
藏在分子里的油藏密码：分子模拟如何揭示多组分烃类的气液相行为？ MDPI Methane

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39688.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

藏在分子里的油藏密码：分子模拟如何揭示多组分烃类的气液相行为？ MDPI Methane。 论文标题：Phase Behaviour of Multicomponent Mixtures of Hydrocarbons: MD Simulation

论文链接：<https://doi.org/10.3390/methane4040024>

期刊名：Methane

期刊主页：<https://www.mdpi.com/journal/methane>

看不见、摸不着的油气在地下多孔岩石中究竟如何分布？当压力降低时，复杂烃类混合物中的轻重组分会怎样各奔东西？这一切的答案，都藏在分子的微观世界里。一项发表于Methane期刊的研究，利用分子动力学模拟技术，在计算机中复现了地下油气藏的真实相态变化，为我们揭示了一个充满细节的微观世界。

1. 研究背景

在油气开采的实践中，准确预测地层流体的相态变化至关重要。当钻井深入地下，压力随着开采而逐渐降低，原本处于液态的烃类混合物会分离出气体——这个过程被称为液气两相分离。

对于甲烷、乙烷等少数几种成分组成的简单体系，工程师们可以利用经典热力学模型进行预测。然而，真实油气藏的烃类流体是包含数十甚至上百种组分的多组分复杂混合物，轻组分和重组分在气液两相中的分布极不均匀。现有的模型在面对如此复杂的体系时，准确度大打折扣。

此外，地下储层广泛存在纳米级孔隙，在纳米受限空间内，流体分子与孔壁之间存在着复杂的相互作用，使得流体的相行为与体相（Bulk Phase）状态截然不同。如何从分子层面理解多组分烃类混合物在宏观体相中的相变规律，成为提升油气资源评估与开发效率的关键。

分子动力学（MD）模拟是一种在原子/分子尺度上通过求解牛顿运动方程来研究物质微观演化过程的计算方法。相比于昂贵且难以在纳米尺度开展的物理实验，它提供了一种高效、可重复且可视化的研究手段。

2. 研究方法

为了研究多组分烃类混合物的气液相变行为，该研究利用分子动力学模拟技术，构建了一个包含8种典型烃类组分的模型流体，其组成与挥发油藏的流体高度相似。

8组分模型流体的摩尔组成如下：

甲烷 (CH₄) 30% 乙烷 (C₂H₆) 10% 正丁烷 (n-C₄H₁₀) 10% 正己烷 (n-C₆H₁₄) 10% 正辛烷 (n-C₈H₁₈) 10% 十二烷 (C₁₂H₂₆) 10% 十六烷 (C₁₆H₃₄) 10% 二十四烷 (C₂₄H₅₀) 10%

研究人员为C₁₂、C₁₆和C₂₄这三种高分子量组分构建了支链分子模型，以更真实地反映原油组分的化学结构。

在恒定温度375.15K（约102 °C）下，通过改变模拟盒子的大小来控制体系密度，进而调控压力。他们系统性地研究了在不同形状的气液界面（平面、球形和圆柱形）条件下，气液两相的相平衡与组分再分布特征

3. 研究结果

模拟结果生动地展示了多组分混合物在压力降低时发生相分离的微观过程。

核心发现 1：甲烷是气泡形成的主要驱动力

当压力降低至约7 MPa的泡点时，体系中开始形成球形气泡。根据图1分析表明，甲烷分子是气泡的主要建造者。气泡内部的气相几乎全部由甲烷组成，伴随少量的乙烷和丁烷，而重质组分则几乎全部留在液相中。

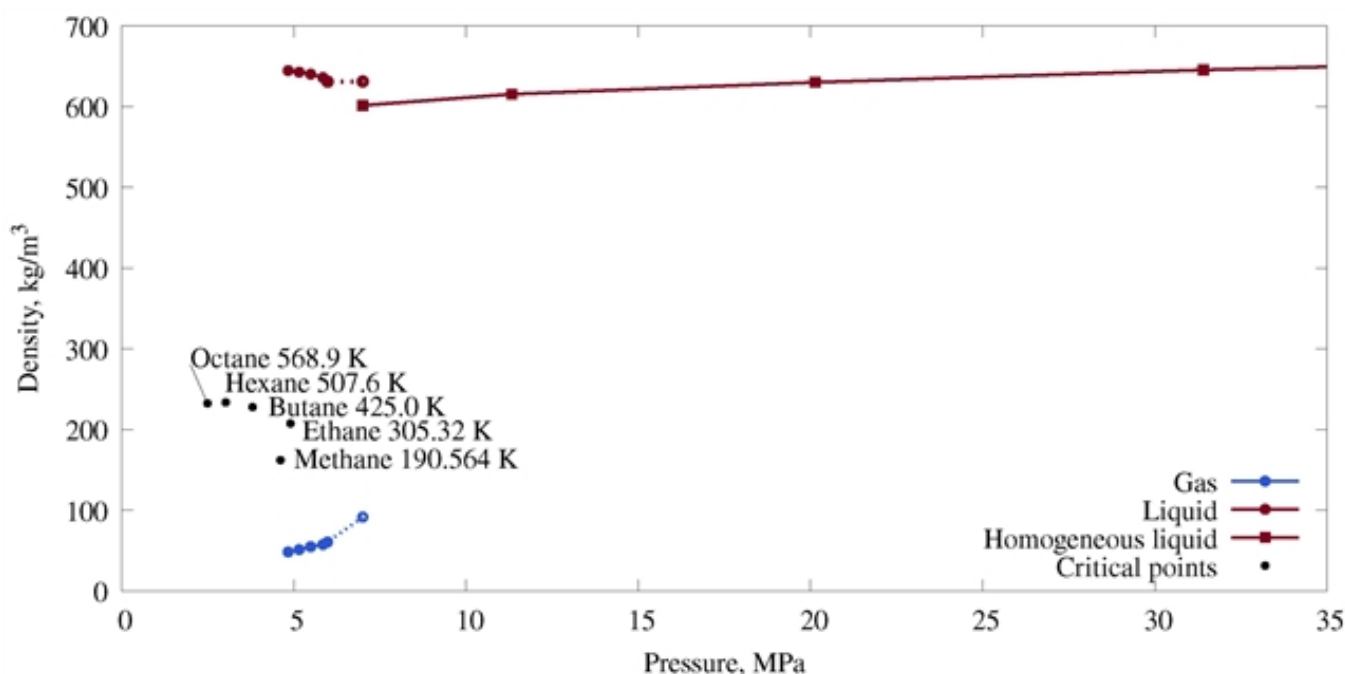


图1. 八组分混合物在恒温下的相图。低压区间表示两种共存相。数据为球形气泡。为了便于比较，图中还列出了甲烷、乙烷、正丁烷、正己烷和正辛烷的气液分离临界点（请注意，这些是实验数据，适用于热力学极限，而我们的有限尺寸系统并非如此）。空心圆圈表示球形气泡内部低密

度相消失的情况。

核心发现 2：气液界面处的组分富集现象

在气液界面层中，甲烷和乙烷的摩尔密度达到峰值，甚至高于它们在气泡内部和液体本体中的密度。这意味着，界面区域对这些轻质组分有着独特的吸附或富集作用，揭示了气液传质过程中的关键微观机制。

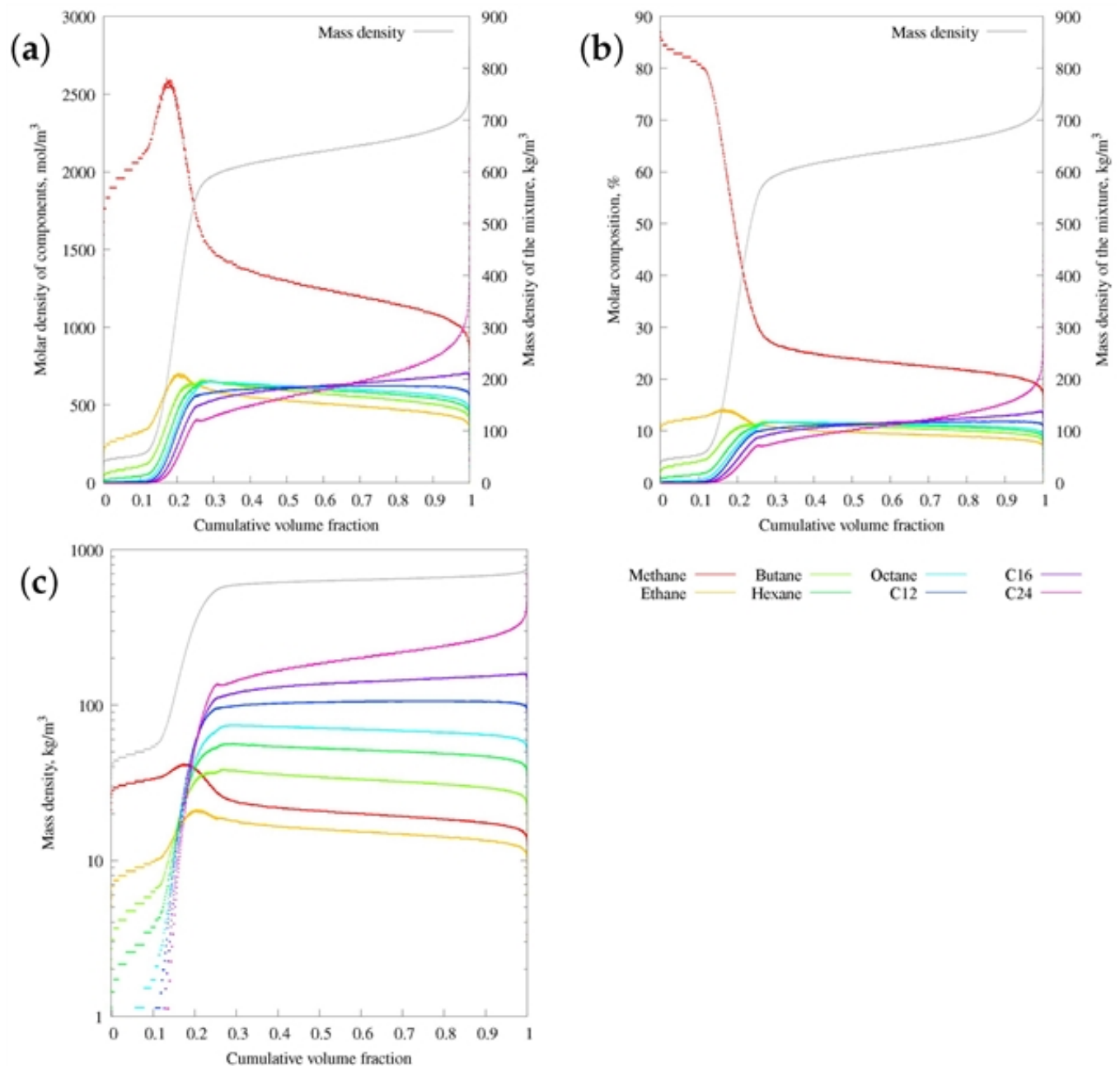


图2. (a) 流体组分的摩尔密度（左侧纵轴，彩色曲线）与混合物的平均质量密度（右侧纵轴）。横轴对应于体素（即局部微小子体积）的累积体积分数；这些体素具有特定的混合物平均质量密度（数值可读自右侧纵轴）及混合物组分（由各组分的摩尔密度表示，数值可读自左侧纵轴）。图中的水平线段表示具有特定密度和组分的体素所占的体积分数区间。在本图的另外两个子图 (b) 和 (c) 中，混合物组分分别通过摩尔组分和质量密度进行表示。(b)

流体的摩尔组分（左侧纵轴，彩色曲线）与混合物的平均质量密度（右侧纵轴）。(c) 流体各组分（左侧纵轴，彩色曲线）与混合物的平均质量密度（右侧纵轴；在此图中，该轴与左侧纵轴数值一致）。本图 (a–c) 所示数据均取自以下工况：体系尺寸为 $26 \times 25 \times 25 \text{ nm}^3$ ，内含一个直径约为 7 nm 的球形气泡；体系压力为 5.15 MPa ，平均密度为 524.68 kg/m^3 。

核心发现 3：界面形状对相平衡的影响

通过对比球形、圆柱形和平面气液界面在不同压力下的密度变化，研究团队发现，界面曲率（即气泡的大小和形状）对相平衡状态有显著影响，这与经典的开尔文方程（描述弯曲液面饱和蒸气压变化的方程）所描述的现象定性一致。

表1. 主要模拟结果汇总表

模拟参数/结果	数值/特征	模拟温度	375.15 K (约 $102 \text{ }^\circ\text{C}$)	泡点压力 (球形界面)	7 MPa
气泡平均密度	100 kg/m^3	液相平均密度	640 kg/m^3	气泡组成	几乎纯甲烷 + 少量乙烷/丁烷
界面行为	甲烷/乙烷摩尔密度在界面处出现峰值	界面曲率效应	气泡形状显著影响相平衡压力		

4 结论与展望

这项研究的重要意义在于，它将我们对多组分烃类混合物相行为的认知，从宏观的热力学统计推进到了分子尺度。通过开发分子模型和计算方法，该研究成功量化了气液相变过程中，不同烃类组分在气相、液相以及界面层中的精细分布。

这些发现为油气藏数值模拟提供了宝贵的分子层面的参数和机理支撑，有助于提高储量评估和产量预测的准确性。

此外，该研究开发的建模方法和分析工具，也可拓展应用于页岩油气等非常规资源的纳米限域相变、 CO_2 提高油气采收率以及碳封存等更广泛的能源与环境领域。随着计算能力的提升，分子模拟技术正成为推动能源科学发展的虚拟实验室。

Methane期刊介绍

<https://www.mdpi.com/journal/methane>

主编：Prof. Dr. Patrick Da Costa, Institut d' Alembert, Sorbonne Université, CNRS UMR7190, 2 pl de la Gare de Ceinture, 78210 St Cyr L' Ecole, France

期刊专注于甲烷及其相关领域的创新研究。期刊涵盖甲烷的生产、储存、转化、利用及环境影响等多个方向，涉及能源科学、环境工程、化学催化、微生物学等交叉学科，旨在为全球学者提供高质量的学术交流平台。本期刊涵盖与甲烷相关的所有研究主题，重点关注但不限于以下领域：甲烷勘探与开采技术，甲烷的化学与物理特性，甲烷及其衍生物的应用，甲烷排放与控制，甲烷代谢过程，天然气水合物（可燃冰），氢能技术，氢燃料开发。期刊于2026年被Scopus收录。

来源：Methane

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发