

分子采油的概念、方法及展望

计秉玉,方吉超,杨书,胡勇

(中国石化石油勘探开发研究院,北京 102206)

摘要:分子层面的认识与控制已成为现代科学技术发展的一种必然趋势,但在油气田开发领域还未引起足够重视。基于分子模拟取得的一些成果和认识,首次提出了分子采油(分子采气)的概念,并对其内涵、现状和发展趋势进行了分析。国内外其他学者在表面活性剂驱油、聚合物驱油及CO₂-EOR等方面也取得了一些相关研究成果,在一定程度上丰富了分子采油的内涵。依靠以分子动力学和量子化学计算为代表的分子模拟技术,结合色谱、光谱、质谱与核磁共振等为代表的现代实验技术,从分子层面深化认识稠油致黏机制和降黏机理,阐明油气分子在岩石表面的吸附、解吸附及滑移特征,提出了基于分子采油的新机理,设计了更具针对性的降黏剂、驱油剂、调堵剂及其他助剂材料分子结构。预计以分子模拟方法为基础分子采油技术将在化学驱油机理、热采机理、CO₂驱油机理、低矿化度水驱机理、页岩油气开采机理及天然气水合物开采机理等方面带来革命性的进步,为油气高效开采方法提供理论支撑。

关键词:分子动力学模拟;驱油机理;驱油剂;分子采油;油气开采

中图分类号:TE355

文献标识码:A

Concept, method and prospect of molecular oil recovery

JI Bingyu, FANG Jichao, YANG Shu, HU Yong

(Petroleum Exploration and Production Research Institute, SINOPEC, Beijing 102206, China)

Abstract: The understanding and control at molecular level has become an inevitable trend in the development of modern science and technology, but it has not attracted enough attention in the field of oil and gas development. Based on some achievements and understandings of molecular simulation, this paper puts forward the concept of molecular oil recovery (molecular gas recovery) for the first time, and analyzes its connotation, current situation and development trend. Relevant research achievements in surfactant flooding, polymer flooding and CO₂-EOR have been documented and enriched the connotation of molecular oil recovery to a certain extent. Relying on molecular simulation technology represented by molecular dynamics and quantum chemical calculation combined with modern experimental technology represented by chromatography, spectroscopy, mass spectrometry, and nuclear magnetic resonance, etc., it is possible to deepen the understanding of the mechanism of viscosity formation and viscosity reduction of heavy oil, and the characteristics of oil and gas adsorption, desorption and slippage on rock surface from the molecular level. In this way, a new mechanism based on molecular oil recovery is proposed, and the molecular structures of more targeted viscosity reducer, oil displacement agent, plugging agent and other auxiliary materials are designed. Molecular oil recovery technology based on molecular simulation methods is expected to bring revolutionary advances to the research of chemical oil displacement mechanism, thermal recovery mechanism, CO₂ displacement mechanism, low salinity water displacement mechanism, shale oil and gas exploitation mechanism and natural gas hydrate exploitation mechanism, etc., providing theoretical support for efficient oil and gas recovery methods.

Key words: molecular dynamics simulation, oil displacement mechanism, oil displacement agent, molecular oil recovery, oil and gas recovery

收稿日期:2022-08-02;修订日期:2022-11-18。

第一作者简介:计秉玉(1963—),男,教授级高级工程师,油气田开发。Email: jiby.syky@sinopec.com。

基金项目:国家重点研发计划项目(2018YFA0702400);国家自然科学基金项目(52204069)。

引用格式: 计秉玉, 方吉超, 杨书, 等. 分子采油的概念、方法及展望[J]. 石油与天然气地质, 2023, 44(1): 195-202. DOI: 10. 11743/ogg20230116.

Ji Bingyu, Fang Jichao, Yang Shu, et al. Concept, method and prospect of molecular oil recovery[J]. Oil & Gas Geology, 2023, 44(1): 195-202. DOI: 10. 11743/ogg20230116.

深化到分子层面的认识与控制已成为现代科学技术发展的一种必然趋势。例如, 分子生物学的诞生成为生物学革命性发展的标志^[1-2]。分子炼油概念的提出及其技术的实施, 使得大幅度提高油品的价值成为石油加工领域追求的目标^[3-4]。此外, 分子设计与控制在新材料科学、医药制造等方面正产生着巨大的变革性作用^[5-6]。因此, 以分子动力学和量子化学计算为代表的分子模拟技术结合以色谱、光谱、质谱分析与核磁共振等为代表的现代实验技术形成的方法论已经得到学术界、工业界的高度重视。

油气田开发技术水平提高依赖现代科学前沿技术的发展^[7]。传统的油田开发理论以流体力学、热力学、物理化学等学科为基础, 具有唯象方面的特征, 适用于岩心到油藏的宏观尺度应用。但随着油气田开采对象日趋复杂, 亟需更加有效的开发机理和方法, 更具针对性、经济性、绿色环保的驱油剂。例如, 特高含水老油田进一步提高采收率、页岩油气田开发及天然气水合物开采等, 都面临着许多科学难题和技术挑战。因此, 有必要从分子层面深入开展理论研究, 设计和操控功能用剂的分子结构, 实现技术的变革性进步。

笔者基于团队近几年研究实践和体会, 提出了分子采油(包括分子采气, 下同)的概念, 并对其内涵、现状和发展趋势进行了分析。认为分子采油目前主要涉及3个方面: ①从分子层面深化认识油气与岩石矿物间相互作用、油气微观赋存方式及驱油剂分子作用机制等, 提出更加有效的剩余油开采新方法; ②以针对性驱油机理为指导, 从分子层面(含量子化学计算)开展驱油剂、调堵剂及其他油田化学助剂的设计与合成; ③基于分子层面理论新认识, 研发采油工程相关材料。本文主要以分子动力学模拟在油气藏工程领域取得的部分成果与认识为主线, 对前两个方面进行讨论。

1 相关研究成果概述

在油气开采方面, 许多专家学者开展了相关研究, 发表了一系列文章, 极大地充实了分子采油的内涵与方法。

1.1 表面活性剂驱油方面

利用分子动力学模拟方法, 研究了表活剂、油、水和岩石系统中分子层面的相互作用^[8-10]。表面活性剂

主要包括阴离子、阳离子、非离子和两性离子4种类型, 原油既有辛烷、十二烷等理想模拟油, 也有考虑了饱和烃、芳香烃、胶质和沥青质的复杂原油模型, 岩石类型包括石英、长石、菱铁矿和白云石等。

在稠油化学驱方面, 通过量子化学计算、分子动力学模拟等手段研究表面活性剂与胶质沥青分子间相互作用、稠油缔合致黏机理和表面活性剂降黏机理。在稀油化学驱方面, 研究分子类型和pH值等因素对表面活性剂的吸附特征、界面能、界面膜厚度和界面张力的影响规律, 明确岩石表面粗糙度及水动力学条件等对油膜剥离效果的影响机制, 揭示润湿性调控机理和油膜型剩余油剥离机理。此外, 在纳米颗粒剥离油膜、微乳液剥离油膜等方面也开展了一些研究。

1.2 聚合物驱油方面

利用分子动力学模拟手段研究了含盐量、高价离子、水化蒙脱土和表面活性剂等因素对部分水解聚丙烯酰胺(HPAM)的分子构象、体系黏度、流体力学半径、回旋半径和特性黏数等参数的影响^[11-13]。同时, 也开展了分子层面的耐盐聚合物设计和交联聚合物模型设计。

1.3 CO₂-EOR方面

研究CO₂与聚合物分子侧链酯基、醚基等基团的相互作用, 阐明聚合物网状结构对CO₂流动性的影响, 为超临界CO₂的增稠剂分子设计提供依据^[14-15]。研究CO₂与页岩、原油之间相互作用, 分析CO₂在岩石表面形成层膜置换原油以及溶解增加原油膨胀能机理。

总之, 在利用分子动力学、量子化学计算等分子模拟技术从分子层面认识油气开采机理、设计驱油剂分子等方面, 国内外学者已经做了大量工作, 但大多数研究中采用的原油组分相对简单, 主要有辛烷、十二烷等“理想油”, 与真实原油多类型分子的复杂混合体差别较大。同时, 模拟的环境参数如温度、压力等也偏离油藏条件。研究成果偏于学术性, 还没有达到实用程度, 但这些工作为分子采油概念的推出, 学科的建立和工业化应用奠定了基础。

1.4 存在问题

1) 原油组成多样, 包括有机、无机、极性、离子等。分子结构尺度差异较大, 如沥青及其缔合体的尺寸远

远大于甲烷分子几个量级。岩石表面矿物类型不同,主要有石英、碳酸钙、蒙脱石等。这些因素给分子建模及分子力场选择带来巨大挑战。

2) 尽管目前CPU+GPU等高速计算模式在分子模拟方面得到充分应用,但模拟体系分子个数仍然受限。而分子模拟关键参数、现象的统计系综需要以一定的分子个数作为基础。

3) 时间尺度皮秒、纳秒级,空间尺度纳米级,与大尺度的油藏模型耦合存在巨大困难,目前主要提供一些定性的认识。

2 基于分子动力学的分子采油部分研究进展

2.1 基于分子层次的稠油开发机理研究与降黏剂研发

运用分子动力学模拟方法,深入到分子层次,研究稠油组成分子间相互作用,揭示其致黏机理。同时,研究油藏注入流体与原油、岩石之间的相互作用,针对性设计化学降黏剂,实现靶向降黏。

1) 基于分子层次的稠油致黏机理认识

黏度是影响原油产量和采收率的主要因素,对于稠油更是如此^[16-17]。有效降黏已经成为稠油高效动用和提高采收率的根本举措。稠油致黏的本质是各种复杂大分子间的相互作用导致稠油体系黏度上升。从分子层面深入认识稠油致黏机理,并提出分子降黏控制方法,是实现稠油针对性降黏的关键。分子动力学模拟理所当然成为分子层面认识其致黏机理的有力工具。通过红外光谱、高分辨率质谱等现代分析手段确

定稠油分子组成、认识分子结构、建立分子模型,应用最小能量原理优化分子体系模型,采用Maxwell-Boltzmann方法确定分子初始速率,选择合适的力场参数即可开展分子动力学模拟。由于黏度是输运参数,可以运用外加扰动力场的方法,模拟体系剪切的非平衡过程,再通过统计力学的系综概念进行统计分析,即可深化对分子致黏机理的认识。

研究表明(图1),沥青质分子优先通过片状结构的 π - π 堆积作用形成缔合体,缔合体向外依次主要分布胶质分、芳香分和饱和分。以缔合体为中心,各组分形成类胶体结构,轻质组分构成类胶体结构的分散介质。通过胶质中杂原子与石油酸、 H_2O 的氢键桥接作用,羧酸基团与 Ca^{2+} 配位作用等,形成以缔合体为基本单元的稠油分子联合体,这种复杂的多层级联合体结构是稠油致黏的关键。缔合体-联合体致黏理论的提出将传统胶质、沥青质堆积致黏机理深化到分子层次,也使人们认识到降黏的有效手段是针对性设计降黏剂分子,破坏缔合体-联合体结构。

2) 稠油化学降黏机理

与热采方法依靠升温加大分子热运动、减弱分子间相互作用降黏机理不同,化学降黏机理有分散降黏和乳化降黏两种方式^[18-19]。分散降黏主要是利用高分子表面活性剂与稠油分子间的嵌入作用,从分子层面设计能与目标稠油沥青质形成更强分子间相互作用的降黏剂分子,使其参与沥青质分子聚结堆积,削弱沥青质分子间的 π - π 作用,破坏体系中沥青质缔合结构,从而达到稠油降黏的目的。分子动力学模拟结果表明,加入降黏剂后,沥青质团簇尺寸变小,聚集程度变低,达到了稠油分散降黏的效果。乳化降黏是通过表面活性剂降低界面张力作用,使注入水或地层水与稠油形成水包油乳液,将由分子间相互作用控制的稠油黏度进一步

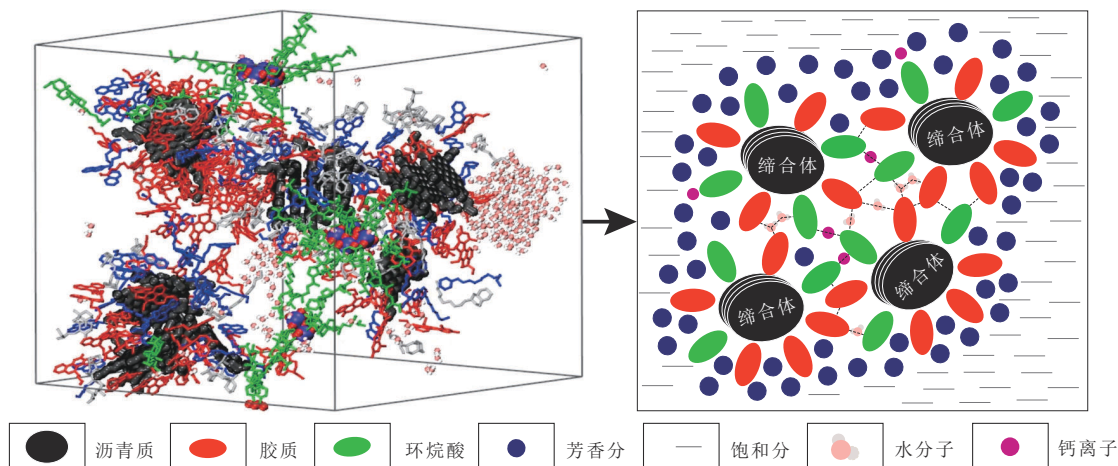


图1 稠油分子缔合体-联合体分子模拟及结构示意图

Fig. 1 Molecular simulation and structure diagram of heavy oil molecular association-combination

转变为以水为外相控制的乳液体系黏度,最终实现稠油大幅度降黏。在稠油降黏开采过程中,分散降黏与乳化降黏往往同时存在,以其中一种降黏作用为主。

3) 基于分子动力学的降黏剂优化设计

在分子层面,稠油化学复合驱的本质是通过油、水和降黏剂分子间的相互作用,形成适于多孔介质流动的复合体系,这给降黏剂分子设计提供了靶向目标。降黏剂分子设计主要包括水溶性降黏剂分子设计和油溶性降黏剂分子设计。

水溶性降黏剂分子设计的关键是利于稠油与水形成水包油乳液体系,乳滴粒径小且较为稳定,便于水驱携带。另外,水包油乳液的形成是一种相界面增加的过程,水包油乳液自身也是一种热力学不稳定体系,需要降黏剂有效降低油水界面能。因此,降黏剂需要具有较好的水溶性、较低的油水界面张力和较强的稠油缔合体-联合体结构破坏能力等。在分子设计上,以聚丙烯酰胺为骨架,加入强活性的磺酸基团、拆散沥青质缔合体-联合体结构和防止沥青质再聚集的儿茶酚基团,设计水溶、强活性和高降黏特性的降黏剂分子结构。通过分子动力学模拟,以沥青质-沥青质径向分布函数和油水界面能量最低为主要优化指标,进一步优化分子中氮形态、苯环形态及单体配比等参数,最终形成三元共聚高分子降黏剂(图2)。室内合成评价实验结果表明,所设计的水溶性降黏剂在加量0.5%~1.0%、油(孤岛油田稠油,黏度3560 mPa·s)/水比3:7时,降黏率可达95%~98%,达到设计要求。

与水溶性降黏剂作用机理和适用环境不同,油溶性降黏剂更为直接地参与稠油分子自组装行为,破坏稠油缔合体-联合体结构并防止其再次生成,这要求降黏剂分子对稠油缔合体-联合体结构具有很强的渗透性,能够打开沥青质分子片层间的 π - π 堆积,破坏胶质、沥青质分子中的氢键位点等。在分子设计上,以油溶性碳骨架为基础,增加渗透性强的烷基侧链、能够

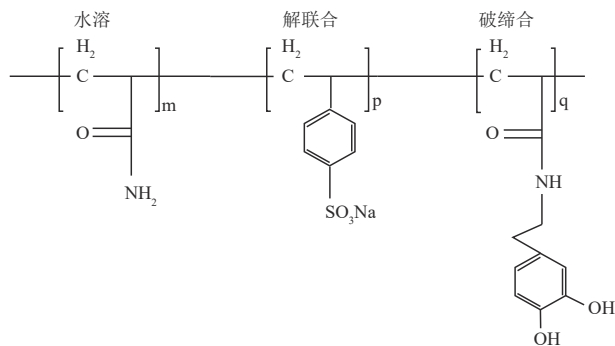


图2 一种水溶性降黏剂分子设计

Fig. 2 Molecular design of a water-soluble viscosity reducer
(m, p, q为常数。)

打开 π - π 堆积的苯环基团和多个氢键作用位点的羟基酰胺基团等^[20]。另外,为了增强降黏剂分子的回收再利用性能,减少其对采出原油性质的影响,设计了可接枝的磁性纳米粒子。通过分子动力学计算,优化纳米粒子类型、硅烷偶连剂结构及共聚单体结构,设计合成可磁回收的高效油溶性降黏剂分子(图3)。室内实验结果表明,所设计的油溶性降黏剂在加量1.6%(降黏剂有效含量5%)时,稠油油样(陈平油田,黏度15632 mPa·s)表观降黏率为72.2%,降黏剂室内磁回收率最高可达76.4%。

2.2 页岩气微观赋存特征与流动机理研究

页岩气藏不仅纳米级孔隙发育,而且有机干酪根孔隙与无机孔隙并存,有机孔隙直径集中分布在5~50 nm,无机孔隙直径集中分布在50~200 nm^[21-25]。固体与流体吸附作用、滑脱作用等更加强烈,传统实验难以认识,为此笔者所带领的团队以涪陵页岩气田储层条件为背景,利用分子动力学和蒙特卡洛模拟方法,开展了页岩气微观赋存特征与流动机理研究。

1) 建立干酪根分子模型及孔隙模型

根据干酪根沉积来源及热演化程度确定干酪根分子结构,并据此重构干酪根孔隙结构,克服了传统干酪根造孔方法存在异常表面能、真实性较差的缺点,能够生成任意形状、大小的干酪根孔隙,建立了干酪根纳米孔隙甲烷吸附模拟方法。

应用镜质体反射率(R_o)与H/C和O/C原子比的相关关系,重构干酪根分子模型(图4)和典型无机矿物表面,如二氧化硅、碳酸钙、高岭石、蒙脱石等表面分子模型。流体主要为CH₄和H₂O。

2) CH₄赋存特征与吸附规律

页岩储层内气体的赋存空间呈现典型的多尺度特征,可分为有机孔、无机孔和微裂缝3类。其中有机孔和无机孔是CH₄的主要赋存空间。两类孔隙的壁面组成、吸附性质、空间结构差异极大。因此,对有机孔隙

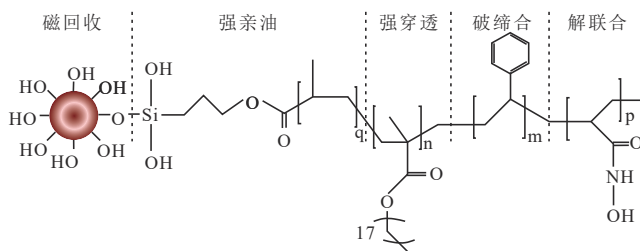


图3 一种油溶性可回收降黏剂分子设计

Fig. 3 Molecular design of an oil soluble and recoverable viscosity reducer
(m, n, p, q为常数。)

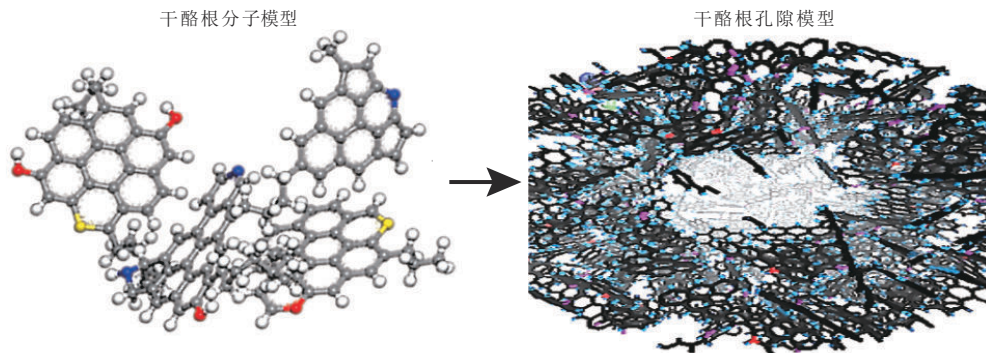


图4 重构干酪根分子模型及干酪根孔隙模型

Fig. 4 Reconstruction of kerogen molecule model and kerogen pore model

和无机孔隙内的气体赋存和流动问题分别进行研究,并取得以下认识。

涪陵页岩储层中有机孔隙与无机孔隙的总体积基本相当,但有机孔隙的表面积是无机孔隙的3.7倍。基于龙马溪组条件重构的干酪根孔隙进行分子动力学模拟研究,发现 CH_4 在页岩中赋存状态可以划分成吸附区与自由区(图5,图6),吸附气与游离气比例约为5:1左右。吸附气高密度,游离气低密度,平均密度比值约为3:1。

低压条件下,有机质及无机矿物表面的甲烷均为单层吸附,吸附等温曲线满足Langmuir方程。高压情况下,吸附层体积不可忽略,此时实验室测定结果应该进行修正。

有机孔隙表面疏水亲气(图7),无机孔隙表面亲水疏气,水分子可吸附在无机孔隙表面,形成刚性水膜,占据孔隙空间,降低有效孔隙度(图8)。水膜厚度受气体湿度、矿物类型和孔隙直径影响。分子动力学模拟结构表明孔隙含水越多、直径越小,水对 CH_4 的竞

争吸附效应越明显。

3) 页岩气流动规律

运用非平衡态分子动力学方法模拟气体流动,利用外加力场法(EFM)和反弹粒子法(RPM)模拟压差,建立了页岩储层纳米孔隙内气体流动的分子动力学模

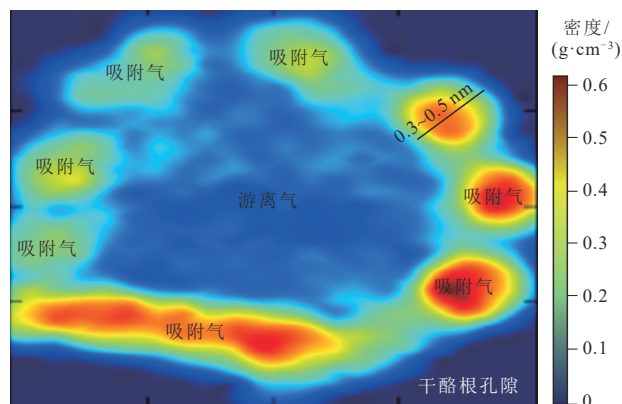


图6 干酪根孔隙内甲烷吸附密度分布(300.0 K, 5.0 MPa)

Fig. 6 Distribution of methane adsorption density in kerogen pores(300.0 K, 5.0 MPa)

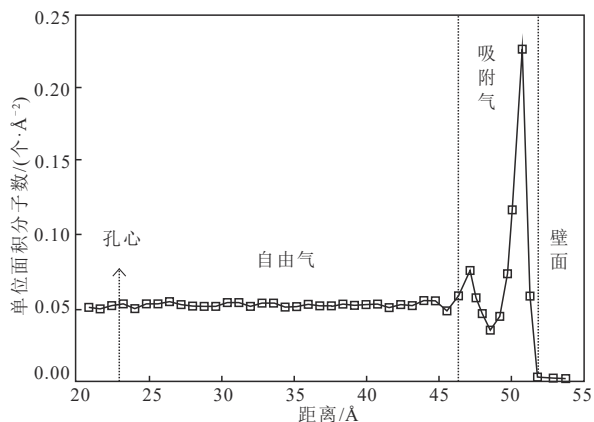


图5 3 nm半径干酪根孔隙中吸附平衡态时甲烷密度分布(300.0 K, 38 MPa)

Fig. 5 Methane density distribution in adsorption equilibrium state in kerogen pores with 3 nm radius(300.0 K, 38 MPa)

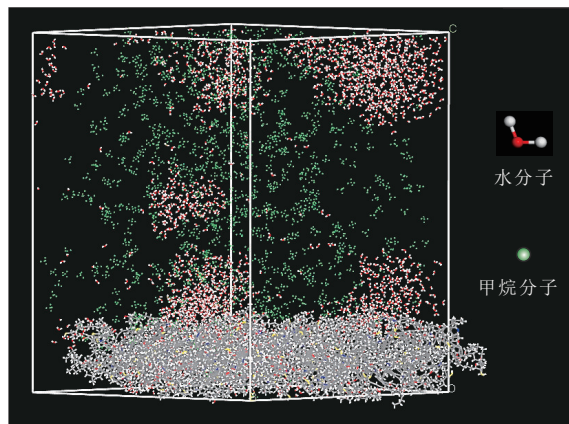


图7 干酪根表面甲烷-水分子共存态(300.0 K, 38 MPa)

Fig. 7 Coexistence of methane and water molecules on kerogen surface(300.0 K, 38 MPa)

拟方法,并针对酪根壁面(图9)、伊利石壁面(图10)孔隙开展模拟研究。

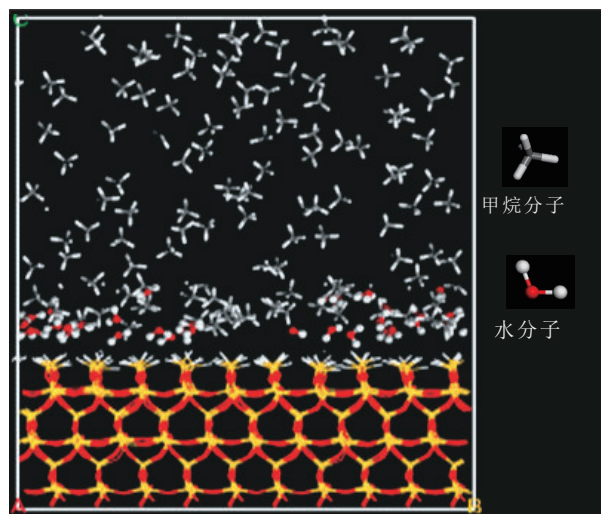


图8 石英表面甲烷-水分子吸附平衡态(300.0 K, 38 MPa)

Fig. 8 Adsorption equilibrium of methane and water molecules on quartz surface(300.0 K, 38 MPa)

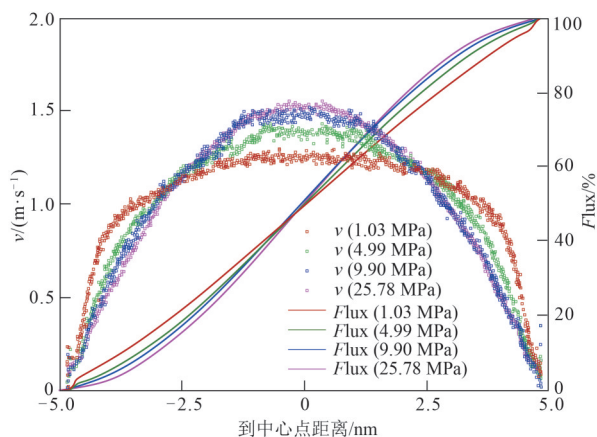


图9 干酪根壁面孔隙中气体流动速度剖面

Fig. 9 Gas flow velocity profile in kerogen wall pore

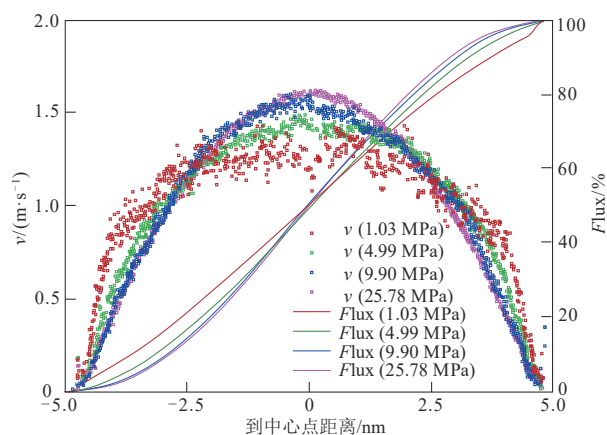


图10 伊利石壁面孔隙中气体流动速度剖面

Fig. 10 Gas flow velocity profile in illite wall pores

研究表明,涪陵页岩储层的纳米级孔隙内 CH_4 吸附区密度大,流动慢,在壁面存在一定的气体滑脱效应; CH_4 自由区密度小,黏度小,流动快,与吸附区具有不同的运动特点;提取速度剖面进行统计,发现其运动特征已经脱离泊肃叶方程所具有的抛物线形状,因而在利用泊肃叶方程或达西定律研究页岩气储层渗流时需要进一步修正。

3 分子采油领域的几点展望

分子采油(采气)的概念及相应的方法涵盖油气田开发和提高采收率的多个领域。本文仅就下面几个重要领域进行展望。

3.1 化学驱油机理

化学驱油过程实际上是注入的化学剂与储层流体和岩石间的分子间相互作用,在分子层面改善储层驱替条件,使更多的原油“动起来”,流向井筒。分子动力学模拟将成为实现分子采油目标的有效手段,搭建化学剂、界面物理化学特性和驱油效率的桥梁,从分子层面定量研究油-水-岩石间相互作用,揭示界面润湿性改变和黏附功降低等微观机理,深入认识并提出化学驱油新机理。

以储层原油类型、岩石特征及储层流体条件为基础,以实现开采新机理为目标,从分子层面优化驱油剂分子组成、功能团类型、分子结构等,设计更具有针对性的化学驱油剂,实现靶向驱油。深入认识油藏开发过程中化学剂体系色谱分离效应和原油组分动态变化特征,揭示高含水开发后期化学剂体系协同规律、原油组分变化规律及原油黏度上升机制。从分子层面适时微调化学驱油剂分子结构与组成、流体注入参数等,对高含水油藏持续高效开发具有重要意义。

目前,受限于化学驱机理认识不够深入及用剂功能达不到预期,以大庆油田和胜利油田为主的成熟化学驱区块,仍有超过50%的剩余油赋存于岩石孔隙内难以采出。分子采油概念的提出,将为此类剩余油精细开采提出新方法,突破化学驱技术界限,为老油田进一步提高采收率奠定基础。

3.2 热采机理

热采是稠油最主要的开发方式之一,以辽河、新疆和胜利为主的陆上油田稠油动用储量约 $28 \times 10^8 \text{ t}$,热采年产量 $1600 \times 10^4 \text{ t}$,但平均采收率仅约20%,大量剩余油无法有效采出。分子采油概念的提出,将在分子层面深入研究高温条件下稠油分子运动特征及其对黏度的

影响,确定稠油流动和储层温度最佳匹配关系,优化热采参数。定量研究热采条件下稠油吸附/解吸附特性和润湿性改变机制,明确化学剂与热联合作用机理,提出更加高效的化学剂作用靶点,针对性设计靶向化学剂分子结构,进一步提升热采动用界限,提高稠油热采收率。

3.3 CO₂驱机理

CO₂驱及CCUS技术是油气田开发实现“碳达峰、碳中和”的重要方法和途径,也是进一步提高采收率的重要方法。目前CO₂驱虽然取得一定的效果,但作用机理还不完善。通过分子采油方法,可以开展CO₂分子与原油分子间相互作用定量研究,深化认识CO₂在原油中的扩散、溶解和萃取等作用,阐述其降低原油黏度、增加原油弹性能机理,精细调整混相控制参数,降低最小混相压力,提出改善CO₂驱油效率新方法,助力实现油气田的绿色、低碳、高效开发。

3.4 低矿化度水驱机理

由于水资源相对丰富、成本低廉,能够有效补充地层能量,驱替原油流入采油井,使得注水开发已成为目前油田应用最广、最成熟的采油技术。特别是海上油田开采,海水资源丰富,矿化度相对较低。分子采油概念的提出,可以深入分子层面研究低矿化度水改变储层润湿性、降低残余油饱和度及提高采收率的机理,为注入水离子分布设计和水型优化提供依据。另外,分子采油还可以研究低矿化度水对储层矿物特性的影响,进而揭示不同注水倍数情况下黏土矿物润湿性变化规律,为宏观数值模拟技术提供储层动态物性参数。

3.5 页岩油气开采机理

页岩油气是中国重要的油气接替能源,但效益开发技术还未成熟,大量的页岩油气未得到高效开采。分子采油概念的提出,可以深入研究页岩气储层富含的有机质与甲烷分子吸附作用,明确吸附气与游离气主要赋存方式、页岩气吸附-解吸附规律及渗流规律,针对性提出页岩油气开发新方法,奠定规模化高效开发与稳产基础。另外,随着CO₂研究的深入,在分子层面揭示注CO₂置换解吸附机理,明确其在页岩储层微纳尺度孔隙中的扩散传质规律,为提高页岩油气采收率和CO₂封存潜力评价提供依据。

3.6 天然气水合物开采机理

天然气水合物分布于深海或永久冻土中,其燃烧后仅生成二氧化碳和水,储量巨大且无污染,被公认为

石油资源的接替能源,但天然气水合物还未实现工业化开采。分子采油概念的提出,可以深入分子层面研究天然气水合物特殊结构,明确CH₄等烃类气体在冰空间点阵空穴中的赋存方式,揭示加热、降压、CO₂置换、化学剂抑制等开发天然气水合物的复杂物理化学机理,为进一步探索和优化天然气水合物经济有效开采方式提供理论依据。

3.7 与其他学科技术的关联

1) 分子动力学模拟技术与现代实验技术如分子光谱、核磁共振、X射线衍射等相结合,是建立正确的分子模型、分子力场和提高分子动力学模拟结果可信度的重要保证,也是实现分子采油的重要途径之一。

2) 以分子动力学模拟为主的分子采油技术与格子玻尔兹曼方法(LBM)、油藏模拟方法的多尺度耦合也是一个重要发展方向。

3) 基于分子采油内涵,从分子层面优化设计压裂液、调堵剂以及相关的管柱材料,是实现技术先进、成本低廉油气田开发的重要保障。

4 结论

1) 分子模拟方法(主要包括量子化学、分子动力学、蒙特卡洛模拟和粗粒化分子动力学方法)正在日益成为主要的科学研究手段,对材料制造以及炼油等领域带来了革命性技术进步。毫不例外,以分子模拟为主的分子采油技术也将会成为油气开采领域的重要方法,应当引起高度重视。

2) 油气开采对象日趋复杂,需要革命性的开发机理、方法和技术突破,必须采用分子模拟与现代实验分析技术相结合的方法深入分子层面开展研究。分子采油时代即将到来,基于分子采油的理论、方法以及新型驱油材料即将涌现,将极大地丰富分子采油与油气田开发理论,促进开发技术水平的提高。

3) 不同尺度模拟方法相结合已经成为发展趋势。分子采油将为LBM、油藏数值模拟等宏观模拟方法提供基础,也为驱油剂、调堵剂等油田化学剂的组成与结构设计提供基础。

致谢:张军、李振、夏淑倩、韩优等参与了本文部分研究工作,在此一并表示感谢。

参 考 文 献

- [1] 刘公社,周庆源,宋松泉,等. 能源植物甜高粱种质资源和分子生物学研究进展[J]. 植物学报, 2009, 44(3): 253-261.
LIU Gongshe, ZHOU Qingyuan, SONG Songquan, et al. Research advances into germplasm resources and molecular biology of the

- energy plant sweet sorghum [J]. Chinese Bulletin of Botany, 2009, 44(3): 253-261.
- [2] FRIEDBERG E C. The intersection between the birth of molecular biology and the discovery of DNA repair[J]. DNA Repair, 2002, 1(10): 855-867.
- [3] 王刚, 孙静, 方东, 等. 分子炼油为导向的催化裂化加工重质油策略[J]. 中国科学: 化学, 2018, 48(4): 362-368.
WANG Gang, SUN Jing, FANG Dong, et al. Molecular-refining oriented strategy of catalytic cracking for processing heavy oil [J]. Scientia Sinica Chimica, 2018, 48(4): 362-368.
- [4] AYE M M S, ZHANG Nan. A novel methodology in transforming bulk properties of refining streams into molecular information [J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60(23): 6702-6717.
- [5] 牟思阳, 郭静, 齐善威, 等. 原子转移自由基聚合在分子结构设计中的应用进展[J]. 高分子通报, 2015, 28(11): 28-34.
MU Siyang, GUO Jing, QI Shanwei, et al. The research of ATRP macromolecular initiator and application process in the molecular structure design [J]. Polymer Bulletin, 2015, 28(11): 28-34.
- [6] 郭彦伸, 郭宗儒. 多靶点药物分子设计[J]. 药学报, 2009, 44(3): 276-281.
GUO Yanshen, GUO Zongru. Design of multiple targeted drugs [J]. Acta Pharmaceutica Sinica, 2009, 44(3): 276-281.
- [7] 巢华庆. 对21世纪大庆油田开发前沿技术发展的初步思考[J]. 石油勘探与开发, 2001, 28(1): 6-8.
CHAO Huaqing. Preliminary thinking on leading edge technology development of Daqing Oil Field in the 21st century [J]. Petroleum Exploration and Development, 2001, 28(1): 6-8.
- [8] 高斯萌, 夏坤, 康志红, 等. “拟双子”阴离子表面活性剂在癸烷/水界面的分子动力学模拟[J]. 化学学报, 2020, 78(2): 155-160.
GAO Simeng, XIA Kun, KANG Zhihong, et al. Molecular dynamics simulation of “quasi-gemini” anionic surfactant at the decane/water interface [J]. Acta Chimica Sinica, 2020, 78(2): 155-160.
- [9] 张恒, 苑世领. 分子动力学模拟在三次采油中的应用[J]. 中国科学: 化学, 2021, 51(6): 761-771.
ZHANG Heng, YUAN Shiling. Application of molecular dynamics simulation in enhanced oil recovery [J]. Scientia Sinica Chimica, 2021, 51(6): 761-771.
- [10] AHMADI M, HOU Qingfeng, WANG Yuanyuan, et al. Interfacial and molecular interactions between fractions of heavy oil and surfactants in porous media: Comprehensive review [J]. Advances in Colloid and Interface Science, 2020, 283: 102242.
- [11] 王亦农, 孙平川, 黎明, 等. 交联共聚聚丙烯酰胺-丙烯酸水凝胶溶胀态分子动力学的NMR弛豫研究[J]. 离子交换与吸附, 1998, 14(3): 191-196.
WANG Yinong, SUN Pingchuan, LI Ming, et al. NMR relaxation studies on the dynamics of P(AAM-NaAA) copolymer hydrogels [J]. Ion Exchange and Adsorption, 1998, 14(3): 191-196.
- [12] HU Songqing, ZHU Qianqian, WANG Pei, et al. Effect of HPAM hydrolysis degree on cationic mixtures of DTAB/HPAM: A coarse-grained molecular dynamic simulation [J]. Computational Materials Science, 2018, 153: 134-140.
- [13] OLDIGES C, TÖNSING T. Molecular dynamic simulation of structural, mobility effects between dilute aqueous CH_3CN solution and crosslinked PAA [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, 4(9): 1628-1636.
- [14] 薛萍. 分子动力学模拟研究 CO_2 -EOR 技术[D]. 济南: 山东大学, 2019.
XUE Ping. Molecular dynamics simulation of CO_2 -EOR technology [D]. Jinan: Shandong University, 2019.
- [15] XUE Ping, SHI Jing, CAO Xulong, et al. Molecular dynamics simulation of thickening mechanism of supercritical CO_2 thickener [J]. Chemical Physics Letters, 2018, 706: 658-664.
- [16] 李宾飞, 王凯, 赵洪涛, 等. 降黏剂作用下油水两相渗流特征[J]. 中国石油大学学报(自然科学版), 2022, 46(1): 104-110.
LI Binfei, WANG Kai, ZHAO Hongtao, et al. Flow characteristics of oil-water two-phase seepage under action of viscosity reducer [J]. Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science), 2022, 46(1): 104-110.
- [17] XU Yan, AYALA-OROZCO C, CHIANG P T, et al. Understanding the role of iron (III) tosylate on heavy oil viscosity reduction [J]. Fuel, 2020, 274: 117808.
- [18] 李洪毅. 稠油分散性降黏剂的降黏效果及其微观驱油机理[J]. 油田化学, 2021, 38(4): 708-713.
LI Hongyi. Viscosity reduction effect evaluation and micro-flooding mechanism of dispersive viscosity reducer for heavy oil [J]. Oilfield Chemistry, 2021, 38(4): 708-713.
- [19] LI Xiaoqi, FANG Jichao, JI Bingyu. Quantitative analysis of phase separation using the lattice Boltzmann method [J]. Frontiers in Earth Science, 2021, 9: 748450.
- [20] XU J P, WANG, N, XUE S, et al. Insights into the mechanism during viscosity reduction process of heavy oil through molecule simulation, Fuel, 310: 122270.
- [21] YANG Feng, NING Zhengfu, LIU Huiqing. Fractal characteristics of shales from a shale gas reservoir in the Sichuan Basin, China [J]. Fuel, 2014, 115: 378-384.
- [22] 郭旭升, 胡东风, 魏志红, 等. 涪陵页岩气田的发现与勘探认识[J]. 中国石油勘探, 2016, 21(3): 24-37.
GUO Xusheng, HU Dongfeng, WEI Zhihong, et al. Discovery and exploration of Fuling shale gas field [J]. China Petroleum Exploration, 2016, 21(3): 24-37.
- [23] 王鹏威, 陈筱, 刘忠宝, 等. 海相富有机质页岩储层压力预测方法——以涪陵页岩气田上奥陶统五峰组-下志留统龙马溪组页岩为例[J]. 石油与天然气地质, 2022, 43(2): 467-476.
WANG Pengwei, CHEN Xiao, LIU Zhongbao, et al. Reservoir pressure prediction for marine organic-rich shale: A case study of the Upper Ordovician Wufeng-Lower Silurian Longmaxi shale in Fuling shale gas field, NE Sichuan Basin [J]. Oil & Gas Geology, 2022, 43(2): 467-476.
- [24] 陆亚秋, 梁榜, 王超, 等. 四川盆地涪陵页岩气田江东区块下古生界深层页岩气勘探开发实践与启示[J]. 石油与天然气地质, 2021, 42(1): 241-250.
LU Yaqiu, LIANG Bang, WANG Chao, et al. Shale gas exploration and development in the Lower Paleozoic Jiangdong block of Fuling gas field, Sichuan Basin [J]. Oil & Gas Geology, 2021, 42(1): 241-250.
- [25] 车世琦. 涪陵气田平桥区块页岩气选区评价[J]. 石油地质与工程, 2022, 36(4): 48-54.
CHE Shiqi. Selection evaluation of shale gas in Pingqiao block of Fuling gas field [J]. Petroleum Geology & Engineering, 2022, 36(4): 48-54.