Uygur Autonomous Region (Grant Nos. 2024D01B96 and 2024B01015), the Karamay Innovation Environment Construction Plan (Grant No. 2025DB0150), and the Scientific Research Start-up Fund of the Karamay Subcampus of the China University of Petroleum, Beijing (Grant No. XQZX20250035).

第一作者: 姜佳彤(1994—), 女, 讲师, 主要从事 CO₂ 驱油与地质封存(CCUS)、微纳尺度流体表界面行为的研究工作。

Email: jiatong_jiang@cupk.edu.cn

通信作者: 宋兆杰(1985—), 男, 教授, 主要从事非常规油气相态与提高采收率、CO₂ 驱油与地质封存(CCUS)的研究工作。

Email: songz@cupk.edu.cn

收稿日期: 2025-08-21; 修回日期: 2025-11-30; 录用日期: 2026-01-07; 网络出版日期: 2026-01-13; 责任编辑: 范二平

Received: 2025-08-21; Revised: 2025-11-30; Accepted: 2026-01-07; Available Online: 2026-01-13; Handling Editor: FAN Erping

possible to simulate CO₂-water-rock interactions in shale oil reservoirs and to analyze pore properties (e.g., average wettability, roughness, porosity) and CO₂ microscale sweep efficiency. The LBM simulations generated a dataset covering various pore property scenarios to support causal machine learning. Using a double machine learning framework with a random forest algorithm, a causal inference prediction model was built for CO₂ microscale sweep efficiency, treating reaction time as a continuous treatment variable. [Results] This model quantified the relative importance of key pore parameters—porosity, wettability, and mean pore diameter—on sweep efficiency within the pore network. Its results indicate that reservoirs with higher proportions of carbonate minerals (calcite) exhibit greater CO₂ microscale sweep efficiency. The CO₂-water-rock reaction triggers calcite dissolution, forming preferential flow paths, while the secondary precipitation of oil-wet calcite induces localized wettability alteration. This dynamic "dissolution–secondary precipitation" process modifies capillary forces by altering the structure and physical properties of pore-throats, thereby influencing the microscale sweep range of CO₂ fluids. However, under identical mineral proportions, CO₂ sweep efficiency varies among samples, with higher calcite proportions correlating with broader variation in sweep performance. [Conclusions] These findings underscore the crucial role of physical pore properties, beyond mineral composition alone, in governing sweep efficiency. Causal learning identified key pore-throat parameters that control CO₂ microscale sweep behavior, with wettability emerging as the most influential factor. Neutrally water-wet pore-throats exhibited the highest CO₂ sweep efficiency. [Significance] By constructing a Lattice Boltzmann model for CO₂-water-rock interactions and quantifying the impact of key physical parameters, this study provides a reference and guidance for the targeted adjustment of CO₂ injection strategies and the enhancement of the geological CO₂ storage effectiveness.

Keywords: CO₂-water-rock interaction; lattice Boltzmann method; porous scale; causal machine learning; geological CO₂ sequestration

摘要: 在废弃油气藏或咸水层注入 CO₂ 后, CO₂-水-岩反应会改变储层孔喉物性参数, 进而通过影响毛细管作用影响 CO₂ 微观波及效率。由于页岩岩芯孔喉结构复杂, 不同结构的孔喉内 CO₂ 微观波及效率难以准确量化, 制约了 CO₂ 注入方案的有针对性调整, 进而影响了 CO₂ 地质封存的效果。通过构建多离子浓度场动态变化的格子玻尔兹曼模型, 模拟不同物性储层中 CO₂-水-岩反应和 CO₂ 微观波及过程, 形成了不同物性储层的 CO₂-水-岩反应数据集。在此基础上, 基于双重机器学习框架, 构建了 CO₂ 微观波及效率的因果学习模型, 并引入随机森林算法, 以 CO₂-水-岩反应时间作为连续型处理变量, 系统量化了孔隙度、润湿性与平均孔径等关键孔喉物性参数对储层孔喉内 CO₂ 微观波及效率的影响权重。研究结果表明, 高碳酸盐岩矿物(方解石)占比储层整体呈现更大的 CO₂ 微观波及效率, CO₂-水-岩反应引发方解石溶解形成优势流动通道, 同时亲油性方解石次生沉淀引发局部润湿性改变。“溶解-次生沉淀”动态过程通过改变储层孔喉结构及物性, 从而影响毛细管作用, 最终改变 CO₂ 流体的微观波及范围。然而, 在相同矿物比例下, 各样本的 CO₂ 微观波及效率存在差异, 且方解石占比越大个体样本 CO₂ 微观波及效率极差越大, 说明不同储层样本的物性差异显著影响 CO₂ 微观波及效率。结合因果学习识别影响 CO₂ 微观波及效率的关键孔喉物性参数, 结果表明储层润湿性对于 CO₂ 波及的影响最为显著, 中性偏水湿的储层孔喉中 CO₂ 的微观波及效率最高。通过构建 CO₂-水-岩反应格子玻尔兹曼模型并量化关键物性参数影响, 为针对性调整 CO₂ 注入方案、增强 CO₂ 地质封存效果提供了参考与借鉴。

关键词: CO₂-水-岩反应; 格子玻尔兹曼模拟; 孔隙尺度; 因果机器学习; CO₂ 地质封存

中图分类号: P594; P578.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1006-6616(2026)01-0258-14

DOI: 10.12090/j.issn.1006-6616.2025116

0 引言

CO₂ 在岩石孔隙中的有效波及范围是衡量油气储层或咸水层 CO₂ 地质封存潜力的重要因素(王海柱等, 2011; 胡永乐等, 2019; 邹才能等, 2022)。油气储层或咸水层中广泛分布的方解石等碳酸盐矿物

与 CO₂ 流体发生水-岩反应(Wang et al., 2024; 张永庶等, 2025; 张超等, 2025), 引发波及储层内孔喉结构的动态演化(Machel, 2004; 陈代钊和钱一雄, 2017; 梁金同等, 2023), 从而改变储层孔隙度、渗透率、润湿性等物性参数(Wang et al., 2023; 姬佳炎等, 2024; Tan et al., 2025), 并通过改变孔隙连通性、流体运移路径及毛细管力而影响 CO₂ 的微观波及效率, 最终影响

储层碳封存能力(Cui et al., 2021; 丁茜等, 2023)。

国内外学者已针对 CO₂-水-岩反应影响的储层演化规律开展了相关研究。Xie et al.(2023)基于格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)建立了流体流动、物质传输与非均相反应的耦合模型,揭示了 CO₂饱和盐水注入储层过程中方解石溶蚀的孔隙尺度演化机制。Chen et al.(2014, 2015)通过耦合格子玻尔兹曼方法与化学反应动力学模型,实现了碳酸盐岩矿物溶蚀过程的孔隙尺度模拟,并采用深度神经网络捕捉了 CO₂-水-岩反应过程中孔喉结构从初始溶解到优势通道形成的全周期演化轨迹(Wang et al., 2022)。研究表明,随着 CO₂-水-岩反应不断进行,储层孔喉直径及渗透率等物性参数的动态演化呈现出复杂的非单调特征:初始阶段的矿物溶解作用可提高储层的微观连通性(刘雨航等, 2025; 吴潇等, 2025; Chai et al., 2025),从而改善孔渗特性;而持续的 CO₂-水-岩反应会诱发次生矿物沉淀,导致孔隙喉道堵塞,减小孔喉半径。此外,不同矿物的溶解反应速率差异较大,例如碳酸盐岩矿物反应速率大,而石英矿物几乎不参与 CO₂-水-岩反应,使得 CO₂-水-岩反应中不同矿物区域的孔喉尺寸差异性增强。另一方面,各类矿物润湿性存在差异,亲油性矿物(如方解石)的溶解(孙占强等, 2001; 李颖等, 2023; 王鑫等, 2023),导致不受 CO₂溶蚀影响的亲水性矿物(如石英)的相对占比增加,从而使得储层孔喉亲水性整体增强。然而,随着 CO₂-水-岩反应的继续进行,碳酸盐岩矿物的次生析出又会增强孔喉表面的亲油性。由此可见,随着 CO₂-水-岩反应的进行,储层孔喉结构与润湿性均表现出非单调变化特征。不断演化的储层物性参数使得储层中 CO₂的停留时长(CO₂-水-岩反应时长)与 CO₂微观波及效率之间难以建立明确的对应关系,导致实际储层的 CO₂封存能力难预测。因此,有必要明确不同 CO₂-水-岩反应阶段影响 CO₂微观波及效率的储层物性参数及其作用机制,从而有针对性调整 CO₂的注入时机与周期,实现地质储层高效碳封存。

目前追踪矿物“溶解-次生沉淀”动态过程的室内实验方法尚未成熟,依赖于传统岩芯渗流实验的可视化表征方法(如扫描电镜)普适性较差,难以动态追踪矿物溶解与沉淀(Guo et al., 2023; 杨诗琪等, 2024)。基于数字岩芯技术的 CO₂-水-岩反应模拟可以实现矿物“溶解-次生沉淀”的动态表征,但模拟结果仅针对特定储层结构,无法预测不同物性

储层的 CO₂微观波及效率。机器学习预测模型的建立可有效解决上述问题,但传统机器学习方法难以揭示各因素之间的真实物理关系(Raissi et al., 2019; Yue et al., 2024),例如有效区分影响 CO₂微观波及效率的直接因素(如孔喉物性参数)与间接因素(如 CO₂-水-岩反应时长)。相比之下,因果学习作为一种考虑各因素间真实物理意义的机器学习方法,通过在预测过程中建立物理逻辑约束(闵超等, 2024),区分影响 CO₂微观波及的直接与间接因素,量化各因素对 CO₂微观波及效率的影响权重,从而可明确多矿物储层影响 CO₂微观波及效率的主控因素。

文章首先构建了“页岩储层注 CO₂矿物溶解-次生沉淀”的 LBM 模型,通过调整方解石与石英矿物的相对占比、设置不同矿物的反应速率常数,模拟不同孔喉物性的页岩储层中 CO₂-水-岩反应的动态过程,获得各类储层 CO₂微观波及效率的多维数据集;进而基于因果机器学习方法,实现不同孔喉物性储层中各注入阶段 CO₂微观波及效率的预测,揭示出影响 CO₂微观波及效率的关键孔喉物性参数,阐明了关键孔喉物性参数对 CO₂微观波及的内在作用机制。因果机器学习方法近年来在油气开发领域,如煤层气开发中水力压裂后的产量预测与压裂方案优化方面,已展现出其潜力(Min et al., 2023)。然而,针对储层 CO₂-水-岩反应的复杂化学作用,特别是水岩反应影响的 CO₂波及效率预测与主控因素分析,相关研究仍然较少。为此,笔者旨在将因果机器学习方法引入至孔隙尺度下的 CO₂-水-岩反应机理解析中,通过构建数值模拟与因果学习的融合框架,以准确识别影响 CO₂波及效率的主控因素,为后续油气开发领域构建“现场数据-物理关系”双驱动的深度机器学习模型提供了新思路。

1 页岩储层 CO₂-水-岩反应的 LBM 模型构建

1.1 CO₂-水-岩反应实验

实验选取某油田页岩岩芯,利用激光共聚焦显微镜(Confocal Laser Scanning Microscope, CLSM)的明场扫描技术扫描反应前岩芯的岩石骨架结构,用于在 LBM 模拟中还原页岩储层的原始孔喉结构。利用 X 射线衍射仪测定页岩岩芯的矿物组成,其中碳酸盐岩类矿物(主要为方解石)占比较高(70%~90%),

其余矿物主要为石英, 黏土矿物占比较小(0.5%)。

参考 Noiriél et al.(2009) 及 Deng et al.(2015) 的研究工作, 选取初始碳酸盐矿物含量为 75% 的岩芯开展 CO₂-水-岩反应实验。首先, 将蒸馏水超声处理 30 min 以去除溶解气体, 随后向其中通入 CO₂, 持续 6 h, 完成饱和 CO₂ 水溶液配置。将岩芯均匀切割为 5 段, 依次编号为 1~5, 设立 5 个反应实验组。利用 CLSM 扫描各岩芯样本反应前孔径分布形貌, 扫描视域范围覆盖岩芯全截面。随后将其置于高温高压反应釜中, 并注入饱和 CO₂ 水溶液, 在 80 °C、25 MPa 的条件下进行为期 10 d 的加压渗吸反应。反应结束后, 在相同的扫描视域内再次对岩芯样本进行 CLSM 扫描。将扫描图像导入 Avizo 软件计算反应前后岩芯的孔隙度及孔径分布, 为模型校验提供验证参数。实验的相关参数设置如表 1 所示。

表 1 CO₂-水-岩反应实验参数设置

Table 1 Experimental parameters for CO₂-water-rock reaction

实验参数	设置值
实验组数	5
温度	80 °C
压力	25 MPa
水岩反应时间	10 d
CLSM物镜倍数	10

1.2 CO₂-水-岩反应的 LBM 模型构建

研究采用具有多松弛时间、多离子分布函数的 LBM 模型模拟 CO₂ 注入后储层矿物“溶解-次生沉淀”的反应过程。采用多个分布函数分别求解流体 CO₂、H⁺、Ca²⁺、CO₃²⁻ 等不同离子的浓度分布场, 密度分布函数和总焓分布函数的多松弛时间格子玻尔兹曼(Lattice Boltzmann, LB)方程为:

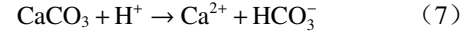
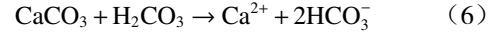
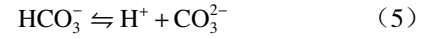
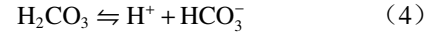
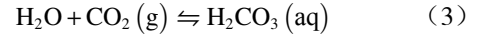
$$f(x + e\Delta t, t + \Delta t) - f(x, t) = \frac{-1}{\tau} (f - f_{eq}) + \frac{1}{\tau} F_m \quad (1)$$

$$g_i(x + e\Delta t, t + \Delta t) - g_i(x, t) = \frac{-1}{\tau_i} (g_i - g_{ieq}) \quad (i = 1, 2, 3 \dots) \quad (2)$$

式中, f —流体分布函数; x —格点的空间位置; t —时间; Δt —间隔时间; e —离散速度矢量; τ —主流体松弛时间; f_{eq} —流体平衡态分布函数; F_m —外力项; g_i —溶质 i 的分布函数; τ_i —溶质 i 的松弛时间; g_{ieq} —溶质 i 平衡态分布函数。

矿物溶解-次生沉淀是一种孔隙尺度的行为, 通过微观渗流模拟, 可以得到流体、溶质离子等在

孔隙空间的分布情况。CO₂ 在水中的溶解反应是一个平衡的过程(朱子涵等, 2011; 王立恒等, 2023), CO₂ 溶于水后会形成 H₂CO₃, 化学反应式见(3), 同时 H₂CO₃ 进一步解离, 释放出 H⁺、HCO₃⁻ 与 CO₃²⁻, 化学反应式见(4)(5), 导致储层流体的 pH 降低。反应生成的 H₂CO₃ 以及解离出的 H⁺ 可与储层中的碳酸盐岩矿物(主要成分为 CaCO₃) 反应, 生成二价阳离子 Ca²⁺ 与 HCO₃⁻, 具体过程见化学反应式(6)(7)。反应生成的离子在孔隙空间中扩散迁移, CO₃²⁻ 与 Ca²⁺ 又易形成沉淀, 化学反应式见(8)。因此, CO₂-水-岩反应过程中, 储层矿物存在溶解与次生沉淀 2 种行为。



采用溶解反应动力学模型对矿物溶解-次生沉淀过程进行模拟, 孔隙尺度的矿物溶解/沉淀速率可以通过过渡态理论(TST)来描述, 矿物反应速率的通用表达式(Lasaga et al., 2014)为:

$$R_m = -k_m \left(1 - \frac{Q_s}{K_{eq}} \right)^n \quad (9)$$

式中, R_m —矿物反应速率; k_m —动力学速率常数; Q_s —反应离子浓度积; K_{eq} —平衡常数; n —反应级数。

根据公式(9), 方解石矿物在 CO₂ 酸性环境中的溶解/沉淀速率可表示为:

$$R_m = (k_1 \alpha_{H^+} + k_2 \alpha_{H_2CO_3} + k_3) \left(1 - \frac{\alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}}}{K_{eq, CaCO_3}} \right) \quad (10)$$

式中, k_1 、 k_2 、 k_3 —反应动力学常数, 分别为 8.9×10^{-1} 、 5.0×10^{-4} 、 6.5×10^{-7} mol/(m²·s); α_{H^+} —氢离子浓度; $\alpha_{H_2CO_3}$ —碳酸浓度; $\alpha_{Ca^{2+}}$ —钙离子浓度; $\alpha_{CO_3^{2-}}$ —碳酸根离子浓度; $K_{eq, CaCO_3}$ —CaCO₃ 溶度积常数, 其值为 3.47×10^{-9} (CHOU et al., 1989)。

通过比较离子浓度积(Q_s)与溶度积(K_{sp})判断矿物溶解或沉淀, 以方解石为例, 离子浓度积可表示为:

$$Q_{s, CaCO_3} = \alpha_{Ca^{2+}} \cdot \alpha_{CO_3^{2-}} \quad (11)$$

若 $Q_{s, CaCO_3} < K_{sp}$, 矿物溶解; 若 $Q_{s, CaCO_3} > K_{sp}$, 离子浓度过饱和, 矿物重新沉淀; 若 $Q_{s, CaCO_3} = K_{sp}$, 保持动态平衡 (Plummer et al., 1978)。矿物溶解-沉淀的过程中, 反应产生的离子溶质通过扩散运移作用向其他孔隙区域迁移, 避免了由反应导致的局部离子堆积现象。

为将 LBM 的无因次时间与实验时间对应, 采用如下方式对 LBM 的无因次时间进行转化:

$$t_{real} = t_{LBM} \cdot \Delta t_{real} = t_{LBM} \cdot \frac{D_{real}}{D_{LBM}} \cdot \left(\frac{\Delta x_{real}}{\Delta x_{LBM}} \right)^2 \quad (12)$$

式中, t_{real} —真实时间; t_{LBM} —LBM 模型的无因次时间; Δx_{LBM} 与 Δx_{real} —LBM 模型中的格子间距与其代表的单元的实际物理长度; D_{real} 和 D_{LBM} —物理单位体系和格子单位体系中的扩散系数。在研究中, Δx_{LBM} 、 Δx_{real} 取值为 $0.3 \mu\text{m}$, D_{real} 取值为 $2 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$, D_{LBM} 取值为 0.001。

为排除其他因素干扰, 研究对储层矿物进行了简化处理, 将矿物组分分为参与水-岩反应 (以方解石为代表) 与不参与反应 (以石英为代表) 2 类, 其中

方解石矿物的溶解/沉淀速率参数已在前述部分给出, 石英则由于其矿物特性不参与反应。此外, 研究着眼于揭示矿物溶解-次生沉淀现象对储层孔喉物性的影响, 且所用岩芯黏土矿物占比较低 (0.5%), 因此在模型构建过程中尚未考虑黏土矿物遇水膨胀效应。

基于页岩岩芯的 CLSM 扫描结果并结合数字图像处理技术, 研究首先提取了以二值化 (0 代表孔隙, 1 代表岩石骨架) 表征的真实储层孔喉空间形态特征。为更好地反映储层的矿物分布特征, 采用固定比例随机生成与聚类块过滤算法, 通过引入密度因子参数, 定量设置岩石骨架空间内不同矿物类型 (溶解矿物与不溶解矿物) 的占比。通过邻域拓展的方式生成符合地质规律的矿物分布结构, 从而模拟真实岩石矿物中的矿物自然聚集特征。此外, 研究在算法中引入尺寸过滤机制, 通过定义矿物最小的聚类尺寸阈值, 实现了对矿物随机生成过程中过小矿物块的剔除。最终形成在空间形态、矿物比例等多个维度与真实岩芯匹配的矿物分布模型, 如图 1 所示。

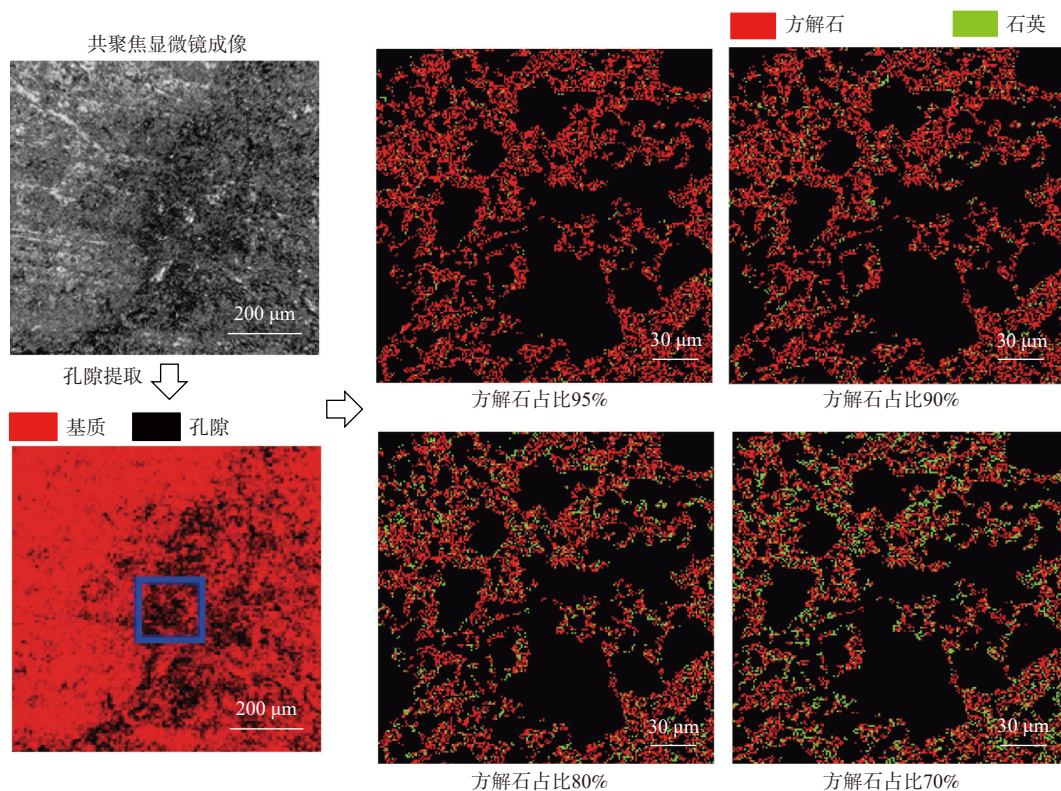


图 1 LBM 模型中不同方解石占比的储层岩石骨架构建示意图

Fig. 1 Reservoir rock skeleton with different proportions of calcite in the LBM Model

基于上述算法所构建的孔隙结构模型, 采用时间单位校正后, 模拟了 CO_2 注入 10 d 内的矿物溶解-

次生沉淀过程, 计算并提取模拟孔隙模型的孔隙度与孔径分布, 提取思路见图 2。

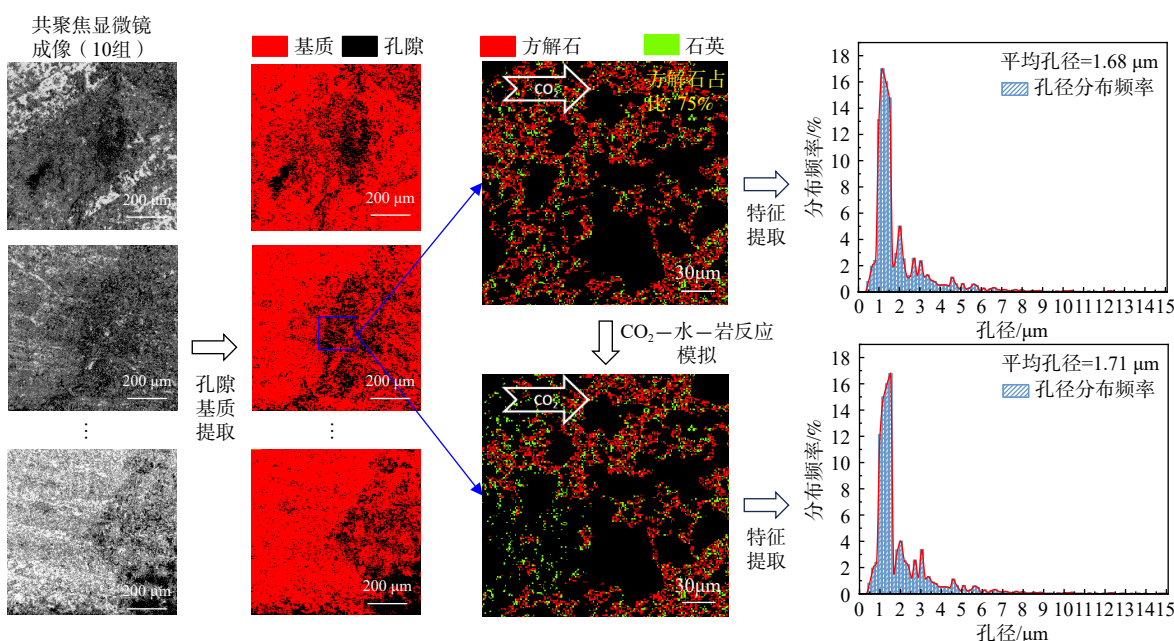
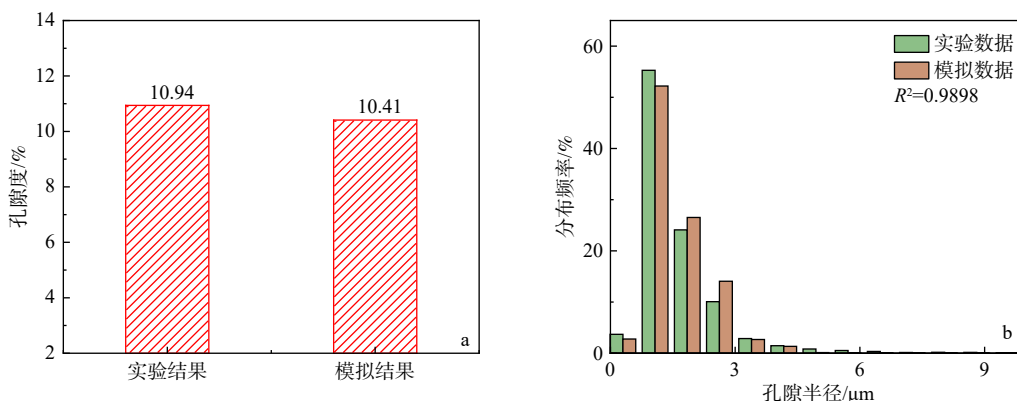


图 2 CO₂-水-岩反应 LBM 模型特征提取思路

Fig. 2 Validation ideas for CO₂-water-rock reaction LBM Model

为验证模型可靠性, 以多组室内实验测得的孔隙度及孔径分布取平均值作为对比指标, 对 CO₂-水-岩反应模型提取的 LBM 模拟结果与室内实验数据进行系统对比, 结果如图 3 所示。对比室内实验与

LBM 模拟的结果可以看出, 研究建立的矿物溶解-次生沉淀 LBM 模型的模拟结果与室内实验结果基本吻合, 证明该模型可有效模拟页岩储层 CO₂-水-岩反应的动态过程。



室内实验及 LBM 模拟中方解石占比均为 75%

a—室内实验与 LBM 模拟的岩芯孔隙度对比; b—室内实验与 LBM 模拟的岩芯孔隙半径分布对比

图 3 室内 CO₂-水-岩实验后与 CO₂-水-岩反应 LBM 模拟的验证指标对比

Fig. 3 Comparison of validation indicators between laboratory CO₂-water-rock experiments and CO₂-water-rock reaction LBM Model

(a) Comparison of porosity between experiments and simulations; (b) Comparison of pore radius distribution between experiments and simulations

The proportions of calcite in both the experiment and the LBM Model are 75%.

1.3 CO₂-水-岩反应 LBM 模型的孔喉物性参数定量表征

为定量表征模拟储层孔喉的微观结构特征, 利

用边缘检测算法提取孔隙边界(张桂梅等, 2016), 识别复杂孔隙拓扑结构, 从而可根据下面公式量化各孔喉物性参数:

$$\varphi = \frac{A_{\text{pore}}}{A_{\text{total}}} \times 100\% \quad (13)$$

$$R_s = \frac{P_{\text{pore}}}{A_{\text{pore}}} \quad (14)$$

$$CV_r = \frac{\sigma_r}{\mu_r} \quad (15)$$

$$\alpha_{\text{CO}_2} = \frac{A_{\text{CO}_2}}{A_{\text{pore}}} \quad (16)$$

$$\cos\theta_{\text{avg}} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \cos\theta_i}{\sum_{i=1}^n \alpha_i} \quad (17)$$

式中, φ —孔隙度; A_{pore} —孔隙区域面积之和; A_{total} —总面积; R_s —粗糙度; P_{pore} —孔隙的周长之和; CV_r —孔径变异系数; μ_r —孔径平均值; σ_r —孔径标准差, 用于衡量孔径大小的离散程度, 反映储层中大小孔分布的非均匀性; α_{CO_2} — CO_2 微观波及效率; A_{CO_2} — CO_2 波及区域面积; $\cos\theta_{\text{avg}}$ —储层平均润湿角加权余弦值, 用于定量表征多矿物混合储层整体的润湿性水平; n —矿物种类, 文章考虑方解石与石英 2 种矿物, 此处 n 取值 2; α_i —与流体接触矿物 i 的面积; θ_i —矿物 i 对应的接触角, 方解石的接触角设定为 120° , 石英的接触角设定为 30° 。

2 因果学习模型的构建

在 CO_2 -水-岩反应进行过程中, 储层孔喉物性不断变化, 会改变流体运移路径与毛细管作用强度, 宏观表现为 CO_2 微观波及效率差异。然而, 储层内岩石矿物分布复杂, 孔喉间连通性存在差异, 因此, CO_2 -水-岩反应对于各物性参数的影响程度不同、不同物性参数对 CO_2 微观波及效率的影响程度不同, 导致储层中 CO_2 的停留时长 (CO_2 -水-岩反应时长) 与 CO_2 波及效率之间难以建立明确的线性影响关系。“黑箱式”传统机器学习在预测 CO_2 微观波及效率过程中, 缺乏有效物理意义约束, 难以区分影响 CO_2 微观波及效率的直接、间接因素 (Durbin, 1975; Glenn and Goldman, 1976; Pearl, 2019), 使得其预测准确性有待进一步提升。而因果学习是一种将因果推断理论与机器学习方法相结合的研究方法, 旨在引入因变量与直接/间接变量之间的物理约束, 从而提升预测结果的准确性。为实现对影响 CO_2 微观波及效率的直接因素 (孔喉物性参数) 与间接因素 (CO_2 停留时长) 的有效区分, 研究在模型设计中引入了关于变量间因果结构的先验知识, 提高了模型的逻辑性及可解释性 (李家宁等,

2023; 龙享福等, 2024)。

基于此, 研究通过搭建因果机器学习模型, 区分了影响 CO_2 微观波及效率的直接与间接因素, 从而准确捕捉影响 CO_2 微观波及效率的关键因子。双重机器学习 (DML) 作为一种实现因果机器学习建模的主要手段, 其通过在样本分割基础上构建主回归与辅助回归模型, 并引入正交化残差来有效控制协变量对因果效应估计的偏差, 从而实现对处理变量影响的稳健估计。文中借鉴 Chernozhukov et al. (2018) 的研究, 构建了部分线性模型, 算法流程图见图 4, 其中样本分割比例为 1:4, 并采用随机森林算法对主回归和辅助回归进行预测求解, 本文构建部分线性的双重机器学习模型如下:

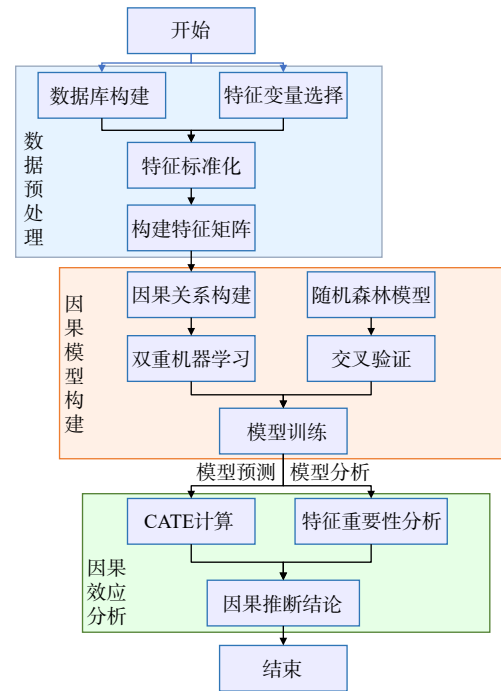


图 4 因果学习模型算法流程图

Fig. 4 Flowchart of the causal learning model algorithm

$$Y_i = \tau(X_i) \cdot T_i + g(X_i) + U_i \quad (18)$$

$$T_i = f(X_i) + v_i \quad (19)$$

式中, Y_i —输出变量; X_i —特征变量; T_i —处理变量; $g(X_i)$ 与 $f(X_i)$ —非线性函数, 用于控制变量对结果变量的非线性影响; U_i 与 v_i —误差项。

在不考虑驱替压差下, 储层孔隙内 CO_2 微观波及效率主要受流动通道的毛细管作用影响。研究充分考虑孔喉物性对毛细管作用的影响机制, 选择最大孔径、最小孔径、粗糙度、平均孔径、孔隙度、孔径变异系数、孔数量以及储层平均润湿性 8 个参

数作为特征变量(即直接变量) X_i , 将 CO₂ 停留时间设定为连续型处理变量(即间接变量) T_i , 并以 CO₂ 微观波及效率[CO₂ 波及区域面积与孔隙区域面积之比; 公式(16)]作为结果变量(即因变量) Y_i 。

在文中, 因果学习的核心指标为条件平均处理效应(Conditional Average Treatment Effect, CATE), 其计算方法如式(20)所示:

$$\text{CATE} = \frac{\partial E[Y|X_i, T_i]}{\partial T_i} \quad (20)$$

式中, CATE—条件平均处理效应, 用于定量刻画经历了 CO₂ 停留时间 T_i 的特定储层条件下 X_i , 与不发生 CO₂-水-岩反应相比, 延长单位 CO₂ 停留时间对其微观波及效率的影响; $E[\cdot]$ —结果预测函数; Y —特定储层条件与 CO₂ 停留时间下某 (X_i, T_i) 的 CO₂ 微观波及效率; 其余变量符号含义同上。

为解决处理变量 T_i (CO₂ 停留时长) 为连续型变量, 传统 CATE 离散化计算方法不适用的问题, 文中将公式(20)拓展为边际处理效应[公式(21)], 以更灵活、准确的刻画 CO₂ 停留时间对于 CO₂ 微观波及效率的影响 (Bockel-Rickermann et al., 2025)。

$$\text{CATE} = E[Y_i(t) - Y_i(0)|X_i] \quad (21)$$

式中, $Y_i(t)$ —经历了 t CO₂ 停留时间样本 i 的 CO₂ 微观波及效率; $Y_i(0)$ —不考虑 CO₂-水-岩反应样本 i 的 CO₂ 微观波及效率; 其余变量符号含义同上。

当 CATE > 0 时, 表明延长单位 CO₂ 停留时间对 CO₂ 微观波及效率具有正向促进效应, 其机理在于 CO₂-水-岩反应使得储层矿物进一步溶解, 储层孔隙连通性得到改善; 反之, 若 CATE < 0, 则说明延长停留时间会因次生沉淀、孔喉堵塞等作用抑制 CO₂ 波及。

同时, 为准确表征间接变量对结果变量与处理变量的非线性影响, 研究采用随机森林算法, 构建多棵回归树提取变量间非线性组合关系, 对函数 $g(X_i)$ 与 $f(X_i)$ 进行非参数估计, 其中:

$$g(X_i), f(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{Tree}_\beta(X_i) \quad (22)$$

式中, N —随机森林中决策树的数量, 研究中取 100; $\text{Tree}_\beta(X_i)$ —第 β 棵决策树对于输入 X_i 的预测输出; 其余变量符号含义同上。随机森林模型的超参数取值及选择依据见表 2。

表 2 随机森林模型超参数取值表

Table 2 Table of hyperparameter values for the random forest model

超参数名称	取值	选择依据
决策树数量	100	基于计算效率与性能平衡的经验值
样本分割比例	1:4	参考已有文献(Chernozhukov et al., 2018)
随机种子	42	确保模拟结果的可重复
分裂准则	均方误差	保证模型收敛
树的最大深度	无	不限制深度以获得更好拟合
内部节点最小分裂样本数	2	最大化单个树的拟合能力
叶节点所需最小样本数	1	避免模型出现过拟合
特征抽样比例	1.0	增强模型泛化性能

模型通过交叉验证实现正交化残差计算规避拟合问题, 并结合随机森林算法预测各孔喉物性参数对 CO₂ 微观波及效率的影响权重, 系统揭示 CO₂ 停留时长对于 CO₂ 微观波及效率的影响规律。因果学习模型的构建思路如图 5 所示。

3 基于因果学习模型的 CO₂ 微观波及效率预测及主控因素分析

3.1 矿物占比影响的页岩储层 CO₂ 微观波及效率

首先基于上述因果学习模型, 预测了经历相同

CO₂-水-岩反应时间后, 各矿物比例相同的页岩储层样本在延长单位反应时间条件下 CO₂ 微观波及效率的变化情况, 由 CATE 值表示(图 6)。对于方解石占比为 95% 和 70% 的储层, CATE 值均呈现出清晰的正态分布特征, 说明在初始矿物占比不同的储层中, 增加单位 CO₂ 停留时间对其微观波及效率的影响存在相似趋势性。方解石占比大的储层 CATE 平均值较大, 说明高碳酸盐岩矿物(方解石)占比有利于提高 CO₂ 微观波及效率。然而, 随着方解石占比增大, 储层样本的 CATE 值极差与标准差增大, 说明在高方解石占比储层中, “矿物溶解-次生沉淀”

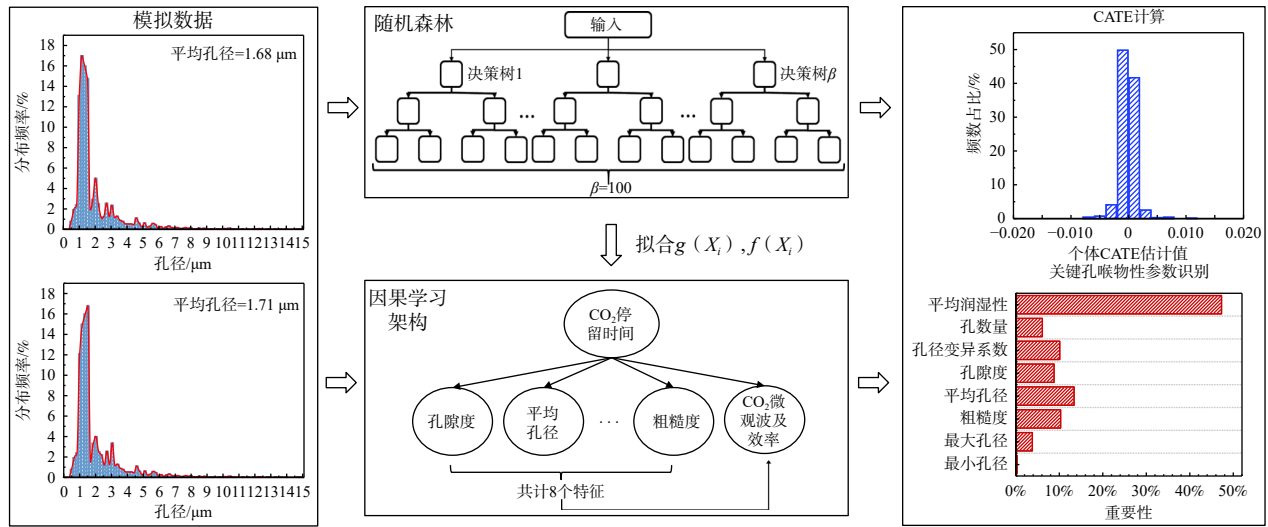
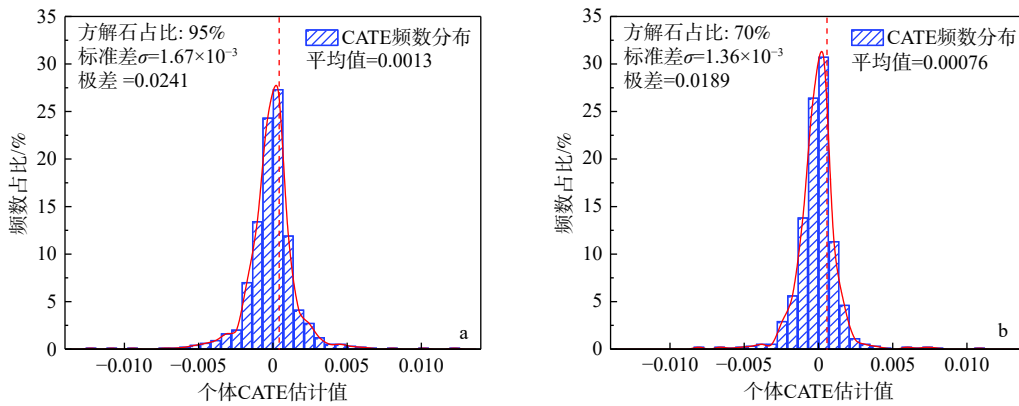


图5 因果学习模型构建框架

Fig. 5 Framework for constructing the causal learning model



a—方解石占比为95%的储层; b—方解石占比为70%的储层

图6 延长单位CO₂停留时间对不同矿物比例储层中CO₂微观波及效率的影响程度

Fig. 6 The impact of extending the unit CO₂ residence time on the microscale sweep efficiency of CO₂ in reservoirs with different mineral ratios

(a) Reservoir with 95% calcite; (b) Reservoir with 70% calcite

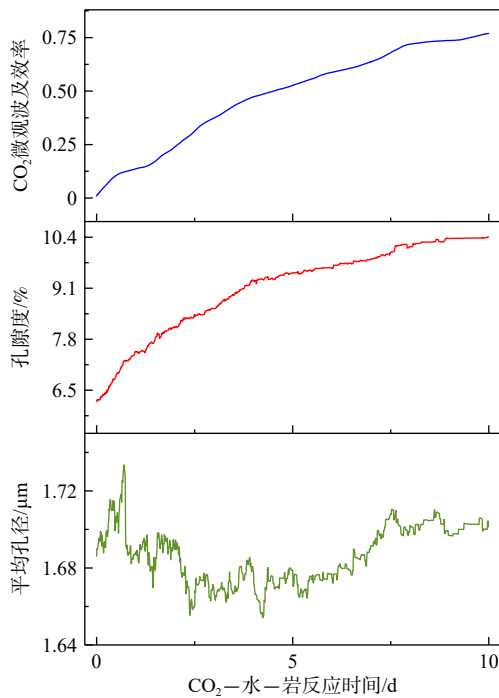
作用范围更广,不同储层样本的CO₂微观波及效率存在更大差异。

上述预测结果表明,CO₂-水-岩反应引发方解石溶解形成优势流动通道,同时亲油性方解石次生沉淀引发局部润湿性改变,“溶解-次生沉淀”动态过程通过改变储层孔喉结构及物性,从而影响毛细管作用,最终改变CO₂的微观波及效率。当储层中方解石含量相对较高时,较高的CO₂-水-岩反应参与程度使得储层中矿物溶解与次生沉淀两种动态过程分布较广,且其作用程度不一,孔喉尺寸及物性难以存在统一的演化趋势,导致同一矿物组成的不同储层样本间CO₂微观波及效率存在差异。因此,需要进一步量化不同储层孔喉物性参数对

CO₂波及微观效率的影响权重,以明确页岩储层影响CO₂波及微观效率的微观作用机制。

3.2 影响CO₂微观波及效率的关键孔喉物性参数识别与作用机制分析

以方解石占比95%储层为例,CO₂-水-岩反应时长对所波及孔喉的影响如图7所示。模拟结果表明,随着反应时间的增加CO₂不断在储层孔喉中扩散波及,储层孔隙度由6.2%逐渐上升至10.4%,平均孔径表现出先增后减,并再次增大后趋于稳定的演化趋势:初期(0~2 d)从2.26 μm急剧增长至峰值2.31 μm,此阶段,CO₂优先波及进入大孔,矿物溶解促进大孔进一步扩大,平均孔径增加;中期(2~7 d),平均孔径逐渐减小至2.24 μm,小孔在溶解的作用下



a—CO₂ 微观波及效率变化; b—波及孔喉孔隙度变化; c—平均孔径变化

图 7 CO₂-水-岩反应过程中储层孔喉物性参数变化曲线

Fig. 7 Curves showing changes in the physical parameters of reservoir pore throats during CO₂-water-rock reactions

(a) Changes in CO₂ microscale sweep efficiency; (b) Changes in pore throat porosity; (c) Changes in average pore size

连通, 部分小孔受次生沉淀的作用堵塞, 导致可波及到的小孔数量减少, 从而使得平均孔径下降; 后

期(7~10 d), 平均孔径再次呈现回升, 最终稳定在 2.28 μm, 表明反应趋于动态平衡状态。

综上, CO₂-水-岩反应过程中储层结构参数并非呈线性变化, 矿物溶解扩大孔隙并形成优势渗流通道以提升 CO₂ 微观波及效率, 次生沉淀则堵塞 CO₂ 运移路径而限制其波及。此过程中, 储层孔隙度、平均孔径等物性参数呈非线性演化, 其对 CO₂ 波及效果的最终调控机制仍不明晰。

为量化不同储层孔喉物性参数对 CO₂ 微观波及效率的影响权重, 识别影响 CO₂ 微观波及效率的主控因素, 从而提升模型预测储层内 CO₂ 微观波及效率的准确度。研究基于因果学习模型, 对不同矿物占比储层孔喉物性参数(即模型的特征变量)的重要性进行了定量表征, 并采用热力图(图 8)的形式展示。当方解石占比为 95% 时, 储层平均润湿性与孔隙度对 CO₂ 微观波及的影响均较为突出; 随着储层方解石含量的下降, 储层孔隙度的影响逐渐下降, 储层的平均润湿性成为影响 CO₂ 微观波及效率最主要的控制因素, 其重要性最高可达 48.6%。

为进一步揭示储层平均润湿性影响 CO₂ 微观波及效率的作用机制, 在 LBM 模型中设置相同岩石骨架结构, 保持其他孔喉物性参数一致, 仅改变不同模型的储层平均润湿性, 模拟 CO₂-水-岩反应 3d 后储层内 CO₂ 的微观波及效率, 如图 9 所示。由模拟结果可以看出, 中性偏水湿的条件最有利于页岩储层孔喉内 CO₂ 的微观波及。当储层处于强亲油状态时, CO₂ 在储层孔喉内的微观波及效率最弱;

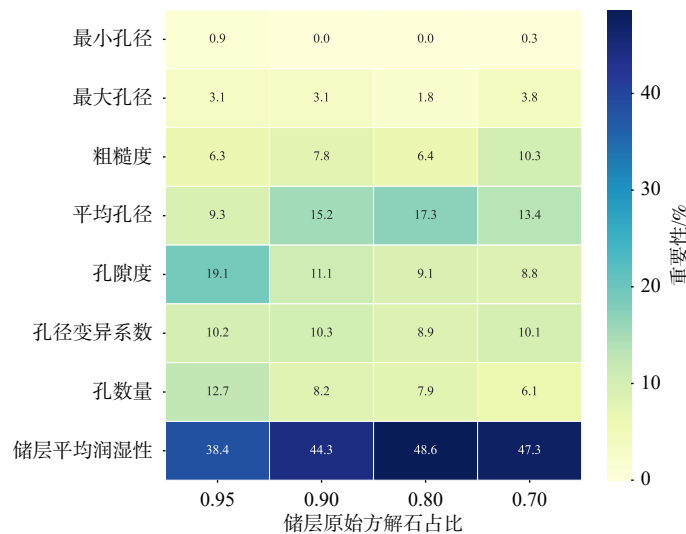


图 8 相同 CO₂ 停留时间内各孔喉物性参数影响 CO₂ 微观波及效率的权重分布图

Fig. 8 Weight distribution of the influence of pore throat physical parameters on the CO₂ microscale sweep efficiency within the same CO₂ residence time

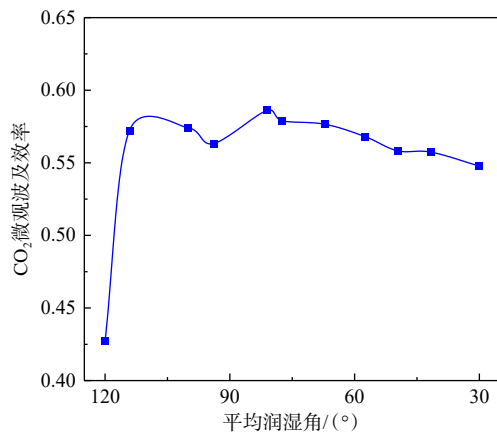


图 9 不同平均润湿性影响的储层孔喉内 CO₂ 微观波及效率对比

Fig. 9 Comparison of CO₂ microscale sweep efficiency in reservoir pores and throats influenced by different average wettability

随着润湿性由亲油向中性润湿转变, CO₂ 的微观波及效率呈现显著提升趋势; 然而, 当储层润湿性进一步向强亲水状态转变时, CO₂ 的微观波及效率再次下降, 说明储层亲水性过强反而抑制 CO₂ 在孔喉内流动迁移。初步考虑其原因为亲水储层束缚水滞留对 CO₂ 流体沿孔喉内运移造成阻碍, 此时 CO₂ 的微观波及仅依靠离子扩散, 因此微观波及效率降低。

3.3 参数敏感性分析

为进一步证实因果学习模型预测结果的可靠性, 研究重点关注模型构建中波动范围较大的参数——储层平均润湿性, 对其开展敏感性分析。在设置参数基础上施加±20%的扰动, 并在所搭建的因果机器学习框架下进行模拟, 对比分析各储层孔喉物性参数在不同润湿角模拟情景下的重要性变化, 模拟的权重分布结果见图 10。

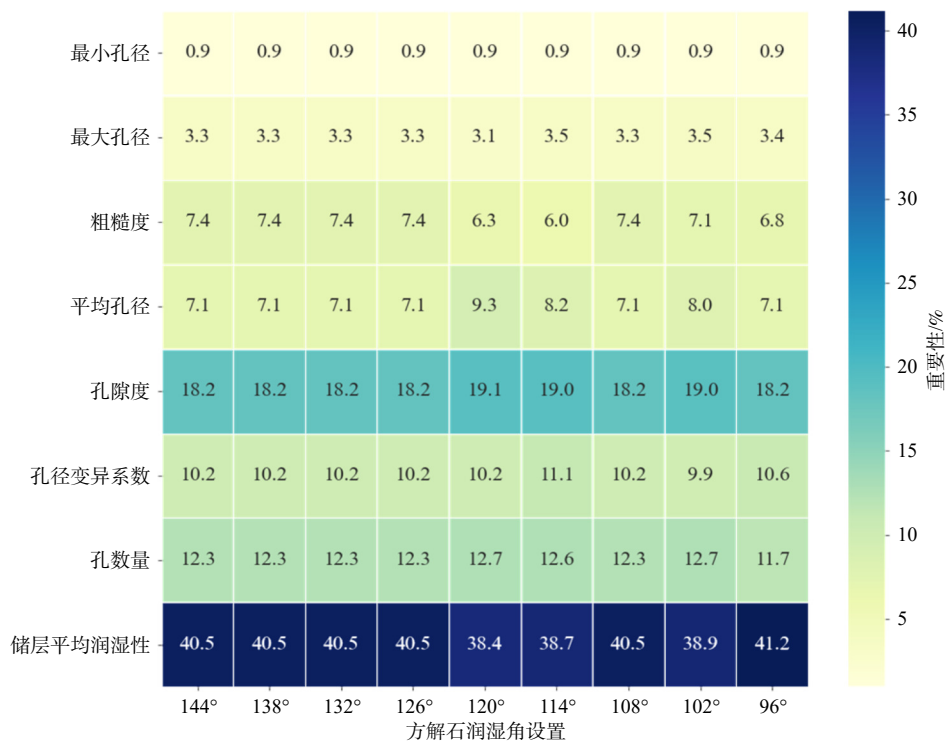


图 10 不同润湿角设置下的各因子影响 CO₂ 微观波及效率的权重分布图

Fig. 10 Weight distribution of various factors affecting CO₂ microscale sweep efficiency under different contact angle settings

从模拟结果可以看出, 当方解石的润湿角在 96°~144°范围内变化时, 储层平均润湿性始终是 CO₂ 微观波及效率的最主要控制因素, 其重要性权重保持在 38.4%~41.2%之间, 变化幅度小于 3%。其余储层物性参数权重变化幅度更小, 在润湿角设置大于 126°后, 各储层物性参数的权重趋于稳定, 这说明在引入因果结构约束后, 模型具有较好的鲁

棒性, 在矿物润湿角参数存在扰动的情况下, 模型所识别的主控因素仍保持一致。

综上所述, 研究所构建的因果机器学习与 LBM 模拟相结合的分析框架, 可准确揭示页岩储层 CO₂ 微观波及机制, 同时该方法也具备向其他储层类型推广的潜力, 例如矿物成分以方解石、白云石为主的碳酸盐岩储层。然而, 当前模型未考虑黏土矿

物的膨胀、水化等特定化学反应, 因此在对富含黏土矿物储层的 CO₂ 微观波及效率预测时, 其预测结果可能存在偏差。此外, 未来研究中将进一步考虑物理动力学作用下的多相流体运移规律, 从而实现更为精细的含油储层的 CO₂ 微观运移模拟及预测。

4 结论

(1) 因果机器学习在建模过程中引入变量间的物理因果关系, 能够有效区分影响 CO₂ 微观波及效率的直接变量(储层物性参数)与间接变量(CO₂ 停留时间), 进而揭示了不同反应阶段、不同孔喉物性条件下 CO₂ 波及效应的差异化响应机制。

(2) 高碳酸盐岩矿物(方解石)占比储层整体呈现更大的 CO₂ 微观波及效率, 然而其 CO₂-水-岩反应参与程度较高, 矿物溶解与次生沉淀 2 种动态过程分布较广且作用程度不一, 此时孔喉尺寸及物性难以存在统一的演化趋势, 导致矿物组成相同且方解石占比较高的不同储层样本之间, CO₂ 的实际微观波及效率差异较大。

(3) 储层的平均润湿性是影响 CO₂ 微观波及效率最关键的孔喉物性参数, 中性偏亲水润湿的储层孔喉最适宜 CO₂ 波及; 强亲油储层 CO₂ 的微观波及范围最小, 此时毛细管作用作为阻力限制了 CO₂ 流体在孔喉中的运移; 强亲水储层中较大的毛细管力使得束缚水占据的孔喉空间难以被 CO₂ 流体波及, 此时仅仅通过离子扩散形式实现 CO₂ 的微观波及, 其波及效率有限。

作者贡献声明: 姜佳彤、宋兆杰、闫瑞升参与论文构思、研究方法和论文写作; 张翊航、郑力军、张凯星、李培宇参与论文初稿撰写、数据分析、技术手段的实践应用和绘图; 黄圣杰、Tangparitkul Suparit 参与方法调研和论文修改。所有作者均阅读并同意稿件的提交和发表。

Author's Contributions: JIANG Jiatong, SONG Zhaojie, and YAN Ruisheng contributed to the conceptualization, methodology, and manuscript writing; ZHANG Yihang, ZHENG Lijun, ZHANG Kaixing, and LI Peiyu contributed to drafting the initial manuscript, data analysis, practical application of technical methods, and figure preparation; HUANG Shengjie and Tangparitkul Suparit contributed to method investigation and manuscript

revision. All authors have read and approved the submission and publication of the manuscript.

利益冲突声明: 本文所有作者声明本研究无任何利益冲突。

Conflict of Interests: All authors declare no conflict of interests.

References

- BOCKEL-RICKERMANN C, VANDERSCHUEREN T, VERDONCK T, et al., 2025. Sources of gain: decomposing performance in conditional average dose response estimation[C]//The thirteenth international conference on learning representations. Singapore: OpenReview. net: 1-25.
- CHAI R, MA Q, GOODARZI S, et al., 2025. Multiphase Reactive Flow During CO₂ Storage in Sandstone[J]. *Engineering*, 48: 81-91.
- CHEN D Z, QIAN Y X, 2017. Deep or super-deep dolostone reservoirs: opportunities and challenges[J]. *Journal of Palaeogeography*, 19(2): 187-196. (in Chinese with English abstract)
- CHEN L, KANG Q J, VISWANATHAN H S, et al., 2014. Pore - scale study of dissolution - induced changes in hydrologic properties of rocks with binary minerals[J]. *Water Resources Research*, 50(12): 9343-9365.
- CHEN L, KANG Q J, TANG Q, et al., 2015. Pore-scale simulation of multicomponent multiphase reactive transport with dissolution and precipitation[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 85: 935-949.
- CHERNOZHUKOV V, CHETVERIKOV D, DEMIRER M, et al., 2018. Double/debiased machine learning for treatment and structural parameters[J]. *The Econometrics Journal*, 21(1): C1-C68.
- CHOU L, GARRELS R M, WOLLAST R, 1989. Comparative study of the kinetics and mechanisms of dissolution of carbonate minerals[J]. *Chemical Geology*, 78(3-4): 269-282.
- CUI G D, YANG L H, FANG J C, et al., 2021. Geochemical reactions and their influence on petrophysical properties of ultra-low permeability oil reservoirs during water and CO₂ flooding[J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 203: 108672.
- DENG H, FITTS J P, CRANDALL D, et al., 2015. Alterations of fractures in carbonate rocks by CO₂-acidified brines[J]. *Environmental Science & Technology*, 49(16): 10226-10234.
- DING Q, WANG J B, YANG L L, et al., 2023. Exploring the mineral dissolution-precipitation processes in fracture-fluid-rock systems based on simulation experiments[J]. *Oil Gas Geology*, 44(1): 164-177. (in Chinese with English abstract)
- DURBIN R P, 1975. Letter: acid secretion by gastric mucous membrane[J]. *American Journal of Physiology-Legacy Content*, 229(6): 1726.
- GLENN J K, GOLDMAN J, 1976. Task delegation to physician extenders--some comparisons[J]. *American Journal of Public Health*, 66(1): 64-66.
- GUO Y L, XU Y S, WANG H J, et al., 2023. Experimental investigation of water-rock reaction for the reinjection of sandstone geothermal reservoirs: a case from Neogene Guantao Formation in Tianjin[J]. *Renewable Energy*, 210: 203-214.
- HU Y L, HAO M Q, CHEN G L, et al., 2019. Technologies and practice of CO₂ flooding and sequestration in China[J]. *Petroleum Exploration and*

- Development, 46(4): 716-727. (in Chinese with English abstract)
- JI J Y, SONG X Z, YI J L, et al., 2024. Study of the effect of water-rock reaction on reservoir pore-permeability evolution during exploitation of karst geothermal resources[J]. *Petroleum Science Bulletin*, 9(5): 737-749. (in Chinese with English abstract)
- LASAGA A C, 2014. Kinetic theory in the earth sciences[M]. Princeton: Princeton University Press.
- LI J N, XIONG R B, LAN Y Y, et al., 2023. Overview of the frontier progress of causal machine learning[J]. *Journal of Computer Research and Development*, 60(1): 59-84. (in Chinese with English abstract)
- LI Y, MA H S, LI H T, et al., 2023. Dissolution of supercritical CO₂ on carbonate reservoirs[J]. *Reservoir Evaluation and Development*, 13(3): 288-295. (in Chinese with English abstract)
- LIANG J T, WEN H G, LI X T, et al., 2023. Research progress of burial dissolution and modification of carbonate reservoirs and fluid-rock simulation experiments[J]. *Earth Science*, 48(2): 814-834. (in Chinese with English abstract)
- LIU Y H, QIANG W, DANG X, et al., 2025. Study on the pore structure characteristics of interbedded shale oil and formation mechanisms of high-quality shale oil reservoirs in the Chang 7 Member, Yanchang Formation, Ansai Oilfield[J]. *Journal of Geomechanics*, 31(3): 506-521. (in Chinese with English abstract)
- LONG X F, LI S B, ZHANG Y Z, et al., 2024. Overview of causal learning techniques and applications[J]. *Computer Engineering and Applications*, 60(24): 1-19. (in Chinese with English abstract)
- MACHEL H G., 2004. Concepts and models of dolomitization: a critical reappraisal[J]. *Geological Society, London, Special Publications*, 235(1): 7-63.
- MIN C, WEN G Q, GOU L J, et al., 2023. Interpretability and causal discovery of the machine learning models to predict the production of CBM wells after hydraulic fracturing[J]. *Energy*, 285: 129211.
- MIN C, WEN G Q, LI X G, et al., 2024. Research progress and application prospect of interpretable machine learning in artificial intelligence of oil and gas industry[J]. *Natural Gas Industry*, 44(9): 114-126. (in Chinese with English abstract)
- NOIRIEL C, LUQUOT L, MADÉ B, et al., 2009. Changes in reactive surface area during limestone dissolution: an experimental and modelling study[J]. *Chemical Geology*, 265(1-2): 160-170.
- PEARL J, 2019. The seven tools of causal inference, with reflections on machine learning[J]. *Communications of the ACM*, 62(3): 54-60.
- PLUMMER L N, WIGLEY T M L, PARKHURST D L. 1978. The kinetics of calcite dissolution in CO₂-water systems at 5 degrees to 60 degrees C and 0.0 to 1.0 atm CO₂[J]. *American Journal of Science*, 278(2): 179-216.
- RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E, 2019. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 378: 686-707.
- SUN Z Q, LIU D L, ZHENG D S, et al., 2001. CO₂ Release and Quantitative Calculation of Metamorphosed Carbonates under Contact Metamorphism: Example from Shuangshan, Feidong, South Tan-Lu Fault Zone[J]. *Journal of Geomechanics*, 7(2): 144-150. (in Chinese with English abstract)
- TAN Q G, PENG H P, TIAN J, et al., 2025. A review on mechanisms of CO₂-fluid-rock interaction during CO₂ injection into carbonate reservoirs[J]. *Geoenergy Science and Engineering*, 249: 213773.
- WANG B, LUO Y, LI X, et al., 2024. Water-rock reactions in the acid leaching of Uranium: hydrochemical characteristics and reaction mechanisms[J]. *Journal of Hydrology*, 636: 131798.
- WANG H Z, SHEN Z H, LI G S, 2011. Feasibility analysis on shale gas exploitation with supercritical CO₂[J]. *Petroleum Drilling Techniques*, 39(3): 30-35. (in Chinese with English abstract)
- WANG L H, GUAN X P, YANG N, et al., 2023. Preparation of nano-calcium carbonate intensified by CO₂ micro bubble and transfer-reaction analysis[J]. *Journal of Process Engineering*, 23(9): 1313-1324. (in Chinese with English abstract)
- WANG X, ZENG J H, JIA K K, et al., 2023. Evolutionary process of the wettability of low-permeability sandstone reservoirs under the control of diagenesis and its mechanism: A case study of the Dongying Sag, Bohai Bay Basin[J]. *Oil & Gas Geology*, 44(5): 1308-1320. (in Chinese with English abstract)
- WANG Z, CHEN L, WEI H K, et al., 2022. Pore-scale study of mineral dissolution in heterogeneous structures and deep learning prediction of permeability[J]. *Physics of Fluids*, 34(11): 116609.
- WANG Z D, DING K L, LIU T Y, et al., 2023. Minireview of microscopic CO₂ interactions with fluids and minerals in shale: advances and outlook[J]. *Energy & Fuels*, 37(14): 9895-9913.
- WU X, LIU R C, et al., 2025. Characteristics of Physical Properties and Pore-Throat Structure Changes in Carbonate Rocks under CO₂ Action[J]. *Reservoir Evaluation and Development*, 15(4): 571-578. (in Chinese with English abstract)
- XIE Q H, WANG W D, SU Y L, et al., 2023. Pore-scale study of calcite dissolution during CO₂-saturated brine injection for sequestration in carbonate aquifers[J]. *Gas Science and Engineering*, 114: 204978.
- YANG S Q, LIU J H, YANG Y H, et al., 2024. Reverse equilibrium simulation of mineral dissolution and precipitation during CO₂+O₂ in-situ leaching of uranium[J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 58(11): 2278-2289. (in Chinese with English abstract)
- YUE M, DAI Q Q, LIAO H Y, et al., 2024. Prediction of ORF for optimized CO₂ flooding in fractured tight oil reservoirs via machine learning[J]. *Energies*, 17(6): 1303.
- ZHANG C, ZHU P Y, HUANG T J, et al., 2025. Study on the influence of CO₂-water-rock reactions under reservoir conditions on geochemical properties of sandstone reservoirs[J]. *Petroleum Reservoir Evaluation and Development*, 15(4): 545-553. (in Chinese with English abstract)
- ZHANG G M, SUN X X, CHEN B B, et al., 2016. Edge detection algorithm combining fractional order derivative and Canny operator[J]. *Journal of Image and Graphics*, 21(8): 1028-1038. (in Chinese with English abstract)
- ZHANG Y S, LIU G Q, YUAN C, et al., 2025. Quantitative identification of shale oil lithofacies and optimization of favorable lithofacies by combining macro-structure and mineral component analyses[J]. *Acta Petrolei Sinica*, 46(2): 372-388. (in Chinese with English abstract)
- ZHU Z H, LI M Y, LIN M Q, et al., 2011. Review of the CO₂-water-rock interaction in reservoir[J]. *Bulletin of Mineralogy, Petrology and Geochemistry*, 30(1): 104-112. (in Chinese with English abstract)
- ZOU C N, ZHU R K, DONG D Z, et al., 2022. Scientific and technological

progress, development strategy and policy suggestion regarding shale oil and gas[J]. Acta Petrolei Sinica, 43(12): 1675-1686. (in Chinese with English abstract)

附中文参考文献

- 陈代钊, 钱一雄, 2017. 深层-超深层白云岩储集层: 机遇与挑战[J]. *古地理学报*, 19(2): 187-196.
- 丁茜, 王静彬, 杨磊磊, 等, 2023. 基于模拟实验探讨断裂-流体-岩石体系中的矿物溶解-沉淀过程[J]. *石油与天然气地质*, 44(1): 164-177.
- 胡永乐, 郝明强, 陈国利, 等, 2019. 中国 CO₂ 驱油与埋存技术及实践[J]. *石油勘探与开发*, 46(4): 716-727.
- 姬佳炎, 宋先知, 易俊琳, 等, 2024. 岩溶型地热资源开采过程水岩反应对储层孔渗演变影响研究[J]. *石油科学通报*, 9(5): 737-749.
- 李家宁, 熊睿彬, 兰艳艳, 等, 2023. 因果机器学习的前沿进展综述[J]. *计算机研究与发展*, 60(1): 59-84.
- 李颖, 马寒松, 李海涛, 等, 2023. 超临界 CO₂ 对碳酸盐岩储层的溶蚀作用研究[J]. *油气藏评价与开发*, 13(3): 288-295.
- 梁金同, 文华国, 李笑天, 等, 2023. 碳酸盐岩储层埋藏溶蚀改造与水岩模拟实验研究进展[J]. *地球科学*, 48(2): 814-834.
- 刘雨航, 强微, 党鑫, 等, 2025. 安塞油田延长组 7 段夹层型页岩油储层孔隙结构特征及优质储层成因机制研究[J]. *地质力学学报*, 31(3): 506-521.
- 龙享福, 李少波, 张仪宗, 等, 2024. 因果学习方法和应用概述[J]. *计算机工程与应用*, 60(24): 1-19.
- 闵超, 文国权, 李小刚, 等, 2024. 可解释机器学习在油气领域人工智能中的研究进展与应用展望[J]. *天然气工业*, 44(9): 114-126.
- 孙占强, 刘德良, 郑德山, 等, 2001. 接触变质条件下变碳酸岩 CO₂ 释放与定量计算: 以郟庐断裂南段肥东县双山为例[J]. *地质力学学报*, 7(2): 144-150.
- 王海柱, 沈忠厚, 李根生, 2011. 超临界 CO₂ 开发页岩气技术[J]. *石油钻探技术*, 39(3): 30-35.
- 王立恒, 管小平, 杨宁, 等, 2023. CO₂ 微气泡强化纳米碳酸钙的制备及传递-反应分析[J]. *过程工程学报*, 23(9): 1313-1324.
- 王鑫, 曾灏辉, 贾昆昆, 等, 2023. 成岩作用控制下低渗透砂岩润湿性演化过程及机制: 以渤海湾盆地东营凹陷为例[J]. *石油与天然气地质*, 44(5): 1308-1320.
- 吴潇, 刘润昌, 2025. CO₂ 作用下碳酸盐岩物性及孔喉结构变化特征[J]. *油气藏评价与开发*, 15(4): 571-578.
- 杨诗琪, 刘金辉, 阳奕汉, 等, 2024. CO₂+O₂ 浸蚀过程中矿物溶解量与沉淀量的逆向平衡模拟[J]. *原子能科学技术*, 58(11): 2278-2289.
- 张超, 朱鹏宇, 黄天镜, 等, 2025. 储层条件下 CO₂-水岩反应对砂岩储层地化性质影响研究[J]. *油气藏评价与开发*, 15(4): 545-553.
- 张桂梅, 孙晓旭, 陈彬彬, 等, 2016. 结合分数阶微分和 Canny 算子的边缘检测[J]. *中国图象图形学报*, 21(8): 1028-1038.
- 张永庶, 刘国强, 袁超, 等, 2025. 融合宏观结构与矿物组分分析的页岩油岩相量化识别与有利岩相优选方法[J]. *石油学报*, 46(2): 372-388.
- 朱子涵, 李明远, 林梅钦, 等, 2011. 储层中 CO₂-水-岩石相互作用研究进展[J]. *矿物岩石地球化学通报*, 30(1): 104-112.
- 邹才能, 朱如凯, 董大忠, 等, 2022. 页岩油气科技进步、发展战略及政策建议[J]. *石油学报*, 43(12): 1675-1686.