

分子动力学模拟在页岩油开采中的研究现状

龚欣浩*, 任雨婷

重庆科技大学石油与天然气工程学院, 重庆

收稿日期: 2026年8月24日; 录用日期: 2026年9月14日; 发布日期: 2026年9月20日

摘要

页岩油作为重要的非常规能源, 其高效开发对缓解能源压力至关重要。然而, 页岩储层纳米孔隙结构复杂、流体多相多组分共存等特性, 导致传统宏观理论难以揭示其流动规律, 分子动力学模拟成为研究纳米尺度运移机制的关键手段。当前研究已在页岩油纳米孔隙结构建模、吸附行为及CO₂驱替过程模拟等方面取得进展, 发现孔隙尺寸、矿物类型及流体组分对页岩油赋存状态和流动特性有显著影响。但仍存在复杂矿物表面相互作用表征精度不足、纳米孔隙边界条件适配性差、多组分流体相行为微观机制认识不清等问题。未来需聚焦专用力场开发、动态边界条件优化、多组分输运机制解析及多尺度耦合平台构建, 通过实验数据与模拟方法协同, 提升分子动力学模拟对页岩油开采中微观机理的阐释能力, 为储层改造和提高采收率技术提供理论支撑。

关键词

分子动力学模拟, 页岩油, 微观机理, 提高采收率

Current Status of Molecular Dynamics Simulation in Shale Oil Extraction

Xinhao Gong*, Yuting Ren

School of Petroleum and Natural Gas Engineering, Chongqing University of Science and Technology, Chongqing

Received: August 24, 2026; accepted: September 14, 2026; published: September 20, 2026

Abstract

As an important unconventional energy source, the efficient development of shale oil is crucial for alleviating energy pressure. However, the complex nanoporous structure and multiphase, multi-component fluid coexistence of shale reservoirs make it difficult for traditional macroscopic

*第一作者。

theories to reveal their flow laws. Molecular dynamics simulation has become a key means to study nanoscale transport mechanisms. Current research has made progress in shale oil nanoporous structure modeling, adsorption behavior, and CO₂ displacement process simulation, finding that pore size, mineral type, and fluid composition have a significant impact on the occurrence state and flow characteristics of shale oil. However, problems still exist, such as insufficient accuracy in characterizing complex mineral surface interactions, poor adaptability of nanoporous boundary conditions, and unclear understanding of the microscopic mechanisms of multi-component fluid phase behavior. Future research should focus on developing dedicated force fields, optimizing dynamic boundary conditions, analyzing multi-component transport mechanisms, and constructing multi-scale coupling platforms. By combining experimental data with simulation methods, we can enhance the ability of molecular dynamics simulations to elucidate the microscopic mechanisms of shale oil extraction, providing theoretical support for reservoir stimulation and enhanced oil recovery technologies.

Keywords

Molecular Dynamics Simulation, Shale Oil, Microscopic Mechanisms, Enhanced Oil Recovery

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

页岩油的赋存基质为页岩, 其主要组分包括黏土矿物、干酪根及其他伴生矿物; 页岩油是赋存于有机质富集的页岩纳米级孔隙内的成熟原油[1]。页岩油是极具开发潜力的非常规油气资源, 已成为油气领域重点研究对象。受页岩储层低孔、低渗特征制约, 页岩油高效开发面临诸多技术挑战[2]。

随着我国对外石油依存度逐年升高, 页岩油作为一种非常规资源, 将在未来缓解国内石油供应紧张和确保我国能源安全方面发挥关键作用。而我国的页岩油开采研究还只是早期阶段, 开采页岩油的理论还没有深入和完善。目前, 我国页岩油高效开发的主要难题之一就是对页岩油流动规律的理解不够深入[3]。传统的流体机理、研究方法以及手段在页岩储层中, 导致了大规模的微观孔洞的破裂[4]。

因此, 采用有效手段探究页岩油在纳米孔隙内的流动机理具有重要意义[5]。由于传统的连续介质力学理论等宏观力学理论已经无法解释这种特殊储层条件下的物质运动规律, 这就需要引入一些新的力学理论和模拟方法, 如分子动力学模拟等。该模拟方法由于合适的尺寸和高效的计算速度已经成为研究纳米空间受限流体运移特性的有效手段[6]。

2. 分子动力学模拟在页岩油开采中的研究现状

近几年在页岩油纳米尺度流动模拟中, 分子动力学模拟被大量使用。页岩油在纳米尺度孔隙中的赋存状态对其流动规律会产生重要影响。

2.1. 页岩油纳米尺度孔隙模拟

了解页岩油中复杂的有机化合物混合物与构成储层岩石-石油界面的矿物质之间的相互作用机制将有助于开采。张世明等[7]依托核磁共振冻融测控试验厘定东营凹陷页岩孔隙全尺寸分布, 构建研究区典型纳米级孔隙模型, 揭示页岩油在有机质纳米孔隙内的赋存状态与微观吸附特征, 定量表征页岩油游离油量, 对东营凹陷页岩油采收率提升具有重要指导意义。

李正等[8]利用分子动力学模拟方法, 建立一个考虑壁面粗糙度的干酪根纳米孔隙分子模型以及考虑壁面羟基化的石英纳米孔隙分子模型。在此模型中, 考虑了非极性和极性组成的多组分页岩油分子模型, 通过实验数据来验证模型的准确性。运用这个模型, 对纳米孔隙内的页岩油流动机理进行了深入的研究, 特别是关注了驱动力、孔隙尺寸以及温度对流动的影响。这为构建页岩油的流动规律提供了理论支持。

在富含黏土的页岩中, 王慧等[9]通过分子动力学模拟探究了富含黏土的页岩中页岩油的扩散行为。采用蒙脱石模型表征富黏土页岩, 选取辛烷作为页岩油代表组分。模拟结果表明, 层间距为 2.8 nm 条件下页岩油扩散系数处于较低水平; 随层间距增大, 扩散系数可提升数个数量级。这表明一旦页岩油从微观孔流入介观孔, 油密度会降低, 扩散系数会极大增加, 这对页岩油的开采非常有利。然而, 吸附在微观孔中的油分子仍然难以开采。此外, 通过探索油分子链长对扩散的影响, 发现短链油有利于开采。这些模拟结果对页岩油的研究提供了有用的参考和重要的基础[10]。

2.2. 页岩油流体吸附行为的研究模拟

Wang 等[11]利用分子动力学模拟研究了富含有机质的页岩体系纳米级碳质狭缝中的石油吸附行为。流体密度在整个孔隙中不均匀, 由孔隙表面至中心平面的振荡减弱, 表现出吸附层及体相流体的差异。采用分子动力学模拟构建石墨烯薄片和碳氢化合物的建模, 采用成功再现烷烃、聚合物、甚至生物大分子热力学和结构特征的全原子液体模拟优化势能力场。预测出了烷烃-页岩体系的平衡特征。在对碳质孔隙中的吸附油和游离油进行分子动力学模拟分析的基础上, 开发了可估算就地可采页岩油的公式。将模型在巴肯页岩中应用后展示了热工艺生产吸附油和提高页岩可采油量的潜力。

Tian 等[12]利用分子动力学模拟研究了储层条件下石油混合物模型在高岭石矿物在页岩中形成的纳米级粒内孔隙中的吸附特性。一系列温度(298, 323, 348 和 373 K)和压力(1, 50, 100 和 200 bar)代表油藏条件, 以便更好地了解石油成分、温度和压力对模型石油混合物吸附特性的影响。研究表明, 油分子在高岭石表面的吸附依赖于表面的种类和距离。更多的极性化合物吸附在铝高岭石基底表面, 而烷烃更倾向于吸附在硅酸盐表面。此外, 页岩油在硅酸盐表面的吸附率更高。吸附油的密度随温度升高而降低, 其压力作用不明显。

Zhang 等[13]利用分子动力学模拟对页岩油相态进行模拟研究, 构建分子模型, 考虑多种矿物类型、温度、压力、烷烃类型及含水量等因素, 对各因素对页岩油扩散系数的影响进行分析, 并对有关机理进行讨论。得出油在有机质中的吸附能力最强, 在无机材料中次之, 在蒙脱石中最弱; 由于石墨烯表面超光滑, 油在有机孔隙中的扩散比在石英和蒙脱石孔隙中快得多; 水在有机孔隙中以团簇形式存在, 对油扩散抑制作用更显著, 在无机孔隙表面形成薄膜的结论。Cao 等[14]通过分子动力学模拟, 在 358 K 和 30 MPa 条件下, 研究了 n-十九烷、甲苯、3-甲基菲和卞啉在黏土矿物(蒙脱石、高岭石和伊利石)的狭缝中的吸附特性, 研究吸附层厚度、吸附容量以及分子结构形态等因素对页岩油相态的影响。

2.3. 页岩纳米孔隙中 CO₂ 驱替原油过程的模拟

Wang 等[15]对注 CO₂ 和 N₂ 在白云岩狭缝中提高页岩油采收率的机理进行了分子动力学的研究; 通过分子模拟研究 CO₂ 与正癸烷在不同孔径下的置换机理; Back 等[16]模拟了 CO₂ 从石墨烯层纳米孔中置换出来烃类的过程, 发现 CO₂ 物质的量浓度达到 50% 阈值时会形成吸附层, 将烃类分子替换掉。但现阶段尚缺乏对 CO₂-原油竞争吸附过程影响规律的相关研究, 如原油组分、壁面润湿性、岩石成分等因素。

2.4. 讨论

现有页岩油纳米尺度流动的分子动力学研究在模型构建与力场选择上的显著差异, 直接造成研究结

论的适用边界分化, 领域内仍存在多处核心争议与不确定性。

模型构建差异是结论分化的主要诱因。孔隙介质建模分为两类: 单矿物规则狭缝模型变量控制清晰, 便于揭示单一界面机制, 但与页岩多矿物共生的地质特征存在差距, 所得扩散系数普遍偏高; 黏土矿物组合或有机质-无机耦合体系更贴近储层实际, 但多因素耦合作用强, 难以拆分单一变量贡献, 更易观测到矿物表面的选择性吸附分层。壁面处理同样影响结果: 理想光滑石墨烯模型忽略表面缺陷与含氧官能团, 系统性高估流体扩散能力; 引入粗糙度与羟基化修饰的石英模型更接近真实岩石界面, 计算得到的流动阻力与吸附强度均更高。流体组分差异决定认识深度: 单组分模型适于单因素敏感性分析, 但无法反映极性组分的选择性吸附行为; 多组分模型可揭示“极性组分表面富集、烷烃分布于孔中心”的分层结构; 是否引入地层水会带来系统性偏差, 含水体系的油相扩散系数显著低于不含水体系。

力场选择差异是研究结果难以横向对比的关键原因。OPLS-AA 等通用有机力场适配碳质孔隙体系, 但矿物界面参数简化, 吸附能计算整体偏低; CLAYFF 黏土专用力场可精准表征黏土晶体结构与水化作用, 但界面耦合参数缺乏统一标定, 不同研究吸附量计算差异可达 10%~30%; COMPASS 等多相力场可统一描述无机-有机相互作用, 但高温高压储层条件下的参数可靠性缺乏充分验证。

当前研究存在争议, 简化干酪根模型地质代表性存疑, 重质组分缺失带来的系统偏差无法量化, 纳米尺度结论向储层尺度升级缺乏公认方法, 储层温压条件下力场计算精度未经验证, CO₂ 驱替微观机制认识不统一, 共同制约了模拟结果的工程化应用。

3. 分子动力学模拟在页岩油开采中现有的关键技术

3.1. 力场

力场是分子动力学经典力学运算的核心基础, 其完备性与精准度直接决定数值模拟结果的可靠性与准确性[17]。场通过定量表征分子体系内的原子间相互作用力, 构建起分子动力学模拟的核心理论框架, 同时建立了分子动力学作用效应与原子间距之间的量化函数关系。现阶段主流力场种类繁多, 不同力场具备差异化的适用场景与应用局限, 模拟计算结果的精度高度依赖力场类型的合理选取。在模拟运算过程中, 不同力场对原子间相互作用的量化描述存在显著差异, 其完备性与适配性是保障分子动力学计算结果可靠、有效的核心前提[18]。

因此, 力场在计算过程中, 力的作用力大小不同, 力场的完备与否直接决定了计算的可靠程度。从 1924 年到 1984 年, 学者先后提出了 Lennard-Jones (LJ) [19]、Morse [20]、Born-Mayer [21]、Buckingham [22]、Busing [23] 和 Embedded Atom Method (EAM) [24] 势函数解析式, 为研究分子动力学打下了基石。常见的力场在分子动力学中可分为:

① 全原子力场

全原子力场在建模过程中保留分子体系全部原子信息, 不对分子基团进行合并简化, 能够完整复现分子的微观结构特征。体系内每一个真实原子均作为独立的力场作用点参与运算, 建立原子与力场位点之间严格的一一映射关系。依据经典分子力学基本假定, 原子质量全部集中在原子核处, 进而实现对分子几何构型、原子间相互作用的高精度描述。把分子中所有的原子都考虑进去, 把分子中所有的原子都一一对应到体系的力点上, 质量集中在原子核上。常见的有 OPLS 力场[25]、AMBER 力场、CHARMM 力场。

② 联合原子力场

忽略分子内部分原子, 将其余原子对氢原子的相互作用叠加至联合原子上; 与碳原子直接成键的氢原子的相对原子质量进行合并, 以此大幅降低力场复杂度, 同时减少势参数数量。联合原子力场借助基

团合并实现体系简化, 难以复现分子的全原子精细结构, 因而其力场作用点数目显著低于体系实际原子总数。常见的有 GROMOS 力场、COMPASS 力场、TraPPE 力场。

③ 粗粒度力场

与前述两类模拟体系相比, 该模型具备更高的简化度与抽象性。以苯环结构为例, 可将苯环及与其键合的氢原子归并为单一整体, 进而实现体系复杂度的降低。常见的有 MARTINI 力场。

3.2. 边界条件

分子动力学模拟常研究尺寸较小、单粒子数量非常多的材料, 一种称为原胞的体积元模型确保体系可以使密度一直处于稳定状态, 可消除尺寸对计算结果的影响, 且材料状态不同, 原胞形状重要性有别。分子动力学中, 边界会影响粒子运动和计算结果, 常使用周期性和非周期性边界条件。周期性边界条件可维持体系密度平衡, 采用此条件时依据最小镜像原理计算粒子间作用力, 并引入截断半径避免重复计算误差。

3.3. 势函数

依据波恩 - 奥本海默近似, 分子能量可通过原子空间坐标函数近似描述, 其仅与原子相对位置相关。分子力场函数作为经验公式, 通过拟合实验数据构建, 简洁描述分子能量与结构的关系, 计算量仅为量子力学从头算方法的 1/10, 显著降低模拟成本。在分子动力学中, 相互作用势函数的选取至关重要: 合理的势函数能提升计算精度, 而计算结果也可验证势函数的适用性。

3.4. 系综

分子动力学的模拟技术包括平衡态与非平衡态的模拟, 进行分子动力学的模拟过程中, 需要依照被研究对象的特性来选择适当的系综, 其中, 主要系综包括微正则系综、正则系综、以及等温等压系综等 [26]-[28]。

① 微正则系综(NVE)

NVE 系综是一个既保守又系统的孤立统计系综。在该系综中, 系统的原子数 N 和系统体积 V 保持不变 [29]。

② 正则系综(NVT)

在 NVT 系综中, 系统的原子数 N 、体积 V 和温度 T 都保持不变, 并且总动量为 0 [30]。

③ 等温等压系综(NPT)

在 NPT 系综中, 系统的原子数 N 、压力 P 和温度 T 都保持不变 [31]。

4. 存在的问题

4.1. 复杂矿物表面相互作用描述不精准

页岩中蒙脱石、伊利石、长石等矿物表面官能团复杂, 存在羟基与离子位点, 但现有 CHARMM、CLAYFF 等势函数对黏土矿物层间水合作用及有机质 - 沥青质相互作用的参数化不足, 致使吸附能与润湿性模拟偏差较大 [32]; 同时, 多矿物共存体系下的跨尺度相互作用缺乏有效建模手段, 无法准确反映储层矿物异质性对流体分布的影响 [33]。

4.2. 纳米孔隙结构的边界条件适配性问题

传统周期性边界条件仅适用于规则孔道, 难以模拟页岩中形状不规则孔隙的曲率效应与表面粗糙度

对流体流动的作用[34]; 在高压、高温的页岩油开采实际工况下, 孔隙表面原子振动与流体分子动能间的耦合作用被简化处理, 缺乏能够准确描述动态边界条件下能量传递过程的有效模型[35]。

4.3. 多组分流体运移与分子体系的相行为机制不明

页岩油中轻质烃、重质沥青质、地层水、CO₂ 及表面活性剂驱替剂构成的多相混合体系, 在纳米孔中的扩散、吸附与相变过程因力场精度不足而难以深入探究, 无法合理解释实验中出现的“分子筛分效应”与“界面富集现象”[36]; 此外, 驱替过程中润湿性反转的分子动力学路径尚不清晰, 表面活性剂分子在黏土表面的吸附现象与溶液浓度、矿化度之间的定量关系也缺乏深入研究[37]。

4.4. 多尺度模拟与模型参数的衔接缺失

分子动力学模拟所获取的扩散系数、吸附等温线等微观参数, 与宏观渗流模型, 如修正的 Navier-Stokes 方程、Lattice-Boltzmann 方法之间缺乏标准化的耦合接口, 使得微观模拟结果难以有效融入宏观储层数值模拟, 无法为页岩油开采方案的优化提供有力支撑[38]。

5. 下一步研究方向

针对当前页岩油纳米尺度分子动力学模拟存在的模型代表性不足、力场适配性差、尺度衔接困难等问题, 未来研究可从复杂矿物表面作用优化、孔隙边界条件构建、多组分运移机制解析、多尺度耦合方法四个方向展开。

5.1. 复杂矿物表面相互作用的优化方法

围绕页岩复杂矿物表面相互作用, 开发基于第一性原理计算与实验数据协同优化的专用势函数, 细化蒙脱石、伊利石等黏土矿物层间水合作用及有机质-沥青质相互作用参数, 提升吸附能与润湿性模拟准确性。现有三类主流力场的适用特性对比见表 1, 通用力场在界面精度上的不足是专用势函数开发的核心出发点。同时, 构建多矿物共存体系的跨尺度建模框架, 运用多尺度耦合方法, 如分子动力学与连续介质力学结合, 量化矿物异质性对流体分布的影响, 实现从原子尺度到宏观尺度的精准刻画。

Table 1. Comparison of the applicability characteristics of typical molecular force fields in shale oil simulation

表 1. 典型分子力场在页岩油模拟中的适用特性对比

力场类别	代表力场	核心适用体系	主要优势	主要局限
通用有机力场	OPLS-AA	碳质孔隙、纯烃体系	烃类热力学性质描述精度高	矿物界面参数简化, 吸附能计算偏差大
黏土专用力场	CLAYFF	黏土矿物、含水体系	黏土晶体结构与水化作用表征精准	与有机力场的界面耦合参数缺乏统一标定
多相通用力场	COMPASS	无机-有机耦合体系	可统一描述矿物-流体界面相互作用	高温高压储层条件下参数可靠性不足

5.2. 纳米孔隙结构的边界条件构建

针对页岩纳米孔隙结构的复杂边界特征, 研发适用于非规则孔隙的定制化边界条件算法。通过引入贴合页岩真实孔隙形貌的几何参数, 精准表征孔隙曲率效应与表面粗糙度对流体运移行为的影响机制; 同时构建高温、高压储层工况下的动态边界条件模型, 充分考虑孔隙壁面原子振动与流体分子动能的耦

合作用, 建立能量传递定量表征体系, 实现对真实页岩油开采环境下流体-孔隙界面相互作用的高精度模拟。

5.3. 多组分流体运移机制解析

聚焦页岩多组分流体的微观输运规律与相态演化行为, 通过优化传统力场参数并构建新型适配力场, 有效提升对轻质烃、重质沥青质等多相复合体系分子间相互作用的精细化表征精度, 系统揭示纳米孔隙内分子筛分效应与界面富集现象的微观分子机制。依托分子动力学模拟结合室内实验表征的联合研究手段, 精准追踪页岩油驱替全过程中储层表面润湿性反转的动态演化规律, 定量阐明表面活性剂分子吸附构象与溶液浓度、地层水矿化度之间的内在关联与响应特征, 为高效页岩油驱替剂的精准设计与优化应用提供坚实的微观理论支撑。

5.4. 多尺度模拟与模型参数耦合方法

针对多尺度模拟与工程参数衔接问题, 制定微观分子动力学模拟参数与宏观渗流模型参数的标准化转换规则, 开发专用的数据接口与耦合算法; 构建多尺度模拟集成平台, 实现从分子尺度的扩散系数、吸附等温线等参数到宏观储层数值模拟的无缝传递, 为页岩油开采方案的优化提供可靠的多尺度模拟支撑体系。

6. 结论

近年来, 页岩油开采技术方法结合分子动力学模拟不断取得突破性进展, 部分已进入矿场试验并初见成效, 应用前景广阔。分子动力学模拟作为探究页岩油纳米孔隙流动机理的关键手段, 在揭示页岩油赋存状态、吸附特性及驱替机制等方面展现出重要价值。

研究纳米粒子在孔隙中的运输行为可以结合分子动力学模拟与微流控实验[39] [40]分析纳米颗粒在孔隙中的运输行为, 预测纳米粒子在微观模型孔隙中的分布和运动规律, 指导优化工艺, 提高采收率。分子动力学模拟结果可以为实验设计和解释提供指导, 通过与实验数据的比较和验证, 可以进一步验证模拟结果的准确性。现有研究通过构建干酪根、石英、黏土等矿物纳米孔隙模型, 结合多组分页岩油分子体系, 系统分析了孔隙尺寸、温度、压力及矿物表面性质对流体运移的影响, 为阐明页岩油流动规律提供了微观理论支撑。同时, 力场开发、边界条件设置、势函数优化等关键技术的进步, 推动了模拟精度与效率的提升。

然而, 当前研究仍面临复杂矿物表面相互作用描述不精准、不规则孔隙边界条件适配性不足、多组分流体相行为机制不明及多尺度模拟参数衔接缺失等挑战。未来需聚焦专用势函数开发、动态边界条件建模、多组分运移机制解析及多尺度耦合方法创新, 通过微观模拟与宏观渗流模型的深度融合, 构建更贴近实际储层条件的理论体系, 助力我国非常规油气资源的规模化开发。

基金项目

重庆科技大学硕士研究生创新计划项目, 项目批准号: YKJCX2520153。

参考文献

- [1] Haile, J.M. (1992) Molecular Dynamics Simulation. Wiley.
- [2] 余涛, 李琦, 谭永胜, 等. 基于分子动力学方法的致密砂岩储层 CO₂ 驱油研究进展[J]. 天然气工业, 2024, 44(4): 146-159.
- [3] 朱玉颖. 基于分子动力学模拟的天然气水合物分解机理研究[D]: [硕士学位论文]. 大庆: 东北石油大学, 2021.

- [4] 庞海明, 赵会军, 于鹏飞, 等. 丙烯酸十八酯-苯乙烯共聚物对含蜡原油改性效果与分子动力学模拟[J]. 石油化工, 2021, 50(1): 48-54.
- [5] 张敬茹. 页岩 CO₂、CH₄ 动态吸附特性模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2022.
- [6] 王乐. 天然气水合物分解抑制型水基钻井液体系研究[D]: [博士学位论文]. 北京: 中国石油大学, 2018.
- [7] 张世明. 东营凹陷页岩油赋存特征分子动力学模拟[J]. 油气地质与采收率, 2021, 28(5): 74-80.
- [8] 李正, 寇建龙, 姚军. 干酪根和石英纳米孔隙内页岩油流动规律的分子动力学模拟[C]//西安石油大学, 成都理工大学, 陕西省石油学会. 2020 油气田勘探与开发国际会议论文集. 上海: 中国石油大学(华东)石油工程学院油气渗流研究中心; 杭州: 浙江师范大学物理与电子信息工程学院, 2020: 18.
- [9] 王慧. 气体在多孔纳米材料中的吸附与分离的分子模拟研究[D]: [博士学位论文]. 北京: 北京化工大学, 2016.
- [10] Wang, H., Wang, X., Jin, X. and Cao, D. (2016) Molecular Dynamics Simulation of Diffusion of Shale Oils in Montmorillonite. *The Journal of Physical Chemistry C*, **120**, 8986-8991. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b01660>
- [11] Wang, S., Feng, Q., Javadpour, F., Xia, T. and Li, Z. (2015) Oil Adsorption in Shale Nanopores and Its Effect on Recoverable Oil-in-Place. *International Journal of Coal Geology*, **147**, 9-24. <https://doi.org/10.1016/j.coal.2015.06.002>
- [12] Tian, S., Erastova, V., Lu, S., Greenwell, H.C., Underwood, T.R., Xue, H., *et al.* (2018) Understanding Model Crude Oil Component Interactions on Kaolinite Silicate and Aluminol Surfaces: Toward Improved Understanding of Shale Oil Recovery. *Energy & Fuels*, **32**, 1155-1165. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.7b02763>
- [13] Zhang, W., Feng, Q., Wang, S. and Xing, X. (2019) Oil Diffusion in Shale Nanopores: Insight of Molecular Dynamics Simulation. *Journal of Molecular Liquids*, **290**, Article 111183. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111183>
- [14] Cao, Z., Jiang, H., Zeng, J., Saibi, H., Lu, T., Xie, X., *et al.* (2021) Nanoscale Liquid Hydrocarbon Adsorption on Clay Minerals: A Molecular Dynamics Simulation of Shale Oils. *Chemical Engineering Journal*, **420**, Article 127578. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127578>
- [15] Wang, R., Bi, S., Guo, Z. and Feng, G. (2022) Molecular Insight into Replacement Dynamics of CO₂ Enhanced Oil Recovery in Nanopores. *Chemical Engineering Journal*, **440**, Article 135796. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.135796>
- [16] Baek, S. and Akkutlu, I.Y. (2018) CO₂-Stripping of Kerogen Condensates in Source Rocks. *SPE Journal*, **24**, 1415-1434. <https://doi.org/10.2118/190821-ms>
- [17] 许江涛. 基于分子模拟方法的温度对软硬无烟煤吸附甲烷特性的影响研究[J]. 煤矿安全, 2022, 53(7): 158-165.
- [18] 王鹏. 页岩油注 CO₂ 过程中重有机质沉积预测方法及应用[D]: [博士学位论文]. 北京: 中国石油大学, 2022.
- [19] Jones, J.E. (1924) On the Determination of Molecular Fields.—I. From the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **106**, 441-462. <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0081>
- [20] Morse, P.M. (1929) Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Physical Review*, **34**, 57-64. <https://doi.org/10.1103/physrev.34.57>
- [21] Dienes, G., Hatcher, R., Smoluchowski, R. and Wilson, W. (1934) Recent Calculations Concerning Point Defects in Alkali Halides. Miscellaneous Publication-National Bureau of Standards.
- [22] Buckingham, R.A. (1938) The Classical Equation of State of Gaseous Helium, Neon and Argon. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, **168**, 264-283. <https://doi.org/10.1098/rspa.1938.0173>
- [23] Ida, Y. (1976) Interionic Repulsive Force and Compressibility of Ions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **13**, 97-104. [https://doi.org/10.1016/0031-9201\(76\)90074-1](https://doi.org/10.1016/0031-9201(76)90074-1)
- [24] 葛春醒. 纳米孔隙气相导热系数的分子动力学模拟[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2010.
- [25] Jorgensen, W.L., Madura, J.D. and Swenson, C.J. (1984) Optimized Intermolecular Potential Functions for Liquid Hydrocarbons. *Journal of the American Chemical Society*, **106**, 6638-6646. <https://doi.org/10.1021/ja00334a030>
- [26] 文玉华, 朱如曾, 周富信, 等. 分子动力学模拟的主要技术[J]. 力学进展, 2003, 33(1): 65-73.
- [27] 樊康旗, 贾建援. 经典分子动力学模拟的主要技术[J]. 微纳电子技术, 2005(3): 133-138.
- [28] 李丽荣, 罗龙, 王宝峰. 概述经典分子动力学模拟计算[J]. 热处理技术与装备, 2012, 33(1): 53-57.
- [29] 武永吉. 储甲烷笼型水合物生成强化方法及机理研究[D]: [博士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2024.
- [30] 侯兆伟. 表面活性剂分子结构对油水界面聚集行为及驱油效率影响研究[D]: [博士学位论文]. 大庆: 东北石油大学, 2023.
- [31] Bosko, J.T., Todd, B.D. and Sadus, R.J. (2005) Molecular Simulation of Dendrimers and Their Mixtures under Shear:

- Comparison of Isothermal-Isobaric (NPT) and Isothermal-Isochoric (NVT) Ensemble Systems. *The Journal of Chemical Physics*, **123**, 199-214. <https://doi.org/10.1063/1.1946749>
- [32] 戴文杰, 陈永贵, 叶为民, 等. 基于分子动力学的缓冲/回填材料膨胀性能研究进展[J]. 土木工程学报, 2023, 56(11): 91-102.
- [33] 肖顺垚. 储层岩石流体分布方式对地震波频散和衰减的影响[D]: [硕士学位论文]. 成都: 成都理工大学, 2020.
- [34] 李滔. 致密气微尺度流体运移 LBM 模拟研究[D]: [博士学位论文]. 成都: 西南石油大学, 2018.
- [35] 罗银辉. 基于广义有限差分法的多孔介质墙体热湿耦合迁移数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 南昌: 南昌大学, 2023.
- [36] 高菲. 基于双子表面活性剂/核酸适配体的超分子组装体荧光检测 ATP 的研究[D]: [硕士学位论文]. 太原: 太原理工大学, 2019.
- [37] 王璐, 张一帆, 刘逸盛, 等. 页岩储层原油赋存特征及 CO₂-原油竞争吸附机制分子动力学[J]. 中国石油大学学报(自然科学版), 2023, 47(4): 128-136.
- [38] 梁怡普. 页岩数字岩心重构与多组分流体流动模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 上海: 中国石油大学, 2022.
- [39] Zhang, Z., Li, J. and Zhou, J. (2011) Microscopic Roles of “Viscoelasticity” in HPMA Polymer Flooding for EOR. *Transport in Porous Media*, **86**, 199-214. <https://doi.org/10.1007/s11242-010-9616-6>
- [40] Lei, W., Gong, W. and Wang, M. (2023) Wettability Effect on Displacement in Disordered Media under Preferential Flow Conditions. *Journal of Fluid Mechanics*, **975**, A33. <https://doi.org/10.1017/jfm.2023.879>