

引用格式:徐建平,袁远达,谢青,等.分子动力学在聚合物驱油中的应用研究进展[J].油气藏评价与开发,2021,11(3):414-421.

XU Jianping, YUAN Yuanda, XIE Qing, et al. Advance in application of molecular dynamics simulation in polymer flooding[J]. Petroleum Reservoir Evaluation and Development, 2021, 11(3):414-421.

DOI: 10.13809/j.cnki.cn32-1825/te.2021.03.017

分子动力学在聚合物驱油中的应用研究进展

徐建平^{1,2},袁远达^{1,2},谢青^{1,2},魏学刚^{1,2},冯震^{1,2}

(1.西安石油大学石油工程学院,陕西 西安,710065;2.西部低渗超低渗透油田开发与治理教育部工程研究中心,陕西 西安,710065)

摘要:传统上,实验室测试和测量被认为是最可靠的表征方法,然而在许多情况下,由于对储层性质范围的敏感性和非均质储层性质的局部变化认识不清,以及基于过于简化的假设条件,使得这种确定性策略获得的特征预测具有高度的不确定性。近年来,分子动力学(MD)模拟在储层岩石、流体性质及其相互作用和原子水平上的研究得到了广泛的关注。在MD中,通过对系统中所有原子运动的牛顿方程的数值解,从原子位置和速度的时间演化分析中提取出有趣的性质。这项技术有助于进行计算机实验,以及进行可能无法完成的、成本极高的或者非常危险的实验。综述了MD模拟技术及其在驱油机理和驱油剂性质研究中的应用,阐述了MD的理论概念和程序,特别是在聚合物驱分析中。这将提供有用的指导方针,以表征储层岩石和流体及其在各种油藏中的行为,有助于更好地优化设计生产计划的运行,为油田聚驱技术的发展提供了理论基础。

关键词:聚合物驱;驱油机理;驱油剂性质;提高采收率;分子动力学

中图分类号:TE319

文献标识码:A

Advance in application of molecular dynamics simulation in polymer flooding

XU Jianping^{1,2}, YUAN Yuanda^{1,2}, XIE Qing^{1,2}, WEI Xuegang^{1,2}, FENG Zhen^{1,2}

(1.College of Petroleum Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an, Shaanxi 710065, China; 2.MOE Engineering Research Center of Development & Management of Western Low & Ultra-Low Permeability Oilfield, Xi'an, Shaanxi 710065, China)

Abstract: Traditionally, laboratory testing and measurement are considered to be the most reliable characterization methods. However, in many cases, due to the unclear understanding of the sensitivity to the range of reservoir properties and local changes of heterogeneous reservoir properties, and based on the oversimplified assumptions, the feature prediction obtained by this deterministic strategy is highly uncertain. In recent years, molecular dynamics (MD) simulation has received extensive attention in the study of reservoir rock, fluid properties and their interactions, as well as at the atomic level. In MD simulation, interesting properties are extracted from the time evolution analysis of atomic position and velocity through the numerical solution of Newton's equations for all atomic motions in the system. This technology can help to carry out the computer experiments which can be used to do the experiments that may not be able to complete, with high cost or very dangerous. In this paper, we review the MD simulation technology and its application in the study of oil displacement mechanism and properties of oil displacement agent, and expounds the theoretical concept and program of MD, especially in the analysis of polymer flooding. It will provide useful guidelines to characterize reservoir rocks and fluids and their behaviors in various reservoirs, help to better optimize the operation of design and production plan, and provide a theoretical basis for the development of polymer flooding technology in oilfields.

Key words: polymer flooding, oil displacement mechanism, properties of oil displacement agent, Enhanced oil recovery, molecular dynamics

收稿日期:2020-11-12。

第一作者简介:徐建平(1963—),男,教授,从事油气田开发工程及测试技术研究。地址:陕西省西安市雁塔区电子二路东段18号,邮政编码:710065。E-mail: 13602105768@163.com

通信作者简介:袁远达(1996—),男,在读硕士研究生,主要从事提高采收率技术及油气渗流机理研究。地址:陕西省西安市雁塔区电子二路东段18号,邮政编码:710065。E-mail: 792343379@qq.com

基金项目:国家自然科学基金面上项目“基于分子动力学方法的聚合物驱油微观流动规律研究”(51874241)。

随着油田的开采,尤其是高含水开采阶段,经济、技术指标都将变差,聚合物驱已是公认的能够提高原油采收率的油田开发技术。常见的驱油聚合物有表面活性剂、疏水缔合水溶性聚合物、三元复合驱体系等。表面活性剂驱作为一种重要的化学驱油技术,在低渗油藏得到越来越多的研究和应用^[1]。疏水缔合水溶性聚合物在水溶液中能够自发聚集,产生物理交联,形成致密的网络聚集体,以达到驱油的效果^[2]。三元复合驱体系(ASP)是在碱水驱、表面活性剂驱和聚合物驱基础上发展起来的一种新型驱油体系,该复合体系黏度较高,波及范围较大,且油水界面张力明显降低,驱油效果显著^[3]。然而无论室内实验还是现场试验,对地下储层中的驱油流动机理都难以明确。

使用计算机分子动力学模拟技术能够从微观尺度上揭示某种驱油的渗流机理,丰富特定的驱油流动理论体系,然而国内外学者对于分子在聚合物驱油中的研究相对较少。国外学者主要是通过分子动力学方法研究轻烃扩散和聚合物黏弹性,对聚合物大分子驱油的流动规律鲜有研究。国内学者则主要集中在孔隙层面上进行无机小分子在孔隙中的扩散性质。这些研究未涉及聚合物链状大分子驱替油分子过程的微观作用机理,以及不同链状结构对聚合物驱替过程渗流机理和分子间相互作用的影响规律,而这些机理和影响规律恰恰是宏观聚合物驱的重要数据。国内外对原子层面上的驱油剂分析与设计很少有研究。

分子动力学模拟方法的基本原理是对符合经典牛顿力学规律的大量粒子系统,通过粒子动力学方程组的数值求解,确定各粒子在相空间的运动规律和轨迹,然后按照统计物理原理得出该系统相应的宏观物理特性^[4]。根据模拟研究对象的不同,从统计物理的角度可以将它分为平衡态分子动力学模拟(EMD)和非平衡态分子动力学模拟(NEMD)^[4],最早的分子动力学模拟由ALDER和WAINWRIGHT完成^[5]。随着非平衡方法在计算传递系数中的引入,随机动力学的发展及其与量子力学效应的结合,计算机模拟有了快速发展,蒙特卡洛方法^[6]和分子动力学方法(MD)等微观分子动力学模型,以及介于微观分子动力学和以N-S方程为代表的宏观力学模型之间的多尺度模拟方法也逐步达到发展^[7],但由于计算速度和存储空间限制,直接求解巨大数目的分子运

动问题是非常困难的^[8-10]。总的来说,通过MD模拟设计分子结构,得到不同性能的聚合物驱油剂,这对于提高聚合物驱油技术采油效率具有重要意义^[11]。

1 分子动力学

1.1 概述与应用

传统上,理论只能期望对特定的情况产生有效的结果,要充分简化到数学模型的方程可以被求解的水平。而实验对某些情况下物质内部发生的物理、化学反应无法充分探究,因为在极短的时间步长或极小尺度上很难观察某些性质或跟踪它们的变化,还可能存在着费用高、高危、高风险等因素。因此,这意味着实际结果与理论模型和实验条件下所得到的结论之间存在着较大的差距。高速计算机的出现及其在科学上的应用使计算机实验成为填补理论和实验之间空白的新元素,计算机实验可以更有效地模拟和促进实验室测试,甚至是现实中的例子^[12]。

MD涉及微观层面系统的详细模拟,是最早应用于1950年代液体动力学等领域的仿真方法之一^[13-14]。从那时起,计算机技术的革命性进步和改进使得MD作为一种有用的模拟方法,在其他科学分支中获得了越来越多的关注和适用性,特别是在大分子的研究中^[15]。事实上,MD提供了一种方法,通过结合物理、化学、数学和计算机科学等不同学科的概念,对系统的行为及其特性进行定量预测^[14]。

1.2 分子动力学计算要点

在MD技术中,明确考虑了小尺度系统的所有分子,并模拟了它们详细的相互作用。然后使用适当的统计平均值研究系统在宏观特性方面的行为^[13]。进行分子尺度计算的主要方法有量子力学、经典分子力学和量子与经典分子力学的结合。在计算中,通常使用两者方法的结合,可模拟10~100 ps的时间尺度和 $10^4 \sim 10^5$ 分子的系统^[16-17]。

1.2.1 原子间的相互作用和作用力

原子间相互作用势包括非键势和键势,系统势能函数就由这两部分组成。非键势指的是原子之间没有直接键合,它们可以是来自不同分子的原子,也可以是来自相同分子的原子。非键势由兰纳-琼斯势(Lennard-Jones)和库仑静电势相加而得。键势反

映的是相邻原子直接成键相互作用所产生的电势,分子的共价结构包括具有特定长度、弯曲角和扭转角的键,这三个组成部分构成了键合势能(图1)。原子间的相互作用势公式和作用力的求得,详细见文献[18-20]。

1.2.2 周期性边界条件

如果仅将分子或原子簇作为有限系统进行模拟,则通常可以将这些粒子视为在一个虚拟的立方体模拟盒中。在这种情况下,系统的边界则是代表系统所在容器的壁表面。在宏观系统的MD模拟中解决这个所谓的盒子边长问题,为维持系统的密度恒定,通常采用周期性边界条件^[19]。周期边界条件的应用是基于这样的假设,即系统的所有粒子最初都被限制在一个模拟盒子中,而这个模拟系统周围是充满整个空间的无限个与其具有相同的排列及运动的周期性镜像系统^[19]。模拟盒的表面是开放的,当一个粒子从一侧离开系统时,该粒子的镜像通过另一侧的表面进入模拟盒。在此限制条件下,使得系统的粒子数和密度维持不变。因此,通过将纳米系统复制到无穷大,壁面对粒子的影响减小了。图2

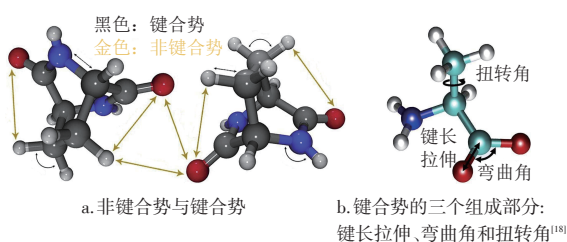


图1 原子间相互作用势^[18]

Fig. 1 Interatomic interaction potential^[18]

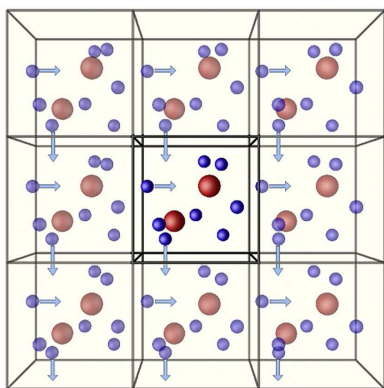


图2 周期性边界条件下的主模拟框及其镜像系统^[18,20]

Fig. 2 Main simulation box and its imaginary replicas in periodic boundary conditions^[18,20]

所示为仿真系统的一部分,其中心为主模拟框,周围环绕着虚拟的周期镜像。

1.2.3 数值积分算法

在MD模拟中使用的最广泛的时间积分算法之一是Verlet算法^[21],其基本公式是通过结合三阶泰勒展开式得到的。Verlet算法准确,稳定且易于在当前计算机的MD仿真中使用^[16-17]。此外,由于在整个计算过程中仅需要记录每个粒子的两个最新位置,因此Verlet算法的计算机内存需求并不庞大。对Verlet算法进行改进,可得到跳蛙(leap-frog)算法^[22],其中粒子的位置和速度是在交错时间点计算的,其优点在于可以直接计算速度,计算位置、速度的误差比Verlet算法小,缺点在于计算得到的速度与位置不在同一时刻,相差 $\Delta t/2$,犹如蛙跳,这样就不能同时求得势能和动能,即不能直接求得总能量。Verlet算法的另一种变种方法—速度Verlet算法,可以求得同一时刻每个核的位置和速度,能获得更准确的速度,而且速度Verlet算法稳定且内存需求低,但它的缺点在于计算复杂性高于Verlet算法和跳蛙法^[22]。当MD模拟中需要大的时间步长时,提出了更复杂的预测—校正方法来计算粒子速度。该方法先是计算前一步粒子的速度、位置以及使用下一时间步计算出的力进行后续校正。以上方法的选择取决于模拟系统。以上提及的算法,详细公式请查阅文献^[16-19,22]。

1.2.4 统计系统

基于统计力学,系统的物理特性是系统微观状态的平均值,其分布与统计系统一致^[15]。统计系统指的是一个理想化的系统,它由其众多可能的状态组成,这些状态与一组约束条件兼容,如施加的温度或压力^[13]。统计系统实际上是所有可能的系统状态的概率分布^[23]。主要的统计系统有微正则系统(NVE)、正则系统(NVT)、巨正则系统(μVT)、等温等压系统(NPT)和吉布斯系统(Gibbs ensemble),不同统计系统的系统状态及在MD模拟中的作用见表1。

1.2.5 模型建立

对以上MD计算要点进行充分考虑和选择之后,就要选择适合且可以实现研究者感兴趣的现象及性质的软件,依托软件进行分子模型建立。较常用的可用于大规模并行计算的分子动力学模拟软件包括

表1 不同统计系统的系统状态及在MD模拟中的作用
Table 1 System states of different statistical systems and their roles in MD simulation

统计系统	系统状态	在MD模拟中的作用
微正则系统(NVE)	孤立	研究输运特性
正则系统(NVT)	能量不确定	评估相性质
巨正则系统(μ VT)	热力学平衡	研究汽液平衡、 吸附等温线和选择性
等温等压系统(NPT)	温压系统守恒	确定相性质
吉布斯系统 (Gibbs ensemble)	液相平衡	研究近临界行为、 吸附等温线和选择性

AMBER, NAMD, GROMACS, DL_POLY, LAMMPS, Materials Studio等。NAMD适用于大分子体系,其尺度可横跨微观至介观,并行处理较好,可以支持几千个CPU同时运算。GROMACS与同类软件相比进行了大量的算法优化使其计算功能更强大。做界面体系,DL_POLY比较强大。AMBER具有很好的内置模型,可方便自定义新分子势能模型。Materials Studio是主要用于材料设计的多功能分子模拟软件,分子动力学模拟例如Forcite和Discover模块。Materials Studio具有友好的图形界面可方便建模和分子模拟操作。LAMMPS软件是一款通用的大规模分子动力学并行计算软件,该软件适用于材料科学领域,支持多种力场和边界条件来模拟全原子、聚合物、金属、粒状和粗粒化体系。LAMMPS软件为开源软件,以C++编写,支持用户自行修改和扩展,应用十分广泛。

1.2.6 性质计算

利用统计力学,MD模拟中以相空间内点表示的微观变量可以转化为压力、温度、摩尔数、能量等宏观观测参数^[24]。一旦产生足够多的系统构型,通过MD模拟可以确定的性质是通过系统轨迹上物理性质的瞬时值的时间平均获得的^[13-17,25]。粒子的物理性质和可观测量一般表示为粒子坐标和速度的函数。从MD模拟中可以得到的一些性质包括体积、势能、动能、温度、压力、扩散系数、黏度、弹性模量和径向分布函数。这些性质的一部分,如势能,是直接由粒子轨迹计算出来的。利用适当的公式可以计算其他热力学性质。例如,由平均动能可以计算出系统的温度。在实际操作中,可以在MD模拟的每个时间步长确定性质的瞬时值,然后将其在每个时间步长的值相加,再用总和除以总时间步长,得到性质的平均值。

1.2.7 运行MD模拟

在MD模拟中,通过分析原子轨迹来研究感兴趣的现象和性质^[17]。图3给出了MD模拟的一般工作流程。该流程演示了MD仿真的主要阶段,包括初始化、平衡相和生产相。

2 聚合物驱油剂中的MD应用

目前,国内外学者对化学驱油微观分子构型的研究多限于聚合物和聚合物凝胶分子聚集态结构方面,并取得了大量研究成果,但主要集中在分子结构的特征和不同离子对凝胶分子构型的影响上,并未将这些分子结构研究与聚合物驱替所相关的流动参数联系起来做科学研究。

2.1 聚合物驱油剂MD模拟

分子动力学模拟是研究聚合物溶液构象和黏度特性的有效工具,可以为合成具有理想溶液性质的聚丙烯酰胺衍生物提供有用的信息。CHEN等^[26]通过MD研究了不同NaCl质量分数下部分水解聚丙烯酰胺(HAPM)和聚丙烯酰胺(PAM)在水溶液中的结构和特性黏度,模拟结果表明,随着NaCl质量分数的

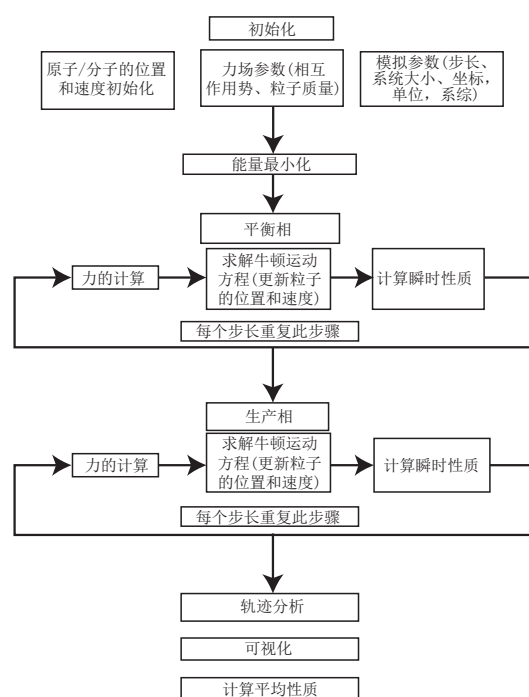


图3 MD模拟的一般工作流程^[18]
Fig. 3 General workflow of MD simulation^[18]

增加,HPAM溶液的流体力学半径、回转半径(R_g)和特性黏度($[\eta]$)均减小,而PAM溶液的这些参数变化不大。刘艳艳等^[27]从微观结构模拟说明了HPAM水溶液黏度随NaCl质量分数增加而减小,且HPAM比PAM-H(非离子型的聚丙烯酰胺)具有较好的增粘效果及较差的抗盐性能。YUAN等^[28]通过MD研究认为多价阳离子与阴离子型改性PAM(HMHPAM)之间的配位相互作用和库仑相互作用对聚合物在溶液中的性质有着极其重要的影响。YAO等^[29]通过向聚合物中引入空间位阻单体,设计出了一种较强耐盐性的HMHPAM驱油剂,且其耐盐性由HM-HPAM1逐渐增强到HM-HPAM3。NI等^[30]用MD和分子力学方法建立交联聚丙烯酰胺网络的原子模型,得到交联聚丙烯酰胺的密度和活性交联位点的数量。

胡晓莹^[31]通过分析表面活性剂及聚合物作用机制,特别是盐度对分子行为的影响,建立表面活性剂及聚合物分子结构—分子行为—体系表现性能的本质联系,并指导高温高盐油藏提高采收率用表面活性剂和聚合物分子的设计以及应用。王华^[32]从分子层次上探讨了表面活性剂与聚合物之间的相互作用与自组装结构,应用MD方法研究了阴离子表面活性剂十二烷基硫酸钠和十二烷基三甲基溴化铵复配体系在水溶液中的自组装。黄茜^[33]研究了聚丙烯酸、表面活性剂硬脂酸钠和两性表面活性剂十二烷基氨基二乙酸钠的环境响应行为,此研究工作的目的是建立表面活性剂及聚合物分子结构—环境因素—表现性能的内在联系。WANG等^[34]将MD用于指导表面活性剂和聚合物刷配合物的设计。

2.2 聚合物驱油剂与油藏环境条件相互作用MD模拟

LI等^[35]通过MD研究了水化蒙脱土对聚丙烯酰胺黏度随温度和剪切速率变化的影响,实验结果表明,PAM的回转半径在较高剪切速率范围内随温度升高或剪切速率增大而减小。分析认为PAM和黏土层之间较弱的H键会导致PAM聚合物链容易卷曲,从而导致PAM旋转半径的值降低,实验也证实了模拟结果中黏度的变化趋势。EL-HOSHOUDY等^[36]利用MD对改性后的棕榈酸酯-瓜尔胶进行分子建模,然后模拟其在油层上的吸附,计算洗油性能,最后结合砂岩岩心驱替实验,数据表明改性后的瓜尔胶通过降低油水界面张力,使岩石的润湿性变得更亲水,从而提高采收率。此研究为计算化学和分子动力学

模拟在提高采收率领域的应用奠定了新的基础。EL-HOSHOUDY等^[37]通过分子动力学和数值模拟计算合成复合材料的力学性能(图4)。

结果表明,硅烷偶联剂的加入显著提高了SiO₂-聚丙烯酸酯共聚物材料的力学性能,包括体积模量、弹性模量、杨氏模量、剪切模量和泊松比。在模拟油藏条件下,进行驱替实验(先注盐水),分别注入SiO₂-聚丙烯酸酯共聚物和天然聚丙烯酸酯共聚物,前者获得采收率为82.9%,而后者为74.9%(图5)。这是一个典型的分子建模、理论模型和实验三者结合的研究案例,表明分子动力学模拟的重要辅助作用。

3 聚合物驱油过程MD模拟

目前,国内外在研究聚合物驱油机理方面取得

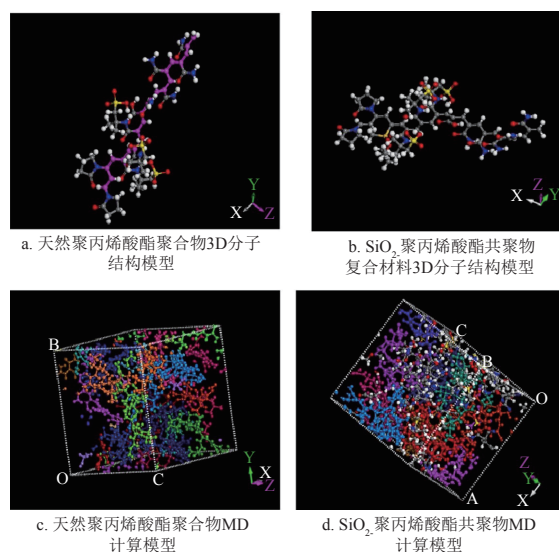


图4 聚合物分子模型与计算模型^[37]

Fig. 4 Polymer molecular model and computational model^[37]

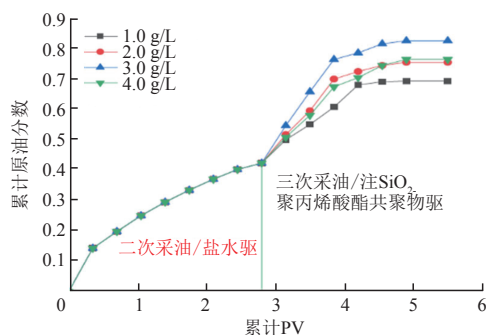


图5 SiO₂-聚丙烯酸酯共聚物复合材料的二、三次原油采收率^[37]

Fig. 5 Secondary and tertiary oil recovery by silica-co-polyacrylates composite^[37]

了很多成果,但缺乏聚合物驱油原子级层面的认识,对复杂的纳米级环境中的碳氢化合物的驱油过程仍不清楚,需要进一步阐明聚合物驱中的黏弹性机制。因此,了解纳米孔中黏弹性聚合物提高采收率的分子机理,对油田开发具有重要意义^[38]。

宋考平等^[39]根据分子动力学基本原理,描述了聚合物驱过程中驱油的分子作用力,证明在相近条件下聚合物驱较水驱既能扩大波及体积,又能提高驱油效率。FAN等^[38]从理论上探讨了黏弹性聚合物提高采收率的分子机制。通过MD模拟,研究了纳米孔内截留油滴从死角位移的动态过程(图6)。研究表明,聚合物驱在采收率中表现优异的关键因素在于聚合物分子独特的弹性特性。与单纯水驱相比,聚合物驱提高微观驱油效果的主要原因是驱油的拉动机理。还发现,聚合物链长越长,小的注入PV数就可以驱替更多的残余油,微观采油效率越高。对聚

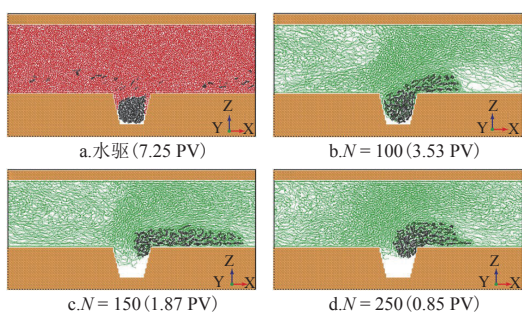
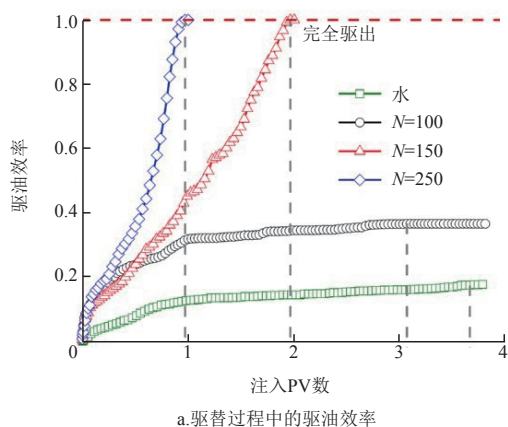


图6 水和不同链长聚合物的驱替行为^[38](黄色部分,孔隙壁;灰色部分,困在死角的油滴;红色,水;绿色,聚合物)

Fig. 6 Displacing behavior of trapped oil by water and polymers with varying chain lengths^[38]

(yellow part: wall of the pore; grey part: oil droplet trapped in the dead end; red: water; green: polymer)



a. 驱替过程中的驱油效率

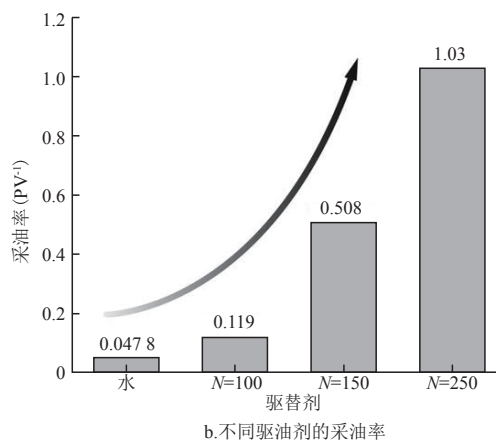
合物的黏弹性分析表明,聚合物链长越长,聚合物的储存模量越大,聚合物的弛豫时间越长,聚合物的弹性效应越强(图7,驱油效率定义为死角中烷烃与孔道中烷烃质量比值;采收率定义为最终采收效率与达到最终采收效率所需的注入PV数之比)。这种弹性的增强使聚合物在孔隙中拉伸更多,对死角中的油滴施加更强的拉力,有利于提高驱油效率。国内王海波^[40]研制了一种兼具调驱作用的活性高分子,利用MD结合其他分子模拟方法,探讨了活性高分子与原油的相互作用机理。研究数据表明,活性高分子可置换岩石表面原油,使其变为可动油,室内研究也证明了这一点。

4 结论及展望

1) MD模拟可以通过观察原子和分子尺度上复杂的流动现象,提供可靠的性质预测,并加深对提高采收率机制的理解,从而增强储层分析。而且可对驱油剂进行优选和设计,使其符合某一特殊油藏的地质环境。

2) MD技术的应用将理论、实验和模拟两两之间架起了互通桥梁,相互佐证。在微观与宏观之间建起了联系,有助于分析微观性质解释宏观现象、预测和开发新产品。

3) MD模拟技术在研究和分析储层流体性质和流动相关现象方面显示出了巨大的潜力,特别是在纳米封闭流体的情况下。然而,MD模拟技术在储层分析方面还处于发展阶段,使用MD模拟仍需要很多探索,使该技术将更适用于更长的时间尺度和更大



b. 不同驱油剂的采收率

图7 水和聚合物驱油的采收率^[38]

Fig. 7 Oil recovery efficiency of water and polymer agents^[38]

的系统。

4) 为了使MD技术成为石油工业中常用的工具,还需要进一步的研究来改进。其中包括设计普遍可接受的程序和模型代表复杂的储层流体和非均匀多孔介质,开发流体和岩石性质预测工具箱,研究储集岩中的胶结地层和生产路径,并进一步提高聚合物驱油的潜在机制和结果预测的理解,特别是对于不成熟的聚合物复合驱油方法,如二元聚-表-聚-碱驱,三元聚-表-碱驱。

参考文献

- [1] 董杰,岳湘安,孔彬,等.表面活性剂乳化能力差异对低渗油藏提高采收率的影响[J].石油与天然气化工,2018,47(2): 80-84.
DONG Jie, YUE Xiang'an, KONG Bin, et al. Effect of surfactant emulsifying ability difference on EOR of low permeability reservoir[J]. Petroleum and natural gas chemical industry, 2018, 47(2): 80-84
- [2] 徐辉,曹绪龙,石静,等.新型物理交联凝胶体系性能特点及调驱能力研究[J].石油与天然气化工,2018,47(1): 69-73.
XU Hui, CAO Xulong, SHI Jing, et al. Performance characteristics and profile control and driving ability of a new physical crosslinked gel system[J]. petroleum and natural gas chemical industry, 2018,47(1): 69-73.
- [3] 张大伟,陈忠喜,任璐,等.三元复合驱采出水水质及稳定性机理研究[J].石油与天然气化工,2020,49(1): 104-111.
ZHANG Dawei, CHEN Zhongxi, REN Lu, et al. Study on properties and stability mechanism of ASP flooding produced water[J]. Petroleum and natural gas chemical industry, 2020, 49 (1): 104-111.
- [4] 赵慧霞.超临界状态的分子动力学模拟研究[D].太原:中北大学,2013.
ZHAO Huixia. Molecular dynamics simulation of supercritical state[D]. Taiyuan: North University of China, 2013.
- [5] ALDER B J, WAINWRIGHT T E. Studies in molecular dynamics. I. General method[J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 31(2): 459-466.
- [6] SHEN Qiuyang, LU Han, WU Xuqing, et al. Statistical geosteering inversion by Hamiltonian dynamics Monte Carlo method[C]// paper presented at the SEG Technical Program Expanded Abstracts, 2017.
- [7] ZAPATA Y, PHAN T N, REZA Z A. Multi-physics pore-scale modeling of particle plugging due to fluid invasion during hydraulic fracturing[C]// Unconventional Resources Technology Conference paper presented at the SPE/AAPG/SEG Unconventional Resources Technology Conference, 2018.
- [8] ALLEN M R, TILDESLEY D J. Computer simulation of liquids [M]. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [9] 薛定谔.多孔介质中的渗流物理[M].王鸿勋,张朝琛,孙书琛译.北京:石油工业出版社,1982.
SCHRÖDINGER A E. The physics of flow through porous media [M]. translated by WANG H X, ZHANG C C, SUN S C. Beijing: Petroleum industry press, 1982.
- [10] 葛春醒.纳米孔隙气相导热系数的分子动力学模拟[D].哈尔滨:哈尔滨工业大学,2010.
GE Chunxing. Investigation of gas thermal conductivity in nanopore by molecular dynamics[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2010.
- [11] SINGH A, JINDAL R, SAXENA A. Simulation and determination of optimal variables for increased oil recovery potential of surfactant polymer flooding[J]. Offshore Technology Conference, 2020.
- [12] 于帅,孙芸芸.基于分子模拟的降凝剂分子设计与性能研究[J].石油与天然气化工,2018,47(3): 54-58.
YU Shuai, SUN Yunyun. Study on molecular design and performance of pour depressant based on molecular simulation [J]. Chemical Engineering of Oil & Gas, 2018, 47(3): 54-58.
- [13] UNGERER P, LACHET V, TAVITIAN B. Applications of molecular simulation in oil and gas production and processing [J]. Oil & Gas Science and Technology, 2006, 61(3).
- [14] EBRO H, KIM Y M, KIM J H. Molecular dynamics simulations in membrane-based water treatment processes: A systematic overview[J]. Journal of Membrane Science, 2013, 438.
- [15] ALLEN M P. Introduction to Molecular dynamics simulation [M]. German: NIC Series, Julich, 2004.
- [16] RAPAPORT D C. The art of molecular dynamics simulation[M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1995.
- [17] HAILE J M. Molecular dynamics simulation: elementary methods[M]. New York: John Wiley and Sons, 1992.
- [18] SEYYEDATTAR M, ZENDEHBOUDI S, BUTT S. Molecular dynamics simulations in reservoir analysis of offshore petroleum reserves: A systematic review of theory and applications[J]. Earth-Science Reviews, 2019, 192.
- [19] 陈正隆,徐为人,汤立达.分子模拟的理论与实践[M].北京:化学工业出版社,2007.
CHEN Zhenglong, XU Weiren, TANG Lida. Theory and practice of molecular modeling[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [20] LE ROUX S, PETKOV V, LE S. Interactive structure analysis of amorphous and crystalline systems[J]. Journal of Applied Crystallography, 2010, 43(43):181-185.
- [21] VERLET L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules[J]. Physical Review, 1967, 159(1): 98-103.
- [22] 陈敏伯.计算化学-从理论化学到分子模拟[M].北京:科学出版社,2009.
CHEN Minbo. Computational chemistry: from theoretical chemistry to molecular simulation[M]. Beijing: Science Press, 2009.
- [23] GIBBS J W. Elementary principles in statistical mechanics[M]. New York: Charles Scribner's Sons, 1902.
- [24] EBRAHIMI D. Multiscale modeling of clay-water systems[M]. Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 2014.
- [25] UNGERER P, NIETO-DRAGHI C, ROUSSEAU B, et al. Molecular simulation of the thermophysical properties of fluids: From understanding toward quantitative predictions[J]. Journal

- of Molecular Liquids, 2007, 134(1-3): 71-89.
- [26] CHEN P K, YAO L, LIU Y Y, et al. Experimental and theoretical study of dilute polyacrylamide solutions: effect of salt concentration[J]. Journal of Molecular Modeling, 2012, 18(7).
- [27] 刘艳艳,陈攀科,罗健辉.聚丙烯酰胺稀溶液的分子模拟[J].物理化学学报,2010,26(11):2907-2914.
LIU Yanyan, CHEN Panke, LUO Jianhui. Molecular Simulation of dilute polyacrylamide solutions[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2010, 26(11):2907-2914.
- [28] YUAN R, LI Y, LI C X, et al. Study about how the metal cationic ions affect the properties of partially hydrolyzed hydrophobically modified polyacrylamide (HMHPAM) in aqueous solution[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2013, 434.
- [29] YAO L, CHEN P K, DING B, et al. Molecular design of modified polyacrylamide for the salt tolerance[J]. Journal of Molecular Modeling, 2012, 18(9).
- [30] NIT, HUANG G S, ZHENG J, et al. Research on the crosslinking mechanism of polyacrylamide/resol using molecular simulation and X-ray photoelectron spectroscopy[J]. Polymer Journal, 2010, 42(5).
- [31] 胡晓莹.抗盐表面活性剂和聚合物的分子行为及性能研究[D].济南:山东大学,2011.
HU Xiaoying. Molecular behavior and properties study on salt tolerance surfactant and polymer[D]. Jinan: Shandong University, 2011.
- [32] 王华.含表面活性剂复配体系自组装机理的理论研究[D].济南:山东大学,2014.
WANG Hua. Theoretical studies on the self-assemble of mixed system containing surfactant[D]. Jinan: Shandong University, 2014.
- [33] 黄茜.表面活性剂及聚合物体系的环境响应行为及机理研究[D].济南:山东大学,2009.
HUANG Q. Environmental-responsive behavior and mechanism of surfactant and polymer systems[D]. Jinan: Shandong University, 2009.
- [34] WANG H, ZHANG H, YUAN S L, et al. Molecular dynamics study of the adsorption of anionic surfactant in a nonionic polymer brush[J]. Journal of Molecular Modeling, 2014, 20(6).
- [35] LI W Z, WANG J H, XU D J. Molecular simulations of the effect of hydrated montmorillonite on the viscosity of polyacrylamide under confined shear[J]. Journal of Wuhan University of Technology (Materials Science Edition), 2015, 30(3): 556-561.
- [36] EL-HOSHOUDY A N, ZAKI E G, ELSAEED S M. Experimental and Monte Carlo simulation of palmitate-guar gum derivative as a novel flooding agent in the underground reservoir[J]. Journal of Molecular Liquids, 2020, 302.
- [37] EL-HOSHOUDY A N, MANSOUR E M, DESOUKY S M. Experimental, computational and simulation oversight of silica-co-polyacrylates composite prepared by surfactant-stabilized emulsion for polymer flooding in unconsolidated sandstone reservoirs[J]. Journal of Molecular Liquids, 2020, 308.
- [38] FAN J C, WANG F C, CHEN J, et al. Molecular mechanism of viscoelastic polymer enhanced oil recovery in nanopores[J]. Royal Society Open Science, 2018, 5(6): 180076.
- [39] 宋考平,杨二龙,王锦梅.聚合物驱提高驱油效率机理及驱油效果分析[J].石油学报,2004(3): 71-74.
SONG Kaoping, YANG Erlong, WANG Jinmei. Mechanism of enhancing oil displacement efficiency by polymer flooding and driving effectiveness analysis[J]. Acta Petrolei Sinica, 2004(3): 71-74.
- [40] 王海波.活性高分子与原油相互作用机理探讨[J].油气地质与采收率,2008(5): 66-68.
WANG Haibo. Discussion on interaction mechanism of activated high molecular polymer and crude oil[J]. Petroleum Geology and Recovery Efficiency, 2008(5): 66-68.

(编辑 徐佩)